

機械学習は複雑な相転移現象に応用できるか？

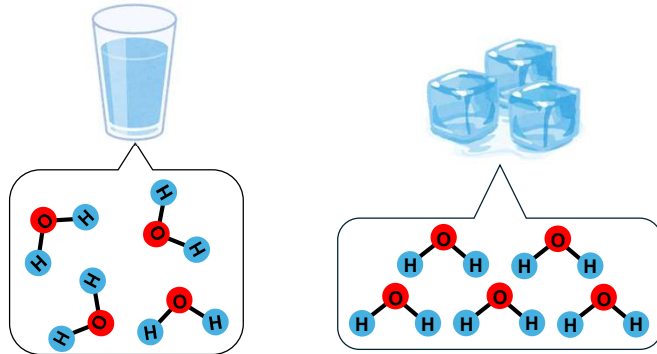
工学研究科 宮原 慶貴

相転移

相転移とは

- 条件によって物質や集団の性質が変わる現象
- 多数の要素の相互作用から集団的な変化が生じる

例) 水の固-液相転移

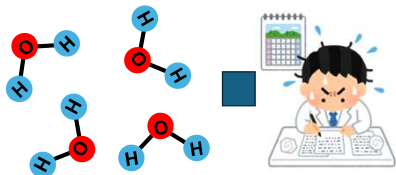


応用される分野



どう研究するのか

- 無数の構成要素の振る舞いを統計的に分析する
 - 体系的な手法はなく、一般的には困難
- 機械学習を利用する！

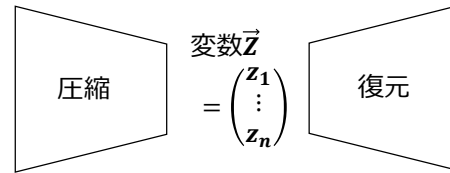


- 転移が起こる条件 (相の分類)
- 普遍的な原理

オートエンコーダの相転移への応用

オートエンコーダ (AE) とは

- データを圧縮・復元するニューラルネット
- 圧縮することで、データの重要な特徴を取り出す

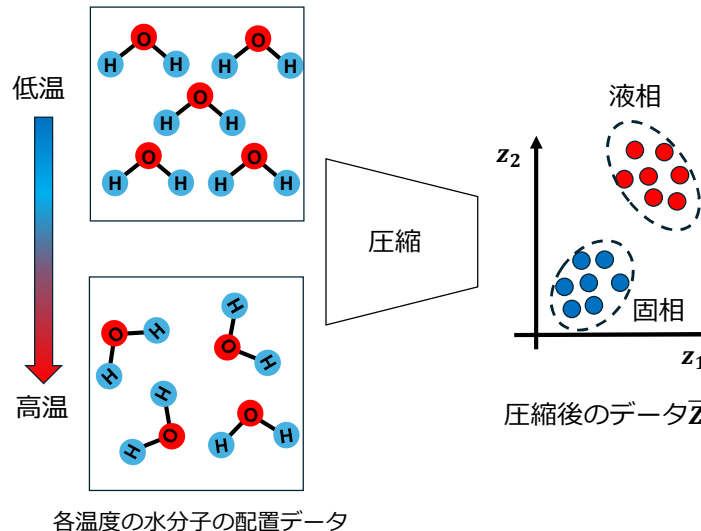


圧縮: 入力データの特徴をつかんで、変数 $\vec{Z}$ に圧縮

復元: その変数 $\vec{Z}$ を基に入力データを再構成

どのように相転移に応用するのか

- 様々な条件での構成要素の振る舞いをAEで学習
 - 圧縮後の $\vec{Z}$ を分析
- 元のデータを直接分析するよりも遥かに楽!!



各温度の水分子の配置データ

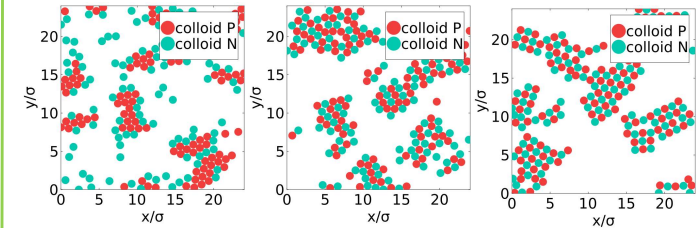
課題

複雑な物理現象に対して、上記のような方法が上手く働くのか？

私たちの研究

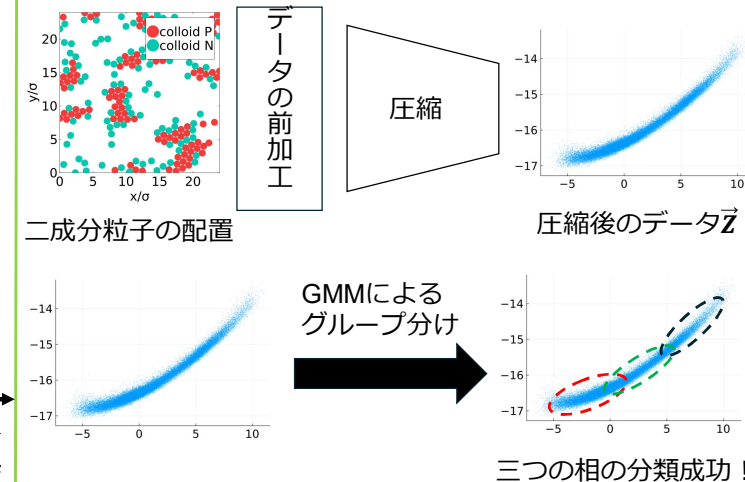
対象とする現象

- 二次元二成分粒子系の構造相転移
 - 条件を変えることで、粒子が三種類の構造をなす
- この三つの相をAEで分類することがここでの目的



私たちの手法

- データを学習する前に加工する
- 圧縮後の変数 $\vec{Z}$ をGMMという方法でグループ分けする



この研究の結果から分かったこと

複雑な三つの相の分類に成功！
しかし.....
前加工なしではAEはうまく機能しない
↓
ニューラルネットワークは万能ではない？