

Czy sztuczna sieć neuronowa może nauczyć nas fizyki kwantowej?

Anna Dawid

Maszyny ogrywają już ludzkich mistrzów w szachy i Go, a nawet zwyciężają pojedynki jeden na jednego w Dota 2. Jak one to robią? Oczywiście, mają przewagę ogromnych zasobów pamięciowych, ale chociaż umożliwiają one zapamiętanie wszelkich możliwych kombinacji ruchów szachowych, to w przypadku Go potencjalnych ruchów jest więcej niż szacowana liczba atomów we Wszechświecie, stąd bez czegoś „więcej” maszyna mogłaby z mistrzem wygrać w Go tylko przypadkiem. Zasluga (albo wina) leży po stronie programistów i naukowców, którzy zainspirowani działaniem ludzkiego mózgu, znaleźli sposób, aby umożliwić maszynom uczenie się. Tworzeniem takich algorytmów zajmuje się dziedzina uczenia maszynowego. Takie uczące się maszyny, poza urażaniem dumy graczy, zajmują się też filtrowaniem naszego spamu, rozpoznają głosy i twarze, nawet prowadzą samochody. Jeszcze nie podbijają świata.

Pomagają nie tylko w codziennym życiu. W sytuacjach, gdy trzeba przeanalizować ogromne ilości danych i znaleźć ukryte wzorce, albo znaleźć bardzo skomplikowaną funkcję bazując na kilku dokładnych, ale drogich pomiarach, naukowcy również korzystają z metod uczenia maszynowego, szczególnie w chemii kwantowej, nauce o materiałach i biologii. Fizyka kwantowa wielu ciał od zawsze miała problem z dużą liczbą danych, spowodowanym eksponencjalnym wzrostem skomplikowania funkcji falowej opisującej układ wraz z liczbą obiektów w nim zawartych, a także ogromną ilością nietrywialnych, zakodowanych w niej korelacji między tymi obiektami. Nic więc dziwnego, że algorytmy uczenia maszynowego znalazły swoje zastosowanie także i tutaj. Okazało się na przykład, że dobrze sobie radzą z klasyfikacją faz w układach fizycznych. Trzeba jednak mieć na uwadze niebezpieczną cechę wszystkich maszyn uczących się. Im bardziej stają się skomplikowane, tym mniej zrozumiałe dla człowieka, a temu wzrostowi skomplikowania nie zawsze towarzyszy wzrost wyrafinowania sieci. Pokazano na przykład, że gdy doda się do obrazka z pandą niewykrywalny (dla człowieka) szum, nowoczesna sieć neuronowa z wielką pewnością zaczyna rozpoznawać ją jako gibbona. To jeden z wielu przykładów, że sieci neuronowe nie działają dokładnie tak, jak oczekiwaliśmy i że ich predykcjom nie możemy całkowicie ufać. Niesamowite, że mimo to stosowane są na całym świecie. Jak ujął to Pedro Domingo: *"Ludzie martwią się, że komputery staną się zbyt inteligentne i przejmą władzę nad światem, ale prawdziwy problem jest taki, że są one zbyt głupie i już przejęły władzę nad światem"*. Brak zrozumienia działania skomplikowanych sieci neuronowych jest więc ogromnie istotny dla życia codziennego, a tym problemem zajmuje się szybko rozwijająca poddziedzina uczenia maszynowego, zwana wyjaśnialnością uczenia maszynowego, która projektuje narzędzia mające na celu odkrycie wewnętrznej logiki, którą kierują się sieci.

Analogiczny problem występuje w przypadku sieci neuronowych stosowanych w problemach fizycznych. Mimo że klasyfikują one fazy, wykorzystując znacznie mniej zasobów numerycznych niż konwencjonalne metody, to potrafią jedynie odtworzyć znane nam diagramy fazowe i właściwie nie nauczyły naukowców niczego nowego na temat fizyki kwantowej. Co więcej, nie można być nawet pewnym czy maszyny uczą się czegoś zgodnego ze znanymi teoriami o przejściach fazowych, jak parametru porządku. Postawimy więc pierwsze kroki w kierunku zrozumienia czego tak naprawdę uczą się sieci stosowane w klasyfikacji faz, a zrobimy to z pomocą metod wyjaśnialności takich jak funkcje wpływu i mapy ciepła. Poprawnie zastosowane potrafią wskazać przykłady treningowe najbardziej istotne dla danej predykcji lub znaleźć części danych będące najbardziej wyróżniające dla wybranej klasy.

Wyniki projektu mogą być trojaki. Po pierwsze, mogą zapewnić pierwsze, silne wskazanie (lub dowód) na to, że sieci neuronowe stosowane w wybranych problemach klasyfikacji faz faktycznie uczą się parametru porządku. Mogą jednakże również pokazać, że maszyna uczy się czegoś zupełnie niezwiązanego z parametrem porządku. Wówczas oznacza to, że uczy się ona szumu, tła, innej informacji nieświadomie podawanej przez naukowca, lub, co byłoby szczególnie ekscytujące, uczy się ona czegoś istotnego dla fizyki, różnego od parametru porządku, a niezauważanego wcześniej. Konsekwencje dla dziedziny będą bardzo istotne: 'uprawomocnimy' użycie metod uczenia maszynowego w fizyce kwantowej, zdyskredytujemy je, lub wreszcie damy im możliwość nauczenia fizyków kwantowych czegoś nowego.