

目 次

第0章 機械学習, 深層学習が物理に何を起こそうとしているか	[橋本幸士] 1
0.1 機械学習とは	1
0.2 深層学習のフレームワーク	3
0.3 機械学習と物理	5
0.3.1 特徴抽出による物理計算の高速化	5
0.3.2 スピン系の物理の埋め込み	6
0.3.3 ネットワークの構造と物理系の関係	8
0.4 学習は物理に何を起こそうとしているか	9
第1部 物 性	
第1章 深層学習による波動関数の解析	[大槻東巳・真野智裕] 12
1.1 はじめに	12
1.2 モデル	13
1.3 手 法	16
1.4 ニューラルネットワークが示した相図	20
1.4.1 2次元系	20
1.4.2 3次元系	22
1.5 ランダムなトポロジカル絶縁体	24
1.6 この章を終えるに当たって	27
第2章 量子多体系とニューラルネットワーク	[斎藤弘樹] 31
2.1 量子多体問題の難しさ	31
2.1.1 序	31

2.1.2	一粒子と多粒子の違い	32
2.2	ニューラルネットワークをどう使うか	33
2.2.1	関数近似器としてのニューラルネットワーク	33
2.2.2	波動関数をニューラルネットワークで表す	34
2.3	ニューラルネットワークで基底状態を求める	35
2.3.1	波動関数が既知の場合	35
2.3.2	基底状態に至る手順	35
2.3.3	簡単な例	37
2.3.4	多体の場合：モンテカルロ法	38
2.4	具体的な応用	39
2.4.1	スピン系	39
2.4.2	格子上の粒子系	40
2.4.3	今後の展望	41
<hr/>		
第3章	機械学習でハミルトニアンを推定する	[藤田浩之] 43
3.1	イントロダクション	43
3.1.1	物性物理学におけるハミルトニアン	43
3.1.2	ハミルトニアンの「画像」圧縮	44
3.1.3	対角化の逆問題としての定式化	45
3.2	有効模型の構成	47
3.2.1	最適化手順	48
3.2.2	例：1次元 half-filled ハバード模型	49
3.3	応用	52
3.3.1	エンタングルメント・ハミルトニアンの構成	52
3.3.2	親ハミルトニアンの構成	53
3.4	おわりに	54
<hr/>		
第4章	深層学習とポテンシャルフィッティング	[安藤康伸] 55
4.1	物質・材料をシミュレーションする	55
4.2	代表的なポテンシャルとその背景	56
4.2.1	レナード・ジョーンズポテンシャル	56
4.2.2	ステイリンジャー・ウェーバーポテンシャル	57

4.3	フィッティングによるパラメータ決定	58
4.3.1	第一原理計算の登場	59
4.3.2	物理モデルに対するフィッティングと TTAM ポテンシャル	60
4.3.3	ニューラルネットワークによるフィッティング	60
4.4	ベラー・パリネロの方法	62
4.4.1	ニューラルネットワークによるフィッティングの課題	62
4.4.2	対称性関数の導入	63
4.4.3	サブネットワークの導入	64
4.5	ニューラルネットワークポテンシャルを応用する際の課題	65
4.5.1	そもそも何のためのポテンシャルなのか？	65
4.5.2	フィッティングポテンシャルの利点と欠点	65
4.5.3	データはどのように・どれくらい準備するのか？	66
4.6	アモルファス物質シミュレーション	67
4.6.1	アモルファス内部の粒子拡散経路の網羅探索	67
4.6.2	妥当なアモルファス構造モデルの作成と検証	69
4.7	おわりに	70

第2部 統計

第5章	自己学習モンテカルロ法	[永井佑紀] 74
5.1	はじめに：機械学習を用いたシミュレーションの高速化	74
5.2	マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC 法) の概略	75
5.2.1	マルコフ連鎖モンテカルロ法	75
5.2.2	メトロポリス・ヘイスティングス法	76
5.2.3	MCMC 法の問題点と SLMC 法	76
5.3	自己学習モンテカルロ法 (SLMC 法) の概略	77
5.3.1	基本コンセプト	77
5.3.2	シミュレーションステップ 1：学習 (learn)	78
5.3.3	シミュレーションステップ 2：実行 (earn)	79
5.4	SLMC 法の有効模型の例	81
5.4.1	二重交換模型	81
5.4.2	不純物模型に対する連続時間量子モンテカルロ法	82

5.5	今後の展望とまとめ	84
-----	-----------	----

第6章 深層学習は統計系の配位から何をどう学ぶのか

[青木健一・藤田達大・小林玉青] 87

6.1	統計系を深層学習する	87
6.2	正答率競争の行方と正答率の理論的上限	91
6.3	最適化された機械はエネルギー分析器となる	92
6.4	最適化された機械パラメータの解	94
6.5	機械は自由エネルギーを確かに記憶した	95
6.6	エピソード：南京玉すだれ	97

第3部 量子情報

第7章 量子アニーリングが拓く機械学習の新時代

[大関真之] 100

7.1	機械学習のブレイクスルーの裏側	100
7.2	量子アニーリングの概要	102
7.3	ボルツマン機械学習	104
7.4	量子アニーリングマシンの使い方	107
7.5	他の機械学習の手法と量子アニーリング	112

第8章 量子計測と量子的な機械学習

[久良尚任] 116

8.1	量子計測	116
8.1.1	標準量子限界とハイゼンベルク限界	117
8.1.2	位相推定	118
8.1.3	ハミルトニアン推定	119
8.1.4	複雑な系の量子計測	119
8.2	量子計算における量子計測	121
8.2.1	探索問題	122
8.2.2	固有値分解	123
8.3	機械学習における量子計測	124
8.3.1	学習データセットの誤分類検出	125

8.3.2	量子主成分分析	125
-------	---------	-----

8.3.3	おわりに	126
-------	------	-----

第4部 素粒子・宇宙

第9章 深層学習による中性子星と核物質の推定

[福嶋健二・村瀬功一] 130

9.1	超高密度物質の研究は現代物理学の未解決問題	130
9.2	観測される物理量と理論計算をつなぐ	131
9.3	仮定をせずにどこまで遡れるのか?	133
9.4	機械学習なら簡単です	134
9.4.1	疑似データでテストする	135
9.4.2	方法を説明する	136
9.4.3	観測データから状態方程式を推定する	138
9.5	まとめ	140

第10章 機械学習と繰り込み群

[船井正太郎] 142

10.1	特徴の抽出	142
10.1.1	Googleの猫	143
10.1.2	粗視化との関係	143
10.2	イジング模型	144
10.2.1	スピン配位	145
10.2.2	繰り込み群	146
10.2.3	温度測定	147
10.3	機械学習とその結果	147
10.3.1	制限ボルツマンマシン (RBM)	147
10.3.2	RBMが作るフロー	149
10.3.3	補足として	151
10.4	繰り込み群との関係	151

第 11 章 量子色力学の符号問題への機械学習的アプローチ	[柏 浩司] 154
11.1 量子色力学とは何だろうか？	154
11.2 符号問題とは何だろうか？	155
11.3 積分経路の複素化による符号問題へのアプローチ	157
11.3.1 複素ランジュバン法	157
11.3.2 レフシッツ・シンプル法	159
11.3.3 経路最適化法	160
11.4 経路最適化法での機械学習による“よい”積分経路の探索	161
11.5 まとめと展望	164
第 12 章 格子場の理論と機械学習	[富谷昭夫] 167
12.1 格子場の理論と格子 QCD, モンテカルロ	167
12.1.1 格子場の理論と格子 QCD	168
12.1.2 ハイブリッドモンテカルロ法	170
12.2 制限ボルツマンマシン	173
12.3 ボルツマン HMC 法	176
12.3.1 実験結果	177
12.4 ま と め	178
第 13 章 深層学習と超弦理論	[橋本幸士] 180
13.1 逆問題と超弦理論のホログラフィー原理	180
13.1.1 量子重力理論の問題	180
13.1.2 ホログラフィー原理	181
13.1.3 逆問題としてのホログラフィー原理	182
13.2 ニューラルネットワークを時空と考えられるか	183
13.2.1 ホログラフィー原理と深層学習の類似性	183
13.2.2 ネットワークの重みと曲がった時空	185
13.3 学習によって創発する時空	188