

ACCEPTED MANUSCRIPT • OPEN ACCESS

## A comprehensive Neural Networks study of the phase transitions of Potts model

To cite this article before publication: Deng-Ruei Tan *et al* 2020 *New J. Phys.* in press <https://doi.org/10.1088/1367-2630/ab8ab4>

### Manuscript version: Accepted Manuscript

Accepted Manuscript is “the version of the article accepted for publication including all changes made as a result of the peer review process, and which may also include the addition to the article by IOP Publishing of a header, an article ID, a cover sheet and/or an ‘Accepted Manuscript’ watermark, but excluding any other editing, typesetting or other changes made by IOP Publishing and/or its licensors”

This Accepted Manuscript is © 2020 The Author(s). Published by IOP Publishing Ltd on behalf of Deutsche Physikalische Gesellschaft and the Institute of Physics.

As the Version of Record of this article is going to be / has been published on a gold open access basis under a CC BY 3.0 licence, this Accepted Manuscript is available for reuse under a CC BY 3.0 licence immediately.

Everyone is permitted to use all or part of the original content in this article, provided that they adhere to all the terms of the licence <https://creativecommons.org/licenses/by/3.0>

Although reasonable endeavours have been taken to obtain all necessary permissions from third parties to include their copyrighted content within this article, their full citation and copyright line may not be present in this Accepted Manuscript version. Before using any content from this article, please refer to the Version of Record on IOPscience once published for full citation and copyright details, as permissions may be required. All third party content is fully copyright protected and is not published on a gold open access basis under a CC BY licence, unless that is specifically stated in the figure caption in the Version of Record.

View the [article online](#) for updates and enhancements.



# Комплексное исследование применения нейронных сетей для расчётов фазовых переходов модели Поттса

D.-R. Tan, C.-D. Li, W.-P. Zhu, and F.-J. Jiang\*

*Department of Physics, National Taiwan Normal University, 88, Sec.4, Ting-Chou Rd., Taipei 116, Taiwan*  
Используя методы нейронных сетей (НС), мы изучаем трёхмерную ферромагнитную модель Поттса с 5 состояниями на кубической решетке (3D 5-state ferromagnetic Potts model on the cubic lattice), а также двумерную антиферромагнитную модель Поттса с 3 состояниями на квадратной решетке (2D 3-state antiferromagnetic Potts model on the square lattice). В отличие от традиционного подхода, здесь мы следуем идеям, высказанным в Ann. Phys. 391 (2018) 312-331. В частности, вместо численного генерирования многочисленных объектов для обучения, все или часть теоретических конфигураций основного состояния (theoretical ground state configuration) изучаемых моделей рассматриваются как обучающие наборы. Примечательно, что наше исследование этих двух моделей даёт убедительные доказательства эффективности метода подготовки тренировочных наборов, используемого в этом исследовании. В частности, результаты для трёхмерной модели, полученные здесь, предполагают, что подход НС так же эффективен, как и традиционный, поскольку сигнал фазового перехода первого порядка, а именно – туннелирование между двумя каналами, определяемый методом НС, так же силен, как и рассчитанный с помощью метода Монте-Карло. Кроме того, результаты, связанные с рассматриваемой 2D-системой, указывают, что даже небольшая частичная информация об основных состояниях может привести к убедительным результатам, касающимся изучаемого фазового перехода. Достигнутые в нашем исследовании успехи показывают, что работа НС, использующей в качестве обучающих наборов определенное количество теоретических конфигураций основных состояний, впечатляет.

PACS numbers:

## 1. ВВЕДЕНИЕ

В последние пару лет применение методов и техник искусственного интеллекта (ИИ) в системах многих тел привлекло огромное внимание сообщества физиков [1–41]. Например, использованием идеи ограниченной машины Больцмана демонстрируется, что эффективность определённых симуляций Монте-Карло может быть значительно улучшена [18]. Кроме того, при использовании контролируемых и не контролируемых нейронных сетей (НС) с высокой точностью определяются критические точки и экспоненты, а также характер фазовых переходов некоторых классических и квантовых моделей [7-13, 15, 26, 27]. Эти применения ИИ в физике очень успешны. Следовательно, ожидается, что идеи ИИ не только предоставляют альтернативные подходы для изучения систем многих тел, но и обладают большим потенциалом в изучении свойств материалов, что выходит за рамки достигнутого с использованием традиционных методов.

Стандартная (общепринятая) процедура применения контролируемой НС для исследования фазовых переходов физических систем состоит из трех этапов, а именно – обучение (training), проверка (validation) и тестирование (testing). На примере двумерной (2D) модели Изинга на квадратной решетке [9], на этапе тестирования типичные конфигурации при различных температурах ниже и выше температуры перехода  $T_c$  генерируются с помощью метода Монте-Карло или других численных методов. Кроме того, всем генерируемым конфигурациям ниже и выше  $T_c$  присваиваются метки (1, 0) и (0, 1) соответственно. Посредством процедуры оптимизации определяются желаемые веса (weights), которые используются в последующих вычислениях как на этапе проверки, так и на этапе тестирования. Роль этапа валидации заключается в том, чтобы убедиться, что правильные

результаты получены при использовании обученных НС (весов). Наконец, на этапе тестирования определяются выходные результаты при многих температурах, пересекающих  $T_c$ . В частности, температура, при которой выход составляет (0,5, 0,5), должна быть  $T_c$ .

При использовании процедур, описанных в предыдущем параграфе, показано, что  $T_c$  двумерной модели Изинга на квадратной решетке действительно может быть точно рассчитан с использованием контролируемой НС [9]. Кроме того, НС может даже обнаружить неверную информацию и точно определить  $T_c$  [15]. Такой подход также применим к другим моделям, в результате чего достигнут определенный успех.

Хотя представляется многообещающим, что в ближайшем будущем методы ИИ могут сыграть важную роль в изучении систем многих тел, когда речь заходит о критических явлениях, вопрос о том, каковы преимущества использования методов НС перед традиционными методами, требует дальнейшего изучения. В частности, крайне важно выяснить, какой из подходов работает лучше. Наконец, традиционная стратегия для этапа обучения, представленная выше, имеет одну оговорку, а именно:  $T_c$  известна до применения НС. В результате, для новой системы без знания её критической точки может быть трудно использовать традиционный подход для непосредственного обучения НС.

Чтобы преодолеть упомянутую выше проблему, касающуюся изучения фазового перехода с неизвестной критической точкой, вместо численного создания конфигураций для обучения, в работе [27] в качестве обучающих наборов НС для изучения фазовых переходов двумерных ферромагнитных моделей Поттса с  $Q$  состояниями на квадратной решетке используются ожидаемые конфигурации основного состояния в упорядоченной фазе [42] (Всякий раз, когда в данной статье упоминаются теоретические конфигурации основного состояния, они относятся к упорядоченной фазе, если не

\*fjjiang@ntnu.edu.tw

указано иное). При использовании этой стратегии  $T_c$  не является существенным для использования НС, и для генерации обучающих наборов требуется очень мало вычислительных усилий. При таком нетрадиционном подходе достигается успех при расчётах  $T_c$  и определении характера фазовых переходов двумерных ферромагнитных моделей Поттса с  $Q$  состояниями [27].

Прежде чем мы продолжим, мы хотели бы указать, что для данного положительного целочисленного  $Q$  существует  $Q$  конфигураций основного состояния в упорядоченной фазе для ферромагнитной модели Поттса с  $Q$  состояниями. Кроме того, все эти конфигурации могут быть использованы в качестве обучающего набора, как было сделано в работе [27] без каких-либо технических трудностей. Возникает интересный вопрос о применимости этого подхода. В частности, если в качестве обучающего набора используется только часть всех конфигураций основного состояния, сможет ли получающаяся в результате НС все же достичь успеха, как показано в работе [27]? Это важный эффект, который необходимо учитывать при изучении систем с сильно вырожденными основными с помощью НС.

Помимо изучения критических явлений, применение методов ИИ в большинстве областей науки требует использования реальных точек данных в качестве учебных наборов. Действительно, такая комбинация значительно продвигает определенные области исследований. Тем не менее, будет чрезвычайно важно понять, могут ли только методы искусственного интеллекта, без какой-либо помощи реальных данных, достичь того же уровня успеха, что и традиционные методы.

Движимые тонкими вопросами, описанными выше, здесь мы рассматриваем NN, которые обучаются без использования реальных данных в качестве обучающих наборов. Кроме того, мы используем построенную НС для изучения трёхмерной (3D) ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке, а также двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями на квадратной решетке. Причины выбора этих двух моделей будут объяснены позже.

Интересно, что наше исследование трёхмерной модели показывает, что НС так же эффективны, как и традиционный метод Монте-Карло, поскольку сигнал фазового перехода первого порядка, а именно туннелирование между двумя каналами, определяемый НС, такой же сильный, как и сигнал, рассчитанный с помощью метода Монте-Карло. Этот результат предполагает, что НС являются многообещающим альтернативным подходом для изучения систем многих тел. Кроме того, результаты работы НС, полученные для рассматриваемой 2D-системы, являются убедительным доказательством того, что при применении идеи, рассмотренной в работе [27], даже небольшая часть информации об основных состояниях может привести к убедительным результатам в отношении изученного фазового перехода. Подводя итог, можно сказать, что производительность NN с использованием определенного количества теоретических конфигураций основного состояния в качестве тренировочного набора впечатляет.

Настоящий документ организован следующим образом. После введения описываются изученные микроскопические модели и детали используемой НС. В частности, подробно описаны обучающие наборы и метки (labels) НС. После этого представлены полученные численные результаты с применением метода Монте-Карло и НС. Наконец, раздел завершается нашим исследованием.

## II. МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И НАБЛЮДЕНИЯ

Гамильтониан  $H$  модели Поттса с  $Q$  состояниями, принятый в нашей работе, дается в [42–45]

$$\beta H = -J\beta \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (1)$$

где  $\beta$  – обратная температура, а  $\langle ij \rangle$  обозначает ближайшие соседние участки  $i$  и  $j$ . Кроме того, в формуле (1)  $\delta$  относится к функции Кронекера и, наконец, переменная Поттса  $\sigma_i$ , появляющаяся выше на каждом участке  $i$ , принимает целочисленное значение из  $\{1, 2, 3, \dots, Q\}$ . Ситуации  $J > 0$  и  $J < 0$  соответствуют ферромагнитной и антиферромагнитной моделям Поттса соответственно.

Как уже упоминалось ранее, в данной работе мы сосредоточимся на исследовании фазовых переходов трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке и двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями на квадратной решетке. Мотивы для рассмотрения этих двух моделей заключаются в следующем.

Во-первых, известно, трёхмерная ферромагнитная модель Поттса с 5 состояниями на кубическую решетку испытывает фазовый переход первого порядка [42]. Кроме того, сигнал фазового перехода первого порядка становится экспоненциально труднее наблюдать по мере увеличения объема пространства-времени [46, 47]. Поэтому изучение трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке дает возможность сравнить эффективность обнаружения фазового перехода первого порядка между традиционным подходом и работой НС.

Здесь исследуется двумерная антиферромагнитная модель Поттса с 3 состояниями на квадратной решетке, поскольку показано, что связанный с ней фазовый переход происходит при нулевой температуре [45, 49, 50]. Другими словами, система неупорядочена при любой  $T > 0$ . В результате, традиционная стратегия обучения, обычно используемая в исследовании НС системы многих тел, может не подходить для этой модели. Следовательно, двумерная антиферромагнитная модель Поттса с 3 состояниями на квадратной решетке служит хорошим испытательным полигоном для подхода к использованию теоретических конфигураций основного состояния в качестве обучающего набора НС.

Рассматриваемые здесь переменные для трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями – плотность энергии  $E$  и плотность намагниченности  $\langle |m| \rangle$ . Здесь  $m$  определяется как

$$m = \frac{1}{L^3} \sum_j \exp\left(i \frac{2\pi \sigma_j}{5}\right), \quad (2)$$

где  $L$  – размеры решёток, используемые в расчетах, а суммирование выполняется по всем узлам решетки  $j$ . Кроме того, для изучения антиферромагнитной двумерной модели Поттса с 3 состояниями на квадратной решетке, ступенчатая намагниченность  $m_s$ , которая определяется как

$$m_s = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 |M_i|, \quad (3)$$

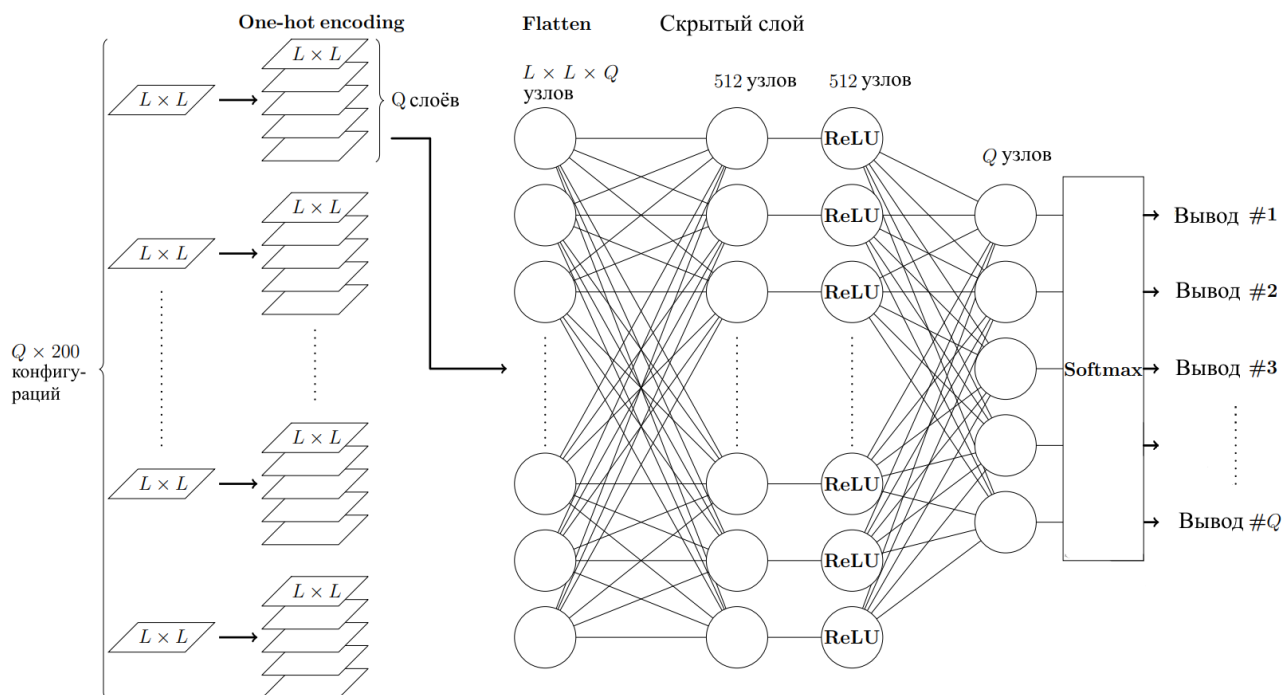


РИС. 1: НС (МСП), который состоит из одного входного слоя, одного скрытого слоя и одного выходного слоя, используемых в этом исследовании. Объекты во входном слое состоят из 200 копий теоретических конфигураций основного состояния в упорядоченной фазе. Кроме того, в скрытом слое имеется 512 узлов, и каждый из этих узлов независимо связан с каждым объектом на входном слое. Перед тем, как каждый обучающий объект подключается к узлам в скрытом слое, применяются этапы горячего кодирования и выравнивания. Функции активации (ReLU и softmax) и где они используются, продемонстрированы в явном виде. Для модели Поттса с  $Q$  состояниями выходной слой состоит из  $Q$  элементов.

измеряется в наших симуляциях. Здесь  $M_i$  определяется как

$$M_i = \frac{2}{L^2} \sum_x (-1)^{x_1+x_2} \delta_{\sigma_x, i} \quad (4)$$

где снова происходит суммирование по всем узлам решетки  $x$ . Наконец, для обеих рассмотренных моделей также записываются конфигурации Поттса, которые будут использоваться в вычислениях, относящихся к НС.

### III. СОЗДАННЫЕ КОНТРОЛИРУЕМЫЕ НС

В этом разделе мы представим детали контролируемой НС (supervised NN), использованной в нашем исследовании. Также будут описаны используемые обучающие наборы и соответствующие метки (labels). Кроме того, мы рассмотрим простейший НС глубокого обучения и исследуем, может ли он достичь того же уровня успеха, что и те, которые получены с помощью сложных НС, таких как свёрточные нейронные сети (СНС).

#### A. многослойный перцептрон (МСП) и свёрточные нейронные сети (СНС)

Поскольку нам хотелось бы понять, способна ли простейшая НС глубокого обучения (многослойный перцептрон, МСП) обнаруживать критическую точку, контролируемая НС, рассматриваемая в нашем исследовании, состоит только из одного входного слоя, одного скрытого слоя из 512 независимых узлов и одного выходного слоя с использованием общедоступных библиотек keras и tensorflow [51, 52]. Алгоритм, оптимизатор и функция потерь, которые используются для расчетов – minibatch, adam и categorical cross-entropy.

Также, чтобы избежать переоснащения, применяется регуляризация  $L_2$ . Рассматриваются следующие функции активации: ReLU (между входным слоем и скрытым слоем) и softmax (между скрытым слоем и выходным слоем). Детали созданного МСП, включая этапы One-hot encoding и flatten (и работа этих двух процессов), показаны на рис. 1. Для сравнения, здесь также приводятся расчёты с использованием свёрточных нейронных сетей, построенных в работе [27], что изображено на рис. 2. Кроме того, для трёхмерной модели также выполняются вычисления с использованием различных размеров пакета, узлов, копий набора предварительной подготовки (определяется позже) и эпох. Кроме того, веса, полученные в тренировочных процессах, которые минимизируют функцию потерь, записываются и используются в последующих вычислениях. Наконец, чтобы понять влияние на выходные результаты исходных значений весов, а также других шагов, выполненных на этапе обучения, в исследовании используются несколько наборов случайных начальных чисел. Для изученной двумерной антиферромагнитной модели, все результаты, полученные с различными случайными значениями, будут учитываться при определении окончательных результатов, связанных с этой моделью.

#### B. Обучающий набор и выходные метки для 3D-модели

Что касается обучающего набора, используемого для трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке, мы будем следовать идее, рассмотренной в работе [27], а именно – используемый обучающий набор состоит из 200 (или любого подходящего числа) копий соответствующих теоретических конфигураций основного состояния.

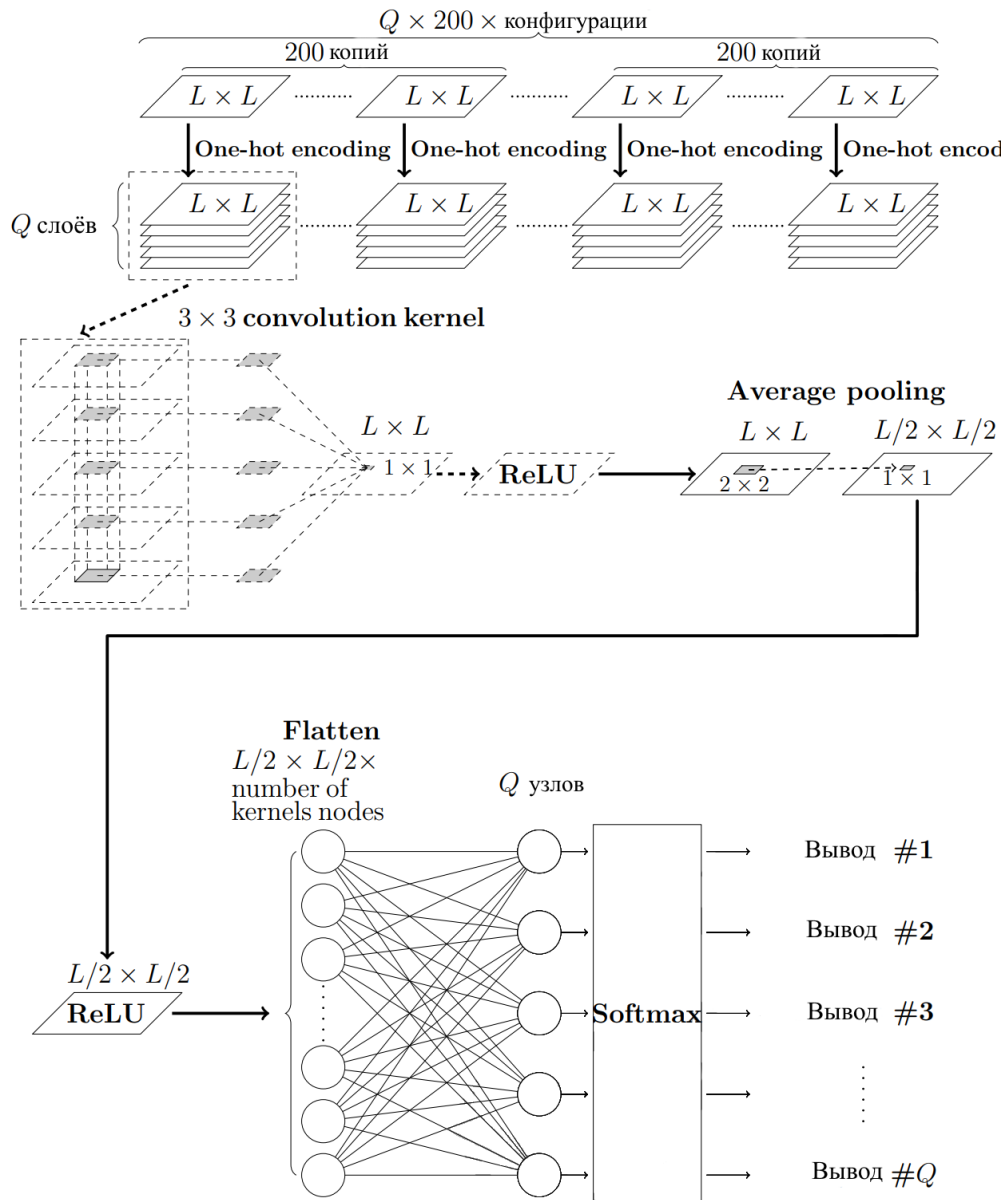


Рис. 2: НС, используемая в этом исследовании. Объекты во входном слое состоят из 200 копий теоретических конфигураций основного состояния в упорядоченной фазе. Кроме того, в расчетах используется свёрточный слой, состоящий из  $Q$  фильтров (ядро 3 на 3) и среднего слоя подвыборки (average pooling layer) (ядро 2 на 2). В явном виде продемонстрированы функции активации (ReLU и softmax) и их использование. Для модели Поттса с  $Q$  состояниями выходной слой состоит из  $Q$  элементов.

Ожидаемые конфигурации основного состояния для трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке получены заданием единого значения всем переменным Поттса на всех узлах решетки (значение должно быть одно для всех переменных и должно быть одним из следующих: 1, 2, 3, 4, 5). Следовательно, существует 5 конфигураций основного состояния. Соответствующие метки для этих 5 конфигураций основного состояния являются базисными векторами пятимерного (5D) евклидова пространства. Очевидно, что можно построить взаимно-однозначное соответствие между 5 конфигурациями основного состояния и базисными векторами 5D евклидова пространства. Одно из таких соответствий показано на рис. 3. В данном исследовании эти пять конфигураций основного состояния будут названы набором для предварительной подготовки. Наконец, мы хотели бы подчеркнуть тот факт, что при построении набора для предварительного обучения должны использоваться все допустимые переменные Поттса.

### С. Ожидаемые выходные векторы для 3D-модели при различных $T$

При такой конфигурации набора предварительной подготовки ожидается, что при экстремально низких температурах норма ( $R$ ) выходных векторов НС составляет около 1, так как большинство переменных Поттса принимают то же целое положительное число  $Q_1$ , что и их значения. В результате один компонент связанного выходного вектора имеет гораздо большую величину, чем другие. Норма такого вектора явно составляет около 1.

По мере повышения температуры некоторые переменные Поттса начинают принимать значения, отличные от  $Q_1$ . Следовательно, величина нормы выходных векторов уменьшается вместе с  $T$ . Когда  $T \geq T_c$ , норма NN выходных векторов находится около своего минимального значения  $1/\sqrt{5}$ . Причиной этому является существование равной вероятности того, что каждое целое число в  $\{1, 2, 3, 4, 5\}$  является значением любой переменной Поттса. Графики, показанные на рис. 4 показывают, как конфигурации Поттса и соответствующие выходные векторы меняются с  $T$ .

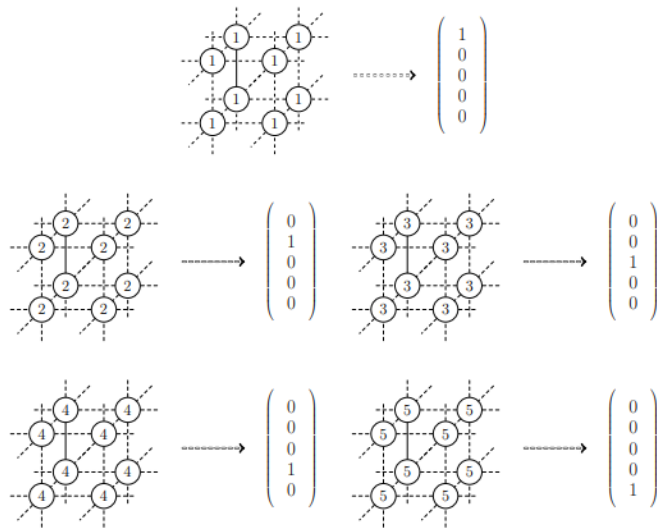


Рис. 3: Набор для предварительной подготовки и соответствующие метки для трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке.

Основываясь на этой зависимости  $R$  от  $T$ , можно оценить, что  $T_c$  находится в диапазоне температур, при котором  $R$  быстро уменьшается от 1 до  $1/\sqrt{5}$ . Действительно, в работе [27] показано, что такой метод способен определять  $T_c$  с высокой точностью. Для более подробного ознакомления с этим подходом использования теоретических конфигураций основного состояния в качестве обучающего набора, включая его проверку, мы отсылаем читателей к работе [27].

#### IV. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Для генерации конфигураций изучаемых 2D и 3D моделей Поттса, которые будут использоваться на этапах тестирования процедур НС, используются алгоритм Свендсена-Вана [43], алгоритм Вольфа [48], а также алгоритм Свендсена-Вана-Котецкого [44, 45]. В частности, конфигурации Поттса сохраняются один раз в каждую тысячу (или две тысячи) разверток Монте-Карло после термализации, и создаются десять тысяч (или двести тысяч) трёхмерных ферромагнитных конфигураций Поттса, а также одна тысяча двумерных антиферромагнитных конфигураций Поттса. Эти конфигурации используются при получении результатов, представленных в данной работе.

##### A. Обучающий набор и выходные метки для 2D моделей

Подобно стратегии, представленной в предыдущем подразделе, здесь мы будем использовать ожидаемые конфигурации основного состояния в качестве набора предварительной подготовки для исследования НС, связанного с рассматриваемой 2D-системой. В отличие от ферромагнитной модели Поттса, любые две ближайшие соседние переменные Поттса для конфигураций основного состояния двумерной антиферромагнитной модели Поттса с  $Q$  состояниями отличаются друг от друга. В результате, при  $Q \geq 3$

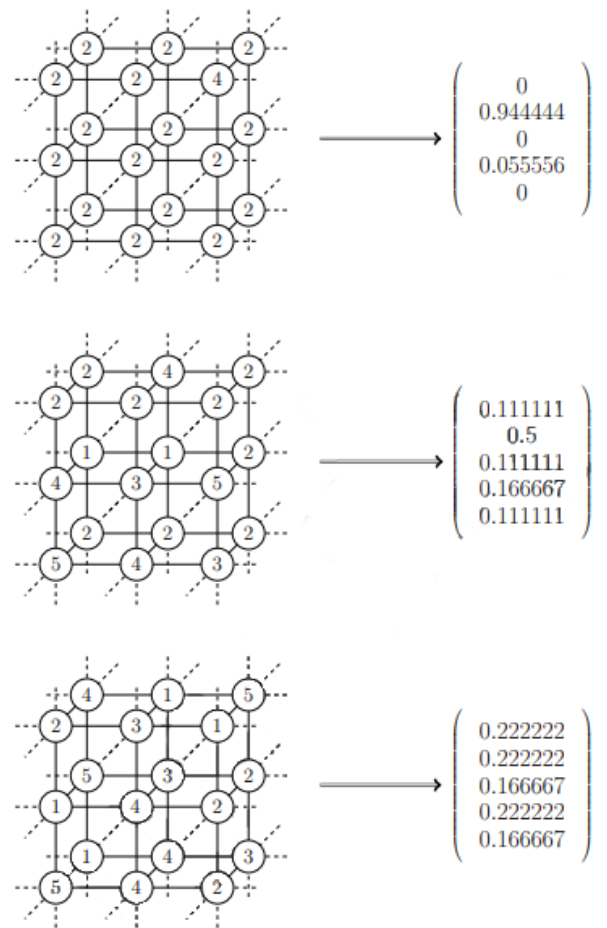


Рис. 4: Ожидаемые конфигурации Поттса и соответствующие выходные векторы НС при низких температурах ( $T \ll T_c$ , верхняя панель), умеренной температуре ( $T < T_c$ , средняя панель) и высокой температуре ( $T \geq T_c$ , нижняя панель) для исследуемой 3D модели. Выходные векторы для демонстрации, а не реальные.

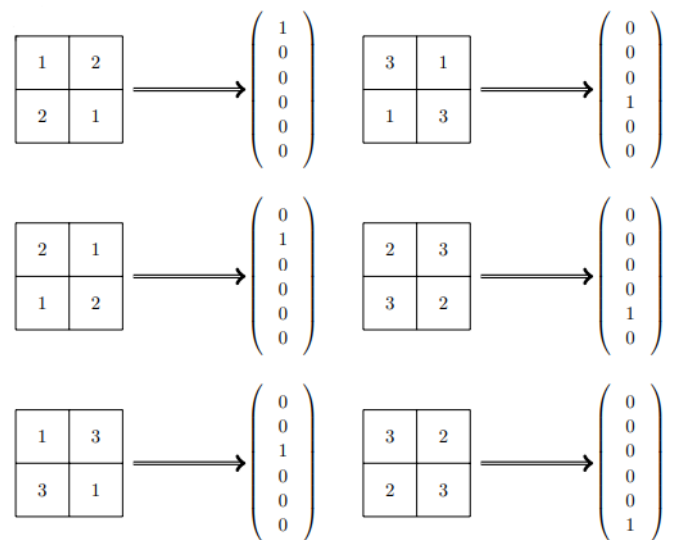


Рис. 5: Блоки (решетки 2 на 2 и переменные Поттса, связанные с ними) для построения набора предварительной подготовки, состоящего из 6 конфигураций, и соответствующие им метки, рассматриваемые здесь для двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями на квадратной решетке.



1	2	1	2	3	2
2	1	2	1	2	3
1	2	1	2	1	3
2	1	2	1	2	3
1	2	2	1	2	3
2	1	3	1	3	1
1	2	1	2	1	3
2	1	3	1	3	1
1	2	2	1	2	3
3	1	1	2	3	2
2	3	1	3	2	3
3	1	3	2	1	3
2	3	1	3	2	3
3	1	3	2	1	3
2	3	1	3	2	3
3	1	3	2	1	3

Рис. 6: Несколько блоков для построения наборов предварительной подготовки, состоящих из 18 (слева решетки 2 на 2 и их переменные Поттса) и 36 (справа решетки 4 на 4 и их переменные Поттса) конфигураций для двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями на квадратной решетке. Конфигурации на более крупных решетках получаются умножением любого из этих блоков в несколько раз как в направлении  $x$ , так и в направлении  $y$ .

существует огромное количество таких конфигураций. Мы построили 6, 18 и 36 ожидаемых конфигураций основного состояния двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями и используем эти конфигурации в качестве наборов для предварительной подготовки. Блоки (решетки 2 на 2 и связанные с ними переменные Поттса) для построенных 6 конфигураций показаны на рис. 5, а конфигурации на более крупных решетках получают путем умножения любого из этих 6 единичных блоков по отдельности несколько раз как в  $x$ -, так и в  $y$ -направлении (соответствующие метки, которые будут описаны в ближайшее время, также показаны на рис. 3). Используя эти предварительные тренировочные наборы, фактические тренировочные наборы являются многократной копией (здесь мы используем коэффициент 200) предварительных тренировочных наборов.

Выходные метки, используемые здесь для наборов для предварительной тренировки, точно соответствуют меткам в предыдущем подразделе, относящимся к трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями. Например, для набора предварительной подготовки, состоящего из 6 конфигураций, соответствующие метки являются базисными векторами 6-мерного евклидова пространства. Ясно, что, как и в случае ферромагнитной модели Поттса, можно однозначным образом сопоставить эти 6 конфигураций в наборе предварительной подготовки с 6 базисными векторами 6-мерного евклидова пространства (эта карта также не уникальна). То же правило построения применяется, когда в качестве наборов предварительной тренировки рассматриваются 18 или 36 конфигураций, см. рис. 6 для части наборов предварительной тренировки, состоящих из 18 и 36 конфигураций.

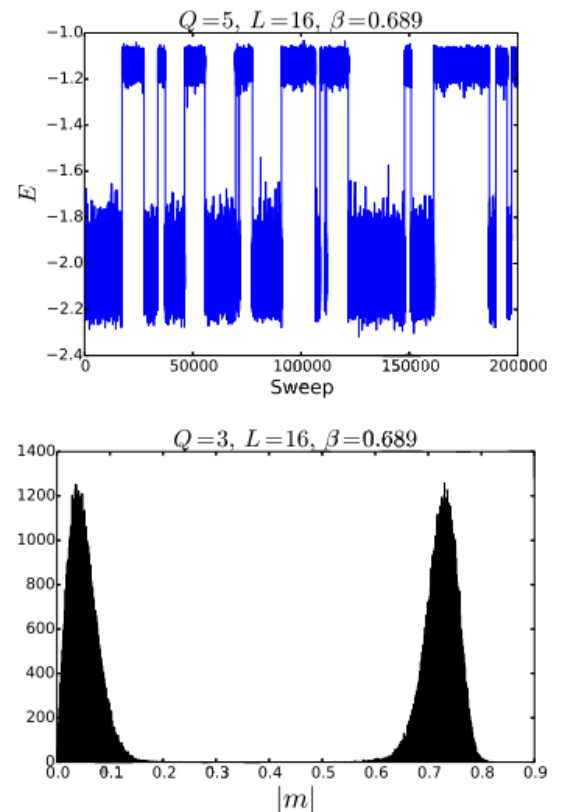


Рис. 7: плотность энергии  $E$  (верхняя панель) как функция развертки МК и гистограмма плотности намагниченности  $\langle |m| \rangle$  (нижняя панель) вблизи  $T_c$  ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке. Соответствующие размеры ячеек  $L$  и  $\beta$  для данных, показанных на этом рисунке, составляют  $L = 16$  и  $\beta = 0,689$  соответственно.

Примечательно, что, хотя в данном исследовании в качестве тренировочных комплектов используется лишь очень мало информации обо всех конфигурациях основного состояния, как мы продемонстрируем в ближайшее время, построенная НС с разработанными обучающими наборами и метками способна продемонстрировать убедительные доказательства того, что фазовый переход исследуемой двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями происходит только при нулевой температуре, как это предсказывает теория.

## В. Результаты трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями

### 1. Результаты Монте-Карло

На рис. 7 показаны плотность энергии  $E$  (верхняя панель) как функция развертки МК и гистограмма плотности намагниченности  $\langle |m| \rangle$  (нижняя панель) при температуре, близкой к  $T_c$ , для трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке. Результаты получены с  $L = 16$  и  $\beta = 0,689$ . Явление туннелирования между двумя значениями отчетливо видно на верхней панели рисунка. Кроме того, структура двух пиков также показана на нижней панели рис. 7. Это особенности фазового перехода первого порядка. Другими словами, данные Монте-Карло подтверждают теоретический прогноз о том, что фазовый переход трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке является прерывистым.



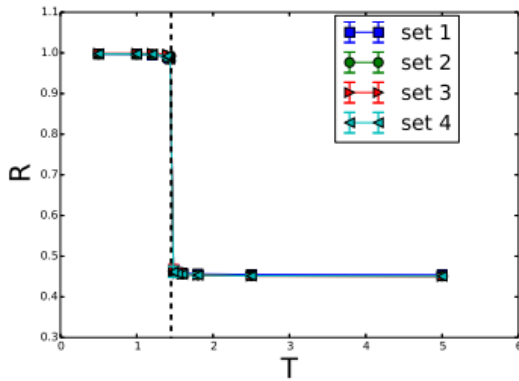


Рис. 8:  $R$  как функции  $T$  для трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке с  $L = 12$ . Вертикальная пунктирная линия - ожидаемая  $T_c$ . Результаты, полученные с использованием разных наборов параметров, показаны на рисунке.

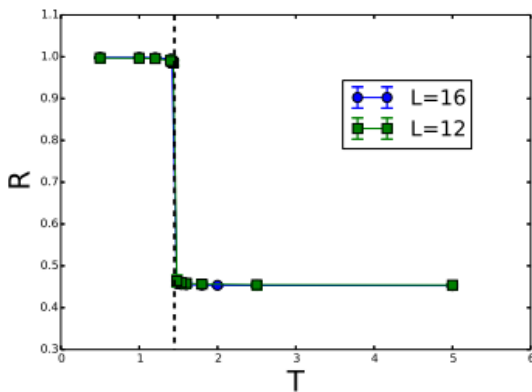


Рис. 9:  $R$  как функции  $T$  для трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке с  $L = 12, 16$ . Вертикальная пунктирная линия - ожидаемая  $T_c$ .

## 2. Результаты НС

Норма  $R$  выходных векторов как функций  $T$  для трёхмерной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке показана на рис. 8. Вертикальная пунктирная линия, показанная на рисунке, является ожидаемой  $T_c$ . Эти результаты получены на решетках  $12 \times 12 \times 12$ . Кроме того, для фиксированной  $T$  проводится 4 вычисления с

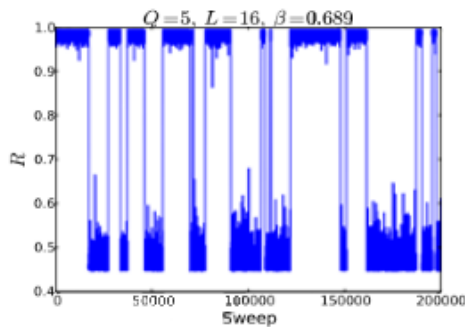


Рис. 10:  $R$  при температуре около  $T_c$  в трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке. Соответствующие размеры блока  $L$  и  $\beta$  для данных, показанных на этом рисунке, составляют, соответственно,  $L = 16$  и  $\beta = 0,689$ .

использованием различных параметров случайных начальных чисел, размера партий, копий набора предварительного обучения и эпохи, все полученные  $R$  показаны на верхней панели рис. 8. Результаты на (верхней панели) рис. 8 показывают, что  $R$  очень устойчив по отношению к перестраиваемым переменным, связанным с НС. Кроме того, как видно из рисунка, а также рис. 9, который включает результаты при  $L = 16$ , величина  $R$  быстро уменьшается в области температур, близкой к теоретической  $T_c$ . На основании этого результата и результата работы [27], вне всякого сомнения, для ферромагнитной модели Поттса с  $Q$  состояниями можно точно оценить, что связанный  $T_c$  лежит в пределах температурного окна, при котором величина  $R$  резко падает от 1 до  $1/\sqrt{Q}$ .

На рис. 10 показана гистограмма  $R$  для трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решетке при температуре  $T$  близкой к  $T_c$ . Результат получен при  $L = 16$  и  $\beta = 0.689$ . Очевидно, что на рисунке видна четкая структура с двумя пиками. В результате исследуемый фазовый переход имеет первый порядок. Другими словами, построенная здесь НС, состоящая только из одного входного слоя, одного скрытого слоя и одного выходного слоя, способна не только точно локализовать  $T_c$ , но и определить характер фазового перехода исследуемой модели. Ожидается, что построенная НС способна успешно выполнять аналогичные вычисления для общих ферромагнитных моделей Поттса с  $Q$  состояниями в любом измерении и при любой геометрии решетки.

Помимо результатов, определенных МСП, мы дополнительно провели расчеты с использованием построенной СНС, показанной на рис. 2. Оба результата  $R$ , связанные с МСП и СНС для  $L = 8$  и  $L = 12$  в качестве функций  $T$  показаны на рис. 11. На рисунке вертикальные пунктирные и горизонтальные сплошные линии обозначают  $T_c$  и  $1/\sqrt{5}$  соответственно. И снова,  $1/\sqrt{5}$  – ожидаемое значение для  $R$ , когда размер системы переходит в бесконечность. По результатам, показанным на рис. 11, как МСП, так и СНС успешно (и точно) определяют местоположение  $T_c$ .

Мы также рассчитали  $R$  для температур, близких к теоретической  $T_c$ . Результаты при  $L = 16$ , полученные от МСП и СНС, изображены на рис. 12. Рядом с вертикальной линией, которая является установленной  $T_c$ , вариации  $R$  велики. Поскольку эффективный алгоритм кластерного типа используется для моделирования, такой результат можно интерпретировать как сигнал для перехода первого порядка (это можно получить из особенности туннелирования между двумя каналами для фазового перехода первого порядка). Также интересно, что область температур, в которой вариации  $R$  становятся большими, немного выше установленного в литературе значения  $T_c$  (вертикальная линия на рис. 12). Это небольшое расхождение можно объяснить различными подходами, а также алгоритмами, используемыми при расчете  $T_c$ .

Наконец, гистограмма  $R$  при  $\beta = 0,689$ , полученная от СНС, показана на рис. 13. Аналогичная ситуация с МСП,  $R$  туннелирует между двумя значениями с разветками Монте-Карло, что снова является четким указанием на то, что фазовый переход имеет первый порядок.

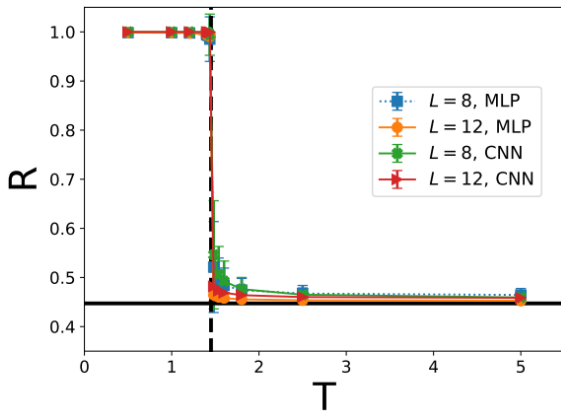


Рис. 11: Сравнение результатов (при  $L = 8$  и  $L = 12$ ), полученных МСП и СНС.

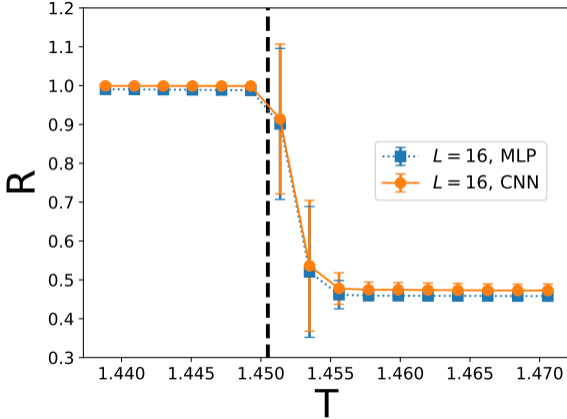


Рис. 12: результаты  $R$  (при  $L = 16$ ), близкие к теоретическому  $T_c$ , полученные МСП и СНС.

### С. Результаты двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями

#### 1. Результаты Монте-Карло

На рис. 14 представлены ступенчатая плотность намагниченности  $m_s$  как функции температуры  $T$  для рассматриваемой двумерной ферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями на квадратной решетке. Результаты при различных  $L$  показаны на рисунке. При взгляде на них становится ясно, что для каждого конечного  $L$  величина его соответствующей намагниченности уменьшается с ростом  $T$ , и, в конечном

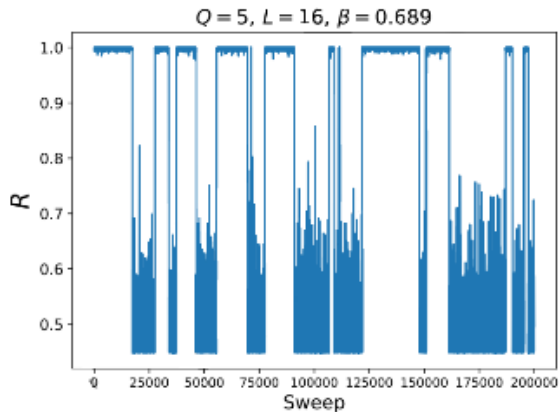


Рис. 13:  $R$  как функция развертки Монте-Карло при  $\beta = 0,689$ . Результаты получены с использованием СНС.

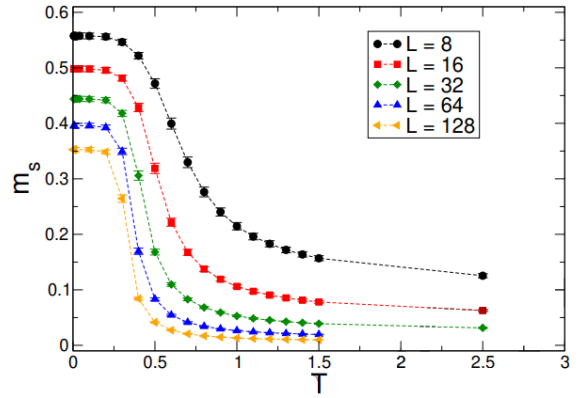


Рис. 14:  $m_s$  как функции от  $T$  для двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями на квадратной решетке. Результаты для различных размеров коробки  $L$ , показаны на рисунке.

итоге, при высокой температуре  $m_s$  достигает насыщенного значения, которое, как ожидается, достигнет нуля при  $L \rightarrow \infty$ . Кроме того, для смоделированных размеров ячеек кривые, показанные на рисунке, не пересекаются между собой. Такая ситуация интерпретируется как фазовый переход при нулевой температуре, а именно, система всегда находится в неупорядоченной фазе при любом  $T > 0$ .

#### 2. Результаты НС

Результаты  $R$  как функции  $T$  для НС при использовании различных обучающих наборов (с использованием 6, 18 и 36 построенных конфигураций наборов для предварительного обучения) показаны на рис. 15, 16, 17, а приведенные данные получены по десяти результатам. В частности, каждый из этих результатов рассчитывается со своим собственным набором случайных чисел, который отличается от других. Эти цифры, полученные с использованием различных обучающих наборов, демонстрируют характеристики, схожие с характеристиками  $m_s$  (рис. 14). В частности, кривые  $T-R$  при различных  $L$  имеют тенденцию к монотонному уменьшению величины  $R$  с уменьшением  $T$ . Кроме того, для каждого используемого обучающего набора соответствующие кривые  $T-R$  не пересекаются между собой, кроме кривых с большим  $L$ , что можно интерпретировать как сходимость по размеру результатов НС. Сплошная Горизонтальная линия, расположенная внизу на рис. 15, отображает ожидаемое значение  $R$  (которое составляет  $1/\sqrt{6}$ ) при любой конечной температуре при  $L \rightarrow \infty$ . Ожидается, что при увеличении  $L$  соответствующая  $R$  приблизится к  $1/\sqrt{6}$  даже в области низких температур.

Мы хотели бы отметить, что для результатов использования 18 конфигураций в качестве набора для предварительного обучения (напр. рис. 16) в области высоких температур  $R$  при  $L = 64$  немного выше, чем при  $L = 32$  (не в пределах статистических ошибок). Мы связываем это с систематической неопределенностью из-за настраиваемых параметров НС, которые здесь не учитываются. Тем не менее, учитывая сходство результатов НС и МК (рис. 14, 15, 16, 17), результаты, полученные при использовании НС, предоставляют убедительные численные доказательства того, что фазовый переход двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями на квадратной решетке происходит при нулевой температуре.

По сравнению с изученной трёхмерной моделью результаты работы НС для двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями имеют (гораздо) большую неопределенность. Действительно, для расчетов с использованием различных случайных начальных чисел, хотя изменение результирующего  $R$  данной рассматриваемой 3D-модели и является незначительным, неопределенность  $R$ , связанная с исследуемой 2D-моделью, значительна. Подобным образом, другие настраиваемые параметры в используемой НС, такие как размер пакета, оказывают определенное влияние на величину  $R$  антиферромагнитной системы. Далее было обнаружено, что для получения результатов, согласующихся с таковыми, определенными на основе моделирования по методу Монте-Карло, соотношение  $p$  между количеством объектов в обучающем наборе и рассматриваемым размером пакета должно быть числом умеренной величины. Так как  $p$  связан с независимыми параметрами во время процедуры оптимизации, слишком большое или слишком малое количество свободных параметров приведет к неудовлетворительным результатам оптимизации, учитывая ограничение алгоритма, используемого в этом процессе.

Найденные НС значения  $R$  при использовании 18 конфигураций наборов предварительной подготовки, при различных  $T$  и  $L$  с использованием пакетов (batch) размером 40, 80, 160 и 320, показаны на рис. 18 (сверху вниз). Как можно видеть на этом рисунке, при размере пакета 40 и  $L = 128$ , соответствующие данные лежат значительно выше таковых при  $L = 32, 64$  в области высоких температур. Это противоречит результатам Монте-Карло. По мере увеличения размера пакета, тенденция изменения  $R$  и  $T$  для различных размеров решетки  $L$  становится все более похожим на полученный при использовании метода МК. Наконец, результаты, показанные на нижней панели рис. 18, который рассчитан с размером пакета 320, соответствуют, по меньшей мере качественно, таковым для МК. Наше исследование двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями на квадратной решетке показывает, что следует соблюдать осторожность, когда рассматривается применение методов НС для изучения физических систем с сильно вырожденными конфигурациями основного состояния.

Наконец, мы хотели бы подчеркнуть тот факт, что результаты, показанные на рис. 15, 16, 17 получены с использованием одинаковых переменных НС для всех рассмотренных размеров решетки  $L = 8, 16, 32, 64$  (128). Вероятно, что наиболее подходящие параметры НС для различных  $L$  могут быть разными. Другими словами, для сложных систем может потребоваться выполнение определенной подстройки для нахождения соответствующих параметров НС, чтобы получить правильные физические сигналы.

## V. ОБСУЖДЕНИЯ И ВЫВОДЫ

В этом исследовании мы исследуем фазовые переходы трёхмерной ферромагнитной модели Поттса с 5 состояниями и двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями, используя как вычисления Монте-Карло, так и методы НС. Рассмотренные здесь НС являются МСП и СНС. Используемая МСП имеет простейшую структуру глубокого обучения, то есть состоит из одного входного слоя, одного скрытого слоя и одного выходного слоя. Используемая СНС построена по схеме, изложенной в работе [27]. Наконец, в отличие от традиционного подхода к использованию данных, сгенерированных численными методами для обучения, в

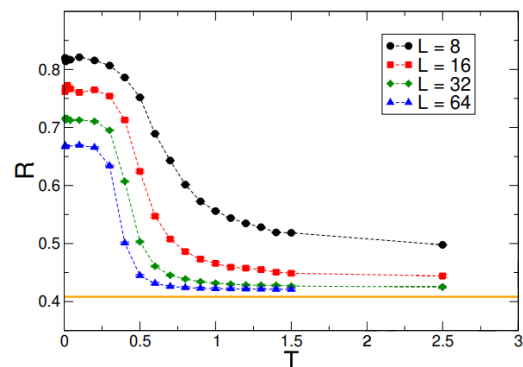


Рис. 15:  $R$  как функция  $T$  для различных размеров решетки  $L$ . Эти результаты получены с использованием 6 конфигураций в качестве набора для предварительной подготовки, и принятый размер пакета составляет 40. Горизонтальная сплошная линия, расположенная внизу, является ожидаемым результатом  $R$  (что составляет  $1/\sqrt{6}$ ) при  $L \rightarrow \infty$ .

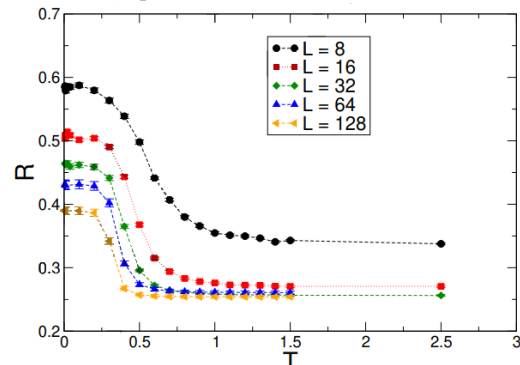


Рис. 16:  $R$  от  $T$  для различных размеров решетки  $L$ . Эти результаты получены с использованием 18 конфигураций в качестве набора для предварительной подготовки, и принятый размер пакета составляет 320.

данном исследовании мы используем все или часть теоретических конфигураций основного состояния в качестве (предварительных) тренировочных наборов.

Традиционное обучение НС обычно требует использования фактических данных. В частности, знание критической точки ( $T_c$ ) необходимо для изучения соответствующего фазового перехода с использованием стандартного подхода методов НС. Наша стратегия процесса обучения имеет преимущество - точное знание  $T_c$  не обязательно для проведения исследования, и для генерации тренировочных наборов требуется очень мало

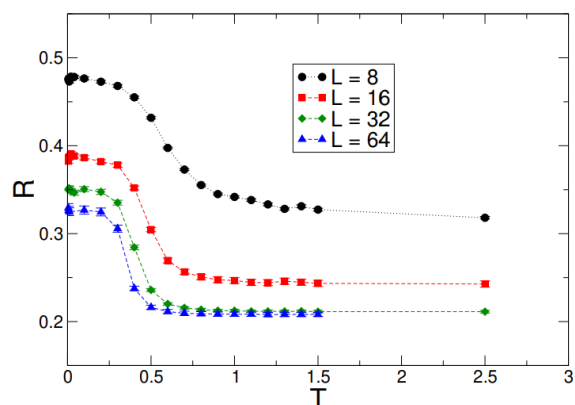


Рис. 17:  $R$  как функции  $T$  для различных размеров решетки  $L$ . Эти результаты получены с использованием 36 конфигураций в качестве набора для предварительной подготовки, и принятый размер пакета составляет 320

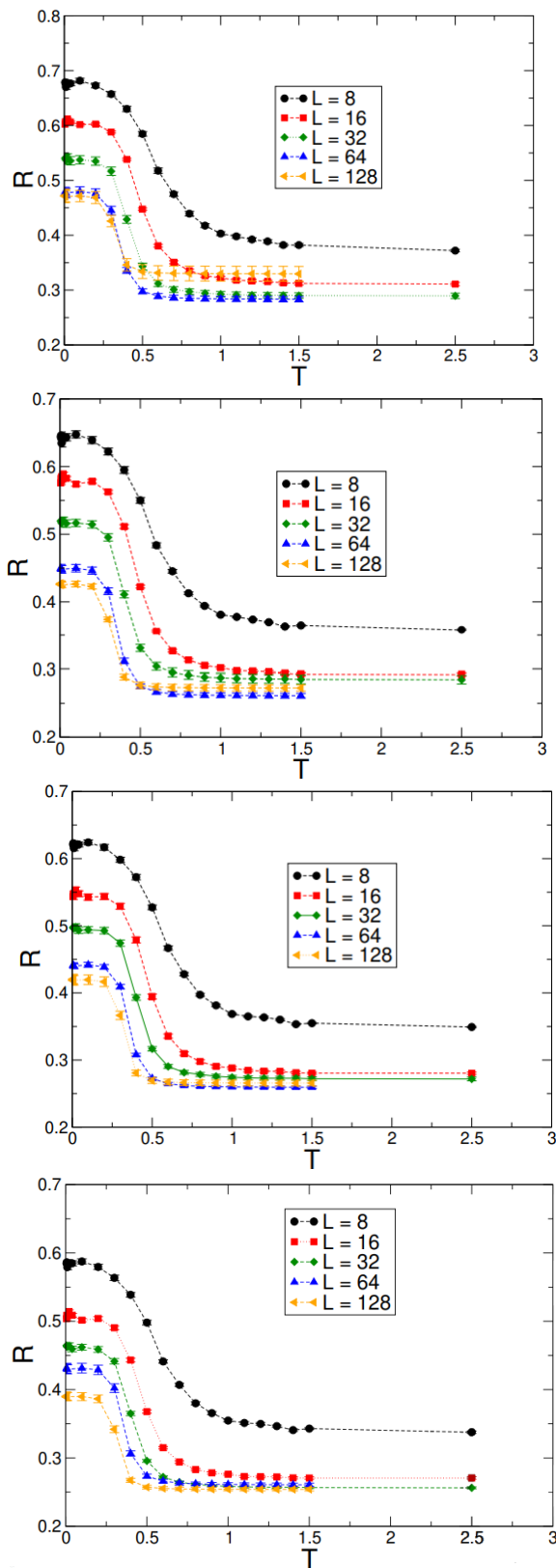


Рис. 18:  $R$  от  $T$  для различных размеров решётки  $L$ . Данные получены с использованием 18 конфигураций в качестве набора для предварительной подготовки, используемые размеры пакетов составляют 40, 80, 160 и 320 (сверху вниз).

вычислительных усилий. Показано, что величина выходных векторов  $R$  является релевантной величиной для локализации критических точек, а также для определения характера фазовых переходов.

Примечательно, что результаты изучения нейросетями 3D моделей, полученные в данной работе, подразумевают, что использование даже простейших НС глубокого обучения может привести к высокоточному определению  $T_c$ . Кроме того, применяемая в данной работе величина  $R$  так же эффективна, как и в традиционных методах, когда дело доходит до определения природы рассматриваемых фазовых переходов. Интересно, что туннельные явления на рис. 7 и 10 показывают, что всякий раз, когда  $E$  достигает результатов больших числовых значений,  $R$  получает результаты с малой величиной и наоборот. Другими словами,  $R$  и  $E$  дополняют друг друга, и  $R$  действительно отражает правильную физику.

Для двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями мы провели исследование метода НС, используя 6, 18 и 36 теоретических конфигураций основного состояния этой модели в качестве предварительных обучающих наборов. В то время как полученные НС результаты с определенными ограничениями на настраиваемые параметры согласуются с результатами Монте-Карло, трудно получить правильную физику из расчетов НС. Действительно, как мы продемонстрировали, различия между результатами работы НС, полученными с различными начальными случайными числами и размером пакета, являются значительными. В частности, соотношение количества обучающих объектов и размера партии играет ключевую роль в получении результатов, имеющих правильные физические сигналы. Таким образом, следует обратить особое внимание, когда модели, имеющие сильно вырожденные конфигурации основного состояния, исследуются с использованием метода НС. В таких случаях может потребоваться определенная настройка для поиска подходящих параметров НС, чтобы соблюсти правильную физику.

Мы хотели бы подчеркнуть, что, поскольку результаты, представленные здесь, подразумевают, что для получения физических правильных результатов требуется только частичная информация, вполне вероятно, что при умеренных модификациях рассматриваемая стратегия применима к классическим системам с непрерывными переменными и моделям квантовых спинов. Для антиферромагнитной модели Гейзенберга со спином  $1/2$  существует две конфигурации соответствующих классических основных состояний. Используя эти две классические конфигурации основного состояния в качестве обучающего набора, наши предварительные результаты исследования квантового фазового перехода, связанного с трёхмерной моделью плакетки, рассмотренной в работе [53], показаны на рис. 19. На рисунке данные НС представлены символами в виде нисходящего треугольника, а сплошные кружки обозначают результат операции  $(1/\sqrt{2}+1)$ -данные НС. Рассмотрение нового набора данных (из сплошных кружков) мотивируется тенденцией линейного приближения  $R$  как функции  $g$  в критическом режиме. При таком раскладе,  $g_c$  должен быть  $g$ , связанным со средней точкой упомянутого линейного приближения. В результате,  $g_c$  также можно определить по пересечению кривых, представленных символами нисходящего треугольника и сплошного круга. С таким критерием, оценочная величина  $g_c$  составляет около 4.0, что согласуется с тем, который рассчитывается с использованием данных работы [53]. Поскольку две классические конфигурации основного состояния, используемые для обучения, даже не являются истинными основными состояниями рассматриваемой квантовой системы спинов, вполне вероятно, что применимость метода, используемого в этом исследовании, превосходит то, что можно было бы ожидать интуитивно.

Применяя вышеописанную стратегию к данным трёхмерной модели Поттса с 5 состояниями при  $L = 12$ , мы приходим к рисунку 20, который однозначно подтверждает утверждение(я), предыдущего абзаца. Мы хотели бы



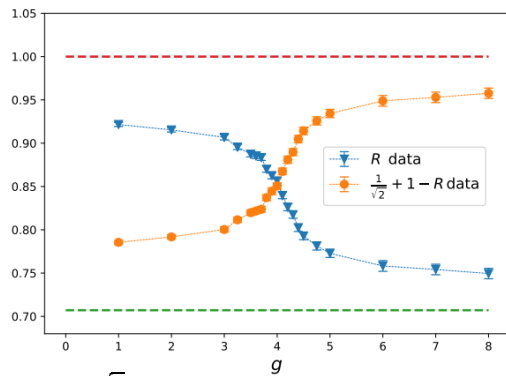


Рис. 19:  $R$  и  $1/\sqrt{2} + 1 - R$  как функции от  $g$  для трёхмерной модели Плотса, рассмотренной в работе [53]. Размер решётки  $L = 8$ . Две пунктирные горизонтальные линии представляют верхнюю и нижнюю границы  $R$ .

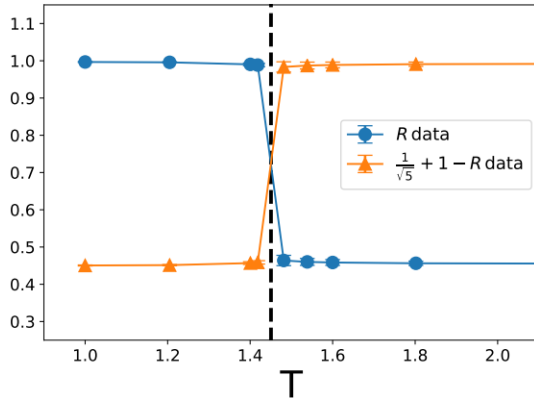


Рис. 20:  $R$  и  $1/\sqrt{5} + 1 - R$  как функции от  $T$  для трёхмерной модели Поттса с 5 состояниями на кубической решётке. Вертикальная пунктирная линия - ожидаемая  $T_c$ . Размер решётки  $L = 12$ .

отметить, что поскольку фазовый переход для трёхмерной модели Поттса с 5 состояниями - первого порядка, эффективность определения  $T_c$  по пересечению двух наборов данных, связанных с  $R$ , требует дальнейшего изучения. Тем не менее результаты, показанные на рис. 19 и 20 указывают, что этот метод является перспективным.

Подводя итоги, мы подтверждаем обоснованность подхода к обучению, рассмотренного в работе. [27]. В частности, нам удалось применить этот метод для изучения фазового перехода двумерной антиферромагнитной модели Поттса с 3 состояниями на квадратной решетке, который происходит при нулевой температуре и может быть труднообнаруживаем с помощью обычной процедуры обучения НС. Будет интересно исследовать, способен ли метод, используемый в этом исследовании, точно вычислять другие физические величины при фазовых переходах, такие как критические показатели.

Хотя проведённые в данном исследовании расчёты НС ориентированы на известную статистическую модель, использование высказанных идей выходит за рамки полученных результатов. Как уже отмечалось во введении, применение методов ИИ в большинстве областей науки требует использования реальных данных в качестве учебных наборов. Результаты, полученные в данном исследовании, указывают на то, что только методы ИИ могут успешно достигать правильных физических результатов без ввода реальных данных. Это стимулирует применение подходов в духе данного исследования к более сложным системам, что может быть достигнуто с помощью следующих процедур. Можно проверить правильность данной теории, сначала проведя обучение с использованием только теоретических данных (экспериментальных данных не требуется), а затем используя реальные данные на этапе тестирования. И, наконец, изучив полученные результаты, можно определить, соответствует ли предлагаемая теория описываемому материалу, или нет.

### Acknowledgement

The first three authors contributed equally to this project. Partial support from Ministry of Science and Technology of Taiwan is acknowledged.

- 
- [1] Matthias Rupp, Alexandre Tkatchenko, Klaus-Robert Müller, and O. Anatole von Lilienfeld, Phys. Rev. Lett. **108** 058301 (2012).
  - [2] John C. Snyder, Matthias Rupp, Katja Hansen, Klaus-Robert Müller, and Kieron Burke, Phys. Rev. Lett. **108** 253002 (2012).
  - [3] B. Meredig, A. Agrawal, S. Kirklin, J. E. Saal, J. W. Doak, A. Thompson, K. Zhang, A. Choudhary, and C. Wolverton, Phys. Rev. B **89**, 094104 (2014).
  - [4] K. T. Schütt, H. Glawe, F. Brockherde, A. Sanna, K. R. Müller, and E. K. U. Gross, Phys. Rev. B **89**, 205118 (2014).
  - [5] Zhenwei Li, James R. Kermode, and Alessandro De Vita, Phys. Rev. Lett. **114**, 096405 (2015).
  - [6] Joohwi Lee, Atsuto Seko, Kazuki Shitara, Keita Nakayama, and Isao Tanaka, Phys. Rev. B **93**, 115104 (2016).
  - [7] Lei Wang, Phys. Rev. B **94**, 195105 (2016).
  - [8] Tomoki Ohtsuki and Tomi Ohtsuki, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 123706 (2016).
  - [9] Juan Carrasquilla, Roger G. Melko, Nature Physics **13**, 431434 (2017).
  - [10] Giuseppe Carleo, Matthias Troyer, Science **355**, 602 (2017).
  - [11] Giacomo Torlai and Roger G. Melko, Phys. Rev. B **94**, 165134 (2016).
  - [12] Peter Broecker, Juan Carrasquilla, Roger G. Melko, and Simon Trebst, Scientific Reports **7**, 8823 (2017).
  - [13] Kelvin Ch'ng, Juan Carrasquilla, Roger G. Melko, and Ehsan Khatami, Phys. Rev. X **7**, 031038 (2017).
  - [14] Akinori Tanaka, Akio Tomiya, J. Phys. Soc. Jpn. **86**, 063001 (2017).
  - [15] Evert P.L. van Nieuwenburg, Ye-Hua Liu, Sebastian D. Huber, Nature Physics **13**, 435439 (2017).
  - [16] Junwei Liu, Huitao Shen, Yang Qi, Zi Yang Meng, Liang Fu, Phys. Rev. B **95**, 241104(R) (2017).
  - [17] Xiao Yan Xu, Yang Qi, Junwei Liu, Liang Fu, Zi Yang Meng, Phys. Rev. B **96**, 041119(R) (2017).

- [18] Li Huang and Lei Wang, Phys. Rev. B **95**, 035105 (2017).
- [19] Junwei Liu, Yang Qi, Zi Yang Meng, Liang Fu, Phys. Rev. B **95**, 041101 (2017).
- [20] Qianshi Wei, Roger G. Melko, Jeff Z. Y. Chen, Phys. Rev. E **95**, 032504 (2017).
- [21] Yuki Nagai, Huitao Shen, Yang Qi, Junwei Liu, and Liang Fu Phys. Rev. B **96** 161102 (2017).
- [22] Dong-Ling Deng, Xiaopeng Li, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **96** 195145 (2017).
- [23] Pedro Ponte and Roger G. Melko, Phys. Rev. B **96**, 205146 (2017).
- [24] Yi Zhang, Roger G. Melko, and Eun-Ah Kim Phys. Rev. B **96**, 245119 (2017).
- [25] Yi Zhang and Eun-Ah Kim, Phys. Rev. Lett. **118**, 216401 (2017)
- [26] Wenjian Hu, Rajiv R. P. Singh, and Richard T. Scalettar, Phys. Rev. E **95**, 062122 (2017).
- [27] C.-D. Li, D.-R. Tan, and F.-J. Jiang, Annals of Physics, 391 (2018) 312-331.
- [28] Kelvin Ch'ng, Nick Vazquez, and Ehsan Khatami, Phys. Rev. E **97**, 013306 (2018).
- [29] Matthew J. S. Beach, Anna Golubeva, and Roger G. Melko, Phys. Rev. B **97**, 045207 (2018).
- [30] Phiala E. Shanahan, Daniel Trewartha, and William Detmold, Phys. Rev. D **97**, 094506 (2018).
- [31] Pengfei Zhang, Huitao Shen, and Hui Zhai, Phys. Rev. Lett. **120**, 066401 (2018).
- [32] Jun Gao et al. Phys. Rev. Lett. **120**, 240501 (2018).
- [33] Wanzhou Zhang, Jiayu Liu, and Tzu-Chieh Wei, Phys. Rev. E **99**, 032142 (2019).
- [34] Jonas Greitemann, Ke Liu, and Lode Pollet, Phys. Rev. B **99**, 060404 (2019).
- [35] Xiao-Yu Dong, Frank Pollmann, and Xue-Feng Zhang, Phys. Rev. B **99**, 121104 (2019).
- [36] Boram Yoon, Tanmoy Bhattacharya, and Rajan Gupta, Phys. Rev. D **100**, 014504 (2019).
- [37] Askery Canabarro, Felipe Fernandes Fanchini, André Luiz Malvezzi, Rodrigo Pereira, and Rafael Chaves, Phys. Rev. B **100**, 045129 (2019).
- [38] Wenqian Lian et al., Phys. Rev. Lett. **122**, 210503 (2019).
- [39] Pankaj Mehta, Marin Bukov, Ching-Hao Wang, Alexandre G.R. Day, Clint Richardson, Charles K. Fisher, and David J. Schwab, Phys. Rep. 810, (2019) 1-124.
- [40] Giuseppe Carleo, Ignacio Cirac, Kyle Cranmer, Laurent Daudet, Maria Schuld, Naftali Tishby, Leslie Vogt-Maranto, and Lenka Zdeborová, Rev. Mod. Phys. **91**, 045002 (2019).
- [41] T. Ohtsuki et al. J. Phys. Soc. Jpn. 89, 022001 (2020)
- [42] F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [43] R. H. Swendsen, and J.-S. Wang, (1987), Phys. Rev. Lett. **58(2)**, 86 (1987).
- [44] J.-S. Wang, R. H. Swendsen, and R. Kotecký, Phys. Rev. Lett. **63**, 109 (1989).
- [45] Jian-Sheng Wang, Robert H. Swendsen, and Roman Kotecký, Phys. Rev. B **42**, 2465 (1990).
- [46] Alain Billoire, arXiv:hep-lat/9501003.
- [47] Yoshihiko Nonomura and Yusuke Tomita, Phys. Rev. E **92**, 062121 (2015).
- [48] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
- [49] P. J. Kundrotas, S. Lapinskas, and A. Rosengren Phys. Rev. B **52**, 9166 (1995).
- [50] Ferreira, S.J. and Sokal, A.D., Journal of Statistical Physics (1999) 96: 461.
- [51] <https://keras.io>
- [52] <https://www.tensorflow.org>
- [53] D.-R. Tan and F.-J. Jiang, Phys. Rev. B **97**, 094405 (2018).