

令和 2 年 6 月 3 日現在

機関番号：22604

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2016～2019

課題番号：16K05480

研究課題名(和文)GPUを用いたスピン系の統計力学の高度計算

研究課題名(英文)High-performance computing of statistical physics of spin systems using GPU

研究代表者

岡部 豊 (Okabe, Yutaka)

首都大学東京・理学研究科・客員教授

研究者番号：60125515

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：GPUを用いた高速クラスターモンテカルロ法を中心とした効率のよい計算手法を用いて、次の3つの課題に取り組んだ。第1は、パイロクロア格子上的スピン系の相転移に関連したもので、希釈反強磁性系の磁場効果、また、エントロピーの巨大ピークが存在を示した。第2は、大規模モンテカルロ法による2次元クロックモデルのBKT転移の研究で、クラスターモンテカルロ法を用いて、コサイン型、Villain型の相互作用系を系統的に調べ、BKT転移の普遍性を確認した。第3は、機械学習の統計力学への応用で、相転移の分類に機械学習を用いるもので、スピン配置ではなく相関配置を扱うことにより、広いモデルに適用できることを示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

効率のよいアルゴリズムを用いて、複雑な物理系のシミュレーションを実行する研究で、研究成果と共に、方法論としても意味がある。特に、機械学習の進展に注目して、新規に始めた機械学習の統計力学への応用は、BKT転移を示す6状態クロックモデルの訓練データを用いて、2次相転移を示す4状態クロックモデルのテストデータによる相分類を行い、2次相転移の臨界点とBKT転移の臨界線との関連を明らかにするなど、ユニークな研究結果も得た。スピン系の研究の新しいパラダイムを提示するもので、その方法は、一般的で多方面への応用範囲がある。特に量子系への応用は、量子情報・量子計算の研究への展開も視野に入れると、興味深い。

研究成果の概要(英文)：High-performance Monte Carlo studies were performed. First, I studied the phase transition of spin systems on the pyrochlore lattice. I observed multiple plateaus in the magnetization curve in the diluted spin-ice materials. I also found large peaks of residual entropy in the diluted spin-ice model. Second, I studied q-state clock models of regular and Villain types with $q = 5, 6$ and observed double transitions in each model. I calculated the correlation ratio and size-dependent correlation length as quantities for characterizing the existence of Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) phase. Third, with the recent developments in machine learning, I proposed a new approach for the study of spin models, which is complementary to the conventional approach investigating the thermal average of macroscopic physical quantities. Paying attention to correlation configurations to use machine learning, I succeeded in the phase classification for both the second-order and the BKT transitions.

研究分野：数物系科学

キーワード：モンテカルロ法 GPU フラストレート系 相転移 BKT転移 イジングモデル クロックモデル 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、研究者個人に帰属されます。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

計算機の発展が研究のブレイクスルーを引き起こしてきたが、GPU (Graphic Processing Unit)が注目されている。急速に科学計算への応用が進み、更なる発展が期待できる。スピン系のモンテカルロ法については、我々のグループが、クラスターモンテカルロ法の GPU を用いた計算法を提案し、その効率の良さを示してきた。

物質系が示す多様な物理現象を理解する上で、計算機シミュレーションの役割が一層増していることは言うまでもない。熱平衡状態だけでなく動的な過程への関心が増し、ランダム系、複雑系などにおいて、緩和の時間スケールが非常に長くなる問題に関心が持たれている。新しい計算手法を提案すると共に、次々に現れる複雑な物理現象を解明することが、急務の問題である。

2. 研究の目的

以上のような背景のもと、GPU を用いた高速クラスターモンテカルロアルゴリズムにより、特にスピン系の問題について、従来の研究と比べて飛躍的に大きなサイズの系に対する高精度の計算を実行し、ランダム系、フラストレート系などを含む、困難な問題に取り組むことにある。対象とする研究課題は、新しく興味を持たれる物質系が現れてくるので臨機応変に対応する。

3. 研究の方法

本研究では、GPU を用いた高速クラスターモンテカルロアルゴリズムを中心とした効率のよい計算手法を用いて、具体的に次の3つの課題に取り組んだ。新規に取り組んだ課題もある。

(1) パイロクローア格子上的スピン系の相転移

パイロクローア格子上的スピン系は、多くの興味ある問題を提供しているが、本研究では、関連するいくつかの問題に取り組んだ。これは、ロシアの極東連邦大学の Nefedev 教授のグループとの共同研究である。フラストレーションを生ずる反強磁性系について、磁場効果と希釈効果の役割を論じた。また、磁場をかけた希釈系のエントロピーを調べた。エントロピーの計算には、状態密度を直接計算する Wang-Landau 法を用いて、精度の高い計算を実行した。一方、[100]方向に磁場をかけた希釈系について、Jaubert らの非希釈系の研究を拡張して、伏見カクタス近似を用いて調べた。

(2) 大規模モンテカルロ法による2次元クロックモデルの BKT 転移の研究

クラスターモンテカルロ法を用いて、2次元 q 状態クロックモデルの相転移を研究した。これは、インドネシア Hasanuddin 大学の Surungan 教授との共同研究である。クロックモデルとして、通常のコサイン型の相互作用の場合と、Villian 型といわれる相互作用の場合の両者を系統的に調べた。 $q=4$ では、1点の2次相転移を示すのに対して、 q が5以上では、2つの Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移を示すことが予測されているが、最近、 $q=5$ の相転移の普遍性について疑問を呈する研究結果もある。この論争に決着をつけることを目指した。本研究では、測定量として、相関関数比、および有限相関距離とシステムサイズの比をとりあげた。これらの量は、BKT 転移に伴う対数補正の影響が小さく、BKT 転移を調べるのにふさわしい。

(3) 機械学習の統計力学への応用

近年、人工知能 (AI) の研究が進み、社会のあらゆる分野で、AI が応用されてきている、AI を使ったコンピュータ囲碁プログラムや、自動運転の進展など、社会的に関心を集めている。AI は、応用技術としてだけでなく、基礎科学分野でも研究の考え方を革新するようなブレイクスルーを起こしつつある。相転移は、物理学の重要な研究分野であるが、その研究に機械学習を応用する試みが Carrasquilla and Melko によりなされた [J. Carrasquilla and R. G. Melko, Nature Physics 13, 431 (2017)]。イジングモデルに、手書き文字の判定に使われる機械学習の手法を応用したものであった。

本研究では、Carrasquilla and Melko (C&M) の手法を拡張、一般化して、イジングモデル以外の広い範囲のスピンモデルを扱えるようにすると共に、通常の2次相転移だけでなく、トポロジカル相転移として知られる BKT 転移の相分類も扱うものである。なお、本研究は、シンガポール・バイオ情報学研究所の Lee 博士との共同研究である。

4. 研究成果

(1) パイロクローア格子上的スピン系の相転移

フラストレーションを生ずる反強磁性イジング系について、磁場効果と希釈効果の役割を論じた。方法としては、磁場と温度の2つのパラメータに関するレプリカ交換法を用いた。[111]方向の磁場をかけると、希釈系では、5つの磁化プラトーを示すことを明らかにした。これは、フラストレーションが希釈により部分的に解消されるため、そのメカニズムを、パイロクローア格子の基本構成要素である正四面体におけるスピン構造の希釈による変化により説明した。また、2次元フラストレート系として、希釈反強磁性三角格子、カゴメ格子系のエントロピーを計算し、パイロクローア格子系と比較検討した。図1に、カゴメ格子上的反強磁性イジングモデルの磁化曲線を示す。

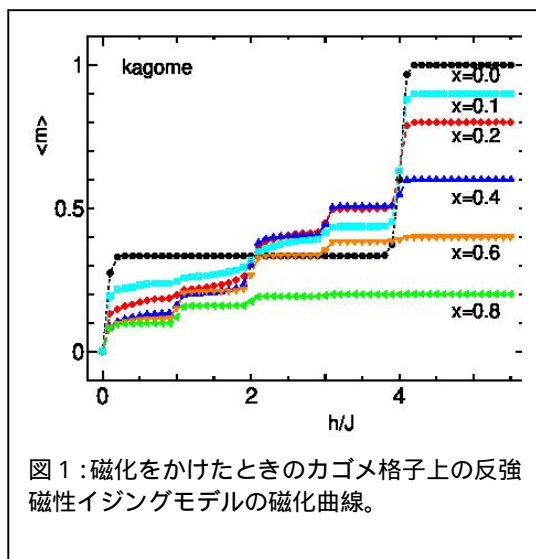


図 1 : 磁化をかけたときのカゴメ格子上的の反強磁性イジングモデルの磁化曲線。

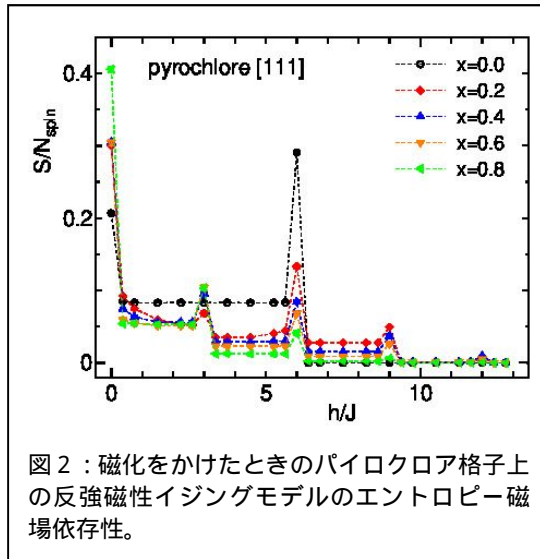


図 2 : 磁化をかけたときのパイロクロア格子上的の反強磁性イジングモデルのエントロピー-磁場依存性。

パイロクロア格子上的の希釈反強磁性系に[111]方向の磁場をかけた系のエントロピーを調べた。非希釈系の場合に、階段状の磁化プラトーを示す系では、磁化の変化する磁場においてエントロピーの巨大ピークが現れることが知られているが、希釈系の場合には、そのピークが5つの磁場に現れることを示した。図2に、パイロクロア格子上的の反強磁性イジングモデルに磁場をかけたときのエントロピーの磁化依存性を示す。

一方、[100]方向に磁場をかけた希釈系について、Jaubert らの非希釈系の研究を拡張して、伏見カクタス近似を用いて調べた。非希釈系の場合に温度効果により議論されているクーロン相のクロスオーバーが、希釈系では絶対零度でも見られることを示した。

(2) 大規模モンテカルロ法による2次元クロックモデルのBKT転移の研究

本研究では、GPUを用いた大規模なクラスターモンテカルロ法のシミュレーションを実施した。2次元離散クロックモデルを取り上げるが、相互作用として、通常のコサイン型とVillain型の両方を扱った。Villain型は厳密な双対関係が成立するので、それを確認することにより、計算の精度が確認できる。と同時に、相互作用の詳細によらない普遍性を調べることができる。

2次元 q 状態クロックモデルは、 q の値により、相転移の性質が異なる。 q が無限大のとき、XYモデルとなり、長距離秩序はないが準長距離秩序を示すBKT転移が起こるが、有限の q (5以上)では、離散性のため、低温で長距離秩序のある強磁性相となり、高温側から、常磁性相、BKT相、強磁性相と2段階転移を示す。一方、 $q=4$ 以下では2次相転移を示す。近年、2次転移となる q に近い $q=5$ の普遍性に疑問を呈する議論がなされ、論争となっているので、それに決着をつけることを目指した。

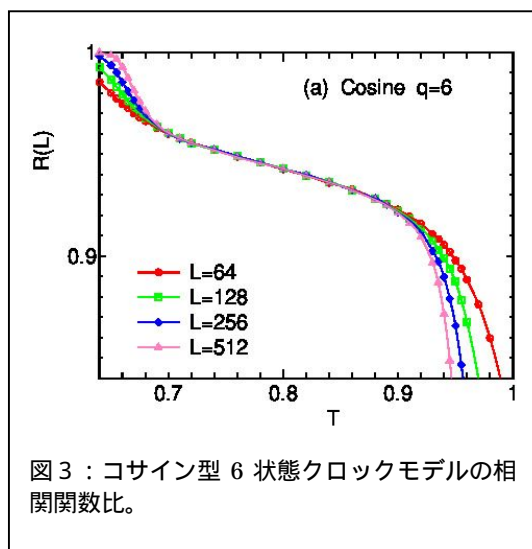


図 3 : コサイン型 6 状態クロックモデルの相関関数比。

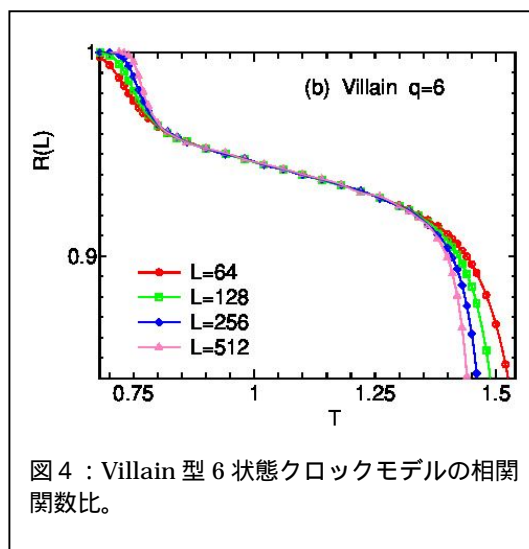


図 4 : Villain 型 6 状態クロックモデルの相関関数比。

図3、図4に、6状態クロックモデルの相関関数比の温度依存性を示す。中間の温度範囲では、サイズによらず曲線が重なること、すなわち臨界線の存在を示している。Villainモデルの場合には、双対関係が成立するが、それから期待される上臨界温度と下臨界温度の関係も確認し、コサイン型とVillain型の両方の場合に、 $q=5, 6$ の2次元クロックモデルの普遍性が成立するこ

とを明瞭に示した。q=5 における普遍性を疑う議論を否定するものである。

さらに、転移温度を仮定しない有限サイズスケールリングの方法を提案し、有限サイズスケールリングが成立すること、また、臨界指数を評価できることを示した。これは、2次転移の場合だけでなく、BKT 転移の場合も同様である。BKT 転移の場合、上臨界温度における臨界指数は $1/4$ で、下臨界温度では $1/q2$ となること、数値的に確認した。

(3) 機械学習の統計力学への応用

C&M の方法は、イジングモデルに限られていて、もっと複雑なモデルには直接適用できない。例えば、多数の状態をとるポッツモデルにも対応するため、スピン配置そのものではなく、2つのスピン間の相関に注目して、相関の配置に C&M の方法を適用することを提案した。機械学習として、全結合型ニューラルネットワークの方法を用い、Tensorflow と呼ばれる機械学習のライブラリを利用した。

3 状態ポッツモデルの場合に、機械学習を用いて相分類を実行した結果を図 5 に示す。常磁性相、強磁性相であることがわかっている高温、低温のデータを訓練データとして相分類を判定する分類器に学習させ、結果を知らない各温度のテストデータが常磁性相、強磁性相に判定される割合を示してある。LxL の系 (L=24, 32, 48) の結果を示してあるが、異なるサイズのデータも、転移温度から測った温度をサイズに応じた長さでスケールすることにより、一つの曲線に乗るといって有限サイズスケールリングがうまくいっていることを挿入図に示してある。

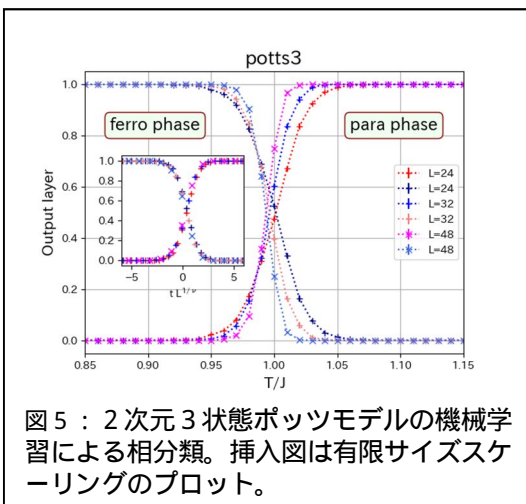


図 5 : 2次元3状態ポッツモデルの機械学習による相分類。挿入図は有限サイズスケールリングのプロット。

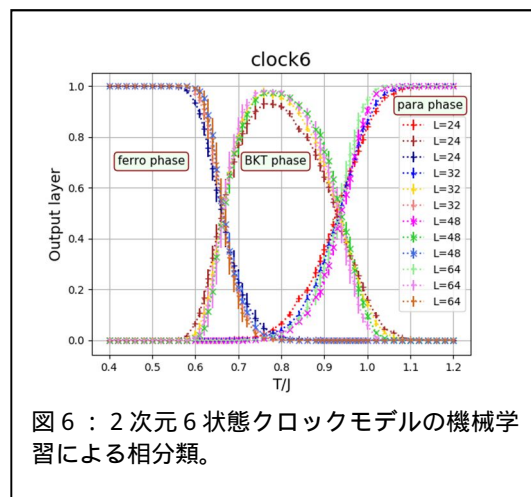


図 6 : 2次元6状態クロックモデルの機械学習による相分類。

連続の状態をとるモデルにも、相関配置を利用することが可能で、トポロジカル相転移として知られる BKT 転移を示す 2次元 XY モデルにこの方法を適用した。2次相転移の場合には1点の相転移温度(臨界点)で示す臨界的な性質が広い温度範囲(臨界線)で観測されるユニークな相転移である。XY モデルの離散版であるクロックモデルに対して、機械学習の方法を適用した結果を図 6 に示すが、離散性のために、低温で強磁性相が出現し、強磁性相-BKT 相-常磁性相と2段階の転移が存在することを明瞭に示している。また、BKT 転移を示す 6 状態クロックモデルの訓練データを用いて、2次相転移を示す 4 状態クロックモデルのテストデータによる相分類を行い、2次相転移の臨界点と BKT 転移の臨界線との関連を明らかにするなど、ユニークな研究結果も得た。

スピン系の相転移の研究に新しいパラダイムを提示して、量子系を含む広い範囲の相転移研究に発展させることが期待される。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件／うち国際共著 9件／うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Petr Andriushchenko, Konstantin Soldatov, Alexey Peretyatko, Yuriy Shevchenko, Konstantin Nefedev, Hiromi Otsuka, Yutaka Okabe	4. 巻 99
2. 論文標題 Large peaks in the entropy of the diluted nearest-neighbor spin-ice model on the pyrochlore lattice in a [111] magnetic field	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Phys. Rev. E	6. 最初と最後の頁 022138(12)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.99.022138	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 Soldatov Konstantin, Peretyatko Alexey, Andriushchenko Petr, Nefedev Konstantin, Okabe Yutaka	4. 巻 383
2. 論文標題 Comparison of diluted antiferromagnetic Ising models on frustrated lattices in a magnetic field	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physics Letters A	6. 最初と最後の頁 1229 ~ 1234
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physleta.2019.01.037	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 Shevchenko Yuriy, Nefedev Konstantin, Okabe Yutaka	4. 巻 95
2. 論文標題 Entropy of diluted antiferromagnetic Ising models on frustrated lattices using the Wang-Landau method	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 052132(5)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.95.052132	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 Otsuka Hiromi, Okabe Yutaka, Nefedev Konstantin	4. 巻 97
2. 論文標題 Husimi-cactus approximation study on the diluted spin ice	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 042132(7)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.97.042132	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 S. Sashida, Y. Okabe, H.-K. Lee	4. 巻 152
2. 論文標題 Application of Monte Carlo simulation with block-spin transformation based on the Mumford-Shah segmentation model to three-dimensional biomedical images	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 Computer Vision and Image Understanding	6. 最初と最後の頁 176-189
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cviu.2016.06.001	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 K. Soldatov, K. Nefedev, Y. Komura, Y. Okabe	4. 巻 381
2. 論文標題 Large-scale calculation of ferromagnetic spin systems on the pyrochlore lattice	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Phys. Lett. A	6. 最初と最後の頁 707-712
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.physleta.2016.12.039	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 A. Peretyatko, K. Nefedev, Y. Okabe	4. 巻 95
2. 論文標題 Interplay of dilution and magnetic field in the nearest-neighbor spin-ice model on the pyrochlore lattice Article	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Phys. Rev. B	6. 最初と最後の頁 144410
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.95.144410	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 Surungan Tasrief, Masuda Shunsuke, Komura Yukihiro, Okabe Yutaka	4. 巻 52
2. 論文標題 Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition on regular and Villain types of q-state clock models	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical	6. 最初と最後の頁 275002 ~ 275002
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1751-8121/AB226D	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

1. 著者名 Shiina Kenta, Mori Hiroyuki, Okabe Yutaka, Lee Hwee Kuan	4. 巻 10
2. 論文標題 Machine-Learning Studies on Spin Models	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 1
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/S41598-020-58263-5	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1件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 1件)

1. 発表者名 Y. Okabe
2. 発表標題 High performance computing for statistical physics
3. 学会等名 The 6th International Conference on Theoretical and Applied Physics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>研究成果を大学より報道発表 https://www.tmu.ac.jp/news/topics/22751.html 日本経済新聞で、記事掲載 https://www.nikkei.com/article/DGKKZ057005360Z10C20A3TJM000/ 研究ニュース"EurekaAlert!" で発表 https://www.eurekaalert.org/pub_releases/2020-03/tmu-mlp032520.php</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
---------------------------	-----------------------	----