

===== 物理学教室 =====

物性コロキウム ご案内

日時：2018年5月28日（月）16:00-17:30

場所：理学研究科合同B棟743号室（743, Science complex B）

講師：野村悠祐 氏（東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻）

題目：ボルツマンマシンを用いた量子多体系の機械学習ソルバーの開発

概要：

機械学習の手法の一つである人工ニューラル・ネットワーク、中でもボルツマンマシンを利用した量子多体系のソルバーの開発について報告する。

近年、制限ボルツマンマシン (RBM) が柔軟に関数形を近似できることに着目し、量子多体系の基底状態波動関数そのものを RBM を使って表すという試みがなされた[1]。この手法ではハミルトニアン内の物理自由度（“見える”層）に加えて、「ニューロン」と呼ばれる自由度からなる“隠れた”層を一層導入し（制限付きボルツマンマシン (RBM)）、物理自由度と「ニューロン」の間の相互作用を変分パラメータとして変分波動関数を構成する。この RBM 試行波動関数は量子スピン系の基底状態を非常に良い精度で表せることが明らかになった[1]。

本発表前半では、機械学習で用いられる柔軟で非経験的な RBM 関数と、従来の波動関数法で用いられる実空間エンタングルメントを効率的に取り込めるペア積 (PP) 状態を組み合わせることによって (RBM+PP)、フェルミオン系、量子スピン系を問わず様々な格子ハミルトニアンに適用できる柔軟かつより精度の良いソルバーを構成したことを報告する[2]。2次元ハイゼンベルグ模型及びハバード模型に RBM+PP を適用した結果、RBM だけで構成された波動関数、PP 状態を用いた従来の変分波動関数のそれぞれの単独の適用よりも精度が劇的に向上した。

後半では、RBM の構造に加え、もう一層“隠れた”層を持つ深層ボルツマンマシン (DBM) を用いて厳密に基底状態を構築する方法を紹介する。DBM は RBM よりも関数の表現能力が向上することが知られている[3]。この性質を用いて、基底状態を表す DBM の

パラメータの導出を解析的に行う [4]。充分長い虚時間発展の後、基底状態が DBM 波動関数で書き下される。得られた DBM をもとに、見える層のスピンと隠れた層のスピン配置をモンテカルロサンプリングすることによって物理量が測定できる。DBM は古典自由度で構成されており、この手法は新たな量子-古典マッピングのフレームワークを提供する (特別な場合経路積分と等価になる)。

これらの成果は、Andrew S. Darmawan 氏 (東大)、山地 洋平氏 (東大)、今田 正俊氏 (東大)、Giuseppe Carleo 氏 (Flatiron Institute) との共同研究によるものである。

[1] G. Carleo and M. Troyer, *Science* 355, 602 (2017).

[2] Y. Nomura, A. S. Darmawan, Y. Yamaji, and M. Imada *Phys. Rev. B* 96, 205152 (2017).

[3] X. Gao and L.-M. Duan, *Nature Communications* 8, 662 (2017).

[4] G. Carleo, Y. Nomura, and M. Imada, arXiv:1802.09558.

連絡先 : 大槻 純也 (795-6365)

---

世話人 : 岩井 伸一郎 (795-6423) 松井 広志 (795-6604)

村島 隆浩 (795-5718) 大槻 純也 (795-6365)