

分类号:

学校代码: 10112

太原理工大学
硕士学位论文
文

(专业学位)

图生成网络用于生成不同条件下的
Ising 构型

姓名: 史跃华
学号: 2020520601
培养单位: 信息与计算机学院
学科: 计算机技术
研究方向: 图神经网络与凝聚态物理
指导教师: 田华 副教授
合作导师: 张万舟 副教授

论文提交日期: 2022 年 11 月

A Dissertation Submitted to
Taiyuan University of Technology
In partial fulfillment of the requirement
For the degree of Master

**Graph neural network for generating the Ising
configurations with different conditions**

By
Yuehua Shi

College of Information and Computing
2022

学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含其他个人或集体已发表或撰写过的科研成果。对本文的研究做出贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本声明的法律责任由本人承担。

论文作者签名： 签字日期： 年 月 日

学位论文版权使用授权书

本学位论文作者和指导教师完全了解太原理工大学有关保留、使用学位论文的规定：学校有权保留并向国家有关部门或机构送交学位论文的复印件和电子版；允许本学位论文被查阅和借阅；学校可以将本学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存和汇编本学位论文。

本学位论文属于：保密 ☐ 在____年解密后适用本授权书

不保密 ☐

论文作者签名： 导师签名：

签字日期： 年 月 日 签字日期： 年 月 日

学位论文答辩信息表

论文题目	蒙特卡罗和机器学习方法研究二维 Ising-XY 耦合模型的相变		
答辩日期		答辩秘书	
学位论文答辩委员会成员			
姓名	职称	工作单位	备注

摘要

深度学习由于其分析复杂系统中基本特征的强大能力，因而在图像识别、语音处理和生物系统等领域有着广泛的应用。特别是在凝聚态物理学领域，深度学习已被证明能够准确近似复杂物理系统，展现其独特的能力。在过去的几年里，传统的神经网络在凝聚态物理学中的特征提取和模型生成方面都取得了良好的效果。然而，由于构型大小的限制，只能生成单一大小的构型，这限制了神经网络的通用性。传统的深度学习算法假设数据样本是相互独立的，但在真实的物理构型中，每个自旋节点都与构型中的其他节点和边相关联。为了解决这些问题，研究人员们开发了一种新型的用于非欧结构的神经网络算法--图神经网络(Graph Neural Network,GNN)。该算法结合传统的神经网络算法，通过使用图(Graph)这种数据结构来构建数据集用于提高构型的质量，并且可以在不同尺寸的构型之间快速切换，从而提高模型的通用性。同时，图神经网络算法不仅可以提高模型的性能，还可以减少计算量，从而可以缩短构型生成的时间。因此，图神经网络在凝聚态物理学中有着重要及广泛的应用前景。变分自编码器(Variational Auto Encoder, VAE)是基于变分推理的一种有监督式学习算法，其目标是将输入数据编码为潜在空间的变量，然后使用这些变量来重构输入数据。VAE 将变分推理引入到深度学习算法中，从而使其能够从训练数据中自动学习潜在空间的分布，并重构潜在变量的分布。VAE 的主要优势在于可以把高维的输入数据映射到潜在空间，从而可以更容易地检测隐藏的规律，发现更复杂的关系。基于图神经网络与变分自编码器的特点，我们构建了一款基于图变分自编码器(Variational Graph Auto Encoder,VGAE)的 Ising 模型模拟器，其生成的 Ising 模型结果与传统蒙特卡洛方法模拟的数据非常接近。该技术可以帮助研究人员更准确地预测物理性质，以及帮助设计出新材料和新模型，进而推动凝聚态物理理论的发展。图神经网络的另一个优势在于，它有助于探索复杂多元物理情况下的复杂结构和结果。此外，由于图神经网络可以在不同尺度上处理和表示信息，因此可以更好地结合有限元和拓扑分析，从而更好地提供复杂系统的数据分析和模拟结果。本文的研究内容主要为：

第一章,介绍了本篇论文的内容,目的和结构,并陈述了深度学习研究凝聚态物理模型生成问题的背景、意义以及研究动机。

第二章，详细描述了研究所用到的模型结构、数据集的生成与处理，以及在研究过程中使用的工具和技术。

第三章，展示了研究成果，包括数据分析、模型建立、模型结果验证等。实验把用模型生成的 Ising 构型和使用传统方法生成的 Ising 构型的物理特性进行对比，同时将其与传统卷积网络和普通的图神经网络生成的构型精准度进行了比对。

第四章，本篇将论文研究结果--图生成网络来生成不同条件下的 Ising 构型制作为一款企业项目。它利用图神经网络来模拟 Ising 构型，形成可视化仿真系统，通过使用不同的图神经网络模型、优化模型参数以更加有效地改善企业的效率和成果

第五章，综合上述研究情况，总结本研究的发现和收获，指出本研究的局限性，并给出建设性建议和未来研究方向。

关键词:Ising 模型;图神经网络;变分自编码;卷积神经网络

ABSTRACT

Deep learning has a wide range of applications in areas such as image recognition, speech processing, and biological systems due to its powerful ability to analyze fundamental features in complex systems. In particular, in the field of condensed matter physics, deep learning has been shown to accurately approximate complex physical systems, demonstrating its unique capabilities. In the past few years, traditional neural networks have achieved good results in both feature extraction and model generation in condensed matter physics. However, the limitation of the configuration size to generate only single-sized configurations has limited the generality of neural networks. Traditional deep learning algorithms assume that data samples are independent of each other, but in real physical configurations, each spin node is associated with other nodes and edges in the configuration. To address these issues, researchers have developed a novel non-Euclidean structured neural network algorithm, the Graph neural Network (GGN). The algorithm combines traditional neural network algorithms to improve the quality of the configurations by using a data structure such as a graph to build the data set, and can quickly switch between configurations of different sizes, thus improving the generality of the model. At the same time, the graph neural network algorithm can not only improve the performance of the model, but also reduce the computational effort, which can shorten the time of configuration generation. Therefore, graph neural networks have important and wide application prospects in condensed matter physics. Variational Auto Encoder (VAE) is a supervised learning algorithm based on variational inference, whose goal is to encode the input data as variables in the potential space and then use these variables to reconstruct the input data. vAE introduces variational inference into the deep learning algorithm, so that it can automatically learn the potential space distribution from the training data and reconstruct the potential variables. The main advantage of VAE is that it can map high-dimensional input data to the latent space, which makes it easier to detect hidden patterns and discover more complex relationships. Based on the characteristics of graph neural networks and variational self-encoders, we have constructed an Ising model simulator based on Variational Graph Auto Encoder (VGAE), which generates Ising model results very close to those simulated by traditional Monte Carlo methods. This technique can help researchers to predict physical properties more accurately, as well as help design new materials and new models, thus advancing the theory of condensed matter physics. Another advantage of graph neural networks is that they help explore complex structures and results in

complex multivariate physical situations. In addition, because graph neural networks can process and represent information at different scales, they can better combine finite element and topological analysis, thus better providing data analysis and simulation results for complex systems.

Chapter 1, introduces the content, purpose and structure of this thesis, and states the background, significance and motivation of deep learning to study the problem of condensed matter physics model generation.

Chapter 2 describes in detail the model structure used in the study, the generation and processing of the dataset, and the tools and techniques used in the research process.

In the third chapter, the research results are presented, including data analysis, model building, and model result validation. The physical properties of Ising configurations generated with the model are compared with those generated using traditional methods, and the accuracy of the configurations generated with traditional convolutional networks and ordinary graph neural networks are also compared.

In the fourth chapter, this paper produces an enterprise project on the result of the thesis research, graph generation network to generate Ising configurations under different conditions. It uses graph neural networks (GNNs) to simulate Ising configurations to form a visual simulation system, which uses different graph neural network models and optimizes model parameters to improve the efficiency and results of the enterprise more effectively

In Chapter 5, the above research is synthesized to summarize the findings and gains of this study, point out the limitations of this study, and give constructive suggestions and future research directions.

Keywords: Ising model; Graph neural network; Variational autoencoder; Convolutional neural networks

目 录

摘 要	I
ABSTRACT	III
第 1 章 绪论	1
1.1 研究背景及研究动机	1
1.2 研究现状	2
1.3 研究内容及研究目的	4
第 2 章 模型与方法介绍	6
2.1 Ising 模型与图结构	6
2.1.1 Ising 模型	6
2.1.2 图结构	6
2.2 图神经网络	7
2.2.1 图卷积网络	7
2.2.2 图卷积推广	8
2.3 变分自编码器	8
2.4 生成数据集	9
2.4.1 蒙特卡罗方法	10
2.4.2 马尔科夫链	10
2.4.3 Metropolis 算法	12
Wolff 算法	13
2.5 数据集格式及所用技术	14
第 3 章 图变分自编码器模拟 Ising 模型	17
3.1 引言	17
3.2 数据预处理	17
3.3 格点图变分自编码器模型	18

3.3.1 编码器	18
3.3.2 解码器	19
3.3.3 损失函数	19
3.3.4 生成器	20
3.4 实验结果与分析	20
3.4.1 实验设计	21
3.4.1 实验结果	21
3.4.2 模型对比	22
3.4.3 敏感度分析	22
3.5 分析与讨论	23
第 4 章 基于 GridVGAE 的物理模型生成应用系统	25
4.1 绪论	25
4.1.1 项目背景	25
4.1.2 研发目的	25
4.1.3 主要工作	25
4.2 开发技术及环境分析	26
4.2.1 开发技术	26
4.2.2 硬件环境	27
4.2.3 MVC 开发模式	27
4.3 任务概述	28
4.3.1 任务描述	28
4.3.2 条件与约束	28
4.3.3 用户特点	28
4.4 需求分析	29
4.4.1 功能需求	29
4.4.2 非功能需求	30
4.4.3 界面需求	30

4.5 可行性分析	30
4.5.1 技术可行性	30
4.5.2 经济可行性	30
4.5.3 法律可行性	31
4.6 软件概要设计	31
4.6.1 总述	31
4.6.2 总体设计	31
4.6.3 接口设计	32
4.6.4 模块设计	35
4.6.5 容灾设计	38
4.6.7 其他设计	39
参考文献	40
攻读学位期间取得的研究成果	43
致 谢	45

第 1 章 绪论

1.1 研究背景及研究动机

随着复杂系统中自由度的增加,准确复制系统行为已经成为物理学界面临的一个日益严峻的挑战。然而,随着大数据与机器学习的兴起,海量数据可以被记录下来,支持我们使用数据驱动的方式高效逼近这些复杂系统。在众多机器学习方法中,深度学习在量子物理、凝聚态物理和高能物理等复杂物理现象的研究中显示出巨大潜力。在过去的几年中,深度学习框架已被物理学科的各个分支所采用。从信息理论的角度来看,深度学习的成功部分归因于其反向传播训练方法和降维处理方法。在凝聚态物理中,深度学习对于复杂系统的低维描述,多尺寸模拟和降低计算量是非常有帮助的。目前,深度学习在凝聚态物理领域的研究主要集中在两个方面:一是模拟

(simulation);二是优化(optimization)。在模拟方面,研究者们试图使用深度学习技术模拟各种物理系统,从而模拟现实世界中的动态过程。这些模拟使用的深度学习架构可以使用深度神经网络(DNN)、卷积神经网络(CNN)、递归神经网络(RNN)、变分自编码器(VAE)和生成对抗网络(GAN)等。优化方面,研究者们利用深度学习为传统物理模拟方法提供新的可优化或可控制变量,从而改进其精度和效率。深度学习新变量可以是神经网络参数或神经网络层,可以是离散或连续控制变量,也可以是策略参数或复杂从动策略。

然而,传统深度学习模型无法考虑到分子与分子之间的相互作用以及在训练过程中物理模型中分子之间的影响。同时,许多物理模型的微观结构是不规则的,生成模型的泛用性和准确性都较差。这就需要一个能够考虑非结构化数据的深度学习网络,并且不仅能计算节点与节点之间的相互作用,还能计算节点与边之间的关系。图卷积神经网络符合这一要求,图神经网络处理非结构化数据的出色能力使其在物理、生物和化学领域有着极大作用。大多数复杂系统物理模型本质上是一种图结构,而传统的卷积神经网络将物理模型理解为图像网格结构,这么做的结果不仅导致精度降低而且无法处理很多复杂的物理系统。与传统卷积网络相比,图卷积网络可以处理任意数据类型与任意数据结构,并且可以学习任意长度的图形特征,同时图卷积网络可以根据每个节点的特征,构建其与其他节点的链接,处理不规则图结构,这为我们处理类似于六方晶格、不规则晶格提供了有效工具,而卷积神经网络只能处理规则图结构类似于 Ising 构型。图卷积网络可以利用多种图属性计算器所有节点的特征,例如用来处理双层 IsingXY 耦合模型等,而 CNN 仅能利用一种属性分析图像特征,导致模型的特性丢失。

综上所述, 传统的卷积神经网络在对复杂系统的模拟方面仍有很多不适用的场合, 即便能处理一些模型也无法做到精确性与泛用性, 我们希望能利用图卷积神经网络的特性来补充传统卷积神经网络的不足, 以提高模拟系统的精确性和泛用性, 将深度学习更加深入的应用到凝聚态物理领域并逐渐投产到企业实际应用领域。

1.2 研究现状

Ising 模型作为一种经典的统计物理模型, 在机器学习领域也引起了广泛的关注和研究。目前, 机器学习在 Ising 模型研究中主要涉及三个方面: 参数估计、模型选择和采样。

首先是参数估计。在实际应用中, 我们通常需要从实验数据中推断出模型的参数。在 Ising 模型中, 参数估计通常是一个最大似然或最大后验估计问题, 需要解决高维空间中的优化问题。近年来, 机器学习方法在 Ising 模型参数估计中得到了广泛应用。其中, 基于神经网络的方法是一种非常有效的方法, 通过构造合适的神经网络结构来近似 Ising 模型的概率分布, 进而进行参数估计。同时, 一些基于梯度下降、蒙特卡罗方法、贝叶斯推断等的机器学习方法也在 Ising 模型参数估计中得到了广泛的应用。例如我们采用非限制玻尔兹曼机、变分自编码器和生成对抗网络通过模型训练来拟合 Ising 模型的概率分布, 从而得到 Ising 模型的参数。在这方面, 兰切斯科·德安杰罗和卢卡斯·伯彻在 PHYSICAL REVIEW RESEARCH 发表的 Learning the Ising model with generative neural networks 就将非限制玻尔兹曼机与变分自编码器应用在 Ising 模型的参数模拟上, 并且通过概率分布生成了物理特征正确的 Ising 模型。

其次是模型选择。在实际应用中, 我们通常需要选择最适合实验数据的 Ising 模型, 这涉及到模型比较和选择问题。在机器学习领域中, 模型比较和选择问题一直是一个热门的研究方向。针对 Ising 模型, 一些基于贝叶斯推断、信息准则、交叉验证等的机器学习方法被广泛应用于模型选择问题。这些方法可以有效地评估不同模型的拟合效果, 从而选择最合适的模型。还有一种方法是通过 Ising 模型的物理特性, 将通过神经网络生成的 Ising 构型进行物理特性的计算, 得出不同神经网络生成 Ising 模型的拟合效果, 目前该方法在主流的机器学习应用在 Ising 模型上的研究得到了广泛应用。

再然后是相变预测。相变是指物质从一种相态转变为另一种相态的过程, 这种转变在温度、压强等外部条件一定范围内发生。相变可以是物理性质的巨大变化, 例如密度、热容、磁化等, 这些物理性质的变化在某一温度或压强下具有突变特征, 称为相变点。相变可以分为两种类型: 一种是一阶相变, 即相变点处物质的自由能不连续, 在温度或压强发生变化时, 物质在相变点附近会出现凝聚和融化的现象; 另一种是二阶相变, 即相变点处物质的自由能连续但其导数不连续, 在相变点附近, 物质的物理

性质呈现出连续性的变化,例如铁磁性材料的顺磁转铁磁。相变是物质在不同相态之间转变的重要现象,对于理解物质的物理性质和研究物质的行为具有重要意义。相变的研究在材料科学、物理学、化学、地球科学等多个领域都有着广泛的应用。Ising 模型的相变对于超导材料的获取与应用有着至关重要的作用。"Discovering phase transitions with unsupervised learning" (Carrasquilla 和 Melko, 2017) 这篇论文是机器学习在 Ising 模型研究中的经典之作,其主要创新点在于将自编码器应用于 Ising 模型的相变预测中。这篇论文将自编码器 (autoencoder) 应用于 Ising 模型,并利用了自编码器的压缩和重构能力来捕捉相变的特征。此外,该论文还通过引入卷积自编码器 (convolutional autoencoder) 以处理空间相关性,从而提高了预测的准确性。"Machine learning phases of matter" (Wang 和 Troyer, 2016) 这篇论文提出了一种基于机器学习技术的相变分类方法,主要工作是将 Ising 模型的不同相转化为图像,并应用卷积神经网络 (CNN) 进行分类。该方法可以对不同相进行准确分类,并可以推广到其他物理模型中。

最后是采样问题。在实际应用中,我们通常需要从 Ising 模型中生成大量的样本,以进行模拟和实验。由于 Ising 模型中的变量数量通常较大,传统的蒙特卡罗方法可能会面临高计算成本和效率低下的问题。近年来,基于机器学习的采样方法得到了广泛的应用,这些方法可以利用神经网络等机器学习技术来加速采样过程,大大提高采样效率和准确性。而在机器学习中,有一种名为生成网络的神经网络模型,这种网络模型能够根据训练得到的概率分布生成出全新的图像,这一网络模型很快便应用到 Ising 模型中。"Learning to Generate Configurations of Statistical Models" (ICML 2016) 该论文提出了一种基于生成对抗网络 (GANs) 的方法来生成 Ising 模型的构型。其中,判别器的输入为一组构型和温度值,输出为对应构型的真实度量值 (即自由能)。生成器的输入为噪声向量和温度值,输出为对应的 Ising 构型。通过对生成器和判别器的对抗训练,可以得到一个能够生成高质量 Ising 构型的生成器。该方法在复杂度较高的二维和三维 Ising 模型上取得了较好的效果。

在上述问题中,卷积网络采用的都是将 Ising 模型转变成图像网格形式再进行训练,这就导致了 Ising 模型的特性并没有被完全利用,在图神经网络问世前,我们认为这种方式是可行的,但在图神经网络问世后,也将它用来对 Ising 模型的相变行为进行研究。

一种常见的应用是通过构建 Ising 模型中的相邻关系图 (也称为 Ising 网络),将图神经网络应用于 Ising 模型的相变分类问题。在这个问题中,目标是将 Ising 模型的状态分类为“相变”或“非相变”。研究者通常会在相变温度附近进行大量的模拟,产生大量的训练数据,然后使用这些数据训练一个图神经网络,将它应用于新的状态,以预测其相变行为。在这方面的研究有很多,Zhang 等人 (2019) 在他们的论文《Ising Model on a Dynamically Evolving Graph: Phase Transition and Emergence of Complex

Structure》中，利用图神经网络探究了动态演化图上的 Ising 模型。他们首先通过模拟在动态演化图上的 Ising 模型，得到了大量的状态数据。然后，他们使用这些数据训练了一个基于图卷积神经网络的分类器，以判断一个状态是否处于相变状态。他们的实验结果表明，图神经网络能够比传统的机器学习方法更好地识别 Ising 模型的相变状态。

但是目前来看，并没有人利用图生成网络来对 Ising 模型进行模拟，通过对以上研究现状的调查，我认为图生成网络可以应用在 Ising 模型的模拟上，并且会取得不错的效果。

1.3 研究内容及研究目的

本文计划运用图变分自编码器(VGAE)生成 Ising 模型,它是一项机器学习与理论物理交叉学科的研究。它通过图变分自编码器的结构和技术来模拟出 Ising 模型的构型，用以帮助我们快速生成 Ising 构型以及更好的了解 Ising 模型的物理特性以及其他应用。

Ising 模型是一种用来描述热力学系统的简单模型。通常用于模拟物理系统的量子态和统计物理学的计算，能够很好地模拟像磁化、伽马函数、形变和相变等行为。在量子物理中，Ising 模型也被广泛应用于研究集合调控等研究领域。

因此，本文旨在通过图变分自编码器来构建 Ising 构型，模拟出 Ising 模型的统计物理性质，以更好地理解其机制。本文地具体目的包括：

- (1) 定义和研究图变分自编码器的结构以及内嵌卷积，利用模型来模拟 Ising 构型。
- (2) 利用图变分自编码器对 Ising 模型的物理性质进行模拟和分析，并将其与传统蒙特卡罗方法生成的构型进行比对。
- (3) 探究图变分自编码器中不同参数对 Ising 模型模拟性质的影响，比较使用传统方法与模拟器生成 Ising 模型所花费的时间。
- (4) 确定如何使用图变分自编码器来生成有效可靠的 Ising 模型，并将起数据可视化，研究如何使用生成的 Ising 模型来解决各种企业时间问题，如定价决策，决策分析等。最后衡量所使用的图变分自编码模型是否可以更有效的生成 Ising 模型，以及确定应用模型生成 Ising 构型的优势。

本文可以为 我们更全面理解图神经网络在 Ising 模型中的应用提供有价值的信息，在未来可以推广到更多物理模型上，同时也研究了应用图生成网络来生成物理模型在企业实践中的有效性。所有提到的算法和思路，我们自行编写了相关程序，分别进行了实际计算和检验。

本文将图卷积网络整合到图变分自编码框架中，构建了一个 Ising 模型模拟器，用于模拟不同温度下不同尺寸的 Ising 模型构型。训练有素的模拟器可以有效地生成具有

物理特性的伊辛模型状态，与传统的蒙特卡洛模拟得到的物理特性没有区别。它还可以适应各种不同的尺寸，并大大减少模拟时间。我们将首先介绍 **Ising** 模型的一般形式、图神经网络和图卷积网络。在论文的核心部分，我们构建了一个与图卷积网络相结合的图变分自编码器来模拟不同温度下的二维 **Ising** 模型，并通过比较生成的数据与蒙特卡罗模拟的数据来验证我们方法的正确性。

第 2 章 模型与方法介绍

本文以统计物理中的双层 XY 耦合模型、Ising-XY 耦合模型作为研究对象，探究其有趣的物理现象，在此之前，我们先分别对 Ising 模型、XY 模型、双层 XY 耦合模型、Ising-XY 耦合模型进行简要的介绍。

2.1 Ising 模型与图结构

2.1.1 Ising 模型

Ising 模型是一种统计物理模型，用来表示一组相互交互的二维或三维磁性点的状态。每一个点都有一个磁矩，它们之间的交互力使它们保持相同（或者相反）的磁矩。该模型可以用来研究多种不同的物理系统，包括金属的磁化，线性玻璃的熔融，以及生物体的行为。该模型假设磁矩本身可以被调整来模拟实际系统中发生的许多状态（如磁极性）。Ising 模型可以用来描述实际系统的行为，以及它们可能的热力学行为。在统计物理学中，Ising 模型被描述为在某些晶格中具有耦合相互作用的二元自旋的集合。考虑到 N 个自旋 $s = s_i$ 可以取值 ± 1 ，其中索引 i 标记自旋 s_i 的位置，Ising 系统的标准哈密顿量仅包括最近邻相互作用，每个自旋方向可以是“向上”（+1）或“向下”（-1），尽管广义模型可能包括长程相互作用和更多的自旋选择性方向。标准哈密顿量为：

$$H = -J \sum_{neighbors} S_i * S_j \quad (1)$$

2.1.2 图结构

图是代表数据点之间关系的节点和边的集合。节点代表单个数据点，而边代表节点之间的关系。图可以用来模拟各种各样的系统，如社会网络、交通网络和计算机网络。图也可以用来表示数据库中实体之间的关系，或者用来表示人工智能中的问题域。图是由多个元素组成的，如节点、边和标签。节点代表单个数据点，而边代表节点之间的关系。标签可以用来提供关于节点和边的额外信息。图可以是定向的（即边有一个方向）或无定向的（即边没有方向）。图形也可以是加权的（即边上有一个与之相关的数值）或无权的（即边上没有与之相关的数值）。图结构中相关符号的描述和定义如下：

定义一 图：图是由节点和连接节点的边所构成的，通常记为 $G = (V, E)$ 。其中 $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ 代表节点集合， $E = \{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ 代表边集合，边也可以用 (v_1, v_2) 的方式来表示。通常节点也被称为顶点或者交点。边也被成为链接或者弧。通用的图表示是一个五元组： $G(V, E, A, X, D)$ 。其中 A 代表图的邻接矩阵， X 代表节点的特征矩阵， D 代表度矩阵。

定义二 邻接矩阵：图的邻接矩阵指用于表示图中节点的连接情况的矩阵。该矩阵可

以是二值的,也可以是带权的.对于有 N 个节点的无向图来说,邻接矩阵是一个 $N \times N$ 的实对称矩阵.

定义三 度矩阵:节点的度表示与该节点相连的边的数量.图的度矩阵即用于描述图中每个节点的度的矩阵.度矩阵是一个对角矩阵,对于无向图来说,一般只使用入度矩阵或者出度矩阵.

定义四 拉普拉斯矩阵: 组合拉普拉斯矩阵,又称标准拉普拉斯矩阵,由对角矩阵和邻接矩阵组合而成

$$L = D - A \quad (2)$$

该矩阵只在中心节点和一阶相连的节点上有非零元素,其余之处均为零.拉普拉斯矩阵也是图的一种表现形式.

定义五 归一化拉普拉斯矩阵

$$L^{sym} = I - D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}} \quad (3)$$

其元素值为:

$$L_{i,j}^{sym} = \begin{cases} 1 & i=j, \text{且 } \deg(v_i) \neq 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{\deg(v_i) \deg(v_j)}}, & i \neq j, \text{并且 } v_i \text{ 与 } v_j \text{ 相连} \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad (4)$$

其中 $\deg(v)$ 表示为节点 v 的度

2.2 图神经网络

2.2.1 图卷积网络

图卷积网络是由传统的卷积神经网络引申出的图卷积网络,图卷积可以分为两种,基于频谱的方法和基于空间的方法。基于频谱的方法从图信号处理的角度,引入滤波器来定义图卷积,因此基于频谱的图卷积可以理解为从图信号中去除噪音。基于空间的图卷积方法通过汇集邻居节点的信息来构建图卷积。

在了解图卷积之前,我们先要对卷积操作有一个基本的概念。卷积网络最开始应用在图像上,我们将图像上的像素点作为特征来进行卷积操作提取特征。用随机的共享的卷积和得到像素点的加权和从而提取到某种特定的特征,然后用反向传播来优化卷积核参数就可以自动的提取特征,是卷积神经网络提取特征的基石。可以这么认为,卷积操作相当于将周围的像素点信息聚合到卷积核中央像素点上,提取出该部分的特征。

因此,我们希望在图域中使用卷积来使用图特征提取的通用范式,如图 2 所示,红色的节点 v_i 聚集了来自黄色的相邻节点 v_j 的特征。(a) $l = 1$ (b) $l = 2$ 。小正方形表示节点的特征向量。图 2,当我们想要获得节点的特征表示时,我们可以聚合相邻节点

的信息，这可以通过这种方式理解，图中的每个节点都在一直改变其状态，直到最终平衡，因为相邻节点内核的较远点的影响，邻居越近，影响越大。

2.2.2 图卷积推广

对于图卷积网络来说，我们想要学习到它对于每个节点的特征表示，任意的图卷积都可以写成这样的一个非线性函数：

$$H^{l+1} = f(H^l, A) \quad (5)$$

$H^0 = X$ 为第一层的输入, l 代表神经网络的层数, A 代表邻接矩阵.

传统的图卷积网络做法就是将邻居节点的信息加入到本节点当中:

$$f(H^l, A) = \sigma(AH^lW^l) \quad (6)$$

W_l 代表第 l 层的参数矩阵, σ 代表激活函数. 根据矩阵乘法可以看出上式中的每个节点都结合了相邻节点的信息, 但由于仅仅使用了邻接矩阵, 邻接矩阵对角线为 0, 无法体现节点自身的信息, 所以我们使用拉普拉斯矩阵来代替邻接矩阵

$$f(H^l, A) = \sigma(LH^lW^l) \quad (7)$$

上式中引入了拉普拉斯矩阵, 从而解决了没有考虑自身节点信息自传递的问题, 但是由于没有被规范化, 我们将拉普拉斯矩阵规则化得到图卷积

$$f(H^l, A) = \sigma(L^{sym}H^lW^l) \quad (8)$$

上面讲述的都是以矩阵形式计算, 我们也可以从单个节点角度来观察公式, 对于第 $l+1$ 层的节点特征 h^{l+1} , 对于他的邻接结点 $j \in N$, N 是结点 i 的所用邻居结点的集合, 所以图神经网络的更新公式同样可以描写为

$$h_i^{l+1} = f(h_i^l) = \sigma(h_i^l \cdot W_1^{l+1} + \sum_j h_j^l \cdot W_2^{l+1}) \quad (9)$$

2.3 变分自编码器

变分自编码器是一种变分推理的生成模型, 由编码器和解码器两部分网络组成, 它是包含隐变量的一种模型. 在变分自编码器当中, 我们基于这样的假设: 我们的样本 x 是某些隐变量 z (latent variable) 通过某种映射产生出的, 而 z 也不是一个固定值, 而是服从一个分布: $z \sim P_\theta(z)$, 则 $x \sim p_\theta(x|z)$, 这里的 P 是由参数 θ 决定的分布族, 而 θ 就是我们需要找到的真实分布. 所以我们最根本的目标就是确定 z 和 θ 的值, 这样就能够得到样本 x . 为了推断 $p_\theta(x|z)$, 我们需要最大化边际对数似然 $\log(p_\theta(x))$ 我们可以重写该式:

$$\begin{aligned} \log(p_\theta(x)) &= \log \int p_\theta(x|z) dz \\ &= \log \int \frac{p_\theta(x|z)p(z)q_\phi(z|x)}{q_\phi(z|x)} dz \\ &\geq E_{z \sim q_\phi(z|x)} [\log p_\theta(x|z)] - D_{KL}(q_\phi(z|x) \| p(z)) \\ &:= \varepsilon(x, \theta, \phi) \end{aligned} \quad (10)$$

我们在第四步应用了 Jensen 不等式,在第二步中对潜在变量 z 的积分通常是棘手的,因此我们引入了带有参数集 ϕ 的近似后验分布 $q_\phi(z|x)$ 并使用变分推理原理来获得边缘对数似然的易处理界限,即证据下界(ELBO)^[22].我们使用 $p(z)=N(1,0)$ 作为潜在变量先验.ELBO 是对数似然的易处理下界,因此可以最大化推断 $p_\phi(x|z)$. $Ez \sim q_\phi(z|x)[\log(p_\phi(x|z))]$ 可以理解为重构误差,因为最大化它会使解码器的输出类似于编码器的输入, $DKL(q_\phi(z|x)|p(z))$ 是 KL 散度,一种衡量两个分布相似性的数值,它可以确保潜在表示是高斯的,使得具有相似特征的数据点具有相似的高斯表示.

我们已经概述了潜在变量模型背后的一般思想,但我们仍然需要指定近似(变分)后验 $q_\phi(z|x)$ 和模型似然 $\log_\phi(p(x|z))$. 近似后验的常见选择是分解高斯分布

$$q_\phi(z|x) = \prod_{j=1}^d N(z_j|\mu_j, \sigma_j^2) \quad (11)$$

其中 μ 和 σ 表示模型的均值和标准差.

总而言之,VAE 是一种基于提取出 $p(z|x)$ 的潜在高斯表示 $q_\phi(z|x)$ 的均值与方差的编码器网络.VAE 中的解码器,它使用高斯 $q_\phi(z|x)$ 的样本作为输入,根据分布 $p_\theta(x|z)$ 生成新样本.我们通过使用反向传播最大化 ELBO 来计算所有的参数,但是高斯分布是随机的,不可微的.因此需要在编码器的输出和解码器的输入之间建立一个确定性和可微分的映射.我们需要将随机变量 z 表示为另一个辅助随机变量 ϵ 的可微可逆变化 g (即 $z = g(\mu, \sigma, \epsilon)$).我们采用重参数化技巧^[22],使 $g(\mu, \sigma, \epsilon) = \mu + \sigma \odot \epsilon$ 即

$$z = \mu + \sigma \odot \epsilon \quad (12)$$

其中 $\epsilon \sim N(0,1)$ 和 \odot 是元素乘积

2.4 生成数据集

Ising 模型是描述磁性物质相互作用的重要模型,常常用于描述铁磁性和铁磁相变现象等。Ising 模型中的构型是指在一定温度下,物质中所有粒子的磁矩方向组成的空间分布情况。生成符合 Ising 模型分布的构型,对于理论研究和实际应用都具有重要意义。

但是,直接从 Ising 模型中采样构型是一件非常困难的事情。这是因为 Ising 模型的分布往往非常复杂,且在实际应用中通常无法求解其精确分布。因此,我们需要寻找一种可行的方法来生成符合 Ising 模型分布的构型。

马尔科夫链蒙特卡罗(MCMC)方法是一种基于马尔可夫链的随机模拟方法,可以生成符合特定分布的样本。因此,我们可以利用 MCMC 方法来生成符合 Ising 模型分布的构型。具体来说,可以通过构建一个基于 Metropolis-Hastings 算法或者 wollef 算法的 MCMC 马尔科夫链,从任意初始构型出发,不断进行状态转移,最终得到符合 Ising 模型分布的构型样本集合。

利用 MCMC 方法生成 Ising 构型具有很多优点，例如可以避免手动构造构型、适用于各种不同类型的 Ising 模型、适用于各种不同类型的构型等。同时，通过生成大量的符合 Ising 模型分布的构型，我们可以进一步研究和探索 Ising 模型的性质和规律，为相关领域的研究提供重要的数据支持。

在该节中将会介绍蒙特卡罗方法，马尔科夫链，以及基于他们实现的生成算法用来保证我们的研究数据准确无误。

2.4.1 蒙特卡罗方法

蒙特卡罗方法是一类基于随机采样的数值计算方法，通常用于估计复杂的数学问题的解。这些问题可能是高维、非线性、难以求解或难以分析的。蒙特卡罗方法的基本思想是通过对问题的定义域进行随机采样，并对采样点进行函数计算，然后基于这些计算结果来估计问题的解。这种方法不需要对问题进行复杂的数学分析，而只需要进行简单的模拟计算，因此非常适用于处理复杂的数学问题。

具体来说，蒙特卡罗方法的基本流程包括以下几个步骤：

1. 定义问题的定义域和要求解的函数；
2. 在定义域上进行随机采样，并对采样点进行函数计算；
3. 根据采样点的计算结果，估计问题的解；
4. 通过增加采样点的数量来提高估计的准确性。

蒙特卡罗方法的核心是随机采样。采样可以通过各种方式进行，例如均匀采样、重要性采样、马尔科夫链蒙特卡罗等。在我们的数据集生成中，使用的为马尔可夫链蒙特卡罗方法。采样点的数量越多，蒙特卡罗方法得到的估计值越准确，但同时也会增加计算时间和计算资源的需求。例如我们在面积为 S_0 的盘子中有一块不规则的区域。我们向盘子中均匀撒 M 个点，其中有 N 个点落在不规则区域内，据此我们可以估计出不规则区域的面积：

$$S \approx S_0 \times \frac{N}{M} \quad (13)$$

在这个例子中，整体是盘子内的无限多个点，样本是随机抽取的 M 个点，待测的统计量是不规则区域中的点占整体的比例。在 M 趋于无穷大时，约等号变成等号：

$$S = S_0 \times \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{N}{M} \quad (14)$$

2.4.2 马尔科夫链

蒙特卡罗方法需要一个服从目标分布的样本集合，但是在大多数情况下，我们并不知道如何直接从目标分布中采样，对 Ising 模型的采样就属于这种情况。这时，我们需要一种工具，能够在一定条件下经过足够多次的状态转移逐渐接近目标分布，这便是马尔科夫链。这种逐渐接近的过程被称为马尔科夫链的收敛。

马尔科夫链(Markov chain)是一种描述随机过程的数学模型。它的本质是一个序列,其中每个状态只依赖于前一个状态,而不依赖于更早的状态。这个性质被称为马尔科夫性质。因此,马尔科夫链可以看作是一种“记忆长度有限”的随机过程。

具体来说,如果一个随机过程在时刻 t 的状态为 x_t ,那么在下一个时刻 $t+1$,该随机过程的状态 x_{t+1} 满足一下条件: x_{t+1} 的概率分布只与 x_t 有关,而与之前的状态 x_1, \dots, x_{t-1} 无关。

马尔科夫链通常由三部分构成:状态空间(state space):表示随机过程可能处于的所有状态的集合;转移概率(transition probability):表示从一个状态转移到另一个状态的概率。具体来说,如果状态空间为 S ,则转移概率可以表示为矩阵 $P = \{p_{ij}\}$,其中 p_{ij} 表示从状态 i 转移到状态 j 的概率;初始状态概率(initial state probability):表示随机过程开始时,处于每个可能状态的概率分布。

马尔科夫链的性质包括:

1. 马尔科夫性:马尔科夫链具有无记忆性,即在给定当前状态下,未来状态的概率分布只与当前状态有关,而与过去状态无关。
2. 长期行为:随着时间的推移,马尔科夫链的状态将会发生变化,最终可能会收敛到一个稳态分布。这个稳态分布可以通过计算马尔科夫链的转移概率矩阵的特征向量得到。在稳态分布下,马尔科夫链的状态分布不再随时间变化而发生变化。
3. 细致平衡条件:对于任意两个状态 i 和 j ,在马尔科夫链的稳态分布下,从状态 i 转移到状态 j 的概率与从状态 j 转移到状态 i 的概率相等。

马尔科夫链在实际问题中有广泛的应用。例如,在自然语言处理中,可以将一个文本看作一个马尔科夫链,每个状态代表一个单词或一个句子,转移概率矩阵描述了单词或句子之间的转移概率。在图像处理中,可以将像素看作状态,转移概率矩阵描述了像素之间的相似度和空间关系。在机器学习中,马尔科夫链可以用于生成模拟数据集和模型训练等。

为了实现马尔科夫链,需要确定状态空间和转移概率矩阵,并计算其平稳分布。通常,状态空间可以从实际问题中得出,而转移概率矩阵和平稳分布需要根据实际问题进行计算。在实际应用中,常用的方法包括 Metropolis-Hastings 算法、wolf 算法、Gibbs 采样等。

然而,马尔科夫链也存在一些局限性,例如长期依赖问题、收敛速度慢等。为了克服这些问题,研究者们提出了一些改进和扩展的方法,例如隐马尔可夫模型、条件随机场等。未来,马尔科夫链在自然语言处理、图像处理、机器学习等领域的应用前景依然广阔,研究者们也将不断探索更加高效、准确的方法来解决现实问题。

2.4.3 Metropolis 算法

Metropolis 算法是一种马尔可夫链蒙特卡罗 (MCMC) 方法, 用于生成符合指定概率分布的随机样本。Metropolis 算法最初是由 Nicholas Metropolis 等人在 1953 年发明的, 其主要思想是基于接受-拒绝采样 (accept-reject sampling) 方法和马尔可夫链的思想, 通过构造一个满足细致平衡条件的转移矩阵来生成符合指定概率分布的随机样本。具体来说, Metropolis 算法的步骤如下:

算法 1

```

1 初始化: 给定初始状态 $x_0$ , 设定转移矩阵 $Q(x, y)$ 
2 for t = 1 to N do //重复迭代 N 次
3      $y \sim Q(x_i, y)$  // 从状态 $x_i$ 开始, 根据状态转移矩阵 $Q(x_i, y)$ 生成一个候选状态 $y$ 
4      $\alpha(x_i, y) \leftarrow \min \{1, \frac{p(y)Q(y, x_i)}{p(x_i)Q(x_i, y)}\}$  //计算接受概率
5      $u \sim U(0,1)$ 
6     if  $u \leq \alpha(x_i, y)$  then
7          $x_{i+1} = y$  // 接受  $y$ 
8     else
9          $x_{i+1} = x_i$  //保持不变
10    end if
11 end for
12 Return Draw histogram of  $\{x_0, x_1, \dots, x_N\}$  // 输出抽样序列
    
```

其中, 接受概率 $\alpha(x, y)$ 的计算方式为:

$$\alpha(x, y) = \min \{1, \frac{p(y)Q(y, x)}{p(x)Q(x, y)}\} \quad (15)$$

$p(x)$ 表示指定的概率分布, $Q(x, y)$ 表示转移矩阵的元素, 即从状态 x 转移到状态 y 的概率。

Metropolis 算法的优点在于可以处理复杂的概率分布, 同时能够在高维空间中生成样本。它的缺点是需要调整转移矩阵的元素, 以使得接受率尽可能高, 这可能需要一定的经验和计算成本。此外, 在接受率较低的情况下, 样本的生成速度会变慢。

我们得到 Metropolis 的接受概率的方式是通过构建它的细致平衡原则, 如果 Metropolis 算法达到稳态, 也就是说状态转移矩它的任意两个状态是相通的, 以此基础来推导: 当一个系统达到平衡态时, 我们用 $P(x)$ 表示系统在平衡态下处于 x 态, 使用 $W(x \rightarrow y)$ 表示系统从 x 态转变为 y 态的概率。为了满足细致平衡原则, 系统从状态 x 到状态 y 的概率应该与从状态 y 到状态 x 的概率相同:

$$W(x \rightarrow y)P(x) = W(y \rightarrow x)P(y) \quad (16)$$

我们将转移概率 $W(x \rightarrow y)$ 分解为两个概率的乘积, 即从状态 x 产生一个提议 $q(x \rightarrow y)$ 的概率和接受该提议 $\alpha(x \rightarrow y)$ 的概率:

$$W(x \rightarrow y) = q(x \rightarrow y)\alpha(x \rightarrow y) \quad (17)$$

则细致平衡原则 $W(x \rightarrow y)P(x) = W(y \rightarrow x)P(y)$ 可以改写成:

$$P(x)q(x \rightarrow y)\alpha(x \rightarrow y) = P(y)q(y \rightarrow x)\alpha(y \rightarrow x) \quad (18)$$

由于一步只能翻转一个分子, 所以只有在 x, y 的差别不大于一个分子的时候, $q(x \rightarrow y)$ 才不为 0, 由于选取分子是随机的, 所以:

$$q(x \rightarrow y) = 1/N(N \text{ 为分子数}) \quad (19)$$

所以由 Eq.(18)可得:

$$\frac{\alpha(y \rightarrow x)}{\alpha(x \rightarrow y)} = \frac{W(x \rightarrow y)P(x)}{W(y \rightarrow x)P(y)} \quad (20)$$

由 $P(x) = e^{-\beta E}$ 可知,

$$\frac{\alpha(y \rightarrow x)}{\alpha(x \rightarrow y)} = e^{-\beta(E_x - E_y)} \quad (21)$$

由 Eq.(21)我们可以得到 Metropolis 接受准则, 这就成为算法计算能否进行状态转移的关键, 也就是我们所说的接受概率:

$$\alpha(\Delta E) = \begin{cases} 1 & \Delta E < 0 \\ e^{-\beta \Delta E} & \Delta E > 0 \end{cases} \quad (22)$$

Wolff 算法

Metropolis 算法的局限性在于一次翻转的分子太少, wolff 算法是一种集团翻转的方式。它的具体步骤是:

算法 2

```

13 初始化: 在系统中随机抽取一个分子x作为种子
14 init stack, cluster
15 stack.push(x) // 将x放入栈中
16 cluster.push(x) // 将x放入集簇
17 while stack no empty: //只要栈不为空
18     y = stack.pop()
19     neighs = y.neighbor()
20     for neigh in neighs:
21         u ~ U(0,1)
22         if u ≤ padd(1 - e-2βJ) then:
23             cluster.push(neigh)
24             stack.push(neigh)
25         end if
26     end for
27 filp cluster
    
```

28 Return configuration

无论是 Metropolis 算法还是 wolff 算法,都是 MCMC 方法,所以 wolff 算法也需要满足细致平衡原则。但与 Metropolis 算法不同的是选取概率 $Q(A \rightarrow B)$ 不再是 $1/N$,不过在已经得到的细致平衡公式中我们更关心的是 $\frac{Q(A \rightarrow B)}{Q(B \rightarrow A)}$ 。

一个 cluster 的停止,取决于与这个 cluster 相邻的同向分子的数目。看起来就像是 cluster 与这些同向的分子“断开了连接”,故称之为“断键”。

如图*所示,如果 $A \rightarrow \text{mid}$ 需要断 m 个键, $B \rightarrow \text{mid}$ 需要断 n 个键那么:

$$\frac{Q(A \rightarrow B)}{Q(B \rightarrow A)} = \frac{(1 - P_{add})^m}{(1 - P_{add})^n} = (1 - P_{add})^{m-n} \quad (23)$$

由细致平衡公式 $P(A)P(A \rightarrow B) = P(B)P(B \rightarrow A)$ 可得:

$$\frac{P(A \rightarrow B)}{P(B \rightarrow A)} = \frac{Q(A \rightarrow B)\alpha(A \rightarrow B)}{Q(B \rightarrow A)\alpha(B \rightarrow A)} = (1 - P_{add})^{m-n} \frac{\alpha(A \rightarrow B)}{\alpha(B \rightarrow A)} = e^{-\beta(E_B - E_A)} \quad (24)$$

又因为 $E_B - E_A = 2J(m-n)$ 于是我们得到了:

$$(1 - P_{add})^{m-n} \frac{A_{u \rightarrow v}}{A_{v \rightarrow u}} = e^{-2\beta J(m-n)} \quad (25)$$

最后简化得到

$$\frac{A_{u \rightarrow v}}{A_{v \rightarrow u}} = e^{2\beta J} (1 - P_{add})^{n-m} \quad (26)$$

由此可知当 $P_{add} = 1 - e^{-2\beta J}$ 时:

$$\frac{A_{u \rightarrow v}}{A_{v \rightarrow u}} = 1 \quad (27)$$

由此可知接受率为 1,只要构造出这个 cluster,我们就一定翻转他。

2.5 数据集格式及所用技术

PyG(PyTorch Geometric)是一个基于 PyTorch 构建的库,可轻松编写和训练图形神经网络(GNN),用于与结构化数据相关的各种应用程序。

它由各种已发表的论文中用于对图形和其他不规则结构进行深度学习的方法组成,也称为几何深度学习。此外,它还包括易于使用的迷你批处理加载器,用于操作许多小型和单个巨型图,多 GPU 支持,DataPipe 支持,通过 Quiver 进行分布式图学习,大量常见的基准数据集(基于简单的界面来创建自己的),GraphGym 实验管理器和有用的转换,用于学习任意图形以及 3D 网格或点云。

本文将利用 PyG 的数据结构来对 Ising 模型进行图结构处理。图结构对节点之间的成对关系进行建模。下面将介绍 PyG 库的图结构包含哪些内容:

节点(x):是一组带形状的节点特征矩阵,形状为[num_nodes,num_node_features]。

边索引(edge_index):具有形状和类型的 COO 格式的图连接[2,num_edges] torch.long

边属性(edge_attr):带形状的边缘特征矩阵[num_edges,num_edge_features]

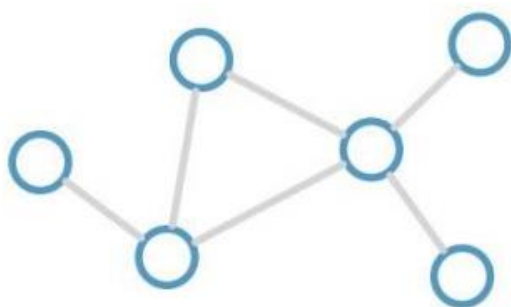
图标签(y):要训练的目标(可以是节点也可以是图)的标签[num_nodes,*],[1,*]

我们对 Ising 构型采取将自旋点加入到 x 中，对相邻自旋点构建 `edge_index`，同时将 `edge_attr` 设置为自旋之间的能量。

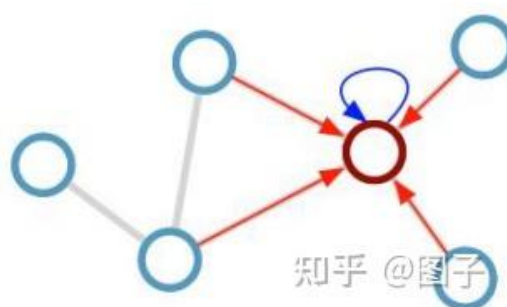
同时我们将使用 PyG 内置的图神经网络算法以及配套的算法实现基础来实现我们的神经网络模型。PyG 构建图神经网络采用的是消息传递网络（Message Passing Neural Network, MPNN），MPNN 是从现有模型中抽象出来的，可以适用于绝大部分图神经网络的构建。

以下图为例，假设我们要计算 k 时刻红色节点的表示，从消息传递的角度来看，会经历以下步骤：1）首先从邻居获取信息：计算红色节点周围的四个邻居节点的消息总和。2）对获得的信息加以利用：将获得的消息与 $(k-1)$ 时刻红色节点本身的表示组合起来，计算得到 k 时刻的红色节点表示。

Consider this undirected graph:



Calculate update for node in red:



在理解了消息传递过程之后，我们正式介绍形式化的消息传递过程。MPNN 共包含两个阶段：消息传递阶段和读出阶段。

1. 消息传递阶段：共运行 T 个时间步，并包含以下两个子函数：
 - **Aggregation Function**：也称消息函数，作用是聚合邻居节点的特征，形成一个消息向量，准备传递给中心节点。
 - **Combination Function**：也称节点更新函数，作用是更新当前时刻的节点表示，组合当前时刻节点的表示以及从 **Aggregation Function** 中获得的消息。
2. 读出阶段：针对于图级别的任务（如图分类）仅仅获得节点级别的表示是不够的，需要通过读出函数（**Readout Function**）聚合节点级别的表示，计算获得图级别的表示。

因此，不同种类的 GNN 就是通过设计不同的 **Aggregation Function**，**Combination Function** 以及 **Readout Function** 实现的。也就是说，从邻居聚合的信息不同，邻居信息与自身信息的组合方式不同，或者节点的读出方式不同，最终都会导致我们最终获得

的表示向量不同。不同的任务为了获得更准确的预测效果，会着重于抓取不同的信息。在 PyG 中，消息传递网络的通式为：

$$x_i^k = \gamma^k \left(x_i^{k-1}, \bigoplus_{j \in \mathcal{N}(i)} \phi^k(x_i^{k-1}, x_j^{k-1}, e_{j,i}) \right) \quad (28)$$

其中 $\bigoplus \gamma \phi$ 表示可微的、排列不变的函数，如 sum、mean 或 max，和表示可微的函数，如 mlp(多层感知器)。

第3章 图变分自编码器模拟 Ising 模型

在第二章中，我们介绍了带边属性的图卷积网络模型和变分自编码器，下面我们将两者结合起来，构建图变分自编码器模型。与类似的图变分自编码器不同，我们将图变分自编码器用来重构节点属性，并忽略其边特征，学习节点属性的特征分布并将其重构。本章将介绍我们的自旋图变分自编码器，以及生成模型的实验结果。

3.1 引言

Ising 模型是物理学中最具代表性的模型之一，它可以用于描述许多物理系统的行为，包括磁性材料、玻璃转变、化学反应和生物学等。为了更好地理解和解释 Ising 模型在实际系统中的行为，生成不同条件下的 Ising 构型是一个重要的研究课题。传统的方法是使用蒙特卡罗模拟(Monte Carlo simulation)，但其计算复杂度高且不易实现高效的采样。近年来，机器学习的方法在解决这一问题上展现出了优异的表现。

在这个背景下，本文提出了一种新颖的图变分自编码器(VGAE)模型，用于生成不同条件下的 Ising 构型。与传统的 VGAE 不同，本文的模型将重点放在了节点的状态预测上，而不是边的预测，这也符合 Ising 模型中节点只有正负两个状态的特点。本文还采用了全连接神经网络来实现解码器，这样可以更好地对每一个节点进行特征提取，而不是聚合邻居信息。此外，本文采用了均方误差(MSE)和 KL 散度来作为损失函数，这样可以更好地平衡重建误差和潜在变量的 KL 散度，从而提高了生成质量。

通过实验结果的展示和分析，我们验证了本文提出的 VGAE 模型在生成不同条件下的 Ising 构型方面的有效性和优越性，同时也展示了本文方法在捕捉 Ising 模型中的关键特征方面的优越性。本文提出的模型为 Ising 模型的研究提供了一种新的思路和解决方法，同时也为其他相关领域的研究提供了借鉴。

3.2 数据预处理

首先我们随机生成一组二维矩阵，二维矩阵的值为 1 或-1，对二维矩阵进行 Metropolis 算法或者 Wolff 算法进行稳态模拟，之后使用 PyG 对 Ising 模型进行图结构处理，将数据文件以 pkl 文件的方式进行存储，同时计算稳态构型的能量与磁化强度，并将这些属性与构型以 hdf5 文件的形式进行存储，以便在模型生成后与模型生成的构型作对比。

3.3 格点图变分自编码器模型

传统的 VGAE 主要用于图数据的链接预测任务,即通过学习图结构中的节点信息和边信息,预测未观察到的边是否存在。VGAE 的主要思路是使用编码器将节点嵌入向量空间,并且使用解码器对节点进行重构,从而预测边的存在性。在 VGAE 中,编码器通常使用图卷积网络将节点特征聚合到一个向量表示中,解码器同样也是用图卷积网络对节点特征进行重构。

而本文提出的 VGAE 则是将 VAE 的思想应用于图结构数据的一种方法。本文的 VGAE 主要是用于生成稳态下的 Ising 模型构型,目标是从潜在空间中采样生成新的 Ising 模型构型。VGAE 的编码器部分将图中的节点嵌入到潜在空间中,解码器部分则将潜在空间的向量解码为节点的状态。在本文提出的 VGAE 中,编码器使用了图卷积网络将节点特征聚合到一个向量表示中,但解码器则使用全连接神经网络对每个节点进行独立的重构。所以我将该 VGAE 命名为格点图变分自编码器(GridVGAE)

相比较传统的 VGAE 模型,本文提出的 VGAE 具有以下的特点与优势:

- VGAE 模型的应用领域不同。本文提出的 GridVGAE 主要用于生成 Ising 模型构型,而传统 VGAE 主要用于链接预测任务。
- VGAE 模型的解码器不同。传统 VGAE 的解码器通常使用图卷积网络对节点特征进行重构,而本文提出的 GridVGAE 则使用全连接神经网络对每个节点进行独立的重构。
- VGAE 模型的性能不同。本文的 GridVGAE 已经在生成稳态下的 Ising 模型构型方面取得了很好的表现,证明了其在特定领域的有效性。

3.3.1 编码器

我们的编码器由三个卷积层构成,分别具有 32,64,64 个通道和一个整流线性单元(ReLU)作为激活函数.为了归一化神经网络我们使用了 batchNorm,GraphNorm 和 0.5 的 dropout 率.前两个 GCN 层生成一个高维特征矩阵,同时我们考虑图结构中的边信息,将边的特征参与到卷积聚合当中,参考之前图卷积的更新公式可以得到我们新的更新公式:

$$x'_i = W_1 x_i + W_2 \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} e_{(j,i)} \cdot x_j \quad (1)$$

其中 x_i 表示节点特征, $e_{j,i}$ 表示从源节点 j 到目标节点 i 的边权重。

卷积操作中上层卷积的结果作为下层卷积的输入来进行卷积的堆叠:

$$\hat{X} = GCN(GCN(X, A), A) \quad (2)$$

第三个卷积层我们采用两个不同的卷积网络来分别获取 $\mu, \log \sigma^2$:

$$\mu = GCN_{\mu}(\hat{X}, A) \quad (3)$$

$$\log \sigma^2 = GCN_{\log \sigma^2}(\hat{X}, A) \quad (4)$$

然后我们就可以从分布中进行采样 z :

$$z = \mu + \sigma \odot \varepsilon, \varepsilon \sim N(0,1) \quad (5)$$

3.3.2 解码器

我们的采样结果 z 是节点的高维表示,在解码器部分,由于 Ising 模型的节点之间的连接方式是固定的,所以我们在解码器部分可以忽略 Ising 模型的边属性,对潜在变量 z 中的每个节点使用全连接神经网络(MLP),使其维度降维至 1.此时我们可以将重构问题认为是对每个节点进行分类,使用 `sigmoid` 激活函数,再将其按值进行分类,之后对所有节点进行重构就可以得到我们生成的 Ising 构型.

$$\bar{x}_i = MLP(z_i) \quad (6)$$

z_i 代表节点的高维表示,通过全连接神经网络使其变为我们需要的重构节点. 由于我们得到的结果为节点信息,实现的方式为对每个节点进行卷积和降维,这样做的好处不仅仅是可以处理不同节点数量的图而且避免了传统矩阵形式的卷积核提取特征所带来的噪音,我们的模型在适应各种尺寸的构型的同时精度也得到了保证.

我们可以进行合理的推测,不同尺寸的构型一起进行训练,可以让模型提取出不同尺寸下稳态构型的共性特征,从而使生成的构型更加符合真实构型.

3.3.3 损失函数

(该章与上一章都值得更多篇幅的描写,并配合图片)

损失函数我们采用均方误差(MSE)与 KL 散度相结合的方式构造损失函数,我们将在附录中相信介绍这两种方法。

$$L = MSE(X, \bar{X}) + KL(q(Z|X, A) || p(Z)) \quad (7)$$

均方误差(Mean Squared Error, MSE)是评估两个连续型随机变量预测结果误差的一种方法,通过用于评估回归模型的性能。它计算预测值和真实值之间差值的平方的平均值,可以用以下公式表示:

$$MSE = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_i)^2 \quad (8)$$

其中 n 是样本数量, x_i 是真实值, \bar{x}_i 是预测值。MSE 越小表示预测结果越接近真实值,因此通过用作损失函数来优化回归模型的参数。

KL 散度 (Kullback-Leibler Divergence, KL 散度) 是一种用于衡量两个概率分布之间距离的指标。它的计算方式是衡量两个概率分布的相对熵 (relative entropy), 可以用以下公式表示:

$$KL(P || Q) = \sum_i p(i) \log \frac{p(i)}{q(i)} \quad (9)$$

其中 P 和 Q 是两个概率部分, i 是概率分布中的元素。KL 散度用于衡量 P 相对于 Q 的信息增益, 因此通常用于优化生成模型的损失函数, 使生成模型生成的样本分布尽可能接近真实样本的分布。

公式 Eq.7 这两项分别代表了重构误差和正则化项, 均方误差可以用来衡量生成的

节点状态和原始节点状态之间的重构误差，而 KL 散度可以用来惩罚生成的节点状态分布和隐变量分布之间的差异，从而使得生成的结果更加真实和多样化。这两个指标的结合可以兼顾数据重构和潜在空间的约束，帮助网络模型更好地学习到数据的分布结构，从而提高生成结果的质量和多样性。

具体来说，均方误差可以使网络更好地学习到输入数据的重要特征，从而提高重构图像的质量。而 KL 散度可以使网络更好地学习到数据的潜在分布结构，从而使生成的图像更加多样化，并且能够根据不同的条件生成不同的 Ising 构型。

此外，使用均方误差和 KL 散度还有一个好处是在模型训练过程中可以更好地平衡两者之间的权衡。因为均方误差和 KL 散度的值在量级上可能存在较大的差异，因此需要在训练过程中调整它们之间的权重比例，以便得到更好的结果。在实验过程中，因为节点的属性值会受到边的影响，并且边的影响是双向的，所以我们给 KL 散度一个 1/8 的权重，使其更好的得到结果，加权重与不加权重的实验效果会在下一小结进行对比。

3.3.4 生成器

生成器是一个由解码器部分组成的模型，我们通过在训练阶段对不同尺寸的构型放在一起进行训练，得到的是一个能够生成任意尺寸构型的生成器。在具体生成某种尺寸构型时，我们需要通过固定网络的生成节点数量来实现。这可以通过重复训练模型并在此过程中还试试尺寸固定技巧来实现。具体方案是我们可以先在已训练完成的模型基础上，再进行 1~5 轮的尺寸固定训练，通过这种方式将网络中的生成节点数量转变为我们想要的构型节点数量，从而生成不同尺寸的构型。这种方法能够快速、有效地生成不同尺寸的构型，并且在保持模型性能的同时，使模型具有更好的适应性和泛化能力。

在生成过程中，我们并不需要再进行模型的训练，我们在训练完成后保存模型和训练出来的 μ 和 σ ，并用生成器来生成我们想要的构型。

3.4 实验结果与分析

（这一章主要是贴图，目前所想的实验方案有 1：测量 16 尺寸 32 尺寸单尺寸的物理特性分布，2：测量混合尺 两种尺寸的物理特性分布 3：测量传统方法与本方法所耗费时间的折线图 4：测量编码器使用不同卷积操作模型的性能 5：测量不同 KL 散度权重模型的性能）

该章节需要说明评估指标，实验价值

3.4.1 实验设计

实验采用的数据集是由 MCMC 方法生成的稳态 Ising 构型和我们通过生成器生成的 Ising 构型。

实验的评估指标采用 Ising 模型的两个物理特性:平均能量与平均磁化强度,下面将介绍两种指标的公式:

$$E = -\frac{J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j}{L^2} \quad (10)$$

其中 J 为常量, $\langle i,j \rangle$ 表示只对最近邻原子求和, L 表示 Ising 构型的尺寸, Eq.10 代表了 Ising 构型的平均能量。

$$M = \frac{\sum_i S_i}{L^2} \quad (11)$$

S_i 表示每个晶格的磁化量, +1 为 1, -1 为 0, M 便是平均磁化强度。

在实验的设计上, 主要将实验分为三部分: 第一部分主要分析模型的生成能力, 将生成的构型与 MCMC 方法生成的构型进行物理特性上的比对, 同时验证模型是否能生成不同尺寸的 Ising 构型; 第二部分模型对比, 将本文提出的模型与其他常用的生成模型进行比较, 将模型所用的图卷积网络与其余图卷积网络相比较, 从多个角度来评估模型的优劣性; 第三部分敏感度分析, 对模型超参数进行敏感度分析, 例如 KL 散度权重, 卷积操作的数量和类型等, 以研究这些参数对模型性能的影响。

3.4.1 实验结果

由于图神经网络的特性, 我们可以在一个生成网络模型中生成不同尺寸的 Ising 构型, 在本小节, 我们使用 VGAE 分别单独生成 16, 32 尺寸的 Ising 构型, 之后我们使用混合模型来生成 16, 32 尺寸的 Ising 构型, 观察生成的构型与 MCMC 方法生成的构型物理特性是否吻合。

(第一次实验图, 对实验结果进行详细讲解)

从实验中, 我们可以看出, 在模型只需要生成单尺寸构型时, VGAE 生成的构型与 MCMC 方法生成的构型近乎一致, 在 32 与 16 尺寸共同训练的 VGAE 模型中, 32 尺寸的精度有所下降但依然符合 Ising 模型的物理特性, 对 16 尺寸来将物理特性没有损失。所以 VGAE 在 Ising 模型的仿真模拟上具有重大意义, 并且可以完成多尺寸构型的模拟生成且具有较高精度, 同时, 在多尺寸的模拟中, 较低尺寸的构型模拟不会有精度损失。

3.4.2 模型对比

在 VGAE 模型卷积层的选择当中，由于图神经网络的不断发展，我们有非常多的选择空间，例如基于谱的图卷积网络 GCN，出自 [smei****](#) 文章，例如将注意力机制融合到图卷积当中的 GAT()，当然包括本实验所采用利用边权重的高维图卷积网络，在本小节中，我们将三种不同的卷积操作分别进行实验模拟，观察使用不同模型生成的 Ising 构型与 MCMC 方法生成的 Ising 构型在物理表征上是否符合，以下便是实验结果：

通过实验我们可以得知，使用 GCN,GAT 做卷积层并没有良好的效果，而使用 H-GCN 作为卷积层则具有较好的模拟效果。这得益于 H-GCN 采用的边属性，对于同样采用边特征的 GAT 来说，效果不如 H-GCN 的原因可能是因为多头注意力导致的过拟合问题无法解决，这只是一种猜测。

同样的，将三种卷积的重构准确性进行对比，我们还是可以发现使用 H-GCN 的 VGAE 拥有压倒性优势：

接下来，我们将 VGAE 与传统的生成网络在 Ising 模型上模拟做对比，参与实验的传统模型是 VAE 与 GAN：

可以看出，VAE 在模拟上的效果不太理想，而 GAN 的模拟效果与 MCMC 方法的物理特性基本符合，但是 GAN 网络由于传统卷积的限制，无法生成多尺寸的 Ising 构型，所以 VGAE 在模型的泛化性上要优于 GAN。

3.4.3 敏感度分析

本文中的模型拟合误差利用了 KL 散度的特性来收敛误差，KL 散度的参数对模型的影响十分关键，本小节将 KL 散度的参数分别设置为 1、1/4 和 1/16 来进行实验分析：

--	--

从实验结果中，我们可以看出，不同的 KL 散度权重对模型的准确性影响非常大。
(篇幅不够的话可以加上卷积层对比)
(也可以加上不同卷积地 KL 散度权重)
(与传统 MCMC 方法比较生成时间)

3.5 分析与讨论

根据上一节的实验结果，我们可以对其进行分析与讨论，以此来总结出模型的优势与局限性，并将其转换在应用领域和做更好的改进。

在单尺寸模拟方面，生成出的 16 尺寸和 32 尺寸的构型物理特征与 MCMC 方法生成构型的物理特征基本吻合。这表明所提出的模型在生成单一尺寸的构型时具有较好的重构能力。同时，模型的生成结果也可以与传统的 MCMC 方法生成的构型进行比较，从而验证模型的有效性。

在多尺寸模拟方面，生成 16 尺寸的 32 尺寸的构型表现都不错，但 32 尺寸构型的表现略逊于单尺寸模型下的构型，16 尺寸则要优于单尺寸模型。这可能是因为多种尺寸在一起训练时，模型的学习能力得到提升，由于数据集更加丰富，相应地训练出地模型泛化能力更好。对于 32 尺寸来说，由于要兼顾 16 尺寸的构型，所以准确性下降。所以在生成不同尺寸构型的时候，我们要采用不同的生成策略，以获得更好的生成效果。

在模型卷积对比方面，使用 H-GCN 的效果要好于使用 GCN 和 GAT 的效果。这可能是因为 H-GCN 可以更好地利用图结构中的局部信息和全局信息。相比之下，GCN 和 GAT 更注重局部信息，忽略的全局信息。因此，在图结构中，具有较强的全局特征时，H-GCN 能够更好地捕捉和利用这些信息，从而提高模型的性能。

在敏感度分析上，使用 $1/16$ 的 KL 散度权重的损失值要好于使用 1 和 $1/4$ 权重的 KL 散度权重。这表明较小的 KL 散度权重有利于构型的重构。在模型训练过程中，KL 散度用于平衡重构误差和噪声项，较小的 KL 散度权重可以使模型更关注重构误差，从而提高重构准确度。

在卷积层数方面，3 层卷积要好于多层卷积。这可能是因为多层卷积会引入更多的噪声和误差，从而降低了模型的重构能力。需要在模型训练时谨慎选择卷积层数，以获得更好的重构效果。

另外，从时间和计算资源的角度来看，我们的方法相对于传统的 MCMC 方法可以节省很多时间和计算资源。因为 MCMC 方法需要进行多次模拟和计算，而我们的方法只需要进行一次模型训练，之后便可以直接生成模拟结果。这对于大规模模拟和数据

分析非常有帮助，可以提高工作效率和准确性。

综上所述，通过实验结果的分析与讨论，我们可以看出我们提出的方法在 Ising 模型的构型生成任务中取得了很好的效果，可以生成具有良好物理特性的构型，并且相对于传统的 MCMC 方法具有更高的效率和准确性。这种方法还可以扩展到其他复杂系统的模拟和分析中，具有很大的应用前景。

第 4 章 基于 GridVGAE 的物理模型生成应用系统

4.1 绪论

4.1.1 项目背景

物理模型是用来描述物质或现象的数学表达式或方程，它可以帮助我们理解和预测物理现象的规律和特性。以 Isin 模型为例，Ising 模型可以用来研究相变、临界现象、磁化、熵等物理概念，也可以用来模拟复杂系统中的许多现象，如神经网络、生物进化、社会行为等。然而，物理模型的建立往往需要大量的实验数据和复杂的数学推导，这在很多情况下是困难或不可行的。因此，如何利用机器学习技术来自动生成或优化物理模型是一个具有重要意义和挑战性的研究课题。图神经网络是一种能够处理非欧几里得结构数据（如图、网格、点云等）的深度学习算法，它可以有效地提取图数据中的拓扑信息和特征信息，并且具有良好的泛化能力和可解释性。变分自编码器是一种基于变分推理的生成式模型，它可以从高维数据中学习潜在空间的分布，并且可以通过潜在变量来重构或生成新的数据样本。基于图神经网络和变分自编码器相结合的方法，在图像、文本、生物等领域已经展示了优异的生成性能。然而，在物理领域，这种方法还没有得到充分地应用和探索。

4.1.2 研发目的

本系统旨在开发一个基于 web 的应用系统，利用 GridVGAE 模型来模拟不同物理系统的构型和性质。GridVGAE 是一种结合了图神经网络和变分自编码器的深度学习算法，能够从训练数据中自动学习潜在空间的分布，并重构潜在变量的分布。GridVGAE 可以把高维的输入数据映射到潜在空间，从而可以更容易地检测隐藏的规律，发现更复杂的关系。GridVGAE 还可以在不同尺寸的构型之间快速切换，提高模型的通用性和效率。与传统方法相比，本系统结合 GridVGAE 后具有以下优势：

- 可以生成任意大小和形状的构型，不受网格结构或边界条件的限制；
- 可以生成高质量和高精度的构型，与真实物理系统保持一致；
- 可以提高计算效率和节省资源，减少冗余运算和存储空间。

本系统对于凝聚态物理学领域具有重要意义和价值，可以帮助研究人员更准确地预测物理性质，以及帮助设计出新材料和新模型，进而推动凝聚态物理理论的发展。

4.1.3 主要工作

本项目基于第三章所提出的基于图变分自编码器的 Ising 模型模拟器进行改进和扩展，形成可视化仿真系统，并完成以下工作：

- 设计并实现了一个基于 Web 技术（HTML/CSS/JavaScript）的用户界面，方便

用户输入参数并查看结果；

- 使用 Python 语言和 PyTorch 框架实现了后端服务器程序，并部署在云平台上；
- 使用 Matplotlib 库对生成结果进行可视化展示，并与传统方法进行对比验证；
- 对不同温度和外场条件下生成的 Ising 构型进行物理量（如能量、磁化率、比热等）的计算，并与理论值进行对比分析；

4.2 开发技术及环境分析

本小节旨在介绍所用的开发技术及开发环境，以便能更加全面系统的了解开发过程中的思路与方法。

4.2.1 开发技术

编程语言：Python

Python 是一种高级的、解释型、面向对象的编程语言。它的语法简洁、易读易写，非常适合快速开发原型、科学计算、数据分析等领域。Python 支持多种编程范式，包括面向对象、函数式和过程式编程。它也有很强的社区支持，丰富的第三方库和框架可以帮助开发者快速实现各种应用。

后端框架：Flask

Flask 是一个轻量级的 Python Web 框架，它基于 Werkzeug WSGI 工具箱和 Jinja2 模板引擎。Flask 具有简单、灵活、可扩展的特点，使得它非常适合构建小型 Web 应用和 API 服务。Flask 的核心是通过路由定义处理不同的 HTTP 请求，同时它也提供了很多扩展，例如支持数据库、表单处理、用户认证等。

前端框架：Vue.js

Vue.js 是一个渐进式 JavaScript 前端框架，它专注于构建用户界面。Vue.js 采用了组件化开发的思想，将一个页面分解为多个组件，使得组件之间的耦合度降低，可维护性和可复用性增加。Vue.js 的 API 设计非常直观，易于学习和使用，同时它也提供了丰富的生态系统和插件，例如 Vuex 状态管理、Vue Router 路由管理等。

数据库：MySQL

MySQL 是一种关系型数据库管理系统，它是最流行的开源数据库之一。MySQL 使用 SQL 语言进行查询和操作数据，支持多种数据类型、完整性约束和事务处理等。它也提供了高可用性、可扩展性和安全性等方面的解决方案，可以支持各种规模的应用场景。

机器学习库：PyTorch

PyTorch 是一个基于 Python 的科学计算包，它主要用于深度学习应用。PyTorch 的特点是动态图，即在计算图的构建和执行过程中可以进行实时调整和优化，这使得它

非常适合用于研究和实验开发。PyTorch 提供了各种深度学习模型和算法的实现，例如卷积神经网络、循环神经网络和变分自编码器等。同时，它也支持在 GPU 上进行并行计算，可以大幅度提高模型训练和推理的效率。

4.2.2 硬件环境

CPU: 2*Xeon 白金 8180(56 核 2.5GHZ)

内存: 512GB DDR4 2666

硬盘空间: 2TB SSD + 150 并行存储

显卡: 10*QGP100(显存 144GB)

带宽: 9*PCIE 8x/每块显卡显存带宽 716GBs

4.2.3 MVC 开发模式

MVC(Model-View-Controller)模式是软件工程中的一种软件架构模式，它把软件系统分为三个基本部分：模型(Model)、视图(View)和控制器(Controller)。其目的是将软件的用户界面(即前端)和业务逻辑分离，使代码具有更高的扩展性、复用性、可维护性以及灵活性。

模型(Model): 用于封装与应用程序业务逻辑相关的数据以及对数据的处理方法。模型主要由两部分组成：实体类和业务处理。实体类专门用来存储业务数据的对象。业务处理类专门用于业务逻辑处理，数据库访问。

视图(View):负责显示用户界面，以及接受用户输入。视图是模型的外观，它可以根据不同的需求和风格进行定制。在 Web 应用中，View 就是我们说的前端页面，通常由 HTML、JSP、CSS、JavaScript 等组成。

控制器(Controller): 负责接收用户输入，并调用相应的模型和视图。控制器是模型的视图之间的协调者，它处理用户请求并更新视图。从流程上来收它负责将用户的请求交给模型层进行处理，并将 Model 层处理完成的数据返回给视图渲染并展示给用户。

MVC 模式的优点:

1. 分工明确，通过 MVC 模式可以把数据库的开发，程序业务逻辑开发以及页面开发分开，这样方便后期的代码维护也使得程序员之间分工更加明确。
2. 重用性高而模型具备可移植性，可以允许更换视图和控制器对象。这样可以为一个模型在运行的同时建立和使用多个视图，也可以使得所有关联的视图和控制器做到同步更新。
3. 提高了应用系统的可维护性、可扩展性、可移植性和组件的可复用性。因为不同部分之间的耦合度低，所以修改或增加某一部分不会影响其他部分。

MVC 模式的缺点:

1. 没有明确的定义，不同人对 MVC 模式由不同理解和实现方式。这可能导致代码

风格不统一或者难以理解

2. 降低了系统的性能以及增加了代码工作量。因为要在三个部分之间进行数据传递和转换，所以会消耗更多的资源和时间。
3. 增加了系统结构和实现过程的复杂度。因为要设计三个部分并保持它们之间协调一致，所以需要更多的技术和经验。

4.3 任务概述

4.3.1 任务描述

系统开发的目的是构建一个基于 web 的应用系统，本系统应用领域主要在物理与经济学领域通过生成不同模型来辅助研究物质特性或者社会性质，本系统能够实现以下功能：

1. 用户可以通过浏览器访问该应用系统，并进行注册，登陆，注销操作。
2. 提供简介、易用的用户界面，支持上传数据集，进行预处理、模型训练和预测。
3. 支持多种数据格式的导入和导出，包括 CSV、Excel 等。
4. 支持自定义数据预处理方式，例如数据清洗，特征提取等。
5. 支持自定义模型训练方法，包括训练参数、损失函数等。
6. 支持多种方式获取数据，包括传统方式与 GridVGAE 生成方式
7. 支持自定义卷积操作，既可以使用默认图卷积操作，也可以使用 GCN,GAT 等卷积操作，同样支持自己实现卷积。
8. 系统实现不同模型的可视化表示，并允许用户自制可视化效果

4.3.2 条件与约束

条件：

安全性：系统具有较强的安全性,对数据和相关信息具有较强的保护性；

稳定性：系统应该有稳定的抗压能力在大多数情况下可以稳定运行；

兼容性：应与大多数硬件软件有良好的兼容性；

可行性：系统应该有简单易懂的操作与明显的输入输出。

约束：

系统必须遵守相关的法规和版权协议；系统必须保证用户数据的安全性和隐私性；系统必须在规定的时间内完成开发和测试。

系统通过浏览器以网站的形式进行访问；服务器运行于 Ubuntu linux 操作系统。

4.3.3 用户特点

操作人员：操作人员是指使用本软件进行物理模型生成的用户，他们需要具备以

下特点:

教育水平: 操作人员应该具有本科以上的学历, 并且有一定的物理学、数学和计算机科学的基础知识。

技术专长: 能够使用本软件提供的用户界面和交互方式进行物理模型生成。

使用频度: 操作人员可能会根据自己的研究目标 and 需求, 不定期地使用本软件进行物理模型生成, 但不会频繁地更换数据集或模型参数。

维护人员: 维护人员是指负责本软件的更新、修复和优化的开发者, 他们需要具备以下特点:

教育水平: 维护人员应该具有硕士以上的学历, 并且有深入的物理学、数学和计算机科学的专业知识。

技术专长: 维护人员应该精通 Python 语言和 Pytorch 框架, 并且能够使用本软件提供的源代码和文档进行物理模型生成算法的改进和扩展。

使用频度: 维护人员可能会根据用户反馈或新技术发展, 定期地对本软件进行更新、修复和优化, 但不会大幅度地修改数据集或模型结构。

4.4 需求分析

(需求分析阶段主要分析在功能上需要做什么, 而不是考虑怎么做, 可以画业务用例图: 用来描述系统的功能和用户之间的交互关系 2。

活动图: 用来描述系统中各个活动或者流程之间的逻辑顺序和条件 2。

状态转换图: 用来描述系统中对象或者实体的状态变化和触发状态转换的事件 3。

原型图: 用来展示系统的界面设计和用户体验 1。

4.4.1 功能需求

(可以画一张图)

用户管理功能: 系统应提供用户注册、登陆、注销等基本功能, 以及用户信息修改、密码找回等辅助功能。

数据管理功能: 系统应支持用户通过浏览器上传和下载数据集, 并支持多种数据格式的导入和导出, 包括 CSV, Excel 等。系统应支持自定义数据预处理方式, 例如数据清洗, 特征提取等。

模型管理功能: 系统应支持用户自定义模型训练方法, 包括训练参数、损失函数等。系统应支持多种方式获取数据, 包括传统方式与 GridVGAE 生成方式。系统应支持自定义卷积操作, 既可以使用默认图卷积操作, 也可以使用 GCN, GAT 等卷积操作, 同样支持自己实现卷积。

可视化功能: 系统应实现不同模型的可视化表示, 并允许用户自制可视化效果。

4.4.2 非功能需求

本系统应该满足以下性能、可靠性、安全性、可用性等方面的标准：

性能：系统应该能够在较短时间内完成一次构型生成任务，并且保证输出结果质量高。

可靠性：系统应该能够稳定地运行，在不同温度不同混合尺寸的参数下都能正常工作，并且处理异常情况（例如输入参数无效或超出范围）。

安全性：系统应该保护用户数据和隐私，不泄露或篡改用户输入或输出信息，并且防止恶意攻击或篡改。

可用性：系统应该提供友好和易用的用户界面，让用户可以方便地输入参数、查看输出结果和评估指标，并且提供必须的帮助和说明信息。

4.4.3 界面需求

本系统与用户和其他系统之间交互方式如下：

用户界面：本系统提供一个图形化界面，让用户可以通过鼠标或键盘输入温度，尺寸，模型类别等参数，并且通过屏幕查看输出结果和评估指标。界面设计简洁明了，符合人机交互原则。

硬件接口：本系统需要与计算机硬件进行交互，包括 CPU、GPU、内存和硬盘等部件。硬件配置要求满足运行 GridVGAE 模型所需资源。

软件接口：本系统需要与操作系统、编程语言、开发框架等软件进行交互。软件环境要求支持运行 GridVGAE 模型所需求库和依赖项。

4.5 可行性分析

可行性分析是对系统在技术、经济、法律、社会等方面的可行性进行评估和分析，以确定是否值得投入资源和时间进行开发和实施。

4.5.1 技术可行性

本系统的技术难点主要在于 GridVGAE 模型的设计和实现，需要使用深度学习，图神经网络等先进技术。由第三章的实验结果可得，我们已经成功的开发了 GridVGAE 模型，并且在生成 Ising 模型构型仿麦呢取得了很好的表现。因此，本系统在技术上是可行的。

4.5.2 经济可行性

本系统的经济成本主要包括硬件设备，软件环境，人力资源等方面。硬件设备方面，需要一台配置较高的计算机来作为服务器部署，这需要一定的投资。软件环境方

面，需要安装支持深度学习和图神经网络等库和依赖项的操作系统和编程语言，这需要一定的时间和精力。人力资源方面，需要有一定专业知识和技能的开发者来维护和优化 GridVAE 模型，这需要一定的培训和管理。本系统的经济收益包括提高物理模型的生成效率、质量、多样性等方面。这可能对物理学研究、教学等领域有着积极意义，并且有潜在市场需求。因此，本系统在经济上是可行的。

4.5.3 法律可行性

本系统涉及到用户数据和隐私保护、知识产权保护等法律问题。用户数据和隐私保护方面，需要遵守相关法律法规，并且获取用户同意后才能收集、存储、处理用户输入或输出信息，并且不泄露或篡改用户数据和隐私。知识产权保护方面，需要尊重原创作者对 GridVGAE 模型及其相关成果所享有的版权，并且不侵犯或滥用他人对类似或相关成果所享有的版权。因此，本系统在法律上是可行。

4.6 软件概要设计

在软件概要设计部分，需要画的图主要有以下几种：

类图：用于描述软件的静态结构，即软件中包含的类、属性、方法以及类之间的关系 1。

用例图：用于描述软件的功能需求，即软件中包含的用例、参与者以及用例之间的关系 1。

顺序图：用于描述软件的动态行为，即软件中对象之间在某个场景下的交互顺序和消息传递 1。

状态图：用于描述软件中对象或系统在不同状态下的转换和行为 2。

活动图：用于描述软件中业务流程或算法逻辑，即软件中活动、控制流、数据流等元素之间的连接和条件 2。

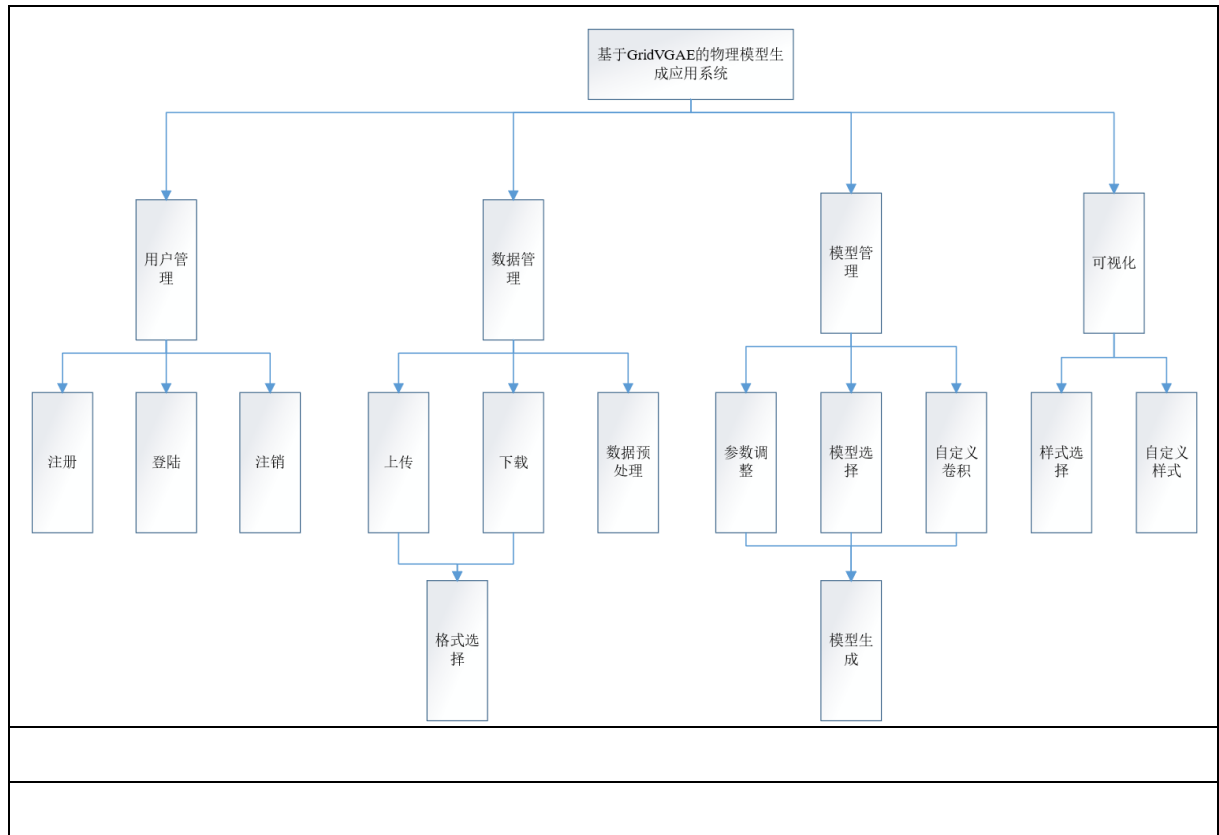
4.6.1 总述

本系统是一个基于 web 的应用系统，为物理和经济学领域的研究人员提供辅助研究的工具。通过提供简洁易用的用户界面、支持数据的预处理、模型训练和预测、自定义数据预处理方式和模型训练方法、多种方式获取数据和自定义卷积操作等功能，让用户能够更加方便地进行研究工作。

4.6.2 总体设计

本系统主要分为四个模块，分别是用户管理模块，数据管理模块，模型管理模块，可视化模块。

系统的总体结构与模块划分如图*所示。其中最主要的模块为模型管理模块，负责模型生成工作，其余模块都是辅助该模块。同时本系统会记录不同的模型种子，在下次进行生成的时候，进行数据匹配。这样就会极大缩短模型生成时间，所有用户共享数据资源，极大的扩展了系统的可用性。



4.6.3 接口设计

接口名称	用户登录接口			
接口描述	用户输入账号和密码来登陆系统			
	字段名称	字段说明	说明	逻辑验证规则
请求参数	username:str	用户名	不可为空	1.为空时返回“用户名不可为空” 2.若无法在数据库检索到用户名，则返回“用户名或密码错误”
	password:str	密码	不可为空	1.为空时返回“密码名不可为空” 2.若无法在数据库检索到用户名，则返回“用户名或密码错误”
返回参数	code:int 状态码,0 表示成功,其他表示失败			
	message:str,状态信息			

接口名称	数据集上传
接口描述	将数据集上传到系统中，以便用户可以使用它们进行模型训练和预测

	字段名称	字段说明	说明	逻辑验证规则
请求参数	user_id: int	用户 ID	必须	必须是一个正整数，且存在于用户表中
	dataset_id:int	数据集 ID	必须	必须是一个正整数
	dataset_name: str	数据集名称	必须	必须是一个非空字符串
	dataset_type: str	数据集类型	必须	必须是一个字符串，在以下列表中: ["Ising", "XY", "Heisenberg", "Potts", "Other"]
	dataset_data: list of list of float	数据集数据	必须	必须是一个非空的二位浮点数列表
	source: str	数据集来源	必须	必须是一个字符串，在以下列表中: ["generated", "uploaded"]
返回参数	code:int 状态码,0 表示成功,其他表示失败			
	失败返回 1，并提示错误信息			

接口名称	数据集下载			
接口描述	将数据集下载到本地计算机，以便用户可以使用它们进行模型训练和预测			
	字段名称	字段说明	说明	逻辑验证规则
请求参数	user_id:int	用户 ID	必须	1.为空时返回“文件名称不可为空”
	dataset_id:int	数据集 ID	必须	1.为空时返回默认数据类型.dat
返回参数	code:int 状态码，0 表示成功，其他表示失败			
	message:str,状态信息			
	dataset_data:list of list of float，数据集数据			

接口名称	模型生成				
接口描述	将用户上传或者后端数据加载然后用 GridVGAE 生成构型				
	字段名称与类型	字段说明	说明	示例	逻辑验证规则

请求参数	user_id:int	用户 ID	不可为空	syh	1. 必须是一个整数,且存在于用户表中
	data_id:int	数据集 ID	不可为空	Ising_001	1.必须是一个正整数,且存在于数据表中,且属于当前用户或者是公开数据
	model_id:int	模型 ID	不可为空	GridVGAE	1.必须是一个正整数,且属于当前用户或者是公开模型
	config:dict	配置信息	JSON 格式	{"loss":....}	1.必须是一个合法的 JSON 格式的字典, 且包含必要的模型配置参数, 例如卷积类型, 损失函数等
返回参数	code:int 状态码,0 表示成功,其他表示失败				
	message:str,状态信息				
	data:dict,返回数据				
	generated_data:list of list of float 生成新的构型数据				

接口名称	可视化转换				
接口描述	将神经网络生成的模型用图表的方式可视化				
	字段名称与类型	字段说明	说明	示例	逻辑验证规则
请求参数	user_id:int	用户 ID	不可为空	syh	必须是一个整数,且存在于用户表中
	data_id:int	数据集 ID	不可为空	Ising_001	必须是一个正整数,且存在于数据表中,且属于当前用户或者是公开数据
	model_id:int	模型 ID	不可为空	GridVGAE	必须是一个正整数,且属于当前用户或者是公开模型
	chart_type:str	图表类型	可选,默认为散点图	line	必须是一个字符串, 在以下列表中: ["scatter", "line", "bar", "pie", "surface", "heatmap"]
返回参数	code:int 状态码,0 表示成功,其他表示失败				
	message:str,状态信息				
	data:dict,返回数据				
	● x:list of float,x 轴数据				

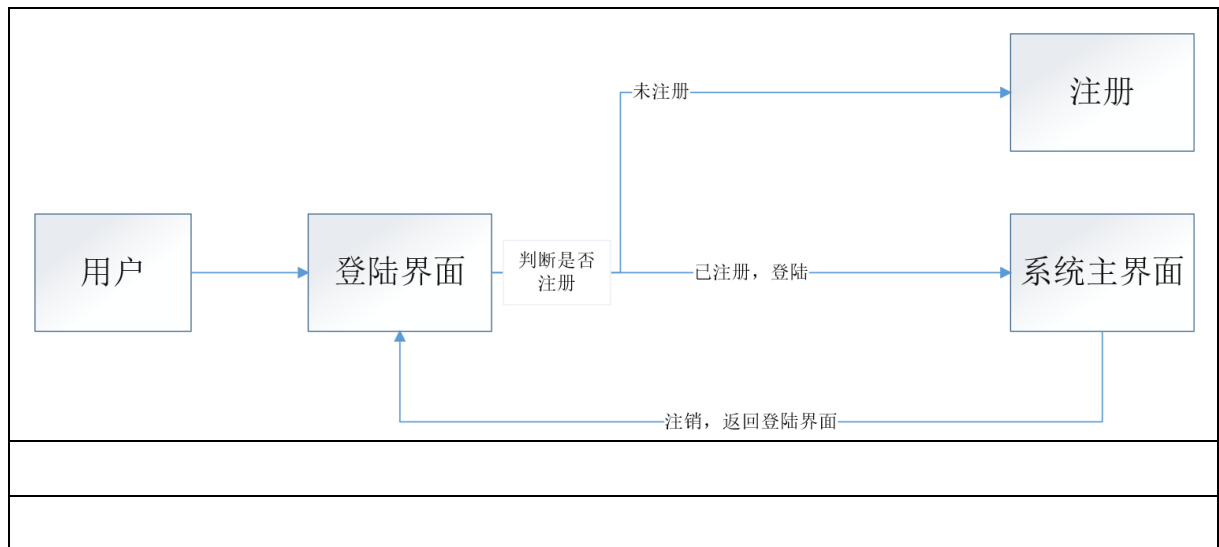
	<ul style="list-style-type: none"> ● y:list of float,y 轴数据 ● z:list of float or None,z 轴数据(如果是三维表) ● lable:list of str or None,标签数据(如果有分类信息)
--	---

接口名称	保存构型记录			
接口描述	将用户生成或者上传的构型信息和记录保存到数据库中			
	字段名称与类型	字段说明	说明	逻辑验证规则
请求参数	user_id:int	用户 ID	不可为空	必须是一个整数,且存在于用户表中
	config_id:int	模型 ID	不可为空	必须是一个正整数,且属于当前用户或者是公开模型
	config_name:str	模型名称	不可为空	必须是一个非空字符串
	config_type:str	模型类型	不可为空	必须是一个字符串,在以下列表中: ["Ising","XY","Heisenberg","Potts","Other"]
	config_status:int	模型状态	不可为空	必须是一个整数,在以下列表中
	config_data:list of list of float	模型数据	不可为空	必须是一个非空的二维浮点数列表
	source:str	模型来源	不可为空	必须是一个字符串,在以下列表中:["generated","uploaded"]
返回参数	code:int 状态码,0 表示成功,其他表示失败			
	message:str,状态信息			

4.6.4 模块设计

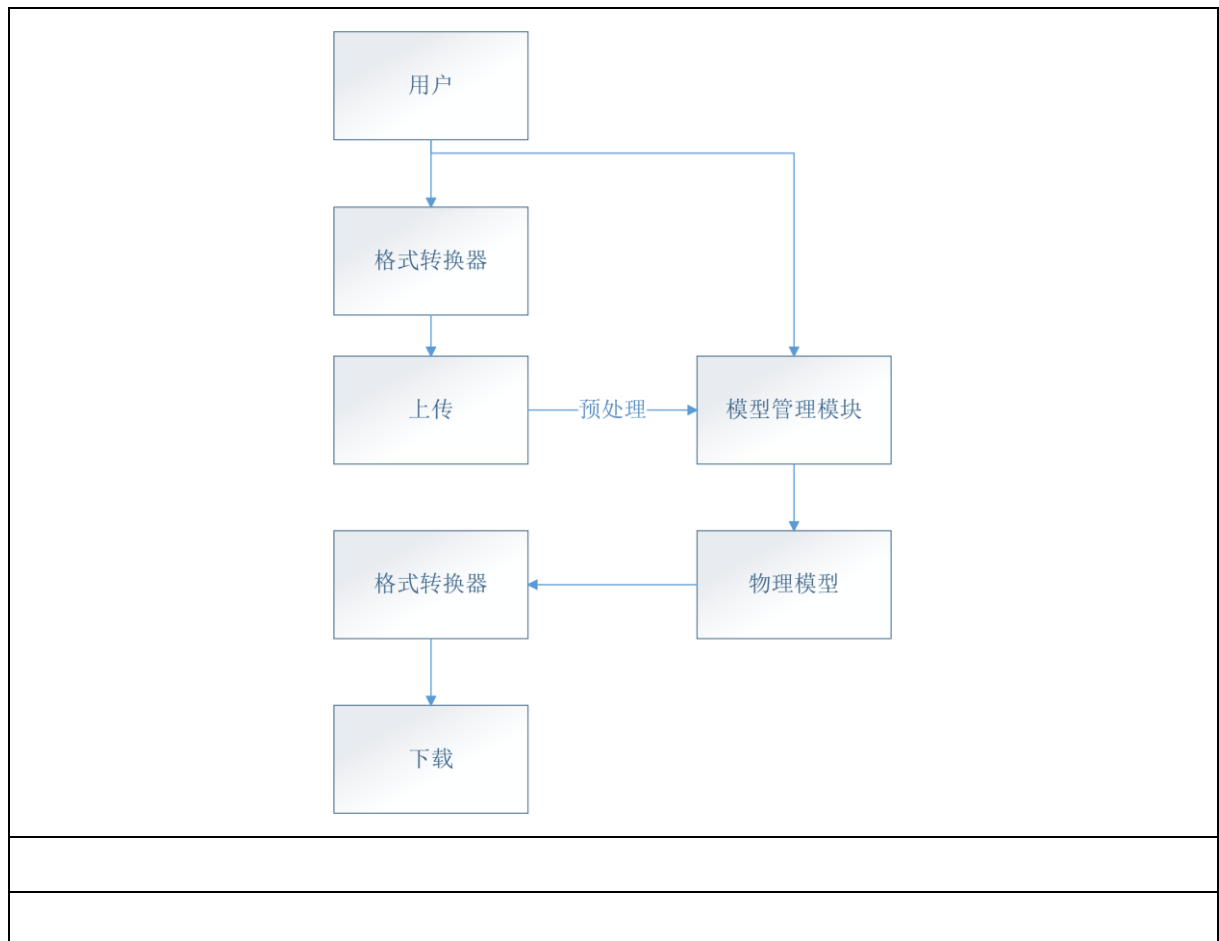
用户管理模块:

用户管理模块主要负责用户的登陆,注册,注销操作,在用户没有注册之前只能停留在登录界面,只有用户完成注册并登陆后,用户才能进入系统主界面。图*展示了用户管理模块的运行流程,用户管理模块的作用主要是为系统安全考虑,只有本站用户才能使用系统功能,并且系统会将用户的历史信息以及生成偏好进行保存,与模型管理模块结合,更好的服务用户。



数据管理模块:

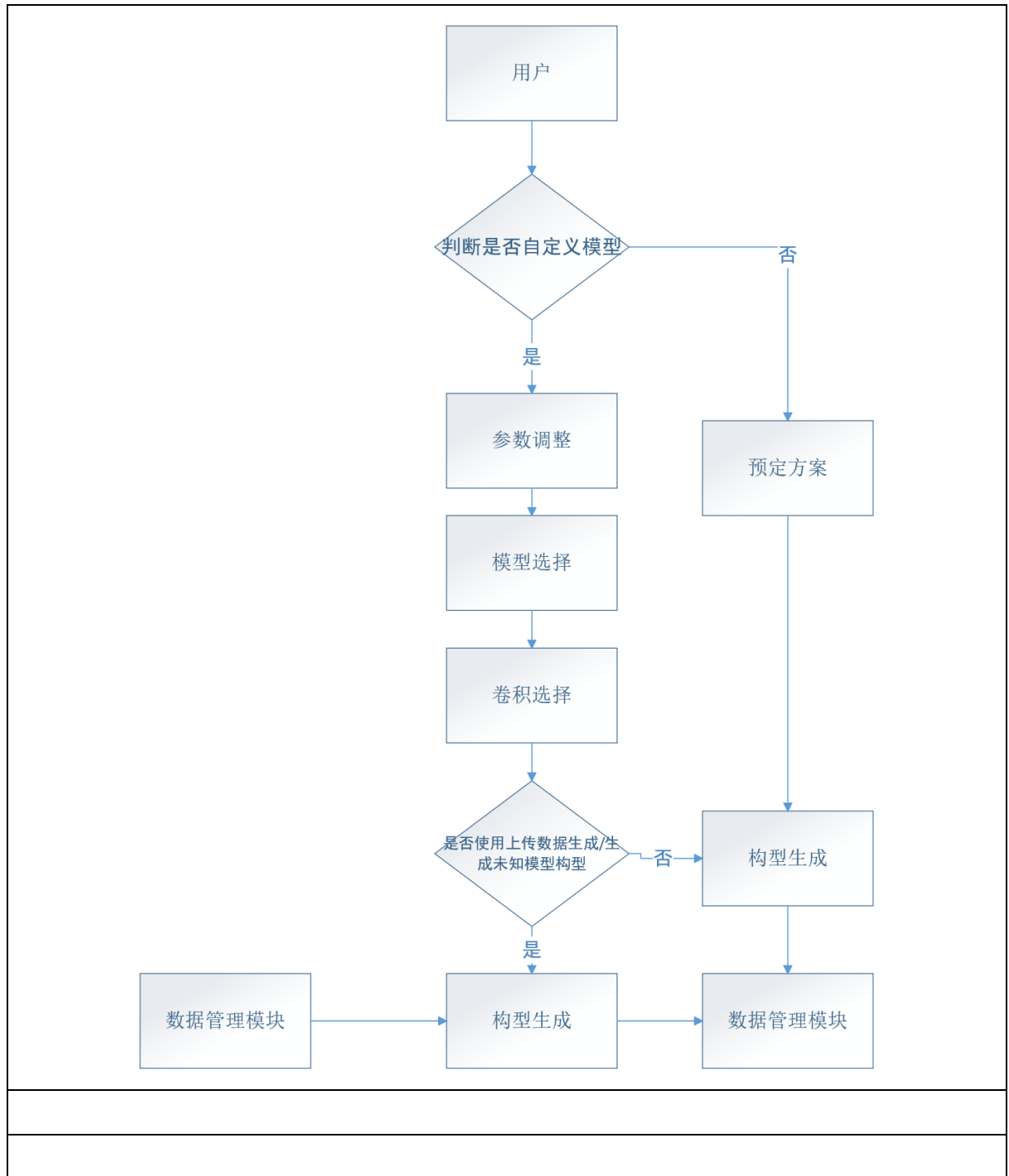
数据管理作为系统的上下游，负责用户数据的上传与系统数据的下载，作为系统的承上启下模块，扮演者非常重要的角色，数据管理模块作为系统的基石，没有数据管理模块，系统就无法正常的运行。它的主要功能流程如图*所示：



模型管理模块:

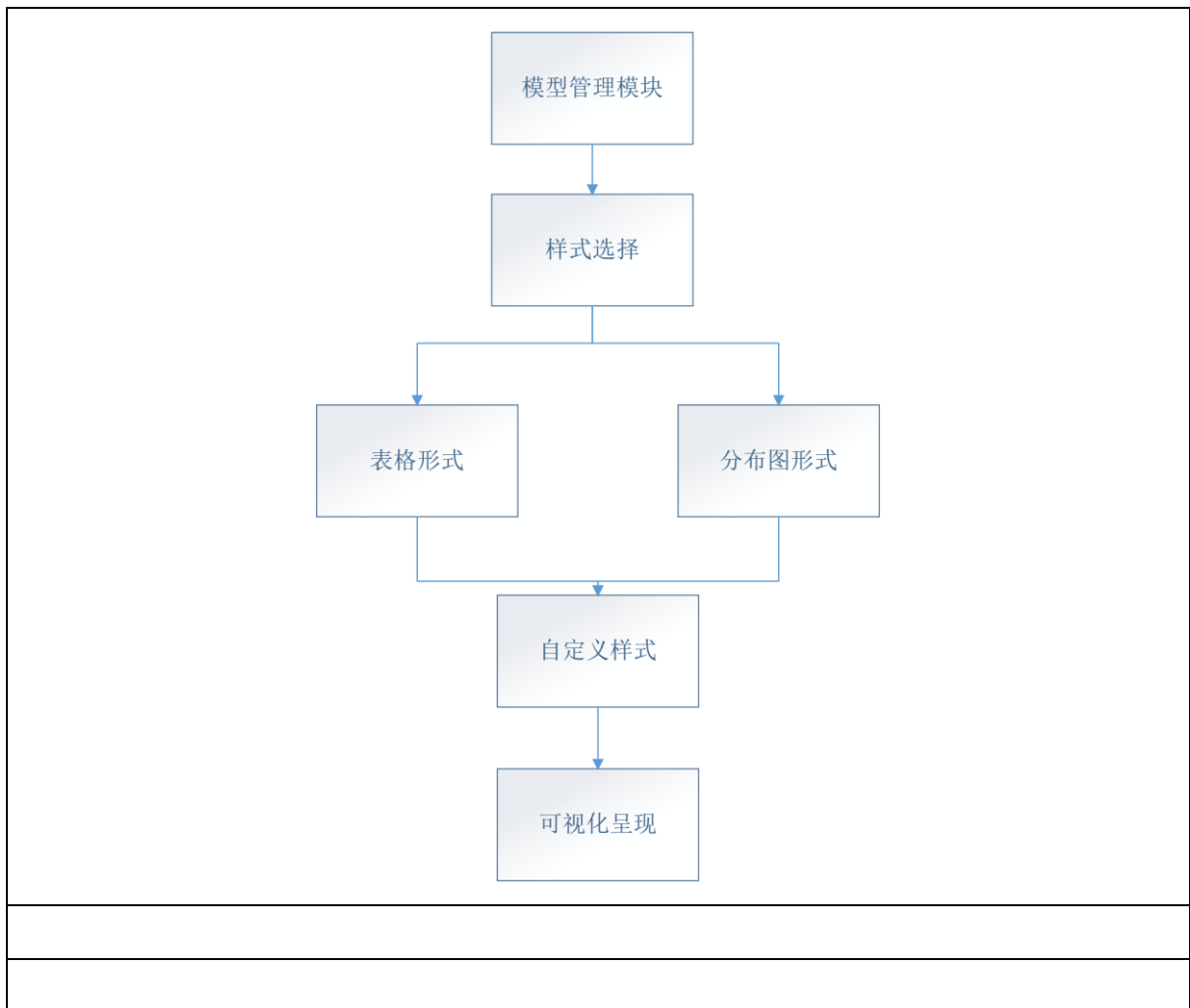
模型管理模块内核搭载了我们的 GridVGAE 算法，用来将从数据管理模块预处理的数据在数据管理模块运行，在生成模型前，我们需要选定参数，用户可以使用已经成熟的参数或者使用自己个

性化的参数来进行科研创新，在模型管理模块，我们支持用户自定义卷积操作或者使用成熟的图卷积，同时可以选择损失函数的选择、KL 权重大小以及卷积层数。当然我们也会提供成熟方案以方便量产。图*代表模型管理模块的功能流程：



可视化模块：

可视化模块作为系统的展示接口，可以使用户直观的了解模型生成的好坏，以及生成构型的物理特性以及样貌。在可视化模块中，我们集成了最主要的模型可视化方法，同样可以使用户自定义可视化样式，使用户有更多的选择。



4.6.5 容灾设计

本项目可能出现的出错情况包括：

- 用户输入错误或非法数据导致程序异常或崩溃
- 网络故障或攻击导致数据传输中断或丢失
- 服务器故障或损坏导致数据无法访问或处理
- 数据库故障或损坏导致数据丢失或损毁
- 火灾、水灾、地震等自然灾害导致硬件设备损坏或无法使用

为了应对可能出现的出错情况，本项目采用以下容灾系统技术方案：

- 对用户输入进行合法性检查和异常处理，防止程序异常或崩溃
- 使用加密和认证技术保护网络传输的安全性，使用重传和校验技术保证网络传输的可靠性
- 使用负载均衡和集群技术提高服务器的可用性，使用监控和报警技术及时发现服务器的故障
- 使用备份和恢复技术保护数据库的完整性，使用分区和复制技术提高数据库

的性能

- 使用防火、防水、防震等措施保护硬件设备的安全性，使用电源切换和发电机等设备保证硬件设备的稳定性

为了保证容灾系统的正常运行和有效维护，本项目采用以下容灾系统运行维护方案：

- 定期对用户输入进行测试和评估，优化程序异常处理逻辑和提示信息
- 定期对网络传输进行测试和评估，优化网络加密认证算法和重传校验机制
- 定期对服务器进行测试和评估，优化负载均衡策略和集群配置参数
- 定期对数据库进行测试和评估，优化备份恢复策略和分区复制规则
- 定期对硬件设备进行测试和评估，优化防火防水防震措施和电源切换发电机设备

4.6.7 其他设计

安全性设计：数据库加密：对于敏感数据，采用加密方式存储，保证数据安全；权限控制：对于不同的用户，采用不同的权限控制，保证数据的安全性；防止 SQL 注入：采用参数化查询的方式，防止 SQL 注入攻击；防止 XSS 攻击：采用输入过滤的方式，防止 XSS 攻击；防止 CSRF 攻击：采用 Token 验证的方式，防止 CSRF 攻击。

可靠性设计：数据备份：对于重要的数据，采用定期备份的方式，保证数据的可靠性；异常处理：对于系统中的异常，采用日志记录的方式，方便后期排查问题；代码规范：采用代码规范的方式，保证代码的可读性和可维护性；单元测试：采用单元测试的方式，保证代码的正确性和可靠性。

效率设计：缓存优化：采用缓存的方式，减少数据库的访问次数，提高系统的效率；数据库优化：对于数据库的查询，采用索引的方式，提高查询效率；码优化：采用代码优化的方式，减少代码的执行时间，提高系统的效率。

4.7 详细设计

参考文献

- [1] 雷桂媛. 关于蒙特卡罗及拟蒙特卡罗方法的若干研究[D]. 浙江大学.
- [2] 陈晓怀, 薄晓静, 王宏涛. 基于蒙特卡罗方法的测量不确定度合成[J]. 仪器仪表学报, 2005(z1): 759-761.
- [3] 何延才. 蒙特卡罗方法在物理学中的应用[J]. 自然杂志, 1982, 5(6): 453-457.
- [4] 邓力李刚, DENG Li L G. 粒子输运蒙特卡罗模拟现状概述[J]. 计算物理, 2010, 27(6): 791.
- [5] 王岩, 尹海丽, 窦在祥. 蒙特卡罗方法应用研究[J]. 青岛理工大学学报, 2006, 27(2): 111-113.
- [6] 王俊峰. 逾渗模型的蒙特卡罗研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2013.
- [7] 应和平, 董绍静, 杨清健. 二维 Spin Glass 系统——随机格点 SO (3) 自旋模型的 Monte Carlo 模拟[J]. 计算物理, 1988, 5(1): 107.
- [8] 朱新玲. 马尔科夫链蒙特卡罗方法研究综述[J]. 统计与决策, 2009(21): 151-153.
- [9] 李长隆, 钮可. 马尔科夫链蒙特卡罗方法浅析[J]. 黑龙江科技信息, 2016(26): 48-48.
- [10] 郭茂祖, 王亚东, 孙华梅, 等. 基于 Metropolis 准则的 Q-学习算法研究[J]. 计算机研究与发展, 2002, 39(6): 684-688.
- [11] 李晓寒, 王宗笠, 宁旭. 二维 Ising 模型临界相变的 Monte-Carlo 数值模拟[J]. 安徽大学学报: 自然科学版, 2008, 32(3): 56-59.
- [12] 王松松. Monte Carlo 方法研究点随机集团模型的渗流[D]. 太原理工大学, 2016.
- [13] 刘会平. 低维受限系统热力学, 相变和临界现象的研究[D]. 华中科技大学, 2006.
- [14] 冯乐. 蒙特卡罗方法研究含集团权重伊辛模型和玻色—哈伯德模型: 相变和超固体[D]. 太原理工大学, 2017.
- [15] Hellmann M, Deng Y, Weiss M, et al. Phase transition of a two-dimensional, multiplicatively coupled XY –Potts model[J]. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 2009, 42(22): 225001.
- [16] Henley C L. Ordering due to disorder in a frustrated vector antiferromagnet[J]. Physical Review Letters, 1989, 62(17): 2056-2059.

- [17] Nguyen H C, Zecchina R, Berg J. Inverse statistical problems: from the inverse Ising problem to data science[J]. *Advances in Physics*, 2017, 66(3): 197-261.
- [18] Efthymiou S, Beach M J S, Melko R G. Super-resolving the Ising model with convolutional neural networks[J]. *Physical Review B*, 2019, 99(7): 075113.
- [19] Wetzel S J. Unsupervised learning of phase transitions: From principal component analysis to variational autoencoders[J]. *Physical Review E*, 2017, 96(2): 022140.
- [20] Long J, Shelhamer E, Darrell T. Fully Convolutional Networks for Semantic Segmentation[C]//*Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*. 2015: 3431-3440.
- [21] Krizhevsky A, Sutskever I, Hinton G E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks[J]. *Communications of the ACM*, 2017, 60(6): 84-90.
- [22] Kingma D P, Welling M. Auto-Encoding Variational Bayes[J]. 2013.
- [23] Goodfellow I J, Pouget-Abadie J, Mirza M, et al. Generative Adversarial Networks[M]. *arXiv*, 2014.
- [24] D'Angelo F, Böttcher L. Learning the Ising model with generative neural networks[J]. *Physical Review Research*, 2020, 2(2): 023266.
- [25] Kipf T N, Welling M. Semi-Supervised Classification with Graph Convolutional Networks[J]. *arXiv:1609.02907 [cs, stat]*, 2017.
- [26] De Cao N, Kipf T. MolGAN: An implicit generative model for small molecular graphs[J]. *arXiv:1805.11973 [cs, stat]*, 2018.
- [27] Kipf T N, Welling M. Variational Graph Auto-Encoders[J]. *arXiv:1611.07308 [cs, stat]*, 2016.
- [28] Chandra P, Coleman P, Larkin A I. Ising transition in frustrated Heisenberg models[J]. *Physical Review Letters*, 1990, 64(1): 88-91.
- [29] Zhou J, Cui G, Hu S, et al. Graph neural networks: A review of methods and applications[J]. *AI Open*, 2020, 1: 57-81.
- [30] Waikhom L, Patgiri R. Graph Neural Networks: Methods, Applications, and Opportunities[J]. *ArXiv*, 2021, abs/2108.10733.
- [31] 数据结构综述（严蔚敏版）[EB]//知乎专栏.
- [32] GNN 入门之路: 01.图拉普拉斯矩阵的定义、推导、性质、应用 - 知乎[EB].
- [33] Song Z, Yang X, Xu Z, 等. Graph-based Semi-supervised Learning: A Comprehensive Review[J]. *IEEE transactions on neural networks and learning systems*, 2021, PP.

- [34] Wu Z, Pan S, Chen F, 等. A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks[J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2019, 32: 4-24.
- [35] Blei D M, Kucukelbir A, McAuliffe J D. Variational Inference: A Review for Statisticians[J]. Journal of the American Statistical Association, 2017, 112(518): 859-877.
- [36] Ioffe S, Szegedy C. Batch Normalization: Accelerating Deep Network Training by Reducing Internal Covariate Shift[J]. arXiv:1502.03167 [cs], 2015.
- [37] Cai T, Luo S, Xu K, et al. GraphNorm: A Principled Approach to Accelerating Graph Neural Network Training[J]. arXiv:2009.03294 [cs, math, stat], 2021.
- [38] Luo D, Cheng W, Yu W, et al. Learning to Drop: Robust Graph Neural Network via Topological Denoising[J]. arXiv:2011.07057 [cs], 2020.
- [39] Morris C, Ritzert M, Fey M, et al. Weisfeiler and Leman Go Neural: Higher-Order Graph Neural Networks[J]. Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 2019, 33: 4602-4609.

攻读学位期间取得的研究成果

[1]丁利利, 张旭, 吴学英, 李媛, 田彦婷。基于 $Y_{0.08}Zr_{0.92}O_{2-\delta}/Er_{0.4}Bi_{1.6}O_3$ 复合电解质的 $Ca_3Co_4O_{9+\delta}$ 氧电极电化学性能。《复合材料学报》, 2022, 002, 13801。(北大核心)

[2]张旭, 吴萍萍, 丁利利, 田彦婷。基于交替浸渍法对 $La_{0.65}Sr_{0.35}MnO_3$ 氧电极的性能优化。《复合材料学报》, 2021,002,13801。(北大核心)

[3]张旭, 田彦婷, 吴萍萍, 丁利利。溶液浸渍法优化可逆固体氧化物电池氧电极研究进展。《化工新型材料》, 2021

致 谢

即将落笔，竟有些许不舍。仍记得考研面试时的紧张和初入理工大的欣喜，现将要离开生活三年的地方，我舍不得。三年的学习生涯给予我很多感动，深深留恋这片育人的土地！在各位老师的帮助下，我顺利完成了了解专业、深入专业、实验摸索、分析数据、整理数据与撰写论文的学习过程。在毕业论文收官之时，我在这儿向所有帮助、呵护过我的人们表示诚挚感谢。

特别感谢我的导师曹铃老师，三年的相处时光太过短暂，但他尽全力给予我无微不至的关心。可能我不是您优秀的学生，但您始终是我心里最为尊敬的老师。学习方面，时常听到来自曹老师的鼓励，这也是我前进的动力。科研方面，我深深感受到了曹老师认真严谨的科学态度，从理论计算到药品称量、溶液配制，他从不马虎。生活方面，曹老师时常找我谈话，询问并帮我解决最近遇到的问题和生活中的困难，他用丰富的人生阅历教导我正确的处事原则。日常生活中的他高大帅气，却没有距离感。感谢曹老师三年的关爱和付出，祝老师青春常驻、事事顺遂。

非常感谢课题组的范明明老师。范老师为人严谨，事无巨细，对学生真诚相待、对实验一丝不苟、认真负责的态度深深令我折服。办公室里的他兢兢业业、勤勤恳恳，实验室里的他早出晚归、精益求精。在实验探索中，范老师始终不厌其烦的解决我遇到的问题，亲自带我做实验摸索条件，在我气馁想要放弃的时候，他总是鼓励我，还给予我很多人文关怀，让我深深感动；在数据分析中，范老师认真教我软件作图的细则和注意事项，从坐标刻度的粗细到字号大小的选择再到图片排版，他总是耐心指导；在论文撰写中，范老师与我每日一谈，每一章、每一句、每个标点、句式逻辑他都会细细斟酌，每章节历经十余次的修改，我知道这是他牺牲了无数休息时间和节假日换来的定稿。衷心感谢范老师三年间对我的指导和鼓励，希望您日后工作顺利、家庭幸福。同时我也很感谢物电学院对困难低谷中的我伸出援助之手，感谢课题组的杨致老师、李秀燕老师、刘瑞萍老师、徐利春老师在科研上给我的帮助，老师们的谆谆教导让我铭记终身。

感谢409课题组的一切。感谢王亚通师兄、郝宇师兄、赵婉彤师姐、申嘉乐师姐给我的关怀和照顾。感谢同窗李荣对我的照顾有加。感谢409的孙庆、霍亦琦、赵文阳、郭宇宏、王岳师妹和梁建新师弟在科研上和生活中的帮助。

感谢舍友张梦、耿鑫、沈洁莲、王佩佩、潘红三年的悉心陪伴，也感谢李雪梅、尚蕾、马晓燕、韩雪婷等小伙伴在我日常学习生活上的相伴，缘分让我们相遇，今后的我们也许各奔前程，但这份友谊永在。

最后，感谢一直默默藏在我身后的避风港和坚强后盾，他们是陪伴着我的爸爸、

妈妈、哥哥、嫂子，共同为我筑起了一道道安心学习的屏障，圆了我的求学梦。

此刻的我，心里也许放空了，但终放不下。毕业，是结束，亦是开始。感恩出现在我生命中的所有人！