社会連携・産学協創推進室
マテリアルズ・インフォマティクスの現状と将来展望

量子多体問題と機械学習

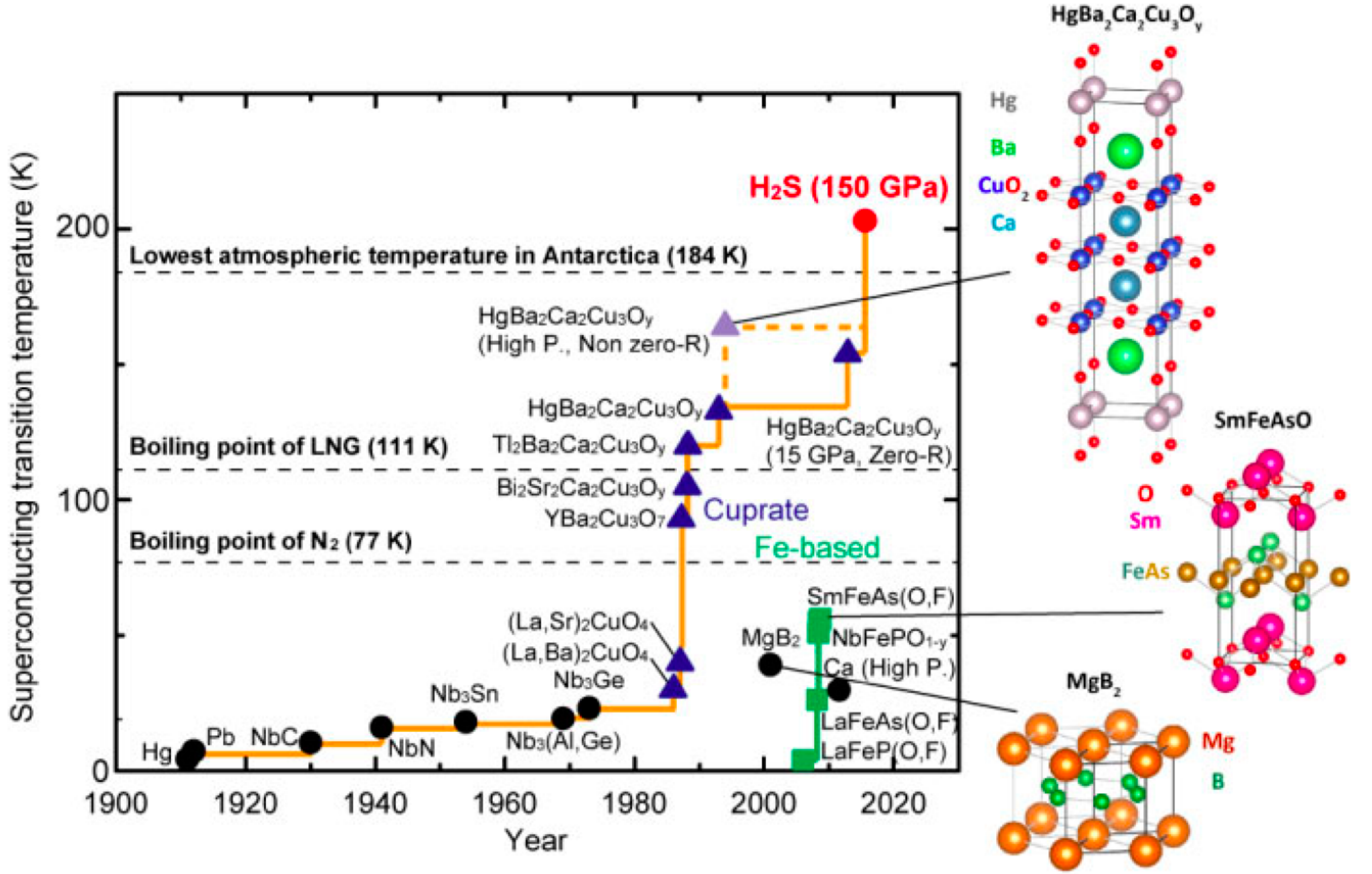
山地洋平
東京大学大学院工学系研究科物工学専攻
計算科学アライアンス特任准教授
Youhei Yamaji
Department of Applied Physics, The University of Tokyo

1. 量子多体問題
2. 物理的直感に基づく量子多体系の表現
3. 機械学習+物理的直感に基づく量子多体系の表現
4. まとめと展望

Computational Science Alliance The University of Tokyo

何故量子多体問題を考えるのか

J. G. Bednorz & K. A. Muller, Z. Phys. B Cond. Matt. 64, 189 (1986).
Y. Kamihara, *et al.*, JACS 130, 3296 (2008).
A. P. Drozdov, *et al.*, Nature 525, 73 (2015).



M. Einaga *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. 56, 05FA13 (2017).

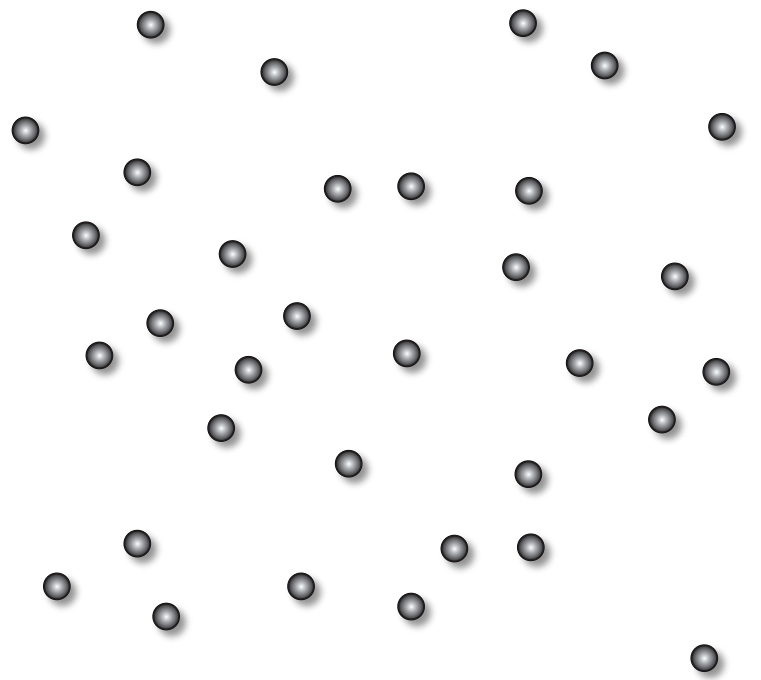
量子多体問題

重ね合わせの原理

$$\vec{\phi} = \sum_{\mu} a_\mu \vec{x}_\mu \qquad (a_\mu \in \mathbb{C})$$

$$\vec{x}_\mu \leftrightarrow \begin{cases} \vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N & (\vec{r}_\ell \in \mathbb{R}^N) \\ |\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_N\rangle & (\sigma_\ell \in \{0, 1\}) \end{cases}$$

ベクトル空間の次元 $\begin{cases} e^{aN} \\ 2^N \end{cases}$



指数関数的に大きな次元

量子多体問題

重ね合わせの原理

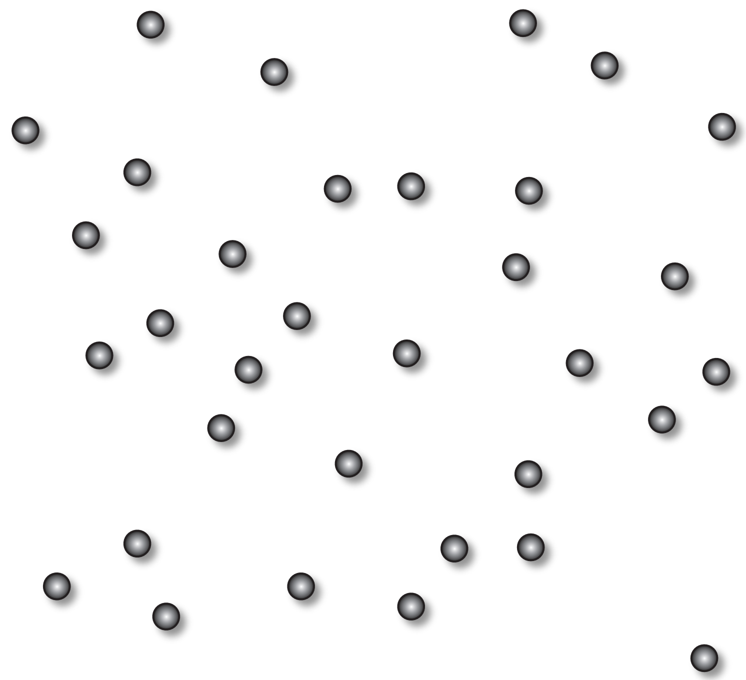
$$\vec{\phi} = \sum_{\mu} a_\mu \vec{x}_\mu \qquad (a_\mu \in \mathbb{C})$$

$$\vec{x}_\mu \leftrightarrow \begin{cases} \vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N & (\vec{r}_\ell \in \mathbb{R}^N) \\ |\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_N\rangle & (\sigma_\ell \in \{0,1\}) \end{cases}$$

ハミルトニアン行列 H

変分原理

$$\frac{\vec{\phi}^\dagger H \vec{\phi}}{\vec{\phi}^\dagger \vec{\phi}} \geq E_0$$



量子多体問題の基底状態→最適化問題

重ね合わせの原理

$$\vec{\phi} = \sum_{\mu} a_\mu \vec{x}_\mu \qquad (a_\mu \in \mathbb{C})$$

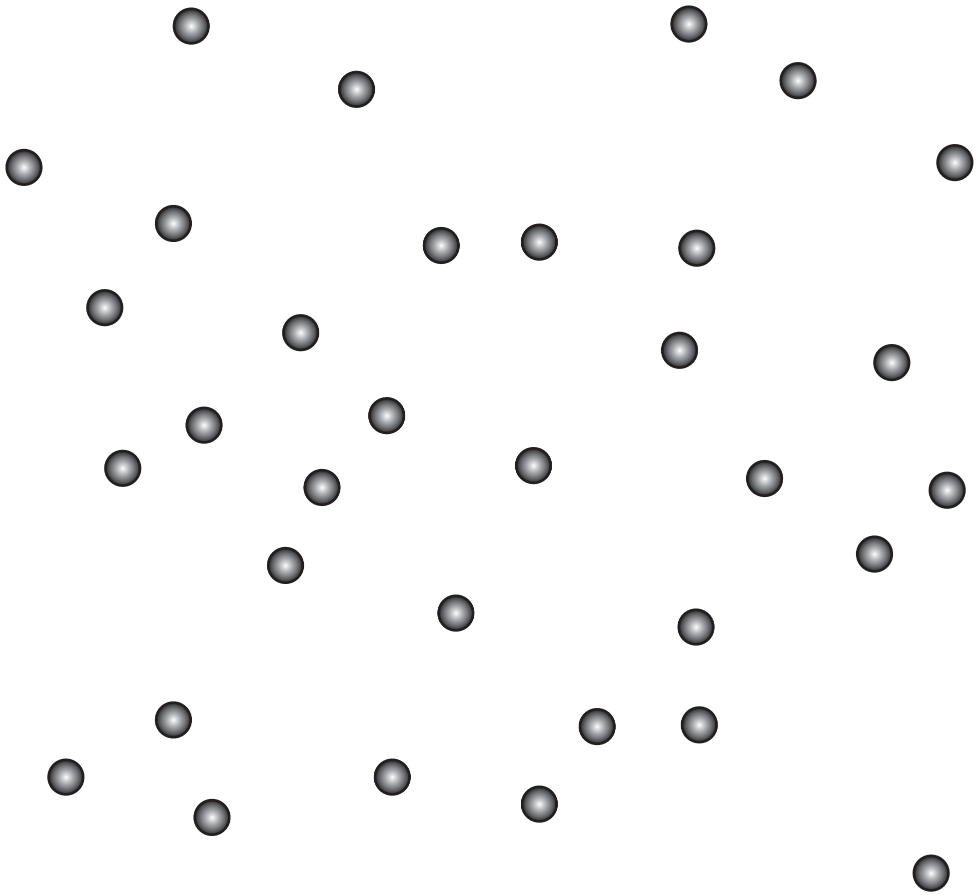
探索空間

指数関数的にたくさんの複素数 a_μ

コスト関数 $$\frac{\vec{\phi}^\dagger H \vec{\phi}}{\vec{\phi}^\dagger \vec{\phi}}$$

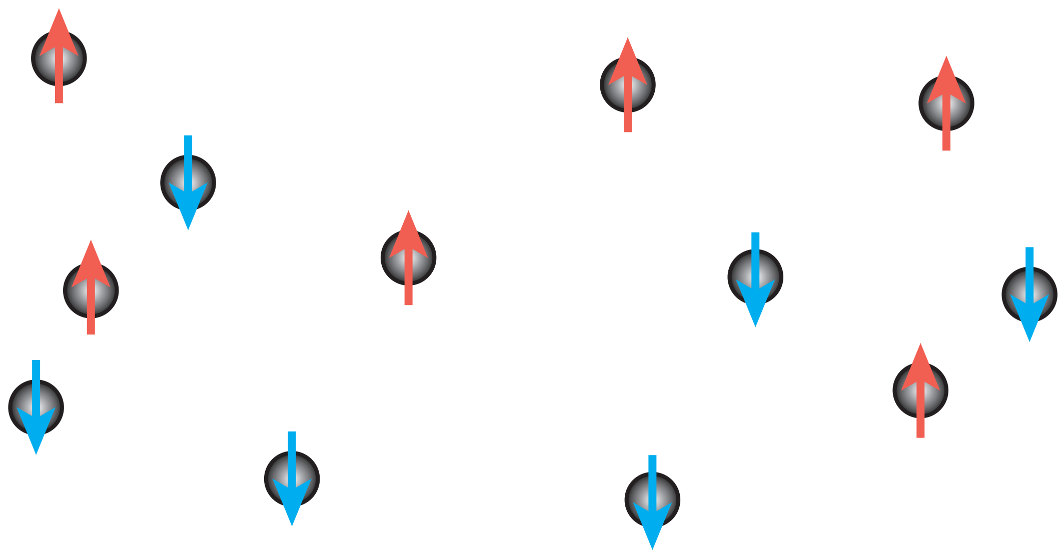
物理的直感による情報の圧縮

指数関数的にたくさんの複素数 a_μ



物理的直感による情報の圧縮

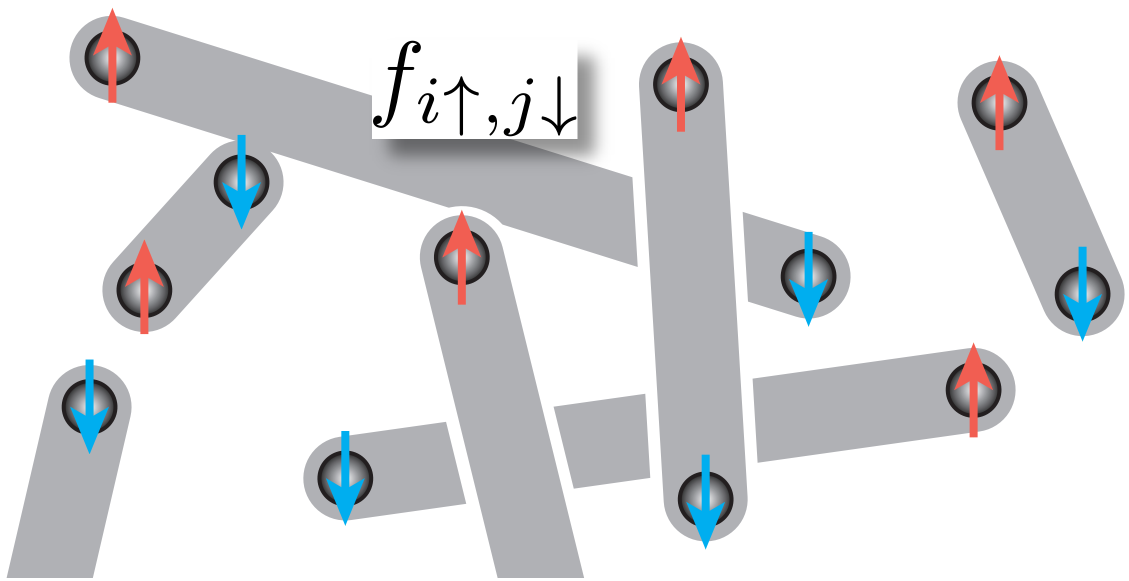
指数関数的にたくさんの複素数 a_μ



ヘリウム3, 電子のスピン自由度

物理的直感による情報の圧縮

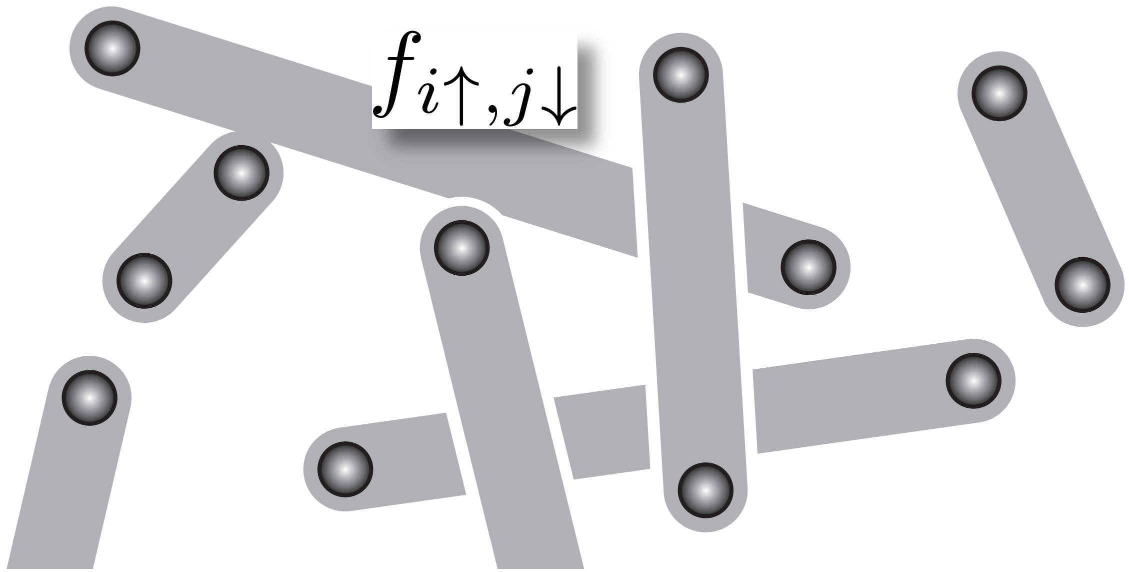
指数関数的にたくさんの複素数 a_μ



$f_{i\uparrow,j\downarrow}$

物理的直感による情報の圧縮

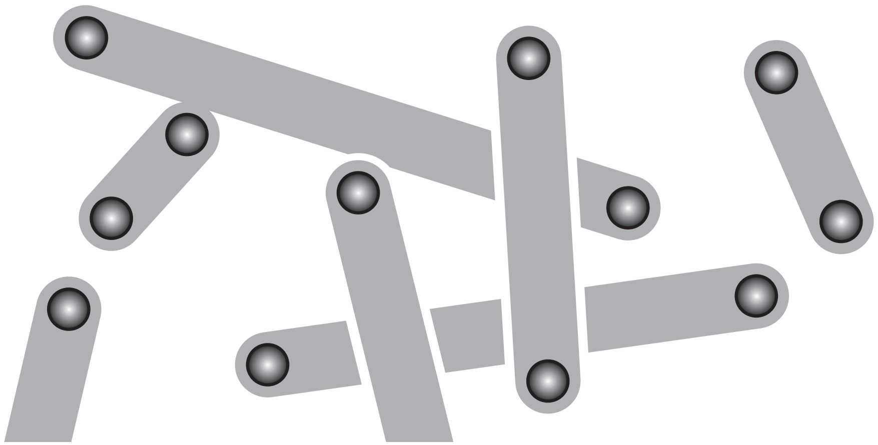
指数関数的にたくさんの複素数 a_μ



スピン一重項/最大エンタングル状態

共鳴原子価結合(RVB)

P. W. Anderson,
Mater. Res. Bull. 8, 153 (1973).
P. Fazekas & P. W. Anderson,
Philos. Mag. 30, 423 (1974).



$$a_\mu = \sum_m \prod_{i,j} f^{(m)}_{i\uparrow,j\downarrow}$$

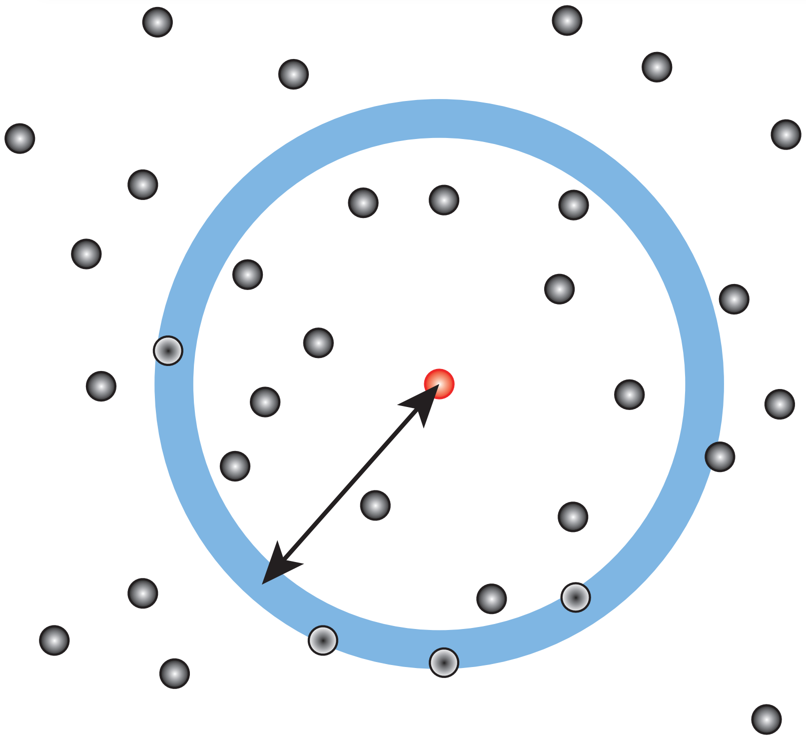
$$e^{aN} \to N^2$$

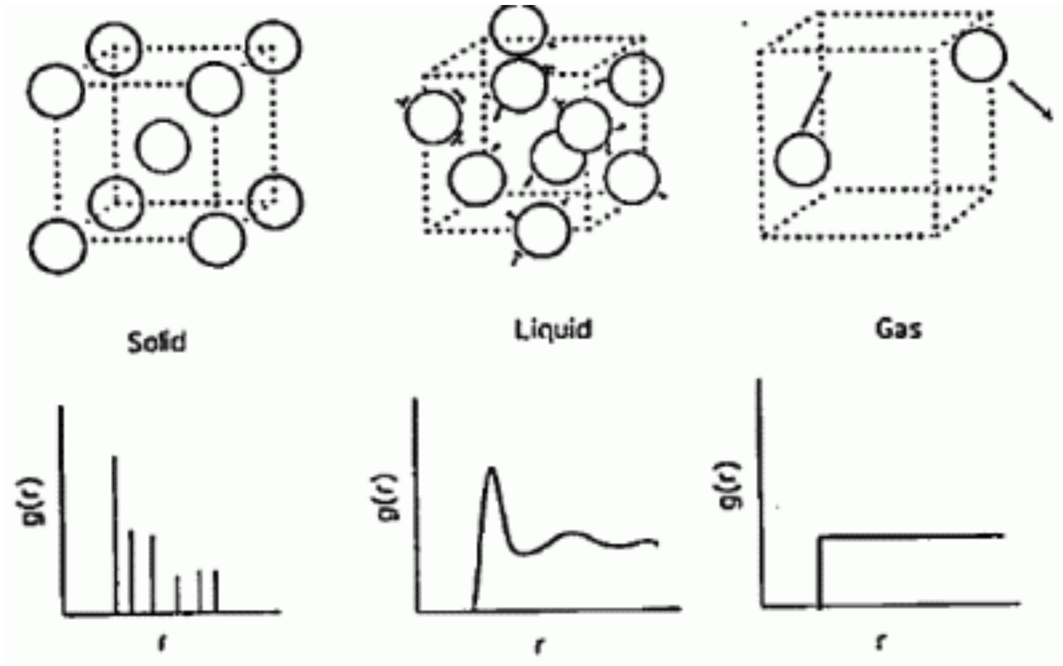
物理的直感による情報の圧縮

ジャストロー-グッツウィラー因子

R. Jastrow. Phys. Rev. 98, 1479 (1955).
M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. 10, 159 (1963).

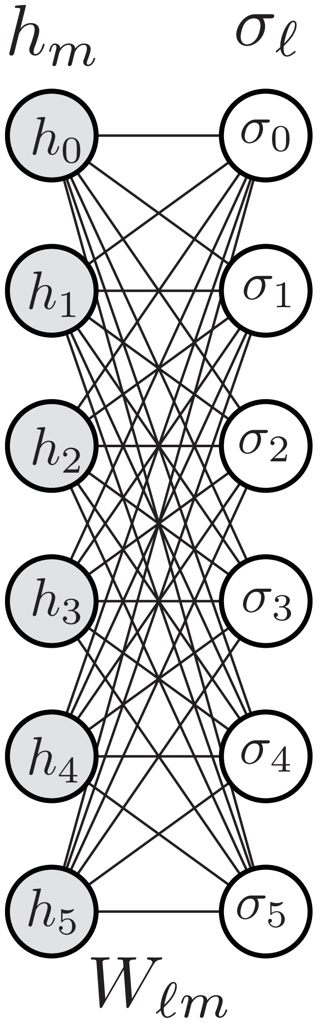
$$a_\mu = \exp[-\sum_{i,j} J(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)] \times \sum_m \prod_{i,j} f^{(m)}_{i\uparrow,j\downarrow}$$





機械学習による情報の圧縮

制限ボルツマン機械による多体量子ビットの基底状態



$$\vec{\phi} = \sum_{\mu} a_\mu \vec{x}_\mu$$

$$\vec{x}_\mu \leftrightarrow |\sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_N\rangle(\sigma_\ell \in \{0,1\})$$

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

a_μ　制限ボルツマン機械

機械学習+物理的直感による情報の圧縮

Y. Nomura, A. S. Darmawan, Y. Yamaji, & M. Imada,
Phys. Rev. B 83, 205152 (2017).

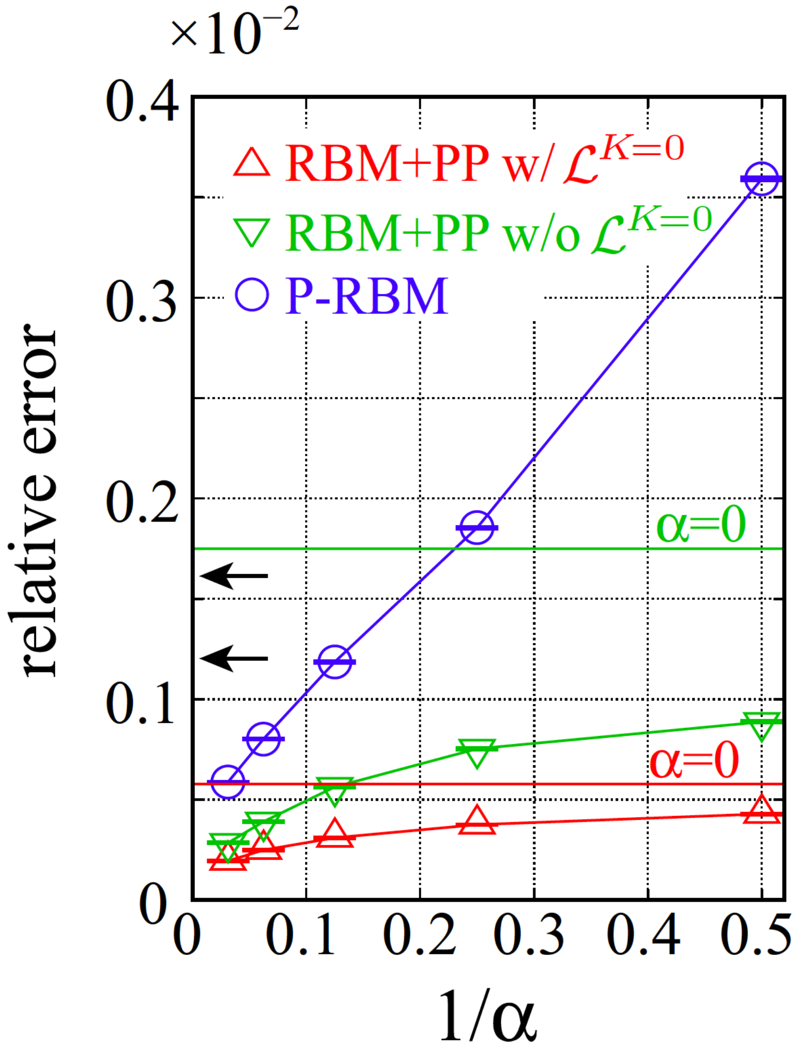
ジャストロー-グッツウィラー因子
→制限ボルツマン機械

$$a_\mu = \exp[-\sum_{i,j} J(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)] \times \sum_m \prod_{i,j} f^{(m)}_{i\uparrow,j\downarrow}$$

多様な量子多体系の新しい記述方法

機械学習+物理的直感による情報の圧縮

Y. Nomura, A. S. Darmawan, Y. Yamaji, & M. Imada,
Phys. Rev. B 83, 205152 (2017).



従来手法を超える精度

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

D. Tahara & M. Imada,
J. Phys. Soc. Jpn. 77, 114701 (2008).
T. Misawa, *et al.*, arXiv:1711.11418.

機械学習→量子多体物理

情報圧縮についての教育活動

大学院講義『計算科学における情報圧縮』
(工学系, 理学系,情報理工,新領域)

大久保　毅 博士
理学系研究科物理学専攻
計算科学アライアンス特任講師

Computational
Science
Alliance
The University of Tokyo

-疎性	L1正則化
-低ランク性	特異値分解
-低エンタングルメント	行列積表現

行列積表現

$$a_\mu \simeq A(\sigma_1)A(\sigma_2)\cdots A(\sigma_N)$$

$$A(\sigma_\ell) \in D \times D \text{ matrix}$$

$$2^N \to N \times D^2$$

機械学習＋量子多体物理

Y. Nomura, A. S. Darmawan, Y. Yamaji, & M. Imada,
Phys. Rev. B 83, 205152 (2017).

機械学習＋量子多体物理

Y. Nomura, A. S. Darmawan, Y. Yamaji, & M. Imada,
Phys. Rev. B 83, 205152 (2017).

-新しい教育プログラム

-ベイズ推定による新しい観測手法
Y. Yamaji, *et al*.

機械学習←量子多体物理

行列積表現による手書き文字認識

E. Miles Stoudenmire and D. J. Schwab, arXiv:1605.05775

ご静聴
ありがとうございました