

磁性体の相関関数を用いた機械学習による相分類

～情報量削減が与える学習への影響を探る～

工学研究科 材料・放射光工学専攻

准教授 すずきたかふみ 鈴木隆史、◎M1 たなかじゅんや 田中淳也

キーワード

機械学習, 磁性体, 相分類

研究概要

従来、磁性体の研究では、巨視的な物理量をモンテカルロシミュレーション等によって調べるアプローチが一般的であった。しかし近年では、高い画像認識能力を持った機械学習の発展に伴い、機械学習を用いて磁性体の磁気的性質を調べる研究が多数行われている。例えば、こうした磁性体の研究では磁化分布を入力情報とした機械学習からの相分類が行われている。本研究では、磁化分布の代わりに二点相関関数を用いた機械学習をさせて、相分類の精度を調べた。二点相関関数は0と1の2値で表現される磁化分布とは違い、0から1までの連続的な値によって構成されたデータであり、学習用データとして好条件である。一方、二点相関関数はデータの生成に必要な計算量が非常に大きい。そこで、本研究では、二点相関関数の計算量を減らす目的で入力する情報を減らした場合に、学習精度にどの程度影響があるかを調べた。まず磁気模型として二次元正方格子イジングモデルを考え、モンテカルロ法により二点相関関数を求めた。次に、求めた二点相関関数の情報量を図1のように削減し、異なる情報量を持ったデータを3種類作成した。これらを入力情報として用いた機械学習を行い、強磁性相と常磁性相の分類を行うことで、相分類精度に対する入力情報量の依存性について調べた(図2)。グラフの横軸はエポック(学習回数の単位)、縦軸は正答率を表す。その結果、情報量を31%まで削減しても、削減しなかったときと比べて正答率はほとんど変化せず、11%まで削減すると、正答率が4%程度低下することが分かった。

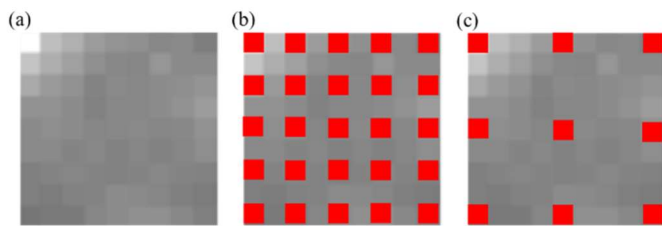


図1 画像化した二点相関関数

- (b)(c)は(a)のデータより赤く塗りつぶした成分のみを残し、それ以外の部分を削減したデータを表す。
(b)は情報量を31%、(c)は11%に削減したデータである。

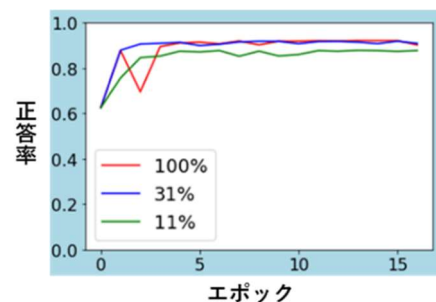


図2 各データの相分類精度
横軸はエポック、縦軸は正答率

アピールポイント

本研究の結果から、二点相関関数を機械学習の入力情報に用いて相の分類を行う場合、データを生成する際の計算を70%程度減らしてもよいことが分かった。これにより、磁性体の解析や、磁性材料の開発をより効率化できる可能性があると考えられる。また、計算量を減らすことを目的とする本研究のアプローチは、より複雑な構造を持った磁性体の解析にも応用できるのではないかと期待している。