

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 活動報告

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)

物理学第二教室 素粒子論研究室

繁村 知宏

スタディグループ8 「学習物理学」 活動報告

機械学習の基礎についての講義（前期）



機械学習の実習（夏季集中講義）

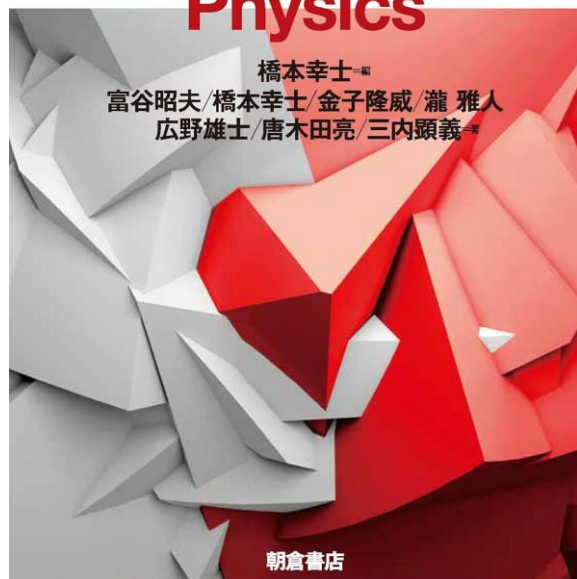


学習物理学の教科書 輪読ゼミ（後期）

学習物理学入門

Introduction to

Machine Learning Physics



機械学習の 基礎についての講義

前期 (6/28, 7/7, 19)

◆ 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

機械学習の基礎についての著者である
東京女子大学講師 富谷昭夫氏による講義を実施

- 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

今後の予定

Toward to understand MLPhys

- 金曜3限 (13:15~14:45)
- 6/28 (金) イントロ + ガウス分布, Zoom
- 7/5 (金) 最尤法 + ニューラルネット, 対面
- 7/12 (金) は休み (「物理屋のための機械学習講義」開催)
 - 「パーシステントホモロジーの基本と材料科学への応用」
 - 講師: 大林 一平 (岡山大学、京大セミナーハウス)
- 7/19 (金) 発展的なニューラルネット, 対面



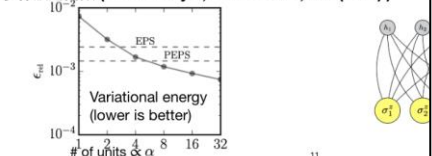
AIと自然科学

いろいろな応用

タンパク質の折りたたみ (AlphaFold2, John Jumper+, Nature)

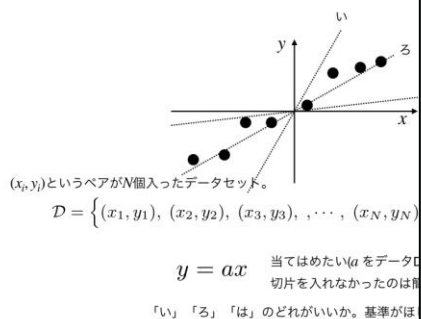


多体波動関数 (Carleo Troyer, Science 355, 602 (2017))



1. 線形モデル

どの直線がいいか



1. 線形モデル

KL ダイバージェンスからの最尤法

KL 距離 $D = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)\}$

$$\mathbb{E}_{q^{(data)}(x)} [D_{KL}(q^{(data)}(y|x) \| p(y|x, \theta))] = \int dx q^{(data)}(x) \int dy q^{(data)}(y|x) \log \frac{q^{(data)}(y|x)}{p(y|x, \theta)}$$

$$\mathbb{E}_{q^{(data)}(x)} [D_{KL}(q^{(data)}(y|x) \| p(y|x, \theta))] + \frac{(-S)}{\text{正の数}} = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log p(y^{(i)} | x^{(i)}, \theta)$$

$$\mathbb{E}_{q^{(data)}(x)} [D_{KL}(q^{(data)}(y|x) \| p(y|x, \theta))] + \text{const} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (y^{(i)} - \hat{y}^{(i)})^2$$

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調整する行為が最尤推定となっていることがわかる。

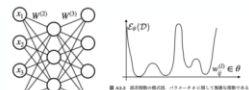
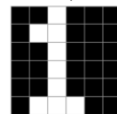
2. ニューラルネット

入力と出力

$$D = \{(x^{(i)}, y^{(i)})\}_{i=1}^N$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & p_{14} & \dots & p_{65} & p_{66} \end{bmatrix}^T$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 255 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{bmatrix}^T$$



勾配法で誤差関数 E を小さくする

$$E_q(D) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N \|f_{\theta}(\mathbf{x}^{(i)}) - y^{(i)}\|^2$$

ニューラルネットの出力

$$\begin{bmatrix} 0 \leftrightarrow [1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0]^T, \\ 1 \leftrightarrow [0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0]^T, \\ 2 \leftrightarrow [0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0]^T, \\ \vdots \\ 9 \leftrightarrow [0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1]^T. \end{bmatrix}$$

「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になった。(実際にできる。MNIST等のデータで可能です)

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))
```

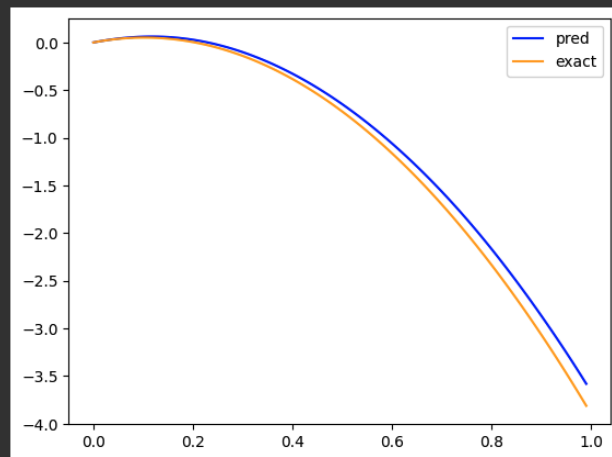
夏季休暇中 (9/4, 5) : 集中講義

村田仁樹氏 (埼玉工業大学 講師) による
Pythonを用いた機械学習ハンズオン

```
⌕ 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)
```

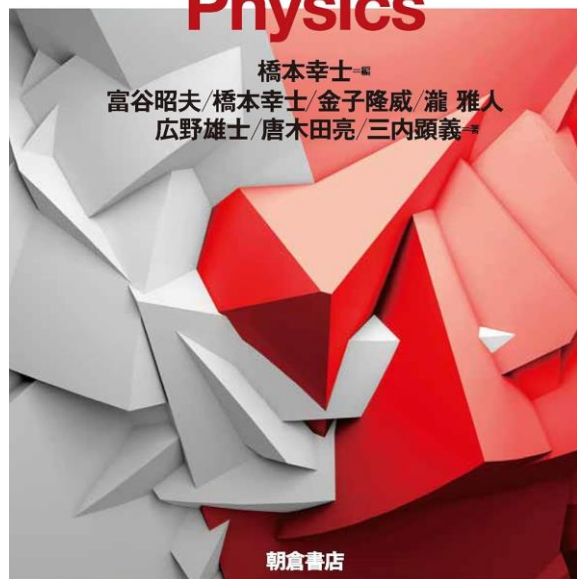
🔄 0.01314022

- Neural Networkの基礎
- Physics Informed Neural Network
- Ads/CFTによる時空再構成

学習物理学入門

Introduction to

Machine Learning Physics



橋本幸士

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

朝倉書店

学習物理学の教科書 輪読ゼミ

後期 (10/21, 11/11, 25, 12/9, 23, 1/6)

教科書：学習物理学入門の後半：

機械学習と物理学に関する最新の研究トピック紹介

学部生・大学院生による輪読形ゼミを実施

- ✓ 古典力学と機械学習：NNと微分方程式
- ✓ 量子力学と機械学習：NN波動関数
- ✓ トランスフォーマー
- ✓ 拡散モデルと経路積分
- ✓ 機械学習の仕組み：統計力学的アプローチ

拡散モデルと経路積分については、『学習物理学入門』のB2章「拡散モデルと経路積分」(p.123〜)で詳しく説明されています。以下に要点を整理します：

拡散モデル

- 基本原理：拡散モデルは、ノイズを加えてデータを破壊し、その逆過程でデータを生成する確率モデルです。
- ランジュバン方程式：拡散モデルの進展にはランジュバン方程式が重要で、確率的過程としての生成モデルが描かれます。
- 生成過程：逐次的な逆拡散（デノイズング）によって元のデータを再構築するプロセスです。
- 損失関数：モデルの学習において、逆過程を正確に再現するための損失関数が定義されます。

経路積分との関連

- 経路積分量子化 (p.133〜)：経路積分は、量子力学や統計力学の理論において使われる数理手法で、全ての可能な経路を考慮して物理量を計算します。
- 拡散モデルへの応用：
 1. 経路積分を用いて、拡散過程の確率的な軌跡を定式化。
 2. 逆過程の導出：経路積分を利用して、ノイズ除去の逆方向の確率を計算します。
 3. 確率フロー：確率的過程が持つ連続 \downarrow 方程式や古典極限の議論も含まれます。

学習物理学入門解説bot にメッセージを送信する



学習物理学bot

- 教科書「学習物理学入門」の内容をChatGPTに学習させたAIチャットボット：
教科書の内容について質問すれば解説してくれる
- 輪講ゼミの準備や参加者各自の予習・復習に活用
- 教科書の出版社ウェブページなどから誰でも利用可能



スタディグループ8 「学習物理学」 活動報告

◆教科書「学習物理入門」の輪読を中心とする 機械学習と物理についてのグループスタディを実施

- 機械学習の基礎についての講義（前期）
- 機械学習の実習（夏季集中講義）
- 学習物理学の教科書 輪読ゼミ（後期）

◆今後

- ✓ 機械学習を活用しつつ、各自の研究・勉強をさらに進展させる
- ✓ 参加者間の研究交流を今後も継続して行いたい