MACSスタディグループ８

学習物理学

機械学習と理学の融合

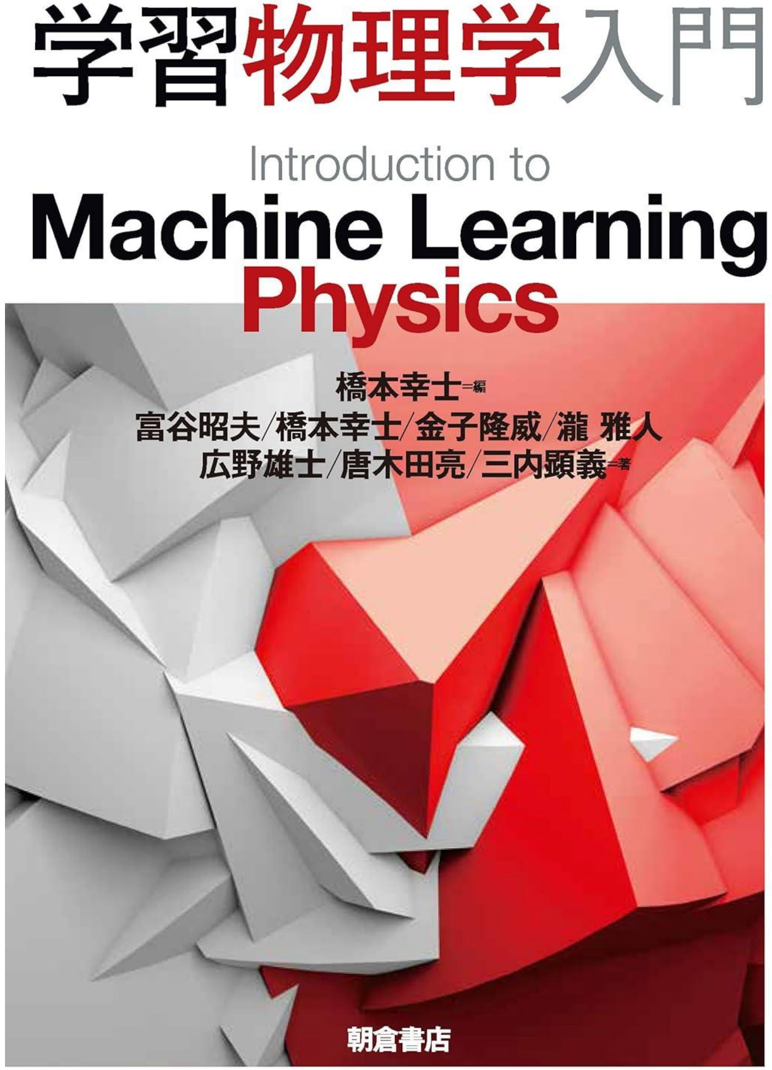
担当教員
棚橋典大（京大理･学習物理学特別講座）
橋本幸士（京大理･物理学宇宙物理学専攻）
坂上貴之（京大理･数学専攻）
繁村知宏（TA：京大理･物理学宇宙物理学専攻）

スタディグループ８「学習物理学」活動予定

集中講義：機械学習の基礎　　　（後期）

実習：機械学習ハンズオン（後期）

学習物理学セミナーへの参加　（通年）



機械学習の
基礎についての集中講義

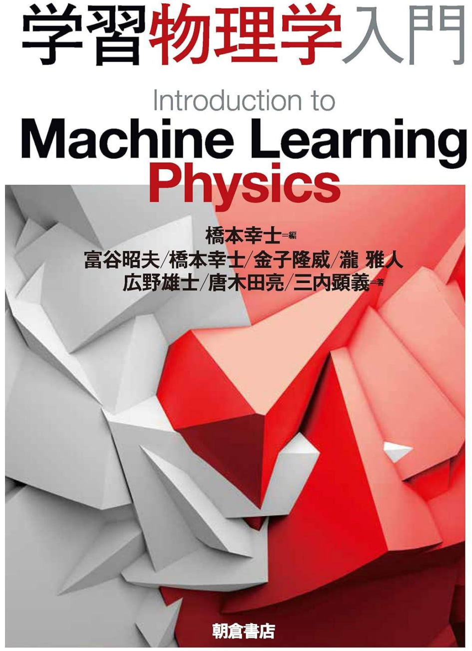
後期（2～3月頃）

◆ **教科書：学習物理学入門**

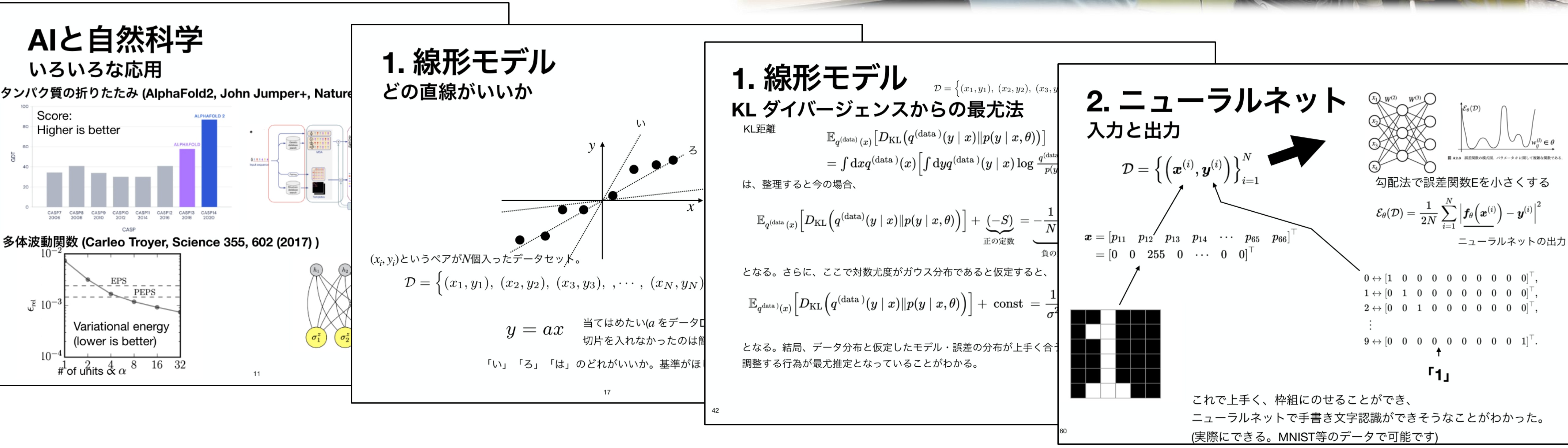
- 前半：機械学習の基礎
- 後半：機械学習と物理学

著者の富谷昭夫氏 (東京女子大学講師)による講義

➢ イントロダクション+ ガウス分布
➢ 最尤法＋ニューラルネット
➢ 発展的なニューラルネット


学習物理学入門
Introduction to
Machine Learning
Physics
橋本幸士 編
富谷昭夫/橋本幸士/金子隆威/瀧 雅人
広野雄士/唐木田亮/三内顕義 著
朝倉書店


物理学史を俯瞰


AIと自然科学
いろいろな応用
タンパク質の折りたたみ (AlphaFold2, John Jumper+, Nature
Score:
Higher is better
ALPHAFOLD 2
ALPHAFOLD
CASP7 2006
CASP8 2008
CASP9 2010
CASP10 2012
CASP11 2014
CASP12 2016
CASP13 2018
CASP14 2020
CASP
多体波動関数 (Carleo Troyer, Science 355, 602 (2017))
EPS
PEPS
Variational energy
(lower is better)
# of units ∝ α
11
1. 線形モデル
どの直線がいいか
い
ろ
(x_i, y_i)というペアがN個入ったデータセット。
$\mathcal{D} = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), (x_3, y_3), \cdots, (x_N, y_N)$
$y = ax$
当てはめたい(a をデータ
切片を入れなかったのは
「い」「ろ」「は」のどれがいいか。基準がほ
17
1. 線形モデル
KL ダイバージェンスからの最尤法
KL距離
は、整理すると今の場合、
正の定数
となる。さらに、ここで対数尤度がガウス分布であると仮定すると、
となる。結局、データ分布と仮定したモデル・誤差の分布が上手く合
調整する行為が最尤推定となっていることがわかる。
42
2. ニューラルネット
入力と出力
$\mathcal{D} = \left\{ \left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{y}^{(i)} \right) \right\}_{i=1}^{N}$
$\boldsymbol{x} = [p_{11} \ p_{12} \ p_{13} \ p_{14} \ \cdots \ p_{65} \ p_{66}]^\top$
$= [0 \ 0 \ 255 \ 0 \ \cdots \ 0 \ 0]^\top$
勾配法で誤差関数Eを小さくする
$\mathcal{E}_\theta(\mathcal{D}) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{N} \left| \boldsymbol{f}_\theta(\boldsymbol{x}^{(i)}) - \boldsymbol{y}^{(i)} \right|^2$
ニューラルネットの出力
$0 \leftrightarrow [1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]^\top$,
$1 \leftrightarrow [0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]^\top$,
$2 \leftrightarrow [0 \ 0 \ 1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]^\top$,
$9 \leftrightarrow [0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1]^\top$.
「1」
これで上手く、枠組にのせることができ、
ニューラルネットで手書き文字認識ができそうなことがわかった。
(実際にできる。MNIST等のデータで可能です)
60

実習：機械学習ハンズオン
後期（2〜3月頃）

Model: "functional"

Layer (type)	Output Shape	Param #
input_layer (InputLayer)	(None, 1)	0
dense (Dense)	(None, 32)	64
dense_1 (Dense)	(None, 64)	2,112
dense_2 (Dense)	(None, 32)	2,080
dense_3 (Dense)	(None, 1)	33

Total params: 4,289 (16.75 KB)
Trainable params: 4,289 (16.75 KB)
Non-trainable params: 0 (0.00 B)

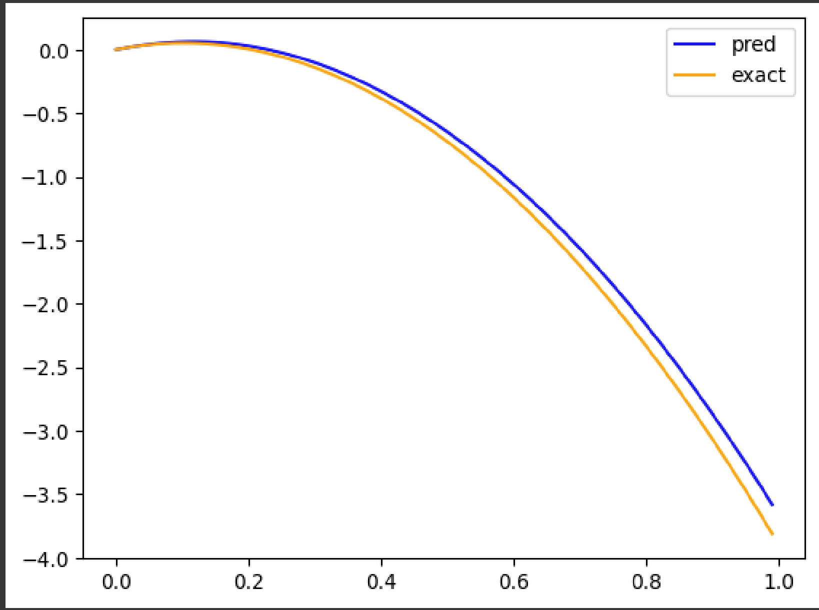
```
g = 9.8
h, v = 0.0, 1.0
x_h, x_v = 0.0, 0.0
xmax = 1.0
bc_x1 = np.array([[x_h]])
bc_x2 = np.array([[x_v]])
bc_f1 = np.array([[h]])
bc_f_x2 = np.array([[v]])
bc_x1 = tf.constant(bc_x1, tf.float32)
bc_x2 = tf.constant(bc_x2, tf.float32)
bc_f1 = tf.constant(bc_f1, tf.float32)
bc_f_x2 = tf.constant(bc_f_x2, tf.float32)

#BC_fx = np.array([[h],[1.0]]) #境界条件fx
#BC_x = np.array([[0.0],[1.0]]) #境界条件x
#BC_fx = tf.constant(BC_fx, tf.float32)
#BC_x = tf.constant(BC_x, tf.float32)

x_train=np.arange(0,xmax,1e-3).reshape((-1,1))
```

```
x_test=np.arange(0,1,0.01).reshape((-1,1))
f_exact = -0.5*g*x_test**2 + x_test*v + h
f_pred_test = model(x_test)

fig, ax = plt.subplots()
ax.plot(x_test, f_pred_test, color="blue", label="pred")
ax.plot(x_test, f_exact, color="orange", label="exact")
ax.legend()
plt.show()
```




```
np.average((f_pred_test-f_exact)**2)
```

0.01314022

- 実習形式の集中講義
- 機械学習によるデータ解析、
  微分方程式の数値解法への応用、…

学習物理学セミナーへの参加（通年）

Deep learning and Physics

- 第17回領域セミナ・第69回DLAP： 阪上雅昭 氏 「変分オートエンコーダーによる乳幼児語彙発達の解析」 4/24
- 第16回領域セミナ・第68回DLAP： 小渕 智之 氏 「圧縮センシングの理論と最近の進展」 2/6
- 第15回領域セミナ・第67回DLAP： 伊藤 創祐 氏 「最適輸送と非平衡熱力学: 拡散モデルへの応用」 1/30
- 第14回領域セミナ・第66回DLAP： 原田 健自 氏 「テンソル木を用いた生成モデルがデータ内の隠れた関係性を抽出する」 1/16
- 第13回領域セミナ・第65回DLAP： 堀江 正信 氏 「局所保存性・相似変換対称性を満たす機械学習モデルによる数値流体力学」 12/19
- 第12回領域セミナ・第64回DLAP： 今田 正俊 氏 「フェルミマシン」 11/28
- 第11回領域セミナ・第63回DLAP： 竹内 駿 氏 「AI社会実装の最前線ー宇宙物理との関連も交えて」 11/14

スタディグループ８「学習物理学」活動予定

集中講義：機械学習の基礎　　　（後期）

実習：機械学習ハンズオン（後期）

学習物理学セミナーへの参加　（通年）