

量子多体系に挑むための機械学習手法の機能拡張

[1] 要旨

量子多体問題という難問に立ち向かうための新たな武器として機械学習が注目されている。量子多体ハミルトニアン固有状態である量子多体波動関数の本質を学習し、莫大な（指数関数的に大きな）サイズの次元を持つ多体波動関数をコンパクトに精度よく表すという試みである。この機械学習手法を拡張してフェルミオン・ボソン結合および励起状態計算への適用を可能にし、かつ、既存手法を超えた高精度解析が可能であることが示された。これにより、機械学習手法のさらなる発展への弾みがついた。今後はベンチマークを超え、未解決の量子多体問題へ応用することで、量子多体系の理解促進につながると期待される。

[2] 本文

多数の目に見えない小さな粒子（例えば電子など）が量子力学の法則に従って互いに相互作用しあう系を量子多体系という。電気抵抗が消失する超伝導や、磁石として使われる強磁性はまさにこの量子多体系が生み出す現象である。よって、量子多体系の理解は、身近な物理現象の理解や新たなデバイスの開発のためにも、非常に重要な課題である。

系の性質を予測するには、その系のハミルトニアンの基底状態や励起状態の波動関数がわかれば十分である。しかしながら、量子多体系の場合、それらを求めることは非常に困難である。量子多体系のハミルトニアンは、自由度の数に対して指数関数的に大きな次元の行列であり、その固有状態である基底状態や励起状態も指数関数的に大きなサイズの次元のベクトルとなる。従って、非常に小さな系（自由度の数が数十個程度）でない限り、一般には基底状態や励起状態の波動関数を厳密に求めることはできない（厳密解が解析的に書き下せる例外もほんのわずかながら存在する）。

基底状態や励起状態の波動関数を高精度に記述するという物性物理の難題（素粒子・原子核・量子化学分野とも共通するグランドチャレンジである）に立ち向かうためには強力な数値計算手法が必須である。実際、これまで様々な数値手法（例えば変分モンテカルロ法、密度行列繰り込み群法をはじめとするテンソルネットワーク手法）が開発されてきた。近年、機械学習をこの難題に立ち向かうための新たな切り札として使う試みが始まっている。指数関数的に大きなサイズのベクトルである多体波動関数の本質的なパターンを機械学習により学習し、波動関数の次元よりもはるかに少ない数のパラメータで波動関数を精度よく近似（次元圧縮）しようとするものである。この新たな機械学習手法は、強い電子間の相互作用により絶縁化したモット絶縁体の基本モデルである量子多体スピン系から適用が始まり、その強力さが世界中の様々な研究により明らかになってきているが、まだこの発展は黎明期にあり、その適用範囲が限られているという問題があった。

最近、理化学研究所創発物性科学研究センターの野村悠祐研究員は、機械学習による量子状態学習手法をフェルミオンとボソンが混在し相互作用しあう系、および、励起状態の計算へ適用できるように拡張し、かつ、その手法が強力であることを示した。これにより、機械学習の様々な量子多体問題への適用が可能になり、我々の量子多体系に対する理解をより一層促進させることにつながる。この成果は、日本物理学会が発行する英文誌 *Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ)* の 2020 年 5 月号に掲載された。

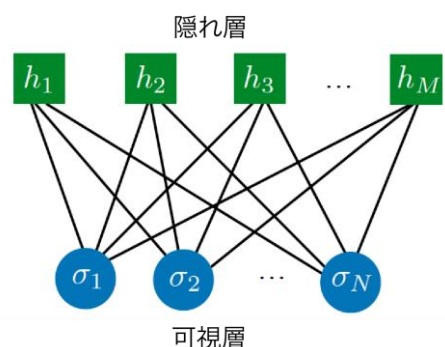


図 1. 制限ボルツマンマシンの構造。多体波動関数を制限ボルツマンマシンを使って表現し、可視層と隠れ層の間の結合（実線）などのパラメータを最適化することで高精度な多体波動関数近似表現を得る。

紹介論文では、まず、フェルミオン・ボソン結合系の代表例としてホルシュタイン模型（電子・格子結合系）に着目し、そのハミルトニアン基底状態計算に機械学習手法を適用できるよう拡張した。電子（フェルミオン）と格子振動の量子であるフォノン（ボソン）の一体の波動関数と、人工ニューラル・ネットワークの一種である制限ボルツマンマシン（図 1）を組み合わせた波動関数を考える。後者の制限ボルツマンマシンによって電子とフォノンの高度・非自明な相関を取り込む。波動関数の形は、一体部分のパラメータと制限ボルツマンマシンのパラメータによって決定される。これらのパラメータを最適化（トレーニング）することによって、基底状態の波動関数を近似する。具体的には波動関数のエネルギー期待値（コスト関数）を最小化するように高次元パラメータ空間内において非線形関数を最適化している。その結果、これまでの波動関数数値手法では得られなかった超高精度な基底状態表現が可能になった。この手法は電子・格子結合系だけでなく、一般のフェルミオン・ボソン結合系に適用が可能であり、これから様々な系への応用などが期待される。

論文の後半では、もう一つの課題である励起状態の高精度計算を可能に取り組んでいる。量子多体ハミルトニアンの固有ベクトルは、そのハミルトニアンの対称性に伴い量子数と呼ばれる保存量によって分類することができる。機械学習によって波動関数をトレーニングする際に、対称性の制限を加えることによって、違う量子数を持つ波動関数を独立に得ることができる。基底状態と異なる量子数を持つものが励起状態である。類似の手法が 2018 年にスイス・アメリカ・フランスの研究グループによって提唱され、ベンチマークされているが、本研究では量子数の制限の方法を改良することによって、先行研究よりも高精度で励起状態を求められることがわかった。

人工知能が将棋や囲碁において驚くべき一手を打つように、人間とは異なる思考回路を持つ機械学習が、量子多体系という難問に対して人の直観とは異なる面白い一手を指し示してくれる可能性が大いにある。本研究によってその適用範囲が広がったことは喜ばしく、量子多体問題の理解促進につながるとして、多くの研究者の注目を集めている。上述のように機械学習による量子状態表現はまだ黎明期にある。今後は、本研究のようなベンチマークではなく、未解明問題への応用も多く出てくるであろう。今後の研究の展開が期待される。

原論文(4 月 15 日公開済)

[Machine Learning Quantum States — Extensions to Fermion–Boson Coupled Systems and Excited-State Calculations, Yusuke Nomura, J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 054706 \(2020\).](#)

<情報提供：野村 悠祐（理化学研究所 創発物性科学研究センター）>