

W ostatnich latach nastąpił gwałtowny rozwój nowych metod uczenia głębokich sieci neuronowych, dzięki czemu znalazły one zastosowanie w wielu dziedzinach nauki i techniki. Sieci neuronowe można często spotkać również w fizyce. W tym projekcie planujemy skupić się na szczególnym zastosowaniu sieci neuronowych, które zostało zaproponowane w ostatnich latach: symulowanie rozkładów prawdopodobieństw układów fizycznych.

Chcąc obliczyć wielkości fizyczne w układzie statystycznym niezbędna jest wiedza na temat rozkładu prawdopodobieństwa stanów fizycznych. W ogromnej większości przypadków, które są rozważane w fizyce, liczba stanów układu jest zbyt duża, aby można ją efektywnie policzyć numerycznie (często jest wręcz nieskończona). W takich przypadkach stosowane są bardziej wyrafinowane metody numeryczne, np. Łańcuchy Markova Monte Carlo, ang. Markov Chain Monte Carlo (MCMC). W MCMC generuje się nowy stan układu fizycznego poprzez małą, losową zmianę w poprzednio wygenerowanej konfiguracji. Każda nowa konfiguracja może zostać zaakceptowana bądź odrzucona z pewnym prawdopodobieństwem, które gwarantuje, że dla bardzo długich łańcuchów wygenerowane konfiguracje mają poszukiwany rozkład prawdopodobieństwa. Zasadniczo występują dwa główne problemy z podejściem MCMC. Po pierwsze, nie jest możliwe obliczenie niektórych funkcji stanu, np. entropii, co wynika z faktu, że metoda nie jest czuła na normalizację rozkładu prawdopodobieństwa. Po drugie, występuje autokorelacja, a więc konfiguracje położone niedaleko od siebie w łańcuchu nie są od siebie statystycznie niezależne. Autokorelacja powoduje zwiększenie błędu symulacji, czasem wielokrotnie. Obydwa te problemy mogą zostać zasadniczo zredukowane dzięki zastosowaniu sieci neuronowych.

Istnieje kilka metod uczenia sieci neuronowych tak, aby odtwarzały zadany rozkład prawdopodobieństwa. W tym projekcie skupimy się na dwóch, które według nas są najbardziej obiecujące: i) Wariacyjne Sieci Autoregresywne, ang. Variational Autoregressive Networks (VAN), które znajdują zastosowanie w układach z dyskretnymi stopniami swobody; ii) Normalizing Flow (NF) stosowane w układach z ciągłymi stopniami swobody. Oba te podejścia mają wspólną cechę: sieć jednocześnie uczy się rozkładu prawdopodobieństwa oraz generuje stany układu. Nie potrzebny jest więc zespół danych, na których sieć się uczy, a jedynie nieznormalizowana forma docelowego rozkładu prawdopodobieństwa. Metoda uczenia polega na minimalizowaniu wariacyjnej energii swobodnej, co pozwala oszacować funkcje stanu z bardzo wysoką dokładnością. Ponadto, tak wytrenowaną sieć neuronową można zastosować do generacji MCMC (tzw. Neuronowy MCMC – NMCMC), gdzie każdy kolejny stan jest niezależny od poprzedniego, a jedyne korelacje mogą pojawiać się z powodu nieidealnego odtworzenia rozkładu docelowego.

Głównymi celami tego projektu są udoskonalenie algorytmów VAN i NF poprzez poprawę ich wydajności oraz zastosowanie ich do różnych układów fizycznych. Niemal w każdej dziedzinie fizyki występują układy, które mają charakterystykę pozwalającą zastosować któryś z tych dwóch algorytmów. Przykładowo są to: pola fizyczne Modelu Standardowego (np. chromodynamika kwantowa), podejście dynamicznych triangulacji do kwantowej teorii grawitacji, szkła spinowe, kryształy czasowe, materiały topologiczne. Proponowany projekt zawiera więc elementy wielu dziedzin fizyki i mamy nadzieję na poszerzenie wiedzy w każdej z nich.