Письма в ЖЭТФ, том 115, вып. 8, с. 500 – 504

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.

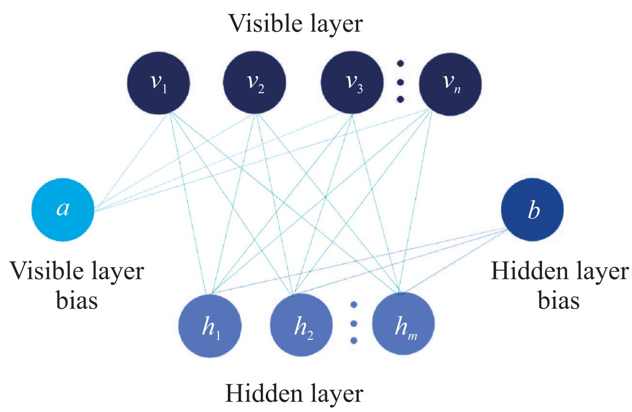

Рис. 1. (Цветной онлайн) Архитектура ограниченной машины Больцмана

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:

$$v^1 \sim p(v|h^0) \to p(v_i = 1|\mathbf{h}) = \sigma\left(a_i + \sum_{j=1}^{n} w_{i,j} h_j\right). \tag{4}$$

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

$$F(v) = -\sum_i v_i a_i - \sum_j \log(1 + e^{x_j}), \tag{5}$$

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

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.

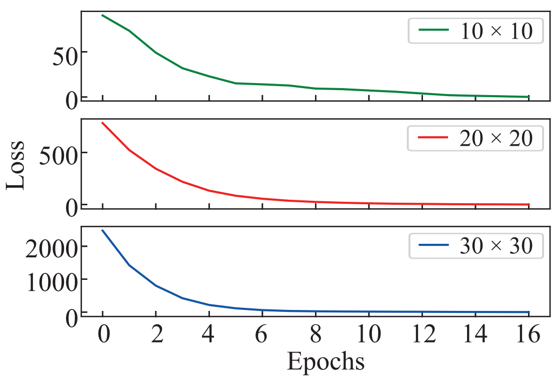

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимость значения функции потерь при обучении от порядкового номера эпохи

Далее обновляются значения весов и коэффициенты смещения:

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

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

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

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

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

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

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 $[0; 1] (-1 \to 0, 1 \to 1)$. 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.

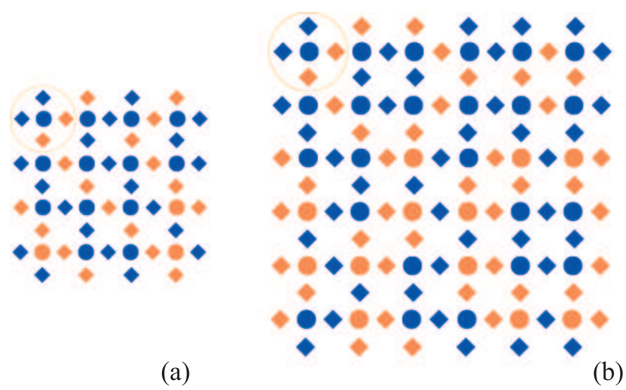

Рис. 3. (Цветной онлайн) Примеры систем для обучения: (a) – 4×4 ($E = -0.5$); (b) – 6×6 ($E = -0.89$) с заданным бимодальным распределением связей. Цвет спинов (круг) или связей (ромб) зависит от координаты z между спином вниз $S = -1$ или $J = -1$ (синий) и вверх $S = +1$ или $J = 1$ (оранжевый)

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.

Таблица 1. Сравнение результатов, полученных различными вычислительными подходами

Количество спинов	EEM $E_{\min}$	TMM $E_{\min}$	HMM $E_{\min}$	RBM $E_{\min}$
4×4	-1.5	-1.5	–	-1.5
6×6	-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

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.

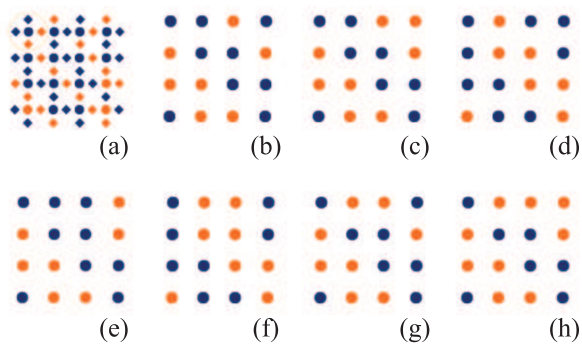

Рис. 4. (a) – Пример системы для обучения: 4×4, ($E = -0.5$) с заданным бимодальным распределением связей; (b)–(h) – основные состояния системы 4×4 при данном распределении связей

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.

---

1. 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.
2. 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).
4. D. Landau and K. Binder, *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*, Cambridge University press, Cambridge (2003).
5. V. I. Belokon, V. Y. Kapitan, and O. I. Dyachenko, J. Phys. Conf. Ser. **490**, 012165 (2014).
6. 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).
8. M. K. Ramazanov, A. K. Murtazaev, M. A. Magomedov, and M. K. Mazagaeva, JETP Lett. **114**, 693 (2021).
9. 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).
10. K. S. Soldatov, K. V. Nefedev, V. Yu. Kapitan, and P. D. Andriushchenko, J. Phys. Conf. Ser. **741**, 012199 (2016).
11. Yu. A. Shevchenko, A. G. Makarov, P. D. Andriushchenko, and K. V. Nefedev, JETP **124**, 982 (2017).
12. 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).
13. P. Mali, S. Radošević, P. Rakić, L. Stričević, M. Pavkov-Hrvojević, and M. Pantić, Chin. J. Phys. **59**, 35 (2019).
14. K. T. Butler, D. W. Davies, H. Cartwright, O. Isayev, and A. Walsh, Nature **559**, 547 (2018).
15. G. Carleo, I. Cirac, K. Cranmer, L. Daudet, M. Schuld, N. Tishby, L. Vogt-Maranto, and L. Zdeborová, Rev. Mod. Phys. **91**, 045002 (2019).
16. J. Carrasquilla and R. G. Melko, Nat. Phys. **13**, 431 (2017).
17. P. Suchsland and S. Wessel, Phys. Rev. B **97**, 174435 (2018).
18. K. Shiina, H. Mori, Y. Okabe, and H. K. Lee, Sci. Rep. **10**, 1 (2020).
19. V. Kapitan, E. Vasiliev, A. Perzhu, D. Kapitan, A. Rybin, A. Korol, K. Soldatov, and Yu. Shevchenko, AIP Adv. **11**, 015041 (2021).
20. D. H. Ackley, G. E. Hinton, and T. J. Sejnowski, Cogn. Sci. **9**, 147 (1985).
21. G. Torlai and R. G. Melko, Phys. Rev. B **94**, 165134 (2016).
22. L. Huang and L. Wang, Phys. Rev. B **95**, 035105 (2017).
23. B. McNaughton, M. V. Milosevic, A. Perali, and S. Pilati, Phys. Rev. E **101**, 053312 (2020).
24. S. F. Edwards and P. W. Anderson, Journal of Physics F: Metal Physics **5**, 965 (1975).
25. B. Kaufman, Phys. Rev. **76**, 1232 (1949).
26. M. A. Padalko, Yu. A. Shevchenko, V. Yu. Kapitan, and K. V. Nefedev, Algorithms **15**, 13 (2022).
27. D. Kapitan, A. Rybin, P. Andriushchenko, V. Kapitan, E. Vasiliev, and K. Nefedev, Solid State Phenomena **312**, 251 (2020).
28. 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).