

# スパースモデリングを応用した量子モンテカルロ虚時間データの実振動数への解析接続

東北大学大学院理学研究科 大槻純也

多体電子系やスピン系に対する量子モンテカルロシミュレーションにおいて、一粒子励起スペクトルや磁気励起スペクトルなどの動的物理量を得るには、シミュレーションで計算される虚時間データを実振動数へと解析接続する必要がある。しかし、解析接続はノイズに極めて敏感であるため、モンテカルロデータに含まれる統計誤差に敏感に反応し、信頼のあるスペクトルを得ることが困難である。この問題を改善する方法としては、例えば最大エントロピー法など様々な方法が考案されているが、未だ決定的な手法が確立していないのが現状である。

本研究ではスパースモデリングを応用した新しい解析接続法を提案する。スパースモデリングとは機械学習などで必要となる多変数の最適化問題において、本質的でないパラメータを強制的にゼロにすることによって、オーバーフィットを避けつつ有意な情報を取り出し、柔軟な予測を可能とする技術である。我々のアイデアは、虚時間データおよび実振動数スペクトルを最小限の要素数で表現できる基底を探し、その基底でスパース性を課して有意なデータを自動抽出することで、ノイズに強い解析接続が可能になるであろうという考えである。

虚時間データを  $G(\tau)$ 、実振動数スペクトルを  $\rho(\omega)$  とすると、それらは次の式で結ばれる：

$$G(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-\beta\tau}}{1 + e^{-\beta\omega}} \rho(\omega).$$

誤差付きのデータ  $G(\tau)$  を入力として  $\rho(\omega)$  を求める逆問題が解析接続である。この式は変数を離散化すると以下のような行列表示に書き換えられる：

$$\mathbf{G} = \mathbf{K}\boldsymbol{\rho}.$$

行列  $\mathbf{K}$  が悪条件 (ill-conditioned) であるため、この逆問題は数値的に不安定である。

本研究では以下の2つの手順で解析接続を行う。(i) まず、悪条件な行列を扱う標準的な方法である特異値分解を適用する。(ii) そして、特異値分解によって変換された基底において  $L_1$  ノルムを用いた正則化を適用し、スパースな解を選び出す。以上の手順をスペクトル  $\rho(\omega)$  が満たすべき拘束条件（総和則と非負性）の下で実行することによって、誤差を含む虚時間データから有意な情報を抜き出し、安定して物理的に妥当なスペクトルを得ることができる [1]。さらに、この解析接続法によって得られた基底は虚時間データを表現する非常に効率の良い基底となっており、この基底によって、量子モンテカルロ法やダイアグラム展開などの虚時間形式の数値計算そのものを効率化することができる [2]。講演では正則化手法の詳細まで踏み込んで説明する。

本研究は大関真之氏（東北大情報）、品岡寛氏（埼玉大理）、吉見一慶氏（東大物性研）との共同研究である。

[1] J. Otsuki, M. Ohzeki, H. Shinaoka, K. Yoshimi, arXiv:1702.03056.

[2] H. Shinaoka, J. Otsuki, M. Ohzeki, K. Yoshimi, arXiv:1702.03054.