

Strojno učenje Hamiltoniana na konačnoj 2D rešetki

Dizajn 2D materijala s unaprijed određenim spektrom

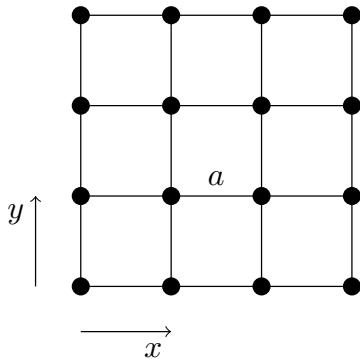
Antun Magdić
mentor: akademik Hrvoje Buljan

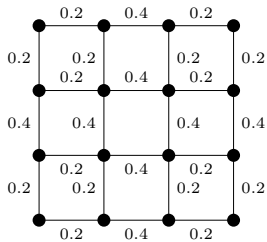
Sveučilište u Zagrebu
Prirodoslovno-matematički fakultet

Postavke problema

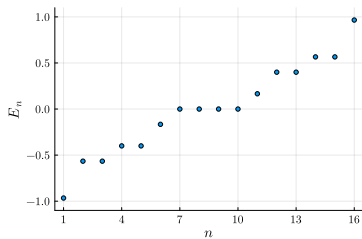
$$H = \sum_{\langle (x,y), (\xi,\eta) \rangle} t_{\{(x,y), (\xi,\eta)\}} (|\xi, \eta\rangle \langle x, y| + |x, y\rangle \langle \xi, \eta|)$$

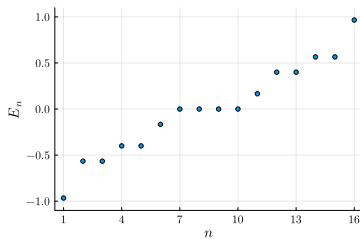
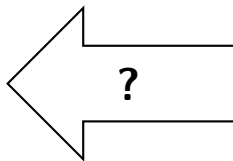
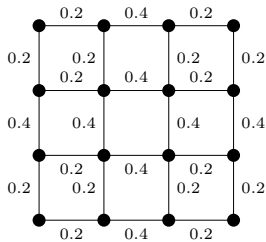
$$\Rightarrow \langle x, y | H | x, y \rangle = 0$$





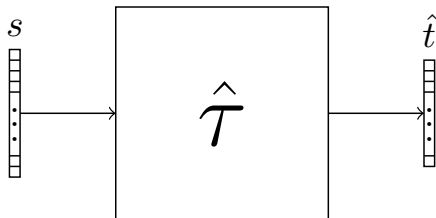
Dijagonalizacija





Rješenje: Neuronska mreža

- Neuronska mreža kao univerzalni aproksimator funkcija
- 1D slučaj (Xia et al., 2024)



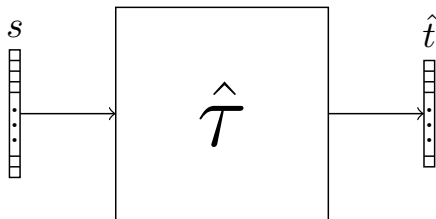
- $s \leftarrow$ spektar
- $\hat{t} \leftarrow$ preskoci

Učenje

- Skup podataka za učenje: (s_i, t_i)
- Učenje: minimiziramo funkciju pogreške na skupu za učenje
- Funkcija pogreške

$$\mathcal{L} = \sum_i d(t_i, \hat{\tau}(s_i))$$

⇒ Ne valja

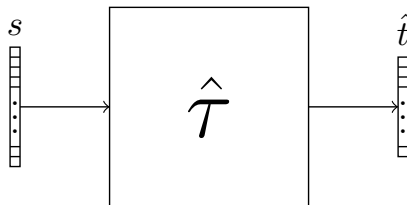


Učenje

- Isti spektar s može se dobiti za različite preskoke t
- Bolja funkcija pogreške

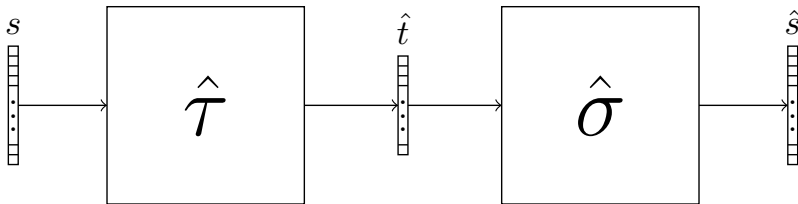
$$\mathcal{L} = \sum_i d(s_i, \sigma(\hat{\tau}(s_i)))$$

- σ se računa sporo i nije diferencijabilna
- Rješenje: naučiti drugu neuronsku mrežu $\hat{\sigma}$ da računa σ



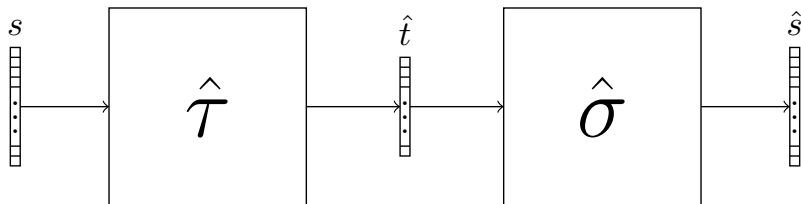
- Prvo učimo $\hat{\sigma}$
- Onda učimo $\hat{\tau}$, a $\hat{\sigma}$ koristimo u funkciji pogreške

$$\mathcal{L} = \sum_i d(s_i, \hat{\sigma}(\hat{\tau}(s_i)))$$



Učenje

- $\hat{\sigma}$ učimo na skupu podataka (s_i, t_i)
- $\hat{\tau}$ učimo na skupu podataka s'_i (nasumični spektri)
- Tako postizemo bolje rezultate na spektrima koje nije moguće savršeno aproksimirati
- $\hat{\tau}$ ne može dobro učiti ako $\hat{\sigma}$ ne radi dobro

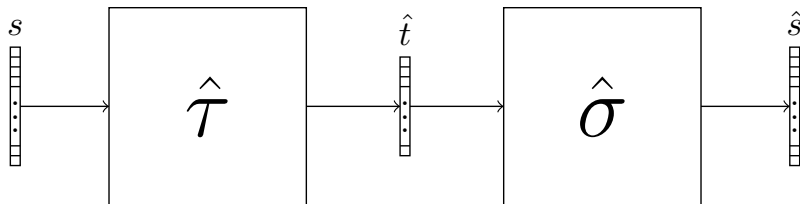


Učenje

- Za učenje koristimo

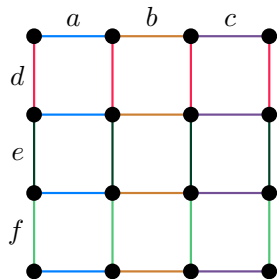
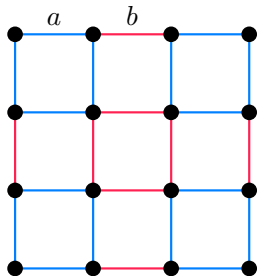
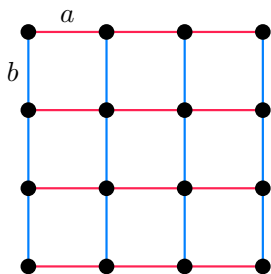
$$d(s, \hat{s}) = \frac{1}{(\max_i s_i)^2} \text{mse}(s, \hat{s})$$

- U skupu podataka moraju biti spektri na svim skalama
- $\hat{\tau}$ tijekom učenja može izbaciti svašta i $\hat{\sigma}$ mora biti spreman



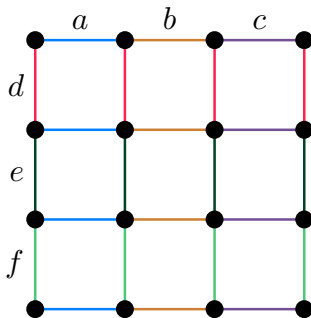
Parametrizacija Hamiltoniana

- Za pronalaženje jednostavnijeg modela smanjujemo broj parametara Hamiltoniana
- U pravilu korisnije i mnogo lakše za naučiti

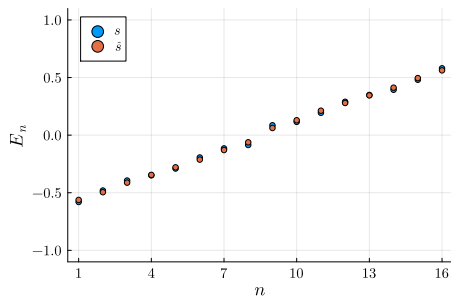
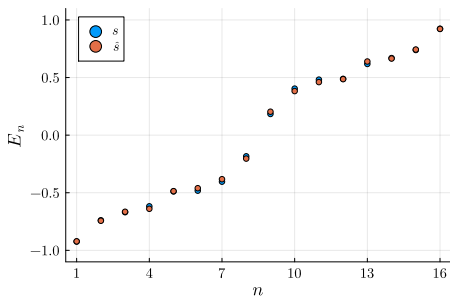


Primjer: 4×4 rešetka

- Veličine skrivenih slojeva
 $\hat{\sigma}$: 32, 32, 32, 16
 $\hat{\tau}$: 64, 128, 128, 128, 64, 32, 32
- Stopa učenja između 0.001 i 0.00001 (ručno namještena)
- Skup za učenje: 100000 primjera
- Pogreška na spektrima sa odabranom parametrizacijom: 0.006
- Pogreška na općenitim spektrima: 0.05



Primjer: 4×4 rešetka



Primjer: 4×4 rešetka

