

経路最適化法を用いた 場の理論における符号問題の研究

森 勇登 (京大理)

共同研究者：柏 浩司 (福工大)

大西 明 (京大基研)

符号問題

- 分配関数

$$Z = \int \mathcal{D}x e^{-S[x]}$$

- 物理量

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}x \mathcal{O} e^{-S}$$

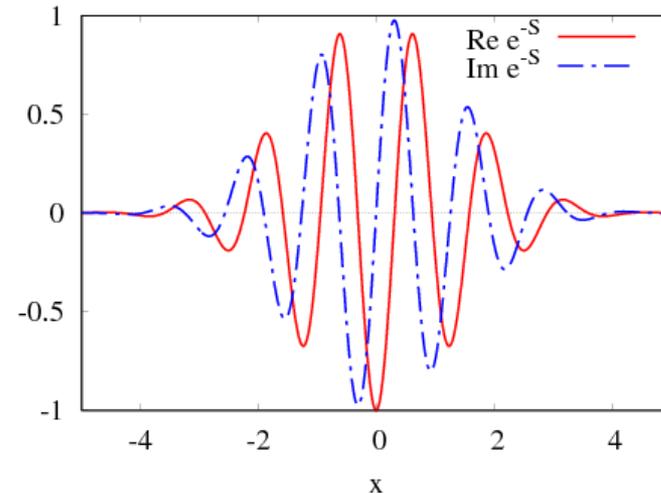
符号問題 : $S[x] \in \mathbb{C}$

- 打ち消し合いによる
計算精度の悪化
- 確率解釈が困難

phase-reweightingで
解釈可能に

例): $e^{-S(x)} = (x + 10i)^{50} e^{-x^2/2}$

J. Nishimura and S. Shimasaki,
PRD 92 (2015) 011501



符号問題

phase-reweighting method

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int \mathcal{D}x \mathcal{O} e^{-S}}{\int \mathcal{D}x e^{-S}} = \frac{\int \mathcal{D}x \mathcal{O} \frac{e^{-S}}{|e^{-S}|} |e^{-S}|}{\int \mathcal{D}x \frac{e^{-S}}{|e^{-S}|} |e^{-S}|} = \frac{\langle e^{-i\text{Im}S} \mathcal{O} \rangle_{\text{pq}}}{\langle e^{-i\text{Im}S} \rangle_{\text{pq}}}$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{\text{pq}} = \frac{\int \mathcal{D}x \mathcal{O} |e^{-S}|}{\int \mathcal{D}x |e^{-S}|} \quad \Rightarrow \quad |e^{-S}| \text{ を確率と見なせる}$$

pq: phase-quench

モンテカルロ計算が可能に

平均位相因子 $\langle e^{-i\text{Im}S} \rangle_{\text{pq}}$

- …小さい時符号問題は深刻
(一般に体積大で小さい)
0/0 に近い計算が必要

経路最適化法

Y.M., K. Kashiwa, A. Ohnishi,
Phys. Rev. D96 (2017) no.11, 111501

打ち消し合いが小さくなるような経路を**変分的に求める**

つまり符号問題を最適化問題とみなす

(例) 1変数の場合

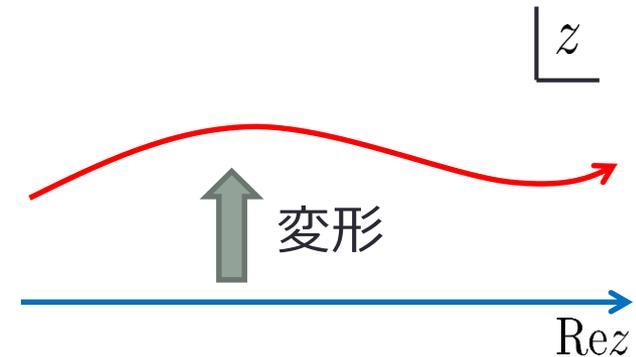
- 試行関数(積分経路)

$$z(\cdot) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$$

- 目的関数(最小化すべき関数)

$$\mathcal{F}[z(t)] = \frac{1}{2} \int dt \underbrace{|e^{i\theta(t)} - e^{i\theta_0}|^2}_{\text{打ち消し合い}} \times \underbrace{|J(t)e^{-S(z(t))}|}_{\text{重み}} = \int dt |J e^{-S}| - \left| \int dt J e^{-S} \right|$$

$$J(t) = \frac{\partial z(t)}{\partial t}, \quad \theta(t) = \arg \left(\frac{\partial z}{\partial t} e^{-S(z(t))} \right), \quad \theta_0 = \arg(\mathcal{Z})$$



経路最適化法

Y.M., K. Kashiwa, A. Ohnishi,
Phys. Rev. D96 (2017) no.11, 111501

● 1変数での例

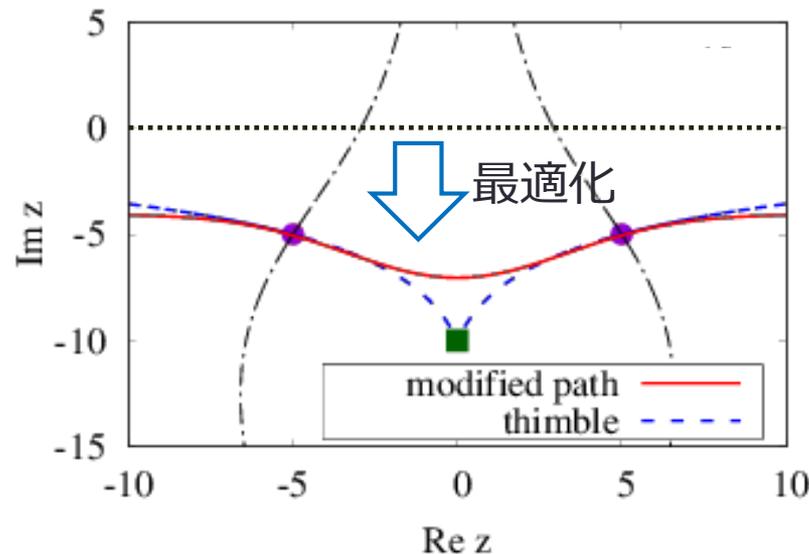
分配関数 J. Nishimura and S. Shimasaki,
Phys. Rev. D92 (2015), 011501

$$\mathcal{Z} = \int dx (x + 10i)^{50} \exp(-x^2/2)$$

積分経路

$$z(t) = t + i \left(c_1 \exp\left(-\frac{c_2^2 t^2}{2}\right) + c_3 \right)$$

- c_i を最急降下法で最適化



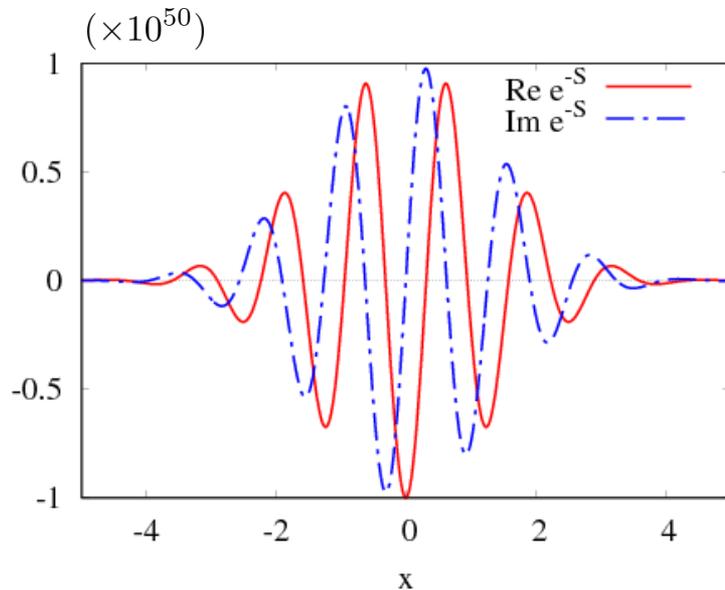
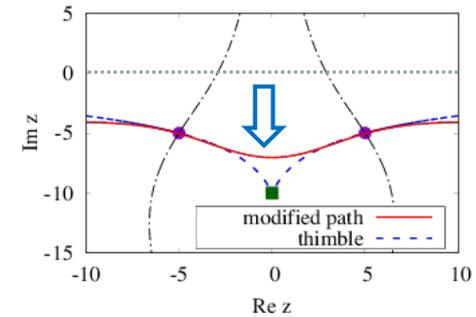
経路最適化法

Y.M., K. Kashiwa, A. Ohnishi,
Phys. Rev. D96 (2017) no.11, 111501

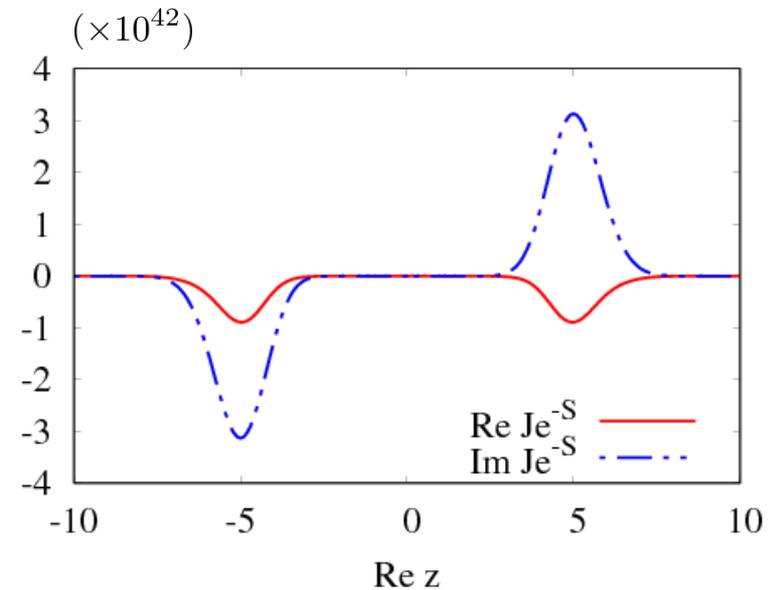
● 1変数での例

分配関数 J. Nishimura and S. Shimasaki,
Phys. Rev. D92 (2015), 011501

$$\mathcal{Z} = \int dx (x + 10i)^{50} \exp(-x^2/2)$$



最適化
→



経路最適化法 | ニューラルネットワーク

- 格子場の理論・・・多変数
- 積分経路に適切な関数形は非自明



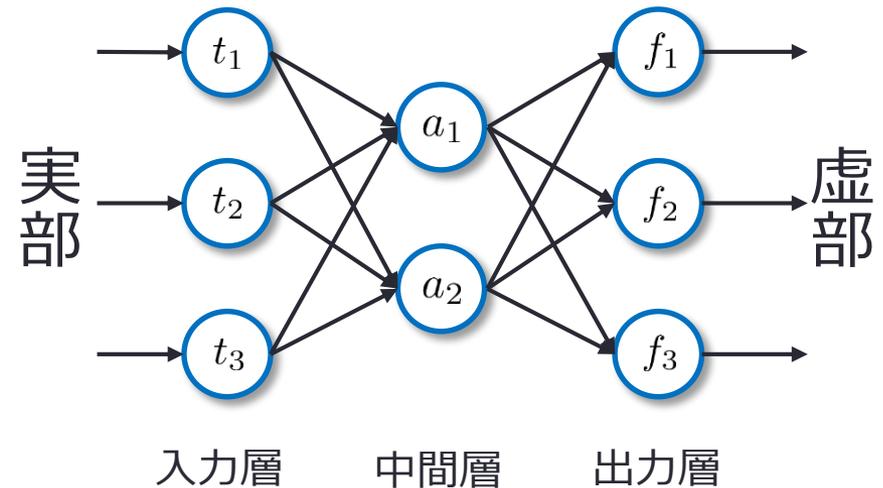
ニューラルネットワーク

$$z_i(t) = t_i + i(\alpha_i f_i(t) + \beta_i)$$

$$\begin{cases} a_i = g(W_{ij}^{(1)} t_j + b_i^{(1)}) \\ f_i = g(W_{ij}^{(2)} a_j + b_i^{(2)}) \end{cases}$$

$g(x)$: 活性化関数(tanh等)

※ W, b, α, β がパラメータ



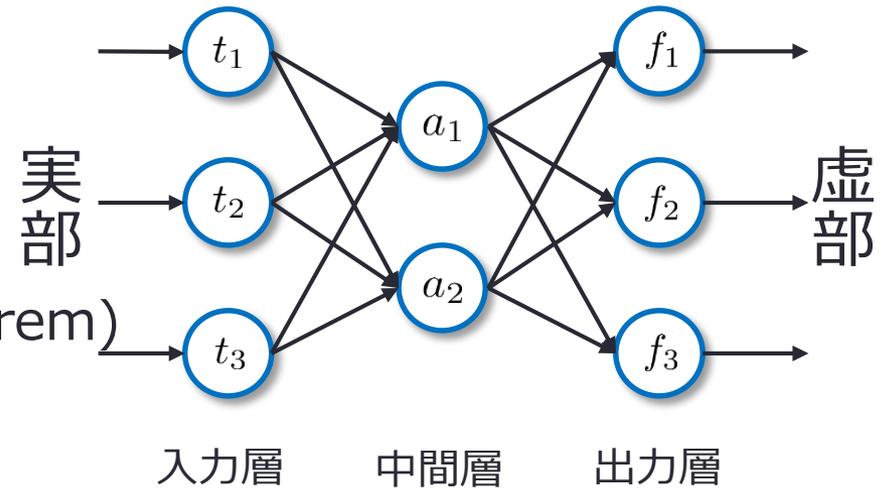
経路最適化法 | ニューラルネットワーク

特徴

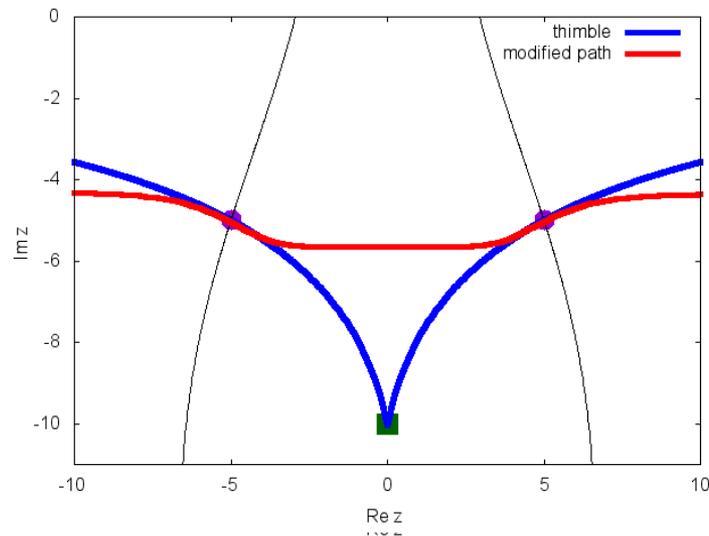
中間層のユニット数 $\rightarrow \infty$ で
任意の連続関数を近似可能
(Universal approximation theorem)

G. Cybenko, *MCSS* 2, 303 (1989)

K. Hornik, *Neural networks* 4, 251 (1991)



例.



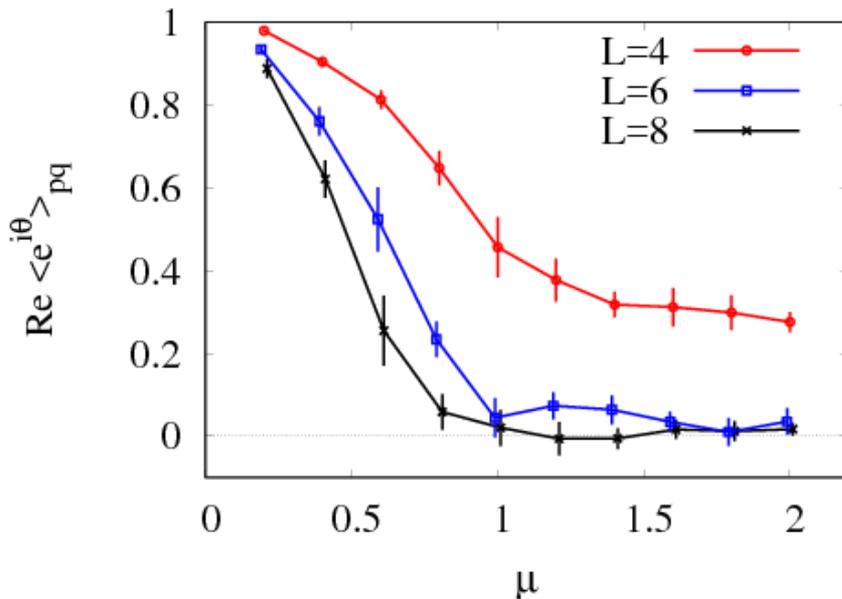
複素 ϕ^4 理論

Y.M., K. Kashiwa and A. Ohnishi,
PTEP **2018**, no. 2, 023B04 (2018)

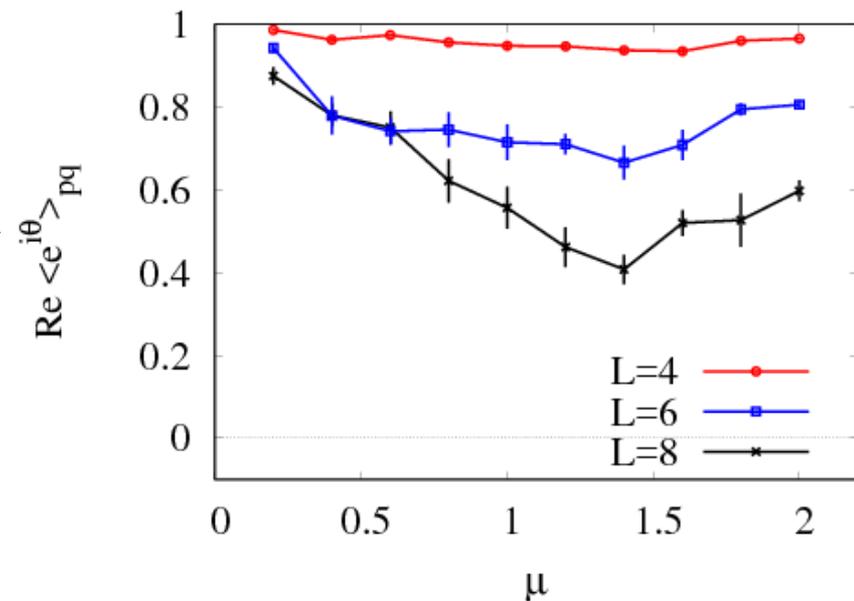
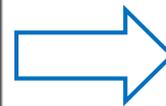
$$S = \sum_x \left[(4 + m^2) \phi_x^* \phi_x + \lambda (\phi_x^* \phi_x)^2 - \sum_{\nu=0}^1 (\phi_x^* e^{-\mu \delta_{\nu,0}} \phi_{x+\hat{\nu}} + \phi_{x+\hat{\nu}}^* e^{+\mu \delta_{\nu,0}} \phi_x) \right]$$

2次元格子, $m = 1$, $\lambda = 1$

● 平均位相因子



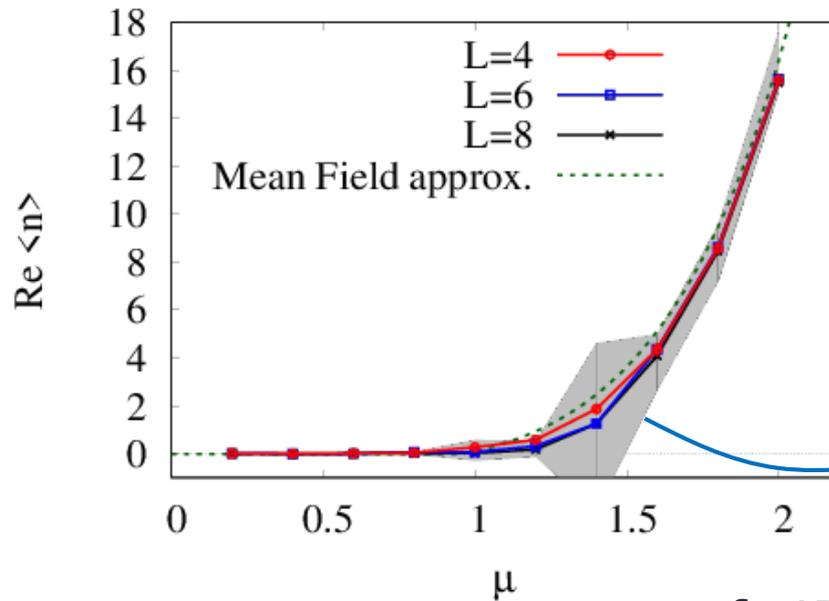
最適化



複素 ϕ^4 理論

Y.M., K. Kashiwa and A. Ohnishi,
PTEP **2018**, no. 2, 023B04 (2018)

● 密度



● 平均場近似と
consistent

● 最適化無しの場合と
誤差の範囲内で一致

■ : 最適化無し (L=8)

● cf. 4D complex ϕ^4

Complex Langevin:

G. Aarts, PRL 102 (2009) 131601

Lefschetz thimble :

H. Fujii, *et al.*, JHEP 1310 (2013) 147

0+1 dim. QCD

YM, Kashiwa, Ohnishi, in prep.

- 1-flavor Staggered fermion

cf. CLM: [Aarts, et al.\(2010\)](#)

LTM: [Schmidt, et al.\(2016\)](#),
[Di Renzo, et al.\(2017\)](#)

$$S = \frac{1}{2} \sum_{\tau} (\bar{\chi}_{\tau} e^{\mu} U_{\tau} \chi_{\tau+\hat{0}} - \bar{\chi}_{\tau+\hat{0}} e^{-\mu} U_{\tau}^{-1} \chi_{\tau}) + m \sum_{\tau} \bar{\chi}_{\tau} \chi_{\tau}$$

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}U \det D[U] = \int dU \det [X_N + (-1)^N e^{\mu/T} U + e^{-\mu/T} U^{-1}]$$

$$X_N = 2 \cosh(E/T), \quad E = \operatorname{arcsinh} m, \quad T = 1/N$$

① 対角的なゲージに固定してから複素化

$$U = \operatorname{diag}(e^{ix_1}, e^{ix_2}, e^{ix_3}), \quad (x_3 = -(x_1 + x_2))$$

$$\mathcal{Z} = \int dx_1 dx_2 \left[\frac{8}{3\pi^2} \prod_{a < b} \sin^2 \left(\frac{x_a - x_b}{2} \right) \right] \left[\prod_a (X_N + 2 + \cos(x_a - i\mu)) \right]$$

$$x_a \in \mathbb{R} \rightarrow z_a \in \mathbb{C}$$

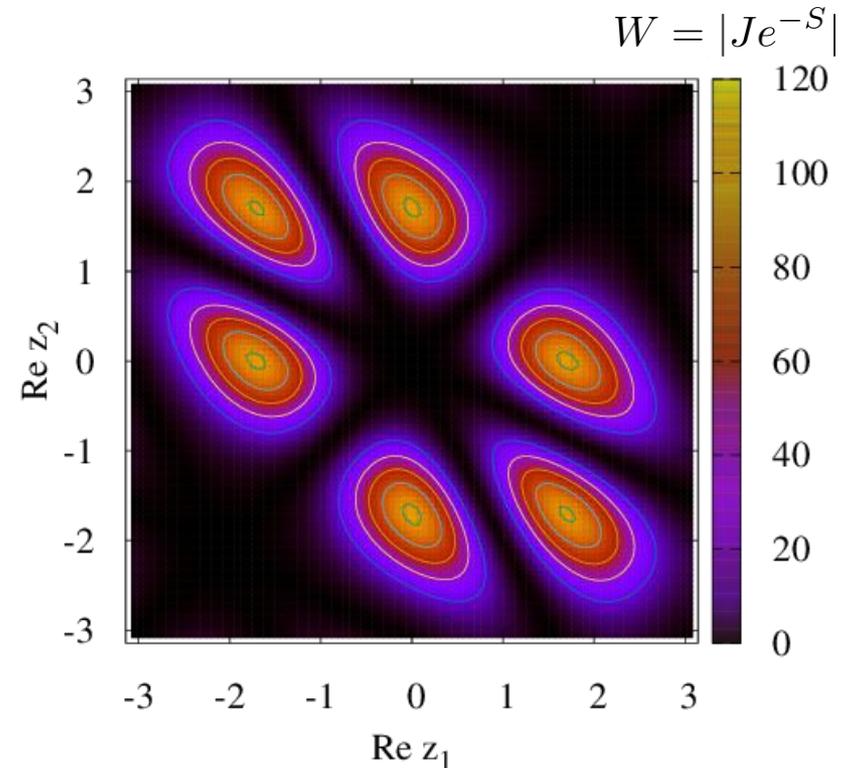
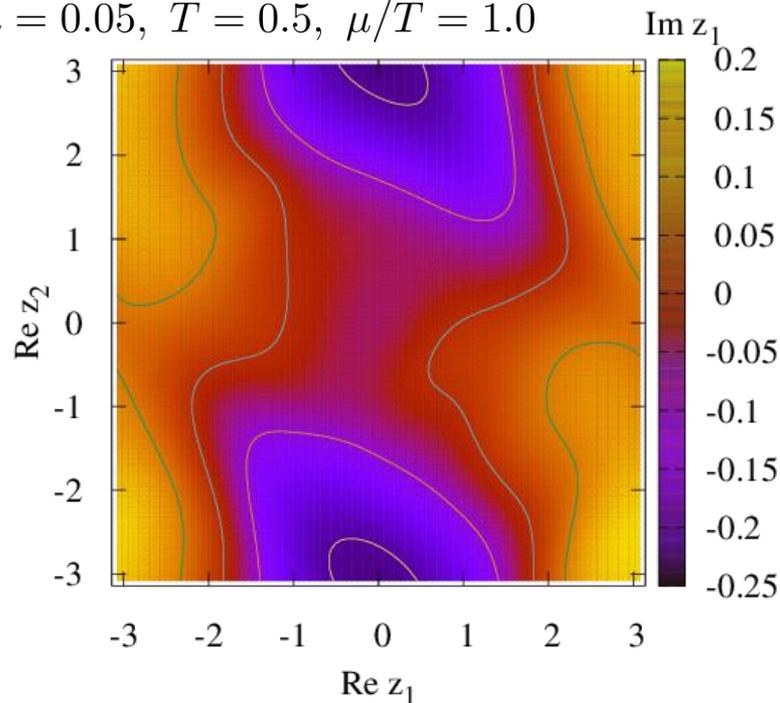
1 dim. QCD 対角ゲージ

YM, Kashiwa, Ohnishi, in prep.

$$\mathcal{Z} = \int dz_1 dz_2 \left[\frac{8}{3\pi^2} \prod_{a < b} \sin^2 \left(\frac{z_a - z_b}{2} \right) \right] \left[\prod_a (X_N + 2 + \cos(z_a - i\mu)) \right]$$

$z_a(x) = x_a + iy_a(x)$, $y_a(x)$: 試行関数、パラメータを最適化

$m = 0.05$, $T = 0.5$, $\mu/T = 1.0$



1 dim. QCD one link

YM, Kashiwa, Ohnishi, in prep.

- z_1, z_2 に対して分布が6つに分離
→単純なHybrid Monte Carloでは遷移不可

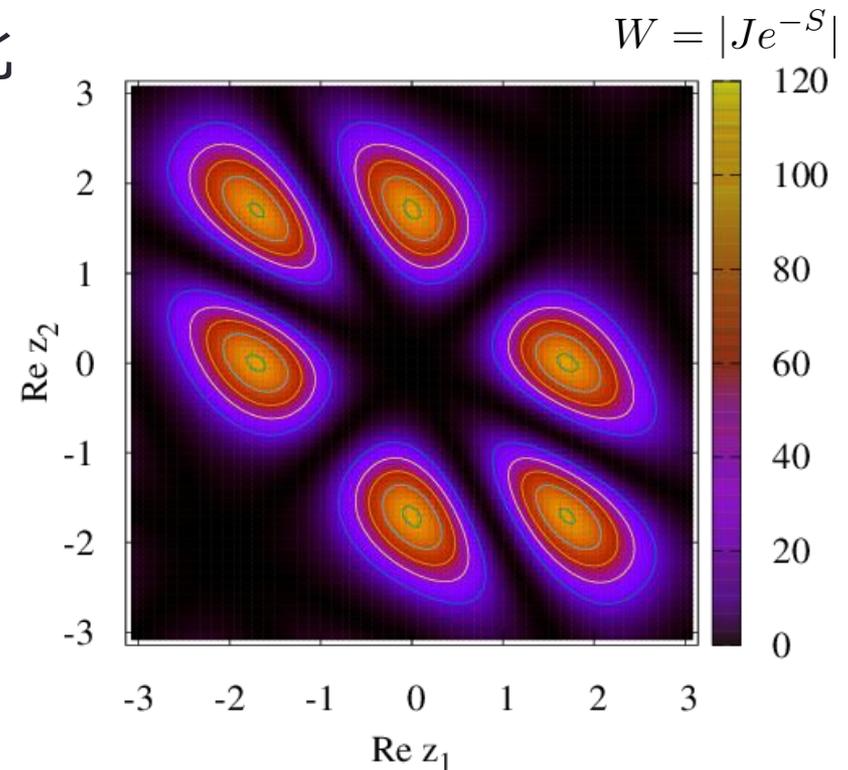
② link変数を対角化せずに複素化

$$U \in \text{SU}(3) \rightarrow \mathcal{U} \in \text{SL}(3, \mathbb{C})$$

- 例

$$\mathcal{U}(U) = U \prod_a e^{y_a \lambda_a / 2}$$

$y_a(U)$: 試行関数



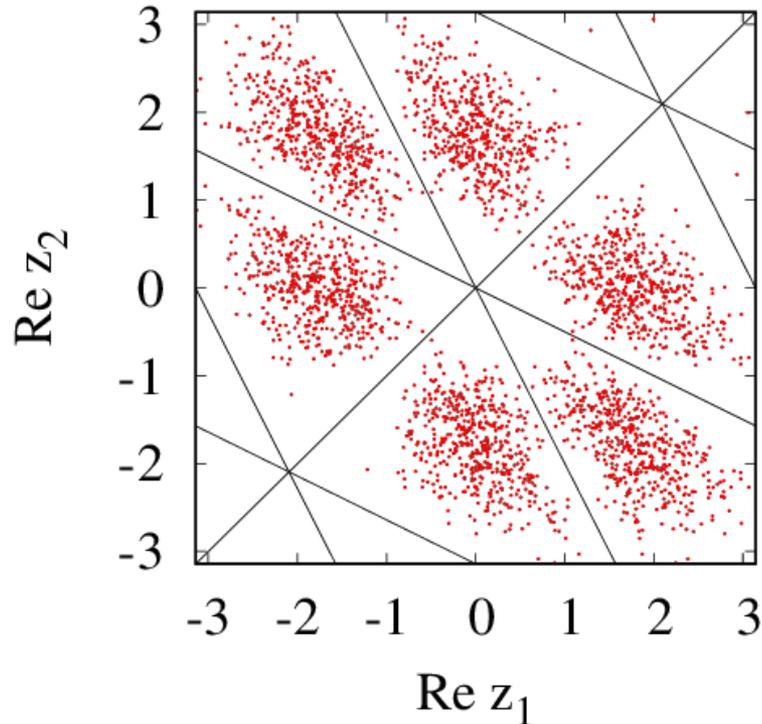
1 dim. QCD one link

YM, Kashiwa, Ohnishi, in prep.

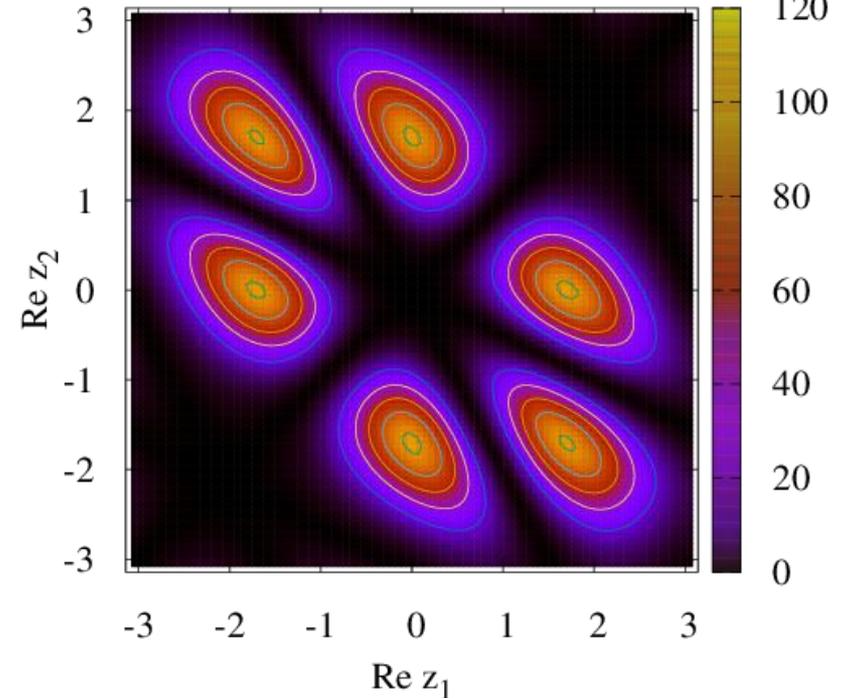
得られた $U(U)$ を対角化 $PUP^{-1} = \text{diag}(e^{iz_1}, e^{iz_2}, e^{-i(z_1+z_2)})$

→ z_1, z_2 空間内に6つの島を再現

w/o gauge fix.



w/ gauge fix. $W = |Je^{-S}|$

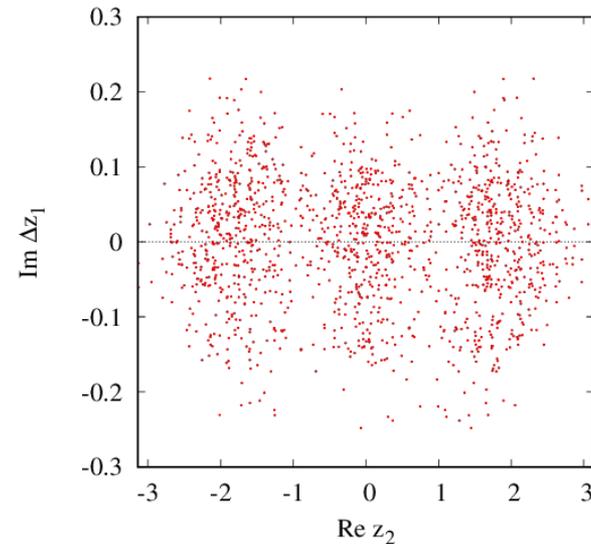
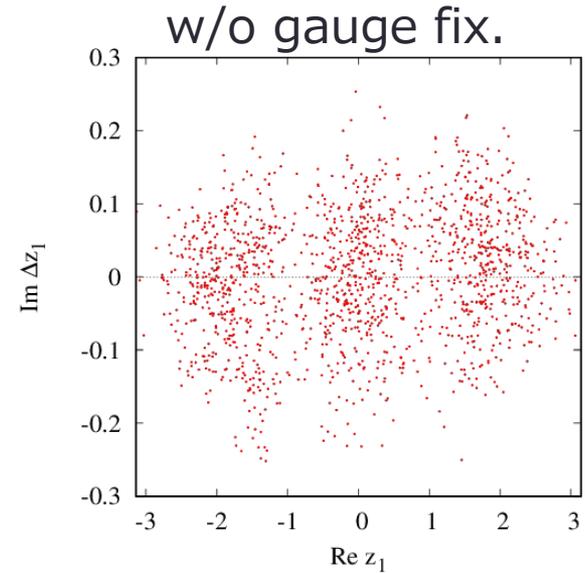
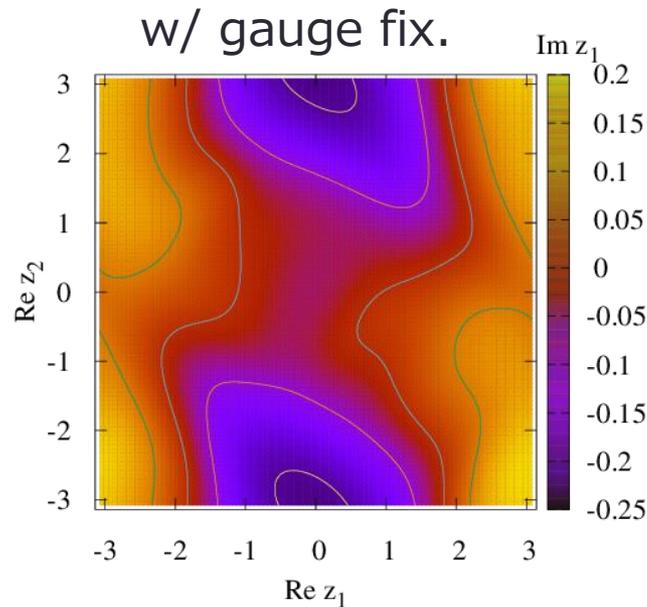


1 dim. QCD one link

YM, Kashiwa, Ohnishi, in prep.

対角化→複素化の場合
 z_1, z_2 空間内の曲面が得られる

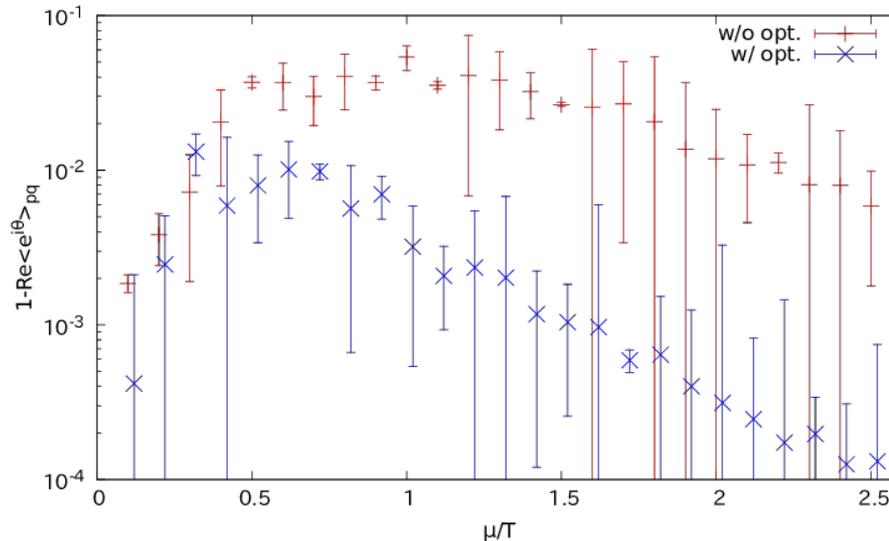
しかし複素化→対角化の場合
 一般に広がって分布



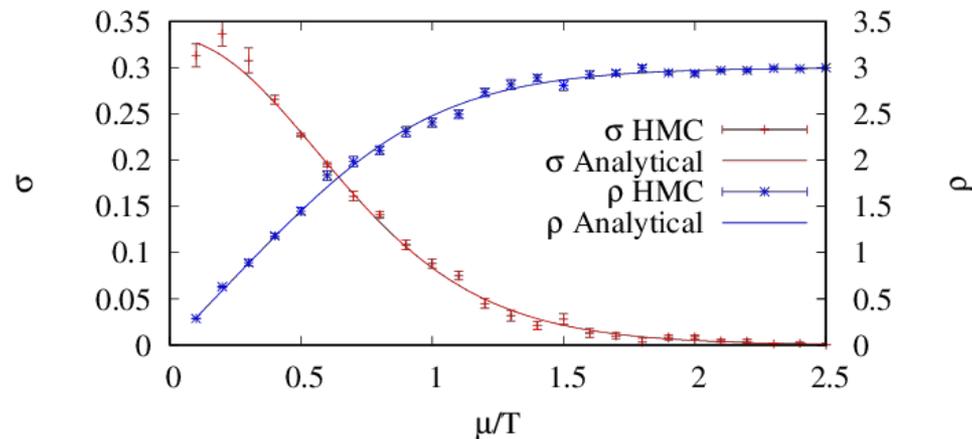
1 dim. QCD one link

YM, Kashiwa, Ohnishi, in prep.

- 平均位相因子
の1からのずれ



- 物理量の期待値



Summary

- 経路最適化法によって符号問題を最適化問題とみなす
- ニューラルネットワークを使えば場の理論への応用も容易
- 1+1 dim. 複素スカラー場、0+1 dim. QCDに適用し、符号問題の改善が見られた