БИБЛИОТЕКА ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ КРИТИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ МАКРОСКОПИЧЕСКИХ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ

А.Н. Вакилов, В.В. Прудников, Е.Л. Филиканов

Омский государственный университет

В ОмГУ в научно-исследовательской лаборатории прикладной теоретической физики и параллельных вычислений (руководитель - проф. В.В. Прудников) в течение ряда лет проводятся плодотворные исследования по направлению “Компьютерное моделирование критического поведения неупорядоченных систем”, поддержанные грантами РФФИ (97-02-16124 , 00-02-16455) и Минобразования [1–6].

Известно, что критические свойства многих материалов можно описать с помощью модели Изинга с гамильтонианом:

$$H = -J\sum_{ij} S_i S_j ,$$

где S_i – спиновые переменные, расположенные в узлах d-мерной решетки и принимающие значения +1 и –1. Энергия спин-спинового взаимодействия J ограничена взаимодействием ближайших соседей. Константа обменного взаимодействия J является мерой силы взаимодействия между соседними спинами. Если $J > 0$, то состояния, которые характеризуются одинаковой ориентацией спинов ближайших соседей, энергетически выгоднее по сравнению с состояниями, у которых соседние спины ориентированы в противоположные стороны. Следовательно, можно ожидать, что для $J > 0$ состояние с наименьшей энергией является ферромагнитным, т.е. в среднем суммарное число спинов, ориентированных в одном направлении, не равно нулю. Если $J < 0$, то предпочтительнее с энергетической точки зрения состояния, для которых соседние спины антипараллельны, и можно ожидать, что состояние с наименьшей энергией является антиферромагнитным, т.е. спины сонаправлены через один. Важная роль статистической теории модели Изинга объясняется тем, что она находит применение при рассмотрении самых разнообразных магнитных и немагнитных систем. Сюда входят ферромагнетики, антиферромагнетики, ферримагнетики, бинарные смеси и сплавы, решеточная модель жидкости, адсорбция на поверхности, «плавление» ДНК и т.д. Поэтому статистика модели Изинга занимает видное место среди других вопросов статистической механики.

Макроскопические свойства системы характеризуются следующими величинами. Так, суммарный магнитный момент, или намагниченность, задается выражением

$$M = \sum_{i=1}^{N} S_i \ .$$

Теплоемкость C при постоянном внешнем магнитном поле может быть определена соотношением

$$C = \frac{d < H >}{dT} = \frac{\left(< H^2 > - < H >^2\right)}{kT^2},$$

а изотермическая магнитная восприимчивость при нулевом магнитном поле может быть задана формулой

$$\chi = \frac{\left(< M^2 > - < M >^2\right)}{kT}.$$

Для вычисления средних характеристик системы, например средней энергии или средней намагниченности, нужно сконструировать марковский процесс, когда каждая спиновая конфигурация $\{S_{i+1}\}$ получается из предыдущей конфигурации $\{S_i\}$ с помощью соответствующей вероятности перехода $W(\{S_i\} \to \{S_{i+1}\})$. Метрополис и др. (1953) указали, что можно выбрать W такой, что в пределе большого числа конфигураций функция распределения $P(\{S_i\})$ спиновых состояний, генерируемых марковским процессом, стремится к равновесному каноническому распределению $P_{EQ}(\{S_i\}) = \frac{1}{Z}\exp(-H/kT)$. Достаточным условием для достижения этого распределения является выполнение принципа детального равновесия

$$P_{EQ}(\{S_i\})W(\{S_i\} \to \{S_{i'}\}) = P_{EQ}(\{S_{i'}\})W(\{S_{i'}\} \to \{S_i\}).$$

Данное условие не задает W единственным образом, оставляя произвол в выборе W. Наиболее часто в качестве вероятности перехода используется функция Метрополиса

$$W\left(\{S_i\} \to \{S_{i'}\}\right) = \begin{cases} \exp\left(-\Delta H \big/ kT\right), & при \quad \Delta H > 0, \\ 1, & при \quad \Delta H \le 0, \end{cases}$$

Поведение ряда физических величин для непрерывных фазовых переходов в окрестности T_c характеризуется набором критических индексов. Так, вблизи T_c можно определить поведение намагниченности $M(T)$, восприимчивости $\chi(T)$ и теплоемкости $C(T)$ следующим образом:

$$M(T) \sim (T_c - T)^{\beta}\ ,\ \chi(T) \sim |T_c - T|^{-\gamma}\ ,\ C(T) \sim |T_c - T|^{-\alpha}\ ,$$

где α, β, γ – критические индексы. Теплоемкость и восприимчивость при $T = T_c$ расходятся. Свойства систем при непрерывных фазовых переходах определяются сильными и долгоживущими флуктуациями параметра порядка. Мерой магнитных флуктуаций является линейный размер $\xi(T)$ ха-

рактерного магнитного домена – области с сильно коррелированными спинами. При $T >> T_c$ длина корреляции $\xi(T)$ по порядку величины равна периоду решетки. Поскольку по мере приближения T к T_c сверху корреляция в ориентации спинов увеличивается, $\xi(T)$ будет возрастать при приближении T к T_c. Расходимость $\xi(T)$ в окрестности T_c описывается критическим индексом ν:

$$\xi(T) \sim |T - T_c|^{-\nu}.$$

Из-за долгоживущих флуктуаций намагниченности время релаксации системы τ_p, а также время корреляции флуктуаций τ в окрестности T_c неограниченно возрастают. Можно ввести динамический критический индекс z, определяемый соотношением

$$\tau_p, \tau \sim (T - T_c)^{-z\nu}.$$

Если проведено n последовательных наблюдений M_i $(i = 1,2,...,n,\ где\ n >> 1)$ намагниченности M, то среднеквадратичная статистическая погрешность будет [7]:

$$\langle (\delta M)^2 \rangle \approx 2\frac{\tau_M}{t_{obs}}\left[\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2\right],$$

τ_M - время релаксации намагниченности; t_{obs} – время наблюдения. При $T = T_c$, $\tau_M \sim L^z$; где L – линейный размер системы; z – динамический критический индекс. Таким образом, очень сложно получить данные с высокой точностью при $T = T_c$, когда погрешность определения намагниченности M максимальна:

$$\langle (\delta M)^2 \rangle \approx 2\frac{\tau_M}{t_{obs}}\left[\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2\right] \sim \frac{L^{z+\gamma/\nu-d}}{t_{obs}}, \text{ при } T = T_c.$$

Поэтому для “последовательного” компьютера время центрального процессора, необходимое для выполнения одного шага на спин по методу Монте-Карло, растет с увеличением размера системы как $L^{z+\gamma/\nu}$ независимо от d при $d \le 4$. Увеличение в 10 раз линейного размера системы потребует в 10^4 раз больше времени центрального процессора. Поэтому применение компьютеров с параллельной архитектурой, для которых выполнение одного Монте-Карло-шага на спин не столь существенно, становится необходимым для Монте-Карло исследований критического поведения термодинамических систем.

В лаборатории разрабатываются параллельные алгоритмы для проведения моделирования критического поведения неупорядоченных систем. Эти алгоритмы можно разделить на два класса: 1) алгоритмы с переворотом одного спина, включая алгоритм Метрополиса; 2) кластерные алгоритмы Свендсена-Ванга, Вольфа. Имеются следующие возможности использования указанных алгоритмов на кластере: вся программа помещается в процессор и можно набирать статистику независимо, заставляя все процес-

сы работать асинхронно и обрабатывая затем накопленные результаты; для моделирования решеток больших размеров необходимо формировать массивы определенной длины из независимых спинов на решетке с учетом топологии расчетов.

В настоящее время разработаны и реализованы на алгоритмическом языке Си с использованием MPI для двумерной и трехмерной модели Изинга алгоритмы Вольфа, Свендсена–Ванга и Метрополиса. Данный пакет программ позволяет проводить моделирование магнитных систем с большим числом спинов (до 200 миллионов). В дальнейшем предполагается создание пакета параллельных программ с использованием алгоритмов Свендсена–Ванга, Метрополиса и кластерных алгоритмов для систем во внешнем случайном поле и спиновых стекол.

Алгоритм, разработанный Свендсеном–Вангом и Вольфом, совершает крупномасштабные, нелокальные изменения в спиновой конфигурации и значительно уменьшает эффект критического замедления. В этом так называемом кластерном алгоритме целый кластер спинов меняет своё направление для каждого шага процедуры Монте-Карло. Кластеры формируются заданием связи между соседними спинами с помощью вероятностной процедуры, от которой зависит вид модели и алгоритма. В алгоритме Свендсена–Ванга связь между соседними спинами считается всегда разорванной, если спины противоположно направлены, если спины сонаправлены, то связь считается замкнутой с вероятностью $1–exp(–2/T)$ и разорванной с вероятностью $exp(–2/T)$. Эта процедура создаёт кластеры взаимодействующих спинов. Новая конфигурация получается путём присваивания спинам каждого кластера значения +1 или –1 с равной вероятностью. В алгоритме Вольфа создаётся только один кластер. В решётке случайным образом выбирается центральный спин, затем вокруг него строится кластер с использованием вероятностного характера связи, как в алгоритме Свендсена–Ванга. Все спины в этом кластере переворачиваются, изменяя свой знак на противоположный (переворот кластера). Время в методе Монте-Карло удобно измерять в количестве последовательных статистически независимых конфигураций. Главная вычислительная задача алгоритма Свендсена–Ванга – это идентификация и маркировка кластеров, дающая новую конфигурацию. Алгоритмы Метрополиса и Свендсена–Ванга наиболее подходят для распараллеливания, чем алгоритм Вольфа, так как все спины решетки участвуют в переворотах. В этом случае можно использовать стандартное разбиение системы, например, поделить решётку на равные участки между процессорами. Однако этого нельзя сделать в случае алгоритма Вольфа, в котором строится только один кластер вокруг случайного участка решётки. В этом случае стандартное разбиение не дает равномерной загруженности процессоров. Алгоритм Вольфа принадлежит к типу задач, в которых весь вычислительный процесс имеет тенденцию концентрироваться в различные времена в ограниченных областях данных. Для тако-

го рода задач применяется разбиение всех локальных участков данных на равные части среди процессоров. Такое разбиение приводит к увеличению затрат времени на коммуникацию между процессорами, однако это может быть скомпенсировано равномерной загруженностью процессоров.

Для алгоритма Вольфа применялось разбиение решётки линейным размером L на N равных полос шириной W так, чтобы $L = WN$, N/P - было целым числом ($1 \le W \le L/P$), где P – число процессоров. Теперь каждому процессору принадлежит N/P число полос, на которые разбита исходная решётка. Эти полосы составляют подрешётку своего процессора. Вводится набор локальных и глобальных координат спинов. Глобальные координаты спинов – это координаты решётки. Локальные координаты – это координаты отдельной подрешётки $a = i, b = (j \bmod WP) \bmod W + W(j \, div WP)$.

Благодаря такому разбиению вычислительная задача распределяется между процессорами более равномерно, чем при стандартном разбиении. В итоге каждый процессор получает некоторое число полос и спинов. Один из процессоров выбирает случайным образом центральный спин и посылает на все остальные.

Каждый процессор, как и в обычном алгоритме Вольфа, строит кластер в своей подрешётке с использованием специальных граничных условий. Если рост частей кластера на всех процессорах завершился, центральный процесс собирает и накапливает данные. По завершении необходимого числа шагов Монте-Карло 0-процессор вычисляет средние значения физических величин. Применение специальных граничных условий связано с особенностью разбиения задачи. По локальной координате a реализуются обычные циклические граничные условия. Иначе обстоит дело с локальной координатой b, так как на левой и правой границах каждой полосы, входящей в подрешётку, необходим обмен информацией между процессорами.

$b \bmod W = 0$ – спин находится на левой границе полосы,

$(b + 1) \bmod W = 0$ – спин находится на правой границе полосы.

Если координата спина b удовлетворяет первому из этих условий, процессор посылает координаты соседа, находящегося слева, процессору, на подрешётке которого этот соседний спин находится. Для передачи координат спина с целью упрощения локальные координаты снова переводятся в глобальные:

$i = a$,

$j = (b \, div W)PW + pW + b \bmod$, где p – номер процессора.

Параллельный алгоритм Вольфа [8] позволит моделировать решётки большого размера, что, как следствие, снизит эффекты конечных размеров моделируемой системы спинов на критические явления.

Литература

1. Вакилов А.Н., Прудников В.В. Компьютерное моделирование критической динамики разбавленных магнетиков // Письма в ЖЭТФ. – 1992. – Т.55, №12. – С. 709–712.
2. Прудников В.В., Вакилов А.Н. Компьютерное моделирование критической динамики разбавленных магнетиков // ЖЭТФ. – 1993. – Т.103, №3. – С. 962–969.
3. Марков О.Н., Прудников В.В. Компьютерное моделирование критической динамики неупорядоченных двумерных изинговских систем // Письма в ЖЭТФ. – 1994. – Т.60, №1. – С. 24–29.
4. Prudnikov V.V., Markov O.N. Critical dynamics of disordered two-dimensional Ising systems: a Monte Carlo study // J. Phys. A: Math. Gen. – 1995. – Vol.2. – P. 47–49.
5. Prudnikov V.V., Markov O.N. Monte Carlo renormalization group of dilute 2D Ising dynamics // Europhys. Lett. – 1995. – Vol.29, №3. – P. 245–250.
6. Прудников В.В., Марков О.Н., Осинцев Е.В. Особенности фазовых превращений в неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга // ЖЭТФ. – 1999. – Т.116, №3. – С. 953–961.
7. Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990.
8. Bae S. and Ko S.H. Parallel Wolff Cluster Algorithms. School of Computer Science, Syracuse University, Syracuse, NY 13244. U.S.A., 1994.