

令和 2 年 5 月 15 日現在

機関番号：32621

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K18763

研究課題名(和文) 深層学習を用いたランダム電子系における量子相転移の研究

研究課題名(英文) Application of deep learning to the quantum phase transition in random electron systems

研究代表者

大槻 東巳(Ohtsuki, Tomi)

上智大学・理工学部・教授

研究者番号：50201976

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,900,000円

研究成果の概要(和文)：深層学習(多層畳み込みニューラルネットワーク)による波動関数の画像解析によって、ランダム電子系における量子相転移を解析した。この手法ではすでに分かっている量子相で波動関数を学習し、汎化性能により未知の相を決定する。様々な次元でのランダム電子系のアンダーソン転移、トポロジカル転移の相図を描くことが可能となった。また、通常的手法ができないアモルファス系(量子パーコレーション系)でもこの手法が有効であることを実証した。トポロジカルな系では、実空間だけでなく波数空間の波動関数の解析が有効であることも明らかにした。この研究により固体物理学における機械学習の有効性を実証し、従来の手法との優劣を比較した。

研究成果の学術的意義や社会的意義
機械学習、広くは人工知能の手法が、金属や半導体、絶縁体の性質を調べる固体物理においても有効性であることを示した。動物や人の画像認識として一般に親しまれている深層学習が、固体物理学に応用できることを示し、この手法の有効性を明らかにできた。

研究成果の概要(英文)：Applications of neural networks to condensed matter physics are becoming popular and beginning to be well accepted. One of the applications is analyzing the wave functions and determining their quantum phases. We have used the multilayer convolutional neural network, so-called deep learning, to determine the quantum phases in random electron systems. After training the neural network by the supervised learning of wave functions in restricted parameter regions in known phases, the neural networks can determine the phases of the wave functions in wide parameter regions in unknown phases; hence, the phase diagrams are obtained. We demonstrate the validity and generality of this method by drawing the phase diagrams of two- and higher dimensional Anderson metal-insulator transitions and quantum percolations as well as disordered topological systems. Both real-space and Fourier space wave functions are analyzed. The advantages and disadvantages over conventional methods are discussed.

研究分野：物性理論

キーワード：深層学習 機械学習 量子相転移 トポロジカル系 アンダーソン転移 量子パーコレーション

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

21 世紀に入り、人工知能（より正確には機械学習）の手法が格段に進歩した。自律運転、自動翻訳、ボードゲームにおける勝利などメディアで話題になったものも多い。また、多くのソフトウェア開発者によって、こうした人工知能の手法を物理の研究者でも使うことができる様な環境が整えられつつあった。そこで本研究では、機械学習の手法、特に近年格段に進歩を遂げた画像認識の手法をもとに、物性物理における量子相転移の研究を始めた。

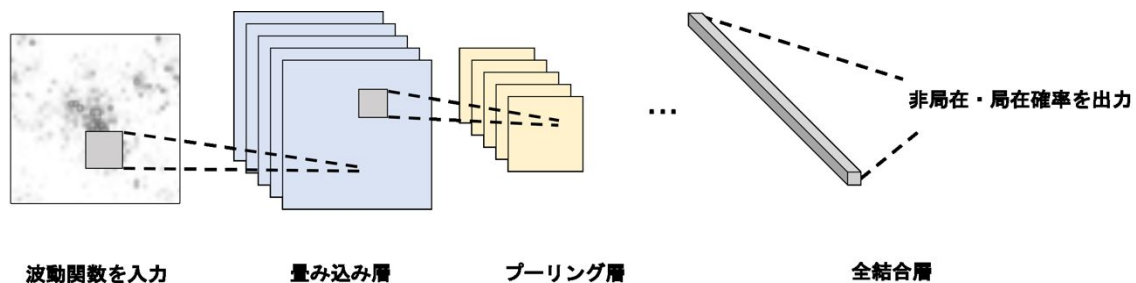
2. 研究の目的

物質の中ではランダムネスにより電子波が複雑な干渉を起こし、非自明な物質相: 乱れた金属, Anderson 絶縁体の他に、量子 Hall 絶縁体, 量子スピン Hall 絶縁体, 3 次元強・弱トポロジカル絶縁体, Weyl 半金属などさまざまな物質相を示し、パラメータを変えることである相から別の相へと量子相転移を示す。一方、こうした物質相での波動関数は、ランダムネスのため揺らぎが大きく、その特徴を客観的には捉えにくい。そこで本研究ではランダム電子系の波動関数を、最近大きな発展を見せた多層ニューラルネットワークによる深層学習を用いた画像認識で解析する。これにより様々な物質相が示す波動関数の特徴を機械的に抽出し、物性物理学の研究の新たな手段を開拓する。

3. 研究の方法

物質の性質を決めるのは主にフェルミエネルギー付近の波動関数である。そこで波動関数を画像とみなし、深層学習の有効性が確かめられている画像認識を行い、これらの波動関数の特徴を自動的に抽出する。ひとたび自ら波動関数の特徴を抽出したニューラルネットワークは、未知の波動関数もどの物質相のものかを判定できる様になる。これにより、従来の手法では解析が困難であったランダム電子系の金属絶-縁体転移、及びトポロジカル転移を解析する。

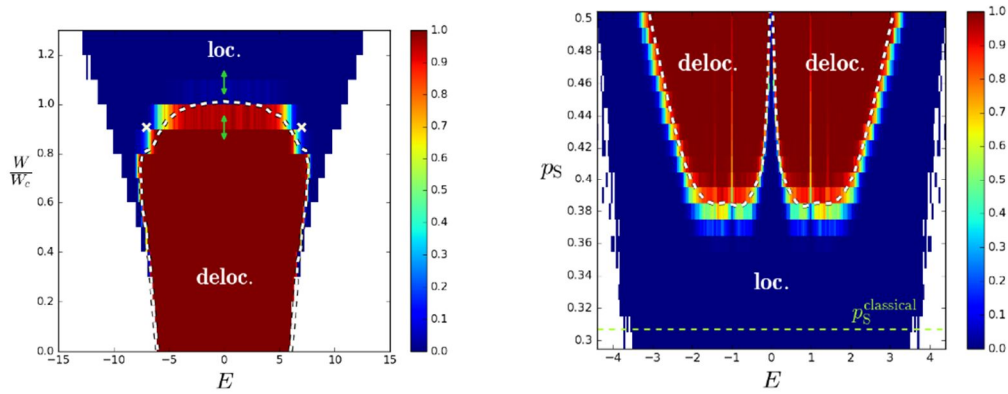
手法の模式図は以下の様なものである。左側から画像とみなした波動関数を入力する。その後、「画像」は畳み込み層、プーリング層からなる数層（4 から 10 枚層）の隠れ層で変換され、全結合層に並べ替えたのち、波動関数の局在・非局在（絶縁体・金属）、もしくはトポロジカルに自明・非自明を判定させる。金属-絶縁体転移の解析では周期境界条件を用いるが、トポロジカル転移の場合、端、表面状態を認識させるため固定境界条件を用いる。



4. 研究成果

- (1) ランダム電子系の相図を決定した。特に金属-絶縁体転移, トポロジカル-非トポロジカル転移に対しての有効性を確認した。空間次元が 2 次元の系で有効性を確認したのち, 3 次元, 4 次元系に関してもこの手法を適用し, 有効性を確認した。
- (2) これを応用し, 相図が分かっている金属-絶縁体転移でニューラルネットワークを訓練し, 相図が未知のアモルファス系の解析を行った。
- (3) 実空間の波動関数だけでなく, 波数空間の波動関数の解析の有効性を示した。これは特にトポロジカル・非トポロジカル転移で有効であった。
- (4) これらの手法・結果に関する総合解説を執筆するとともに和書でも解説を行った。

左の図はアンダーソン金属絶縁体の相図, 右は量子パーコレーションの相図である。横軸はフェルミエネルギー, 縦軸は左はランダムネスの強さ, 右は格子点の充填律である。左の図の $E=0$ での金属相, 絶縁体相はよく分かっているのを既知としてニューラルネットワークを訓練し, その他のエネルギー領域 (左図) や, 量子パーコレーションの相図 (右図) を描いた。



5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 大槻東巳, 真野智裕	4. 巻 53
2. 論文標題 多層畳み込みニューラルネットワークによるランダム電子系の相図	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 固体物理	6. 最初と最後の頁 447-454
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 大槻東巳	4. 巻 33
2. 論文標題 機械学習・深層学習と物性物理	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 パリティ	6. 最初と最後の頁 6-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 X. Luo, T. Ohtsuki, R. Shindou	4. 巻 98
2. 論文標題 Unconventional scaling theory in disorder-driven quantum phase transition	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 020201(R), 1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.98.020201	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Tomohiro Mano, and Tomi Ohtsuki	4. 巻 86
2. 論文標題 Phase Diagrams of Three-Dimensional Anderson and Quantum Percolation Models Using Deep Three-Dimensional Convolutional Neural Network	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 113704-1, 5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) doi.org/10.7566/JPSJ.86.113704	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 大槻東巳	4. 巻 32
2. 論文標題 深層学習を利用したトポロジカル物質の研究	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 パリティ	6. 最初と最後の頁 52-56
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ohtsuki Tomi, Mano Tomohiro	4. 巻 89
2. 論文標題 Drawing Phase Diagrams of Random Quantum Systems by Deep Learning the Wave Functions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 022001 ~ 022001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.89.022001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Mano Tomohiro, Ohtsuki Tomi	4. 巻 88
2. 論文標題 Application of Convolutional Neural Network to Quantum Percolation in Topological Insulators	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 123704 ~ 123704
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.123704	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計13件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 9件)

1. 発表者名 Tomi Ohtsuki
2. 発表標題 Detecting topological and non-topological quantum phase transitions using neural network
3. 学会等名 Edge Reconstruction: Transport and Quantum Phase Transitions (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tomi Ohtsuki
2. 発表標題 Applications of deep 3D convolutional neural network to Anderson and quantum percolation models
3. 学会等名 Anderson Localization and Interactions (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tomi Ohtsuki
2. 発表標題 Detection of Quantum Phase Transitions in Disordered Systems Using Convolutional Neural Network
3. 学会等名 日本物理学会シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Ohtsuki
2. 発表標題 Applications of multilayer convolutional neural network to quantum phase transitions in disordered topological and non-topological systems
3. 学会等名 Americal Physical Society March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 真野智裕, 大槻東巳
2. 発表標題 多層畳み込みニューラルネットワークで得た三次元ランダム電子系の相図
3. 学会等名 日本物理学会年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 T. Ohtsuki
2. 発表標題 Deep learning the quantum phase transitions of disordered topological matters
3. 学会等名 Nanophysics, from fundamental to application, Vietnam (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 T. Ohtsuki
2. 発表標題 Deep Learning Topological Phases of Random Systems
3. 学会等名 Osaka CTSR-Riken iTHES Joint Symposium: Deep learning and physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 大槻東巳
2. 発表標題 機械学習を使ったトポロジカル物質表面・エッジの研究
3. 学会等名 第31回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 大槻東巳
2. 発表標題 深層学習で求めたスピナイス模型における量子マグノンホール効果の相図
3. 学会等名 日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Tomi Ohtsuki
2. 発表標題 Phase Diagrams and Scaling Behaviors of Disordered Weyl Semimetals
3. 学会等名 International conference on Frontiers of correlated electron sciences (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomi Ohtsuki
2. 発表標題 Determining Quantum Phases of Disordered Systems by Deep Learning
3. 学会等名 RANDOM GEOMETRIES AND MULTIFRACTALITY IN CONDENSED MATTER AND STATISTICAL MECHANICS (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomi Ohtsuki
2. 発表標題 Detecting topological phases in random electron systems via convolutional neural network
3. 学会等名 NTTI 2019 and BEC 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Tomi Ohtsuki
2. 発表標題 Application of Convolutional Neural Network (CNN) to Quantum Percolation in Topological Insulators
3. 学会等名 Mini-Workshop On "Localization, Many-body Physics, and Machine Learning (ML) Applications to Physics Research" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 Koji Kobayashi, Tomi Ohtsuki, Ken-Ichiro Imura	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Wiley online library	5. 総ページ数 49
3. 書名 advanced topological insulator	

1. 著者名 橋本 幸士、大槻 東巳、真野 智裕、斎藤 弘樹、藤田 浩之、安藤 康伸、永井 佑紀、青木 健一、藤田 達大、小林 玉青、大関 真之、久良 尚任、福嶋 健二、村瀬 功一、船井 正太郎、柏 浩司、富谷 昭夫	4. 発行年 2019年
2. 出版社 朝倉書店	5. 総ページ数 212
3. 書名 物理学者，機械学習を使う	

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>www.ph.sophia.ac.jp/~tomi 本研究課題に関して，第24回日本物理学会論文賞を受賞。</p>
--

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----