

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
“Национальный исследовательский университет ИТМО”

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ОТКРЫТОЙ КВАНТОВОЙ
ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МАШИННОГО
ОБУЧЕНИЯ

Автор Звягинцева Дарья Александровна
(Фамилия, Имя, Отчество) (Подпись)

Направление подготовки (специальность) 01.03.02
(код, наименование)
Прикладная математика и информатика

Квалификация бакалавр
(бакалавр, магистр, инженер)*

Руководитель ВКР Ульянцев В.И., к.т.н., доцент ФИТИП
(Фамилия, И., О., ученое звание, степень) (Подпись)

Санкт-Петербург, 2020 г.

Обучающийся _____ Звягинцева Дарья Александровна _____
(ФИО полностью)

Группа _____ М3437 _____ Факультет/институт/кластер _____ ИТИП _____

Направленность (профиль), специализация _____ Математические модели и алгоритмы в
разработке программного обеспечения _____

Консультант (ы):

а) _____ Кириенко А.А., PhD, Fellow (старший научный сотрудник), _____
(Фамилия, И., О., ученое звание, степень) (Подпись)

ВКР принята “ _____ ” _____ 20 _____ г.

Оригинальность ВКР _____ %

ВКР выполнена с оценкой _____

Дата защиты “ _____ ” _____ 20 _____ г.

Секретарь ГЭК _____
(ФИО) (подпись)

Листов хранения _____

Демонстрационных материалов/Чертежей хранения _____

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
"НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИТМО"

УТВЕРЖДАЮ

Руководитель ОП

____ Парфенов В. Г. _____
(Фамилия, И.О.) (подпись)

« ____ » « ____ » 20 ____ г.

ЗАДАНИЕ
НА ВЫПУСКНУЮ КВАЛИФИКАЦИОННУЮ РАБОТУ

Обучающийся _____ Звягинцева Дарья Александровна _____
(ФИО полностью)

Группа _____ М3437 _____ Факультет/институт/кластер _____ ИТИП _____

Квалификация _____

бакалавр

(магистр, инженер, бакалавр)**

Направление подготовки _____ 01.03.02 Прикладная математика и информатика _____
(код, название направления подготовки)

Направленность (профиль) образовательной программы _____ Математические модели
и алгоритмы в разработке программного обеспечения _____

Специализация _____

Тема ВКР Изучение фазовых переходов в открытой квантовой оптической системе с
помощью методов машинного обучения _____

Руководитель _____ Ульянцев В.И., к.т.н., доцент ФИТИП _____
(ФИО полностью, место работы, должность, ученая степень, ученое звание)

2 Срок сдачи студентом законченной работы до « 29 » « ____ » мая ____ » 2020г.

3 Техническое задание и исходные данные к работе _____ Необходимо изучить область
квантовой физики, связанную с диссипативными решетками поляритонных конденсатов и
применить методы машинного обучения для поиска новых фаз _____

**4 Содержание выпускной квалификационной работы (перечень подлежащих
разработке вопросов)**

_____ В ходе работы необходимо проанализировать и построить графические иллюстрации
решеток для исходного набора данных, проанализировать их. Применить методы
кластеризации для поиска новых фаз. Построить фазовую диаграмму и найти границы
фазового перехода. _____

5 Перечень графического материала (с указанием обязательного материала)

____ Графические изображения решеток. Диаграммы, полученные с помощью машинного обучения с указанием на них фаз. Фазовая диаграмма с указанием межфазных границ. _____

6 Исходные материалы и пособия

- _1._ Machine learning phases of matter Juan Carrasquilla and Roger G. Melko _____
- _2._ A high-bias, low-variance introduction to Machine Learning for physicists Pankaj Mehta, Ching-Hao Wang, Alexandre G. R. Day, and Clint Richardson _____
- _3._ Learning phase transitions by confusion Evert P. L. van Nieuwenburg*, Ye-Hua Liu and Sebastian D. Huber _____

7 Дата выдачи задания «_15_» «__сентября__» 2019г.

Руководитель ВКР _____
(подпись)

Задание принял к исполнению _____ «_15_» «__сентября__» 2019г.
(подпись)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
"НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИТМО"

АННОТАЦИЯ

ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ

Обучающийся _____ Звягинцева Дарья Александровна _____
(ФИО)

Наименование темы ВКР: Изучение фазовых переходов в открытой квантовой оптической системе с помощью методов машинного обучения _____

Наименование организации, где выполнена ВКР _____ Университет ИТМО _____

ХАРАКТЕРИСТИКА ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЫ

1 Цель исследования _____ Найти новые фазы в диссипативных решетках поляритонных конденсатов _____

2 Задачи, решаемые в ВКР _____ Анализ набора данных, составление фазовой диаграммы, поиск межфазных границ _____

3 Число источников, использованных при составлении обзора _____ 13 _____

4 Полное число источников, использованных в работе _____ 13 _____

5 В том числе источников по годам

Отечественных			Иностранных		
Последние 5 лет	От 5 до 10 лет	Более 10 лет	Последние 5 лет	От 5 до 10 лет	Более 10 лет
5			7	1	

6 Использование информационных ресурсов Internet _____ да, 10 _____
(Да, нет, число ссылок в списке литературы)

7 Использование современных пакетов компьютерных программ и технологий (Указать, какие именно, и в каком разделе работы)

Пакеты компьютерных программ и технологий	Раздел работы
Python, PyCharm, numpy, matplotlib	2
Python, PyCharm, sklearn, numpy, matplotlib, keras	3

8 Краткая характеристика полученных результатов. В ходе работы построена фазовая диаграмма и найдены новые фазы. По мнению экспертов, новые фазы являются интересными для области квантовой оптики в целом и будут служить предметом дальнейшей публикации. Разбиение границ похоже на реальное и, хоть данная область в физике является малоизученной, машинное обучение продвинуло её. _____

9 Полученные гранты, при выполнении работы _____
(Название гранта)

10 Наличие публикаций и выступлений на конференциях по теме выпускной работы _____ да _____
(Да, нет)

а) 1 _____

(Библиографическое описание публикаций)

б) 1 IX Конгресс молодых ученых _____

Обучающийся Звягинцева Д.А. _____
(ФИО) (подпись)

Руководитель ВКР Ульянцев В.И. _____
(ФИО) (подпись)

“ _____ ” _____ 20__ г.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ОГЛАВЛЕНИЕ	4
СПИСОК ТЕРМИНОВ	6
ВВЕДЕНИЕ.....	8
ГЛАВА 1. ОБЗОР ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ И СПОСОБОВ ЕЕ	
ИССЛЕДОВАНИЯ	10
1.1. ПРЕДМЕТНАЯ ОБЛАСТЬ.....	10
1.2. ПОСТАНОВКА ЦЕЛИ И ЗАДАЧ	14
1.2.1. Цель работы.....	15
1.2.2. Задачи.....	15
1.3. ОПИСАНИЕ ИСПОЛЬЗУЕМЫХ МЕТОДОВ	16
1.3.1. Выбор методов машинного обучения.....	16
1.3.2. PCA.....	16
1.3.3. TSNE	18
1.3.4. Agglomerative clustering.....	19
1.3.5. Learning by confusion	20
Выводы по главе 1	23
ГЛАВА 2. АНАЛИЗ ИСХОДНЫХ ДАННЫХ.....	24
2.1. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ.....	24
2.1.1. Расчётная модель	24
2.1.2. Исходные данные.....	24
2.2. АНАЛИЗ РЕШЕТОК.....	25
2.2.1. Известные ранее фазы	25
2.2.2. Новые фазы.....	27
2.3. ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА	30
2.3.1. Построение диаграммы	31
2.3.2. Анализ диаграммы.....	31

Выводы по главе 2	32
ГЛАВА 3. ПРАКТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ.....	33
3.1. ВЫБОР ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ТЕХНОЛОГИЙ	33
3.2. ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ ВЫДЕЛЕННЫХ ФАЗ.....	33
3.2.1. Обоснования выбора алгоритма.....	33
3.2.2. Оценка качества	34
3.2.3. Применение метода	38
3.3. ПОСТРОЕНИЕ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ.....	39
3.3.1. Обоснования выбора алгоритма.....	39
3.3.2. Оценка качества	39
3.3.3. Применение метода	45
3.4. ПОИСК МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ.....	46
3.4.1. Подготовка тестового и тренировочного набора данных...	46
3.4.2. Структура нейронной сети.....	46
3.4.3. Итоговая фазовая диаграмма	47
Выводы по главе 3.....	48
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	49
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	50

СПИСОК ТЕРМИНОВ

Learning rate – в машинном обучении, скорость обучения. Определяет размер шага при движении к минимуму функции. Настраиваемый параметр во многих алгоритмах оптимизации.

Perplexity – настраиваемый параметр в алгоритмах оптимизации, использующих информацию о соседях. Задает количество ближайших соседей, используемых для обучения.

Диссипативная система — это открытая система, которая находится вдали от термодинамического равновесия.

Дырка – здесь, место, которое покинул возбужденный электрон.

Коэффициент связи – параметр в диссипативных решетках поляритонных конденсатов, отвечающий за взаимодействие соседних узлов.

Ошибка второго рода – в математической статистике, ситуация, когда принята неверная нулевая гипотеза.

Ошибка первого рода – в математической статистике, ситуация, когда опровергнута правильная нулевая гипотеза.

Параметр накачки – параметр в диссипативных решетках поляритонных конденсатов, отвечающий за энергию, сообщенную системе.

Поляритонный конденсат – система, поддерживающая одновременное существование экситонов и фотонов.

Стохастическая система – случайная система. Поведение таких систем не является детерминированным. Состояние такой системы описывается не только величинами, которые могут быть предсказаны, но и случайными.

Фаза – часть системы однородная по составу и строению и отделенная от других частей системы (других фаз) на фазовой диаграмме границей раздела (межфазной границей).

Фазовая диаграмма – графическое представление фазовых равновесий той или иной системы в координатах основных параметров состояния системы.

Фотон — элементарная частица света. Квант электромагнитного излучения и переносчик электромагнитного взаимодействия. Фотон не имеет массы и перемещается в пространстве со скоростью света.

Экситон — пара электрон плюс его дырка.

ВВЕДЕНИЕ

Методы машинного обучения все глубже проникают во все сферы жизни. Нет ни одной области, которую они бы не затронули. Технологии прочно закрепились в нашей жизни в виде голосовых помощников, банковских и рекомендательных системах. Методы машинного обучения проникают и в науку. Все чаще мы слышим слова биоинформатика, искусственный интеллект. Не стоит особняком и физика. Более того, существуют области физики, в которых дальнейшее развитие невозможно без использования машинного обучения.

Одна из них — квантовые оптические системы, которые не удовлетворяют условиям равновесности. В данной работе рассматривается лишь часть этой области - решетки поляритонных конденсатов и ведется поиск новых фаз для этих систем. Все исследования проводились с помощью методов машинного обучения.

Описанные в работе подходы являются в некотором смысле универсальными и могут быть применены в других смежных научных областях.

Основной целью работы является поиск новых фаз в диссипативных решетках поляритонных конденсатов. Для ее достижения применялись алгоритмы кластеризации, уменьшения размерности, а также относительно новый метод learning by confusion. Он использовался всего в нескольких научных работах[1], но никогда не применялся к нестохастическим системам. В работе мы строим фазовую диаграмму и находим межфазные границы для описанной системы.

В классической физике поиск фаз связан с теорией фазовых переходов Ландау и введения параметра порядка. Внутри самой фазы считается, что система ведет себя универсально по отношению к какой-то глобальной функции системы. Это можно описать определенным поведением корреляций. Например, для водяного пара корреляции быстро затухают, тогда как лед — кристалл, а значит имеет коррелированный отклик. Свойства, которые нужно изучать физики выбирают самостоятельно или они могут быть мотивированы экспериментом. При этом встает вопрос: как выбрать параметр порядка? Кроме

того, он не всегда существует. При поиске фаз в термодинамических системах может сработать следующий подход. Часто фазовый переход наблюдается в точках, где производная свободной энергии испытывает скачок. Проблема оптических систем в том, что они неравновесные и, следовательно, не могут быть описаны законами термодинамики. Поэтому приходится искать альтернативные методы поиска фаз. В данной работе для этого используются методы машинного обучения.

Первая глава работы посвящена теоретическому обзору рассматриваемой области и выбору методов для исследования. В ней дается подробная характеристика поляритонным конденсатам, ставится цель и задачи, описываются применяемые в работе методы.

Во второй главе рассказывается про исходный набор данных, используемый в работе, приводим анализ решеток, построенных для него, и даем им рабочие названия. Мы делаем предположение о фазовом разбиении которые будет подтверждено в следующей главе.

Третья глава посвящена практическому исследованию в работе. В ней рассказывается о результатах, полученных в работе, приводится итоговая фазовая диаграмма.

В заключении рассказывается о результатах работы. В ней приведены выводы и анализ полученных результаты.

ГЛАВА 1. ОБЗОР ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ И СПОСОБОВ ЕЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

В данной главе рассказывается о том, что из себя представляет основной объект работы. Формулируются цель и задачи. Производится выбор и анализ используемых в работе методов.

1.1. ПРЕДМЕТНАЯ ОБЛАСТЬ

Рассматриваемый объект — микрорезонатор с квантовой ямой. Он состоит из нескольких слоев. Внешние — два брэгговских зеркала. Внутренние — возбужденные полупроводники, с разными коэффициентом преломления (рисунок 1.1).

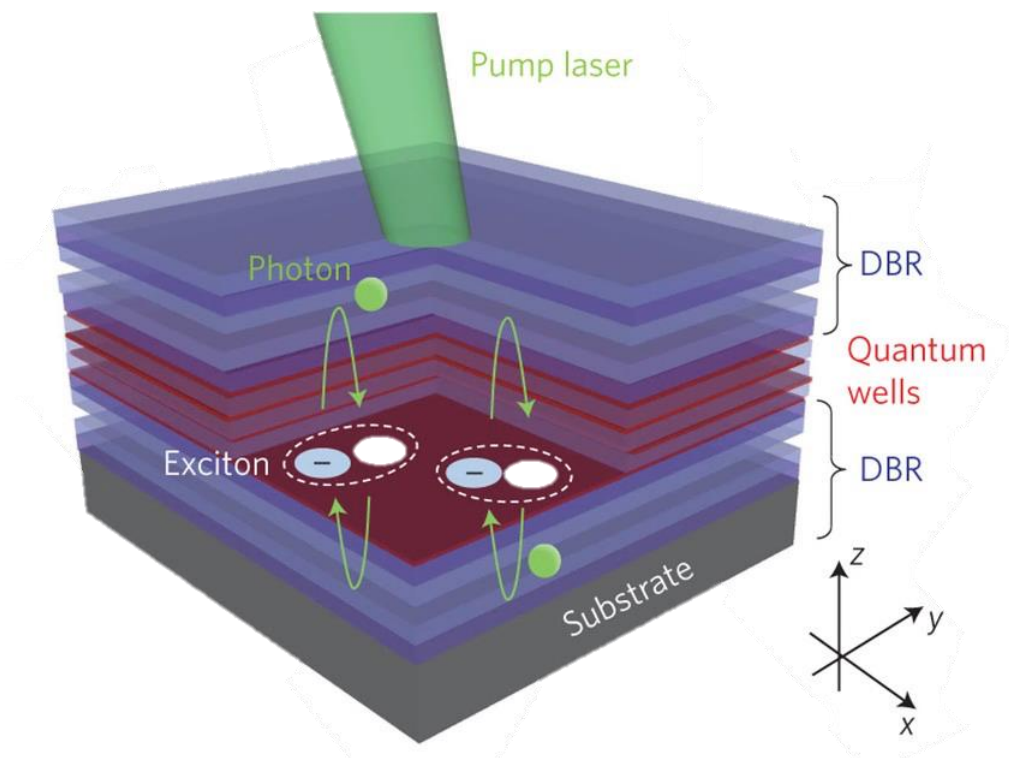


Рисунок 1.1 - Поляритонный конденсат [2] (Pump laser — лазер накачки, photon — фотон, exciton — экситон, substrate — подложка, DBR, distributed Bragg reflectors — Распределённый брэгговский отражатель, Quantum wells — квантовые ямы)

С помощью лазера можно возбудить внутри огромное количество электронов. В возбужденном состоянии они покидают свое первоначальное место. Место, которое покинул электрон называется дырка. Электроны

перемещаются не одни, а вместе со своими дырками. Такая пара электрон плюс дырка называется экситон.

Если к системе не прикладывать энергию, экситон возвращается на место (соединяется с дыркой), а остаточная энергия преобразуется в фотон (свет). В микрорезонаторе фотоны отражаются от зеркал, и снова возбуждают экситоны. Такой коктейль из фотонов и экситонов называется поляритоном.

Описанные микрорезонаторы можно объединять в решетку (рисунок 1.2). Она может иметь разную форму (квадратичная, гексагональная).

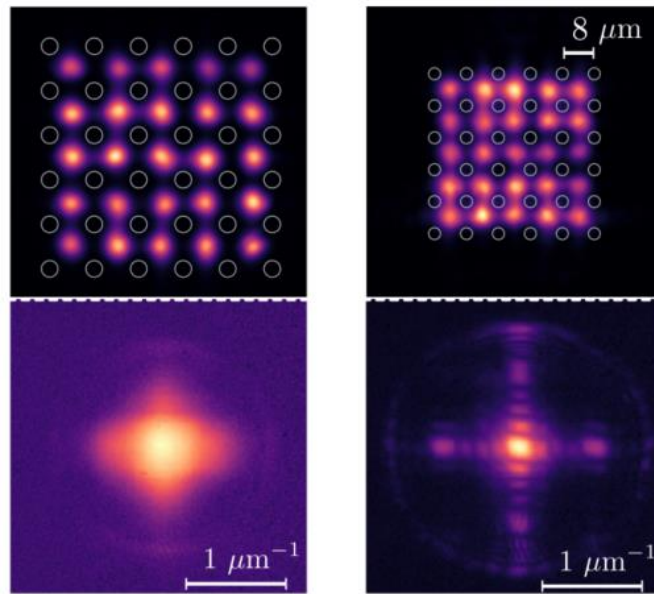


Рисунок 1.2 - Примеры решеток на физическом уровне [3]

В данной работе объектом изучения являются квадратичные решетки из 64 узлов (такowymi были исходные данные, описанные в главе 2 данной работе). Однако все рассуждения и вычисления могут быть применены к любым конфигурациям и размерностям.

Каждый узел решетки характеризуется значением Ψ - макроскопическая волновая функция поляритонов, которая записана в приближении среднего поля. Ее так же можно связать с амплитудой электрического поля в узле решетки. Квадрат модуля волновой функции Ψ^2 отвечает за интенсивность - количество поляритонов. $(\Psi_+, \Psi_-)^T$ — спинорные компоненты волновой функции, которые описывают поляритоны с поляризацией «плюс» и «минус» соответственно. По

ним рассчитывается нормированный по трем координатам параметр намагниченности:

$$S_{xn} = \frac{-2 * Im(\Psi_-^* * \Psi_+)}{|\Psi_+|^2 + |\Psi_-|^2} \quad (1.1)$$

$$S_{yn} = \frac{-2 * Re(\Psi_-^* * \Psi_+)}{|\Psi_+|^2 + |\Psi_-|^2} \quad (1.2)$$

$$S_{zn} = \frac{|\Psi_+|^2 - |\Psi_-|^2}{|\Psi_+|^2 + |\Psi_-|^2} \quad (1.3)$$

Каждое из значений (S_{xn}, S_{yn}, S_{zn}) изменяется в интервале $[-1, 1]$.

Для визуализации решеток в качестве цвета используется значение S_{zn} (рисунок 1.3).

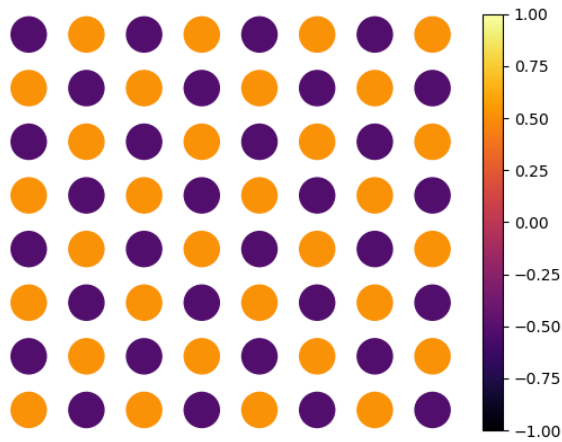


Рисунок 1.3 - Пример визуализации решетки. Цвет соответствует параметру S_{zn}

Систему характеризуют два параметра J (коэффициент связи между ячейками) и W (параметр намагниченности). Коэффициент связи между ячейками — это то, как соседние узлы решетки взаимодействуют друг с другом (рисунок 1.4), а параметр накачки — энергия, которую мы сообщаем системе (рисунок 1.5).

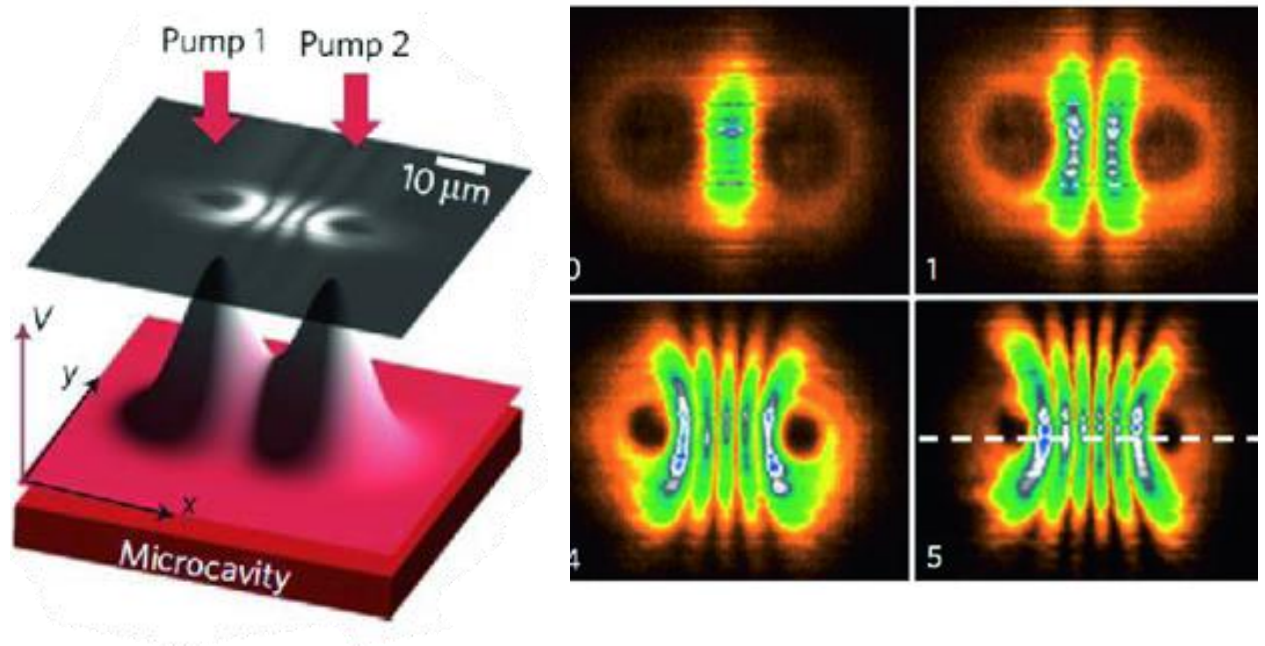


Рисунок 1.4 - Коэффициент связи между ячейками [4] (pump – накачка, microcavity – микрополость)

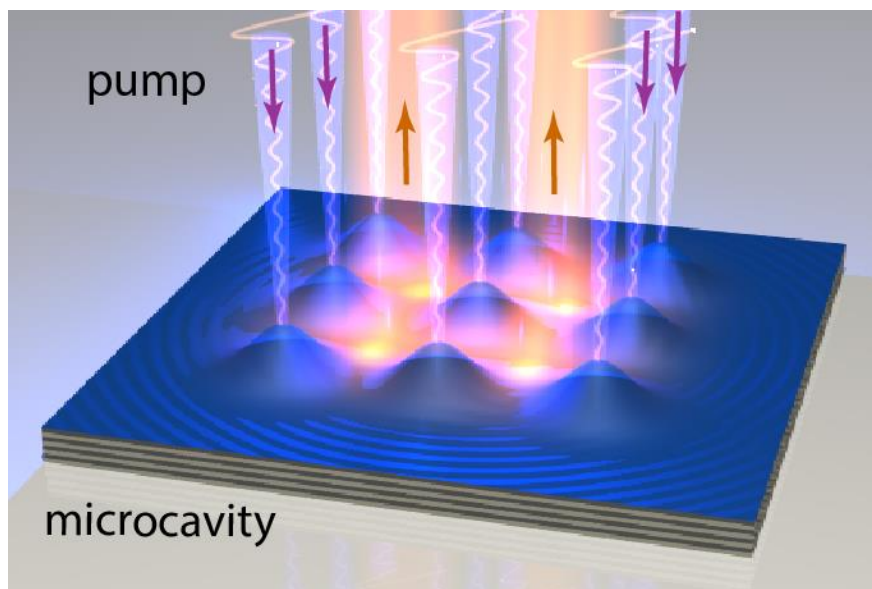


Рисунок 1.5 - Параметр накачки [5] (pump – накачка, microcavity – микрополость)

В ходе данной работы также поставлена задача построить фазовую диаграмму для заданной оптической системы.

Хорошим примером фазовых диаграмм является диаграмма, описывающее агрегатное состояние воды (рисунок 1.6). Каждая из областей соответствует трем состояниям воды — лед, жидкая вода, пар. (рисунок 1.7).



Рисунок 1.6 - Фазы агрегатного состояния воды [6]

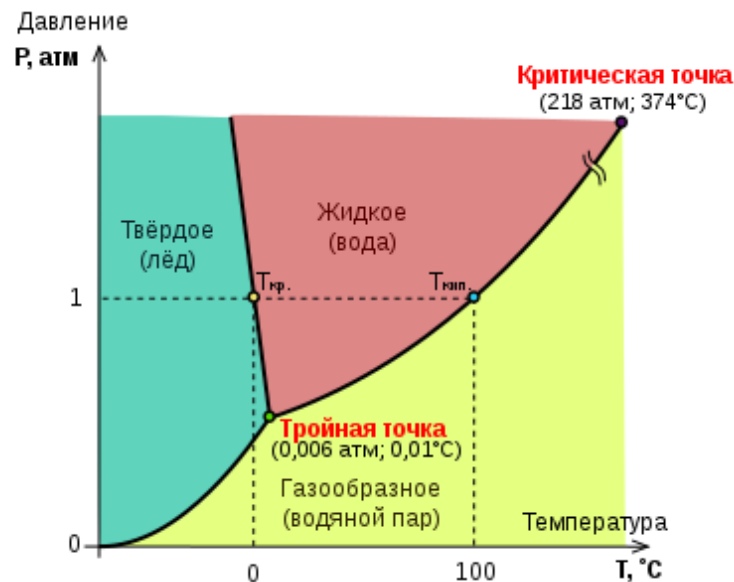


Рисунок 1.7 - Фазовая диаграмма агрегатного состояния воды [7]

Фазы занимают непрерывные области на графике. Они разделены между собой линиями — межфазными границами. Диаграмма построена в координатах давление-температура и позволяет понять, в каком состоянии будет находиться вода при заданных параметрах.

Фазовая диаграмма, построенная в работе, немного отличается от классического определения. В квантовой оптике нельзя говорить о равновесном состоянии. Системе все время сообщается энергия. Но опуская этот факт, диаграмма может быть построена. Параметрами для диаграммы служат J и W .

1.2. ПОСТАНОВКА ЦЕЛИ И ЗАДАЧ

Как уже было сказано в пункте 1.1 узлы решетки характеризуются параметром намагниченности. При этом все узлы могут принимать значение ноль (нулевая фаза), принимать одинаковое ненулевое значение (ферромагнетик) или образовывать шахматную доску (антиферромагнетик). Эти

фазы подробнее рассмотрены в главе 2. Вопрос состоит в том, существуют ли другие фазы помимо этих трех.

1.2.1. Цель работы

Цель работы: найти новые фазы в диссипативных решетках поляритонных конденсатов.

Анализируя набор исходных данных (описанный в пункте 2.1) можно встретить много различных решеток, отличных от трех привычных. Но вопрос состоит в том, являются ли они отдельными фазами, или это просто разновидности того же антиферромагнетика. Этот вопрос в работе переадресуется машинному обучению. Так исключается субъективный фактор принятия решений, а решение о разделении на фазы отдается математике.

1.2.2. Задачи

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

- проанализировать набор данных. Это важный пункт любой работы, так как он дает первичное представление о системе. Здесь рассматриваются все решетки, которые могут встретиться и даются им рабочие названия. Это первичное представление помогает дальше проводить анализ результатов, полученных при использовании методов машинного обучения;
- применить методы кластеризации и классификации для поиска фаз. На этом этапе подтверждаются (или опровергаются) гипотезы, предложенные при решении предыдущей задачи. Выделяются те фазы, которые определенно имеют место быть;
- составить фазовую диаграмму. Фазовая диаграмма — важная визуализация для описания фаз. Просто найти абстрактные фазы недостаточно. Нужно также дать понять, при каких параметрах возможно получить те или иные решетки;
- найти точную границу между фазами методами машинного обучения. Важный объект на фазовых диаграммах — межфазовые границы. Они ищутся в работе так же методами машинного обучения.

Все задачи выполняются лично студентом в рамках дипломной бакалаврской работы, под присмотром научного руководителя и научного консультанта.

1.3. ОПИСАНИЕ ИСПОЛЬЗУЕМЫХ МЕТОДОВ

В работе применяются различные метода машинного обучения. В данной подглаве подробно описывается каждый из них, а также дается краткое объяснение, почему выбраны именно эти методы.

1.3.1. Выбор методов машинного обучения

По понятным причинам нам не подходят методы машинного обучения с учителем. Основная цель — поиск новых фаз. Исходный набор данных не размечен и не может быть размечен человеком. Даже имея сопоставление с известными фазами, спорные решетки все еще остаются без классов, а в такой неполной разметке отсутствует интересующая нас информация. Поэтому такая разметка бесполезна в поиске новых фаз.

Основными методами, используемыми в работе, являются методы *unsupervised learning*. Среди них методы tSNE и Agglomerative clustering.

Метод PCA используется как вспомогательный, для возможного улучшения исходных данных.

Кроме того, в работе также применяется подход *learning by confusion*, который позволяет использовать *supervised* методы на неразмеченных данных. Однако использовать его можно только имея предположительное представление, основанное на применении других методов.

1.3.2. PCA

Метод главных компонент (англ. *principal component analysis, PCA*) — метод уменьшения размерности, с наименьшей потерей информации. Он используется в работе с целью предобработки данных перед использованием tSNE и agglomerative clustering. [8]

На рисунке показан пример того, как организует данные PCA на примере известного и часто используемого датасета Iris (рисунок 1.8).

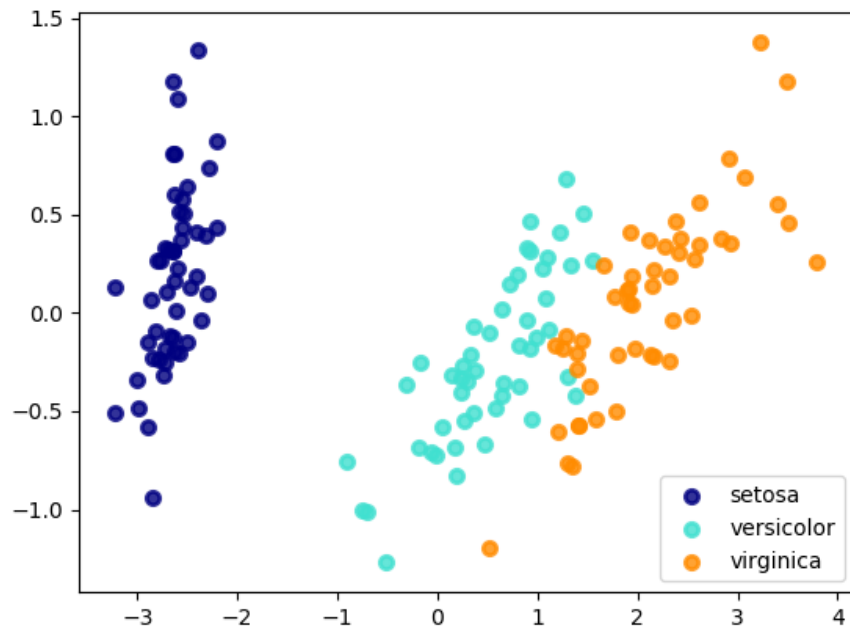


Рисунок 1.8 - Применение PCA на датасете Ирис [9]

При декомпозиции набора данных PCA преобразует их в набор последовательных ортогональных компонентов, при этом максимизируя величину выборочной дисперсии (рисунок 1.9)

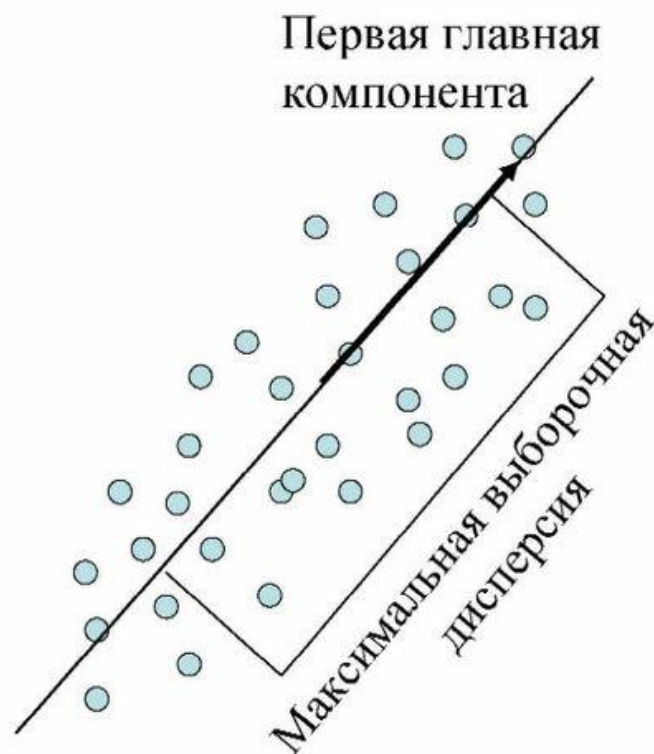


Рисунок 1.9 - Иллюстрация максимальной выборочной дисперсии [8]

1.3.3. TSNE

Метод tSNE (англ. *t-distributed Stochastic Neighbor Embedding*) — стохастическое вложение соседей с t-распределением. Это алгоритм машинного обучения применяется для визуализации. Как. И в случае с PCA, является техникой снижения размерности. Однако делает это таким образом, что похожие объекты в новом пространстве расположены близко, а разные — далеко. [10]

На рисунке 1.10 пример того, как. tSNE отделяет классы на числовом наборе данных.

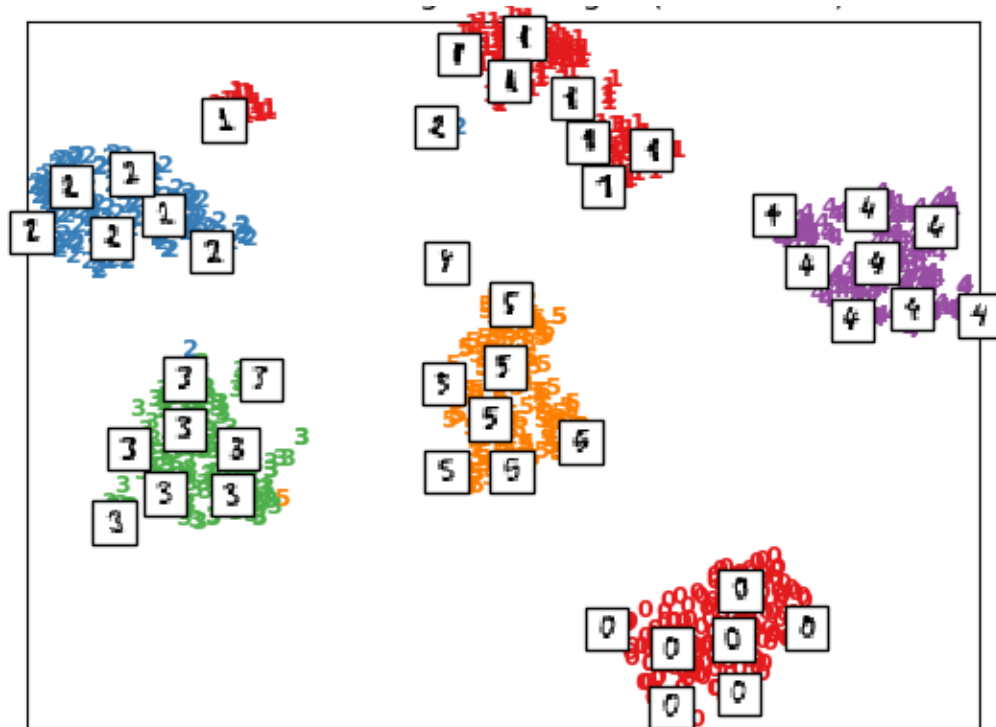


Рисунок 1.10 - Пример tSNE диаграммы для датасета с числами [11]

Схожесть объектов в исходном пространстве определяется Гауссовскими совместными вероятностями, а схожесть в конечном — t-распределением Стюдента.

Расхождение Кульбака-Лейблера совместных вероятностей в исходном пространстве и вложенном пространстве минимизируется градиентным спуском. Результатом оптимизации является отображение, которое отражает схожесть между объектами пространства высокой размерности.

1.3.4. Agglomerative clustering

Agglomerative clustering относится к иерархическим алгоритмам кластеризации. Метод рекурсивно объединяет пары кластеров, при этом функцию расстояния между парами кластеров увеличивается минимально.

Функция расстояния между кластерами может задаваться несколькими способами [12]:

– *Ward*. Эта функция основана на дисперсионном анализе. В качестве расстояния между кластерами берётся прирост суммы квадратов расстояний объектов до центра кластера, получаемого в результате их объединения. Таким образом, минимизируется следующая функция:

$$\min \left(\sum_i (x_i - \bar{x})^2 - \sum_{x_i \in A} (x_i - \bar{a})^2 - \sum_{x_i \in B} (x_i - \bar{b})^2 \right) \quad (1.4)$$

– *Complete*. Определяется, как максимальное расстояние между двумя элементами разных кластеров:

$$\min(\max\{dist(a, b) : a \in A, b \in B\}) \quad (1.5)$$

– *Average*. Расстояние между двумя кластерами полагается равным среднему расстоянию между элементами этих кластеров:

$$\min \left(\frac{1}{|A||B|} \sum_{a \in A} \sum_{b \in B} dist(a, b) \right) \quad (1.6)$$

– *Single*. Расстояние определяется, как минимальное расстояние между двумя элементами из разных кластеров:

$$\min(\min(\{dist(a, b) : a \in A, b \in B\}))$$

Помимо изменения способа определения расстояний между двумя кластерами, можно менять также и функцию *dist* (метрику). Стандартно она может выбираться из Евклидова расстояния, Манхэттонского расстояния или косинусного расстояния:

$$euclidean(p, q) = \sqrt{\sum_i (p_i - q_i)^2} \quad (1.7)$$

$$manhattan(p, q) = \sum_i |p_i - q_i| \quad (1.8)$$

$$cosine(p, q) = \cos \theta = \frac{P \cdot Q}{\|P\| \|Q\|} = \frac{\sum_i p_i * q_i}{\sqrt{\sum_i p_i^2} * \sqrt{\sum_i q_i^2}} \quad (1.9)$$

1.3.5. Learning by confusion

Метод learning by confusion был впервые описан в 2017 году [1]. Его особенность состоит в том, что мы применяем методы обучения с учителем (обучение нейронной сеть) на неразмеченных данных. Опишем принцип работы данного метода.

Не умоляя общности, пусть состояние системы зависит от единственного параметра x . Если это не так, мы можем зафиксировать все остальные параметры, и рассматривать только его.

Пусть также нам удалось локализовать место фазового перехода x_{crit} до интервала (x_1, x_2) .

$$\exists x_{crit} \in (x_1, x_2) : \quad \forall x \in X: \quad class(x) = \begin{cases} 0, & x \leq x_{crit} \\ 1, & x > x_{crit} \end{cases} \quad (1.10)$$

При этом не известно точное значение x_{crit} .

Исходные данные, как правило, дискретные (если это не так, мы всегда можем их дискретизировать, взяв значения x_i , с малым шагом. Тогда для x_{crit} существует конечное количество позиций на интервале (x_1, x_2) . Попробуем угадать ее.

Проведем границу между классами выбрав значение $x_0 \in (x_1, x_2)$, x_0 находится между двумя соседними точками данных. Тогда набору данных будут присвоены следующие метки:

$$\forall x \in X: \text{label}(x) = \begin{cases} 0, & x \leq x_0 \\ 1, & x > x_0 \end{cases} \quad (1.11)$$

На рисунке 1.11 показан пример разметки. Круги — реальные данные и то, каким классам они принадлежат. Звезды — назначенная разметка посредством выставления точки x_0 . Вертикальная прямая иллюстрирует местоположение точки x_0 (проведенная граница).



Рисунок 1.11 - Пример искусственной разметки данных. Круги – реальные классы, звездочки – назначенные метки.

Разделим данные на тренировочный и тестовый набор. Применим разметку к обоим наборам, и обучим нейронную сеть. Протестировав сеть на тестовом наборе, оценим качество разметки (посредством меры ассигасы). Напомним, что значение x_0 мы выбрали случайным образом из заданного диапазона. Будем изменять его в значении от x_1 до x_2 и обучать нейронную сеть на разных разметках. Построим график зависимости $accuracy(x_0)$. Если имеет

место фазовый переход, то его вид должен иметь форму W, а пик посередине соответствует точке фазового перехода (рисунок 1.12).

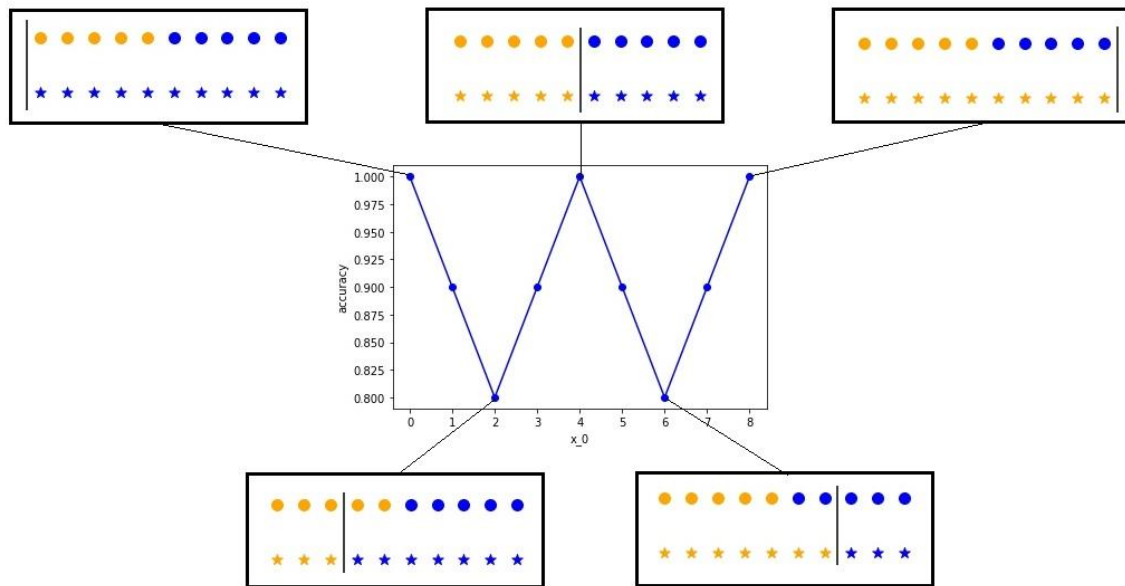


Рисунок 1.12 - Общий вид графика зависимости $accuracy(x_0)$

Это свойство нетрудно объяснить. Действительно, выставив границу x_0 слева или справа от данных, мы фактически обучаем нейронную сеть относить все объекты к одному классу. Это мы и ожидаем увидеть, тестируя ее. Точность в таком случае близка к единице.

Обучаясь на верной разметке, сеть также дает высокий результат. В этом случае метки соответствуют внутренней структуре данных. Это объясняет высокое значение точности в точке, соответствующей месту фазового перехода.

В остальных случаях разметка противоречит внутренней структуре. Объекты, которые на самом деле принадлежат к одному классу, а значит имеют схожую внутреннюю структуру, здесь обозначены разными метками. С другой стороны, принадлежащие к разным классам данные, размечены одинаково. Сеть обучается на неверных данных и дает точность ниже, чем в двух предыдущих случаях. И чем больше данных размечены неправильно, тем ниже значение ассурасу.

Таким образом, не имея первоначального предположения о точной межфазной границе, мы можем её найти.

«Пик» математически можно описать следующим образом. Рассмотрим производную оцениваемой функции. Она будет иметь следующий вид (рис.1.13).

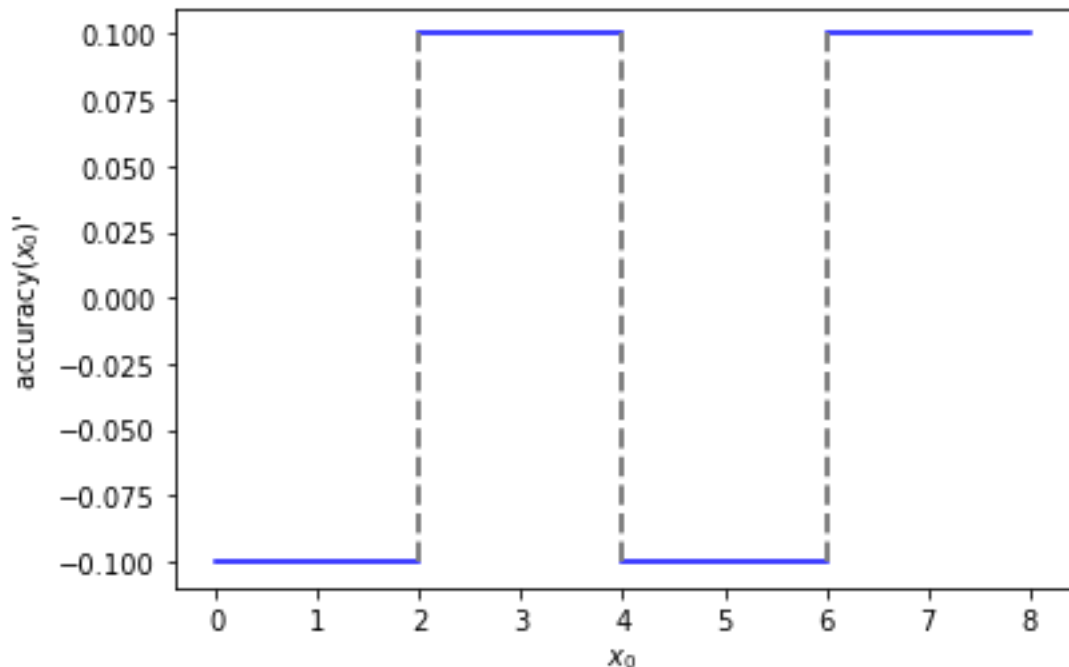


Рисунок 1.13 График зависимости первой производной $accuracy'(x_0)$

Не трудно заметить, что функция, будет иметь 3 разрыва первого рода типа «скачок». Пик будет соответствовать скачку от плюса, к минусу.

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 1

1. Была описана предметная область и рассмотрен основной объект изучения.
2. Были проанализированы известные сведения о фазах решеток поляритонных конденсатов.
3. Были сформулированы четкие задачи и намечен вектор развития.
4. Были определены основные методы для работы и разобраны их свойства.

ГЛАВА 2. АНАЛИЗ ИСХОДНЫХ ДАННЫХ

Первая задача, поставленная в предыдущей главе – анализ исходных данных. В данной главе приводится описание исходного набора данных и его анализ.

2.1. ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ

В ходе работы рассматриваются диссипативные решетки поляритонных конденсатов, состоящая из 64 узлов.

2.1.1. Расчётная модель

Состояние искомой системы можно описать уравнением Гросса-Питаевского:

$$i \frac{d\Psi_n}{dt} = \frac{i}{2} (W(t) - \eta S_n) \Psi_n - \frac{i}{2} (\gamma - i\epsilon) \hat{\sigma}_x \Psi_n + \frac{S_n}{2} (\bar{\alpha} + \alpha S_{zn} \hat{\sigma}_z) \Psi_n - (1 - i\Lambda) \frac{J}{2} \sum_{\langle nm \rangle} \Psi_m \quad (2.1)$$

Оно может быть решено при помощи метода Adams-Bashforth-Moulton linear multistep method.

В ходе дипломной работы опустим подробное описание уравнение и метода его решения. Эту часть работы сделал ученый из Англии Helgi Sigurdsson. Данные, полученные в результате его вычислений, являются исходными для моей дипломной работы.

2.1.2. Исходные данные

Исходные данные представляют из себя .dat файлы со спинорными компонентами волновой функции $(\Psi_+, \Psi_-)^T$, и соответствующие им значения W (параметр накачки) и J (связь между ячейками).

$$W \in (0, 4)$$

$$J \in (0, 2.5)$$

W и J и изменяются дискретно и равномерно в соответствующих диапазонах, по 397 значений для каждого. Всего имеем 157609 комбинаций.

По формулам (1.1, 1.2, 1.3), приведенным в 1 главе данной работы, рассчитываются значения параметра намагниченности.

Полученные значения S_{nz} , S_{ny} , S_{nx} используются для построения иллюстраций и исследований системы методами машинного обучения, которые описаны в третьей главе данной работы.

2.2. АНАЛИЗ РЕШЕТОК

Для каждой из пар (W , J) были построены графические изображения решеток. Они были проанализированы. Были выделены как известные решетки, так и, возможно, новые фазы.

2.2.1. Известные ранее фазы

Начнем с фаз, которые уже известны. Естественно, что они были замечены среди наборов данных.

Во-первых, среди наборов данных была *нулевая фаза* (рисунок 2.1), представляющая из себя решетку с нулевой намагниченностью по оси z в каждом узле, но с ненулевыми x и y компонентами.

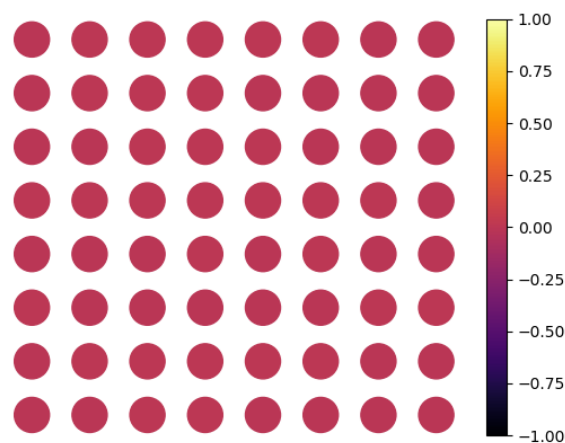


Рисунок 2.1 - Нулевая фаза

Кроме того, наблюдали *ферромагнетик* (решетка с ненулевым равным значением намагниченности во всех узлах) (рисунок 2.2).

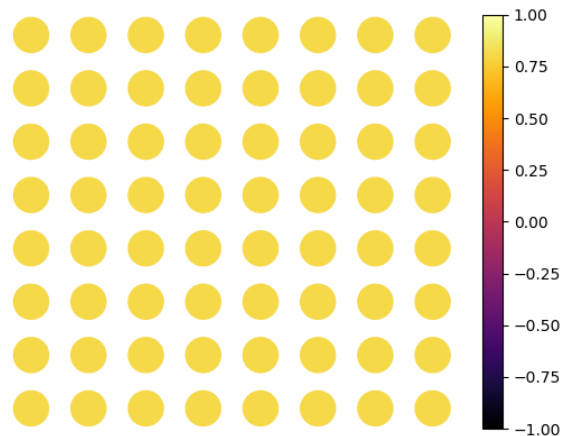


Рисунок 2.2 - Ферромагнетик

Также среди решеток встречался *антиферромагнетик* (рисунок 2.3). В нем во всех узлах значение намагниченности одинаково по модулю, но отличается по знаку. При этом наблюдаемая решетка напоминает шахматную доску.

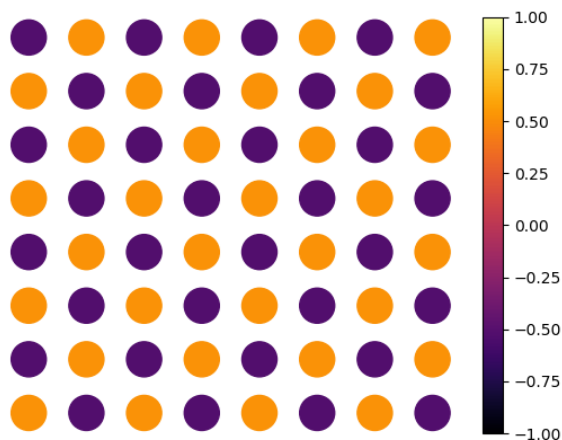


Рисунок 2.3 - Антиферромагнетик

Эти три фазы хорошо известны в квантовой оптике. По ним может быть частично размечен исходный набор данных. Иными словами, есть точное соответствие в фазы для трех типов решеток.

Но помимо них, наблюдались также и другие решетки, описание которых мы дадим в следующем подразделе. Для них такого соответствия провести

невозможно и вопрос состоит в том, являются ли они разновидностями антиферромагнетика или представляют из себя отдельные фазы.

2.2.2. Новые фазы

Одной из таких новых фаз может стать *антиферромагнетик с прямолинейной структурой* (рисунок 2.4). Мы называем его антиферромагнетиком, поскольку половина узлов все еще имеет один знак, половина противоположный, но значение во всех узлах одинаковое по модулю. Однако в отличие от классического антиферромагнетика, узлы с одинаковым значением выстраиваются в прямые линии.

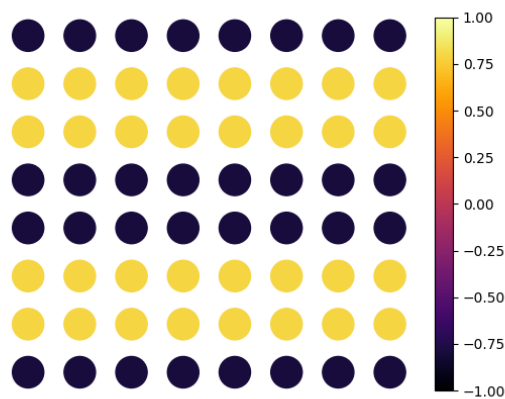


Рисунок 2.4 - Антиферромагнетик с прямолинейной структурой

Помимо горизонтальных линий, узлы с одинаковой намагниченностью могут выстраиваться и по вертикали (рисунок 2.5). Поскольку эти два случая являются симметричными с точностью до поворота, мы относим их к одной фазе.

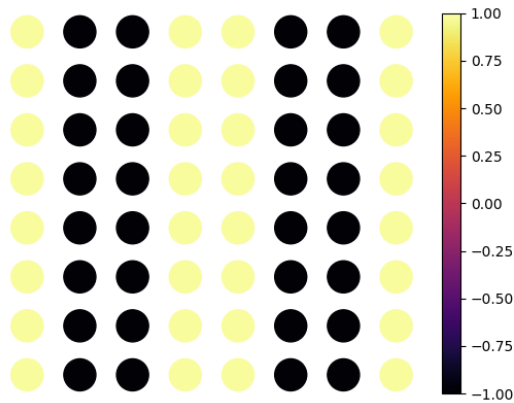


Рисунок 2.5 - Антиферромагнетик с прямолинейной структурой (другая конфигурация)

Еще одна возможная конфигурация — диагональная. Эту решетку мы не можем получить из предыдущего простым преобразованием, поэтому временно отнесем к другой фазе — *антиферромагнетик с диагональной структурой*.

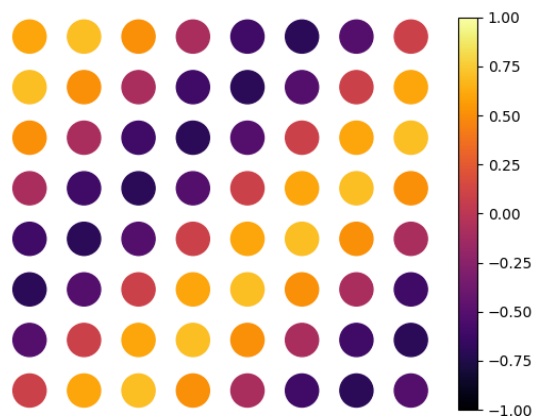


Рисунок 2.6 - Диагональная решетка

Иногда узлы решетки выстраиваются в более сложные структуры. Одна из них — квадраты (рисунок 2.7), или напоминающие квадраты фигуры (рисунок 2.8). Мы назовем эти решетки «*антиферромагнетик с квадратичной структурой*», поскольку значения в узлах все еще напоминают антиферромагнетик, а вот наблюдаемая форма несколько иная.

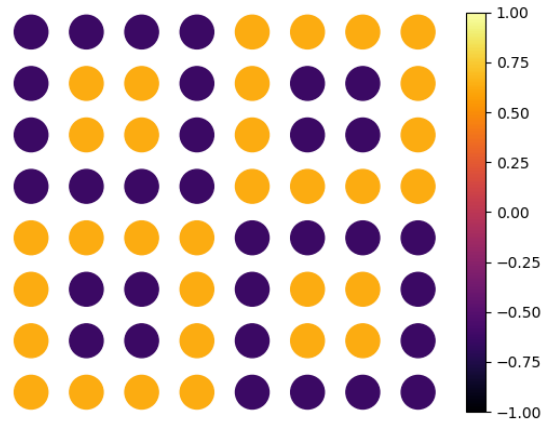


Рисунок 2.7 - Антиферромагнетик с квадратичной структурой

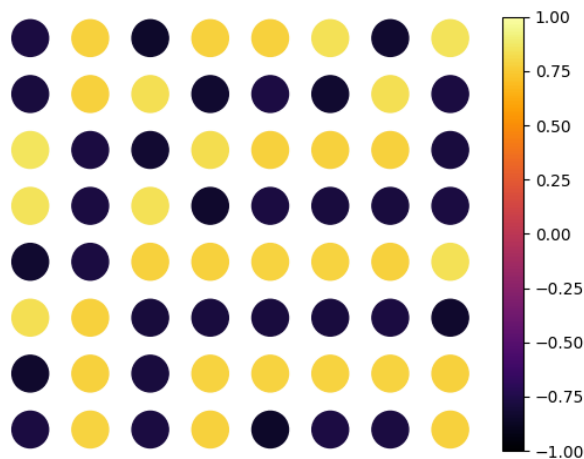


Рисунок 2.8 - Антиферромагнетик с квадратичной структурой. Здесь квадраты менее четкие, но решетка все еще отличается от других фаз

Также была замечена доменная решетка (рисунок 2.9). Узлы с одинаковым значением намагниченности здесь выстраиваются в виде доменов (источников). Решетка напоминает распространение тепла в воздухе (от высокой намагниченности к низкой). Однако, возможно, она является лишь переходом из одной фазы в другую. Эта гипотеза будет проверена в практической части исследования (глава 3).

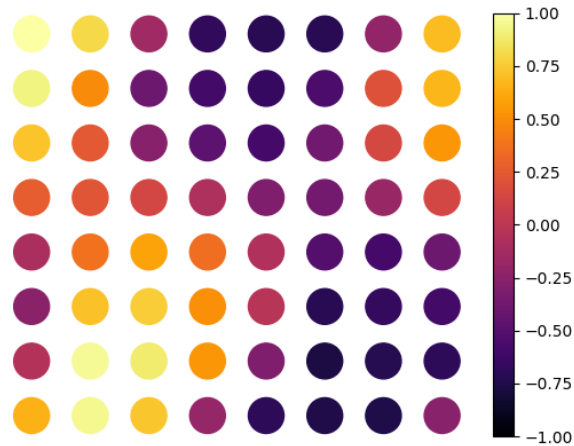


Рисунок 2.9 - Доменная решетка

Наблюдались также и решетки, которые сложно как-то охарактеризовать (рисунок 2.10). Значения намагниченности в узлах располагаются практически случайно). Назовем их «случайные решетки». Однако, они наблюдались при очень низких значениях накачки и коэффициента связи между узлами. С точки зрения физики, в таком случае, нет смысла говорить о них, как об отдельной фазе, так как в системе еще недостаточно энергии.

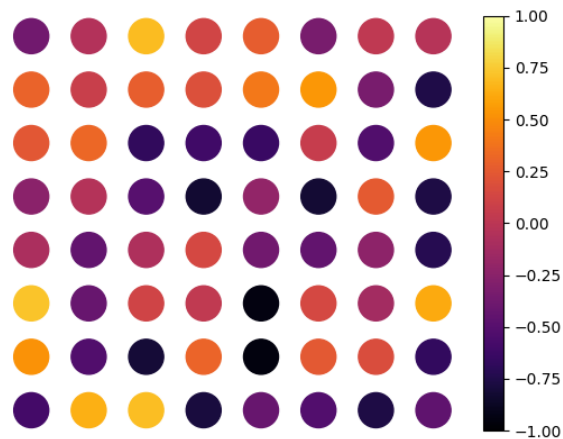


Рисунок 2.10 - Случайная решетка

2.3. ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА

Попробуем отметить выделенные фазы на графике (J , W). Полученное изображение станет первым приближением фазовой диаграммы. Ему нельзя

доверять на все 100%. Просто потому, что разметка выбрана субъективно. Однако оно может помочь в дальнейшем анализе системы.

2.3.1. Построение диаграммы

Все области, отмеченные в подглаве 2.2. были нанесены на фазовую плоскость (рисунок 2.11).

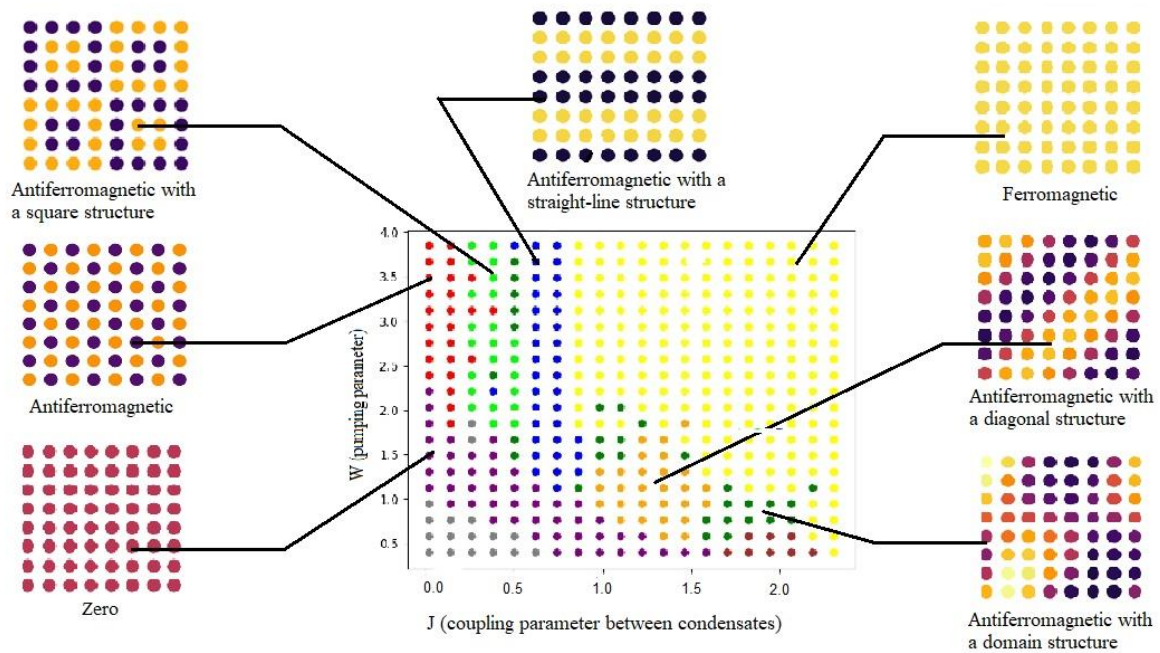


Рисунок 2.11 - Ожидаемая фазовая диаграмма

Для того, чтобы упростить задачу разметки, данные были прорежены, наносилась каждая 20 точка по каждой из координат. Данная глава посвящена именно анализу данных. Диаграмма построена вручную, без использования методов машинного обучения. Она субъективна и в данном случае, нет смысла говорить о ее правдивости. Однако она может быть подвергнута анализу.

2.3.2. Анализ диаграммы

Из диаграммы видно, что объекты, которые, как мы предполагаем, относятся к одной фазе, занимают непрерывные отдельные области на фазовой диаграмме. Это дает возможность надеяться, что области были выделены правильно, однако представленная на рисунке 2.11 диаграмма субъективна. Ее можно лишь сравнивать с объективными результатами agglomerative clustering.

Дадим также комментарий по поводу серой области внизу. Она соответствует случайной решетке (рисунок 2.10), которая была описана в подглаве 2.2. Как и было сказано, параметр накачки и коэффициент связи здесь настолько мал, что нет смысла говорить об этой области, как об отдельной фазе. В дальнейшем, эту область мы будем опускать и рассматривать только ее верхнюю границу, в качестве границы нулевой фазы.

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 2

1. В главе 2 мы подробно рассмотрели исходные данные. Зная, что каждый узел решетки характеризуется тремя параметрами S_{xn}, S_{yn}, S_{zn} , мы можем использовать для методов машинного обучения как все три параметра одновременно, так и любые их комбинации.

2. Построив решетки для всех данных, мы убедились в том, что среди них есть известные ранее фазы.

3. Кроме того, мы обнаружили решетки, принципиально отличные от нулевой фазы, ферромагнетика и антиферромагнетика, дали их описание и рабочие названия.

4. Все фазы были отмечены на предварительной фазовой диаграмме.

ГЛАВА 3. ПРАКТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

В предыдущих главах была рассмотрена предметная область, и сформулированы задачи и описаны методы машинного обучения, используемые для их решения. Эта глава посвящена практической части исследования. В ней описываются результаты, полученные при помощи методов машинного обучения и оценка их качества.

3.1. ВЫБОР ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Для любых программистских исследований необходимо выбрать технологии.

В данной работе весь исходный код в работе реализован на языке python. Выбор пал на этот язык программирования, так как он предоставляет множество библиотек для машинного обучения: sklearn, keras, numpy, matplotlib позволяют использовать методы машинного обучения из коробки, строить графики, диаграммы.

Однако не все алгоритмы взяты напрямую из библиотек. Так не существует готовый метод learning by confusion. Поэтому он был реализован самостоятельно, но на нейронных сетях из keras.

3.2. ПРОВЕРКА ГИПОТЕЗЫ ВЫДЕЛЕННЫХ ФАЗ

Во второй главе были выделены предполагаемые фазы. Для того, чтобы подтвердить или опровергнуть подобное разделение был применен метод tSNE.

3.2.1. Обоснования выбора алгоритма

Как описано в первой главе работы, основное свойство данного алгоритма в том, что он располагает на диаграмме похожие объекты близко, а разные – далеко, может быть применено к нашей задаче. «Похожесть» объектов хорошо ложится на определение фаз. Таким образом, если tSNE поместит объекты, которые мы считаем одной фазой, рядом и далеко от других решеток, это укрепит идею о том, что объекты относятся к одной фазе.

3.2.2. Оценка качества

Для оценки качества результатов был разработан следующий алгоритм.

Мы хотим добиться того, чтобы объекты одного класса были рядом, и далеко от объектов другого класса.

Пусть V — множество точек в пространстве, полученном после преобразования tSNE. Назовем ближайшим соседом для данной вершины $v \in V$ точку в конечном пространстве u ($u \neq v, u \in V$), такую, что функция расстояния $dist(u, v)$ принимает минимальное значение. Посмотрим, какой класс имеет ближайший сосед.

Естественным образом задается следующая целевая функция:

$$cnt \left(v \in V \mid class \left(\min_{u \in V} dist(u, v) \right) \neq class(v) \right) \quad (3.1)$$

Меняя параметры для алгоритма tSNE, такие как perplexity и learning rate, а также добавляя предобработку в виде PCA с различным количеством принципиальных компонент, добьёмся минимума этой функции. Для большей наглядности перейдем от абсолютных значений к относительным. А именно, разделим получившееся по формуле 3.1 значение на общее количество точек. Также удобно перейти к обратной величине, вычтя результат из единицы и сведя задачу к максимизации. Таким образом будем не минимизировать ошибку, а максимизировать точность.

Итоговый код будет следующий:

```
def quality(x, label):
    penalty = 0
    nn = 0
    for i in range(cntwj):
        minv = float('inf')
        if (label[i]=='grey'):
            continue
        else:
            nn+=1
            minx = -1
```

```

for j in range(cntwj):
    if (label[j]!='grey'):
        continue
    if (j!=i):
        d = ((x[i][0] - x[j][0])**2
              - (x[i][1] - x[j][1])**2)**0.5
        if (d < minv):
            minx = label[j]
            minv = d
    if (minx!=label[i]):
        penalty+=1
return 1 - penalty/nn

```

Результаты для Szn, (Szn, Sxn), (Sxn, Syn), (Szn, Sxn, Syn) компонент приведены в таблицах 3.1-3.4.

Таблица 3.1 – Оценка качества tSNE для Szn

№	Learning rate	perplexity	PCA			
			Не использовалось	5	10	25
1	10	5	0,697	0,663	0,669	0,697
2	50		0,643	0,635	0,686	0,703
3	200		0,671	0,657	0,717	0,680
4	500		0,674	0,663	0,694	0,629
5	1000		0,691	0,725	0,756	0,680
6	10	30	0,694	0,717	0,626	0,666
7	50		0,728	0,737	0,686	0,705
8	200		0,705	0,742	0,705	0,720
9	500		0,725	0,770	0,714	0,802
10	1000		0,773	0,810	0,807	0,788
11	10	100	0,771	0,731	0,819	0,759
12	50		0,737	0,728	0,771	0,771
13	200		0,844	0,807	0,788	0,807

14	500		0,850	0,793	0,853	0,745
15	1000		0,802	0,830	0,861	0,841

Таблица 3.2 – Оценка качества tSNE для S_{xp} , S_{zn}

№	Learning rate	perplexity	PCA			
			Не использовалось	5	10	25
1	10	5	0,694	0,717	0,646	0,728
2	50		0,645	0,694	0,683	0,666
3	200		0,731	0,765	0,711	0,688
4	500		0,720	0,705	0,722	0,745
5	1000		0,725	0,700	0,722	0,768
6	10	30	0,694	0,657	0,708	0,671
7	50		0,765	0,725	0,742	0,720
8	200		0,805	0,771	0,762	0,733
9	500		0,807	0,793	0,790	0,805
10	1000		0,796	0,785	0,867	0,810
11	10	100	0,839	0,725	0,671	0,671
12	50		0,773	0,748	0,768	0,703
13	200		0,880	0,864	0,711	0,819
14	500		0,877	0,833	0,858	0,827
15	1000		0,776	0,805	0,776	0,850

Таблица 3.3 – Оценка качества tSNE для S_{xp} , S_{yp}

№	Learning rate	perplexity	PCA			
			Не использовалось	5	10	25
1	10	5	0,629	0,674	0,592	0,654
2	50		0,666	0,700	0,637	0,668
3	200		0,595	0,663	0,671	0,669
4	500		0,657	0,666	0,714	0,657

5	1000		0,742	0,683	0,674	0,694
6	10	30	0,646	0,720	0,711	0,720
7	50		0,635	0,652	0,739	0,745
8	200		0,694	0,688	0,714	0,670
9	500		0,717	0,691	0,713	0,688
10	1000		0,720	0,742	0,640	0,720
11	10	100	0,722	0,691	0,705	0,669
12	50		0,680	0,703	0,731	0,677
13	200		0,694	0,722	0,686	0,708
14	500		0,708	0,728	0,759	0,722
15	1000		0,756	0,771	0,742	0,773

Таблица 3.4 – Оценка качества tSNE для Sxn, Syn, Szn

№	Learning rate	perplexity	PCA			
			Не использовалось	5	10	25
1	10	5	0,697	0,705	0,728	0,680
2	50		0,728	0,711	0,714	0,626
3	200		0,697	0,754	0,711	0,720
4	500		0,728	0,728	0,776	0,742
5	1000		0,759	0,745	0,708	0,742
6	10	30	0,751	0,728	0,722	0,748
7	50		0,756	0,705	0,708	0,720
8	200		0,742	0,731	0,788	0,802
9	500		0,765	0,754	0,847	0,793
10	1000		0,813	0,796	0,841	0,784
11	10	100	0,703	0,796	0,700	0,768
12	50		0,680	0,836	0,827	0,836
13	200		0,830	0,881	0,805	0,850

14	500		0,836	0,836	0,836	0,847
15	1000		0,841	0,884	0,841	0,793

Наилучшие результаты достигаются при параметрах, выделенных цветом. Из них наилучшая конфигурация достигается для данных z и x компонент, при параметрах learning rate = 200, perplexity = 100, без PCA.

3.2.3. Применение метода

Выбрав лучший из результатов методом, описанным в предыдущем пункте, получим диаграмму, на которой отмечено расположение фаз (смотри рисунок 3.1). Одним цветом указаны решетки, предположительно принадлежащие к одной и той же фазе.

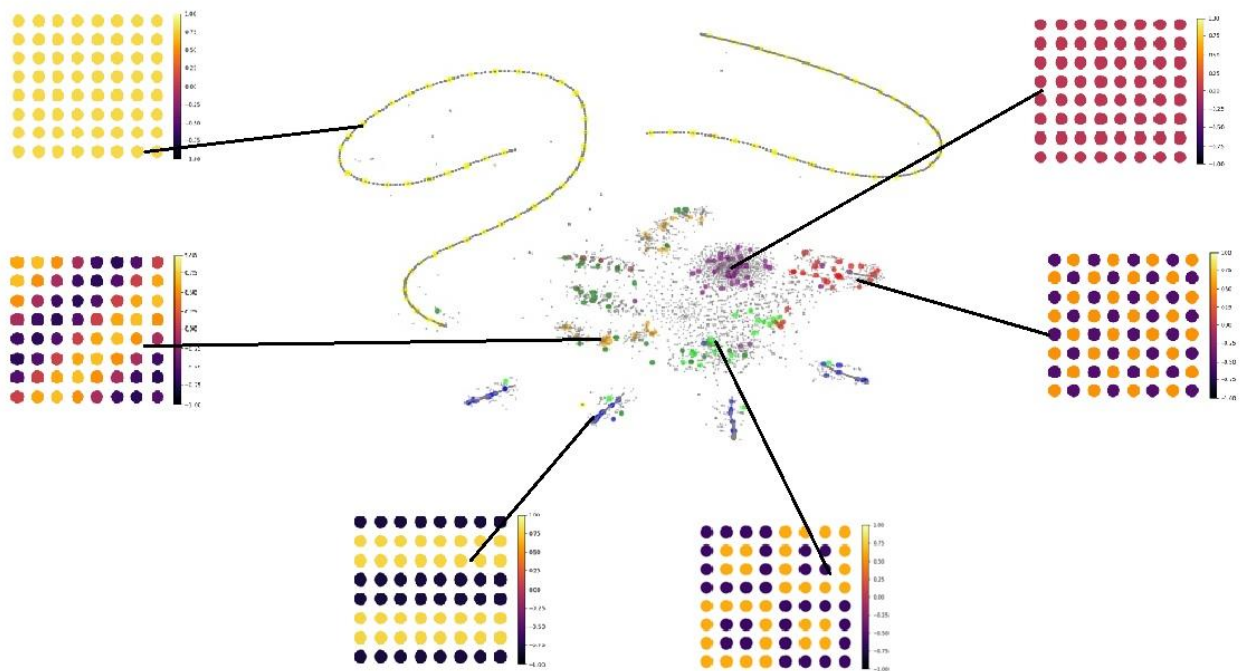


Рисунок 3.1 - Предполагаемые фазы на tSNE диаграмме

На диаграмме видно, что все предполагаемые фазы отделены хорошо. Да и значение функции оценки качества, получившиеся в предыдущем пункте (0,880), достаточно высоко. Это еще раз подтверждает правильность разбиения. Однако сами по себе результаты, полученные в tSNE не могут считаться

доказательством. Действительно, функция качества все ещё основана на предположении о разбиении. Поэтому она оценивает соответствие диаграммы предположению. Тем не менее это полезный анализ.

3.3. ПОСТРОЕНИЕ ФАЗОВОЙ ДИАГРАММЫ

Перейдем к построению фазовой диаграммы. Для того, чтобы построить примерную диаграмму, использовался метод *agglomerative clustering* и была разработана функция оценки качества фазовой диаграммы.

3.3.1. Обоснования выбора алгоритма

Как было отмечено ранее, поиск фаз похож на стандартную задачу машинного обучения — кластеризацию. В ней также неразмеченные данные распределяются между кластерами на основании их свойств. В данном случае свойствами выступают различные комбинации трех нормированных компонентов параметра намагниченности.

В качестве алгоритма кластеризации был выбран *agglomerative clustering*.

3.3.2. Оценка качества

Как и в случае *tSNE* возможны различные модификации в применении метода. Можно уменьшать размерность данных с помощью *PCA* до использования алгоритма, изменять количество принципиальных компонент. Можно также менять способы подсчета расстояний между кластерами и метрику пространства. Об этих опциях подробно описано во второй главе данной работы.

Несомненно, необходимо оценивать полученные диаграммы. Поскольку я использую данный метод для того, чтобы уйти от субъективной разметки, ее нежелательно использовать. Однако можно разметить данные частично.

Действительно несмотря на отсутствие классов для спорных фаз, разметка антиферромагнетика, ферромагнетика и нулевой фазы практически тривиальна:

```
def is_ferromagnetic(arr):
    if (eq(arr[0], 0)):
        return False
```

```

if (all(eq(a, arr[0]) for a in arr)):
    return True
return False

def is_zero(arr):
    if (all([eq(a, 0) for a in arr])):
        return True
    return False

def is_antiferromagnetic(arr):
    x1 = arr[0]
    x2 = arr[1]
    if (eq(x1, 0) or not (eq(x1, x2))):
        return False
    for i in range(0, 8):
        for j in range(0, 8):
            cur = i * 8 + j
            if ((i + j) % 2) == 0:
                if (not eq(arr[cur], x1)):
                    return False
            else:
                if (not eq(arr[cur], x2)):
                    return False
    return True

```

Имея такую частичную разметку, можно оценить, насколько алгоритм справляется с определением именно этих фаз. Введем соответствующую целевую функцию.

Алгоритм кластеризации может совершать в отношении трех известных классов ошибки первого и второго рода. Ошибка первого рода — ситуация, когда отвергнута правильная нулевая гипотеза и ошибка второго рода — ситуация, когда принята неправильная нулевая гипотеза. В отношении к нашей задаче, ошибка первого рода, когда известная фаза помечается другой меткой, а второго — меткой известного класса помечается другая фаза.

Пусть X — исходное множество, $X = X_{labeled} \cup X_{unlabeled}$, где $X_{labeled}$ — размеченная часть (антиферромагнетик, ферромагнетик, нулевая фазы), а $X_{unlabeled}$, соответственно, неразмеченная. Для удобства будем считать, что все точки из неразмеченного класса имеют метку «другое». Тогда для любого $x \in X$, существуют две метки $c_1(x)$ и $c_2(x)$, полученные искусственно и после agglomerative clustering соответственно.

Тогда итоговая формула:

$$\frac{cnt(x \in X \mid c_2(x) \neq c_1(x) \wedge (c_1(x) == p \vee c_2(x) == p))}{|X|}, \quad (3.2)$$

Где p по очереди принимается равным метке каждого из известных классов. Из трех полученных значений берется средняя величина.

Как и в случае с оценкой tSNE удобно перейти от величины ошибок к точности, отняв полученную функцию от единицы. Соответствующий код:

```
def checkLabel(real, pred, realLabel, predLabel):
    penalty = 0
    for i in range(len(real)):
        is_phase_in_real = False
        is_phase_in_pred = False
        if (real[i]==realLabel):
            is_phase_in_real = True
        if (pred[i]==predLabel):
            is_phase_in_pred = True
        if (is_phase_in_pred!=is_phase_in_real):
            penalty+=1
    if (len(real)==0):
        return 0
    return 1 - penalty/len(real)
```

Варьируя описанные выше параметры, получим следующие результаты (таблицы 3.5-3.8)

Таблица 3.5 — Оценка качества кластеризации для Szn

№	Метрика	Расстояние между кластерами	PCA			
			Не использовалось	5	10	25
1	euclidean	ward	0,840	0,840	0,842	0,840
2	euclidean	average	0,293	0,840	0,841	0,841
3	manhattan		0,336	0,392	0,394	0,293
4	cosine		0,573	0,792	0,793	0,792
5	euclidean	complete	0,905	0,408	0,889	0,907
6	manhattan		0,919	0,404	0,864	0,420
7	cosine		0,843	0,807	0,928	0,912

Таблица 3.6 — Оценка качества кластеризации для S_{xp} , S_{zp}

№	Метрика	Расстояние между кластерами	PCA			
			Не использовалось	5	10	25
1	euclidean	ward	0,984	0,969	0,981	0,988
2	euclidean	average	0,297	0,837	0,8401	0,828
3	manhattan		0,791	0,840	0,396	0,296
4	cosine		0,298	0,804	0,7927	0,797
5	euclidean	complete	0,951	0,834	0,851	0,918
6	manhattan		0,765	0,876	0,902	0,506
7	cosine		0,915	0,921	0,895	0,917

Таблица 3.7 — Оценка качества кластеризации для S_{xp} , S_{yp}

№	Метрика	Расстояние между кластерами	PCA			
			Не использовалось	5	10	25
1	euclidean	ward	0,839	0,825	0,840	0,720
2	euclidean	average	0,291	0,804	0,780	0,291
3	manhattan		0,291	0,345	0,291	0,291

4	cosine		0,291	0,745	0,741	0,798
5	euclidean	complete	0,846	0,765	0,679	0,651
6	manhattan		0,472	0,687	0,831	0,387
7	cosine		0,518	0,701	0,769	0,804

Таблица 3.8 — Оценка качества кластеризации для Sxp, Syn, Szn

№	Метрика	Расстояние между кластерами	РСА			
			Не использовалось	5	10	25
1	euclidean	ward	0,986	0,990	0,992	0,992
2	euclidean	average	0,295	0,837	0,840	0,838
3	manhattan		0,291	0,839	0,392	0,294
4	cosine		0,298	0,548	0,792	0,798
5	euclidean	complete	0,902	0,844	0,971	0,920
6	manhattan		0,902	0,845	0,963	0,885
7	cosine		0,902	0,892	0,858	0,905

В таблице нет способа single, т.к. он относит почти все точки к одному классу и оценочная функция всегда около 0,291.

В таблице отмечены параметры с самым высоким значением оценочной функции (более 95%). Этот метод позволил отсеять очевидно плохие результаты. Однако выбор среди них следует провести другим способом. Хороший пример почему это следует сделать показан на рисунках 3.2 – 3.3.

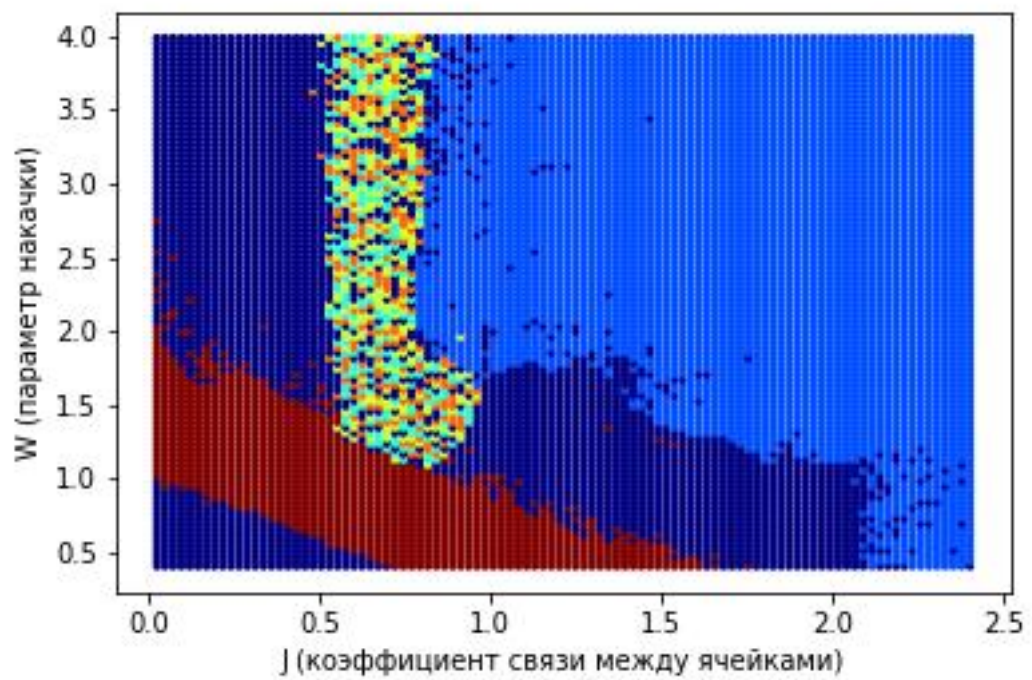


Рисунок 3.2 - Результаты agglomerative clustering (x,y,z), ward, euclidian без PCA

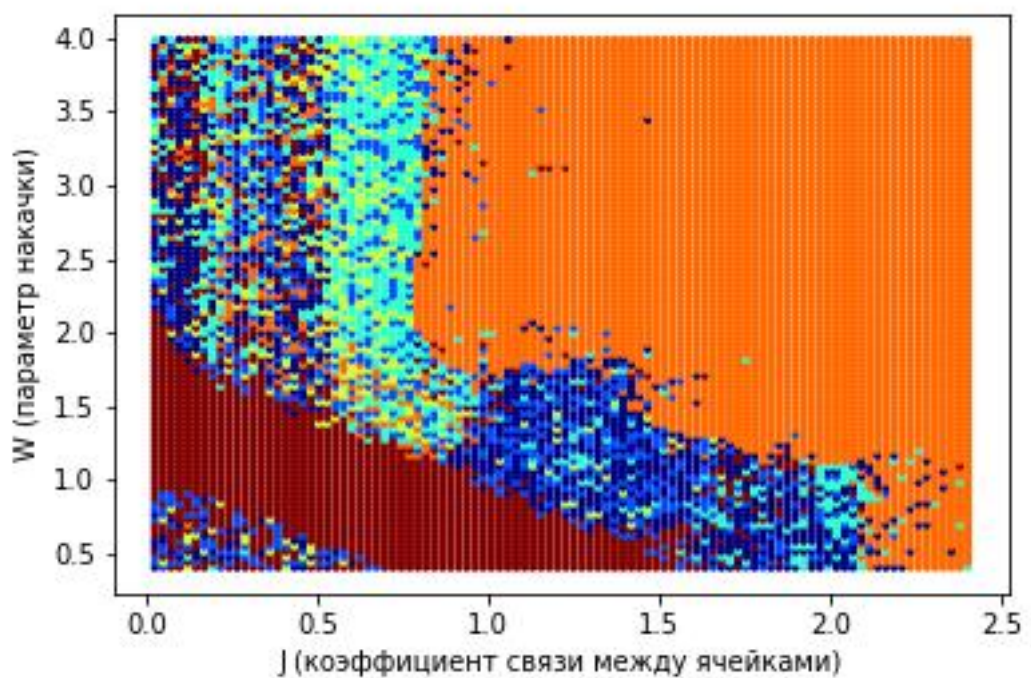


Рисунок 3.3 - Результат agglomerative clustering (x, z), complete euclidean, без PCA

Оценочная функция в обоих случаях высока (0,986 и 0,951), но во втором случае происходит нежелательное дробление областей.

В выборе лучшей из диаграмм поможет аналитически построенная диаграмма из второй главы.

В качестве наилучших параметров выберем следующие значения: диаграмма для трех компонент (x , y , z), с функцией расстояния complete и манхэттоновским расстоянием и предварительной обработкой PCA с 10 принципиальными компонентами.

3.3.3. Применение метода

Вот диаграмма, полученная методом agglomerative clustering (рисунок 3.4).

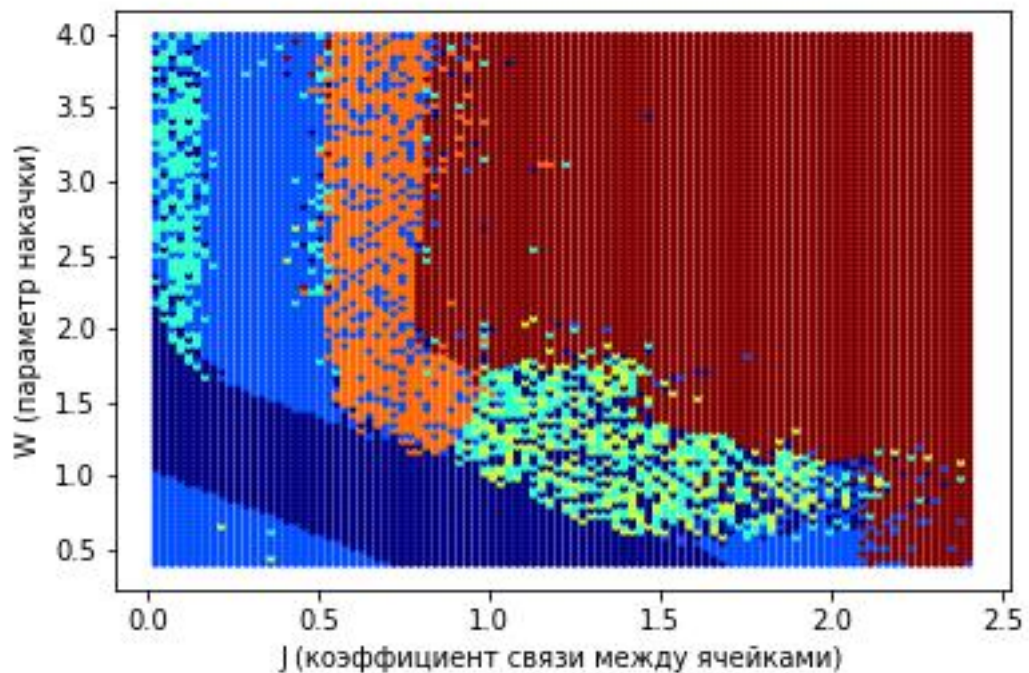


Рисунок 3.4 - Фазовая диаграмма, полученная методом agglomerative clustering

Эта диаграмма практически идентична той, что была построена во второй главе данной работы. Ее точность, согласно оценочной функции, описанной в предыдущем пункте, 0,963.

На фазе выделены основные области, границы совпадают с предполагаемыми. Значит ее можно использовать как отправную точку в методе learning by confusion для поиска межфазных границ.

3.4. ПОИСК МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ

В данной подглаве описывается поиск межфазовых границ. Мы выполняем его относительно новым методом *learning by confusion*, описанным в 1 главе, основываясь на диаграмме, полученной в подглаве 3.3.

3.4.1. Подготовка тестового и тренировочного набора данных

Первая трудность — разделение множества на тренировочные и тестовые данные. Известно, что для обучения нейронной сети требуется много примеров. Однако в данной задаче их нет.

В отличие от задачи с моделью Изинга[13], для поиска критической точки, в которой также использовался метод *learning by confusion* [1], решаемая задача для данной работы не является стохастической. Другими словами, невозможно получить несколько вариантов изображений решеток при одних и тех же параметрах. Поэтому за одинаковые принимаются близкие по значению J и W .

3.4.2. Структура нейронной сети

Структура нейронной сети изображена на рисунке 3.5.

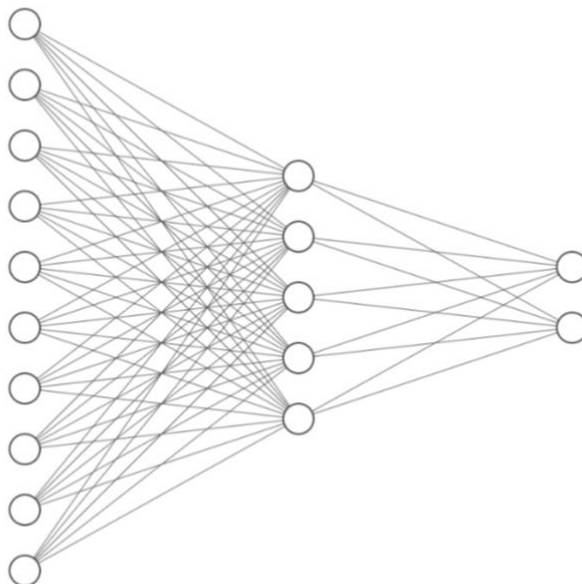


Рисунок 3.5 - Структура нейронной сети для метода *learning by confusion*

Первый фиктивный слой состоит из 192 нейронов. Он соответствует значениям S_{xn}, S_{yn}, S_{zn} для каждого из 64 узлов решетки.

Второй полносвязный слой состоит из 80 узлов, имеет сигмоидальную функцию регуляризации и $l2$ регуляризация ($l2 = 0.001$).

Следующий слой также является полносвязным, но имеет всего два выхода, соответствующие двум рассматриваемым фазам. Применяется функция активации «relu» и $l2 = 0.001$.

3.4.3. Итоговая фазовая диаграмма

На рисунке 3.6 изображен пример графика $accuracy(x_0)$, получаемый на наших данных.

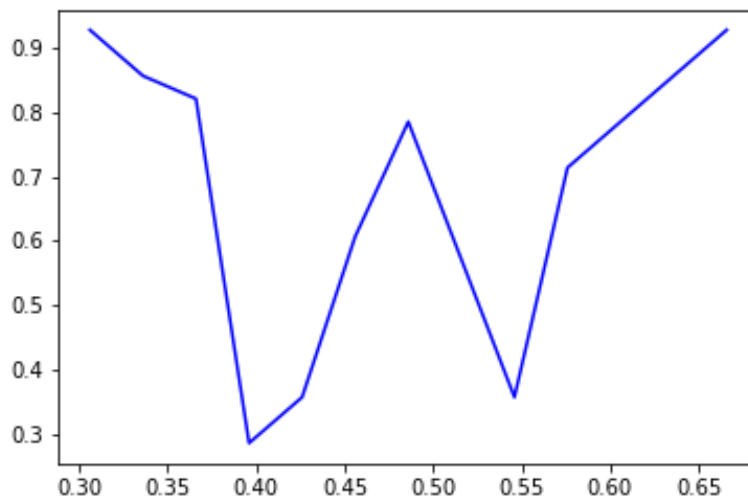


Рисунок 3.6 - Пример графика $accuracy(x)$ в задаче. Имеет форму "W"

Последовательно применяя алгоритм вдоль прямых предполагаемых межфазных границ, получаем следующую диаграмму (рисунок 3.7).

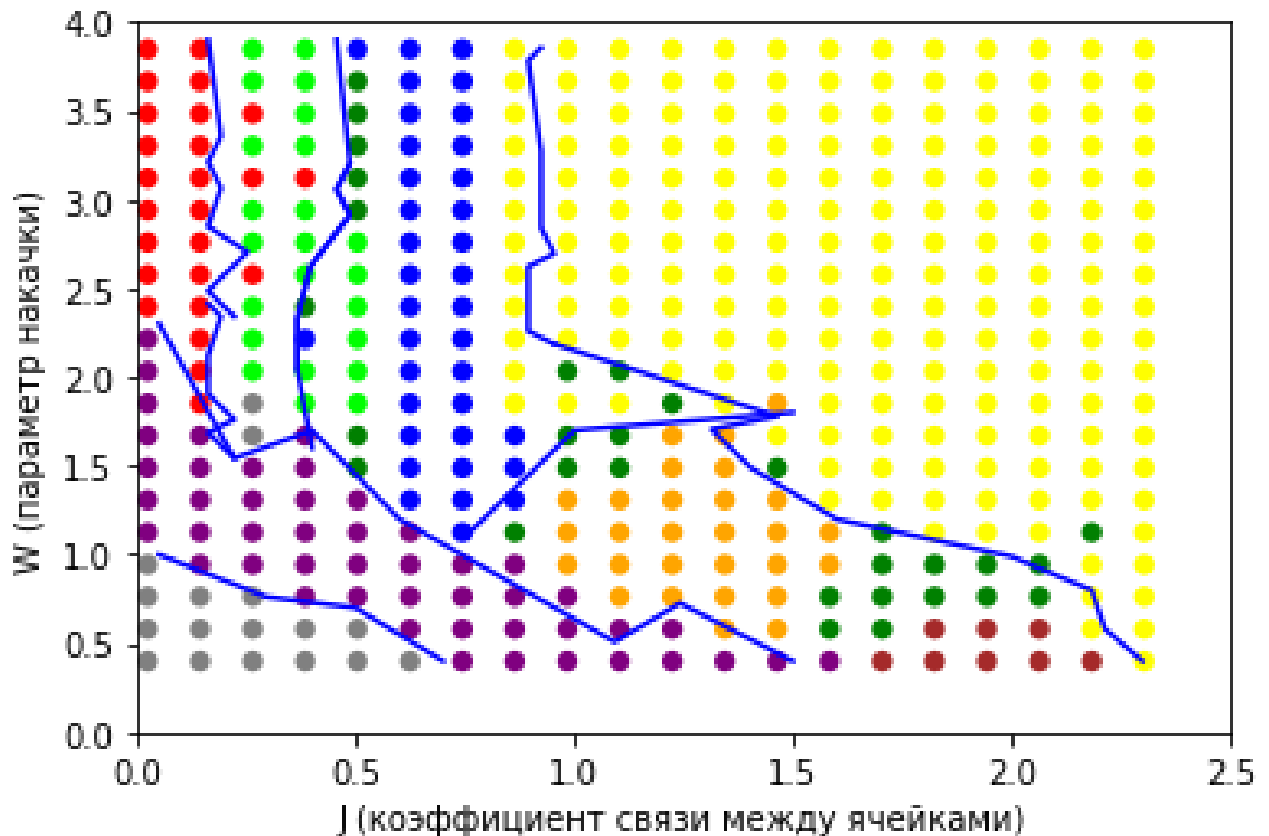


Рисунок 3.7 - Итоговая фазовая диаграмма

Заметим, что границы, полученные методом learning by confusion, в целом совпадают с границами областей, обозначенных ранее. Отлично отделяются нулевая фаза, ферромагнетик, антиферромагнетики с классической, квадратичной и прямолинейной структурой. В дальнейшем эту диаграмму можно будет уточнить, применяя другие методы машинного обучения.

ВЫВОДЫ ПО ГЛАВЕ 3

1. В данной главе были применены методы tSNE, agglomerative clustering и learning by confusion.
2. Результатом стала фазовая диаграмма, с отмеченными на ней границами фазового перехода.
3. Были обнаружены новые фазы: антиферромагнетик с квадратичной и антиферромагнетик с прямолинейной структурой.
4. Полученная фазовая диаграмма уже является репрезентативной, однако может быть улучшена в дальнейших исследованиях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе достигнута основная цель — найдены новые фазы (антиферромагнетик с квадратичной, прямой и диагональной структурой). Также построена фазовая диаграмма. В дальнейшем мы можем уточнить и дополнить диаграмму применив другие методы.

Работа была выполнена совместно с научным консультантом в области квантовой физики, Александром Кириенко. По его мнению, новые фазы, полученные в работе, являются интересными для области в целом и будут служить предметом дальнейшей публикации. Разбиение границ похоже на реальное и хоть данная область в физике является малоизученной, машинное обучение продвинуло ее.

Результаты, полученные в работе, могут быть полезны не только в области квантовых оптических систем. Сам подход может считаться универсальным и быть применен в других похожих задачах.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Learning phase transitions by confusion Evert P. L. van Nieuwenburg, Ye-Hua Liu and Sebastian D. Huber, 2017
2. Exciton-polariton condensates, Tim Byrnes, Na Young Kim, Yoshihisa Yamamoto, 2014
3. Synchronization crossover of polariton condensates in weakly disordered lattices, H. Ohadi, Y. del Valle-Inclan Redondo, A. Ramsay, Z. Hatzopoulos, T. Liew, P. Eastham, P. Savvidis, J. Baumberg, 2018
4. https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-39333-5_8, 2020
5. <https://www.st-andrews.ac.uk/~qflight/project/spin-lattices/>, 2020
6. <https://www.yaklass.ru/p/okruzhayushchij-mir/3-klass/priroda-vokrug-nas-324086/krugovorot-vody-v-prirode-329399/re-41a59e8b-2278-4a47-bce7-22d88f80b349>, 2020
7. https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A2%D1%80%D0%BE%D0%B9%D0%BD%D0%B0%D1%8F_%D1%82%D0%BE%D1%87%D0%BA%D0%B0_%D0%B2%D0%BE%D0%B4%D1%8B, 2020
8. https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9C%D0%B5%D1%82%D0%BE%D0%B4_%D0%B3%D0%BB%D0%B0%D0%B2%D0%BD%D1%8B%D1%85_%D0%BA%D0%BE%D0%BC%D0%BF%D0%BE%D0%BD%D0%B5%D0%BD%D1%82, 2020
9. <https://scikit-learn.org/stable/modules/decomposition.html#pca>, 2020
10. https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A1%D1%82%D0%BE%D1%85%D0%B0%D1%81%D1%82%D0%B8%D1%87%D0%B5%D1%81%D0%BA%D0%BE%D0%B5_%D0%B2%D0%BB%D0%BE%D0%B6%D0%B5%D0%BD%D0%B8%D0%B5_%D1%81%D0%BE%D1%81%D0%B5%D0%B4%D0%B5%D0%B9_%D1%81_t-%D1%80%D0%B0%D1%81%D0%BF%D1%80%D0%B5%D0%B4%D0%B5%D0%BB%D0%B5%D0%BD%D0%B8%D0%B5%D0%BC, 2020
11. <https://scikit-learn.org/stable/modules/manifold.html#t-sne>, 2020
12. https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%98%D0%B5%D1%80%D0%B0%D1%80%D1%85%D0%B8%D1%87%D0%B5%D1%81%D0%BA%D0%B0%D1%8F_%D0%BA%D0%BB%D0%B0%D1%81%D1%82%D0%B5%D1%80%D0%B8%D0%B7%D0%B0%D1%86%D0%B8%D1%8F, 2020
13. https://physics.bu.edu/~pankajm/ML-Notebooks/HTML/NB12_CIX-DNN_ising_TFlow.html, 2020