

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)»**

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор физтех-школы физики  
и исследований им. Ландау  
А.В. Рогачев**

	<b>Рабочая программа дисциплины (модуля)</b>
<b>по дисциплине:</b>	Машинное обучение для квантовой и статистической физики
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра Российского квантового центра
<b>курс:</b>	1
<b>квалификация:</b>	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 60 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составили:

А.Е. Уланов, канд. физ.-мат. наук

Е.С. Тиунов

Программа обсуждена на заседании кафедры Российского квантового центра 29.01.2025

## Аннотация

В курсе расскажут про применение базовых методов машинного обучения для задач квантовой физики. Курс состоит из двух частей.

Первая часть дает общие представления о предмете глубокого обучения. Объяснение основ строится на примере задач классификации и регрессии. Для решения этих задач предлагается изучить различные типы искусственных нейронных сетей (полносвязные, сверточные, рекуррентные).

Вторая часть курса направлена на решение задач квантовой физики с помощью машинного обучения. Будет рассмотрен вариационный метод в парадигме нейронных сетей для задач квантовой томографии и поиска основного состояния многочастичных гамильтонианов. Также будут объяснены различные методы сэмплирования в контексте применения вариационного подхода для Гильбертовых пространств большой размерности.

Все занятия курса организованы как набор пар: лекция-семинар. На лекциях будут рассмотрены теоретические основы вышеописанных тем. Семинары состоят из решения практических задач на языке Python по темам лекций. В процессе решения задач будет дано базовое представление о библиотеках Numpy и Pytorch. Критерием успешного завершения курса является сдача проекта. Для успешного прохождения курса необходимы базовые навыки программирования на языке Python.

## 1. Цели и задачи

### Цель дисциплины

Преподать краткое введение в методы современного глубокого машинного обучения, дать обзор существующих способов применения инструментов машинного обучения для экспериментальной квантовой и статистической физики

### Задачи дисциплины

снабдить слушателей необходимыми знаниями и умениями для проведения самостоятельных междисциплинарных исследований на стыке машинного обучения и физики

## 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.4 Представляет публично результаты проекта (или отдельных его этапов) в форме отчетов, статей, выступлений на научно-практических конференциях, семинарах и т.п.
УК-3 Способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной задачи	УК-3.1 Организует и координирует работу участников проекта, способствует конструктивному преодолению возникающих разногласий и конфликтов
	УК-3.4 Способен планировать командную работу, распределять поручения членам команды, организовать обсуждение разных идей и мнений
УК-6 Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способствовать совершенствованию на основе	УК-6.1 Умеет решать задачи собственного личностного и профессионального развития, определять и реализовывать приоритеты совершенствования собственной деятельности

способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.2 Оценивает свою деятельность, соотносит цели, способы и средства выполнения деятельности с её результатами
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов
ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.1 Способен работать в коллективе, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)

### 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

основные методы глубокого машинного обучения и существующие способы их применения для исследований в области современных квантовых технологий

уметь:

выбирать необходимые инструменты машинного обучения для проведения экспериментальных и теоретических исследований в области квантовой физики и статистической физики, ориентироваться в современных исследованиях на стыке квантовых технологий и машинного обучения

владеть:

основными технологиями и алгоритмами глубокого машинного обучения, и методами их использования в качестве инструментария для проведения научно-исследовательской деятельности в различных областях квантовой физики и статистической физики

#### 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

##### 4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Вводная лекция.	3			5
2	Линейная классификация и полносвязные нейронные сети	3			5
3	Методы диагностирования качества обученных моделей	3			5
4	Сверточные нейронные сети	3			5
5	Рекуррентные нейронные сети	3			5
6	Больцмановские машины для задач статистической физики	3			5
7	Больцмановские машины для томографии квантовых состояний	3			5
8	Методы сэмлирования	3			5
9	Вариационные авторегрессионные нейронные сети для задач статистической физики	3			5
10	Обзорная лекция по современным достижениям в области	1			5
11	Финальный проект	2			10
Итого часов		30			60
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

##### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 2 (Весенний)

1. Вводная лекция.

На лекции предлагается обзор задач и методов машинного обучения.

## 2. Линейная классификация и полносвязные нейронные сети

Вводится формулировка задач линейной, нелинейной, логистической регрессии и классификации. На примере задачи классификации объясняется понятие искусственной нейронной сети.

## 3. Методы диагностирования качества обученных моделей

На примерах рассматриваются явления переобучения и недообучения глубоких нейронных сетей, а также способы их диагностирования и устранения.

## 4. Сверточные нейронные сети

Вводится понятие глубокой сверточной нейронной сети, и рассматривается задача классификации изображений. Объясняются понятия ядро свертки, шаг свертки, рассматриваются различные базовые архитектуры сверточных нейронных сетей.

## 5. Рекуррентные нейронные сети

Рассматриваются архитектуры (GRU, LSTM) рекуррентных нейронных сетей на примере задач машинного перевода. Объяснение проблем взрывающихся и затухающих градиентов.

## 6. Больцмановские машины для задач статистической физики

Лекция направлена на решение задачи оценки статвеса для модели Изинга с помощью аппроксимации Больцмановского распределения нейронной сетью.

## 7. Больцмановские машины для томографии квантовых состояний

На примере задачи томографии квантовых состояний объясняется вариационный метод в парадигме нейронных сетей. В качестве такой нейронной сети рассматривается Больцмановская машина.

## 8. Методы сэмлирования

На лекции рассматриваются два алгоритма сэмлирования из произвольного распределения --- алгоритм Гиббса и Метрополис. Данные алгоритмы применяются для обучения Больцмановской машины.

## 9. Вариационные авторегрессионные нейронные сети для задач статистической физики

На примере задачи из Темы 6 вводится понятие авторегрессионной нейронной сети и объясняется ее обучение с помощью встроенного в нее сэмлирования.

## 10. Обзорная лекция по современным достижениям в области

Обзор современных достижений в области машинного обучения.

## 11. Финальный проект

Ответы на вопросы студентов по выбранным финальным проектам.

## 5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, оснащенная мультимедиапроектором и экранам. Слушателям также понадобятся персональные компьютеры.

## 6. Перечень рекомендуемой литературы

### Основная литература

Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, Aaron Courville. Deep Learning, MIT Press, 2016. (available online)

### Дополнительная литература

A. I. Lvovsky and M. G. Raymer, Continuous-variable optical quantum-state tomography. *Reviews of Modern Physics* 81, 299–332 (2009).

G. Carleo and M. Troyer, Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. *Science* 355, 602–606 (2017).

G. Torlai, G. Mazzola, J. Carrasquilla, M. Troyer, R. Melko and G. Carleo, Neural-network quantum state tomography. *Nature Physics* 1 (2018).

E. S. Tiunov, V. V. Tiunova, A. E. Ulanov, A. I. Lvovsky and A. K. Fedorov, Experimental quantum homodyne tomography via machine learning. (2019).

M. Benedetti, J. Realpe-Gómez, R. Biswas and A. Perdomo-Ortiz, Quantum-Assisted Learning of Hardware-Embedded Probabilistic Graphical Models. *Physical Review X* 7, 041052 (2017).

D. Wu, L. Wang and P. Zhang, Solving Statistical Mechanics Using Variational Autoregressive Networks. *Physical Review Letters* 122, 080602 (2019).

## 7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

[https://github.com/yandexdataschool/Practical\\_DL](https://github.com/yandexdataschool/Practical_DL)

## 8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

У всех обучающихся должен быть установлен пакет программ Anaconda и библиотека Pytorch

## 9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий дисциплину, должен, с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения и понятия, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)**

**по направлению:** Прикладные математика и физика  
**профиль подготовки:** Общая и прикладная физика  
Физтех-школа физики и исследований им. Ландау  
кафедра Российского квантового центра  
**курс:** 1  
**квалификация:** магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 2 (весенний) - Дифференцированный зачет

**Разработчики:**

А.Е. Уланов, канд. физ.-мат. наук  
Е.С. Тиунов

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий	УК-1.1 Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними
	УК-1.2 Осуществляет поиск вариантов решения поставленной проблемной ситуации на основе доступных источников информации
	УК-1.3 Разрабатывает стратегию достижения поставленной цели как последовательность шагов, предвидя результат каждого из них и оценивая их влияние на внешнее окружение планируемой деятельности и на взаимоотношения участников этой деятельности
УК-2 Способен управлять проектом на всех этапах его реализации	УК-2.4 Представляет публично результаты проекта (или отдельных его этапов) в форме отчетов, статей, выступлений на научно-практических конференциях, семинарах и т.п.
УК-3 Способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной задачи	УК-3.1 Организует и координирует работу участников проекта, способствует конструктивному преодолению возникающих разногласий и конфликтов
	УК-3.4 Способен планировать командную работу, распределять поручения членам команды, организовать обсуждение разных идей и мнений
УК-6 Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1 Умеет решать задачи собственного личностного и профессионального развития, определять и реализовывать приоритеты совершенствования собственной деятельности
	УК-6.2 Оценивает свою деятельность, соотносит цели, способы и средства выполнения деятельности с её результатами
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
	ОПК-1.3 Понимает междисциплинарные связи в области математики и физики и способен их применять при решении задач профессиональной деятельности
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ОПК-4 Способен успешно реализовывать решение поставленной задачи, провести анализ результата и представить выводы, применяя знания и навыки в области физико-математических наук и информационно-коммуникационных технологий	ОПК-4.1 Способен применять знания и навыки по использованию информационно-коммуникационных технологий для поиска и изучения научной литературы, применения прикладных программных продуктов

ОПК-5 Способен и готов к повышению квалификации, профессиональному росту и руководству коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия	ОПК-5.1 Способен работать в коллективе, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
	ОПК-5.3 Стремится к получению новых знаний, профессиональному и личностному росту
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
ПК-2 Способен самостоятельно или в качестве члена (руководителя) малого коллектива организовывать и проводить научные исследования и их апробацию	ПК-2.1 Способен планировать и проводить научные исследования самостоятельно или в составе научного коллектива
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Машинное обучение для квантовой и статистической физики» обучающийся должен:

### знать:

основные методы глубокого машинного обучения и существующие способы их применения для исследований в области современных квантовых технологий

### уметь:

выбирать необходимые инструменты машинного обучения для проведения экспериментальных и теоретических исследований в области квантовой физики и статистической физики, ориентироваться в современных исследованиях на стыке квантовых технологий и машинного обучения

### владеть:

основными технологиями и алгоритмами глубокого машинного обучения, и методами их использования в качестве инструментария для проведения научно-исследовательской деятельности в различных областях квантовой физики и статистической физики

## 3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

Примеры контрольных заданий

1. Решить задачу нелинейной логистической регрессии
2. Решить задачу классификации изображений, используя многослойный перцептрон, на примере базы данных MNIST
3. Проанализировать кривые обучения и применить методы регуляризации для улучшения качества модели
4. Решить задачу классификации изображений, используя глубокую сверточную сеть, на примере базы данных MNIST
5. Численно оценить с помощью разных методов сэмплирования корреляционные функции в модели Изинга и сравнить с точным решением

#### 4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Перечень контрольных вопросов:

1. Получить форму фокусирующей поверхности, разделяющей две среды с разными показателями преломления, с помощью нейронной сети
2. На примере атома гелия применить несколько вариационных анзацев для поиска энергии основного состояния
3. Натренировать ограниченную машину Больцмана с помощью сэмлирования
- 4.. Натренировать полносвязную машину Больцмана с помощью сэмлирования с одним скрытым слоем
5. Найти основное состояние многочастичного гамильтониана с помощью нейросетевого Анзаца
6. Пронаблюдать фазовый переход в этой системе изменяя параметры Гамильтониана
7. Создать нейронную сеть, предсказывающую волновую функцию в координатном представлении
8. Решить задачу томографии состояния квантового гармонического осциллятора
9. Разработать метод, решающий дифференциальные уравнения с помощью нейронных сетей
10. Предсказать динамику физической системы, минимизируя интеграл действия с помощью нейронной сети.

Примеры экзаменационных билетов:

Билет 1.

1. Получить форму фокусирующей поверхности, разделяющей две среды с разными показателями преломления, с помощью нейронной сети
2. На примере атома гелия применить несколько вариационных анзацев для поиска энергии основного состояния

Билет 2.

1. Натренировать ограниченную машину Больцмана с помощью сэмлирования
- 2.. Натренировать полносвязную машину Больцмана с помощью сэмлирования с одним скрытым слоем

#### Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

## **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

Экзамен проводится в письменной форме по билетам. В каждом билете представлено два вопроса. При проведении зачёта и экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.