مطالعهٔ گذار فاز مدل آیزینگ کلاسیک با استفاده از یادگیری ماشین

کرم‌نژاد، هومن[۱]؛ سیوف جهرمی، سید سعید[۱]

[۱] دانشکدهٔ فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایهٔ زنجان، بلوار یوسف ثبوتی، زنجان

چکیده

مطالعه و بررسی گذار فازهای ماده در علم فیزیک از اهمیت و جایگاه ویژه‌ای برخوردار است. یافتن نقطه گذار فاز در سامانه‌های بس‌ذره‌ای بر پایهٔ تحلیل آماری، همواره دست‌یافتنی و امکان‌پذیر نیست. این سامانه‌ها انبوهی از اطلاعات را با خود به همراه دارند که می‌توان برای بررسی آن‌ها از راهکارهای مبتنی برکلان‌داده‌ها و یادگیری ماشین بهره برد. مدل آیزینک کلاسیکی ساده، مدلی متشکل از شبکهٔ اسپین‌های $\frac{1}{2}$ است که می‌توان به صورت تحلیلی رفتار آن را حول نقطهٔ گذار فاز مورد مطالعه قرار داد. گذار فاز در این مدل می‌تواند نمونهٔ خوبی برای آموزش به ماشین باشد. برای این منظور با استفاده از الگوریتم «مونت‌کارلو» سیر تحولی یک شبکهٔ ساده در همسایگی نقطهٔ گذار فاز شبیه‌سازی شده است و در ادامه با استفاده از یک شبکهٔ عصبی مصنوعیِ تمام‌بند گذار فاز مدل آیزینگ کلاسیکی به ماشین آموخته شده است.

***واژه‌های کلیدی**: یادگیری ماشین، شبکهٔ عصبی، گذار فاز و آیزینک کلاسیک.*

Machine Learning Phase Transition in Classic Ising Model

Karamnejad Hooman[1], Jahromi Saeed[1]

[1]Department of Physics, Institute for advanced studies in basic science, Zanjan

Abstract

Phase transition is an important subject in condensed-matter physics. There are cases where it is impossible to find the critical point of many-body systems according to analysis based on conventional approaches. Huge amount of data requiring machine learning and big-data analysis techniques. Locating phase transitions uses similar powerful tools. The Simple Ising classical model is based on a half-spin lattice. An appropriate application of machine learning is to learn a model to detect phase transitions and find critical points in a system. So that critical point of a system is verified. One usually prepares samples of the configuration of the Ising Hamiltonian, whereby Monte Carlo simulates the structure of the system around the critical point. These datasets will be infused as input data into a fully connected artificial neural network.

***Keywords:** Machine learning, Neural network, Phase transition, Classic Ising model*

مقدمه

در سال‌های اخیر استفاده از دانش شبکه‌های عصبی و پیرو آن یادگیری ماشین در علم فیزیک گسترش پیدا کرده است. از جمله این کاربردهای می‌توان به یادگیری ماشین در شاخهٔ فیزیک مادهٔ چگال و مبحث مهم و ویژهٔ گذار فاز اشاره کرد. یکی از ویژگی‌های جالب و جذاب یادگیری ماشین این است که ماشین بدون آگاهی از هامیلتونی سیستم قادر است موضوع یا ویژگی مشخصی از سیستم را یاد بگیرد. به عنوان مثال در یک شبکه مربعی ساده از ذرات، که با هامیلتونی آیزینگ تعریف و پیکربندی می‌شوند، می‌توان گذار فاز سیستم را با استفاده از یادگیری ماشین مورد بررسی قرار داد. مدل آیزینگ ساده کلاسیکی با هامیلتونی زیر تعریف می‌شود:

$$H = \sum_{<ij>} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \qquad (۱)$$

در این رابطه $S_i = \pm 1$ عملگرکلاسیکی اسپین $\frac{1}{2}$ است. همچنین عملیلت جمع اوّل بر روی همسایه‌های نزدیک $< ij >$ و جمع دوّم بر روی رأس‌های شبکه است. همچنین $J_{ij} = 1$ شدت برهمکنش تبادلی بین دو ذرهٔ i و j را نشان می‌دهد .

گذار فاز در این مدل به دلیل سادگی مدل، نمونهٔ مناسبی برای آموزش به ماشین است. می‌توان نشان داد که سیستم در عدم حضور میدان مغناطیسی خارجی$(h = 0)$، در دمای تقریبی ۲/۲۶ کلوین با گذار فاز روبرو می‌شود. نقطهٔ گذار فاز برای این مدل بر اساس رابطهٔ ۲ نوشته می‌شود.

$$T_c = \frac{2J}{ln(1 + \sqrt{(2)})} \qquad (۲)$$

شکست تقارن جهت مغناطش، در دماهای پایین‌تر از نقطهٔ گذار فاز، از ویژگی‌های بارز این مدل است. رفتار ویژگی‌های شناختهٔ شدهٔ سیستم از قبیل مغناطش، پذیرفتاری مغناطیس و گرمای ویژهٔ سیستم در نقطهٔ گذار فاز تغییر می‌کند و سیستم از یک فاز فرومغناطیس در دمای صفر به یک فاز پارامغناطیس نامنظم در دمای بالا گذار می‌کند. چنانچه پیکربندی تابع موج کلاسیکی سیستم در دماهای مختلف در دو سمت نقطهٔ گذار فاز، به عنوان دادهٔ آموزش به ماشین تزریق شود، ماشین می‌تواند نقطهٔ گذار فاز (دمای بحرانی T_c) را با دقت خوبی آشکار نماید. در این مقاله گذار فاز مدل آیزینگ کلاسیک را با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی مورد مطالعه قرار می‌دهیم. یافته‌های ما نشان می‌دهد که یادگیری ماشین نه تنها قادر به آشکارسازی گذار فاز در سیستم‌های ساده از قبیل مدل آیزینگ است، بلکه می‌تولند برای مطالعهٔ گذار فاز در مدل‌های پیچیده‌تر از جمله مدل‌هایی با نظم توپولوژیک نیز مورد استفاده قرار گیرد.

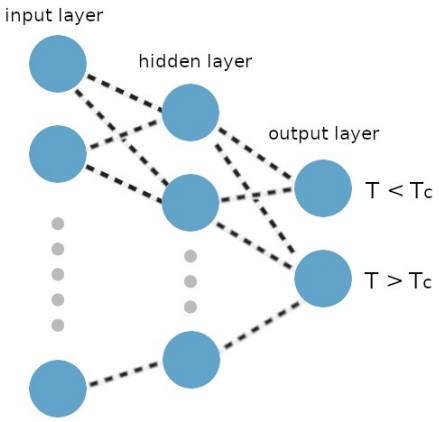
الگوریتم یادگیری ماشین

برای اینکه بتوانیم گذار فاز مدل آیزینگ را به ماشین آموزش دهیم در مرحلهٔ اوّل به تعداد زیادی نمونه که شامل پیکربندی‌های مختلف اسپینی از حالت پایه (تعادلی) مدل آیزینگ در دماهای مختلف است، نیاز داریم.

برای تولید نمونه‌ها و پیکربندی‌های حالت‌های تعادلی مدل آیزینگ کلاسیک در دماهای مختلف در دو سمت نقطهٔ گذار فاز، از روش مونت‌کارلو کلاسیک بر پایهٔ الگوریتم «متروپلیس»[۱] و نمونه‌گیری در آنسامبل کانونیک[۲] استفاده می‌کنیم. در این راستا ابتدا مدل آیزینگ را بر روی شبکهٔ مربعی با ابعاد مختلف $L \times L$ پیاده‌سازی کرده و برای هر دما تعداد ۱۰۰ پیکربندی اسپینی به عنوان داده‌های آموزشی برای ماشین تولید می‌کنیم. لازم به یادآوری است که نمونه‌گیری در هر دما در حالت تعادل صورت می‌گیرد. همچنین انرژی نمونه‌ها از تابع توزیع بولتزمان پیروی می‌کند.

در این پروژه برای آموزش ماشین از شبکه‌های عصبی تمام‌بند[۳] استفاده شده است. ساختار این شبکه در شکل ۱ آورده شده است. شبکهٔ پیش رو از سه لایه تشکیل شده است: لایهٔ ورودی، لایهٔ میانی (پنهان) و لایهٔ خروجی.

از آنجا که یادگیری شبکهٔ مورد نظر به صورت «با نظارت»[۴] صورت گرفته است؛ نیاز است که داده‌های تولید شده در مرحلهٔ قبل با برچسب[۱] از یکدیگر تفکیک شوند.



شکل ۱: معماری شبکهٔ عصبی تمام هم‌بند

به این منظور ما نمونه‌های تولید شده را به دو دسته تقسیم کرده‌ایم. نمونه‌هایی که در دمای پایین‌تر از گذار فاز قرار دارند و نمونه‌هایی که در دمای بالاتر از دمای گذار فاز هستند. این دو دسته را به ترتیب با برچسب‌های «صفر» و «یک» مشخص شده‌اند.

تعداد نرون‌های لایهٔ ورودی بر حسب طول شبکه (L) و به مقدار L^2 تعیین می‌شود. توجه داشته باشید که ورودی شبکهٔ عصبی تانسور مرتبهٔ یک (بردار) است. به همین جهت اطلاعات شبکهٔ مربعی به صورت یک رشته عدد (شامل مقادیر 1 و -1 به ازای اسپین $\frac{1}{2}$ و $-\frac{1}{2}$) به شبکهٔ عصبی تزریق می‌شود.

در پیاده‌سازی شبکهٔ عصبی، برای لایهٔ میانی ۱۰۰ نورون با تابع فعال‌ساز $ReLU$ در نظر گرفته شده است؛ و در نهایت به دلیل اینکه شبکهٔ عصبی وظیفه کلاس‌بندی اطلاعات ورودی را بر عهده دارد، در لایهٔ خروجی تنها دو نورون (به تعداد کلاس‌های موجود: $T < T_c$ و $T > T_c$) با تابع فعال‌ساز $sigmoid$ قرار داده شده است؛

گذار فاز ماشینی

برای اطمنیان از سلامت داده‌های شبیه‌سازی شده، این داده‌ها بر اساس روابط ۵ و ٦ مورد بررسی قرار می‌گیرند. رابطهٔ ۵ میانگین مغناطش سیستم و رابطهٔ ٦ مقدار پذیرفتاری مغناطیس سیستم را گزارش می‌کند. شکل‌های ۲ و ۳ به ترتیب برای روابط ۵ و ٦ و با استفاده از داده‌های به دست آمده از شبیه‌سازی «مونت‌کارلو» رسم شده‌اند.

$$M = \sum_{i}^{N} S_i \qquad (٤)$$

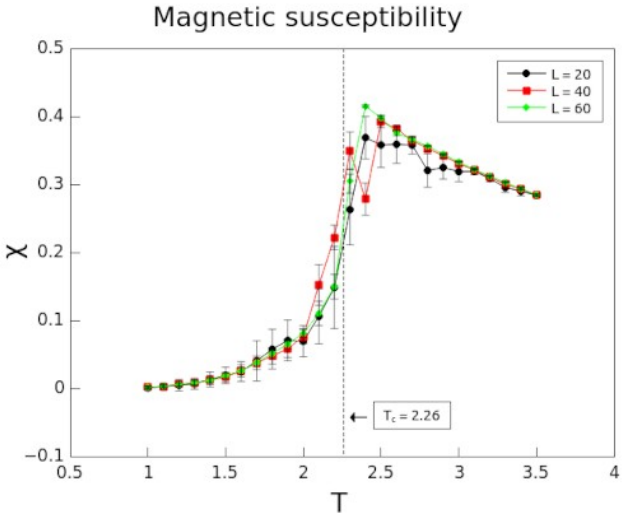
$$\frac{\partial < M >}{\partial B} = \beta(< M^2 > - < M >^2) \qquad (۵)$$

$$< m >= \frac{< M >}{N} \qquad (٦)$$

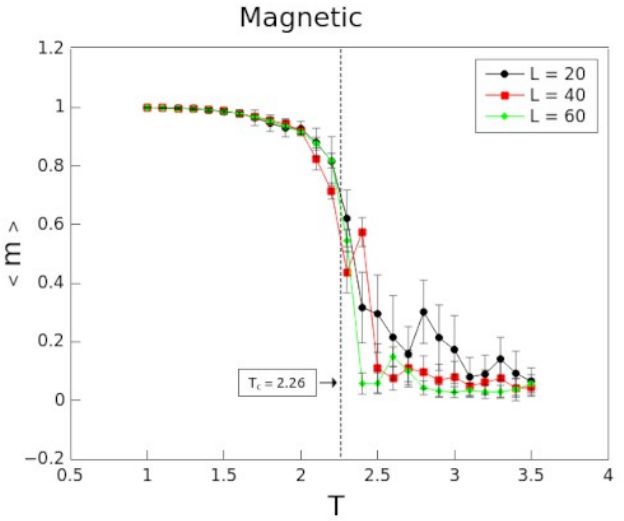
پس از اطمینان از صحت فیزیک نمونه‌های تولید شده به روش مونت‌کارلو آن‌ها را به عنوان دادهٔ آموزشی برای یادگیری ماشین مورد استفاده قرار می‌دهیم. شبکهٔ عصبی طی هر دوره یادگیری برای طول‌های مختلف شبکهٔ اسپینی، ۲٦۰ هزار نمونه را در ورودی خود دریافت کرده است. در ادامه برای بررسی سلامت یادگیری شبکه ۲٦۰ هزار دادهٔ آزمون به آن تزریق شده است تا نتیجهٔ یادگیری مورد ارزیابی قرار گیرد.

پس از یادگیری، شبکه عصبی توانسته است با دقت ۹٦ درصد نسبت به کلاس‌بندی نمونه‌ها اقدام کند. شکل ٤، نمودار وزن‌های لایهٔ خروجی شبکه را نمایش می‌دهد که به خوبی می‌توان نقطهٔ گذار فاز را بر حسب دما در آن تشخیص داد.

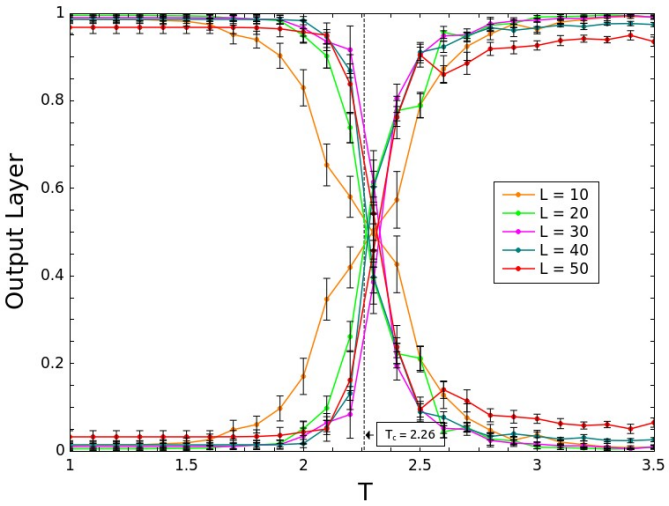
این نمودار به طور آشکار نشان می‌دهد که ابعاد سیستم در دقت برآمده برای تعیین نقطهٔ گذار فاز نقش اساسی و مهمی دارد. یافته‌های ما همچنین نشان می‌دهد که نقطهٔ گذار فاز (T_c) با افزایش طول سیستم (L) با دقت بیشتری تعیین می‌شود. به علاوه رفتار وزن‌های لایهٔ خروجی شبکهٔ عصبی یادآور رفتار مغناطش سیستم در دو سمت نقطهٔ گذار فاز است. یافته‌های ما نشان می‌دهد که یادگیری ماشین به خوبی قادر است که گذار فاز مدل بس‌ذره‌ای را، تنها با تکیه بر داده‌های پیکربندی‌های اسپینی (در مدل‌های کلاسیک) و پیکربندی تابع موج (در مدل‌های کوانتومی) آشکارسازی کند.



شکل ۲: نمودار پذیرفتاری مغناطیسی بر حسب دما



شکل ۳: نمودار مغناطش بر حسب دما



شکل ٤: وزن نرون‌های خروجی شبکهٔ عصبی بر حسب دما

بحث و نتیجه‌گیری

با توسعهٔ راهکارهای مبتنی بر شبکه‌های عصبی و یادگیری ماشین، این رویکردها راه خود را در علم فیزیک باز کرده‌اند و در شاخه‌های این علم مورد استفاده قرار می‌گیرند. مسئله مهم و ویژه گذار فاز در فیزیک مادهٔ چگال را می‌توان با مدل آیزینگ کلاسیکی ساده با استفاده از روش مونت‌کارلو و اگوریتم «متروپلیس» شبیه‌سازی کرد. با استفاده از داده‌های این الگوریتم می‌توان پیکربندی حالت تعادل شبکهٔ آیزینگ کلاسیک را در دمای مشخص استخراج کرد و از آن به عنوان دادهٔ آموزشی شبکهٔ عصبی بهره برد. برای تشخیص نقطهٔ گذار فاز (T_c) در شبکهٔ مربعی مدل آیزینگ کلاسیکی می‌توان از شبکهٔ تمام هم‌بند با سه لایهٔ ورودی، میانی و خروجی استفاده کرد. پس از آموزش پیکربندی‌های مختلف مدل آیزینگ به ماشین، با بررسی وزن‌های لایهٔ خروجی می‌توانیم روند تغییر فاز و نقطهٔ گذار فاز را در این شبکه آشکار و با دقت خوبی–نسبت به روش‌های تحلیلی– دمای گذار فاز را در آن تعیین کنیم. در ادامه این مسیر و برای تعیین گذار فاز سیستم‌هایی با هامیلتونی پیچیده‌تر، مانند سیستم‌هایی با گذار فاز توپولوژیک، می‌توان از معماری شبکه‌های عصبی «CNN»[٥] استفاده کرد. این شبکه‌های عصبی توانایی یافتن هم‌بستگی‌های[٦] دو بعدی در پیکربندی حالت تعادل چنین سیستم‌هایی را دارا هستند و می‌توانند افق نوینی را در حل مسائلی از این دست پیش روی ما باز کنند.

مراجع

[1] Carrasquilla, J., Melko, R.G.: *Machine learning phases of matter*. Nat. Phys. 13(5), 431 (2017)

[2] M. E. J. Newman, G. T. Barkema: *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press (2001)

[3] Rodney J. Baxter: *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Academic Press (1989)

[4] Akinori Tanaka, Akio Tomiya, Koji Hashimoto: *Deep Learning and Physics*. Springer (2021)

١- Metropolis-Hastings ٢- Canonical ensemble ٣- Fully Connected ٤- Supervised ٥- Convolutional Neural Network ٦- Correlation