

# 物性研究所短期研究会

## 「階層型方程式と機械学習」報告

報告者：杉野修（東京大学物性研究所）

期間：2023年10月4日(水)、10月10日(火)

場所：東京大学物性研究所 6階 A615 セミナー室

webpage:<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/seminar/all2.html?ptype=seminar&pid=19638>

提案代表者：杉野修（東京大学物性研究所）

共同提案者：明石遼介（量子科学技術研究開発機構）

横田猛(理化学研究所数理創造プログラム)

永井瞭(株式会社 Preferred Networks)

春山潤(東京大学物性研究所)

多体系は BBGKY(Bogoljubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon)を始めとする様々な多体相関関数の階層型方程式で特徴づけられる。これを直接的に扱う理論が、量子散逸系や古典流体系、電子系や核子系でそれぞれ発展してきた。これらの理論は最近、波動関数やモンテカルロ計算結果などの機械学習に基づきさらに発展を遂げている。各分野の研究者がそれぞれの技法や考え方を紹介し意見交換することにより、新たなブレイクスルーがもたらされる可能性が高い。そのように考え、本研究会はこの研究テーマを議論する場を提供することを目的として開催された。具体的には、量子散逸系の HEOM(Hierarchical Equation Of Motion)理論、古典流体系の古典密度汎関数理論・繰り込み群の方法、電子系を中心とする量子系の密度汎関数理論や汎関数繰り込み群の方法、動的平均場法とその拡張に関する紹介と議論が行われた。それらと関連して、密度汎関数理論の超伝導への応用なども議論された。

Haoran Chen 氏の講演は超伝導と超イオン導電性が共存している系の第一原理計算に関するものであり、水素原子がサブメルトした系に対する新しい研究が紹介された。

Ryota Masuki 氏の講演は、非調和性の強い系に対する構造決定に関する研究紹介であり、有限温度下での自己無撞着フォノンの計算のための新しい方法が議論された。

Yuuki Kubo 氏の講演はデータ同化法に関するものであり、実験結果を基に第一原理計算を行うことにより、構造決定が従来よりも高速かつ高精度に行えるという事例が紹介された。

Sergei Manzhos 氏の講演は、機械学習法の新しい方法論に関する意欲的な研究紹介であった。Koji Inui 氏の講演は、多変量で構成される Hamiltonian のパラメー

タを如何に決定するかに関する研究であり、勾配を計算することによりそれが効率的に行えるという事例紹介であった。Ming-Chun Jiang 氏の講演では、鉄系超伝導体の第一原理計算に関する最新の研究が紹介された。

Takuya Nomoto 氏の講演では、実験と共同して行った反強磁性体の high throughput 計算に関する事例紹介が行われた。Hsiao-Yi Chen 氏の講演は、excitonic insulator に関する研究である。Tomohito Amano 氏の講演は、分子性液体に対する機械学習を用いた研究である。Ken Inayoshi 氏の講演は、非平衡統計力学の方法を用いたエネルギー緩和に関する研究である。Le The Anh 氏は、固体酸素の様々な相に関する第一原理計算結果を紹介した。

本研究会は、理論の滞在型国際ワークショップの期間中に行われたものであり、ワークショップのテーマに関連するトピックを若手が中心となって講演したものである。オンライン参加を含む事前参加登録者数は 66 名、現地参加者は 10月4日が 45名、10月10日が 38名であった。意欲的な研究が発表され、ワークショップ講師の先生方との質疑応答が活発に行われた。方向性としては重なりがあるものの普段はあまり同じ研究会で顔を合わせることがない研究者が参加し、刺激を与え合いながら進行するような研究会となった。



## プログラム

October 4th (Wed.) 13:00~17:00

13:00~13:30 S1 Haoran Chen (Peking University)

Coexistence of superconductivity and superionicity in  $\text{Li}_2\text{MgH}_{16}$

13:30~14:00 S2 Ryota Masuki (The University of Tokyo)

Ab initio calculation of crystal structures at finite temperatures and its application to the polar metals  $\text{LiBO}_3$

14:00~14:15 Coffee break

14:15~14:45 S3 Yuuki Kubo (The University of Tokyo)

Crystal structure determination of multiple phases by data assimilation

14:45~15:15 S4 Sergei Manzhos (Tokyo Institute of Technology)

Machine learning beyond plain neural networks and kernel methods: from getting rid of non-linear optimization and overfitting to building many-body representations

15:15~15:30 Coffee break

15:30~16:00 S5 Koji Inui (The University of Tokyo)

Inverse Hamiltonian design using automatic differentiation: application to topology and quantum entanglement

16:00~16:30 S6 Ming-Chun Jiang (RIKEN, National Taiwan University)

Ab initio study of phonon-mediated superconductivity in iron-based superconductors  $\text{Sc}_6\text{MTe}_2$  (M=Fe, Co, Ni)

16:30~17:00 S7 Peshal Pokharel (Tribhuvan University)

First-Principles Study of Europium Doping Effects on  $\text{SmMnO}_3$  Perovskite for Energy Conservation in Electronic Devices (withdrawn)

18:00~ Banquet

October 10th (Tue.) 14:15~17:30

14:15~14:45 S8 Takuya Nomoto (The University of Tokyo)

High-throughput calculations of functional antiferromagnets

14:45~15:15 S9 Hsiao-Yi Chen (RIKEN)

Density Functional Theory for excitonic insulator

15:15~15:30 Coffee break

15:30~16:00 S10 Tomohito Amano (The University of Tokyo)

First-principles study of THz dielectric properties of liquid molecules with a machine learning model for dipole moments

16:30~17:00 S11 Ken Inayoshi (Tokyo Institute of Technology)

Energy flow during relaxation in an electron-phonon system with multiple modes: A nonequilibrium Green's function study

17:00~17:30 S12 Le The Anh (The University of Tokyo)

The Hubbard- and van der Waals-corrections on the DFT calculations of epsilon-zeta transition pressure in solid oxygen

18:30~ Banquet

