

УСКОРЕНИЕ ШАГА АЛГОРИТМА МЕТРОПОЛИСА ДЛЯ ДВУХМЕРНОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА

Кадыров А.В.

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Россия

Ферромагнетики могут состоять из доменов конечного размера, в которых спины атомов имеют одинаковое направление (по-другому, говорят, что существует дальний порядок магнитных моментов атомов). Если к такому материалу приложить магнитное поле, разные домены выстраиваются, и материал становится намагниченным. При повышении температуры, намагниченность уменьшается, а при прохождении точки Кюри, система испытывает фазовый переход, при котором намагниченность пропадает [1].

В качестве модели ферромагнетика рассмотрена двухмерная модель Изинга в приближении ближайшего соседа на квадратной решетке со стороной N частиц из N^2 фиксированных в пространстве частиц, а спины которых $x_{i,j}$ (проекция спинов на ось z) могут принимать 2 значения:

$$x_{i,j} = \pm 1, \quad (1)$$

$$E(x) = -J \sum_{i,j} (x_{i+1,j} + x_{i,j+1}) x_{i,j} - h \sum_{i,j} x_{i,j}, \quad (2)$$

$$M(x) = \frac{1}{N} \sum_{i,j} x_{i,j}. \quad (3)$$

Формулы для ускорения шага алгоритма Метрополиса:

$$\Delta E_{i,j} = 2J (x_{i-1,j} + x_{i,j-1} + x_{i+1,j} + x_{i,j+1}) x_{i,j} + 2h x_{i,j}, \quad (4)$$

$$\Delta M_{i,j} = -2 \frac{1}{N} x_{i,j}. \quad (5)$$

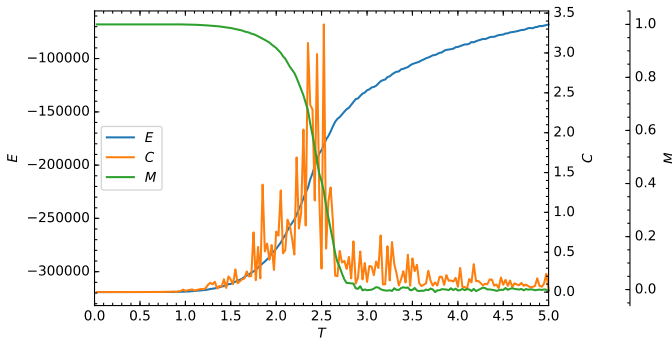


Рис. 1. График кривых энергии E , теплоемкости C и намагниченности M от температуры T

На рис. 1 представлен расчет кривых, каждая из которых с 200 точками, для системы 160000 частиц без внешнего поля $h = 0$ с энергией взаимодействия $J = 1$. Теплоемкость расходится в точке Кюри $T_c \approx 2.269185J$. На графике теплоемкости $C(T)$ приблизительно в T_c наблюдается резкий пик.

Программа расчета написана на языке программирования Python с применением библиотек NumPy для векторизации вычислений и Numba для трансляции кода на Python с NumPy в производительный машинный код. Расчет на рис. 1 занял 33.2 секунд на компьютере с процессором Intel Pentium 4415U и операционной системой Ubuntu 20.04.

Литература

1. Ising E., Beitrag zur Theorie des Ferro- und Paramagnetismus // Hamburg, 1924
2. Биндер К., Хеерман Д. В., Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике // Наука, М., 1995, 144 с.

© Кадыров А.В., 2021 г.