

Wariacyjna teoria grupy renormalizacji w opisie uczenia głębokiego czyli Deep Learning oczami fizyka statystycznego

Maksymilian Bujok



Zakład Algebry i Kombinatoryki
Wydział Matematyki i Nauk Informatycznych

18 kwietnia 2018

Wstęp

Plan prezentacji

- ▶ Czym zajmuje się mechanika statystyczna.
- ▶ Czym są przemiany fazowe i dlaczego zwracamy na nie uwagę.
- ▶ Model Isinga. Przemiany fazowe w modelu Isinga.
- ▶ Teoria grupy renormalizacji.
- ▶ Wariacyjna teoria grupy renormalizacji.
- ▶ Odwzorowanie wariacyjnej teorii grupy renormalizacji i sieci głębokich.
- ▶ Podsumowanie i perspektywy na przyszłość.

Fizyka statystyczna

Fizyka statystyczna

Fizyka statystyczna, dział fizyki teoret. zajmujący się badaniem właściwości układów makroskopowych, tj. układów składających się z olbrzymiej liczby cząstek;

Mechanika statystyczna

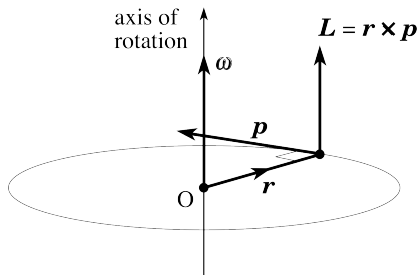
Dział fizyki statystycznej zajmujący się opisem równowagowych i nierównowagowych właściwości układów makroskopowych (wynikających z ich właściwości mikroskopowych opisywanych prawami mechaniki klasycznej lub kwantowej) za pomocą statystyki matematycznej.

(Źródło: Encyklopedia PWN)

Moment pędu w mechanice klasycznej

- ▶ W mechanice klasycznej moment pędu (kręt) punktu materialnego \vec{p} , którego położenie opisujemy wektorem wodzącym \vec{r} definiuje się jako wektor będący rezultatem iloczynu wektorowego wektora położenia i pędu

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (1)$$



Rysunek: Źródło: http://www.physics.brocku.ca/PPLATO/h-flap/phys2_8f_5.png

Moment pędu ciała obracającego się

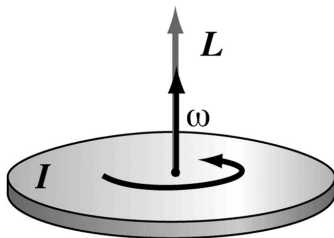
- ▶ Moment bezwładności jest miarą bezwładności ciała w ruchu obrotowym względem określonej, ustalonej osi obrotu. Im większy moment, tym trudniej zmienić ruch obrotowy ciała, np. rozkręcić dane ciało lub zmniejszyć jego prędkość kątową.
- ▶ Moment bezwładności ciała składającego się z n punktów jest suma momentów względem osi obrotu

$$I = \sum_{i=1}^n m_i r^2 \quad (2)$$

Moment pędu ciała obracającego się

- ▶ Zatem w mechanice klasycznej można wyrazić moment pędu obracającego się z prędkością $\vec{\omega}$ ciała jako

$$\vec{L} = I \times \vec{\omega} \quad (3)$$



Rysunek: Źródło: <https://www.desktopclass.com/wp-content/uploads/2012/09/The-sphere-in-rotating.jpg>

Moment pędu w mechanice kwantowej

- ▶ W mechanice kwantowej dzięki zasadzie odpowiedniości również możemy wprowadzić moment pędu analogiczny do tego w mechanice kwantowej interpretując \vec{r} jako operator położenia, a \vec{p} kwantowy operator momentu pędu. Nazywamy wtedy \vec{L} operatorem momentu pędu.
- ▶ Jednakże w mechanice kwantowej znamy jeszcze jeden rodzaj momentu pędu, *spinowy moment pędu* czyli po prostu **spin**.
- ▶ Nie jest on związany z obrotem wokół osi. Cząstka posiada spin nawet znajdując się w spoczynku.

Moment pędu w mechanice kwantowej

- ▶ Spin jest opisywany liczbowo za pomocą kwantowych liczb spinowych.
- ▶ Cząstki o spinie o wartościach całkowitych nazywamy bozonami.

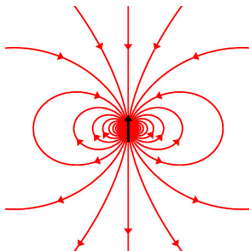
$$0, 1, 2 \dots \quad (4)$$

- ▶ Natomiast cząstki opisywane wartościami niecałkowitymi nazywamy fermionami.

$$0, \frac{1}{2}, 1\frac{1}{2} \dots \quad (5)$$

Spin

- ▶ Z istnieniem spinu związane jest istnienie tzw. *spinowego momentu magnetycznego*.
- ▶ Niezerowy moment magnetyczny mogą mieć zarówno cząstki obdarzone ładunkiem jak i takie nieposiadające ładunku na przykład neutron.



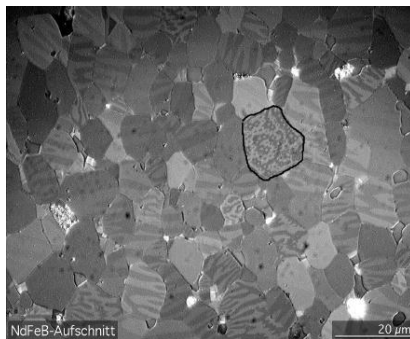
Rysunek: Źródło: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Neutron_spin_dipole_field.jpg

Magnetyki

- ▶ W ciałach stałych lub cieczech wzajemne oddziaływanie może prowadzić do powstania zjawiska *ferromagnetyzmu*.
- ▶ Ferromagnetyzm to zjawisko polegające na spontanicznym namagnesowaniu (przy zerowym zewnętrznym polu magnetycznym).
- ▶ Jest to wprost związanie z istnieniem spinowego momentu magnetycznego o wartościach różnych od zera.
- ▶ Cząstki takie wytwarzają słabe pole magnetyczne, za pomocą którego oddziałują ze sobą.

Własności matnetyków

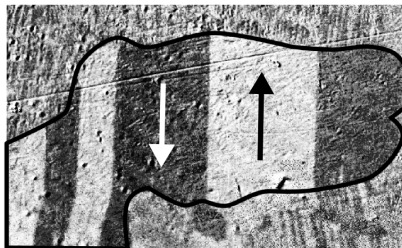
- ▶ Istnienie obszarów uporządkowanych (*domen*) tzn. takich, w których cząstki wykazują uporządkowanie momentów magnetycznych wiąże się z występowaniem między innymi magnesów trwałych.



Rysunek: Źródło: <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:3ANdFeB-Domains.jpg>

Własności magnetyków

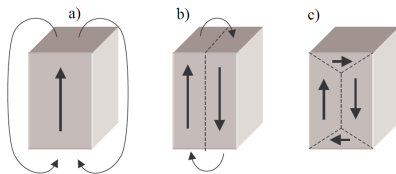
- ▶ W ferromagnetykach atomy znajdują się stosunkowo blisko siebie, tak, że momenty magnetyczne niesparowanych elektronów silnie oddziałują ze sobą, analogicznie do magnesów sztabkowych.
- ▶ Sąsiadujące obszary o mające momenty magnetyczne ustawiają się równoległe, co powoduje powstawanie domen magnetycznych.



Rysunek: Źródło: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:3AMagnetic_domain_with_arrows_by_Zureks.png

Własności magnetyków

- ▶ Spontaniczne namagnesowanie prowadzi do osiągnięcia przez układ najmniejszej energii.



Rysunek: Źródło: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:3APowstawanie_domen_by_Zureks.png

Model Isinga

- ▶ Jednym z pierwszy, a na pewno jednym z najszerszej znanych i wykorzystywanym przez fizyków modelem magnetyzmu, i nie tylko, jest *model Isinga*. Nazwany tak na część Ernesta Isinga.
- ▶ Został on sformułowany w 1920 przez doktoranta Isinga Wilhelma Lenza.
- ▶ Badanie jego własności odgrywa dużą rolę poznawaniu zjawisk związanych z przejściami fazowymi.
- ▶ Skala mikro tłumaczy zachowanie w skali makro.
- ▶ Jest modelem sieci neuronowej Hopfielda.

Definicja modelu Isinga

- ▶ W ogólności model Isinga możemy zdefiniować następująco:

dana jest d -wymiarowa sieć Λ , w każdym węźle owej sieci znajduje się obiekt, który możemy utożsamiać ze spinem v_j , gdzie j jest numerem węzła. Możemy rozważać spiny będące klasycznymi momentami magnetycznymi.

Każdy spin może przybierać wartości ± 1 ($\pm \frac{1}{2}$).

Zbiór wszystkich wszystkich wartości $\{v_j\}$ jednoznacznie wyznacza stan układu.

Definicja modelu Isinga

- ▶ Hamiltonian układu zapisujemy w następującej postaci

$$H[\{v_i\}] = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} v_i v_j - B \sum_{i=1}^N v_i, \quad (6)$$

gdzie pierwsze sumowanie odbywa się po sąsiednich, rozróżnialnych parach spinów. Ile jest par zależy od liczby wymiarów i rodzaju sieci. Drugie z sumowań odbywa się natomiast po wszystkich spinach w sieci.

N jest liczbą spinów w sieci, B to zewnętrzne pole magnetyczne.

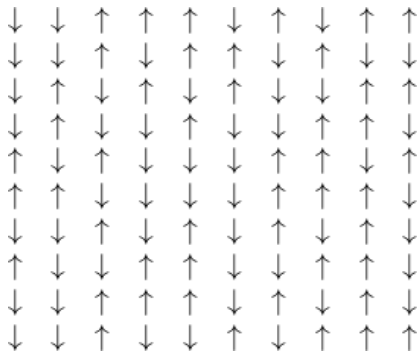
J to sprzężenie pomiędzy i a j węzłem, które czasem nazywamy „całką wymiany”.

Definicja modelu Isinga

- ▶ Wartości stałych sprzężenia J wpływają na zachowanie całego układu
- ▶ $J_{ij} > 0$ układ ma własności ferromagnetyczne;
- ▶ $J_{ij} < 0$ układ ma własności antyferromagnetyczne, tj. własności magnetyczne poszczególnych spinów znoszą się;
- ▶ $J_{ij} = 0$ spiny nie oddziałują.

Model Isinga 2D

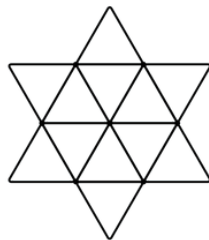
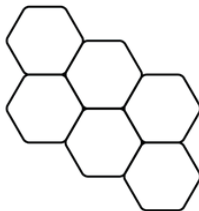
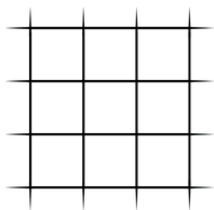
- ▶ Najczęściej rozważaną wersją modelu Isinga jest model na sieci kwadratowej w dwóch wymiarach.



Rysunek: Źródło: <http://www.physics.buffalo.edu/phy410-505/2011/topic5/app2/img/tex30.png>

Różne wersje modelu Isinga 2D

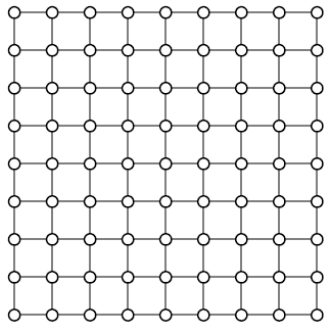
- ▶ Oprócz najprostszej wersji na sieci kwadratowej sieci regularnej istnieją też inne układy.



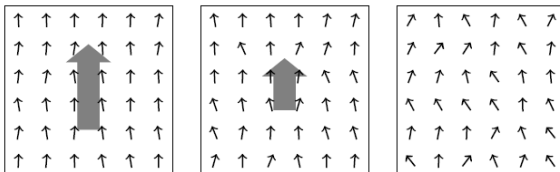
Rysunek: Źródło: <http://www.brandonrayhaun.com/2016/01/09/dualities-in-two-dimensional-ising-models/>

Własności termodynamiczne modelu Isinga

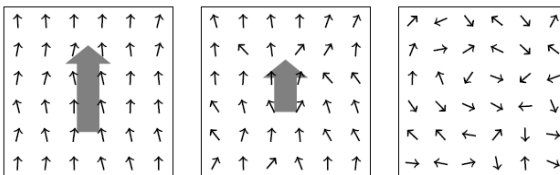
- ▶ Zakładamy, że siła oddziaływań jest malejącą funkcją temperatury.
- ▶ Zakłada się również, że skłonność spinów do porządkowania się w jednym ze stanów $+$ albo $-$, i magnetyzacji $M = \sum_i v_i$ odpowiednio większej lub mniejszej od zera może być dodatkowo wzmocniona zewnętrznym polem magnetycznym.



Rysunek: Schematyczne przedstawienie dwuwymiarowej siatki dla modelu Isinga.



Rysunek: Ferromagnetyzacja



Rysunek: Paramagnetyzacja.

(www.unige.ch/math/folks/velnik/smbook)

Suma statystyczna

Jednym z najważniejszych pojęć w mechanice statystycznej jest *suma statystyczna*:

$$Z = \sum_{\{v_i\}} \exp(-\beta H(\{v_i\})), \quad (7)$$

gdzie β to odwrotność temperatury:

$$\beta = \frac{1}{kT}, \quad (8)$$

a k to stała Boltzmannna równa $1,38064852(79) \times 10^{-23} \frac{J}{K}$.

Interpretacja probabilistyczna sumy statystycznej

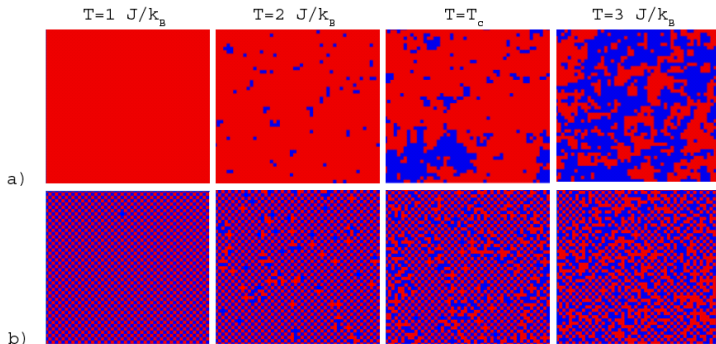
- ▶ Przy pomocy sumy statystycznej możemy określić prawdopodobieństwo znalezienia się układu w określonym stanie tzn. w konfiguracji $\{v_i\}$ i energii $E = H(\{v_i\})$:

$$P(\{v_i\}) = \frac{\exp(-\beta H[\{v_i\}])}{Z}. \quad (9)$$

- ▶ W dalszym ciągu prezentacji będziemy zakładali, że $\beta = 1$.

Przemiana fazowa modelu Isinga 2D

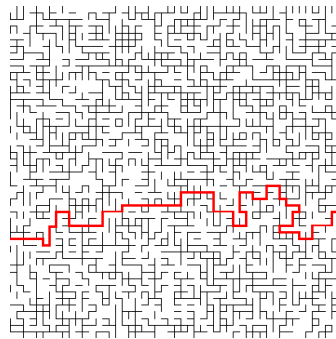
- ▶ Dwuwymiarowa wersja modelu Isinga jest jednym z najprostszych modeli, w których możemy obserwować przemiany fazowe.



Rysunek: Źródło: <http://quantumtheory.physik.unibas.ch/people/bruder/Semesterprojekt2007/p1/index.html>

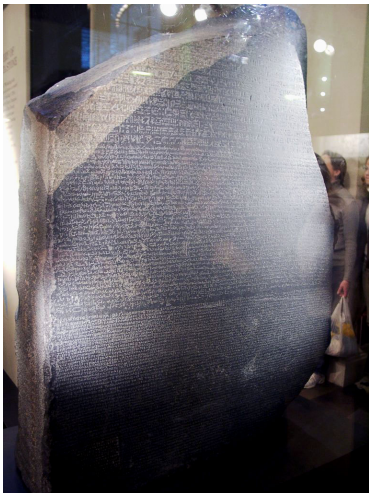
Perkolacja - strukturalne przemiana fazowa

- ▶ Perkolacja jest przykładem **ciągłej** przemiany fazowej.
- ▶ Spójne grupy zajętych węzłów/połączeń nazywamy **klastrami**.
- ▶ Ważną cechą omawianego procesu jest istnienie pewnej krytycznej koncentracji zwanej **progiem perkolacji** przy, której po raz pierwszy pojawia się **klaster perkolacyjny**.



Rysunek: Perkolacja na sieci kwadratowej.

Kamień z Rosetty



Rysunek: Źródło: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Rosetta_stone.jpg

An exact mapping between the Variational Renormalization Group and Deep Learning

Pankaj Mehta

Dept. of Physics, Boston University, Boston, MA

David J. Schwab

Dept. of Physics, Northwestern University, Evanston, IL

Deep learning is a broad set of techniques that uses multiple layers of representation to automatically learn relevant features directly from structured data. Recently, such techniques have yielded record-breaking results on a diverse set of difficult machine learning tasks in computer vision, speech recognition, and natural language processing. Despite the enormous success of deep learning, relatively little is understood theoretically about why these techniques are so successful at feature learning and compression. Here, we show that deep learning is intimately related to one of the most important and successful techniques in theoretical physics, the renormalization group (RG). RG is an iterative coarse-graining scheme that allows for the extraction of relevant features (i.e. operators) as a physical system is examined at different length scales. We construct an exact mapping from the variational renormalization group, first introduced by Kadanoff, and deep learning architectures based on Restricted Boltzmann Machines (RBMs). We illustrate these ideas using the nearest-neighbor Ising Model in one and two-dimensions. Our results suggests that deep learning algorithms may be employing a generalized RG-like scheme to learn relevant features from data.

4 Oct 2014

Rysunek: Źródło: [1]

Teoria grupy renormalizacji

- ▶ Teoria mające zastosowanie w różnych działach fizyki.
- ▶ Główne podejścia związane z teorią pola i mechaniką statystyczną.
- ▶ Prace związane z teorią grupy renormalizacji zostały uhonorowane nagrodą Nobla dla Kennetha G. Wilsona w 1982 roku.
- ▶ Wariacyjna teoria grupy renormalizacji została po raz pierwszy opublikowana przez Leo Kadanoff w 1976 roku. [2]

Ogólna postać hamiltonianu

- ▶ Hamiltonian w postaci ogólnej dla układu wielu ciał ze sprzężeniem $\mathbf{K} = \{\mathbf{K}_v\}$ można zapisać w następujący sposób:

$$H[\{v_i\}] = - \sum_i K_i v_i - \sum_{ij} K_{ij} v_i v_j - \sum_{ijk} J_{ijk} v_j v_j v_k + \dots, \quad (10)$$

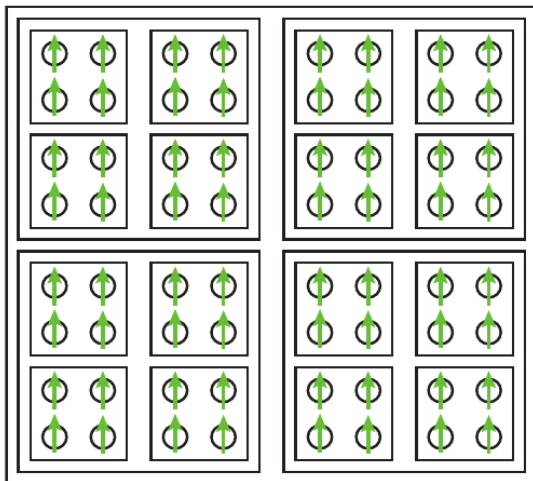
- ▶ Energia swobodna przyjmuje postać:

$$F = - \ln Z = - \ln \sum_{\{v_i\}} \exp(-H[\{v_i\}]). \quad (11)$$

Teoria grupy renormalizacji Kadanofa

- ▶ Idea stojąca za renormalizacją polega na znalezieniu bardziej „gruboziarnistego” (ang. coarse-grained) opisu układu spinów, z którego usuwamy fluktuacje blisko zasięgowe.
- ▶ W tym celu wprowadzamy nowy zbiór spinów (ukrytych) $\{h_j\}$ w liczbie $M < N$, gdzie N to liczba spinów $\{v_i\}$.
- ▶ Każdy ze spinów h_j jest swego rodzaju grubo ziarnistym uogólnieniem stanu wielu spinów ze zbioru $\{v_i\}$.

Wariacyjna teoria grupy renormalizacji Kandanofa



Rysunek: Źródło: [1]

Wariacyjna teoria grupy renormalizacji Kandanofa

- ▶ Na proces renormalizacji możemy spojrzeć w przypadku modelu Isinga jak na proces, gdzie oddziaływanie pomiędzy spinami ze zbioru h_j wynika z oddziaływań spinów ze zbioru v_i .
- ▶ W przypadku układu wielu cząstek możemy zapisać *hamiltonian efektywny* („gruboziarnisty”) dla spinów h_j jako:

$$\tilde{H}\{h_j\} = - \sum_i \tilde{K}_i h_i - \sum_{ij} \tilde{K}_{ij} h_j h_j - \sum_{ijk} \tilde{K}_{ijk} h_j h_j h_k + \dots, \quad (12)$$

gdzie $\{\tilde{K}\}$ opisuje oddziaływania pomiędzy spinami ze zbioru h_j .

Wariacyjna teoria grupy renormalizacji Kandanofa

- ▶ Renormalizację możemy potraktować jako odwzorowanie zbioru stałych oddziaływanie $\{K\}$ w $\{\tilde{K}\}$.
- ▶ W schemacie wariacyjnej teorii grupy renormalizacji tworzymy funkcję $\mathbf{T}_\lambda(\{\mathbf{v}_i\}, \{\mathbf{h}_j\})$ zależną od parametru λ .
- ▶ Przy pomocy funkcji $\mathbf{T}_\lambda(\{\mathbf{v}_i\}, \{\mathbf{h}_j\})$ definiujemy hamiltonian dla spinów ze zbioru $\{h_j\}$:

$$\exp(\tilde{H}[\{h_j\}]) \equiv \sum_{\{\mathbf{v}_i\}} \exp((\mathbf{T}_\lambda(\{\mathbf{v}_i\}, \{\mathbf{h}_j\}) - \mathbf{H}[\{\mathbf{v}_i\}]), \quad (13)$$

oraz energię swobodną :

$$F_\lambda^h = -\ln \sum_{\{\mathbf{v}_i\}} \exp(-\tilde{H}_\lambda(\{\mathbf{v}_i\})). \quad (14)$$

Ograniczone maszyny Boltzmann

- ▶ Idea polega na dobraniu takiej wartości parametru λ aby zminimalizować $\Delta F = F_\lambda^h - F^v$.
- ▶ Rozważamy ograniczoną maszynę Boltzmann (ang. Restricted Boltzmann Machine), która jest przykładem modelu bazującego na pojęciu funkcji energetycznej. Oddziaływanie pomiędzy widocznymi v_i i niewidocznymi h_j jednostkami (spinami/neuronami) opisuje funkcja energii:

$$\mathbf{E}(\{v_i\}, \{h_j\}) = - \sum_j b_j h_j - \sum_{ij} v_i w_{ij} h_j - \sum_i c_i v_i, \quad (15)$$

gdzie $\{b_j, w_{ij}, c_i\} = \lambda$ to parametry wariacyjne.

Ograniczone maszyny Boltzmann

- ▶ Teraz możemy sformułować *wspólny rozkład prawdopodobieństwa*:

$$p_{\lambda}(\{v_i\}, \{h_j\}) = \frac{\exp(-\mathbf{E}(\{v_i\}, \{h_j\}))}{Z}, \quad (16)$$

- ▶ które definiuje *rozkład wariacyjny* dla widocznych spinów:

$$p_{\lambda}(\{v_i\}) = \sum_{\{h_j\}} p_{\lambda}(\{v_i\}, \{h_j\}). \quad (17)$$

- ▶ Możemy także zdefiniować *rozkład brzegowy* dla spinów ukrytych:

$$p_{\lambda}(\{h_j\}) = \sum_{\{v_i\}} p_{\lambda}(\{v_i\}, \{h_j\}). \quad (18)$$

Ograniczone maszyny Boltzmann

- ▶ Hamiltonian dla neuronów widzialnych w ograniczonej maszynie Boltzmann:

$$p_{\lambda}(\{v_i\}) \equiv \frac{\exp(-\mathbf{H}_{\lambda}^{RBM}[\{v_i\}])}{Z}, \quad (19)$$

- ▶ oraz dla neuronów ukrytych:

$$p_{\lambda}(\{h_j\}) \equiv \frac{\exp(-\mathbf{H}_{\lambda}^{RBM}[\{h_j\}])}{Z}, \quad (20)$$

gdzie Z to suma statystyczna.

Ograniczone maszyny Boltzmann

- ▶ Do określania rozbieżności pomiędzy rozkładem prawdopodobieństwa dla danych $P(\{v_i\})$ a rozkładem wariacyjnym używamy *dywergencji Kullbacka-Leiblera* w postaci:

$$D_{KL}(P(\{v_i\}) \parallel p_\lambda(\{v_i\})) = \sum_{\{v_i\}} P(\{v_i\}) \log \left(\frac{P(v_i)}{p_\lambda(\{v_i\})} \right) \quad (21)$$

- ▶ Zatem jeśli ograniczona maszyna Boltzmann dokładnie odtwarza rozkład prawdopodobieństwa danych to:

$$D_{KL}(P(\{v_i\}) \parallel p_\lambda(\{v_i\})) = 0. \quad (22)$$

Odwzrowowanie modeli teorii grupy renormalizacji w ograniczoną maszynę Boltzmann

- ▶ W teorii grupy renormalizacji oddziaływanie pomiędzy spinami widzialnymi i ukrytymi opisane jest przy pomocy operatora $\mathbf{T}_\lambda(\{v_i\}, \{h_j\})$.
- ▶ W przypadku ograniczonych maszyn Boltzmann tę samą rolę pełni funkcja opisująca energię całkowitą układu $\mathbf{E}(\{v_i\}, \{h_j\})$.
- ▶ Jak pokażemy dalej te dwa obiekty możemy powiązać ze sobą za pomocą poniższego równania:

$$\mathbf{T}_\lambda(\{v_i\}, \{h_j\}) = -\mathbf{E}(\{v_i\}, \{h_j\}) + \mathbf{H}[\{v_i\}], \quad (23)$$

gdzie \mathbf{H} to hamiltonian.

Odwzrowowanie modeli teorii grupy renormalizacji w ograniczoną maszynę Boltzmann

- ▶ Możemy teraz pokazać, że hamiltonian $\tilde{\mathbf{H}}_\lambda[\{h_j\}]$ w modelu „gruboziarnistym” czyli

$$\exp(\tilde{\mathbf{H}}[\{h_j\}]) \equiv \sum_{\{\mathbf{v}_i\}} \exp((\mathbf{T}_\lambda(\{\mathbf{v}_i\}, \{\mathbf{h}_i\}) - \mathbf{H}[\{\mathbf{v}_i\}]), \quad (24)$$

opisuje również ukryte neurony w ograniczonej maszynie Boltzmann.

Odwzrowowanie modeli teorii grupy renormalizacji w ograniczoną maszynę Boltzmann

- Pokażemy teraz, że hamiltonian teorii grupy renormalizacji jest równoważny hamiltonianowi ograniczonego modelu Boltzmann:

$$\frac{\exp(\tilde{\mathbf{H}}\{h_j\})}{Z} = \frac{\sum_{\{v_i\}} \exp(-(\mathbf{T}_\lambda(\{v_i\}, \{h_j\}) - H[\{v_i\}]))}{Z}, \quad (25)$$

$$\frac{\exp(\tilde{\mathbf{H}}\{h_j\})}{Z} = \frac{\sum_{\{v_i\}} \exp(-\mathbf{E}(\{v_i\}, \{h_j\}))}{Z} = \sum_{\{v_i\}} p_\lambda(\{v_i\}, \{h_j\}) = p_\lambda(\{h_j\}) \quad (26)$$

podstawiając równanie:

$$p_\lambda(\{h_j\}) = \frac{\exp(-\mathbf{H}_\lambda^{RBM}[\{h_j\}])}{Z}. \quad (27)$$

Odwzrowowanie modeli teorii grupy renormalizacji w ograniczonej maszynie Boltzmann

- ▶ Otrzymujemy ostatecznie:

$$\tilde{\mathbf{H}}[\{h_j\}] = \mathbf{H}_\lambda^{RBM}[\{h_j\}] \quad (28)$$

- ▶ Warto zauważyć również, że w przypadku kiedy:

$$\tilde{\mathbf{H}}[\{v_i\}] = \mathbf{H}_\lambda^{RBM}[\{v_i\}] \quad (29)$$





to

$$D_{KL}(P(\{v_i\}) \parallel p_\lambda(\{v_i\})) = 0. \quad (30)$$

Podsumowanie i perspektywy

- ▶ Teoria grupy renormalizacji pozwala spojrzeć w nowy sposób na uczenie głębokie.
- ▶ W chwili obecnej wydaje się, że jest to na razie ogólny zarys postępowania i szukania analogii pomiędzy układami fizycznymi a sieciami głębokimi, niż gotowa do użycia teoria.
- ▶ Potencjalnie istnieją możliwości zastosowania innych narzędzi z teorii zjawisk krytycznych i przejść fazowych do badania sieci głębokich.

Dziękuję za uwagę

-  Mehta, Pankaj, and David J. Schwab. An exact mapping between the variational renormalization group and deep learning. arXiv preprint arXiv:1410.3831 (2014).
-  Kadanoff, Leo P., Anthony Houghton, and Mehmet C. Yalabik. "Variational approximations for renormalization group transformations." Journal of Statistical Physics 14.2 (1976): 171-203
-  WHY DEEP LEARNING WORKS II: THE RENORMALIZATION GROUP, <https://calculatedcontent.com/2015/04/01/why-deep-learning-works-ii-the-renormalization-group/>
-  Hinton, Geoffrey E. A practical guide to training restricted Boltzmann machines. Neural networks: Tricks of the trade. Springer, Berlin, Heidelberg, 2012. 599-619.