

テンソルネットワーク学習法で切り拓く 量子多体問題の新たな解析手法 －複雑な内部自由度を持つ量子系のための新たなアルゴリズム－

1 ポイント

- ・ 多軌道電子フォノン系におけるファインマンダイアグラムの低ランク構造を世界で初めて発見した。
- ・ Tensor Cross Interpolation アルゴリズムを改良しテンソルネットワーク推定の安定性を向上させた。
- ・ 現実物質のシミュレーションにより、次世代の材料、デバイス開発への応用が期待される。

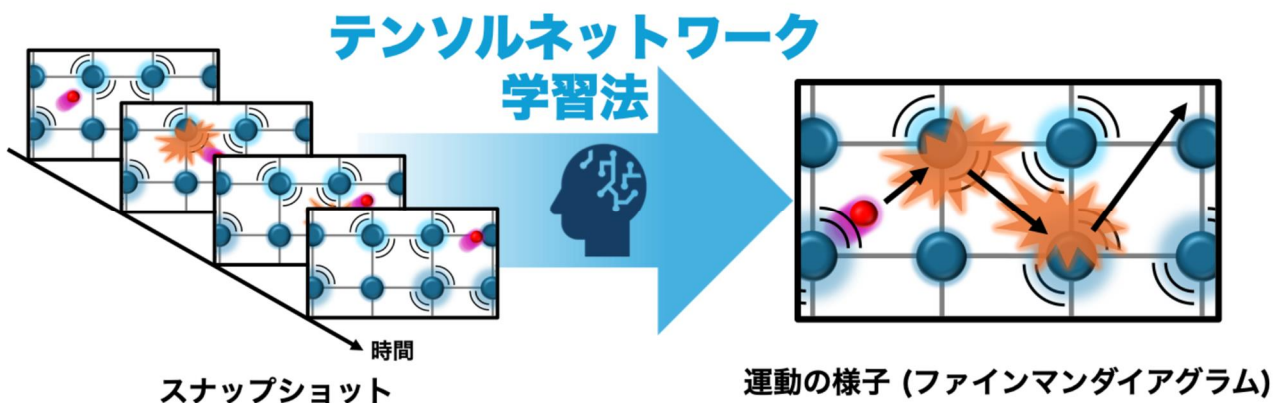


図 1: Tensor Cross Interpolation (TCI, テンソルネットワーク学習法)により、わずかなスナップショットから物質中の電子の運動(ファインマンダイアグラム)を高速かつ高精度に再現。

2 概要

本研究は埼玉大学大学院理工学研究科の石田洋音大学院生と岡田夏希大学院生(現:千葉大学大学院融合理工学府大学院生)、および同大学の星野晋太郎助教(現:千葉大学大学院理学研究院 准教授)、品岡寛准教授との共同研究で実施され、アメリカの国際学術誌『Physical Review Letters』に7月22日付けでオンラインにて掲載されました。

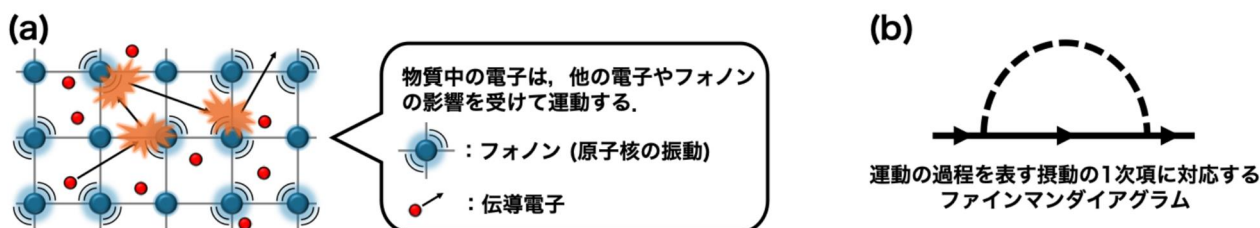
ファインマンダイアグラムは、物質中の電子の振る舞いを記述する基本的な枠組みです。しかし、その数値的評価には多次元積分が含まれ、複雑な系では計算コストが非常に高くなります。これまでは確率的な手法による精度の問題や、計算コスト増大という課題を抱えていました。

本研究では、電子が軌道自由度を持ち、さらにフォノンからの影響も受ける複雑な系を対象に、テンソルネットワーク学習法を適用することで、非常に少ないコストでファインマンダイアグラムを評価できることを発見しました。この方法を用いることで、複雑な電子系に対しても高精度かつ高効率な計算が可能になります。次世代の数値計算手法として、量子物質シミュレーションへの応用が期待されます。

3 研究の背景

現代の物性物理学では、金属や半導体、超伝導体など、さまざまな材料の性質を理論的に予測することが重要な課題となっています。このような物質の内部では、複数の電子同士が互いに強く影響しており、その振る舞いは単純な計算では捉えられません。特に多軌道系と呼ばれる系では電子のとりうる状態が非常に多くなるため、計算はより難しくなります。また、電子は格子を作る原子の振動(フォノン)とも影響しあい、これが電気伝導や超伝導など物質の性質に大きく関わっています[下図(a)]。

PRESS RELEASE



このような複雑な現象を厳密に解くことは難しいため、摂動論と呼ばれる近似手法を使って理解します。ファインマンダイアグラムは摂動論のプロセスを視覚的に分かりやすく表したものであり、電子やフォノンが物質中でどのように動き、他の電子やフォノンとどのように影響し合うのかを図(ダイアグラム)で示しています[上図(b)]。摂動論に由来して、このダイアグラムには対応する高次元の関数が存在します。実際に物理量を得るためにはこの関数を数値的に積分する必要があります。しかし、軌道の数が増えたり、フォノンの影響がある場合その計算は爆発的に難しくなります。従来はモンテカルロ法と呼ばれる乱数を使った確率的手法で計算していましたが、系によっては計算精度が大幅に落ちる負符号問題が現れ、解ける範囲に限界がありました。そこで、軌道・フォノンの影響を正しく取り扱えるような、確率に頼らない新しい計算の枠組みが求められていました。

テンソルネットワークは大規模な多次元データを小さなテンソルの掛け算としてコンパクトに表現する情報圧縮技術の一つです。特に、コンパクトな表現を能動的に学習するテンソルネットワーク学習法は低コストで高速な積分手法としての利用が期待されています。実際に自由度の少ない系では従来のモンテカルロ法よりも良い性能を示すことが報告されています。

4 研究内容

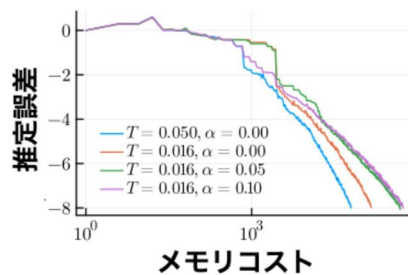
ファインマンダイアグラムは、多くの離散・連続変数を持つ関数の多次元積分として表されています。そこで私たちは、その被積分関数をテンソルネットワークで表現することを考えました。関数をテンソルネットワークで表現するためには、(1)連続的な変数の離散化、(2)テンソル分解の2つの手順が必要です。本研究では、それぞれ(1)Quantics 表現、(2)Tensor Cross Interpolation (TCI)と呼ばれる技術を利用しました。Quantics 表現は連続的な変数を2進数表示に基づき離散化するもので、指数的に異なる長さやエネルギーのスケールが混在する系で非常に有効な表現方法です。このように関数を離散化して得られたテンソルは高次元テンソルであり、このままでは扱いが困難です。そこで、より小さなテンソルの積に分解することを考えます。この分解に利用する手法が TCI です。TCI は、関数のごくわずかな評価点をもとにテンソル分解を行う機械学習アルゴリズムで、高速な分解が可能です。しかし、今回のような軌道やフォノンの自由度を含む場合、既存の TCI アルゴリズムだけでは正しくテンソル分解を行うことができず、誤った結果になる問題点が知られていました。私たちはその問題を克服するために、グローバル探索という新しい仕組みを開発しました。グローバル探索は全体を広く見渡しなが良い分解の方法を探せるため、見落としが少なく、安定的にテンソル分解が可能です。

以上に基づき、ファインマンダイアグラムを Quantics 表現により離散化し、改良した TCI アルゴリズムによってテンソル分解を行います(下図)。



ファインマンダイアグラムのテンソルネットワーク表現

この方法は従来法に比べて計算精度が大幅に高く、さらに計算にかかる時間やメモリコストも大きく削減できることが分かりました(下図)。Quantics 表現と TCI による数値積分は、(i)被積分関数をテンソル分解することと、(ii)分解されたテンソルに対する和の操作の2つのステップからなります。後者の操作はテンソル分解と比較して、十分少なく無視できるほどのコストしかかかりません。



電子のファインマンダイアグラムの精度を表したグラフ。
横軸はメモリコスト、縦軸は誤差を表す。
メモリコストに対して、精度が高速に上がることを示している

現実の物質は非常に多くの自由度が影響し合う複雑な系であり、材料開発など発展的な研究にはこの複雑性を考慮した計算が必要です。本研究は、このような現実的な物質を扱うための手法として、大きな一歩となりました。

5 今後の展開

本研究で提案した手法は、軌道やフォノンといった多くの自由度が関わる複雑な系に対して、高速かつ高精度にファインマンダイアグラムの評価を行う新しい道を開きました。特に遷移金属酸化物や、銅酸化物系をはじめとする高温超伝導体など軌道自由度が重要な物性現象の解明に活用でき、次世代の材料、デバイス開発への応用が期待されます。

6 論文情報

掲載誌	アメリカ物理学会 Physical Review Letters
論文名	Low-rank quantum tensor train representations of Feynman diagrams for multiorbital electron-phonon models
著者	石田洋音、岡田夏希、星野晋太郎、品岡寛
DOI	10.1103/tkcp-p5br
URL	https://doi.org/10.1103/tkcp-p5br

7 研究支援

本研究は JPSJ 科研費 21H01041(H. S.)、21H01003(H. S.)、23H03817(H. S.)、22KK0226(H. S.)、21K03459(N. O. and S. H.)、23H01130(N. O. and S. H.)および JST PRESTO JPMJPR2012(H. S.)、JST FOREST JPMJFR2232(H. I. and H. S.) の支援を受けて実施しました。

8 用語解説

ファインマンダイアグラム

ファインマンダイアグラムは、電子などの粒子がどのように運動し、他の粒子と影響し合うかを図で表したものです。直線や波線、破線で粒子の動きや相互作用を描き複雑な摂動計算を視覚的に分かりやすく整理できます。物理量を計算するためには、ファインマンダイアグラムが表す多次元積分を数値的に実行する必要があります。

テンソルネットワーク

テンソルネットワークは、大規模なデータを効率的に扱うための数学的な表現方法で、小さなテンソル同士が繋がったネットワーク形式として表されます。多体系の量子力学のように多くの自由度が関係する計算では膨大な情報量が必要であり、そのままでは現代のコンピュータをもってしても計算は困難です。テンソルネットワーク表現を使うことで、重要な部分に着目しながら情報量を圧縮することができ、本質を保ったまま効率的な計算が可能となります。

負符号問題

量子系を計算機でシミュレーションする方法のひとつにモンテカルロ法があります。モンテカルロ法では乱数に基づき関数の評価値を集め足しあげます。しかし、計算に使う数が正負ばらけてしまうことがあり、正と負が打ち消し合う結果、正確な値を計算するために膨大な計算量が必要になる場合があります。これが負符号問題です。特に複雑な量子系では負符号問題が深刻で、計算の大きなボトルネック

PRESS RELEASE



になります。