

Feedforward 型の NeuralNetwork を用いた多体電子系波動関数の基底状態の解法

乾 幸 地

理化学研究所量子コンピュータ研究センター

1. はじめに

近年の機械学習の発展は物理学にも大きな影響を及ぼしている[1]。機械学習では大量のデータを用いた学習を行うことによって、未知のデータに対しても適切な推論を行うことが可能となる。このような考え方は物理にも応用され、画像解析を用いた相の分類や、STM画像の解析、物質の組成を元にした物性予測、ニューラルネットワークを用いた波動関数近似、特定の系が従う方程式を自動的に発見することなどさまざまな応用がなされている。こういった手法の大きなメリットの一つは、これまで人が物理的な直感や経験則に基づいて考えてきた部分を、柔軟な形で自動的に構築できることである。

とりわけ、ニューラルネットワークによる多体量子系の波動関数近似は、既存手法よりも高い精度を達成したことで大きな注目を集めている。これまでに、制限ボルツマンマシンを用いた研究を皮切りに[2]、畳み込みニューラルネット[3]やガウス過程近似[4]を用いたものなど様々な手法が提案されている。しかしながら、電子系をはじめとするフェルミオン系では、フェルミ粒子の交換に伴う負符号問題のため高い精度の近似には困難である。こういった問題に対処するために、これまでのニューラルネットワークを用いた研究の多くは反交換関係に伴う符号変化の取り扱いにスレーター行列式（またはパフィアン）を用いている[5]。しかし、行列式の計算には粒子数を N とした時に $O(N^3)$ の計算コストがかかり、計算のボトルネックとなっている。そこで我々は、スレーター行列式を用いずにニューラルネットワークに波動関数を近似させる変分計算手法を開発した[6]。

2. フレームワーク

我々の手法では、実空間内の粒子の順序を定義することでフェルミオンの反交換関係に関連する波動関数の符号変化が明示的に計算し、波動関数の残りの部分を全結合ニューラルネットワーク (FCNN) によって最適化を行う。粒子配置は一般に

$$|x\rangle = |(\mathbf{r}_1, \sigma_1), (\mathbf{r}_2, \sigma_2), (\mathbf{r}_3, \sigma_3), \dots, (\mathbf{r}_N, \sigma_N)\rangle$$

のように書くことが出来る。ここで \mathbf{r}_i は i 番目の実空間座標、 σ_i はスピンなどの内部自由度、 N は全粒子数を表す。この時、この $|x\rangle$ の中の粒子の並び順は $I(\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ で定義された自然数 I が小さいものから並ぶとする。仮に順番通りに並んでいない場合には、順番通りになるように並び替えを行う。この並び替えの際に、粒子を入れ替えた回数を p として、 $(-1)^p$ の符号を付与する。これによって、スレーター行列式を用いることなく反交換関係に起因する符号を取り入れる事が可能となる。数値計算コストは、計算の詳細やNNへの入力に応じて、 $O(N) \sim O(N^2)$ とすることが出来た。これは、計算コストが $O(N^3)$ であるスレーター行列式（またはパフィアン）に基づく他の手法よ

りも優れている。さらに、以下の計算上の工夫を行うことにより、最適化の効率を改善することにも成功した。①最適化する目的関数として、エネルギーだけでなくエネルギーの「分散」も取り入れる。②局所エネルギーの不安定性を避けるために、モンテカルロサンプリングの重みを変更し、リウエイティングを行う。③系の対称性によって紐付けられる粒子配置に関しては、その中の「代表」配置のみを計算に取り込む。これら3つの工夫である。

今回用いたニューラルネットワークは図1に示すように、main NNとGJ-type NNの2つのFCNNを組み合わせたものを使って実装した。main NNは、波動関数の符号と振幅の両方を表現し、粒子の数だけでなくそれらの積も入力として含めるようにしている。一方、GJ-type NNは、相関効果を取り込むためのグッツウィラージャストロー (GJ) ファクターの一般化となっており、出力は常に正となっている。

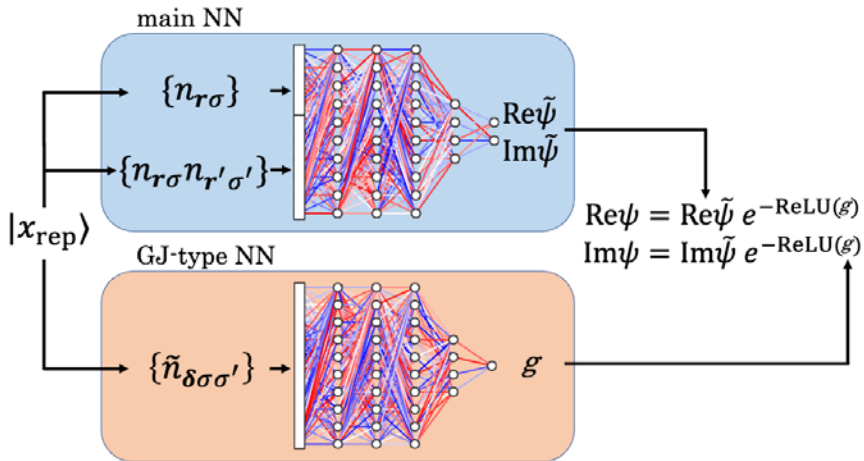


図1 計算で用いたニューラルネットワークのアーキテクチャ

3. モデルと計算結果

我々は、この手法を6×6サイトの2次元正方格子上のハバードモデルに対して適用した。オンサイトクーロンエネルギーUと隣接サイトへのホッピングの比U/t=4に固定している。厳密対角化は計算コスト上実行することは出来ない。そこで、ニューラルネットワークを用いない計算手法の中では非常に精度の高い手法である、多変数変分モンテカルロ法(mVMC) [7]と比較を行った。その結果、我々の手法はmVMCよりも低いエネルギーを達成していることが分かった(図2)。これは我々の手法の方が高い精度で波動関数を近似出来ていることを意味している。論文では、フレームワークで紹介した3つの工夫の効果の検証も行っている。

4. まとめ

我々は、スレーター行列式を用いることなく、ニューラルネットワークによってフェルミオンの多体波動関数を近似的に計算する枠組みを開発した。計算コストを $O(N^3)$ から最大で $O(N)$ にまで下げることができた。さらに、mVMC法と比較して高い精度を出すことも出来た。

さらなる改善のためには、ニューラルネットワークにシステムの対称性を課すとより良い結果が得られると考えられる[8]。また、学習したパラメータを小さなシステムから大きなシステムまで再利用できるアーキテクチャは、計算コストを改善する可能性がある。

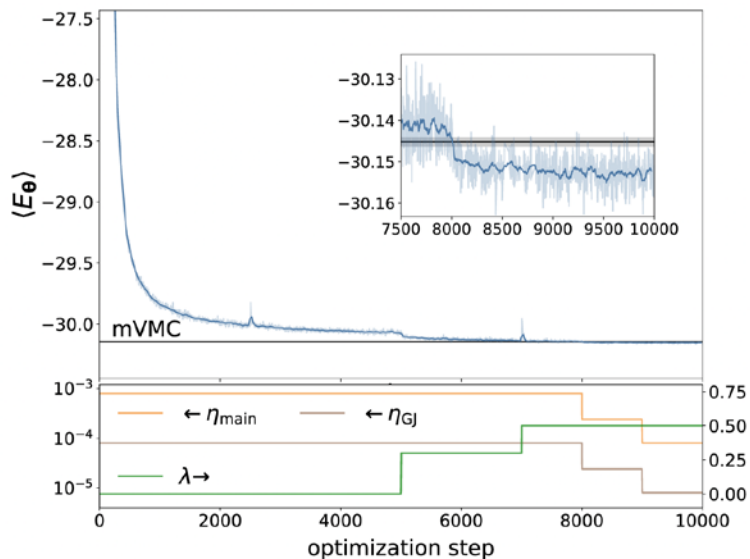


図2 本手法と mVMC とのエネルギーの比較。インセットは最適化プロセス後半の振る舞いを拡大したもの。

参考文献

- [1] G. Carleo, *et. al.*, Machine learning and the physical sciences, *Rev. Mod. Phys.* **91**, 045002 (2019).
- [2] G. Carleo and M. Troyer, Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks, *Science* **355**, 602 (2017).
- [3] K. Choo, *et. al.*, Two-dimensional frustrated J1–J2 model studied with neural network quantum states, *Phys. Rev. B* **100**, 125124 (2019).
- [4] A. Glielmo, *et. al.*, Gaussian Process States: A Data-Driven Representation of Quantum Many-Body Physics, *Phys. Rev. X* **10**, 041026 (2020).
- [5] Y. Nomura, *et. al.*, Restricted Boltzmann machine learning for solving strongly correlated quantum systems, *Phys. Rev. B* **96**, 205152 (2017).
- [6] K. Inui, *et. al.*, Determinant-free fermionic wave function using feed-forward neural networks, *Phys. Rev. Research* **3**, 043126 (2021).
- [7] T. Misawa, *et. al.*, mVMC- open-source software for many-variable variational Monte Carlo method, *Comput. Phys. Commun.* **235**, 447 (2019).
- [8] Y. Nomura, Helping restricted Boltzmann machines with quantum-state representation by restoring symmetry, *J. Phys.: Condens. Matter* **33**, 174003 (2021).