# 最大エントロピー法でいいの? —スパースモデリングの量子多体論への応用—

大槻純也	東北大学大学院理学研究科
大関真之	東北大学大学院情報科学研究科
品岡 寛	埼玉大学大学院理工学研究科
吉見一慶	東京大学物性研究所

# 1 はじめに

最大エントロピー法という言葉を聞いたことがあ るだろう.これまでに利用したことがある読者もい るかもしれない.「神秘的な手法」そんなイメージを 抱いているかもしれない.しかし,その原理を理解 している人はそれほど多くはないのではないだろう か.原理を理解していたとしても,実際に得られた 結果を前にして,なぜその結果が得られたのかを説 明できる人はおそらくいないだろう.

最大エントロピー法は「逆問題」を解く手法のひと つである. 逆問題とは, well-defined なデータの変換 規則  $x \mapsto y$  があって, 変換後のデータ y が与えられ た時に元のデータ x を求める問題である. 現実の状 況では,何らかの理由で逆変換が難しい場合が多々 ある.例えば,測定環境などによりインプットデー タ y が不完全な状態でしか得られない場合,もしく は大きな誤差を持つ場合などが考えられる. このと き,追加の情報(事前知識)を使うことで,もっとも らしい解を得ようというのが逆問題を解く様々なア ルゴリズムにある共通のアイデアである.

それではどのような事前知識を使うのがよいだろ うか.先に挙げた最大エントロピー法は,デフォル トモデルと呼ばれる「理想的な解」を仮定し,その解 に近くあるべしという事前知識を使う [1].この方法 を初めて学んだ際に,デフォルトモデルの導入に違 和感を覚えた読者は少なくないはずである.

一方,最近注目されているのが,解*x*の持つ「スパース性(疎性)」を利用した逆問題の解法である.

今求めようとしている解*x*は,実は少数の成分しか 持っていないという事前知識を利用する.少し言葉 を変えると,入力データ*y*の再現性を多少犠牲にし てでも少ないパラメータでフィットすることを良し とする事前知識である.この条件を満たす解を効率 よく見つける技術を用いて,与えられたデータから 少数の重要なパラメータを見出す方法論をスパース モデリングと呼ぶ.複雑な現象(結果)から本質的 なパラメータ(原因)を抜き出すことを可能とする. 実に物理屋好みである.

本稿で扱うのは,量子モンテカルロ法などで多体 系の励起スペクトルを計算する際に直面する解析接 続の問題である.この解析接続において,入力デー タの微小な誤差が,結果に甚大な影響を及ぼすとい う問題がある.実際に数値計算をしてみると分かる のだが,解析接続の結果,決して人には見せられない ようなスペクトルがしばしば得られる.ただし,そ のようなデータは決して人には見せないため,文献 には載っていない.そういった場合,そのデータは そっと仕舞っておき,代わりに最大エントロピー法 などを利用して,「よく分からないけどそれっぽいス ペクトルになったねぇ」と,それっぽいスペクトルの みを文献に載せるわけである.

さて,それではスパースモデリングを用いるとどう なるか.スペクトルを少ない基底で表現するスパー スな解を追求することで,誤差に強い解析接続が可 能となる [2].そして,その過程から,なぜ誤差が増 大されるのか,というこの問題の本質が明らかとな る.さらにこのスパースな基底は,解析接続のみな らず,量子多体計算そのものを劇的に効率化する可 能性があることも分かってきた [3].スパース性とい う切り口が,量子多体論に新たな視点をもたらすこ とを本稿で味わってもらいたい.

本稿の構成は以下のとおりである.まず,第2節 はスパースモデリング入門である.第3節で量子多 体論におけるスパース性について議論し,そこから 第4節の解析接続,第5節の量子多体計算の効率化 という2つの応用を紹介する.本稿で紹介するアル ゴリズムを実際に試してみたい読者のために,我々 が公開しているオープンソースソフトウェアについ て第6節で紹介する.最後に,第7節で今後の展望 を述べる.

# 2 逆問題再考:「常識」を疑う

#### 2.1 劣決定系の逆問題

本節で,逆問題に関する既存の方法を置き換える スパースモデリングの考え方を解説する\*1.簡単な 問題をじっくり考えることで,色々と見えてくるこ とがある.そこで,逆問題の典型例である,連立方程 式を考えてみることにしよう.N個の未知数をまと めたN次元ベクトルxに対して,係数行列Aがか かり,その結果がyであるとする.その場合にこの 連立方程式は.

$$\boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x} \tag{1}$$

と書くことができる.なんだ、つまらない問題だな、 と思うかもしれない.確かに y が N 次元のベクトル であれば、変な係数行列を持ってこない限り A には 逆行列  $A^{-1}$  が存在して、直ちに

$$\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{y} \tag{2}$$

と解くことができる. それでは **y** の次元 *M* が *M* < *N* であるとしよう. この場合,一意に *x* を決めるこ とができない.劣決定系の問題と呼ばれる. そのよ うな場合はどうしたら良いだろうか.

実は,劣決定系の問題を厳密に解くことができる 場合がある.その数理的背景に横たわるのがスパー ス性(疎性)である.ここでスパース性とは,ベク トル *x* についての性質を指す.ベクトル *x* の成分の ほとんどがゼロである場合に,*x* はスパースである と言う.いま*x* の非ゼロ成分の個数が*K* であると しよう.もし仮にこの非ゼロ成分の場所を知ること ができて,ゼロ成分を連立方程式から除去すること ができれば,実際上の未知数は*K* 個である.このと き,*K* < *M* であれば連立方程式を解くことができ る.劣決定系の方程式であるからといって,解けな いわけではない.

#### 2.2 スパース解の探索

理屈はわかった.スパースであれば,一見解けな いように見える連立方程式も解くことができる.そ こで問題となるのは,どの成分が非ゼロかを見つけ る手段である.その一番素朴な方法は,L<sub>0</sub>ノルム最 小化と呼ばれるものである.L<sub>0</sub>ノルムとはまた見慣 れない用語が出た,と構えるかもしれない.これは 単にベクトルの非ゼロ要素の個数を数えた量である. それを最小にするというわけだから,できるだけゼ ロが多い解を探せということになる.ただし,連立 方程式を満たした上で,である.このL<sub>0</sub>ノルム最小 化は以下のように定式化される:

$$\min_{\boldsymbol{x}} \|\boldsymbol{x}\|_0 \quad \text{subject to} \quad \boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x} \qquad (3)$$

ここで、 $\|x\|_0$  はベクトル x の  $L_0$  ノルムを表す.こ の式は、連立方程式 y = Ax に矛盾しない形で、 $L_0$ ノルムを最小化しなさいということを表している. しかし、残念ながらこの  $L_0$  ノルム最小化は、計算量 困難であることが知られている.素朴に考えてもら えばわかる通り、どこがゼロか順々に試していく手 数分、計算量が増大してしまう.そのため、次元が大 きくなればなるほど、使い物にならない方法となっ ていく.

そこで代替手段として提案されたのが、ノルムの 緩和である. $L_0$ ノルムの代わりに、 $L_1$ ノルムを最 小化する:

 $\min \|\boldsymbol{x}\|_1 \quad \text{subject to} \quad \boldsymbol{y} = A\boldsymbol{x} \tag{4}$ 

L<sub>1</sub> ノルムとはベクトルの各成分の絶対値の和を取ったもの

$$\|\boldsymbol{x}\|_{1} = |x_{1}| + |x_{2}| + \dots + |x_{N}|$$
 (5)

<sup>\*1</sup> スパースモデリングについて,より詳しく知りたい読者のために,日本語の解説 [4,5,6] を挙げておく.



図 1  $L_1$  ノルム最小解を与える図. 直線が方程式の解を、ひし形が  $\|\boldsymbol{x}\|_1 = \text{const}$ を表し、それらの 交点が解となる.

である. この  $L_1$  ノルムであれば内点法と呼ばれる 最適化手法を利用することで,計算量困難を伴わず に最適解を得ることができる. そしてその解は,幸 いなことにスパースなものとなる. どうしてスパー スになるのか?定性的な理解をするために図にして 考えてみよう.  $x_1$  と  $x_2$  を未知数として,それらの 間にただ一つの方程式が与えられたとする. N = 2, M = 1 の劣決定系の方程式である. この方程式の解 の集合は,図1に示すように, $x_1, x_2$  平面上の直線と して描かれる. 一方で  $L_1$  ノルム  $\|x\|_1 = |x_1| + |x_2|$ は,ひし形の大きさとして表される. このひし形を できるだけ小さくしつつ直線と交わる点を探すと, 軸上の一点が定まる. 確かに片方の未知数がゼロに なっており,スパースな解が選択されていることが わかる.

#### 2.3 「伝統的」方法:L<sub>2</sub>ノルム最小解

それでは  $L_2$  ノルムはどうなんだ?と考えた読者 がいるかもしれない.  $L_2$  ノルムはユークリッドノル ムと呼んだ方が通りが良いだろう. いわゆる「通常 のノルム」である:

$$\|\boldsymbol{x}\|_{2} = \sqrt{x_{1}^{2} + x_{2}^{2} + \dots + x_{N}^{2}} \tag{6}$$

この場合は図 2 に示すように,方程式が示す直線と L<sub>2</sub> ノルムを表す円の接点が L<sub>2</sub> ノルム最小解となる. なお,L<sub>2</sub> ノルム最小解は,ラグランジュ未定乗数 法を用いると,以下のように解析的に得ることがで きる:

$$\boldsymbol{x}^* = A^{\mathrm{t}} (AA^{\mathrm{t}})^{-1} \boldsymbol{y} \tag{7}$$



図 2  $L_2$  ノルム最小解を与える図.円は  $\|\boldsymbol{x}\|_2 =$  const を表す.

この y にかかる行列  $A^t(AA^t)^{-1}$  をムーア・ペンロー ズの擬似逆行列と呼ぶ<sup>\*2</sup>.

#### 2.4 真のスパース解を当てる

ここで強調しておきたいのは,劣決定系の方程式 であっても, $L_1$ ノルム最小解, $L_2$ ノルム最小解と いったように,付加的な条件を課せば,何かしらの解 を得ることが可能だということだ.問題は,その解 が当たるかどうか,である.幸い $L_1$ ノルム最小解に はスパースな解という明確な特徴がある.したがっ て,連立方程式の真の解がスパース性という特徴を 持っているならば, $L_1$ ノルム最小化によって真の解 が得られる可能性がある.実際,一定の条件のもと で, $L_1$ ノルム最小解が真の解と一致することが証明 されている [7,8].細かい証明についてはここでは触 れないが,係数行列 A の性質が最も重要であるとい うことだけ述べておく.

一方で, $L_2$ ノルム最小解にはこれといった特徴が ない.ここがポイントである.特に,真の解がスパー スな場合には, $L_2$ ノルムは全くあてにならないこと がわかっている.真の解が当たるのはM = Nの場 合だけ,つまり,劣決定系の方程式の解を当てるこ とは不可能である.しかしながら困ったことに,こ れまで多くの劣決定系の問題は式(7)によって解か れてきた.データ処理を行うソフトウェアの内部で この $L_2$ ノルム最小解が採用されていることに,ユー ザーが気付いていない状況もしばしば散見される.

<sup>\*2</sup> M < N を仮定している. M > N の場合には,  $x^* = (A^{t}A)^{-1}A^{t}y$  が  $\min_{x} ||y - Ax||_{2}^{2}$ の解(最小二乗解)を 与える.

知らない間に,全くもって当たることのない方法を 利用していたのだと思うと,足元がぐらつく恐怖を 覚えるだろう.

# 2.5 LASSO: ノイズあり逆問題のスパース解

ここまでの議論では,連立方程式が厳密に満たさ れることを前提としてきた.しかし,実際の状況で は,**y**の持つノイズなどにより,方程式が厳密には満 たされない場面が多々ある.その場合,連立方程式 とできるだけ矛盾しない,という条件に緩める必要 がある.そこで,スパースな解を選択するための*L*<sub>1</sub> ノルムに加え,連立方程式からのズレも考慮した以 下の最適化問題を考える:

$$\min_{\boldsymbol{x}} \left\{ \frac{1}{2} \|\boldsymbol{y} - A\boldsymbol{x}\|_{2}^{2} + \lambda \|\boldsymbol{x}\|_{1} \right\}$$
(8)

この形をした最適化問題はしばしば LASSO(Least Absolute-value Shrinkage and Selection Operators)と呼ばれる [9]. ここで  $\lambda$  はスパース度合い を調整するパラメータで,あらかじめ設定しておく. この LASSO は凸最適化問題のクラスに含まれるた め,最適化手法の初期条件に依らない唯一の解を与 える.また,数値解法も多く研究され,効率よく最適 解を得る手法が確立している<sup>\*3</sup>.

# 2.6 最大エントロピー法の正体

さて,ここで今一度思い出して欲しい.劣決定系 の方程式を解くためには,付加的な条件を課せば良 い.最大エントロピー法も,ある付加的条件を利用 した劣決定系の方程式の解法のひとつである.その 付加的条件として,デフォルトモデルと呼ばれる「理 想的な解」からのズレを考慮する.そうなると,いよ いよもって最大エントロピー法を利用することに意 味があるのだろうかと不安になってくるのではない だろうか.

最大エントロピー法で解く最適化問題は以下の式 で与えられる:

$$\min_{\boldsymbol{x}} \left\{ \frac{1}{2} \|\boldsymbol{y} - A\boldsymbol{x}\|_2^2 - \alpha S(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{x}) \right\}$$
(9)



図3 等エントロピー曲線. m = (1,2)の場合.

ここで, *S*(*m*,*x*) は以下で定義される「エントロピー」 で,デフォルトモデル *m* からのズレを表す:

$$S(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{N} \left[ x_i - m_i - x_i \log \left( \frac{x_i}{m_i} \right) \right] \quad (10)$$

これまでの議論と同様に, N = 2の場合についてこ のエントロピーの値が等しい点の集合を描いてみよ う(図 3). ノイズが含まれない場合には, 方程式の 解を表す直線と等エントロピー曲線が接する点が解 となる.その解には別段特徴があるとは言い難い. ましてや真の解に当たることはないだろう.デフォ ルトモデルを中心とした歪んだ円と直線との接点が 最大エントロピー法により得られる解の正体である. この解は,デフォルトモデルの選択により, いくらで も変化させることができる.最大エントロピー法に より正しい解が得られるというのは幻想であったこ とがこの考察からわかるであろう.

それでも最大エントロピー法にこだわる気持ちも あるかもしれない.ここで,最大エントロピー法は, 実はスパースモデリングの方法論の一部を活用して いることを述べておこう.最大エントロピー法では, デフォルトモデルの設定によって,推定される *x* に 対して非負値制約が課されている.後に述べる解析 接続の問題でも,スペクトル *x* は非負値性を持つ. 実は,この非負値制約を課すとスパースな解を得や すくなるという性質が知られている<sup>\*4</sup>.その性質の

<sup>\*3</sup> 現在では, ADMM と呼ばれる手法 [10] が最も汎用性が高 く, さらにコーディングも簡単なのでおすすめである. 詳 細は, 著者のひとりによる解説 [4] を参考にされたい.

<sup>\*4</sup> この顕著な性質を利用して,非負値制約行列分解 [11] と呼ばれる技術が確立している.

影響を受けて,解がスパースさを保ちつつ,経験から 設定されたデフォルトモデルに誘導されて,それら しい解が得られてきたのだろう.ただ,積極的に正 しい解を追求しようという姿勢は明確ではなかった と言わざるを得ない.

最大エントロピー法を利用した解析を行う分野は 意外に多い.次節以降で紹介する量子多体問題の他 に,例えば,天文学の分野における観測データの画像 解析に利用されている.天体の画像については,お よそこのような形状になるべし,という良質のデフォ ルトモデルが仮定できるため,それほど大きな問題 にはならなかったのかもしれない.しかし見たいも のをデフォルトモデルとして用いてしまうと,バイ アスのかかった解析をしているに過ぎず,真の姿を 見ているとは言い難い.

#### 2.7 計測革命:圧縮センシング

スパースな真の解を見つけることのできる L1 ノ ルム最小化の方法は、ここ10年ほどの間に、計測に 関する逆問題に利用され,革命を起こしている. 圧 縮センシングと呼ばれる方法である [12, 13]. 計測過 程の中には、連立方程式によって表現をすることの できるものがある. 例えば, 磁気共鳴画像法, いわゆ る MRI では、離散フーリエ変換を表す行列を A と して, 測定されたフーリエ成分 y から水分子の空間 分布 x を決定し、体内の様子を画像化する.この解 析に L<sub>1</sub> ノルム最小化を利用することで,少ないデー タからでも画像を構築することが可能となり、計測 時間を大幅に縮減できる [14]. 同様の方法は,電子 顕微鏡や中性子散乱などによる実空間分布の解析に も利用できる.また,最近では天文学の分野におい ても、圧縮センシングが積極的に活用され始めてい る [15]. 最大エントロピー法や L<sub>2</sub> ノルム最小化法か らの脱却が進んでいる.

このように *L*<sub>1</sub> ノルム最小化が広く利用されてい るのは,係数行列 *A* の特徴も大事であるが,大前提 として *x* がスパースであることが期待できるためで ある. *L*<sub>1</sub> ノルムによりスパースな解を選ぶのである から,そもそも真の解がスパースでないと話は始ま らない.

#### 2.8 真の解はスパースか

多くの読者は、「私のデータはスパースじゃない」 と思ったかもしれない.本当にそうだろうか.ベク トル*x* そのものはスパースに見えない,非ゼロ要素 が多く含まれているように見えるかもしれない.し かし x そのものではなく,何かしらの変換を通して, xの潜在的なスパース性を引き出すことは可能であ る.例えば, x が画像を表している場合を考えてみよ う. ほとんどの場合, 画像の保存に「圧縮」を利用す るだろう. 例えば JPEG がその一例である. JPEG では、画像ベクトル x に対して、離散コサイン変換を 適用する. この変換後のベクトル x' に, あるしきい 値を設けて、非常に小さい成分をゼロにしてしまえ ばスパースとなる. JPEG2000 という圧縮形式の場 合には、ウェーブレット変換を利用する. これもス パースにするための変換法のひとつである.つまり, *x* そのものがスパースである必要はない.スパース にするためのうまい変換, それにより, x に眠るス パースさを引き出すことが重要である.

上述の例のように, 圧縮センシングを利用した研 究は, 画像を対象としたものが多い. 画像データに 対する圧縮方法が確立しており, スパースさに対す る直感が働くこと, スパースにするための変換が分 かっていることがその理由である. また, 音声に関 する研究も比較的多い. これも同様に, オーディオ 圧縮技術の発展による.

それでは、画像や音声以外のデータ形式の場合に は、どのような変換を利用すれば良いだろうか.ス パースにするためのうまい変換を見つける方法論は 辞書学習と呼ばれ、盛んに研究されている [5,6].辞 書学習によってスパースな表現を獲得し、圧縮セン シングによって非ゼロ成分を当てる.これら二つの 方法論を利用して、データの背後にある本質を探る 技術を総称してスパースモデリングと呼ぶ.

以降の節では,このスパースモデリングの技術を 量子多体論の問題に適用した領域横断的な研究を紹 介しよう.

5

# 3 量子多体系のグリーン関数とスパース 表現

ここから量子多体系の話に入る.前節との繋がり を考えて,y = Axの式が量子多体論のどこに現れ るかということから見ていこう.

# 3.1 量子多体問題における y = Ax

知りたい物理量 x をスペクトル関数  $\rho(\omega)$  とする. 例えば,角度分解光電子分光で測られる一粒子励起 スペクトルや中性子散乱で測られる磁気励起スペク トルがある.これらの量を,相互作用を含むハミル トニアンから出発して正確に計算することが量子多 体計算における目標である.しかし, $\rho(\omega)$  を直接計 算することは解析的にも数値的にも難しいので,時 間 t を複素数  $it \equiv \tau$  で置き換えて定義される虚時間 グリーン関数  $G(\tau)$  というものを導入する.これが y である.このように虚時間を導入することでファ インマンダイアグラムを用いた摂動展開や量子モン テカルロ法などの枠組みが適用できるようになる.

さて,必死の努力によって  $G(\tau)$  を計算することが できたとしてもそこがゴールではない.所望の  $\rho(\omega)$ を得るために,虚時間を実時間に戻さなければなら ない.この操作が解析接続である.実際の計算では,  $G(\tau) \ge \rho(\omega)$ の変数を離散化してベクトル  $G, \rho \ge$ 表し,それらの間に成り立つ厳密な関係式

$$\boldsymbol{G} = \boldsymbol{K}\boldsymbol{\rho} \tag{11}$$

を利用する.こうして y = Ax の式が登場する.与 えられた G から  $\rho$  を求める問題が解析接続である. なお,式 (11) は以下で与えられるグリーン関数のス ペクトル表示 (レーマン表示)を離散化表現したもの である:

$$G(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega K(\tau, \omega) \rho(\omega)$$
 (12)

ここで, $K(\tau, \omega)$ はグリーン関数の統計性(フェルミ オンまたはボゾン)によって決まる積分核で逆温度  $\beta$ を含む<sup>\*5</sup>. 離散化に際し,いくつか注意が必要であ



図 4 カーネル K の特異値 s<sub>l</sub>. 文献 [2] より.

るが、より精密な議論は第5節で行う.

式 (11) が本稿で扱う逆問題である. この一見する と簡単に見える逆問題は,実は極めて厄介な問題を 含んでいる<sup>\*6</sup>. その理由については,後程,明らかに なる.本稿では,この問題に対して,前節で解説した スパースモデリングの方法を適用する. その手順は 次の2段階に分けられる:

- (i) スパースな表現への基底変換
- (ii) *L*<sub>1</sub> 正則化によるスパースな解の選択

スパースな解の選択は前節の方法によって自動的に 行うことができるが,それをどの基底で行うかが重 要であり,結果に大きく影響する.それでは,以下で 基底変換について考えよう.

#### 3.2 グリーン関数の「中間表現」

一般に非正方型の実数行列である K は、特異値分解 (singular-value decomposition; SVD) を使って

$$K = USV^{t} \tag{13}$$

の形に分解することができる. U, V は直交行列で, S は特異値を対角要素にもつ行列である. 特異値は 一般に非負で,降順に並べる. 特筆すべき性質は,図 4 に見られるように,特異値が指数関数的に減衰する ことである\*<sup>7</sup>.

<sup>\*&</sup>lt;sup>5</sup>フェルミオンの場合に +, ボゾンの場合に – として,  $K(\tau,\omega) = e^{-\tau\omega}/(1 \pm e^{-\beta\omega})$ で定義される.本稿で示 す計算例は全てフェルミオンの場合である.

<sup>\*6</sup> 解析接続に関する文献は数多くあるが,最大エントロピー 法 [1] の他に最近のものを挙げると,確率論的方法 [16, 17] や機械学習を利用したもの [18] がある.

<sup>\*7</sup> 特異値の最大と最小の比  $s_{\text{max}}/s_{\text{min}}$  が大きいほど悪性 (ill-conditioned) な行列と呼ばれる. 今の場合,計算機の 精度の範囲で,  $s_{\text{max}}/s_{\text{min}} = \infty$  であり, K は究極の悪性



図 5 (a) 順変換  $\rho(\omega) \rightarrow G(\tau)$  と (b) 逆変換  $G(\tau) \rightarrow \rho(\omega)$  の概念図. 逆変換で  $G(\tau)$  の持つ ノイズが増大される様子を表す.

この特異値分解の物理的意味を考えてみよう.式 (13) を式 (11) に代入すると

$$\mathbf{G}' = S\boldsymbol{\rho}' \tag{14}$$

が得られる.ここで  $G \ge \rho$ を基底変換した新しいベ クトル  $G' \equiv U^{t}G \ge \rho' \equiv V^{t}\rho$ を定義した.S は対 角行列なので,この式は成分ごとに独立になってお り, $G' \ge \rho'$ のl番目の成分をそれぞれ $G'_{l} \ge \rho'_{l}$ で 表すと

$$G_l' = s_l \rho_l' \tag{15}$$

となる. この関係式は次のように解釈できる.  $\rho$  か ら G に変換するには,まず V で基底変換をし,そ の基底においてスケール変換を施した後,U で元の 基底に戻す. その際のスケール因子が特異値  $s_l$  であ る. それが今,指数関数的に減衰している. このこ とは,G が $\rho$  の持つ情報を大小さまざまなスケール で足し合わせたものになっていることを意味する. この様子を図 5(a) に示した.

ここで, カーネル  $K(\tau, \omega)$  は逆温度  $\beta$  のみを含み, 系の詳細に依存しないことを思い出そう.したがっ て,変換行列 U, V は任意の  $G(\tau), \rho(\omega)$  を展開する 一般的な基底を与えている.この汎用的な基底が  $\tau$ 



図 6 虚時間と実時間を結ぶ変換行列 K から得ら れる「中間表現」の概念図. 文献 [3] より.

 $と \omega を結ぶ変換行列から得られることから、それを$ 中間表現 (intermediate representation; IR) と呼ぶことにした、その概念図を図 6 に示す、

#### 3.3 具体例

基底変換の適用例を見ることで、この IR 基底の特 徴を理解しよう. 図 7(a) に示したモデルスペクトル  $\rho(\omega)$ を考える. この  $\rho(\omega)$ を式 (12) に代入し、積分 を実行することによって得られた  $G(\tau)$  が図 7(b) で ある.  $G(\tau)$ を  $\rho(\omega)$  に戻す逆問題が本稿で議論する 解析接続であるが、その話に進む前に、まずは基底変 換に注目しよう.

図 7(c) と (d) はそれぞれ  $\rho(\omega)$  と  $G(\tau)$  を IR 基底 で展開した係数  $\rho'_l$  と  $G'_l$  である.添え字 l は特異値 のそれと対応している.図から、 $\rho'_l$  と  $G'_l$  が共に、lの増加に従い指数関数的に減衰していることがわか る.特に、 $G'_l$ の減衰が  $\rho'_l$  と比較して極めて速いこと に注目してほしい.これは、 $G'_l$  と  $\rho'_l$  を結ぶ比例係 数である特異値  $s_l$  が極めて速く減衰するためである (図 4).特異値(あるいはカーネル  $K(\tau,\omega)$ )は系の 詳細には依らない量であるので、 $G'_l$ の指数関数的な 減衰は虚時間グリーン関数の本質的な性質であると いえる.

#### 3.4 $G(\tau)$ に含まれる情報はスパース

それでは, $G'_l$ の急速な減衰は何を意味しているの だろうか?これを考えるために,入力 $G(\tau)$ が一定の 誤差を持っている状況を考える.量子モンテカルロ 法で $G(\tau)$ を計算した場合の統計誤差がその代表例 である.この状況を想定し,厳密な $G(\tau)$ にガウスノ

行列になっている.



図 7 (a) テスト計算用のスペクトル  $\rho(\omega)$ . (b) 式 (12) によって計算された虚時間グリーン関数  $G(\tau)$ . (c),(d)  $\rho(\omega) \geq G(\tau)$  を IR 基底で展開した際の展開係数  $\rho'_l \geq G'_l$ . 水色の点 (+) は  $G(\tau)$  にノイズを加え たデータを  $G(\tau) \rightarrow G'_l$  と変換したもの. 逆温度  $\beta = 1/T = 100$  としている. 文献 [2] より.

イズ (幅  $\sigma = 10^{-3}$ )を加えたものを図 7(b) に示し た (水色の点). 図 7(d) はそのデータを基底変換し たものである.この図から、ノイズの影響が明瞭に 見て取れる.すなわち、厳密な  $G'_l$ が指数関数的に減 衰するために、高次の基底 ( $l \ge 14$ )では、ノイズの 影響が顕著になる.もっと言えば、高次のデータは ノイズの情報しか持っていないのである.

この結果は2つの見方ができる.まず, $\rho(\omega)$ を知 りたいという目的からすると, $G(\tau)$ は $\rho(\omega)$ に関す る十分な情報を持っていないということを認めざる をえない.つまり,解析接続は本質的に劣決定系の 問題になっている.さらに,ノイズの情報が支配的 な高次の $G'_l$ が解析接続を不安定にすることを次節で 見る.少ない情報を有効に活用するスパースモデリ ングの方法が,解析接続に有効なことが自然に想像 できたであろう.

一方で、 $\rho(\omega)$ への逆変換はとりあえず忘れ、 $G(\tau)$ そのものに興味があるとしよう。例えば、虚時間形 式における相関関数のダイアグラム計算などである。 この場合,  $G(\tau)$  の持つ情報が少ないという事実は,  $G(\tau)$  を少ない基底でコンパクトに表現できるとい う,正の効果をもたらす.図7の例で言えば, $G(\tau)$ の4000点のデータがわずか7点ほどで,数値精度の 範囲で厳密に表される.この基底を利用することで, これまでの量子多体系の数値計算が劇的に効率化さ れる.これについては第5節で詳しく議論する.

# 4 スパースモデリング解析接続

#### 4.1 誤差の爆発

解析接続の問題に戻ろう.我々の目的はノイズあ りデータ $G(\tau)$ が与えられた時に,スペクトル $\rho(\omega)$ を計算することである.これは式 (11)の線型方程式 を解くという問題に帰着されるが,変換行列Kが悪 性であるために,この逆問題は入力Gの持つ有意な 情報が必然的に少ない劣決定方程式になっているこ とは前節で示した通りである.それだけでなく,悪 性行列の逆変換は,入力Gのノイズを爆発的に増大 させるという性質も持っている.このことを以下で 見ていこう.

 $G(\tau) \ge \rho(\omega) \ge \operatorname{IR} \overline{}$ 基底で表したときの展開係数  $G'_l \ge \rho'_l$ は式 (15) で互いに結びついている.した がって,入力データ  $G(\tau) \ge G'_l$ に変換し,

$$\rho_l' = G_l' / s_l \tag{16}$$

によって  $\rho'_l$ を求めた後で,もう一度基底変換をすれ ば  $\rho(\omega)$  が求まる.しかし,これはうまくいかない. ノイズが存在するためである.

特異値による基底空間の切断は,次元削減と呼ば れ,大規模データの扱いにおいては常套手段である. ここで,通常の次元削減と解析接続の問題との相違 点を強調しておくことは重要であろう.通常の次元 削減では基底を多く残すほど精度が向上する.例え ば,1次元量子多体系の数値研究において絶対的地位 を占める密度行列くり込み群法はその典型例である. しかし,解析接続の問題では基底を多く残すと逆に 精度が悪化してしまうのである.逆変換による誤差 の増大があるためである.そこで,基底の切断では なく,適切な基底の選択が必要となる.

#### 4.2 基底選択

さて,基底選択によってノイズの影響を除くわけ であるが,これは言い換えると,この基底空間におけ るスパースな解を探すということである.ここまで 来てようやく,解析接続の問題と第2節で解説した スパースモデリングが繋がる.

IR 基底で表現した方程式 (14) に加え, *L*<sub>1</sub> 正則化 項を考慮した次の LASSO 型の最小化問題を考える:

$$F(\boldsymbol{\rho}') \equiv \frac{1}{2} \|\boldsymbol{G}' - S\boldsymbol{\rho}'\|_2^2 + \lambda \|\boldsymbol{\rho}'\|_1 \qquad (17)$$



図 8 解析接続によって得られたスペクトル  $\rho(\omega)$ (赤)と厳密なスペクトル (青)の比較. 左から正 則化パラメーター  $\lambda$  が大きい場合, 適度な場合, 小 さい場合の結果. 文献 [2] より.

これを解くことで, $\rho'$ の重要でない成分が自動的に 除去されたスパースな解が得られるというわけであ る.この方法では,正則化の強さを調整するパラメー タ  $\lambda$ が決定的に重要であるが,その選び方について は後ほど議論する.この最小化問題を,スペクトル が本来持っている性質,すなわち非負性 $\rho(\omega) \ge 0$ と 総和則  $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) d\omega = 1$ を満たすような拘束条件の 下で解く必要がある.そのため,アルゴリズムは多 少複雑になるが,ADMM 法を使えば問題なく実行す ることができる.詳細は文献 [2] を参照されたい.

#### 4.3 解析接続の例

それでは、スペクトルの計算例を見てみよう.特 に、正則化パラメーター  $\lambda$  の役割に注目する.図 8 は異なる  $\lambda$  の値ごとに、最小化問題を解いて得られ たスペクトル  $\rho(\omega)$  である. $\lambda$ を適切な値にとること で、厳密なスペクトル(青線)と良い一致をしている ことがわかる [図 8(b)]. $\lambda$ が大きすぎると、正則化が 強すぎて、スペクトルのピーク構造が消えてしまう. 一方で、 $\lambda$ が小さすぎる場合には、誤差の影響が強く 残り、激しく振動したスペクトルになってしまう.

以上の結果が得られる仕組みは、IR 基底に移ると 簡単に理解できる.図9の赤丸は収束解 $\rho'_l$ から式 (15)を使って $G'_l$ に変換したもので、それを図7(d) のデータと合わせて描いている.これにより、イン プットデータ(水色の+)のうち、どの基底の情報 が解析接続に利用されたかが分かる. $\lambda$ を適切に選 んだ場合、ノイズの影響の少ない有意な情報を持つ



図 9 解析接続の結果から再構成した  $G'_l$ (赤い〇) とインプットデータ(水色の+)および厳密な値 (青い×)との比較.文献 [2]より.



図 10 収束解と入力データとのズレを表す二乗誤 差の入依存性. 文献 [2] より.

基底のみを選択し,ノイズの影響の大きな基底を無 視していることが見て取れる.λが大きすぎる場合 には,有意なデータまでも捨ててしまっているため, 特徴のないスペクトルを与えている.一方,λが小 さすぎる場合には,ノイズが支配的な成分をも採用 してしまっている.なお,lの大きい領域で解析接続 の結果(赤い○)がインプット(水色の+)とズレて おり,むしろ厳密な値(青い×;計算には使用してい ない)に近くなっているのは,最小化問題を解く際に 課したスペクトルの拘束条件のためである.

# 4.4 正則化パラメーター λ の選び方

ここまで見てきたように,スパースモデリングに 基づく解析接続法では,*L*<sub>1</sub>ノルムによる正則化の強 さをコントロールするパラメーター λ が重要な役割 を果たす.得られるスペクトルは λ の選び方に大き く依存する.ここで λ の決定法について述べておく. 図 10 は式 (17) の右辺第 1 項を  $\lambda$  の関数として図 示したものである. この量は収束解と入力データと のズレの大きさを表している(二乗誤差). 当然,  $\lambda$ に関して単調増加であるが,ほとんどの場合,図 10 の $\lambda \approx 10^{-2} \equiv \lambda_{kink}$  付近に見られるような折れ曲が りを示す.その意味は、 $\lambda \gtrsim \lambda_{kink}$  の領域では $G(\tau)$ の大局的な構造を合わせているために二乗誤差が大 きく変化するのに対し、 $\lambda \lesssim \lambda_{kink}$  では $G(\tau)$ の微細 構造、つまりノイズを合わせるような微調整が行わ れているために二乗誤差があまり変化しないと理解 できる.よって、 $\lambda \sim \lambda_{kink}$  において、ノイズの影響 の少ない適度なフィッティングが期待できる.実際、 図 8(b) のスペクトルは  $\lambda_{kink}$  近傍で得られたもので ある.この特徴を利用することで、自動的に適切な  $\lambda$ の値を決定することができる.

#### 4.5 スペクトルはどの程度再現可能か?

ここまでの例で、スパースモデリングの技法を用 いることで、ノイズがあっても安定して解析接続を 実行できることを見てきた.ここで、スパースモデ リングとは、劣決定系の問題 y = Axにおいて、y の 次元が真の解 x 中の非ゼロ要素の個数よりも大きい 場合に、正解を当てる技術であることを思い出して 欲しい.解析接続の問題では、「真の解」 $\rho'$ に含まれ る非ゼロ要素の個数は、入力データ G の精度によっ て決まる.より正確に言えば、G を IR 基底で表し たときの成分  $G'_l$  の内、ノイズレベルよりも大きい値 の数で決まる.このことは、IR 表示における高次の 基底  $\rho'_l$ によって表されるスペクトル構造は、解析接 続によって事実上再現できないことを意味している.

なんだ,結局真のスペクトルは得られないのか,と 思ったかもしれない.情報が失われてしまったもの は仕方がない.しかし,IR基底を使えば,どのよう な構造が再現できるか(しやすいか)ということが 一目瞭然となる.例えば, $\rho(\omega)$ のピークが細いほど, また,高振動数に位置するほど, $\rho'_l$ の減衰は遅くな る.よって,解析接続で再現することが難しい.こ の解析をもっと掘り下げると,あるスペクトル構造 を再現するためには,どの程度のモンテカルロ精度 が必要かということを,事前に知ることもできるよ うになる [2].実質的に再現不可能なスペクトルの微 細構造を得るために,ひたすらスパコンを走らせ,解 析接続の結果に一喜一憂するよりは,よっぽど健全 であろう.

# 5 圧縮表現を利用した数値計算

従来,量子モンテカルロ法など,虚時間グリーン関 数を扱う手法を用いる場合には,不安定な解析接続 をできるだけ避けることが,ある意味常識であった. 図 6 の概念図で示したように,今回見つかった圧縮 表現は,虚時間と実時間を結ぶカーネルから得られ る.今まで忌み嫌われていた解析接続の中間表現に あえて移ることで,計算の効率化がむしろ達成され るという点が興味深い.この章では,圧縮表現を作 る基底の性質や,それに基づく数値計算の効率化を 少し掘り下げて議論する.

#### 5.1 グリーン関数の汎用的な疎表現

第3節において,離散化されたカーネル K の特異 値分解によって IR 基底を導入した.ここでは数学的 により正確な議論をしよう.まずは,式 (12) の  $\omega$  積 分にカットオフ  $\omega_{\text{max}}$ を導入して,以下の式を得る:

$$G(\tau) = \int_{-\omega_{\text{max}}}^{\omega_{\text{max}}} d\omega K(\tau, \omega) \rho(\omega)$$
(18)

ここで, $\omega_{\text{max}}$ はスペクトルの幅よりも大きく取る. 次に,無次元変数  $x \equiv 2\tau/\beta - 1, y \equiv \omega/\omega_{\text{max}}$ を導入し変数変換する.変数  $x \ge y$ は [-1,1] の範囲で 定義されている.注目すべき事実として,カーネル K(x,y)は  $\Lambda \equiv \beta \omega_{\text{max}}$ を通してのみ, $\beta$ や $\omega_{\text{max}}$ に 依存する.例えば,フェルミオンの場合には,係数を 除いて

$$K(x,y) = \frac{e^{-\frac{\Lambda}{2}xy}}{\cosh(\frac{\Lambda}{2}y)}$$
(19)

で与えられる.一方,カーネル行列 K の特異値分解 は,連続極限で以下の分解と等価になる:

$$K(x,y) = \sum_{l=0}^{\infty} s_l u_l(x) v_l(y)$$
(20)

ここで、 $\{u_l(x)\}, \{v_l(y)\}$ はそれぞれ正規直交関数系 である.この分解は、以下の固有値方程式を解くこ とで実現できる:

$$u_l(x) = s_l^2 \int_{-1}^{1} dx' S(x, x') u_l(x')$$
(21)

$$S(x,x') \equiv \int_{-1}^{1} dy K(x,y) K(x',y)$$
(22)

これは非等質な第二種フレドホルム積分方程式と呼ばれる.

本来,  $\Lambda$  は  $\beta\omega_{max}$  で決まる無次元量であり, 任意 の値を取ることができなかった ( $\omega_{max}$  の下限はスペ クトルの幅である). ここで,  $\Lambda$  そのものを正の任意 パラメータとみなしてみよう. すると, 式 (20) は,  $\Lambda$  でパラメタライズされた正規直交基底を決める役 割を持っていることに気づく. これが IR 基底の正確 な定義である.

では, IR 基底はどのような関数形をしているのだ ろうか?この分解を数値的に行って得られた結果を 図 11 に示す.領域 [-1,1] で完全系を張る基底系と しては,ルジャンドル多項式が有名であるが,興味深 いことに, IR 基底 { $u_l(x)$ }, { $v_l(y)$ } は  $\Lambda \to 0$ の極限 でルジャンドル多項式に一致する [3].一方, $\Lambda > 0$ では,図から明らかなように,ルジャンドル多項式と は異なる新しい直交基底系になっている.

次に, IR 基底を使って,物理的なグリーン関数  $G(\tau)$ を展開しよう  $(0 \le \tau \le \beta)$ :

$$G(\tau) = \frac{\sqrt{2}}{\beta} \sum_{l=0}^{\infty} G_l u_l (2\tau/\beta - 1)$$
(23)

 $\{u_l(x)\}$ は完全系をなすので、この展開は  $\Lambda$  の値に関わらず常に可能であることに注意して欲しい. 我々が注目しているのは、展開係数  $G_l$  の収束の速さである。今扱っているグリーン関数に対応するスペクトル関数  $\rho(\omega)$  が $\omega \in [-W,W]$  の範囲で有限の値を持つとする。  $\Lambda$  が十分大きく、 $\Lambda > W\beta$  を満たす場合には、式 (15) に従って、スペクトルの詳細によらず、 $G_l$  が特異値  $s_l$  のために急速に減衰することが保証されている。

#### 5.2 量子モンテカルロ法におけるサンプリング

このグリーン関数のコンパクトな表現を積極的に 使って,多体量子計算を効率化することができる.そ の一例を紹介しよう.近年開発された連続時間量子



図 11 IR 基底関数  $u_l(x), v_l(y)$  (フェルミオン,  $\Lambda = 100$ ).

モンテカルロ法を用いると,格子模型や量子不純物 模型の虚時間相関関数を計算することができる.連 続時間量子モンテカルロ法と IR 基底を組み合わせる ことで,展開係数 *G*<sup>1</sup> を直接モンテカルロ計測するこ とが可能になる.

図 12 に、単サイトの S = 1/2 アンダーソン不純 物模型での計算結果を示した. IR 基底における  $G_l$ の結果に加えて、参考のために、ルジャンドル多項 式で展開した結果も示してある. ルジャンドル基底 を用いると従来の振動数表示に比べて速く減衰する ことが知られているが [19], IR 基底ではそれよりも 格段に速く減衰していることがわかる. 図 12 の下図 は、 $G_l$  の低次の 7 成分だけを使って  $G(\tau)$  を再構成 した結果である. 数値的に厳密な値に一致している ことが見て取れる.

この手法では,基底数を既存の手法に比べて大幅 に少なくできるため,モンテカルロ計測に必要なメ モリ量や計算量を削減することができる.計測に使 用する基底数を特異値の値から予め決められるとい う点も実用的に便利な性質となっている.



図 12 アンダーソン不純物模型での量子モンテカ ルロ計測の結果.上図は,ルジャンドル多項式,IR 基底でのグリーン関数の展開係数の計測結果であ る.下図は, $l = 0, 1, \dots, 5, 6$ のデータを用いてグ リーン関数の虚時間依存性を再現した結果である. 文献 [3] より.

#### 5.3 今後の展開

今回我々が提示した解析接続から得られる圧縮表 現の概念は、1 粒子グリーン関数 (2 点グリーン関数) に限らない一般的なものである.メモリ容量や計算 量の問題は、高次のグリーン関数 (2 粒子グリーン関 数などの4 点グリーン関数等) でより深刻となる.こ のような高次のグリーン関数は、磁気・軌道感受率の 計算や、動的平均場法の拡張理論 [20] などにおいて 重要な役割を果たすため、正確に計算する必要性が 高まってきている.N 点グリーン関数の圧縮表現を 利用する際、基底関数を具体的にはどのように計算 すればいいのだろうか?我々の最新のから、1 粒子グ リーン関数の IR 基底関数をあるルールに従って組み 合わせることで、N 点グリーン関数の汎用的な基底 関数を構成できることがわかった [21].また,非平 衡系における Keldysh グリーン関数などにもこのよ うな概念を適用できるのかという更なる展開も興味 深い.

新しい圧縮表現をダイソン方程式など,ダイアグ ラム計算に利用できないだろうか?将来,量子モン テカルロ計算からダイアグラム計算まで圧縮した表 現の中で行うことが可能になったならば,計算・メ モリ量の問題のため現在困難な,複雑な強相関化合 物の第一原理計算に,大幅な進歩がもたらされるだ ろう.

N 点グリーン関数も圧縮できる魔法のような IR 基底関数の正体は何だろうか?特に解析的な表現を 得ることができれば,実用上有用であるのみならず, グリーン関数の本質に新しい知見を得ることが可能 だろう.その第一歩として,著者らは最近,任意精 度浮動小数点演算を使って,基底関数の数値的に厳 密な解を連続極限で計算するアルゴリズムを開発し た[22].得られた数値解を精密に解析することで,そ の興味深い非自明な性質が明らかになってきており, 更なる進展が見込まれる.

# 6 オープンソースソフトウェア

#### 6.1 SpM 概要

新しく提案された手法は多くの人に活用・試用さ れることでより進展していく.それを実現する最も 有効な手段はソフトウェアの公開である.適切なサ ンプルファイルとマニュアルを合わせて提供するこ とで,気軽な利用が可能となり新規ユーザーが参入 しやすくなる.そして,さらに一歩踏み込みソース ファイルの公開を行うことで,ユーザーのみならず 開発者の参入も可能となり,コミュニティの形成へ と繋がる.このコミュニティを活用し,手法の改良, 新規機能の実装,開発者同士の意見交換などが盛ん に行われれば,計算手法の加速的な発展にも繋がっ ていく.今回紹介したスパースモデリングを用いた 解析接続法も,このような流れを期待し,オープン ソースソフトウェア SpM として GitHub 上に公開し ている [23].

さて,多くの読者には想像がつく通り,上記は理想



図 13 SpM での計算フロー図.

論となることが多く,ソフトウェア開発を実際にし てみると,ユーザーの獲得にすら頭を悩ませるケー スが多い.理想を現実に近づけるためには,地につ いた活動を一歩ずつ行うことが最善.我々はそう考 え,まずは最初のステップである新規ユーザーの参 入を期待し,以下簡単に SpM の使用方法について述 べさせていただく.

SpM は, 虚時間グリーン関数のデータを与えるファ イル (図 13 内 Gtau.in) と, 一つの入力ファイル (図 13 内 param.in) を用意するだけで利用可能なシン プルなソフトウェアである.入力ファイルでは, グ リーン関数のデータが格納されているファイルの情 報に加え,各種パラメータとして,グリーン関数の統 計性,振動数ωの範囲と分割数,そしてスパースモ デリングを行うために必要なパラメータを定義する. 入力ファイル作成後は,

#### \$ SpM.out param.in

とターミナル上で入力することで計算が開始する.

実際の計算では,最初に離散化されたカーネルを作 成し,その後は第3,4節の手順に従い,カーネルの 特異値分解,各入についてのL<sub>1</sub> 正則化を行う.最後 に最適な正則化パラメータ入optを決定し,入optを用 いて計算されたスペクトル関数,カーネルの特異値 等がテキストファイル形式で出力されて計算完了で ある(オプションにより各入に対する出力も可能). なお,得られたデータを図8,9のように容易に可視 化できるよう,ポスト処理用のシェルスクリプトも 補助ツールとして用意している.本記事で計算実行 した例に加え,ボソンのサンプルファイルも用意し ているので,実際に試される場合には,その足がかり としてぜひ利用していただきたい.

#### 6.2 今後の展開

さて、SpM は現在、単一軌道模型の解析接続を対 象としたシンプルなソフトウェアである. もちろん, そこに留まらず、今後の方向性として、実際の化合 物への応用を視野に入れた多軌道系への拡張や,入 カデータ間の相関(共分散)を考慮に入れた拡張,交 差検証法を用いた λ<sub>opt</sub> の決定などを検討している. また、これと並行して、IR 基底  $u_l(x), v_l(y)$  を生成 するライブラリ irlib の開発も行っている [24]. IR 基底はカーネル K(x,y) の特異値分解によって得ら れるが,実際の計算では,変数の離散化など多くの注 意を要する.このライブラリを利用することで、そ のような問題を気にせずに、気軽に IR 基底を利用で きる.研究はもちろん、このようなソフトウェア開 発・公開・普及といった活動を通し、本節最初に述べ たようなコミュニティの構築, 延いては計算物質科 学分野の発展に貢献できればと切に願っている.

#### 7 おわりに

スパースモデリングは、極めて汎用性の高い方法 論である.それを計測に応用した圧縮センシングは、 従来必要とされてきた量のデータを測定せずとも対 象の素性を調べることを可能とする.スパース性を 利用するには表現の選び方が重要であり、そこに人 間の経験が生かされるのであるが、辞書学習と呼ば れる方法論はそれをも自動化する.その圧縮表現上 で、圧縮センシングを利用することで、計測データの 大幅な縮減が可能となる.

本稿ではこのスパースモデリングの方法を、量子 モンテカルロデータの解析接続に応用した研究を紹 介した. その研究を始めたきっかけは単に方程式が 同じというだけのことであった. y = Ax という最 も簡単とも言える連立方程式も、劣決定系という条 件の下で見直してみると、実は奥が深いものである. 研究当初は、解析接続における「スパース性」が何な のかが全くわからなかった.しかし,試行錯誤を重 ねるうちに、実は我々の利用できる情報がスパース であることに気付いた.  $G(\tau)$  がほとんど有意な情報 を持っていなかったのである. そこで, 真の解を探 すことは諦め、持っている情報を最大限有効に使う ことを考えると、自然と方法が定まっていった.以 降は第4節で紹介したとおりである. さらに、そこ で見出したスパース性の正体は、解析接続だけでな く, *G*(τ) そのものの本質を表しているようにも思え る.実際,我々の得た IR 基底は *G*(τ) を極めてコン パクトに表現している. IR 基底による  $G(\tau)$  の展開 係数 G<sub>l</sub> が,系を支配する少数のパラメータになって いると言える.

スパースモデリングは、自然現象にスパース性を 求めてきた物理学と相性が良い.というよりも,物 理学者と相性が良いのかもしれない.「一見複雑に見 える振る舞いも、ただ一つの支配方程式で決まり、ご く少数のパラメータのみで記述される」という考え が我々の体には染みついている.複雑な現象の背後 に潜む支配方程式を見つけるために,これまでは,計 測データと考え得る多くの方程式との整合性をひと つひとつ検証し、多くの理論が生まれ消えていった. 今回紹介したスパースモデリングの方法は、物理学研 究の新しい姿を提示しているのかもしれない. デー タ科学的技法によって,膨大なデータの中に潜む法 則を発見する. 読者の方々もぜひ, 大量に保有する 計測データを見直して、そこに埋もれている本質を 掘り出してもらいたい. そのための方法論は整備さ れている.これまでとは違った雰囲気を持つ方法論 であるため,乗り出すにはなかなか勇気がいるかも しれない.本稿がそのきっかけになれば幸いである. 読者の挑戦を待つ.

## 謝辞

本研究は以下に列挙する科学研究費補助金の支援を受けて行われました:26800172,16H01059 (J-Physics),25120008,16H04382,16H01064 (J-Physics),16K17735,文部科学省人材育成のコンソーシアムの構築事業 (PCoMS).数値計算の一部は東京大学物性研究所のスーパーコンピュータを使用して行われました.数値計算の一部には以下のライブラリを利用しました:ALPSCore[25],ALPSCore/CT-HYB[26].

#### 参考文献

- M. Jarrell and J. Gubernatis: Physics Reports 269 (1996) 133.
- [2] J. Otsuki, M. Ohzeki, H. Shinaoka, and K. Yoshimi: Phys. Rev. E 95 (2017) 061302.
- [3] H. Shinaoka, J. Otsuki, M. Ohzeki, and K. Yoshimi: Phys. Rev. B 96 (2017) 035147.
- [4] 大関真之: 今日から始めるスパースモデリング (講談 社サイエンティフィク, 2018 年刊行予定).
- [5] M. Elad: Sparse and Redundant Representations: From Theory to Applications in Signal and Image Processing (Springer, 2010), [玉木徹 (訳): スパース モデリング (共立出版, 2016)].
- [6] 冨岡亮太: スパース性に基づく機械学習 (講談社, 2015).
- [7] D. L. Donoho and J. Tanner: Proc. Nat. Acad. Sci. **102** (2005) 9452.
- [8] Y. Kabashima, T. Wadayama, and T. Tanaka: J. Stat. Mech. Theory Exp. **2009** (2009) L09003.
- [9] R. Tibshirani: J. R. Stat. Soc. B 58 (1996) 267.
- [10] S. Boyd, N. Parikh, E. Chu, B. Peleato, and J. Eckstein: Foundations and Trends<sup>®</sup> in Machine Learning 3 (2011) 1.
- [11] D. D. Lee and H. S. Seung: Nature 401 (1999) 788.
- [12] 田中利幸: 電子情報通信学会 基礎・境界ソサイエティ
   Fundamentals Review 4 (2010) 39.
- [13] K. Hayashi, M. Nagahara, and T. Tanaka: IEICE Trans. Commun. E96.B (2013) 685.
- [14] 藤本晃司,田中利幸:応用数理 25 (2015) 10.
- [15] 池田思朗, 本間希樹, 植村誠: 応用数理 25 (2015) 15.
- [16] A. W. Sandvik: Phys. Rev. E **94** (2016) 063308.
- [17] O. Goulko, A. S. Mishchenko, L. Pollet, N. Prokof'ev, and B. Svistunov: Phys. Rev. B 95 (2017) 014102.
- [18] L.-F. Arsenault, R. Neuberg, L. A. Hannah, and A. J. Millis: Inverse Problems **33** (2017) 115007.

- [19] L. Boehnke, H. Hafermann, M. Ferrero, F. Lechermann, and O. Parcollet: Phys. Rev. B 84 (2011) 075145.
- [20] 大槻純也, 楠瀬博明: 固体物理 51 (2016) 223.
- [21] H. Shinaoka, J. Otsuki, K. Haule, M. Wallerberger, E. Gull, K. Yoshimi, and M. Ohzeki: Phys. Rev. B 97 (2018) 205111.
- [22] N. Chikano, J. Otsuki, and H. Shinaoka: Phys. Rev. B 98 (2018) 035104.
- [23] https://github.com/SpM-lab/SpM.
- [24] https://github.com/SpM-lab/irlib.
- [25] A. Gaenko, A. E. Antipov, G. Carcassi, T. Chen, X. Chen, Q. Dong, L. Gamper, J. Gukelberger, R. Igarashi, S. Iskakov, M. Könz, J. P. F. LeBlanc, R. Levy, P. N. Ma, J. E. Paki, H. Shinaoka, S. Todo, M. Troyer, and E. Gull: Comput. Phys. Commun. **213** (2016) 235.
- [26] H. Shinaoka, E. Gull, and P. Werner: Comput. Phys. Commun. **215** (2017) 128.