

# МУЛЬТИКАНОНИЧЕСКОЕ СЕМПЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВА СОСТОЯНИЙ $\mathcal{H}(2, n)$ -ВЕКТОРНЫХ МОДЕЛЕЙ

Ю. А. Шевченко <sup>a,b\*</sup>, А. Г. Макаров <sup>a,b</sup>, П. Д. Андриющенко <sup>a,b</sup>, К. В. Нефедев <sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Школа естественных наук, Дальневосточный федеральный университет  
690091, Владивосток, Россия

<sup>b</sup> Институт прикладной математики, Дальневосточное отделение Российской академии наук  
690041, Владивосток, Россия

Поступила в редакцию 16 мая 2016 г.

Методом энтропийного моделирования решены задачи о температурном поведении теплоемкости моделей Изинга на простой квадратной решетке и квадратного спинового льда с взаимодействием ближайших соседей, моделей гексагональных решеток с дипольным близкодействующим, а также дальнедействующим взаимодействием и свободными граничными условиями, и квазирешеток спинов с конечным радиусом взаимодействия. Установлено, что системы конечного числа спинов Изинга с дальнедействующими дипольными взаимодействиями могут обладать необычными термодинамическими свойствами, которые характеризуются наличием нескольких пиков теплоемкости в отсутствие внешнего магнитного поля. Для метода параллельного мультиканонического семплирования эмпирически найдены оптимальные схемы разбиения пространства состояний на энергетические зоны для моделей Изинга и квадратного спинового льда, обсуждаются способы объединения и перенормировки гистограмм, предложен критерий их равномерности. Установлено, что в модели с взаимодействием ближайших соседей на гексагональной решетке отсутствует фазовый переход, при этом температурное поведение теплоемкости обнаруживает сингулярность в этой же модели, но для дальнедействующего взаимодействия. Найдена квазирешетка спинов, для которой наблюдается ненулевое значение остаточной энтропии.

DOI: 10.7868/S0044451017060165

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Любые равновесные статистические свойства сложных систем, состоящих из  $N$  взаимодействующих частиц, могут быть рассчитаны, если известны значения энергии  $E_i$  каждого из  $2^N$  состояний. Знание вида распределения значений энергии взаимодействия в пространстве этих состояний  $g(E)$ , т. е. распределения плотности вероятности состояний  $g(E)/2^N$ , или так называемого «энергетического ландшафта» [1], могло бы позволить точно рассчитать средние термодинамические величины. Однако экспоненциальное возрастание числа конфигураций и сложный рост количества разрешенных значений энергии в зависимости от  $N$  делает эту задачу чрезвычайно сложной. Равновесная термодинамика системы взаимодействующих магнитных моментов может быть исследована различными приближен-

ными численными методами. Одним из самых перспективных и активно развивающихся методов, который позволяет выполнить семплирование пространства состояний и вычислить плотность вероятности состояний (ПВС, англ. density of states — DOS), является метод, предложенный Фугао Вангом и Дэвидом Ландау в работах [2,3], в зарубежной научной литературе он получил название «метод Ванга–Ландау» (ВЛ-метод). Он позволяет динамически конструировать ПВС с помощью условно случайных блужданий по всему энергетическому ландшафту путем формирования статистических весов для вырожденных или квазивырожденных (отличающихся друг от друга на бесконечно малую величину энергии взаимодействия) состояний.

Широкий спектр прикладных и фундаментальных задач, общее назначение, необозримое поле для применений, элегантность и очевидная простота ВЛ-метода явились причиной гигантского разнообразия его применений и в статистической физике, и в биофизике, и других областях, начиная от спиновых систем [2,4–11], квантовых систем [12], атом-

\* E-mail: shevchenko.ya@dvfu.ru

ных кластеров [13, 14], дипольных [15] и спиновых стекол [16], жидких кристаллов [17], жидкостей [18], ХУ-модели [19], модели Блюма – Капеля [20], модели Потса [21], биомолекул [22], фолдинга протеинов [23], полимерных пленок [24], а также во множестве других наук, например, для решения задач оптимизации [25], развития комбинаторной теории чисел [26] и других.

Относительно быстрая сходимость ВЛ-метода делает его превосходным для вычисления ПВС, однако нужно отметить, что существуют некоторые вопросы к точности вычислений, что отмечалось множеством авторов (см., например, работу [27]). Несомненно, ВЛ-алгоритм является одним из наиболее интересных и необычных достижений в методах моделирования Монте-Карло (МК) за последнее десятилетие [28].

Метод основывается на алгоритме вычисления плотности вероятности состояний  $g(E)$  — относительного числа возможных состояний (конфигураций) для энергетического уровня  $E$ . Таким образом, могут быть вычислены любые термодинамические величины, характеризующие появляющиеся в ходе случайных блужданий по пространству состояний конфигурации, включая свободную энергию в широком диапазоне температур.

Использование гистограмм для получения  $g(E)$  существенным образом повысило уровень моделирования. Это продвижение сделало возможным получение результатов для исследуемых моделей сложных систем и позволило существенно продвинуться в направлении численного исследования и описания фазовых переходов. В отличие от самых известных и общепринятых МК-алгоритмов, таких как алгоритм Метрополиса [29], кластерное МК-моделирование Свендсена – Ванга [30], параллельный отжиг или обменно-репличный алгоритм Монте-Карло [31], алгоритм Вольфа [32] и др., ВЛ-алгоритм позволяет получить информацию о каноническом распределении  $g(E) \exp[-E/k_B T]$  при заданной температуре  $T$ . Диапазон значений  $g(E)$  для одной и той же системы может варьироваться от нескольких единиц до нескольких порядков. Например, в модели Изинга на квадратной решетке  $100 \times 100$  спинов имеются только два основных состояния, т.е.  $g(E_{min} = -20000) = 2$ , но при этом  $g(E = 0) \approx 10^{3000}$ .

В научной литературе регулярно публикуются результаты исследования эффективности и сходимости метода [33–35], предлагаются способы его улучшения [27, 36, 37]. Существуют и другие ограничения, которые до настоящего времени остаются

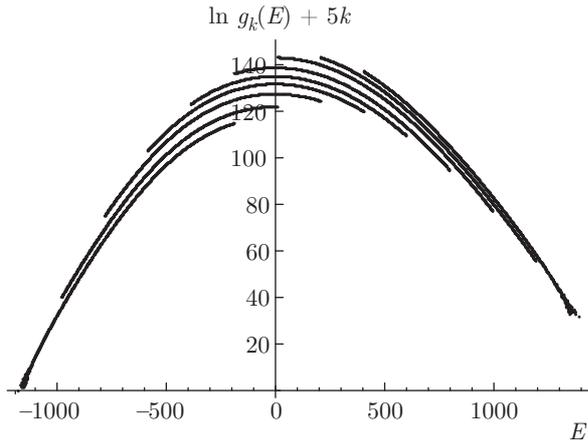
до конца не исследованными, например, ограничение скорости построения «плоских» гистограмм (см., например, работу [38]). Обоснования схемы перенормировки ВЛ-метода были приведены в работе [28]. В качестве других вопросов, сформулированных в работах [28, 39], очень важных для практического применения метода, можно подчеркнуть следующие. Когда гистограмма может считаться плоской? Какая существует связь между значением модификационного фактора  $f$  и ошибкой вычислений? Существует ли какой-нибудь универсальный способ управления скоростью сходимости ВЛ-алгоритма?

Энергетическое пространство может иметь очень грубую структуру, сильные шероховатости, скачки, запрещенные зоны или разрывы, пренебрежение которыми может существенно повлиять на ошибку вычисления значений термодинамических величин. Такие ландшафты могут наблюдаться, например, в спиновых стеклах и в спиновом льду, которые благодаря внутреннему устройству, или топологии решетки, могут характеризоваться отсутствием или даже недостижимостью равновесия, обусловленной, в частности, макроскопическим вырождением основного состояния. Поэтому применение ВЛ-алгоритма для вычисления равновесных термодинамических свойств систем спинов, способных переходить в состояние спинового стекла или спинового льда, было бы очень интересным. Отметим, что в физике фазовых переходов до настоящего дня вопрос перехода из состояния парамагнетика в состояние спинового стекла также до конца не исследован.

В данной работе мы подробно рассмотрим последовательный и параллельный ВЛ-алгоритмы, попытаемся ответить на приведенные выше вопросы, представим решение задачи о расчете теплоемкости квадратной модели Изинга ВЛ-методом для обоснования работоспособности алгоритма, решение задачи о ПВС квадратного спинового льда (КСЛ) с конечным числом спинов с помощью параллельного ВЛ-алгоритма, решение для полностью связанных моделей гексагональных решеток спинов с дальнедействующим диполь-дипольным взаимодействием, решение для квазирешеток спинов с конечным радиусом взаимодействия.

## 2. ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА

Как и метод Метрополиса [40], ВЛ-метод принадлежит группе МК-методов. В основу работы таких методов положено условно случайное блуждание по пространству состояний. Однако алгорит-



**Рис. 1.** Пример нормированной гистограммы  $\ln g(E)$ , полученной для модели КСЛ 180 спинов параллельным ВЛ-методом с дальнедействующим взаимодействием между диполями. Энергетическое пространство разделено на девять равных интервалов с перекрытием 75 %. Части  $g_k(E)$  сдвинуты вдоль оси ординат для наглядности

мы, используемые этими методами, различаются способом выборки или подходом к семплированию, т.е. способом составления выборочной совокупности, части генеральной совокупности состояний, которая охватывается одним экспериментом, серией последовательных или параллельных экспериментов. Для построения выборки в ВЛ-методе используется равновероятное семплирование. Распределение вероятностей энергетических уровней, или ПВС, представляется в виде гистограммы  $g(E)$ , см. рис. 1.

Также (см., например, [41, 42]) существует возможность вычислить многомерное распределение ПВС любой измеряемой в численном эксперименте термодинамической величины  $X(E)$  и получить ее среднее значение

$$\langle X \rangle = \frac{\sum_E X(E)g(E) \exp(-E/kT)}{\sum_E g(E) \exp(-E/kT)}. \quad (1)$$

Гистограмма  $g(E)$  обновляется при каждом шаге независимо от принятия или отмены конфигурации. Такой подход позволяет значительно уменьшить время работы алгоритма.

Принцип работы и детали реализации последовательного ВЛ-алгоритма изложены в основополагающих работах [2, 3], см. также [43, 44]. Дополнительно к  $g(E)$  формируется гистограмма  $H(E)$ , которая служит индикатором равномерного обхода всех возможных энергетических уровней системы. Задаются следующие начальные значения:  $g(E) =$

$= 1, H(E) = 0, \forall E$ , модификационный фактор  $f = e^1 \approx 2.7182818$ , влияние точности которого на результат и скорость сходимости будет обсуждаться ниже.

Процесс работы алгоритма заключается в пошаговой генерации цепочки состояний системы. На каждом МК-шаге происходит выдвижение кандидата на новую конфигурацию  $C'_{i+1}$ , отличающуюся от предыдущей одним перевернутым спином. С учетом вероятности  $P_{ac}$  либо принимается новая конфигурация ( $C_{i+1} = C'_{i+1}$ ), либо возвращается старая ( $C_{i+1} = C_i$ ):

$$C_1 \xrightarrow{P_{ac}^{1,2}} C_2 \xrightarrow{P_{ac}^{2,3}} \dots \xrightarrow{P_{ac}^{(n-1),n}} C_n. \quad (2)$$

Вероятность обновления

$$P_{ac}(E_{old} \rightarrow E_{new}) = \min \left[ 1, \frac{g(E_{old})}{g(E_{new})} \right] \quad (3)$$

зависит от распределения вероятности энергетических состояний, полученного на предыдущих итерациях алгоритма, где  $E_{old}$  и  $E_{new}$  — энергии соответственно старой и новой конфигураций.

Гистограммы обновляются независимо от принятия или отмены новой конфигурации согласно правилу

$$\begin{cases} g(E) \rightarrow g(E)f, \text{ где } f > 1, \\ H(E) \rightarrow H(E) + 1. \end{cases} \quad (4)$$

В практической реализации для достижения пределов точности, которые вычислительное устройство может обеспечить, желательно использовать  $\ln g(E)$  вместо  $g(E)$ . Тогда условие обновления  $g(E)$  запишется как

$$\ln g(E) \rightarrow \ln g(E) + \ln(f). \quad (5)$$

Семплирование выполняется до момента, пока гистограмма  $H(E)$  не станет равномерной с определенной точностью. На этом шаг ВЛ заканчивается, устанавливаются новые значения  $f = \sqrt{f}$  и  $H(E) = 0, \forall E$ . Таким образом алгоритм начинает новый цикл семплирования с большей точностью обновления  $g(E)$ . Точность равномерности определяется максимальным отклонением каждого элемента гистограммы  $H(E)$  от ее среднего значения. Обычно это 80 %. Согласно результатам, приведенным в работе [2], увеличение порогового значения приводит к ухудшению сходимости алгоритма. Увеличения точности результата не наблюдается. Ответ на вопрос, как влияет равномерность распределения вспомогательной гистограммы на точность вычислений, требует дополнительных исследований. Однако можно уверенно сказать, что увеличение равномерности

распределения приведет к снижению скорости работы алгоритма.

Новое распределение  $g(E)$  формируется на основе предшествующего. Модификационный фактор  $f$  является одновременно и критерием завершения, и показателем скорости вычисления. Алгоритм продолжается до тех пор, пока  $f > f_{min}$ , т.е. пока не достигнуто определенное минимальное значение. Учитывая, что каждый МК-шаг  $g(E)$  увеличивается в  $f$  раз, путем изменения  $f_{min}$  мы фактически варьируем точность изменения  $g(E)$  за счет изменения числа полных ВЛ-циклов. Эта закономерность определяет баланс между точностью  $g(E)$  и скоростью работы алгоритма.

### 3. ПАРАЛЛЕЛЬНОЕ СЕМПЛИРОВАНИЕ

Параллельный ВЛ-метод является удачным симбиозом МК-алгоритмов: последовательного ВЛ-метода и метода репличного обмена, который иногда еще называют методом параллельного отжига [31]. В классическом ВЛ-алгоритме один последовательный процесс производит блуждание по всему пространству состояний в интервале от  $E_{min}$  до  $E_{max}$ . В схеме параллельного расчета [16, 45] пространство энергий разделено на  $h$  перекрывающихся интервалов (энергетических окон или зон). Величина перекрытия может варьироваться в зависимости от условий задачи [16, 45] или вида распределения Гиббса. Каждый энергетический интервал независимо обрабатывается  $m$  процессами.

Каждый процесс во время работы выполняет случайные блуждания в своей уникальной реплике системы, имеет индивидуальные независимые распределения  $g(E)$ ,  $H(E)$  и свое значение  $f$ .

Во время работы процессы  $i$  и  $j$ , работающие в соседних окнах и обладающие своими гистограммами  $g_i$  и  $g_j$  соответственно, обмениваются конфигурациями  $C_x$  и  $C_y$ , имеющими энергии  $E_x$  и  $E_y$  соответственно, с вероятностью

$$P_{ex} = \min \left[ 1, \frac{g_i(E(C_x)) g_j(E(C_y))}{g_i(E(C_y)) g_j(E(C_x))} \right]. \quad (6)$$

Необходимо отметить, что случайный  $i$ -процесс из одного окна выбирает для обмена случайный  $j$ -процесс в одном из двух соседних окон. Обмен конфигурациями между процессами, находящимися в окнах, не являющихся соседними, не допускается ввиду того, что в результате такого обмена энергия с большей вероятностью выйдет за рамки энергетического окна.

После завершения процедуры обмена, в соответствии с правилом (4), следует обновить гистограммы каждого из процессов, участвовавших в обмене. В целях уменьшения ошибки вычислений в момент достижения заданного значения критерия равномерности  $H(E)$  во всех процессах одного энергетического окна  $g(E)$  усредняется по всем процессам этого окна, и каждый процесс принимает среднее значение  $\langle g(E) \rangle$  [45]. Все значения гистограммы  $H(E)$  устанавливаются равными нулю.

#### 3.1. Энергетические интервалы

С целью увеличения производительности метода пространство состояний от  $E_{min}$  до  $E_{max}$  может быть разделено на равные интервалы с заданным уровнем перекрытия. Такие энергетические «зоны» могут семплироваться независимо. Границы задаются следующим способом:

$$\Delta E = \frac{E_{max} - E_{min}}{h(1-l) + l}, \quad (7)$$

$$E_{min}^k = \Delta E(k-1)(1-l) + E_{min}, \quad (8)$$

$$E_{max}^k = \Delta E + E_{min}^k, \quad (9)$$

где  $\Delta E$  — ширина энергетической зоны,  $E_{min}^k$  и  $E_{max}^k$  — соответственно нижняя и верхняя граница  $k$ -интервала, нумерация  $k$  начинается с 1,  $l$  — уровень перекрытия интервала. Размер окна  $\Delta E$  для каждой из исследуемых моделей подбирается эмпирически для получения оптимального времени вычислений.

Неоптимальное значение  $l$  может привести к снижению скорости сходимости алгоритма, но не влияет на точность результатов вычислений (за исключением случая  $l = 0$ ). Слишком большое  $l$  приводит к значительному увеличению размера окна и, как следствие, возникает необходимость обхода большего числа состояний. При малом значении  $l$  заметно возрастает вероятность отказа при обмене конфигурациями. Одна из обмениваемых энергий может оказаться за рамками энергетического окна принимающего конфигурацию процесса. Для модели КСЛ оптимальным значением будет  $l = 0.8$ .

В работе [16] дополнительно было предложено динамически увеличивать  $\Delta E$  и сокращать  $l$  при увеличении энергетического уровня. Такой подход оправдан в случае систем с грубым энергетическим ландшафтом. В местах резких скачков  $g(E)$  следует уменьшать значения  $\Delta E$  и  $l$ , а в местах с более гладким ландшафтом — увеличивать размер окна.

### 3.2. Выход за рамки энергетического окна

В процессе работы алгоритма критически важно следить за тем, чтобы получаемые значения энергии подчинялись условию

$$E_{min}^k < E_i < E_{max}^k, \quad (10)$$

иначе возникают сложности с возвратом процесса в свое энергетическое окно. Необходимо перед запуском сбалансировать систему, т. е. проводить МК-шаги до тех пор, пока каждый случайный процесс не примет для работы реплику, энергия которой попадет в пределы своего энергетического окна. При известной конфигурации  $E_{min}$  следует начинать балансировку с нее и проводить последующие МК-шаги, принимая только конфигурации, повышающие энергию.

В случае нарушения условия (10) в ходе семплирования следует отменять конфигурации ( $P_{ac} = 0$ ). Обмен конфигурациями  $C_x$  и  $C_y$  между процессами  $i$  и  $j$  может состояться только при выполнении условий

$$\begin{aligned} E_{min}^i < E(C_y) < E_{max}^i, \\ E_{min}^j < E(C_x) < E_{max}^j. \end{aligned} \quad (11)$$

В противном случае обмен отменяется.

### 3.3. Объединение и перенормировка гистограмм

Предварительным результатом работы параллельного ВЛ-метода будет набор гистограмм  $g_k(E)$ , ограниченных соответствующими интервалами  $[E_{min}^k, E_{max}^k]$ , которые необходимо объединить в итоговую гистограмму  $g(E)$ . Гистограммы могут существенно различаться по высоте в различных энергетических окнах.

Процесс объединения заключается в определении точки «склеивания» и последующей нормировке каждой  $k$ -части для обеспечения непрерывности  $g(E)$ . Пример нормированного набора  $g_k(E)$  изображен на рис. 1. Две гистограммы объединяются в участке, где их скорости роста (углы наклона) совпадают, т. е. значения производных максимально близки друг к другу.

Для исследования приведенных ниже моделей мы применяли простое дифференцирование по двум точкам:

$$g'(E_i) = \frac{g(E_{i+1}) - g(E_i)}{E_{i+1} - E_i}. \quad (12)$$

Такой подход является эффективным в числовых рядах с небольшой дисперсией, см. рис. 2б. Однако

он неприменим при рассмотрении систем с «плотным» и «шершавым» энергетическим ландшафтом ввиду большого разброса значений гистограммы, см. рис. 2а. В таком случае необходимо применять техники сглаживания перед дифференцированием.

Авторы работы [45] предлагают использовать пятиточечную аппроксимацию с заданной длиной последовательности для случая, когда распределение по состояниям «гладкое» и практически не имеет запрещенных зон. Ширина охвата аппроксимации должна быть достаточно большой для получения достаточно сглаженных производных. Примеры дифференцирования с шириной охвата 1 и 10 изображены соответственно на рис. 2в и 2г. При неудовлетворительном результате «сопряжения» участков ПВС возможно дополнительное использование техник сглаживания прямых.

Для вычисления теплоемкости может быть использована относительная плотность вероятности состояний, поэтому в нашей работе теплоемкость магнитной системы вычислялась на основе ненормированной гистограммы  $g(E)$  как производная внутренней энергии:

$$C(T) = \frac{\partial \langle E(T) \rangle}{\partial T}. \quad (13)$$

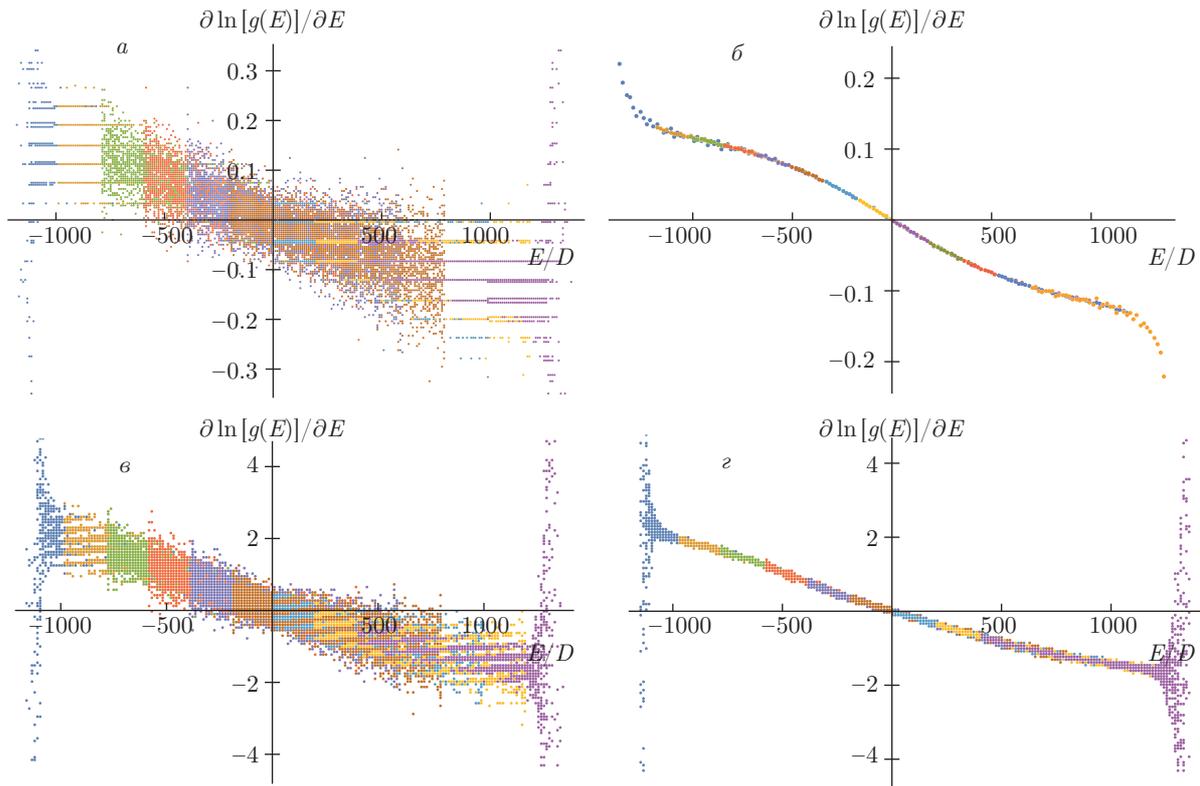
В случае если необходимо рассчитать другие термодинамические величины, например, энтропию, необходимо получать истинные значения кратности вырождения уровней. В ферромагнитной модели Изинга это может быть легко сделано: если в гистограмме  $g(E)$  первый элемент  $g(E_{min}) = 1$ , тогда все остальные могут быть нормированы на значение  $g(E_{min})$ . В модели Изинга основное состояние имеет двукратное вырождение, то же самое наблюдается и для модели КСЛ вне зависимости от радиуса взаимодействия диполей.

Поскольку параллельный метод мультиканонического семплирования нуждается в дальнейшей разработке, все результаты, приведенные ниже, получены с помощью последовательного ВЛ-метода.

## 4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

### 4.1. Критические явления и фазовые переходы в $\mathcal{H}(d, n)$ -векторных моделях

Явления расходимости термодинамических величин, неустойчивости или нестабильности термодинамического поведения при определенных параметрах (например, расходимость теплоемкости, магнитной восприимчивости при заданном значении



**Рис. 2.** (В цвете онлайн) Примеры численного дифференцирования  $g(E)$  различными методами. Производная по двум точкам гистограмм КСЛ с учетом дальнего действия (а) и ближнего действия (б). Дифференцирование гистограмм КСЛ с учетом дальнего действия методом пятиточечной аппроксимации с разбросом 1 (в) и 10 (г). Цветами помечены различные энергетические интервалы

внешнего магнитного поля, температуры), обычно называют «критическими явлениями» [46]. Они сопровождаются фазовым переходом второго рода, который происходит при некоторой критической температуре  $T_c$ . Считается, что при таком переходе две фазы трансформируются друг в друга без затрат энергии.

Непрерывный характер термодинамических функций, описывающих фазовый переход второго рода, позволяет исследовать поведение системы вблизи  $T_c$ . Было даже установлено, что поведение вблизи температуры фазового перехода может быть описано степенными законами, показатели которых зависят от очень малого числа параметров, таких как размерность  $d$  и число степеней свободы системы  $n$  [47–49] (хотя симметрия решетки и радиус взаимодействия могут изменить характер критического поведения [46, 47, 50, 51]). Фактически это означает, что критическое поведение большинства систем может описываться двумя гамильтонианами, включающими микроскопические парные

взаимодействия [52].

1. Модель Потса  $Q$ -состояний, где каждый  $i$ -спин может быть в одном из  $Q$  возможных дискретных состояний (ориентаций)  $\zeta_i$  ( $\zeta_i = 1, 2, \dots, Q$ ). Если два близлежащих спина имеют одну и ту же ориентацию, то они дают вклад  $-J$  в общую энергию конфигурации, в противном случае вклад не дают:

$$\mathcal{H}(d, n) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta(\zeta_i, \zeta_j), \quad (14)$$

где  $\delta$  — символ Кронекера и  $\langle ij \rangle$  означает суммирование по всем взаимодействующим соседям,  $J$  — обменная константа.

2.  $n$ -векторная модель, которая характеризуется тем, что спин способен находиться в континууме состояний:

$$\mathcal{H}(d, n) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (15)$$

где  $\mathbf{S}_i$  —  $n$ -мерный единичный вектор в узле  $i$ , который взаимодействует с вектором  $\mathbf{S}_j$ , расположенным в узле  $j$ .

В данной работе с целью исследования термодинамики фазовых переходов в сложных спиновых системах с помощью рассмотренного выше ВЛ-метода были семплированы пространства состояний  $\mathcal{H}(2, 1)$ - и  $\mathcal{H}(2, 2)$ -векторных моделей. К последним относятся модель КСЛ, модель гексагонального спинового льда (ГСЛ), плоские квазирешетки спинового льда, так называемого «спинового снега».

Модели Изинга и КСЛ исследовались с близкостоящим взаимодействием (БД), т. е. учитывалось взаимодействие между спинами только в первой координационной сфере. Гексагональная модель была рассчитана как с БД, так и с дальнедействующим взаимодействием (ДД), где учитывались взаимодействия между всеми спинами.

Как будет показано, в одной и той же  $\mathcal{H}(2, 2)$ -векторной модели в зависимости от радиуса и характера взаимодействия может наблюдаться существенное изменение поведения теплоемкости в области  $T_c$ , сопровождающееся появлением нескольких максимумов. Также мы показали, что для случая гексагонального спинового льда в пределе бесконечного числа частиц вне зависимости от радиуса взаимодействия форма образца со свободными граничными условиями не влияет на температурное поведение теплоемкости в области  $T_c$ .

#### 4.2. Модель Изинга на квадратной решетке

Для проверки точности ВЛ-алгоритма мы сравнили результаты с точным решением для самой простой и хорошо исследованной модели Изинга на простой квадратной решетке.

Гамильтониан модели

$$\mathcal{H}(2, 1) = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j, \quad (16)$$

где  $S_i$  и  $S_j$  принимают значения  $\pm 1$ .

Размер квадратной решетки составлял  $100 \times 100$  спинов с периодическими граничными условиями. Критерий равномерности гистограммы составлял 80%. Мы использовали 24 цикла ВЛ-семплирования, т. е. на последней итерации  $f = e^{1/2^{23}}$ . В процессе работы было выполнено суммарно  $3 \cdot 10^{11}$  МК-шагов. Проверка на равномерность гистограммы  $H(E)$  проводилась каждые  $10^8$  шагов.

На рис. 3 приведено сравнение температурных зависимостей теплоемкости, полученных ВЛ-методом и точным аналитическим решением для  $N = 10^4$  [53]. Температура пика составила  $T_c = 2.279 J/k_B$  для ВЛ и  $T_c = 2.269 J/k_B$  для точного

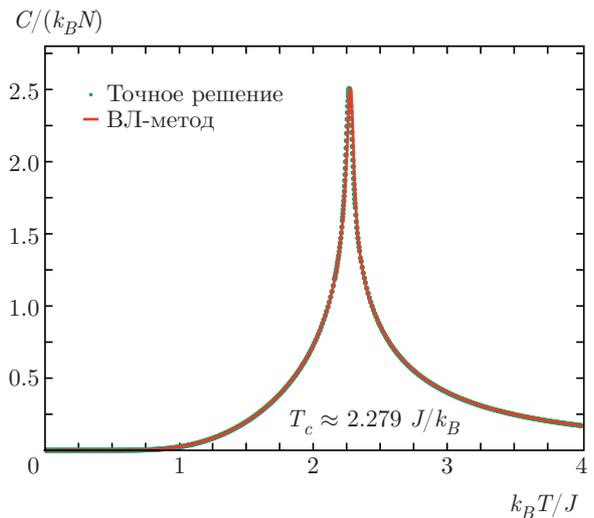


Рис. 3. Теплоемкость двумерной модели Изинга  $10^4$  спинов, полученная двумя независимыми методами: аналитически [53] и с помощью последовательного ВЛ-метода

решения. Значения теплоемкости в пике равны соответственно 2.50497 и 2.50688 в безразмерных единицах. Относительное отклонение значения теплоемкости от точного решения составило менее 0.08%. На рис. 3 приведены данные одного запуска алгоритма. Величина отклонения между независимыми запусками алгоритма была меньше размера точки на рисунке.

#### 4.3. Искусственные массивы суперспинового льда

Наноархитектура искусственного суперспинового (макроспинового) льда представляет собой массив однодоменных ферромагнитных наночастиц заданной геометрии, размещенных на подложке или в объеме немагнитного материала. Наночастицы обычно изготавливаются из тонкопленочных магнитных материалов, например, пермаллоя или кобальта. Объем наноостровка порядка  $10^5 \text{ нм}^3$ , а намагниченность порядка  $10^7 \mu_B$ . Анизотропия формы, появляющаяся из-за геометрии наноостровка, приводит к параллельному упорядочению атомных магнитных моментов вдоль длинной оси, а поведение магнитного момента наноостровка является изинг-подобным (суперспиновым или макроспиновым), как было показано во множестве экспериментальных работ [54–57].

В работах [58–60] представлены результаты численного моделирования экспериментов магнито-силовой микроскопии (МСМ), на основании которых

можно сделать выводы, что МСМ-изображения исследуемых массивов наночастиц (см., например, работу [61]) не содержат неоднородных состояний nanoостровков и отклонением от однородной намагниченности из-за присутствия краевых эффектов можно пренебречь даже для квадратных наночастиц. Для прямоугольных тонкопленочных островков с существенной анизотропией формы краевые эффекты будут еще меньше. Это дает основания для использования модели спинов Изинга с дипольным взаимодействием для описания равновесной термодинамики дипольного льда.

Модель искусственного дипольного льда была представлена в нашей недавней работе [62]. Гамильтониан дипольного взаимодействия

$$\mathcal{H}(2, 2) = \sum_{\langle ij \rangle} E_{dip}^{ij}, \quad (17)$$

энергия диполь-дипольного взаимодействия для  $ij$ -пары спинов

$$E_{dip}^{ij} = D \left( \frac{\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j}{|\mathbf{r}_{ij}|^3} - 3 \frac{(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{|\mathbf{r}_{ij}|^5} \right), \quad (18)$$

где  $D = \mu^2/a^3$  — размерный коэффициент,  $\mu$  — общий магнитный момент островка,  $a$  — параметр решетки. Каждый nanoостровок рассматривается нами как магнитный изинг-подобный диполь.

Все решения задач о температурном поведении теплоемкости, приведенные в данной работе, получены в рамках равновесной термодинамики, т.е. в предположении о том, что все энергетические барьеры, контролирующиеся анизотропией формы или другими видами анизотропий, преодолены.

#### 4.3.1. Квадратный спиновый лед

С помощью параллельного ВЛ-метода была получена ПВС для модели квадратного спинового льда (рис. 4) размером  $70 \times 70$  элементарных ячеек (9940 диполей) и с БД-взаимодействием (четыре соседа) со свободными граничными условиями. Пространство энергий разбито на 80 равных интервалов с перекрытием 80%. Алгоритм работал на 400 вычислительных ядрах, пять реплик на один интервал.

Результаты, полученные ВЛ-методом, в пределах ошибки эксперимента находятся в хорошем количественном и качественном согласии с результатами, полученными с помощью алгоритма Метрополиса (рис. 5). Температура пика  $T_c \approx 9.52D/k_B$ . Однако значение отличается от результатов  $T_c \approx 7.2D/k_B$ , полученных в работе

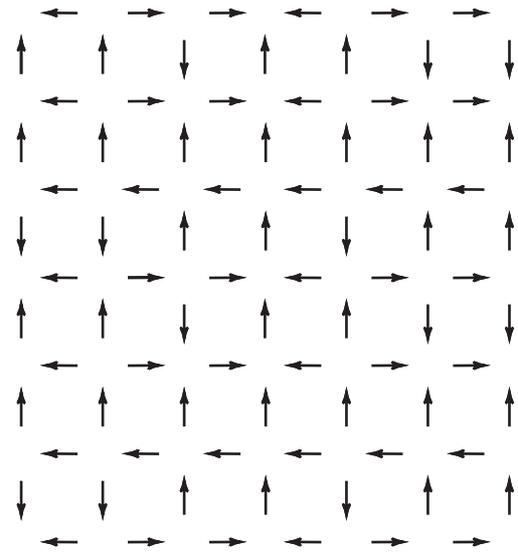


Рис. 4. Схематичное изображение модели квадратного спинового льда

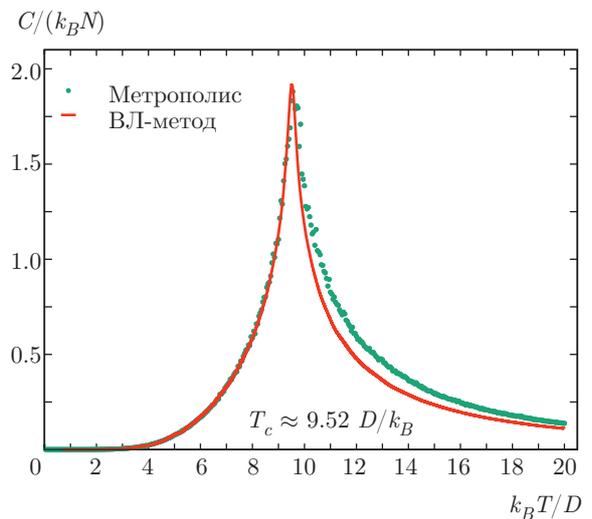


Рис. 5. Теплоемкость модели квадратного спинового льда (9940 диполей) с взаимодействием ближайших соседей, полученная независимо методами Метрополиса (точки) и последовательным ВЛ-методом (сплошная кривая)

[63]. Различие в температурах обусловлено различным числом ближайших взаимодействующих соседей, используемых в модели. Диполь-дипольное взаимодействие носит антиферромагнитный характер, поэтому приводит к понижению температуры фазового перехода с увеличением числа взаимодействующих соседей в квадратном спиновом льду.

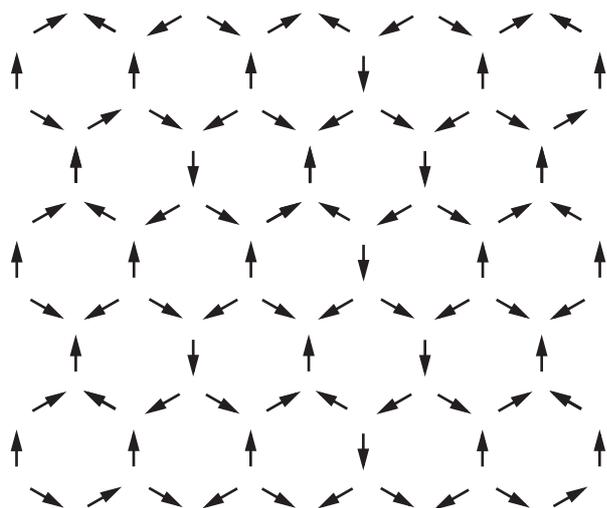


Рис. 6. Схематическое изображение квадратного образца гексагонального спинового льда

### 4.3.2. Гексагональный спиновый лед

Мы исследовали две серии образцов, состоящих из различного числа частиц, сформированных в массивы гексагонального спинового льда, квадратной и гексагональной («из центра») формы с различным радиусом взаимодействия. При БД взаимодействие считалось только с ближайшими четырьмя соседями (на границах меньше). При ДД каждый спин взаимодействовал с каждым. Термодинамика образцов была рассчитана при помощи 24 шагов последовательного алгоритма ВЛ.

Модель спинового льда в виде квадратного образца гексагональной решетки со свободными граничными условиями и дипольным взаимодействием (17),  $5 \times 5$  ячеек, т.е.  $N = 94$  магнитных моментов, схематично изображена на рис. 6. Температурное поведение теплоемкости моделей  $4 \times 4$ ,  $N = 63$ ;  $5 \times 5$ ,  $N = 94$ ; и  $10 \times 10$ ,  $N = 339$  представлено на рис. 7 и 8.

При ДД (рис. 7) температурное поведение теплоемкости проявляет аномальный характер, наблюдаются два температурных пика, т.е. существенным образом изменяется критическое поведение системы диполей в районе  $T_c$ . Первый пик с увеличением количества частиц растет, а второй уменьшается. Как видно из рис. 8, пик теплоемкости моделей с БД с ростом количества частиц уменьшается.

Модель спинового льда образца гексагональной формы гексагональной решетки со свободными граничными условиями и дипольным взаимодействием (17) схематично изображена на рис. 9. Температурное поведение теплоемкости образцов данной фор-

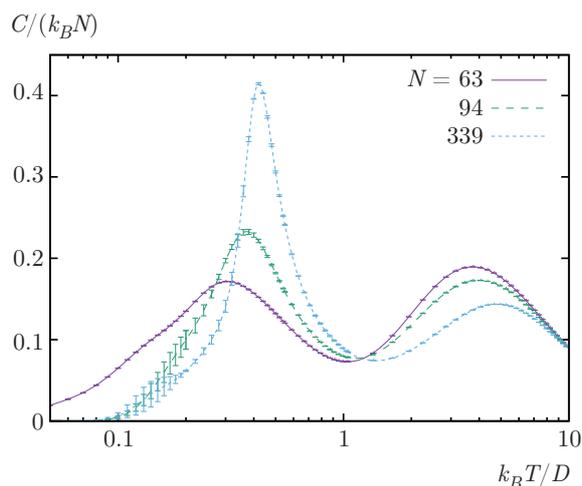


Рис. 7. Температурное поведение теплоемкости гексагонального спинового льда (квадратный образец) при ДД

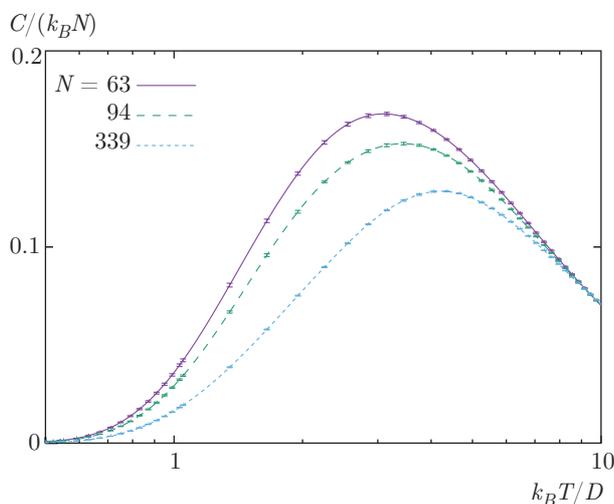


Рис. 8. Температурное поведение теплоемкости гексагонального спинового льда (квадратный образец) при БД

мы представлено на рис. 10 и 11.

Значения пиков теплоемкостей гексагональной решетки квадратной и гексагональной формы в зависимости от размера системы изображены на рис. 12. Были построены аппроксимации следующими уравнениями:

- 1) БД (квадрат)  $3.05759/N + 0.11964$ ;
- 2) БД (гексагон)  $2.58662/N + 0.11929$ ;
- 3) ДД (квадрат) второй пик  $3.56674/N + 0.13368$ ;
- 4) ДД (гексагон) второй пик  $2.84817/N + 0.13379$ ;
- 5) ДД (квадрат) первый пик  $0.00083N + 0.13619$ ;
- 6) ДД (гексагон) первый пик  $0.00089N + 0.11031$ .

Из рис. 12 следует, что при  $N \rightarrow \infty$  влиянием эффекта границ на критические явления в области

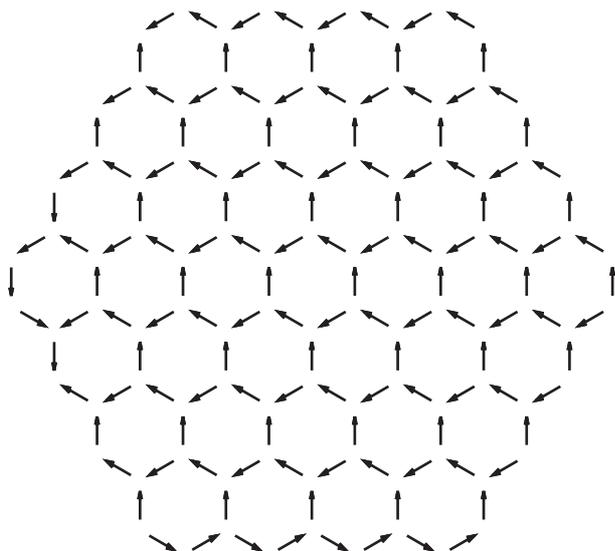


Рис. 9. Схематическое изображение образца гексагонального спинового льда в форме гексагона

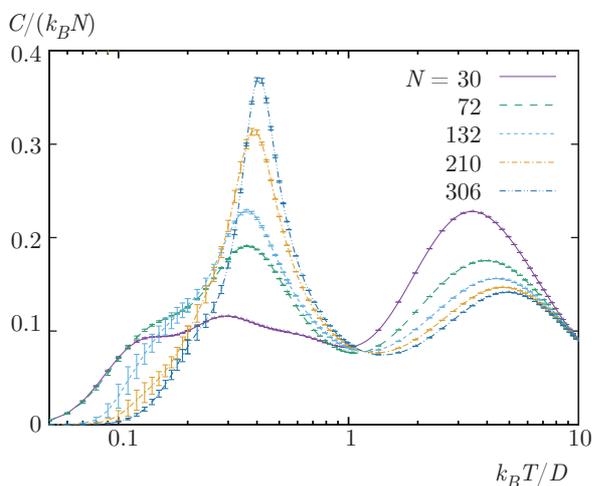


Рис. 10. Температурное поведение теплоемкости гексагонального спинового льда (гексагональный образец) при ДД

$T_c$  можно пренебречь. Наблюдается сходимость пиков теплоемкости для квадратных и гексагональных образцов. При БД высота пика теплоемкости стремится к значению  $0.119 D/k_B$ , при ДД теплоемкость обнаруживает сингулярность в низкотемпературной области, а высота второго пика при увеличении размеров системы стремится к значению  $0.133 D/k_B$ . Из этого следует, что в модели с БД отсутствует фазовый переход, в то время как в модели с ДД он имеет место. Вопрос о том, сколько необходимо учитывать соседей, чтобы не потерять основные термодинамические свойства системы, необходимо исследовать дополнительно.

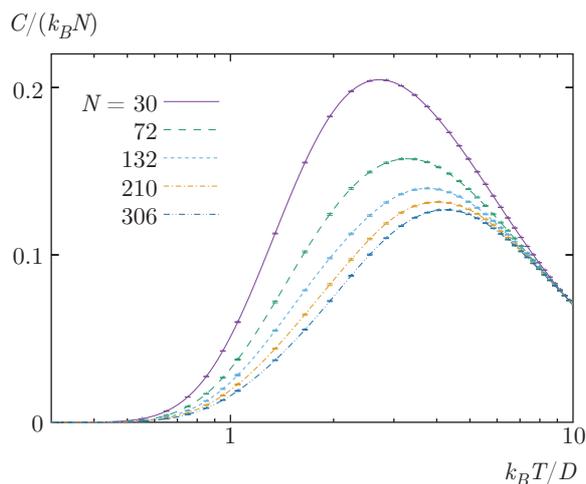


Рис. 11. Температурное поведение теплоемкости гексагонального спинового льда (гексагональный образец) при БД

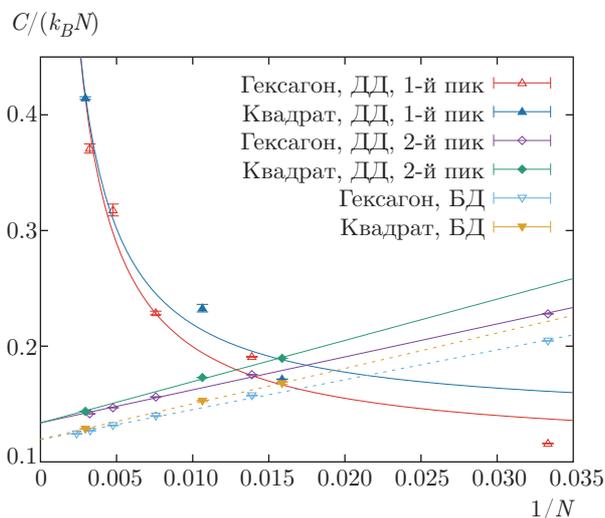


Рис. 12. Сравнение роста пиков теплоемкости в зависимости от числа частиц в системе для моделей гексагональной решетки образцов квадратной и гексагональной формы. При  $N \rightarrow \infty$  для ДД температурное поведение теплоемкости обнаруживает сингулярность, второй пик стремится к  $0.133 D/k_B$ , а при БД пик теплоемкости стремится к  $0.119 D/k_B$

### 4.3.3. Спиновый снег

Магнитные наночастицы предоставляют и для экспериментаторов, и для теоретиков поистине неисчерпаемое многообразие систем многих тел, поскольку возможности конструирования массивов наночастиц произвольной архитектуры практически не ограничены. Свободный выбор геометрии массива, так же как и геометрии составляющих его

нанозаэлементов, позволяет конструировать любые решетки, не имеющие аналогов в естественной природе. Мы нашли аналогию с бесконечным многообразием снежинок обычного водяного льда, которые образуют обычный снег. Настоящий раздел мы назвали «спиновый снег», потому что под «снегом» обычно понимается множество кристаллов льда. В данном разделе в качестве примера нами продемонстрированы возможности моделирования произвольных образцов спинового снега с заданным числом соседей, т.е. с произвольным радиусом взаимодействия.

В частности, последовательным ВЛ-методом были исследованы квазирешетки, представленные на рис. 13. Вычисления проводились с учетом различных координационных сфер, в зависимости от которых варьировалось число соседей от 14 до 57 для различных образцов. Оказалось, что такие решетки обнаруживают интереснейшие термодинамические свойства.

Например, в представленном на рис. 13а образце, состоящем из 400 спинов, радиус координационной сферы был выбран равным 4 параметрам решетки. В связи с этим число соседей варьировалось от 18 до 20 в зависимости от местоположения спинов. Интересно заметить, что в температурном поведении теплоемкости наблюдаются три конечных пика.

Для показанного на рис. 13б образца, который включал 108 спинов, на графике теплоемкости характерно выражены два глобальных пика. Радиус координационной сферы был выбран равным 6 параметрам решетки, число соседей варьировалось в диапазоне от 37 до 57. Обнаружено ненулевое значение остаточной энтропии  $S(T \rightarrow 0)$ .

Температурное поведение теплоемкости решетки спинового снега, изображенного на рис. 13в, состоящего из 432 спинов, имеет два пика. Взаимодействие между диполями было ограничено четырьмя координационными сферами, что составляло от 14 до 16 соседей на одну частицу.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе рассматриваются последовательная и параллельная реализации ВЛ-алгоритма. В предложенной схеме численного расчета ПВС осуществляются случайные блуждания по состояниям, а вероятность перехода между состояниями зависит от отношения частоты появления предыдущего состояния к частоте появления нового. Таким образом, ВЛ-метод предполагает более частое посещение

энергетических уровней с меньшим значением  $g(E)$ . Метод показывает хорошую сходимость результатов с точным решением двумерной модели Изинга, а также сходимость с результатами независимого моделирования методом Метрополиса модели КСЛ.

Расхождение теплоемкости при  $T \gtrsim T_c$  на рис. 5 связано с недостаточным числом шагов Метрополиса.

Параллельный алгоритм Ванга–Ландау имеет множество варьируемых параметров, таких как  $f_{min}$ ,  $d_{min}$ ,  $\Delta E$ ,  $h$ ,  $m$ , размеры энергетических окон и их перекрытие, влияющих на скорость и точность вычисления. Однако в настоящее время не существует универсального алгоритма подбора этих значений. Тонкая настройка алгоритма проводится в зависимости от сложности энергетического ландшафта и типа рассматриваемой системы.

Обнаруженное аномальное поведение теплоемкости в массивах необходимо детально исследовать для выяснения причин изменения критического поведения в области критической температуры фазового перехода. Здесь возможны два направления исследований с целью теоретического описания фазового перехода второго рода.

Первое, очевидно, может быть связано с тем, что классическое представление о фазовом переходе второго рода предполагает взаимную трансформацию двух фаз, которая обычно объясняется в терминах теории перколяции, т.е. возникновением «перколяционного кластера». Наличие одного или нескольких пиков в области  $T_c$  может быть обусловлено существованием нескольких переходов между возможно сосуществующими фазами, созданием и последовательной трансформацией перколяционного кластера в условиях дальнедействующего дипольного взаимодействия. Открытым остается вопрос и о понятии «перколяционного кластера» в системах со знакопеременным дальнедействующим взаимодействием.

Второе направление исследований может быть связано с определением критического поведения, которое теперь уже не описывается в рамках универсальных и простых степенных законов, т.е. гипотеза универсальности критического поведения фазовых переходов второго рода в рамках некоторых  $\mathcal{H}(2, n)$ -векторных моделей требует проверки.

Авторы выражают благодарность Дальневосточному федеральному университету за предоставленные суперкомпьютерные мощности. Коллектив авторов выражает благодарность Шаповаловой Ксе-

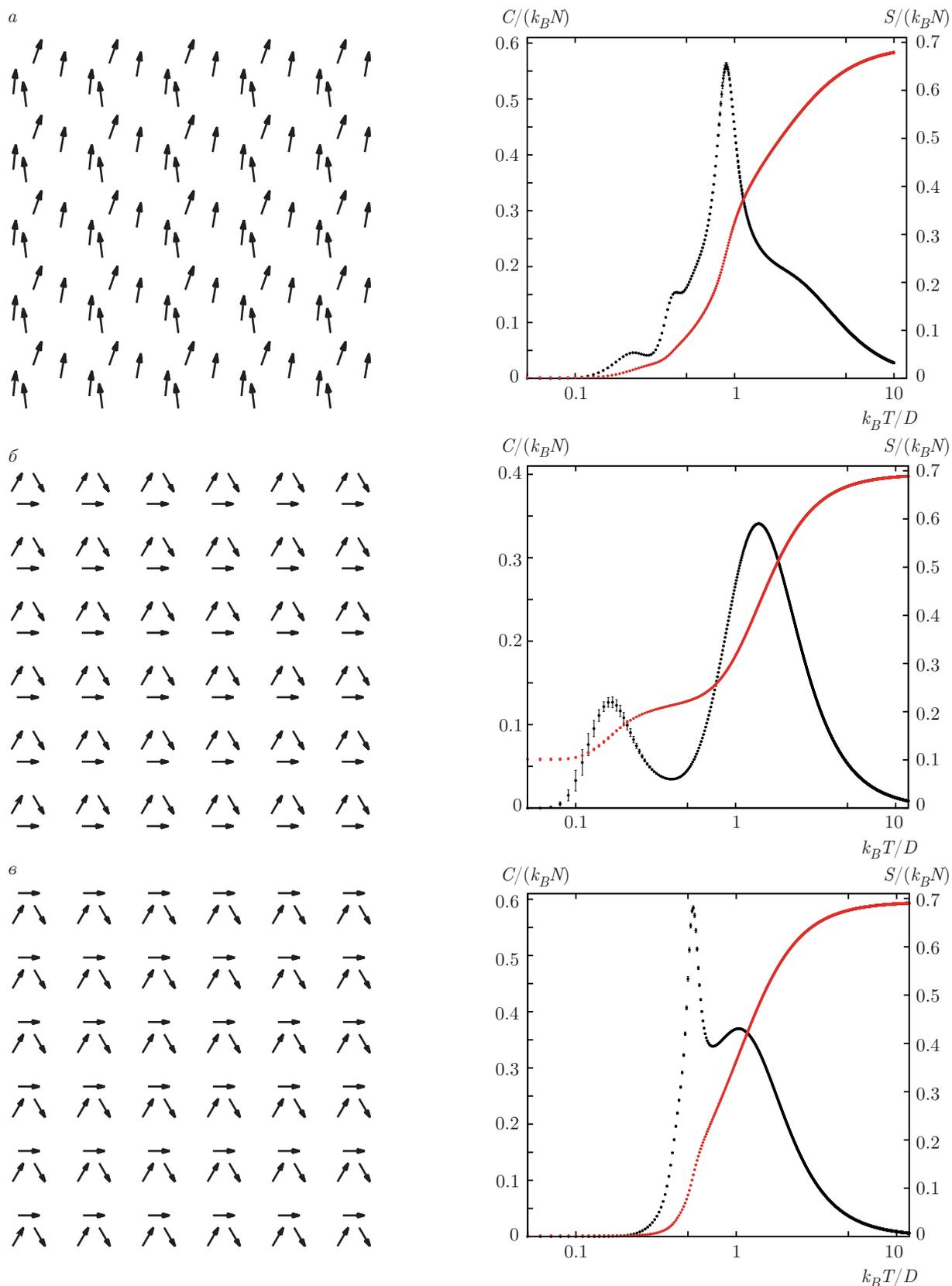


Рис. 13. Термодинамика спинового снега. Слева схематично приведены квазиришетки, справа — температурное поведение теплоемкости и энтропии

нии Валерьевне за подготовку интересных образцов спинового снега.

Работа выполнена при финансовой поддержке стипендии Президента РФ молодым ученым и аспирантам в соответствии с программой развития приоритетного направления «Стратегические информационные технологии, включая вопросы создания суперкомпьютеров и разработки программного обеспечения» (гранты №№ СП-946.2015.5, СП-1675.2015.5), а также в рамках госзадания «Магнитные свойства и многомасштабная структура наноматериалов» (задание № 3.7383.2017/Б4).

## ЛИТЕРАТУРА

1. T. F. Middleton and D. J. Wales, *J. Chem. Phys.* **118**, 4583 (2003).
2. F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2050 (2001).
3. D. P. Landau, S. H. Tsai, and M. Exler, *Amer. J. Phys.* **72**, 1294 (2004).
4. F. Wang and D. P. Landau, *Phys. Rev. E* **64**, 056101 (2001).
5. B. J. Schulz, B. Kurt, and M. Müller, *Int. J. Mod. Phys. C* **13**, 477 (2002).
6. A. Proykova and D. Stauffer, *Open Phys.* **3**, 209 (2005).
7. M. Troyer, S. Wessel, and F. Alet, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 120201 (2003).
8. A. Malakis, A. Peratzakis, and N. G. Fytas, *Phys. Rev. E* **70**, 066128 (2004).
9. G. Brown and T. C. Schulthess, *J. Appl. Phys.* **97**, 10E303 (2005).
10. B. J. Schulz, K. Binder, and M. Müller, *Phys. Rev. E* **71**, 046705 (2005).
11. S. Reynal and H. T. Diep, *Phys. Rev. E* **72**, 056710 (2005).
12. F. Calvo, *Phys. Rev. E* **82**, 046703 (2010).
13. Y. L. Xie, P. Chu, Y. L. Wang et al., *Phys. Rev. E* **89**, 013311 (2014).
14. F. Calvo and P. Parneix, *J. Chem. Phys.* **119**, 256 (2003).
15. J. Snider and C. Y. Clare, *Phys. Rev. B* **72**, 214203 (2005).
16. T. Vogel, Y. W. Li, T. Wüst et al., *Phys. Rev. Lett.* **110**, 210603 (2013).
17. D. Jayasri, V. S. S. Sastry, and K. P. N. Murthy, *Phys. Rev. E* **72**, 036702 (2005).
18. C. Desgranges and J. Delhommelle, *J. Chem. Phys.* **130**, 244109 (2009).
19. V. T. Ngo, D. T. Hoang, and H. T. Diep, *Phys. Rev. E* **82**, 041123 (2010).
20. W. Kwak, J. Jeong, J. Lee et al., *Phys. Rev. E* **92**, 022134 (2015).
21. A. A. Caparica, S. A. Leão, and C. J. DaSilva, *Physica A: Stat. Mech. Applic.* **438**, 447 (2015).
22. J. Liu, B. Song, Y. Yao et al., *Phys. Rev. E* **90**, 042715 (2014).
23. N. Rathore and J. J. de Pablo, *J. Chem. Phys.* **116**, 7225 (2002).
24. S. H. Tsai, F. Wang, and D. P. Landau, *Brazilian J. Phys.* **36**, 635 (2006).
25. M. A. De Menezes and A. R. Lima, *Physica A: Stat. Mech. Applic.* **323**, 428 (2003).
26. V. Mustonen and R. Rajesh, *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 6651 (2003).
27. C. Zhou and R. N. Bhatt, *Phys. Rev. E* **72**, 025701 (2005).
28. R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra, *Phys. Rev. E* **75**, 046701 (2007).
29. N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth et al., *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
30. R. H. Swendsen and J. S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987).
31. D. J. Earl and M. W. Deem, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **7**, 3910 (2005).
32. U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 361 (1989).
33. S. Xu, X. Zhou, Y. Jiang et al., *Sci. China Phys., Mech. Astron.* **58**, 1 (2015).
34. R. E. Belardinelli, S. Manzi, and V. D. Pereyra, *Phys. Rev. E* **78**, 067701 (2008).
35. K. A. Maerzke, L. Gai, P. T. Cummings et al., *J. Chem. Phys.* **137**, 204105 (2012).
36. L. Bornn, P. E. Jacob, and P. Del Moral, *J. Comput. Graph. Stat.* **22**, 749 (2013).
37. B. Bauer, E. Gull, S. Trebst et al., *J. Stat. Mech.: Theory and Experiment* **2010**, P01020 (2010).

38. P. Dayal, S. Trebst, S. Wessel et al., *Phys. Rev. Lett.* **92**, 097201 (2004).
39. R. E. Belardinelli and V. D. Pereyra, *J. Chem. Phys.*, **127**, 184105 (2007).
40. D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2000).
41. G. Brown, Kh. Odbadrakh, D. M. Nicholson et al., *Phys. Rev. E* **84**, 065702 (2011).
42. M. S. Kalyan, R. Bharath, V. S. S. Sastry et al., *J. Stat. Phys.* **163**, 197 (2016).
43. И. А. Силантьева, П. Н. Воронцов-Вельяминов, *Вычислительные методы и программирование* **12**, 397 (2011).
44. Л. Н. Щур, *Механика, управление и информатика* **6**(6), 160 (2014).
45. T. Vogel, Y. W. Li, T. Wüst et al., *Phys. Rev. E* **90**, 023302 (2014).
46. S. K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Reading, MA, Benjamin (1976).
47. M. E. Fisher, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 597 (1974).
48. K. G. Wilson, *Sci. Amer.* **241**, 140 (1979).
49. K. S. Soldatov, K. V. Nefedev, and Y. Okabe, *Phys. Lett. A* **381**, 707 (2017).
50. J. V. Jose, L. P. Kadanoff, S. Kirkpatrick, and D. R. Nelson, *Phys. Rev. B* **16**, 1217 (1977).
51. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *Progress in Low Temperature Physics*, Vol. VII B, ed. by D. F. Brewer, North-Holland, Amsterdam (1978), p. 371.
52. C. A. F. Vaz, J. A. C. Bland, and G. Lauhoff, *Rep. Progr. Phys.* **71**, 056501 (2008).
53. A. E. Ferdinand and M. E. Fisher, *Phys. Rev. B* **185**, 832 (1969).
54. R. F. Wang, C. Nisoli, R. S. Freitas et al., *Nature* **439**, 303 (2006).
55. Y. Qi, T. Brintlinger, and J. Cumings, *Phys. Rev. B* **77**, 094418 (2008).
56. M. Lederman, G. A. Gibson, and S. Schultz, *J. Appl. Phys.* **73**, 6961 (1993).
57. G. Möller and R. Moessner, *Phys. Rev. B* **80**, 140409 (2009).
58. K. V. Nefedev, Y. P. Ivanov, and A. A. Peretyatko, *Methods and Tools of Parallel Programming Multicomputers: Second Russia-Taiwan Symposium*, MTPP 2010, Vladivostok, Russia, 2010, Revised Selected Papers **6083**, 260 (2010).
59. Y. P. Ivanov, K. V. Nefedev, A. I. Iljin et al., *J. Phys.: Conf. Ser.* **266**, 012117 (2011).
60. K. V. Nefedev, Y. P. Ivanov, A. A. Peretyatko et al., *Sol. St. Phenom.* **168**, 325 (2011).
61. C. Nisoli, R. Moessner, and P. Schiffe, *Rev. Mod. Phys.* **85**, 1473 (2013).
62. Y. Shevchenko, A. Makarov, and K. Nefedev, *Phys. Lett. A* **381** 428 (2017).
63. R. C. Silva, F. S. Nascimento, L. A. S. Mól et al., *New J. Phys.* **14**, 015008 (2012).