

# Supervised Machine Learning the Classical Spin Models

作者: 趙淨(S10210006)

指導教師: 吳桂光 教授

\*Email: [s10210006@thu.edu.tw](mailto:s10210006@thu.edu.tw)

## 摘要

此專題報告主要想透過監督式機器學習的方法，探討分類和迴歸模型在二維 Ising 模型的表現和限制，了解如何準確地從給定的自旋組態中，辨別其對應的溫度，以及預測相關長度、能量和磁化強度，並在未來嘗試將此方法應用在其他模型中。

## 研究計畫內容

### (一) 研究動機與研究問題

凝聚態物理學是對電子、原子核、磁矩、原子或量子位元的無限複雜組合的集體行為的研究，其中一項核心任務是識別系統的不同相變，並在參數空間中找到分隔這些階段的關鍵點。傳統上計算序參數是定義相和相變的一種方式，然而某些相並沒有明確的序參數，即使存在某些序參數，但在實驗中很難測量。而機器學習技術有助於解決這種問題，其通常分為監督學習、非監督學習和強化學習，是研究從數據中獲取經驗來提高性能的算法。機器學習常被用於圖像分類、目標檢測、自動駕駛汽車、語音識別和許多其他依賴數據的任務。最近機器學習方法已被證明可以解決凝聚態問題，像是卷積神經網路 (CNN) 已成功應用於二維和三維系統中的相分類，還有其他用於研究 disordered quantum systems、Bose-Hubbard 模型、Blume-Capel 模型、highly degenerate biquadratic-exchange spin-one Ising variant 和二維 XY 模型，以及材料特性等，這樣的研究有助於理解材料的性質隨溫度的變化，以及對相變和其他物理現象的預測。

在這裡，我們想引用參考文獻[1]的方式，讓機器從數據中獲取經驗來提高性能，探討機器學習分類和迴歸模型在二維 Ising 模型的表現和限制，了解如何準確地從給定的自旋組態中辨別其對應的溫度，以及預測相關長度、能量和磁化強度，並期待未來能應用在其他的模型中。

### (二) 文獻回顧與探討

Ising 模型主要的目標是透過數學方法研究自旋之間的相互作用，以及外部磁場對整個系統的影響，可以用來探討相變和臨界現象等磁性行為，它是統計物理學和凝聚態物理學中被廣泛使用的一種理想化模型。Ising 模型將材料分割成一個微觀「自旋」組成的格點網路，每個自旋代表了材料中的一個微小磁矩，而自旋可以取兩個離散的值，通常是+1或-1。這些自旋之間存在的相互作用可以 Ising Hamiltonian 的能量函數來描述。

$$H = -J\sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \mu B \sum_i S_i$$

其中  $H$  是系統的哈密頓量 (描述系統總能量的函數)； $J$  表示相互作用強

度； $\langle i, j \rangle$  表示相鄰自旋之間的求和； $s_i$  和  $s_j$  是自旋； $\mu$  是磁矩； $B$  是外部磁場。

參考文獻[1]研究使用機器學習方法中的神經網絡(CNN)，主要探討分類和迴歸模型在二維 Ising 模型的表現和限制。在分類模型中，輸入給定的自旋組態讓機器判斷其對應的溫度，探討其分類出不同溫度數量的極限；在迴歸模型中，預測方晶格 Ising 模型的能量、磁化強度和相關長度隨溫度變化的情況。

Figure 1.

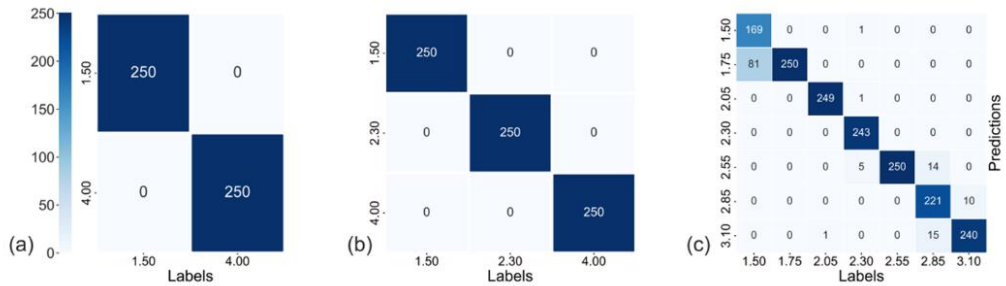
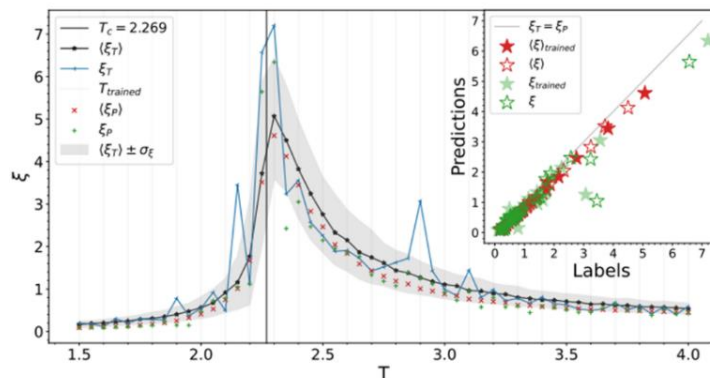


Figure 1. 為溫度分類的混淆矩陣，說明分類模型分類出不同溫度數目的情形。水平軸表示真實值、縱軸表示預測值，顏色條表示每個條目中的樣本數。(a)二類： $T \in \{1.5, 4.0\}$ ，(b)三類： $T = 1.5, 2.3 \sim T_c$  and  $4.0$ ，(c)七類： $T \in \{1.50, 1.75, 2.05, 2.30, 2.55, 2.85, 3.10\}$ 。圖片來源：參考文獻[1]

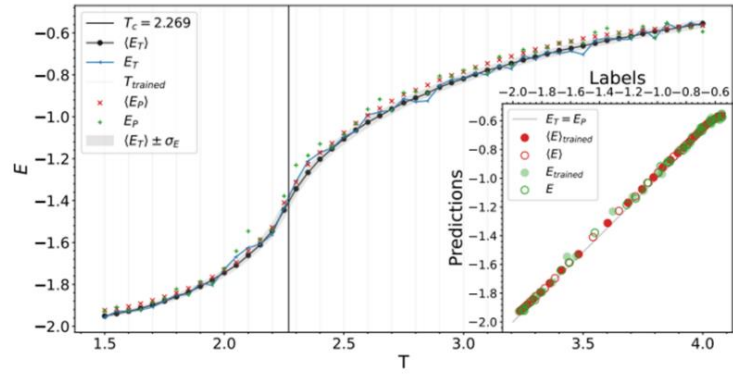
由圖可以觀察到當類別數增加到 7 時，混淆矩陣會出現非對角線項，表示“混淆”，即誤報和漏報，且大部分混淆發生在最高和最低溫度。

對於迴歸模型保持相同的網絡架構，但將輸出層調整為迴歸模型，使單個密集節點代替softmax激活輸出層，此單個節點返回所需的數值估計，而損失函數使用均方誤差 (MSE)。

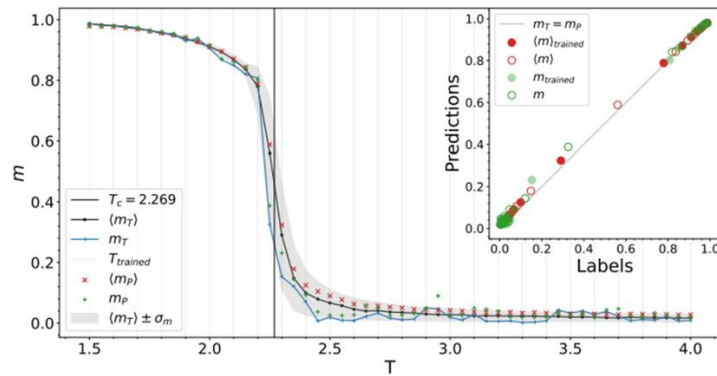
Figure 2.



(a) 相關長度對溫度的函數



(b) 能量對溫度的函數



(c) 磁化強度對溫度的函數

Figure 2. 說明迴歸模型分別對相關長度、能量和磁化強度的預測情形。圖片來源:參考文獻[1]

在迴歸模型預測相關長度、能量和磁化強度上，論文結果顯示除了相關長度預測值低於真實值的系統趨勢使標準差的波動最大，而預測能量和磁化強度的整體性能良好。這對於網路未經訓練的中間溫度也有效，從而證明了網路的泛化能力。

### (三) 研究方法及步驟

對於 2D 中的 Ising 模型進行機器學習的研究，仿效論文的方式建立網路模型，並可將步驟大致分為：

- (1) 使用 standard Monte-Carlo simulations 生成系統為  $20 \times 20$ 、 $40 \times 40$ 、 $60 \times 60$  自旋組態的樣本。
- (2) 建立網路模型、讀取自旋組態的數據。
- (3) 利用公式計算能量和磁化強度。
- (4) 使用分類模型讓機器學習辨別不同自旋組態對應的溫度，並繪製混淆矩陣討論分類結果。
- (5) 使用迴歸模型預測不同溫度的能量和磁化強度，並與實際值進行比較。

使用 standard Monte-Carlo simulations 生成大量系統為  $20 \times 20$ 、 $40 \times 40$ 、 $60 \times 60$  且不同溫度的自旋組態樣本，作為機器學習方法的訓練和驗證數據，溫度是由 80 個不同溫度  $T = 0.05, 0.1, 0.15, \dots, 4$  組成，每個溫度

有 1000 筆樣本，並將每個溫度中 25% 的數據保留為交叉驗證數據。與論文不同的是，由於訓練的樣本大小不同，為了有更好的訓練結果，我們在卷積層和池化層的層數會做些調整。

自旋組態透過以下公式可計算出能量  $E$ 、磁化強度  $m$ ，其定義分別如下：

$$E = - \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad m = \frac{1}{N} \left| \sum_i s_i \right|$$

分類模型使用數個卷積層的不同卷積神經網絡(CNN)架構，皆具有  $3 \times 3$  內核，每層步長 1 和過濾器的數量以雙倍數量增加 (16、16、32、32、...) 和  $2 \times 2$  池化層，使用ReLU激活函數，而層與層之間有 25% 的 dropout，三個密集層大小分別為 512、128，而最後一個密集層為類別數  $K$ ，並在輸出層的激活函數使用softmax，損失函數使用分類交叉熵。

對於迴歸模型的網絡架構調整方式如分類模型，但將輸出層使用單個密集節點代替softmax激活輸出層，此單個節點返回所需的數值估計，而損失函數使用均方誤差(MSE)。

#### (四) 現有結果

Figure 3.

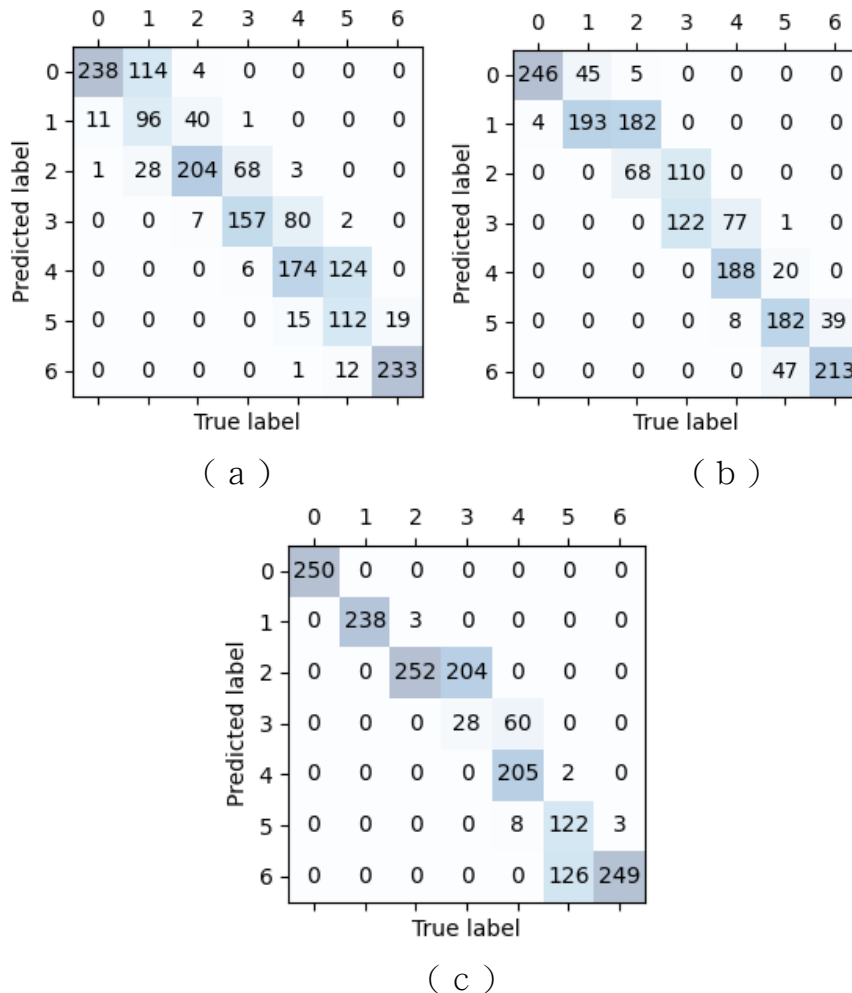


Figure 3. 是分別系統為  $20 \times 20$ 、 $40 \times 40$ 、 $60 \times 60$  的分類情形

目前分類的情形還沒有非常理想，混淆矩陣皆出現非對角項的分類，並且大部分都在相鄰的溫度有混淆的情形。往後會再繼續研究適合的參數來達到更佳的分類結果。

Figure 4.

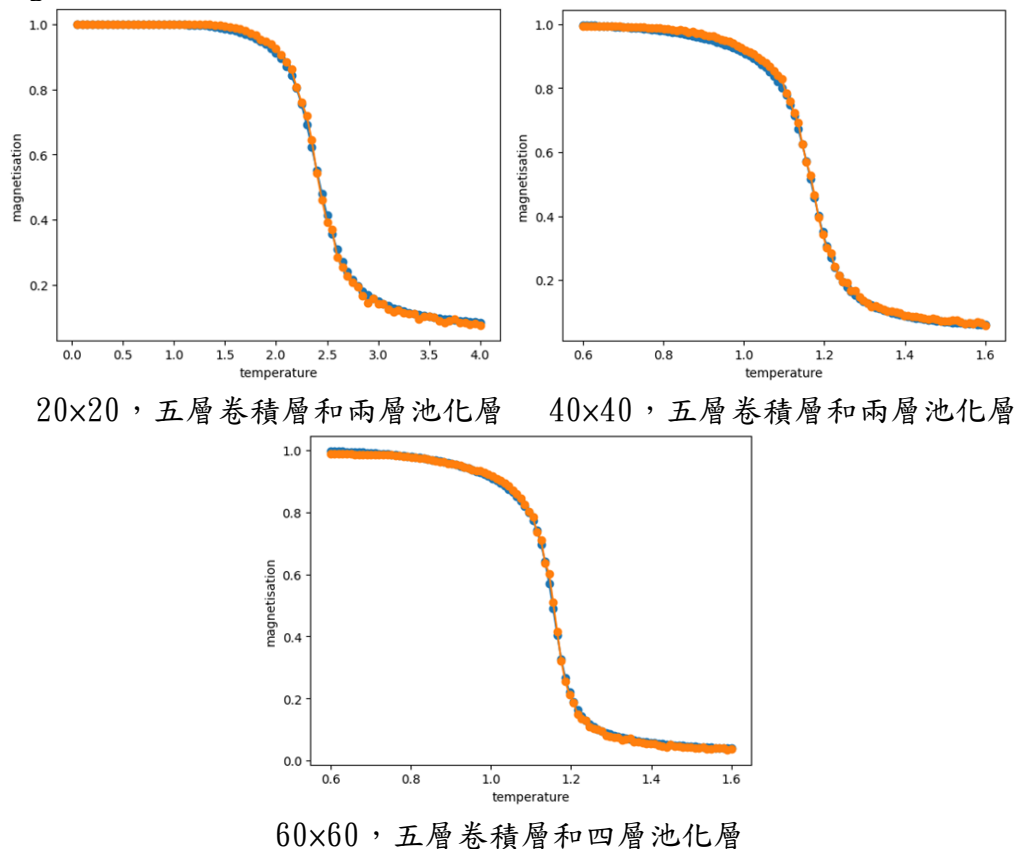


Figure 4. 分別為20x20、40x40、60x60的系統中，磁化強度的預測情形，藍色為真實值、橘色為預測值。

由於訓練樣本的系統大小和論文的不同，按照論文提供的架構，並無法得到適合的訓練結果，所以在網路架構上有做些微的調整，使迴歸預測的結果更理想。我們可以觀察到在適當調整網路架構後，預測磁化強度的結果皆相當接近實際值。在調整的過程中，我們發現無謂的增加卷積層的數量並不會得到更好的預測值，而過多的池化層也會使預測的結果變的更不精準。接下來還會探討能量和相關長度的預測和各個標準差的波動變化情形，以及探討應用在其他的模型的效果。

## (五) 參考文獻

- [1] Burak Civitcioglu, Rudolf A. Römer and Andreas Honecker, Machine Learning the Square-Lattice Ising Model, J. Phys., Conf. Ser. 2207 012058 (2022)
- [2] Tanaka A and Tomiya A, Detection of Phase Transition via Convolutional Neural Networks, J. Phys. Soc. Jpn. 86 063001 URL (2017)
- [3] Carrasquilla J and Melko R G, Machine learning phases of matter, Nat. Phys. 13 431{434 URL (2017)