

## 2022年度 第17回凝縮系科学賞受賞者業績紹介

### 「理論部門」

#### 業績題目：機械学習手法を用いた量子多体系の研究

受賞者：野村 悠祐（のむら ゆうすけ）氏（慶應義塾大学）

#### 学歴

2010年3月 東京大学理学部物理学科 卒業

2012年3月 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 修士課程修了

2015年3月 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 博士課程修了（博士（工学））

#### 職歴

2015年4月－2016年8月 エコール・ポリテクニーク（フランス） 博士研究員

2016年9月－2019年3月 東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻 助教

2019年4月－2022年3月 理化学研究所創発物性科学研究センター 研究員

2022年4月－現在 慶應義塾大学理工学部物理情報工学科 准教授

#### 授賞理由

量子力学に従う多数の自由度が相互作用しあう量子多体系では、多体性と量子性の絡み合いにより様々な量子相が非常に小さいエネルギースケールで競合するため、時として真の量子状態にたどり着くことが困難となっています。この解決のため、多数の自由度を系のサイズとともに指数関数的に大きくなる膨大なデータと捉えることで、情報科学的アプローチを取り入れる手法が発展しています。その一つに、量子もつれの本質を機械学習によって人工ニューラルネットワークに埋め込み、高精度に量子状態を求める試みがあります。

野村悠祐氏は、2017年に Carleo と Troyer によって導入された制限ボルツマンマシンと呼ばれる人工ニューラルネットワークを用いた量子状態の変分手法に、多変数変分モンテカルロ法において用いられてきたペア積変分波動関数を組み合わせることによって、これまでにない高い計算精度をもち広範な量子多体系に適用可能な変分モンテカルロ法を開発することに成功しました。実際、野村氏は、フラストレーションのある2次元正方格子上の  $J_1$ - $J_2$  ハイゼンベルグ模型にこの手法を適用し、励起状態に対する解析方法も駆使することで長年の論争となっていた量子スピン液体相の存在を高い確度で示しました。その量子スピン液体相では励起スペクトルにはギャップがないことを示すとともに、スピンの分数化されたスピノンが線形分散構造を持つ可能性を指摘しました。また、野村氏は多体量子系の有限温度計算に対する機械学習手法開発も行い、複数の隠れ層からなる深層ボルツマンマ

シンを、ヒルベルト空間を拡張してギブス状態を求める手法と組み合わせることで有限温度量子状態を柔軟に表現する新たなアルゴリズムを提案しました。

以上のように、野村氏の業績は量子多体系に人工ニューラルネットワークを適用して世界最高水準の変分モンテカルロ法や有限温度での量子状態を表現する手法の開発だけでなく、実際にフラストレーションのある量子スピン系に適用して量子スピン液体や分数化励起などの非自明な量子多体物性の解明に大きく寄与しており、凝縮系科学賞に相応しいものです。

#### 参考文献

- [1] Yusuke Nomura, Andrew S. Darmawan, Youhei Yamaji, and Masatoshi Imada, “Restricted Boltzmann machine learning for solving strongly correlated quantum systems,” *Physical Review B* **96**, 205152 (2017).
- [2] Yusuke Nomura, Nobuyuki Yoshioka, and Franco Nori, “Purifying Deep Boltzmann Machines for Thermal Quantum States,” *Physical Review Letters* **127**, 060601 (2021).
- [3] Yusuke Nomura and Masatoshi Imada, “Dirac-Type Nodal Spin Liquid Revealed by Refined Quantum Many-Body Solver Using Neural-Network Wave Function, Correlation Ratio, and Level Spectroscopy,” *Physical Review X* **11**, 031034 (2021).