Sparse modeling approach to extract spectral functions form Euclidean-time correlators of lattice QCD

大野浩史 (筑波大学計算科学研究センター)
共同研究者: 髙橋純一 (気象大学校)、富谷昭夫 (大阪国際工科専門職大学)

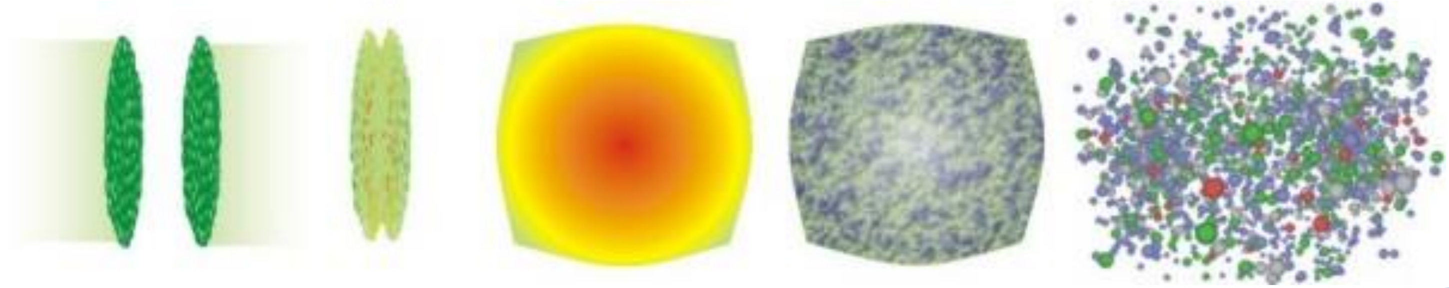
宇宙史研究センター2023年度
第2回構成員会議・成果報告&交流会
2023年12月18日

目次

- 背景
- スパースモデリング
- スペクトル関数の計算への応用
  - Mock data テスト
  - Lattice QCD data
- まとめと今後の展望

QGPとクォーコニウム

- クォーコニウム (η_c, J/Ψ, χ_c, η_b, Υ, χ_b …)
  - 重いクォーク (c, b クォーク) とその反クォークの束縛状態
  - 重イオン衝突の早い段階で生成 → QGPの生成からハドロンへの再凝縮に至るすべての過程を経験



© S.A. Bass

重イオン衝突

$q\bar{q}$

QGP

- 非閉じ込め
- 色荷に対するデバイ遮蔽効果

→ クォーコニウムが消失

T. Matsui and H. Satz (1986)

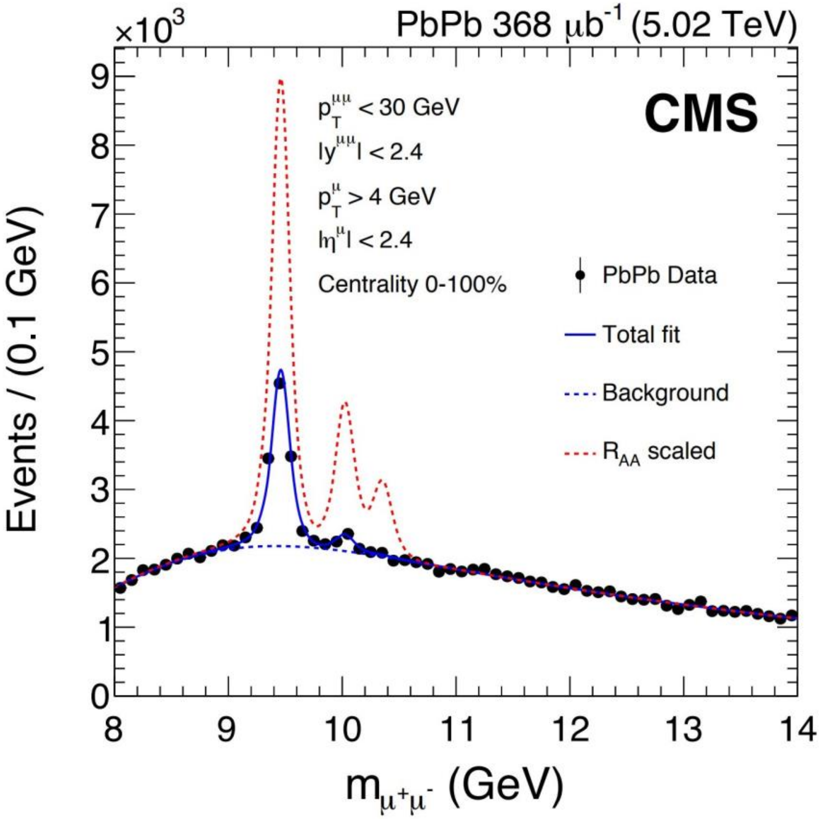
$q\bar{u}$

$\bar{q}u$

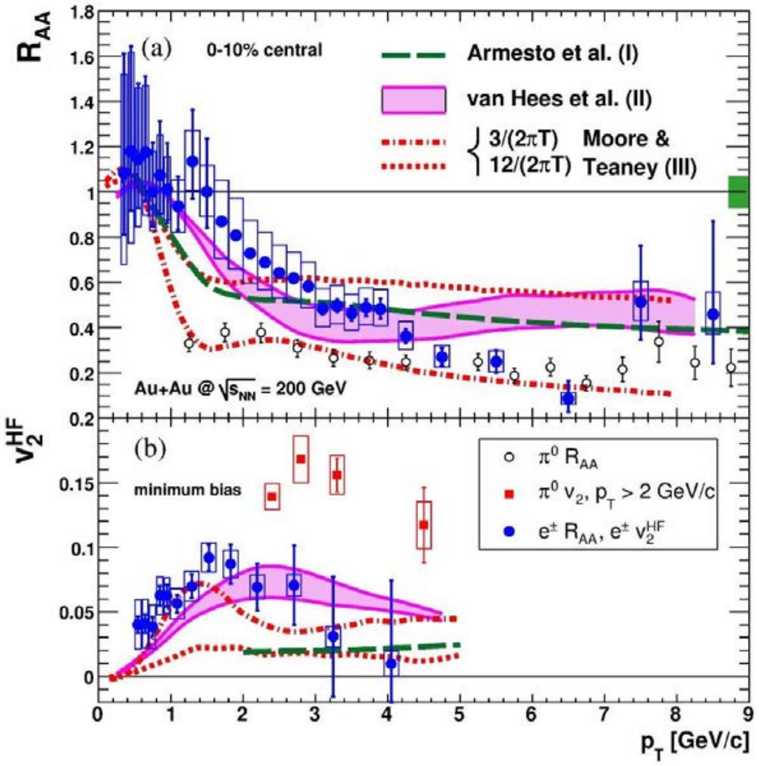
…

– **重イオン衝突実験において生成される QGP の性質を調べる上で重要な粒子**

高温媒質中のクォーコニウム及び重クォークの性質の理解



CMS Collaboration@QM2018



PHENIX Collaboration, PRL 98 (2007) 172301

クォーコニウムの種類ごとに異なる束縛エネルギー
→ **異なる消失温度 → QGP温度計**

重クォークの流体力学的性質 (輸送係数)
→ **流体モデルに対する重要なインプット**

相関関数とスペクトル関数

クォーコニウム相関関数 ← 格子QCD計算で計算可能

$$G_H(\tau,\vec{p}) \equiv \int d^3x e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} \langle J_H(\tau,\vec{x}) J_H(0,\vec{0}) \rangle$$

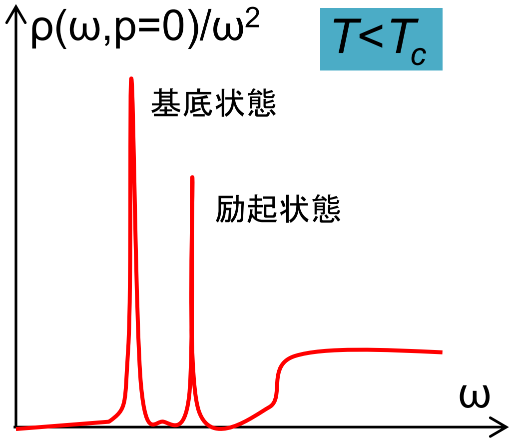
$$= \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \boxed{\rho_H(\omega,\vec{p})} K(\omega,\tau)$$

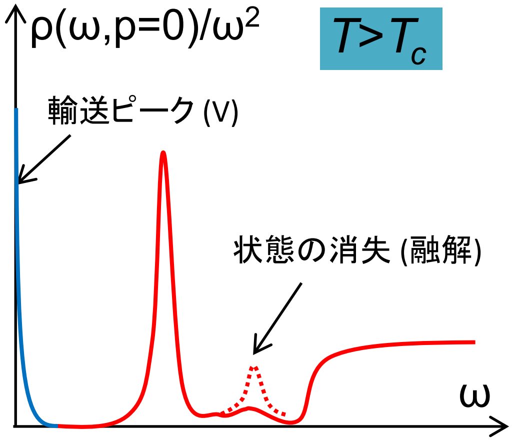
$$J_H(\tau,\vec{x}) \equiv \bar{\psi}(\tau,\vec{x}) \Gamma_H \psi(\tau,\vec{x})$$

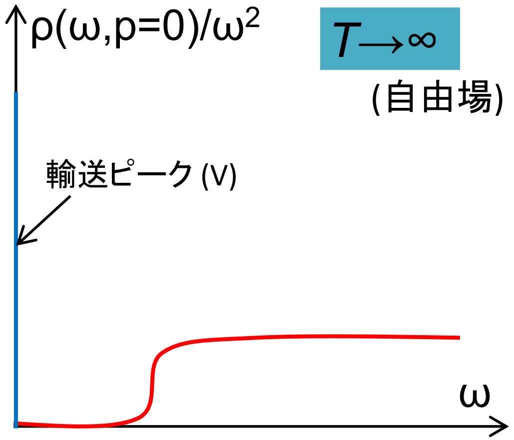
$$K(\omega,\tau) \equiv \frac{\cosh[\omega(\tau - 1/2T)]}{\sinh(\omega/2T)}$$

スペクトル関数 → 高温媒質中のクォーコニウムの情報を含む

T_c: 相転移温度







重クォーク拡散係数

$$D = \frac{1}{6\chi_{00}} \lim_{\omega\to 0} \sum_{i=1}^{3} \frac{\rho^V_{ii}(\omega,\mathbf{0})}{\omega}$$

ρ^V_{ii} : ベクタースペクトル関数

χ_{00} : クォーク数感受率

スペクトル関数計算の困難

- 典型的な ill-posed 問題
  - 相関関数からスペクトル関数への逆問題を解く必要がある
  - （格子QCDで得られる相関関数のデータ点数）

    << （スペクトル関数を表現するために必要な自由度の数）
  - 単純な χ^2 フィットはうまくいかない
  - 何かしら事前にわかっている情報が必要
    - 摂動論等理論的考察に基づくモデリング H.-T. Ding, O. Kaczmarek, A.-L. Kurse, HO, H. Sandmeyer and H.-T. Shu, Phys. Rev. D **104** (2021) 11, 114508
    - 最大エントロピー法 (MEM) M. Asakawa, T. Hatsuda and Y. Nakahara, Prog. Part. Nucl. Phys. 46 (2001) 459-508
    - Stochastic法 H.-T. Ding, O. Kaczmarek, Swagato Mukherjee, HO and H.-T. Shu, PRD 97 (2018) 9, 094503
    - Backus Gilbert法 B. B. Brandt, A. Francis, H. B. Meyer, and D. Robaina, Phys. Rev. D 92, 094510 (2015)
    - スパースモデリング E. Itou, Y. Nagai, J. High Energ. Phys. 2020, 7 (2020)
    - …

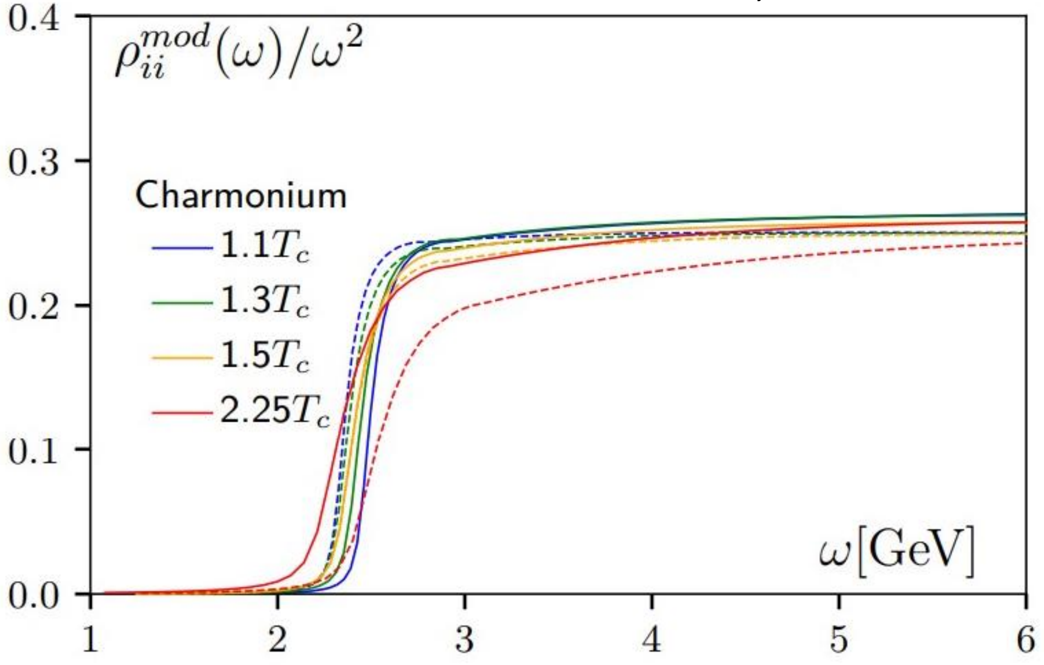
様々な手法を比較して系統誤差を見積もることが必要！

摂動論等理論的考察に基づくモデリング

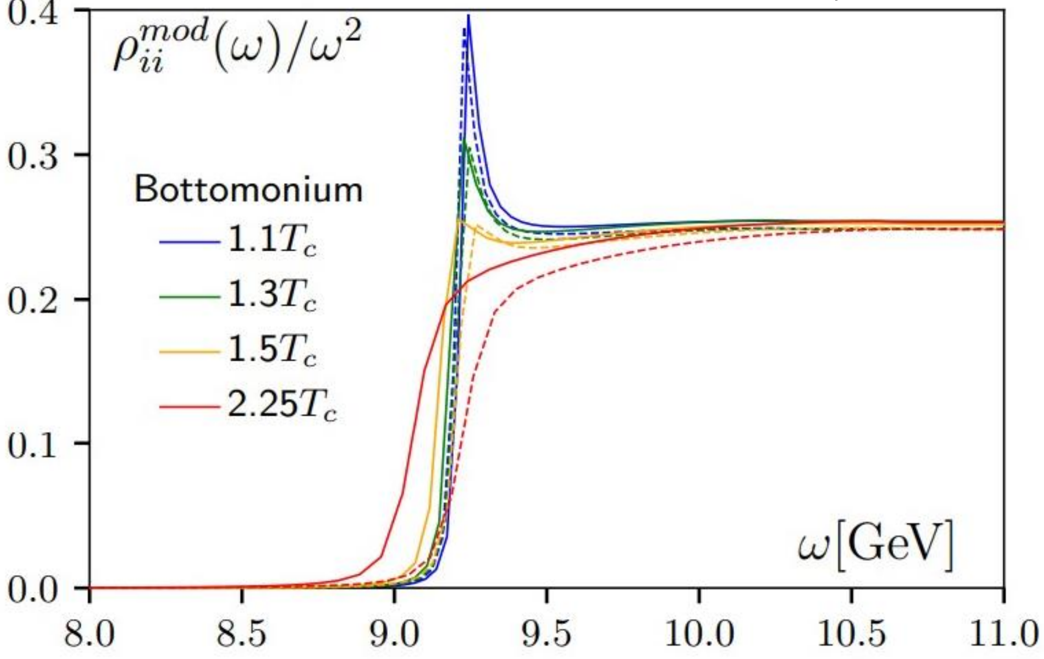
H.-T. Ding, O. Kaczmarek, A.-L. Kurse, HO, H. Sandmeyer and H.-T. Shu, Phys. Rev. D **104** (2021) 11, 114508

$$\rho^{pert}(\omega) = \underbrace{\rho^{vac}(\omega)}_{\text{Vacuum asymptotics}}\,\theta(\omega-\omega^{match}) + A^{match}\,\underbrace{\rho^{NRQCD}(\omega)}_{\text{pNRQCD}}\,\theta(\omega^{match}-\omega)\,\underbrace{\Phi(\omega)}_{\text{Suppression}}$$

Charm, V



Bottom, V



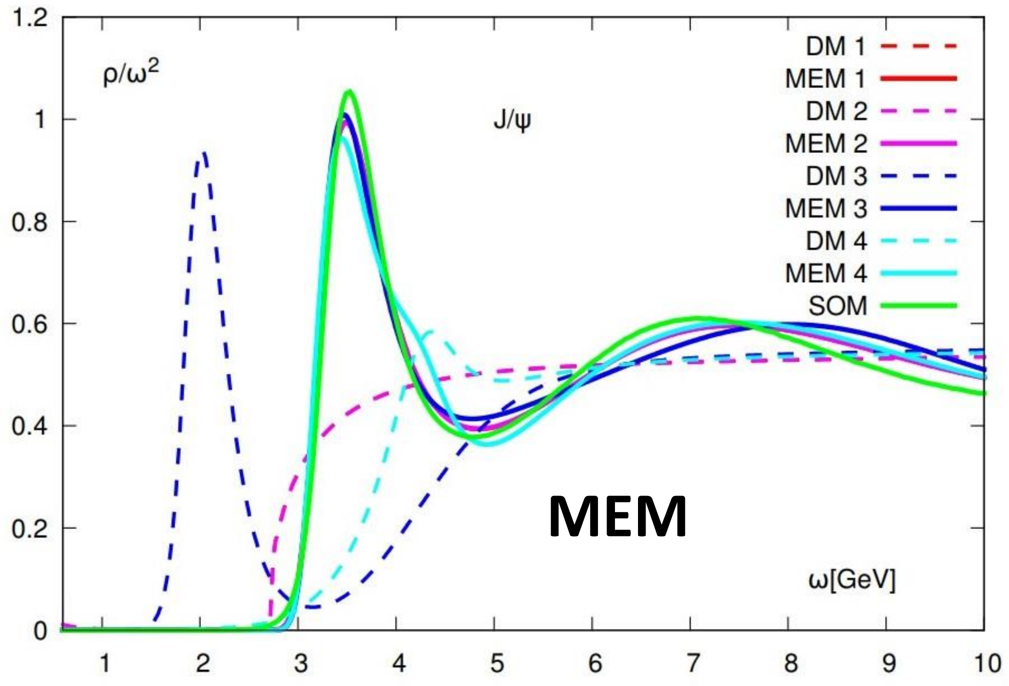
- チャーモニウムにはピーク構造が必要ない (消失を示唆)
- ボトモニウムには相転移温度の1.5倍の温度程度までピーク構造があってもよい (残存を示唆)

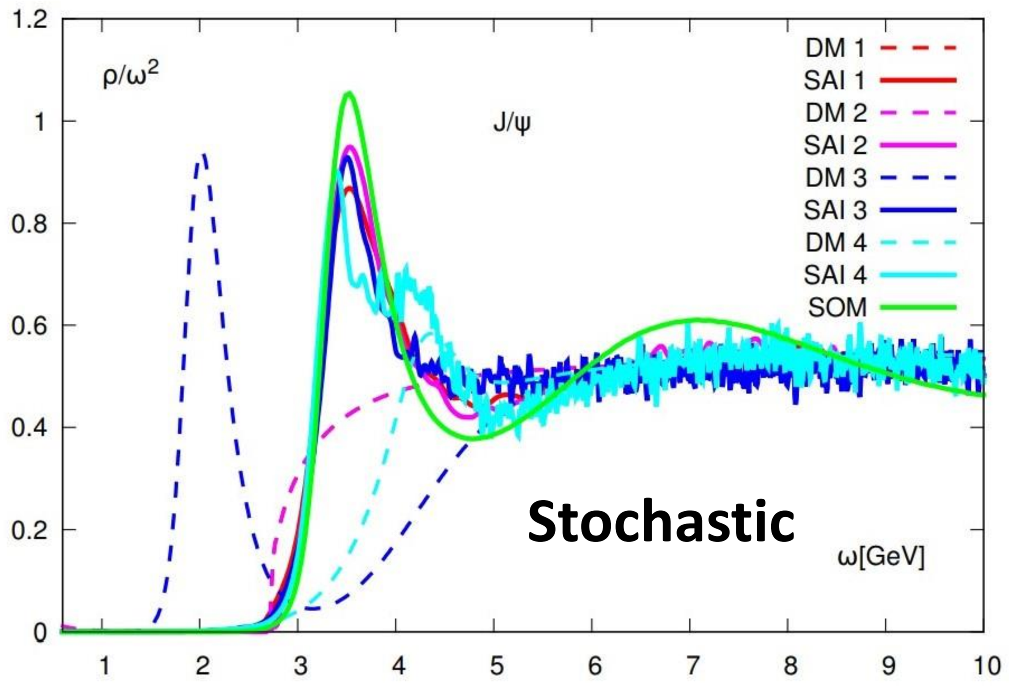
MEM & Stochastic method

J/Ψ@0.75T_c, 128^3x96, Quenched

K.S.D. Beach, arXiv:cond-mat/0403055

H.-T. Ding, O. Kaczmarek, Swagato Mukherjee, HO and H.-T. Shu, PRD 97 (2018) 9, 094503

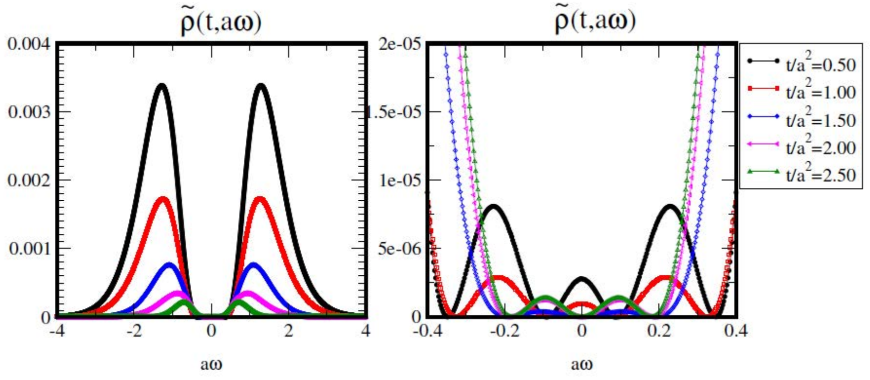




スペクトル関数計算の困難

- 典型的な ill-posed 問題
  - 相関関数からスペクトル関数への逆問題を解く必要がある
  - （格子QCDで得られる相関関数のデータ点数）
    << （スペクトル関数を表現するために必要な自由度の数）
  - 単純な χ^2 フィットはうまくいかない
  - 何かしら事前にわかっている情報が必要
    - 摂動論等理論的考察に基づくモデリング H.-T. Ding, O. Kaczmare Phys. Rev. D **104** (2021
    - 最大エントロピー法 (MEM) M. Asakawa, T. Hatsuda and Y. Nakahara, P
    - Stochastic法 H.-T. Ding, O. Kaczmarek, Swagato Mukherjee, HO and H.-T. Shu,
    - Backus Gilbert法 B. B. Brandt, A. Francis, H. B. Meyer, and D. Robaina, Phys.
    - スパースモデリング E. Itou, Y. Nagai, J. High Energ. Phys. 2020, 7 (2020)
    - …

エネルギー・運動量テンソルの相関関数への応用



様々な手法を比較して系統誤差を見積もることが必要！

スパースモデリングの概要

- スパースモデリングを用いたスペクトル関数の計算 ← 物性物理学分野で提案

  H. Shinaoka, J. Otsuki, M. Ohzeki, K. Yoshimi, Phys. Rev. B 96 (2017) 035147

  J. Otsuki, M. Ohzeki, H. Shinaoka, K. Yoshimi, Phys. Rev. E 95 (2017) 061302

- MEMと異なる正則化 (デフォルトモデルがない)

  → L1正則化 (LASSO回帰)

$$F(\boldsymbol{\rho}') = \frac{1}{2}||\boldsymbol{G}' - S\boldsymbol{\rho}'||_2^2 + \lambda||\boldsymbol{\rho}'||_1$$

L1 norm: $\|\boldsymbol{\rho}'\|_1 \equiv \sum_l |\rho'_l|$

λ > 0: ハイパーパラメータ

- カーネルを特異値分解し、小さい特異値の寄与を無視

  → スペクトル関数のランクを削減

$$K = USV^{\mathrm{t}} \longrightarrow \boldsymbol{\rho}' \equiv V^{\mathrm{t}}\boldsymbol{\rho} \quad \boldsymbol{G}' \equiv U^{\mathrm{t}}\boldsymbol{G}$$

- Alternating Direction Method of Multipliers (ADMM) により最適化問題を解く

  S. Boyd, et al., Foundations and Trends R in Machine Learning 3, 1 (2011)

Cf. 最大エントロピー法 (MEM)

$$F(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{2}||\boldsymbol{G} - S\boldsymbol{\rho}||_2^2 - \lambda S(\boldsymbol{\rho})$$

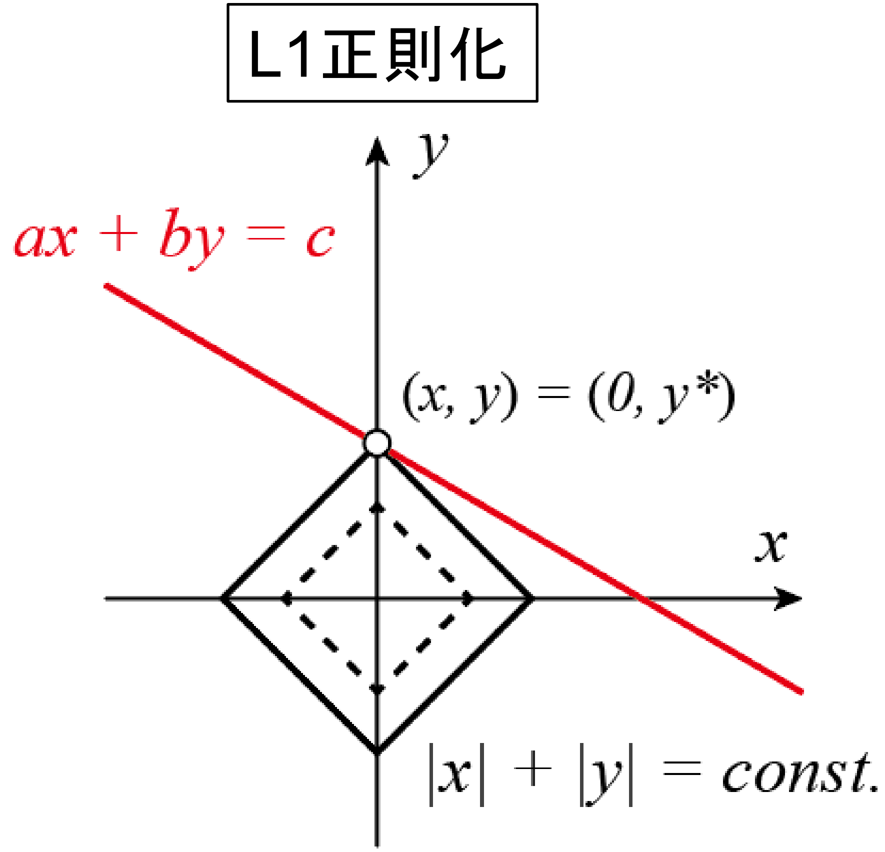
$$S(\boldsymbol{\rho}) = \sum_{l=1}^{N_\omega}\left[\rho_l - m_l - \rho_l \log\left(\frac{\rho_l}{m_l}\right)\right]$$

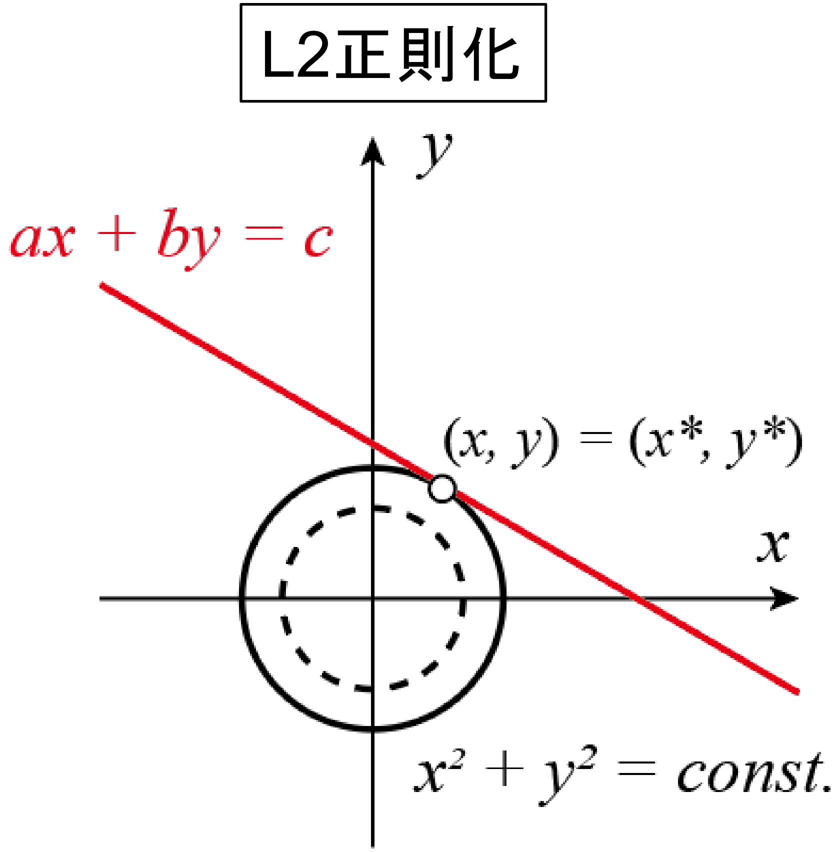
: Shannon-Jaynes エントロピー

$\boldsymbol{m}$: デフォルトモデル (事前知識)

L1正則化の幾何学的解釈

簡単のため、2変数の問題を考える





なるべく大きさが小さく、**スパースな解を選択**

なるべく大きさの小さい解を選択 (スパースとは限らない)

スパースモデリングの手順 (1)

1. カーネル K(ω,τ) を特異値分解

$$K = USV^{\mathrm{t}}$$

S: M×N 対角行列、U: M×M 直行行列、V: N×N 直行行列

M: 虚時間 τ の点数、N: 周波数 ω の点数

2. V^{t} で基底を変換

$$\boldsymbol{\rho}' \equiv V^{\mathrm{t}}\boldsymbol{\rho}$$

3. ρ'_l の要素の内、小さい特異値に対応するもの ($s_l/s_1 < 10^{-15}$) を削減

S : M×N → L×L

U : M×M → M×L

V : N×N → N×L

L: 使用する特異値の数

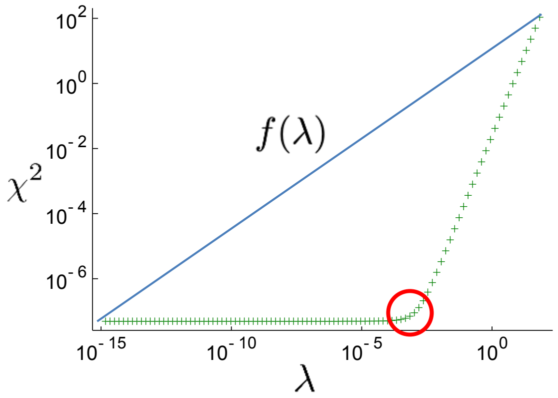
スパースモデリングの手順 (2)

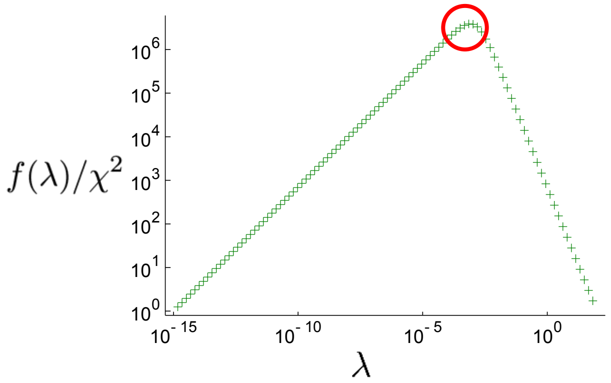
4.　損失関数を以下で定義

共分散行列

$$F(\boldsymbol{\rho}') = \underbrace{\frac{1}{2}(\boldsymbol{G} - US\boldsymbol{\rho}')^{\mathrm{t}}C^{-1}(\boldsymbol{G} - US\boldsymbol{\rho}')}_{\text{二乗誤差}} + \underbrace{\lambda||\boldsymbol{\rho}'||_1}_{\text{L1正則化}} \equiv \chi^2(\boldsymbol{\rho}') + \lambda||\boldsymbol{\rho}'||_1$$

5.　最適なハイパーパラメータ $\lambda = \lambda_{\mathrm{opt}}$ を χ^2 の kink から決定





6.　尤もらしいスペクトル関数を ADMM による最適化問題を解くことで決定

スペクトル関数の非負値性を課しながら解く

Mock data テスト: mock spectral function

- Vector channel e^+e^- annihilation

T. Yamazaki, et al.(CP-PACS Collaboration), Phys. Rev. D 65, 014501 (2002)

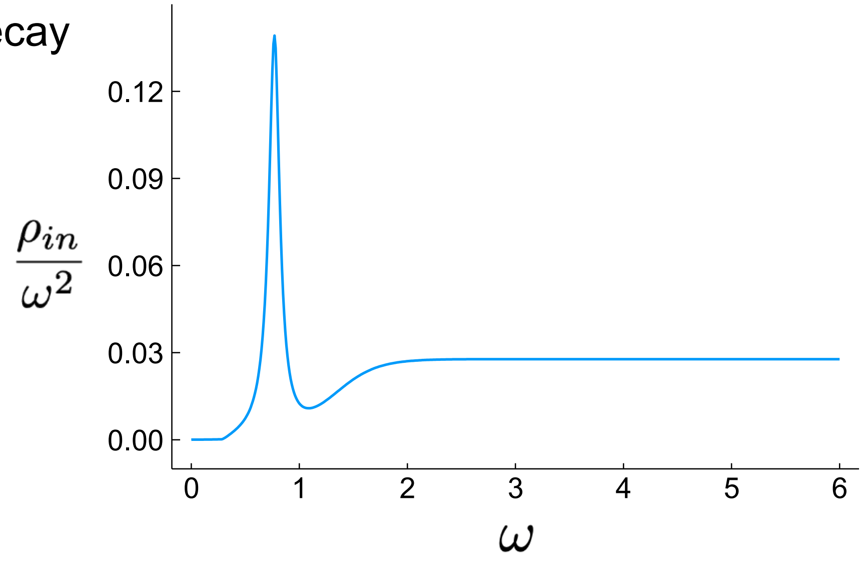
$$\rho_{in}(\omega) = \frac{2\omega^2}{\pi}\left[\underbrace{F_\rho^2 \frac{\Gamma_\rho(\omega) m_\rho}{(\omega^2 - m_\rho^2)^2 + \Gamma_\rho^2(\omega) m_\rho^2}}_{\text{peak}} + \underbrace{\frac{1}{8\pi}\left(1+\frac{\alpha_s}{\pi}\right)\frac{1}{1+e^{(\omega_0-\omega)/\delta}}}_{\text{continuum}}\right]$$

- $\langle 0|\bar{d}\gamma_\mu u|\rho\rangle = \sqrt{2}F_\rho m_\rho \epsilon_\mu = \sqrt{2} f_\rho m_\rho^2 \epsilon_\mu$

- $\Gamma_\rho(\omega) = \frac{1}{48\pi}\frac{m_\rho^3}{F_\rho^2}\left(1-\frac{4m_\pi^2}{\omega^2}\right)^{3/2}\theta(\omega - 2m_\pi)$: threshold of $\rho \to \pi\,\pi$ decay

- パラメータ

$$m_\rho = 0.77,\ m_\pi = 0.14,\ F_\rho = 0.142,\ \omega_0 = 1.3,\ \delta = 0.2,\ \alpha_s = 0.3$$



Mock data テスト: mock data の作成

- 相関関数の中心値

$$G(\tau) = \int d\omega \rho_{in}(\omega) K(\omega, \tau) \qquad K(\omega, \tau) = e^{-\omega\tau} \qquad \tau_{max} = \Delta\tau(N_\tau - 1)$$

Δτ = 0.5

- 相関関数の誤差: 以下で定義される分散 σ(τ) のガウス乱数で生成 (共分散は 0)

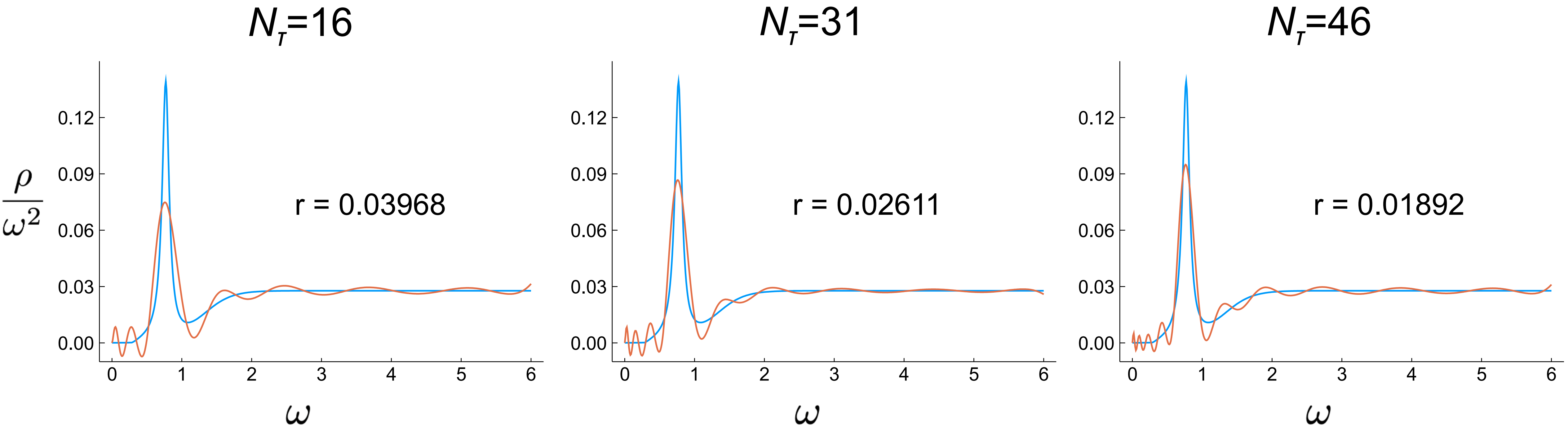
$$\sigma(\tau) = b \cdot e^{a\tau} G(\tau) \qquad a = 0.1 \qquad b = 10^{-10}$$

- 周波数の範囲と点数: $0 \le \omega \le 6$ 、$N_\omega = 601$

- 虚時間の点数 (3種類): $N_\tau = 16,\ 31,\ 46$

- 次の再構成誤差を評価: $r = \sum_{j=1}^{N_\omega} ((\rho_{in}(\omega_j) - \rho_{out}(\omega_j))/\omega^2)^2$

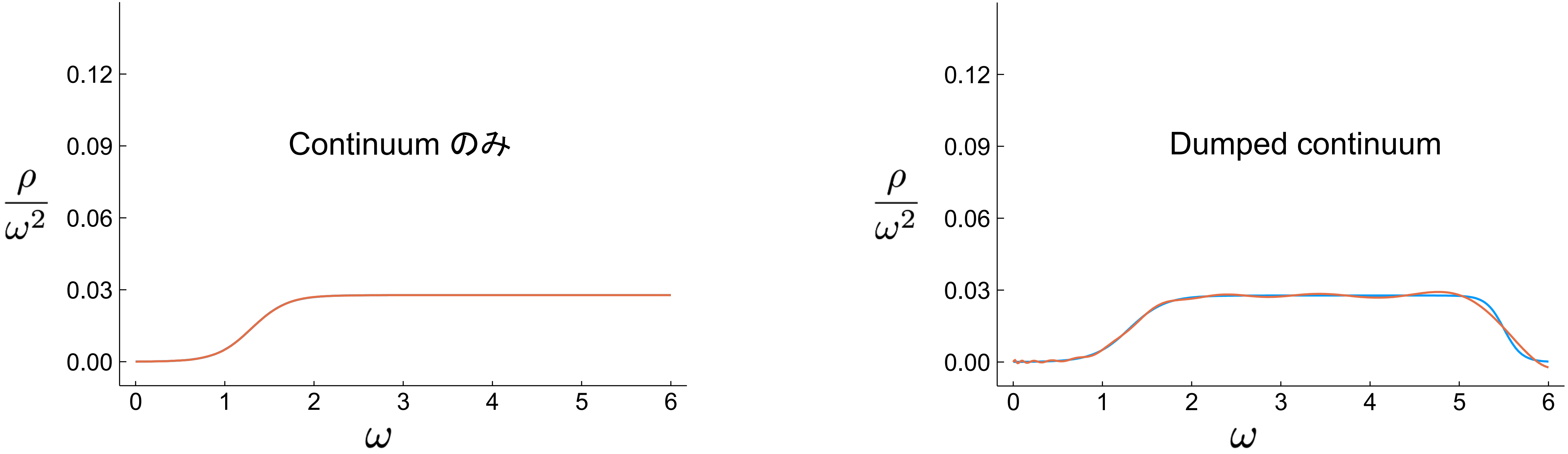
Mock data テスト: 結果1



- データ点数が大きいほど再構成誤差が小さい。
- 周波数が低い領域で非負値性が満たされていない。

Mock data テスト: 結果2

$N_\tau = 46$

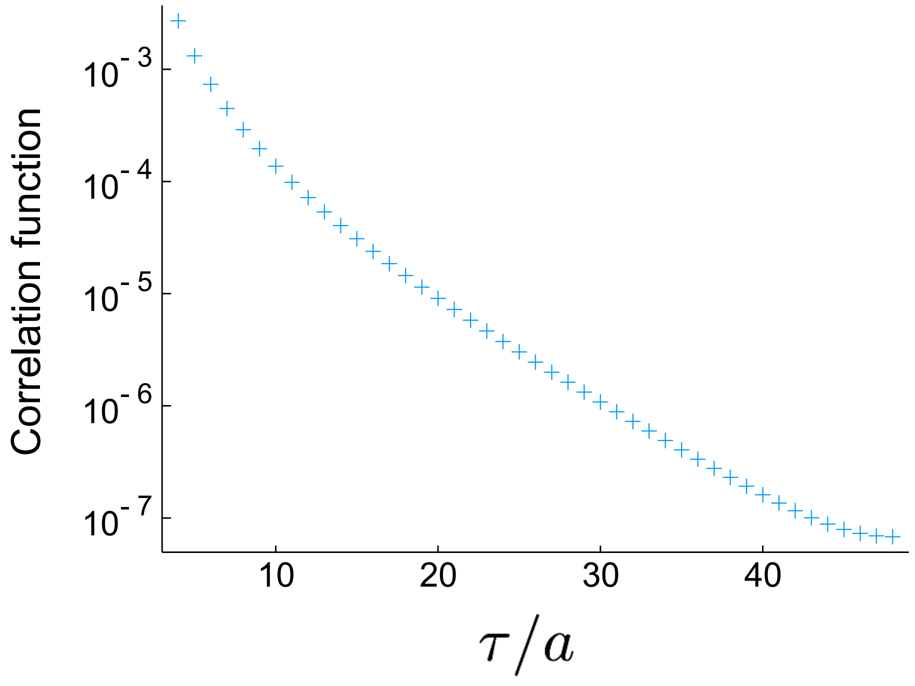


- 非負値性も含めよく再現できている

→ピークがない場合は低周波数領域の振動が小さい

Lattice QCD data: セットアップ

- Standard plaquette gauge + O(a) improved Wilson fermion 作用
- クエンチ近似 (クォーク真空偏極の効果を無視、計算コスト小)
- 格子間隔: $a = 0.010\,\mathrm{fm},\ a^{-1} \simeq 18.97\,\mathrm{GeV}$
- 格子サイズ (空間、時間方向): $N_\sigma = 128,\ N_\tau = 96$
- 配位数: 234
- Charmonium correlator in the vector channel at 0.75T_c



H.-T. Ding, A. Francis, O. Kaczmarek, F. Karsch, H. Satz, W. Soeldner, Phys. Rev. D 86, 014509 (2012)

Lattice QCD data: 規格化とデータの選択

- カーネルとスペクトル関数を次のように変形

$$\tilde{K}(\omega, \tau; \tau_0) \equiv \frac{K(\omega, \tau)}{K(\omega, \tau_0)} = \frac{\cosh\left[\omega\left(\tau - \frac{1}{2T}\right)\right]}{\cosh\left[\omega\left(\tau_0 - \frac{1}{2T}\right)\right]}$$

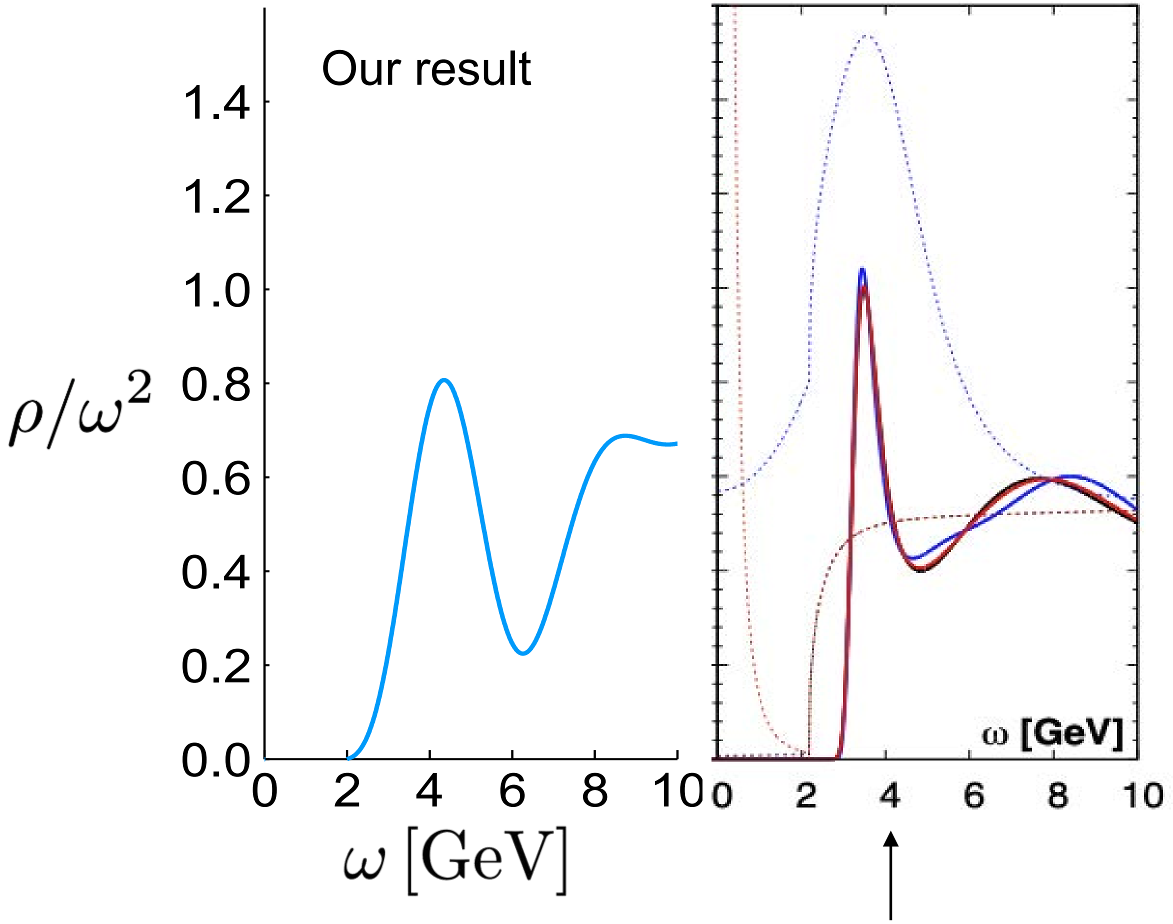
$$\tilde{\rho}(\omega; \tau_0) = \rho(\omega) K(\omega, \tau_0)$$

- 相関関数のデータの内、格子化誤差の大きい部分は用いない

$^{\tau_0}/_a \le {}^{\tau}/_a \le {}^{N_\tau}/_2$、$^{\tau_0}/_a = 4$

Lattice QCD data: 結果

- スペクトル関数はおよそω = 2 GeV 辺りから立ち上がっている。
- ω = 4 GeV 付近に幅の広いピークを持つ。
- 先行研究 w/ MEM のピーク位置 (約3.48 GeV) とこの格子上での J/Ψ 質量 (約3.472 GeV) より若干大きな位置にピークがある。



H.-T. Ding, A. Francis, O. Kaczmarek, F. Karsch, H. Satz, W. Soeldner, Phys. Rev. D 86, 014509 (2012)

まとめ

- スパースモデリングを用いて、格子QCDのEuclidean-time correlatorからスペクトル関数を計算した。
- Mock data を用いたテストで、本手法の性能を評価した
- 実際の Lattice QCD data に対して本手法を適用し、先行研究との比較を行った。
  - 先行研究よりも高い周波数の位置により幅の広い J/Ψ ピークが得られた

今後の展望

- より詳細な手法のチェックが必要
  - スペクトル関数の非負値性
  - 最適なハイパーパラメータλ
  - ADMMの収束性
  - …

- 格子QCDの他のデータに対する解析
  - 高温のデータから Transport peak は得られるか？
  - …