

論文審査の結果の要旨

氏名 吉岡 信行

近年、機械学習の工学的応用の可能性が盛んに研究され、計算機の新しい利用法が提案されてきている。なかでも機械学習による画像認識は大きな注目を集めている。人間では判定に時間のかかる画像分類タスクをニューラルネットワークなどの機械学習的手法で解決する試みなどは応用上重要である。この方向の研究はこれからも大きく発展していくものと期待される。提出された論文において、提出者は、ニューラルネットワークの物性理論研究への応用の可能性を探求している。第一には、機械学習による画像分類の応用として、粒子数密度の空間分布から相を判定する試みであり、第二に、系の状態をニューラルネットワークの形式に表現しなおすことによって、古典系の熱力学的性質を効率的に計算する手法や量子開放系の定常状態を求めるための手法などを提案している。

本論文の第1章と第2章はイントロダクションであり、第3章から第5章が本論文のオリジナルな部分になっている。第1章は機械学習の過去の事例に関するイントロダクションであり、その前半では第3章の内容に関連する物理学における分類課題の機械学習の事例のサーベイ、後半では第4章と第5章の内容に関連する機械による古典系や量子系の表現（モデル構築）の事例がサーベイされている。第2章では、分類とモデル構築のそれぞれの課題について用いられるニューラルネットワークの構造が紹介されている。第3章は量子状態の相判定への画像認識の機械学習手法を応用、第4章は古典統計力学モデルへのニューラルネットワーク表現の応用、第5章は量子開放系の定常状態計算へのニューラルネットワーク表現の応用、について提出者自身が行った数値実験とその結果に関する議論にそれぞれ充てられている。

以下では、この論文のオリジナルな部分である第3、4、5章の内容について述べる。

第3章では、ニューラルネットワークの一つである多層パーセプトロンを用いた画像認識を利用して2次元の空間的に不均一な超電導モデルの相図を描いている。ここで、「画像」として利用されるのは、粒子数密度の位置依存性を示すマップを空間不均一性に関して平均化したものである。多層パーセプトロンとしては、入力相と出力層の他、2層の中間相を含んだ4層のものが用いられている。論文提出者は、自由フェルミオンモデルを題材として取り上げて、Altland-Zirnbauer の分類で DIII と分類される対称性クラスの場合を考察の対象としている。このカテゴリのモデルは空間不均一性がない場合、常伝導相、トポロジカルに自明な超伝導相、トポロジカルに非自明な超伝導相の3つの相があることが知られている。第3章の主題は、空間的に均一な場合に得られる粒子数密度の空間分布マップを学習データとして学習した上述の多層パーセプトロンが、空間不均一性がある場合に

も正しく相分類できるかどうかという問題になっている。実際の数値実験の結果は、数値転送行列法による先行研究の結果とよく一致しており、本論文で提案されている方法が相図を描くうえで有効な方法であることが分かった。

第4章では、古典統計力学モデルのニューラルネットワーク表現に基づいたモンテカルロ法のアルゴリズムが提案されている。具体的には任意の n に関して n 体相互作用を含んだ一般化イジングモデルを多層ニューラルネットワークの形式に表現しなおす方法が提示されており、さらに、この表現に基づいた Swendsen-Wang アルゴリズムが提案されている。計算が収束するまでに必要な計算時間は自己相関時間として見積もることができるが、これをカゴメ格子上で定義された3体相互作用を含むイジングモデルについて計測した結果、通常アルゴリズムを利用した場合に比べて、本論文で提案する Swendsen-Wang アルゴリズムを利用した場合は1から2桁程度短縮されることが分かった。

第5章で扱うのは熱浴との相互作用のもとにある量子系の定常状態に関するものである。具体的な計算ターゲットは定常状態に対応する密度演算子である。定常状態の密度演算子は、系の時間発展を記述するリュービル演算子とそのエルミート共役演算子の積として定義される有効ハミルトニアン基底状態に対応している。このため、本章で提案されている方法では、密度演算子をその始状態と終状態を入出力としてもつ多層ニューラルネットワークの形で表現しておき、それを上述の有効ハミルトニアンによって「虚数時間」発展させることで、有効ハミルトニアン基底状態、すなわちリュービル演算子の定常状態が得られる。実際に、この方法に基づいて、1次元と2次元の横磁場イジングモデル、および1次元 XYZ モデルの3つのモデルに対して、それぞれが熱浴と接触している条件で、定常状態の計算が行われた。いずれの場合も、4~9スピン程度の小規模な系では、予想通り有効ハミルトニアン基底状態に収束していることが確認され、方法論として有効であることが確認された。

以上のように、論文提出者は本論文において、ニューラルネットワークの物性理論研究への応用を試み、そのなかでいくつかの新しい方法論を提案している。さらにその方法論を具体的な統計力学的モデルを使って検証している。科学諸分野の研究手法として情報科学的な手法の導入は有望であり、本論文で提案されている新手法はこれからの多くの研究者にとって有用な知見を与えるものとなっていると評価できる。また、共同研究の成果である部分についても主として論文提出者の寄与によって得られたものと認められ、論文の内容と形式は東京大学大学院理学系研究科における博士論文に関する指針に則っている。

これらの理由により、博士（理学）の学位を授与できるものと認める。