

# 1 次元 Bose–Hubbard 模型の基底状態を機械学習で解く

中村 祐介 (2022 年 12 月 5 日)

## 概要

論文 [2] と [1] を参考に、外部ポテンシャルがある 1 次元 Bose–Hubbard 模型の基底状態を求める。

学習に関するアイデアはメモ [3] と同様で、2 段階に分けて行えばよいかもしれない。step1 では出力が基底状態に近いと期待される基底状態の候補  $|\Psi_{\text{train}}\rangle$  に近づくように学習させる。具体的には出力された状態  $|\Psi\rangle$  と  $|\Psi_{\text{train}}\rangle$  との内積を最大化するように学習させる。step2 では状態  $|\Psi\rangle$  によるエネルギー期待値を最小化するように、学習させる。step1 は計算が発散するのを防ぐための前処理であり、step2 が本命の学習である。この方法は論文 [2] では採用されていないが、[1] では採用されている。必要かどうか不明だが、それを含めて検証すれば良い。

## 1 対象と表記と論点整理

### 1.1 モデル

対象とするハミルトニアンは

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \sum_i \left[ V_i \hat{n}_i + \frac{U}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \right], \quad V_i = V_0 \left( i - \frac{M}{2} \right)^2 \quad (1)$$

ただし  $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$  であり、 $M$  はサイト数である。また  $J, U > 0$  とする。外部ポテンシャル  $V_i$  の形は論文 [2] に合わせてあるが、そんなに拘りはない。系に閉じ込める粒子の数を  $N$  とする。

我々のゴールはこのハミルトニアンの基底状態  $|\Psi_{\text{exact}}\rangle$  を近似的に求めることである。つまり以下の固有値問題の基底状態を求めたい：

$$\hat{H} |\Psi_{\text{exact}}\rangle = E |\Psi_{\text{exact}}\rangle \quad (2)$$

あるいは同じことだが、

$$\langle \Psi_{\text{exact}} | \hat{H} | \Psi_{\text{exact}} \rangle \quad (3)$$

を最小化する状態を求めたい。

ここでは各サイトに入れる粒子は  $N_P$  未満であると制限する。本来は  $N_P = \infty$  であるべきであるが、数値計算の都合で制限する。ハミルトニアンが全粒子数演算子  $\hat{N}$

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i \quad (4)$$

と交換するので、系の基底状態は普通は  $\hat{N}$  の固有状態になる<sup>1)</sup>が、自発的対称性の破れが起きる場合では、その限りではない。その可能性を取り入れた計算がどうなるかにも興味がある。

---

1) 論文 [2] ではそう仮定している

この系の ( $N_P$  を有限に制限した上での) 厳密な基底状態は

$$|\Psi_{\text{exact}}\rangle = \sum_{n_1, n_2, n_3, \dots} \psi(n_1, n_2, n_3, \dots) |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle = \sum_{\mathbf{n}} \psi(\mathbf{n}) |\mathbf{n}\rangle \quad (5)$$

と書ける (最右辺は  $\mathbf{n}$  の定義である)。ここで  $|\mathbf{n}\rangle$  は  $\hat{n}_i$  の固有状態の直積であり、正規完全直交系をなす：

$$|\mathbf{n}\rangle = |n_1\rangle_1 \otimes |n_2\rangle_2 \otimes |n_3\rangle_3 \otimes \dots \quad (6)$$

$$\langle \mathbf{n} | \mathbf{n}' \rangle = \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'}, \quad \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| = 1 \quad (7)$$

基底状態は、 $c$  数の係数  $\psi(\mathbf{n})$  によって表現されていることがポイントである。つまり  $\psi(\mathbf{n})$  を求めることが、基底状態を求めることと同値である。

## 1.2 厳密対角化

(2) に左から  $\langle \mathbf{n}|$  を作用させると

$$\sum_{\mathbf{n}'} \langle \mathbf{n} | \hat{H} | \mathbf{n}' \rangle \psi(\mathbf{n}') = E \psi(\mathbf{n}) \quad (8)$$

を得る。これは  $c$  数行列  $\langle \mathbf{n} | \hat{H} | \mathbf{n}' \rangle$  の固有値問題である。この行列の最小固有値問題を解くことを厳密対角化という。

さて、厳密対角化で解くべき行列の次元は  $(N_P)^M$  である。これは  $M$  を大きくすると絶望的に大きな数になる。ごく小さな系を除けば、行列の対角化どころか  $\psi(\mathbf{n})$  をコンピューターのメモリ上に確保することすら厳しいのである。

## 1.3 Gutzwiller 近似

Gutzwiller 近似はこの模型に有効な変分法であり、試行関数を

$$|\Psi_G\rangle = \left( \sum_n \varphi_1(n) |n\rangle_1 \right) \otimes \left( \sum_n \varphi_2(n) |n\rangle_2 \right) \otimes \left( \sum_n \varphi_3(n) |n\rangle_3 \right) \otimes \dots = \prod_i \left( \sum_{n_i} \varphi_i(n_i) |n_i\rangle_i \right) \quad (9)$$

と採用する。サイト間の相関を取り入れず、直積でつなぐことが大きな特徴である。その上で変分法の理念に従って  $\langle \Psi_G | \hat{H} | \Psi_G \rangle$  を最小化するように試行関数  $\varphi_i(n)$  を決定する。これもある種の対角化問題に帰着するが、 $\varphi_i(n)$  の次元が  $MN_P$  に過ぎないため、簡単に解くことができる。<sup>2)3)</sup> その一方で、状態に対する制約が厳しすぎるので、Gutzwiller 近似では落としてしまう情報も多いと思われる。

$|\Psi_G\rangle$  と  $|\Psi_{\text{exact}}\rangle$  に左から  $\langle \mathbf{n}|$  を掛ければすぐ分かる通り、Gutzwiller 近似は  $\psi(\mathbf{n})$  を

$$\psi(\mathbf{n}) = \prod_i \varphi_i(n_i) \quad (10)$$

という形に制限することに対応している。

2) なのに Mott 絶縁体相、超流動相などをきちんと表現できる。本質を上手に抽出した素晴らしい近似であることは間違いない。

3) あと Gutzwiller 近似は平均場近似と等価な方法である。

## 1.4 モチベーション

我々の目標は「Gutzwiller 近似並の計算量で、厳密対角化並の結果を出すこと」である。(もしくはもう少し謙虚に「厳密対角化以下の計算量で、Gutzwiller 近似以上の結果を出すこと」である)

そのための手法としては DMRG や量子モンテカルロ法がある。ただし DMRG は高次元が苦手だし、量子モンテカルロ法は Fermion 系 (の一部) などが苦手である。そこで、機械学習を応用した新しい手法を提案したい。

$\psi(\mathbf{n})$  の全要素の確保を必要とする厳密対角化とは異なり、機械学習による方法では、 $\mathbf{n} \mapsto \psi$  という関数をニューラルネットワーク上に構成する。ハミルトニアン  $\hat{H}$  の期待値は  $\sum_{\mathbf{n}} \sum_{\mathbf{n}'} \psi^*(\mathbf{n}) \langle \mathbf{n} | \hat{H} | \mathbf{n}' \rangle \psi(\mathbf{n}')$  で表されるが、 $\langle \mathbf{n} | \hat{H} | \mathbf{n}' \rangle$  が疎行列であることを利用すれば  $\sum_{\mathbf{n}'}$  は手計算で処理できる。残った  $\sum_{\mathbf{n}}$  の計算の際に全ての  $\mathbf{n}$  を巡ることは不可能なので、モンテカルロ法を用いて計算することにする。

## 2 Gutzwiller 近似

束縛条件  $\langle \sum_i \hat{n}_i \rangle = N_{\text{tot}}$  の下で、元々のハミルトニアン (1) を最小化する。Lagrange 未定乗数法に基づき化学ポテンシャル (あるいは Lagrange 未定乗数)  $\mu$  を導入し、ハミルトニアンを以下のように書き換える：

$$\hat{H} = \sum_i \left[ -J \hat{a}_i^\dagger (\hat{a}_{i+1} + \hat{a}_{i-1}) + V_i \hat{n}_i + \frac{U}{2} \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \right] - \mu \left[ \sum_i \hat{n}_i - N_{\text{tot}} \right] \quad (11)$$

ただし元の Hamiltonian と期待値が変わらないように工夫した。Gutzwiller 近似では変分関数を (9) にとる：

$$|\Psi_G\rangle = \prod_{i=1}^M \left( \sum_{n_i=0}^{N_P-1} \varphi_i(n_i) |n_i\rangle_i \right) \quad (12)$$

ただし今回の模型では  $\varphi$  は実関数に限れば十分である。また各  $i$  に対して

$$\sum_n \varphi_i(n)^2 = 1 \quad (13)$$

と規格化されているものとする。

$N_P$  も  $M$  も全然大きくないので全ての和は計算可能である。興味がある期待値は以下の通り：

$$\bar{\beta}_i \equiv \langle \Psi_G | \hat{a}_i | \Psi_G \rangle = \sum_n \sqrt{n+1} \varphi_i(n) \varphi_i(n+1) \quad (14)$$

$$\bar{n}_i \equiv \langle \Psi_G | \hat{n}_i | \Psi_G \rangle = \sum_n n \varphi_i^2(n) \quad (15)$$

$$\bar{n}_i^2 \equiv \langle \Psi_G | \hat{n}_i^2 | \Psi_G \rangle = \sum_n n^2 \varphi_i^2(n) \quad (16)$$

$$\bar{N} \equiv \sum_i \bar{n}_i, \quad \bar{N}^2 \equiv \sum_i \bar{n}_i^2 \quad (17)$$

$$\bar{E} \equiv \langle \Psi_G | \hat{H} | \Psi_G \rangle = \sum_i \left[ -2J \bar{\beta}_i \bar{\beta}_{i+1} + (V_i - \mu) \bar{n}_i + \frac{U}{2} (\bar{n}_i^2 - \bar{n}_i) \right] + \mu N_{\text{tot}} \quad (18)$$

いくつかの解き方が考えられるが、今回は  $\bar{E}$  を最急降下法を用いて最小化する（いわゆる虚時間発展法）。<sup>4)</sup>興味ある期待値の勾配は以下の通り：

$$\frac{\partial \bar{\beta}_j}{\partial \varphi_i(n)} = \delta_{ij} \cdot \left( \sqrt{n+1} \varphi_i(n+1) + \sqrt{n} \varphi_i(n) \right) \quad (19)$$

$$\frac{\partial \bar{n}_j}{\partial \varphi_i(n)} = \delta_{ij} \cdot 2n \varphi_i(n) \quad (20)$$

$$\frac{\partial \bar{n}_j^2}{\partial \varphi_i(n)} = \delta_{ij} \cdot 2n^2 \varphi_i(n) \quad (21)$$

よって

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial \varphi_i(n)} = -2J \left( \bar{\beta}_{i+1} + \bar{\beta}_{i-1} \right) \left( \sqrt{n+1} \varphi_i(n+1) + \sqrt{n} \varphi_i(n) \right) + 2 \left\{ (V_i - \mu)n + \frac{U}{2} n(n-1) \right\} \varphi_i(n) \quad (22)$$

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial \mu} = N_{\text{tot}} - \bar{N} \quad (23)$$

勾配法は規格化と符号に気をつけて

$$\varphi_i^{\text{new}}(n) = \frac{\tilde{\varphi}_i(n)}{\sqrt{\sum_{n'} |\tilde{\varphi}_i(n')|^2}}, \quad \tilde{\varphi}_i(n) = \varphi_i(n) - \eta \frac{\partial \bar{E}}{\partial \varphi_i(n)} \quad (24)$$

$$\mu^{\text{new}} = \mu + \eta (N_{\text{tot}} - \bar{N}) \quad (25)$$

とループを回せば良い。ここで  $\eta$  は学習率である。 $\bar{N} < N_{\text{tot}}$  の時は  $\mu$  大きくしなくてはいけないので、符号に注意する。Lagrange 未定乗数法では  $\mu$  方向に関しては  $\bar{E}$  が極小ではなく、勾配ゼロにしなければならないことに注意する。 $\bar{N} \rightarrow \infty$  方向に転がる場合もありうるのである。そこで経験的には、 $\bar{E}$  に

$$c \left( \bar{N}_i - N_{\text{tot}} \right)^2 \quad (26)$$

のようなペナルティ項を付けた方が安定する。その場合  $\frac{\partial \bar{E}}{\partial \varphi_i(n)}$  には

$$2c(\bar{N} - N_{\text{tot}})n\varphi_i(n) \quad (27)$$

が追加される。 $c$  はあまり大きくとってもダメで、たとえば系のエネルギースケールに合わせて  $c = U$  とかにしておけば良い。

### 3 ニューラルネットワーク

入力層が  $M$  ユニット、隠れ層が  $N_h$  ユニット、出力層が 1 ユニットのニューラルネットワークを考える：

$$u_j^{(1)} = \sum_i^M w_{ji}^{(1)} n_i + b_j^{(1)} \quad (28)$$

$$u^{(2)} = \sum_j^{N_h} w_j^{(2)} f_j^{(1)}(u_j^{(1)}) + b^{(2)} \quad (29)$$

$$\psi = f^{(2)}(u^{(2)}) \quad (30)$$

---

4) この方法は機械学習の勾配法と似ているから練習になるのである。

1 つ目の活性化関数をあえて  $j$  依存性を持たせている。ここでもし

$$N_h = M, \quad w_{ji}^{(1)} = \delta_{ji}, \quad b_j^{(1)} = 0, \quad w_j^{(2)} = 1, \quad (31)$$

$$b^{(2)} = 0, \quad f_j^{(1)}(u) = \log[\varphi_j(u)], \quad f^{(2)}(u) = \exp(u) \quad (32)$$

と選ぶと

$$\psi(\mathbf{n}) = \exp \left\{ \sum_i \log[\varphi_i(n_i)] \right\} = \prod_i \varphi_i(n_i) \quad (33)$$

となり、これは Gutzwiller 近似の試行関数に他ならない。Gutzwiller 近似もそう悪い近似ではないので、この関係は活性化関数の選び方の参考になるかもしれない。

一般に Gutzwiller 近似において  $\varphi_i(n)$  は特定の  $n$  に鋭いピークを持つ (特に Mott 相では Kronecker delta になる)。これを大雑把にガウス型であると考え、 $f^{(1)}(u)$  は  $u^2$  的な構造 (極値が 1 つだけあるような?) が好ましいのかもしれない。幅や位置は  $w_{ji}^{(1)}$  や  $b_j^{(1)}$  が調整してくれるであろう。

量子数の  $\mathbf{n}$  の内、一つでも大きな値があったら (例えば  $\mathbf{n} = (1, 3, 2, 10000, 3, \dots)$  のように)、 $\psi$  はゼロになるべきである。そう考えると  $f^{(2)}(u) = \exp(u)$  は違和感がない。そして、 $\mathbf{n}$  の要素に大きい値があった場合に、 $w_j^{(2)} f_j^{(1)}(u_j^{(1)})$  が大きな負の値が取れるような構造を保ちたい。

$f_j^{(1)}$  に  $\tanh$  と  $x^2$  を混在させるなども試しても良いかもしれない。

## 4 この系で研究できるようなこと

1. 以下の内容を非一様系ではなく、一様系を対象とする (こっちの方が簡単かも)
2. ニューラルネットワークを用いた方法の可能性。そもそも計算できるか? Gutzwiller 近似よりエネルギーが小さい基底状態が求まるか?
3. 活性化関数の意味と選び方
4.  $N_h$  をどのくらい取ればよいかを明らかにする
5. 成分の和が  $N_P$  の与える  $\mathbf{n}$  のしか与えない方法 (つまり全粒子数の固有状態に空間を制限する。化学ポテンシャルを使わない) と、あくまで全粒子数の期待値を  $N_P$  とする方法の比較
6. 化学ポテンシャルありの場合の機械学習のアルゴリズムの提案。
7. ネットワークの改良 ( $u^{(1)} = \sum w^{(1)} f^{(0)}(n) + b$  のように活性化関数をもう一つ増やすとか)
8.  $M$  や  $N_P$  を増やした時の、収束性・精度・計算時間の変化を評価する
9. 前処理の工夫。重なり積分ではなく、小さい  $H_h$  で計算してから、どんどん大きくするとか。
10. 勾配法の物理的な意味付け。新しい方法の提案。(ヒントは虚時間発展法にあると思う)

## 参考文献

- [1] Hiroki Saito, J. Phys. Soc. Jpn. **87**, 074002 (2018).
- [2] Hiroki Saito, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 093001 (2017).

- [3] 中村祐介、1次元調和振動子の Schrödinger 方程式を機械学習で解く (メモ).
- [4] 斉藤 康毅, ゼロから作る Deep Learning, オライリー (2016).