

機械学習ゼミ

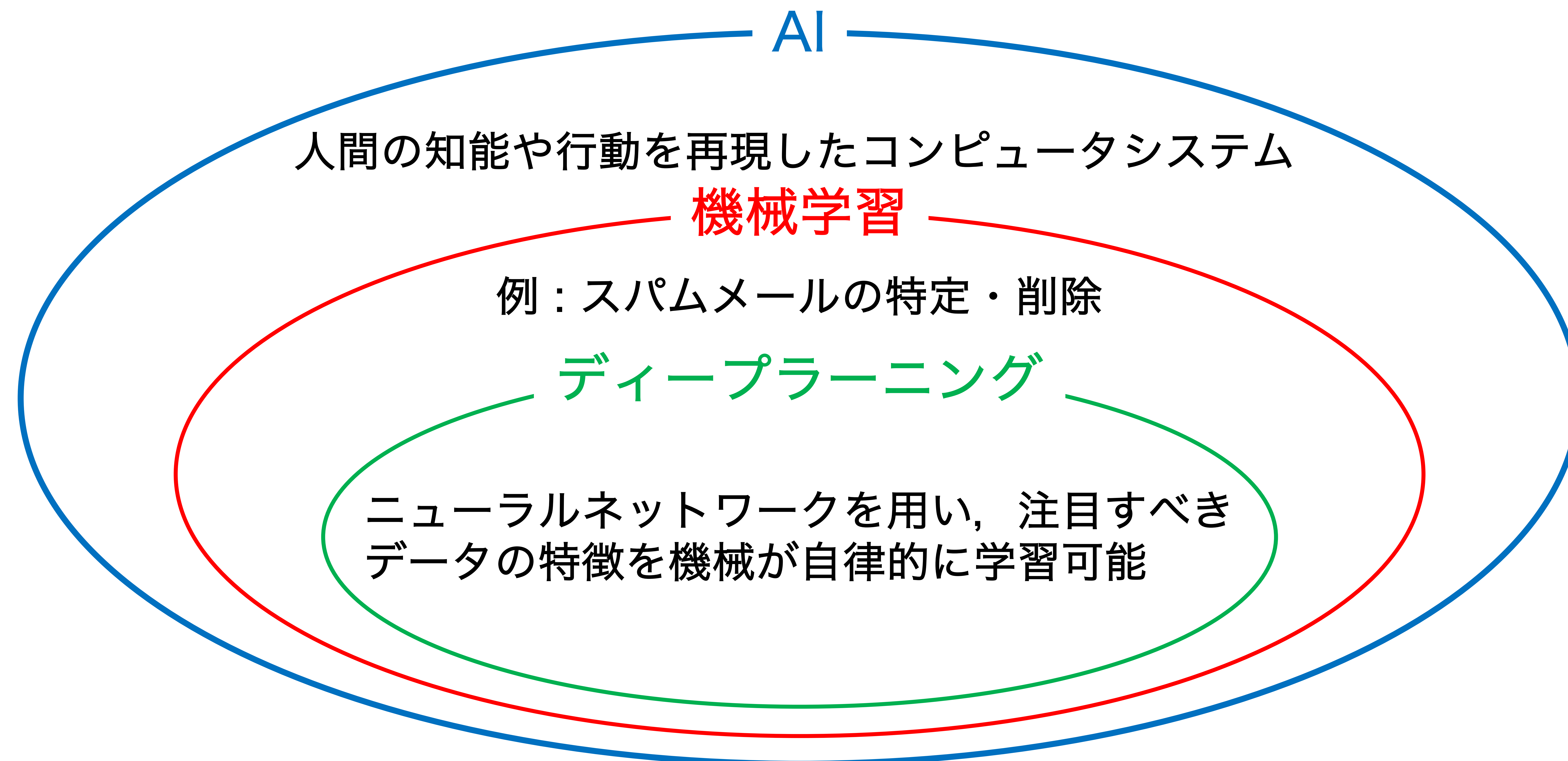
0. イントロダクション

別所秀将

1. 機械学習とは

■機械学習

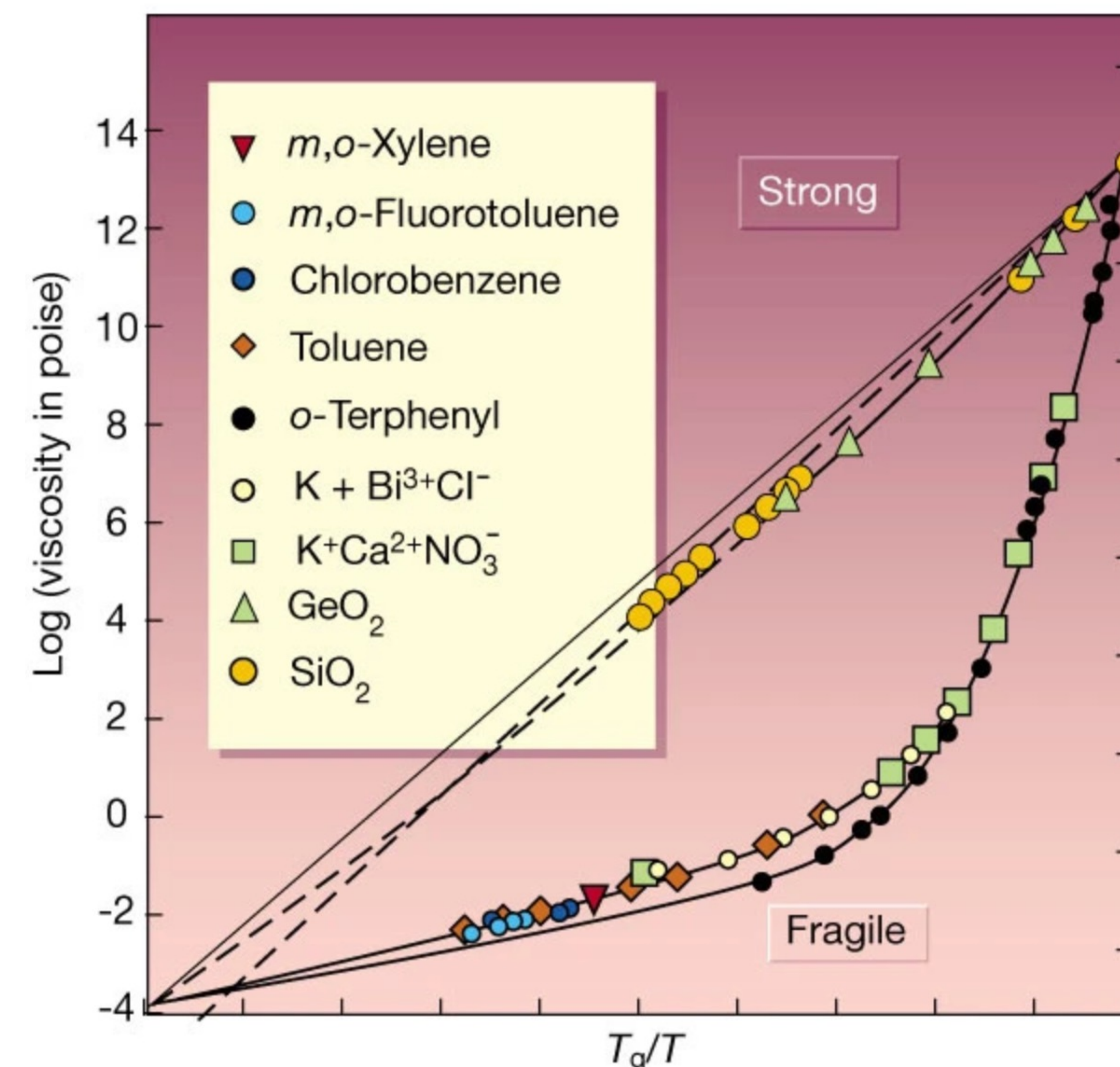
- コンピュータに大量のデータを読み込ませ、データ内に潜むパターンを学習させることで、未知のデータを判断するための法則を獲得することを可能にするデータ解析技術.
- 例：画像処理, 自然言語処理, 需要予測
- AI, ディープラーニングとの関係性



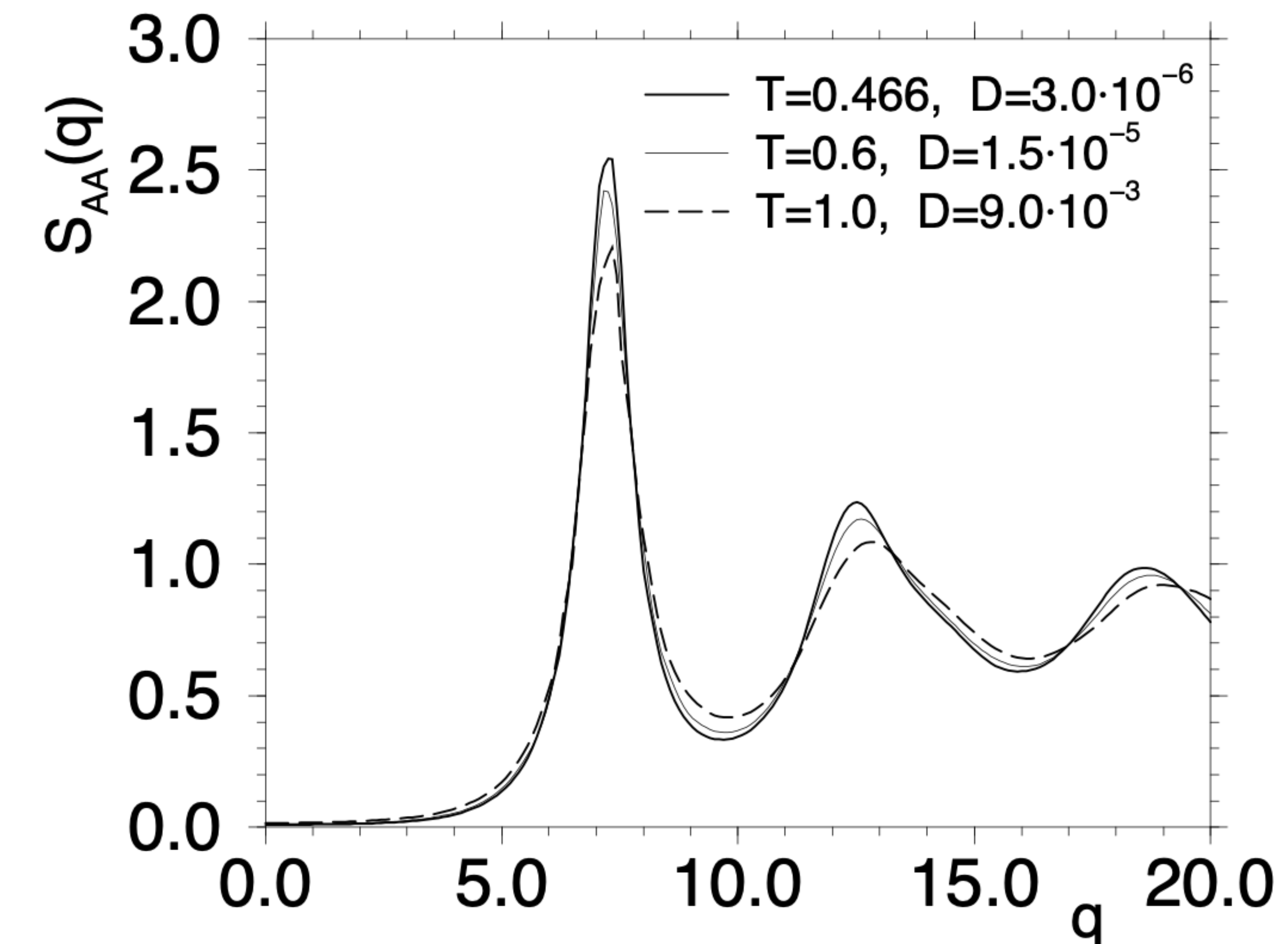
2. 機械学習ゼミのモチベーション

■ガラス物理研究と機械学習

- **非晶質固体**：結晶構造を有さない，粒子運動が凍結した状態。
(例) 金属，酸化物，コロイド
- **ガラス転移**：液体状態から非晶質固体への変化。
 - 急激な粘性発散を伴う。
 - 構造変化を通常手法(散乱実験など)によって捉えることが困難。



[P. G. Debenedetti and F. H. Stillinger, Nature **410**, 259 (2001)]

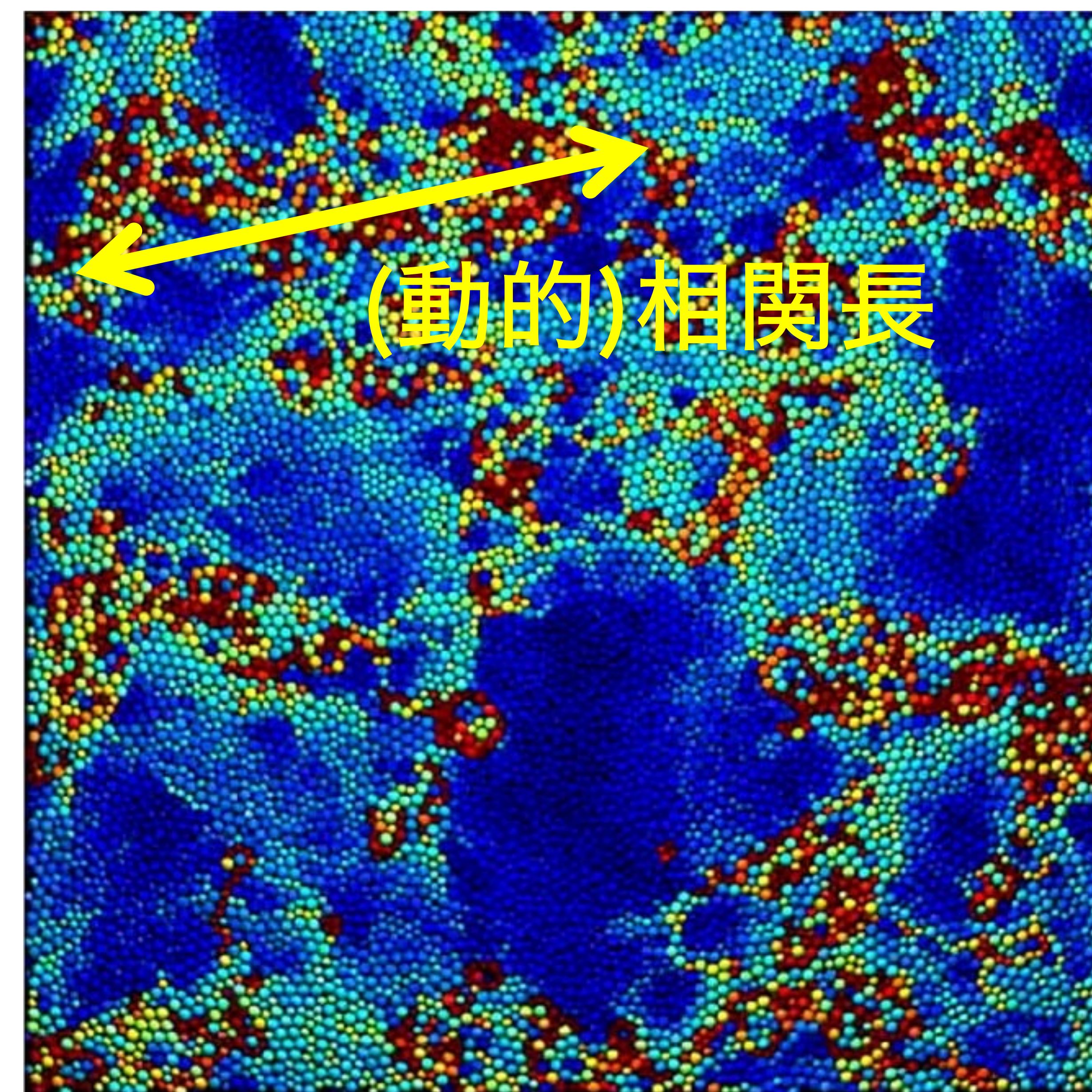


[W. Kob, J. Phys. Condens. Matter **11**, R85 (1999)]

2. 機械学習ゼミのモチベーション

■ガラス物理研究と機械学習

- 動的不均一性：ガラス転移点近傍において、粒子ダイナミクスが不均一になる。
 - 温度低下に伴い、相関長が増大する。(通常の相転移現象と共通)
 - 動的不均一性がガラス転移の鍵！？



[J. P. Garrahan, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **108**, 4701 (2011)]

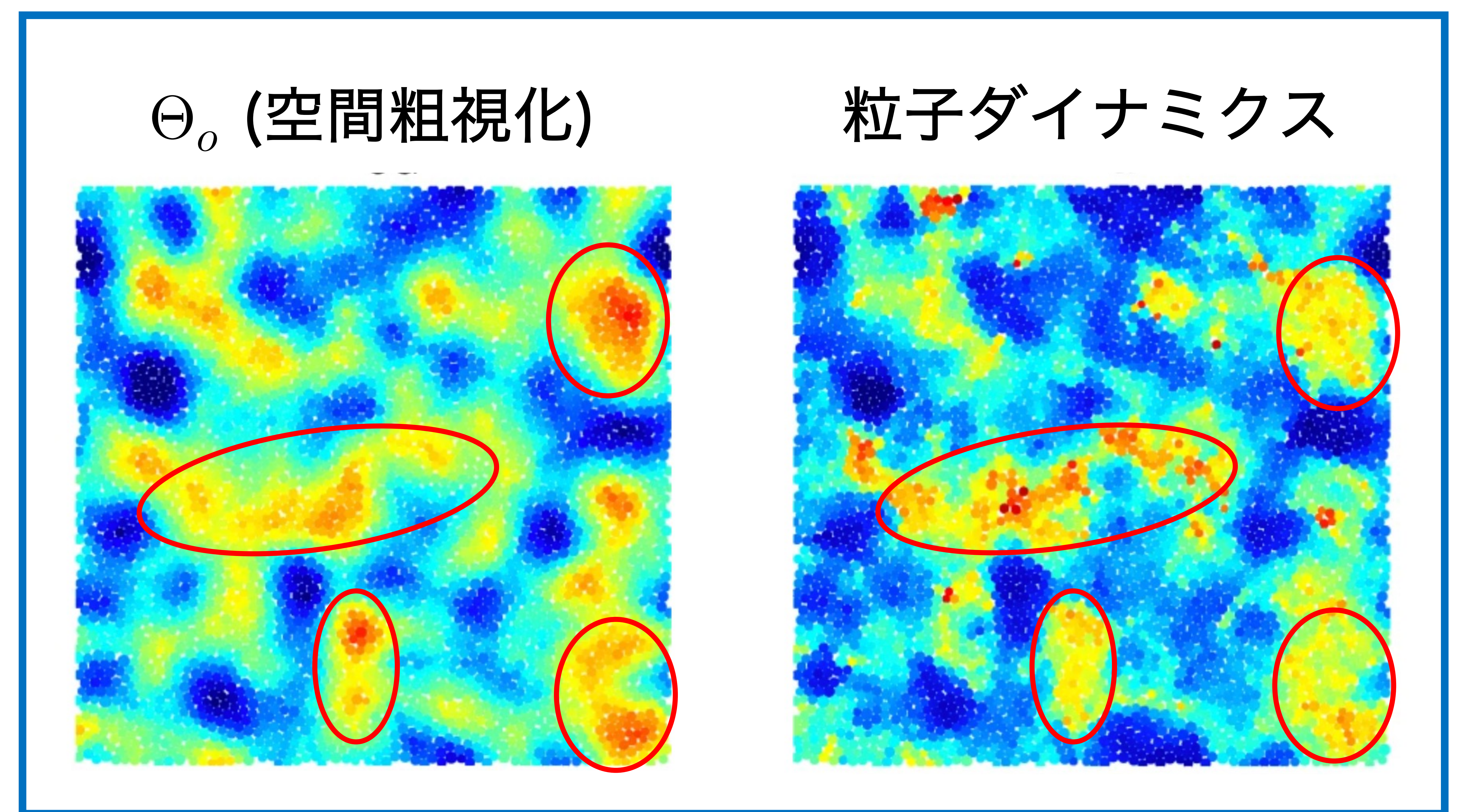
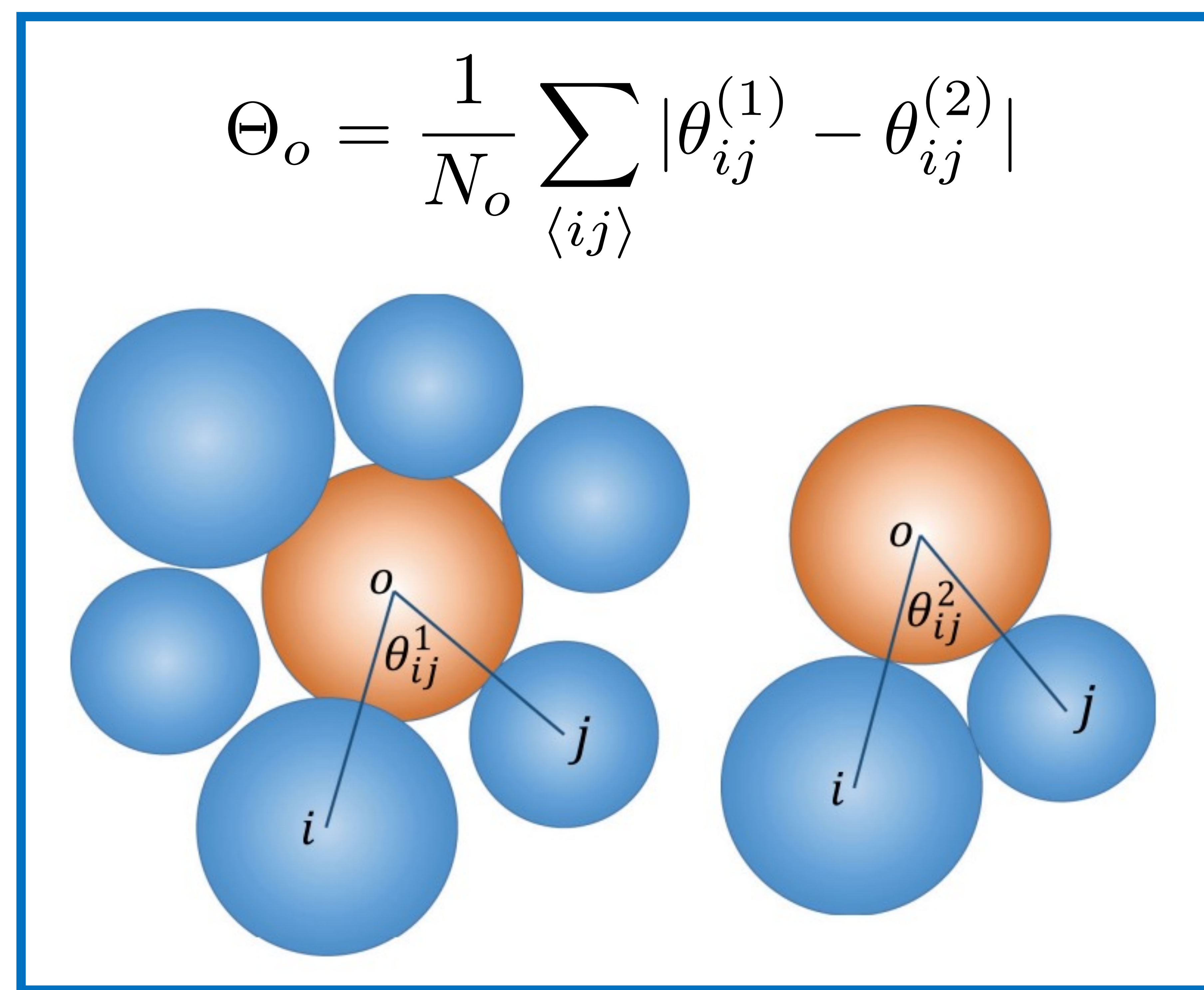
- 動的不均一性の起源に対する評価は不明。
 - 従来手法では捉えられない構造が動的不均一性の起源では？

2. 機械学習ゼミのモチベーション

■ ガラス物理研究と機械学習

- ガラスの中距離秩序：粒子ダイナミクスと相関のある構造秩序変数がいくつか発見される。

(例) Tong-Tanaka 秩序変数 [H. Tong and H. Tanaka, Phys. Rev. X 8, 011041 (2018)]



- 複数のガラスにおいて、「無秩序」に見える構造中に「秩序」が存在 → 動的不均一性の起源？

● 課題

- 幾何学的に構造秩序変数を定義することが困難な系が存在.
- 全てのガラスに普遍的に構造秩序変数が存在するかは不明.

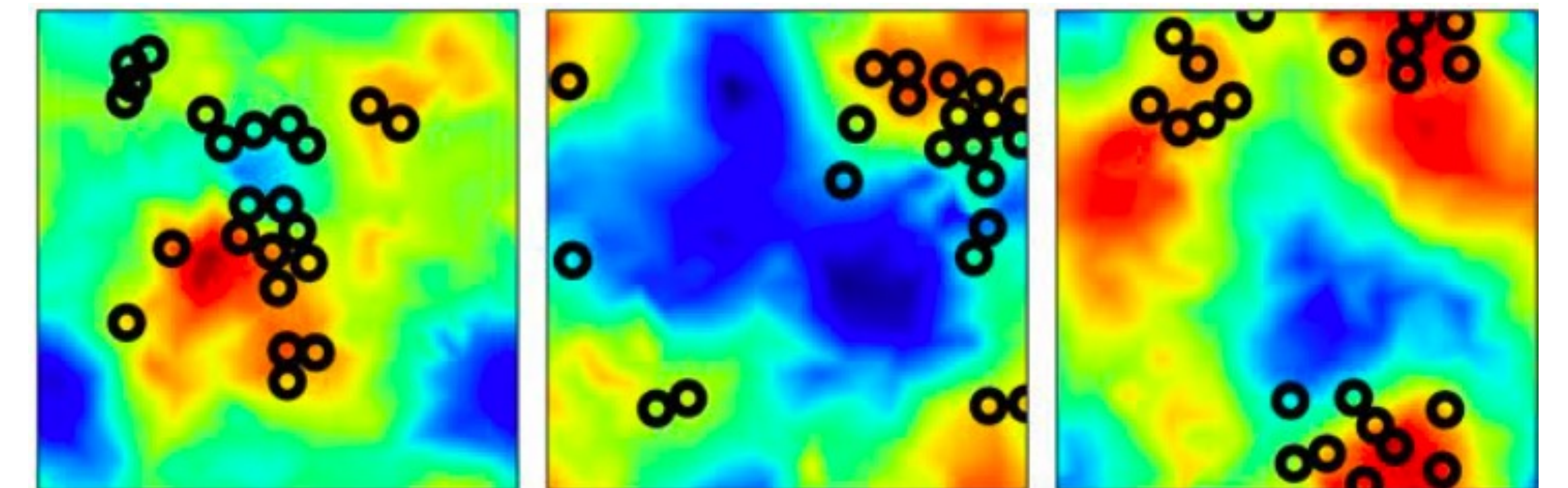
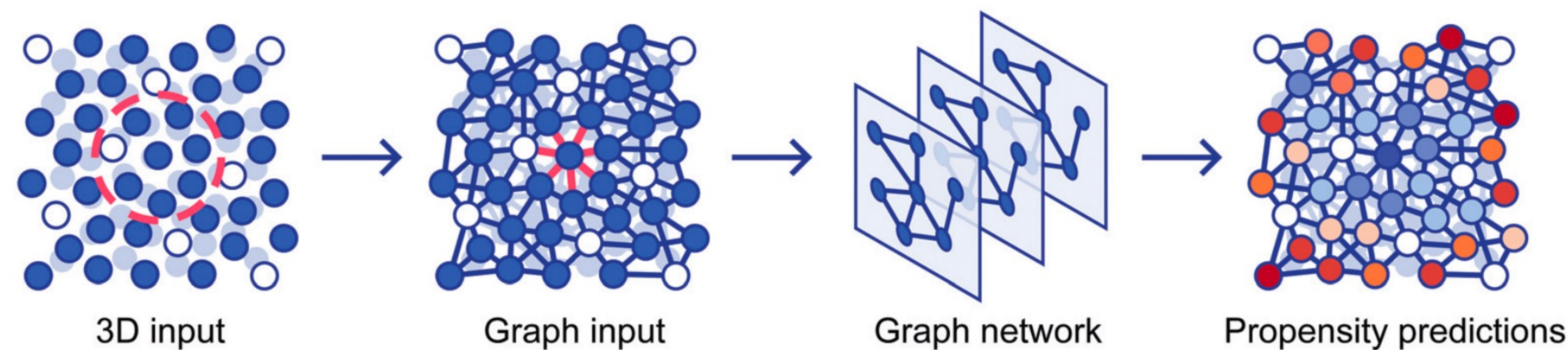
2. 機械学習ゼミのモチベーション

■ガラス物理研究と機械学習

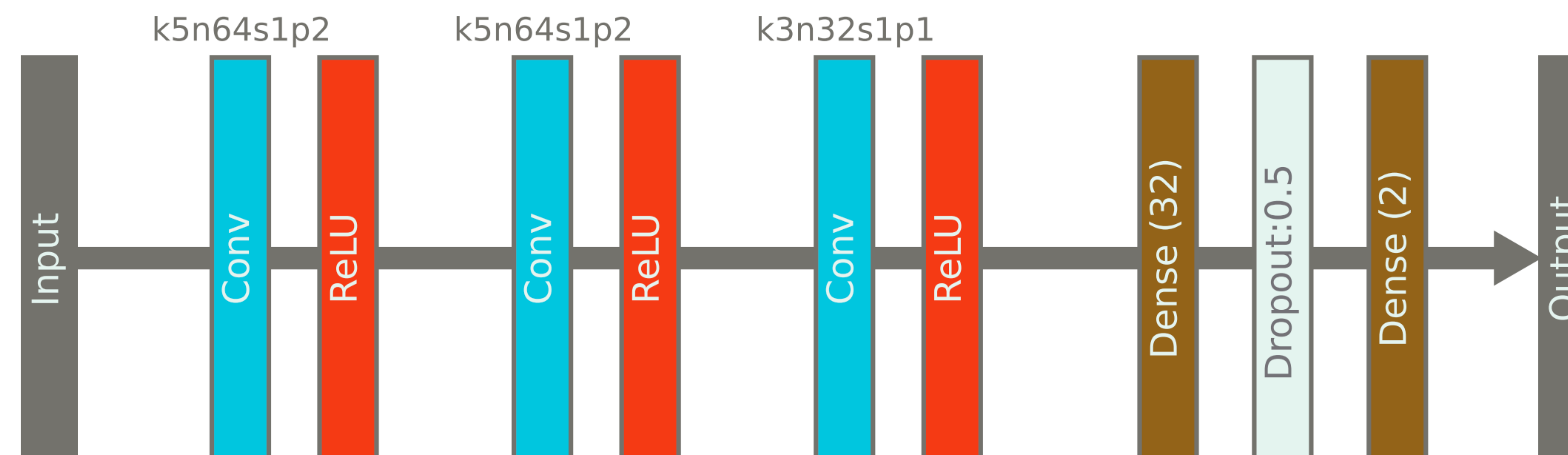
- 「ガラスの構造とダイナミクスには相関(=法則)があるはず」という知見.

➤ データを学習させ、そこから法則を抽出する機械学習が有効では？

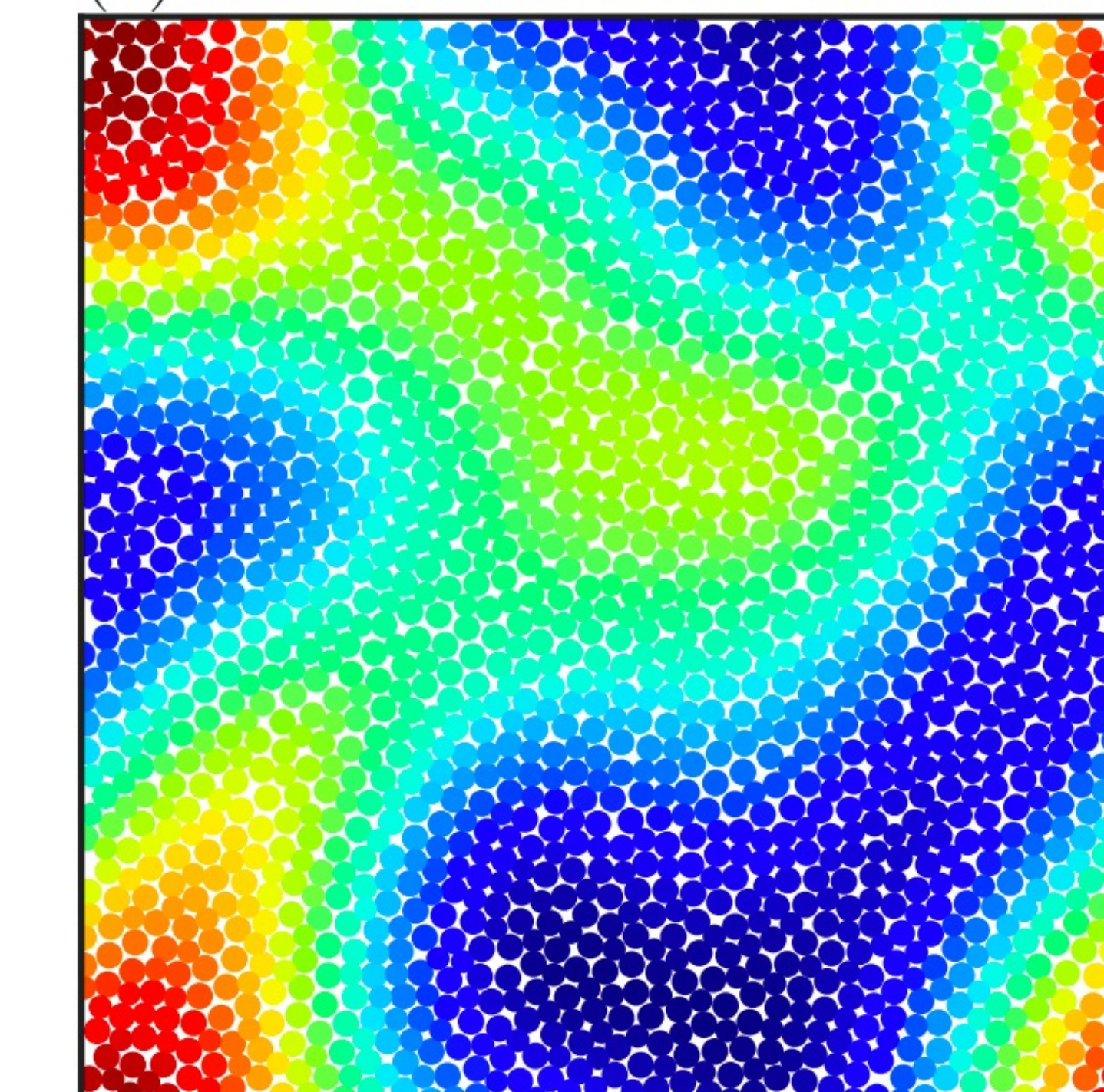
(例) グラフニューラルネットワーク (GNN) [V. Bapst, *et al.*, Nature **16**, 4 (2020)]



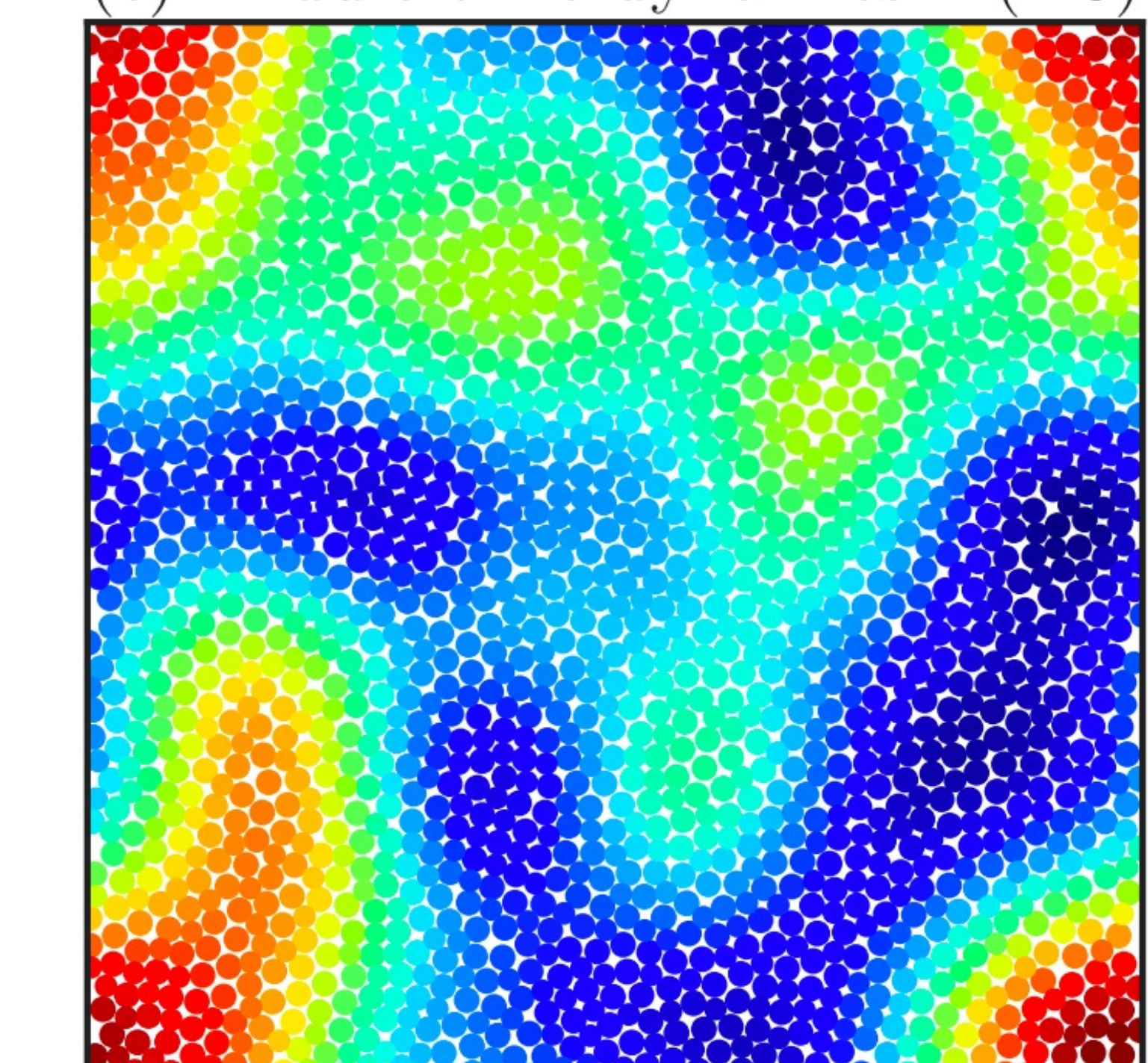
(例) Grad-CAM [N. Oyama, *et al.*, Front. Phys. **10**, 1007861 (2023)]



(a) Grad-CAM score $1 - I$



(e) Middle-time dynamics $\Delta(1.0)$



- ガラス物理を含む非平衡系において、機械学習は有効！

2. 機械学習ゼミのモチベーション

■これまでの機械学習ゼミ and More...

- 2021年度：機械学習の基礎座学 + ガラス物理への適用研究 [V. Bapst, *et al.*, Nature **16**, 4 (2020)]
- 2022年度：機械学習のガラス物理への適用研究の輪講
 - N. Oyama, *et al.*, Front. Phys. **10**, 1007861 (2023)
 - H. Shiba, *et al.*, J. Chem. Phys. **158**, 084503 (2023)
 - G. Jung and L. Berthier, Phys. Rev. Lett. **130**, 238202 (2023) etc.
- 個人：2023年～ 機械学習を実際にやり始める
 - 知識があやふや
 - コードが書けないどころか読むことすらままならない
 - 実際に自分で手を動かす経験が不足していた...
- 実際にコードを自分で書く経験を積む
 - 機械学習に対する理解を深める + 研究に用いることができる実践力を高める

3. 機械学習ゼミの予定

■実装に重点を置きながら進めます！

I. 機械学習の基礎(ニューラルネットワーク) [参考：[リンク](#)]

II. 畳み込みニューラルネットワーク(CNN) [参考：[リンク](#)]

III. グラフニューラルネットワーク(GNN) [参考：[リンク](#)]
(GNNを用いたガラス研究のコード)

●用意しておいて欲しいもの

➤ Jupyter Notebook または Google Colaboratory