

УДК 517.958:[531–142.6+536]

MSC2010 82B44

© К. С. Солдатов^{1,2}; М. А. Падалко^{1,2}; В. С. Стронгин^{1,2};
Д. Ю. Капитан^{1,2}; Е. В. Васильев^{1,2}; А. Е. Рыбин^{1,2}; В. Ю. Капитан^{1,2};
К. В. Нефедев^{1,2}

Конечно-размерный скейлинг в ферромагнитных спиновых системах на решетке пирохлора

В работе представлены результаты высокопроизводительных вычислений модели Изинга, XY-модели и классической модели Гейзенберга для решетки пирохлора. Расчеты осуществлялись с помощью алгоритмов Вольффа и Свендсена – Ванга в GPU-реализации. С использованием метода конечно-размерного скейлинга были вычислены критические индексы и критические температуры.

Ключевые слова: Монте-Карло моделирование, конечно-размерный скейлинг, модель Изинга, модель Гейзенберга, классическая XY-модель, решетка пирохлора

DOI: <https://doi.org/10.47910/FEMJ202026>

1. Введение

Критическими явлениями называют процессы, происходящие с физическими системами при приближении их состояний к точкам фазовых переходов. Важными аспектами критических явлений являются универсальность и масштабируемость [1, 2]. Критические явления, связанные с фазовыми переходами второго рода, подразделяются на ограниченное число классов, универсальность которых определяется, в частности, пространственной размерностью, геометрической структурой, параметром порядка.

Объектом моделирования была решетка пирохлора, в узлах которой располагались взаимодействующие спины. Решетка пирохлора представляет собой трехмерную структуру, состоящую из тетраэдров. При этом каждая вершина тетраэдра соединена с вершиной другого (см. рис. 1). Спины в узлах решетки выстраиваются таким образом, что два из них смотрят внутрь тетраэдра, а два других — наружу.

¹ Дальневосточный федеральный университет, Школа естественных наук, 690922, г. Владивосток о. Русский, п. поселок Аякс, 10.

² Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 7.
Электронная почта: konstantin.soldatov@bk.ru (К. С. Солдатов),
padalkoma1992ofacc@gmail.com (М. А. Падалко).

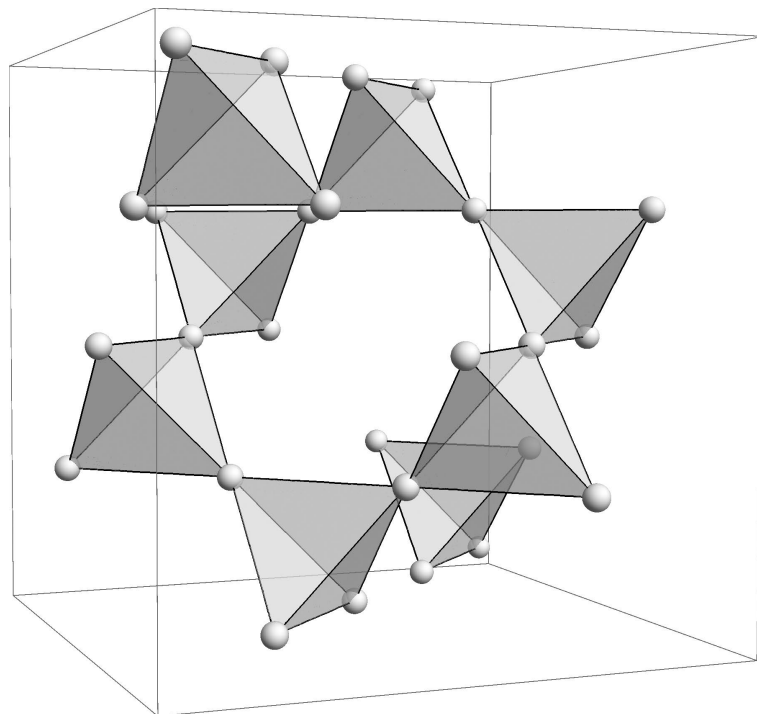


Рис. 1. Структура решетки пирохлора. Каждая вершина тетраэдра соединена с вершиной соседнего тетраэдра.

Стоит отметить, что в последнее время наблюдается повышенный интерес к материалам из пирохлора из-за того, что они проявляет свойства спинового льда [6, 7].

Одним из эффективных подходов, часто используемым в расчете физических систем, состоящих из большого числа частиц, является Монте-Карло моделирование [8]. К классу Монте-Карло методов относится и алгоритм Метрополиса, применяемый для определения различных физических параметров систем, находящихся в состоянии термодинамического равновесия [9]. Однако алгоритм Метрополиса имеет серьезный недостаток, связанный с проблемой критического замедления: для приведения системы в состояние термодинамического равновесия вблизи критической температуры требуется очень большое количество времени. Для преодоления данной проблемы были разработаны кластерные алгоритмы Монте-Карло, например, мультикластерный алгоритм Свендсена – Ванга [10] и однокластерный алгоритм Вольфа [11].

Высокопроизводительные вычисления осуществлялись с использованием графических процессоров (GPU). Параллелизация кластерных алгоритмов не является тривиальной задачей, так как часть алгоритма, в которой происходит определение кластера, требует последовательных операций. Комура и Окабе [12] предложили использовать GPU для мультикластерного алгоритма Свендсена – Ванга с примене-

нием идей Ховика [13] и Калантева [14]. Не так давно Комура [15] предложил эффективный подход к реализации мультикластерного алгоритма Свендсена – Ванга. Программный код медотов [12] и [15] опубликован в [16,17]. Данные алгоритмы применялись при исследовании фазовых переходов в двумерной XY модели [18] и модели Изинга на квазикристаллической решетке Пенроуза [19].

Оставшаяся часть материала организована следующим образом: модель и метод описаны в Разделе 2. Раздел 3 содержит представление и обсуждение результатов, в Разделе 4 подводятся итоги.

2. Модель и метод

В качестве основной структурной единицы рассматривалась 16-узловая единичная кубическая ячейка пироклора [20]. Из множества таких ячеек строилась основная моделируемая конструкция. Расчет осуществлялся для систем из $L \times L \times L$ таких ячеек. Число спинов в такой системе равно $16 \cdot L^3$. Рассматривались периодические граничные условия.

Гамильтониан для классических спиновых моделей имеет вид

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j, \tag{1}$$

где J — константа обменного взаимодействия, \mathbf{s}_i есть n -мерный единичный вектор в узле решетки i [21]. При этом $n = 1$ для модели Изинга, $n = 2$ классической XY модели и $n = 3$ классической модели Гейзенберга соответственно. Суммирование производится по всем парам ближайших соседей $\langle i,j \rangle$. Координационное число решетки пироклора равно 6, как и у простой кубической решетки.

Расчеты были осуществлены для трех моделей: модели Изинга, XY-модели и модели Гейзенберга. Для каждой из них осуществлялось по 4 расчета для решеток пироклора с линейными размерами: $L = 32$ (524288 спинов), $L = 48$ (1769472 спинов), $L = 64$ (4194304 спинов) и $L = 96$ (14155776 спинов).

Расчет модели Изинга осуществлялся с использованием алгоритма Свендсена – Ванга [15]. Для моделирования систем с непрерывной симметрией (XY модели и модели Гейзенберга) использовался подход с использованием алгоритма Вольффа [11]. Во всех трех моделях критическая температура была определена методом конечно-размерного скейлинга [22] кумулянтов Биндера [23]. Данные, получаемые с первых 10,000 Монте-Карло шагов отбрасывались, чтобы избежать влияния стартовой конфигурации. В расчете учитывались данные следующих 200,000 Монте-Карло шагов. Для системы каждого размера было проведено по 5 независимых численных экспериментов; рассчитывалось среднее по пяти результатам, производился расчет среднеквадратического отклонения. В расчетах использовалась ферромагнитная модель.

3. Результаты

3.1. Модель Изинга

Сперва рассмотрим модель Изинга. В ней наблюдается фазовый переход второго рода для систем с размерностью выше одного [24]. Эффективным способом оценки T_c является метод кумулянтов Биндера [23]. В данном подходе необходимо вычислить так называемый кумулянт Биндера по намагниченности, определяемый по формуле (с точностью до аддитивной постоянной и постоянного множителя)

$$U(T) = \frac{\langle M(T)^4 \rangle}{\langle M(T)^2 \rangle^2} = \frac{\langle m(T)^4 \rangle}{\langle m(T)^2 \rangle^2}, \quad (2)$$

где m — намагниченность на один спин: $m = M/N$. На рис. 2 приводится зависимость кумулянта Биндера от температуры для систем с $L = 32$ ($N = 524288$), $L = 48$ ($N = 1769472$), $L = 64$ ($N = 4194304$) и $L = 96$ ($N = 14155776$). На рисунке можно увидеть, что $U(T) \rightarrow 1$ при $T \rightarrow 0$, в то время как $U(T) \rightarrow 3$ при $T \rightarrow \infty$. Размерность температуры представлена в единицах J ; другими словами, мы принимаем $J = 1$. Среднеквадратическое отклонение находится в пределах размеров знаков на рисунке. На рис. 2 мы видим, что данные для различных L пересекаются в точке $T = 4.214$, что дает нам значение критической температуры T_c .

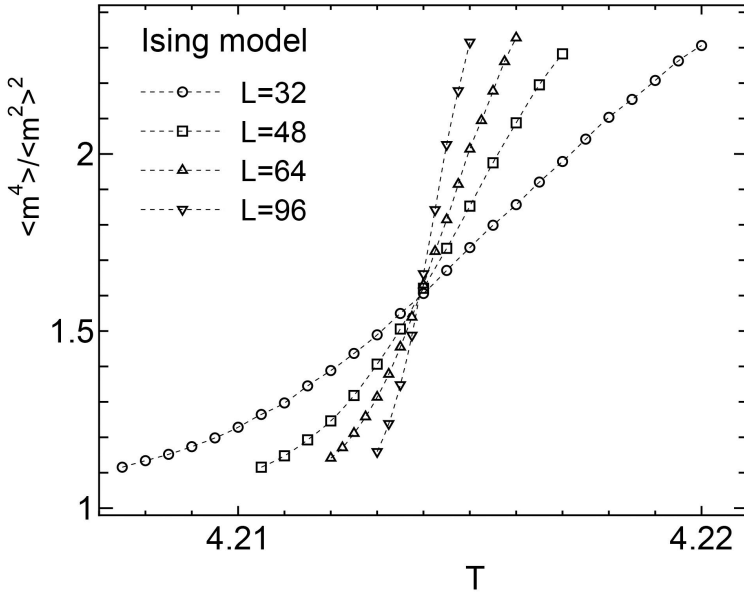


Рис. 2. Температурная зависимость кумулянта Биндера для намагниченности в модели Изинга на решетке пирохлора для систем с линейными размерами (и числом спинов) $L = 32$ ($N = 524288$), $L = 48$ ($N = 1769472$), $L = 64$ ($N = 4194304$) и $L = 96$ ($N = 14155776$). $L = 64$ ($N = 4194304$) и $L = 96$ ($N = 14155776$).

Чтобы получить более точную оценку T_c , рассмотрим скейлинговую функцию [22] для соотношения $U(T)$.

$$U(t) = f_1\left(t(N^{1/3})^{1/\nu}\right), \tag{3}$$

где $t = (T - T_c)/T_c$ и ν — критический индекс корреляционной длины. Зависимость $U(T) = \langle m^4 \rangle / \langle m^2 \rangle^2$ как функции от $t(N^{1/3})^{1/\nu}$ представлена на рис. 3; видно, что графики для систем различных размеров сходятся в одну кривую в рамках среднеквадратического отклонения при следующих значениях $T_c = 4.21394(2)$ и $\nu = 0.629(2)$. Полученное значение ν универсально для трехмерных систем в рамках модели Изинга [30]. Значение $T_c = 4.21394(2)$, составляет 93.4% от T_c для простой кубической решетки, 4.511524(20) [30], хотя координационное число обеих решеток совпадает и равно 6.

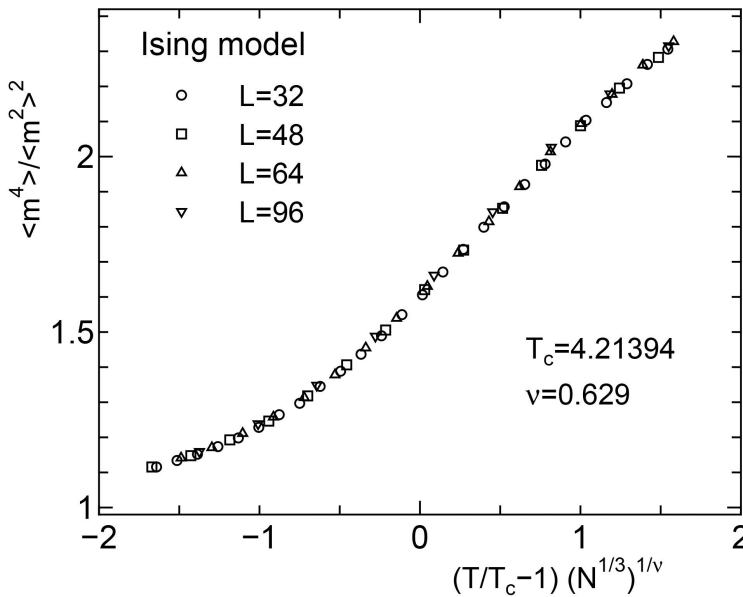


Рис. 3. График скейлинговой функции соотношения Биндера в модели Изинга на решетке пирохлора для систем с линейными размерами (и числом спинов) $L = 32$ ($N = 524288$), $L = 48$ ($N = 1769472$), $L = 64$ ($N = 4194304$) и $L = 96$ ($N = 14155776$). Значения T_c и ν представлены на изображении.

Далее рассмотрим скейлинговую функцию для среднеквадратичной намагниченности:

$$\langle m^2 \rangle = (N^{1/3})^{-2\beta/\nu} f_2\left(t(N^{1/3})^{1/\nu}\right), \tag{4}$$

где β — критический индекс намагниченности. Используя полученные ранее значения T_c и ν , построим график скейлинговой функции среднеквадратичной намагниченности (рис. 4). Графики для решеток разных размеров накладываются друг на

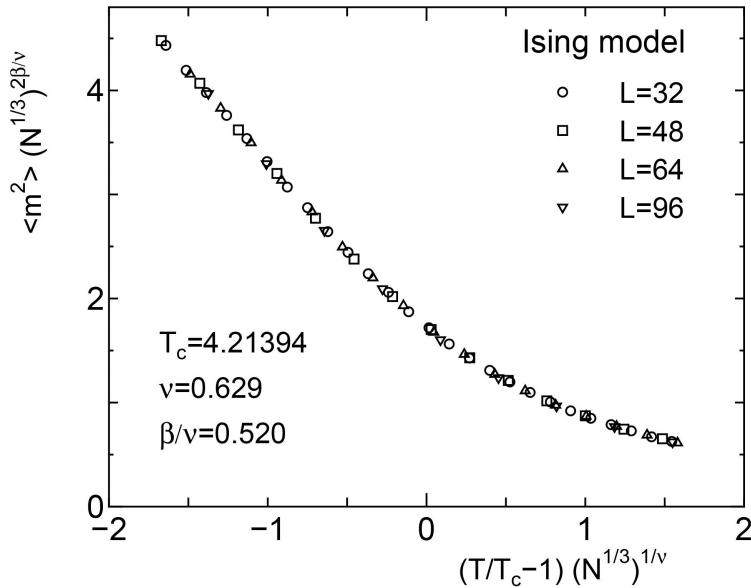


Рис. 4. График скейлинговой функции среднеквадратичной намагниченности в модели Изинга на решетке пирохлора для систем с линейными размерами (и числом спинов) $L = 32$ ($N = 524288$), $L = 48$ ($N = 1769472$), $L = 64$ ($N = 4194304$) и $L = 96$ ($N = 14155776$). Значения T_c , ν и β/ν представлены на изображении.

друга при β/ν равном $0.520(5)$, что подтверждает эффективность метода конечно-размерного скейлинга.

3.2. XY модель

Найдем критическую температуру для XY-модели. Вновь воспользуемся методом кумулянтов Биндера. Температурная зависимость кумулянтов Биндера для намагниченности M для классической XY-модели на решетке пирохлора представлена на рис. 5. На рисунке показано, что для случая XY-модели ($n=2$), $U(T) \rightarrow 2$ при $T \rightarrow \infty$. Размеры систем аналогичны ранее рассмотренным в модели Изинга, среднеквадратическое отклонение в пределах знаков на рисунке. На графике видим, что данные для различных L пересекаются в точке $T = 2.029$.

На рис. 6 изображен график скейлинговой функции для соотношения Биндера в классической XY-модели на решетке пирохлора. Данные для различных размеров с хорошей точностью накладываются друг на друга при значениях T_c и ν , равных $2.02850(2)$ и $0.672(2)$ соответственно. Полученное значение критического индекса ν универсально для 3D XY-модели [31]. Величина $T_c = 2.02850(2)$, составляет 92.1% от $T_c = 2.20182(5)$ для простой кубической решетки [32]. График скейлинговой функции среднеквадратичной намагниченности в классической XY-модели на ре-

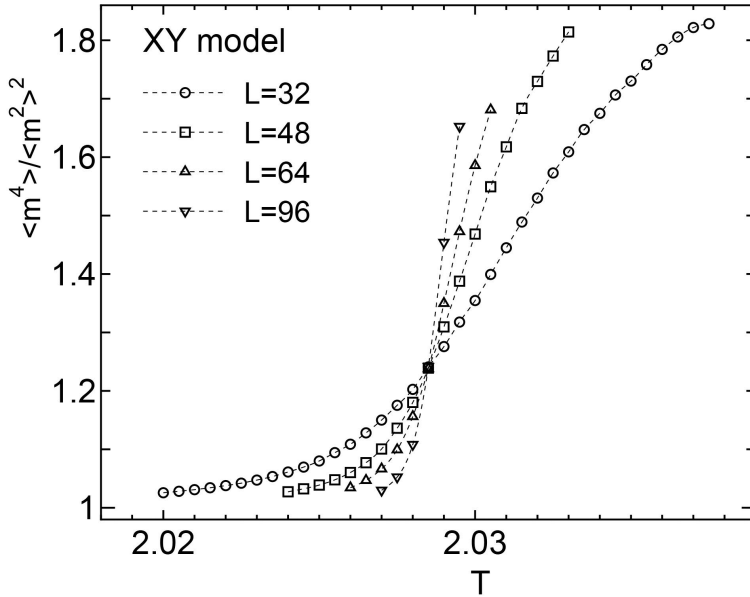


Рис. 5. Температурная зависимость соотношения Биндера для намагниченности в XY модели на решетке пирохлора для систем с линейными размерами (и числом спинов) $L = 32$ ($N = 524288$), $L = 48$ ($N = 1769472$), $L = 64$ ($N = 4194304$) и $L = 96$ ($N = 14155776$).

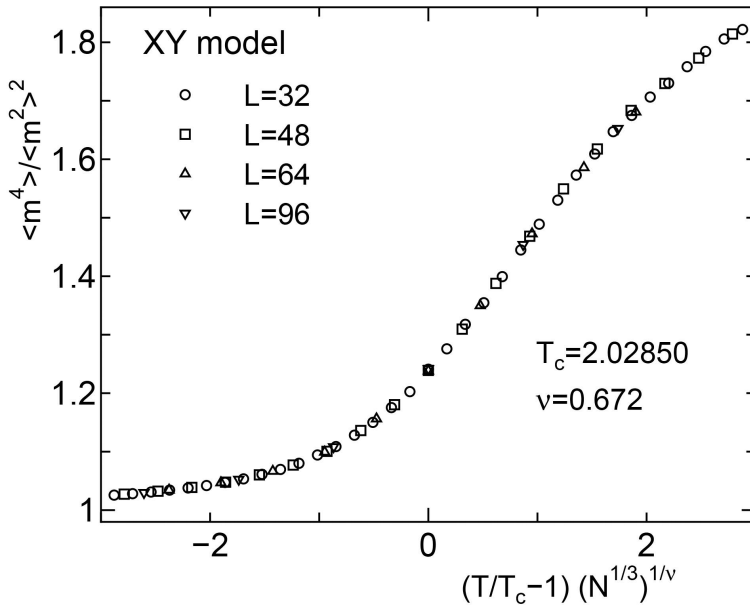


Рис. 6. График скейлинговой функции соотношения Биндера в классической XY модели на решетке пирохлора для систем с линейными размерами (и числом спинов) $L = 32$ ($N = 524288$), $L = 48$ ($N = 1769472$), $L = 64$ ($N = 4194304$) и $L = 96$ ($N = 14155776$). Значения T_c и ν представлены на изображении.

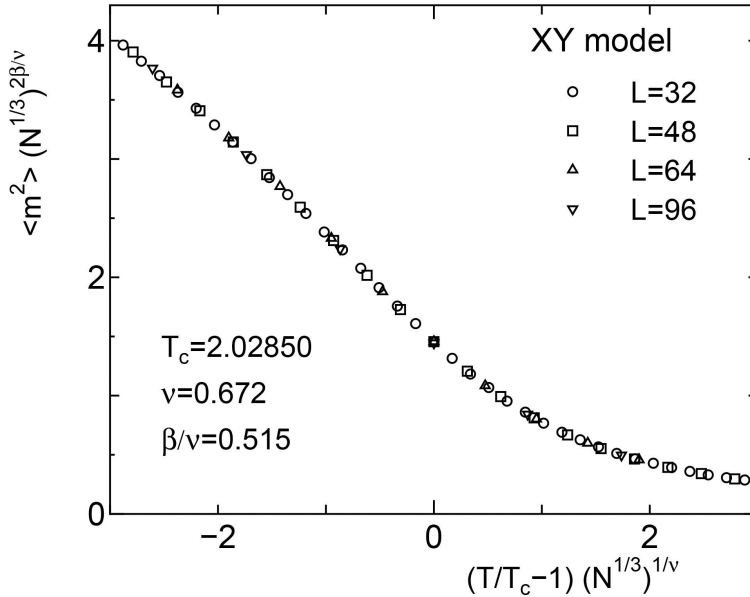


Рис. 7. График скейлинговой функции среднеквадратичной намагниченности в классической XY модели на решетке пирохлора для систем с линейными размерами (и числом спинов) $L = 32$ ($N = 524288$), $L = 48$ ($N = 1769472$), $L = 64$ ($N = 4194304$) и $L = 96$ ($N = 14155776$). Значения T_c , ν и β/ν представлены на изображении.

шетке пирохлора изображен на рис. 7. Используя полученные ранее значения T_c и ν , находим $\beta/\nu = 0.515(5)$.

3.3. Модель Гейзенберга

Далее рассмотрим температурную зависимость соотношения Биндера в классической модели Гейзенберга на решетке пирохлора (рис. 8). В случае модели Гейзенберга (размерность равна трем), $U(T) U(T) \rightarrow 5/3$ при $T \rightarrow \infty$.

На рис. 9 изображен график скейлинговой функции соотношения Биндера для классической модели Гейзенберга на решетке пирохлора. Графики для решеток различных размеров накладываются друг на друга при значениях T_c и ν , равных $1.31695(2)$ и $0.711(2)$ соответственно. Полученное значение критического индекса ν универсально для 3D модели Гейзенберга [33]. Величина T_c , $1.31695(2)$ составляет 91.3% от T_c простой кубической решетки. $1.4430(2)$ [34].

График скейлинговой функции среднеквадратичной намагниченности классической модели Гейзенберга на решетке пирохлора изображен на рис 10. Используя полученные ранее значения T_c и ν , находим $\beta/\nu = 0.515(5)$.

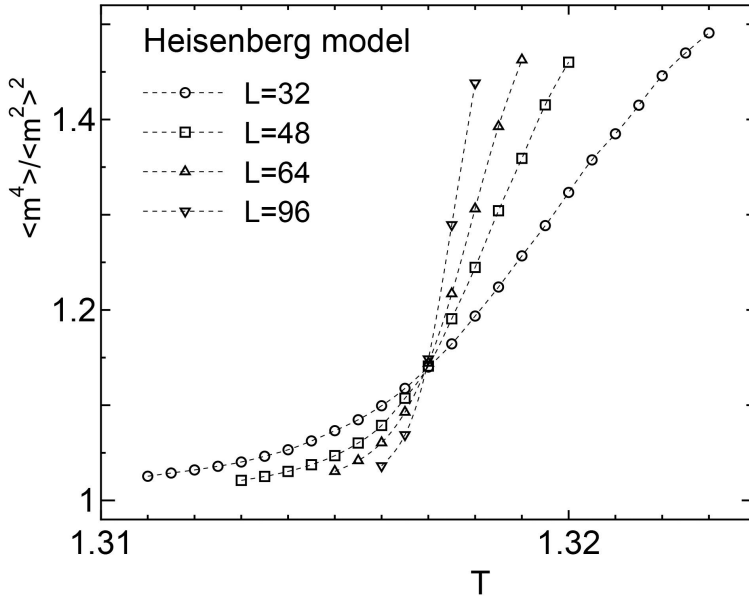


Рис. 8. Температурная зависимость соотношения Биндера для намагниченности в модели Гейзенберга на решетке пирохлора для систем с линейными размерами (и числом спинов) $L = 32$ ($N = 524288$), $L = 48$ ($N = 1769472$), $L = 64$ ($N = 4194304$) и $L = 96$ ($N = 14155776$).

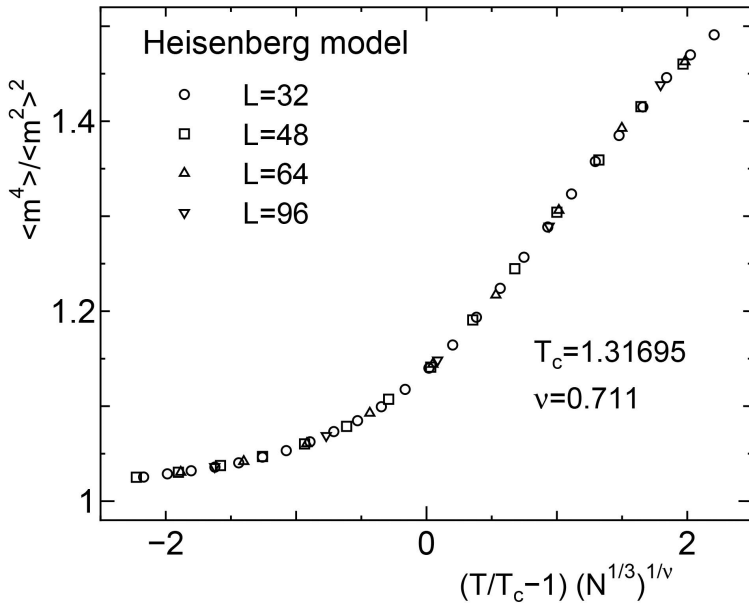


Рис. 9. График скейлинговой функции соотношения Биндера в классической модели Гейзенберга на решетке пирохлора для систем с линейными размерами (и числом спинов) $L = 32$ ($N = 524288$), $L = 48$ ($N = 1769472$), $L = 64$ ($N = 4194304$) и $L = 96$ ($N = 14155776$). Значения T_c и ν представлены на изображении.

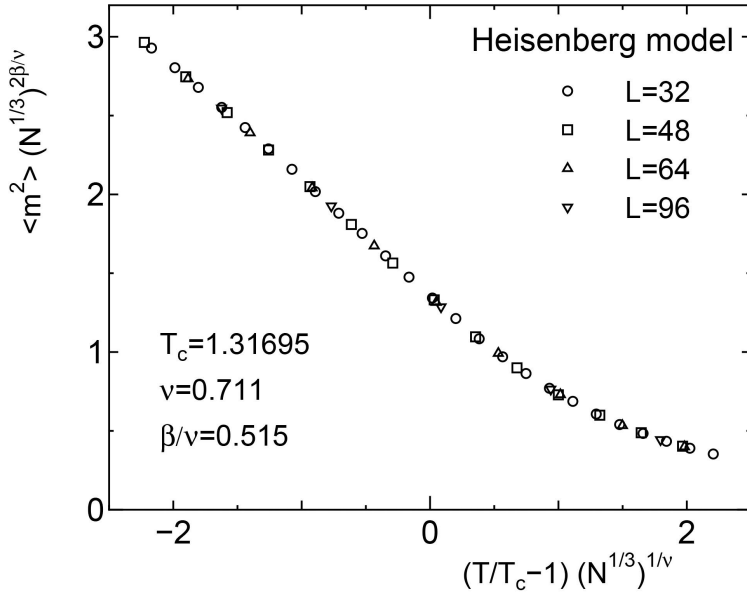


Рис. 10. График скейлинговой функции средне-квадратичной намагниченности в классической модели Гейзенберга на решетке пирохлора. Размеры систем $N = 16L^3$. Значения T_c , ν и β/ν представлены на изображении.

4. Выводы

Были произведены высокопроизводительные вычисления для ферромагнитных классических спиновых моделей на решетке пирохлора. Для расчетов использовался мультикластерный алгоритм Вольффа, а также алгоритм Свендсена – Ванга в GPU реализации [15]. Методом конечно-размерного скейлинга были получены критические температуры 4.21394(2), 2.02850(2), и 1.31695(2) для модели Изинга ($n = 1$), XY модели ($n = 2$), и модели Гейзенберга ($n = 3$) соответственно, что составляет 93.4%, 92.1% и 91.3% от T_c для простой кубической решетки. В данной работе была рассмотрена идеальная решетка. В дальнейшем планируется исследовать применимость данного метода к случайным системам, например, на решетку пирохлора с разбавлениями.

Для выполнения расчетов были использованы вычислительные ресурсы ЦКП "Центр данных ДВО РАН". Исследование выполнено в рамках государственного задания миннауки РФ #075-00400-19-01.

Список литературы

- [1] Н.Е. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford Univ. Press, New York, 1971.

- [2] C.-K. Hu, “Historical Review on Analytic, Monte Carlo, and Renormalization Group Approaches to Critical Phenomena of Some Lattice Models”, *Chinese J. Phys.*, **52**:1, (2014), 1–76.
- [3] M. J. Harris, S. T. Bramwell, D. F. McMorrow, T. Zeiske, K. W. Godfrey, “Geometrical Frustration in the Ferromagnetic Pyrochlore $Ho_2Ti_2O_7$ ”, *Phys. Rev. Lett.*, **79**:13, (1997).
- [4] A. P. Ramirez, A. Hayashi, R. J. Cava, R. Siddharthan, B. S. Shastry, “Zero-point entropy inspinice”, *Nature (London)*, **399**, (1999), 333–335.
- [5] S. T. Bramwell, J. P. Gingras, “Spin Ice State in Frustrated Magnetic Pyrochlore Materials”, *Science*, **294**:5546, (2001), 1495–1501.
- [6] X. Ke, R. S. Freitas, B. G. Ueland, G. C. Lau, M. L. Dahlberg, R. J. Cava, R. Moessner, P. Schiffer, “Nonmonotonic Zero-Point Entropy in Diluted Spin Ice”, *Phys. Rev. Lett.*, **99**, (2007), 137203.
- [7] Y. Shevchenko, K. Nefedev, Y. Okabe, “Entropy of diluted antiferromagnetic Ising models on frustrated lattices using the Wang-Landau method”, *Physical Review E*, **95**:5, (2017), 052132.
- [8] D. P. Landau, K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, 3rd edition, Cambridge University Press, Cambridge, 2009.
- [9] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines”, *J. Chem. Phys.*, **21**:6, (1953), 1087.
- [10] R. H. Swendsen, J. S. Wang, “Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations”, *Phys. Rev. Lett.*, **58**, (1987), 86.
- [11] U. Wolff, “Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems”, *Phys. Rev. Lett.*, **62**, (1989), 361.
- [12] Y. Komura, Y. Okabe, “GPU-based Swendsen-Wang multi-cluster algorithm for the simulation of two-dimensional classical spin systems”, *Comput. Phys. Comm.*, **183**, (2012), 1155.
- [13] K. A. Hawick, A. Leist, D. P. Playne, “Parallel Graph Component Labelling with GPUs and CUDA”, *Parallel Computing*, **36**, (2010), 655.
- [14] O. Kalentev, A. Rai, S. Kemnitzb, R. Schneider, “Connected component labeling on a 2D grid using CUDA”, *J. Parallel Distrib. Comput.*, **71**, (2011), 615.
- [15] Y. Komura, “A generalized GPU-based connected component labeling algorithm”, *Comput. Phys. Comm.*, **194**, (2015), 54, arXiv:1603.08357.
- [16] Y. Komura, Y. Okabe, “CUDA programs for the GPU computing of the Swendsen–Wang multi-cluster spin flip algorithm: 2D and 3D Ising, Potts, and XY models”, *Comput. Phys. Comm.*, **185**, (2014), 1038–1043.
- [17] Y. Komura, Y. Okabe, “Improved CUDA programs for GPU computing of Swendsen–Wang multi-cluster spin flip algorithm: 2D and 3D Ising, Potts, and XY models”, *Comput. Phys. Comm.*, **200**, (2016), 400–401.
- [18] Y. Komura, Y. Okabe, “Large-Scale Monte Carlo Simulation of Two-Dimensional Classical XY Model Using Multiple GPUs”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **81**, (2012), 113001.
- [19] Y. Komura, Y. Okabe, “High-Precision Monte Carlo Simulation of the Ising Models on the Penrose Lattice and the Dual Penrose Lattice”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **85**, (2016), 044004.
- [20] H. Shinaoka, Y. Tomita, Y. Motome, “Effect of magnetoelastic coupling on spin-glass behavior in Heisenberg pyrochlore antiferromagnets with bond disorder”, *Phys. Rev. B*, **90**, (2014), 165119.
- [21] J. H. Van Vleck, *The Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities*, Oxford University Press, Oxford University Press, O, 1932.
- [22] M. E. Fisher, “The Theory of critical point singularities”, *Proc. 1970 E. Fermi Int. School*

- of Physics*, v. 51, ed. M.S. Green, Academic, New York, 1971, 1–99.
- [23] K. Binder, “Finite size scaling analysis of ising model block distribution functions”, *Z. Phys. B: Condens. Matter*, **43**, (1981), 119.
- [24] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, В 10 т. Т. 5 (В 2 ч. Ч.1) Статистическая физика, Физматлит, М., 2013.
- [25] С.-К. Hu, С.-Y. Lin, J.-A. Chen, “Universal Scaling Functions in Critical Phenomena”, *Phys. Rev. Lett.*, **75**, (1995), 193.
- [26] Y. Okabe, M. Kikuchi, “Universal finite-size-scaling functions”, *International Journal of Modern Physics C*, **7**, (1996), 287–294.
- [27] Y. Okabe, K. Kaneda, M. Kikuchi, С.-К. Hu, “Universal finite-size scaling functions for critical systems with tilted boundary conditions”, *Phys. Rev. E*, **59**, (1999), 1585.
- [28] Y. Tomita, Y. Okabe, С.-К. Hu, “Cluster analysis and finite-size scaling for Ising spin systems”, *Phys. Rev. E*, **60**, (1999), 2716.
- [29] М.-С. Wu, С.-К. Hu, N. Sh. Izmailian, “Universal finite-size scaling functions with exact nonuniversal metric factors”, *Phys. Rev. E*, **67**, (2003), 065103(R).
- [30] H. W. J. Blöte, E. Luijten, J. R. Heringa, “Ising universality in three dimensions: a Monte Carlo study”, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **28**, (1995), 6289.
- [31] M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari, “Critical behavior of the three-dimensional XY universality class”, *Phys. Rev. B*, **63**, (2001), 214503.
- [32] A. P. Gottlob, M. Hasenbusch, S. Meyer, “Critical behaviour of the 3D XY-model: A Monte Carlo study”, *Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.)*, **30**, (1993), 838.
- [33] M. Campostrini, M. Hasenbusch, A. Pelissetto, P. Rossi, E. Vicari, “Critical exponents and equation of state of the three-dimensional Heisenberg universality class”, *Phys. Rev. B*, **65**, (2002), 144520.
- [34] C. Holm, W. Janke, “Critical exponents of the classical three-dimensional Heisenberg model: A single-cluster Monte Carlo study”, *Phys. Rev. B*, **48**, (1993), 936.

Поступила в редакцию
5 ноября 2019 г.

Soldatov K. S., Padalko M. A., Strongin V. S., Kapitan D. Yu., Vasiliev E. V., Rybin A. E., Kapitan V. Yu., Nefedev K. V. Finite-size scaling in ferromagnetic spin systems on the pyrochlore lattice. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2020. V. 20. No 2. P. 255–266.

ABSTRACT

In this paper we present the results of the high-performance computations for the Ising model, the XY-model and the classical Heisenberg model for the pyrochlore lattice. We used Wolff and Swendsen-Wang cluster algorithms with GPU parallelization for the calculations. We obtained critical exponents and critical temperatures using finite-size scaling approach.

Key words: *phase transitions, critical temperature, finite-size scaling, pyrochlore lattice, cluster algorithms.*