# PRÍRODOVEDECKÁ FAKULTA UPJŠ V KOŠICIACH Katedra teoretickej fyziky a astrofyziky, Ústav fyzikálnych vied

# DIPLOMOVÁ PRÁCA

Metóda Monte Carlo pri konštrukcii veľkoškálových hamiltoniánov vybraných spinových systémov

Košice, apríl 2006

Daniel Reitzner Školiteľ: doc. RNDr. Denis Horváth, CSc.

## Abstrakt

Práca je zameraná na použitie metódy multikanonické Monte Carlo na problém z oblasti magnetických nanoštruktúr, kde dochádza ku kvázi-narušeniu ergodicity. Študovaný je klasický spinový vektorový model magnetickej nanočastice. Dôležitým aspektom prístupu je konštrukcia vhodného parametra usporiadania — vorticity — na základe numerického štúdia základného stavu nanočastice, ktorý neumožňuje použitie magnetizácie ako parametra usporiadania. Bol vyvinutý originálny autoadaptívny spôsob určenia multikanonickej aditívnej funkcie a následne aj blokového hamiltoniánu v termínoch vorticity. Výpočty sú doplnené o nové aplikácie samoorganizovaných neurónových sietí.

## Abstract

The work concentrates on the application of multicannonical Monte Carlo method on problems concerning magnetic nanostructures, where ergodicity breaking occurs. A model of magnetic nanoparticle with classical vector spins is introduced. An important point is the construction of a suitable order parameter — vorticity — based on numerical results of the ground state of nanoparticle, which prevents us from using magnetization as an order parameter. Original autoadaptive approach to the estimation of multicannonical additive function and large-scale hamiltonian is discussed. New application of Self Organized Maps to Monte Carlo simulations is shown as well.

#### Prehlásenie:

Čestne prehlasujem, že som túto diplomovú prácu vypracoval samostatne pod odborným vedením doc. RNDr. Denisa Horvátha, CSc., vedúceho diplomovej práce, a s použitím uvedenej literatúry.

Košice, apríl 2006

#### Pod'akovanie:

Týmto by som sa chcel poďakovať vedúcemu diplomovej práce, doc. RNDr. Denisovi Horváthovi, CSc., za vedenie pri štúdiu nielen danej problematiky, za cenné pripomienky a rady a konštruktívne rozhovory.

# Obsah

| 1                          | Mag                               | gnetizr                           | nus nanoštruktúr                     | 1         |  |  |  |
|----------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|--------------------------------------|-----------|--|--|--|
| <b>2</b>                   | Cie                               | le prác                           | 2e                                   | 3         |  |  |  |
|                            | 2.1 Model magnetickej nanočastice |                                   |                                      | 3         |  |  |  |
|                            | 2.2                               | Zvoler                            | né parametre modelu                  | 4         |  |  |  |
| 3                          | Metóda Monte Carlo                |                                   |                                      |           |  |  |  |
|                            | 3.1                               | 3.1 Princípy metodiky Monte Carlo |                                      |           |  |  |  |
|                            | 3.2                               | Marko                             | ovovské procesy                      | 8         |  |  |  |
|                            |                                   | 3.2.1                             | Metropolisovo akceptačné kritérium   | 10        |  |  |  |
|                            |                                   | 3.2.2                             | Glauberovo akceptačné kritérium      | 10        |  |  |  |
|                            |                                   | 3.2.3                             | Algoritmus simulácie Monte Carlo     | 10        |  |  |  |
|                            | 3.3                               | Simulo                            | ované žíhanie                        | 11        |  |  |  |
|                            |                                   | 3.3.1                             | Algoritmus pre simulované žíhanie    | 12        |  |  |  |
|                            | 3.4                               | Termá                             | lne aktivovaná nanoštruktúra         | 12        |  |  |  |
|                            |                                   | 3.4.1                             | Vorticita ako parameter usporiadania | 15        |  |  |  |
| 4                          | Met                               | tódy ef                           | fektívneho simulovania               | <b>21</b> |  |  |  |
| 4.1 Problémy klasického MC |                                   | émy klasického MC                 | 21                                   |           |  |  |  |
|                            | 4.2                               | Niektoré urýchľujúce metódy       |                                      |           |  |  |  |
|                            |                                   | 4.2.1                             | <i>n</i> -fold way                   | 22        |  |  |  |
|                            |                                   | 4.2.2                             | Algoritmus Swendsena-Wanga           | 22        |  |  |  |
|                            |                                   | 4.2.3                             | Histogramová technika                | 23        |  |  |  |
|                            | 4.3                               | Multik                            | kanonické MC a jeho ohraničenia      | 24        |  |  |  |
|                            | 4.4                               | Autoa                             | daptivita v určovaní $\eta(v)$       | 26        |  |  |  |
|                            | 4.5                               | Výslec                            | łky pre uvedený model                | 27        |  |  |  |
|                            |                                   | 4.5.1                             | Prepólovanie vorticity, ART sieť     | 32        |  |  |  |
|                            |                                   | 4.5.2                             | Perspektívy prístupu                 | 32        |  |  |  |
| <b>5</b>                   | Záver 37                          |                                   |                                      |           |  |  |  |
|                            | 5.1                               | Nedor                             | iešené problémy                      | 38        |  |  |  |

| D            | Dodatky                  |  |    |  |  |
|--------------|--------------------------|--|----|--|--|
| $\mathbf{A}$ | Niektoré dôležité vzťahy |  |    |  |  |
|              | A.1                      | Elementárna zmena energie                          | 39 |  |  |
|              | A.2                      | Energia v termínoch lokálnych polí pre dvojčasticu | 40 |  |  |
|              | A.3                      | Multikanonickej schéma stredovania                 | 41 |  |  |
| в            | Prei                     | relaxačná technika                                 |    |  |  |
|              | B.1                      | Efektívneho pole                                   | 43 |  |  |
| С            | SON                      | iete 44  |    |  |  |
|              | C.1                      | Algoritmus pre SOM sieť uvedeného modelu           | 46 |  |  |
|              | C.2                      | Ukážka použitia SOM siete.                         | 47 |  |  |
| Re           | Referencie               |  |    |  |  |

## 1 Magnetizmus nanoštruktúr

Vývoj v oblasti magnetických materiálov využiteľných pri konštrukcii vysokohustotných záznamových médií alebo nových typov senzorov, sa v poslednom čase začína orientovať na supermriežky magnetických nanočastíc (napr. [1]). Takéto supermriežky je možné s veľkou presnosťou pripravovať epitaxnými a litografickými metódami [2]. Tieto metódy dokážu vytvoriť supermriežky prakticky ľubovoľného tvaru [3]. Výhoda supermriežok magnetických nanočastíc spočíva aj vo vysokej koercitivite, nízkom šume, ako aj v ich fundamentálnych symetrických vlastnostiach. Práve preto je veľmi dôležité skúmať magnetické usporiadania supermriežok, ktoré vznikajú dôsledkom súperenia interakcií medzi časticami a vnútri častíc. Koncepcia uniformne polarizovanej nanočastice, skúmaná v [4] alebo aj v [5], je však použiteľná len pre častice vzájomne oddelené relatívne veľkými vzdialenosťami.

Nehomogenita polarizácie v rámci jednej nanočastice je spôsobená konkurenciou medzi magnetostatickou interakciou, výmennou interakciou a anizotropiou. Analytické modely zahŕňajúce nehomogenitu v polarizácii boli navrhnuté v [6]. Výpočtová náročnosť však s komplexnosťou modelu značne narastá a preto je nutné používať numerické prístupy. Pri týchto simuláciách je nutné dostatočne husté delenie nanočastíc na segmenty. Zvyčajne sa využíva rozklad na interagujúce dipóly, zrnká, feromagnetické kocky, alebo iné elementy. Optimálne delenie je pritom dané minimálnou relevantnou dĺžkou v častici determinovanou napr. dosahom výmennej interakcie, šírkou magnetickej steny a pod. Pre feromagnetické látky sa táto veľkosť pohybuje na úrovni nanometra [7] a tak pre popis plošnej častice s porovnateľnou veľkosťou je potrebných približne 10<sup>6</sup> objemových elementov, avšak pre kvalitatívny, nie kvantitatívny, popis je možné tento počet zredukovať.

Vzhľadom na predchádzajúce je štúdium magnetických vlastností malej magnetickej častice dôležité. Výskum sa obzvlášť sústreďuje na materiály s vhodnými vlastnosťami pre uchovávanie informácií. Takými sú napríklad častice s vortexovým základným stavom, ktorý je charakteristický svojim (takmer) nulovým celkovým magnetickým momentom. Stabilita takýchto štruktúr je skúmaná napríklad v [8], [9], alebo [10], kde je sledovaný pinning vortexovej štruktúry. Vortexové konfigurácie sa tiež často objavujú pri premagnetizačných procesoch ([11], alebo [12]), aj preto sú častým objektom štúdia. Pokrok pri numerických Monte Carlo simuláciách bol dosiahnutý vznikom a rozvojom mnohých urýchľujúcich techník, medzi inými napr. *n*-fold way [13], algoritmus Swendsena-Wanga [14], histogramová technika [15], entropické vzorkovanie [16], alebo Landauov prístup na výpočet hustoty stavov [17]. Medzi tieto techniky patrí aj multikanonické Monte Carlo po prvýkrát implementované Bergom [18]. Metóda bola ďalej rozvíjaná napríklad Hansmannom [19]. O podobné vylepšenie tejto metódy sme sa v tejto práci pokúsili aj my.

## 2 Ciele práce

V tejto práci sme sa zamerali na štúdium magnetických vlastností jednej magnetickej nanočastice s cieľom efektívnejšieho simulovania v prípade kvázi-narušenia ergodicity. Zistené bolo, že základným stavom skúmanej nanočastice je vortexová štruktúra. Na takejto častici sme sledovali procesy, pri ktorých dochádza k zmene vortexovej štruktúry na opačne orientovanú. Pre dosiahnutie tohoto cieľa sme okrem klasickej Monte Carlo simulácie volili výhody použitia multikanonickej Monte Carlo simulácie, ktorá bola doplnená o autoadaptívne určenie multikanonického hamiltoniánu  $\tilde{\mathcal{H}}$ . Výsledky simulácií nám za pomoci SOM siete poskytli reprezentatívne určenie systému s prechodovými pravdepodobnosťami medzi jednotlivými stavmi. Táto reprezentácia tak môže slúžiť ako čiastočná náhrada veľkoškálového hamiltoniánu použiteľného pri ďalších simuláciách.

#### 2.1 Model magnetickej nanočastice

Študovaná magnetická nanočastica bola uložená na nemagnetickom substráte pričom bola delená na kubické elementy, z ktorých každému prislúchal jeden efektívny spin  $\mathbf{S}_i$ . Tento systém bol študovaný za použitia klasického Heisenbergovho hamiltoniánu, ktorý, podobne ako v [20], mal tvar

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + D \sum_{\langle i,k \rangle} \left[ \frac{r_{ik}^2 \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_k - 3(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{ik})(\mathbf{S}_k \cdot \mathbf{r}_{ik})}{r_{ik}^5} \right] - A \sum_i (S_i^z)^2 - \sum_i \mathbf{H}^{\text{ext}} \cdot \mathbf{S}_i,$$
(2.1)

kde  $\mathbf{S}_i$  sú efektívne (nasýtené) spiny<sup>1</sup> s normovaním  $|\mathbf{S}_i| = 1$ ,  $\mathbf{r}_{ik}$  je vektor smerujúci od *i*-teho spinu ku *k*-temu a  $r_{ik}$  je jeho veľkosť. Prvý člen vo vzťahu (2.1) prislúcha výmennej interakcii — sumácia je cez všetkých najbližších susedov, J je výmenný integrál so zarátaným normovaním pre spiny  $\mathbf{S}_i$  tak, aby ich veľkosť bola 1. Druhý člen prislúcha ďalekodosahovej magnetostatickej interakcii — sumácia je cez všetky páry spinov. Tretí člen vzťahu (2.1) zodpovedá jednoosovej anizotropii v smere osi z a posledný člen popisuje interakciu systému s vonkajším poľom  $\mathbf{H}^{\text{ext}}$ . Voľba členov vystupujúcich v tomto

 $<sup>^1 {\</sup>rm \check{D}alej}$  budeme pod pojmom spin rozumieť efektívny spin.



**Obrázok** 1: Skúmaný model magnetickej nanočastice uloženej na nemagnetickom substráte s naznačeným delením na spinové elementy. Častica je trojrozmerná s delením do dvoch vrstiev so  $6 \times 6$  spinmi v každej vrstve.

hamiltoniáne môže byť aj iná — vo výmennej interakcii nemusíme vyberať len susedné spiny, ale do úvahy môžu prichádzať aj druhé najbližšie spiny, kedy parameter J vchádza pod sumu a závisí od vybranej dvojice spinov i, j. Podobne pod sumu môžu vchádzať aj parametre A a D — pri parametri A určujúcom veľkosť anizotropie, môžeme naprí-klad rozlišovať medzi anizotropiou na povrchu častice, na hrane, v rohu, v objeme a pod. Takéto modely sú študované napr. v [21].

#### 2.2 Zvolené parametre modelu

Pre naše simulácie sme zvolili nanočasticu, ktorá pozostávala zo N = 72 objemových elementov. Tie boli charakterizované vlastným efektívnym spinom  $\mathbf{S}_i$ , ktorého veľkosť bola konštantná — jednotková. Počet objemových elementov vychádza z delenia nanočastice na  $6 \times 6 \times 2$  kubických elementov (viď. obr. 1) — voľbou boli teda trojrozmerné častice. Voľba parametrov vystupujúcich v hamiltoniáne (2.1) pritom bola nasledovná:

- *J* = 1.0,
- *D* = 0.003,
- *A* = 0.1.

Tieto parametre boli zvolené s ohľadom na základný stav nanočastice, ktorým bola vortexová štruktúra (viď. obr. 4). Tá má vhodné vlastnosti pre využitie v praxi a je aj experimentálne realizovateľná. Bližší fyzikálny zmysel sme parametrom nedávali, keďže hlavným cieľom práce nebolo štúdium materiálových vlastností ale metóda použiteľná pri konštrukcii veľkoškálových hamiltoniánov. Hamiltonián (2.1) bol kvôli jednoduchej implementácii do simulácie zapísaný v tvare

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i} \mathbf{S}_{i} \cdot \mathbf{H}_{i}^{\text{loc}} - A \sum_{i} (S_{i}^{z})^{2} - \sum_{i} \mathbf{H}^{\text{ext}} \cdot \mathbf{S}_{i}, \qquad (2.2)$$

kde

$$\mathbf{H}_{i}^{\text{loc}} = J \sum_{j(i)} \mathbf{S}_{j} - D \sum_{k \neq i} \frac{\mathbf{S}_{k} r_{ik}^{2} - 3 \mathbf{r}_{ik} (\mathbf{S}_{k} \cdot \mathbf{r}_{ik})}{r_{ik}^{5}}$$
(2.3)

a  $\sum_{j(i)}$  znamená sumáciu cez najbližšie spiny  $\mathbf{S}_j$  k spinu  $\mathbf{S}_i$ . Zmena energie vystupujúca v akceptačných kritériách (3.17) alebo (3.19) pri zmene spinu  $\mathbf{S}_{\alpha} \longleftarrow \mathbf{S}'_{\alpha}$  v Monte Carlo simulácii je daná nasledovným vzťahom

$$\Delta \mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{x}') - \mathcal{H}(\mathbf{x}) = -(\mathbf{S}'_{\alpha} - \mathbf{S}_{\alpha}) \cdot (\mathbf{H}^{\text{loc}}_{\alpha} + \mathbf{H}^{\text{ext}}) - A[(S'^{z}_{\alpha})^{2} - (S^{z}_{\alpha})^{2}], \qquad (2.4)$$

kde veličiny s čiarkou  $(\prime)$  sú tie, ktoré získame zmenou stavu. Odvodenie (2.4) je podrobnejšie spracované v dodatku A.1.

V našom prípade sme v Monte Carlo simulácii volili zmeny spinu z uniformného rozdelenia  $\Delta S^{\nu}_{\alpha} \in \mathcal{U}(-0.3, 0.3), \ \nu = x, y, z$ . Tento krok bol vykonávaný s 95% pravdepodobnosťou. Zvyšných 5% tvorili preklopenia vybraného spinu spinu  $\mathbf{S}'_{\alpha} = -\mathbf{S}_{\alpha}$ .

## 3 Metóda Monte Carlo

#### 3.1 Princípy metodiky Monte Carlo

Monte Carlo je stochastická numerická simulačná metóda, ktorá pri výpočte náhodné čísla. Pravdepodobnostný charakter tejto metódy môže byť využitý aj pri získavaní veličín, ktorých hodnota nie je definovaná stochasticky. Ako príklad môže slúžiť výpočet viacrozmerných integrálov — metóda Monte Carlo v prípade integrálov v dimenzii  $d \ge 3$  je už efektívnejšia než klasické integračné schémy. Ďalším príkladom výpočtu veličiny neštatistického charakteru je známy experiment nazvaný *Buffonova ihla* — je to jedna z najstarších aplikácií metódy Monte Carlo<sup>2</sup>. Pri tomto experimente sa náhodným hádzaním ihiel na riadkovaný papier dá určiť približná hodnota čísla  $\pi$ .

Často sa v praxi metóda Monte Carlo využíva aj na získavanie štatistických dát, resp. pri simuláciách náhodných procesov, akými sú napr. simulácie chemických reakcií [22], simulácie experimentov subjadrovej fyziky, alebo simulácie v teórii tuhých látok. Takto získané dáta väčšinou slúžia ako podklad pre výpočet stredných hodnôt rôznych veličín. Motivácia pri ich získavaní spočíva v aplikovaní ergodickej hypotézy a dôležitostného vzorkovania (*importance sampling*), bez ktorých by metóda Monte Carlo nemohla byť úspešne používaná v praxi. Pre hlbšie pochopenie tohoto prístupu je potrebné definovať niekoľko pojmov. Časová stredná hodnota veličiny Q je definovaná vzťahom

$$\bar{Q}(t_0, t) = \frac{1}{t - t_0} \int_{t_0}^t Q(\mathbf{x}(\tau)) d\tau,$$
(3.1)

kde  $t_0$  je počiatočný čas merania, t je konečný čas pri meraní a  $\mathbf{x}(\tau)$  je trajektória systému vo fázovom priestore  $\Omega$  daná mikroskopickou dynamikou. Takéto stredné hodnoty sú výsledkami experimentov, avšak pri simulácii, keď nás dynamika systému nezaujíma, stredná hodnota môže byť definovaná aj inak, ako to hneď ukážeme.

Kanonickým súborom, ktorý využívame pri našich výpočtoch, nazývame súbor s hus-

 $<sup>^{2}</sup>$ V tom čase (19. st.) základy metódy neboli ešte rozpracované a tento experiment bol považovaný skôr za matematickú kuriozitu.

totou rozdelenia

$$\rho(\mathcal{H}(\mathbf{x})) = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{x})},\tag{3.2}$$

kde  $\mathcal{H}(\mathbf{x})$  je energia systému v stave (bode fázového priestoru)  $\mathbf{x}, \beta = \frac{1}{k_B T}, k_B$  je Boltzmannova konštanta, T je teplota a  $\mathcal{Z}$  je štatistická suma daná vzťahom

$$\mathcal{Z} = \int_{\Omega} e^{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{x})} d\mathbf{x}.$$
(3.3)

Všimnime si, že hustota rozdelenia nezávisí priamo od stavu, v ktorom sa systém nachádza, ale závisí len na energii tohoto stavu. Pre takto definovaný súbor potom strednú hodnotu veličiny Q určujeme pomocou vzťahu

$$\langle Q \rangle = \int_{\Omega} Q(\mathbf{x}) \rho(\mathcal{H}(\mathbf{x})) d\mathbf{x}.$$
 (3.4)

Ergodická hypotéza tvrdí, že časová stredná hodnota veličiny Q v limite  $t \to \infty$  je rovná strednej hodnote cez definovaný súbor, čo sa pomocou predchádzajúcich vzťahov zapíše

$$\langle Q \rangle = \lim_{t \to \infty} \bar{Q}(t_0, t). \tag{3.5}$$

Na základe tohoto vzťahu môžeme tvrdiť, že v rámci istej nepresnosti sú si časová stredná hodnota a stredná hodnota cez súbor totožné, čo je obzvlášť výhodné pri numerických simuláciách, kedy nepotrebuejeme poznať presnú dynamiku systému, ale len hustotu pravdepodobnosti výskytu jednotlivých stavov.

Motivovaní možnosťami využitia vzťahu (3.4) pri získavaní stredných hodnôt veličín v numerických simuláciách môžeme integrál v tomto vzťahu formálne prepísať na sumu stochastických veličín  $\mathbf{x}_j$  vyberaných rovnomerne (uniformne) z fázového priestoru  $\Omega$ , čím dostávame odhad strednej hodnoty veličiny Q

$$\langle Q \rangle \simeq \sum_{j=1}^{n} Q(\mathbf{x}_j) \rho(\mathcal{H}(\mathbf{x}_j)) \frac{|\Omega|}{n}.$$
 (3.6)

V tomto prípade je element fázového priestoru dx nahradený veľkosťou tohoto elementu, ktorá je daná podielom  $\frac{|\Omega|}{n}$ , n je počet vybraných elementov a  $|\Omega|$  je objem fázového

priestoru. Vzhľadom na túto skutočnosť môžeme súčin  $\rho(\mathcal{H}(\mathbf{x}_j))\frac{|\Omega|}{n}$  považovať za pravdepodobnosť  $\pi(\mathcal{H}(\mathbf{x}_j))$  výskytu stavu z blízkeho okolia stavu  $\mathbf{x}_j$  a preto píšeme

$$\langle Q \rangle \simeq \sum_{j=1}^{n} Q(\mathbf{x}_j) \pi(\mathcal{H}(\mathbf{x}_j)).$$
 (3.7)

Tento vzťah je už použiteľný pri numerickej simulácii, avšak rovnomerné prehľadávanie fázového priestoru je v prevažnej väčšine prípadov neefektívne, keďže stavy, ktoré prispievajú k strednej hodnote málo, sú obsadzované rovnako často ako stavy, ktoré k strednej hodnote prispievajú vo väčšej miere. Tento nedostatok odstraňuje tzv. *dôležitostné vzorkovanie*, kedy na základe výberu stavov  $\mathbf{x}_j$  z vhodného rozdelenia, je dosiahnuté efektívnejšie získavanie stredných hodnôt v zmysle rýchlejšej konvergencie k strednej hodnote. K dôležitostnému vzorkovaniu môžeme dospieť cez iný pohľad na vzťah (3.6). Súčin  $\rho(\mathcal{H}(\mathbf{x}_j))|\Omega|$ predstavuje hustotu stavov  $g(\mathcal{H}(\mathbf{x}_j))$  v okolí stavu  $\mathbf{x}_j$  a preto

$$\langle Q \rangle \simeq \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} Q(\mathbf{x}_j) g(\mathcal{H}(\mathbf{x}_j)).$$
 (3.8)

Ak vyberáme stavy  $\mathbf{x}_j$  z rozdelenia  $\rho(\mathcal{H}(\mathbf{x}_j))$ , v okolí každého bodu  $\mathbf{x}_j$  dostávame hustotu vybraných stavov rovnú práve  $g(\mathcal{H}(\mathbf{x}_j))$ . S ohľadom na tento fakt potom vzťah (3.8) prepisujeme do tvaru

$$\langle Q \rangle \simeq \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} Q(\mathbf{x}_j) \big|_{\text{pdf}(\mathbf{x}_j = \mathbf{x}) = \rho(\mathcal{H}(\mathbf{x}))},$$
(3.9)

kde sme naznačili, že stavy  $\mathbf{x}_j$  sú vyberané z rozdelenia  $\rho(\mathcal{H}(\mathbf{x}_j))$ . V prípade numerickej simulácie hrá tento vzťah dôležitú úlohu, keďže jeho použitím dochádza k značnému zníženiu chyby výpočtu.

#### 3.2 Markovovské procesy

Ak teraz nájdeme algoritmus, ktorý bude schopný generovať stavy z požadovaného rozdelenia, tak budeme môcť získavať odhady stredných hodnôt veličín závislých od stavu systému pomocou vzťahu (3.9). Podstata týchto algoritmov spočíva v zahrnutí *markovovských procesov* do simulačného procesu. Markovovský proces je taký proces, v ktorom prechodová pravdepodobnosť medzi dvoma stavmi závisí len od jediného predchádzajúceho stavu. Pre zmenu pravdepodobnosti výskytu stavu  $\mathbf{x}$  s časom v markovovských procesoch teda platí<sup>3</sup>

$$\frac{\mathrm{d}\pi(\mathbf{x},t)}{\mathrm{d}t} = -\sum_{\mathbf{x}'} \mathcal{T}(\mathbf{x},\mathbf{x}')\pi(\mathbf{x},t) + \sum_{\mathbf{x}'} \mathcal{T}(\mathbf{x}',\mathbf{x})\pi(\mathbf{x}',t), \qquad (3.10)$$

kde  $\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  označuje prechodovú pravdepodobnosť zo stavu  $\mathbf{x}$  do  $\mathbf{x}'$ . Časová derivácia  $\pi(\mathbf{x}, t)$  v (3.10) je nenulová len pre nerovnovážny stav, avšak v rovnovážnom stave, v ktorom skúmame náš systém, je identicky rovná nule, a teda  $\pi(\mathbf{x}, t) \equiv \pi(\mathbf{x})$ . Preto z rovnosti (3.10) dostávame podmienku globálnej rovnováhy

$$\sum_{\mathbf{x}'} \mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \pi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{x}'} \mathcal{T}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \pi(\mathbf{x}').$$
(3.11)

Určovanie artificiálnych prechodových pravdepodobností  $\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  na základe vzťahu (3.11) je možné, avšak v praxi sa kvôli svojej jednoduchosti častejšie využíva postačujúca podmienka pre splnenie (3.11) — detailná rovnováha

$$\frac{\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}{\mathcal{T}(\mathbf{x}', \mathbf{x})} = \frac{\pi(\mathbf{x}')}{\pi(\mathbf{x})}.$$
(3.12)

Prechodová pravdepodobnosť musí naviac podľa definície spĺňať podmienky

$$\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') > 0 \qquad \qquad \text{pre všetky } \mathbf{x} \text{ a } \mathbf{x}', \qquad (3.13)$$

$$\sum_{\mathbf{x}} \mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 1 \qquad \text{pre všetky } \mathbf{x}, \qquad (3.14)$$

$$\sum_{\mathbf{x}'} \mathcal{T}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) \pi(\mathbf{x}') = \pi(\mathbf{x}) \qquad \text{pre všetky } \mathbf{x}. \tag{3.15}$$

Prechodová pravdepodobnosť spĺňajúca tieto podmienky, ako aj podmienku detailnej rovnováhy (3.12) alebo globálnej rovnováhy (3.11) pri ľubovoľnom počiatočnom stave systému vedie k tomu, že markovovský proces bude produkovať stavy s požadovaného rozdelenia stavov  $\pi(\mathbf{x})$ . V ďalšom ukážeme časté voľby prechodovej pravdepodobnosti  $\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ pri konštrukcii markovovských reťazcov<sup>4</sup>.

 $<sup>^{3}</sup>$ V tomto výklade sa obmedzíme na diskrétne rozdelenie stavov **x**. Prechod medzi diskrétnym a spojitým rozložením stavov bol naznačený v predchádzajúcej kapitole — integrály a sumy v nasledujúcich vzťahov je možné medzi sebou zamieňať.

 $<sup>^4 {\</sup>rm Markovovské}$ reťazce sú postupnosti stavov získané pomocou markovovských procesov.

#### 3.2.1 Metropolisovo akceptačné kritérium

Vzťahy pre globálnu rovnováhu (3.11) a pre detailnú rovnováhu (3.12) ponúkajú veľký priestor pre voľbu prechodovej pravdepodobnosti  $\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ . Jednou z možností je voľba Metropolisa [23]

$$\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \min\left\{1, \frac{\pi(\mathbf{x}')}{\pi(\mathbf{x})}\right\}.$$
(3.16)

Táto voľba je často používaná, aj keď sa nevyhla námietkam, že nesymetria kritéria nie je fyzikálna. Tento výber sme pri väčšine našich simulácií urobili aj my. Keďže sme vzorkovali z kanonického rozdelenia, vzťah (3.16) prechádza do tvaru

$$\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \min\left\{1, e^{-\beta[\mathcal{H}(\mathbf{x}') - \mathcal{H}(\mathbf{x})]}\right\} = \min\left\{1, e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}\right\},\tag{3.17}$$

kde sme zaviedli označenie pre zmenu v energii  $\Delta \mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{x}') - \mathcal{H}(\mathbf{x}).$ 

#### 3.2.2 Glauberovo akceptačné kritérium

Glauberova voľba je, naproti Metropolisovej voľbe, fyzikálne akceptovateľnejšia a má tvar

$$\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\pi(\mathbf{x}')}{\pi(\mathbf{x}) + \pi(\mathbf{x}')}.$$
(3.18)

Pri kanonickom rozdelení nadobúda tento vzťah tvar

$$\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{\mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{x}')}}{\mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{x})} + \mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{x}')}} = \frac{1}{1 + \mathrm{e}^{\beta \Delta \mathcal{H}}}.$$
(3.19)

## 3.2.3 Algoritmus simulácie Monte Carlo s Metropolisovou voľbou a kanonickým súborom

Vstupnými parametrami algoritmu Monte Carlo simulácie s Metropolisovou voľbou prechodovej pravdepodobnosti (3.17) a s použitým kanonickým súborom sú teplota T, počet krokov algoritmu max a počiatočná konfigurácia systému **x**:  $MC(T, max, \mathbf{x})$ :

- 1. Polož počítadlo krokov  $krok \longleftarrow 0$
- 2. Zisti energiu  $\mathcal{H}(\mathbf{x})$  konfigurácie  $\mathbf{x}$
- Náhodne vyber stav x a zmeň ho (o malú hodnotu) čím dostaneš pokusný stav x'
- 4. Zisti energiu pokusnej konfigurácie  $\mathcal{H}(\mathbf{x}')$  so zmeneným elementom
- 5. Ak je  $\mathcal{H}(\mathbf{x}') \leq \mathcal{H}(\mathbf{x})$  prijmi stav  $\mathbf{x}'$ , t.j.  $\mathbf{x} \longleftarrow \mathbf{x}'$ , inak urob nasledovné
  - (a) Vypočítaj hodnotu prechodovej pravdepodobnosti podľa (3.17), teda $^5$

$$\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(\mathbf{x}') - \mathcal{H}(\mathbf{x})}{T}\right)$$

- (b) Zvoľ náhodné číslo q z uniformného rozdelenia na intervale (0;1)
- (c) Ak  $q \leq \mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ , nový stav prijmi, t.j.  $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x}'$ , inak stav nemeň
- 6. Zahrň stav systému x do štatistiky
- 7. Zmeň stav počítadla  $krok \longleftarrow krok + 1$
- 8. Ak je krok = max výpočet ukonči, inak pokračuj krokom 2.

#### 3.3 Simulované žíhanie

Analógia s klasickým žíhaním viedla koncom 80-tych rokov Kirkpatricka, Gelatta a Vecchiho [24] a nezávisle od nich Černého [25] k vytvoreniu nového simulačného algoritmu na hľadanie globálneho minima. Pomalým ochladzovaním telesa napomáhame tomu, aby prešlo do konfigurácie s minimálnou energiou — do základného stavu, čím sa odstraňujú metastabilné stavy, do ktorých sa systém mohol dostať.

Metóda simulovaného žíhania tak umožňuje optimalizovať ľubovoľný problém, u ktorého vieme určiť mieru vhodnosti jednotlivých stavov (analóg energie) — pomalým znižovaním teploty v Monte Carlo simulácii<sup>6</sup> bude systém prechádzať do stavu s minimálnou energiou. Teplota sa zvykne znižovať exponenciálne s časom — takto sme pri simulácii postupovali aj my.

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Pri simulácii môžeme položiť  $k_B = 1$  a teda  $\beta = T^{-1}$  a teplota je tak vyjadrená v jednotkách energie. <sup>6</sup>Teplota vystupuje v parametri  $\beta = 1/k_B T$  v hustote rozdelenia (3.2).

#### 3.3.1 Algoritmus pre simulované žíhanie

Parametrami vystupujúcimi v algoritme sú teraz počiatočná (dostatočne vysoká) teplota telesa  $T_0$ , multiplikatívny faktor zmeny teploty<sup>7</sup> k, konečná požadovaná teplota  $T_1$ , počet krokov max Monte Carlo simulácie pri jednej teplote a počiatočný stav systému **x**, ktorým môže byť v princípe ľubovoľná konfigurácia, keďže vysoká počiatočná teplota vytvorí v systéme neusporiadaný stav, ktorý si počiatočnú konfiguráciu "nepamätá":

 $SA(T_0,k,T_1,max,\mathbf{x})$ :

- 1. Nastav teplotu  $T \longleftarrow T_0$
- 2. Pokiaľ  $T \ge T_1$ , vykonaj:
  - (a) Spusti Monte Carlo simuláciu MC(T, max, x)
  - (b) Zmeň teplotu  $T \longleftarrow T \cdot k$

Na konci tejto simulácie dostaneme stav systému  $\mathbf{x}$  v jednom zo stabilných stavov, ktoré majú nižšiu energiu než mal pôvodny systém.

#### 3.4 Termálne aktivovaná nanoštruktúra

Model uvedený v kapitole 2.1 bol skúmaný Monte Carlo simuláciou pri rôznych teplotách. Teplotu sme volili v jednotkách energie, t.j. položili sme  $k_B = 1$ . Pre získanie úplnejšej štatistiky (z hľadiska ergodicity) sme pri každej teplote štartovali viackrát. Následným prechodom cez spektrum teplôt sme sledovali niektoré význačné štatistické veličiny, konkrétne magnetizáciu

$$M = \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}_i \right| \tag{3.20}$$

a jej strednú hodnotu  $\langle M \rangle$ , ktorá je častou voľbou parametra usporiadania. To v našom prípade nebude možné, ako uvidíme, keďže základným stavom je stav s nulovým magnetickým momentom. Ďalšími sledovanými veličinami boli merné teplo, ktoré sa podľa

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>Zvyčajná voľba je 0 « k < 1. Násobenie týmto faktorom zaručuje exponenciálny pokles teploty T s časom t, keďže platí  $k^t = e^{t \ln k}$ , a z predchádzajúceho je zrejmé, že ln k < 0.

fluktuačno-disipatívnej teorémy dá vyjadriť v tvare

$$C = \frac{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2}{k_B T^2} \tag{3.21}$$

a magnetická susceptibilita, ktorá opäť odvodená cez *fluktuačno-disipatívnu teorému*, nadobúda tvar

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T}.$$
(3.22)

Simulované závislosti sú zobrazené na obrázku 2. Stredné hodnoty boli získané stredovaním cez 100 mil. MC krokov získaných z desiatich nezávislých štartov a po 5 mil. ekvilibračných krokoch pri každom štarte. Môžeme si všimnúť, že všetky zobrazené závislosti vykazujú extrém (maximum) pri pseudokritickej teplote<sup>8</sup>  $T_C \sim 1$ . To naznačuje, keďže sa jedná o systém s konečnými rozmermi, že pri tejto teplote by sa mohlo jednať o kvalitatívny prechod v konfigurácii častice. To potvrdzujú aj výsledky ďalších simulácií, pri ktorých sme nechali vypisovať konfigurácie pri vysokých a nízkych teplotách:

- Pri vysokých teplotách dostávame neusporiadanú konfiguráciu.
- Systém simulovaný pri nízkych teplotách, štartovaný z náhodnej (neusporiadanej) konfigurácie prechádza do jedného z metastabilných stavov. Niektoré z nich sú zobrazené na obrázku 3.

Zo získaných metastabilných stavov avšak len jeden je stabilný — jeho energia je najnižšia — a tým je vortexová štruktúra (buď s kladnou, alebo so zápornou orientáciou). Tento záver môžeme urobiť na základe porovnania energií jednotlivých metastabilných stavov získaných prerelaxačným procesom (bližšie viď dodatok B). My sme ho získali simulovaným žíhaním podľa algoritmu z odseku 3.3.1 a následným prerelaxačným procesom. Získanú vortexovú konfiguráciu častice (viď. obr. 4), ako uvidíme v nasledujúcom odseku, použijeme na definíciu parametra usporiadania, ktorým by mala byť veličina, ktorá je nulová pri neusporiadanej konfigurácii a nenulová pri usporiadanej konfigurácii. Požiadavka definície vhodnejšieho parametra usporiadania vyplýva z nulovej magnetizácie častice s vortexovou konfiguráciou a teda neúčelnosti použitia magnetizácie ako parametra usporiadania.

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup>Vzhľadom na konečné rozmery systému týto teplotu nemôžeme nazývať kritickou.



**Obrázok** 2: Stredná hodnota magnetizácie  $\langle M \rangle$ , kde magnetizácia je definovaná vzťahom (3.20), vykazuje pri teplote  $T_C \sim 1$  v jednotkách energie (vyznačená bodkočiarkovane) maximum (hore), čo naznačuje, že pri tejto teplote dochádza k zmene usporiadania. Aj merné teplo (v strede) definované podľa vzťahu (3.21) a magnetická susceptibilita (dole) definovaná podľa vzťahu (3.22) naznačujú, že pri teplote  $T_C \sim$ 1 nastáva zmena v usporiadaní nanočastice. Teplota  $T_C$  je teda pseudokritická teplota — vzhľadom na konečné rozmery systému nemôžeme túto teplotu nazývať kritickou. Rozdiel v píkoch je tiež typickým dôsledkom konečného rozmeru. Pozn.: krivky v grafoch sú len vodiace čiary pre lepšiu názornosť.



**Obrázok** 3: Metastabilné stavy nanočastice získané pri teplote T = 0.1 — stabilný vortexový stav (vpravo hore) je jedným z výstupov simulácie. Ďalšie sú napr. antivortexový stav (vľavo hore), U-stav (vľavo dole) a S-stav (vpravo dole).

#### 3.4.1 Vorticita ako parameter usporiadania

Otázku voľby parametra usporiadania sme rozriešili pomocou analógie s *Edwardsovym*-*Andersonovym* parametrom usporiadania z oblasti terminológie spinových skiel, ktorý je definovaný vzťahom:

$$q_{ab} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}_i^a \cdot \mathbf{S}_i^b.$$
(3.23)

Tento vzťah kvantitatívne popisuje podobnosť dvoch stavov a a b. Parameter  $q_{ab}$  podľa vzťahu (3.23) je pre nekorelované fázy nulový, keďže v sume s rovnakou pravdepodobnosťou vystupujú aj kladné aj záporné hodnoty a preto je celá suma (pre veľké N) blízka nule. Oproti tomu v úplne korelovaných (resp. antikorelovaných) stavoch sú všetky členy rovné 1 (resp. -1) a teda  $q_{ab} = 1$  (resp.  $q_{ab} = -1$ ).

Na základe tohoto rozboru teda vidíme, že ak mieru priblíženia sa stavu k základnému stavu nášho systému — *vorticitu* definujeme vzťahom

$$v = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i^{\mathbf{R}}, \tag{3.24}$$



**Obrázok** 4: Referenčný vortexový stav magnetickej nanočastice použitý v definícii parametra usporiadania v našom systéme — vorticity podľa vzťahu (3.24), ktorý bol získany pomocou simulovaného žíhania (odsek 3.3) a následnej prerelaxácie (dodatok B).

kde N je počet spinov a  $\mathbf{S}_{i}^{\mathrm{R}}$  je *i*-ty spin referenčného vortexového stavu, dostaneme parameter spĺňajúci požiadavky kladené na parameter usporiadania. Ak teda stav systému **x** je blízky vortexovému referenčnému stavu  $\mathbf{x}^{\mathrm{R}}$ , parameter  $v \sim \pm 1$ . Pri stavoch systému **x**, ktoré sa od referenčného vortexového stavu výrazne líšia, je  $v \sim 0$ .

Ostáva teda len bližšie objasniť podstatu referenčného vortexového stavu  $\mathbf{x}^{R}$ . Ten je daný ako výsledok simulácie (viď. obr. 4), kedy sme najprv použili techniku simulovaného žíhania (viď. odsek 3.3) a minimum energie sme dosiahli pomocou prerelaxácie (viď. dodatok B). Takto nám zo simulácie získaný základný stav nanočastice slúži ako vhodný prostriedok pre určenie kvantitatívnej podobnosti ľubovoľného stavu  $\mathbf{x}$  s týmto vortexovým referenčným stavom  $\mathbf{x}^{R}$ .

Ďalšie závislosti boli získané prerelaxačnou technikou (pri 100 000 krokoch pri každej vzdialenosti) prevedenou na dvoch identických nanočasticiach pri ich rôznej vzájomnej vdialenosti<sup>9</sup> a v závislosti na vzájomnej orientácii ich vortexových konfigurácií, ktorá môže byť buď súhlasná, alebo nesúhlasná. V takomto prípade z hamiltoniánu (2.1) možno vyčleniť nielen príspevky od rôznych typov interakcií, ale aj príspevky prislúchajúce jednej častici, druhej častici, alebo príspevok  $\mathcal{H}^{int}$  prislúchajúci len medzičasticovej interakcii. Zo vzťahu (2.1) vidíme, že k medzičasticovej interakcii prispieva len člen magnetosta-

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>Vzdialenosť uvádzame v jednotkách (pozdĺžnej) veľkosti týchto nanočastíc.



**Obrázok** 5: Vplyv vzdialenosti dvoch nanočastíc na vorticitu (hore), magnetizáciu (stred) a interakčnú časť energie (dole). Vidíme, že s rastúcou vzdialenosťou častíc je ich vzájomné pôsobenie menšie. Aj pri malej vzdialenosti nanočastíc je však toto pôsobenie relatívne malé.



**Obrázok** 6: Závislosť energie dvoch častíc na ich vzdialenosti. Približovaním častíc k sebe dochádza k vzrastaniu ich vzájomnej interakcie a narušeniu ideálneho vortexového stavu. Tým dochádza aj k zmene celkovej energie nanočastíc. Pritom je zaujímavé, že energia súhlasne orientovaných vortexov je nielen nižšia než u nesúhlasne orientovaných vortexov, ale je taktiež nižšia než energia dvoch izolovaných nanočastíc v základnom stave.

tickej interakcie, keďže len on, na rozdiel od člena výmennej interakcie, môže zahŕňať spiny z oboch nanočastíc zároveň. Krátke priblíženie tejto diferenciácie v hamiltoniáne je priblížené v dodatku A.2.

Závislosti sme znázornili na obrázku 5 kde vidíme, že interakcia nanočastíc veľmi rýchlo zaniká pri ich vzďaľovaní a pri vzdialenosti častíc približne dvakrát väčšej ako je veľkosť nanočastice, je interakcia medzi nanočasticami zanedbateľná. Konfigurácie nanočastíc sa tak s narastajúcou vzdialenosťou medzi nanočasticami blížia k ideálnemu (a teda referenčnému) vortexovému stavu s nulovou magnetizáciou. Z týchto záverov je zrejmý záujem o nanočastice, ktorých základnym stavom je vortexová štruktúra. Tieto častice sa tak vďaka malému celkovému magnetickému momentu ovplyvňujú len veľmi slabo a preto sú vhodne pre uchovávanie dát v záznamových médiách.

Taktiež zaujímavá je závislosť celkovej energie dvoch nanočastíc na ich vzdialenosti (viď. obr. 6). Vidíme, že pri približovaní častíc sa ich celková energia mení, avšak pre súhlasne orientované vortexy energia klesá, čo znamená, že súhlasne orientované vortexy sú energeticky výhodnejšou konfiguráciou ako nesúhlasne orientované vortexy aj ako ideálne vortexy.



**Obrázok** 7: Závislosť hustoty rozdelenia stavov nanočastice od teploty. Pri teplote  $T_C \sim 1$  vidíme, že hustota pravdepodobnosti nadobudne namiesto jedného maxima pri v = 0 maxima dve. Znamená to, že pri teplotách pod  $T_C$  systém prechádza len do jednej vetvy a nastáva spontánne narušenie symetrie. Prechod medzi jednotlivými vetvami je veľmi nepravdepodobný.

Dalšou získanou závislosťou, ktorú sme simulovali už s prihliadnutím na parameter usporiadania — vorticitu v, je zmena hustoty pravdepodobnosti výskytu stavov na teplote (viď. obr. 7). Pri každej simulovanej teplote sme systém štartovali už z vortexovej konfigurácie, preto ekvilibračný čas nebol potrebný. Rozdeľovacia funkcia bola získaná z 50 mil. MC krokov, pričom počas simulácie bola symetrizovaná.

Pri pseudokritickej teplote  $T_C$  vidíme, že hustota rozdelenia stavov s jedným extrémom pri vorticite v = 0 prechádza na hustotu rozdelenia s dvomi symetricky položenými extrémami. Pri tejto teplote dochádza k spontánnemu narušeniu symetrie a systém pod teplotou  $T_C$  prechádza len do oblasti jedného z extrémov a z tejto oblasti nemá možnosť sa vyslobodiť kvôli malej prechodovej pravdepodobnosti medzi týmito oblasťami.

V mnohých situáciách je táto pravdepodobnosť dostatočne malá na to, aby sme systém mohli považovať za stabilný. Avšak s postupom času začínajú do popredia vystupovať potreby skúmania týchto prechodov napríklad za účelom získania bližších poznatkov ohľadom stability systému, ktorá je nutnou podmienkou pre to, aby bol systém považovaný za vhodný na uchovávanie informácií.

Ďalším dôvodom skúmania prechodov medzi opačnými vorticitami je aj nutnosť po-

znania ako tieto prechody nastávajú, aby boli tieto systémy lepšie predikovateľné a taktiež lepšie kontrolovateľné, čo je tiež veľmi dôležité pre čo najefektívnejšie využitie v praxi.

Simulovanie týchto prechodov klasickou Monte Carlo simuláciou však kvôli nízkej prechodovej pravdepodobnosti nie je efektívne. Preto pri simulovaní systému je nutné použiť iný prístup pre získavanie dostatočne relevantnej štatistiky a ergodického správania. Takýto prístup je ukázaný v nasledujúcom odseku.

## 4 Metódy efektívneho simulovania

#### 4.1 Problémy klasického MC

Nemožnosť ergodického prehľadávania celého fázového priestoru je spôsobená nízkou prechodovou pravdepodobnosťou medzi stavmi s opačnou vorticitou. Získavame tak dáta len z malej oblasti fázového priestoru, pričom prepólovanie vorticity prakticky nemôže nastať ani pri dlhých simulačných časoch. Zmeny v polarite vorticity však z aplikačného hľadiska je nutné mať preskúmané ale z vyššie uvedených dôvodov to pri klasickej Monte Carlo simulácii nie je možné.

Ďalší problém, ktorý často vyvstáva pri Monte Carlo simuláciách je tzv. *critical* slowing-down (kritické spomaľovanie), ktoré je dôsledkom vzťahu

$$\xi(T) \sim |T - T_K|^{-\nu} \tag{4.1}$$

pre korelačnú dĺžku v systéme  $\xi$ , kde  $T_K$  je kritická teplota a  $\nu$  je kritický exponent. Pri  $T \to T_K$  táto korelačná dĺžka diverguje, čím sa celý systém stáva silne skorelovaný a zmeny v systéme pri simulácii sa značne spomaľujú. Systém sa tak mení veľmi pomaly a Monte Carlo simulácia je neefektívna. Aj v takýchto prípadoch je potrebné zaviesť niektoré urýchľujúce techniky.

Podobne aj systémy pri nízkych teplotách môžu vykazovať podobné vlastnosti, ktoré sú spojené so znižujúcou sa prechodovou pravdepodobnosťou medzi stavmi. Tu je tiež nutné uviesť do simulácie urýchľujúce techniky. V nasledujúcom odstavci predstavíme niektoré z týchto techník. Tieto techniky sú dôležitými obzvlášť pri posledných dvoch spomenutých prípadoch, preto sa bližšie budeme venovať až technike použitej pri našich simuláciách, ktorá sa nazýva multikanonické Monte Carlo.

#### 4.2 Niektoré urýchľujúce metódy

V tomto odseku v krátkosti priblížime niektoré techniky vhodné pre efektívnejšie získavanie dát z Monte Carlo simulácií (bližšie viď. napr. [26]). Je tu uvedený len úzky výber, ktorý si vôbec nerobí nárok na úplnosť. Jeho účelom je ukázať čitateľovi rôznorodosť techník používaných na prekonanie problémov klasického Monte Carla.

#### 4.2.1 *n*-fold way

Monte Carlo metóda typu *n*-fold way bola do praxe zavedená A.B. Bortzom, M.H. Kalosom a J.L. Lebowitzom v roku 1975 [13]. Táto metóda je založená na "skladaní" neefektívnych krokov klasického Monte Carlo algoritmu, kedy nenastáva zmena stavu do jedného kroku. Pravdepodobnosť, že sa stav **x** systému nezmení vieme určiť z prechodových pravdepodobností  $\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  (napr. pomocou Metropolisovho kritéria (3.17), alebo Glauberovho kritéria (3.19)). Tak vieme odvodiť pravdepodobnosť P(m) toho, že stav sa zmení po m+1krokoch

$$P(m) = [\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x})]^m [1 - \mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x})].$$
(4.2)

Potom pomocou náhodného čísla  $\zeta$ z uniformného rozdelenia vieme tento čas numericky odhadnúť vzťahom

$$\tau_{\text{fold}}(\mathbf{x}) = \frac{\ln \zeta}{\ln \mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x})}.$$
(4.3)

Po určení tohoto času zmeníme stav systému, čím vlastne v priemere odstránime ~  $\lfloor \tau_{\text{fold}} \rfloor$ krokov klasického Monte Carlo algoritmu jedným krokom. Určovanie strednej hodnoty veličiny Q potom robíme nasledovne:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{n} Q(\mathbf{x}_i) \tau_{\text{fold}}(\mathbf{x}_i)}{\sum_{i=1}^{n} \tau_{\text{fold}}(\mathbf{x}_i)}.$$
(4.4)

Táto metóda je pochopiteľne použiteľná len v prípade, že poznáme pravdepodobnosti prechodu  $\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  do všetkých stavov, keďže  $\mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 1 - \sum_{\mathbf{x}'} \mathcal{T}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ . To je zväčša prípad Monte Carlo simulácií na diskrétnych systémoch.

#### 4.2.2 Algoritmus Swendsena-Wanga

Dalším zaujímavým algoritmom urúchľujúcim Monte Carlo simuláciu je Swendsenov-Wangov algoritmus [14] z roku 1987. Tento algoritmus bol vytvorený pre efektívnejšie prevádzanie simulácií na *Isingovom* alebo *Pottsovom modeli*, v ktorom spin-spin interakcia je tvorená len výmennou interakciou a spiny nadobúdajú len konečný počet stavov. V tomto prípade zo spinov sú vytvorené klastre a tieto klastre sú preklápané. Je to teda mnoho-spinový preklápací algoritmus (na rozdiel od predchádzajúcich, ktoré preklápali len po jednom spine — boli to tzv. *single-spin-flip* algoritmy). Výpočet sa prevádza tak, že v každom kroku sa na všetkých susedných dvojiciach spinov, v ktorých obidva spiny nadobúdajú rovnakú hodnotu, vytvorí spoj s pravdepodobnosťou

$$\mathcal{P} = 1 - \mathrm{e}^{-2\beta J},\tag{4.5}$$

kde *J* je výmenný integrál. Potom každému klastru spoločne prepojených spinov je pridelená nová hodnota spinov a dostávame tak nový stav. Takýto algoritmus, ako sa dá ukázať, spĺňa detailnú rovnováhu (3.12) a je ergodický. Obmedzením však ostáva ťažká aplikácia na odlišné systémy od vyššie uvedených, keďže tvar vzťahu 4.5 závisí do značnej miery od tvaru zavedeného hamiltoniánu. Algoritmus má aj napriek tomu mnohé obmeny, napr. Wolffov algoritmus, klastrovací algoritmus s premenlivou pravdepodobnosťou a pod.

#### 4.2.3 Histogramová technika

Histogramová technika je jedna z najstarších urýchľujúcich techník, avšak používanou sa stala až po publikácii [15]. Jej princíp spočíva v tom, že makroskopické vlastnosti systému pri inverznej teplote  $\beta$  zistíme z nasimulovaných stavov pri inverznej teplote  $\beta^* \neq \beta$ .

Ak označíme  $h_i(\beta^*)$  histogram získaný pri simulácii pri inverznej teplote  $\beta^*$ , ktorý prislúcha stavom z intervalu  $\Delta \mathcal{H}$  z okolia energie  $\mathcal{H}_i$ , jednoduchým preváhovaním vieme získať hustotu pravdepodobnosti pre výskyt stavu s energiou  $\mathcal{H}_i$  pri inverznej teplote  $\beta$  v tvare

$$\rho(\mathcal{H}_i,\beta) = \frac{h_i(\beta^\star) \mathrm{e}^{-(\beta-\beta^\star)\mathcal{H}_i}}{\sum_j h_j(\beta^\star) \mathrm{e}^{-(\beta-\beta^\star)\mathcal{H}_i}}.$$
(4.6)

Pri použití (4.6) vieme potom pre strednú hodnotu veličiny Q písať

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{n} Q(\mathbf{x}_{i}) \mathrm{e}^{-(\beta - \beta^{\star}) \mathcal{H}(\mathbf{x}_{i})}}{\sum_{i=1}^{n} \mathrm{e}^{-(\beta - \beta^{\star}) \mathcal{H}(\mathbf{x}_{i})}}.$$
(4.7)

Ako uvidíme v odseku 4.3, tento výpočet je podobný výpočtu strednej hodnoty pre multikanonické Monte Carlo (4.16). Hlavný rozdiel spočíva v tom, že pri multikanonickej Monte Carlo simulácii máme každému stavu priradenú inú teplotu  $\beta'(\mathcal{H}(\mathbf{x}))$  podľa schémy (4.10), avšak v tomto prípade pracujeme len pri dvoch teplotách —  $\beta$  a  $\beta^*$ . Tieto teploty pre správnu funkčnosť algoritmu musia byť naviac blízke, preto sa často používa aj multihistogramová metóda využívajúca väčší počet histogramov pri rôznych teplotách.

#### 4.3 Multikanonické MC a jeho ohraničenia

Multikanonické Monte Carlo bolo uvedené v práci [18] a ako bolo neskôr ukázané, je úzko prepojené z *entropickým vzorkovaním* [16]. Ako už názov napovedá, multikanonické Monte Carlo využíva liberálny prístup k teplote, ktorý tak následne umožňuje systému prechádzať cez energetické bariéry oddeľujúce rôzne fázy, ktoré sú pri nízkych teplotách prakticky nepreniknuteľné. Tento voľný prístup k teplote však musí byť pri simulácii dobre kontrolovateľný, aby sme mohli získané štatistické dáta používať na určovanie stredných hodnôt. Ako uvidíme, multikanonické Monte Carlo túto vlastnosť má. Pozrime sa na to bližšie.

V multikanonickom Monte Carle sa zavádza efektívny hamiltonián podľa vzťahu

$$\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathbf{x}) + \eta(v), \tag{4.8}$$

kde v je parameter usporiadania — v našom prípade sa jedná o vorticitu. Funkcia  $\eta(v)$ zaručuje multikanonicitu — efektívne mení hamiltonián tak, aby pri stavoch, ktoré sú pre systém energeticky nevýhodné, sa pravdepodobnosť ich výskytu zvýšila. Vidíme teda, že k rôznym stavom  $\mathbf{x}_1$  a  $\mathbf{x}_2$  tak pristupujeme nerovnoprávne. Môžeme povedať, že prechod medzi stavmi neprebieha stále pri rovnakej teplote (taktiež môžeme hovoriť aj o tom, že jednotlivé stavy majú rôznu teplotu). Ukážeme to jednoducho pre Metropolisovo akceptačné kritérium. Vzťah medzi multikanonickou prechodovou pravdepodobnosťou a efektívnou klasickou pravdepodobnosťou definovanou efektívnymi veličinami T' a  $\beta'$  je daný rovnosťou

$$e^{-\beta[\Delta \mathcal{H}(\mathbf{x}) + \Delta \eta(v)]} = e^{-\beta' \Delta \mathcal{H}(\mathbf{x})},\tag{4.9}$$

odkiaľ triviálne

$$\beta' = \beta \left[ 1 + \frac{\Delta \eta(v)}{\Delta \mathcal{H}(\mathbf{x})} \right], \text{ resp. } T' = T \left[ 1 + \frac{\Delta \eta(v)}{\Delta \mathcal{H}(\mathbf{x})} \right].$$
(4.10)

Vidíme teda, že pri  $\Delta \mathcal{H}(\mathbf{x}) > 0$ , kedy sa používa prechodová pravdepodobnosť (4.9), položením  $\Delta \eta(v) < 0$ , dosiahneme jednak zvýšenie pravdepodobnosti prijatia stavu, a jednak novú teplotu, pri ktorej k zmene dochádza. Odtiaľ pocházda názov metódy.

Ako sme uviedli, metóda musí poskytovať aj možnosť spätného návratu ku kanonickému rozdeleniu stavov, t.j. k možnosti získavať správne hodnoty všetkých veličín. Pre tento účel postačí vychádzať s pravdepodobnosti pre nájdenie stavu s vorticitou v:

$$\rho(v) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int_{\Omega} \delta(v - v(\mathbf{x})) e^{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{x})} d\mathbf{x}, \qquad (4.11)$$

kde  $\delta$  je Diracova  $\delta$ -funkcia. Pre multikanonické Monte Carlo potom analogicky platí

$$\tilde{\rho}(v) = \frac{1}{\tilde{\mathcal{Z}}} \int_{\Omega} \delta(v - v(\mathbf{x})) e^{-\beta \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x})} d\mathbf{x}, \qquad (4.12)$$

kde $\tilde{\mathcal{Z}}$ je multikanonická štatistická suma definovaná vzťahom

$$\tilde{\mathcal{Z}} = \int_{\Omega} e^{-\beta \tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x})} d\mathbf{x} = \int_{\Omega} e^{-\beta [\mathcal{H}(\mathbf{x}) + \eta(v(\mathbf{x}))]} d\mathbf{x}.$$
(4.13)

Za využitia vzťahov (4.11) a (4.12) dostávame

$$\rho(v) = \frac{\tilde{\mathcal{Z}}}{\mathcal{Z}} \frac{1}{\tilde{\mathcal{Z}}} \int_{\Omega} \delta(v - v(\mathbf{x})) e^{-\beta [\mathcal{H}(\mathbf{x}) + \eta(v(\mathbf{x}))]} e^{\beta \eta(v(\mathbf{x}))} d\mathbf{x} = \frac{\tilde{\mathcal{Z}}}{\mathcal{Z}} e^{\beta \eta(v)} \tilde{\rho}(v).$$
(4.14)

Tu sme využili vlastnosti Diracovej  $\delta$ -funkcie. Teraz už vidíme, že:

$$\rho(v) \sim e^{\beta \eta(v)} \tilde{\rho}(v), \tag{4.15}$$

kde koeficientom úmery je pomer štatistických súm pre klasické i multikanonické Monte Carlo  $\frac{\tilde{z}}{z}$ . Pre získavanie správnych stredných hodnôt sledovaných veličín ďalej slúži schéma:

$$\Xi = \sum_{k=1}^{n} e^{\beta \eta(v(\mathbf{x}_{k}))} \big|_{\mathrm{pdf}(\mathbf{x}_{k}=\mathbf{x})=\rho\left(\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x})\right)},$$

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{j=1}^{n} Q(\mathbf{x}_{j}) e^{\beta \eta(v(\mathbf{x}_{j}))} \big|_{\mathrm{pdf}(\mathbf{x}_{j}=\mathbf{x})=\rho\left(\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x})\right)},$$
(4.16)

kde n je počet Monte Carlo krokov. Podrobné odvodenie vzťahu (4.16) môže čitateľ nájsť v dodatku A.3.

Vráťme sa teraz k multikanonickej škálovacej funkcii  $\eta(v)$ . Vo všeobecnosti je jej určenie zdĺhavé, pričom v niekorých prípadoch sa stretávame s určovaním tejto funkcie *ad hoc.* V pôvodnej práci [18] bolo navrhnuté iteratívne určovanie tejto funkcie. Iný prístup bol ukázaný v [19], kde použili na určenie škálovacej  $\eta$ -funkcie simulované žíhanie. Spoločným znakom jednotlivých prístupov však je snaha dosiahnuť pri multikanonickom rozdelení pravdepodobnosť nestabilných stavov porovnateľnú s pravdepodobnosťou stavov stabilných. Vtedy pri simulácii vykonávame náhodné kráčanie v priestore parametra usporiadania. V našej práci sme sa zamerali na iný prístup v určení tejto funkcie v nasledujúcom odseku je navrhnutý spôsob založený na autoadaptívnom prístupe.

## 4.4 Autoadaptivita v určovaní $\eta(v)$

Ako sme spomínali určenie  $\eta$ -funkcie nie je jednoduchá záležitosť, preto sme sa pokúsili zakomponovať do procesu jej určovania autoadaptivitu. Vychádzali sme z požiadavky, aby oblasti fázového priestoru s konštantnou vorticitou, ktoré sú často obsadzované, boli znevýhodňované vysokou hodnotou  $\eta$ -funkcie pri tejto vorticite. Naopak málo obsadzované oblasti konštantnej vorticity by mali byť zvýhodňované malým príspevkom od  $\eta$ -funkcie. Kvôli tejto korešpondencii sme teda vychádzali z predpokladu, že

$$\eta(v) = \lambda \frac{n(v)}{\Sigma_u},\tag{4.17}$$

kde n(v) je histogram — počet navštívení intervalu  $\mathcal{I} = (v; v + dv)$ ,  $\Sigma_u$  je normovacia konštanta a  $\lambda$  je koeficient úmery, ktorého veľkosť sme volili  $\lambda = 500$ . Táto závislosť nám poskytuje spätnú väzbu, ktorú môžeme využiť v autoadaptačnom procese, kde pri každej iterácii v najjednoduchšom prípade meníme

$$n(v) \longleftarrow n(v) + 1$$
 pre vorticitu  $v$ , ktorú systém nadobudol,  
 $\Sigma_u \longleftarrow \Sigma_u + 1.$ 
(4.18)

Podiel  $n(v)/\Sigma_u$  v tomto prípade aproximuje pravdepodobnosť  $\rho(v)dv$  výskytu stavu s vorticitou v v intervale  $\mathcal{I}$ . Konvergencia adaptačnej schémy (4.18) je veľmi pomalá. Jej urýchlenie sa dá dosiahnuť zavedením premenlivého kroku vzťahom

$$u = u_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$$
, kde  $t$  je krok iterácie a  $\tau$  je konštanta,  
 $n(v) \longleftarrow n(v) + u$  pre vorticitu  $v$ , ktorú systém nadobudol, (4.19)  
 $\Sigma_u \longleftarrow \Sigma_u + u$ .

Ďalším urýchlením konvergencie zavedeným do simulácie bola myšlienka, že miesta, ktoré sú často navštevované, budú aj naďalej systémom často navštevované, a preto prídavný člen môže byť v tejto oblasti väčší — tým sa urýchli zvýšenie  $\eta$ -funkcie v týchto miestach. Znamená to, že adaptačné kroky môžeme zapísať nasledovne:

$$u = u_0 e^{-\frac{t}{\tau}},$$
  

$$n(v) \longleftarrow n(v)(1+u) \text{ pre vorticitu } v, \text{ ktorú systém nadobudol},$$

$$\Sigma_u \longleftarrow \Sigma_u + un(v).$$
(4.20)

Uvedená autoadaptačná schéma bola použitá pri našich simuláciách. Obvyklou voľbou bolo  $u_0 = 15$  a  $\tau$  takým, že po ekvilibračnom čase 100 mil. MC krokoch bolo  $u \sim 10^{-4}$ . Táto voľba zabezpečila stabilitu  $\eta$ -funkcie po 50 mil. MC krokoch. Avšak nie je jediná, ktorá môže byť aplikovaná. Iným príkladom je heuristická schéma

$$u = u_0 e^{-\frac{t}{\tau}},$$
  

$$n(v) \longleftarrow (1-u)n(v) + u\Sigma_u \tilde{\pi}(v) \text{ pre vorticitu } v, \text{ ktorú systém nadobudol}, \quad (4.21)$$
  

$$\Sigma_u \longleftarrow \sum_v n(v).$$

Pri tejto schéme je  $\tilde{\pi}(v)$  multikanonická pravdepodobnosť výskytu stavu s vorticitou vz intervalu  $\mathcal{I}$ . Môžeme si bližšie všimnúť, že  $n(v)/\Sigma_u \not\equiv \tilde{\pi}(v)$ . Na začiatku simulácie, keď je u relatívne vysoké, má n(v) tendenciu blížiť sa k $\Sigma_u \tilde{\pi}(v)$ , avšak s poklesom veľkosti parametra u prechádza kritérium na tvar  $n(v) \leftarrow n(v)$ , čo nám už nezaručuje konvergenciu k $\Sigma_u \tilde{\pi}(v)$ . Pri adaptačnej schéme prechod od schémy (4.18) ku (4.20) taktiež znamená, že n(v) nekonverguje k $\Sigma_u \tilde{\pi}(v)$ .

Je potrebná ešte jedna dôležitá poznámka. Pre rovnovážnu štatistiku zber dát musí byť prevádzaný až *po* ukončení autoadaptačného procesu  $\eta$ -funkcie —  $\eta(v)$  musí byť funkcia, ktorá sa s časom nemení, aby váhy hodnôt stredovaných veličín v schéme (4.16) boli jednoznačne určené.

#### 4.5 Výsledky pre uvedený model

Ako sme uviedli v predchádzajúcich odsekoch,  $\eta$ -funkcia bola pri našich simuláciách určovaná v autoadaptívnom procese. Museli sme však dbať na niektoré aspekty spojené s implementáciou daného problému. V prvom rade sa jedná o prechod od spojitého systému, akým uvedený model v skutočnosti je, na systém diskrétny, ktorý je vhodný na implementáciu problému. Túto skutočnosť sme naznačili už v predošlom odseku. Pre funkciu  $\eta(v)$ , závislú na adaptovanej funkcii n(v), to znamenalo, že sme sa museli obmedziť na diskrétne hodnoty vorticít, keďže n(v) muselo byť spojené s výskytom vorticity na niektorom intervale. Tak sa ukazuje opodstatnenie použitia pravdepodobností namiesto hustôt pravdepodobnosti a súm namiesto integrálov.

S diskretizáciou intervalu vorticity je však spojená jedna nežiadúca vlastnosť algoritmu. Funkcia  $\eta(v)$  je pri každom Monte Carlo kroku volaná pre určenie  $\tilde{\mathcal{H}}$ . Schodovitá



**Obrázok** 8: Funkcia  $\eta$  pri rôznych simulačných prístupoch: a) adaptačná schéma (4.20) s Metropolisovym akceptačným kritériom (3.17) a lineárnou interpoláciou  $\eta$ -funkcie, b) ako v prípade a, ale s adaptačnou schémou (4.18), c) ako v prípade a, ale s adaptačnou schémou (4.21), d) ako v prípade a, ale s Glauberovym akceptačným kritériom (3.19), e) ako v prípade b, ale s histogramovou (schodovitou)  $\eta$ -funkciou. Prístupy k  $\eta$ -funkcii cez histogramy a cez lineárnu interpoláciu nekonvergujú k rovnakej závislosti, avšak vzhľad  $\eta$ -funkcie je robustný voči voľbe adaptačnej schémy aj akceptačného kritéria. V týchto prípadoch je rozdiel len v rýchlosti konvergencie ako aj k dosiahnutej symetrii  $\eta$ -funkcie.

 $\eta$ -funkcia z obrázku 8e obsahuje intervaly, v rámci ktorých je systém necitlivý na vplyv  $\eta$ -funkcie, čo má za následok nežiadúci drift systému k stavom s nižšou energiou a zhoršuje tak konvergenčné vlastnosti algoritmu.

Odstránenie vplyvu schodov bolo dosiahnuté lineárnou interpoláciou schodovitej  $\eta$ -funkcie tak, že výška schodu prislúchala len stredu intervalu; ostatné hodnoty boli lineárne interpolované. Táto úprava zlepšila konvergenčné vlastnosti algoritmu a súčasne zmenila tvar  $\eta$ -funkcie. Ako si tiež možno všimnúť, iné zmeny v algoritme nemenia podstatne tvar  $\eta$ -funkcie. Avšak konvergenčné vlastnosti sú pre jednotlivé algoritmy rozdielne — algoritmus s adaptačnou schémou (4.20) konverguje rýchlejšie než algoritmus so schémou (4.18), čo sa prejavilo hlavne na symetrii  $\eta$ -funkcie.

Zaujímavý je priebeh adaptačného procesu  $\eta$ -funkcie (obr. 9). Na začiatku simulácie, kedy  $\eta$ -funkcia nemá výrazný vplyv na systém, ten prejde k jednému z vortexových stavov, v ktorom uviazne. To však znamená, že  $\eta$ -funkcia pri týchto vorticitách postupne narastá a začne vypudzovať systém od tejto vorticity k opačnej. Takto vznikajú "zhluky" vysokých vorticít.

Tiež si môžeme všimnúť správanie sa vorticity a magnetizácie — tie sú previazané



**Obrázok** 9: Začiatok autoadaptačného procesu  $\eta$ -funkcie — vorticita sa spočiatku drží blízko hodnoty v = 1, odkiaľ je po čase vypudená narastajúcou  $\eta$ -funkciou. Proces sa niekoľkokrát opakuje až dokiaľ nie je  $\eta$ -funkcia zadaptovaná. Zo závislostí tiež vidno, že v oblastiach s vysokou vorticitou je magnetizácia nízka a s klesajúcou veľkosťou vorticity ( $v \sim 0$ ) magnetizácia dosahuje vysoké hodnoty.

tak, že v oblasti vysokých vorticít je magnetizácia nízka. Naopak pri nízkych vorticitách nadobúda magnetizácia vysoké hodnoty. To je dobre viditeľné aj na obrázku 10 — stredná hodnota magnetizácie  $\langle M \rangle (v)$  získaná z Monte Carlo dát (body) je tu vynesená v závislosti na vorticite v. Výrazný je tu kvadratický charakter získanej závislosti, ktorý sme preložili krivkou získanou metódou najmenších štvorcov

$$\langle M \rangle \simeq -0.954v^2 + 0.879 \equiv \langle M \rangle_{\text{fit}} \,. \tag{4.22}$$

Na obrázku 10 v dolnej časti je vykreslená aj závislosť štandardnej odchýlky

$$\sigma_M = \sqrt{\langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle} \tag{4.23}$$

na vorticite.

Na obrázku 11 si ďalej môžeme všimnúť dôsledky pomalej konvergencie pri schéme (4.18), kedy získaná  $\eta$ -funkcia nebola symetrická, ako by sme očakávali, čo malo za následok uprednostňovanie stavov so zápornými vorticitami, kde bola  $\eta$ -funkcia nižšia. Preto



**Obrázok** 10: Závislosť strednej hodnoty magnetizácie  $\langle M \rangle (v)$  na vorticite v (čiarkovaná čiara) sme preložili kvadratickou funkciou v tvare  $\langle M \rangle_{\rm fit} = -0.954v^2 + 0.879$ .



**Obrázok** 11: Hore je znázornená závislosť vorticity v na kroku simulácie t pri dĺžke autoadaptačného procesu 100 mil. krokov a adaptačnej schéme (4.18), kedy  $\eta$ -funkcia nebola dokonale symetrická s vyšším maximom pri kladných vorticitách, čo sa prejavilo na uprednostňovaní stavov so zápornými vorticitami. Dole je priebeh simulácie za použitia už známej funkcie  $\eta_{\text{fit}}$  získanej fitom cez symetrické Čebyševove polynómy. Teraz už nie je výrazná žiadna nesymetria v naštevovaní kladných a záporných vorticít.

| $a_0$                  | $(1.05 \pm 0.01) \times 10^{-2}$   |
|------------------------|------------------------------------|
| $a_2$                  | $(2.95 \pm 0.22) \times 10^{-3}$   |
| $a_4$                  | $(-4.67 \pm 0.22) \times 10^{-3}$  |
| $a_6$                  | $(-5.35 \pm 0.22) \times 10^{-3}$  |
| $a_8$                  | $(-2.41 \pm 0.21) \times 10^{-3}$  |
| <i>a</i> <sub>10</sub> | $(-5.61 \pm 20.65) \times 10^{-5}$ |
| $a_{12}$               | $(1.25 \pm 1.99) \times 10^{-4}$   |
| $a_{14}$               | $(9.27 \pm 1.89) \times 10^{-4}$   |
| $a_{16}$               | $(1.65 \pm 0.18) \times 10^{-3}$   |
| $a_{18}$               | $(1.18 \pm 0.16) \times 10^{-3}$   |
| $a_{20}$               | $(1.07 \pm 0.14) \times 10^{-3}$   |
| $a_{22}$               | $(6.32 \pm 1.18) \times 10^{-4}$   |
| $a_{24}$               | $(2.61 \pm 0.93) \times 10^{-4}$   |
| $a_{26}$               | $(1.01 \pm 0.66) \times 10^{-4}$   |

**Tabuľka** 1: Koeficienty fitnutej  $\eta$ -funkcie (4.25)

sme fitovali $\eta\text{-funkciu pomocou Čebyševových polynómov}$ 

$$\Phi_n(v) = \cos(n \arccos v) \tag{4.24}$$

na polynóm tvaru

$$\eta_{\rm fit}(v) = \sum_{i=0}^{13} a_{2i} \Phi_{2i}(v), \qquad (4.25)$$

čím sme získali koeficienty  $a_{2i}$ , i = 0, 1, ..., 13 (viď. tabuľka 1). Takto získaná funkcia  $\eta_{\text{fit}}(v)$  pri simuláciách poskytuje symetrické prehľadávanie intervalu vorticity, čím sa získajú presnejšie výsledky a odstráni nutnosť opätovného adaptovania  $\eta$ -funkcie pri opätovnom spúšťaní simulácie<sup>10</sup>. Ďalšie výsledky boli už dosiahnuté s použitím symetrickej funkcie  $\eta_{\text{fit}}(v)$ .

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup>Pochopiteľne zmena parametrov modelu (napr. teplota T, koeficienty J, D, A alebo externé pole  $\mathbf{H}^{\text{ext}}$ ) musí byť opäť nasledovaná novým autoadaptačným procesom  $\eta$ -funkcie.

#### 4.5.1 Prepólovanie vorticity, ART sieť

V predchádzajúcom odseku sme naznačili nutnosť štúdia premagnetizačných procesov. Pri vortexových štruktúrach je potrebná zasa znalosť procesov, u ktorých dochádza k prepólovaniu vorticity. To by pri použití klasického Monte Carla bez tunelujúcich techník nebolo možné. Multikanonická Monte Carlo simulácia nám teraz zabezpečuje ergodickejšie prehľadávanie priestoru, čím získavame požadované prepólovania vorticity.

Pre pochopenie týchto procesov prepólovania vorticity sme najprv na simulačné dáta aplikovali SOM sieť (viď. dodatok C), ktorá je schopná klasifikácie a vyhľadávania význačných reprezentantov. Takto sme získali význačné konfigurácie zobrazené na obrázku 12. Vidíme, že sieť našla stabilnú vortexovú štruktúru, ako aj ďalšie metastabilné stavy, medzi ktorými sú na strane 15 už spomínané U-stavy, S-stavy, ale aj stavy, ktoré neboli nájdené pri náhodnom štarte, akými sú stav typu *leaf*, či z osí vychýlené vortexové štruktúry. Naproti tomu SOM sieť nenašla antivortexový stav z obrázku 3. Je to spôsobené tým že antivortexový stav neleží v oblasti, cez ktorú prebiehajú procesy prepólovania vorticity pri multikanonickej Monte Carlo simulácii.

Prepólovanie vorticity na opačnú môžeme na základe príslušnosti každého stavu k niektorému reprezentantovi pomocou SOM siete projektovať na graf s uzlami, ktorými sú nájdení reprezentanti. Prechodové pravdepodobnosti medzi uzlami sme zistiťovali pri ďalšej simulácii (viď. obr. 13). Vidíme teda, že k prepólovaniu vorticity dochádza prechodom cez metastabilné stavy tak, že centrum vortexu prejde hranou alebo rohom mimo nanočasticu, čím dôjde k vytvoreniu U-stavu, prechodom cez niektorý z S-stavov a opačným procesom opäť dochádza k formácii opačne orientovaného vortexu.

#### 4.5.2 Perspektívy prístupu

SOM sieť nám pomohla pri redukcii systému na niekoľko reprezentantov. Tieto výsledky môžu byť následne použité napríklad pri odhadoch niektorých dynamických veličín. Ako príklad získavania týchto veličín môže poslúžiť nasledujúca úvaha.

Bez použitia SOM siete postupujeme tak, že interval vorticity, ktorý je kvôli numerickým požiadavkam už diskretizovaný, slúži ako grafová reprezentácia systému. Budeme mať teda stavy zatriedené do skupín, z ktorých každá pri známej  $\eta$ -funkcii je charakterizovaná istou pravdepodobnosťou výskytu  $\pi(v)$ . Tú vieme určiť pomocou vzťahu (4.14).



**Obrázok** 12: Význačné konfigurácie pri multikanonickej Monte Carlo simulácii získané pomocou SOM siete. Reprezentanti vyznačení modrou farbou boli nájdení neurónovou sieťou, zelení reprezentanti boli dopočítaní pomocou symetrických reprezentantov — SOM sieť ich nenašla. Pozadie zaznamenáva hustotu výskytu stavov (pdf) v závislosti na priemete celkového magnetického momentu nanočastice do smeru osi x a y:  $S^x$  a  $S^y$ .



**Obrázok** 13: Naznačené prechodové pravdepodobnosti medzi vybranými reprezentantmi nájdenými neurónovou sieťou (hore). Čím hrubšie je daný prechod naznačený, tým väčšia je pravdepodobnosť prechodu. V dolnej časti je vyznačená celá sieť zistených prechodov — tento stereogram je vhodné prezerať tak, že si stránku priblížite asi na vzdialenosť z ktorej čítate, a pri ponechanej polohe očí postupne obrázok vzďaľujete. Pri istej vzdialenosti dôjde k prekrytiu obrázkov a vynorí sa trojrozmerný obraz — vtedy pravé oko sleduje ľavú časť obrázku a ľavé oko pravú časť.



**Obrázok** 14: Rôzne realizácie Monte Carlo simulácií prechodov medzi vorticitami pri štarte z vorticity v = 0 (plné krivky hore) a ich ustrednený priebeh (čiarkovaná krivka) vykazujúci exponenciálny prechod k vorticite  $v_0 = -0.946$  s charakteristickým (relaxačným) časom  $\tau_{1/2} \doteq 485$  MC-krokov (bodkočiarkovane). Dole sú znázornené realizácie prechodov pri štarte z vorticity v = -0.5 a ich ustrednený priebeh s rýchlym poklesom na začiatku (s relaxačným časom  $\tau_{1/2}^{(1)} \doteq 64$  MC-krokov), ktorý zodpovedá priamemu prechodu do vortexového stavu. Relaxačný čas sa po čase ~ 80 MC-krokoch predlžuje na hodnotu  $\tau_{1/2}^{(2)} \doteq 454$  MC-krokov, kedy prevláda dočasné uviaznutie systému v metastabilnom U-stave s vorticitou  $v \sim -0.4$ .

Monte Carlo simuláciou štartom z v = 0 a s akceptačným kritériom (3.16) alebo (3.18) dosiahneme dynamický systém, ktorý po určitom čase skonverguje k jednej z dvoch vorticít  $v \sim \pm 1$ . Znázornenie týchto prechodov z v = 0 do  $v \sim -1$  je na obrázku 14 hore (plná čiara). Tieto trajektórie boli získané tak, že v každom kroku bol realizovaný krok

$$v \longleftarrow -|v|, \tag{4.26}$$

aby bola zaručená konvergencia len k jednej z vorticít (teda k v = -1). Vzhľadom na symetriu systému voči inverzii vorticity to môžeme urobiť. Stredovaním súboru takýchto trajektórií získavame krivku (čiarkovaná), ktorú sme preložili exponenciálnou závislosťou  $\mathcal{R}(t) = v_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_{1/2}}\right)\right]$ , kde t je krok Monte Carlo algoritmu v prepočte na jeden spin. Získané koeficienty sú: vorticita, ku ktorej systém konverguje  $v_0 = -0.943$  a relaxačný čas tohoto procesu je  $\tau_{1/2} \doteq 485$  MC-krokov (naznačený bodko-čiarkovane). Všimnime si taktiež, že systém pri relaxácii istý čas zotrváva v oblasti s vorticitou  $v \sim -0.4$ , ktorá zodpovedá metastabilnému U-stavu.

Podobne môžeme získať trajektórie prechodov napr. z v = -0.5 do  $v \sim -1$ , ktoré sú znázornené na obrázku 14 dole (plná čiara). Na týchto trajektóriách vidíme, že blízkosť metastabilného U-stavu s vorticitou  $v \sim -0.4$  pôsobí ako atraktor pre systém. Systém tak má nielen možnosť rýchleho prechodu k vorticite  $v \sim -1$ , ale aj prechodu do oblasti s vorticitou  $v \sim -0.4$ , kde istý čas zotrvá a až následne prejde do oblasti s vorticitou  $v \sim -1$ . To spôsobuje, že stredná trajektória v dôsledku rýchleho prechodu spočiatku rýchlo klesá (zistený bol relaxačný čas  $\tau_{1/2}^{(1)} \doteq 64$  MC-krokov). Po tejto počiatočnej fáze sa systém nachádza buď vo vortexovom stave, alebo v U-stave, z ktorého pomaly prechádza do vortexového stavu a preto klesanie strednej trajektórie je pomalé (s relaxačným časom  $\tau_{1/2}^{(2)} \doteq 454$  MC-krokov). Čas pri ktorom začína prevažovať vplyv trajektórií prechádzajúcich U-stavom je na úrovni 80 MC-krokov.

Na základe získaných veličín môžme určiť veličiny, ktoré je možné určiť aj experimentálne. Takými veličinami sú napríklad pomery relaxačných časov

$$\mu^{(1)} = \frac{\tau_{1/2}^{(1)}}{\tau_{1/2}} \doteq 0.13,$$

$$\mu^{(2)} = \frac{\tau_{1/2}^{(2)}}{\tau_{1/2}} \doteq 0.94.$$
(4.27)

Tieto hodnoty potvrdzujú tvar získaných priebehov — vysoká hodnota parametra  $\mu^{(2)}$  poukazuje na krátku dobu prechodu systému zo stavu s nulovou vorticitou do metastabilného U-stavu. Táto doba je teda nízka na úrovni relaxačného času  $\tau_{1/2}^{(1)}$ .

Ako vidíme, veľkou výhodou takéhoto prístupu je krátka dĺžka behu simulácie a teda vyššia efektivita výpočtu. Znalosť  $\eta$ -funkcie nahradzuje pri výpočte energiu a správa sa tak ako veľkoškálový hamiltonián. Vzhľadom na predchádzajúce zistenia si myslíme, že táto metóda má perspektívu a mala by byť ďalej rozvíjaná.

## 5 Záver

V tejto práci sme sa na modeli magnetickej nanočastice pokúsili ukázať možnosti multikanonického prístupu, ktorý odstraňuje kvázi-narušenie ergodicity. Častica samotná bola vhodným objektom pre štúdium. Jej základným stavom bola vortexová štruktúra vhodná pre využitie v praxi ako pamäťový element s výhodnými vlastnosťami. Vortexový stav sa vyznačuje nulovým magnetickým momentom a interakcia medzi časticami, ako sme ukázali, je potom veľmi nízka. Výskyt vortexového stavu ako základného stavu nanočastice nám však neumožnil použiť magnetizáciu ako parameter usporiadania. Ten sme definovali na základe analógie s Edwardsovym-Andersonovym parametrom u spinových skiel. Tento parameter usporiadania — vorticitu sme definovali vzťahom (3.24), pri ktorom sme však museli definovať referenčný vortexový stav — tým bol výstup simulácie. Výhoda v tomto prístupe spočíva hlavne v možnosti voľby ľubovoľného referenčného stavu, kedy parameter usporiadania pre ľubovoľný základný stav je určený týmto základným stavom.

Pri aplikácii multikanonického prístupu v simulácii sme ďalej volili autoadaptívny prístup pri určovaní multikanonickej škálovacej  $\eta$ -funkcie zaručujúcej ergodickejšie prehľadávanie fázového priestoru. Funkcia  $\eta(v)$  sa v tomto autoadaptívnom procese ukázala ako atraktor pre rôzne použité prístupy.

V ďalšom sme zistenú  $\eta$ -funkciu symetrizovali a použili sme ju, za využitia SOM siete, na určenie význačných reprezentantov pri procese prepólovania vorticity. Pri tomto procese sme zistili prechodové pravdepodobnosti medzi jednotlivými reprezentantmi, ktoré môžu slúžiť ako merítko pri určovaní pravdepodobnej cesty prepólovania vorticity. Táto trajektória, ako bolo zistené, vedie cez metastabilné stavy (U-stav, S-stav), ktoré sú charakteristické malou vorticitou a vysokou magnetizáciou. Prechod vortexu do týchto stavov pritom nastáva tak, že sa centrum vortexu dostane mimo časticu.

Získané multikanonické pravdepodobnosti výskytu jednotlivých reprezentantov ďalej môžeme použiť aj na odhady dynamických veličín spojených s procesmi preklápania vortexov. Multikanonické Monte Carlo spolu so SOM sieťou sú tak vhodnými nástrojmi pri konštrukcii veľkoškálových hamiltoniánov.

Ako už tiež bolo spomínané, metóda multikanonického Monte Carla je veľmi perspektívnou metódou, ktorá je použiteľná pri akejkoľvek simulácii, v ktorej je nutné odstrániť kvázi-narušenie ergodicity súvisiace s existenciou energetických bariér medzi rôznymi oblasťami fázového priestoru. Jedinou nutnosťou je voľba vhodného parametra usporiadania.

#### 5.1 Nedoriešené problémy

- Dosiaľ neosvetlený pohľad ostáva na vzťah hustoty pravdepodobnosti výskytu stavov s vorticitou v a η-funkcie. Zistili sme, že predpoklad, že η-funkcia má byť úmerná pravdepodobnosti výskytu stavov s danou vorticitou nie je vždy splnený. Súvisí to s voľbou adaptačnej schémy (4.20) alebo (4.21). Naviac, ako sa ukazuje, priebehu η-funkcie sa viac približuje skôr stabilita stavov (prechodová pravdepodobnosť T(v, v)). Ako však tieto tri závislosti spolu súvisia ostáva na teraz neuzavreté.
- Taktiež nebol dostatočne preskúmaný vplyv veľkosti parametra  $\lambda$ . V simulácii bola použitá jediná hodnota  $\lambda = 500$ . Dá sa predpokladať, že nízka hodnota  $\lambda$  by nemala za následok odstránenie kvázi-narušenia ergodicity, ale len preskúmavanie širšieho okolia jednej z vorticít  $v = \pm 1$ . Vysoká hodnota  $\lambda$  zasa na druhej strane by spôsobovala silné oscilácie v priestore vorticít. Parameter  $\lambda$  tak môžeme prirovnať k umelo zavedenej "druhej" teplote systému.
- Vplyv magnetického poľa tiež nebol preskúmaný. Pritom magnetické pole pri mriežkach takýchto nanočastíc hrá dôležitú úlohu, keďže indukuje polarizáciu, ktorá zosilňuje interakciu medzi časticami.
- Problematickým ostáva aj obmedzenie multikanonického Monte Carla na konštantné parametre. Zmena parametrov tak vedie k nutnosti novej adaptácie  $\eta$ -funkcie.

# Dodatky

## A Niektoré dôležité vzťahy

## A.1 Elementárna zmena energie pri spinovom otočení vo všeobecnom prípade

Zmena energie po zmene spinu  $\mathbf{S}_{\alpha}$  na spin $\mathbf{S}'_{\alpha}$ , pri ponechaní ostatných spinov nezmenených, je daná

$$\Delta \mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{x}') - \mathcal{H}(\mathbf{x}), \tag{A.1}$$

kde  $\mathcal{H}(\mathbf{x})$  je energia aktuálneho stavu systému a  $\mathcal{H}(\mathbf{x}')$  je energia stavu predkladaného na prijatie. Dosadením vzťahu (2.2) do (A.1) a za vyrušenia všetkých členov, v ktorých zmena nenastala (keď ani jeden z indexov nie je rovný  $\alpha$ ) dostávame

$$\Delta \mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq \alpha} \mathbf{S}_i \cdot (\mathbf{H}_i^{\prime \text{loc}} - \mathbf{H}_i^{\text{loc}}) - \frac{1}{2} (\mathbf{S}_{\alpha}^{\prime} - \mathbf{S}_{\alpha}) \cdot \mathbf{H}_{\alpha}^{\text{loc}} - \\ - A[(S_{\alpha}^{\prime z})^2 - (S_{\alpha}^z)^2] - \mathbf{H}^{\text{ext}} \cdot (\mathbf{S}_{\alpha}^{\prime} - \mathbf{S}_{\alpha}).$$
(A.2)

Prvý člen by pri implementácii takéhoto zápisu značne spomaľoval výpočet, preto ho prepíšeme na aplikačne oveľa výhodnejší vzťah. Najprv doň však dosadíme vyjadrenie lokálneho poľa (2.3), pričom pre zjednodušenie zápisu budeme zapisovať  $\Delta \mathbf{S}_i = \mathbf{S}'_i - \mathbf{S}_i$ 

$$\sum_{i \neq \alpha} \mathbf{S}_{i} \cdot (\mathbf{H}_{i}^{\prime \text{loc}} - \mathbf{H}_{i}^{\text{loc}}) =$$

$$= \sum_{i \neq \alpha} \mathbf{S}_{i} \cdot \left[ J \sum_{j(i)} \Delta \mathbf{S}_{j} - D \sum_{k \neq i} \frac{\Delta \mathbf{S}_{k} r_{ik}^{2} - 3 \mathbf{r}_{ik} (\Delta \mathbf{S}_{k} \cdot \mathbf{r}_{ik})}{r_{ik}^{5}} \right]. \quad (A.3)$$

Obidve sumy v hranatých zátvorkách dávajú nenulový príspevok len ak je indexom  $\alpha$ , preto dostávame

$$\sum_{i \neq \alpha} \mathbf{S}_{i} \cdot (\mathbf{H}_{i}^{\prime \text{loc}} - \mathbf{H}_{i}^{\text{loc}}) = \\ = J \sum_{i(\alpha)} \mathbf{S}_{i} \Delta \mathbf{S}_{\alpha} - D \sum_{i \neq \alpha} \frac{\mathbf{S}_{i} \cdot \Delta \mathbf{S}_{\alpha} r_{i\alpha}^{2} - 3(\mathbf{r}_{i\alpha} \cdot \mathbf{S}_{i})(\mathbf{r}_{i\alpha} \cdot \Delta \mathbf{S}_{\alpha})}{r_{i\alpha}^{5}}. \quad (A.4)$$

Využitím symetrií  $\mathbf{r}_{ij} = -\mathbf{r}_{ji}$  a  $r_{ij} = r_{ji}$  dostávame

$$\sum_{i \neq \alpha} \mathbf{S}_i \cdot (\mathbf{H}_i^{\text{loc}} - \mathbf{H}_i^{\text{loc}}) = \Delta \mathbf{S}_\alpha \cdot \left[ J \sum_{i(\alpha)} \mathbf{S}_i - D \sum_{i \neq \alpha} \frac{\mathbf{S}_i r_{\alpha i}^2 - 3\mathbf{r}_{\alpha i} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r}_{\alpha i})}{r_{\alpha i}^5} \right].$$
(A.5)

Porovnaním s (2.3) vidíme, že

$$\sum_{i \neq \alpha} \mathbf{S}_i \cdot (\mathbf{H}_i^{\prime \text{loc}} - \mathbf{H}_i^{\text{loc}}) = \Delta \mathbf{S}_\alpha \cdot \mathbf{H}_\alpha^{\text{loc}}.$$
(A.6)

Spätným dosadením do (A.2) potom dostávame vzťah (2.4)

$$\Delta \mathcal{H} = -(\mathbf{S}'_{\alpha} - \mathbf{S}_{\alpha}) \cdot (\mathbf{H}^{\text{loc}}_{\alpha} + \mathbf{H}^{\text{ext}}) - A[(S'^{z}_{\alpha})^{2} - (S^{z}_{\alpha})^{2}].$$
(A.7)

#### A.2 Energia v termínoch lokálnych polí pre dvojčasticu

Pri dvoch nanočasticiach hamiltonián (2.1) po zavedení lokálneho poľa možno rozložiť na tri členy:

• členy prislúchajúce vlastnej energii jednotlivých nanočastíc:

$$\mathcal{H}^{\text{self},(\nu)} = -\frac{1}{2} \sum_{i \in \nu} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_i^{\text{loc},(\nu)} - A \sum_{i \in \nu} (S_i^z)^2 - \sum_{i \in \nu} \mathbf{H}^{\text{ext}} \cdot \mathbf{S}_i, \ \nu = 1, 2, \qquad (A.8)$$

• interakčný člen

$$\mathcal{H}^{\text{int}} = -\frac{1}{2} \sum_{i \in 1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_i^{\text{loc},(2)} - \frac{1}{2} \sum_{i \in 2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_i^{\text{loc},(1)} = -\sum_{i \in 1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_i^{\text{loc},(2)} =$$
$$= -\sum_{i \in 2} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_i^{\text{loc},(1)},$$
(A.9)

kde znak pod sumou  $i \in \nu$  predstavuje výber spinov z  $\nu$ -tej nanočastice a lokálne pole prislúchajúce *i*-temu spinu na  $\nu$ -tej nanočastici je dané

$$\mathbf{H}_{i}^{\mathrm{loc}(\nu)} = J \sum_{j(i)\in\nu} \mathbf{S}_{j} - D \sum_{\substack{k\in\nu\\k\neq i}} \frac{\mathbf{S}_{k}r_{ik}^{2} - 3\mathbf{r}_{ik}(\mathbf{S}_{k}\cdot\mathbf{r}_{ik})}{r_{ik}^{5}}.$$
(A.10)

Pre zmenu jednotlivých členov energie po zmene spinu  $\mathbf{S}_{\alpha}$  na prvej častici<sup>11</sup> sa zmena energie na druhej častici nezmení ( $\Delta \mathcal{H}^{\text{self},(2)} = 0$ ) a zmena energie na prvej častici bude

$$\Delta \mathcal{H}^{\text{self},(1)} = -\Delta \mathbf{S}_{\alpha} \cdot \mathbf{H}_{\alpha}^{\text{loc},(1)} - A\Delta[(S_{\alpha}^{z})^{2}] - \mathbf{H}^{\text{ext}} \cdot \Delta \mathbf{S}_{\alpha}, \qquad (A.11)$$

 $<sup>^{11}\</sup>mathrm{Na}$ druhej častici platia analogické vzťahy.

kde $\Delta x = x' - x$ je zmena veličiny xna x'. Pre zmenu interakčného člena platí

$$\Delta \mathcal{H}^{\text{int}} = -\Delta \mathbf{S}_{\alpha} \cdot \mathbf{H}_{\alpha}^{\text{loc},(2)}.$$
(A.12)

#### A.3 Multikanonickej schéma stredovania

Vychádzajme zo vzťahu (3.4) pre strednú hodnotu

$$\langle Q \rangle = \int_{\Omega} Q(\mathbf{x}) \rho(\mathcal{H}(\mathbf{x})) d\mathbf{x} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int_{\Omega} Q(\mathbf{x}) e^{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{x})} d\mathbf{x}.$$
 (A.13)

Tento integrál sa dá teraz prepísať nasledovne

$$\langle Q \rangle = \frac{\tilde{\mathcal{Z}}}{\mathcal{Z}} \int_{\Omega} Q(\mathbf{x}) \underbrace{\frac{1}{\tilde{\mathcal{Z}}} e^{-\beta [\mathcal{H}(\mathbf{x}) + \eta(v(\mathbf{x}))]}}_{\rho(\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x}))} e^{\beta \eta(v(\mathbf{x}))} d\mathbf{x}, \tag{A.14}$$

kde  $\tilde{\mathcal{Z}}$  je multikanonická štatistická suma daná vzťahom (4.13). Dostali sme tak vzťah, v ktorom už vystupuje multikanonické rozdelenie  $\rho(\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x}))$  a teda píšeme

$$\langle Q \rangle = \frac{\tilde{\mathcal{Z}}}{\mathcal{Z}} \int_{\Omega} Q(\mathbf{x}) e^{\beta \eta(v(\mathbf{x}))} \rho(\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x})) d\mathbf{x}.$$
 (A.15)

Pomer štatistických súm môžeme podobným postupom vyjadriť nasledovne:

$$\frac{\tilde{\mathcal{Z}}}{\mathcal{Z}} = \frac{\tilde{\mathcal{Z}}}{\int_{\Omega} e^{-\beta \mathcal{H}(\mathbf{x})} d\mathbf{x}} = \left[ \int_{\Omega} \underbrace{\frac{e^{-\beta \{\mathcal{H}(\mathbf{x}) + \eta(v(\mathbf{x}))\}}}{\tilde{\mathcal{Z}}}}_{\rho(\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x}))} e^{\beta \eta(v(\mathbf{x}))} d\mathbf{x} \right]^{-1} = \\
= \frac{1}{\int_{\Omega} e^{\beta \eta(v(\mathbf{x}))} \rho(\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x})) d\mathbf{x}}.$$
(A.16)

Vzhľadom na tieto vzťahy a pri použití analogického prechodu medzi spojitým rozdelením a rozdelením vhodným na implementáciu, podobne ako sme prešli od integrálne zadanej strednej hodnoty (3.4) ku vzťahu (3.9), môžeme písať

$$\Xi = \sum_{k=1}^{n} e^{\beta \eta(v(\mathbf{x}_{k}))} \big|_{\mathrm{pdf}(\mathbf{x}_{k}=\mathbf{x})=\rho(\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x}))},$$

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{\Xi} \sum_{j=1}^{n} Q(\mathbf{x}_{j}) e^{\beta \eta(v(\mathbf{x}_{j}))} \big|_{\mathrm{pdf}(\mathbf{x}_{j}=\mathbf{x})=\rho(\tilde{\mathcal{H}}(\mathbf{x}))},$$
(A.17)

## B Prerelaxačná technika

Pri simulovanom žíhaní musíme výpočet ukončiť pri teplote hoci malej, ale konečnej. To znamená, že takto dosiahnutý stav systému nemusí byť (a ani nie je) stav s minimálnou energiou. Jedným riešením môže byť úprava algoritmu pre Monte Carlo simuláciu, kedy spravíme limitu pre  $T \rightarrow 0$  a veľkosti pokusných zmien na systéme postupne zmenšujeme.

Ďalšou možnosťou je využitie *prerelaxačných*<sup>12</sup> techník<sup>13</sup>. Jednou z nich je aj technika, ktorá preklápa všetky spiny paralelne do smeru efektívneho poľa. Táto technika patrí do skupiny gradientných algoritmov a dá sa ukázať, že týmto efektívnym poľom pre *i*-ty spin je pole

$$\mathbf{H}_{i}^{\text{eff}} = \mathbf{H}_{i}^{\text{loc}} + 2AS_{i}^{z}\mathbf{e}_{z},\tag{B.1}$$

kde  $\mathbf{e}_z$  je smerový vektor v smere os<br/>iz. Odvodenie (B.1) môže čitateľ nájsť v odseku B.1 tohoto dodatku.

Algoritmus prerelaxačného procesu má dva parametre, ktorými sú počiatočná konfigurácia systému  $\mathbf{x}$  a počet iterácií pre zrelaxovanie systému max:

**OR**(**x**,max):

- 1. Nastav hodnotu počítadla krokov  $krok \longleftarrow 0$
- 2. Pokiaľ je krok < max, rob nasledovné paralelne na všetkých spinoch:
  - (a) Pretoč všetky spiny do smeru ich efektívneho poľa (B.1)
  - (b) Uprav veľkosť každého spinu  $\mathbf{S}_i$  sférickou transformáciou tak, aby  $|\mathbf{S}_i| = 1$
  - (c) Zvýš hodnotu počítadla  $krok \longleftarrow krok + 1$

Táto technika zabezpečuje relaxáciu termálne aktivovaného magnetického systému do základného stavu s minimálnou energiou.

 $<sup>^{12}</sup>$ V angl. over-relaxation.

 $<sup>^{13}{\</sup>rm Z}$ veľkého množstva techník, ktoré sa zvyknú zaradzovať medzi prerelaxačné techniky sme vybrali jednu, implementačne nenáročnú.

#### B.1 Efektívne pole pre techniku over-relaxation

Odvoďme vzťah (B.1) pre hamiltonián (2.2) a lokálne pole (2.3). Dôsledným derivovaním a s prihliadnutím ku vzťahom z dodatkov A.1 zisťujeme, že pre jednotlivé parciálne derivácie hamiltoniánu podľa zložiek spinu platí

$$-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial S_{\alpha}^{x}} = H_{\alpha}^{\text{loc},x} + H^{\text{ext},x},$$

$$-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial S_{\alpha}^{y}} = H_{\alpha}^{\text{loc},y} + H^{\text{ext},y},$$

$$-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial S_{\alpha}^{z}} = H_{\alpha}^{\text{loc},z} + H^{\text{ext},z} + 2AS_{\alpha}^{z},$$
(B.2)

kde horné indexy  $x,\,y$ azzodpovedajú jednotlivým zložkám vektorov. Zapísaním v kompaktnom tvare dostávame

$$-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{S}_{\alpha}} \equiv -\frac{\partial \mathcal{H}}{S_{\alpha}^{x}} \mathbf{e}_{x} - \frac{\partial \mathcal{H}}{S_{\alpha}^{y}} \mathbf{e}_{y} - \frac{\partial \mathcal{H}}{S_{\alpha}^{z}} \mathbf{e}_{z} = \mathbf{H}_{\alpha}^{\text{loc}} + \mathbf{H}^{\text{ext}} + 2AS_{\alpha}^{z} \mathbf{e}_{z} \equiv \mathbf{H}_{\alpha}^{\text{eff}}, \tag{B.3}$$

čo nie je nič iné než záporne vzatý gradient hamiltoniánu podľa  $\alpha$ -tej spinovej premennej. Gradientná metóda využíva tento spád k hľadaniu minima funkcie — v našom prípade energie  $\mathcal{H}$  — pomocou dynamiky

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{S}_{\alpha}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\mathbf{S}_{\alpha}} = \mathbf{H}_{\alpha}^{\mathrm{eff}}, \ |\mathbf{S}_{\alpha}| = 1.$$
(B.4)

Berúc do úvahy fakt, že v našom prípade sa jedná o dynamiku spinu na povrchu gule s jednotkovým polomerom, vidíme, že smer vektora  $\mathbf{S}_{\alpha}$  sa nemení, ak je natočený do smeru efektívneho poľa — v takomto prípade nastáva len zmena veľkosti spinu, ktorá je potom opäť sférickou transformáciou zmenená na jednotkovú. Takouto zmenou všetkých spinov do smeru ich efektívneho poľa približujeme stav systému metastabilnej konfigurácii. Ako vidíme, technika over-relaxation predstavuje gradientnú metódu, kde sa gradient realizuje v spinovom priestore. Môže teda slúžiť ako metóda na dosiahnutie najbližšieho lokálneho minima. Ak teda simulovaným žíhaním dosiahneme priblíženie sa ku globálnemu minimu, technika over-relaxation dokáže systém dostať do tohoto minima.

Okrem tejto prerelaxačnej techniky existuje aj ďalšia, ktorá je založená na použití *Landauovej-Lifshitzovej-Gilbertovej* rovnici (C.13) bez precesného člena. Tento prístup má výhodu v tom, že je viac fyzikálny a súčasne zachováva veľkosť spinu  $\mathbf{S}_i$ .

## C SOM siete

Neurónové siete typu  $SOM^{14}$  sú samoorganizované siete schopné učenia sa bez učiteľa, klasifikácie a zhlukovania dát. Sú preto vhodné najmä na problémy *pattern-recognition*<sup>15</sup> a pod. V rámci neurónových sietí sa javia ako dobrým kompromisom v otázke stabilita–plasticita.

Proces učenia týchto sietí pozostáva z troch fáz: (i) *konkurenčnej*, (ii) *kooperatívnej* a (iii) *adaptívnej*. Formálne zavedenie adaptovaného vektora a vhodná definícia normy (resp. postačuje aj definícia vzdialenosti dvoch vektorov bez zavedenia normy) určujúcej vzdialenosť dvoch takýchto vektrorov sú podmieňujúce pre správnu funkčnosť siete a jej rýchle učenie. Vektory reprezentujúce daný stav sústavy sú pri učení siete privádzané na vstup siete, kde sú následne porovnávané so všetkými reprezentantmi uchovávanými neurónovou sieťou.

Ak privádzané vstupy označíme  $\mathbf{w}_t$ , kde t určuje poradie vstupného vektora — u nás krok Monte Carlo simulácie, a ak reprezentantov komprimovaných v neurónovej sieti označíme  $\mathbf{W}_k$ , k indexuje reprezentantov, tak učeným reprezentantom siete sa v *konkurenčnej fáze* stáva vektor s indexom

$$k^{\star} = \arg\min_{k=1,2,\dots,N} ||\mathbf{W}_k - \mathbf{w}_t||, \tag{C.1}$$

kde  $\mathcal{N}$  je počet uchovávaných reprezentantov. *Kooperatívna* fáza zaručuje výber okolia reprezentanta  $k^*$ , ktoré sa bude podieľať na učení — u nás táto fáza bola redukovaná na výber jediného adaptovaného vektora  $\mathbf{W}_{k^*}$ . Vo fáze *adaptácie* sú nakoniec vybrané vektory učené zväčša pomocou *Hebbovho* pravidla

$$\mathbf{W}_{k^{\star}} \longleftarrow (1 - \gamma(t)) \mathbf{W}_{k^{\star}} + \gamma(t) \mathbf{w}_{t}.$$
(C.2)

Volili sme  $\gamma(t)$  exponenciálne klesajúce s počtom iterácií t:

$$\gamma(t) = \gamma_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau_N}\right),\tag{C.3}$$

kde $\gamma_0$  je hodnota parametra učenia na začiatku simulácie <br/>a $\tau_N$  je relaxačná konštanta.

<sup>&</sup>lt;sup>14</sup>Z anglického Self Organized Map.

<sup>&</sup>lt;sup>15</sup>Vyhľadávanie vzorov.

Pri učení neurónovej siete sme naviac používali niekoľko kritérií zabezpečujúcich väčšiu stabilitu i plasticitu SOM siete.

**Kreovanie neurónu:** Toto kritérium poskytuje nájdenie vhodného počtu reprezentantov bez explicitného zadania a tým zvyšuje plasticitu siete. Podmienka pre kreáciu neurónu je

$$||\mathbf{W}_{k^{\star}} - \mathbf{w}_t|| > \xi,\tag{C.4}$$

kde  $\xi$  je parameter *vigilance*<sup>16</sup>. Znamená to, že ak najbližší (víťazný) reprezentant je dostatočne blízko k vstupujúcemu vektoru, prebehne adaptácia. Keď však vzdialenosť vstupného vektora je aj od najbližšieho reprezentanta veľká (teda väčšia než  $\xi$ ), vstup je považovaný za vektor patriaci ešte nezistenému klastru a teda nastane kreovanie nového reprezentanta podľa pravidiel

$$\mathcal{N} \longleftarrow \mathcal{N} + 1,$$

$$\mathbf{W}_{\mathcal{N}} \longleftarrow \mathbf{w}_{t}.$$
(C.5)

Anihilácia neurónov: Táto procedúra zabraňuje výskytu dvoch neurónov, ktoré by reprezentovali rovnaký stav. Pre anihiláciu neurónov zavádzame podmienku

$$||\mathbf{W}_k - \mathbf{W}_l|| < \xi, \ k, l = 1, 2, \dots, \mathcal{N}, \ k \neq l.$$
 (C.6)

Neuróny  $\mathbf{W}_k$  a  $\mathbf{W}_l$ , ktoré túto podmienku spĺňajú, považujeme za dve reprezentácie jedného stavu (klastra) a tak inicializujeme ich zánik a namiesto nich vzniká nový neurón  $\mathbf{W}_k$  podľa nasledujúcich pravidiel:

$$\mathbf{W}_{k} \longleftarrow \frac{1}{2} (\mathbf{W}_{k} + \mathbf{W}_{l}), 
\mathbf{W}_{l} \longleftarrow \mathbf{W}_{\mathcal{N}}, 
\mathcal{N} \longleftarrow \mathcal{N} - 1.$$
(C.7)

Naučená sieť môže slúžiť ako reprezentácia vstupných dát, avšak môže byť ďalej využitá na klasifikáciu vstupných dát, ktoré nemusia nutne byť odlišné od tých, ktoré boli

<sup>&</sup>lt;sup>16</sup>V preklade bdelosť, ostražitosť, opatrnosť.

použité na učenie siete. Klasifikácia je prevádzaná na základe výberu najbližšieho reprezentanta podľa vzťahu (C.1). Naviac stavy spĺňajúce (C.4) je možné pri klasifikácii považovať za neklasifikované. Výber spočíva na pleciach programátora a jeho cieľoch.

#### C.1 Algoritmus pre SOM sieť uvedeného modelu

**Tvar adaptovaného vektora a norma:** Adaptovaný "vektor" môžeme pri našom modeli najjednoduchšie definovať ako *N*-ticu všetkých spinov nanočastice, kedy symbolicky

$$\mathbf{w}_t = \{ \mathbf{S}_i(t) | i = 1, 2, \dots, N \},$$
 (C.8a)

kde N je počet spinov nanočastice. Vzdialenosť vektorov v takomto prípade definujeme podobným vzťahom ako vorticitu (3.24):

$$||\mathbf{W}_{k} - \mathbf{W}_{l}|| = 1 - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \mathbf{S}_{j}^{(k)} \cdot \mathbf{S}_{j}^{(l)},$$
 (C.8b)

kde horný index v zátvorke určuje príslušnosť k reprezentantovi. Adaptačná formula (C.2) je aplikovaná na každý spin reprezentanta  $\mathbf{S}_i^{(k)}$  zvlášť. Iná možnosť ktorú sme použili je definícia adaptovaného vektora v tvare

$$\mathbf{w}_t = \{\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_N; v(t), S^x(t), S^y(t)\},\tag{C.9a}$$

kde v(t) je vorticita,  $S^x(t)$  a  $S^y(t)$  sú priemety celkového magnetického momentu nanočastice do karteziánskych osí x a y dané vzťahom

$$S^{\alpha}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} S_i^{\alpha}(t), \ \alpha = x, y,$$
 (C.9b)

 $S_i^{\alpha}(t)$  je priemet *i*-teho spinu v čase *t* do smeru osi  $\alpha$ . V takomto prípade sme sa obmedzili na kvázi-Euklidovskú normu<sup>17</sup>, v ktorej sú zakomponované len priemety magnetického momentu nanočastice a vorticita

$$||\mathbf{W}_{k} - \mathbf{W}_{l}|| = \sqrt{(S^{x,(k)} - S^{x,(l)})^{2} + (S^{y,(k)} - S^{y,(l)})^{2} + \kappa^{2} (v^{(k)} - v^{(l)})^{2}}, \qquad (C.9c)$$

 $<sup>^{17}\</sup>mathrm{V}$ tom<br/>to prípade sme vzdialenosť vektorov definovali cez normu a rozdiel vektorov, zatiaľ čo v prípade (C.8b) sme boli nútení definovať vzdialenosť vektorov priamo bez normy.

kde  $\kappa$  je konštanta, ktorá charakterizuje previazanosť jednotlivých veličín použitých v norme. Aj napriek tomu, že jednotlivé spiny nanočastice nevystupujú v norme, práve oni sú adaptované tak ako v predchádzajúcom prípade. Veličiny v,  $S^x$  a  $S^y$  sú následne dopočítané — zastávajú len funkciu veličín určujúcich vzdialenosť (resp. veľkosť) vektorov.

Porovnanie schém (C.8) a (C.9) však, ako zo simulácií vyplýva, dáva kvalitatívne rovnaké výsledky. Reprezentanti získaní oboma spôsobmi boli rovnakí.

Algoritmus adaptácie SOM siete: V tomto prípade ukážeme jeden krok adaptačného algoritmu, kedy na vstup privádzame vstupný vektor (podľa voľby buď (C.8a) alebo (C.9a)) a krok algoritmu t, ktorý je použitý vo vzťahu (C.3) pri adaptácii:

 $SOM(t, w_t)$ :

- 1. Podľa vzťahu (C.1) nájdi najbližšieho reprezentanta  $\mathbf{W}_{k^{\star}}$  ku vstupnému vektoru  $\mathbf{w}_{t}$ .
- Ak je splnená podmienka kreácie reprezentanta (C.4), tak použi schému (C.5), inak adaptuj reprezentanta W<sub>k\*</sub> podľa pravidla (C.2).
- Anihiluj všetky dvojice reprezentantov W<sub>k</sub>, W<sub>l</sub> spĺňajúce podmienku (C.6) podľa pravidiel (C.7).

### C.2 Ukážka použitia SOM siete.

V praxi sa často stretávame s magneticky tvrdými materiálmi, v ktorých vznikajú domény charakterizované jednotnou orientáciou spinov. V nanočasticiach je však rozmer doménovej steny porovnateľný s rozmerom nanočastice, preto ostrý pojem doména stráca zmysel. Niekedy, napríklad pri časovo náročných simuláciách, je však žiadané poznať zjednodušenú reprezentáciu magnetickej častice, kedy týmto spôsobom môžeme značne urýchliť simuláciu.

Pre tento prípad je výhodné získať reprezentáciu magnetickej konfigurácie častice pomocou SOM siete, ktorá vyhľadá kvázi-homogénne "domény". Vektor  $\mathbf{w}_t$  je potom definovaný vzťahom

$$\mathbf{w}_t = (r_t^x, r_t^y, s_t^x, s_t^y), \ t = 1, 2, \dots, N.$$
(C.10)



Obrázok 15: Rozklad vektorového poľa na kvázi-homogénne domény

V tomto prípade  $r_t^x$  a  $r_t^y$  sú karteziánske zložky polohového vektora spinu,  $s_t^x$  a  $s_t^y$  sú veľkosti tohoto spinu a N je počet spinov. Sieť SOM uchováva potom M reprezentantov v tvare

$$\mathbf{W}_{k} = (R_{k}^{x}, R_{k}^{y}, S_{k}^{x}, S_{k}^{y}), \ k = 1, 2, \dots, M.$$
(C.11)

Norma je definovaná vzťahom:

$$||\mathbf{w}_{i} - \mathbf{w}_{j}|| = \sqrt{\kappa^{2} \left[ (r_{i}^{x} - r_{j}^{x})^{2} - (r_{i}^{y} - r_{j}^{y})^{2} \right] + (m_{i}^{x} - m_{j}^{x})^{2} + (m_{i}^{y} - m_{j}^{y})^{2}}.$$
 (C.12)

Tu je  $\kappa$  opäť konštanta spriahnutia jednotlivých veličín. Takto definovanú SOM sieť sme aplikovali na štvorcové dvojrozmerné vektorové pole, ktoré bolo získané z neusporiadanej spinovej konfigurácie riešením *Landauovej-Lifshitzovej* rovnice

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{S}_i}{\mathrm{d}t} = -\gamma\mu_0\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i^{\mathrm{eff}} - \gamma\mu_0\mathcal{L}\left(\mathbf{S}_i \times \left(\mathbf{S}_i \times \mathbf{H}_i^{\mathrm{eff}}\right)\right),\tag{C.13}$$

kde  $\mathbf{S}_i$  je magnetizácia *i*-teho elementu,  $\gamma$  je gyromagnetický pomer,  $\mu_0$  je permeabilita vákua,  $\mathcal{L}$  je bezrozmerný tlmiaci parameter a  $\mathbf{H}_i^{\text{eff}}$  je efektívne pole na *i*-tom elemente, ktoré je súčtom výmennej a magnetostatickej interakcie. Pritom jednotlivé spiny boli na vstup SOM siete privádzané v náhodnom poradí.

SOM sieť nám na konci výpočtu poskytla nielen reprezentáciu vstupného vektorového poľa (červené šípky na obrázku 15), ale aj umožnila klasifikáciu jednotlivých vektorov. Tak vznikli doménové štruktúry — zhluky spinov na základe definovanej normy prislúchajúcich jednému reprezentantovi. Vzhľadom na to, že klasifikované vektory boli rovnaké ako učiace vektory, ku každému vektoru bol nájdený reprezentant vzdialený menej ako vigilance parameter  $\xi$ .

## Referencie

- [1] D. Horváth, M. Gmitra, J. Magn. Magn. Mater. 256 (2003) 195–213
- [2] S.Y. Chou, Proc. IEEE 85 (1997) 652
- [3] Te-Ho Wu, J.C. Wu, Bing-Mau Chen, Han-Ping D. Shieh, J. Magn. Magn. Mater. 193 (1999) 155
- [4] K.Yu. Guslienko, Appl. Phys. Lett. 75 (1999) 394
- [5] R.L. Stamps, R.E. Camley, J. Magn. Magn. Mater. 177 (1998) 813
- [6] M. Pardavi-Horvath, J. Magn. Magn. Mater. 198 (1999) 219
- [7] T. Schrefl, J. Magn. Magn. Mater. 207 (1999) 66
- [8] J.P. Park, P.A. Crowell, Phys. Rev. Lett. 95, 167201 (2005)
- [9] K.Yu. Guslienko, K.L.Metlov, Phys. Rev. B 63, 100403 (2001)
- [10] T. Uhlig, M. Rahm, Ch. Dietrich, R. Höllinger, M. Heumann, D. Weiss, J. Zweck, Phys. Rev. Lett. 95, 237205 (2005)
- [11] T. Schrefl, J. Fidler, K.J. Kirk, J.N. Chapman, J. App. Phys., Vol. 85, Nr. 8, 6169 (1999)
- [12] K.Yu. Guslienko, V. Novosad, Y. Otani, H. Shima, K. Fukamichi, Phys. Rev. B 65, 024414 (2002)
- [13] A.B. Bortz, M.H. Kalos, J.L. Lebowitz, A new algorithm for Monte Carlo simulations of Ising spin systems, J. Comp. Phys. 17, 10 (1975)
- [14] R.H. Swendsen, J.-S. Wang, Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulation, Phys. Rev. Lett. 58, 86 (1987)
- [15] A.M. Ferrenberg, R.H. Swendsen, New Monte Carlo technique for studying phase transition, Phys. Rev. Lett. 61, 2635 (1988)
- [16] J. Lee, Phys. Rev. Lett. 71, 211 (1993)
- [17] F. Wang, D.P. Landau, Phys. Rev. Lett., Vol. 86, Nr. 10 (2001)
- B.A. Berg, T. Neuhaus, Phys. Rev. Lett. 68, 9 (1992), Phys. Lett. B 267, 249 (1991), B.A. Berg,
   J. Stat. Phys. 82, 323 (1996), B.A. Berg, Nucl. Phys. B 63, 982 (1998)
- [19] U.H.E. Hansmann, Y. Okamoto, Phys. Rev. E 54, 5 (1996)
- [20] H. Kachkachi, A. Ezzir, M. Nogues, E. Tronc, Eur. Phys. J. B14 (2000) 681-689

- [21] H. Kachkachi, M. Dimian, Hysteretic properties of a magnetic particle with strong surface anisotropy, Phys. Rev. B 66, 174419 (2002)
- [22] Daniel T. Gillespie, Exact Stochastic Simulation of Coupled Chemical Reactions, The Journal of Physical Chemistry, Vol. 81, No. 25, 1977
- [23] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, N.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller: Equation of State Calculations for Fast Computing Machines, J. Chem. Phys 21 (1953) 1087-1092
- [24] S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt Jr., M.P. Vecchi: Optimization by Simulated Annealing, Science 220 (1983) 671-680
- [25] J. Černý, Thermodynamical Approach to the Travelling Salesman Problem: An Efficient Simulation Algorithm, J. Opt. Theory Appl. 45 (1985) 41-51
- [26] K.P.N. Murthy, An introduction to Monte Carlo simulations in statistical physics, cond-mat/0104167 (2003)