arXiv:2611.32129v1 [physics.comp-ph] 24 Nov 2026

采用机器学习磁势的高效自旋–晶格动力学与自旋测温

Yuanmai Zheng,[1] Liangliang Hong,[1] Xingao Gong,[1] Hongjun Xiang,[1,*] 以及 Hongyu Yu[1,†]
[1]*Key Laboratory of Computational Physical Sciences (Ministry of Education), Institute of Computational Physical Sciences, State Key Laboratory of Surface Physics, and Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China*（日期：2026年11月25日）

在有限温度自旋–晶格动力学中，对于每个自旋能量呈非线性的情况，传统的仅力自旋温度计会失效，而标准的半隐式SIB积分器每一步都需要进行两次模型评估。本文提出了一种几何探针自旋温度：仅利用一阶自旋力、无需海森矩阵，即可对任意高阶光滑哈密顿量给出精确结果，因此天然适用于非线性多体机器学习（ML）磁势。此外，我们的缓存场积分器（CFI）每一步仅需进行一次模型评估，同时保持二阶精度；在采用ML磁势时，每步耗时约可减少一半。针对解析体系和ML体系开展的广泛基准测试，并与蒙特卡罗结果进行比较，证实了该方法在自旋测温方面的精确性以及热力学性质计算的准确性。

磁性材料中的自旋和晶格自由度相互耦合，这种耦合决定了超快退磁 [1, 2], 磁振子–声子杂化 [3], 热输运 [4], 磁各向异性和磁弹性的温度依赖性 [5, 6], 以及爱因斯坦–德哈斯效应 [7]。因此，要准确模拟有限温度下的磁性系统，需要采用自旋–晶格动力学（SLD），使原子坐标和经典自旋协同演化 [8–12] ，方法是将分子动力学（MD）与随机朗道–利夫希茨–吉尔伯特（LLG）方程及朗之万热浴相结合 [13–15]。如今，磁性机器学习（ML）势可为此类模拟提供近乎第一性原理精度的能量和力 [16–26], , 例如用于体心立方铁 [18, 25–27], 铁–铝合金 [24], 铁$_3$锗碲$_2$ [19], 单层铬碘$_3$ 和铬碲$_2$[21], 铋铁氧体$_3$ [28, 29], 以及二氧化铀$_2$ [30]。

这些势函数使定量自旋–晶格动力学面临两个问题。首先，当自旋和晶格热浴分别控制时，必须测量自旋温度，以检查自旋是否达到热浴温度，因为有限时间步长可能使其偏移；然而，LLG动力学没有可用于读取该温度的自旋动量。Nurdin和Schotte的动力学自旋温度 [31, 32], 在LAMMPS SPIN软件包 [10], 报告的简化形式中，仅使用自旋取向和自旋力，但只有当哈密顿量 H 对每个自旋均为线性时才是精确的；单离子各向异性、双二次交换和机器学习多体项都不满足这一条件。广义构型温度 [33–38]适用于任意光滑的 H，但实际使用的Nurdin–Schotte型或Rickayzen型估计量 [31, 38, 39], 需要 H的二阶导数；对于磁性机器学习势，这需要通过网络进行二阶自动微分，从而大幅增加内存占用和评估时间。其次，采用机器学习势时，模型评估占据了自旋–晶格动力学每个步长的大部分计算成本：自旋–晶格动力学代码[11, 41], 中使用的半隐式SIB积分器 [40], 每步调用模型两次，一次用于自旋更新，一次用于计算原子力。

早期研究通过 Cayley变换和几何映射 [42–44], 能量平衡 [45], 以及对称分裂 [10, 46, 47]改进了范数保持。据我们所知，还没有任何方法能在每步只进行一次模型评估的同时保持 LLG动力学，并且无需额外模型开销，就能针对任意哈密顿量精确测量自旋温度。

在这里，我们保留 LLG动力学，并同时解决这两个问题（图 1）。对于第一个问题，我们仅根据自旋力求得自旋温度：唯一依赖哈密顿量的输入是自旋力 $\mathbf{f}_i = -\partial H/\partial \mathbf{s}_i$，积分器本来就会计算该自旋力；该估计量对任意光滑哈密顿量都精确，而基于相同输入构造的简化版 Nurdin读数，仅对每个自旋呈线性的能量才精确。我们将这一估计量称为几何探针自旋温度（GPST），T_{GP}因为它由我们指定的几何探针场构造，且不包含 H。对于第二个问题，缓存场积分器（CFI）每步调用模型一次，而非两次，同时保持二阶精度。我们通过在解析的体心立方铁模型和 SpinGNN势上进行独立的蒙特卡罗（MC）采样来验证 T_{GP} ，并在铁以及层状反铁磁体 CrSBr 的 SpinGNN势上比较 CFI 与 SIB [20, 48]。

由自旋力得到的自旋温度。——我们仅根据自旋力得到自旋温度；对于任意光滑哈密顿量 $H(\mathbf{x},\mathbf{s})$，所得结果都是精确的。令$\rho \propto e^{-\beta H} d\mathbf{x} \prod_i d\Omega(\mathbf{s}_i)$，其中 $|\mathbf{s}_i| = 1$且 $\beta = 1/k_B T$，并令 $\mathbf{X}_i$ 为自旋 i单位球面上的任意光滑切向量场。该论证适用于位置固定的情形

$\mathbf{x}$，因此适用于冻结晶格和运动晶格，也适用于NPT系综，且使用每一帧的几何结构。由于球面没有边界，$\oint \nabla_{S_i} \cdot (\mathbf{X}_i e^{-\beta H})\, d\Omega_i = 0$，因此

$$\langle \nabla_{S_i} \cdot \mathbf{X}_i \rangle = \beta \langle \mathbf{X}_i \cdot \nabla_{S_i} H \rangle = -\beta \langle \mathbf{X}_i \cdot \mathbf{f}_i^{\perp} \rangle, \qquad (1)$$

其中 $\mathbf{f}_i^{\perp} = (\mathbf{I} - \mathbf{s}_i \mathbf{s}_i^{\mathsf{T}})\mathbf{f}_i = -\nabla_{S_i} H$ 是切向部分

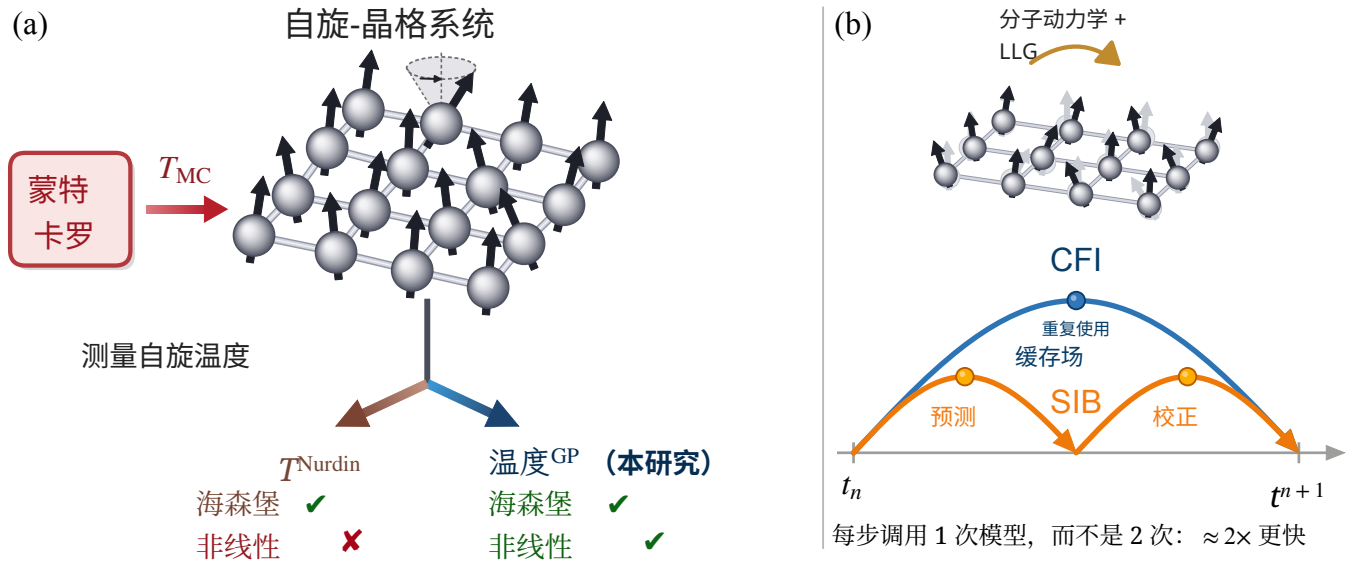


图 1. 自旋测温与单次调用SLD积分。(a) 蒙特卡罗固定 T_{MC}。简化 Nurdin 读数 T_{Nurdin}对于海森堡模型是精确的，因为其能量关于每个自旋呈线性；但对于非线性哈密顿量则会失效。几何探针自旋温度（GPST） T_{GP} （本研究）仅根据自旋力计算，适用于任意光滑哈密顿量。(b) 一个耦合的分子动力学 + LLG 步骤 $t_n \to t_{n+1}$：SIB 每步调用模型两次，分别用于预测和校正；而 CFI 会重复使用缓存场进行预测器计算，并仅调用模型一次。“≈ 2× 更快”指的是在 SpinGNN 势上测得的 CFI/SIB 每步时间比，为 0。51–0。54。

自旋力。对自旋求和可得

$$\langle N_X\rangle = k_B T\,\langle D_X\rangle,$$
$$N_X = \sum_i \mathbf{f}_i^{\perp}\cdot\mathbf{X}_i, \qquad D_X = -\sum_i \nabla_{S_i}\cdot\mathbf{X}_i. \tag{2}$$

公式 (2) 是已知的 [33, 35, 36]；对于自旋，它是文献 [38]，中公式 (20) 的与 H 无关的特殊情形，而该公式适用于任意场。该工作构造了 Rickayzen 型估计量 [39]，，其散度一般涉及 H 的二阶导数，仅给出了海森堡模型的显式公式，且未报告数值测试结果。

$\mathbf{X}_i$ 的选择决定了需要用到 H 的哪些导数： H 仅通过 $\mathbf{f}_i^{\perp}$进入 N_X ，但通过 $\nabla_{S_i}\cdot\mathbf{X}_i$进入 D_X。Nurdin选择 $\mathbf{X}_i = \mathbf{f}_i^{\perp}$给出$N = \sum_i |\mathbf{s}_i\times\mathbf{f}_i|^2$ 和 $D = \sum_i \Delta_{S_i} H$，即 H的二阶导数。只有当 H 关于 $\mathbf{s}_i$ 是线性的， $\Delta_{S_i} H$ 才会简化为 $2\,\mathbf{s}_i\cdot\mathbf{f}_i$，从而得到简化的表达式 $T_N = \langle\sum_i |\mathbf{s}_i\times\mathbf{f}_i|^2\rangle/(2k_B\langle\sum_i \mathbf{s}_i\cdot\mathbf{f}_i\rangle)$ [31, 32]。对于 GPST，我们改为采用 $\mathbf{X}_i = \nabla_{S_i}\Phi$ ，其中探针 $\Phi(\mathbf{s};\mathbf{x})$是自旋方向和原子几何的标量函数，由我们指定且不包含 H。因此， $D_X = -\sum_i \Delta_{S_i}\Phi$ 是构型的显式函数，而 H 仅通过 $\mathbf{f}_i^{\perp}$进入：对于任意光滑哈密顿量，T_{GP} 仅由自旋力决定。由于只有切向力起作用， T_{GP} 不取决于 H 在单位球面之外如何延拓；而 T_N 的分母 $\mathbf{s}_i\cdot\mathbf{f}_i$ 是径向导数，因此取决于这种延拓。我们的主要探针是勒让德对探针 $\Phi_\ell = \sum_{i<j} w_{ij} P_\ell(c_{ij})$，其中 $c_{ij} = \mathbf{s}_i\cdot\mathbf{s}j$，几何权重 w_{ij} 用于选择邻居壳层，而 $\ell\in\{1,2,4,8\}$。由于 P_ℓ是关于每个自旋的 s 次球谐函数，$\Delta_{S_i} P_\ell = -\ell(\ell+1)P_\ell$ 和

$$N_\ell = \sum_{i<j} w_{ij} P'_\ell(c_{ij})\,(\mathbf{s}_j\cdot\mathbf{f}_i^{\perp} + \mathbf{s}_i\cdot\mathbf{f}_j^{\perp}),$$
$$D_\ell = 2\ell(\ell+1)\sum_{i<j} w_{ij} P_\ell(c_{ij}). \tag{3}$$

单点二次、键方向和手性探针补全了 [49]。我们从系综均值之比估计 $T_{GP} =$ $N/(k_B D)$，并通过交叉拟合广义矩估计法结合这些探针，同时采用全链刀切不确定性和 Fieller 置信集 [49, 50]。这要求至少有一个探针满足 $\langle D_X\rangle \neq 0$ 。每个构型中存储的力使我们能够在无需额外模型评估的情况下获得T_{GP} 。相比之下，使用 8 个探针的有限差分构型温度每帧需要调用模型 17 次：对每个探针进行一次未扰动评估和两次扰动评估。 $\sum_i \Delta_{S_i} H$ [51] 的随机迹估计仍然需要对每个随机向量至少额外进行一次力评估，或计算一次 Hessian–向量乘积，并且会引入采样噪声。在不输出结果的 CPU基准测试中，对于 128–1024 个原子，探针求和每帧耗时 66.5–510.9 μ 秒。

缓存场积分器。—SIB [40]分两个阶段，使用保持范数的 Cayley映射推进每个自旋 [49]。预测器使用当前自旋$\mathbf{s}_n$ 处的自旋场估算中点 $\mathbf{m} = (\mathbf{s}_n + \mathbf{p})/|\mathbf{s}_n + \mathbf{p}|$，校正器则使用$\mathbf{m}$处的场推进$\mathbf{s}_n$ ； 每个场都需要一次

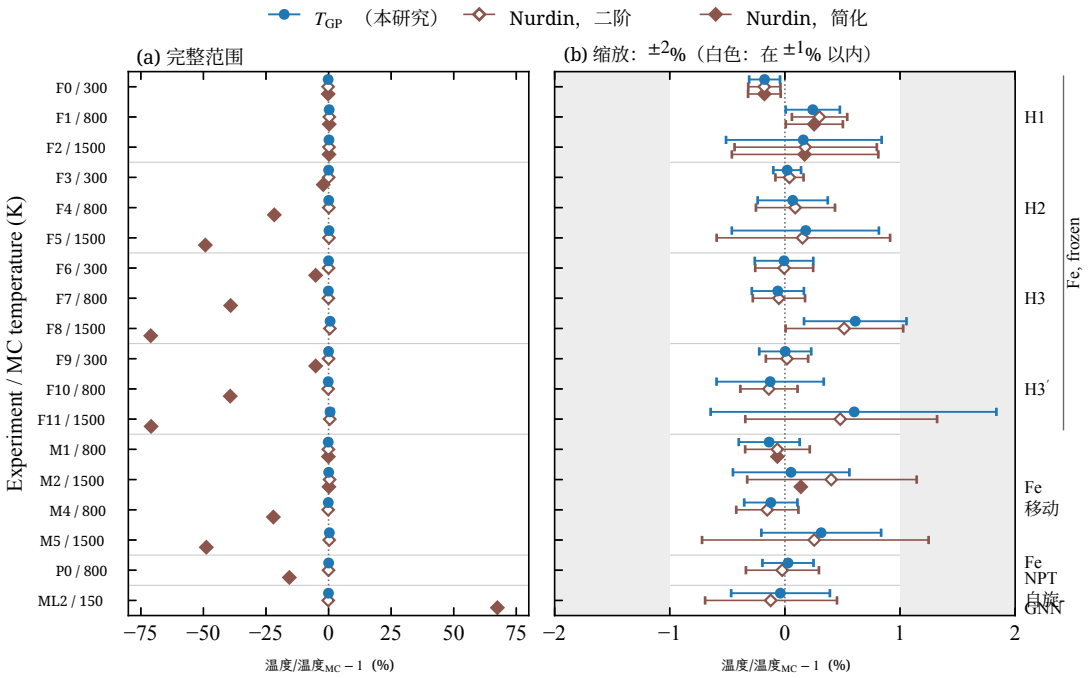


图 2. 自旋温度计与蒙特卡罗结果的比较。对于 18 个基准测试中的每一个（按实验和蒙特卡罗温度标记），图中显示了相对于蒙特卡罗中设定的温度 T_{MC} 的偏差 $T/T_{\mathrm{MC}}-1$：GPST T_{GP}（本研究，蓝色圆点）、使用 H 二阶导数的二阶 Nurdin 读数（空心菱形），以及简化 Nurdin 读数（实心菱形）。(a) 线性坐标轴上的完整范围。(b) ±2% 的放大视图（白色：在 ±1% 以内）；简化 Nurdin 读数仅在落入此范围时显示。F0–F11，冻结铁（F0–F2 H_1、F3–F5 H_2、F6–F8 H_3、F9–F11 H_3'，即在受扰几何结构上的 H_3）；M1、M2（$K=0$）和 M4、M5（$K=0.02$ eV），移动铁；P0，铁 NPT；ML2，第二个 SpinGNN势。误差条：基于 8 条链的普通 95% Fieller 区间；一致性根据预注册的家族误差率区间进行判定。M1–M5 和 ML2 的简化 Nurdin 点为无区间的点值；ML2 的二阶 Nurdin 读数使用每五帧中的一帧。

模型评估。在此作为基准使用的移动晶格 SIB 中，第二次评估是在新位置调用 velocity-Verlet 算法计算力，因此每一步都要调用模型两次：一次用于自旋更新，一次用于计算原子力；自旋则在旧位置$\mathbf{x}_n$处推进。

CFI 基于一个观察：预测器只需定位中点。其场在自旋更新中乘以时间步长 h，因此，该场中 h 阶的误差会使 $\mathbf{m}$ 偏移 h^2 阶；而校正器使用在 $\mathbf{m}$ 处新计算的场进行评估，仍可得到二阶步进。因此，CFI 会复用上一步中点评估得到的场。该场与 $\mathbf{s}_n$ 处的场相差 h 阶，因而无需在 $\mathbf{s}_n$ 处调用模型。为使这一次评估同时服务于自旋和晶格，CFI 对每一步采用对称的顺序：(1) 先进行半步晶格奥恩斯坦–乌伦贝克（OU）热浴演化和半步漂移，将原子移动到 $\mathbf{x}^{n+1/2}$；(2) 利用缓存场得到预测值和中点 $\mathbf{m}$；(3) 在 $(\mathbf{x}^{n+1/2},\ \mathbf{m})$ 处进行一次模型评估，得到原子力、自旋场，以及 NPT系综下的维里；(4) 对速度施加完整的踢步，用新场校正自旋，并缓存该场；(5) 进行半步漂移和半步 OU 热浴演化

即可完成该步。因此，每一步只调用模型一次[图 1(b)]。写出构型时，会在步末状态额外评估一次，以提供与存储构型相匹配的力；这次评估不参与动力学，其成本随写出的帧数而非步数增长 [49]。这种对称顺序在运动晶格上具有二阶精度，而缓存场预测器将评估次数减半；采用相同顺序并使用新鲜预测器进行消融实验，可区分这两项的作用 [49]。关闭热浴且 $\alpha=0$ 时，CFI 在 4 原子系统上的 $\mathbf{x}/\mathbf{v}/\mathbf{s}$ 阶收敛率为 1.9991–2.0002，能量收敛率为 1.9994–2.0008；在块体铁中，收敛率为 1.9955–1.9998。相比之下，SIB 基线在 4 原子系统上的自旋收敛阶为 1.0022– 1.0118，在块体铁中的短时间窗口自旋斜率为 1.91–1.94。

蒙特卡罗验证。—图 2 将T_{GP} 与蒙特卡罗温度 T_{MC} 进行了比较，涵盖 18 个基准测试 [49]：具有各向同性交换 H_1（对每个自旋呈线性）的冻结晶格体心立方铁（128 个原子）、加入单轴单离子各向异性的 H_2，以及加入 Dzyaloshinskii–Moriya相互作用（DMI）和双二次交换的 H_3；具有单离子各向异性 $K=0$ 或 0。02 eV 的运动晶格铁NVT；铁NPT；以及，

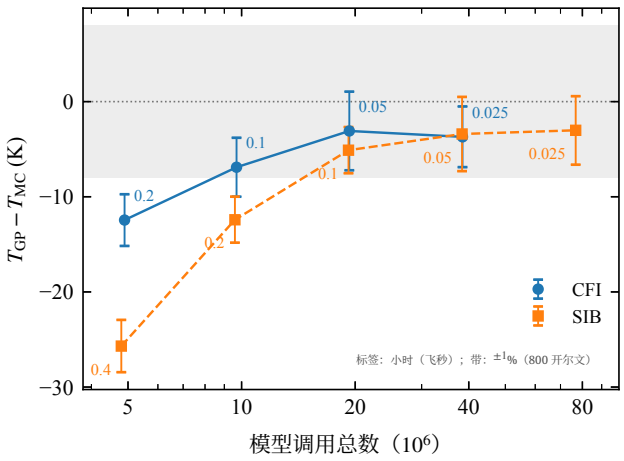


图 3. SIB 和 CFI 的准确度与成本。运动晶格铁NVT在 800 开尔文下的 GPST 偏差 $T_{GP} - T_{MC}$ 与模型评估总次数的关系（对数坐标轴）（128 个原子，$K = 0.02$ eV，$\mu = 2.2\,\mu_B$，$\alpha = 1$）。数值表示步长 h（飞秒）：CFI（蓝色圆圈）为 0.2–0.025，SIB（橙色方块）为 0.4–0.025。误差条：基于 8 条链计算的常规 95% 置信区间。阴影带：800 开尔文的 ±1%。

在 150 开尔文下，另一个用于 CrSBr（108 个原子，36 个 Cr 自旋）的 SpinGNN势，其训练独立于下文用于动力学的模型，并在确定性精度模式下进行评估，以确保蒙特卡罗采样接受结果可复现。所有蒙特卡罗参考均通过了采样资格检查 [52, 53]。

T_{GP} 在所有 18 项基准测试中与 T_{MC} 的差异均在 0.62% 以内，涵盖线性、非线性和机器学习哈密顿量，以及冻结、运动和恒压晶格。图中给出了所有 18 项基准测试的简化 Nurdin 读数，包括在受扰几何结构上的 H_3 （H_3'）；它仅对线性哈密顿量（H_1 以及带有$K = 0$的运动铁）准确；对非线性解析模型的偏差最高达 −71%，对 SpinGNN势的偏差则达 +67%。因此，正如式 (2) 的推导所示，其偏差源于非线性。二阶 Nurdin 读数以 $D = \sum_i \Delta_{S_i} H$ 代替 $2\sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{f}_i$，在所有 18 项基准测试中与 T_{MC} 的差异均在 0.52% 以内；但对于铁解析模型，每帧需要额外进行 2–32 次力评估，对于 SpinGNN势，每帧需要 72 次海森矩阵-向量乘积 [49]；T_{GP} 则不需要。

SIB 与 *CFI* 的比较。——图 3 展示了运动晶格铁 NVT在 800 开尔文下相对于 MC 的 GPST 偏差随模型评估总次数的变化。在相同的 h 下，两种积分器具有相同的有限步长偏差，且在 $h = 0.05$飞秒时均与 T_{MC}相差不到 1%；由于 CFI 每步所需的评估次数只有一半，因此其曲线对应的评估次数减半，并且在有限步长偏差占主导的区域，其偏差更小。与具有相同对称阶数且每步进行两次评估的消融实验相比，两项单侧等效性检验 [54] 表明，在相同的 h 在铁和 CrSBr 的所有测试观测量中均如此 [49]。在确定性 NVE 模拟中，若模型调用预算相同，CFI 的轨迹误差小于 SIB；并且在 $h \leq 0.5$ 飞秒时，其长期能量误差也更小 [49]。

每步中，对于解析铁势，CFI耗时为SIB墙钟时间的0.598–0.613；对于CrSBr SpinGNN势，则为0.509–0.541，接近评估比例1/2，因为使用机器学习势时，模型评估占据了主要计算成本 [49]。对于CrSBr SpinGNN势（108个原子，$h = 0.5$ 飞秒），两种积分器的 T_{GP} 在80–120开尔文范围内均保持在浴温的1.6%以内[49]。在单个NPT状态点（800开尔文下采用解析势的铁）上，CFI在体积、能量、磁化强度和 T_{GP} 方面与独立的NPT蒙特卡罗结果一致，均处于预先注册的等效性界限内 [49]。

热力学。—图4检验了冻结晶格铁在磁性转变附近的各积分器 H_3，涉及$N = 128$ 和432个自旋；CFI的时间步长为 $h = 1$ 飞秒，SIB为 $h = 2$ 飞秒，两者使用相同数量的模型评估。两种动力学结果在大多数温度下均与蒙特卡罗带重合，最大偏差出现在交叉点以上的800开尔文处 [图4(a,b)]。在双尺寸Binder累积量交叉方面，时间步长为 $h = 0.5$ 飞秒的CFI结果 [55] 与蒙特卡罗结果的95%区间一致；在模型调用预算相同的情况下，时间步长为 $h = 1$ 飞秒的CFI和 $h = 2$ 飞秒的SIB得到相同的交叉点，均比蒙特卡罗结果高约7开尔文 [图4(c)]，，因此每步省去一次评估并未引入可分辨的偏差。在不使用热浴的NVE系综中（$\alpha = 0$、$N = 432$，750开尔文），从相同状态出发并采用相同的 h，20皮秒后的中位能量漂移 $\Delta E/N$ 为：时间步长为 $h = 0.5$ 飞秒时，CFI为 −2.01 毫电子伏/原子，SIB为−3.72 毫电子伏/原子；时间步长为 $h = 1$ 飞秒时，则为 −16.65 和−43.48 毫电子伏/原子 [图4(d)]。

讨论。—我们仅根据自旋力获得自旋温度；对于任何光滑哈密顿量，GPST 都是精确的，无需额外的模型评估，并且对于线性、非线性和机器学习哈密顿量，其结果与蒙特卡罗结果的偏差均在 0.62% 以内，而简化 Nurdin 读数的误差为 −71% 至 +67%。CFI 使 LLG动力学在每个步长中仅需进行一次模型评估，在相同步长下具有与 SIB 相同的有限步长偏差；使用机器学习势时，其每步耗时约为 SIB 的一半。蒙特卡罗验证涵盖解析铁模型和一个 SpinGNN势，因为用于动力学的 CrSBr 模型的能量评估无法在蒙特卡罗接受尺度下复现。

我们感谢以下项目提供的资金支持：中国国家重点研发计划（项目编号：2022YFA1402901，H.X.）、国家自然科学基金委员会（项目编号：12504262，Y.Z.）、国家自然科学基金委员会（项目编号：12188101，H.X.）、上海市科学技术计划（项目编号：23JC1400900，H.X.）、广东省基础与应用基础研究重大项目（极端条件下的未来功能材料——项目编号：2021B0301030005，H.X.）、上海市试点研究—复旦大学 21TQ1400100（项目编号：23TQ017，H.X.）、中国科学院机器人 AI 科学家平台（H.X.）以及新基石科学基金会（H.X.）。

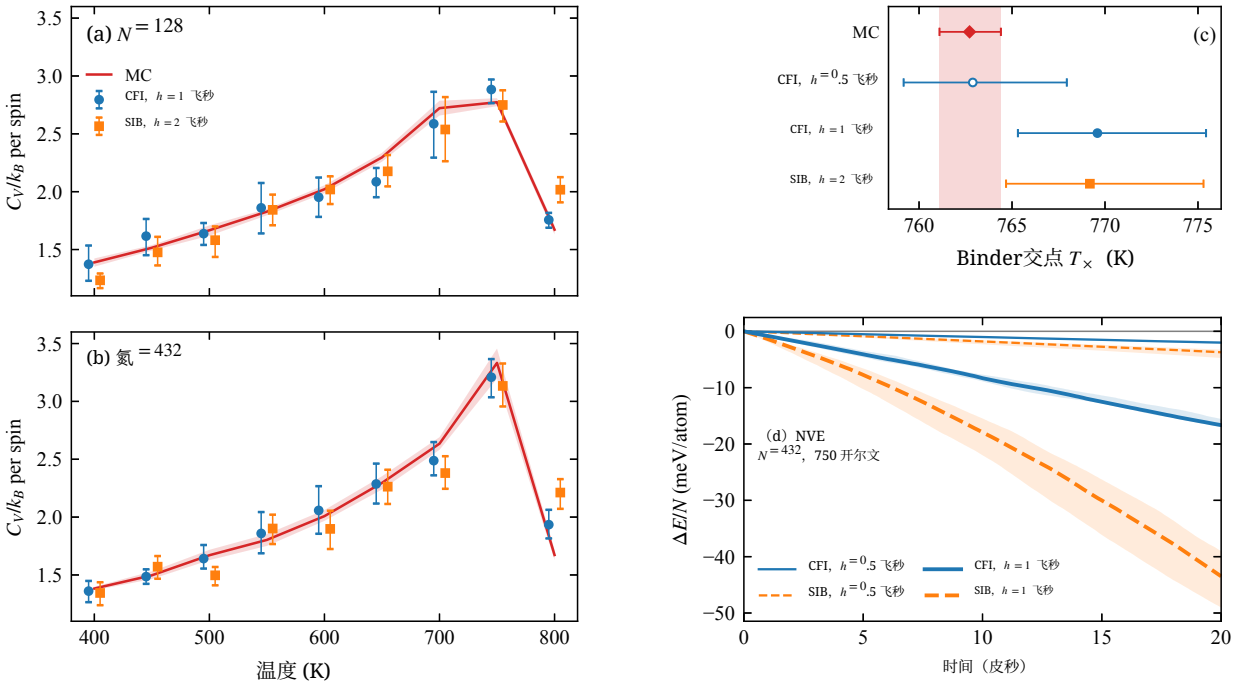


图 4. 冻结晶格体心立方铁（H_3）中 SIB 和 CFI 的热力学与能量守恒。对于（a） $N = 128$ 和（b） $N = 432$，每自旋的比热为 C_V/k_B：蒙特卡罗（红线和 95%区间；线段连接网格点）、 $h = 1$ 飞秒时的 CFI（蓝色圆点）以及 $h = 2$ 飞秒时的 SIB（橙色方块），三者使用相同数量的模型评估。CFI 和 SIB 的点分别偏移 -5 和 $+5$ 开尔文。（c）双尺寸 Binder交叉温度 $T_\times$，这是有限尺寸交叉，而非体相有序温度；阴影带表示蒙特卡罗 95%区间。（d）NVE 中的能量漂移 $\Delta E/N$（无热浴， $\alpha = 0$），针对 750 开尔文下的 $N = 432$：在相同步长 h（0.5 和 1 飞秒）下，CFI（实线）和 SIB（虚线）均来自相同的初始态；曲线为中位数，阴影带为 8 个初始态的取值范围。所有误差条均为基于 8 条链计算的常规 95%置信区间。

代码可用性。—代码已公开发布于 https://github.com/Hyyu-Lab/spingnn-lammps。

* hxiang@fudan.edu.cn † hongyuyu20@fudan.edu.cn

[1] E. Beaurepaire、J.-C. Merle、A. Daunois 和 J.-Y. Bigot，《铁磁性镍中的超快自旋动力学》，《物理评论快报》**76**，4250（1996）。[2] X. Chen *et al.*，《铁磁材料中的超快退磁：起源与进展》，Phys. Rep. **1102**，1 2025( )。[3] H. Man *et al.*，《直接观测钇铁石榴石中的磁振子-声子耦合》，《物理评论B辑》**96**，100406（2017）。[4] Y. Zhou、J. Tranchida、Y. Ge、J. Murthy 和 T. S. Fisher，《铁磁-顺磁转变过程中的声子与磁振子热输运原子模拟》，《物理评论B辑》**101**，224303（2020）。[5] S. Nikolov、P. Nieves、A. P. Thompson、M. A. Wood 和 J. Tranchida，《基于经典自旋-晶格计算的磁各向异性与磁弹性温度依赖性》，《物理评论B辑》**107**，094426（2023）。[6] S. Nikolov、M. A. Wood、A. Cangi、J.-B. Maillet、M.- C. Marinica、A. P. Thompson、M. P. Desjarlais 和 J. Tranchida, 数据驱动的磁弹性预测与可扩展经典自旋-晶格动力学, npj Com- put. Mater. **7**, 153 (2021). [7] W. Dednam, C. Sabater, A. E. Botha, E. B. Lombardi, J. Fern´andez-Rossier, and M. J. Caturla, 爱因斯坦–德哈斯效应的自旋-晶格动力学模拟, Com- put. Mater. Sci. **209**, 111359 (2022). [8] P.-W. Ma, C. H. Woo, and S. L. Dudarev, 铁磁性铁中自旋-晶格动力学的大规模模拟,《物理评论B辑》**78**, 024434 (2008). [9] P.-W. Ma, S. L. Dudarev, and C. H. Woo, 磁性材料的自旋-晶格-电子动力学模拟,《物理评论B辑》**85**, 184301 (2012). [10] J. Tranchida, S. J. Plimpton, P. Thibaudeau, and A. P. Thompson, 耦合磁自旋动力学与分子动力学的大规模并行辛算法, J. Comput. Phys. **372**, 406 (2018). [11] J. Hellsvik, D. Thonig, K. Modin, D. Iu.san, A. Bergman, O. Eriksson, L. Bergqvist, and A. Delin, 具有第一性原理精度的原子级自旋-晶格动力学通用方法,《物理评论B辑》**99**, 104302 (2019). [12] M. Strungaru, M. O. A. Ellis, S. Ruta, O. Chubykalo- Fesenko, R. F. L. Evans, and R. W. Chantrell, 适用于正则系综和微正则系综、包含角动量转移的自旋-晶格动力学模型,《物理评论B辑》**103**, 024429 (2021). [13] W. F. Brown, 单畴

粒子, 《物理评论》130, 1677 (1963). [14] J. L. Garc´ıa-Palacios and F. J. L´azaro, 小型磁性粒子动力学性质的朗之万动力学研究, 《物理评论B辑》58, 14937 (1998). [15] P.-W. Ma and S. L. Dudarev, 朗之万自旋动力学, 《物理评论B辑》83, 134418 (2011). [16] M. Eckhoff and J. Behler, 使用自旋依赖的原子中心对称函数构建磁性系统的高维神经网络势, npj Com- put. Mater. 7, 170 (2021). [17] M. Domina, M. Cobelli, and S. Sanvito, 矢量场的谱邻域表示：包含自旋的机器学习势, 《物理评论B辑》105, 214439 (2022). [18] I. Novikov, B. Grabowski, F. K¨ormann, and A. Shapeev, 磁矩张量势可再现体心立方铁的不同磁态, npj Comput. Mater. 8, 13 (2022). [19] H. Yu, C. Xu, X. Li, F. Lou, L. Bellaiche, Z. Hu, X. Gong, and H. Xiang, 由人工神经网络表示的复杂自旋哈密顿量, 《物理评论B辑》105, 174422 (2022). [20] H. Yu, Y. Zhong, L. Hong, C. Xu, W. Ren, X. Gong, and H. Xiang, 面向磁性材料的自旋依赖图神经网络势, 《物理评论B辑》109, 144426 (2024). [21] H. Yu, B. Liu, Y. Zhong, L. Hong, J. Ji, C. Xu, X. Gong, and H. Xiang, 面向磁性材料的物理信息时间反演等变神经网络势, 《物理评论B辑》110, 104427 (2024). [22] T. Yang, Z. Cai, Z. Huang, W. Tang, R. Shi, A. Godfrey, *et al.*, 深度学习揭示磁性材料中的自旋与晶格相互作用, 《物理评论B辑》110, 064427 (2024). [23] Z. Yuan, Z. Xu, H. Li, X. Cheng, H. Tao, Z. Tang, *et al.*, 磁性材料的等变神经网络力场, Quantum Front. 3, 8 (2024). [24] A. S. Kotykhov, K. Gubaev, M. Hodapp, C. Tantardini, A. V. Shapeev, and I. S. Novikov, 基于约束密度泛函理论的磁性机器学习势：铁铝合金案例研究, Sci. Rep. 13, 19728 (2023). [25] J. B. J. Chapman and P.-W. Ma, 用于缺陷磁性铁动力学模拟的机器学习自旋-晶格势, Sci. Rep. 12, 22451 (2022). [26] M. Rinaldi, M. Mrovec, A. Bochkarev, Y. Lysogorskiy, a nd R. Drautz, 铁的非共线磁性原子簇展开, npj Comput. Mater. 10, 12 (2024). [27] M. A. Br¨annvall, D. Gambino, R. Armiento, and B. Alling, 用于体心立方铁在 T_c 及地核条件下纵向自旋涨落效应的机器学习方法, 《物理评论B辑》105, 144417 (2022). [28] Y. Cheng, H. Yu, and H. Xiang, 磁性原子间势主动学习中的切平面证据不确定性, Phys. Rev. Mater. 10, 103807 (2026). [29] X. Zhang, H. Yu, L. Hong, and H. Xiang, 磁性材料的完全第一性原理自旋-晶格动力学框架, arXiv:2605.01781 (2026). [30] K. Kobayashi, H. Nakamura, and M. Itakura, 用于二氧化铀磁性相变的自旋神经网络势, arXiv:2603.07260 (2026). [31] W. B. Nurdin and K.-D. Schotte, 自旋系统的动力学温度, 《物理评论E辑》61, 3579 (2000). [32] P.-W. Ma, S. L. Dudarev, A. A. Semenov, and C. H. Woo, 动态自旋系综的温度, 《物理评论E辑》82, 031111 (2010). [33] H. H. Rugh

, 温度的动力学方法

《物理评论快报》78, 772 (1997). [34] B. D. Butler, G. Ayton, O. G. Jepps, and D. J. Evans，构型温度：蒙特卡罗模拟的验证，《化学物理杂志》109, 6519 (1998). [35] O. G. Jepps, G. Ayton, and D. J. Evans，热力学温度的微观表达式, 《物理评论》E 62, 4757 (2000). [36] S. Davis and G. Guti´érrez，连续最大熵推断中的共轭变量，《物理评论》E 86, 051136 2012( ). [37] G. Palma, G. Guti´érrez, and S. Davis, 自旋系统的无系综构型温度，《物理评论》E 94, 062113 (2016). [38] G. Guti´érrez, S. Davis, and G. Palma，受约束系统中的构型温度：自旋动力学的情形，《物理与数学理论杂志A》51, 455003 (2018). [39] G. Rickayzen and J. G. Powles, 经典微正则系综中的温度，《化学物理杂志》114, 4333 (2001). [40] J. H. Mentink, M. V. Tretyakov, A. Fasolino, M. I. Katsnelson, and T. Rasing，随机朗道–利夫希茨方程的稳定快速半隐式积分，《凝聚态物质杂志》22, 176001 (2010). [41] G. P. M¨uller *et al.*，Spirit：原子级自旋模拟的多功能框架，《物理评论B辑》99, 224414 (2019). [42] P. S. Krishnaprasad and X. Tan，微磁学中的凯莱变换, Physica B 306, 195 (2001). [43] J. Frank，铁磁材料的几何时空积分，《应用数值数学》48, 307 (2004). [44] D. Dahlbo m, H. Zhang, C. Miles, X. Bai, C. D. Batista, and K. Barros, 通过平均场薛定谔方程实现经典自旋动力学的几何积分，《物理评论B辑》106, 054423 (2022). [45] D. A. Garanin，经典自旋系统动力学中的能量平衡与能量修正，《物理评论》E 104, 055306 2021( ). [46] P.-W. Ma, S. L. Dudarev, and C. H. Woo，SPILADY：用于自旋–晶格磁性分子动力学模拟的并行 CPU 和 GPU 代码，《计算物理通讯》207, 350 (2016). [47] M. Ableidinger and E. Buckwar，随机朗道–利夫希茨方程的分裂积分器，《SIAM科学计算杂志》38, A1788 (2016). [48] E. J. Telford *et al.*，层状反铁磁性使范德瓦耳斯半导体 CrSBr 产生巨大的负磁阻，《先进材料》32, 2003240 (2020). [49] 参见补充材料 [URL will be inserted by publisher] ，其中包含基准参数、SIB更新、探针族、估计量和兼容性检查、二阶 Nurdin 读数、模型评估核算、采用两次调用积分器的消融实验、NVE与NPT系综比较，以及图2–4的数据表。 [50] E. C. Fieller，区间估计中的若干问题，《皇家统计学会杂志B辑》16, 175 (1954). [51] M. F. Hutchinson，拉普拉斯平滑样条影响矩阵迹的随机估计量，《统计模拟与计算通讯》19, 433 (1990). [52] H. Flyvbjerg and H. G. Petersen，相关数据平均值的误差估计，《化学物理杂志》91, 461 (1989). [53] A. Gelman and D. B. Rubin，利用多序列迭代模拟进行推断，《统计科学》7, 457 (1992). [54] D. J. Schuirmann，采用双单侧检验程序和检验效能方法评估平均生物利用度等效性的比较

, 物理学

, 《药代动力学与生物药剂学杂志》**15**, 657 (1987).

[55] K. Binder, 《伊辛模型块分布函数的有限尺寸标度分析》, 《物理学杂志B辑》**43**，119（1981）。