素粒子物理学とテンソルネットワーク

秋山進一郎[a), b)]

[a)] 東京大学大学院理学系研究科 量子ソフトウェア寄付講座
[b)] 東京大学大学院理学系研究科 知の物理学研究センター

2023.1.30 @ 第2回量子ソフトウェアワークショップ

自己紹介

名前　秋山進一郎

所属

・東京大学大学院理学系研究科 量子ソフトウェア寄付講座（特任助教）

・東京大学大学院理学系研究科 知の物理学研究センター

研究分野　素粒子理論（格子場の理論）

現在の研究テーマ

・テンソルネットワーク法を用いた格子場の理論の研究

→ 特に「テンソル繰り込み群」と呼ばれる手法の応用

・テンソルネットワーク形式に基づく情報圧縮手法の研究・開発

Outline

- イントロダクション：素粒子物理学（特に格子場の理論）の研究動機

- テンソル繰り込み群のアルゴリズムとその応用

- 古典から量子へ、量子から古典へ

イントロダクション

素粒子物理学の目標

✔ **我々の住む世界はどのようにして形作られているのか?**

この世界を形成する最小の構成単位(素粒子)は何か?
それらの間ではどのような力(相互作用)が働くのか?

✔ **Higgs粒子の発見(2012年)と標準模型の完成**

現在知られている相互作用は4種類: 重力/電磁気力/強い力/弱い力
重力以外の相互作用は「標準模型」によって統一的に記述されている.
「標準模型」は場の量子論の言葉で書かれている.

✔ **標準模型を超える物理現象の探索**

標準模型を超える物理現象を探索し, 標準模型を内包した根源的な理論を探究する上で, 標準模型からの予言の検証は重要なアプローチのひとつ.

→ **標準模型(場の量子論)を解きたい**.

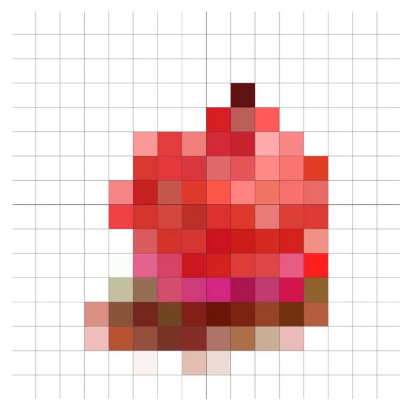
格子場の理論（格子理論）1/2

✔ 標準模型は手で解けない

標準模型は強い力（量子色力学; QCD）を含む.
強い力は短距離では弱く，長距離では強い（漸近的自由性）.
そのため，長距離スケールでのQCD物理現象は非摂動的.

✔ 格子上に場の量子論を定義する

連続時空上ではなく，離散的な時空（格子）上に場の量子論を定義する.
格子理論とその連続極限は摂動論によらない場の量子論の定式化.



格子場の理論（格子理論）2/2

✔ 格子理論を数値的に解く

「場の量子論を解く」＝「場の量子論の経路積分を解く」
格子理論の経路積分は数学的には単なる多重積分に過ぎない.
モンテカルロ法による計算が主力アプローチとなっている（Lattice計算）.

連続理論の経路積分

$$\boxed{\int \prod_{x\in\mathbf{continuum}} \mathrm{d}\phi(x)\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{cont}}[\phi]}}$$

非可算無限大の自由度

⇒

格子理論の経路積分

$$\boxed{\int \prod_{n\in\mathbf{lattice}} \mathrm{d}\phi(n)\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{lat}}[\phi]}}$$

可算無限大の自由度

※ $S_{\mathrm{cont(lat)}}$: 連続（格子）理論の作用

モンテカルロ法の困難

✔ **確率論的手法であるが故のモンテカルロ(MC)法の困難**

MC法が機能するのは，格子理論から作られる重み $\mathrm{e}^{-S_{\mathrm{lat}}}$ に対する確率解釈が可能な場合のみ．負値や複素数値で特徴付く理論のMC計算は困難.

<u>符号問題</u>

自由度の数に対して指数関数的に大きなサンプル数を用意しないと統計誤差を低減できない.

✔ **フェルミオン由来の困難**

フェルミオン(ex. 電子，クォーク)は反可換なGrassmann数($\psi\phi = -\phi\psi$)で記述されるため，直接的な取り扱いは不可.

こうしたMC法に起因した困難を克服する手段の一つとしてテンソルネットワーク法，特にテンソル繰り込み群に注目してみたい.

テンソル繰り込み群のアルゴリズムとその応用

格子理論とテンソルネットワーク

✔ テンソルネットワーク法

目的関数をテンソルの縮約形(テンソルネットワーク)で表現することに基づいた計算手法. **その多くが符号問題と無縁(確率論的手法ではないから).** **フェルミオン系の取り扱いも容易.**

✔ 格子理論の経路積分はテンソルネットワークで表せる

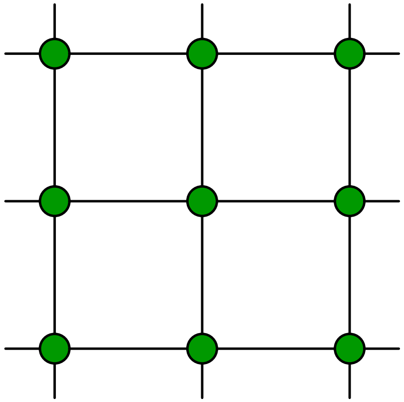
$$\boxed{\int \prod_{n \in \mathrm{lattice}} \mathrm{d}\phi(n) \mathrm{e}^{-S_{\mathrm{lat}}[\phi]}} \Rightarrow \boxed{\sum_{a,b,c,d,\cdots} T_{aiw\cdots} T_{bjx\cdots} T_{cky\cdots} T_{dlz\cdots} \cdots}$$

※ ϕがフェルミオンでも問題なし

Cf. SA-Kadoh, JHEP10(2021)121

4次元超立方格子の場合，各サイトに8階のテンソルが定義され，それらが超立方格子の幾何に従って縮約されたテンソルネットワークとなる.

→ テンソルの縮約を厳密に行うことはできない.



Cf. 2次正方格子の場合

テンソルネットワークを近似的に縮約する

✔ **テンソル繰り込み群（Tensor Renormalization Group; TRG）**

Levin-Nave, PRL99(2007)120601

テンソルの縮約計算を近似的に実行するアルゴリズム.

反復可能な粗視化変換を構成し，これを何度も繰り返すことで無限個のテンソルからなる縮約を計算する.

TRGのアルゴリズムにはヴァリエーションがあるが，**行列の特異値分解**に基づく低ランク近似を応用して粗視化変換を構成する点は共通.
ボンド次元Dが大きいほど近似精度が高くなる.

$$\boxed{A_{ij} = \sum_k U_{ik}\sigma_k V^*_{jk} \approx \sum_{k=1}^{D} U_{ik}\sigma_k V^*_{jk}}$$

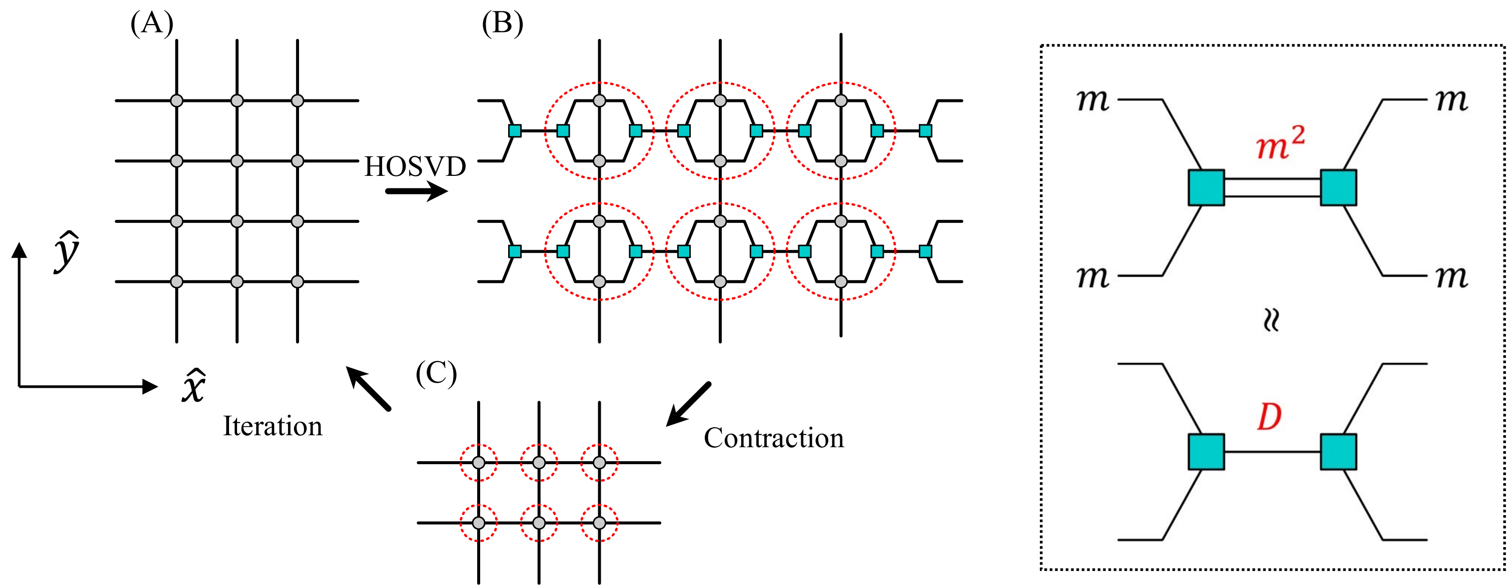
A : $m\times n$行列，U : $m\times m$ユニタリ行列，V : $n\times n$ユニタリ行列

σ: 特異値，$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_{\min(m,n)} \geq 0$とする

***D*: ボンド次元（bond dimension）**

TRGアルゴリズムの一例

Ex. Higher-Order TRG (HOTRG)　Xie+, PRB86(2012)045139



1回の粗視化変換でテンソルの総数が半減する.

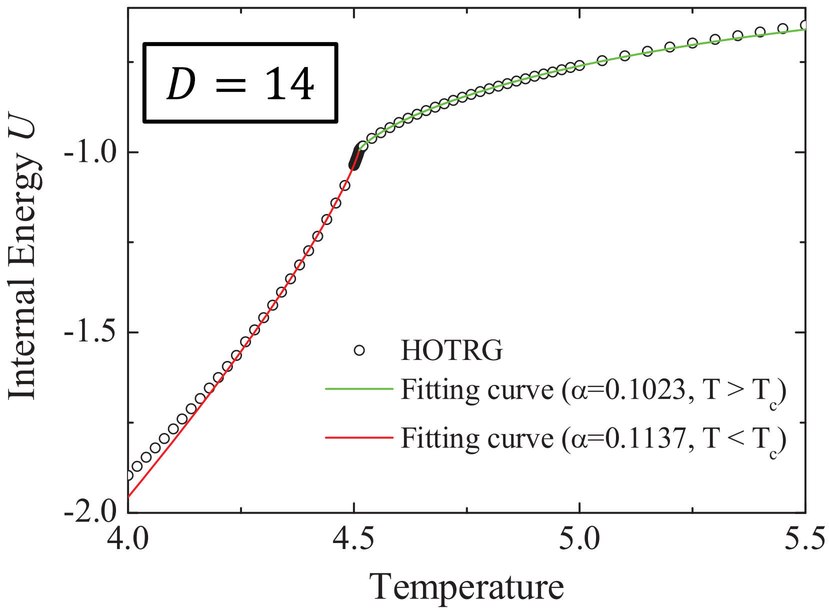
粗視化変換をn回反復すれば，2^n個のテンソルを近似的に縮約したことになる.

→ **無限体積極限での経路積分を評価することができる.**

HOTRGによる3次元Ising模型の計算

Xie+, PRB86(2012)045139

内部エネルギー



臨界点

Method	T_c
HOTRG ($D = 16$, from U)	4.511544
HOTRG ($D = 16$, from M)	4.511546
Monte Carlo[37]	4.511523
Monte Carlo[38]	4.511525
Monte Carlo[39]	4.511516
Monte Carlo[35]	4.511528
Series expansion[40]	4.511536
CTMRG[12]	4.5788
TPVA[13]	4.5704
CTMRG[14]	4.5393
TPVA[16]	4.554
Algebraic variation[41]	4.547

無限体積極限の内部エネルギー，臨界点を高い精度で計算可能.
MC計算の結果ともよく一致している.

4次元格子上でのTRG計算に挑む

✔ **4次元格子上の経路積分 = 8階のテンソルからなるネットワーク**

従来のTRG法では要求される計算コスト（計算時間とメモリコストの両方）が非常に高い.
Ex. HOTRG: 計算時間は$O(D^{15})$, メモリコストは$O(D^{8})$でスケール.

✔ **個別のTRGアルゴリズムに特化した並列計算手法の開発**

テンソル同士の縮約計算を並列化. Yamashita-Sakurai, CPC278(2022)108423

✔ **計算コストがより低いTRGアルゴリズムの構築**

8階テンソルをランクの低いテンソルに分解して粗視化変換を構成.
Cf. **Anisotropic TRG (ATRG): 計算時間は$\boldsymbol{O(D^{9})}$, メモリコストは$\boldsymbol{O(D^{5})}$.**

Adachi-Okubo-Todo, PRB102(2020)054432

“「コスト削減アルゴリズム」＋「並列計算手法」”の組み合わせにより，4次元格子上でのTRG計算が可能になった. SA+, PoS(LATTICE2019)138

高次元格子上でのTRG計算の現状

D: ボンド次元, V: 格子体積, d: 時空間次元

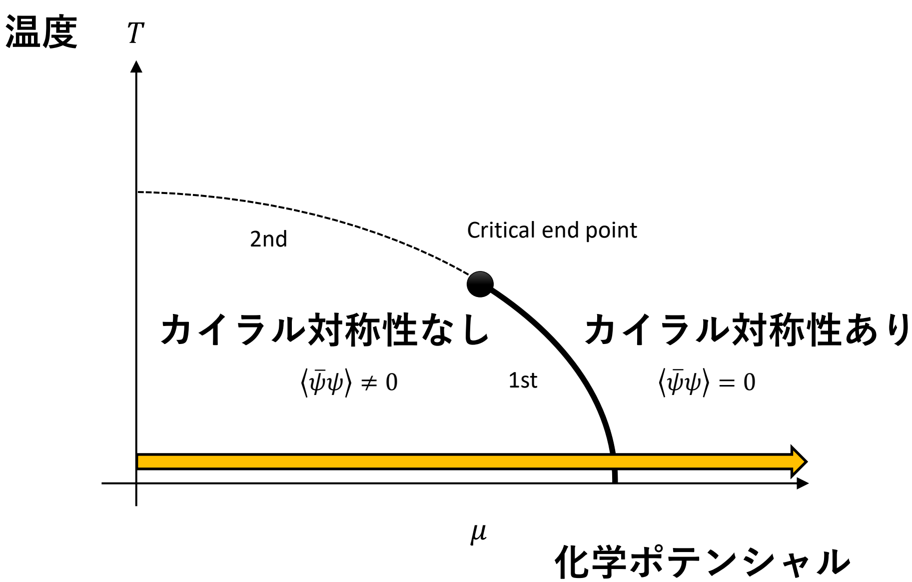
TRGアルゴリズム	計算コスト	3次元系への応用	4次元系への応用
HOTRG Xie+, PRB86(2012)045139	$D^{4d-1}\ln V$	Ising model Xie+, Potts model Wang+, free Wilson fermion Sakai+, $\mathbb{Z}_2$ gauge theory Dittirich+, Kuramashi-Yoshimura	Ising model SA+, Staggered fermion w/strongly coupled U(N) Milde+
Anisotropic TRG (ATRG) Adachi-Okubo-Todo, PRB102(2020)054432	$D^{2d+1}\ln V$	Ising model Adachi+, SU(2) gauge Kuwahara-Tsuchiya, Real ϕ^4 theory SA+, Hubbard model SA-Kuramashi $\mathbb{Z}_2$ gauge-Higgs SA-Kuramashi	Complex ϕ^4 theory SA+, NJL model SA+, Real ϕ^4 theory SA+ $\mathbb{Z}_2$ gauge-Higgs SA-Kuramashi
Triad RG Kadoh-Nakayama, arXiv:1912.02414	$D^{d+3}\ln V$	Ising model Kadoh-Nakayama, O(2) model Bloch+, $\mathbb{Z}_3$ (extended) clock model Bloch+ Potts models Raghav G. Jha	-

4次元のスピン系，フェルミオン系，ボソン系，格子ゲージ理論で実証計算が完了

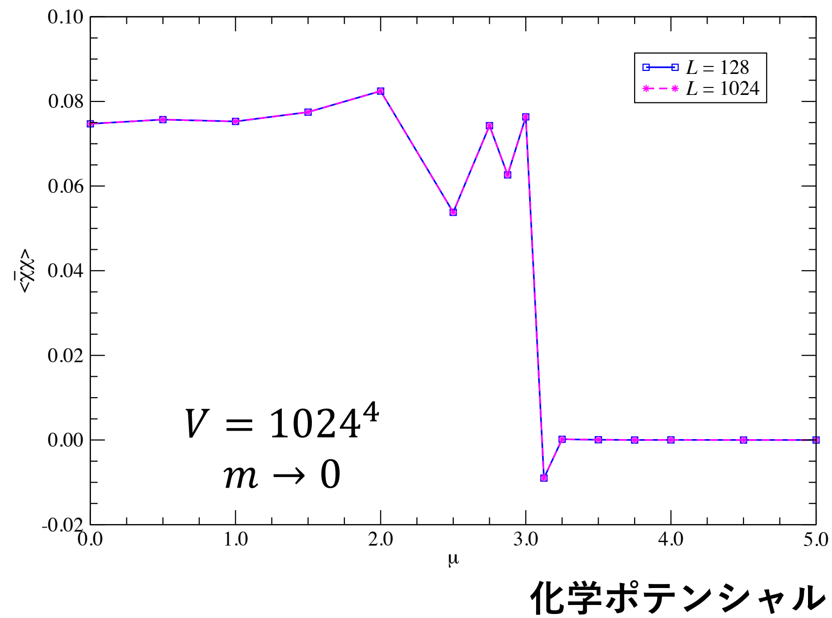
4次元NJL模型の低温・高密度領域でのカイラル対称性の回復

SA-Kuramashi-Yamashita-Yoshimura, JHEP01(2021)121

予想されている相図



カイラル凝縮

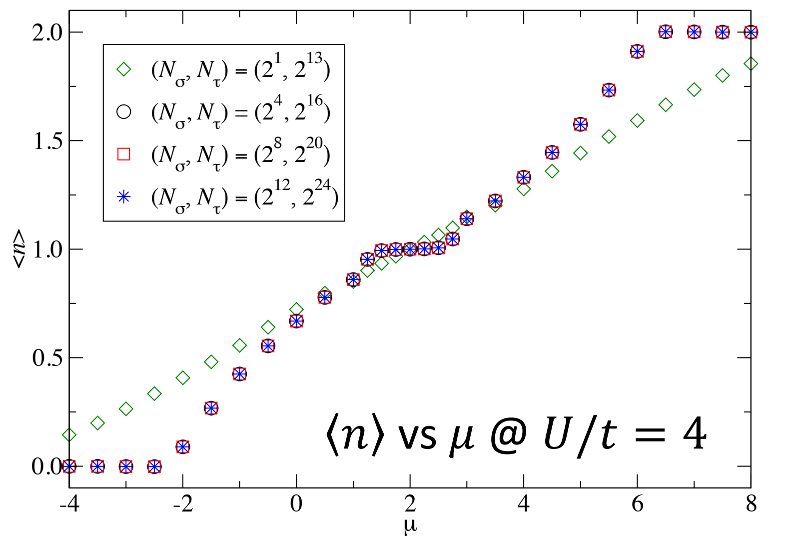


Nambu-Jona-Lasinio（NJL）模型は量子色力学（QCD）の有効理論.
低温・高密度領域ではカイラル対称性が回復すると考えられているが，符号問題によってMC計算が極めて困難.
TRG法によって，カイラル相転移の秩序変数であるカイラル凝縮を計算.
低温・高密度領域におけるカイラル対称性の破れを数値的に実証.

有限密度Hubbard模型の金属・絶縁体転移

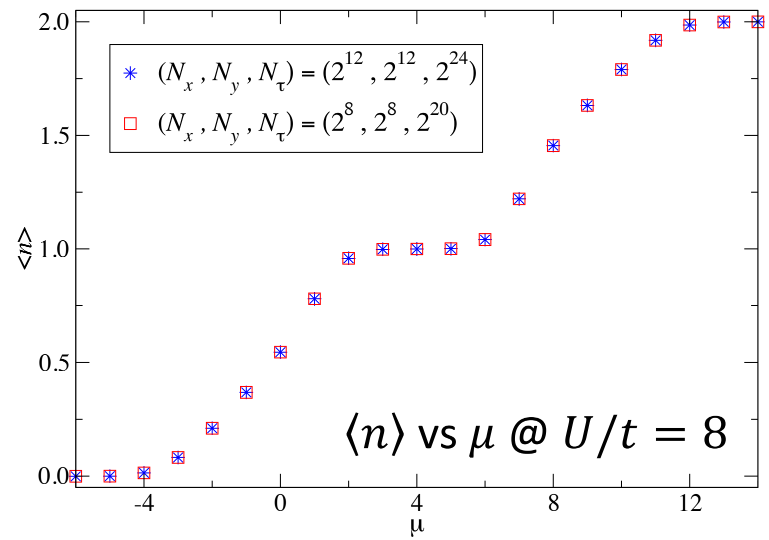
SA-Kuramashi, PRD104(2021)014504,
SA-Kuramashi-Yamashita, PTEP2022(2022)023I01

(1+1)次元モデルの電子数密度



化学ポテンシャル

(2+1)次元モデルの電子数密度

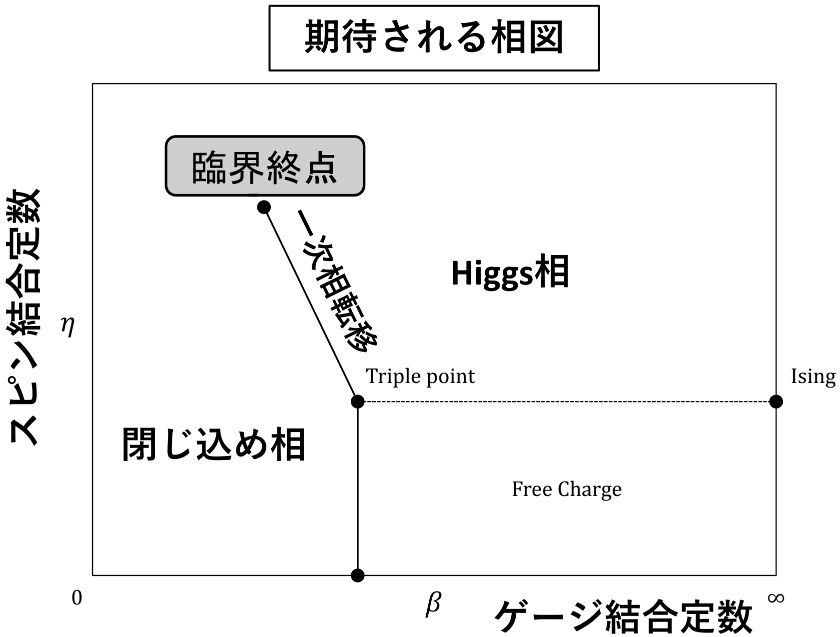


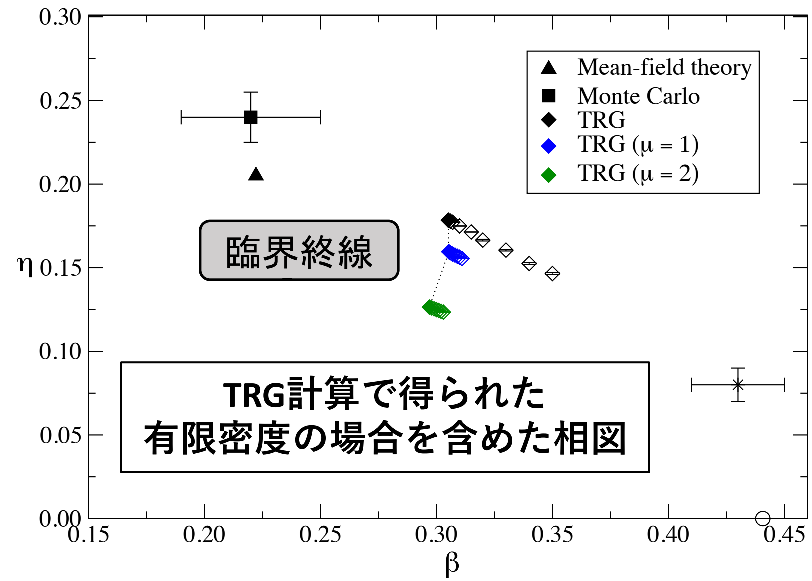
化学ポテンシャル

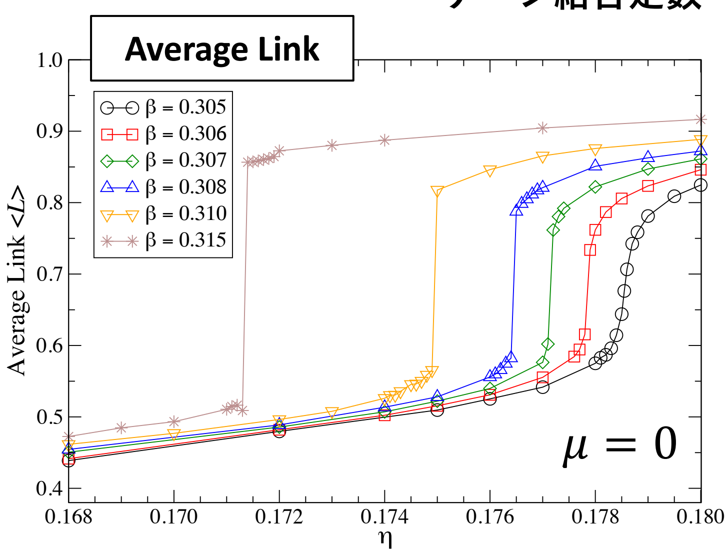
Hubbard模型の経路積分表示はNJL模型の経路積分と類似の構造を有する.
空間1次元および空間2次元の場合についてTRG計算を実行し，符号問題が発生するパラメタ領域上で金属・絶縁体転移を確認.
特に，空間1次元の場合は，厳密な相転移点（$\mu_c = 2.643 \ldots$）とTRG計算の結果（$\mu_c = 2.642(05)(13)$）の一致も確認.

(3+1)次元有限密度Z_2ゲージ・Higgs模型における臨界終点の決定

SA-Kuramashi, JHEP05(2022)102







Average linkの振る舞い（左図）から臨界終点を決定．有限密度の場合についても臨界終点を決定．

本研究は4次元格子ゲージ理論に対する世界初のTRG計算．
TRG法によって有限密度の格子ゲージ理論の臨界終点を決定できることを示した．

古典から量子へ、量子から古典へ

量子計算と古典計算の互恵関係 1/2

✔ **4次元非可換ゲージ理論の量子計算に向けて**

従来のMC計算ではゲージ理論の取り扱いは容易.

一方，量子計算では連続的な自由度は離散化しないと取り扱えないため，高次元のゲージ理論への応用には工夫が必要．この事情はTRG計算でも同様.

→ **TRG計算を通じて，ゲージ理論の量子計算に関する知見が得られる可能性がある．その逆も期待できる.**

量子計算と古典計算の互恵関係 2/2

✔ **将来の量子計算のベンチマークとして**

TRGに限らず，テンソルネットワーク法には符号問題がない．

経路積分形式ではなく，演算子形式の格子理論をテンソルネットワーク法で調べることもできる． Bañuls-Cichy, Rep. Prog. Phys. 83(2020)024401
ただし，高次元系への応用に関しては，現状では経路積分形式に基づくTRG計算の方が多い．

Ex. (3+1)次元の有限密度量子電磁気学（QED）への応用

Tree Tensor Networkによる計算（$L \leq 8$） Magnifico+, Nature Commun. 12(2021)1

テンソルネットワーク法による4次元格子理論の古典計算は現在も発展中．

量子計算と親和性の高いテンソルネットワーク計算に対するベンチマーク，相互検証のツールとして，TRGが役に立つのではないか．
→ 長期的には将来の量子計算のベンチマークへ．

まとめ

- ✔ **テンソルネットワーク法には符号問題がない**

  従来のMC法では取り扱えない格子理論の数値計算が可能.
  特に，TRGを使うことで高次元系（4次元系）の無限体積計算も可能.

- ✔ **4次元格子理論に対するTRG計算が進展している**

  TRGの並列計算手法とコスト削減アルゴリズムの融合により，素粒子物理学の4次元格子理論への応用が飛躍的に進展.
  従来のMC法では符号問題によって探索できないパラメタ領域をも調べられるようになった.

- ✔ **TRG計算の展望**

  さらに複雑な内部自由度を有する4次元ゲージ理論のTRG計算を目指す.
  より量子計算と親和性の高いテンソルネットワーク計算に対するベンチマーク，相互検証のツールとして，TRGからの知見が役に立つのではないか.