



I POMORSKA UCZNIOWSKA
KONFERENCJA NAUKOWA
„ZDOLNI Z POMORZA”

SZTUCZNA INTELIGENCJA

Nadzieje, wyzwania,
perspektywy

Materiały z naukowej konferencji uczniowskiej

Gdańsk, 18 listopada 2017

Urząd Marszałkowski Województwa Pomorskiego
Pedagogiczna Biblioteka Wojewódzka w Gdańsku

Wydawnictwo
bernardinum

2018

Konferencja zorganizowana przez Samorząd Województwa Pomorskiego we współpracy z Pedagogiczną Biblioteką Wojewódzką w Gdańsku i Politechniką Gdańską

Materiał współfinansowany ze środków Unii Europejskiej w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego

Egzemplarz bezpłatny

Komitet redakcyjny
dr Grzegorz Stunża
mgr Arkadiusz Działoszewski
mgr inż. Dorota Martynow
mgr inż. Aleksander Mroziński
mgr inż. Krzysztof Zagórski

Opracowanie redakcyjne: zespół pracowników Pedagogicznej Biblioteki Wojewódzkiej w Gdańsku w składzie Dorota Dela, Arleta Kundera, Małgorzata Kwaśnik, Ewa Różańska i Magdalena Schramm

Projekt okładki: Piotr Bojko z wykorzystaniem elementów graficznych opracowanych przez Urszulę Abucewicz oraz Macieja Drawsa

Zdjęcia: Klaudia Malinowska, Beata Kwaśniewska oraz Uczniowska grupa promocyjna I Pomorskiej Uczniowskiej Konferencji Naukowej „Zdolni z Pomorza”, w skład której weszli uczniowie ze Szkół Okrętowych i Ogólnokształcących Conradinum w Gdańsku: Krzysztof Obara, Adam Rogowski, Alina Rybandt, Małgorzata Kunicka, Karol Szumacher

Działania grupy promocyjnej koordynowała nauczycielka ze Szkół Okrętowych i Ogólnokształcących Conradinum w Gdańsku – Karolina Urbanowicz

Korekta: zespół

© Copyright by Urząd Marszałkowski Województwa Pomorskiego.
Departament Edukacji i Sportu, Gdańsk 2018

ISBN 978-83-8127-165-3

Wydawnictwo „Bernardinum” Sp. z o.o.
ul. Biskupa Dominika 11, 83-130 Pelplin
tel. 58 536 17 57, fax 58 536 17 26
bernardinum@bernardinum.com.pl
www.bernardinum.com.pl

Skład, druk i oprawa:
Drukarnia Wydawnictwa „Bernardinum” Sp. z o.o., Pelplin

Czy fizyka może pomóc w rozwoju sztucznej inteligencji? (Czy sztuczna inteligencja pomoże w rozwoju fizyki?)

Co dziennie produkujemy 2,5 eksabajtów danych. To odpowiednik danych zgromadzonych w 250 000 wielkich bibliotek lub w 5 milionach laptopów. W każdej minucie każdego dnia 3,2 miliarda globalnych użytkowników internetu dostarcza bankom danych ponad 9000 pinów na Pinterest, 350 000 tweetów, 4,2 miliona polubień na Facebooku, a ponadto ogrom innych danych, które tworzymy, robiąc zdjęcia i filmy, zapisując dokumenty, otwierając konta itp. [4]

Globalnie jesteśmy na granicy mocy przetwarzania danych za pomocą tradycyjnych komputerów, a zbiory danych wciąż rosną. Prawo Moore'a przewiduje, że liczba tranzystorów na układach scalonych będzie podwajać się co dwa lata. O ile od czasu sformułowania go w 1965 roku okazywało się ono niezwykle trafne, to obecnie te tranzystory są tak małe, że przy użyciu istniejącej technologii nie da się ich już zmniejszyć. Właśnie dlatego istnieje wyścig wśród największych liderów branży, któremu z nich, jako pierwszemu, uda się uruchomić wydajny komputer kwantowy. Byłby on wykładniczo potężniejszy niż dzisiejsze komputery, a tym samym byłby zdolny przetwarzać wszystkie dane generowane każdego dnia i rozwiązywać coraz bardziej złożone problemy [4].

Przewiduje się, że te komercyjne komputery kwantowe będą w stanie w ciągu kilku sekund wykonać obliczenia, które zajęłyby dzisiejszym komputerom tysiące lat. Powinno stać się tak dlatego, że sztuczna inteligencja, a w szczególności uczenie maszynowe, może korzystać z postępów w technologii obliczeń kwantowych i będzie to nadal robić, nawet zanim dostępne będzie pełne rozwiązanie obliczeń kwantowych. Kwantowe algorytmy obliczeniowe pozwalają nam ulepszyć to, co jest już możliwe dzięki uczeniu maszynowemu.

² Doktor inż. Beata Bochentyn, Politechnika Gdańska, Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej, Katedra Fizyki Ciała Stałego.

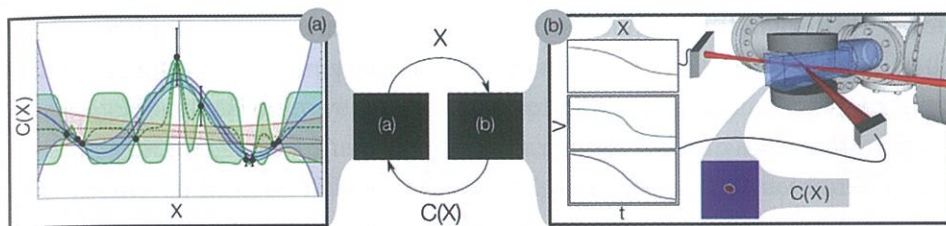
U podstaw teoretycznych funkcjonowania komputerów kwantowych leży rozbudowany dział fizyki zwany mechaniką kwantową. Została ona stworzona niezależnie przez Heisenberga i Schrödingera na początku XX wieku, a jej szybki rozwój nastąpił dzięki pracom Maxa Borna i Paula Diraca. Uzupełnia ona mechaniczną teorię ruchu o opis sytuacji, w których nie działa mechanika klasyczna, i opisuje zjawiska dotyczące przede wszystkim obiektów o bardzo małych masach i rozmiarach. Przewiduje, iż cząstka nie musi zachowywać się tylko i wyłącznie jak fala czy cząstka, lecz może jednocześnie spełniać cechy stanu pośredniego, co charakteryzowane jest za pomocą tzw. gęstości prawdopodobieństwa.

Związki pomiędzy mechaniką kwantową a sztuczną inteligencją badał m.in. austriacki fizyk teoretyk Hans Briegel. Wykazał on, że zasady teorii kwantowej mogą pomóc sztucznej inteligencji przyspieszyć procesy decyzyjne. Działoby się to na zasadzie aktywnego badania otoczenia przez maszynę i nabierania doświadczeń, które potem może ona wykorzystać w podejmowaniu decyzji na wzór człowieka. W miarę rozbudowywania bazy nabytej wiedzy i zgromadzonych doświadczeń roboty obdarzone sztuczną inteligencją powinny być zdolne do wykonywania coraz bardziej skomplikowanych i zróżnicowanych zadań. Całe założenie teoretyczne opiera się na sformułowanym przez Briegela modelu sztucznej inteligencji, która miałaby prowadzić wewnętrzną symulację potencjalnych przyszłych zdarzeń. W sytuacji, gdy stanie ona przed jakimś zagadnieniem problemowym, będzie przeszukiwać swoją bazę doświadczeń w celu odnalezienia powiązanych zdarzeń, by na tej podstawie znaleźć rozwiązanie. Jest to idea tzw. spaceru kwantowego. Powiązanie tej koncepcji z zasadami kwantowego przetwarzania danych przyspieszyłoby dodatkowo procesy decyzyjne inteligentnych maszyn.

O ile założenia Hansa Briegela są w pełni teoretyczne, o tyle w literaturze naukowej można znaleźć bardzo wiele doniesień na temat różnorodnych form stosowania zasad sztucznej inteligencji w rozwiązywaniu problemów z zakresu fizyki, inżynierii materiałowej czy nanotechnologii.

Przykładowo grupa australijskich naukowców z Australian National University, University of Adelaide i University of New South Wales pod kierownictwem prof. Robinsa i prof. Husha wykazała, że system sztucznej inteligencji jest w stanie samodzielnie uzyskać kondensat Bosego-Einsteina [5]. Pojęcie to opisuje stan kwantowy, dzięki któremu uzyskujemy temperatury bliskie zera absolutnego. W praktyce wytworzenie takiego kondensatu wymaga stosowania zestawu laserów schładzających gaz, które przy odpowiednim doborze parametrów

pracy będą stopniowo zmniejszać temperaturę medium do poziomu nanokelwinów. W dyskutowanym eksperymencie naukowcy najpierw wstępnie schłodzili gaz do mikrokelwinów, a następnie wydali układowi sztucznej inteligencji polecenie, by tak optymalizował parametry pracy laserów, by osiągnąć pożądaną temperaturę rzędu nanokelwinów. Schemat układu eksperymentalnego został przedstawiony na rys. 1.



Rys.1. Schemat układu eksperymentalnego i sprzężonego z nim systemu sztucznej inteligencji stosowany w doświadczeniu z wytwarzaniem kondensatu Bosego-Einsteina

Źródło: <https://www.nature.com/articles/srep25890.pdf>.

Idea jego pracy polegała na tworzeniu przez obiekt „uczący się” zestawu parametrów X do przetestowania w eksperymencie, który miał za zadanie jak najbardziej schłodzić gaz. Gdy proces parowania został zakończony, obraz zimnych atomów był analizowany w celu obliczenia funkcji kosztu związanej z uzyskiwaną jakością $C(X)$. $C(X)$ było następnie przekazywane obiektowi „uczącemu się” w celu przeprowadzenia modelowania relacji między wartościami parametrów wejściowych a wartościami funkcji kosztu wygenerowanymi przez eksperyment. W konsekwencji tej wielokrotnej optymalizacji udało się uzyskać kondensat Bosego-Einsteina w skończonym czasie, co z zastosowaniem zwykłych komputerów zajęłoby więcej niż wiek Wszechświata.

Praktyczny potencjał stosowania kondensatu Bosego-Einsteina jest bardzo szeroki. W związku z tym, że kondensat jest bardzo wrażliwy na zewnętrzne zaburzenia (np. pola grawitacyjnego czy magnetycznego), można go pośrednio stosować w nawigacji lub np. do poszukiwania minerałów. Jeśli udałoby się skonstruować przenośne urządzenie, w którym kondensat byłby szybko tworzony ze wsparciem systemu sztucznej inteligencji, to dałoby się go używać np. do pomiarów lokalnych wartości natężenia pola grawitacyjnego bez konieczności angażowania do eksperymentu całego zespołu fizyków.

Innym przykładem zastosowania sztucznej inteligencji do rozwiązywania problemów z zakresu fizyki jest wspólna praca naukowców z Caltech oraz Uniwersytetu w Południowej Kalifornii (pod kierownictwem prof. Marii Spiropulu i prof. Daniela Lidara), którzy zastosowali techniki uczenia maszynowego, zgodnego z zasadami mechaniki kwantowej, do wyłapywania sygnału Bozonu Higgsa z mocno zaszumionych danych eksperymentalnych [3]. Bozon Higgsa jest cząstką elementarną, której istnienie było postulowane przez model standardowy, ale doświadczalne potwierdzenie jej istnienia nastąpiło dopiero w roku 2012 w Wielkim Zderzaczu Hadronów. W eksperymencie z zastosowaniem sztucznej inteligencji naukowcy do wyłapywania sygnału Bozonu Higgsa wykorzystali tzw. **kwantową wyżarzarkę** (ang. *quantum annealer*), czyli rodzaj komputera kwantowego zdolnego przeprowadzać tylko zadania optymalizacyjne i tym samym wyłuskiwać właściwe informacje z pełnych błędów zestawów danych eksperymentalnych. Program kwantowy poszukiwał wzorców w zbiorze danych, aby oddzielić sensowne dane od śmieci. Oczekuje się, że będzie on przydatny również w przypadku problemów wykraczających poza fizykę wysokich energii [3].

Popularną techniką komputerową do klasyfikowania danych jest metoda sieci neuronowej, znana ze swojej skuteczności w wydobywaniu ukrytych wzorców w zbiorze danych. Wzorce identyfikowane przez sieci neuronowe są trudne do zinterpretowania, ponieważ proces klasyfikacji nie ujawnia, w jaki sposób zostały one odkryte. Techniki prowadzące do lepszej interpretowalności są często bardziej podatne na błędy i mniej skuteczne. Nowy program kwantowy to „prosty model uczenia maszynowego, który osiąga wynik porównywalny z bardziej skomplikowanymi modelami bez utraty solidności i interpretacji” – twierdzą autorzy eksperymentu [3].

W przypadku wcześniejszych technik dokładność klasyfikacji zależała w dużym stopniu od wielkości i jakości szkoleniowego zestawu danych, który był ręcznie wybraną częścią zestawu danych do analizy. Było to problematyczne w przypadku badań nad fizyką wysokich energii, które koncentrują się wokół rzadkich zdarzeń pochowanych w dużej ilości szumów. W związku z tym, że Wielki Zderzacz Hadronów generuje ogromną liczbę zdarzeń, fizycy cząstek muszą otrzymane pakiety danych dzielić na małe porcje, aby po żmudnej analizie dowiedzieć się, które z nich są interesujące. Opracowany przez amerykańskich naukowców nowy program kwantowy „jest prostszy, pobiera bardzo mało danych treningowych, a nawet może być szybszy, co uzyskaliśmy dzięki

uwzględnieniu stanów wzbudzonych” – twierdzi jeden z nich. Wzbudzone stany systemu kwantowego mają nadwyżkę energii, która przyczynia się do błędów w wynikach, ale w przypadku zastosowania technik uczenia maszynowego korzystanie ze stanów wzbudzonych i nieoptymalnych rozwiązań okazało się korzystne [3]. „Programowanie komputerów kwantowych zasadniczo różni się od programowania klasycznych komputerów. To jest jak kodowanie bitów bezpośrednio. Cały problem musi zostać zakodowany od razu, a następnie uruchamia się tylko raz, tak jak został zaprogramowany” [3].

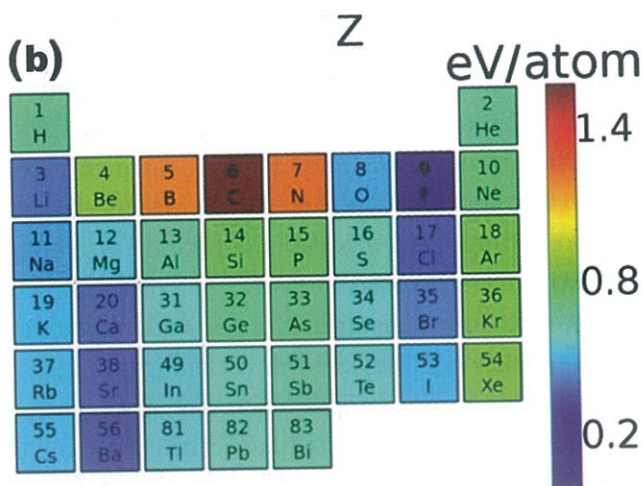
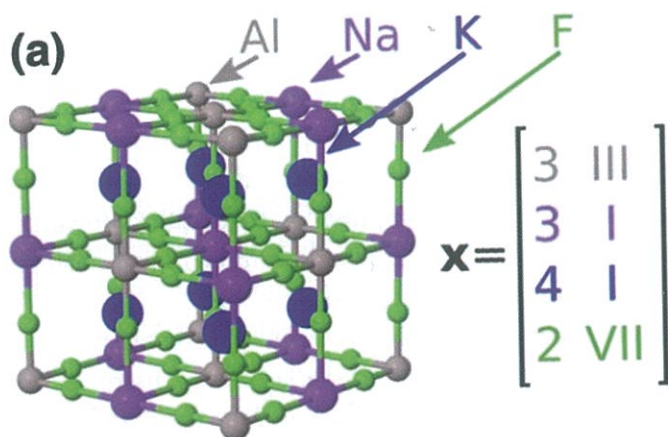
Naukowcy aktywnie poszukują dalszych zastosowań nowej techniki klasyfikacji wyżarzania kwantowego. Udało im się zademonstrować bardzo podobny wynik w zupełnie innej dziedzinie aplikacji. Stosując tę samą metodologię, byli w stanie znaleźć rozwiązanie problemu z zakresu biologii obliczeniowej.

Z kolei chemicy z Uniwersytetu w Bazylei w Szwajcarii wykorzystali sztuczną inteligencję do obliczenia właściwości ok. 2 mln kryształów zawierających cztery rodzaje pierwiastków. W ten sposób udało im się zidentyfikować 90 stabilnych termodynamicznie, a nieznanych dotąd związków [2]. Tym samym wykazali, że sztuczna inteligencja może przyczynić się również do rozwoju kolejnej dziedziny nauki związanej z fizyką, a mianowicie inżynierii materiałowej.

Głównym autorem pracy jest Felix Faber, doktorant w grupie Prof. Anatola von Lilienfelda z Uniwersytetu w Bazylei. Wraz z zespołem analizował on związki o strukturze krystalicznej elpasolitu, który w warunkach naturalnych jest przezroczystym, błyszczącym, miękkim minerałem występującym w górach El Paso County, Górach Skalistych czy Apeninach. Komórka elementarna elpasolitu została przedstawiona na rys. 2. W zależności od składu mogą one wykazywać różne właściwości elektryczne (metal, półprzewodnik lub izolator) oraz emitować światło pod wpływem promieniowania [1].

W pierwszej kolejności naukowcy, korzystając z obliczeń kwantowych, określili prawdopodobieństwa tworzenia związków czteroskładnikowych o różnej stechiometrii. Następnie uzyskane wyniki wykorzystali do uczenia maszynowego, które dzięki lepszej strategii algorytmowej dało dokładność porównywalną ze standardową analizą kwantową.

Na rys. 3 przedstawiono matryce energii tworzenia 2 milionów związków o strukturze krystalicznej elpasolitu. Zawiera ona kombinacje wszystkich głównych pierwiastków układu okresowego (do bizmutu) przewidzianych przez model uczenia maszynowego (ML) 10×10^3 . Zewnętrzne osie pozioma i pionowa przedstawiają pierwiastki zajmujące odpowiednio pozycje o symetrii x_3 i x_4

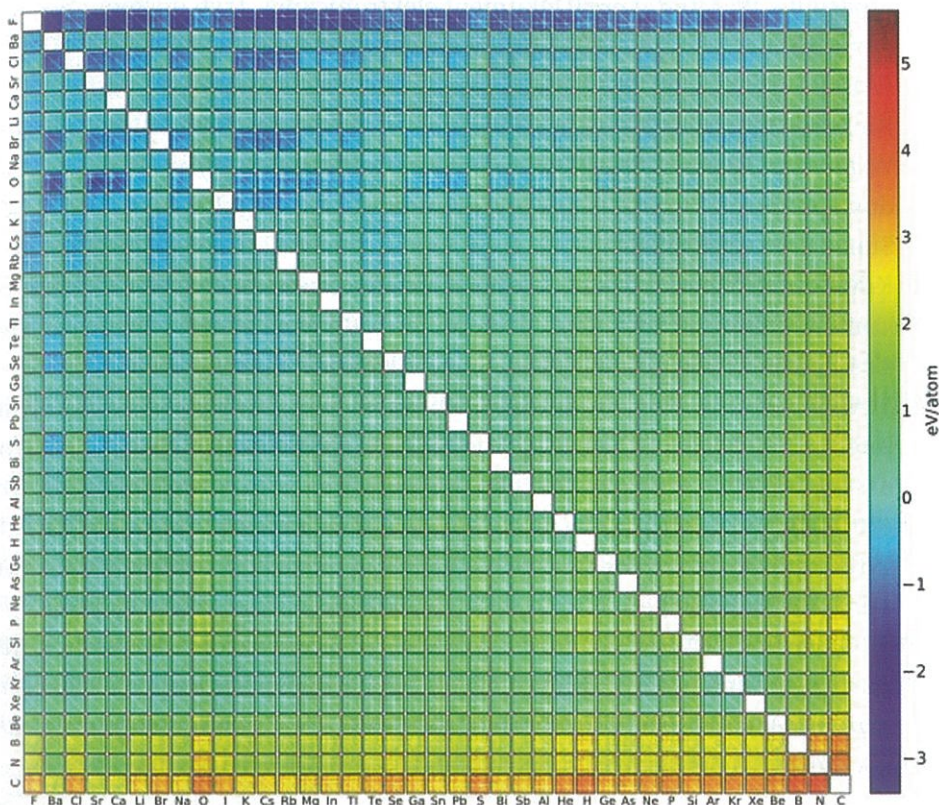


Rys. 2. (a) Komórka elementarna związku o strukturze elpasolitu, (b) Uśredniony wkład energetyczny poszczególnych pierwiastków do tworzenia związków o strukturze elpasolitu

Źródło: <https://journals.aps.org/prl/pdf/10.1103/PhysRevLett.117.135502>.

w komórce. Wewnętrzne osie pozioma i pionowa prezentują pierwiastki zajmujące odpowiednio pozycje o symetrii x_1 i x_2 w komórce. Skala barwna odpowiada położeniu pierwiastków w układzie okresowym zgodnym z rys. 2b. W zależności od kombinacji pierwiastków energia tworzenia związku jest wysoka (kolor czerwony) lub niska (kolor niebieski).

Uczenie maszynowe pozwala uzyskać wyniki kilka rzędów wielkości szybciej niż z obliczeń kwantowych. Obliczenie energii tworzenia ok. 2 mln kryształów zajęło dzięki temu tylko jeden dzień! Analogiczne obliczenia z wykorzystaniem mechaniki kwantowej zajęłyby 20 mln godzin!



Rys. 3. Matryca energii tworzenia 2 milionów związków o strukturze krystalicznej elpasolitu

Źródło: <https://journals.aps.org/prl/pdf/10.1103/PhysRevLett.117.135502>.

Przedstawione w niniejszej pracy przykłady prezentują tylko kilka możliwości zastosowań sztucznej inteligencji w rozwiązywaniu problemów naukowych z zakresu fizyki i dziedzin pokrewnych. Potwierdzają one, że sztuczna inteligencja pozwala uzyskiwać rozwiązania skomplikowanych zagadnień w bardzo krótkim czasie, często o kilka rzędów wielkości krótszym niż w przypadku tradycyjnych metod podejścia do problemu. Można być zatem przekonanym, że

obszar i częstotliwość stosowania sztucznej inteligencji w naukach fizycznych będzie się nieustannie poszerzać, odsłaniając tym samym tajniki niepoznanej dotąd wiedzy.

Bibliografia

1. Elpasolite. W: *Mindat.org* [Dokument elektroniczny]. Tryb dostępu: <https://www.mindat.org/min-1369.html>. Stan z dnia 08.03.2018.
2. FABER Felix A., LINDMAA Alexander, LILIENFELD Anatol von, ARMIENTO Rickard. Machine Learning Energies of 2 Million Elpasolite Crystals. W: *Physical Review Letters* [Dokument elektroniczny]. 2016, nr 117, s. 1-6. Tryb dostępu: <https://journals.aps.org/prl/pdf/10.1103/PhysRevLett.117.135502>. Stan z dnia 08.03.2018.
3. KIM Mark H. Physics Boosts Artificial Intelligence Methods. W: *Caltech* [Dokument elektroniczny]. Tryb dostępu: <http://www.caltech.edu/news/physics-boosts-artificial-intelligence-methods-80127>. Stan z dnia 08.03.2018.
4. MARR Bernard. How Quantum Computers Will Revolutionize Artificial Intelligence, Machine Learning And Big Data. W: *Forbes* [Dokument elektroniczny]. Tryb dostępu: <https://www.forbes.com/sites/bernardmarr/2017/09/05/how-quantum-computers-will-revolutionize-artificial-intelligence-machine-learning-and-big-data/#1210425e5609>. Stan z dnia 08.03.2018.
5. WIGLEY Paul, EVERITT Patrick, HENGEL Anton van den. Fast machine-learning online optimization of ultra-cold-atom experiments. W: *Scientific Reports* [Dokument elektroniczny]. 2016, nr 6, s. 1-6. Tryb dostępu: <https://www.nature.com/articles/srep25890.pdf>. Stan z dnia 08.03.2018.