

プロジェクト名(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(1)

理研における所属研究室名:

(1) 開拓研究本部 Nori 理論量子物理研究室

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

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に関する非経験的な手法を確立することは、最も重要な課題の一つである。弱相関領域においては、結合クラスター法などの手法により比較的精密に計算できる一方で、電子相関の強い領域においては、従来用いられてきた理論は破綻してしまう。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、固体系をはじめとした未開拓領域が残されている。

本研究は、以上の4つの要素を満たす候補となる手法を、提案・拡張・改良することを目的としている。近年、その候補としてニューラルネットワークや量子コンピュータといった、最先端のハードウェアを駆使するような変分手法を開発できないか、といった試みが注目を集めている。本研究では、変分モンテカルロ法による NQS の最適化を行ったほか、変分量子回路による固体系の第一原理計算も行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

ニューラルネットワークに基づいた量子多体系のシミュレーションソフト「NetKet」と、量子回路シミュレーションソフト「Qulacs」「Qiskit」をインストールした。利用者の所有するノート PC 上において、HOKUSAI 用のジョブスクリプトを作成したのち、実際にジョブを投入した結果を精査することで、効率的に計算の導入を行った。

3. 結果

2020 年度には、ニューラルネットワークを用いた基底状態

計算により、水素鎖のように従来手法が破綻する系においても化学精度を達成できることを示した。今年度は、励起状態計算の手法をさらに追加したほか、部分空間に基づく手法が、量子変分回路においても有効であることを示した。前者に関してはポリアセチレンにおける準粒子バンドを、後者に関しては水素ダイマー鎖に関する準粒子バンドを計算し、同一の波数セクター内における励起状態計算が効率的に実行できることを世界で初めて示した。以上の結果は原著論文としてまとめられ、出版された。

4. まとめ

原子が周期的に配置された結晶系において、古典・量子いずれも最先端のハードウェアを活用できるような波動関数理論を新たに提唱した。スケール性が高く、かつ表現能力の高い変分波動関数を導入したことで、従来の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、厳密対角化との誤差が化学精度で一致することを数値的に示した。

5. 今後の計画・展望

本課題を通じて、モデル計算における信頼性が確立されたことから、今後はツイスト二層グラフェンや酸化銅などといったエキゾチックな性質を示す物質への適用が期待される。また、波数空間描像における量子状態の相関/エンタングルメントは、実空間描像における性質に比べて未解明な点が多く、例えば「電子対の空間的解離」などのような単純な説明ができない。これらの振る舞いを系統的に調べていくこともまた、さらなる高度計算の確立に不可欠だと考えられる。

2021年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

- [1] N. Yoshioka, W. Mizukami, F. Nori, “Solving quasiparticle band spectra of real solids using neural-network quantum states,” Communications Physics 4, 106 (2021).
- [2.] Nobuyuki Yoshioka, Takeshi Sato, Yuya O. Nakagawa, Yu-ya Ohnishi, Wataru Mizukami, “Variational Quantum Simulation for Periodic Materials,” Phys. Rev. Res. 4, 013052 (2022).

【口頭発表】

[招待講演]

- [1] 吉岡信行, 「量子多体系をニューラルネットワークに埋め込む」, [理論研究会「量子多体系の相形成とダイナミクス」](#), Zoom (2021.4).
- [2] 吉岡信行, 「量子多体系に機械学習アプローチで挑む」, [第35回人工知能学会全国大会](#), オンライン (2021.06).
- [3] 吉岡信行, 「ニューラルネットワークによる量子多体物性の探索」, 第3回冷却原子研究会「アトムの会」, Zoom, 2021.08.
- [4] N. Yoshioka, “Advancing variational algorithms for quantum many-body problems,” Quantum Techniques in Machine Learning, RIKEN, Japan (Zoom), 2021.11.

[口頭発表]

- [5] N. Yoshioka, W. Mizukami, and F. Nori, “Simulating quasiparticle band spectra of real solids by neural-network quantum states,” Pacificchem 2021, online, US (2021.12).
- [6] N. Yoshioka, W. Mizukami, and F. Nori, “Encoding solid-state electronic structures in neural-network quantum states,” Conference on Computational Physics (CCP) 2021, online, UK (2021.08).

【その他(著書、プレスリリースなど)】

- [1] プレスリリース『結晶の世界をのぞくニューラルネットワーク -固体系のマイクロな量子多体物性に迫る-』
https://www.riken.jp/press/2021/20210521_2/index.html