

2023/01/30

第2回量子ソフトウェアワークショップ

量子多体物理と人工ニューラルネットワーク

野村 悠祐

慶應義塾大学



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



E-mail

nomura@appi.keio.ac.jp

量子技術との接点

量子ソフトウェアとHPC・シミュレーション技術の共創によるサステイナブルAI研究拠点

The screenshot shows the homepage of the SQAI (Sustainable Quantum AI Research Hub) website. The header features the SQAI logo and a navigation menu with links to Home, News, Members, Projects, Joint Research, Grants, and Contact. The main content area on the left displays the SQAI logo, a tagline 'サステイナブルな量子AI技術の開拓へ', and a descriptive paragraph about combining quantum machine learning, simulation, and sensing technologies to create a quantum AI base. The right side highlights '5つの研究開発課題' (5 research and development topics) with numbered links: 01 量子機械学習, 02 量子シミュレーション, 03 量子埋め込み (circled in red), 04 量子最適化, and 05 量子HPC.

SQAI
サステイナブル量子AI研究拠点

サステイナブルな
量子AI技術の開拓へ

量子機械学習・量子シミュレーション・量子計測デバイスを結合した量子AI技術を創出し、誰もがシームレスに量子AI技術を利用できる量子HPC基盤を実現します

5つの研究開発課題

01 量子機械学習 →

02 量子シミュレーション →

03 量子埋め込み →

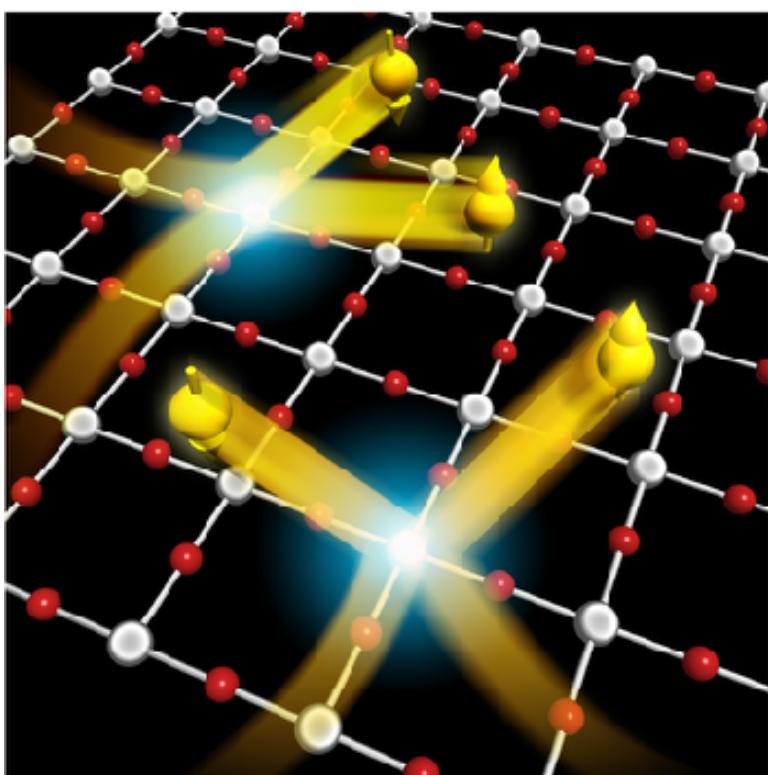
04 量子最適化 →

05 量子HPC →

量子多体物性

現実物質 = 量子多体系

多数の電子(量子力学的自由度)が相互作用



量子多体問題

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

—
量子多体
ハミルトニアン

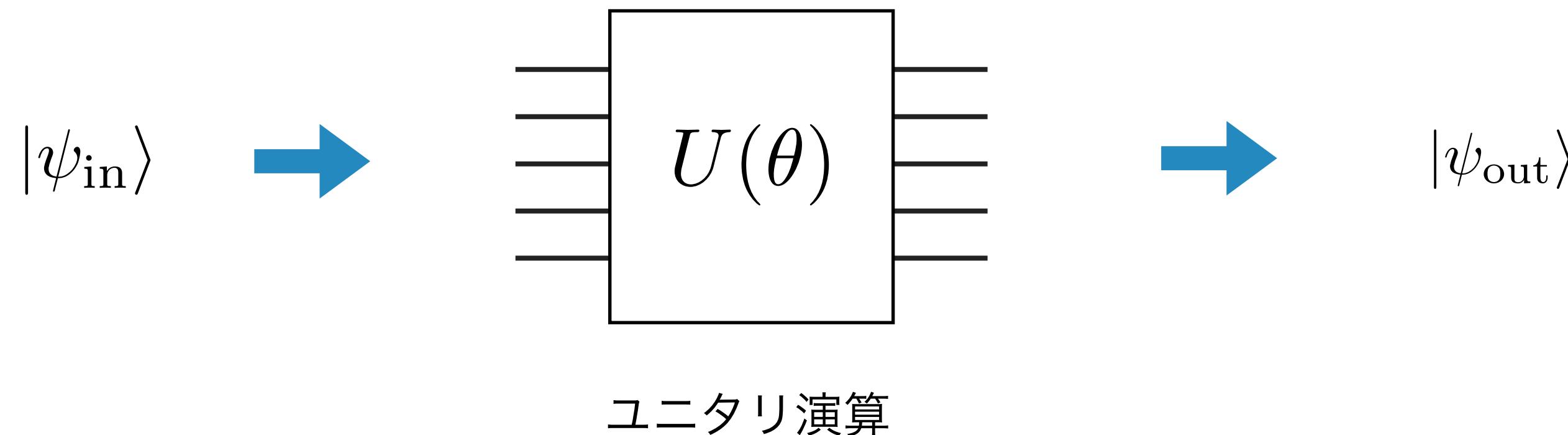
—
量子状態

古典デバイスで厳密に解くには指数関数的計算コスト

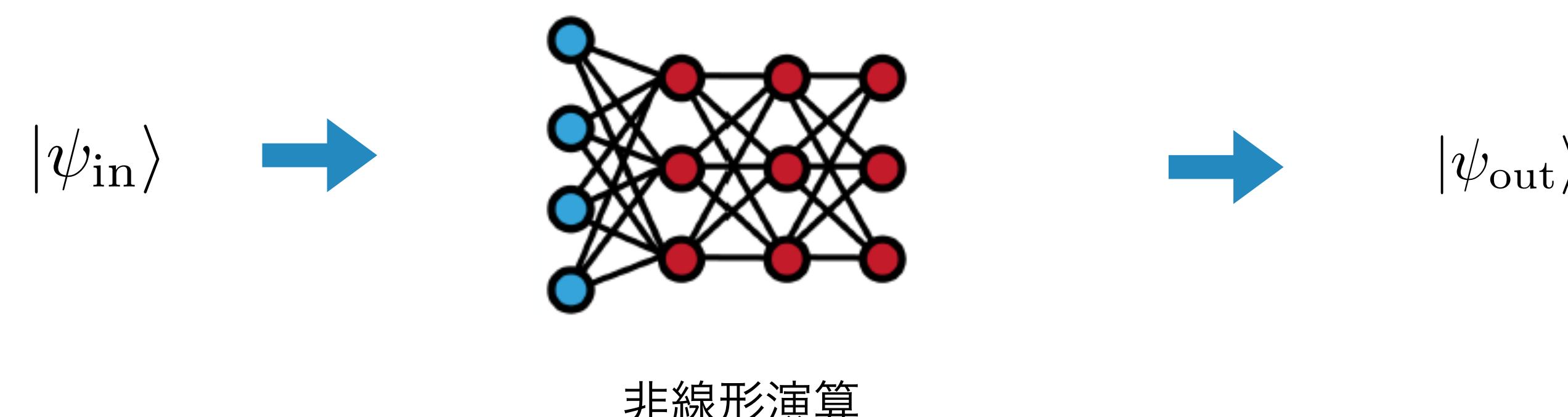
- ▶ 高精度な量子状態計算：物性、素粒子、原子核、量子化学など様々な分野に共通するグランドチャレンジ
- ▶ 量子もつれ・量子多体现象の理解・制御 → 機能物質設計へ

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：古典情報によって量子エンタングルメントを記述



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

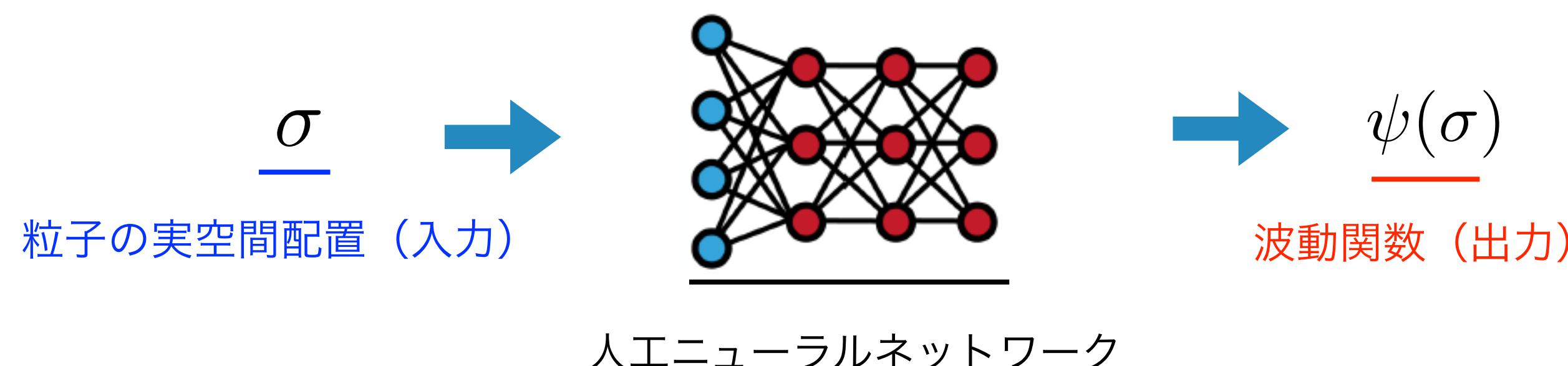
量子多体問題

$$\frac{\mathcal{H}\psi = E\psi}{\text{量子多体ハミルトニアン} \quad \text{量子状態}}$$

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~)

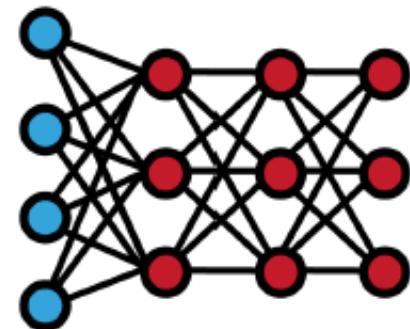
Carleo and Troyer Science 355, 602 (2017)

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



- 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

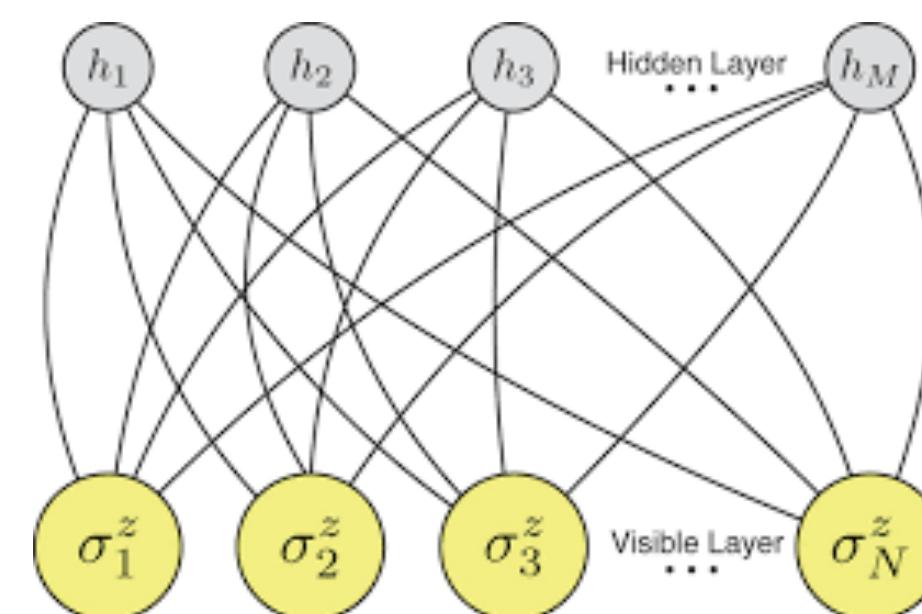
人工ニューラルネットワークとテンソルネットワーク



ニューラルネットワーク

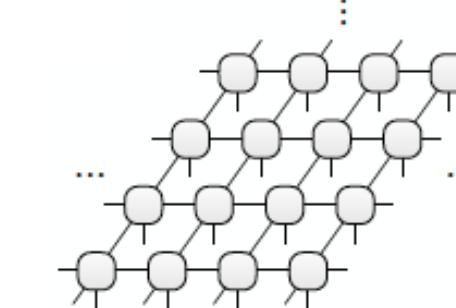
脳の生体ニューロンを模したユニットから構成される数理モデル

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



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

両者ともに系統的改善性があり、両者は相補的

本日の発表内容

1. 制限ボルツマンマシンの数値的な最適化による高精度変分計算

→ 量子状態を人工ニューラルネットワークに数値的・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. 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

本日の発表内容

1. 制限ボルツマンマシンの数値的な最適化による高精度変分計算

→ 量子状態を人工ニューラルネットワークに数値的・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

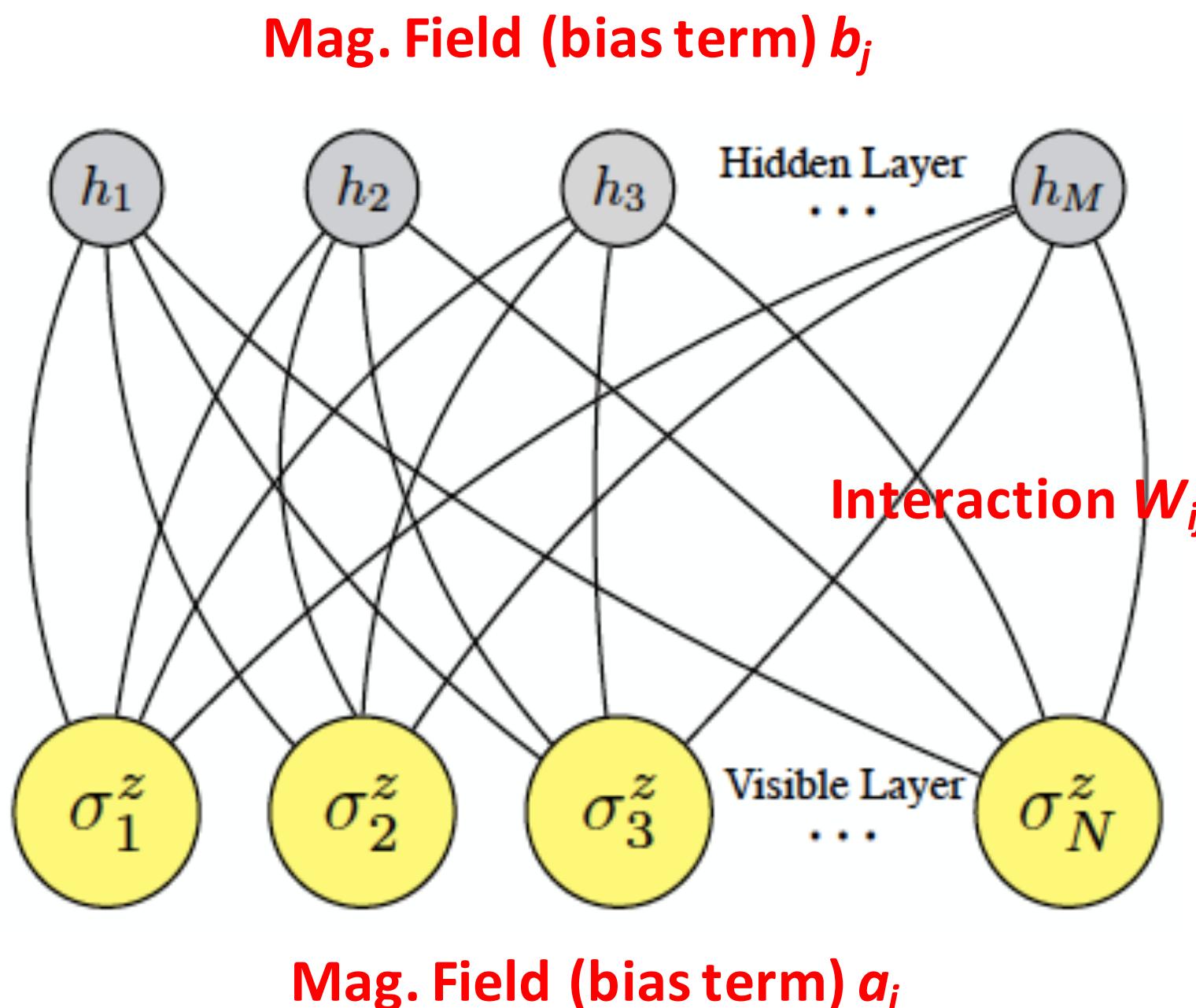
→ 量子状態を人工ニューラルネットワークに解析的に埋め込み

3. 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

制限ボルツマンマシン(RBM)による量子状態表現

Carleo and Troyer Science 355, 602 (2017)



RBM (restricted Boltzmann machine) 波動関数

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

$\sigma^z = (\sigma_1^z, \sigma_2^z, \dots, \sigma_N^z)$: 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（万能近似性能）

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

デモンストレーション：1次元反強磁性ハイゼンベルグ模型（8サイト）

ハミルトニアン

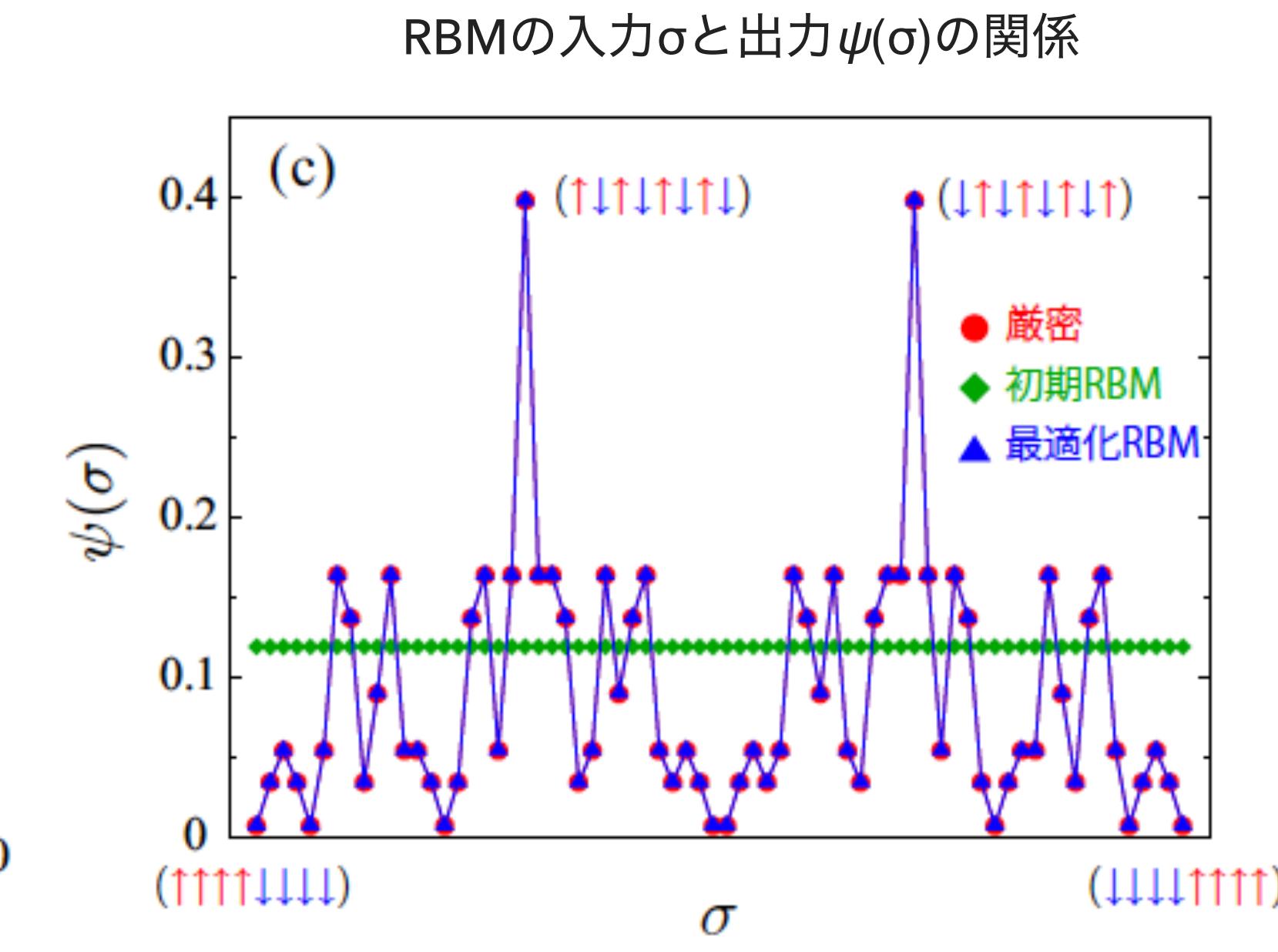
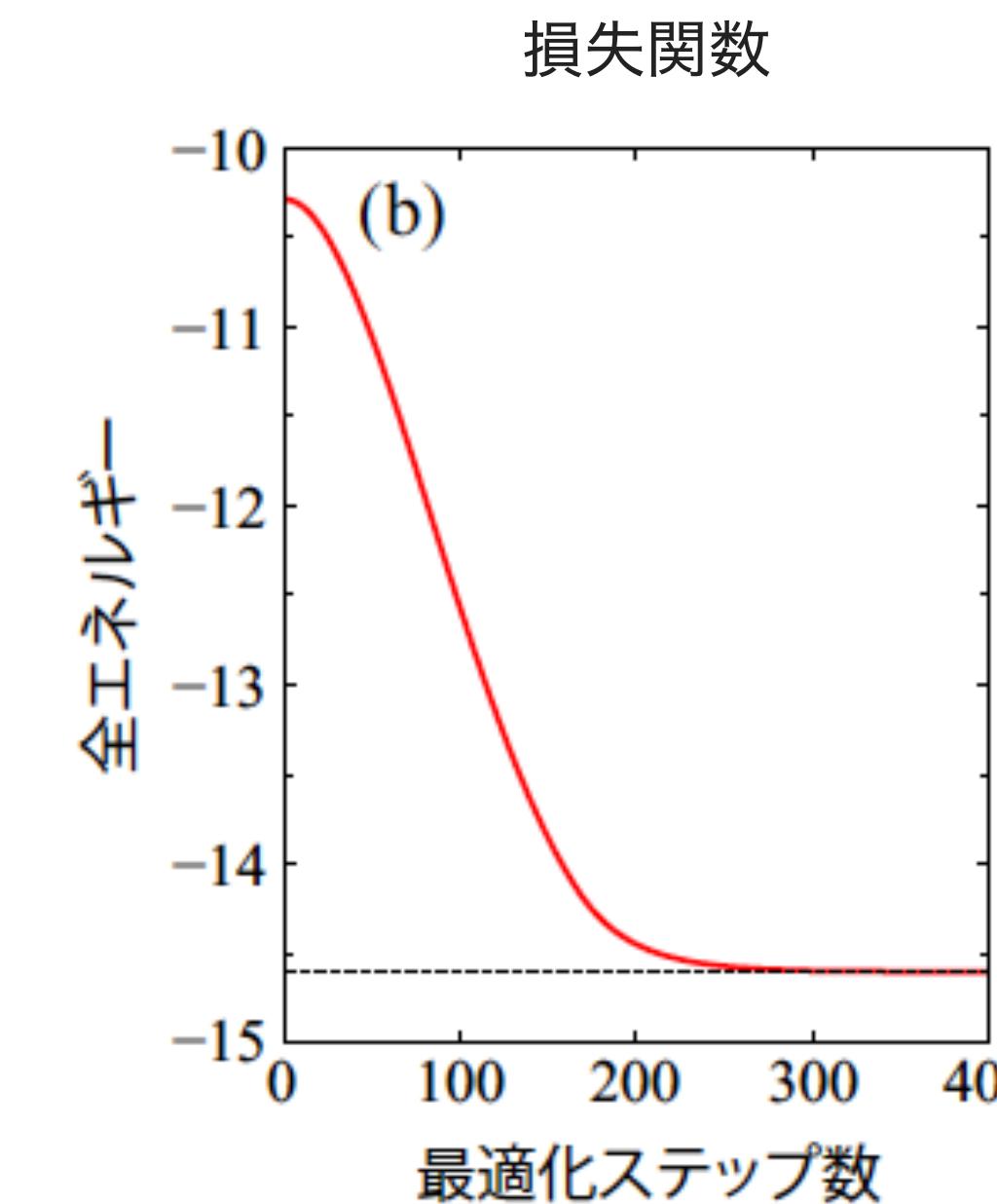
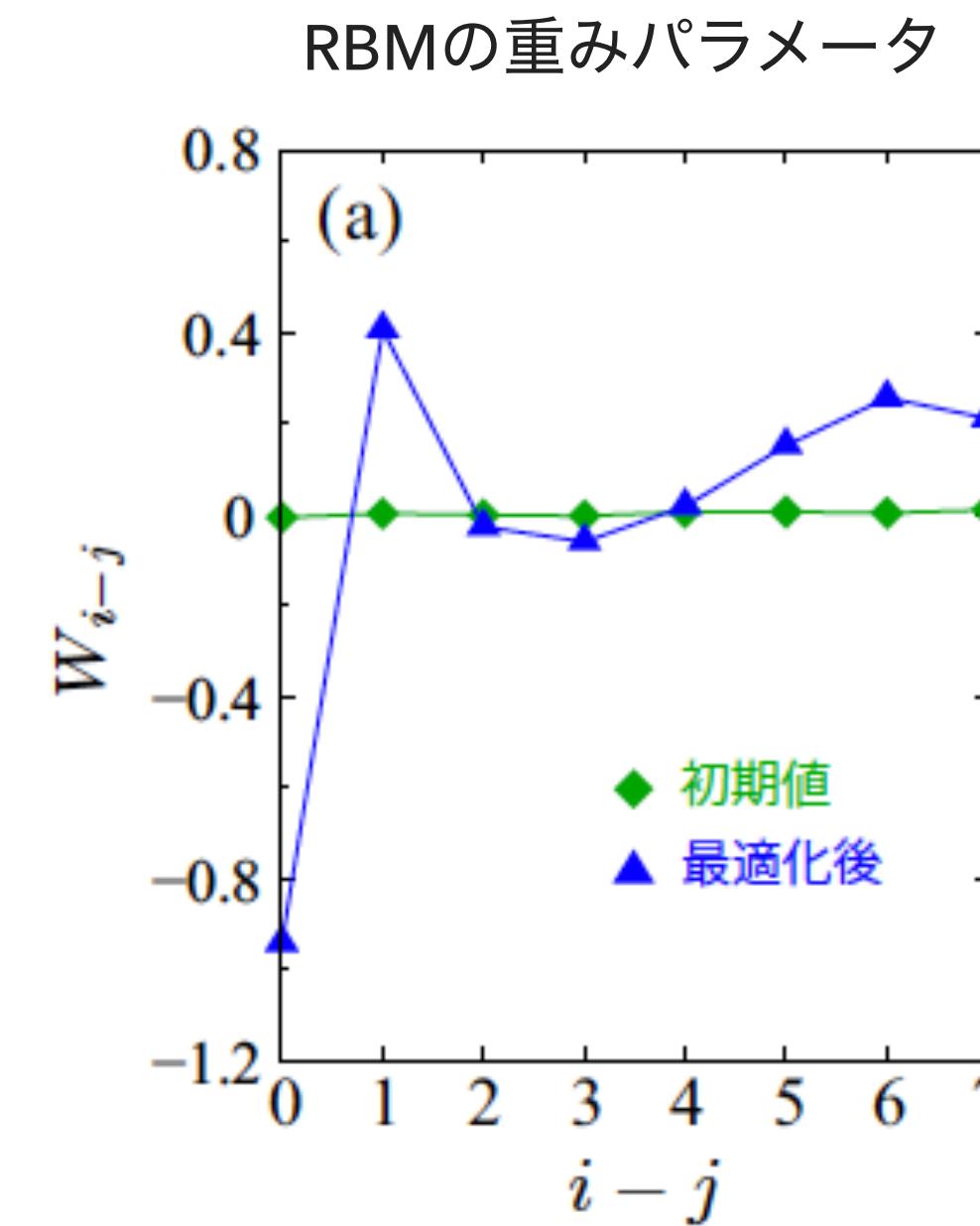
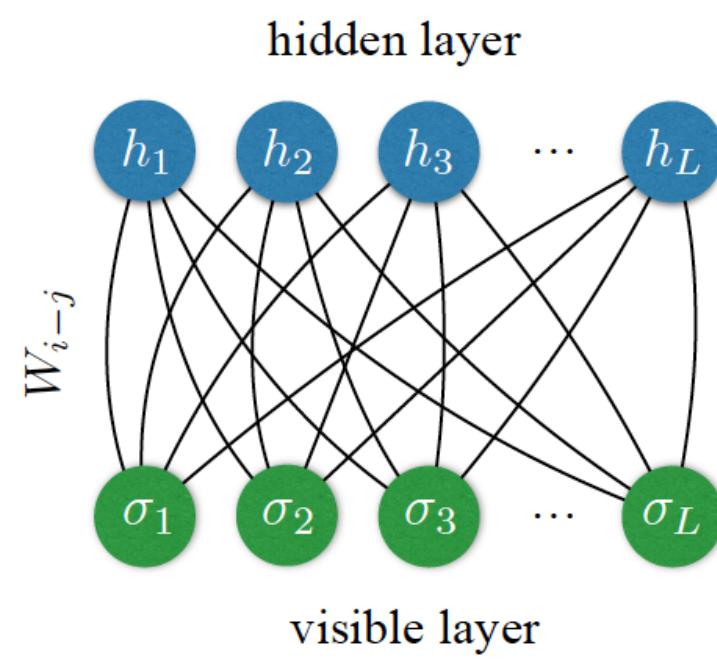
$$\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = J \sum_{(i,j)} (-\sigma_i^x \sigma_j^x - \sigma_i^y \sigma_j^y + \sigma_i^z \sigma_j^z)$$

損失関数＝エネルギー

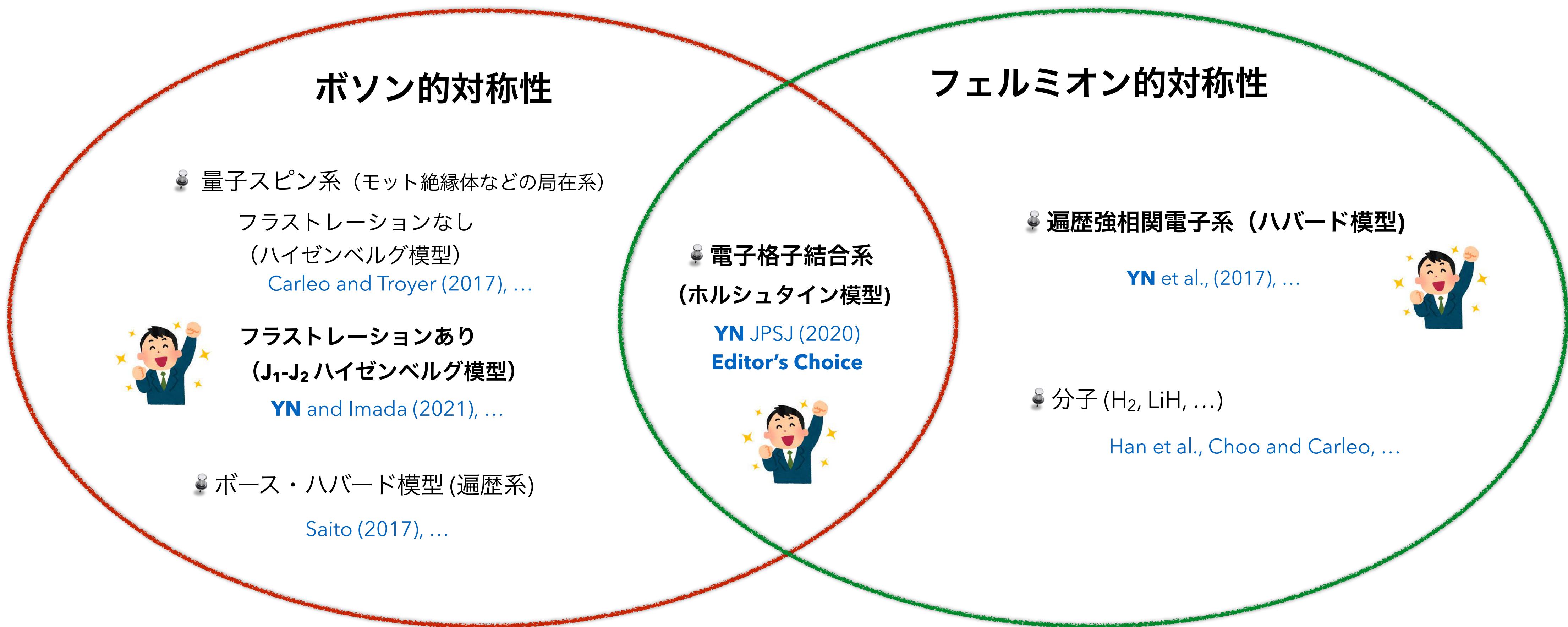
$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

変分原理 $\langle \mathcal{H} \rangle \geq E_0$

制限ボルツマンマシン (RBM)

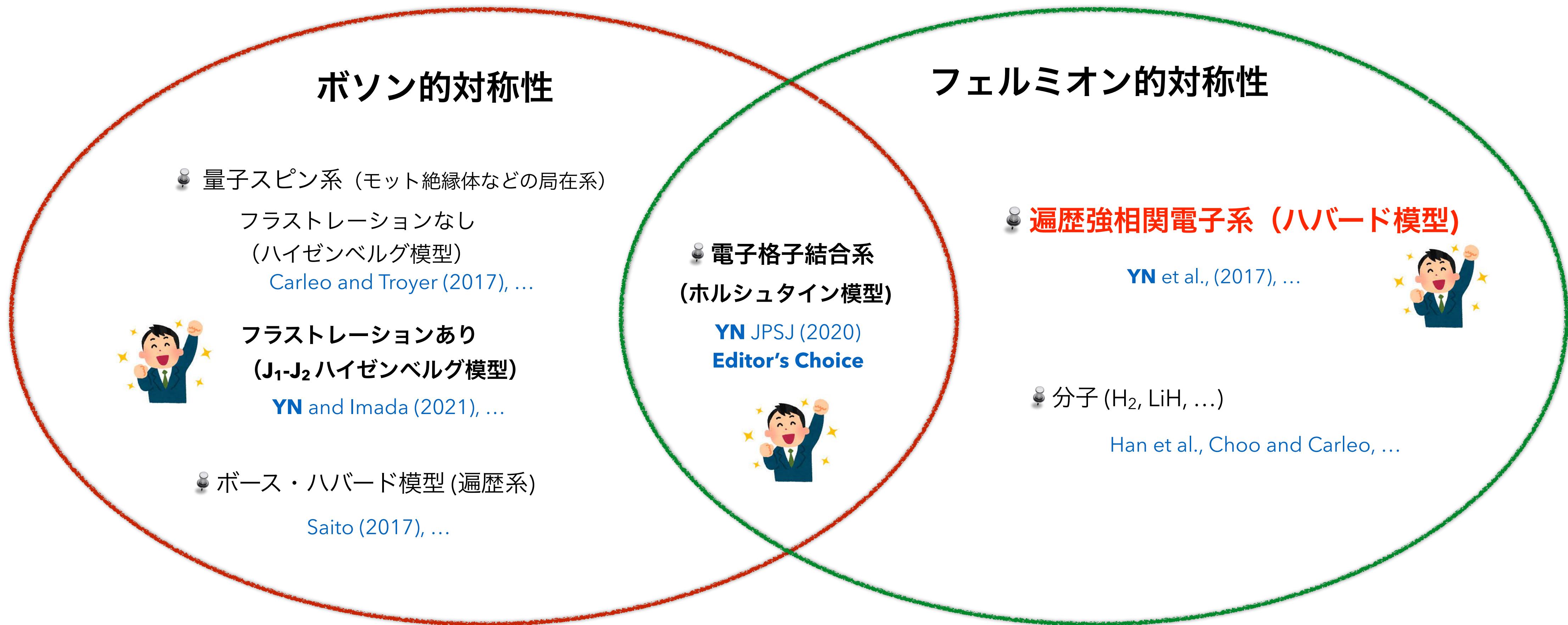


現実の量子多体物質への適用に向けて



人の手で構成された強力な波動関数を凌駕する精度に到達・物理の難問に対する適用が可能に

現実の量子多体物質への適用に向けて



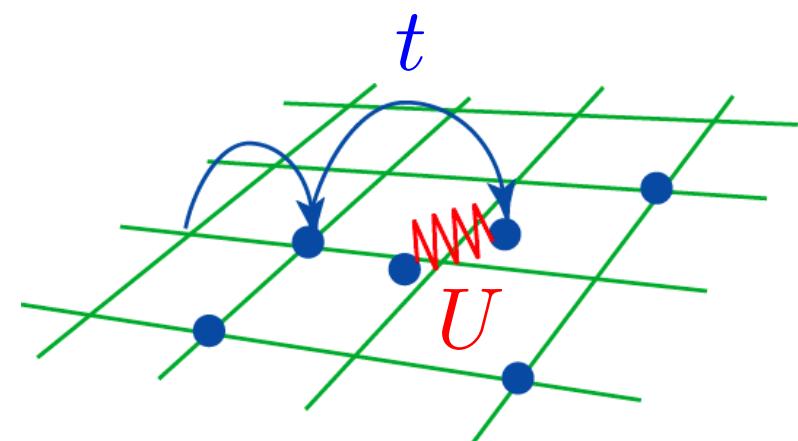
相互作用するフェルミオン系への初めての適用

YN, A. Darmawan, Y. Yamaji, and M. Imada, Phys. Rev. B **96**, 205152 (2017)

フェルミオン系への手法拡張

2次元ハバード模型

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



RBM+PP波動関数

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

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

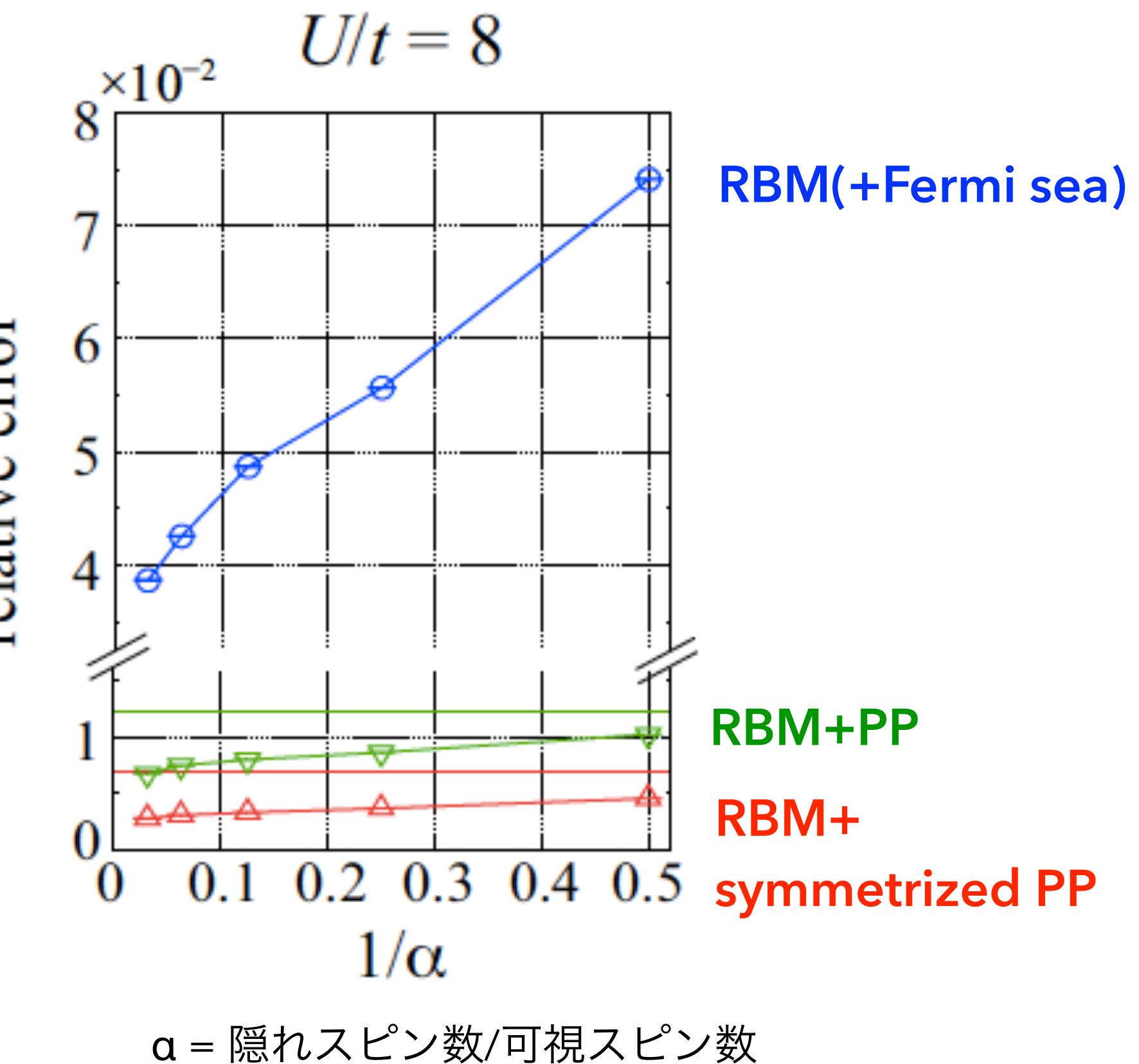
$\rightarrow \frac{\Psi_{\text{exact}}(x)}{\phi_{\text{pair}}(x)}$ を $\mathcal{N}(x)$ で近似

cf. その他のアプローチ： (例) ジョルダン・ウィグナー変換でスピン系にマップ

Choo and Carleo, Yoshioka et al., ...

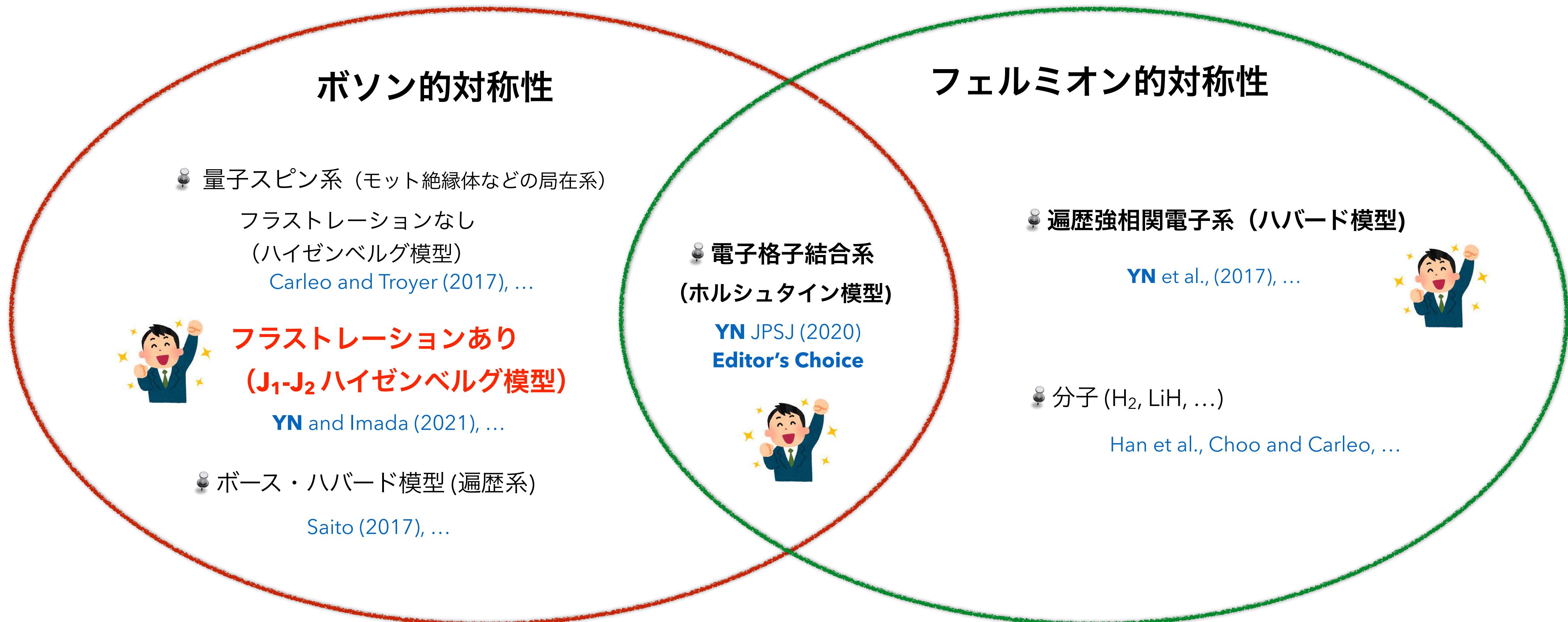
2次元ハバード模型への適用

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



ペア積(PP)状態によりRBムの学習を容易に

現実の量子多体物質への適用に向けて



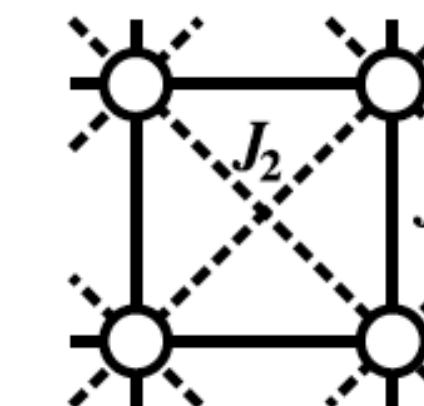
物理における挑戦的問題に適用・非自明な量子もつれを解明

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

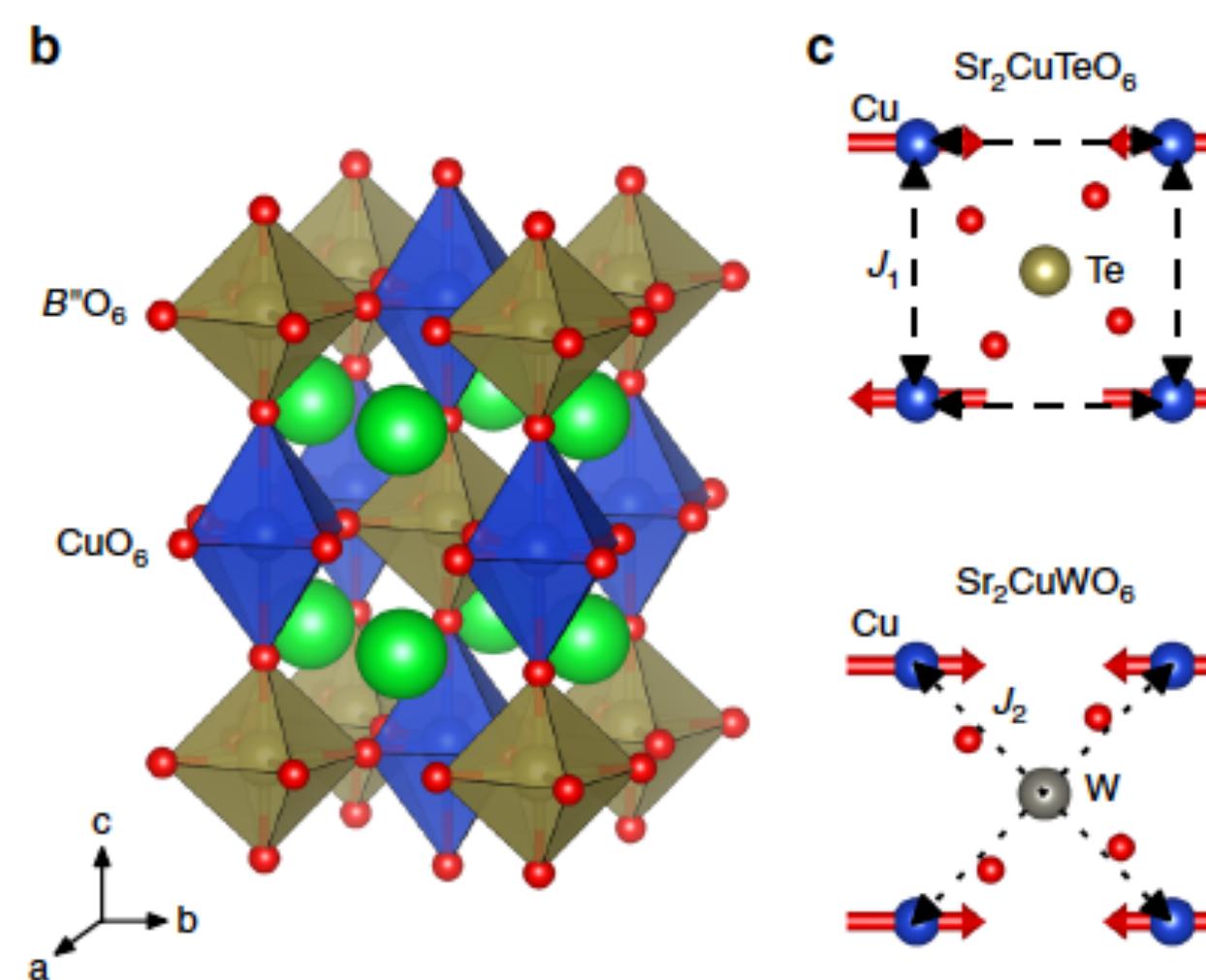
See also Liang et al., PRB (2018), Choo et al., PRB (2019), Ferrari et al., PRB (2019),
Westerhout et al, Nat. Commun. (2020), Szabó and Castelnovo PRR (2020), ...

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

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



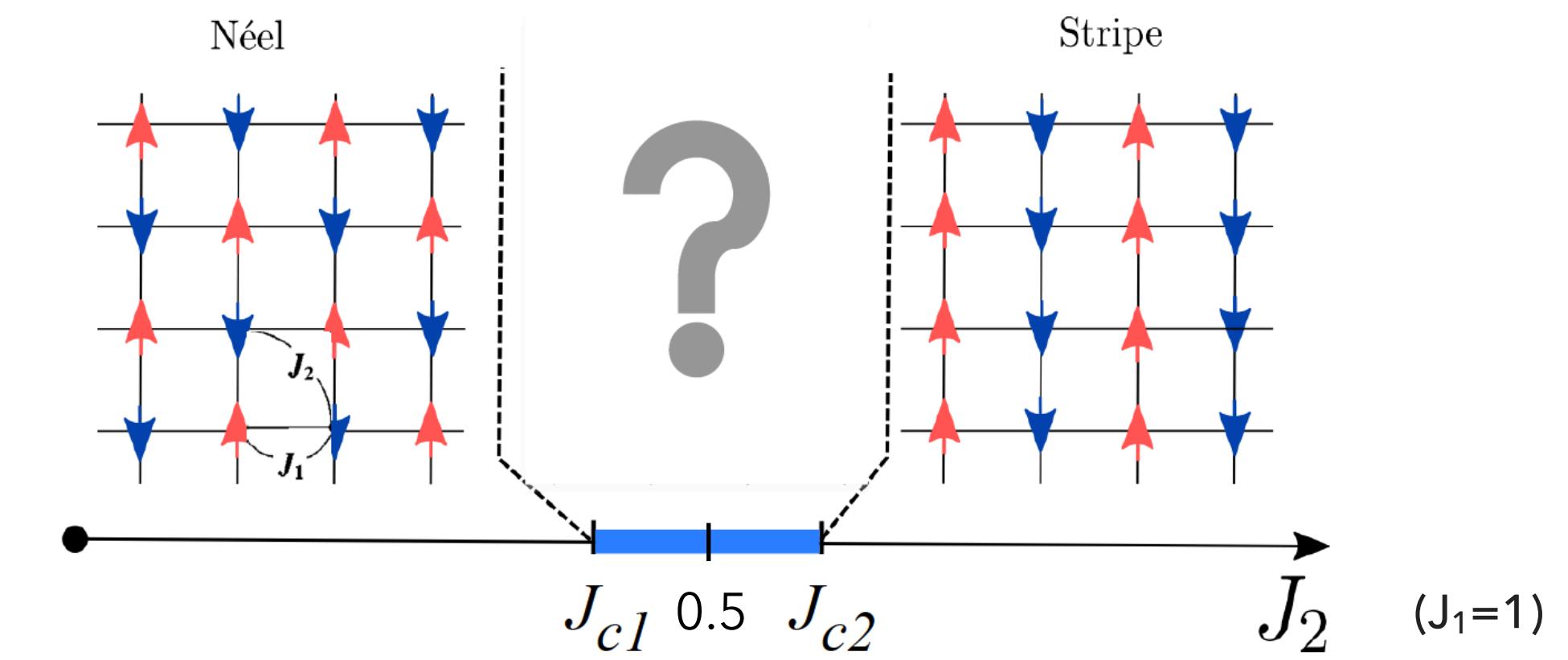
物質の候補



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

未解決の相図 ($J_1=1$)

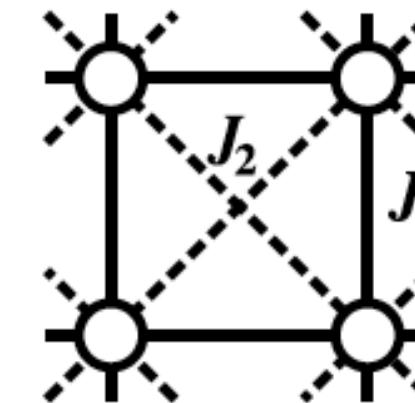
1980年代後半からの長年の挑戦的課題



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, ...

2次元正方格子上の反強磁性 J_1 - J_2 ハイゼンベルグ模型 ($J_1 > 0, J_2 > 0, J_1$ 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

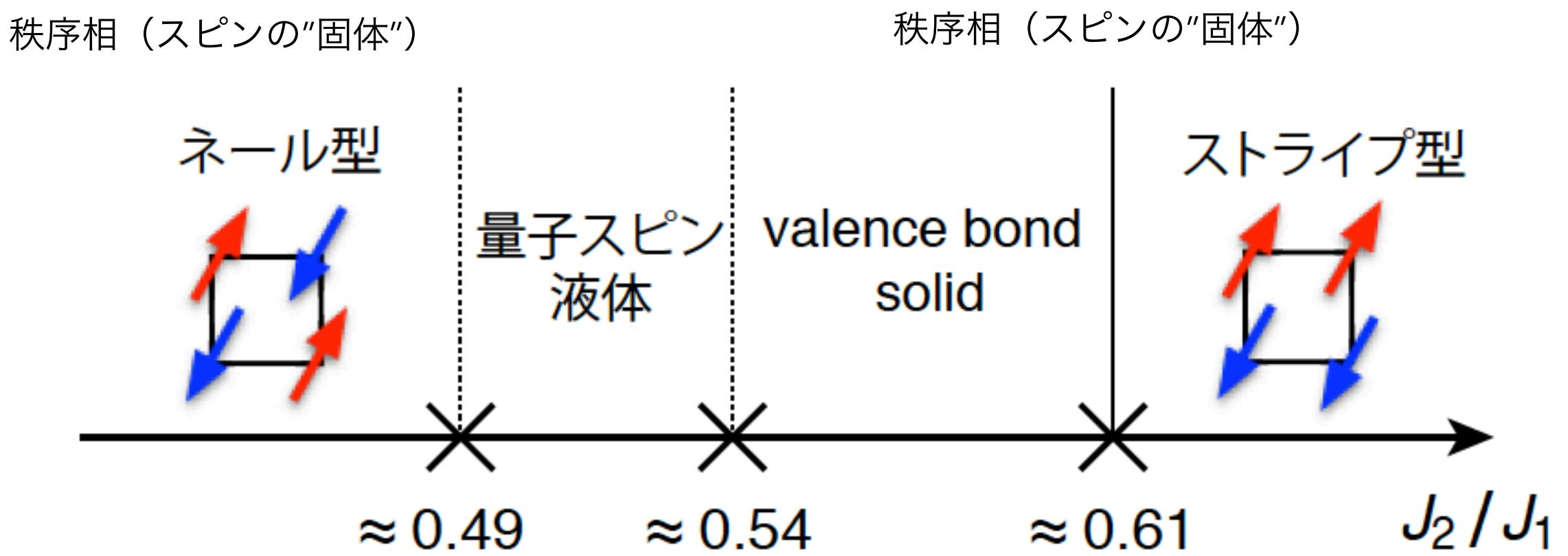
基底状態エネルギー, $J_2=0.5$, 10x10格子

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]
-0.49530	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が揺らぐ“液体相”を確認

本日の発表内容

1. 制限ボルツマンマシンの数値的な最適化による高精度変分計算

→ 量子状態を人工ニューラルネットワークに数値的・近似的に埋め込み

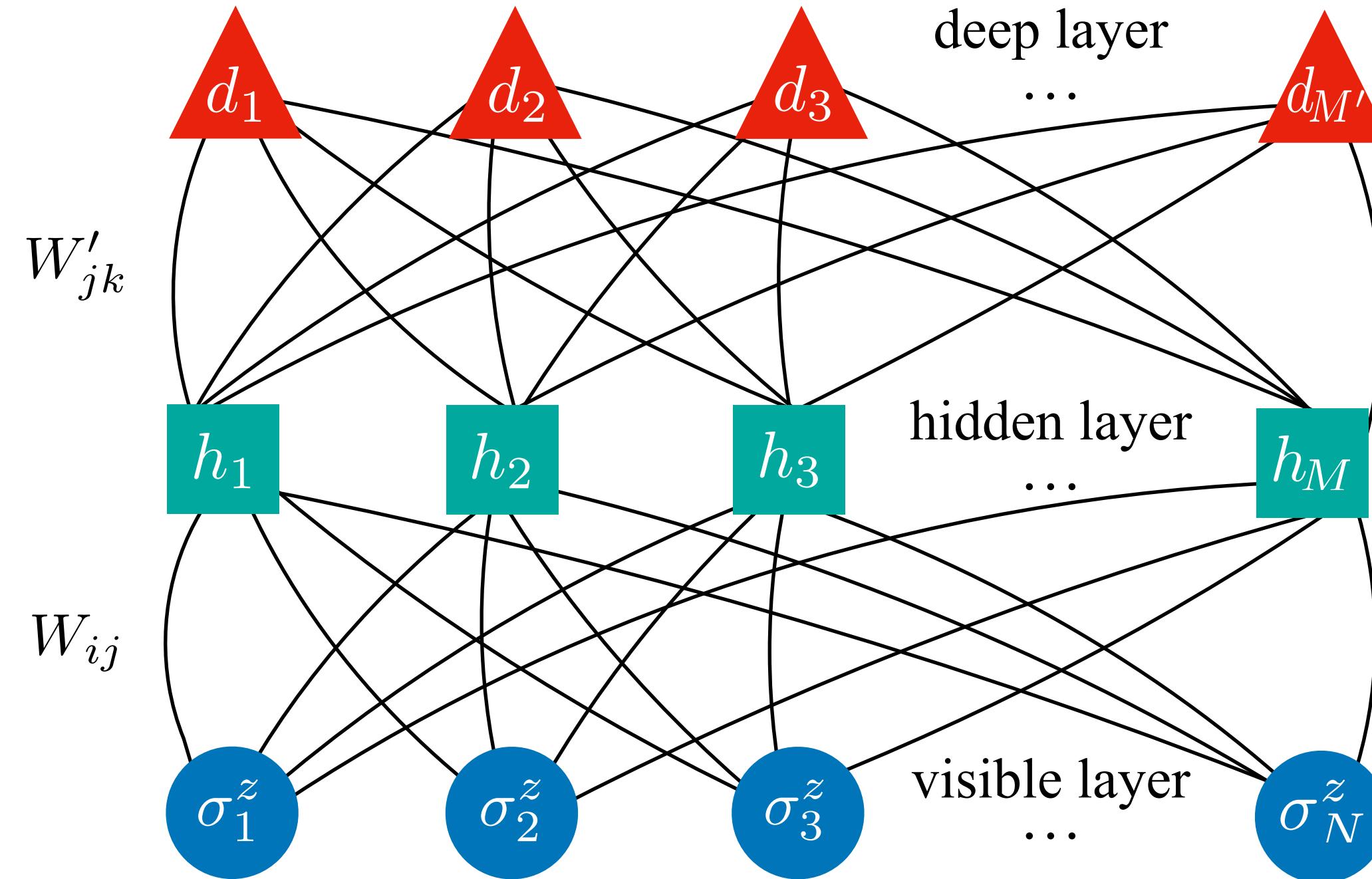
2. 基底状態を表す深層ボルツマンマシンの解析的な構築

→ 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. 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



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

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

基底状態を表す深層ボルツマンマシン(DBM)の解析的構築

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

RBMと比較したDBMの性質

- 良い点

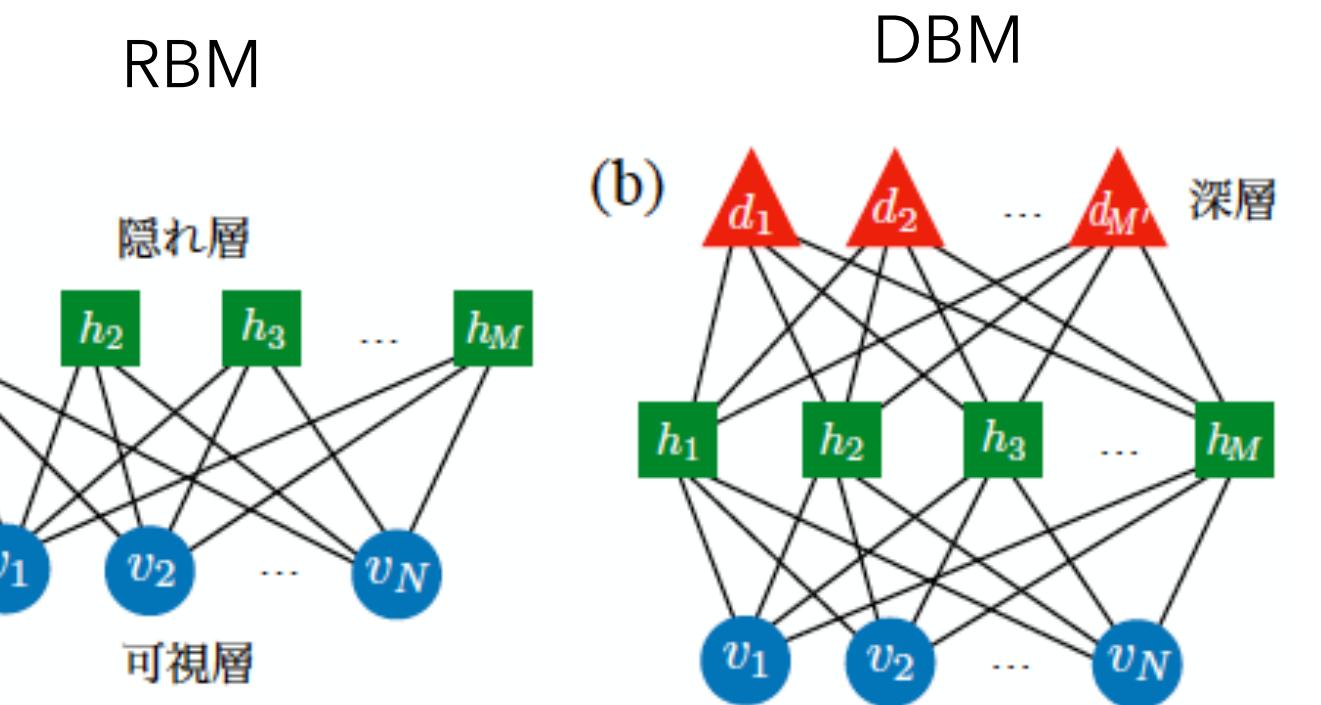
より柔軟な表現能力を持つ

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)



キーとなるアイデア

- 鈴木・トロッターフィルター分解された虚時間発展をDBMのパラメータ変化で厳密に再現する → 十分長い虚時間発展で基底状態に収束
(RBMの場合のように数値的最適化は必要なし！全て解析的にできる！)

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

$$e^{-\tau\mathcal{H}} |\Psi_0\rangle \longrightarrow |\text{GS}\rangle \quad (\tau \rightarrow \infty)$$

- 物理量は可視スピンと隠れスピンの自由度の両方に対するモンテカルロサンプリングを実行することで計算

DBMによる量子古典マッピング (経路積分を包含するマッピングとなっている)

横磁場イジング模型に対する例

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

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

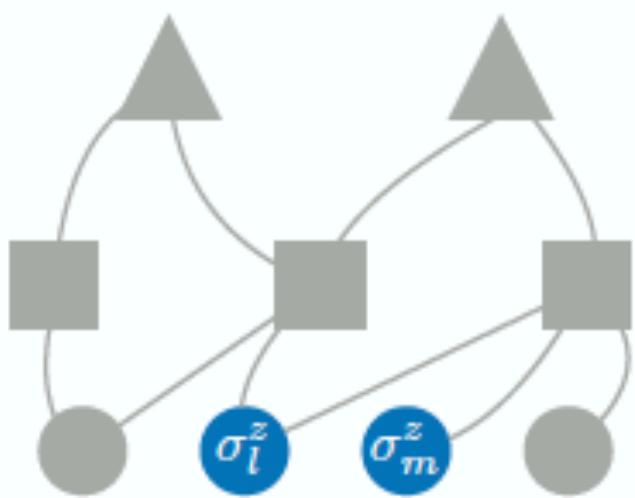
相互作用(古典的): $\mathcal{H}_1 = \sum_{l < m} V_{lm} \sigma_l^z \sigma_m^z$

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?

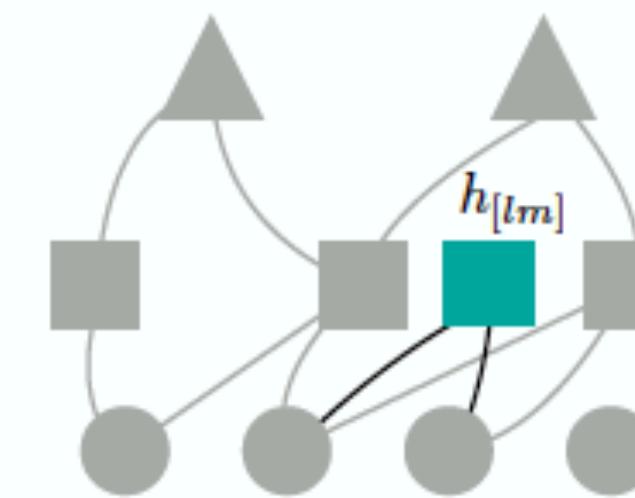
$$e^{-\delta_\tau \mathcal{H}_\nu} |\text{DBM}\rangle$$

初期DBM



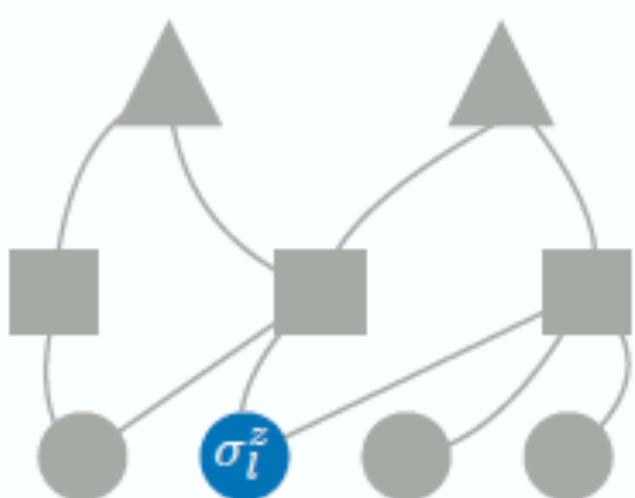
$$\frac{e^{-\delta_\tau V_{lm} \sigma_l^z \sigma_m^z} |\psi_\gamma\rangle}{\text{相互作用虚時間発展}}$$

虚時間発展後のDBM

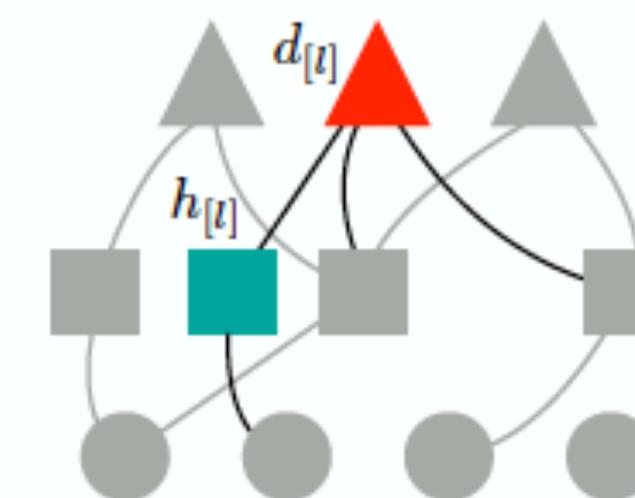


$$W_{l[lm]} = \frac{1}{2} \text{arcosh} \left(e^{2|V_{lm}| \delta_\tau} \right)$$

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



$$\frac{e^{\delta_\tau \Gamma_l \sigma_l^x} |\psi_\gamma\rangle}{\text{横磁場虚時間発展}}$$



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

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

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

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

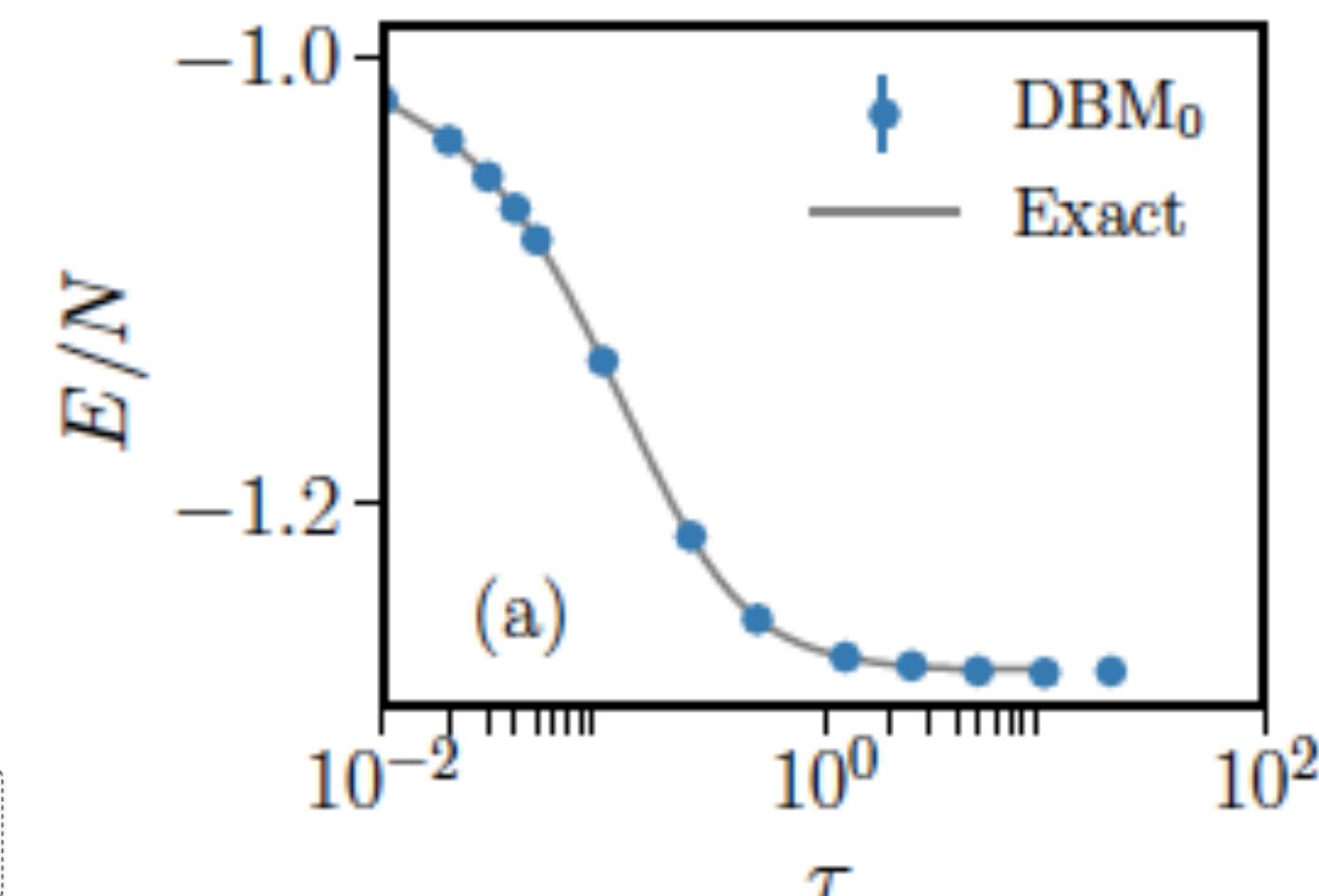
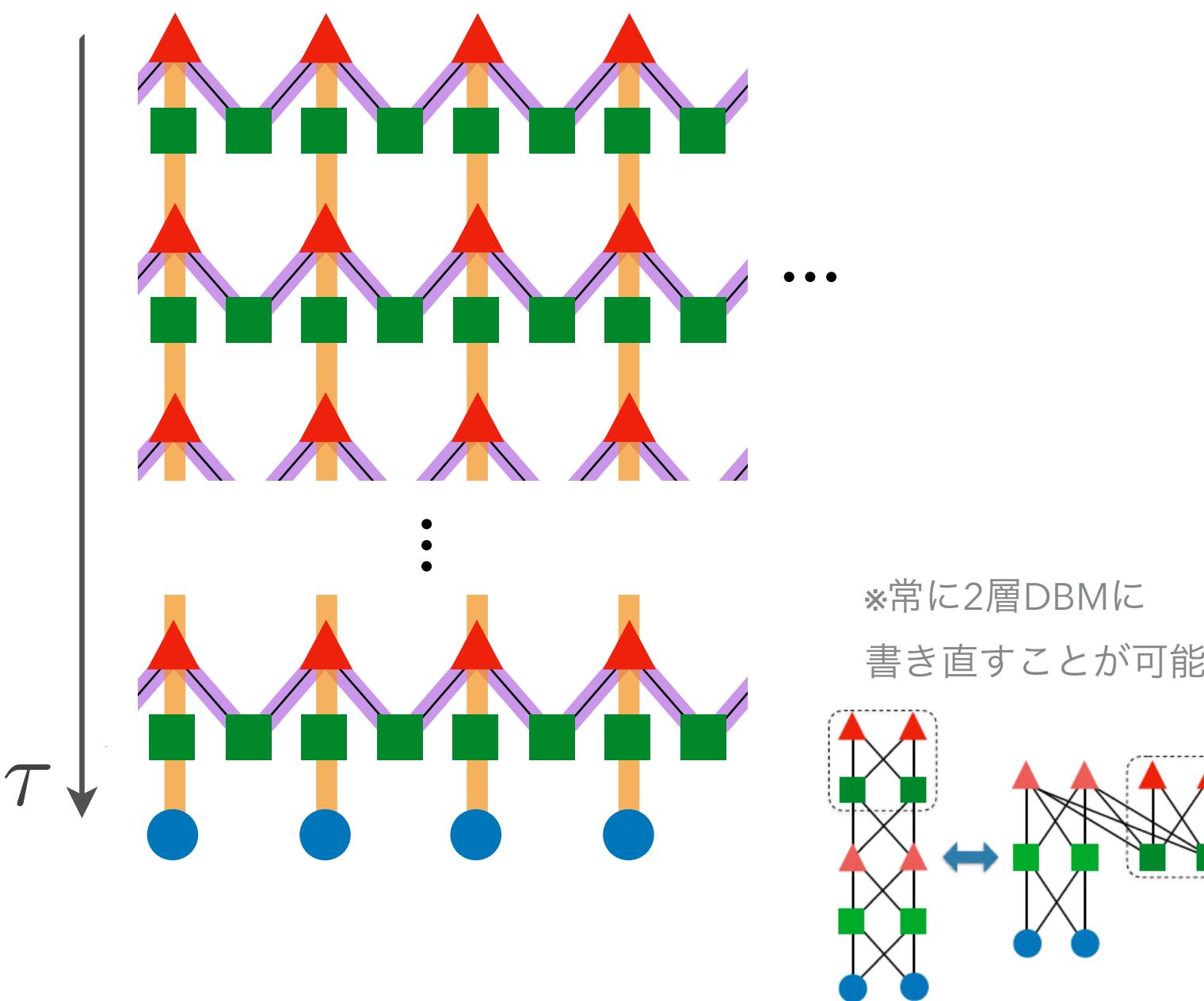
ベンチマーク (物理量はモンテカルロ法で計算)

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

1次元横磁場イジング模型

$N = 20, J\delta\tau = 0.01$

相互作用関連 横磁場関連



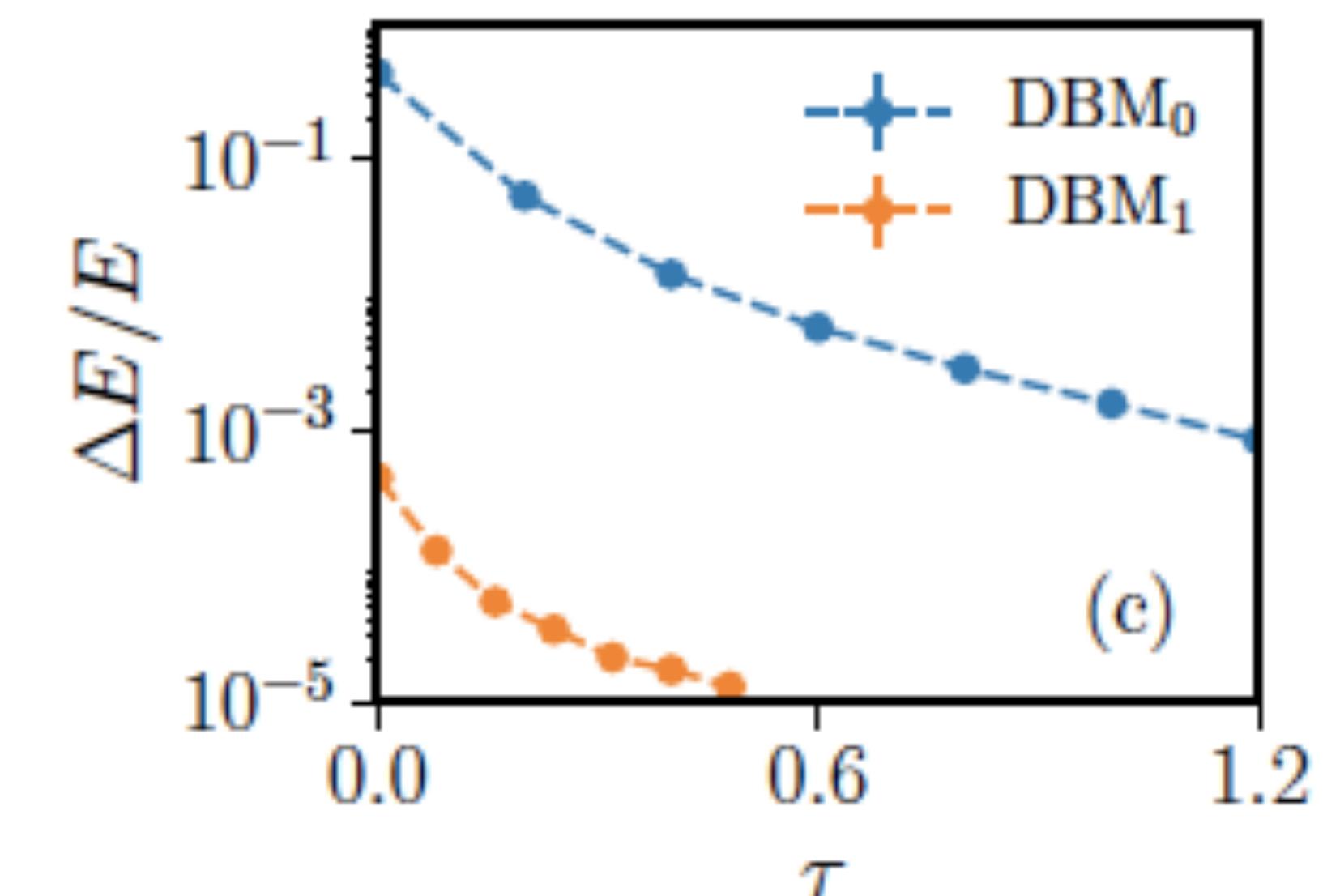
DBM手法が確かに厳密な虚時間発展を再現

1D反強磁性ハイゼンベルグ模型

$N = 80, J\delta\tau = 0.01$

空のネットワークから虚時間発展

数値最適化したRBMから虚時間発展



初期状態を工夫 => 収束が早まる

ここまでまとめ (RBMとDBMによる量子状態表現)

RBM (変分的アプローチ)	DBM (量子古典マッピング)
最適化と精度	数値的・近似的
隠れスピンの数	DBMに比べて少ない (よりコンパクト)
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
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)

本日の発表内容

1. 制限ボルツマンマシンの数値的な最適化による高精度変分計算

→ 量子状態を人工ニューラルネットワークに数値的・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. 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）

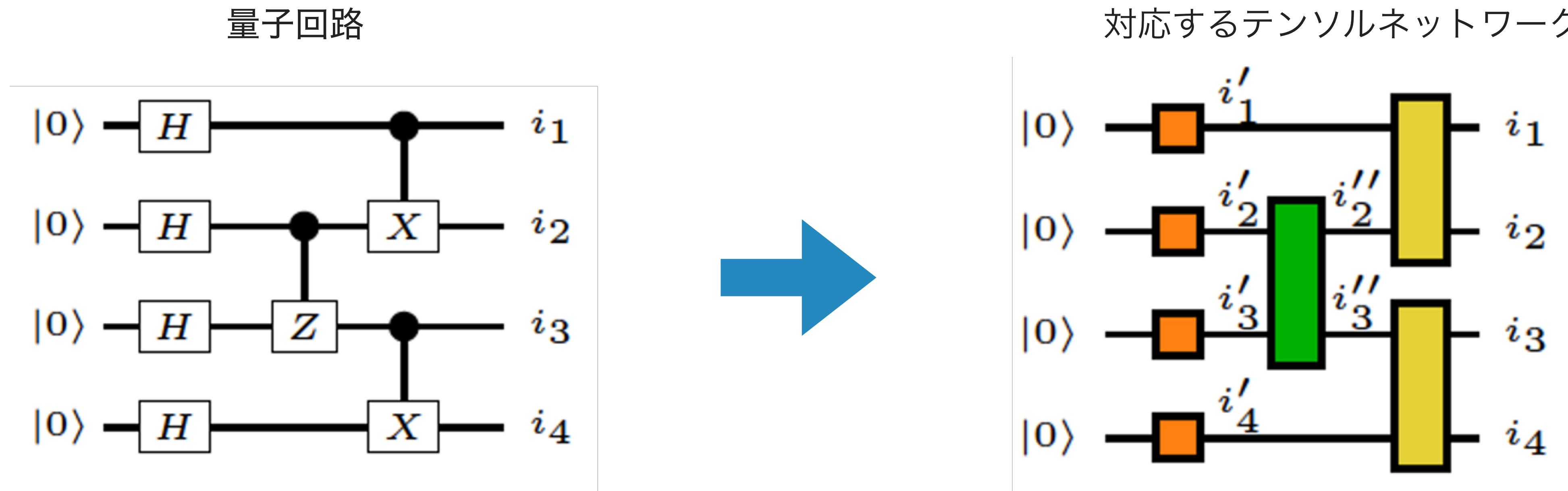
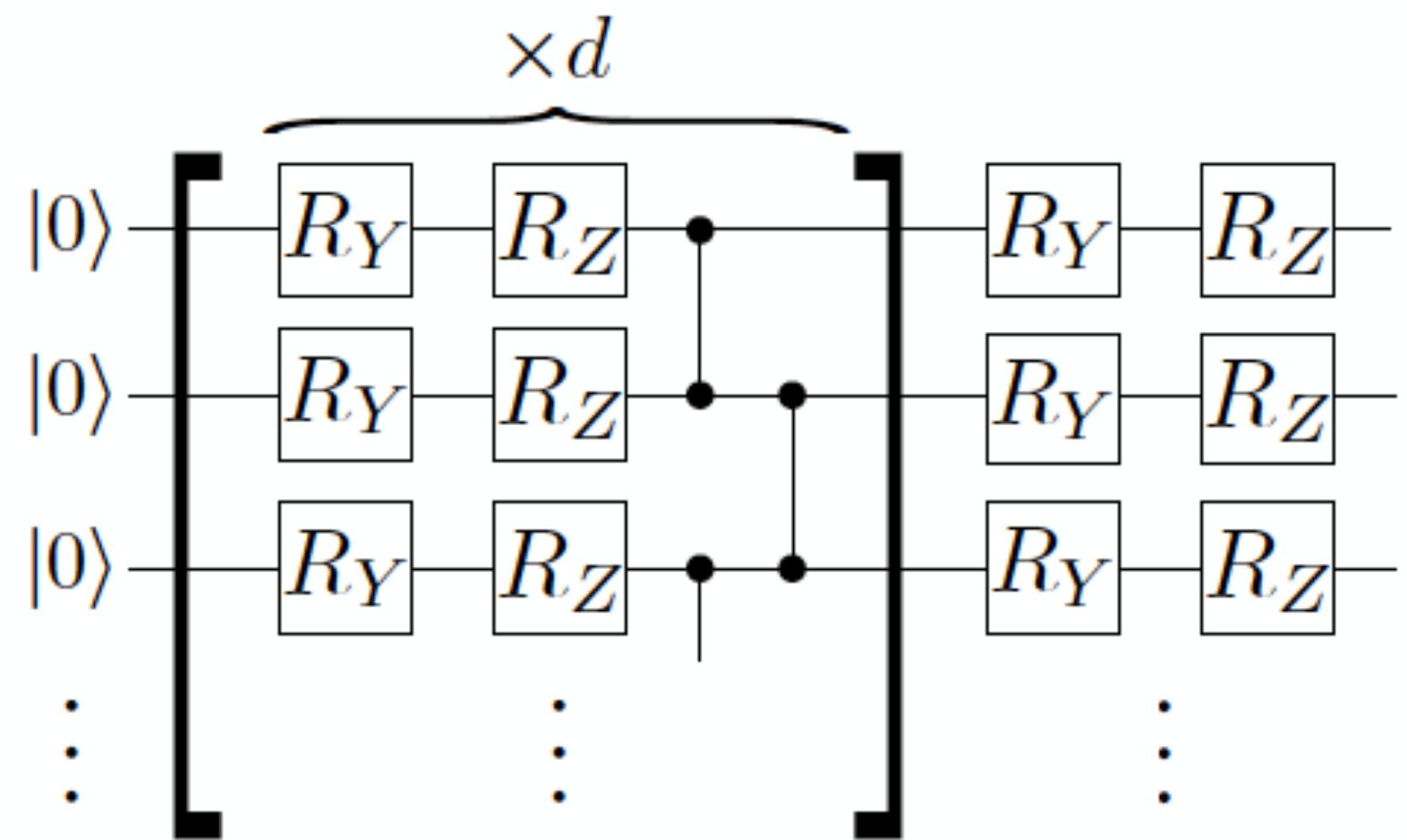


Figure from arXiv:2207.05612

- 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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

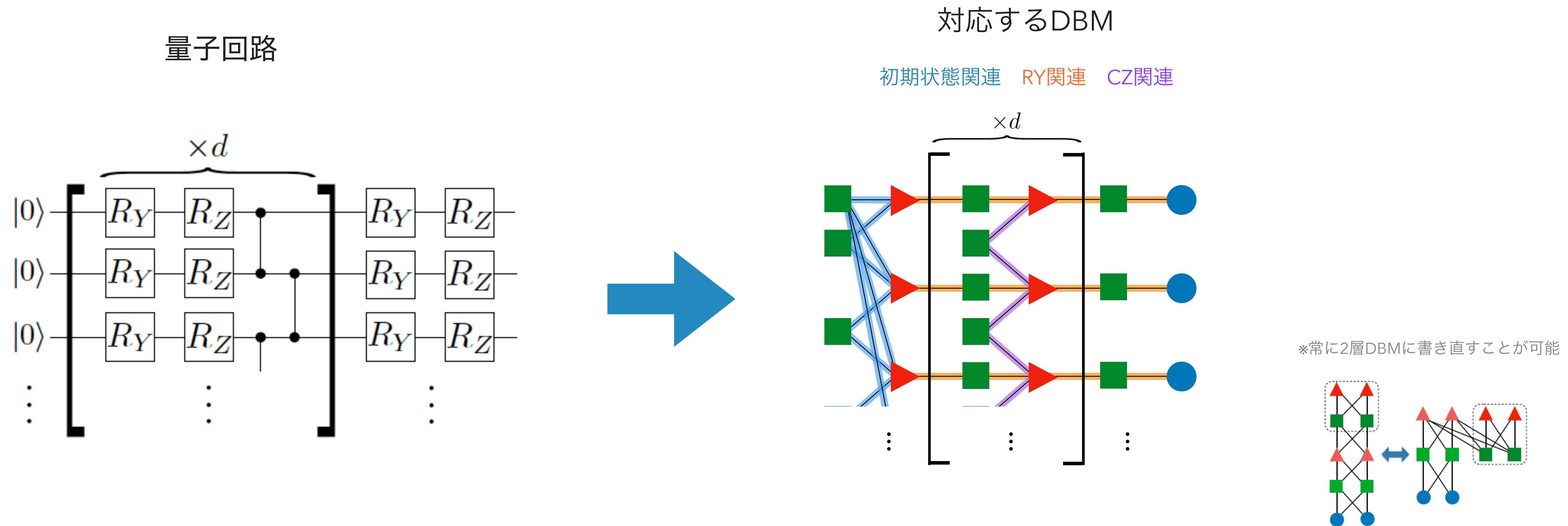
$$\Delta a_m = i\pi/4$$

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

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

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

量子回路のDBMへのマッピング



- 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？

cf. RBMを用いた量子回路の近似表現: Jónsson et al., arXiv:1808.05232; Medvidović and Carleo, npj Quantum Inf. 7, 101 (2021)

まとめ

1. 制限ボルツマンマシンの数値的な最適化による高精度変分計算

- 量子状態を人工ニューラルネットワークに数値的・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. 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？

ご清聴ありがとうございました。