

## 課題名(タイトル):

ニューラルネットワークによる量子多体系の第一原理計算

## 利用者氏名:

吉岡信行

## 理研における所属研究室名:

開拓研究本部 Nori 理論量子物理研究室

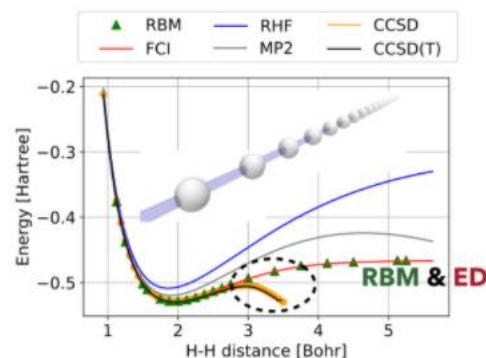
## 1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

物質科学において、予測能力のある電子状態の第一原理計算は、最も重要な課題の一つである。関連の弱い系においては、密度汎関数法のような経験的手法から、Hartree-Fock 理論(平均場的描像)や結合クラスター理論のような波動関数型的手法まで、様々な計算手法が開発されてきた。一方で、超伝導やスピン液体のような非自明な現象が発現する強相関領域においては、上記の理論は破綻し、定量性のある議論・物理現象の開拓を妨げる要因となっている。このような状況を鑑みると、現代の物質科学においては、量子化学者 Pople が指摘したように、以下の要請を満たす大規模計算手法の開発が不可欠である:

- ・弱相関領域において、既存の手法と同等の精度
- ・2 電子励起の範囲において厳密
- ・変分法
- ・スピン軌道数に関する計算量のスケールが多項式的波動関数型の理論を構成するために、密度行列くりこみ群法(DMRG)などの試みが行われてきたが、精度・システムサイズのどちらの観点からも、多くの課題が残されている。

本研究の目的は、以上の 4 つの要素を全て満たしうる候補として、ニューラルネットワークによる量子多体計算手法を大幅に拡張・改良することにある。変分波動関数としてのニューラルネットワーク(Neural Quantum State, 以下 NQS)は、量子スピン系の基底状態計算において、テンソルネットワーク法を始めとした最先端の手法を凌駕する精度に到達できることが示されて以降、フェルミオン系やフラストレート系などにおいてもその威力を発揮し続けている。そこで、本研究では、変分モンテカルロ法による NQS の最適化を行い、従来法を超える大規模計算が可能になることを示すことを目標に掲げ、研究を遂行した。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法



(上): 第一原理計算における計算量と精度のヒエラルキー。  
(下): 水素鎖の基底状態エネルギー曲線。従来手法(結合クラスター法)が破綻する領域においても、RBMにより極めて正確な計算が可能となる。

新たなソフトウェアとして、量子多体系のシミュレーションソフト”NetKet”をインストールした。まず利用者の所有するノート PC 上において、モンテカルロシミュレーションを念頭においた並列計算用のジョブスクリプトの作成を含めたデバッグを行った後、O(1000)コアの計算における正当性を確認することで、HOKUSAI への導入を効率的に行った。

## 3. 結果

ニューラルネットワーク型の多体波動関数を変分モンテカルロ法によって最適化することで、

1. 弱相関領域の熱力学的極限
2. 既存手法の破綻する強相関領域
3. 準粒子バンドスペクトル

の計算において、化学精度を達成可能であることを示した。特に、1, 2 では、いまだに基底状態相図が未解明である水素鎖への適用を行い、結合クラスター法が破綻するような領域においても定量性のある計算が可能であることがわかった(図 1)ほか、単層グラフェンや LiH 結晶(岩塩構造)などといった実在固体においても、化学精度を達成可能であることを示した。3.においては、量子部分空間展開法と呼ばれる励起状態計算テクニックにより、ニューラルネットワークによる複数の励起状態が可能であることを、世界で初めて実証することに成功した。具体的には、固体系の各波数に

おける励起状態計算から、ポリアセチレンにおいて価電子帯と伝導帯のそれぞれにおいて3つの準粒子バンド図を作成した。

#### 4. まとめ

原子が周期的に配置された結晶系において、ニューラルネットワークを用いた波動関数理論を新たに提唱した。計算量的に望ましく、かつ表現能力の高い変分波動関数の導入したことで、既存の結合クラスター法のような弱相関に特化した手法が破綻するような領域(つまり平均場的な描像が成立しない領域)においても、NQSによる計算が、厳密対角化と化学精度で一致することを確認した。特に、ブリルアンゾーン中のk-point samplingに関する有限サイズスケールングを行うことで、NQSによる手法が、熱力学的極限をも効率的にシミュレート可能であることが示された。

#### 5. 今後の計画・展望

本課題を通じて、NQSのモデル計算における信頼性が確立されたため、今後はより複雑な強相関物質を念頭に適用を進めていく。例えば、2018年の実験的な発見以降、その強相関性の高さとモデル化の難易度も相まって多くの理論家を煙に巻いている、ツイスト二層グラフェン系の超伝導発現機構を調べる足がかりとなることが期待される。また、本研究で行われたように、波数空間表示された多体電子の波動関数の構造に関しては未解明な点が多く、「エンタングルメント」や「波数間の相関」などといった実空間的な描像に基づく物理量の振る舞いなどは、未解明である。これらに関して系統的に調べることで、さらに高精度・高効率な計算手法を確立できると考えられる。

2020年度 利用研究成果リスト

**【雑誌に受理された論文】**

[1] N. Yoshioka, “Neural Networks as Quantum Many-body Wavefunction,” Frontier 2, 196, (2020)

**【口頭発表】**

[1] N. Yoshioka, “Solving dissipative many-body system by neural quantum states,” Machine learning for Quatum Simulation, Flatiron Institute, New York, US (Zoom), 2020.06.

[2] N. Yoshioka, “Neural Networks as Quantum Many-body Solver,” Frontiers of Quantum Computational Science, Tokyo, Japan (Zoom), 2020.07.

[3] N. Yoshioka, “Advancing variational algorithms for quantum many-body problems,” Recent progress in theoretical physics based on quantum information theory, Kyoto, Japan (Zoom), 2021.03

**【その他(著書、プレスリリースなど)】**

[1] N. Yoshioka, W. Mizukami, F. Nori, “Neural-Network Quantum States for the Electronic Structure of Real Solids,” arXiv:2010.01358 (2020).