

機械に物理を 教わる日は来るか

日本物理学会副会長
東京大学物性研究所

勝本信吾

機械に物理を 教わる日は来るか

部分的な答：すでに来ている

どのような意味で？ どのようにして？

日本物理学会副会長
東京大学物性研究所

勝本信吾

AIとは何か？



素人の戯言

AIは、(とりあえずは)世界を「理解」しようとはしない。
AIは、ビッグデータに基づいて**アナロジー**と**分類**を行う。

AIに、「理解」のイミテーションをさせるか？

ただし、何のために？

そもそも、**人の「理解」への渴望**は、何処から来るのか？

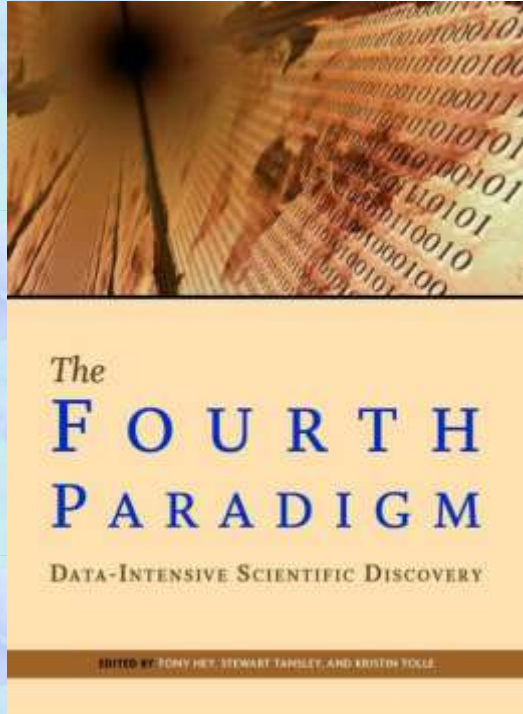
人がAIを通して(使って)、世界を「理解」するようになる
というのは、ありそうな展開。

大量失業時代はやってきても、

真のシンギュラリティは(半永久的に)起きないのでは？

traditional modeの科学研究価値観：大切だが、別の価値観もある？

Data scienceでは10年以上前から・・・



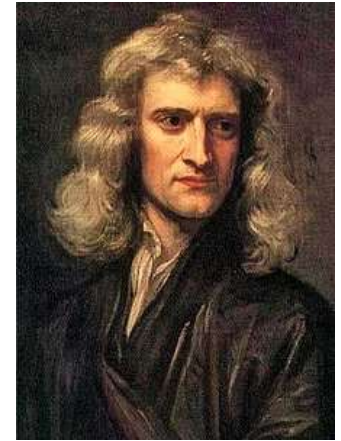
このようなことが言われていた



Tycho Brahe
1546-1601



Johannes Kepler
1571-1630



Isaac Newton
1643-1727

We are no longer data-limited but insight-limited.

いやそれどころかNewton力学の基礎となったKeplerの法則は、Tycho Brahe のbig dataからpattern抽出したものと考えられる。

人間にとって自然科学の優位性：予測性 (predictability)

Neural Network (NN)が正確な予測をするようになれば、低次元公理系としての物理学は必要でなくなる？

物理学会 2019年年次大会 検索

講演番号	登録番号	タイトル	著者	所属	領域
15aK304-11	2686	ハミルトニアン機械学習によるダイヤモンドNV中心のホロノミック量子ゲートパラメータ全量推定	古賀悠太, 倉見谷航洋, 石坂泰一, 田宮志郎, 松田一泰, 小坂英男	横国大院理工	領域1
15aF304-9	596	機械学習による磁化過程の精密計算	中村統太	芝浦工大工	領域3
15pD209-7	3355	機械学習による乱れたカゴメ高次トポロジカル絶縁体の相の決定	荒木広夢, 溝口知成, 初貝安弘	筑波大数理物質	領域4
15pK211-9	2269	機械学習によるSU(3)ヤンミルズ理論におけるトポロジカル電荷の推定	松本拓也, 北沢正清	阪大理	素粒子論領域
16pK406-2	60060-2	物性物理のグランドチャレンジに対する重回帰分析と機械学習	今田正俊	東大院工	素粒子論領域
16pK406-5	60060-5	機械学習によるマルコフ連鎖モンテカルロ法の高速化へ向けて	田中章詞	理研(AIP/ITHEMS), 慶應大・数理	素粒子論領域
16pK406-6	60060-6	機械学習による特徴抽出と、繰り込み群や熱力学との関係	船井正太郎	OIST	素粒子論領域
16pK406-8	60060-8	量子力学と機械学習の数理	大関真之	東北大院情報科学	素粒子論領域
15aK215-4	2229	中性子星の状態方程式の機械学習による観測からの推定	藤本悠輝, 福岡健二, 村瀬功一 ^A	東大理, 上智大理工 ^A	理論核物理領域

「機械学習」：28 件 「データ駆動」：3 件

本日の話： AI → 物理 の例：レーザー切断，第一原理計算

物理 → AIの例：量子機械学習

物性研究所でのAI（使用）研究例（1）

レーザー切断



小林洋平

未発表データ

未発表データ

更に(本当に)やりたいこと

未発表データ

物性研究所でのAI（使用）研究例 (2)



杉野修

固体中の電子状態の第一原理計算：基本的物理法則のみを用いて物質の電子状態を計算する。

(1) 周期ポテンシャル中の1個の電子の問題：擬ポテンシャル近似，多数バンド $k \cdot p$ 近似など

(2) 電子間相互作用：平均場(Hartree-Fock)近似 – 異なるスピンの電子同士に対する近似が悪い

電子間相関効果をいかに取り入れて計算するか

Kohn-Sham 方程式 (1965)：

$$\left[\underbrace{-\frac{\nabla^2}{2} + V_{\text{ion}}(\mathbf{r})}_{(1)} + \underbrace{\int d\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}_{(2)} + \underbrace{V_{\text{xc}}(\mathbf{r})}_{\text{交換相関ポテンシャル}} \right] \varphi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \varphi_i(\mathbf{r})$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i f(\epsilon_i) |\varphi_i(\mathbf{r})|^2 \quad : \text{電子濃度}$$

密度汎関数法と交換相関ポテンシャル

交換相関ポテンシャル：一般には $n(\mathbf{r})$ の汎関数 $V_{xc}\{n(\mathbf{r})\}$

Hohenberg-Kohnの定理 $\rightarrow V_{xc}\{n(\mathbf{r})\}$ は系によらないユニバーサルな汎関数

交換相関ポテンシャルにより電子状態を計算：密度汎関数法

$$V_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{xc}}{\delta n(\mathbf{r})} \quad E_{xc}\{n(\mathbf{r})\} \equiv \int d\mathbf{r} \epsilon_{xc}(\mathbf{g}\{n\}(\mathbf{r}))$$

局所密度近似 (LDA) $\mathbf{g}\{n\}(\mathbf{r}) = \left[n(\mathbf{r}), \frac{n_{\uparrow}(\mathbf{r}) - n_{\downarrow}(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})} \right]$

一般化勾配法 (GGA) $\mathbf{g}\{n\}(\mathbf{r}) = \left[n(\mathbf{r}), \frac{n_{\uparrow}(\mathbf{r}) - n_{\downarrow}(\mathbf{r})}{n(\mathbf{r})}, \frac{|\nabla n(\mathbf{r})|}{n^{4/3}(\mathbf{r})} \right]$

$n(\mathbf{r}) \rightarrow V_{xc}$ にニューラルネットワークを使う

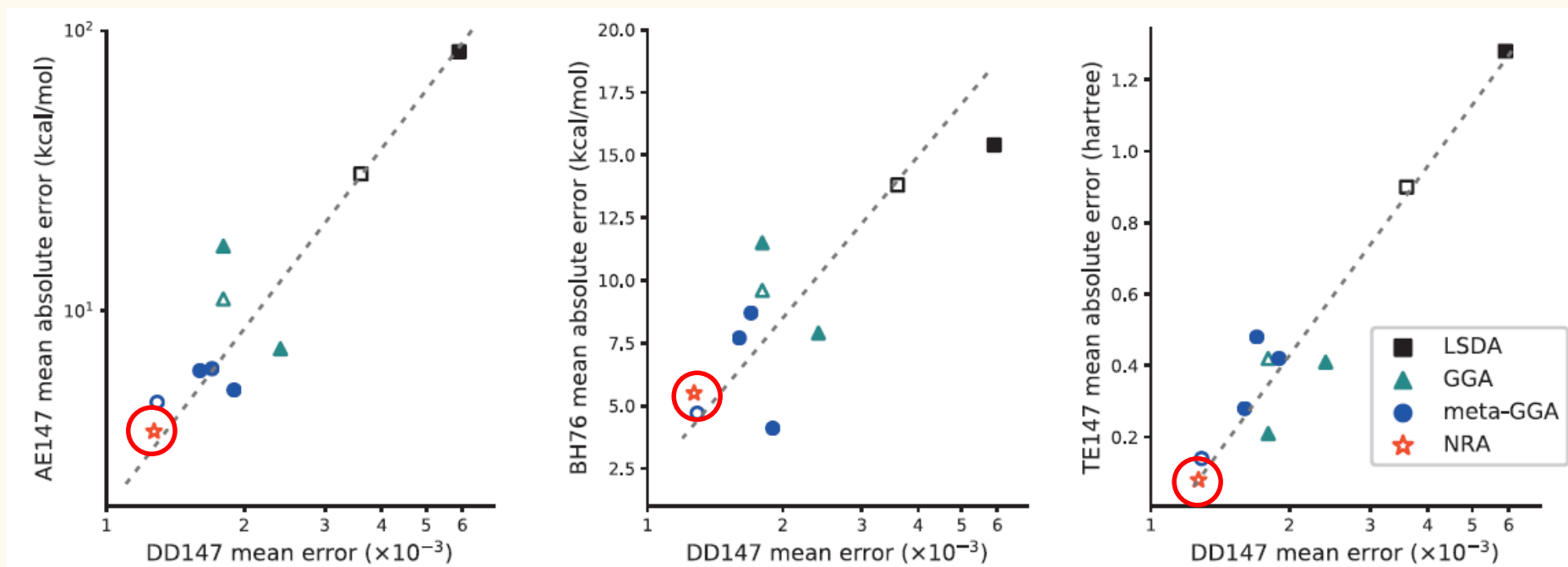
R. Nagai, R. Akashi, O. Sugino, arXiv:1903.00238

$$\mathbf{v} = h_H(\cdots (h_2(h_1(\mathbf{u})) \cdots))$$

$$h_i(\mathbf{x}) \equiv f(\mathbf{x}\mathbf{W}_i + \mathbf{b}_i)$$

小さな分子 H_2O , NH_3 , NO より訓練データを得る

100 個程度 of 他の小さな分子に適用



原子化エネルギー

障壁高さ

全エネルギー

ほとんどの量で、最も良い近似を与える！

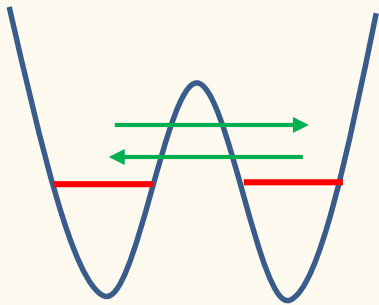
Hohenberg-Kohnの定理から、他の系にも応用可能と考えられる。

訓練系の簡単さから、何らかの簡単な近似を施しているに違いない：**どのような近似なのか教えてほしい！**

量子計算による機械学習 (quantum machine learning)

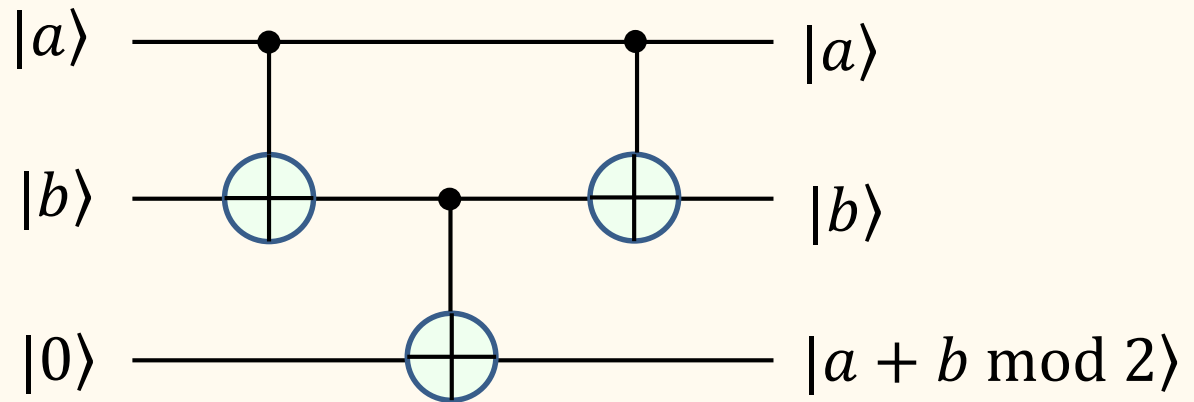
量子コンピュータ { 量子ゲート
量子アニーリング

量子ゲート量子計算



量子ビット(2準位系)
qubit

2量子ビットユニタリ変換の例: $U_{\text{CNOT}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$



量子ゲート操作とNNは大変相性が良い

Quantum speedup:

Bayesian inference $O(\sqrt{N})$, Quantum Boltzmann machine $O(\log N)$

Quantum circuit learning

K. Mitarai et al., Phys. Rev. A **98**, 032309 (2018)

教師あり学習 input $\{\mathbf{x}_i\}$ teacher $\{f(\mathbf{x}_i)\}$

output $y_i = y(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta})$ を量子計算する

$$L = \sum_i \|f(\mathbf{x}_i) - y_i\|^2$$

N-qubit 系へのimplement

1) 入力データ $\{\mathbf{x}_i\} \rightarrow$ ユニタリー変換 $U(\mathbf{x}_i)$ により

$$|\psi_{in}(\mathbf{x}_i)\rangle = U(\mathbf{x}_i)|0\rangle$$

2) パラメーター $\boldsymbol{\theta}$ に対して指定される $U(\boldsymbol{\theta})$ により

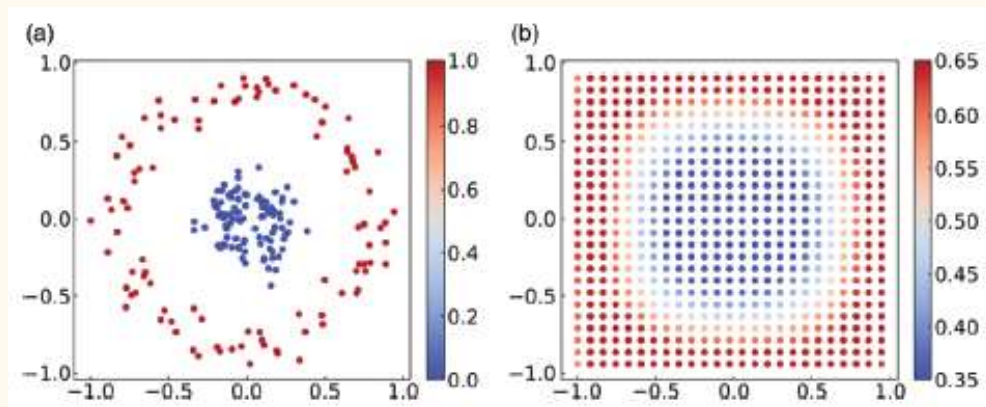
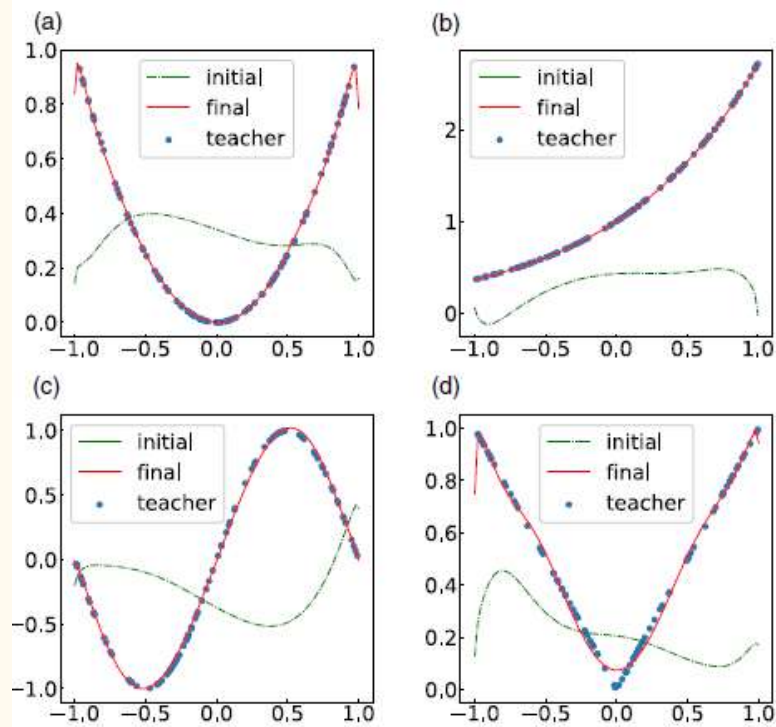
$$|\psi_{out}(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta})\rangle = U(\boldsymbol{\theta})|\psi_{in}(\mathbf{x}_i)\rangle$$

3) オブザーバブル $\{B_j\} \subset \{I, X, Y, Z\}^{\otimes N}$ で観測。出力は

$$y_i = y(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}) \equiv F(\{\langle B_j(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}) \rangle\})$$

4) $\boldsymbol{\theta}$ を調整してコスト関数 $L(f(\mathbf{x}_i), y(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}))$ を最小化する

QCL simulation example



教師

量子ビット
出力

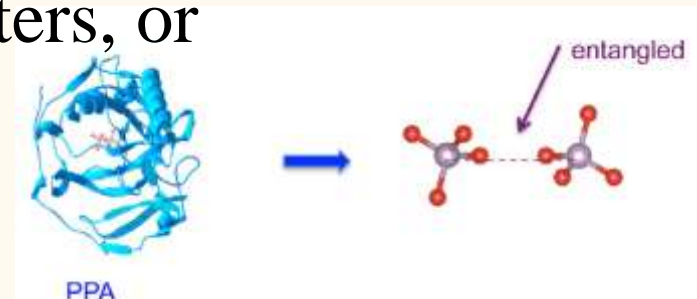
学習成果

量子計算とNNは何故このように相性が良いのか？

Are We Quantum Computers, or
Merely Clever Robots?



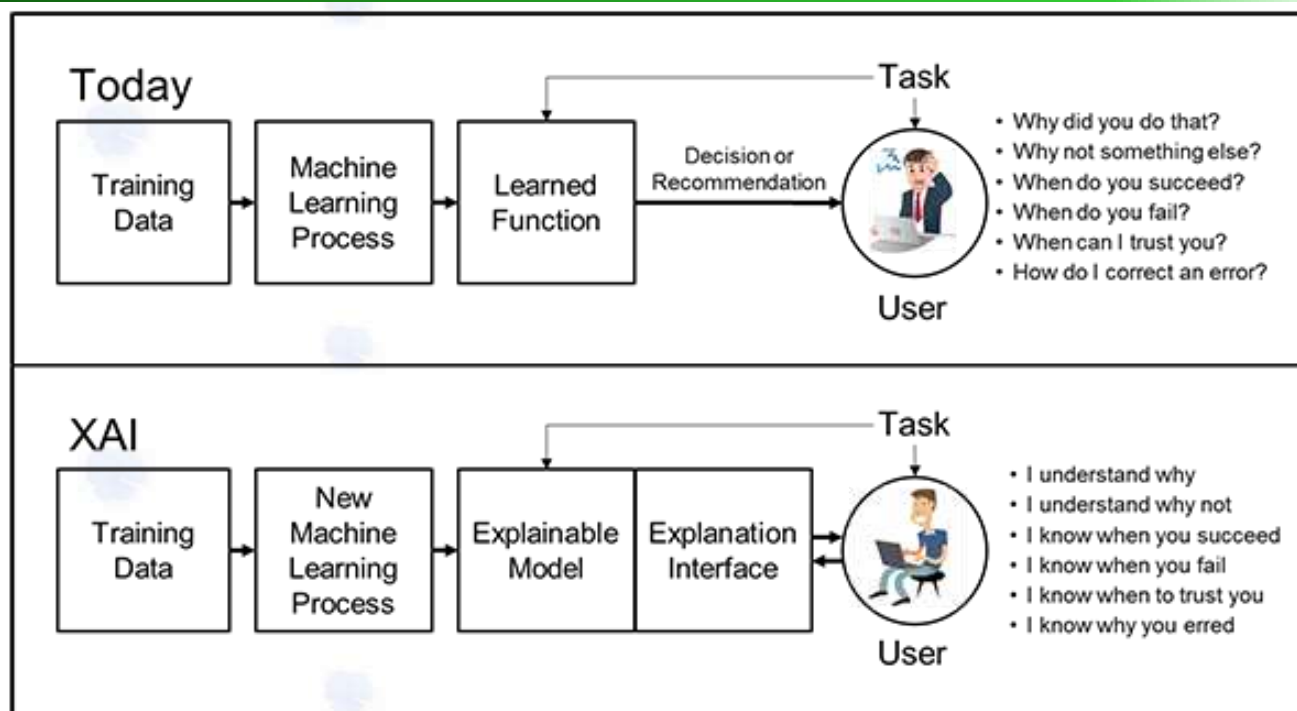
Matthew P A Fisher
University of California, Santa Barbara, USA



人間の思考の仕組みも解けるか？

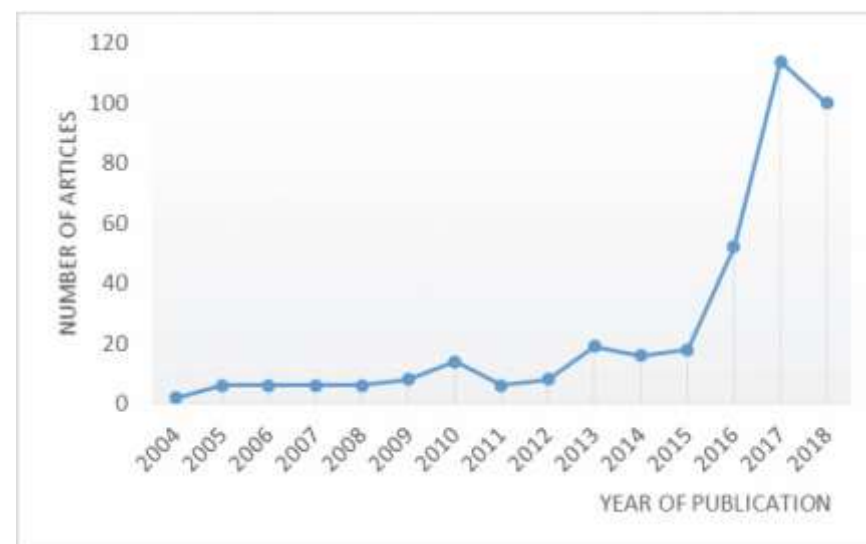
Explainable AI ?

Explainable AI (DARPA)



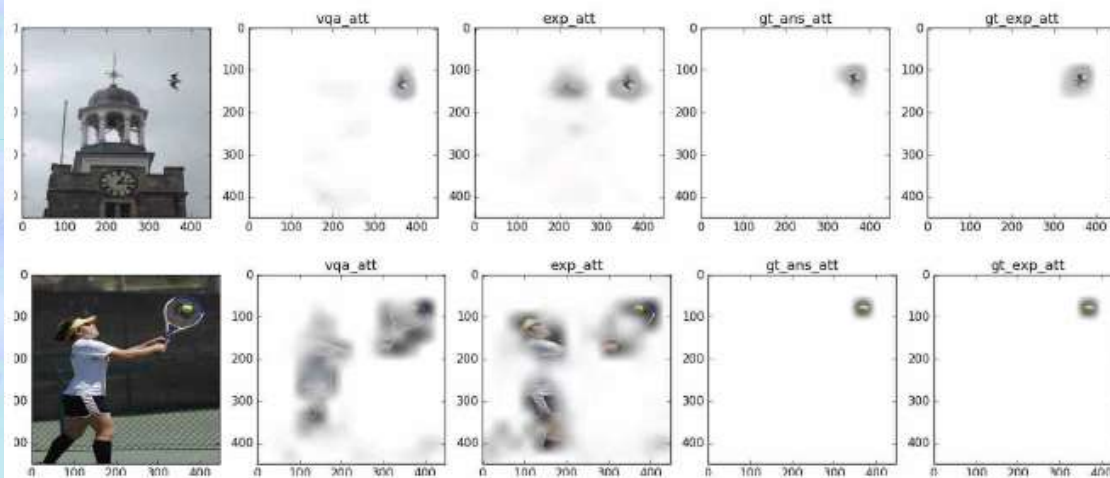
XAI関係論文数

<https://ieeexplore.ieee.org/document/8466590>



Explainable AI ?

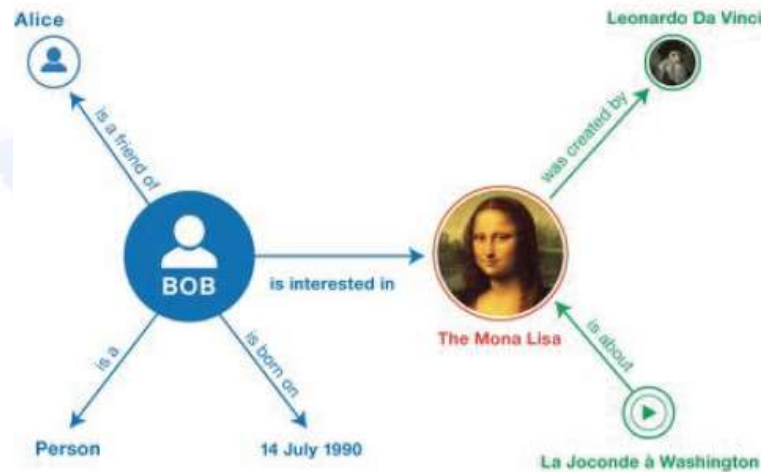
NNを「チラ見」する



What is the bird doing?
Flying.
Because it is up in the sky.

What game is this?
Tennis
Because the man is holding a tennis racket.

Knowledge graph



White box AI

今のところ物理を教えてくれそうにない！

No need for explanation : 高次元科学？



高次元科学への誘い

https://japan.cnet.com/blog/maruyama/2019/05/01/entry_30022958/

丸山宏

More is different. But more is more.

変数を恣意的に取捨選択しない：超高次元科学

それは従来の物理ではない：

従来の物理型科学でない自然科学の出現？

次へのつなぎ & 皆さんへの問いかけ

1. AIは物理を教えてくださいか？
2. 「高次元科学」は従来型物理，あるいは物理型（Newton力学型）科学を補完するものでしょうか？

言い換え：「教えてくれない物理」もあると認めるべきでしょうか？