

УДК 519.63

MSC2020 35Q79 + 76D07

© П. А. Овчинников^{1,2}; К. С. Солдатов^{1,2}

Вычисление критической температуры спинового льда на решетке Апамея с помощью сверточной нейронной сети

В настоящей работе решается задача определения критической температуры модели Изинга на решетке Апамея, представляющей собой вершино-фрустрированную геометрию квадратного искусственного спинового льда. Исследовалась модель в рамках ферромагнитного взаимодействия ближайших соседей с периодическими граничными условиями, был произведен расчет теплоёмкости, средней намагниченности и магнитной восприимчивости. С помощью сверточного нейросетевого классификатора фазовых состояний были получены температурные профили усреднённой апостериорной вероятности высокотемпературной фазы, которые образуют S-образные кривые, пересекающиеся в критической точке. Показано, что разработанный CNN-классификатор можно успешно использовать для анализа фазовых состояний сложных фрустрированных геометрических решеток при правильной укладке входных данных, что делает разработанный подход перспективным и универсальным инструментом для анализа фазовых переходов в искусственных спиновых системах.

Ключевые слова: спиновый лёд, решётка Апамея, сверточные нейронные сети, фазовый переход, критическая температура.

DOI: <https://doi.org/10.47910/FEMJ202607>

Введение

Физика конденсированных сред изучает поведение систем, состоящих из огромного числа взаимодействующих частиц. Уже для простейших моделей, таких как модель Изинга, линейный рост числа частиц дает экспоненциальный рост числа возможных состояний, что делает прямое вычисление статистической суммы невозможным даже для относительно малых размеров систем [1]. Классические методы Монте-Карло позволяют получать термодинамические характеристики, однако поиск точного значения критической точки для сильно фрустрированных систем, а

¹ Институт наукоемких технологий и передовых материалов, Дальневосточный федеральный университет, 690922, г. Владивосток, о. Русский, пос. Аякс, д. 10.

² Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 7.
Электронная почта: ovchinnikov.pa@dvvfu.ru (К. С. Солдатов).

также для решеток экзотических геометрий остаётся нетривиальной вычислительной задачей [2, 3].

Под критической температурой T_c далее будем понимать температуру фазового перехода, отделяющую низкотемпературную упорядоченную фазу от высокотемпературной фазы беспорядка (для двумерной модели Изинга это граница между ферромагнитным и парамагнитным режимами). Так как в конечных системах фазовый переход сглажен на практике определяется псевдокритическая температура $\hat{T}_c(L)$, извлекаемая из максимумов откликов (например, теплоёмкости или восприимчивости) либо из эквивалентных критериев. Оценка T_c важна для сравнения различных геометрий искусственных спиновых льдов и сопоставления численных результатов с экспериментальными данными.

Развитие методов машинного обучения в текущих реалиях всерьез рассматривается как альтернатива существующим численным подходам [4, 5]. Нейросетевые модели могут извлекать нелинейные пространственные корреляции непосредственно из конфигураций спинов и таким образом действовать как эффективные «детекторы фазы», не обращаясь к явному виду гамильтониана. Особенно перспективными являются свёрточные нейронные сети (CNN), естественно работающие с двумерными структурированными данными [6, 7].

Для решения задачи классификации фазовых состояний нами был разработан универсальный классификатор, имеющий глубокую сверточную архитектуру. Обучение классификатора выполнялось на наборе данных, состоящем из конфигураций двумерных решеток спинов Изинга [8]. Для обучения модели использовались спиновые конфигурации квадратной, треугольной и гексагональной решеток, полученные кластерным алгоритмом Свендсена – Ванга [9, 10]. В настоящей работе этот классификатор применяется к геометрически более сложной решётке Апамея, представляющей собой вершинофрустрированный искусственный спиновый лёд, полученный из квадратной решётки удалением части наномангнитов [11, 12]. Ранее в работе [11] были подробно исследованы основные состояния и термодинамика дипольной модели Апамея с дальнедействующим взаимодействием; здесь же мы рассматриваем модель ближайших соседей с изинговскими спинами и используем её для оценки универсальности разработанного классификатора.

Важно отметить, что при обучении фазового классификатора [8] критическая температура не вычисляется для каждой конфигурации. Метки классов задаются по температурным диапазонам $T < T_c$ (низкотемпературный класс) и $T > T_c$ (высокотемпературный класс), при этом конфигурации из узкой окрестности T_c исключаются из обучения. В настоящей работе веса сети не обновляются: мы демонстрируем переносимость разработанного нами и уже обученного классификатора [8] на новую вершинофрустрированную геометрию. Референсная оценка T_c^{ref} , полученная из термодинамических откликов, используется далее как независимый контроль корректности нейросетевой оценки.

1. Исследуемая модель и вычислительные методы

Модель Изинга на решётке Апамея

Решётка Апамея (Aramea) (рис. 1) строится из базовой ячейки, содержащей вершины с координационными числами два и три, и обладает трансляционной симметрией в двух направлениях [11]. Координационным числом (степенью) вершины называется число её ближайших соседей в графе взаимодействий. Для решётки Апамея неоднородная локальная топология — как следствие удаления части элементов исходной квадратной структуры — приводит к появлению вершин со степенями 2 и 3. В отличие от классического квадратного спинового льда, в решётке Апамея присутствуют вершины с разным числом соседей, что приводит к вершинной фрустрации и нетривиальной структуре низкоэнергетических состояний.

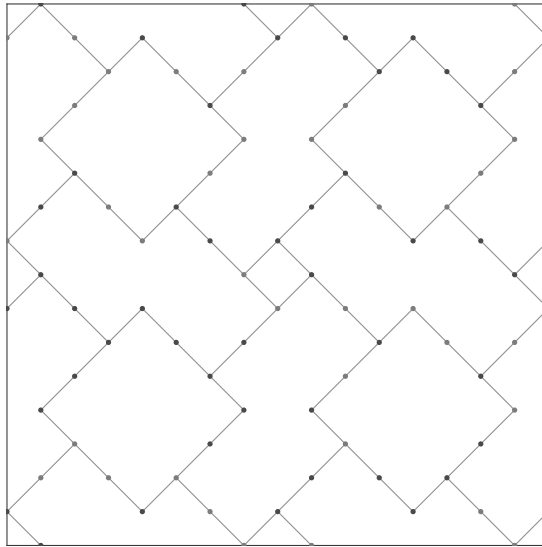


Рис. 1. Иллюстрация геометрии решётки Апамея. Точки соответствуют узлам (изинговским спином) графа, а связи ближайших соседей задаются рёбрами решётки. Точки на рисунке используются для наглядного выделения двух типов узлов (± 1) в базовой ячейке; в рассматриваемой модели Изинга все узлы описываются одинаковыми переменными $s_i = \pm 1$.

Полная периодическая укладка размеров 10×10 и 12×12 базовых ячеек получается трансляционным повторением базового фрагмента с наложением периодических граничных условий.

В настоящей работе рассматривается двумерная решётка Апамея размером 10×10 и 12×12 базовых ячеек с периодическими граничными условиями. Каждой наномангнитной ячейке сопоставляется изинговский спин $s_i = \pm 1$; взаимодействуют

только ближайшие соседи по графу решётки. Гамильтониан имеет вид

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

где суммирование ведётся по всем парам ближайших соседей, а $J > 0$ — константа ферромагнитного обменного взаимодействия.

Физическая температура T_{phys} измеряется в Кельвинах, однако в статистической физике удобно использовать энергетическую температуру $k_B T_{\text{phys}}$. Поэтому далее вводится приведённая безразмерная температура

$$T \equiv \frac{k_B T_{\text{phys}}}{J}, \quad (2)$$

и везде по тексту под T понимается именно эта величина (полагаем $k_B = 1$ и измеряем энергию в единицах J).

В первую очередь были рассчитаны основные термодинамические характеристики, для чего был применен кластерный алгоритм Свендсена – Ванга [9]. Под конфигурацией понимается набор значений спинов $x = \{s_i\}_{i=1}^N$ на фиксированной решётке, геометрия и положение узлов не меняются. Под шагом между конфигурациями понимается число кластерных обновлений алгоритма Свендсена – Ванга, выполняемых между двумя сохранениями состояний для уменьшения автокорреляций. Расчёты выполнялись на температурной сетке $T \in [0.25, 3.5]$ с шагом 0.01 (в приведённых единицах (2)). Для каждого значения T формировалась статистическая выборка из $n_T^{\text{MC}} = 2000$ конфигураций. Для каждой температуры запускались 40 независимых симуляций, и после этапа термализации длиной 2500 кластерных переворотов из каждой симуляции сохранялось по 50 конфигураций. Чтобы снизить автокорреляции, сохранение выполнялось с прореживанием: между двумя записанными состояниями выполнялось 5 дополнительных кластерных обновлений, а в критической области $T \in [0.5, 1.1]$ прореживание увеличивалось до 15. Таким образом, суммарный объём данных составил 652 000 конфигураций для каждого размера решётки.

Для каждой конфигурации $x = \{s_i\}_{i=1}^N$ вычислялась энергия, то есть значение гамильтониана

$$E(x) = \mathcal{H}(x) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j,$$

где суммирование ведётся по всем парам ближайших соседей $\langle i,j \rangle$, а N — число спинов (узлов) в рассматриваемой периодической укладке. Также вычислялась намагниченность

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i,$$

и вспомогательные величины E^2 и m^2 .

Важно подчеркнуть, что конфигурация спинов не является функцией температуры. При фиксированном T существует множество конфигураций x ; температура задаёт лишь вероятностное распределение на них. В равновесии конфигурации распределены по закону Гиббса

$$P_T(x) = \frac{1}{Z(T)} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(x)}{k_B T_{\text{phys}}}\right) = \frac{1}{Z(T)} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(x)}{JT}\right), \quad (3)$$

где $Z(T)$ — статистическая сумма, а $T \equiv k_B T_{\text{phys}}/J$ — приведённая температура.

Угловые скобки $\langle \cdot \rangle_T$ обозначают среднее по ансамблю конфигураций при фиксированной температуре T :

$$\langle A \rangle_T = \frac{1}{n_T^{\text{MC}}} \sum_{k=1}^{n_T^{\text{MC}}} A(x_k^{(T)}),$$

где $x_k^{(T)}$ — k -я конфигурация, сгенерированная методом Монте-Карло при температуре T , как показывает выборка из распределения (3).

Удельная теплоёмкость приходящаяся на спин определялась как

$$C(T) = \frac{\langle E^2 \rangle_T - \langle E \rangle_T^2}{NT^2},$$

а магнитная восприимчивость — через флуктуации намагниченности:

$$\chi(T) = N \frac{\langle m^2 \rangle_T - \langle |m| \rangle_T^2}{T}.$$

Здесь T — приведённая (безразмерная) температура (2), а усреднение $\langle \cdot \rangle_T$ выполняется по ансамблю конфигураций при данной температуре.

По максимуму $C(T)$ и согласованным изменением поведения $|m(T)|$ и $\chi(T)$ в критической области для двух размеров 10×10 и 12×12 базовых ячеек была получена референсная оценка критической температуры $T_c^{\text{ref}} \approx 0.968$ (в приведённых единицах (2)). Максимум $C(T)$ определялся по дискретной температурной сетке.

Архитектура свёрточной нейронной сети

Нейросетевой анализ выполнялся с помощью разработанного свёрточного классификатора фазовых состояний, архитектура которого представлена на рис. 2. Технические детали работы классификатора, архитектуры и набора обучающих данных

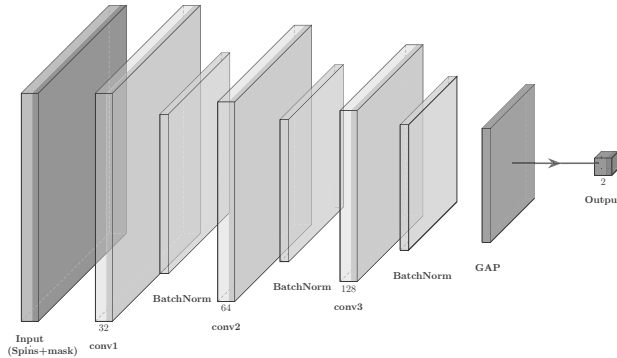


Рис. 2. Архитектура свёрточного нейросетевого классификатора фазовых состояний.

Таблица 1. Ключевые параметры CNN-классификатора фазовых состояний (см. также [8]).

Вход	$56 \times 66 \times 2$ (канал спинов ± 1 + бинарная маска)
Свёрточные слои	$\text{Conv2D}(32, 3 \times 3) \rightarrow \text{Conv2D}(64, 3 \times 3) \rightarrow \text{Conv2D}(128, 3 \times 3)$
Stride / padding	stride=1; padding=same (zero-padding)
Активации	ReLU в свёрточных слоях; Softmax на выходе
Нормализация	BatchNorm после каждого свёрточного слоя
Dropout	$p = 0.25$ после каждого блока
Агрегация	Global Average Pooling
Выход	Dense(2) + Softmax: $(P_{\text{low}}, P_{\text{high}})$, $P_{\text{low}} + P_{\text{high}} = 1$
Функция потерь (обучение в [8])	categorical cross-entropy
Оптимизация (обучение в [8])	Adam, learning rate 10^{-3} , batch size 256
Обучающая выборка (в [8])	конфигурации квадратной, треугольной и гексагональной решёток; общий объём 266 400 конфигураций

подробнее представлены в нашей предыдущей работе [8]. Ниже приведены ключевые параметры архитектуры и режима обучения, используемые в [8]; в настоящей работе обучение не проводится, выполняется только инференс с фиксированными весами.

Каждой конфигурации спинов сопоставляется тензор размером $56 \times 66 \times 2$. Первый канал содержит значения спинов в кодировке ± 1 , второй — бинарную маску занятых узлов. Единица там, где расположен узел решётки, и ноль на пустом фоне. Такой формат позволяет CNN-архитектуре обрабатывать решётки различной геометрии и размера, не изменяя структуру сети.

В настоящей работе геометрия решётки Апамея обрабатывается путём укладки на основе обхода графа ближайших соседей в ширину (Breadth-First Search, BFS). Граф решётки с N узлами задаёт перестановку π , соответствующую порядку обхода, после чего одномерный вектор спинов $(s_{\pi(1)}, \dots, s_{\pi(N)})$ записывается построчно со сменой направления строк, что уменьшает разрывы локальной связности между концом одной строки и началом следующей. После чего каждая конфигурация спинов записывается в прямоугольный канал размером 56×66 . Дополнительно используется канал маски, позволяющий сети отличать реальные узлы от пустого фона.

Архитектура классификатора содержит три свёрточных блока со слоями нормализации, слоями Dropout и слоем глобального усреднения (Global Average Pooling), за которым следует выходной полносвязный слой размерностью два, возвращающий

вероятности низко- и высокотемпературной фаз. Модель оптимизировалась методом Adam, обучение процессу классификации фаз производилось при помощи набора данных спиновых конфигураций квадратной, треугольной и гексагональной решёток; конфигурации решётки Апамея подавались на вход уже обученной модели и использовались только для тестирования [8].

В настоящей работе параметры сети не переобучаются. Отметим, что температура T не подаётся в нейросеть как отдельный входной параметр: на вход подаётся только конфигурация спинов $x_i^{(T)}$, сгенерированная методом Монте-Карло при температуре T . Для каждой конфигурации решётки Апамея, сгенерированной при температуре T , сеть возвращает вероятность высокотемпературной фазы $P_{\text{high}}(x^{(T)})$. Здесь $x_i^{(T)}$ — i -я конфигурация, полученная при температуре T , а выход Softmax представляет собой пару вероятностей $(P_{\text{low}}, P_{\text{high}})$, сумма которых равна единице. Далее мы не используем жёсткий порог для каждой отдельной конфигурации, а строим непрерывную температурную кривую среднего $P_{\text{high}}(T)$. По ансамблю конфигураций при данной температуре определяется усреднённая величина

$$P_{\text{high}}(T) = \frac{1}{n_T^{\text{CNN}}} \sum_{i=1}^{n_T^{\text{CNN}}} [\text{CNN}(x_i^{(T)})]_{\text{класс}=\text{high}},$$

где n_T^{CNN} — число конфигураций при температуре T , используемых для нейросетевого усреднения; в данной работе $n_T^{\text{CNN}} = 600$, выбранных из полного ансамбля размера $n_T^{\text{MC}} = 2000$. Метка $\text{класс} = \text{high}$ означает «взять компоненту Softmax-выхода, соответствующую классу высоких температур (high)». Кривые $P_{\text{high}}(T)$ и $1 - P_{\text{high}}(T)$ выполняют роль эффективного параметра порядка: при низких температурах $P_{\text{high}}(T) \approx 0$, при высоких — $P_{\text{high}}(T) \approx 1$. Нейросетевая оценка критической температуры \hat{T}_c определяется как значение

$$P_{\text{high}}(T) = \frac{1}{2},$$

полученное с помощью точки пересечения кривых. Практически \hat{T}_c извлекается по дискретной температурной сетке линейной интерполяцией: выбираются две соседние температуры $T_k < T_{k+1}$, для которых $P_{\text{high}}(T_k) < 1/2$ и $P_{\text{high}}(T_{k+1}) > 1/2$, после чего

$$\hat{T}_c = T_k + \frac{\frac{1}{2} - P_{\text{high}}(T_k)}{P_{\text{high}}(T_{k+1}) - P_{\text{high}}(T_k)} (T_{k+1} - T_k).$$

2. Результаты

Термодинамика модели ближайших соседей

На рис. 3 и рис. 4 представлены температурные зависимости теплоёмкости $C(T)$, средней намагниченности $m(T)$ и магнитной восприимчивости $\chi(T)$ решётки Апамея размерами 10×10 и 12×12 спинов Изинга. В области высоких температур система находится в парамагнитной фазе с нулевой средней намагниченностью и малой

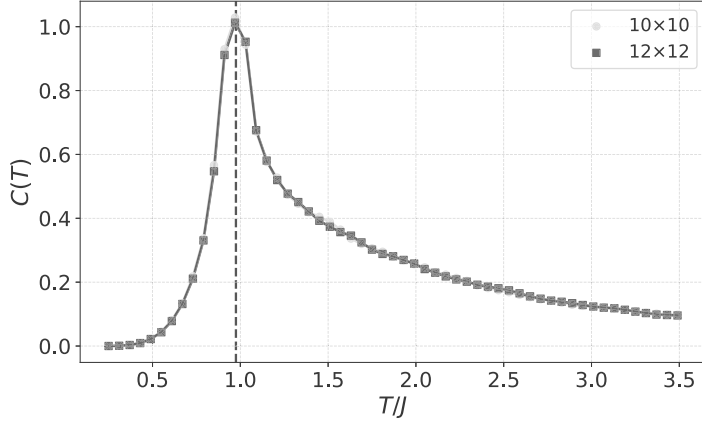


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости $C(T)$ решётки Апамея размерами 10×10 и 12×12 спинов Изинга. Вертикальная пунктирная линия указывает на положение T_c^{ref} .

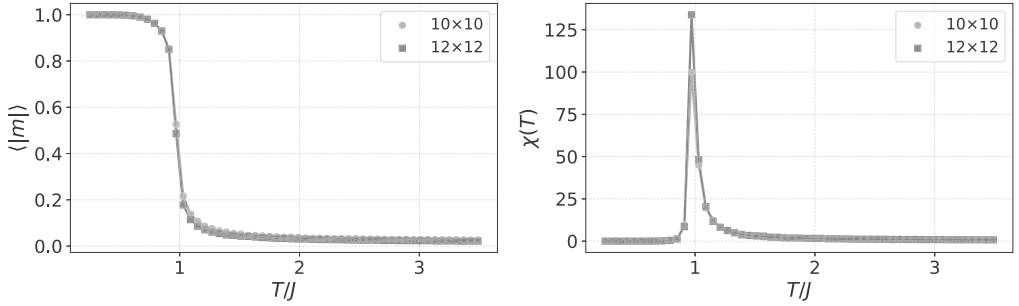


Рис. 4. Температурные зависимости средней намагниченности $m(T)$ и магнитной восприимчивости $\chi(T)$ решётки Апамея размерами 10×10 и 12×12 спинов Изинга.

теплоёмкостью. При понижении температуры теплоёмкость демонстрирует выраженный пик в окрестности $T \approx 0.968$, сопровождающийся быстрым ростом модуля намагниченности. С ростом линейного размера (числа базовых ячеек вдоль стороны, $L = 10 \rightarrow 12$) максимум $C(T)$ увеличивается и смещается к пределу T_c^{ref} для бесконечной системы.

Референсная оценка критической температуры T_c^{ref} определялась по положению максимума $C(T)$. Далее значение T_c^{ref} используется как независимый контроль при проверке нейросетевой оценки \hat{T}_c , получаемой без дополнительного обучения классификатора на данных решётки Апамея.

Классификация фазовых состояний с помощью нейронной сети

На рис. 5 представлены полученные с использованием CNN-классификатора температурные профили $P_{\text{high}}(T)$ и $1 - P_{\text{high}}(T)$ для размеров 10×10 и 12×12 .

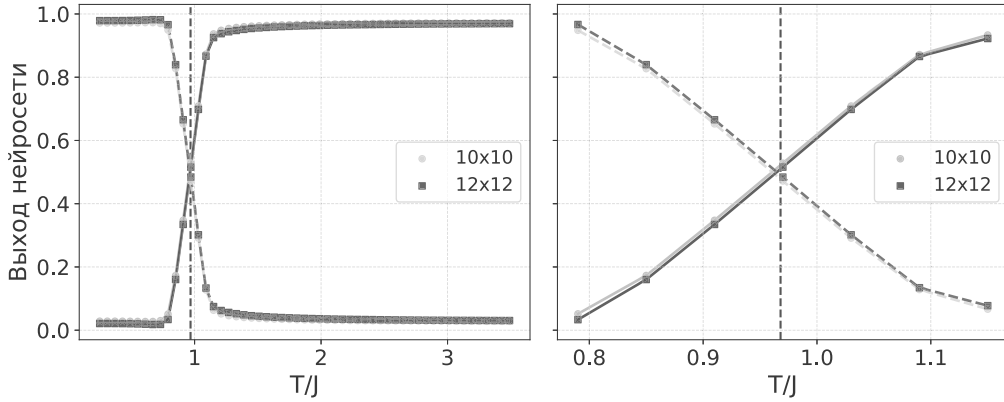


Рис. 5. Предсказание нейронной сети для модели Изинга на решётке Апамея размерами 10×10 и 12×12 спинов Изинга. Кривые $P_{\text{high}}(T)$ и $1 - P_{\text{high}}(T)$ усреднены по $n_T^{\text{CNN}} = 600$ конфигурациям при каждой температуре, выбранным из полного ансамбля размером $n_T^{\text{MC}} = 2000$. Справа увеличение окрестности критической области. Вертикальная пунктирная линия показывает референсное значение T_c^{ref} .

Во всём интервале температур кривые имеют ожидаемую S-образную форму: при $T \ll T_c^{\text{ref}}$ вероятности высокотемпературной фазы близки к нулю, при $T \gg T_c^{\text{ref}}$ — к единице. В критической области наблюдается пересечение кривых $P_{\text{high}}(T)$ и $1 - P_{\text{high}}(T)$ для обоих размеров решётки. Получаемые нейросетевые оценки $\hat{T}_c^{(10 \times 10)}$ и $\hat{T}_c^{(12 \times 12)}$ согласуются между собой и с T_c^{ref} в пределах статистической погрешности, определяемой шагом по температуре и дисперсией по конфигурациям.

С точки зрения трудоёмкости вычислений нейросетевой подход оказывается особенно выгодным при анализе нескольких геометрий: обучение CNN-классификатора происходит один раз, после чего для новых решёток достаточно лишь построить корректную геометрическую укладку (в нашем случае — BFS-перестановку) и выполнить инференс модели. Это существенно проще, чем обучать новую сеть под каждую конкретную геометрию, особенно если она обладает сложной вершинной структурой, как решётка Апамея.

Заключение

В работе исследован общий универсальный подход к определению значения критической температуры для двумерной модели Изинга со взаимодействием ближайших соседей на решётке Апамея, основанный на сочетании классического Монте–Карло моделирования и свёрточного нейросетевого классификатора, ранее обучен-

ного на двумерных решётках простых геометрий (квадратной, треугольной, гексагональной). Для модели ближайших соседей на решётке Апамея получены температурные зависимости удельной теплоёмкости, намагниченности и магнитной восприимчивости. Положение максимума теплоёмкости даёт референсную оценку псевдокритической температуры T_c^{ref} для конечных размеров, которая используется как независимый контроль нейросетевой оценки.

Показано, что разработанный CNN-классификатор, обученный на решетках геометрий, отличных от тестируемой, способен корректно классифицировать фазу на решётке Апамея. Полученные результаты демонстрируют, что ключевым элементом успешного переноса нейросетевой модели на новые геометрии является не усложнение архитектуры, а корректная укладка данных, отражающая топологию взаимодействий. Это открывает путь к применению CNN-классификатора для широкого класса искусственных спиновых льдов и других вершинно-фрустрированных систем, а также к возможной обработке экспериментальных данных (например, ХМCD-изображений) без промежуточного восстановления гамильтониана.

Список литературы

- [1] Sandvik A. W., “Computational studies of quantum spin systems”, *AIP Conference Proceedings*, **1297**, American Institute of Physics, 2010, 135–338.
- [2] Landau D. P., Binder K., *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, 2014.
- [3] Newman M. E. J., Barkema G. T., *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press, 1999.
- [4] Carrasquilla J., Melko R. G., “Machine learning phases of matter”, *Nature Physics*, **13**:5, (2017), 431–434.
- [5] Shiina K., Nakamura H., et al., “Machine-learning studies on spin models”, *Scientific Reports*, **10**, (2020), 2177.
- [6] LeCun Y., Bengio Y., Hinton G., “Deep learning”, *Nature*, **521**:7553, (2015), 436–444.
- [7] Goodfellow I., Bengio Y., Courville A., *Deep Learning*, MIT Press, 2016.
- [8] Kapitan D., Ovchinnikov P., Soldatov K., et al., *arXiv preprint*, arXiv:2512.07458, 2025.
- [9] Swendsen R. H., Wang J.-S., “Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations”, *Physical Review Letters*, **58**:2, (1987), 86–88.
- [10] Wolff U., “Collective Monte Carlo updating for spin systems”, *Physical Review Letters*, **62**:4, (1989), 361–364.
- [11] Shevchenko Yu. A., Kapitan V. Y., Soldatov K. S., et al., “Ground state candidate and thermodynamics of Apamea spin ice”, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **58**:38, (2025), 385002.
- [12] Saccone M., Farhan A., et al., “Vertex-frustrated artificial spin ice on the Apamea lattice”, *SciPost Physics*, **15**, (2023), 123.

Поступила в редакцию
20 октября 2025 г.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-21-00286, <https://rscf.ru/project/25-21-00286/>

Ovchinnikov P. A.^{1,2}; *Soldatov K. S.*^{1,2} Determination of the critical temperature of the Apamea lattice using a convolutional neural network classifier. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2026. V. 26. No 1. P. 57–67.

¹Far Eastern Federal University, Vladivostok, Russia

²Institute of Applied Mathematics, Far Eastern Branch, Russian Academy of Sciences

ABSTRACT

In this work, the problem of determining the critical temperature of the Ising model on an Apamea lattice is addressed. This lattice represents a vertex-frustrated geometry of a square artificial spin ice. The model was studied within the framework of ferromagnetic nearest-neighbor interaction with periodic boundary conditions. Calculations of specific heat, average magnetization, and magnetic susceptibility were performed. Using a convolutional neural network (CNN) classifier for phase states, temperature profiles of the averaged posterior probability of the high-temperature phase were obtained, forming S-shaped curves that intersect in the critical temperature. It is shown that the developed CNN classifier can be successfully used for complex vertex-frustrated geometries solely through proper data structuring, making this approach a promising universal tool for analyzing phase transitions in artificial spin systems with complex geometry.

Key words: *Spin ice, Apamea lattice, convolutional neural networks, phase transition, critical temperature.*