

令和 4 年 6 月 6 日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2018～2021

課題番号：18K03552

研究課題名（和文）強相関電子系における自己学習連続時間量子モンテカルロ法の確立

研究課題名（英文）Self-learning continuous-time Monte Carlo method in strongly correlated systems

研究代表者

永井 佑紀（Nagai, Yuki）

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・副主任研究員

研究者番号：20587026

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：自己学習モンテカルロ法を様々な系へ適用し、その適用可能性について調べた。当初の予定では強相関電子系において研究を行う予定であったが、研究の進展により機械学習分子動力学分野や格子量子色力学などの非常に広範囲において極めて有用であることがわかり、関連分野においての適用可能性について調べた。例えば、機械学習分子動力学においては、分子動力学とモンテカルロ法を組み合わせた自己学習ハイブリッドモンテカルロ法と呼ばれる手法を開発し、計算精度を第一原理計算分子動力学と同じに保ったまま機械学習分子シミュレーションが可能であることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

自己学習モンテカルロ法を様々な分野へと適用できることを示した。特に原子分子シミュレーション分野における自己学習ハイブリッドモンテカルロ法は、第一原理分子動力学計算と呼ばれる材料物性分野において非常に重要なシミュレーションを大幅に高速化することが可能であり、学術的な重要性に加えて産業界への応用可能性も考えられる。

研究成果の概要（英文）：We applied the self-learning Monte Carlo method to various kinds of fields, such as electron systems, molecular simulations, lattice quantum chromodynamics. For example, in the field of the molecular simulations, we developed self-learning hybrid Monte Carlo method, which is one of the best tools to generate very accurate neural network potentials.

研究分野：物性理論

キーワード：自己学習モンテカルロ法 機械学習

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

自己学習モンテカルロ法とは、マルコフ連鎖モンテカルロ法における次配位の提案を機械学習によって構築した有効模型によるモンテカルロ法で構築する手法である。そのため、有効模型の構築をどのように行うかが重要であった。様々な強相関電子系における有効模型の構築を行うことができれば、シミュレーションの高速化を行うことができる。研究代表者は、連続時間量子モンテカルロ法と呼ばれる強相関電子系における量子モンテカルロ法の一つに対して自己学習モンテカルロ法を行う方法を確立していた。しかし、ここで用いられた有効模型は物理的洞察から得られた模型であり、不純物模型にのみ適用可能なものであった。

2. 研究の目的

自己学習モンテカルロ法を様々な強相関電子系に対して適用可能にする方法を模索することが本研究の目的である。特に、系統的に有効模型を作成する方法を確立することで、自己学習モンテカルロ法の有用性を示すことができる。

3. 研究の方法

自己学習モンテカルロ法における有効模型の構築を様々な系において調べることで、自己学習モンテカルロ法の汎用性について調べる。研究開始当初においては強相関電子系に着目して研究を行う予定であったが、自己学習モンテカルロ法の予想以上の汎用性に気づき、分野に囚われない適用可能性を探ることとなった。

4. 研究成果

まず、当初の研究対象であった強相関電子系に関して、自己学習モンテカルロ法の有効模型構築法について詳細に検討した結果、ニューラルネットワークによる有効模型の自動構築法を提案することができた。自動構築法を作るにあたって、第一原理分子動力学法における機械学習の利用法を参考にすることができた。これは、原子分子系の手法を強相関電子系に適用したことになる。第一原理計算で得られたポテンシャルを用いて分子動力学法を行う第一原理分子動力学法の分野では、第一原理計算で得られたポテンシャルを模倣するようなニューラルネットワークを構築する方法である機械学習分子動力学法が提案されていた。そこで、モンテカルロ法と分子動力学法との類似点に着目した。分子動力学法における原子の位置をモンテカルロ法における配位、その原子配置における第一原理計算によって得られるエネルギーをモンテカルロ重みとみなし、機械学習分子動力学法で用いられているニューラルネットワークの構築法を自己学習モンテカルロ法に適用することを試みた。この手法によって、これまで手で構築してきた有効模型よりも遙かによい精度の有効模型を構築することができた。

第一原理分子動力学法における機械学習法の利用について調べる過程において、この分野においても自己学習モンテカルロ法を有効に使えることに気がついた。これは、上述と逆に、強相関電子系の手法を原子分子系に適用したことになる。機械学習分子動力学法の分野においては、作られた有効模型の精度に依存してシミュレーションの精度が変化してしまうという問題があった。この問題の解決に本研究で用いている自己学習モンテカルロ法の考え方が使えることに気がついた。このアイデアを機械学習分子シミュレーション分野に応用した結果、第一原理計算と同じ精度を保ったまま機械学習分子シミュレーションができる自己学習ハイブリッドモンテカルロ法という新しい手法を開発することができた。第一原理計算とは密度汎関数理論を用いた多電子系を扱う計算手法であるから、この成果もまた相関電子系への自己学習モンテカルロ法への適用に関する成果となっている。

さらに、研究の進展によって、自己学習モンテカルロ法はハミルトニアンで記述される系以外にラグランジアンで記述される系においても適用可能であることに気がついた。そこで、格子量子色力学と呼ばれるクォークとグルーオンに関する強相関系において自己学習モンテカルロ法が可能かどうかについて調べた。その結果、フェルミオンの自由度を消去した有効ラグランジアンを構築することで自己学習モンテカルロ法が良いパフォーマンスを示すことがわかった。この結果は、自己学習モンテカルロ法というアイデアが物性分野に限らず適用可能であることを示している。

この他に、電子とスピンの相互作用をしているスピンフェルミオンのランダム系において、有効ハミルトニアンとしてスピンのみが相互作用するものを考え、フェルミオンの自由度を消去することに成功した。これにより、スピングラスが生じるであろうランダムスピンフェルミオン系においても自己学習モンテカルロ法が有効であることがわかった。また、スピンフェルミオン間の相互作用が強い領域においても、相互作用が弱いとして摂動論的に導出された RKKY 相互作用

と有効相互作用がよく似ていることがわかった。このように、本手法によって、摂動を超えた領域における有効モデルの形状の議論ができるようになった。

以上のように、本研究によって、自己学習モンテカルロ法が物性分野に限らず様々な分野へと適用可能な手法であることが明らかになった。そして、自己学習モンテカルロ法を用いることで、今後様々な相関のある系のシミュレーションが高速化されるだろうと期待できる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Kobayashi Keita, Nagai Yuki, Itakura Mitsuhiro, Shiga Motoyuki	4. 巻 155
2. 論文標題 Self-learning hybrid Monte Carlo method for isothermal-isobaric ensemble: Application to liquid silica	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 034106 ~ 034106
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0055341	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 Itou Etsuko, Nagai Yuki	4. 巻 2020
2. 論文標題 Sparse modeling approach to obtaining the shear viscosity from smeared correlation functions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of High Energy Physics	6. 最初と最後の頁 1-31
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/JHEP07(2020)007	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 Kohshiro Hidehiko, Nagai Yuki	4. 巻 90
2. 論文標題 Effective Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida-like Interaction in Diluted Double-exchange Model: Self-learning Monte Carlo Approach	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 034711 ~ 034711
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.90.034711	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 Shinaoka Hiroshi, Nagai Yuki	4. 巻 103
2. 論文標題 Sparse modeling of large-scale quantum impurity models with low symmetries	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 045120-1
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.103.045120	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 Nagai Yuki, Okumura Masahiko, Kobayashi Keita, Shiga Motoyuki	4. 巻 102
2. 論文標題 Self-learning hybrid Monte Carlo: A first-principles approach	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 041124-1,6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.102.041124	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 Nagai Yuki, Okumura Masahiko, Tanaka Akinori	4. 巻 101
2. 論文標題 Self-learning Monte Carlo method with Behler-Parrinello neural networks	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 115111-1,12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.115111	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 Nagai Yuki, Shinaoka Hiroshi	4. 巻 88
2. 論文標題 Smooth Self-energy in the Exact-diagonalization-based Dynamical Mean-field Theory: Intermediate-representation Filtering Approach	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 064004 ~ 064004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.064004	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 -

〔学会発表〕 計11件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 3件)

1. 発表者名 永井佑紀
2. 発表標題 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法; 精度保障された機械学習分子シミュレーションと効率的な力場構築
3. 学会等名 令和3年度電気化学界面シミュレーションコンソーシアム第4回研究会 (招待講演)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 永井佑紀
2. 発表標題 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法; 精度保証された機械学習分子シミュレーション
3. 学会等名 レア・イベントの計算科学第4回ワークショップ「レア・イベント解析とデータ科学」(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 永井佑紀
2. 発表標題 精度保証された機械学習分子動力学法; 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法
3. 学会等名 ディープラーニングと物理学 2020(第1回)(招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuki Nagai
2. 発表標題 Self-learning Monte Carlo method; Speedup of the Markov chain Monte Carlo with machine learning
3. 学会等名 Quantum Engineering meets Harmonic Analysis, Saskatoon, Canada (招待講演)(国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 永井佑紀, 奥村雅彦, 小林恵太, 志賀基之
2. 発表標題 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法: 第一原理分子シミュレーションの高速化
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 永井佑紀, 奥村雅彦, 小林恵太, 志賀基之
2. 発表標題 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法: 機械学習による第一原理分子シミュレーションの高速化
3. 学会等名 2019分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuki Nagai
2. 発表標題 Self-learning Hybrid Monte Carlo for first-principles molecular simulations
3. 学会等名 Deep learning and Physics 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 永井佑紀
2. 発表標題 自己学習モンテカルロ法
3. 学会等名 深層学習と物理2018 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 永井佑紀、奥村雅彦、田中章詞
2. 発表標題 Self-learning Monte Carlo method with neural networks inspired by machine-learning molecular dynamics
3. 学会等名 Mini-workshop on Machine Learning in Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 永井佑紀、奥村雅彦、田中章詞
2. 発表標題 Behler-Parrinello 型ニューラルネットワークを用いた自己学習モンテカルロ法
3. 学会等名 日本物理学会第 74 回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 永井佑紀
2. 発表標題 自己学習モンテカルロ法; 機械学習を用いたモンテカルロ法の高速化
3. 学会等名 第 7 回材料系ワークショップ (招待講演)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計1件

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〕

-

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

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関