Identifikacija faznih prijelaza strojnim učenjem i metodom konfuzije

Ivan Emanuel Pavlov

Mentor: dr.sc. Vinko Zlatić

Zašto strojno učenje?

- Veliki uspjesi strojnog učenja u brojnim područjima uključujući fiziku
- Fazni prijelazi – klasifikacijski problem u strojnom učenju
- Algoritmi direktno iz podataka uče pozadinsku fiziku
- Mogućnost identificiranja nepoznatih faznih prijelaza

2d Ising model

$$H = -J \sum_{<i,j>} \sigma_i \sigma_j \qquad T_c = 2.269 \frac{J}{k_B}$$

- Ispod T_c -feromagnetska faza, iznad T_c –paramagnetska faza

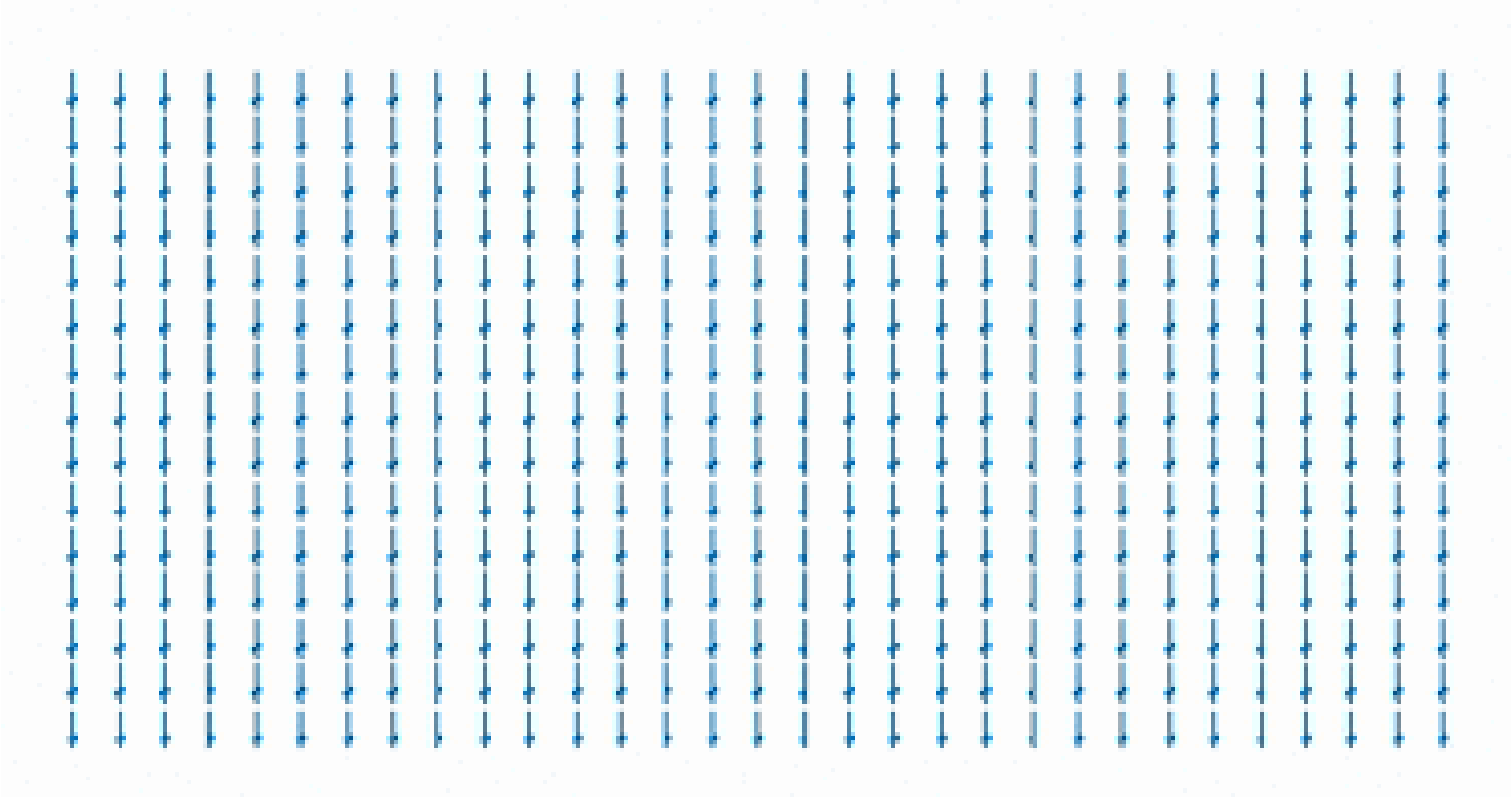
- $P_\mu = \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{k_B T} E_\mu}$ - vjerojatnost da je sustav u stanju μ

2d XY model

$$H = -J \sum_{<i,j>} \vec{s_i}\vec{s_j} = -J \sum_{<i,j>} \cos(\theta_i - \theta_j) \qquad \frac{T_c}{J} = 0.893 \pm 0.002K$$

- $P_\mu = \frac{1}{Z} e^{-\frac{1}{k_B T} E_\mu}$ - vjerojatnost da je sustav u stanju μ
- Mermin-Wagnerov teorem (za kontinuirane simetrije)
  - Ne postoji uređena faza u 2d no može postojati fazni prijelaz
- Topološki fazni prijelaz
- Spinski vrtlozi umjesto pojedinih spinskih usmjerenja

Animacija anihilacije spinskih virova

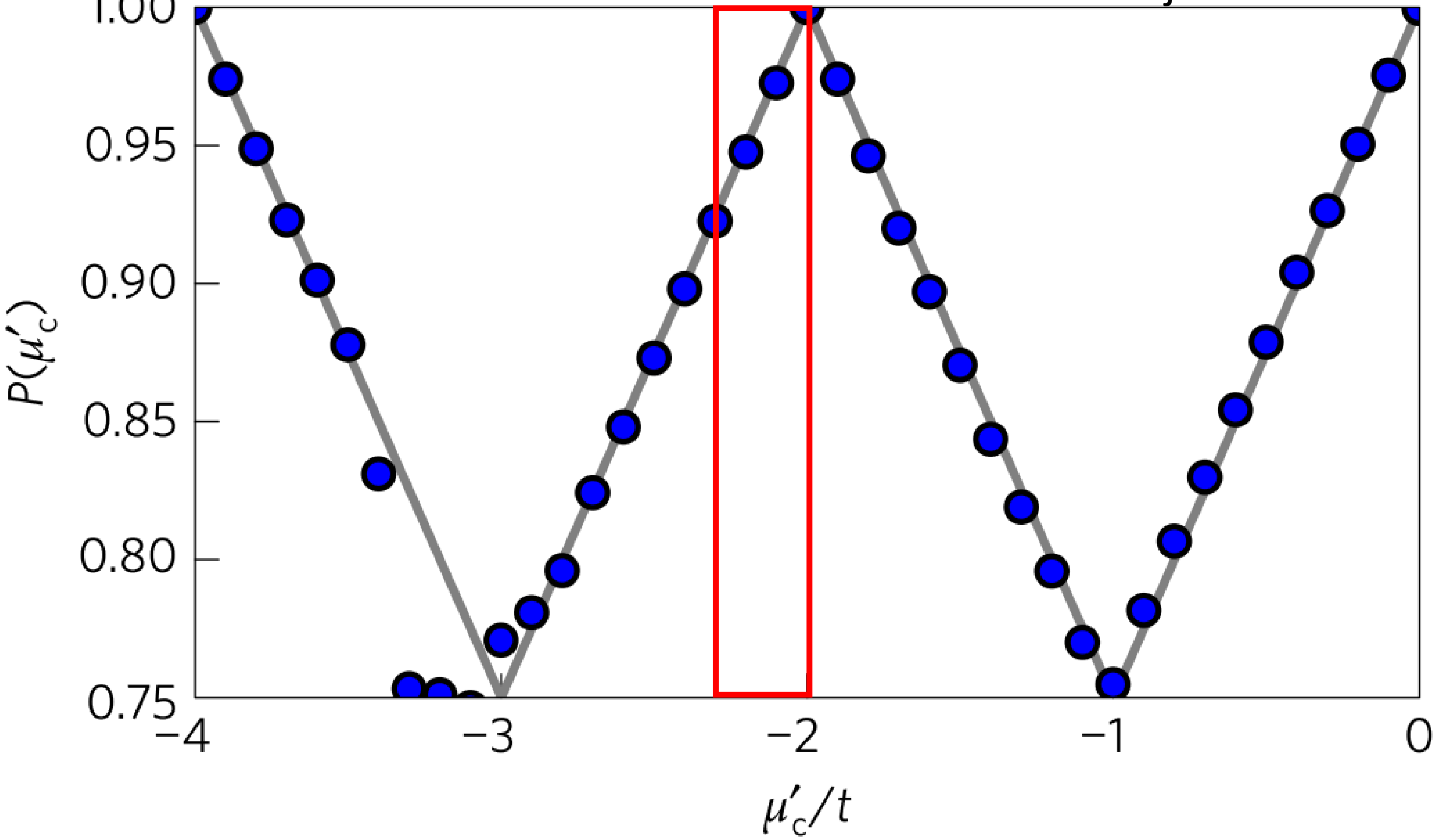


Metoda konfuzije

- Metoda označavanja skupa podataka
- Način prelaska s nenadziranog na nadzirano učenje
- Algoritam se “zbunjunje” parcijalno krivim označavanjem no uči na temelju većinski dobrih oznaka
- Preciznost algoritma ima W oblik krivulje

Ilustracija:

Krive oznake u crvenoj kućici



Monte Carlo metoda - Ising model

- Generiramo inicijalnu konfiguraciju generatorom slučajnih brojeva
- Izabiremo jednu ćeliju i računamo energetski doprinos ćelije sustavu

$$\boxed{dE(i,j) = -J \cdot S(i,j) \cdot \left(S(i+1,j) + S(i-1,j) + S(i,j+1) + S(i,j-1) \right)}$$

- Okrećemo spin u toj ćeliji

$$S(i,j) = -S(i,j) \quad \Rightarrow \quad dE'(i,j) = -dE(i,j)$$

$$\Delta E(i,j) = -2 \cdot dE(i,j)$$

- Generiramo slučajni broj p_{random} za koji vrijedi $0 \le p_{random} \le 1$

$$\text{Ako } \Delta E(i,j) < 0 \Rightarrow \quad S(i,j) = -S(i,j)$$

$$\text{Ako } \Delta E(i,j) > 0 \Rightarrow \begin{cases} \text{Ako} \quad e^{\frac{-\Delta E}{k_B T}} > p_{random} & \Rightarrow S(i,j) = -S(i,j) \\ \text{Inače} & \Rightarrow S(i,j) = S(i,j) \end{cases}$$

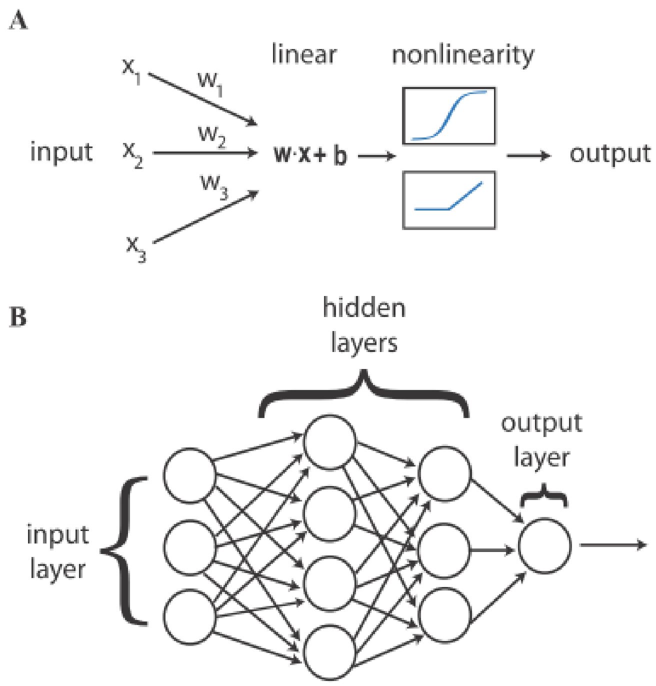
Monte Carlo metoda - XY model

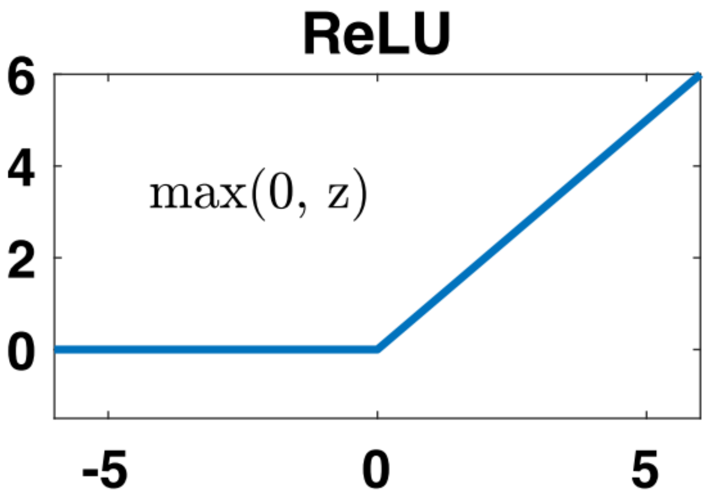
- Analogno Ising modelu

- Razlika:
  - Generiramo slučajni broj (novi kut) te računamo energetski doprinos ćelije s novim usmjerenjem spina
  - Računamo razliku energija sustava prije i poslije promjene orijentacije spina
  - Ostalo je isto kao u Ising modelu

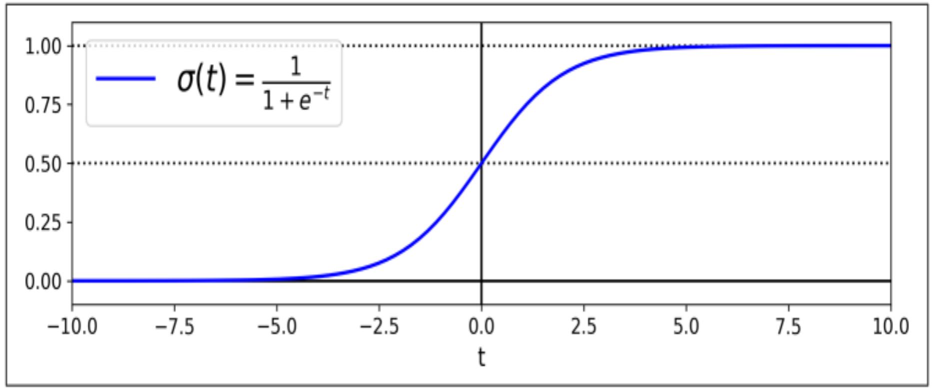
- Konfiguracije spremamo u listu - umjesto kuta spremamo sinus i kosinus kuta svake ćelije

Neuronska mreža





Sigmoidna aktivacijska funkcija (logistička)



"Loss function" - unakrsna entropija

$$C(\mathbf{w}) = -(1-y_i)\log\left[1-\sigma(\mathbf{x}_i^T\mathbf{w})\right].$$ + regularizacija

Parametri modela i neuronske mreže

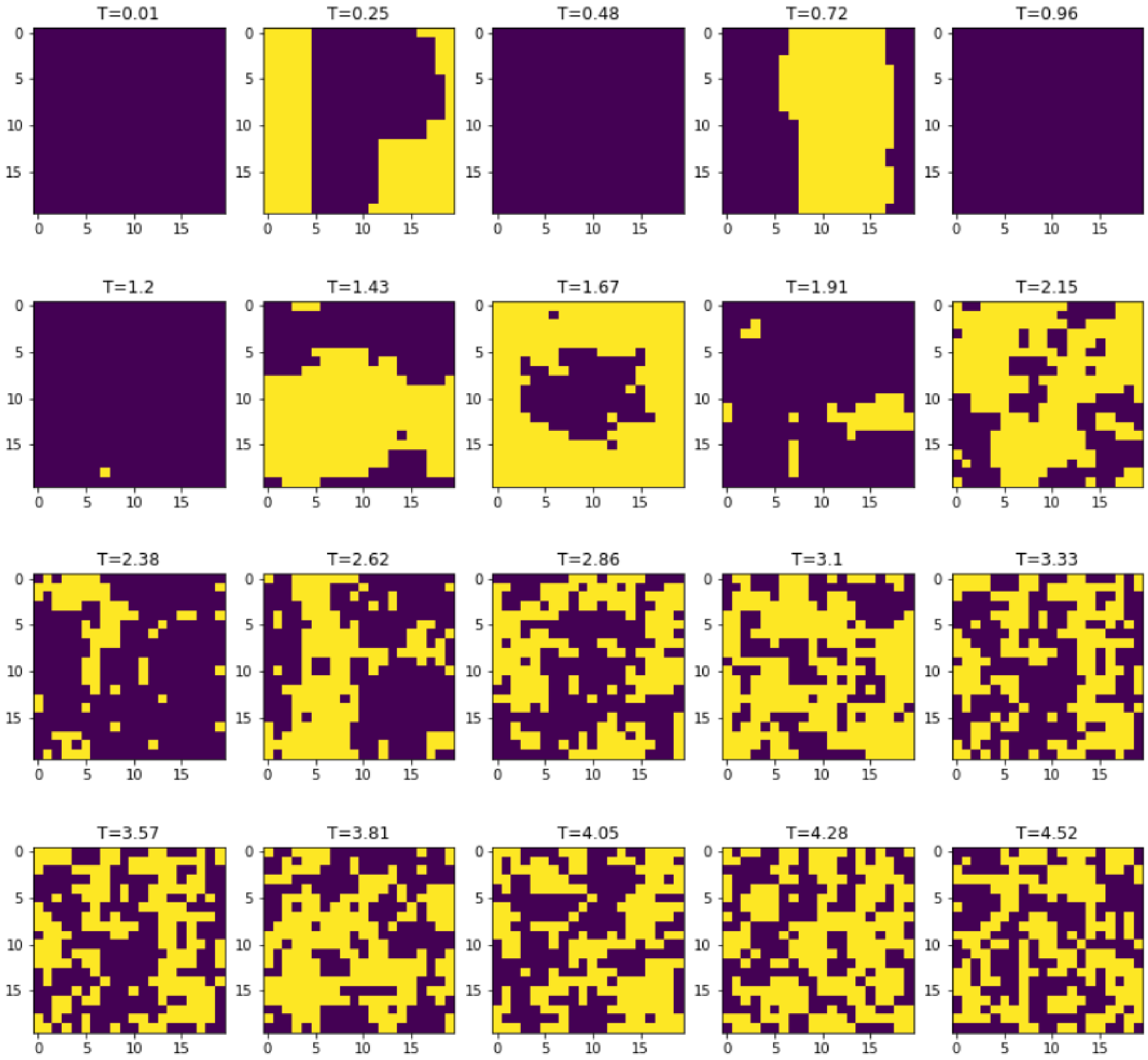
- Parametri oba modela su radi jednostavnosti postavljeni kao

$$\boxed{J = 1,\ k_B = 1}$$

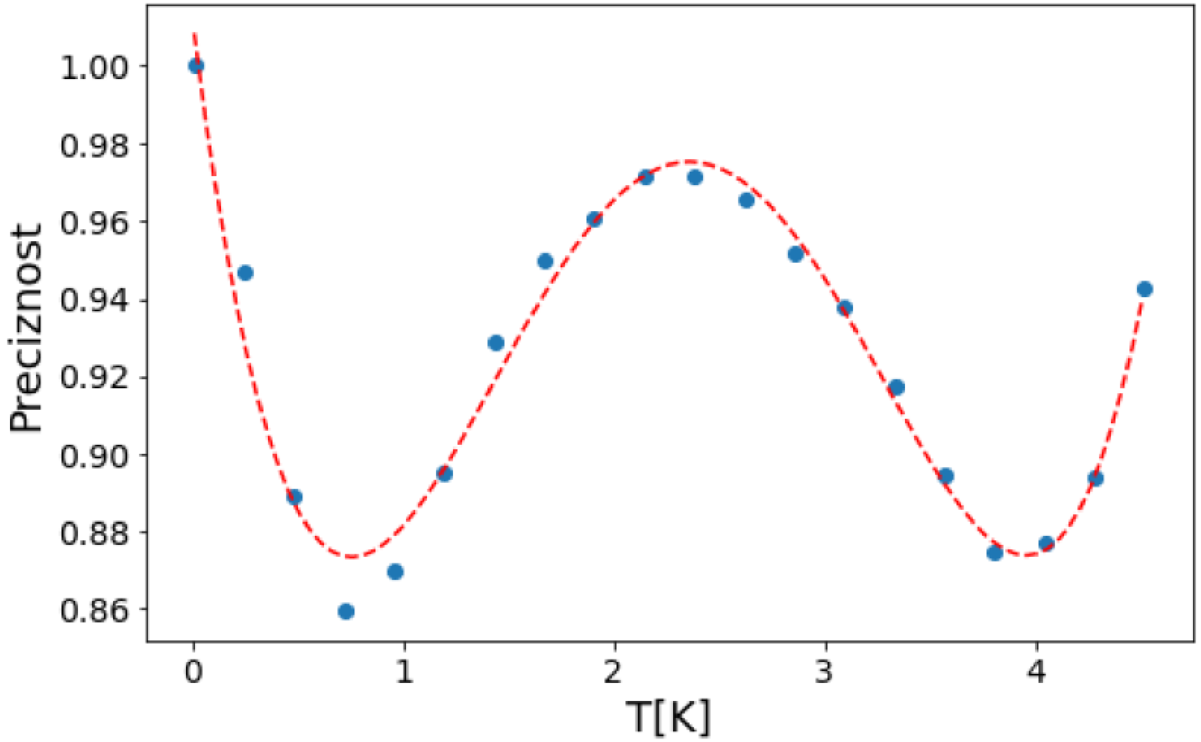
- 2000 spinskih konfiguracija za 20 temperatura u slučaju Isingovog modela u rasponu od 0 do 2*Tc (dakle 20 različitih neuronskih mreža)
- 2000 spinskih konfiguracija za 40 temperatura u slučaju XY modela rasponu od 0 do 2K (dakle 40 različitih neuronskih mreža)

- Rešetka veličine L*L, L=20 (to je i broj ulaza neuronske mreže)

Monte Carlo konfiguracije za Isingov model



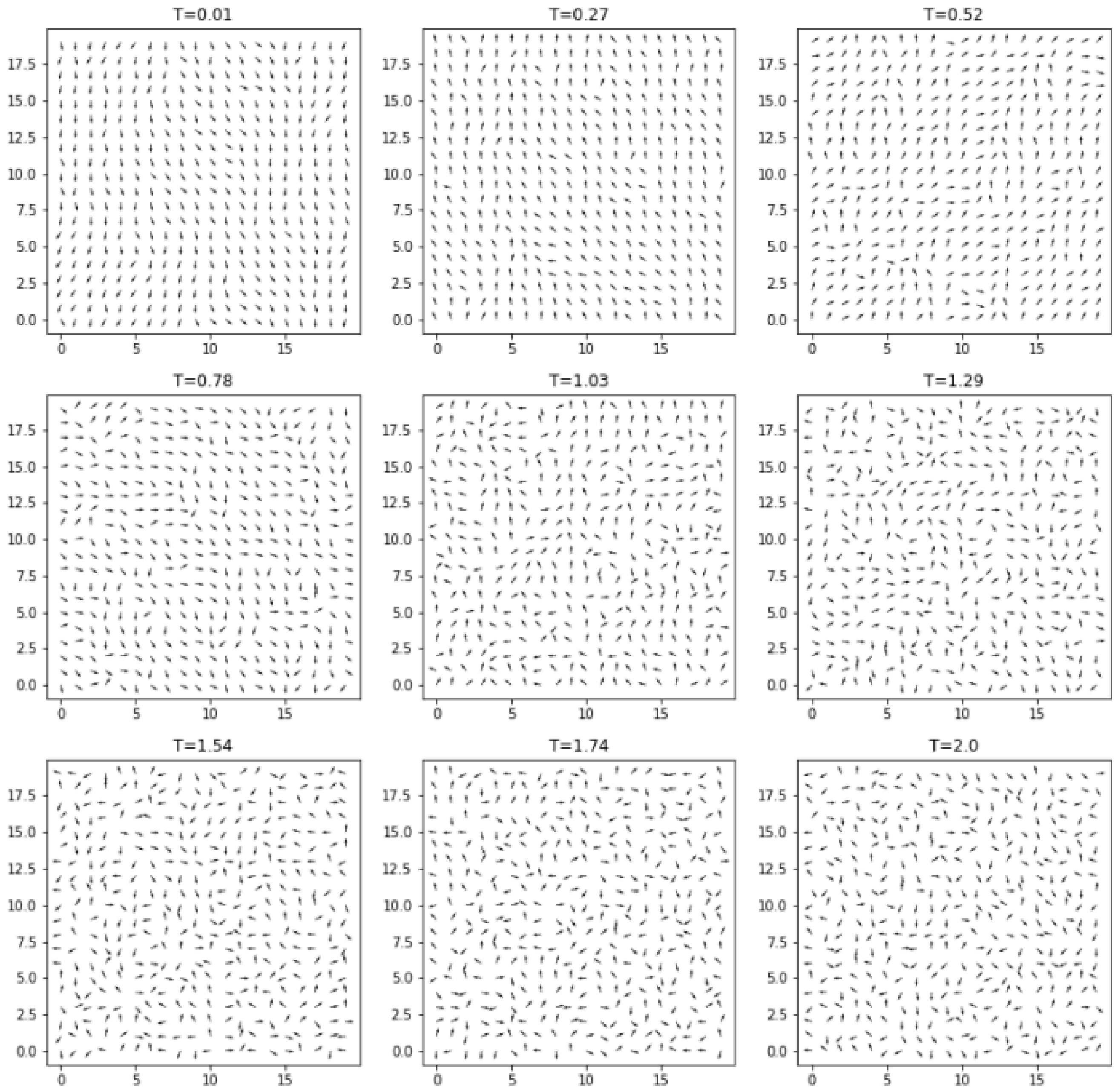
W krivulja preciznosti za Isingov model



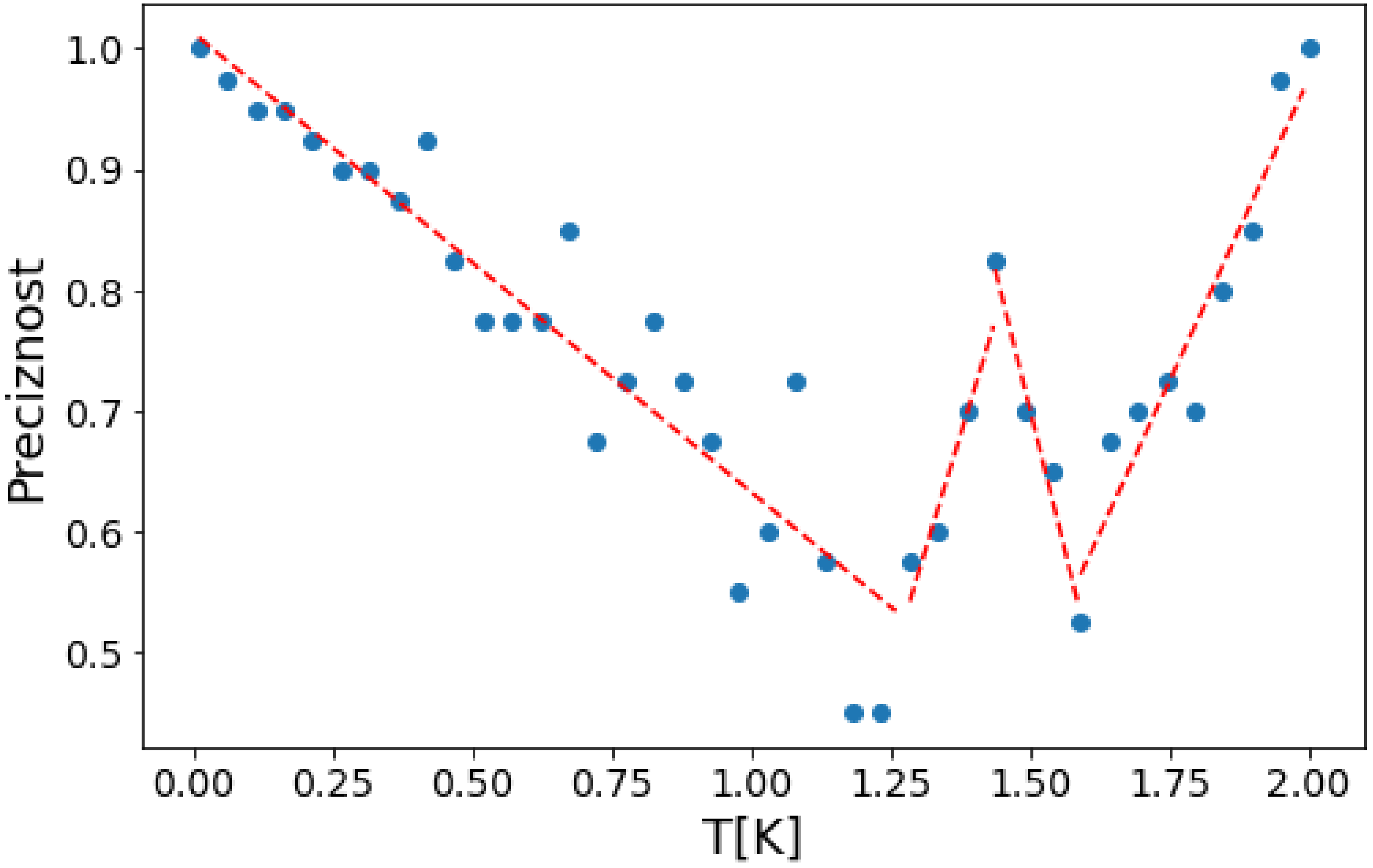
Slika 5: Preciznost 20 istreniranih neuronskih mreža za svaki od 20 odabira označavanja skupa podataka

- Vrh krivulje je između vrijednosti na T=2.15 i T=2.38.

Monte Carlo konfiguracije za XY model



W krivulja preciznosti za XY model



Slika 7: Preciznosti 40 različitih neuronskih mreža za 40 različitih označavanja podataka

- Vrh na T=1.43K. Idealno bi bio na 0.89K

Zaključak

- Metoda konfuzije uspješna na Isingovom modelu
- Metoda konfuzije manje uspješna na XY modelu
- Općenito, metoda se čini perspektivna u slučaju da su ulazi algoritma strojnog učenja dovoljno dobri (kao u Isingovom modelu)
- Inače, potrebno preprocesirati podatke da ulazi budu bolji
- Drugi modeli na koje bi se mogla primjeniti metoda konfuzije s konfiguracijama generiranima Monte Carlo simulacijom : trokutasti Ising, XY model s diskretnim kutevima (modeli sata)

Literatura

[1] Anders W. Sandvik. Computational Studies of Quantum Spin Systems. AIP Conference Proceedings 1297, 135 (2010)

[2] Sacha Friedli,Yvan Velenik. Statistical Mechanics of Lattice Systems, (2017)

[3] Barry M. McCoy and Tai Tsun Wu, The Two- Dimensional Ising Model. Harvard University Press, Cambridge Massachusetts, (1973)

[4] Evert P. L. van Nieuwenburg, Ye-Hua Liu and Sebastian D. Huber. Learning phase transitions by confusion. Nature physics, (2017).

[5] Song Sub Lee and Beom Jun Kim. Confusion scheme in machine learning detects double phase transitions and quasi-long-range order. Physical Review E, (2019)

[6] P. Olsson and P. Minnhagen, On the helicity modulus, the critical temperature and Monte Carlo simulations for the two-dimensional XY-model. Phys. Scr. 43, 203 (1992).

[7] Nielsen, Michael A. Neural networks and deep learning. Determination Press, (2015)

[8] Pankaj Mehta, Marin Bukov, Ching-Hao Wang, Alexandre G.R. Day, Clint Richardson, Charles K. Fisher, David J. Schwab. A high-bias, low-variance introduction to Machine Learning for physicists. Physics Reports,(2019)

[9] Aurelien G´eron.Hands-On Machine Learning with Scikit-Learn, Keras, and TensorFlow. O'Reilly Media, (2019)

Hvala na pažnji!