Вычисление основных состояний спиновых стекол с использованием ограниченной машины Больцмана

А. О. Король^{+*}, В. Ю. Капитан^{+*1)}, А. В. Пержу⁺, М. А. Падалко^{+*}, Д. Ю. Капитан^{+*}, Р. А. Волотовский^{+*}, Е. В. Васильев^{+*}, А. Е. Рыбин^{+*}, П. А. Овчинников⁺, П. Д. Андрющенко[×], А. Г. Макаров^{+*}, Ю. А. Шевченко^{+*}, И. Г. Ильюшин⁺, К. С. Солдатов^{+*}

+Дальневосточный федеральный университет, 690922 Владивосток, Россия

*Институт прикладной математики Дальневосточного отделения РАН, 690041 Владивосток, Россия

× Университет ИТМО, 197101 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 21 февраля 2022 г. После переработки 17 марта 2022 г. Принята к публикации 17 марта 2022 г.

В работе представлен нейросетевой метод вычисления конфигураций и значений энергий основных состояний модели спинового стекла Эдвардса–Андерсона с периодическими граничными условиями. Наблюдается макроскопическое вырождение основных состояний и нарушение трансляционной симметрии. Достоверность результатов подтверждается сравнением с данными точных и приближенных вычислительных методов.

DOI: 10.31857/S1234567822080079

Введение. Спиновое стекло характеризуется наличием беспорядка и фрустрации, которые возникают из-за равного количества положительных и отрицательных взаимодействий в системе [1]. Понятие фрустрации определяется как невозможность удовлетворения всех совокупных взаимодействий в системе из-за конкуренции между ними [2]. Решение задач минимизации энергии и вычисления конфигураций основного состояния в моделях спинового стекла связано с серьезными трудностями теоретического анализа и численных расчетов. Эти задачи относятся к классу недетерминистически полиномиальных задач (NP-класс) [3]. По этим причинам создание эффективных алгоритмов для вычисления низкоэнергетических состояний является одной из определяющих проблем в теории фрустрированного магнетизма.

Методы Монте-Карло – группа математических методов вероятностного расчета для исследования интегральных характеристик систем. Данные методы позволяют исследовать системы взаимодействующих многих тел, для которых невозможно выполнить генерацию конфигураций, обладающих минимальной энергией, из-за сложности и размера пространства состояний, поэтому используют приближенные методы [4]. Монте-Карло алгоритмы не только давно и широко используются для исследования различных физических систем [5–9], но и продолжают активно развиваться и совершенствоваться [10–13], благодаря развитию вычислительной техники.

Несмотря на то, что методы Монте-Карло являются часто используемыми инструментами при исследовании классических систем, вблизи критических точек эффективность резко снижается и возникает так называемое "критическое замедление", и движение системы в фазовом пространстве становится очень медленным. Одним из алгоритмов, позволяющих преодолеть критическое замедление, является гибридный мультиспиновый метод, который был представлен и подробно описан в работе [12].

В последнее время в физике начали применяться новые вычислительные подходы, такие как машинное обучение и нейронные сети [14, 15]. Можно выделить два основных подхода к применению нейронных сетей для исследования спиновых систем. Первый подход является альтернативой исследованию термодинамических средних физических величин, когда изучение спиновых конфигураций состоит в классификации неупорядоченных и упорядоченных фаз с использованием алгоритмов машинного обучения. Использование такого подхода сводит проблему определения фаз и фазового перехода к задаче классификации [16–19].

¹⁾e-mail: kapitan.vyu@dvfu.ru

Второй подход заключается в использовании нейронных сетей, например, машины Больцмана [20–22] или авторегрессионной нейронной сети [23] для предсказания спиновых конфигураций с наименьшей энергией.

В данной работе была рассмотрена модель спинового стекла Эдвардса–Андерсона [24] на квадратной решетке спинов Изинга с бимодальным распределением связей и периодическими граничными условиями. Для численных расчетов использовалась комбинация гибридного мультиспинового метода (от англ. Hybrid Multispin Method (HMM)) [12] и ограниченной машины Больцмана (от англ. Restricted Boltzmann Machine (RBM)) для предсказания основных энергетических состояний в модели спинового стекла Эдвардса–Андерсона.

Для вычисления основных состояний мы использовали данные гибридного мультиспинового метода для обучения нейронной сети и прогнозирования состояния спинового стекла с более низким уровнем энергии, чем в наборах обучающих данных. На примере небольших спиновых систем (4×4 и 6×6) были проверены результаты работы нейронной сети и проведено сравнение с результатами точного решения, рассчитанного методом исчерпывающего перечисления (от англ. Exhaustive Enumeration Method (EEM)). Также для проверки был использован алгоритм, основанный на методе трансфер-матриц (от англ. Transfer-Matrix Method (TMM)) [25, 26] для систем до 20×20 спинов Изинга.

Модель спинового стекла Эдвардса– Андерсона. Эдвардс и Андерсон в 1975 г. в работе [24] предложили модель спинового стекла из $L \times L$ спинов Изинга $S_i = \pm 1$, расположенных в узлах квадратной решетки, с линейным размером L, периодическими граничными условиями и Гамильтонианом:

$$H = -\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij} S_i S_j,\tag{1}$$

где S_i, S_j – спины Изинга в решетке, $\langle i, j \rangle$ означает, что суммирование идет только по ближайшим спинам; J_{ij} – связь между ближайшими соседними спинами i и j. Важно отметить, что перед началом расчетов определяются все связи, и после этого они остаются неизменными до конца исследования.

Одной из основных характеристик спинового стекла является длительное время релаксации. При низких температурах релаксация системы становится медленной, и трудно достичь равновесия даже для систем небольшого количества частиц, в том числе в численных экспериментах, поэтому применяются различные модификации приближенных методов [27].

Ограниченная машина Больцмана. Ограниченная машина Больцмана – это стохастическая, генеративная модель нейронной сети, которая использует идею "энергии" в качестве метрики для измерения качества обучения [21].

Как видно на рис. 1, ограниченная машина Больцмана состоит из одного видимого слоя нейронов (v_1, \ldots, v_n) , одного скрытого слоя (h_1, \ldots, h_m) и соответствующих коэффициентов смещения a и b.



Рис. 1. (Цветной онлайн) Архитектура ограниченной машины Больцмана

Связи между слоями задаются с помощью матрицы весов $W = (w_{i,j})$ размера $m \times n$ и коэффициентов смещения a и b.

Изначально связи и коэффициенты смещения инициализируются случайными значениями. В процессе обучения они меняются по алгоритму, описанному ниже. Входными данными для нейронной сети являются конфигурации спинового стекла и количество нейронов видимого слоя соответствует количеству спинов. Для обучения сети используются прямой (от видимого слоя к скрытому) и обратный (от скрытого слоя к видимому) проходы по нейронам.

В первую эпоху обучения на видимый слой сети подаются входные данные v^0 . При прямом проходе нейроны видимого слоя обрабатывают эти данные и передают результат нейронам скрытого слоя h^0 :

$$h^0 \sim p(h|v^0) \to p(h_j = 1|\mathbf{v}) = \tag{2}$$

$$\sigma\left(b_j + \sum_{i=1}^m w_{i,j} v_i\right),\tag{3}$$

где
 σ – сигмоидная функция активации.

При обратном проходе обработанные в скрытом слое данные подаются обратно на видимый слой v^1 :

$$v^{1} \sim p(v|h^{0}) \rightarrow p(v_{i} = 1|\mathbf{h}) = \sigma\left(a_{i} + \sum_{j=1}^{n} w_{i,j}h_{j}\right).$$
(4)

Для контроля переобучения сети сравниваются величины свободной энергии видимого слоя F(v) до прямого и обратного проходов и после них [28]:

$$F(v) = -\sum_{i} v_{i} a_{i} - \sum_{j} \log(1 + e^{x_{j}}), \qquad (5)$$

$$\mathcal{L} = \sum_{v^1} F(v^1) - \sum_{v^0} F(v^0), \tag{6}$$

где $x_j = b_j + \sum_i v_i w_i$ – входные данные для скрытого нейрона j, \mathcal{L} – функция потерь (от англ. Loss Function).

Если модель не переобучается – значение функции потерь \mathcal{L} должно быть примерно равно нулю. В противном случае – средняя свободная энергия видимого слоя увеличивается после прямого и обратного проходов и эта разница представляет собой величину переобучения. На рисунке 2 представлены значения функции потерь \mathcal{L} в зависимости от номера эпохи обучения для систем различного числа спинов.



Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость значения функции потерь при обучении от порядкового номера эпохи

Далее обновляются значения весов и коэффициенты смещения:

$$\Delta W = v^0 [p(h=1|v^0)]^T - v^1 [p(h=1|v^1)]^T, \quad (7)$$

$$\Delta a = v^0 - v^1, \tag{8}$$

$$\Delta b = p(h = 1|v^0) - p(h = 1|v^1), \tag{9}$$

$$W = W + \alpha \Delta W, \tag{10}$$

$$a = a + \alpha \Delta a, \tag{11}$$

$$b = b + \alpha \Delta b, \tag{12}$$

где α – скорость обучения.

Описанный выше способ обучения сети называется алгоритмом контрастной дивергенции с выборкой по Гиббсу [29].

Нейросеть не различает связи и спины, поэтому для обучения используются только спины, значения которых масштабируются в диапазоне $[0;1](-1 \rightarrow 0, 1 \rightarrow 1)$. Решетка спинов представляется в виде бинарного одномерного массива длины $L \times L$ (где L – размер системы) и подается на вход сети.

Результаты и обсуждение. Для обучения нейронной сети и подтверждения результатов, методом исчерпывающего перечисления были сгенерированы системы спиновых стекол 4×4 и 6×6 спинов с бимодальным распределением связей J_{ij} . Для обучения выбирались 400 конфигураций из выбранных диапазонов энергий на один спин [1.5; 1.0] и [-0.5; -0.75] для системы 4×4 , [1.33; 1.22] и [-0.67; -0.89] для системы 6×6 . Это было сделано с целью независимого сравнения полученных результатов ограниченной машины Больцмана для каждой системы. Примеры систем для обучения 4×4 (E = -0.5) и 6×6 (E = -0.89) показаны на рис. 3. Для численных расчетов использовались безразмерные величины в |J|единицах.



Рис. 3. (Цветной онлайн) Примеры систем для обучения: (a) -4×4 (E = -0.5); (b) -6×6 (E = -0.89) с заданным бимодальным распределением связей. Цвет спинов (круг) или связей (ромб) зависит от координаты z между спином вниз S = -1 или J = -1 (синий) и вверх S = +1 или J = 1 (оранжевый)

Исследование систем относительно небольшого числа спинов 4 × 4, 6 × 6 с помощью метода исчерпывающего перечисления позволило получить точные решения. Энергии и конфигурации основных состояний систем относительно большого числа спинов были рассчитаны методами гибридного Монте-Карло и трансфер-матриц, см. табл. 1.

	EEM	TMM	HMM	RBM
Количество спинов	E_{\min}	E_{\min}	E_{\min}	E_{\min}
4×4	-1.5	-1.5	_	-1.5
6 imes 6	-1.3	-1.3	_	-1.3
10×10	—	-1.4	-1.4	-1.4
20×20	—	-1.38	-1.34	-1.38
30×30	_	_	-1.334	-1.342

Таблица 1. Сравнение результатов, полученных различными вычислительными подходами

Различные вычислительные методы показали одинаковые результаты для системы 4×4 : минимальная энергия составила $E_{\min} = -1.5$, кратность вырождения 14, половина конфигураций является антисимметричной, см. рис. 4.



Рис. 4. (а) – Пример системы для обучения: 4 \times 4, (E=-0.5) с заданным бимодальным распределением связей; (b)–(h) – основные состояния системы 4 \times 4 при данном распределении связей

При исследовании системы 6 × 6 с помощью метода исчерпывающего перечисления вычислены $E_{\min} = -1.3$, 184-х кратное вырождение основного состояния. Результаты ограниченной машины Больцмана: $E_{\min} = -1.3$, 138-ми кратное вырождение основного состояния, что несколько меньше, чем в точном решении. 6 × 6 – максимальное количество спинов для расчета методом исчерпывающего перечисления; системы относительно большого числа частиц изучались гибридным Монте-Карло методом и методом трансфер-матриц. Метод исчерпывающего перечисления позволяет получить все основные состояния, метод трансфер-матриц вычисляет конфигурации этих состояний для систем меньше, чем 12×12 , а для систем до 20×20 спинов он позволяет рассчитывать только значения минимальной энергии. В свою очередь, методы Монте-Карло, в силу вероятностной специфики, позволяют вычислять лишь малую часть вырожденных основных состояний и не всегда достигают минимума, поэтому для решения такого класса задач актуально применение нейросетевых алгоритмов как перспективного вычислительного подхода.

Для численных расчетов систем относительно большого числа частиц ограниченная машина Больцмана вычислила конфигурации с меньшей энергией, чем гибридное Монте-Карло для 20 × 20 и 30 × 30, и достигла минимума, который был рассчитан методом трансфер-матриц, см. табл. 1. Также нейронная сеть позволяет вычислять не только отдельные конфигурации в минимуме энергии, но и изучать грубый энергетический ландшафт вырожденных основных состояний спиновых стекол. На примере системы 30×30 спинов было выявлено, что в найденных низкоэнергетических конфигурациях невозможно выделить элементарную ячейку спинов, трансляция которой позволила бы получить такие состояния. В рамках данного исследования ограниченная машина Больцмана показала более высокую точность по сравнению с оптимизированным алгоритмом гибридного Монте-Карло.

Заключение. Нами было показано, что основные состояния систем спинового стекла можно вычислять нейросетевыми методами. Работоспособность ограниченной машины Больцмана проверена точными и приближенными вычислительными методами, которые позволили подтвердить достоверность полученных результатов. Точно вычислена кратность вырождения основных состояний, их энергия и конфигурации для систем с относительно малым числом спинов, для систем с относительно большим числом спинов вычислены значения минимальной энергии и некоторые соответствующие ей конфигурации с разным спиновым избытком.

На основании этих результатов, с одной стороны, можно сделать вывод, что нейронные сети уже являются полезными инструментами для решения задач, связанных с изучением сложных спиновых систем и позволяют значительно улучшить результаты теоретических исследований, проводимых обычными вычислительными методами. С другой стороны, мы столкнулись с проблемой определения числа вырождений основного энергетического уровня из-за отсутствия точных решений для больших систем и, как следствие, невозможностью проверки, смогли ли используемые приближенные вычислительные методы достичь глобального энергетического минимума.

Авторы выражают благодарность проф. К.В.Нефедеву и проф. В.И.Белоконю за советы при планировании исследования и ценные замечания при работе над данной статьей.

Исследование фрустрированных магнитных систем с применением ограниченной машины Больцмана выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 21-72-00058. Развитие гибридного мультиспинового метода ведется в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ # 0657-2020-0005. Исследования методом трансфер-матриц проведены при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки ведущих научных школ Российской Федерации # НШ-2559.2022.1.2.

Для проведения численных расчетов были использованы вычислительные ресурсы ДВФУ.

- P. Nordblad, Disordered Magnetic Systems, Encyclopedia of condensed matter physics, ed. by
 F. Bassani, G.L. Liedl, and P. Wyder, Elsevier, Amsterdam (2005), p. 452.
- M. J. Harris, S. T. Bramwell, D. F. McMorrow, T. H. Zeiske, and K. W. Godfrey, Phys. Rev. Lett. 79, 2554 (1997).
- 3. A. Lucas, Front. Phys. 2, 5 (2014).
- D. Landau and K. Binder, A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics, Cambridge University press, Cambridge (2003).
- V.I. Belokon, V.Y. Kapitan, and O.I. Dyachenko, J. Phys. Conf. Ser. 490, 012165 (2014).
- V. V. Prudnikov, P. V. Prudnikov, A. N. Purtov, and M. V. Mamonova, JETP Lett. **104** 776 (2016).
- 7. M. Žukovič, Phys. Lett. A 404, 127405, (2021).
- M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, M. A. Magomedov, and M. K. Mazagaeva, JETP Lett. **114**, 693 (2021).
- K. Makarova, V. Strongin, Iu. Titovets, A. Syrov, I. Zinchenko, V. Samoylov, K. Hofhuis, M. Saccone, A. Makarov, A. Farhan, and K. Nefedev, Phys. Rev. E 103, 042129 (2021).
- K.S. Soldatov, K.V. Nefedev, V.Yu. Kapitan, and P.D. Andriushchenko, J. Phys. Conf. Ser. 741, 012199 (2016).
- Yu. A. Shevchenko, A. G. Makarov, P. D. Andriushchenko, and K. V. Nefedev, JETP **124**, 982 (2017).

- A.G. Makarov, K.V. Makarova, Yu.A. Shevchenko, P.D. Andriushchenko, V.Yu. Kapitan, K.S. Soldatov, A.V. Perzhu, A.E. Rybin, D.Yu. Kapitan, E.V. Vasil'ev, R.A. Volotovskii, Yu.V. Chubov, and K.V. Nefedev, JETP Lett. **110**, 702 (2019).
- P. Mali, S. Radošević, P. Rakić, L. Stričević, M. Pavkov-Hrvojević, and M. Pantić, Chin. J. Phys. 59, 35 (2019).
- K. T. Butler, D. W. Davies, H. Cartwright, O. Isayev, and A. Walsh, Nature 559, 547 (2018).
- G. Carleo, I. Cirac, K. Cranmer, L. Daudet, M. Schuld, N. Tishby, L. Vogt-Maranto, and L. Zdeborová, Rev. Mod. Phys. **91**, 045002 (2019).
- J. Carrasquilla and R.G. Melko, Nat. Phys. 13, 431 (2017).
- P. Suchsland and S. Wessel, Phys. Rev. B 97, 174435 (2018).
- K. Shiina, H. Mori, Y. Okabe, and H. K. Lee, Sci. Rep. 10, 1 (2020).
- V. Kapitan, E. Vasiliev, A. Perzhu, D. Kapitan, A. Rybin, A. Korol, K. Soldatov, and Yu. Shevchenko, AIP Adv. 11, 015041 (2021).
- D. H. Ackley, G. E. Hinton, and T. J. Sejnowski, Cogn. Sci. 9, 147 (1985).
- G. Torlai and R. G. Melko, Phys. Rev. B 94, 165134 (2016).
- 22. L. Huang and L. Wang, Phys. Rev. B 95, 035105 (2017).
- B. McNaughton, M.V. Milosevic, A. Perali, and S. Pilati, Phys. Rev. E 101, 053312 (2020).
- S. F. Edwards and P. W. Anderson, Journal of Physics F: Metal Physics 5, 965 (1975).
- 25. B. Kaufman, Phys. Rev. 76, 1232 (1949).
- M. A. Padalko, Yu. A. Shevchenko, V. Yu. Kapitan, and K. V. Nefedev, Algorithms 15, 13 (2022).
- D. Kapitan, A. Rybin, P. Andriushchenko, V. Kapitan,
 E. Vasiliev, and K. Nefedev, Solid State Phenomena 312, 251 (2020).
- R. Salakhutdinov, A. Mnih, and G. Hinton, Proceedings of the 24th International Conference on Machine Learning (2007), p.791.
- 29. G.E. Hinton, Neural Comput. 14, 1771 (2002).