

深度学习在物理学中的应用

1300017678 孙浩

指导老师： 林宙辰[†] 宋慧超^{*}

[†] 北京大学信息科学技术学院

^{*} 北京大学物理学院

2018 年 6 月 3 日



目 录

1 深度学习在 Ising Model 中的应用

- Ising Model 简介
- 使用 Hopfield 神经网络加速 MCMC
- 使用无监督学习方法重现物理规律
- 使用生成模型生成 Ising Model 自旋构型

2 深度学习在天文学中的应用

- 数据集介绍
- 无监督星系-恒星分类
- 无监督星系-恒星分割

3 深度学习与 MRI 影像处理

- PROMISE12 数据集简介
- 数据标准化方法与损失函数的选择
- 网络结构图与分割结果



目 录

1 深度学习在 Ising Model 中的应用

- Ising Model 简介
- 使用 Hopfield 神经网络加速 MCMC
- 使用无监督学习方法重现物理规律
- 使用生成模型生成 Ising Model 自旋构型

2 深度学习在天文学中的应用

- 数据集介绍
- 无监督星系-恒星分类
- 无监督星系-恒星分割

3 深度学习与 MRI 影像处理

- PROMISE12 数据集简介
- 数据标准化方法与损失函数的选择
- 网络结构图与分割结果



Ising Model 简介

- Ising Model 是统计物理学中被研究最广泛的几个基础模型之一，它在 1920 年被 Lenz 首次提出，由 Ising 进行计算。
- Ising Model 最初被用来研究磁性物质在磁场中的行为。是描述简单铁磁体的物理模型
- 在二维 Ising Model 中，考虑 $L \times L$ 的自旋粒子处在正方晶格中，每点的自旋方向为向上或向下，Ising Model 只考虑最近邻自旋间的相互作用，可以写出其哈密顿量

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - \mu B \sum_i s_i \quad (1)$$



目 录

1 深度学习在 Ising Model 中的应用

- Ising Model 简介
- 使用 Hopfield 神经网络加速 MCMC
- 使用无监督学习方法重现物理规律
- 使用生成模型生成 Ising Model 自旋构型

2 深度学习在天文学中的应用

- 数据集介绍
- 无监督星系-恒星分类
- 无监督星系-恒星分割

3 深度学习与 MRI 影像处理

- PROMISE12 数据集简介
- 数据标准化方法与损失函数的选择
- 网络结构图与分割结果



Metropolis 算法

Algorithm 1 MCMC 方法模拟 $L \times L$ Ising Model 自旋构型

Require: 模拟尺度 L , 重复采样次数 M

Ensure: 自旋构型

```
for each t in 0,1,2,...,M do
    for each i in 1,2,3,...,L*L do
        flip a spin randomly, calculate  $\Delta E = E_1 - E_0$ 
        if  $\Delta E < 0$  then
            accept the flip
        else
            if  $\exp(-\frac{\Delta E}{kT}) < \text{random}(0, 1)$  then
                reject the flip
            else
                accept the flip
            end if
        end if
    end for
end for
```



HMC 算法

Algorithm 2 异步更新算法 HMC 方法模拟 $L \times L$ Ising Model 自旋构型

Require: 模拟尺度 L , 重复采样次数 M

Ensure: 自旋构型

```

1: for each  $t$  in  $0,1,2,\dots,M$  do
2:   for each  $i$  in  $1,2,3,\dots,L^*L$  do
3:      $S_i(t+1) = \text{sign}(\sum_{j=1}^4 S_i S_j - T \cdot \ln \frac{1}{\text{random}(0,1)}) \cdot S_i(t)$ 
4:   end for
5: end for

```

Algorithm 3 同步更新方法模拟 $L \times L$ Ising Model 自旋构型

Require: 模拟尺度 L , 重复采样次数 M

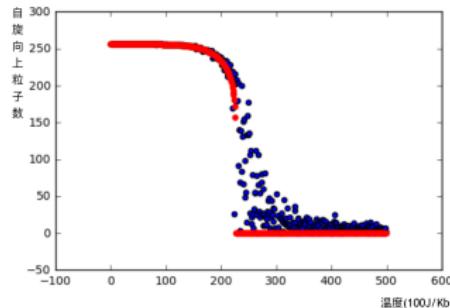
Ensure: 自旋构型

```

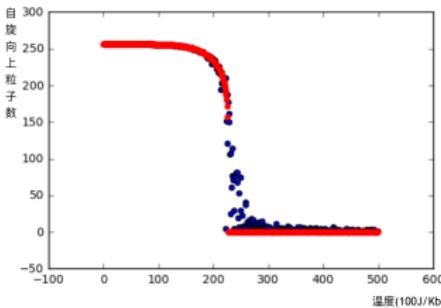
1: for each  $t$  in  $0,1,2,\dots,M$  do
2:   for all  $i$  in  $L^*L$  configuration do
3:      $S_i(t+1) = \text{sign}(\sum_{j=1}^4 S_i S_j - T \cdot \ln \frac{1}{\text{random}(0,1)}) \cdot S_i(t)$ 
4:   end for
5: end for

```

MCMC 与 HMC 方法的模拟结果对比



(a) MCMC, 1e3 steps, MSE=827, time=4191s



(b) HMC-P2, 1e3 steps, MSE=461, time=2017s

图 1: MCMC 与 HMC-P2 的结果对比

	Iteration Steps	Time / s	MSE
(1)MCMC	1000	297	272
(2)HMC	4000	311	133
(3)HMC	1000	77	197
(4)HMC-P2	2500	284	127
(5)HMC-P2	1000	111	143
(6)HMC-P2	10	1.13	294

表 1: MCMC、HMC 与 HMC-P2 的结果对比



目 录

1 深度学习在 Ising Model 中的应用

- Ising Model 简介
- 使用 Hopfield 神经网络加速 MCMC
- 使用无监督学习方法重现物理规律
- 使用生成模型生成 Ising Model 自旋构型

2 深度学习在天文学中的应用

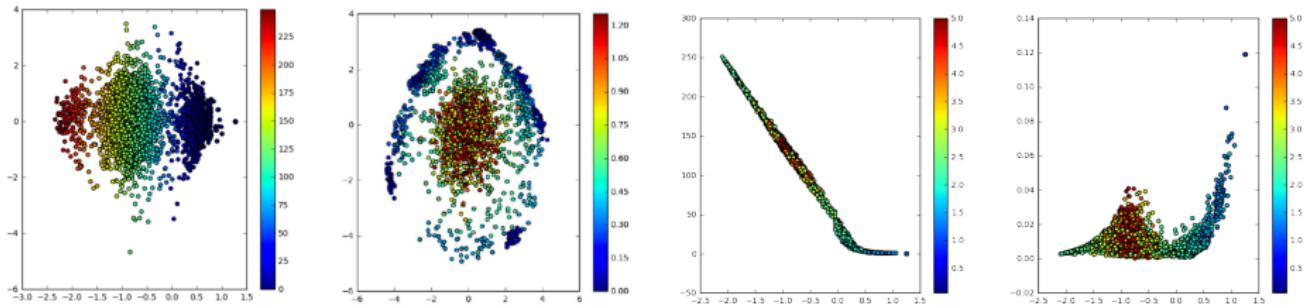
- 数据集介绍
- 无监督星系-恒星分类
- 无监督星系-恒星分割

3 深度学习与 MRI 影像处理

- PROMISE12 数据集简介
- 数据标准化方法与损失函数的选择
- 网络结构图与分割结果



使用无监督方法寻找 Ising Model 序参量



(a) 2D-Ising model 的隐变量 (b) 2D-XY model 的隐变量 (c) Ising Model 隐变量与磁矩对比 (d) Ising Model 隐变量的方差信息

图 2: 无监督学习的结果

结论

一些统计物理学的知识可以被无监督学习方法习得。在没有加入人为先验知识的情况下，生成模型重新发现了物理学的定律。

目 录

① 深度学习在 Ising Model 中的应用

- Ising Model 简介
- 使用 Hopfield 神经网络加速 MCMC
- 使用无监督学习方法重现物理规律
- 使用生成模型生成 Ising Model 自旋构型

② 深度学习在天文学中的应用

- 数据集介绍
- 无监督星系-恒星分类
- 无监督星系-恒星分割

③ 深度学习与 MRI 影像处理

- PROMISE12 数据集简介
- 数据标准化方法与损失函数的选择
- 网络结构图与分割结果



使用 VAE 生成 Ising Model 自旋构型

VAE 的损失函数通常定义：

$$L_{\text{VAE}} = \| X_{\text{in}} - X_{\text{out}} \|^2 + D_{\text{KL}}(P(V), \mathcal{N}(0, I)) \quad (2)$$

最简单的生成方法为使用 VAE 进行生成，此时会发生较为显著的模式塌缩现象

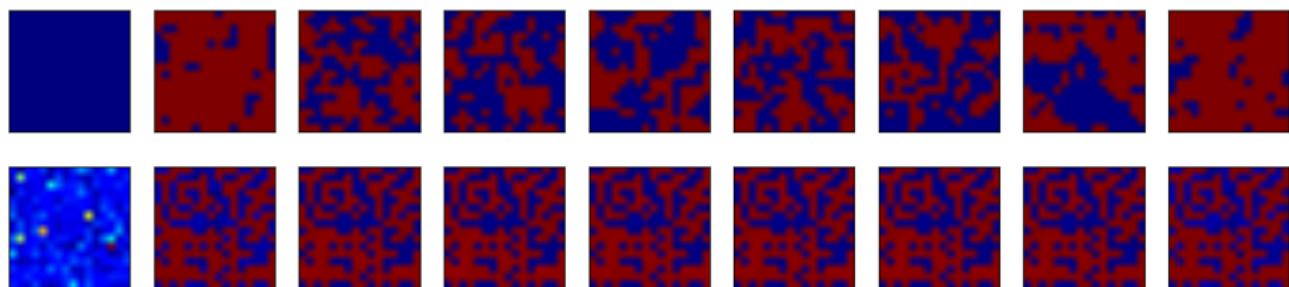


图 3: VAE 生成的自旋构型图样

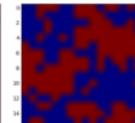
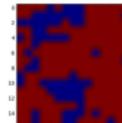
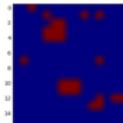
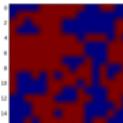
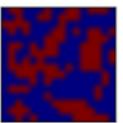
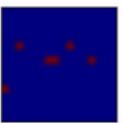
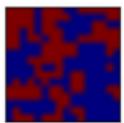
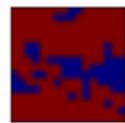


使用 Actor-Critic 网络生成 Ising Model 自旋构型

使用 Actor-Critic 网络，损失函数被修改为如下所示：

$$L_{\text{Actor}} = \| \text{CriticNet}(X_{\text{in}}) - \overline{\text{CriticNet}(\text{Scale}(X_{\text{out}}))} \|^2 \quad (3)$$

这样的损失函数有助于生成任务的优化，生成的同等大小与扩大规模的图像如下图所示：



(a) AC-net 生成同样尺度自旋构型

(b) AC-net 实现规模扩增

图 4: Actor-Critic 网络生成的结果



目 录

1 深度学习在 Ising Model 中的应用

- Ising Model 简介
- 使用 Hopfield 神经网络加速 MCMC
- 使用无监督学习方法重现物理规律
- 使用生成模型生成 Ising Model 自旋构型

2 深度学习在天文学中的应用

- 数据集介绍
- 无监督星系-恒星分类
- 无监督星系-恒星分割

3 深度学习与 MRI 影像处理

- PROMISE12 数据集简介
- 数据标准化方法与损失函数的选择
- 网络结构图与分割结果



数据集介绍

本研究中使用的数据集为 SDSS 数据集，包含了带标签的数据集 A 和无标签的数据集 B

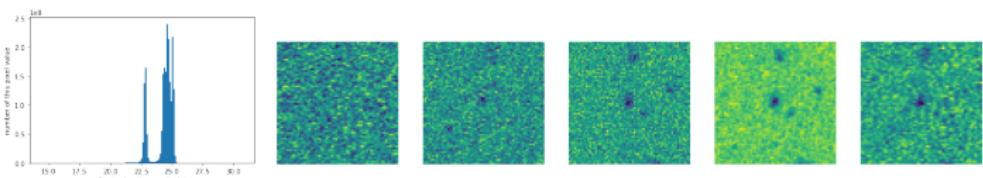
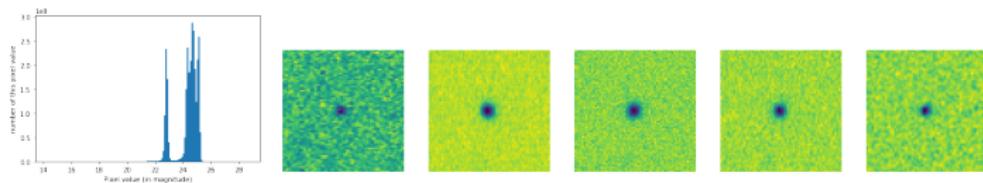


图 5: 两数据集的对比



目 录

1 深度学习在 Ising Model 中的应用

- Ising Model 简介
- 使用 Hopfield 神经网络加速 MCMC
- 使用无监督学习方法重现物理规律
- 使用生成模型生成 Ising Model 自旋构型

2 深度学习在天文学中的应用

- 数据集介绍
- 无监督星系-恒星分类
- 无监督星系-恒星分割

3 深度学习与 MRI 影像处理

- PROMISE12 数据集简介
- 数据标准化方法与损失函数的选择
- 网络结构图与分割结果



修改 VAE 中的 KL 距离项

通常的 VAE 模型带有高斯先验，从而有助于生成模型中采样过程的进行，让模型生成更加真实的图片。但这样的先验在进行分类任务时并不能带来帮助。在二分类任务中，为了将不同类别的图片在隐层中尽可能地分开，应当使用更有助于分类的先验：

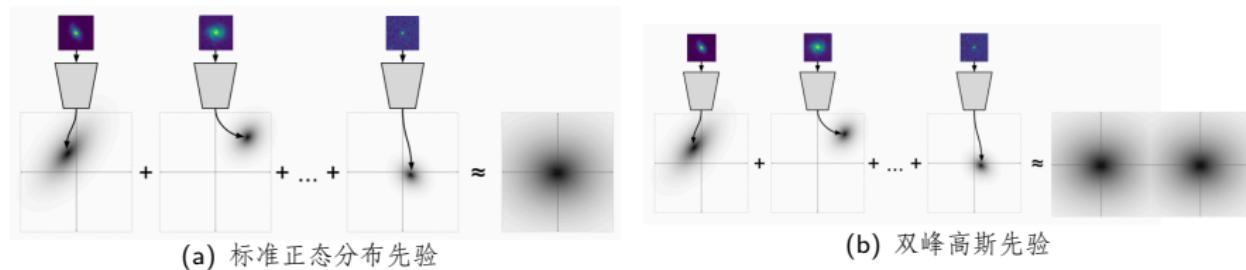


图 6: 不同先验时对应的 VAE 隐空间分布

这里，选用了双峰高斯先验

$$Q(V) \sim \frac{1}{2} N(-m, s^2) + \frac{1}{2} N(m, s^2) \quad (4)$$



一种分层设计的无监督分类网络

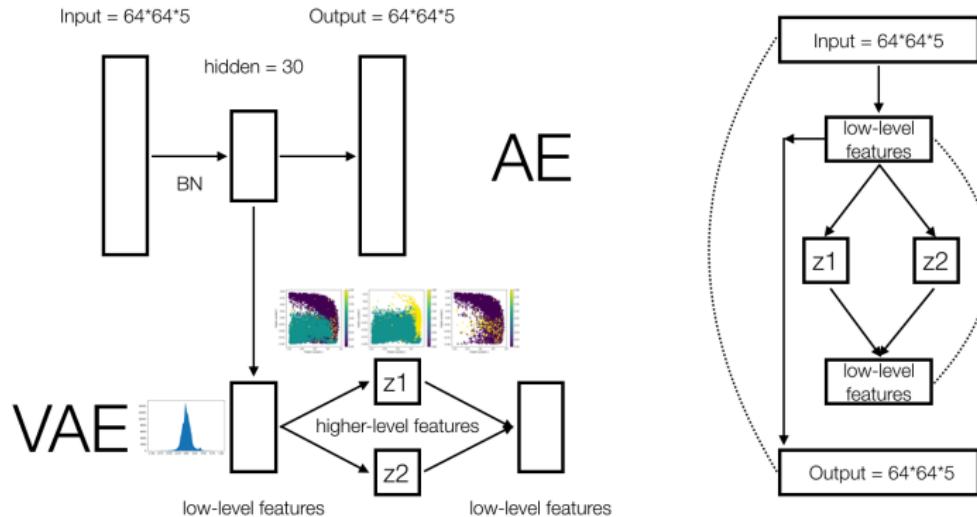


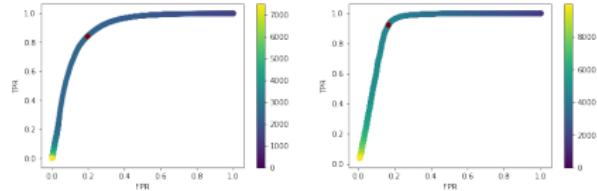
图 7: 网络结构图



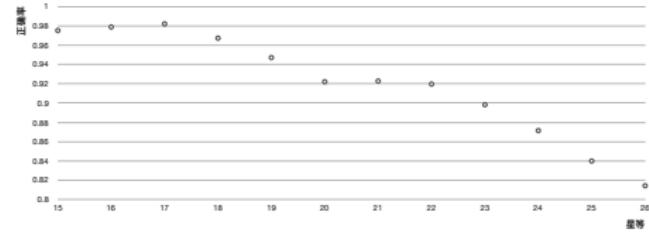
分类任务结果

Method	mean	Highest	Lowest	Std	repeat time
VAE + Manifold Learning	0.76	0.89	0.56	0.1	10
AE+VAE with revised KLD	0.90	0.91	0.90	0.002	100

表 2: 不同方法下的 AUC 对比



(a) Vae+Manifold Learn-
ing: AUC=0.89
(b) AE+VAE with revised
KLD:AUC=0.91



(c) 不同星等对应的正确率

图 8: 分类结果

结论

在分层设计的网络结构下，分类结果的 AUC 比传统使用 VAE+ 流形学习方法得到了明显的提升。且分类性能稳定，在标准差方面也远小于传统方法。得到的分类正确率约为 91%

目 录

1 深度学习在 Ising Model 中的应用

- Ising Model 简介
- 使用 Hopfield 神经网络加速 MCMC
- 使用无监督学习方法重现物理规律
- 使用生成模型生成 Ising Model 自旋构型

2 深度学习在天文学中的应用

- 数据集介绍
- 无监督星系-恒星分类
- 无监督星系-恒星分割

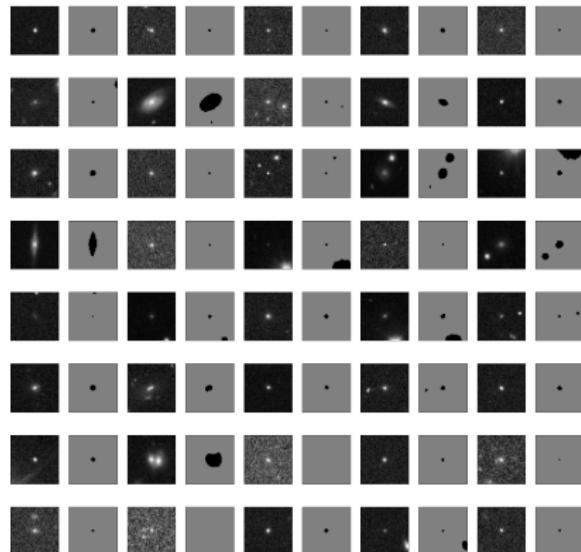
3 深度学习与 MRI 影像处理

- PROMISE12 数据集简介
- 数据标准化方法与损失函数的选择
- 网络结构图与分割结果

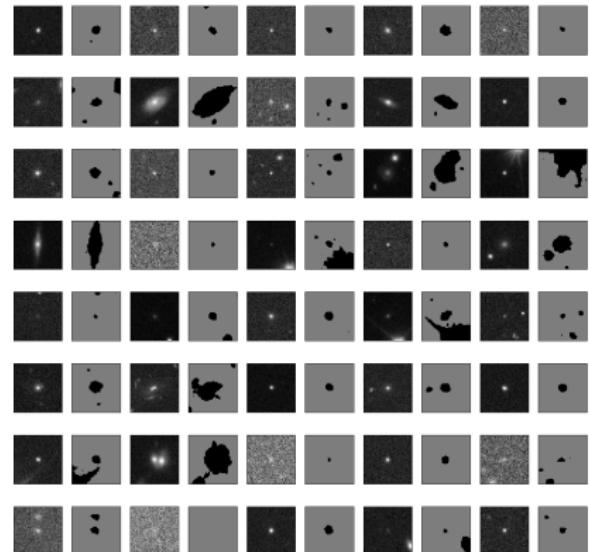


无监督星系-恒星分割

使用 AE 为基础的神经网络框架，结合 Hypercolumns 算法进行无监督的恒星-星系前景背景分割任务。使用残差连接的方法实现不同敏感度的分割结果，进行对比如下：



(a) AE + Hypercolumns



(b) AE + residual connection + Hypercolumns

图 9：分割任务结果



分类结果与分割结果的整合

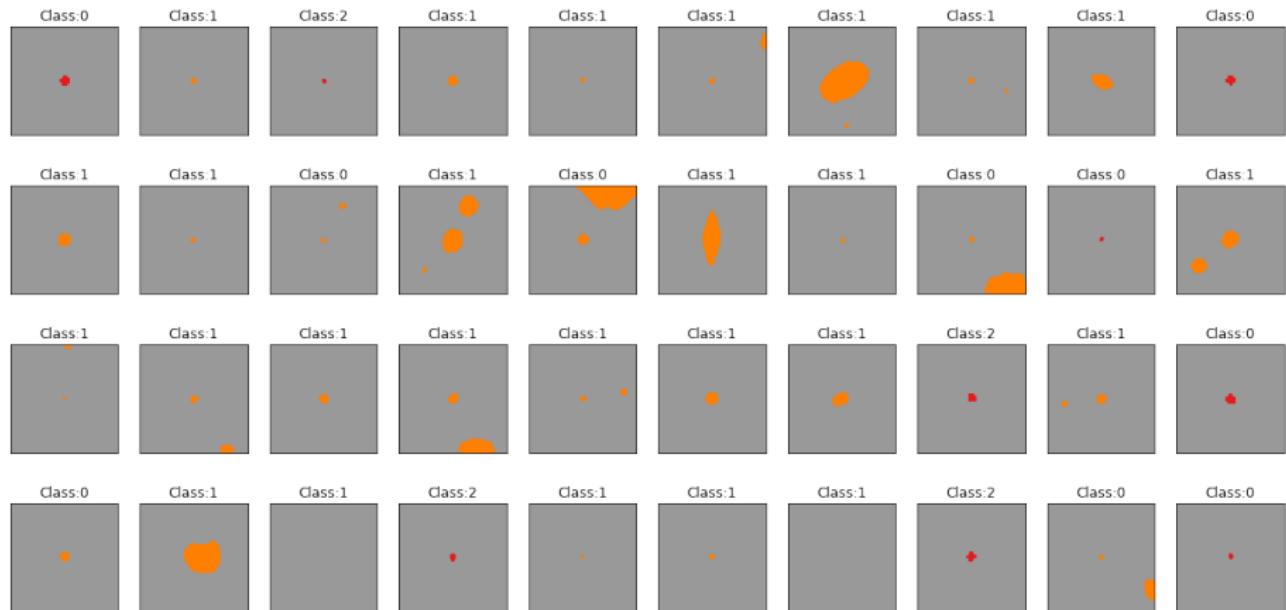


图 10: 无监督方法下的分割与分类结果



目 录

1 深度学习在 Ising Model 中的应用

- Ising Model 简介
- 使用 Hopfield 神经网络加速 MCMC
- 使用无监督学习方法重现物理规律
- 使用生成模型生成 Ising Model 自旋构型

2 深度学习在天文学中的应用

- 数据集介绍
- 无监督星系-恒星分类
- 无监督星系-恒星分割

3 深度学习与 MRI 影像处理

- PROMISE12 数据集简介
- 数据标准化方法与损失函数的选择
- 网络结构图与分割结果



PROMISE12 数据集简介

PROMISE12 挑战赛是至今仍然活跃的一项前列腺 MRI 影像分割竞赛

- 训练集: 50 张 3D MRI 影像以及其中前列腺区域的分割标签
- 测试集: 30 张 3D MRI 影像, 无标签

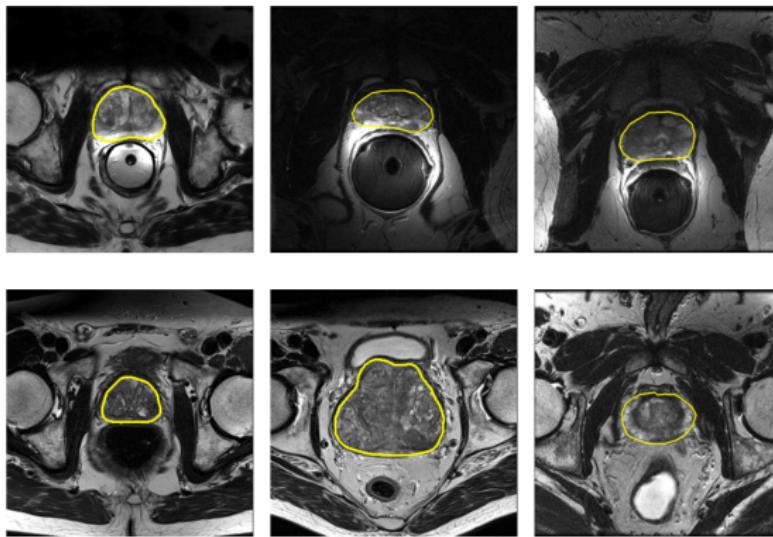


图 11: 样例图片



目 录

① 深度学习在 Ising Model 中的应用

- Ising Model 简介
- 使用 Hopfield 神经网络加速 MCMC
- 使用无监督学习方法重现物理规律
- 使用生成模型生成 Ising Model 自旋构型

② 深度学习在天文学中的应用

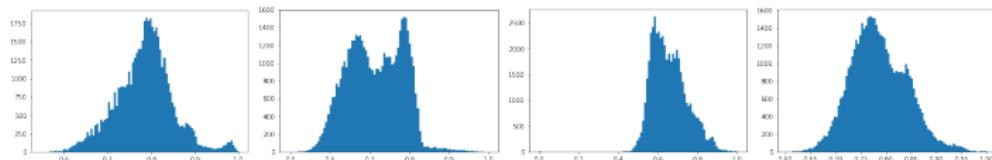
- 数据集介绍
- 无监督星系-恒星分类
- 无监督星系-恒星分割

③ 深度学习与 MRI 影像处理

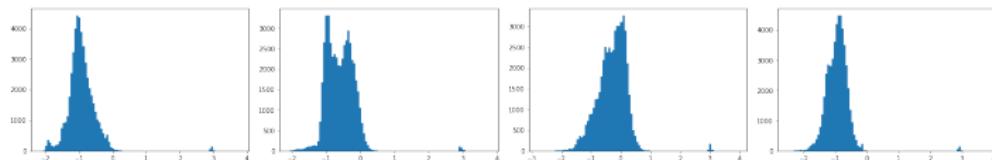
- PROMISE12 数据集简介
- 数据标准化方法与损失函数的选择
- 网络结构图与分割结果



数据标准化方法与损失函数



(a) 进行 0-1 标准化后的图像像素频数分布直方图



(b) 使用带有 BN 的 CNN 进行标准化后的图像像素频数分布直方图

图 12: 不同标准化方法对应的图像像素频数分布直方图

实验中，考虑到背景与前景图案比例的失衡问题，使用 Dice Coefficient(DSC) 作为损失函数

$$D = \frac{2 \sum_i^N p_i g_i}{\sum_i^N p_i^2 + \sum_i^N g_i^2}$$



目 录

① 深度学习在 Ising Model 中的应用

- Ising Model 简介
- 使用 Hopfield 神经网络加速 MCMC
- 使用无监督学习方法重现物理规律
- 使用生成模型生成 Ising Model 自旋构型

② 深度学习在天文学中的应用

- 数据集介绍
- 无监督星系-恒星分类
- 无监督星系-恒星分割

③ 深度学习与 MRI 影像处理

- PROMISE12 数据集简介
- 数据标准化方法与损失函数的选择
- 网络结构图与分割结果



网络结构图

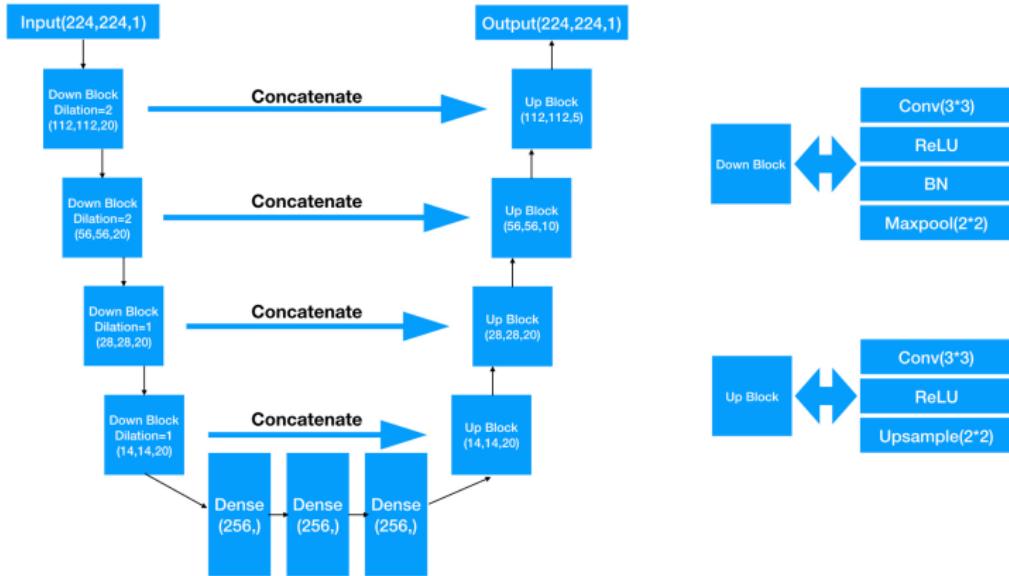


图 13: 网络结构图 (以四层网络为例)



分割结果

layers	down kernels	up kernels	dilation	residual	DSC	DSC(BN)
4	20,20,20,20	20,10,5,1	2,2,1,1	conv1-4	0.755	0.7899
4	20,20,20,20	20,20,10,5,1	2,2,1,1	conv1-4	0.7789	0.8257
5	20,20,20,20,20	20,10,10,10,5,1	2,2,1,1	conv1-4	0.7512	0.8455
5	20,20,20,20,20	20,10,10,10,5,1	2,2,1,1	conv1-5	0.762	0.8383
5	20,20,20,20,20	20,10,10,5,5,1	2,2,1,1	conv1-5	0.729	0.7939
5	20,20,20,20,20	20,10,10,10,5,1	2,2,2,1	conv1-5	0.755	0.7994
5	40,40,20,20,20	20,20,20,20,10,1	2,2,1,1	conv1-4	0.762	0.8318
5	20,20,20,20,20	20,10,10,10,10,1	2,2,1,1	conv1-5	0.7601	0.8197

表 3: 不同超参数设定下的网络表现

结论

面对训练数据集小，数据来源不同的挑战，本研究中提出了使用带有 BN 的 CNN 进行数据标准化的方法，在这种方法下，使用 DSC 作为损失函数的网络在训练时有更高的稳定性，也得到了更加的表现，在 DSC 指标上得到了 0.04-0.09 的提升。

