

Classification of universality class using machine learning

簡靖諺(s12210011)

指導教師: 吳桂光 教授

*Email: 1212pppok@gmail.com

摘要

臨界現象描述物質在臨界狀態及其鄰近區域的特殊物理性質。近年來，利用機器學習研究統計物理系統的相變問題已成為重要趨勢。本研究針對 Ising 模型等統計系統，分析監督式神經網路 (NN) 輸出函數之變異數 (Variance of Output Function, VOF) 隨溫度的演化行為。VOF 在臨界溫度附近表現出顯著特徵，透過對其峰值寬度進行有限尺寸標度 (Finite-size Scaling, FSS) 分析，本研究嘗試提取出對應普適類 (Universality Class) 的關聯長度指數 ν 。

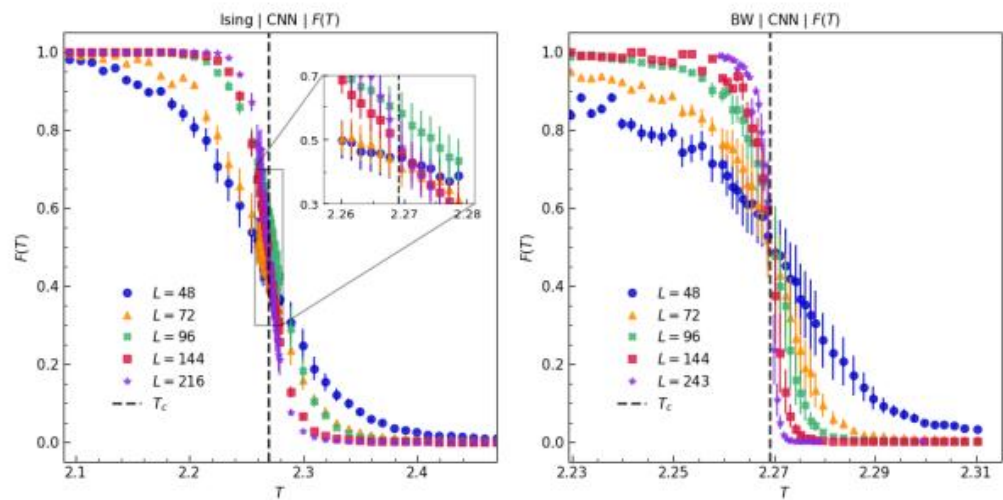
研究計畫內容

(1) 研究動機與研究問題

自 Carrasquilla 與 Melko (2017)[1] 開創以機器學習識別相變以來，機器學習已成為研究臨界現象的工具之一，然而物理學界仍質疑神經網路是否真正學到了普適類的臨界行為，抑或僅是單純的數據擬合。本研究重點在於探討何種神經網路觀測量能正確反映物理機制。

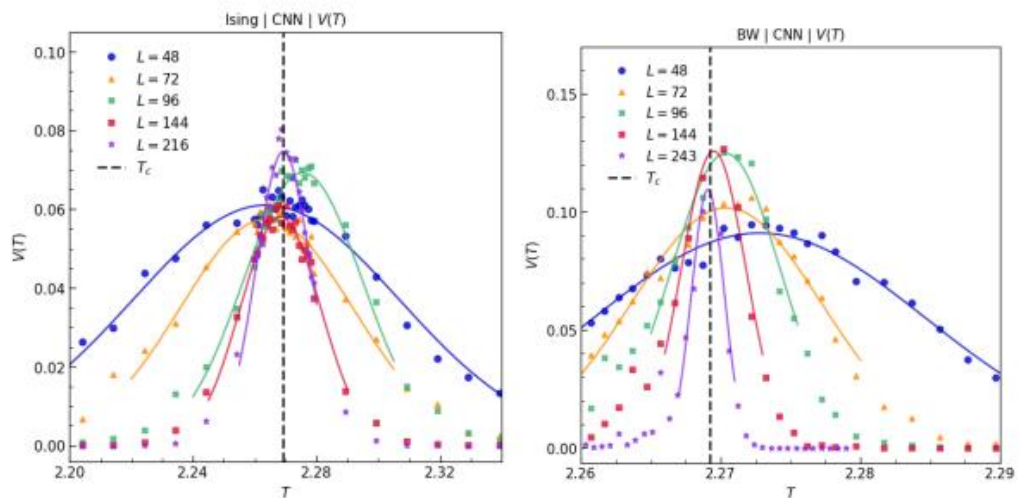
(2) 文獻回顧與探討

研究提出，相比於不穩定的平均輸出，網路輸出的「變異數」(VOF) 才包含關於相變最可靠的資訊。本研究旨在依據論文[2]，驗證 VOF 峰值的寬度是否遵循由關聯長度指數控制的有限尺寸標度律，並探討不同網路架構對提取臨界指數準確性的影響，從而建立更穩健的物理分析方法，學界多聚焦於神經網路的平均輸出 $F(T)$ ，並假設其在臨界點 T_c 處應為 0.5。然而，論文中深入探討發現此假設缺乏普適性， $F(T)=0.5$ 的位置會隨網路架構 (如 FCNN、ResNet) 與系統尺寸產生非物理性偏移，導致估計誤差。為解決此問題，論文中提出以「輸出變異數」(VOF) 作為更穩健的物理指標，指出 VOF 類似於磁化率，其峰值寬度遵循有限尺寸標度律 $\sigma(L) \sim L^{-1/\nu}$ 。結果證實，不同架構的神經網路皆能捕捉到正確的 ν 值，顯示機器確實學會了普適類特徵而非單純記憶數據。[2]



圖一. Ising model & BW model 對應之不同 L 順磁機率[3]

雖然在這張針對 CNN 的結果圖中，曲線似乎在 $F(T)=0.5$ 處與 T_c 重合，這符合早期文獻[1]關於 Ising 模型的觀察。然而，論文作者在文中強調，這種「0.5 判定準則」並非對所有網絡架構都成立（例如 FCNN 或 ResNet 可能會有偏移），且 $F(T)$ 的標準差（即圖中數據點的誤差棒）在臨界點附近顯著增大，這暗示了比起單純看 $F(T)$ 的平均值，分析其波動（變異數）可能包含更豐富的物理資訊。



圖二. Ising model&BW model 之變異數[3]

與 $F(T)$ 不同， $V(T)$ 呈現出典型的鐘形曲線特徵，其形態與物理學中的磁化率高度相似。觀察圖二可知，無論是 Ising 模型（左）或 Baxter-Wu 模型（右）， $V(T)$ 的峰值位置皆精準地對應於理論臨界溫度 T_c ，且未出現顯著的偏移現象。更重要的是， $V(T)$ 展現了極為清晰的有限尺寸效應：隨著系統尺寸 L 的增加，峰值寬度顯著收縮。這種行為暗示了 $V(T)$ 的峰寬 $\sigma(L)$ 與系統的關聯長度存在內在聯繫。

(3) 研究方法及步驟

大致步驟為：

1. 數據生成與標記
2. 建構模組化網路架構
3. 迭代式訓練
4. 提取分類長度尺度
5. 驗證縮放行為與相變類型

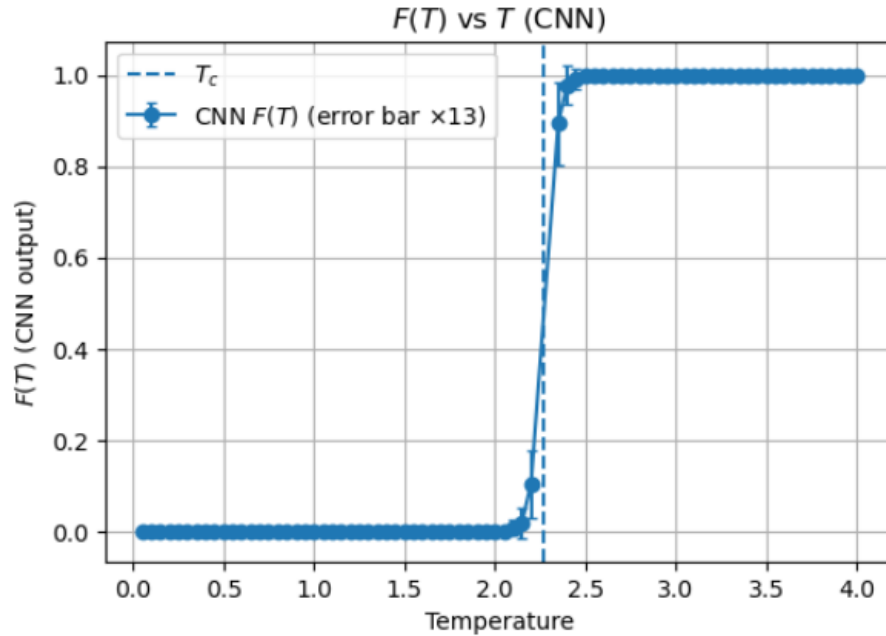
數據生成與標記，數據生成目前是以 Ising model、Metropolis 蒙地卡羅演算法(Monte Carlo algorithm)並搭配 wolff 更新以提高效率，分別模擬 20×20 到 50×50 的晶格系統，針對每個溫度 T 取 1000 個快照，為了保持樣本獨立性，每個快照至少間隔 $2 \tau_{\text{corr}}$ 個，並且將 $T < T_c$ 標記為鐵磁相，如果 $T > T_c$ 則為順磁相[3]。

建構模組化網路架構，目前使用了 CNN 作為網路架構[2]，使用 TensorFlow&Keras 建構的，給定的 Kernel Size 為 3×3 ，第一層的池化為 2×2 第二層的卷積把濾鏡數量增加到 32 個，並將 Kernel 設為 2×2 掃描特徵。這套架構的設計邏輯深受統計物理啟發，其中第一層的 3×3 卷積核恰好對應於 Ising 模型中的最近鄰交互作用範圍，負責捕捉局部的自旋關聯。隨後的 2×2 最大池化層 (Max Pooling) 則在物理上類比於重整化群中的粗粒化 (Coarse-graining) 過程，透過降低圖像維度來保留主要的磁疇結構特徵。進入第二層後，濾鏡數量倍增至 32 個，目的是在經過粗粒化後的特徵圖上提取更深層、更抽象的幾何模式。經過再次池化與展平 (Flatten) 後，數據進入包含 128 個神經元的全連接層進行邏輯推演。為了應對物理系統中普遍存在的熱漲落雜訊，架構中特別引入了 Dropout 層 (設為 0.5)，強迫網絡學習整體的序參數變化而非死記特定的隨機組態，從而避免過擬合。最終輸出層採用 Sigmoid 激活函數，將結果壓縮為 0 到 1 之間的數值，直接對應系統處於鐵磁相的機率 F^T 。**迭代式訓練**，將蒙地卡羅模擬生成的自旋快照劃分為訓練集與驗證集，通常採用 8:2 的比例。配合 Adam 自適應優化器與二元交叉熵 (Binary Cross-entropy) 損失函數，網絡權重會在每一次迭代 (Epoch) 中逐步更新。

提取分類長度尺度，通過分析 VOF(神經網絡輸出函數的變異數)可以觀察到 VOF 的曲線圖是以高斯鐘行呈現的。

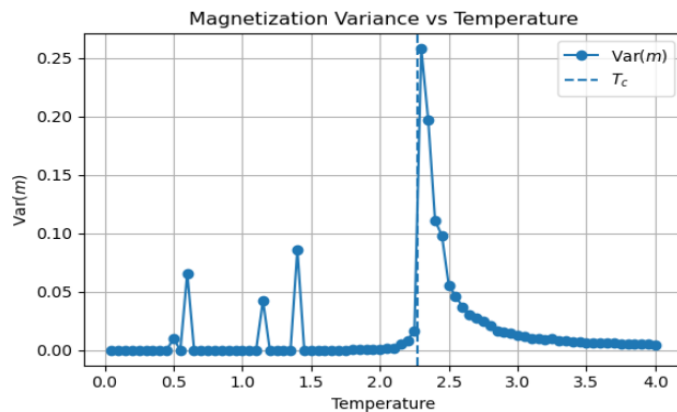
(4) (現有)結果及討論

目前已經分別使用 CNN 跑過了 $L=20$ 、 30 、 40 、 50 的，以 $L=30$ 來做說明



圖三. L=30 之 $F(T)$ vs T 順磁機率

圖三所表示的是在機器學習 CNN 後 $L=30$ 的 $F(T)$ vs T ，。圖中曲線顯示神經網絡判斷系統為高溫相的機率，隨溫度升高由 0 急劇躍升至 1，形成明顯的階躍變化，其轉折處精確對應了理論臨界溫度 T_c （虛線所示） [1]



圖四, L=30, 磁化強度變異數 $\text{Var}(m)$ 隨溫度變化圖

這張圖在理論臨界溫度 溫度=2.262 處存在顯著峰值，反映了系統在相變點附近的劇烈臨界漲落。低溫區 ($T < 1.5$) 的零星尖峰為演算法在有限取樣下的數值漲落，不影響對臨界溫度的識別。 [2]

(5) 個人貢獻主要項目及比重

前期資料生成由吳桂光教授提供，後期資料與機器學習由個人完成

(6) 預期結果

透過蒙特卡羅模擬強調了神經網路在臨界點的特徵一致性，結果顯示平均輸出 $F(T)$ 存在非物理誤差。為了解決這個問題，研究引入了輸出變化

(VOF)，這是一種更可靠的度量，可以與磁化率進行比較，並且在臨界區域中具有較大的高斯鐘形波動。具體而言，VOF 峰的寬度符合有限尺寸標度律，這使得可以精確地確定臨界指數。Ising 模型和 Baxter-Wu 模型的比較表明，機器學習能夠正確檢測相變中的物理機制，但它並非僅僅依賴影像記憶。

(7) 結論

基於目前的研究結果，我們證實了 CNN 能夠進行相態分類，透過輸出變異數 (VOF) 的有限尺寸標度律，真正捕捉到臨界現象中的關聯長度發散機制。後續研究方向想要以 CNN 架構應用於其他具有不同對稱性或普適類的物理模型 (如 XY 模型) 時，是否仍具備識別相變的泛化能力[5]，或是對比非監督式學習與其他監督式架構在缺乏標籤的狀況下[4]，是否也能透過 VOF 指標展現對臨界現象的物理感知，希望可以將研究結果應用在統計物理的領域。

(8) 參考文獻

- [1] J. Carrasquilla and R. G. Melko, Nature Physics 13, 431 (2017)
- [2] Vladislav Chertenkovi,1,2, Evgeni Burovski2, and Lev Shchur1 2305.03342v2(2023)
- [3] A. Morningstar and R. G. Melko, Journal of Machine Learning Research 18, 1 (2018)
- [4] Discovering phase transitions with unsupervised learning–Lei Wang–2016 / *Physical Review B* (2016)
- [5] Matthew J. S. Beach, Anna Golubeva, Roger G. Melko– 2018 / *Physical Review B*(2018)