

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：2020～2022

課題番号：20K03773

研究課題名（和文）機械学習と格子変形で作る新たなシミュレーション技法

研究課題名（英文）Introducing a new simulation method using machine learning and lattice deformation

研究代表者

中村 統太（Nakamura, Tota）

芝浦工業大学・工学部・教授

研究者番号：50280871

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,800,000円

研究成果の概要（和文）：磁性体のスピンモデルに対して、スピン間相互作用の強さに変調を加えて、測定される物理量の温度変化を一括して求めるシミュレーション手法の開発を行った。これと同時に、測定された物理量の解析に機械学習を用い、相転移温度近傍での測定精度の向上を行った。これを各種スピンモデルに応用してその有用性の確認を行った。厳密解のわかっているモデルでは、相転移温度や臨界指数をこれまでにない精度で求めることができた。従来から解析が困難であったコスタリッツサウレス転移を示すモデルでも、十分な精度での計算が実現した。非整合相などが実現する複雑な系では特に有効な手法であることも確認できた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

一様な系の解析を変形を加えた別な系で代用することができる、しかも一様系で生じていた解析の困難を緩和・解決することができる、このような野心的な試みを達成することがこの研究課題の最も重要な意義です。結果として、測定量の精度向上が確認され、解析困難系への応用の道も開けました。これまでは一様系の解析は一様系のシミュレーションで行う、という固定観念に一石を投じる成果だと言えます。従来の価値観に囚われず、そこを崩した上で新しい価値観を創造する、という意味では社会的な意義も大きいと言えます。

研究成果の概要（英文）：We developed a simulation method for a spin model of a magnetic material by modulating the strength of the spin-spin interaction to collectively obtain the temperature dependence of the measured physical quantities. At the same time, machine learning was used to analyze the measured physical quantities to improve the measurement accuracy near the phase transition temperature.

We applied this method to various spin models and confirmed its usefulness. The phase transition temperature and critical exponents were obtained with unprecedented accuracy for an exactly-solved model. Calculations with sufficient accuracy were achieved for models showing the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition, which have been conventionally difficult to analyze. We have also confirmed that this method is particularly effective for complex systems with incommensurate phases.

研究分野：物性理論

キーワード：格子変形 機械学習 モンテカルロ法 相転移

様式 C-19、F-19-1、Z-19（共通）

1. 研究開始当初の背景

(1) 磁性体模型の研究において、残されている未解決問題の多くは数値的研究の困難さがその原因となっている。例えば、フラストレーション系、ランダム系、非整合系などでは大規模数値計算を妨げる遅い緩和問題や、強い有限サイズ効果、サンプル依存効果が存在し、これまでの計算手法では、満足する結果が得られないまま今日に至っている。

(2) 近年、機械学習手法が物理の様々な分野に応用され、その新たな展開が期待されている。上記の数値的困難を伴う問題への応用は特に注目されている。しかし、個々の事例を見る限り、すでに性質がよくわかっている一様系においても、得られる数値精度は低く信頼性の面で改善すべき点が多い。ここで問題となるのは、学習される元データを如何に生成するか、になる。これまでは有限系のシミュレーション結果が用いられることが多く、その信頼性が直接学習結果に反映されることになる。したがって、機械学習に適したデータ供給としてのシミュレーション技法の開発が求められている。

(3) 上記2つの問題を連結統合して解決する手法として本研究課題では「サイン自乗変形」に注目した。これは元々、量子スピン系の無限サイズ系の基底状態を有限サイズの計算結果から厳密に求める手法として開発されたもので、その有用性により応用の範囲が徐々に広がっている。その一つが、適用範囲を基底状態から有限温度に広げる取り組みであり、その一環として本研究課題では、古典スピン系の計算が困難な模型の有限温度相転移に適用することを考えた。

2. 研究の目的

(1) サイン自乗変形を古典スピン系に応用し、有限温度の物理量を正しく求められるのかをまず確認する。その上で、変形パターンの選択肢を広げ、次に行う機械学習への効率的データ供給に叶うものを探索する。

(2) 機械学習をシミュレーションデータ解析に用い、種々の物理量および相転移温度や臨界指数の新たな効率的評価法を開発する。そして、相転移温度を評価しつつ最適な変形パターンを探索するアルゴリズムを開発する。

3. 研究の方法

(1) 格子変形されたスピン模型に対してモンテカルロシミュレーションを行う。このとき、格子変形が温度変形と等価になることを用いて、変形された系の各格子点の測定物理量を、格子変形されてない一様系の異なる温度点の物理量と読み替える。これにより、一度のシミュレーションで多くの温度点の物理量を一括して求めることができる。温度を変えて計算する手間を省く代わりに格子サイズを大きくとることができ、結果としてサイズ効果、温度変形の効果を削減することができる。よって、サイズ効果の少ないバルクデータのみを用いて解析することができる。

(2) 機械学習アルゴリズムとしてガウスクERNEL回帰法（GKR）を用いる。得られた生データを

用いて回帰曲線を求めると、その微分回帰曲線も自動的に求めることができる。これにより、これまで差分による数値微分に頼っていたデータ解析の精度を著しく向上することができる。回帰曲線は任意の精度で求めることができるので、その数値積分の精度も同時に向上することができる。例えば、相関関数データから、対数微分によって相関長と臨界指数を求め、体積積分によって帯磁率を求める、ということが可能になる。このようにして求められた複数の物理量の臨界発散を自己無撞着的に解析することによって、転移温度と臨界指数を求めることができる。

4. 研究成果

(1) 2次元イジング強磁性体模型を用いてサイン自乗変形を用いたアルゴリズムの確認を行った。

[1] 転移温度と臨界指数が厳密に求められているため、精度確認に用いることができる。

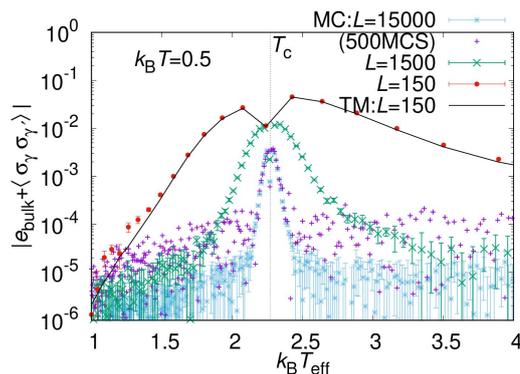


図1：2次元イジング強磁性体のエネルギー測定値の厳密解との差を温度に対してプロット。サイズLの増加とともに厳密解に近づくが、転移温度近傍での不一致は存在する。[1]から引用

図1に示されたように、測定値の厳密解との一致はサイズとともに改善するが、相転移温度 ($T=2.2691853$)直上ではその改善は遅くなる。これはシングルスピントリッを用いたモンテカルロ法の臨界緩和が遅くなるために起こるもので、クラスターフリップ法を用いると除去することができる。なお、局所温度が連続的に変化するだけであるので、クラスターフリップの実装は容易である。

(2) 機械学習に最適なデータ供給元としてモンテカルロシミュレーションを考えたとき、最終的な転移温度や臨界指数の評価法を見直す確認がある。本研究課題では、バルクデータのガウスクーネル回帰を用いて得られた物理量が冪発散することを仮定し、両対数プロットしたときに最も直線性が良くなる温度を転移温度、その傾きから臨界指数を求める、という方法をとる。したがって、両対数プロットしたときにデータが均等分布するように有効温度が変化するように格子変形を行った。ただし、転移温度は予めわからないので、適当な施行値を設定して行った。2次元イジング強磁性体の結果を図3に示す。ここでは、クラスターフリップ法を用いた。極めて高精度で厳密解を再現することがわかった。

(3) コスタリッツ・サウレス転移への応用。過去の研究で転移温度がよくわかっている2次元XY強磁性体を用いた。この模型では相関長が指数関数的に発散するため臨界温度近傍でのサイズ効果は特に厳しくなる。イジング模型と同様に試行的な転移温度を用いて相関長の対数プロットが均等に分布する温度配位を用いて計算を行い、発散プロットの尤度が最大になる温度を転移温度とした。結果を図4に示す。相関長が10から 10^4 のオーダーまで極めてコンシステントに得られ、転移温度評価は過去の文献とも一致した。転移温度近傍では、サイズ効果が現れるクロスオーバーが見られるが、その手前のデータを用いればバルクの性質は解析可能である。

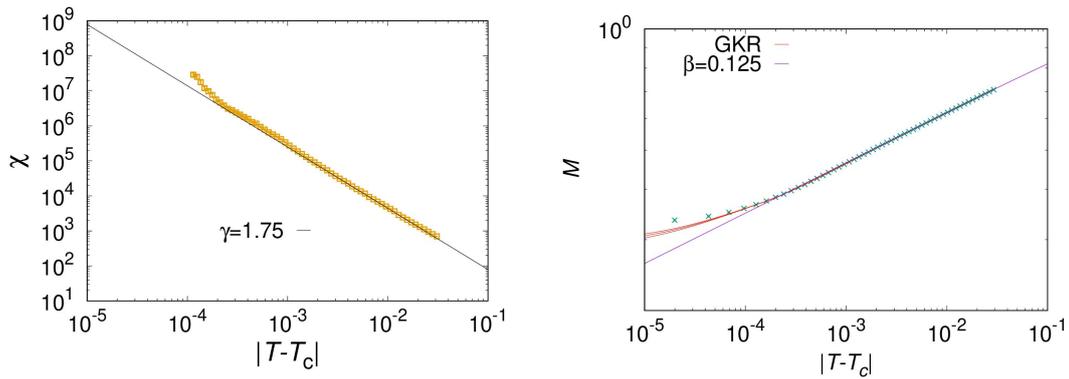


図3：2次元イジング強磁性体の転移温度評価のためのプロット。左が帯磁率、右が磁化。これらに加えて、エネルギー、相関長、帯磁率と相関長のクロス相関、の全ての臨界プロットの尤度が同時に最大になる温度と臨界指数を求めた。得られた評価値は、 $T_c=2.269190(6)$, $\alpha=-0.008(8)$, $\beta=0.1256(5)$ となり、厳密解： $T_c=2.2691853$, $\alpha=0$, $\beta=1/8$ を高精度で再現する。系のサイズは30720x30720、10000モンテカルロステップ、12回の独立計算の平均をとった。

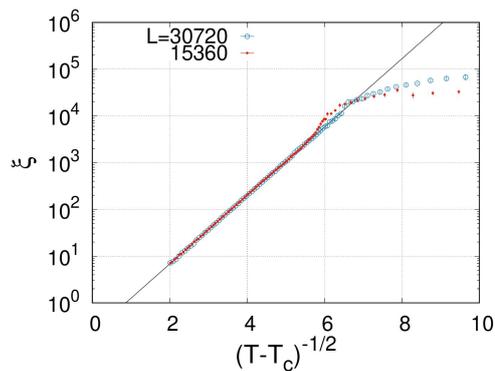


図4：2次元XY模型の相関長の発散プロット。L=30720のデータを用いた転移温度評価 $T_c=0.8929(11)$ は過去の研究とも一致する。転移温度に近づくと、サイズ効果によって発散傾向から外れる。

(4) その他の模型への応用として、2次元ANNNI模型を扱った。この模型は、y軸方向に相互作用がフラストレートし、x軸方向は強磁性的であるイジング模型である。低温ではy軸方向に4倍周期の整合相が存在するが、中間温度で非整合な波数の状態が出現することが予想されている。そこで、y軸方向にサイン自乗的に温度を変化させる一方、x軸方向は一様にして、y軸方向の構造因子とx軸方向の相関長を求めた。非整合状態を実現するため、系のサイズをL=61440とした

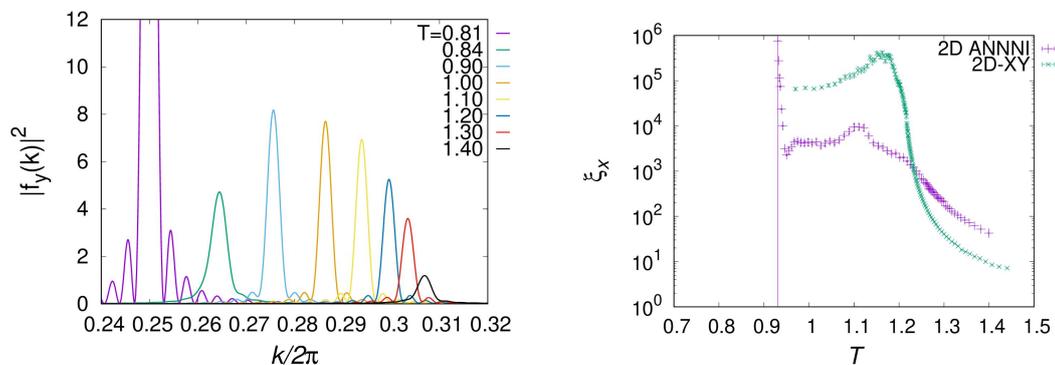


図5：2次元ANNNI模型。(左)構造因子の波数依存。低温相では4倍周期波数のところに巨大なピークが立つ一方、非整合ピークは小さい。(右)x軸方向の相関長の温度変化。比較のために、2次元XY模型の相関長を転移温度が同じになるようにずらしてプロットした。ANNNI模型の相関長の発散傾向は弱い。

結果を図5に示す。中間温度の非整合の構造因子のピーク位置は連続的に温度変化するが、値は小さいままである。また、 x 方向相関長も発散傾向は見られない。 $T=1.2$ 付近で予想されているコストリッツ・サウレス転移の兆候は弱かった。これにより、明確な中間相の存在は確認できなかった。

以上の研究結果をまとめると、本研究課題で開発した手法は、2次転移はもちろんコストリッツ・サウレス転移のような数値計算が困難なモデルにおいても、有効に機能することが確認できた機械学習を用いる場合には、単純にデータの個数を多くとることが精度向上に不可欠だが、この手法を用いれば、有効温度を連続的に変化させて一度に多数のデータ取得が可能になり、大きなアドバンテージになる。これまでは、格子変形=温度変形された系の観測量と元の一様系の観測量は一致しないと考えられてきたが、大規模計算が可能となった現在、その差は物理現象を解析する際には無視できる程度にコントロール可能になった。これまで数値計算が困難であった系への応用が大いに期待される。

<引用文献>

[1] C. Hotta, T. Nakamaniwa, and T. Nakamura, Phys. Rev. E 104, 034133 (2021).

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 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Hotta Chisa, Nakamaniwa Takashi, Nakamura Tota	4. 巻 104
2. 論文標題 Sine-square deformation applied to classical Ising models	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 034133-1--14
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevE.104.034133	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 Nakamura Tota	4. 巻 10
2. 論文標題 Machine learning as an improved estimator for magnetization curve and spin gap	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 14201
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41598-020-70389-0	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 -

〔学会発表〕 計1件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 中村統太、堀田知佐
2. 発表標題 サイン二乗温度変調を用いたモンテカルロシミュレーション
3. 学会等名 日本物理学会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔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
---------	---------