

プロジェクト名(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. 本プロジェクトの研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

量子コンピュータが実現すべき量子もつれとそれを用いた量子計算は、量子多体系を理解することと不可分の関係にある。量子もつれを操って量子計算を実現できれば、量子多体系である現実物質の量子もつれを理解してその基底状態を求めることが可能になる。一方で、現実の量子物質のもつれを理解することは量子コンピュータ実現の鍵でもある。

量子多体系の量子もつれはハミルトニアン固有状態の波動関数に取り込まれている。その波動関数が厳密にわかれば、系の性質を正確に記述することができる。しかし、厳密な計算を実行しようとする、その計算コストは指数関数的に増大してしまう(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量子状態も指数関数的に大きなサイズの次元のベクトルである)。従って、非常に小さな系(自由度の数が数十個程度以下)でない限り、一般には量子状態の波動関数を厳密に求めることはできない。

量子状態に取り込まれている量子もつれを高精度に記述するという量子性を扱う広範な分野に共通する挑戦的課題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。この課題に対し、近年、人工ニューラルネットワーク/機械学習を用いた手法が大きく発展してきた。人工ニューラルネットワークの柔軟な表現能力を利用して、古典アルゴリズムを用いて、量子もつれの本質を抽出する取り組みである。

この新たな手法は、量子スピン系(例えば、電子間に働く強い斥力の効果により絶縁化したモット絶縁体はスピン自由度が互いに相互作用する量子スピン系とみなせる)から

適用が始まり、その有用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、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、量子多体系である現実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、昨年度の課題(G20025)からの継続課題として、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)を用いた有限温度計算手法のさらなる開発・適用を目的とする。昨年度は、フラストレーション(全てのスピン相互作用の利得を満たせない状況を指す)のない量子スピン系に対する有限温度計算を報告したが、本年度は、フラストレーションのある量子スピン系への適用拡張を目的として研究を行った。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

人工ニューラルネットワークによる波動関数手法を“purification”と組み合わせることによって、有限温度計算に拡張する。“purification(純粋化)”とは、系の自由度に対して補助自由度(アンシラ)を加えた拡張された系を考え、元の系の混合状態を、拡張された系の純粋状態として表すことを言う。アンシラ自由度に対する部分状態和(トレース)を取ると、元の系の密度行列が再現される。

本手法では、“purification”に基づき、DBMを用いて拡張された系の純粋状態を表現する。まず、DBMによって元の系の無限温度混合状態に対応する拡張された系の純粋状態を再現する。無限温度状態からハミルトニアンによる虚時間発展を行うことで、有限温度計算を実行することができる。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。

図 1 に、フラストレーションのある量子スピン系に適用するための DBM の構造を示す。 $\sigma$  が元の系のスピン自由度、 $\sigma'$  がアンシラ自由度である。 $\sigma$  と  $\sigma'$  が各サイトで最大エンタングルした純粋状態は、元の系の無限温度混合状態に対応するが、その状態は図 1 の DBM の構造で厳密に再現できる( $i\pi/4$  という複素数の値を持つ結合パラメータで  $\sigma$  と  $\sigma'$  をつなげば良い)。

図 1 の構造を用いると  $\sigma$  と  $\sigma'$  に対する拡張された系に対する純粋状態を近似する DBM 波動関数の関数形を解析的に書き下すことができる。すると、変分的な手法をとることが可能になる。そのため、無限温度 DBM 状態からの虚時間発展は stochastic reconfiguration (SR) 法[1]を用いる。SR 法は厳密な虚時間発展を、変分波動関数がはるることのできる部分空間の中で、できるだけ忠実に再現する手法である。SR 法により DBM の結合パラメータを数値的に最適化し、各温度に対する DBM 純粋状態を得ることができる。物理量の計算は、 $\sigma$  と  $\sigma'$  に対するモンテカルロサンプリングで実行されるが、その時使用される重みとして、 $|\Psi(\sigma, \sigma')|^2$  というように正の重みを使用することができるので、負符号問題の影響を陽に受けることがない。そのため、昨年度提案した有限温度手法では負符号問題のため適用が難しかった、フラストレーションのある系への適用が可能になった。

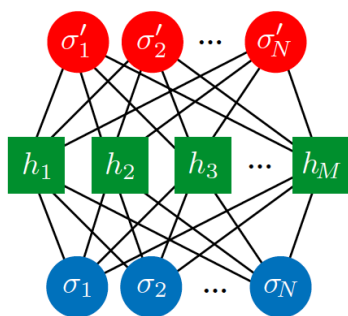


図 1: 本研究で用いた DBM の構造。 $\sigma$  が元の系のスピン自由度、 $\sigma'$  がアンシラ自由度である。 $\sigma$  と  $\sigma'$  の間の量子相関がニューラルネットワークによって媒介される。

### 3. 結果

最も代表的なフラストレーションのある量子スピン模型の一つとして正方格子上的  $J_1$ - $J_2$  ハイゼンベルグ模型 ( $J_1$  と  $J_2$

がともに反強磁性的な領域を考える)がある。この模型は銅酸化物高温超伝導体の母物質のモット絶縁体を記述する重要な模型でもある。最近接のスピン間相互作用  $J_1$  と次近接のスピン間相互作用  $J_2$  が競合しあう(フラストレーション)ことで、非自明な物理が発現する。

本研究では 2. で説明した DBM 手法を用いて 6x6 正方格子上的  $J_1$ - $J_2$  ハイゼンベルグ模型 ( $J_1=1$ ) に対する有限温度計算を実行した(図 2)。その結果、エラーバーの範囲内で数値的に厳密な結果を与える参照データを、DBM 手法 (DBM が表現することのできる範囲内でできるだけ厳密に温度発展を近似する手法)がよく再現することがわかった。数値的に厳密な結果を与える手法は、その計算コストが指数関数的に増大してしまうために 6x6 からさらにサイズの大きい系への適用が難しい。一方でこの DBM 手法は計算コストが系のサイズに対して多項式時間で増えるので、より大きな系への適用も可能である。

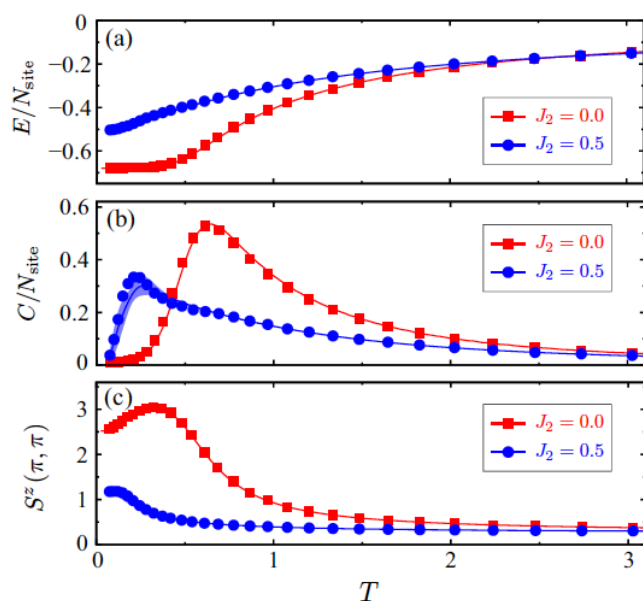


図 2: 6x6 正方格子上的  $J_1$ - $J_2$  ハイゼンベルグ模型 ( $J_1=1$ ) に対する (a) エネルギー、(b) 比熱、(c) 相関関数の温度依存性。DBM の結果 (シンボル) が、数値的に厳密な結果 (エラーバー付き実線) をよく再現する。

### 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。特に、

図1で示したDBMの構造を用い、SR法に基づいた変分的アプローチを取ることによって、フラストレーションのあるような量子スピン系に対しても適用可能な手法を構築することができた。

#### 5. 今後の計画・展望

本研究では手法開発に重点を置き、数値的に厳密な参照データが得られる小さな系でのベンチマーク計算を行った。今後は、さらにシステムサイズの大きな系への適用を行うことでこれまで未解明であったフラストレーションのある量子スピン系の有限温度の性質にも迫っていききたい。

また、今回は”purification”という概念を用いることで有限温度計算を行ったが、有限温度計算を実行するには元の系の密度行列を直接再現するなど、他にも様々なアプローチが考えられる。人工ニューラルネットワークが持つ柔軟な表現能力を生かすにはどのアプローチが最適かはわかっていない。他のアプローチと人工ニューラルネットワークの組み合わせを試すことで、より効率的かつ高精度な有限温度計算の手法を探っていききたい。

#### 参考文献

- [1] S. Sorella, Phys. Rev. B **64**, 024512 (2001)

2021 年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

1. Yusuke Nomura, Nobuyuki Yoshioka, and Franco Nori, “Purifying Deep Boltzmann Machines for Thermal Quantum States”, *Phys. Rev. Lett.* **127**, 060601 (2021)

【口頭発表】

1. 野村悠祐, “量子多体問題とニューラル・ネットワーク”, 統計物理と統計科学のセミナー, 2021 年 5 月 18 日(オンライン)
2. 野村悠祐, “Purifying Deep Boltzmann Machines for Thermal Quantum States”, XXXII IUPAP Conference on Computational Physics (CCP) 2021, 2021 年 8 月 4 日(オンライン)
3. 野村悠祐, “Quantum many-body problems and artificial neural networks”, Statphys seminar, 2021 年 10 月 18 日(オンライン)
4. 野村悠祐, “Purifying deep Boltzmann machines for thermal quantum states”, APW-RIKEN-Tsinghua-Kavli workshop “Highlights on condensed matter physics” 2021, 2021 年 10 月 23 日(オンライン)
5. 野村悠祐, “Artificial neural networks for representing quantum many-body states”, Quantum Techniques in Machine Learning (QTML) 2021, 2021 年 11 月 11 日(オンライン)
6. 野村悠祐, “Artificial Neural Networks for Analyzing Quantum Many-Body Problems”, KMS 2021 Winter Conference, 2021 年 11 月 25 日(オンライン)

【その他(著書、プレスリリースなど)】

1. プレスリリース:熱と量子の揺らぎを発現する深層学習モデルを発見 —「富岳」などにより自然界の根源的なシミュレーションが加速—, [https://www.riken.jp/press/2021/20210806\\_2/](https://www.riken.jp/press/2021/20210806_2/)
2. 解説:野村悠祐, “量子多体問題への機械学習”, 電子情報通信学会誌 **104**, 1150 (2021)