

4. félévi beszámoló  
**Biricz András Mátyás** (andras.biricz@ttk.elte.hu)  
Statistikus Fizika, Biológiai Fizika és Kvantumrendszerek Fizikája PhD program  
Témavezető: Csabai István  
A dolgozat címe: Gépi tanulás a tudományokban  
2021.06.01.

## Bevezetés:

Az elmúlt évtizedek során tapasztalt rendkívül gyors technológiai fejlődésnek, az egyre bővülő és hozzáférhető adathalmazoknak, valamint a dinamikus fejlődő programcsomagoknak köszönhetően a gépi tanulás és mélytanulás egyre inkább mindennapi segédeszközzé válik a tudományban. Eddig számítási kapacitásban hatalmas kihívást jelentő és hagyományos, elméleti úton nem vagy nehezen megközelíthető problémák is vizsgálhatóvá válnak, korábban nem ismert összefüggések is megfigyelhetőek lettek, illetve lesznek. A mesterséges intelligencia modellek a tudomány szerteágazó területein bevethetőek és egy új, értékes megközelítési módot vázolnak fel. Ugyan hagyományos értelemben nem értelmezhetőek ezek az akár több milliós paraméterkészlettel rendelkező modellek, de a létjogosultságukat a velük elért teljesítmény igazolja. A doktori munkám célkitűzése a gépi tanulás és mélytanulás módszereinek elméleti és gyakorlati elsajátítása, mely főként a neurális hálóok különböző architektúráinak alkalmazásával, fejlesztésével természettudományos kutatásokban való részvételt jelenti.

## Az előző három félévben elért kutatási eredmények összefoglalása:

### *Az El-Nino jelenség előrejelezhetőségének vizsgálata*

Az első két félév során a tanulmányi és oktatási feladataim, illetve a doktori képzés során végzendő munkámhoz szükséges elméleti és gyakorlati tudás elsajátítása mellett főként a Nature-ben megjelent cikk [1] nyomán az El-Nino előrejelzés pontosításán dolgoztam gépi tanulás és mélytanulási algoritmusok segítségével. Az említett cikket kiindulási alapnak tekintettem, így elsőként a reprodukálásával próbálkoztam meg. Az ehhez szükséges adatokat a hivatkozott adatbázisokból<sup>1</sup> kikerestem és letöltöttem, majd pedig saját feldolgozó kódokkal<sup>2</sup> megfelelően előkészítettem a bemeneti adatokat a tanításhoz. Ezalatt többször diszkutáltam a témavezetőmmel, valamint a témában jártas szakértővel, Jánosi Imrével, illetve további publikációk is a segítségemre voltak [2][3]. Mivel az adatok előfeldolgozásáról rendkívül kevés információ szerepelt [1]-ben, felvettem a kapcsolatot a szerzőkkel is, akik nem tudtak/nem akartak minden feltett kérdésemre részletes választ adni. Így az általunk elfogadott módon dolgoztam fel az adatokat és adtam be az [1]-ben leírt modellnek bemenetként. Többszöri nekifutás, kódújraírás és jobb bemeneti adatok keresése, feldolgozása után sem sikerült az [1]-ben bemutatott eredményeket reprodukálni, így a témavezetőmmel arra a következtetésre jutottunk, hogy a cikk szerzői túlságosan optimisták voltak a saját eredményeik megítélésében. Valószínűleg, valamilyen nem kellően dokumentált hiba miatt átszivároghatott információ a tesztelésbe, ezért jöhettek ki [1]-ben meglepően jó eredmények. Úgy döntöttünk, hogy túl sok munka lenne alaposan felderíteni és alátámasztani a hibákat, úgyhogy ennek a témának a további vizsgálatát félretettük.

A második félév végétől, illetve a harmadik félév kezdetétől három kutatásba csatlakoztam.

---

1 <https://pcmdi.llnl.gov/mips/cmip5/>  
<https://climatedataguide.ucar.edu/climate-data/soda-simple-ocean-data-assimilation>  
<https://www.psl.noaa.gov/data/gridded/data.godas.html>

2 [https://github.com/abiricz/ENSO\\_DL](https://github.com/abiricz/ENSO_DL)

### *Pollenfelismerés*

A Nemzeti Népegészségügyi Központtal (NNK) való együttműködés keretében pollenmintákat tartalmazó tárgylemezek képeit digitalizálva, tanulómintát építve automatikus pollenrészecske felismerő szoftver fejlesztését tűztük ki célul. Kezdetben néhány pollenmintával teli referencia tárgylemezt sikerült beszkenneálni, illetve ezek digitális képeit felhasználva kipróbáltam egy objektumfelismerő mélytanulási modellt [4], mely a parlagfű szemcséit viszonylag jó eredménnyel képes detektálni. Referenciaként friss tanulmányok: [5][6]. A továbbblépéshez további minták digitalizálása szükséges.

### *Egydimenziós soktest-rendszer MI sűrűségfukcionálja a Hubbard-modellben*

Oroszlány Lászlóval és Barcza Gergellyel közösen elkezdtem gépi tanulási módszereket alkalmazni egy kvantummechanikai soktest probléma számolásában. Kezdetben egy korábbi cikk [7] reprodukcióját tűztük ki, melyet a későbbiekben meg szeretnénk haladni. A reprodukció sikeres volt: a szükséges adatokat elkészítettük, feldolgoztuk, majd pedig a cikkben említett modellt felépítettem, kiértékeltem.

### *Humánmobilitás vizsgálata, előrejelzése*

Szabó Tündével (Csillagászati és Földtudományi Kutatóközpont) belekezdtem mobilcella adatokon alapuló kutatásba, mely során a humánmobilitást vizsgáltam, a regisztrált mozgásokból gráfokat építettem, melyeken elemzéseket végeztem, illetve (gráf) neurális hálók alkalmazásával forgalomelőrejelzésre készítettem terveket [9][10] alapján. Az eddigi eredményeimet a TK MILAB bemutatkozó konferenciáján előadtam, illetve a munkám során megírt kódokból egy github könyvtárat hoztam létre<sup>3</sup>.

## **Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése:**

### *Pollenfelismerés*

A korábban digitalizált parlagfű referencia tárgylemezek után sikerült három másik, valós körülmények között felvett tárgylemezről is felvételt készíteni. Így lehetőség nyílt a munkafolyamat megtervezésére és egy demonstráció készítésére, melyeket el is végeztem. Az NNK által biztosított tárgylemezeket egy 3DHistech patológiai szkennelrel digitalizálva a Cytomine szoftver segítségével böngészőn keresztül meg lehet tekinteni és a felügyelt tanításhoz szükséges annotációkat be lehet jelölni. Ezzel a módszerrel az NNK szakértő munkatársai egyszerűen és gyorsan tudnak a képeken dolgozni. Az annotációk információit felhasználva képfelismerő AI segítségével az eddig nem látott tárgylemezek is osztályozhatóak a pollenek. A predikciók visszatölthetőek a Cytomine-ba, ahol a szakértők ellenőrizhetik a modell teljesítményét és bővíthetik a tanulómintát. A félév során segítettem a Cytomine telepítésében, megtanultam a használatát, valamint demonstrációs célból összeállítottam a Detectron2 csomag használatával egy egyszerű modellt 3 különböző pollenrészecske felismerésére. A minták digitalizálását követően a folyamat automatikusan képes működni. Ezen túl tudományos publikáció tervezéséhez irodalomkutatást is végeztem [11][12][13][14][15].

### *Egydimenziós soktest-rendszer MI sűrűségfukcionálja a Hubbard-modellben*

Az előző félévben elvégzett munkára építkezve további vizsgálatokat végeztem el a kiindulásnak tekintett publikációban [7] részletezett eredmények meghaladásához. Oroszlány Lászlóval és Barcza Gergellyel közösen vizsgáltuk a bemeneti adatok eloszlásait mind fizikai, mind pedig statisztikai megközelítésből. A [7]-ben szereplő egyetlen kiválasztott eset mellett eltérő paraméterbeállítással (különböző kölcsönhatás-erősség és elektronszám-betöltöttség) további érdekes eseteket állítottunk elő. Így is vizsgáltuk, hogy miképp működik a korábbi neurális háló,

---

3 <https://github.com/abircz/cellphone>

valamint hogy képes-e a transfer learningre. Az eredmények tisztázása és kisebb problémák megoldása után tudományos publikációban szeretnénk összefoglalni a munkánkat.

### *Humánmobilitás vizsgálata, előrejelzése*

Az előző féléves adatfeldolgozást továbbfejlesztettem, a mobilitási gráfokat a mobilcellák átfedési arányait felhasználva korrigáltam, valamint elkészítettem a gráf neurális hálók bemenetére beadható formátumban az adatokat. Demonstrációs célból egy egyszerűbben kezelhető gráf neurális hálót implementáló programcsomagot<sup>4</sup> ki is próbáltam, mely eredményei megfeleltek az előzetes elvárásaimnak. A továbblépéshez szükséges bonyolultabb modellekhez elkezdtem beletanulni egy másik csomag használatába is<sup>5</sup>. Ezzel párhuzamosan irodalomkutatót is végeztem. Egy tavalyi publikáció [16] meghaladása a legújabb gráf neurális háló architektúrák alkalmazásával [17] érdekes feladat, mely eredményeit egy tudományos publikációban lehetne közölni.

### **Publikációk:**

Jelenleg három kéziratot dolgozom első szerzőként. A kvantummechanikai soktest-rendszer mesterséges intelligencia segítségével történő vizsgálatát bemutató kézirat előrehaladott állapotban van, várhatóan még a nyáron beküldésre kerül a Phys. Rev. B-be. Reményeink szerint a másik két futó projekt eredményei is hamarosan beküldésre kerülnek nemzetközi tudományos folyóiratba.

### **Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben:**

Összesen 1 kurzust vettem fel és végzek majd el:

-Az érzékelés biofizikája II.: Bioakusztika (FIZ/3/045E).

Ezenkívül a PhD képzés korábbi féléveiben 6 tárgyat jeles, egyet pedig jó érdemjeggyel teljesítettem.

### **Konferenciák, workshopok a képzés alatt:**

Az első félévtől kezdve részt vettem a tanszéken tartott olvasószemináriumon, melyen a mesterséges intelligenciával kapcsolatos érdekességekkel, újdonságokkal foglalkoztunk.

További események:

-2019.10.01.: BME TMIT & NVIDIA DLI Workshop: Fundamentals of Deep Learning for Natural Language Processing hosted by EIT Digital,

-2019.10.29.: Single-Cell Bioinformatics Conference at Biopartner Center Leiden organized by BISC Global & Single Cell Discoveries,

-2019.11.25-26.: Academia-Industry Matching Event (AIME) Artificial Intelligence, Machine Learning Workshop organised by CERN, SZTAKI and WIGNER RCP together with the HEP Tech Network,

-2019.12.12.: Budapest Deep Learning Reading Seminar: Cutting-Edge Gradient Descent Variants Theory and Practice.

-2021.01.12.: TK MILAB bemutatkozó konferenciáján online adtam elő.

---

4 <https://github.com/danielegrattarola/spektral>

5 [https://github.com/benedekrozemberczki/pytorch\\_geometric\\_temporal](https://github.com/benedekrozemberczki/pytorch_geometric_temporal)

A jelenlegi félévben továbbra is folytatódó járványhelyzet miatt nem tudtam részt venni személyesen konferenciákon, workshop-okon.

### **Oktatási tevékenység az aktuális félévben:**

A doktori képzés első két éve során az alábbi tárgyak oktatásában vállaltam szerepet:

-2019/2020/1 Programozási alapismeretek (progalapf17va, 3 kredit) (korábban C programozás (if1c2m05, 3 kredit)) - gyakorlat - heti 2 óra,

-2019/2020/1 Adatbányászat és gépi tanulás (dsminingf17vm, 4 kredit) - gyakorlat - heti 2 óra,

-2019/2020/2 A fizika numerikus módszerei (fiznum1f19la, labor, 3 kredit) - gyakorlat - heti 2 óra,

-2019/2020/2 Tudományos modellezés számítógépes laboratórium (dsscimodf17lm, labor, 5 kredit) - gyakorlat - heti 2 óra,

-2020/2021/1 Adatbányászat és gépi tanulás (dsminingf17vm/dsminingf20vm/FIZ/3/084, 4/6/6 kredit) – gyakorlat - heti 2 óra,

-2020/2021/1 Haladó numerikus módszerek (progalapf17va/halnumf19la, 3/3 kredit) - gyakorlat - heti 2 óra,

-2020/2021/1 Számítógépes alapismeretek (szamalapf18la/szamalapf19la, 4/4 kredit) - gyakorlat - heti 2 óra,

-2020/2021/1 Számítógépes szimulációk (compsimf17em/compsimf20em/ff2n1t08, 2/3/2 kredit) - gyakorlat - heti 1 óra,

-2020/2021/2 Deep learning és gépi tanulás a tudományokban (deplea17em/FIZ/3/089, 2/6 kredit) - előadás - 2x 2 óra összesen.

### **Hivatkozások:**

[1] Ham, Y., Kim, J. & Luo, J. Deep learning for multi-year ENSO forecasts. Nature 573, 568–572 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41586-019-1559-7>.

[2] Saha, M, Nanjundiah, RS. Prediction of the ENSO and EQUINOO indices during June–September using a deep learning method. Meteorol Appl. 2020; 27:e1826. <https://doi.org/10.1002/met.1826>

[3] He, Dandan & Lin, Pengfei & Liu, Hailong & Ding, Lei & Jiang, Jinrong. (2019). DLENZO: A Deep Learning ENSO Forecasting Model. 10.1007/978-3-030-29911-8\_2.

[4] Yuxin Wu and Alexander Kirillov and Francisco Massa and Wan-Yen Lo and Ross Girshick 2019. Detectron2, <https://github.com/facebookresearch/detectron2>

[5] Gallardo-Caballero, R., García-Orellana, C. J., García-Manso, A., González-Velasco, H. M., Tormo-Molina, R., & Macías-Macías, M. (2019). Precise Pollen Grain Detection in Bright Field Microscopy Using Deep Learning Techniques. Sensors, 19(16), 3583. doi:10.3390/s19163583

[6] A. R. d. Geus, C. A. Z. Barcelos, M. A. Batista and S. F. d. Silva, "Large-scale Pollen Recognition with Deep Learning," 2019 27th European Signal Processing Conference (EUSIPCO), A Coruna, Spain, 2019, pp. 1-5, doi: 10.23919/EUSIPCO.2019.8902735.

- [7] Nelson, James and Tiwari, Rajarshi and Sanvito, Stefano 2019. Machine learning density functional theory for the Hubbard model, *Phys. Rev. B* 99(7), American Physical Society, doi:10.1103/PhysRevB.99.075132
- [8] Giuseppe Carleo, Matthias Troyer, Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks, *Science* Vol. 355, Issue 6325, pp. 602-606 (2017), doi:10.1126/science.aag2302
- [9] Ji, B., & Hong, E. J. (2019). Deep-Learning-Based Real-Time Road Traffic Prediction Using Long-Term Evolution Access Data. *Sensors* (Basel, Switzerland), 19(23), 5327, doi:/10.3390/s19235327
- [10] Essien, A., Petrounias, I., Sampaio, P. et al. A deep-learning model for urban traffic flow prediction with traffic events mined from twitter. *World Wide Web* (2020). <https://doi.org/10.1007/s11280-020-00800-3>
- [11] S. Battiato, A. Ortis, F. Trenta, L. Ascari, M. Politi and C. Siniscalco, "Detection and Classification of Pollen Grain Microscope Images," 2020 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition Workshops (CVPRW), 2020, pp. 4220-4227, doi: 10.1109/CVPRW50498.2020.00498.
- [12] Sevillano V, Holt K, Aznarte JL (2020) Precise automatic classification of 46 different pollen types with convolutional neural networks. *PLoS ONE* 15(6): e0229751. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0229751>
- [13] Bourel, Benjamin & Marchant, Ross & de Garidel-Thoron, Thibault & Tetard, Martin & Barboni, Doris & Gally, Yves & Beaufort, Luc. (2020). Automated recognition by multiple convolutional neural networks of modern, fossil, intact and damaged pollen grains. *Computers & Geosciences*. 140. 104498. 10.1016/j.cageo.2020.104498.
- [14] Dunker, S., Motivans, E., Rakosy, D., Boho, D., Mäder, P., Hornick, T. and Knight, T.M. (2021), Pollen analysis using multispectral imaging flow cytometry and deep learning. *New Phytol*, 229: 593-606. <https://doi.org/10.1111/nph.16882>
- [15] Grant-Jacob, James & Praeger, Matthew & Eason, Robert & Mills, Ben. (2021). In-flight sensing of pollen grains via laser scattering and deep learning. *Engineering Research Express*. 3. 025021. 10.1088/2631-8695/abfd8.
- [16] Li, Shen & Li, Guofa & Cheng, Yang & Ran, Bin. (2020). Urban arterial traffic status detection using cellular data without cellphone GPS information. *Transportation Research Part C: Emerging Technologies*. 114. 446-462. 10.1016/j.trc.2020.02.006.
- [17] Jiang, W., & Luo, J. (2021). Graph neural network for traffic forecasting: A survey. *arXiv preprint arXiv:2101.11174*.