

機械学習の量子多体問題への応用

東北大学 金属材料研究所

野村 悠祐



研究室ウェブサイト <https://www.nomura-lab.imr.tohoku.ac.jp>



E-mail yusuke.nomura@tohoku.ac.jp



IMR 東北大学 金属材料研究所
Institute for Materials Research, Tohoku University

野村研：メンバー



関

陳

森

亀岡

三原

川崎

野村

岡田

桑原

村上

服部

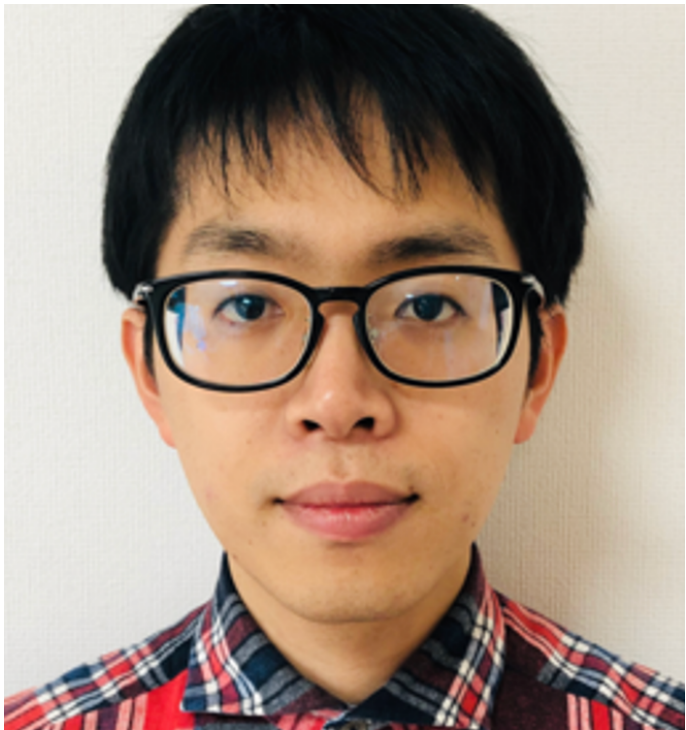
野村 悠祐

量子多体論、機械学習



村上 雄太

非平衡・光物性



陳 曉邑

磁性・エキシトン



森 仁志

フォノン(超伝導・熱電)





サイエンス社

第1章 <物理|機械学習>

- 1.1 機械学習とは？
- 1.2 物理における機械学習 (I) : 物理状態の分類・相転移検出
- 1.3 物理における機械学習 (II) : 物理状態・物理モデルの表現
- 1.4 物理における機械学習 (III) : その他の例

第2章 量子多体系・量子多体波動関数

- 2.1 量子多体系とは
- 2.2 量子多体波動関数
- 2.3 量子多体波動関数に対する数値手法

第3章 人工ニューラルネットワーク

- 3.1 オーバービュー
- 3.2 識別モデル (とその動作原理)
- 3.3 生成モデル (とその動作原理)
- 3.4 学習方法の比較
- 3.5 人工ニューラルネットワークの表現能力

第4章 人工ニューラルネットワークを用いた量子状態表現

- 4.1 人工ニューラルネットワーク波動関数
- 4.2 テンソルネットワーク
- 4.3 人工ニューラルネットワーク波動関数の基本性質とテンソルネットワークとの比較
- 4.4 人工ニューラルネットワーク波動関数の適用例

第5章 人工ニューラルネットワークを用いた変分法

- 5.1 変分法とは
- 5.2 人工ニューラルネットワークを用いた変分アルゴリズム
- 5.3 量子スピン系を用いたデモンストレーション
- 5.4 量子スピン模型に対するカルレオ-トロイヤーの数値結果
- 5.5 適用の“本丸”
- 5.6 一般の量子多体ハミルトニアンへの適用

第6章 量子状態トモグラフィー

- 6.1 量子状態トモグラフィーとは
- 6.2 量子状態トモグラフィーの原理

第7章 基底状態計算に関する進展

- 7.1 変分法
- 7.2 基底状態を表す深層ボルツマンマシンの解析的な構築

第8章 発展的課題：励起状態・ダイナミクス・開放量子系・有限温度

- 8.1 励起状態
- 8.2 実時間ダイナミクス
- 8.3 開放量子系
- 8.4 有限温度

第9章 これからに向けて

- 9.1 機械学習手法の課題と将来の方向性
- 9.2 終わりに

参考文献

索引

Topical Review

Boltzmann machines and quantum many-body problems

Yusuke Nomura 

Department of Applied Physics and Physico-Informatics, Keio University, 3-14-1 Hiyoshi, Kohoku-ku, Yokohama 223-8522, Japan

E-mail: nomura@appi.keio.ac.jp

Received 2 July 2023, revised 12 October 2023

Accepted for publication 2 November 2023

Published 10 November 2023



CrossMark

Abstract

Analyzing quantum many-body problems and elucidating the entangled structure of quantum states is a significant challenge common to a wide range of fields. Recently, a novel approach using machine learning was introduced to address this challenge. The idea is to ‘embed’ nontrivial quantum correlations (quantum entanglement) into artificial neural networks. Through intensive developments, artificial neural network methods are becoming new powerful tools for analyzing quantum many-body problems. Among various artificial neural networks, this topical review focuses on Boltzmann machines and provides an overview of recent developments and applications.

Quantum Many-Body Solver Using Artificial Neural Networks and its Applications to Strongly Correlated Electron Systems

Yusuke Nomura^{1*}  and Masatoshi Imada^{2,3} 

¹*Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai 980-8577, Japan*

²*Physics Division, Sophia University, Chiyoda, Tokyo 102-8554, Japan*

³*Faculty of Engineering, University of Tokyo, Bunkyo, Tokyo 113-8656, Japan*

(Received August 16, 2024; accepted August 30, 2024; published online December 19, 2024)

With the evolution of numerical methods, we are now aiming at not only qualitative understanding but also quantitative prediction and design of quantum many-body phenomena. As a novel numerical approach, machine learning techniques have been introduced in 2017 to analyze quantum many-body problems. Since then, proposed various novel approaches have opened a new era, in which challenging and fundamental problems in physics can be solved by machine learning methods. Especially, quantitative and accurate estimates of material-dependent physical properties of strongly correlated matter have now become realized by combining first-principles calculations with highly accurate quantum many-body solvers developed with the help of machine learning methods. Thus developed quantitative description of electron correlations will constitute a key element of materials science in the next generation.

ANNs as powerful tools in physics and other scientific disciplines

Much of the above discussion is focused on how physics has been a driving force underlying inventions and development of ANNs. Conversely, ANNs are increasingly playing an important role as a powerful tool for modelling and analysis in almost all of physics.

In some applications, ANNs are employed as a function approximator [36]; i.e. the ANNs are used to provide a “copycat” for the physics model in question. This can significantly reduce the computational resources required, thereby allowing larger systems to be probed at higher resolution. Significant advances have been achieved in this way, e.g. for quantum-mechanical many-body problems [37-39]. Here, deep learning architectures are trained to reproduce energies of phases of materials, as well as the shape and strength of interatomic forces, with an accuracy comparable to *ab initio* quantum-mechanical models. With these ANN trained atomic models, considerably faster determination of phase stabilities and the dynamics of new materials can be made. Examples showing the success of these methods involve the prediction of new photovoltaic materials.

資料 1 の内容

1. ボルツマンマシンの導入

2. （物性物理における）量子多体問題の導入

資料 1 の内容

1. ボルツマンマシンの導入

2. (物性物理における) 量子多体問題の導入

生成モデルと識別モデル

生成モデルと識別モデルの違い

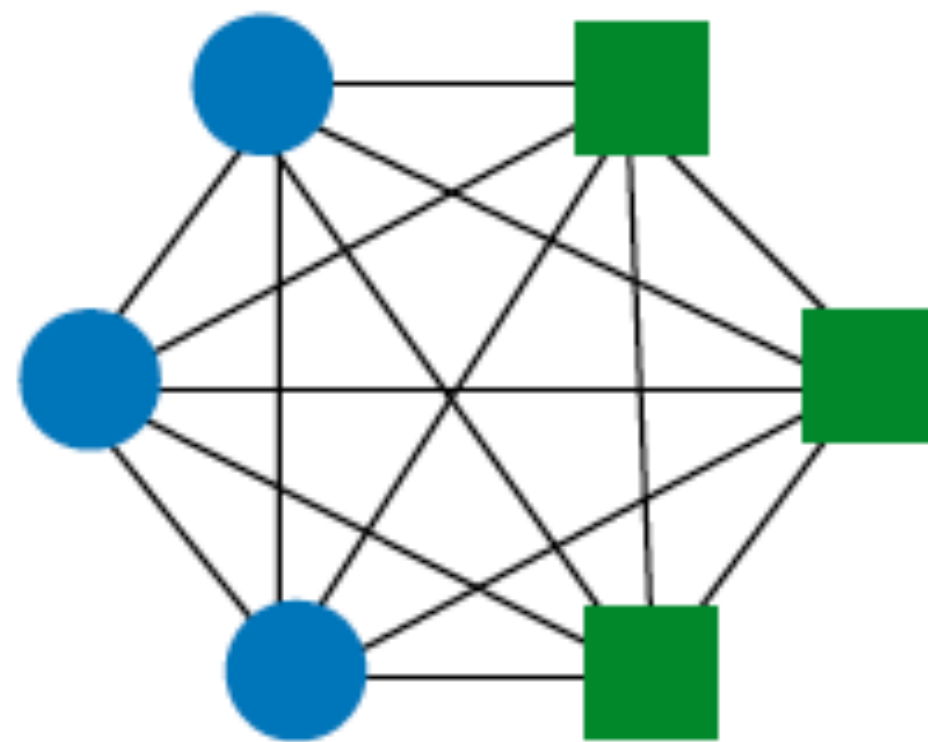
項目	生成モデル (Generative Model)	識別モデル (Discriminative Model)
目的	データの分布を学習し、新しいデータを生成する	クラス分類やラベル予測を行う
学習する確率分布	$P(X)$ または $P(X, Y)$ (データ全体の確率分布)	条件付き確率 $P(Y X)$ (入力データ X からラベル Y へのマッピング)
出力	確率分布や新しいデータのサンプル	クラスラベルや確率値
代表的なモデル	GAN, VAE, Boltzmann Machine, Flow-based Model	ロジスティック回帰, SVM, CNN, BERT
動作原理	確率的にデータを生成する仕組みを学習	データの特徴を学習し、最適な分類境界を見つける
応用例	画像生成 (DeepFake, AIアート), テキスト生成 (GPT), 欠損データ補完	画像分類 (犬・猫判別), 音声認識, 自然言語処理 (感情分析, 質問応答)

ChatGPT (無料版)

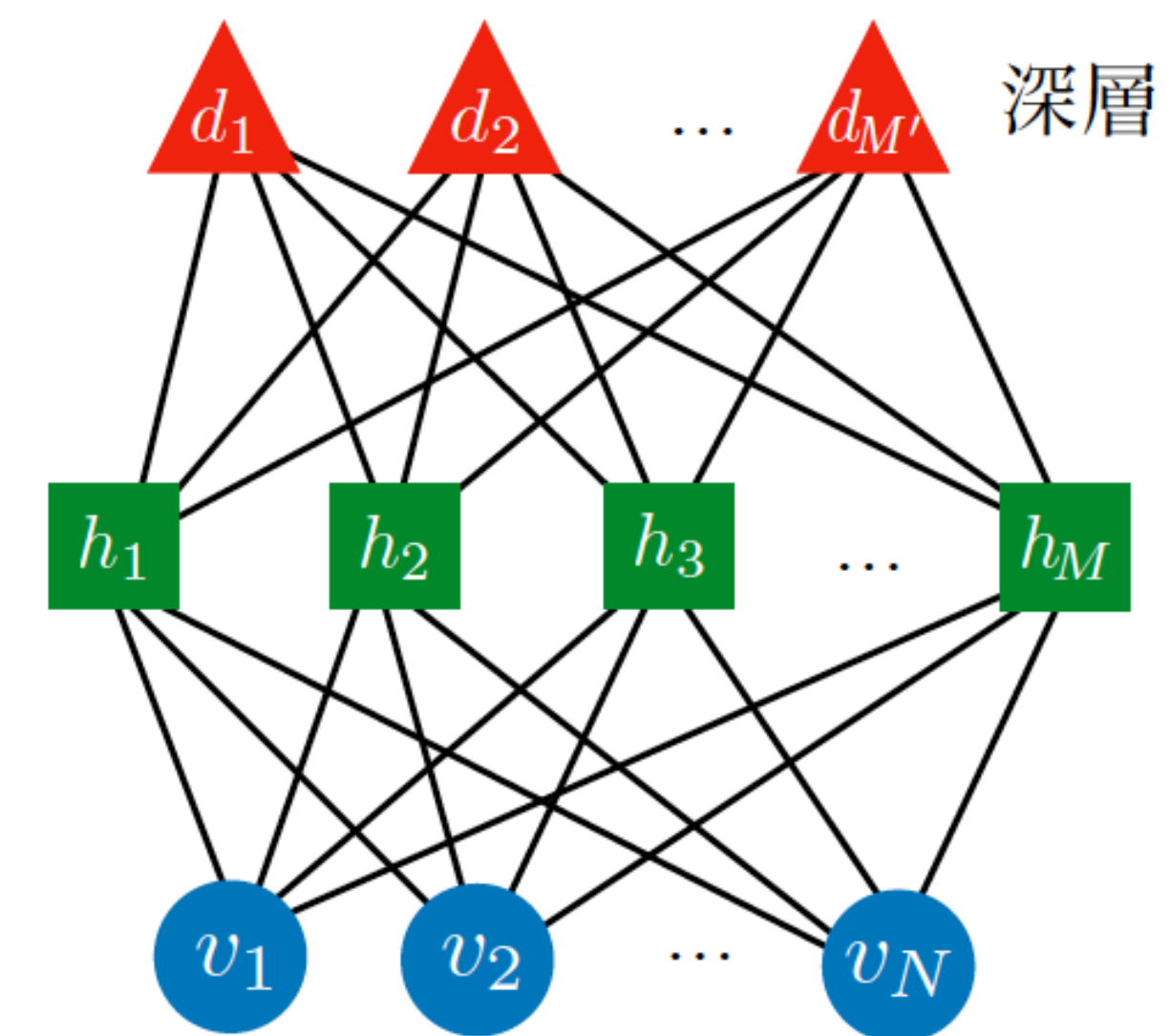
ボルツマンマシン：エネルギーベースの生成モデル

色々なボルツマンマシン

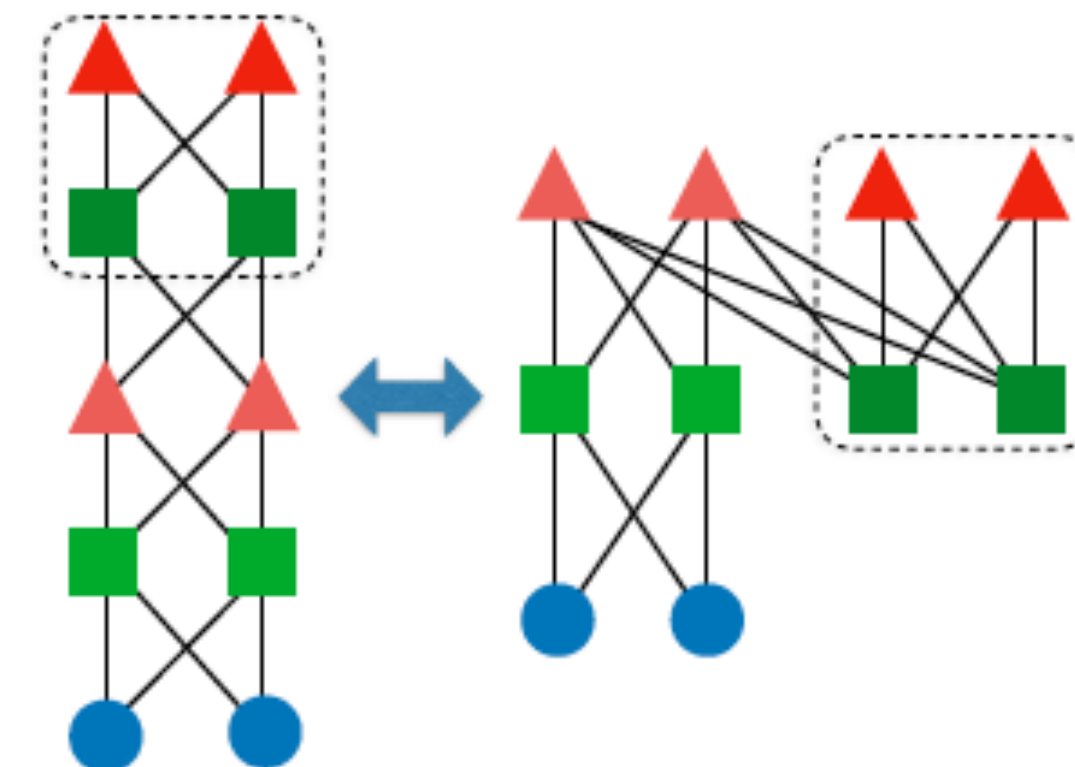
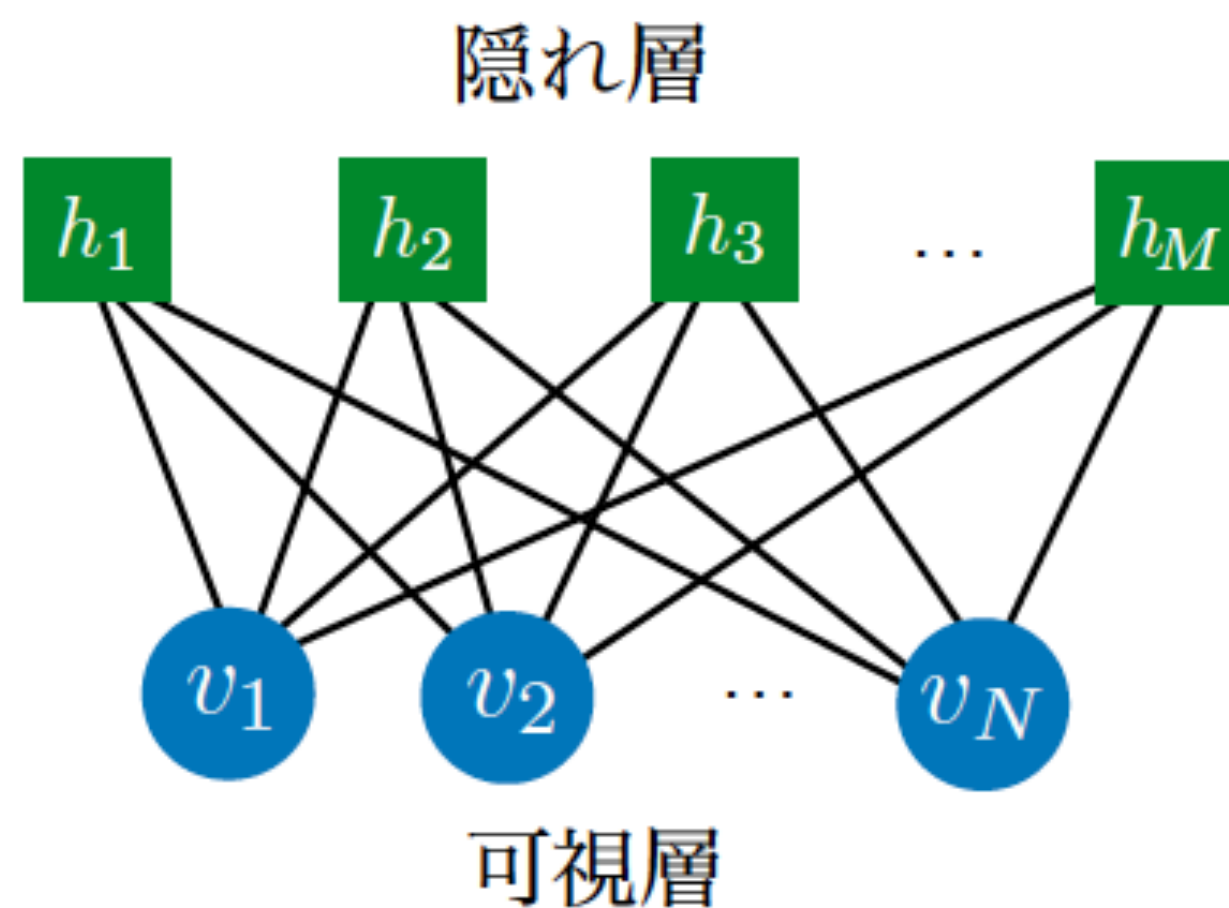
一般のボルツマンマシン



深層ボルツマンマシン



制限ボルツマンマシン



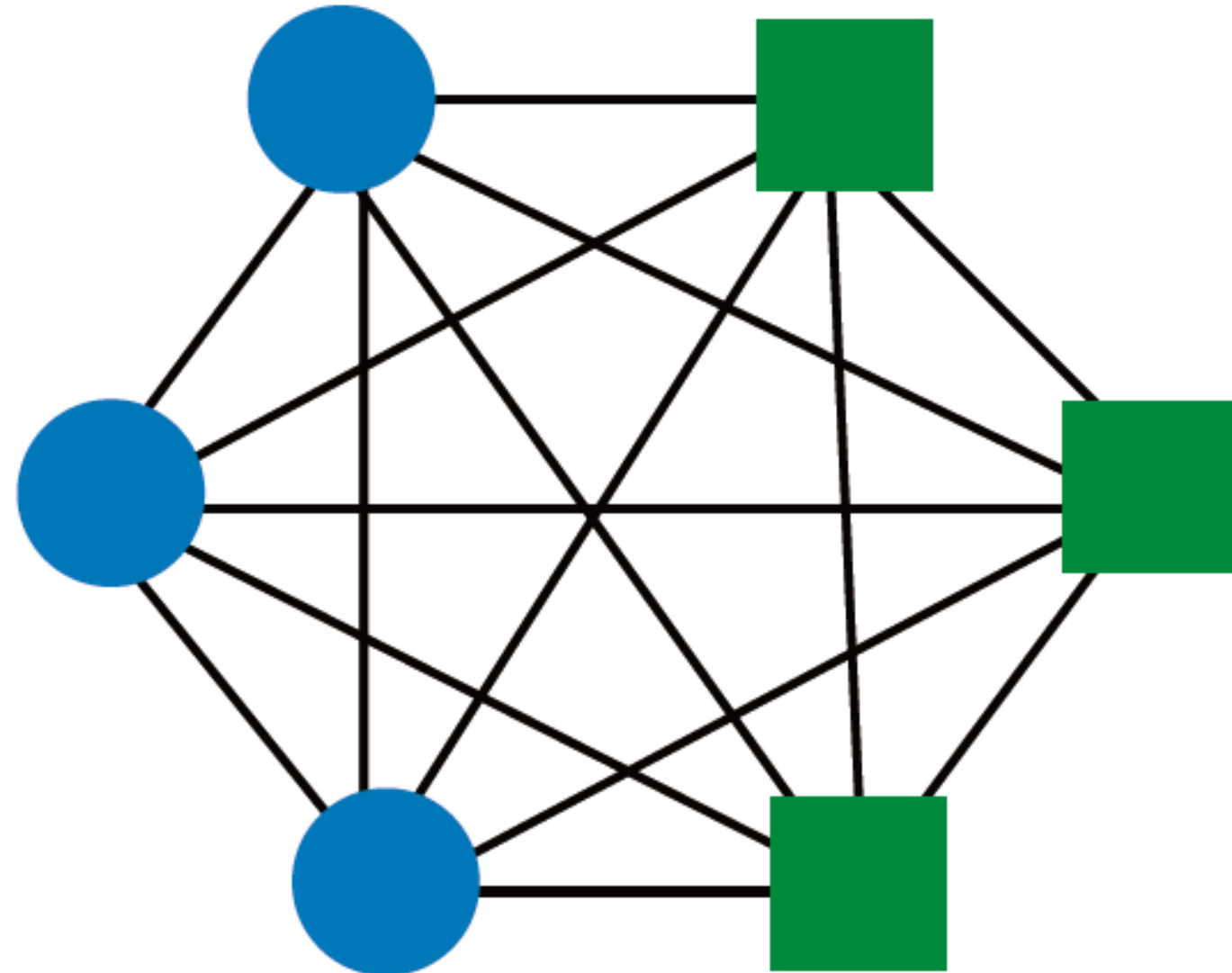
通常のボルツマンマシン

仮想的なエネルギー関数

$$E(v, h) = -\sum_{i,j} W_{ij} v_i h_j - \sum_{i,i'} W_{ii'}^{(v)} v_i v_{i'} - \sum_{j,j'} W_{jj'}^{(h)} h_j h_{j'} - \sum_i a_i v_i - \sum_j b_j h_j$$

可視変数

隠れ変数



$$v \in \{0, 1\}^N \quad h \in \{0, 1\}^M$$

ボルツマン分布

$$p(v, h) = \frac{e^{-E(v, h)}}{Z}$$

$$Z = \sum_{v, h} e^{-E(v, h)}$$

周辺分布

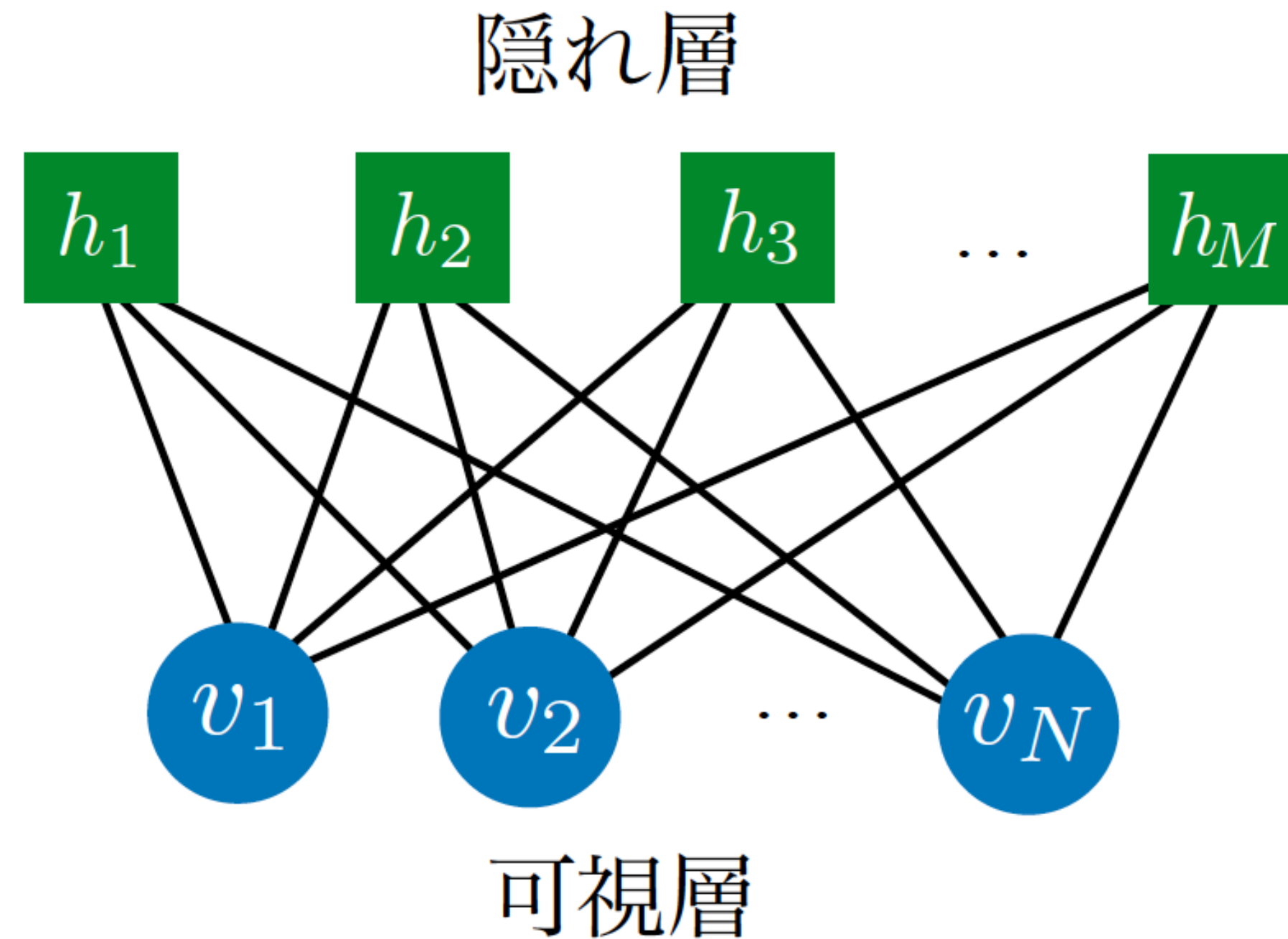
$$\tilde{p}(v) = \sum_h p(v, h)$$

$$\sum_v \tilde{p}(v) = 1$$

補足：周辺分布

$$\tilde{p}(v) = \sum_h p(v, h)$$

v \ h	0,0	0,1	1,0	1,1	Total
0,0	p(0,0; 0,0)	p(0,0; 0,1)	p(0,0; 1,0)	p(0,0; 1,1)	$\tilde{p}(0,0)$
0,1	p(0,1; 0,0)	p(0,1; 0,1)	p(0,1; 1,0)	p(0,1; 1,1)	$\tilde{p}(0,1)$
1,0	p(1,0; 0,0)	p(1,0; 0,1)	p(1,0; 1,0)	p(1,0; 1,1)	$\tilde{p}(1,0)$
1,1	p(1,1; 0,0)	p(1,1; 0,1)	p(1,1; 1,0)	p(1,1; 1,1)	$\tilde{p}(1,1)$



仮想的なエネルギー関数

$$E(v, h) = - \sum_i a_i v_i - \sum_{i,j} W_{ij} v_i h_j - \sum_j b_j h_j$$
$$v \in \{0, 1\}^N \quad h \in \{0, 1\}^M$$

ボルツマン分布

$$p(v, h) = \frac{e^{-E(v, h)}}{Z}$$

$$Z = \sum_{v, h} e^{-E(v, h)}$$

周辺分布

$$\tilde{p}(v) = \sum_h p(v, h)$$

$$\sum_v \tilde{p}(v) = 1$$

- 隠れ層が1層 + 層間の結合のみ（層内の結合なし） → 制限ボルツマンマシン（restricted Boltzmann machine、RBM）
- Mが無限大の極限で任意の確率分布を周辺分布 $\tilde{p}(v)$ によって近似することができる（普遍近似性）

深層ボルツマンマシン

仮想的なエネルギー関数

$$E(v, h, d) = -\sum_i a_i v_i - \sum_{i,j} W_{ij} v_i h_j - \sum_j b_j h_j - \sum_{j,k} W'_{jk} h_j d_k - \sum_k b'_k d_k$$

$$v \in \{0, 1\}^N \quad h \in \{0, 1\}^M \quad d \in \{0, 1\}^{M'}$$

ボルツマン分布

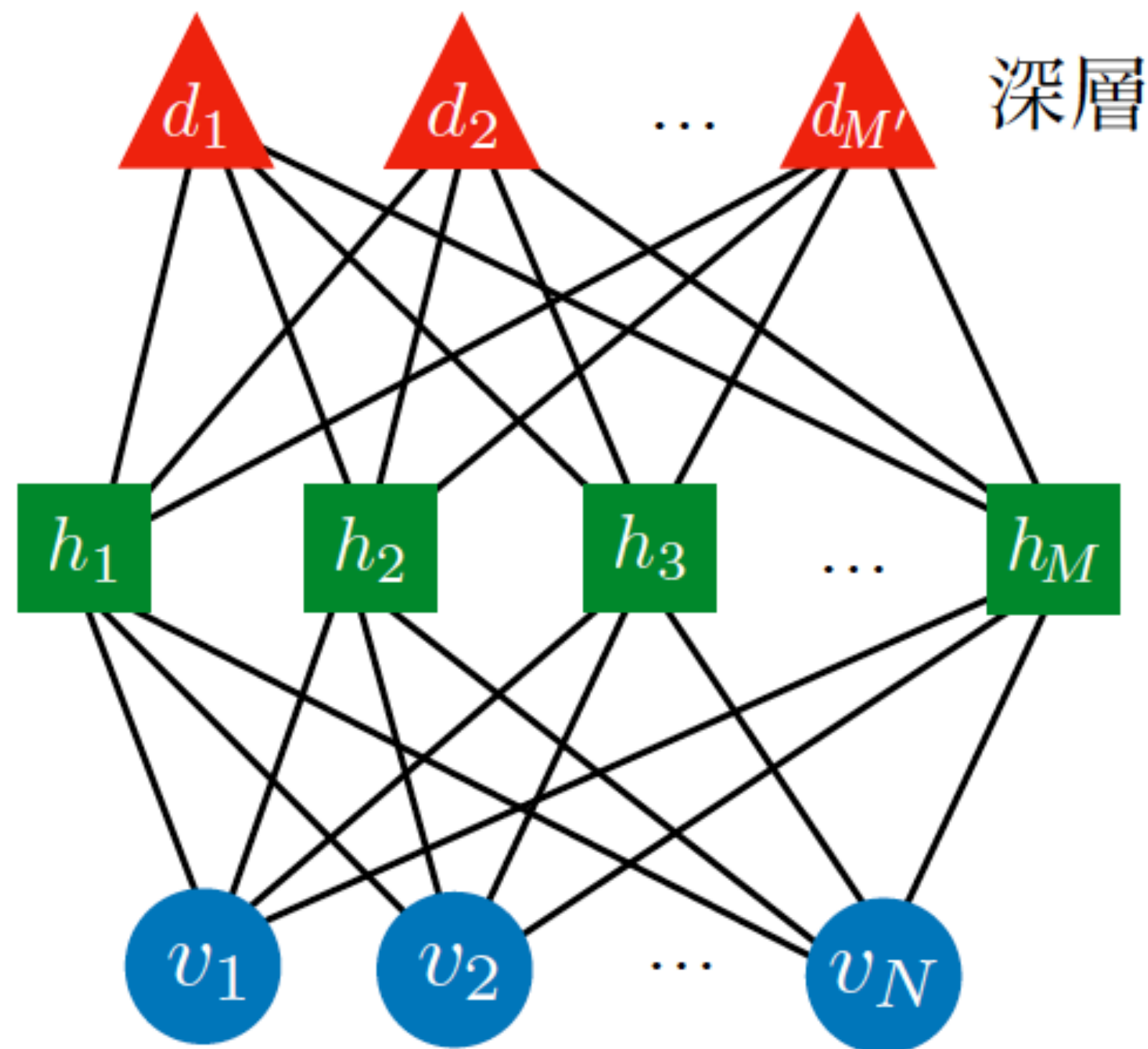
$$p(v, h, d) = \frac{e^{-E(v, h, d)}}{Z}$$

$$Z = \sum_{v, h, d} e^{-E(v, h, d)}$$

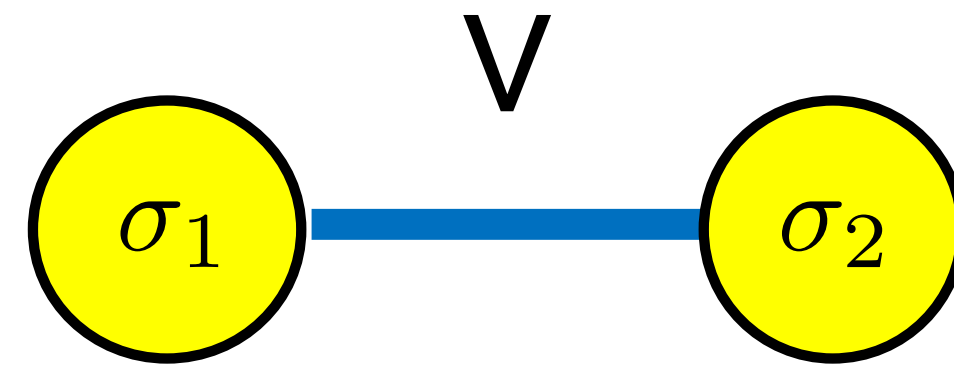
周辺分布

$$\tilde{p}(v) = \sum_{h, d} p(v, h, d)$$

$$\sum_v \tilde{p}(v) = 1$$

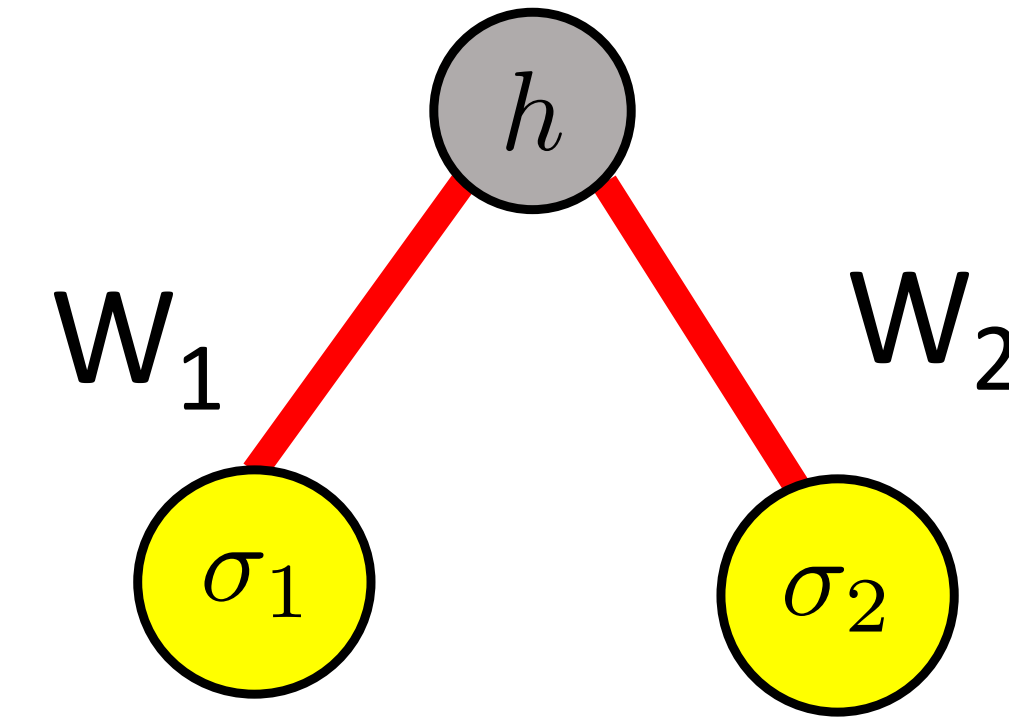


補足：相互作用の分解



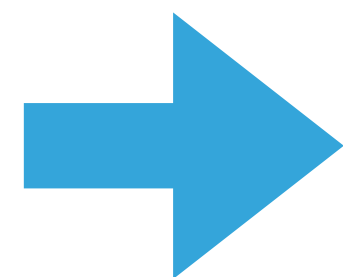
$$C \exp(V \sigma_1 \sigma_2)$$

$$\begin{cases} C e^V & (\sigma_1, \sigma_2) = (1, 1), (-1, -1) \\ C e^{-V} & (\sigma_1, \sigma_2) = (1, -1), (-1, 1) \end{cases}$$



$$\sum_{h=\pm 1} \exp(W_1 \sigma_1 h + W_2 \sigma_2 h) = 2 \cosh(W_1 \sigma_1 + W_2 \sigma_2)$$

$$\begin{cases} 2 \cosh(W_1 + W_2) & (\sigma_1, \sigma_2) = (1, 1), (-1, -1) \\ 2 \cosh(W_1 - W_2) & (\sigma_1, \sigma_2) = (1, -1), (-1, 1) \end{cases}$$



$$C = 2 \exp(|V|) \quad W_1 = \frac{1}{2} \operatorname{arcosh} \left(e^{2|V|} \right) \quad W_2 = \operatorname{sgn}(V) \times W_1$$

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

この分解を使うと一般のボルツマンマシンは深層ボルツマンマシンにマップすることが可能

資料 1 の内容

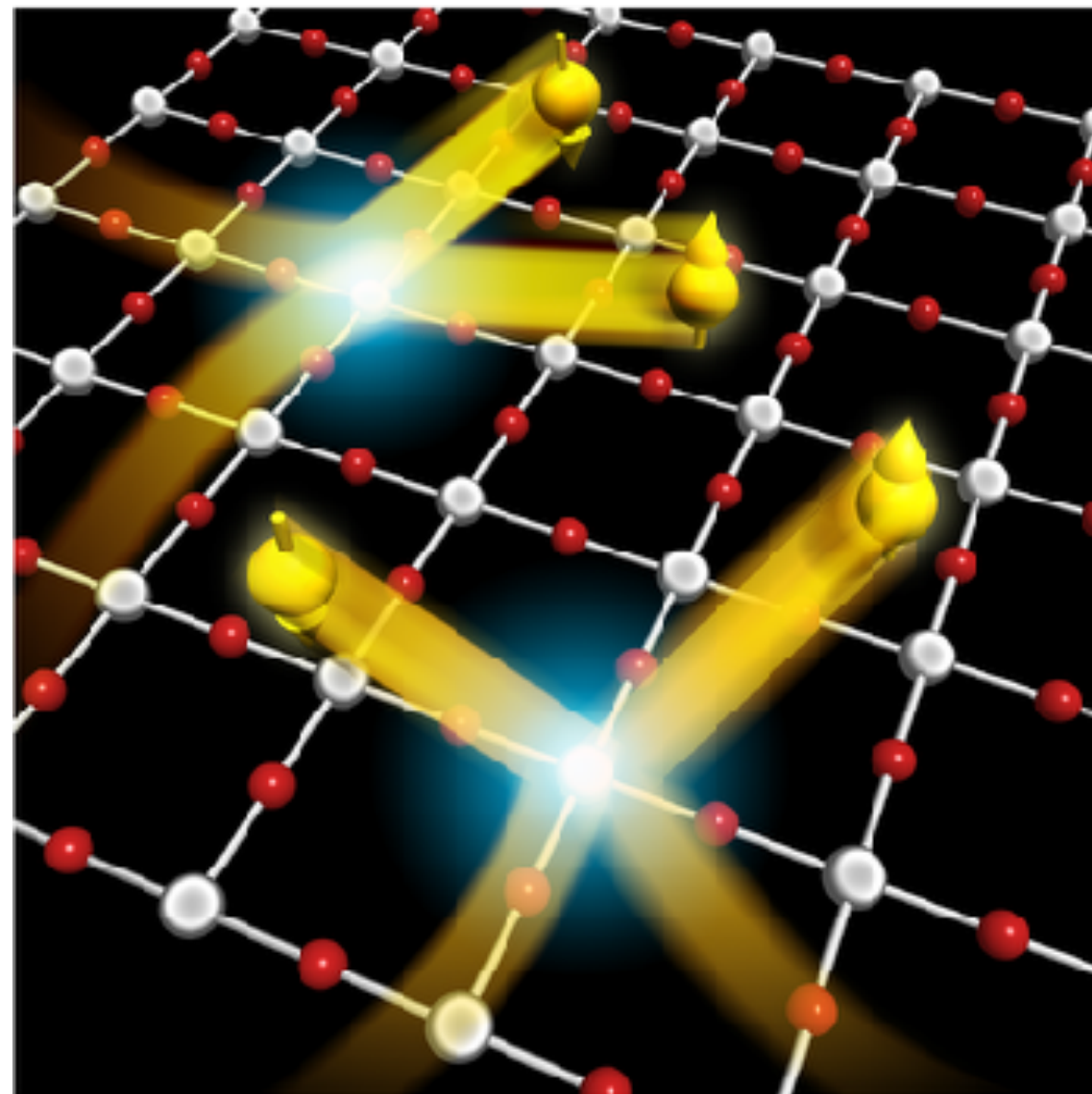
1. ボルツマンマシンの導入

2. (物性物理における) 量子多体問題の導入

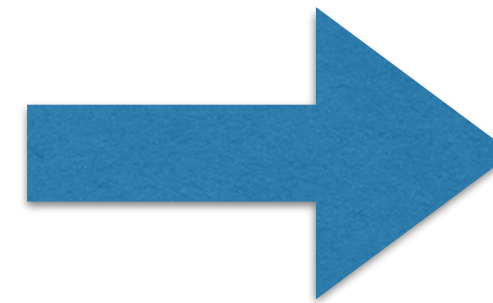
物質中の電子=最も身近な量子多体系

結晶中の相互作用する電子（ミクロ）

最も身近な量子多体系



多体性+量子性



量子多体現象（マクロ）

超伝導

磁性

⋮

結晶中の電子の振る舞いを調べるためのミクロな描像

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_{\text{el}}(\{\mathbf{r}\}, t)}{\partial t} = \left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} - \sum_I \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I|} \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right] \Psi_{\text{el}}(\{\mathbf{r}\}, t)$$

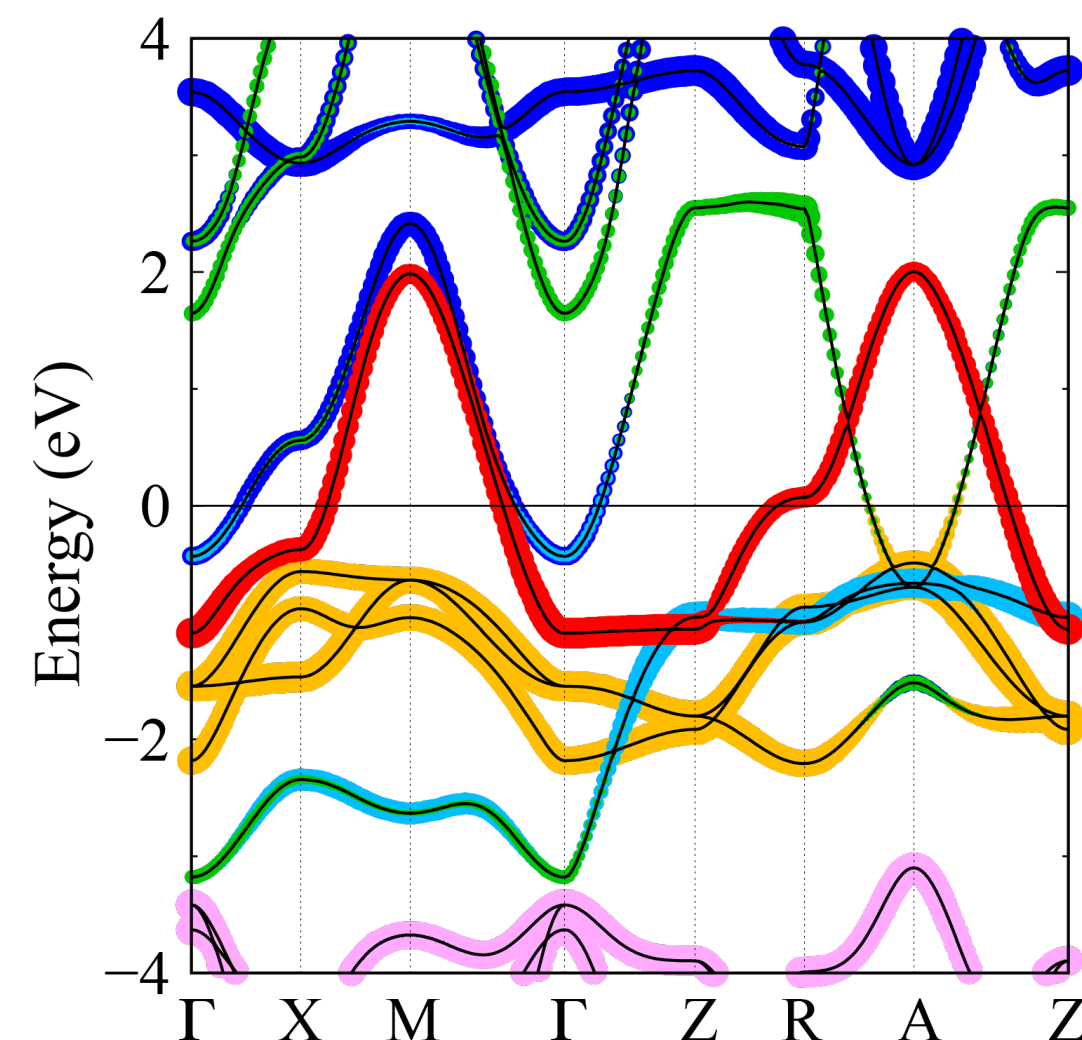
運動エネルギー

原子核からの引力
(結晶構造の情報)

電子間相互作用

バンド構造 (電子が周期ポテンシャルの下結晶中を動き回る)

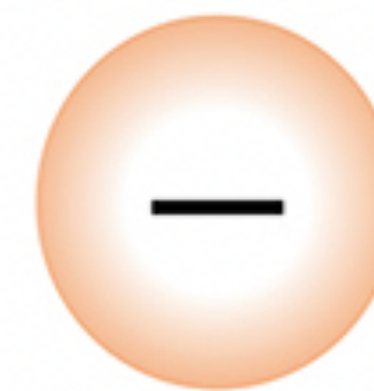
タイトバインディングハミルトニアン



電子が持つ自由度間の相互作用

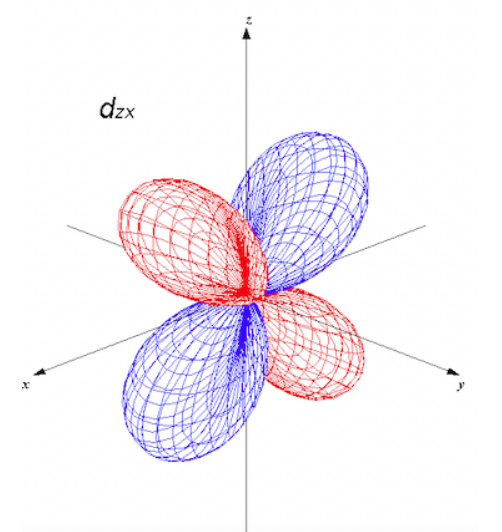
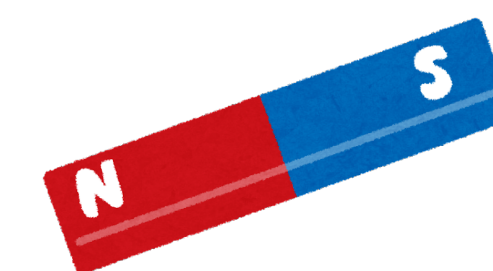
電荷間クーロン斥力、磁気相互作用、...

+



電荷

スピン



軌道 (電子の波の形)

この描像に従って数値シミュレーションをする (特に相互作用の取り扱いが難しい)

ミクロな基礎方程式を解く

物性物理における量子多体問題＝多電子系のシュレーディンガー方程式の解析

$$\left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} - \sum_I \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I|} \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = E \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$$

量子多体ハミルトニアン

波動関数（量子状態を表す関数）

波動関数は複素数ベクトルで表現できる。 $(r_1, \dots, r_N)$ 成分に対するベクトルの値が $\psi(r_1, \dots, r_N)$

実空間のメッシュ点が10点しかなくても、 $N=15$ の時点でその次元は 10^{15} → PBオーダーのメモリ

厳密に解くことはできないので、精度の良い近似を行うことのできる数値手法が必須

工夫①：電子がフェルミオンであることに着目、エネルギーの階層性を用いて自由度を削減→有効ハミルトニアン

工夫②：有効ハミルトニアンをできるだけ正確に解くためのソルバーを開発する→機械学習/人工ニューラルネットワーク

工夫その①：重要な自由度のみに着目した有効ハミルトニアン

第一原理ハミルトニアン

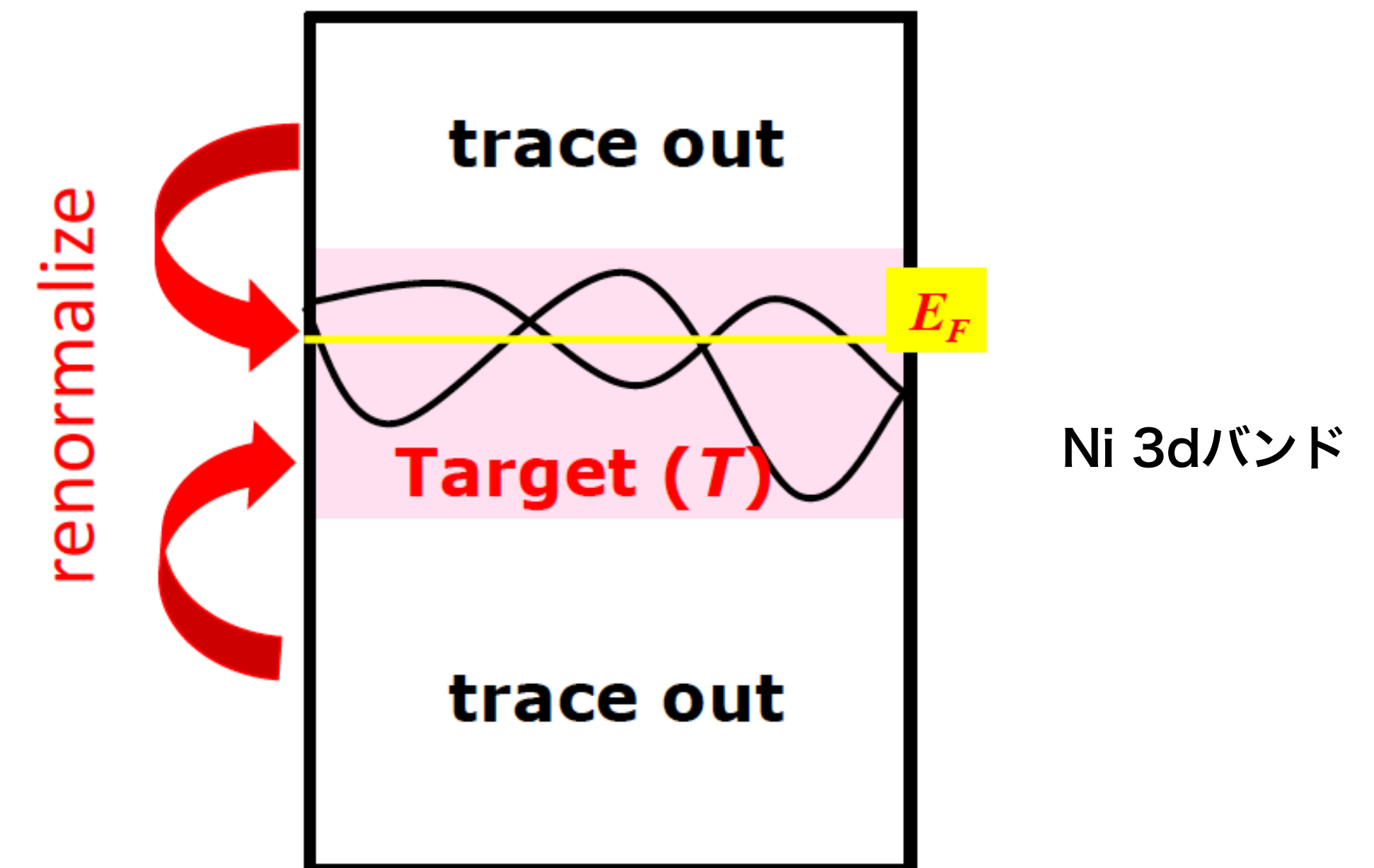
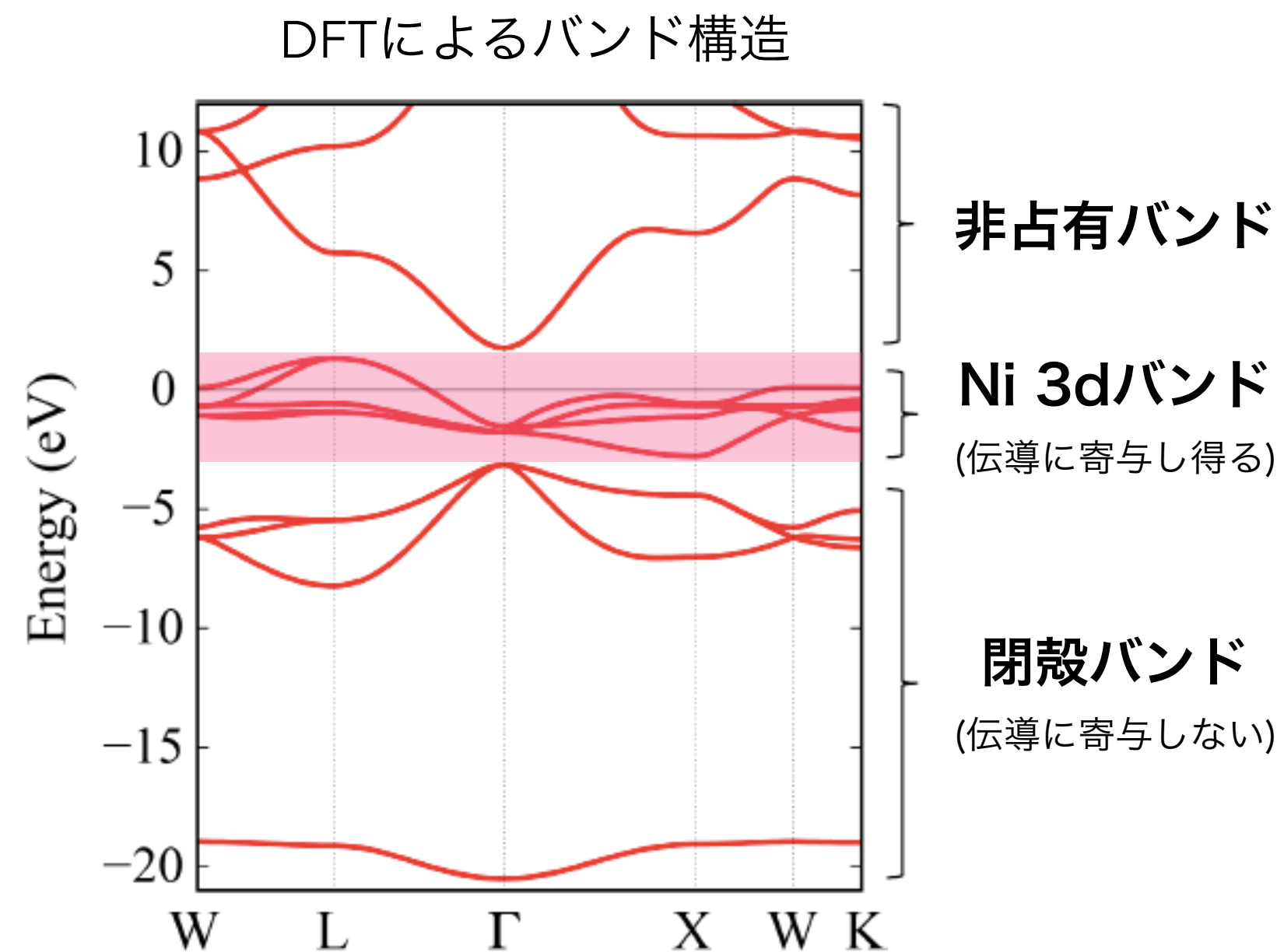
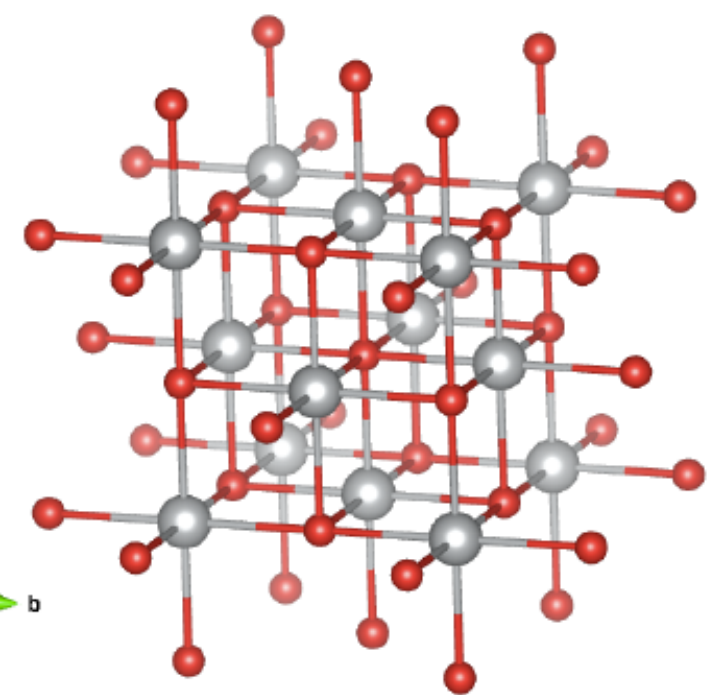
$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} - \sum_I \frac{Z_I e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I|} \right) + \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

有効ハミルトニアン

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_{ijkl} \sum_{\sigma\rho} U_{ijkl} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\rho}^{\dagger} c_{l\rho} c_{k\sigma}$$

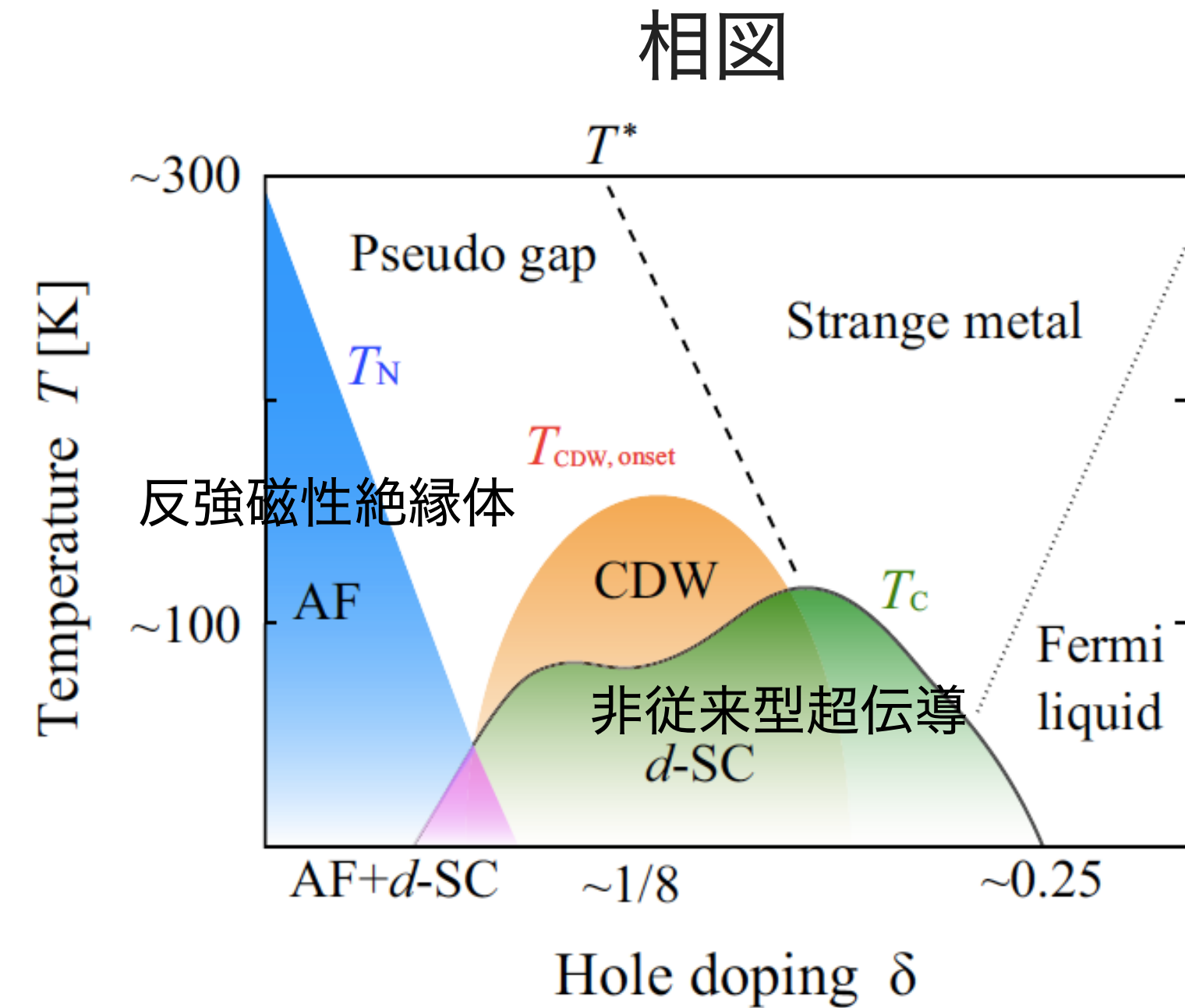
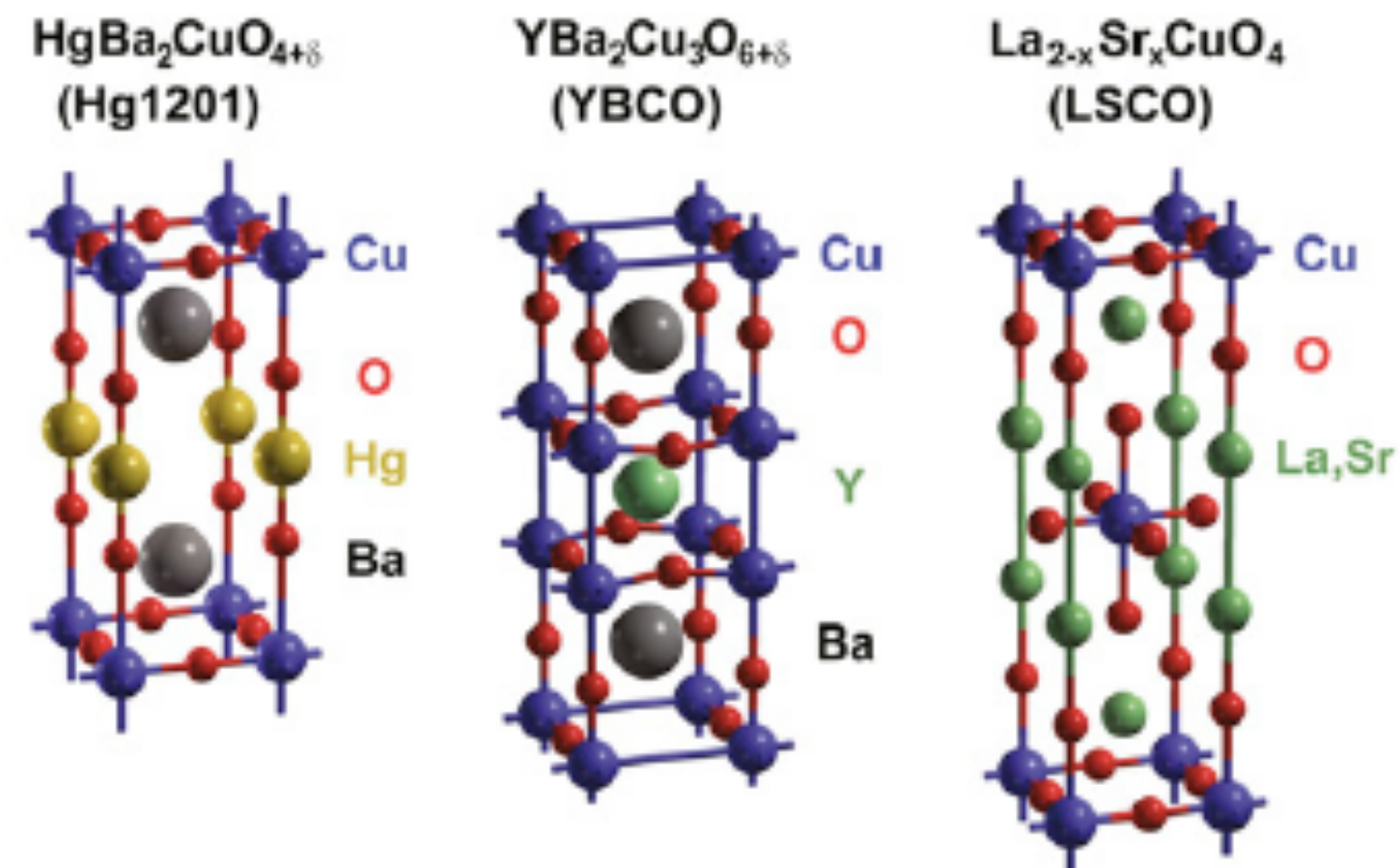
例：酸化ニッケル(II) NiO

Ni²⁺ → [Ar] 3d⁸
O²⁻ → 1s²2s²2p⁶ (閉殻)

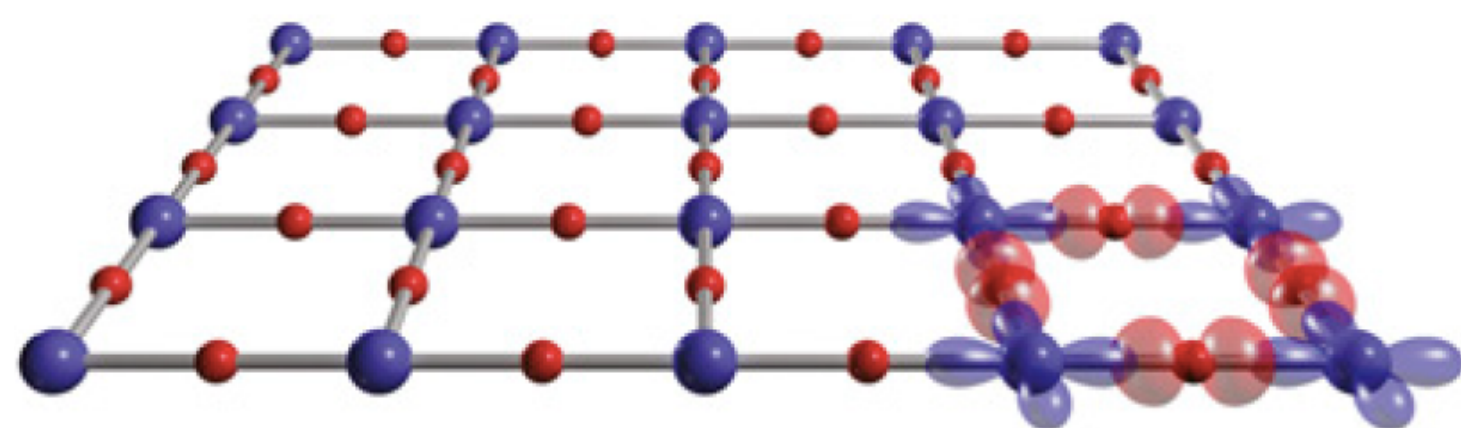


有効模型の例 1 : ハバード模型

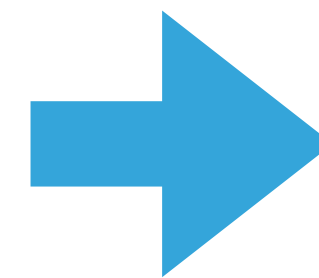
銅酸化物高温超伝導体



CuO₂面上の電子（フェルミ準位近傍のx²-y²バンドの電子）の運動

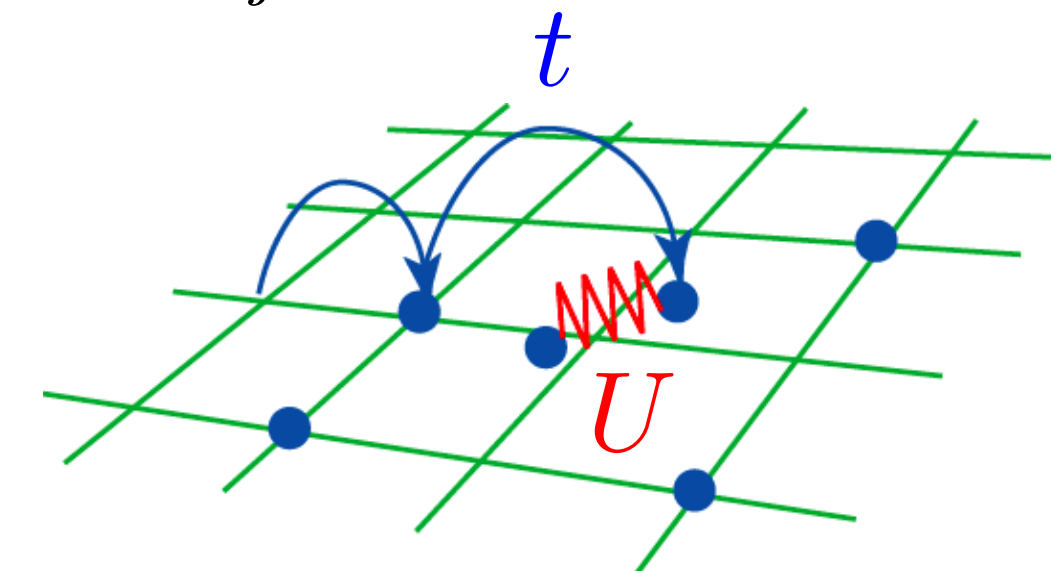


有効ハミルトニアン



2次元正方格子上的ハバード模型

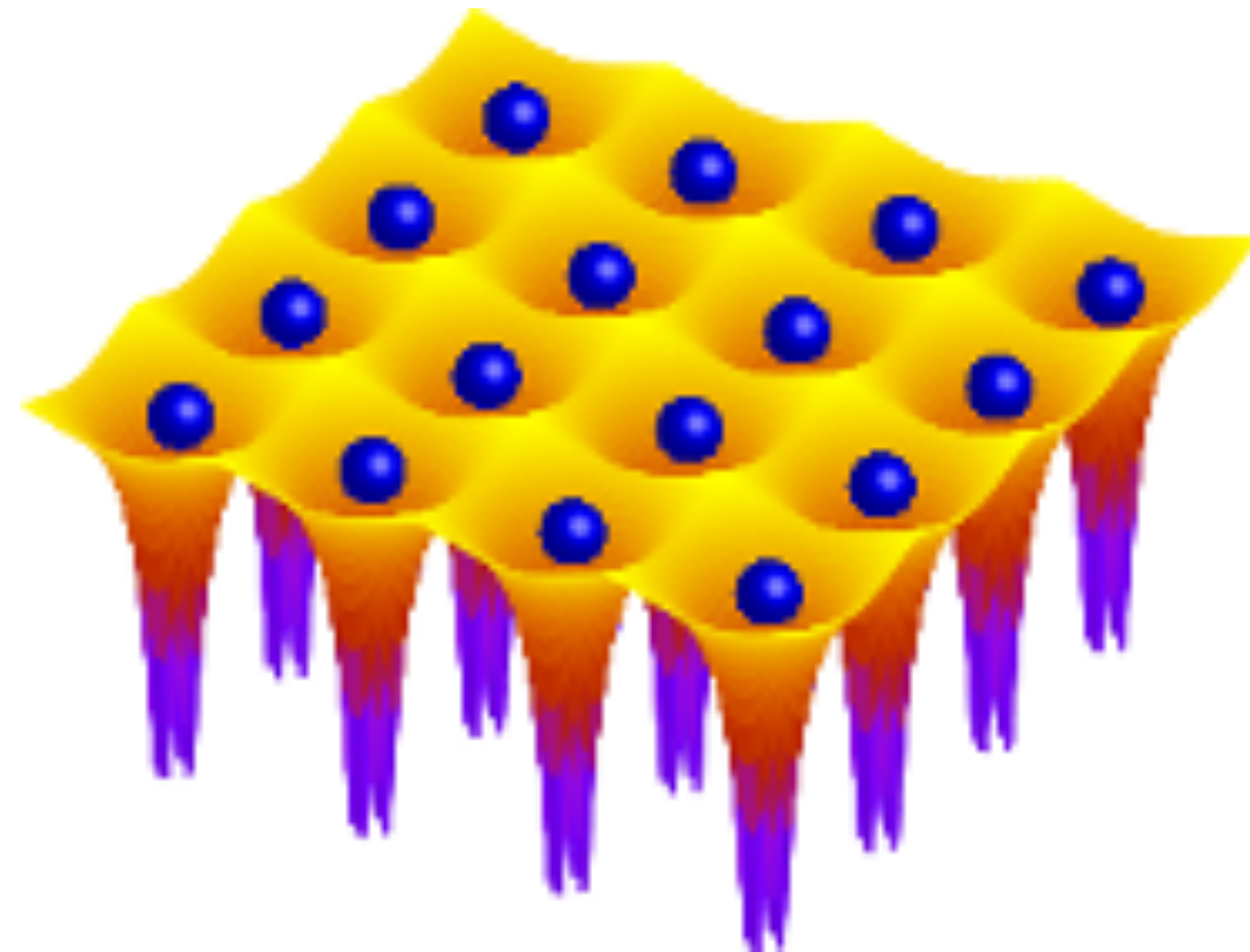
$$\hat{\mathcal{H}} = - \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$



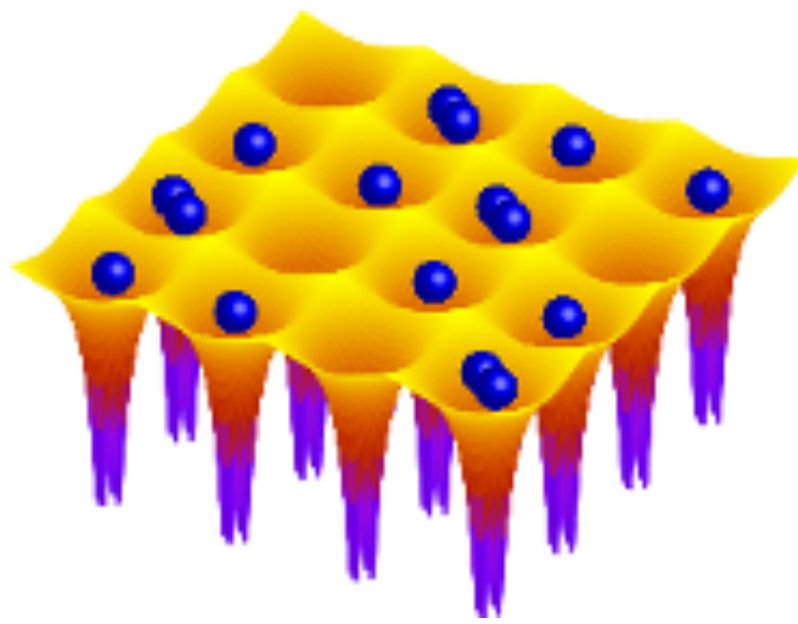
モット絶縁体の有効ハミルトニアン：量子スピン模型

モット絶縁体

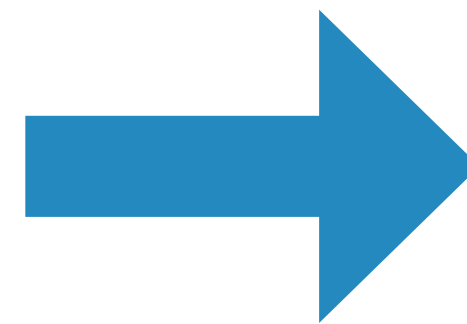
例えば銅酸化物高温超伝導体の母物質



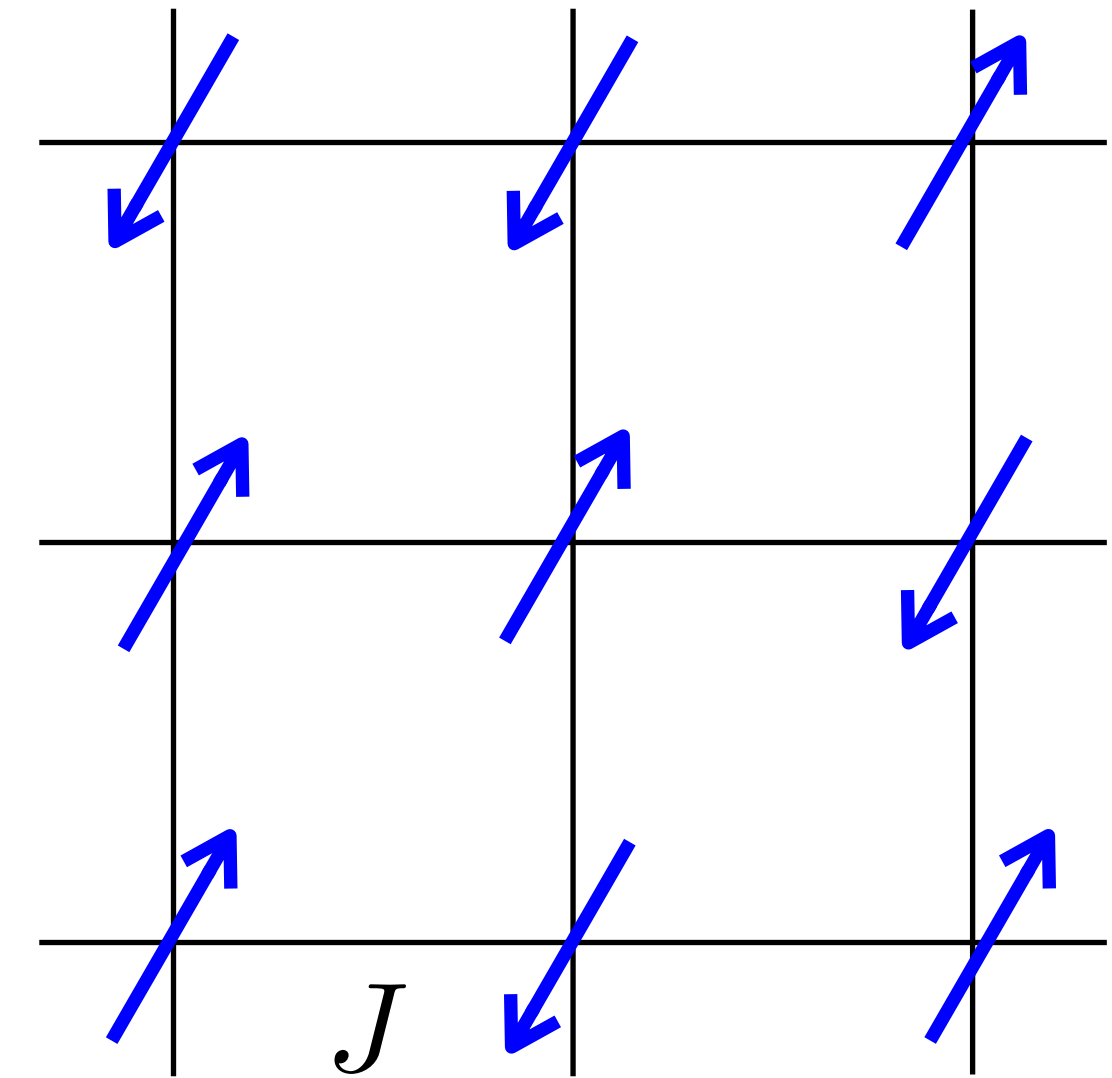
cf. 金属



有効ハミルトニアン



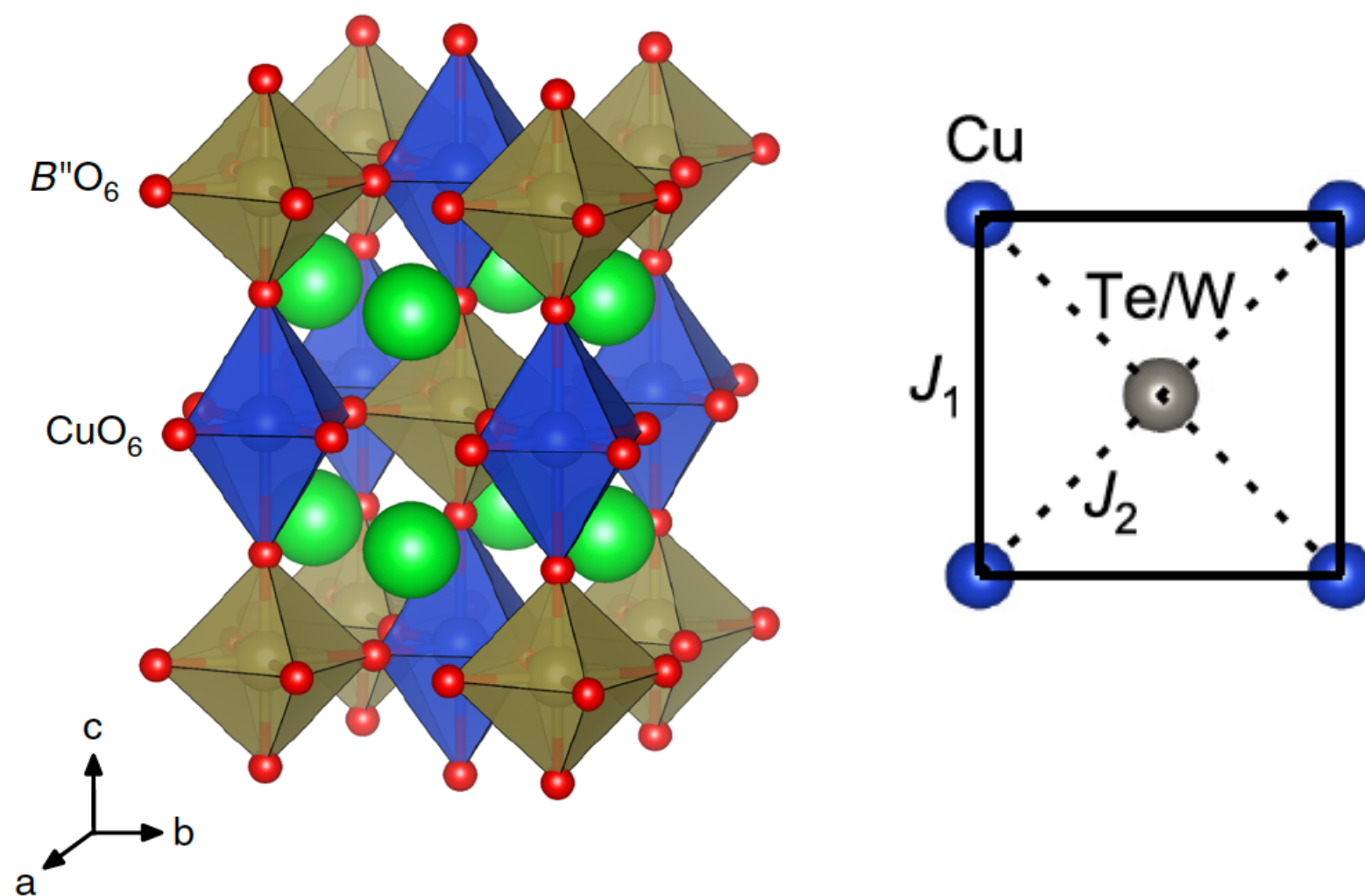
量子スピン模型（ハイゼンベルク模型）



$$\hat{\mathcal{H}} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \frac{J}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i^x \sigma_j^x + \sigma_i^y \sigma_j^y + \sigma_i^z \sigma_j^z)$$

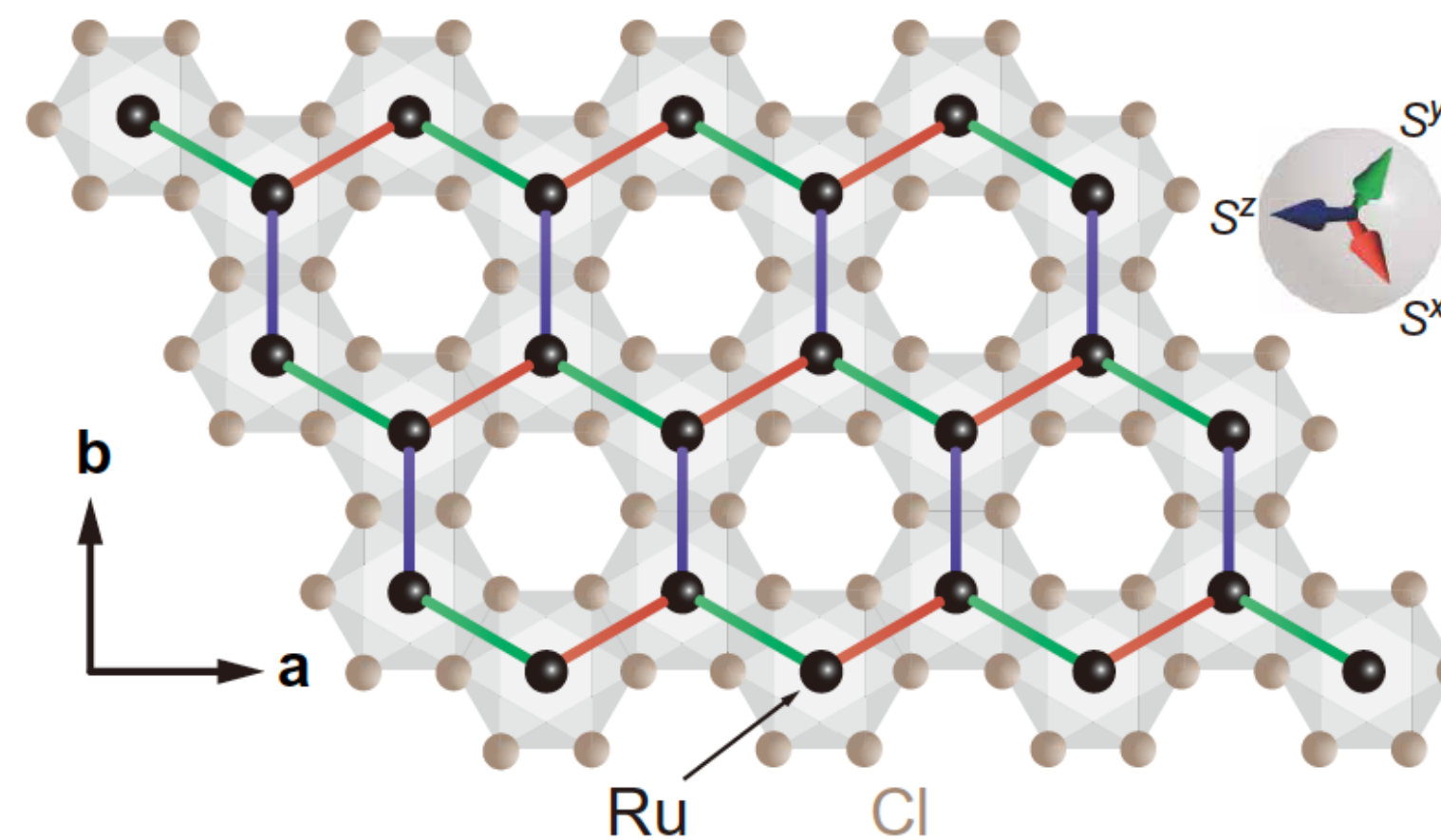
様々な格子上の量子スピン模型

正方格子



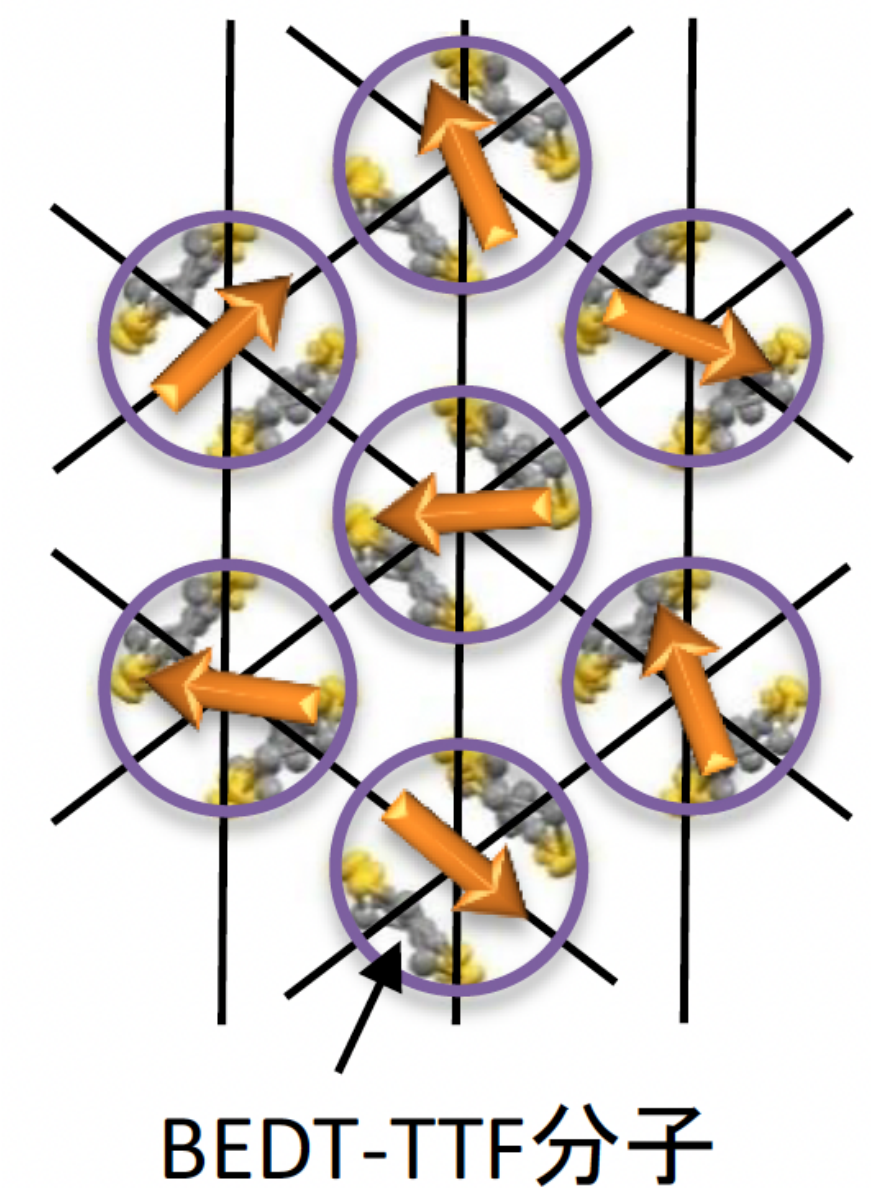
O. Mustonen et al, Nat. Commun. (2018); Phys. Rev. B (2018)

ハニカム格子



Imamura et al., Sci. Adv. **10**, eadk3539 (2024)

三角格子



<https://www.nims.go.jp/press/2018/04/201804230.html>

有効ハミルトニアンは物質の組成や構造に依存して様々存在

→ 正確に解くことができれば物質の性質を予言可能！

有効ハミルトニアン解析

量子多体問題

$$\mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

有効ハミルトニアン

(PC上では複素数の膨大な次元の行列)

量子状態

(PC上では複素数の膨大な次元のベクトル)

有名な量子状態近似の例

BCS波動関数 (1972年ノーベル賞)

$$|\psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle$$

従来型超伝導

ラフリン波動関数 (1998年ノーベル賞)

$$\psi_{\text{Laughlin}} = \prod_{i>j} (z_i - z_j)^m \exp \left[-\frac{1}{4l_B^2} \sum_i |z_i|^2 \right]$$

分数量子ホール効果

...

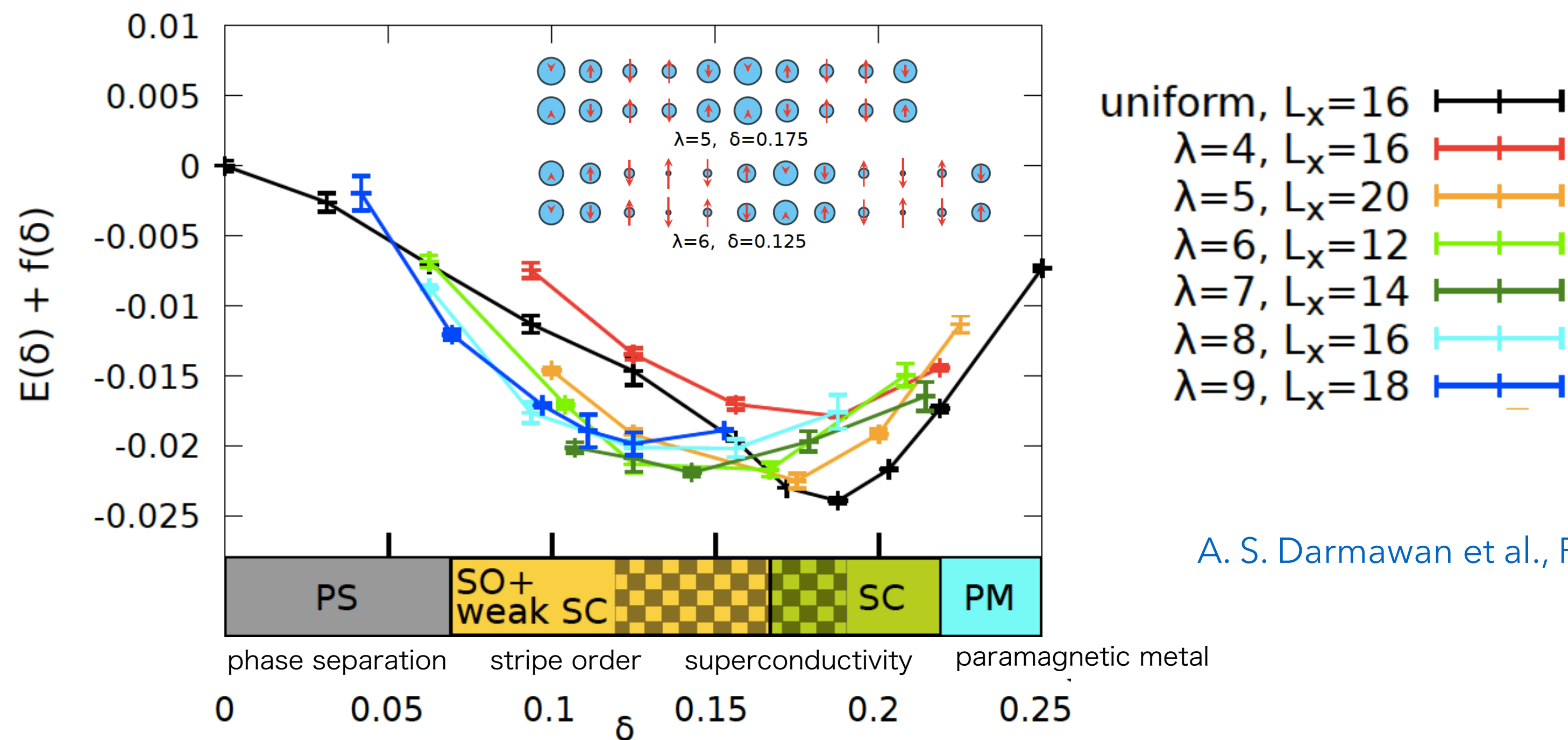
量子状態に対する優れた洞察が物理現象の解明に革新をもたらしてきた

工夫その②：なぜ機械学習？

量子多体物理は超難問（だけどとても面白い）

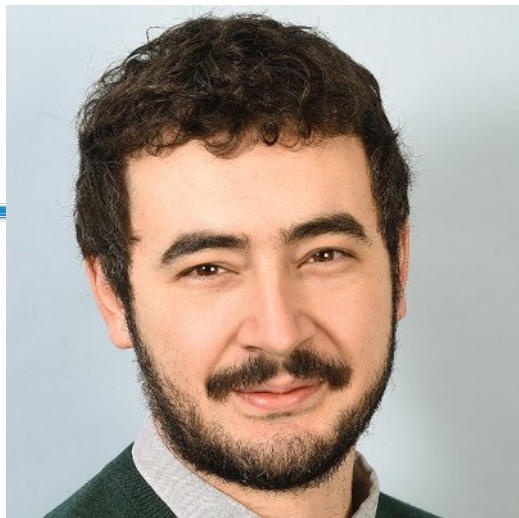
- 量子性と多体性の絡み合いにより1つの電子の運動とは質的に異なる新たな物理法則が創発
- 異なる量子相に対応する量子状態が小さいエネルギースケールの中で競合する

例：2次元正方格子上的ハバード模型($U/t=10$)



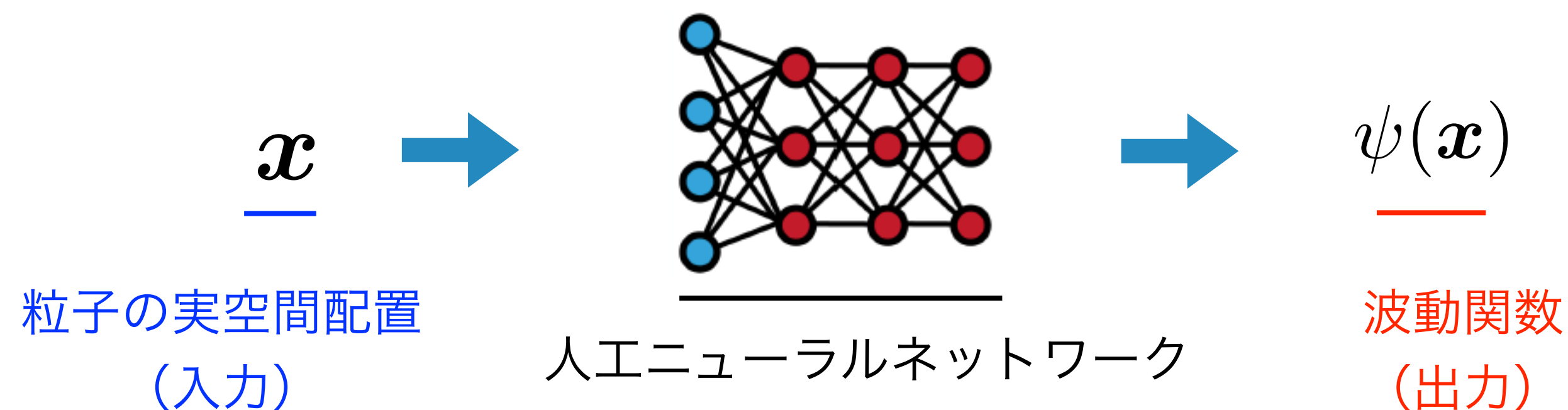
A. S. Darmawan et al., Phys. Rev. B **98**, 205132 (2018)

量子多体問題に対する人工ニューラルネットワーク手法



人工ニューラルネットワークを用いた量子状態表現 (2017年～) [Carleo and Troyer Science 355, 602 \(2017\)](#)

非自明な量子もつれ（膨大な数の多粒子配置の量子力学的な重ね合わせ）を学習（コスト関数 = エネルギー）



※ 必要なメモリはニューラルネットワークのパラメータ数だけ

- ▶ 物理洞察に頼っていた波動関数の構築を機械学習による構築に切り替える
- ▶ 人工ニューラルネットワークの柔軟な関数表現能力をフル活用

人工ニューラルネットワーク手法が取り組むべき問題：実験の立場から



東京大学大学院理学系研究科
高木英典教授 最終講義

「物質中の電子が示す
多彩な顔」

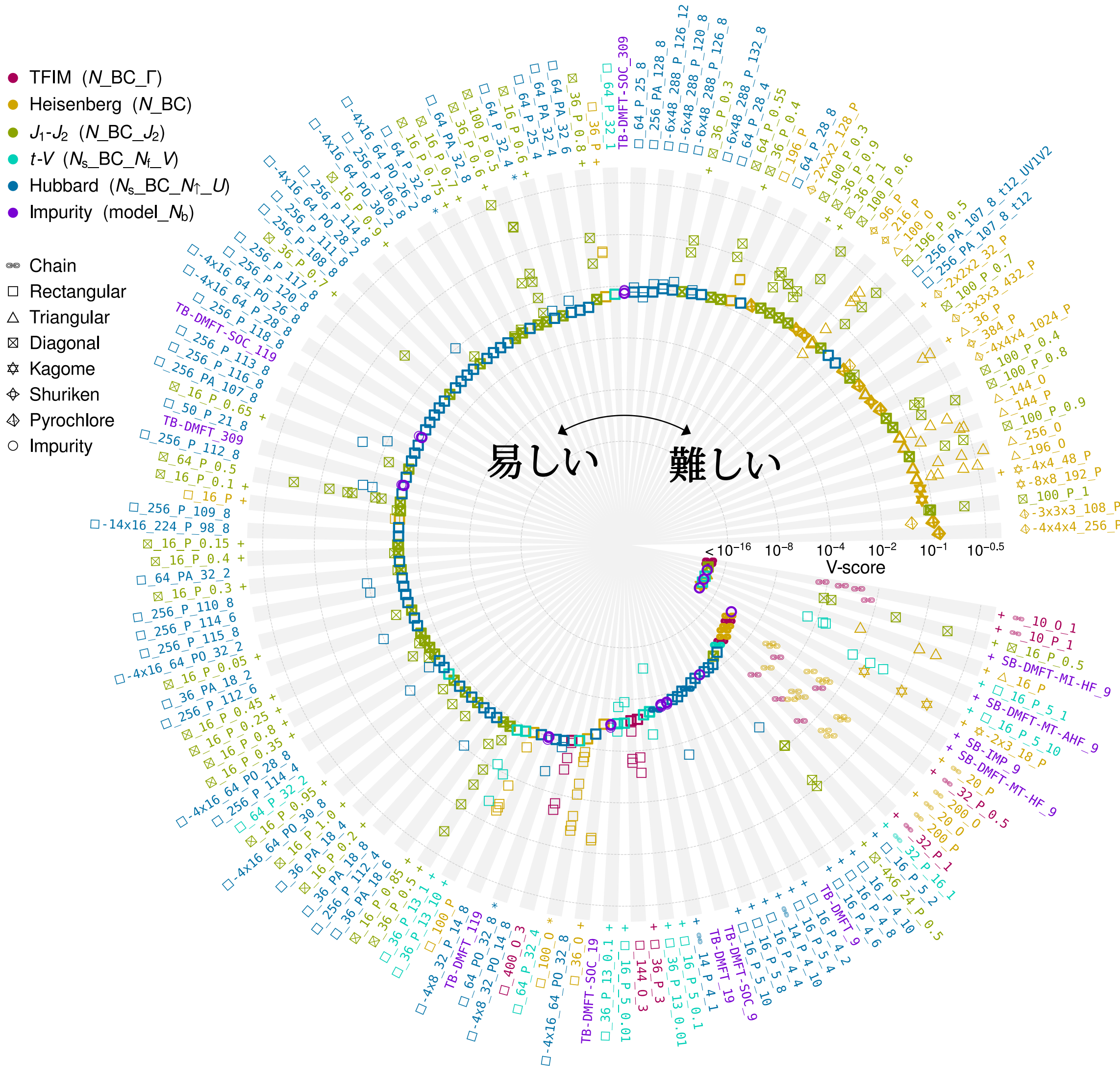


2025/3/11 15:00-

人工ニューラルネットワーク手法が取り組むべき問題：数値解析の立場から

物性物理の様々な量子多体問題に対する数値解析のパフォーマンス

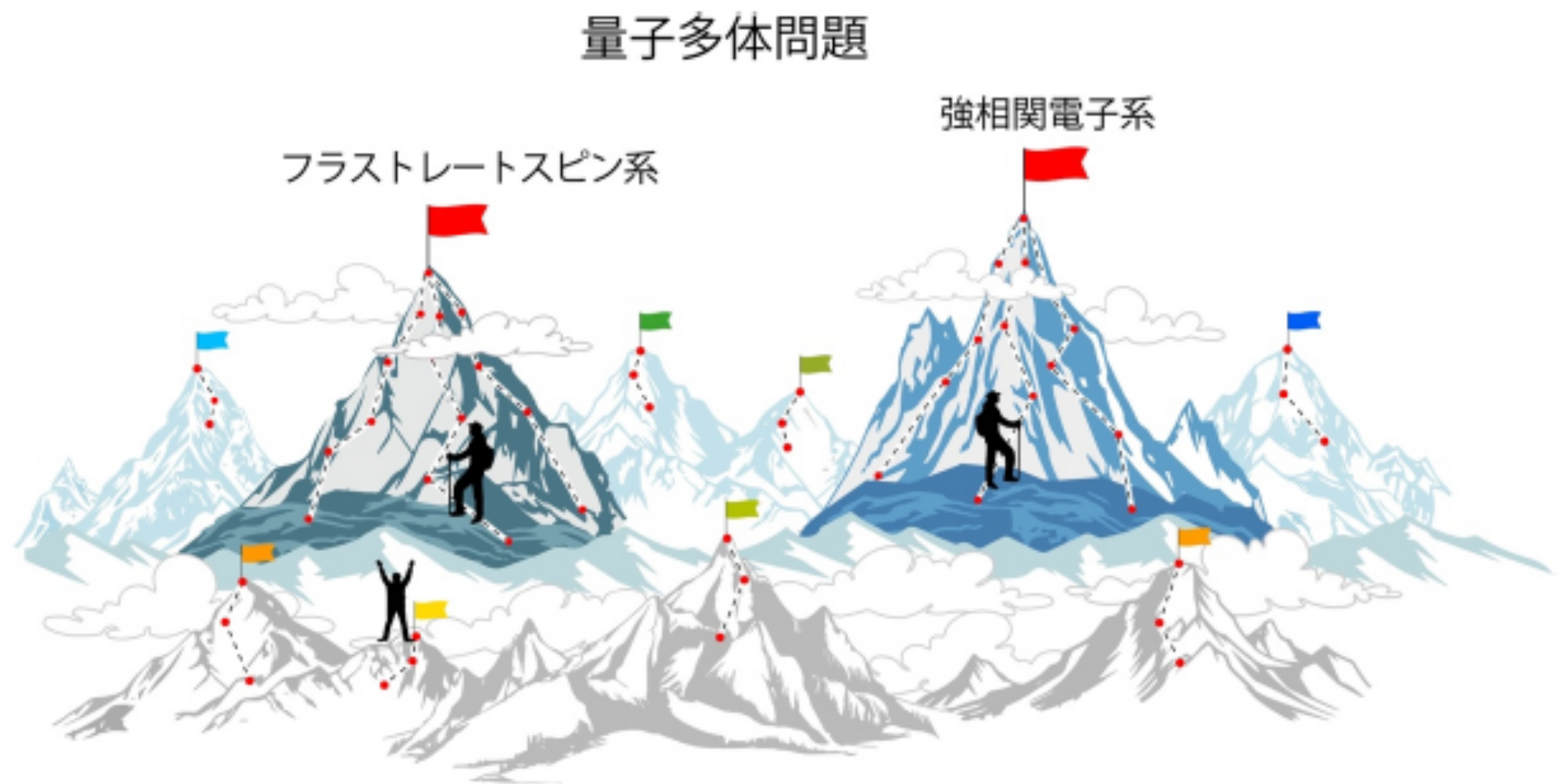
(円の中心に近いほどパフォーマンスが良い)



物性物理においては

強相関遍歴電子系

幾何学的フラストレーションのある量子スピン系



D. Wu et al., Science **386**, 296 (2024)