ガウス過程回帰を用いた効率的な状態方程式推定及び相図探索

Efficient Equation-of-State Estimation and Phase Diagram Search

Using Gaussian Process Regression

物理情報工学科　渡辺研究室　学籍番号：61713173　内藤翔太

Abstract:

We investigated the method to estimate the equation of state and create a phase diagram of a particle system efficiently. First, we measured the pressure for each density in the particle system by molecular dynamics simulations. We estimated the equation of state by approximating the pressure with a low-degree polynomial on the density and created a phase diagram by confirming the existence of a phase transition. We performed Gaussian process regression and estimated the equation of state of the particle system efficiently with uncertainty.

Keywords: Gaussian Process Regression, Equation Of State, Phase Diagram, Molecular Dynamics

1. 研究背景・目的

実存気体の状態方程式の推定や相図の作成は物性物理の分野において重要な役割を果たす。実存気体の状態方程式を再現しようとする試みは、ビリアル展開やその発展法を用いて行われてきたが、項の個数は際限なく増え、その物理的意味も不明瞭であった。そこで、機械学習により、より多くの項の候補から状態方程式を推定することが1点目の目的である。また、相図の作成は様々な高度なサンプリングアルゴリズムにより効率的に行われてきたが、これらの研究は予め状態点の相が全て判別されており、その中から必要な状態点を取得し、状態点の相を形式的に効率的に特定しているに過ぎない。つまり、この手法は状態点の相が分からない未知の系において状態点の相を効率的に特定する手法とは言えない。そこで、状態点の相が分からない未知の系に対しても状態点の相を自動的に特定していく手法を構築するのが2点目の目的である。本研究では、短距離斥力相互作用系における圧力を数密度に関する低次の多項式で近似することで状態方程式を推定した上で、ガウス過程回帰[1]を適用することにより、状態方程式を効率的に推定しつつ、相図を効率的に作成することを目的とする。

2. 方法

まず、短距離斥力相互作用系において各数密度における圧力を分子動力学シミュレーションにより定義した。その後、測定した圧力と数密度の関係にガウス過程回帰を適用し、測定点以外の密度における圧力の推定値と推定誤差を評価した

1. 結果

WCAポテンシャル粒子系において圧力と数密度の関係にガウス過程回帰を適用した時の、入力データ8点、25点での様子をFig. 1,2にそれぞれ示す。

グラフ, 折れ線グラフ

自動的に生成された説明

Fig. 1　Gaussian process regression (8 points)

グラフ が含まれている画像

自動的に生成された説明

Fig. 2　Gaussian process regression (26 points)

ガウス過程回帰を用いることで、Fig. 1,2のように標準偏差（不確かさ）を小さくしていくように次の測定点を選ぶアルゴリズムの構築及び、短距離斥力相互作用系における状態方程式の効率的な推定に成功した。

4　結論と今後の展望

本研究では、ガウス過程回帰を適用することで、短距離斥力相互作用系における状態方程式を効率的に推定することに成功した。今後は、相図を効率的に作成するアルゴリズムの構築を目指す。

参考文献

[1] Glotzer SC. Dai C. Efficient phase diagram sampling by active learning.J Phys Chem B, Vol. 124,No. 7, pp. 1275–1284, 2020.