2020/06/11

深層ボルツマンマシンを用いた量子多体波動関数の厳密な構築

野村 悠祐

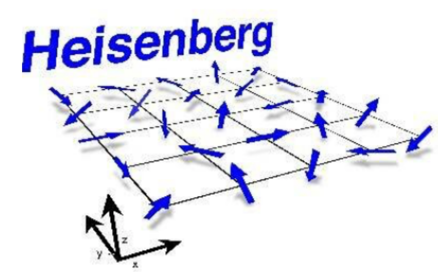
理研 CEMS

量子多体問題

$$\underbrace{\mathcal{H}}_{\text{ハミルトニアン}}|\Psi\rangle = E\underbrace{|\Psi\rangle}_{\text{固有量子状態}}$$

量子多体ハミルトニアンの例：ハイゼンベルグ模型 (スピン1/2の量子スピンが最近接磁気相互作用で相互作用しあう模型、モット絶縁体の有効模型)

$$\mathcal{H} = J\sum_{(i,j)} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j$$



基底状態：ハミルトニアン（指数関数的に大きな次元の行列）の最低エネルギー固有状態（指数関数的に大きな次元のベクトル）

→ 絶対零度において最も安定な量子状態で物質の低温の性質を記述する

$$\mathcal{H}|\Psi_{\mathrm{GS}}\rangle = E_0|\Psi_{\mathrm{GS}}\rangle$$

基底状態の高精度計算： 物性物理のグランドチャレンジであり、素粒子、原子核、量子化学と共通の課題

→ 広範な波及効果

xとΨ(x)の間の関係性をモデル化（機械学習）

$$|\Psi\rangle = \underbrace{\sum_x}_{\text{ハイゼンベルグ模型の場合、}2^N\text{個の和}} \Psi(x)|x\rangle \qquad \Psi(x) \approx \underbrace{\psi_{\boldsymbol{\gamma}}}_{\gamma\text{は有限個のパラメータ}}(x)$$

ハイゼンベルグ模型の場合、2^N個の和

$$|x\rangle = |\sigma_1^z, \sigma_2^z, \ldots, \sigma_N^z\rangle$$

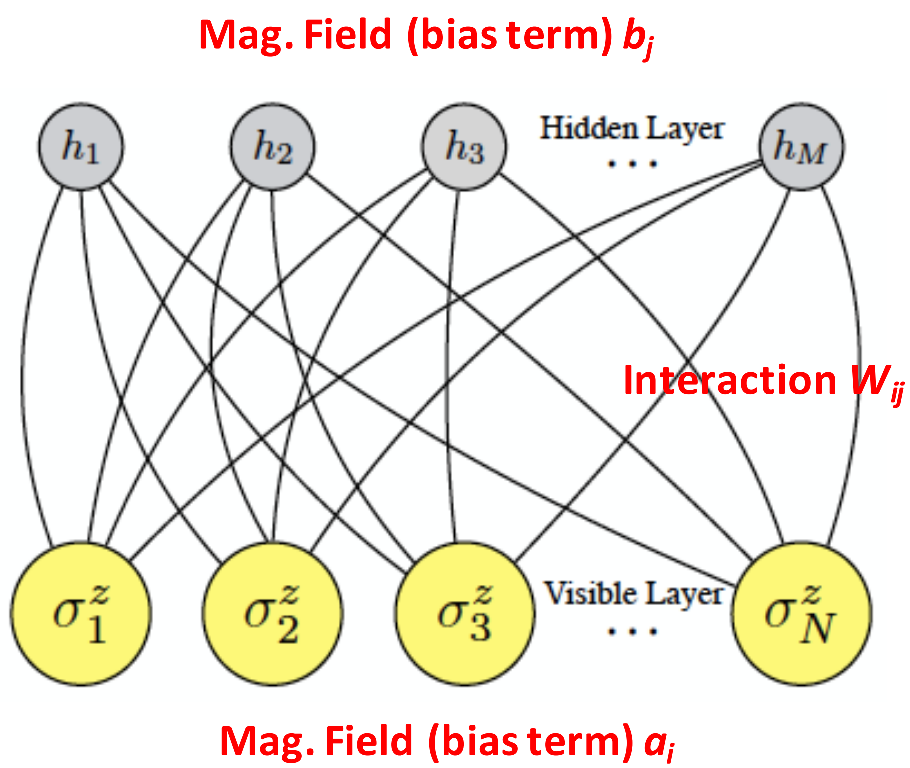
γは有限個のパラメータ

機械学習を用いた量子状態表現

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

制限ボルツマンマシン(RBM)

隠れ層が一層 + 層間の相互作用のみ



RBM

スピン配置 $\longleftrightarrow$ 波動関数の値

σ^z $\Psi(\sigma^z)$

RBM波動関数

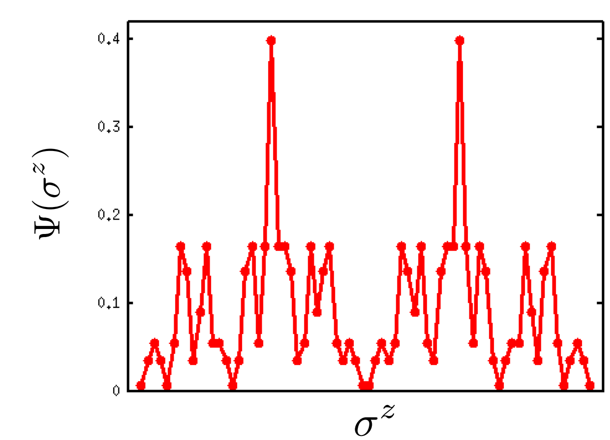
$$\Psi(\sigma^z) = \sum_{\{h_j\}} \exp\Big(\sum_i a_i \sigma_i^z + \sum_{i,j} \sigma_i^z W_{ij} h_j + \sum_j b_j h_j\Big)$$

$\sigma^z = (\sigma_1^z, \sigma_2^z, \ldots, \sigma_N^z)$ ：実空間スピン配置

$h_j = \pm 1$ ：隠れ層のスピン自由度

- 量子状態を求める問題が非線形関数(RBM)の最適化に帰着
- 量子相関はニューラル・ネットワークによって取り込まれる
- 隠れ自由度の数が無限大でどんな波動関数も表現可能(万能近似)

１次元ハイゼンベルグ模型(8サイト)の基底状態波動関数



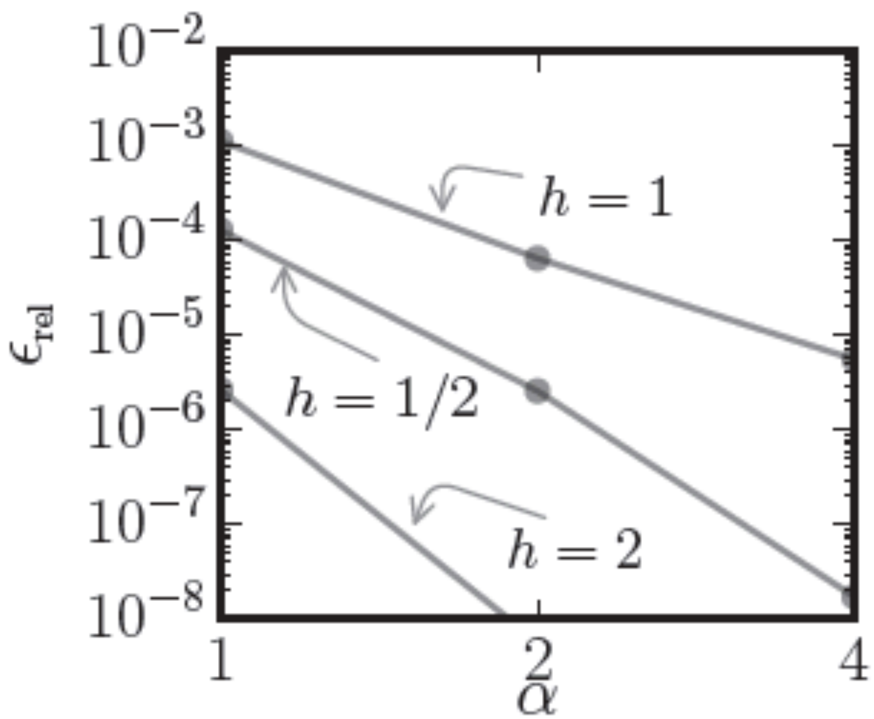
RBM波動関数の精度

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

1次元横磁場イジング模型

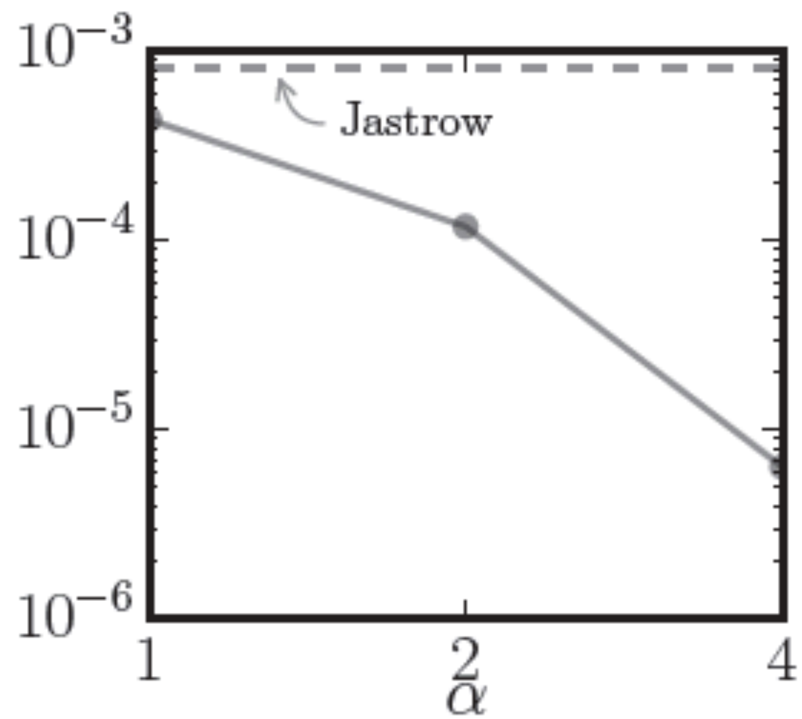
80サイト, 周期境界条件

h: 横磁場 (h=1: critical)



1次元反強磁性ハイゼンベルグ模型

80サイト, 周期境界条件

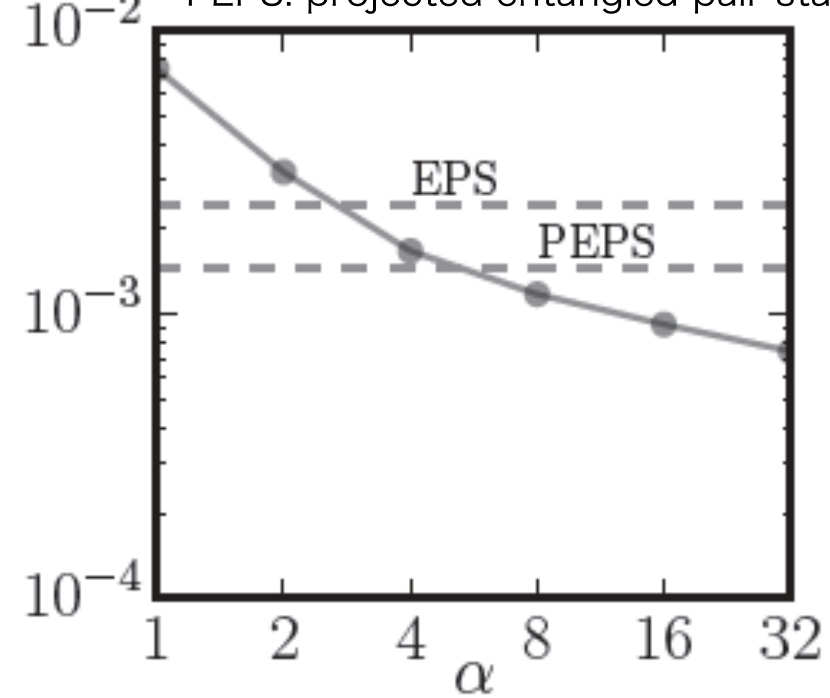


2次元反強磁性ハイゼンベルグ模型

10×10, 正方格子, 周期境界条件

EPS: entangled-plaquette states

PEPS: projected entangled-pair states

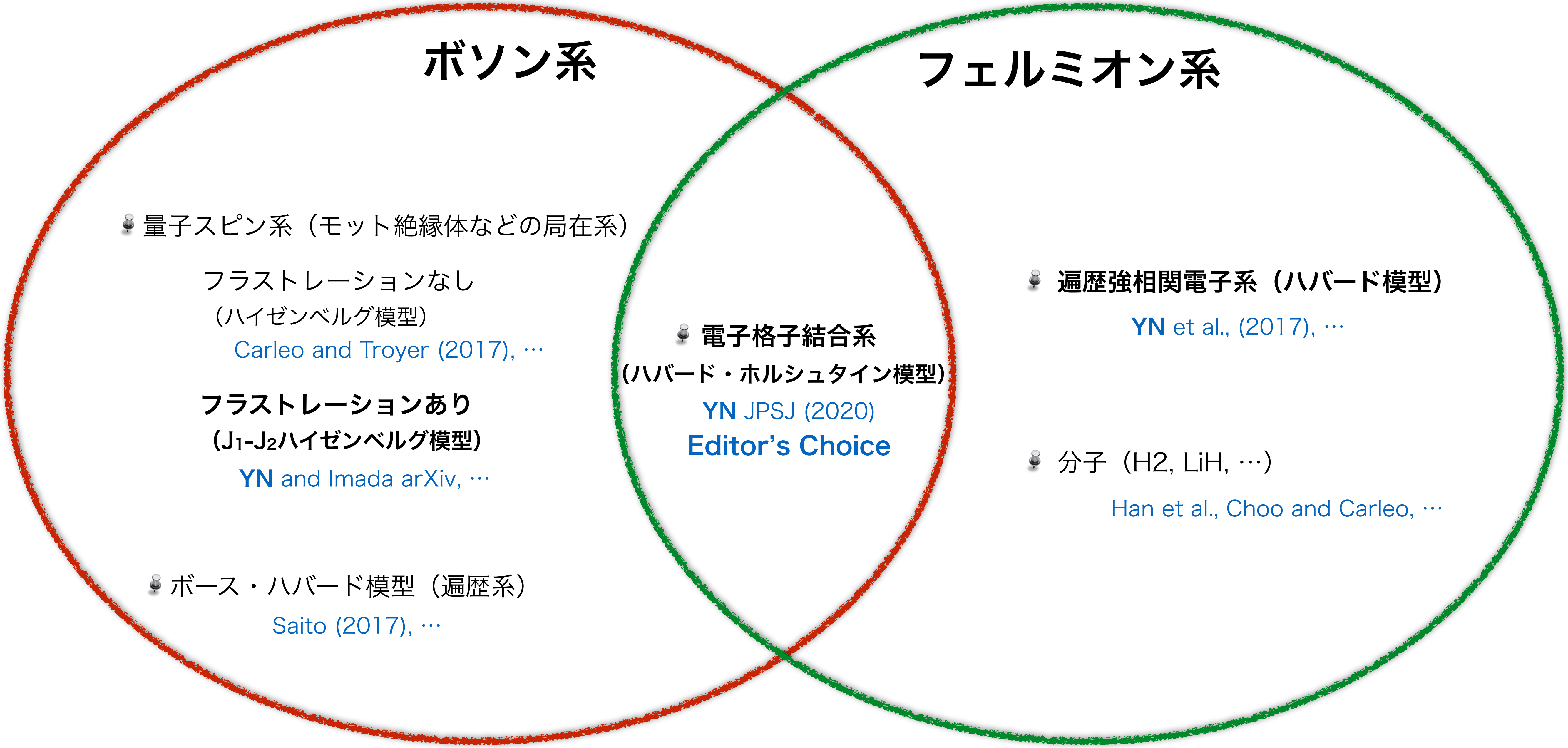


α = (隠れ変数の数)/(# 物理自由度の数)

$$\epsilon_{\mathrm{rel}} = (E_{\mathrm{NQS}}(\alpha) - E_{\mathrm{exact}}) \,/\, |E_{\mathrm{exact}}|$$

📍 最も強力な手法の一つであるテンソル・ネットワークよりも良い精度

実際の強相関系への適用に向けて



強相関模型の高精度解析：ベンチマークから応用へ

ハバード模型、フラストレート磁性模型の未解決相図・物理解明

強相関系の現実的な模型への適用も視野

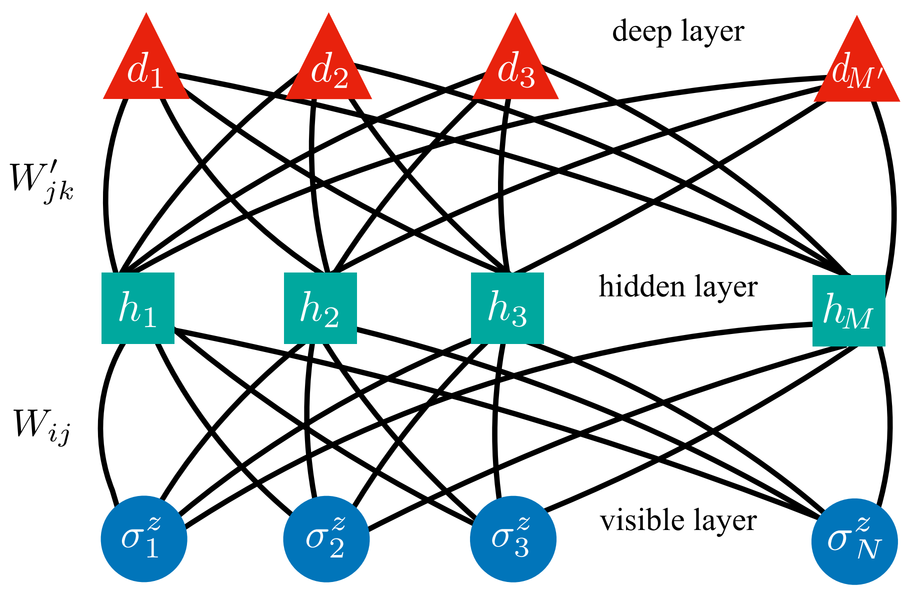
※ なぜ機械学習が量子状態表現に強力か？

→ 深層ボルツマンマシンを用いた厳密な量子古典対応（cf. 制限ボルツマンマシンを用いた近似的量子古典対応）

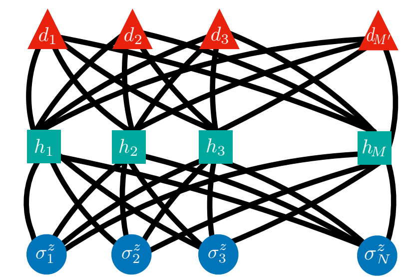
G. Carleo, YN, and M. Imada, Nat. Commun, **9**. 5322 (2018)

深層ボルツマンマシンを用いた量子多体波動関数の厳密な構築

深層ボルツマンマシン(DBM)による波動関数



$$\Psi(\sigma) = \sum_{h,d}$$



$$= \sum_{h,d} e^{\sum_i a_i \sigma_i^z + \sum_{i,j} \sigma_i^z W_{ij} h_j + \sum_j b_j h_j + \sum_{j,k} h_j W'_{jk} d_k + \sum_k b'_k d_k}$$

キーアイデア

- ハミルトニアンによる虚時間発展を深層ボルツマンマシンのパラメータを変化させることで厳密に追う
  (数値的最適化は不要。解析的にパラメータが求まる。隠れ層自由度の数は虚時間に比例)

$$|\Psi(\tau)\rangle = e^{-\mathcal{H}_1 \frac{\delta_\tau}{2}} e^{-\mathcal{H}_2 \delta_\tau} \ldots e^{-\mathcal{H}_2 \delta_\tau} e^{-\mathcal{H}_1 \frac{\delta_\tau}{2}} |\Psi_0\rangle$$

- 量子統計力学における新たな次元(虚時間方向) ＝ 深層ボルツマンマシンにおける新たな隠れ層

- 物理量計算には可視層と隠れ層の自由度の状態のモンテカルロサンプリングが必要

新たな量子古典対応手法

G. Carleo, Y. Nomura, and M. Imada, Nat. Commun. **9**, 5322 (2018) (see also N. Freitas et al., arXiv:1803.02118)