

学部2, 3年生~ を想定しています

# ニューラルネットを使った 2次元イジングモデルの相検出



富谷昭夫 (RIKEN-BNL)  
akio.tomiya\_AT\_riken.jp





### 主な論文

ニューラルネットを使った相検出  
 Detection of phase transition via convolutional neural networks

A Tanaka, A Tomiya  
 Journal of the Physical Society of Japan 86 (6), 063001

高温でのU(1)量子異常の消失の証拠  
 Evidence of effective axial  $U(1)$  symmetry restoration at high temperature QCD

A Tomiya, G Cossu, S Aoki, H Fukaya, S Hashimoto, T Kaneko, J Noaki, ...  
 Physical Review D 96 (3), 034509

深層学習とAdS/CFT  
 Deep learning and the AdS/CFT correspondence

K Hashimoto, S Sugishita, A Tanaka, A Tomiya  
 Physical Review D 98 (4), 046019

格子作用におけるカイラル対称性の破れ  
 Violation of chirality of the Möbius domain-wall Dirac operator from the eigenmodes

G Cossu, H Fukaya, A Tomiya, S Hashimoto  
 Physical Review D 93 (3), 034507

ホログラフィックQCDと深層学習  
 Deep learning and holographic QCD

K Hashimoto, S Sugishita, A Tanaka, A Tomiya  
 Physical Review D 98 (10), 106014

量子クエンチとエンタングルメントエントロピーのスケールリング則  
 Quantum quench and scaling of entanglement entropy

P Caputa, SR Das, M Nozaki, A Tomiya  
 Physics Letters B 772, 53-57

### 略歴

2010 : 兵庫県立大学理学部物質科学科卒

2015 : 阪大で博士号取得。素粒子論。

2015 - 2018 : 華中師範大学でポスドク (中国、武漢)

2018 - : 理研/BNLでポスドク (米国、NY)

Deep learning and Physics 2020



# もくじ

15分の講義 + 20分の実践 (ちょっとのびるかもしれません)

1. イジングモデルと相転移
2. Nature Physics<sup>[1]</sup>の論文の概要
3. ニューラルネットとは
4. 実践
5. まとめ



8章につながる

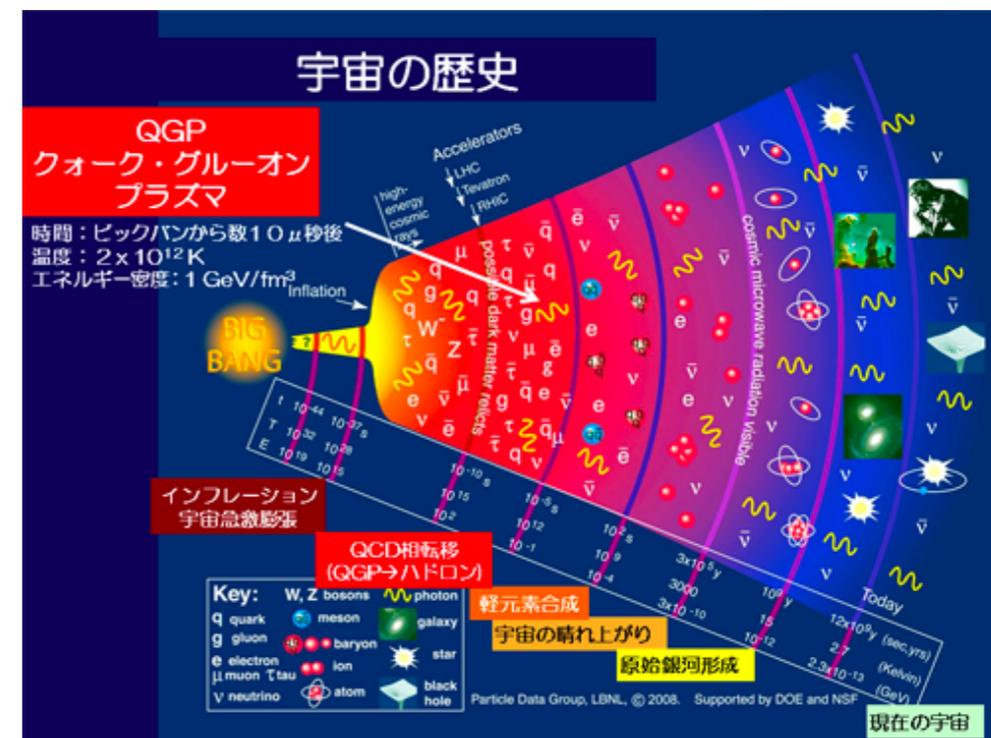
[1] Juan Carrasquilla & Roger G. Melko, Nature Physics volume 13, pages431–434(2017)

# イジングモデルと相転移

## 物理と相転移

色々な相転移がある

気液相転移, 磁性転移, 宇宙初期の相転移などなど



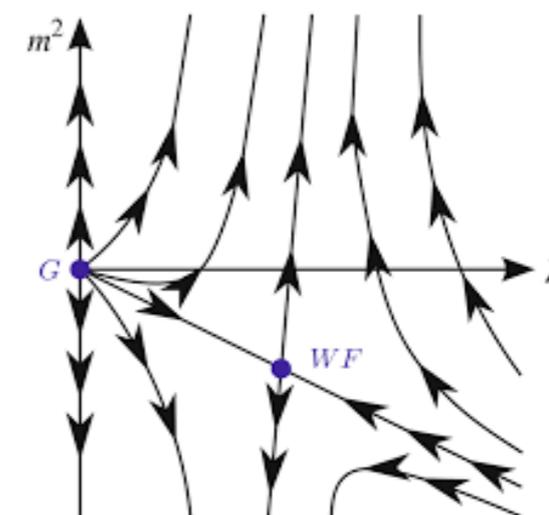
ALICE:

相転移を調べることも自体が重要だが、

相転移を調べること $\equiv$ 場の量子論を調べる(くりこみ群)

となり、素粒子理論としても重要な研究対象

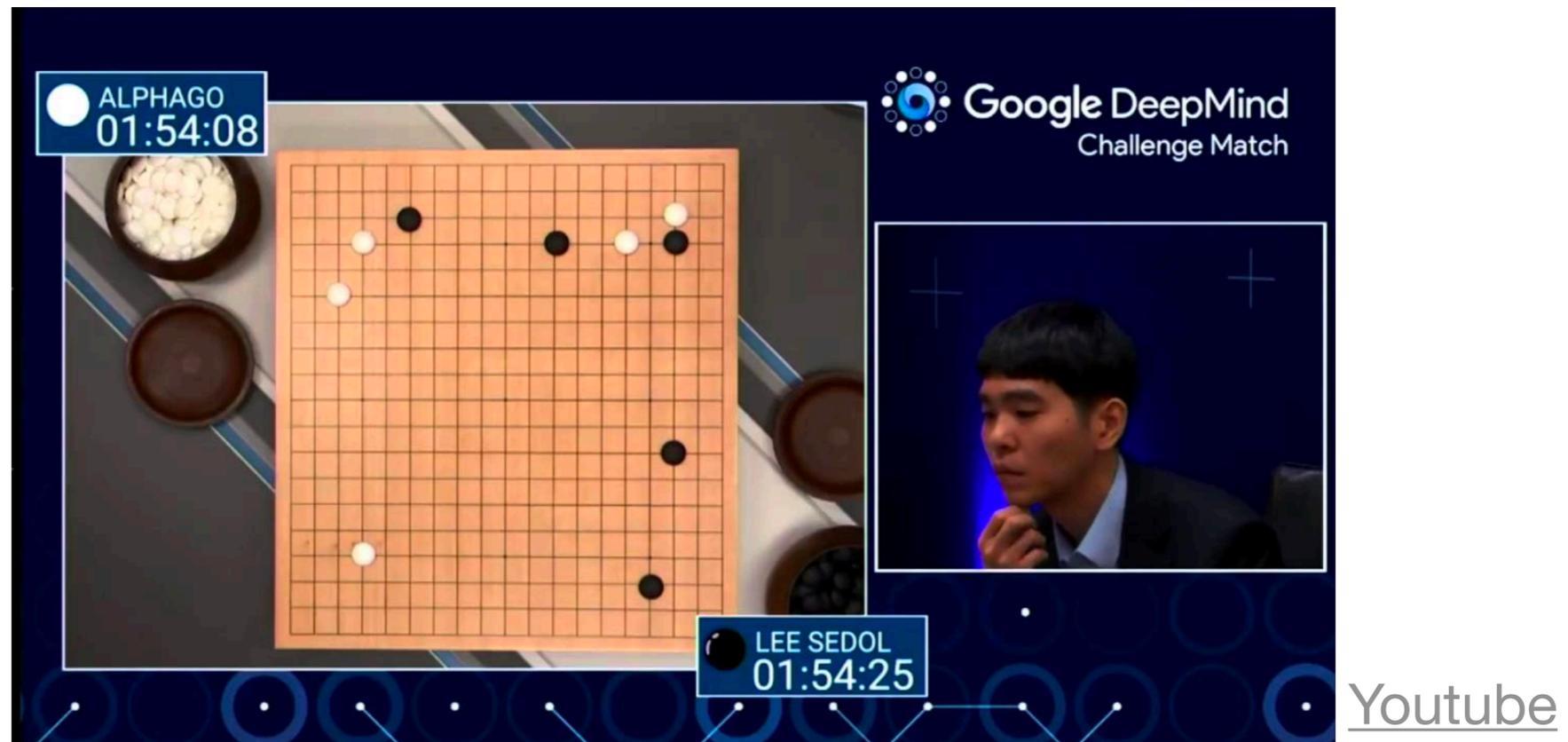
(そもそも) ニューラルネットは相転移をみつけられるのか?



# イジングモデルと相転移

## 物理と相転移

2016年といえば、アルファ碁がイ・セドル氏に勝った。



深層学習(ニューラルネット)が盤面の判定に大きな役割を果たした

ニューラルネットをつかって相転移を見つけられるか？

... J. CarrasquillaとR. Melko らはこれをしらべた

結果として、ニューラルネットは相転移温度もわかる！

ことがわかった

[1] Juan Carrasquilla & Roger G. Melko, Nature Physics volume 13, pages431-434(2017)

# イジングモデルと相転移

2次元イジングモデル = 磁石のモデル, 相転移を記述, 解ける

磁石：常温で磁石の性質を持つが、加熱すると磁石ではなくなる = 相転移！

二次元イジングモデル

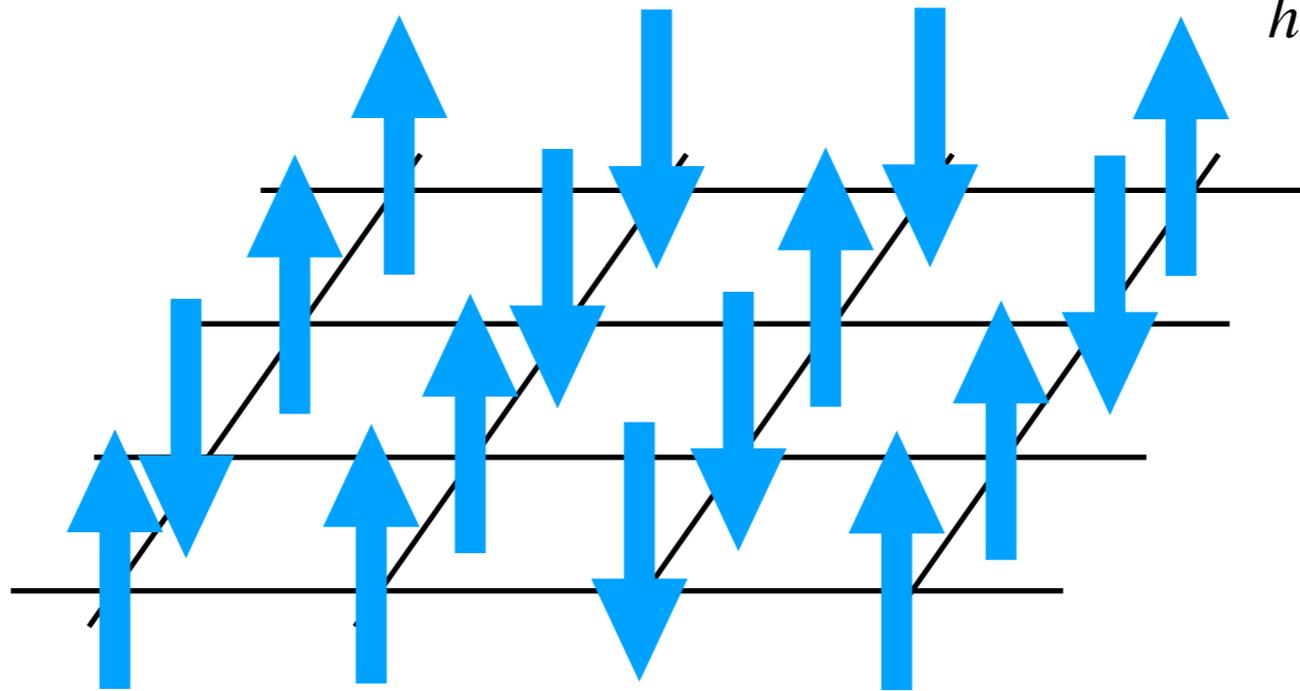
$$E[C] = - \sum_{i=1}^{L^2} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} s_i s_j - h \sum_{i=1}^{L^2} s_i$$

$i$ : 格子点番号

$\mathcal{N}(i)$ : 最近接格子

$L$ : 系の大きさ

$h$ : 外部磁場



$$s_i = \begin{cases} +1, \\ -1 \end{cases} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array}$$

# イジングモデルと相転移

状態和 = すべての可能なスピンの配置で期待値を取る

磁石：常温で磁石の性質を持つが、加熱すると磁石ではなくなる = 相転移！

二次元イジングモデル

$$E[C] = - \sum_{i=1}^{L^2} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} s_i s_j - h \sum_{i=1}^{L^2} s_i$$

$i$ : 格子点番号

$\mathcal{N}(i)$ : 最近接格子

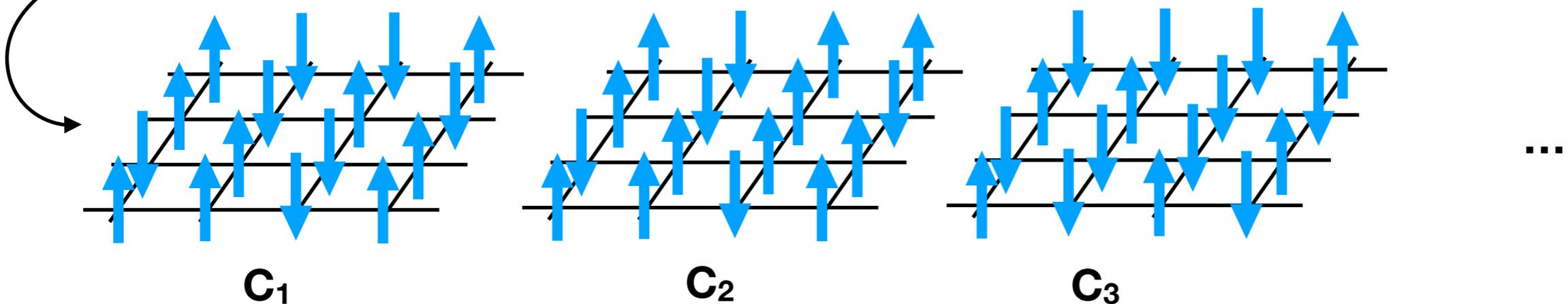
$s_i = \pm 1$

$L$ : 系の大きさ

逆温度 $\beta=1/T$ の時の磁化の期待値

$$m(\beta) = \mathbb{E}_\beta [\hat{m}[s]] \equiv \frac{1}{Z} \sum_{C \in \{s\}} e^{-\beta E[C]} \hat{m}[s] \quad \hat{m}[s] = \frac{1}{L^2} \sum_i s_i$$

目標: 磁化 $m$  を逆温度の関数として求める



すべての可能なスピンの並べ方 $C$ について重み $e^{-\beta E[C]}$ を付けて足し上げると $m(\beta)$ がもとまる。

# イジングモデルと相転移

磁化  $m$  を逆温度  $\beta = 1/T$  の関数として求めたい

磁石：常温で磁石の性質を持つが、加熱すると磁石ではなくなる = 相転移！

二次元イジングモデル

$$E[C] = - \sum_{i=1}^{L^2} \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} s_i s_j - h \sum_{i=1}^{L^2} s_i$$

$i$ : 格子点番号

$\mathcal{N}(i)$ : 最近接格子

$s_i = \pm 1$

$L$ : 系の大きさ

逆温度  $\beta=1/T$  の時の磁化の期待値

$$m(\beta) = \mathbb{E}_\beta [\hat{m}[s]] \equiv \frac{1}{Z} \sum_{C \in \{s\}} e^{-\beta E[C]} \hat{m}[s] \quad \hat{m}[s] = \frac{1}{L^2} \sum_i s_i$$

$Z$  は規格化定数

すべての可能なスピンの並び方の和

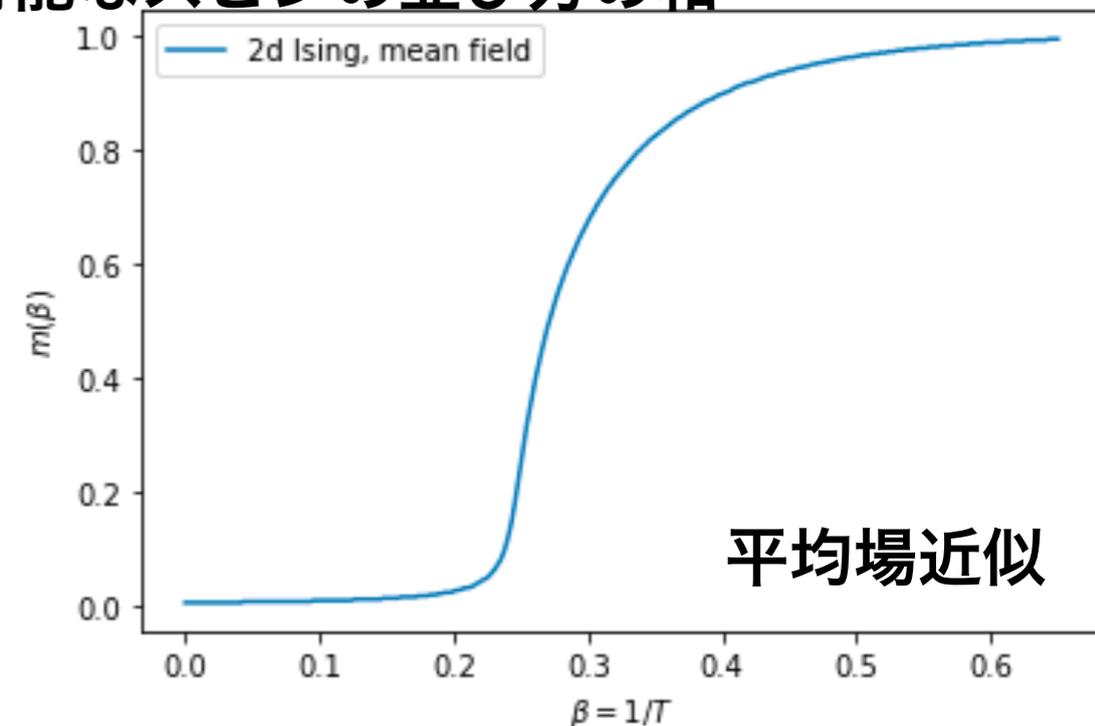
平均場近似を使うと右図のように  $m$  を  $\beta$  の関数として  
近似的に計算できる  $\rightarrow \beta \sim 0.3$  で何かある？

四角でかこった部分の和はとれない？

$\rightarrow$  和の公式が知られている例はまれ

(実は2次元イジングモデルは和の公式が知られている)

$\rightarrow$  モンテカルロ法をつかう

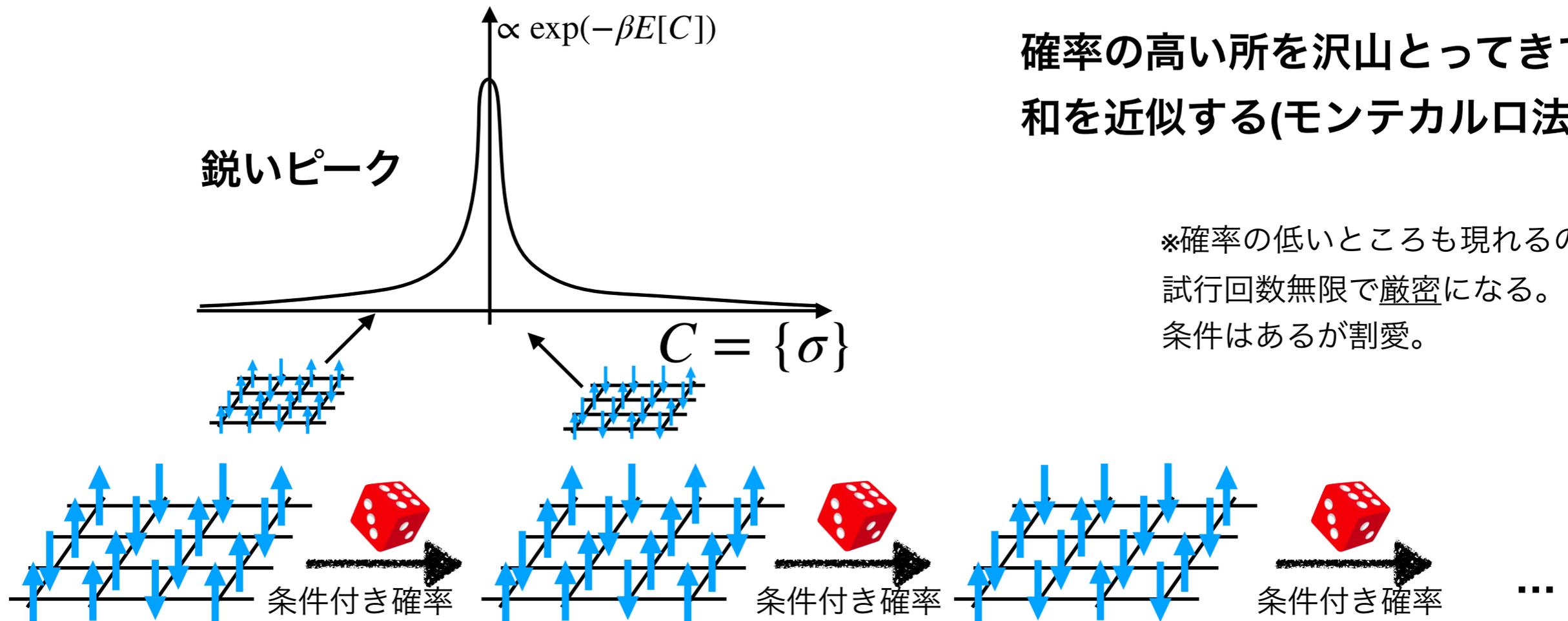


平均場近似

# イジングモデルと相転移

モンテカルロ法 = 確率を使って足し算を近似する

$$m(\beta) = \mathbb{E}_\beta [\hat{m}[s]] \equiv \frac{1}{Z} \sum_{C \in \{s\}} \underbrace{e^{-\beta E[C]}}_{\uparrow \text{確率とみなす}} \hat{m}[s] \approx \frac{1}{N_{\text{cnf}}} \sum_{c=1}^{N_{\text{cnf}}} \hat{m}[s_c]$$



確率の高い所を沢山とってきて、和を近似する(モンテカルロ法)

※確率の低いところも現れるので  
試行回数無限で厳密になる。  
条件はあるが割愛。

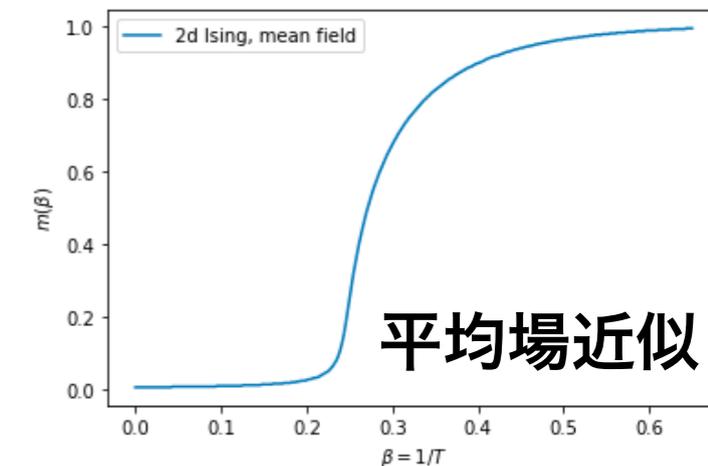
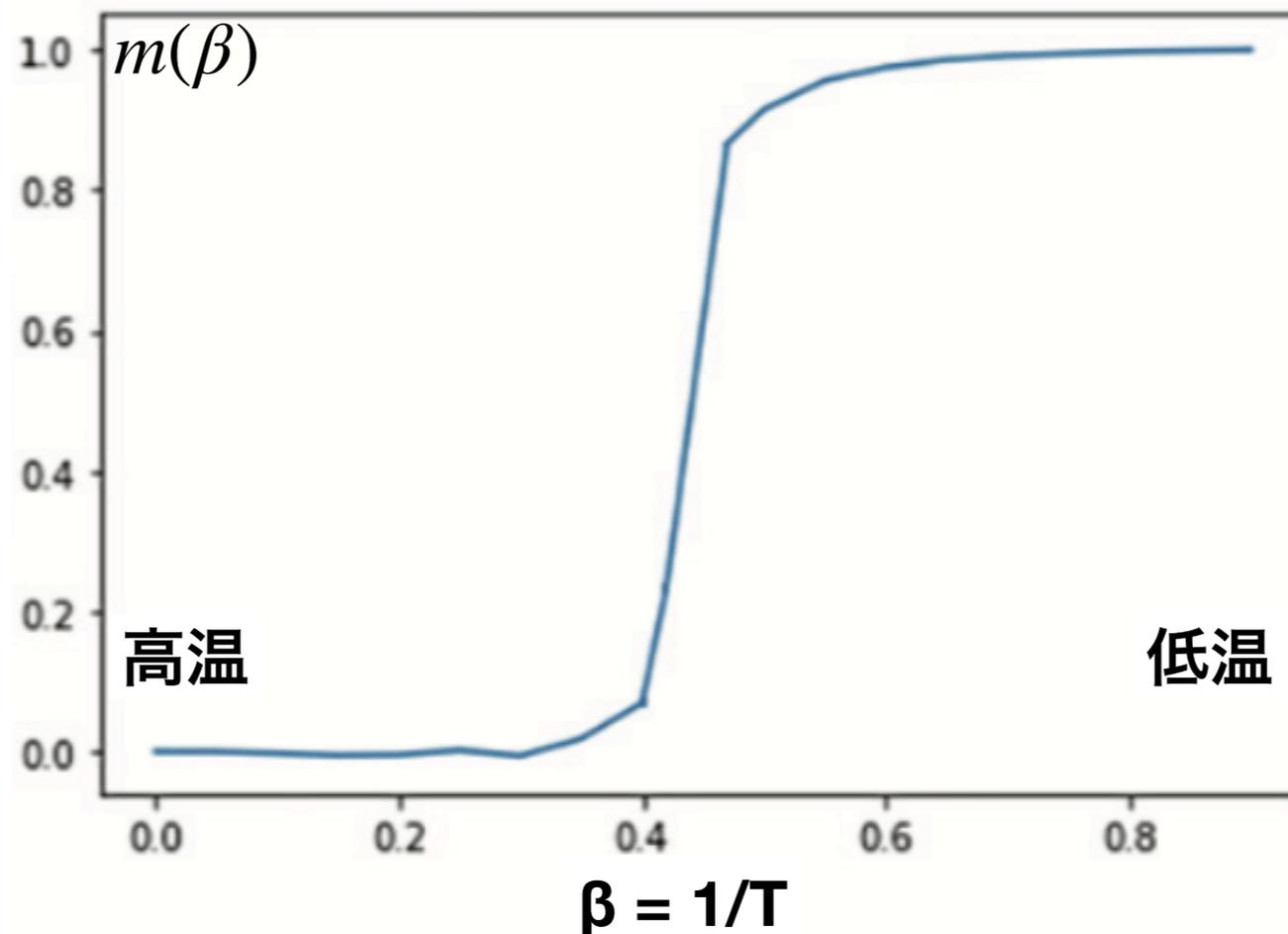
上のようにつくったスピンの配置の一つ一つをスピン配位とよぶ  
m をスピン配位について平均すると、ある  $\beta=1/T$  での m が求まる

# イジングモデルと相転移

2次元イジングモデルは、 $\beta \doteq 0.4$  で相転移を起こす

$$m(\beta) = \mathbb{E}_\beta [\hat{m}[s]] \equiv \frac{1}{Z} \sum_{C \in \{s\}} e^{-\beta E[C]} \hat{m}[s] \approx \frac{1}{N_{\text{cnf}}} \sum_{c=1}^{N_{\text{cnf}}} \hat{m}[s_c]$$

いろんな $\beta$ でモンテカルロ法(熱浴法)を使って $m$  を計算した。

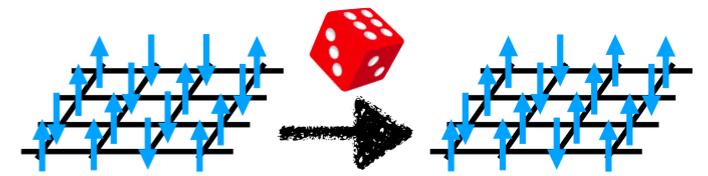


低温だと磁化は1だが、高温だと0。

$\beta = 0.4$ ? あたりでなにか起こってる = 相転移!

## ここまでのまとめ

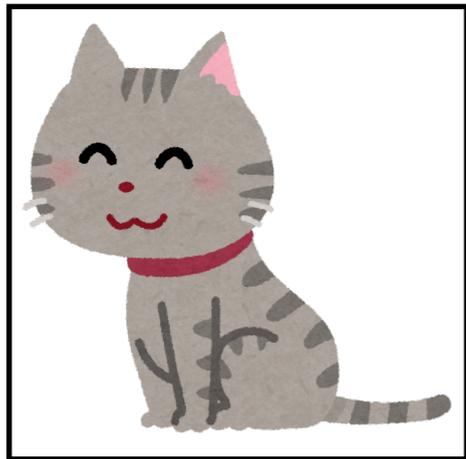
- 相転移は、いろいろなところに現れる
- くりこみ群を通して場の量子論ともつながってるため  
素粒子理論としても重要
- 統計力学の状態和は取れないので、確率的に足し上げる  
(モンテカルロ法)
- モンテカルロ法に現れる「スピンの配置」のことをスピン配位という
- 2次元(正方)イジングモデルは、 $\beta=1/T \simeq 0.4$  で相転移を起こす
- コメント: 場の量子論の一種の格子ゲージ理論も同じ構造→同じ研究手法がつかえる
- ニューラルネットで2次元イジングモデルの相転移をしらべよう！



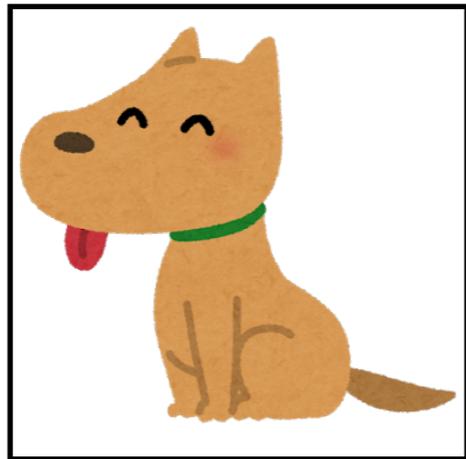
# Nature Physics の論文の概要

## イジング模型の配位を画像だと思って分類する

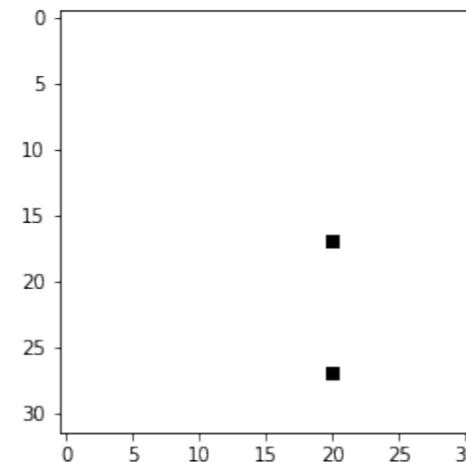
- 2次元イジング模型の配位は、「画像データ」とみなせる
- イジング模型の相は2つしかない。
- ニューラルネットは、画像の分類ができる (後述)
- ニューラルネットによる2値分類を使えば相転移がわかりそう



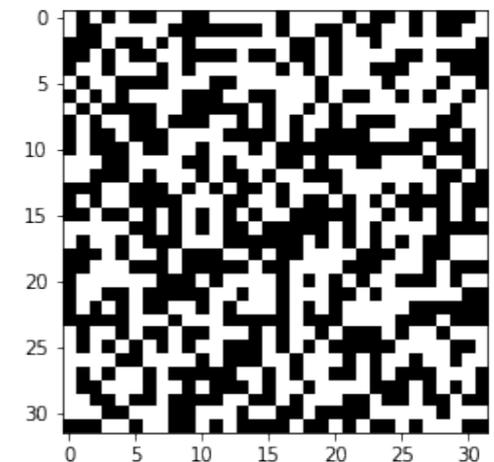
猫



犬



低温の配位



高温の配位

白 = スピン+

黒 = スピン-

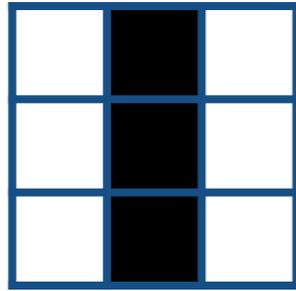
ニューラルネットで相転移検出  
(論文のものすごく一部)

# ニューラルネットとは

ニューラルネットとは、”線形変換” + 非線形変換

## 1. 画像は、ベクトル

たとえば  
数字の「1」  
をドット絵で書く



$$= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sim \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \vec{x}$$

今の例だと、9次元ベクトル

## 2a. ベクトルは、行列で変換できる。行列の要素は後で決める

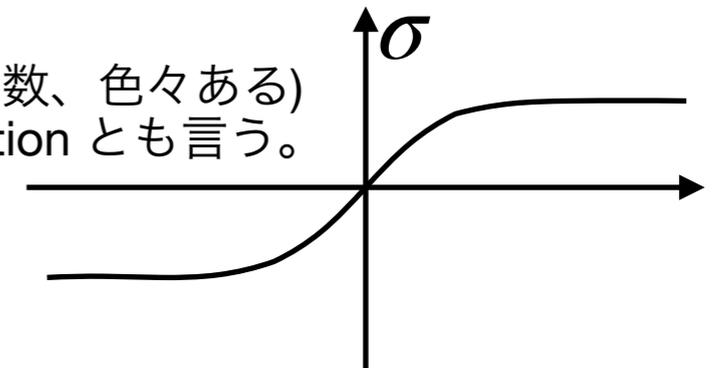
$$\vec{u} = W \vec{x} = \begin{pmatrix} w_{1,1} & w_{1,2} & \cdots & w_{1,9} \\ w_{2,1} & w_{2,2} & \cdots & w_{2,9} \end{pmatrix} \vec{x}$$

## 2b. ベクトルは、非線形関数 $\sigma$ で変換できる(非線形関数 $\sigma$ : 活性化関数、色々ある)

$$\sigma(\vec{u}) \equiv \begin{pmatrix} \sigma(u_1) \\ \sigma(u_2) \end{pmatrix}$$

要素ごとに作用する

activation とも言う。



## 3. ニューラルネットは、行列積と非線形変換の組み合わせ

$$f(\vec{x}) = \sigma_2(W_2 \sigma_1(W_1 \vec{x}))$$

( $\sigma$ は適当な活性化関数)

例えば、ベクトル(画像)を入れて、2次元ベクトルを出す関数を作る

# ニューラルネットとは

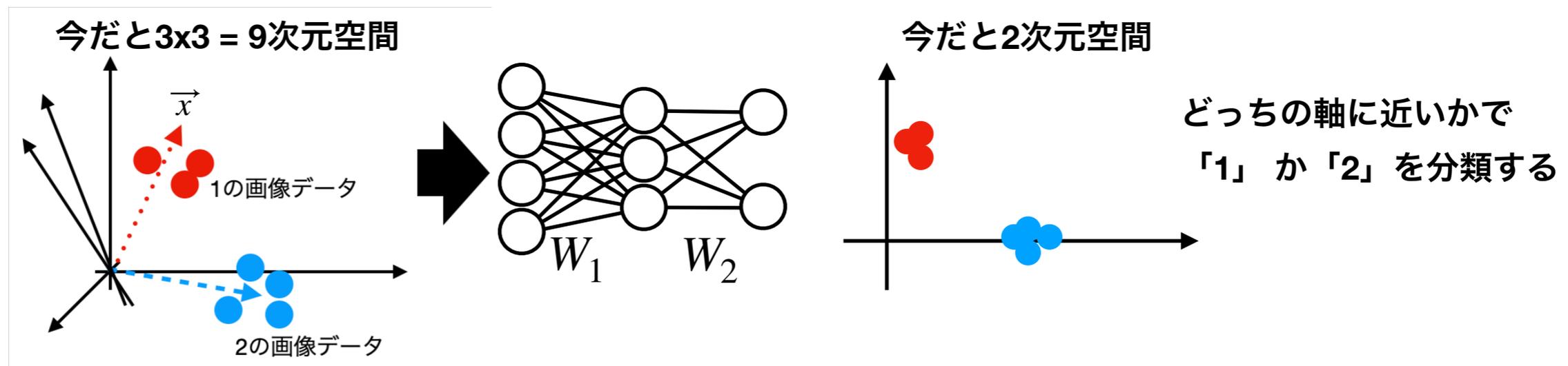
## 学習 = パラメータの調整

1. 画像は、ベクトル
- 2a. ベクトルは、行列で変換できる。大きさは上手く調整する
- 2b. ベクトルは、非線形関数 $\sigma$ で変換できる
3. ニューラルネットは、行列積と非線形変換の組み合わせ

$$\vec{y} = \sigma_2(W_2\sigma_1(W_1\vec{x}))$$

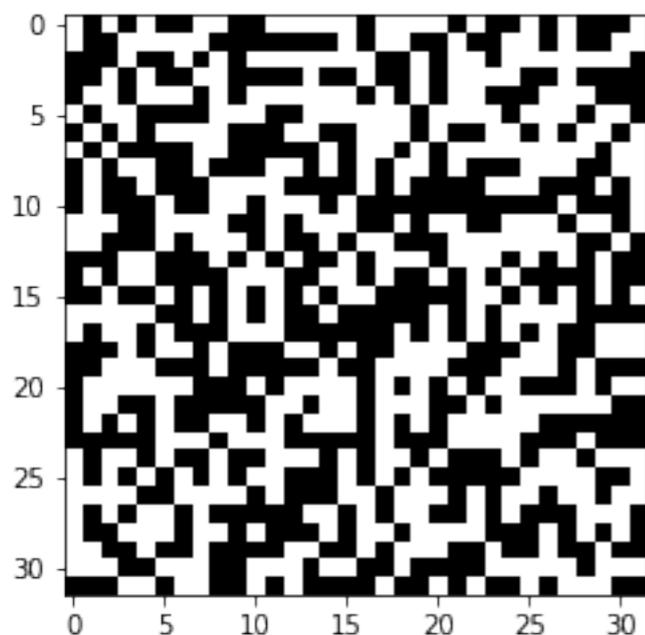
「1」か「2」の手書き文字を分類したいとする

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

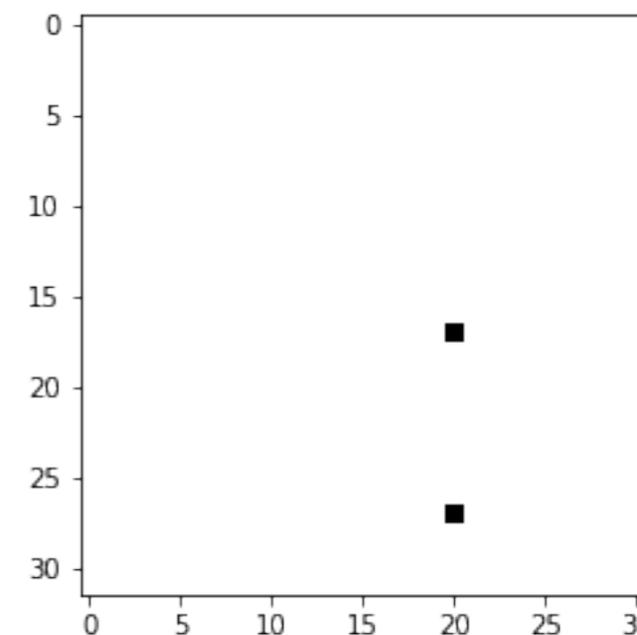
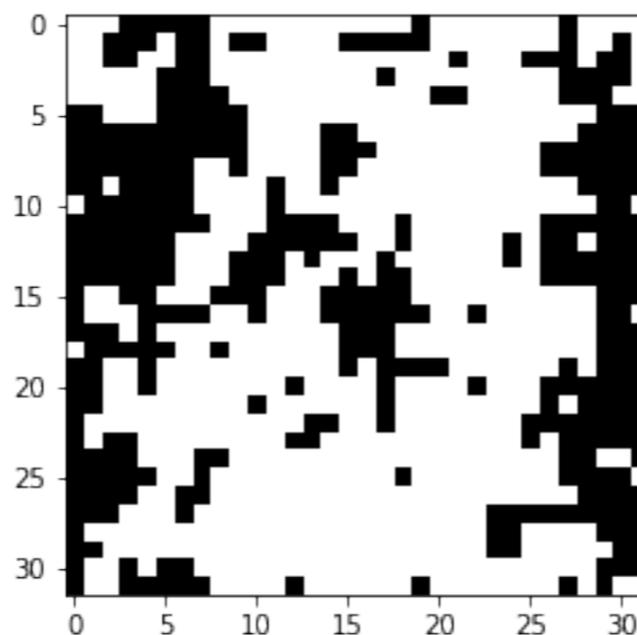


$W_1$  と  $W_2$  は、うまく識別できるように  
画像を入れて試しながら調整する(学習/トレーニング)

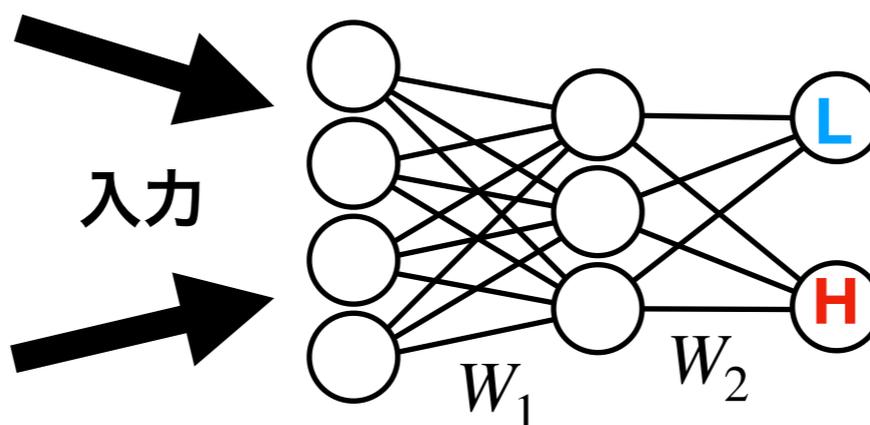
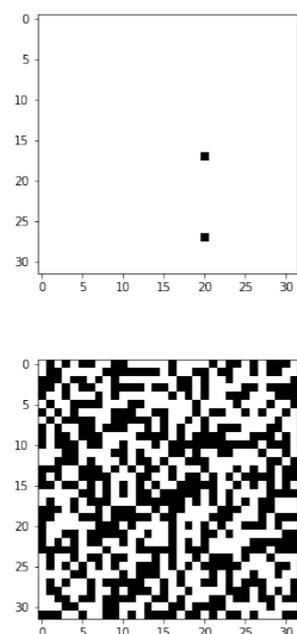
## 目標: イジングモデルの配位を高温相と低温相で分類する



$\beta = 1/T = \text{小(高温)}$



$\beta = 1/T = \text{大(低温)}$



入力

低温の配位が入力されたら **L** の値が大きく、  
 高温の配位が入力されたら **H** の値が大きくなるように  $W$  を調整する(学習)

$$(W_I)_{ij} \leftarrow (W_I)_{ij} - \epsilon \frac{\partial E}{\partial (W_I)_{ij}} \quad \begin{array}{l} E: \text{誤差} \\ \epsilon: \text{小さい正の数} \end{array}$$

事前に送ったPDFの準備を行っている事を前提とします。

- 1.配位をダウンロード
- 2.配位をアップロード
- 3.ノートブックをコピー
- 4.Google drive のマウント

1. 使うニューラルネットを解説
2. トレーニングを実行
3. 結果を見てみる
4. まとめ

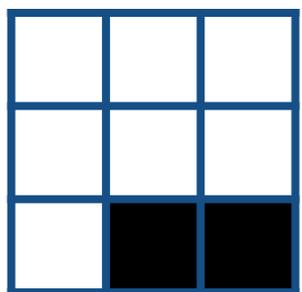
## ライブラリのロード

```
1 import tensorflow as tf
2 from tensorflow import keras
3 print(tf.__version__)
```

## ニューラルネットの構成

```
1 tf.random.set_seed(12345)
2 model_FC = keras.Sequential([
3     keras.layers.Flatten(input_shape=(32, 32)),
4     keras.layers.Dense(100, activation='relu'),
5     keras.layers.Dense(2, activation='softmax')
6 ])
```

—— ①  
—— ②



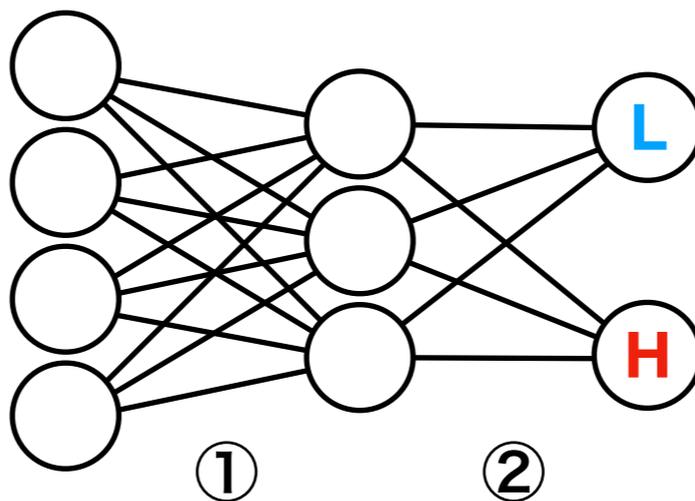
$\beta=1/T$ : 大きい  
(低温相)

$$= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

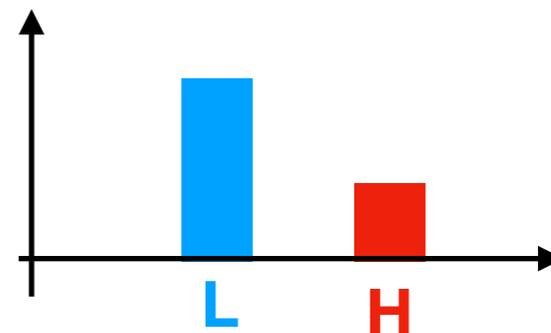
$$\sim \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \vec{x}$$

入力

$$f(\vec{x}) = \sigma_2(W_2 \sigma_1(W_1 \vec{x}))$$



出力



## 前処理、ラベル付け

配位と配位を作った時の $\beta$ を使ってラベル付け

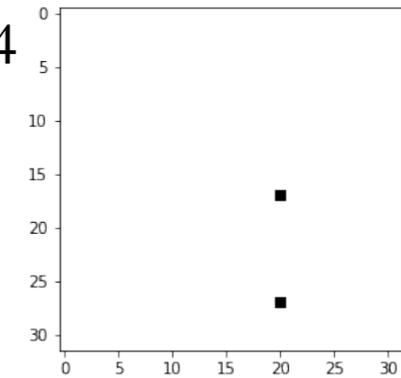
```

1 nconf = 100 # The number of configurations per beta
2 betacr = 0.440686 # critical temp for 2d ising
3 #
4 data = []
5 labels = []
6 betas = []
7 nprm=len(prm_list)
8 for ibeta in range(nprm):
9     beta = prm_list[ibeta][0]
10    fname = prm_list[ibeta][3]
11    for itrj in range(nconf):
12        npsc = np.load(f"{fname}{itrj}.npy")
13        data.append(npsc)
14        if beta > betacr:
15            labels.append([0,1])
16        else:
17            labels.append([1,0])
18        betas.append(beta)
19 data = np.array(data)
20 labels = np.array(labels)
21 #
22 train_data=data[0::2]
23 train_labels=labels[0::2]
24 train_betas=betas[0::2] # this will not be used in training
25 #
26 val_data=data[1::2]
27 val_labels=labels[1::2]
28 val_betas=betas[1::2]

```

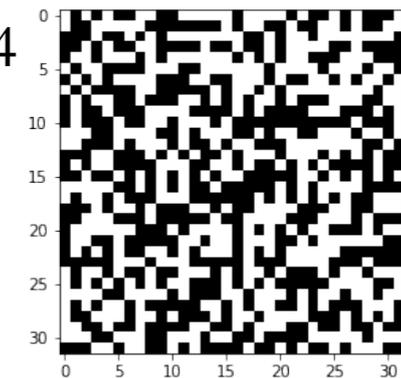
$$\beta=1/T > \beta_{cr} = 0.44$$

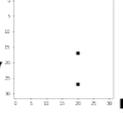
低温相



$$\beta=1/T < \beta_{cr} = 0.44$$

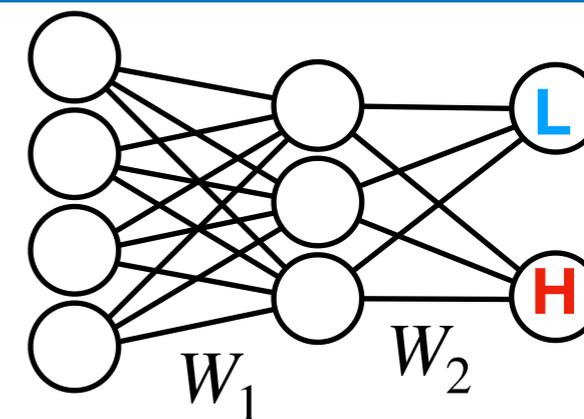
高温相



データ={(, 低温相), (, 高温相), ...}

## ニューラルネットのトレーニング

```
1 model_FC.compile(optimizer='adam',  
2                 loss='categorical_crossentropy',  
3                 metrics=['accuracy'])  
  
1 model_FC.fit(train_data, train_labels, epochs=10)
```

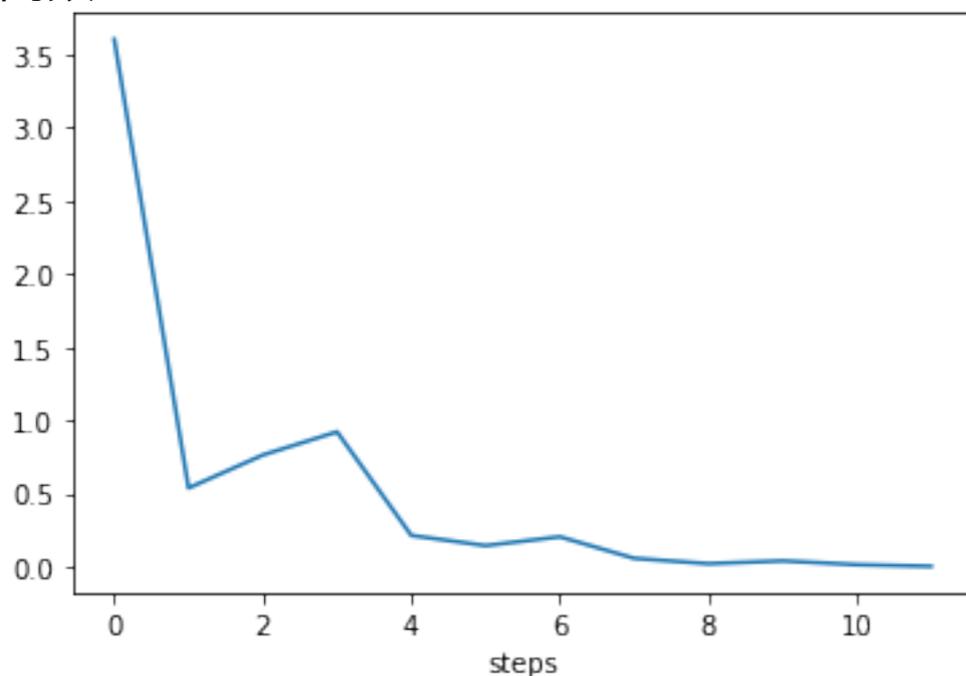


$$(W_I)_{ij} \leftarrow (W_I)_{ij} - \epsilon \frac{\partial E}{\partial (W_I)_{ij}}$$

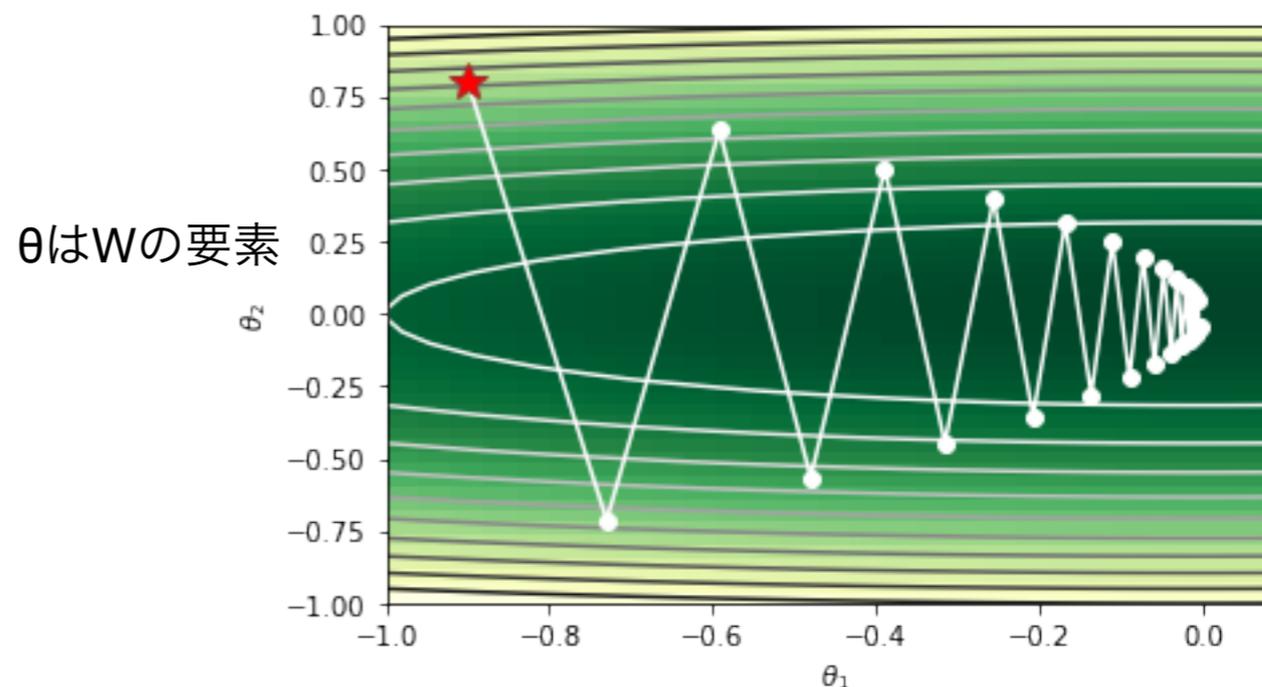
$E$ : 誤差  
 $\epsilon$ : 小さい正の数

2次のおもちゃでの最適化例

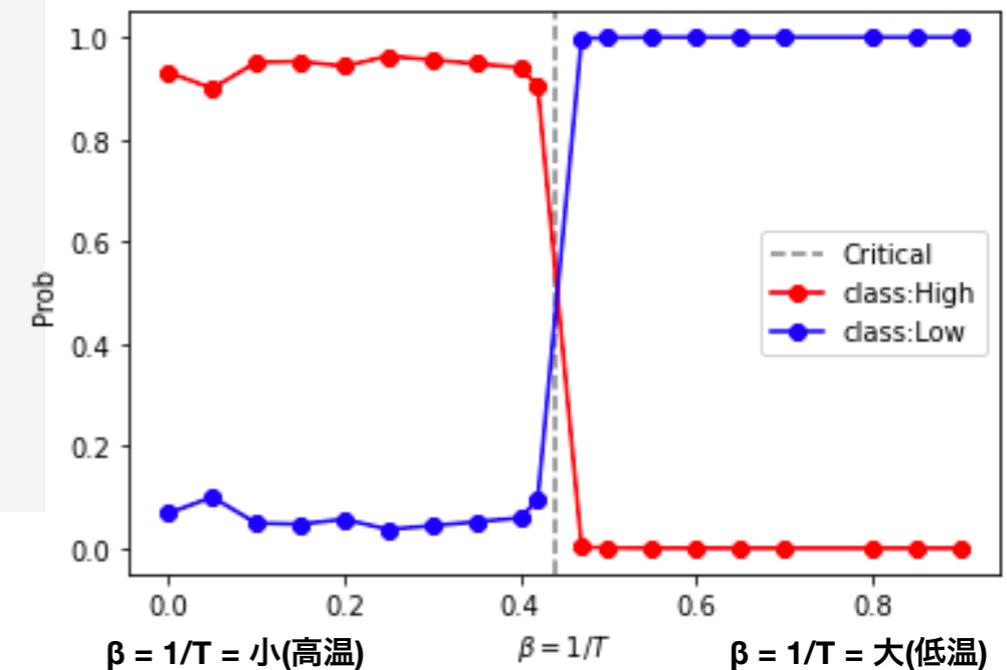
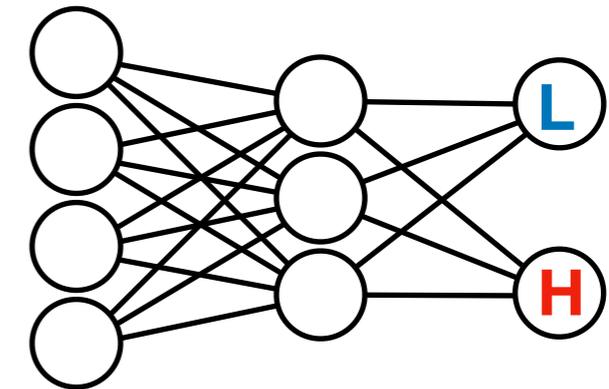
誤差関数E



誤差関数Eの等高線。★がスタート位置。



```
1 xs=[]
2 y1s=[]
3 y2s=[]
4 Ndatamax = 950
5 Nsameclass = 50
6 for ii in range(0,Ndatamax,Nsameclass):
7     res = model_FC(val_data[ii:ii+Nsameclass])
8     x = val_betas[ii]
9     y1= np.mean(res.numpy().T[0] )
10    y2=np.mean(res.numpy().T[1] )
11    xs.append( x)
12    y1s.append( y1 )
13    y2s.append( y2 )
14    print(x,y1,y2)
15 plt.axvline(x=0.440686, ymin=0, ymax=1, ls="dashed",color="gray",label="Critical")
16 plt.plot(xs,y1s,label="class:High",marker="o",color="red")
17 plt.plot(xs,y2s,label="class:Low",marker="o",color="blue")
18 plt.legend()
19 plt.xlabel(r"$\beta=1/T$")
20 plt.ylabel(r"Prob")
21 plt.show()
```



クロスしてる点が  
相転移点になってる！

# まとめと補足

## ニューラルネットでも相転移を検出できる

- ニューラルネットでも2次元イジング模型の相転移をしらべた[1]
- 2次元(正方)イジング模型は、 $\beta=1/T \approx 0.4$  で相転移を起こす
- 実は正方格子イジング模型で学習したネットワークを使うと、三角格子イジング模型の相転移温度もわかる(非自明)
- 2次元のイジングゲージ理論 (Z2 格子ゲージ理論) も調べている。オーダーパラメータなし\*
- 残る疑問など
  - なぜ検出できたのか？ → 論文[1]の付録参照
  - エラーバーは付けられないのか？、ハイパーパラメータ依存性？ → 未解決
  - 相転移温度の情報つかってるじゃん  
→ A. Tanaka, A. Tomiya 2016 or 「ディープラーニングと物理学」 8章を見てください
  - 画像生成できるなら、配位も生成できる？ → 最先端の話題！ [arXiv:2010.11900](https://arxiv.org/abs/2010.11900) や引用文献参照



[1] Juan Carrasquilla & Roger G. Melko, Nature Physics volume 13, pages431–434(2017)

\*実はクロスオーバー

