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

科研費 KAKENHI
J-Physics：多極子伝導系の物理
J-Physics : Physics of Conductive Multipole Systems

自己紹介

- 専門
  - 強相関電子系（f電子系、d電子系）
  - 量子多体系の数値計算

- 私とスパースモデリング
  - 2016年10月に大関さんを招待　→　解析接続への応用を思いつく
  - 2017年2月に2編の論文を投稿

今日からはじめました！

というわけで、データサイエンス初心者です。

初心者からの視点で講演いたします！

共同研究者

大関真之（東北大情報）

情報統計力学
スパースモデリング

品岡寛（埼大理）

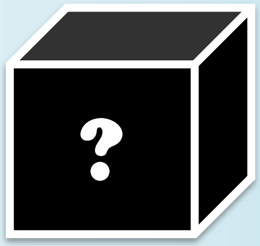
計算物質学
量子モンテカルロ法

吉見一慶（東大物性研）

プログラムの高度化
High Performance Comp.

スパースモデリングの応用

＝　技術：圧縮センシング、ノイズ除去



新しい解析接続法

JO, Ohzeki, Shinaoka, Yoshimi, arXiv:1702.03056

本質を抜き出す　物理の醍醐味

新しい基底の発見

Shinaoka, JO, Ohzeki, Yoshimi, arXiv:1702.03054

INTRODUCTION:

Two Problems
in Quantum Many-body Computations

虚時間

統計力学：多体系の有限温度の性質

古典系 $$Z = \sum_j e^{-\beta E_j}$$ $\beta = 1/T$ ：逆温度

量子系 $$Z = \mathrm{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}$$ $\mathcal{H}$ ：ハミルトニアン行列

次元 $= \mathcal{O}(e^N)$

対角化できない

c.f. 量子力学の時間発展演算子

$$U(t) = e^{-it\mathcal{H}}$$

虚時間 $it \to \tau$ $\int_0^\beta d\tau$

量子モンテカルロ法
ダイアグラム展開

なぜ解析接続が必要か

知りたい量：動的応答

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^{\mathrm{R}}(\omega)$$

例：一粒子励起スペクトル
磁気励起スペクトル

フーリエ変換

解析接続

遅延グリーン関数

$$G^{\mathrm{R}}(t) = -i\theta(t)\langle[A(t), B]_{\pm}\rangle$$

$$A(t) = e^{iHt}Ae^{-iHt}$$

“虚時間”

$it \to \tau$

虚時間グリーン関数

$$G(\tau) = -\langle T_\tau A(\tau)B\rangle$$

$$A(\tau) = e^{\tau H}Ae^{-\tau H}$$

扱いにくい

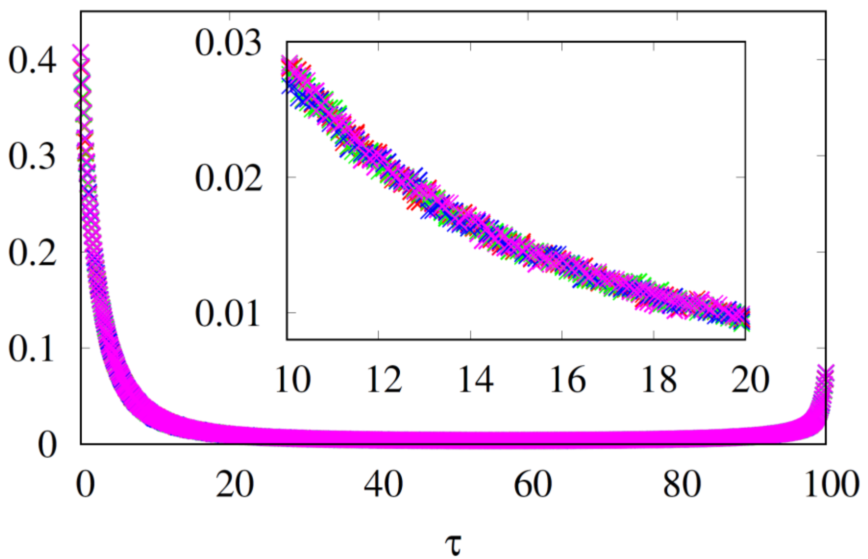
扱いやすい
（ダイアグラム展開
量子モンテカルロ法）

解析接続はノイズに弱い

The standard method: Pade近似

Vidberg, Serene, 1977

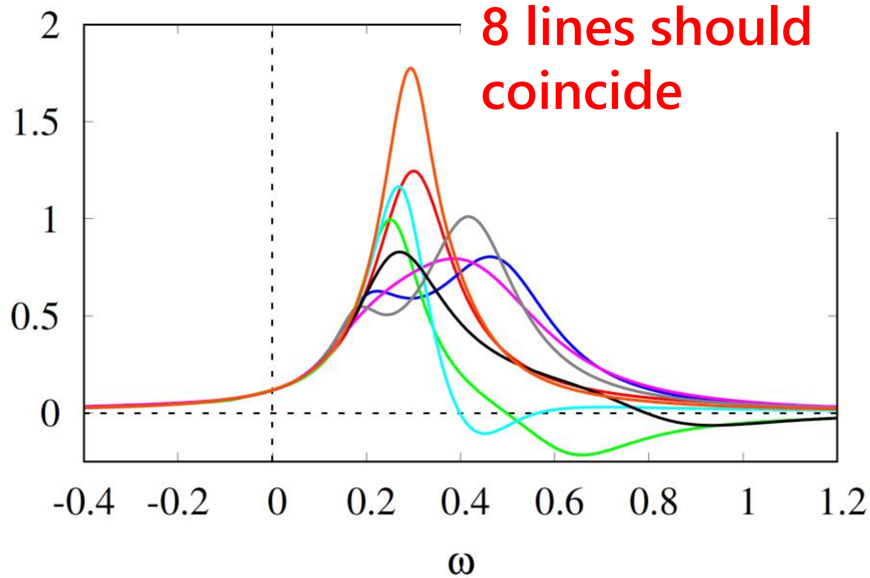
$G(\tau)$ 8-fold degenerate impurity Anderson model



CT-QMC data

$\rho(\omega)$

8 lines should coincide



解析接続 → 逆問題

Lehmann表示

$$G(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega K_{\pm}(\tau,\omega)\rho(\omega)$$

$$K_{\pm}(\tau,\omega) = \frac{e^{-\tau\omega}}{1 \pm e^{-\beta\omega}}$$

フェルミオン
ボゾン

離散化

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

Gからρを求める逆問題

difficulty: K は悪性な行列 (ill-conditioned matrix)

最小二乗解

$$\boldsymbol{\rho} = (K^{\mathrm{t}}K)^{-1}K^{\mathrm{t}}\boldsymbol{G}$$

不安定 (NaN)

誤差を考慮

$$\chi^2(\boldsymbol{\rho}) \equiv \frac{1}{2}\|\boldsymbol{G} - K\boldsymbol{\rho}\|_2^2 < \eta$$

解が無数に存在（ほとんどは非物理的）
→ノイズに敏感に反応

関連研究

Maximum entropy method

M. Jarrell, J. E. Gubernatis, Phys. Rep. 269, 133 (1996)

$$F(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{G} - K\boldsymbol{\rho}\|_2^2 + \boxed{\alpha \sum_i [\rho_i - m_i - \rho_i \log(\rho_i / m_i)]}$$

$\boldsymbol{m}$: “default model” = 事前情報

$\boldsymbol{m}$からのズレに対して罰金

Stochastic method

A. W. Sandvik, PRB 57, 10287 (1998)
S. Fuchs, T. Pruschke, and M. Jarrell, PRE 81, 056701 (2010)
K. S. D. Beach, arXiv:cond-mat/0403055
A. W. Sandvik, PRE 94, 063308 (2016)

Growing attempts

K. S. D. Beach, R. J. Gooding, and F. Marsiglio, PRB 61, 5147 (2000)
A. Dirks *et al.*, Phys. Rev. E 87, 023305 (2013).
F. Bao *et al.*, PRB 94, 125149 (2016)
O. Goulko *et al.*, PRB 95, 014102 (2017).
G. Bertaina, D. Galli, and E. Vitali, arXiv:1611.08502.
L.-F. Arsenault *et al.*, arXiv:1612.04895.

PROBLEM I

解析接続

$$G(\tau) \to \rho(\omega)$$

虚時間　　　　　　　　実振動数

様々な相関関数

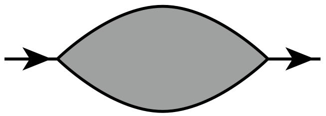
一粒子グリーン関数　　fermionic

$$G(\tau-\tau') = -\langle T_\tau c(\tau) c^\dagger(\tau') \rangle$$

一粒子励起スペクトル

二粒子相関関数　　bosonic

$$\chi(\tau) = \langle T_\tau c^\dagger(\tau) c(\tau) c^\dagger(\tau') c(\tau') \rangle$$



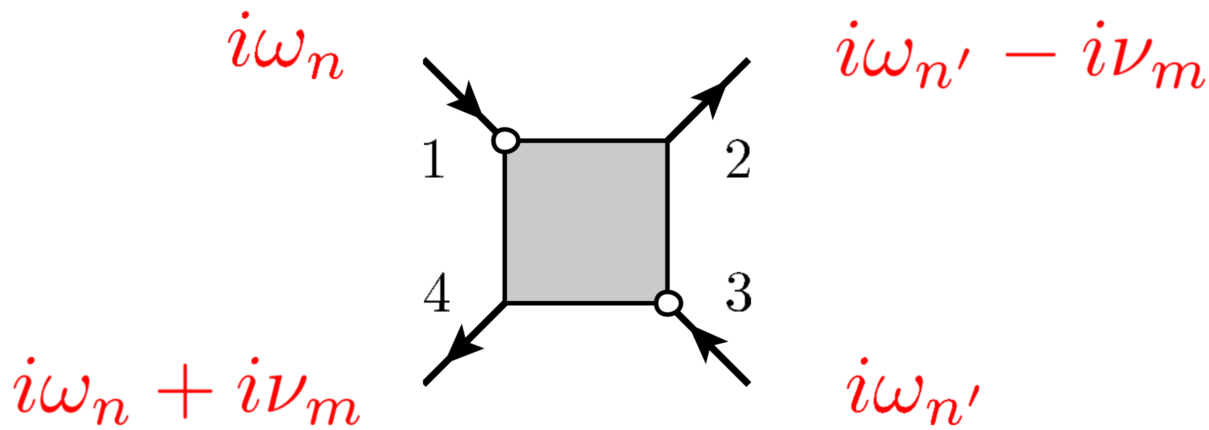
スピン励起
電荷励起

二粒子グリーン関数　　More complicated object

$$\chi(\tau_1,\tau_2,\tau_3,\tau_4) = \langle T_\tau c^\dagger(\tau_1) c(\tau_2) c^\dagger(\tau_3) c(\tau_4) \rangle$$

有効相互作用

有効相互作用



$$\Gamma_{1234}(i\omega_n, i\omega_{n'}; i\nu_m)$$

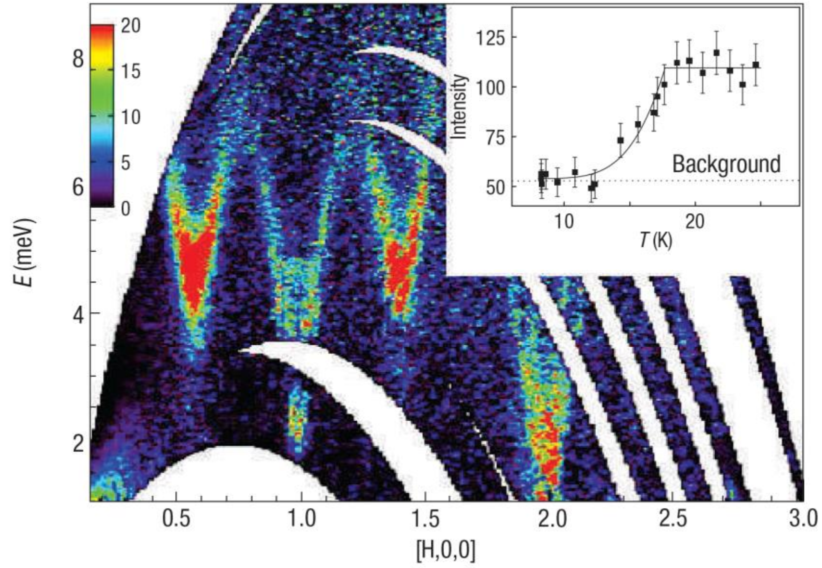
強相関電子系では
振動数依存性が重要

$1, 2, 3, 4$	内部自由度
$\omega_n, \omega_{n'}$	フェルミオン松原振動数
ν_m	ボゾン松原振動数

有効相互作用が必要

$$\chi(\boldsymbol{q},\omega)$$

例：
スピン波励起

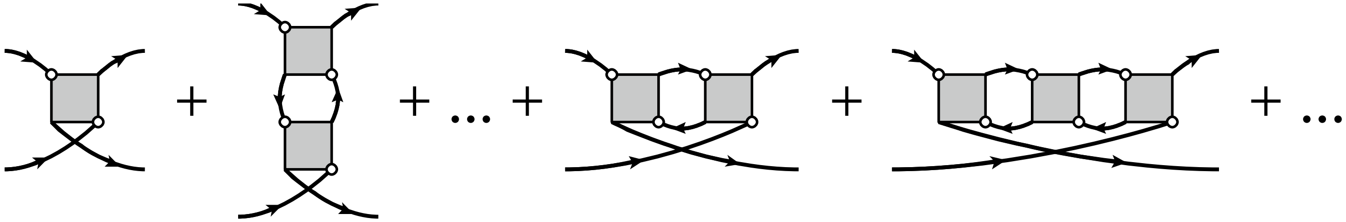


中性子非弾性散乱

URu_2Si_2
Wiebe et al. 2007

有効相互作用　～　有効相互作用

テンソル積



PROBLEM II

メモリ容量、計算時間

$$\Gamma(i\omega_n, i\omega_{n'}; i\nu_m)$$

We will show…

- Two problems are "*two sides of the same coin*"

- Solution to
  - Problem I (analytical continuation)

    スパースモデリング　＝　ノイズ除去、情報抽出

  - Problem II (two-particle objects)

    実時間と虚時間の中間表現　＝　情報圧縮

SOLUTION to problem I

Sparse-Modeling (SpM) Analytical Continuation

JO, Ohzeki, Shinaoka, Yoshimi, arXiv:1702.03056

スパースモデリング (SpM)

$$\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x}$$

$M < N$

劣決定系

解が一意に定まらない

事前情報

スパース性

「**x**のN個の成分の内、ほとんどはゼロ」

解析接続 $$\boldsymbol{G} = K\boldsymbol{\rho}$$

スパース性

||

「ノイズの影響を受けていない真の情報は少ない」

スパース性は基底依存

手順１：基底変換

Q. ρがスパースになる基底は何か？

A.

$$\boldsymbol{\rho}' = V^{\mathrm{t}}\boldsymbol{\rho} \qquad \boldsymbol{G}' = U^{\mathrm{t}}\boldsymbol{G}$$

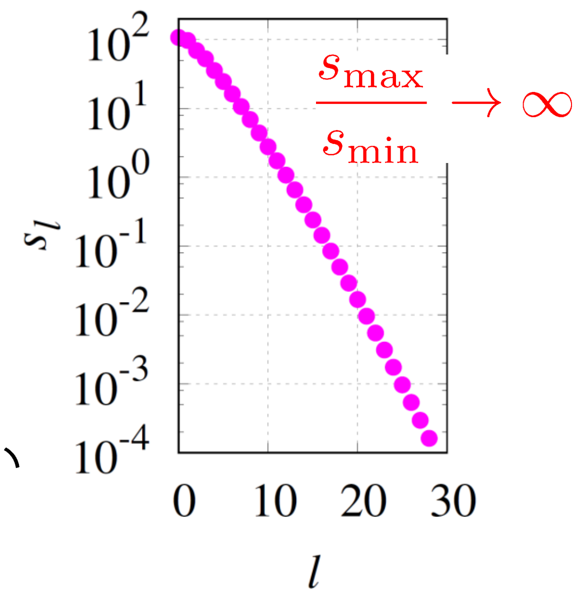
特異値分解

$$K = USV^{\mathrm{t}}$$

∵ K は悪性な行列 **(ill-conditioned matrix)**

$$\chi^2(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{G} - K\boldsymbol{\rho}\|_2^2 = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{G}' - S\boldsymbol{\rho}'\|_2^2$$

$\boldsymbol{\rho}'$のうち、特異値の小さい基底は$\boldsymbol{G}'$に影響しない



手順２：$L1$正則化

スパース性

$$F(\boldsymbol{\rho}') \equiv \frac{1}{2}\|\boldsymbol{G}' - S\boldsymbol{\rho}'\|_2^2 + \boxed{\lambda\|\boldsymbol{\rho}'\|_1}$$

L1ノルム

$$\|\boldsymbol{\rho}'\|_1 \equiv \sum_i |\rho_i'|$$

LASSO型最適化問題
(Least Absolute Shrinkage of Selection Operators)
R. Tibshirani, J. R. Stat. Soc. B 58, 267 (1996)

拘束条件の下でFを最小化

非負性 総和則

$$\rho_i \geq 0, \quad \sum_i \rho_i = 1$$

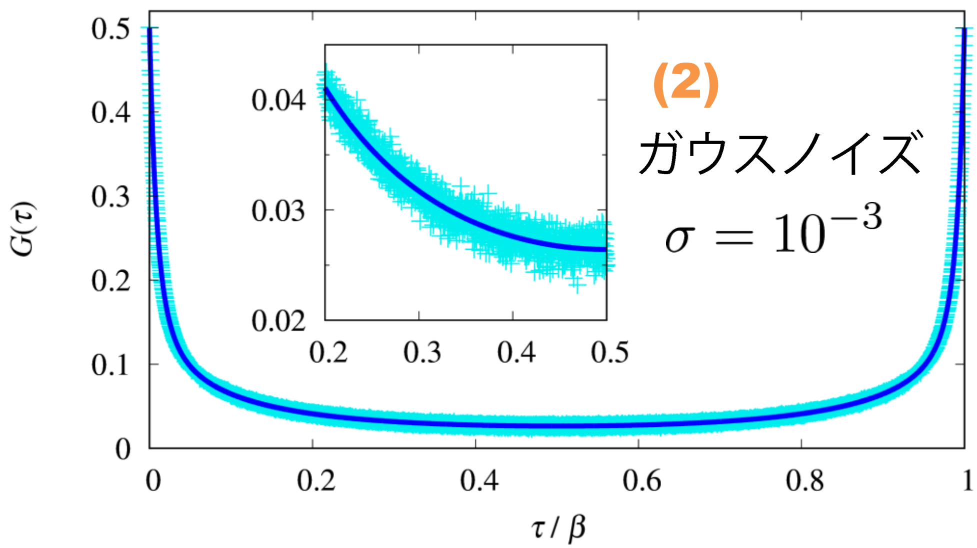
(注：元の基底)

ADMMアルゴリズム (alternating direction method of multipliers)
Boyd et al., Foundations and Trends in Machine Learning 3, 1 (2011)

テストデータ

$$G(\tau)$$

$$\boldsymbol{\rho}$$



(2)
ガウスノイズ

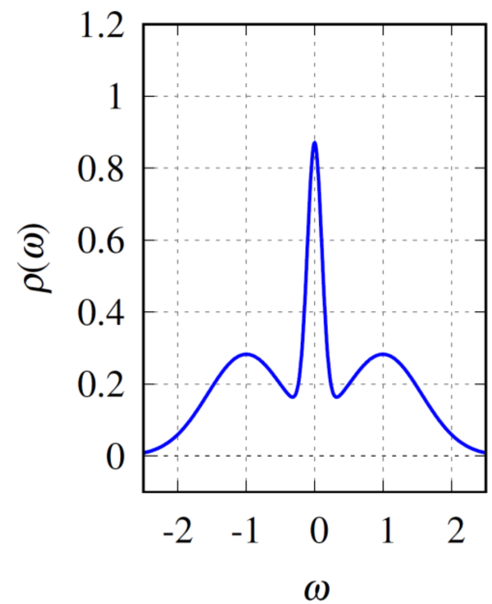
$$\sigma = 10^{-3}$$

(1)

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

解析接続

?



M=4000点

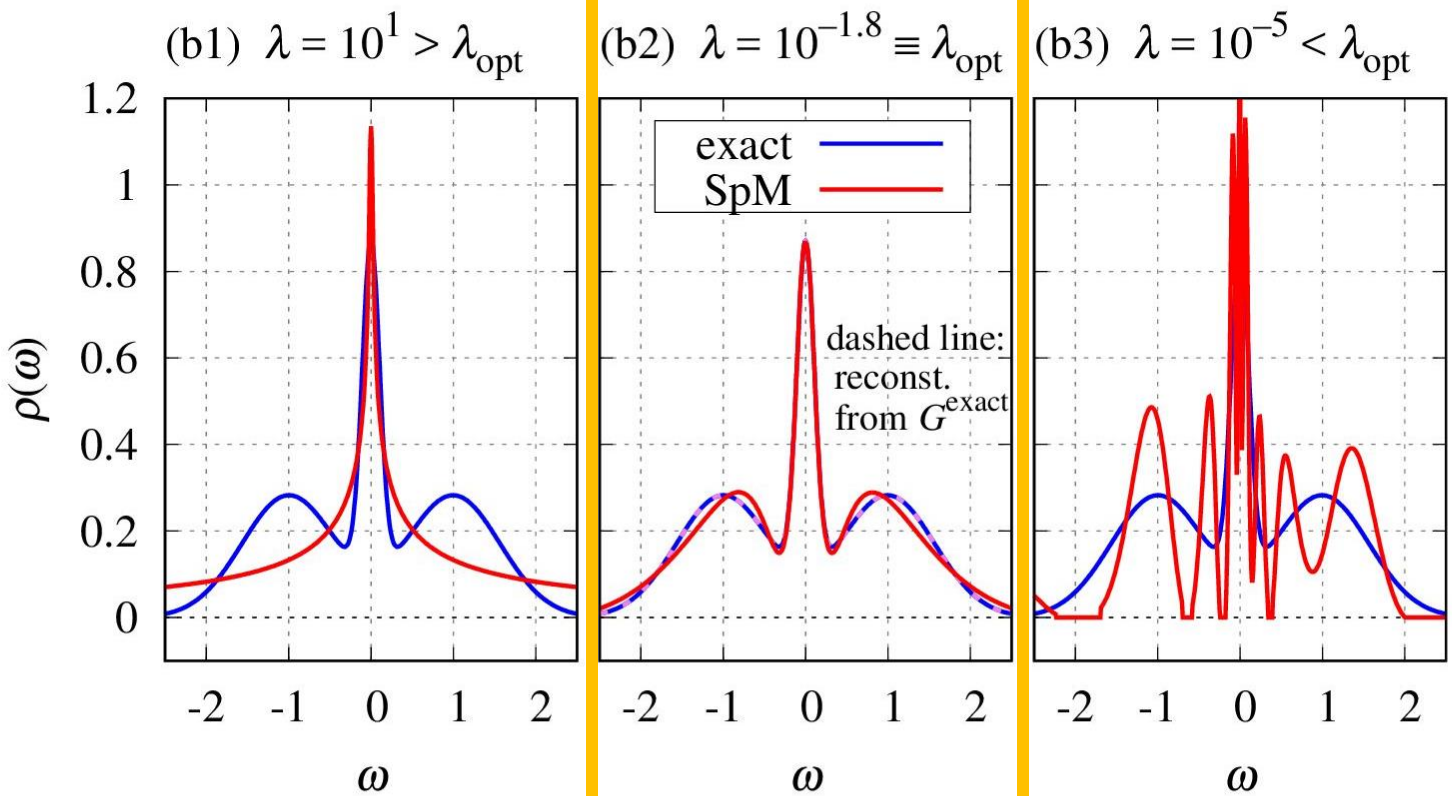
（通常はQMCで計算）

結果

正則化パラメーター

λ

強すぎ　最適　弱すぎ



なぜうまくいくか

入力（ノイズあり）

虚時間 $\boldsymbol{G}' = U^{\mathrm{t}}\boldsymbol{G}$

スパース正則化

通常

実振動数 $\boldsymbol{\rho}' = V^{\mathrm{t}}\boldsymbol{\rho}$

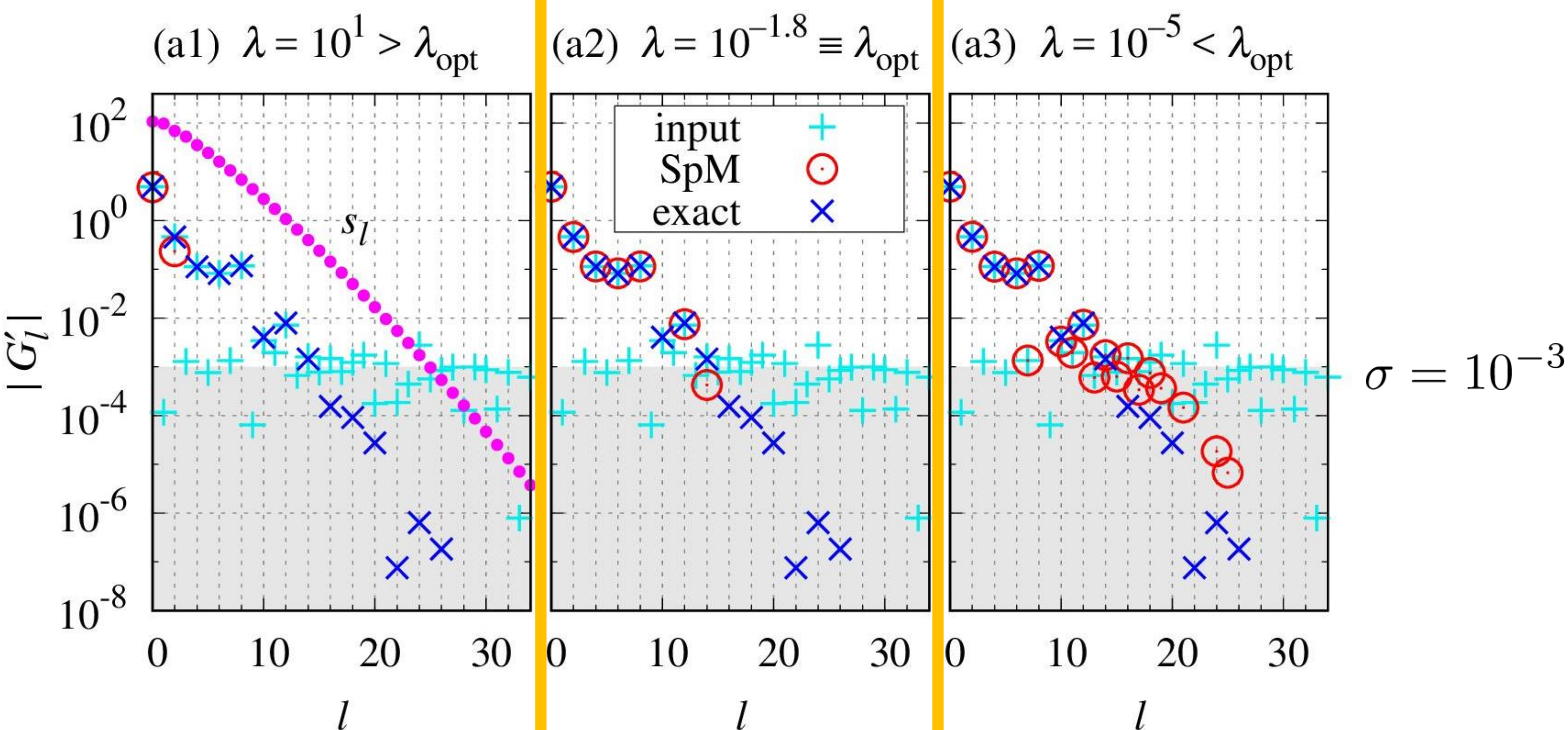
結果

入力データ $G' = U^{\mathrm{t}} G$

正則化パラメーター

λ

強すぎ 最適 弱すぎ



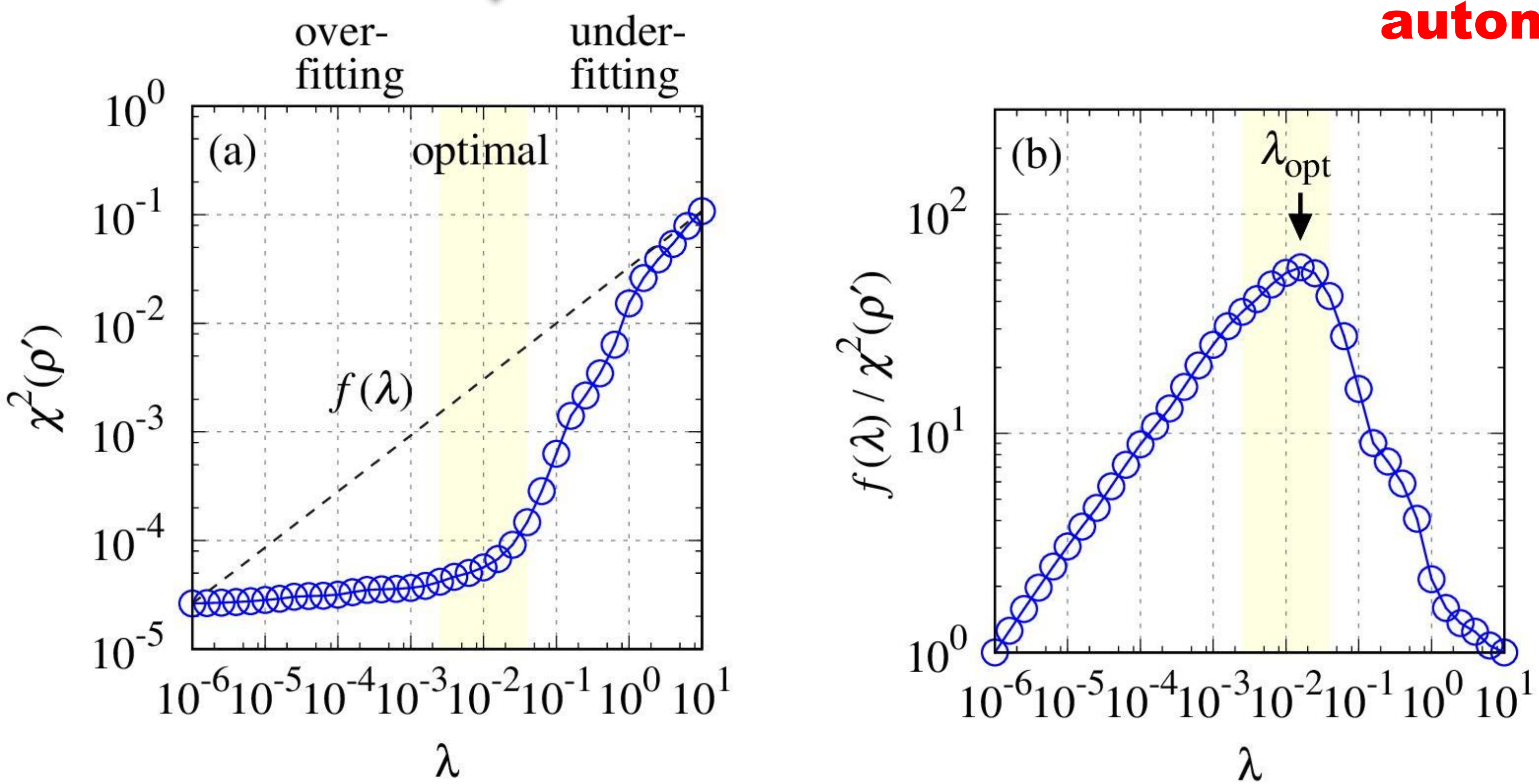
インプット（ノイズあり）
厳密（ノイズなし）
結果

正則化パラメーター λ の決定

For a given λ

$$\min_{\boldsymbol{\rho}'} \left\{ \boxed{\frac{1}{2}\|\boldsymbol{G}' - S\boldsymbol{\rho}'\|_2^2} + \lambda\|\boldsymbol{\rho}'\|_1 \right\} \quad \text{subj. to} \quad \text{constraints}$$

automatic!



ここまでのまとめ

✓ スパースモデリング（SpM）解析接続法

1. 特異値分解：効率の良い基底へ変換
2. **L1**正則化：有意な情報を抽出（基底選択）

– 手法として
  • ノイズに強い、パラメーターフリー
  • 悪性の**(ill-conditioned**な**)**逆問題の一般的解法

– 根本的な視点
  • 虚時間データがどれだけ情報を持っているか

*Our code will be available soon on **GitHub***

SOLUTION to problem II

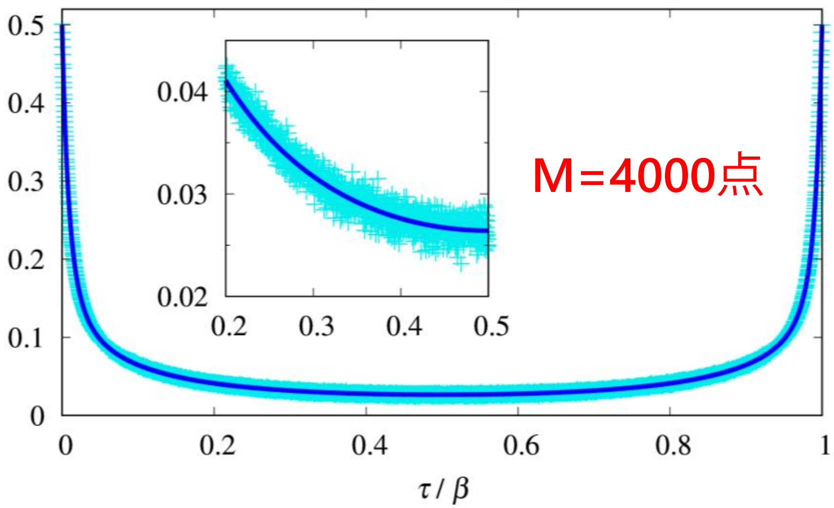
Intermediate Representation (IR)

Shinaoka, JO, Ohzeki, Yoshimi, arXiv:1702.03054

あらためてデータを見てみる

元の虚時間データ

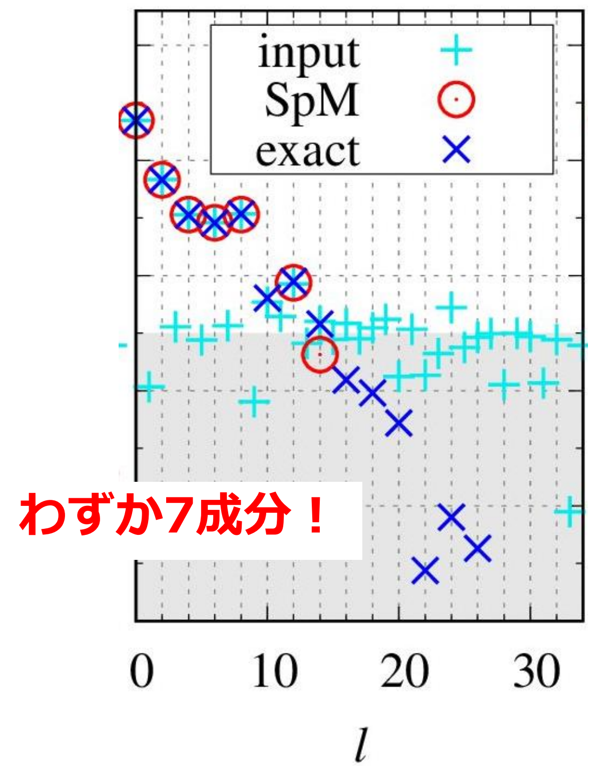
$$G(\tau)$$



基底変換

変換後

$$G' = U^{t}G$$



$$\boldsymbol{G}' = U^{\mathrm{t}}\boldsymbol{G}$$

「情報圧縮に使えそう」

新しい直交基底

$$G(\tau) = \int_{-\omega_{\max}}^{\omega_{\max}} d\omega K_{\pm}(\tau,\omega)\rho(\omega)$$

$$K_{\pm}(\tau,\omega) = \frac{e^{-\tau\omega}}{1 \pm e^{-\beta\omega}}$$

$$K(\tau,\omega) = \sum_{l=0}^{\infty} s_l u_l(\tau) v_l(\omega)$$

$\Lambda \equiv \beta\omega_{\max}$ 無次元パラメーター

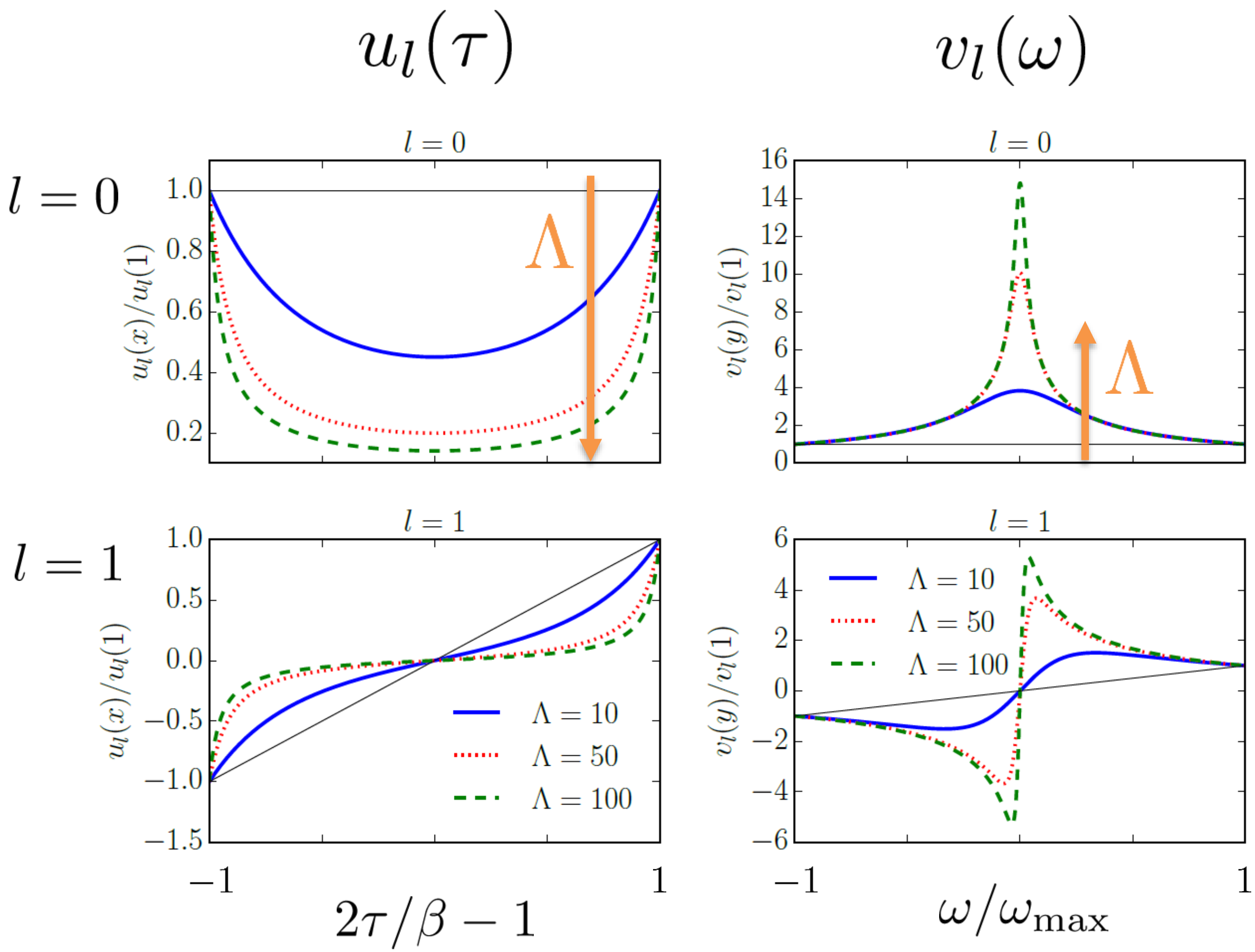
離散化

連続極限

SVD

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{K}\boldsymbol{\rho} \longrightarrow K = USV^{\mathrm{t}}$$

新しい直交基底



コントロールパラメーター

$\Lambda \equiv \beta\omega_{\rm max}$

灰色：ルジャンドル多項式

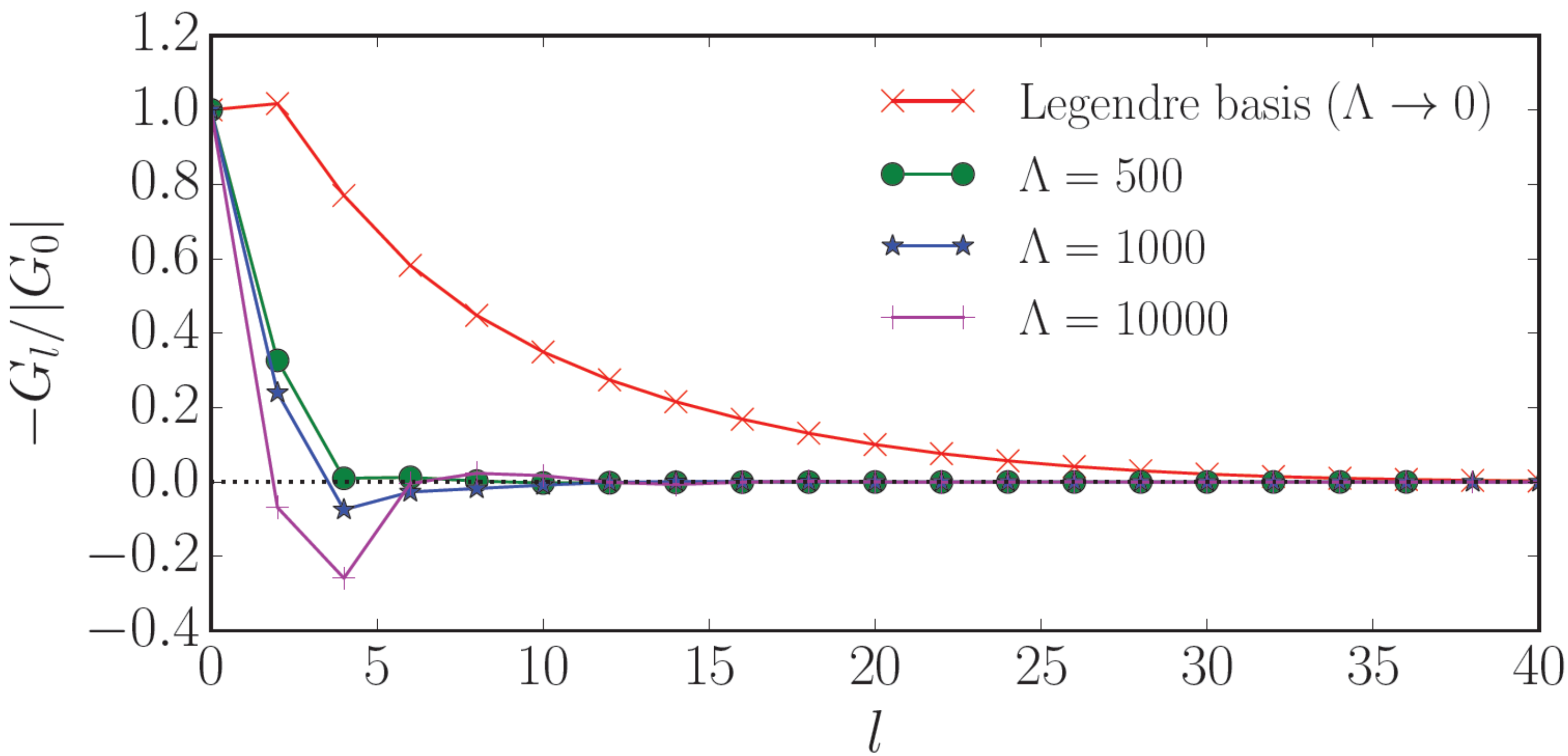
Λ→0でルジャンドル多項式に一致！

（高温極限）

一粒子グリーン関数

$$G(\tau) \propto \sum_{l=0}^{\infty} G_l u_l(x)$$

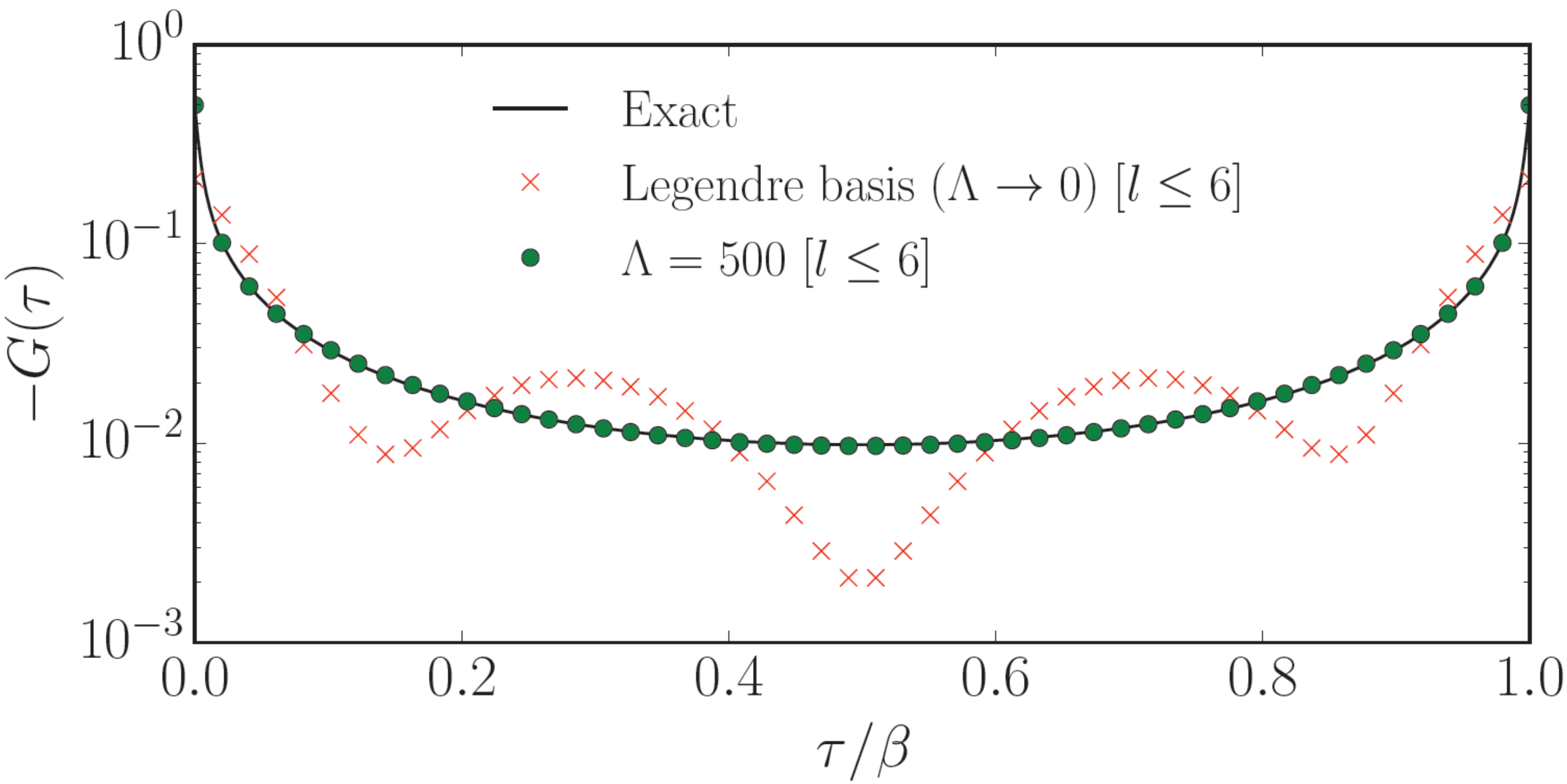
わずか5, 6要素で十分！



c.f. フーリエ表現ではベキ減衰
ルジャンドル展開 Boehnke et al. 2011

元の関数を再現できるか確認

$$G(\tau) \overset{?}{=} \sum_{l=0}^{l_{\mathrm{cutoff}}} G_l u_l(x)$$



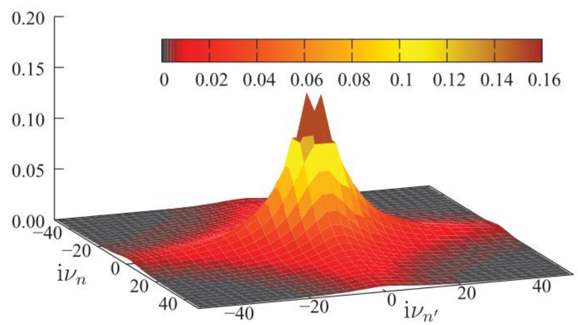
二粒子グリーン関数

$$\chi(i\nu_n, i\nu_{n'}; i\omega_m) \to \chi_{ll'}(i\omega_m)$$

過去の研究 (Boehnke et al. 2011)

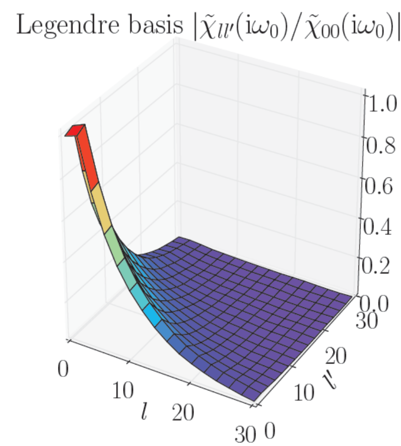
SVD基底

振動数

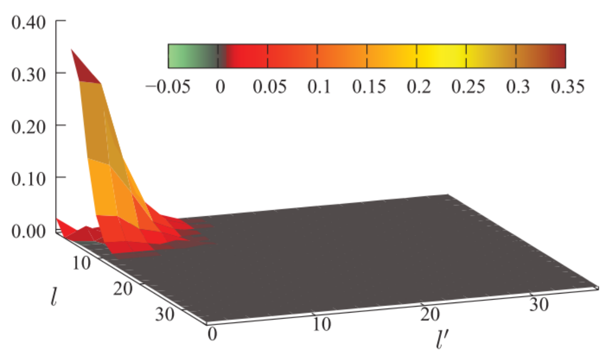


$\Lambda = 0$

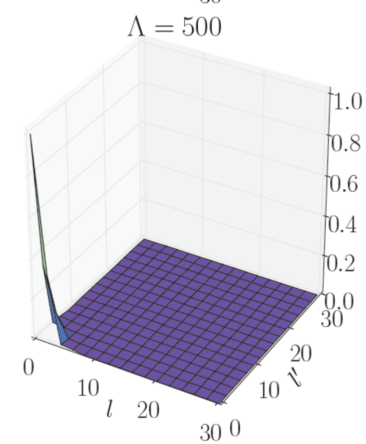
(Legendre)



Legendre



$\Lambda = 500$



The solution has been there

Lehmann表示 (basic equation)

$$G(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{i\omega_n - \omega} \rho(\omega) \xrightarrow{\text{フーリエ変換}} G(\tau)$$

ここ

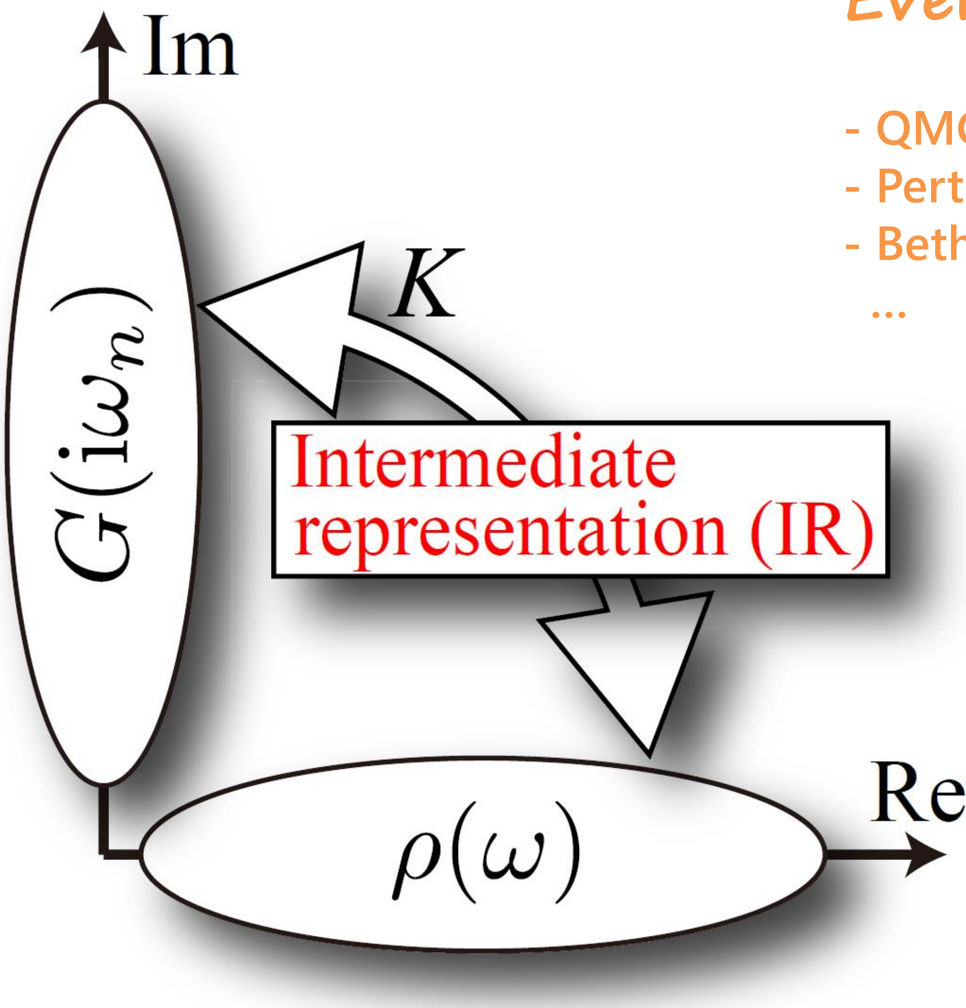
SVD

$$K = USV^{\mathrm{t}}$$

c.f. SV truncation Creffield et al. 1995
Bryan method in MaxEnt Bryan 1990

スパースモデリング
＝本質を抜き出す

A "new" rep



Everything in IR basis!

- QMC measurement
- Perturbative expansion
- Bethe-Salpeter equation

…

まとめ

- *Two problems in quantum many-body calculations*
  - **I.** 解析接続
  - **II.** 多体動的相関
- *Our solution*
  - – カーネルの**SVD**
  - – **L1**正則化による基底選択

スパースモデリングで本質を見抜く