

課題名(タイトル):

## 深層ボルツマンマシンを用いた量子多体系の有限温度計算

利用者氏名:

○野村悠祐

理研における所属研究室名:

創発物性科学研究センター 計算物質科学研究チーム

## 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

多数の目に見えない小さな粒子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。電気抵抗がゼロになる超伝導や、磁石として用いられる強磁性は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、重要な課題である。

量子多体系のハミルトニアン固有状態の波動関数がわかれば、系の性質を正確に記述できるが、それらを求めることは非常に困難である。量子多体系の全エネルギーを与えるハミルトニアンは、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。

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グランドチャレンジ(素粒子・原子核・量子化学とも共通する課題である)に挑む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、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スピン系から適用が始まり、その強力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、これまでの研究のほとんど

は絶対零度の計算に終始していた。しかしながら、量子多体系である実際の物質に対する実験は有限温度で行われるため、実験と直接比較できる量を計算するという意味でも、有限温度の計算への拡張は喫緊の課題である。

本研究では、機械学習で用いられる深層ボルツマンマシン(Deep Boltzmann machine, 略してDBM,その構造は図1)を用いて有限温度計算を可能にする新たなアルゴリズムを開発し、比熱や感受率などの実験と直接比較可能な量の計算を可能にすることを目的とする。

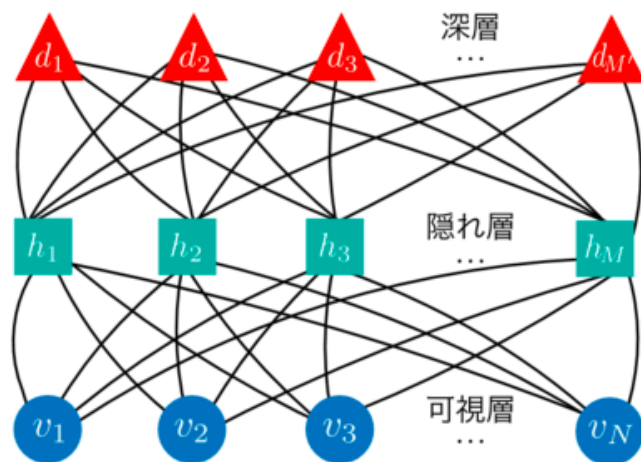


図1: 深層ボルツマンマシン(DBM)の構造。物理自由度に対応する可視層と補助自由度である二つの隠れ層からなる。区別のため、二つの隠れ層を、隠れ層と深層と呼称する。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

これまで絶対零度の計算に終始していた機械学習手法を“purification”と組み合わせることによって、有限温度に拡張する。“purification(純粋化)”とは、系の自由度

に対して補助自由度を加えた拡張されたヒルベルト空間を考えることによって、与えられた系の混合状態を、拡張された系の純粋状態として表すことを言う。

本手法では“purification”という概念に基づいて、DBM によって無限温度混合状態を再現し、そこからハミルトニアンによる虚時間発展を行うことで有限温度計算を行う。虚時間の逆数が温度に比例し、虚時間発展とともに各温度に対する物理量が計算できる。

そのため、まず本手法では無限温度状態を表す必要があるが、DBM の可視層を系の自由度に、深層を拡張する補助自由度と対応づけ、それらの間のエンタングルメントを隠れ層によって取り込むことによって、DBM が表す拡張された系の純粋状態が、元々の系の無限温度混合状態に対応することを解析的に示すことができる。

この無限温度 DBM 状態からの虚時間発展は DBM のネットワークを拡大しながら、そのパラメータを変化させていくことによって書き下せる[1]。そのようにして得られた DBM の隠れ層の自由度と物理自由度をモンテカルロサンプリングすることで物理量の計算が行われる。モンテカルロサンプリングしなければいけない隠れ層の自由度は系のサイズや虚時間(温度の逆数)に比例する。

### 3. 結果

16 サイトの 1 次元横磁場イジング模型(周期境界条件)に対して DBM を用いて有限温度計算を行った。まず、16 サイトの補助自由度を用意し(系の自由度を DBM の可視層の自由度、補助自由度を DBM の深層の自由度と同一視する)、DBM の隠れ層を用いて可視層自由度と深層自由度をエンタングルさせることによって、拡張された系の純粋状態として、系の無限温度混合状態を表す。この無限温度状態を表す DBM から出発し、虚時間発展を作用させ、各温度での物理量を計算した(図 2)。その結果、16 サイトの横磁場イジング模型の各有限温度の厳密解の結果を再現することを確認できた。

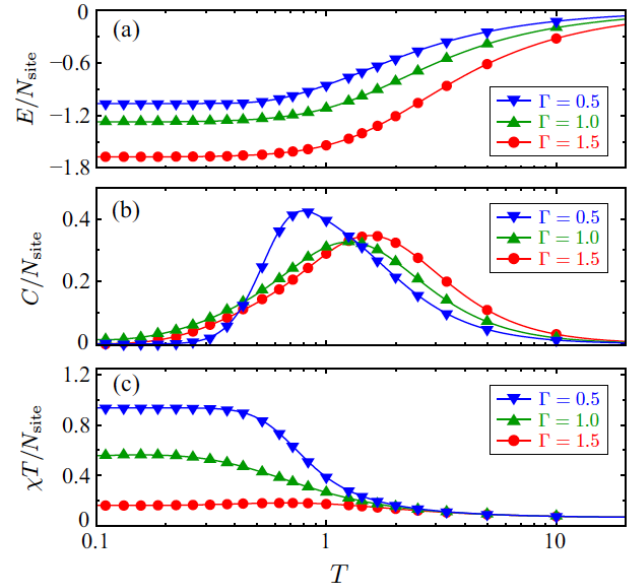


図 2 : 16 サイトの 1 次元横磁場イジング模型(周期境界条件)に対する有限温度計算の結果。(a)エネルギー, (b)比熱, (c)感受率。 $\Gamma$  は横磁場の強さ。エネルギーの単位はイジング型スピン相互作用の値。DBM の結果(丸、上三角、下三角)が、厳密解(実線)をよく再現する。

### 4. まとめ

“purification”という概念と組み合わせることによって、DBM を用いた有限温度計算が可能であることを示した。有限温度状態を DBM を用いて解析的に構築できるということは、DBM の表現能力が非常に高いことを証明している。この手法は DBM による新たな量子古典対応のフレームワークを提供する。

### 5. 今後の計画・展望

DBM によって解析的に有限温度状態を表現できるという発見は有限温度計算のさらなる開発を促進するものである。ただし、本手法の弱点は他の量子古典対応手法と同様、物理量計算の際のモンテカルロ法において負符号問題が出る可能性がある点にある。今後は負符号問題を回避できる有限温度手法の開発に重点を置きたい。

### 参考文献

- [1] G. Carleo, Y. Nomura, and M. Imada, Nat. Commun. **9**, 5322 (2018).

2020年度 利用研究成果リスト

【口頭発表】

1. 野村悠祐, “ボルツマンマシンを用いた量子多体波動関数表現: 深層ボルツマンマシンによる厳密な表現と制限ボルツマンマシンによる数値的近似表現”, Deep Learning and Physics 2020, 2020年8月6日(オンライン)
2. 野村悠祐, “機械学習手法を用いた量子多体系の研究 —手法拡張を含む最近の進展”, CMT セミナー, 2020年8月24日(オンライン)
3. 野村悠祐, “機械学習を用いた2次元  $J_1$ - $J_2$  ハイゼンベルグ模型の研究”, 物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の新展開 2020」, 2020年12月21日(オンライン)
4. 野村悠祐, “機械学習を用いた量子多体波動関数表現: 物理の難問であるフラストレーションのある量子スピン系への適用”, 第11回材料系ワークショップ〜マテリアル DX を加速する「富岳」を活用した成果の創出に向けて〜, 2021年2月10日(オンライン)

【その他(著書、プレスリリースなど)】

1. 野村悠祐, “機械学習手法を用いて量子多体系に挑む —手法拡張を含む最近の進展—”, 固体物理 **56**, 117 (2021).