

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы физики
и исследований им. Ландау
А.В. Рогачев**

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Machine Learning for Quantum and Statistical Physics/Машинное обучение для квантовой и статистической физики
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра Российского квантового центра
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составили:

А.Е. Уланов, канд. физ.-мат. наук

Е.С. Тиунов

Программа обсуждена на заседании кафедры Российского квантового центра 21.05.2021

Аннотация

В курсе расскажут про применение базовых методов машинного обучения для задач квантовой физики. Курс состоит из двух частей.

Первая часть дает общие представления о предмете глубокого обучения. Объяснение основ строится на примере задач классификации и регрессии. Для решения этих задач предлагается изучить различные типы искусственных нейронных сетей (полносвязные, сверточные, рекуррентные).

Вторая часть курса направлена на решение задач квантовой физики с помощью машинного обучения. Будет рассмотрен вариационный метод в парадигме нейронных сетей для задач квантовой томографии и поиска основного состояния многочастичных гамильтонианов. Также будут объяснены различные методы сэмплирования в контексте применения вариационного подхода для Гильбертовых пространств большой размерности.

Все занятия курса организованы как набор пар: лекция-семинар. На лекциях будут рассмотрены теоретические основы вышеописанных тем. Семинары состоят из решения практических задач на языке Python по темам лекций. В процессе решения задач будет дано базовое представление о библиотеках Numpy и Pytorch. Критерием успешного завершения курса является сдача проекта. Для успешного прохождения курса необходимы базовые навыки программирования на языке Python.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Преподать краткое введение в методы современного глубокого машинного обучения, дать обзор существующих способов применения инструментов машинного обучения для экспериментальной квантовой и статистической физики

Задачи дисциплины

снабдить слушателей необходимыми знаниями и умениями для проведения самостоятельных междисциплинарных исследований на стыке машинного обучения и физики

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.4 Представляет публично результаты проекта (или отдельных его этапов) в форме отчетов, статей, выступлений на научно-практических конференциях, семинарах и т.п.
УК-3 Способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной задачи	УК-3.1 Организует и координирует работу участников проекта, способствует конструктивному преодолению возникающих разногласий и конфликтов
	УК-3.4 Способен планировать командную работу, распределять поручения членам команды, организовать обсуждение разных идей и мнений
УК-6 Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способствовать ее совершенствованию на основе	УК-6.1 Умеет решать задачи собственного личностного и профессионального развития, определять и реализовывать приоритеты совершенствования собственной деятельности

способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.2 Оценивает свою деятельность, соотносит цели, способы и средства выполнения деятельности с её результатами
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.1 Способен работать в коллективе, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

основные методы глубокого машинного обучения и существующие способы их применения для исследований в области современных квантовых технологий

уметь:

выбирать необходимые инструменты машинного обучения для проведения экспериментальных и теоретических исследований в области квантовой физики и статистической физики, ориентироваться в современных исследованиях на стыке квантовых технологий и машинного обучения

владеть:

основными технологиями и алгоритмами глубокого машинного обучения, и методами их использования в качестве инструментария для проведения научно-исследовательской деятельности в различных областях квантовой физики и статистической физики

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Вводная лекция.	3			5
2	Линейная классификация и полносвязные нейронные сети	3			5
3	Методы диагностирования качества обученных моделей	3			5
4	Сверточные нейронные сети	3			5
5	Рекуррентные нейронные сети	3			5
6	Больцмановские машины для задач статистической физики	3			5
7	Больцмановские машины для томографии квантовых состояний	3			5
8	Методы сэмлирования	3			5
9	Вариационные авторегрессионные нейронные сети для задач статистической физики	3			5
10	Обзорная лекция по современным достижениям в области	1			5
11	Финальный проект	2			10
Итого часов		30			60
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 2 (Весенний)

1. Вводная лекция.

На лекции предлагается обзор задач и методов машинного обучения.

2. Линейная классификация и полносвязные нейронные сети

Вводится формулировка задач линейной, нелинейной, логистической регрессии и классификации. На примере задачи классификации объясняется понятие искусственной нейронной сети.

3. Методы диагностирования качества обученных моделей

На примерах рассматриваются явления переобучения и недообучения глубоких нейронных сетей, а также способы их диагностирования и устранения.

4. Сверточные нейронные сети

Вводится понятие глубокой сверточной нейронной сети, и рассматривается задача классификации изображений. Объясняются понятия ядро свертки, шаг свертки, рассматриваются различные базовые архитектуры сверточных нейронных сетей.

5. Рекуррентные нейронные сети

Рассматриваются архитектуры (GRU, LSTM) рекуррентных нейронных сетей на примере задач машинного перевода. Объяснение проблем взрывающихся и затухающих градиентов.

6. Больцмановские машины для задач статистической физики

Лекция направлена на решение задачи оценки статвеса для модели Изинга с помощью аппроксимации Больцмановского распределения нейронной сетью.

7. Больцмановские машины для томографии квантовых состояний

На примере задачи томографии квантовых состояний объясняется вариационный метод в парадигме нейронных сетей. В качестве такой нейронной сети рассматривается Больцмановская машина.

8. Методы сэмлирования

На лекции рассматриваются два алгоритма сэмлирования из произвольного распределения --- алгоритм Гиббса и Метрополис. Данные алгоритмы применяются для обучения Больцмановской машины.

9. Вариационные авторегрессионные нейронные сети для задач статистической физики

На примере задачи из Темы 6 вводится понятие авторегрессионной нейронной сети и объясняется ее обучение с помощью встроенного в нее сэмлирования.

10. Обзорная лекция по современным достижениям в области

Обзор современных достижений в области машинного обучения.

11. Финальный проект

Ответы на вопросы студентов по выбранным финальным проектам.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, оснащенная мультимедиапроектором и экранам. Слушателям также понадобятся персональные компьютеры.

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, Aaron Courville. Deep Learning, MIT Press, 2016. (available online)

Дополнительная литература

A. I. Lvovsky and M. G. Raymer, Continuous-variable optical quantum-state tomography. *Reviews of Modern Physics* 81, 299–332 (2009).

G. Carleo and M. Troyer, Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. *Science* 355, 602–606 (2017).

G. Torlai, G. Mazzola, J. Carrasquilla, M. Troyer, R. Melko and G. Carleo, Neural-network quantum state tomography. *Nature Physics* 1 (2018).

E. S. Tiunov, V. V. Tiunova, A. E. Ulanov, A. I. Lvovsky and A. K. Fedorov, Experimental quantum homodyne tomography via machine learning. (2019).

M. Benedetti, J. Realpe-Gómez, R. Biswas and A. Perdomo-Ortiz, Quantum-Assisted Learning of Hardware-Embedded Probabilistic Graphical Models. *Physical Review X* 7, 041052 (2017).

D. Wu, L. Wang and P. Zhang, Solving Statistical Mechanics Using Variational Autoregressive Networks. *Physical Review Letters* 122, 080602 (2019).

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

https://github.com/yandexdataschool/Practical_DL

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

У всех обучающихся должен быть установлен пакет программ Anaconda и библиотека Pytorch

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен, с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения и понятия, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра Российского квантового центра
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Дифференцированный зачет

Разработчики:

А.Е. Уланов, канд. физ.-мат. наук
Е.С. Тиунов

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.4 Представляет публично результаты проекта (или отдельных его этапов) в форме отчетов, статей, выступлений на научно-практических конференциях, семинарах и т.п.
УК-3 Способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной задачи	УК-3.1 Организует и координирует работу участников проекта, способствует конструктивному преодолению возникающих разногласий и конфликтов
	УК-3.4 Способен планировать командную работу, распределять поручения членам команды, организовать обсуждение разных идей и мнений
УК-6 Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1 Умеет решать задачи собственного личностного и профессионального развития, определять и реализовывать приоритеты совершенствования собственной деятельности
	УК-6.2 Оценивает свою деятельность, соотносит цели, способы и средства выполнения деятельности с её результатами
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов

ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.1 Способен работать в коллективе, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Machine Learning for Quantum and Statistical Physics/Машинное обучение для квантовой и статистической физики (РКЦ)» обучающийся должен:

знать:

основные методы глубокого машинного обучения и существующие способы их применения для исследований в области современных квантовых технологий

уметь:

выбирать необходимые инструменты машинного обучения для проведения экспериментальных и теоретических исследований в области квантовой физики и статистической физики, ориентироваться в современных исследованиях на стыке квантовых технологий и машинного обучения

владеть:

основными технологиями и алгоритмами глубокого машинного обучения, и методами их использования в качестве инструментария для проведения научно-исследовательской деятельности в различных областях квантовой физики и статистической физики

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

Примеры контрольных заданий

1. Решить задачу нелинейной логистической регрессии
2. Решить задачу классификации изображений, используя многослойный перцептрон, на примере базы данных MNIST
3. Проанализировать кривые обучения и применить методы регуляризации для улучшения качества модели
4. Решить задачу классификации изображений, используя глубокую сверточную сеть, на примере базы данных MNIST
5. Численно оценить с помощью разных методов сэмплирования корреляционные функции в модели Изинга и сравнить с точным решением

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Перечень контрольных вопросов:

1. Получить форму фокусирующей поверхности, разделяющей две среды с разными показателями преломления, с помощью нейронной сети
2. На примере атома гелия применить несколько вариационных анзацев для поиска энергии основного состояния
3. Натренировать ограниченную машину Больцмана с помощью сэмлирования
- 4.. Натренировать полносвязную машину Больцмана с помощью сэмлирования с одним скрытым слоем
5. Найти основное состояние многочастичного гамильтониана с помощью нейросетевого Анзаца
6. Пронаблюдать фазовый переход в этой системе изменяя параметры Гамильтониана
7. Создать нейронную сеть, предсказывающую волновую функцию в координатном представлении
8. Решить задачу томографии состояния квантового гармонического осциллятора
9. Разработать метод, решающий дифференциальные уравнения с помощью нейронных сетей
10. Предсказать динамику физической системы, минимизируя интеграл действия с помощью нейронной сети.

Примеры экзаменационных билетов:

Билет 1.

1. Получить форму фокусирующей поверхности, разделяющей две среды с разными показателями преломления, с помощью нейронной сети
2. На примере атома гелия применить несколько вариационных анзацев для поиска энергии основного состояния

Билет 2.

1. Натренировать ограниченную машину Больцмана с помощью сэмлирования
- 2.. Натренировать полносвязную машину Больцмана с помощью сэмлирования с одним скрытым слоем

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Экзамен проводится в письменной форме по билетам. В каждом билете представлено два вопроса. При проведении зачёта и экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.