A novel approach for computing gradients of physical observables

arXiv:2305.07932

Simone Bacchio

概要:
格子QCDで作用パラメータ微分係数を計算する新しい手法の提案

結論:
テスト計算で提案方法が正しいこと、
統計精度が100倍以上改善(する場合がある)ことを確認

QCD作用に含まれるパラメータ微分

例えば、未知粒子-核子散乱断面積で重要となるσ項

$$\sigma = m_q \frac{\partial M_N}{\partial m_q} \sim \begin{cases} 40\ \text{MeV} & \text{(格子QCD)} \\ 60\ \text{MeV} & \text{(現象論)} \end{cases}$$

どちらが正しいか未解決 c.f.) PRL127:242002(2021)

高精度計算ができるとうれしい

格子QCDで作用に含まれるパラメータの微分係数計算方法

1. 複数のパラメータで計算した結果から微分係数を数値的に求める
2. パラメータ１点の計算から微分係数を直接計算

新しい計算方法の提案

格子QCDでのパラメータ微分直接計算

作用 S と演算子 O: パラメータ θ に依存

期待値 $\langle O \rangle$:

$$\langle O_\theta \rangle_\theta = \frac{1}{Z_\theta} \int D[U] O_\theta e^{-S_\theta}$$

$$\langle O_{\theta+d\theta} \rangle_{\theta+d\theta} = \frac{1}{Z_{\theta+d\theta}} \int D[U] O_{\theta+d\theta} e^{-S_{\theta+d\theta}} \qquad \left(S_{\theta+d\theta} \approx S_\theta + \frac{\partial S}{\partial \theta} d\theta \right)$$

$$\approx \frac{1}{\left\langle e^{-(\partial S/\partial\theta)d\theta} \right\rangle_\theta} \left\langle \left(O_\theta + \frac{\partial O}{\partial \theta} d\theta \right) e^{-(\partial S/\partial\theta)d\theta} \right\rangle_\theta$$

$$\approx \langle O_\theta \rangle_\theta + d\theta \left(\left\langle \frac{\partial O}{\partial \theta} \right\rangle_\theta - \left\langle O_\theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \right\rangle_\theta + \langle O_\theta \rangle_\theta \left\langle \frac{\partial S}{\partial \theta} \right\rangle_\theta \right)$$

$$\frac{d \langle O \rangle}{d\theta} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial \theta} \right\rangle_\theta - \left\langle O_\theta \frac{\partial S}{\partial \theta} \right\rangle_\theta + \langle O_\theta \rangle_\theta \left\langle \frac{\partial S}{\partial \theta} \right\rangle_\theta$$

格子QCD計算の困難:

期待値 $\langle \cdot \rangle$ はモンテカルロ計算 $\longrightarrow$ 統計誤差不可避

$\langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$ は大きな統計誤差の原因になる (ことが多い)

このような寄与のない (小さくする) 計算方法が望ましい

提案方法

新しい方法の基本方針 (の意訳)　　以降 θ を省く: $\langle O_\theta \rangle_\theta = \langle O \rangle$

1. 期待値を変えない (ゲージ場に依存した) 変換 f (パラメータ $d\theta$)

   $$\langle O \rangle^{f_{d\theta}} = \langle O \rangle$$

   期待値を変えないので微分係数はゼロ

   $$\frac{d\langle O \rangle^f}{d\theta} = 0:$$ ゲージ場に依存しているので統計的に揺らぐ

2. 微分係数にゼロを加える　$$\frac{d\langle O \rangle}{d\theta} \to \frac{d\langle O \rangle}{d\theta} + \frac{d\langle O \rangle^f}{d\theta}$$

   中心値は変わらないが統計誤差は変わる

3. うまい変換 f を選び、$\langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$ をなくす (小さくする)

提案方法

変換 f として Gradient Flow [Lüscher,CMP293:899(2010)]

U の smearing，エネルギー運動量テンソル計算などに応用

Flow 時間 $t(=\theta)$ をパラメータとしたゲージ場の変換: $\dot{U}_t = -\partial F(U_t)U_t$

$$\frac{d\langle O\rangle^f}{d\theta} = -\langle(\partial O, \partial F)\rangle + \left\langle O(-\partial^2 F + (\partial S, \partial F))\right\rangle - \langle O\rangle\langle -\partial^2 F + (\partial S, \partial F)\rangle$$

演算子　Jacobian　作用

$$\partial G = \partial^a_{x,\mu} G(U) = \frac{d}{d\rho} G(U_\rho)\bigg|_{\rho=0}, \quad U_\rho(y,\nu) = \begin{cases} e^{\rho T^a} U(x,\mu) & \text{for } (x,\mu) = (y,\nu) \\ U(x,\mu) & \text{for } (x,\mu) \neq (y,\nu) \end{cases}$$

T^a: SU(3) 生成子，$B_\mu(x) = \sum_a B^a_\mu(x) T^a$，$(A,B) = \sum_{x,\mu,a} A^a_\mu(x) B^a_\mu(x)$

微分係数に (-1) 倍を加える（F の定義で符号は吸収できる）

$$\frac{d\langle O\rangle}{d\theta} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial\theta}\right\rangle - \left\langle O\frac{\partial S}{\partial\theta}\right\rangle + \langle O\rangle\left\langle\frac{\partial S}{\partial\theta}\right\rangle - \frac{d\langle O\rangle^f}{d\theta}$$

$$= \left\langle \frac{\partial O}{\partial\theta}\right\rangle + \langle(\partial O, \partial F)\rangle - \langle OC\rangle + \langle O\rangle\langle C\rangle$$

$$C = -\partial^2 F + (\partial S, \partial F) + \frac{\partial S}{\partial\theta}$$

提案方法

$$\frac{d\langle O\rangle}{d\theta} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial\theta} \right\rangle + \langle(\partial O, \partial F)\rangle - \langle OC\rangle + \langle O\rangle\langle C\rangle$$

$$C = -\partial^2 F + (\partial S, \partial F) + \frac{\partial S}{\partial\theta}$$

うまい変換 F として $C=$ 定数 (ゲージ場に依らない) になるものを選ぶと

$$\frac{d\langle O\rangle}{d\theta} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial\theta} \right\rangle + \langle(\partial O, \partial F)\rangle$$

$\langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$ の必要無し

$C \neq$ 定数の場合でも C を加えた式で微分係数を計算可能

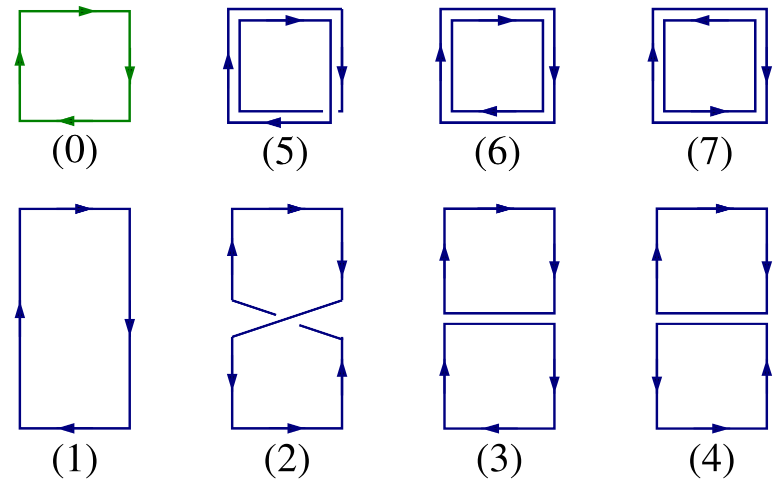
$C \sim$ 定数の F では、ある程度の統計誤差改善になる

$\rightarrow$ テスト計算

テスト計算

quench QCD $L^3 \times T = 16^3 \times 16$, $\beta = 0$–6, 各β 10,000配位

Wilson gauge action $S = -\frac{\beta}{6}\mathcal{W}_0$



Wilson loopのβ微分係数: $O = \mathcal{W}_i$ ($i = 0$–7)

$$\mathcal{W}_i = \sum_{C \in \Gamma_i} \mathrm{Tr}\,[U(C)] \qquad \text{for } i = 0,1,2,5$$

$$\mathcal{W}_i = \sum_{C, C' \in \Gamma_i} \mathrm{Tr}\,[U(C)]\,\mathrm{Tr}\left[U(C')\right] \qquad \text{for } i = 3,4,6,7$$

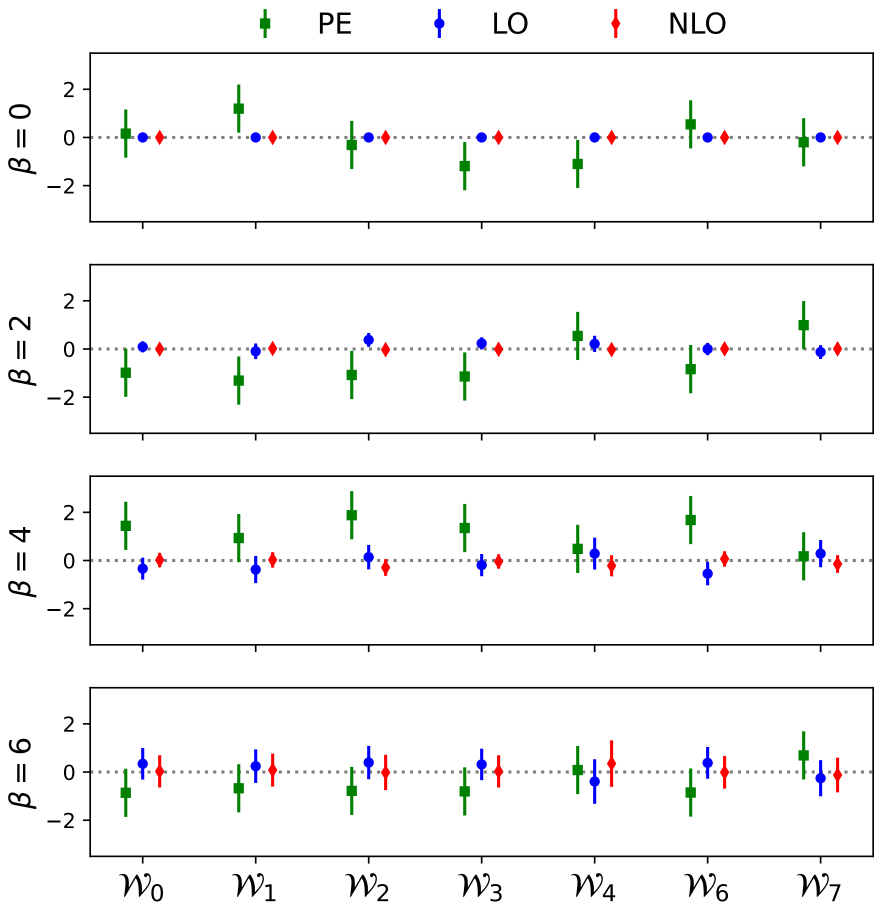
$C = -\partial^2 F - \frac{\beta}{6}(\partial\mathcal{W}_0, \partial F) - \frac{1}{6}\mathcal{W}_0 = 0$ となるF [Lüscher,CMP293:899(2010)]

$$F = \frac{1}{6}\sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{\beta}{6}\right)^k F^{(k)}, \quad F^{(0)} = \frac{3}{16}\mathcal{W}_0, \quad -\partial^2 F^{(k)} = \left(\partial\mathcal{W}_0, \partial F^{(k-1)}\right) \quad (k>0)$$

今回は$F|_{k=0}$(LO)と$F|_{k\leq 1}$(NLO)を考える

$$\beta = 0 \text{ では } C = 0 \text{ が満たされる} \qquad \because -\partial^2 F^{(0)} = \mathcal{W}_0$$

結果



PE: 従来の方法, LO,NLO: 新提案方法

3つの $\dfrac{d\langle \mathcal{W}_i \rangle}{d\beta}$ 結果の平均値からのずれ
(PEの誤差が一定になるように規格化)

- 各 $\beta, \mathcal{W}_i$ で良い一致
  $\rightarrow$ 提案方法が正しい確認
- $\beta < 6$ ではPEより誤差改善
  $C \neq$ 定数 $(\beta \neq 0)$ でも誤差改善
  $\delta_{\mathrm{NLO}} < \delta_{\mathrm{LO}} \quad (0 < \beta < 6)$
  $C =$ 定数 $(\beta = 0)$ では100倍以上改善
- $\beta = 6$ ではPEとほぼ同じ誤差

C と $\partial S/\partial\beta$ の分散の比 $\sigma_C/\sigma_{\partial S/\partial\beta}$[%]

β	0	1	2	3	4	5	6
LO	0.00	15.0	29.2	47.1	65.6	75.6	102.0
NLO	0.00	2.4	9.7	22.7	42.3	62.2	100.7

PEとLO,NLOの誤差の関係と強い相関 $\rightarrow$ 誤差の改善度を見る指標になる

まとめ

Gradinet Flowを使った新しい微分係数計算方法の提案

$$\frac{d\langle O\rangle}{d\theta} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial \theta} \right\rangle + \langle(\partial O, \partial F)\rangle - \langle OC\rangle + \langle O\rangle\langle C\rangle$$

$$C = -\partial^2 F + (\partial S, \partial F) + \frac{\partial S}{\partial \theta}$$

$C=$定数となるうまい変換Fを選ぶと

$$\frac{d\langle O\rangle}{d\theta} = \left\langle \frac{\partial O}{\partial \theta} \right\rangle + \langle(\partial O, \partial F)\rangle$$

- Wilson loopのβ微分係数計算で提案方法が正しいことを確認
- $C=$定数では100倍以上統計誤差の改善
- $C\sim$定数になるようなFでも、ある程度の統計誤差改善になる

うまいFが見つけられれば、誤差を改善できる