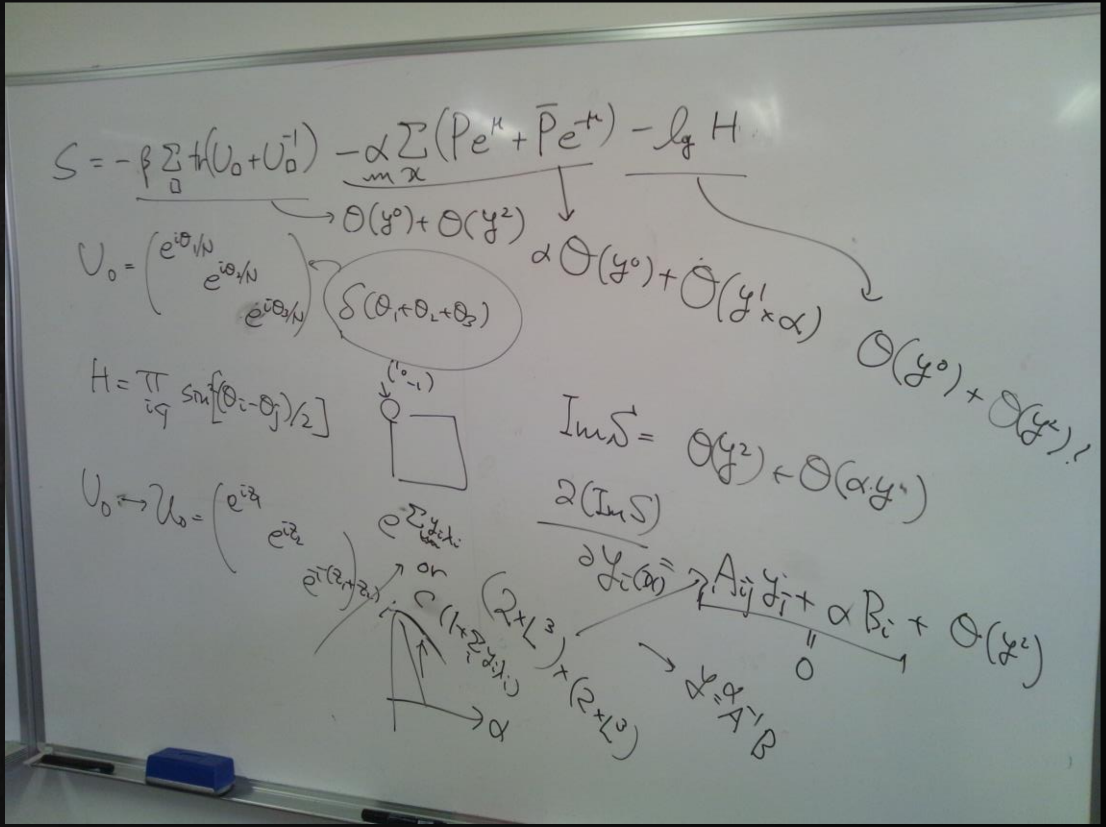
符号問題の研究：
機械学習を用いた研究を軸として

福岡工業大学 情報工学部 情報工学科

柏 浩司



研究議論時の大西さんによる板書

写真提供：市川さん、滑川さん、谷崎さん

基礎物理学研究所 原子核グループ（2014～2017）

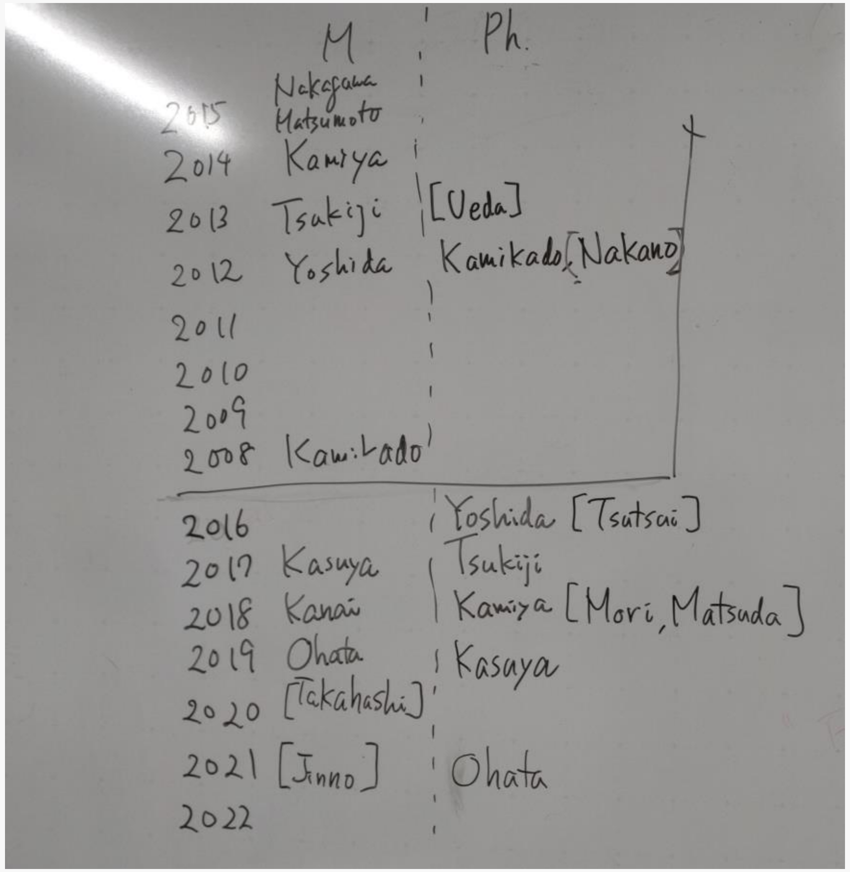
敬称略

2014年
（スタッフ）**大西明**、板垣直之、八田佳孝、兵藤哲雄
（PD）市川隆敏、祖谷元、 Jenifer Nebreda、森田健司、稲倉恒法、柏浩司
（院生）吉田侑太、築地秀和、神谷有輝

2015年
（スタッフ）**大西明**、板垣直之、八田佳孝、兵藤哲雄
（PD）市川隆敏、森田健司、前沢祐、山口康宏、柏浩司
（院生）吉田侑太、築地秀和、神谷有輝、中川裕也、松本滉平

2016年
（スタッフ）**大西明**、板垣直之、八田佳孝、兵藤哲雄
（PD）森田健司、前沢祐、柏浩司
（院生）吉田侑太、築地秀和、神谷有輝、中川裕也、松本滉平

2017年
（スタッフ）**大西明**、板垣直之、八田佳孝、兵藤哲雄
（PD）前沢祐、 Sanjin Benic、柏浩司
（院生）築地秀和、神谷有輝、中川裕也、加須屋春樹



大学院生の入学年度（共同研究の開始時）
に関する大西さんのメモ

基礎物理学研究所 原子核グループ（2014～2017）

敬称略

2014年　（スタッフ）**大西明**、板垣直之、八田佳孝、兵藤哲雄

（PD）市川隆敏、祖谷元、 Jenifer Nebreda、森田健司、稲倉恒法、柏浩司

（院生）吉田侑太、築地秀和、神谷有輝

2014年

基礎物理学研究所 原子核グループ（2014～2017）

敬称略

2016年　（スタッフ）**大西明**、板垣直之、八田佳孝、兵藤哲雄

（PD）森田健司、前沢祐、柏浩司

（院生）吉田侑太、築地秀和、神谷有輝、中川裕也、松本滉平

2016年

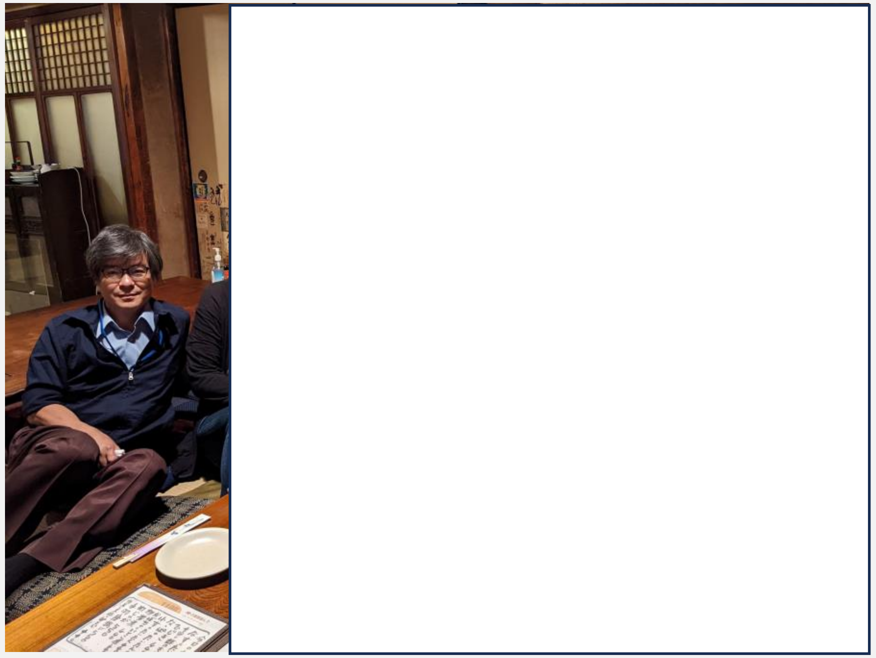
基礎物理学研究所 原子核グループ（2014～2017）

大西さん 「熱場の量子論とその応用」世話人、2008年～2022年

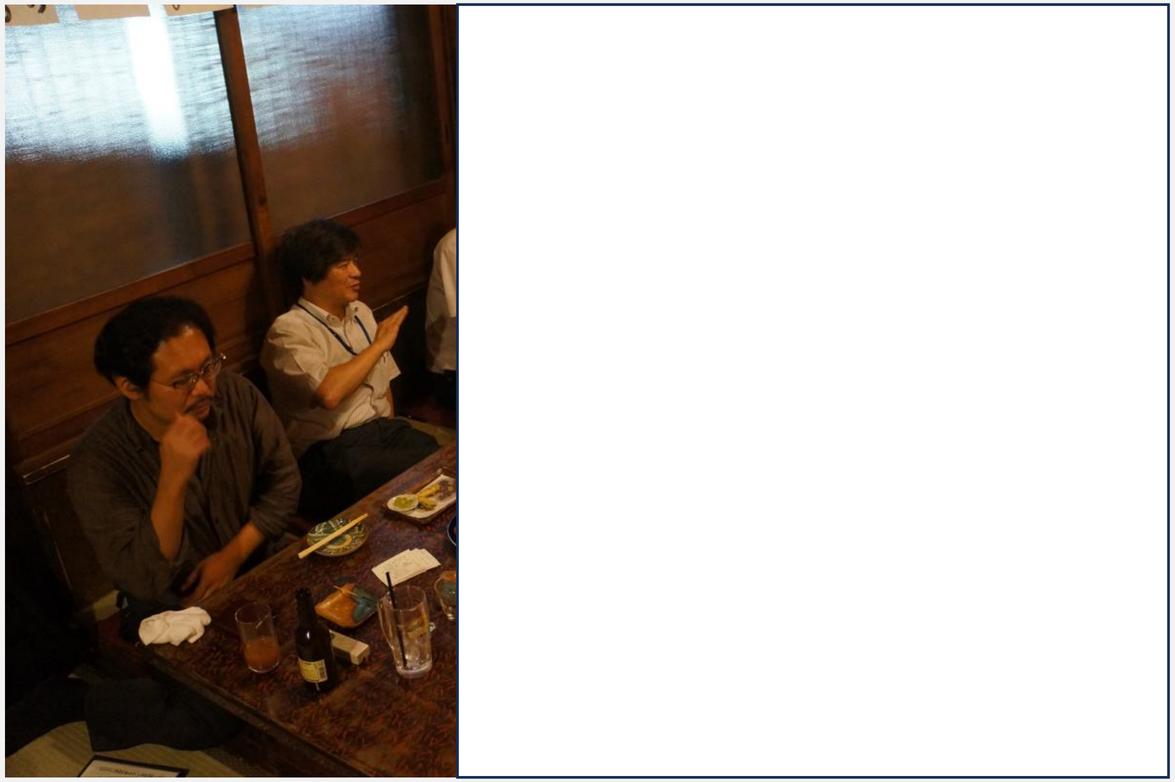
2017年に大西さんに誘われて柏が世話人に参加

ポスドクだったが参加

2020年頃に大西さんに誘われて谷崎さんが世話人に参加



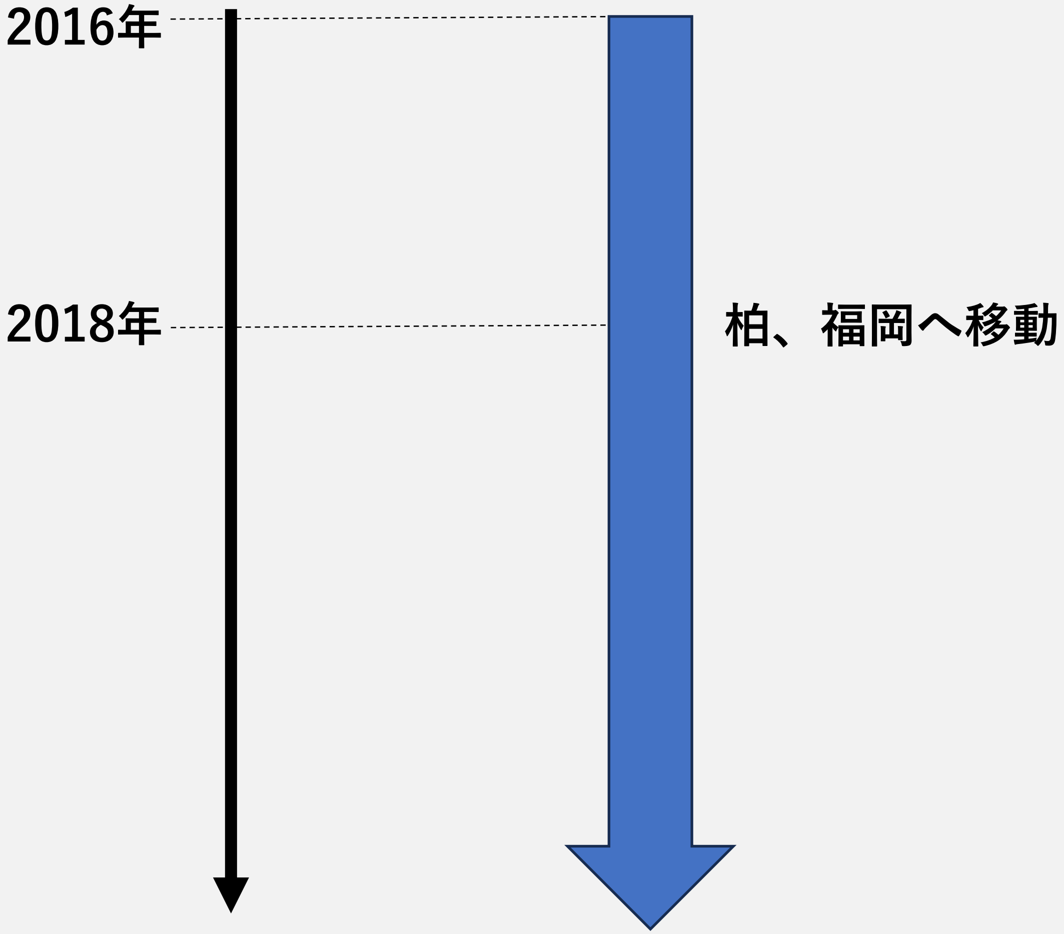
2022年度 世話人打ち上げ



2019年度 世話人打ち上げ

共同研究

森さんM1。大西さんが（実質の）指導教員に
共同研究スタート（森、大西、柏）



共同研究

森さんM1。大西さんが（実質の）指導教員に
共同研究スタート（森、大西、柏）

2016年

経路最適化法

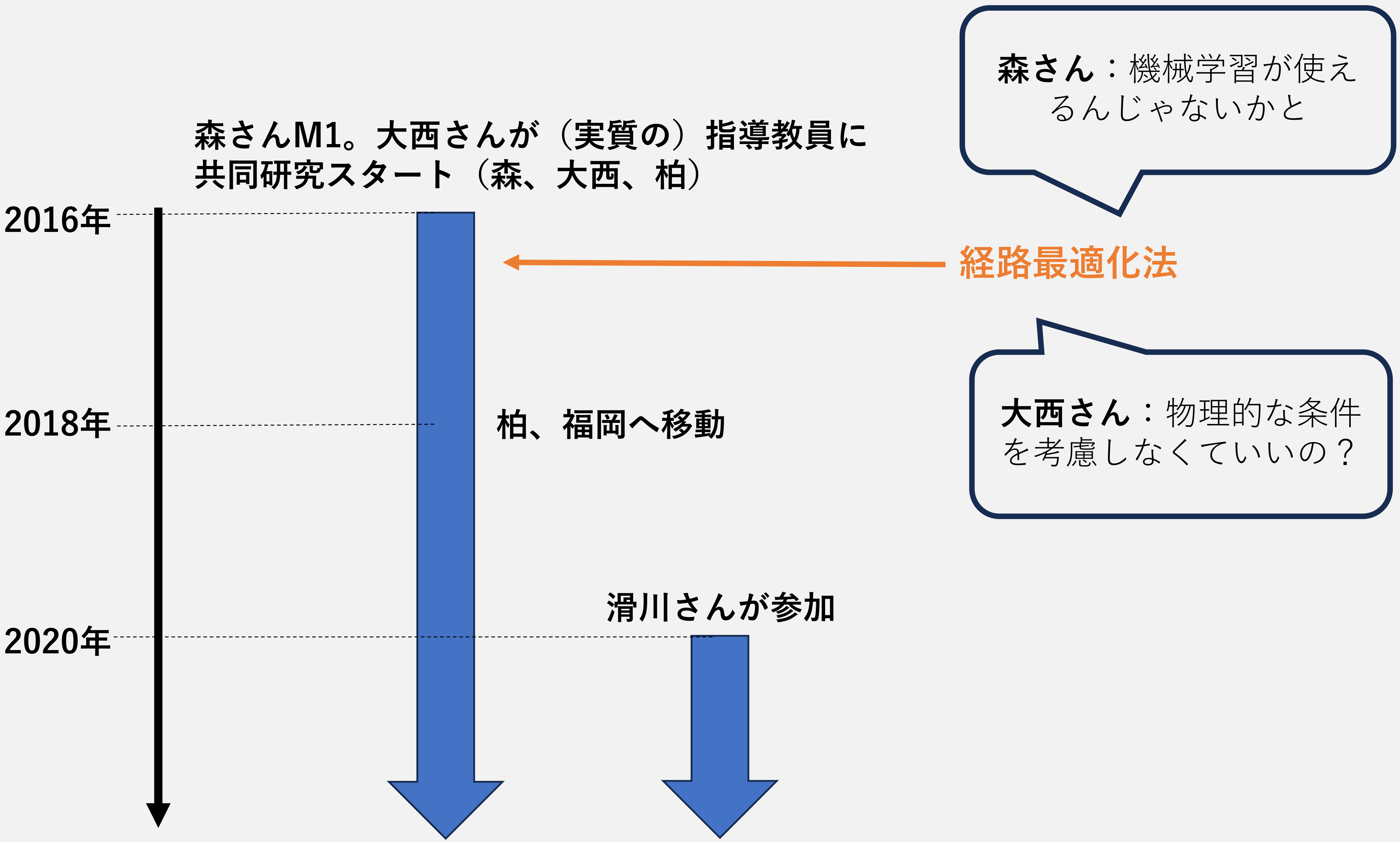
2018年

柏、福岡へ移動

森さん：機械学習が使えるんじゃないかと

大西さん：物理的な条件を考慮しなくていいの？

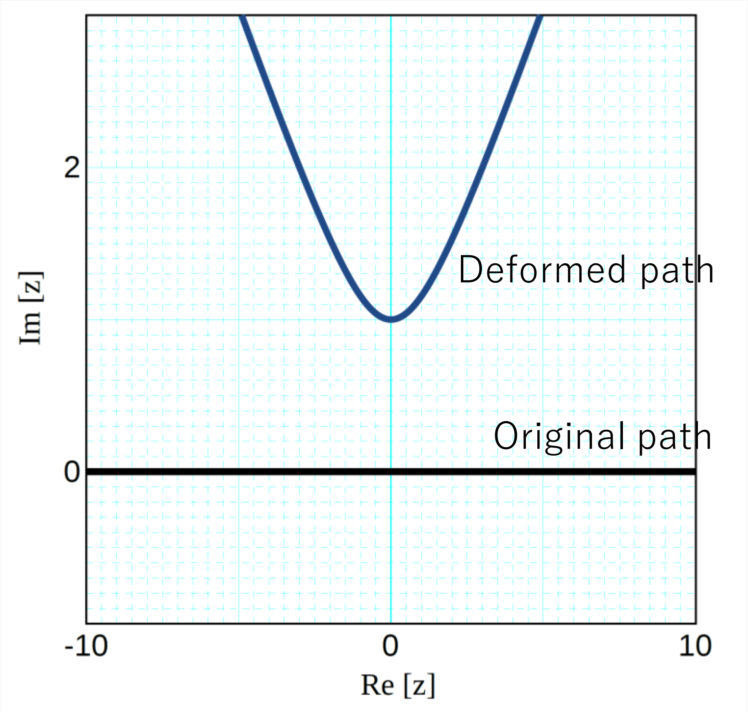
共同研究

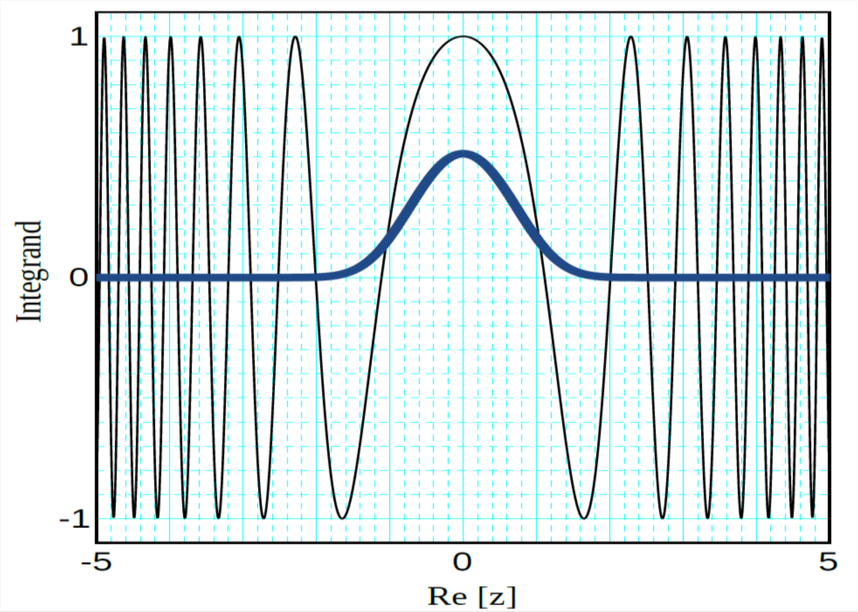

森さんM1。大西さんが（実質の）指導教員に
共同研究スタート（森、大西、柏）
2016年
2018年
2020年
柏、福岡へ移動
滑川さんが参加
経路最適化法
森さん：機械学習が使えるんじゃないかと
大西さん：物理的な条件を考慮しなくていいの？

符号問題

経路積分を（数値的に）行う際、被積分関数が強い振動を示し
キャンセレーションが発生する　→　**符号問題**

例)： Airy integral　$\mathrm{Ai}(a) = \int_{\mathbb{R}} \frac{\mathrm{d}x}{2\pi} \exp \mathrm{i} \left(\frac{x^3}{3} + ax \right)$





See also
Witten, AMS/IP Stud. Adv. Math. 50 (2011) 347

符号問題

QCD大分配関数

実数化学ポテンシャル

ディラック演算子

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}A\ Det[\not{\mathcal{D}}(A,\mu) + m]\, e^{-S_{YM}(A)}$$

クォークの寄与 $\in \mathbb{C}$

グルーオンの寄与 $\in \mathbb{R}$

➡ QCDの大分配関数において
有限実数化学ポテンシャル領域で**符号問題が発生**する

再重み付け法

多次元積分ではモンテカルロ法を用いることが多い

$$\langle O\rangle = \frac{\int O e^{-S} dx}{\int e^{-S} dx}$$

e-S ：ボルツマン因子

S が**複素数**になると確率と解釈できなくなるが、

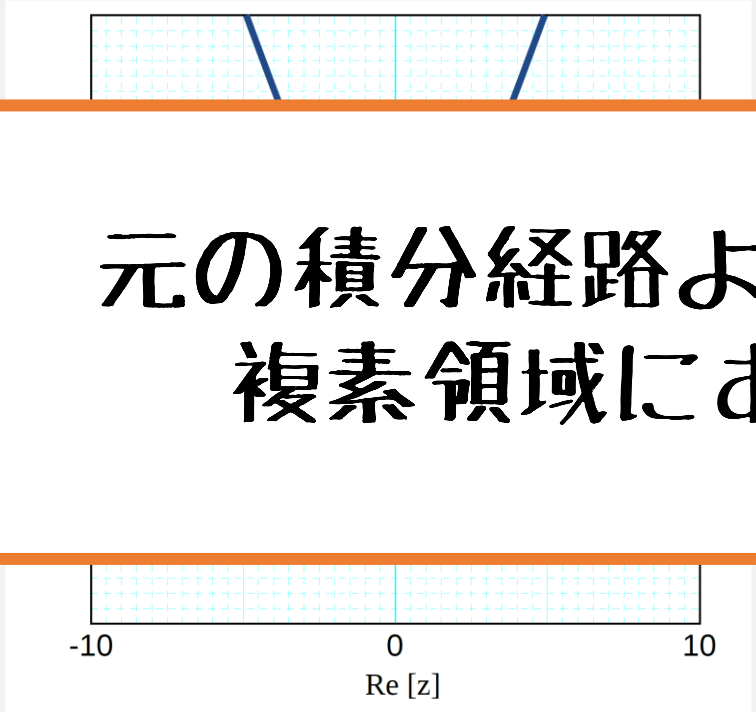
$$\langle O\rangle = \frac{\int O e^{-S} dx}{\int e^{-S} dx} = \frac{\int O \frac{e^{-S}}{|e^{-S}|} |e^{-S}| dx}{\int \frac{e^{-S}}{|e^{-S}|} |e^{-S}| dx} = \frac{\langle O e^{i\theta}\rangle_{pq}}{\langle e^{i\theta}\rangle_{pq}}$$

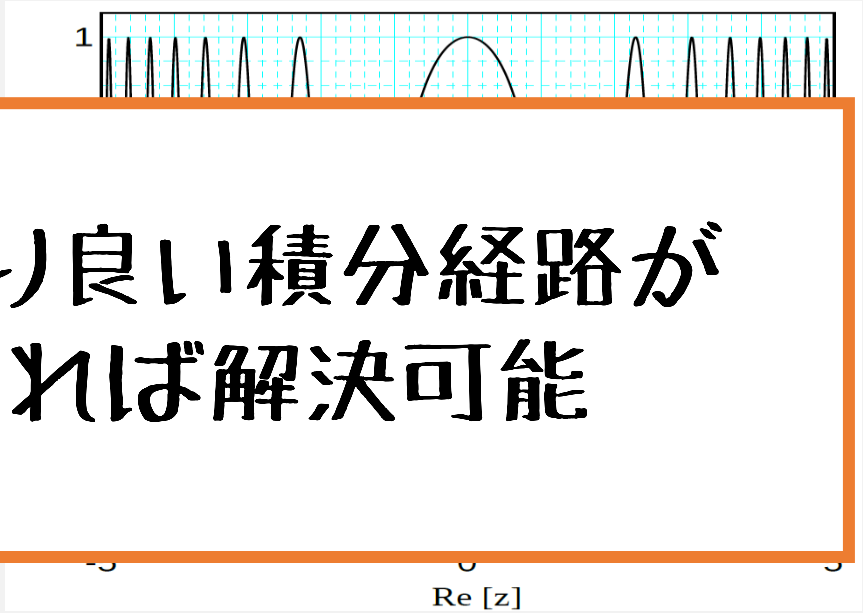
とすると計算可能。しかし $|\langle e^{i\theta}\rangle_{pq}|$ が小さいと精度が上がらない

積分変数の複素化

経路積分を（数値的に）行う際、被積分関数が強い振動を示し
キャンセレーションが発生する　→　**符号問題**

例)： Airy integral　　$\mathrm{Ai}(a) = \int_{\mathbb{R}} \frac{\mathrm{d}x}{2\pi} \exp \mathrm{i} \left(\frac{x^3}{3} + ax \right)$





元の積分経路より良い積分経路が
複素領域にあれば解決可能

See also
Witten, AMS/IP Stud. Adv. Math. 50 (2011) 347

積分変数の複素化

重要　：　積分変数を複素化する

$$x_i \quad \rightarrow \quad z_i \in \mathbb{C}$$

もちろんこのままでは元の理論と異なる理論になるので、
元の理論へ戻るような制限が必要

経路最適化法

我々の手法

経路最適化法

Y. Mori, K.K. and A. Ohnishi, Phys. Rev. D 96 (2017) 111501

経路最適化法

Y. Mori, K.K. and A. Ohnishi, Phys. Rev. D 96 (2017) 111501

経路最適化法の戦略

1. 符号問題の深刻さを表す**目的関数**を用意

↓

2. 積分経路を**複素積分変数空間**で変形

↓

3. 最も**良い経路**を複素積分変数空間で選択

つまり符号問題を最適化問題に落とし込む

経路最適化法

Y. Mori, K.K. and A. Ohnishi, PTEP 2018 (2018) 023B04

目的関数 ： 符号問題の深刻さを示す関数（一意ではない）

下記の関数を用意

$$\mathcal{F}[\underset{\text{媒介変数}}{z(t)}] = \frac{1}{2}\int dt \underbrace{|e^{i\theta(t)} - e^{i\theta_0}|^2}_{\text{各 t で位相を揃えようとする項}} \times \underbrace{|J(t)e^{-S(z(t))}|}_{\text{積分への寄与（重み）}}$$

試行関数 ：経路を変形させる関数

試行関数内部のパラメータを探索し、
目的関数を最適化することでより良い経路を求める

経路最適化法

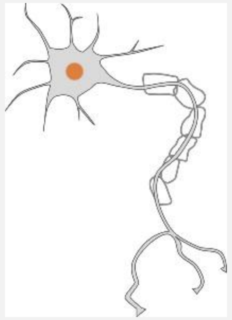
Y. Mori, K.K. and A. Ohnishi, PTEP 2018 (2018) 023B04

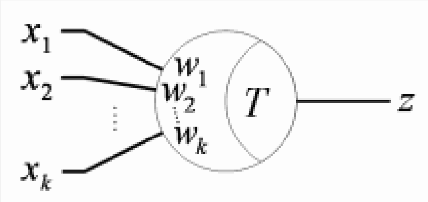
元々の経路最適化法では試行関数を手で用意していた

複雑な系では経路の変形に人の力が必要だとコストが掛かりすぎる

そこで、ニューラルネットワークを用いて経路の最適化を行う

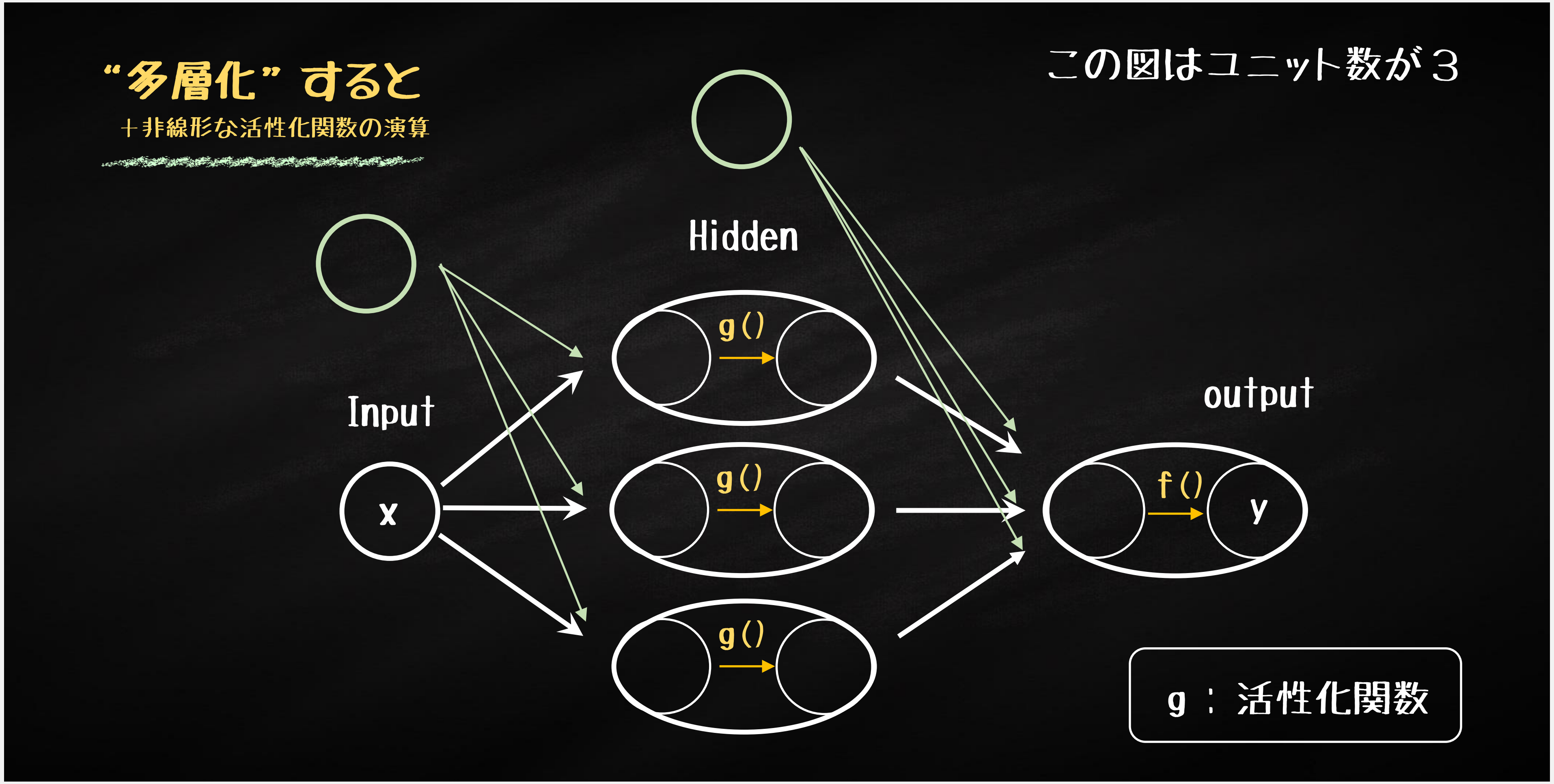
↑ 脳の働きを模した**数理モデル**
(有向グラフによる模型の準備)





データから良い積分経路を学ぶ

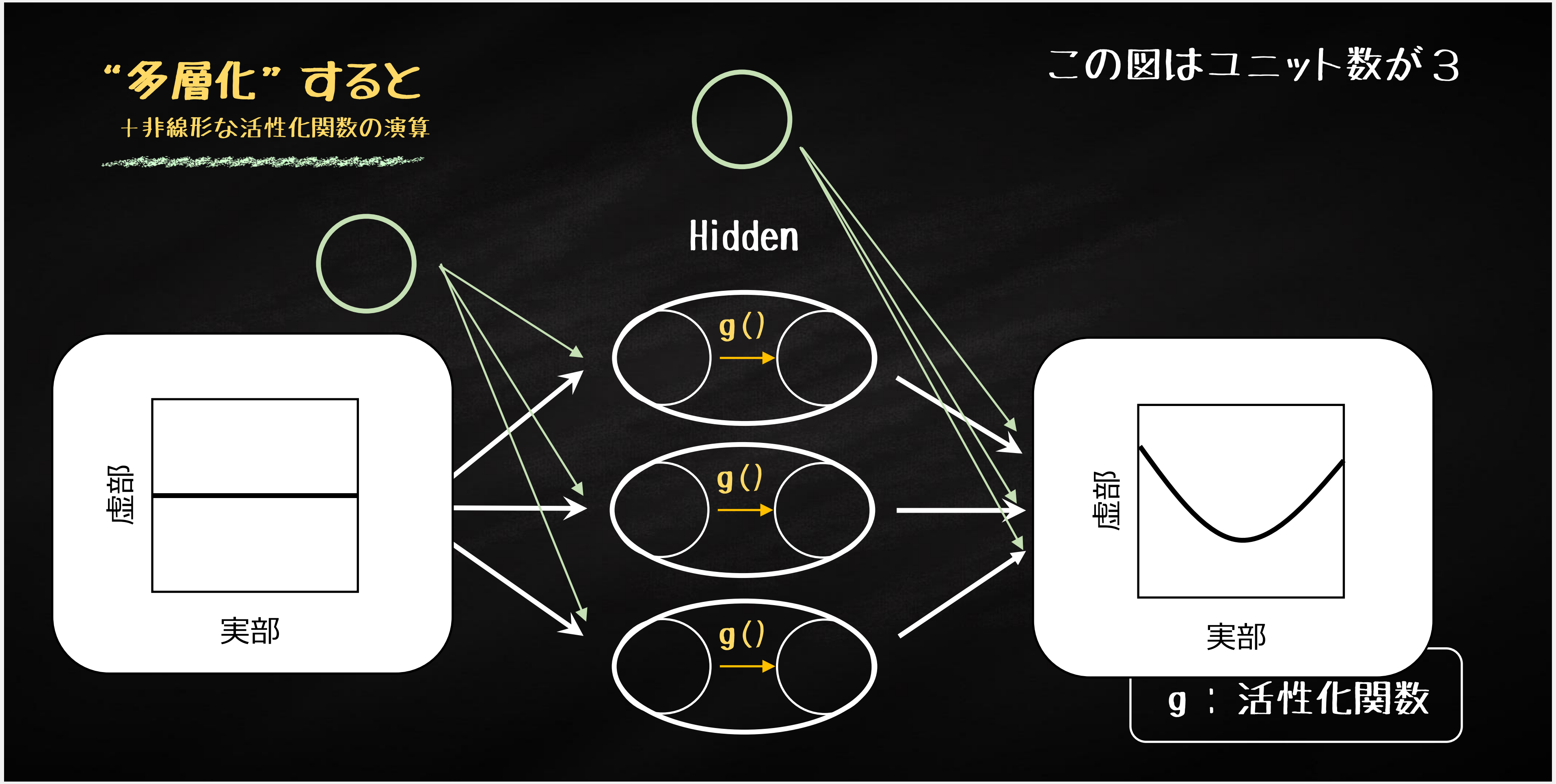
経路最適化法



"多層化" すると
＋非線形な活性化関数の演算
この図はユニット数が３
Hidden
Input
x
g()
g()
g()
output
f()
y
g：活性化関数

経路最適化法

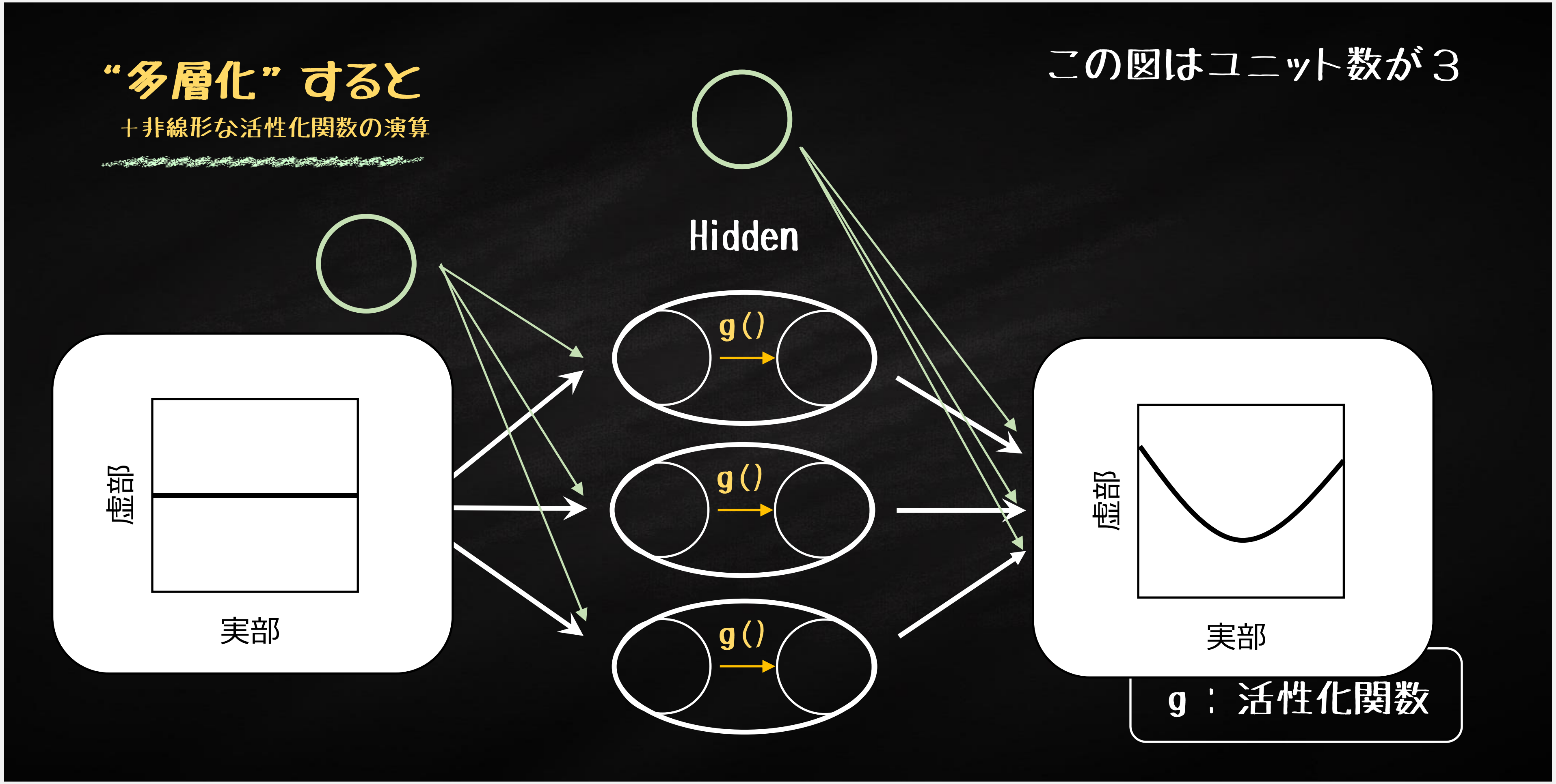
Y. Mori, K.K. and A. Ohnishi, PTEP 2018 (2018) 023B04



実際の計算では積分変数の**実部を入力**とし、**虚部を出力**する

経路最適化法

Y. Mori, K.K. and A. Ohnishi, PTEP 2018 (2018) 023B04

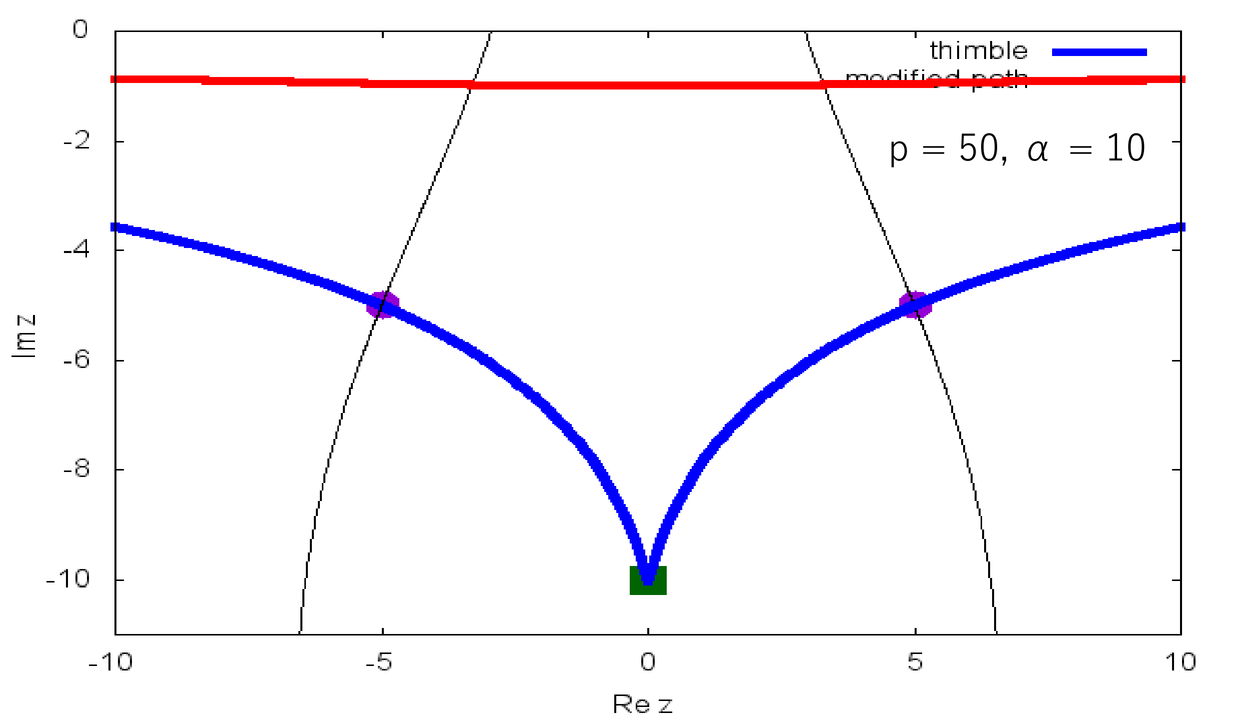


もう少し凝った複素化も試している Y. Namekawa, K.K., H. Matsuda, A. Ohnishi, H. Takase, Phys. Rev. D 108 (2023) 094504

（大西さんが言及していた物理的な条件を考慮したネットワーク）

経路最適化法

Before



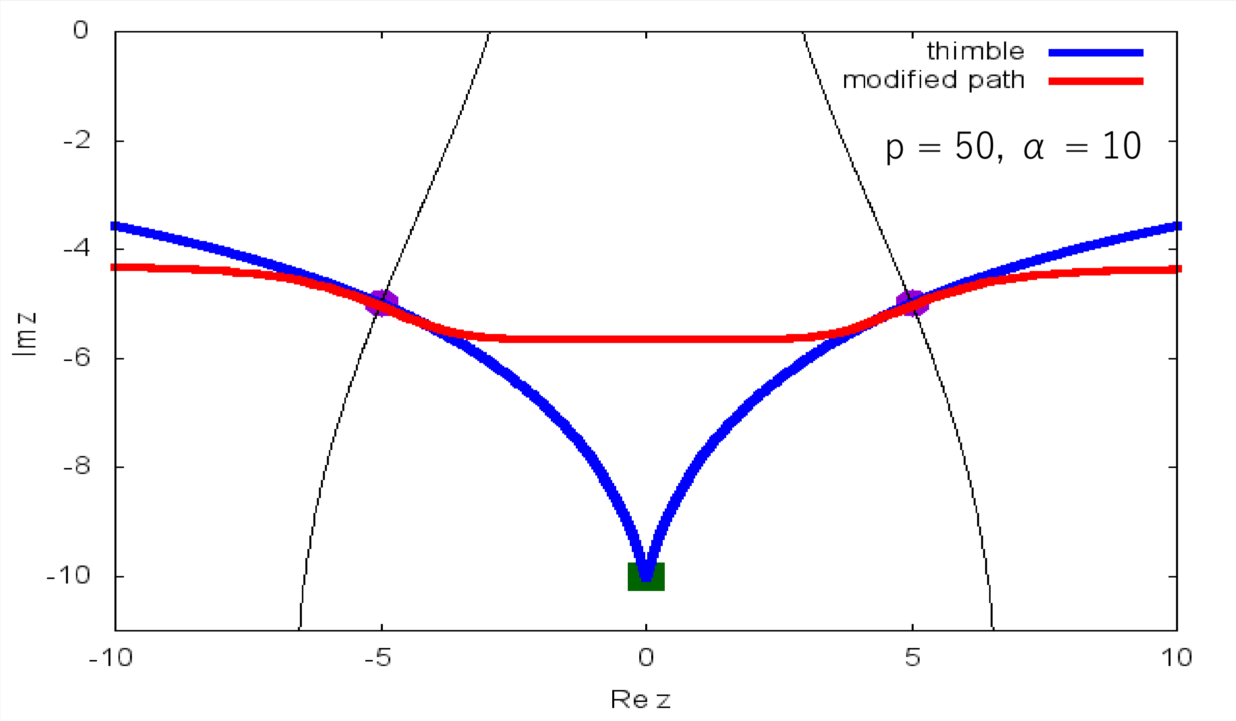
符号問題の厳しい簡単な模型

$$\mathcal{Z}_p = \int dx\ (x + i\alpha)^p e^{-\frac{x^2}{2}}$$

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

経路最適化法

After



符号問題の厳しい簡単な模型

$$\mathcal{Z}_p = \int dx\ (x + i\alpha)^p e^{-\frac{x^2}{2}}$$

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

更新ごとにより良い経路へ更新される

経路最適化法

大西さんとの最後の議論：5月13日（土）

その次の議論予定：5月27日（土）

この時に議論していた内容の論文

PHYSICAL REVIEW D **108,** 094504 (2023)

Application of the path optimization method to a discrete spin system

Kouji Kashiwa,[1,*] Yusuke Namekawa,[2] Akira Ohnishi,[3,†] and Hayato Takase

[1]*Department of Computer Science and Engineering, Faculty of Information Engineering, Fukuoka Institute of Technology, Fukuoka 811-0295, Japan*

[2]*Education and Research Center for Artificial Intelligence and Data Innovation, Hiroshima University, Hiroshima 730-0053, Japan*

[3]*Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto 606-8502, Japan*

(Received 19 September 2023; accepted 13 October 2023; published 13 November 2023)

The path optimization method, which is proposed to control the sign problem in quantum field theories with continuous degrees of freedom by machine learning, is applied to a spin model with discrete degrees of freedom. The path optimization method is applied by replacing the spins with dynamical variables, via the Hubbard-Stratonovich transformation, and the sum with the integral. The one-dimensional (Lenz-)Ising model with a complex coupling constant is used as a laboratory for the sign problem in the spin model. The average phase factor is enhanced by the path optimization method, indicating that the method can weaken the sign problem. Our result reproduces the analytic values with controlled statistical errors.

DOI: 10.1103/PhysRevD.108.094504

経路最適化法

大西さんとの最後の議論：5月13日（土）

その次の議論予定：5月27日（土）

この時に議論していた内容の論文

PHYSICAL REVIEW D **108,** 094504 (2023)

Application of the path optimization method to a discrete spin system

Kouji Kashiwa,[1,*] Yusuke Namekawa,[2] Akira Ohnishi,[3,†] and Hayato Takase

[1]*Department of Computer Science and Engineering, Faculty of Information Engineering, Fukuoka Institute of Technology, Fukuoka 811-0295, Japan*

[2]*Education and Research Center for Artificial Intelligence and Data Innovation, Hiroshima University, Hiroshima 730-0053, Japan*

[3]*Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto 606-8502, Japan*

(Received 19 September 2023; accepted 13 October 2023; published 13 November 2023)

The path optimization method, which is proposed to control the sign problem in quantum field theories with continuous degrees of freedom by machine learning, is applied to a spin model with discrete degrees of freedom. The path optimization method is applied by replacing the spins with dynamical variables, via the Hubbard-Stratonovich transformation, and the sum with the integral. The one-dimensional (Lenz-)Ising model with a complex coupling constant is used as a laboratory for the sign problem in the spin model. The average phase factor is enhanced by the path optimization method, indicating that the method can weaken the sign problem. Our result reproduces the analytic values with controlled statistical errors.

DOI: 10.1103/PhysRevD.108.094504

経路最適化法

研究テーマ：

離散的自由度への経路最適化法の適用

K.K., Y. Namekawa, A. Ohnishi, H. Takase,
Phys. Rev. D 108 (2023) 094504

1次元イジング模型

$$\mathcal{H} = -J\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} - h\sum_i \sigma_i$$

Hubbard-Stratonovich 変換

$$-\frac{1}{2J'}v^\top \tilde{K}v+\sum_j \ln\cosh[H'_j+(\tilde{K}v)_j]$$

J. Ostmeyer, et al.,
Comput. Phys. Commun. 265 (2021) 107978

Parallel tempering も利用

経路最適化法への導入

K.K., and Y. Mori, Phys. Rev. D 102 (2020) 054519

経路最適化法

研究テーマ：

離散的自由度への経路最適化法の適用

K.K., Y. Namekawa, A. Ohnishi, H. Takase,
Phys. Rev. D 108 (2023) 094504

1次元イジング模型

$$\mathcal{H} = -J\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} - h\sum_i \sigma_i$$

Hubbard-Stratonovich 変換

$$-\frac{1}{2J'}v^\top \tilde{K} v + \sum_j \ln\cosh[H'_j + (\tilde{K}v)_j]$$

J. Ostmeyer, et al.,
Comput. Phys. Commun. 265 (2021) 107978

Parallel tempering も利用

大西さん：せっかくだから二人で出したら？

経路最適化法への導入

K.K., and Y. Mori, Phys. Rev. D 102 (2020) 054519

経路最適化法

研究テーマ：
離散的自由度への経路最適化法の適用

K.K., Y. Namekawa, A. Ohnishi, H. Takase,
Phys. Rev. D 108 (2023) 094504

1次元イジング模型

$$\mathcal{H} = -J\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1} - h\sum_i \sigma_i$$

Hubbard-Stratonovich 変換

$$-\frac{1}{2J'}v^\top \tilde{K}v + \sum_j \ln\cosh[H'_j + (\tilde{K}v)_j]$$

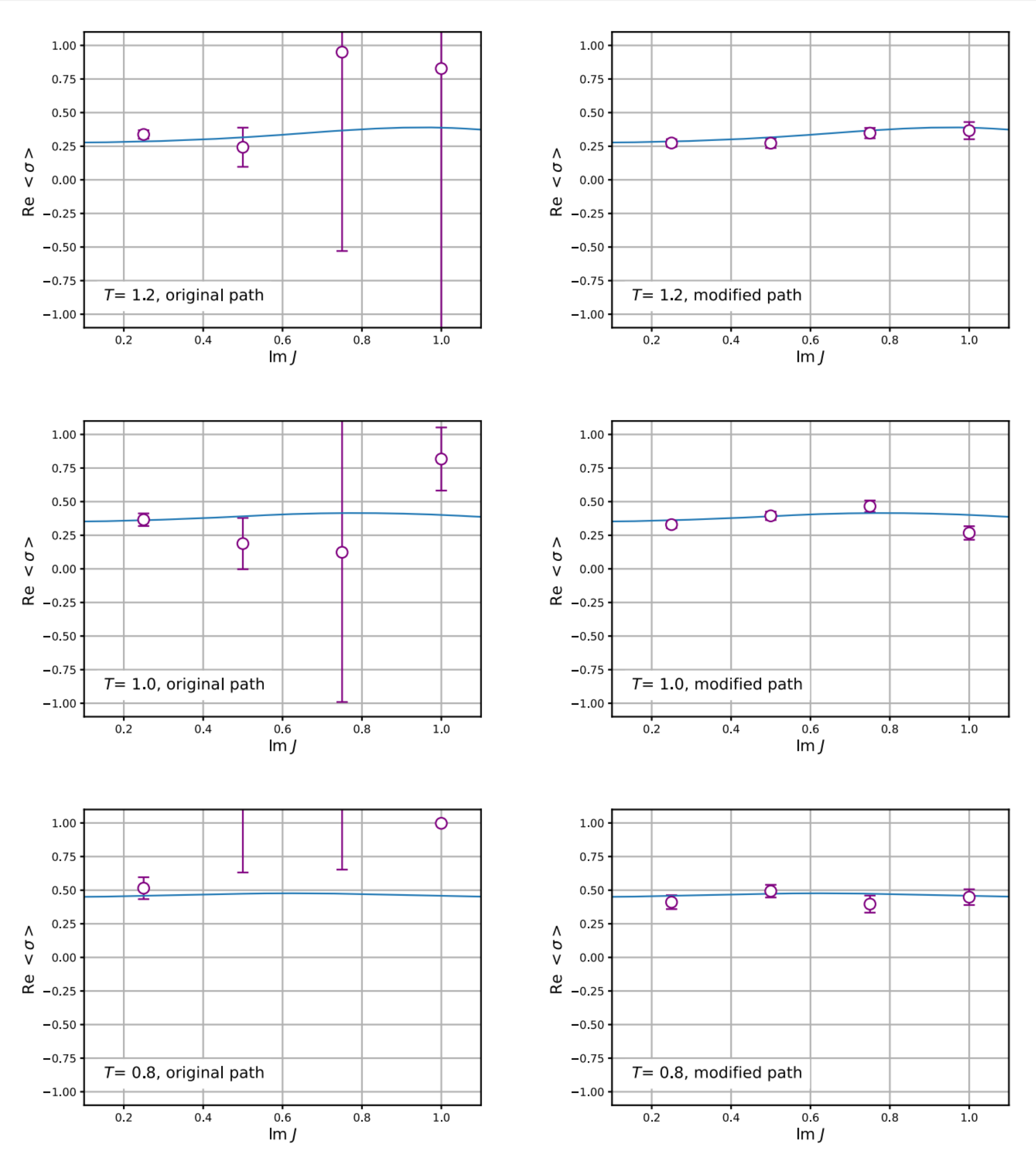
J. Ostmeyer, et al.,
Comput. Phys. Commun. 265 (2021) 107978

Parallel tempering も利用

経路最適化法への導入

K.K., and Y. Mori, Phys. Rev. D 102 (2020) 054519

最適化前　　**最適化後**



まとめ

最終目標：経路最適化法を3+1次元QCDに適用する

これまで

2次元複素$\lambda\phi^4$理論

格子PNJL模型

格子PNJL模型＋ベクター型相互作用

2次元 U(1)ゲージ理論

2次元 U(1)ゲージ理論＋Θ項

これから

1次元 Thirring 模型

Stephanov 模型

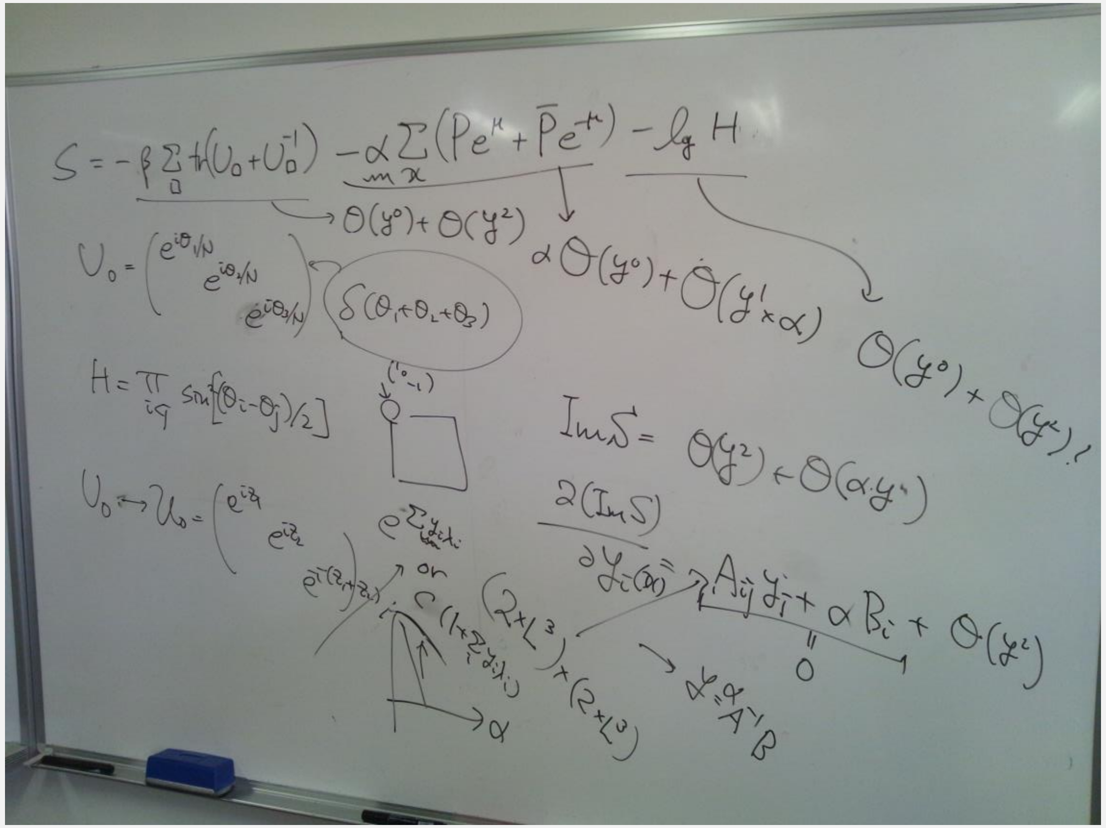
2次元 SU(2) ゲージ理論

・・・

3+1次元 QCD

まとめ

最終目標：経路最適化法を3+1次元QCDに適用する



まとめ

最終目標：経路最適化法を3+1次元QCDに適用する

もうしばらく

共同研究

をよろしくお願いします