

Классификация фазовых состояний модели Изинга с помощью графовой нейронной сети

П. А. Овчинников, З. А. Московченко, М. Э. Дуранова, К. С. Солдатов¹⁾

*Институт наукоемких технологий и передовых материалов, Дальневосточный федеральный университет,
690922 Владивосток, Россия*

Институт прикладной математики, Дальневосточное отделение РАН, 690041 Владивосток, Россия

Поступила в редакцию 4 мая 2026 г.

После переработки 8 июня 2026 г.

Принята к публикации 16 июня 2026 г.

Разработан подход на основе графовой нейронной сети для распознавания фазовых состояний и оценки критической температуры конечноразмерных систем в рамках модели Изинга. Преимуществом нового подхода является явное задание геометрии решетки и структуры связей с помощью графа. Это позволяет в единой постановке задавать на вход нейронной сети равновесные спиновые конфигурации решеток различных пространственных размерностей и геометрий. Метод был применен для семи различных решеток: двумерной квадратной, треугольной, гексагональной и двумерной решетки Апамея, а также трехмерных – простой кубической, объемноцентрированной и гранецентрированной кубической решеток. Показано, что путем пересечения выхода нейронной сети с уровнем $1/2$ извлекается значение критической температуры. Подача на вход графовой нейронной сети малой выборки равновесных конфигураций позволяет достичь средней абсолютной ошибки 9.7×10^{-3} относительно референсного значения T_c^{ref} . Для решетки Апамея проведен дополнительный скейлинговый анализ, результаты которого показали, что нейросетевая оценка критической температуры согласуется с точкой пересечения кривых кумулянта Биндера для систем различных размеров.

DOI: 10.7868/S3034576626070166

Введение. Определение точки фазового перехода по данным скейлинговых расчетов остается одной из ключевых задач вычислительной статистической физики [1, 2]. Для классических двумерных решеток методы Монте-Карло и размерного скейлинга хорошо отработаны, однако при переходе к геометрически неоднородным или трехмерным типам решеток этих методов может быть недостаточно.

Методы машинного обучения, в которых информация о типе фазы извлекается непосредственно из равновесных спиновых конфигураций, стали естественным развитием существующих вычислительных методов [3, 4]. Интересные результаты по исследованию природы фазовых переходов были получены с помощью переобучения нейронной сети на намеренно неправильно размеченных данных [5], также была показана связность нейросетевого выхода с физически интерпретируемыми характеристиками и размерным скейлингом [6, 7]. Эти идеи и подходы затем применялись к фрустрированным решеткам, а также к трехмерным моделям [8–13]. Современное состояние методов машинного обучения в физике фа-

зовых переходов подробно обсуждается в обзорной работе [14].

Для двумерных моделей представление геометрических конфигураций в виде матриц или изображений часто оказывается достаточно эффективным для обработки. Так, в [15] нами был разработан сверточный нейросетевой классификатор фазовых состояний для квадратной, треугольной, гексагональной и кагоме-решеток, где геометрия кодировалась матрицей фиксированного размера с маской занятых узлов. Результаты показали, что фазовая кривая, построенная по выходу классификатора, действительно, может использоваться как рабочий инструмент для определения критической области. Вместе с тем, у такого подхода имеется естественное ограничение: для каждой новой геометрии решетки приходится специально конструировать способ укладки данных входных конфигураций. Сравнение этих двух подходов показывает, что сверточная архитектура является удобным инструментом в тех случаях, когда конфигурация может быть представлена в виде матрицы, а локальные связи решетки согласуются с соседством элементов этой матрицы [16]. В этом случае сверточные фильтры эффективно извлекают локаль-

¹⁾e-mail: soldatov_ks@dvvu.ru

ные пространственные корреляции. Однако при переходе к решеткам усложненной геометрии, переменного числа узлов или иной пространственной размерности такое представление становится менее универсальным: требуется либо специальная укладка, либо отдельное преобразование данных для каждой новой геометрии решетки. Также вычислительные проблемы возникают при попытке исследовать решетки нерегулярных геометрий или решетки систем спинового стекла с неоднородным распределением связей. Графовая архитектура снимает это ограничение, поскольку использует в качестве входа сам граф ближайших соседей. При обучении модели одни и те же графовые слои с общими параметрами применяются ко всем узлам и ребрам независимо от размера графа, а последующая агрегация по узлам формирует представление фиксированной размерности. В качестве примера системы со сложной геометрией в работе рассматривалась решетка Апамея [17].

Целью данной работы было разработать подход, заключающийся в представлении геометрии решетки в виде графа: узлы соответствуют спинам, а ребра задают взаимодействия ближайших соседей. Такое представление позволяет в единой схеме численного эксперимента рассматривать как регулярные двумерные типы решеток, так и решетки более сложной геометрии и пространственной размерности. Как и в конфигурационных классификаторах фаз [4, 5, 15], критическая температура определяется по температурной зависимости усредненной вероятности принадлежности конфигурации к ферромагнитной фазе.

Модель Изинга и референсное значение T_c . При расчетах рассматривалась ферромагнитная модель Изинга с взаимодействием ближайших соседей на фиксированном графе решетки $G = (V, E)$ с периодическими граничными условиями. Рассмотрим ферромагнитный случай $J > 0$. Каждому узлу графа сопоставляется спин Изинга $S_i = \pm 1$, гамильтониан имеет вид

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j, \quad (1)$$

где суммирование проводится по всем парам ближайших соседей.

В качестве референсной величины при оценке точности работы нейронной сети для каждой конечно-размерной системы использовалось такое значение температуры T_c^{ref} , соответствующее максимуму магнитной восприимчивости $\chi(T)$.

С помощью кластерного алгоритма Свендсена–Ванга [18] для каждого значения температуры бы-

ла выполнена генерация равновесных спиновых конфигураций, а также произведен расчет намагниченности

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i, \quad (2)$$

и магнитной восприимчивости

$$\chi(T) = N \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{T}. \quad (3)$$

Для каждой температуры перед сохранением данных выполнялось 8×10^3 кластерных шагов отжига для всех двумерных решеток, кроме решетки Апамея. Для решетки Апамея термализация составляла 10^4 кластерных шагов. Для трехмерных решеток термализация составляла 2×10^4 полных кластерных шагов алгоритма Свендсена–Ванга. После термализации сохранялись только конфигурации, разделенные дополнительными шагами декорреляции. Вне критической области между двумя сохраняемыми конфигурациями выполнялось 10 кластерных шагов для двумерных систем (12 для решетки Апамея) и 20 кластерных шагов для трехмерных систем. В окрестности ожидаемой критической температуры, где флуктуации и автокорреляции возрастают, интервал между сохраняемыми конфигурациями увеличивался до 48 кластерных шагов для двумерных систем (56 для решетки Апамея) и 128 кластерных шагов для трехмерных решеток. Полным кластерным шагом является одно обновление всей спиновой конфигурации в рамках кластерного алгоритма Свендсена–Ванга.

Состав набора данных и протокол тестирования. Набор обучающих данных включает в себя спиновые конфигурации семи типов решеток разных линейных размеров L . Для двумерных решеток каждой температуре соответствует 4096 спиновых конфигураций, для трехмерных – 6144 конфигураций. Для трехмерных решеток выбрано большее число конфигураций, поскольку в них сильнее проявляется влияние конечного размера системы, и увеличенная выборка уменьшает статистические отклонения как в рассчитываемых термодинамических кривых, так и в нейросетевой фазовой кривой. Подробное описание набора данных приведено в табл. 1.

Для проверки универсальности модели при обучении один тип решетки полностью исключался из обучающего набора данных и использовался только для тестирования. Тем самым проверялась не интерполяция по размерам внутри уже известной геометрии, а способность классификатора распознавать фазы систем, отличающихся размерностью, координ-

Таблица 1. Состав основного набора данных

Lattice type	Linear sizes L	Number of temperatures	Number of configurations per temperature	T_c^{ref} for each linear size L respectively	Temperature range T
Square	$32 \times 32, 48 \times 48, 56 \times 56$	125	4096	2.330, 2.315, 2.300	1.00–5.02
Triangular	$32 \times 32, 48 \times 48, 56 \times 56$	134	4096	3.730, 3.715, 3.700	1.00–5.02
Hexagonal	$22 \times 22, 34 \times 34, 42 \times 42$	173	4096	1.560, 1.5475, 1.545	1.00–2.20
Apamea	$10 \times 10, 12 \times 12, 14 \times 14$	138	4096	0.975, 0.970, 0.967	0.25–3.49
Body-centered cubic	$5 \times 5 \times 5, 6 \times 6 \times 6,$ $7 \times 7 \times 7, 8 \times 8 \times 8,$ $10 \times 10 \times 10$	121	6144	6.265, 6.330, 6.330, 6.335, 6.350	5.20–7.40
Face-centered cubic	$4 \times 4 \times 4, 5 \times 5 \times 5,$ $6 \times 6 \times 6, 7 \times 7 \times 7,$ $8 \times 8 \times 8$	162	6144	9.740, 9.740, 9.760, 9.760, 9.770	8.20–10.80
Simple cubic	$6 \times 6 \times 6, 8 \times 8 \times 8,$ $10 \times 10 \times 10, 12 \times 12 \times 12,$ $14 \times 14 \times 14$	118	6144	4.445, 4.495, 4.500, 4.505, 4.510	3.50–5.40

Таблица 2. Ключевые параметры графового нейросетевого классификатора фазовых состояний

Input	Lattice graph + set of spin configurations at fixed temperature T
Input batch size	$b = 16$ equilibrium configurations in the main variant; the case $b = 1$ was additionally studied
Node features	$s_i = \pm 1$
Edge features	$(\Delta x_{ij}, \Delta y_{ij}, \Delta z_{ij}, r_{ij})$: normalized direction vector of the bond, where r_{ij} is the edge length
Initial node embedding	Dense(64) + ReLU
Graph blocks	4 residual message-passing graph blocks
Block structure	Two consecutive graph layers with summation of messages over edges
Normalization	Layer Normalization after each graph layer
Dropout	$p = 0.1$
Node aggregation	Global Average Pooling + Global Max Pooling
Configuration aggregation	Global Average Pooling + Global Max Pooling
Hidden representation size	64
Output	Dense(1) + Sigmoid: $P_{\text{ord}}(B^{(T)})$
Loss function	Binary cross-entropy
Optimization	Adam, learning rate 3×10^{-4}
Training regime	12 epochs, batch size 8, 256 steps per epoch
Temperature labeling	Ordered/disordered with respect to T_c^{ref} excluding the vicinity of the $\chi(T)$ maximum

национным числом и локальной структурой ближайших соседей.

При обучении ближайшие точки в диапазоне 10^{-2} около T_c^{ref} не использовались для задания фазовых меток. Это было сделано для исключения влияния критической области на процесс обучения.

Архитектура графовой нейронной сети. Получив на вход набор спиновых конфигураций для каждой температуры, классификатор предсказывает вероятность упорядоченной фазы. В отличие от сверточных моделей с двумерной укладкой спиновой конфигурации на входе нейронной сети, в настоящей работе геометрия решетки задается через граф ближайших соседей. Ключевые параметры графовой

нейронной сети и особенности ее архитектуры приведены в табл. 2.

Каждая конфигурация спинов рассматривается как сигнал на фиксированном графе решетки. Узлам графа соответствуют значения $s_i = \pm 1$, а ориентированные ребра характеризуются четырьмя геометрическими признаками: тремя компонентами нормированного вектора, задающего направление связи между ближайшими соседями $(\Delta x_{ij}, \Delta y_{ij}, \Delta z_{ij})$, и длиной ребра r_{ij} . Значение температуры T в саму нейронную сеть как отдельный признак не подается.

В режиме предсказания для каждой температуры T на вход сети подается набор из b равновесных конфигураций той же решетки, сгенерирован-

ных при этой температуре. Кроме значений спинов, списка ребер и признаков ребер, в наборе передаются индексы принадлежности узлов к отдельным графам и графов к температурному набору.

Архитектура сети содержит два уровня агрегации. Сперва каждая отдельная конфигурация из набора при фиксированной температуре кодируется графовыми слоями. Затем по узлам вычисляются среднее и максимум, что дает векторное представление одной конфигурации. После этого аналогичная агрегация выполняется уже по множеству конфигураций, относящихся к одной температуре, и из полученного представления предсказывается вероятность упорядоченной фазы. В каждом эксперименте обучается одна нейронная сеть с общими весами для всех обучающих семейств и размеров. Отдельные сети для разных размеров решетки не обучаются.

Подача на вход нейронной сети малой выборки конфигураций. В существующих исследованиях по применению методов машинного обучения в спиновых системах на вход, как правило, подается одна спиновая конфигурация [4, 9, 13]. В нашей работе был проведен дополнительный эксперимент. Благодаря графовой архитектуре появляется возможность передачи на вход малой выборки (16 штук) спиновых конфигураций. Сравнительные результаты между подачей одной конфигурации и такой малой выборки приведены в табл. 3.

Таблица 3. Сравнение входа по одной конфигурации и по малой выборке конфигураций. Приведены характерные значения $|\hat{T}_c - T_c^{\text{ref}}|$, полученные при одинаковом протоколе обучения

Lattice type	MAE_f with input $b = 1$	MAE_f with input $b = 16$
Apamea	0.334	0.0049
Body-centered cubic	0.061	0.0153
Face-centered cubic	0.241	0.0168

Наблюдать видимые изменения температурной фазовой кривой, получаемой на выходе нейронной сети при переходе от подачи на вход одной конфигурации $b = 1$ к подаче малой выборки $b = 16$, можно на рис. 1.

Во всех протестированных случаях переход от подачи одной конфигурации к подаче малой равновесной выборки приводит к заметному уменьшению величины отклонения от референсного значения критической температуры. Наиболее сильный эффект наблюдается для решетки Апамея и гранецентрированной кубической решетки; для объемноцентрированной кубической решетки улучшение точности также остается отчетливым. Поэтому в рас-

сматриваемой схеме число конфигураций, формирующих входной объект при фиксированной температуре, следует рассматривать как содержательный параметр метода.

Для решетки Апамея дополнительно были рассчитаны температурные зависимости кумулянта Биндера 4-го порядка [1] для систем линейных размеров L : 10×10 , 12×12 , 14×14 .

$$U_4(T, L) = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2}. \quad (4)$$

Точка пересечения кривых кумулянта Биндера для систем различных линейных размеров $T_{\text{Binder}} \approx 0.9525$ хорошо согласуется с оценкой критической температуры, полученной методом графовой нейронной сети, на вход которой подается малая выборка конфигураций, как показано на рис. 1.

Оценка результатов. Для оценки точности работы нейронной сети, для каждого эксперимента вычислялась средняя абсолютная ошибка

$$MAE_f = \frac{1}{2n_f} \sum_{r=1}^2 \sum_{k=1}^{n_f} |\hat{T}_{c,fk}^{(r)} - T_{c,fk}^{\text{ref}}|, \quad (5)$$

где f – тип геометрии, исключенной из обучающих данных, n_f – число исключенных систем, а r – независимые запуски обучения. В таблице 4 приведены значения MAE_f .

Таблица 4. Средняя абсолютная ошибка $|\hat{T}_c - T_c^{\text{ref}}|$ в режиме полного исключения одного типа решеток из обучения

Lattice geometry type f	MAE_f
Apamea	0.0049
Hexagonal	0.0022
Square	0.0061
Triangular	0.0050
Body-centered cubic	0.0153
Face-centered cubic	0.0168
Simple cubic	0.0175
Average value	0.0097

Представленные в табл. 4 результаты показывают, что графовый подход устойчиво работает для всех рассмотренных типов решеток, а средняя абсолютная ошибка составляет 9.7×10^{-3} . Наиболее точные значения T_c получились для гексагональной, Апамея, треугольной и квадратной решеток, где MAE_f не превышает 6.1×10^{-3} .

Дополнительно был проведен статистический анализ устойчивости нейросетевой оценки на примере решетки Апамея. Для трех размеров $L = 10, 12, 14$ были рассмотрены индивидуальные отклонения

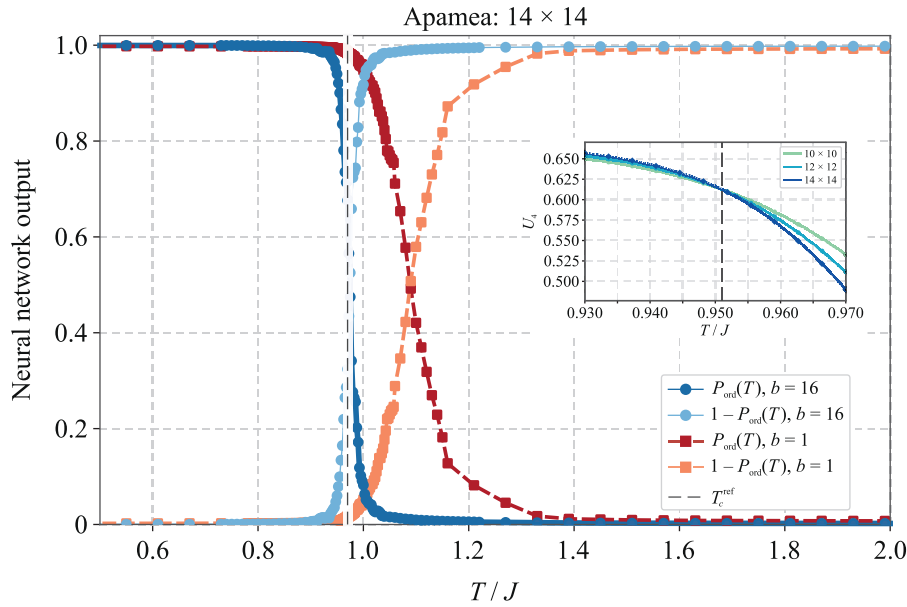


Рис. 1. (Цветной онлайн) Сравнение нейросетевых температурных фазовых зависимостей, полученных при $b = 1$ и $b = 16$ для решетки Апамея линейным размером $L = 14$. Передача на вход сети малой равновесной выборки конфигураций приводит к более устойчивой форме фазовой кривой и к более точной локализации точки пересечения с уровнем $1/2$. Вставка в правом верхнем углу показывает температурную зависимость кумулянта Биндера $U_4(T)$ для решеток Апамея размеров 10×10 , 12×12 и 14×14 ; вертикальная пунктирная линия соответствует оценке температуры перехода, найденной по пересечению кривых для разных размеров

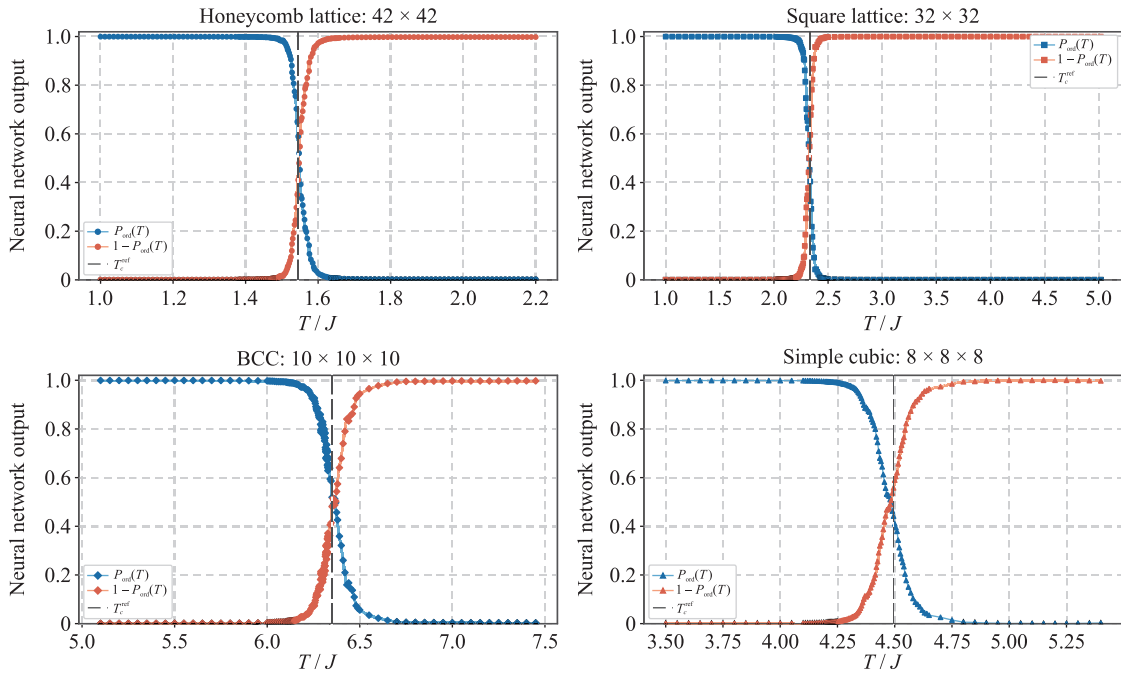


Рис. 2. (Цветной онлайн) Примеры нейросетевых температурных фазовых зависимостей $\bar{P}_{\text{ord}}(T)$ для двумерных гексагональной и квадратной решеток, а также для трехмерных объемноцентрированной и простой кубической решеток. Вертикальным пунктиром отмечено референсное значение T_c^{ref}

$|\hat{T}_c - T_c^{\text{ref}}|$. Они составили соответственно 0.0057, 0.0045 и 0.0044, что дает среднее значение 0.0049

при стандартном отклонении порядка 7×10^{-4} . Максимальное отклонение не превышает 5.7×10^{-3} ,

а выраженных выбросов по размерам решетки не наблюдается.

Для проверки влияния числа конфигураций во входной выборке были дополнительно рассмотрены независимые запуски с другим значением размера выборки. При использовании $b = 8$ получены значения $\text{MAE}_f = 0.0124, 0.0164$ и 0.0210 в различных независимых запусках. Несмотря на увеличение ошибки по сравнению с основным вариантом, значения остаются одного порядка и не демонстрируют отдельных аномальных выбросов по размерам решетки.

Отдельно был рассмотрен предельный случай поддачи на вход одной конфигурации, $b = 1$. В этом случае ошибка существенно возрастает: для независимых запусков были получены значения $\text{MAE}_f = 0.3245, 0.3246$ и 0.3541 . Такое поведение указывает на то, что отдельная конфигурация хуже репрезентирует равновесное состояние системы вблизи перехода, особенно для геометрически неоднородной решетки Апаея.

Таким образом, увеличение числа конфигураций во входной выборке стабилизирует нейросетевую фазовую кривую и уменьшает разброс оценок $\hat{T}_c$. Проведенный анализ по размерам решетки и независимым запускам обучения не выявил выраженных выбросов для варианта с малой равновесной выборкой, что подтверждает устойчивость полученной оценки T_c относительно размера системы и стохастичности обучения.

Характерные примеры температурных фазовых кривых, полученные с помощью графовой модели для двумерных и трехмерных типов решеток, приведены на рис. 2.

Для трехмерных решеток величина отклонения составляет $0.0153\text{--}0.0175$. Стоит отметить, что в трехмерном случае приходится работать с меньшими линейными размерами, а сама критическая область формируется на графах с более сложной локальной связностью. В дальнейшем, для трехмерных решеток важно увеличить диапазон доступных для расчета размеров. Кроме того, отдельный интерес представляет изучение моделей с другой пространственной связностью и радиусом обменного взаимодействия. Исходный код программ опубликован в открытом доступе по электронному адресу <https://github.com/FullHeat/Ising-GNN>. В репозиторий также включены сохраненные веса обученных моделей, температурные сетки и параметры обучения графовой нейронной сети. Перспективным продолжением также представляется исследование того, какие графовые признаки можно оптимизиро-

вать для возможности производить расчеты для решеток больших размеров.

Финансирование работы. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 24-71-10069,

<https://rscf.ru/project/24-71-10069/>.

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. D.P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2014).
2. M.E.J. Newman and G.T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford University Press, Oxford, 1999).
3. L. Wang, “Discovering phase transitions with unsupervised learning”, *Phys. Rev. B* **94**(19), 195105 (2016).
4. J. Carrasquilla and R.G. Melko, “Machine learning phases of matter”, *Nat. Phys.* **13**(5), 431 (2017).
5. E.P.L. van Nieuwenburg, Y.-H. Liu, and S.D. Huber, “Learning phase transitions by confusion”, *Nat. Phys.* **13**(5), 435 (2017).
6. P. Suchsland and S. Wessel, “Parameter diagnostics of phases and phase transition learning by neural networks”, *Phys. Rev. B* **97**(17), 174435 (2018).
7. D. Kim and D.-H. Kim, “Emergence of a finite-size scaling function in the supervised learning of the ising phase transition”, *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* **2021**(02), 023202 (2021).
8. R. Zhang, B. Wei, D. Zhang, J.-J. Zhu, and K. Chang, “Few-shot machine learning in the three-dimensional Ising model”, *Phys. Rev. B* **99**(9), 094427 (2019).
9. K. Shiina, H. Mori, Y. Okabe, and H.K. Lee, “Machine learning studies on spin models”, *Sci. Rep.* **10**, 2177 (2020).
10. D. Bachtis, G. Aarts, and B. Lucini, “Mapping distinct phase transitions to a neural network”, *Phys. Rev. E* **102**(5), 053306 (2020).
11. I. Corte, S. Acevedo, M. Arlego, and C.A. Lamas, “Exploring neural network training strategies to determine phase transitions in frustrated magnetic models”, *Comput. Mater. Sci.* **198**, 110702 (2021).
12. Z. Tian, S. Zhang, and G.-W. Chern, “Machine learning for structure-property mapping of ising models: Scalability and limitations”, *Phys. Rev. E* **108**(6), 065304 (2023).
13. X. Li, R. Guo, Y. Zhou, K. Liu, J. Zhao, F. Long, Y. Wu, and Z. Li, “Machine learning phase transitions of the three-dimensional Ising universality class”, *Chin. Phys. C* **47**(3), 034101 (2023).
14. V.K. Babu and R. Pandit, “Artificial intelligence and machine learning for phases and transitions in the ising model: an overview”, *Eur. Phys. J. B* **98**, 258 (2025).

15. D. Y. Kapitan, P. A. Ovchinnikov, K. S. Soldatov, P. D. Andriushchenko, and V. Y. Kapitan, “Optimized machine learning methods for studying the thermodynamic behavior of complex spin systems”, *Computer Research and Modeling* **18**(1), 25 (2026).
16. S. Efthymiou, M. J. Beach, and R. G. Melko, “Superresolving the Ising model with convolutional neural networks”, *Phys. Rev. B* **99**(7), 075113 (2019).
17. Y. A. Shevchenko, V. Strongin, I. Trefilov, E. Lobanova, P. A. Ovchinnikov, N. Ternovoi, M. Cherkasov, and K. Nefedev, “Ground state candidate and thermodynamics of apamea spin ice”, *Phys. Rev. E* **113**(2), 024127 (2026).
18. R. H. Swendsen and J.-S. Wang, “Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations”, *Phys. Rev. Lett.* **58**(2), 86 (1987).