УДК 537.6

**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 частиц из фиксированных в пространстве частиц, а спины которых (проекции спинов на ось ) могут принимать 2 значения:

(1)

(2)

(3)

Формулы для ускорения шага алгоритма Метрополиса:

(4)

(5)

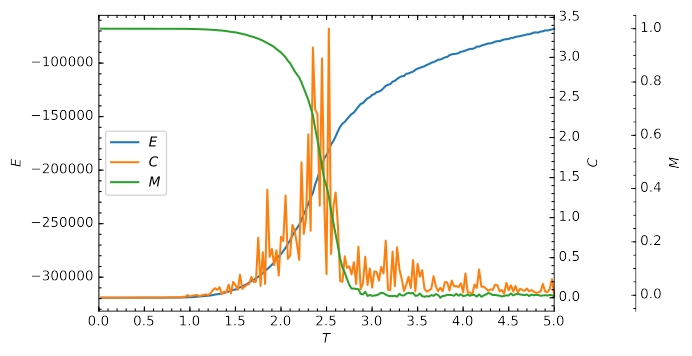


Рис. 1. График кривых энергии , теплоемкости и намагниченности от температуры

На рис. 1 представлен расчет кривых, каждая из которых с 200 точками, для системы 160000 частиц без внешнего поля с энергией взаимодействия . Теплоемкость расходится в точке Кюри . На графике теплоемкости приблизительно в 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 Paramagnetimus // 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.