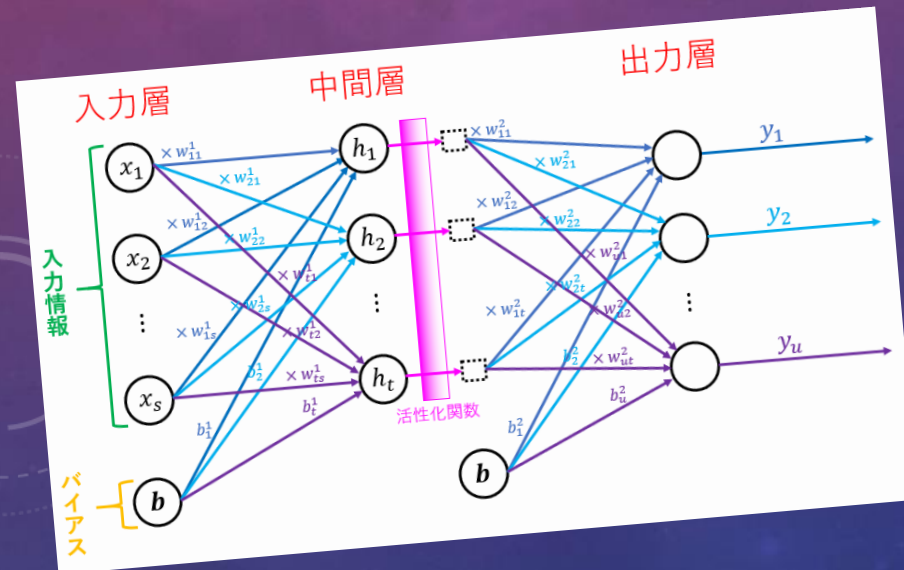


ニューラルネットワークと物性物理



中央大学 理工学部 物理学科
香取研究室 4年 丸山友華里

目次

1. どのように適応されているのか
2. ニューラルネットワークの応用
3. 結合SQUIDを利用した超伝導ニューラルネットワーク
4. 参考文献

1. どのように適用されているのか

人工知能の発展により、半導体、金属、絶縁体などの研究において機械学習の手法が適用されている。

物性物理学において機械学習の方法がどのように注目されているのか。

物性物理学の使命

→物性の性質の解明であり、新たな現象を示す物質の探索

電子の振る舞いが重要となってくる。

→電荷をもつ、安定(放射性がない)、軽い、強い磁性を持っている

電子の振る舞いを調べれば、物質の電気現象や磁気現象が分かる。

電子の運動は以下の波動方程式で表される。

$$H\Psi = E\Psi$$

H :ハミルトニアン(考えている系の特性を記述する)

E :電子のエネルギー

Ψ :波動関数

$|\Psi|^2$:電子の存在する確率密度

シュレディンガー方程式は電子間の相互作用は含まれないが、電子の様々な特性を調べることができる。

シュレディンガー方程式

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z)$$

V :ポテンシャルエネルギー

$\hbar = h/2\pi$ (h :プランク定数)

また電子の磁性に注目して、ミクロな磁石が格子点に配置された場合を考える場合は次のように表す。

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j$$

$\vec{\sigma}_i, \vec{\sigma}_j$: 格子点 i, j におけるスピン

J_{ij} : スピン相互作用

波動関数が分かれば多くの物性が理解できるため、波動関数を求めて解析することが必要となる。



ニューラルネットワーク

2. ニューラルネットワークの応用

LeNetを用いて物質の性質の判定を行う。

畳み込みニューラルネットワーク

→人工ニューロンが周囲の細胞の一部をカバー範囲内として応答することができ、大規模な画像処理に適している。

(例)二次元電子系、スピン軌道相互作用
各サイトのポテンシャルエネルギー

$$-\frac{W}{2} < V(x, y) < \frac{W}{2}$$

波動関数が広がっていれば系は電流を流せる→金属
局在している系は電流を流せない→絶縁体



波動関数の広がり度で系が金属か絶縁体か議論できる。

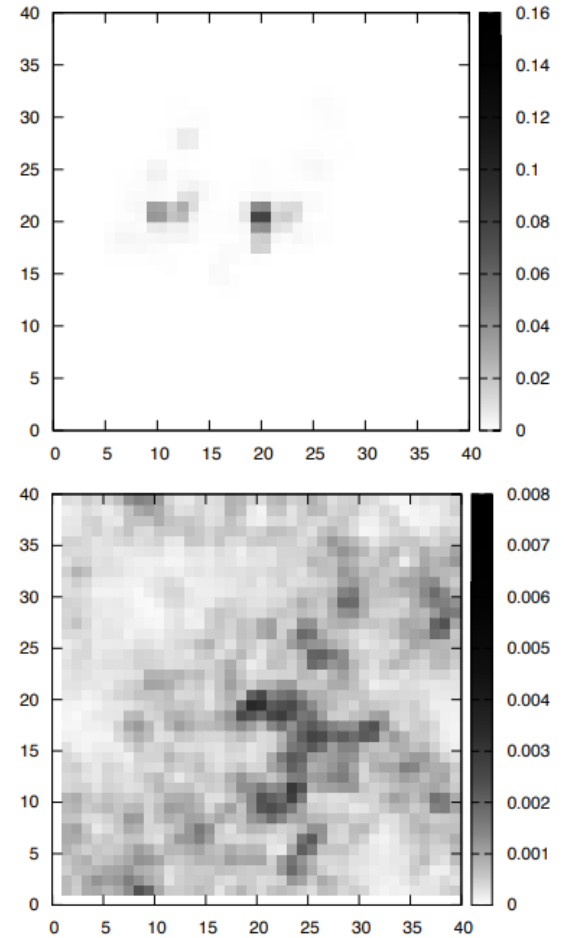


図1. 波動関数の振れ幅の2乗をプロットしたもの。

上が局在した波動関数(絶縁体に対応)、下が広がった波動関数(金属に対応)である。

波動関数がどのようになっているのかわからない場合
→ニューラルネットワークによる画像認識が有効

W が小さいところと大きいところでそれぞれ波動関数を用意し、画像認識の教習あり学習を行う。

そしてCNNにより解析すると、この波動関数は確率 p で広がっている(金属相)ことが分かり、確率 $(1 - p)$ で局在している(絶縁体相)と判断してくれる。

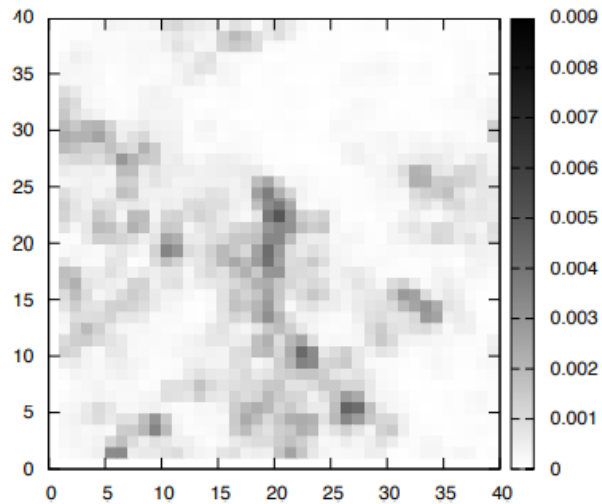


図2. ランダムネスの強さ W が大きくもなく、小さくもない波動関数の負振れ幅の2乗

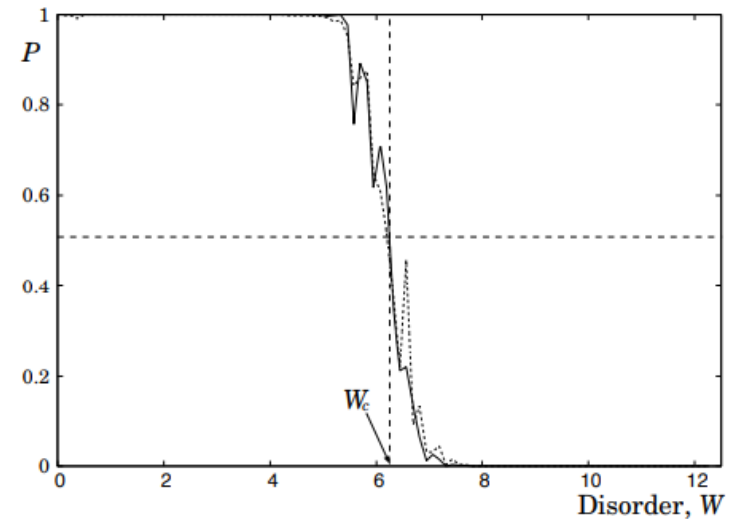
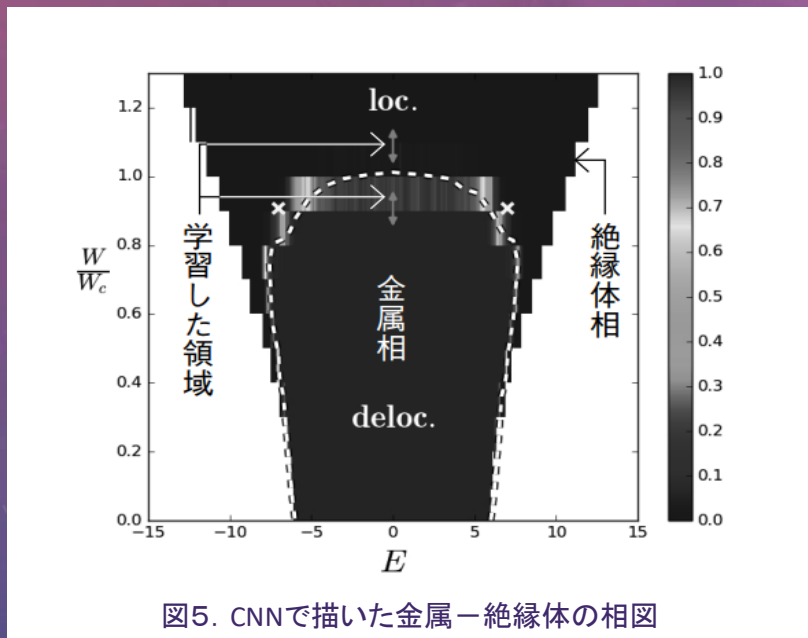
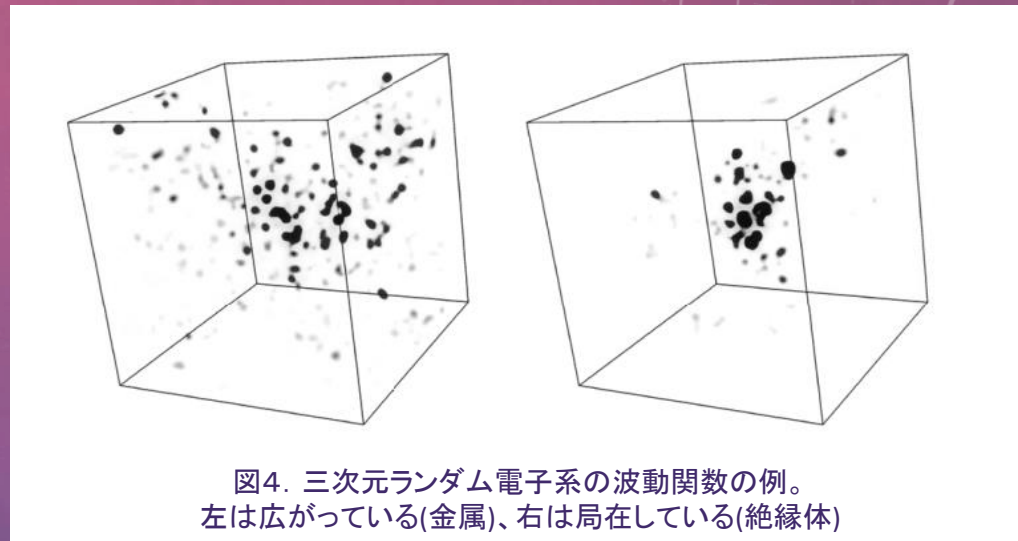


図3. CNNの波動関数を判定させた結果

(例)三次元画像認識、三次元系の単純立方格子を電子が飛び回るモデルについて

金属から絶縁体への転移がどこで起こるかはランダムネスの強さ W と電子の運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの和 E による。

金属相と絶縁体相の波動関数を用意し、ニューラルネットワークに学習させるとCNNはその特徴を捉えていろいろな相図を描いてくれる。



ランダムネスとエネルギーのパラメータ空間で物質が金属か絶縁体かを描いている。

波動関数を求めるのが困難な場合

→強化学習を用いた方法が注目を集めている

(例)ミクロな磁石が格子点に配置されたモデル

格子点の数が L の場合、状態はアップスピンかダウンスピンの 2^L 個の場合があり、ハミルトニアン行列の次元は $2^L \times 2^L$ となる。

→次元の値がとても大きくなってしまふ

従って、よりエネルギーが低い状態を求める強化学習を行うことにより、エネルギーは次のようになる。

$$E = \sum_{i,j} \Psi_i^* H_{ij} \Psi_j$$

基底状態の波動関数は各状態の線形結合で表され、その係数を求めればよい。

$$C_{\{\sigma\}} = \sum_{\{h_j\}} \exp \left(\sum_{i=1}^L a_i \sigma_i + \sum_{j=1}^M b_j h_j + \sum_{i,j} W_{ij} \sigma_i h_j \right)$$

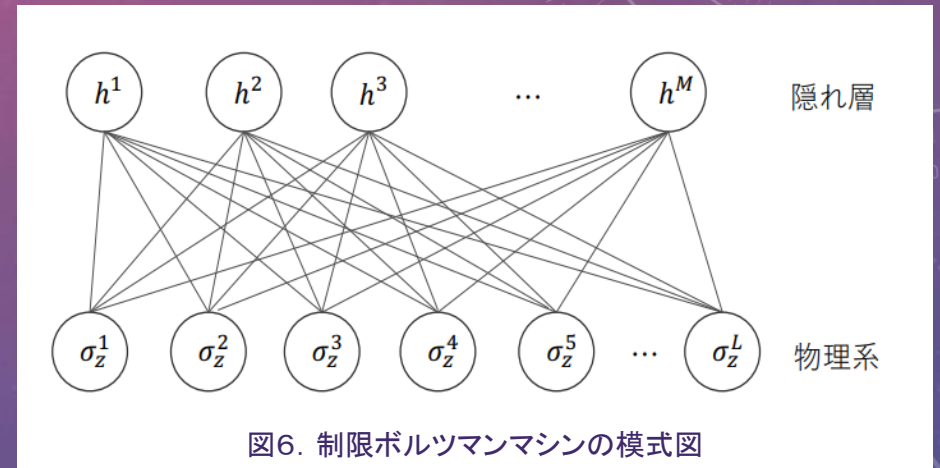


図6. 制限ボルツマンマシンの模式図

エネルギーがなるべく小さくなるように係数を決める。線形結合の係数は α_i, b_j を仮想的な磁界、 W_{ij} を隠れ層と物理系の結合パラメータとして左のようなボルツマン因子で与えられる(制限ボルツマンマシン)。

3. 結合SQUIDを利用した超伝導ニューラルネットワーク

【目的】

組み合わせ最適化問題を解くニューラルネットワークを超伝導デバイスによるニューロン粒子で構成し、そのネットワークダイナミクスを解析する。

【方法】

結合SQUIDによる神経回路素子をホップフィールド型ネットワークに適用し、数値解析によってその動作を検証する。

N-Queen問題を取り上げてネットワークの集積回路上でのダイナミクスを調査する。
→ジョセフソン電子回路固有の物理現象を利用したネットワーク性能向上を目指す。

【結果】

- (1) ホップフィールドネットワークを実現するためのニューロン回路の最適化として、ニューロン回路の設計・試作・測定を行った。平坦な出力特性を持つしきい値特性が得られ、電流ゲインも従来のものよりも約30%大きな回路が得られ、実測での動作が確認された。
- (2) ダイナミクスの評価を行った結果、ネットワークの動作が確認されてジョセフソン電子回路の固有発振によるネットワークの正解率向上が確認された。
- (3) 集積回路のレイアウト設計と集積化により、ニューロン回路を構成する結合SQUIDの回路パラメータを実施し、数値解析と誤差の少ない入出力特性が得られた。
- (4) 4-Queens問題を解くネットワークを設計し数値解析により励振機構を導入したネットワークにおいて、正解率の向上が得られた。

(5)集積回路によるチップの試作を行った。
回路の計測を実施したが、試作チップのパラメータ揺らぎやノイズによる誤動作により、ネットワークの完全動作を確認するには到らなかった。
→ノイズ対策とネットワークが動作する電流バイアスマージンの拡大が必要

(6) 平坦で電流ゲインの高いニューロン回路を利用することで、新しい超伝導回路用弛張発振器が構成できることが提案され、数値解析の結果、弛張発振動作が確認された。
→超伝導電子回路上での発振回路としての応用が期待される

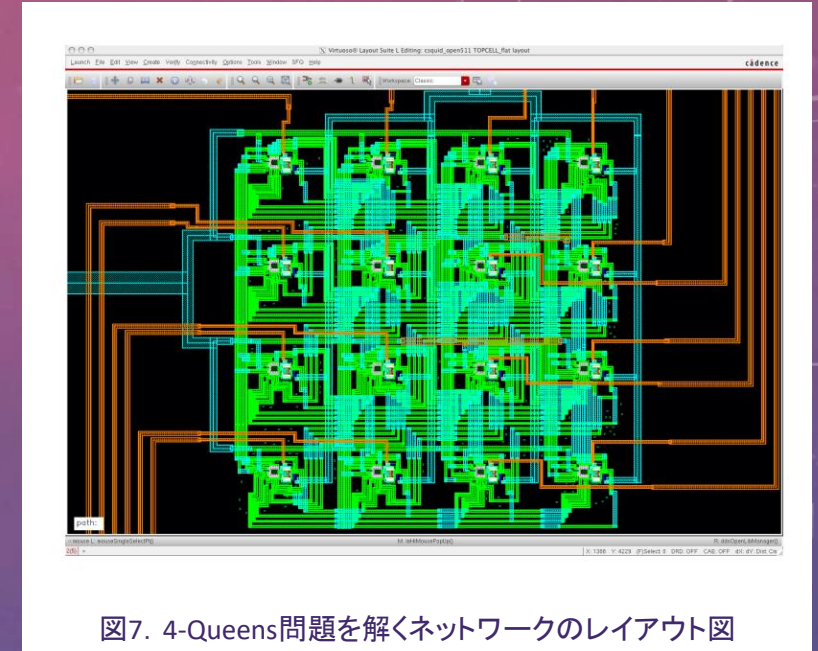


図7. 4-Queens問題を解くネットワークのレイアウト図

超伝導回路によるニューラルネットワーク実現へ

4. 参考文献

1.大槻東巳,「物理学とAI」 ニューラルネットワークを使った物性物理学, 人工知能, 33巻4号, 2018年7月, p429-p434

https://www.jstage.jst.go.jp/article/jjsai/33/4/33_429/_pdf

2.小野美武, 平成27年5月19日, 組み合わせ最適化問題を解く超伝導ニューラルネットワークの構成と動特性解析, 10/19閲覧

[24500271 研究成果報告書 \(nii.ac.jp\)](https://nii.ac.jp/24500271)