



Лаборатория вычислительной
физики, НИУ ВШЭ

14 июня 2024

Влияние анизотропии взаимодействия на точность оценки критических свойств моделей

Диана Суховерхова



(Обобщенная) модель Изинга

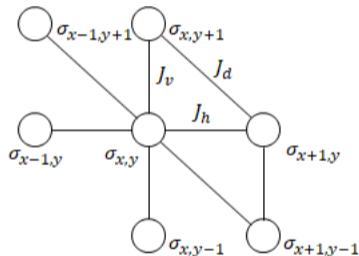
$$\sigma = \{\sigma_{x,y} = \pm 1 | x = \overline{1, L}, y = \overline{1, L}\}$$

$$\mathcal{H}(\sigma) = - \sum_{x,y=1}^L \sigma_{x,y} [J_h \sigma_{x+1,y} + J_v \sigma_{x,y+1} + J_d \sigma_{x+1,y+1}]$$

$J_d = 0, J_v = J_h$ - изотропная модель Изинга

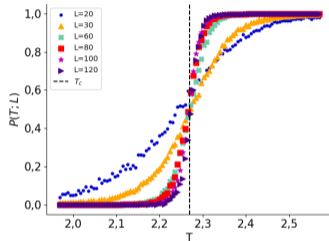
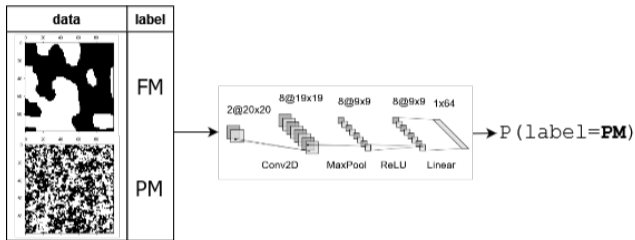
Два случая анизотропии:

- $J_d \neq 0, J_v = J_h$ - диагональная анизотропия
- $J_d = 0, J_v \neq J_h$ - ортогональная анизотропия





Фазовый переход и бинарная классификация



Выражение для критической температуры T_c известно¹:

$$\sinh \frac{2J_v}{k_B T_c} \cdot \sinh \frac{2J_h}{k_B T_c} + \sinh \frac{2J_h}{k_B T_c} \cdot \sinh \frac{2J_d}{k_B T_c} + \sinh \frac{2J_d}{k_B T_c} \cdot \sinh \frac{2J_v}{k_B T_c} = 1$$

$$J_v + J_h > 0, \quad J_h + J_d > 0, \quad J_v + J_d > 0$$

В каждой температурной точке²

$$P(T; L) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i^T$$

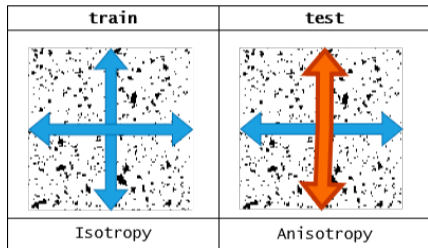
¹Houtappel R. M. F. Order-disorder in hexagonal lattices //Physica. – 1950. – Т. 16. – №. 5. – С. 425-455.

²Carrasquilla J., Melko R. G. Machine learning phases of matter //Nature Physics. – 2017. – Т. 13. – №. 5. – С. 431-434.



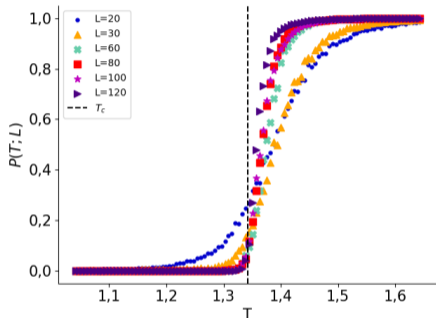
Детали обучения нейронной сети

- Каждый образец - черно-белое квадратное изображение, сгенерированное алгоритмом Метрополиса.
- Нейронная сеть недообучается: результаты берутся после 1 эпохи обучения
- Обучающий набор данных состоит из **изотропных** образцов, тестовый набор данных - из **анизотропных** образцов

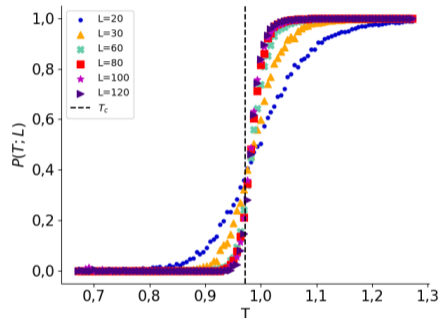




Выходы нейронной сети



Диагональная анизотропия,
 $J_d = -0.5$



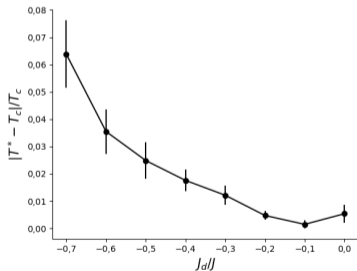
Ортогональная анизотропия,
 $J_v = 0.125, J_h = 1.0$



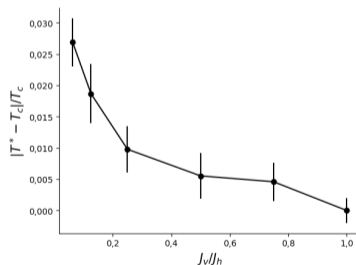
Оценка критической температуры

Оцениваем точку фазового перехода как температуру, при которой предсказания $P(T; L)$ пересекаются с $y = 0.5$ ³

$$T_c^*(L) = \arg \min_T |P(T; L) - 0.5|$$



Диагональная анизотропия



Ортогональная анизотропия

³Carrasquilla J., Melko R. G. Machine learning phases of matter //Nature Physics. – 2017. – Т. 13. – №. 5. – С. 431-434.

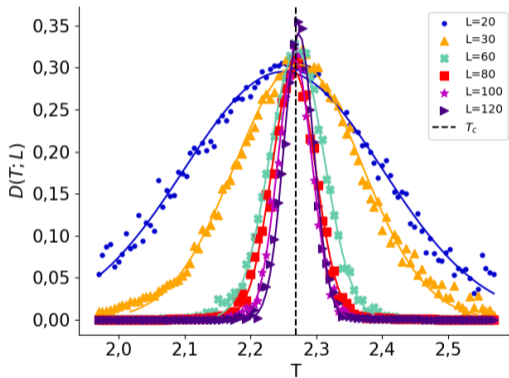


Распределение прогнозов

Вычисляем стандартные отклонения в каждой температуре⁴

$$D(T; L) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (f_i^T)^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_i^T \right)^2}$$

Фитируем $D(T; L)$ функцией Гаусса и получаем среднее μ и полуширину σ ; $\sigma_{r,l}$

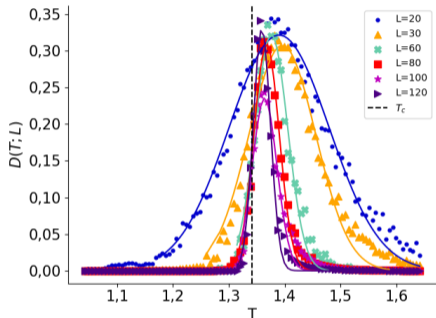


Isotropic case, $J_d = 0$, $J_v = J_h = 1$

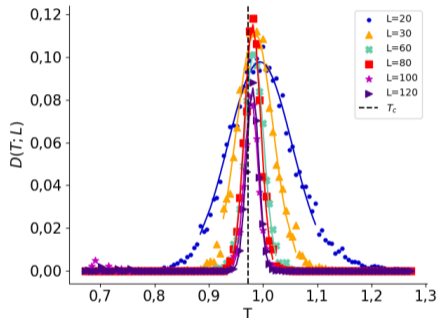
⁴Chertenkov V., Burovski E., Shchur L. Finite-size analysis in neural network classification of critical phenomena // Physical Review E. – 2023. – Т. 108. – № L032102.



Распределение прогнозов



Диагональная анизотропия,
 $J_d = -0.5$



Ортогональная анизотропия,
 $J_v = 0.125, J_h = 1.0$



Класс универсальности

Корреляционная длина:

$$\xi \approx \tau^{-\nu}, \tau = \frac{T - T_c}{T_c}$$

В классе универсальности двумерного Изинга: $\nu = 1$

Находим оценку критического показателя ν из предположения (в дважды логарифмическом масштабе):

$$\sigma(L) \approx \left(\frac{1}{L}\right)^{\frac{1}{\nu}}$$



Оценка ν

J_v/J_h	$\frac{1}{\nu}$	$(\frac{1}{\nu})_r$	$(\frac{1}{\nu})_l$
1.0	1.09(3)	1.12(4)	1.14(5)
0.75	1.07(4)	1.02(5)	1.12(7)
0.5	1.09(3)	1.09(9)	1.09(7)
0.25	1.09(4)	1.01(10)	1.10(3)
0.125	0.97(7)	1.01(7)	0.93(8)
0.0625	0.86(14)	0.83(11)	0.82(19)

Table: Ортогональная анизотропия

J_d/J_h	$\frac{1}{\nu}$	$(\frac{1}{\nu})_r$	$(\frac{1}{\nu})_l$
0.0	1.05(3)	1.07(5)	1.07(4)
-0.1	1.08(3)	1.05(5)	1.13(5)
-0.2	1.04(3)	1.06(4)	1.12(6)
-0.3	1.01(1)	0.97(2)	1.21(7)
-0.4	1.01(2)	0.95(4)	1.08(6)
-0.5	0.93(4)	0.91(6)	1.05(9)
-0.6	0.78(4)	0.97(6)	0.91(7)
-0.7	1.16(26)	1.05(9)	0.82(21)

Table: Диагональная анизотропия



Результаты

- Чем сильнее анизотропное взаимодействие, тем больше ошибка в оценке критической температуры
- Оценка экспоненты длины корреляции не зависит от анизотропии (диагональной или ортогональной) и совпадает с теоретическим значением $\nu = 1$ в пределах погрешности
- Хотя мы не можем определить класс универсальности только по предсказаниям сети, мы можем найти показатель корреляционной длины из того же класса универсальности, что и образцы обучающего набора
- Мы предполагаем, что сеть видит увеличение корреляционной длины в точке фазового перехода, другими словами - находит физические закономерности в изучаемой системе