

Г.В. Парадеженко

---

ПОИСК ОСНОВНЫХ СОСТОЯНИЙ ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОГО  
АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА НА ТРЕУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ МЕТОДАМИ  
МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

---

Рассмотрен антиферромагнетик с классическими спинами на двухмерной треугольной решетке во внешнем магнитном поле с одноионной анизотропией. С помощью нового метода машинного обучения вычислены основные состояния и построена фазовая диаграмма намагниченности в зависимости от внешнего поля и коэффициента анизотропии. Показано, что результаты расчетов находятся в хорошем согласии с симуляциями Монте-Карло. Учет анизотропии приводит к возникновению плато намагниченности на уровне  $1/3$  в интервале значений внешнего поля, отвечающем основному состоянию  $uud$ . Размеры этого плато существенно возрастают с ростом степени анизотропии.

*Ключевые слова:* магнетизм, классические спины, антиферромагнетики, треугольная решетка, фрустрированные системы, машинное обучение.

G.V. Paradezhenko

---

SEARCHING GROUND STATES OF THE HEISENBERG  
ANTIFERROMAGNET ON A TRIANGULAR LATTICE USING  
MACHINE LEARNING METHODS

---

We consider an antiferromagnet with classical spins on two-dimensional triangular lattice in the external magnetic field with the single-ion anisotropy. Using a novel machine learning method, we calculate the ground states and obtain the magnetization phase diagram in dependence on the external magnetic field and anisotropy coefficient. We show that the calculation results are in good agreement with Monte-Carlo simulations. The anisotropy leads to the  $1/3$  magnetization plateau in the range of external field that corresponds to the  $uud$  ground state. The size of this plateau substantially increases with increasing strength of anisotropy.

*Keywords:* magnetism, classical spins, antiferromagnet, triangular lattice, frustrated systems, machine learning.

*Введение*

Исследование фрустрированных магнитных систем представляет интерес в связи с явлением спиновой жидкости [1]. Одной из простейших фрустрированных систем является антиферромагнетик на двухмерной треугольной решетке. Система описывается классической моделью Гейзенберга, учитывающей попарное взаимодействие ближайших соседних спинов, представленных трехмерными векторами. При нулевой температуре магнитная система находится в основном состоянии – конфигурации спинов на решетке, при которой энергия взаимодействия минимальна. На квадратной решетке спины в основном состоянии беспрепятственно выстраиваются попарно в противоположных направлениях, но на треугольной решетке такая конфигурация невозможна. Это связано с тем, что из трех ближайших соседей два спина выстраиваются в противоположных направлениях, а третий не может одновременно минимизировать свое взаимодействие с ними. Такое явление называется геометрической фрустрацией (см., например, [2]).

**Парадеженко Георгий Витальевич**

стажер-исследователь Сколковского института науки и технологий, Москва.  
Сфера научных интересов: математическое моделирование, вариационные методы, вычислительные методы в физике, магнетизм металлов. Автор 16 опубликованных научных работ.

E-mail: g.paradezhenko@skoltech.ru

В отсутствие внешнего магнитного поля основным состоянием антиферромагнетика на треугольной решетке является конфигурация, при которой соседние спины составляют угол в  $120^\circ$  друг с другом [3]. С ростом величины магнитного поля происходят фазовые переходы системы между четырьмя различными основными состояниями [4]. В частности, при некоторой единственной критической величине магнитного поля, система находится в основном состоянии  $uud$ , где два ближайших спина направлены вдоль внешнего поля, а третий – в противоположном направлении. В работе [5] показано, что учет одноионной анизотропии приводит к возникновению небольшой, но конечной, области значений магнитного поля, при которых наблюдается основное состояние  $uud$ . На существование этой области указывает плато на уровне  $1/3$ , наблюдаемое на фазовой диаграмме намагниченности. В настоящей работе проведено исследование размеров этого плато в зависимости от величины коэффициента анизотропии.

Стандартным методом поиска основных состояний магнитных систем до последнего времени являлись многомасштабные симуляции Монте-Карло на основе алгоритма Метрополиса (см., например, [6]). Однако, в связи с развитием методов машинного обучения для решения физических задач (см., например, [7; 8]), недавно был предложен новый метод поиска основных состояний классических магнитных систем [9]. Идея метода заключается в обучении нейронной сети без учителя для поиска конфигурации взаимодействующих спинов на решетке, при которой магнитная энергия системы, выступающая в роли функции потерь, минимальна. В работе [9] показано существенное преимущество нового метода над традиционными симуляциями Монте-Карло в эффективности оптимизации. В работе [9] метод использован для поиска основных состояний магнетиков на прямоугольной решетке. В настоящей работе метод модифицирован для треугольной решетки и использован для расчета основных состояний антиферромагнетика в зависимости от внешнего магнитного поля и коэффициента анизотропии.

Статья построена следующим образом. В разделе 1 описана модель антиферромагнетика на треугольной решетке во внешнем поле с одноионной анизотропией. В разделе 2 кратко изложен вычислительный метод для поиска основного состояния на основе машинного обучения. В разделе 3 приведены численные результаты, фазовая диаграмма намагниченности и их обсуждение. Раздел 4 суммирует результаты работы.

### *1. Модель*

Рассмотрим модель Гейзенберга с классическими спинами на треугольной решетке, описываемую гамильтонианом

$$H = J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - B \sum_i S_i^z - D \sum_i (S_i^z)^2, \quad (1)$$

где  $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  – трехмерные векторы спинов,  $|\mathbf{S}_i|=1$ ,  $J$  – коэффициент обменного взаимодействия,  $B$  – величина внешнего магнитного поля (направленного вдоль оси  $z$ ) и  $D > 0$  – коэффициент одноионной анизотропии. Суммирование в первом слагаемом происходит по всем ближайшим соседям  $\langle i, j \rangle$  на двухмерной треугольной решетке с периодическими краевыми условиями. В зависимости от знака коэффициента  $J$ , гамильтониан (1) описывает ферромагнетик ( $J < 0$ ) или антиферромагнетик ( $J > 0$ ). В настоящей работе рассматривается антиферромагнитная система.

### 2. Вычислительный метод

Для поиска основного состояния модели (1) используем метод машинного обучения [9]. В основе метода лежит обучение нейронной сети, схематично представленной на Рис. 1. На вход нейронной сети подается вектор размерности  $n$  из случайных чисел. На каждом шаге обучения нейронной сети генерируется случайная выборка размерности  $[n_b, n]$  из таких векторов  $X$ . Далее нейронная сеть преобразует входные величины по формуле  $Y = XW + C$ , где  $W$  и  $C$  – веса и смещение нейронной сети размерностей  $[n, 3m]$  и  $[1, 3m]$  соответственно. В качестве выходных нейронов выступает вектор размерности  $3m$ , где  $m = L \times L$  – полное число спинов (трехмерных векторов) на решетке размерности  $L$ . На выходе получается выборка  $Y$  размерности  $[n_b, 3m]$  из  $n_b$  конфигураций  $m$  спинов магнитной системы. Полученные векторы спинов нормируются к единичным векторам. Нормировка спинов играет роль активационной функции в нейронной сети для обеспечения нелинейных связей между входными и выходными данными.



Рис. 1. Схематичное изображение нейронной сети и алгоритма для поиска основного состояния магнитной системы

Затем, используя полученную выборку из  $n_b$  конфигураций  $(\mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_m)$  спинов магнитной системы, вычисляется функция потерь, в качестве которой выступает усредненная энергетическая плотность

Поиск основных состояний гейзенберговского антиферромагнетика на треугольной ...

$$\langle \varepsilon \rangle_{n_b} = \left\langle -\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{h}_i^{eff} \right\rangle_{n_b}, \quad (2)$$

где  $\mathbf{h}_i^{eff} = -\partial H / \partial \mathbf{S}_i$  – эффективное магнитное поле. Величина  $\mathbf{h}_i^{eff}$  определяется модельным гамильтонианом  $H$  и типом решетки. Для поиска минимума функции потерь (2) используется метод оптимизации Adam [10] с коэффициентом скорости обучения  $\alpha = 0.001$ . Оптимизация происходит по весам  $W$  и смещению  $C$  нейронной сети. После обучения, когда алгоритм сходится к оптимальным значениям весов, обученная нейронная сеть на любых случайных входных данных выдает конфигурацию спинов  $(\mathbf{S}_1^*, \dots, \mathbf{S}_m^*)$ , отвечающую основному состоянию магнитной системы. Отметим, что обучение происходит без учителя, поскольку основное состояние гамильтониана  $H$ , вообще говоря, неизвестно.

Описанный метод поиска основного состояния магнитной системы реализован в виде программного комплекса на языке Python с использованием библиотеки машинного обучения Tensorflow [11]. Благодаря встроенным возможностям Tensorflow, программный комплекс легко ускоряется за счет параллельных вычислений на графических процессорах GPU.

### 3. Численные результаты и обсуждение

Параметры алгоритма выбраны следующим образом: размер выборки  $n_b = 256$ , число входных нейронов в сети  $n = 64$ , размеры решетки  $L = 9$  ( $m = 81$ ), число шагов обучения  $N = 10^4$ . Параметры модели (1): коэффициент обменного взаимодействия выбран равным  $J = 1$ , коэффициент анизотропии  $D/J = 0.05$  взят из работы [5], а внешнее магнитное поле  $V/J$  варьируется в диапазоне от 0 до 9. Все расчеты проведены на графическом процессоре GPU с использованием суперкомпьютера “Жорес” [12].

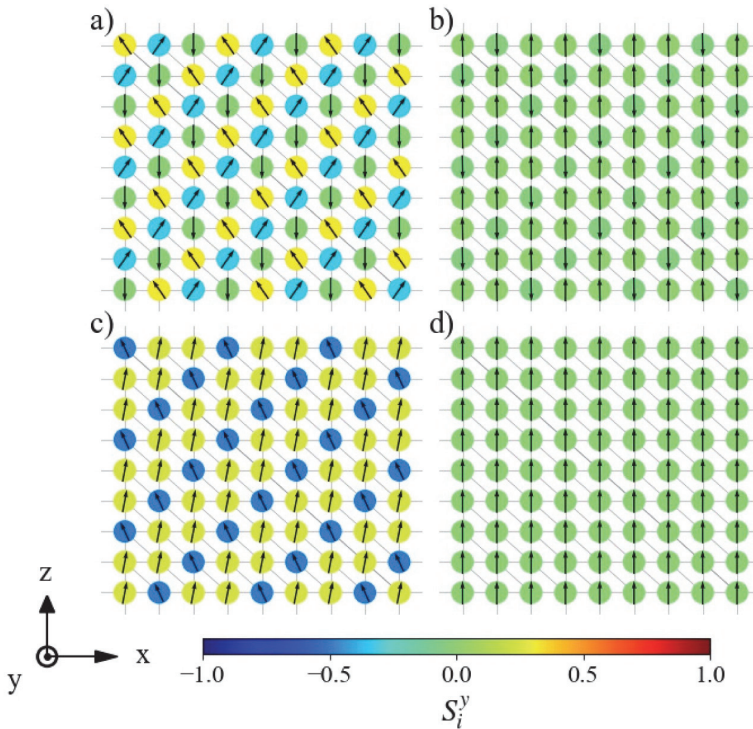
На Рис. 2 представлены конфигурации спинов на решетке в основных состояниях, вычисленных методом машинного обучения. Как видно из рисунка, алгоритм распознает четыре основных состояния системы в зависимости от величины внешнего поля  $V/J$ . При малых значениях  $V/J$ , система находится в основном состоянии Y, где один ближайший спин направлен обратно к направлению поля, а два других образуют “рогатку”, направленную в сторону поля (Рис. 2а). При достижении некоторого критического значения  $V/J$ , система переходит в состояние ucd, где два ближайших спина направлены вдоль поля, а третий – в обратном направлении (Рис. 2б). Затем система переходит в скошенное состояние, где два ближайших спина немного отклоняются от направления поля, а третий плавно разворачивается с ростом  $V/J$  в направлении поля (Рис. 2с). Наконец, система переходит в поляризованное состояние, где все спины направлены вдоль магнитного поля (Рис. 2д). Полученные основные состояния находятся в качественном согласии с результатами работы [5].

Чтобы оценить количественное согласие и точность полученных результатов, построим фазовую диаграмму намагниченности в направлении оси  $z$  и сравним с результатами работы [5]. Намагниченность вычисляется по формуле

$$M^z = \left\langle \sum_{i=1}^m S_i^z \right\rangle_{n_b}$$

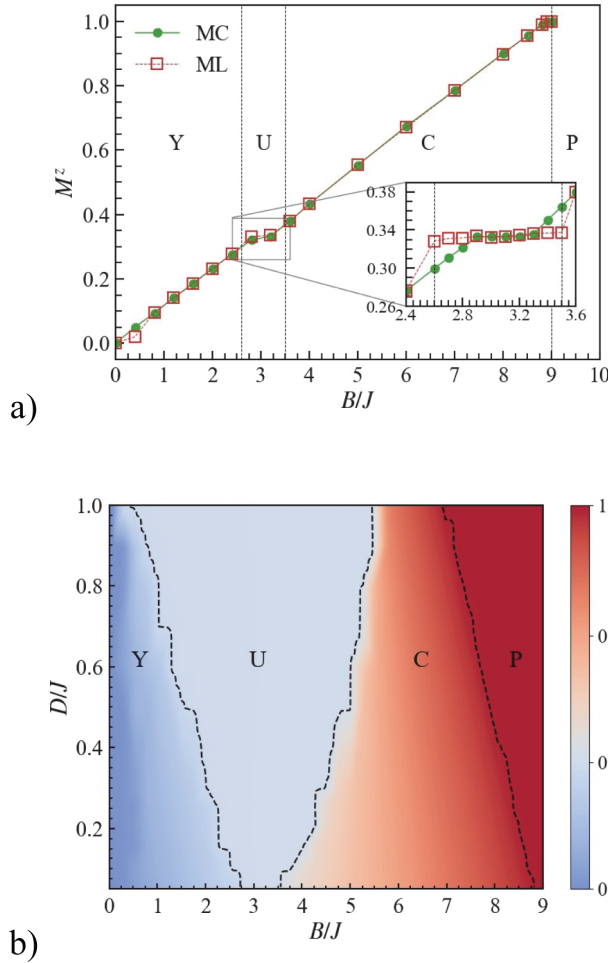
и принимает значения в диапазоне от нуля до единицы. При малых значениях магнитного поля  $V/J$ , когда система находится в состоянии Y, намагниченность  $M^z$  возрастает от

нуля к  $1/3$ . Фазе  $uid$  отвечает плато  $M^z$  на уровне  $1/3$ . В скошенной фазе  $M^z$  возрастает от  $1/3$  к единице. Когда  $M^z$  достигает единицы, система переходит в поляризованное состояние. На Рис. 2а приведена фазовая диаграмма намагниченности  $M^z$  как функции магнитного поля вычисленная с использованием метода машинного обучения, в сравнении с результатами симуляций Монте-Карло [5]. Из рисунка видно, что результаты двух методов почти полностью совпадают. Различия наблюдаются только на плато  $1/3$  в фазе  $uid$ : метод машинного обучения дает границы плато в интервале  $2.7 \leq B/J \leq 3.5$  против  $2.9 \leq B/J \leq 3.3$ , полученного в симуляциях Монте-Карло. Различие результатов объясняется тем, что поиск основного состояния в симуляциях Монте-Карло происходит при близких к нулю, но конечных температурах. В работе [9] отмечено, что метод машинного обучения сходится к спиновым конфигурациям, отвечающим меньшим значениям энергии системы (целевой функции), чем симуляции Монте-Карло. В связи с этим можно утверждать, что полученная оценка границ плато более точная.



**Рис. 2.** Конфигурации спинов антиферромагнетика на треугольной решетке (1) с коэффициентами обменного взаимодействия  $J=1$  и анизотропии  $D/J=0.05$ , вычисленные методом машинного обучения для а) Y, б)  $uid$ , в) скошенного и д) поляризованного основных состояний при внешнем магнитном поле равном  $B/J=1, 3, 7$  и  $9$  соответственно. Стрелки указывают направления спинов в плоскости  $xz$ , а цветом отмечены величины  $y$ -компоненты  $S_y^i$ .

Поиск основных состояний гейзенберговского антиферромагнетика на треугольной ...



**Рис. 3.** а) Фазовая диаграмма намагниченности  $M^z$  антиферромагнетика на треугольной решетке (1) при фиксированном значении коэффициента анизотропии  $D/J=0.05$ , вычисленная методом машинного обучения, в сравнении с симуляциями Монте-Карло [5]. Вертикальные пунктирные линии разделяют фазы, помеченные как Y – Y-фаза, U – фаза uud, C – (canted) скошенная фаза и P – поляризованная фаза. На врезке дана более подробно область плато  $1/3 M^z$  с большим количеством расчетных точек. б) Фазовая диаграмма намагниченности  $M^z$  как функции магнитного поля  $B/J$  и коэффициента анизотропии  $D/J$ , вычисленная методом машинного обучения. Пунктирные кривые разделяют четыре основных состояний – Y, U, C и P.

Для ответа на вопрос, как меняется граница плато в зависимости от коэффициента анизотропии  $D/J$ , построена фазовая диаграмма намагниченности  $M^z$  как функции  $B/J$  и  $D/J$  (см. Рис. 3б). Результаты расчетов показывают, что увеличение степени анизотропии приводит к существенным изменениям границ плато в фазе uud. Так, при  $D/J=0.05$  границы плато лежат в интервале  $2.7 \leq B/J \leq 3.5$ , а при  $D/J=1$  – в интервале

$1 \leq B/J \leq 5$ . Кроме того, с ростом  $D/J$  поляризация спинов наступает при меньшем значении поля  $B/J$ . При  $D/J=0.05$  переход в поляризованную фазу происходит при  $B/J=9$ , а при  $D/J=1$  полная поляризация наступает при  $B/J=7$ .

#### 4. Выводы

В настоящей работе новый метод машинного обучения успешно применен для исследования простой фрустрированной магнитной системы – антиферромагнетика с классическими спинами на треугольной решетке. Показано, что алгоритм распознает четыре основных состояния –  $Y$ ,  $uid$ , скошенное и поляризованное – в зависимости от величины внешнего магнитного поля в качественном согласии с симуляциями Монте-Карло. С помощью алгоритма вычислена фазовая диаграмма намагниченности  $M^z$  как функции внешнего магнитного поля  $B/J$  и коэффициента анизотропии  $D/J$ . Показано, что расчет  $M^z$  при малом  $D/J$  находится в полном согласии с симуляциями Монте-Карло, что подтверждает наличие плато  $1/3 M^z$  в конечном интервале значений  $B/J$ , соответствующем фазе  $uid$ . Получены оценки границ плато в зависимости от степени анизотропии: при  $D/J=0.05$  плато сохраняется в интервале  $2.7 \leq B/J \leq 3.5$ , а при  $D/J=1$  – в интервале  $1 \leq B/J \leq 5$ . Полученные результаты показывают, что границы плато  $1/3 M^z$  и фазы  $uid$  монотонно возрастают с ростом  $D/J$ .

Результаты работы открывают перспективы приложения метода машинного обучения для исследования более сложных фрустрированных магнитных систем, таких как скирмионы в модели с решеткой Шастри-Сазерленда и взаимодействием Дзялошинско-Мория [12].

#### Литература

1. Balents L. Spin liquids in frustrated magnets // Nature. 2010. Vol. 464. P. 199–208.
2. Wannier G. H. Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net // Phys. Rev. 1950. Vol. 79. P. 357–364.
3. Collins M., Petrenko O. Triangular antiferromagnets // Can. J. Phys. 1997. Vol. 75. P. 605.
4. Kawamura H., Miyashita S. Phase Transition of the Heisenberg Antiferromagnet on the Triangular Lattice in a Magnetic Field // J. Phys. Soc. Jap. 1985. Vol. 54, issue 12. P. 4530–4538.
5. Yun M., Jeon G. S. Classical Heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice in the presence of single-ion anisotropy // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. Vol. 592. P. 024423.
6. Hukushima K., Nemoto K. Exchange Monte Carlo Method and Application to Spin Glass Simulations // J. Phys. Soc. Jap. 1996. Vol. 65, issue 6. P. 1604–1608.
7. Carrasquilla J., Melko R. Machine learning phases of matter // Nature Phys. 2017. Vol. 13. P. 431.
8. Hu W., Singh R. R. P., Scalettar R. T. Discovering phases, phase transitions, and crossovers through unsupervised machine learning: A critical examination // Phys. Rev. E. 2017. Vol. 95. P. 062122.
9. Kwon H. Y., Kim N. J., Lee C. K., Won C. Searching magnetic states using an unsupervised machine learning algorithm with the Heisenberg model // Phys. Rev. B. 2019. Vol. 99. P. 024423.
10. Kingma D. P., Ba J. Adam: A method for stochastic optimization // arXiv, P. 1412.6980.

11. *TensorFlow: Large-scale machine learning on heterogeneous systems*, 2015. Software available from tensorflow.org.
12. Zacharov I., Arslanov R., Gunin M., Stefonishin D., Bykov A., Pavlov S., Panarin O., Maliutin A., Rykovanov S., Fedorov M. “Zhores” – Petaflops supercomputer for data-driven modeling, machine learning and artificial intelligence installed in Skolkovo Institute of Science and Technology // *Open Eng.* 2019. Vol. 9. P. 512–520.
13. Yu J., Li W., Huang Z., Liang J., Chen J., Chen D., Hou Z., Qin M. Skyrmion Crystals in Frustrated Shastry-Sutherland Magnets // *Physica Status Solidi – RRL.* 2019. Vol. 13, issue 11. P. 1900161.

### References

1. Balents L. Spin liquids in frustrated magnets // *Nature.* 2010. Vol. 464. P. 199–208.
2. Wannier G. H. Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net // *Phys. Rev.* 1950. Vol. 79. P. 357–364.
3. Collins M., Petrenko O. Triangular antiferromagnets // *Can. J. Phys.* 1997. Vol. 75. P. 605.
4. Kawamura H., Miyashita S. Phase Transition of the Heisenberg Antiferromagnet on the Triangular Lattice in a Magnetic Field // *J. Phys. Soc. Jap.* 1985. Vol. 54, issue 12. P. 4530–4538.
5. Yun M., Jeon G. S. Classical Heisenberg antiferromagnet on a triangular lattice in the presence of single-ion anisotropy // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2015. Vol. 592. P. 024423.
6. Hukushima K., Nemoto K. Exchange Monte Carlo Method and Application to Spin Glass Simulations // *J. Phys. Soc. Jap.* 1996. Vol. 65, issue 6. P. 1604–1608.
7. Carrasquilla J., Melko R. Machine learning phases of matter // *Nature Phys.* 2017. Vol. 13. P. 431.
8. Hu W., Singh R. R. P., Scalettar R. T. Discovering phases, phase transitions, and crossovers through unsupervised machine learning: A critical examination // *Phys. Rev. E.* 2017. Vol. 95. P. 062122.
9. Kwon H. Y., Kim N. J., Lee C. K., Won C. Searching magnetic states using an unsupervised machine learning algorithm with the Heisenberg model // *Phys. Rev. B.* 2019. Vol. 99. P. 024423.
10. Kingma D. P., Ba J. Adam: A method for stochastic optimization // *arXiv*, P. 1412.6980.
11. *TensorFlow: Large-scale machine learning on heterogeneous systems*, 2015. Software available from tensorflow.org.
12. Zacharov I., Arslanov R., Gunin M., Stefonishin D., Bykov A., Pavlov S., Panarin O., Maliutin A., Rykovanov S., Fedorov M. “Zhores” – Petaflops supercomputer for data-driven modeling, machine learning and artificial intelligence installed in Skolkovo Institute of Science and Technology // *Open Eng.* 2019. Vol. 9. P. 512–520.
13. Yu J., Li W., Huang Z., Liang J., Chen J., Chen D., Hou Z., Qin M. Skyrmion Crystals in Frustrated Shastry-Sutherland Magnets // *Physica Status Solidi – RRL.* 2019. Vol. 13, issue 11. P. 1900161.