

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ  
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

2016年度採択研究者

2018年度 実績報告書
-----------------

辻 直人

理化学研究所創発物性科学研究センター

研究員

強相関電子系に対する機械学習を用いた高精度量子多体計算の新たな数理アプ  
ローチの開拓

## § 1. 研究成果の概要

前年度までの結果で、強相関電子系のマテリアルシミュレーションに使われる連続時間量子モンテカルロ法において、計算効率を最大化する展開基底を推定するモデルを構築した。このモデルの問題点として、クラスター内で負符号を完全にキャンセルできる特殊な基底が存在する場合は推定できるが、そうではない一般の場合には予測精度が落ちてしまうという問題があった。

そこで、強結合展開型の量子モンテカルロを走らせる際に生成される大量の情報を学習して、効率よくサンプリングを行う手法を開発した。モンテカルロの確率分布を学習するモデルとして、虚時間軸上に相互作用する古典スピンの配置されたモデルを考えた。相互作用係数をパラメーター表示し、モンテカルロを回して得られる訓練データから線形回帰によってパラメーターを学習した。単一不純物のアンダーソン模型に対してテストした結果、 $R^2$  スコアが 0.94 から 0.99 に達する程度に精度よくモンテカルロの確率分布を推定できることがわかった。得られた学習モデルを使ってモンテカルロのアップデートを行うことで、計算コストを  $O(N^2)$  から  $O(N)$  に落とすことができる ( $N$  は強結合展開の次数)。また、学習モデルによるアップデートを繰り返した後、真の確率分布を計算してアップデートを行うことで、バイアスをかけることなく数値的に厳密にモンテカルロの自己相関時間を短くすることができるようになった。これによって、動的平均場理論のソルバーとして広く使われる強結合展開型の量子モンテカルロ法の計算効率を格段に向上することができた。

## § 2. 研究実施体制

①研究者:辻 直人 (理化学研究所創発物性科学研究センター 研究員)

②研究項目

・強相関電子系に対する高精度量子多体計算への機械学習の応用