

機械学習の関数を用いて量子状態を表現する方法を提唱 —機械学習の手法を用いて量子多体系の性質に迫る—

1. 発表者：

野村 悠祐（東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻 助教）

今田 正俊（東京大学大学院工学系研究科 物理工学専攻 教授）

2. 発表のポイント：

- ◆量子多体系において絶対零度で最も安定な量子状態である基底状態を機械学習の関数である深層ボルツマンマシンを用いて表現する方法を理論的に提案しました。
- ◆基底状態を表現する深層ボルツマンマシンと大規模数値計算を組み合わせることによって、今まで謎とされてきた量子多体系の基底状態の性質に迫ることができます。
- ◆今回提案した手法は、量子多体系の性質を調べる数値計算手法における新たな可能性を切り開くもので、この手法をもとに新たな数値手法の開発が促進されるだけでなく、量子多体系の性質の理解が進むものと期待されます。

3. 発表概要：

量子力学の法則に従う小さな粒子が互いに相互作用しあうような系を量子多体系と言います。例えば、電気抵抗が0になる超伝導現象や磁石を生み出す強磁性は、電子が互いに相互作用しあうことによって発現する量子多体系現象です。そのため、量子多体系の性質の解明は、身の回りの物理現象の説明に欠かせません。性質解明のために、これまでに様々な数値計算手法が提案されてきましたが、多体系現象の完全解明には至っていません。そのため、新たな強力な手法開発が大きな課題の一つとなっています。

フラットアイロン研究所(アメリカ)のジュゼッペ・カルレオ研究員および東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻の野村悠祐助教、今田正俊教授の研究グループは、機械学習の関数を用いた新たな数値計算手法を提案しました。人工ニューラル・ネットワークの一種である深層ボルツマンマシンを用い、量子多体系の基底状態を任意の精度で表現できることを示しました。得られた基底状態を表現する深層ボルツマンマシンをもとにして多体系の数値シミュレーションを行うことにより、量子多体系の性質を調べる事ができます。この結果は、量子多体系の数値計算手法において、新たな局面を切り開く成果と言えます。

本研究成果は、英国の科学雑誌「Nature Communications」のオンライン版（ロンドン時間：12月14日付）に掲載されました。

4. 発表内容：

① 研究の背景

金属を冷やしていった時に電気抵抗が0になる超伝導現象や、磁石の性質を生み出す磁性の現象は、量子力学の法則に従う多数の電子が互いに相互作用しあうことによって発現します。このように量子力学の性質に従う多数の自由度が相互作用しあう系を量子多体系と呼びます。量子多体系の理解は、身の周りの物理現象の解明には不可欠であり、新たな新機能デバイスの開発にも欠かせない、非常に重要な課題です。

このような量子多体系の性質は、量子力学の粒子が従うシュレーディンガー方程式(あるいはディラック方程式)の解である多体波動関数によって決定されます。従って、多体波動関数がわかってしまえば性質がつまびらかになります。しかしながら、系の自由度の数が増えていくにつれて、波動関数の次元がものすごい勢いで(指数関数的に)増大するため、一般には解析的に厳密な多体波動関数を得ることができません。そのため、数値計算によって、多体波動関数を精度よく近似する手法が様々に提案されてきましたが、量子多体系の完全理解には未だ到達していません。さらなる理解のためにも、強力な数値手法の開発が大きな課題の一つとなっています。本研究においては、機械学習で用いられる関数が非常に高い関数表現能力を持っていることに着目し、多体波動関数の表現にも有用ではないかと考え、新たな手法の開発に至りました。

② 成果の内容

本研究では、多体波動関数の中でも、量子多体系において絶対零度で最も安定な量子状態である基底状態の波動関数の表現を目指しました。ハミルトニアン(注1)による微小虚時間発展(注2)を基底状態の成分を含む任意の量子状態に作用させると、その状態の中から、基底状態以外の成分が少し減ることがわかっています。したがって、基底状態の成分を含む任意の状態から微小虚時間発展を繰り返し、状態を更新していくと、直観的には濁った水が多段階でろ過されていくプロセスに似て、最終的に基底状態だけが重みを持つようになり、基底状態が得られます。

よって、量子状態を有限個のパラメータを持つ何らかの関数形で表現し、そこから虚時間発展を再現するようにパラメータを最適化していく(微小虚時間発展の度にパラメータが更新される)と基底状態を表すことが可能になります。しかしながら、既存の関数形は関数表現能力に制限があるために、この虚時間発展を厳密に追うことができず、

基底状態を近似的にしか表現できませんでした。それに対して、人工ニューラル・ネットワークの一種である深層ボルツマンマシン(図 1)を用いて量子状態を表現すると、その非常に高い関数表現能力のおかげで、虚時間発展を厳密に再現することが可能であることが示されました。このことにより、深層ボルツマンマシンによって基底状態を任意の精度で表現することが可能になりました。系のエネルギーなどの物理的な性質は得られた深層ボルツマンマシン状態をもとに数値計算によって求めることができます(図 2)。

③ 今後の展望

本研究によって、高い関数表現能力を持つ機械学習の関数が量子多体波動関数の表現にも有益であることが示されました。機械学習と物理という異なった分野間の交流により、今後ますます強力な数値手法開発につながっていくと期待されます。そのため、本研究は量子多体系に対する我々の理解の促進にはずみをつける成果と言えます。

本研究は、文部科学省の科学研究費補助金 (No. 16H06345, No. 17K14336)、文部科学省 「ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発」重点課題 (7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」(CDMSI)および、理化学研究所計算科学研究機構のスーパーコンピュータ「京」HPCI システム利用研究課題 (課題番号: hp170263, hp180170)の助成を受け行われました。一部の計算は東京大学物性研究所のスーパーコンピュータが使用されました。

5. 発表雑誌:

雑誌名: 「Nature Communications」(オンライン版(ロンドン時間): 12月14日(金))

URL: <https://www.nature.com/articles/s41467-018-07520-3>

論文タイトル: Constructing exact representations of quantum many-body systems with deep neural networks

著者: Giuseppe Carleo, Yusuke Nomura, and Masatoshi Imada

DOI 番号: <https://doi.org/10.1038/s41467-018-07520-3>

6. 問い合わせ先：

東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻
助教 野村 悠祐 (のむら ゆうすけ)

東京大学大学院 工学系研究科 物理工学専攻
教授 今田 正俊 (いまだ まさとし)

<報道担当>

東京大学 大学院工学系研究科 広報室
〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1

8. 用語解説：

(注1) **ハミルトニアン**：系のエネルギーを表す演算子。ハミルトニアンを行列表示すると、その行列のサイズは系の自由度の数に対して指数関数的に大きくなる。この莫大なサイズの行列の固有ベクトルが系の固有状態に対応し、その中でも一番エネルギーの低い状態を基底状態という。

(注2) **虚時間発展**：ハミルトニアンによる実時間発展は実数の時間 t に対して、どのように系が時間発展するかを表しているが、虚時間発展はそれに対して虚軸方向の”時間” it へ系がどのように変化するかを表す。実時間発展が系のダイナミクスに対応するのに対し、虚時間発展は系の温度の上下に対応する。虚軸の正の方向に虚時間発展すると有効的に系の温度が低下していく。したがって、基底状態を含む量子状態から虚時間発展すると、系の温度の低下に伴い、最終的に絶対0度で一番安定な基底状態のみの成分だけ取り出すことができる。

9. 添付資料：

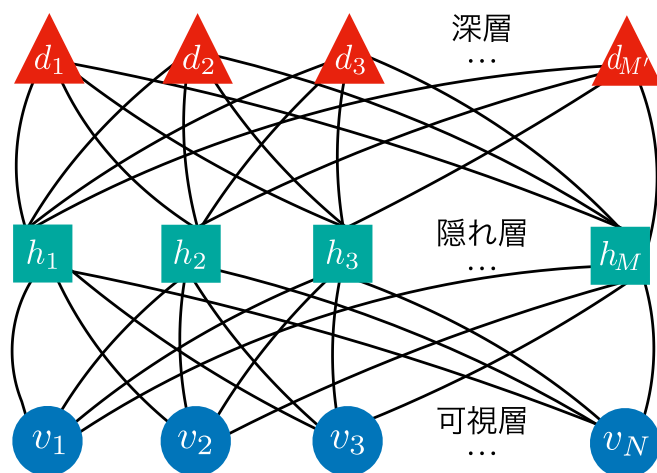


図 1：深層ボルツマンマシンの構造

深層ボルツマンマシンは可視ユニット(丸)、隠れユニット(四角)、深層ユニット(三角)によって構成され、可視ユニットの状態を入力として、それぞれの状態に対して確率を与える機械である。物理的自由度と可視ユニット自由度を同一視し、多体波動関数の値が、可視ユニットの状態配置に対する(複素数に一般化された) 確率であると考えらることで、多体波動関数をボルツマンマシンによって書き下す。多体波動関数の値は可視ユニット・隠れユニット間、隠れユニット・深層ユニット間の相互作用(実線)のパラメータの値に依存する。

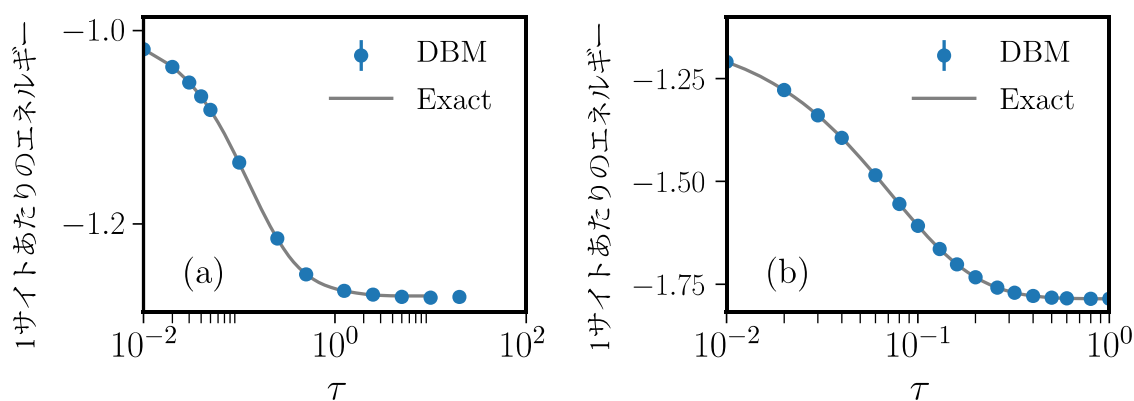


図 2：深層ボルツマンマシンが表す量子状態のエネルギーの虚時間発展

量子スピンの間に相互作用する多体系の量子状態を深層ボルツマンマシン (DBM: deep Boltzmann machine) を用いて表現した。典型的な量子力学的スピン模型である (a) 1次元横磁場イジング模型、(b) 1次元反強磁性ハイゼンベルグ模型に対する DBM 量

子状態のエネルギーの虚時間発展のベンチマーク。手法が正しいかを確かめるため、サイズの小さい系(それぞれ 20 サイト、16 サイト)に対して適用し、厳密対角化によって得られた厳密な虚時間発展(実線)と比較している。実際には、厳密対角化が適用不可能な大きな系(40~50 サイト以上)に対しても、深層ボルツマンマシンの手法は適用可能である。