

ニューラルネットワークによる物理状態の判定から表現まで

東京大学大学院理学系研究科物理学専攻

東京大学大学院理学系研究科

吉岡信行・赤城裕・桂法称

I. はじめに

神経細胞の数理モデル化の研究に端を発するニューラルネットワークは、深層化による表現能力の向上・最適化手法の効率化・計算機の飛躍的性能改善などを経て、画像/音声認識 [1, 2] や自動翻訳 [3] を含む様々な分野の進展を加速させた。さらに近年は、物性物理学においても有用性が認知され始めている。この異分野融合的領域では、単なる方法論の輸出入に終始せず、双方のアプローチから止揚した、新たな手法が開発されつつある¹。日々論文が生まれ続ける中で、原点に立ち返り、研究者たちの興味の由来や期待を整理するのが本稿の目的である。そのキーワードとなる言葉が、「分類」および「表現」である。

分類 (**Classification**) は、機械学習における中心タスクの一つである。例えば、SNS に写真をアップロードした際に自動的に行われる、人物の囲み枠生成と名前のタグ付けについて考えてみよう。このような画像認識の技術では、各画素の RGB 値を渡された「予測関数」が、対応するラベル (人物・動物・物体 etc. の名前) を計算する。この「RGB \mapsto ラベル」の関係性を正しく記述するために、ニューラルネットワークが活用されることが多い [6]。以上の例を始めとした「自動情報処理スキームによる、分類タスクの効率化」という問題設定は、非常に広範な研究分野の根底に横たわっている。データの背後に存在する自然現象を異にするにも関わらず、機械学習的な分類手法が強力であることが数々の研究から判明し始めており、物性物理学もその例外ではない。

始めに「顔認識」ならぬ「相認識」が可能であることを示した研究では、2次元イジングモデルの強磁性-常磁性転移の検出にニューラルネットワークが応用された [7]。スピンの値に

¹ Mehta ら [4] や Carleo ら [5] によるレビュー論文を参照されたい。また、〈physics|machine learning〉というウェブサイト (<https://physicsml.github.io>) では、関連分野の新規論文をリストアップしている。

応じて白/黒を各サイトに割り当てれば、「白黒画像」が生成される。そこで、後に詳説する教師あり学習 (Supervised Learning) のプロセスにより、相転移点よりも十分高い/低い温度の熱平衡状態に対応する白黒画像を学習させれば、相転移温度近傍での判定も可能になるだろう、というアイデアである。実際に学習・未知データの判定が可能になるだけでなく、相転移温度も高い精度で予想できることが示されている²。

上述のように画像認識的なアプローチ³を用いて物理状態を分類する手法は、広範なモデルで有効であることが確認されている。先の古典イジング模型の研究に触発され研究された非自明な例として挙げられるのは、不純物や乱れの影響で誘起される、量子系の多体局在相 [8–11] や、局所的な秩序変数により特徴付けられないトポロジカル相 [12–17] である。特に、乱れの下でのトポロジカル相の分類は、従来よく知られたトポロジカル不変量の計算公式が破綻するため、非常に興味深い問題である。例えば、Altland-Zirnbauer の分類の範囲では、並進対称性のない自由フェルミオン系におけるトポロジカル不変量について、無限系での定義 [18, 19] が与えられているほか、有限格子系における計算手法の有効性が示された対称類が複数存在する [20–28]。これらはトポロジカル不変量の定義の拡張に基づくために、トポロジカル結晶絶縁体や高次トポロジカル絶縁体などへの拡張は一筋縄ではない。そこで考案されたのが、バルク-エッジ対応により保証される端状態や角状態の画像認識的な検出手法である [12–14, 29]。本稿では、2次元のクラス DIII に属するトポロジカル超伝導体を例にとり、乱れのない極限の相図の情報のもと、乱れが有限な状況での相図を予測する手法を紹介する。

また、入力データの生成元となる物理モデルについて、パラメータを自由に設定可能な状況を陽に利用する研究もある。例えば、「仮想的に」設定された相転移点に基づくラベリングによる分類精度の変遷から、真の相転移点を求める手法 [30] や、微小なパラメタ領域において異常検知的に相転移点を探索する手法 [31] などが開発されている。モデルから生成されるデータで学習した機械により、現実の実験データの分類に応用する事例なども増えており、当該分野がますます多くの研究者を巻き込んで進展している現状が浮き彫りになっている [32–34]。

機械学習手法との融合により進展が著しい方向性として、物理状態の表現 (Represent-

² 2つのラベルの確信度が等しく 50%になった温度、すなわち機械がもっとも「混乱」する温度に関する有限サイズスケールが行われている。

³ ここでは説明に一貫性を持たせるために「画像」としているが、もちろん系の次元性に関らずスキームが適用できる。

tation) も見逃すことはできないだろう。本稿で議論する「表現」とは、孤立系における基底状態の波動関数や、開放系における定常状態の密度行列などに代表される、物理的な状態の具体的な表式を指す。例えば、ハミルトニアンの基底状態の厳密解が求まる状況を「厳密な表現が得られる」と記述したり、変分関数の最適化により基底状態を求めようとする試みを「近似表現を計算する」などと表すことにする。また、状況に応じて、近似に際して導入される変分関数を**表現関数**と呼称する。

量子系における数値計算では、近似表現の開発が活発に行われているが、これは計算量やメモリの指数的增长を避けるためである。厳密対角化/量子モンテカルロ法の適用場面は、システムサイズ/パラメタ領域の観点から制限を受けてしまうことから、より広範な状態を低コストかつ高精度に表現する手段が、精力的に研究されている。例えばエネルギーギャップの開いた1次元系では、エンタングルメントエントロピーが面積則を満たすために、行列積状態 (Matrix Product State, MPS) が極めて優れた近似表現を与えることが知られている [35–37] が、二次元系を始めとした、高次元空間における変分状態に関しては、未だ乗り越えるべき困難が積層している。

複雑な量子エンタングルメントを持つ状態の表現能力の高さから近年注目を浴び始めたのが、ニューラルネットワークに基づいた変分波動関数である。Carleo と Troyer は、波動関数の変分状態として、特にボルツマン機械と呼ばれる表現関数を用いると、横磁場イジング模型やハイゼンベルグ模型などの低次元の量子スピン系における基底状態を高精度に表現できること⁴、さらに時間発展の記述も可能であることを示した [38]。テンソルネットワーク型の変分関数を用いた手法と同等の精度が得られたことで、大きな期待が持たれている。特に、純粋状態における最大エンタングル状態 [39] など、体積則を満たす状態の表現能力が明らかになったことで、フェルミオン系 [40, 41] やボゾン系 [42, 43] への応用や、励起状態の計算 [44]、虚時間発展の構築 [45, 46] など研究が進んでいる。同時に4つのグループから、開放系の定常状態の近似表現に関する論文が発表される [47–50] など、盛り上がりが続いている分野である。

古典系における近似表現も、統計学/機械学習分野における分布推定とオーバーラップがあることから盛んに調べられており、特にモンテカルロ・シミュレーションの高速化に活用されることが多い。例として、古典イジング模型 [51–53]、フェルミオン自由度がトレース・アウトされた Falicov-Kimball 模型 [54]、古典スピニアイス模型 [55, 56] などが挙げられる。本稿では、古典系における熱平衡状態の厳密な表現もまた、モンテカルロ・シミュレーショ

⁴ 波動関数の全成分が正となる問題設定を積極的に活用した結果だが、一般に複素パラメータを含む場合にも適用が可能である。

ンの文脈から有用であることを示す [57]. 多体相互作用を含むイジング模型を「一般化イジング模型」と呼ぶが、こちらに補助的なイジング自由度を追加することで、二体相互作用のみを用いた表現が得られることを示す. この補助自由度を含めた表現は、ボルツマン機械に他ならない. 古典系の熱統計力学にインスパイアされて情報科学の分野で考案された表現関数が、これまで知られていた以上の表現能力を持つことを再発見した、と言えるだろう. さらに、得られた表現がモンテカルロ・シミュレーションの高速化の観点でも有益であることを議論する. 具体的には、任意の一般化イジング模型に対し、ボルツマン機械による表現を導入することで、クラスタ更新法と呼ばれる大域更新法が適用可能となり、相転移の臨界減衰を緩和できることを示す.

本稿の残りの構成は以下の通りである. まず、§II では、順伝播型ニューラルネットワークによる分類スキームを扱う. 一般的な教師あり学習の概念を導入したのちに、乱れのない極限で構築されたニューラルネットワークを用いて、乱れのあるトポロジカル超伝導体の相図を作成する方法を紹介する. §III では制限/深層ボルツマン機械による表現について詳しく述べ、一般化イジング模型の熱平衡状態がボルツマン機械により厳密に表現可能であることを示す. §IV にて、得られた表現を用いたクラスタ更新により、相転移温度における臨界減衰を大幅に緩和できることを示したのちに、§V で本稿のまとめを与える.

II. 識別関数としてのニューラルネットワーク

ある入力データに対し、適当な演算が出力する離散ラベルによって高次元空間的な分離を行う関数を識別関数と呼ぶ. 本節では、識別関数の一種である順伝播型ニューラルネットワーク (**Feedforward Neural Network**, 以下 **FFNN**) を導入し、これを物理的な状態相の分類に応用する方法を議論する. イメージとして図 1 を参照されたい.

識別関数の構築方法には、状況に応じて多くの流儀が存在するが、本稿では紙面の都合上、データの集合 $\{x_n\}$ と対応するラベルの集合 $\{y_n\}$ がセットで与えられた「教師あり学習」を想定することにする. 以下では識別関数の関数系・学習方法・適用例を順に議論するが、本誌でも畳み込みニューラルネットワークを用いた分類手法が紹介されていることから [58], 関数系及び学習方法の導入は簡潔にとどめ、詳細は他の文献に譲りたい [59, 60].

A. 順伝播ニューラルネットワーク (FFNN)

まずはじめに、FFNNの定義を与える。FFNNとは、ニューロンと呼ばれる計算ユニットの集合からなる非線形関数の一種である。ニューロンは、入力値 \mathbf{x} に線形操作 \mathcal{W} と非線形操作 \mathcal{A} ⁵ を作用させる役割を果たす。つまり、入力 \mathbf{x} を受け取ったニューロンの出力 u は、中間出力 z を用いて

$$\begin{aligned} u &= \mathcal{A}(z); \\ z &= \mathcal{W}(\mathbf{x}) = \sum_i W_i x_i + b; \end{aligned} \quad (1)$$

のように計算される。ただし、 i 番目の入力要素への重み W_i とバイアス項 b は、線形操作を特徴付けるパラメタである。入力を同時に受け取り、かつ互いの出力が干渉しないようなニューロンの集合を層 (Layer) と呼ぶが、図 1 のように、層が幾重にも積み重なった構造で与えられるのが FFNN である⁶。第 k 層における j 番目のニューロンからの出力 $\{u_j^{(k)}\}$ は、第 $k-1$ 層の i 番目の出力 $\{u_i^{(k-1)}\}$ を用いて

$$\begin{aligned} u_j^{(k)} &= \mathcal{A}(z_j^{(k)}); \\ z_j^{(k)} &= \sum_i W_{ji}^{(k)} u_i^{(k-1)} + b_j^{(k)}; \end{aligned} \quad (2)$$

と計算される。式 (1) と同様に、式 (2) に登場する重み $\{W_{ji}^{(k)}\}$ およびバイアス $\{b_j^{(k)}\}$ は FFNN に内在する自由度である。これらのパラメタは、教師あり学習などのアルゴリズムにより、所望の動作を示すよう最適化される。一般に、入力と出力ニューロンの間に位置する中間層の数や、各層のニューロン数を増やすことで、近似精度で学習データを近似できるという「万能性定理」が知られている [61] 一方で、必要なニューロン数は精度に対して指数的に増大してしまうため、用途に応じて構造への制約・最適化手法の改善・精度十分な局所最適解の探索などの工夫が必要となる。

B. 識別関数の構築：教師あり学習

次に述べるのは、教師あり学習の手順に関する一般的な枠組である。教師あり学習とは、与えられた入力データ $\{\mathbf{x}_n\}$ とラベル $\{y_n\}$ の対応関係を精度よく再現するように (一般に非

⁵ \mathcal{A} は活性化関数と呼ばれる。具体的にはシグモイド関数 $\mathcal{A}(z) = 1/(\exp(-z) + 1)$ などが使われている。原理的には、活性化関数に最適化パラメタを含めることも可能だが、計算コストなどの観点から、通常は線形操作のみにパラメタが含まれる。

⁶ 深層ニューラルネットワーク (Deep Neural Network) の一種として数えられる。

線形な) 予測関数 f を特徴付けるパラメタの組⁷ を最適化することで、未知のデータ群に対して有益な情報を得ることを目的とした機械学習スキームである。入手可能なデータセット $\mathcal{D} = \{(\mathbf{x}_n; y_n)\}$ を用いて予測関数の性能を定量化したものを目的関数 (**Loss function**) と呼び、 $\mathcal{L}_D(\cdot)$ と表す。ラベルのない未知データに関する予測精度を確かめることは難しいため、「目的関数の最適化が、最良の予測関数の構築に繋がる」との仮定のもとでシミュレーションを行うことが多い⁸。つまり、最適パラメタの組

$$= \arg \min \mathcal{L}_D(\cdot); \quad (3)$$

のように計算する。

例えば、 d 次元データ $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ の K クラス分類を考えよう。ここでは特に、出力が K 次元ベクトルかつ、和が1に規格化されているような関数 $f: \mathbb{R}^d \rightarrow [0; 1]^K$ を採用したとする。最も基本的な目的関数は、交差エントロピー (**Cross Entropy**) と呼ばれ、

$$\mathcal{L}_D(\cdot) = -\frac{1}{|\mathcal{D}|} \sum_{(\mathbf{x}; y) \in \mathcal{D}} \sum_{k=1}^K y_k \log u_k; \quad (4)$$

のように定義される。ここで、 K 次元の **one-hot** ベクトルによるラベル表記 $\mathbf{y} \in \{(1; 0; \dots; 0); (0; 1; 0; \dots); \dots\}$ に対して第 k 成分を y_k として導入したほか、予測関数の出力 $\mathbf{u} = f(\mathbf{x})$ の第 k 成分を u_k と表記した。交差エントロピーは一般に $\mathcal{L}_D(\cdot) \geq 0$ を満たし、データセット \mathcal{D} に含まれる全てのデータに対して $\mathbf{y} = \mathbf{u}$ を満たす場合のみゼロに等しい。さらにいえば、 $\{\mathbf{y}\}$ と $\{\mathbf{u}\}$ によって与えられる2つの分布の、近さに関する尺度、すなわち **Kullback-Leibler 情報量** と呼ばれる量に対応しており、機械学習ではしばしば目的関数として採用される。これに加えて、本稿では過学習を防ぐ目的で L_2 正則化項が導入された。

C. 乱れたトポロジカル超伝導体の量子相分類

次に、FFNN を用いて物理的なモデルの量子相図を描画する手法について議論する。ターゲットにするのは、大域的な秩序変数であるトポロジカル不変量により特徴付けられる、トポロジカル超伝導体である [62, 63]。中でも、 $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ [64, 65] や $\text{FeTe}_x\text{Se}_{1-x}$ [66–68] などの候補物質により注目を集めている、クラス DIII と呼ばれる対称類の2次元系を扱うことにしよう。乱れない極限で \mathbb{Z}_2 トポロジカル不変量を計算する手法はすでに確立されている

⁷ FFNN については、重み $\{W_{ij}^k\}$ およびバイアス $\{b_i^{(k)}\}$ の集合に対応する。

⁸ 例えば、同一分布から独立に (*i.i.d.*, independent and identically distributed) データを抽出した場合や、本稿で紹介する手法のように、未知データの適切な変換によって、既知データの分布への帰着が期待できる場合などが相当する。

ものの [62, 63, 69–73], 乱れにより並進対称性が破れた状況において厳密な相図が計算できるのは, 無限系において非可換幾何を用いる手法に限られている [18, 19]. 執筆者らは, 論文 [18, 19] の手法を有限系で検証するとともに, 乱れの無い極限において学習したニューラルネットワークによって, 乱れの存在下へ相図を外挿する手法を開発したので, 以下に紹介したい.

1. 乱れのあるトポジカル超伝導体のモデル

正方格子のもと, 2次元におけるクラス DIII のトポジカル超伝導体を考えよう. 粒子-正孔空間とスピン空間にそれぞれ作用するパウリ行列 s_a と σ_a ($a = 0; 1; 2; 3$) を用いると,

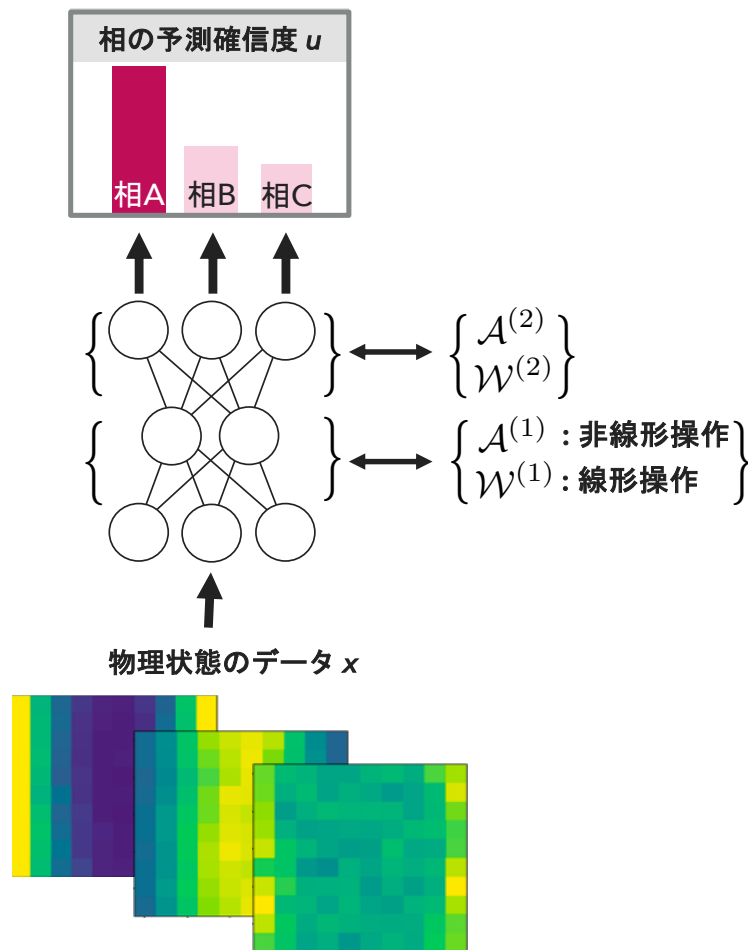


FIG. 1. 順伝播型ニューラルネットワークを用いた状態相の分類. 入力データ \mathbf{x} に対して, 線形操作と非線形操作を繰り返して得られた出力 \mathbf{u} を, 各相に対する予測の確信度と解釈する.

Bogoliubov-de Gennes ハミルトニアンは,

$$H = \sum_{\mathbf{r}} \sum_{k=1,2} \Psi_{\mathbf{r}}^y \hat{T}_k \Psi_{\mathbf{r}+\mathbf{e}_k} + h.c. + \sum_{\mathbf{r}} \Psi_{\mathbf{r}}^y \hat{V} \Psi_{\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{r}} \Psi_{\mathbf{r}}^y (W_{\mathbf{r}} \mathbf{s}_3 \otimes \sigma_0) \Psi_{\mathbf{r}}; \quad (5)$$

$$\hat{T}_1 = \mathbf{s}_3 \otimes \sigma_0 + \frac{i\Delta}{2} \mathbf{s}_1 \otimes \sigma_3; \quad (6)$$

$$\hat{T}_2 = \mathbf{s}_3 \otimes \sigma_0 + \frac{\Delta}{2} \mathbf{s}_1 \otimes \sigma_3; \quad (7)$$

$$\hat{V} = -\mathbf{s}_3 \otimes \sigma_0 - \Delta_2 \mathbf{s}_2 \otimes \sigma_2; \quad (8)$$

と与えられる [72]. ここで, $c_{\mathbf{r}}$ はサイト \mathbf{r} 上でスピン σ を持った電子の消滅演算子を表し, $\Psi_{\mathbf{r}} = [c_{\mathbf{r}\sigma}; c_{\mathbf{r}\sigma\#}; c_{\mathbf{r}\sigma}^\dagger; c_{\mathbf{r}\sigma\#}^\dagger]^T$ により南部演算子を与える. 式 (5) の第1項は $x(y)$ 方向への単位ベクトル $\mathbf{e}_{1(2)}$ とヘリカル p 波相互作用 Δ を含む形で, ホッピング行列 $\hat{T}_{1(2)}$ により記述される. また, 第2項のオンサイト項 \hat{V} は, 化学ポテンシャル μ および s 波相互作用 Δ_2 により決定される. 正方格子にも関わらず, 式 (5) にてスピン一重項とスピン三重項が混在しているのは, 候補物質の結晶構造における空間反転対称性の破れを反映している. さらに, 第3項のランダムポテンシャル $W_{\mathbf{r}} \in [-W=2; W=2]$ は, 系の乱れを反映している. 振幅 W に対する状態相の変化を調べるのが目的となる.

2. 入力データの計算

FFNN への入力データとして用いられるのは, 第一励起状態に対応する準粒子の空間分布 $P(\mathbf{r})$ である. 乱れのない極限では, ハミルトニアンのパラメータに対して $P(\mathbf{r})$ が一意に定まる一方で, 乱れの下では様々な分布が実現する. こちらについて, N_r 個のデータに関する平均を考えてみよう. 準粒子の振る舞いの質的な違いは, FFNN が相を分類するのに十分な情報を与えると期待できる. 例えば Z_2 相では, バルク-エッジ対応により, 低エネルギー準位がロバストな端状態を与えることが保証されている. さらに, 自明相におけるバルクへの局在や, 熱金属 (Thermal Metal, ThM) 相においてはバルクギャップが閉じるために非局在状態が現れることを考慮すると, 第一励起状態 ψ_1 における準粒子分布

$$P(\mathbf{r}) = |e(\mathbf{r})|^2 + |e_{\#}(\mathbf{r})|^2 + |h(\mathbf{r})|^2 + |h_{\#}(\mathbf{r})|^2; \quad (9)$$

が入力データとして適切であることが予想される. ここで, 上(下)付きの添字は南部(スピン)空間における自由度を指す. 乱れの存在下では, 個々の $P(\mathbf{r})$ に特定のパターンを見いだすことは難しい一方で, 平均操作により並進対称性が統計的に回復し, 乱れのない極限で構築した FFNN による分類が可能になると期待できる. 以下では, バルク-エッジ対応による

端状態の発現を活用するため、円筒境界条件下での準粒子分布 (の統計平均) を用いることにする。

3. FFNNによる相分類結果

次に、乱れのない極限で $P(\mathbf{r})$ を学習した FFNN によって、相図を「外挿」した結果を紹介する。 $\Delta = 3; \Delta_2 = 2$ における準粒子分布を FFNN に学習させたのち、乱れの存在下での各相に関する確信度を出力した結果を図 2 に示す。統計平均数 $N_r = 1$ および 500 の準粒子分布に対する出力が図 2(a) と (b) にそれぞれ与えられている。黒い点は、転送行列法と呼ばれる、局在長の発散を検出するような独立な手法により得られた相転移点である。乱れを強くすると、 $N_r = 1$ では分類結果が全く意味をなさない一方で、 $N_r = 500$ とすると並進対称性が統計的に回復し、転移点近傍においても正確な分類が行なわれていることが分かる。また、執筆者らの論文 [14] にて詳しく議論されているように、非可換幾何の手法に基づいたトポロジカル不変量の計算により作成された相図ともよく一致している。

図 2(c) には乱れのない極限における相境界および FFNN の学習領域が示されている。 Z_2 相に関しては $2 - 2 \frac{1}{q} \frac{1 - (\Delta_2 = \Delta)^2}{1 - (\Delta_2 = \Delta)^2} < | | < 2 + 2 \frac{1}{q} \frac{1 - (\Delta_2 = \Delta)^2}{1 - (\Delta_2 = \Delta)^2}$ での発現が知られている [74] ほか、 $|\Delta_2| < |\Delta|$ においては (i) $| | < 2 - 2 \frac{1}{q} \frac{1 - (\Delta_2 = \Delta)^2}{1 - (\Delta_2 = \Delta)^2}$ および (ii) $2 + 2 \frac{1}{q} \frac{1 - (\Delta_2 = \Delta)^2}{1 - (\Delta_2 = \Delta)^2} < | | < 4 \frac{1}{q} \frac{1 - (\Delta_2 = \Delta)^2}{1 - (\Delta_2 = \Delta)^2} = 2$ において熱金属相が現れる。この既知領域の一部で生成した準粒子分布を用いて、FFNN の教師あり学習を行った。

特に $q = 2$ に着目してみると、乱れのない極限において Z_2 相に属する系が、ランダムポテンシャルを強くしていくと熱金属相、自明相と振る舞いを変えていく様子が、FFNN により捕らえられている。熱金属相と自明相の中間領域 ($W \sim 15$) における FFNN の確信度は、統計平均の枚数 N_r を増やしてデータのゆらぎを抑えることで改善できる。そのほかの Z_2 -熱金属および熱金属-自明相の相転移は精度よく再現されている。また、 $q \sim 3.5$ で弱い乱れを導入した際の分類結果も、注目に値する。このように間隔の狭い平行な相転移線に関して、有限サイズスケリングにより局在長の発散を検出する転送行列法による検出は難しい一方で、FFNN は Z_2 相、熱金属相、自明相を精度よく分類している。

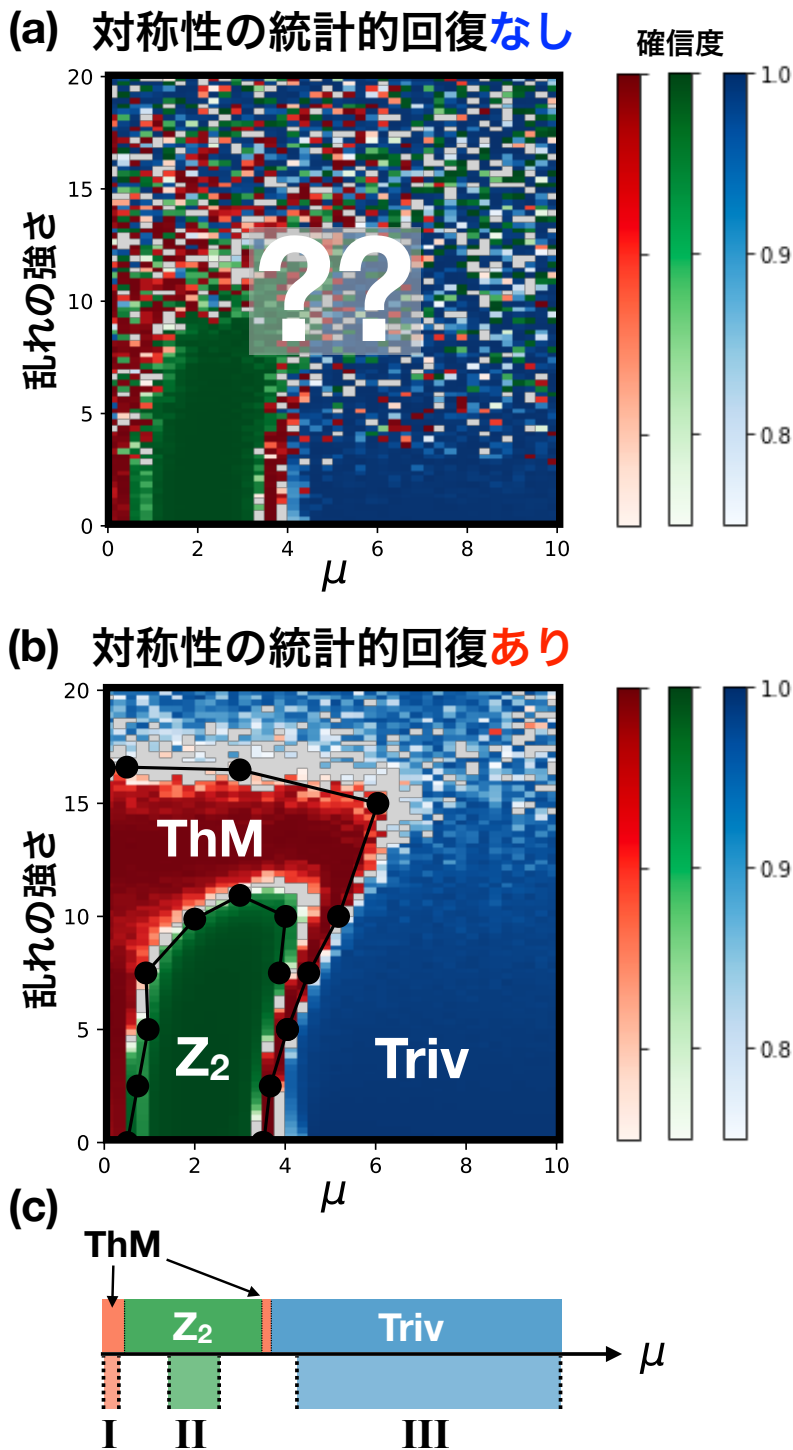


FIG. 2. (a)(b) 準粒子分布の統計平均数をそれぞれ $N_r = 1$ および 500 とした場合の FFNN の出力。特に (b) では、独立に学習した 200 個の FFNN による平均が与えられている。図中の Z_2 , Triv, ThM はそれぞれ Z_2 相, 自明相, 熱金属相を表し, FFNN による確信度が緑, 青, 赤色の濃淡で与えられている。(c) 乱れのない極限における相境界と, FFNN の学習領域。教師データは I:[0, 0.3], II:[1.0, 2.5], III:[4.0, 10.0] でそれぞれ 1000 枚作成された。この図は執筆者らの論文 [14] より, 改変の上転載された。

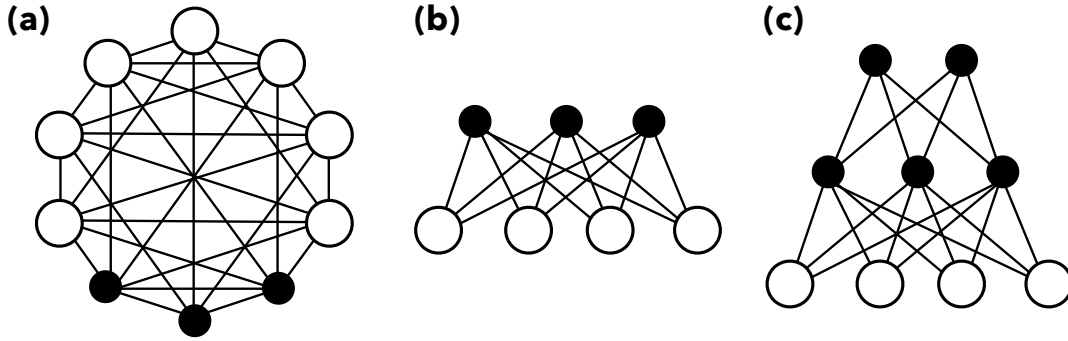


FIG. 3. (a) 一般のボルツマン機械, (b) 完全二部グラフ構造を持つ制限ボルツマン機械, (c) 深層ボルツマン機械を表す無向グラフ. 可視スピンの白丸で, 隠れ/深層スピンの黒丸で, 非ゼロな相互作用黒実線でそれぞれ表されている.

III. ボルツマン機械による熱平衡状態の表現

前節では, ニューラルネットワークを用いてトポロジカル超伝導体の量子状態を分類する手法を紹介した. 続いて本節では, ニューラルネットワーク応用の観点で, 分類タスクと双壁をなす分野である, 物理状態の表現を議論する. §I で述べたように, 物理系で実現される純粋状態や混合状態に対応する, 具体的な表式が「表現」である. 幾多と存在するニューラルネットワーク⁹の中でも, 制限/深層ボルツマン機械と呼ばれる表現関数は, 物性物理で扱う状態の厳密/近似表現に適用できることが, 数々の研究から明らかにされており [38, 39, 75], 物性物理のフロンティア開拓を担うツールとして期待を集めている. 特に本節では, 古典スピン系の熱平衡状態を厳密に表現する手法を議論したい.

A. ボルツマン機械

物理学者にとってなんとも愛着のわきやすい名前であるボルツマン機械 (**Boltzmann Machine**) とは, 系を構成する離散的な局所変数¹⁰の配位により与えられる仮想的な「エネルギー」を反映したカノニカル分布によって, 変数の配位に対応する尤度を与える表現関数である. 与えられたデータ標本 $\{x_i\}$ を最もよく説明する尤度分布を近似・推定する目的で, 統計学の分野で考案された [77, 78]. 具体的には, $\{-1; +1\}$ のいずれかを値にもつ N_v 個の

⁹ 例として, **Neural Network Zoo**(<http://www.asimovinstitute.org/neural-network-zoo/>) を参照されたい.

¹⁰ もちろん, 連続的な変数を導入することもできる. 可視変数が連続的で補助変数が離散的である「ガウス・ベルヌーイ型」のボルツマン機械なども活用されている [76].

スピン変数の組で指定されるような状態 \mathbf{h} に対応する尤度 (またはボルツマン因子) $e(\mathbf{h}; \mathbf{h})$ を

$$e(\mathbf{h}; \mathbf{h}) = \prod_{i,j} e(W_{ij} h_i h_j + a_i h_i + b_j h_j); \quad (10)$$

$$e(\mathbf{h}; \mathbf{h}) = \exp \left(\sum_{ij} W_{ij} h_i h_j + \sum_{i^0} W_{i^0} h_i + \sum_{jj^0} W_{jj^0} h_j h_{j^0} + \sum_i a_i h_i + \sum_j b_j h_j \right); \quad (11)$$

と与える表現関数を, ボルツマン機械と呼ぶことにする. ここで, 系を記述する i 番目の局所変数 h_i は可視スピン, 仮想的に導入された j 番目の局所変数 h_j は隠れスピンと呼んで区別する. さらに, 異なる空間における尤度を区別するために, N_v 個の可視スピン配位が張る空間 $S = \{-1; +1\}^{N_v}$ をスピン空間, N_h 個の隠れスピンまで含めた配位が張る空間 $S \cup H = \{-1; +1\}^{N_v + N_h}$ を拡張空間と定義する. 可視スピンおよび隠れスピンの作用する局所磁場 (もしくはバイアス) がそれぞれ $a_i; b_j$ で表現されているほか, スピン間の 2 体相互作用が W_{ij} などで表されている. 一般にボルツマン機械を図示する上で, スピンをノードに, 非ゼロの相互作用をエッジに見立て, 無向グラフとして示すことが多いため, 本稿でも同様の記法を導入する. 図 3(a) では, 可視スピンを白丸, 隠れスピンを黒丸で表した.

拡張空間からバイナリな N_h 個の隠れスピンの組 $\mathbf{h} := (h_1; h_2; \dots; h_{N_h})$ をトレース・アウトした関数形を考えることで, 複雑な相関を保つような状態の表現が可能となる. 一方で, 最適化コストなどの実用性の観点からは, 一般的な表式 (10) よりも, あえて $W_{i^0} = W_{jj^0} = 0$ の条件を課した制限ボルツマン機械 (**Restricted Boltzmann Machine, RBM**) が望ましい. 第 3 図 (b) に表されているように, 制限ボルツマン機械では可視スピン同士, 隠れスピン同士に相互作用が存在せず, 完全二部グラフをなす. 対応する尤度分布は

$$e(\mathbf{h}; \mathbf{h}) = \prod_{i,j} e(W_{ij} h_i h_j + a_i h_i + b_j h_j); \quad (12)$$

$$e(\mathbf{h}; \mathbf{h}) = \exp \left(\sum_{ij} W_{ij} h_i h_j + \sum_i a_i h_i + \sum_j b_j h_j \right); \quad (13)$$

により与えられる. グラフの形に「制限」が加わったとはいえ, 可視スピンに対して指数的な数の隠れスピンを用意すれば, 任意の尤度分布を厳密に表現可能である [79].

FFNN における層の定義を援用すれば, 制限ボルツマン機械には可視スピンの層が 1 つと, 隠れスピンの層が 1 つ存在する, と考えることができる. 補助的なスピンの層が 2 層以上連なった構造を持つボルツマン機械は深層ボルツマン機械 (**Deep Boltzmann Machine, DBM**) と呼ばれ, より高い表現能力を持つ¹¹. 例として, 第 3 図 (c) のように隠れスピンの層を 2

¹¹ 層構造が保たれるように隠れスピン同士の相互作用 $W_{jj'}$ を導入した, と理解することもできる.

つ持つ場合¹²を考えよう．2層目に属する k 番目の深層スピンを d_k ， N_d 個の深層スピンの配位を $\mathbf{d} := (d_1; d_2; \dots; d_{N_d})$ とすると，可視スピンの尤度分布は

$$Z(\mathbf{h}; \mathbf{d}) = \sum_{\mathbf{h}, \mathbf{d}} e(\mathbf{h}; \mathbf{d}); \quad (14)$$

$$e(\mathbf{h}; \mathbf{d}) = \exp \left(\sum_{i,j} W_{ij} h_i h_j + \sum_{j,k} W_{jk}^0 h_j d_k + \sum_i a_i h_i + \sum_j b_j h_j + \sum_k b_k^0 d_k \right); \quad (15)$$

により与えられる．ただし， $e(\mathbf{h}; \mathbf{d})$ は，拡張空間における各スピン配位を固定した時の尤度であり， d_k に対応する局所磁場が b_k^0 ，そして j 番目の隠れスピンとの相互作用が W_{jk}^0 により与えられている．

B. 初等的な変換

ボルツマン機械の定義を踏まえた上で，本節の冒頭で述べた「一般化イジング模型がボルツマン機械により厳密に表現できる」を言い換えると，「スピン空間における尤度が保たれるような，隠れスピンや深層スピンの埋め込み方法が存在する」といえよう．本節の残りでは，具体的に尤度の等価変形 (以下では変換と呼ぶ) を議論したい．

一般的な変換を考える上で，核となる二つの変換手法が図4に示されている．これらはそれぞれ装飾変換 (図4(a)) および $Y\Delta$ 変換 (図4(b)) と呼ばれ，いずれも新しく隠れスピンを1つ埋め込むような操作に対応している．変換により導入されるスピンはあくまでも補助自由度であるため，これらをトレース・アウトすることで得られる可視スピンの尤度は不変であることを繰り返し強調しておく．

1. 装飾変換

図4(a)に描かれた装飾変換を施すと，その名の通り，エッジ上にノードを「装飾」する操作，つまり相互作用する二つのスピンの間に，新たに隠れスピンを導入される．その具体的な変換式は，規格化定数 C を用いて [80, 81]，

$$e^{J_1 J_2} = C \sum_{h=1}^X \exp [W (J_1 + \text{sgn}(J) J_2) h]; \quad (16)$$

¹² 一般化イジング模型を変換することで得られる深層ボルツマン機械の隠れスピンの層の数は，たかだか2である．

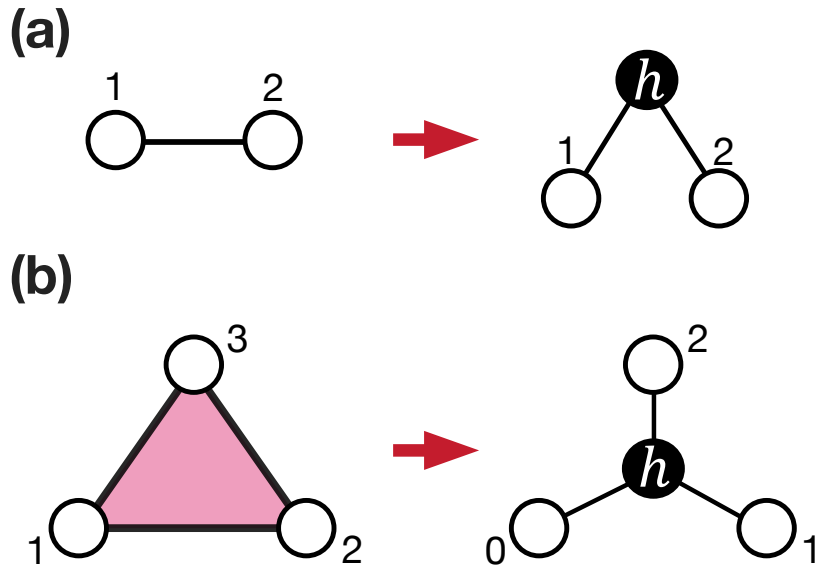


FIG. 4. (a) 装飾変換と (b) $Y\Delta$ 変換. 3体相互作用が赤領域で示されているほかは, 図3の記法に従う.

と与えられる. ここで, 拡張空間における相互作用 W は, スピン空間における相互作用の振幅 J と

$$W = \text{arc cosh } e^{2J} = 2; \quad (17)$$

のような関係を持つ.

2. $Y\Delta$ 変換

もう一つの変換手法である $Y\Delta$ 変換は, 3体および2体相互作用をする3つのスピンの対し, 補助的なスピンを1つ導入することで, 図4(b)に示されるように, Δ 形のグラフをY形(を180度回転させた)グラフに変える手法である. その具体的な表式は,

$$\begin{aligned} & \exp [M_{123} + J_{123} + J_{231} + J_{312}] \\ &= C \prod_{h=1} \prod_{i=1} \exp (W_i h + a_i)_i + b h ; \end{aligned} \quad (18)$$

のように与えられる [81–86]. ただし, 左辺における M と J_i はそれぞれ, スピン空間における3体相互作用と2体相互作用の振幅を表す. 右辺に現れる a_i および b はそれぞれ, i 番目の

可視スピンと隠れスピンへの局所磁場に相当し、 W_i はスピン間の相互作用を表す。式 (18) により与えられる八つの非線形方程式を解くと、右辺のパラメータが

$$\exp(4 \quad a_i) = \frac{\sinh(2(|J_i| + M))}{\sinh(2(|J_i| - M))}, \quad (19)$$

$$\cosh(2W_i) = \frac{e^{2J_{ij}} \cosh(2(|J_j| + |J_k|)) - e^{-2J_{ij}} \cosh(2(|J_j| - |J_k|))}{[2 \cosh(4|J_i|) - 2 \cosh(4M)]^{1-2}}, \quad (20)$$

$$\sinh(2b) = \frac{-\sinh(2 \quad W_i) \sinh(4M)}{[(\cosh(4J_j) - \cosh(4M))(\cosh(4J_k) - \cosh(4M))]^{1-2}}. \quad (21)$$

と与えられる。ここで、 $\quad = \text{sgn}(J_i)$ はスピン空間における 2 体相互作用の符号を表わす。式 (20) と (21) に登場する添字 i, j, k は互いに異なるように選ぶ必要があるほか、 $Y\Delta$ 変換の適用条件として

$$|M| < |J_i| \quad (i = 1; 2; 3); \quad (22)$$

$$\text{sgn}(J_1 J_2 J_3) = 1; \quad (23)$$

を満たす必要があることに注意されたい。一見、これらの条件は変換可能なモデルに制限を加えるように思えるが、次節で述べる「仮想的相互作用」の導入などにより、任意の一般化イジングモデルが制限/深層ボルツマン機械に変換可能であることが示せる。

C. 一般化イジングモデルの変換

次に、装飾変換と $Y\Delta$ 変換を組み合わせることにより、任意の多体相互作用を含むようなイジングモデル、つまり一般化イジングモデルについて、等価なボルツマン機械を構築可能であることを示そう。そのためには、任意の p 体相互作用についての変換が可能であることを示せばよいことが、以下の簡単な考察からわかる。まず、系の達する熱平衡状態に対応する、カノニカル分布の逆温度を β とし、一般化イジングモデルのハミルトニアン H が

$$-H = \sum_{f n_i g} M_{f n_i g} \prod_i n_i \quad (24)$$

と与えられているとする。ただし、 $n_i = 0; 1$ は i 番目のスピンの相互作用に含まれるか否かを表し、全ての $\{n_i\}$ の組み合わせに関する和が取られている。この表記のもとで、スピン配位 $\{n_i\}$ の尤度は

$$P(\{n_i\}) = \sum_{f n_i g} \exp(-\beta M_{f n_i g}) \prod_i n_i \quad (25)$$

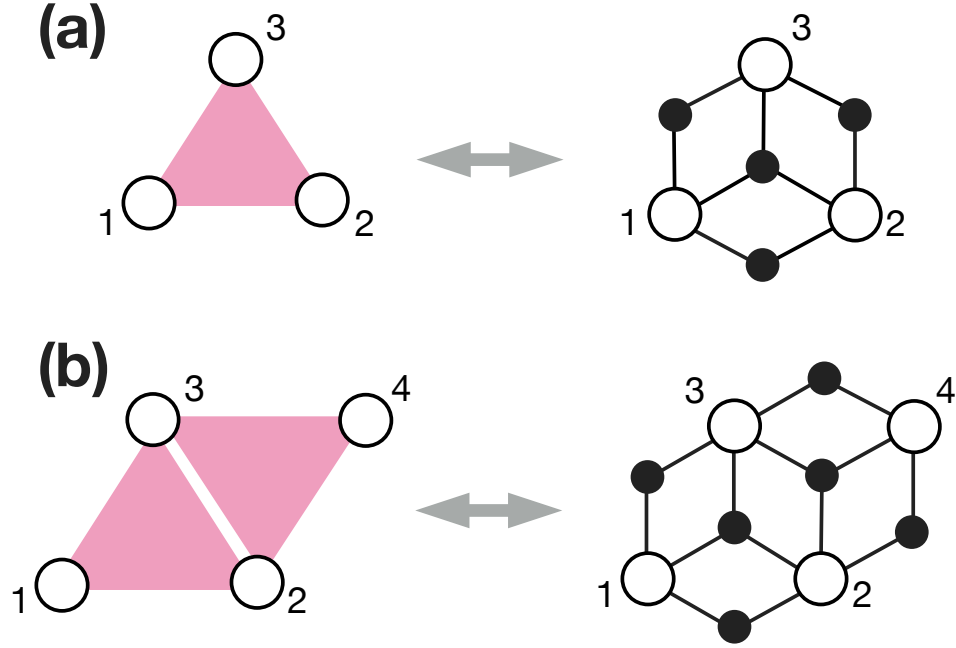


FIG. 5. (a) 単一の3体相互作用のボルツマン機械への変換と, (b) 複数の3体相互作用の変換. 後者では仮想相互作用の符号を調節することで, 隠れスピンの数を削減している.

と, それぞれの相互作用項を独立な積で与えられることから, 単一の p 体相互作用項に対応する尤度

$$p(\mathbf{y}; M) := \exp \left(\sum_j M_j y_j \right); \quad (26)$$

に関する変換を考えれば十分である (M は相互作用の振幅と関係付けられる).

1. 制限ボルツマン機械への変換

まず始めに, 最も単純な場合である, 3体相互作用の変換を考えよう. 条件式 (22) と (23) のために, $Y\Delta$ 変換を直接適用することはできない. そこで, 互いに打ち消しあうような「仮想的相互作用」を導入し, $Y\Delta$ 変換に用いられる項と, 装飾変換に用いられる部分に分割しよう. つまり,

$$\begin{aligned} z_3(\mathbf{y}; M) &= \exp(M_{123}) \\ &= \exp[M_{123} + J_1_{23} + J_2_{31} + J_3_{12}] \\ &\quad \times \exp[-(J_1_{23} + J_2_{31} + J_3_{12})]; \end{aligned} \quad (27)$$

のように変形した上で、第一因子には式 (18) で与えられる $Y\Delta$ 変換を、第二因子には式 (16) で与えられる装飾変換を適用すれば、図 5(a) に示されているようなボルツマン機械の表現が完成する。条件式である式 (22) と (23) が満たされている限り、仮想的相互作用 J_i の振幅は任意の値を取りうる。

仮想的相互作用の符号をうまく調節することで、隠れスピンの数を削減することも可能である。例えば、図 5(b) では、2つの3体相互作用に対して、辺共有される部分の仮想的相互作用を打ち消すことで、本来8個必要となる隠れスピンを6個に減らしている。

2. 深層ボルツマン機械への変換

次に、深層スピンの層を導入することで、4体相互作用も表現されることを示す。これにあたり、図 6(a) のように2つの段階に分割して考えよう。まず、第1段階では、2つの可視スピンの積を1つのスピンのみとみなして装飾変換を適用することで、

$$\begin{aligned} 4(\ ; M^{(0)}) &= \exp \sum_{1,2,3,4} M^{(0)} \\ &= \Delta \sum_{d=1} \exp M^{(1)}(\ 1 \ 2 + \ 3 \ 4) d \\ &= \Delta \sum_{d=1} \sum_{3,1;2;d} M^{(1)} \sum_{3,3;4;d} M^{(1)} \ ; \end{aligned} \quad (28)$$

と3体相互作用の積を得る。ただし、左辺の $4(\ ; M^{(0)})$ は4体相互作用するスピンの配位が与えられる場合の尤度であり、その振幅 $M^{(0)}$ と変換後の振幅 $M^{(1)}$ は、式 (17) により

$$M^{(1)} = \text{arc cosh } e^{2jM^{(0)}j} = 2; \quad (29)$$

の関係を持つ。次に第2段階にて、式 (28) で得られた2つの相互作用に対し、前節の変換(式 (27))を適用すれば、2体相互作用のみを用いて4体相互作用を表現することが可能となることがわかる¹³。

以上の4体相互作用に関する議論は、図 6(b) に示されているように、一般の p 体相互作用にも拡張できる。つまり、装飾変換により相互作用の次数を下げ、少数系で得られた結果を使うことで、任意の p について変換が可能であることが帰納的に示せるが、詳細については、執筆者らの論文 [57] を参照されたい。導入される隠れスピンおよび深層スピンの数をそれぞれ $n_h; n_d$ とおくと、これらは

$$n_h = 4(p-2); \quad n_d = p-3; \quad (30)$$

¹³ 4体相互作用をボルツマン機械に変換するもう一つの方法に、星-四角変換と呼ばれる変換手法の適用がある。1つの深層スピンを用いるという点は $Y\Delta$ 変換と共通するが、隠れスピンの数やパラメタの値が異なる。導入される補助スピン数を最小に抑えるために、本稿では星-四角変換は考えない。

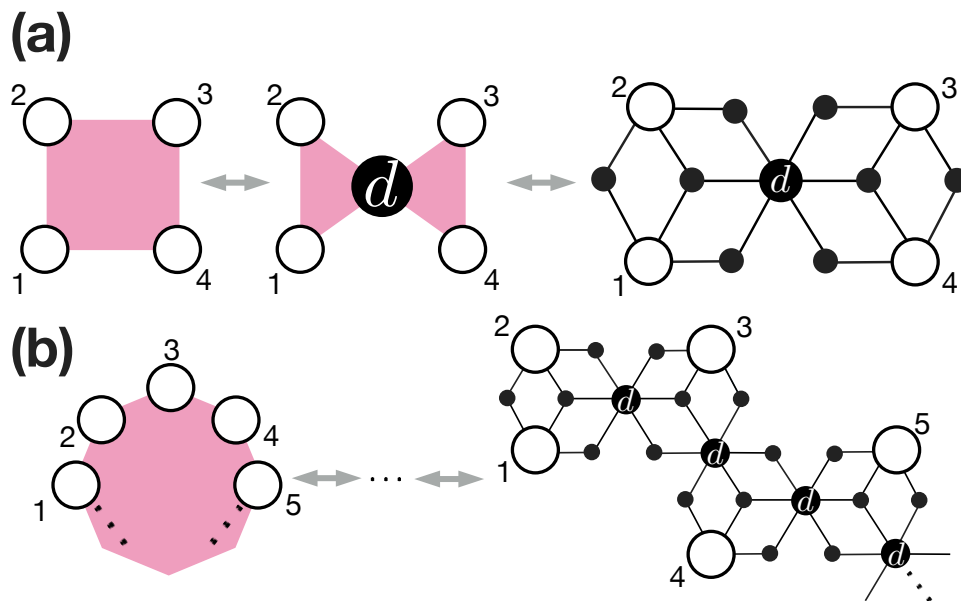


FIG. 6. (a) 4体相互作用の深層ボルツマン機械への変換. (b) 一般の p 体相互作用の深層ボルツマン機械への変換. 深層スピンの黒丸で与えられているほかは, 図5と同様な記法に従う.

と与えられる. いずれも p に関して線形増加に止まることから, スピン空間・拡張空間のいずれにおいても, アルゴリズムの計算量オーダーが不変に保たれる. これは数値計算的な観点から意義深いため, 次節では得られた変換を積極的に活用していこう.

IV. ボルツマン機械表現を応用した古典モンテカルロ・シミュレーション

本節では、前節で導入された一般化イジング模型の変換テクニックの応用例として、大域的更新法の適用による古典モンテカルロ・シミュレーションの高速化を考えよう。古典スピン系にて最も広く用いられているマルコフ連鎖モンテカルロ法の一つである、シングル・スピン・フリップ法は、局所的なスピン配位に着目して逐次的に更新を行うため、相転移温度近傍のように相関長の大きな領域では効率が悪い。この問題点を解決するために、多数のスピン配位を一斉に更新する、大域的更新法の研究が進められてきたが、多くは2体相互作用のみを想定した手法である。

前節で導入した尤度変換のテクニックと、既存の大域的更新法を組み合わせれば、多体相互作用を持つモデルにおいても大域的更新法が適用可能となることが、執筆者らにより示された。以下では、Swendsen と Wang により考案された大域的更新法 [87] を導入したのちに、カゴメ格子上の一般化イジング模型における計算結果を示す。特に、本稿で議論する、強磁性的な2体相互作用および符号交代する3体相互作用を持つ模型は、多体相互作用のもと相転移点近傍で臨界減衰を示すような、最も基本的なモデルの1つである。

A. Swendsen-Wang の更新法

まずは、3体以上相互作用を持たない模型に適用可能な大域的更新法を導入する。これは Swendsen と Wang によって考案された [87] ことから、以下では **SW 法** と呼ぶことにしよう。サイトの集合 V とエッジの集合 E から定義されるグラフ $G = (V; E)$ 上でハミルトニアンが

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle \in E} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i \in V} h_i \sigma_i \quad (31)$$

と与えられているとする。ただし、 J_{ij} はサイト i と j に置かれたスピン、つまり σ_i と σ_j の間に働く2体相互作用の振幅を、 h_i は個々のスピンに作用する磁場を表している。このようなハミルトニアンと逆温度 β のもとで、以下のようなアルゴリズムによりスピン配位を更新するのが SW 法である:

1. あるエッジ $e = \langle i; j \rangle \in E$ に対して、 J_{ij} が正(負)であるとする。 i と j に置かれたスピンが(反)平行であれば、確率 $p = 1 - \exp(-2\beta |J_{ij}|)$ で2つのスピンを「結合」する。この操作を全てのエッジ e に対して行う。
2. 結合されたスピン同士により形成される「クラスタ」を整理する。

3. k 番目のクラスタ C_k における Zeeman エネルギー $m_k = - \sum_{i \in C_k} h_i$ に対し, 確率 $p_k = \frac{e^{-m_k}}{e^{-m_k} + e^{m_k}}$ で集合内の全てのスピンを反転する. これを全ての k に対して行う.

4. 得られる物理量が収束するまで, 1 から 3 を繰り返す.

上記のようなスピン配位の更新は, 結合の有無により形成されたクラスタを同時に更新するクラスタ更新法の一つである. 低温領域におけるドメイン・ウォール形成や, 相転移温度近傍における低速化などの問題を軽減できることから, 臨界点の性質を調べるために使われることが多い.

B. 一般化イジング模型におけるクラスタ更新

上で導入したクラスタ更新法は, 任意の 2 体相互作用模型に対して適用可能なため, 一般化イジング模型のボルツマン機械表現に対しても有効である. 最も基本的な例として, 強磁性的な 2 体相互作用に加え, 3 体相互作用を持つようなカゴメ格子上的イジング模型を考えよう. E をエッジの集合, Δ (∇) を 3 つのサイトからなる上 (下) 向き三角形として, ハミルトニアンを

$$-H(\{s_i\}) = \sum_{\langle i, i' \rangle \in E} J_{ii'} s_i s_{i'} + \sum_{\triangleleft} M_4 s_i s_{i'} s_{i''} + \sum_{\triangleright} M_5 s_i s_{i'} s_{i''}; \quad (32)$$

のように定義する. ただし, $\triangleleft = \{i, i', i''\}$ と $\triangleright = \{i, i', i''\}$ はスピン変数の積, $M_4 = -M_5$ は上 (下) 向き三角形上の 3 体相互作用の振幅, $\langle i, i' \rangle$ はサイト i と i' をつなぐエッジである. 相互作用の振幅が $M_4 + M_5 = 0$ を満たす場合には, スピン反転と鏡像反転を組み合わせた対称性が存在し, 有限の M_4 に対して有限温度における 2 次相転移が存在する. そこで, 以下では, $M_4 = -M_5 = M > 0$ を仮定しよう. この時, 尤度分布は

$$Z(\{h_i\}) = \sum_{\{s_i\}} \exp \left[\sum_{\langle i, i' \rangle \in E} J_{ii'} s_i s_{i'} + \sum_{\triangleleft} M_4 s_i s_{i'} s_{i''} + \sum_{\triangleright} M_5 s_i s_{i'} s_{i''} \right] \quad (33)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{\mathbf{h}} \Delta \exp \left[\sum_{\triangleleft} W_4 h_4 s_i s_{i'} s_{i''} + \sum_{\triangleright} W_5 h_5 s_i s_{i'} s_{i''} \right] \\ &\quad + b \sum_{\triangleleft, \triangleright} (h_4 + h_5) s_i s_{i'} s_{i''} \\ &= \sum_{\mathbf{h}} e(\mathbf{h}; \{h_i\}); \end{aligned} \quad (34)$$

のように変換される．拡張空間におけるパラメタは $Y\Delta$ 変換の表式 (18) に $M_{4(5)}$ と を代入することで得られるが，相互作用の符号交代により，可視スピンへの外部磁場がキャンセルされていることに注意されたい．図 7 に示されているように，1つの三角につき1つの隠れスピンが導入され，その向きに応じて h_4 もしくは h_5 と表記されている．

さて，相転移温度 (図 8(a) を参照) 近傍における模型の振る舞いを詳細に調べよう．そのために，拡張空間において SW 法を適用する．特に，可視スピンの磁化の自己相関時間を比較した結果が，図 8(b) にまとめられている．ここで，自己相関時間は，以下に定義される自己共分散の減衰の時定数として

$$A(t) = \frac{\langle |m(t_0 + t)m(t_0)| \rangle - \langle |m(t_0)| \rangle^2}{\langle |m(t_0)|^2 \rangle - \langle |m(t_0)| \rangle^2} = A_0 e^{-t/\tau}; \quad (35)$$

のように見積もられる．ただし， $m(t) = \frac{1}{N_v} \sum_{i=1}^{N_v} m_i(t)$ は t 番目のモンテカルロ・ステップにおける磁化を， $\langle \dots \rangle$ はモンテカルロ・ステップに関する平均を表す．スピン空間におけるシングル・スピン・フリップ法を用いると，臨界減衰が顕著に現れる一方で，拡張空間上でクラスタ更新を適用すると状況が改善されることがわかる¹⁴．

最後に，模型のユニバーサリティクラスについても述べたい．くりこみ群理論により，以下のように定義される Binder 比，

$$g := \frac{1}{2} \left(3 - \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \right); \quad (36)$$

はスケーリング則に従うと仮定される．ここで， m はサイトあたりの磁化， $\langle \dots \rangle$ は熱平衡状態における統計平均を表す．Binder 比は相転移温度 T_c 近傍において，一辺の格子サイズ L に対して

$$g \sim F L^{1-\nu} (T - T_c); \quad (37)$$

のようにスケールする．ただし， ν は相関長の臨界指数で， F はスケーリングに対応する適当な多項式である¹⁵．本稿で議論した模型では，様々なパラメタに対して，臨界指数が $\nu = 1$ であり，2次元イジング模型のユニバーサリティクラスに属することを示唆している [88]．他のユニバーサリティクラスにおける適用可能性については興味深い課題であり，今後の研究課題の一つとして挙げられる．

¹⁴ このモデルで $M = M_c$ を増加させるに連れて自己相関時間が増大していく原因として，以下のように理解できる． $Y\Delta$ 変換により隠れスピんに導入された仮想磁場は $M = M_c$ とともに増大することから，クラスターあたりの仮想的な磁化も増大する．詳細釣り合い条件の満たされたモンテカルロ・シミュレーションを行うためには，磁化に応じて反転確率が変わるため，非常に偏った配位更新が行われ，スピン空間の効率的な探索が阻害されることが考えられる．

¹⁵ 本稿では3次の多項式と仮定して計算している．

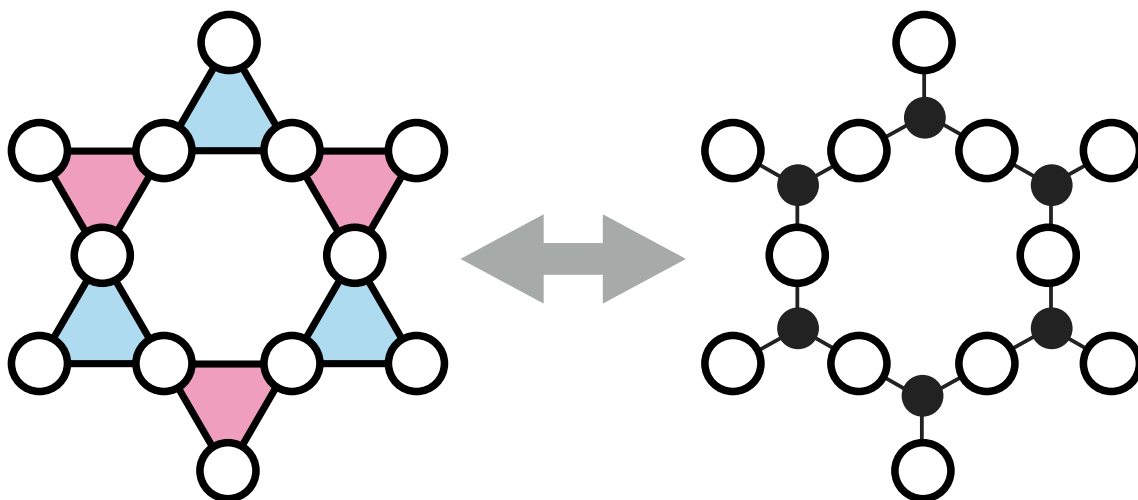


FIG. 7. 式 (7) で与えられる模型と、変換により得られたボルツマン機械表現. 模型が定義されたカゴメ格子上の可視スピンを白丸で、変換により導入された隠れスピンの黒丸で示されている. 2体相互作用が黒実線で表されているほか、3体相互作用の働く3つのスピンの形成する三角形が、符号に応じて赤と青で色付けされている.

V. むすびに

以上、ニューラルネットワークを用いた物理状態の分類および表現について紹介した. 機械学習分野と物性物理分野、双方の概念が混ざり合うことで、新たな知見が日々生み出されている様子が伝われば幸いである.

§IIで紹介した分類スキームは、機械学習で発展してきた概念と親和性が高い. 紹介した文献からもわかるように、理論モデルから生成された「人工的な」データが集中的に調べられてきた中で、実験で得られた「現実的な」データへの本格的な適用も見られるようになってきた. モデル構築と現象観測の垣根を超えた科学的手法を確立するために、高い解釈性と予測精度の両立を軸にした研究が今後も増え続けるだろう.

§IIIおよび§IVで議論した表現関数の構築に関して、本稿では便宜上、近似表現と厳密表現を分割して扱った. 一方で、尤度分布や波動関数の厳密表式が得られる模型に対して摂動を加えた場合の近似的取り扱いなど、両者を統合するような方向性も面白いだろう. また、表現関数についても、PixelCNN[89]のように効率的なサンプリングが可能なニューラルネットワーク [90] の、大規模な量子多体系の研究における適性も、追求すべき課題として挙げられる.

紙面の関係上紹介できなかった方向性として、データ科学的な観点から物理量やハミルトニアンを予測・補間するアプローチが挙げられる。元素組成比や格子構造から物性値を予測するマテリアルズインフォマティクス分野では、機械学習手法による材料開発の促進が2011年頃より行われてきたが[91]、近年になり物性物理の分野でも有用性が認知され始めている[92–94]。実験データへの応用手法が発展することで、より大きな潮流として分野の促進を支えることが予想される。

なお、本稿で紹介した分類/表現に関する研究は、ほとんどが3年以内に発表された内容であり、新奇なアイデアの源泉となっている。本稿を読んだ読者が、物性物理とニューラルネットワーク、もしくはさらに広く機械学習との融合領域に興味を持ち、研究を行う足がかりとなることを願って、筆を擱く。

謝辞

本研究においては、大久保毅氏、小布施秀明氏、佐藤昌利氏、田中宗氏、田村亮氏、藤堂眞治氏、宮下精二氏、王磊 (Lei Wang) 氏に有意義な助言・議論をいただきました。この場をお借りして深く感謝申し上げます。ただし、本稿の内容に誤りがある場合、その責任は執筆者らにあります。本研究の成果は、科研費番号 15K17719 [若手研究 (B)], 16H00985・18H04220 [新学術領域研究「トポロジーが紡ぐ物質科学のフロンティア」], 17J00743 [特別研究員奨励費], 17K14352 [若手研究 (B)], 18K03445 [基盤研究 (C)], 18H04478 [新学術領域研究「次世代物質探索のための離散幾何学」], フォトンサイエンス・リーディング大学院 (ALPS), 計算科学アライアンスの助成を受けて行われたものです。

英文題目・英文シノプシス

英文題目 From classification to representation of physical states by neural networks

英文シノプシス : We present two flavors of research that combine the concepts in condensed matter physics and machine learning: classification and representation. For the former, we first introduce the general procedure to train a neural network to classify labels, and then discuss a concrete application to data produced from physical models. Then, for the latter, we define the expression of the Boltzmann machine and provide transformation techniques to express classical systems with binary degrees of freedom.

著者略歴・専攻など

- 吉岡 信行 よしおか のぶゆき
2017 東京大学院理学系研究科物理学専攻 修士課程修了同年 同博士課程進学, 日本学術振興会特別研究員 (DC1), 現在に至る
専攻 物性理論
e-mail: nysocloud@g.ecc.u-tokyo.ac.jp
- 赤城 裕 あかぎ ゆたか
2014 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻修了, 博士 (工学) 取得
同年 沖縄科学技術大学院大学 博士研究員を経て, 2015 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 助教, 現在に至る
専攻 物性理論
e-mail: akagi@cams.phys.s.u-tokyo.ac.jp
- 桂 法称 かつら ほうしょう
2008 同大学院工学系研究科物理工学専攻修了, 博士 (工学) 取得, 理化学研究所基礎科学特別研究員
2009 カリフォルニア大サンタバーバラ校博士研究員, 2010 学習院大学理学部物理学科講師, 2012 同准教授を経て, 2014 東京大学大学院理学系研究科物理学専攻准教授, 現在に至る
専攻 物性理論・統計物理学
e-mail: katsura@phys.s.u-tokyo.ac.jp

-
- [1] A. Krizhevsky, I. Sutskever, and G. E. Hinton, in *Advances in neural information processing systems* (2012) pp. 1097–1105.
 - [2] G. Hinton, L. Deng, D. Yu, G. Dahl, A.-r. Mohamed, N. Jaitly, A. Senior, V. Vanhoucke, P. Nguyen, B. Kingsbury, and T. Sainath, *IEEE Signal processing magazine* **29**, 82 (2012).
 - [3] D. Bahdanau, K. Cho, and Y. Bengio, arXiv:1409.0473 (2014).
 - [4] P. Mehta, M. Bukov, C.-H. Wang, A. G. Day, C. Richardson, C. K. Fisher, and D. J. Schwab, *Physics Reports* **810**, 1 (2019).
 - [5] G. Carleo, I. Cirac, K. Cranmer, L. Daudet, M. Schuld, N. Tishy, L. Vogt-Maranto, and L. Zdeborova, arXiv:1903.10563 (2019).
 - [6] Y. Taigman, M. Yang, M. Ranzato, and L. Wolf, in *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition* (2014) pp. 1701–1708.
 - [7] J. Carrasquilla and R. G. Melko, *Nat. Phys.* **13**, 431 (2017).
 - [8] F. Schindler, N. Regnault, and T. Neupert, *Phys. Rev. B* **95**, 245134 (2017).
 - [9] J. Venderley, V. Khemani, and E.-A. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 257204 (2018).
 - [10] E. van Nieuwenburg, E. Bairey, and G. Refael, *Phys. Rev. B* **98**, 060301 (2018).
 - [11] Y.-T. Hsu, X. Li, D.-L. Deng, and S. D. Sarma, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 245701 (2018).
 - [12] T. Ohtsuki and T. Ohtsuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 123706 (2016).
 - [13] T. Ohtsuki and T. Ohtsuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 044708 (2017).
 - [14] N. Yoshioka, Y. Akagi, and H. Katsura, *Phys. Rev. B* **97**, 205110 (2018).
 - [15] Y. Zhang and E.-A. Kim, *Phys. Rev. Lett.* **118**, 216401 (2017).
 - [16] M. J. S. Beach, A. Golubeva, and R. G. Melko, *Phys. Rev. B* **97**, 045207 (2018).
 - [17] P. Zhang, H. Shen, and H. Zhai, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 066401 (2018).
 - [18] H. Katsura and T. Koma, *J. Math. Phys.* **57**, 021903 (2016).
 - [19] H. Katsura and T. Koma, *J. Math. Phys.* **59**, 031903 (2018).
 - [20] Q. Niu, D. J. Thouless, and Y.-S. Wu, *Phys. Rev. B* **31**, 3372 (1985).
 - [21] T. A. Loring and M. B. Hastings, *EPL* **92**, 67004 (2010).
 - [22] H.-M. Guo, *Phys. Rev. B* **82**, 115122 (2010).
 - [23] I. C. Fulga, F. Hassler, and A. R. Akhmerov, *Phys. Rev. B* **85**, 165409 (2012).
 - [24] B. Leung and E. Prodan, *Phys. Rev. B* **85**, 205136 (2012).

- [25] B. Sbierski and P. W. Brouwer, *Phys. Rev. B* **89**, 155311 (2014).
- [26] T. A. Loring, *Ann. Phys.* **356**, 383 (2015).
- [27] T. A. Loring and H. Schulz-Baldes, *New York J. Math.* **23**, 1111 (2017).
- [28] Y. Akagi, H. Katsura, and T. Koma, *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 123710 (2017).
- [29] H. Araki, T. Mizoguchi, and Y. Hatsugai, *Phys. Rev. B* **99**, 085406 (2019).
- [30] E. P. L. Nieuwenburg, Y.-H. Liu, and S. D. Huber, *Nat. Phys.* **13**, 435 (2017).
- [31] P. Broecker, F. F. Assaad, and S. Trebst, *arXiv:1707.00663* (2017).
- [32] B. S. Rem, N. Käming, M. Tarnowski, L. Asteria, N. Fläschner, C. Becker, K. Sengstock, and C. Weitenberg, *arXiv:1809.05519* (2018).
- [33] A. Bohrdt, C. S. Chiu, G. Ji, M. Xu, D. Greif, M. Greiner, E. Demler, F. Grusdt, and M. Knap, *arXiv:1811.12425* (2018).
- [34] Y. Zhang, A. Mesaros, K. Fujita, S. Edkins, M. Hamidian, K. Ch'ng, H. Eisaki, S. Uchida, J. Davis, E. Khatami, and E.-A. Kim, *Nature* **570**, 484 (2019).
- [35] M. B. Hastings, *Phys. Rev. B* **73**, 085115 (2006).
- [36] M. B. Hastings, *J. Stat. Mech.* **2007**, P08024 (2007).
- [37] M. B. Hastings, *Phys. Rev. B* **76**, 035114 (2007).
- [38] G. Carleo and M. Troyer, *Science* **355**, 602 (2017).
- [39] D.-L. Deng, X. Li, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. X* **7**, 021021 (2017).
- [40] Y. Nomura, A. S. Darmawan, Y. Yamaji, and M. Imada, *Phys. Rev. B* **96**, 205152 (2017).
- [41] Z. Cai and J. Liu, *Phys. Rev. B* **97**, 035116 (2018).
- [42] H. Saito, *J. Phys. Soc. Jpn.* **86**, 093001 (2017).
- [43] H. Saito and M. Kato, *J. Phys. Soc. Jpn.* **87**, 014001 (2018).
- [44] K. Choo, G. Carleo, N. Regnault, and T. Neupert, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 167204 (2018).
- [45] G. Carleo, Y. Nomura, and M. Imada, *Nat. Commun.* **9**, 5322 (2018).
- [46] N. Freitas, G. Morigi, and V. Dunjko, *International Journal of Quantum Information* **16**, 1840008 (2018).
- [47] N. Yoshioka and R. Hamazaki, *Phys. Rev. B* **99**, 214306 (2019).
- [48] M. J. Hartmann and G. Carleo, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 250502 (2019).
- [49] A. Nagy and V. Savona, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 250501 (2019).
- [50] F. Vicentini, A. Biella, N. Regnault, and C. Ciuti, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 250503 (2019).
- [51] G. Torlai and R. G. Melko, *Phys. Rev. B* **94**, 165134 (2016).

- [52] A. Morningstar and R. G. Melko, *The Journal of Machine Learning Research* **18**, 5975 (2017).
- [53] J. Liu, Y. Qi, Z. Y. Meng, and L. Fu, *Phys. Rev. B* **95**, 041101 (2017).
- [54] L. Huang and L. Wang, *Phys. Rev. B* **95**, 035105 (2017).
- [55] T. A. Bojesen, *Phys. Rev. E* **98**, 063303 (2018).
- [56] K.-W. Zhao, W.-H. Kao, K.-H. Wu, and Y.-J. Kao, *Phys. Rev. E* **99**, 062106 (2019).
- [57] N. Yoshioka, Y. Akagi, and H. Katsura, *Phys. Rev. E* **99**, 032113 (2019).
- [58] 大槻東巳, 真野智裕, 『固体物理』 **53**, 447 (2018).
- [59] M. Nielsen, *Neural Networks and Deep Learning* (Determination Press, 2015).
- [60] 瀧雅人, 『これならわかる深層学習入門』 (講談社, 2017).
- [61] K. Hornik, M. Stinchcombe, and H. White, *Neural Networks* **2**, 359 (1989).
- [62] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, *Phys. Rev. B* **78**, 195125 (2008).
- [63] A. Y. Kitaev, *AIP Conf. Proc.* **1134**, 22 (2009).
- [64] L. A. Wray, S.-Y. Xu, Y. Xia, Y. S. Hor, D. Qian, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Nat. Phys.* **6**, 855 (2010).
- [65] L. Fu and E. Berg, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 097001 (2010).
- [66] Z. Wang, P. Zhang, G. Xu, L. K. Zeng, H. Miao, X. Xu, T. Qian, H. Weng, P. Richard, A. V. Fedorov, H. Ding, X. Dai, and Z. Fang, *Phys. Rev. B* **92**, 115119 (2015).
- [67] Z. F. Wang, H. Zhang, D. Liu, C. Liu, C. Tang, C. Song, Y. Zhong, J. Peng, F. Li, C. Nie, L. Wang, X. J. Zhou, X. Ma, Q. K. Xue, and F. Liu, *Nat. Mater.* **15**, 968 (2016).
- [68] P. Zhang, K. Yaji, T. Hashimoto, Y. Ota, T. Kondo, K. Okazaki, Z. Wang, J. Wen, G. D. Gu, H. Ding, and S. Shin, *Science* **360**, 182 (2018).
- [69] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005).
- [70] C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
- [71] L. Fu and C. L. Kane, *Phys. Rev. B* **76**, 045302 (2007).
- [72] M. Sato and S. Fujimoto, *Phys. Rev. B* **79**, 094504 (2009).
- [73] X.-L. Qi, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **81**, 134508 (2010).
- [74] M. Diez, I. C. Fulga, D. I. Pikulin, J. Tworzydło, and C. W. J. Beenakker, *New J. Phys.* **16**, 063049 (2014).
- [75] X. Gao and L.-M. Duan, *Nat. Commun.* **8**, 662 (2017).
- [76] A. Tanaka and A. Tomiya, arXiv:1712.03893 (2017).
- [77] P. Smolensky, *Parallel Distributed Processing: Volume 1: Foundations* (MIT Press, Cam-

- bridge, 1986), Vol. 1, p. 194.
- [78] 恐神貴行, 『ボルツマンマシン』 (コロナ社, 2019).
- [79] N. Le Roux and Y. Bengio, *Neural Computation* **20**, 1631 (2008).
- [80] M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **113**, 969 (1959).
- [81] F. J. Wegner, *J. Math. Phys.* **12**, 2259 (1971).
- [82] K. Lin and F. Wu, *Int. J. Mod. Phys. B* **5**, 2125 (1991).
- [83] F. Y. Wu, *J. Phys. A* **23**, 375 (1990).
- [84] K. Lin and F. Wu, *Mod. Phys. Lett. B* **4**, 311 (1990).
- [85] W. T. Lu and F. Y. Wu, *Phys. Rev. E* **71**, 046120 (2005).
- [86] F. Caravelli and C. Nisoli, arXiv:1810.09190 (2018).
- [87] R. H. Swendsen and J.-S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987).
- [88] M. E. Fisher, *Phys. Rev.* **180**, 594 (1969).
- [89] A. v. d. Oord, N. Kalchbrenner, and K. Kavukcuoglu, arXiv:1601.06759 (2016).
- [90] Y. Levine, O. Sharir, N. Cohen, and A. Shashua, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 065301 (2019).
- [91] R. Potyrailo, K. Rajan, K. Stoewe, I. Takeuchi, B. Chisholm, and H. Lam, *ACS Comb. Sci.* **13**, 579 (2011).
- [92] J. Otsuki, M. Ohzeki, H. Shinaoka, and K. Yoshimi, *Phys. Rev. E* **95**, 061302 (2017).
- [93] H. Fujita, Y. O. Nakagawa, S. Sugiura, and M. Oshikawa, *Phys. Rev. B* **97**, 075114 (2018).
- [94] T. Nakamura, arXiv:1902.02941 (2019).
- [95] I. Syozi, *Prog. Theor. Phys.* **6**, 306 (1951).

