

令和 6 年 5 月 28 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2023

課題番号：19K03649

研究課題名（和文）情報理論を用いた精度保証付き解析接続手法の確立

研究課題名（英文）Development of an analytic continuation method with guaranteed accuracy using information theory

研究代表者

吉見 一慶 (Yoshimi, Kazuyoshi)

東京大学・物性研究所・特任研究員

研究者番号：10586910

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：量子モンテカルロ法は、磁化率や比熱などの静的物理量に関する実験との詳細な比較を可能にする強力な手法であるが、電子状態のスペクトル解析のような動的物理量については、高精度な解析接続を行う決定的手法が存在しないため、実験との詳細な比較が困難である。本研究は、解析接続の精度と信頼性を高めることを目指し、理論計算と実験結果の精度保証された比較を実現するための技術基盤を構築するため、交差検証を用いたハイパーパラメータ自動推定機能の検証や多軌道系での解析接続手法開発などを実施した。また、機能物質設計に活用できるように関連するソフトウェアの開発・整備も実施した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、精度保証された高精度な解析接続を実現し、複雑なスペクトル構造や動的感受率を高精度に求めることを目的とする。これにより、現実物質を対象とした理論解析の基盤技術が構築される。本研究では、誤差増幅を抑制する計算手法の確立と、解析接続データの精度評価手法の確立を目指した。これにより、解析結果の定量的・客観的な精度評価が可能となり、解析の信頼度向上と計算コストの軽減が実現する。得られた高精度データはベータ・サルビータ方程式などの応用計算に活用されることが期待され、理論解析の信頼性が向上し、幅広い材料科学分野への応用が期待される。

研究成果の概要（英文）：Quantum Monte Carlo methods are a powerful tool for making detailed comparisons with experimental data on static physical properties such as magnetization and specific heat. However, for dynamic physical quantities like spectral analysis of electronic states, there is no deterministic method for high-precision analytic continuation, making detailed comparisons with experiments difficult. This research aims to enhance the accuracy and reliability of analytic continuation, and to establish a technical foundation for precision-guaranteed comparisons between theoretical calculations and experimental results. To this end, we have implemented the verification of automatic hyperparameter estimation using cross-validation and developed analytic continuation methods for multi-orbital systems. Additionally, we have carried out the development and maintenance of related software to facilitate the design of functional materials.

研究分野：物性理論

キーワード：解析接続 スパースモデリング 交差検証 虚時間グリーン関数

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

近年の物性理論および計算機技術の進歩に伴い、第一原理計算を出発点にしたハバード模型やスピン模型などの有効模型の作成が可能となり、現実物質を対象にした理論解析・物質設計に向けての基盤が確立しつつある。量子多体系を表す有効模型の有限温度解析を行う一つの強力な手法として量子モンテカルロ法があるが、現実物質を表す有効模型は多くの自由度を持つため、解析には膨大な計算コストが必要となる。計算量を軽減するには、サンプリング数を減らし必要な精度の範囲内で解析を済ませることが単純な対策法として挙げられるが、どの程度の精度であれば十分か、事前に知ることが難しい。また、相転移温度などが決定できる感受率の計算には、ベーテ・サルピータ方程式を解く必要があり、その際に行列演算処理が行われる。計算量の軽減には、適切な基底を選び行列サイズを減らすといったアプローチが挙げられるが、どのような基底を選べばよいか自動判定することは難しい。解析に必要な精度・対象空間を自動判定した上で、計算量の削減・高速化を達成することが可能か？本研究課題ではこの問いについて取り組んだ。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、精度保証された高精度な解析接続を実現し、複雑なスペクトル構造や動的感受率を高精度に求めることである。これにより、現実物質を対象にした理論解析の基盤技術を構築する。目的達成に向け、本課題では、(1) 物理的および統計的な情報により制限を加え誤差増幅を抑制する計算手法の確立、および (2) 解析接続により得られたデータ(出力データ)から虚時間データ(入力データ)の精度が必要精度に達しているかを成否判定する手法の確立を目標とした。これまでの解析接続では、得られた結果の検証は研究者の経験・センスに基づいて行われてきたが、本手法により定量的・客観的な精度評価が可能となり、解析の信頼度の指標を手にすることができる。これにより、必要な精度を与えるモンテカルロサンプリング数を把握することができ、計算コストの軽減にもつなげられる。さらに、得られた高精度な圧縮基底をベーテ・サルピータ方程式などの応用計算に活用することで、磁気秩序転移や超伝導転移などの幅広い現実物質の物性予測に向けた高精度・高速な解析へと発展することが期待される。

### 3. 研究の方法

#### (1) 解析接続における統計誤差の増幅の抑制

スパースモデリングを用いた解析接続法に、低エネルギーの励起情報を取り入れた解析機能と、虚時間データの相関(共分散)情報からの実時間データ情報抽出機能を実装する。前者は、低エネルギーの励起状態をよく再現するパデ近似を援用し部分最適化をかける。後者は、現状の解析で現れる行列表現を、共分散を考慮したものへ拡張し解析を行う。これらの情報を取り入れることで、ノイズにより失われた圧縮基底の復元を行い、より高精度な解析接続を行うための手法を確立する。

#### (2) 虚時間データの解析接続結果に対する情報理論を用いた精度検証

スパースモデリングの成否について、交差検証を用いることで判定する。量子モンテカルロデータのサンプリング数について交差検証を行うことで、量子モンテカルロデータの解析接続の成否判定を行う。これにより、これまで経験的に行われていた解析接続の精度検証を、バイアスなく実施することが可能になる。

### 4. 研究成果

以下に、主な成果について述べる。

#### (1) 解析接続における統計誤差の増幅の抑制

スパースモデリングを用いた解析接続法において、低エネルギーの励起情報を取り入れた解析機能から実時間データ情報を抽出する機能を実装した。低エネルギー近傍では、パデ近似による解析接続の精度が良いことが知られている。そこで、低エネルギー近傍での解析接続の精度を向上させるために、スパースモデリングとパデ近似を組み合わせた手法を新しく開発した。また、動的平均場理論ソフトウェアDCoreを用いたモデル計算を実施し、本手法の解析接続の精度検証を行った。その結果、スパースモデリングを用いた解析接続のみでは抑えられない低エネルギー部の人工的な振動を抑制できることを示した。さらに、DCoreとスパースモデリングを用いた解析ツールSpMの連携機能を強化し、円滑に解析接続を行えるようにした。これにより、現実のモデルで対象とする場合が多い多軌道モデルでの検証が行いやすくなり、多軌道モデルでのスパースモデリングを活用した解析接続手法について検証を推進することができた。その結果、多軌道系でのスペクトルの対角成分が各周波数成分で正となるような拘束条件を課した上で、本手法を適用した場合によく使用される解析接続手法であるパデ近似を適用する場合よりも高精度な解析接続が得られることを示した。虚時間データの相関（共分散）情報を利用した解析接続については、スパースモデリング解析接続において共分散情報を組み合わせたコスト関数を導入した。量子モンテカルロ法ソルバーDSQSSを用いることで共分散情報を取り入れた解析接続手法の確認をし、いくつかの事例に対して、その有用性について検証した。

#### (2) 虚時間データの解析接続結果に対する情報理論を用いた精度検証

交差検証を大型計算機で行えるように拡張したプログラムの開発を行った。また、実験データを対象とした検証を行い、速度改善などを実施した。交差検証プログラムを用い、ノイズを人工的に与えたテストデータに対して交差検証によるハイパーパラメータの決定が可能かどうかを検証した。その結果、ノイズがある程度大きい領域では、誤差があるハイパーパラメータで最小値を持ち、それよりも小さいハイパーパラメータでは過学習状態による誤差の増加、それよりも大きいハイパーパラメータでは成分を過剰に削るための誤差の増加が確認できた。一方で、ノイズが小さい場合には誤差のハイパーパラメータ依存性が非常に小さくなり、既存の解析接続用プログラム（SpM）では数値精度および収束性の問題から最適なハイパーパラメータの検出が難しくなり、より高精度な検証を行うには別のアプローチを行う必要があることを確認した。

#### (3) ソフトウェア開発・普及活動

スパースモデリングを用いた解析接続法を実装したソフトウェアSpMに加え、虚時間データをシミュレーションデータから得るための量子モンテカルロ法ソルバーDSQSS、動的平均場近似用ソフトウェアDCoreの整備を実施した。また、これらの論文を執筆し、SpM、DSQSSに関してはComputer Physics Communications誌、DCoreについては、SciPost誌に成果を発表された。また、これらのソフトウェアが様々な環境で利用できるよう、MateriApps Installerの整備を実施し、MateriApps Installerおよび関連ツールであるMateriApps LIVE!に関する論文をSoftwareX誌に投稿し出版した。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6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 Motoyama Yuichi, Yoshimi Kazuyoshi, Kato Takeo, Todo Synge	4. 巻 20
2. 論文標題 MateriApps LIVE! and MateriApps Installer: Environment for starting and scaling up materials science simulations	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 SoftwareX	6. 最初と最後の頁 101210-1~6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.softx.2022.101210	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 Motoyama Yuichi, Yoshimi Kazuyoshi, Otsuki Junya	4. 巻 105
2. 論文標題 Robust analytic continuation combining the advantages of the sparse modeling approach and the Pade approximation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 035139-1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.105.035139	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 Shinaoka Hiroshi, Otsuki Junya, Kawamura Mitsuaki, Takemori Nayuta, Yoshimi Kazuyoshi	4. 巻 10
2. 論文標題 DCore: Integrated DMFT software for correlated electrons	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 SciPost Physics	6. 最初と最後の頁 117-1~31
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.21468/SciPostPhys.10.5.117	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 Motoyama Yuichi, Yoshimi Kazuyoshi, Masaki-Kato Akiko, Kato Takeo, Kawashima Naoki	4. 巻 264
2. 論文標題 DSQSS: Discrete Space Quantum Systems Solver	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 107944~107944
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2021.107944	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 Yoshimi Kazuyoshi, Otsuki Junya, Motoyama Yuichi, Ohzeki Masayuki, Shinaoka Hiroshi	4. 巻 244
2. 論文標題 SpM: Sparse modeling tool for analytic continuation of imaginary-time Green's function	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 319 ~ 323
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2019.07.001	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 Otsuki Junya, Ohzeki Masayuki, Shinaoka Hiroshi, Yoshimi Kazuyoshi	4. 巻 89
2. 論文標題 Sparse Modeling in Quantum Many-Body Problems	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 012001 ~ 012001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.012001	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7件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 0件)

1. 発表者名 吉見 一慶
2. 発表標題 物質科学分野におけるオープンサイエンスをめぐるトピックスの紹介
3. 学会等名 科学技術ソフトウェア研究センター講演会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉見 一慶, 田村 亮, 山地 洋平, 三澤 貴宏
2. 発表標題 ベイズ最適化を用いた有効模型推定ツール(BEEMs)の開発
3. 学会等名 日本物理学会 2023年春季大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 本山裕一, 品岡寛, 吉見一慶, 大槻純也
2. 発表標題 多軌道系のスパースモデリング解析接続
3. 学会等名 日本物理学会 2022年秋季大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 本山裕一, 吉見一慶, 大槻純也, 品岡寛
2. 発表標題 グリーン関数の解析接続ソフトウェア SpM version2
3. 学会等名 日本物理学会 2021年秋季大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 本山裕一, 吉見一慶, 大槻純也
2. 発表標題 スパースモデリングを活用した多軌道系への解析接続手法の検証
3. 学会等名 日本物理学会 第77回年次大会 (オンライン開催)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 本山裕一, 吉見一慶, 大槻純也, 品岡寛
2. 発表標題 スパースモデリング解析接続への虚時間相関情報の導入
3. 学会等名 日本物理学会 2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 本山裕一, 吉見一慶, 大槻純也, 品岡寛
2. 発表標題 スパースモデリング解析接続への虚時間相関情報の導入 II
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会 (2020年)
4. 発表年 2020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
研究分担者	本山 裕一  (Motoyama Yuichi)  (30816731)	東京大学・物性研究所・技術専門職員    (12601)	

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0件

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
---------	---------