Министерство образования и науки РФ
Школа естественных наук
Кафедра компьютерных систем

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА МИНИМИЗАЦИИ ЭНЕРГИИ ПАРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ВЕКТОРНЫХ И ДИСКРЕТНЫХ МОДЕЛЯХ

Дипломная работа

Выполнил:
студент группы Б8118-09.03.02
Данилов Максим Данилович

Научный руководитель:
д.ф-м.н.
профессор Нефедев К.В.

Владивосток 2021

1 Литературный обзор

1.1 Фрустрации и явление ферромагнетизма

Отмечается, что некоторые конфигурации спинов у протонов водорода льда воды показывают, как фрустрации приводят к большому числу состояний с равной энергией, в результате чего появляется энтропия не равная нулю при температуре, которая стремится к абсолютному нулю. Это один из первых примеров более обширного явления фрустраций, которые возникают в различных конденсированных системах. [1].

Данный рисунок является примером фрустрации для 3-х спинов Изинга, которые взаимодействуют друг с другом. При двух антипараллельных спинах с антиферромагнитным взаимодействием третий в любом случае будет сонаправлен с одним и противоположно направлен по отношению к другому спину (рис. 1).

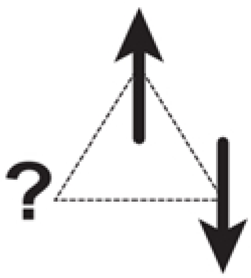

Рис. 1: Фрустрация для трех взаимодействующих спинов Изинга.

Для понимания нужно разобрать, что такое модель Изинга и дать определение спину. Спин – это вращательный момент, которым обладает электрон.

Подробно в разделе 1.3 описаны существующие Монте-Карло методы

Таблица 1 со спинами, как первый пример

Таблица 1: Направление спинов

Номер	Направление	Спин
Спин 1	вверх	первый
Спин 2	вверх	второй
Спин 3	вниз	третий

Формула, представленная без переноса строки (1)

$$f(x,y,\alpha,\beta) = \frac{\sum\limits_{n=1}^{\infty} A_n \cos\left(\frac{2n\pi x}{\nu}\right)}{\prod \mathcal{F} g(x,y)} \tag{1}$$

1.2 Спиновый лед и спиновое стекло

Сами магнетики – это материалы, которые меняют магнитное поле, с которым взаимодействуют. В нашем случае, фрустрированными магнетиками являются пирохлоры – прототипы материалов естественного спинового льда. В таких материалах магнитные ионы образуют решетку пирохлора из тетраэдров. Магнитные моменты здесь находятся вдоль линий, которые связывают центры двух тетраэдров при довольно низких температурах [2].

Изначально искусственный спиновый лед понимали, как искусственно созданную систему, имитирующую некоторые области из физики фрустраций, которые наблюдаются в спиновом льду пирохлора. Решетка пирохлора образуется из тетраэдров, которые соединены общими вершинами. В вершинах находятся ионы, имеющие большие магнитные спиновые моменты. Поле кристалла, наводит на них одноосную анизотропию, где ось находится вдоль линии между центрами 2-х соседних тетраэдров. В одноосной анизотропии учитывается зависимость лишь от квадратов элементов вектора намагниченности. Каждый магнитный момент в решетке пирохлора имеет направление внутрь одного и наружу второго тетраэдра, то есть принимает лишь два состояния. Здесь эти моменты можно описать как в модели Изинга.

Рисунок с изображением ячейки решетки пирохлора внизу страницы (рис. 2)

Методы Монте-Карло в пронумерованном списке :

1. Алгоритм Метрополиса
2. Метод репличного обмена
3. Последовательный алгоритм Ванга-Ландау
4. Параллельный алгоритм Ванга-Ландау

Формула, представленная без переноса строки (2)

$$H = -J \sum_{i,j} S_i * S_j \tag{2}$$

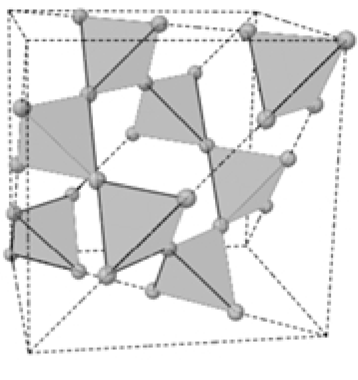

Рис. 2: Ячейка решетки пирохлора.

Методы Монте-Карло в маркированном списке:

- Алгоритм Метрополиса
- Метод репличного обмена
- Последовательный алгоритм Ванга-Ландау
- Параллельный алгоритм Ванга-Ландау

Фрустрация описана в разделе 1.1

1.3 Раздел 3

Для расчета термодинамических свойств векторных моделей используются Монте-Карло методы. Наиболее распространенным методом является алгоритм Метрополиса. Он популярен в силу своей скорости и простоты реализации, однако недостатком является то, что его применение в критической области возле фазового перехода становится затруднительным. Более сложные, но в то же время эффективные алгоритмы, не имеющие недостатков алгоритма Метрополиса, являются алгоритм репличного обмена, или по-другому параллельный отжиг, а также алгоритм Ванга-Ландау.

Алгоритм Метрополиса наиболее универсален в области исследования свойств термодинамических систем. Он хорошо масштабируется при параллельных вычислениях, а также имеет возможность для повышения точности вычислений. Самой простой возможностью организации распараллеливания алгоритма является то, что вычисления для всех значений термодинамического среднего при заданной температуре проводятся на отдельных ядрах одновременно в суперкомпьютерном кластере. Следовательно, время расчета не зависит от шагов по температуре. Второй вариант параллельной организации алгоритма заключается в том, что проход по системе спинов и выполнение Монте-Карло шагов происходит в шахматном порядке. Это делается чтобы учесть граничные условия вычисляемых конфигураций. Но в силу того, что вблизи критической температуры находятся большие флуктуации, то есть отклонения от средней величины, сильно осложняется вычисление термодинамических свойств вблизи этой температуры. Это и является недостатком алгоритма Метрополиса, так как из-за этого происходит замедления скорости вычислений, а значит для систем большого размера его применение будет затруднительным.

Метод репличного обмена, или так называемый параллельный отжиг, применяется для расчета термодинамических средних при разной температуре. В нем исследуются копии одной и той же моделируемой системы. Эти копии, по-другому реплики, отжигаются при очень близких температурах. А реплики для соседних температур частично обменивают информацию о своих конфигурациях. Для решения проблемы замедления вблизи критических значений, соседние по температуре реплики меняются своими конфигурациями с определенной вероятностью. Количество реплик и определенные значения температур подбирают с учетом конкретной задачи и вычислительной возможности. Благодаря параллельному отжигу за меньшее число шагов можно провести вычисления сразу для набора различных температур.

Параллельный алгоритм Ванга-Ландау является совмещением репличного обмена и последовательного алгоритма Ванга-Ландау. Он используется для вычисления плотности энергетических состояний.

Геометрия гексагональной решетки описана вверху следующей страницы (рис. 3)

Спиновый лед описывается в разделе 1.2

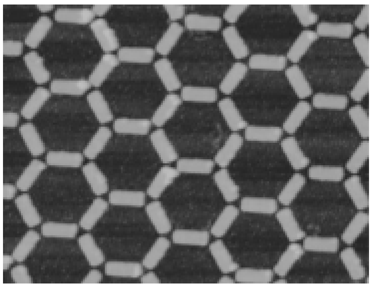

Рис. 3: Гексагональная решетка.

Формула, представленная с переносом строки (3)

$$H = -J\sum_{i,j} S_i * S_j - J\sum_{i,j} S_i * S_j - J\sum_{i,j} S_i * S_j - J\sum_{i,j} S_i * S_j \\ - J\sum_{i,j} S_i * S_j - J\sum_{i,j} S_i * S_j \quad (3)$$

Таблица 2, где представлены данные алгоритмы с описанием

Таблица 2: Алгоритмы Монте-Карло

Алгоритм Метрополиса:	Один	Первый
Метод репличного обмена:	Два	Второй
Алгоритм Ванга-Ландау:	Три	Третий

Список литературы

[1] Andrey Kovtanyuk, Konstantin Nefedev, and Igor Prokhorov. Advanced computing method for solving of the polarized-radiation transfer equation. In *Russia-Taiwan Symposium on Methods and Tools of Parallel Processing*, pages 268–276. Springer, 2010.

[2] Aleksandr Gennadievich Makarov, KV Makarova, Yu A Shevchenko, Petr Dmitrievich Andriushchenko, V Yu Kapitan, Konstantin Sergeevich Soldatov, Aleksandr Vasil'evich Perzhu, AE Rybin, D Yu Kapitan, EV VasilвЂ™ev, et al. On the numerical calculation of frustrations in the ising model. *JETP Letters*, 110(10):702–706, 2019.