

## **Cientistas Usam IA Generativa para Responder a Perguntas Complexas em Física**

Uma nova técnica que pode classificar automaticamente fases de sistemas físicos pode ajudar cientistas a investigar novos materiais.

Adam Zewe | MIT News

Data de Publicação: 16 de maio de 2024

Consultas de Imprensa Um robô fofo está no quadro-negro. O quadro-negro está cheio de gráficos complexos, ondas e formas.

Legenda: Pesquisadores usaram IA generativa para desenvolver uma técnica informada pela física para classificar transições de fase em materiais ou sistemas físicos, que é muito mais eficiente do que as abordagens existentes de aprendizado de máquina. O trabalho foi liderado por pesquisadores do MIT e da Universidade de Basel.

Quando a água congela, ela transita de uma fase líquida para uma fase sólida, resultando em uma mudança drástica em propriedades como densidade e volume. As transições de fase na água são tão comuns que a maioria de nós provavelmente nem pensa nelas, mas as transições de fase em novos materiais ou sistemas físicos complexos são uma área importante de estudo.

Para entender completamente esses sistemas, os cientistas precisam ser capazes de reconhecer as fases e detectar as transições entre elas. Mas como quantificar as mudanças de fase em um sistema desconhecido muitas vezes não é claro, especialmente quando os dados são escassos.

Pesquisadores do MIT e da Universidade de Basel, na Suíça, aplicaram modelos de inteligência artificial generativa a esse problema, desenvolvendo uma nova estrutura de aprendizado de máquina que pode mapear automaticamente diagramas de fase para novos sistemas físicos.

Sua abordagem de aprendizado de máquina informada pela física é mais eficiente do que técnicas manuais e trabalhosas que dependem de conhecimento teórico. Importante, porque sua abordagem aproveita modelos generativos, não requer grandes conjuntos de dados rotulados usados em outras técnicas de aprendizado de máquina.

Tal estrutura poderia ajudar cientistas a investigar as propriedades termodinâmicas de novos materiais ou detectar emaranhamento em sistemas quânticos, por exemplo. Em última análise, essa técnica poderia tornar possível que os cientistas descobrissem fases desconhecidas da matéria de forma autônoma.

"Se você tem um novo sistema com propriedades totalmente desconhecidas, como escolheria qual quantidade observável estudar? A esperança, pelo menos com ferramentas baseadas em dados, é que você possa examinar grandes novos sistemas de maneira automatizada, e isso apontará para mudanças importantes no sistema. Isso pode ser uma ferramenta no pipeline da descoberta científica automatizada de novas propriedades exóticas de fases", diz Frank Schäfer,

pós-doutorando no Julia Lab do Laboratório de Ciência da Computação e Inteligência Artificial (CSAIL) e coautor de um artigo sobre essa abordagem.

Juntando-se a Schäfer no artigo estão o primeiro autor Julian Arnold, estudante de pós-graduação na Universidade de Basel; Alan Edelman, professor de matemática aplicada no Departamento de Matemática e líder do Julia Lab; e o autor sênior Christoph Bruder, professor no Departamento de Física da Universidade de Basel. A pesquisa foi publicada hoje na Physical Review Letters.

## **Detectando Transições de Fase Usando IA**

Enquanto a transição da água para o gelo pode ser um dos exemplos mais óbvios de uma mudança de fase, mudanças de fase mais exóticas, como quando um material transita de um condutor normal para um supercondutor, são de grande interesse para os cientistas.

Essas transições podem ser detectadas identificando um "parâmetro de ordem", uma quantidade que é importante e esperada para mudar. Por exemplo, a água congela e transita para uma fase sólida (gelo) quando sua temperatura cai abaixo de 0 graus Celsius. Nesse caso, um parâmetro de ordem apropriado poderia ser definido em termos da proporção de moléculas de água que fazem parte da rede cristalina versus aquelas que permanecem em um estado desordenado.

No passado, os pesquisadores confiaram na expertise em física para construir diagramas de fase manualmente, baseando-se na compreensão teórica para saber quais parâmetros de ordem são importantes. Isso não apenas é tedioso para sistemas complexos, e talvez impossível para sistemas desconhecidos com novos comportamentos, mas também introduz um viés humano na solução.

Mais recentemente, os pesquisadores começaram a usar aprendizado de máquina para construir classificadores discriminativos que podem resolver essa tarefa aprendendo a classificar uma estatística de medição como vinda de uma fase particular do sistema físico, da mesma forma que esses modelos classificam uma imagem como sendo de um gato ou um cachorro.

Os pesquisadores do MIT demonstraram como modelos generativos podem ser usados para resolver essa tarefa de classificação de maneira muito mais eficiente e informada pela física.

A Linguagem de Programação Julia, uma linguagem popular para computação científica que também é usada nas aulas introdutórias de álgebra linear do MIT, oferece muitas ferramentas que a tornam inestimável para a construção de tais modelos generativos, acrescenta Schäfer.

Modelos generativos, como aqueles que fundamentam o ChatGPT e o Dall-E, tipicamente funcionam estimando a distribuição de probabilidade de alguns dados, que eles usam para gerar novos pontos de dados que se encaixam na distribuição (como novas imagens de gatos que são semelhantes às imagens de gatos existentes).

No entanto, quando simulações de um sistema físico usando técnicas científicas testadas e comprovadas estão disponíveis, os pesquisadores obtêm um modelo de sua distribuição de probabilidade gratuitamente. Essa distribuição descreve as estatísticas de medição do sistema físico.

## Um Modelo Mais Conhecedor

A percepção da equipe do MIT é que essa distribuição de probabilidade também define um modelo generativo sobre o qual um classificador pode ser construído. Eles conectam o modelo generativo em fórmulas estatísticas padrão para construir diretamente um classificador em vez de aprendê-lo a partir de amostras, como era feito com abordagens discriminativas.

"Esta é uma maneira muito interessante de incorporar algo que você sabe sobre seu sistema físico profundamente dentro do seu esquema de aprendizado de máquina. Vai muito além de simplesmente realizar engenharia de características em suas amostras de dados ou vieses indutivos simples", diz Schäfer.

Este classificador generativo pode determinar em qual fase o sistema está dado algum parâmetro, como temperatura ou pressão. E porque os pesquisadores aproximam diretamente as distribuições de probabilidade subjacentes às medições do sistema físico, o classificador tem conhecimento do sistema.

Isso permite que seu método desempenhe melhor do que outras técnicas de aprendizado de máquina. E porque pode funcionar automaticamente sem a necessidade de treinamento extensivo, sua abordagem melhora significativamente a eficiência computacional de identificar transições de fase.

No final do dia, semelhante a como alguém poderia pedir ao ChatGPT para resolver um problema de matemática, os pesquisadores podem fazer perguntas ao classificador generativo como "esta amostra pertence à fase I ou fase II?" ou "esta amostra foi gerada em alta temperatura ou baixa temperatura?"

Os cientistas também poderiam usar essa abordagem para resolver diferentes tarefas de classificação binária em sistemas físicos, possivelmente para detectar emaranhamento em sistemas quânticos (o estado está emaranhado ou não?) ou determinar se a teoria A ou B é a mais adequada para resolver um problema particular. Eles também poderiam usar essa abordagem para entender melhor e melhorar grandes modelos de linguagem como o ChatGPT, identificando como certos parâmetros devem ser ajustados para que o chatbot dê as melhores respostas.

No futuro, os pesquisadores também querem estudar garantias teóricas sobre quantas medições seriam necessárias para detectar efetivamente transições de fase e estimar a quantidade de computação que isso exigiria.

Este trabalho foi financiado, em parte, pela Fundação Nacional de Ciências da Suíça, pelo Fundo de Sementes MIT-Suíça Lockheed Martin e pelas Iniciativas Internacionais de Ciência e Tecnologia do MIT.