

令和 5 年 6 月 8 日現在

機関番号：82401

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2022

課題番号：18K13548

研究課題名（和文）機械学習を用いた場の量子論のモンテカルロ法の改良

研究課題名（英文）Toward improvement on Monte Carlo method by machine learning

研究代表者

田中 章詞（Tanaka, Akinori）

国立研究開発法人理化学研究所・革新知能統合研究センター・上級研究員

研究者番号：20791924

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、場の量子論における数値シミュレーション(MCMC)を機械学習で高速化する手法の開発を目的としていた。そのために、MCMCの実行中に機械学習モデルを訓練し続けることができ、かつ目的の理論への修正ステップも含めた汎用的手法である自己学習モンテカルロ法(SLMC)をいくつかの理論に応用した。最終的にはフェルミオンの入った非可換ゲージ群(SU(2))を持つ格子ゲージ理論への応用し、その正確性をチェックし、実際に自己相関が改善することまで示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

機械学習の手法を物理学に、より広くは科学分野に応用しようという動きが広がっているが、その場合におそらく最も重要な問題は、機械学習モデルの「間違い」を、精密さが要求される科学分野でどのように取り扱うかだと思われる。その点で、SLMCを用いたシミュレーションは（応用先の理論がわかっている場合には）、Metropolis-Hastingsテストを挟むことで正確さを担保するという意味で一つの解法を与えている。

研究成果の概要（英文）：The purpose of this project is developing Markov Chain Monte-Carlo (MCMC) method accelerated by machine learning techniques. To achieve it, I focus on so-called Self Learning Monte-Carlo (SLMC) method that enables training during execution of MCMC and modifying the bias of the trained model in the generation step, and I apply this method to some physical theories. In the end of this project, we have achieved to make SLMC supported simulation of lattice gauge theory with dynamical fermions and non-commutative gauge group (SU(2)). We have checked its results and shown reduction of the autocorrelation.

研究分野：機械学習、数理物理

キーワード：機械学習 場の量子論

1. 研究開始当初の背景

(1) 研究開始当初は、機械学習の手法が物理学の分野で使われ始めた時期と一年程度遅れてはいたが、ほぼ重なっており、特に物理系のモンテカルロ計算を高速化するという話も簡単な古典統計力学系にて提案されていた。素粒子物理学においてもモンテカルロ計算は主要な計算手法として確立しているが、研究開始当初ではそちらに機械学習手法を応用した例は、私の把握している範囲内では無かった。素粒子物理学におけるモンテカルロ計算は、パラメータを固定すれば単純な古典統計力学系とみなせるが、より計算を要する領域でのシミュレーションが必要であるため、機械学習手法で高速化することには大きな意義があった。

(2) 一方で、いかに訓練後の機械学習モデルといってもその推論が間違っているケースがある。これは、素朴に機械学習モデルをモンテカルロ計算のような精密計算に組み込むと、その数学的正当性が破綻しかねないことを意味する。従って、訓練後の機械学習モデルの間違いを修正するステップが必要であるが、モンテカルロ計算の一種である、Metropolis-Hastings法を用いることでこの問題を解決することができるということも にて指摘されており、Self-Learning Monte Carlo (SLMC) 法と名付けられていた (図1参照)。

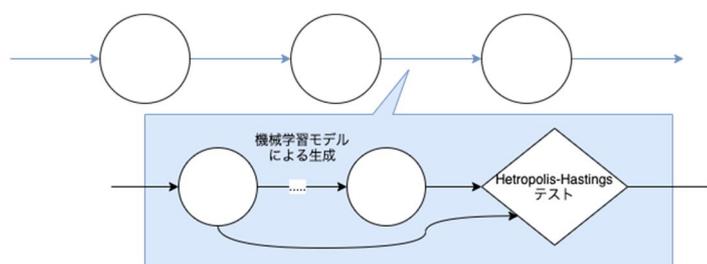


図1: SLMC の概要図。丸は対象となる物理系の配位を表す。

2. 研究の目的

(1) 本研究では、主に素粒子物理学、特に格子ゲージ理論と呼ばれる枠組みにおけるモンテカルロ計算の機械学習手法による高速化、特に上記の数学的問題がない形での応用を目的とした。

(2) なお、機械学習手法としては、対象となる物理系の配位を生成するモデル、すなわち生成モデルと呼ばれる枠組みの手法を使うため、生成モデルそのものの改善に関する研究を行うことも視野に入れていた。

3. 研究の方法

(1) 深層学習の手法を用いた生成モデル、深層生成モデルの使用の可能性を検討するため、その能力を調べる。特に研究開始当初に最先端モデルであった敵対的生成ネットワークに関する性能向上の研究を行った。

(2) 機械学習手法を応用して実行したシミュレーションの妥当性をチェックするために、実際に幾つかの物理量の期待値計算を、機械学習を使わないシミュレーションでモンテカルロ計算したものと比較することも考えた。また、このチェックに関しては上記の SLMC 法を適用することで自動的にパスするはずであり、場合によっては SLMC 手法の妥当性のチェックとしても使った。

(3) 本研究で用いるモンテカルロ法は、Markov 連鎖を用いるものであり、アルゴリズムの性能はいかにして独立な配位のサンプリングを実行できるか、という点にある。これを Markov 連鎖の各ステップにおける配位から計算される物理量の自己相関を測ることで調べた。一般に、自己相関が早く切れるほど、Markov 連鎖の中で独立なサンプルの割合が多いとみなせる。

4. 研究成果

(1) 深層生成モデルの研究として、敵対的生成ネットワークの性能向上アルゴリズムを提案した。研究成果は国際会議のプロシーディングス論文として発表され、どう国際会議でポスター発表を行った。敵対的生成ネットワークでは深層生成モデルに加え、その生成結果を「批判」する識別モデルを導入し、これらを互いに高め合うことで、より本物に近いデータ生成を達成する。当時の状況として、訓練後は生成モデルのみを用いて画像生成などを行っていたが、単純な生成だけではなく、訓練後の識別モデルによる棄却サンプリングを行うことで、精度向上が可能との報告があり、これに触発されて棄却サンプリングのように失敗した生成サンプルを捨てるの

ではなく、それを直接修正するようなアルゴリズムを提案、これでも実際に精度向上が見られることをいくつかのデータを用いた数値実験によって示した。

(2) 機械学習を用いたモンテカルロ計算における有望な手法として、上記の SLMC 手法が挙げられる。この SLMC 手法を簡単なニューラルネットワークを用いて量子モンテカルロのケースで行った。訓練にて、この分野でよく知られたニューラルネットワーク (Behler-Parrinello NN) を用いたが、これに深層ニューラルネットワークの訓練改善手法のバッチ正規化を応用した batch-atom 正規化を提案した。

(3) 素粒子物理学の格子ゲージ理論におけるモンテカルロ計算の高速化を、SLMC 手法と簡単なモデルのギブスサンプリングによる (条件付き) 生成モデルを組み合わせで行った。深層生成モデルの精度向上の研究を通じて、敵対的生成ネットワークのような生成モデルを物理学のターゲットに適用すると、ターゲットの物理系に生成した配位の見目は似ているが、モンテカルロ計算に対しての数学的正当性に欠けると判断したため、モデルとしては深層学習ではなく、より解釈性のある軽量なモデルを用いた。

また、ターゲットとなるゲージ理論にも様々なバリエーションがあるが、より現実のモデルに近い、

- 物質場 (フェルミオン) が存在しており
- それが非可換ゲージ場 (SU(2)) と結合した理論で
- 定義された時空が 4 次元 (空間 3 次元、時間 1 次元)

の場合での数値シミュレーションを行った。このようなより現実のモデルに近い設定での機械学習手法の応用は我々の論文が初である。

では SLMC の性質を生かし、機械学習モデルによる配位生成を行いながら、Markov 連鎖の中でさらに訓練を継続する手法をとった。図 2 に、実際に数値シミュレーションをして得られた配位から計算される期待値やアクセプト率を既存のモンテカルロ法 (ハイブリッドモンテカルロ法, HMC) と提案手法 (SLMC) で比較した図を載せる。機械学習モデルとして、物理的な解釈が可能な作用汎関数 (古典統計物理学におけるハミルトニアンに該当) を用い、様々な局所相互作用を入れられるように設定した。これらの相互作用は物質場 (フェルミオン) が重くなる領域における有効理論とも解釈でき、実際に適度に物質場 (フェルミオン) が重い場合は、HMC の自己相関時間よりも短い自己相関時間を SLMC で達成できることがわかった。ただし、物質場 (フェルミオン) が重い領域ではその限りでなく、その場合はより表現力のある機械学習モデルを使うなどの対策が必要だと思われる。このことは将来の研究で解決されることを期待したい。

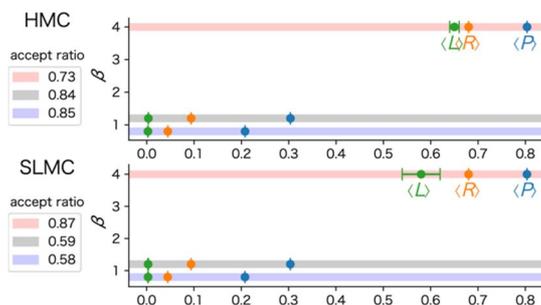


図 2: HMC と SLMC での期待値などの比較。
=4 の $\langle L \rangle$ がややずれている (統計エラーと思われる) が、それ以外はあっている。

< 引用文献 >

Liu, Junwei, et al. "Self-learning monte carlo method." *Physical Review B* 95.4 (2017): 041101.

Tanaka, Akinori. "Discriminator optimal transport." *Advances in Neural Information Processing Systems* 32 (2019).

Azadi, Samaneh, et al. "Discriminator rejection sampling." *arXiv preprint arXiv:1810.06758* (2018).

Nagai, Yuki, Masahiko Okumura, and Akinori Tanaka. "Self-learning Monte Carlo method with Behler-Parrinello neural networks." *Physical Review B* 101.11 (2020): 115111.

Nagai, Yuki, Akinori Tanaka, and Akio Tomiya. "Self-learning Monte Carlo for non-Abelian gauge theory with dynamical fermions." *Physical Review D* 107.5 (2023): 054501.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Akinori Tanaka	4. 巻 32
2. 論文標題 Discriminator optimal transport	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Advances in Neural Information Processing Systems	6. 最初と最後の頁 6816--6826
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Yuki Nagai, Masahiko Okumura, Akinori Tanaka	4. 巻 101
2. 論文標題 Self-learning monte carlo method with behler-parrinello neural networks	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 115111
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevB.101.115111	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yuki Nagai, Akinori Tanaka, Akio Tomiya	4. 巻 107
2. 論文標題 Self-learning Monte Carlo for non-Abelian gauge theory with dynamical fermions	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Physical Review D	6. 最初と最後の頁 1-16
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevD.107.054501	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 4件/うち国際学会 5件）

1. 発表者名 Akio Tomiya (RIKEN) Yuki Nagai (JAEA) Akinori Tanaka (RIKEN)
2. 発表標題 Self-learning Monte-Carlo for non-abelian gauge theory with dynamical fermions
3. 学会等名 APS April Meeting 2021（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Akinori Tanaka
2. 発表標題 Discriminator optimal transport
3. 学会等名 Advances in Neural Information Processing Systems, 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中章詞
2. 発表標題 機械学習によるマルコフ連鎖モンテカルロ法の高速化へ向けて
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会 シンポジウム 機械学習と物理 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Akinori Tanaka
2. 発表標題 Machine learning techniques to probe theoretical physics
3. 学会等名 Strings and Fields 2018 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Akinori Tanaka
2. 発表標題 Machine Learning and its application to lattice Monte Carlo simulations
3. 学会等名 5th Joint Meeting of the APS and the Physical Society of Japan (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Akinori Tanaka
2. 発表標題 Toward reducing autocorrelation in HMC
3. 学会等名 The Machine Learning in Geometry and Physics Workshop (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計1件

国際研究集会	開催年
Deep Learning And Physics 2019	2019年 ~ 2019年

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関