

令和 5 年 6 月 16 日現在

機関番号：32619

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2022

課題番号：19K03657

研究課題名（和文）視覚情報量の統計物理学

研究課題名（英文）Statistical Physics of Visual Information

研究代表者

富田 裕介 (Tomita, Yusuke)

芝浦工業大学・工学部・教授

研究者番号：50361663

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 1,600,000円

研究成果の概要（和文）：スピン模型を用いて、スピン配置とスピン相関の機械学習への影響の違いについて研究を行った。我々はスピン配置が示す見たままの視覚情報と、スピン相関の情報を含むグラフ表現を機械学習の学習データとして与えたとき、学習結果はそれらの情報をどのように反映するのかについて考えた。古典XY模型と量子XY模型へのKosterlitz-Thouless相の判別では、古典XY模型での学習結果をそのまま量子XY模型に適用できることを確認した。逆くりこみ変換への適用では、グラフ表現が持つスピン相関の情報を学習データに取り込むことにより、逆くりこみ変換の精度が大きく向上することを確認した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

スピン模型のグラフ表現は元のスピン変数を用いた記述に比べ、様々な場面で有用であることが知られている。本研究では機械学習の学習データとしてグラフ表現がスピン変数より常に同等もしくは優位であることが示され、視覚情報（スピン変数）が陰に持っているスピン相関（グラフ表現）が重要となることと、学習データから真に重要な情報がいつでも取得されるわけではないことが明らかになった。視覚情報のみの場合とスピン相関を含めた場合とで学習に有意な差が見られたことは今後の研究にも生かされる重要な知見が得られたと考えている。本研究で得られた結果は今後の人工知能技術など社会への波及効果も期待される。

研究成果の概要（英文）：The differences between spin configurations and spin correlations in machine learning are investigated using spin models. Recent progress in machine learning stimulates applications to physics and analyzing mechanisms of machine learning from the viewpoint of statistical physics. We paid attention to the different effects on learning efficiency between apparent spin configurations and graph representations which contain information of correlations. In the case of the application to the classical and the quantum XY model, we have shown that the neural network trained by the classical XY model can discriminate phases in the quantum XY model. Through the application to the inverse renormalization group, we have confirmed that feeding information of correlations between spins by the graph representation has improved the precision of the inverse renormalization.

研究分野：統計物理学

キーワード：統計物理学 視覚情報 特徴抽出

### 1. 研究開始当初の背景

我々は日々、目でものを見て、見たものの状態を判断している。物理学においても対象としている系の状態を判断し、判断に用いた物理量を用いてその系の特性が議論されている。しかしながら、「見た目」そのもので議論されることはほとんどない。なぜなら視覚情報を定量的に考察する方法が確立されていないからである。視覚情報をもとに様々な判断を行うことができる一方で、定量的議論では視覚情報を用いないことは、視覚情報に対する理解が足りないものと考えられた。

### 2. 研究の目的

視覚的な情報を物理量に落とし込むことはよく行われている。流体中の渦は過度に、磁性体中のスピンの揃い具合は磁化といった量に置き換えられる。しかしながら、視覚情報そのものが扱われることはほとんどない。視覚情報を定量的に考察する方法が確立されていないからである。本研究の目的は、視覚情報そのものを物理量として定式化し、視覚情報によって系の定量的解析を行う手段を与えるものである。この研究は、統計物理学の適用範囲を広げるだけでなく、情報の抽出と凝縮という「くりこみ群」的な研究に対する新たな指針を与え、機械学習における豊み込みニューラルネットワークなどの枠組みに定量的な考察、数理解理解を与えることも期待される。

### 3. 研究の方法

磁性体の相転移を調べるための理論的・数値的手段を与えるものとしてスピン模型がある。強磁性体は、相転移温度より高温ではスピンの向きはランダムに乱れ、相転移温度より低温ではスピンの向きは同じ向きに揃う。相転移温度から高温側あるいは低温側に十分離れた温度では、スピンの向きの配置は系の状態をよく反映したものとなるが、相転移温度近傍では非自明な配置となる。この非自明な配置について機械学習にかけ、そこからどのような知見が得られるかが1つの研究方法となる。

くりこみ群の方法の一つとしてブロックスピン変換がある。これはある領域内のスピン配置を元の領域よりも小さな領域へのスピン配置を写像する方法で、元のスピン配置の情報をなるべく損なわないような写像が選ばれる。相転移温度から十分に離れた高温あるいは低温側では、スピン配置は比較的自明なため、高温相は高温相へ、低温相は低温相へ移される。相転移点近傍では、スピン配置のフラクタル性により、写像が適切に選ばれば、相転移点直上のスピン配置は相転移点上に止まり、それより高温ではより高温側へ、低温ではより低温側へ移動し、その振る舞いの系統性を調べることによって系の性質が調べられてきた。これは統計物理学における視覚情報の利用の一例となっている。ブロックスピン変換は大きな系から小さな系への変換はよく利用されているが、逆向きの小さな系から大きな系への変換(粗視化の逆)についてはよく分かっておらず、そのような逆変換を構成できるかが長い間課題となっていた。先行研究では低画質の画像から高画質の画像を生成する super-resolution 法をブロックスピン変換に適用して、逆ブロックスピン変換を構成する方法が提案されていたが、我々は super-resolution 法で用いるデータとして生のスピン配置ではなく、グラフ表現から得られる物理量を用いることによる変化を調べることによって、スピン配置が持つ情報について調べた。

### 4. 研究成果

(1) 系のスピンの向きがランダムに配置される高温相とスピンの向き同じ向きに揃う低温相を隔てる相転移温度近傍でスピンの向きの配置は非自明なものとなる。強磁性体など比較的単純な相転移・臨界現象を調べるための手法はほぼ確立されており、多くの場合、標準的な手法に沿って解析が行われる。また確立された手法は、その現象の背後にある数理についても理解されている。では、これらの臨界現象を機械的に学習させ、解析を行わせた場合、学習済みの機械はどこまで理解しているのか、また学習させた問題を他の問題に応用することができるのか問うことは、視覚情報がどのようにして処理・凝縮され、また展開されるのかについての理解を深めることとなる。

研究の対象として選んだのは、ポッツ模型、クロック模型、XY 模型と呼ばれるスピン模型である。これらのスピン模型を研究する上で下記のような工夫を行なった。スピンの状態から系の状態を機械学習によって判別させる研究の嚆矢となった Carrasquilla と Melko の研究[1]があるが、彼らはスピンの状態をそのまま扱ったので、スピンがいくつもの状態を取れる場合には、処理すべき入力データの次元が増え、数値計算での扱いが難しくなる困難があった。この問題については共同研究者がすでに解決法を与えており、スピンの状態をそのまま扱うのでは

なく、局所的なスピン情報(2点相関など)に置き換えたものを入力データとした[2]。我々は局所的なスピン情報をして、グラフ表現から得られる物理量を用いる工夫を行なった。グラフ表現を用いることはスピンの状態を入力とする以上の意味を持つ。スピンの状態から局所的な物理量を計算することはできるが、その物理量はスピンの状態ごとにゆらぐので、シミュレーションを重ね、熱平均を取った後に系の状態と対応する。一方で、グラフ表現では、局所的な物理量(例えば2点相関)は相関が取り込まれたグラフの上で評価されるので、ゆらぎは小さく、特に相関がない場合には相関はゼロとなる。これは正負の値でゆらぐスピン変数を用いた場合とは大きな違いである。古典スピン模型でこの効果を検証したところ、スピン変数を用いた場合と比べて大きな改良は見られなかった。この結果は、ゆらぎの大きな相転移温度近傍において、ゆらぎを抑えた物理量を用いずとも、入力されたスピン変数から臨界点との距離が推定できていることを示している。

古典 XY 模型と量子 XY 模型はともにグラフ表現で記述することが可能であるが、そのグラフは古典と量子で大きく異なっている。古典 XY 模型のグラフは向きの揃ったスピンを適切な確率でつなぎ合わせることによって形成されるが、量子 XY 模型のグラフは空間 2 次元と虚時間の 3 次元空間内のループで形成される。グラフの形状は古典と量子で異なっている一方で、この 2 つのスピン模型はある温度(それぞれ異なる)で Kosterlitz-Thouless(KT)転移を示す。我々は古典と量子双方の KT 転移の判別が機械学習によって行うことができることを確認した後、古典 XY 模型で学習させた判別機で量子 XY 模型の KT 転移の判別を行ったところ、問題なく判別できることを確認した(図 1)。この結果は、古典と量子の区別なく、背後にある共通した対称性の破れを機械学習によって判別できることを意味しており、異なる量子模型と古典模型との間の対応関係の確認に機械学習の結果を用いること応用も残している。

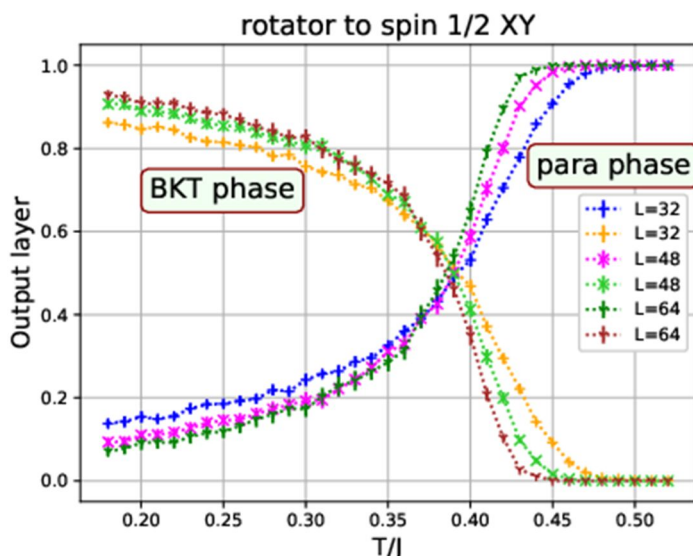


図 1: 古典 XY 模型で学習した判別機で量子 XY 模型の相の判別を行なった結果

[1] J. Carrasquilla and R. G. Melko, Nat. Phys. **13**, 431-434 (2017).

[2] K. Shiina, H. Mori, Y. Okabe, and H. K. Lee, Sci. Rep. **10**, 2177 (2020).

(2) 相転移・臨界現象を調べる一つの方法として粗視化をした結果を調べる方法がある。スピンの向きが揃った低温側では、粗視化するたびにマイノリティーは減少していき、スピンの向きの配置は温度の低い配置へ向かっていく。スピンの向きがランダムに乱れた高温側では、粗視化するたびに乱れが増大し、スピンの向きの配置は温度の高い配置へ向かっていく。温度の高い領域と低い領域の境目である相転移温度では、スピンの向きの配置のフラクタル性により、粗視化を行っても、スピンの向きの配置は相転移温度の特徴を保ち続ける。

ブロックスピン変換と呼ばれる粗視化についてはこれまで多くのスピン模型に対し適用され、その相転移・臨界現象について研究がなされてきたが、粗視化の逆向き、つまり小さな領域のスピン配置から大きな領域のスピン配置を生成する方法についてはよく知られていない。そこで我々は最近 Efthymiou らが用いた低解像度の画像から高解像度の画像を生成する super-resolution と呼ばれる手法[3, 4]を利用して、逆向きのくりこみ変換を行った。我々はスピン配置ではなく、グラフ表現から得られる 2 点相関を super-resolution に用いた。その結果、スピン配置を利用するよりも大幅な精度改善が見られた。高温側のスピン配置とその逆くりこみ変換を考えると、グラフ表現の利用によって精度が上がった理由がわかる。つまり、スピン配置を用いた場合、乱れたスピン配置から同様の乱れたスピン配置を生成する必要があるが、適

当な相関を取り込む工夫がされないで生成されたスピン配置は高温のスピン配置のままとなってしまう。一方グラフ表現を用いた場合、高温では乱れた配置ではなく、相関がほとんどない一様な配置から少しずつ相関が増していくことになる。相関の有無はグラフのスナップショットから容易に読み取れるため、グラフ表現を用いることによって逆くりこみ変換の精度が向上したと考えられる。

- [3] S. Efthymiou, M. J. S. Beach, R. G. Melko, Phys. Rev. B **99**, 075113 (2019).
- [4] C. Dong, C. C. Loy, K. He, and X. Tang, IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. **38**, 295 (2016).

5. 主な発表論文等

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

1. 著者名 Tomita Yusuke, Shiina Kenta, Okabe Yutaka, Lee Hwee Kuan	4. 巻 102
2. 論文標題 Machine-learning study using improved correlation configuration and application to quantum Monte Carlo simulation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevE.102.021302	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 Shiina Kenta, Mori Hiroyuki, Tomita Yusuke, Lee Hwee Kuan, Okabe Yutaka	4. 巻 11
2. 論文標題 Inverse renormalization group based on image super-resolution using deep convolutional networks	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 9617-1, 9617-9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41598-021-88605-w	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 該当する

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 0件／うち国際学会 1件）

1. 発表者名 富田裕介
2. 発表標題 1次元長距離パーコレーション模型の有限サイズスケーリング解析
3. 学会等名 日本物理学会第77回年次大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yusuke Tomita, Kenta Shiina, Yutaka Okabe, Hwee-Kuan Lee
2. 発表標題 Machine-learning study using improved correlation configuration and application to the 2D quantum XY model
3. 学会等名 XXXII IUPAP Conference on Computational Physics（国際学会）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 富田裕介, 椎名拳太, 岡部豊, 李恵光
2. 発表標題 Improved estimatorを用いた機械学習による古典および量子スピン模型の分類
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 富田裕介
2. 発表標題 グラフ表示によるシェルピンスキー格子上のイジング模型の解析
3. 学会等名 日本物理学会 第75回年次大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>機械学習の超解像技術を応用したスピン系の逆くりこみ群変換の研究  <a href="https://www.shibaura-it.ac.jp/news/nid00001656.html">https://www.shibaura-it.ac.jp/news/nid00001656.html</a></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

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
---------	---------