

УДК 004.021

MSC2010 68Q87 + 68W20

© К. В. Макарова^{1,2}; А. Г. Макаров^{1,2}; М. А. Падалко^{1,2}; В. С. Стронгин^{1,2};
К. В. Нефедев^{1,2}

Мультиспиновый Монте-Карло метод

Предложен метод кластерного Монте-Карло для численного расчета статистической выборки пространства состояний векторных моделей. Статистическая эквивалентность подсистем в модели Изинга и квазимарковские случайные блуждания могут использоваться для повышения эффективности алгоритма расчета термодинамических средних величин. Кластерный мультиспиновый подход расширяет вычислительные возможности алгоритма Метрополиса и позволяет найти конфигурации основных и низкоэнергетических состояний.

Ключевые слова: алгоритм Метрополиса, гибридный алгоритм, кластерное Монте-Карло, мультиспиновый метод, основное состояние, спиновые системы.

DOI: <https://doi.org/10.47910/FEMJ202020>

Введение

Алгоритм Метрополиса был предложен в 1953 году [1] и в свое время стал прорывным инструментом решения проблем вычислительной физики. Несмотря на простоту реализации, он до сих пор остается очень популярным методом статистического исследования в неожиданно разнородных науках. До настоящего времени амбициозная задача об увеличении числа элементов в счетной системе, когда еще возможно субэкспоненциально быстро получить строгое решение, является архиважной для прогресса в решении огромного класса задач. Даже для самой простой модели — модели Изинга, имеющей без малого почти вековую историю, задача поиска быстрого метода строгого численного расчета системы конечного числа N спинов $S_i = \pm 1$ порядка числа Авогадро $N_A = 6.022 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ на решетке произвольной геометрии (произвольное число соседей z для каждого i -спина), с произвольным разбавлением вакансиями, с Гамильтонианом Гейзенберга, содержащим суммы парных скалярных произведений векторных величин

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j, \quad (1)$$

¹ Дальневосточный федеральный университет, 690091, г. Владивосток, ул. Суханова, 8.

² Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 7.

Электронная почта: makarov.ag@dvfu.ru (А. Г. Макаров), nefedev.kv@dvfu.ru (К. В. Нефедев).

$$J_{ij} = J_{ji} = \begin{cases} 1, & \text{если } S_i, S_j \text{ — ближайшие соседи;} \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases}$$

является настолько же интересной и привлекательной, насколько является фундаментальной, многомасштабной, сложной, трудноразрешимой, вполне возможно NP-полной, [2]. И это даже если не брать в расчет условие заданного распределения рандомизации знака обменной константы в модели Эдвардса – Андерсона или еще большее усложнение в случае несимметричного обмена.

Для расширения класса решаемых задач, роста размера счетных систем, повышения точности расчетов, увеличения скорости вычислений, расширения совокупности вычисляемых в ходе семплирования статистическо-термодинамических параметров, решения проблемы критического замедления и т.д. за последние пять десятилетий было предложено множество новых интересных подходов в попытках полиномиально быстро получить приближение к строгому решению хотя бы для относительно небольших N . Например, метод реплично-обменного Монте-Карло (*Parallel Tempering*) [3], в котором семплирование происходит одновременно при различных температурах. Через заданное количество шагов реплики обмениваются конфигурациями с определенной вероятностью. В кластерном алгоритме Свендсена – Ванга (*Swendsen – Wang*) [4] строится кластер из соседних спинов и переворот осуществляют все спины, включенные в этот кластер. Это позволяет существенно уменьшить количество непринятых новых конфигураций. Позже появились алгоритмы, использующие гистограммные техники. Например, метод Ванга – Ландау (*Wang – Landau*) [5, 6]. Данный метод принадлежит классу энтропийных алгоритмов и позволяет напрямую рассчитывать плотность состояний $G(E)$. Монте-Карло (МК) методы имеют свои тонкие места: низкие масштабируемость, применимость, возможности для параллелизма и многие другие.

Для решения задач о термодинамике сложных систем многих взаимодействующих тел мы предлагаем использовать гибридный мультиспиновый (*Hybrid Multispin*) НМ-метод Монте-Карло семплирования пространства состояний векторных моделей, который является логическим продолжением алгоритма Метрополиса. НМ-подход объединяет, с одной стороны, субэкспоненциально быструю МК-технику для относительно небольших N , с другой, хотя и экспоненциально длительное, но однократное исчерпывающее перечисление одной из подсистем.

1. Реализация НМ-метода для 2D модели Изинга

Наиболее распространенным тестом для численных методов в статистической физике является 2D модель Изинга [7–12]. Рассмотрим случай ферромагнитной системы с прямым симметричным обменом J_{ij} для всех ij -пар N спинов Изинга $S_i = \pm 1$, расположенных в узлах простой квадратной решетки, Гамильтониан (1), где каждый спин имеет четыре $z = 4$ ближайших соседа.

При семплировании канонического распределения Гиббса априори предполагается, что система уже находится в термодинамическом состоянии равновесия и обладает свойствами эргодичности (среднее по времени равно среднему по конфигурациям). Известно, что в модели Изинга в решении, полученном Онзагером, размер

флуктуаций или радиус корреляции $\beta = 1/8$, в точке фазового перехода имеет степенную зависимость от числа частиц $N^{1/8}$, поэтому достижение равновесия в системах большого числа взаимодействующих частиц — это уже сама по себе весьма непростая задача. Основное положение, на котором базируется НМ-подход, состоит в том, что в адиабатическом процессе при заданной температуре термодинамическое равновесие в относительно большой системе может наступить только при термодинамическом равновесии в ее подсистемах относительно небольшого размера $< N^{1/8}$. Условие равновесия достигается в подсистемах малого размера существенно быстрее, чем в системе целиком. Все подсистемы с одинаковым устройством локального Гамильтониана физически и статистически эквивалентны, поэтому необходимо и достаточно вычислить их статистическо-термодинамические характеристики и всех возможных конфигураций границы всего лишь один раз. Мы продолжаем реализовывать алгоритм Метрополиса. Однако вместо Монте-Карло переворота одного спина используем исчерпывающее перечисление для кластера θ спинов (ограниченной компактной области) внутри замкнутой “петли” (последовательности, цепочки) ρ граничных спинов, принимающих фиксированные $S_b = \pm 1$ значения. Это позволяет нам получить строгое решение задачи о статистике конфигураций с заданными термодинамическими параметрами, которые в рассматриваемой модели Изинга зависят от взаимодействия $S_{k_0} S_{k_1}$ пар внутрикластерных спинов в q -конфигурации кластера $\{S_{k_0}\}$, взаимодействия $S_{k_0} S_b$ пар спинов со спинами границы в l -конфигурации $\{S_b\}$, спинового избытка кластера M_q и любых других несущих необходимую информацию о микросостояниях величин.

Энергия взаимодействия E_{ql}^c (верхний символ “с” — конфигурация) в случае q -конфигурации кластера и l -конфигурации петли граничных спинов состоит из двух вкладов

$$E_{ql}^c = E_l^{c-} + E_q^{c+},$$

первое слагаемое E_l^{c-} есть энергия взаимодействия спинов в глобальной ql -конфигурации без учета энергии взаимодействия спинов кластера. Второй вклад E_q^{c+} — сумма энергии парных взаимодействий спинов кластера между собой и энергии взаимодействия между спинами кластера в q -конфигурации с l -границей

$$E_q^{c+} = -\frac{1}{2} \sum_{k_0=1}^{\theta} \left(\sum_{k_1=1}^{\theta} J_{k_0, k_1} S_{k_0} S_{k_1} + \sum_{b=1}^{\rho} J_{k_0, b} S_{k_0} S_b \right),$$

где

$$J_{k_0, k_1} = \begin{cases} 1, & \text{если } S_{k_0}, S_{k_1} \text{ — ближайшие соседи;} \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases}$$

$$J_{k_0, b} = \begin{cases} 1, & \text{если } S_{k_0}, S_b \text{ — ближайшие соседи;} \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases}$$

спиновый избыток кластера

$$M_q^c = \sum_{k_0}^{\theta} S_{k_0}.$$

Вероятность принятия/отмены новой глобальной конфигурации в односпиновом алгоритме Метрополиса–Гастингса [1] определяется как

$$p(E_{old}^c \rightarrow E_{new}^c) = \min \left(1, \frac{p(E_{old}^c)}{p(E_{new}^c)} \right) = \min \left(1, \exp \left[\frac{E_{old}^c - E_{new}^c}{k_B T} \right] \right). \quad (2)$$

Вероятность термодинамического q -состояния кластера с заданным значением энергии E_q^{c+} при l -конфигурации границы в подходе Гиббса определяется как

$$p(E_q^{c+}) = \frac{1}{Z_{ql}^{c+}} \exp \left[- \frac{E_q^{c+}}{k_B T} \right], \quad (3)$$

где локальная статистическая сумма

$$Z_{ql}^{c+} = \sum_{q=1}^{2^n} \exp \left[- \frac{E_q^{c+}}{k_B T} \right].$$

Необходимо отметить, что формула (2) верна для любых двух конфигураций, отличающихся одним перевернутым спином. Если мы зафиксируем в l -конфигурации значения b -спинов и для заданной температуры проведем Монте-Карло семплирование пространства состояний только внутри кластера, то легко увидеть, что оба канонических распределения Гиббса, одно из которых вычислено с помощью формулы (2), а второе с помощью стандартного в статистической механике подхода (3), будут тождественны при бесконечном числе МК-шагов для любой заданной температуры, в т.ч. и при $T \rightarrow 0$. При известной термодинамической вероятности канонического распределения $p(E_q^{c+})$ не представляет труда с помощью МК-схемы случайно выбрать новую мультиспиновую конфигурацию кластера, которую будет принимать система на каждом шаге НМ-семплирования.

Очевидно, что при семплировании кластера в системе при заданной температуре вероятность появления глобальных ql -конфигураций с заданным значением энергии зависит от суммарной энергии парных взаимодействий между спинами кластера, парных взаимодействий между спинами кластера и спинами границы, а также кратности вырождения конфигурации кластера $g(E_q^{c+})$ с заданным значением энергии

$$p(E_{ql}^{tot}) \rightarrow p(E_q^{c+}) = \frac{g(E_q^{c+}) \exp \left[- \frac{E_q^{c+}}{k_B T} \right]}{\sum_{r=1} g(E_r^{c+}) \exp \left[- \frac{E_r^{c+}}{k_B T} \right]}.$$

Статистику q -конфигураций кластера для каждой l -последовательности граничных спинов из 2^p существующих конфигураций границы достаточно строго вычислить однократно, чтобы получить локальное распределение Гиббса. Для каждой из существующих 2^p конфигураций граничных спинов рассчитываются все возможные 2^θ конфигурации кластера. В общем получаем $2^{p+\theta}$ всех возможных конфигураций кластера и граничных спинов, что из-за ограничений памяти счетных устройств определяет вычислительный предел для гибридного алгоритма.

Таким образом мы можем описать последовательность действий для НМ-метода. Изначально перед семплированием для каждой l -конфигурации граничных спинов вычисляется локальная плотность состояний кластера, которая будет использоваться в дальнейшем для оценки термодинамических средних. Шаги цикла гибридного мультиспинового алгоритма состоят в следующем

- 1) Выбираем случайно область глобальной системы — компактный кластер спинов заранее установленного размера, локальная плотность состояний которого предварительно вычислена. Устанавливаем распределение в l -конфигурации спинов на границе $\{S_b\}$.
- 2) Используем локальную плотность состояний для l -конфигурации и термодинамические вероятности $p(E_q^{c+}, M_q^c)$ для всех q -состояний для вычисления средних для текущего мультиспинового МК-шага по формулам

$$\langle E \rangle_t = E_l^{c-} + \sum_q E_q^{c+} p(E_q^{c+}), \quad \langle M \rangle_t = M_l^c + \sum_q M_q^c p(E_q^{c+}, M_q^c).$$

- 3) Новая конфигурация кластера выбирается случайно из набора 2^θ с вероятностью $p(E_q^{c+})$.

По завершении циклов, число Ω которых устанавливается для выполнения условия стабилизации средних термодинамических величин (наступление равновесия), имеем

$$\langle E \rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_t \langle E \rangle_t, \quad \langle M \rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_t \langle M \rangle_t.$$

Для двумерной квадратной решетки Изинга размером $N = 10^6$ спинов с периодическими граничными условиями результаты расчетов представлены на рисунке 1. Температуры максимумов теплоемкости и восприимчивости были равны $T_c = 2.271$ и $T_f = 2.272$ с точностью до третьего знака.

Температурные зависимости теплоемкости $C(T)$ в отсутствие внешнего магнитного поля и магнитной восприимчивости $\chi(T)$ в исчезающе малом внешнем магнитном поле $H \rightarrow 0$ рассчитывались следующим образом:

$$C(T) = \frac{1}{N} \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B^2 T^2}, \quad \chi(T)|_{H \rightarrow 0} = \frac{1}{N} \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T}.$$

Достоверность результатов была проверена и подтверждена путем сравнения данных, полученных с помощью гибридного метода, с данными, полученными с помощью аналитического решения $2D$ модели Изинга без внешнего поля, опубликованного в работе [13]. Авторами не только были повторены результаты, опубликованные в работе [6]. Показано, см. рис. 1, что количество спинов в расчетной системе спинов Изинга может быть увеличено до 10^6 , что на два порядка больше, чем с помощью односпинового алгоритма Метрополиса. Кроме того, с помощью кластерного Монте-Карло рассчитано температурное поведение магнитной восприимчивости $\chi(T)$. К сожалению, аналитическое вычисление термодинамически усредненной восприимчивости для $2D$ модели Изинга представляет в настоящее время серьезные математические трудности.

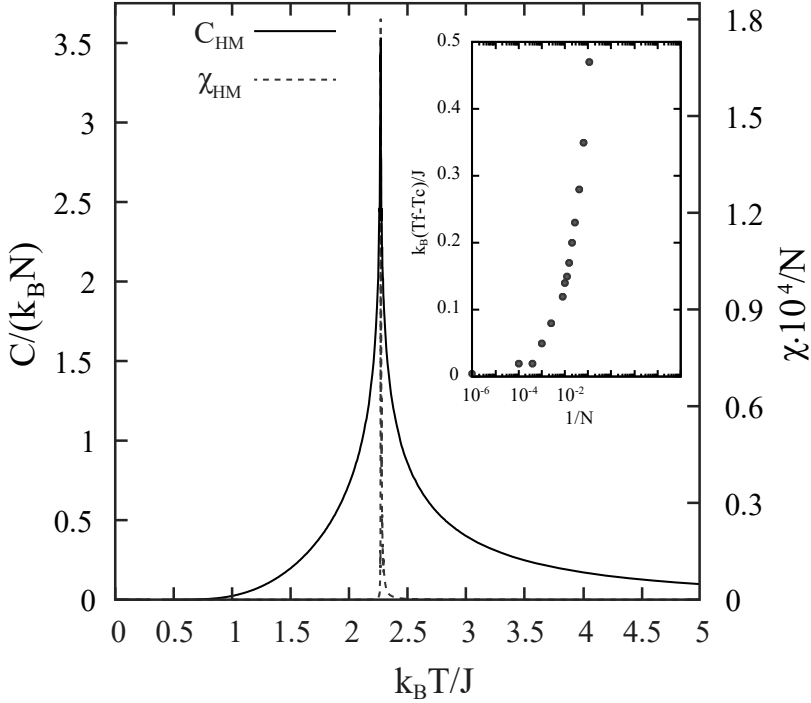


Рис. 1. Теплоемкость C_{HM} и магнитная восприимчивость χ_{HM} , полученные НМ-методом. На вставке приведена разность между температурами пиков восприимчивости и теплоемкости в обратной зависимости от числа спинов.

2. Применение НМ-метода в модели диполей

НМ-метод может быть применен и для решения актуальной задачи термодинамики искусственного суперспинового льда (ИСЛ) в более сложной модели диполей Изинга.

Если магнитный момент i -диполя задается как $\mathbf{m}_i = S_i \mathbf{m}_i^* = S_i \{m_x, m_y\}$, то энергия диполь-дипольного взаимодействия между суперспинами ИСЛ в глобальной ql -конфигурации может быть рассчитана по следующей формуле

$$E_{ql}^d = Da^3 \sum_{i < j} \left[\frac{(\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j)}{r^{3/2}} - 3 \frac{(\mathbf{m}_i \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \mathbf{r}_{ij})}{r^{5/2}} \right],$$

где $D = \mu^2/a^3$ есть константа дипольного взаимодействия, a — постоянная решетки и \mathbf{r}_{ij} — радиус-вектор, соединяющий суперспины i и j . Так же, как и в предыдущем случае прямого обмена, общая энергия будет содержать два вклада E_l^{d-} , E_q^{d+} . Магнитный момент глобальной конфигурации

$$\mathbf{M}_{ql}^d = \{M_x^d, M_y^d\} = \left\{ \sum_{i=1}^N m_{xi}, \sum_{i=1}^N m_{yi} \right\}.$$

Значение скалярной проекции вектора намагниченности \mathbf{M}_{ql}^d на вектор поля $\mathbf{H} = \{h_x, h_y\}$ системы суперспинов

$$\mathbf{H}\mathbf{M}_{ql}^d = \frac{\mathbf{M}_{ql}^d \mathbf{H}}{|\mathbf{H}|} = \frac{M_x^d h_x + M_y^d h_y}{\sqrt{h_x^2 + h_y^2}},$$

соответственно, среднее по всем q -конфигурациям кластера

$$\langle \mathbf{H}\mathbf{M}_{ql}^d \rangle_t = \mathbf{H}\mathbf{M}_{ql}^{d-} + \sum_q \mathbf{H}\mathbf{M}_q^{d+} p(E_q^{d+}, \mathbf{H}\mathbf{M}_q^{d+}).$$

НМ-метод позволяет в некоторых случаях решить фундаментальную задачу поиска конфигураций низкоэнергетических состояний и даже основного состояния. Фрустрированные магнетики [14] привлекают внимание и теоретиков, и экспериментаторов как модели систем с сильным взаимодействием из-за необычных конфигураций основного состояния и элементарных возбуждений. Например, вызывает интерес задача о решетке кагоме (гексагональной решетке или решетке медовых сот), на которой расположены диполи, см. например, работы [15–17].

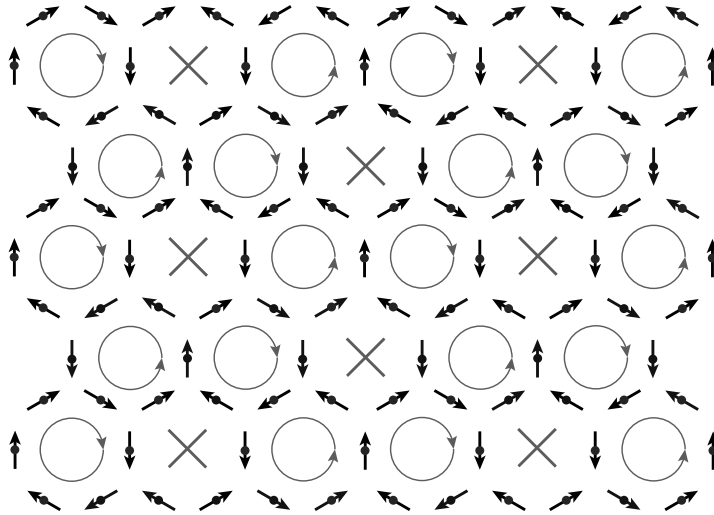


Рис. 2. Одно из основных состояний искусственного спинового льда на гексагональной решетке, полученное НМ-методом.

Мы рассчитали НМ-методом одну из конфигураций вырожденного основного состояния системы диполей искусственного спинового льда на решетке кагоме, рисунок 2. Радиус диполь-дипольного взаимодействия ограничивался нами до трех координационных сфер, в соответствии с выводами, приведенными в работе [18]. Каждый диполь ядра имел 14 ближайших соседей, ядро состояло из 6 диполей. Основное состояние — это минимум энергии, в дипольных магнетиках он определяется максимальным числом замкнутых линий магнитного поля, фактически —

максимальным числом замкнутых контуров, в данном случае имеется в виду упорядочение “голова-хвост” в гексагоне, см. рисунок 2. Как можно увидеть в некоторых гексагонах, линии магнитного поля остаются не замкнутыми — упорядочение “голова-хвост” не выполняется. Все гексагоны упорядочить не удается — такая конфигурация в природе невозможна. Это определяет присутствие элементарных возбуждений — фрустраций на решетке кагоме диполей даже при $T \rightarrow 0$. Такие магнетики называются фрустрированными. Иногда в литературе их еще называют геометрически фрустрированными для того, чтобы подчеркнуть, что геометрия решетки изменяет физические свойства системы.

В заключение хотелось бы отметить, что нахождение алгоритма поиска конфигурации основного состояния является одной из определяющих проблем в теории фрустрированного магнетизма. Вопрос о кратности вырождения энергии основного состояния, т.е. вопрос о том, какое количество конфигураций имеют минимальную энергию для заданной решетки и заданным законом взаимодействием между диполями, является более сложным. Основное состояние антиферромагнитных моделей с взаимодействием ближайших соседей на решетках специфических геометрий бросает вызов всем теоретическим и численным методам, используемым до настоящего времени.

Авторы выражают признательность доценту Юрию Шевченко и доценту Петру Андриященко за ценные обсуждения, полезные дискуссии при подготовке работы, а также Сорокину А. А. [19] за предоставленные вычислительные ресурсы ЦКП “Центр данных ДВО РАН” для выполнения расчетов.

Список литературы

- [1] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, “Equation of state calculations by fast computing machines”, *The journal of chemical physics*, **21**:6, (1953), 1087–1092.
- [2] F. Barakona, “On the computational complexity of Ising spin glass models”, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **15**:10, (1982), 3241.
- [3] R. H. Swendsen, J. Wang, “Replica Monte Carlo simulation of spin-glasses”, *Physical review letters*, **57**:21, (1986), 2607.
- [4] R. H. Swendsen, J. Wang, “Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations”, *Physical review letters*, **58**:2, (1987), 86.
- [5] F. Wang, D. P. Landau, “Efficient, multiple-range random walk algorithm to calculate the density of states”, *Physical review letters*, **86**:10, (2001), 2050.
- [6] Yu. A. Shevchenko, A. G. Makarov, P. D. Andriushchenko, K. V. Nefedev, “Multicanonical sampling of the space of states of $H(2, n)$ -vector models”, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, **124**:6, (2017), 982–993.
- [7] F. Wang, P. D. Landau, “Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States”, *Phys. Rev. Lett.*, **86**:10, (2001), 2050–2053.
- [8] E. Bittner, A. Nußbaumer, W. Janke, “Make life simple: Unleash the full power of the parallel tempering algorithm”, *Physical review letters*, **101**:13, (2008), 130603.
- [9] R. H. Swendsen, J. Wang, “Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations”, *Phys. Rev. Lett.*, **58**:2, (1987), 86–88.

- [10] Y. Tomita, Y. Okabe, “Crossover and self-averaging in the two-dimensional site-diluted Ising model: Application of probability-changing cluster algorithm”, *Physical Review E*, **64**:3, (2001), 036114.
- [11] A. K. Hartmann, “Ground-state clusters of two-, three-, and four-dimensional \pm -J Ising spin glasses”, *Phys. Rev. E*, **63**:1, (2000), 016106.
- [12] O. Melchert, A. K. Hartmann, “Analysis of the phase transition in the two-dimensional Ising ferromagnet using a Lempel-Ziv string-parsing scheme and black-box data-compression utilities”, *Phys. Rev. E*, **91**:2, (2015), 023306.
- [13] A. E. Ferdinand, M. E. Fisher, “Bounded and Inhomogeneous Ising Models. I. Specific-Heat Anomaly of a Finite Lattice”, *Phys. Rev.*, **185**:2, (1969), 832–846.
- [14] C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, “Introduction to frustrated magnetism: materials, experiments, theory”, *Springer Science & Business Media*, **164**, (2011).
- [15] Gia-Wei Chern, P. Mellado, and O. Tchernyshyov, “Two-Stage Ordering of Spins in Dipolar Spin Ice on the Kagome Lattice”, *Phys. Rev. Lett.*, **106**:20, (2011), 207202.
- [16] G. Möller and R. Moessner, “Magnetic multipole analysis of kagome and artificial spin-ice dipolar arrays”, *Phys. Rev. B*, **80**:14, (2009), 140409.
- [17] I. A. Chioar, N. Rougemaille and B. Canals, “Ground-state candidate for the classical dipolar kagome Ising antiferromagnet”, *Phys. Rev. B*, **93**:21, (2016), 214410.
- [18] Petr Andriushchenko, “Influence of cutoff dipole interaction radius and dilution on phase transition in kagome artificial spin ice”, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **476**, (2019), 284–288.
- [19] A. A. Sorokin, S. V. Makogonov and S. P. Korolev, “The Information Infrastructure for Collective Scientific Work in the Far East of Russia”, *Scientific and Technical Information Processing*, **44**:4, (2017), 302–304.

Поступила в редакцию
28 августа 2019 г.

Исследование выполнено при финансовой поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 075-00400-19-01.

Makarova K.V., Makarov A.G., Padalko M.A., Strongin V.S., Nefedev K.V.
Multispin Monte Carlo Method. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2020.
V. 20. No 2. P. 212–220.

ABSTRACT

The article offers a Monte Carlo cluster method for numerically calculating a statistical sample of the state space of vector models. The statistical equivalence of subsystems in the Ising model and quasi-Markov random walks can be used to increase the efficiency of the algorithm for calculating thermodynamic means. The cluster multispin approach extends the computational capabilities of the Metropolis algorithm and allows one to find configurations of the ground and low-energy states.

Key words: *hybrid algorithm, multispin method, ground state, spin systems.*