符号問題はどこまで解けるか
～複素ランジュバン法からの新たな視点～

KEK連携コロキウム・研究会エディション
「量子多体系の素核・物性クロスオーバー」

KEKつくばキャンパス・４号館セミナーホール
2019年1月14日（月）-16日（水）

西村　淳　（KEK、総研大）

0. はじめに

符号問題

モンテカルロ法による実変数の多重積分

$$Z = \int_{\mathbb{R}^n} dx\, e^{-S(x)}$$

$$x = (x_1, \cdots, x_n) \in \mathbb{R}^n$$

群多様体のように
曲がった空間上の積分に
も拡張可能 （eg., QCD）

$$S(x) = S_{\mathrm{R}}(x) + iS_{\mathrm{I}}(x) \in \mathbb{C}$$

$$\langle \mathcal{O}(x) \rangle = \frac{1}{Z} \int_{\mathbb{R}^n} dx\, \mathcal{O}(x) \boxed{e^{-S(x)}}$$

このままでは確率分布
（ボルツマン重率）と
解釈できない。

$$\langle \mathcal{O}(x) \rangle_{\mathrm{R}} = \frac{1}{Z_{\mathrm{R}}} \int_{\mathbb{R}^n} dx\, \mathcal{O}(x)\, e^{-S_{\mathrm{R}}(x)}$$

$$\langle \mathcal{O}(x) \rangle = \frac{\langle \mathcal{O}(x) e^{-iS_{\mathrm{I}}} \rangle_{\mathrm{R}}}{\langle e^{-iS_{\mathrm{I}}} \rangle_{\mathrm{R}}}$$

生成した配位間で激しい相殺がおき、
important samplingが機能しない

reweighting

符号問題は、様々な興味深い系で起きる

- θ項
- Chern-Simons項
- 実時間のダイナミクス
- 有限密度系
- 湯川相互作用
- 超対称理論
- カイラル・フェルミオン
- 強相関電子系など

フェルミオンに起源を持つケース

符号問題が解決できれば、理論物理学における大きなブレークスルーになる！

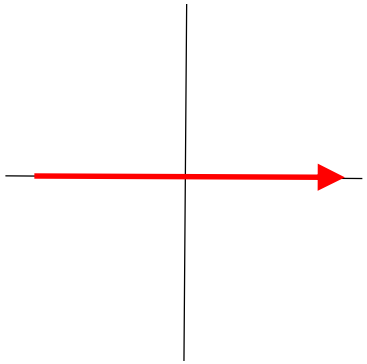
符号問題の解決に向けた新たな発展

Key : 力学変数の複素化

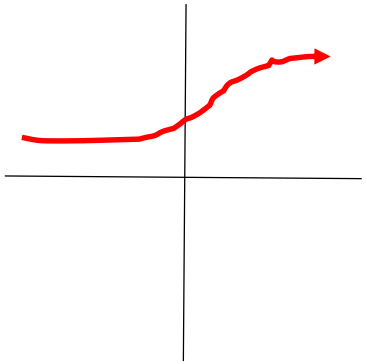
2011～

もともとの経路積分

$$Z = \int dx\, w(x)$$



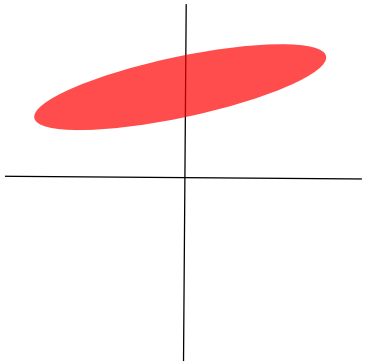
被積分関数　$w(x)$ の位相が激しく振動　(符号問題)



$$Z = \int dz\, w(z)$$

積分路を変形することにより、
符号問題を最小化する。

“Generalized thimble 法”



複素化した変数に対する確率過程のもとで、期待値を計算
（符号問題は一切なし!)

“複素ランジュバン法”

但し、もともとの経路積分との等価性には、
一定の条件が必要。

Generalized thimble 法		複素ランジュバン法
かなり広い	適用範囲	限定的 （正当化するための条件が存在）
少し残っているため、 系のサイズを無限に大きく することはできない	符号問題は 解けたか？	一定のモデル、パラメタ領域 で完全に解け、系のサイズ を無限に大きくできる
実軸上のメトロポリス法。 1ステップ毎に積分路の変形のしかた、 及びそれに伴うJacobianを計算する。 またreweightingも必要。	アルゴリズム	ふつうのランジュバン法 （確率過程量子化法）と同じ。
系のサイズの３乗 （どこかで指数的増大）	計算コスト	系のサイズに比例
フェルミオンを含む低次元場の理論 量子系の実時間発展の計算	成功例	有限密度系（QCDも?!） 超弦理論の”第一原理計算”

相補的なアプローチであり、どちらがよいかはcase by case

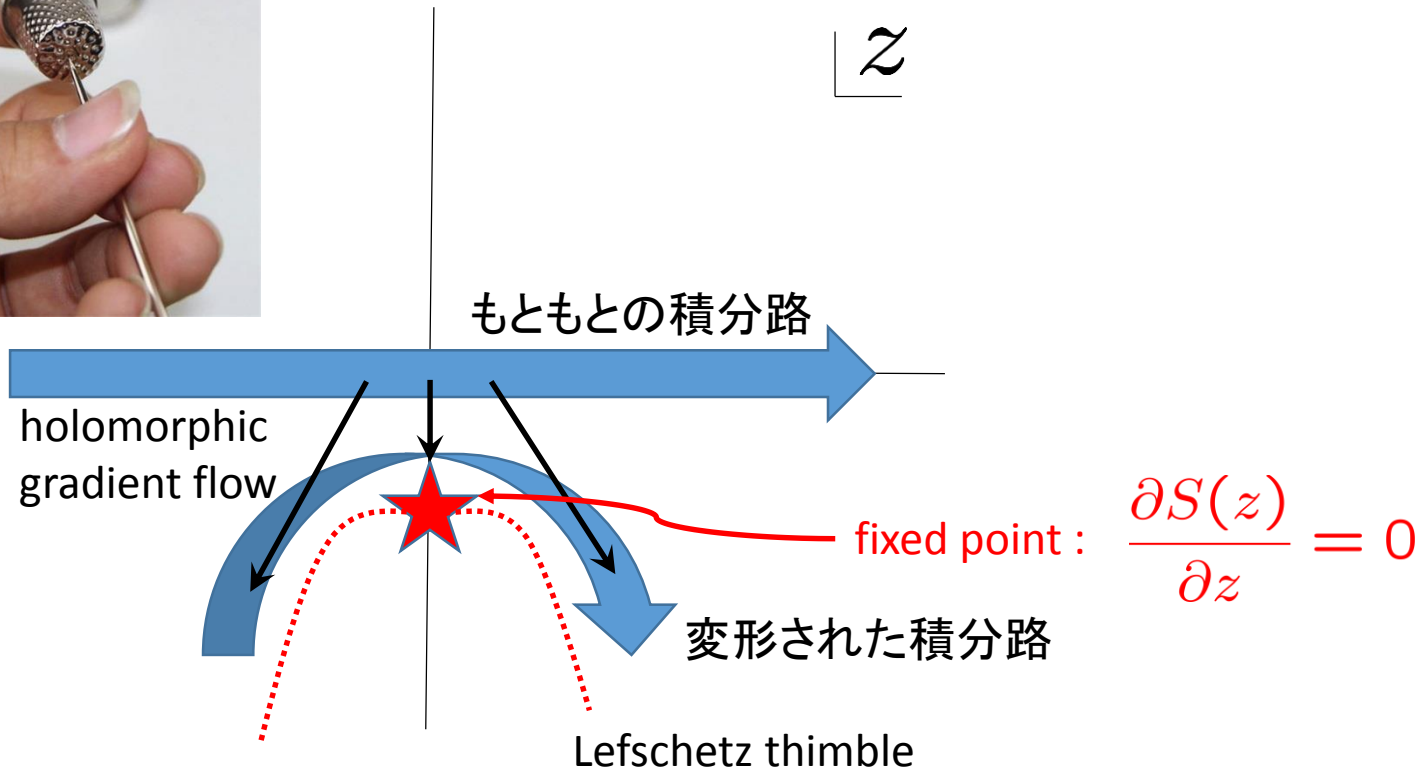
目次

0. はじめに
1. Generalized thimble法
2. 複素ランジュバン法
3. 有限密度QCDにおける最新結果
4. まとめと展望

1. Generalized thimble法

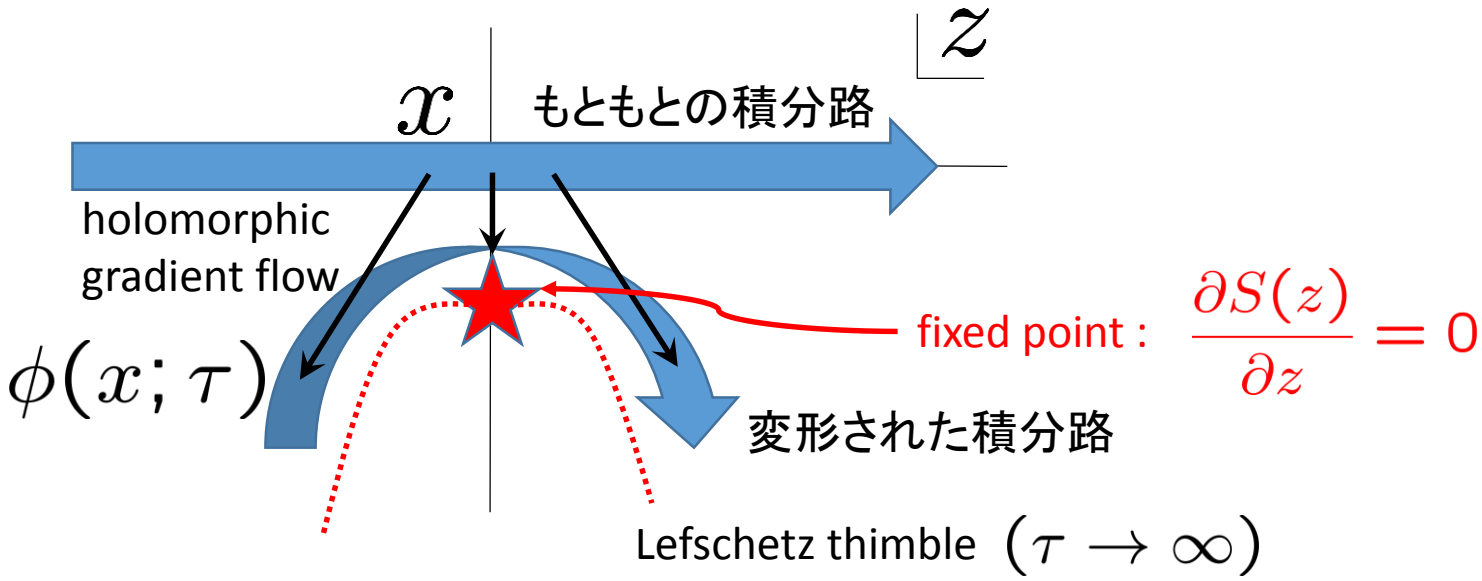
Generalized thimble method (GTM)

A.Alexandru, G.Basar, P.F.Bedaque, G.W.Ridgway and N.C.Warrington, JHEP 1605 (2016) 053



holomorphic gradient flowのもつ性質のおかげで、
変形された積分路上では符号問題が緩和される！

holomorphic gradient flow とは



$$\frac{\partial}{\partial \sigma}\phi_k(x;\sigma) = \overline{\left(\frac{\partial S(\phi(x;\sigma))}{\partial \phi_k}\right)}$$

初期条件: $\phi(x;0) = x \in \mathbb{R}^n$ のもとで、

$\sigma = 0$ から $\sigma = \tau$ まで解く。

τ は一度決めたら固定。
（アルゴリズムのパラメタ）

$\Rightarrow$ x から $\phi(x;\tau)$ への1対1写像が得られる。

x でパラメトライズされた形で変形された積分路が決まる。

holomorphic gradient flowのもつ重要な性質

flowに沿って作用 S の変化を見てみると、

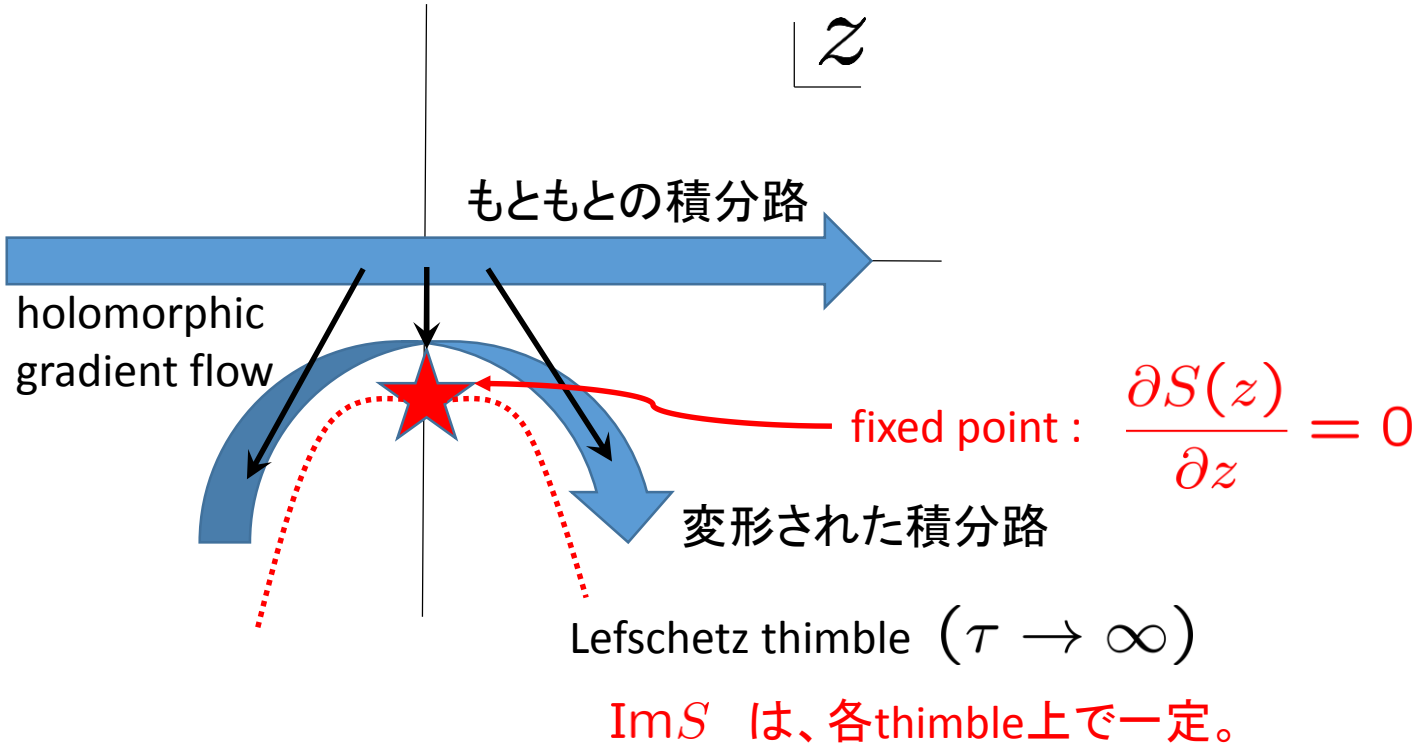
$$\begin{aligned}\frac{d}{d\sigma}S(\phi(x;\sigma)) &= \frac{\partial S(\phi(x;\sigma))}{\partial \phi_k}\frac{\partial \phi_k(x;\sigma)}{\partial \sigma} \\ &= \frac{\partial S(\phi(x;\sigma))}{\partial \phi_k}\overline{\left(\frac{\partial S(\phi(x;\sigma))}{\partial \phi_k}\right)} \\ &= \left|\frac{\partial S(\phi(x;\sigma))}{\partial \phi_k}\right|^2\end{aligned}$$

実かつ正！

作用 S の実部はflowに沿って単調に増加する一方、
虚部は一定に保たれる。

flowの固定点 ($\frac{\partial S(z)}{\partial z}=0$) に向かう領域以外は、
作用の実部が際限なく大きくなるため、積分には効かなくなる。

flowさせる時間が長くなるに従い、積分に効く実軸上の領域は狭まる



結果的に、符号問題が緩和されることになる。

歴史的にはflowさせる時間 (τ) を無限大にしたときに得られるLefschetz thimbleが先に提案されたが、当時、実軸から連続的に積分路を変形するという見方はなかった。

変形された積分路

$$M_\tau = \{\phi(x;\tau) | x \in \mathbb{R}^n\}$$

$\mathbb{C}^n$ 内の　n 次元実多様体　（x でパラメトライズされている）

$$\begin{aligned} Z &= \int_{\mathbb{R}^n} dx\, e^{-S(x)} \\ &= \int_{M_\tau} d\phi\, e^{-S(\phi)} \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} dx\, \det J(x;\tau)\, e^{-S(\phi(x;\tau))} \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} dx\, e^{-S_{\text{eff}}(x;\tau)} \end{aligned}$$

$$J_{kl}(x;\tau) \equiv \frac{\partial}{\partial x_l}\phi_k(x;\tau)$$

$$S_{\text{eff}}(x;\tau) \equiv S(\phi(x;\tau)) - \log\det J(x;\tau)$$

$$\langle \mathcal{O}(x) \rangle = \frac{\langle e^{-i\,\mathrm{Im}S_{\text{eff}}(x;\tau)} \mathcal{O}(\phi(x;\tau)) \rangle_{\mathrm{Re}S_{\text{eff}}}}{\langle e^{-i\,\mathrm{Im}S_{\text{eff}}(x;\tau)} \rangle_{\mathrm{Re}S_{\text{eff}}}}$$

(reweighting)

符号問題は少し残ってしまう

$\tau \to \infty$　の極限でも！

- $\mathrm{Im}S = \text{const.}$　(thimble毎に異なる)
- $\det J$　は一般に複素数値をとる。

Generalized thimble法の問題点

- メトロポリス・アルゴリズムの各ステップで

$$\frac{\partial}{\partial\sigma}\phi_k(x;\sigma) = \overline{\left(\frac{\partial S(\phi(x;\sigma))}{\partial\phi_k}\right)}$$

(holomorphic gradient flow)

を解かなければいけない。

特に、積分路の変形に伴うJacobian $J_{kl}(x;\tau) \equiv \frac{\partial}{\partial x_l}\phi_k(x;\tau)$
を求めるのにも、対応するflow方程式を解く必要があり、
系のサイズの3乗の計算コストがかかってしまう。

- 積分に効くthimbleが複数存在する場合、
一つのthimble付近の領域から、別のthimble付近の領域
への遷移が充分な頻度で起きない。(特に T が大きいとき)

➡ 実質的にエルゴード性が破れてしまう問題

これらの問題点を解決する様々な提案

- parallel tempering

  エルゴード性の問題を解決する一般的なテクニックを利用可能。

  Fukuma, Umeda,
  PTEP 2017 (2017) no.7, 073B01, arXiv:1703.00861 [hep-lat]など

- machine learningの利用

  変形された積分路 $\phi(x;\tau)$ を有限のサンプルで学習させて、
  本格的な配位生成の段階でflowを解かなくても済むようにする

  A.Alexandru, P.F.Bedaque, H.Lamm, S.Lawrence,
  Phys.Rev. D96 (2017) no.9, 094505, arXiv:1709.01971 [hep-lat]

  符号問題の厳しさをコスト関数とするmachine learningで経路を決定する

  Y.Mori, K.Kashiwa, A.Ohnishi,
  PTEP 2018 (2018) no.2, 023B04, arXiv:1709.03208 [hep-lat]

系のサイズが小さい（力学的自由度が少ない）うちは、
大抵の系で使えるので、トライする価値は充分ある。

しかし、符号問題が少し残っているせいで、系のサイズが大きくなってくると、どこかでreweightingがうまくいかなくなるという宿命をもつ。

2. 複素ランジュバン法

ふつうのランジュバン法の復習

$$Z = \int dx\, w(x) \qquad w(x) \geq 0$$

Parisi-Wu ('81)

モンテカルロ法の基本的方針にのっとり、
力学変数 x の確率過程を考える。

ランジュバン方程式

$$\frac{d}{dt}x^{(\eta)}(t) = v(x^{(\eta)}(t)) + \eta(t)$$

「ドリフト項」

ガウシアン・ノイズ

$$\text{probability} \propto \mathrm{e}^{-\frac{1}{4}\int dt\, \eta(t)^2}$$

$$v(x) \equiv \frac{1}{w(x)}\frac{\partial w(x)}{\partial x}$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \lim_{t\to\infty} \langle \mathcal{O}(x^{(\eta)}(t)) \rangle_\eta \qquad \langle \cdots \rangle_\eta = \frac{\int \mathcal{D}\eta \cdots \mathrm{e}^{-\frac{1}{4}\int dt\, \eta^2(t)}}{\int \mathcal{D}\eta\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{4}\int dt\, \eta^2(t)}}$$

実際の計算では、η に関する平均を長時間平均に置き換える。(エルゴード性)

ふつうのランジュバン法の復習（つづき）

$\langle \mathcal{O} \rangle = \lim_{t\to\infty} \langle \mathcal{O}(x^{(\eta)}(t)) \rangle_\eta$　の証明

$x^{(\eta)}(t)$ の確率分布　$P(x,t) = \langle \delta(x - x^{(\eta)}(t)) \rangle_\eta$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{w(x)}\frac{\partial w(x)}{\partial x}\right) P$$

Fokker-Planck 方程式

$$\Rightarrow \quad \lim_{t\to\infty} P(x,t) = \frac{1}{Z} w(x)$$　が示せる。

$$\langle \mathcal{O}(x^{(\eta)}(t)) \rangle_\eta = \int dx\, \mathcal{O}(x) P(x,t)$$　より、

$$\lim_{t\to\infty} \langle \mathcal{O}(x^{(\eta)}(t)) \rangle_\eta = \int dx \mathcal{O}(x) \frac{1}{Z} w(x) = \langle \mathcal{O}(x) \rangle$$

複素ランジュバン法

Parisi ('83), Klauder ('83)

$$Z = \int dx\, w(x)$$

複素の場合にランジュバン法を拡張する

ランジュバン方程式

$$\frac{d}{dt}x^{(\eta)}(t) = v(x^{(\eta)}(t)) + \eta(t)$$

「ドリフト項」

$$v(x) \equiv \frac{1}{w(x)}\frac{\partial w(x)}{\partial x}$$

- ドリフト項が複素になってしまうので、力学変数も複素に拡張せざるを得ない。 $z^{(\eta)}(t) = x^{(\eta)}(t) + i\, y^{(\eta)}(t)$

$$\frac{d}{dt}z^{(\eta)}(t) = v(z^{(\eta)}(t)) + \eta(t)$$

ガウシアン・ノイズ（実）

$$\text{probability} \propto \mathrm{e}^{-\frac{1}{4}\int dt\, \eta(t)^2}$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle \stackrel{?}{=} \lim_{t\to\infty} \langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t)) \rangle_\eta$$

- ドリフト項 $v(x) \equiv \frac{1}{w(x)}\frac{\partial w(x)}{\partial x}$ と オブザーバブル $\mathcal{O}(x)$ を、

  複素化された変数に対して定義するには、解析接続を用いる。

複素ランジュバン法の正当化

$\langle \mathcal{O} \rangle = \lim_{t\to\infty} \langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t)) \rangle_\eta$　　を証明できればよい。

$$z^{(\eta)}(t) = x^{(\eta)}(t) + i\, y^{(\eta)}(t)$$

$x^{(\eta)}(t),\ y^{(\eta)}(t)$ の確率分布: $P(x,y;t) = \left\langle \delta(x - x^{(\eta)}(t))\, \delta(y - y^{(\eta)}(t)) \right\rangle_\eta$

$$\langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t)) \rangle_\eta = \int dxdy\, \mathcal{O}(x+iy) P(x,y;t)$$

これが $t \to \infty$ で　$\langle \mathcal{O} \rangle \equiv \int dx\, \mathcal{O}(x) \frac{1}{Z} w(x)$　となることを示したい。

複素数を値にもつ関数！

$$\int dxdy\, \mathcal{O}(x+iy) P(x,y;t) = \int dx\, \mathcal{O}(x) \rho(x;t) \quad \cdots\cdots (\#)$$ を示す。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{w(x)} \frac{\partial w(x)}{\partial x} \right) \rho$$

（Fokker-Planck方程式と形式的に同じ）

$$\Rightarrow \quad \lim_{t\to\infty} \rho(x;t) = \frac{1}{Z} w(x)$$

Fokker-Planck 方程式の解の $t \to \infty$ での振舞い

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \boxed{\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{1}{w(x)}\frac{\partial w(x)}{\partial x}\right)\rho}$$

Fokker-Planck 方程式

$$\| $$

$$-H$$

Fokker-Planck ハミルトニアン

$\rho(x;t) \propto w(x)$ は H のゼロモード

- $w(x) \geq 0$ の場合は、Hの他のすべての固有値が実かつ正であることが示せる。

$$t \to \infty \quad \text{で} \quad \rho(x;t) \to \frac{1}{Z} w(x)$$

- $w(x) \in \mathbb{C}$ の場合は、Hの固有値は一般に複素数になる。

ゼロモード以外のすべての固有値が正の実部をもつことが必要。

$P(t=\infty)$ がユニークで、かつ (#) が成り立てば保証される。

J.N.-Shimasaki, PRD 92 (2015) 1, 011501 arXiv:1504.08359 [hep-lat]

$P(x,y;t)$ と $\rho(x)$ の時間発展

c.f.) $\int dxdy\,\mathcal{O}(x+iy)P(x,y;t) = \int dx\,\mathcal{O}(x)\rho(x;t)$ が示したい式

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,y;t) = L^{\top}P(x,y;t) \qquad \langle L\,\mathcal{O}, P\rangle = \langle \mathcal{O}, L^{\top}P\rangle$$

$$L = \left\{\mathrm{Re}v(z) + \frac{\partial}{\partial x}\right\}\frac{\partial}{\partial x} + \mathrm{Im}v(z)\frac{\partial}{\partial y}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x;t) = L_0^{\top}\,\rho(x;t) \qquad \langle L_0\,\mathcal{O}, \rho\rangle = \langle \mathcal{O}, L_0^{\top}\rho\rangle$$

$$L_0 = \left\{v(x) + \frac{\partial}{\partial x}\right\}\frac{\partial}{\partial x}$$

- L は L_0 とは一見ずいぶん違うが、holomorphicな関数に作用させると、

$$L\,\mathcal{O}(x+iy) = \left[\left\{\mathrm{Re}v(z) + \frac{\partial}{\partial x}\right\}\frac{\partial}{\partial x} + \mathrm{Im}v(z)\frac{\partial}{\partial y}\right]\mathcal{O}(x+iy)$$

$$= \left\{v(z) + \frac{\partial}{\partial z}\right\}\frac{\partial}{\partial z}\mathcal{O}(z)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \mapsto \frac{\partial}{\partial z}\,, \qquad \frac{\partial}{\partial y} \mapsto i\frac{\partial}{\partial z}$$

よって、 $\boxed{L\,\mathcal{O}(z)|_{y=0} = L_0\,\mathcal{O}(x)}$

$\int dxdy\,\mathcal{O}(x+iy)P(x,y;t) = \int dx\,\mathcal{O}(x)\rho(x;t)$ の証明

(Aarts, James, Seiler, Stamatescu: Eur. Phys. J. C ('11) 71, 1756)

$$
\begin{aligned}
&\int dxdy\,\mathcal{O}(x+iy)P(x,y;t)\\
&= \int dxdy\,\mathcal{O}(x+iy)(\mathrm{e}^{tL^\top}P)(x,y;0)\\
&= \int dxdy\,\{\mathrm{e}^{tL}\mathcal{O}(x+iy)\}P(x,y;0)\\
&= \int dxdy\,\{\mathrm{e}^{tL_0}\mathcal{O}(x)\}\rho(x;0)\\
&= \int dxdy\,\mathcal{O}(x)(\mathrm{e}^{tL_0^\top}\rho)(x;0)\\
&= \int dxdy\,\mathcal{O}(x)\rho(x;t)
\end{aligned}
$$

$P(x,y;0) = \rho(x;0)\,\delta(y)$

$L\,\mathcal{O}(z)|_{y=0} = L_0\,\mathcal{O}(x)$ for holomorphic function $\mathcal{O}(z)$

ここで使う部分積分が必ずしも正当化できないことを指摘。

一方、この表式が t 無限大でwell-definedであることは、暗黙の仮定。

「時間発展したオブザーバブル」の期待値が定義できるための条件

Nagata-J.N.-Shimasaki,
Phys.Rev. D94 (2016) no.11, 114515, arXiv:1606.07627 [hep-lat]

実は、ランジュバン時間に関する帰納法を用いることにより、
有限の時間に対して定義できていればよい。

$$\langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t+\tau))\rangle_\eta = \int dxdy\{\mathrm{e}^{\tau\tilde{L}}\mathcal{O}(x+iy)\}P(x,y;t)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\tau^n}{n!}\int dxdy\{\tilde{L}^n\mathcal{O}(x+iy)\}P(x,y;t)$$

$$\tilde{L} = \left\{v(z) + \frac{\partial}{\partial z}\right\}\frac{\partial}{\partial z}$$

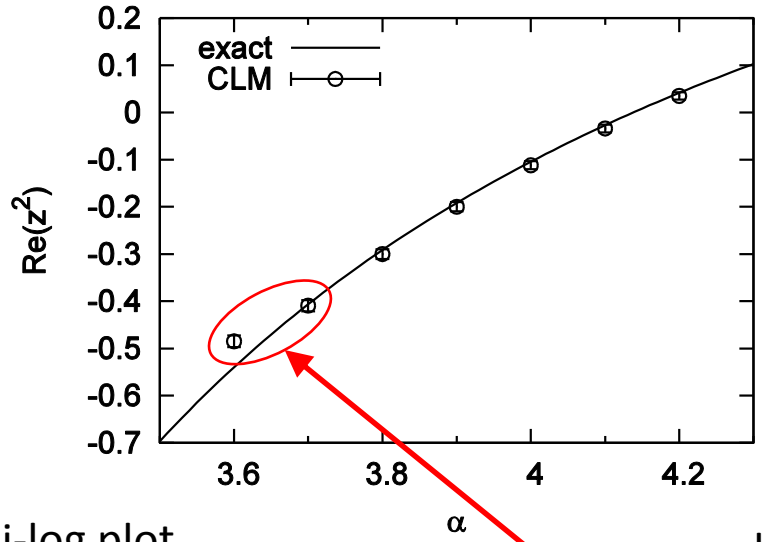
この表式が有限のτ に対して定義できるためには、
上の無限級数が有限の収束半径を持つことが必要。

それには、ドリフト項の確率分布が大きい値に対して指数関数的に抑制されていることが必要。

また、この条件が満たされていれば、従来指摘されていた「部分積分の問題」は起こらないことが言える。

複素ランジュバン法が正当化できるための必要十分条件

正当化できるための条件を簡単な例で検証

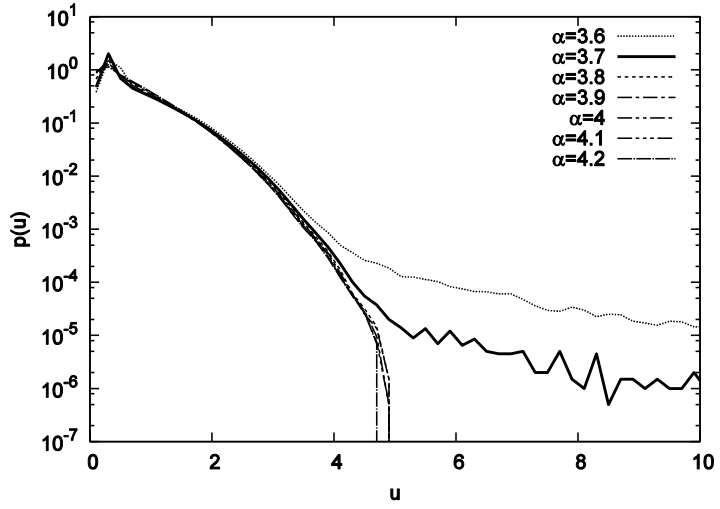


$$Z = \int dx\, w(x)$$

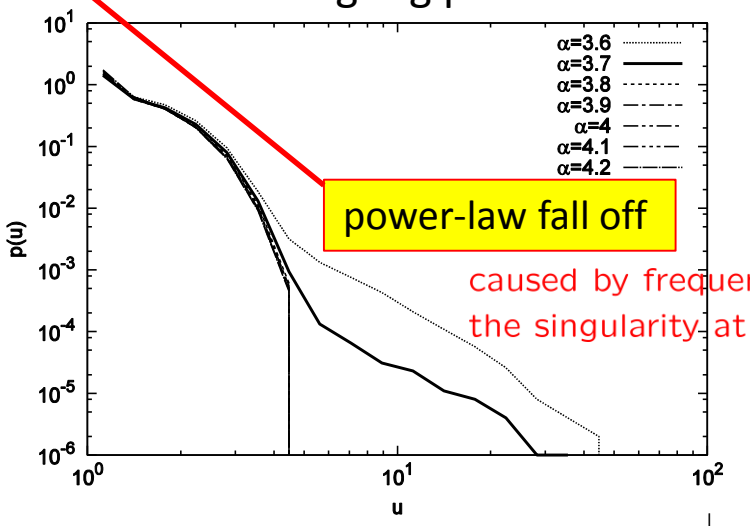
$$w(x) = (x + i\alpha)^p \, \mathrm{e}^{-x^2/2}$$

$$p = 4$$

semi-log plot



log-log plot



power-law fall off

caused by frequent visits to the singularity at $z = -i\alpha$

ドリフト項の大きさの確率分布

$$u \equiv |v(z)| = \left| \frac{p}{z + i\alpha} - z \right|$$

この模型では、$\alpha \lesssim 3.7$ で複素ランジュバン法が破綻する。

３. 有限密度QCDにおける最新結果

有限密度QCDへの応用

$$w(U) = \mathrm{e}^{-S_{\mathrm{plaq}}[U]} \det M[U]$$

$$S_{\mathrm{plaq}}(U) = -\beta \sum_n \sum_{\mu \neq \nu} \mathrm{tr}\,(U_{n\mu} U_{n+\hat{\mu},\nu} U^{-1}_{n+\hat{\nu},\mu} U^{-1}_{n\nu})$$

SU(3)の生成子

$$v_{an\mu}(U) = \frac{1}{w(U)} D_{an\mu} w(U) \qquad D_{an\mu} f(U) = \frac{\partial}{\partial x} f(\mathrm{e}^{ixt_a} U_{n\mu})\Big|_{x=0}$$

力学変数の複素化： $U_{n\mu} \mapsto \mathcal{U}_{n\mu} \in \mathrm{SL}(3,\mathbb{C})$

離散化した複素ランジュバン方程式

$$\mathcal{U}^{(\eta)}_{n\mu}(t+\epsilon) = \exp\left\{ i \sum_a \left(\epsilon\, v_{an\mu}(\mathcal{U}) + \sqrt{\epsilon}\, \eta_{an\mu}(t) \right) t_a \right\} \mathcal{U}^{(\eta)}_{n\mu}(t)$$

ドリフト項が大きくなるのは以下のようなとき。

1） リンク変数 $\mathcal{U}_{n\mu}$ がユニタリー行列から著しくずれたとき。（漂流問題）

「ゲージ・クーリング」を用いて、可能な限り回避する。

2） $M[\mathcal{U}]$ の固有値がゼロに近づくとき。（特異ドリフト問題）

ドリフト項に $\mathrm{tr}\,(M[\mathcal{U}]^{-1} \mathcal{D}_{an\mu} M[\mathcal{U}])$ が現れることに注意。

「ゲージ・クーリング」

Seiler-Sexty-Stamatescu, PLB 723 (2013) 213
arXiv:1211.3709 [hep-lat]]

N個の実変数 x_k から成る系:

$$Z = \int dx\, w(x) = \int \prod_k dx_k\, w(x)$$

$$v_k(x) \equiv \frac{1}{w(x)} \frac{\partial w(x)}{\partial x_k}$$

ドリフト項 $v_k(z)$ とオブザーバブル $\mathcal{O}(z)$ の持つ対称性

$$x'_j = g_{jk} x_k$$

$$z'_j = g_{jk} z_k \qquad g \in \text{complexified Lie group}$$

力学変数の複素化に伴い対称性が高くなる

ランジュバン過程を以下のように変更。

$$\tilde{z}_k^{(\eta)}(t) = g_{kl}\, z_l^{(\eta)}(t)$$

「ゲージ・クーリング」

$$z_k^{(\eta)}(t+\epsilon) = \tilde{z}_k^{(\eta)}(t) + \epsilon\, v_k(\tilde{z}^{(\eta)}(t)) + \sqrt{\epsilon}\, \eta_k(t)$$

「ゲージ・クーリング」の正当化

Nagata-J.N.-Shimasaki, Phys.Rev. D94 (2016) no.11, 114515, arXiv:1606.07627 [hep-lat]

$$\langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t+\epsilon))\rangle_\eta = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\epsilon^n \int dx\, dy \left(:\tilde{L}^n: \mathcal{O}(z) \right)\Big|_{z(g)} P(x,y;t)$$

$$z_k^{(g)} = g_{kl}(x,y)\, z_l$$

ゲージ・クーリングの影響はここだけ

$$\left(:\tilde{L}^n: \mathcal{O}(z) \right)\Big|_{z(g)} = :\tilde{L}^n: \mathcal{O}(z)$$

⇒ 複素化した対称性により効かない。

$\mathcal{O}(z)$ と $\tilde{L} = \left(v_k(z) + \frac{\partial}{\partial z_k} \right) \frac{\partial}{\partial z_k}$ は、複素化した対称性のもとで不変。

但し、P(x,y;t) はゲージ・クーリングの影響で変わることに注意。
ノイズ項が複素化した対称性のもとで共変的に変換しないため。

注) ノイズは実。複素にしても共変的でない。

この自由度を利用して、正当化できるための条件を満たすことができる。

最新の結果

Ito, Matsufuru, J.N., Shimasaki, Tsuchiya, Tsutsui, arXiv:1811.12688 [hep-lat]

- lattice size : $8^3 \times 16$ $\quad a \sim 0.045\text{fm}$
- plaquette action with $\beta = 5.7$
- staggered fermion (4 quark flavors)
- quark chemical pot.: $0 \leq \mu a \leq 0.5$
  corresponding to $0 \leq \mu/T \leq 8$
- quark mass : $ma = 0.01$
- total Langevin time $= 50 \sim 150$
  with stepsize $\epsilon = 10^{-4}$

ドリフト項の大きさの頻度分布

$8^3 \times 16, \quad N_f = 4$

$\beta = 5.7$

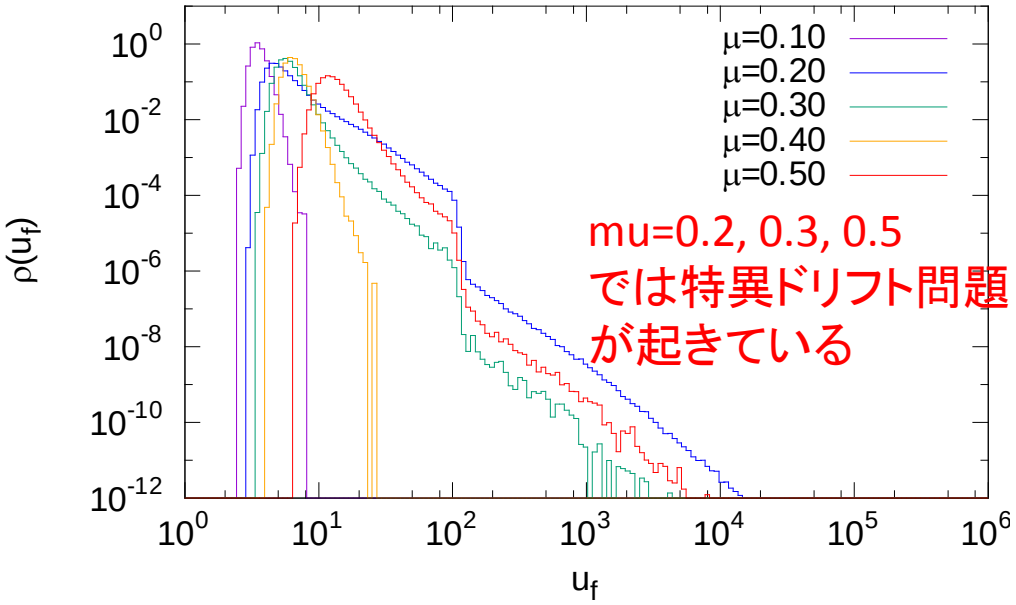
$m = 0.01$

信用できるパラメタ領域

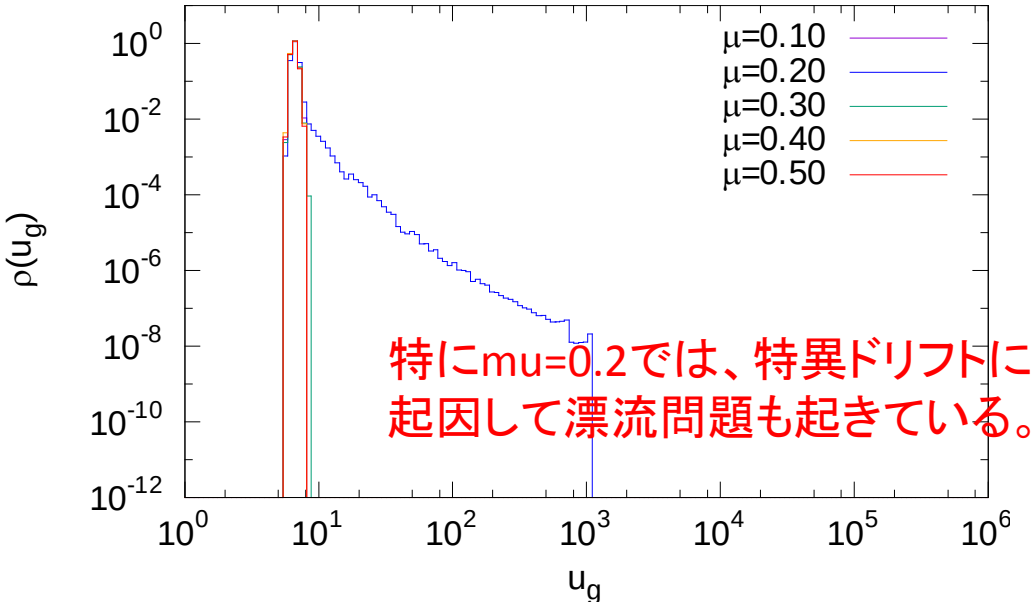
$\mu \leq 0.1$

$0.325 \leq \mu \leq 0.475$

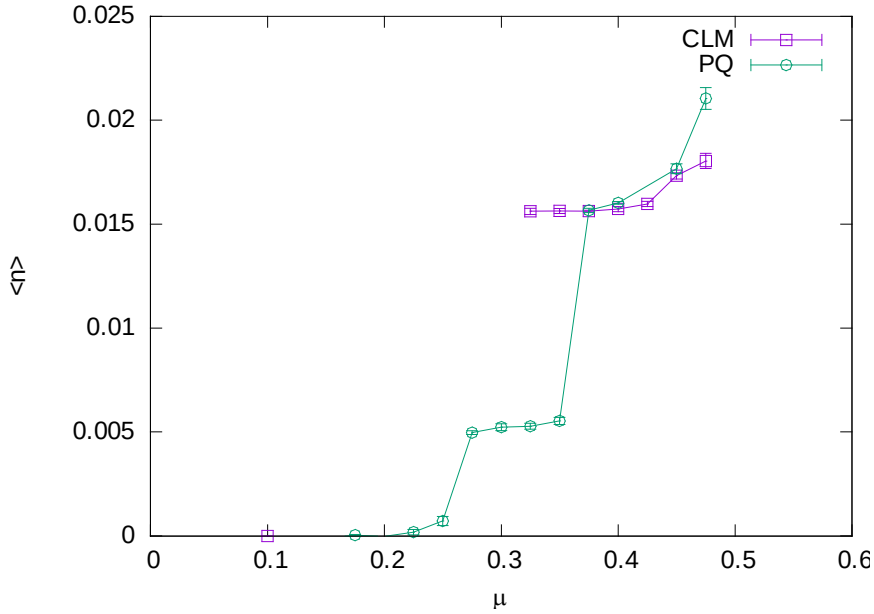
フェルミオンの寄与



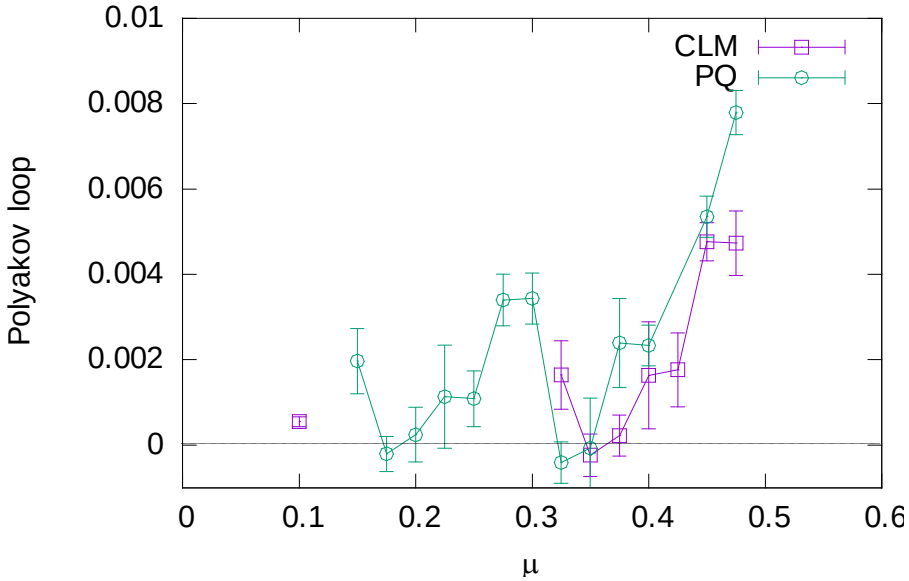
ゲージ場の寄与



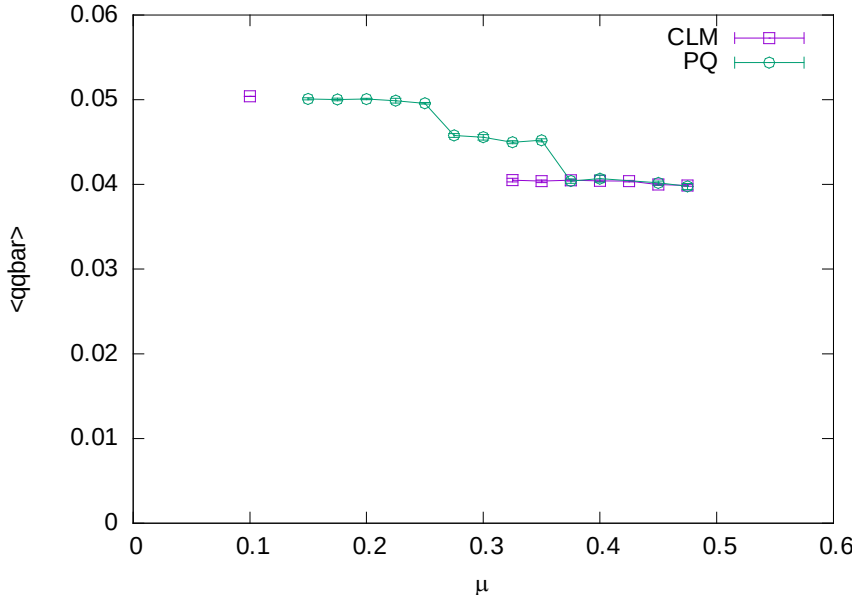
バリオン数密度



ポリャコフ・ループ

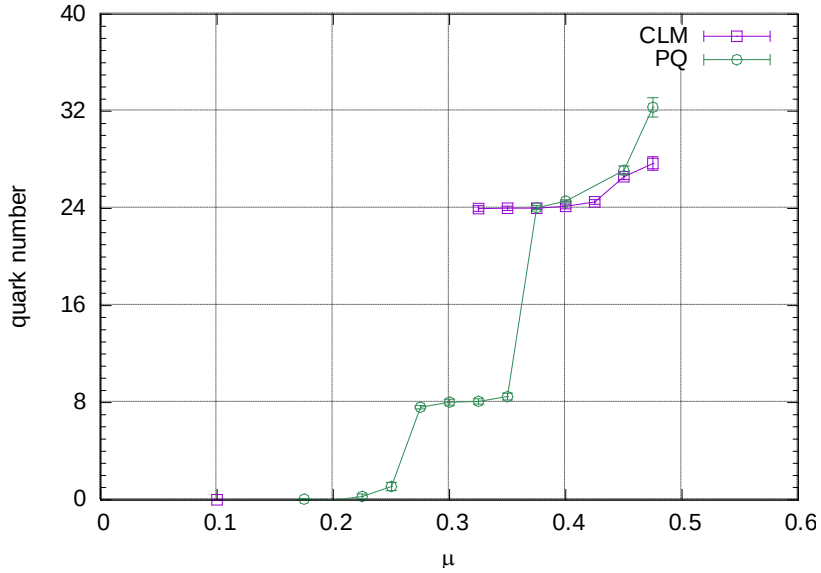


カイラル凝縮

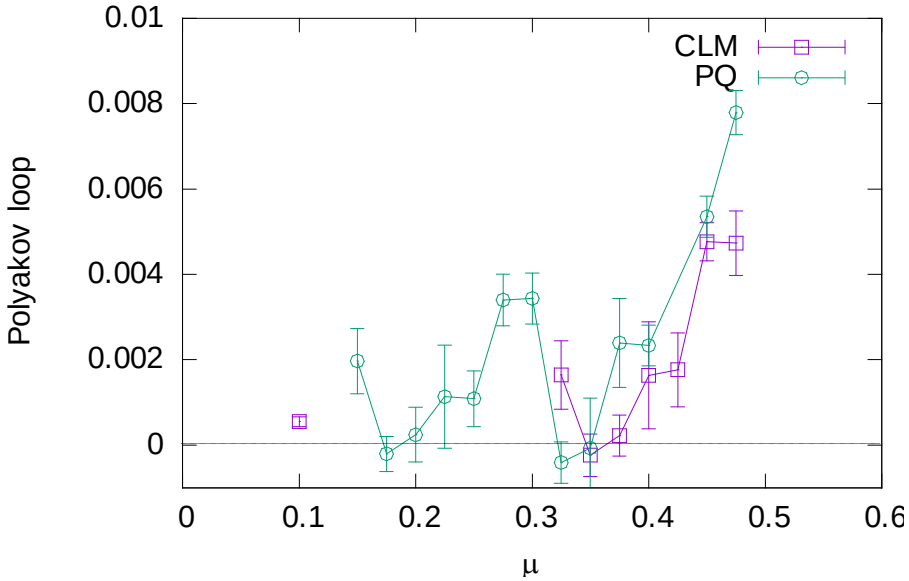


- はっきりしたプラトーが見られる。
  （8個のバリオンが生成）
- プラトーの領域では、ポリャコフ・ループは小さい （“閉じ込め相”）
  空間の体積が小さすぎるため
- フェルミオン行列式の位相を落としたPhase Quenched模型では、小さいmuの領域に別のプラトーも。
  （4個のメソンが生成）

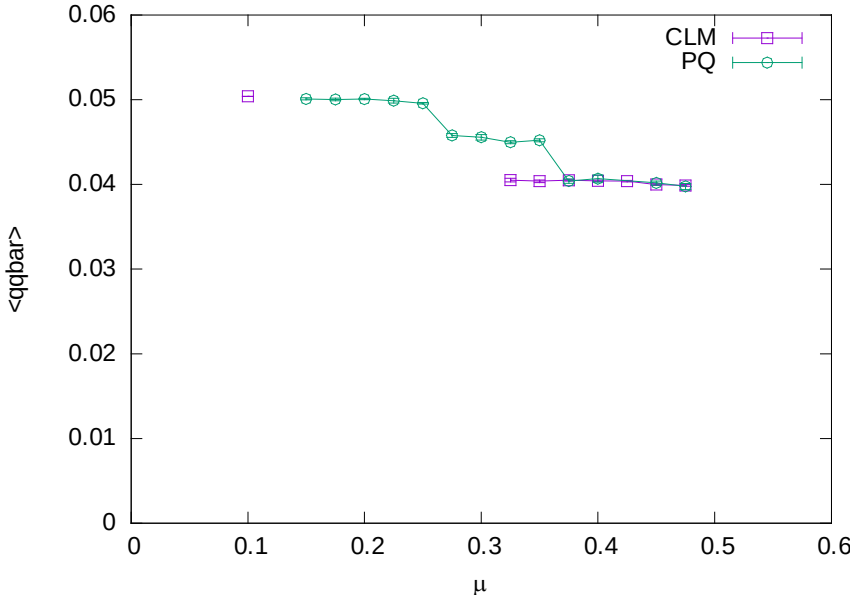
バリオン数密度



ポリャコフ・ループ



カイラル凝縮



- はっきりしたプラトーが見られる。
  （8個のバリオンが生成）
- プラトーの領域では、ポリャコフ・ループは小さい （“閉じ込め相”）
  空間の体積が小さすぎるため
- フェルミオン行列式の位相を落とした Phase Quenched模型では、小さいmuの領域に別のプラトーも。
  （4個のメソンが生成）

４．まとめと展望

まとめ

- 符号問題に対する有望なアプローチ

  Generalized thimble法　　v.s.　複素ランジュバン法

両者に共通する「鍵」：　力学変数を複素化し、holomorphyを利用

Generalized thimble法

ほとんどの系に適用可能だが、符号問題がどうしても少し残るので、
系のサイズ（力学的自由度）が大きくなると、いずれreweightingがうまくいかなくなる。

複素ランジュバン法

正当化できるための条件は「ドリフト項の大きさの頻度分布が指数的に落ちること」
それが満たされるモデル、パラメタ領域では、符号問題が完全に解決

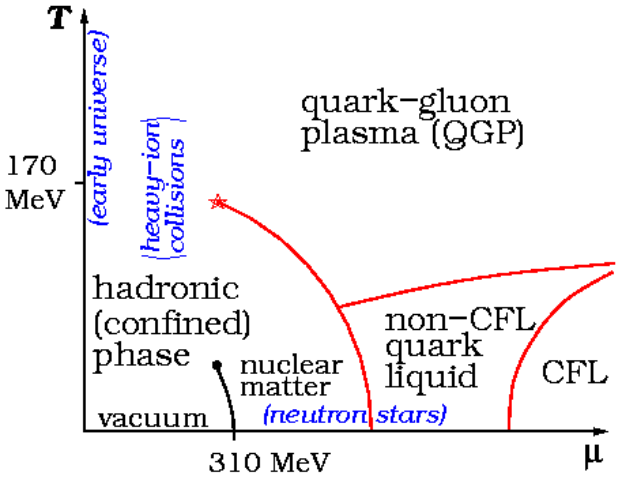
有限密度QCDの研究への応用が進展している。
超弦理論の非摂動的定式化（IKKT行列模型）の研究への応用も。

Ishibashi-Kawai-Kitazawa-Tsuchiya (’97)

K.N Anagnostopoulos, T.Azuma, Y.Ito, J.N., S.K.Papadoudis,
JHEP 1802 (2018) 151, arXiv:1712.07562 [hep-lat]

今後の展望

- QCDの相図の探索
  - 信頼に足る方法に基づく臨界終点の決定
    （重イオン衝突実験において重要。）
  - 大きい μ の領域で現れる核物質やクォーク物質の状態方程式 （天体物理に対するインパクト）



- 超弦理論の非摂動的定式化（IKKT行列模型）から(3+1)次元の膨張宇宙や標準模型が現れるか？

- 以下にあげるものに手が届くようになる可能性あり。

既に論文あり

- Θ 項
- Chern-Simons 項
- 実時間のダイナミクス
- 湯川相互作用
- 超対称理論
- カイラル・フェルミオン
- 強相関電子系　など。

全く新しい理論物理学の世界が開かれようとしているのかもしれない

5. バックアップ・スライド

正当化の議論に関する新しい理解

Ref.) Nagata-J.N.-Shimasaki,
Phys.Rev. D94 (2016) no.11, 114515, arXiv:1606.07627 [hep-lat]

“時間発展したオブザーバブル”の期待値が、十分長い時間に対しては ill-defined になりうる。

$$\langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t+\tau))\rangle_\eta = \int dxdy\{\mathrm{e}^{\tau\tilde{L}}\mathcal{O}(x+iy)\}P(x,y;t)$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\tau^n}{n!}\int dxdy\{\tilde{L}^n\mathcal{O}(x+iy)\}P(x,y;t)$$

この無限級数の収束半径は一般に無限大ではない。

実は、ランジュバン時間に関する帰納法を用いることにより、
有限の時間に対して定義できていればよい。

従来指摘されていた「部分積分の問題」が起こらないための条件よりも僅かに強い条件を与える。

正しい収束のための「必要十分条件」が得られた。実用上も重要。

正しい収束のための条件

- ドリフト項の大きさの確率分布

$$p(u;t) = \int dxdy\, \delta(u - |v(z)|)\, P(x,y;t)$$

- n次のモーメント $\int_0^\infty du\, u^n\, p(u;t)$ が有限であるためには、
  $p(u;t)$ は大きな u に対してベキ則よりも速く落ちることが必要。

- 例えば $p(u;t) \sim \mathrm{e}^{-\kappa u}$ であるならば、

$$\int_0^\infty du\, u^n\, p(u;t) \sim \int_0^\infty du\, u^n\, \mathrm{e}^{-\kappa u} \sim \frac{n!}{\kappa^{n+1}}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\tau^n \int_0^\infty du\, u^n\, p(u;t) \sim \frac{1}{\kappa}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{\tau}{\kappa}\right)^n$$

収束半径は $\tau_{\mathrm{conv}} \sim \kappa$ と評価できる。

必要十分条件

オブザーバブルの有限 t 発展 ⇒ 指数関数的に落ちることが必要

部分積分の有効性 ⇒ ベキ則よりも速く落ちることが必要

「部分積分」を正当化するための条件

$$\frac{d}{dt}\langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t))\rangle_\eta = \int dx\, dy\, \{\tilde{L}\, \mathcal{O}(x+iy)\}\, P(x,y;t) \qquad \cdots\cdots (\flat)$$

が成り立てば、部分積分が正当化できたことになる。

いったんランジュバン時間を離散化して、ステップ・サイズ ϵ を導入

$$\langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t+\epsilon))\rangle_\eta = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\epsilon^n \int dx\, dy\, \{:\tilde{L}^n: \mathcal{O}(x+iy)\}\, P(x,y;t)$$

$$\tilde{L} = \left\{v(z) + \frac{\partial}{\partial z}\right\}\frac{\partial}{\partial z}$$

$$:(f(x)+\partial)^2: = f(x)^2 + 2f(x)\partial + \partial^2$$

この積分の収束性は明らかでない !!!

ϵ 展開が正当化されるには、ドリフト項の確率分布が大きい値に対して、ベキ則よりも強く抑制されていないといけない。

$$\langle \mathcal{O}(z^{(\eta)}(t+\epsilon))\rangle_\eta = \int dx\, dy\, \{(1+\epsilon\tilde{L})\, \mathcal{O}(x+iy)\}\, P(x,y;t) + O(\epsilon^2)$$

$\epsilon \to 0$ の極限をとることにより、($\flat$) が示せる。

鍵となる恒等式の証明

任意の k に対する以下の恒等式を *t* に関する帰納法で証明

$$\int dxdy \left\{ \tilde{L}^k \mathcal{O}(x+iy) \right\} P(x,y;t) = \int dx \left\{ (L_0)^k \mathcal{O}(x) \right\} \rho(x;t)$$

$$\tilde{L} = \left\{ v(z) + \frac{\partial}{\partial z} \right\} \frac{\partial}{\partial z} \ , \qquad L_0 = \left(v(x) + \frac{\partial}{\partial x} \right) \frac{\partial}{\partial x}$$

t=0 では自明に満たされる。

$$P(x,y;0) = \rho(x)\,\delta(y) \ , \qquad \rho(x;0) = \rho(x)$$

ある *t* で満たされているとすると、 $\tau < \tau_{\mathrm{conv}}$ に対して、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \tau^n \int dx\, dy \, \{ \tilde{L}^{n+k} \mathcal{O}(x+iy) \} \, P(x,y;t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \tau^n \int dx \, \{ (L_0)^{n+k} \mathcal{O}(x) \} \, \rho(x;t)$$

$$\begin{aligned} \int dxdy \left\{ \tilde{L}^k \mathcal{O}(x+iy) \right\} P(x,y;t+\tau) &= \int dx \left\{ \mathrm{e}^{\tau L_0} (L_0)^k \mathcal{O}(x) \right\} \rho(x;t) \\ &= \int dx \left\{ (L_0)^k \mathcal{O}(x) \right\} \mathrm{e}^{\tau (L_0)^\top} \rho(x;t) \\ &= \int dx \left\{ (L_0)^k \mathcal{O}(x) \right\} \rho(x;t+\tau) \end{aligned}$$