テンソルくりこみ群による
素粒子物理学の諸問題へのアプローチ

武田　真滋

2015.10.19-20 @筑波大学計算科学研究センター
第7回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム
ー多分野に広がる計算科学の発展と将来像ー

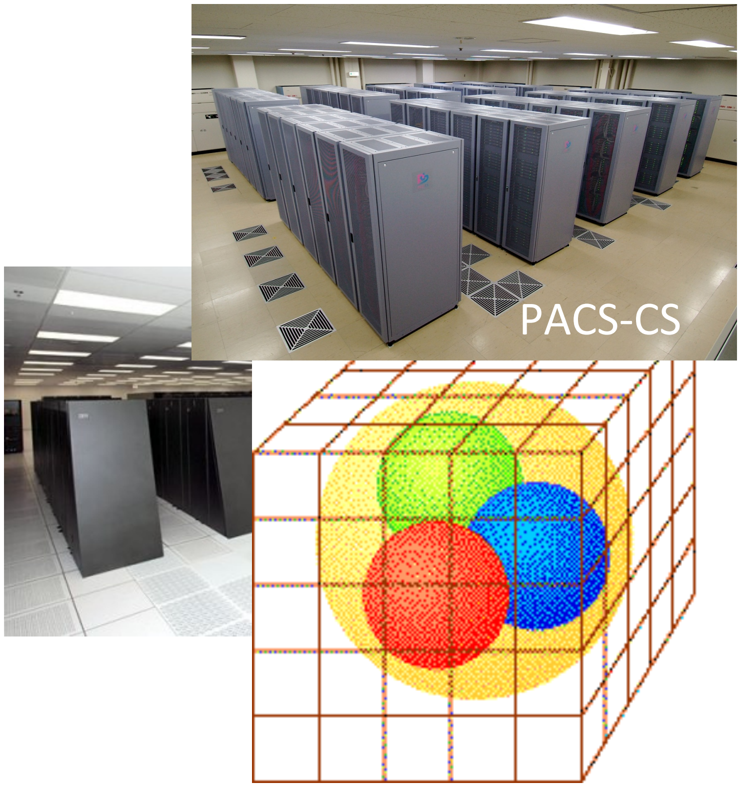
内容

- 導入
- ２次元イジングモデルを使ったテンソルくりこみ群の説明
- 現状
- 課題
- まとめと展望

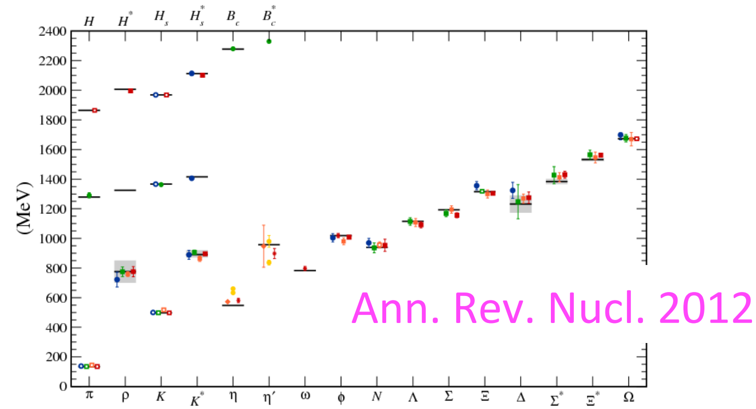
導入

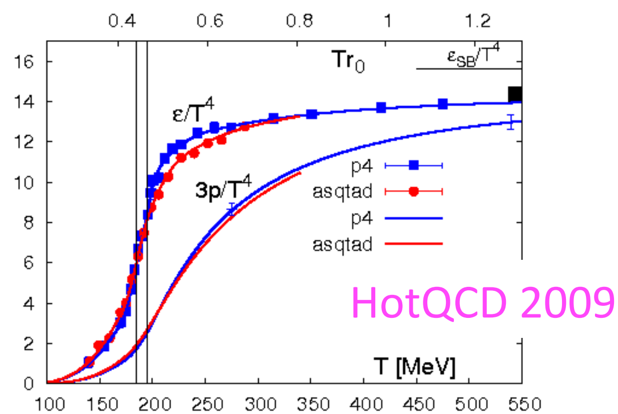
なぜ、モンテカルロ法ではなく
テンソルくりこみ群なのか？

格子QCDのMCシミュレーションの例



筑波大学素粒子論研究室





ハドロン質量や有限温度QCDでは威力を発揮！

モンテカルロ法の限界と問題

- 軽いクオーク質量（物理点直上の計算） 済 PACS-CS 2008
  アルゴリズムや格子作用の改良により克服
- 臨界減速 (critical slowing down)
  連続極限（臨界点）に近づくと「効率」が悪くなる
- 符号問題（複素作用問題）
  作用が複素数になると直接モンテカルロは使えない

素粒子物理で符号問題が生じる例

- 有限クォーク密度QCD
  - 高密度天体内部の状態方程式
- 格子カイラルゲージ理論
  - 弱い相互作用（標準模型丸ごと）のシミュレーション
- Lattice SUSY
  - SUSY(超対称性)：ボゾンとフェルミオンを混ぜる対称性
  - 標準模型を越える理論に存在すると期待
- θ項
  - Strong CP問題：QCD作用の中で、CP（荷電共役・パリティー）対称性を破る演算子の係数θが何故非常に小さいのか？

符号問題に対する
モンテカルロ法による試み

- テイラー展開法：相転移などの非解析的な問題にはちょっと？
- 位相再重み付け法：体積を大きくすると厳しい
- 虚数パラメーター法（虚数化学ポテンシャル、虚数θ）：解析接続可能な範囲の問題へ先送り
- 複素ランジュバン法：~~正しい「分布」に収束しているか数学的保証がない。~~　正しい分布に収束する場合もある。やってみないとわからない。
- Lefschetz thimble：菊川氏ポスター

符号問題に対する
モンテカルロ法による試み

- テイラー展開法：相転移などの非解析的な問題にはちょっと？
- 位相再重み付け法：体積を
- ル、虚数
  能な範囲の問題へ先送り
- 複素ランジュバン法：~~正しい「分布」に収束しているか数学的保証がない。~~　正しい分布に収束する場合もある。やってみないとわからない。
- Lefschetz thimble：菊川氏ポスター

モンテカルロ法に代わるアルゴリズムは？

テンソルくりこみ群！

Tensor renormalization group (TRG)

Levin & Nave 2007

格子モデルの分配関数を近似的(制御可能な形で)に計算するアルゴリズム

古典系あるいは、経路積分表示の量子系を扱う

- 利点：符号問題なし
- 弱点：系の次元を上げるとコストが急激に増加

テンソルくりこみ群
例：２次元イジングモデル

テンソルくりこみ群の流れ

① 分配関数を**テンソルネットワーク表示**に書き換える

$$Z \equiv \sum_{\{s\}} e^{-\beta H[s]} = \sum_{i,j,k,l,\ldots} \ldots T_{ijkl} T_{mnio} \ldots$$

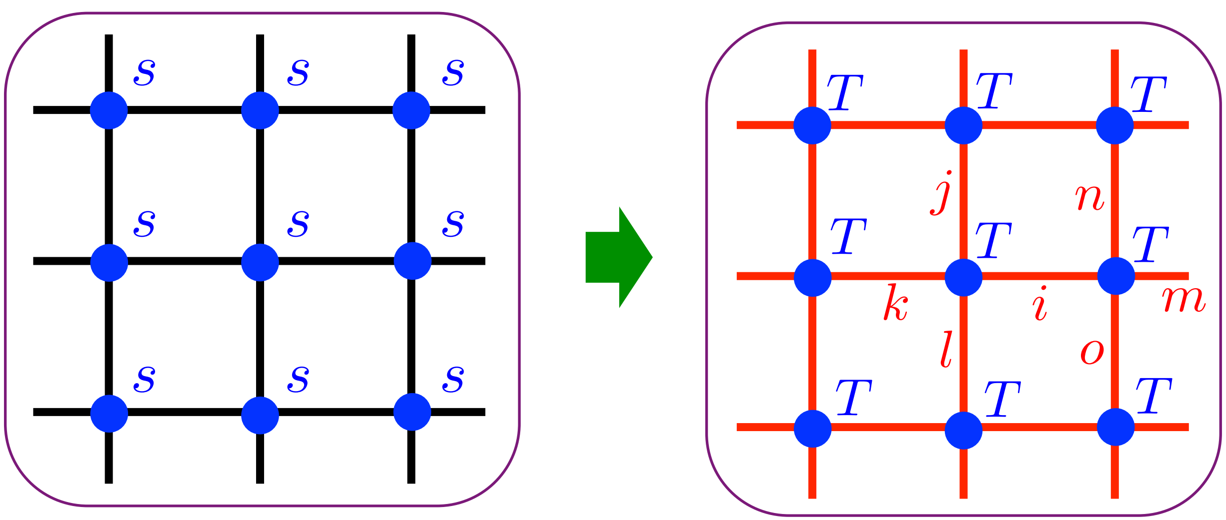
テンソル

スピン変数

後でもう少し説明

離散的な新しい変数

・解析的
・近似なし



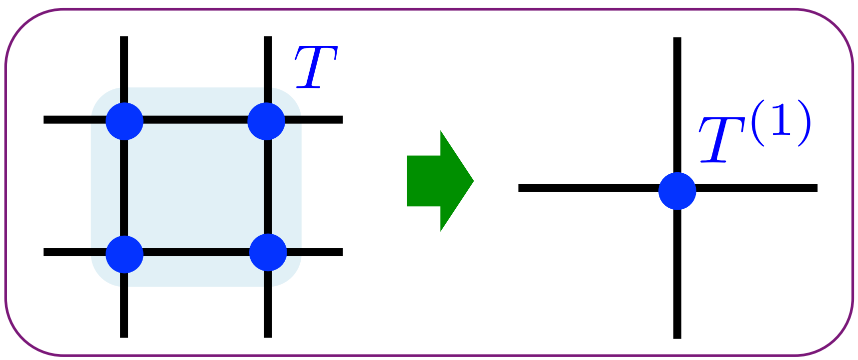
格子点：テンソルT
ボンド：添字$i,j,k,l,\ldots$

テンソルくりこみ群の流れ

① 分配関数をテンソルネットワーク表示に書き換える

② テンソルの粗視化

テンソルのブロック変換



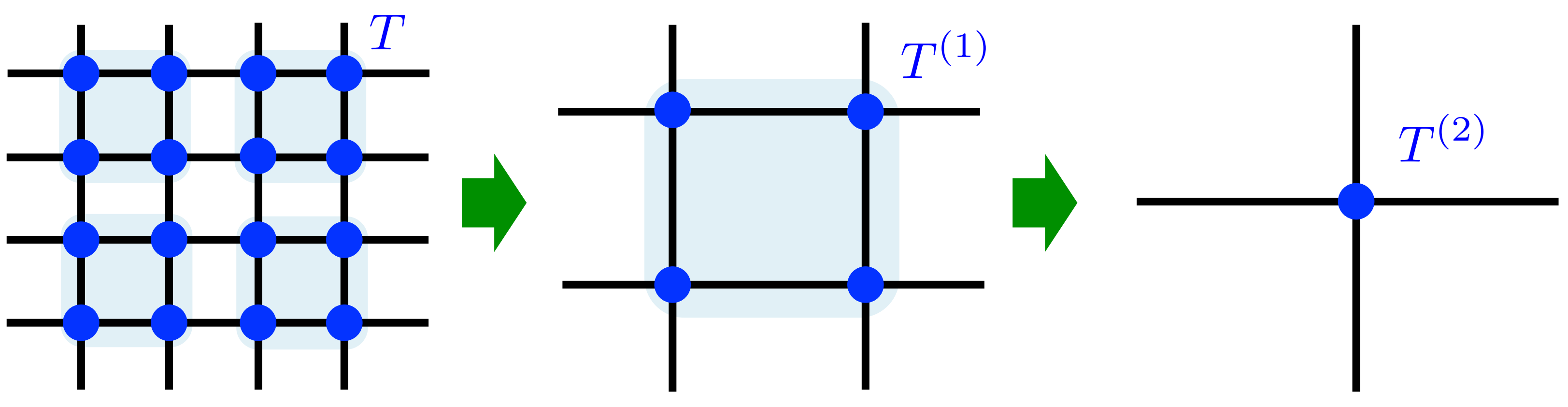
重要な情報の抽出(数値的)と
選択によって近似が入る

テンソルくりこみ群の流れ

① 分配関数をテンソルネットワーク表示に書き換える

② テンソルの粗視化

③ 粗視化を繰り返し、テンソルの数を十分小さくしてから分配関数を計算

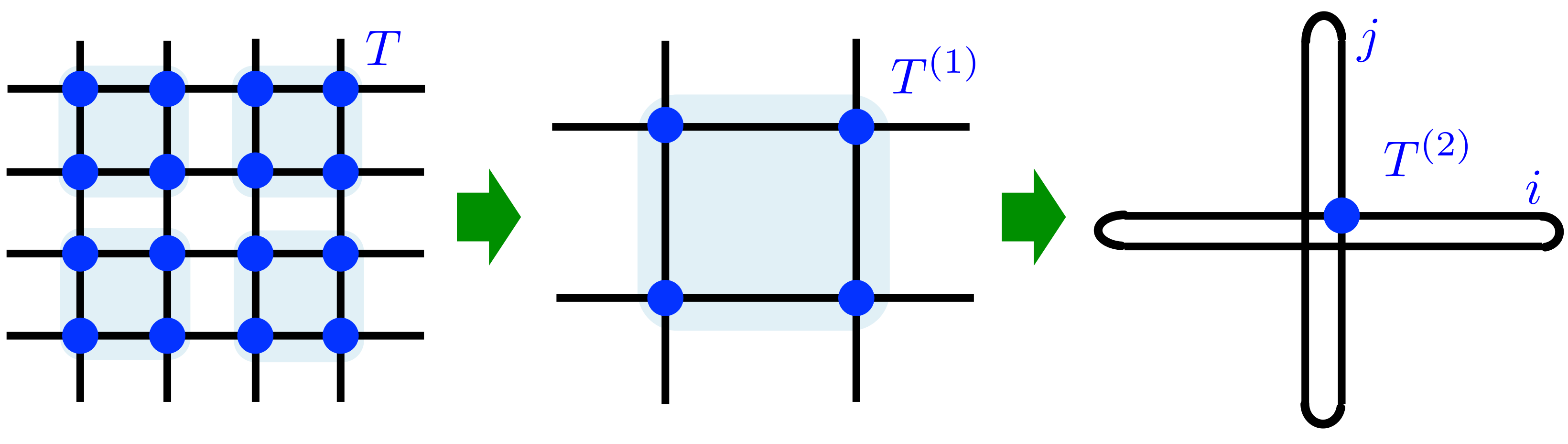


テンソルくりこみ群の流れ

① 分配関数をテンソルネットワーク表示に書き換える

② テンソルの粗視化

③ 粗視化を繰り返し、テンソルの数を十分小さくしてから分配関数を計算 $Z \approx \sum_{i,j} T^{(n)}_{ijij}$



①テンソルネットワーク表示

方針

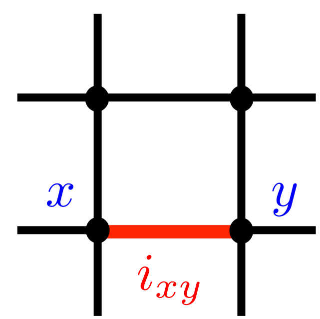
$$Z \equiv \sum_{\{s\}} e^{-\beta H[s]} = \sum_{i,j,k,l,\ldots} \ldots T_{ijkl} T_{mnio} \cdots$$

- 各ボルツマン因子を展開（高温展開で使うもの、β=1/T）
- その展開で現れる各項を区別する整数（ボンド変数）を、新しい自由度とみなす → テンソルの添字

$$\begin{aligned}
e^{\beta s_x s_y} &= \cosh(\beta s_x s_y) + \sinh(\beta s_x s_y) \\
&= \cosh\beta + s_x s_y \sinh\beta \\
&= \cosh\beta (1 + s_x s_y \tanh\beta) \\
&= \cosh\beta \sum_{i_{xy}=0}^{1} (s_x s_y \tanh\beta)^{i_{xy}}
\end{aligned}$$

$s_x = \pm 1$

新しい自由度

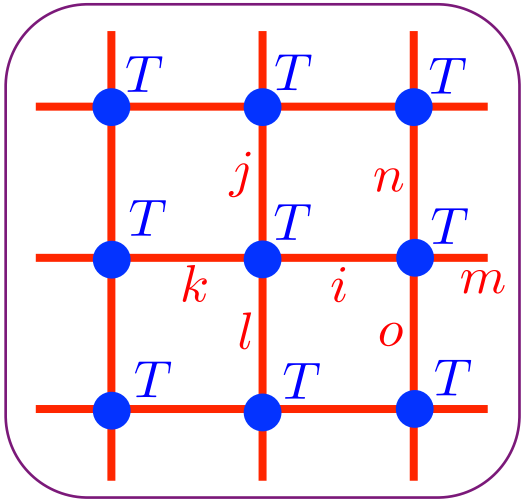


①テンソルネットワーク表示

方針

$$Z \equiv \sum_{\{s\}} e^{-\beta H[s]} = \sum_{i,j,k,l,\ldots} \ldots T_{ijkl} T_{mnio} \cdots$$

- 各ボルツマン因子を展開(高温展開で使うもの、β=1/T)
- その展開で現れる各項を区別する整数(ボンド変数)を、新しい自由度とみなす → テンソルの添字
- 古い自由度(スピン変数s)を積分(略)
- テンソルネットワーク表示完成！



テンソルの中身

$$\begin{bmatrix} T_{0000} & T_{0001} & T_{0010} & T_{0011} \\ T_{0100} & T_{0101} & T_{0110} & T_{0111} \\ T_{1000} & T_{1001} & T_{1010} & T_{1011} \\ T_{1100} & T_{1101} & T_{1110} & T_{1111} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \tanh\beta \\ 0 & \tanh\beta & \tanh\beta & 0 \\ 0 & \tanh\beta & \tanh\beta & 0 \\ \tanh\beta & 0 & 0 & (\tanh\beta)^2 \end{bmatrix}$$

$$\times 2(\cosh\beta)^2$$

①テンソルネットワーク表示

$$\mathcal{Z} = \sum_{..,i,j,k,l,m,n,o,..} \cdots T_{ijkl} T_{mnio} \cdots$$

- ここまでは、分配関数を書き直しただけ。
- 安直に和を取るとコストは2^{2V}に比例する。無理。
- ある種の近似を導入することによってコストを減らしつつも、「重要」な部分はきっちり出し足し上げて分配関数を精度よく計算したい

①テンソルネットワーク表示

$$\mathcal{Z} = \sum_{..,i,j,k,l,m,n,o,..} \cdots T_{ijkl} T_{mnio} \cdots$$

- ここまでは、分配関数を書き直しただけ。
- 安直に和を取るとコストは2^{2V}に比例する。無理。
- ある種の近似を導入することによってコストを減らしつつも、「重要」な部分はきっちり出し足し上げて分配関数を精度よく計算したい

テンソルの粗視化（繰り込み、ブロッキング）

②テンソルの粗視化

方針

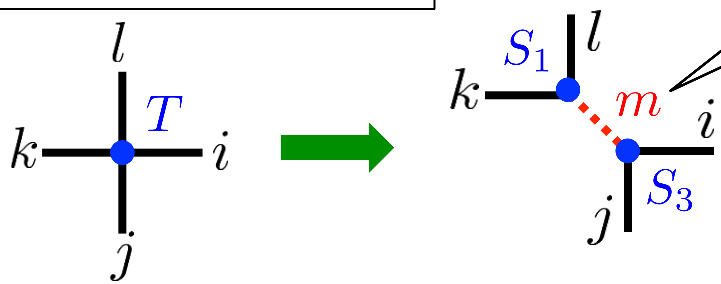
仮定：システムが一様、つまり、「特別」なテンソルはない

- テンソルを（特異値）分解し、「重要な部分」を取り出す（近似）＝情報の圧縮
- 次に、コンパクトになったテンソルを組み合わせて、新しいテンソルを作る＝古い自由度の縮約
- テンソルの分解（圧縮）と縮約を繰り返すことによってテンソルの数を減らすことができる
- テンソルの数が十分小さくなったら分配関数を計算する＝③

②テンソルの粗視化

テンソルの分解

新しい自由度



$$T_{ijkl} = \sum_{m} (S_3)_{ijm} (S_1)_{klm}$$

特異値分解(SVD)

特異値

$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq 0$　非負実

$$M_{ab} = \sum_{m} u_{am} \sigma_m (v^T)_{mb}$$

u, v：直交行列

近似

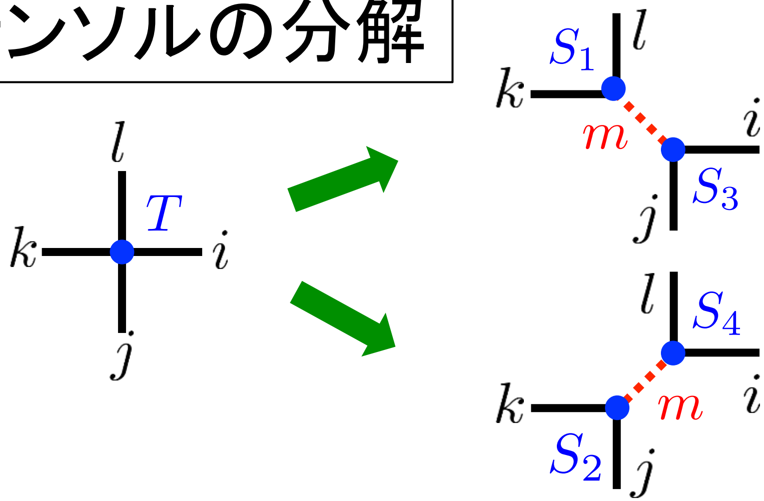
$$T_{ijkl} = M_{(ij),(kl)} = \sum_{m} \underline{u_{(ij),m} \sqrt{\sigma_m}} \cdot \underline{\sqrt{\sigma_m} (v^T)_{m(kl)}} \approx \sum_{m=1}^{D_{\mathrm{cut}}} \underline{(S_3)_{ijm}} \, \underline{(S_1)_{klm}}$$

D_{cut}で打ち切られた行列は、Mに対するランクD_{cut}の最小2乗近似になっている

テンソル（行列）を低ランク行列で近似＝情報の圧縮

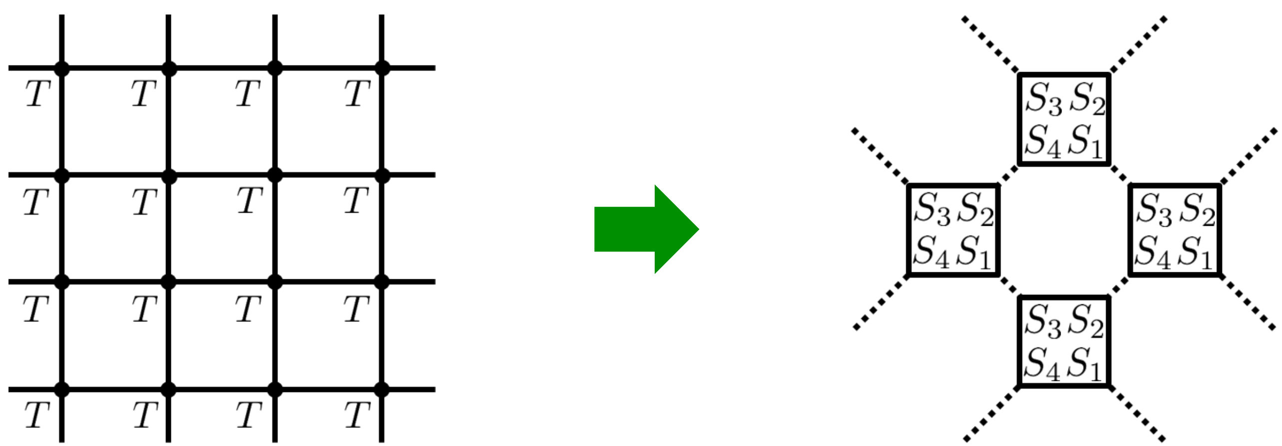
②テンソルの粗視化

テンソルの分解



$$T_{ijkl} \approx \sum_{m=1}^{D_{\mathrm{cut}}} (S_3)_{ijm}(S_1)_{klm}$$

$$T_{ijkl} \approx \sum_{m=1}^{D_{\mathrm{cut}}} (S_4)_{lim}(S_2)_{jkm}$$



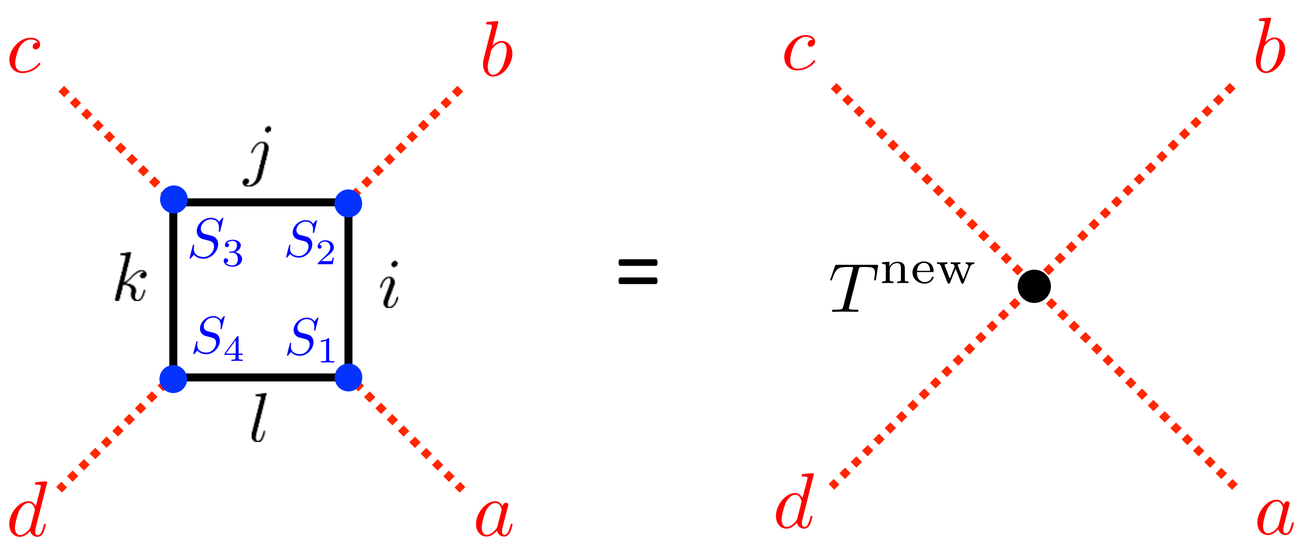
②テンソルの粗視化

縮約して新しいテンソルを作る

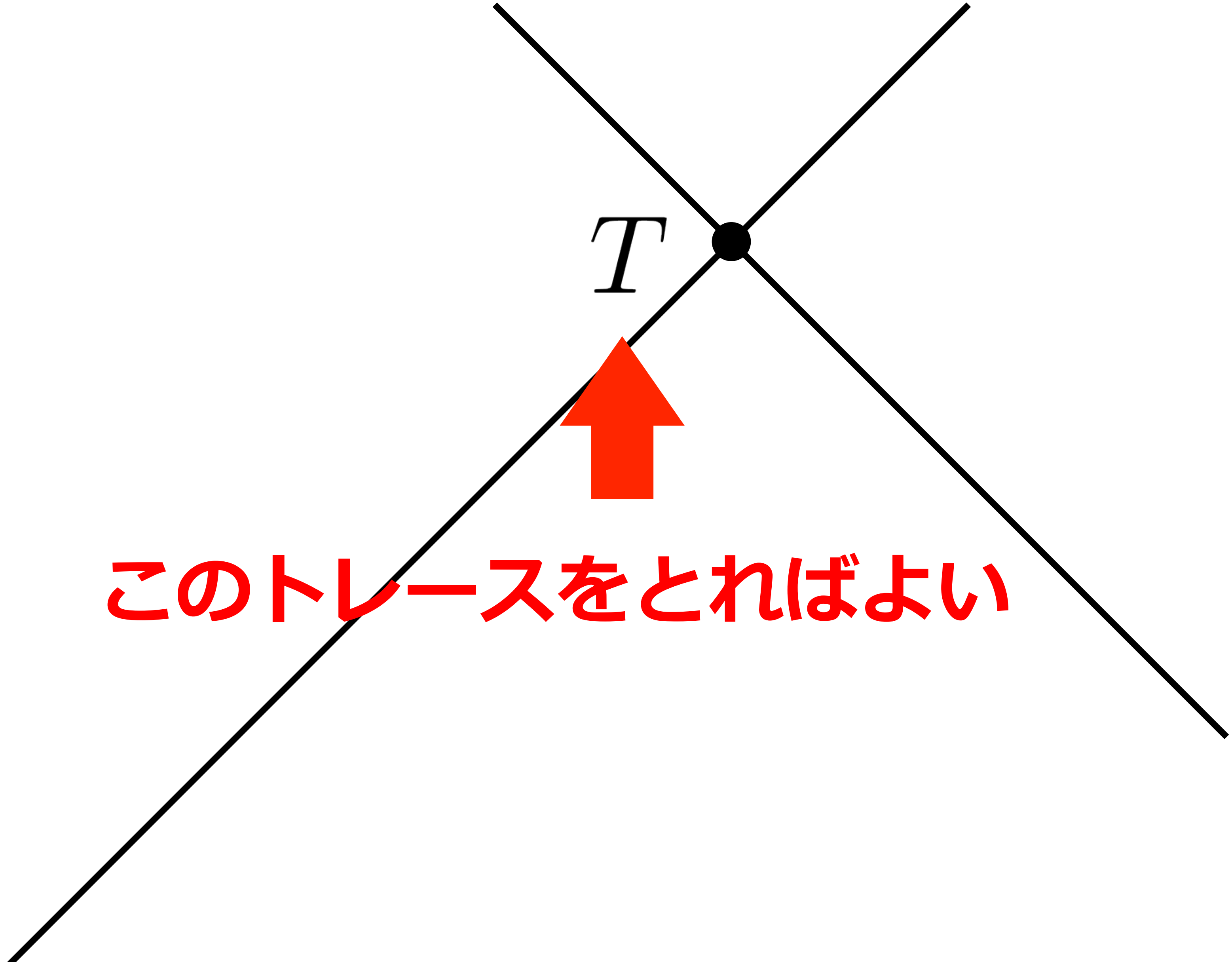
$$\sum_{i,j,k,l}^{\mathrm{all}} (S_1)_{ila}(S_2)_{jib}(S_3)_{kjc}(S_4)_{lkd} = T^{\mathrm{new}}_{abcd}$$

古い自由度を integrate out

くりこみっぽい

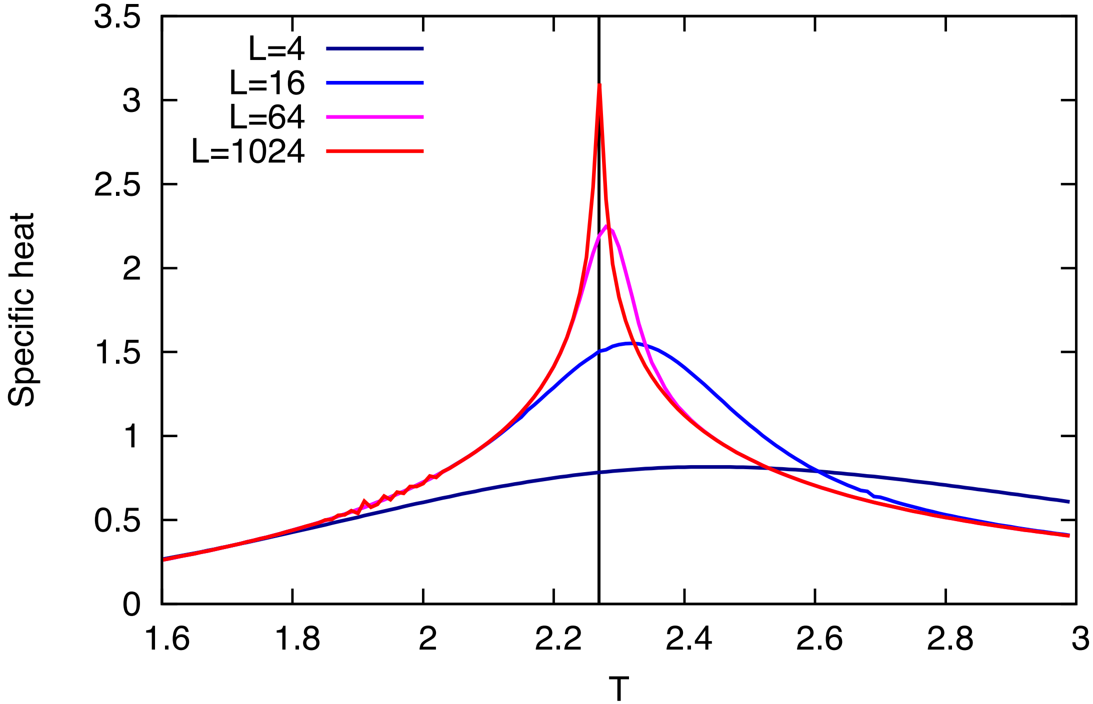


D1河内さん作成



このトレースをとればよい

TRGの数値計算例



２次元正方格子
イジングモデル

D_{cut}=32

$$T_c = 2/[\ln(1+\sqrt{2})] = 2.269\ldots$$

このMacBook Airで丸1日ぐらいの計算

計算コスト ∝ log(格子サイズ) × $(D_{cut})^6$ × [温度のメッシュ数]

TRGの数値的研究の現状

- ２次元
  - スピン系：イジングモデル Levin & Nave 2007、XYモデル Yu et al. 2013、非線形σモデルO(3) Judah et al. 2014
  - スカラー系：ϕ^4理論 Shimizu 2012
  - ゲージ・フェルミオン系：QED_2 Shimizu & Kuramashi 2013
  - $QED_2+\theta$項： Shimizu & Kuramashi 2014
  - 有限密度系：Gross-Neveuモデル ST & Yoshimura 2014
- 高次元
  - 別の粗視化：Higher order TRG(HOTRG)を使う。任意次元可能
    3Dイジング：Xie et al. 2012、４Dイジング： ポスター清水裕也氏
- ゲージ理論用
  - Decorated tensor network renormalization: Wittrich et al. 2014

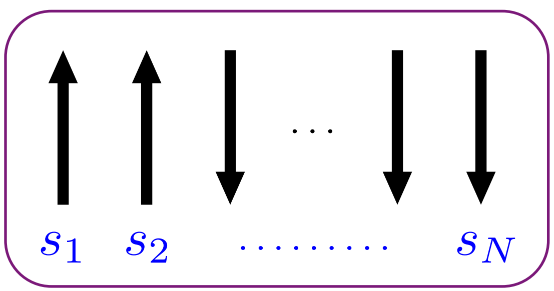
歴史的背景

- 密度行列くりこみ群 (DMRG) White 1992
  - 1次元格子量子系の基底状態の変分計算
  - 基底をうまく選ぶ(特異値分解を用いた情報圧縮)ことにより、扱う情報量を大幅に削減できる O(2^N)→O(N)、N:サイト数
    波動関数のテンソルネットワーク表示
  - これ以前は、N=30ぐらいが限界だったが、DMRGによって一気にN=100ぐらいまでが可能になった

2^N成分

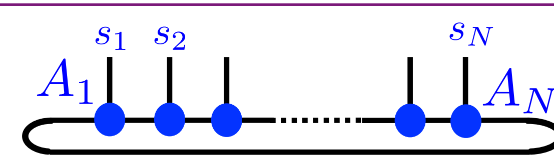
$$|\psi\rangle = \sum_{s_1,s_2,\ldots,s_N} \underbrace{\psi_{s_1,s_2,\ldots,s_N}} |s_1\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes \cdots \otimes |s_N\rangle$$

$$\underline{\mathrm{tr}\,[A_1^{s_1} A_2^{s_2} \cdots A_N^{s_N}]} \qquad A^s : d \times d \text{ matrix}$$



行列積状態

$2Nd^2$ 成分



波動関数のテンソルネットワーク表示

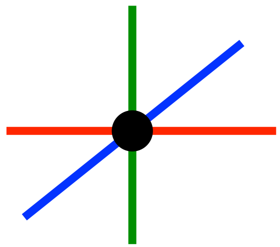
歴史的背景

- 密度行列くりこみ群 (DMRG) White 1992
  - １次元格子量子系の基底状態の変分計算
  - 基底をうまく選ぶ（特異値分解を用いた情報圧縮）ことにより、扱う情報量を大幅に削減できる O(2^N)→O(N)、N:サイト数 波動関数のテンソルネットワーク表示
  - これ以前は、N=30ぐらいが限界だったが、DMRGによって一気にN=100ぐらいまでが可能になった
- テンソルくりこみ群 Levin & Nave 2007
  - ターゲット：古典統計系の分配関数
  - 分配関数をテンソルネットワーク表示し、特異値分解によってテンソルを圧縮しながら粗視化を繰り返し、情報量を落としつつ近似的に分配関数を計算する
  - 低次元ではモンテカルロを脅かす存在になりつつある

モンテカルロ法	テンソルくりこみ群
ボルツマン因子を確率解釈	分配関数をテンソルネットワーク表示（確率解釈なし）
importance sampling	テンソルの圧縮(SVD)近似による系統誤差
符号問題の可能性あり	符号問題なし（∵確率を使わない）
臨界減速	臨界点近傍ではテンソルの圧縮が悪化

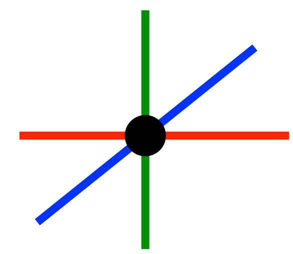
TRGの数値計算的側面と課題

- 主な計算（HOTRGの場合、n次元モデル）
  - テンソルの分解　⇒　特異（固有）値分解：$O(D_{cut}^{6})$
  - テンソルの縮約　⇒　行列・行列積：$O(D_{cut}^{4n-1})$
- メモリ
  - テンソルの成分の数：$O(D_{cut}^{2n})$
  - 内部自由度が増えるとさらに厳しい



TRGの数値計算的側面と課題

- 主な計算（HOTRGの場合、n次元モデル）
  - テンソルの分解　⇒　特異（固有）値分解：$O(D_{cut}^{6})$
  - テンソルの縮約　⇒　行列・行列積：$O(D_{cut}^{4n-1})$
- メモリ
  - テンソルの成分の数：$O(D_{cut}^{2n})$
  - 内部自由度が増えるとさらに厳しい



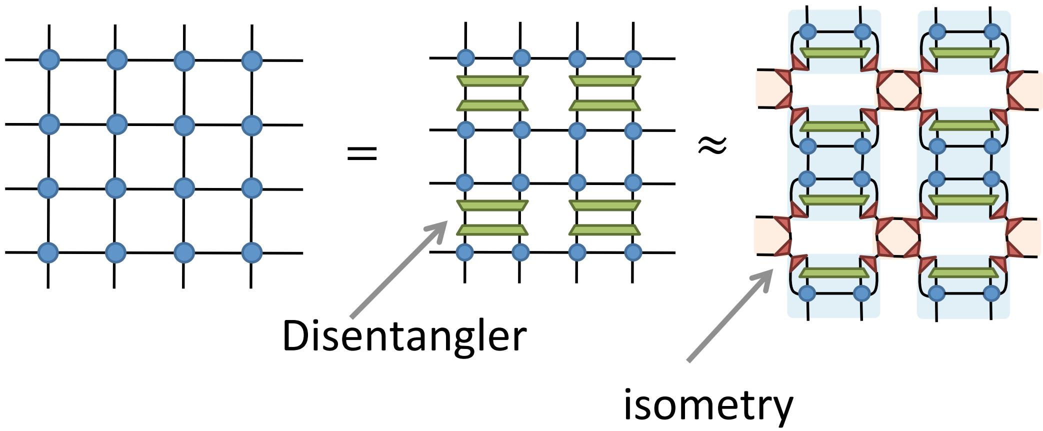
- 行列・行列積：Level 3 BLAS使用　≫　特異値分解
- D_{cut}を小さくする（情報の圧縮度を高める）アルゴリズム?

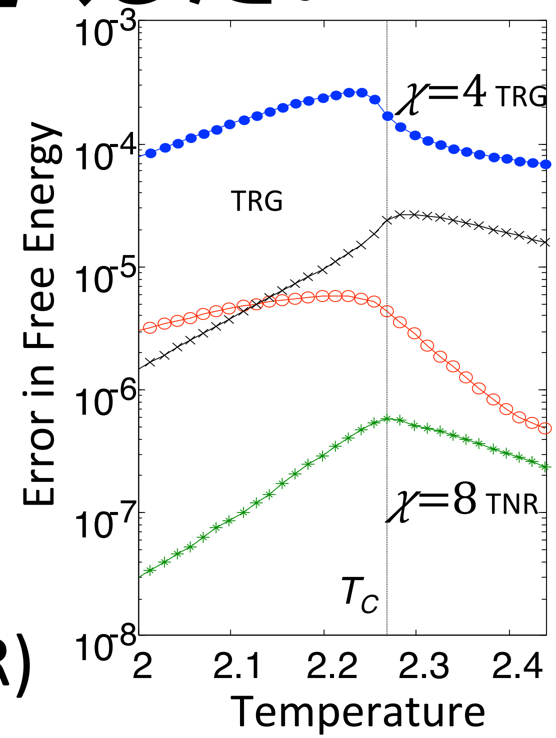
粗視化の改良：D_{cut}を小さくしたい

- Tensor entanglement filtering renormalization Gu et al. 2009
  - 短距離相関の除去
  - 非臨界点では機能するが、臨界点ではダメ
- Second TRG Xie et al. 2009
  - 環境を含めた最適化
- Tensor network renormalization (TNR)

  Evenbly & Vidal 2014：
  - Disentanglerを用いて短距離相関（エンタングルメント）を除去してから粗視化する
  - 臨界点近傍でも、持続可能な粗視化が可能

粗視化の改良：D_{cut}を小さくしたい





- Tensor network renormalization (TNR)

  Evenbly & Vidal 2014：

  - Disentangler を用いて短距離相関（エンタングルメント）を除去してから粗視化する
  - 臨界点近傍でも、持続可能な粗視化が可能

まとめ

- TRGでは符号問題がない
- TRGの数値計算結果は臨界点以外では精度がよい。一方、臨界点付近では精度が落ちるという問題があった。
- しかし、Tensor network renormalization (TNR)で克服可能。ただし、高次元化は未完。
- とにかく、低次元では強力！

展望

- 4次元QCD（有限密度・θ項）までの道のりは長い
  - 高次元化
    - 計算コスト：$O(D_{cut}^{15})$、メモリ：$O(D_{cut}^{8})$
    - 並列化
  - 非可換ゲージ理論
    - キャラクター展開は可能⇒テンソルネットワーク表示はOK。ただし、内部自由度が大きい
- 低次元において符号問題でお困りの系は？
  - 2次元CP(N)モデル+θ項：Strong CP問題　Lattice 2015 河内&ST
  - Lattice SUSY、カイラルゲージ理論