研究提出三维自旋玻璃高效采样新方法

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/42012.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

研究提出三维自旋玻璃高效采样新方法

。自旋玻璃是一类兼具无序与阻挫的复杂系统。其内部的相互作用既有合作也有竞争，使体系形成大量由高能垒分隔的亚稳态。准确获得三维自旋玻璃的平衡态构型，是统计物理的基础难题。这关系到玻璃相变、复本对称性破缺和老化动力学等基本问题，也是检验复杂体系数值方法的试金石。

近日，中国科学院理论物理研究所等提出张量网络马尔可夫链蒙特卡洛方法（TNMCMC）。该方法通过张量网络引导的大尺度集体更新，缓解了三维自旋玻璃数值模拟中的临界慢化问题。

传统Metropolis算法通常每次只尝试翻转一个自旋。这种局域更新方式在高温下十分有效，但在自旋玻璃的低温区域，系统容易被困在数量随系统规模迅速增长的亚稳态中。随着体系增大、温度降低，相邻样本之间的关联时间急剧增长，数值模拟可能需要极长时间才能达到平衡。

团簇更新可以同时改变大量自旋，是缓解临界慢化的重要途径。然而，自旋玻璃中的随机耦合和相互竞争使传统团簇算法难以正确捕捉复杂的自旋关联。同时，直接缩并整个三维体系的张量网络，会带来难以承受的计算开销。

研究团队在两者之间找到了新路径：将三维晶格“切片”，把待更新的自旋安排在二维晶格层上，其余自旋暂时固定。在给定周围自旋的条件下，团队利用二维张量网络近似计算待更新层的条件概率，并一次生成整层或相邻两层自旋的新构型。这种更新方式能够在复杂能量景观中迈出“大步”，从而跨越局域能垒。由于近似张量网络缩并会引入误差，为保证抽样结果的严格正确性，团队在张量网络生成候选构型后，引入Metropolis-Hastings接受判据，对近似误差进行严格校正。

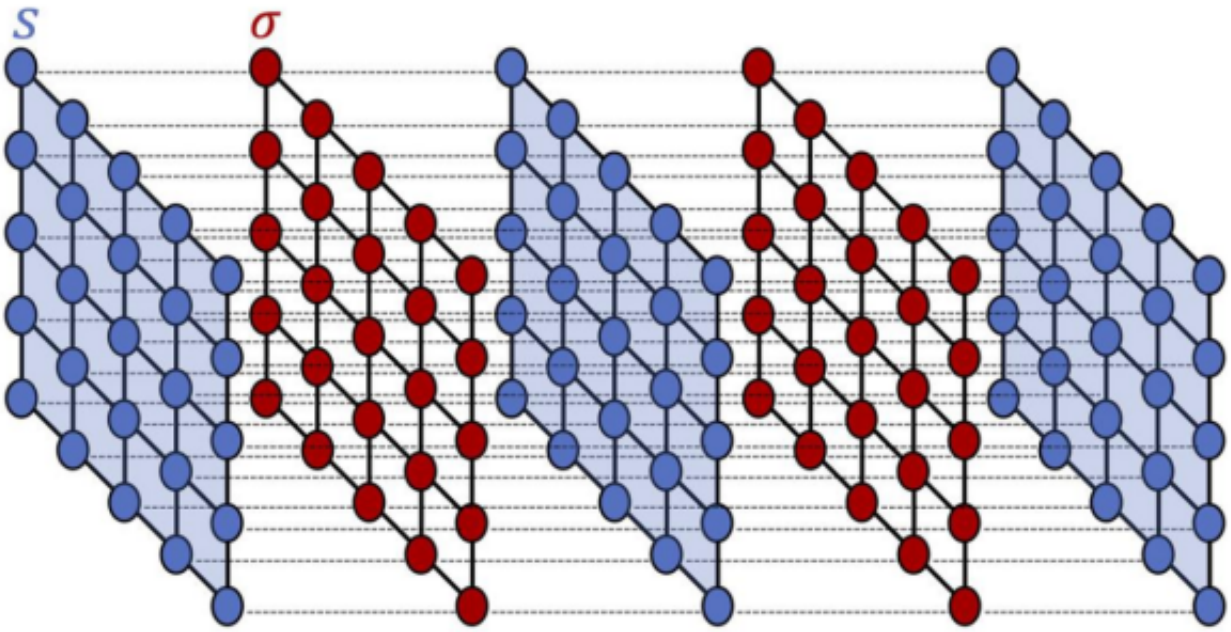
三维Edwards-Anderson自旋玻璃模型的数值结果显示，TNMCMC在低温区域降低了自旋玻璃重叠参量的积分自关联时间。对于线性尺度为8的体系，TNMCMC在蒙特卡洛步数和获得独立样本所需的实际计算时间上均实现了数量级节省；随着体系尺度增大和温度降低，其优势进一步扩大。

TNMCMC还可以与并行回火算法直接结合。在包含21个温度副本的对比实验中，TNMCMC与并行回火的组合在整个测试温区内均获得最低的自关联时间。这说明，张量网络集体更新与跨温度副本交换能够相互补充——前者帮助每个温度下的体系快速摆脱局域构型，后者通过不同温度之间的交换进一步促进低温平衡。

为检验方法的普适性，团队进一步将TNMCMC用于具有一阶相变的三维三态和四态Potts模型。一阶相变附近存在随体系尺度迅速增长的界面自由能垒，传统局域更新容易长期滞留在有序相或无序相中。对于规模最高达到64×64×64的三态Potts模型，TNMCMC能够在有序相和无序相之间反复穿越，并正确采样两相共存区域。这表明，该方法能够缓解自旋玻璃中的临界慢化，也能跨越一阶相变中的指数自由能垒。

相关研究成果发表在《物理评论快报》（*Physical Review Letters*）上。研究工作得到国家自然科学基金、科技创新2030-“量子通信与量子计算机”重大项目、中国科学院战略性先导科技专项等的支持。

论文链接



张量网络马尔可夫链蒙特卡洛方法示意图

研究团队单位：理论物理研究所

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发