

機械学習による トポロジカル相転移の検出

赤城 裕 / 東京大学 大学院理学系研究科 助教



人工知能、AI、機械（深層）学習。最近では日常生活の中でこれらの単語を耳にしているのではないのでしょうか。機械学習とは、与えられたデータから反復的に学習するアルゴリズムによって、そこに潜むパターンを見つけ出し、未知なるデータに関して予測をする技術です。その応用の幅は実に広く、世界的な動画ストリーミングサービスである Netflix の recommendation engine [1] や最近登場し始めたリアル「ほんやくコンニャク」[2] と思えるような通訳機などにも機械学習が使われており、本質的な役割を果たしています。また、Google 傘下の DeepMind 社が機械学習をベースとして作り上げた囲碁プログラム「アルファ碁」が世界トップクラスの囲碁棋士イ・セドルを破ったことは、新しい時代の幕開けを感じさせる一つの事件でした。

これほどの機械学習の発展の背景には、コンピュータの処理能力の向上に加え、深層学習（ディープラーニング）の学習アルゴリズムに関するブレイクスルーがあります。深層学習で用いら

れるニューラルネットワークでは、隠れ層と呼ばれる、非線形な特徴量抽出を処理する部分が、多重に繰り返されます。この非線形性と「深層化」が、データの分離性を高め、識別能力の劇的な向上を可能とさせています。

最近では、物性物理の分野における機械学習の有用性が認知され始めており、相転移検出・相の同定 [3,4] やモンテカルロ法の加速 [5,6] 等、その適用範囲は多岐にわたります。我々も機械学習との親和性の高さに刺激を受け、ニューラルネットワークの一つの形態であるボルツマン機械を用いることで、 n 体相互作用を含むような一般化イジング模型のモンテカルロ・シミュレーションを高速化できることを実証しました [7]。また、乱れない極限のみで学習し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を含む相を同定する手法 [8] を開発しました。この手法で作成された相図は、乱れがある場合にも適用可能な非可換 Z_2 指数の計算 [9,10] によって作成した相図とも良い一致を示しました。

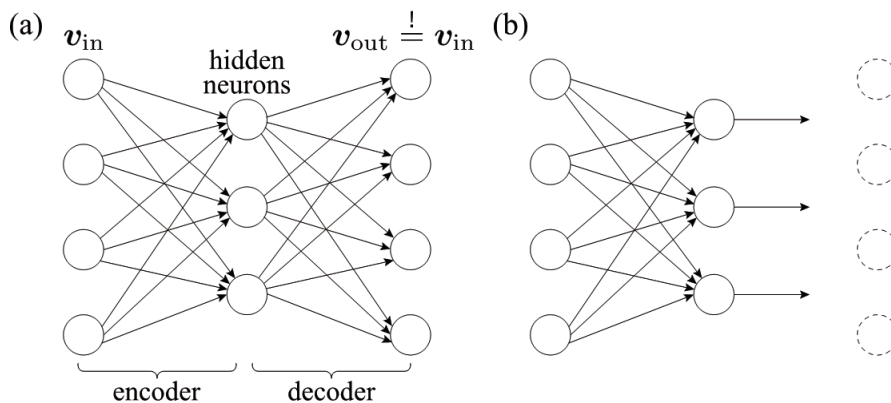


図1: オートエンコーダ（自己符号化器）で用いるニューラルネットワーク。(a) 砂時計型ニューラルネットワーク。出力データ v_{out} が入力データ v_{in} に近づくようにこのニューラルネットワークの学習を行います。(b) 学習後に (a) の出力層を取り除いたニューラルネットワーク。入力データの特徴量を出力します。

一方、[機械学習×物性物理]の研究の多くが、他手法により確立した結果に立脚し、そのデータ(の一部)を学習用のデータとした教師あり学習によるものであり、教師なし学習を応用した先例はあまりありません。そこで我々は、教師なし学習の一手法であるオートエンコーダ(図1)を用いて、様々な量子スピン鎖の量子相を判定しました。

オートエンコーダにおける入力データは厳密対角化により得られた波動関数そのものです。ただし、ここでは入力データがこういった相のものであるかという情報は与えず(そのため、教師なし学習と呼ばれます)、出力データが入力データに近づくように図1(a)の砂時計型ニューラルネットワークを学習させます。すると、ニューロンの数が少ない中間層(隠れ層)までが情報の圧縮(符号化)、中間層から出力層までが情報の復元の役割を担うニューラルネットワークが得られることになります。そして、図1(b)のように出力層を取り除くことで、中間層から入力データの特徴量が直接抽出できます。

この手法を、AKLT Hamiltonian と large-D 相を与える Hamiltonian を1パラメタでつないだ模型に対し適用しました。すると図2に示したように、symmetry-protected topological 相である Haldane 相と trivial 相である large-D 相のデータ間に分離が見られ、トポロジカル相転移の検出に成功しました。すなわち、深い知識がなくとも利用することが可能なトポロジカル相転移の検出器ができたこととなります。さらに、局所的な秩序

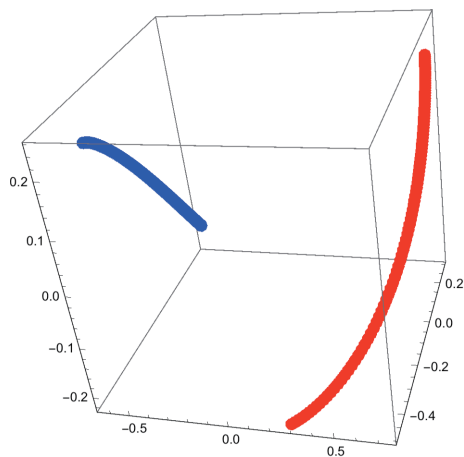


図2: 図1(b)の特徴量の主成分のうちの最も主要な3次元への射影。赤が large-D 相、青が Haldane 相に対応。

変数では特徴付けられない両相ですが、入力データとして4サイト程度までの相関関数を用いても同様に相転移の検出に成功しました。

欧米諸国ではAIがすでに産業の一部となっています。一方、日本は随分と後手に回っていると言われています。実際、AI技能ランキング(トップ20位)[11]を見ると、上位3カ国は、アメリカ、中国、インドとなっており、日本はランク外となっています。既に生活の一部に溶け込んでいるAIは、我々の生き方を激変させるほどのポテンシャルを持っています。今後日本はAIに対しどのように向き合っていくのでしょうか。

- [1] 最大の特徴は、ユーザーの視聴履歴に基づいた、高精度な提案システムにあります。今までは、検索することで求める情報に辿り着く時代でしたが、検索されるより先にユーザーのニーズを汲み取り、情報を提案する時代の到来を思わせるサービスです。
- [2] 藤子・F・不二雄の漫画「ドラえもん」に登場するひみつ道具の一つ。これを食べるとあらゆる言語のやり取りが可能になります。
- [3] J. Carrasquilla and R. G. Melko, Nat. Phys. **13**, 431 (2017).
- [4] T. Ohtsuki and T. Ohtsuki, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 044708 (2017).
- [5] J. Liu, Y. Qi, Z. Y. Meng, and L. Fu, Phys. Rev. B **95**, 041101(R) (2017).
- [6] L. Huang and L. Wang, Phys. Rev. B **95**, 035105 (2017).
- [7] N. Yoshioka, Y. Akagi, and H. Katsura, Preprint, arXiv: 1812.05269.
- [8] N. Yoshioka, Y. Akagi, and H. Katsura, Phys. Rev. B **97**, 205110 (2018).
- [9] Y. Akagi, H. Katsura, and T. Koma, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 123710 (2017).
- [10] H. Katsura and T. Koma, J. Math. Phys. **59**, 031903 (2018).
- [11] <https://economicgraph.linkedin.com/blog/how-artificial-intelligence-is-already-impacting-todays-jobs>