

Self-supervised learning on q-state clock model

Shu-Min Lin , Kwai-Kong Ng

Department of Applied Physics, Tunghai University, Taichung, Taiwan

為了尋找 q-state clock model 中的Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT)相變，從q=2的Ising model著手，構建Convolutional neural network(CNN)，以分類的方法預測spin configurations所對應之溫度。目前結果直至11類時model的準確度可以超過50%。

■ 介紹

- Self-supervised learning在訓練模型時會賦予資料label進行訓練。
- 以機器學習的方法，尋找q-state clock model 中的Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT)相變。
- q-state clock model模型主要是用以描述自旋組態的模型，不同的q值代表允許幾種不同方向的spin。
- BKT相變為q-state clock model 當q 值 ≥ 5 的時候才會出現的一種相變。

■ 研究方法

- (1)數據預處理(2)建立模型(3)訓練模型(4)評估模型準確度(5)進行預測
- 以機器學習的方法構建CNN模型。
- 以spin configurations為特徵。
- 溫度label以one hot encoding做數據預處理，此方法會賦予類別一向量，向量元素中只有一位為1其餘皆為0，多少個類別決定向量元素個數：

```
[[1. 0. 0. ... 0. 0. 0.]  
 [1. 0. 0. ... 0. 0. 0.]  
 [1. 0. 0. ... 0. 0. 0.]  
 ...  
 [0. 0. 0. ... 0. 0. 1.]  
 [0. 0. 0. ... 0. 0. 1.]  
 [0. 0. 0. ... 0. 0. 1.]
```

Fig.1 One-hot encoding 示意圖

- 進行預測時，藉由BKT相變在臨界溫度時，出現某些異常特性來找尋臨界溫度。
- 以q-state clock model，q=2，溫度0.05~4(K)每0.05劃分一個溫度共80個溫度，每個溫度1000筆資料，共80000筆的資料訓練model，並以分類方式尋找相變臨界溫度。

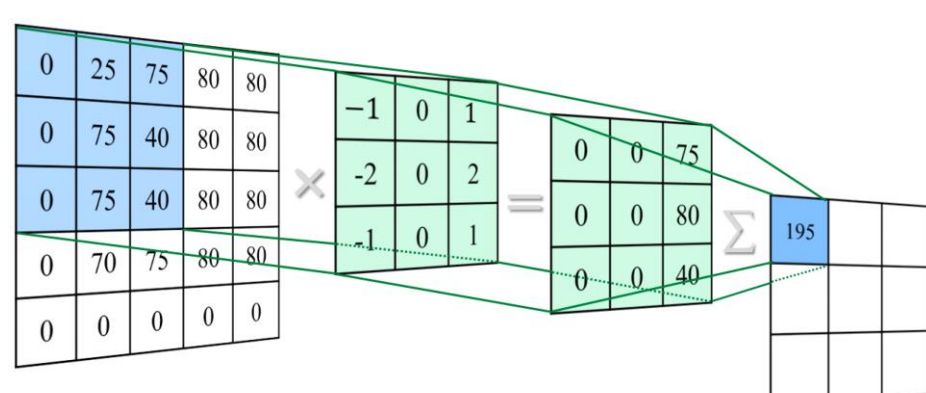


Fig.2 kernel特徵擷取示意圖

■ 結果與討論

- 結構為兩層的2D CNN model，參數kernel數分別為128、64；kernel size 3x3；pooling size 2x2；L=20。
- 將溫度等分5類，模型的validation accuracy 到達80%。
- 將溫度等分11類，模型的validation accuracy 到達60%。
- validation accuracy突然到達震盪平均後準確度便不隨訓練次數增加而增加。

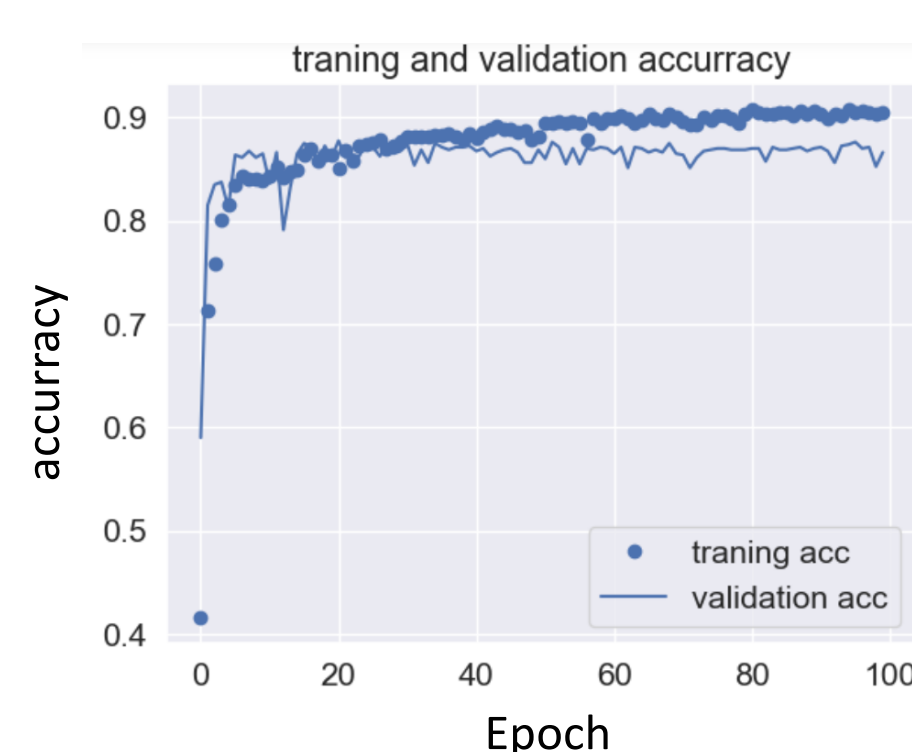


Fig.3 5個分類溫度之model的accuracy

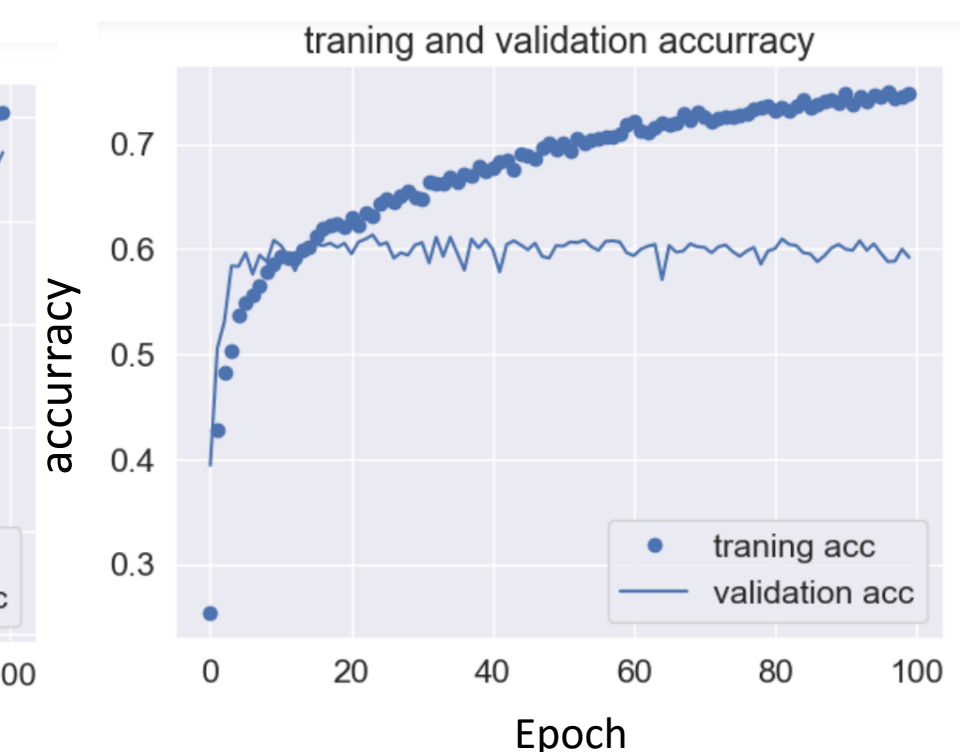


Fig.4 11個分類溫度之model的accuracy

■ 未來的方向

- 將訓練後的模型進行預測。
- 目前只涉及q-state clock model 當q=2時的Ising model，未來會嘗試q為其他值的狀況。
- 嘗試優化模型準確度。
- 分類方法其侷限性在於只能得到某些特定值的溫度所以接下來將嘗試regression方法來實現能夠預測任意溫度的model。

■ References

[1] New J. Phys. 24 (2022) 043040