経路最適化法による符号問題の解消への試み

森　勇登（京大理）

共同研究者：柏　浩司、大西　明（京大基研）

Y.M., K. Kashiwa, and A. Ohnishi, arXiv:1705.05605
Y.M., K. Kashiwa, and A. Ohnishi, arXiv:1709.03208

2017/11/20
ハドロン・原子核物理の理論研究最前線　2017

Contents

- Introduction
- 経路最適化法
- 複素 ϕ^4 理論
- Summary

Contents

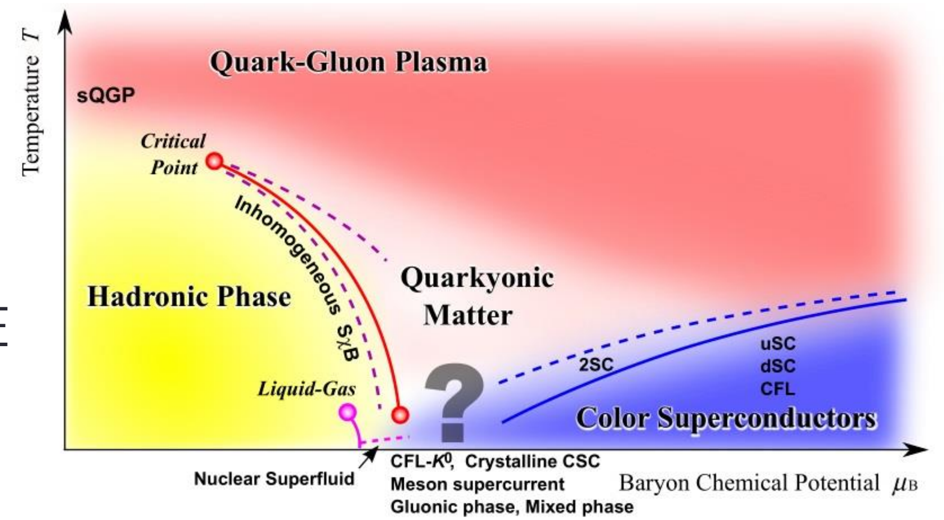
- Introduction
- 経路最適化法
- 複素 ϕ^4 理論
- Summary

Introduction

本研究の目的 (目標)

符号問題の解決

有限密度QCDに存在



K. Fukushima and T. Hatsuda, Rept.Prog.Phys. 74 (2011) 014001

戦略

- **最適化問題**に落とし込む
- コーシー（-ポアンカレ）の積分定理

符号問題

- 分配関数

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

- 物理量

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

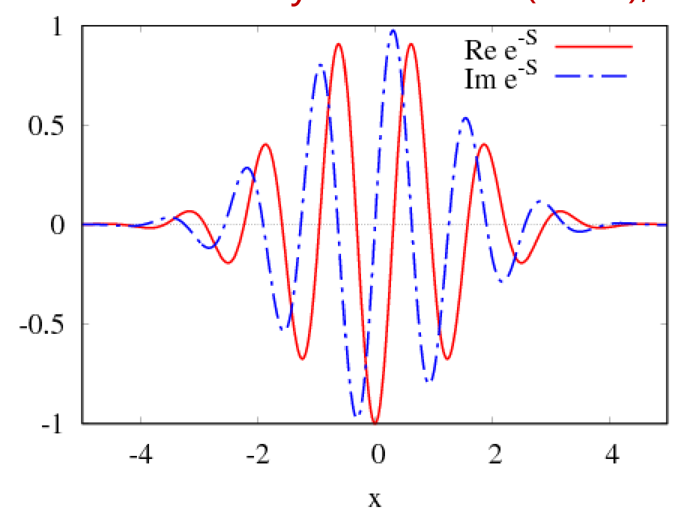
符号問題：$S[x] \in \mathbb{C}$

- 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, Phys. Rev. D92 (2015), 011501



符号問題

phase-reweighting method

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

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{\mathrm{pq}} = \frac{\int \mathcal{D}x \mathcal{O} |e^{-S}|}{\int \mathcal{D}x |e^{-S}|}$$

pq: phase-quench

⇒ $|e^{-S}|$ を確率と見なせる
モンテカルロ計算が可能に

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

・・・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

Lefschetz thimble

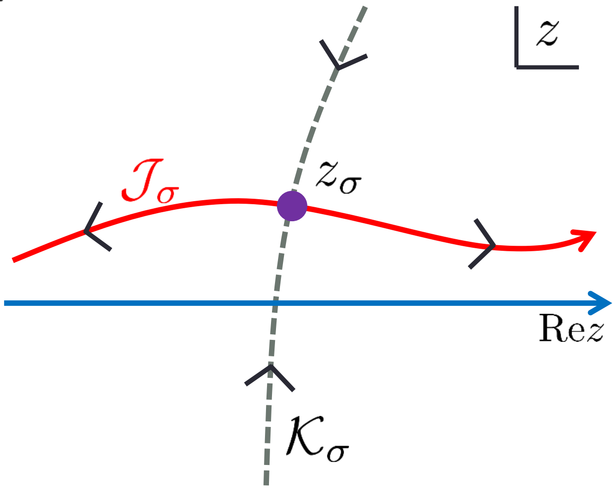
E. Witten, AMS/IP Stud. Adv. Math. 50 (2011) 347-446

Flow方程式

$$\frac{d}{dt}z(t) = \overline{\left(\frac{\partial S[z]}{\partial z}\right)}$$, 停留点： $$\left.\frac{\partial S}{\partial z}\right|_{z_\sigma} = 0$$

に対してthimbleを以下で定める

$$\begin{cases} \mathcal{J}_\sigma = \{z(t) \mid t \in \mathbb{R},\ z(-\infty) = z_\sigma\} \\ \mathcal{K}_\sigma = \{z(t) \mid t \in \mathbb{R},\ z(+\infty) = z_\sigma\} \end{cases}$$



元の積分領域 ($\mathbb{R}^n$) と等価な領域は

$$\mathcal{C} = \sum_\sigma n_\sigma \mathcal{J}_\sigma,\ n_\sigma = \langle \mathbb{R}^n, \mathcal{K}_\sigma \rangle$$

※コーシーの積分定理より
　物理量の期待値等に影響はない

Lefschetz thimble

- 重要な性質：
  thimble毎に作用の虚部は一定

$$\frac{d}{dt}S(z(t)) = \left|\frac{\partial S}{\partial z}\right|^2 \in \mathbb{R}$$

⇒ thimble上で積分すれば
打ち消し合いを防ぐことができる

- 欠点：
  - thimbleの構造(n_σ 等)を調べるのが面倒
    (cf. generalized Lefschetz thimble A. Alexandru *et al.*, JHEP 1605 (2016) 053)
  - 積分測度もFlow方程式から求める必要あり
    (cf. deep learning Lefschetz thimble A. Alexandru *et al.*, Phys. Rev. D 96 (2017) 094505)

Contents

- Introduction
- 経路最適化法
- 複素 ϕ^4 理論
- Summary

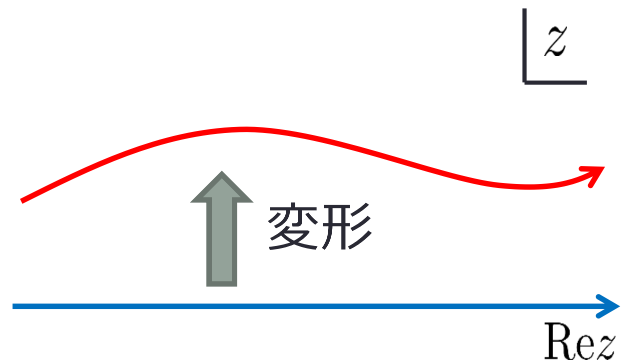
経路最適化法

Y.M., K. Kashiwa, and A. Ohnishi,
arXiv:1705.05605

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)

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

- 目的関数(最小化すべき関数)

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

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

経路最適化法

Y.M., K. Kashiwa, and A. Ohnishi,
arXiv:1705.05605

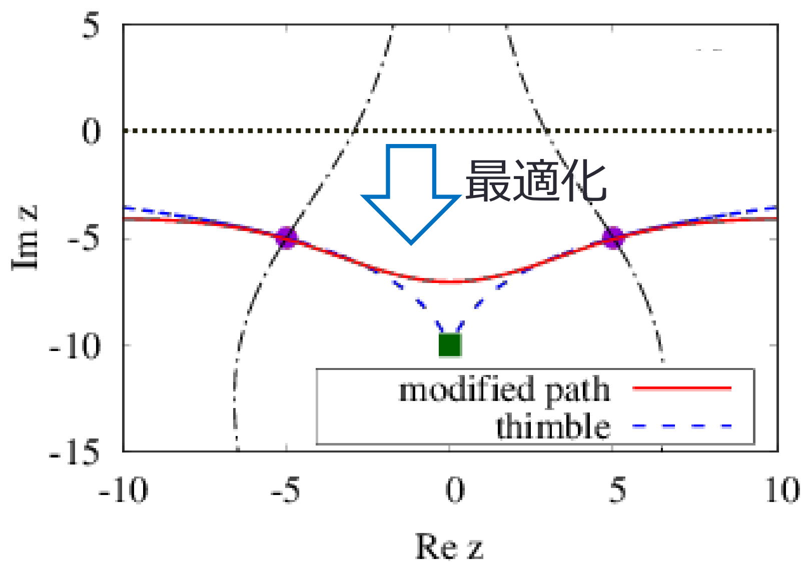
分配関数 J. Nishimura and S. Shimasaki, Phys.Rev. D92 (2015), 011501

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

積分経路

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

- c_iを最急降下法で最適化



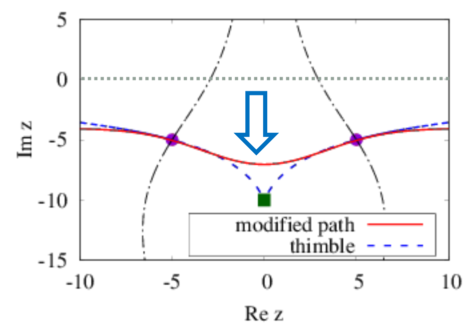
経路最適化法

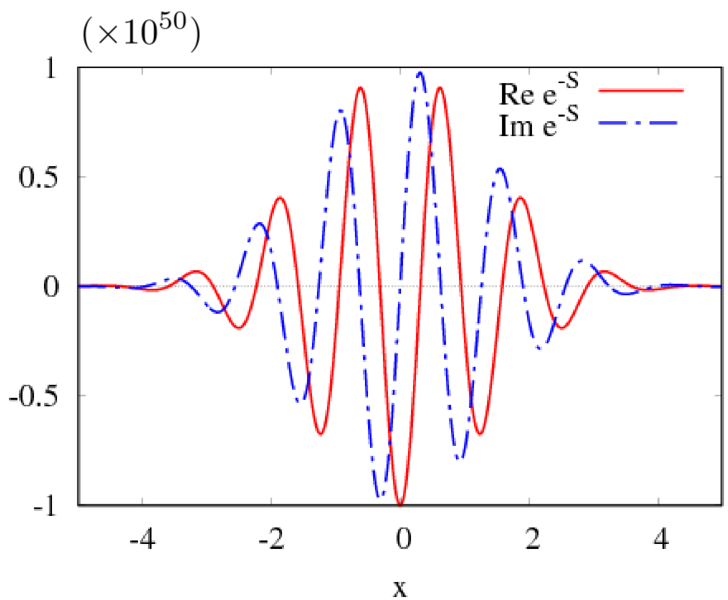
Y.M., K. Kashiwa, and A. Ohnishi, arXiv:1705.05605

分配関数

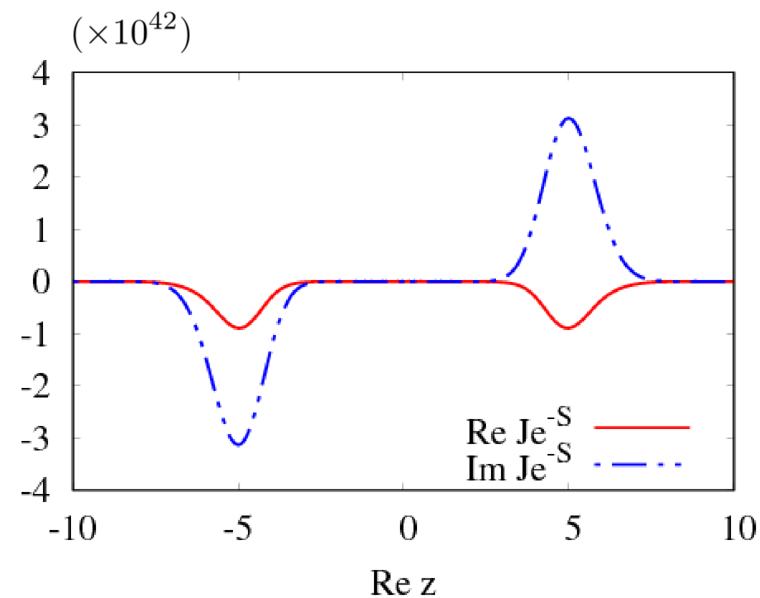
J. Nishimura and S. Shimasaki, Phys.Rev. D92 (2015), 011501

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





最適化



経路最適化法 | ニューラルネットワーク

- 格子上の場の理論・・・多変数
- 積分経路に適切な関数形は非自明

⇩

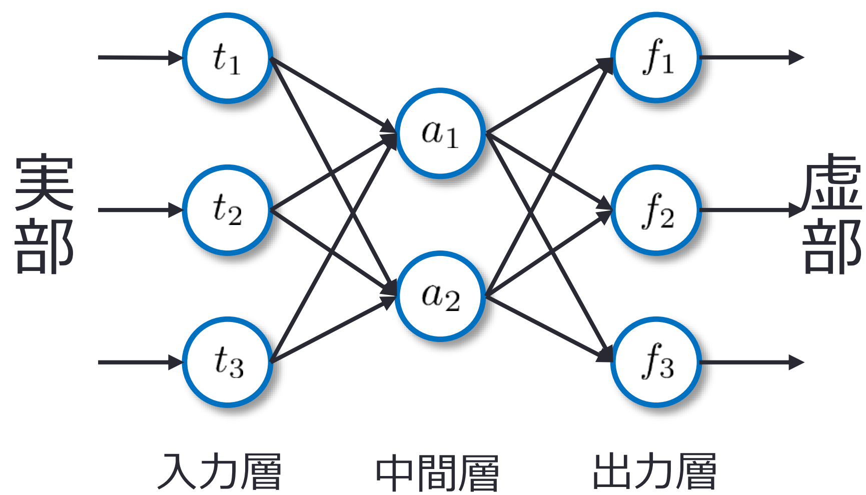
ニューラルネットワーク

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

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

$g(x)$:活性化関数(tanh等)

※W, b, α, β がパラメータ



Contents

複素 ϕ^4 理論

- 2D Lattice

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

- 積分変数

$\phi = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + i x_2)$ ・・・積分変数 $x_1,\ x_2$ について作用 S は解析的

$\longrightarrow$ $x_1,\ x_2$ それぞれを複素化

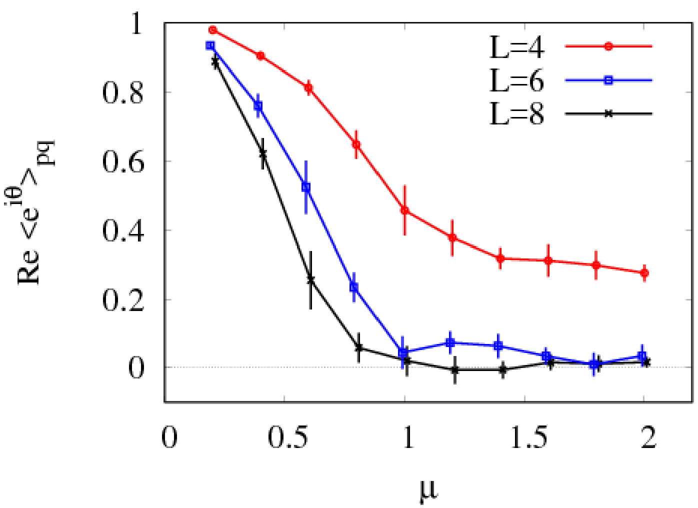
$$z_i(t) = t_i + i(\alpha_i f_i(t) + \beta_i)$$

以下の計算では$m=1,\ \lambda=1$の場合を考える

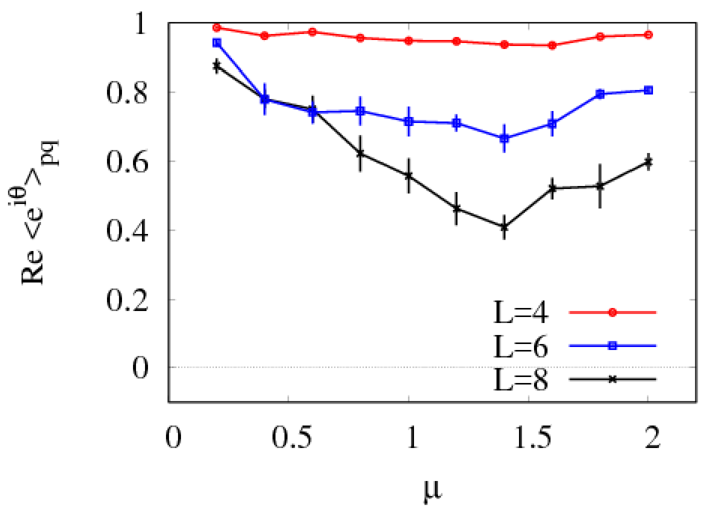
複素 ϕ^4 理論 | Result

Y.M., K. Kashiwa, and A. Ohnishi,
arXiv:1709.03208

● 平均位相因子



最適化



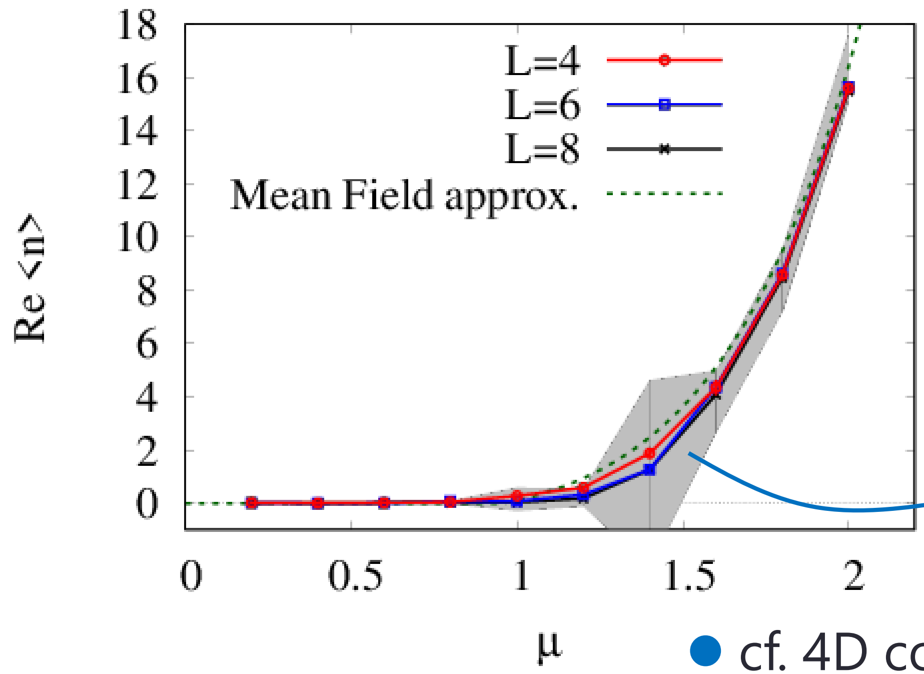
最適化によって改善
しかし体積依存性が残る…

最適化自体の最適化が必要？

複素 ϕ^4 理論 | Result

Y.M., K. Kashiwa, and A. Ohnishi, arXiv:1709.03208

● 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, Phys. Rev. Lett. 102, 131601 (2009)
  - Lefschetz thimble :
    H. Fujii, *et al.*, JHEP 1310, 147 (2013)

Contents

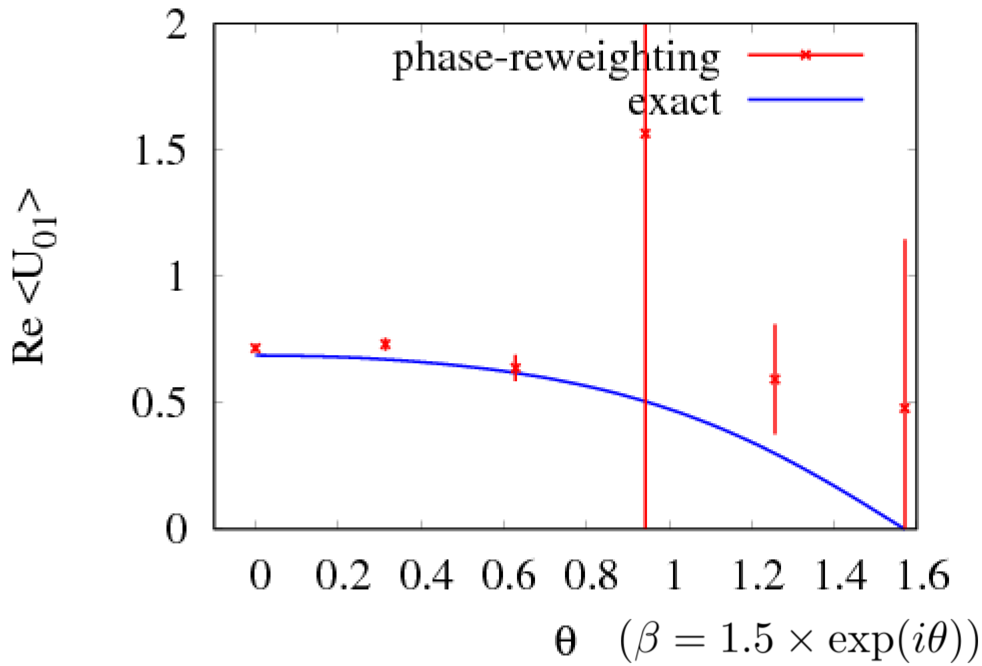
Summary

- 符号問題に取り組むために経路最適化法を提案
  - 試行関数を用いて経路を表現
  - 符号問題を最適化問題とみなす

- 1変数の系、2D lattice 複素 ϕ^4 模型に適用
  - 最適化によって平均位相因子を大きくでき、計算精度を上げられる
  - ニューラルネットワークを使うことで積分経路の関数形を陽に仮定する必要はなくなる

今後の予定

- SU(2) gauge with complex coupling



- 0+1 (or 1+1) dim. QCD