

修士論文要旨

スパースモデリング法による格子 QCD のハドロンスペクトル関数の推定 Estimation of Hadron Spectral Functions by Sparse Modeling Method in Lattice QCD

東北大学大学院理学研究科物理学専攻 原子核理論研究室

長瀬伊織

背景

身の周りの多くの物質中の原子の中心には、中性子や陽子から構成される原子核が存在する。さらに、中性子や陽子はクォークやグルーオンと呼ばれる素粒子で構成されていることが実験的に明らかになっている。現在、クォークには6種類のフレーバーが存在することが知られており、それらを構成要素としたバリオンやメソンは数多く発見されてきた。その中には同じクォーク組成・量子数を持つが、質量の異なるハドロンの状態が存在することも知られており、一番質量の軽い粒子を基底状態、それ以外を励起状態と呼んでいる。また、同じ量子数を持つ状態の質量エネルギー分布を示すものとしてスペクトル関数があり、それは例えばフレーバーが隠れたベクトル粒子の場合では e^-e^+ 散乱でのハドロン生成の断面積に関係する R 比に対応している。

これらのハドロンを構成する素粒子を記述する理論として量子色力学 (QCD) が定式化されているが、ハドロンの物理を完全に記述するに至っていない。これは、バリオンやメソンが存在するエネルギースケールでは QCD を用いて解析的に解くことが困難なためである。そこで、クォーク・グルーオンの自由度でハドロンの性質を理論的に調べるための有効な手法として格子 QCD による数値計算があり、これまでにさまざまな解析において実験と一致する結果を示してきた。本修士論文で扱うハドロンのスペクトル関数の解析手法についても、転送行列対角化法 [1] や最大エントロピー法 [2] が提案され、それらを用いた解析が従来行われてきたが、現在でも新しい解析手法の発展が必要とされている。

問題・手法

本修士論文では、格子 QCD により計算されたハドロンの2点相関関数 $D(\tau)$ から、スペクトル表示の関係式 $D(\tau) = \int d\omega K(\tau, \omega) A(\omega)$ を用いて、そのハドロンのスペクトル関数 $A(\omega)$ を推定する“逆問題”を扱った。この逆問題は、(1) 不良設定問題であること、(2) 2点相関関数のノイズにより解 (推定されるスペクトル関数) が不安定になること、の2つの困難がある。そこで本修士論文では、この問題に対しスパースモデリング法を応用することを提案し、実際に η_c メソンの2点相関関数のデータに適用して、この新しい解析手法の有用性についての精査を目的とした。この手法は不良設定問題に対し、解のスパース性を仮定することで一意に解を決定する方法であり、具体的に L1 ノルム正則化 (LASSO)[3] という形で上記の問題を定式化した。この際、スパース性は求めるスペクトル関数自体に課すのではなく、カーネル $K(\tau, \omega) = e^{-\omega\tau}$ (を離散化した行列) を特異値分解した基底に変換したスペクトル関数に対して仮定する。このように仮定した理由は、カーネルの最大特異値と最小特異値の比である条件数が非常に大きいことに由来する解の不安定性を取り除くためである。よって、スパース性の仮定自体は問題を解く上で上記に挙げた2つの困難を同時に解決する仮定になっている。さらに、本修士論文では上記で定式化された問題を交互方向乗数法 (ADMM)[4] というアルゴリズムを用いて数値的に解いた。このアルゴリズムでは、スパース性のパラメータ λ を固定して解を推定するため、このパラメータについて最適なものを決定する必要がある。そこで本修士論文では、カイ二乗誤差の値の振る舞いを用いて、オーバーフィットとアンダーフィットということに注目してこのパラメータを決定した。

結果

まず、最適なスパース性のパラメータ λ を決定するため様々な λ に対するカイ二乗誤差の振る舞いを調べ、最適なものを $\lambda = 0.5$ と決定し、その際にどのようなスペクトル関数が得られる調べた。さらに、アンダーフィット領域の $\lambda = 3000$ やオーバーフィット領域の $\lambda = 0.0001$ についても詳細に調べ、結果の比較を行った。ここで、最適なパラメータ $\lambda = 0.5$ で推定されたスペクトル関数は図1のように2ピーク構造のスペクトル関

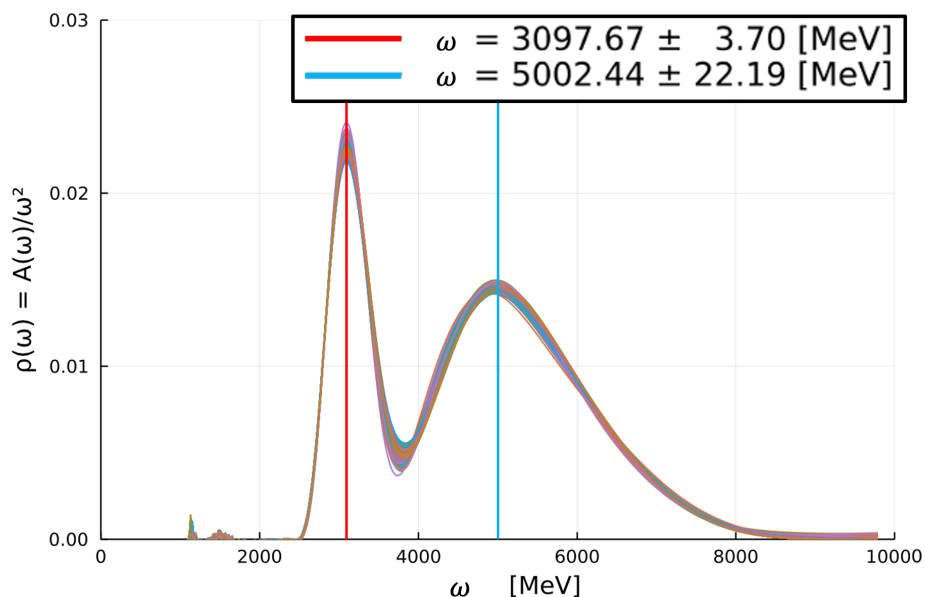


図1 格子QCDによって得られた η_c メソンの2点相関関数から、スパースモデリング法（ADMM アルゴリズムのパラメータ $\lambda = 0.5$ ）で得られた η_c メソンのスペクトル関数 $\rho(\omega)$ 。各データ標本に対し求めたスペクトル関数を同時にプロットしているので、複数の線が重なっている。また、各ピーク位置の平均値と誤差はブートストラップ法で評価している。

数が解として得られる。この解は、データ標本の選び方によらず安定的な形をしており、スパース性の仮定により解の不安定性を取り除けていることが確かめられた。また、より大きな λ 、例えば $\lambda = 3000$ では一つの幅の広いピーク構造を持つ安定的な解が得られたので、大局的な構造は捉えられるがスペクトル関数の詳細な形は捉えきれなくて、アンダーフィットの状態であると判断できる。

さらに、より小さな λ 、例えば $\lambda = 0.0001$ では、データ標本の選び方によって大きく形が異なる解が得られる。このことは、データ標本ごとの異なるノイズに強く依存してしまうオーバーフィットの状態であると考えられる。ただし、この小さな λ を選び、ジャックナイフ法を用いてデータ標本をリサンプリングした場合には、従来の最大エントロピー法で求められた解と近い解が得られることを確認した。このことから、モデル依存のないスパースモデリングの解析から、最大エントロピー法の解がオーバーフィット領域の解をモデルを導入することによって、安定化させることに成功していると判断できる。

さらに $\lambda = 0.5$ 、及び 0.0001 のとき、エネルギーが最小なピークの位置について比較すると安定的に存在している。このことから、スパースモデリング法では基底状態の情報はスパース性を仮定して安定的に抽出できるが、励起状態の情報はデータのノイズに強く依存するため、その情報の抽出が困難であると結論づけられる。

これらの解析結果により、今後の展望としては転送行列対角化法との併用により、ハドロンの2点相関関数のデータに対して各エネルギー状態の情報を射影し、射影後のデータに対してスパースモデリング法を用いるハイブリットな活用法が考えられる。これは、各状態の情報のみに射影されたデータからは本質的に1ピーク構造のスペクトル関数しか得られないが、その概形についてわからないため解のモデルを仮定しないスパースモデリング法が有効となるためである。

参考文献

- [1] M. Lüscher, U. Wolff. Nuclear Physics B, 339(1):222-252, 1990.
- [2] M. Asakawa, *et. al.* Progress in Particle and Nuclear Physics, 46(2):459-508, 2001.
- [3] R. Tibshirani. Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological), 58(1):267-288, 1996.
- [4] S. Boyd, *et. al.* Foundations and Trends in Machine Learning, 3(1):1-122, 2011.