

What can PINN do?

-PDE, lattice fermions and topology-

近畿大学 三角樹弘

目次

1. PINNの非線形シュレディンガー方程式への応用
2. NNはGinsparg-Wilson関係式から格子カイラルフェルミオンを見つけられるか？
3. NNは格子上のGW関係式を見つけられるか？

PINNの非線形シュレディンガー方程式への応用

PINN(Physics-Informed Neural Network)とは?

Raissi, et.al. (2017)

損失関数に物理的な制約（**初期状態**，**境界条件**，**微分方程式**など）を組み込み学習させ，物理的に妥当な条件下で系の性質を調べる手法.



従来のニューラルネットワークと違い数値解などの学習データが必要ない.

物理的な制約を組み込んでいるため合理的な結果を得る可能性が高い.

PINN(Physics-Informed Neural Network) for PDE

Raissi, et.al. (2017)

$$u_{\theta}(t, \mathbf{x}) \text{ の偏微分方程式 : } \mathcal{R}_{\theta} = \frac{\partial u_{\theta}}{\partial t}(t_r, \mathbf{x}_r) + \mathcal{N}[u_{\theta}](t_r, \mathbf{x}_r)$$

以下の平均二乗誤差損失を足し合わせた複合損失関数を最小にするよう学習:

$$\mathcal{L}(\theta) = \lambda_{ic}\mathcal{L}_{ic}(\theta) + \lambda_{bc}\mathcal{L}_{bc}(\theta) + \lambda_r\mathcal{L}_r(\theta) \quad \lambda_{ic}, \lambda_{bc}, \lambda_r : \text{hyper parameters}$$

$$\mathcal{L}_{ic}(\theta) = \frac{1}{N_{ic}} \sum_{i=1}^{N_{ic}} |\mathbf{u}_{\theta}(0, \mathbf{x}_{ic}^i) - \mathbf{g}(\mathbf{x}_{ic}^i)|^2,$$

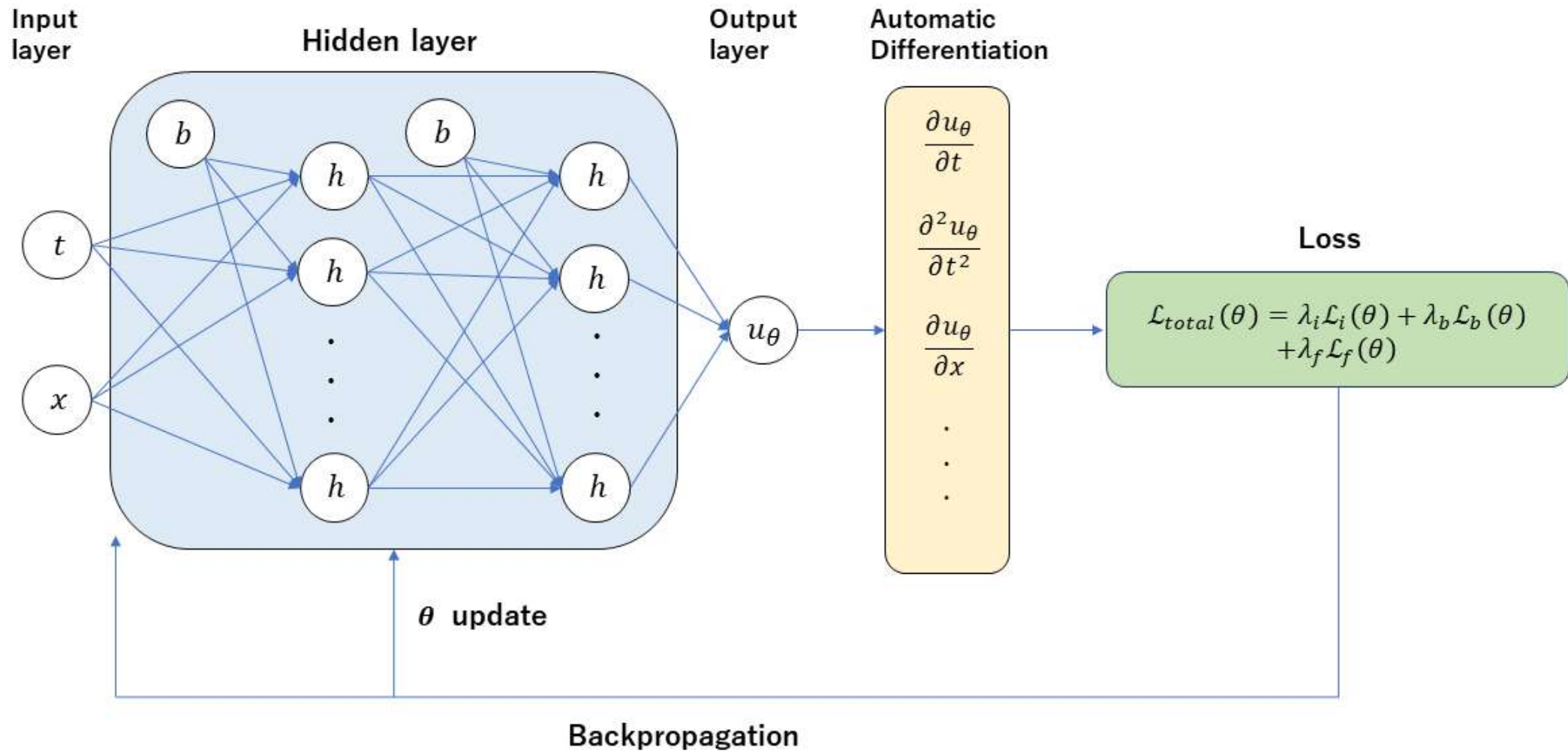
$$\mathcal{L}_{bc}(\theta) = \frac{1}{N_{bc}} \sum_{i=1}^{N_{bc}} |\mathcal{B}[\mathbf{u}_{\theta}](t_{bc}^i, \mathbf{x}_{bc}^i)|^2,$$

$$\mathcal{L}_r(\theta) = \frac{1}{N_r} \sum_{i=1}^{N_r} |\mathcal{R}_{\theta}(t_r^i, \mathbf{x}_r^i)|^2,$$

$u_{\theta}(t, x)$: DNNの出力
$\mathcal{L}_{ic}(\theta)$: 初期状態の損失関数
$\mathcal{L}_{bc}(\theta)$: 境界条件の損失関数
$\mathcal{L}_r(\theta)$: 偏微分方程式の損失関数
$\{\mathbf{x}_{ic}^i\}_{i=1}^{N_{ic}}$: 初期状態のトレーニングデータ
$\{t_{bc}^i, \mathbf{x}_{bc}^i\}_{i=1}^{N_{bc}}$: 境界条件のトレーニングデータ
$\{t_r^i, \mathbf{x}_r^i\}_{i=1}^{N_r}$: 方程式のトレーニングデータ

PINN(Physics-Informed Neural Network) for PDE

Raissi, et.al. (2017)



b : bias , h : Activation function, $\lambda_i, \lambda_b, \lambda_f$: Hyperparameter

1. 調和振動子の重ね合わせ状態の時間発展

- 調和振動子のシュレディンガー方程式

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H_x \psi(x, t), \quad H_x = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\omega^2}{2} x^2$$



$$\psi(x, t) = u + iv, \quad u = \text{Re}(\psi), v = \text{Im}(\psi)$$

$$\left(-\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{\omega^2}{2} x^2 \right) + i \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{\omega^2}{2} x^2 \right) = 0$$

- 初期状態: 基底状態と第一励起状態の重ね合わせ状態

$$\psi(x, t = 0) = u(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} x e^{-x^2/2} + \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2} \right], \quad v(x, 0) = 0$$

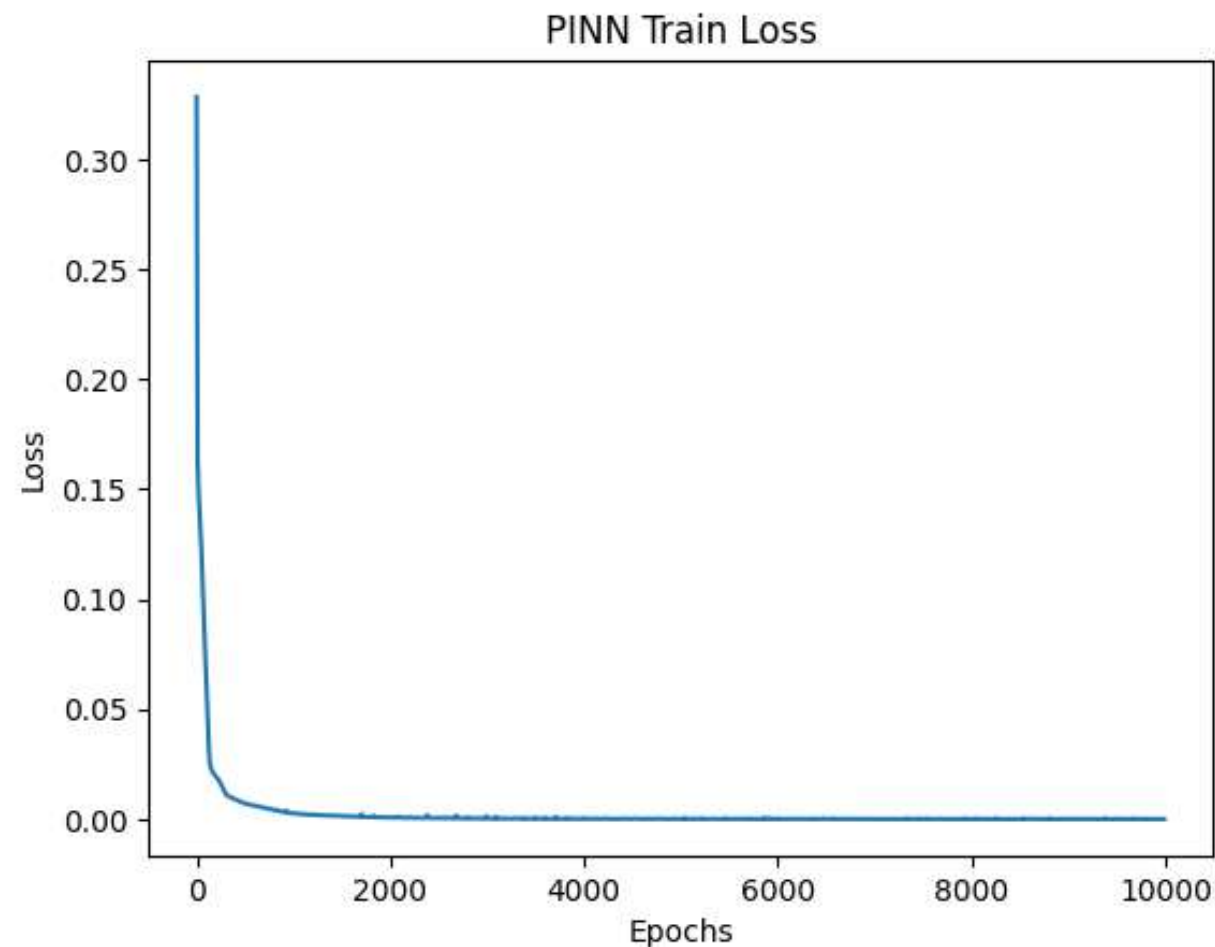
- 境界状態

$$u(x_0, t) = 0, v(x_0, t) = 0, \quad x_0 \in \{-\pi, \pi\}$$

1. 調和振動子の重ね合わせ状態の時間発展

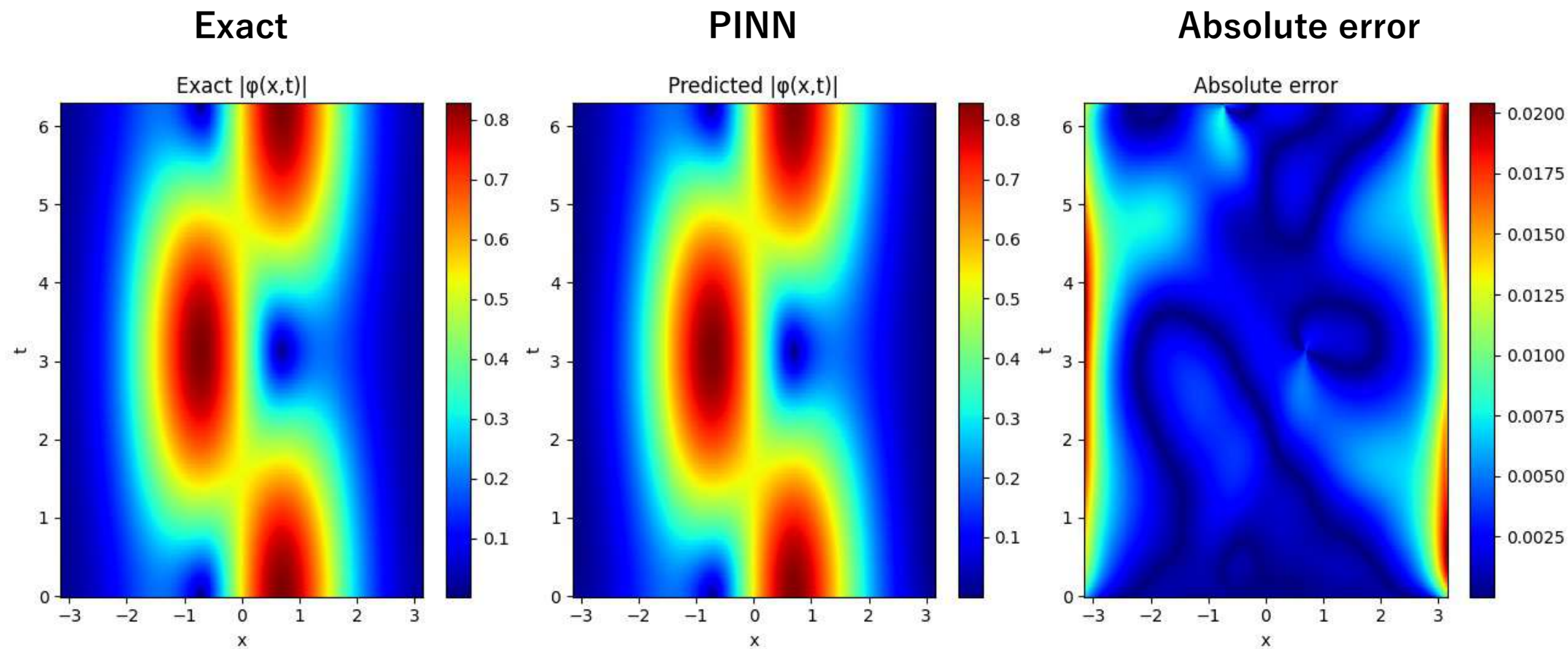
layer	ニューロン数	活性化関数	Initial weight
input	2		
1st	40	SiLU	Xavier
2nd	40	SiLU	Xavier
3rd	40	SiLU	Xavier
4th	40	SiLU	Xavier
output	2		Xavier

- 最適化手法: Adam optimizer
- $\eta = 0.001$, $\beta_1 = 0.9$, $\beta_2 = 0.999$
- 学習データ数: i.c. 300, b.c. 300, inside 3000
- 学習回数: 10000
- 学習時間: 163s
- 損失関数の最終値: $1.8567e-04$



1. 調和振動子の重ね合わせ状態の時間発展

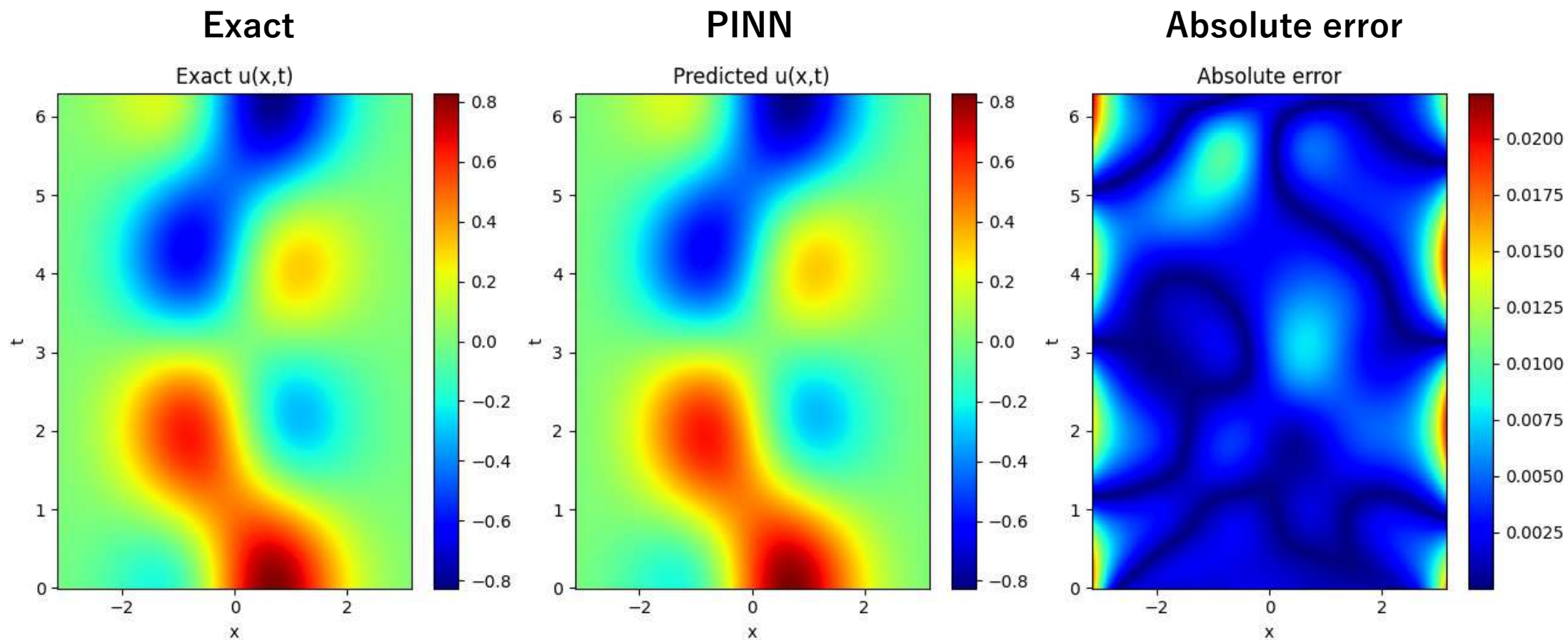
Cf.) Shah, Stiller, Hoffmann, Cangi (2022)



境界を除いて高い一致！

1. 調和振動子の重ね合わせ状態の時間発展

Cf.) Shah, Stiller, Hoffmann, Cangi (2022)



境界を除いて高い一致！

2. 非線形シュレディンガー方程式

- 時間依存Gross-Pitaevskii方程式

$$i\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} - V(x,t)\psi(x,t) - |\psi(x,t)|^2\psi(x,t) = 0, \quad x \in [-\pi, \pi], t \in [-1.5, 1.5]$$

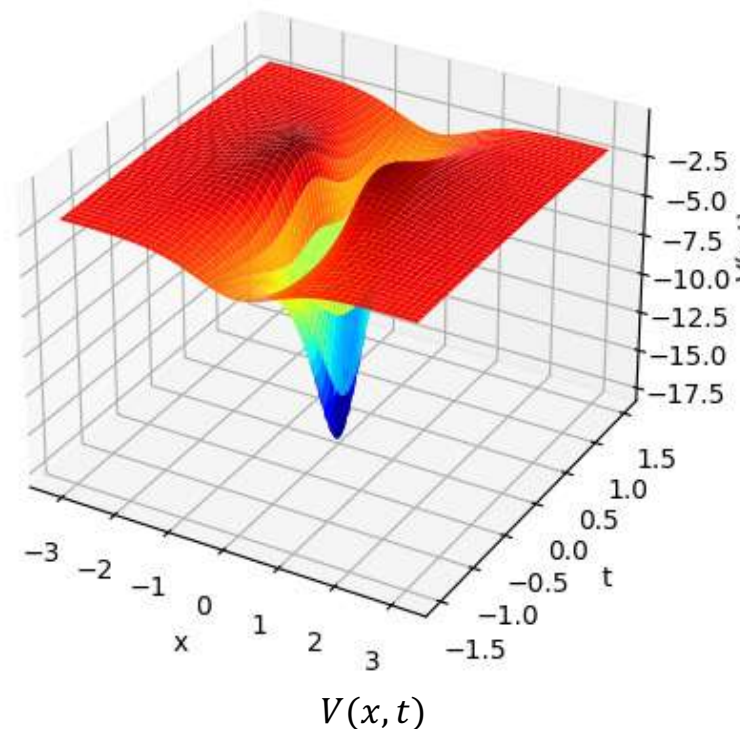
$$\psi(-\pi, t) = \psi(\pi, t)$$

- ポテンシャル

$$V(x, t) = \frac{4(x^2 - t^2) - 1}{(x^2 + t^2 + 0.25)^2} - 2$$

- 初期状態

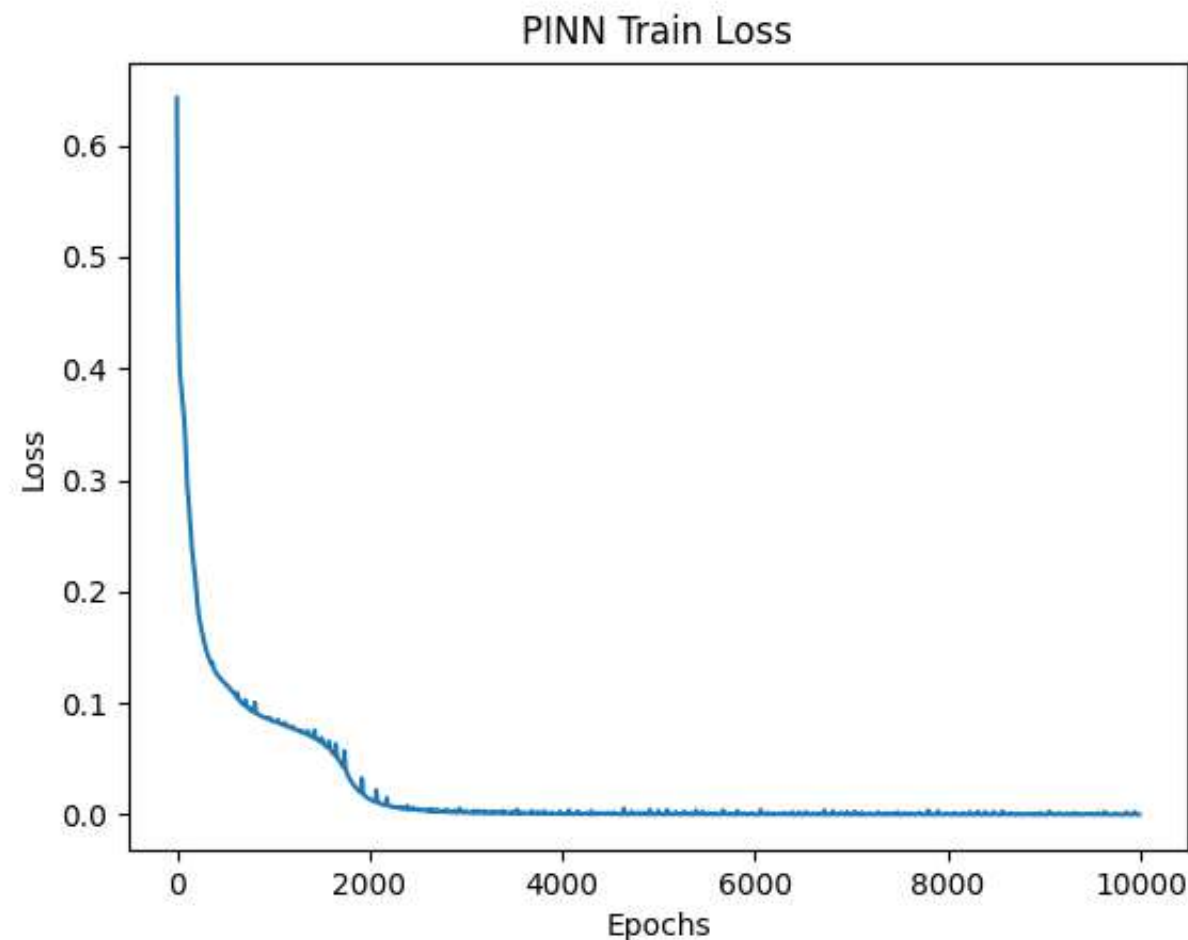
$$\psi(x, -1.5) = \left[1 - \frac{4(1 - 3i)}{4(x^2 + 2.25) + 1} \right] \exp(-1.5i)$$



2. 非線形シュレディンガー方程式

layer	ニューロン数	活性化関数	Initial weight
input	2		
1st	60	SiLU	Xavier
2nd	60	SiLU	Xavier
3rd	60	SiLU	Xavier
4th	60	SiLU	Xavier
output	2		Xavier

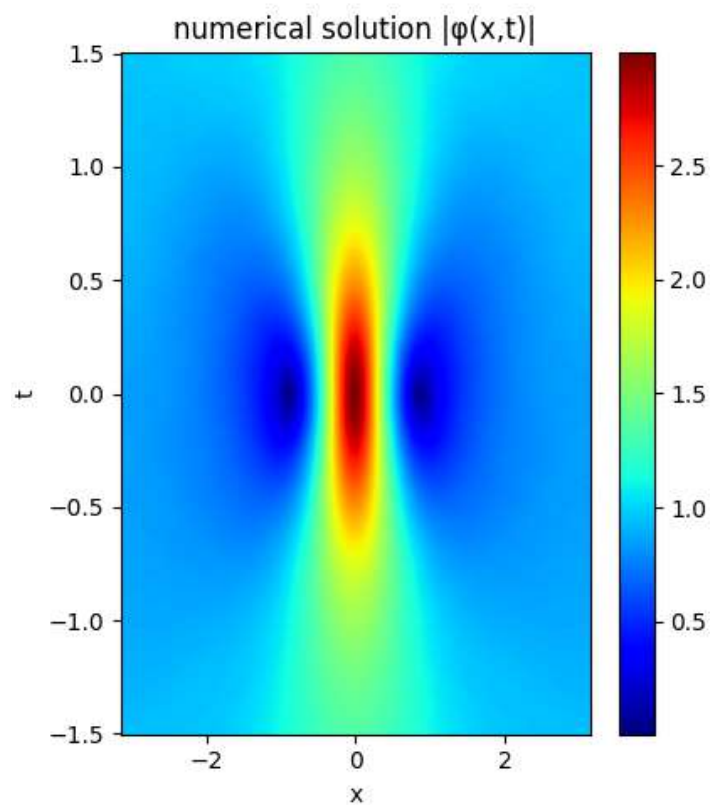
- 最適化手法: Adam optimizer
- $\eta=0.001$, $\beta_1=0.9$, $\beta_2=0.999$
- 学習データ数: i.c. 600, b.c. 300, inside 6000
- 学習回数: 10000
- 学習時間: 216s
- 損失関数の最終値: $7.8104\text{e-}05$



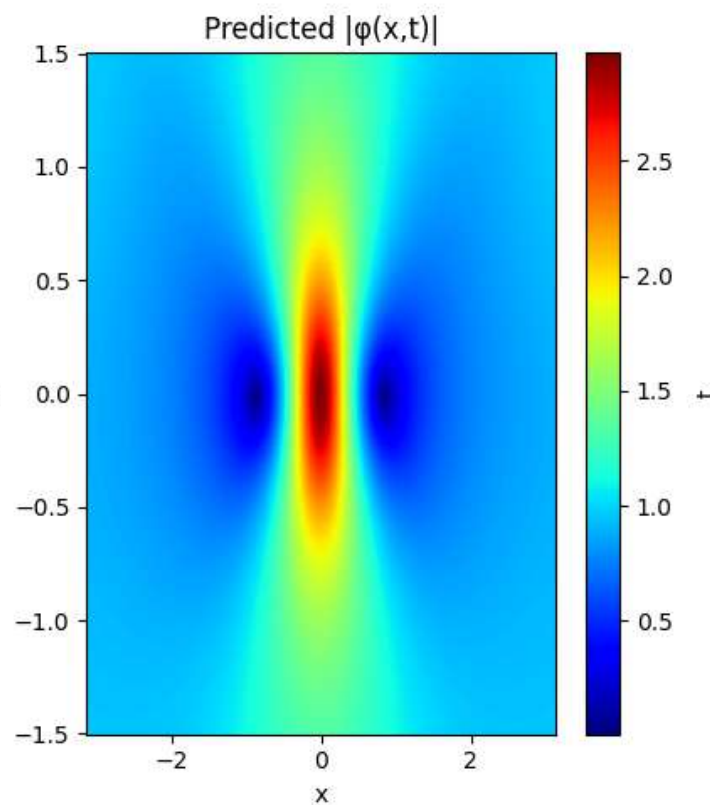
2. 非線形シュレディンガー方程式

Cf.)Cuomo, et al.(2022)
Zhang, Bai (2022)

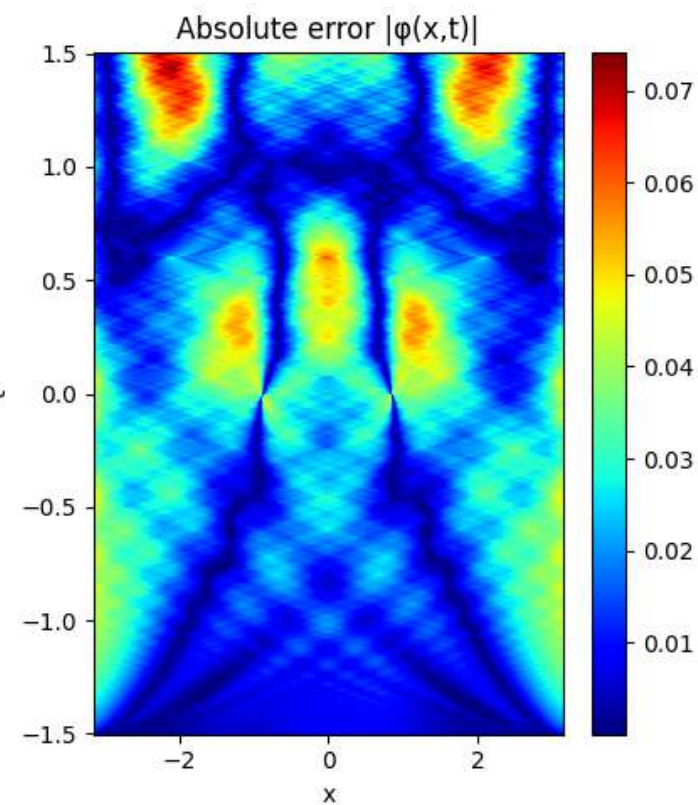
Numerical result



PINN



Absolute error



従来の数値計算と境界を除いて一致

◆ C^k or C^∞ periodic layer Dong, Ni (2020)

DNNに層を加えることで自動的に周期境界条件を満たすようにする手法

$$v_{1i}(x_1) = \sigma(A_{1i} \cos(\omega_1 x_1 + \phi_{1i}) + c_{1i}), \quad 1 \leq i \leq m, \quad \omega_1 = \frac{2\pi}{L_1}, \quad L_1 : \text{period}$$

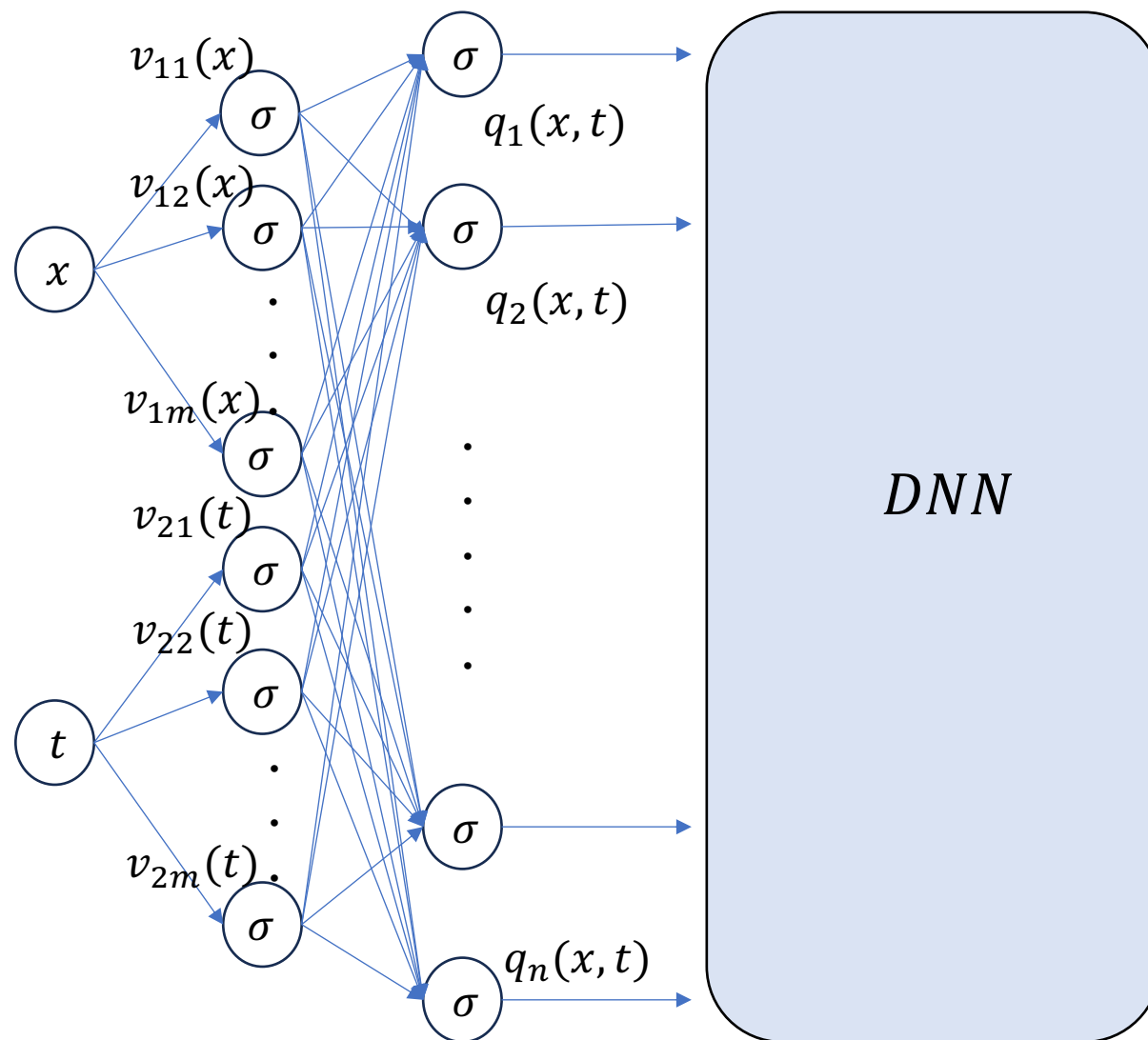
$$v_{2i}(t) = \sigma(A_{2i}t + c_{2i}), \quad 1 \leq i \leq m,$$

$$q_j(x_1, t) = \sigma\left(\sum_{i=1}^m v_{1i}(x_1)W_{ij}^{(1)} + \sum_{i=1}^m v_{2i}(t)W_{ij}^{(2)} + B_j\right), \quad 1 \leq j \leq n,$$

training parameters : $A_{1i}, A_{2i}, \phi_{1i}, c_{1i}, c_{2i}, W_{ij}^{(1)}, W_{ij}^{(2)}, B_j$, σ : Activation function

周期 L_1 を持つ周期関数を組み込み学習させることで周期境界条件を満たすモデルを構築

◆ C^k or C^∞ periodic layer Dong, Ni (2020)



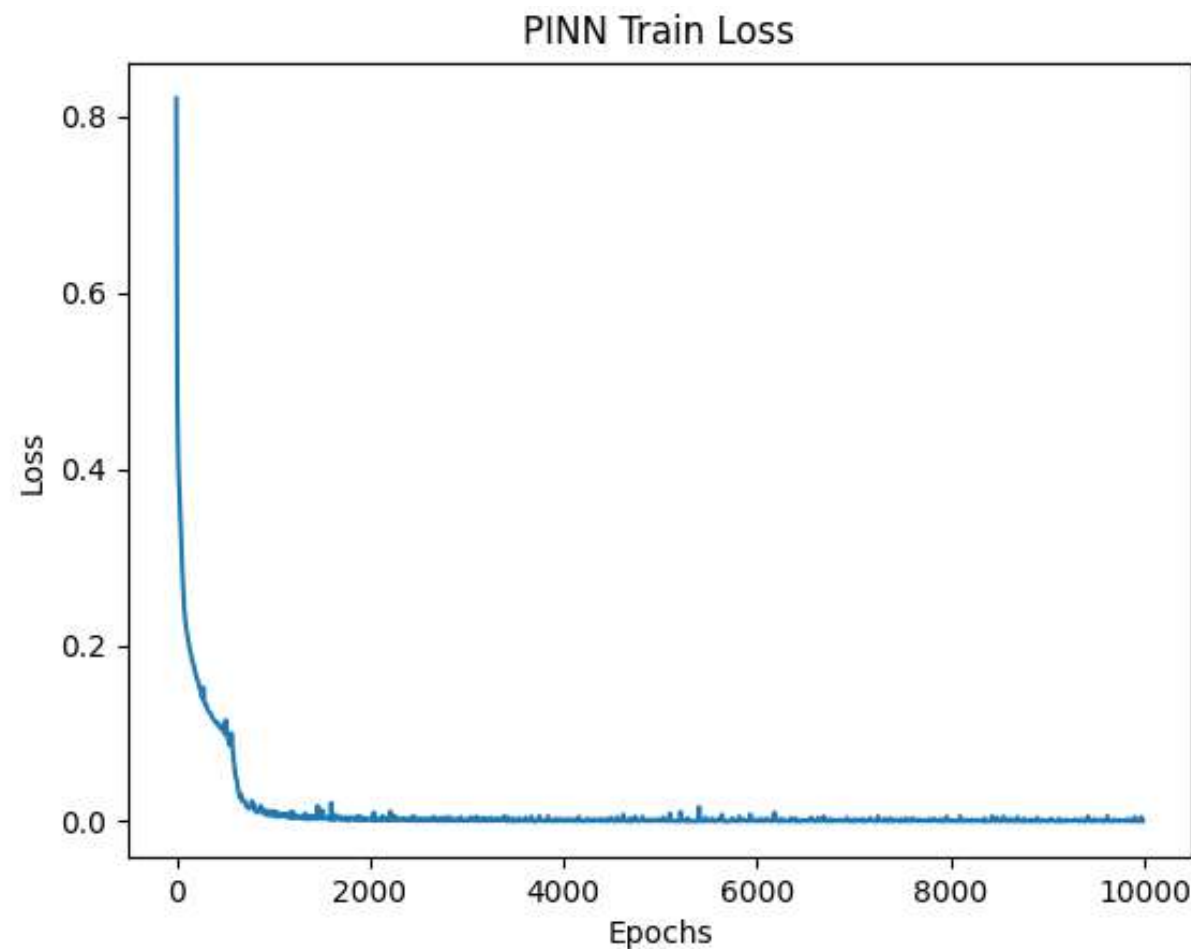
σ : Activation function

◆ 非線形シュレディンガー方程式 (C^k or C^∞ periodic layer)

Hamada, TM in progress

layer	ニューロン数	活性化関数	Initial weight
input	2		
1st	40	SiLU	Xavier
2nd	40	SiLU	Xavier
3rd	60	SiLU	Xavier
4th	60	SiLU	Xavier
5th	60	SiLU	Xavier
6th	60	SiLU	Xavier
output	2		Xavier

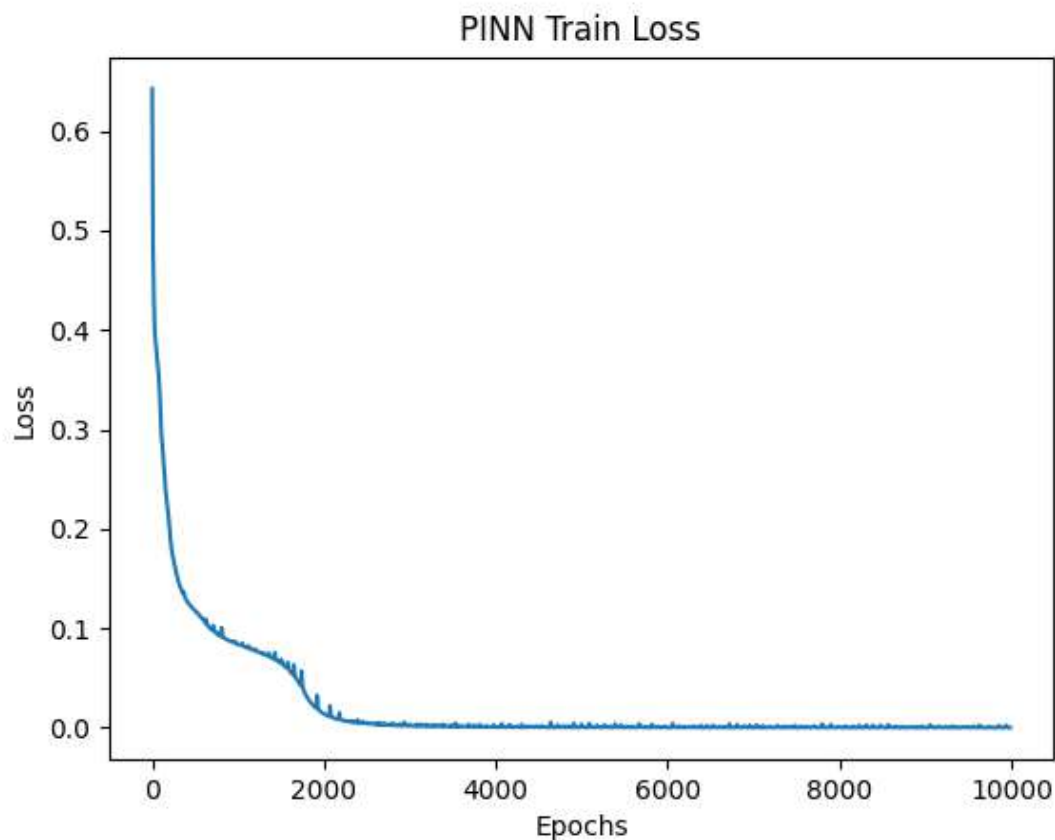
- 最適化手法: Adam optimizer
- $\eta = 0.001$, $\beta_1 = 0.9$, $\beta_2 = 0.999$
- 学習データ数: i.c. 600, inside 6000
- 学習回数: 10000
- 学習時間: 247s
- 損失関数の最終値: $9.2192e-05$



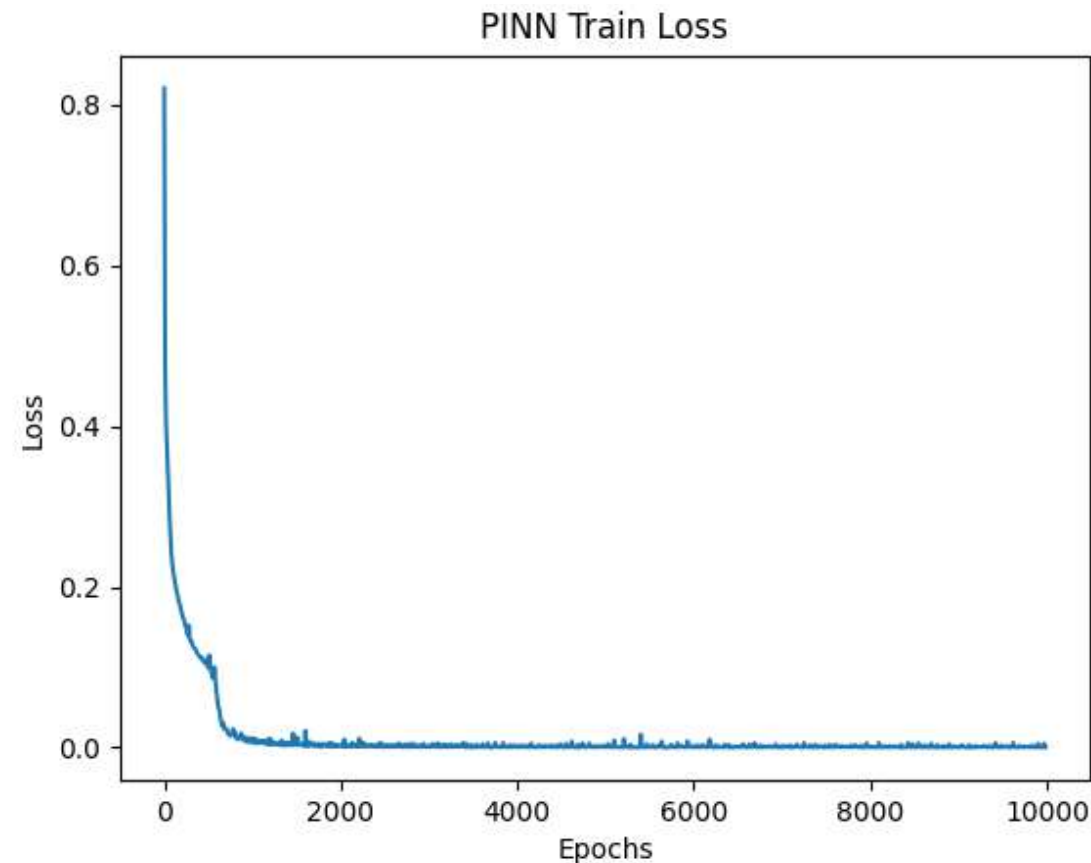
◆ 非線形シュレディンガー方程式 (C^k or C^∞ periodic layer)

Hamada, TM in progress

Standard DNN(Deep Neural Network)



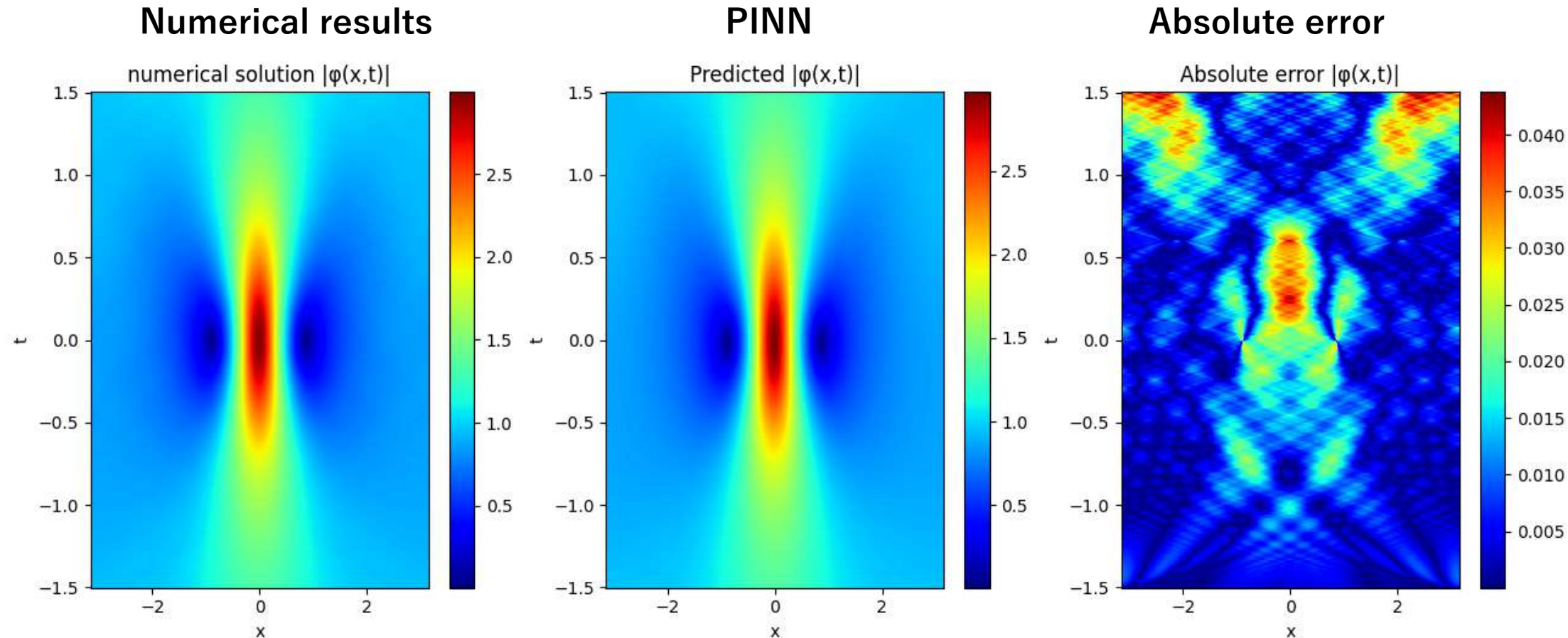
C^∞ periodic layer



従来のDNNより早い収束

◆ 非線形シュレディンガー方程式 (C^k or C^∞ periodic layer)

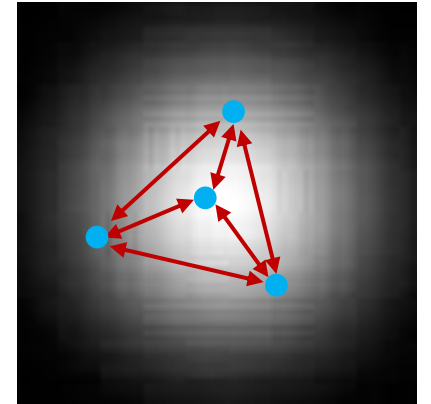
Hamada, TM in progress



従来の数値計算と高い一致

3. シュレディンガー-ニュートン方程式

Diosi(1984) Penrose(1996)



$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - Gm^2 \int d^3\mathbf{x}' \frac{|\psi(\mathbf{x}', t)|^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \right] \psi(\mathbf{x}, t)$$

波動関数の確率密度を“質量密度”として取り扱い，波動関数の fragment 同士の重力相互作用を取り入れた方程式.
量子測定や宇宙論において重要視されている.



$$i\partial_t \psi(\mathbf{x}, t) + \left[\frac{\nabla^2}{2} - Q(\mathbf{x}, t) \right] \psi(\mathbf{x}, t) = 0$$

$$\nabla^2 Q(\mathbf{x}, t) = |\psi(\mathbf{x}, t)|^2$$

$$\tau = \hbar^3 G^{-2} m^{-5} \quad \text{典型的な時間スケール}$$

$$a = \hbar^2 G^{-1} m^{-3} \quad \text{電子質量の場合, } \tau \sim 10^{68} \text{ s}$$

シュレディンガー方程式とポアソン方程式の連立系

3. シュレディンガー-ニュートン方程式

Hamada, TM in progress cf.) Mocz, et al. (2017)

・ SN方程式の数値計算

$$i\partial_t\psi(\mathbf{x},t) + \left[\frac{\nabla^2}{2} - Q(\mathbf{x},t) \right] \psi(\mathbf{x},t) = 0$$

$$\nabla^2 Q(\mathbf{x},t) = |\psi(\mathbf{x},t)|^2$$

初期条件: $\psi(\mathbf{x},0) \propto \exp(-|\mathbf{x}|^2/(2\sigma^2))$

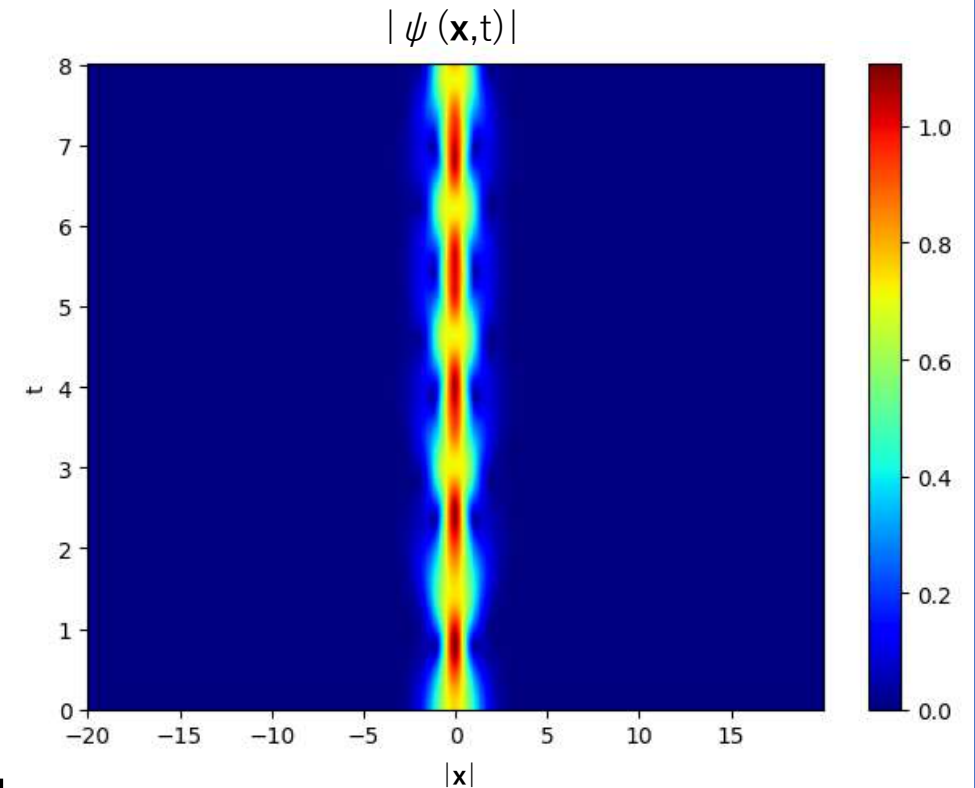
Split Step Fourier法

$$\exp(-i(T+V)dt) \approx \exp\left(-i\frac{Vdt}{2}\right)\exp(-iTdt)\exp\left(-i\frac{Vdt}{2}\right) + \mathcal{O}(dt^3)$$



高速フーリエ変換を用いて実空間と波数空間を切り替えながら作用させる。

$$\psi(x,t+dt) = \exp\left(-i\frac{Vdt}{2}\right) \left[IFFT \left[(\exp(-i\hat{T}dt)) FFT \left[\exp\left(-i\frac{Vdt}{2}\right) \psi(x,t) \right] \right] \right]$$



波束幅が一定周期で振動

3. シュレディンガー-ニュートン方程式

Hamada, TM in progress cf.) Mocz, et al. (2017)

・ SN方程式の数値計算

$$i\partial_t\psi(\mathbf{x},t) + \left[\frac{\nabla^2}{2} - Q(\mathbf{x},t) \right] \psi(\mathbf{x},t) = 0$$

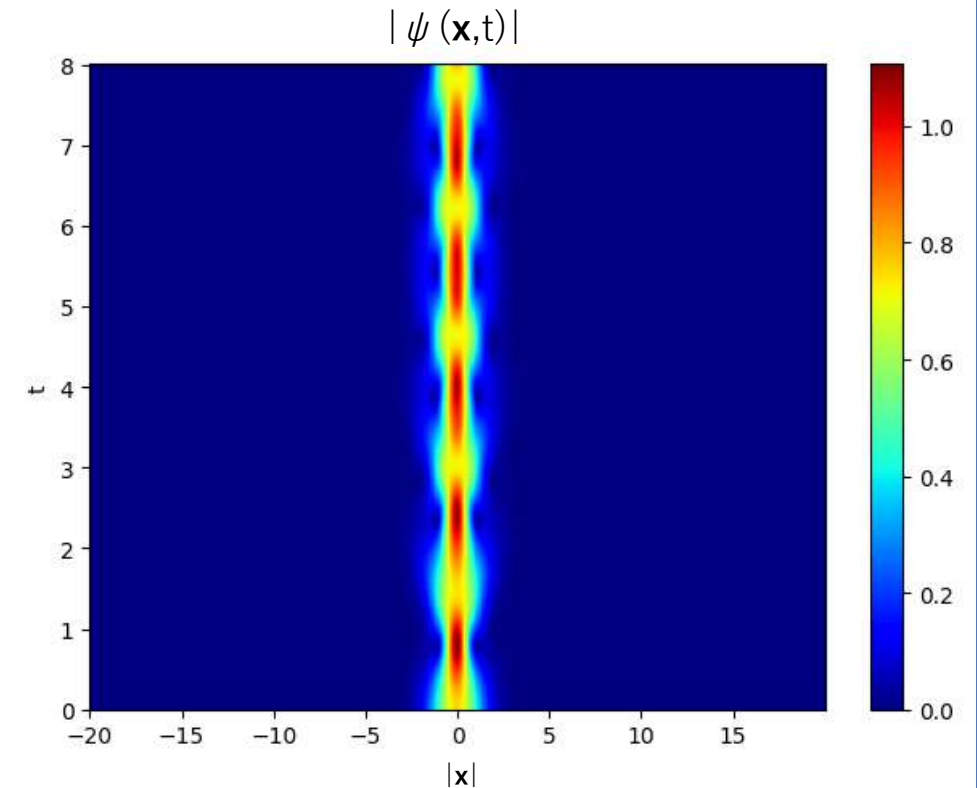
$$\nabla^2 Q(\mathbf{x},t) = |\psi(\mathbf{x},t)|^2$$

初期条件: $\psi(\mathbf{x},0) \propto \exp(-|\mathbf{x}|^2/(2\sigma^2))$

ラプラシアンが拡散, ポテンシャル項が引力
の効果を生み出す



波束サイズの範囲で時間的に振動する振る舞い
振動の詳細は τ/σ に依存



波束幅が一定周期で振動

3. シュレディンガー-ニュートン方程式

Hamada, TM in progress cf.) Mocz, et al. (2017)

- SN方程式の数値計算

$$i\partial_t\psi(\mathbf{x},t) + \left[\frac{\nabla^2}{2} - Q(\mathbf{x},t) \right] \psi(\mathbf{x},t) = 0$$

$$\nabla^2 Q(\mathbf{x},t) = |\psi(\mathbf{x},t)|^2$$

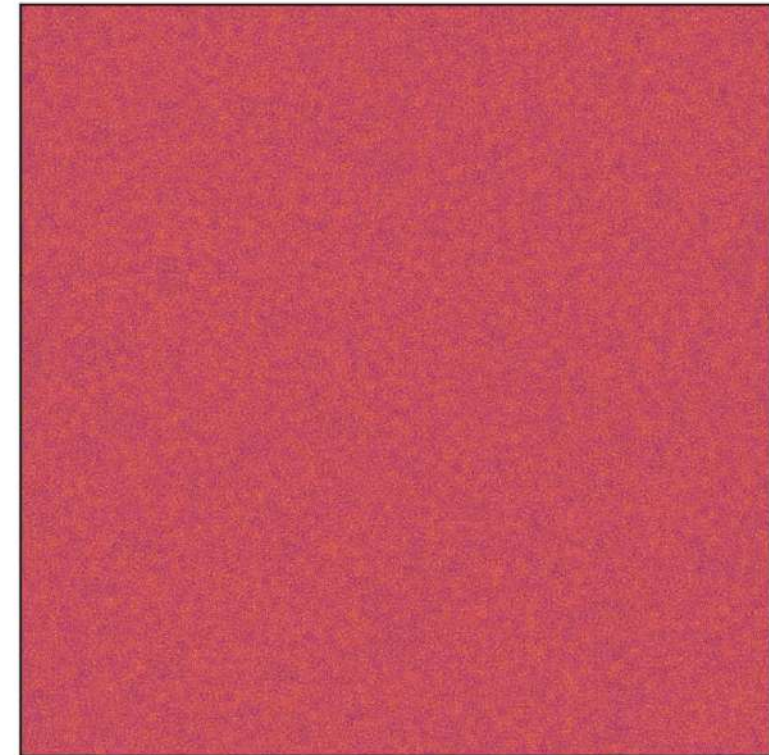
初期条件: random noise

ラプラシアンが拡散，ポテンシャル項が引力
の効果を生み出す



振動する振る舞いを見せるが，引力により最終的に
波束がクラスターを形成：宇宙の大規模構造？

$|\psi(\mathbf{x},t)|$

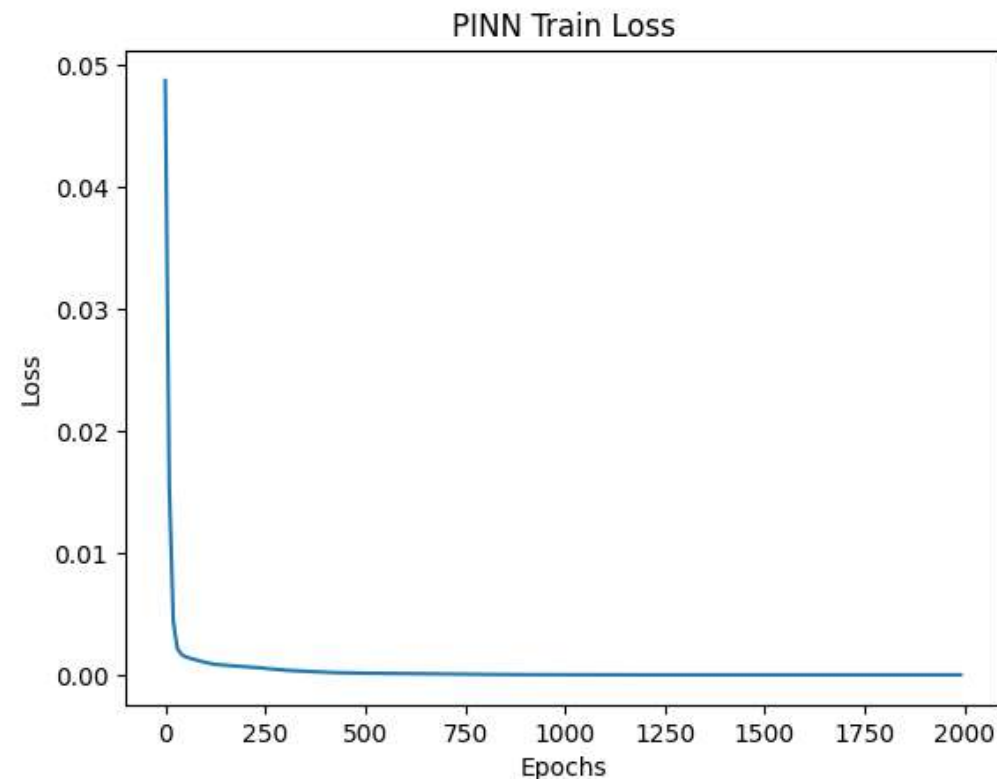


3D Time evolution in 2D-projected space

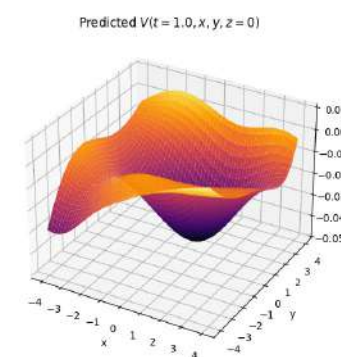
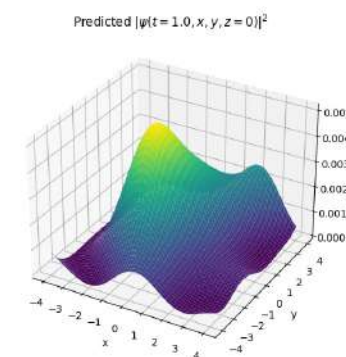
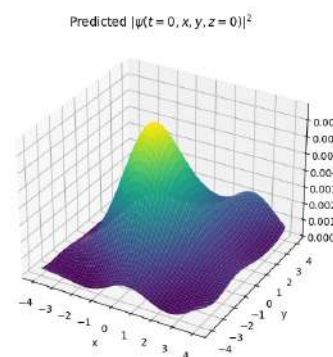
◆ PINN for シュレディンガー-ニュートン方程式

Hamada, TM in progress

layer	ニューロン数	活性化関数	Initial weight
input	4		
1st	40	SiLU	Xavier
2nd	40	SiLU	Xavier
3rd	60	SiLU	Xavier
4th	60	SiLU	Xavier
5th	60	SiLU	Xavier
6th	60	SiLU	Xavier
output	3		Xavier

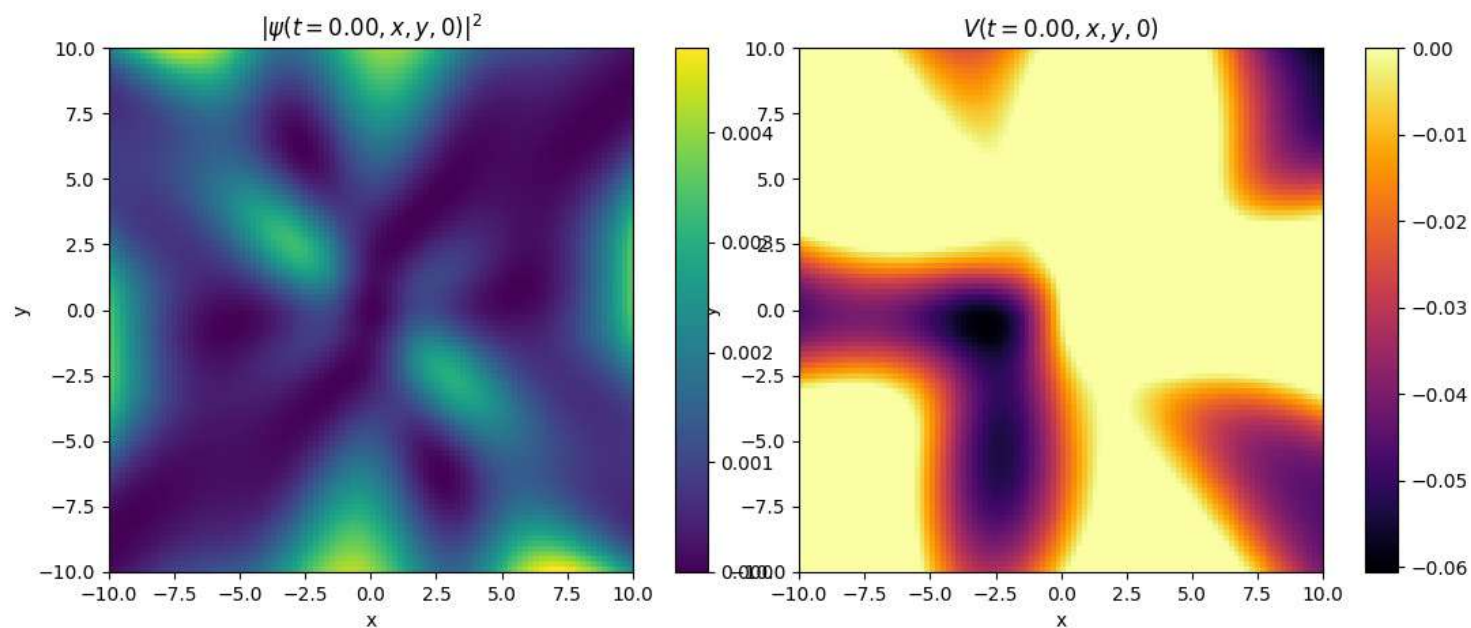


- 最適化手法: L-BFGS optimizer
- $\eta = 0.1$
- 学習データ数: i.c. 2000, inside 80000
- 学習回数: 2000
- 学習時間: 7640s
- 損失関数の最終値: $2.6814e-05$



◆ PINN for シュレディンガー-ニュートン方程式

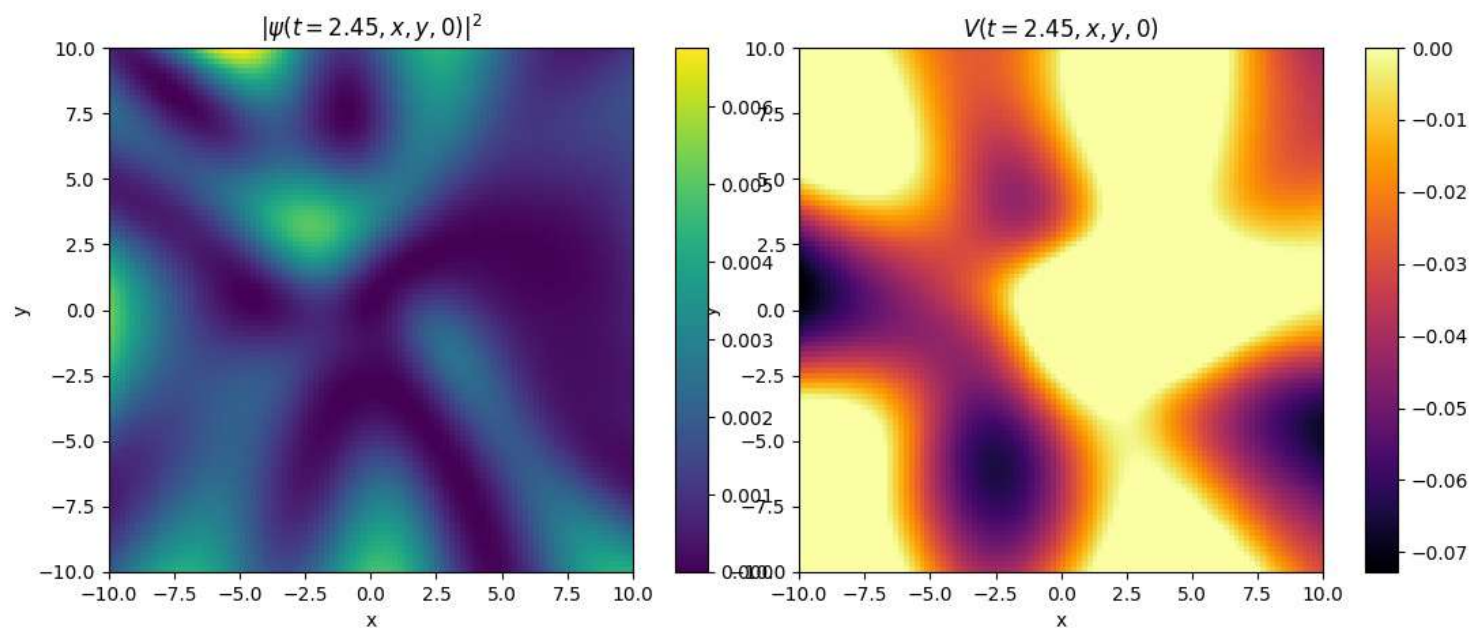
Hamada, TM in progress



定性的に数値計算と一致.

◆ PINN for シュレディンガー-ニュートン方程式

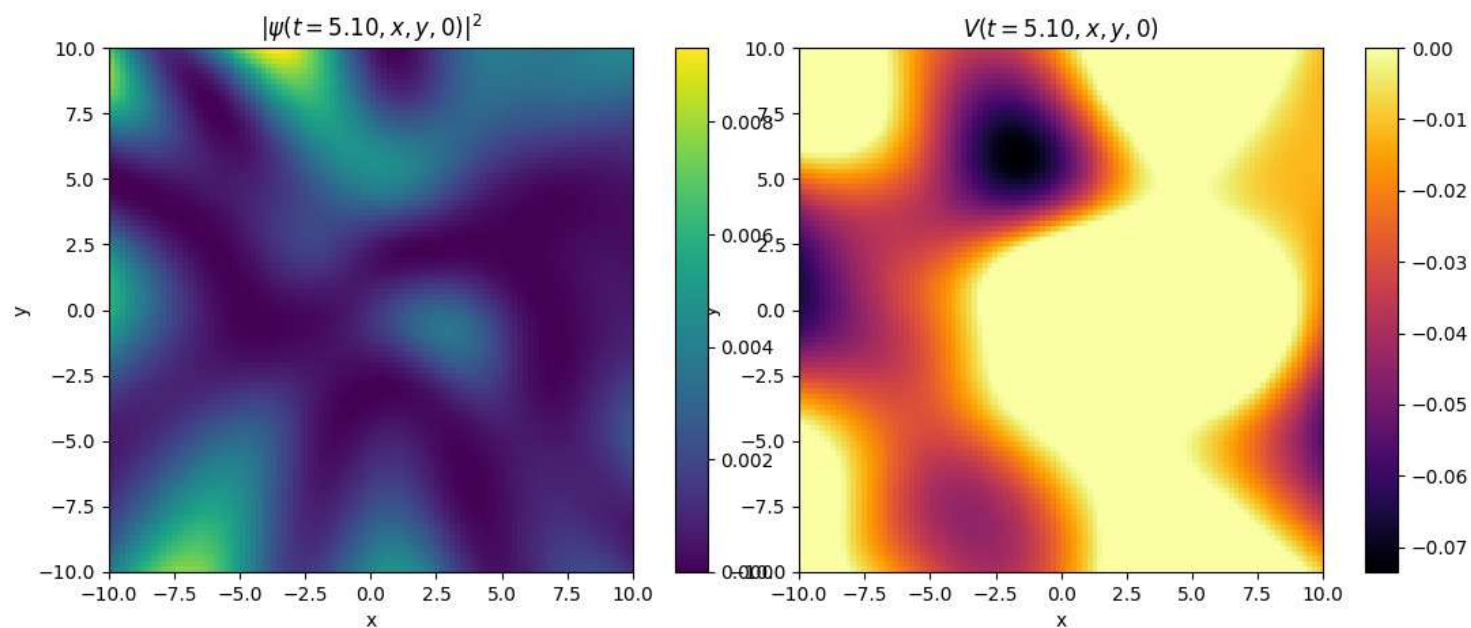
Hamada, TM in progress



定性的に数値計算と一致.

◆ PINN for シュレディンガー-ニュートン方程式

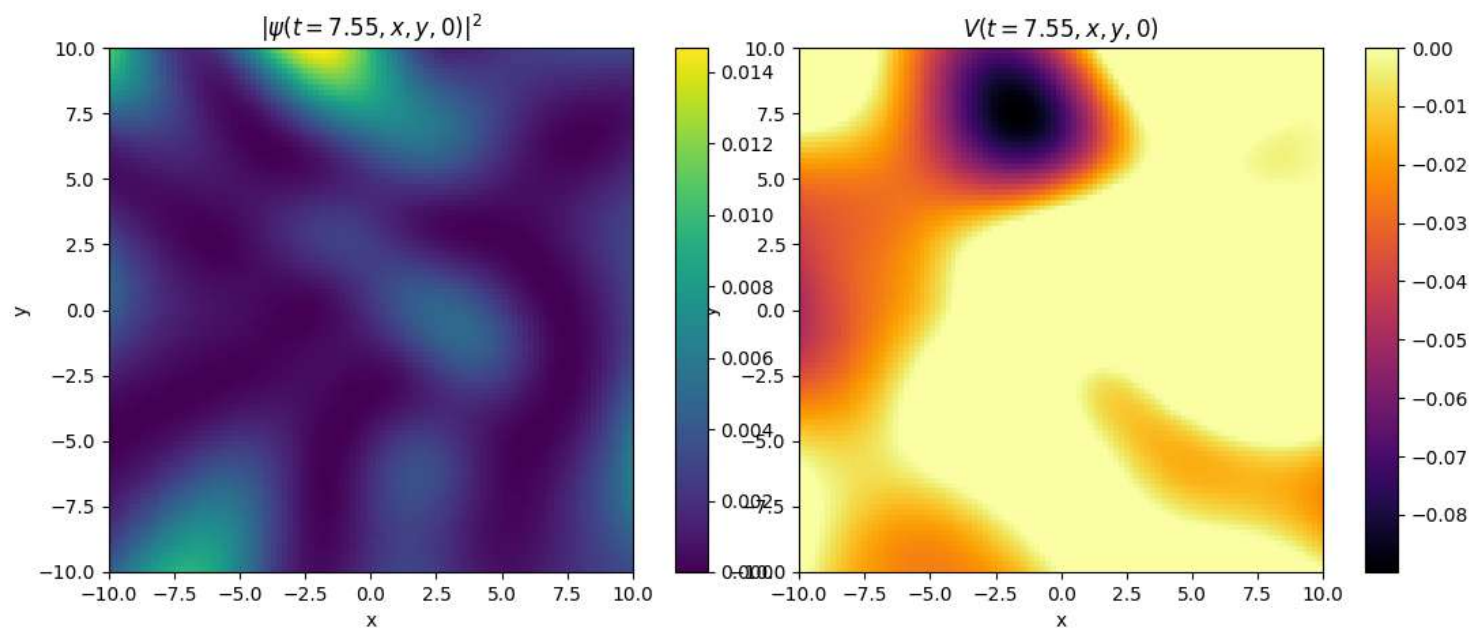
Hamada, TM in progress



定性的に数値計算と一致.

◆ PINN for シュレディンガー-ニュートン方程式

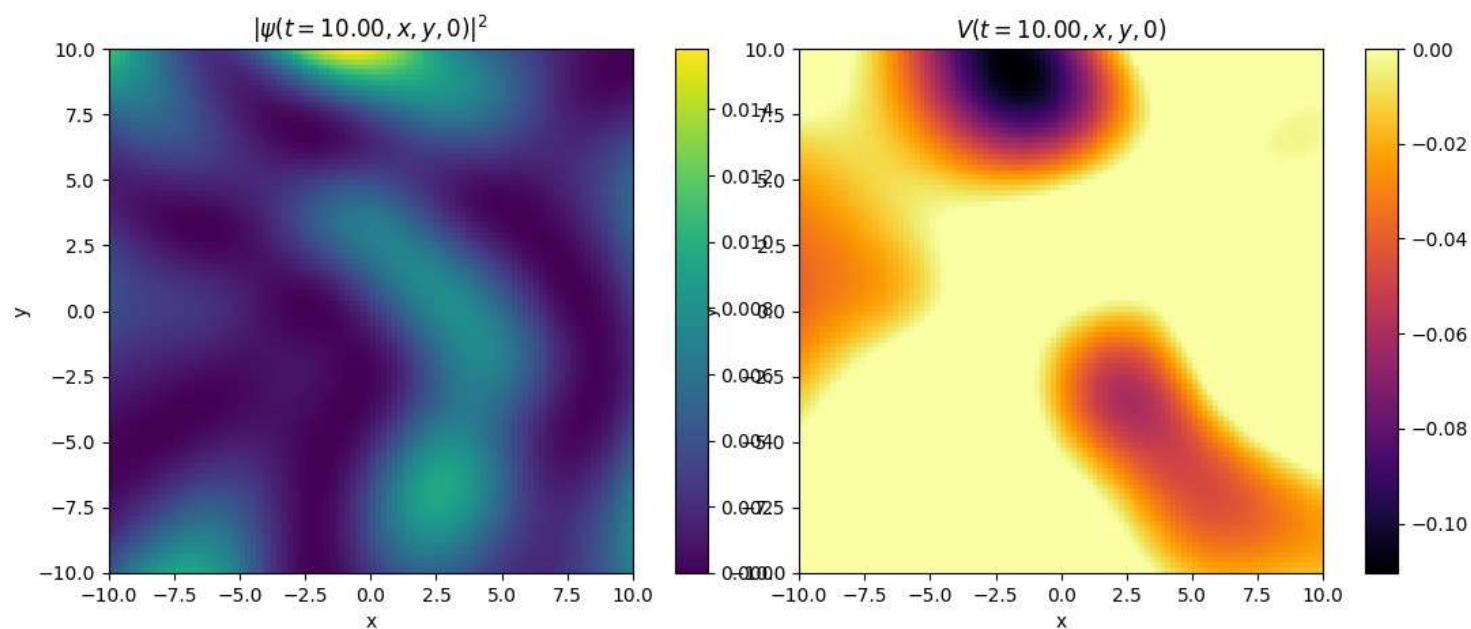
Hamada, TM in progress



定性的に数値計算と一致.

◆ PINN for シュレディンガー-ニュートン方程式

Hamada, TM in progress



定性的に数値計算と一致.

前半のまとめ

- C^k or C^∞ periodic layerを導入することで非線形シュレディンガー方程式の解を高い精度で予測できる.
- シュレディンガー-ニュートン方程式の興味深い性質は量子測定や宇宙論の文脈で非常に重要である.
- PINN with C^k or C^∞ periodic layer はシュレディンガー-ニュートン方程式の解を少なくとも定性的には予測できている. 適切なセットアップの改善によってさらなる制度の改善が見込まれる.

Cf.) SPINN: Advancing Cosmological Simulations of Fuzzy Dark Matter with Physics Informed Neural Networks

A. K. Mishra, E. Tolley, [arXiv:2506.02957]

"We introduce **the Schrodinger-Poisson informed neural network (SPINN)** which solve nonlinear Schrodinger-Poisson (SP) equations to simulate the gravitational collapse of Fuzzy Dark Matter (FDM) in both 1D and 3D setting..."

NNはGinsparg-Wilson関係式から
格子カイラルフェルミオンを見つけられるか？

格子上のフェルミオン作用

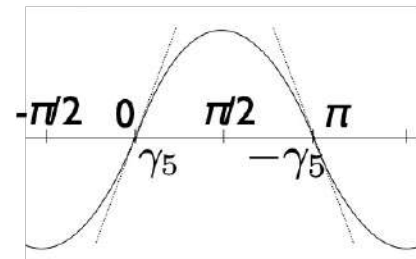
- Doubling problem : Naive chiral&local fermion → 16 species

$$S_N = \sum_n \left[\frac{a^3}{2} \bar{\psi}_n \gamma_\mu (U_{n,\mu} \psi_{n+\mu} - U_{n-\mu,\mu}^\dagger \psi_{n-\mu}) + a^4 m \bar{\psi}_n \psi_n \right]$$

Free propagator

$$D^{-1}(pa) = \frac{-i\gamma_\mu \sin ap_\mu + am}{\sin^2 ap_\mu + a^2 m^2} \rightarrow \frac{1}{a} \sum_{\underline{p}_\mu=0,\pi/a} \frac{-i(-1)^{\delta_\mu} \gamma_\mu \hat{p}_\mu + m}{\hat{p}_\mu^2 + m^2}$$

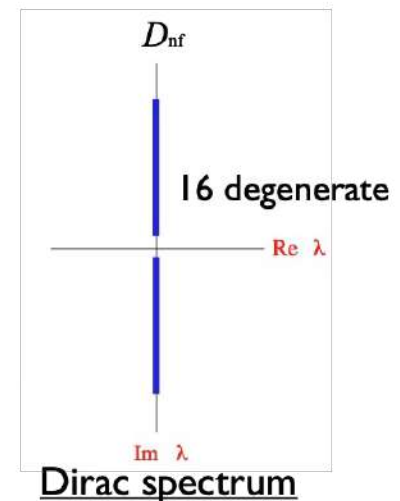
2 poles per dim. → 16 doublers in 4d



Nielsen-Ninomiya

➔ Chiral symmetry v.s. desirable flavor number

	flavors	chiral	tuning	artifact
Wilson:	1	0	severe	$O(a)$
Staggered:	4	1	N/A	$O(a^2)$
Domain-wall	1	(1)	easy	$O(a^2)$
Overlap	1	1	N/A	$O(a^2)$



格子フェルミオンのNo-go定理

場の量子論を格子上で正則化する際、フェルミオン場の記述には特有の困難が伴う。単純な離散化 (Naive Fermion) を行くと、運動量空間のブリルアンゾーンの端点 ($k_\mu = \pi$) において、本来存在しないはずの余分な粒子 (ダブラー) が $2^d - 1$ 個現れてしまう。Nielsen-Ninomiya の定理によれば、以下の 4 つの条件を同時に満たす格子フェルミオン作用は存在しない。

1. 局所性 (Locality)
2. 並進対称性 (Translational Invariance)
3. エルミート性 (Hermiticity)
4. カイラル対称性 (Chiral Symmetry)

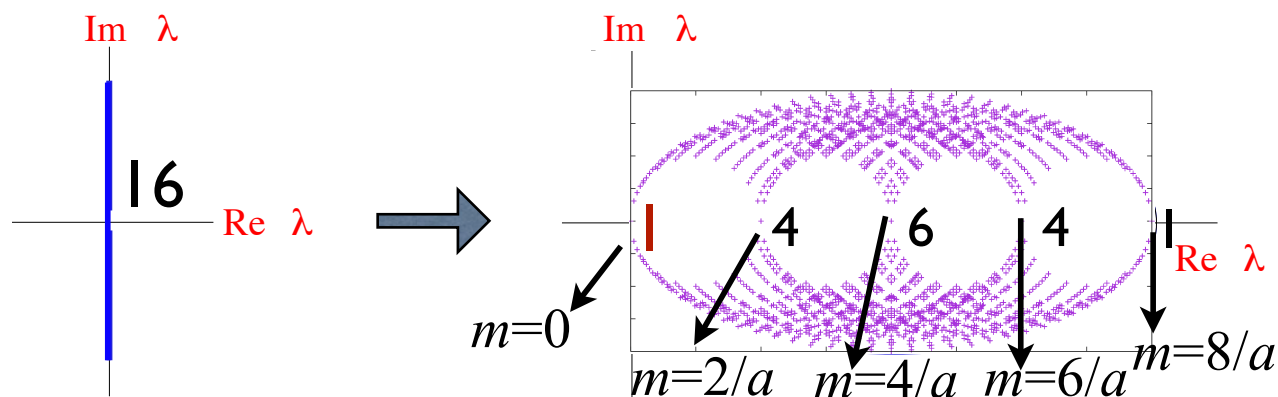
	Locality	Translation	Hermiticity	onsite-chiral
Naive	○	○	○	○
Staggered	○	○	○	○
Wilson	○	○	○	×
Domain-wall	×	○	○	○ → gapless edge mode
Overlap	△	○	○	× → GW relation

比較的安易な解決法: Wilson fermion

格子 QCD の数値計算において広く用いられる **Wilson フェルミオン**は、ダブラーを除去するために意図的にカイラル対称性を破る質量項（Wilson 項）を導入する手法である。

$$D_W(k) = \sum_{\mu} [i\gamma_{\mu} \sin k_{\mu} + r(1 - \cos k_{\mu})]$$

ここで r は Wilson パラメータ（通常 $r = 1$ ）である。この項により、 $k = 0$ （物理モード）では質量ゼロ、 $k = \pi$ （ダブラー）では $2r$ の質量を持ち、ダブラーは連続極限で分離される。しかし、代償として $\{D_W, \gamma_5\} \neq 0$ となり、カイラル対称性は明示的に破れる。



格子上の厳密カイラル対称性：Ginsparg-Wilson relation

1982 年、Ginsparg と Wilson は、くりこみ群のブロック変換の考察から、格子上でカイラル対称性が満たすべき「修正された条件」を導いた。

$$\gamma_5 D + D \gamma_5 = a D \gamma_5 D$$

これを **Ginsparg-Wilson (GW) 関係式** と呼ぶ。右辺の $O(a)$ の項は格子アーティファクトであり、連続極限 ($a \rightarrow 0$) では通常のカイラル対称性 $\{D, \gamma_5\} = 0$ に回帰する。

Overlapディラック演算子固有値が持つ性質

$$\gamma_5 D \gamma_5 = D^\dagger \quad \longrightarrow \quad D + D^\dagger = a D^\dagger D \quad \longrightarrow \quad \lambda + \lambda^* = a |\lambda|^2$$

格子上の厳密カイラル対称性：Ginsparg-Wilson relation

Lüscher (1998) は、演算子 D が GW 関係式を満たすとき、格子作用は以下の「修正されたカイラル変換」に対して厳密に不変であることを示した。

$$\begin{aligned}\delta\psi &= i\epsilon\gamma_5 \left(1 - \frac{a}{2}D\right) \psi \\ \delta\bar{\psi} &= i\epsilon\bar{\psi} \left(1 - \frac{a}{2}D\right) \gamma_5\end{aligned}$$

この変換による作用の変化 $\delta S = \bar{\psi} \left(D\gamma_5 \left(1 - \frac{a}{2}D\right) + \left(1 - \frac{a}{2}D\right) \gamma_5 D \right) \psi$ は、GW 関係式を用いると厳密にゼロとなる。つまり、GW 関係式を満たすフェルミオン（GW フェルミオン）は、格子上で定義可能な「厳密なカイラル対称性」を持つ。

この $O(a)$ 変形カイラル対称性は Onsite chiral symmetry ではないので、Nielsen-Ninomiya の定理には抵触しない！

Overlap fermion と Ginsparg-Wilson関係式

GW 関係式の一般解として、Neuberger (1998) は **Overlap Dirac** 演算子 を提案した。これは、カイラル対称性を破っているがダブラーを含まない演算子（Wilson Dirac 演算子 D_W ）を出発点とし、そのエルミート部分 $H_W = \gamma_5 D_W$ の符号関数を用いて構成される。

$$D_{ov} = \frac{1}{a} (1 + \gamma_5 \text{sgn}(H_W))$$

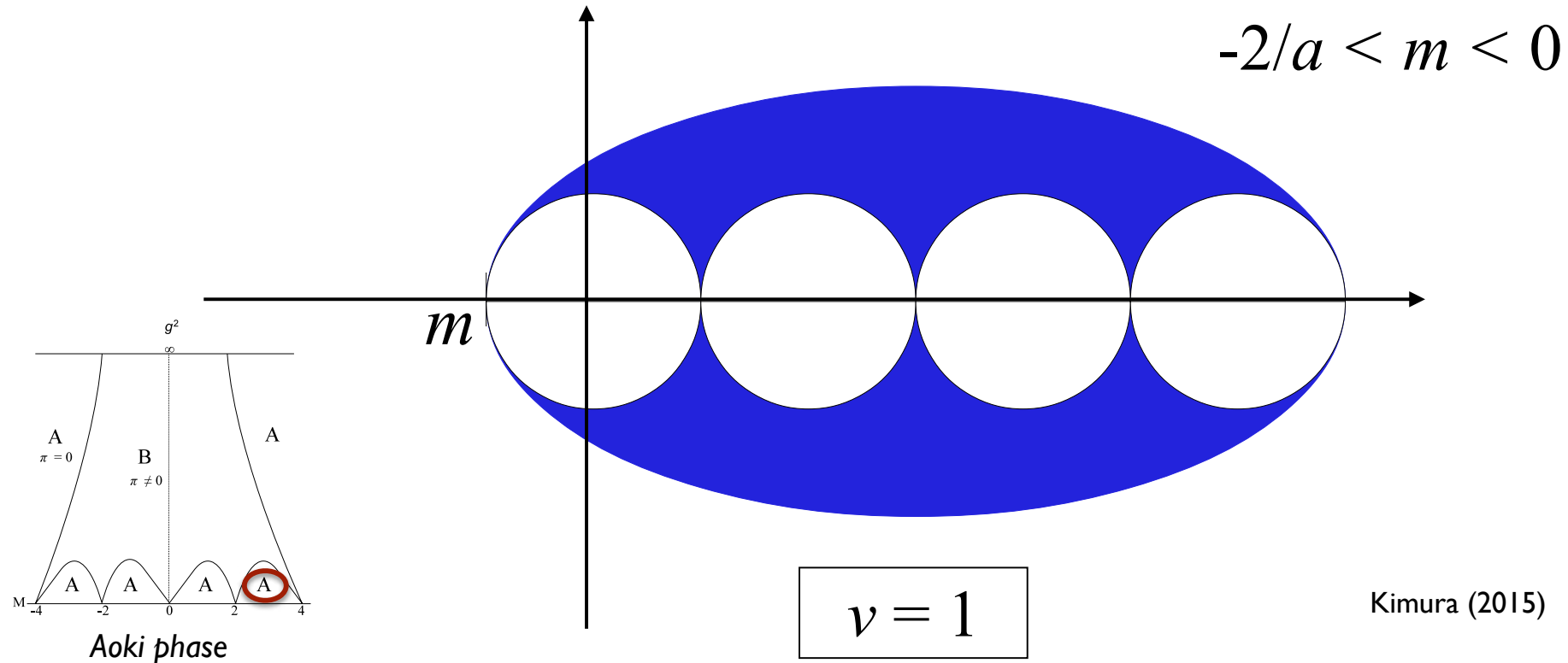
ここで重要な点は、カーネルとして用いる D_W の質量パラメータ m_0 の設定である。Overlap 演算子が非自明なトポロジ（指数定理を満たすゼロモード）を持つためには、 D_W がトポロジカル相にある必要がある。具体的には、 m_0 は以下の負質量領域に設定されなければならない。

$$-2 < m_0 < 0 \quad (\text{typically } m_0 = -1)$$

この領域において D_W は物理モード付近で負の質量、ダブラー付近で正の質量を持つため、符号関数 $\text{sgn}(H_W)$ がそれらを区別し、正しいカイラルフェルミオンが射影される。逆に $m_0 > 0$ の領域では、物理モードもダブラーと同様に扱われて消失してしまう。

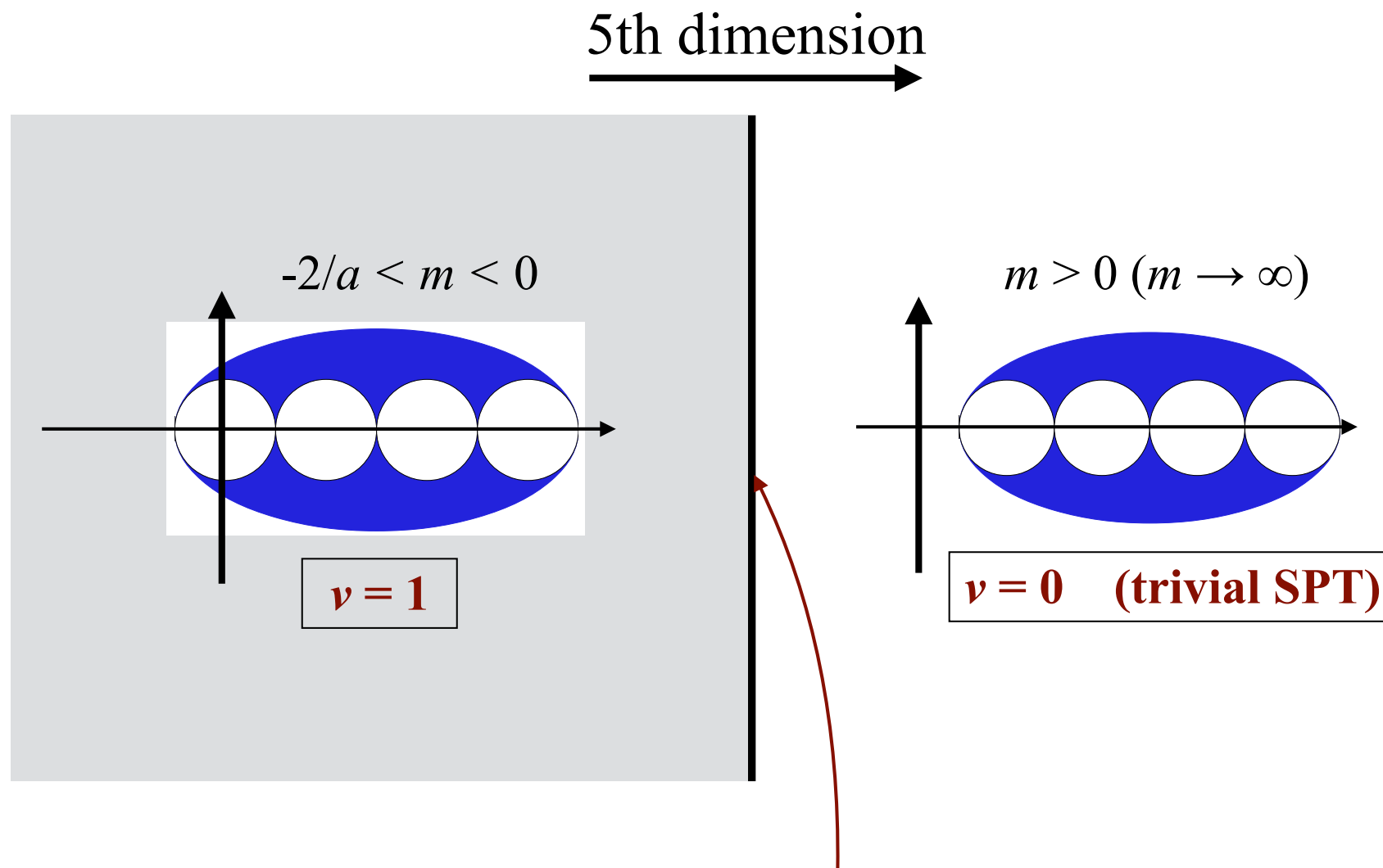
Overlap fermion と Ginsparg-Wilson 関係式

Topological # of SPT \sim sum of chiral charges of species with $m < 0$



Domain-wall fermion : gapless mode emerging at boundary between $\nu=0$ and $\nu=1$ SPTs, where 't Hooft anomaly cancels.

Overlap fermion と Ginsparg-Wilson 関係式



Wilson and Domain-wall fermion are ahead of their time!

Overlap fermion と Ginsparg-Wilson関係式

GW 関係式は、Dirac 演算子の固有値分布に対して強力な幾何学的制約を課す。 $D|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ とし、 γ_5 -Hermiticity $D^\dagger = \gamma_5 D \gamma_5$ を用いて関係式を変形すると、

$$D + D^\dagger = aD^\dagger D$$

が導かれる。これを固有値 λ で書き下すと、

$$\lambda + \lambda^* = a|\lambda|^2 \iff 2\text{Re}\lambda = a(\text{Re}\lambda^2 + \text{Im}\lambda^2)$$

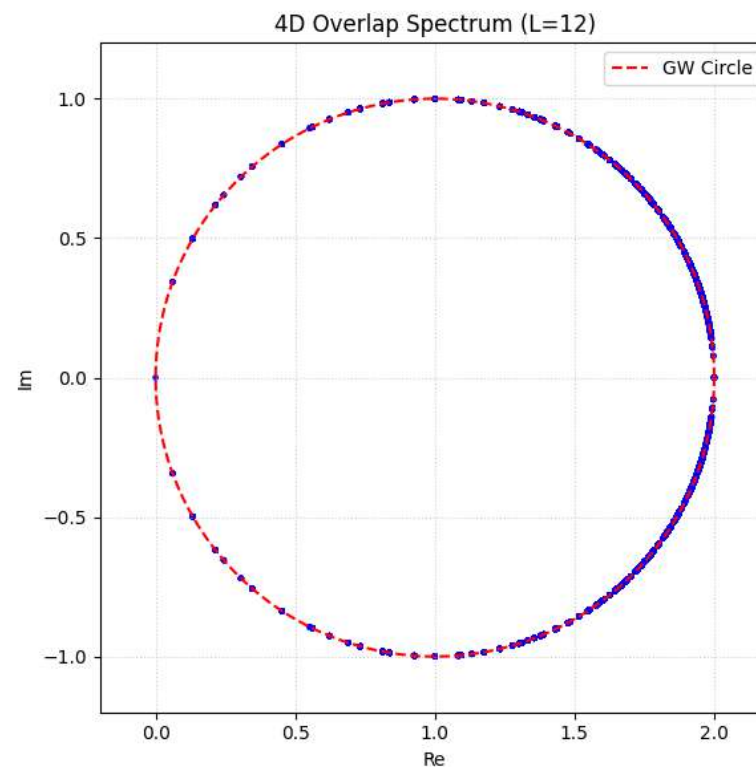
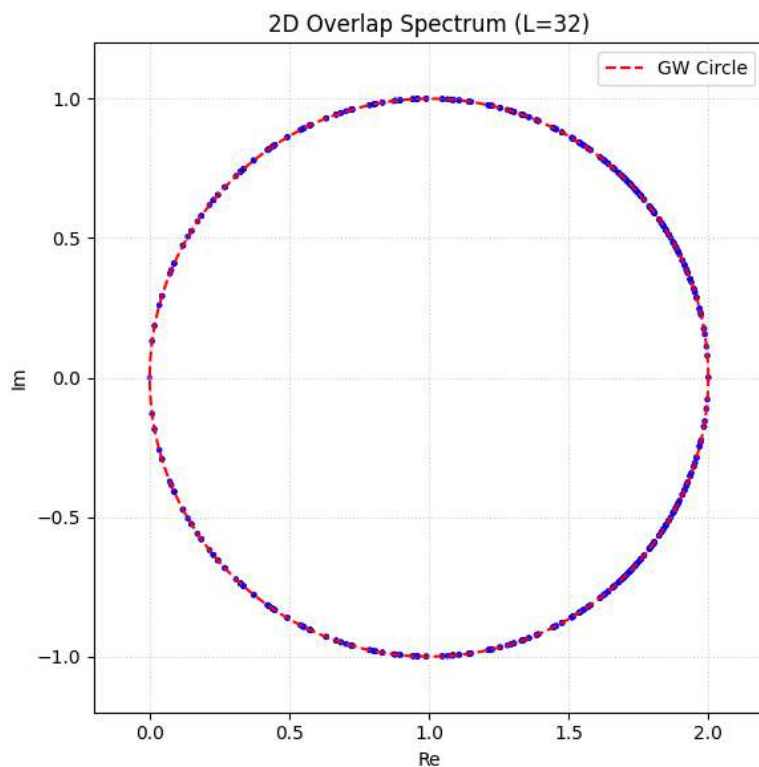
これを整理すると以下の円の方程式となる。

$$\left(\text{Re}\lambda - \frac{1}{a}\right)^2 + (\text{Im}\lambda)^2 = \left(\frac{1}{a}\right)^2$$

すなわち、GW フェルミオンのスペクトルは、複素平面上で中心 $(1/a, 0)$ 、半径 $1/a$ の円周上に分布しなければならない。これを **Ginsparg-Wilson 円** と呼ぶ。

Overlap fermion と Ginsparg-Wilson関係式

- 物理モード: 原点 $\lambda = 0$ 付近のモード。
- ダブラー: 円上の対蹠点 $\lambda = 2/a$ 付近のモード (質量がカットオフオーダーとなり分離される)。



ゼロモードとAtiyah-Singer指数定理

連続理論における Atiyah-Singer の指数定理は、Dirac 演算子のゼロモードのカイラリティの差が、ゲージ場のトポロジカルチャージ Q に等しいことを主張する。

$$\text{Ind}(D) \equiv n_+ - n_- = Q$$

格子上で GW 関係式が成立する場合、この指数定理が厳密に成り立つことが証明されている (Hasenfratz-Lalien-Niedermayer, 1998)。

$$\text{Tr}(\gamma_5) = \sum_{\lambda} \langle \lambda | \gamma_5 | \lambda \rangle = a \sum_{\lambda} \frac{\lambda}{2} \langle \lambda | \lambda \rangle$$

GW 関係式を用いると、非ゼロモード ($\lambda \neq 0, 2/a$) に対しては $\langle \lambda | \gamma_5 | \lambda \rangle = 0$ となり、ゼロモードのみが寄与として残る。これにより、格子シミュレーションにおいてもトポロジーの効果を正しく取り入れることが可能となる。

局所性の問題

Overlap 演算子における最大の懸念事項は「局所性 (Locality)」である。通常の格子作用 (Wilson 等) は、有限範囲のホッピングしか持たない「超局所性 (Ultra-locality)」を満たす。一方、Overlap 演算子は符号関数 (逆平方根 $1/\sqrt{H_W^2}$) を含むため、原理的には全格子点間にホッピングを持つ非局所的な演算子となる。

しかし、Hernández, Jansen, Lüscher (1999) は、カーネルとなる H_W がギャップを持つ (ゼロ固有値を持たない) 限り、Overlap 演算子は指数関数的局所性 (Exponential Locality) を満たすことを証明した。

$$|D_{ov}(x, y)| \leq C \exp(-\gamma|x - y|)$$

前述の負質量領域 ($m_0 \approx -1$) においては、Wilson 演算子 H_W は十分に大きなギャップを持つため、この局所性は保証される。したがって、Overlap フェルミオンは厳密な意味での局所作用ではないが、物理的に許容されるクラス (Local Field Theory) に属する。

Overlap fermionの格子上での近似

$$D = \frac{r_0}{a} [1 + \gamma_5 \epsilon [h(-r_0/a)]]$$

格子上でSign関数 ϵ を有理関数で近似する必要がある！

- **Chebyshev approximation**

$$\epsilon(h) = h s_N(h^2) = h \sum_{n=0}^N c_n h^{2n}$$

$$s_N(x) = \sum_n c_n T_n(x)$$

- **Zolotarev approximation**

$$\epsilon_N(x) = x \sum_{\ell=1}^N \frac{b_\ell}{x^2 + c_{2\ell-1}}$$

$$c_\ell = \left[\frac{\operatorname{sn}(u, \kappa^2)}{\operatorname{cn}(u, \kappa^2)} \right]^2 x_{\min}^2$$
$$b_\ell = \frac{\prod_{i=1}^{N-1} (c_{2i} - c_{2\ell-1})}{\prod_{i=1; i \neq \ell}^N (c_{2i-1} - c_{2\ell-1})}.$$

より良いOverlap kernel

◆ Naive flavored mass

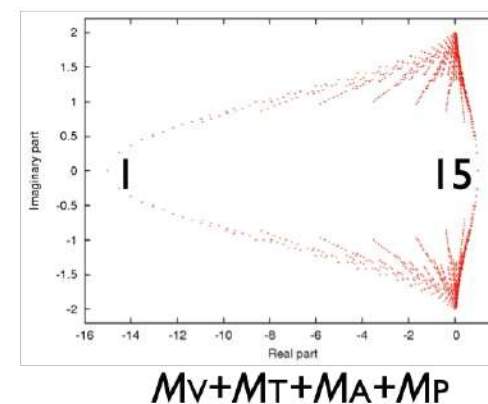
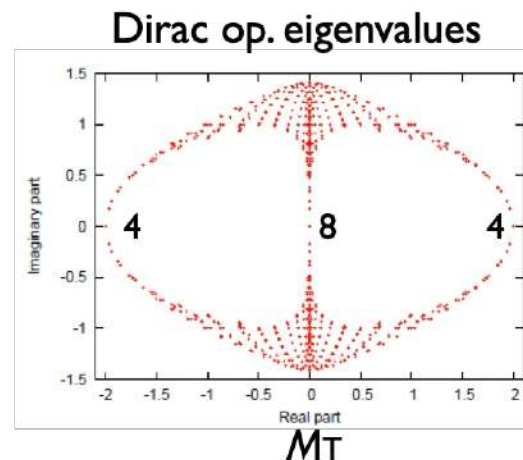
Creutz, Kimura, TM (10)

$$M_V = \sum_{\mu} C_{\mu}, \quad \text{Vector (1-link)}$$

$$M_T = \sum_{\text{perm. sym.}} C_{\mu} C_{\nu}, \quad \text{Tensor (2-link)}$$

$$M_A = \sum_{\text{perm. sym.}} \sum_{\nu} C_{\nu}, \quad \text{Axial-V (3-link)}$$

$$M_P = \sum_{\text{sym.}} \prod_{\mu=1}^4 C_{\mu}, \quad \text{Pseudo-S (4-link)}$$



- Hypercubic sym, gamma5-hermiticity, C, P, T...

- Lattice laplacian $\sum_n \bar{\psi}_n (M_P - 1) \psi_n \rightarrow -a \int d^4x \bar{\psi}(x) D_{\mu}^2 \psi(x) + O(a^2)$

- Generalized Wilson fermions

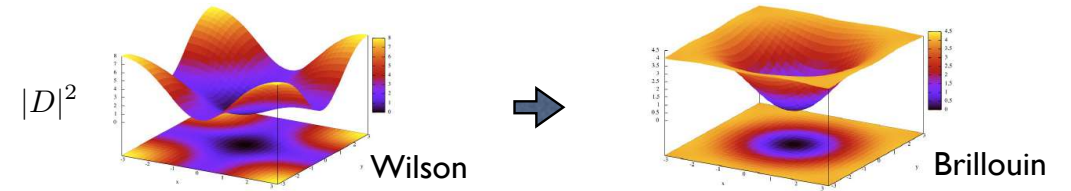
より良いOverlap kernel

• Brillouin kernel (hypercubic kernel)

Brillouin Laplacian $M_V \rightarrow M_V + M_T + M_A + M_P$

$$\Delta = 4 - \sum_{\mu} C_{\mu} \rightarrow \Delta^{bri} = 2 - 2 \prod_{\mu} \frac{1 + C_{\mu}}{2}$$

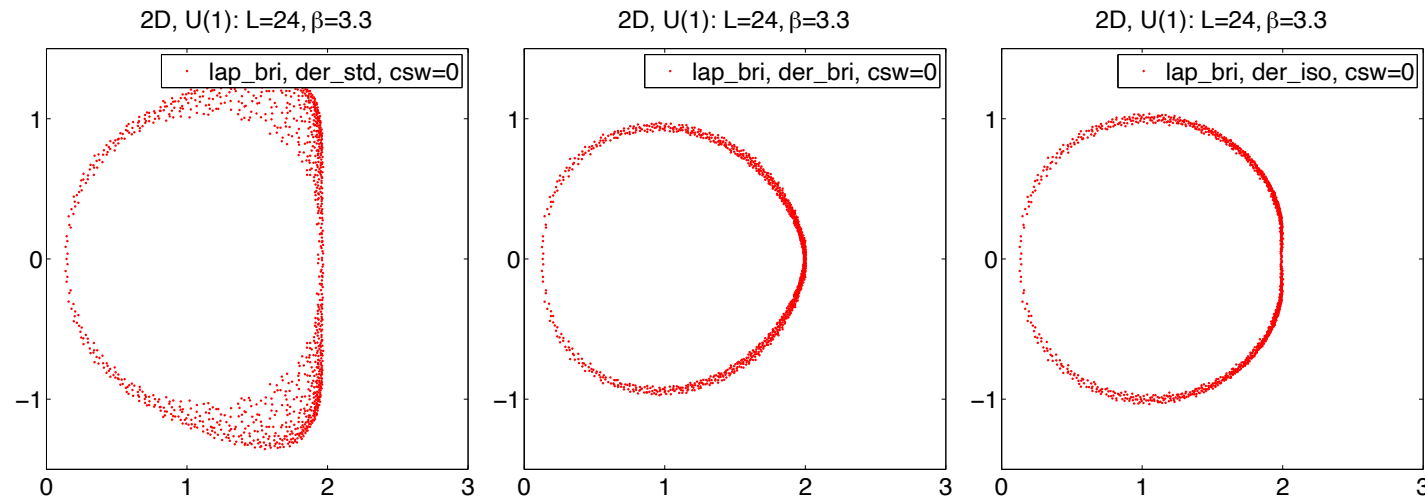
$$\left(\nabla_{\mu} = i\gamma_{\mu} S_{\mu} \rightarrow \nabla_{\mu}^{iso} = i\gamma_{\mu} S_{\mu} \prod_{\nu \neq \mu} \frac{2 + C_{\nu}}{3} \right)$$



$$|D_W|^2 = (E^2 - \mathbf{p}^2) + \frac{1}{12}(E^4 + \mathbf{p}^4 + 6E^2\mathbf{p}^2)a^2 + O(a^4) = (E^2 - \mathbf{p}^2) + O(a^2)$$

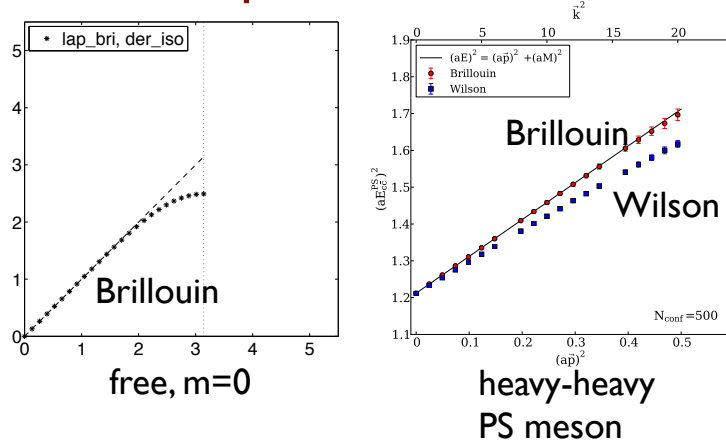
$$|D_B|^2 = (E^2 - \mathbf{p}^2) + \frac{1}{12}(E^2 - \mathbf{p}^2)^2 a^2 + \frac{1}{360}(E^2 - \mathbf{p}^2)(E^4 + E^2\mathbf{p}^2 + \mathbf{p}^4)a^4 + O(a^6)$$

Better dispersion relation !

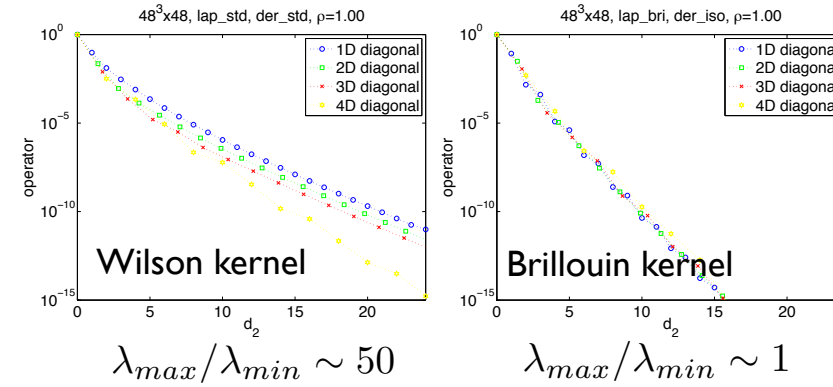


より良いOverlap kernel

• Better dispersion relation



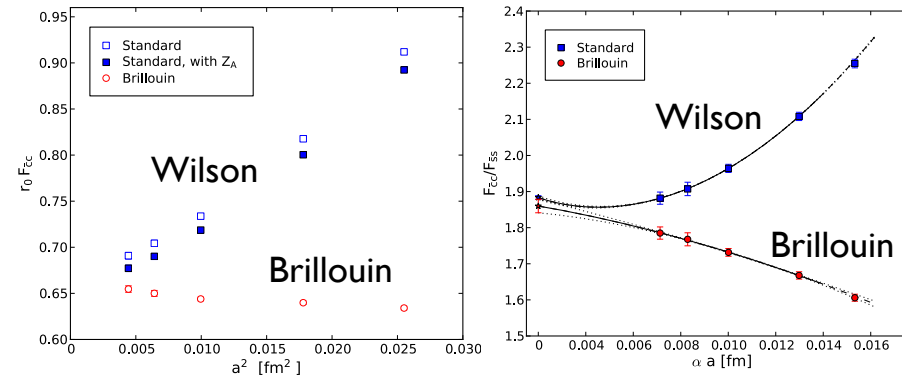
• Locality of overlap operator



• Good scaling in c mass region

$$F_{\bar{c}c}/F_{\bar{s}s} = d_0 + \underset{\rightarrow \text{small}}{d_1 \alpha a} + \underset{\rightarrow \text{small}}{d_2 a^2}$$

➡ suits heavy-quark system



Heavy PS meson decay constant
(Quench, Clover $c_{sw}=1$, APE-smear $\alpha=0.72$)

**NNを用いてGW関係式を厳密に満たす他の格子カイラルフェルミオン，現実的にはより良いOverlap kernel
を見つけない！**

つまりある対称性を満たす演算子をNNで作りたい．

方法論：PINN的手法

本研究では、運動量空間における Dirac 演算子 $D(k)$ のカーネルを、ニューラルネットワークを用いてゼロから直接構築する **Direct Learning**（直接学習）アプローチを採用する。これは演算子の全成分をニューラルネットワークの出力として定義する手法である。

Input: $\mathbf{x} = (\sin k_1, \sin k_2, M_W(k)) \in \mathbb{R}^3$

Model: MLP with 3 hidden layers (256 units each), Tanh activation

Output: $D_\theta(k) = i \sum_{\mu} \gamma_{\mu} \mathcal{V}_{\mu}(k) + \mathbb{I}\mathcal{M}(k) \in \mathbb{C}^{2 \times 2}$

- 構造: 全結合ニューラルネットワーク (MLP)
- 層構成: Input(3) \rightarrow Linear(256) \rightarrow Tanh \rightarrow Linear(256) \rightarrow Tanh \rightarrow Linear(256) \rightarrow Tanh \rightarrow Linear(3)
- 隠れ層: 3 層, 各 256 ユニット.

入力として Wilson 質量項 $M_W(k) = m_0 + r \sum (1 - \cos k_{\mu})$ を含めることで、トポロジカル相転移に必要な質量依存性は確保しつつ、出力の関数形は Wilson 演算子に縛られず、ネットワークが自由に探索・決定できる構造となっている。

損失関数

教師データ（正解の Overlap 演算子）は一切与えず、物理的要請のみを損失関数として定義する.

Ginsparg-Wilson Loss (Symmetry)

GW 関係式を満たすことを要請する. これは幾何学的には, 固有値スペクトルが複素平面上の中心 $(1, 0)$, 半径 1 の円周上に乗ることに対応する ($a = 1$ の場合).

$$\mathcal{L}_{\text{GW}} = \frac{1}{N_k} \sum_k \|\{D_\theta(k), \gamma_5\} - D_\theta(k) \gamma_5 D_\theta(k)\|^2$$

Pole Pinning Loss (Boundary Condition)

物理的に正しいフェルミオンであるために, 特定の運動量における極（ゼロ点とポール）を固定する.

- 物理モード ($k = 0$): 質量ゼロ. $D(0) = 0$.
- ダブラー ($k = \pi$): 無限大質量 (カットオフ). GW 円上では対蹠点である $D(\pi) = 2$ に対応する.

$$\mathcal{L}_{\text{pin}} = \|D_\theta(0)\|^2 + \|D_\theta(\pi) - 2\mathbb{I}\|^2$$

損失関数

教師データ（正解の Overlap 演算子）は一切与えず、物理的要請のみを損失関数として定義する.

Locality Loss via FFT

Overlap 演算子は実空間において指数関数的な局所性（Exponential Locality）を持つ必要がある. 学習プロセス内で、運動量空間のカーネル $D(k)$ を逆フーリエ変換（FFT）して実空間配位 $D(r)$ を求め、遠距離成分に対して指数関数的なペナルティを課す.

$$\mathcal{L}_{\text{loc}} = \sum_r \|D(r) \cdot (e^{\alpha r} - 1)\|^2 \quad (\alpha \approx 0.8)$$

この項により、理論的に保証された局所性をニューラルネットワークに強制的に学習させ、非局所的なノイズの混入を排除する.

損失関数

Optimization Details

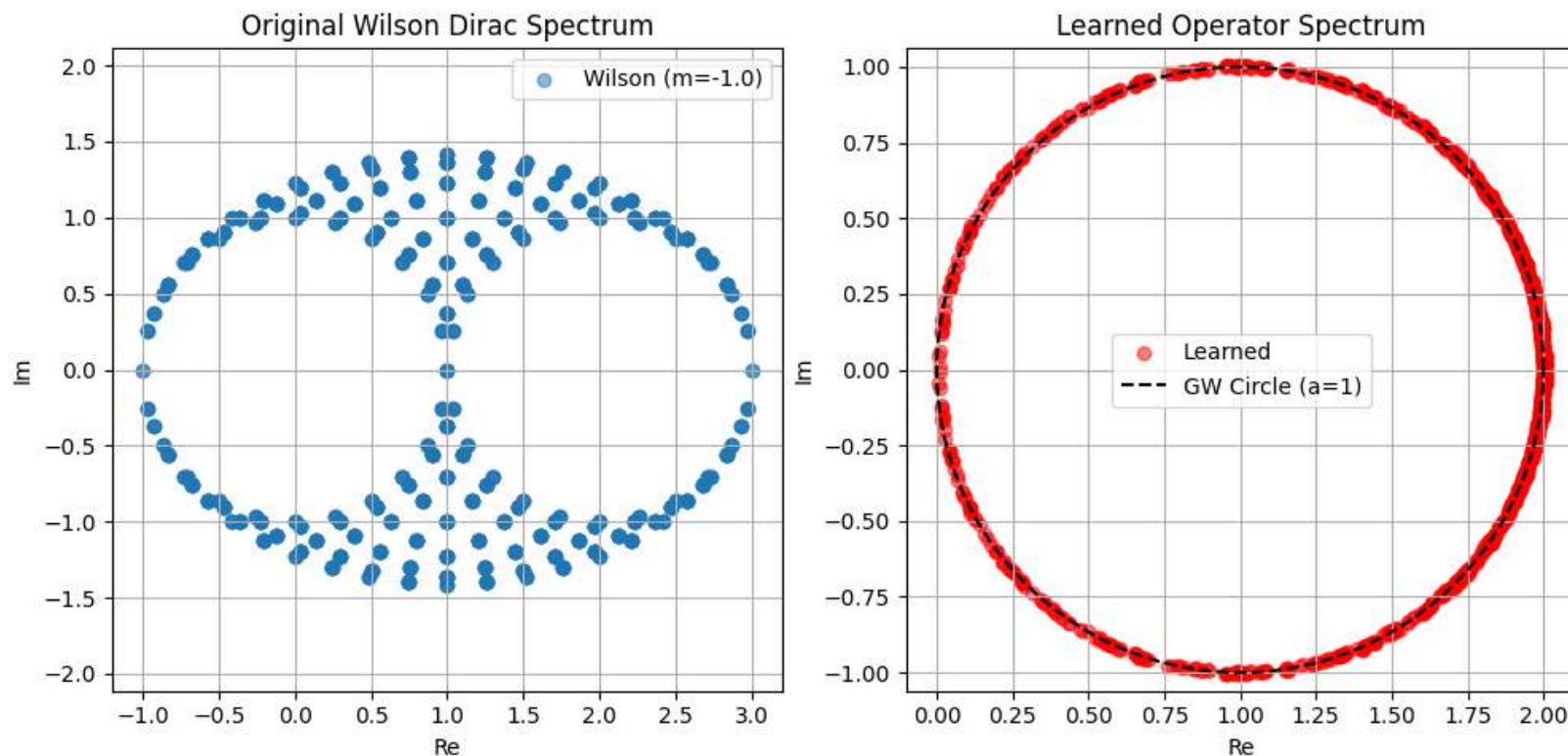
$$\mathcal{L} = w_{\text{GW}}\mathcal{L}_{\text{GW}} + w_{\text{pin}}\mathcal{L}_{\text{pin}} + w_{\text{loc}}\mathcal{L}_{\text{loc}}$$

- **Loss Weights:** 対称性と局所性を最優先し、 $w_{\text{GW}} = 100$, $w_{\text{loc}} = 1.0$, $w_{\text{pin}} = 10$ と設定.
- **Optimizer:** Adam ($lr = 0.005$) を使用.
- **Scheduler:** Cosine Annealing ($T_{\text{max}} = 8000$) により、学習終盤での収束精度を高める.
- **Domain Randomization:** 入力質量 m_0 をトポロジカル相内 ($m_0 \in [-1.6, -0.4]$) でランダムに変動させ、あらゆる質量パラメータに対して頑健な演算子を学習させる.

Results : Dirac固有値分布

Eigenvalue Spectrum

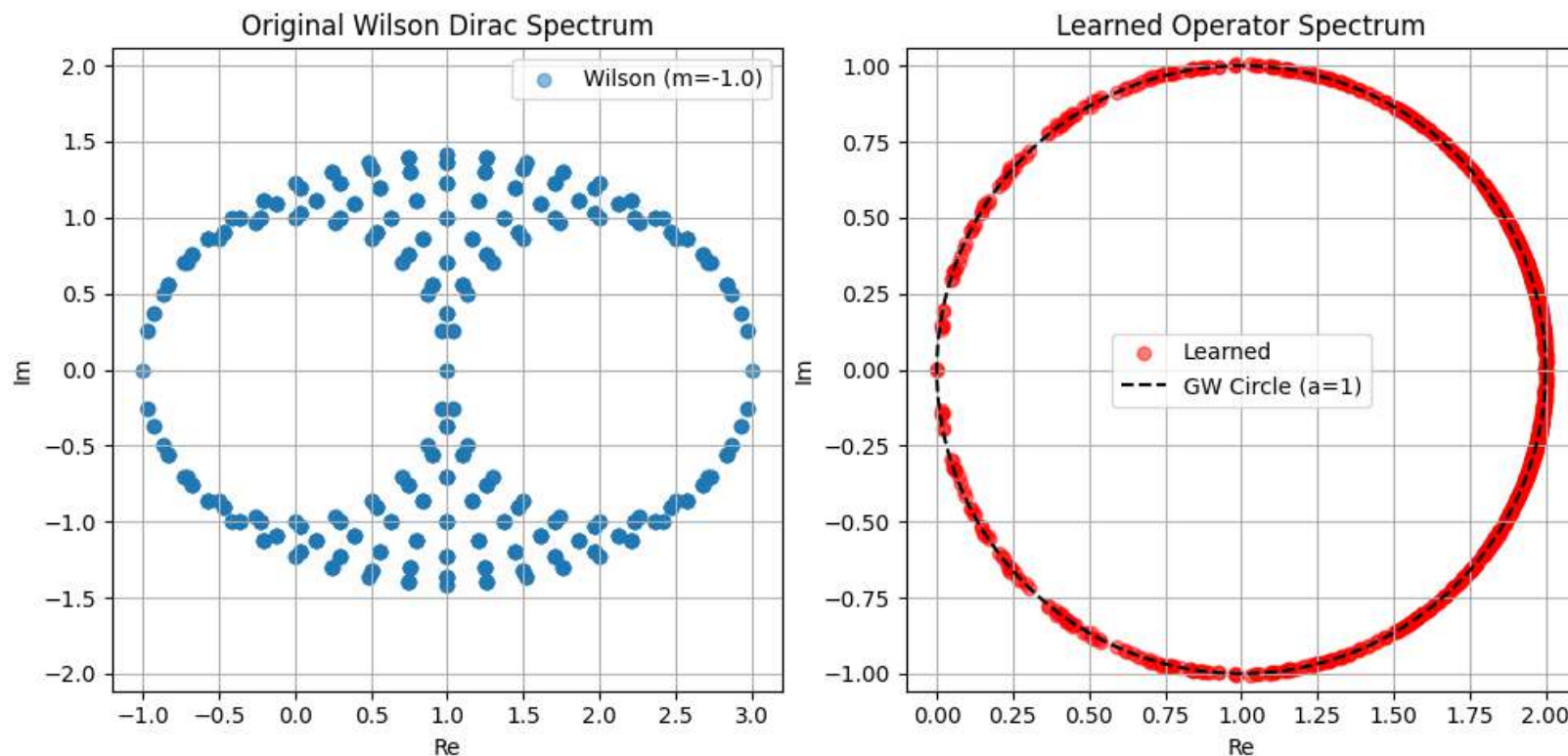
学習後の演算子 D_θ の固有値分布を確認したところ、初期の Wilson 演算子の「半月型」スペクトルから劇的に変化し、複素平面上の $(0,0)$ と $(2,0)$ を直径とする真円に見事に収束した。これは、ニューラルネットワークが GW 関係式を数値誤差の範囲内 ($\text{Loss} \sim 10^{-5}$) で満たしていることを示す。



Results : Dirac固有値分布

Eigenvalue Spectrum

学習後の演算子 D_θ の固有値分布を確認したところ、初期の Wilson 演算子の「半月型」スペクトルから劇的に変化し、複素平面上の $(0,0)$ と $(2,0)$ を直径とする真円に見事に収束した。これは、ニューラルネットワークが GW 関係式を数値誤差の範囲内 ($\text{Loss} \sim 10^{-5}$) で満たしていることを示す。



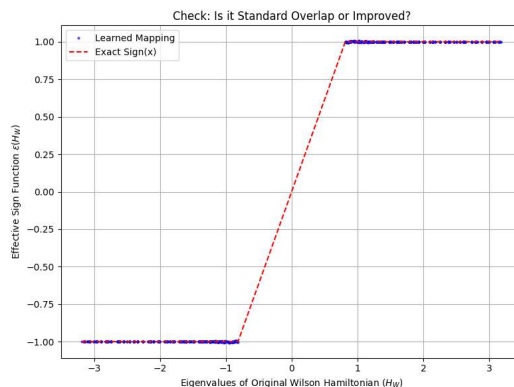
Results：符号関数

Effective Sign Function

得られた演算子が Overlap 演算子の定義 $D = 1 + \gamma_5 \text{sgn}(H_W)$ を満たしているか確認するため、学習された D_θ から有効的な符号関数を逆算した。

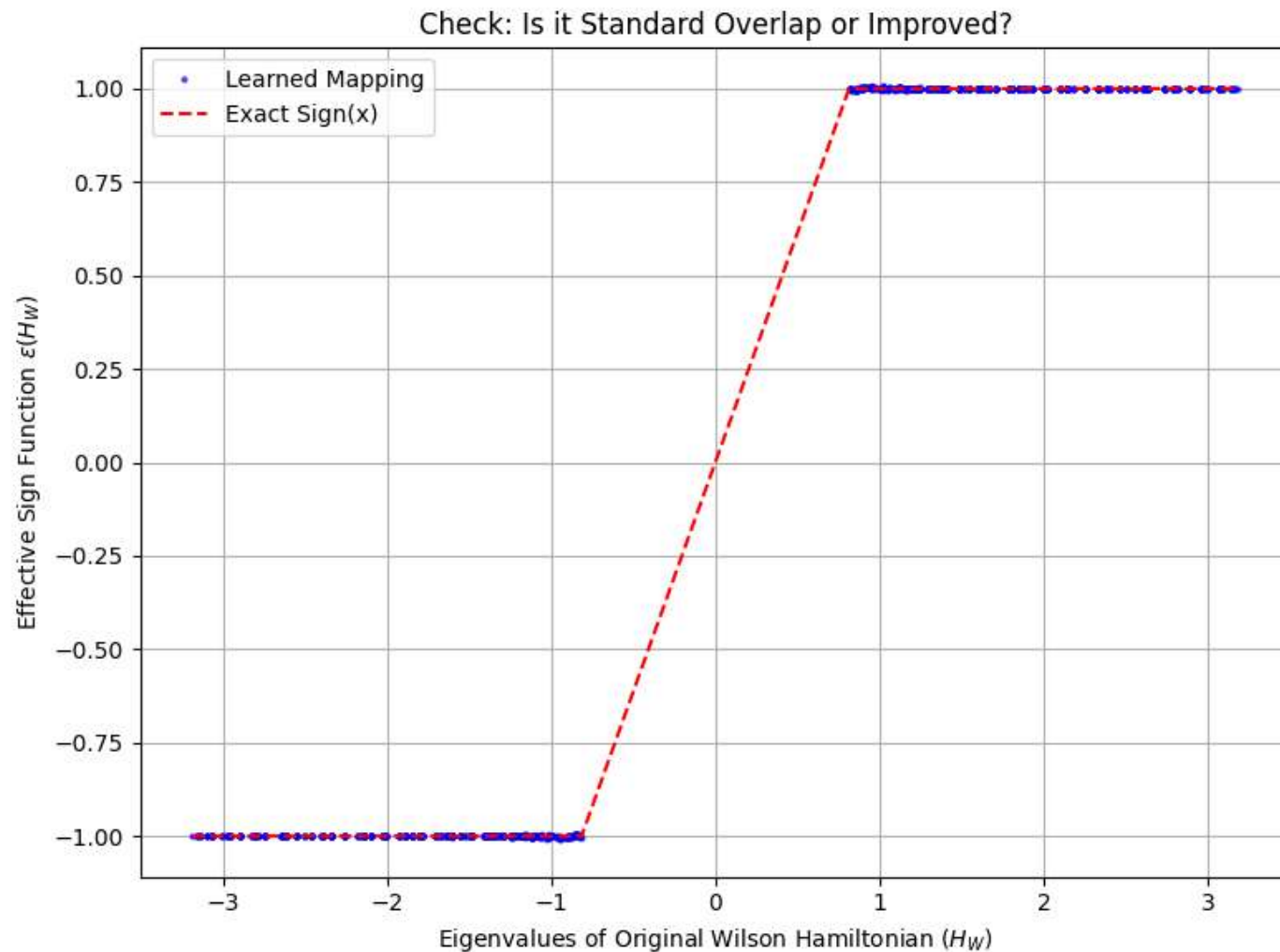
$$\epsilon_{\text{eff}}(\lambda) = \text{eig}(\gamma_5(D_\theta - 1))$$

元のハミルトニアン H_W の固有値 λ に対して ϵ_{eff} をプロットした結果、 $\lambda = 0$ で急峻に ± 1 が切り替わる階段関数 (**Step Function**) が得られた。通常が多項式近似 (チェビシェフ近似等) で見られるような Gibbs 振動も最小限に抑えられており、NN が符号関数の良い近似器として機能している。



Results : 符号関数

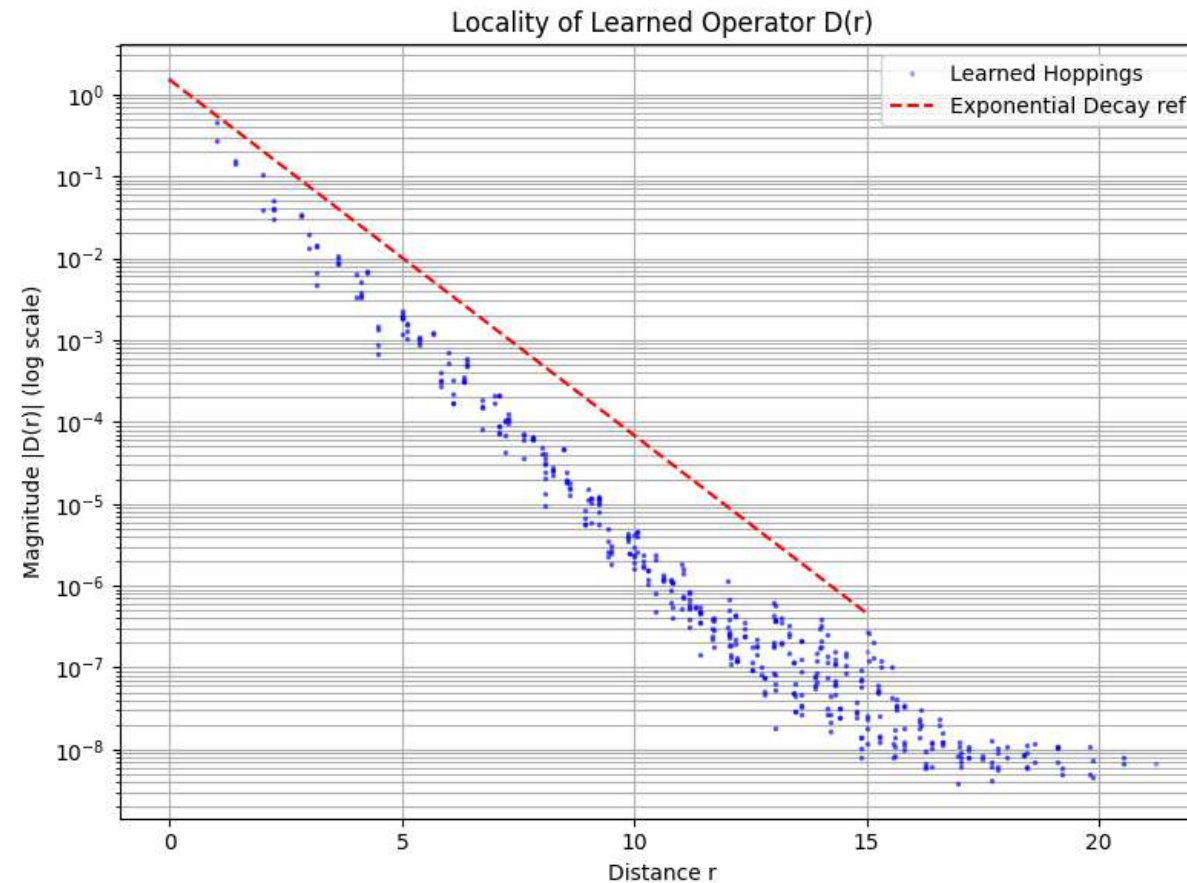
Effective Sign Function



Results : 局所性

Exponential locality

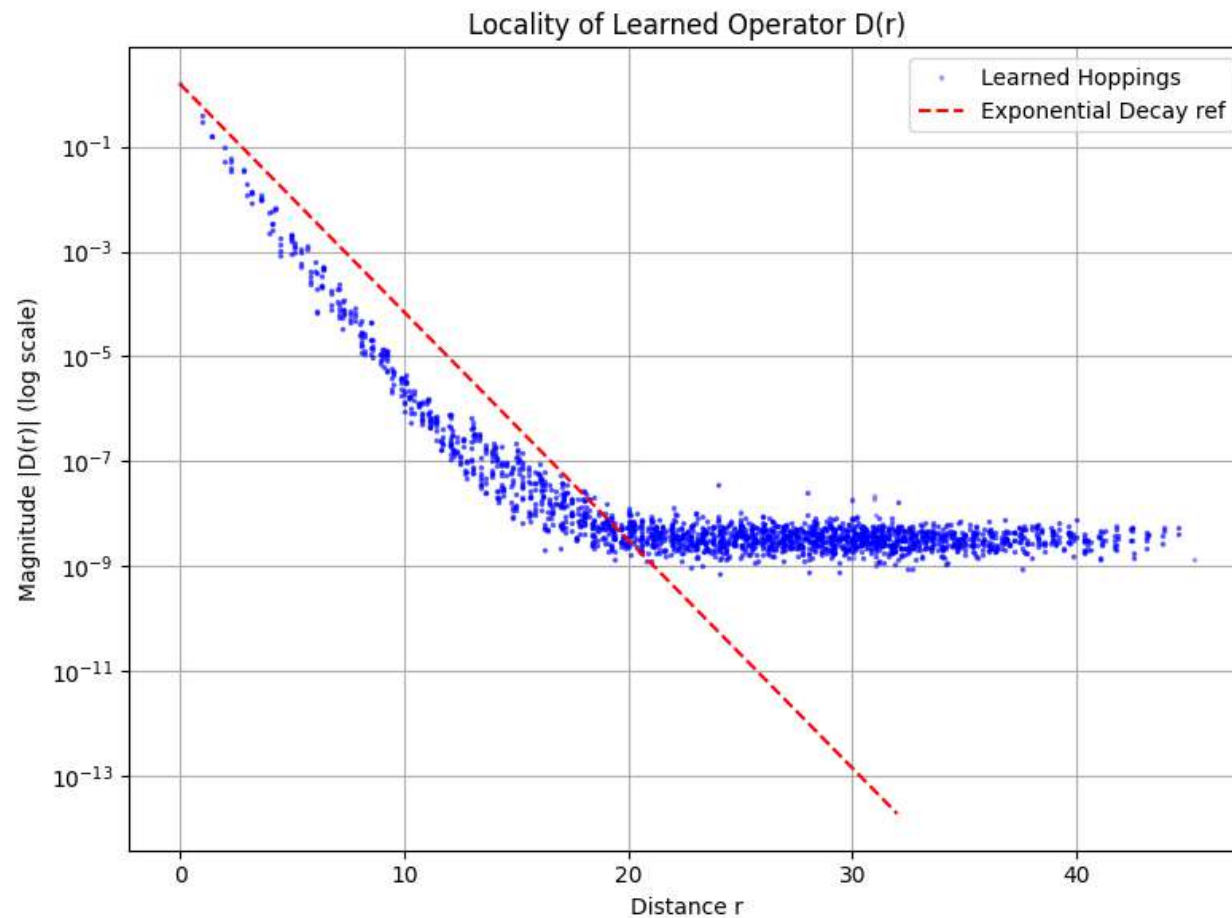
得られた演算子が指数関数的局所性を満たすことを確かめた. むしろより良い局所性.



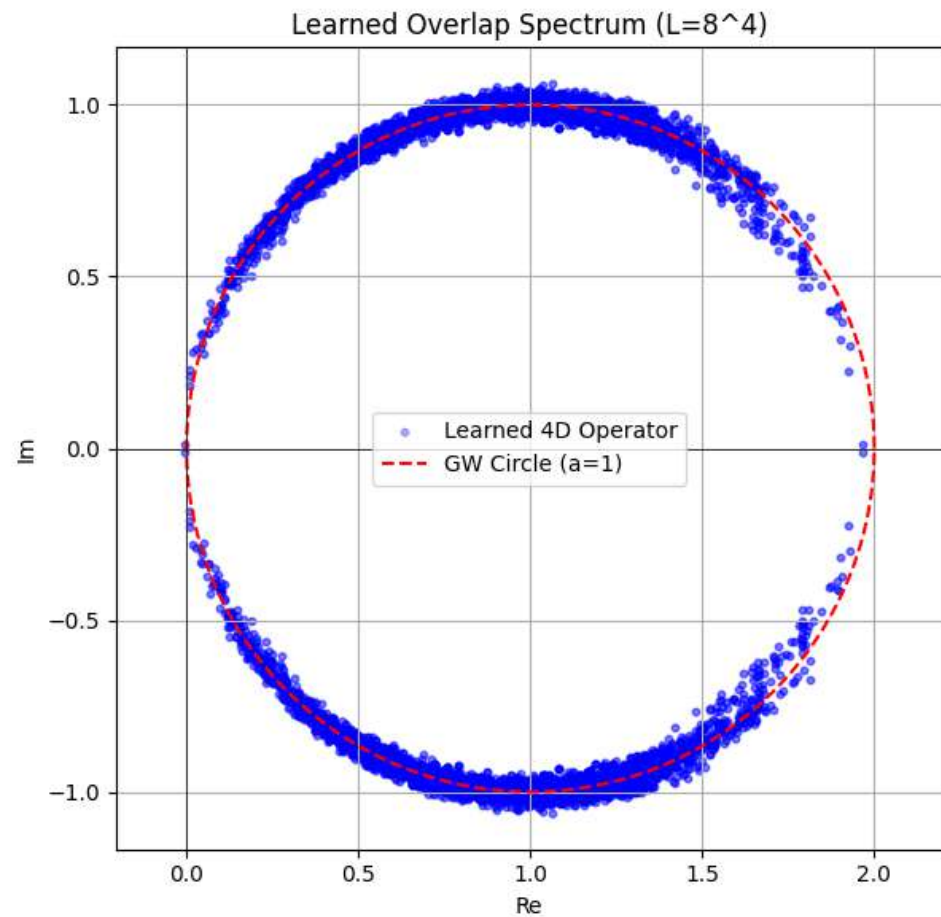
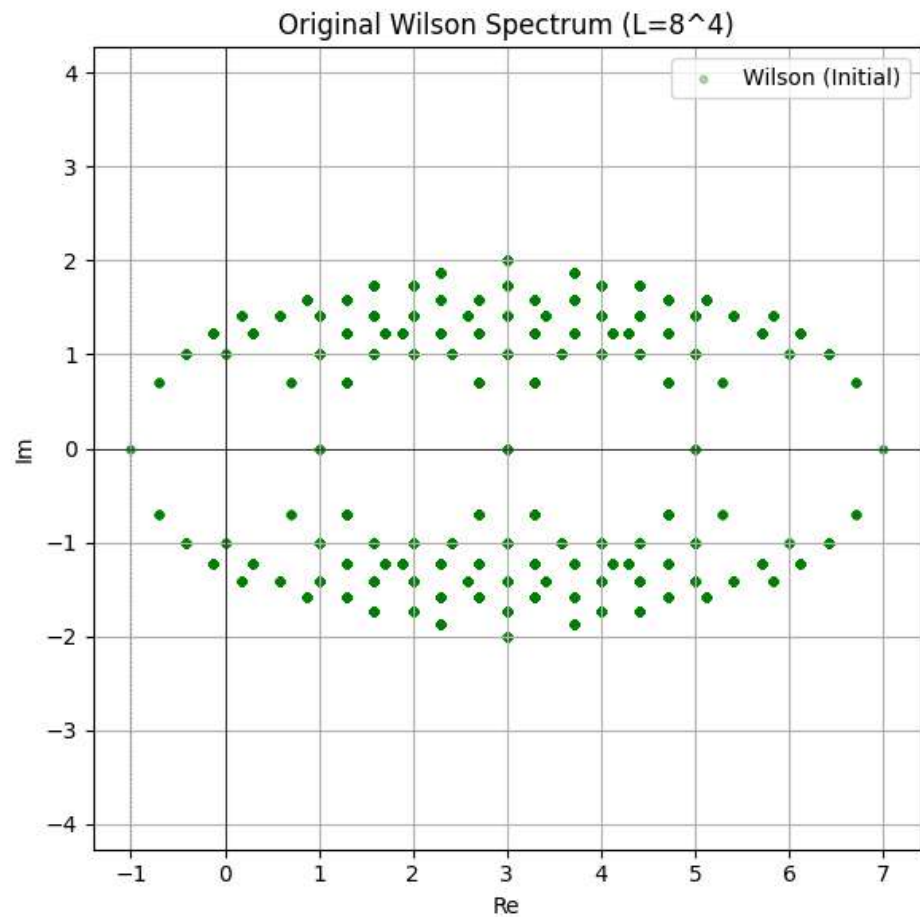
Results : 局所性

Exponential locality

得られた演算子が指数関数的局所性を満たすことを確かめた. むしろより良い局所性.



Results : 4次元



Results : ゼロモードと指数定理

Real-space Topology and Spectral Flow

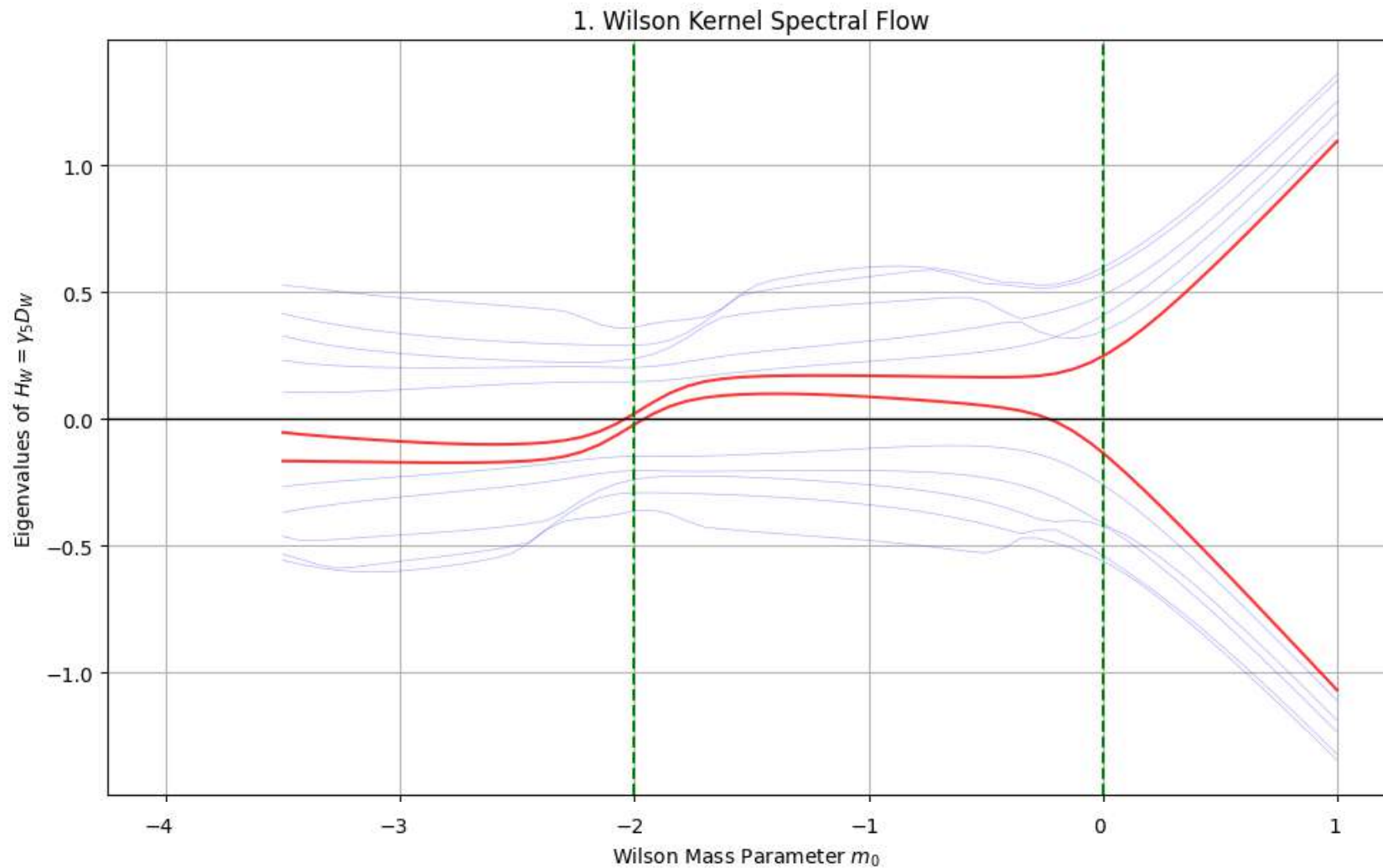
学習は運動量空間で行ったが、トポロジーは大域的な性質であるため、実空間での検証が不可欠である。

- 設定: 20×20 の実空間格子に、トポロジカルチャージ $Q = 1$ を持つ $U(1)$ ゲージ場を導入.
- **Gauging:** 学習したカーネル $D(k)$ を逆フーリエ変換し、ゲージリンク変数 $U_\mu(x)$ を付与して実空間演算子 D_{lat} を構築.
- **Spectral Flow:** 質量パラメータ m_0 を -2.5 から 0.5 まで掃引し、エルミート演算子 $H(m_0) = \gamma_5 D_{lat}(m_0)$ の固有値フローを計算.

Results : ゼロモードと指数定理

Real-space Topology and Spectral Flow

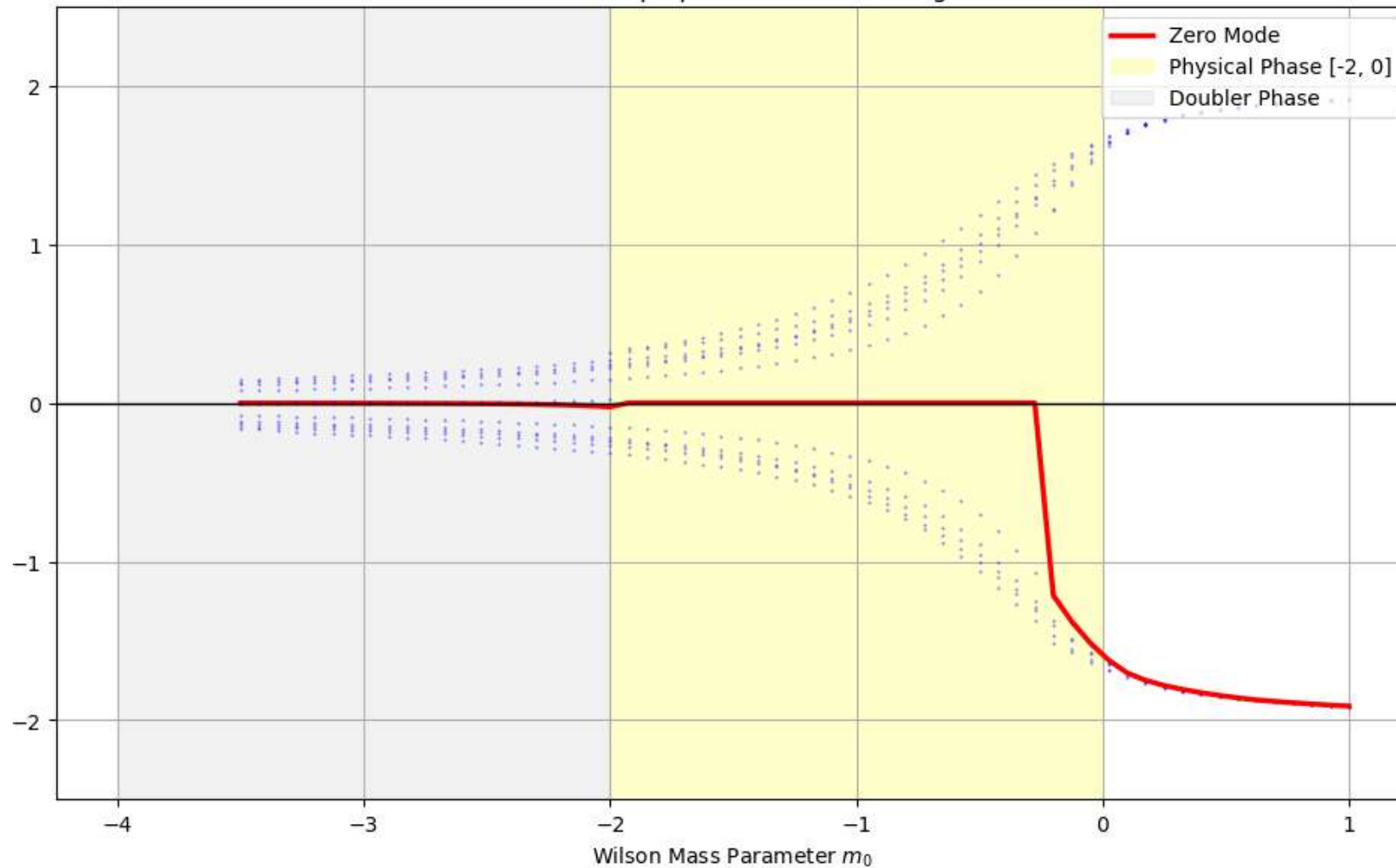
$Q = 1$ Wilson fermion



Results : ゼロモードと指数定理

Real-space Topology and Spectral Flow

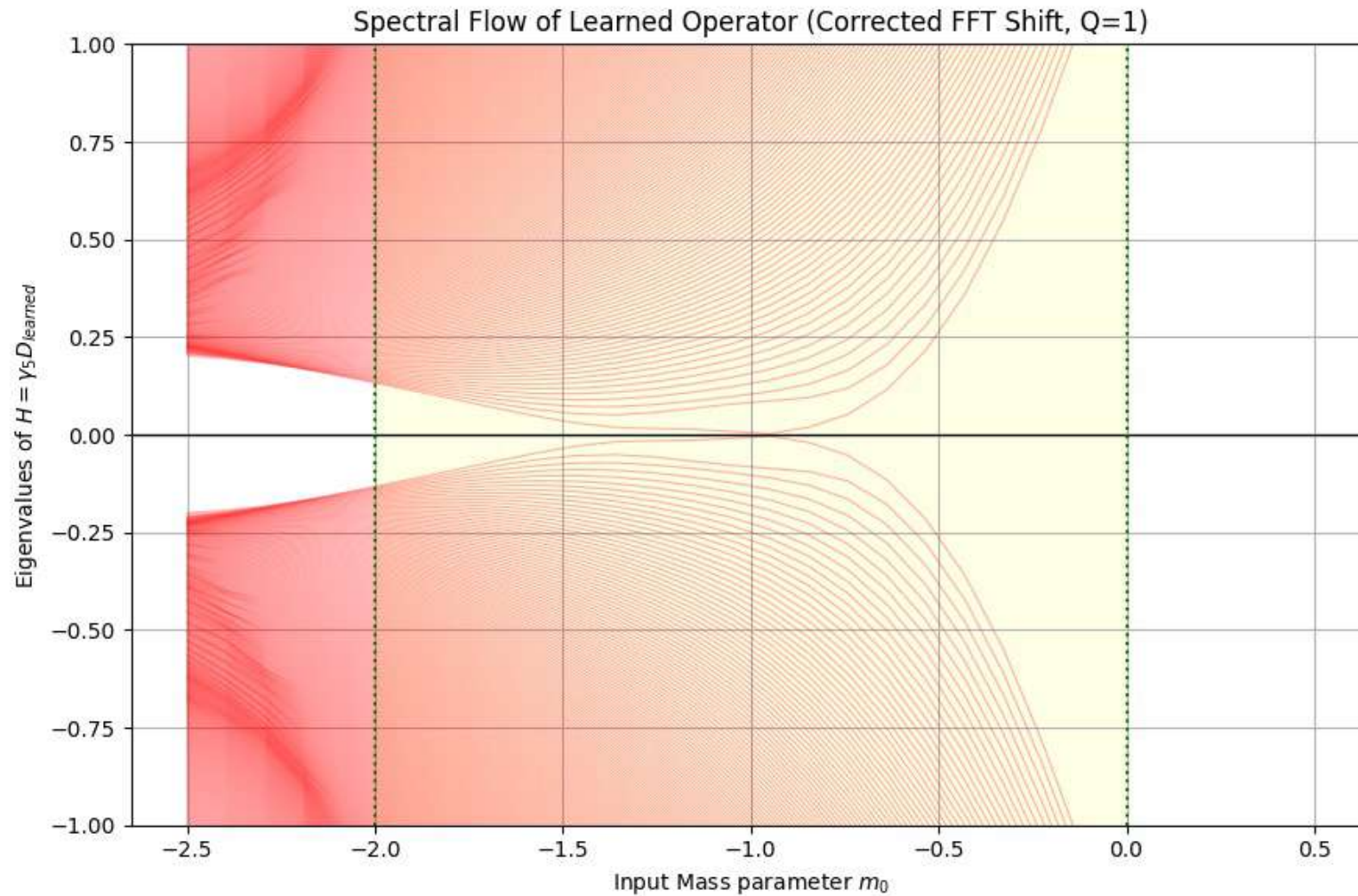
$Q = 1$ Overlap (exact)



Results : ゼロモードと指数定理

Real-space Topology and Spectral Flow

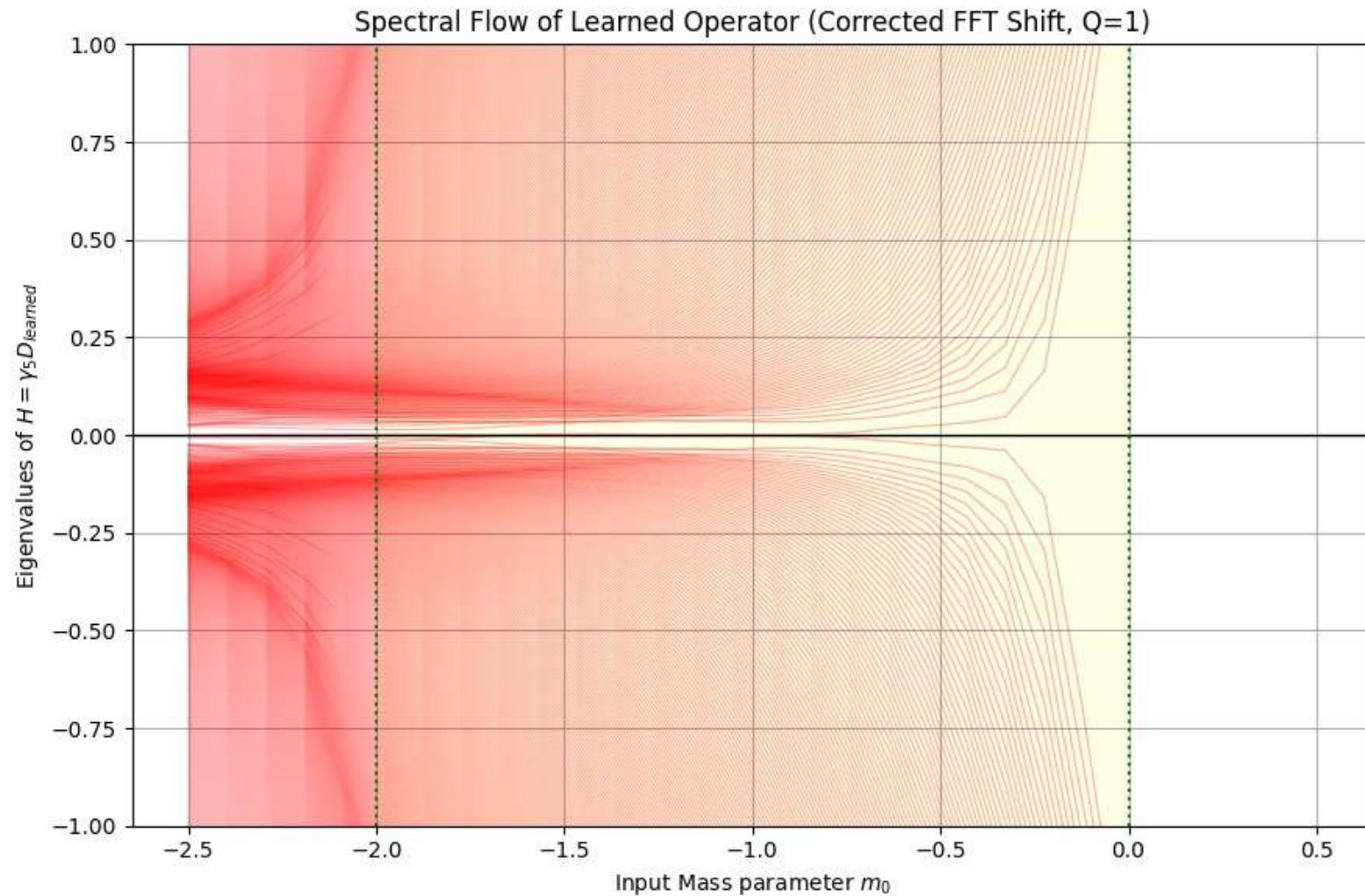
$Q = 1$ our learned operator



Results : ゼロモードと指数定理

Real-space Topology and Spectral Flow

$Q = 1$ our learned operator



Results : ゼロモードと指数定理

Real-space Topology and Spectral Flow

結果: トポロジカル相 ($-2 < m_0 < 0$) において, 固有値がゼロ付近に張り付く ”Zero Mode Plateau” が明瞭に観測された. これは Atiyah-Singer の指数定理

$$N_L - N_R = Q$$

を満たすゼロモード (カイラル対称なモード) が存在することの直接的な証拠である.

ただし, ChebyshevやZolotarev程度の残留質量が見られる.

そもそも、 NNを用いて、 Ginsparg-Wilson関係式その
ものを見つけ出すことは可能か？
つまりNNによる対称性の発見は可能か？

NNによるGW関係式の発見検証

これまでは GW 関係式の形（右辺 = $D\gamma_5 D$ ）を人間が与えていた。本節では、NN が物理的要請の整合性だけから、この関係式そのものを再発見できるか検証した。

具体的には、GW 関係式の右辺を既知とせず、未知の関数 $f(X)$ （ここで $X = D^\dagger D$ ）と仮定する。

$$D + D^\dagger = f(D^\dagger D)$$

この関数 $f(X)$ を N 次の多項式でモデル化し、その係数 $\{c_n\}$ を NN の重みパラメータ θ と同時に学習させる。

$$f(X) \approx \sum_{n=1}^N c_n X^n = c_1(D^\dagger D) + c_2(D^\dagger D)^2 + \cdots + c_N(D^\dagger D)^N$$

本研究では $N = 5$ と設定した。もし NN が標準的な Overlap フェルミオンを「再発見」するならば、係数は $c_1 = 1, c_{n \geq 2} = 0$ に収束するはずである。

損失関数

NN に対称性の形を一切教えずに学習させるため、損失関数には特定の解（例えば $D = 2$ への固定など）への誘導を含まない「ミニマルな物理要請」のみを採用した。損失関数は以下の 3 項からなる。

$$\mathcal{L} = w_{\text{rel}}\mathcal{L}_{\text{rel}} + w_{\text{const}}\mathcal{L}_{\text{const}} + w_{\text{loc}}\mathcal{L}_{\text{loc}}$$

. Symmetry Relation Loss

未知の対称性関係式が成立することを要請する項である。

$$\mathcal{L}_{\text{rel}} = \frac{1}{N_k} \sum_k \left\| (D + D^\dagger) - \sum_{n=1}^N c_n (D^\dagger D)^n \right\|^2$$

ここで係数 $\{c_n\}$ も勾配法により更新される学習パラメータである。

損失関数

Inequality Constraints via ReLU

最も重要な変更点は、ダブラー（非物理的極）に対する制約である。従来のように $D(\pi, \pi) = 2$ と固定してしまうと、その時点でスペクトルが円（GW 関係式）になることを強く示唆してしまう。そこで本手法では、等式拘束を撤廃し、Rectified Linear Unit (ReLU) 関数を用いた不等式制約 (**Inequality Constraints**) を導入した。

$$\mathcal{L}_{\text{const}} = \|D(0)\|^2 + \sum_{k \in \text{doublers}} \text{ReLU}(\mu - \text{Re}D(k)) \quad (14)$$

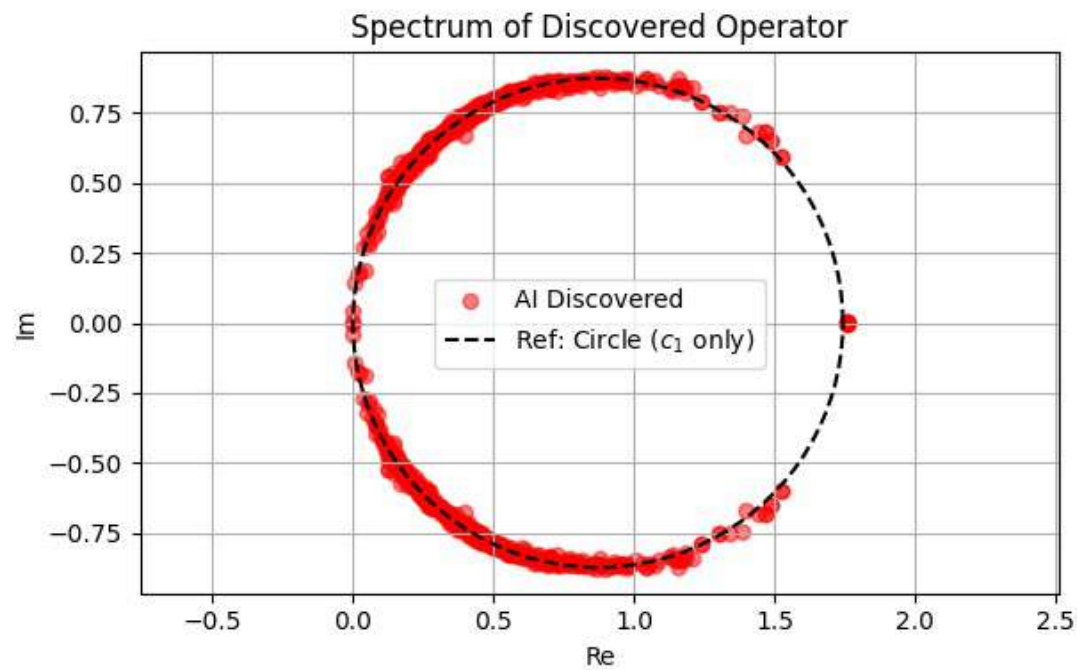
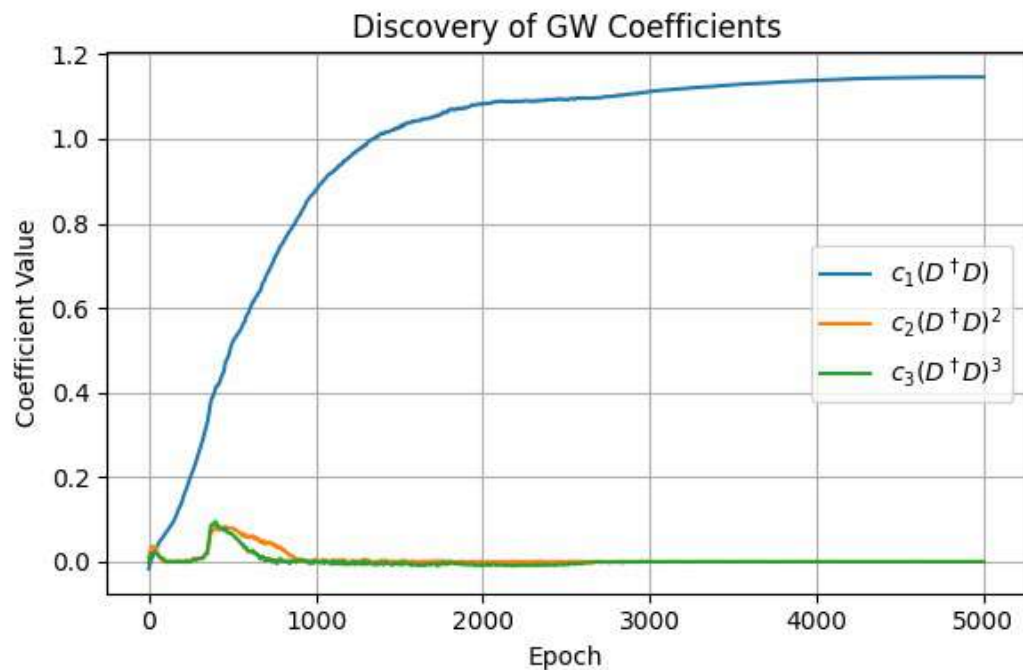
ここで $\mu = 0.5$ は閾値である。この損失関数は、ダブラーの実部が 0.5 より大きければゼロとなる。つまり、NN はダブラーを物理モード（原点）から引き離ささえすれば、複素平面上のどこに配置してもよい（自由度を持つ）。これにより、NN は「ダブラーを $D = 2$ に置くべきか、あるいは別の場所に置くべきか」を、対称性の整合性のみから判断することになる。

Results : ダブラーのpinningを強く課した場合

学習の結果、係数は以下の値に収束した。

$$c_1 \approx 1.0, \quad c_2 \approx \text{finite small value}, \quad c_{n \geq 3} \approx 0$$

これは標準的な GW 関係式 ($c_1 = 1, c_{>1} = 0$) を主要項として再現している。

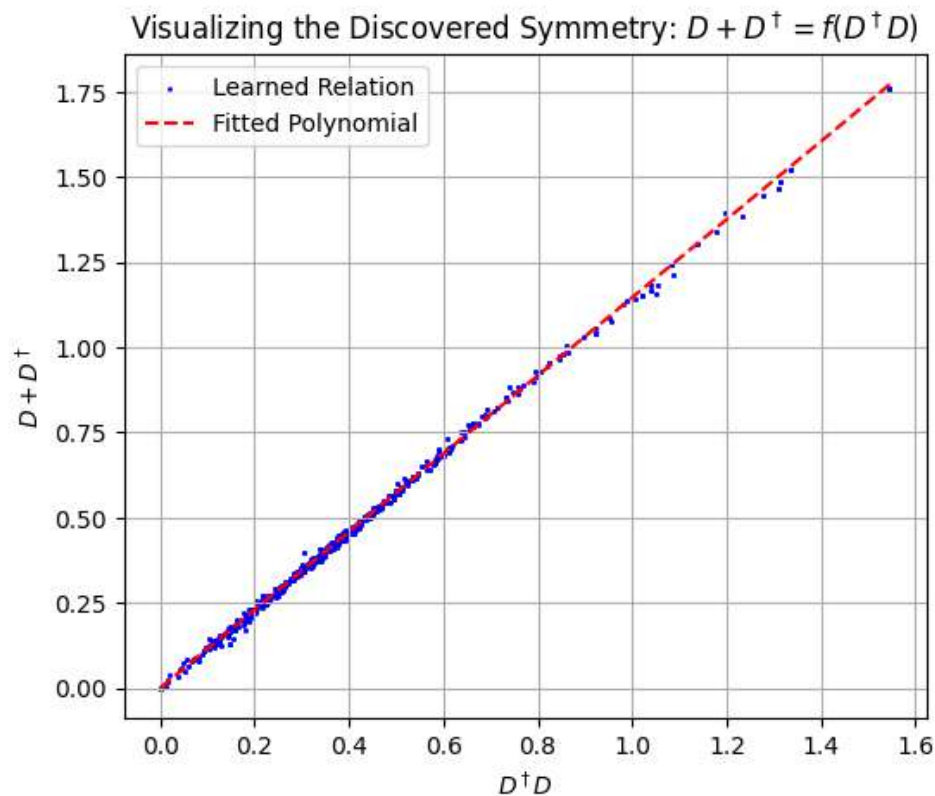


Results : ダブラーのpinningを強く課した場合

学習の結果, 係数は以下の値に収束した.

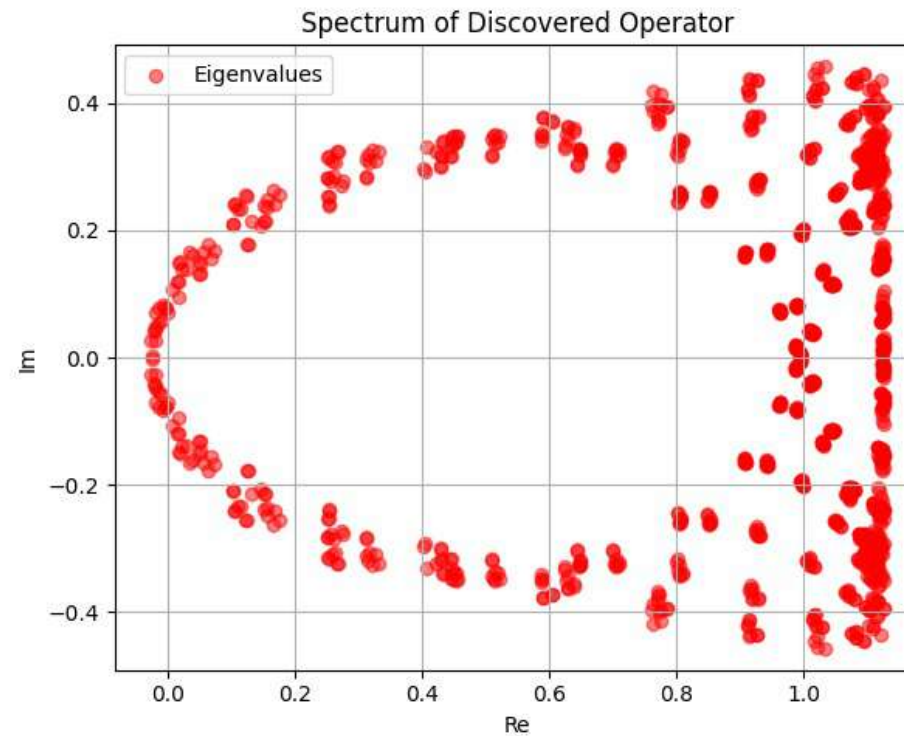
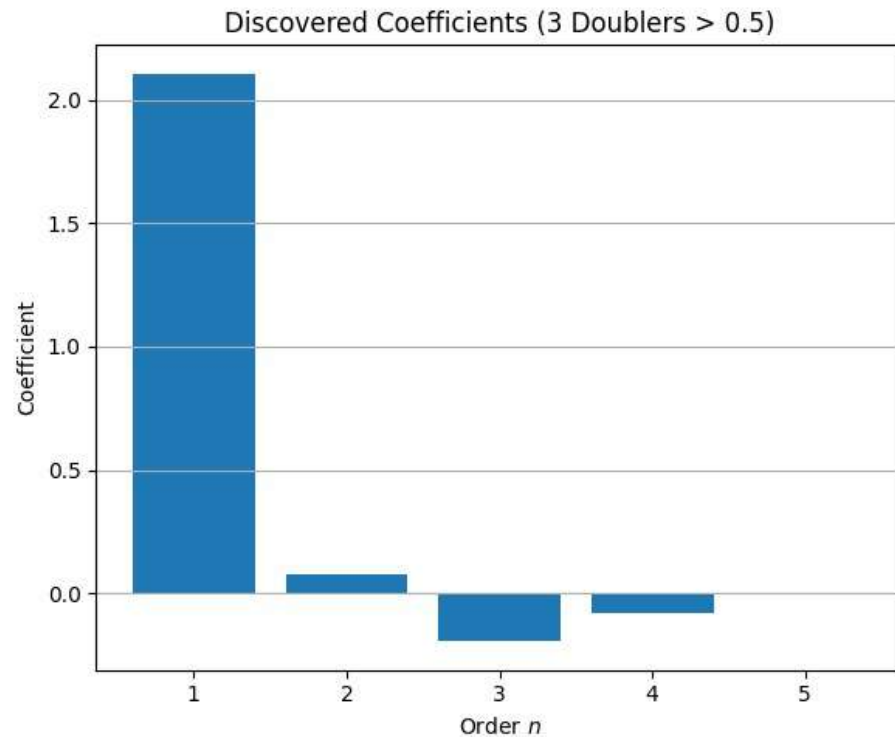
$$c_1 \approx 1.0, \quad c_2 \approx \text{finite small value}, \quad c_{n \geq 3} \approx 0$$

これは標準的な GW 関係式 ($c_1 = 1, c_{>1} = 0$) を主要項として再現している.



Results：局所性を強く課した場合

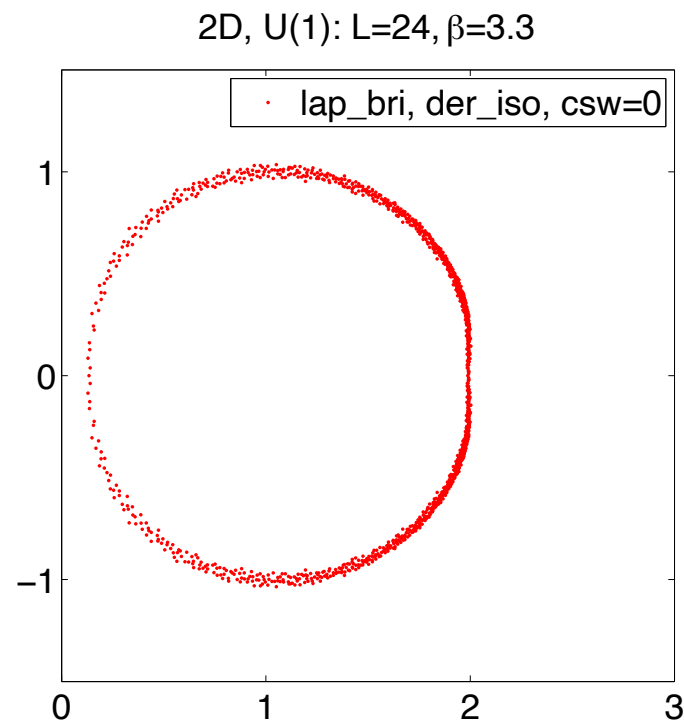
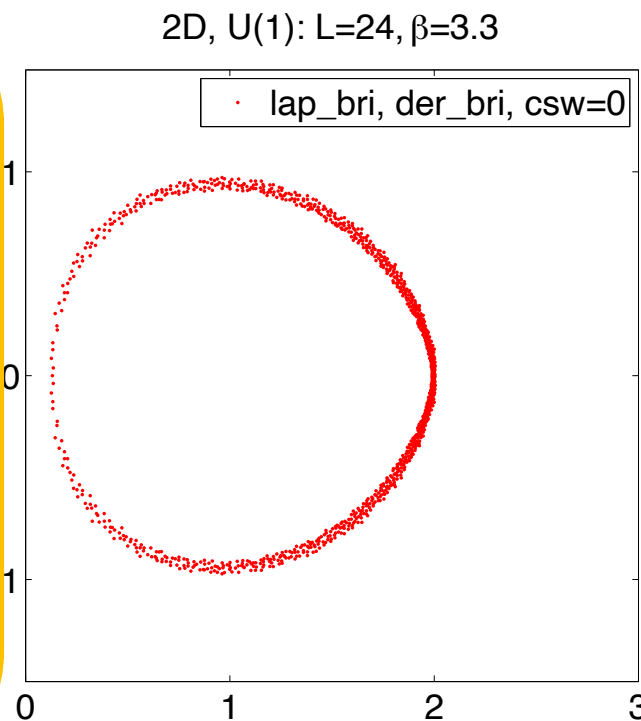
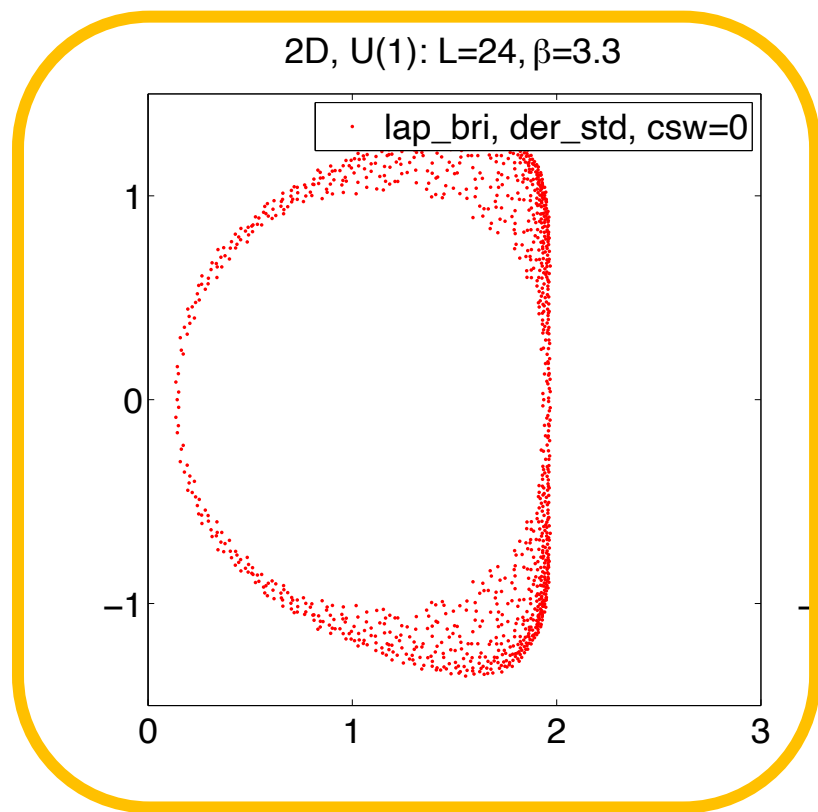
学習の結果，再び c_1 が主要な演算子を得られた．しかし，全然overlapではない．．．
一方，この固有値分布は見覚えあり → **Brillouin fermion kernel !**



Brillouin fermionの再発見

Results : 局所性を強く課した場合

学習の結果, 再び c_1 が主要な演算子を得られた. しかし, 全然overlapではない. . .
一方, この固有値分布は見覚えあり → **Brillouin fermion kernel !**

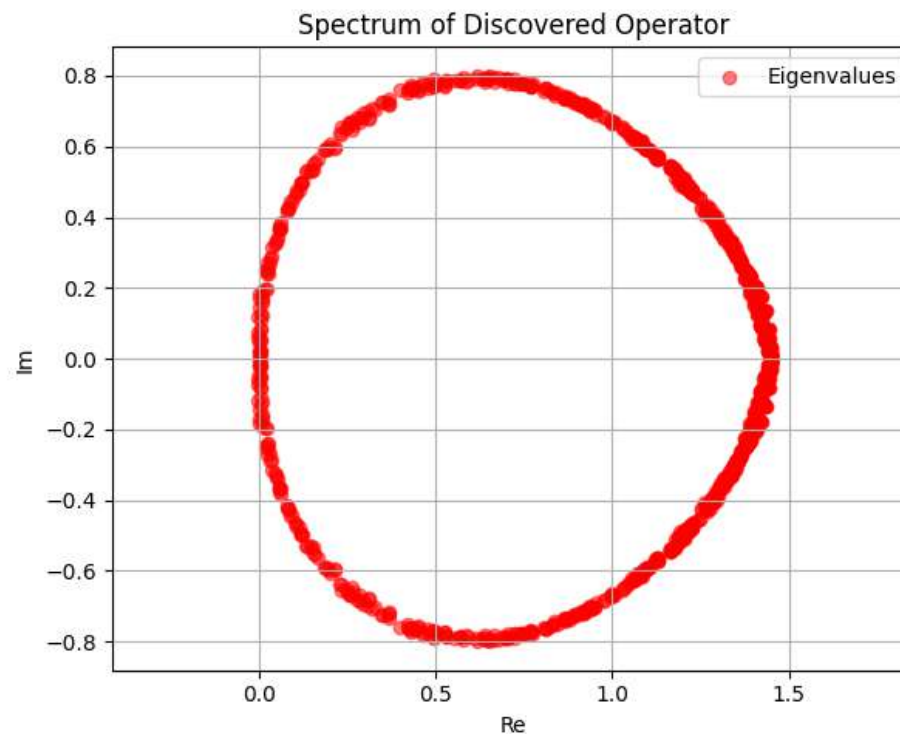
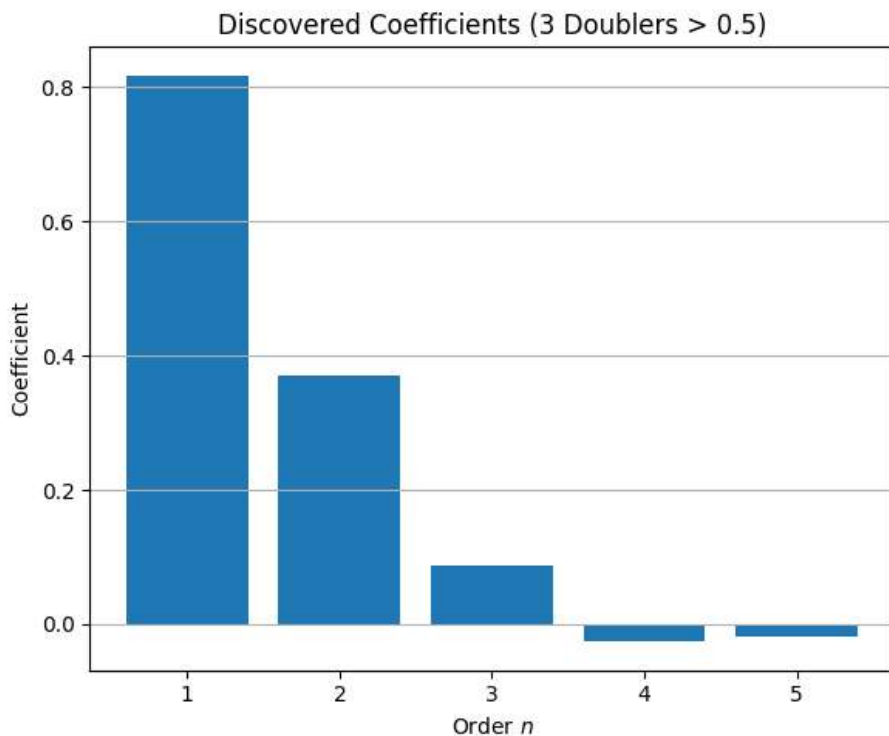


Brillouin fermionの再発見

Results : ダブラーpinning + 局所性を課した場合

学習の結果, 再び c_1 と c_2 が主要な演算子を得られた.
いわゆる単純なoverlapではない.

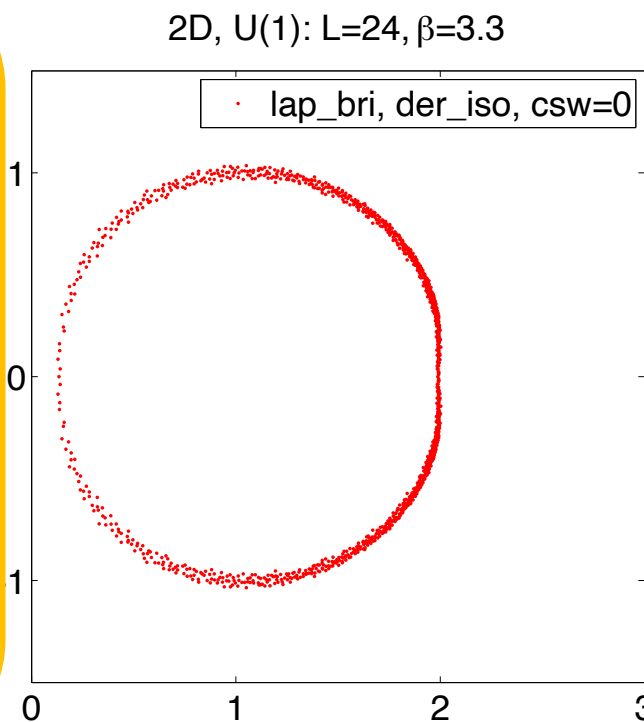
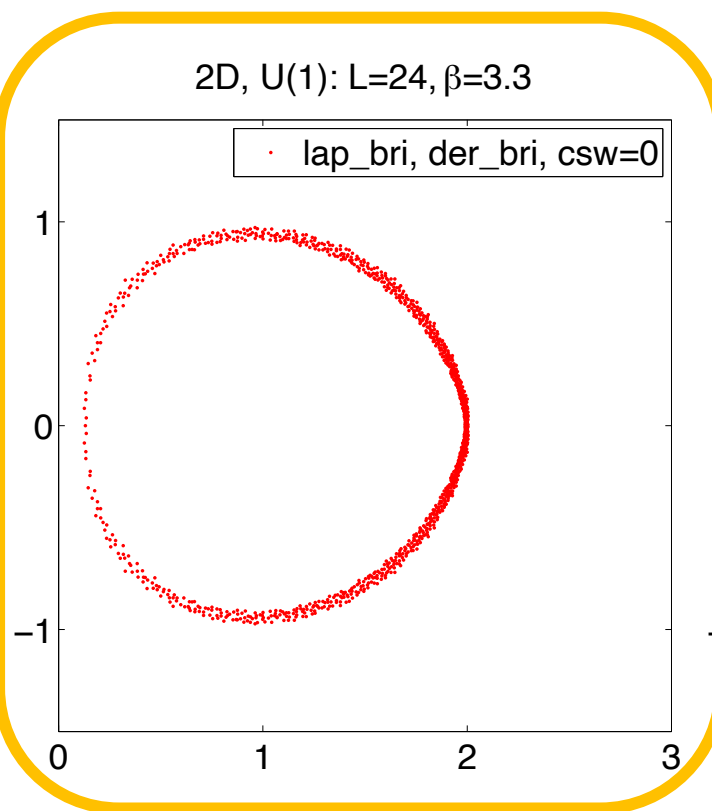
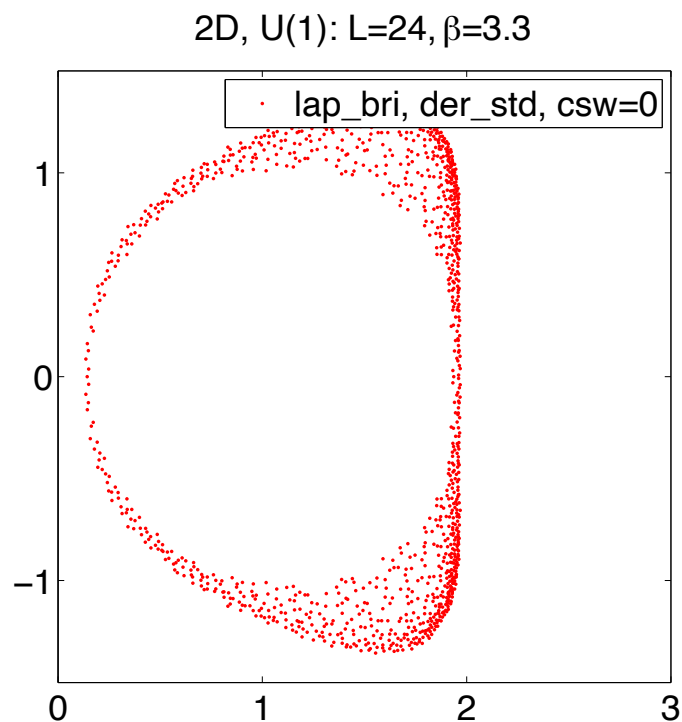
→ **Brillouin fermion kernel** もしくは一般化GW関係式を満たす演算子



Results : ダブラーpinning + 局所性を課した場合

学習の結果, 再び c_1 と c_2 が主要な演算子を得られた.
いわゆる単純なoverlapではない.

→ **Brillouin fermion kernel** もしくは一般化GW関係式を満たす演算子



Brillouin fermionの再発見

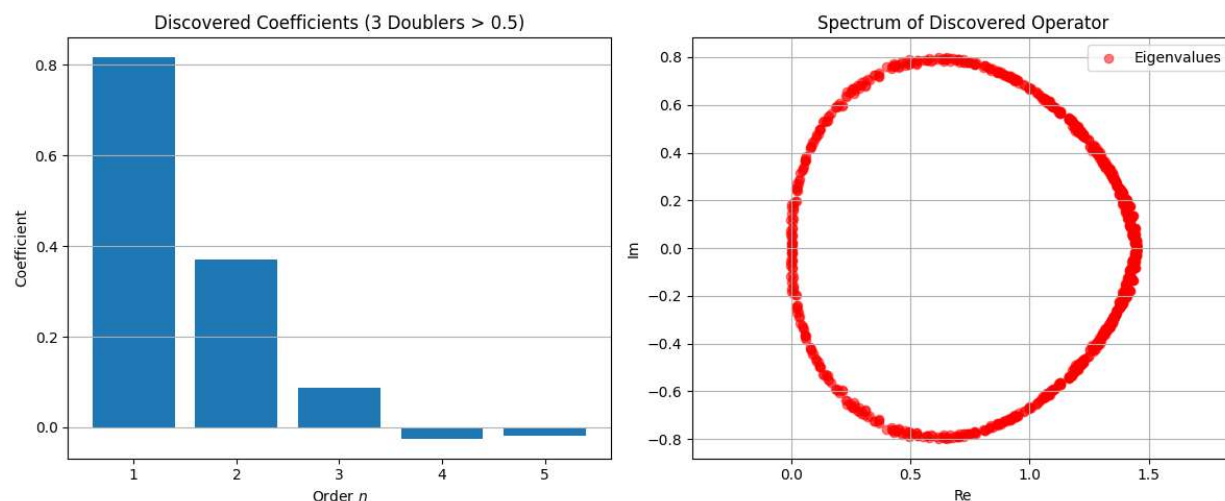
Results : ダブラーpinning + 局所性を課した場合

学習の結果, 再び c_1 と c_2 が主要な演算子を得られた.
いわゆる単純なoverlapではない.

→ **Brillouin fermion kernel もしくは一般化GW関係式を満たす演算子**

$$\gamma_5(\gamma_5 D) + (\gamma_5 D)\gamma_5 = 2a^{2k+1}(\gamma_5 D)^{2k+2}$$

Fujikawa (2000), Clancy, Kaplan, Singh(2023)



一般化GW関係式の再発見. さらに2つの項の線型結合を示唆.

Results : 総括

1. 一般化された対称性：指数定理を満たすための条件は、スペクトルが物理モードとダブラーを分離する閉曲線を描くことであり、必ずしも深淵である必要はない。 → Generalized GW relation
2. NNの最適化：「極の分離」と「局所性」を両立させる解の中で、最も安定、かつ表現コストが低い一般化GW関係式を見つけてきたと解釈できる。
3. 本結果は、NNが単なる関数近似器としてだけでなく、物理系に潜む対称性や保存則をデータ駆動（あるいは物理制約駆動）で発見する「理論探索ツール」として機能する可能性を強く示唆。

Conclusion and Discussion

Summary

1. **Beyond Solver:** PINN の枠組みは、微分方程式を解くだけでなく、格子場の理論における複雑な演算子構築にも有効である.
2. **Automatic Construction:** 物理的要請 (GW 関係式, 局所性など) を Loss として与えるだけで, Overlap フェルミオンを自動学習できる.
3. **Data-driven Discovery:** NN はデータを与えられなくても, 物理制約の整合性から, Ginsparg-Wilson 関係式のような深い対称性を「再発見」・「一般化」する能力を持つ.

Future Perspectives

- ・ 実際にここで得られた演算子の有効性を詳しく調べる必要がある.
- ・ さらなる改善: 損失関数, Optimizer などなど.
- ・ 一般に, 対称性 \rightarrow 演算子 (作用), 理論の特質 \rightarrow 対称性, を NN でどこまでできるか.
- ・ 格子ハミルトン形式への応用. ハミルトン形式の GW 関係式が近年重要視されており, 適切な格子フェルミオン演算子を探索する意義がある.