

フェルミマシン——強相関電子の分数化を取り込んだ機械学習による量子多体問題解法

今田 正 俊 〈上智大学理工学部 imada@g.ecc.u-tokyo.ac.jp〉

AIや機械学習の手法の開発や活用が社会全般、経済、産業活動から日常生活まであらゆる局面で活発化している。自然科学研究も例外ではない。もともとAIの手法には物理学で培われた考え方や概念に起源を持ち、それを応用したものも多い。最近はこの物理学に逆輸入し活用する潮流があり、実験、理論を問わず急激に活発化している。

物理学における難問の一つに量子多体問題がある。量子多体系を厳密に扱おうとすると、古典的な原理に従うコンピュータでは、単純には系のサイズの指数関数に比例する計算時間やメモリーを要し、どんなスーパーコンピュータを用いても充分大きな系を扱うことはできない。しかし、自然は究極において量子力学の法則に従う多体系であると現在信じられているから、量子多体問題をより良い近似で解くことは自然科学全般にわたる波及効果の大きな挑戦的課題である。

例えば物性物理学においては、電子間のクーロン斥力相互作用の効果の大きな強相関電子系と呼ばれる物質群の物性と現象の機構を理解することが挑戦的課題である。強相関電子系では強い量子ゆらぎや**量子もつれ**と多体効果が相俟って、未踏でエキゾチックな量子液体や高温超伝導の舞台となり、多くの全く異なる相が激しく競合するために、高い精度の量子多体解法が望まれてきた。多体量子系を扱うためにファインマンの経路積分の考え方を利用する量子モンテカルロ法やさまざまな変分波動関数法が提案され、それぞれに大きな成果をあげてきたが、いろいろな困難や限界があって、万能で強力な方法は見つかっていない。

この量子多体問題にAIや機械学習を活用する研究が10年ほど前から発展している。その中で、**制限ボルツマンマシン**を用

いて基底状態の波動関数を表現する方法が発展の当初から活発に研究されてきた。量子多体問題で使われる制限ボルツマンマシンでは、物理変数と相互作用する隠れ変数と呼ばれる古典変数を導入し、それら物理変数と隠れ変数が作るネットワークで決まる仮想的なハミルトニアンを定義する。この仮想ハミルトニアンから決まる分配関数に対して、隠れ変数の自由度の部分対角和を取ったものが、物理系の基底状態波動関数をよく近似するように、ネットワークのつながり方を最適化することで、高い精度を示している。しかし制限ボルツマンマシンやその他の機械学習法では隠れ変数が古典変数であり、非局所的な量子もつれを古典変数でどこまで効率よく表現できるのか不明である。そこで隠れ古典変数を量子化し、多体フェルミオン系の場合は、隠れたフェルミオンを導入してフェルミマシンと呼ぶネットワークを構成し、基底状態を表現しようとする提案がなされた。

強相関電子系である**銅酸化物高温超伝導体**では強相関効果のために、真空中では素粒子である電子が物質中で2種類のフェルミオンに分裂して「2重人格」的にふるまい、観測される電子はその両者が量子もつれした複合体であると考えすることで多くの実験や理論計算の結果をうまく説明できる。つまり電子の「**分数化**」を支持する研究が蓄積してきている。フェルミマシンはこの分数化による量子もつれ構造を自然にかつ容易に表現する方法を提供し、今後、複数の相が激しくせめぎ合って競合する様相や、強い量子もつれを可視化して、強相関電子系の普遍的かつ特有の実体解明に貢献しうる。また、量子もつれの物理をあらかじめ組み込んだAIと将来に期待されている量子コンピュータとの連携も期待できる。

——用語解説——

量子もつれ：

ある基底表現で複数の重ね合わせでしか表現できない量子状態の構造。例えばスピン1/2の2サイトの一重項状態は、 $\uparrow$ スピンと $\downarrow$ スピンの量子もつれして2サイトにまたがって重ね合わさった $|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle$ である。

制限ボルツマンマシン：

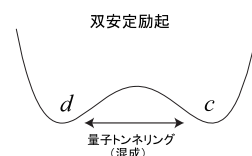
ボルツマンマシンは隠れ古典変数で表される仮想的なハミルトニアンの分配関数が物理ハミルトニアンの基底状態をよく近似するように仮想ハミルトニアンのネットワークを最適化する機械学習手法である。制限ボルツマンマシンは隠れ変数間の相互作用をなくし、隠れ変数の配置に関する部分対角和を解析的に実行できるので、計算コストと統計誤差を劇的に減らせる。

銅酸化物高温超伝導体：

層状ペロブスカイト構造を持ち、銅と酸素からなる層が超伝導を担っている。常圧下では既知の物質中で最高の超伝導転移温度を示す。

分数化：

真空中での基本粒子が、物質中で分裂した2種類以上の自由度としてふるまう現象。ここでの分数化は、図のように局所多重安定なエネルギー構造のエネルギー極小状態周辺でそれぞれがフェルミオンを生み出すときの一般概念である。



双安定な局所エネルギー構造が生む分数化した粒子cとd。