

РЕАЛИЗАЦИЯ ПРИНЦИПОВ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ ДЛЯ АНАЛИЗА СЛОЖНЫХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Мирзиярова Д.А., Мокшин А.В.

магистр 1-го года обучения

Казанский (Приволжский) федеральный университет,

Институт физики, г. Казань, Россия

mirziyarova_diana@mail.ru

В современной физике все более самостоятельно представляется направление, которое обозначается как «*физика сложных систем*» [1]. Под сложными системами, как правило, понимаются такие системы, удовлетворяющие следующим условиям. Первое, система должна состоять из очень большого числа элементов (структурных элементов). Так, в физике такому требованию удовлетворяет, например, любая многочастичная система. Второе, свойства всей системы как целого не могут быть определены лишь через свойства отдельных элементов, ее образующих. Третье, число степеней свободы, которыми определяется эта система, является бесконечно большим [2]. Кроме того, такая система может быть «открытой», и для нее сложно сформулировать законы, подобные законам сохранения энергии, импульса и массы. Четвертое, система характеризуется параметрами (факторами), взаимосвязь между которыми является неустановленной или неочевидной, а задача выявления этой взаимосвязи, как правило, является нетривиальной. Примечательно, что решение такой задачи становится возможным с использованием методов *машинного обучения* [3], основанных на использовании генетических алгоритмов, нейронных сетей, алгоритмического подхода, обозначаемого как «деревья принятия решений».

В настоящей работе демонстрируется, что можно провести прямое соответствие между ключевыми понятиями в методологии машинного обучения и некоторыми базовыми принципами статистической физики. Так, одна из реализаций генетических алгоритмов для анализа систем базируется на использовании полинома Колмогорова-Габора [4, 5]:

$$y(t) = a_0 + \sum_{i=1}^M a_i x_i(t) + \sum_{i=1}^M \sum_{l>i}^M a_{il} x_i(t) x_l(t) + \sum_{i=1}^M \sum_{l>i}^M \sum_{k>l}^M a_{ilk} x_i(t) x_l(t) x_k(t) + \dots, \quad (1)$$

где $y(t)$, $x_1(t)$, $x_2(t)$, $x_3(t)$, ..., $x_M(t)$ – есть параметры, характеризующие систему; t – есть управляющий параметр, который выбирается, исходя из условия задачи; a_i – есть весовые коэффициенты. Явный вид этого полинома, который устанавливает взаимосвязь между параметрами системы, может быть определен с помощью методов машинного обучения через статистико-вероятностный анализ известных «экспериментальных» данных. Если управляющий параметр t задан в виде дискретного ряда, то параметры $x_1(t)$, $x_2(t)$, $x_3(t)$, ..., $x_M(t)$ приобретают смысл векторов. При такой трактовке эти вектора могут быть сопоставлены базис-векторам, которые формируют фазовое пространство. Размерность этого пространства задается количеством произведений в полиноме Колмогорова-Габора (1), а величина $y(t)$ приобретает смысл фазовой траектории. Таким образом, получаем прямое соответствие со стандартной методологией, используемой в статистической физике.

В работе будет продемонстрировано использование данного подхода для решения известных физических задач и задач, связанных с анализом сложных систем. В частности, будет представлено решение задачи по восстановлению уравнения состояния

щелочных металлов в равновесных жидкой и газообразной термодинамических фазах. Кроме того, будет представлено применение данного метода для выявления ключевых факторов управляющих некоторой сложной системой, а также для прогнозирования динамики этой системы [6].

Работа поддержана РФФИ (проект № 18-02-00407)

Литература

1. Gell-Mann M. What is complexity? Complexity, 1995, vol. 1, pp. 16-19.
2. Сычёв В. В. Сложные термодинамические системы. М.: Издательский дом МЭИ. 2009. 296 с.
3. Carleo G., Cirac I., Cranmer K. *et al.* Machine learning and the physical sciences // Reviews of modern physics. 2019, V. 91.
4. Гладков Л.А., Курейчик В.В., Курейчик В.М. Генетические алгоритмы. М.: ФИЗМАТЛИТ. 2006. 320 с.
5. Koza J.R. Genetic programming: A paradigm for genetically breeding populations of computer programs to solve problems. Stanford: Computer Science Department. 1990. 127 p.
6. Mokshin A.V., Mokshin V.V., Sharnin L.M. Adaptive genetic algorithms used to analyze behavior of complex system // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2019, V. 71. pp. 174-186.