
机器学习探索复杂非平衡相变研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/12978.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

物质从一种状态转变为另一种状态的过程称之为相变。简单而言，相变对应了物质从一种“序”变为另一种“序”的过程。诺贝尔物理学奖获得者朗道提出的基于序参量为研究变量的朗道理论，已成为研究相变过程普遍采用的统计物理学方法。以水结冰为例：在相变发生之前，水分子是无规分布的；但相变发生之后，水分子按照四面体结构周期性的排列方式而形成冰。因而，水结冰这种相变对应着“晶体序”的产生。

与水结冰完全不同，由过冷液体在临界温度以下形成的玻璃态的过程，在相变前后，分子都呈现出无序的排列方式（图1）。液态和玻璃态的明显区别在于其各自的动力学行为：处于液态中的分子运动很快，因此液体具有流动性；而玻璃态中的分子则基本不动，因而玻璃宏观上呈现为没有流动性的固态。相对于平衡态相变（如水结冰），液体形成玻璃的过程是一个典型的非平衡过程。由于难以定义和测量体系的序参量，对于这类复杂的非平衡态相变，传统的统计物理方法显得束手无策，关于玻璃态物

理本质的理解是公认的难题，在Science

创刊125周年之际被列为125个最具挑战性的科学问题之一。由于玻璃态物质在材料应用和科学探索方面的重要价值，科学家们构建了物理和数学模型，试图理解玻璃化转变的物理本质及其规律。

中国科学院理论物理研究所副研究员金瑜亮、北京航空航天大学化学学院研究员蒋滢和加拿大滑铁卢大学教授陈征宇等合作，采用机器学习方法，直接从分子模拟数据出发，研究玻璃模型中的一种特有的复杂非平衡相变——Gardner相变，即在降温条件下，玻璃体系呈现出由具有单一cage size的Glass相到多级次cage size的Gardner相的动力学转变。基于深度学习算法的特征结构识别功能，通过构造基于分子动力学轨迹的输入数据、并结合“有限时间-有限尺寸”效应分析，研究发现机器学习算法不但可以识别这种非平衡相变，而且可以体现体系的空间关联性，从而精确确定该相变对应的临界指标等物理性质（图2）。这也是首次基于分子模拟数据对Gardner相变临界指标的数值报道。该研究方法无需对体系事先构建物理模型，而是直接从轨迹数据出发，由机器学习算法自动提取体系的非平衡态物理规律，从而有效避免了因人为理解的偏差而导致物理模型的失真。该研究非平衡态相变的思路和方法有望在自旋玻璃、高分子聚合物、生物细胞等非平衡态体系中得到进一步应用。相关研究成果发表在PNAS

上。博士李华平（北航博士后，现在中国科学院大学温州研究院工作）和金瑜亮为论文的共同第一作者，金瑜亮和蒋滢为论文的共同通讯作者。

研究工作得到国家自然科学基金委员会、中科院、北京航空航天大学拔尖人才等的支持。部分计算在理论物理所和北京航空航天大学先进计算平台完成。

机器学习探索复杂非平衡相变研究获进展

研究团队单位：理论物理研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发