

機械学習を使って 凄いガラスを 誰よりも先にみつけよう!

滋賀大学 教育学部

徳田陽明

<https://glass1.net>





- ガラスってなんだろう
 - どこで使われている？
 - ガラスってなに？
 - ガラスの性質？

京都大学 在籍時
(1996~2016)

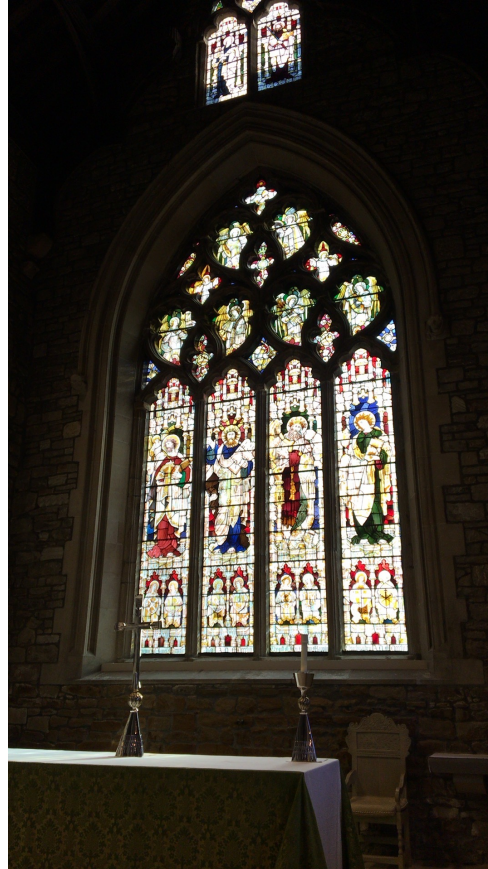
- 機械学習ってなんだろう
 - 機械が学習する？
 - ガラスの性質を機械学習しよう

滋賀大学 着任以降
(2016~現在)

- おわりに



- **ガラスってなんだろう**
 - どこで使われている？
 - ガラスってなに？
 - ガラスの性質？
- 機械学習ってなんだろう
 - 機械が学習する？
 - ガラスの性質を機械学習しよう
- おわりに



江戸切子

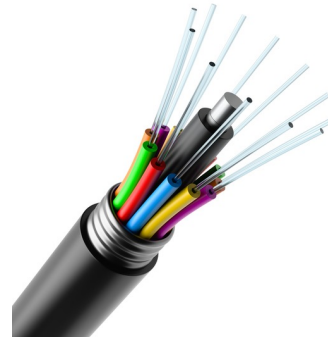
Sunrising / PIXTA

シェフィールド大聖堂 (イギリス)



液晶ディスプレイ

shu / PIXTA



光ファイバ

Make / PIXTA



アンプル

panoramaimages / PIXTA

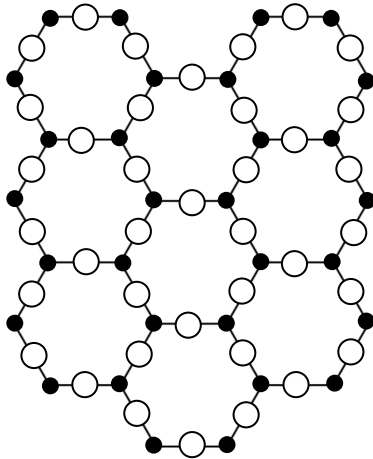
ガラスの特長

- ✓透明
- ✓加工しやすい
- ✓長持ちする



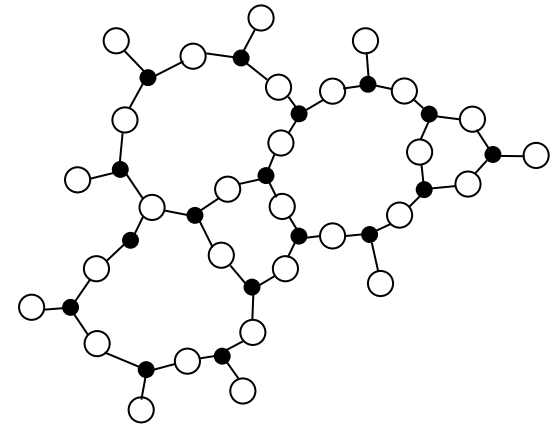
- 結晶

- 規則正しい
- 固体



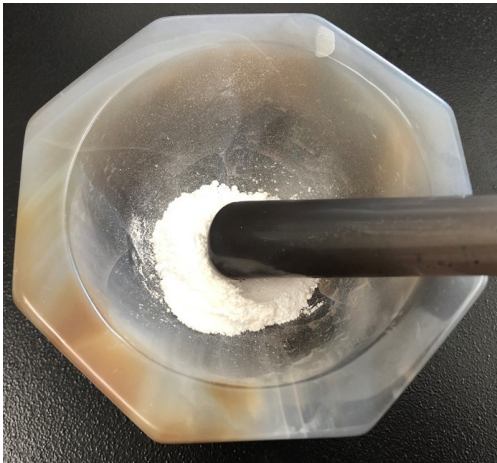
- ガラス

- ばらばら
- 固体 (液体に似ている)

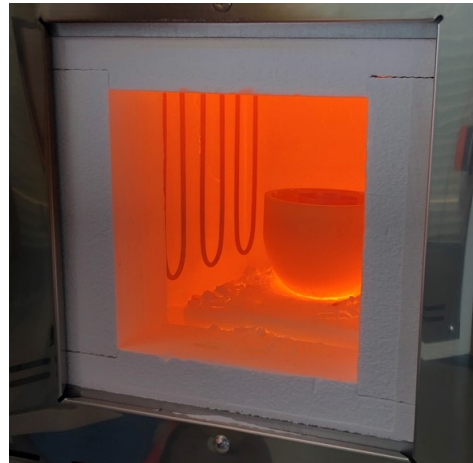




量る



溶かす



冷やす



溶かしてから素早く冷やすことで
液体のような構造のまま固体にできる



何色？

傷のつきやすさは？

割れやすさは？

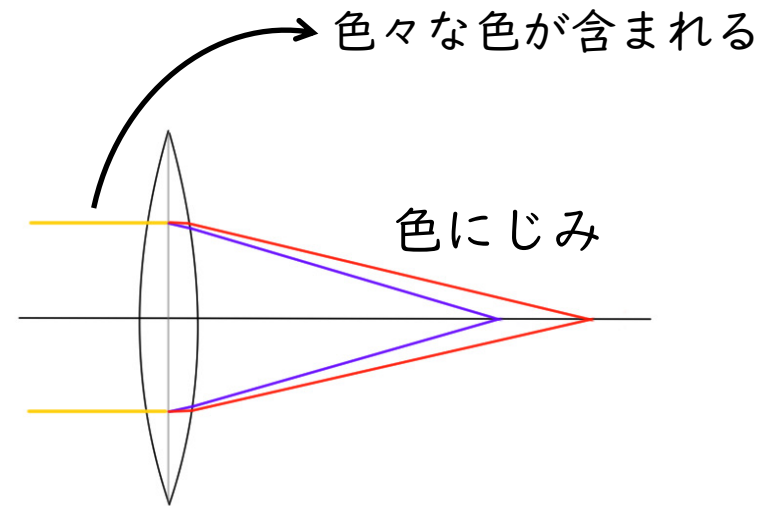
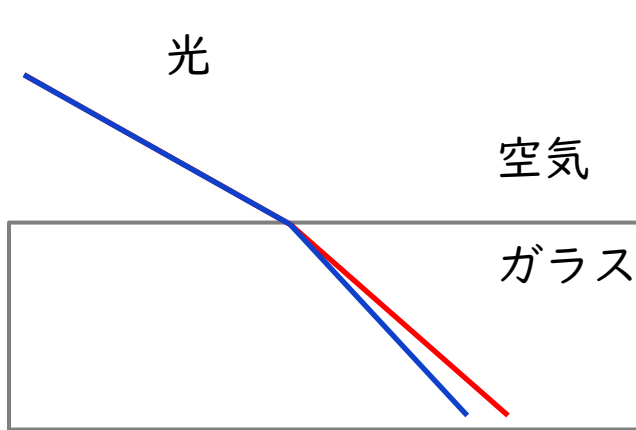
加工しやすい？

何度で軟らかくなる？

どのくらい透明かな？

屈折率は？

光を曲げる性質（屈折率）に着目



光の色によって
曲がりやすさが
異なる

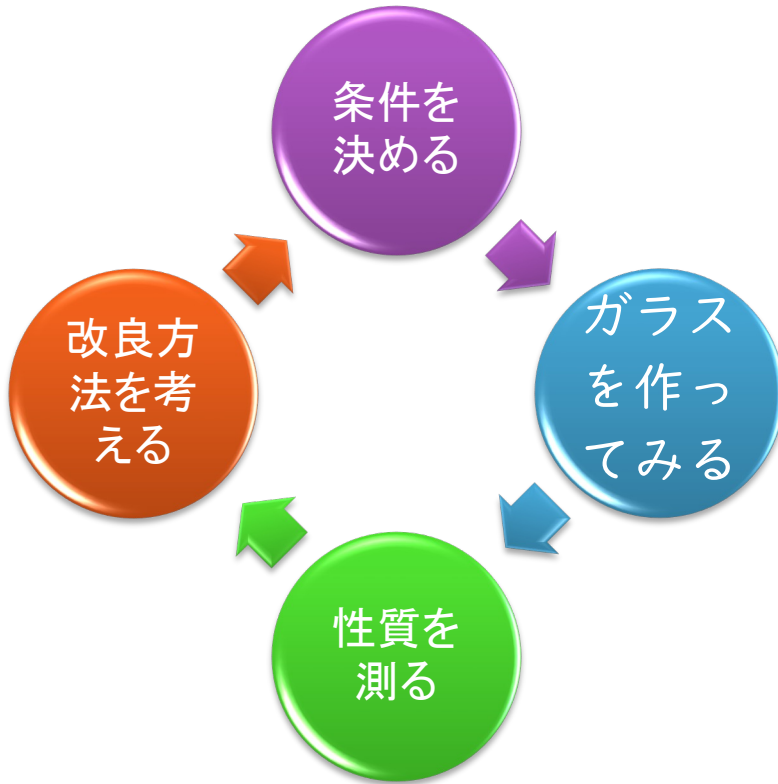
色にじみが小さいと
デバイスを小さくで
きる

色にじみの小さいガラスを作りたい

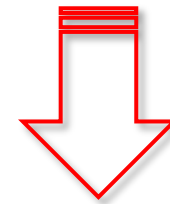


(～京都大学時代)

(滋賀大学着任以降)



もっとスマートな方法はないかな？



機械学習を使ってみよう！

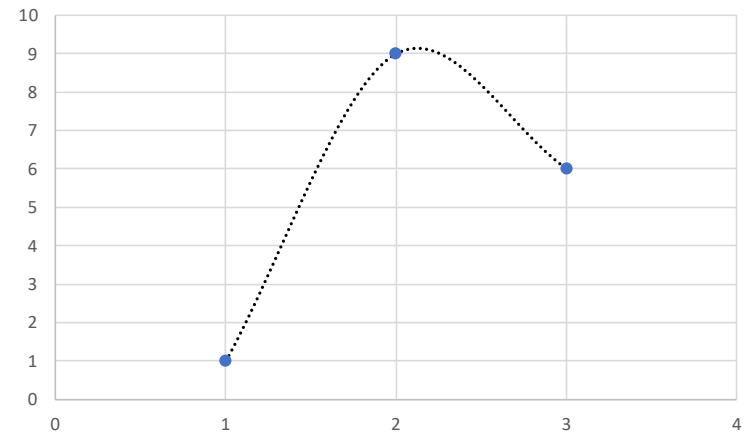
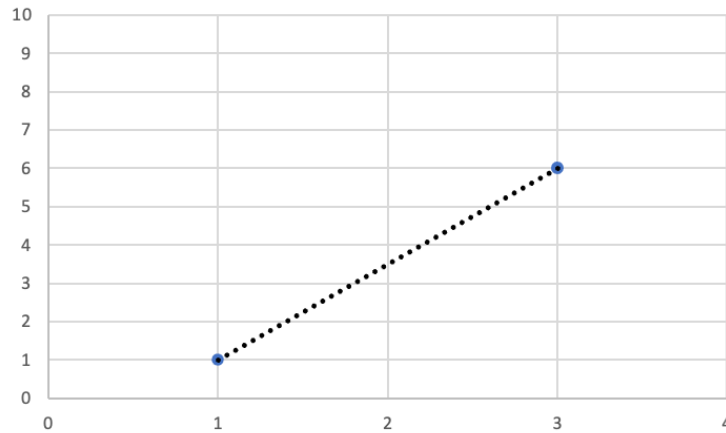


- ガラスってなんだろう
 - どこで使われている？
 - ガラスってなに？
 - ガラスの性質？
- **機械学習**ってなんだろう
 - 機械が学習する？
 - ガラスの性質を機械学習しよう
- おわりに



- 機械（コンピュータ）がデータを用いて自動で学習し、そのデータの背後にあるルールを発見すること。

なんとなく難しそう・・・



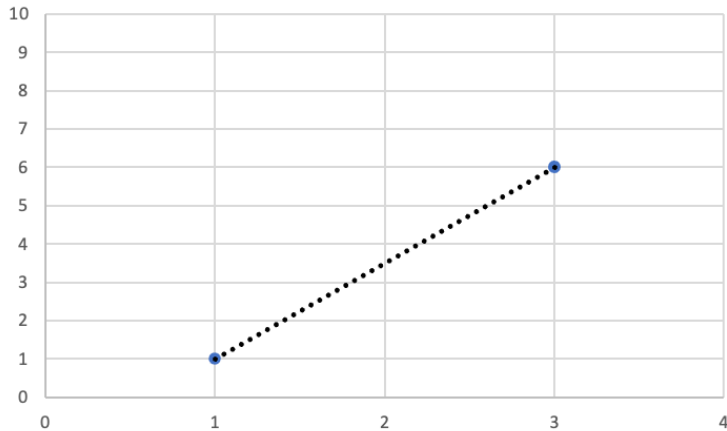
この点線を予想するのが機械学習（の一つ）



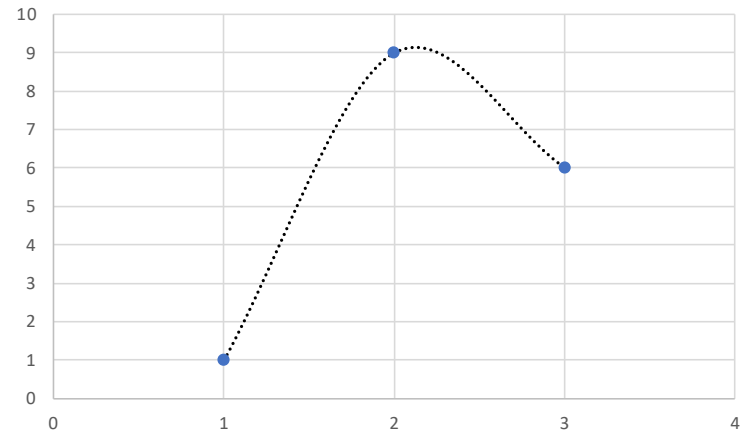
学習：与えられた入力 x と出力 y に合うように関数の形を変えること

$$y = ax^2 + bx + c$$

データが増えると a, b, c が変わる



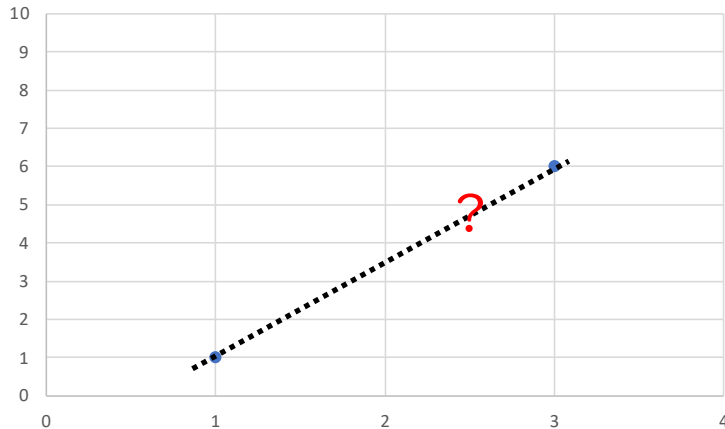
$$y = 0x^2 + 2.5x - 1.5$$



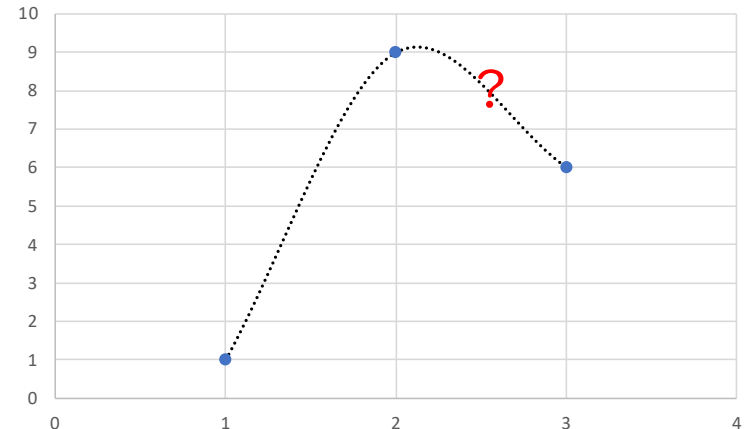
$$y = -6x^2 + 25x - 18$$



目的： $x = 2.5$ の時の y の値を推定したい



データ増



データ点が増えれば増えるほど、予測しやすくなる

ガウス過程回帰では点同士の関係（**共分散**）から予測できる



共分散Kとは

$$\mathbf{K} = E[yy^T] - E[y]E[y]^T = \Phi E[ww^T] \Phi^T$$

$$= \lambda^2 \Phi \Phi^T$$

$$= \begin{bmatrix} k(x_1, x_1) & \cdots & k(x_1, x_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_n, x_1) & \cdots & k(x_n, x_n) \end{bmatrix}$$

行列
=ベクトルを
並べたもの

指数関数

カーネル関数 $k(x_i, x_j) = \theta_1 \exp\left(-\frac{|x_i - x_j|^2}{\theta_2}\right)$

2点のデータ x と x' の類似度を表現



計算方法（省略）

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \\ y^* \end{pmatrix} \sim N \left(\begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} K & k_* \\ k_*^T & k_{**} \end{pmatrix} \right)$$

x_1, \dots, x_n (top row of K)
 x_n^* (bottom row of K)
 K (kernel matrix for original data)
 k_* (kernel vector for original data)
 k_{**} (kernel scalar for new data)

元のデータ同士の類似度

新しいデータと元のデータの類似度

新しいデータと元のデータの類似度

正規分布

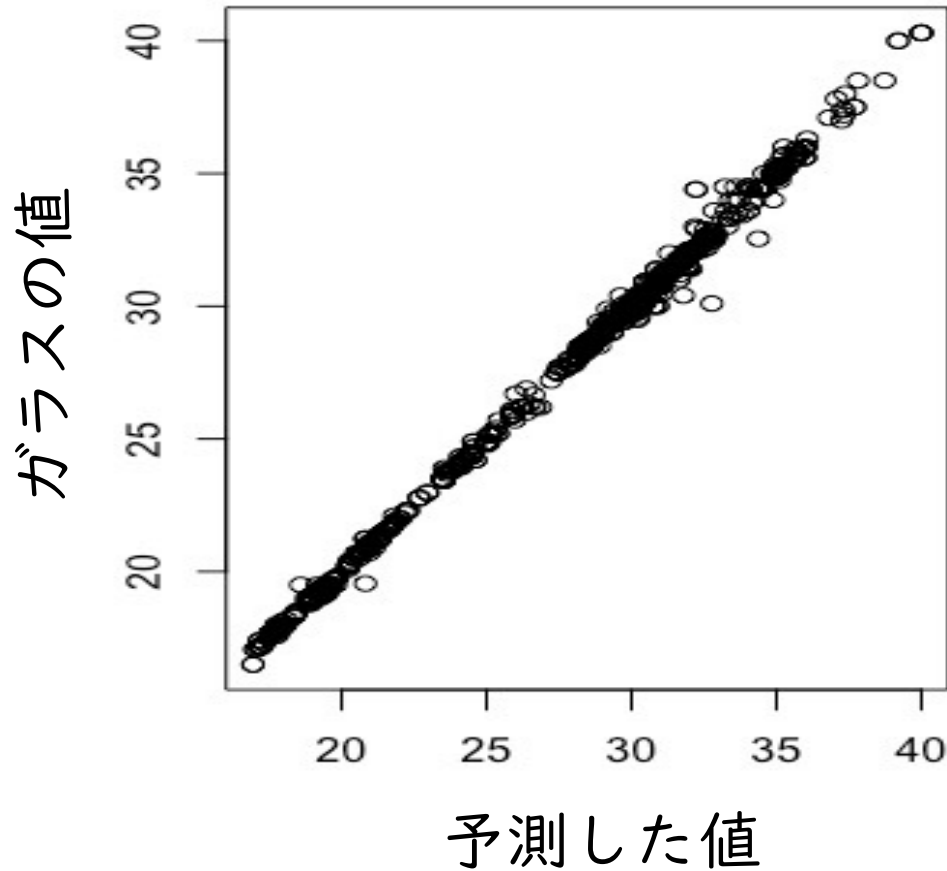
・ガウス過程の予

$$p\{y^* | x^*, D\} = (k_*^T K^{-1} y, k_{**} - k_*^T K^{-1} k_*)$$

ベクトルや微分積分を使います

表計算ソフトでも計算できます

難しそうだけど、これだけで予測できるのは凄い！

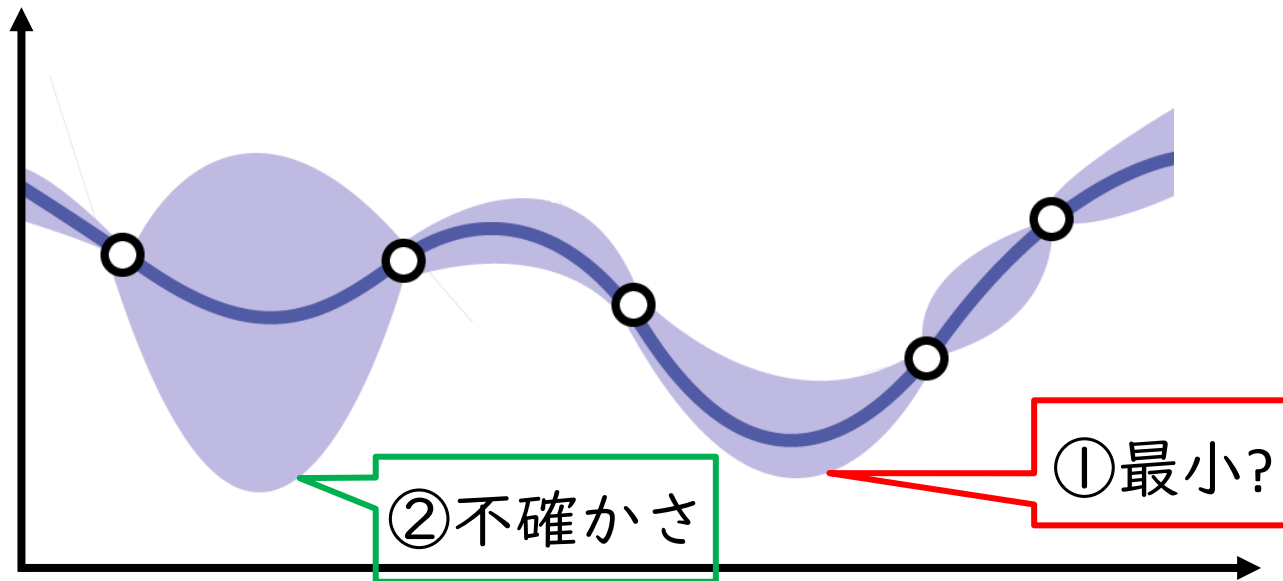


うまく予測することができた



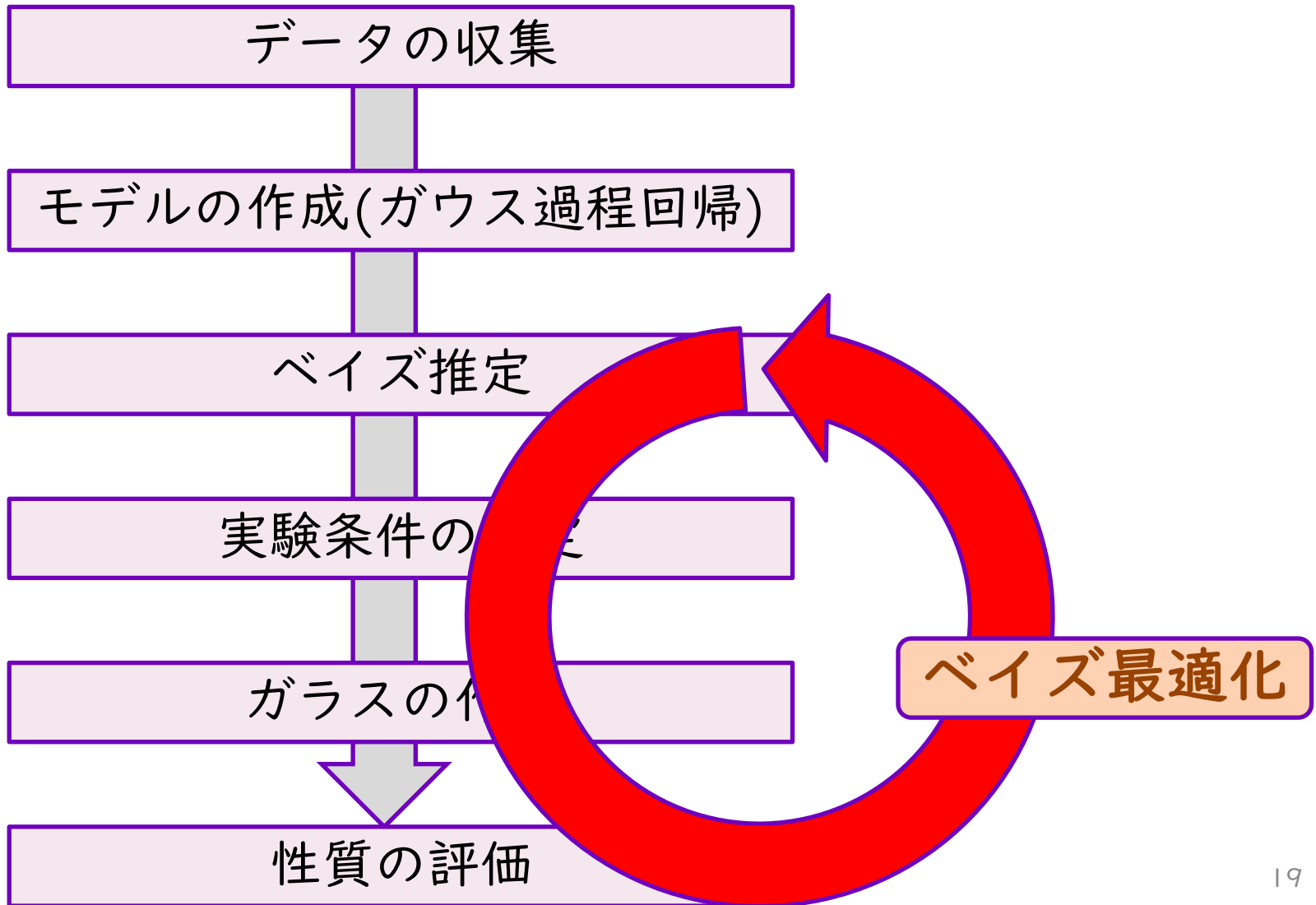
形状がわからない関数の最小値を求める方法

- ① 予測値の低いところから探す → 「活用」
- ② 不確かさの大きいところから探す → 「探索」



活用と探索の両方から次の選択点を提案する

$$p\{y^* | x^*, D\} = (k_*^T K^{-1} y, k_{**} - k_*^T K^{-1} k_*)$$





最初のガラス



2番目のガラス



3番目のガラス



機械学習で新しいガラスを見つけることができた

- ・この方法は一般的な方法なので、様々な対象に使える
- ・誰でも（“簡単に”とは言わないが）挑戦できる！

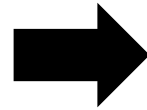


- ガラスってなんだろう
 - どこで使われている？
 - ガラスってなに？
 - ガラスの性質？
- 機械学習ってなんだろう
 - 機械が学習する？
 - ガラスの性質を機械学習しよう
- **おわりに**



原理原則に基づく理解

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(r) \right\} \Psi(r) = E\Psi(r)$$

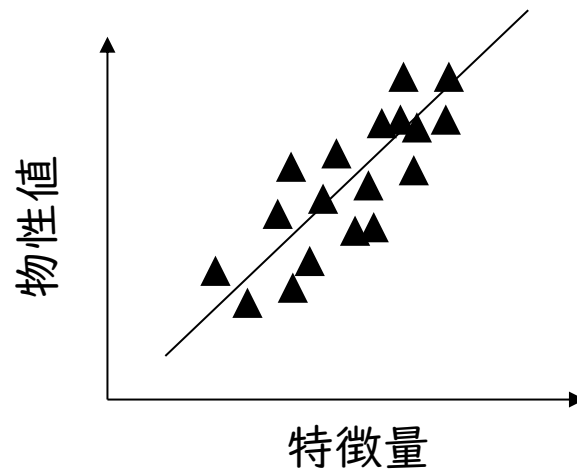


ガラスの性質の理解



Sunrising / PIXTA

経験(データ)に基づく理解



この関係がわかれば十分
(ということもある)

データ駆動型のアプローチ



- **回帰**
 - 直線あてはめ
 - ノンパラメトリック回帰
- **分類**
 - 数字の判別
- **クラスタリング**
 - グループ分け
- **パターンの発見**

何らかの関係が発見できた



数式で表現できるはず

|評価値 - 予想値| → 最小

$$A_1 > A_2 > \dots > A_k$$

数学やアルゴリズムで実装可能！



- 機械学習（データサイエンスの手法の一つ）は魔法の技術ではなく、誰でも使えます。
- 機械学習を使えば、あなたも世界の誰よりも先に新しいガラスをみつけられるかもしれません。

興味がでてきたら試してみよう!