# Exact solution algorithm of $\pm J$ Ising model

Viacheslav Trukhin[a,1,], Elisa Lobanova[a,1,], Alexandr Anisich[a,1,], Konstantin Nefedev[a,1,], Eliza Lobanova[a,1,], Anisich Alexandr[a,1,]

[a] *Far Eastern Federal University, Vladivostok, Russky Island, 10 Ajax Bay, 690922, the Russian Federation*

[b] *Institute of Applied Mathematics, Far Eastern Branch, Russian Academy of Science, Vladivostok, Radio 7, 690041, the Russian Federation*

## Abstract

*Keywords:* Ising model, GPU and CPU high performance calculations, spin ice, spin glass, statistical thermodynamics.

*Email addresses:* `trukhin.vo@dvfu.ru` (Viacheslav Trukhin), `lobanova.eal@dvfu.ru` (Elisa Lobanova), `anisich.ai@dvfu.ru` (Alexandr Anisich), `nefedev.kv@dvfu.ru` (Konstantin Nefedev), `lobanova.eal@dvfu.ru` (Eliza Lobanova), `anisich.ai@dvfu.ru` (Anisich Alexandr)

## Содержание

## Введение

Задача решения больших графов полным перебором является с одной стороны основной проблемой для математических моделей не приближенное решение которых является критичным для прогнозирования и описания реальных событий и экспериментов, с другой стороны может служить отличной мерой эффективности как аппаратного так и программного обеспечения. Работа по оптимизации таких решений активно ведется [1].

В данной работе представлен алгоритм решения планарного графа, представленного в виде плоской квадратной решетки Изинга с обменными интегралами $\pm1$ (уточнение Эдвардса-Андерсена). В первой главе представлены подробности этой модели.

Во второй главе рассматривается математический подход к решению, его преимущества и недостатки.

## 1. Модель Изинга

Простое математическое описание модели Изинга (МИ) делает ее эталоном в теории сложности, так как любая комбинаторная NP-сложная задача может быть сведена к задаче нахождения минимальной энергии в МИ [2]. Например, она эквивалентна таким комбинаторным задачам оптимизации, как задача коммивояжера (TSP) [3] или задача максимального разреза графа (MAX-CUT) [4].

В нашей работе энергия взаимодействия спинов Изинга рассчитывается по формуле

$$E = \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} J_{ij} S_i S_j, \tag{1}$$

где $S_i, S_j = \pm1$ - значения спинов, $J_{ij} = \pm1$ - связь между взаимодействующими спинами в модели Эдвардса-Андерсона. Такую энергию легко распараллелить, считая по отдельности энергии взаимодействия цепочек спинов, а затем отдельно добавляя взаимодействия между спинами отдельных цепочек. Такой метод распараллеливания удобен и для пересчёта магнитного избытка.

## 2. Математический подход

Для статистической суммы есть точное решение как для двумерной [5], так и для трёхмерной [6] моделей. Производными этой функции являются такие параметры системы, как свободная энергия и теплоёмкость. Но такие решения не дают возможности моделировать поведение системы Эдвардса-Андерсона в поле или искать её минимум. Для задачи нахождения минимума есть алгоритмы машинного обучения [7] и квантовый алгоритм адиабатического отжига [8]. Нейронные сети [9] так же позволяют моделировать систему вблизи фазовых переходов, когда стохастические алгоритмы [10] тратят на термолизацию слишком много времени.

Кроме перечисленных выше задач есть задача моделирования системы спинового стекла в поле или при наличии разбавлений. Для разбавлений уже есть эффективный алгоритм [11], сложность которого, при распараллеливании, совпадает со сложностью нашего алгоритма - $(L)$, где $L$ - линейный размер системы спинов Изинга.

Однако у точного решения Онзагера [5] есть и существенное преимущество - на основе него можно говорить о точности других алгоритмов. Поэтому на рис. 1 мы сравниваем точное решение для энергии и намагниченности с теми графиками, которые даёт наш алгоритм.

## 3. Алгоритм

Далее представлен псевдокод, реализованный в последствии на языке CUDA. По ходу выполнения алгоритма система спинов делится на 1D цепи, параллельные друг другу, и постепенно записываются результаты перебора состояний каждой новой цепи. Сначала перебираются все состояния первой цепи и набор параметров GEMC (вырождение-энергия-спиновый избыток-конфигурация спинов в ведущей - последней просчитанной - цепочке) передаётся на $2^L$ потоков. Таким образом каждый перебирает все состояния следующей цепочки только для одного состояния ведущей цепочки). Далее заполняется многомерная матрица G-tensor [config right][E][M][prime number set] с осями под набор конфигураций присоединяемой цепочки, максимальной энергии $\times 2 + 1$, максимального спинового избытка $\times 2 + 1$ и набора простых чисел для записи вырождения, соответственно. В этот тензор в процессе расчёта атомарно добавлялась информация о вырождении по координатам энергии $+E_{max}$ и спинового избытка $+M_{max}$.

Поскольку вырождение состояний с одинаковой энергией и спиновым избытком могут принимать значения от 1 до $\approx 2^N$, где $N$ – размер решетки, то при размерах больше чем $8 \times 8$ вырождения уже не помещаются в целочисленный встроенный тип. Для решения этой проблемы получаемые при решении вырождения разбиваются на простые числа, а после всех расчётов расшифровываются с помощью китайской теоремы об остатках [12].

Вычисление GEM для записи одной конфигурации присоединяемой цепи производилось по формулам:

$$E_\Sigma = E_r + E_l + E_m,$$

$$M_\Sigma = M_r + M_l,$$

$$G[M, E] += G_r,$$

где $E_r, E_l, E_m$ - энергии взаимодействий только спинов правой цепи между собой, только левой и энергия только смежных взаимодействий соответственно (считается, что цепи добавляются справа налево, аналогичные обозначения приняты для спинового избытка и вырождения).

Таким образом, каждый из $2^11$ потоков работает над своей конфигурацией ведущей цепи и обновляет общий для всех потоков G-тензор. Алгоритм обеспецивает неодновременную запись для каждой ячейки.

**Algorithm 1** Calculation density of states by exhaustive search.

**INPUT:** Cell size, exchange integral distribution.
**OUTPUT:** Full density of states.

GPU configuration:
creating massive of configurations 1D chain by bit offset
creating G-tensor [config right][E][M][prime number set]
**for** Number of layer in cell
 **do**
  **for** Each configuration of the outermost layer of the build-up lattice
   **do**
    **for** Each added 1D chain
     **do**
      **for** Each configuration of added 1D chain
       **do**
        Calculate energy and magnetic susceptibility
        Atomic add degeneration of the build-up lattice in G-tensor[configuration of outermost layer][energy][magnetic susceptibility][prime numer coefficients]
      **end for**
    **end for**
  **end for**
**end for**
Deciphering degeneracies from the set of prime numbers
Reformating data from G-tensor to degeneracy, energy, magnetic susceptibility density of states

В таблице 1 представлено сравнение времени выполнения нашего алгоритма перебора с классическими алгоритмами перебора на других языках.

Таблица 1: Сравнение времён, затрачиваемых на полный перебор систем спинов Изинга с помощью различных программных средств (значения указаны в секундах). Словом "CUDA"обозначен наш алгоритм перебора.

| | $3\times3$ | $4\times4$ | $5\times5$ | $6\times6$ | $7\times7$ | $8\times8$ | $9\times9$ | $10\times10$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| один поток Python | 0 | 4.09 | ? | — | — | — | — | — |
| Python + numba | 0 | 0.046 | 66 | — | — | — | — | — |
| один поток на C++ | 0.003 | 0.201 | 204.564 | — | — | — | — | — |
| c++ + OpenMP | ? | ? | 23.443 | — | — | — | — | — |
| CUDA | ? | ? | ? | ? | ? | ? | ? | ? |

## Заключение

Есть определённая топологическая трудность [13] в том чтобы использовать обычные низкотемпературные расширения [12], обычные высокотемпературные расширения [14], пертурбативную группу перенормировки [15] и моделирование Монте-Карло [16] для моделирования 3D-системы спинов Изинга. Кроме того, уже было показано, что 3D-модель не может иметь алгоритмическую сложность меньше $O(2^{mnl})$, где $m$, $n$, $l$ - линейные размеры [17]. Это делает параллельный подход к точному решению наиболее перспективным в рамках точного моделирования.

Наш алгоритм выдаёт уникальные характеристики конфигурации системы, поэтому с помощью них можно точно определять, глобальный ли минимум был найдён с помощью, например, алгоритма Монте-Карло [10] или генетического алгоритма [18]. За счёт него можно вычислить оптимальное количество шагов Метрополиса, необходимых для нахождения глобальных минимумов. На основе характеристик состояний системы, которые выдаёт наш алгоритм, можно классифицировать систему Эдвардса-Андерсона в один из видов магнетиков или смоделировать её поведение в поле.

## Благодарности

## Список литературы

[1] J. Romero, M. Bisson, M. Fatica, M. Bernaschi, High performance implementations of the 2d ising model on gpus, Computer Physics Communications 256 (2020) 107473.

[2] M. LA, Parallel algorithm based on the ising model for solving combinatorial optimization problems, in: Information Technology and Systems 2019, 2019, pp. 350–358.

[3] C. H. Papadimitriou, The euclidean travelling salesman problem is np-complete, Theoretical computer science 4 (3) (1977) 237–244.

[4] R. M. Karp, Reducibility among combinatorial problems, Springer, 2010.

[5] L. Onsager, Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition, Physical Review 65 (3-4) (1944) 117.

[6] Z. ZHANG, Exact solution of ferromagnetic three-dimensional (3d) ising model and spontaneous emerge of time, Acta Metall Sin 59 (4) (2023) 489–501.

[7] A. J. Maren, A logical topology of neural networks, in: Proceedings of the Second Workshop on Neural Networks, 1991.

[8] E. K. Grant, T. S. Humble, Adiabatic quantum computing and quantum annealing, in: Oxford Research Encyclopedia of Physics, 2020.

[9] A. O. Korol, V. Y. Captain, Neural network for determining the curie temperature of the two-dimensional ising model, Far Eastern Mathematical Journal 21 (1) (2021) 51–60.

[10] W. Janke, Monte carlo methods in classical statistical physics, in: Computational many-particle physics, Springer, 2008, pp. 79–140.

[11] Y. L. Loh, E. W. Carlson, Efficient algorithm for random-bond ising models in 2d, Physical review letters 97 (22) (2006) 227205.

[12] V. J. Katz, The Mathematics of Egypt, Mesopotamia, China, India, and Islam: A Sourcebook, Princeton University Press, 2007.

[13] Z. Zhang, Topological effects and critical phenomena in the three-dimensional (3d) ising model, Many-Body Approaches at Different Scales: A Tribute to Norman H. March on the Occasion of his 90th Birthday (2018) 331–343.

[14] Z.-D. Zhang, Mathematical structure of the three-dimensional (3d) ising model, Chinese Physics B 22 (3) (2013) 030513.

[15] Z. ZHANG, Mathematical structure and the conjectured exact solution of threedimensional (3d) ising model, Acta Metall Sin 52 (10) (2016) 1311–1325.

[16] Z. Zhang, The nature of three dimensions: Non-local behavior in the three-dimensional (3d) ising model, in: Journal of Physics: Conference Series, Vol. 827, IOP Publishing, 2017, p. 012001.

[17] Z. Zhang, Computational complexity of spin-glass three-dimensional (3d) ising model, Journal of Materials Science & Technology 44 (2020) 116–120.

[18] T. V. Panchenko, Y. Y. Tarasevich, Comparative analysis of the efficiency of application of genetic algorithms and metropolis algorithm in problems of solid state physics, computational methods and programming 8 (2007) 77–87.