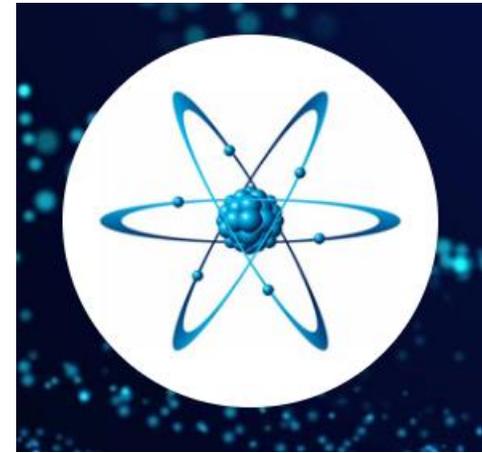


# Машинное обучение в задаче экстраполяции расчетов в модели оболочек без инертного кора

30 сентября – 6 октября 2024, Хабаровск  
XXII всероссийская научная конференция  
«Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование».



Collaborators:  
A. Mazur  
A. Shirokov  
R. Sharypov

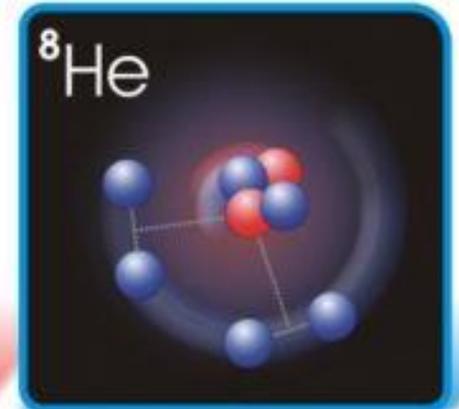
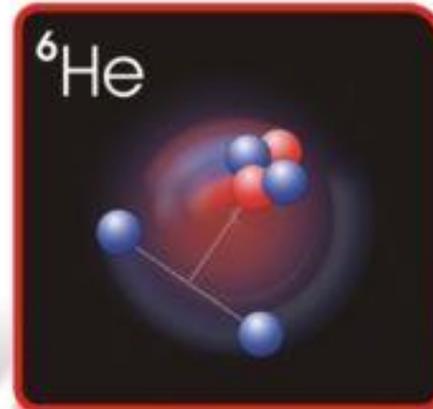
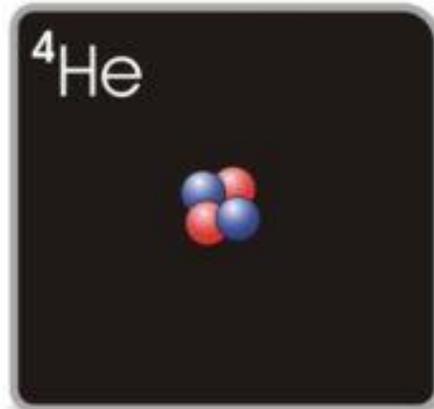
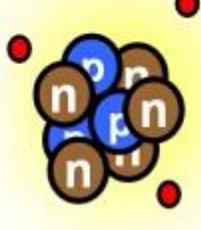
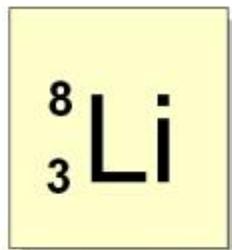
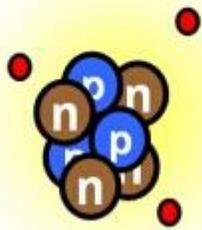
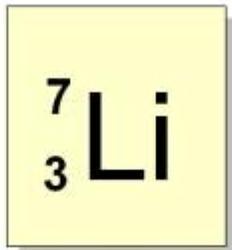
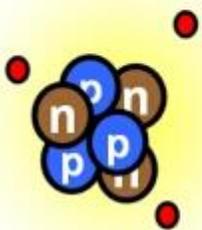
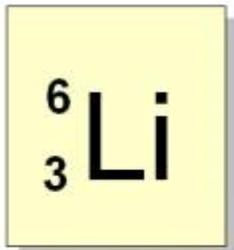


# Постановка задачи

- Из-за растущей вычислительной сложности расчетов в МОБИК есть нужда в методах экстраполяции
- Результаты расчетов в МОБИК содержат 2 параметра: число квантов возбуждения  $N_{max}$  и осцилляторную энергию  $\hbar\Omega$
- Существующие техники экстраполяции феноменологические (e.g. экспоненциальная Extrapolation B)
- → Следовательно, мы нуждаемся в новых методах экстраполяции

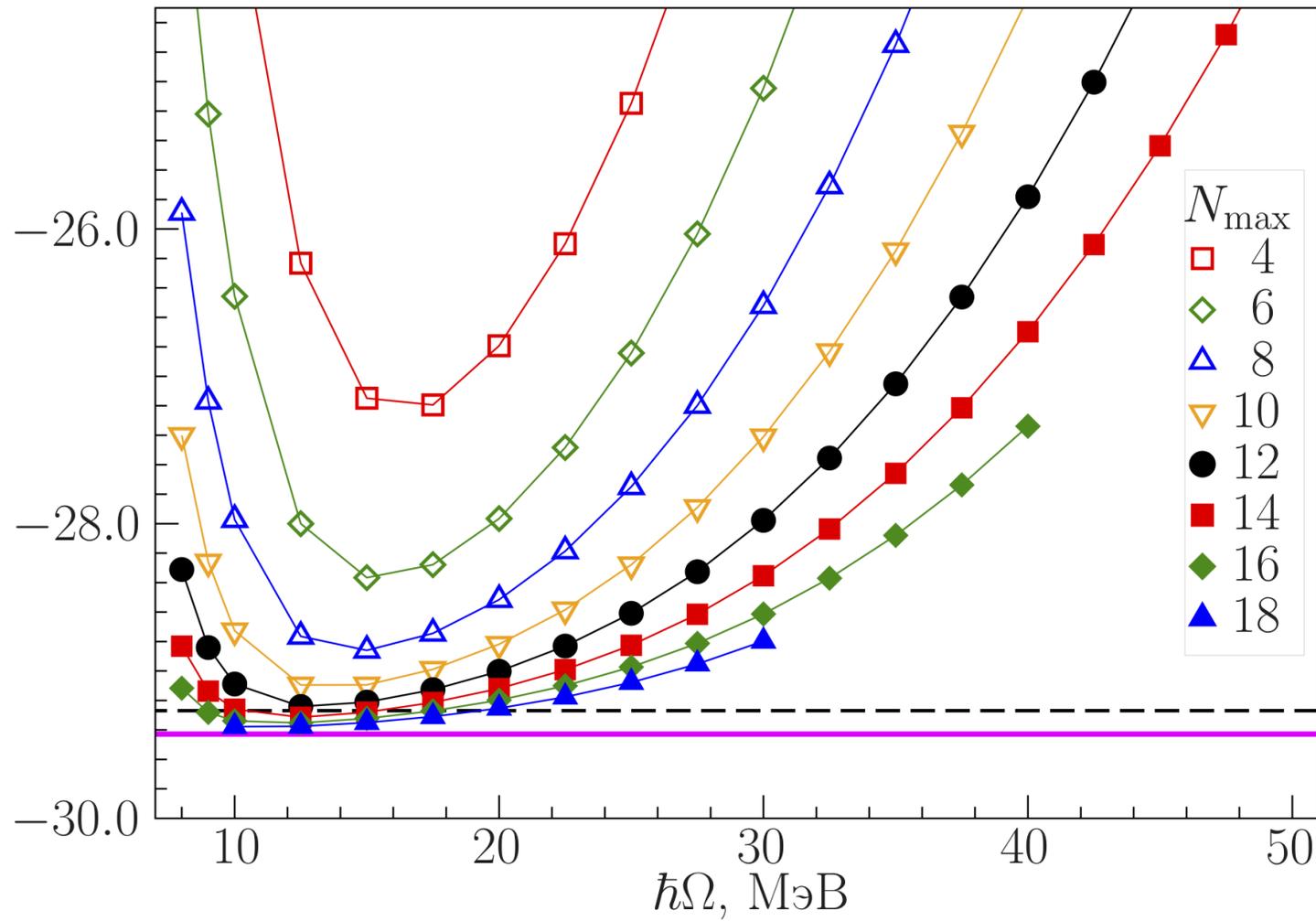
# Объект исследования

- Расчеты энергии и радиуса в МОБИК для ядер:
  - ${}^6\text{He}$
  - ${}^6\text{Li}$



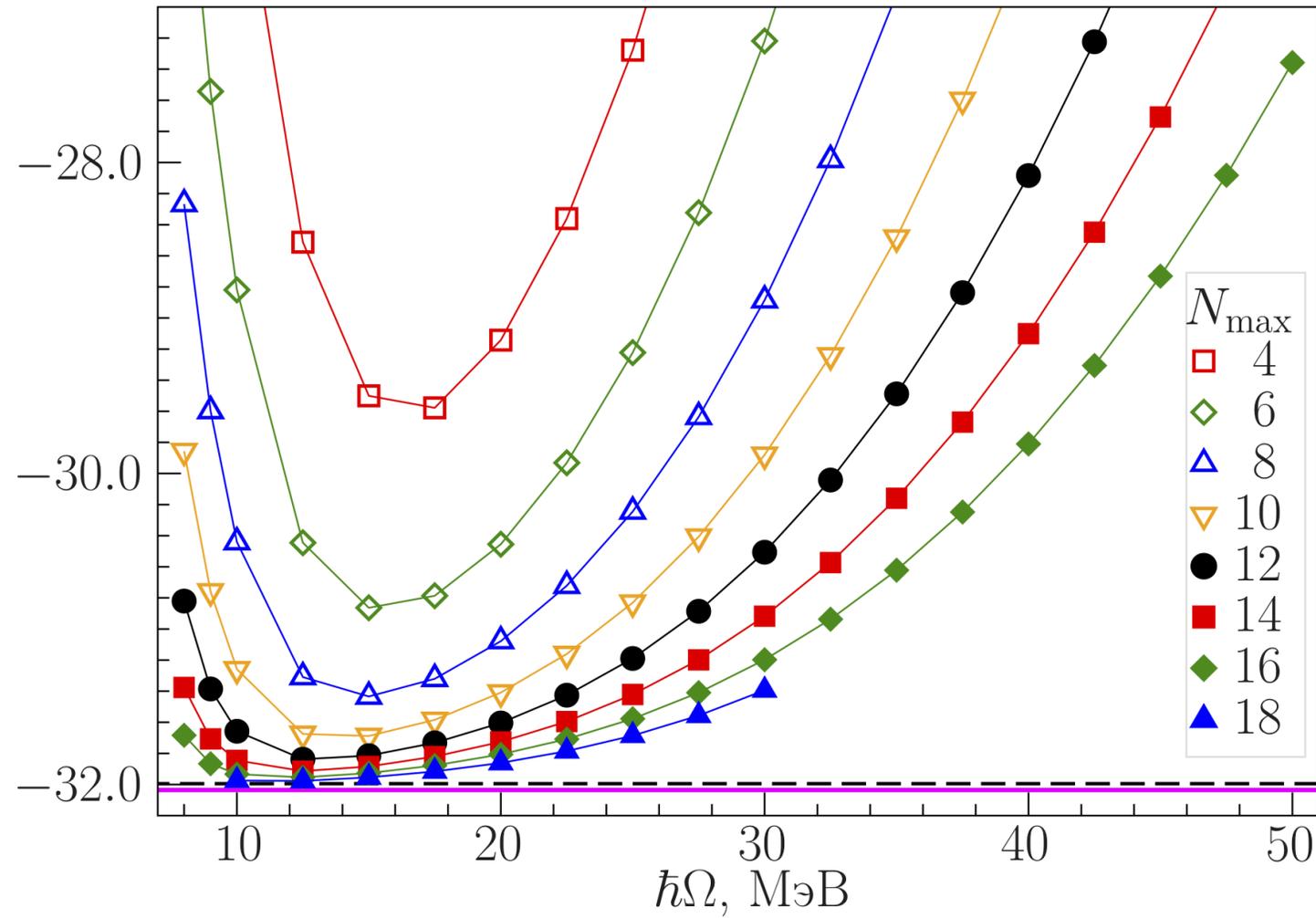
# Результаты расчетов энергии основного состояния для ядра ${}^6\text{He}$

$E$ , МэВ

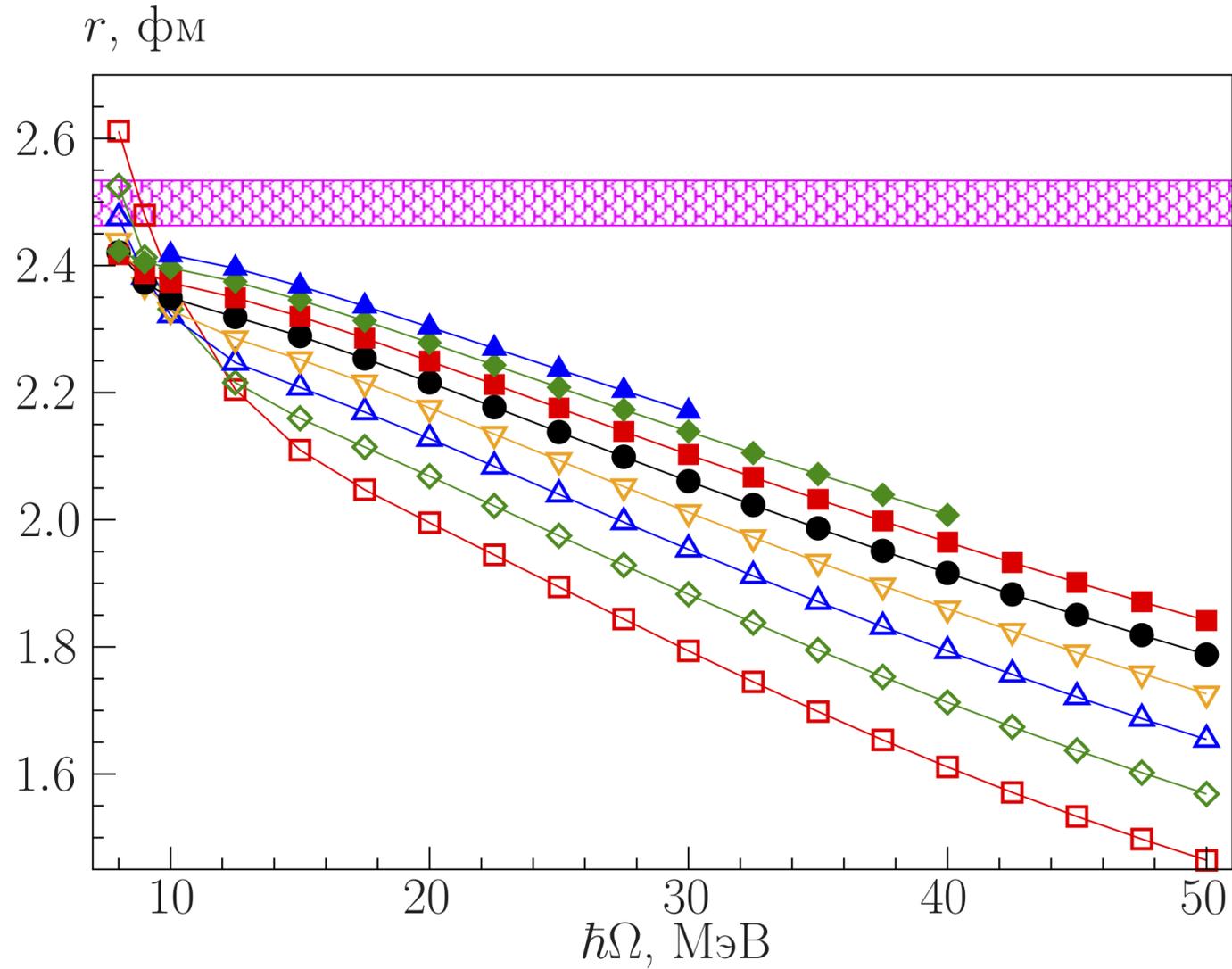


# Результаты расчетов энергии основного состояния для ядра ${}^6\text{Li}$

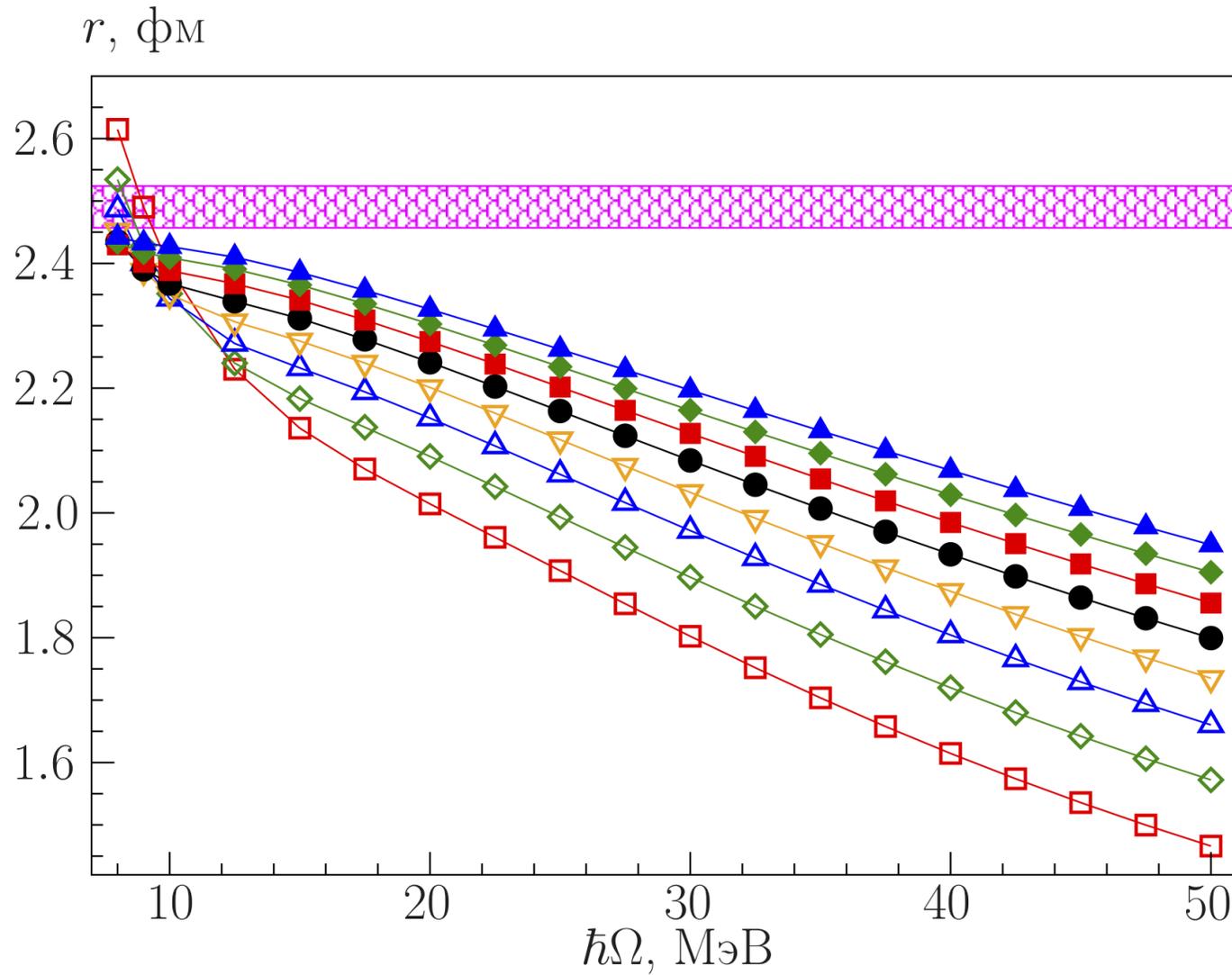
$E$ , МэВ



# Результаты расчетов материального радиуса ядра ${}^6\text{He}$

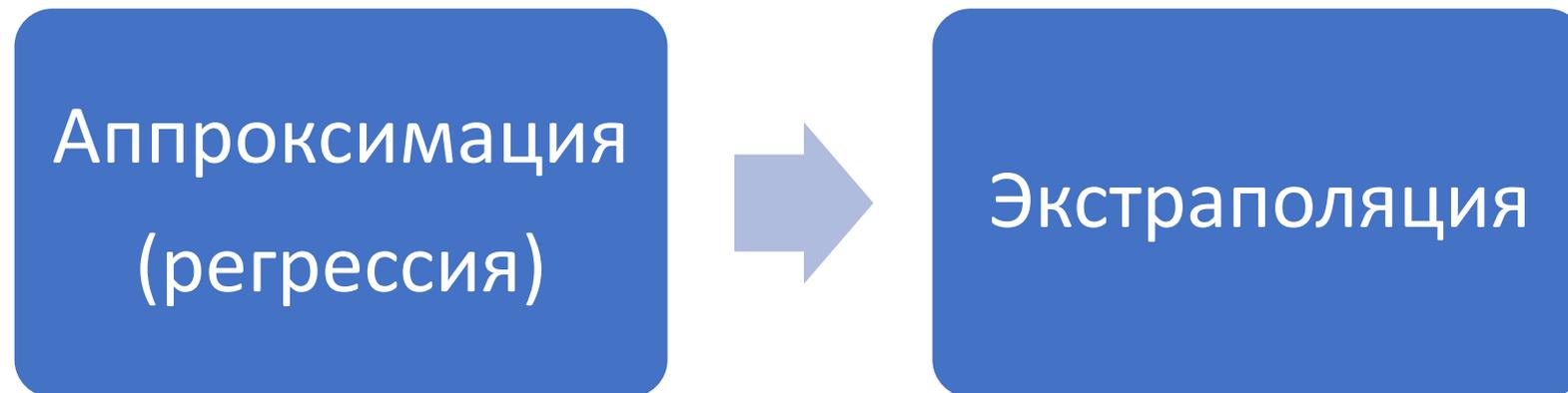


# Результаты расчетов материального радиуса ядра ${}^6\text{Li}$

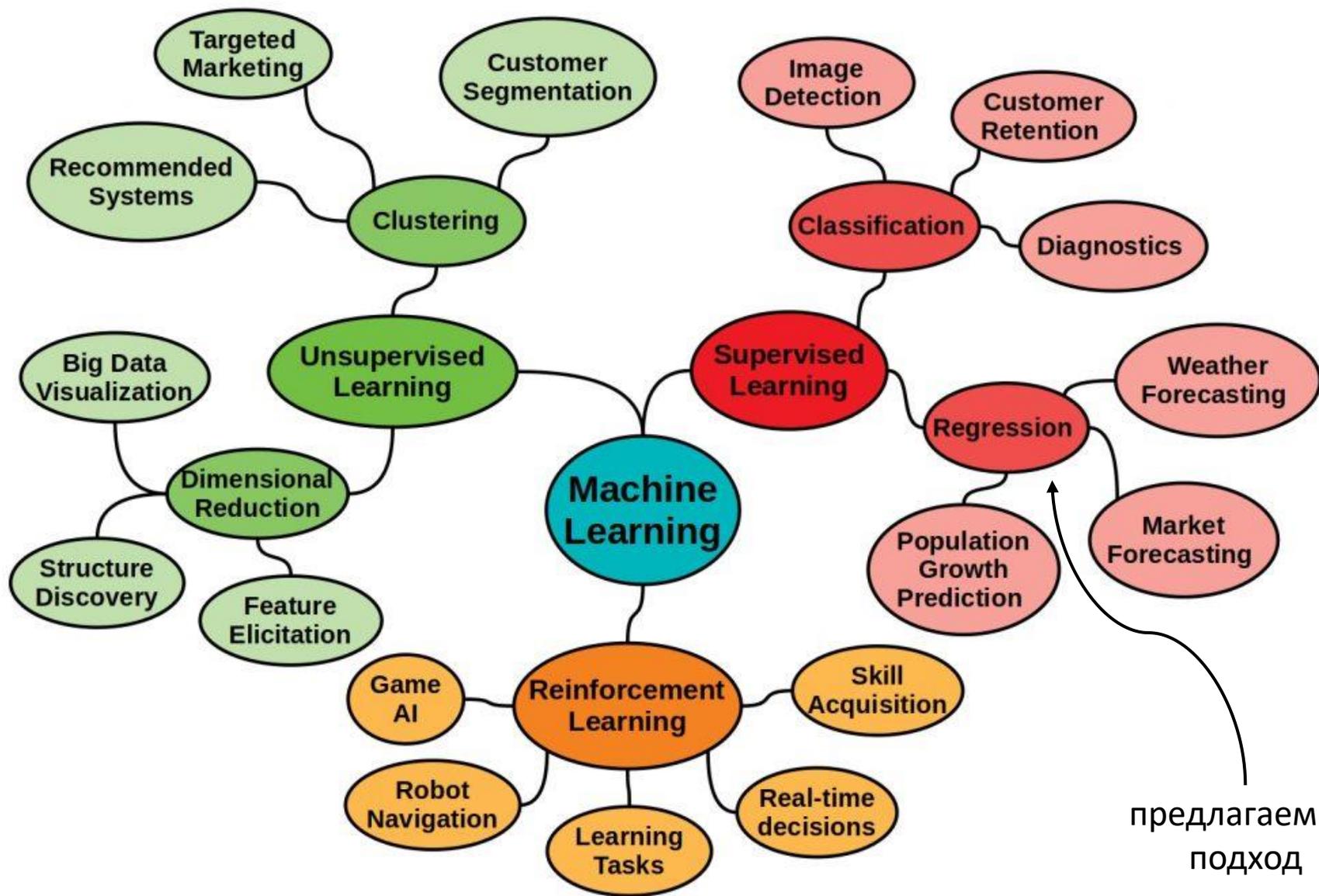


# Метод исследования

- Аппроксимация расчетов с помощью *модели* — искусственной нейронной сети
- Получение предсказаний при больших  $N_{max}$
- *Модель* не единственная, а *ансамбль*



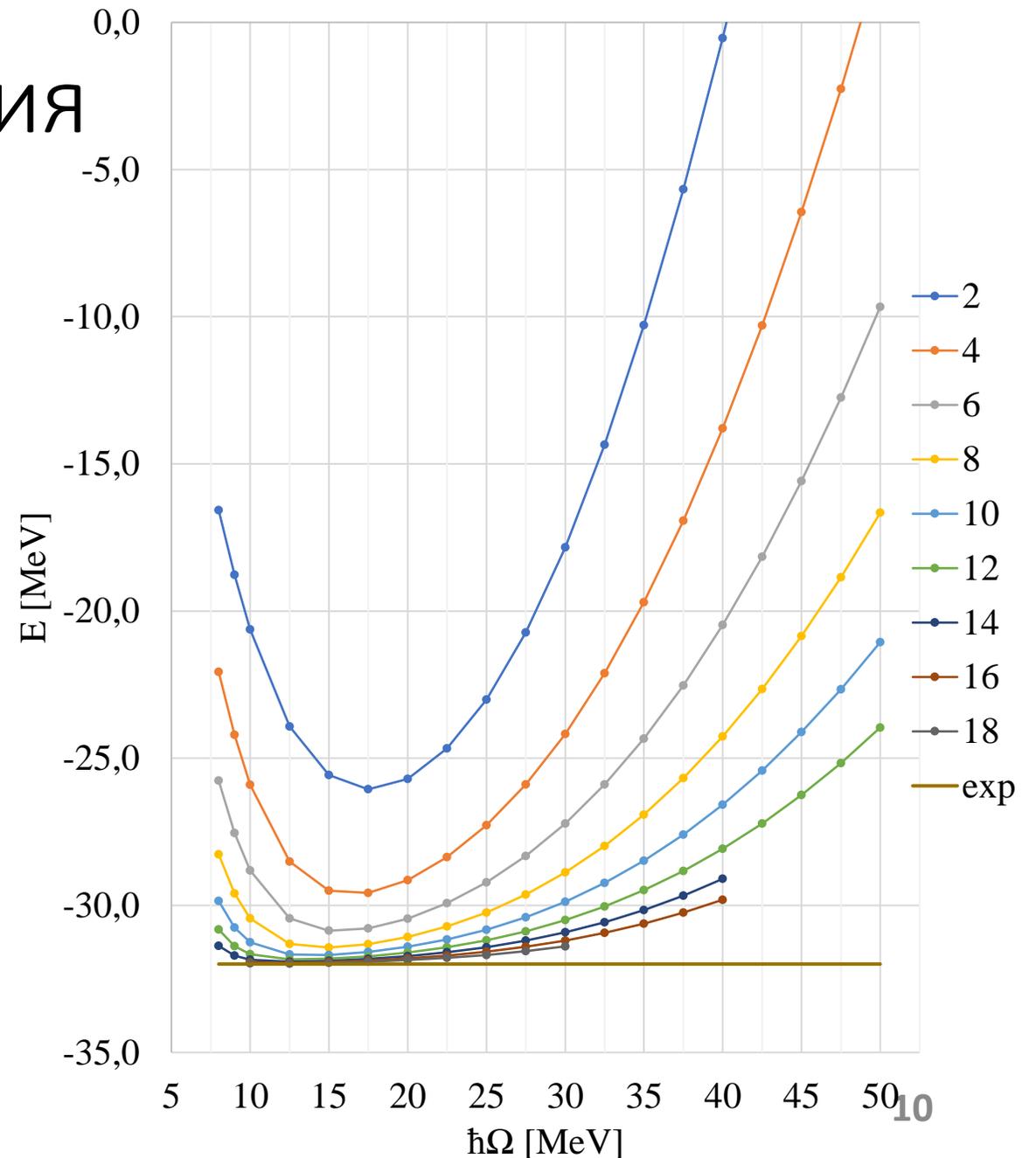
# Задачи машинного обучения



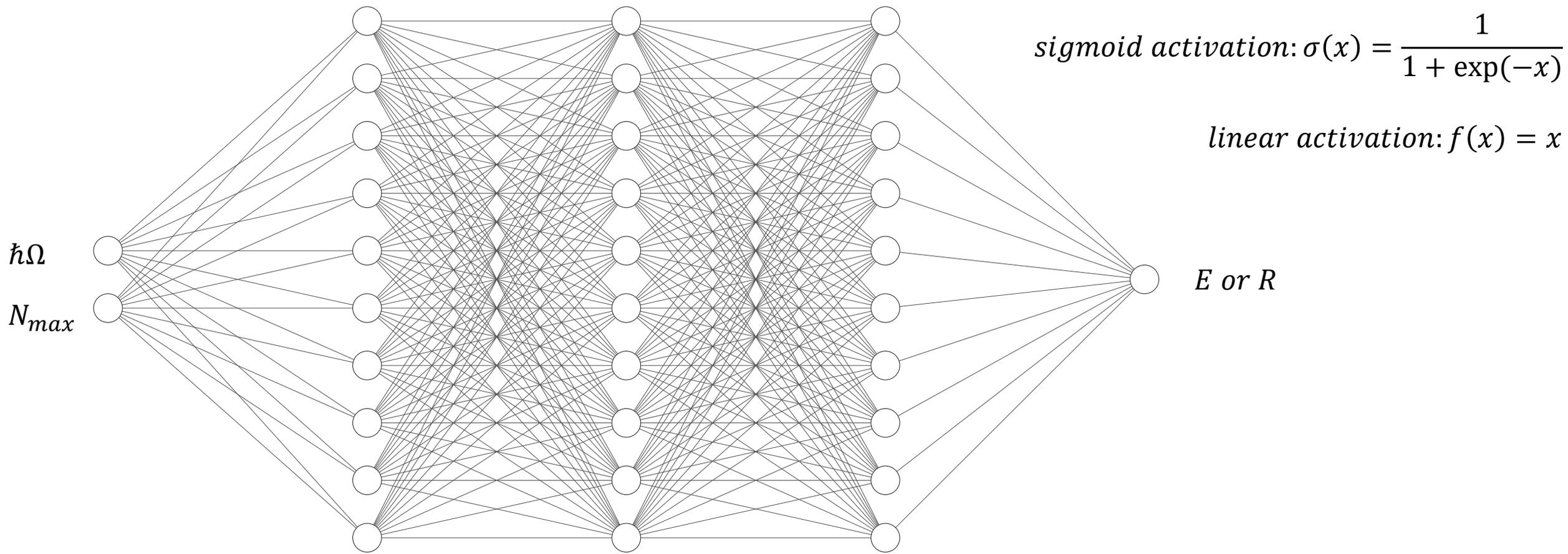
предлагаемый подход

# Априорная информация

- *Расчеты*: интервалы  $\hbar\Omega$
- Независимость от  $\hbar\Omega$  при больших  $N_{max}$
- *Энергия*: вариационный принцип
- *Модель* должна быть достаточно простой  $\Rightarrow$  ограничение на число параметров



# Топология нейронной сети

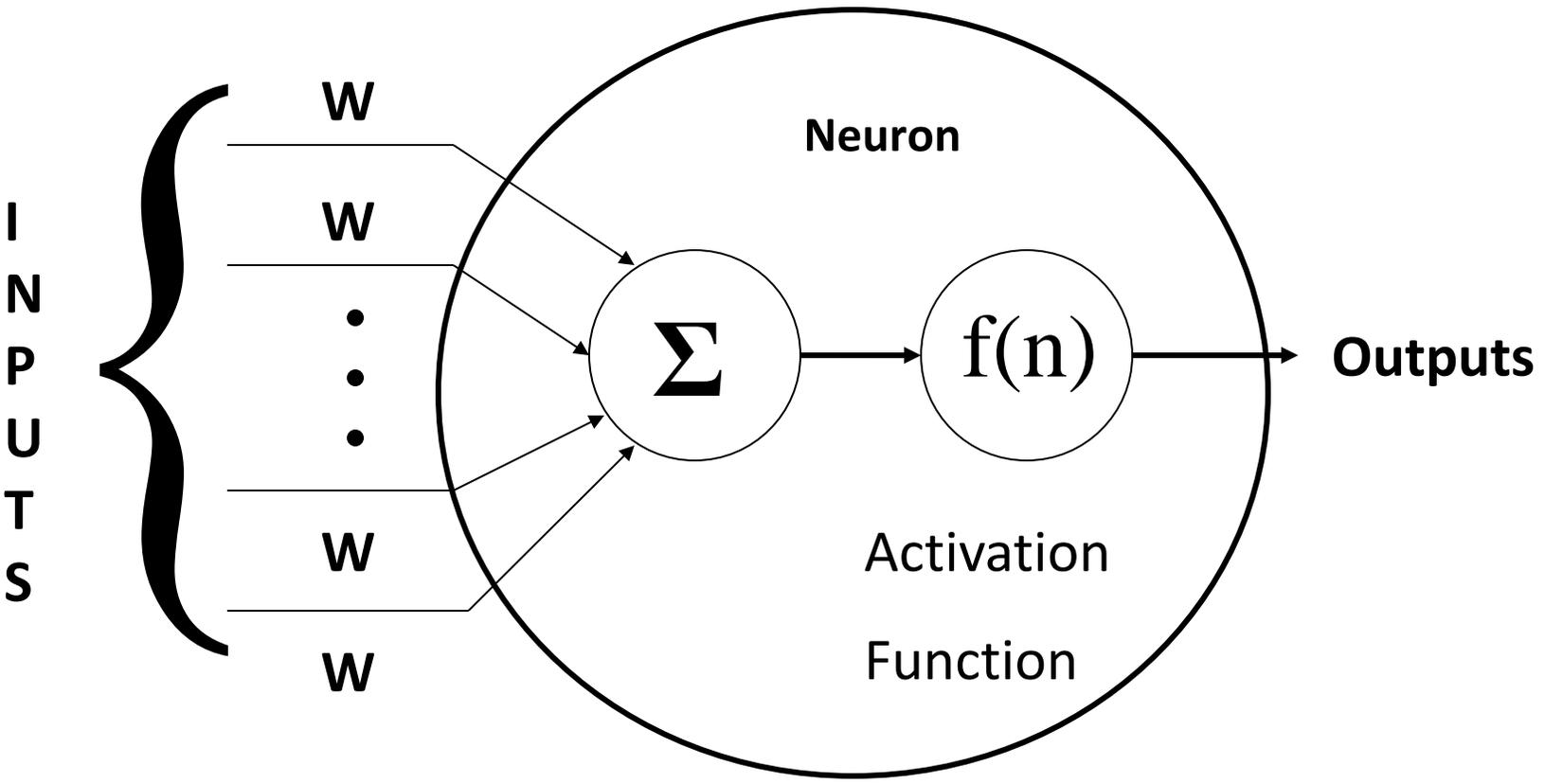


*sigmoid activation:  $\sigma(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}$*

*linear activation:  $f(x) = x$*

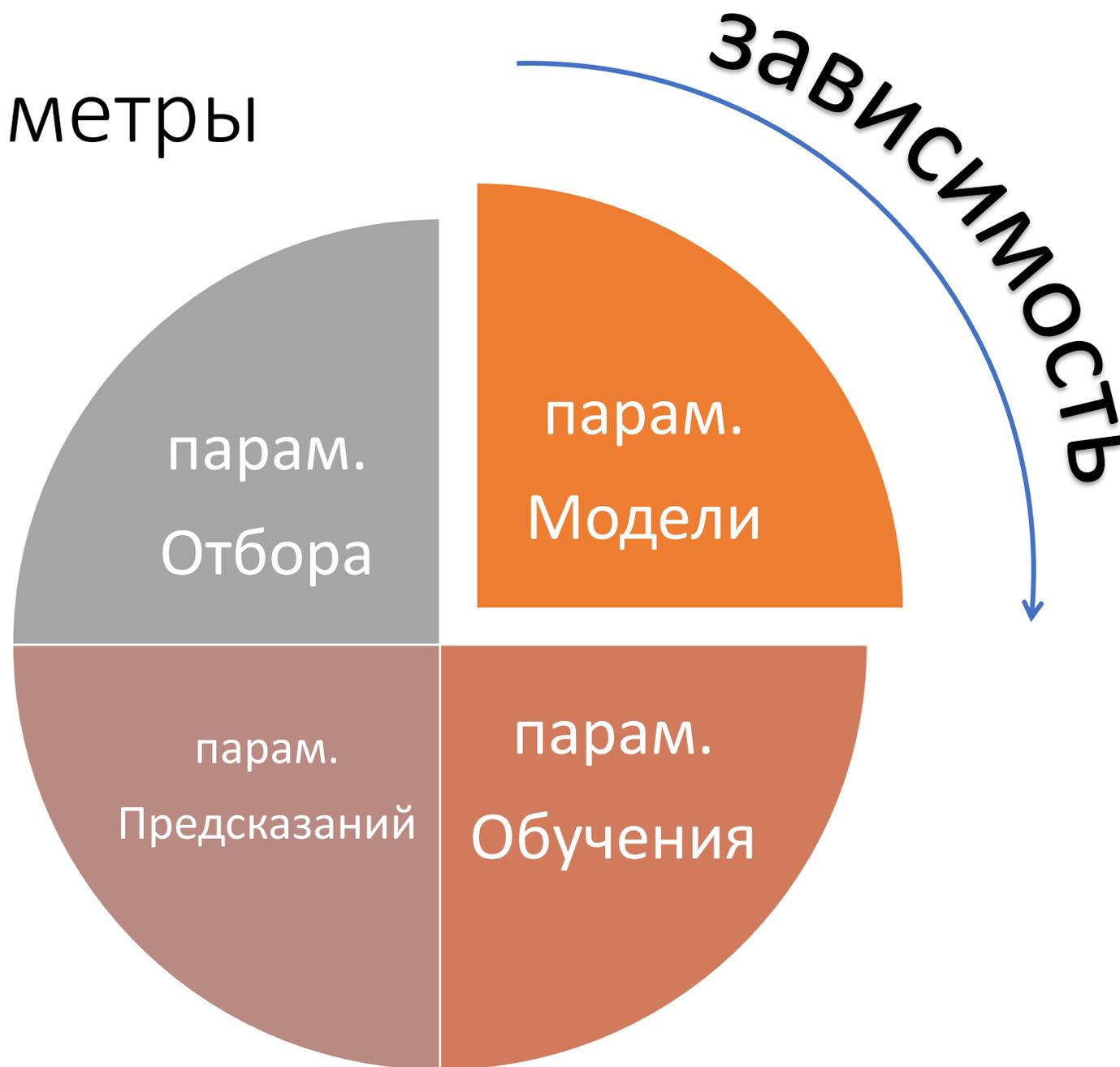
*linear activation → sigmoid activation → sigmoid activation → linear activation*

# Artificial Neuron



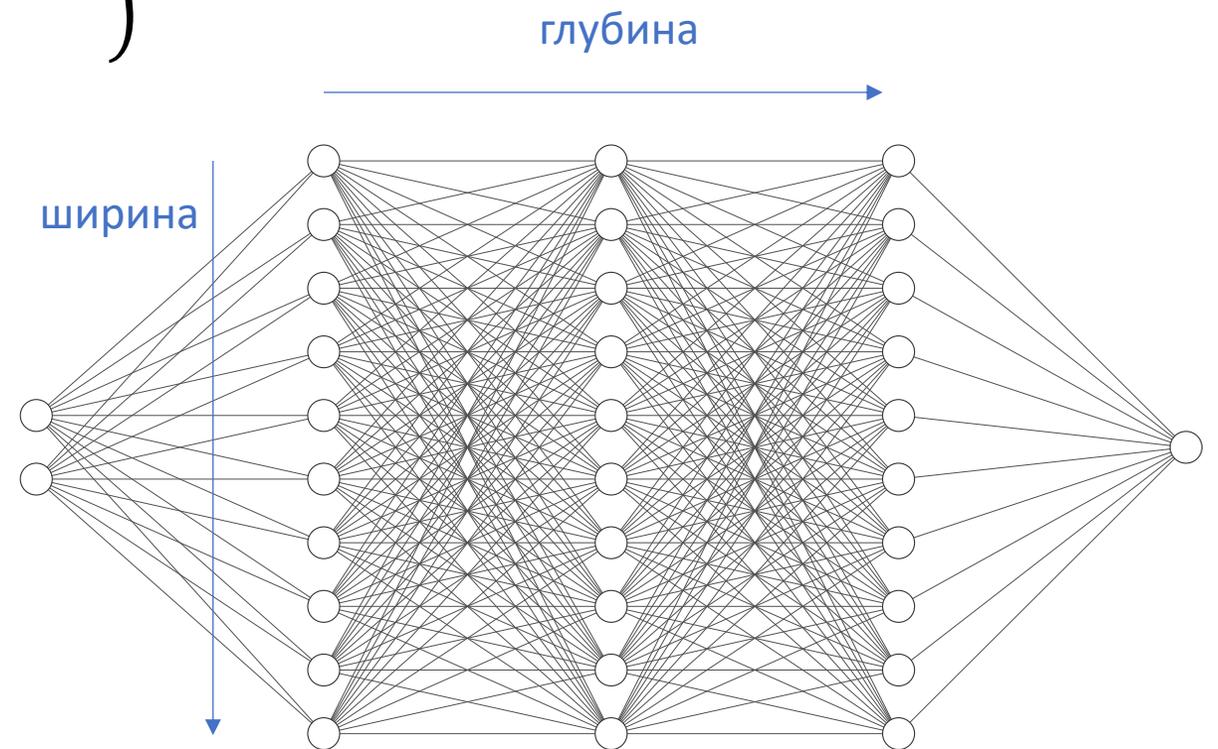
W = Weight

# Гиперпараметры



# Нейронная сеть как формула

$$output = f_j \left\{ \sum_{i=0}^k \left[ \sum_{i=0}^l (... ) + bias \right] + bias \right\}$$



SIG Addons

TensorFlow



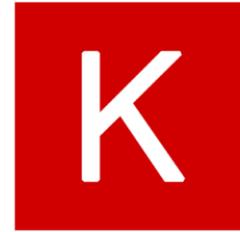
python



seaborn



TensorFlow



Keras



pandas



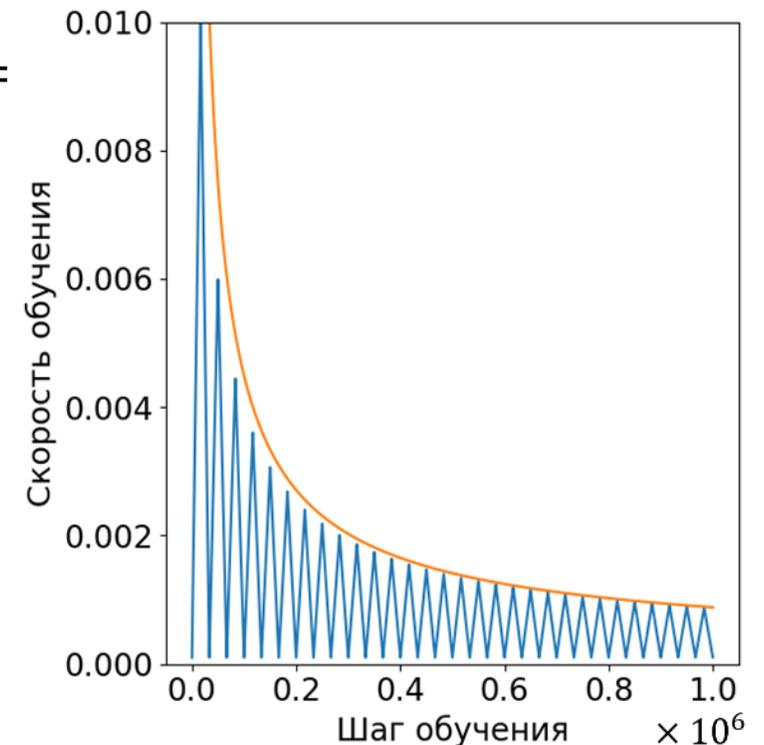
NumPy

matplotlib

# Некоторые технические аспекты

- Основные библиотеки — Keras, Tensorflow (+TFA)
- Алгоритм оптимизации — Adam
- Производится предварительный отбор данных
- Производится линейное масштабирование данных:  $x' =$
- Используются линейная или сигмоидальная активирующая функции:  $f(y) = 1/(1 + e^{-y})$  или  $f(y) = y$
- Обучение проводится с использованием циклической скорости обучения (CLR):  
 $10^6$  эпох

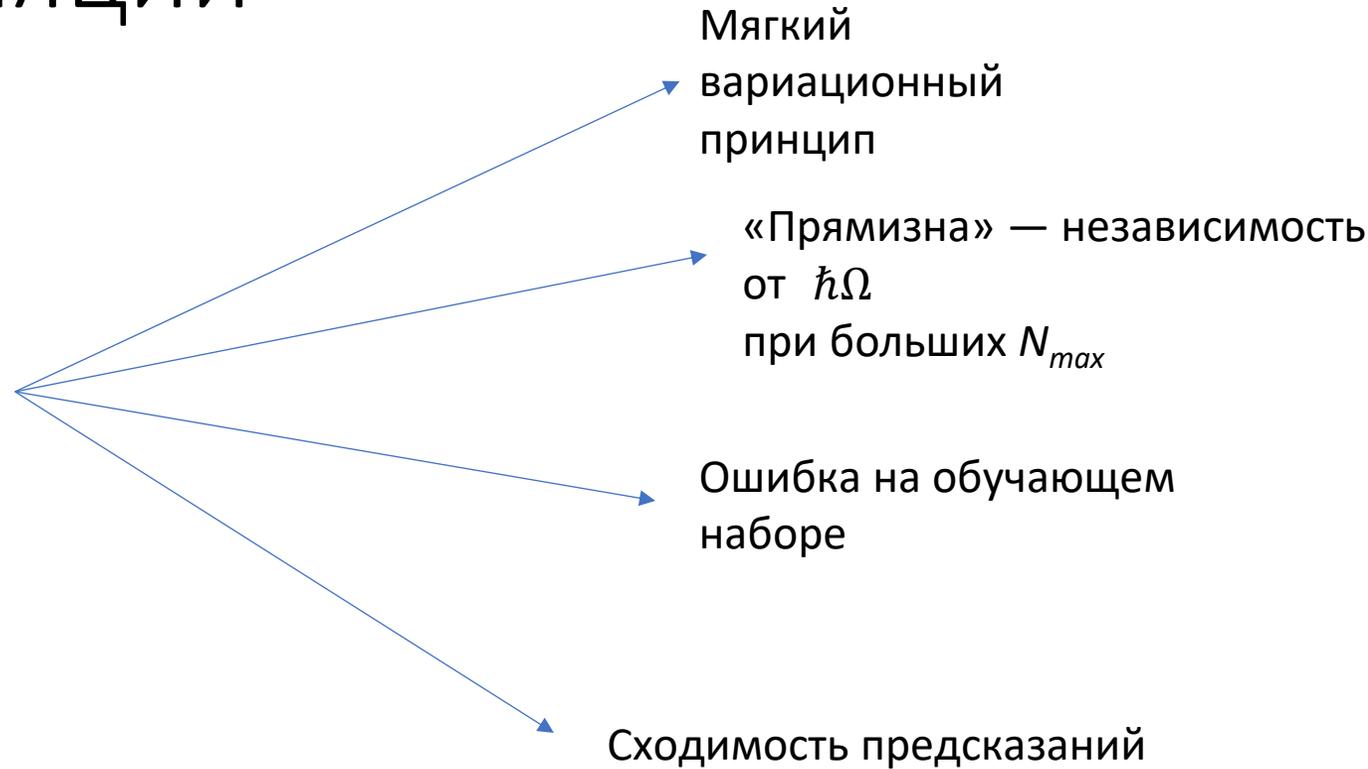
$$\Delta w_{ij} \sim -\eta \frac{\partial L}{\partial w_{ij}}$$



Следствием топологии и выбранных гиперпараметров является насыщение связей, то есть сходимость предсказаний

# Алгоритм экстраполяции

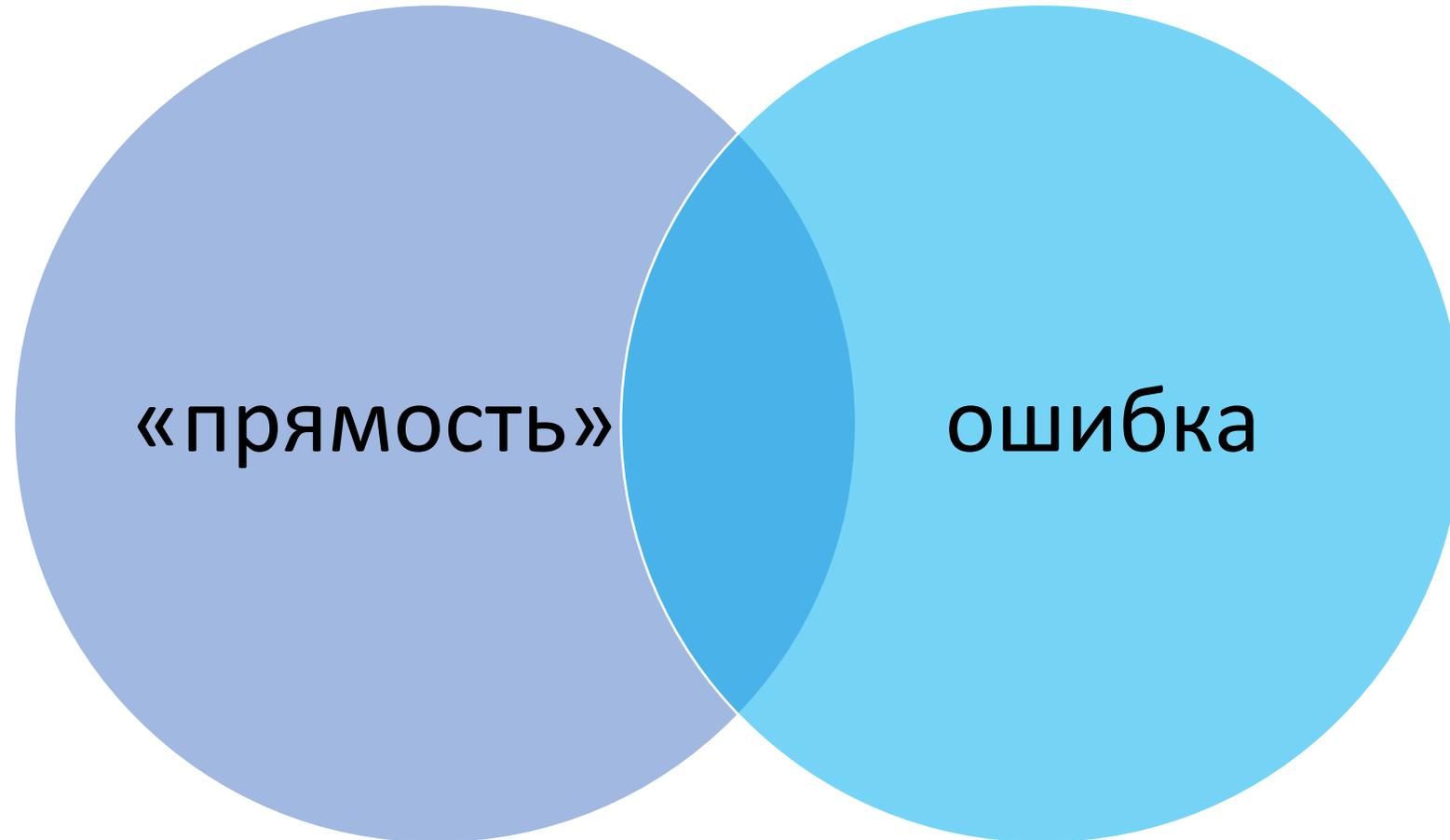
1. Обучение ансамбля нейронных сетей
2. Отбор нейронных сетей на основе их предсказаний
3. Статистический анализ набора нейронных сетей, прошедших отбор



# Построение множества для получения предсказаний: энергия

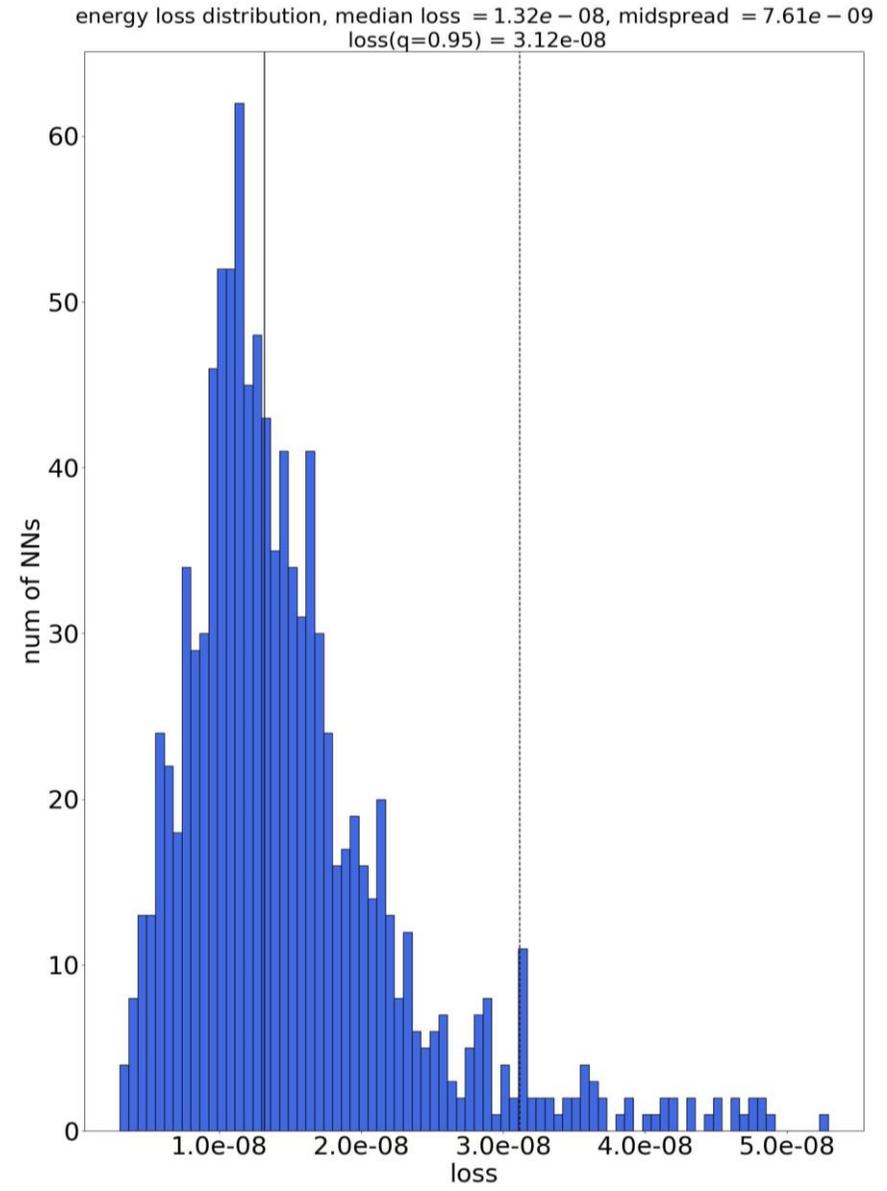
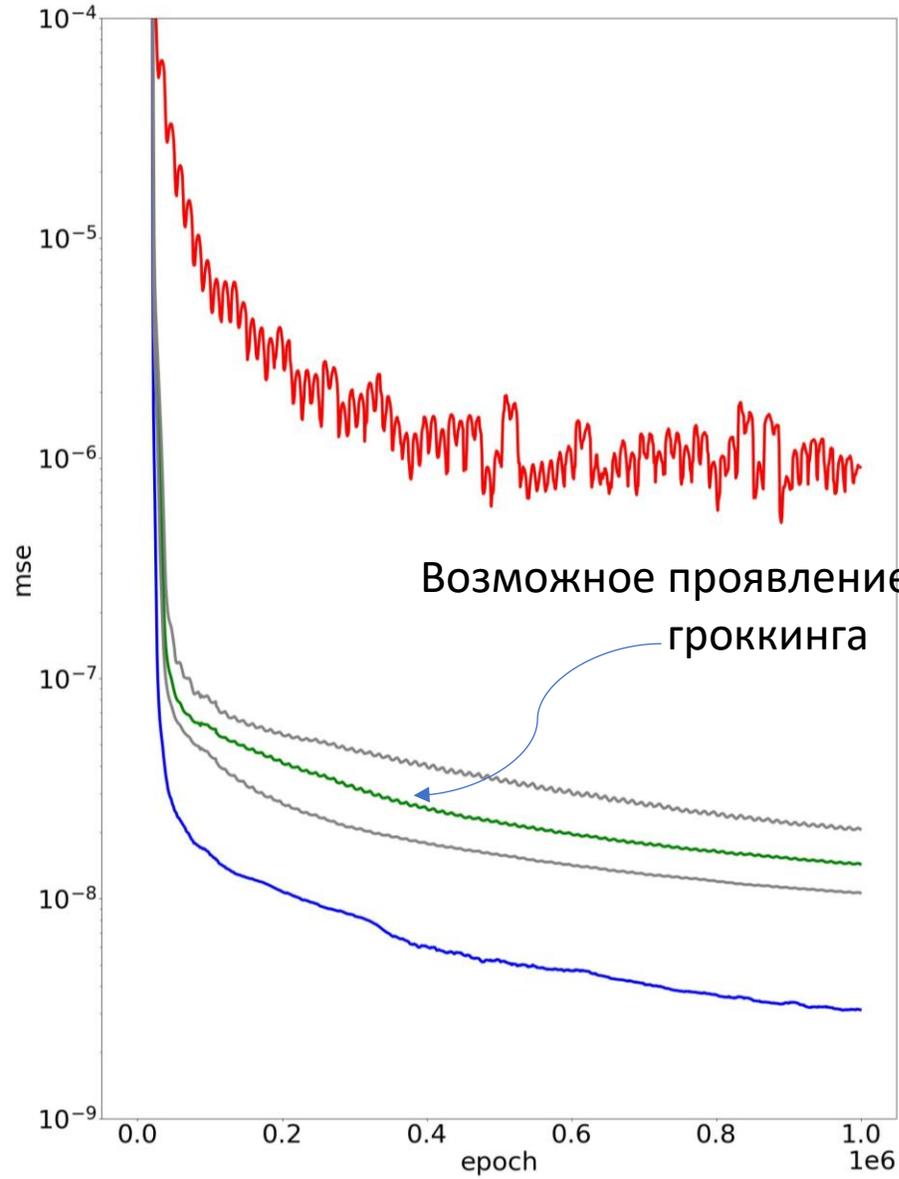


Построение множества для получения предсказаний: радиус

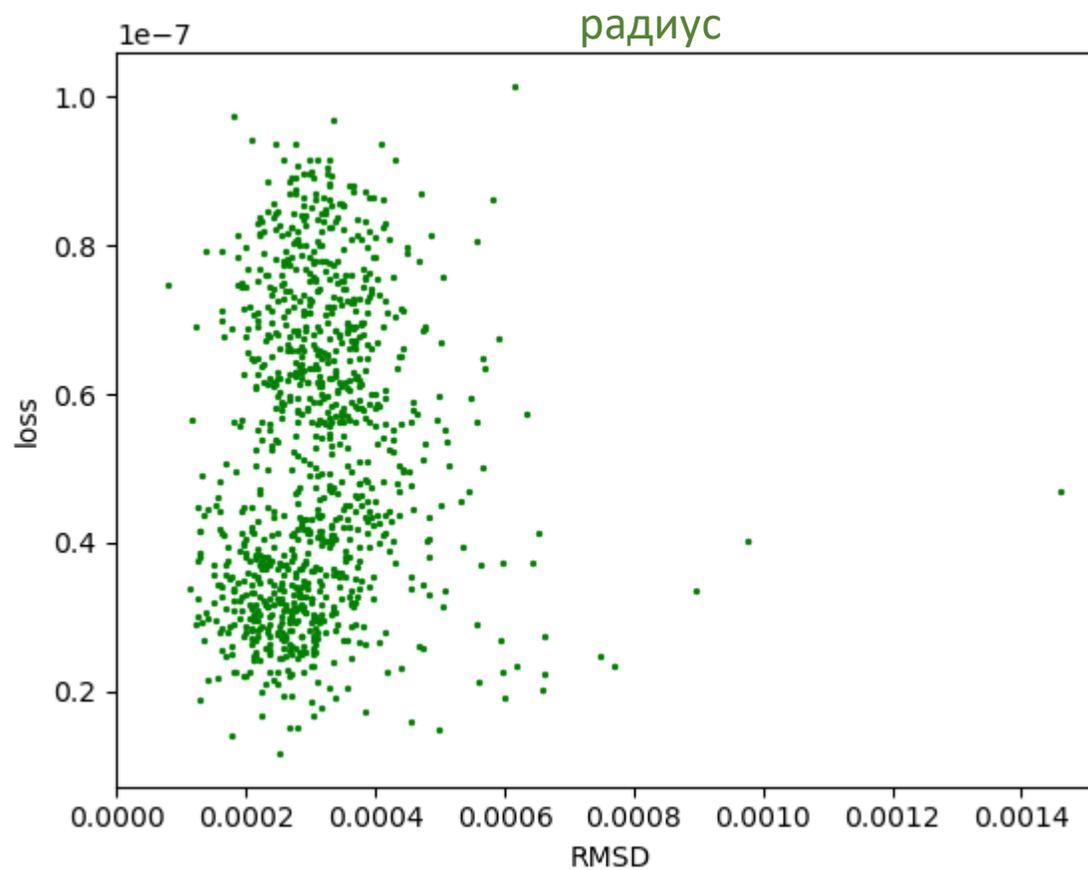
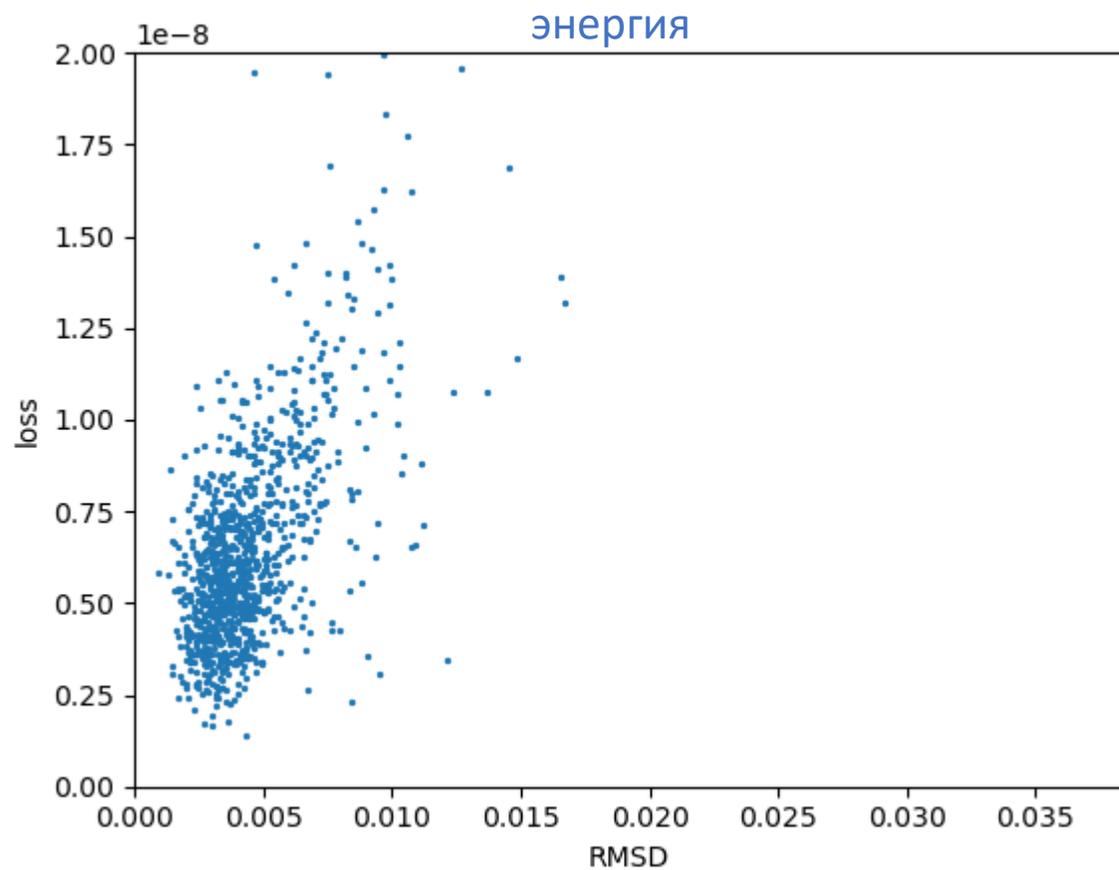


# Зачем нужен ансамбль нейросетей?

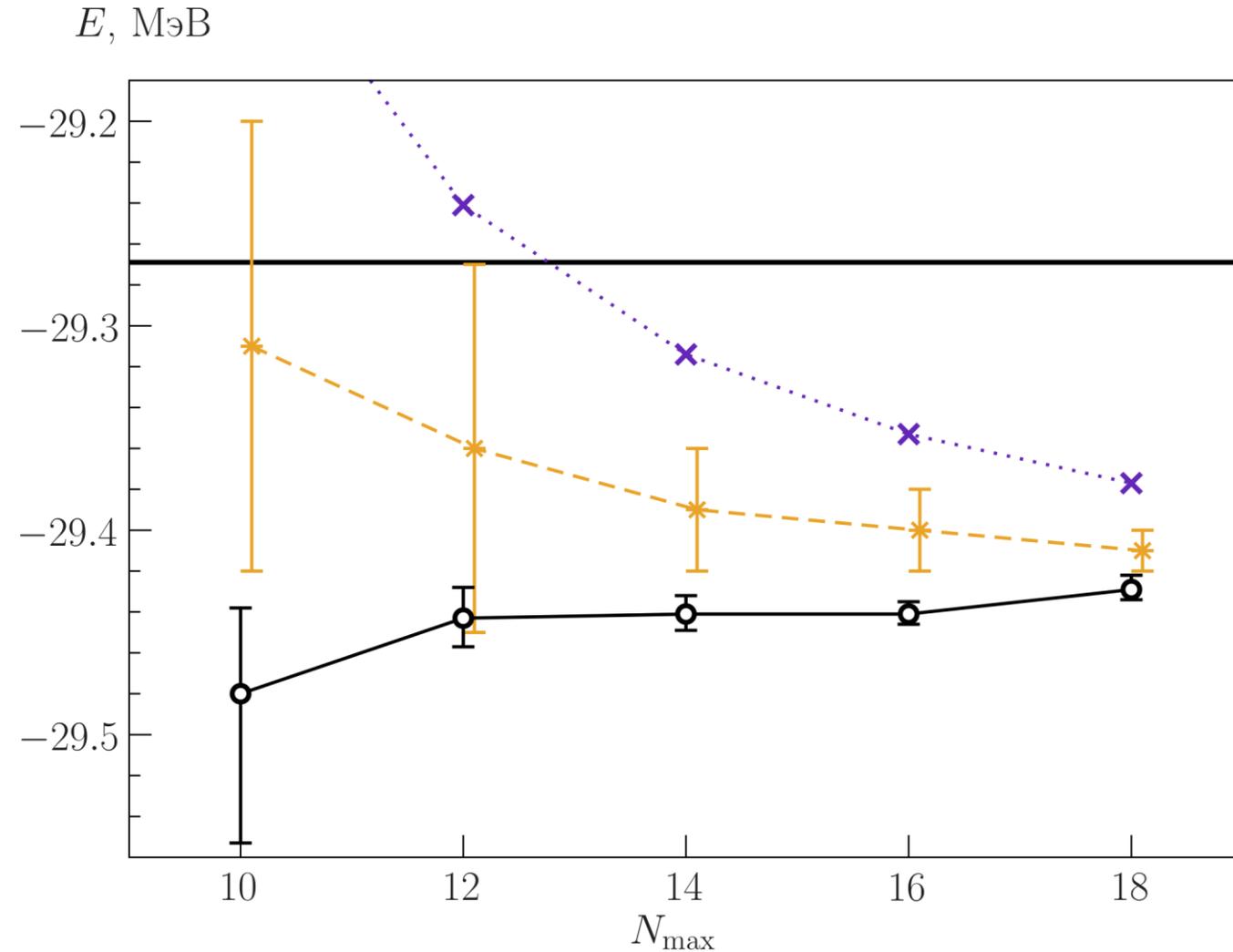
[arXiv:2201.02177](https://arxiv.org/abs/2201.02177) [cs.LG]



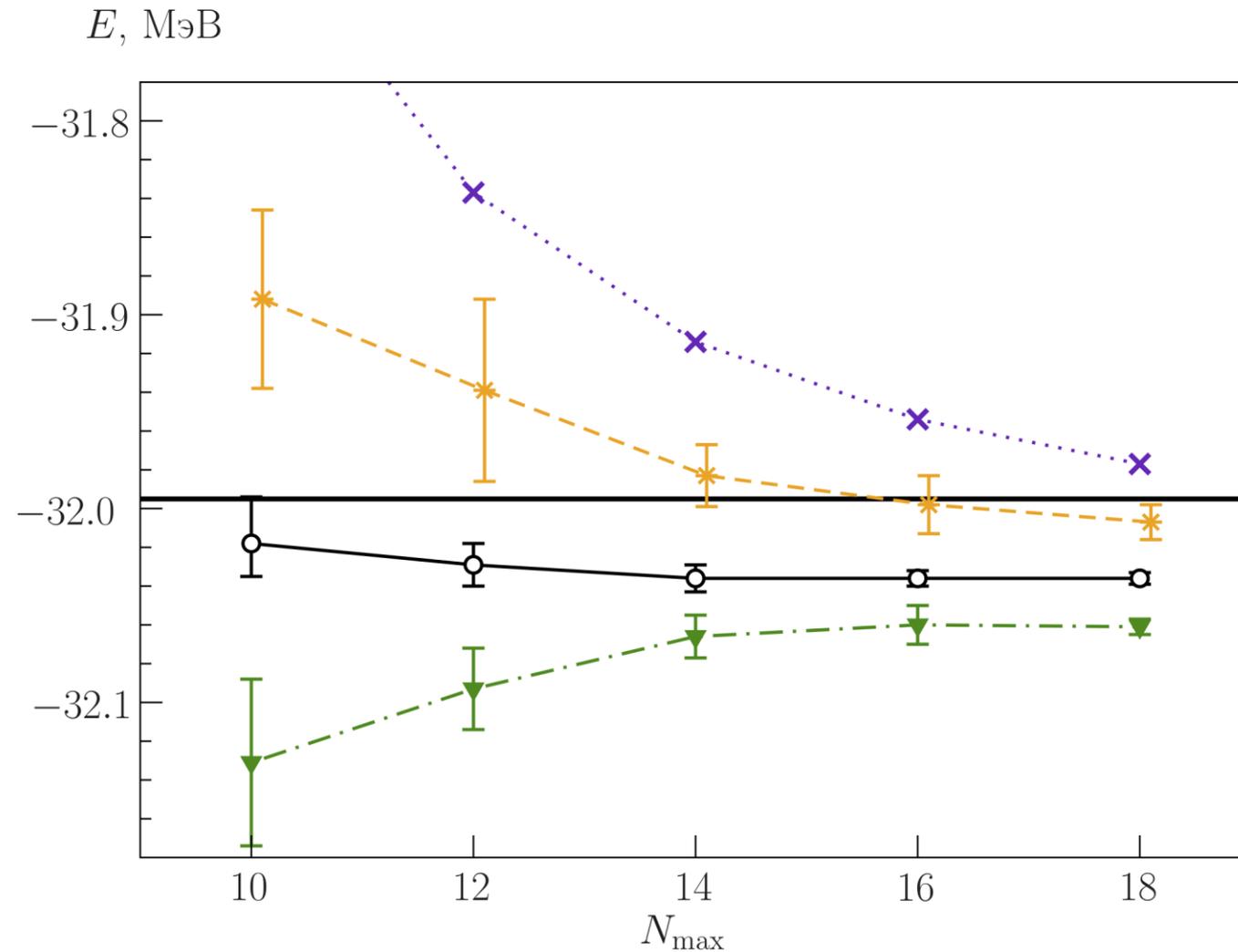
При достаточном “качестве” обучения корреляции предсказательной силы и качеством обучения практически нет!



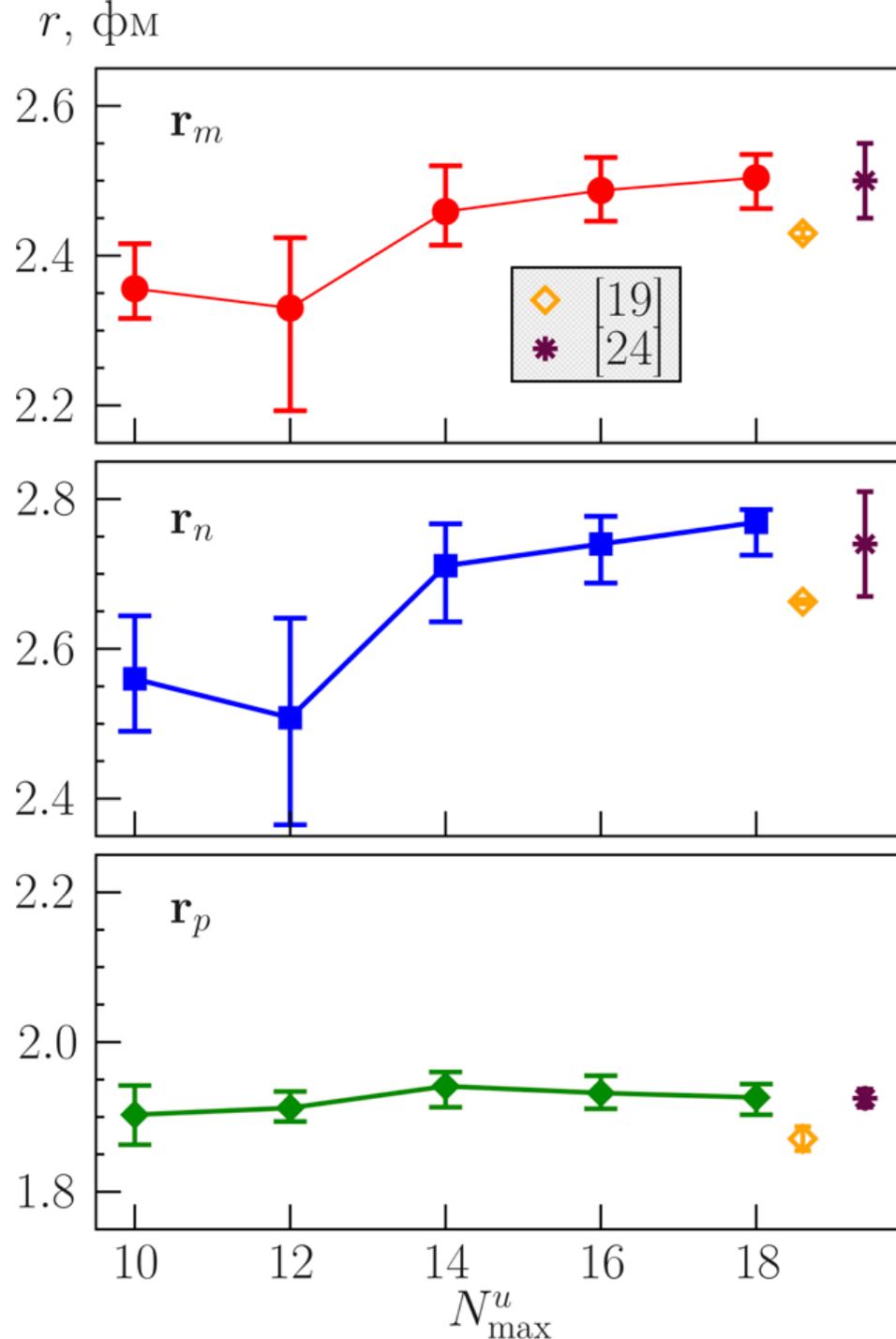
# Результаты экстраполяции энергии основного состояния для ядра ${}^6\text{He}$



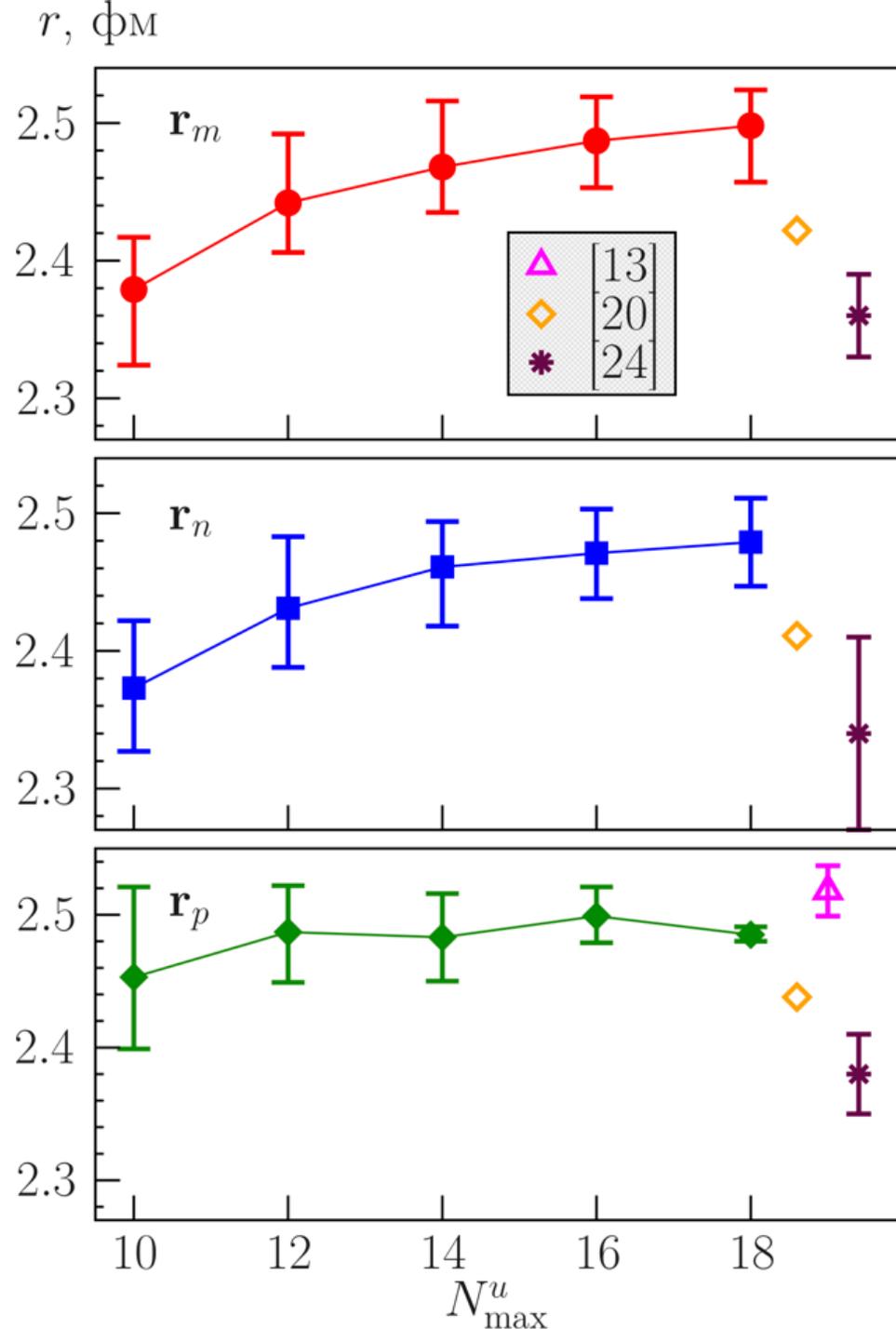
# Результаты экстраполяции энергии основного состояния для ядра ${}^6\text{Li}$



Результаты  
экстраполяции  
радиуса  
для ядра  ${}^6\text{He}$



Результаты  
экстраполяции  
радиуса  
для ядра  ${}^6\text{Li}$

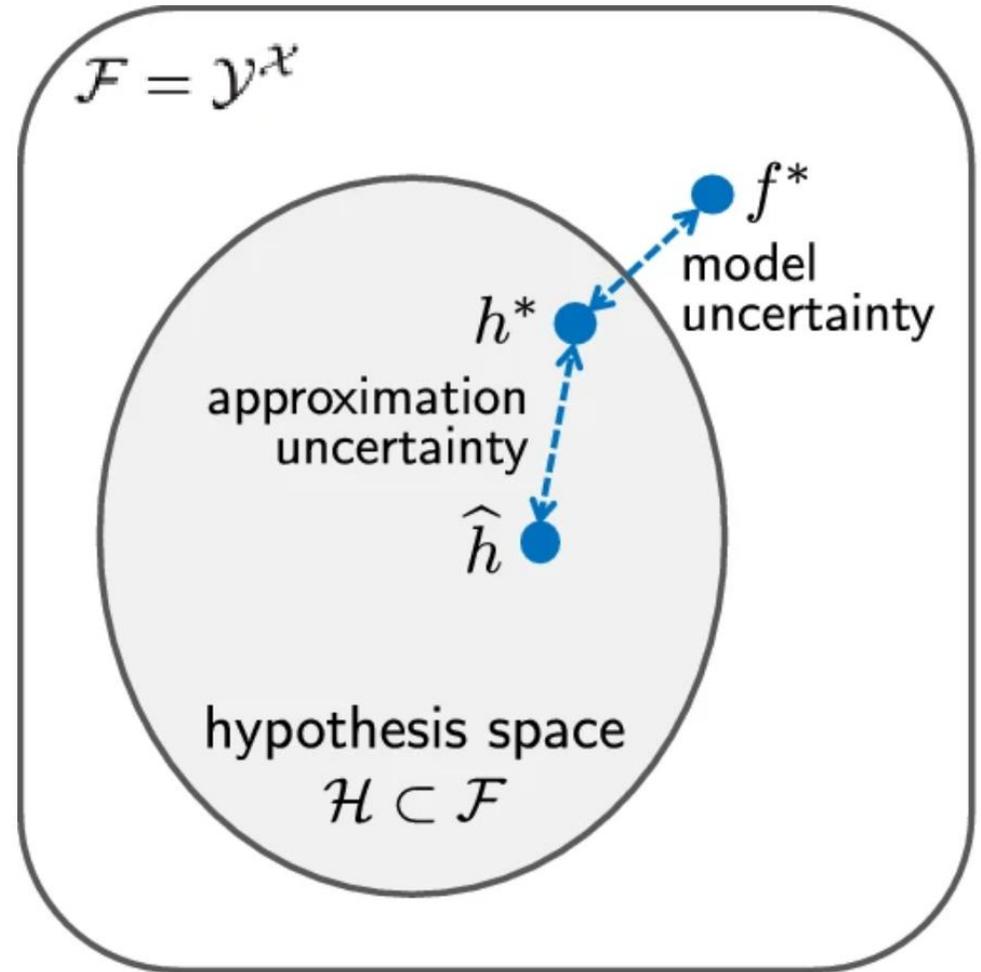


# Некоторые выводы

- Разработан инструмент экстраполяции с помощью машинного обучения на основе входных данные из расчетов в МОБИК для наблюдаемых: энергии основного состояния и среднеквадратичного радиуса
- Для решения задачи предложена топология нейронной сети, определен набор гиперпараметров. Разработанный алгоритм позволяет получать устойчивые результаты
- Оценка погрешности метода состоит в вычислении статистических характеристик множества отобранных нейронных сетей

# Пути совершенствования метода

- Получать не точечные предсказания, а распределения — Байесовские нейронные сети?
- Конструирование добавление новых входных признаков
- Тюнинг гиперпараметров...



**Спасибо за внимание!**

# Некоторые ссылки

- Negoita G. A. Deep learning: Extrapolation tool for ab initio nuclear theory / G. A. Negoita, J. P. Vary, G. R. Luecke, P. Maris, A. M. Shirokov, I. J. Shin, Y. Kim, E. G. Ng, C. Yang, M. Lockner, G. M. Prabhu // Phys. Rev. C – 2019. – vol. 99 – 054308.
- Jiang W. G. Extrapolation of nuclear structure observables with artificial neural networks / W. G. Jiang, G. Hagen, T. Papenbrock // Phys. Rev. C 100, 054326 – 2019.
- Vidaña I. Machine learning light hypernuclei. / I. Vidaña // arXiv:2203.11792v2 [nucl-th] – 2023.
- Maris P. Ab initio no-core full configuration calculations of light nuclei / P. Maris, J. P. Vary, A. M. Shirokov // Phys. Rev. C – 2009. – vol. 79 – 014308.
- Smith L. Cyclical Learning Rates for Training Neural Networks / L. Smith // arXiv:1506.01186 [cs.CV] – 2017.