



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Иванов А.В.

Расчет статистической
суммы и аппроксимация
многочастичных функций
распределения для
магнетиков в модели
Гейзенберга

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Иванов А.В. Расчет статистической суммы и аппроксимация многочастичных функций распределения для магнетиков в модели Гейзенберга // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 104. 12 с. doi:[10.20948/prepr-2019-104](https://doi.org/10.20948/prepr-2019-104)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-104>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.КЕЛДЫША
Российской академии наук**

А.В. Иванов

**Расчет статистической суммы и
аппроксимация многочастичных функций
распределения для магнетиков в модели
Гейзенберга**

Москва — 2019

Иванов А.В.

e-mail: aivanov@keldysh.ru

Расчет статистической суммы и аппроксимация многочастичных функций распределения для магнетиков в модели Гейзенберга

В данной работе построен прямой полуаналитический метод вычисления статистической суммы для магнетиков в рамках модели Гейзенберга, основанный на аппроксимации экспонентой однократного интеграла по сфере. Результаты расчетов хорошо совпадают с результатами моделирования «атом-в-атом», по крайней мере для высоких температур, при этом алгоритмическая сложность метода не хуже чем $O(N^{7/3})$.

Ключевые слова: Статистическая сумма, многочастичные функции распределения, моделирование магнетиков

Anton Valeryevich Ivanov

e-mail: aivanov@keldysh.ru

Calculation of the statistical sum and approximation of multiparticle distribution functions for magnetics in the Heisenberg model

In this paper, we have constructed a direct semi-analytical method for calculating the statistical sum for magnetics in the framework of the Heisenberg model, based on approximation by the exponential of a single integral over the sphere. The calculation results are in good agreement with the atomistic simulation results at least for high temperatures, while the algorithmic complexity of the method is no worse than $O(N^{7/3})$.

Keywords: The statistical sum, multiparticle distribution functions, modeling of magnets

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 19-01-00602.

Содержание

1	Введение	3
2	Исходная физическая модель	4
3	Расчет статистической суммы	4
4	Аппроксимация многочастичных функций распределения	6
5	Программная реализация	7
6	Результаты моделирования	9
7	Заключение	11
	Список литературы	12

Введение

Расчет статистической суммы для многочастичных систем является одной из ключевых проблем статистической физики [1]. Прямой расчет требует вычисления N -кратных интегралов, и его вычислительная сложность является неприемлемой для систем хоть сколь-либо актуального размера даже для самых мощных суперкомпьютеров. Для магнетиков существенных успехов удалось добиться в рамках модели Изинга, где в некоторых случаях было получено точное аналитическое решение, однако в рамках модели Гейзенберга (при произвольной ориентации магнитного момента) ситуация значительно хуже. Как правило, можно провести расчет до установления равновесия для одной системы из 10^{6-9} магнитных моментов [2, 3], однако полноценное моделирование ансамбля таких систем требует слишком больших вычислительных ресурсов.

В данной работе построен полуаналитический метод вычисления статистической суммы для магнетика в рамках модели Гейзенберга, основанный на аппроксимации однократного аналитического интеграла по сфере в виде экспоненты. Метод хорошо работает для высоких температур, однако его применимость для низких температур и случаев сильной анизотропии вызывает вопросы.

Важным следствием построенного метода является явный вид многочастичной функции распределения, необходимый для замыкания цепочки Боголюбова для магнетиков [4].

Исходная физическая модель

Рассмотрим систему уравнений Ландау–Лифшица, описывающую эволюцию N магнитных моментов $\mathbf{m}_i(t)$, $|\mathbf{m}_i(t)| = 1$, $i \in [1, N]$, расположенных в узлах кристаллической решетки при температуре T :

$$\frac{d\mathbf{m}_i}{dt} = \gamma [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}] - \gamma\alpha [\mathbf{m}_i \times [\mathbf{m}_i \times \mathbf{H}_i^{\text{eff}}]] + 2\sqrt{\alpha T} \boldsymbol{\xi}(\mathbf{m}_i, t); \quad (1)$$

$$\mathbf{H}_i^{\text{eff}} = -\nabla_{\mathbf{m}_i} W = \sum_{j=1}^N J_{ij} \mathbf{m}_j + \mathbf{H}; \quad W = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N J_{ij} (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) - \sum_{j=1}^N \mathbf{H} \cdot \mathbf{m}_j;$$

где γ — гиромагнитное соотношение, α — параметр затухания, \mathbf{H}^{eff} — эффективное магнитное поле, W — полная энергия системы, $\nabla_{\mathbf{m}_i}$ — оператор ∇ по магнитному моменту \mathbf{m}_i , J_{ij} — симметричная матрица обменных интегралов с нулевой диагональю ($J_{ii} = 0 \forall i$), задающая обменные связи между магнитными моментами в кристаллической решетке (мы будем считать что $J_{ij} = J$ только для ближайших соседей), \mathbf{H} — внешнее поле, $\boldsymbol{\xi}(\mathbf{m}, t)$ — случайный источник с гауссовым распределением, сохраняющий модуль магнитного момента и обеспечивающий единичную дисперсию по направлениям [5].

Здесь и далее мы будем использовать безразмерную систему единиц, в которой $\gamma = 1$, а температура выражается в единицах энергии.

Расчет статистической суммы

Ансамбль систем (1) в состоянии равновесия описывается равновесной N -частичной функцией распределения

$$f^{(N)}(\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_N) = \frac{1}{Z^{(N)}} \exp \left[\beta \mathbf{H} \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i + \frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N J_{ij} \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j \right], \quad (2)$$

$$Z^{(N)} = \int_{\text{sph}} \dots \int_{\text{sph}} \exp \left[\beta \mathbf{H} \sum_{i=1}^N \mathbf{m}_i + \frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N J_{ij} \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j \right] d\mathbf{m}_1 \dots d\mathbf{m}_N, \quad (3)$$

где $\beta = 1/T$ — обратная температура в единицах энергии. Нашей целью будет построение экономичного алгоритма расчета $Z^{(N)}$, пригодного для случаев достаточно больших N , вплоть до $N \sim 10^{6 \div 9}$.

Рассмотрим однократный интеграл по сфере единичного радиуса вида

$$\int_{\text{sph}} e^{\mathbf{p} \cdot \mathbf{m}} d\mathbf{m} = 2\pi \int_0^\pi e^{p \cos \theta} \sin \theta d\theta = 2\pi \int_{-1}^1 e^{px} dx = \frac{4\pi}{p} \text{sh } p \equiv \mathcal{Z}(p) \equiv \mathcal{Z}(\mathbf{p}). \quad (4)$$

Тогда статистическую сумму (3) можно переписать как

$$\begin{aligned}
 Z^{(N)} &= \int \cdots \int_{\text{sph}} \exp \left[\beta \mathbf{H} \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{m}_i + \frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} J_{ij} \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j \right] \times \\
 &\quad \times \exp \left[\left(\beta \mathbf{H} + \beta \sum_{i=1}^{N-1} J_{iN} \mathbf{m}_i \right) \cdot \mathbf{m}_N \right] d\mathbf{m}_1 \dots d\mathbf{m}_N = \\
 &= \int \cdots \int_{\text{sph}} \exp \left[\beta \mathbf{H} \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{m}_i + \frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} J_{ij} \mathbf{m}_i \mathbf{m}_j \right] \times \\
 &\quad \times \mathcal{Z} \left(\beta \mathbf{H} + \beta \sum_{i=1}^{N-1} J_{iN} \mathbf{m}_i \right) d\mathbf{m}_1 \dots d\mathbf{m}_{N-1},
 \end{aligned}$$

последний сомножитель можно преобразовать как

$$\mathcal{Z} \left(\beta \mathbf{H} + \beta \sum_{i=1}^{N-1} J_{iN} \mathbf{m}_i \right) = \mathcal{Z} \left(\sqrt{\left(\sum_{i=0}^{N-1} a_{iN} \mathbf{m}_i \right)^2} \right) = \mathcal{Z} \left(\sqrt{\sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} a_{iN} a_{jN} x_{ij}} \right),$$

где $\mathbf{m}_0 = \mathbf{H}/H$, $x_{ij} = \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \in [-1, 1]$, $x_{ii} = 1$, $a_{iN} = \beta J_{iN}$ при $i \geq 1$ и $a_{0i} = \beta H$. Логарифмируя и раскладывая в многокомпонентный ряд Тейлора до линейных членов в окрестностях некоторой точки $x_{ij} = x_{ij}^*$, получаем:

$$\exp \ln \mathcal{Z}(\sqrt{\dots}) \approx \exp \left[\ln \mathcal{Z}(A_N^*) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=0}^{i-1} \frac{x_{ij} - x_{ij}^*}{\mathcal{Z}(A_N^*)} \cdot \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial x_{ij}} \right],$$

$$\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial x_{ij}} = 4\pi \frac{A_N^* \operatorname{ch} A_N^* - \operatorname{sh} A_N^*}{A_N^{*3}} a_{iN} a_{jN}, \quad A_N^* = \sqrt{\sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} a_{iN} a_{jN} x_{ij}^*},$$

или

$$\begin{aligned}
 \exp \ln \mathcal{Z}(\sqrt{\dots}) &\approx \exp \left[\ln \mathcal{Z}(A_N^*) - \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=0}^{i-1} b_{ij}^N x_{ij}^* \right] \exp \left[\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=0}^{i-1} b_{ij}^N x_{ij} \right], \quad (5) \\
 b_{ij}^N &= \frac{A_N^* \operatorname{ch} A_N^* - \operatorname{sh} A_N^*}{A_N^{*2} \operatorname{sh} A_N^*} a_{iN} a_{jN} = \mathcal{L}(A_N^*) \frac{a_{iN} a_{jN}}{A_N^*},
 \end{aligned}$$

где $\mathcal{L}(x) = \operatorname{cth} x - 1/x$ — функция Ланжевена.

Таким образом, исходная статистическая сумма может быть представлена в виде

$$Z^{(N)} = \int \cdots \int_{\text{sph}} \exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N a_{ij} x_{ij} \right] d\mathbf{m}_1 \dots d\mathbf{m}_N,$$

и интегрирование по каждому магнитному моменту \mathbf{m}_k сводится к домножению на константу, исключению k -х строки и столбца из матрицы a_{ij} и прибавлению элементов матрицы b_{ij}^k к оставшимся элементам матрицы a_{ij} , что сводит задачу к предыдущей. Интеграл по нескольким последним элементам может считаться численно.

Остается открытым вопрос о выборе точки x_{ij}^* . Пусть

$$A_N^2 = \left\langle \left[\sum_{i=0}^{N-1} a_{iN} \mathbf{m}_i \right]^2 \right\rangle = \sum_{i=0}^{N-1} a_{iN}^2, \quad A_{\Sigma N} = \sum_{i=0}^{N-1} a_{iN}.$$

Если x_{ij}^* лежит на главной диагонали пространства $\{x_{ij}\}$, т.е. $x_{ij}^* = x^* \forall i \neq j$, то

$$A_N^* = \sqrt{A_N^2 + \left(A_{\Sigma N}^2 - A_N^2 \right) x^*} \in [0, A_{\Sigma N}], \quad -\frac{A_N^2}{A_{\Sigma N}^2 - A_N^2} \leq x^* \leq 1.$$

Исходная матрица a_{ij} является симметричной и разреженной, симметричная матрица b_{ij}^k содержит ненулевые члены, отвечающие ненулевым членам (связям между магнитными моментами) a_{ij} на k -х строке и столбце матрицы a_{ij} , и приводит к появлению дополнительных ненулевых элементов (связей) в сокращенной матрице a_{ij} . Алгоритм может быть легко обобщен на случай произвольного кристалла, в том числе с нарушением связей, дефектами типа «случайное поле» и т.д. Серьезную сложность представляет обобщение построенного алгоритма на случай сильной анизотропии.

Аппроксимация многочастичных функций распределения

При взятии интеграла (3) по всем магнитным моментам, кроме K , мы получаем K -частичную функцию распределения вида

$$f^{(K)}(\mathbf{m}_1, \dots, \mathbf{m}_K) \sim \exp \left[\sum_{i=1}^K \rho_i \mathbf{H} \cdot \mathbf{m}_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^K \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^K \lambda_{ij} \mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j \right],$$

где ρ_i и λ_{ij} — некоторые коэффициенты. Такой вид двухчастичной функции распределения согласуется с видом двухчастичной функции распределения для цепочек фазовых осцилляторов [6] и позволяет замкнуть цепочку Боголюбова

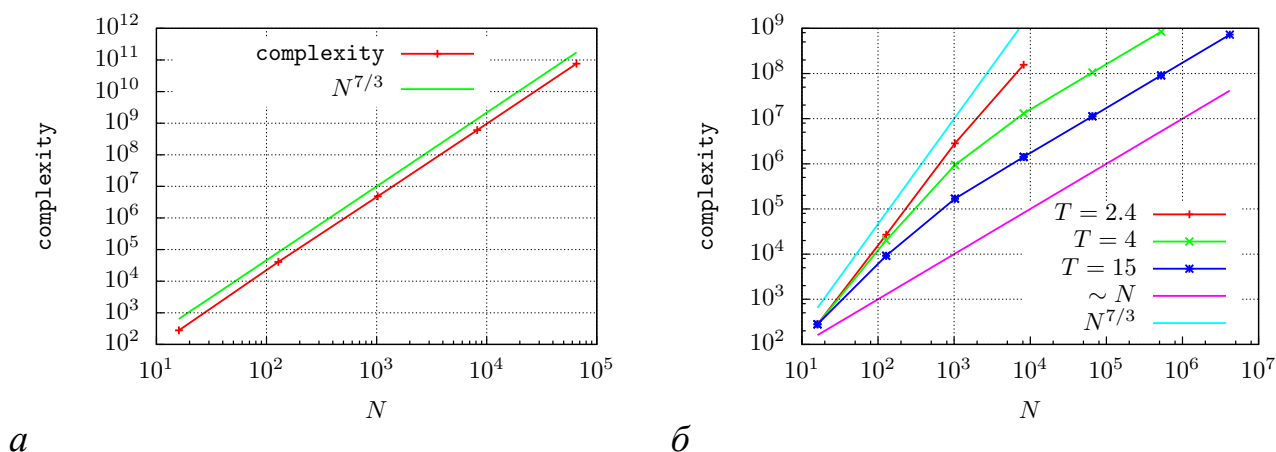


Рис. 1. Вычислительная сложность метода: без отбрасывания малых элементов матрицы (а), с отбрасыванием малых элементов при различных температурах (б)

для магнетиков [4], что после перехода к приближению сплошной среды и аппроксимации одночастичной функции распределения позволяет, в свою очередь, уточнить вид уравнения Ландау–Лифшица–Блоха для эволюции распределения намагниченности [7] с учетом корреляций между ближайшими соседями.

Программная реализация

Построенный метод был реализован в виде кода на языках C++-11 и Python для OS Linux с использованием библиотеки aiwlib [8, 9]. Распараллеливание не применялось, однако оно легко может быть реализовано различными способами при условии использования структуры данных, исключающей гонку данных.

Вычислительная сложность оценивалась как суммарное число обработанных связей (элементов матрицы a_{ij}) и составила $O(N^{7/3})$, однако при исключении добавок к связям b_{ij} с малыми значениями она может быть уменьшена до $O(N)$ в случае высоких температур без потери точности итогового результата, рис. 1.

Индексация магнитных моментов была организована на основе Z -кривой Мортонна, для расчетов был выбран кубический фрагмент объемно центрированной кристаллической (ОЦК) решетки (рис. 2 а) со стороной 2^R , итого $N = 2^{3R+1}$ частиц, граничные условия периодические. Поскольку каждая ячейка ОЦК-решетки содержит два магнитных момента, на первом проходе интегрировались все магнитные моменты второй подрешетки (рис. 2 б, в). Дальнейший обход был реализован рекурсивно, на каждой итерации K интегрировалась внутренность кубов со стороной $2^K - 1$ узлов, разделенных «стенками» толщиной в один узел (рис. 2 г, д, е). Среди всех рассмотренных вариантов такой способ обхода обеспечивал максимальную производительность.

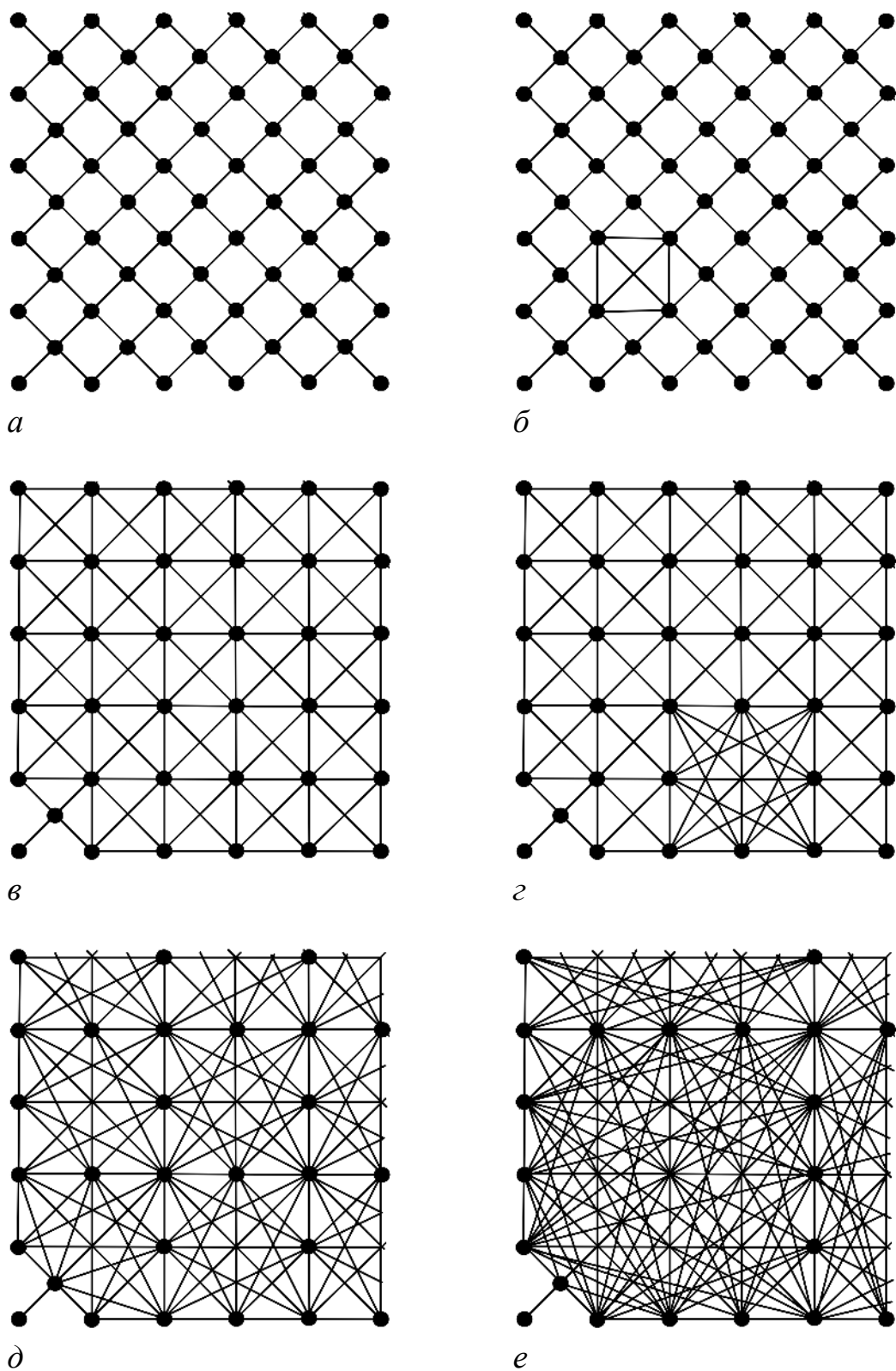


Рис. 2. Последовательность обработки узлов кристаллической решетки, линиями показаны связи между атомами

Два последних расположенных рядом магнитных момента интегрировались по сфере численно напрямую. Взаимодействие между этими моментами включало косвенные корреляции и позволяло вычислить энергию системы, а при наличии внешнего поля взаимодействие с полем позволяло вычислить среднюю намагниченность.

Результаты моделирования

Результаты расчетов статистической суммы $\ln Z$ и энергии W на основе построенного метода от числа частиц N для различных температур T приведены на рисунке 3. Хорошо видно, что начиная с $N \approx 10^3$ наступает насыщение. Для всех расчетов эмпирически бралась точка разложения $x^* = 0.125$.

Значения статистической суммы и энергии позволяют вычислить энтропию системы как

$$S = \ln Z + \frac{W}{T}.$$

Эти параметры, в расчете на одну частицу, сравнивались с результатами моделирования «атом-в-атом» (1) куба магнитных моментов со стороной 64 ячейки (524288 частицы).

При атомистическом моделировании энтропия рассчитывалась на основе второго начала термодинамики

$$dS = \frac{dW}{T},$$

при этом, поскольку энтропия является термодинамическим потенциалом и определена с точностью до константы, то при больших температурах $T = 15J$ считалось, что энтропия отвечает постоянной функции распределения $f^{(N)} = 1/(4\pi)^N$ и в расчете на одну частицу равна $\ln 4\pi \approx 2.53$. Из рисунка 4 видно, что в отсутствие внешнего поля совпадение энергии весьма хорошее. Энтропия, посчитанная на основе построенного метода, оказывается больше энтропии, полученной из атомистического моделирования, на 0.017 безразмерных единицы (около 0.7%) — видимо, речь идет о систематической ошибке в реализации построенного метода или в самом методе.

К сожалению, текущая реализация метода в отсутствие внешнего поля не позволяет продвинуться в область температур ниже $2.13J$, что отвечает температуре фазового перехода $T_c \approx 2.12J$. Пока неясно, связано ли это с особенностями реализации или является принципиальным ограничением метода. Надо отметить, что с точки зрения ансамбля моделируемых систем ферромагнитное состояние в отсутствие внешнего поля является вырожденным (средняя намагниченность может быть ориентирована произвольным образом), поэтому, возможно, сама постановка задачи в этом случае не вполне корректна.

При внешнем поле $H = 0.25J$ (для ОЦК решетки максимально возможное обменное поле равно $8J$), для моделирования «атом-в-атом» нет результатов

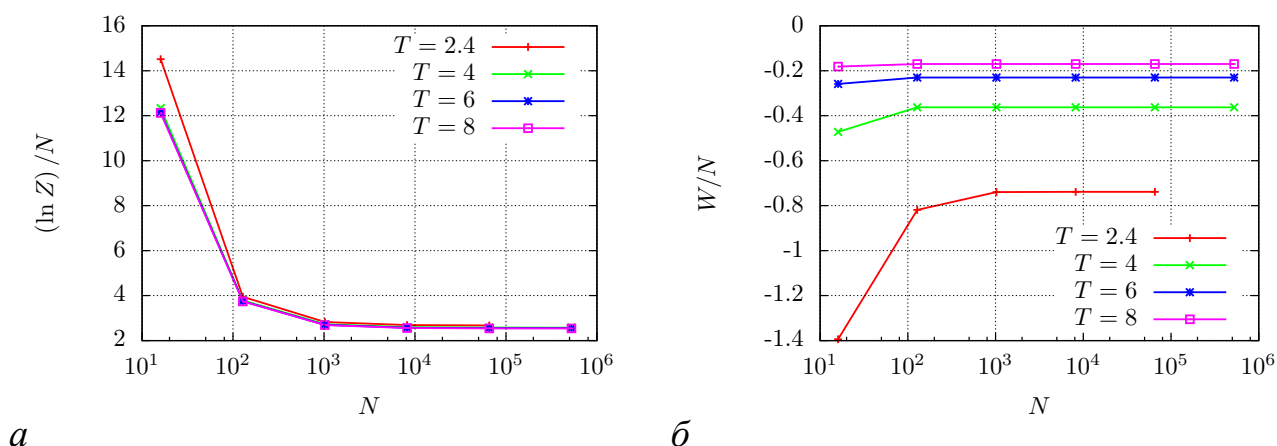


Рис. 3. Зависимости логарифма статистической суммы $\ln Z$ и энергии системы W в расчете на одну частицу от числа частиц N для различных температур T

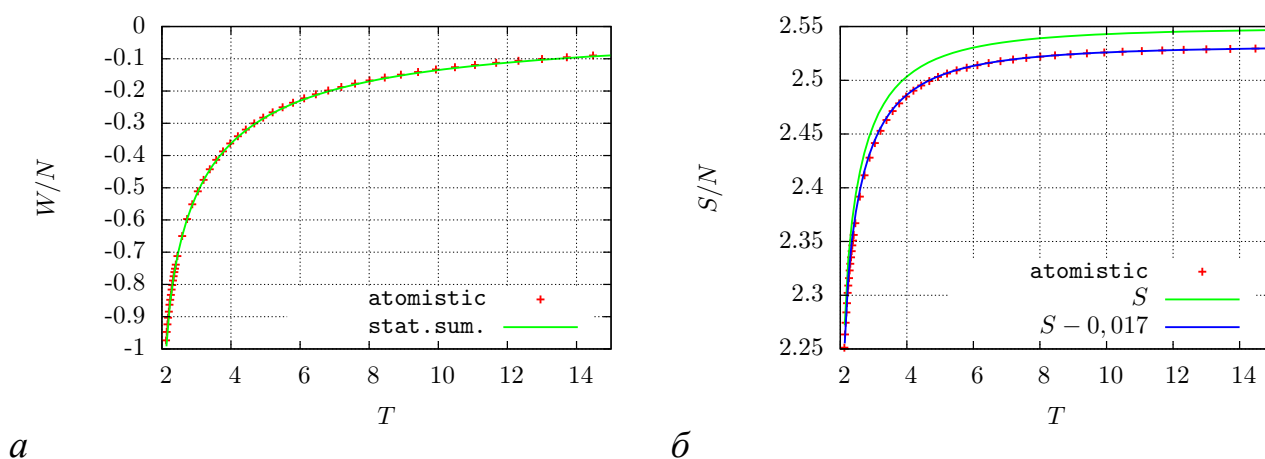


Рис. 4. Сравнение зависимостей энергии W и энтропии S от температуры T , полученных на основе построенного метода ($N = 8196$ частиц), с результатами атомистического моделирования в отсутствие внешнего поля $H = 0$

расчета энтропии (поскольку неизвестно даже, как оценивать значение энтропии при больших температурах), зато есть значения средней намагниченности $\langle m \rangle$.

Для хорошего совпадения с результатами моделирования «атом-в-атом» необходимо корректировать точку разложения в зависимости от температуры

$$x^* \approx 1.455 - 0.725 \cdot T + 0.09 \cdot T^2,$$

эта кривая является эмпирической и зависит от величины внешнего поля. Такой подход обеспечивает совпадение с хорошей точностью для значений энергии, значения средней намагниченности несколько расходятся (рис. 5). Текущая реализация метода в отсутствие внешнего поля не позволяет продвинуться в

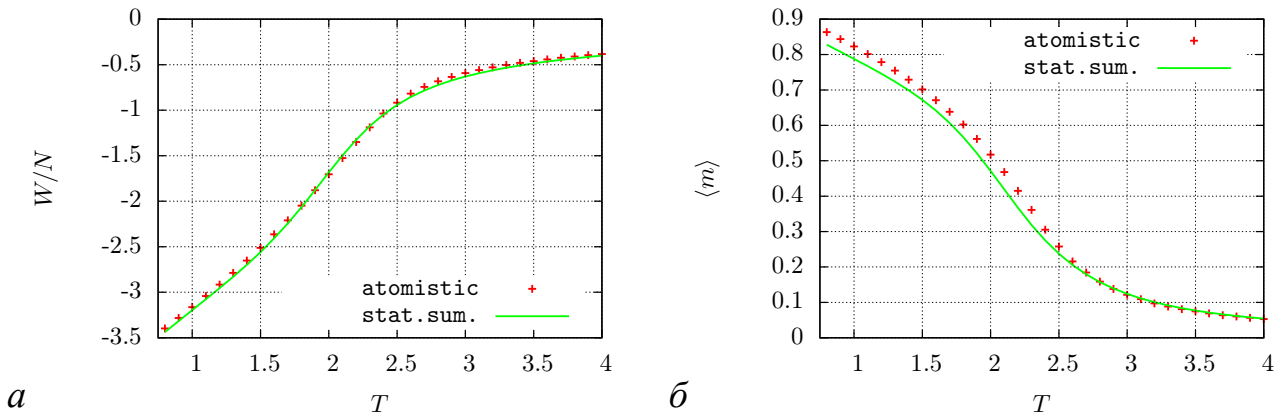


Рис. 5. Сравнение зависимостей энергии W и намагненности $\langle m \rangle$ от температуры T , полученных на основе построенного метода ($N = 8196$ частиц), с результатами атомистического моделирования при внешнем поле $H = 0.25J$

область температур ниже $0.8J$, что, видимо, связано с тем что линейная аппроксимация (5) при малых температурах оказывается недостаточно точной. Тем не менее температура $T = 0.8J$ уже отвечает ферромагнитной фазе и является актуальным значением для решения ряда задач, поскольку соответствует комнатной температуре для многих ферромагнетиков.

Заключение

Построенный в данной работе метод вычисления статистической суммы имеет ряд недостатков. Очевидны проблемы с точностью разложения в ряд Тейлора до линейного члена в области низких температур, остается открытым вопрос о выборе точки, в окрестностях которой проводится разложение, неясно, как учитывать анизотропию, играющую в ряде случаев значительную роль.

Тем не менее, построенный метод позволяет проводить расчеты для достаточно больших систем — алгоритмическая сложность $O(N^{7/3})$ уже допускает расчеты для систем из $10^{4\div 5}$ частиц на персональных компьютерах, при этом сложность может быть уменьшена за счет исключения слабых связей между атомами. Метод позволяет проводить эффективное распараллеливание и задействовать графические ускорители. Даже предварительные расчеты на персональных компьютере хорошо согласуются с результатами моделирования магнетиков «атом-в-атом».

Построенный метод позволяет получить вид многочастичной функции распределения, что играет ключевую роль для замыкания цепочки Боголюбова и построения системы уравнений типа Ландау–Лифшица–Блоха, описывающих эволюцию намагненности с учетом корреляций между ближайшими соседями.

Список литературы

- [1] Фейнман Р. Статистическая механика. Курс лекций. — 1975.
- [2] Зипунова Е.В., Иванов А.В. Выбор оптимальной численной схемы для моделирования системы уравнений Ландау–Лифшица с учетом температурных флуктуаций // Математическое моделирование. — 2014. — Т. 26, № 2. — С. 33–49.
- [3] Зипунова Е.В., Иванов А.В. Две новые численные схемы для моделирования магнетиков // Препринты ИПМ им.М.В.Келдыша. — 2017. — № 140. — С. 18.
- [4] Khilkov S.A., Ivanov A.V., Zipunova E.V. Numerical simulation of strongly nonequilibrium processes in magnets based on physical kinetics equations // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2016. — Vol. 8, no. 6. — P. 703–708.
- [5] Иванов А.В. Кинетическое моделирование динамики магнетиков // Математическое моделирование. — 2007. — Т. 19, № 10. — С. 89–104.
- [6] Иванов А.В., Хилков С.А. Бета-аппроксимация двухчастичной функции распределения при описании цепочек фазовых осцилляторов // Препринты ИПМ им.М.В.Келдыша. — 2017. — № 87. — С. 19.
- [7] Garanin D. A. Fokker-Planck and Landau-Lifshitz-Bloch equations for classical ferromagnets // Phys. Rev. B. — 1997. — Vol. 55. — P. 3050.
- [8] Иванов А.В. Использование библиотеки aiwlib на примере численного моделирования стохастического резонанса // Препринты ИПМ им.М.В.Келдыша. — 2018. — № 89. — С. 30.
- [9] Иванов А.В., Хилков С.А. Библиотека aiwlib — инструмент для создания приложений численного моделирования, визуализации и анализа результатов // Научная визуализация. — 2018. — Т. 10, № 1. — С. 110–127.