

# Machine-Learning Study On Ising Model

劉峻豪(S07210028)

指導教師姓名:吳桂光老師

Email:[S07210028@thu.edu.tw](mailto:S07210028@thu.edu.tw)

## 摘要

使用機器學習[1][2][3][4][5]的監督式學習，來研究自旋模型，本研究使用 2D Ising model 來進行探討及判斷 2D Ising model 是有序相還是無序相，有序相及無序相與溫度之間的關係。L 為 2D Ising model 的晶格長寬，使用 L=10 和 L=20 的 2D Ising model，探討產生像變的溫度是否有差別。模型採用多層感知器(MLP)，輸入層為自旋磁矩間的 correlation function，隱藏層使用 100 個 units，輸出層為 2 個 units，2 個 units 分別代表有序及無序。

## 研究計畫內容

### (一) 研究動機與研究問題

人類的大腦很聰明可以處理許多複雜的問題，人會因為疲累導致處理事情的效率下降甚至發生錯誤，因此可以利用機器來幫助我們處理一些複雜或者資料量大的運算，因此有了人工智慧的誕生，而機器學習是人工智慧的分支，機器學習有分為很多種類，而此研究使用監督式學習，所謂監督式學習就是，由給定的資料中，告訴機器相對應的值，也就是你所需要的答案，來建立一個模型，也可以針對模型來做優化，因此有不同方式來建立模型，本計畫使用監督式學習來判斷 2D Ising model 中的有序相還是無序相，及不同 L 的 2D Ising model 所訓練出的模型是否可以互相使用，若不行呈現出的效果會是如何，及不同 L 的 2D Ising model 產生相變的溫度是否會有所差別。

### (二) 文獻回顧與探討

(Machine-Learning Studies On Spin Models)[1]，介紹了三種 model 分別是 2D Ising model、Potts model、clock model，使用多層感知器(MLP)分析這三個自旋模型的 Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 過渡[6] [7] [8] [9]，將 MLP 輸出的資料分為三類：無序，BKT 和有序。

### (三) 研究方法及步驟

2D Ising model 是一種描述物質鐵性的模型，特點是每個原子的磁矩只能為 +1 或 -1，分別代表其自旋是往上還是往下，相鄰的自旋會互相影響，每一自旋磁矩都會對 2D Ising model 的整體能量做出貢獻，因此每個原子的磁矩都需要計算，形成晶格，當溫度變化時會產生相變，2D Ising model 的 Hamiltonian 為：

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j$$

$S_i = \pm 1$ ，這報告中使用 2D Ising model，來探討 L 為 10 及 20 的 2D Ising model，使用 Swendsen-Wang multi-cluster flip algorithm[]，計算出每個自旋磁矩的 correlation function:

$$g_i(r) = S_i S_{i+r}$$

r 為自旋磁矩間的距離，計算時只需要計算該自旋磁矩的上下左右的自旋

磁矩，晶格的整體是週期性的，因此可以改寫correlation function為：

$$g_i\left(\frac{L}{2}\right) = \left(s_{x,y} s_{x+L/2,y} + s_{x,y} s_{x,y/2}\right) / 2$$

模型建立方法選用MLP，使用correlation function作為輸出層，並隱藏層使用100個units，輸出層為2個units，分別代表有序和無序，損失函數使用交叉熵(cross-entropy)，最佳化方法(Optimizer)使用Adam方法，最後畫出圖表來比較不同L的ising model產生相變的溫度。

#### (四) (現有)結果及討論

使用L=10的2D Ising model，利用python的函式庫中pandas的dataframe進行資料的處理，再計算correlation function，目前已經完成計算correlation function，接下來預計進行建立MLP，使用Keras Sequential順序模型，使用一層一層有序的(Sequential)搭建神經網路架構。10\*10的輸入層，設定隱藏層為100個units，權重初始化的方法使用normal，啟動函數使用relu，輸出層為2個units，設定模型訓練方式為，將權重初始化的方法使用normal，啟動函數使用softmax，損失函數使用交叉熵(Cross Entropy)，優化器使用adam[11]，評估準確率方法使用accuracy，下一步驟將進行模型的訓練，再把2D Ising model的資料帶入訓練好的模型，再使用python函式庫中的matplotlib畫出溫度與輸出層結果的圖形。

#### (五) 預期結果

採用2D Ising model並使用機器學習的方法，建立MLP，利用得到的資料畫出溫度與輸出層結果的圖形，來觀察產生相變的曲線變化及晶格為有序或無序，至於精確的溫度為 $(1 \div \ln(1 + \sqrt{2}))$ ，觀察不同L的2D Ising model所呈現的曲線之間的差別，預期在圖表上看到，不同L的2D Ising model所呈現的曲線，有一些細微差別，L較大的Ising model需要比較高的溫度才會產生相變，及研究多層感知器(MLP)判斷2D Ising model為有序或無序。

#### (六) 結論

使用2D Ising model，計算出自旋之間的相關函數，使用MLP建立出模型，分別建立出L為10和20的模型，畫出圖溫度為x軸，輸出層的資料為y軸，所畫出的圖形較大L的2D Ising model需要比較高的溫度才會產生相變，未來將會使用不同的模型如:Potts model，也會以不同的建立神經網路方法如卷積神經網路(CNN)來與現有的MLP來比較哪一種才是比較適合、更精確或更明確的建立神經網路方法進行本實驗。

#### (七) 參考文獻

- [1] Carrasquilla, J. & Melko, R. G. Machine learning phases of matter. Nat. Phys. 13, 431–434 (2017).
- [2] Beach, M. J. S., Golubeva, A. & Melko, R. G. Machine learning vortices at the Kosterlitz-Thouless transition. Phys. Rev. B. 97, 045207 (2018).
- [3] Suchsland, P. & Wessel, S. Parameter diagnostics of phases and phase transition learning by neural networks. Phys. Rev. B. 97, 174435 (2018).
- [4] Zhang, W., Liu, J. & Wei, T.-C. Machine learning of phase transitions in the percolation and XY models. Phys. Rev. E. 99, 032142 (2019).
- [5] Rodriguez-Nieva, J. F. & Scheurer, M. S. Identifying topological order through unsupervised machine learning. Nat. Phys. 15, 790–795 (2019).
- [6] Berezinskii, V. L. Destruction of Long-range Order in One-dimensional and Two-dimensional Systems having a Continuous Symmetry Group I. Classical

- Systems. Sov. Phys. JEPT 32, 493–500 (1970).
- [7] Berezinskii, V. L. Destruction of Long-range Order in One-dimensional and Two-dimensional Systems Possessing a Continuous Symmetry Group. II. Quantum Systems. Sov. Phys. JEPT 34, 610–616 (1972).
- [8] Kosterlitz, J. M. & Thouless, D. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. J. Phys. C: Solid State Phys. 6, 1181–1203 (1973).
- [9] Kosterlitz, J. M. The critical properties of the two-dimensional xy model. J. Phys. C: Solid State Phys. 7, 1046–1060 (1974).
- [10] Swendsen, R. H. & Wang, J. S. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations. Phys. Rev. Lett. 58, 86–88 (1987).
- [11] Kingma, D. P. & Adam, J. B. A method for stochastic optimization. arXiv:1412.6980 (2014).