arXiv:2601.07583v1 [cond-mat.str-el] 12 Jan 2026

机器学习研究电荷密度波绝缘体中的非平衡相变

Yunhao Fan,[1] Sheng Zhang,[1] 和 Gia-Wei Chern[1]1 *Department of Physics, University of Virginia, Charlottesville, VA 22904, USA*（日期：2026年1月13日）

非平衡电子力在电压驱动相变中起着核心作用，但在动力学模拟中，计算这类力的成本极高。本文提出了一种用于非平衡电子耦合下绝热晶格动力学的机器学习框架，并以Holstein模型中从电荷密度波态出发的栅控诱导绝缘体-金属转变为例进行验证。尽管可以通过非平衡格林函数（NEGF）计算获得精确的电子力，但其高昂的计算成本使得长时间动力学模拟难以承受。通过利用电子响应的局域性，我们训练了一个神经网络，根据晶格构型直接预测瞬时局域电子力，从而避免在时间演化过程中反复进行NEGF计算。将由此得到的机器学习力场与布朗动力学相结合后，能够定量重现完整NEGF模拟得到的畴壁运动和非平衡相变动力学，同时将计算效率提升数个数量级。研究结果表明，直接力学习是一种高效且准确的方法，可用于模拟受驱动量子材料中的非平衡晶格动力学。

I. 引言

机器学习（ML）方法已成为加速量子化学和材料科学计算研究的强大工具，它们以高效的代理模型取代昂贵的电子结构计算 [1–5]。这一范式的一项重要成果是开发出基于机器学习的力场，使大规模量子分子动力学（QMD）模拟成为可能 [6] ，其通过复现第一性原理计算所得的原子力，达到近乎从头算的精度 [7–21]。这些方法利用了电子物质的局域性，亦称近邻性；这种性质确保作用于给定自由度的力主要由其紧邻的局域环境决定 [22, 23]。因此，复杂的多体相互作用可以分解为格点或原子分辨贡献，从而便于高效学习和可扩展模拟。

现有的大多数机器学习力场方法都以能量为基础，通过对学习得到的总能量求导来获得力，Behler-Parrinello（BP）框架就是一个典型例子 [7]。在这种方法中，总能量被分解为 $E = \sum_i \epsilon_i$，其中每个原子能 ϵ_i 仅取决于原子 i [7, 8] 的局域环境。原子 ϵ_i 对周围环境复杂的多体依赖关系通过机器学习模型加以近似，该模型经过训练，可复现量子力学计算得到的总能量和各个原子力。随后，原子力按$\mathbf{F}_i = -\partial E/\partial \mathbf{R}_i$计算，从而确保能量与力在内部保持一致。

BP型方案的一个重要优势是能够自然地纳入对称性性质。由于原子能 ϵ_i 是标量，因此在平移和旋转等对称操作下保持不变，所以可以使用对称性适配描述符，直接在机器学习表示 [7, 8]层面强制实现正确的变换性质。人们已提出许多用于此类对称性适配描述符 [7–10, 24–29]。除分子系统外，基于 BP 的力场还扩展到了凝聚态晶格系统，从而能够对若干研究充分的晶格哈密顿量中的绝热动力学进行大规模模拟 [30–36]，，以及对准平衡相关电子磁体进行大规模兰道–利夫希茨动力学模拟 [37–40]。这些扩展凸显了基于能量的机器学习力场方法在平衡及近平衡条件下的灵活性和广泛适用性。

相比之下，许多与技术应用密切相关的现象——包括电流驱动的离子运动、电压诱导的相变、电迁移和自旋转移力矩——都涉及会产生内禀非保守力的非平衡电子态 [41–44]。在此类状态下，通常不存在全局势能面，因此基于能量构造力的方法并不适用。因此，开发能够准确学习和预测非平衡非保守力的机器学习框架，既是重大的概念与实践挑战，也是将机器学习加速的模拟拓展至受驱动、开放且远离平衡的量子系统所必不可少的条件。

在这项工作中，我们展示了基于机器学习的直接力学习在受驱动的Holstein系统中用于学习非保守力的可行性 [45]。尽管非保守力的一般机器学习表示仍是一个尚未解决的问题，我们利用了Holstein模型的一个关键简化特征：其动力学自由度是表示局域呼吸模振幅的标量变量。因此，相应的电子力也是标量。在局域性原理的基础上，我们构建了一个神经网络模型，直接根据瞬时局域晶格环境预测这些标量力。重要的是，由于输出力按标量变换，这种方法保留了BP类架构的一项核心优势——

即可以通过对称性适配描述符，系统地纳入底层电子哈密顿量的对称性，尽管该力并非由能量泛函导出。

我们将这一机器学习力场框架应用于模拟Holstein 模型中的电压驱动的绝缘体-金属转变。在半填充条件下，系统处于平衡态时是带绝缘体，其特征是具有棋盘状电荷密度波（CDW）序。当通过与外部电极耦合施加化学势降时，CDW态变得不稳定，并通过电极附近金属畴的成核启动向金属相的转变，随后金属-绝缘体畴壁在系统中传播。利用实空间非平衡格林函数（NEGF）方法计算由非平衡电子态产生的驱动力 [46–49]。然而，即便对于中等规模的系统，NEGF计算也需要大量计算资源，而在每个时间步长都执行这类计算，会使非平衡相变的动力学模拟变得耗时过高，难以开展。

我们证明，基于 NEGF 计算生成的力数据训练的BP型机器学习模型，能够准确再现局域电子力，以及支配 CDW-金属畴壁传播的涌现集体动力学。这些结果确立了一种通用且实用的机器学习框架，可在非平衡量子系统中直接学习力，将机器学习力场方法拓展至近似平衡区间之外；在近似平衡区间内，基于能量的构造和保守力场适用。

II. 驱动霍尔斯坦模型的绝热动力学

我们首先构建方格子Holstein模型的非平衡动力学模拟。该模型与两个电子库耦合，并由外加栅极电压驱动。装置示意图见图 1(a)。系统由一个由Holstein模型描述的中心相互作用区构成，该区域连接着非相互作用电子引线，后者充当粒子库和能量库。半经典Holstein哈密顿量 [45]包含两个部分：描述巡游电子的有效紧束缚哈密顿量，以及描述晶格畸变的经典弹性能泛函。电子部分的哈密顿量为

$$\hat{\mathcal{H}} = -t_{\mathrm{nn}} \sum_{\langle ij \rangle} \hat{c}_i^{\dagger} \hat{c}_j - g \sum_i \hat{n}_i \, Q_i, \tag{1}$$

这里，$\hat{c}_i^{\dagger}$ （$\hat{c}_i$）在晶格位点 i 创建（湮灭）一个电子，而$\hat{n}_i = \hat{c}_i^{\dagger} \hat{c}_i$ 是局域电子密度算符。标量变量 Q_i 表示与格点 i相关的局域集体晶格畸变的振幅，例如钙钛矿氧化物中八面体笼的呼吸模。第一项描述最近邻方形晶格上的电子跃迁，其振幅为t_{nn}；第二项则表示强度为 g的局域形变势型电子–晶格耦合，该耦合在能量上有利于与局域电子密度成正比的晶格畸变。晶格自由度按经典方式处理，并由弹性能量泛函控制

$$\mathcal{V} = \frac{k}{2} \sum_i Q_i^2 + \kappa \sum_{\langle ij \rangle} Q_i Q_j. \tag{2}$$

其中， k 是有效现场弹性常数， κ表示晶格畸变之间的最近邻反铁畸变耦合。

Holstein模型是电子–声子物理的典型描述模型，长期以来，人们在平衡态下对其进行了广泛研究，探讨极化子形成、电荷有序和超导性 [50–54]。在半填充时，方格子Holstein模型会经历有限温度相变，进入公度电荷密度波（CDW）相 [55–58], , 其特征是电子密度呈棋盘格调制：$n_{A/B} = (1 \pm \delta)/2$，其中 A 和 B 表示二分方形晶格的两个子晶格， δ 量化电荷密度波振幅。通过电子–晶格耦合，这种电荷调制还伴随着交错晶格畸变 $Q_{A/B} = \pm Q$，因此有序相自发破缺 Z_2 子晶格对称性。从对称性角度看，电荷密度波相变属于伊辛普适类，这一结论已由大规模量子蒙特卡罗模拟 [55, 56]定量证实。

在本文中，我们重点研究电压驱动的电荷密度波到金属相变的非平衡动力学。施加的栅极电压使电子子系统远离热平衡，破坏电荷密度波序，并引发非平庸的晶格动力学。由于晶格自由度的质量远大于电子的质量，我们采用绝热（玻恩–奥本海默）近似：晶格变量 Q_i 随时间动态演化，而电子子系统则迅速弛豫至由瞬时晶格构型决定的非平衡稳态。至关重要的是，与平衡态量子分子动力学中的传统玻恩–奥本海默动力学不同，这里的电子稳态并非热态，而是由偏压和库分布确定的驱动非平衡态。如下文所述，这一非平衡电子态通过非平衡格林函数（NEGF）形式体系计算，该形式体系提供作用于晶格的电子力，并使耦合电子–晶格动力学闭合。

晶格自由度的时间演化采用过阻尼朗之万动力学进行模拟，这种方法也称为布朗动力学 [59–61],

$$\frac{dQ_i}{dt} = -\frac{1}{\gamma} F_i + \eta_i(t), \tag{3}$$

其中， F_i 是驱动力， γ 是有效阻尼系数， $\eta_i(t)$表示一种随机力，其

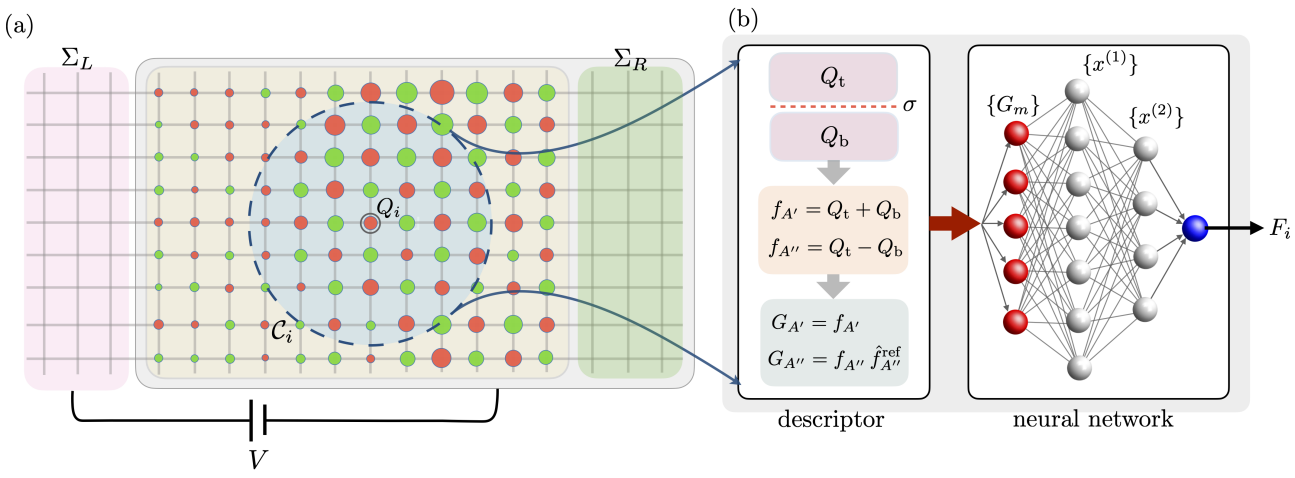


图 1. 电压驱动的霍尔斯坦系统绝热动力学的机器学习框架。(a) 栅控霍尔斯坦装置示意图：中心的方格晶格霍尔斯坦系统与两个电极耦合，其中右电极充当衬底，左电极提供静电栅控。外加电压 V 驱动系统偏离平衡，而局域晶格畸变 Q_i 则响应电子自由度而绝热演化。虚线区域表示参考位点-i 的局域邻域 $\mathcal{C}_i$，该邻域作为机器学习模型的输入。(b) 机器学习力预测架构概览，该架构将 Behler-Parrinello 框架推广至驱动晶格系统。首先，将邻域内的晶格畸变分解为对称性适配分量，并处理为在位点晶格点群对称性（此处为镜像群 C_s）下保持不变的描述符变量。随后，将这些不变特征输入全连接神经网络，其输出直接给出作用于位点-i处晶格自由度的局部力 F_i。

均值为零，$\langle \eta_i(t) \rangle = 0$，且相关函数为 $\langle \eta_i(t)\eta_j(t') \rangle = 2\gamma k_B T \delta_{ij}\delta(t-t')$。

作用于格点 F_i i 的总力由两个不同的贡献组成。第一种是弹性力，$F_i^{\mathrm{elastic}} = -\partial \mathcal{V}/\partial Q_i$ 它源自经典晶格势。第二种是电子力，由晶格畸变与驱动电子子系统之间的耦合产生。在非平衡稳态下，电子子系统通常无法用有效势能面描述，因此电子力无法写成标量能量泛函的梯度。尽管如此，研究已表明，非平衡电子对慢经典自由度施加的力仍可通过广义 Hellmann-Feynman 定理 [41, 42, 62–64], $F_i^{\mathrm{elec}} = -\langle \partial \hat{\mathcal{H}}/\partial Q_i \rangle$计算，其中期望值 $\langle \cdots \rangle$ 是相对于准稳态但处于非平衡状态的电子态取的。

结合弹性和电子贡献，力的显式表达式为

$$F_i = -\left\langle \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial Q_i} \right\rangle - \frac{\partial \mathcal{V}}{\partial Q_i} = g\langle \hat{n}_i \rangle - kQ_i - \kappa \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} Q_j, \tag{4}$$

其中，$\mathcal{N}(i)$ 表示格点-i 的最近邻集合。经典弹性力的计算较为直接，而电子贡献——与局域电子密度成正比——则需要进行完整的非平衡格林函数（NEGF）计算，构成主要的计算开销。在

在非平衡稳态下，格点上的电子密度由小于格林函数的对角元素得到，

$$\langle \hat{n}_i \rangle = \int d\epsilon \, G^<_{ii}(\epsilon; \{Q_i\}). \tag{5}$$

这里明确标出了 $G^<$ 对瞬时晶格构型的依赖关系。小于格林函数由 Keldysh 方程确定：

$$\mathbf{G}^<(\epsilon) = \mathbf{G}^r(\epsilon)\mathbf{\Sigma}^<(\epsilon)\mathbf{G}^a(\epsilon). \tag{6}$$

其中 $\mathbf{\Sigma}^<$ 为电极诱导的 lesser 自能。对于当前设置，$\mathbf{\Sigma}^<$ 为对角矩阵：

$$\Sigma^<_{ij}(\epsilon) = 2i\,\delta_{ij}\,\Gamma_i\, f_{\mathrm{FD}}(\epsilon - \mu_i). \tag{7}$$

能级展宽因子为 $\Gamma_i = \Gamma_{\mathrm{lead}}$ 或 Γ_{bath}，具体取决于格点i 位于边界还是体区，以及 μ_i 相应的局部化学势。如图1(a)所示，衬底（右电极）和中心区域的化学势均固定为零 $\epsilon_F = \mu_R = 0$，该值位于电荷密度波能隙中心；而左电极的化学势则移至 $\mu_L = -eV$，其中 V 为外加电压。中心区域的推迟格林函数和超前格林函数 $\boldsymbol{G}^r$ 和 $\boldsymbol{G}^a$分别满足$\mathbf{G}^a = (\mathbf{G}^r)^\dagger$，其表达式为

$$\mathbf{G}^r(\epsilon) = (\epsilon\mathbf{I} - \mathbf{H} - \mathbf{\Sigma}^r)^{-1}, \tag{8}$$

其中，$H_{ij} = t_{ij} - g\delta_{ij}Q_i$ 是Holstein模型的紧束缚矩阵，而 $\mathbf{\Sigma}^r$ 是电极诱导的自能；更多详情请参见附录A。值得注意的是，方程（5）中的能量积分需要计算

多个能量点处的格林函数。每次计算都需要进行矩阵求逆，如方程（8）所示。采用快速矩阵乘法算法时，其计算复杂度最优可达 $\mathcal{O}(N^{\omega})$，其中 $\omega \approx 2.37$；采用标准LU分解时，计算复杂度则为 $\mathcal{O}(N^3)$。因此，基于非平衡格林函数的力计算对计算资源要求很高，在大规模动力学模拟中很快就会变得难以承受。接下来，我们将介绍一种机器学习力场模型，旨在克服这一计算瓶颈并大幅提高模拟效率。

III. 机器学习力场模型

如第 I 节所述，线性标度电子结构方法的可行性最终取决于多电子系统的局域性，即其近视性 [22,23]。现代机器学习（ML）技术为将这一局域性原理嵌入 $\mathcal{O}(N)$ 方法的实际实现中，提供了一种明确而高效的途径。本文提出一种机器学习框架，如图 1(b) 所示，用于直接预测作用于晶格位点 F_i 上的局域总力 i。由于驱动霍尔斯坦模型产生的力本质上是非保守的，因此传统的基于能量的 BP 方法并不适用。为此，我们训练机器学习模型直接预测力。尽管如此，由于力 F_i 是一个标量，仍可在所提出的架构中使用适应对称性的描述符——即在相关晶格对称性变换下保持不变的特征变量。

这种方法的理论依据直接来自局域性原理 [22, 23]，，该原理表明，作用于局域晶格模 Q_i 的有效力 F_i 主要由其紧邻邻域内的结构构型决定。具体而言，我们将以格点 i 为中心的邻域定义为截断半径 r_c范围内晶格畸变的集合，

$$\mathcal{C}_i = \left\{ Q_j \,\middle|\, |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i| \le r_c \right\}. \tag{9}$$

实际应用中，局域环境 $\mathcal{C}_i$ 通过一组特征变量 $\boldsymbol{G} = \{G_1, G_2, \cdots\}$ 进行编码，这些变量由截断区域内的结构信息构造而成。对于电子哈密顿量中一组固定的参数，局部力便可表示为这些描述符的通用函数，

$$F_i = \mathcal{F}(\boldsymbol{G}) = \mathcal{F}\big(\{G_1(\mathcal{C}_i), G_2(\mathcal{C}_i), \cdots\}\big). \tag{10}$$

F_i 对局域环境的非平凡依赖关系，通过一个在精确的基于NEGF的力计算结果上训练的全连接神经网络来近似。从概念上讲，这一方法在绝热极限下得到一种有效的经典力场描述。同时，深度学习架构的最新进展为学习高度非线性的映射 $\mathcal{F}(\cdot)$ 提供了系统而灵活的框架，兼具高精度和计算效率，与直接进行NEGF计算相比，效率显著提高。

对称性适配描述符。如图 1(b) 示意图所示，机器学习力场框架的核心组成部分是描述符的选择，它将底层电子哈密顿量的对称性直接编码到学习架构中。不同于量子分子动力学模拟（其中相关的对称群是连续的三维欧几里得群） $E(3)$，晶格系统仅具有离散平移对称性——即在整数倍晶格矢量平移下保持不变——以及与局部旋转和反射相关的有限位点点群对称性。

在我们的机器学习框架中，通过将同一局部力预测模型一致地应用于每个晶格位点，可以自然地保持离散晶格平移对称性。剩余的位点点群对称性则可通过群论方法构造的对称性适配描述符，系统地纳入其中 [30, 65]。近年来，人们已开发出多种这类对称性感知描述符和架构的具体实现，并成功应用于晶格模型 [32–39]。

尽管理想方形晶格的格点对称性由 D_4（或 C_{4v}）点群描述，但两个电极的存在会显式地将这一对称性降低为简单的镜像群 C_s，其唯一的非平凡对称操作是反射 σ。对于给定的晶格位点 i，镜面沿 x 方向，并经过位点 i。为构造对称不变量特征变量，我们首先将局部晶格构型 $\mathcal{C}_i$ 分解为该点群的不可约表示（IR）；对于 C_s，这些表示由两个一维不可约表示 A' 和 A''组成。令 j 和ˆ j 表示邻域中一对由镜像操作 σ相互映射的格点。相应的对称性适配基函数为

$$f_{A'} = Q_j + Q_{\hat{j}}, \qquad f_{A''} = Q_j - Q_{\hat{j}}. \tag{11}$$

对称组合 $f_{A'}$ 在镜面反射下保持不变，而反对称组合 $f_{A''}$ 在 σ下变号。原则上，幅值 $|f_{A''}|$可以与 A' 分量一起用作对称不变量特征，但这种构造会丢弃 ± 1 相位信息，尤其是不同 A'' 基函数之间的相对相位；这些相位编码了有关局部构型的重要几何信息。

为保留这一相位信息，我们引入参考不可约表示的概念，为非平凡不可约表示提供一致的相位约定。在本例中，我们通过对邻域内较大区域中的晶格畸变取平均，为 A'' 表示构造一个参考。具体而言，我们将 $Q_{\mathrm{t}} = \sum_{j \in \mathcal{C}_i^{\mathrm{t}}} Q_j$定义为格点 i上方“顶部”区域的平均值，并将 Q_{b} 定义为与之镜像对应的“底部”区域的平均值；见图1(b)。这些量定义了一个参考

反对称模，$f_{A''}^{\mathrm{ref}} = Q_{\mathrm{t}} - Q_{\mathrm{b}}$。使用空间平均的晶格振幅可确保参考不可约表示不受 $\mathcal{C}_i$中局部涨落的影响。

重要的是，参考不可约表示使我们能够为每个反对称基函数 $\eta_{A''} = \mathrm{sign}\left(f_{A''} f_{A''}^{\mathrm{ref}}\right) = \pm 1$ 引入定义良好的相位变量。两个反对称不可约表示分量 $f_{(1)\,A''}$与 $f_{A''}^{(2)}$之间的相对相位因此可简单表示为 $\eta_{A''}^{(1)}\eta_{A''}^{(2)}$。将这些相位信息与相应的振幅相结合，可得到以下对称不变量特征变量，

$$G_{A'} = f_{A'}, \qquad G_{A''} = f_{A''} f_{A''}^{\mathrm{ref}} \tag{12}$$

以此方式从邻域中的不同格点对构造的特征变量 $\mathcal{C}_i$ 作为直接输入馈入神经网络，如图 1(b) 所示。根据构造方式，这保证了每个格点处预测的标量力在底层晶格哈密顿量的全部对称操作下保持不变。

神经网络实现。如图 1(b) 所示，神经网络以对称性适配描述符集合 $\boldsymbol{G} = G_{A'},\ G_{A''}$ 作为输入，并输出作用于晶格位点 F_i 上的预测局部力 i。这些对称性适配描述符以一种在相关晶格对称性下保持不变的形式编码局部结构环境。输入维度由截断半径 $r_c = 6$ 个晶格常数范围内此类描述符的数量决定，因此每个晶格位点总共有 113 个输入特征。所有神经网络均使用 PyTorch 框架 [66, 67]实现。网络架构首先通过嵌入层将 113 维输入向量映射到 4096 维潜在特征空间，从而能够高容量地表征局部环境。随后接入七个全连接隐藏层，其宽度逐渐减小，

$$4096 \to 2048 \to 1024 \to 512 \to 256 \to 128 \to 64 \to 64$$

以及一个最终的单节点输出层，用于生成标量力预测。所有隐藏层均采用修正线性单元（ReLU）激活函数 [68]，，使网络能够高效捕捉力对局部晶格构型的强非线性依赖关系。网络架构、训练过程和超参数选择的详细总结见表I。

训练细节与数据集。网络参数通过最小化机器学习预测力与非平衡格林函数（NEGF）计算所得相应参考力之间的均方误差（MSE），使用学习率为 1×10^{-4}的 Adam优化器 [69] 进行优化，

$$\mathcal{L} = \sum_i \left| F_i^{\mathrm{ML}} - F_i^{\mathrm{NEGF}} \right|^2 \tag{13}$$

层	网络
输入（嵌入）层	全连接层(113,4096)[a] 激活[b] =ReLU
隐藏层 1	全连接层(4096,2048) 激活函数 =ReLU
隐藏层 2	全连接层(2048,1024) 激活函数 =ReLU
隐藏层 3	全连接层(1024,512) 激活函数 =ReLU
隐藏层 4	全连接层(512,256) 激活函数 =ReLU
隐藏层 5	全连接层(256,128) 激活函数 =ReLU
隐藏层 6	全连接层(128,64) 激活函数 =ReLU
隐藏层 7	全连接层(64,64) 激活函数 =ReLU
输出层	全连接层 (64,1)

[a] 全连接层，参数为（输入大小，输出大小）。[b] 激活函数。

表 I. 用于电子力预测的全连接神经网络架构与超参数。

虽然沿 y 方向保持平移对称性，但与外部电极的耦合会明确破坏沿 x方向的平移不变性。在这项工作中，我们聚焦于方形晶格的中心区域，并训练机器学习模型，以捕捉非平衡相变过程中电荷密度波-金属界面的传播。训练数据集和验证数据集由基于非平衡格林函数的动力学模拟生成，[70],其中的晶格构型取自晶格中心区域内的不同位置，并排除距离任一电极约 10 个晶格常数以内的区域。在该中心区域内，我们假设平移不变性成立，并期望单个机器学习模型能够忠实地描述整个系统中的畴壁动力学。训练共使用 1096 个构型，其中 30% 的数据留作验证。

相比之下，需要采用不同的机器学习模型来描述近电极区域，因为这些区域由不同的物理过程主导。具体而言，这些区域的特征包括：(i) 在转变早期，化学势较低的电极附近金属畴的成核；(ii) 传播的绝缘体-金属界面最终接触对侧电极。要准确模拟这些过程，需要针对各电极附近存在的局域非平衡环境专门训练力场。

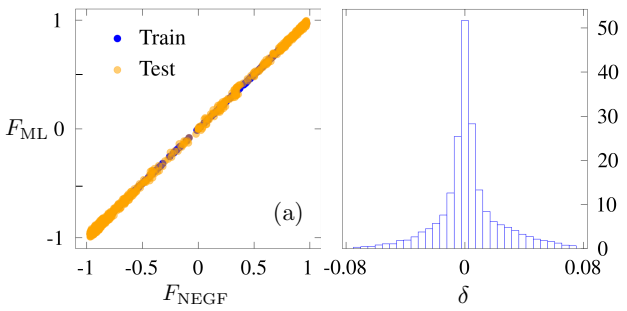


图 2。机器学习预测电子力与 NEGF 结果的基准比较。(a) 机器学习预测力与参考 NEGF 力的散点图，分别对应训练数据集（蓝色）和测试数据集（橙色）。为便于比较，将力重新缩放至区间 $[-1,1]$ 。(b) 测试数据集的预测误差 $\delta = F_{\mathrm{NEGF}} - F_{\mathrm{ML}}$ 的归一化分布，展示了机器学习力预测的准确性和偏差。

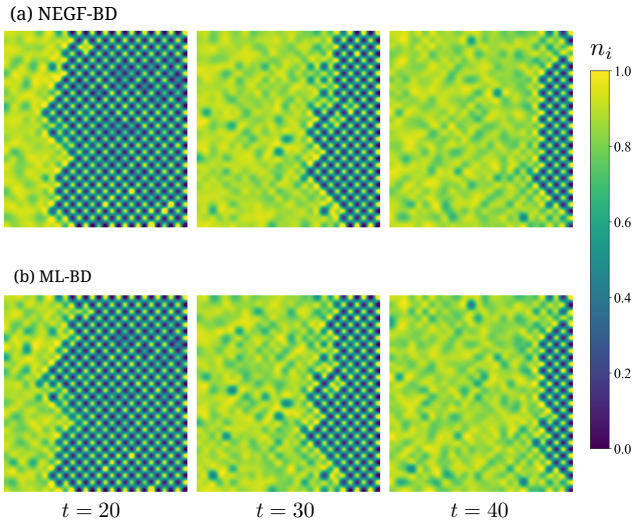


图3. 在相同驱动条件下，比较 NEGF-BD 和 ML-BD 模拟得到的金属相扩张。面板 (a) 和 (b) 展示了具有代表性的时间步长下，n_i 个格点的 28×30 晶格区域内位点电子密度的快照，表明这两种方法在捕捉金属相的非平衡扩张时，在定量和定性方面均高度一致。

IV. 基准测试和机器学习布朗动力学模拟

我们首先通过将机器学习力场模型对电子驱动力的预测与精确的非平衡格林函数（NEGF）计算结果进行比较，评估该模型的准确性 [70]。从机器学习的角度来看，这项基准测试考察了直接力学习方法能否推广到从电荷密度波到金属的转变不同阶段采样得到的非平衡晶格构型，而不仅仅是在训练集内进行插值。

图 2定量比较了从非平衡动力学模拟中提取的晶格构型所对应的机器学习预测电子力与 NEGF 电子力。如图2（a）所示，在整个力值范围内，机器学习预测结果与 NEGF 结果高度一致；训练数据和测试数据均紧密聚集在对角线附近，表明二者具有极佳的一致性。这种高水平的准确性体现在测试数据集上的均方误差为 3.0×10^{-3}。相应的预测误差分布如图2（b）所示，在零点附近呈现尖锐峰值，标准差约为 0。05，表明不存在系统偏差，且残余波动很弱。

接下来，我们将训练好的机器学习力场模型与布朗动力学（BD）方案相结合，在动力学模拟中用机器学习模型作为显式非平衡格林函数（NEGF）计算的高效替代方案。在每个时间步长，直接根据瞬时晶格构型预测式（3）中的驱动力，从而无需进行计算成本高昂的格林函数求值。这种机器学习-布朗动力学方法能够以远低于完全自洽NEGF计算的成本，对非平衡晶格动力学进行大规模模拟。为评估基于机器学习的动力学的准确性，我们直接比较

受驱动的Holstein系统的时间演化：一组采用显式NEGF计算所得的力，另一组采用机器学习模型预测的力。具体而言，我们考虑定义在 28×30 方形晶格上的Holstein模型，该模型受到施加在两个电极之间的外部电压所引起的化学势差驱动，因而处于非平衡状态。

为对模型和模拟参数进行无量纲表征，我们采用最近邻跃迁振幅 t_{nn} 作为基本能量尺度，以此设定能量、电子展宽和温度的单位。除非另有说明，展宽因子和温度分别固定为 $\Gamma_{\mathrm{lead}} = 1.0$、 $\Gamma_{\mathrm{bath}} = 0.001$ 和 $k_{\mathrm{B}}T = 0.1$。电子-晶格耦合强度用无量纲参数 $\lambda = g^2/(Wk)$ 表示，其中 $W = 8t_{\mathrm{nn}}$ 为电子带宽。除非另有说明，模拟均采用 $\lambda = 0.28$ 和 $\kappa/k = 0.18$ 。时间以 γ^{-1} 为单位计量，其中 γ 是布朗动力学方案中的有效阻尼系数，积分时间步长取为 $\delta t = 0.1\,\gamma^{-1}$。

如第 III 节所述，机器学习力场模型旨在描述电压诱导的非平衡相变过程中电荷密度波-金属界面的传播。因此，电极附近的晶格构型根据 NEGF-BD 模拟获得的数据固定。这些区域分别对应于一个电极附近金属畴的初始成核，以及另一个电极附近 CDW畴的最终收缩。这些过程背后的不同物理机制超出了当前机器学习框架的研究范围；该框架旨在预测已有畴壁运动所产生的力。

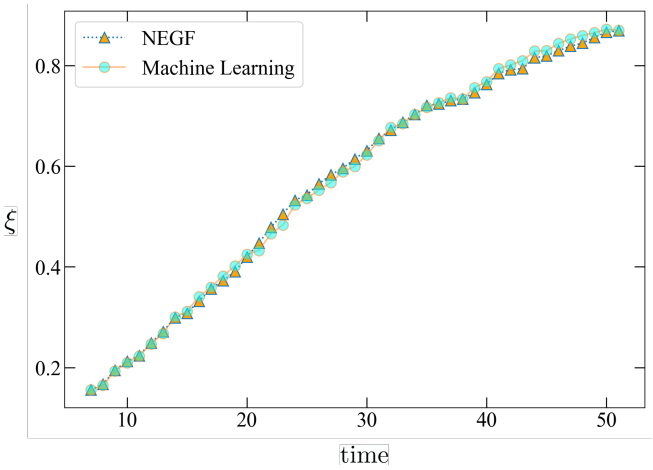


图4. 布朗动力学淬火模拟得到的电荷密度波-金属界面位置随时间的演化 ξ。黄色三角形表示由非平衡格林函数驱动的动力学结果，绿色圆圈表示机器学习驱动模拟的结果。两条轨迹在定量上高度吻合，表明机器学习力场准确再现了支配畴壁传播的非平衡电子驱动力。

文献 [70] 中详细讨论了这种电压诱导相变的微观机制；此处我们简要概述其基本物理过程。施加栅极电压会使电子系统偏离平衡，并使左侧电极的化学势 μ_L 与局域在偏压晶格边缘附近的带隙内态形成共振。这种共振耦合使电子能够弛豫至电极，从而抑制电荷密度波序，并在边界附近成核形成金属层。随后，电荷密度波-金属畴壁向体区传播，金属区域在内禀非保守的非平衡电子力作用下逐层推进，并受到热涨落的辅助。

图3(a) 和 (b) 分别展示了非平衡格林函数-BD模拟以及对应机器学习-BD模拟中的局域电子密度代表性快照 n_i；这些构型是多次独立运行中常见的情况。电荷密度波到金属的转变主要由畴壁传播驱动，而机器学习力场模型能够准确捕捉这一过程。机器学习驱动模拟准确再现了非平衡格林函数动力学中观察到的金属相时空扩展。各条轨迹之间的细微偏差，是随机噪声与残余力预测误差共同作用的结果。尽管如此，两种方法所得畴壁位置和形态高度一致，证明机器学习力场忠实地捕捉了支配电荷密度波到金属转变的关键非平衡电子驱动力。

为进行更定量的比较，我们跟踪 CDW-金属界面的位置，并对其沿横向——向 y 的平均值进行时间演化分析。畴壁位置定义为金属相在整个晶格中所占的分数延伸范围。如图 4所示，机器学习-BD模拟得到的轨迹与完全自洽NEGF-BD模拟的结果高度吻合。尽管随机动力学固有的热噪声会导致单次模拟出现小幅波动，但两种方法所得畴壁的整体传播速度和时间演化过程高度一致。

这种高度吻合表明，机器学习模型中的残余力预测误差不会以改变长时间动力学定性特征的方式累积。相反，机器学习力场忠实地捕捉了非平衡电子驱动力、晶格弹性与热涨落之间的相互作用，而这种相互作用决定了电压诱导相变的动力学过程。重要的是，这项基准测试超越了静态力的比较，并证明机器学习模型能够可靠地再现由电子-晶格耦合产生的新兴集体非平衡现象。

V. 结论与展望

总之，我们展示了一种可扩展的机器学习力场方法，可用于处理由非平衡电子态产生的非保守力。以电压驱动的霍尔斯坦模型为具体示例，我们表明，基于局部晶格环境构建的机器学习力场能够准确再现非平衡电子力及由此产生的集体晶格动力学，同时使模拟效率远高于完全自洽的非平衡格林函数计算。与现有的大多数基于机器学习的量子分子动力学方法不同——这些方法面向平衡或近平衡电子系统，并依赖保守的、由能量导出的力——我们的结果表明，即使电子力本质上是非保守的且系统远离平衡，仍可构建并应用可扩展的局域机器学习力场。这项原理验证表明，可扩展的机器学习力场模型不仅适用于平衡和近平衡电子，也适用于非平衡电子态，前提是底层电子响应仍具有足够的局域性。

更一般地，为非保守力构建机器学习表示，需要超越传统的 Behler–Parrinello 型能量方法；在这类方法中，力是由某个准保守势的导数得到的。在某些特殊情况下，这种扩展是可行的。例如，在自旋动力学中，局部驱动力——有效磁场——构成定义在单位球面上的矢量场，因此一般的非保守力可以用两个标量势来表示 [71]。在这种情况下，可以推广 BP 框架：训练机器学习模型，将局部自旋环境映射到这两个有效能

量。然而，对于分子系统或晶格系统中的一般非平衡力，并不存在类似的基于势的表示方式，这限制了此类构造的适用性。

在这些情况下，一种自然的替代方案是直接预测力，而不引入中间的局域能量。这一策略面临的核心挑战之一，是如何系统地纳入对称性约束。BP 型力场模型的一大优势在于，可以通过局域环境的对称不变描述符，在机器学习表征层面强制满足对称性。在本研究中，我们利用了 Holstein模型的简洁性：其动态晶格自由度是标量变量，对应于局域呼吸模的振幅。这使得即便在直接力学习框架中，也可以采用对称性适配描述符，从而让我们能够聚焦于局域性和可扩展性的关键作用，而不必额外处理与对称性相关的复杂问题。

展望未来，一个重要的未解难题是将面向非平衡系统的可扩展机器学习力场框架，推广到相关力为矢量或张量的情形，例如 Jahn–Teller 电子-晶格模型 [34] 或量子分子动力学模拟中的原子力 [6]。在这些情况下，直接力预测必须满足空间对称性下非平凡的变换性质，因此，构建对称性一致的机器学习模型，要比本文讨论的标量力情形困难得多。一个颇具吸引力且前景广阔的方向，是将直接力学习与等变神经网络（ENN）相结合。等变神经网络通过设计确保模型输出在对称操作下具有正确的协变性。通过在架构层面而非借助手工设计的描述符来嵌入对称性约束，等变模型为学习矢量场和张量场提供了自然的框架，同时保留局域性和可扩展性，因此有望成为未来机器学习力场模型的有力候选，用于研究受驱动、远离平衡态的量子材料中的非保守力。

附录 A：非平衡格林函数（NEGF）计算

这里我们补充说明用于生成训练数据集并对机器学习力场模型进行基准测试的非平衡格林函数（NEGF）计算细节 [46–49] 。电极和储库的自由度通过哈密顿量显式建模

$$\mathcal{H}_{\rm res} = \sum_{\xi,i} \varepsilon_\xi \, d^\dagger_{i,\xi} d_{i,\xi} - \sum_{i,\xi} V_{\xi,i} \big(d^\dagger_{i,\xi} c_i + \text{h.c.} \big). \tag{A1}$$

其中 $d_{i,\xi}$ 湮灭储库中的一个非相互作用费米子（储库代表体相热浴或引线），而ξ 标记储库的量子数，例如能带或动量指标。位于体区的格点 i 是与耗散热浴耦合的，而两个开放边界处的格点则与电子引线耦合。

消去储库费米子后，中心区域的推迟格林函数矩阵可写为

$$\mathbf{G}^r(\epsilon) = (\epsilon \mathbf{I} - \mathbf{H} - \mathbf{\Sigma}^r)^{-1}, \tag{A2}$$

其中， $H_{ij} = t_{ij} - g\delta_{ij} Q_i$ 是 Holstein 模型的紧束缚矩阵，而

$$\Sigma^r_{ij}(\epsilon) = \delta_{ij} \sum_\xi |V_{i,\xi}|^2 / (\epsilon - \epsilon_\xi + i0^+) \tag{A3}$$

是由储库引起的推迟自能。相应的能级展宽矩阵定义为 $\mathbf{\Gamma} = i(\mathbf{\Sigma}^r - \mathbf{\Sigma}^a)$，且为对角矩阵，其元素为

$$\Gamma_{ii} = \pi \sum_\xi |V_{i,\xi}|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_\xi). \tag{A4}$$

为简便起见，我们采用宽带极限，假设库态密度为平坦分布。该近似使展宽参数与能量无关，并具有两个不同的取值： $\Gamma_{\rm lead}$ 对应与电极耦合的格点， $\Gamma_{\rm bath}$ 对应体相格点。

小于格林函数通过 Keldysh 方程获得，

$$\mathbf{G}^<(\epsilon) = \mathbf{G}^r(\epsilon) \mathbf{\Sigma}^<(\epsilon) \mathbf{G}^a(\epsilon), \tag{A5}$$

其中，小于自能通过涨落–耗散关系与延迟自能和超前自能相关联，

$$\Sigma^<_{ij}(\epsilon) = 2i \, \delta_{ij} \, \Gamma_i \, f_{\rm FD}(\epsilon - \mu_i). \tag{A6}$$

这里， $\Gamma_i = \Gamma_{\rm lead}$ 或 $\Gamma_{\rm bath}$ ，取决于格点 i 位于边界还是体区，而 $f_{\rm FD}$ 表示费米–狄拉克分布。对于体相热浴，局部化学势为 $\mu_i = \epsilon_F$ ；对于左、右电极，则为 $\mu_i = \mu_{L/R}$ 。

在图 1(a)所示的设置中，衬底（右电极）和中心区域的化学势固定为 $\epsilon_F = \mu_R = 0$，位于电荷密度波能隙的中心，而左电极的化学势移动至 $\mu_L = -eV$，其中 V 为外加电压。已知小于格林函数后，局部电子密度可通过对 $G^<_{ii}(\epsilon)$[的能量积分获得，参见方程（5）], ，进而计算作用于晶格自由度的电子力。实际上，能量积分采用步长为 $\Delta\epsilon = 0.003$的黎曼和计算，对应最多 4×10^3 个能量网格点。

致谢

本研究得到美国能源部基础能源科学办公室的资助，合同编号为 DE-SC0020330。作者还感谢弗吉尼亚大学研究计算中心提供的支持。

[1] J. C. Snyder、M. Rupp、K. Hansen、K.-R. M¨uller 和 K. Burke，《利用机器学习寻找密度泛函》，《物理评论快报》108，253002（2012年）。[2] F. Brockherde、L. Vogt、L. Li、M. E. Tuckerman 和 K. Burke，《利用机器学习绕过 Kohn–Sham方程》，《物理评论快报》118，146401（2017年）。[3] K. T. Sch¨utt、M. Gastegger、A. Tkatchenko、K.-R. M¨uller 和 R. J. Maurer，《利用用于分子波函数的深度神经网络统一机器学习与量子化学》，《自然·通讯》10，5024（2019年）。[4] S. Wang、K. Fan、N. Luo、Y. Cao、F. Wu、C. Zhang、K. A. Heller 和 L. You，《利用神经网络模拟基于机制的生物模型，大幅提升计算速度》，《自然·通讯》10，4354（2019年）。[5] M. Tsubaki 和 T. Mizoguchi，《量子深场：利用机器学习进行数据驱动的波函数和电子密度生成，以及原子化能预测与外推》，《物理评论快报》125，206401（2020年）。[6] D. Marx 和 J. Hutter，*Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods*（剑桥大学出版社，2009年）。[7] J. Behler 和 M. Parrinello，《高维势能面的广义神经网络表示》，《物理评论快报》98，146401（2007年）。[8] A. P. Bart´ok、M. C. Payne、R. Kondor 和 G. Cs´anyi，《高斯近似势：无需电子即可达到量子力学的精度》，《物理评论快报》104，136403（2010年）。[9] Z. Li、J. R. Kermode 和 A. De Vita，《通过在线机器学习量子力学作用力进行分子动力学模拟》，《物理评论快报》114，096405（2015年）。[10] A. V. Shapeev，《矩张量势：一类可系统改进的原子间势》，《多尺度建模与模拟》14，1153（2016年）。[11] R. T. McGibbon、A. G. Taube、A. G. Donchev、K. Siva、F. Hern´andez、C. Hargus、K.-H. Law、J. L. Klepeis 和 D. E. Shaw，《利用神经网络提高 Møller–Plesset 微扰理论的精度》，《化学物理学杂志》147，161725（2017年）。[12] V. Botu、R. Batra、J. Chapman 和 R. Ramprasad，《机器学习力场：构建、验证与展望》，《物理化学杂志 C》121，511（2016年）。[13] J. S. Smith、O. Isayev 和 A. E. Roitberg，《ANI-1：一种可扩展的神经网络势，以力场计算成本实现密度泛函理论精度》，《化学科学》8，3192（2017年）。[14] L. Zhang、J. Han、H. Wang、R. Car 和 W. E，《深度势分子动力学：一种兼具可扩展性与量子力学精度的模型》，《物理评论快报》120，143001（2018年）。[15] J. Behler，《展望：用于原子模拟的机器学习势》，《化学物理学杂志》145，170901（2016年）。[16] S. Chmiela、A. Tkatchenko、H. E. Sauceda、I. Poltavsky、K. T. Schutt 和 K.-R. Muller，《精确且能量守恒的分子力场的机器学习》，《科学》《先进材料》3, e1603015（2017年）。[17] S. Chmiela、H. E. Sauceda、K.-R. Muller 和 A. Tkatchenko，《利用机器学习力场实现精确分子动力学模拟》，《自然通讯》9, 3887（2018年）。[18] H. Suwa、J. S. Smith、N. Lubbers、C. D. Batista、G.-W. Chern 和 K. Barros，《利用机器学习研究强关联电子的分子动力学》，《物理评论B》99, 161107（2019年）。[19] V. L. Deringer、M. A. Caro 和 G. Csanyi，《机器学习原子间势：材料科学中的新兴工具》，《先进材料》31, 1902765（2019年）。[20] T. Mueller、A. Hernandez 和 C. Wang，《用于原子间势模型的机器学习》，《化学物理学杂志》152, 050902（2020年）。[21] H. E. Sauceda、M. Gastegger、S. Chmiela、K.-R. Muller 和 A. Tkatchenko，《利用梯度域机器学习（梯度域机器学习）构建分子力场：与经典力场的比较及协同效应》，《化学物理学杂志》**153**, 124109 2020 2008 04198 （），[ ] arXiv: . physics.chem-ph。[22] W. Kohn，《随原子数线性增长的密度泛函和密度矩阵方法》，《物理评论快报》76，3168（1996年）。[23] E. Prodan 和 W. Kohn，《电子物质的近视性》，《美国国家科学院院刊》102, 11635（2005年）。[24] J. Behler，《用于构建高维神经网络势的原子中心对称函数》，《化学物理学杂志》134, 10.1063/1.3553717（2011年）。[25] L. M. Ghiringhelli、J. Vybiral、S. V. Levchenko、C. Draxl 和 M. Scheffler，《材料科学的大数据：描述符的关键作用》，《物理评论快报》114, 105503（2015年）。[26] A. P. Bart´ok、R. Kondor 和 G. Cs´anyi，《化学环境的表示》，《物理评论B》87, 184115（2013年）。[27] R. Drautz，《用于精确且可迁移原子间势的原子簇展开》，《物理评论B》99, 014104 2019（）。[28] L. Himanen、M. O. J¨ager、E. V. Morooka、F. Federici Canova、Y. S. Ranawat、D. Z. Gao、P. Rinke 和 A. S. Foster，《Dscribe：材料科学机器学习描述符库》，《计算物理通讯》247, 106949（2020年）。[29] H. Huo 和 M. Rupp，《用于机器学习的分子与晶体统一表示》，《机器学习：科学与技术》3, 045017（2022年）。[30] J. Ma、P. Zhang、Y. Tan、A. W. Ghosh 和 G.-W. Chern，《无序介质中的机器学习电子关联》，《物理评论B》99, 085118（2019年）。[31] Y.-H. Liu、S. Zhang、P. Zhang、T.-K. Lee 和 G.-W. Chern，《无序关联电子系统局域电子性质的机器学习预测》，《物理评论B》106, 035131（2022年）。[32] S. Zhang、P. Zhang 和 G.-W. Chern，《关联电子系统中的反常相分离：机器学习赋能的大规模动力学蒙特卡洛模拟》，《美国国家科学院院刊》119, e2119957119（2022年）。[33] C. Cheng、S. Zhang 和 G.-W. Chern，《机器学习

用于电荷密度波的相序动力学》，《物理评论B》108, 014301（2023年）。[34] S. Ghosh、S. Zhang、C. Cheng 和 G.-W. Chern，《协同 Jahn-Teller 模型中的轨道有序动力学：机器学习赋能的大规模模拟》，《物理评论材料》8, 123602（2024年）。[35] A. Tyberg、Y. Fan 和 G.-W. Chern，《用于巡游伊辛磁体动力学蒙特卡洛模拟的机器学习力场模型》，《物理评论B》111, 235132（2025年）。[36] H. Jang、Y. Yang 和 G.-W. Chern，《Peierls 二聚化转变的动力学：机器学习力场方法》（2025年），arXiv:2510.20659 [cond-mat.stat-mech]。[37] P. Zhang、P. Saha 和 G.-W. Chern，《关联电子磁体中的相分离机器学习动力学》（2020年），arXiv:2006.04205 [cond-mat.str-el]。[38] P. Zhang 和 G.-W. Chern，《双交换模型中的受阻相分离：机器学习赋能的大规模模拟》，《物理评论快报》127, 146401（2021年）。[39] Y. Fan、S. Zhang 和 G.-W. Chern，《巡游电子磁体中手性畴的粗化：机器学习力场方法》，《物理评论B》110, 245105（2024年）。[40] X. Cheng、S. Zhang、P. C. H. Nguyen、S. Azarfar、G.-W. Chern 和 S. S. Baek，《用于巡游磁体大规模动力学建模的卷积神经网络》，《物理评论研究》5, 033188（2023年）。[41] J.-T. L¨u、M. Brandbyge、P. Hedeg˚ard、T. N. Todorov 和 D. Dundas，《电流诱导的原子动力学、不稳定性和拉曼信号：准经典朗之万方程方法》，《物理评论B》85, 245444（2012年）。[42] T. N. Todorov、D. Dundas 和 E. J. McEniry，《非保守广义电流诱导力》，《物理评论B》81, 075416（2010年）。[43] J. Slonczewski，《磁性多层膜的电流驱动激发》，《磁学与磁性材料杂志》159, L1（1996年）。[44] L. Berger，《电流通过磁性多层膜时自旋波的发射》，《物理评论B》54, 9353（1996年）。[45] T. Holstein，《极化子运动研究》，《物理年鉴》8, 325（1959年）。[46] Y. Meir 和 N. S. Wingreen，《相互作用电子区域中电流的 Landauer 公式》，《物理评论快报》68, 2512（1992年）。[47] A.-P. Jauho、N. S. Wingreen 和 Y. Meir，《相互作用与非相互作用共振隧穿系统中的时间依赖输运》，《物理评论B》50, 5528（1994年）。[48] H. Haug 和 A.-P. Jauho，*Quantum Kinetics in Transport and Optics of Semiconductors*，《Springer 固态科学丛书》，第123卷（Springer 出版社，柏林，2008年）。[49] M. Di Ventra，*Electrical Transport in Nanoscale Systems*（剑桥大学出版社，剑桥，2008年）。[50] J. Bonˇca、S. A. Trugman 和 I. Batisti´c，《Holstein 极化子》，《物理评论B》60, 1633（1999年）。[51] D. Goleˇz、J. Bonˇca、L. Vidmar 和 S. A. Trugman，《Holstein 极化子的弛豫动力学》，《物理评论快报》109, 236402（2012年）。[52] A. S. Mishchenko、N. Nagaosa、G. De Filippis、A. de Can-dia 和 V. Cataudella，《有限温度下 Holstein 极化子的迁移率：无偏方法》，《物理评论快报》114

[53] N. C. Costa、T. Blommel、W.-T. Chiu、G. Batrouni 和 R. T. Scalettar，声子色散与配对和电荷序之间的竞争，《物理评论快报》120，187003（2018年）。[54] S. Li，自学习量子蒙特卡罗：经典 Holstein 自旋-费米子模型的应用，《物理评论B》112, 155121（2025年）。[55] R. M. Noack、D. J. Scalapino 和 R. T. Scalettar，二维电子-声子模型中的电荷密度波和配对磁化率，《物理评论快报》66，778（1991年）。[56] Y.-X. Zhang、W.-T. Chiu、N. C. Costa、G. G. Batrouni 和 R. T. Scalettar，蜂窝晶格 Holstein 模型中的电荷序，《物理评论快报》122, 077602（2019年）。[57] C. Chen、X. Y. Xu、Z. Y. Meng 和 M. Hohenadler，与声子耦合的狄拉克费米子的电荷密度波转变，《物理评论快报》122，077601（2019年）。[58] M. Hohenadler 和 G. G. Batrouni，半填充方格晶格 Holstein 模型中的主导电荷密度波关联，《物理评论B》100，165114（2019年）。[59] B. Cohen-Stead、K. Barros、Z. Meng、C. Chen、R. T. Scalettar 和 G. G. Batrouni，半填充立方 Holstein 模型的朗之万模拟，《物理评论B》102，161108（2020年）。[60] A. G¨otz、S. Beyl、M. Hohenadler 和 F. F. Assaad，通过朗之万动力学研究二维 Su-Schrieffer-Heeger 模型中的价键固体到反铁磁转变，《物理评论B》105，085151（2022年）。[61] K. Michielsen 和 H. De Raedt，Su-Schrieffer-Heeger 模型的量子分子动力学研究，《物理学杂志B：凝聚态物质》103，391（1997年）。[62] M. Di Ventra 和 S. T. Pantelides，Hellmann–Feynman 定理与量子含时和输运问题中力的定义，《物理评论B》61，16207（2000年）。[63] T. N. Todorov，含时紧束缚，《物理学杂志：凝聚态》13，10125（2001年）。[64] D. Dundas、E. J. McEniry 和 T. N. Todorov，电流驱动的原子水车，《自然·纳米技术》4, 99（2009年）。[65] P. Zhang、S. Zhang 和 G.-W. Chern，凝聚态系统中广义力场机器学习模型的描述符（2022年），arXiv:2201.00798 [cond-mat.str-el]。[66] A. Paszke、S. Gross、S. Chintala、G. Chanan、E. Yang、Z. DeVito、Z. Lin、A. Desmaison、L. Antiga 和 A. Lerer，PyTorch 中的自动微分，载于 *Workshop on Autodiff* 2017 （）。

[67] A. Paszke、S. Gross、F. Massa、A. Lerer、J. Bradbury、G. Chanan、T. Killeen、Z. Lin、N. Gimelshein、L. Antiga、A. Desmaison、A. K¨opf、E. Yang、Z. DeVito、M. Rai-son、A. Tejani、S. Chilamkurthy、B. Steiner、L. Fang、J. Bai 和 S. Chintala，PyTorch：一种命令式风格的高性能深度学习库，载于 *Proceedings of the 33rd International Conference on Neural Information Processing Systems* （Curran Associates Inc.，雷德胡克，纽约州，美国，2019年）。[68] V. Nair 和 G. E. Hinton，修正线性单元改进受限玻尔兹曼机，载于 *Proceedings of the 27th International Conference on Machine Learning (ICML)*（Omnipress

，146401 (2015年)。

，海法，以色列，2010年）第807–814页，

arXiv:1003.0358 [cs.LG]。[69] D. P. Kingma 和 J. Ba, Adam：一种随机优化方法 （2017年），arXiv:1412.6980 [cs.LG]。[70] S. Zhang、Y. Fan 和 G.-W. Chern，电荷密度波绝缘体中栅控诱导电阻转变的非平衡动力学 （2025年），arXiv:2201.02194 [cond-mat.mes-hall]。

[71] P. Zhang 和 G.-W. Chern，针对巡回磁体自旋动力学的机器学习非平衡电子力npjComputational Materials **9**，32（2023年）。