

深度学习如何帮助物理学家重构物质三维结构

前几天（2021/04/05），自然-机器智能杂志发表了一篇有趣的论文，介绍了利用深度学习重构物质三维结构的工作[1]。

我们知道物质的性质是由其微观结构决定的，不同的工艺可能得到不同的微观结构，从而得到具有不同性质的物质。一个重要的问题是，大部分物质的微观结构是三维的，但我们容易观察到的只是二维结构，即物体的切面形态。如果能从二维图像中重构出三维结构，将极大方便物理学家对物质结构的理解，同时有助于设计新的加工工艺，生产具有特定属性的新材料。

传统三维结构重构方法多基于简单的模式扩展，例如从 2D 图像中计算出模式的大小和方向，将其在三维图像中重现；或者使得相距为 r 的两个随机点之间的相关性在二维图像和三维结构中相近。这些方法都有很大局限性，无法重构较复杂的三维结构。

文章作者提出了一种 SliceGAN 的深度生成模型，如图所示。这一模型本质上是一个对抗生成网络（Generative Adversarial Network, GAN）。一个标准的 GAN 包括一个生成器 G 和一个区分器 D ，生成器负责生成图片，而区分器 D 负责判断生成的图片是否足够真实，如果不够真实，就告诉生成器 G 继续努力改进其生成效果，最终的效果是生成器 G 可以合成非常真实的图片。在图 1 所示的 SliceGAN 结构中，真实数据由左侧观察图像得到，生成数据由右侧生成器 G 产生，这两种数据一起用来训练区分器 D 。

直接用 G 生成的数据来训练区分器 D 是有问题的，这是因为 G 生成的是三维结构，而真实数据是二维的，区分器 D 无法对一个三维结构和一个二维图片进行比较和区分。为了解决这一困难，SliceGAN 采用了一种“切片法”，首先将生成的三维结构从三个方向切成若干二维面，区分器 D 对这些切片进行真实与否的判断。

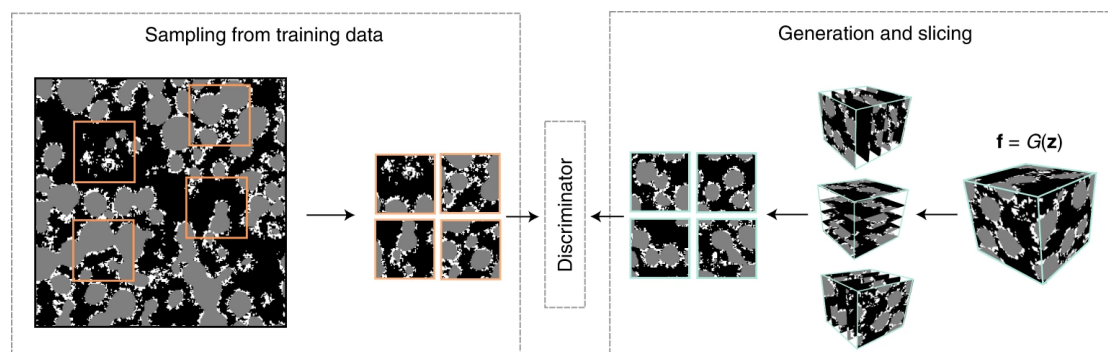


图 1: SliceGAN 的模型示意图

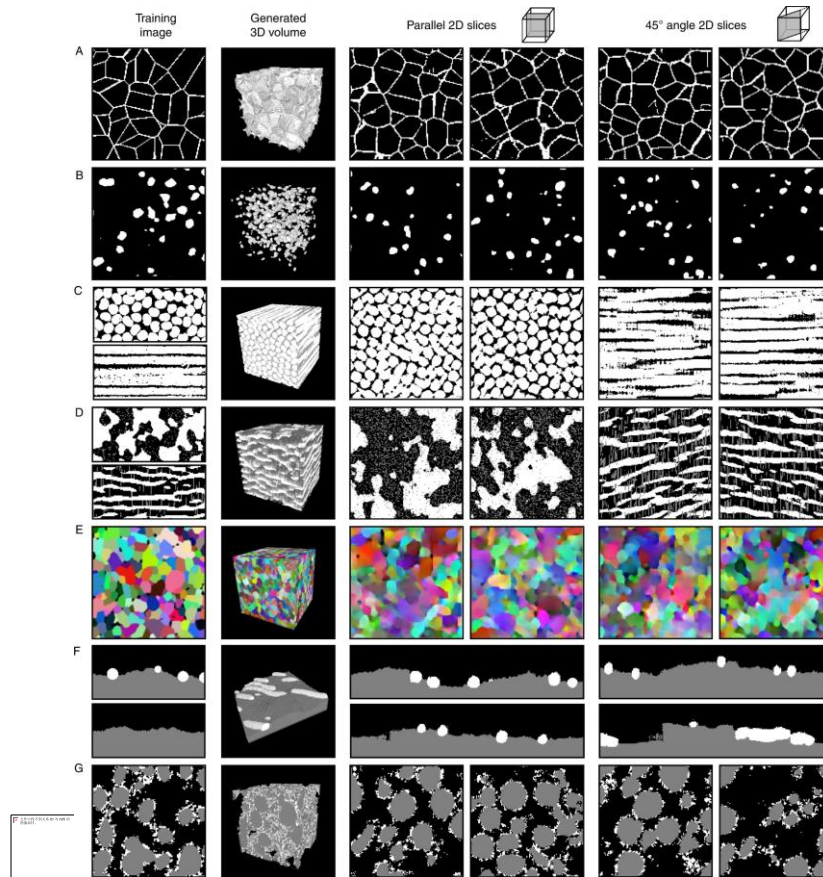


图 2: SliceGAN 在各种结构上的实验结果

图 2 是 SliceGAN 应用在各种结构上的实验结果，其中每一行是一种物质；第一列是真实的二维图像，第二列是重构出的三维结构，后面几列是从三维结构中切片出的二维图像。可以看到，重构出的三维结构可以很精确地代表物质的实际结构。值得说明的是，如果材料的结构不是各向同性的，则需要两个方向进行二维扫描，如第 C，D，F 行所示。

事实上，GAN 已经帮助物理学家做了很多事了，比如设计半导体材料，生成储能材料的微结构等。未来，机器学习必将在物理学研究中起到更大作用，成为物理学家们探索未知世界的利器。

[1] Kench, S., Cooper, S.J. Generating three-dimensional structures from a two-dimensional slice with generative adversarial network-based dimensionality expansion. Nat Mach Intell 3, 299–305 (2021).