



سیمای فاز مدل هایزبرگ: روش یادگیری ماشین

عبدالرضا رسولی کناری^۱ و محمدحسین زارع^{۲*}

۱. دانشکده برق و کامپیوتر، دانشگاه صنعتی قم، قم

۲. دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی قم، قم

پست الکترونیکی: zare@qut.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۸/۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۰/۱۰/۲۱)

چکیده

الگوریتم یادگیری ماشین به عنوان ابزاری قدرتمند، چشم انداز خوبی برای مطالعه فازهای مختلف ماده در زمینه فیزیک ماده چگال ترسیم می کند. در این مقاله سعی خواهیم کرد با بازبینی در فرمول بندی الگوریتم های شبکه عصبی عمیق، روشی نو جهت حل مسئله بهینه سازی سامانه های اسپینی، برای بررسی حالت پایه سامانه های مغناطیسی زیر دمای کوری، که تقارن دورانی اسپین به صورت خودبه خودی شکسته می شود، معرفی کنیم. با استفاده از روش شبکه یادگیری عمیق، سیمای فاز کلاسیکی مدل هایزبرگ همسانگرد شبکه مربعی و شبکه لانه زنبوری را مطالعه کردیم. نتایج به دست آمده با روش یادگیری ماشین، با سیمای فاز کلاسیکی مدل هایزبرگ که از دیگر روش های تحلیلی و محاسباتی پیدا شده، همخوانی کامل دارد. همچنین، در تحقیق حاضر که اساس آن بر یادگیری عمیق است، مزیت بالاتری نسبت به الگوریتم های تکاملی، که با چالش اساسی در حل مسئله های بهینه سازی مواجه اند، برخوردار است. بنابراین، توانایی الگوریتم های یادگیری ماشین نظیر شبکه عصبی عمیق در حل مسائل فیزیک ماده چگال، استفاده از آن را در مطالعه حالت پایه سامانه های مغناطیسی، اجتناب ناپذیر می سازد.

واژه های کلیدی: یادگیری ماشین، شبکه عصبی عمیق، روش بهینه سازی آدم، مدل هایزبرگ

۱. مقدمه

مستقیم، به مشاهده پذیرهای فیزیکی مرتبط می شوند. در فیزیک کوانتومی، ناوردایی مشاهده پذیرها تحت تبدیلات معین، دلالت بر وجود عملگر یکانی معینی بر روی فضای هیلبرت حالت ها دارد. اگر آن تبدیل تقارنی با دینامیک سامانه سازگار باشد، این به معنای جابه جایی پذیر این عملگر با هامیلتونی است که در این صورت منجر به ساختار چندگانه مشخصی در طیف آن می شود. هرچند، سامانه هایی وجود دارند که دینامیک آنها تحت تبدیلی ناوردا است، ولی تقارن مورد نظر در طیف یا

فیزیکدانان برای بررسی منشأ قوانین طبیعت، از مفاهیم تقارن استفاده می کنند. بنابراین مبحث تقارن در فهم طبیعت، نقش مهمی بازی می کند. با پیدایش مکانیک کوانتومی در قرن بیستم، استفاده از روش های تقارن مبتنی بر نظریه گروه، ابزار خوبی جهت مطالعه سامانه های فیزیکی به وجود آمد. در فیزیک کلاسیک، طبق قضیه نوتر، تقارن های فیزیک کلاسیک به طور

وجود تعداد بی‌نهایت حالت کمینه موضعی، به مراتب سخت‌تر است.

روش محاسباتی یادگیری ماشین را می‌توان به‌عنوان ابزاری قدرتمند برای تحقیقات فیزیک مدرن نام برد [۳ و ۴]. اخیراً در فیزیک ماده چگال، روش‌های محاسباتی یادگیری ماشین را برای مطالعه فازها و گذار فاز بین حالت‌های مختلف ماده [۵-۱۰]، حالت‌های مغناطیسی کوانتومی [۱۱-۱۷]، سامانه اسپینی کلاسیکی [۱۸-۲۰]، تجزیه و تحلیل نتایج تجربی [۲۱ و ۲۲] و جستجوی مواد جدید [۲۳]، مورد استفاده قرار گرفته‌اند. با استفاده از روش محاسباتی یادگیری ماشین که در مرجع‌های [۱۸-۲۰] ارائه شده‌اند، می‌توان آرایش‌های اسپینی متفاوت را با استفاده از کمینه‌کردن انرژی مغناطیسی، به دست آورد. بنابراین، این نتایج بیانگر این است که روش یادگیری ماشین را می‌توان برای مطالعه سامانه‌های همبسته قوی استفاده کرد و می‌تواند ابزاری مناسب برای حل مسئله‌های سخت و باز در زمینه فیزیک ماده چگال باشد.

در این مقاله سعی داریم که ابتدا روش محاسباتی شبکه یادگیری عمیق را با جزئیات بیان کنیم. سپس به تعیین حالت پایه مغناطیسی مدل اسپینی کلاسیکی هایزنبرگ، که شامل برهم‌کنش تبادلی بین همسایه اول و دوم روی شبکه‌های مربعی و لانه زنبوری است، پردازیم. در نهایت، سازگاری نتایج روش یادگیری ماشین با نتایجی که قبلاً با روش‌های محاسباتی دیگر به دست آمده است، را بررسی می‌کنیم.

۲. مدل هایزنبرگ

فیزیک ابررساناهای دمای بالا، مانند کوپرایت‌ها، در دو بُعد است، بدین معنی که الکترون‌ها به صورت مؤثر در صفحات دو بُعدی حرکت می‌کنند. بنابراین برای توصیف نظری این گونه مواد، از حرکت الکترون‌ها بین صفحات صرف‌نظر می‌شود. در ضمن، اتم‌هایی که نقش اصلی را در فیزیک این دسته از مواد دارند، مانند اتم مس در ابررسانایی کوپرایت‌ها، شبکه‌های دو بُعدی مربعی را تشکیل می‌دهند که اوربیتال d آنها در حال پر شدن است. باید توجه کرد که برهم‌کنش کولنی بین الکترون‌ها،

مشاهده‌پذیرهای فیزیکی قابل مشاهده نیست که از این، به عنوان شکست خودبه‌خودی تقارن نام برده می‌شود. بنابراین شکست خودبه‌خودی تقارن، زمانی اتفاق می‌افتد که هامیلتونی سامانه تحت تقارن خاصی ناورداست ولی حالت پایه سامانه آن تقارن را ندارد. فازهای مختلف ماده از قبیل ابررسانایی، ابرشارگی و فرومغناطیس و همچنین گذار فازهای ممکن در این سامانه‌ها را می‌توان با استفاده از این پدیده توصیف کرد. مواد مغناطیسی در دماهایی، زیر دمای کوری، خاصیت مغناطیسی پیدا می‌کنند، هرچند برهم‌کنش تبادلی بین ممان‌های مغناطیسی، جهت ارجحی را موجب نمی‌شوند. با توجه به این که از تقارن هامیلتونی نمی‌توان برای تعیین حالت‌های پایه مغناطیسی استفاده کرد، باید از روش‌های شهودی که همراه با حدسیات زیادی است، برای تعیین حالت پایه مغناطیسی استفاده کرد. تعیین حالت پایه مغناطیسی سامانه‌های مغناطیسی ناکام، سخت است؛ زیرا این‌گونه سامانه‌ها، حالت‌های با کمینه موضعی زیادی دارند که انرژی آنها به انرژی حالت کمینه کلی، نزدیک است. این ناکامی مغناطیسی را در سامانه‌هایی که با مدل‌های اسپینی ناکام توصیف می‌شوند، مانند مدل هایزنبرگ شامل برهم‌کنش همسایه‌های اول و دوم روی شبکه‌های مربعی و لانه زنبوری یا در سامانه‌هایی که هندسه شبکه آنها باعث ناکامی می‌شود مانند شبکه مثلثی و شبکه کاکومه، می‌توان جستجو کرد.

در فیزیک ماده چگال، روش‌های محاسباتی زیادی وجود دارند که برای فهم بهتر نتایج تجربی مورد استفاده قرار می‌گیرند. ساختارهای مغناطیسی را می‌توان با حل هامیلتونی اسپینی این گونه سامانه‌ها، با استفاده از روش‌های شبیه‌سازی عددی نظیر مونت‌کارلو و دینامیک اسپین [۱ و ۲]، مورد مطالعه قرار داد. مطالعه دقیق فازهای مغناطیسی متفاوت با استفاده از این روش‌ها خیلی سخت است؛ زیرا حالت‌های مغناطیسی زیادی با انرژی کمینه موضعی متفاوت از انرژی کمینه کلی در این سامانه‌ها وجود دارند. باید توجه کرد که استفاده از این روش برای تعیین حالت پایه سامانه‌های مغناطیسی که هامیلتونی آنها شامل برهم‌کنش‌های تبادلی ناهمسانگرد هستند، به خاطر

ناکام است.

۳. الگوریتم یادگیری ماشین

حالت پایه مدل اسپینی شبکه مربعی یا لانه زنبوری، در اصل یافتن آرایش اسپینی با کمترین انرژی است که این یک مسئله بهینه سازی خواهد بود. بدین منظور می توان از الگوریتم های تکاملی مانند ژنتیک (GA)^۱، تبرید شبیه سازی شده (SA)^۲ و کلونی مورچه ها برای حل این گونه مسئله ها استفاده کرد. روش حل مسئله با استفاده از الگوریتم های تکاملی، بدین گونه است که با کاوش و اکتشاف فضای حالت های محتمل برای اسپین ها، سعی در پیدا کردن آرایش اسپینی است که در آن تابع هدف، در اینجا انرژی حالت پایه هایزبرگ، به کمینه کلی خود برسد. چالش اساسی در حل مسئله های بهینه سازی با الگوریتم های تکاملی، بزرگ بودن فضای حالت های ممکن برای مسئله و همچنین وجود حالت های زیاد با کمینه های موضعی است که پیدا کردن پاسخ درست، که انرژی به ازای آن کمینه کلی دارد، را خیلی زمان بر و سخت می کند.

اخیراً روش های یادگیری ماشین، به ویژه شبکه های عصبی عمیق که در آن قدرت پردازش الگوریتم های یادگیری ماشین افزایش یافته است، می تواند برای حل مسئله هایی با فضای حالت های بزرگ، مناسب باشد. بنابراین با استفاده از شبکه های عصبی عمیق می توان چالش جدی در حل مسئله های اسپینی با روش های الگوریتم تکاملی را برطرف کرد. همچنین، شبکه های عصبی عمیق که قدرت پردازش بالاتری دارند را می توان برای حل مسائل بهینه سازی و یافتن فضای حالت های ممکن مسئله، جهت پیدا کردن آرایش اسپینی با انرژی کمینه کلی استفاده کرد. در این مقاله سعی خواهیم کرد با بازیابی در فرمول بندی شبکه های عصبی عمیق، روشی نو جهت حل مسئله بهینه سازی سامانه های اسپینی، برای پیدا کردن حالت پایه، ارائه دهیم. در این بخش، ابتدا روش شبکه های عصبی عمیق را با جزئیات بیشتر توضیح خواهیم داد و همچنین این روش را جهت بررسی حالت پایه سامانه های اسپینی، مورد بازیابی قرار می دهیم.

در اتم هایی که اوربیتال d یا f در حال پر شدن دارند، به خاطر گسترش فضایی کمتر در مقایسه با اوربیتال های s یا p، بسیار قوی تر است. گسترش فضایی کمتر اوربیتال های d یا f باعث می شود که دو الکترون با اسپین های مخالف در فاصله کمتری نسبت به هم قرار گیرند و در نتیجه دافعه کولنی افزایش می یابد. بنابراین از مرتبه بزرگی برهم کنش کولنی در عناصر مختلف، می توان آنها را به دو دسته، هم بسته ضعیف یا هم بسته قوی، تقسیم بندی کرد. در این مقاله علاقه مندیم که روی سامانه های هم بسته قوی متمرکز شویم. در این گونه سامانه ها که برهم کنش کولنی قوی است، الکترون ها به صورت جداگانه، جایگاه های شبکه را اشغال می کنند که انرژی سامانه را کمینه کنند. به این حالت، حالت نیمه پر گفته می شود. در این صورت، درجات آزادی بار یخ می زنند و فیزیک این دسته از سامانه ها، به صورت مؤثر، تنها با درجات آزادی اسپینی توصیف می شود.

در این مقاله علاقه مندیم مدل هایزبرگ همسانگرد $S = \frac{1}{2}$ شبکه های مربعی و لانه زنبوری را که به صورت زیر تعریف می شود مطالعه کنیم:

$$H = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j, \quad (1)$$

که J_1 و J_2 به ترتیب برهم کنش های تبادلی پادفرومغناطیس بین همسایه های اول و دوم روی شبکه های مربعی و لانه زنبوری را نشان می دهند، (شکل ۱ را ببینید). قابل ذکر است که در این دو مورد، ناکامی مغناطیسی از وجود رقابت بین برهم کنش های تبادلی بین همسایه های اول و دوم روی این دو شبکه ناشی می شود؛ زیرا اسپین ها تمایل دارند نسبت به اسپین های روی جایگاه های همسایه، به صورت پادموازی قرار بگیرند که انرژی سامانه کمینه شود. بنابراین یک اسپین که در یک جایگاه قرار دارد نمی تواند به طور هم زمان، با اسپین های همسایه اول و دوم خود به صورت پادموازی جهت گیری کند. در این صورت به ازای مرتبه بزرگی خاصی از ثابت های جفت شدگی، سامانه نمی تواند حالت پایه یکتا پیدا کند و حالت هایی با انرژی یکسان در این گونه سامانه ها زیاد می شود که در این حالت، می گوئیم که سامانه در پیدا کردن حالت پایه،

۱. Genetic Algorithm

۲. Simulated Annealing

۳.۱. شبکه عصبی عمیق

روش شبکه عصبی عمیق از سه لایه اصلی از نورون‌ها (۱) لایه ورودی، (۲) لایه پنهان میانی و (۳) لایه خروجی تشکیل شده است. مبنای اصلی کار در روش شبکه عصبی عمیق، یافتن رابطه مؤثر بین داده‌های ورودی و داده‌های خروجی بر اساس این رابطه، بتوان برای هر داده ورودی جدید، خروجی درست را به دست آورد. با شبکه عصبی عمیق می‌توان هرگونه روابط خطی یا غیرخطی را بین داده‌های ورودی و داده‌های خروجی مدل‌سازی کرد. در واقع، در شبکه عصبی عمیق، باید مجموعه پارامتر Θ را طوری انتخاب کرد که برای مجموعه داده‌های آموزشی، رابطه زیر برقرار باشد:

$$Y = f_{\Theta}(X), \quad X = \{X_1, X_2, \dots, X_n\}, \quad (2)$$

$$Y = \{Y_1, Y_2, \dots, Y_n\},$$

که در آن Θ ، مجموعه پارامترهای یادگیری شونده شبکه عصبی، X و Y به ترتیب داده‌های آموزشی ورودی و خروجی شبکه و n تعداد نمونه‌های آموزشی هستند. در این روش، با تغییر پارامتر یادگیری، Θ ، باید رابطه (۲) به ازای تمام داده‌های آموزشی (ورودی و خروجی) برقرار باشد یا کمترین مقدار خطا را داشته باشد. تابع خطا، که معمولاً در محاسبات از تابع مجذور مربعات استفاده می‌شود، را می‌توان با مقایسه داده‌های خروجی داده شده Y و خروجی شبکه با استفاده از رابطه زیر، به دست آورد:

$$L = \sum_i |Y_i^* - Y_i|^2 = \sum_i |f_{\Theta}(X_i) - Y_i|^2, \quad (3)$$

که در آن Y^* و Y به ترتیب داده‌های خروجی شبکه و مقدار واقعی در داده‌های آموزشی هستند. اینجا نیاز است که Θ را طوری بیابیم که مقدار تابع خطا (L) کمینه شود. بدین منظور باید از تابع خطا نسبت به پارامتر یادگیری شونده، مشتق بگیریم، $\frac{dL}{d\Theta}$ ، و در جهت عکس شیب تابع مذکور، به سمت نقطه کمینه حرکت کنیم. لازم به ذکر است: مقادیر پارامترهای یادگیری شونده که با توجه به مقدار مشتق به دست آمده اند باید طوری تغییر پیدا کنند که در جهت منفی شیب، به سمت نقطه

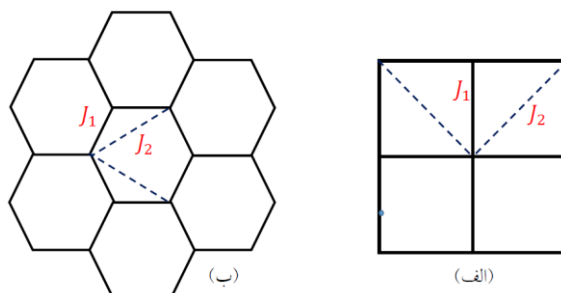
کمینه نزدیک شوند، تا بهترین مقدار برای این پارامترها به دست بیاید. از این روش به عنوان گرادینان کاهش نام برده می‌شود. چالش اصلی در استفاده از روش شبکه عصبی عمیق برای حل مسائل بهینه‌سازی، فقدان داده‌های آموزشی مورد نیاز برای یادگیری شبکه است. در واقع، در مسئله بهینه‌سازی، باید به مجموعه‌ای از جواب‌ها دسترسی داشته باشیم که از آنها به عنوان داده‌های آموزشی، برای یادگیری شبکه عصبی استفاده کنیم. بنابراین با داشتن مجموعه‌ای از این داده‌های آموزشی، که به عنوان داده‌های ورودی و خروجی شبکه عصبی در نظر گرفته می‌شوند، می‌توان به شبکه، آموزش لازم را برای حل مسئله داد. در یک مسئله بهینه‌سازی، تابع هدف مشخص است و تلاش برای یافتن پاسخ کمینه است، در حالی که در شبکه عصبی عمیق سعی می‌شود با داشتن پاسخ‌های مسئله، تابع مورد نظر تخمین زده شود. باید توجه کرد که در الگوریتم‌های تکاملی با داشتن تابع هدف، با خلق جواب‌های متفاوت، سعی در انتخاب بهترین جواب از میان جواب‌های ممکن هستیم، در حالی که در شبکه عصبی عمیق، با داشتن جواب‌ها، سعی در پیدایش رابطه مؤثر بین داده‌های ورودی و خروجی هستیم. در بخش بعدی، سعی خواهیم کرد با بازنویسی فرمول‌بندی شبکه عصبی عمیق، از توانایی‌های آن برای حل مسئله بهینه‌سازی سامانه‌های اسپینی، جهت پیدا کردن حالت پایه مغناطیسی، استفاده کنیم.

۳.۲. شبکه عصبی عمیق بهینه‌ساز برای سامانه‌های اسپینی

همان طور که قبلاً ذکر شد، روش اصلی حل مسئله با شبکه یادگیری عمیق^۲ (DL)، یافتن مجموعه پارامترهای یادگیری شونده است. هرچند، برای یافتن پارامترهای یادگیری شونده، نیاز است مجموعه‌ای از جواب‌های درست را، به عنوان داده‌های آموزشی، به شبکه عصبی عمیق داد. در مورد حالت پایه سامانه‌های اسپینی، که در این مقاله مدنظر است، آرایش‌های

۱. Gradient Descent

۲. Deep Learning



شکل ۱. نمایش شبکه‌های (الف) مربعی و (ب) لانه زنبوری، که J_1 و J_2 به ترتیب برهم‌کنش‌های بین اسپین هر جایگاه با اولین و دومین همسایه‌اش را نشان می‌دهد.

می‌گیریم. بنابراین، انرژی کلاسیکی هر اسپین برابر است با:

$$\varepsilon = \frac{1}{Q} \sum_i \bar{M}_i \cdot \bar{S}_i, \quad (5)$$

که Q تعداد کل اسپین‌های شبکه را نشان می‌دهد. طبق این رابطه، برای کمینه شدن انرژی سامانه، اسپین‌ها روی هر جایگاه شبکه باید به گونه‌ای باشند که در خلاف جهت میدان مؤثر \bar{M}_i که احساس می‌کنند، جهت‌گیری کنند. در اینجا، انرژی میانگین سامانه، به عنوان تابع هدف است که برای پیدا کردن آرایش اسپینی مناسب به ازای ثابت‌های تبدیلی مختلف در روش شبکه عصبی عمیق، باید تا حد امکان به مقدار کمینه آرمایش، نزدیک شود تا تابع خطا به کمترین مقدار خود برسد. در این مقاله، برای سادگی در انجام محاسبات، $J_1 = 1$ در نظر گرفته‌ایم.

اینجا سعی می‌کنیم روش عددی شبکه عصبی عمیق را با جزئیات بیشتر توضیح دهیم. همان‌طور که در شکل ۲ نشان داده شده است، لایه ورودی شامل ماتریس واحد است که به نوروهای لایه میانی، مرتبط است. نوروهای لایه میانی را می‌توان با ضرب ماتریس ورودی در ماتریس وزن $W_{1 \times (L \times L)}$ و جمع با ماتریس سوپیده $B_{1 \times (L \times L)}$ از طریق رابطه زیر به دست آورد، که همان پارامترهایی هستند که باید توسط شبکه یادگیری شوند.

$$S_{1 \times (L \times L)} = X_{1 \times 1} \cdot W_{1 \times (L \times L)} + B_{1 \times (L \times L)}, \quad (6)$$

با استفاده از روش گرادیان کاهشی، این مقادیر باید آن قدر تغییر کنند تا بهترین مقدار با کمترین مقدار خطا در نهایت به دست آید که به فرایند فوق، آموزش شبکه می‌گویند. توجه

اسپینی درست را که به ازای آن، انرژی سامانه در کمینه کلی خودش قرار دارد، از قبل نداریم. بنابراین داده‌های ورودی و خروجی مورد نیاز برای آموزش شبکه عصبی عمیق، در دسترس نیستند.

برای پیدا کردن حالت پایه مدل هایزبرگ با استفاده از روش شبکه عصبی، این روش را به گونه‌ای بازنویسی می‌کنیم که آرایش اسپین‌ها به عنوان پارامترهای شبکه عصبی شناخته شوند. در واقع، با بازنویسی این روش، به جای در نظر گرفتن بردار اسپین به عنوان نوروهای ورودی، از آنها به عنوان پارامترهای یادگیری شونده استفاده خواهیم کرد. در نتیجه می‌توان با استفاده از شبکه عصبی عمیق، بهترین آرایش با کمترین انرژی را پیدا کرد.

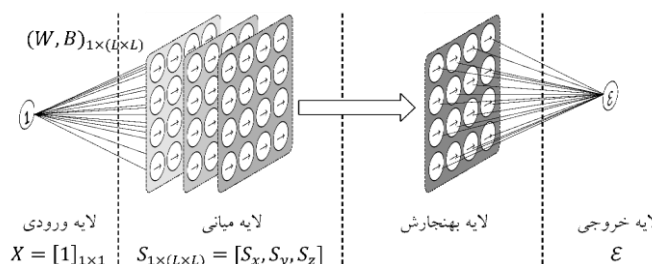
برای حل مسئله با این روش، شبکه با شرایط مرزی دوره‌ای به ابعاد $L_x \times L_y$ در نظر می‌گیریم. در اینجا، اسپین‌ها همانند برداری $\bar{S} = [S_x, S_y, S_z]$ روی جایگاه‌ها مختلف شبکه در نظر گرفته می‌شوند. برای هر آرایش اسپینی، می‌توان هامیلتونی سامانه را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$H = J_1 \sum_{\langle ij \rangle} \bar{S}_i \cdot \bar{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \bar{S}_i \cdot \bar{S}_j = \sum_i \bar{M}_i \cdot \bar{S}_i, \quad (4)$$

که در آن

$$\bar{M}_i = J_1 \sum_{j: \langle ij \rangle} \bar{S}_j + J_2 \sum_{j: \langle\langle ij \rangle\rangle} \bar{S}_j$$

توجه داشته باشید که اثرات برهم‌کنش هر اسپین با همسایه‌هایش را به صورت میدان مغناطیسی مؤثری همانند \bar{M}_i در نظر



شکل ۲. طرح کلی شبکه عصبی عمیق، متشکل از سه بخش لایه ورودی، میانی و خروجی.

بیشتری را انتخاب کنیم. بنابراین، بردار ورودی که یک درایه داشت به برداری با n درایه تبدیل می‌شود و همچنین تعداد نمونه‌های ورودی به N نمونه افزایش می‌یابد. برای انجام ضرب ماتریسی در رابطه (۵)، لازم است که ماتریس وزنی همانند $W_{n \times (L \times L)}$ در نظر گرفته شود. هرچند باید دقت کرد که اگر هر مرحله یادگیری، با در نظر گرفتن تمام نمونه‌ها انجام گیرد، سرعت یادگیری به شدت پایین می‌آید. بدین منظور، هر بار از فضای حالت مربوط به ورودی‌های مختلف، به صورت تصادفی چند نمونه انتخاب می‌شود و با میان‌گیری روی نمونه‌های متفاوت، انرژی محاسبه می‌شود. در شبکه عصبی عمیق، از این به عنوان روش مینی بچ^۱ یاد می‌شود. طرح نهایی شبکه عصبی عمیق استفاده شده را در شکل ۳ مشاهده می‌کنید.

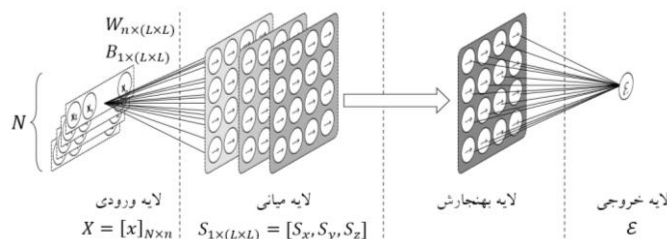
باید دقت کرد که در حل مسئله‌های بهینه‌سازی، بسیار محتمل است که سامانه در کمینه‌های موضعی قرار بگیرد. برای این که سامانه بتواند به کمینه کلی خودش برسد، در این مقاله، از دو روش متفاوت استفاده کرده‌ایم. در روش اول، به جای استفاده از روش گرادیان کاهشی جهت یادگیری ماتریس وزن شبکه عصبی، از روش بهینه‌سازی آدام^۲ استفاده کرده‌ایم [۲۴]. در روش آدام، برای انجام محاسبات یادگیری ماتریس وزن، گشتاورهای مرتبه اول و دوم به صورت همزمان، در نظر گرفته می‌شوند. با در نظر گرفتن مراتب بالاتر گشتاور، می‌توان در بسیاری از موارد، سامانه را از قرار گرفتن در کمینه‌های موضعی دور کرد و به کمینه کلی سوق داد. در روش دوم، به جای در نظر گرفتن مقادیر ثابت برای پارامتر نرخ یادگیری آدام (α),

داشته باشید که در شبکه عصبی عمیق، عناصر ماتریس وزن می‌توانند هر مقداری را اختیار کنند. بنابراین ممکن است که مقادیر نهایی به دست آمده برای اسپین‌ها، هر مقدار دلخواهی داشته باشد. برای اعمال شرط سخت، که اندازه اسپین در هر جایگاه باید یک باشد، آنها از یک لایه بهنجارش عبور داده می‌شوند تا بردارهای مربوط به اسپین‌ها، بهنجارش شوند. در گام بعدی، با محاسبه انرژی سامانه، مقدار خطا را می‌توان با اختلاف انرژی حاصل با آرمانی‌ترین انرژی سامانه، یعنی QSM_{max} - (که در آن، M_{max} بیشینه میدان مغناطیسی مؤثر میانگینی است که هر اسپین می‌تواند احساس کند)، با استفاده از رابطه (۳) به دست آورد و از میزان خطای محاسبه شده، ماتریس‌های وزن و سویدیه مربوطه را اصلاح کرد. این فرایند باید تا همگرا شدن این روش به یک مقدار بهینه، ادامه یابد.

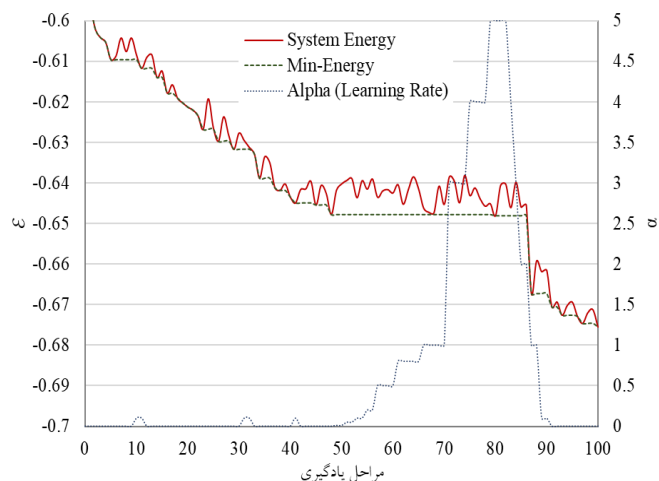
یکی از کاستی‌های روش شبکه عصبی عمیق، احتمال بیش‌برازش یا یادگیری بیش‌ازحد شبکه است. با توجه به داده‌های کم آموزشی برای سامانه‌های اسپینی و همچنین زیاد بودن پارامترهای یادگیری، احتمال بیش‌برازش به‌خودی‌خود افزایش می‌یابد. جهت رفع این نقصان، لایه ورودی را بزرگ‌تر خواهیم کرد تا ترکیب احتمالاتی بیشتری جهت پیدا کردن آرایش اسپینی با کمترین انرژی را داشته باشیم. با توجه به بزرگی فضای حالت‌های ممکن برای سامانه‌های اسپینی، تنها با در نظر گرفتن یک نمونه ورودی حتی با ابعاد بزرگ‌تر، منتج به قدرت اکتشافی زیادی برای شبکه نمی‌شود. برای اطمینان از درستی حالت پایه به دست آمده، از تعداد بیشتری نمونه ورودی جهت یادگیری شبکه استفاده می‌کنیم که این امکان را می‌دهد که آرایش‌های اسپینی

۱. Mini-Batch

۲. Adam Optimizer



شکل ۳. طرح کلی شبکه عصبی عمیق با داده‌های ورودی بیشتر، جهت رفع احتمال بیش‌برازش.



شکل ۴. تغییر دینامیکی نرخ یادگیری، α ، به‌عنوان تابعی از زمان، که دور شدن از کمینه موضعی را نشان می‌دهد.

می‌ماند. اگر پارامتر نرخ یادگیری را ثابت در نظر بگیریم، سامانه در کمینه موضعی باقی خواهد ماند. با بهره‌گیری از نرخ یادگیری دینامیکی و افزایش آن، سامانه از مرحله ۹۰ به بعد، از کمینه موضعی خارج شده و به یک فضای حالت جدید با انرژی پایین‌تر قرار می‌گیرد. نتایج نشان می‌دهد که در نظر گرفتن نرخ یادگیری دینامیک، به سامانه این اجازه را می‌دهد که حالت‌هایی را با انرژی پایین‌تر، نسبت به حالتی که نرخ یادگیری ثابت است، پیدا کند. در ادامه، فرایند یادگیری شبکه عصبی عمیق پیشنهادی را با جزئیات بیشتر توضیح خواهیم داد.

(الف) مقداردهی اولیه:

ابتدا ماتریس ورودی $X_{N \times n}$ ، ماتریس وزن $W_{n \times (L \times L)}$ و بردار سوئیچ $B_{1 \times (L \times L)}$ با توجه به اندازه شبکه L ، بعد ورودی n و تعداد نمونه‌های در نظر گرفته‌شده برای ورودی N با اعداد تصادفی مقداردهی می‌شوند. قابل ذکر است که اگر اعداد در نظر گرفته شده کاملاً تصادفی باشند طوری که میانگین آنها صفر

اجازه می‌دهیم این پارامتر با شرایط لحظه‌ای مسئله تغییر کند. پارامتر نرخ یادگیری آدام جهت کنترل یادگیری شبکه عصبی عمیق استفاده می‌شود. توجه داشته باشید در این روش، با نزدیک شدن تابع هدف به مقدار کمینه کلی، باید پارامتر نرخ یادگیری کاهش یابد تا به سامانه اجازه دهیم که با آهنگ تغییرات کم، به کمینه کلی‌اش نزدیک شود. قابل ذکر است که در این حالت، در نظر گرفتن مقدار نرخ یادگیری بزرگ‌تر، سامانه را از کمینه کلی‌اش دور می‌کند. در ضمن، همان‌طور که در شکل ۴ نشان داده شده است، می‌توان با تغییر پارامتر نرخ یادگیری، سامانه را از کمینه موضعی خارج کرد و به سامانه اجازه داد که در کمینه کلی‌اش قرار گیرد. شکل ۴، یک برش ۱۰۰ مرحله‌ای از یادگیری سیستم شبکه عصبی مورد استفاده را نشان می‌دهد. همان‌طور که واضح است نمودار تغییرات انرژی سامانه (System_Energy) از مرحله ۵۰ به بعد، تغییر موثری نمی‌کند و سامانه در کمینه موضعی قرار می‌گیرد و نمودار کمینه انرژی یافت‌شده (Min_Energy) تا این مرحله، ثابت باقی

گشتاور مرتبه دوم (η) ، پارامترهای یادگیری (W, B) در روش آدم از روابط بازگشتی زیر محاسبه می‌شوند:

$$\begin{aligned} \rho_t^{(W)} &= \gamma_1 \cdot \rho_{t-1}^{(W)} + (1-\gamma_1) \frac{dY}{dW_t}, \\ \eta_t^{(W)} &= \gamma_2 \cdot \eta_{t-1}^{(W)} + (1-\gamma_2) \left(\frac{dY}{dW_t} \right)^2, \\ \rho^{(W)} &= \frac{\rho_t^{(W)}}{1-\gamma_1^t}, \quad \eta^{(W)} = \frac{\eta_t^{(W)}}{1-\gamma_2^t}, \\ \rho_t^{(B)} &= \gamma_1 \cdot \rho_{t-1}^{(B)} + (1-\gamma_1) \left(\frac{dY}{dB_t} \right), \\ \eta_t^{(B)} &= \gamma_2 \cdot \eta_{t-1}^{(B)} + (1-\gamma_2) \left(\frac{dY}{dB_t} \right)^2, \\ \rho^{(B)} &= \frac{\rho_t^{(B)}}{1-\gamma_1^t}, \quad \eta^{(B)} = \frac{\eta_t^{(B)}}{1-\gamma_2^t}, \end{aligned} \quad (10)$$

γ_1 و γ_2 به ترتیب، ضرایب فراموشی گرادیان و گشتاور دوم گرادیان هستند و t نمایانگر تکرار در هر مرحله از یادگیری است. t در هر مرحله یادگیری، یک واحد افزایش می‌یابد. با استفاده از رابطه (۱۰)، می‌توان پارامترهای یادگیری را همانند زیر اصلاح کرد:

$$\begin{aligned} W_t &= W_{t-1} - \alpha \left(\frac{\rho^{(W)}}{\sqrt{\eta^{(W)}} + \delta} \right), \\ B_t &= B_{t-1} - \alpha \left(\frac{\rho^{(B)}}{\sqrt{\eta^{(B)}} + \delta} \right), \end{aligned} \quad (11)$$

α پارامتر نرخ یادگیری و δ یک مقدار بی‌نهایت کوچک است که برای رفع تکینگی در محاسبات عددی به مخرج کسر اضافه می‌شود.

(د) اعمال پویای نرخ یادگیری:

بر اساس شرایط لحظه‌ای که سامانه دارد، می‌توان با تغییر پویای نرخ یادگیری بر اساس روابط زیر، سامانه را از باقی ماندن در کمینه‌های موضعی دور کرد.

$$\begin{aligned} P(\alpha \uparrow) &= \begin{cases} 1 & \Delta \varepsilon > 0 \\ 0 & \Delta \varepsilon < 0 \end{cases}, \\ P(\alpha \downarrow) &= \begin{cases} 1 & \Delta \varepsilon < 0 \\ 0 & \Delta \varepsilon > 0 \end{cases}, \end{aligned} \quad (12)$$

در این رابطه، چنانچه مقدار انرژی تغییر نکند $\Delta \varepsilon = 0$ ، نرخ یادگیری $\alpha \uparrow$ افزایش می‌یابد تا سامانه از کمینه موضعی خارج شود. به محض کاهش مقدار انرژی و خارج شدن سامانه از

باشد، سرعت یادگیری بیشتر خواهد شد.

(ب) مرحله پیش‌رو:

همان‌گونه که قبلاً ذکر شد، جهت افزایش سرعت یادگیری شبکه، به جای انتخاب همه نمونه‌های ورودی در هر تکرار، تعداد نمونه (R) به صورت تصادفی انتخاب می‌شود و برای محاسبه تابع هدف، روی همه نمونه‌های انتخابی، میان‌گیری می‌شود. مطابق با رابطه (۵)، آرایش اولیه اسپین‌ها روی شبکه، با ضرب بردار ورودی در ماتریس وزن و جمع آن با ماتریس سوئیده به دست می‌آید. برای اعمال شرط سخت، که اندازه اسپین در هر جایگاه باید یک باشد، آنها از یک لایه بهنجارش عبور داده می‌شوند تا بردارهای مربوط به اسپین‌ها، بهنجار شوند. چنانچه انرژی مربوط به آرایش به دست آمده، از انرژی حالت قبلی کمتر باشد، این آرایش به عنوان آرایش جدید انتخاب می‌شود و در غیر این صورت در همان حالت قبلی باقی می‌ماند. احتمال پذیرش را می‌توان با استفاده از اختلاف انرژی حالت‌های قدیم (S_{old}) و حالت جدید (S_{new}) ، همانند زیر بیان کرد:

$$\begin{aligned} \Delta \varepsilon &= \varepsilon_{new} - \varepsilon_{old}, \\ P(S_{old} \rightarrow S_{new}) &= \begin{cases} 1 & \Delta \varepsilon < 0 \\ 0 & \Delta \varepsilon > 0 \end{cases}, \end{aligned} \quad (7)$$

(ج) پس‌انتشار خطا و اصلاح پارامترهای ماتریس‌های وزن و

سوئیده به روش آدم:

مشق جزئی تابع خطا نسبت به هر یک از پارامترهای یادگیری وزن و سوئیده را می‌توان همانند زیر تعریف کرد:

$$\begin{aligned} \frac{dY}{dW} &= \frac{dY}{d\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dS} \frac{dS}{dW} = \frac{\gamma}{R} | \varepsilon_{t \text{ arg et}} - \varepsilon_{net} | \times \sum_{i=1}^{L \times L} Q \overline{M}_i \times \overline{X}, \\ \frac{dY}{dB} &= \frac{dY}{d\varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dS} \frac{dS}{dB} = \frac{\gamma}{R} | \varepsilon_{t \text{ arg et}} - \varepsilon_{net} | \times \sum_{i=1}^{L \times L} Q \overline{M}_i \times \overline{X}, \end{aligned} \quad (8)$$

که در آن

$$\begin{aligned} \varepsilon_{net} &= \frac{1}{R} \sum_{r=1}^R \varepsilon(S_r), \quad \varepsilon_{t \text{ arg et}} = -QSM_{max}, \\ Y &= | \varepsilon_{net} - \varepsilon_{t \text{ arg et}} |^2, \end{aligned} \quad (9)$$

با استفاده از رابطه (۹)، بردارهای گشتاور مرتبه اول $(\hat{\rho})$ و

موج متناظر با آن متناسب با بردار شبکه وارون است، حالت کمینه انرژی موضعی شامل حوزه‌هایی محدود با نظمی مشابه حالت پایه است که با دیواره‌هایی از هم جدا شده‌اند. باید توجه داشته باشید که در روش شبکه عصبی عمیق، تعداد مراحل یادگیری ثابت در نظر گرفته نشده است و در این روش، با نزدیک شدن به عدد اشباع، آهنگ تغییرات انرژی کاهش می‌یابد تا سامانه، حالت پایه با کمینه کلی را پیدا کند (ردیف آخر شکل ۵ را ببینید). با افزایش اندازه شبکه، تعداد مراحل یادگیری که سامانه به آرایش اسپینی نهایی‌اش برسد، به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد.

با این توضیح کلی که چگونه می‌توان با روش عصبی عمیق، حالت پایه سامانه‌های مغناطیسی را پیدا کرد، در ادامه به مطالعه سیمای فاز کلاسیکی مدل هایزبرگ همسانگرد همسایه اول و دوم شبکه مربعی و شبکه لانه زنبوری خواهیم پرداخت.

۴.۱. سیمای فاز کلاسیکی مدل هایزبرگ شبکه مربعی

آرایش اسپینی به دست آمده با استفاده از روش عددی شبکه عصبی عمیق نشان می‌دهد که با افزایش برهم‌کنش تبادل همسایه دوم تا $J_2 < \frac{1}{4}$ ، نظم پادفرومغناطیس هنوز پایدار است که در این آرایش اسپینی، اسپین‌های همسایه هر جایگاه به صورت پادموازی جهت‌گیری کرده‌اند (شکل ۶. الف را ببینید). فاز میانی پیچشی، شکل ۶. ب، فقط به $J_2 = \frac{1}{4}$ پایدار است. محاسبات نشان می‌دهد که حالت پایه کلاسیکی پیچشی، واگنی بی‌نهایت دارد. قابل ذکر است که بردار موج متناظر با نظم پیچشی، ضریب گویایی از بردار شبکه وارون نیست، یعنی بردار موج ناجور $\vec{q}_{inc} \neq \frac{c}{d}G$ ، که در آن c و d اعداد صحیح هستند. همچنین به ازای $J_2 > \frac{1}{4}$ ، نظم مغناطیسی هم‌خط با بردار موج $\vec{q} = (\pi, 0)$ یا $\vec{q} = (0, \pi)$ پایدار است. در فاز مغناطیسی هم‌خط، جهت‌گیری اسپین‌ها در یک راستای شبکه مربعی به صورت فرومغناطیس و در راستای دیگر شبکه، آرایش پادفرومغناطیس دارند (شکل ۶. ج را ببینید).

کمینه موضعی $\Delta E < 0$ ، نرخ یادگیری $\downarrow \alpha$ کاهش می‌یابد تا به کمینه کلی نزدیک شود.

(ه) تکرار مراحل یادگیری:

برای رسیدن به حالت پایه درست، مراحل فوق باید تکرار شوند تا یکی از شرایط زیر برقرار شود:

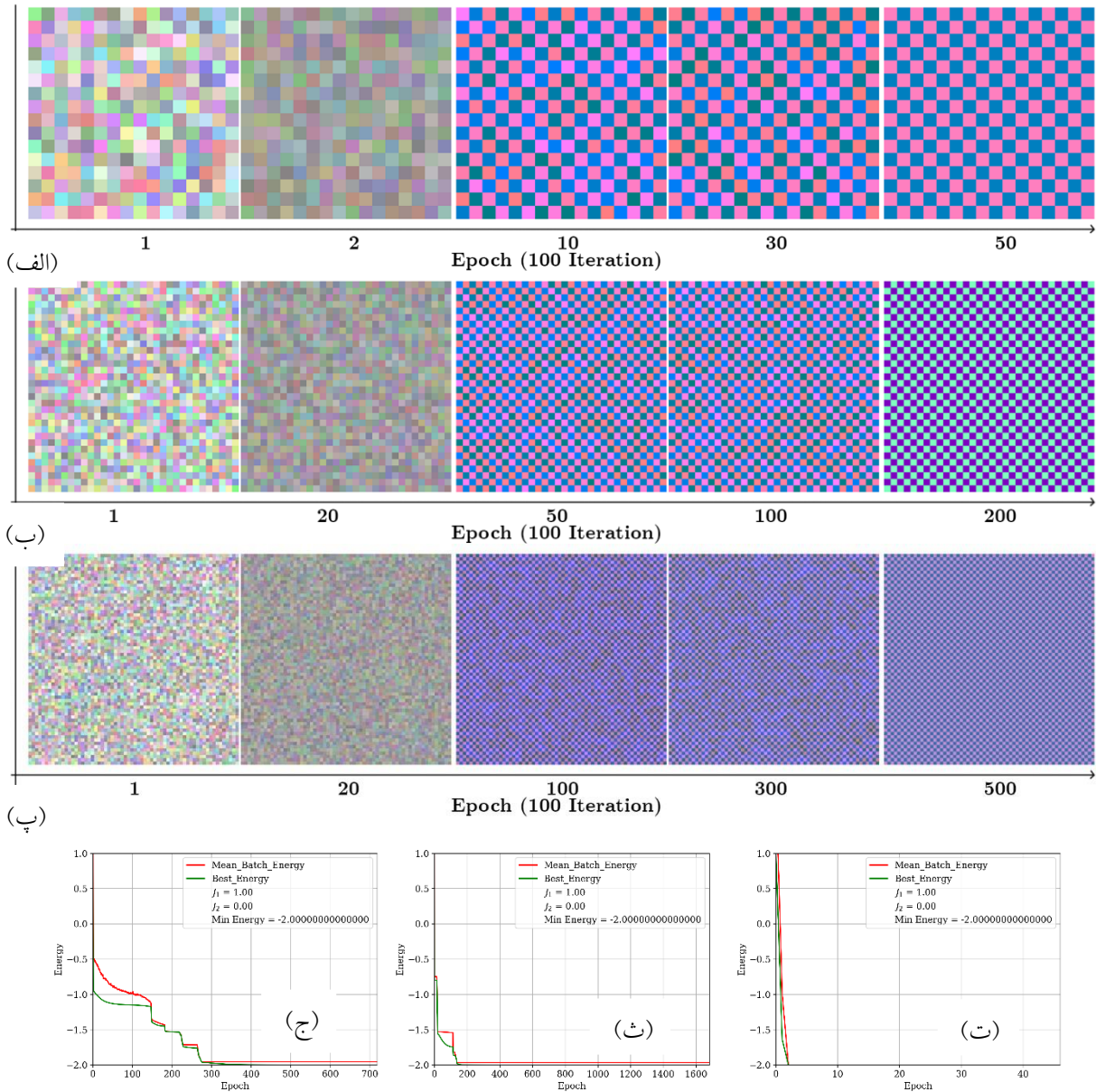
- سامانه به حالتی با مقدار کمینه کلی همگرا شود.
- میزان خطا از یک حد آستانه تعیین شده کمتر شود.
- تعداد مراحل تکرار یادگیری از آستانه تعیین شده، بیشتر شود.

۴. نتایج

در این بخش، ابتدا با استفاده از روش شبکه عصبی عمیق پیشنهادی، مدل هایزبرگ شبکه مربعی و شبکه لانه زنبوری مطالعه می‌کنیم و سپس در مقایسه با روش الگوریتم‌های تکاملی، به مزیت‌های روش شبکه عصبی عمیق برای مطالعه سامانه‌های اسپینی، خواهیم پرداخت.

قبل از این که به مطالعه سیمای فاز کلی مدل هایزبرگ همسایه اول و دوم شبکه مربعی بپردازیم، حالت پایه مدل هایزبرگ شبکه مربعی $J_2 = 0$ را بررسی می‌کنیم. بدین منظور شبکه مربعی 16×16 ، 32×32 و 64×64 را انتخاب می‌کنیم. برای فهم نسبت به حالت مغناطیسی با کمینه انرژی کلی، می‌توان آرایش اسپینی مربوط به این حالت را در فضای حقیقی رسم کرد. همان طور که در سه ردیف اول شکل ۵ نشان داده شده است آرایش اسپینی در فضای حقیقی به ازای مراحل یادگیری تا نزدیک شدن به آرایش اسپین نهایی (ستون آخر) برای مدل هایزبرگ شبکه مربعی با اندازه‌های متفاوت 16×16 ، 32×32 و 64×64 پادفرومغناطیس است. زمانی که تعداد مراحل تکرار به عدد اشباع برسد، شکست خودبه‌خودی تقارن اتفاق می‌افتد و آرایش اسپینی با نظم بلند برد پادفرومغناطیس (ستون آخر) پایدار می‌شود. قابل ذکر است که نتیجه به دست آمده برای این حالت، با کارهای قبلی همخوانی کامل دارد [۲۵].

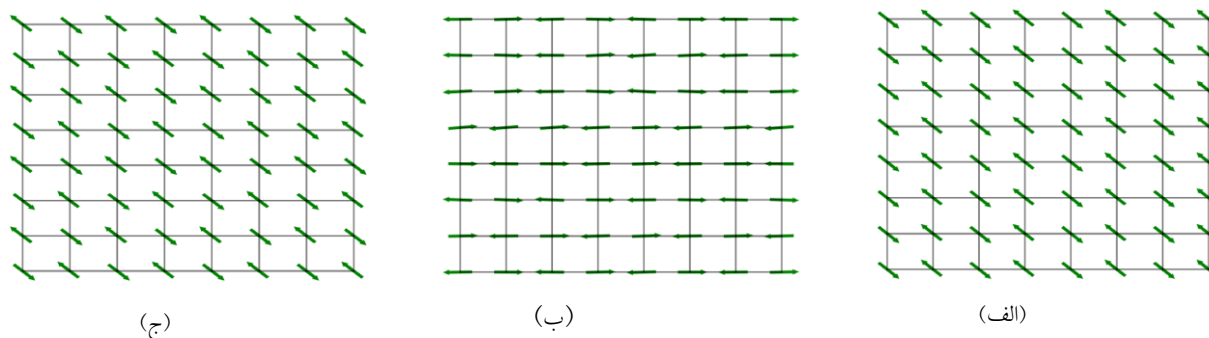
در این مرحله می‌توان گفت سامانه مغناطیسی، کمینه کلی‌اش را پیدا کرده است. برای آرایش‌های اسپینی که بردار



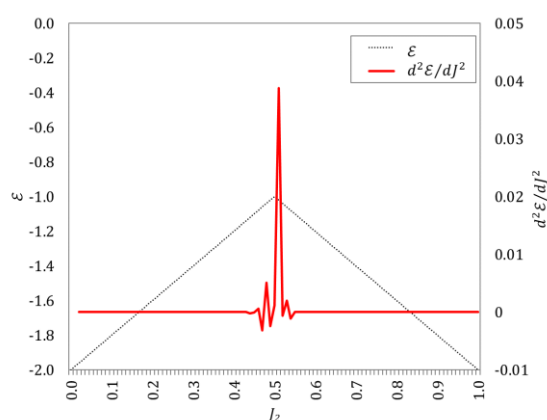
شکل ۵. نمایش آرایش اسپینی حالت $J_4 = 0$ به ازای مراحل تکرار متفاوت برای شبکه مربعی با اندازه (الف) 16×16 ، (ب) 32×32 و (ج) 64×64 . رنگ‌بندی در این شکل‌ها، نمایش اسپینی را در فضای حقیقی نمایش می‌دهد. در مراحل یادگیری اولیه، رنگ‌های کاملاً تصادفی روی جایگاه‌های شبکه مربعی انتخاب شده‌اند که بیانگر وجود آرایش اسپینی بی‌نظم است. با افزایش مراحل یادگیری، اسپین‌ها روی شبکه مربعی، آرایش پادرومغناطیس پیدا می‌کنند. همان‌طور که در ستون آخر سه ردیف اول مشخص است، واحدهای کوچک با رنگ متفاوت، نمایانگر اسپین‌ها با جهت‌گیری فضایی کاملاً مخالف هم در فضای حقیقی هستند. تغییرات انرژی بر حسب مراحل یادگیری برای شبکه مربعی با اندازه (ت) 16×16 ، (ث) 32×32 و (ج) 64×64 .

دوم انرژی به ازای $J_4 = \frac{1}{4}$ ، بیانگر گذار فاز بین نظم‌های پادرومغناطیس و هم‌خط است و در ضمن ناپیوستگی مشتق مرتبه اول انرژی به ازای $J_4 = \frac{1}{4}$ نشان دهنده گذار از مرتبه اول

انرژی حالت پایه و مشتق مرتبه دوم انرژی حالت پایه مدل هایزنبرگ همسانگرد شبکه مربعی به عنوان تابعی از J_4 در شکل ۷ نشان داده شده است. تکنیکی موجود در مشتق مرتبه



شکل ۶. آرایش اسپینی مدل هایزنبرگ همسانگرد شبکه مربعی به ازای (الف) $J_{\nu} < \frac{1}{4}$ ، (ب) $J_{\nu} = \frac{1}{4}$ و (ج) $J_{\nu} > \frac{1}{4}$ که با استفاده از روش شبکه عمیق به دست آمده است.



شکل ۷. انرژی حالت پایه (خط نقطه چین) و مشتق مرتبه دوم انرژی حالت پایه (خط توپر) مدل هایزنبرگ شبکه مربعی به عنوان تابعی از J_{ν} .

پادفرومغناطیس به نظم پیچشی با بردار موج ناجور وجود خواهد داشت. آرایش های اسپینی مربوط به نظم پیچشی شبکه لانه زنبوری به ازای $J_{\nu} = 0/35$ و $J_{\nu} = 0/75$ به ترتیب در شکل های ۸ ب و ۸ ج نشان داده شده است. به ازای $J_{\nu} > \frac{1}{6}$ ، حالت پایه کلاسیکی، تبهگنی بی نهایت دارد یعنی بی نهایت آرایش اسپینی با انرژی یکسان وجود دارد. در این حالت، تعدادی نامحدود از حالت های پیچشی تبهگن را داریم که حالت پایه می تواند از یک رویه انتخاب شود [۲۶].

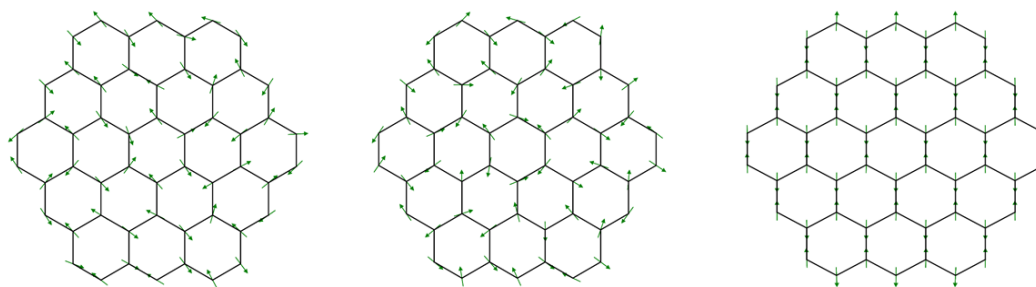
۴.۳. مقایسه کارایی شبکه یادگیری عمیق با الگوریتم ژنتیک و تبرید شبیه سازی شده

در این بخش قصد داریم به مقایسه روش های الگوریتم تکاملی نظیر ژنتیک (GA) و تبرید شبیه سازی شده (SA) با روش شبکه

بین این دو نظم مغناطیسی بلند برد است. قابل ذکر است که سیمای فاز کلاسیکی به دست آمده با استفاده از روش شبکه عصبی عمیق برای مدل هایزنبرگ همسانگرد شبکه مربعی، با نتایجی که با روش های لاتینجر-تیزا و کمینه سازی وردشی به دست آمده، سازگاری کامل دارد [۲۵].

۴.۲. سیمای فاز کلاسیکی مدل هایزنبرگ شبکه لانه زنبوری

در این بخش قصد داریم سیمای فاز کلاسیکی مدل هایزنبرگ همسانگرد همسایه اول و دوم شبکه لانه زنبوری را بررسی کنیم. در انجام محاسبات برای مقادیر کوچک J_{ν} ، نظم پادفرومغناطیس با بردار موج $\vec{q} = (0, 0)$ پایدار است که در هر یاخته واحد، جهت گیری اسپین ها خلاف جهت هم هستند (شکل ۸ الف را ببینید). برای $J_{\nu} = \frac{1}{6}$ ، گذار فازی از نظم

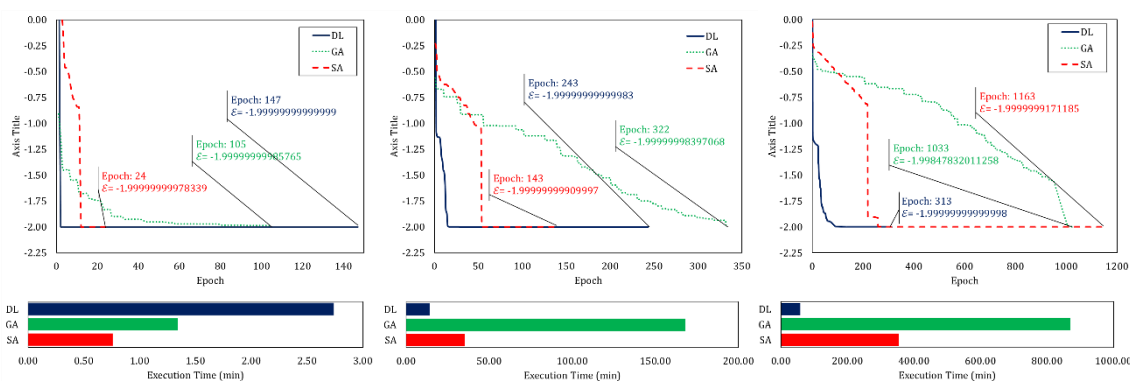


(ج) $J_2 = 0.75$

(ب) $J_2 = 0.35$

(الف) $J_2 = 0.1$

شکل ۸. آرایش اسپینی مدل هایزنبرگ همسانگرد شبکه لانه زنبوری به ازای (الف) $J_1 = 0/1$ ، (ب) $J_1 = 0/35$ و (ج) $J_1 = 0/75$.



(ج)

(ب)

(الف)

شکل ۹. محاسبه تغییرات انرژی بر حسب مراحل یادگیری و مدت زمان لازم برای پیدا کردن کمینه کلی مدل هایزنبرگ شبکه مربعی با اندازه (الف) 4×4 ، (ب) 8×8 و (ج) 16×16 با استفاده از روش های الگوریتم تکاملی نظیر ژنتیک (GA) و تبرید شبیه سازی شده (SA) و روش شبکه یادگیری عمیق (DL).

نیاز دارد که سامانه بتواند کمینه کلی اش را پیدا کند. با افزایش اندازه سامانه، شکل های ۹. ب و ج، سامانه با استفاده از روش شبکه عصبی عمیق در تعداد مراحل یادگیری خیلی کمتری می تواند حالت کمینه کلی اش را پیدا کند. بنابراین نتایج به دست آمده بیانگر این است که روش شبکه عصبی عمیق از نظر بازه زمانی که نیاز است حالت پایه کلاسیکی را پیدا کند، برتری خیلی خوبی نسبت به دیگر روش های ذکر شده دارد.

۵. نتیجه گیری

با بازبینی در فرمول بندی شبکه های عصبی عمیق، الگوریتم شبیه سازی مناسبی برای محاسبه حالت پایه سامانه هایی که زیر دمای کوری شکست تقارن خودبه خودی در آنها اتفاق می افتد،

یادگیری عمیق (DL) پردازیم. در شکل ۹ (ردیف بالا)، روند یادگیری سامانه شبکه مربعی با اندازه های متفاوت (الف) 4×4 ، (ب) 8×8 (ج) 16×16 برای حالت خاص $J_1 = 0$ ، جهت پیدا کردن حالت پایه نهایی نشان داده شده است. شکل ۹ (ردیف پایین) مدت زمانی که طول می کشد انرژی سامانه، به کمترین مقدارش همگرا شود را بیان می کند که در این حالت، می توان ادعا کرد که سامانه اسپینی، کمینه کلی اش را پیدا کرده است.

قابل توجه است که برای سامانه هایی با اندازه کوچک تر، یعنی شبکه مربعی 4×4 شکل ۹. الف، روش شبکه یادگیری عمیق، به خاطر پارامترهای زیادی که در این روش جهت کمینه کردن انرژی وجود دارد، نسبت به دو روش دیگر زمان بیشتری

یادگیری آدام، اجازه می‌دهیم این پارامتر با شرایط لحظه‌ای مسئله تغییر کند، یعنی با نزدیک شدن تابع هدف به مقدار کمینه کلی، باید پارامتر نرخ یادگیری طوری تغییر یابد، که سامانه بتواند با آهنگ تغییرات کم، به کمینل کلی‌اش نزدیک شود. صحت کارکرد روش شبکه عصبی عمیق پیشنهادی را با مطالعه مدل هایزنبرگ همسانگرد شبکه مربعی و شبکه لانه زنبوری بررسی کردیم که نتایج به دست آمده با نتایج روش‌های الگوریتم تکاملی، کاملاً سازگار است.

معرفی کردیم. در این روش محاسباتی، آرایش اسپین‌ها را به عنوان پارامترهای شبکه عصبی در نظر می‌گیریم، یعنی با در نظر گرفتن بردار اسپین به عنوان نورون‌های ورودی، از آنها به عنوان پارامترهای یادگیری شونده استفاده می‌کنیم. در حل مسئله‌های بهینه‌سازی، بسیار محتمل است که سامانه در کمینه‌های موضعی که انرژی بسیار نزدیکی با کمینه کلی دارند، قرار گیرد. برای این‌که سامانه را از قرار گرفتن در کمینه‌های موضعی دور کنیم و به کمینه کلی سوق دهیم، از روش آدام استفاده کرده‌ایم. در این روش، به جای در نظر گرفتن مقادیر ثابت برای پارامتر نرخ

مراجع

1. M Seul and D Andelman, *Science* **267** (1995) 476.
2. P Bogdan, E Jonckheere, and S Schirmer. *Chaos, Solitons, & Fractals* **103** (2017) 622.
3. G Carleo, *et al.*, *Rev. Mod. Phys.* **91** (2019) 045002.
4. P Mehta, *et al.*, *Physics Reports* **810** (2019) 1.
5. L Wang, *Phys. Rev. B* **94** (2016) 195105.
6. P Ponte and R G Melko, *Phys. Rev. B* **96** (2017) 205146.
7. J Carrasquilla and R G Melko, *Nat. Phys.* **13** (2017) 431.
8. K Ch'ng, *et al.*, *Phys. Rev. X* **7** (2017) 031038.
9. S J Wetzel, *Phys. Rev. E* **96** (2017) 022140.
10. K Ch'ng, N Vazquez, and E Khatami, *Phys. Rev. E* **97** (2018) 013306.
11. G Carleo and M Troyer, *Science* **355** (2017) 602.
12. Z Cai and J Liu, *Phys. Rev. B* **97** (2018) 035116.
13. J Carrasquilla, *Adv. Phys. X* **5** (2020) 1797528.
14. D L Deng, X Li, and S Das Sarma, *Phys. Rev. X* **7** (2017) 021021.
15. J Hermann, Z Schatzle, and F No'e, *Nature Chem.* **12** (2020) 891.
16. D Pfau, *et al.*, *Phys. Rev. Research* **2** (2020) 033429.
17. T Vieijra, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **124** (2020) 097201.
18. K Liu, *et al.*, *Phys. Rev. Research* **3** (2021) 023016.
19. N Rao, *et al.*, *arXiv: 2102.01103* (2021).
20. H Y Kwon, *et al.*, *Phys. Rev. B* **99** (2019) 024423.
21. Y Zhang, *et al.*, *Nature* **570** (2019) 484.
22. A Bohrdt, *et al.*, *Nature Phys.* **15** (2019) 921.
23. J Schmidt, *et al.*, *Npj Comput. Mater.* **5** (2019) 83.
24. D P Kingma and J L Ba, *arXiv:1412.6980* (2014).
25. Z Mortazavizade, H Mosadeq, and M H Zare, *Iran. J. Phys. Res.* **20** (2020) 117.
26. M H Zare, F Fazileh, and F Shahbazi, *Phys. Rev. B* **87** (2013) 224416.