

УДК 537.6: 004.021

## ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В МОДЕЛИ ИЗИНГА В ЗАВИСИМОСТИ ОТ РАЗМЕРОВ РЕШЕТКИ И РАДИУСОВ КОРРЕЛЯЦИИ

А. А. Бирюков, Я. В. Дегтярева, М. А. Шлеенков

В работе рассмотрены фазовые переходы в двумерной и трехмерной решетках Изинга в зависимости от их размеров и радиусов корреляции методом Монте-Карло. Показано, что оптимальный размер решетки для двумерной модели – порядка  $10^4$  элементов, а для трехмерной –  $10^6$  элементов. Увеличение радиуса взаимодействия между спинами приводит к повышению температуры фазового перехода.

Изучение фазовых переходов и связанных с ними критических явлений традиционно привлекают к себе активное внимание физиков. В настоящее время представления о фазовых переходах проникают в различные области физики (физика твердого тела, физическая химия, биохимия и биофизика макромолекул, квантовая электроника) [1]. Большой интерес представляют фазовые переходы второго рода, связанные с перестройкой структуры вещества без обмена энергией с окружающей средой. Описание фазовых переходов на основе микроскопической модели вещества представляет большие математические трудности ввиду сложной структуры реальных веществ и сложных потенциалов взаимодействия между атомами. В связи с этим для исследования закономерностей фазовых переходов рассматриваются модели, отображающие основные свойства реального тела и позволяющие провести численное или аналитическое описание системы и таким образом описать фа-

зовый переход. Для изучения закономерностей фазовых переходов весьма удобны оказались модели теории магнетизма. Для описания магнитных систем существует множество моделей. Одна из них впервые была предложена в 1920 году В. Ленцем [2]. В своей диссертации 1924 года [3] Э. Изинг рассмотрел частный случай линейной цепочки спинов, связанных взаимодействием с ближайшими соседями. Он показал, что в одномерной модели фазового перехода не существует. Предложенная модель Изинга активно исследуется с 1920-х годов. Двумерная модель Изинга прекрасно иллюстрирует переход парамагнетик – ферромагнетик, что было доказано в 1942 году Л. Онсагером [4], который смог точно рассчитать статистическую сумму такой модели. Далее двумерная модель Изинга рассматривалась Чжэньнином Янгом [5], который вывел значение спонтанной намагниченности. Ю. М. Зиновьевым [6] были исследованы пределы статистической суммы и корреляционной функции на бесконечной решетке. Однако трехмерная модель Изинга не поддавалась аналитическому исследованию и встала проблема ее изучения методами численного моделирования. Численное моделирование базировалось на методе Монте-Карло, и апробация была проведена на двумерных моделях [7].

В настоящее время разрабатываются новые методы численного моделирования

---

*Бирюков Александр Александрович, (biryukov@samsu.ru), профессор, заведующий кафедрой общей и теоретической физики Самарского государственного университета, 443011, Россия, г. Самара, ул. академика Павлова, 1.*

*Дегтярева Яна Владимировна, (degt-yana@yandex.ru), магистрант 2 года обучения кафедры ОТФ СамГУ.*

*Шлеенков Марк Александрович, (shleenkov@list.ru), аспирант 3 года обучения кафедры ОТФ СамГУ.*

спиновых стекол как двумерной модели Изинга [8]. Так, в работе М. Ройяс с соавторами [9] спиновая решетка моделируется пятиугольниками (классическая модель Изинга моделируется четырехугольниками). В данной модели до достижения критической температуры авторы получают необычно низкие значения энтропии и теплоемкости.

В работе В. В. Прудникова с соавторами [10] описаны результаты компьютерного моделирования критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга, полученные результаты согласуются с результатами экспериментальных исследований критического поведения разбавленных изингоподобных магнетиков. Методами нейтронной дифракции исследуется фазовая динамика монокристаллов  $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$ , которая была успешно объяснена на трехмерной решетке Изинга [11]. Активно изучаются концентрационные фазовые переходы в магнетиках с РККИ-обменным взаимодействием между случайно распределенными по узлам кристаллической решетки спинами и между случайно распределенными по объему сферическими наночастицами в немагнитной матрице [12–13].

Модель Изинга используется при моделировании адсорбции в наноструктурах. Разрабатываются алгоритмы и программы для расчета времени релаксации и корреляционной длины для одномерной модели адсорбции (одномерного решеточного газа с оборванными концами) в рамках модели Изинга. Получены зависимости корреляционной длины и времени релаксации от температуры и числа частиц [14]. Проводится анализ компьютерного моделирования двумерной и трехмерной модели Изинга с целью создания алгоритма тестирования псевдослучайных последовательностей и хеширования данных [15,16].

С возрастанием производительности компьютерных технологий точность исследований непрерывно повышалась, прежде всего, путем увеличения числа элементов в моделируемой решетке. Так, размерность

изучаемых решеток постепенно увеличивалась от  $30 \times 30$  [17] до  $60 \times 60$  [18], а также  $20 \times 20 \times 20$  [19]. С увеличением числа элементов появляется возможность исследовать модель Изинга, которая более реалистично описывает существующие магнетики с учетом взаимодействия не только с ближайшими, но и с более дальними соседями. Работы ряда зарубежных коллег посвящены изучению моделей с радиусами взаимодействия 2 и 3, однако размеры кубических решеток в них не превышали 15000 элементов, то есть в решетке вдоль каждого ребра рассматривалось по 70 атомов [19–21].

Данная работа посвящена исследованию фазового перехода в зависимости от размера решеток. При выборе оптимальных двумерных и трехмерных решеток исследуется температура фазового перехода с учетом ближних и дальних взаимодействий между спинами.

### Модель Изинга

Двумерная модель Изинга описывается решеткой, в узлах которой расположены спины, принимающие только два значения: +1 или -1 (направление спина "вверх" или "вниз"). Гамильтониан системы [22] при нулевом внешнем поле имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{J}{\rho} \sum_{|i-j| \leq r} S_i S_j,$$

где  $\rho$  – геометрическое расстояние между спинами,

$r$  – радиус корреляции,

$J$  – коэффициент взаимодействия между спинами.

Для трехмерной модели гамильтониан модифицируется следующим образом:

$$\hat{H} = -\frac{J}{\rho} \sum_{|i-j| \leq r, |i-k| \leq r, |k-j| \leq r} S_{\langle i,j \rangle} S_k.$$

Если при этом учитывается действие внешнего поля, то гамильтониан преобразуется к виду:

$$\hat{H} = -\frac{J}{\rho} \sum_{|i-j| \leq r} S_i S_j - h \sum_i S_i,$$

где  $h$  – величина поля.

Аналогично для трехмерной модели. Вероятность нахождения спина в каждом  $i$ -м состоянии определяется распределением Гиббса:

$$P_i = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{1}{kT} H_i\right),$$

где  $k$  – коэффициент Больцмана,

$T$  – температура,

$Z = \sum_i P_i$  – нормировочная константа.

В случае, когда исследуемая величина имеет вероятностный характер, для решения задачи удобно воспользоваться недетерминированными численными методами. Одним из таких методов является метод Монте-Карло и его модификации.

### Метод Монте-Карло

Методы Монте-Карло — численные методы решения математических задач и прямое статистическое моделирование (физических, химических и других процессов) при помощи получения и преобразования случайных чисел. Основное преимущество методов Монте-Карло по сравнению с другими аналитическими и численными методами заключается в том, что с их помощью можно исследовать физические явления любой сложности, которые нельзя или очень сложно решить другими способами. Кроме того, этот метод имеет простую структуру. Алгоритм составляется для одного случайного испытания (шага модели), а затем испытание повторяется большое число раз, причем все шаги должны быть независимыми.

Впервые этот метод был исследован в 1873 году А. Холлом [23] для экспериментального определения числа  $\pi$  путем бросания иглы на лист линованной бумаги. А в 1949 году Н. Метрополис и С. Улам [24] использовали метод Монте-Карло для решения линейных интегральных уравнений.

Методы Монте-Карло применяются для расчета физических задач (перенос энергии и вещества, ядерная физика, статистическая физика и в других областях). Часто эти методы используются для вычисления интегралов (в том числе интегралов по траекториям). И. М. Соболев [25] приводит пример решения методом Монте-Карло

задачи о рассеянии частиц.

В статистической физике метод Монте-Карло начал применяться достаточно давно [26]. Он позволяет проводить «эксперименты» на эффективных «кристаллах» с любым гамильтонианом взаимодействия, что помогает исследовать такие явления, как фазовые переходы. При численных расчетах методом Монте-Карло сначала задается начальная конфигурация переменных модели, хранимых в памяти компьютера [27]. Затем последовательно производятся псевдослучайные изменения переменных так, чтобы получаемая плотность вероятности появления некоторой конфигурации  $C$  была пропорциональна больцмановскому фактору:

$$p(C) \propto e^{-\beta \hat{H}(C)},$$

где  $\hat{H}(C)$  – действие на конфигурации,  $\beta$  – обратная температура.

После этого конфигурация  $C$  заменяется на некоторую новую конфигурацию  $C'$ , для которой снова вычисляется  $H(C')$  и сравнивается с  $H(C)$ . Если действие уменьшается, то есть  $H(C')$  имеет больший больцмановский вес, чем  $H(C)$ , то замена конфигурации  $C$  на  $C'$  принимается (условие теплового равновесия с окружающей средой) [28].

Используя описанный метод как основу для нахождения зависимости средней намагниченности от температуры для двух- и трехмерных решеток Изинга, мы составили компьютерную программу, алгоритм которой рассмотрен ниже.

### Алгоритм решения

1. Установка значений параметров. При решении задачи предполагалось, что константа взаимодействия между спинами  $J$  и коэффициент Больцмана равны 1.

2. Инициализация решетки. Двумерная (трехмерная) решетка представлена двумерным (трехмерным) массивом, элементы которого – значения спинов в данном узле. Решетка считается периодической, то есть учитывается выход за ее границы при подсчете энергии взаимодействия с соседями. Начальное состояние решетки зада-

ется при  $T \rightarrow \infty$  («горячий» старт,  $\beta = 0$ ). В этом случае вероятность того, что спин примет значение  $+1$ , равна  $0.5$ , то есть спины расположены хаотически, а намагниченность обращается в ноль. Поэтому в начале счета спины решетки задавались так, чтобы каждый спин был направлен в противоположную сторону по отношению к своим соседям.

3. При охлаждении и действии внешнего поля конфигурация решетки меняется, поэтому конфигурацию решетки нужно изменить до нужной температуры. Направления спинов решетки меняются в соответствии с формулами (см. шаг 4). Измерения при этом не производятся.

4. Далее для каждого узла решетки вычисляем значение энергии  $H$  и вероятности  $P(S) = \frac{\exp(-\beta H(S))}{\exp(-\beta H(+1)) + \exp(-\beta H(-1))}$  (где  $S$  — значение спина в рассматриваемом узле). Затем, согласно алгоритму Монте-Карло, генерируется псевдослучайное число  $x$  из отрезка  $[0, 1]$  и сравнивается с полученными значениями вероятностей. В случае, когда  $x > P(+1)$ , значение спина принимается равным  $-1$ , иначе  $+1$ .

5. Следующий шаг - для определенного значения внешнего поля и температуры вычислить среднее значение намагниченности по всей решетке. Однако, чем больше решетка, тем более длительным становится время счета. Например, для трехмерной решетки размера  $100 \times 100 \times 100$  с радиусом корреляции  $1$  время вычисления намагниченности в одной точке занимает девять минут, а при радиусе корреляции  $2$  — уже сорок три минуты. Поэтому встает необходимость распараллеливания вычислений. Намагниченность здесь — алгебраическая сумма спинов системы. Распараллеливание осуществлялось следующим образом:

5.1. Решетка разбивается на равные кубические части.

5.2. Каждому компьютеру в зависимости от его номера выделяется определенная часть решетки.

5.3. Каждый компьютер выполняет шаги 3–4 для своей части решетки и вычисляет сумму спинов на ней.

5.4. Результаты пересылаются «главному» компьютеру.

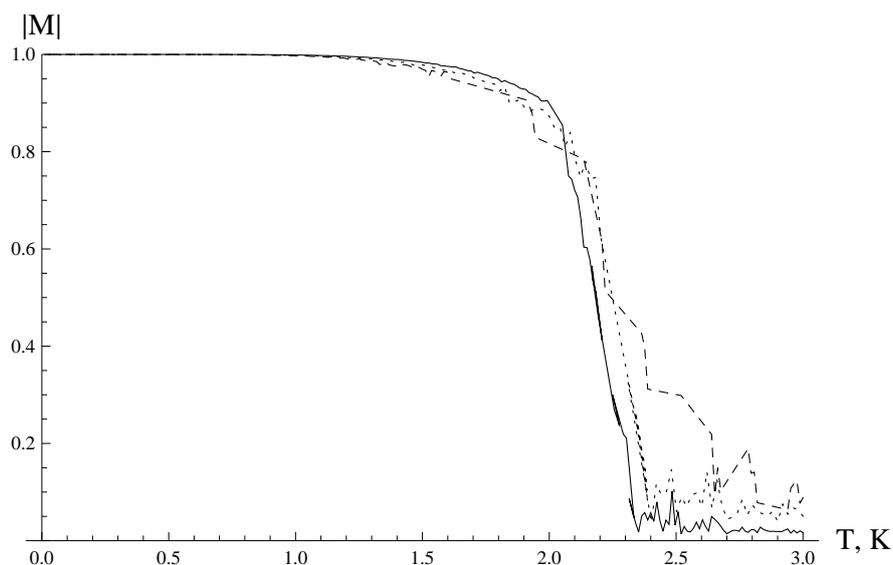
5.5. Получив результаты от всех остальных узлов, «главный» компьютер складывает их и проводит нормировку по всей решетке.

Поскольку метод Монте-Карло является статистическим, то для каждой конфигурации осуществлялось несколько измерений, а потом по ним проводилось усреднение.

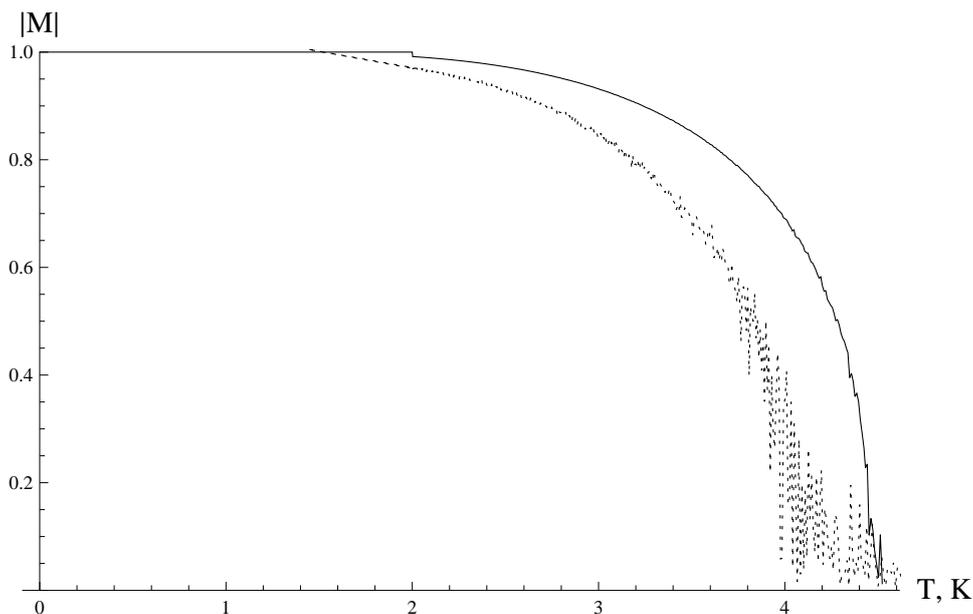
В задаче исследовалась зависимость намагниченности от температуры решетки при различных параметрах. При фазовом переходе наблюдается резкий скачок кривой намагниченности — спины выстраиваются в одну сторону, что и продемонстрировано полученными результатами.

### Результаты и их обсуждение

Исследования проводились для решеток размером  $50 \times 50$ ,  $600 \times 600$ ,  $200 \times 200$ . Большие решетки были рассчитаны при помощи параллельных вычислений на кластере «Сергей Королев». Каждый «узел» считал сумму спинов по своей части решетки. Нормировка проводилась на главном вычислительном узле с учетом размеров всей решетки в целом после сложения результатов, полученных от каждого «узла». Графики намагниченности для разных размеров решетки (прочие параметры не менялись) представлены на рисунке 1. Видно, что для двумерной решетки с увеличением ее линейных размеров точность расчетов повышается, и фазовый переход прослеживается более четко. Так, для решетки размера  $50 \times 50$  кривая намагниченности плавно опускается вниз, и фазовый переход почти незаметен. В случае решеток  $200 \times 200$  и  $600 \times 600$  наблюдается уже более резкий скачок кривой намагниченности. Температура фазового перехода здесь —  $2.23$  К, что согласуется с теоретическими результатами [4].



**Рис. 1.** Зависимость намагниченности ( $|M|$ ) от температуры ( $T$ ) для различных размеров двумерной решетки: сплошная линия –  $600 \times 600$ , пунктирная –  $50 \times 50$ , точки –  $200 \times 200$



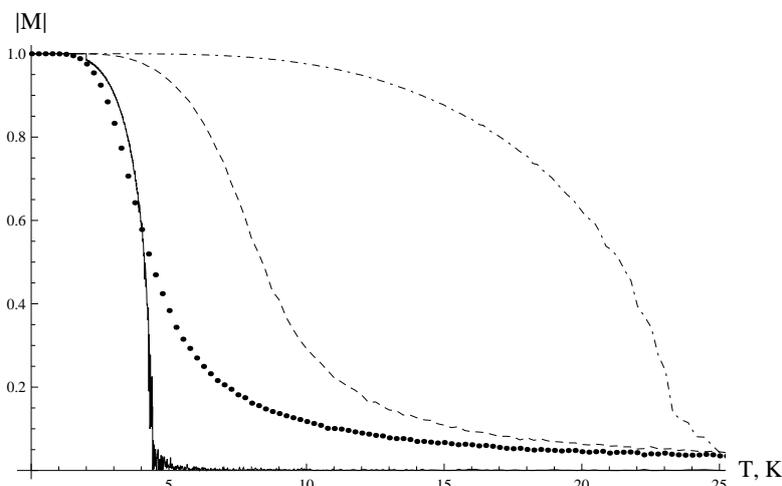
**Рис. 2.** Зависимость намагниченности ( $|M|$ ) от температуры ( $T$ ) для трехмерной решетки: сплошная линия –  $300 \times 300 \times 300$ , точки –  $60 \times 60 \times 60$

Аналогично была просчитана трехмерная модель для решеток размером  $60 \times 60 \times 60$ ,  $300 \times 300 \times 300$ , результаты вычислений представлены на рисунке 2. Как видно, здесь размер решетки имеет существенное значение - области фазовых переходов заметно отличаются.

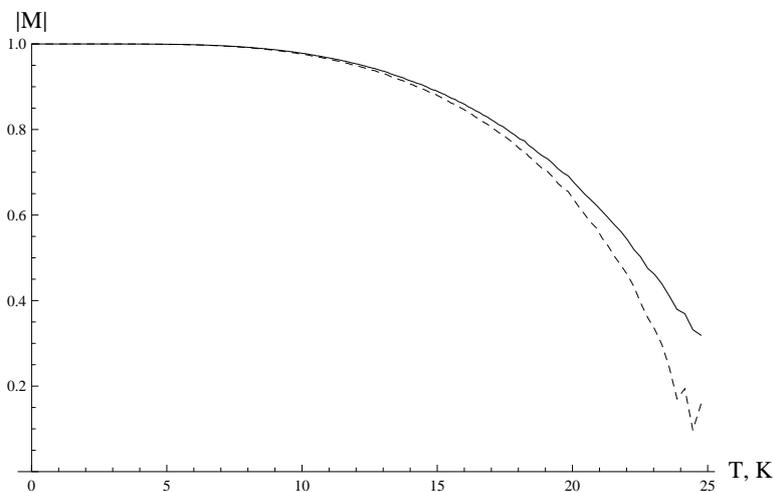
В статье [29] представлены результаты исследования двумерной модели Изинга с дальним радиусом взаимодействия. Было показано, что радиус корреляции существенно влияет на температуру фазового перехода. Так, если учитывать взаимодействие лишь с ближайшими спинами, то

температура фазового перехода составляет примерно 2.5 К, а если радиус взаимодействия равен двум, то критическая темпе-

ратура принимает значение уже 6.4 К, то есть увеличивается в два с половиной раза.



**Рис. 3.** Зависимость намагниченности ( $|M|$ ) от температуры ( $T$ ): для решетки  $120 \times 120 \times 120$  при радиусах корреляции 1 (сплошная линия) и 2 (штрих-пунктирная линия). Для двумерной модели  $120 \times 120$ : радиус корреляции 1 (точки), радиус корреляции 2 (пунктир)



**Рис. 4.** Зависимость намагниченности ( $|M|$ ) от температуры ( $T$ ) для кубической решетки  $120 \times 120 \times 120$  для значений внешнего поля:  $h = 0.1$  Тл (пунктир),  $h = 0.5$  Тл (сплошная линия). Радиус корреляции 2

С помощью разработанной программы исследована зависимость фазового перехода от корреляционного радиуса в случае трехмерной решетки. Здесь разница становится еще более существенной — темпе-

ратура возрастает в пять раз. На рисунке 3 представлены зависимости намагниченности для двумерной и трехмерной решеток для радиусов корреляции 1 и 2. В случае трехмерной решетки даже при уче-

те взаимодействия только ближайших соседей кривая намагниченности имеет более резкий скачок, чем для двумерной модели. Таким образом, трехмерная модель лучше подходит для описания фазовых переходов.

Также нами была исследована двумерная модель Изинга во внешнем постоянном магнитном поле [30]. Было показано, что под действием внешнего поля температура фазового перехода повышается. Аналогичных результатов следует ожидать и для трехмерной модели. На рисунке 4 представлены графики зависимости намагниченности от температуры для кубической решетки  $120 \times 120 \times 120$  для различных значений внешнего поля. Полученные при данном исследовании результаты аналогичны таковым для двумерной модели.

### Заключение

В ходе работы с помощью разработанной параллельной программы были проведены исследования двумерной и трехмерной моделей Изинга для различных размеров решеток. Было показано, что размер решетки существенно влияет на температуру и динамику фазового перехода. При малых размерах решетки (меньше 80 узлов на ребре) система испытывает сильные флуктуации в окрестности критической температуры. При увеличении размера решетки (до 300 узлов на ребре) флуктуации исчезают, и наблюдается классический фазовый переход в модели Изинга.

Проведены исследования моделей, в которых учитываются взаимодействия всех спинов в пределах заданного радиуса корреляции. Было выяснено, что температура фазового перехода повышается как в двумерной, так и в трехмерной модели при увеличении радиуса корреляции. Для трехмерной решетки рассматривался также случай отличного от нуля магнитного поля, при этом случае температура фазового перехода увеличивается.

В дальнейшем предполагается исследование явного вида зависимости критической температуры в трехмерной модели Изинга от радиуса корреляции и величины внешнего магнитного поля.

### Благодарности

Работа выполнена на суперкомпьютере "Сергей Королев" на базе Самарского Государственного Аэрокосмического Университета (СГАУ) и при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (государственное задание 2.2459.2011).

### Литература

1. Елесин В. Ф., Кашурников В. А. Физика фазовых переходов. М.: МИФИ, 1997. 180 с.
2. Lenz W. Beitrage zum Verstandnis der magnetischen Eigenschaften in festen Korpern // Phys. Zeitschrift. 1920. P. 613–615.
3. Ising E. Beitrag zur Theorie des Ferro- und Paramagnetismus. Hamburg, 1924. P. 253–258.
4. Onsager L. Crystalstatistics. A two-dimensional model with order-disorder transitions // Phys Rev. 1944. Vol. 65. P. 117–149.
5. Yang C. N. The Spontaneous Magnetization of a Two-Dimensional Ising Model // Phys Rev. 1952. Vol. 85. P. 808–816.
6. Зиновьев Ю. М. Спонтанная намагниченность в двумерной модели Изинга // ТМФ. 2003. Т. 136. С. 444–462.
7. McCoy В. М., Wu T. T. The two-dimensional Ising model. Cambridge, Harvard Univ. Press. 1973. P. 31–47.
8. Creighton K. T., Middleton A. A. Numerically exact correlations and sampling in the two-dimensional Ising spin glass. // Phys Rev. 2013. Vol. 87. P. 16.
9. Rojas M., Rojas O., Souza S. M. Frustrated Ising model on the Cairo pentagonal lattice. // Phys Rev. 2012. Vol. 86. P. 11.
10. Прудников В. В., Прудников П. В., Вакилов А. Н., Криницын А. С. Компьютерное моделирование критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга // ЖЭТФ. 2007. Т. 132. Вып. 2 (8). С. 417–425.
11. Magnetic neutron diffraction study of  $Ba(Fe_{1-x}Co_x)_2As_2$  critical exponents

- through the tricritical doping // Pajerowski D. M., Rotundu C. R., Lynn J. W., Birgeneau R. J. // Phys Rev. 2013. Vol. 87. P. 6.
12. Белоконов В. И., Нефедев К. В., Дьяченко О. И. Распределение случайных полей обменного взаимодействия и магнитные фазовые переходы // Перспективные материалы. 2012. № 6. С. 5–9.
13. Belokon V. I., Nefedev K. V., Dyachenko O. I. Magnetic ordering in the nanoparticles with the RKKY interaction // Book of abstracts. Parma: Publishing of Dipartimento di Fisica, 2012. P.14.
14. Таскин А. Н., Удодов В. Н., Потекаев А. И. Критические индексы с учетом динамического скейлинга для адсорбции на малых одномерных кластерах // Известия высших учебных заведений. Физика. 2005. № 8. С. 82–87.
15. Шершик А. Ю. Использование модели Изинга на двухмерной решетке для построения хеш-функции // Вестник Омского университета. 2012. № 4. С. 187–190.
16. Белим С. В., Шершик А. Ю. Тестирование генераторов псевдослучайных последовательностей с помощью трехмерной модели Изинга // Наука и образование. 2012. № 9. С. 1–5.
17. Ramirez-Pastor A. J., Nieto F., Vogel E. E. Ising lattices with  $\pm J$  second-nearest-neighbor interactions // Phys Rev. 1997. V. 55. №21. P. 14323–14329.
18. Zandvliet H. J. W. The 2D Ising square lattice with nearest- and next-nearest-neighbor interactions // Europhys. Lett. 2006. №74. P. 1123–1124.
19. Муртазаев А. К., Камилев И. К., Бабаев А. Б. Критическое поведение трехмерной модели Изинга с замороженным беспорядком на кубической решетке. //ЖЭТФ. 2004. Т. 126. С. 1377–1383.
20. Wolf M., Schotte K. D. Ising model with competing next-nearest-neighbour interactions on the Kagome lattice // J. Phys. 1988. Vol. 21. P. 2195–2209.
21. Emilio N., Cirillo M., Gonnella G., Pelizzola A. New critical behavior of the three-dimensional Ising square lattice with nearest-neighbor, next-nearest-neighbor and plaquette interactions // PhysRev. 1997. Vol. 55. P. 17–20.
22. Изюмов Ю. А., Скрыбин Ю. Н., Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М.: Наука, 1987. 264 с.
23. Hall A. On an experiment determination of  $\pi$  // Messeng. Math. 1873. № 2. P. 113–114.
24. Metropolis N., Ulam S. The Monte-Carlo method // J.Amer. Stat. Assos. 1949. Vol. 44. № 247. P. 335–341.
25. Соболев И. М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973. 313 с.
26. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines / Metropolis N. et al. // J.Chem.Phys. 1953. № 21. P. 1087–1092.
27. Кройц М. Кварки, глюоны и решетки. М.: Мир. 1987. С. 148–160.
28. Биндер К., Хеерман Д. В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. М.: Наука, 1995. 142 с.
29. Бирюков А. А., Дегтярева Я. В., Шлеенков М. А. Компьютерное моделирование фазовых переходов в модели Изинга с дальними корреляциями // Вестник СамГУ. Естественнонаучная серия. 2012. № 9 (100). С. 159–163.
30. Бирюков А. А., Дегтярева Я. В., Шлеенков М. А. Компьютерное моделирование модели Изинга во внешнем постоянном магнитном поле // Вестник молодых ученых и специалистов Самарского университета. 2012. №1. С. 78–82.

Статья поступила в редакцию 20.04.2013.