Низкоэнергетические спиновые системы на основе модели Бернаскони

А. Н. Леухин,* В. И. Безродный,† Н. А. Коковихина‡
Марийский государственный университет. Россия, 424000, Йошкар-Ола, пл. Ленина, д. 3
(Статья поступила 24.07.2017; Подписана в печать 16.10.2017)

Предложен метод построения низкоуровневой квантовой системы для одномерной спиновой решетки, состоящей из N частиц с одинаковым расстоянием между соседними частицами. В модели Бернаскони задача построения простейшей квантовой системы в виде одномерной модели Изинга сводится к задаче построения бинарных последовательностей с наименьшей энергией боковых лепестков. В данной работе приводится эффективный в вычислительном плане метод исчерпывающего поиска бинарных последовательностей с низким уровнем боковых лепестков. Синтезированы и представлены примеры низкоуровневых одномерных спиновых решеток рекордных длин $N > 80$.

PACS: 05.50.+q УДК: 621.391.266
Ключевые слова: одномерная модель Изинга спиновой решетки, оптимальные бинарные последовательности, низкоуровневая квантовая система, апериодическая автокорреляционная функция, энергия боковых лепестков.

ВВЕДЕНИЕ

Рассмотрим одномерную спиновую решетку $S = (s_0, s_1, ..., s_{N-1})$, состоящую из N частиц с одинаковым расстоянием между соседними частицами. В рамках одномерной модели Изинга [1] каждом узле решетки с номером n спин может принимать одно из двух значений $s_n = \pm 1$.

Энергия такой квантовой системы складывается из обменного попарного взаимодействия спинов соседних атомов и взаимодействия спинов с внешним магнитным полем:

$$E(S) = -\sum_{n,\tau} J_{n\tau} s_n s_\tau - \sum_n h_n s_\tau,$$

где индексы n и τ нумеруют узлы решетки, h_n — значение внешнего магнитного поля на n-м узле, $J_{n\tau}$ — энергия взаимодействия спинов, находящихся в узлах n и τ.

При внешнем магнитном поле $h = 0$ любой энергетический уровень дважды вырожден, так как энергия взаимодействия не изменяется при повороте всех спинов. В простейшем случае энергию взаимодействия можно считать одной и той же для всех пар соседних атомов, т.е. $J_{n\tau} = J$. В результате получим следующую модель энергии квантовой системы:

$$E(S) = -J \sum_{n,\tau} s_n s_\tau. \quad (1)$$

Бернаскони в работе [2] указал на связь между задачей поиска низкоэнергетических состояний упрощенной одномерной модели Изинга (1) с задачей построения бинарных последовательностей $S = (s_0, s_1, ..., s_{N-1})$ длины N с низким уровнем автокорреляции.

*E-mail: leukhinan@list.ru
†E-mail: vova.bezrodny@gmail.com
‡E-mail: nat.kokovihina@gmail.com

Апериодическую автокорреляционную функцию $\mathbf{C} = (c_0, c_1, ..., c_{N-1})$ бинарной последовательности можно представить в виде:

$$c_\tau = \sum_{n=0}^{N-1-\tau} s_n \cdot s_{n+\tau},$$

$$\tau = 0, 1, ..., N-1.$$

В модели Бернаскони гамильтониан квантовой системы простейшей одномерной модели Изинга равен энергии боковых лепестков апериодической автокорреляционной функции:

$$H(S) = \sum_{\tau=1}^{N-1} C_\tau^2.$$

Таким образом, задача построения простейшей квантовой системы в виде одномерной модели Изинга сводится к задаче построения бинарных последовательностей с наименьшей энергией боковых лепестков.

Существует два критерия оптимальности бинарных последовательностей, имеющих низкий уровень апериодической автокорреляции. Первый -минимаксный критерий, согласно которому максимальный уровень бокового лепестка PSL:

$$PSL(C) = \max_{1 \le \tau \le N-1} |C_\tau|$$

должен быть минимальным

$$MPS = \min_S PSL.$$

Второй критерий — коэффициент MF (merit factor), характеризующий отношение энергии главного отсчета к энергии боковых лепестков апериодической автокорреляционной функции:

$$MF(C) = \frac{N^2}{2 \sum_{\tau=1}^{N-1} [C_\tau]^2}.$$

Оптимальная бинарная последовательность заданной длины N имеет наибольшее значение коэффициента MF.

В общем случае бинарные последовательности, оптимальные по этим двум критериям, являются различными, но для целого ряда длин они одни и те же. В 1975 г. в работе [3] был осуществлен полный поиск бинарных MPS последовательностей до длины $N = 40$. В работе [4] в 1990 г. в результате глобального поиска были найдены все оптимальные минимаксные последовательности до длины $N = 48$. В работе [5] представлен алгоритм исчерпывающего глобального поиска и представлены результаты его работы для последовательностей длины $N = 64$. Таким образом, полный поиск бинарных MPS–последовательностей был осуществлен для длин $N = 2...48$ и $N = 64$. В работах [6–9] авторами данной работы исчерпывающий поиск оптимальных минимаксных бинарных последовательностей проведен для значений длин из диапазона $N = [2 - 80]$. В данной работе приведем краткий обзор полученных ранее результатов, а также впервые приведем результаты глобального поиска минимаксных последовательностей для новых значений длин $N = [81, 82]$.

1. НОВЫЙ АЛГОРИТМ ИСЧЕРПЫВАЮЩЕГО ПОИСКА МИНИМАКСНЫХ БИНАРНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ

Разработанный нами алгоритм представляет собой модификацию известного алгоритма ветвей и границ, рассмотренного в работе [10]. Отметим, что алгоритм полного перебора имеет вычислительную сложность $O\left((N-1)\cdot 2^N\right)$. Глобальный алгоритм исчерпывающего поиска, предложенный в работе [10], является более быстрым и имеет вычислительную сложность $O\left((N-1)\cdot 1.85^N\right)$. Основная идея работы алгоритма ветвей и границ основана на исключении эквивалентных последовательностей, полученных в результате эквивалентных преобразований бинарной последовательности, сохраняющих минимальный и максимальный уровни боковых лепестков ААКФ без изменения.

Уровень максимального бокового лепестка ААКФ бинарной последовательности S не изменится в результате следующих преобразований эквивалентности:

- инвертирования всех бит $s_n^{(e)} = \overline{s_n}$, где $\overline{0} = 1$, $\overline{1} = 0$, $n = 0, ..., N-1$;
- инверсии
$$s_n^{(e)} = s_{N-n-1}, n = 0, ..., N-1;$$
- инвертирования четных бит
$$s_{2n}^{(M)} = \overline{s_{2n}}, n = 0, ..., N-1.$$

Процедуры отсечения из рассмотрения эквивалентных последовательностей позволяют уменьшить пространство поиска в 8 раз.

Мы внесли следующие усовершенствований в работу алгоритма ветвей и границ для поиска минимаксных бинарных последовательностей.

1. Модификация, основанная на связи между периодической и апериодической автокорреляционной функции (ААКФ) и (ПАКФ).

Выражение для ПАКФ будет иметь вид:

$$R_\tau = \sum_{n=0}^{N-1} s_n \cdot s_{n+\tau\ (mod\ N)}, \tau = 0, 1, ..., N-1.$$

Нулевой отсчет R_0 и C_0 автокорреляционной функции называется главным, а все остальные отсчеты АКФ R_τ и C_τ, $\tau = 1, 2, ..., N-1$ называются боковыми отсчетами (лепестками). Для бинарной последовательности выполняется условие

$$R_0 = C_0 = N. \tag{2}$$

Между боковыми лепестками апериодической и периодической автокорреляционных функций существует зависимость вида

$$R_\tau = C_\tau + C_{N-\tau}, \tau = 1, 2, ..., N-1.$$

Отсчеты ПАКФ бинарной последовательности удовлетворяют условиям:

$$R_\tau = [\min, \min + 4, ..., \max],$$

если

$$N \ \ (mod\ 4) = 0:$$
$$\min = -2 \cdot PSL + 2 \cdot (PSL\, mod\, 2),$$
$$\max = 2 \cdot PSL - 2 \cdot (PSL\ mod\ 2);$$

если

$$N\ (mod\ 4) = 1:$$
$$\min = -2 \cdot PSL + 1 + 2 \cdot (PSL\, mod\, 2),$$
$$\max = 2 \cdot PSL - 3 + 2 \cdot (PSL\ mod\ 2);$$

если

$$N \ \ (mod\ 4) = 2:$$
$$\min = -2 \cdot PSL + 2 \cdot (PSL + 1\ \ mod\ 2),$$
$$\max = 2 \cdot PSL - 2 \cdot (PSL + 1\, mod\, 2);$$

если

$$N \ \ (mod\ 4) = 3:$$
$$\min = -2 \cdot PSL + 3 - 2 \cdot (PSL\, mod\, 2),$$
$$\max = 2 \cdot PSL - 1 - 2 \cdot (PSL\ mod\ 2).$$

Можно определить последние отсчеты ААКФ C_τ, $\tau = \lceil (N-1)/2 \rceil, \lceil (N-1)/2 \rceil + 1, ..., N-1$ по первым известным отсчетами C_τ, $\tau = 1, 2, ..., \lfloor (N-1)/2 \rfloor$, где $\lfloor x \rfloor$ - округление «вниз» до целого, $\lceil x \rceil$ — округление «вверх» до целого.

Введем обозначения $Left_\tau = C_\tau$, $Right_\tau = C_{N-1-\tau}$. Теперь можно записать

$$Left_\tau = R_\tau - Right_\tau, \quad \tau = 1, 2, ..., \lfloor (N-1)/2 \rfloor. \quad (3)$$

ПАКФ R_τ — одинакова для всех циклически сдвинутых копий последовательности S. Таким образом, необходимо лишь один раз определить ПАКФ R_τ для некоторой исходной последовательности в соответствии с выражением (2). Для всех $(N-1)$ других циклически сдвинутых копий необходимо использовать выражение (3) и вычислять лишь половину отсчетов ААКФ.

2. Модификация, основанная на законе распределения отсчетов ААКФ. Количество исключаемых последовательностей при обходе бинарного дерева при вычислении отсчетов ААКФ при начальных значениях сдвигов $\tau = 1, 2, ..., \lfloor (N-1)/2 \rfloor$, значительно превышает количество исключаемых последовательностей при обходе бинарного дерева при вычислении отсчетов ААКФ при конечных значениях сдвигов $\tau = \lceil (N-1)/2 \rceil, \lceil (N-1)/2 \rceil + 1, ..., N-1$. Заполнение отсчетами бинарной последовательности происходит одновременно с двух сторон. В силу такой особенности формирования бинарной последовательности приходится вычислять отсчеты ААКФ с номерами $\tau = \lceil (N-1)/2 \rceil, \lceil (N-1)/2 \rceil + 1, ..., N-1$, но затем необходимо перейти к расчетам отсчетов C_τ с номерами $\tau = 1$, затем $\tau = 2$ и т.д. Таким образом, происходит изменение направление расчета отсчетов ААКФ после центрального отсчета с номером $\tau = \lfloor N/2 \rfloor$. В результате время поиска сокращается на 25%.

3. Поскольку при поиске последовательностей длины $N+2$ алгоритм обходит то же самое дерево поиска, кроме дополнительного яруса листьев, что и при поиске последовательностей длины N, то множество узлов дерева поиска, на которых условие PSL не выполняется, не меньше, чем для предыдущих длин. Это позволяет заранее исключать из будущего поиска те узлы дерева, в поддеревьях которых алгоритм не дошел ни до одного листа на самом нижнем ярусе.

Если хотя бы один лист дерева участвовал в обходе в процессе поиска, то его поддерево уже нельзя исключать из последующих обходов. Поэтому чем больше начальное количество непересекающихся поддеревьев, на которое разбито дерево поиска, тем больше будет найдено поддеревьев, не порождающих ни одного решения. Для этого были взяты ранее найденные множества начальных значений для четных (2122026) и нечетных (2122256) длин, корни поддеревьев которых находятся на 13 ярусе общего дерева поиска T для заданного уровня $PSL \leq 4$, где заранее известными являются по 13 бит в левом и правом полукодах. Затем был осуществлен обход каждого непересекающегося поддерева на минимальной длине, где не существует кодов с уровнем $PSL < 4$, для четных значений длин последовательностей осуществлялся исчерпывающий поиск последовательностей длины $N = 50$, для нечетных значений — $N = 49$. Поскольку более половины отсчетов в искомых последовательностях было уже известно по причине использования большого количества непересекающихся поддеревьев, а также в связи с относительно небольшой длиной последовательностей, перебор всех поддеревьев не занял большого времени и показал, что при обходе 207323 поддерева для четных длин и 206194 — нечетных алгоритм поиска не «дошел» ни до одного его листа, что позволило исключить из обхода 9,77% и 9,72% поддеревьев соответственно с корневыми узлами на 13 ярусе, которые абсолютно точно не дадут ни одного решения для последовательностей с уровнем $PSL \leq 4$. При обходе оставшегося количества непересекающихся поддеревьев с ростом N появляются дополнительные поддеревья, которые можно считать «тупиковыми».

4. Также можно использовать «пакетный» режим поиска для формирования MPS–последовательной сразу для нескольких длин N, $N+2$, $N+4, \ldots$, потому что взаимная корреляция между левой и правой частями «исходных» последовательностей для данных длин будет той же самой.

Экспериментальные результаты определения вычислительной сложности можно аппроксимировать законом:

$$O\left(c \cdot b^N\right),$$

где c — среднее число вычислений отсчетов ААКФ по всему пространству поиска b^N.

Вычислительная сложность алгоритма поиска бинарных последовательностей с уровнем боковых лепестков $PSL = 2, 3, 4, 5$ представлена в табл. 1.

Отметим, что полученная вычислительная сложность разработанного глобального алгоритма поиска минимаксных бинарных последовательностей соизмерима с вычислительной сложностью некоторых локальных алгоритмов поиска.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ ГЛОБАЛЬНОГО ПОИСКА МИНИМАКСНЫХ БИНАРНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ

Результаты поиска оптимальных минимаксных последовательностей приведем в табл. 2. В качестве примеров представлены оптимальные минимаксные последовательности, имеющие максимальное значение MF для длин $N = [60; 82]$. Жирным шрифтом в таблице выделены значения критерия MF, найденной оптимальной минимаксной последовательности длины N, в том случае если значение MF является оптимальным или.

Таблица I: Вычислительная сложность глобального алгоритма поиска бинарных последовательностей с заданным уровнем боковых лепестков

$PSL = 2$	$PSL = 3$	$PSL = 4$	$PSL = 5$
$O\left(22.9 \cdot 1.42^N\right)$	$O\left(19.9 \cdot 1.6^N\right)$	$O\left(8.1 \cdot 1.69^N\right)$	$O\left(1.79^N\right)$

Таблица II: Результаты полного поиска оптимальных бинарных последовательностей

Длина	PSL	MF	Пример (в шестнадцатеричном представлении)	Количество неэквивалентных решений
60	4	8,108	119D01522ED3C34	5542
61	4	7,563	0024BA568EB83731	3246
62	4	**8,179**	000C67247C59568B	1212
63	4	**9,587**	1B3412F0501539CE	1422
64	4	**9,846**	26C9FD5F5A1D798C	1859
65	4	8,252	04015762C784EC369	1003
66	4	7.751	03FEF2CCB0B8CAC54	324
67	4	7.766	073C2FADC44255264	381
68	4	8.438	562B8CA48E0C9027E	489
69	4	7.988	0292582AC6A767CC03	248
70	4	7.313	01C2FFD4AF33356596	72
71	4	8.105	12493BE76A5EE2A3F1	115
72	4	7.2	27C8D6E165A71577FE	107
73	4	8.327	012DE781C9167577AB7	46
74	4	7.039	00ABFA66C560E3094C2	18
75	4	7.878	0E0038AEB50B59C99B6	16
76	4	7.113	2CD864E4AA90B8073DE	17
77	4	6.959	066B7BDB752AA6F80E3C	10
78	4	7.548	0C4852361E77C0574BAC	1
79	4	7.308	0028AE35C3A59AC4ED89	4
80	4	6.349	01A4F07798EA85AE6C48	7
81	4	6.358	0E3C32FA1FEFD2519AB32	1
82	4	6.554	3CB25D380CE3B7765695F	1

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрена задача построения основных состояний квантовой системы в виде цепочки попарно взаимодействующих спинов длины N. Показано, что, согласно модели Бернаскони, данная задача сводится к задаче построения бинарных последовательностей с наименьшим уровнем энергии боковых лепестков ААКФ. Предложен новый алгоритм глобального поиска оптимальных минимаксных последовательностей, имеющий вычислительную производительность, сравнимую с вычислительной производительностью некоторых локальных алгоритмов. Приводятся результаты построения оптимальных минимаксных бинарных последовательностей в диапазоне длин $N = [2; 82]$, имеющих максимальное значение коэффициента MF.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов Минобрнауки России (договор №02.G25.31.0204) в рамках реализации Постановления Правительства РФ № 218, РФФИ в рамках научного проекта №15-07-99514 и в рамках госзадания Минобрнауки РФ (задание №2014/81, проект №1856).

[1] *Ising E.* Z. Phys. 1925. N 31. P. 253
[2] *Bernasconi J.* J. Phys. 1987. **48**. P. 559.
[3] *Lindner J.* Binary sequences up to length 40 with best possible autocorrelation function. 1975. **11**. N 21. P. 507.
[4] *Cohen M.N., Fox M.R.,Baden J.M.* Proc. of the IEEE. International Radar Conference. 1990. P. 633.
[5] *Coxson G.E.,Russo J.* IEEE Trans. Aerospace and Electron. Systems. 2005. **41**. P. 302.

[6] *Leukhin A. N., Potekhin E. N.* Binary sequences with minimum peak sidelobe level up to length. **68**. 2013.
[7] *Leukhin A. N., Potekhin E. N.* Proc. of the 10th European Radar Conference, EuRAD'2013. 2013. P. 495.
[8] *Leukhin A. N., Shuvalov A. S., Potekhin E. N.* Bull. of the RAS: Physics. 2014. **78**. N 3. P. 207.
[9] *Leukhin A. N.* Lecture Notes in Computer Science. **8865**. P. 1.
[10] *Mertens S.* J. of Phys. A: Mathematical and General. 1998. **48**. P. 3731.

Low–energy spin systems based on the Bernasconi model

A. N. Leukhin[a], V. I. Bezrodnyy[b], N. A. Kokovihina[c]

Mari State University. Yoskar-Ola, 424000, Russia
E-mail: [a]leukhinan@list.ru, [b]vova.bezrodny@gmail.com, [c]nat.kokovihina@gmail.com

A method of constructing a low-level quantum system for a one-dimensional spin lattice consisting of N particles is proposed. In the Bernasconi model, the problem of constructing the simplest quantum system in the form of a one–dimensional Ising model reduces to the problem of constructing binary sequences with the lowest side–lobe energy. In this paper, we provide a computationally effective method of exhaustive search for binary sequences with a low level of side lobes. Examples of low–level one–dimensional spin lattices of record lengths $N > 80$ are synthesized and presented.

PACS: 05.50.+q
Keywords: one-dimensional Ising model of the spin lattice, optimal binary sequences, low–level quantum system, aperiodic autocorrelation function, side–lobe energy.
Received 24 July 2017.

Сведения об авторах

1. Леухин Анатолий Николаевич — доктор физ.-мат. наук, проректор по научной работе и инновационной деятельности; тел.: (8362) 68-80-16, e-mail: leukhinan@list.ru.
2. Безродный Владимир Иванович — аспирант; тел.: (8362) 68-80-19, e-mail: vova.bezrodny@gmail.com.
3. Коковихина Наталья Александровна — нач. центра высокопроизводительных вычислений; e-mail: nat.kokovihina@gmail.com.