

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

資料 3 の内容

1. 制限ボルツマンマシンを用いた変分法の進展

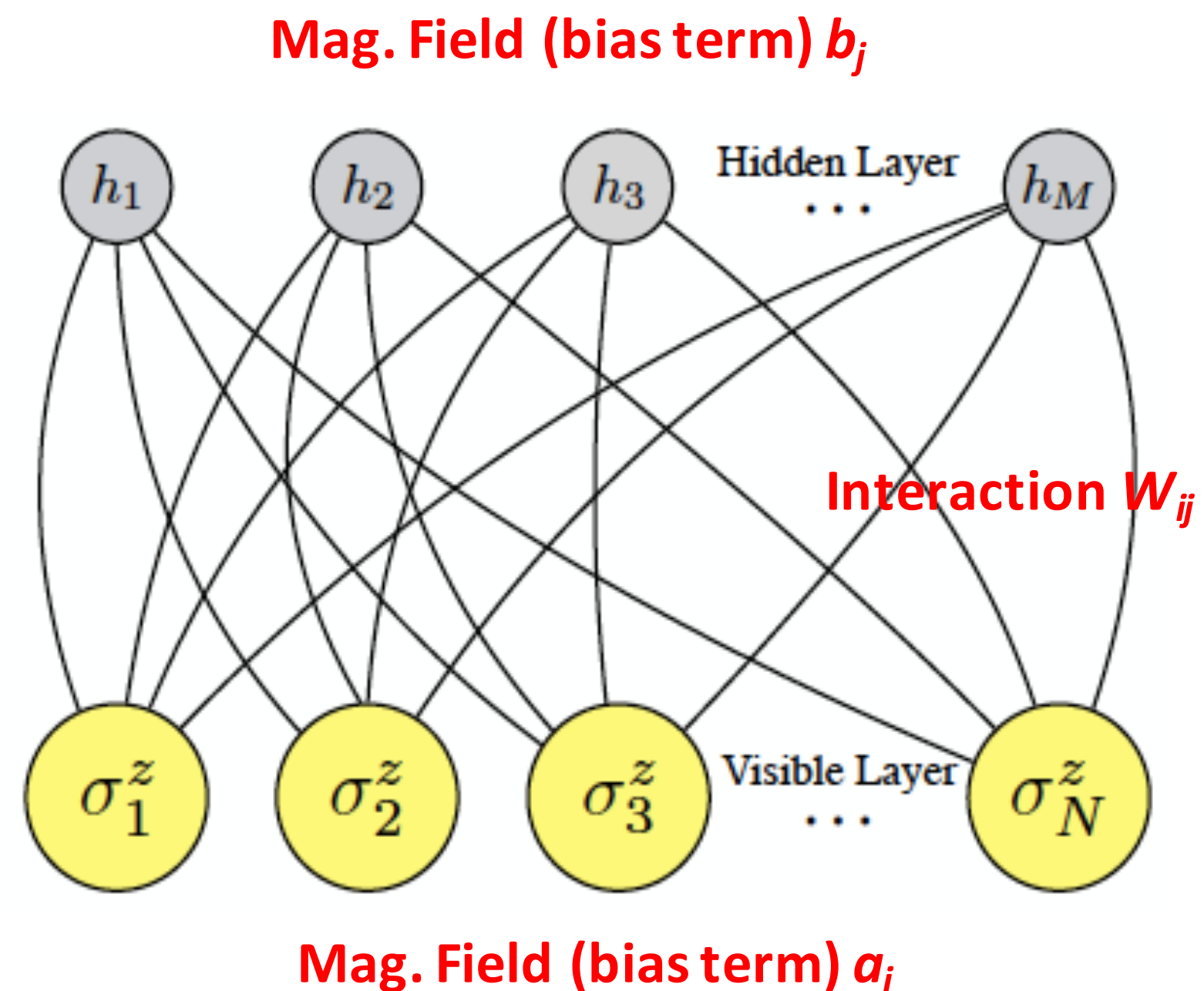
→ 量子状態を人工ニューラルネットワークに数值的・近似的に埋め込み

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

→ 量子状態を人工ニューラルネットワークに解析的に埋め込み

3. （おまけ）量子回路状態を表す深層ボルツマンマシンの解析的な構築

→ 2.と同様のアイデアを用いる



RBM (restricted Boltzmann machine) 波動関数

$$\psi_{\theta}(\sigma) = \sum_h \exp \left(\underbrace{\sum_i a_i \sigma_i^z + \sum_{i,j} W_{ij} \sigma_i^z h_j + \sum_j b_j h_j}_{e^{-E_{\text{RBM}}(\sigma, h)} \text{ (Boltzmann weight)}} \right)$$

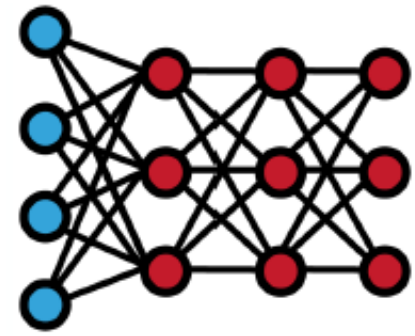
$\sigma = (\sigma_1^z, \sigma_2^z, \dots, \sigma_N^z)$: スピン配置

$h_j = \pm 1$: 隠れスピン

- 基底状態の学習：エネルギーを損失関数とするRBMパラメータの最適化
- 隠れスピンとの結合を媒介として物理スピン間の量子相関が表現される
- 隠れスピンの数が無限大の極限で量子状態を任意の精度で表現可能（普遍近似）

$$\psi_{\theta}(\sigma) = \exp \left(\sum_i a_i \sigma_i^z \right) \times \prod_j 2 \cosh \left(b_j + \sum_i W_{ij} \sigma_i^z \right)$$

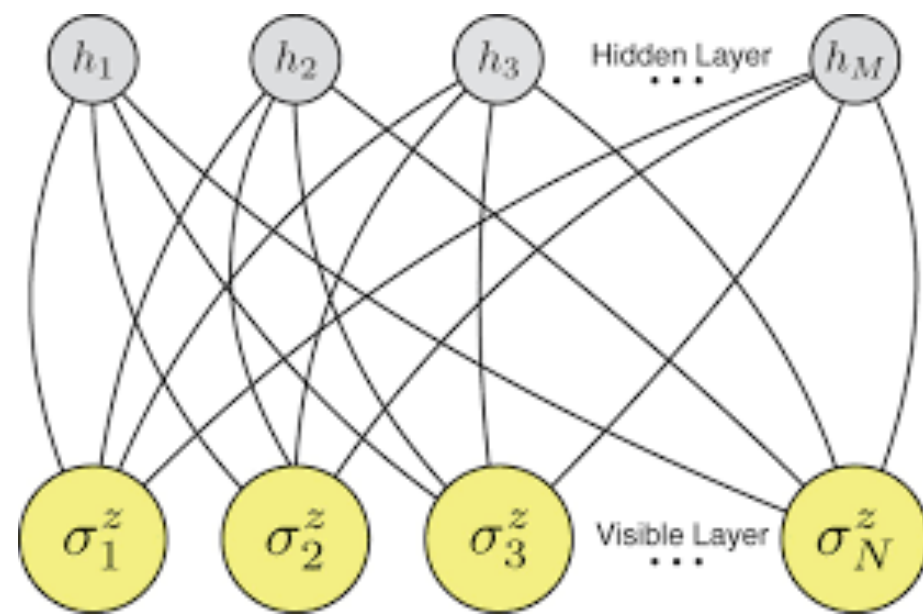
人工ニューラルネットワークとテンソルネットワーク



ニューラルネットワーク

脳の生体ニューロンを模したユニットから構成される数理モデル

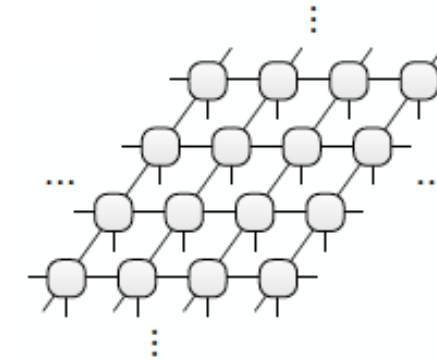
例：制限ボルツマンマシン



$$\psi_{\theta}(\sigma) = \exp\left(\sum_i a_i \sigma_i^z\right) \times \prod_j 2 \cosh\left(b_j + \sum_i W_{ij} \sigma_i^z\right)$$

隠れ自由度の数が無限の極限で万能近似性能

体積則のエンタングルメント・エントロピーを持つ状態も表現可能



テンソルネットワーク

多数のテンソルからなるテンソル積の縮約で物理量を表現

例：行列積状態（DMRGで使用される）



$$\psi_{\theta}(\sigma) = \text{Tr}\left(M_1^{(\sigma_1^z)} M_2^{(\sigma_2^z)} \cdots M_N^{(\sigma_N^z)}\right)$$

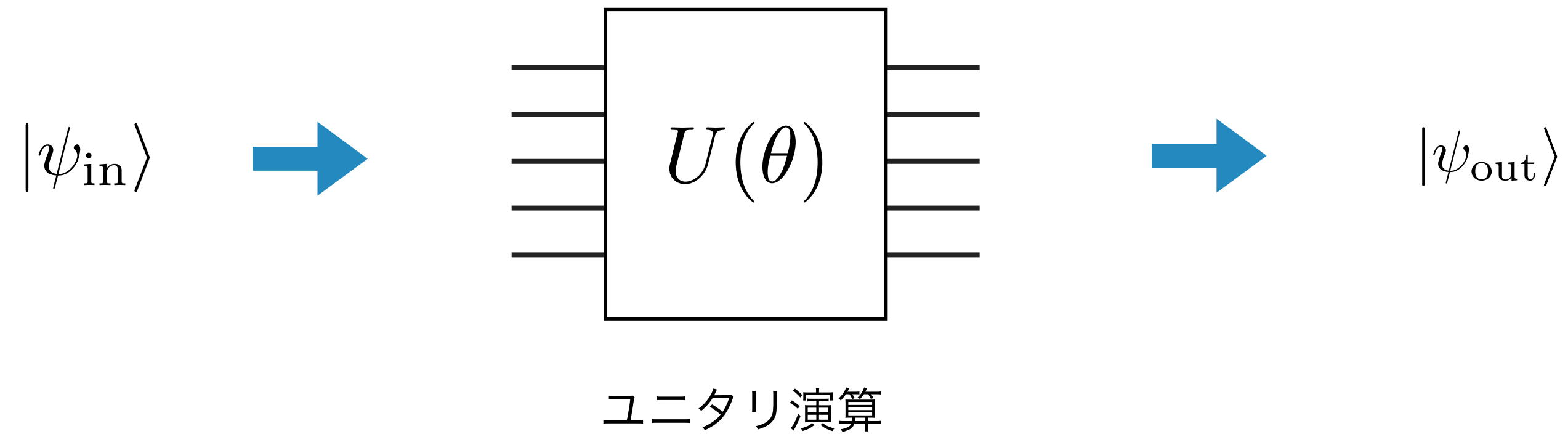
ボンド次元が無限の極限で万能近似性能

表面則のエンタングルメント・エントロピーを持つ状態に特化

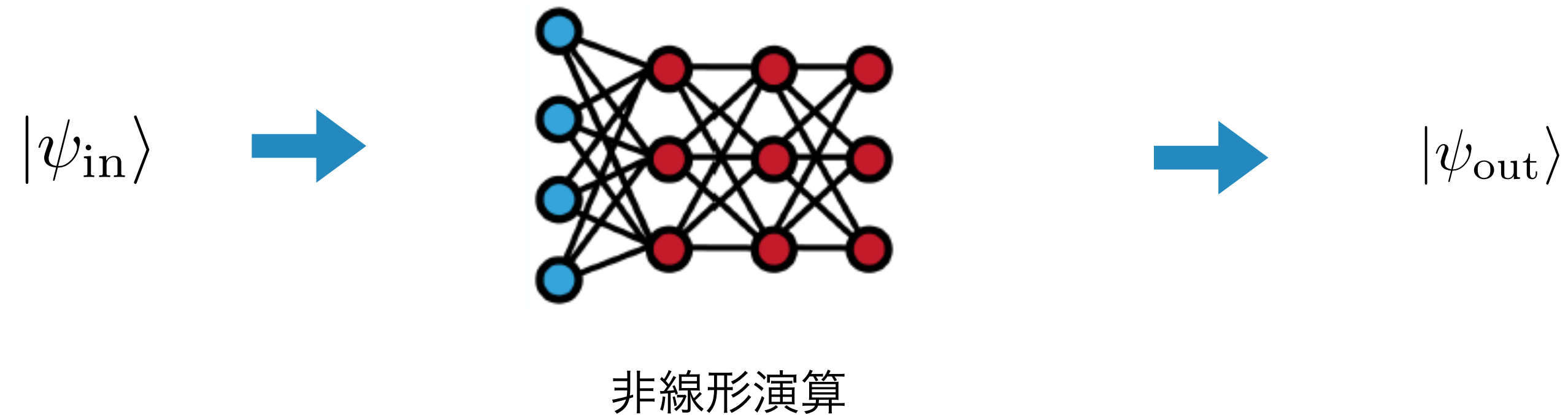
両者ともに系統的改善性があり、両者は相補的

変分手法：量子アルゴリズムと古典アルゴリズム

☑ 変分量子固有値ソルバー（VQE）：変分量子回路と古典コンピュータを組み合わせた変分手法



☑ 人工ニューラルネットワーク手法：古典計算機上で量子相関を記述



ターゲットは何か？Vスコア

現状：量子多体問題の数値解析に関して、計算機の種類もアルゴリズムも多様化、解くべき問題も様々

→ 数値手法間で性能比較、有効ハミルトニアン間で難しさ、を統一的に比較できる数値指標（Vスコア）の提唱

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

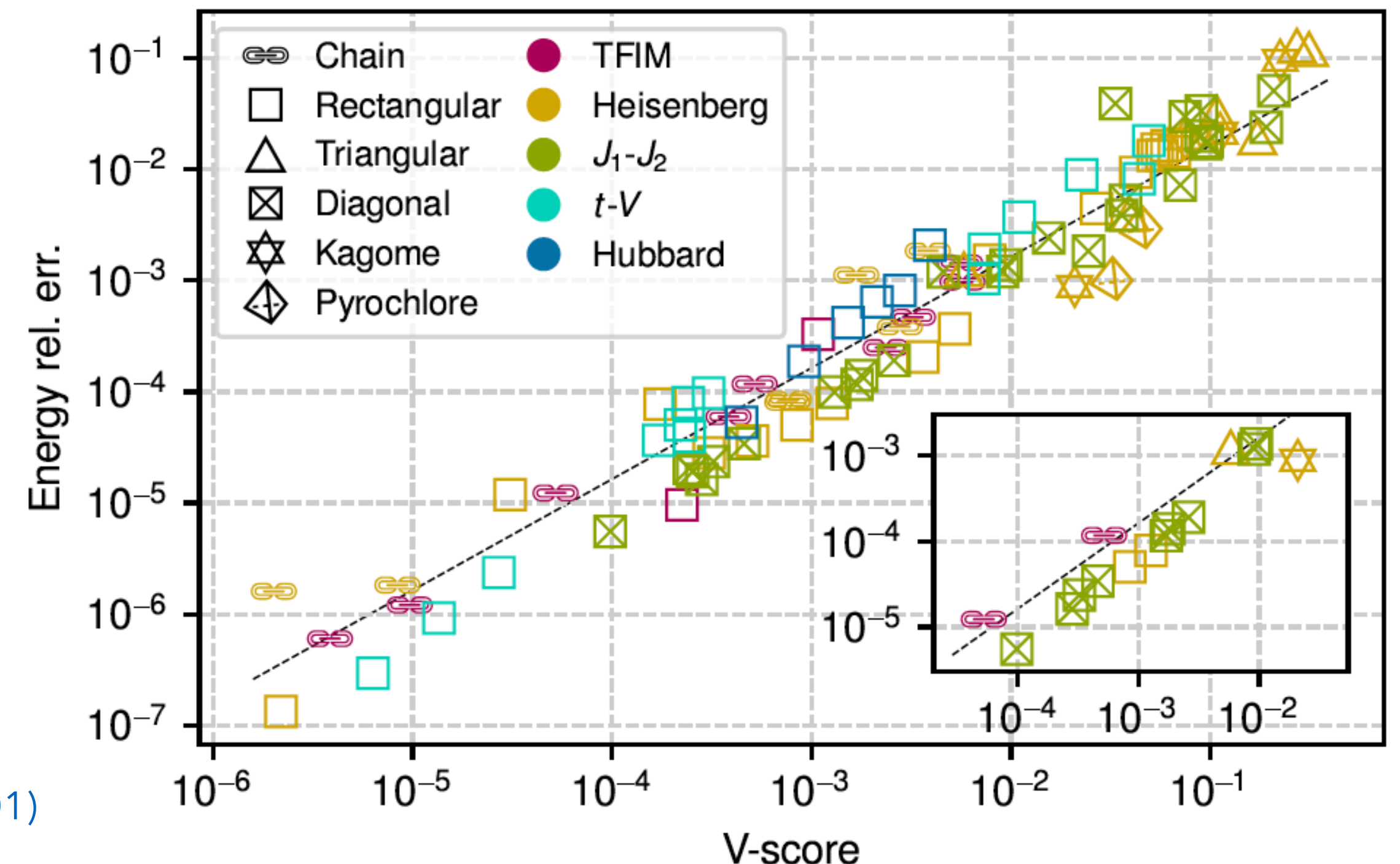
統一的指標：Vスコア

$$\text{V-score} := \frac{N \text{Var } E}{(E - E_{\infty})^2}$$

変分エネルギー 無限温度におけるエネルギー

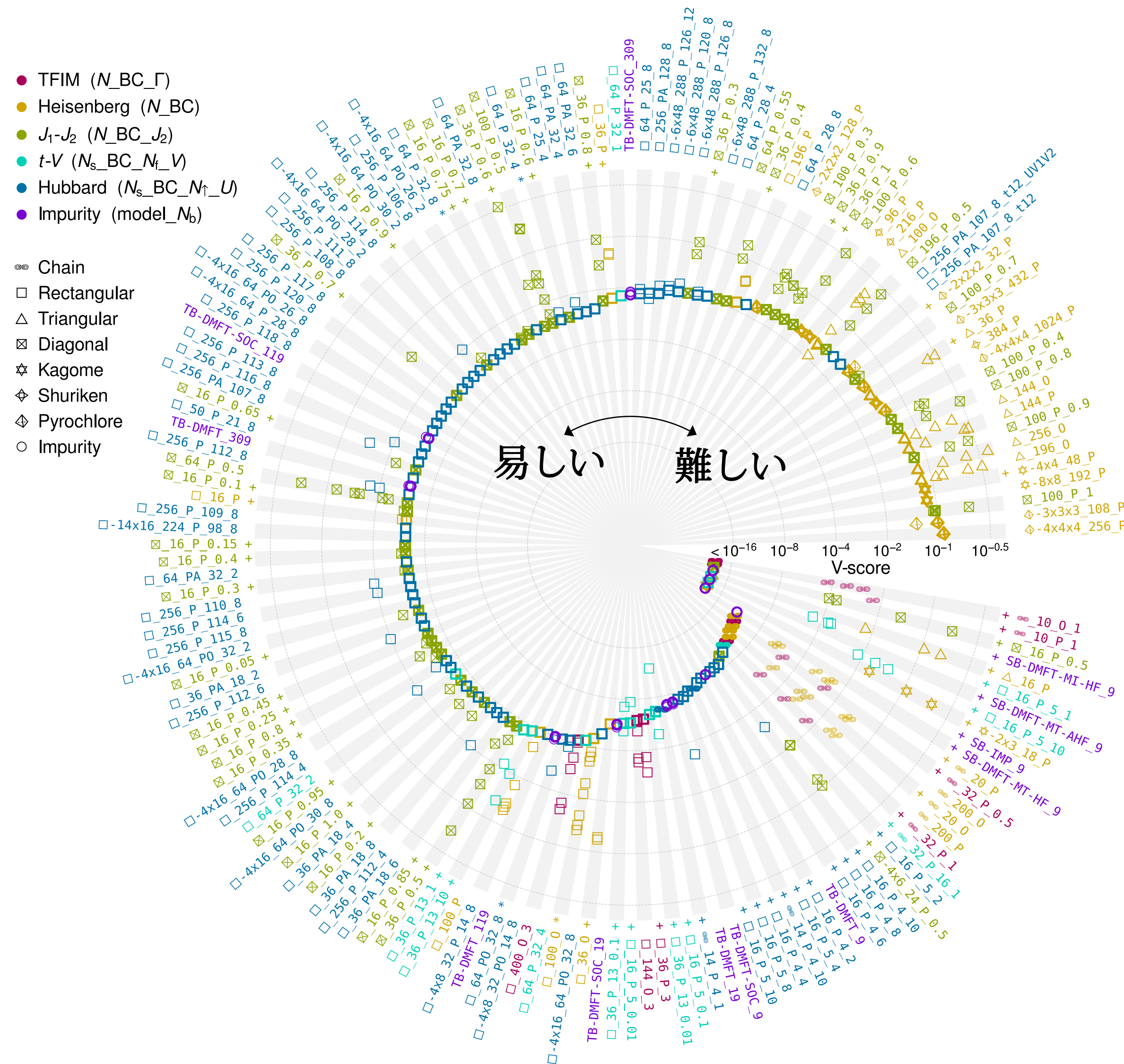
cf. variance extrapolation

Imada and Kashima, JPSJ **69**, 2723 (2000); Kashima and Imada, JPSJ **70**, 2287 (2001)



最先端手法が取り組むべき挑戦的課題

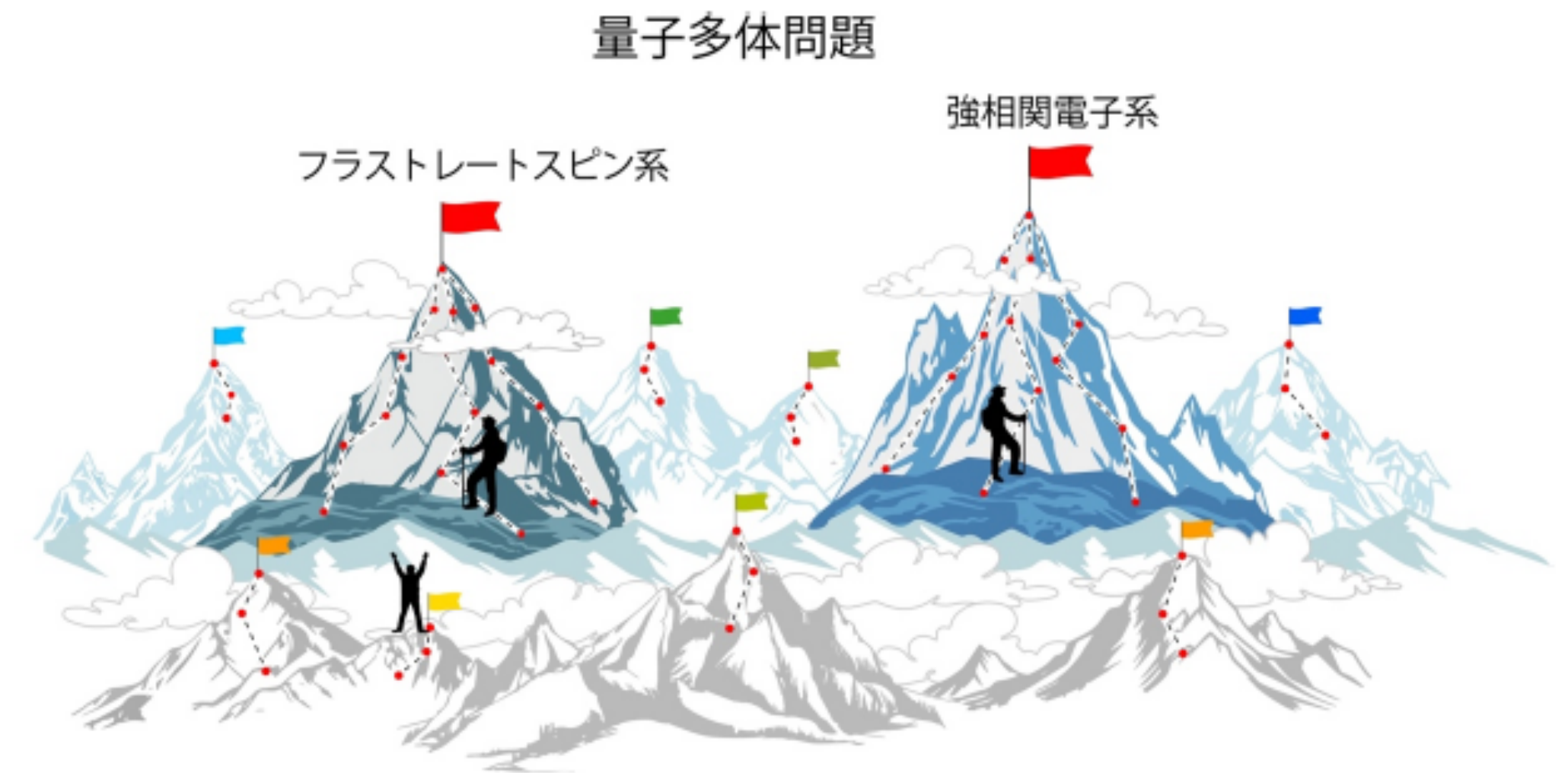
物性物理の様々な量子多体問題に対するVスコアのリスト



物性物理においては

強相関遍歴電子系

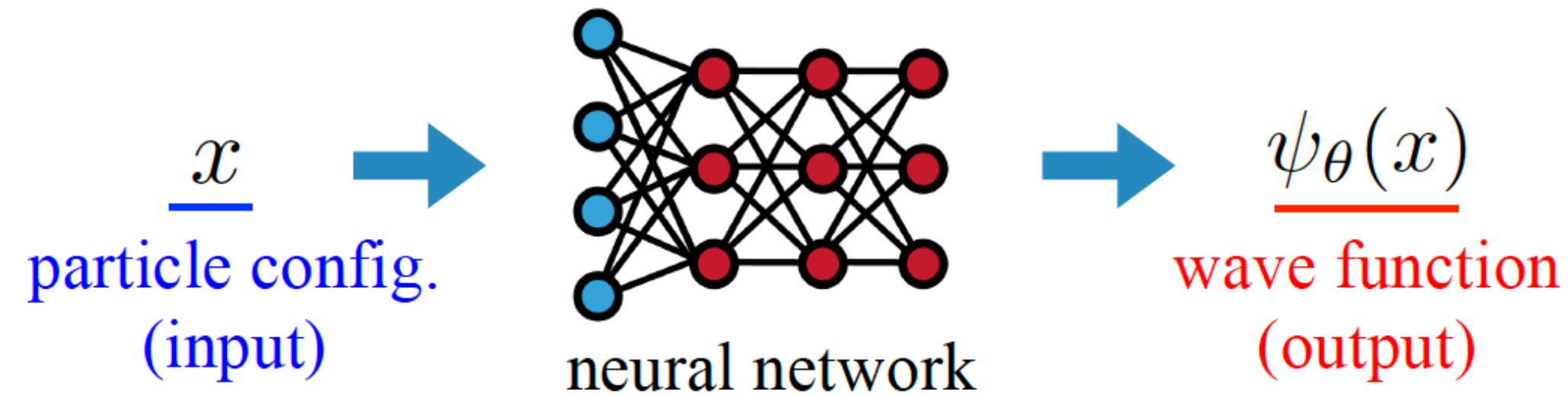
幾何学的フラストレーションのある量子スピン系



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

人工ニューラルネットワークを用いた変分法（基底状態計算）の進展

変分波動関数



変分原理

$$\underbrace{E_\theta}_{\text{コスト関数}} = \frac{\langle \psi_\theta | \mathcal{H} | \psi_\theta \rangle}{\langle \psi_\theta | \psi_\theta \rangle} \geq E_{\text{GS}}$$

θ : 変分パラメータのセット

2017~ 最初の適用（量子スピン系）

Carleo and Troyer Science 2017

2017~ ボソン系（ボース・ハバード模型）への適用

Saito JPSJ 2017

2017~ フェルミオン系（ハバード模型）への適用

Nomura et al. PRB 2017

2021~ ベンチマークを超えた強相関基礎模型の解析

Nomura et al. PRX 2021

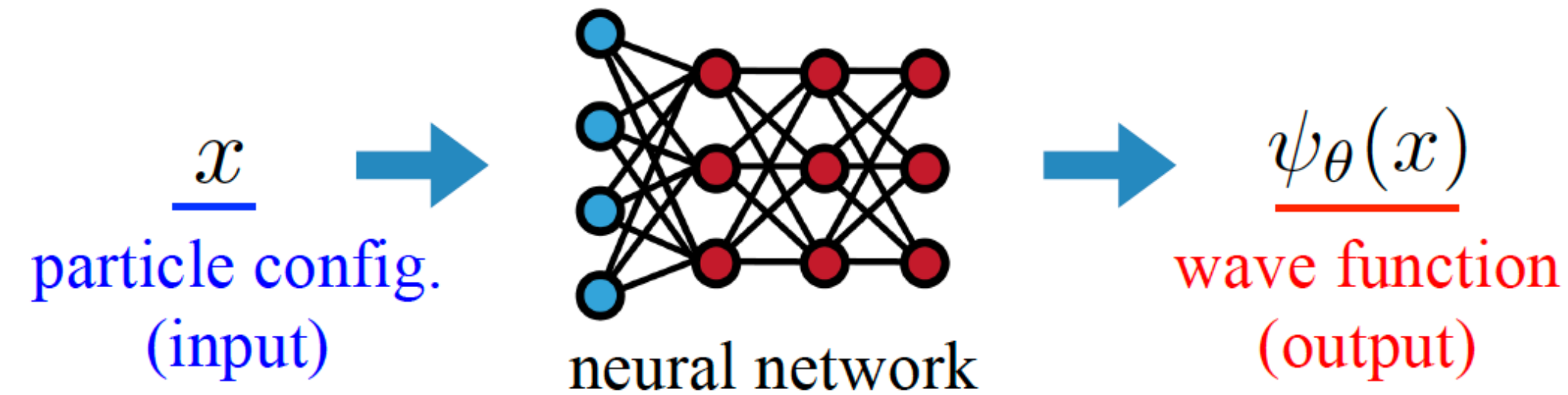
2022~ 現実物質に即した有効ハミルトニアンへの解析

Ido et al. npj Quantum Mater. 2022

Schmid et al. PRX 2023

人工ニューラルネットワークを用いた変分法（基底状態計算）の進展

変分波動関数



変分原理

$$\underbrace{E_\theta}_{\text{コスト関数}} = \frac{\langle \psi_\theta | \mathcal{H} | \psi_\theta \rangle}{\langle \psi_\theta | \psi_\theta \rangle} \geq E_{\text{GS}}$$

θ : 変分パラメータのセット

2017~ 最初の適用（量子スピン系）

Carleo and Troyer Science 2017

2017~ ボソン系（ボース・ハバード模型）への適用

Saito JPSJ 2017

2017~ フェルミオン系（ハバード模型）への適用

Nomura et al. PRB 2017

2021~ ベンチマークを超えた強相関基礎模型の解析

Nomura et al. PRX 2021

2022~ 現実物質に即した有効ハミルトニアンへの解析

Ido et al. npj Quantum Mater. 2022

Schmid et al. PRX 2023

フェルミオン系への拡張

対称性の違い：

ボソン系

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = +\Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$$

フェルミオン系

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = -\Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1)$$

※ RBM波動関数はボソンの対称性を持つ

拡張年表：

著者（出版年）	手法	主な適用対象
Nomura <i>et al.</i> (2017)	ジャストロー型	格子模型
Luo <i>et al.</i> (2019)	バックフロー型	格子模型
Han <i>et al.</i> (2019)	反対称化 ANN	連続空間, 分子
Choo <i>et al.</i> (2020)	スピン模型へマップ	連続空間, 分子
Pfau <i>et al.</i> (2020)	バックフロー型	連続空間, 分子
Hermann <i>et al.</i> (2020)	バックフロー + ジャストロー型	連続空間, 分子
Stokes <i>et al.</i> (2020)	ジャストロー型	格子模型
Yoshioka <i>et al.</i> (2021)	スピン模型へマップ	連続空間, 固体
Inui <i>et al.</i> (2021)	反対称化 ANN	格子模型
Moreno <i>et al.</i> (2022)	拡張ヒルベルト空間 + 射影	格子模型
Cassella <i>et al.</i> (2023)	バックフロー型	連続空間, 電子ガス

RBM+PP波動関数

$$\Psi(x) = \mathcal{N}(x) \phi_{\text{pair}}(x)$$

Neural network (RBM) ボソンの
Pair-product (PP) state (geminal) フェルミオンの

cf. many variable VMC wave function

$$\Psi(x) = \mathcal{P}_G(x) \mathcal{P}_J(x) \phi_{\text{pair}}(x)$$

Gutzwiller因子 Jastrow因子

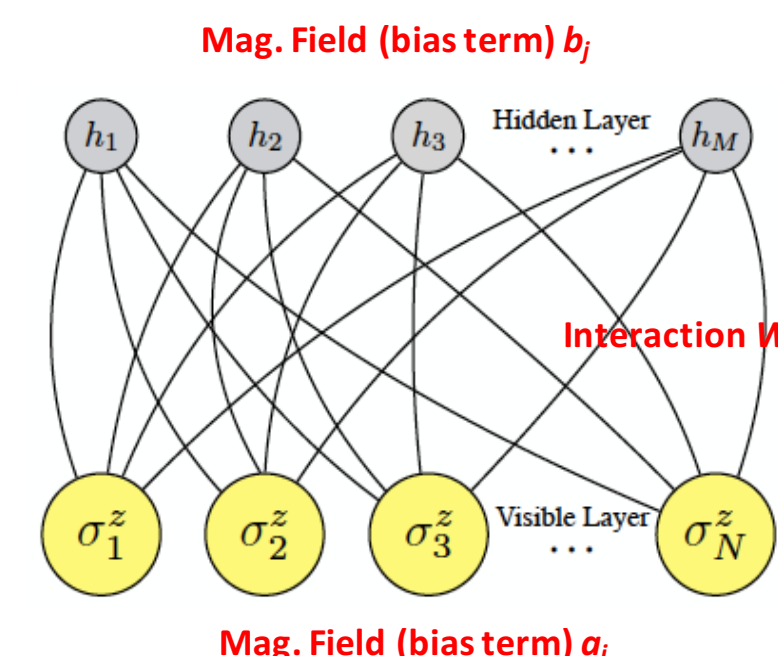
D. Tahara and M. Imada JPSJ **77**, 114701 (2008)

RBMパート (非自明な量子相関を取り込む)

$$\mathcal{N}(x) = \prod_k 2 \cosh \left(b_k + \sum_i W_{ik} \sigma_i \right)$$

可視層のスピン数はサイト数の2倍

$$\begin{aligned} \sigma_{2i} &= 2n_{i\uparrow} - 1 = \pm 1 \\ \sigma_{2i-1} &= 2n_{i\downarrow} - 1 = \pm 1 \end{aligned}$$



PPパート (重要な相関を予め取り込む)

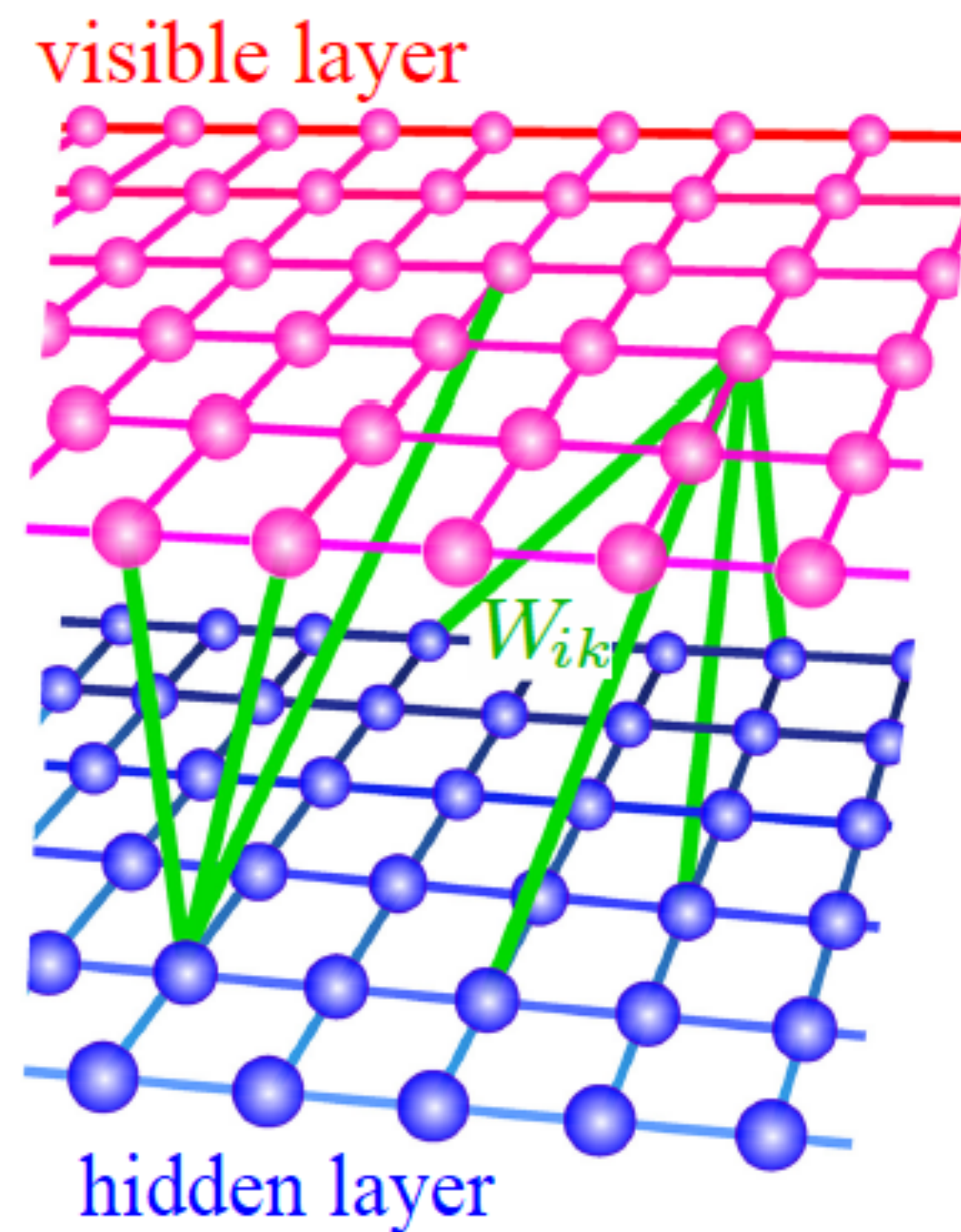
$$|\phi_{\text{pair}}\rangle = \left(\sum_{i,j=1}^{N_{\text{site}}} \sum_{\sigma,\sigma'=\uparrow,\downarrow} f_{ij}^{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger \right)^{N_e/2} |0\rangle$$

RBM vs RBM+PP

RBM

ボソンの波動関数

変分パラメータは b_j, W_{ik} (RBM)

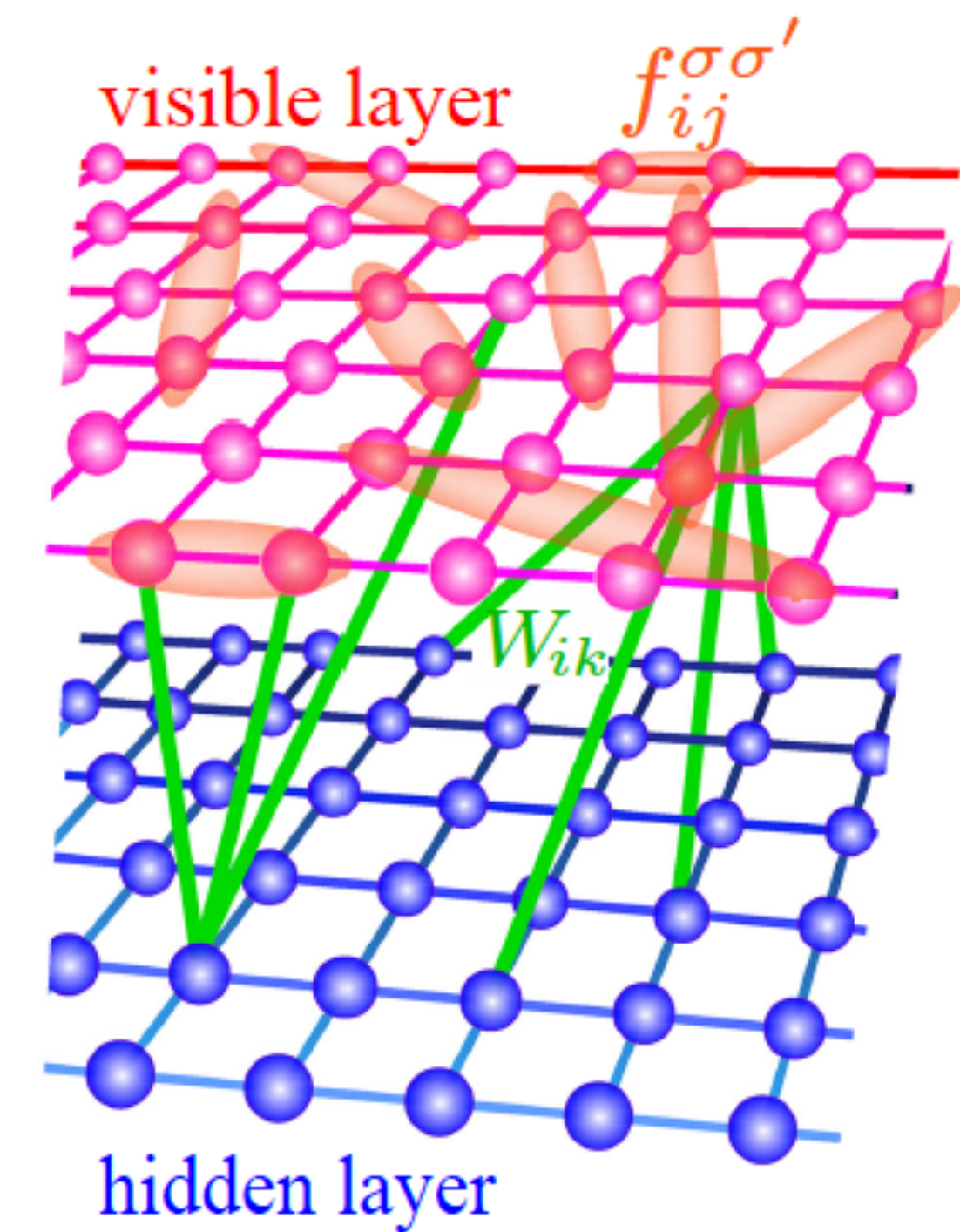


$\Psi_{\text{exact}}(x)$ をRBMで近似

RBM+PP

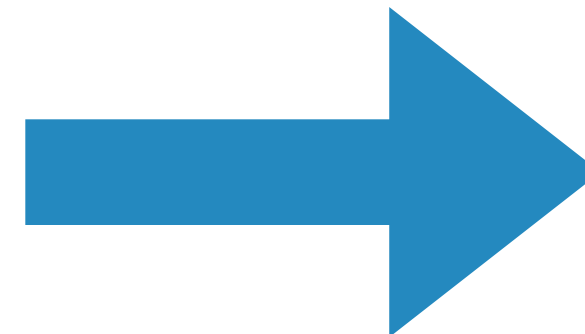
フェルミオンの波動関数

変分パラメータは b_j, W_{ik} (RBM)と f_{ij} (PP)



$\frac{\Psi_{\text{exact}}(x)}{\phi_{\text{pair}}(x)}$ をRBMで近似

物理的な波動関数と融合

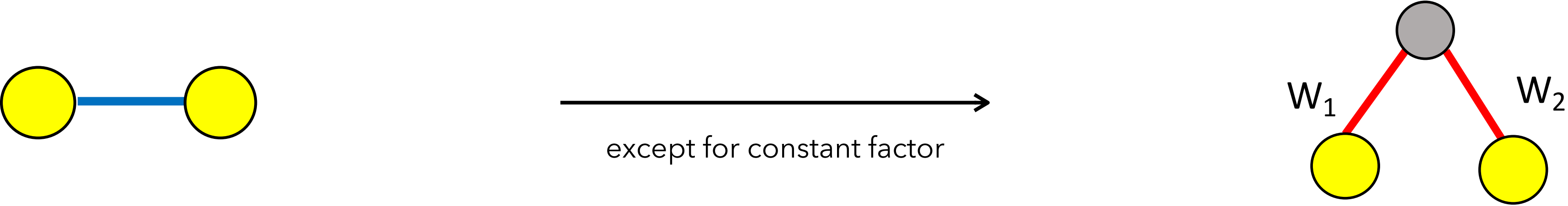


RBMによるGutzwiller因子やJastrow因子の表現

Gutzwiller因子

$$\mathcal{P}_G = \exp(-gn_{i\uparrow}n_{i\downarrow}) \xrightarrow[\text{except for constant factor and one-body potential}]{\text{書き換え}} \mathcal{P}_G = \exp\left(-\frac{g}{4}\sigma_{2i}\sigma_{2i-1}\right)$$
$$(\sigma_{2i}, \sigma_{2i-1}) = (2n_{i\uparrow} - 1, 2n_{i\downarrow} - 1)$$

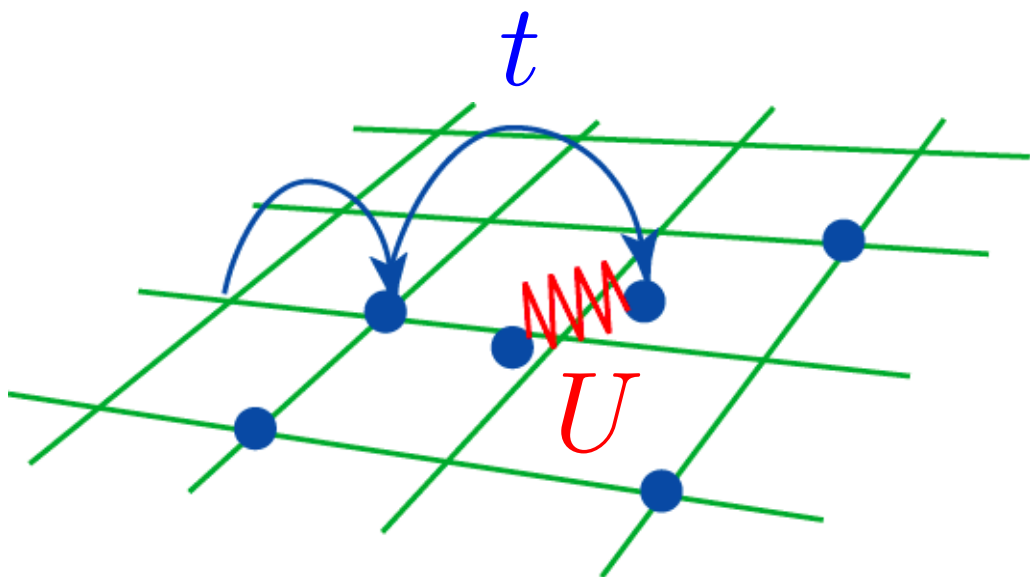
RBMによるGutzwiller因子の表現 (Jastrow因子も同様)


$$\mathcal{P}_G = \exp\left(-\frac{g}{4}\sigma_{2i}\sigma_{2i-1}\right)$$
$$\mathcal{P}_G = \sum_{h=\pm 1} \exp(W_1\sigma_{2i}h + W_2\sigma_{2i-1}h)$$
$$= 2 \cosh(W_1\sigma_{2i} + W_2\sigma_{2i-1})$$
$$\begin{cases} W_1 = \frac{1}{2} \operatorname{arcosh}(\exp(|g|/2)) \\ W_2 = -\operatorname{sgn} g \times W_1 \end{cases}$$

2次元正方格子上のハバード模型

8x8正方格子 (periodic, anti-periodic), ハーフフィリング

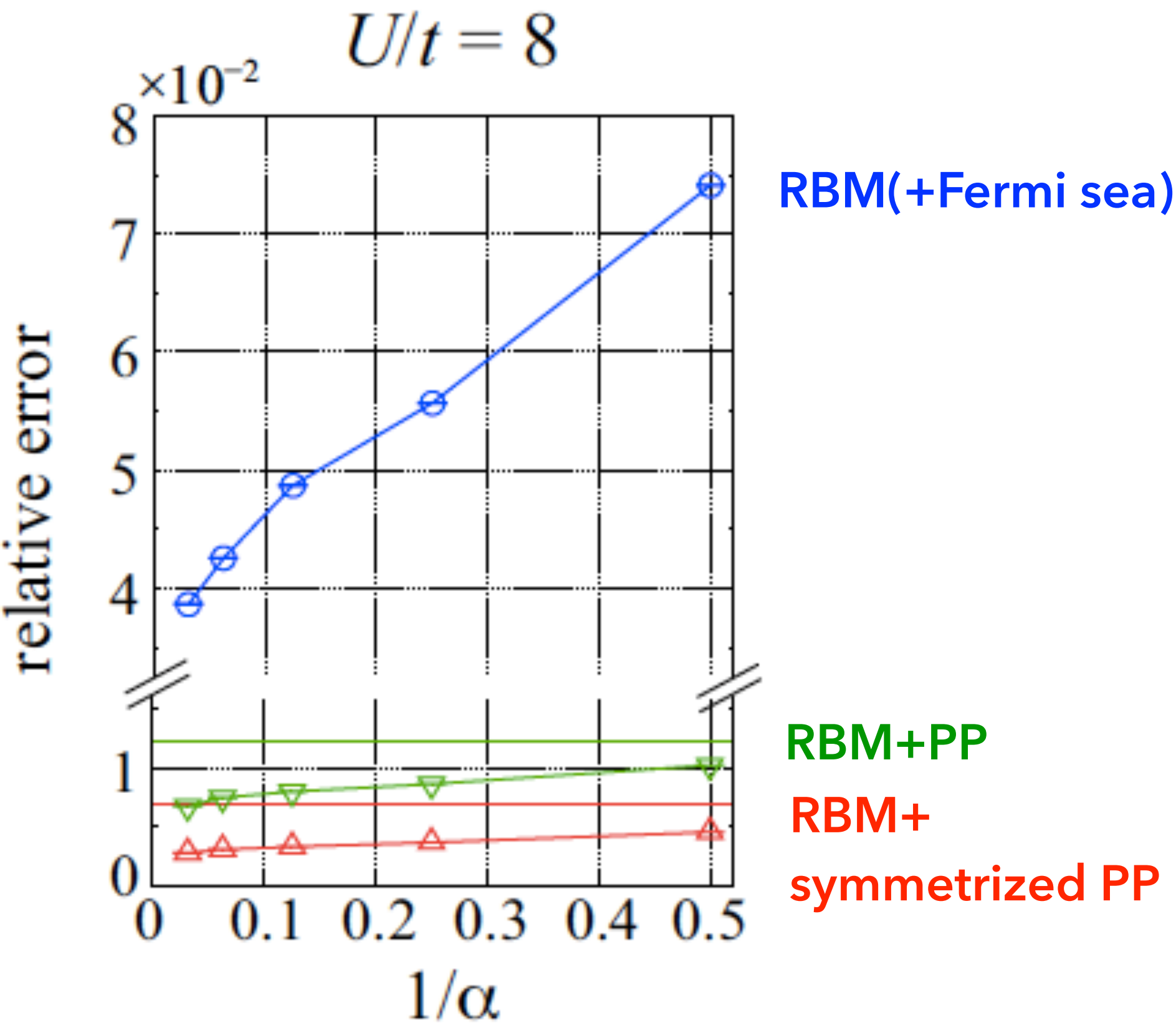
$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$$



ベンチマーク結果：スピン相関関数

	$S(\pi, \pi)/N_{\text{site}} \times 10^2$				
	$\alpha = 2$	$\alpha = 8$	$\alpha = 32$	mVMC	AF-QMC
$U/t=4$	3.078(5)	3.057(5)	3.021(5)	3.107(4)	2.92(2)
$U/t=8$	5.233(9)	5.206(9)	5.20(1)	5.30(1)	5.0(1)

ベンチマーク結果：エネルギー

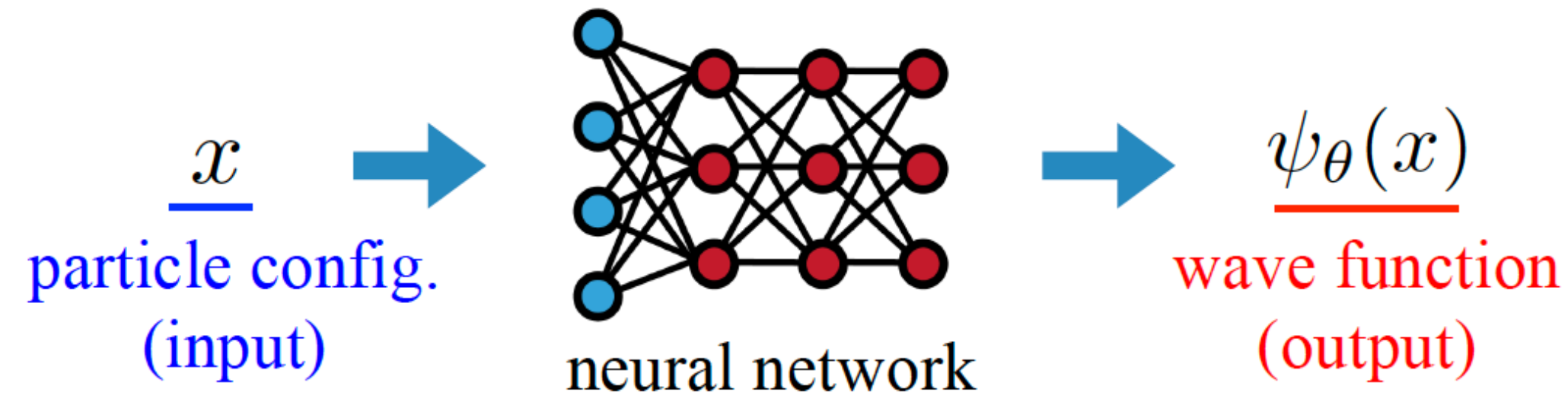


α = 隠れスピン数/可視スピン数

ペア積(PP)状態によりRBMの学習を容易に

人工ニューラルネットワークを用いた変分法（基底状態計算）の進展

変分波動関数



変分原理

$$\underbrace{E_\theta}_{\text{コスト関数}} = \frac{\langle \psi_\theta | \mathcal{H} | \psi_\theta \rangle}{\langle \psi_\theta | \psi_\theta \rangle} \geq E_{\text{GS}}$$

θ : 変分パラメータのセット

2017~ 最初の適用（量子スピン系）

Carleo and Troyer Science 2017

2017~ ボソン系（ボース・ハバード模型）への適用

Saito JPSJ 2017

2017~ フェルミオン系（ハバード模型）への適用

Nomura et al. PRB 2017

2021~ ベンチマークを超えた強相関基礎模型の解析

Nomura et al. PRX 2021

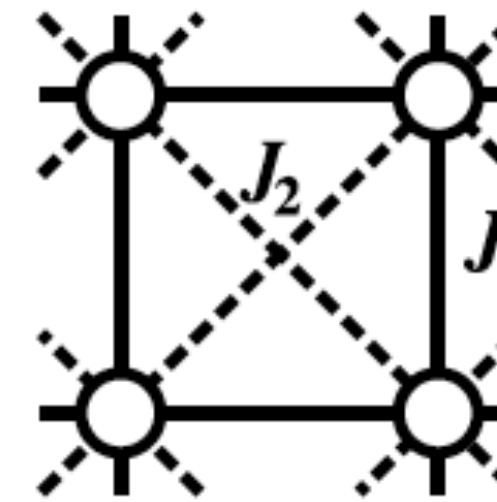
2022~ 現実物質に即した有効ハミルトニアンへの解析

Ido et al. npj Quantum Mater. 2022

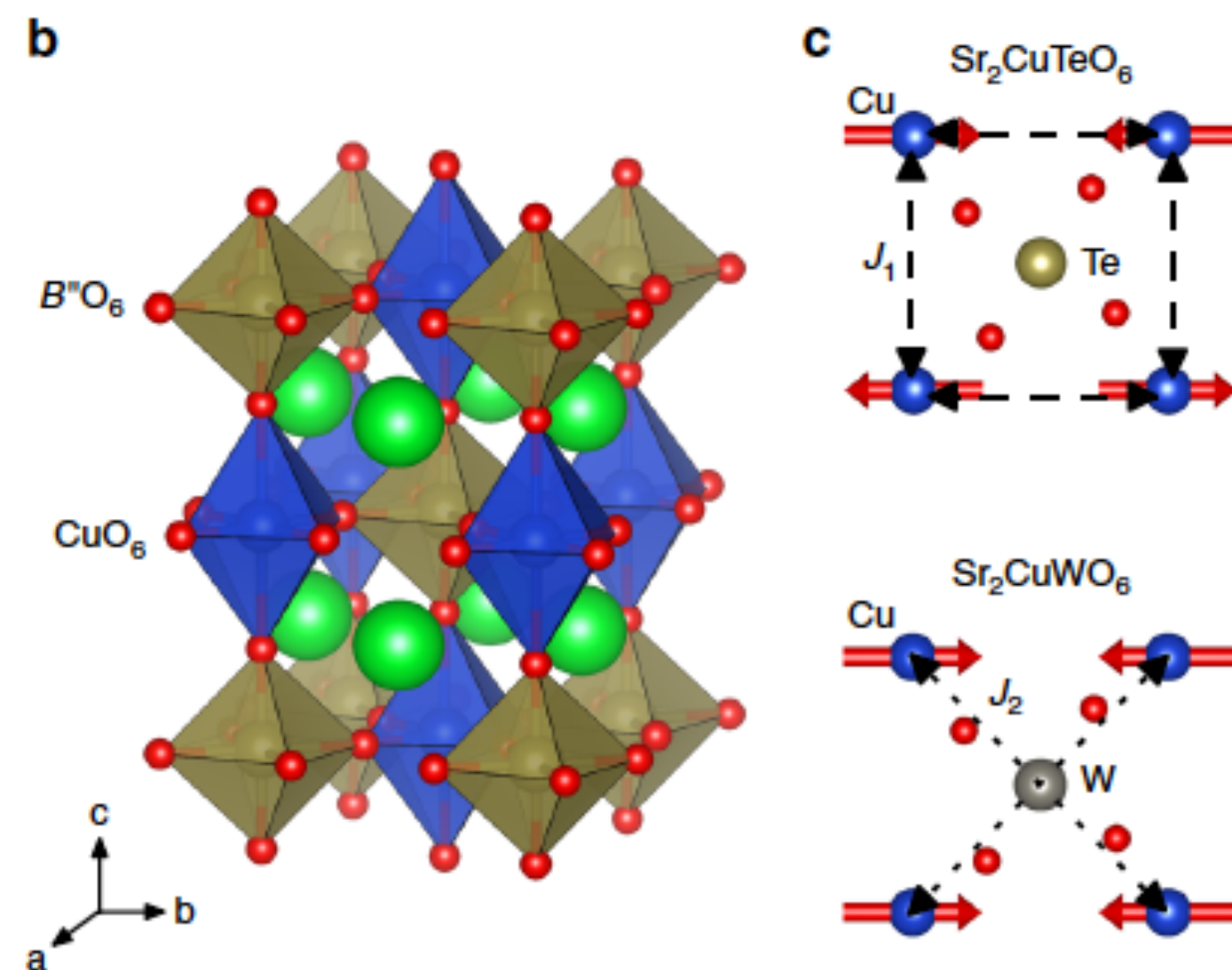
Schmid et al. PRX 2023

2次元正方格子上の反強磁性 J_1 - J_2 ハイゼンベルク模型 ($J_1 > 0, J_2 > 0, J_1$ と J_2 が競合)

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$



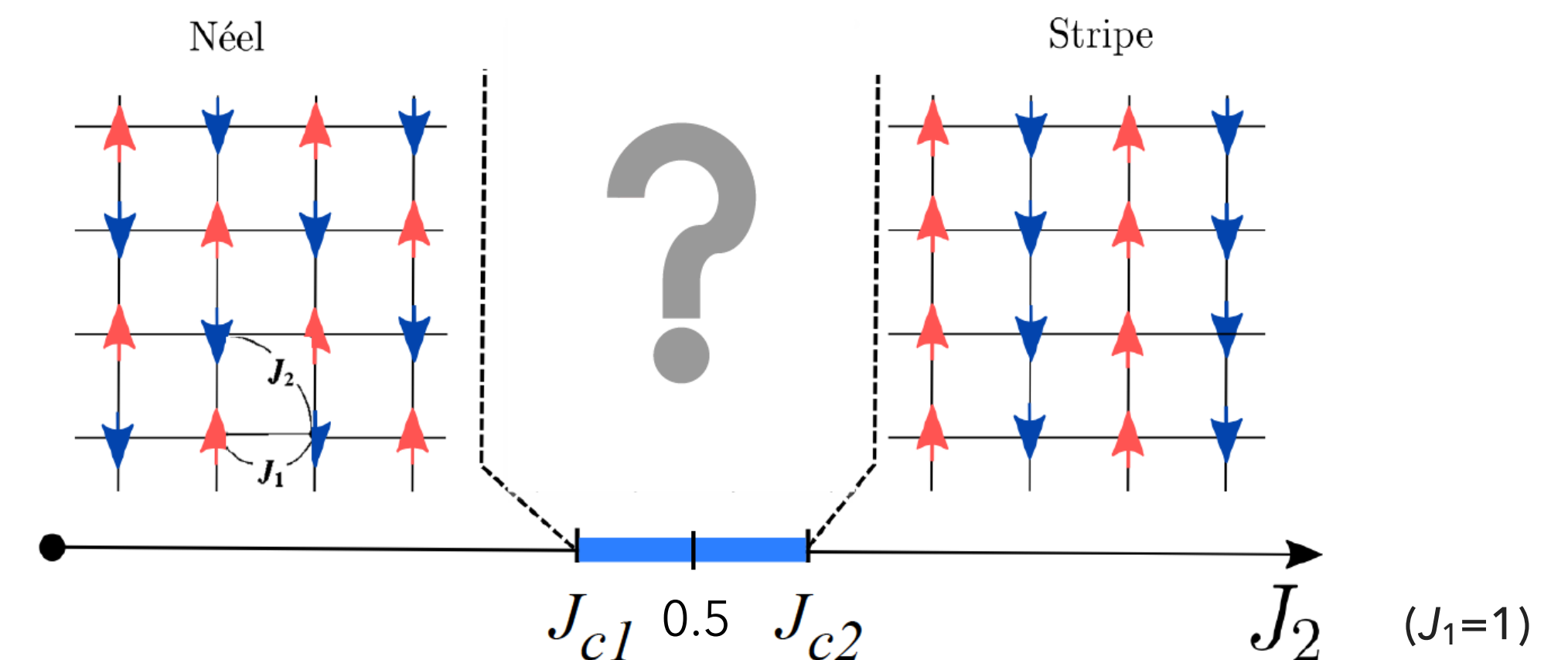
物質の候補



O. Mustonen et al, Nat. Commun., **9** 1085 (2018)

未解決の相図 ($J_1=1$)

1980年代後半からの長年の挑戦的課題



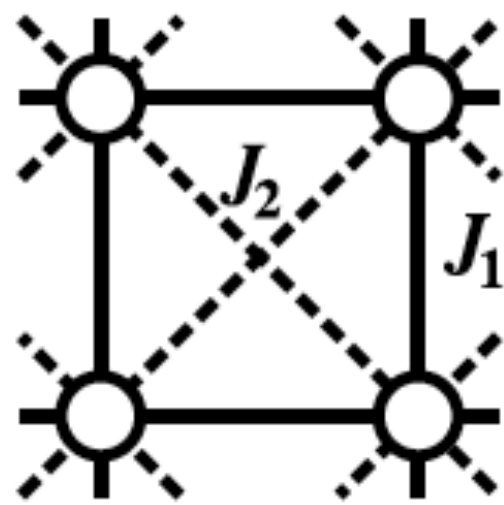
Chandra, Doucot 1988, Read Sachdev 1989, Capriotti et al., 2001, Zhang et al., 2003, Jiang et al., 2012, Hu et al., 2013, Gong et al., 2014, Morita et al., 2015, Wang, Sandvik 2018, Ferrari, Becca, 2020, ...

スピンの秩序が“溶けた”量子スピン液体相が実現

YN and M. Imada
Phys. Rev. X **11**, 031034 (2021)

2次元正方格子上の反強磁性 J_1 - J_2 ハイゼンベルク模型 ($J_1 > 0, J_2 > 0, J_1$ と J_2 が競合)

$$\mathcal{H} = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$$



計算精度のベンチマーク

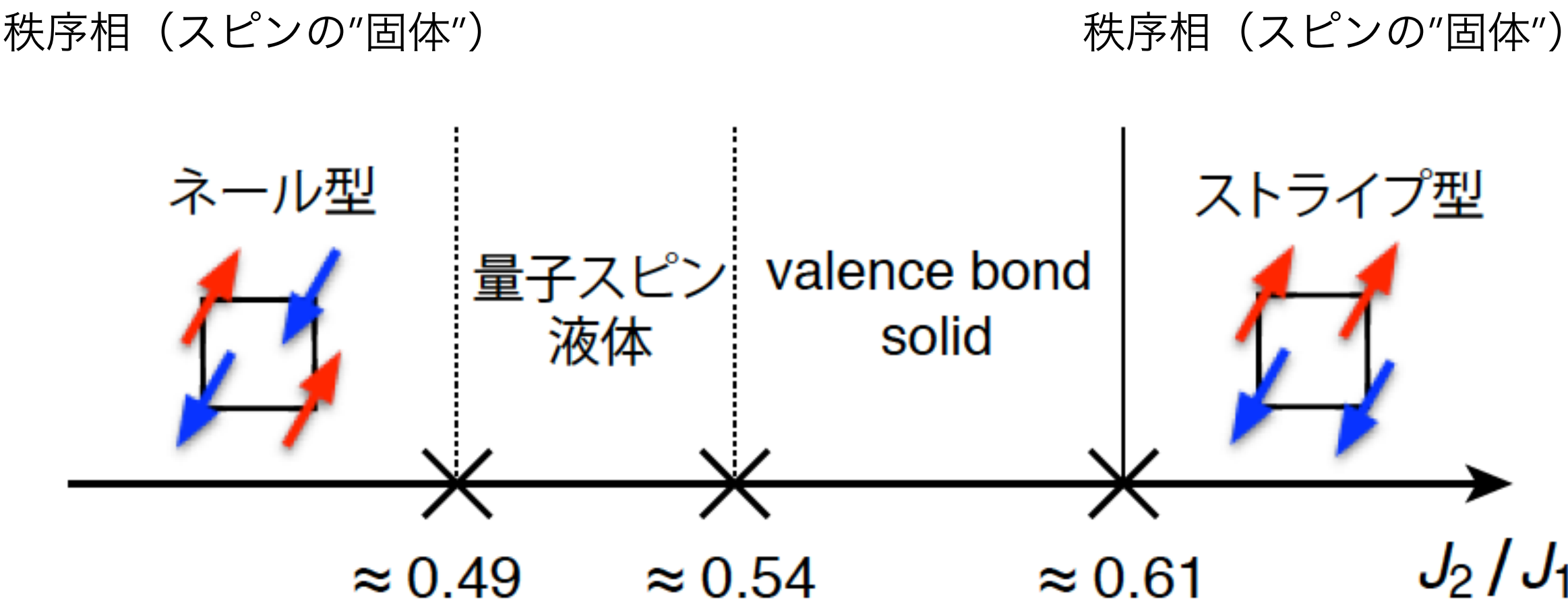
基底状態エネルギー, $J_2=0.5$, 10×10 格子

Energy per site	Wave function	Reference
-0.494757(12)	Neural quantum state	[72]
-0.49516(1)	CNN	[67]
-0.49521(1)	VMC($p = 0$)	[23]
-0.495530	DMRG	[25]
-0.49575(3)	RBM-fermionic wave function	[70]
-0.497549(2)	VMC($p = 2$)	[23]
-0.497629(1)	RBM + PP	Present study

[72] Szabó and Castelnovo PRR 2020 [67] Choo et al., PRB 2019
[23] Hu et al., PRB 2013 [25] Gong et al., PRL 2014 [70] Ferrari et al., PRB 2019

最高峰の精度を達成

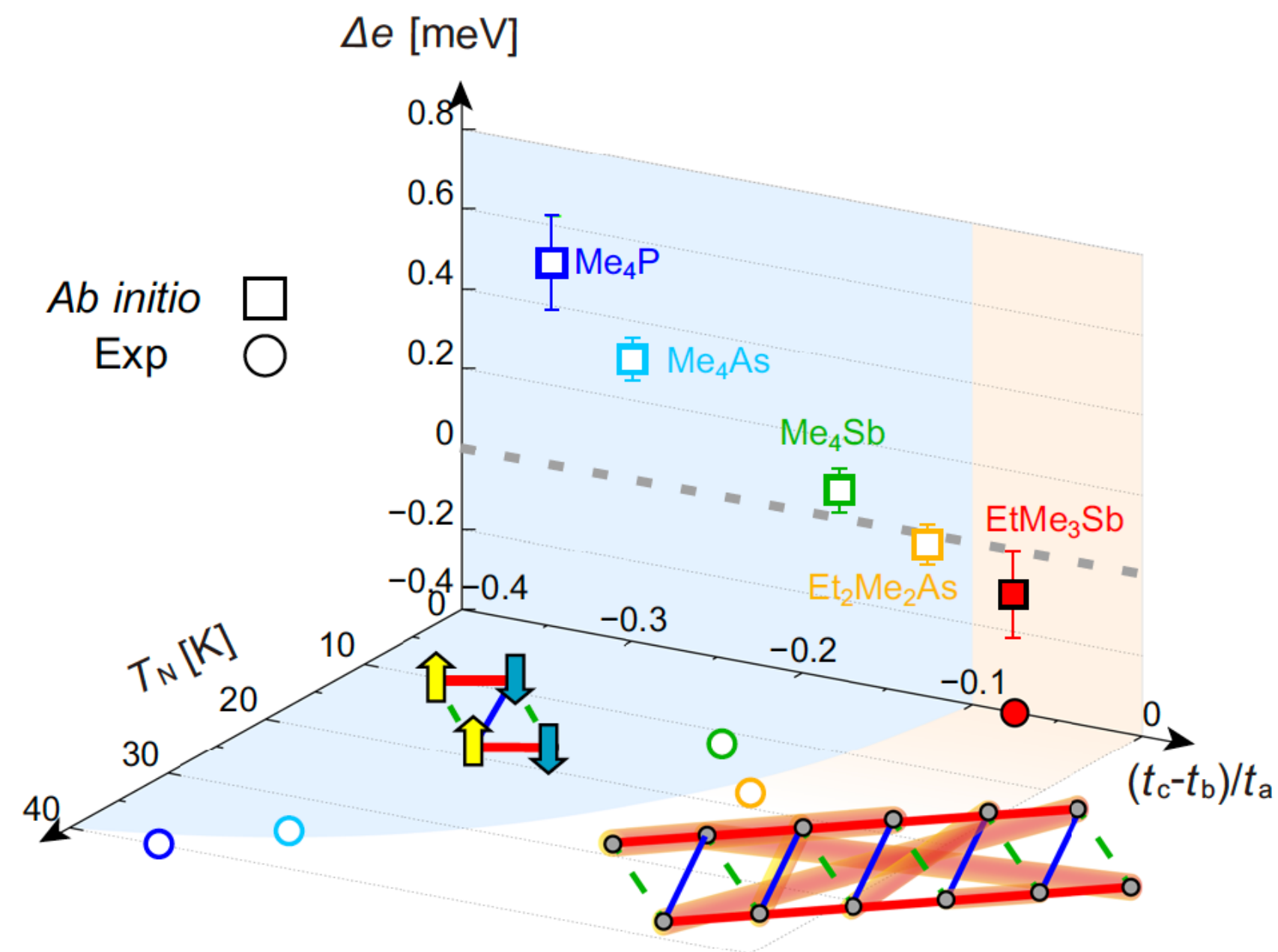
人工ニューラルネットワーク手法により求められた相図



絶対零度でもスピンの揺らぐ“液体相”を確認

現実物質に即した有効ハミルトニアンの解析

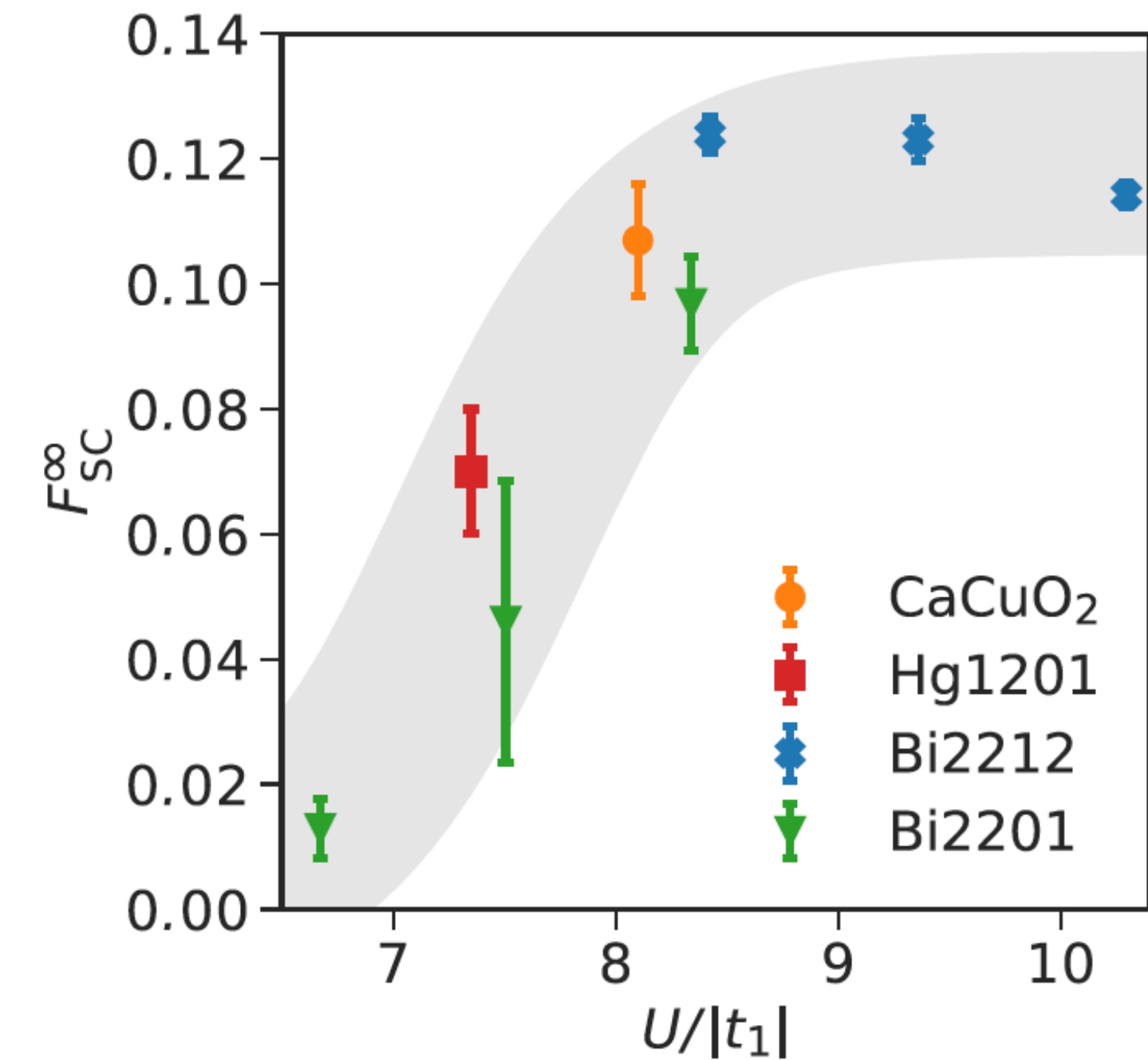
有機固体Pd(dmit)₂塩の有効ハミルトニアンの解析



有機固体で実現する量子スピン液体の特異な性質を解明

K. Ido et al., npj Quantum Mater. **7**, 48 (2022)

銅酸化物超伝導体の有効ハミルトニアンの解析



物質依存の定量再現、超伝導を制御する主成分を特定

M.-T. Schmid et al., Phys. Rev. X **13**, 041036 (2023)

→ 機械学習/人工ニューラルネットワークを用いて物理の挑戦的課題に取り組むことのできる研究のフェーズに

基底状態以外の進展

2017~ 実時間ダイナミクス

Carleo and Troyer Science 2017
Schmitt and Heyl PRL 2020

2018~ 励起状態計算

Choo et al. PRL 2018
Nomura JPCM 2021
Yoshioka et al. Commun. 2021

2019~ 量子開放系

Nagy and Savona PRL 2019, Hartmann and Carleo PRL 2019
Vicentini et al. PRL 2019, Yoshioka and Hamazaki PRB 2019

2020~ 有限温度計算

Irikura and Saito PRR 2020
Nomura and Yoshioka et al. PRL 2021

資料 3 の内容

1. 制限ボルツマンマシンを用いた変分法の進展

→ 量子状態を人工ニューラルネットワークに数值的・近似的に埋め込み

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

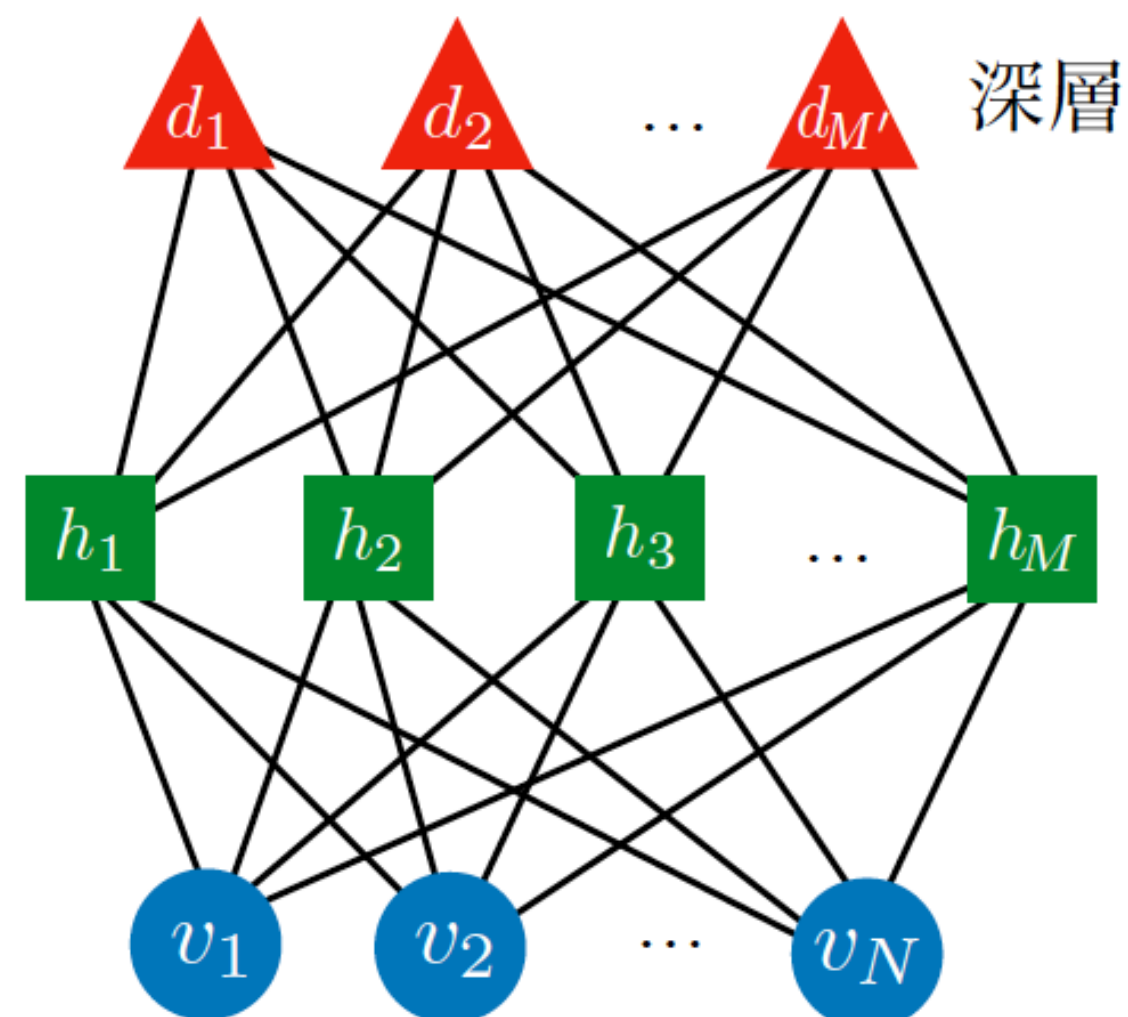
→ 量子状態を人工ニューラルネットワークに解析的に埋め込み

3. (おまけ) 量子回路状態を表す深層ボルツマンマシンの解析的な構築

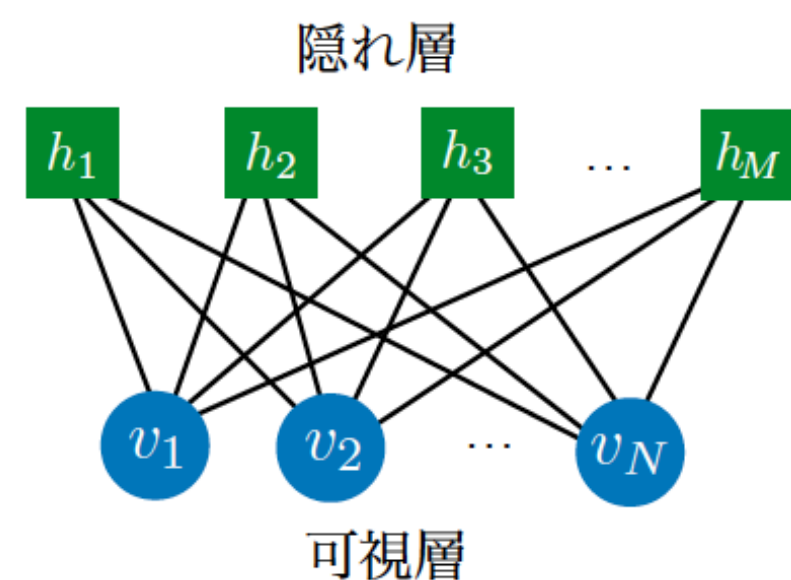
→ 2.と同様のアイデアを用いる

深層ボルツマンマシン(deep Boltzmann machine)波動関数

DBM



cf. RBM



DBM波動関数

$$\Psi(\sigma) = \sum_{h,d} \exp \left(\sum_i a_i \sigma_i^z + \sum_j b_j h_j + \sum_k b'_k d_k + \sum_{i,j} W_{ij} \sigma_i^z h_j + \sum_{j,k} W'_{jk} h_j d_k \right)$$

$$e^{-E_{\text{DBM}}(\sigma, h, d)}$$

RBMと比較したDBMの性質

- 良い点

より柔軟な表現能力を持つ

[X. Gao and L.-M. Duan, Nat. Commun. 8, 662 \(2017\).](#)

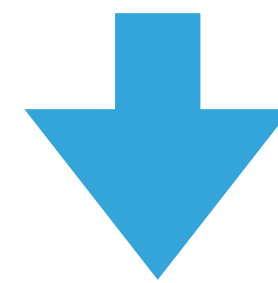
- 悪い点

hとdの自由度を同時に解析的にトレースアウトできない

(波動関数を得るためにhかdの少なくともどちらか一方をモンテカルロサンプリングする必要あり)

Stochastic Reconfiguration法を用いた虚時間発展の精度の良い近似 (主に浅いネットワーク構造に使用)

$$\delta\theta = \arg \min_{\delta\theta} \mathcal{F} \left(\underbrace{e^{-2\delta\tau \mathcal{H}} |\psi_\theta\rangle}_{\text{厳密な発展}}, \underbrace{|\psi_{\theta+\delta\theta}\rangle}_{\text{変分状態による近似}} \right) = -\delta\tau S^{-1} \partial_\theta \langle \mathcal{H} \rangle$$



DBMを用いた厳密かつ解析的な微小時間虚時間発展の再現

$$|\Psi(\tau)\rangle = e^{-\mathcal{H}_1 \frac{\delta\tau}{2}} e^{-\mathcal{H}_2 \delta\tau} \dots e^{-\mathcal{H}_2 \delta\tau} e^{-\mathcal{H}_1 \frac{\delta\tau}{2}} |\Psi_0\rangle \quad e^{-\tau \mathcal{H}} |\Psi_0\rangle \longrightarrow |\text{GS}\rangle \quad (\tau \rightarrow \infty)$$

- 数値計算による最適化が不要 (全て解析的にパラメータのアップデートが可能)
- トロッターエラーを除いて厳密なマッピング

深層の導入による表現能力の向上によって解析的なマッピングが可能に

横磁場イジング模型の虚時間発展の再現

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

ハミルトニアン: $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2$

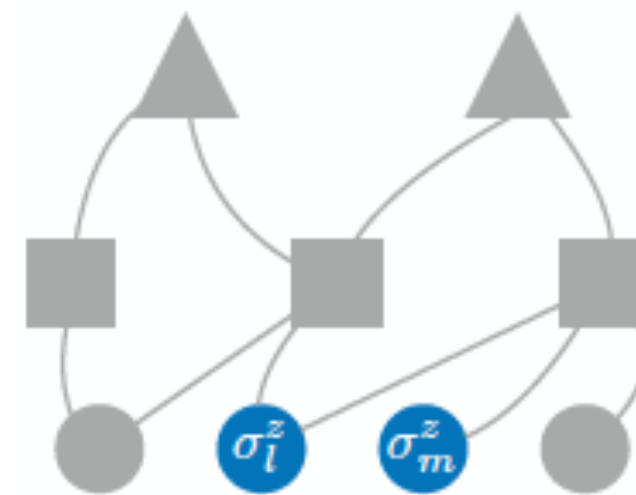
相互作用 (古典的): $\mathcal{H}_1 = \sum_{l < m} V_{lm} \sigma_l^z \sigma_m^z$

横磁場(量子的): $\mathcal{H}_2 = - \sum_l \Gamma_l \sigma_l^x$

どのようにすれば微小虚時間発展をDBMによって再現できるか？

$$e^{-\delta\tau \mathcal{H}_\nu} |\text{DBM}\rangle$$

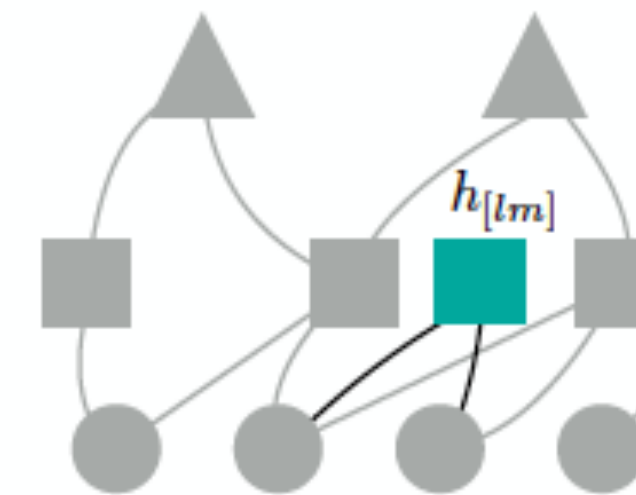
初期DBM



$$e^{-\delta\tau V_{lm} \sigma_l^z \sigma_m^z} |\psi_\gamma\rangle$$

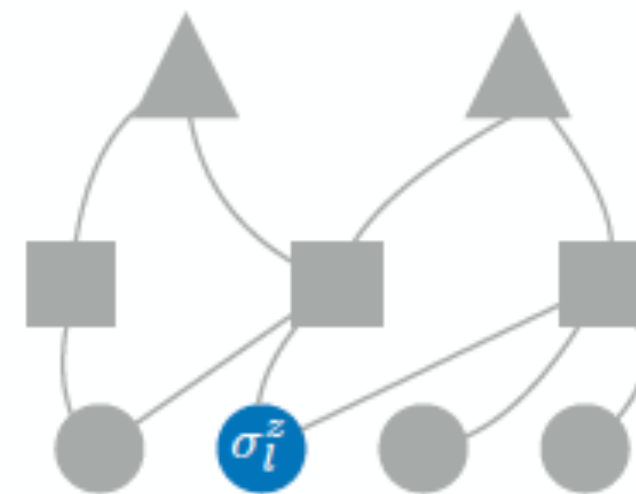
相互作用項の
虚時間発展

虚時間発展後のDBM



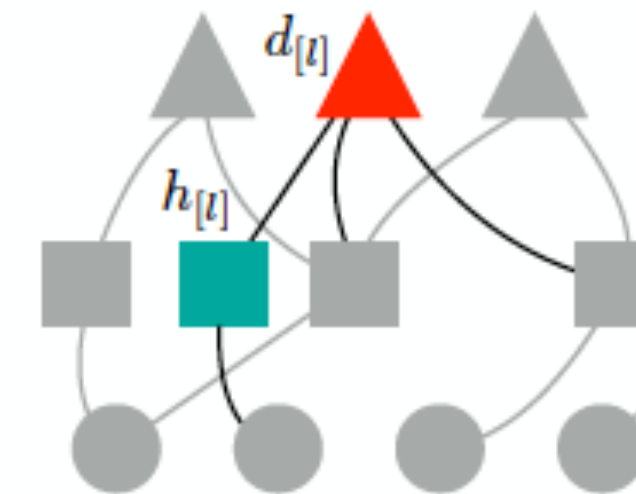
$$W_{l[lm]} = \frac{1}{2} \text{arcosh} \left(e^{2|V_{lm}|\delta\tau} \right)$$

$$W_{m[lm]} = -\text{sgn}(V_{lm}) \times W_{l[lm]}$$



$$e^{\delta\tau \Gamma_l \sigma_l^x} |\psi_\gamma\rangle$$

横磁場項の
虚時間発展



$$W'_{j[l]} = -W_{lj}$$

$$\bar{W}_{lj} = W_{lj} + \Delta W_{lj} = 0$$

$$W_{l[l]} = \frac{1}{2} \text{arcosh} \left(\frac{1}{\tanh(\Gamma_l \delta\tau)} \right)$$

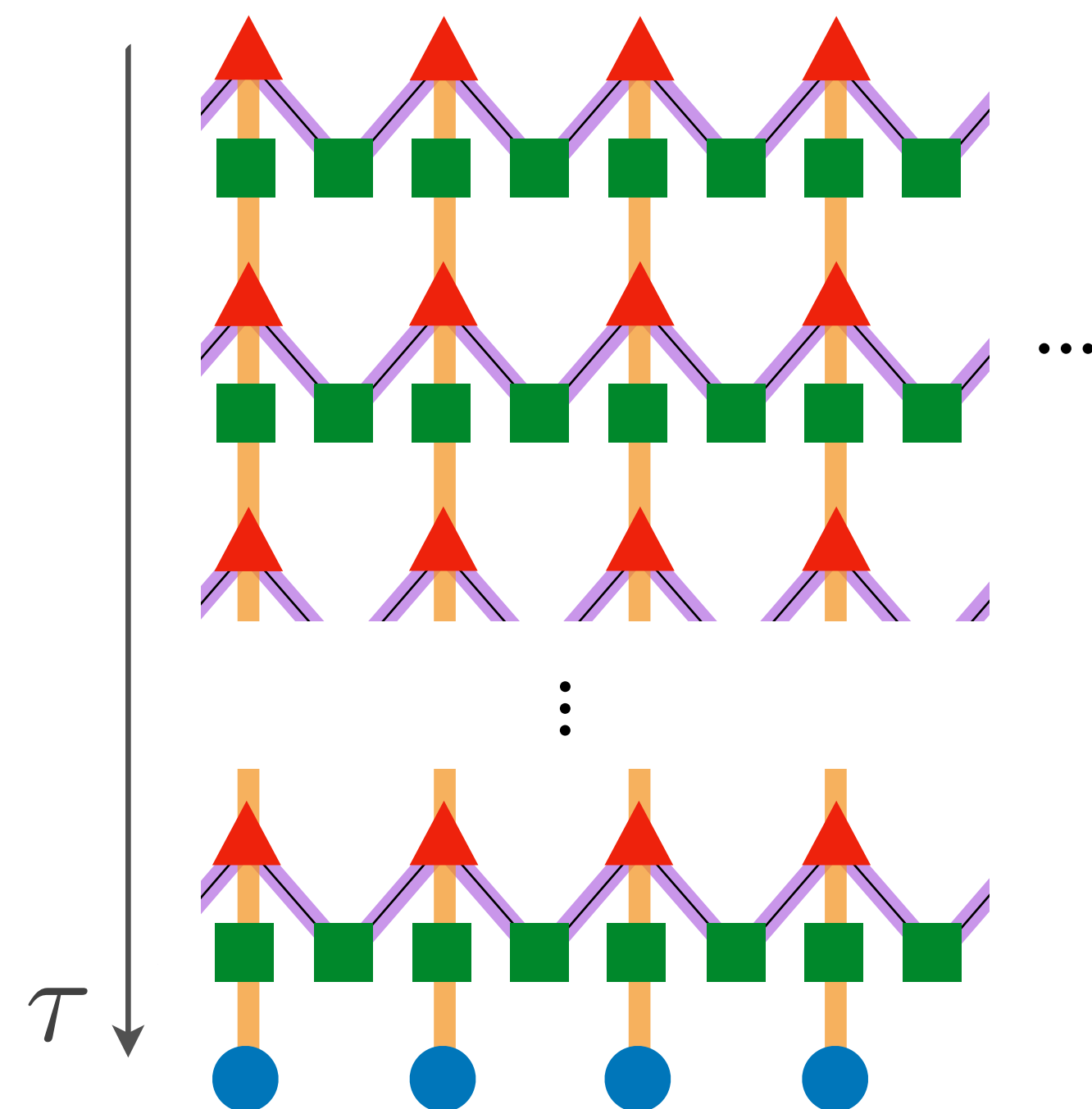
$$W'_{[l][l]} = -W_{l[l]}.$$

1次元横磁場イジング模型に対するベンチマーク

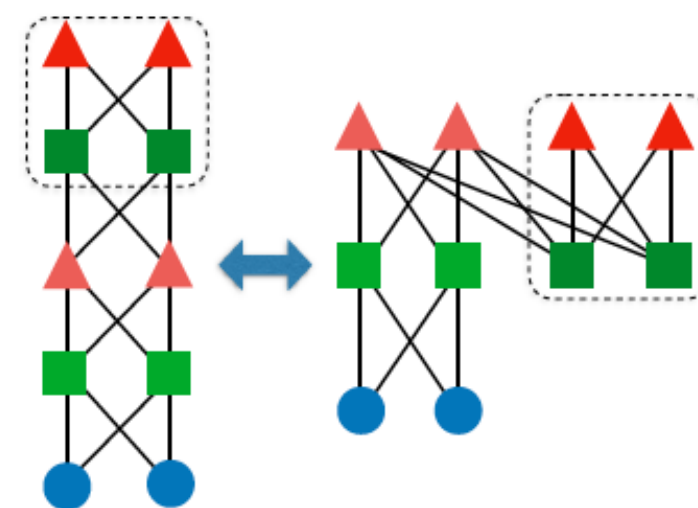
G. Carleo, YN, and M. Imada,
Nat. Commun. **9**, 5322 (2018)

基底状態を表すDBM構造

相互作用関連 横磁場関連

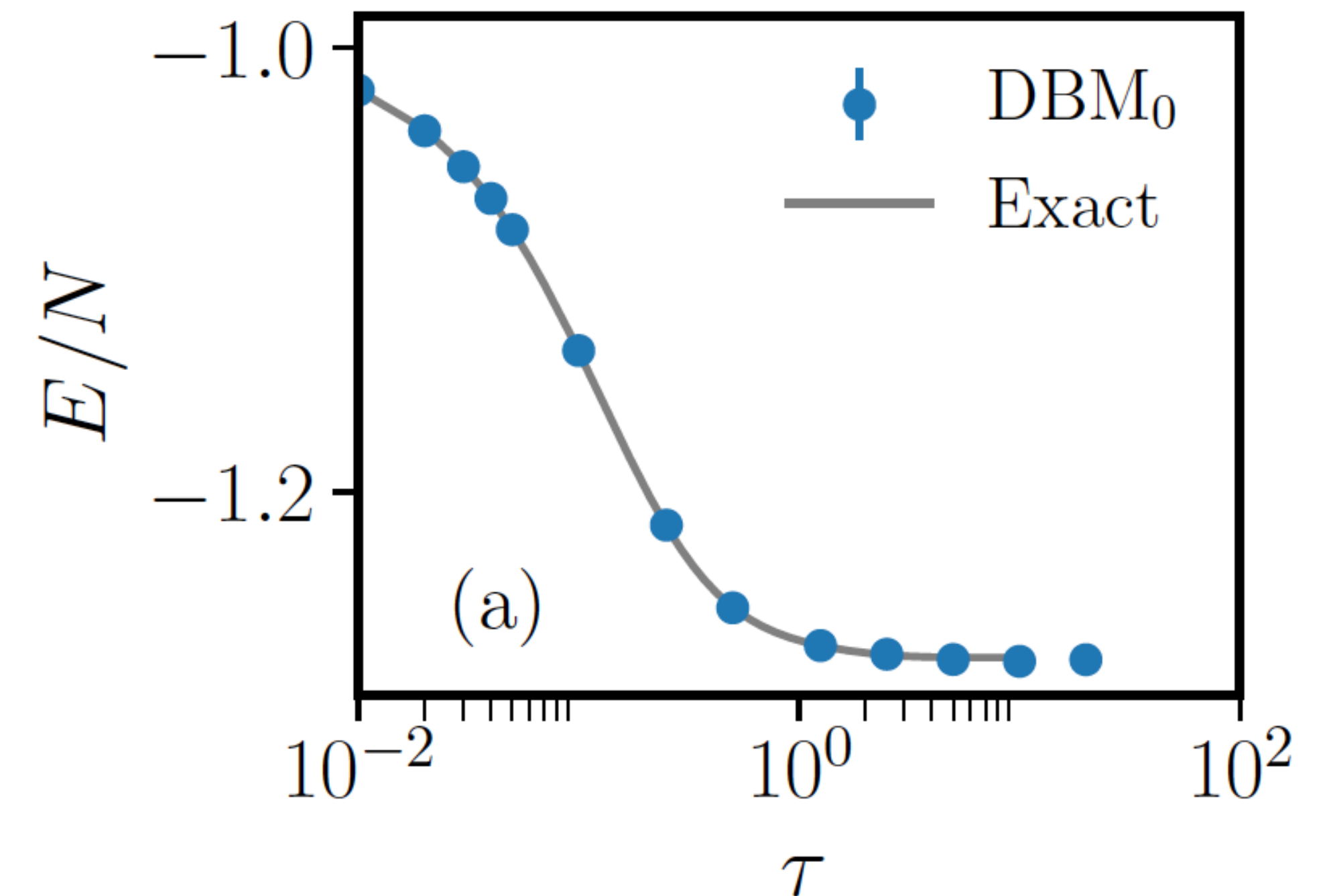


※2層構造へ書き直しが可能



(# 隠れ・深層スピンの数) $\propto$ (系のサイズ) $\times$ (虚時間の長さ)

ベンチマーク ($N=20, J\delta\tau=0.01$)

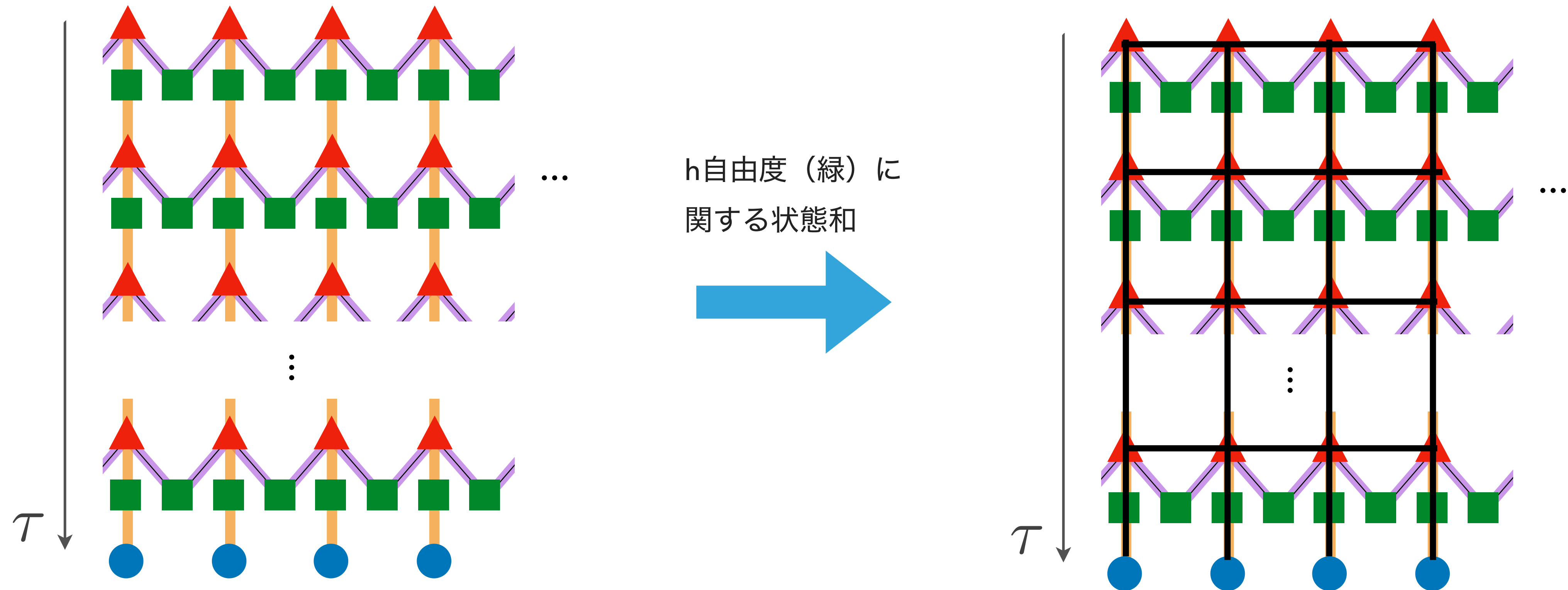


物理量はDBM内のスピン変数に対する

モンテカルロ法により計算

(この場合は全てのボンドが実数のため負符号なし)

深層方向と虚時間次元の関係



虚時間方向 = 深層方向 → 物理によるニューラルネットワークの“再解釈”

新たな量子古典マッピング手法 (経路積分形式を包含する)

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

ここまでのまとめ (RBMとDBMによる量子状態表現)

	RBM (変分法)	DBM (量子古典マッピング)
最適化と精度	数值的・近似的	解析的・厳密 (トロッターエラーを除き)
隠れスピンの数	DBMに比べて少ない (よりコンパクト)	$O(N_T N_{\text{site}})$
物理量計算のための モンテカルロサンプリングの対象	σ	σ と h,d (の両方もしくはどちらか一方)
負符号問題	フラストレーションのある系にも 適用可能	避けられない (経路積分と同様)

資料 3 の内容

1. 制限ボルツマンマシンマシンを用いた変分法の進展

→ 量子状態を人工ニューラルネットワークに数值的・近似的に埋め込み

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

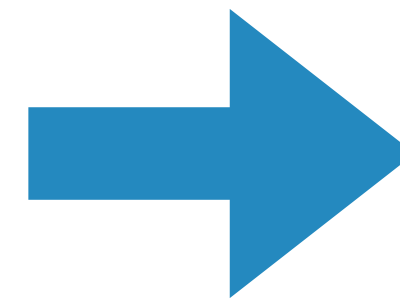
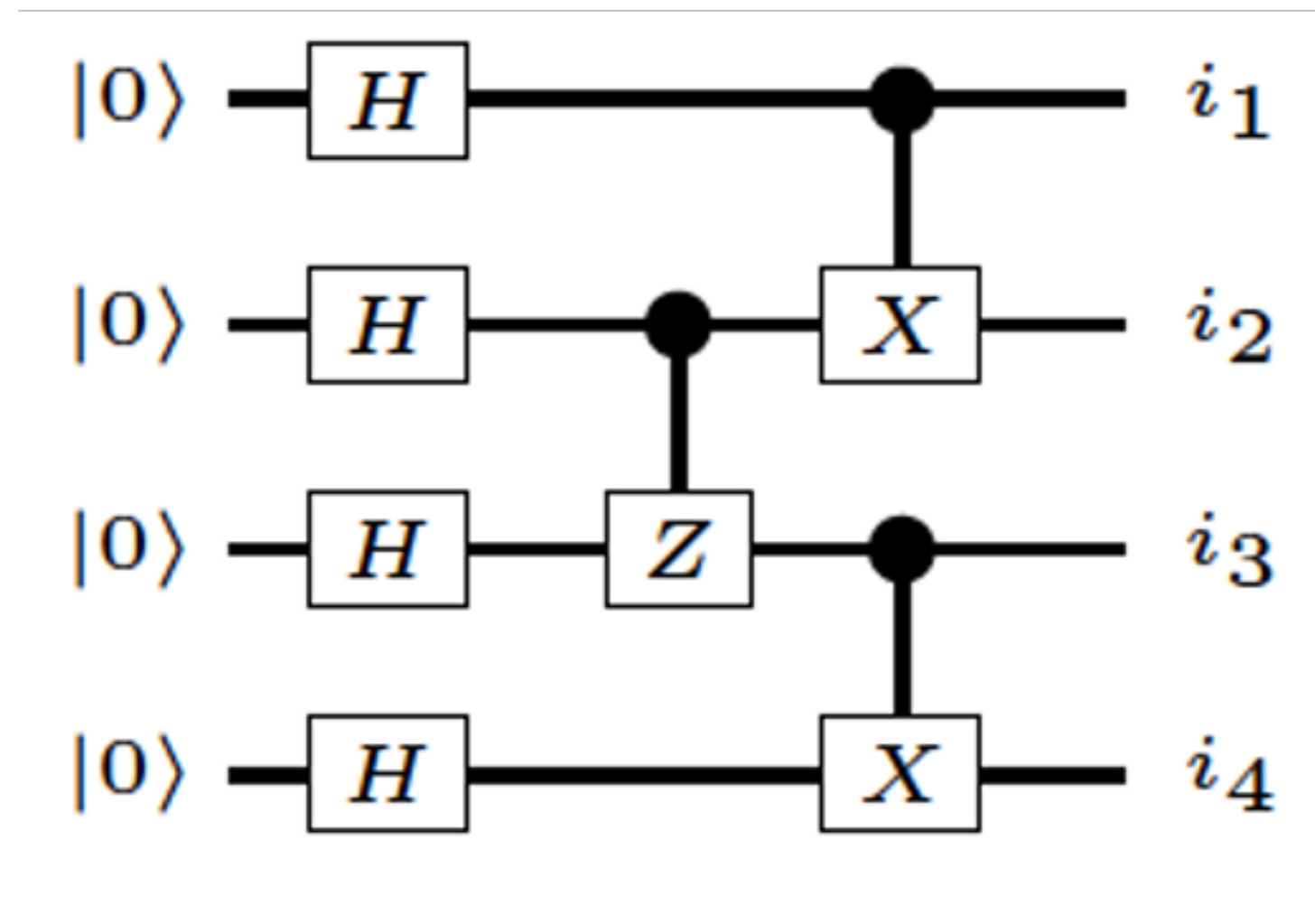
→ 量子状態を人工ニューラルネットワークに解析的に埋め込み

3. (おまけ) 量子回路状態を表す深層ボルツマンマシンの解析的な構築

→ 2.と同様のアイデアを用いる

量子回路の古典ネットワーク表現（テンソルネットワークの場合）

量子回路



対応するテンソルネットワーク

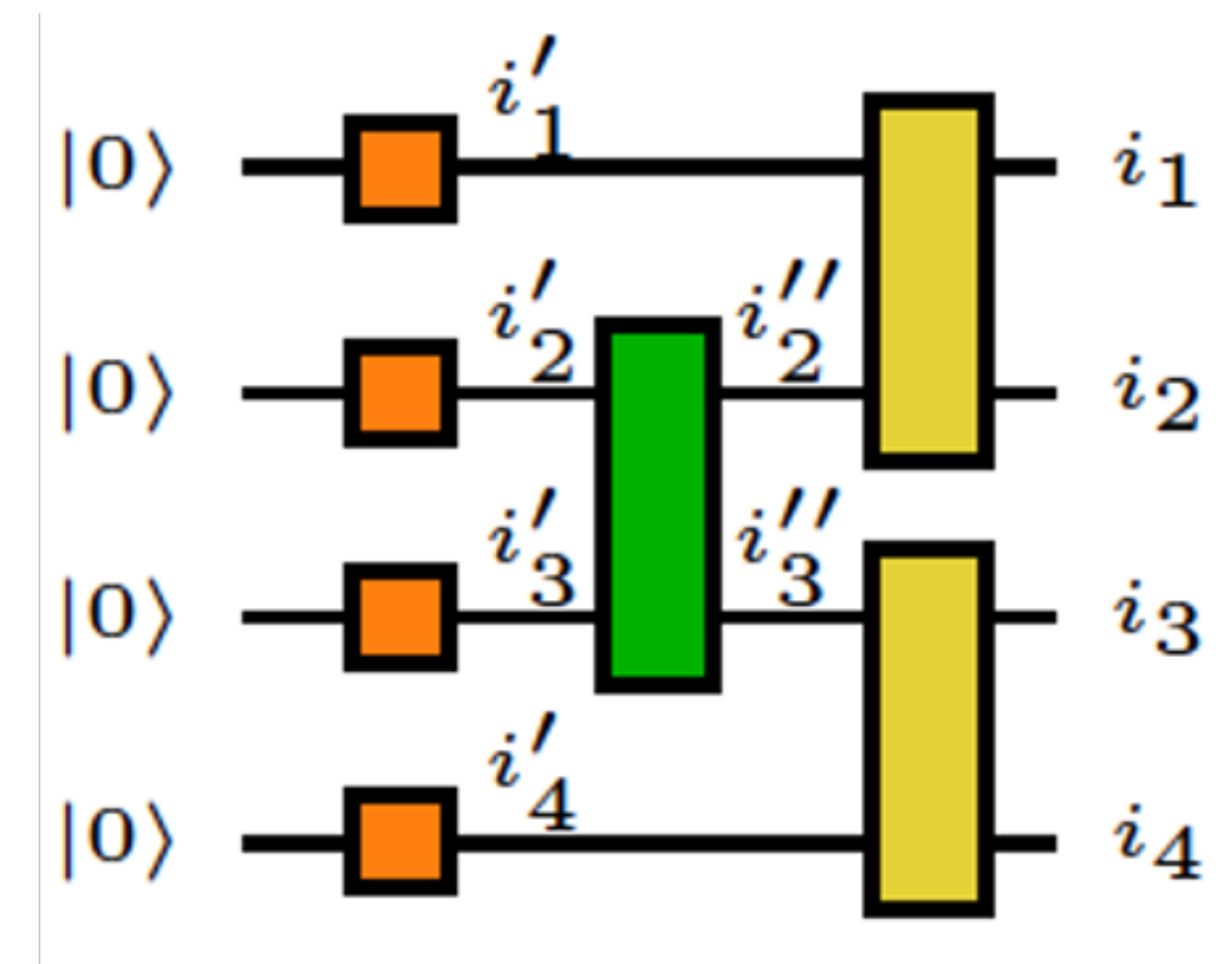
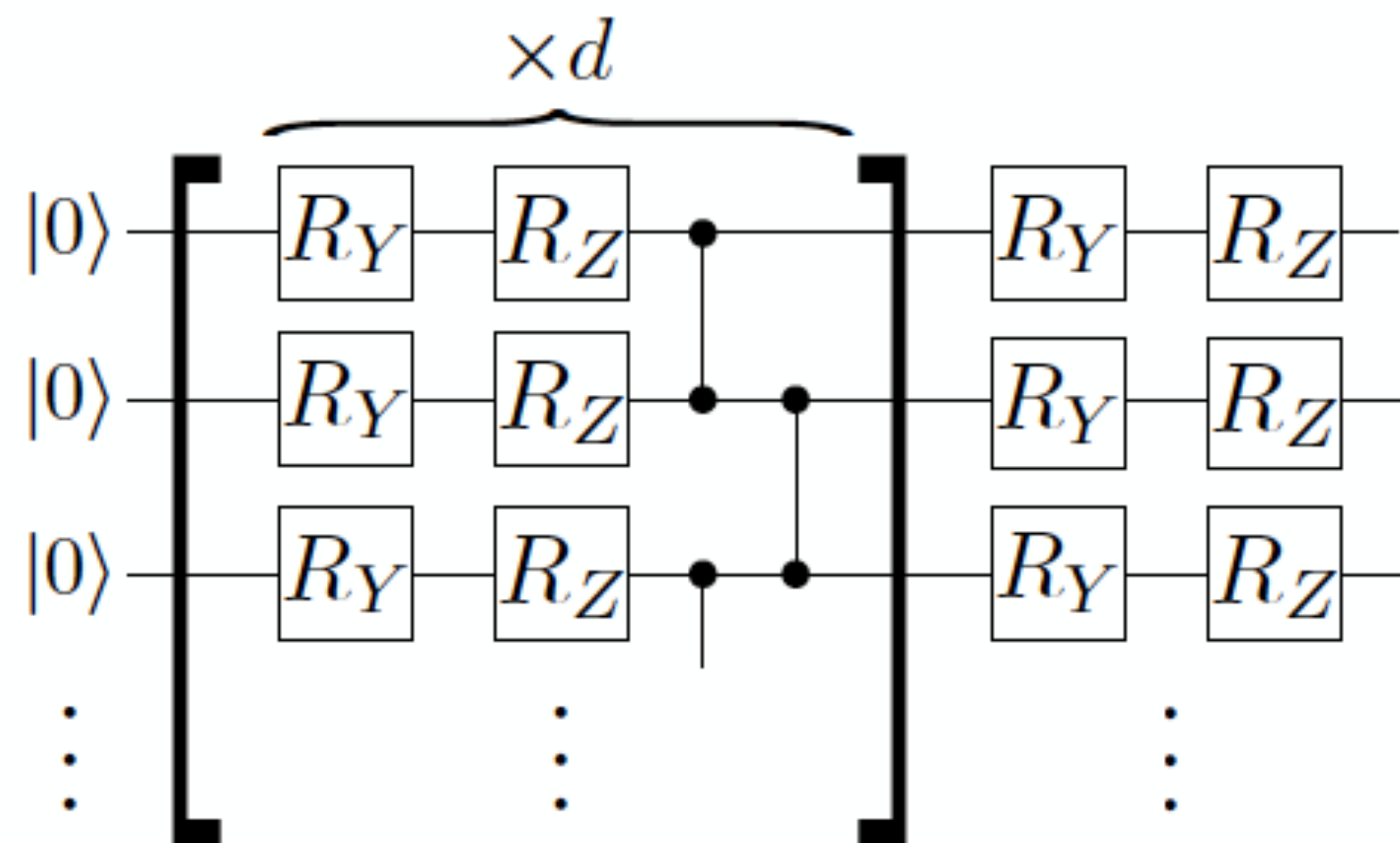


Figure from arXiv:2207.05612

- 量子回路はテンソルネットワークとして表現可能
- 近似的な縮約で解像度可変

量子回路の古典ネットワーク表現 (DBMの場合)

以下の量子回路を考える



N. Yoshioka, et al., Phys. Rev. Lett. **129**, 020502 (2022)

☑RYを再現するDBMのパラメータ変化

$h_{[l]}$ と $d_{[l]}$ を導入し以下のパラメータを設定

$$\Delta a_l = -a_l + i\pi/4$$

$$b'_{[l]} = a_l - i\pi/4$$

$$W'_{j[l]} = W_{lj}$$

$$\Delta W_{lj} = -W_{lj}$$

$$W_{l[l]} = \frac{1}{2} \operatorname{arsinh} \left(\frac{1}{\tan(\theta/2)} \right) + i\frac{\pi}{4}$$

$$W'_{[l][l]} = W_{l[l]}$$

☑RZを再現するDBMのパラメータ変化

$$\Delta a_l = i\frac{\theta}{2}$$

☑CZを再現するDBMのパラメータ変化

$h_{[lm]}$ を導入し以下のパラメータを設定

$$\Delta a_l = i\pi/4$$

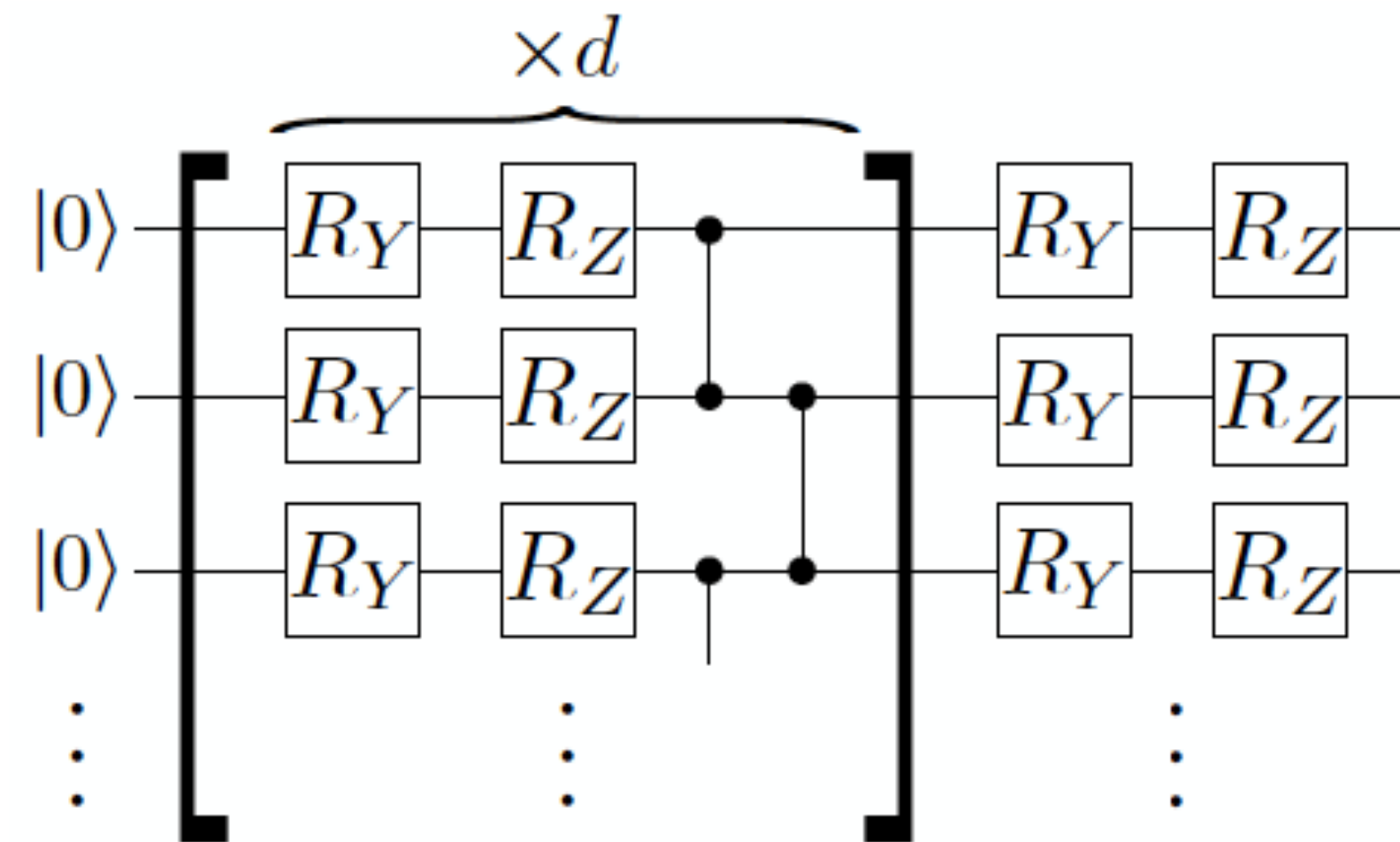
$$\Delta a_m = i\pi/4$$

$$W_{l[lm]} = \frac{1}{2} \operatorname{arsinh} (1) + i\frac{\pi}{4}$$

$$W_{m[lm]} = -W_{l[lm]}$$

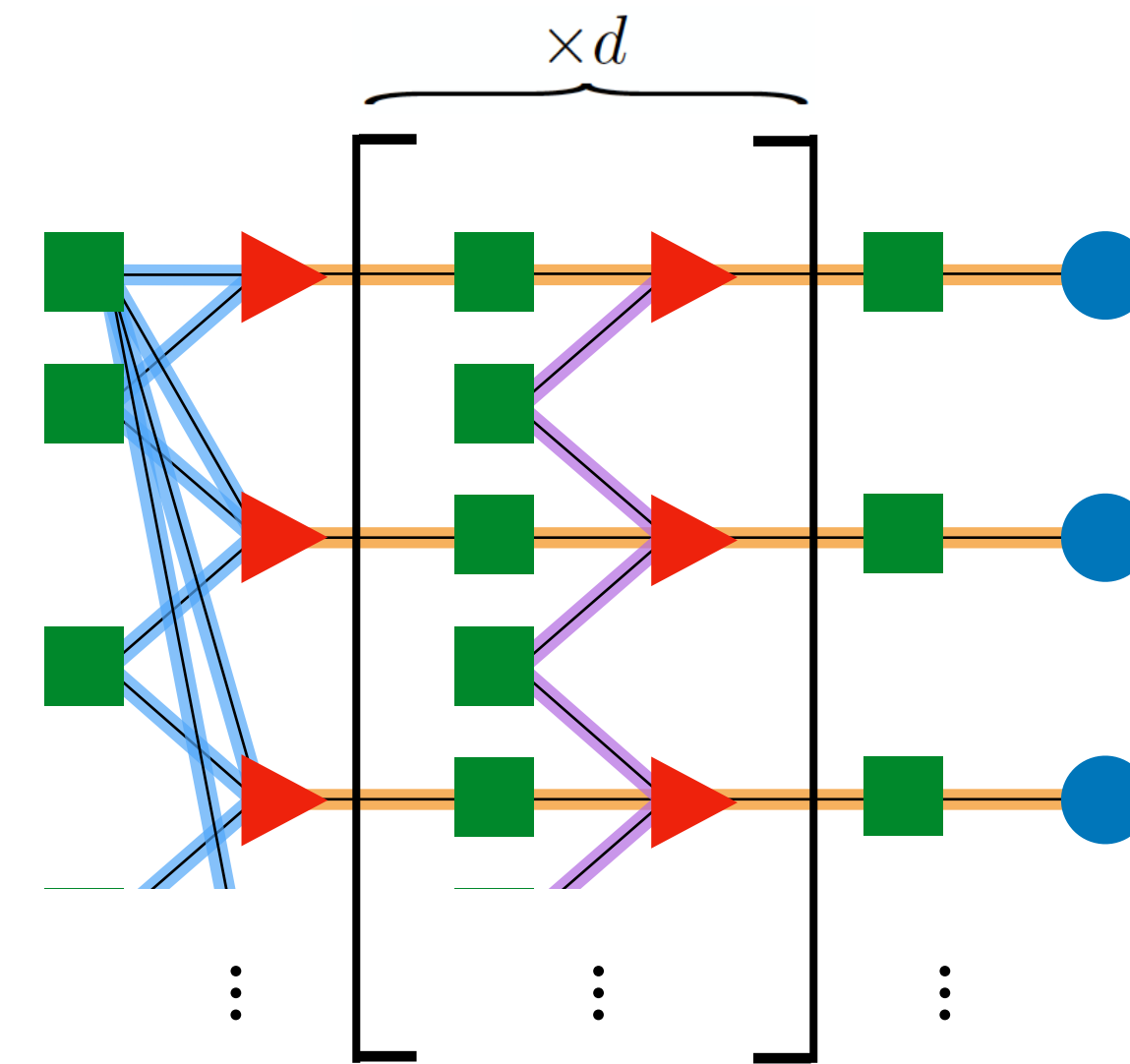
量子回路のDBMへのマッピング

量子回路

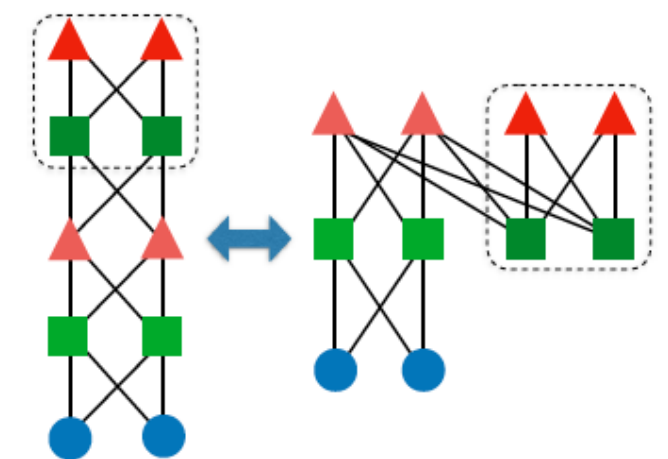


対応するDBM

初期状態関連 RY関連 CZ関連



※常に2層DBMに書き直すことが可能



- 量子回路はDBMに厳密かつ解析的にマッピングすることができる
- このままでは古典コンピュータ上の計算コストのスケールリングは元の量子回路と一緒に
- 情報をできるだけ落とさずよりコンパクトなネットワークが生成できるか？

まとめ

1. 制限ボルツマンマシンを用いた変分法の進展

- 量子状態を人工ニューラルネットワークに数值的・近似的に埋め込み
- ベンチマークを超えて物理の難問（フラストレーションのある系やフェルミオン系）に挑戦できるフェーズへ

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

- 量子状態を人工ニューラルネットワークに解析的に埋め込み
- 量子古典マッピングの新たなフレームワークを提供（DBMの高い表現能力によって実現）

3. （おまけ）量子回路状態を表す深層ボルツマンマシンの解析的な構築

- 量子回路状態はDBMによって表現可能
- 量子アルゴリズム開発にどう貢献するか？



なぜ有限温度？

量子揺らぎ＋熱揺らぎ：数値手法における挑戦的課題（特に2次元系）

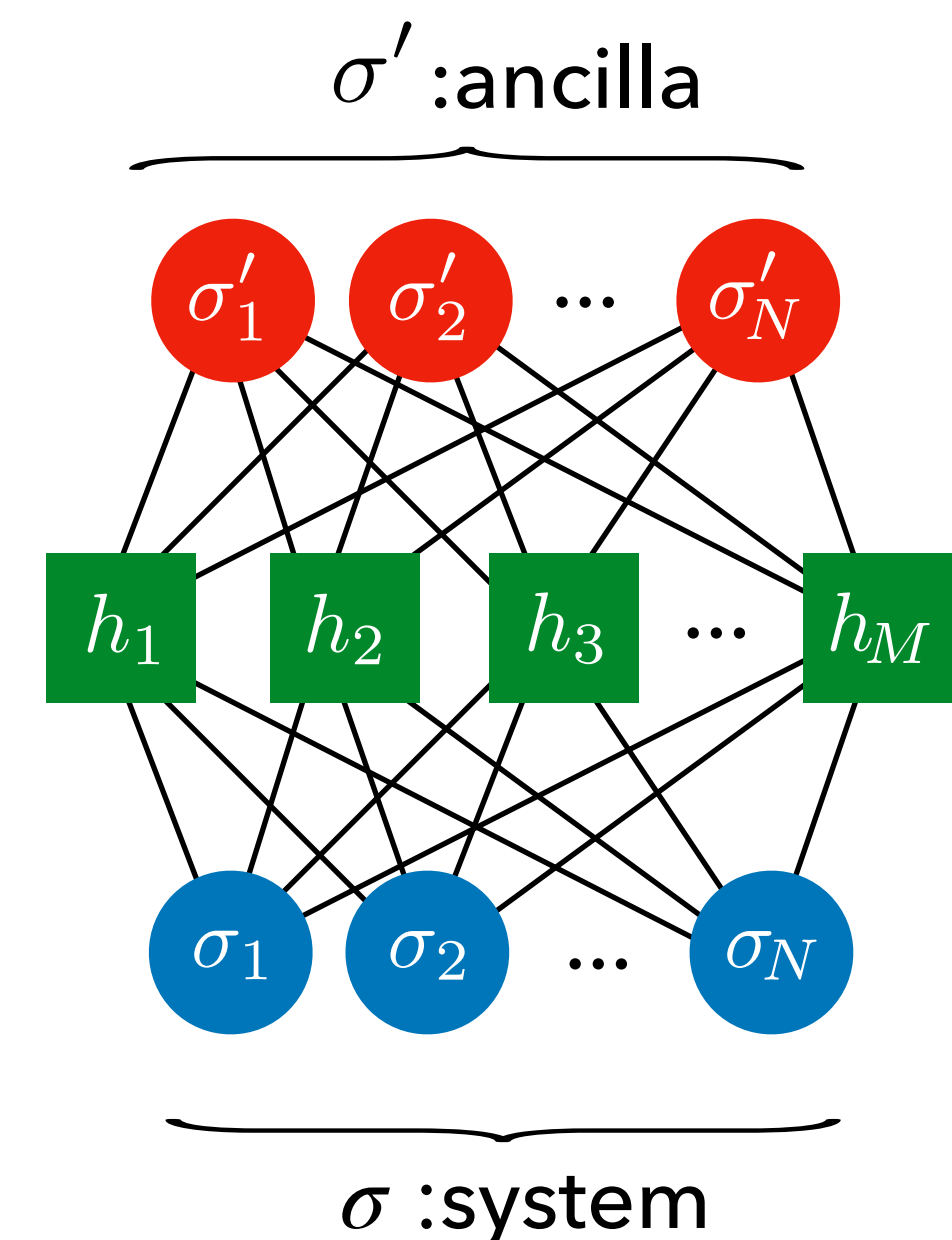
- テンソルネットワーク → 主に1次元系への適用（最近は2次元系への拡張がなされている）
- 動的平均場理論 → 高次元極限で厳密、2次元系への適用は精度が落ちる
- 熱的純粋量子状態(TPQ) → 系のサイズに制限あり

ニューラルネットワークと純粋化を用いた新たなアルゴリズム

有限温度の密度行列 = 拡張された系の純粋状態（+ アンシラ自由度をトレースアウト）

ボルツマンマシンを用いた純粋化（purification）

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{1}{Z} e^{-\beta H} = \text{Tr}_{\mathcal{A}} [|\Psi_T^{(\text{DBM})}\rangle \langle \Psi_T^{(\text{DBM})}|] \\ &= \frac{1}{Z} \text{Tr}_{\mathcal{A}} [e^{-\beta H/2} | \Psi_{T=\infty}^{(\text{DBM})}\rangle \langle \Psi_{T=\infty}^{(\text{DBM})}| e^{-\beta H/2}]\end{aligned}$$



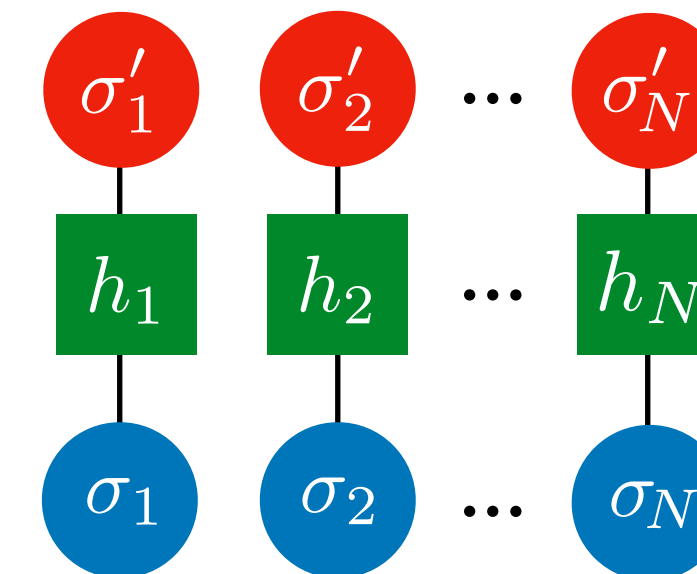
ステップ(I): 無限温度における混合状態の純粋化

無限温度に対応する拡張された系の純粋状態

$$|\Psi_{T=\infty}\rangle = \bigotimes_i \frac{(|\uparrow\downarrow'\rangle + |\downarrow\uparrow'\rangle)_i}{\sqrt{2}}$$



対応するボルツマンマシン



$$\Psi(\sigma, \sigma') = \prod_i 2 \cosh \left[i \frac{\pi}{4} (\sigma_i + \sigma'_i) \right]$$

ステップ(II): ハミルトニアンによる虚時間発展 (温度発展)

$$|\Psi_T\rangle = e^{-\beta\mathcal{H}/2} \otimes \mathbb{1}' |\Psi_{T=\infty}\rangle$$

確率的再配置(SR)法を使用: 変分状態の表現能力の範囲内でできるだけ正確に虚時間発展を再現

S. Sorella, PRB **64**, 024512 (2001)

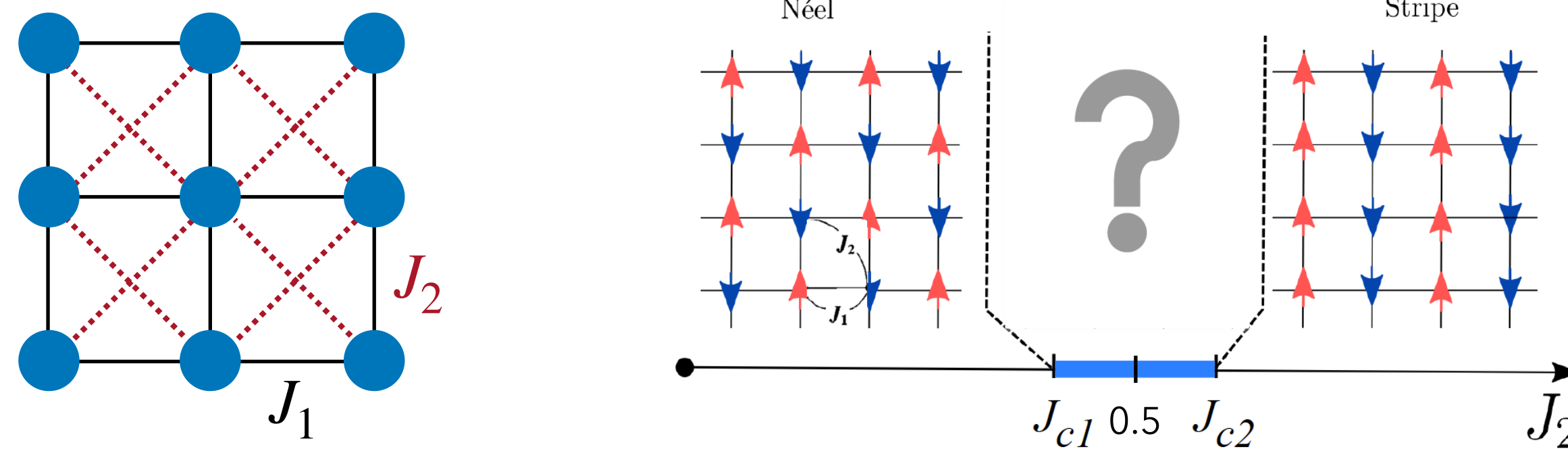
$$\underbrace{\delta\mathcal{W}}_{\text{パラメータ変化}} = \arg \min_{\delta\mathcal{W}} \left(\mathcal{F} \left(\underbrace{e^{-2\delta\tau\mathcal{H}} |\Psi_{\mathcal{W}}\rangle}_{\text{厳密な発展}}, \underbrace{|\Psi_{\mathcal{W}+\delta\mathcal{W}}\rangle}_{\text{変分状態による近似}} \right) \right) \quad \mathcal{F} : \text{フビニ・スタディ計量}$$

$$= -\underbrace{\delta\tau}_{\text{モンテカルロ法で計算}} \underbrace{S^{-1}}_{\text{フビニ・スタディ計量テンソル}} \partial_{\mathcal{W}} \langle \mathcal{H} \rangle$$

フラストレーションのある量子スピン系への適用

Y. Nomura*, N. Yoshioka*, and F. Nori,
Phys. Rev. Lett. **127**, 060601 (2021)

2次元正方格子上の反強磁性 J_1 - J_2 ハイゼンベルク模型への適用



- TPQ ($J_2=0.5$) やQMC ($J_2=0$) の結果と良い一致を示す
- 計算コストは $O(N_h N^2)$ cf. TPQは指数関数的にコストが増える
 N : サイト数, N_h : 隠れスピンの数
- 物性探索のためのニューラルネットワーク手法の開発を大きく促進

6x6 lattice, total $S_z=0$, 周期境界条件

シンボル: 本手法 (隠れスピン数) = $8N$

実線(reference): QMC ($J_2=0$), TPQ ($J_2=0.5$)

