

## 利用神经网络识别高分子链在表面的吸附相变\*

孙立望<sup>1)</sup> 李洪<sup>1)</sup> 汪鹏君<sup>1)†</sup> 高和蓓<sup>2)‡</sup> 罗孟波<sup>3)</sup>

1) (温州大学数理与电子信息工程学院, 温州 325035)

2) (温州职业技术学院信息系, 温州 325035)

3) (浙江大学物理系, 杭州 310027)

(2018年4月29日收到; 2018年7月25日收到修改稿)

采用深度神经网络和 Monte Carlo (MC) 模拟方法研究了线性高分子链在均质表面以及条纹表面的临界吸附现象. 通过 MC 模拟退火算法构建高分子链的构象样本集, 采用状态标记法和温度标记法对模拟产生的样本集进行标记并采用神经网络对标记后的样本进行训练, 发现神经网络可以很好地识别高分子链在均质表面的脱附态和吸附态以及在条纹表面的脱附、多条纹吸附和单条纹吸附的三个不同状态, 且发现神经网络对这两种样本标记法得到一致的临界吸附温度. 通过对训练集大小与神经网络的识别率之间的关系进行研究, 发现神经网络可以在每个温度抽取较少的训练样本集上学习得到较高的高分子链构象状态的识别率. 神经网络结合传统 MC 方法可以为高分子模拟计算研究提供一种新的方法.

**关键词:** 神经网络, 吸附相变, 高分子链, Monte Carlo 模拟

**PACS:** 07.05.Kf, 82.20.Wt, 82.35.Lr

**DOI:** 10.7498/aps.68.20190643

## 1 引言

近年来, 机器学习在各个领域都受到了研究人员的广泛关注<sup>[1-5]</sup>, 作为机器学习的分支, 人工神经网络凭借着出色的模式识别能力活跃在图像识别<sup>[6-8]</sup>、语音识别<sup>[9,10]</sup>、自然语言处理<sup>[11,12]</sup>以及推荐系统<sup>[12,13]</sup>等领域. 更有学者认为, 人工神经网络<sup>[14-16]</sup>会成为最有可能实现人工智能的方法之一. 神经网络采用反向传播 (back propagation, BP) 算法<sup>[17,18]</sup>, 并使用大量的样本进行训练, 在模式识别问题上可以达到很高的准确率. 例如在比较经典的 MNIST 手写数字识别问题和 ImageNet 图像分类问题上, 采用全连接神经网络和卷积神经网络分别取得了 99.17%<sup>[6]</sup> 和 96.43%<sup>[7]</sup> 的识别率.

最近, 人工神经网络被用于凝聚态物理、高分子物理等领域研究. 卷积神经网络被用来区分凝聚态物质在高温下的顺磁性和在低温下的铁磁性<sup>[2]</sup>, 还有深度学习被用来研究聚合物的 Coil-globule 相变, 这种将机器学习与 MC 方法相结合的方法在科学计算研究上取得了非常好的效果<sup>[1]</sup>. 这激发我们将机器学习应用于高分子吸附的研究, 也为我们研究的可行性提供了保障. 对于高分子链在表面的吸附相变问题已经有研究人员采用传统的 MC 模拟方法进行了研究并且计算了临界吸附点<sup>[19-25]</sup>. 本文将神经网络和 MC 模拟方法相结合来研究高分子链在表面的吸附相变. 吸附表面分为均质表面和条纹表面两种情况. 研究表明对于单一的高分子链, 神经网络可以很好地识别在均质表面的脱附态和吸附态以及在条纹表面的脱附态、多条纹吸附态

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11775161, 61874078)、浙江省自然科学基金 (批准号: LY17A040007) 和浙江省教育厅 (批准号: Y201738867) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wangpengjun@wzu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: bogolyx@126.com

和单条纹吸附态, 并分别计算出了高分子链在均质表面以及条纹表面的临界相变温度, 为研究高分子链的临界吸附提供了一种新方法.

## 2 模型与方法

MC 模拟方法在分子模拟领域是非常经典的研究方法之一, 本文采用 MC 模拟生成样本. 高分子链是基于自回避行走算法 (self-avoiding walking, SAW) 生成的, 链长  $N = 160$ , 键长取值为  $1, \sqrt{2}, \sqrt{3}$ . 模拟空间采用三维简立方格子空间, 在  $Z = 0$  以及  $Z = D$  处分别设置一个不可穿透的挡板,  $D > N^\nu$  ( $\nu$  为三维的 Flory 指数,  $\nu = 0.588$ ),  $Z = 0$  处的表面会对单体产生吸附作用,  $Z = D$  处的表面对单体只考虑体积排斥作用, 目的是使高分子链不远离具有吸附作用的表面. 在  $X$  和  $Y$  两个方向设置周期性边界条件, 模拟盒的水平方向尺寸  $L_X = L_Y > N^\nu$  ( $\nu$  二维的 Flory 指数,  $\nu = 0.75$ ), 在条纹宽度  $L = 4$  的条纹表面上, 为了条纹满足周期性条件, 统一取较大模拟盒尺寸  $L_X = L_Y = 144$ . 采用了模拟退火算法, 设置了 48 个温度用于退火, 在每个温度都将经历  $T = 2.5 \times N^{2.13}$  MCS 来到达平衡状态. 采用 Metropolis 重要性抽样方法 [26,27] 用来判断高分子链的每一步运动是否被接受. 假设每一个单体接触到吸附表面就获得一个能量  $\epsilon = -1$ , 然后以概率  $p$  来判断该运动是否被接受,

其中

$$p = \min \{1, \exp [-\Delta E / (k_B T)]\}, \quad (1)$$

这里的  $\Delta E$  表示每一次运动前后的能量变化,  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $T$  为温度.

本文采用卷积神经网络和全连接神经网络研究高分子链的吸附相变, 在每个温度下抽取了 9600 个样本用于神经网络的训练和测试. 神经网络的梯度更新采用累积更新算法, 并使用滑动平均以及正则化来防止过拟合. 本文所采用的神经网络模型如图 1 所示.

在图像识别领域通常将一张图片转换成矩阵输入神经网络. 卷积神经网络的结构示意图如图 1(a) 所示. 将构象的坐标信息当作“RGB 图像”转换成  $16 \times 10 \times 3$  的三维矩阵数据输入卷积神经网络, 通过卷积层提取特征、池化层泛化特征、全连接层组合特征以及丢弃 (dropout) 层暂时丢弃部分神经元和连接来防止过拟合, 最后输出高分子构象状态的识别结果. 全连接神经网络的结构示意图如图 1(b) 所示. 将坐标数据直接拉伸成长度为 480 的一维数据, 经过若干隐藏层提取特征最后输出高分子构象状态识别结果. 在全连接网络中 dropout 也通过随机丢掉一些神经元和连接来防止过拟合, 正则化 (regularization) 可以通过对学习到的权重加上惩罚项来防止过拟合, 如 L2 正则化.

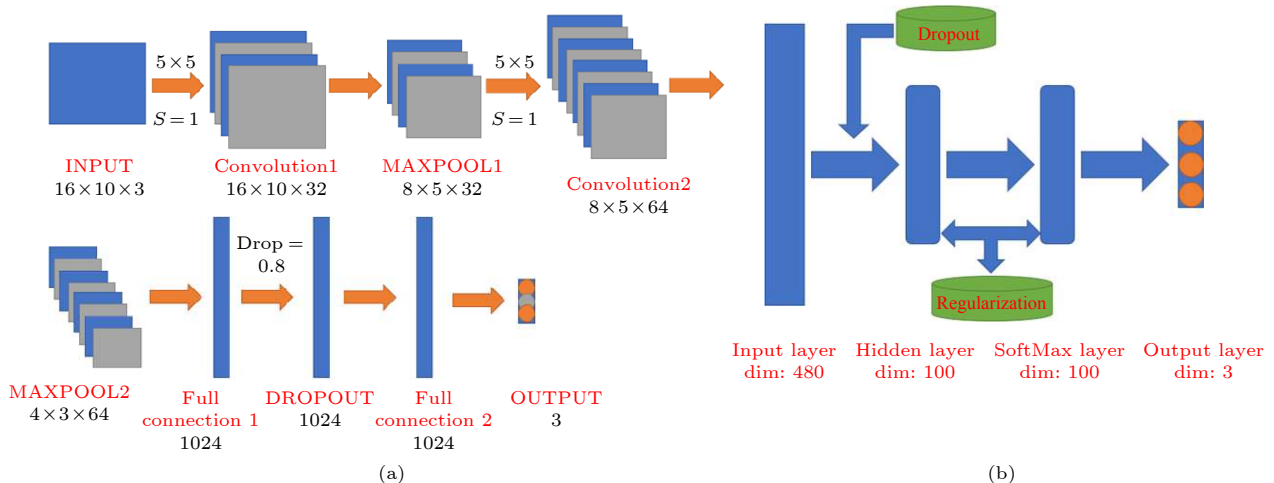


图 1 神经网络结构示意图 (a) 卷积神经网络, INPUT 表示输入层, Convolution 表示卷积层, MAXPOOL 表示池化层, Full connection 表示全连接层, OUTPUT 表示输出层, PADDING 方式均为 SAME; (b) 全连接网络的一般结构, 其中 hidden layer 表示隐藏层, 使用正则化和 dropout 来防止过拟合, DIM 表示输入张量的维度

Fig. 1. Schematic diagram of the neural network structure: (a) Convolutional neural network, INPUT is the data entry, OUTPUT is the learning result, and the padding way is SAME; (b) the general structure of a full-connected network, where regularization and dropout are used to prevent overfitting, and DIM represents the dimension of the tensor.

本文采用 ROC (receiver operating characteristic) 曲线 [28,29] 来辅助判断识别的性能, 当 ROC 曲线围成的面积越接近 1 时则说明分类器的性能越好, 即采用 ROC 下面积 AUC (area under curve) 来判断分类器的性能, AUC 的计算过程为

$$AUC = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m-1} (f_{i+1} - f_i)(t_i + t_{i+1}), \quad (2)$$

其中  $f$  表示假正例率,  $t$  表示真正例率, 通过将分类器学习的可能性先排序然后将阈值从 1 开始不断减小来得到近似的  $f$  与  $t$ , 最后通过近似介值定理计算得到近似的 AUC 值. 正确率则是学习得到的与标记一致的结果所占的比例, 如 (3) 式所示:

$$P = N_+/N, \quad (3)$$

其中  $N_+$  表示预测正确的样例个数,  $N$  表示总样例个数.

采用状态标记法和温度标记法来对模拟得到的样本进行标记. 状态标记法针对每一个样本都进行标记, 高分子链在每个温度运行  $T = 2.5 \times N^{2.13}$  MCS 后, 每隔 1000 MCS 进行一次抽样, 如果这 1000 MCS 内一直有单体接触表面, 标记为吸附态, 否则标记为脱附态. 在条纹表面的高分子链样本状态使用类似的方法. 温度标记法则是首先根据吸附率分布来估计高分子链状态的大致温度范围, 然后将这段温度范围内的样本都标记为同一个状态. 我们在数据集中选取特定比例的样本用于训练, 其余的样本用于测试与验证.

### 3 结果与讨论

首先采用机器学习研究了均质表面上高分子链吸附相变的问题. 由前人的研究可知高分子链在均质表面存在着高温时的脱附状态 (desorption state, DE 态)、低温时吸附状态 (adsorption state, AD 态) 以及在这两个状态之间存在的一个临界相变点. 高分子链在表面上的吸附率以及构象如图 2 所示.

从图 2 可以看出当吸附率等于 0 (即没有单体接触表面) 时即为脱附状态, 其典型的构象如图 2(b) 所示. 当吸附率非零时即发生了吸附现象, 称为吸附状态, 典型构象如图 2(a) 所示. 临界相变点大约在  $T = 1.6$  附近, 因此对于温度标记法, 我们选取  $T \in [1.1, 1.4]$  的样本作为吸附态标记,  $T \in [1.8, 3.0]$  的样本作为脱附态标记. 然后采用卷

积网络和全连接网络来对标记好的样本进行训练以及识别, 其中全连接网络采用不同数量的隐藏层来进行实验, 结果如图 3 所示.

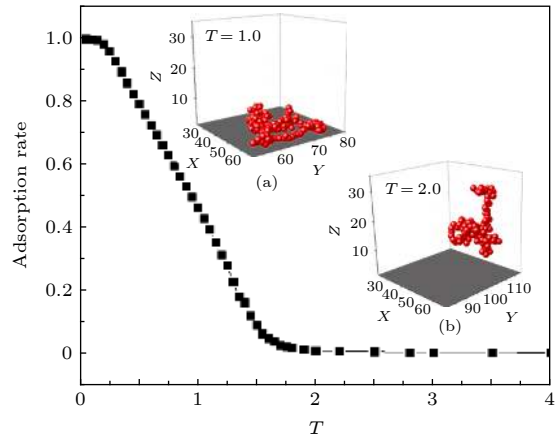


图 2 吸附率与温度之间的关系. 其中链长  $N = 160$ , 插图 (a) 是温度  $T = 1.0$  时的吸附态构象, 插图 (b) 是温度  $T = 2.0$  时的脱附态构象

Fig. 2. Relationship between adsorption rate and temperature. Wherein the chain length  $N = 160$ , inset (a) is the conformation of polymer adsorbed on the surface at temperature  $T = 1.0$ , and inset (b) is the conformation of polymer desorbed from surface at temperature  $T = 2.0$ .

从图 3(a) 中可以看出, 随着隐藏层数目的增加, 识别率先提高然后趋于稳定, 当隐藏层数目大于等于 3 时识别率基本稳定在 97.1%, 因此本文缺省所采用的隐藏层数均为 3. 当 Epoch > 30 时训练基本趋于稳定. 从图 3(b) 中可以看出, 即使每个温度下抽取用于训练神经网络的样本数目 (sample per temperature, SPT) 足够小, 例如 SPT=1 时神经网络仍然拥有 91.88% 的识别率, 也足以识别大部分的样本. 当 SPT ≥ 24 时识别率达到 95.5% 以上, 这说明本文采用较小的样本数就可以达到较高的高分子构象的识别率. 然后我们采用卷积神经网络进行研究, 识别结果如图 4 所示.

从图 4 可以看出, 卷积神经网络和全连接神经网络都得到了较高的识别率以及较大的 AUC 值, 因此神经网络可以较好地识别高分子链在均质表面的两个状态, 且卷积神经网络的识别率稍高一些. 两种方法都可以用来确定其吸附相变点, 且得到的临界相变温度相同, 均为  $T_c = 1.5$ , 稍小于无限链长的临界相变温度  $T_c = 1.625$  [19], 存在这个差值是因为存在有限尺寸效应, 本实验的高分子链长为  $N = 160$ , 随着链长的增加, 其临界吸附温度会趋于无限链长的临界吸附温度.

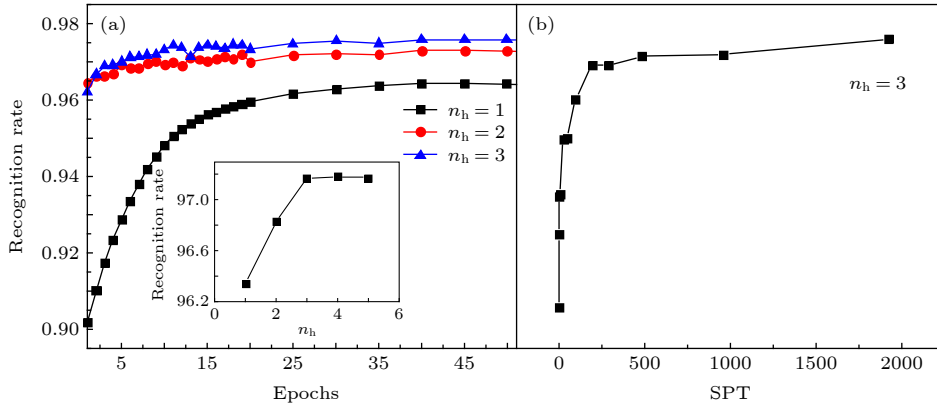


图 3 识别率与训练样本的 Epoch, 神经网络层数以及每个温度采用的训练样本数之间的关系 (a) 识别率与 Epoch 的关系图, SPT (sample per temperature) 表示在每个温度下抽取的用于训练神经网络的样本数目, 采用状态标记法标记样本. 其中  $n_h = 1$  表示隐藏层数目为 1, 其他的类似,  $n_h = 1$  至  $n_h = 3$  均采用 SPT = 192 的样本用于训练, 剩余的样本用于测试与验证, 插图描述的是识别率与隐藏层数目  $n_h$  的关系, 该识别率为每个学习器最终稳定的识别结果; (b) 识别率与每个温度采用训练样本数目的关系图, 采用状态标记法标记样本, 隐藏层数等于 3, 纵坐标为不同训练样本在足够 Epoch 下达到稳定时的识别率, 测试集均为 SPT = 7680, 且与训练集不重复

Fig. 3. The relationship between the recognition rate and the Epochs of training case, the number of neural network layers and the number of training samples obtained from each temperature: (a) the plot of recognition rate versus Epochs. SPT (sample per temperature) represents the number of samples extracted at each temperature for training the neural network. The sample is labeled by status. Where  $n_h = 1$  indicates that the number of hidden layers is equal to 1, and the others are similar. All of  $n_h = 1$  to 3 uses a sample of SPT = 192 for training, and the remaining samples are used for verification. The illustration depicts the relationship between the recognition rate and the number of hidden layers, which is the final stable recognition result for each classifier; (b) the plot of the recognition rate versus the number of training samples selected at each temperature. The sample is marked by status and the number of hidden layers is equal to 3. The  $y$ -axis is the stable recognition rate of different number of training samples under a sufficiently large Epoch. The validation set is SPT = 7680 and is not repeated with the training set.

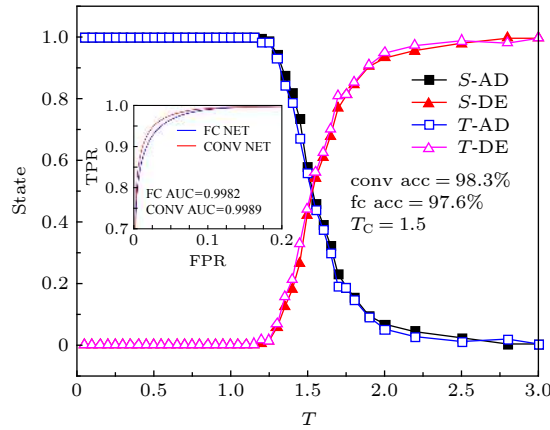


图 4 神经网络训练的识别结果图. 横坐标为温度, State 表示每个温度下的样本被识别为某个状态的概率, S 表示状态标记法, T 表示温度标记法, AD 表示吸附态, DE 表示脱附态. 图为两种标记方法的识别结果, 卷积网络的识别率为 98.3%, AUC 值为 0.9989, 全连接网络为 97.6%, AUC 值为 0.9982, 两种标记方法的临界相变温度  $T_C = 1.5$

Fig. 4. A plot of the result based on the neural network. The  $x$ -axis is the temperature, State represents the probability that the sample at each temperature is recognized as a certain state, The letter S represents the state labeling method, the letter T represents the temperature labeling method, AD represents the adsorption state, and DE represents the desorption state. The figure shows the learning results of the two labeling methods. The recognition rate of the convolutional network is 98.3%, the AUC value is 0.9989, the fully connected network is 97.6%, the AUC value is 0.9982, and the critical phase transition temperature is 1.5 of the two labeling methods.

接下来采用神经网络对高分子链在条纹表面的吸附状态识别进行研究. 高分子链在条纹表面的吸附率如图 5 所示, 插图分别是三种状态下的典型

构象, 其中表面上的两种不同条纹对高分子单体有不同的吸附作用, 颜色深的条纹对高分子单体有吸附作用, 白色条纹对高分子单体只有体积排斥作



用. 高分子链在条纹表面的构象涉及三种状态, 单条纹吸附态 (single-stripe adsorption state)、多条纹吸附态 (multi-stripe adsorption state) 以及脱附态 (desorption state), 因此三种状态之间的转变伴随着两个临界相变点.

从图 5 可以看出, 在高温时高分子链的吸附率几乎为 0, 即为脱附态, 该状态与均质表面的脱附态相一致; 在低温时高分子链吸附率非常高, 而且高分子链被单条纹所吸附, 我们把这个吸附状态称为单条纹吸附态, 如图 5(a) 所示; 而在中间温度存在高分子链吸附在多条纹上, 其吸附率也介于脱附态和单条纹吸附之间, 我们把这个吸附态称为多条纹吸附态. 在多条纹吸附态, 高分子链分布在不同的吸附条纹上, 如图 5(b) 所示. 对于温度标记法, 我们选取  $T \in [1.35, 1.5]$  的样本作为脱附态标记,  $T \in [0.75, 0.9]$  的样本作为多条纹吸附态标记,  $T \in [0.25, 0.4]$  的样本作为单条纹吸附态标记. 然后

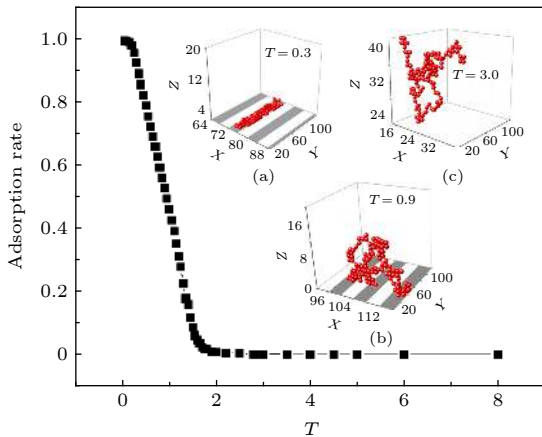


图 5 高分子链在条纹表面的吸附率随温度的变化以及典型的三态构象示意图 (a) 单条纹吸附状态, 温度  $T = 0.3$ ; (b) 多条纹吸附状态,  $T = 0.9$ ; (c) 脱附状态,  $T = 3.0$ . 其中链长  $N = 160$ , 条纹宽度  $L = 4$ , 条纹方向垂直于  $x$  轴, 沿着  $y$  轴方向延伸, 选取的空间尺寸为  $25 \times 120 \times 20$ , 在条纹表面上, 深色部分为吸附条纹, 白色部分为作用力排斥条纹

Fig. 5. The schematic diagram of the adsorption rate of polymer adsorbed on the stripe surface changes with temperature and typical tri-state conformations: (a) the single-strip adsorption state, where the temperature is 0.3; (b) the multi-strip adsorption state, where the temperature is 0.9; (c) the desorption state, where the temperature is 3.0. Wherein the chain length  $N$  is 160, and the stripe width  $L$  of the adsorption surface is 4. The stripe direction is perpendicular to the  $x$  axis and extends along the  $y$  axis, and the selected space size is  $25 \times 120 \times 20$ . For the adsorption surface, the dark part is the adsorption surface and the white part is the non-force surface.

我们对在条纹表面上的高分子链构象样本进行了训练与识别, 结果如图 6 所示.

从图 6 可以看出, 卷积网络和全连接网络同样具有较高的高分子构象状态的识别率, 且 AUC 值非常接近 1, 这说明神经网络可以识别高分子链在条纹表面的三种状态, 且卷积神经网络识别率略高于全连接网络. 两种样本标记方法所得到的临界相变温度基本相同, 其中多条纹吸附向单条纹吸附的相变点为  $T_1 = 0.55$ , 脱附态向高分子多条纹吸附的相变点为  $T_2 = 1.1$ , 与文献 [30] 计算得到的临界相变温度  $T_1 = 0.58$  和  $T_2 = 1.05$  相一致.

完成了上述实验之后, 我们发现条纹的表面的高分子识别率要低于均质表面, 因此我们对识别过程中的误判进行了统计, 如图 7 所示.

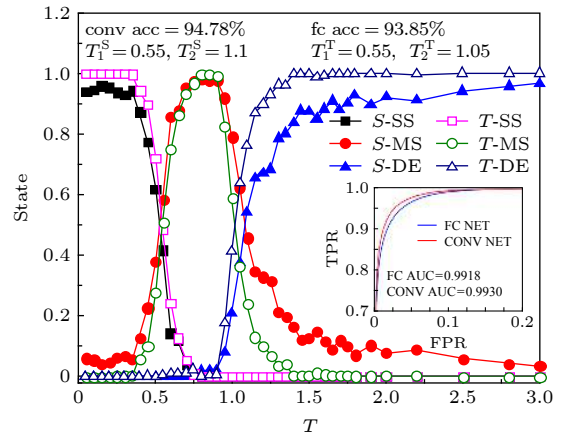


图 6 神经网络训练的识别结果图 横坐标为温度, 纵坐标 State 表示每个温度下的样本被识别为某个状态的概率, 图标中 S 表示状态标记法, T 表示温度标记法, SS 表示单条纹吸附态, MS 表示多条纹吸附态, DE 表示脱附态. 其中卷积网络的识别率为 94.78%, AUC 值为 0.9930, 全连接网络为 93.85%, AUC 值为 0.9918, 状态标记法的临界相变温度  $T_1 = 0.55$ ,  $T_2 = 1.1$ , 温度标记法的临界相变温度  $T_1 = 0.55$ ,  $T_2 = 1.05$

Fig. 6. A plot of the result of the neural network training. The  $x$ -axis is the temperature, the State indicates the probability that the sample at each temperature is recognized as a certain state, S indicates the state labeling method, T indicates the temperature labeling method, SS indicates the single-striped adsorption state, MS indicates the multi-striped adsorption state, and DE indicates desorbed state. The figure shows the learning results of two kinds of labeling methods. The recognition rate of convolutional network is 94.78%, where the AUC value is 0.9930. the fully connected network is 93.85%, where the AUC value is 0.9918, and the critical phase transition temperature of state labeling method is 0.55 and 1.1. The critical phase transition temperature of the temperature labeling method is 0.55 and 1.05.

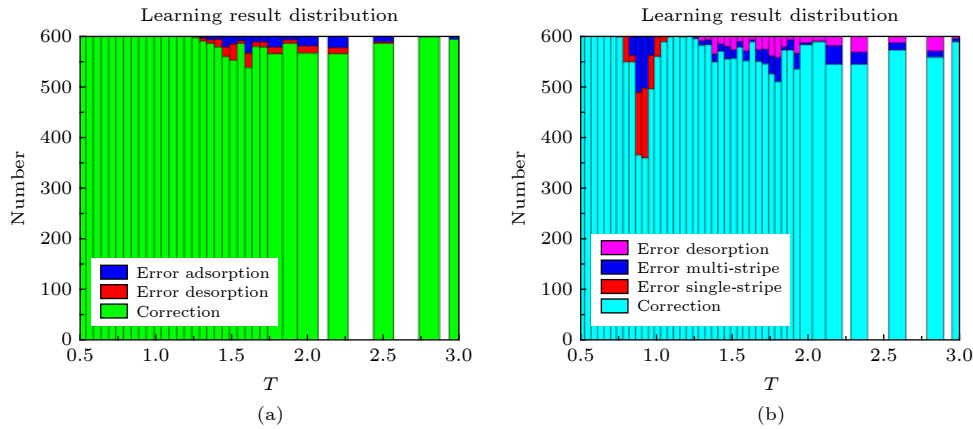


图 7 神经网络学习结果的分布图 (a) 均质表面下的学习结果分布, 绿色表示识别正确的样本, 其他的表示识别错误的样本; (b) 条纹表面下的学习结果分布, 蓝色表示识别正确的样本, 其他的表示识别错误的样本

Fig. 7. The distribution of neural network learning results: (a) the distribution of learning outcomes on the homogeneous surface, green indicates that the correct sample, and other samples that identify the error; (b) the distribution of learning results on the pattern-stripe surface, blue indicates that the correct sample, and other samples that identify the error.

从图 7 中可以看出, 识别错误的样本主要集中在临界相变点附近, 这是因为该附近的有限链长样本自身属于哪一个态的典型特征不明显, 容易被识别为相邻状态中的另一个状态, 因此误判的可能性比较高. 该结果也说明了随着临界相变点的增多增加了模式识别的复杂性, 其识别率也随之下降.

## 4 结 论

本文采用 MC 模拟和神经网络研究了高分子链在吸附表面的状态以及吸附相变的计算. 研究表明神经网络可以识别高分子链在均质表面的脱附与吸附状态, 从而可以确定其吸附相变. 即使在每个温度选取较少的样本数也可以获得比较高的高分子链状态识别率. 分别采用温度标记法和状态标记法对高分子链构象样本进行标记, 研究发现采用这两种方法所得到的临界相变点基本相同, 高分子链在均质表面的吸附相变点  $T_C = 1.5$ , 在条纹表面的多条纹向单条纹的相变点  $T_1 = 0.55$  和脱附态与吸附态之间的相变点为  $T_2 = 1.1$ . 总之, 经过训练的神经网络对高分子链的构象状态具有较高的识别能力, 人工神经网络为高分子物理的模拟计算研究提供了一种新的途径.

## 参考文献

[1] Wei Q, Melko R G, Chen J Z Y 2017 *Phys. Rev. E* **95** 032504

[2] Carrasquilla J, Melko R G 2017 *Nat. Phys.* **13** 431  
 [3] Xing X, Yu D X, Tian X J 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 230501 (in Chinese) [邢雪, 于德新, 田秀娟 2017 物理学报 **66** 230501]  
 [4] Deo R C 2015 *Circulation* **132** 1920  
 [5] Lin W Y, Hu Y H, Tsai C F 2012 *IEEE. Trans.* **42** 421  
 [6] Deng L, Dong Y 2011 *Twelfth Annual Conference of the International Speech Communication Association* Florence, Italy, August 27–31, 2011 p2285  
 [7] He K, Zhang X, Ren S 2016 *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition* Las Vegas, USA, June26–July 1, 2016 p770  
 [8] Sun Q S, Zeng S G, Liu Y 2005 *Pattern Recognit.* **38** 2437  
 [9] Porter E W 1989 *US Patent* **4** 829  
 [10] Jacobs P E, Chang C 1999 *US Patent* **5** 956  
 [11] Berger A L, Pietra V J D, Pietra S A D 1996 *Comput. Linguist.* **22** 39  
 [12] Brill E 1995 *Comput. Linguist.* **21** 543  
 [13] McIlroy G T, Kees J E, Kalscheuer J A 1996 *US Patent* **5** 583  
 [14] Anneroth G, Batsakis J, Luna M 1987 *Eur. J. Oral Sci.* **95** 229  
 [15] Carleo G, Troyer M 2017 *Science* **355** 602  
 [16] Ali J B, Fnaiech N, Saidi L 2015 *Appl. Acoust.* **89** 16  
 [17] Wang L, Zeng Y, Chen T 2015 *Expert Syst. Appl.* **42** 855  
 [18] Vogl T P, Mangis J K, Rigler A K 1988 *Biol. Cybern.* **59** 257  
 [19] Li H, Qian C J, Luo M B 2012 *J. Appl. Polym. Sci.* **124** 282  
 [20] Li H, Qian C J, Sun L Z 2010 *Polym. J.* **42** 383  
 [21] Li H, Qian C J, Wang C 2013 *Phys. Rev. E* **87** 012602  
 [22] Li H, Gong B, Qian C J 2013 *Sens. Transducers J.* **159** 242  
 [23] Luo M B 2008 *J. Chem. Phys.* **128** 044912  
 [24] Luo M B, Huang J H 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 2439  
 [25] Luo M, Huang J, Chen Y 2001 *Eur. Polym. J.* **37** 1587  
 [26] Chib S, Greenberg E 1995 *Am. Stat.* **49** 327  
 [27] Haario H, Saksman E, Tamminen J 2001 *Bernoulli* **7** 223  
 [28] Hanley J A, McNeil B J 1982 *Radiology* **143** 29  
 [29] Bradley A P 1997 *Pattern. Recognit.* **30** 1145  
 [30] Li H, Gong B, Qian C J, Luo M B 2015 *Soft Matter* **11** 3222

# Recognition of adsorption phase transition of polymer on surface by neural network\*

Sun Li-Wang<sup>1)</sup> Li Hong<sup>1)</sup> Wang Peng-Jun<sup>1)†</sup>  
Gao He-Bei<sup>2)‡</sup> Luo Meng-Bo<sup>3)</sup>

1) (*College of Mathematics, Physics and Electronic Information Engineering, Wenzhou University, Wenzhou 325035, China*)

2) (*Department of Information, Wenzhou Vocational and Technical College, Wenzhou 325035, China*)

3) (*Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China*)

( Received 29 April 2018; revised manuscript received 25 July 2018 )

## Abstract

Traditional Monte Carlo simulation requires a large number of samples to be employed for calculating various physical parameters, which needs much time and computer resources due to inefficient statistical cases rather than mining data features for each example. Here, we introduce a technique for digging information characteristics to study the phase transition of polymer generated by Monte Carlo method. Convolutional neural network (CNN) and fully connected neural network (FCN) are performed to study the critical adsorption phase transition of polymer adsorbed on the homogeneous cover and stripe surface. The data set (conformations of the polymer) is generated by the Monte Carlo method, the annealing algorithm (including 48 temperatures ranging from  $T = 8.0$  to  $T = 0.05$ ) and the Metropolis sampling method, which is marked by the state labeling method and the temperature labeling method and used for training and testing of the CNN and the FCN. The CNN and the FCN network can not only recognize the desorption state and adsorption state of the polymer on the homogeneous surface (the critical phase transition temperature  $T_C = 1.5$ , which is close to the critical phase transition temperature  $T_C = 1.625$  of the infinite chain length of polymer adsorbed on the homogeneous surface regardless of the size effect), but also recognize the desorption state, the single-stripe adsorption state and the multi-stripe adsorption state of polymer on the stripe surface (the critical phase transition temperature  $T_1 = 0.55$  and  $T_2 = 1.1$ , which are consistent respectively with  $T_1 = 0.58$  and  $T_2 = 1.05$  of polymer adsorbed on the stripe-patterned surface derived from existing research results). We obtain almost the same critical adsorption temperature by two different labeling methods. Through the study of the relationship between the size of the training set and the recognition rate of the neural network, it is found that the deep neural network can well recognize the conformational state of polymer on homogeneous surface and stripe surface of a small set of training samples (when the number of samples at each temperature is greater than 24, the recognition rate of the polymer is larger than 95.5%). Therefore, the deep neural network provides a new calculation method for polymer simulation research with the Monte Carlo method.

**Keywords:** deep neural network, adsorption phase transition, polymer, Monte Carlo method

**PACS:** 07.05.Kf, 82.20.Wt, 82.35.Lr

**DOI:** 10.7498/aps.68.20190643

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11775161, 61874078), the Natural Science Foundation of Zhejiang Province, China (Grant No. LY17A040007), and the Research Foundation of Education Bureau of Zhejiang Province, China (Grant No. Y201738867).

† Corresponding author. E-mail: wangpengjun@wzu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: bogolyx@126.com