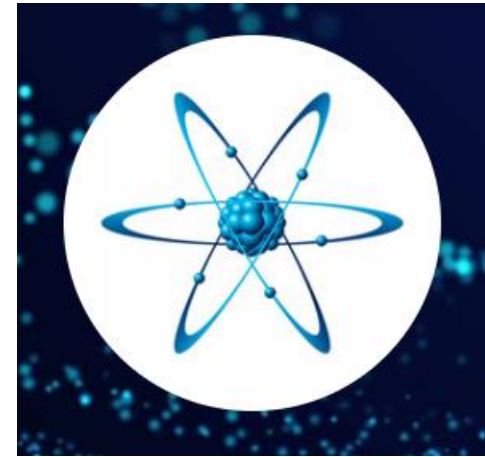


Машинное обучение в задаче экстраполяции расчетов в модели оболочек без инертного кора

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



Collaborators:
A. Mazur
A. Shirokov
R. Sharypov

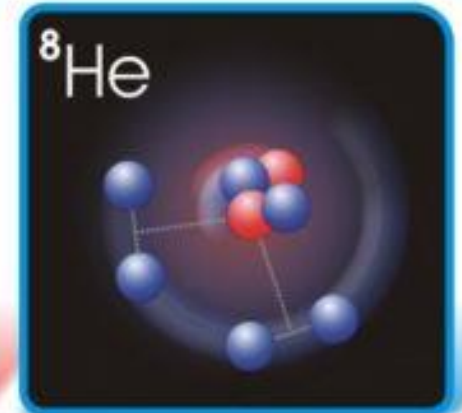
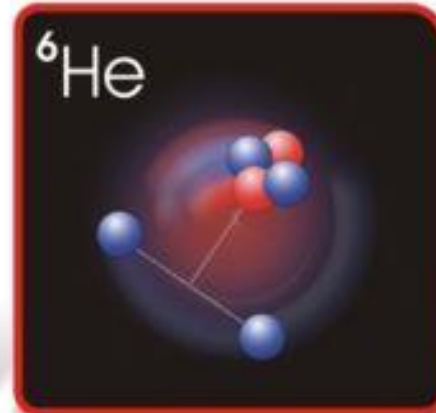
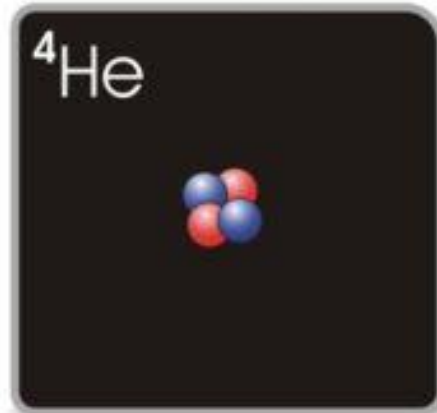
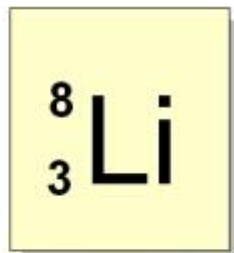
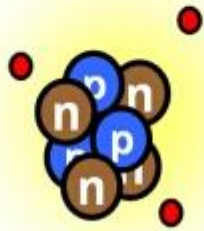
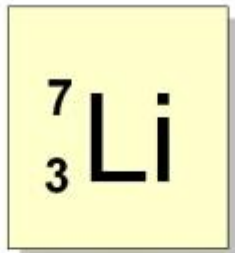
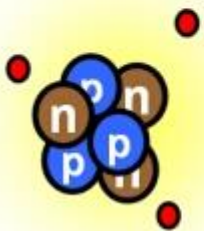
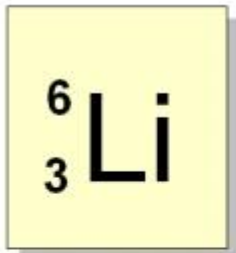


Постановка задачи

- 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

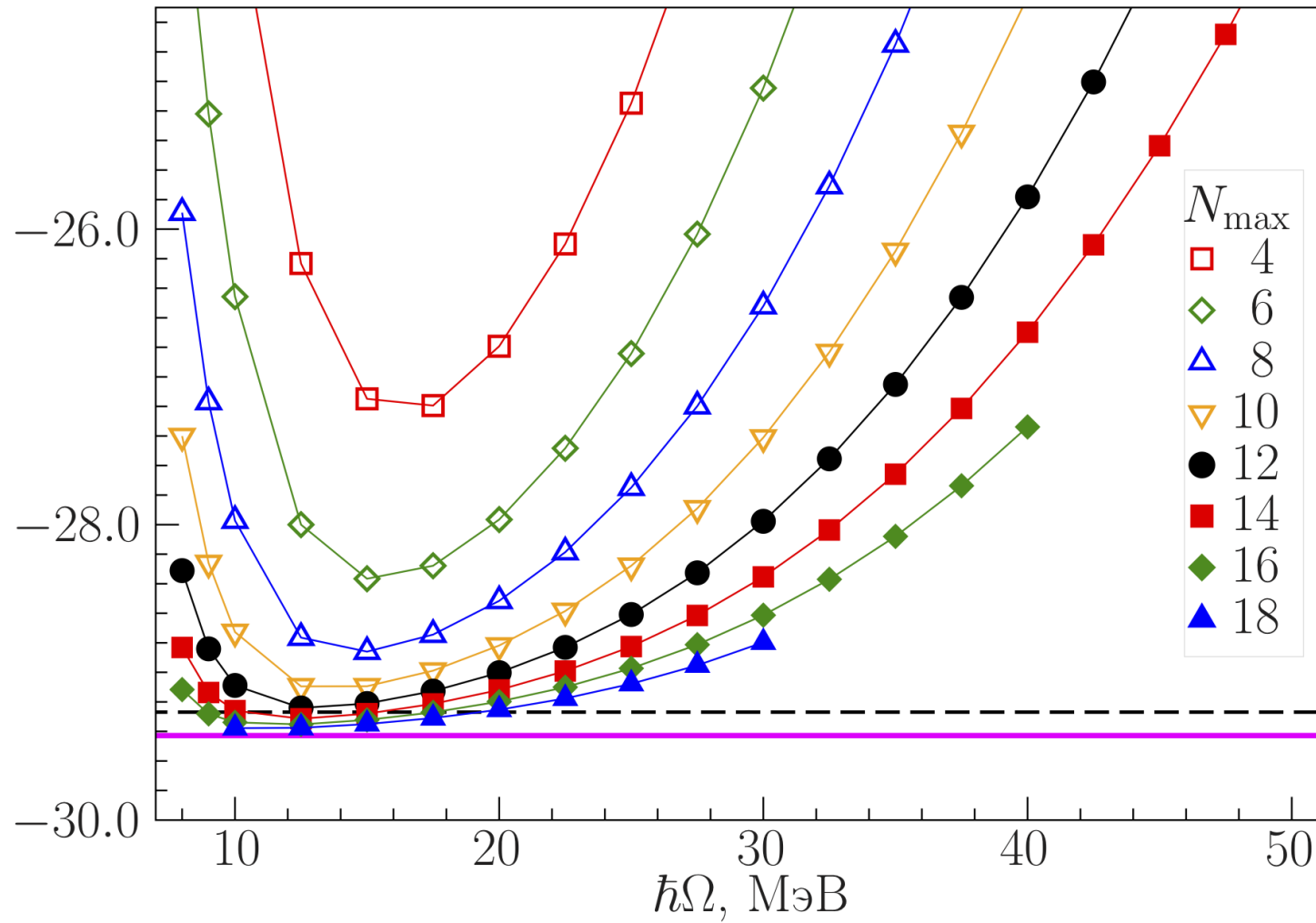
Объект исследования

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



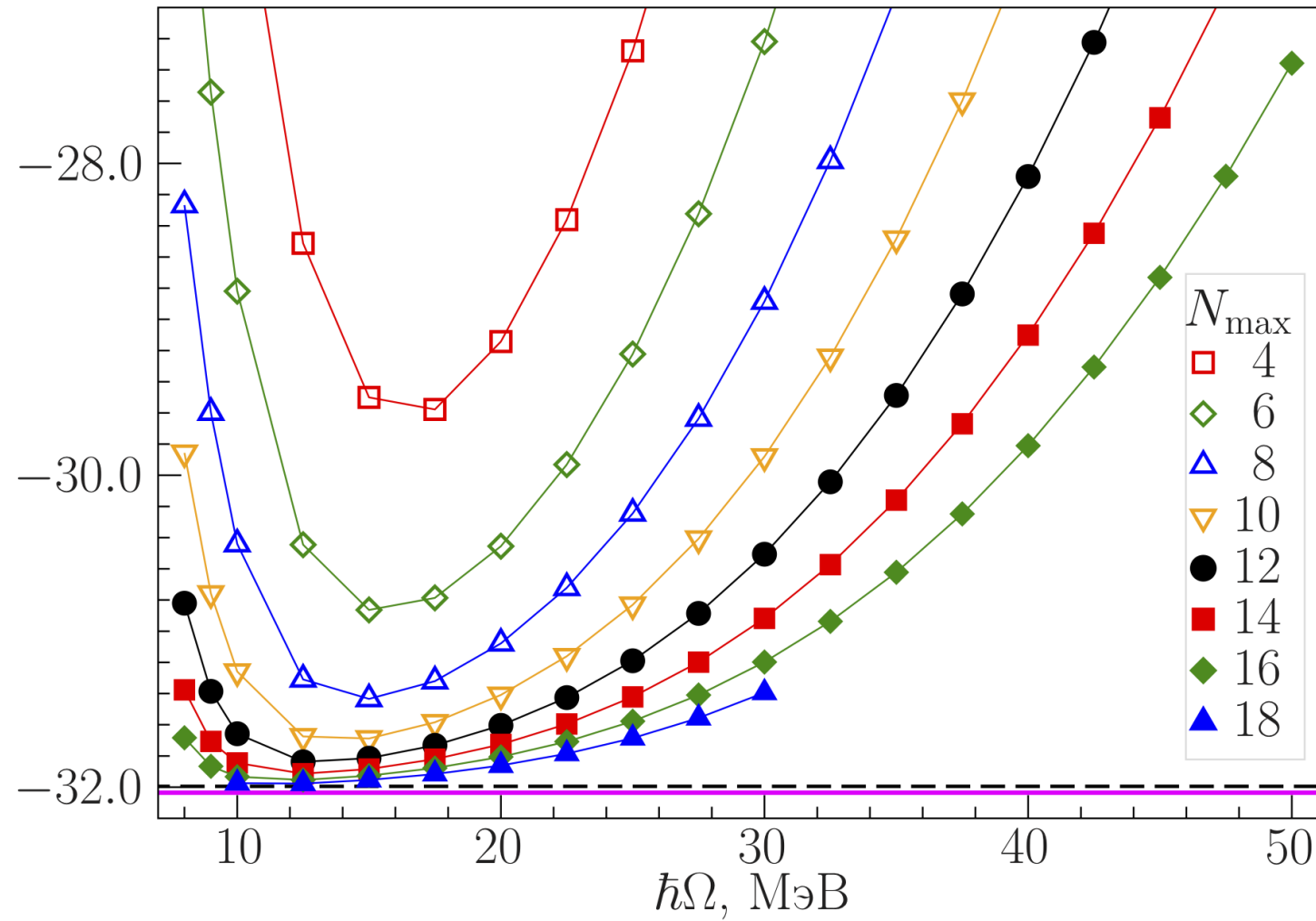
Результаты расчетов энергии основного состояния для ядра ${}^6\text{He}$

E , МэВ

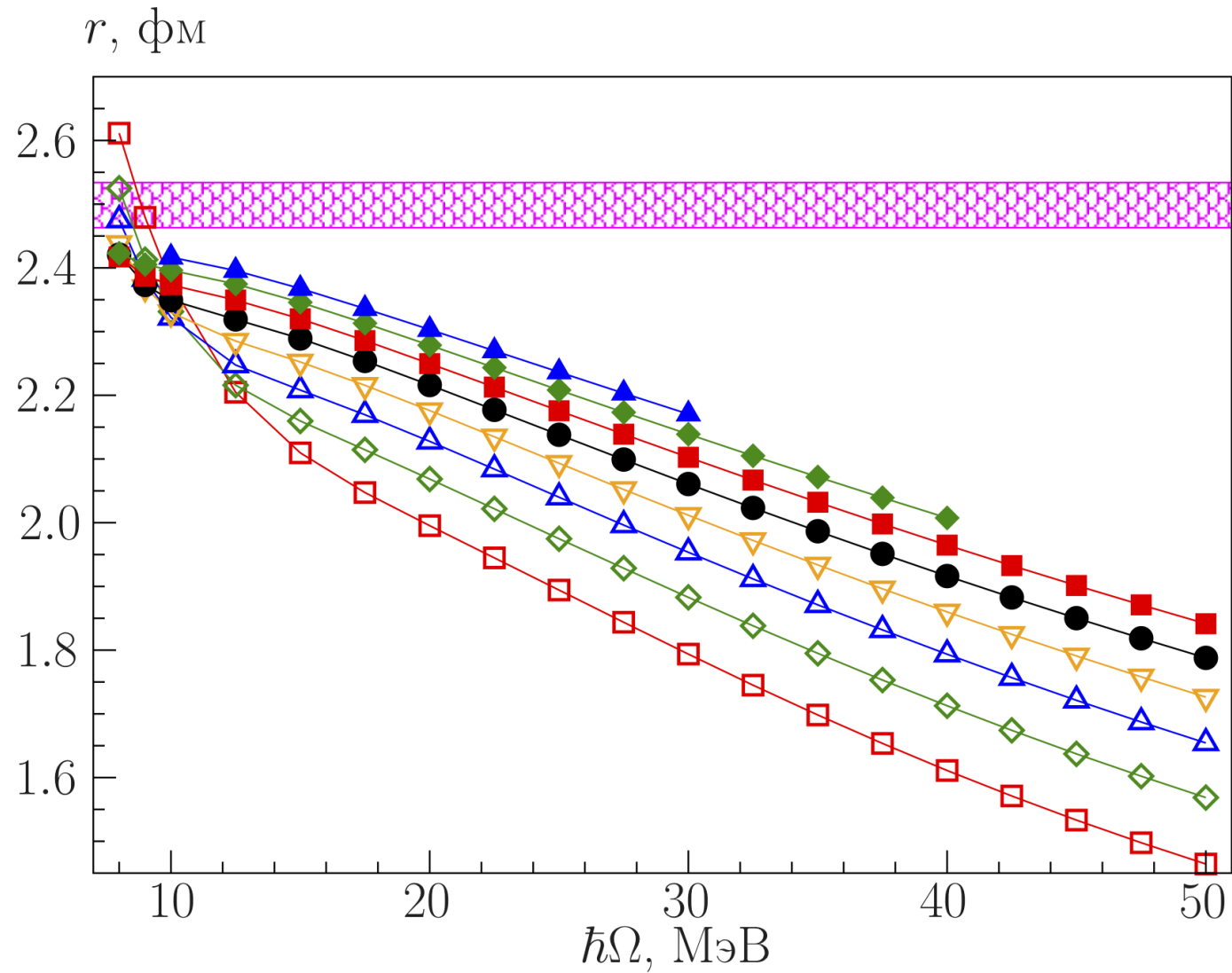


Результаты расчетов энергии основного состояния для ядра ${}^6\text{Li}$

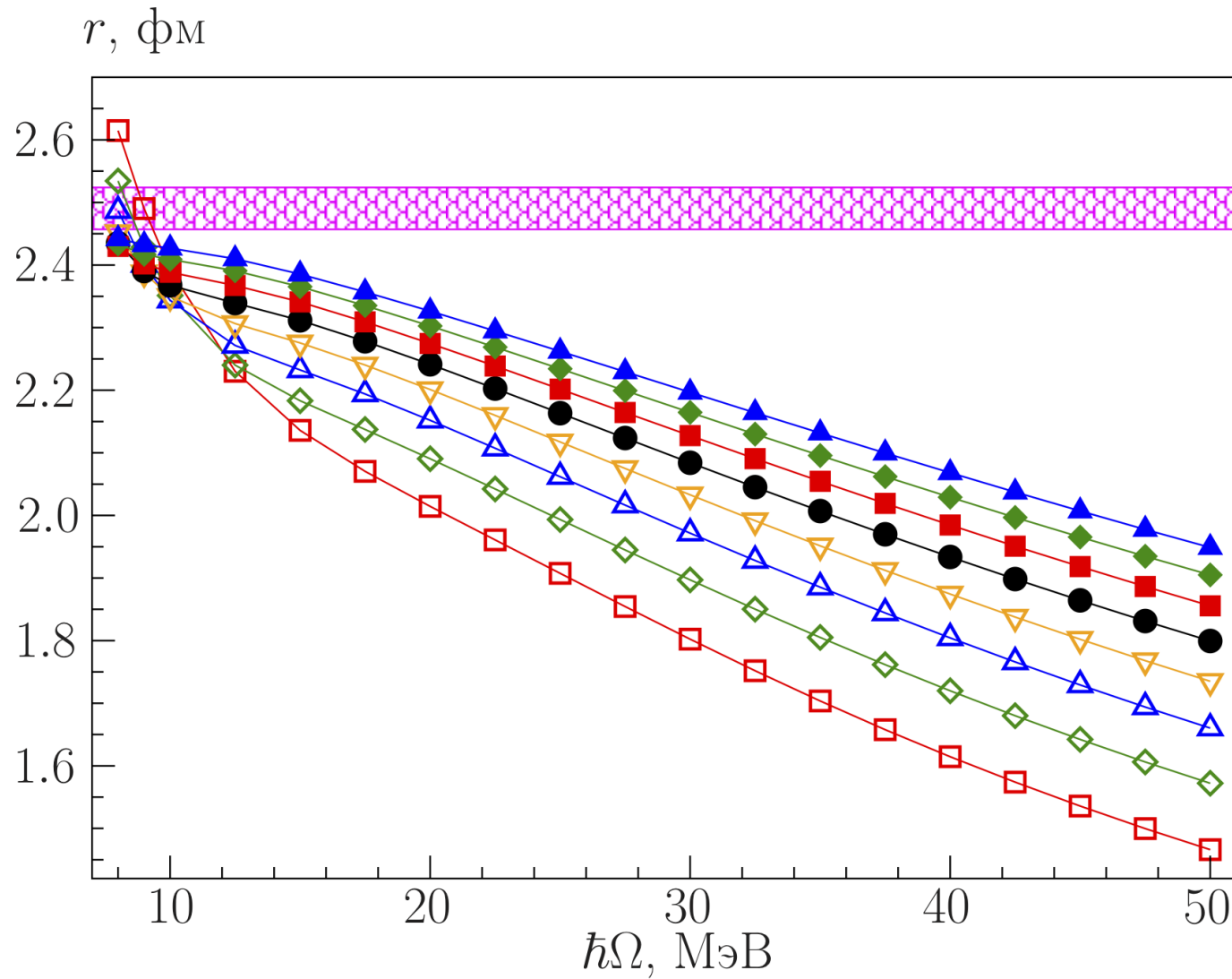
E , МэВ



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

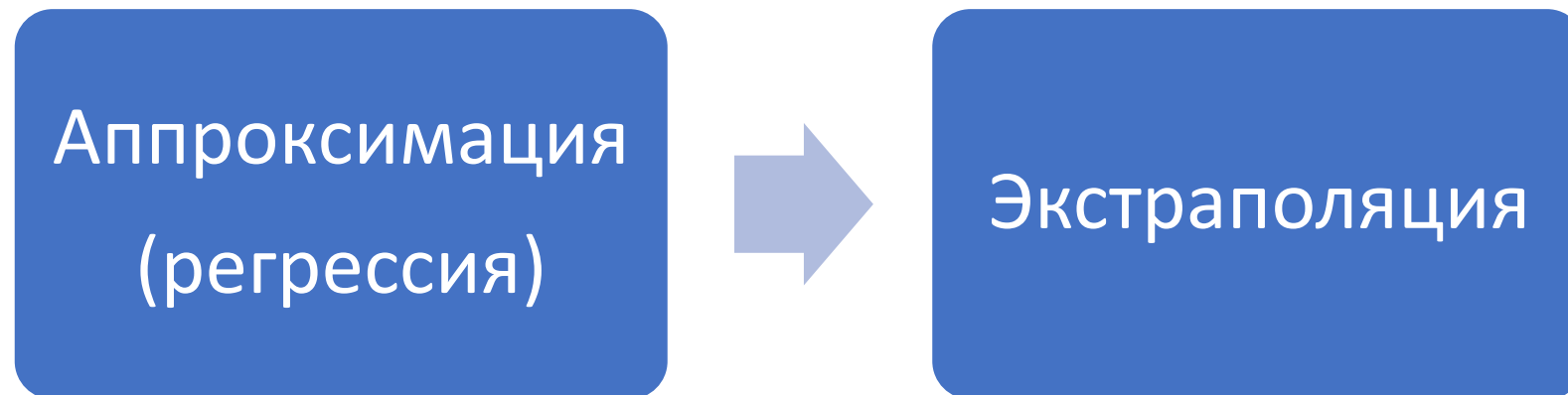


Результаты расчетов материального радиуса ядра ${}^6\text{Li}$

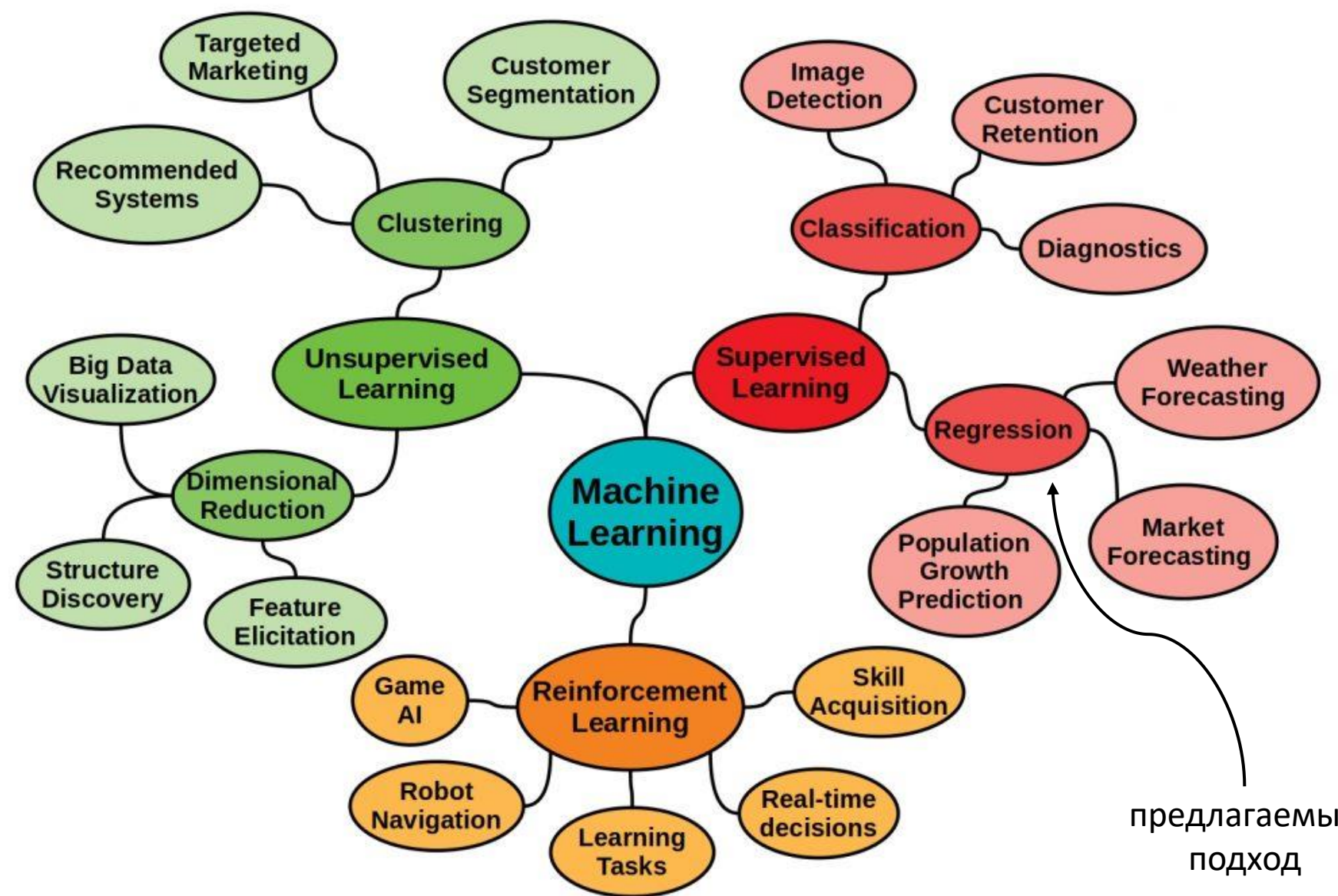


Метод исследования

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



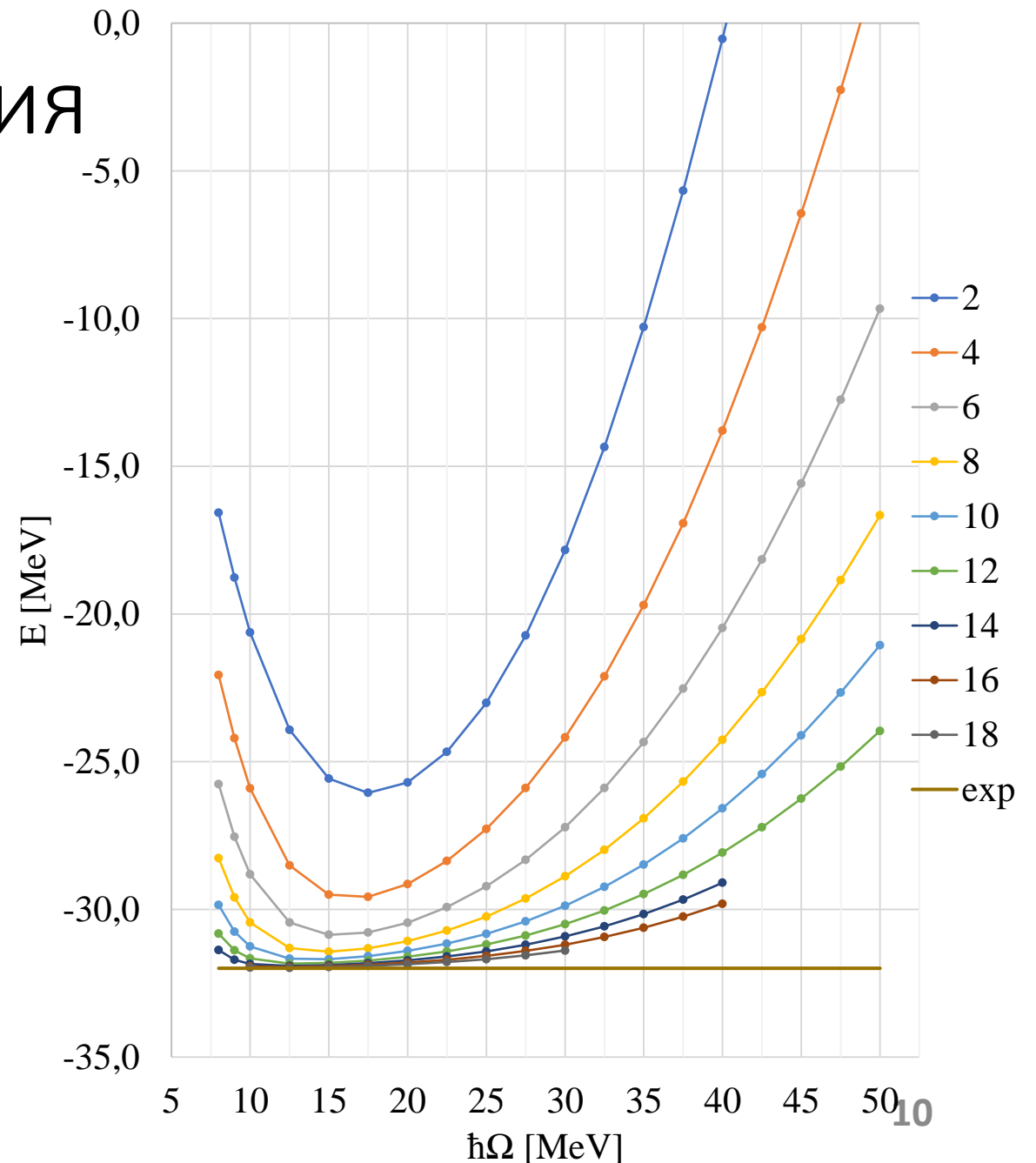
Задачи машинного обучения



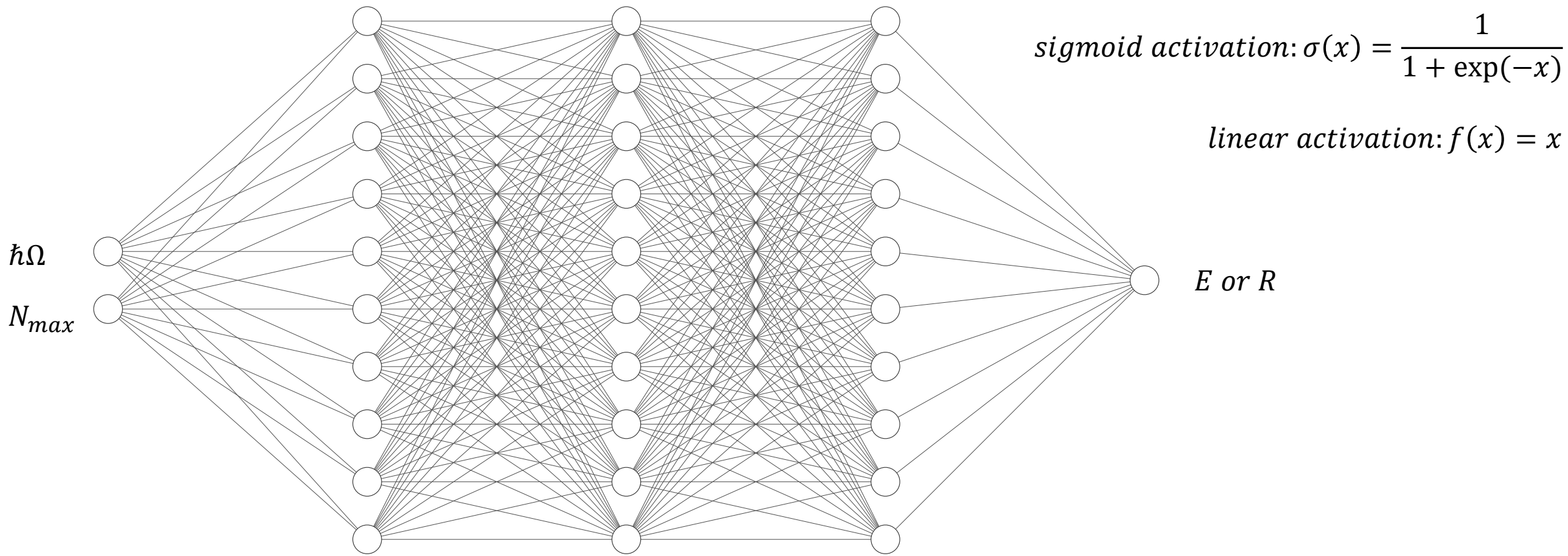
предлагаемый подход

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

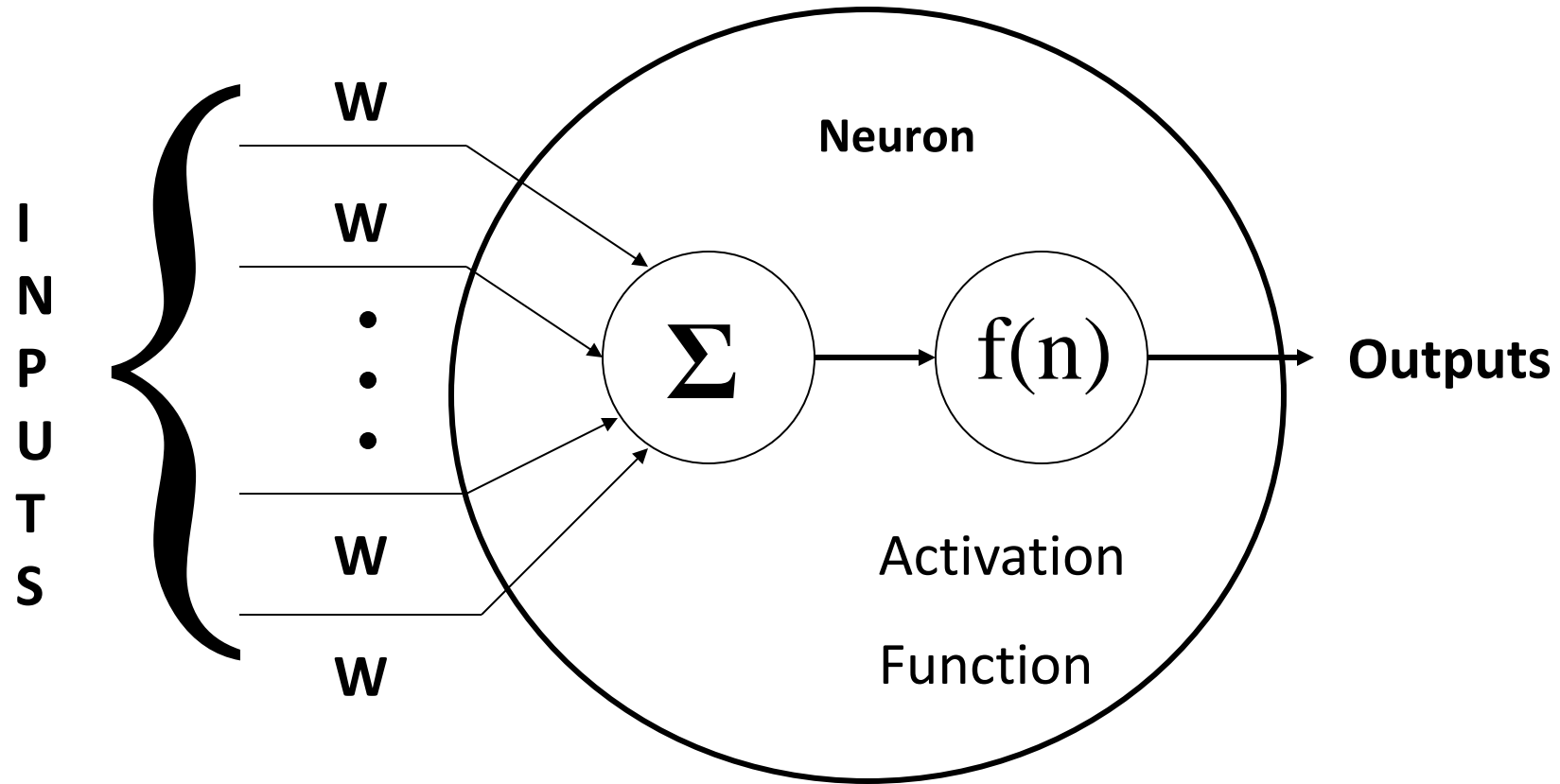


sigmoid activation: $\sigma(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}$

linear activation: $f(x) = x$

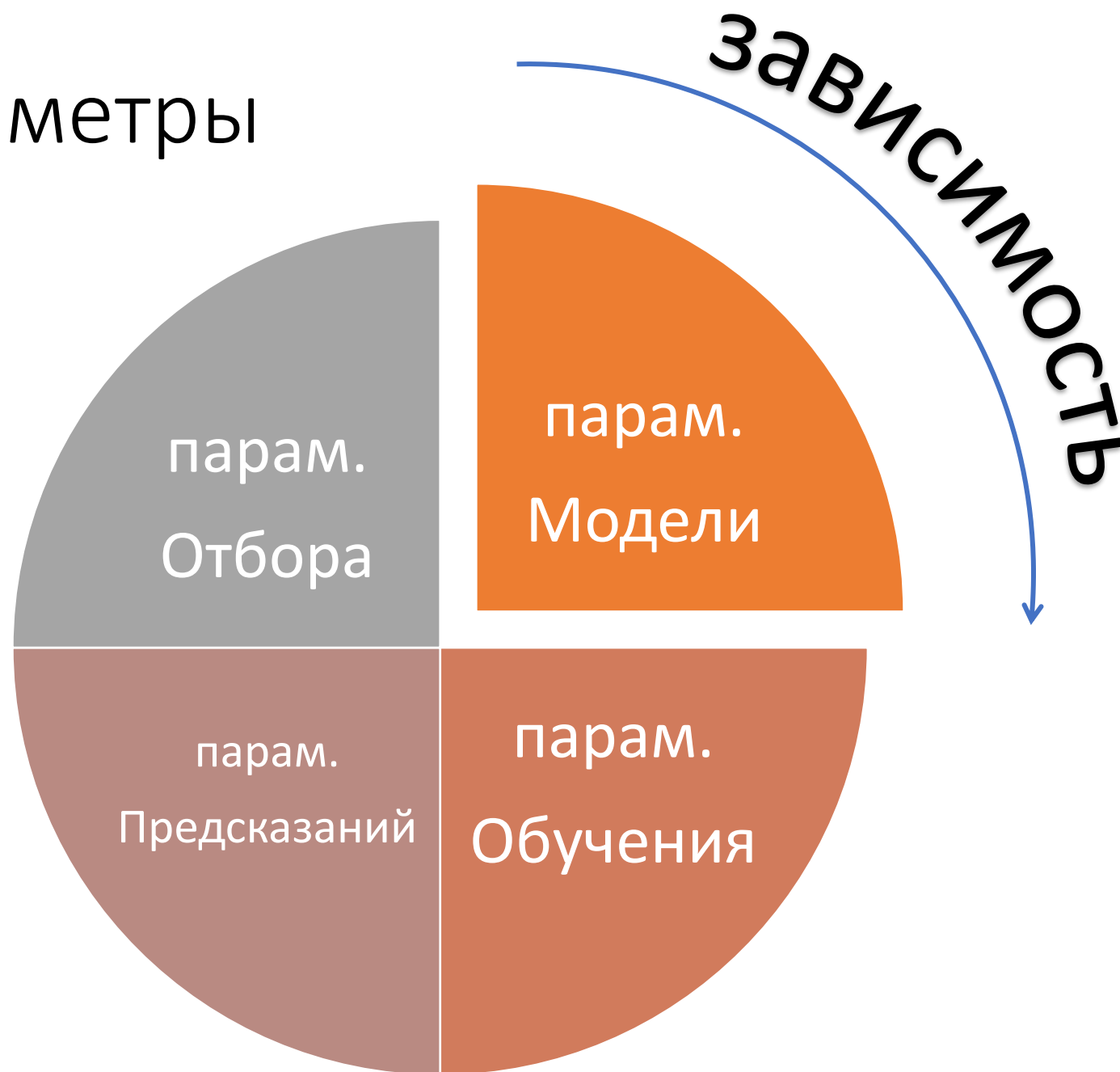
linear activation → sigmoid activation → sigmoid activation → linear activation

Artificial Neuron



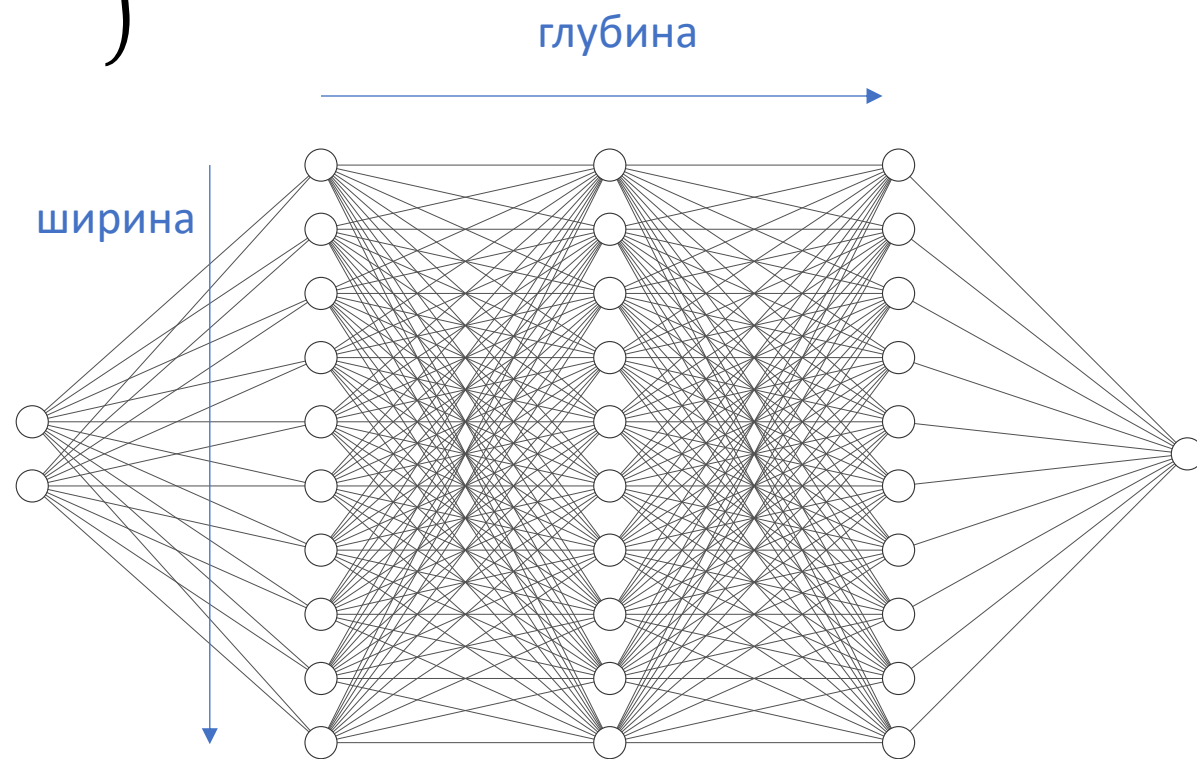
W = Weight

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



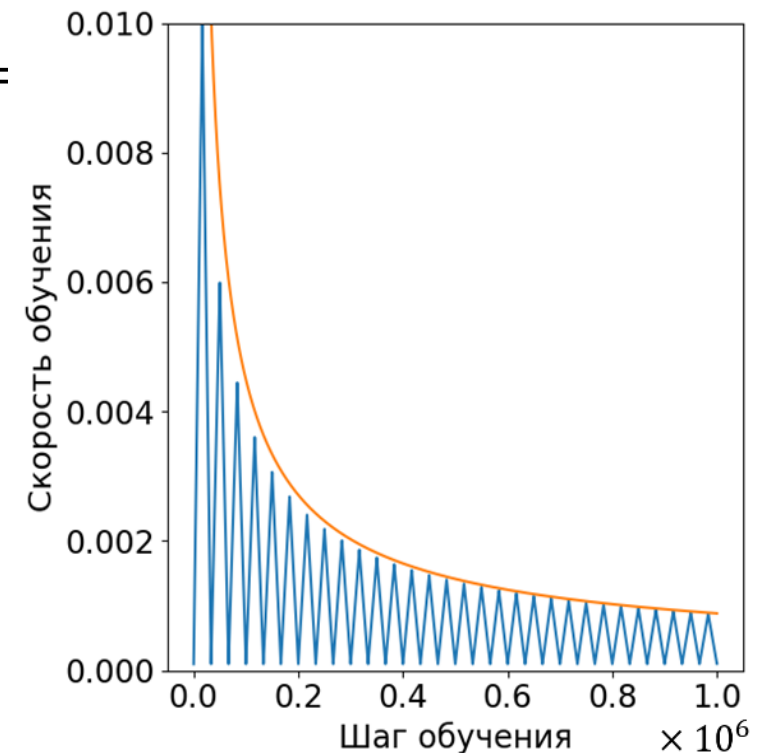
NumPy

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

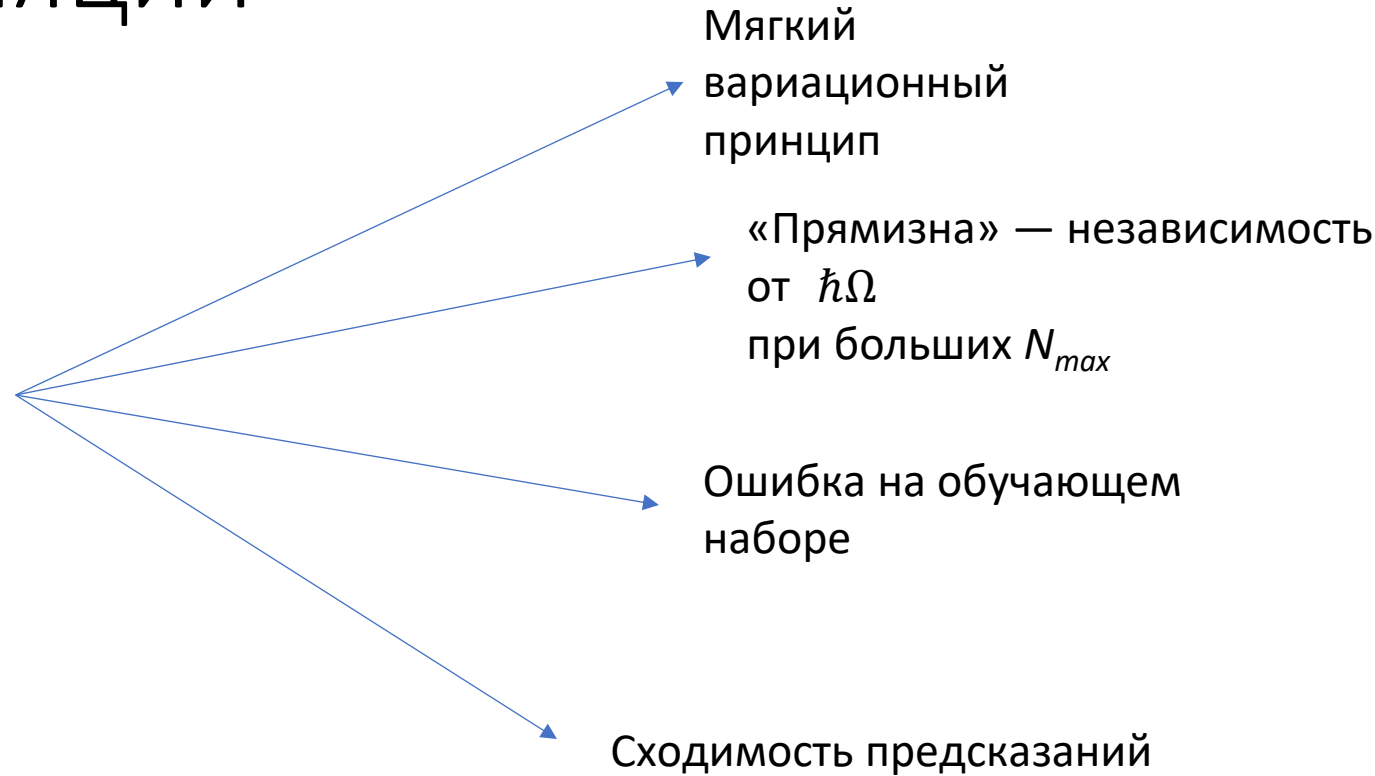
$$\Delta w_{ij} \sim -\eta \frac{\partial L}{\partial w_{ij}}$$



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

Алгоритм экстраполяции

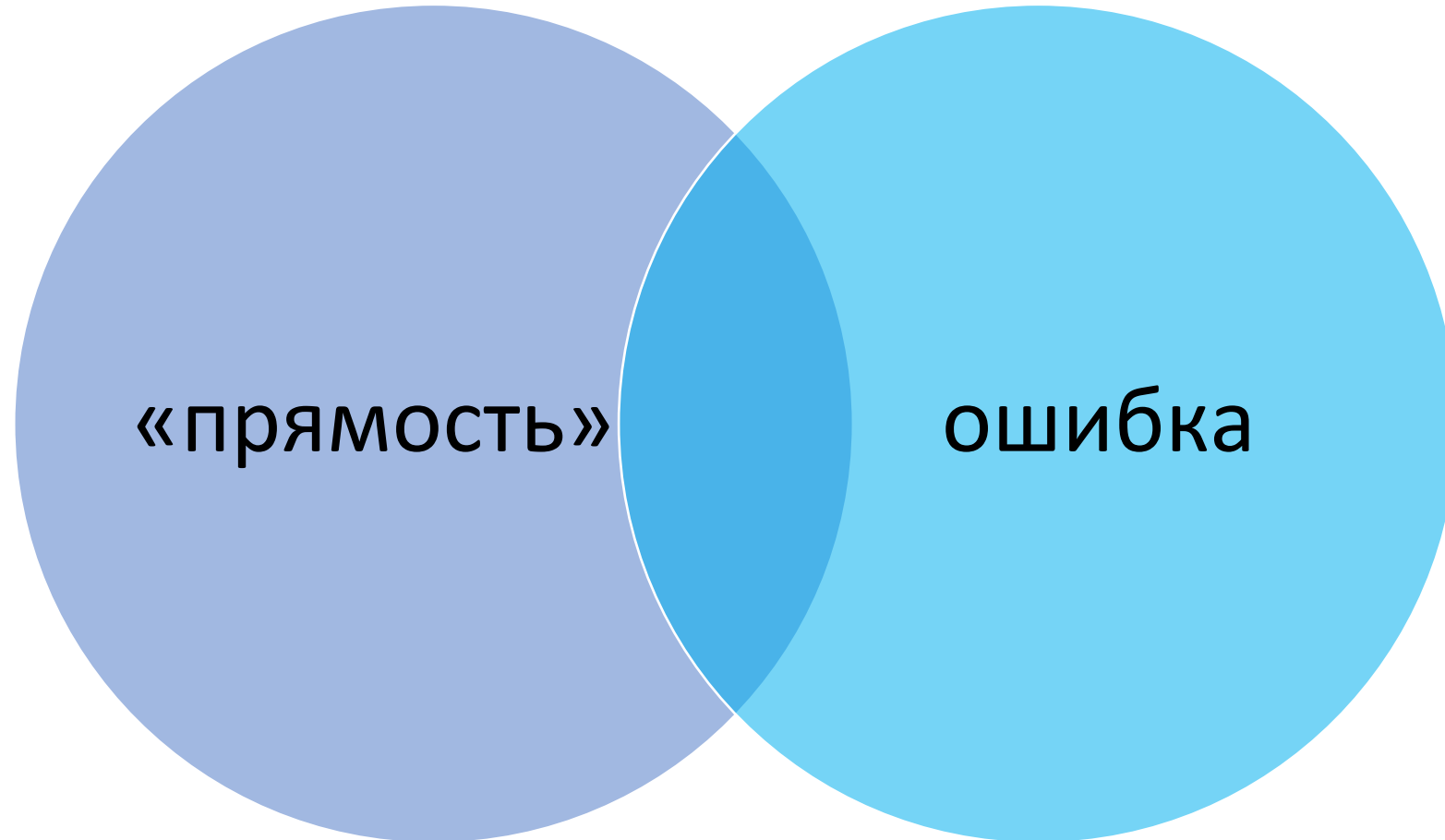
1. Обучение ансамбля нейронных сетей
2. Отбор нейронных сетей на основе их предсказаний
3. Статистический анализ набора нейронных сетей, прошедших отбор



Построение множества для получения предсказаний: энергия

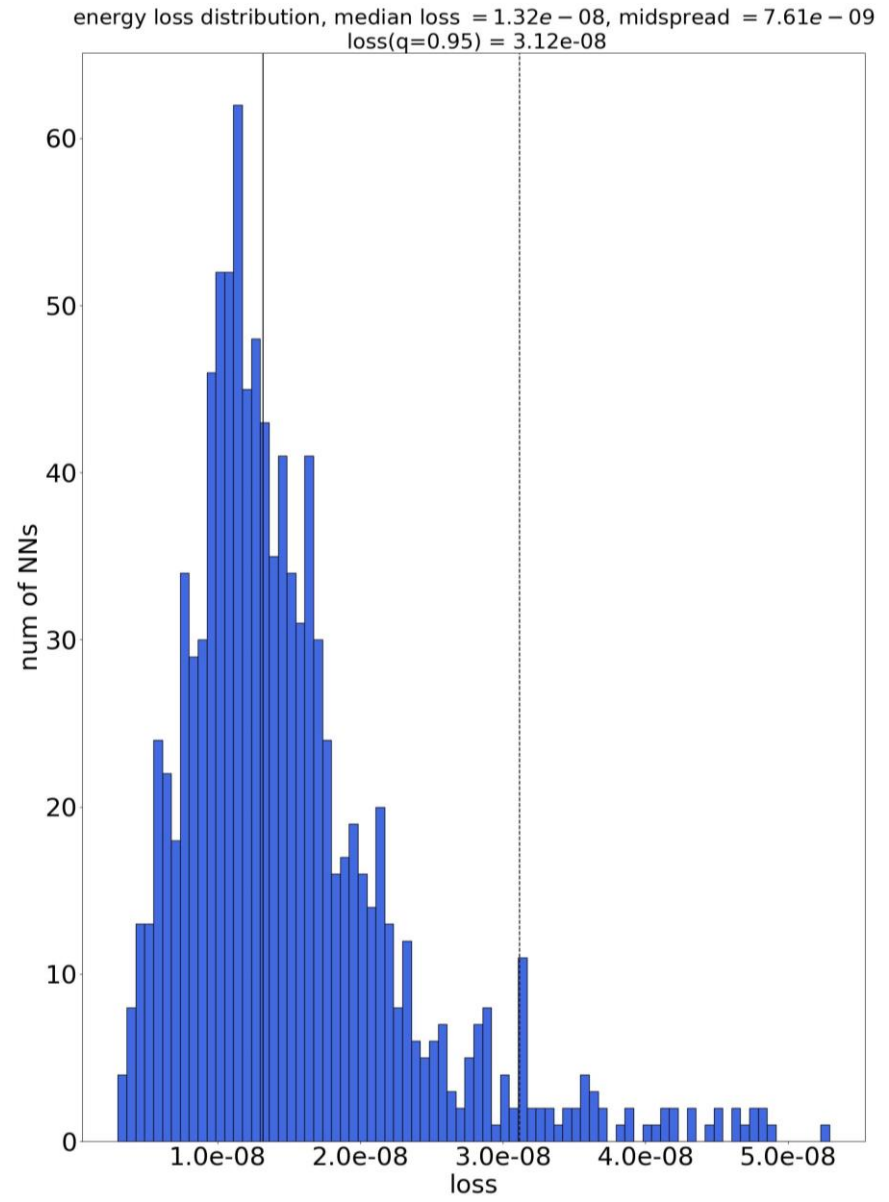
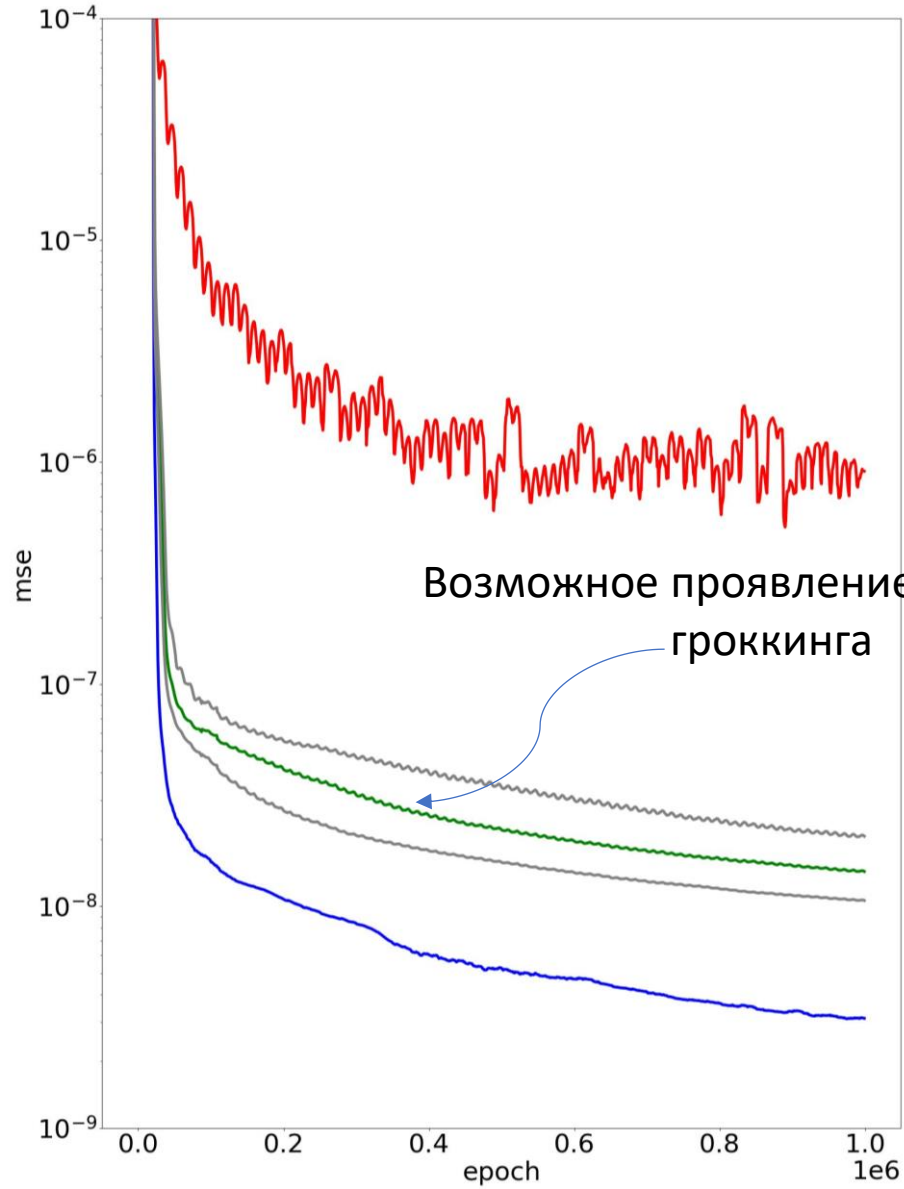


Построение множества для получения предсказаний: радиус

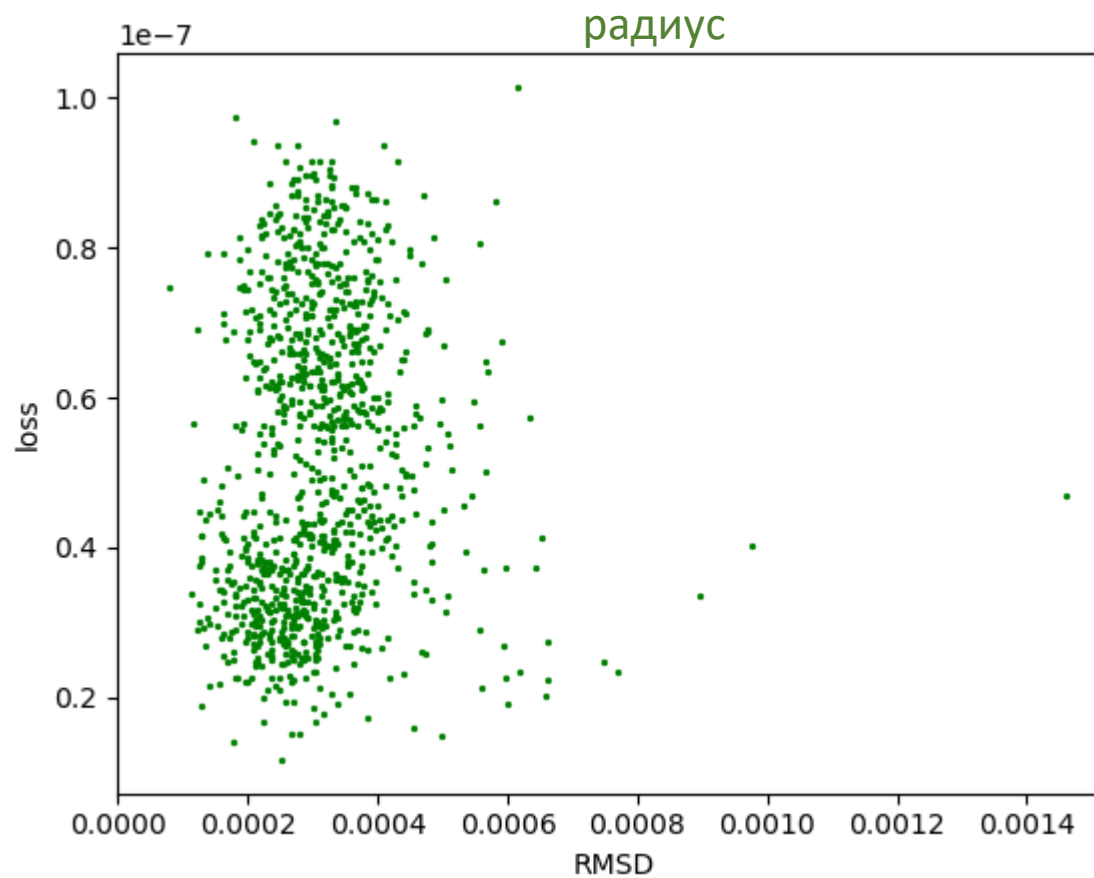
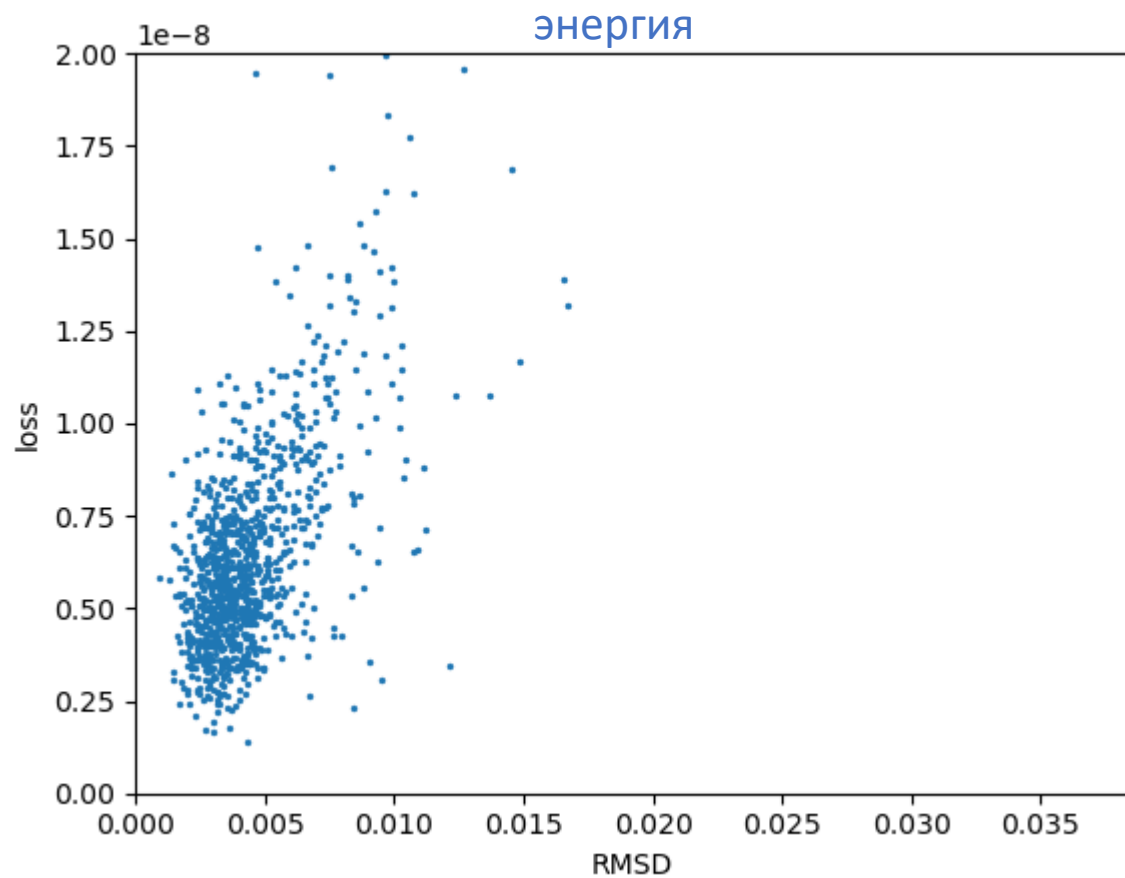


Зачем нужен ансамбль нейросетей?

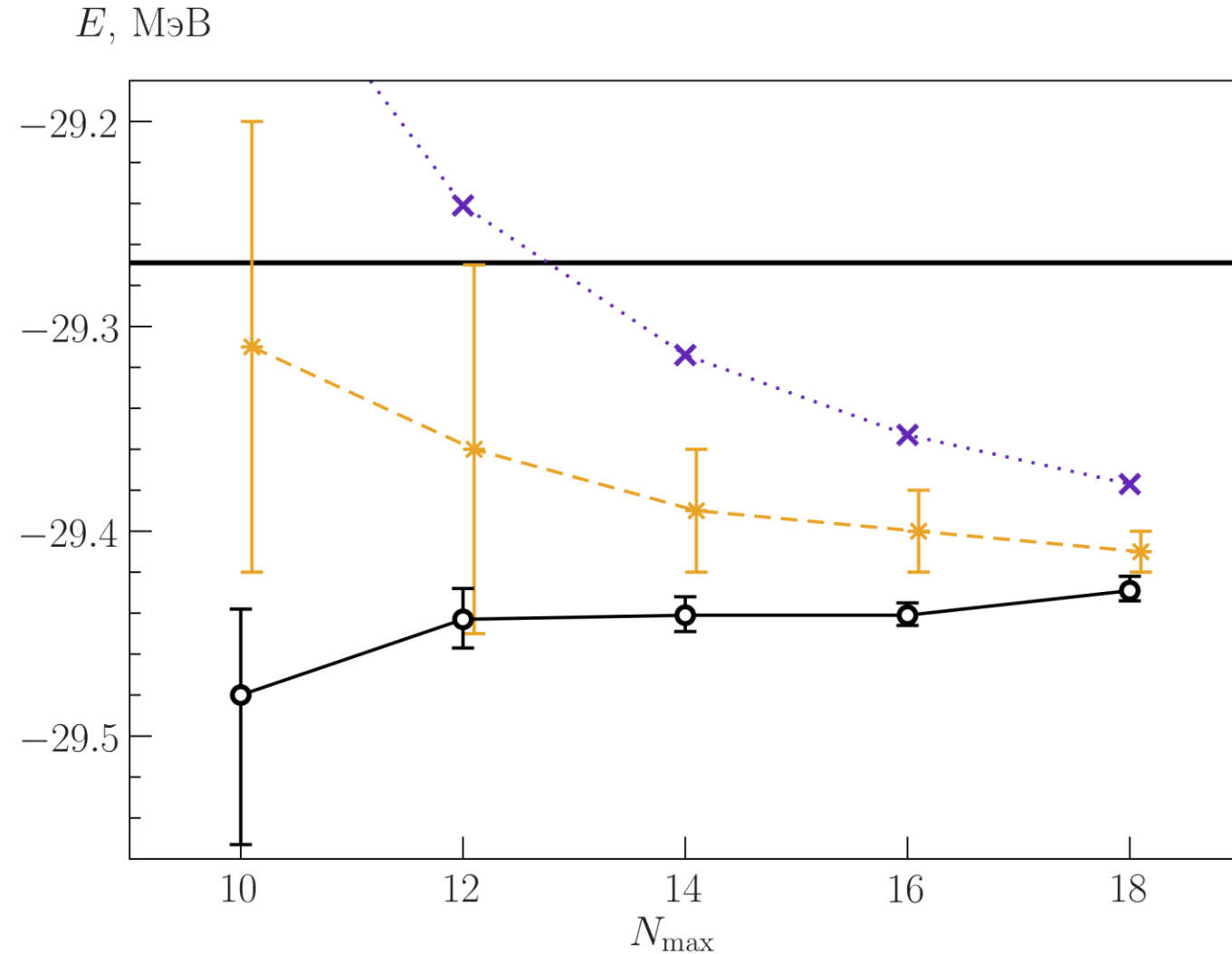
[arXiv:2201.02177](https://arxiv.org/abs/2201.02177) [cs.LG]



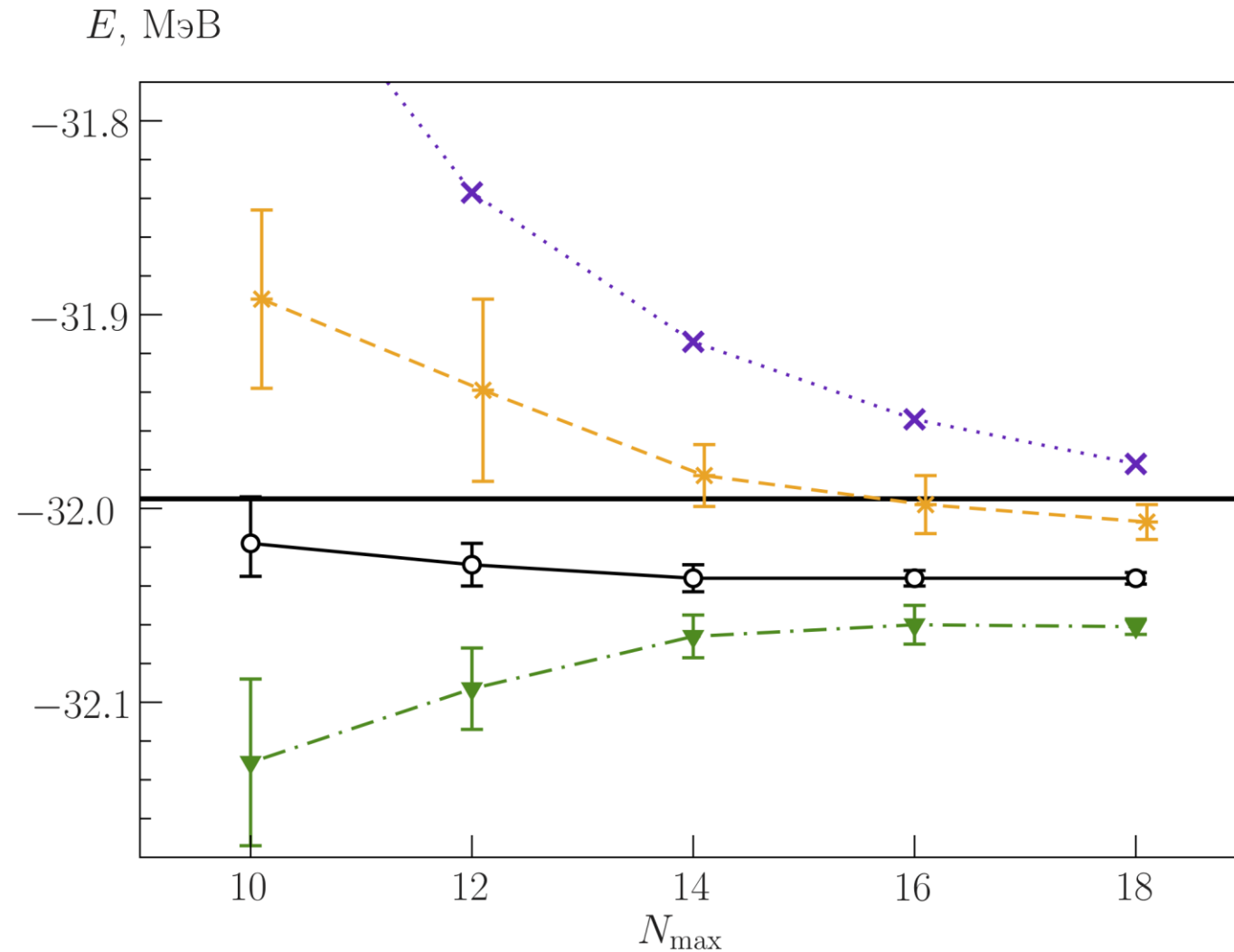
При достаточном “качестве” обучения корреляции предсказательной силы и качеством обучения практически нет!



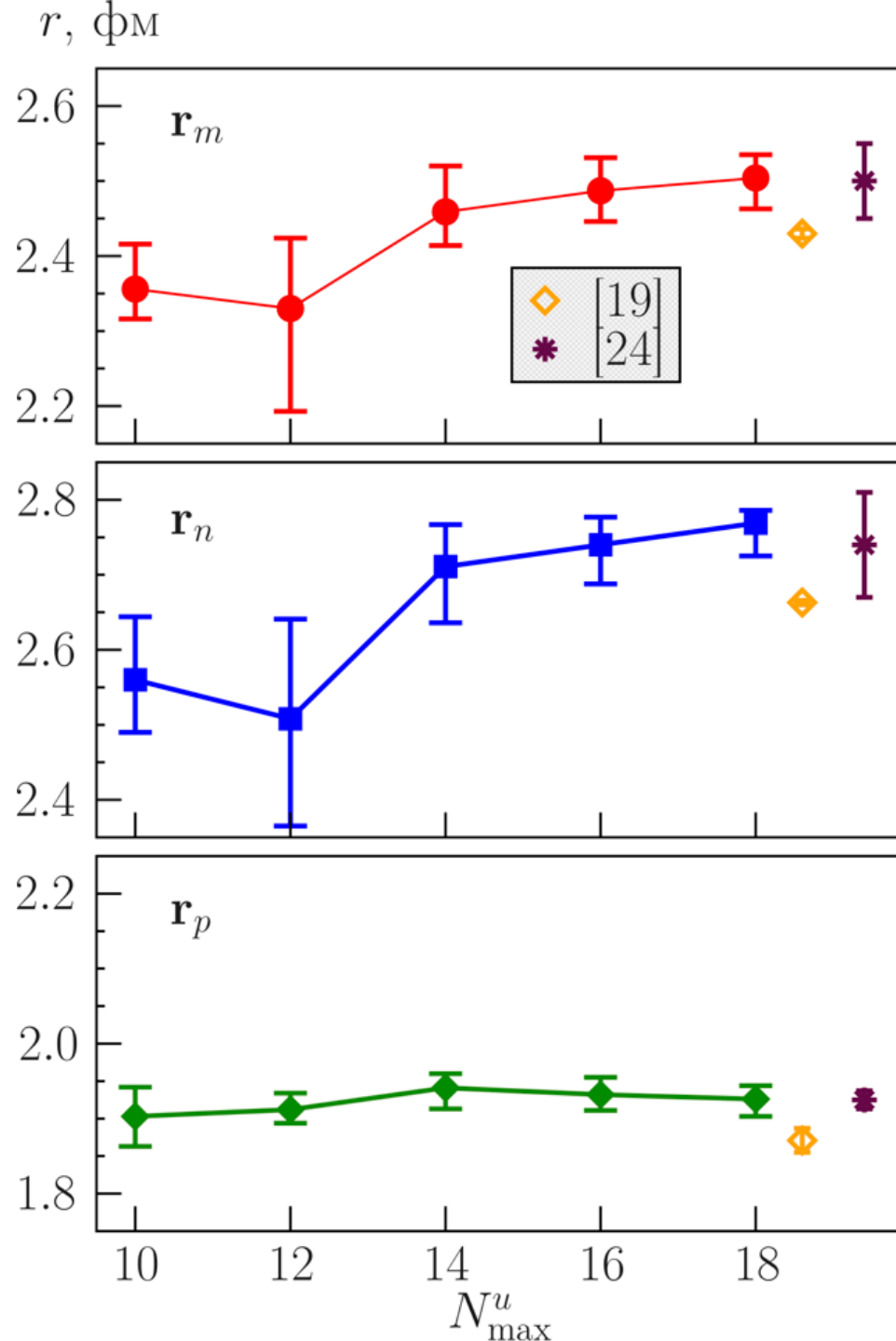
Результаты экстраполяции энергии основного состояния для ядра ${}^6\text{He}$



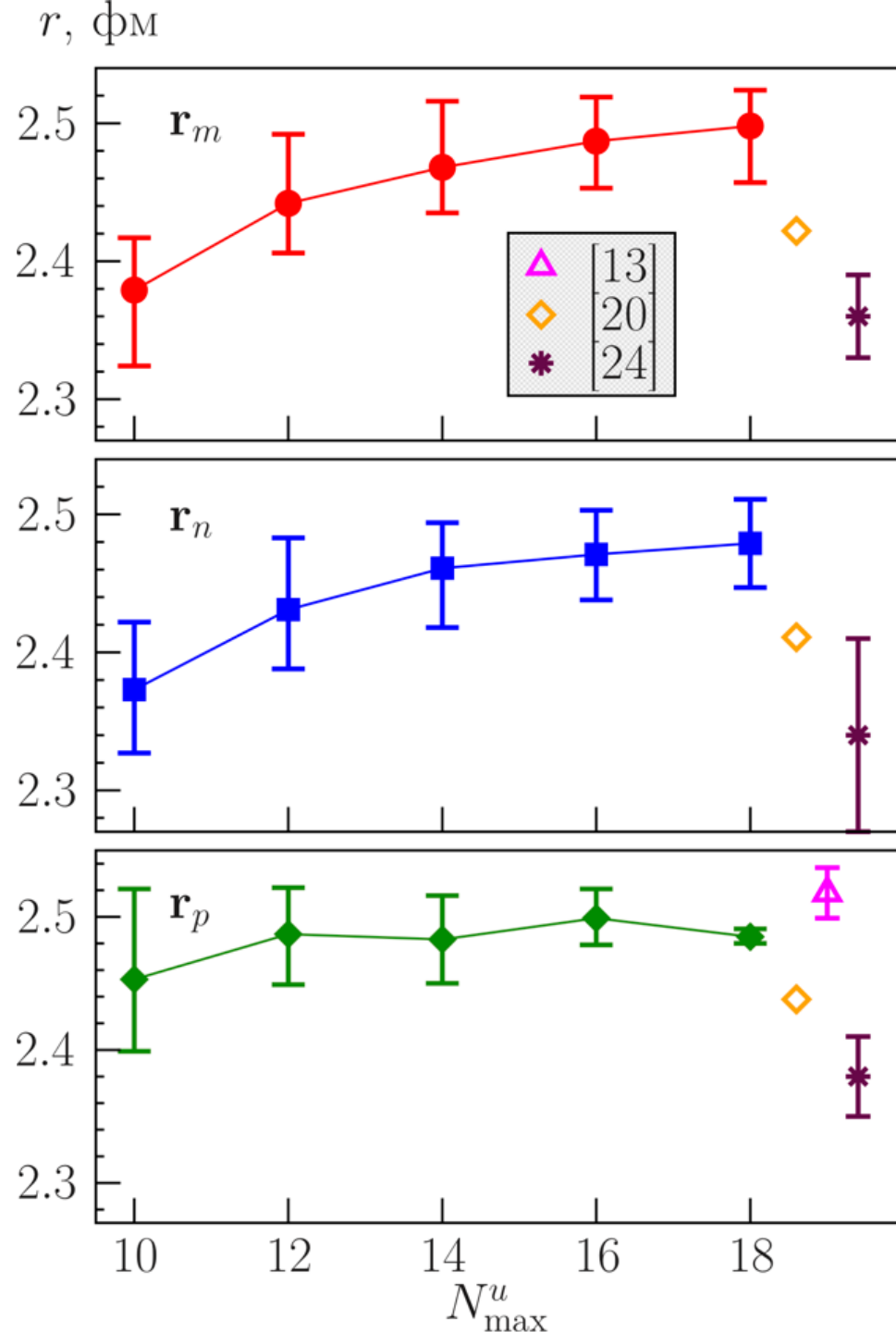
Результаты экстраполяции энергии основного состояния для ядра ${}^6\text{Li}$



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



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

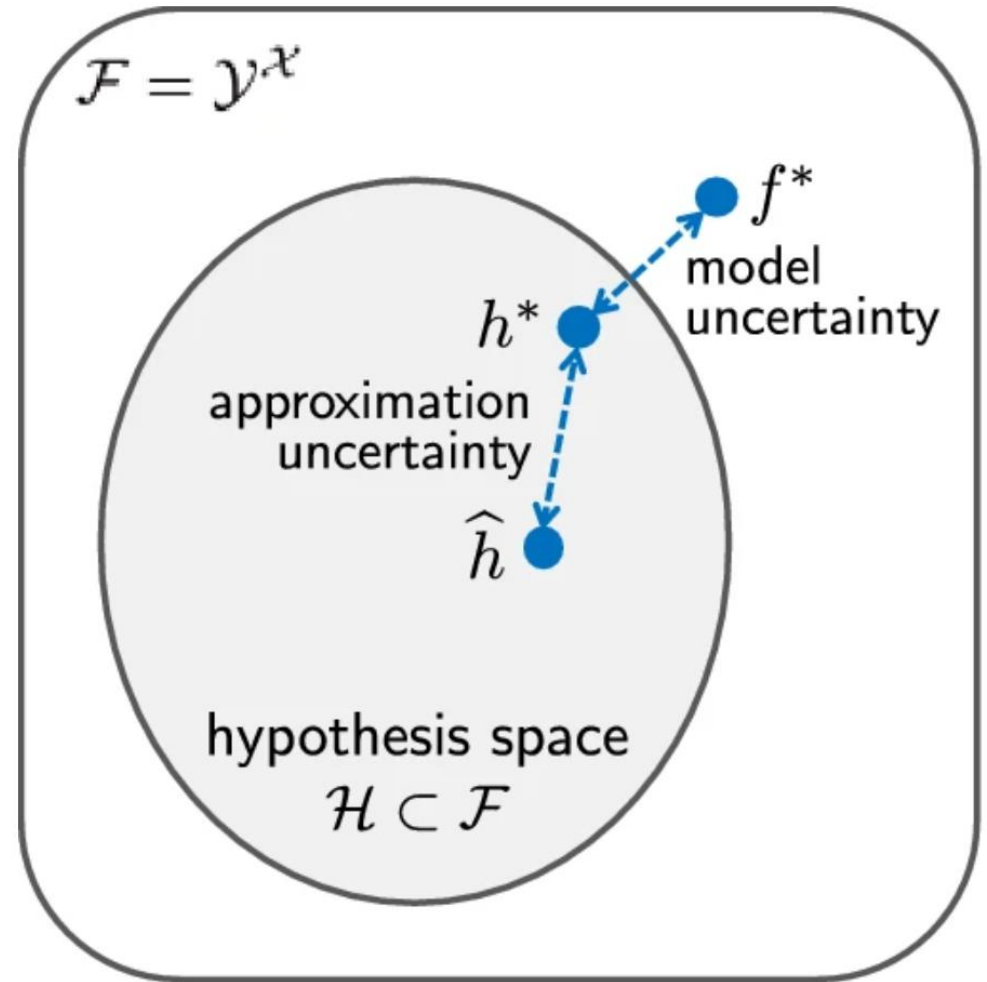


Некоторые выводы

- 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.