

# 機械学習によるハミルトニアン推定

田村 亮 〈物質・材料研究機構国際ナノアーキテクトニクス研究拠点 tamura.ryo@nims.go.jp〉

長谷正司 〈物質・材料研究機構先端材料解析研究拠点 hase.masashi@nims.go.jp〉

福島孝治 〈東京大学大学院総合文化研究科 hukusima@phys.c.u-tokyo.ac.jp〉

「物質のハミルトニアンを知りたい」、物性研究者なら誰でも思うことだろう。しかし、対象物質の実験結果を説明できるハミルトニアンを構築するのは、一筋縄にはいかない。ハミルトニアン関数系、含まれるパラメータ値を決定するためには、多くの試行錯誤が必要となるためである。この煩雑な作業を回避するにはどうしたらよいだろうか。近年注目されている機械学習をはじめとしたデータ駆動手法の利用が一つの道筋だろう。我々は機械学習を利用することで、実験・観測データからハミルトニアンを推定する手法を開発した。

ハミルトニアンを推定するために、実験データが与えられた際のハミルトニアンの事後確率を定義する。ベイズ推定を利用することで、この事後確率は、ハミルトニアンが与えられた際の測定ノイズを含めた実験データの尤度（計算物質科学手法により評価可能）および事前分布で表すことができる。事前分布は、推定するハミルトニアンに対する事前知識を表し、推定対象に適した分布を導入する必要がある。このようにして定義された事後確率を最大とするハミルトニアンが最も実験・観測データを説明できると推定される。

しかしながら、この事後確率の最大条件探索は、使用する計算物質科学手法によっては簡単ではない。あるパラメータの組における事後確率の値は、対象とする物理量を計算物質科学手法により評価することで得られる。そのため、計算に時間がかかる場合、最大条件を見つけるのは困難である。これを克服するために、機械学習が使える。機械学習を利用することでできるだけ少ない試行回数でよりよい条件を探索することができるベイズ最適化を、事後確率の最大

条件探索に利用した。テストケースとして、1次元量子スピン系に対して適用した。ベイズ最適化を用いることで、物理学でよく利用されるマルコフ連鎖モンテカルロ法や勾配法よりも物理量の計算回数が少なくても、よりよい最大条件を見つけ出せることがわかった。

一方で、ベイズ最適化を用いると実験データを説明できるハミルトニアンを高速に導出することはできるが、事後確率の最大条件だけでは、観測ノイズを見積もることはできない。そこで、マルコフ連鎖モンテカルロ法によって事後確率を詳しく解析することで観測ノイズを求め、推定されたハミルトニアンに誤差をつける手法を開発した。

このように開発された手法の有用性を示すために、実際の実験系への適用として、低次元量子スピン系  $\text{KCu}_4\text{P}_3\text{O}_{12}$  に対して高磁場測定で得られた磁化過程および帯磁率の実験結果から、スピンハミルトニアンを推定した。その結果、推定されたスピンハミルトニアンは、実験データをよく再現できた。また、磁氣的相互作用の誤差も見積もることができた。

推定されたスピンハミルトニアンを用いることで、実験室レベルでは直接見積もることが難しい、スピンギャップや磁気エントロピーなども予測することができる。つまり、“高価”な実験なしに物質を理解できるため、ハミルトニアン推定は物質開発のコスト削減に繋がり、新物質の発見を加速させるだろう。また、この手法は、ハミルトニアンが定義でき、入力する実験・観測データを計算できる計算手法があれば利用することができる。物理学における様々な分野において、広く応用できる手法である。

## 用語解説

### 事後確率：

観測したデータが与えられた条件の下で、推定するパラメータの確率のこと。観測した「後」での確率であるために、ベイズ統計では事後確率とよばれる。

### ベイズ推定：

ベイズの定理に基づき、観測事象（実験データ）から、推定したい事象（ハミルトニアン）を、確率的に推論すること。事後確率を最大にする推定は Maximum A Posterior (MAP) 推定とよばれ、事後確率を詳細に解析することで MAP 推定に誤差をつけることができる。

### 事前分布：

推定対象のハミルトニアンに対する事前知識を表現する分布のこと。ベイズ推定を行うためには、事前に決める必要がある。事前情報として、変数の数が少ないことや過剰に大きくないことがわかっているときには、それぞれ  $L_1$  ノルムや  $L_2$  ノルムを用いた事前分布を利用する。

### ベイズ最適化：

機械学習による予測を用いた最適化手法のこと。機械学習を利用することで、できるだけ少ない計算回数で、よりよい解を見つけることができ、ハミルトニアン推定の高速化に利用できる。

