

# 机器学习在光谱分析、材料相变中的应用 未知目标检测 论文阅读报告

报告人：宋明辉

HPCL

April 14, 2018

# 报告内容

- 1 机器学习在光谱分析、材料相变中的应用
- 2 未知目标检测

# 报告说明

在这一部分，将省略物理背景，而将关注以下几点：

- 实验目的
- 应用背景及输入的数据格式 (而不关注数据产生背后的物理原理)
- 用到的算法
- 结果

[1] Ueno, T. etc. 2018. Adaptive design of an X-ray magnetic circular dichroism spectroscopy experiment with Gaussian process modelling. npj Computational Materials

[2] Li, L.etc. 2018. Machine learning-enabled identification of material phase transitions based on experimental data: Exploring collective dynamics in ferroelectric relaxors. Science Advances

- 1 机器学习在光谱分析、材料相变中的应用
  - 利用 Gaussian Process Modelling 生成连续 XMCD 光谱
  - 基于机器学习算法分析材料的相变
  - 小结
  
- 2 未知目标检测
  - 未知目标检测与 Zero-shot Learning
  - Unseen Class Discovery
  - Recent Advances in ZSL
  - 相关文献

## 摘要 (目的)

- 借助 Gaussian Process(GP) Regression, 利用少量光谱数据点预测完整连续的光谱, 分析材料的磁矩 (Magnetic Moments)
- 减少试验次数, 提高效率

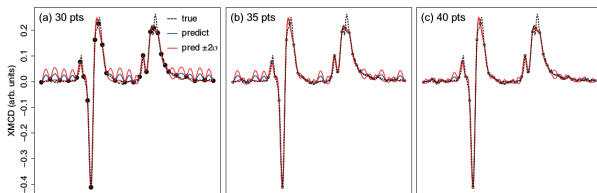


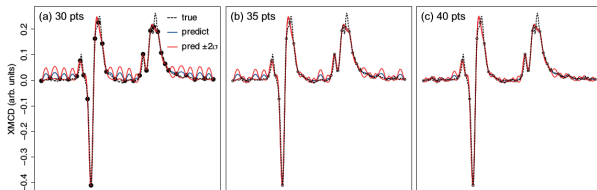
Fig. 1 : 示意图

图中, Black Dashed: 真实的光谱数据; Blue Solid: GP 的预测结果; Black filled circles: 用到的数据点; Red Solid: 预测波形的  $\pm 2\sigma$  置信区间.

## 背景

为了得到材料的光谱图进行分析，  
**传统的做法：**

- 利用大量不同波长 Wavelength 或能量 (Energy) 的 X 射线对材料进行扫描 (Point by Point Scanning)，得到满足信噪比要求的光谱图<sup>1</sup>。
- 实验测量 (Measurement) 与分析 (Analysis) 是分离的



<sup>1</sup>与 Wavelength 或 Energy 成非线性关系

## 实验手段对比

为了得到材料的光谱图进行分析，

**传统的做法：**

- 利用大量不同波长 Wavelength 或能量 (Energy) 的 X 射线对材料进行扫描 (Point by Point Scanning)，得到满足信噪比要求的光谱图<sup>2</sup>。
- 实验测量 (Measurement) 与分析 (Analysis) 是分离的

**论文提出的解决思路：**

- 初始化
  - 在  $S_m M_{4,5}$  吸收谱的 Pre-edge、Post-edge 之间均匀采样 (30 个)
  - 在峰值附近采样
- 采样新的数据点  
若初始化中得到的数据点不满足需要，则重新进行采样。
- 利用 GP 对离散的采样点进行插值回归，得到连续的图谱

<sup>2</sup>与 Wavelength 或 Energy 成非线性关系

## 新的测量方式

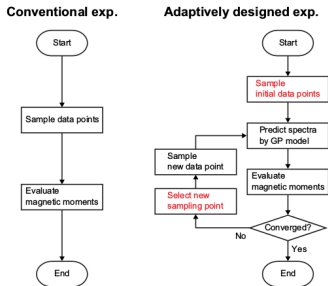


Fig. 2: 对比图

注意，判断算法的有效性是通过计算磁矩来确定的，而不是预测完全正确的光谱。

与传统的测量方式相比，优势在于：

- 依靠高效的采样、GP 回归策略，降低了所需的数据采样点。Initial data points 只需要 30 个

采样策略同样对结果具有较大的影响。在 Select new sampling point 中用的策略：

- 最大方差采样
- 随机采样
- 以方差为权重的随机采样



## 几种采样类型的实际表现

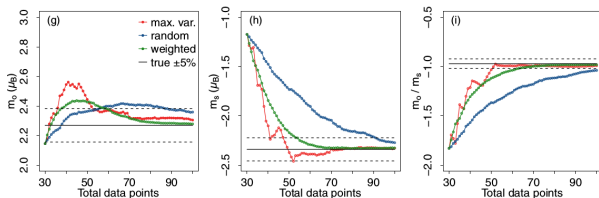


Fig. 3：三类采样方式的实验效果

可以看出，**最大方差采样**效果最好，收敛速度最快。

## 具体算法

- 实验设置
  - $S_mC_{o_5}$  的 XMCD(X-ray Magnetic Circular Dichroism) 以及 XAS(X-ray Absorption Spectrum) 光谱
  - $FeC_o$  合金的上述光谱
- Magneto-optical sum rules

对 XMCD 与 XAS 光谱应用 Magneto-optical Sum Rules 可以得到材料的磁矩: Orbital Magnetic Moment( $m_o$ ), Spin Magnetic Moment( $m_s$ )
- GP 产生连续光谱

## GP 回归算法 --模型

- 模型

构建输入与输出的关系。

$$y(x_i) = \mu + z(x_i), i \in 1, \dots, n$$

其中,  $x_i$  为 Energy(或波长),  $y(x_i)$  为对应的输出, 即光谱。在高斯模型中,  $z(x_i)$  为正态分布:  $z(x_i) \sim \text{Norm}_x(0, \sigma^2 R_{ij}), R_{ij}$  为高斯相关函数  $R_{ij} = \exp(-\theta |x_i - x_j|^2)$ , 最终得到  $Y$  符合多元高斯分布:

$$Y \sim \text{Norm}_Y(\mathbf{1}_n \mu, \sigma^2 R)$$

- 学习

利用最大似然法确定模型中的参数  $\theta$ 。

- 推理

对于新得到的数据进行预测。

## GP 回归算法 -- 学习与推理

- 学习

最大化似然法计算  $\hat{\theta}$ :

$$\hat{\theta} = \operatorname{argmin}_{\theta} \log[\Pr(Y|X, \theta)]$$

- 推理

利用学习得到的  $\hat{\theta}$ , 进行预测:

$$\hat{y}(x^*) = \hat{\mu} + r^T R^{-1} (Y - \mathbf{1}_n \hat{\mu})$$

Figure 3 consists of three subplots labeled (a), (b), and (c), each showing the evolution of a normalized mass moment versus the total number of data points (ranging from 30 to 100). The legend for all plots is: Gaussian (red line with '+' markers), Exp. (p=1) (blue line with '+' markers), Matérn (k=0.5) (green line with '+' markers), Matérn (k=1) (cyan line with '+' markers), Matérn (k=1.5) (magenta line with '+' markers), Matérn (k=2) (purple line with '+' markers), and true (black horizontal line).

- (a)  $m_1 / (m_0 l)$  vs. Total data points:** The y-axis ranges from 2.0 to 3.0. The true value is a horizontal line at approximately 2.3. The Gaussian model converges quickly to this value. The exponential model converges more slowly. The Matérn models converge to the true value, with higher  $k$  values converging faster.
- (b)  $m_2 / (m_0 l^2)$  vs. Total data points:** The y-axis ranges from -3.0 to 0.0. The true value is a horizontal line at approximately -2.5. The Gaussian model converges quickly. The exponential model converges slowly. The Matérn models converge to the true value, with higher  $k$  values converging faster.
- (c)  $m_3 / (m_0 l^3)$  vs. Total data points:** The y-axis ranges from -4 to 0. The true value is a horizontal line at -1.0. The Gaussian model converges quickly. The exponential model converges slowly. The Matérn models converge to the true value, with higher  $k$  values converging faster.

- 通过在少量 Energy 得到的离散光谱点，利用 GP 回归算法得到连续的光谱图，然后进行磁矩分析，提高了实验效率
- 在进行 GP 计算时，可以进一步借助一些近似算法来加快计算。

- 预测的光谱图与实际光谱图之间还是有差距，只不过满足了后续的磁矩分析要求的精度
- 可进一步提高收敛速度

## 1 机器学习在光谱分析、材料相变中的应用

- 利用 Gaussian Process Modelling 生成连续 XMCD 光谱
- 基于机器学习算法分析材料的相变
- 小结

## 2 未知目标检测

- 未知目标检测与 Zero-shot Learning
- Unseen Class Discovery
- Recent Advances in ZSL
- 相关文献

## 摘要 (目的)

- 利用机器学习算法，在序参量<sup>3</sup>未知的情况下，得到材料的纳米尺度的结构相变图，以及临界区 (Critical Regimes) 及相界 (Phase Boundaries) 等。

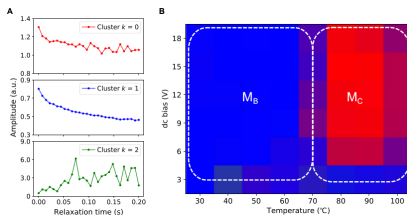


Fig. 4: 示意图

<sup>3</sup>相变临界点的一个物理量，如温度、电压等

## 背景

### 相变 (Phase Transition):

- 研究相变，有助于研究相变临界区发生的磁极系数 (Susceptibility) 的增强 (Enhancement)
- 相变可由序参数 (Order parameter) 表征
- 对于纳米尺度的结构，序参数的确定是十分复杂的，无论是理论研究还是实验研究，均是如此
- 可以利用机器学习自动生成特征 (Feature) 代替不可测量 (Unmeasurable。或未知 Unknown) 的序参数

### 测量装置:

- Piezoresponce Force Microscopy(PFM), 可以测量纳米尺度下 Piezoresponce 效应, 序参数未知
- 材料: PMN-27.5PT Crystals



## 实验步骤

- **开始:**  
测量 2D Ising System 的参数: Ferromagnetic(逆磁性)-to-Paramagnetic(顺磁性) 的相变、比热容。自由度 (DoF) 已知
- **施加电场**  
对应于不同的电场强度, 测量若干个 “Relaxation Curves”:  
 $A = A_1, A_2, \dots, A_n, A_i \in R^d$ ,  $n=100$  为 Curves 的数量,  $d=28$  为维度、等于测量次数 (number of time steps)。此时 DoF 未知
- **改变温度**  
对应每一个电场强度, 测试八种不同的温度。所以共:  $100 * 8$  个松弛曲线
- **利用 K-means 对上述 Curves 进行聚类**  
类别数  $k$  由人为输入, 试验中,  $k = 3$

## 用到的机器学习算法 --PCA

试验中，共设置了  $n=100$  个不同的电场强度，对应于每一个电场强度是维度  $d=28$  的一维向量，表征在  $d$  个不同时间点测量得到的数据；同时，试验中进一步设置了 8 个不同的温度。因此，得到的输入数据为一个  $800 \times 28$  的矩阵。

- PCA

对输入矩阵  $M$  进行 SVD 分解

$$M = USV^T$$

矩阵  $V$  中每一列为  $M$  的奇异向量，其对应的奇异值降序排列，在分析实验数据时，基于  $V$  的前若干列(主成份)进行分析相变情况。示意图见下页。

## 实验结果 --PCA

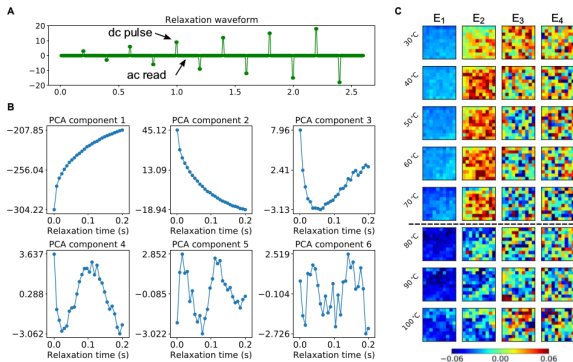


Fig. 5 : PCA 结果

从图 c 中可以看出，前两个最大的奇异值在  $70^{\circ}\text{C}$  与  $80^{\circ}\text{C}$  之间变化较大，意味着相变发生。

## 用到的机器学习算法 --K Means

### PCA 算法的缺点:

- 缺少物理解释
- 在辨别不同相 (Phase) 时, 特征值较小但比较重要的成份被忽略

### 改进 (使用 K-means):

$$\operatorname{argmin} \sum_{j=1}^k \sum_{A \in S_j} \|A - \mu_j\|^2$$

其中,  $A$  为输入的 28 维向量, 代表一个测量曲线,  $\mu_j$  为第  $j$  类的中心,  $S_j$  为属于第  $j$  类的向量的集合。

- 使用所有数据, 而不像 PCA 那样仅使用少数数据
- 每一类中心对应与材料的一种“相”(Phase)

## 实验结果 --K Means

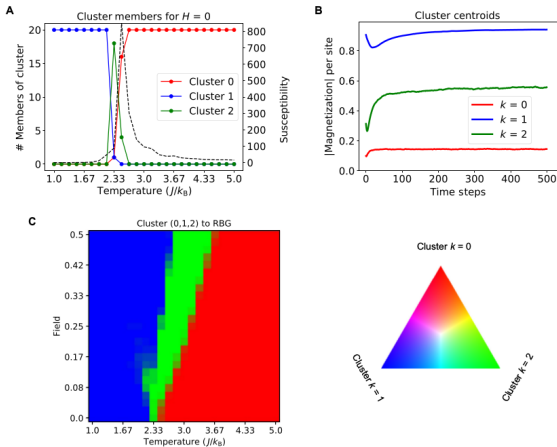


Fig. 6 : K-Means 结果

## 优势与不足

- **优势:**

- 基于实验数据，可自动生成相变图，而无需复杂的计算序参数
- 算法较简单

- **不足:**

- 需要人为输入聚类数，即  $k$

## 1 机器学习在光谱分析、材料相变中的应用

- 利用 Gaussian Process Modelling 生成连续 XMCD 光谱
- 基于机器学习算法分析材料的相变
- 小结

## 2 未知目标检测

- 未知目标检测与 Zero-shot Learning
- Unseen Class Discovery
- Recent Advances in ZSL
- 相关文献

# 机器学习在材料相变、光谱分析中的应用两篇论文小结

这两个实验：

- 体现了在两个方面的应用：

- 改进实验手段 (如降低光谱图生成过程中所需的数据点 (Scanning points))
- 帮助实验结果的数据分析

- 具有以下特点：

- 用到的机器学习算法都比较简单，如 K-Means, PCA, 高斯回归等
- 提高了实验效率



- ① 机器学习在光谱分析、材料相变中的应用
  - 利用 Gaussian Process Modelling 生成连续 XMCD 光谱
  - 基于机器学习算法分析材料的相变
  - 小结
  
- ② 未知目标检测
  - 未知目标检测与 Zero-shot Learning
  - Unseen Class Discovery
  - Recent Advances in ZSL
  - 相关文献

# 未知目标检测与 Zero-shot Learning

文章 [1] 中对 Zero-shot Learning (ZSL) 的解释:

*ZSL aims to recognize an object instance from a new category **never seen** before.*

*The task of identifying classes without any observed data is called ZSL.*

*\*\* The ZSL can be considered a type of life-long learning. ... This ability is termed "learning to learn".*

文章 [2] 中对未知目标检测的叙述:

*... This situation calls for open-world classification or simply open classification which can classify those examples from the seen classes and also detect/reject examples from unseen or novel classes.*

# 未知目标检测

## Unseen Class Discovery in Open-world classification

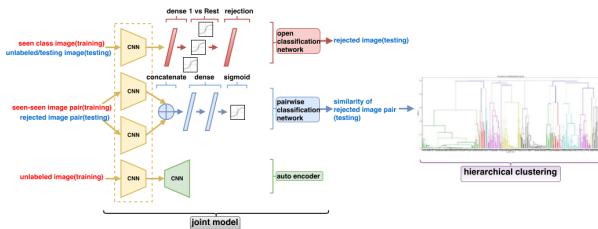


Fig. 7: 示意图

由四部分组成: Open Classification Network(OCN), Pairwise Classification Network(PCN), Auto-encoder, Hierarchical clustering

## 算法细节

- OCN:  
结构：一层卷积 + 最大池化层 + 两层全连接 + ReLU + 1-vs-rest layer  
主要通过 1-vs-rest 层实现未知目标检测，以  $m$  个 sigmoid 函数 + 阈值的方式实现
- PCN:  
判断一对目标是否属于同一类
- Auto-encoder  
对未知目标生成表示
- Hierarchical clustering  
对未知目标 (Rejected object) 进行聚类学习。

# Recent Advances in ZSL

## Recent Advances in Zero-shot Recognition.

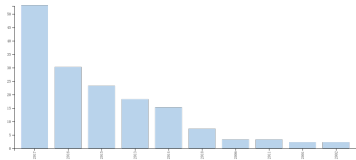


Fig. 8: 相关文章数, 关键字: Zero shot learning

- 基本框架  
借助语义的帮助, 进行识别。步骤:
  - 基于 Embedding Model 建立目标 (包括已知与未知) 与语义之间的映射关系
  - 基于 Recognition 模块判断目标是否为未知

文章分别对上述两个步骤进行了综述。[4] 与 [3](CVPR2018 Oral) 基本符合这个框架。

## References I

-  Yanwei Fu, etc. *Recent Advances in Zero-shot Recognition*. [arXiv:1710.04837](#), 2017.
-  Lei Shu, Hu Xu, Bing Liu. *Unseen Class Discovery in Open-world Classification*. [arXiv:1801.05609](#), 2018.
-  Xiaolong Wang, Yufei Ye, Abhinav Gupta. *Zero-shot Recognition via Semantic Embedding and Knowledge Graphs*. [arXiv:1803.08035](#), 2018.
-  Yan Li, etc. *Discriminative Learning of Latent Features for Zero-Shot Recognition*. [arXiv:1803.06731](#), 2018.
-  Chen Zhiyuan, Bing Liu. *Lifelong machine learning*. Synthesis Lectures on Artificial Intelligence and Machine Learning, 2016.

请各位老师、同学批评指正！