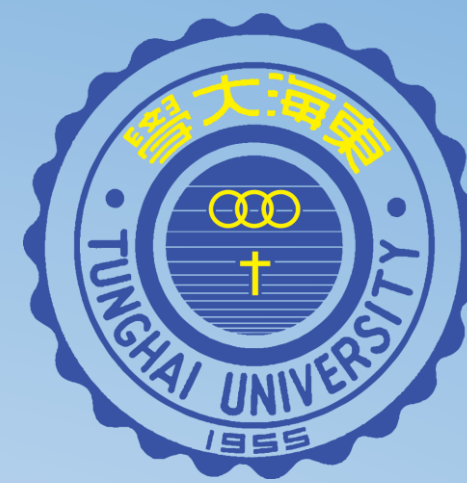


Classification of phases using autoencoder

余彥承
東海大學應用物理系 三年級
指導教授：吳桂光



東海大學
TUNG HAI UNIVERSITY

簡介

我們試著使用基於CNN的自編碼器(autoencoder)，探討是否可以學習Generalized XY model的不同phases的特徵。經過驗證過後，在 $\Delta < 0.4$ 的條件下，基於CNN的autoencoder只能夠找出ferromagnetic phase跟nematic phase之間的phase transition，而在 $\Delta \geq 0.4$ 的條件下，可以學習到ferromagnetic phase跟disordered phase間的phase transition。我們初步判斷，可能是因為低溫的兩個相之間的phase transition與低溫到高溫之間的phase transition是屬不同種類的，才會導致autoencoder無法同時學習到它們的特徵。

模型配置

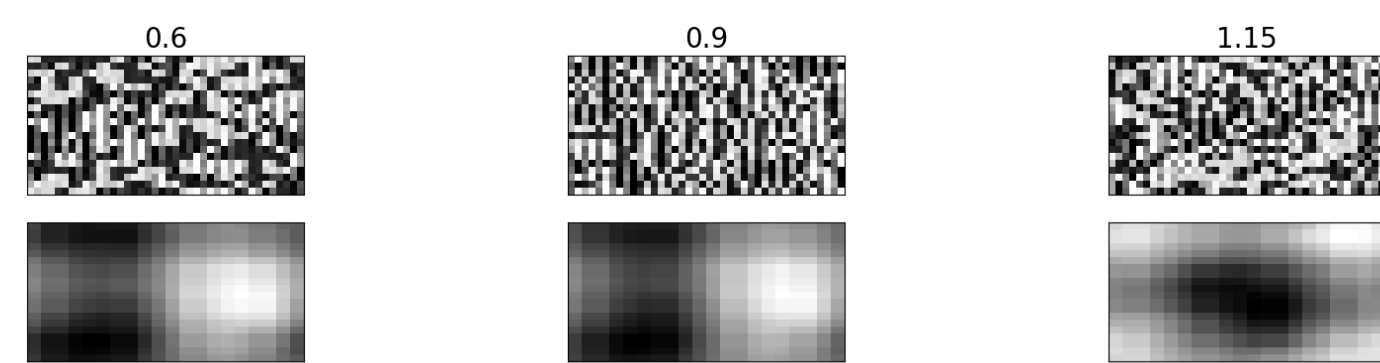
Generalized XY model跟一般經典的XY model的差別在於，在後項加入項列耦合，並用參數 Δ 來調整兩者的比例，讓模型呈現兩個模型的競爭，其Hamiltonian為

$$H = -\sum[\Delta \cos(\theta_i - \theta_j) + (1 - \Delta) \cos(q\theta_i - q\theta_j)]$$

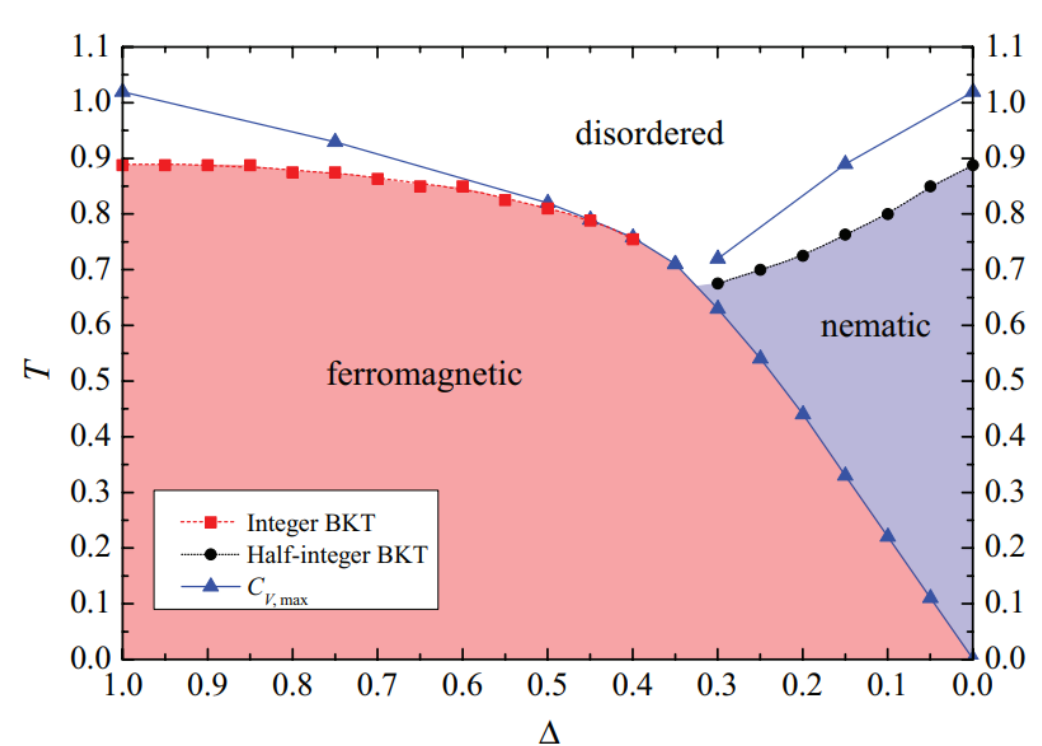
我們將原本的自旋方向換成自旋在兩個軸上的分量，也就是其cos及sin值，能更精確地描述自旋的方向，故 $L=20 \times 20$ 的模型會變為 $L=20 \times 40$ 。

輸入與輸出

將輸入資料與輸出資料可視化後的結果，標籤上標示溫度，上面一排為輸入資料，下面一排為輸出資料。



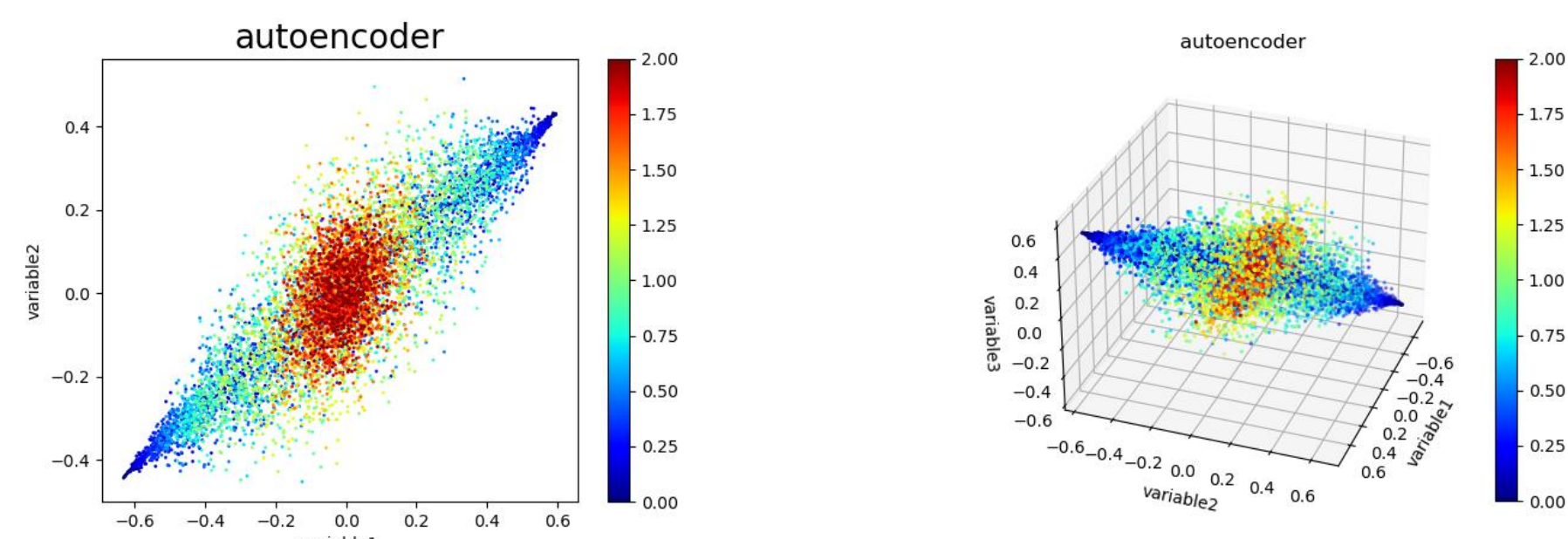
相圖



- 左圖為Ref.[3]得出的GXY model相圖，隨著 Δ 的改變，從低溫到高溫的條件下，會從三個相，變為兩個相。可以看到從三相變為兩相的界線，約為 $\Delta \approx 0.33$ 。
- 根據Ref.[3]的描述，低溫下ferromagnetic-nematic的transition為Ising-like，但高溫下nematic-disordered或ferromagnetic-disordered的transition為BKT transition。

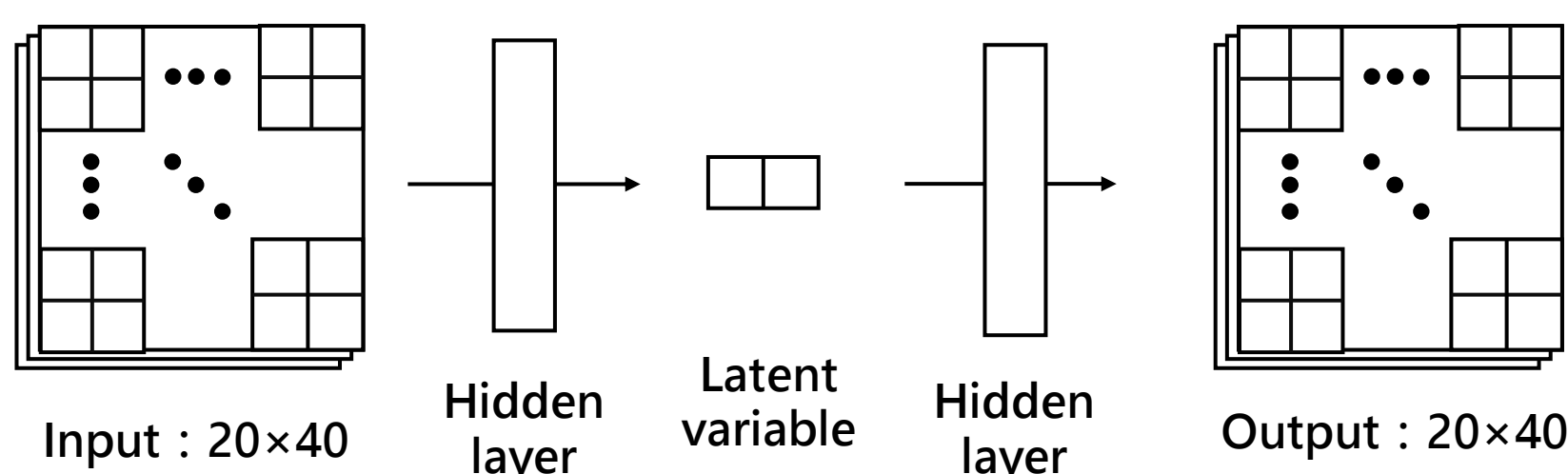
特徵參數作圖

- 左圖為兩個特徵參數作圖的二維分布圖，可以看到高溫下的模型會集中在中間的區域，而低溫則會集中分佈在左下及右上兩邊。
- 右圖為三個特徵參數的三維分布圖，同樣也可看到高溫及低溫會分開集中在不同區域。



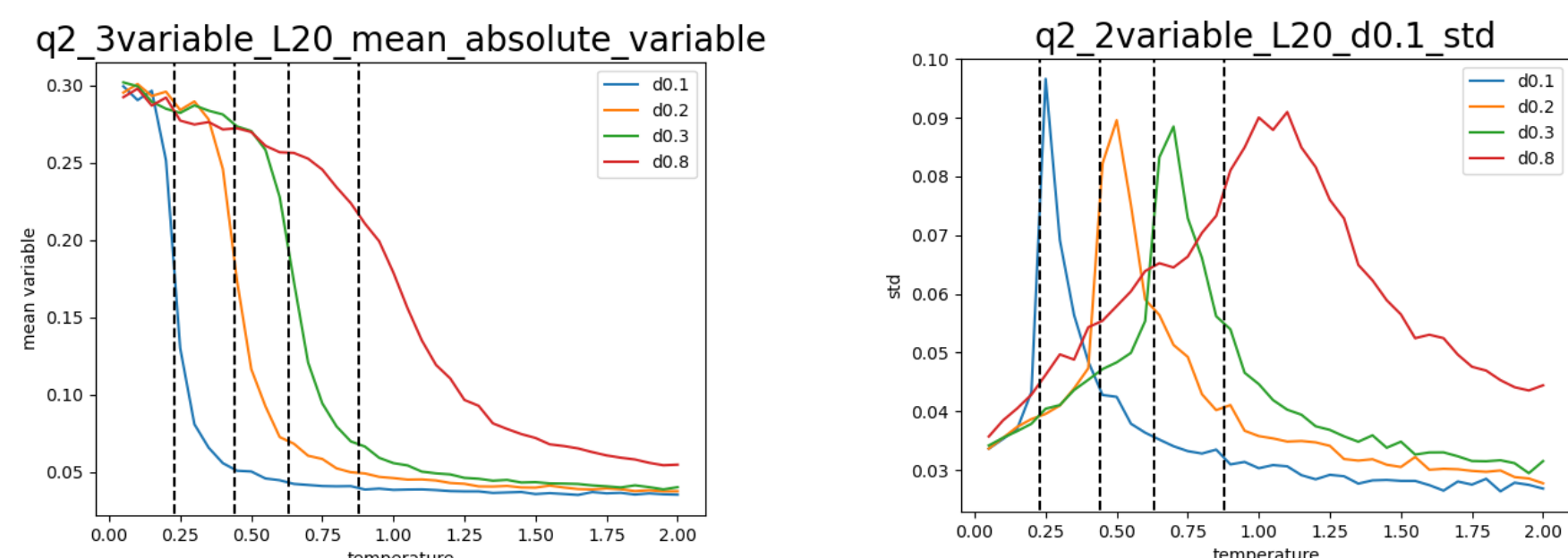
CNN自編碼器

我們採用基於CNN的自編碼器，經過hidden layer壓縮維度後，將原本的數據壓縮成2維或3維的latent variable，再經過一次hidden layer後，還原成原本維度的數據。並經過損失函數計算損失值，更新模型的權重，我們採用均方誤差(mean square error)當作損失函數。



平均值與標準差

- 左圖為將特徵參數做平均後跟溫度的比較圖，可以看到接近phase transition的地方，會有數據崩潰的情形。
- 右圖則是平均值的標準差與溫度的比較，在接近transition point的標準差，會有一個峰值。



結論

從本次的方法可以看出，基於CNN的自編碼器可以學習低溫之間，ferromagnetic phase和nematic phase之間transition的特徵，但卻不能學習高溫下nematic phase和disordered phase之間的特徵。我們初步判斷可能是因為兩個之間的transition是屬於不同種類的的原因，低溫下的transition是屬於Ising-like的transition，但高溫的transition是屬於BKT的transition。

但是同樣的結論下，卻不能解釋為何在 $\Delta \geq 0.4$ 下，可以學習到高溫disordered phase與低溫ferromagnetic phase間的phase transition，因為按照Ref.[3]的描述，這之間的phase transition也屬於BKT transition，關於這部分還需要後續的討論，也不排除程式計算錯誤的問題。

參考文獻

- [1] Sebastian J. Wetzel Phys. Rev. E 96, 022140 – Published 18 August 2017
- [2] Jieli Wang, Wanzhou Zhang, Tian Hua, and Tzu-Chieh Wei Phys. Rev. Research 3, 013074 – Published 22 January 2021
- [3] David M. Hübscher and Stefan Wessel Phys. Rev. E 87, 062112 – Published 10 June 2013