

熱と量子の揺らぎを発現する深層学習モデルを発見

— 「富岳」などにより自然界の根源的なシミュレーションが加速 —

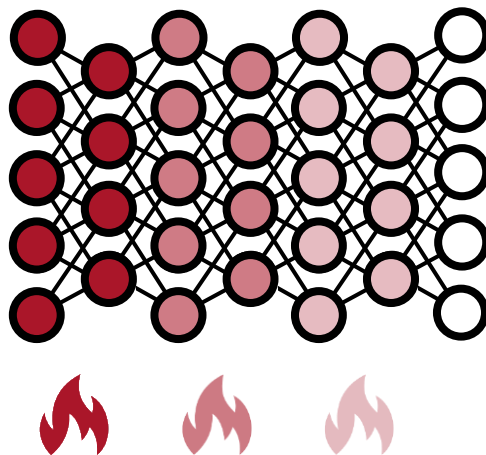
理化学研究所（理研）創発物性科学研究センター計算物質科学研究チームの野村悠祐研究員、開拓研究本部 Nori 理論量子物理研究室の吉岡信行客員研究員（東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻助教）、フランコ・ノリ主任研究員の研究チームは、深層学習モデル^[1]を用いることで、熱および量子的な揺らぎの双方が内在する現象を、精密かつ高速に計算できることを発見しました。

本研究成果は、未知の量子多体现象の解明や高効率な量子デバイスの開発などに貢献すると期待できます。

熱で活性化された粒子の運動が揺らぐ効果と、量子系特有の量子もつれ^[2]による揺らぎ^[3]の効果を調べることは、いずれも物理の根源的な課題です。特に、量子力学の法則に従う多粒子系（量子多体系）における両者の働きを調べることは、物理学における最大級の難問の一つといえます。

今回、研究チームは、機械学習^[1]において活用されている深層学習モデルが、さまざまな関数系を柔軟に記述する表現能力を持つことに着目し、量子多体系の有限温度^[4]状態を計算する新たなアルゴリズムを開発しました。そして、世界最先端の演算性能を持つスーパーコンピュータ「富岳」^[5]などを用いて、本手法が高い精度と効率を両立することを実証しました。

本研究は、科学雑誌『*Physical Review Letters*』のオンライン版（8月4日付）に掲載されました。



深層学習モデルを用いた量子多体系の有限温度計算のイメージ

研究支援

本研究は、日本学術振興会（JSPS）科学研究費助成事業基盤研究（S）「強相関物質設計と機能開拓—非平衡系・非周期系への挑戦—（研究代表者：今田正俊）」、同若手研究（B）「強相関物質における格子自由度の役割解明とフォノンがもたらす機能物性の探索（研究代表者：野村悠祐）」、同基盤研究（B）「高次元データの次元圧縮によって実現する磁性と超伝導の第一原理計算（研究代表者：大槻純也）」、同若手研究「機械学習と物性理論の分野融合的アプローチによる強相関第一原理計算（研究代表者：野村悠祐）」、文部科学省「富岳」成果創出加速プログラム「量子物質の創発と機能のための基礎科学—「富岳」と最先端実験の密連携による革新的強相関電子科学（研究代表者：今田正俊）（課題番号：hp200132, hp210163）」、科学技術振興機構（JST）戦略的創造研究推進事業 CREST「超伝導人工原子を使った光子ベースの量子情報処理（領域代表者：蔡兆申）」、日本学術振興会国際共同研究事業（JSPS-RFBR）「相互作用を有する空間非一様な二次元構造体（研究代表者：NORI FRANCO）」、NTT Research「Theoretical studies of topological states in nonlinear optics and synthetic topological matter（研究代表者：NORI FRANCO）」、Funding Agency Army Research Office（ARO）「Advanced properties of mesoscopic and spatially inhomogeneous electronic matter（研究代表者：NORI FRANCO）」、Foundational Questions Institute Fund（FQXi）「Exploring the fundamental limits set by thermodynamics in the quantum regime（研究代表者：NORI FRANCO）」、Asian Office of Aerospace Research and Development（AOARD）「Studies on light-light and light-matter interactions（研究代表者：NORI FRANCO）」による支援を受けて行われました。

また、本研究には東京大学物性研究所のスーパーコンピュータおよび理研のスーパーコンピュータ「富岳」、「HOKUSAI」が使用されました。

1. 背景

量子力学の法則に従う小さな粒子が多数集まり、それらが相互作用し合う系を「量子多体系」といいます。例えば、磁石の性質は、電子の持つ「スピン^[6]」という量子力学的自由度が相互作用し合うことで生じる量子多体现象です。この量子多体系の理解は、有用なデバイス開発のためにも欠かせない重要な課題です。

身の周りの量子多体现象は、有限温度において粒子が熱で活性化される効果と、量子力学的な重ね合わせ（量子もつれ）の効果の兼ね合いによって発現します。熱による活性化とは、例えば、温度を上げると水の分子（ H_2O ）の運動が活性化されることで、 H_2O 分子が規則正しく整列している氷（固体）が溶けて、 H_2O 分子の位置が固定されない状態である水（液体）になるような効果のことです。また、量子力学的な重ね合わせとは、二つのスピンの、 $\uparrow\downarrow$ と $\downarrow\uparrow$ の配置を同時に実現しているような状態のことです。

これら熱で活性化された粒子の運動が揺らぐ効果と量子もつれによる揺らぎの効果の二つを同時に取り込んだ計算は非常に難しく、厳密解（誤差なく求められた解）は最新のスーパーコンピュータをもってしても、粒子が数十個の場合までしか得ることができません。つまり、粒子数が数十を超えると厳密解を求めることが不可能になる物理の難問として知られています。

2. 研究手法と成果

量子多体系の有限温度計算という物理の難問に挑むために、研究チームは機械学習の技術を用いるという新たなアイデアを導入し、深層学習モデルの人工ニューラルネットワーク^[1]を使った革新的な計算手法を開発しました。人工ニューラルネットワークは、さまざまな関数形を柔軟に記述できる高い表現能力を持っていることから、量子多体系の有限温度の状態を非常に高精度に近似表現するのに最適だと考えられます。

今回、研究チームは、電子の量子力学的自由度であるスピンの相互作用し合う量子スピン系に着目し、その有限温度状態と、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^[7]が表す状態との間に対応関係を見いだすことに成功しました。例として、横磁場イジング模型^[8]と呼ばれる代表的な量子スピン模型の有限温度の状態は、図1に示す深層ボルツマンマシンが表現する状態と等価になります。熱および量子的な揺らぎのために、極めて複雑な構造を持つ有限温度状態が、特定のネットワーク構造により表せる事実は驚くべきことであり、深層ボルツマンマシンが高い表現能力を持つ証拠といえます。

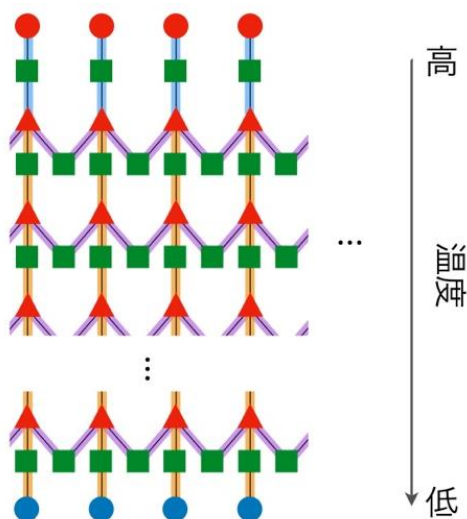


図1 横磁場イジング模型の有限温度状態に対応する深層ボルツマンマシンの構造

まず、量子スピン系のスピン配置を、可視層のユニット（青丸）の状態配置に1対1で関係付ける。その上で、温度を上げるとバラバラのスピン配置を好む熱の効果や、スピン配置の重ね合わせを作る量子もつれの効果を、緑や赤で表された隠れ層との結合によって取り込む。深層ボルツマンマシンの層が厚くなればなるほど、温度が低い状態に対応する。

さらに進んで、東京大学物性研究所のスーパーコンピュータや理研のスーパーコンピュータ「富岳」および「HOKUSAI」を用いて、熱による粒子の活性化の効果と量子もつれの効果を学習させるアルゴリズムを導入したところ、解析的に求めたネットワーク構造よりも、さらに圧縮された構造で有限温度状態を表す深層ボルツマンマシンを構築できることが分かりました。

そこで、これら解析的に得られた深層ボルツマンマシンと、スーパーコンピュ

ータを用いて学習して得られた深層ボルツマンマシンの二つを用いて、横磁場イジング模型を含むいくつかの量子スピン模型の有限温度におけるエネルギーや比熱などの物理量を計算しました。その結果、厳密解を求めることのできるスピンの数が数十以下の場合に、確かに厳密解を再現することが分かり、この手法の精度が実証されました。

今回開発した高精度な近似手法は、真の厳密解を求める手法と異なり、スピンの数(粒子数)を増やしていても、計算量が爆発的に増えることはありません。したがって、今後、粒子数がもっと多い(より現実の系の状況に近い)量子多体系の有限温度の性質の高精度シミュレーションを可能にする強力な武器になると考えられます。

3. 今後の期待

量子多体系の有限温度の高精度計算が可能になると、身の周りの量子多体系現象の理解が促進されます。そして、将来的には、量子多体系現象を用いた有用なデバイスの開発につながるものと期待できます。

また、今回、機械学習の手法が量子多体系における有限温度計算という物理の難問に挑戦する武器になると分かったことは、物理研究において新たな潮流が生まれる第一歩であるといえます。今後、このような分野融合的な研究がより進展していくことで、機械学習手法による物理研究の促進や、その逆の物理による機械学習の性能向上など、様々な波及効果をもたらされると思われれます。

4. 論文情報

<タイトル>

Purifying Deep Boltzmann Machines for Thermal Quantum States

<著者名>

Yusuke Nomura*, Nobuyuki Yoshioka*, and Franco Nori

<雑誌>

Physical Review Letters

<DOI>

10.1103/PhysRevLett.127.060601

5. 補足説明

[1] 深層学習、機械学習、人工ニューラルネットワーク

機械学習は、データ間の非自明な関係を非線形関数でモデル化し、データの本質的なパターンを学習することで、分類や予測などのタスクを行うことを指す。人工ニューラルネットワークは機械学習で用いられる非線形関数の一つで、人間の脳の生体ニューロンを模したユニット(人工ニューロン)から構成される数理モデルである。人工ニューラルネットワークの中でも、特に多層構造を持つものを用いて機械学習を行うことを、深層学習と呼ぶ。

[2] 量子もつれ

離れた粒子間に働く、量子力学特有の相関関係。エンタングルメントとも呼ばれる。

[3] 揺らぎ

小さな時間・空間スケールに着目すると、温度や粒子の空間配置が大きいスケールの平均からずれていることがある。この変動を揺らぎという。

[4] 有限温度

最低温度である絶対零度（ -273.15°C ）を温度の軸の原点にとると、絶対零度よりも高い温度は温度軸上で正の値を取る。ゼロでない値を取ることを「有限」と呼ぶことがあることから、ゼロでない温度を有限温度という。

[5] スーパーコンピュータ「富岳」

スーパーコンピュータ「京」の後継機。2020年代に、社会的・科学的課題の解決で日本の成長に貢献し、世界をリードする成果を生み出すことを目的とし、電力性能、計算性能、ユーザーの利便性・使い勝手の良さ、画期的な成果創出、ビッグデータやAIの加速機能の総合力において世界最高レベルのスーパーコンピュータとして2021年3月共用開始。

[6] スピン

電子や陽子などのミクロな粒子が持つ自由度の一つ。小さな磁石のような相互作用のもとになる。

[7] 深層ボルツマンマシン

人工ニューラルネットワークの一種。データの分布を柔軟に学習できるため、深層学習が脚光を浴びる一つのきっかけとなった。

[8] 横磁場イジング模型

スピンの間が量子性を持たない古典的な相互作用で相互作用し合う模型をイジング模型という。そのイジング模型に対して、上向きスピンと下向きスピンの重ね合わせ、すなわち量子効果を生み出す横磁場の項が追加された模型を横磁場イジング模型という。

6. 発表者・機関窓口

*今般の新型コロナウイルス感染症対策として、理化学研究所では在宅勤務を実施しておりますので、メールにてお問い合わせ願います。

<発表者> ※研究内容については発表者にお問い合わせください。

理化学研究所

創発物性科学研究センター 計算物質科学研究チーム

研究員 野村 悠祐（のむら ゆうすけ）

開拓研究本部 Nori 理論量子物理研究室

客員研究員 吉岡 信行（よしおか のぶゆき）

（東京大学 大学院工学系研究科 物理工学専攻 助教）

主任研究員 フランコ・ノリ（Franco Nori）



野村 悠祐



吉岡 信行



フランコ・ノリ

<機関窓口>

理化学研究所 広報室 報道担当

東京大学 大学院工学系研究科 広報室