

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 10 日現在

機関番号：12601

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2013～2015

課題番号：25610102

研究課題名(和文) データ駆動科学の物性物理への展開

研究課題名(英文) Data-driven approach to condensed-matter physics

研究代表者

福島 孝治 (Hukushima, Koji)

東京大学・総合文化研究科・准教授

研究者番号：80282606

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)：本研究は、データ駆動型の研究方法を物性物理の分野で展開することである。まず磁化曲線の観測データを入力として、これまでの経験的な理論モデルの構築に機械学習の技法を援用する方法を提案した。複数の候補から適切なモデル選択が可能となった。その結果、スピン構造など実験的に観測が難しい情報へのアクセスが可能となり、その後の実験計画に役立てられるようになった。さらに、扱う系を量子系に展開するためにはベイズ最適化の手法が有力であることがわかった。一方、大規模施設からのデータを想定して、中性子散乱実験のスペクトルから緩和時間分布を推定する問題に着手し、実データ解析も含めた新しい方向性を示すことができた。

研究成果の概要(英文)：Our main purpose in this project is to develop a data-driven method for materials science. We first propose a systematic method based on the machine learning in which a theoretical model with magnetic interactions is established from an input data of magnetization curve. The proposed method enables us to infer a suitable model among many candidates. Consequently, one may obtain microscopic spin structure which is difficult to see in a conventional experiments and it provides useful information on a following experiment design. It is also found to be efficient to use a Bayesian optimization for quantum spin systems. Meanwhile, dealing with the possibility of handling a big data from large experimental facilities, we develop an inference method of a relaxation-time distribution from neutron-diffraction experiments and offer a new direction including real-data analyses.

研究分野：統計物理学

キーワード：物性理論 磁性モデル 磁化曲線 機械学習 モンテカルロ法 中性子散乱

### 1. 研究開始当初の背景

近年、JPARC やSACLA などの大型実験施設から高精度の散乱実験データが得られるようになってきている。科学の広い分野でイメージングの手法が大きく発展し、実空間の観察が驚くほどの高精度で得られる。例えば、走査型プローブ顕微鏡は走査型トンネル顕微鏡 (STM) をはじめ、様々なプローブに展開され、精度の向上も含め著しい進展を見せている。これらのデータは精度向上に伴って大容量のデータとなるために、データ解析は重要な課題になる。特に、イメージング画像データは直接の理論の予言対象になりにくいために解釈のためにもデータ解析は必要となる。実験データの精度向上の効果として自然現象を理解するための情報がそこに含まれることは期待されるものの、データの背後にある物理特性を抽出する方法の発展は必ずしも十分ではないと考える。本研究では理論模型を積極的に取り入れたデータ解析方法の開発を目的とする。そのための知見が情報統計力学にあると研究代表者は考える。情報統計力学は、ランダム系の統計力学とベイズ統計の数理的類似性に注目し、近年発展した統計物理の一分野である。そこで一つのテーマは画像修復の問題であり、平均場近似等の統計力学的手法を用いることで効率のよい方法などが議論されてきた。情報統計力学の成熟してきたこの時期にこそ、その知見を物理実験データの解析解析に展開するよい機会であると思われる。気象研究など時系列解析などで「データ同化」と呼ばれるデータ駆動型の研究スタイルが進展している時代背景も、本研究を推進すべきと研究代表者が考える大きな要因である。

### 2. 研究の目的

近年、様々な実験技術は発展し大量の高精度データが得られつつあり、また走査型トンネル顕微鏡に代表されるミクロな測定から実空間のイメージング画像データが得られる。これらは高精度化に伴いデータ量は膨大になり、しかも直接的な理論の予言対象になりにくいために、解釈のためにはデータ解析が必要となるが、その方法論の開発は必ずしも実験技術の向上に伴っているとは考えにくい状況にある。本研究では、実験で得られたデータを出発点として理論模型の持つパラメータを推定する計算物理的方法の開発を目的とし、従来の第一原理計算からのアプローチとは異なる実験データ駆動型の新しい科学の方法論の構築を目指す。

### 3. 研究の方法

本研究課題の目標は、実験データから我々の仮定する模型の範囲で、相互作用パラメータなどの模型に含まれる微視的パラメータを推定し、さらにはその模型の妥当性の定量的な検討を可能にする一般的な方法論を開発することである。仮定する模型は実験の精度などによって適切に決められるべきものであり、ミクロスケールから現象論的な粗視化モデルまで様々な階層が考えられる。ここで

は、解析手法の一般論を展開しつつも、具体的な物理的問題を考察し、実際に実データ解析に向けた準備を進めていくことを考える。問題を設定すると、確率モデルを導入することができ、その元でベイズ統計に従って、導入された確率モデルに含まれる未知パラメータを推定する。推定には、大自由度の積分計算が必要となり、マルコフ連鎖モンテカルロ法などの計算物理の方法を用いる。

### 4. 研究成果

本研究課題の目的は、データ駆動型の研究方法を物性物理の分野で展開することである。近年社会科学において注目されているビッグデータ解析は自然科学にも重要な問題であるが、自然科学特有の重要な視点は、社会科学と比較すると自然科学の問題の多くは基礎法則が整備されていることにあり、また特に物性物理の分野では計測データの精度が非常に高いことが特徴であると考えている。やみくもに、データから機械学習を用いて、背後のデータ構造を抽出するのではなく、基礎法則の未知変数を精度を制御しながら評価する方法を考えることが、物性物理の分野に必要なことである。

(1) 走査型トンネル顕微鏡に代表されるミクロな測定から得られる実空間のイメージング画像データの新しい解析方法の模索である。特に、単なるノイズ除去ではなく、背後にある物理描像を抽出する方法論の発展を考えていて、本年度は得られたデータを出発点としてある理論模型の持つパラメータを推定する計算物理的方法の開発を研究した。具体的には、Cu(110)面上へのカリウムなどのアルカリ原子の吸着による表面再構成の問題を取り上げ、アルカリ原子に働く異方的斥力相互作用を推定する枠組みを構成した。それはベイズの定理に基づくベイズ推定として定式化され、ベイズ推定の文脈では事前分布に統計力学モデルを導入し、ハイパーパラメータを推定することが物理モデルを推定することに相当する。具体的な計算としては大規模なモンテカルロ計算を必要がある。まずはノイズの入った人口データの解析を行い、有効相互作用として、これまでに提案されているある種の統計力学模型のモデルパラメータをデータから再構成できることを確認した。この方法は、従来の第一原理計算からのアプローチとは異なる実験データ駆動型の新しい科学の方法論を提供しうると考えられる。

(2) 走査型トンネル顕微鏡に代表される実空間のイメージング画像データの新しい解析方法に引き続き、この基本路線を最も顕著に表す例題として、磁性の問題の磁化曲線の観測データから磁気モデルを推定する方法論の構築を試みた。磁場の関数として磁化の値を入力データとして、相互作用のモデルとそのパラメータを推定する枠組みはベイズ推定の枠組みで定式化することができる。この枠

組みをまずは人工データでの検証を行った。その中心部分の計算に統計力学の多体問題を解く必要があり、計算量は多くなる。多体問題の性質は絶対零度を仮定して、エネルギー関数の最急降下法を用い、モデルの選択には L1 ノルム正則化の方法を用いた。この正則化は通常の機械学習で用いられる LASSO では、正しいモデルを選択できなかった。そのために、正則化項に物理的な性質に基づき、長距離項には距離に比例した罰金項を導入して、正しいモデルの再現に成功した。この点は人工データを用いた研究の利点と言える。この研究内容は日本物理学会でのシンポジウムにて講演し、ある程度の反響を得た。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

#### [雑誌論文](計 8 件)

Yuji Sakai, Koji Hukushima, Eigenvalue analysis of an irreversible random walk with skew detailed balance conditions, *Physical Review E*, 査読有, Vol. 93, 2016, 043318-1-13,

<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.93.043318>

Yoshihiko Nishikawa, Manon Michel, Werner Krauth, and Koji Hukushima, Event-chain algorithm for the Heisenberg model: Evidence for  $z=1$  dynamic scaling, *Physical Review E*, 査読有, vol. 92, 2015,063306-1-5,

<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.92.063306>

Takashi Takahashi and Koji Hukushima, Evidence of a one-step replica symmetry breaking in a three-dimensional Potts glass model, *Physical Review E*, 査読有, Vol. 91, 2015,020102-1-4,

<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.91.020102>

Satoshi Takabe and Koji Hukushima, Minimum vertex cover problems on random hypergraphs: Replica symmetric solution and a leaf removal algorithm, *Physical Review E*, 査読有, Vol.89,2014, 062139-1-8, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.89.062139>

Satoshi Takabe, and Koji Hukushima, Typical Behavior of the Linear Programming Method for Combinatorial Optimization Problems: A Statistical-Mechanical Perspective, *Journal of the Physical Society of Japan*, 査読有, Vol.83,2014,043801-1-4, <http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.83.043801>

Munetaka Sasaki and Koji Hukushima, A List Referring Monte-Carlo Method for Lattice Glass Models, *Journal of the Physical Society of Japan*, 査読有, Vol. 82,

2013,094003-1-15,

<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.094003>

Yuji Sakai and Koji Hukushima, Dynamics of One-Dimensional Ising Model without Detailed Balance Condition, *Journal of the Physical Society of Japan*, 査読有, Vol. 82, 2013,064003-1-8,

<http://dx.doi.org/10.7566/JPSJ.82.064003>

Koji Hukushima, An irreversible Markov-chain Monte Carlo method with skew detailed balance conditions, *Journal of Physics: Conference Series*, 査読有, Vol. 473,2013,12012-1-9,

[doi:10.1088/1742-6596/473/1/012012](https://doi.org/10.1088/1742-6596/473/1/012012)

#### [学会発表](計 9 件)

田村亮, 福島孝治, 磁化過程を入力としたスピン間相互作用の推定手法, 日本物理学会 第 71 回年次大会, 2016 年 03 月 21 日, 東北学院大学 泉キャンパス (仙台市泉区)

西川宜彦, 福島孝治, 三次元カイラルらせん磁性体の相転移の解析, 日本物理学会 第 71 回年次大会, 2016 年 03 月 19 日, 東北学院大学 泉キャンパス (仙台市泉区)

田村亮, 福島孝治, ベイズ統計を用いた磁化過程からの相互作用推定, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 2015 年 09 月 19 日, 関西大学 千里山キャンパス (大阪府吹田市)

高橋昂, 福島孝治, 3 次元ポツグラスにおける静的・動的協調スケールの研究, 日本物理学会, 2015 年 03 月 24 日, 早稲田大学早稲田キャンパス (東京都新宿区)

福島孝治, 物性物理へのデータ駆動型アプローチ, 日本物理学会, 2015 年 03 月 23 日, 早稲田大学早稲田キャンパス (東京都新宿区)

Koji Hukushima, Equilibrium-state simulation of some spin glass models in finite dimensions, *Conference of Computational Physics 2014*, 2014 年 08 月 13 日, ボストン大学 (米国ボストン)

Koji Hukushima, Inference of an effective physical model from STM imaging data, *Cooperation of Computational Materials Science and Mathematics toward Smart Materials Design II* (招待講演), 2014 年 01 月 09 日, 東北大学 WPI (宮城県仙台市)

福島孝治, データ駆動科学の物性物理への展開, 東京大学物性研究所スーパーコンピュータ成果報告会 (招待講演), 2013 年 12 月 12 日, 東京大学物性研究所 (千葉県柏市)

酒井佑士, 福島孝治, ねじれ詳細つり合い条件を用いたマルコフ連鎖モンテカル

ル口法の性能評価, 日本物理学会 2013  
年秋季大会, 2013年09月13日, 徳島大  
学常三島キャンパス(徳島県徳島市)

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

<https://scholar.google.co.jp/citations?user=L45cnxIAAAJ&hl=ja>

[https://www.researchgate.net/profile/Koji\\_Hukushima](https://www.researchgate.net/profile/Koji_Hukushima)

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

福島 孝治 (HUKUSHIMA, Koji)

東京大学・大学院総合文化研究科・准教授

研究者番号: 80282606

### (2) 研究分担者

### (3) 連携研究者