Дальневосточный математический журнал. 2015. Том 15. В 2. С. 0–0

УДК 519.6
MSC2010 90-05, 90-08, 90-10

© (Д. В. Бобров, К. С. Солдатов)[1]

Вычисление критических точек в двумерных спиновых системах с помощью алгоритма нейронной сети

В данной работе представлен алгоритм определения точки фазового перехода в спиновых моделях с использованием нейронной сети. Достоверность полученных результатов подтверждается сравнением с существующим точным решением. Разработанный алгоритм выполняется за время, куда меньшее чем время, необходимое на вычисление точного решения, и может послужить мощным инструментом для анализа и исследования сложных спиновых систем.

Ключевые слова: *Модель Изинга, Нейронная сеть, Критическая температура*

Введение

Физика конденсированных сред изучает поведение сложных систем, состоящих из большого числа взаимодействующих частиц. Сложность численного расчета таких систем обусловлена огромным количеством возможных состояний, полный перебор которых необходим для записи статистической суммы. Число возможных состояний растёт экспоненциально с увеличением количества частиц в системе [1].

В связи с этим, необходимо разрабатывать новые методы, которые могут эффективно работать с большими и сложными наборами данных. К таким методам относятся алгоритмы машинного обучения и нейронные сети, которые после правильной и внимательной калибровки способны распознавать, классифицировать и характеризовать сложные системы.

Применение методов обучения в физике конденсированных сред представляет большой интерес, особенно при изучении систем с сильными взаимодействиями. В таких системах микроскопический гамильтониан сложно решить аналитически, поэтому численное моделирование становится важным инструментом для исследования фазовых диаграмм и характеристик фазовых переходов.

[1] 690922, Приморский край, г. Владивосток, остров Русский, п. Аякс, 10; Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, Владивосток, ул. Радио, 7. Электронная почта: bobrov.dv@dvfu.ru

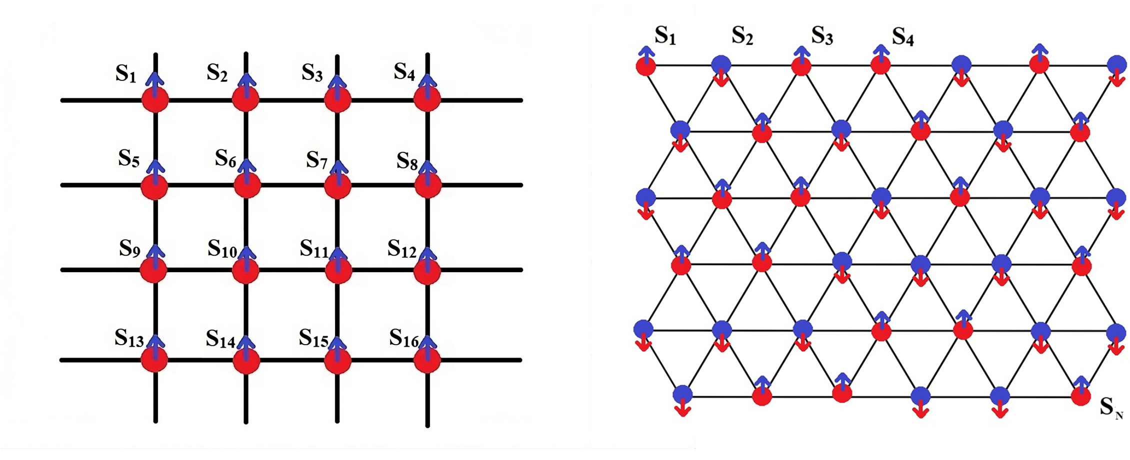
Современные архитектуры машинного обучения, такие как полносвязные нейронные сети, могут предоставить дополнительный подход к идентификации фаз и фазовых переходов в различных системах физики конденсированных сред. Обучение нейронных сетей на наборах данных, полученных методом выборки по методу Монте-Карло, обеспечивает мощную и простую основу для контролируемого изучения фаз и фазовых границ в физических моделях.

Модель и метод

В данной работе в качестве исследуемой системы была выбрана модель Изинга на квадратной решётке. Гамильтониан системы выглядит следующим образом::

$$H = \sum_{i,j}^{N} S_{i,j} \tag{1}$$

Двумерная квадратная решетка спинов Изинга (рисунок 1a) является одной из простых моделей статистической физики, в которой можно наблюдать фазовый переход второго рода. Модель включает сетку узлов, представляющих собой дискретные местоположения в пространстве. На каждом узле размещаются атомы с магнитными моментами. Ключевой особенностью этой модели является возможность направления каждого магнитного момента вверх или вниз, что обусловлено двумя допустимыми состояниями спина: параллельным или антипараллельным внешнему магнитному полю [2].



(a) (b)

Рис. 1: a) Двумерная модель Изинга на квадратной решетке b) Двумерная модель Изинга на треугольной решетке.

Между высокотемпературной парамагнитной и низкотемпературной ферромагнитной фазами существует хорошо изученный переход при температуре $T_c = 2.26934$ [3]. Точный расчет критической температуры является экспоненциально сложной вычислительной задачей в зависимости от размера исследуемой системы, поэтому для решения, как правило, используются приближенные вероятностные методы. В данной работе предложен новый подход к определению критической температуры с помощью алгоритма нейронной сети. Основная идея заключается в классификации конфигураций системы, полученных алгоритмом Метрополиса [4] в температурном диапазоне в области T_c. Для этого была использована полносвязная нейронная сеть (рис. 2), для выполнения контролируемого обучения непосредственно на термализованных и коррелированных конфигурациях, полученных с помощью Монте-Карло моделирования [5, 6].

Нейронная сеть состоит из входного слоя, который принимает данные в виде двумерного массива, представляющего собой корреляционные конфигурации [7], скрытого слоя со 100 нейронами сигмоидальной функцией активации и аналогового выходного слоя (рисунок 2).

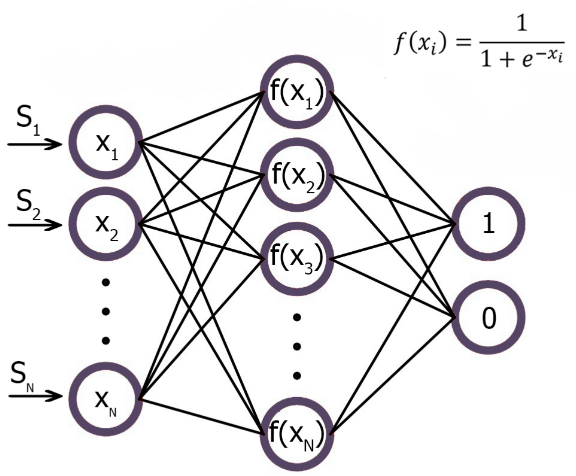


Рис. 2: Архитектура используемой нейронной сети.

Для предотвращения переобучения модели была использована функция, случайным образом выключающая определенный процент нейронов в слое, тем самым исключая возможность их зависимости от определённых нейронов и делая модель более устойчивой к случайным шумам.

Результаты

После обучения нейронной сети на термализованных и коррелированных конфигурациях, нейросетевая модель была протестирована на новых конфигурациях модели Изинга с квадратной решеткой, не участвовавших в обучении. Значение критической температуры, полученное с помощью алгоритма нейронной сети $T_c \approx 2.25$ (рисунок 3) при точности модели $\approx 94\%$.

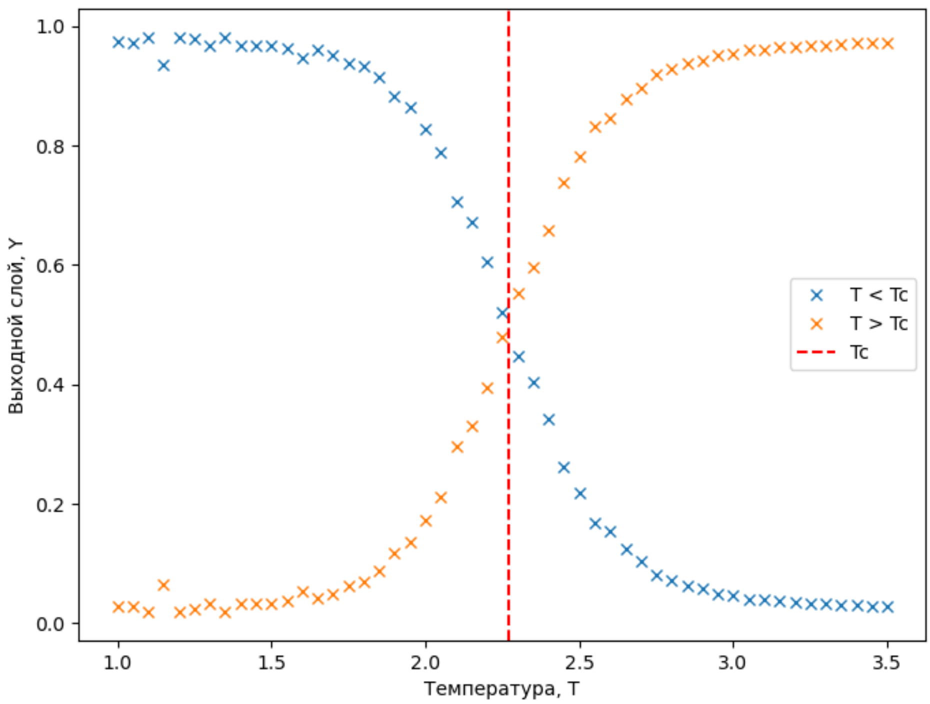


Рис. 3: Классификация фазового состояния в зависимости от температуры для модели Изинга с квадратной решеткой; синие точки - предсказание модели к феромагнитной фазе, оранжевые - к парамагнитной фазе, красный пунктир - точное решение ($T_c = 2.26934$ [3]), решение полученное с помощью алгоритма нейронной сети $T_c \approx 2.25$.

Полученный результат хорошо сходится с известным решением Онзагера[3], что подтверждает корректность работы данного метода. На графике показаны 2 кривые, представляющие собой вероятность принадлежности точки (системы в данной температуре) к ферромагнитной и парамагнитной фазам. Пунктирной линией на графике отмечено точное решение, при котором происходит фазовый переход.

Затем разработанная модель, обучение которой производилось на входных данных конфигураций квадратной решетки, была применена для исследования модели с другой геометрией – треугольной решетки, где каждый узел взаимодействует с 6-ю ближайшими соседями (рисунок 1b). Известное решение для температуры, при которой происходит фазовый переход в модели Изинга на треугольной решетке составляет ≈ 3.6409 [8]. Значение, полученное с помощью алгоритма нейронной сети представлено на рисунке 4.

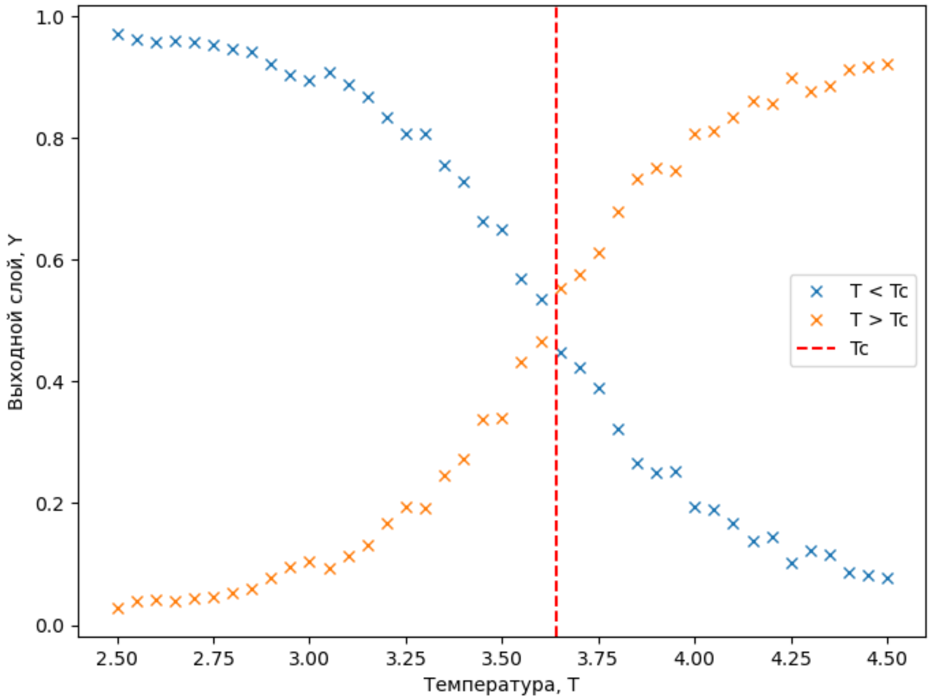


Рис. 4: Классификация фазового состояния в зависимости от температуры для модели Изинга с треугольной решеткой; синие точки - предсказание модели к феромагнитной фазе, оранжевые - к парамагнитной фазе, красный пунктир - точное решение ($T_c = 3.640957$ [8]), решение полученное с помощью алгоритма нейронной сети $T_c \approx 3.59$.

Созданная нейронная сеть также определила переход системы от одной фазы к другой с точностью $\approx 87\%$, значение критической температуры в данном случае получилось $T_c \approx 3.59$, что может говорить об универсальности полученной модели.

Выводы

В результате данного исследования был разработан алгоритм для определения температуры фазового перехода в спиновых моделях с использованием нейронной сети и входного набора данных температурных конфигураций. Результат был сопоставлен с уже существующими известными значениями, полученными с помощью других методов, показав хорошую сходимость. На основании полученных результатов можно утверждать, что разработанный алгоритм определения фазового перехода в спиновых моделях может послужить мощным инструментом для анализа и исследования магнитных систем, состоящих из большого числа взаимодействующих частиц.

В дальнейшем планируется модернизировать архитектуру нейронной сети для возможности обработки дополнительных параметров, таких как связи между узлами решетки. Такой подход позволит учитывать более сложные взаимодействия между частицами, что особенно важно для определения критической температуры в моделях со сложной топологией взаимодействий, к примеру модель Эдварда-Андерсона.

Список литературы

[1] A. W. Sandvik, “Computational studies of quantum spin systems”, *AIP Conference Proceedings*, **1297**, Â 1, American Institute of Physics, 2010, 135–338.
[2] Z. Bian, et al., “The Ising model: teaching an old problem new tricks”, *D-wave systems*, **2**, (2010), 1–32.
[3] L. Onsager, “Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition”, *Physical Review*, **65**:3-4, (1944), 117.
[4] N. Metropolis, et al., “Equation of state calculations by fast computing machines”, *The journal of chemical physics*, **21**:6, (1953), 1087–1092.
[5] M. Abadi, et al., “Tensorflow: Large-scale machine learning on heterogeneous distributed systems”, *arXiv preprint*, 2016, arXiv:1603.04467.
[6] J. Carrasquilla, R. G. Melko, “Machine learning phases of matter”, *Nature Physics*, **13**:5, (2017), 431–434.
[7] K. Shiina, et al., “Machine-learning studies on spin models”, *Scientific reports*, **10**:1, (2020), 2177.
[8] G. F. Newell, “Crystal statistics of a two-dimensional triangular Ising lattice”, *Physical Review*, **79**:5, (1950), 876.

Представлено в Дальневосточный математический журнал 2024 г.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (№ 24-71-10069) https://rscf.ru/project/24-71-10069/

(D. V. Bobrov, K. S. Soldatov) Computation of critical points in two-dimensional spin systems using a neural network algorithm. Far Eastern Mathematical Journal. 2015. V. 15. В 2. P. 0–0.

ABSTRACT

This paper presents an algorithm for determining the phase transition point in spin models using a neural network. The validity of the obtained results is confirmed by comparison with the existing exact solution. The developed algorithm is performed in a time much shorter than the time required to calculate the exact solution and can serve as a powerful tool for analysing and investigating complex spin systems.
Key words: *Ising model, Neural network, Critical Temperature.*