

**ՀՀ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԻ ԱԶԳԱՅԻՆ ԱԿԱԴԵՄԻԱՅԻ  
ԻՆՖՈՐՄԱՏԻԿԱՅԻ ԵՎ ԱՎՏՈՄԱՏԱՑՄԱՆ ՊՐՈԲԼԵՄՆԵՐԻ  
ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ**

**Արաջյան Հակոբ Գագիկի**

**3D սպինային ապակու մոդելավորումը հաշվի առնելով արտաքին  
դաշտում համակարգի ռելաքսացիան**

Ե.13.05 «Մաթեմատիկական մոդելավորում, թվային մեթոդներ և ծրագրերի  
համալիրներ» մասնագիտությամբ  
Ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի  
գիտական աստիճանի հայցման ատենախոսության

**ՍԵՂՍԱԳԻՐ**

Երևան - 2012

---

---

**ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ИНФОРМАТИКИ И АВТОМАТИЗАЦИИ  
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК РА**

**Абаджян Акоп Гагикович**

**Моделирование 3D спинового стекла с учетом релаксации  
системы во внешнем поле**

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-  
математических наук  
по специальности 05.13.05 “Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ”

Երևան – 2012

Ատենախոսության թեման հաստատվել է ՀՀ ԳԱԱ Ինֆորմատիկայի և ավտոմատացման պրոբլեմների ինստիտուտում

Գիտական ղեկավար՝	Ֆ. մ. գ. դ.	Ա. Ս. Գևորգյան
Պաշտոնական ընդդիմախոսներ՝	Ֆ. մ. գ. դ. տ. գ. թ.	Հ. Բ. Մարանջյան Ռ. Գ. Հակոբյան

Առաջատար կազմակերպություն՝ Ա. Ի. Ալիխանյանի անվան ազգային գիտական լաբորատորիա (Երևանի Ֆիզիկայի Ինստիտուտ) Հիմնադրամ

Պաշտպանությունը կայանալու է 2012թ. մայիսի 3-ին, ժամը 16.00-ին ՀՀ ԳԱԱ Ինֆորմատիկայի և ավտոմատացման պրոբլեմների ինստիտուտի 037 «Ինֆորմատիկա և հաշվողական համակարգեր» մասնագիտական խորհրդի նիստում, հետևյալ հասցեով՝ 0014, Երևան, Պ.Սևակի 1:

Ատենախոսությանը կարելի է ծանոթանալ ՀՀ ԳԱԱ ԻԱՊԻ-ի գրադարանում:

Սեղնագիրն առաքված է 2012թ. ապրիլի 2-ին:

037 մասնագիտական խորհրդի գիտական քարտուղար, Ֆ. մ. գ. դ.



Հ. Գ. Սարուխանյան

---

Тема диссертации утверждена в Институте проблем информатики и автоматизации НАН РА

Научный руководитель:	д.ф.м.н.	А. С. Геворкян
Официальные оппоненты:	д.ф.м.н. к.т.н.	Г. Б. Маранджян Р. Г. Акопян

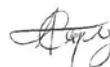
Ведущая организация: Национальная научная лаборатория имени А. И. Алиханяна (Ереванский институт физики) фонд

Защита состоится 3 мая 2012г. в 16.00 часов на заседании специализированного совета 037 “Информатика и вычислительные системы” Института проблем информатики и автоматизации НАН РА по адресу: 0014, Ереван, ул. П. Севака 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИПИА НАН РА.

Автореферат разослан 2 апреля 2012г.

Ученый секретарь специализированного совета 037, д.ф.м.н.



А. Г. Саруханян

## ԱՇԽԱՏԱՆՔԻ ԸՆԴՀԱՆՈՒՐ ԲՆՈՒԹԱԳԻՐԸ

### Թեմայի արդիականությունը

Բնության և մարդկային հասարակության մեջ բարդ համակարգերը վիճակագրական հավասարակշռության սահմանում նկարագրվում են որոշակի պարամետրերի միջոցով, որոնք շատ հաճախ մեծ արդյունավետությամբ հնարավոր է մոդելավորել չկարգավորված սպինային համակարգերի միջոցով: Նշենք, որ դասական Հեյզենբերգի Համիլտոնիանի շրջանակներում կատարվել են բազմաթիվ տեսական և թվային հետազոտություններ, սակայն նրանք հիմնականում վերաբերվում են միաչափ և երկչափանի մոդելներին: Շատ ավելի քիչ են այն հետազոտությունների քանակը, որոնք վերաբերվում են երեք և ավելի չափողականություններով մոդելներին և հատկապես դրանց քվանտային տարբերակներին: Հիշեցնենք, որ մեծ չափողականությամբ խնդիրների հետազոտություններն, որպես կանոն, իրականացվում են թվային մոդելավորման ճանապարհով: Ինչպես ցույց է տալիս այս ուղղության զարգացման ներկայիս դրությունը, նույնիսկ համեմատաբար փոքր թվով սպինային համակարգերի թվային մոդելավորումը բավականին դժվար հաշվողական խնդիր է և այն հնարավոր է իրականացնել միայն ժամանակակից գերհամակարգիչների վրա: Չկարգավորված սպինային համակարգերի կարևոր դաս է հանդիսանում *սպինային սպակինները*: Այդ համակարգերի մոդելավորման միջոցով, նյութի վրա գործադրված արտաքին ազդակի տարածա-ժամանակային մասշտաբների վրա, հնարավոր է ստանալ շատ կարևոր գիտական տեղեկատվություն նյութի կառուցվածքի և հատկությունների վերաբերյալ: Նշված հետազոտություններն արդիական են հատկապես ժամանակակից տեխնիկայի և տեխնոլոգիաների զարգացման տեսանկյունից, որոնց տարածա-ժամանակային մասշտաբները *նանո*, այսինքն  $10^{-9}$  կարգի են:

Նկատենք, որ վիճակագրական համակարգերի ուսումնասիրման համար հիմնական մաթեմատիկական օբյեկտ է հանդիսանում *վիճակագրական գումարը* (partition function), որն օգտագործելով հնարավոր է կառուցել համակարգի բոլոր թերմոդինամիկական պոտենցիալները, օրինակ, Շենոնի էնտրոպիան, Հելմհոլցի ազատ էներգիան և այլն, ինչպես նաև հաշվել համակարգի բոլոր վիճակագրական պարամետրերը: Վիճակագրական գումարի ներկայացման ընդունված ձևերից է Բոյցմանի կշռային ֆունկցիայով բազմակի ինտեգրալային ներկայացումը կոնֆիգուրացիոն տարածությունում:

Այնհայտ է, որ վիճակագրական գումարի սահմանումը ճիշտ է, եթե տրված է ինտեգրման տիրույթը: Դիտարկվող խնդրում սակայն ինտեգրման տիրույթը հանդիսանում է բազմաչափ տոպոլոգիական տարածություն, որը չափազանց դժվար է հետազոտման տեսանկյունից: Նշենք, որ մինչև այժմ վիճակագրական գումարը և նրա ածանցյալները հաշվարկվում են ամբողջ կոնֆիգուրացիոն տարածության մեջ՝ որոշ մոդելների համար անալիտիկորեն, բայց հիմնականում Մոնտե-Կառլո ալգորիթմի կամ նրա տարբեր ձևափոխությունների վրա հիմնված ալգորիթմների թվային մոդելավորմամբ: Սակայն նշված ալգորիթմների միջոցով իրականացված հաշվարկների հավաստիությունը, մաթեմատիկական տեսանկյունից ակնհայտ չէ և առավել ևս սպառնուցիվ է: Մոդելավորման խնդիրները սկսում են ավելի բարդանալ, երբ մենք փորձում ենք հետազոտել վիճակագրական և դինամիկ երևույթները, որոնք նշված համակարգում առաջանում են արտաքին ազդակների կիրառմամբ՝ այդ ազդակներին

տարածա-ժամանակային մասշտաբների վրա: Նշված դեպքում հաշվարկները որպես կանոն ուղեկցվում են մեծ և անկանխատեսելի սխալներով:

Այսպիսով, մաթեմատիկորեն հիմնավորված մեթոդների և գուգահեռ ալգորիթմների մշակումը, որոնք թույլ կտան թվայնորեն մոդելավորել  $3D$  սպինային ապակու վիճակագրական հատկությունները արտաքին դաշտերի տարածա-ժամանակային պարբերությունների մասշտաբների վրա, հանդիսանում է կարևոր արդիական խնդիր:

**Աշխատանքի նպատակն ու խնդիրները**

Աշխատանքի հիմնական նպատակն է առաջարկել նոր մոտեցումներ, որոնք թույլ կտան վիճակագրական հավասարակշռության սահմանում առավել ճշգրիտ հաշվել  $3D$  սպինային ապակու բոլոր վիճակագրական պարամետրերը: Հետևաբար, աշխատանքի հիմնական խնդիրներն են.

- Հետազոտել կամայական երկարությամբ չկարգավորված  $1D$  տարածական սպինային շղթաների արտաքին դաշտով չխտորված *իդեալական* (սպիները փոխազդում են միայն շղթայի ներսում) *համույթի* (unperturbed ideal ensemble) վիճակագրական հատկությունները: Կառուցել համակարգի բոլոր վիճակագրական պարամետրերի բաշխման ֆունկցիաները, այդ թվում սպին-սպին փոխազդեցության հաստատունի բաշխման ֆունկցիան համույթի *հիմնական վիճակում* (սպինային համակարգի մինիմալ էներգիայի վիճակում),
- Հետազոտել  $1D$  *իդեալական համույթի* վիճակագրական հատկությունները արտաքին դաշտի տարածա-ժամանակային պարբերությունների մասշտաբների վրա,
- Հետազոտել  $1D$  *իդեալական համույթի* վիճակագրական հատկությունները՝ հաշվի առնելով համակարգում ընթացող ռելաքսացիոն երևույթները: Մշակել գուգահեռ ալգորիթմ՝ *ֆրաստրացված համակարգի* (frustrated system) մոդելավորման համար, ներառյալ այն կետերում, որտեղ համակարգը ցուցաբերում է կրիտիկական հատկություններ,
- $3D$  սպինային ապակիների բերելիության հնարավորությունը  $1D$  *ոչ իդեալական* (երբ շղթաների միջև փոխազդեցությունը պատահական է) *համույթին* (nonideal ensemble),
- Ստեղծել գուգահեռ ալգորիթմներ և ծրագրային փաթեթ, որը մշակված մեթոդների հիման վրա հնարավորություն կտա կառուցել բննարկված մոդելների բոլոր կարևոր վիճակագրական պարամետրերի բաշխման ֆունկցիաները:

Նշենք, որ հետազոտությունների նշված ծավալի իրագործումը թույլ կտա ստեղծել բարդ համակարգերի լայն դասի սիմերգետիկ օրինաչափությունները մոդելավորելու համար օգտակար և կարևոր *մաթեմատիկական գործիք*:

**Հետազոտման օբյեկտներ են** հանդիսանում չկարգավորված բարդ համակարգերը, որոնք հնարավոր են նկարագրել  $3D$  պարբերական ցանցի միջոցով: Մաթեմատիկորեն դրանք ներկայացվում են սպինային ապակիների մոդելներով դասական Հեյզենբերգի մոտակա-հարևան Համիլտոնիանի (nearest-neighboring Hamiltonian) շրջանակներում, որը սահմանվում է կանոնավոր  $3D$  դիսկրետ ցանցի վրա:

### **Հետազոտման մեթոդները**

Հետազոտությունների ընթացքում օգտագործվել են բազմազան անալիտիկ մեթոդներ՝ ռեկուրենտ տրանսցենդենտ հավասարումների համակարգը և համապատասխան *ID* պարբերական դիսկրետ ցանցի վրա Սիլվեստրի պայմանները ստանալու համար: Դա անհրաժեշտ է, որպեսզի ստեղծվի բարձր արտադրողական ալգորիթմ՝ *հիմնական վիճակում* գտնվող (ground state) սպինային շղթաների ճշգրիտ մոդելավորման համար: Համիլտոնիան մեխանիկան, սպինային համակարգի Հեյզենբերգի մոդելը, Բիրկհոֆֆի էրգոդիկ կանխադրույթը և հավանականության տեսության ընդունված սահմանումները օգտագործվել են վիճակագրական համակարգի տարբեր բաշխումների կառուցման և հաշվարկման համար: Խնդրի տարբեր փուլերի թվային մոդելավորման և համապատասխան թվային տվյալների տեսանելիացման (visualization) համար օգտագործվել են *Matlab/Octave*, *Mathematica*, *ALPS*, *Plot*, *MAPPLE*, *Gnu Scientific Library* հայտնի ծրագրային փաթեթները:

### **Արդյունքների գիտական նորույթը**

Ատենախոսությունում հետազոտվել է *3D* սպինային ապակի համակարգը՝ դիսկրետ ցանցի վրա ռեկուրենտ հավասարումների համակարգի ճշգրիտ մոդելավորման եղանակով: Սպինային ապակի համակարգում ռելաքսացիոն երևույթները, որոնք առաջանում են արտաքին ազդակների առկայությամբ, դիտարկվում են կոմպլեքս-դասական հետազոտների (complex-classical trajectories) ներկայացման շրջանակներում: Նշված խնդիրների լուծման համար ստեղծվել է յուրօրինակ ծրագրային փաթեթ: Նշված խնդիրների թվային մոդելավորման համար մշակվել է բարձր արտադրողական ալգորիթմներ և համապատասխան մաթեմատիկական գործիք: Ատենախոսության մեջ ստացված բոլոր տեսական, ալգորիթմական և ծրագրային արդյունքները *նոր* են:

### **Ստացված արդյունքների կիրառական նշանակությունը**

Դիտարկված մոդելների կիրառությունների ոլորտները չափազանց լայն են: Ատենախոսության արդյունքները կարող են օգտագործվել ֆիզիկայի, քիմիայի, նյութագիտության, կենսաբանության, էվոլյուցիայի, կազմակերպության դինամիկայի, բարդ օպտիմիզացիայի, բնապահպանության և սոցիոլոգիական կառույցների, մարդկային տրանսբանության համակարգերի, ֆինանսական մաթեմատիկայի և այլ բնագավառներում:

### **Ներդրումներ**

Մշակվել է ծրագրային փաթեթ, որը հնարավորություն է տալիս *կլաստերային հաշվողական համակարգում* (*ArmCluster*-ի միջավայրում) և ընհանուր նշանակության համար նախատեսված *GPGPU* նոր զարգացող ոլորտում *գրաֆիկական քարտերի* (General-Purpose computing on Graphics Processing Units) վրա կատարել զուգահեռ հաշվարկներ՝ օգտագործելով մշակված բարձր արտադրողական ալգորիթմները, որոնք նախատեսված են արտաքին դաշտի առկայությամբ *3D* սպինային ապակիների մոդելավորմանը անհրաժեշտ բոլոր կարևոր վիճակագրական պարամետրերի բաշխման ֆունկցիաները կառուցելու համար:

Ատենախոսության արդյունքների հիման վրա ստեղծված ծրագրային փաթեթը ներդրվել է ՀՀ ԳԱԱ ՖԿՊԻ և ԻԱՊԻ ինստիտուտներում:

**Պաշտպանությանը ներկայացվում են հետևյալ դրույթները.**

- Ապացուցվել է *1D* տարածական սպինային շղթաների (SUC) *իդեալական համույթի* բոլոր վիճակագրական պարամետրերի բաշխման ֆունկցիաների ճշգրիտ հաշվարկի հնարավորությունը *համակարգի հավասարակշռության սահմանում* դասական մեխանիկայի հիմնարար օրենքների շրջանակներում:
- Հաշվարկվել և կառուցվել են *1D* SUC *իդեալական համույթի* ճշգրիտ վիճակագրական բաշխումները արտաքին դաշտի տարածա-ժամանակային պարբերությունների մասշտաբների վրա: Հետազոտվել է համույթի *մագնիսականացման (բևեռացման) պարամետրի* ֆրաստրացիաների վարքը՝ կախված արտաքին դաշտի լարվածության մեծությունից: Յույց է տրվել, որ ֆրաստրացիաներն ունեն ֆռակտալ վարք:
- Յույց է տրվել, որ *1D* սպինային ապակի համակարգում արտաքին դաշտի ազդեցությամբ ընթացող ռելաքսացիոն երևույթները կարող են նկարագրվել կոմպլեքս-դասական հետազոծերի մոտեցման շրջանակներում:
- Տեսականորեն և թվային հաշվարկների ճանապարհով ցույց է տրվել, որ կոմպլեքս-դասական հետազոծերի մոտեցման շրջանակներում կարելի է հաշվարկել սպինային համակարգի բոլոր վիճակագրական հատկությունները՝ ներառյալ կրիտիկական կետերում:
- Ապացուցվել է *3D* սպինային ապակի և *1D* տարածական սպինային շղթաների *ոչ իդեալական* համակարգերի համարժեքությունը՝ Բիրկհոֆֆի էրգոդիկ կանխադրույթի տեղի ունենալու պայմանում:
- Առաջարկվել է սպինային ապակի համակարգի վիճակագրական գումարի ճշգրիտ, վերջավոր թվով ինտեգրավներով ներկայացման նոր տեսք:
- Մշակվել է նմանատիպը չունեցող մաթեմատիկական գործիք սպինային ապակիների մոդելավորման համար՝ ելնելով կոմպլեքս-դասական մեխանիկայի հիմնարար սկզբունքներից (first principles):

**Ստացված արդյունքների ասորագրահան**

Թեկնածուական աշխատանքի հիմնական արդյունքները և դրույթները քննարկվել և ներկայացվել են Դուբնայի *Միջուկային Հետազոտությունների Միավորված Ինստիտուտի* տեսական ֆիզիկայի և ինֆորմացիոն տեխնոլոգիաների լաբորատորիաների գիտական սեմինարներում (2011թ.), ԵՊՀ *Ինֆորմատիկայի և Կիրառական Մաթեմատիկայի* ֆակուլտետի թվային անալիզի և մաթեմատիկական մոդելավորման ամբիոնի գիտական սեմինարներում (2010թ.), ԵՊՀ *Ֆիզիկայի* ֆակուլտետի ակադեմիկոս Գ.Սահակյանի անվան տեսական ֆիզիկայի ամբիոնի սեմինարում (2011թ.), ՀՀ ԳԱԱ *Ֆիզիկայի Կիրառական Պրոբլեմների Ինստիտուտի* գիտական սեմինարներում (2011թ.), ՀՀ ԳԱԱ ԻԱՊԻ գիտական սեմինարում (2011թ.), Վիճակագրական ֆիզիկա միջազգային կոնֆերանսին 2011թ. (SigmaPhi՝ 2011, Լառնակա, Կիպրոս), Հավանականության տեսության և ֆիզիկայի հիմունքներ կոնֆերանսին 2011թ. (FFP6՝ 2011, Վախշո, Շվեդիա), Ֆիզիկայի սիմետրիա մեթոդներ, պրոֆեսոր Միսակյանին նվիրված XV միջազգային կոնֆերանսին 2011թ. (SymPhys՝ 2011, Երևան, Հայաստան), GRID և վիզուալիզացիայի համակարգեր միջազգային կոնֆերանսին 2011թ. (MIPRO GVS՝ 2011, Ռիչեկա, Խորվաթիա), Արտաքին ազդեցությամբ էլեկտրոնային, պոզիտրոնային, նեյտրոնային, ռենտգենյան ճառագայթում միջազգային կոնֆերանսին 2011թ. (EPNXRSEI՝ 2011, Երևան-Մերդի, Հայաստան),

Կոմպյուտերային գիտության և ինֆորմացիոն տեխնոլոգիաներ կոնֆերանսին 2011թ. (CSIT' 2011, Երևան, Հայաստան):

**Հրապարակումներ**

Ատենախոսության թեմայով հրապարակված են 9 գիտական աշխատանքներ, որոնց ցանկը բերված է սեղմագրի վերջում:

**Աշխատանքի կառուցվածքն ու ծավալը**

Ատենախոսությունը բաղկացած է առաջաբանից, հինգ գլուխներից, եզրակացությունից և օգտագործված գրականության ցանկից: Աշխատանքի ծավալը կազմում է 128 էջ, օգտագործված գրականության ցանկն ընդգրկում է 80 անուն:

**ԱՇԽԱՏԱՆՔԻ ԲՈՎԱՆԴԱԿՈՒԹՅՈՒՆԸ**

**Առաջաբանում** հիմնավորվում է թեմայի արդիականությունը, հետազոտության նպատակն ու հիմնական խնդիրները, ձևակերպվում են ուսումնասիրման օբյեկտն ու մեթոդները, հետազոտությունների գիտական նորույթն ու ստացված արդյունքների կիրառական նշանակությունը:

**Առաջին գլխում** հակիրճ ձևակերպվում է սպինային ապակի համակարգերի հիմնախնդիրը, տրվում է միջին դաշտի տեսության (mean-field theory), Մոնտե-Կառլո և Վանդ-Լանդաու ալգորիթմների վերաբերյալ անհրաժեշտ տեղեկատվություն և հիմնադրույթները, նկարագրվում է սպինային ապակի համակարգերի մոդելը, ինչպես նաև բերված է աշխատանքի համառոտ նկարագրությունն ըստ գլուխների:

§1.1-ում բերված է աշխատանքի համառոտ նկարագրությունն ըստ գլուխների:

§1.2-ում նկարագրված են սպինային ապակի տեսության մեջ օգտագործվող հիմնական մոդելների սահմանումներն ու բերված են այս աշխատանքի շրջանակներում արված նշանակումները և սահմանումները:

§1.3-ում բերված են սպինային ապակի տեսության մեջ մինչև այժմ արված հետազոտությունների հիմնական արդյունքները, և ներկայացված են սպինային ապակի համակարգերի հիմնախնդիրները: Ինչպես նաև հիմնավորված է նոր տեսական մոտեցումների անհրաժեշտությունը և զուգահեռ մոդելավորման համար մաթեմատիկական ալգորիթմների մշակման կարևորությունը:

§1.4-ում նկարագրված է դասական Մոնտե-Կառլո մեթոդը, որը մինչև այժմ օգտագործվում է սպինային ապակի համակարգերը նկարագրող բազմաչափ ինտեգրալներ հաշվելու համար՝ հիմնվելով փուլային տարածության մեջ պատահական կետերի որոնման մեթոդի վրա, որի արդյունքում գտնվում են այնպիսի նախընտրելի տիրույթներ, որոնք ունեն զգալի ներդրում ինտեգրալի հաշվման մեջ: Նշված մոտեցումն օգտագործում է Մարկովյան շղթաների գեներացիան, որն իրենից ներկայացնում է այնպիսի հաջորդականություն, երբ հաջորդ վիճակը միմյայն կախված է ներկա վիճակից և կախված չէ նախորդ վիճակներից:

§1.4.1-ում բերված է Մետրոպոլիսի ալգորիթմի նկարագրությունը: Ինչպես հայտնի է, թերմոդինամիկական մեծությունների հաշվարկներն արվում են Մարկովյան էրգոդիկ շղթաներով՝ միջինացման կանոնակարգի միջոցով: Տրված բաշխման ֆունկցիայով Մարկովյան պրոցեսների իրականացման տարբերակներից մեկը հանդիսանում է

Մետրոպոլիսի ալգորիթմը:

**§1.4.2-**ում բերված է Վանգ-Լանդաուի ալգորիթմի նկարագրությունը: Այն հանդիսանում է Մետրոպոլիսի ալգորիթմի ընդհանրացումը, որն օգտագործվում է տարբեր խնդիրների կոմպյուտերային մոդելավորման, մասնավորապես, սպինային ապակու վիճակների խտությունը հաշվելու համար:

**§1.5-**ում բերված է *ALPS* ծրագրային գործիքի հիմնական հնարավորությունների ցուցակը: Այն տրամադրում է ալգորիթմների տարբեր իրականացումներ և պատրաստի գրադարաններ՝ նախատեսված թվային մոդելավորման համար: Այն հանդիսանում է բաց կոդով ծրագիր (open-source) և յուրաքանչյուրը կարող է կատարել ցանկացած ծրագրային փոփոխություն կողի մեջ՝ ալգորիթմներն իր խնդիրն հարմարեցնելու նպատակով:

**Երկրորդ գլխում** հետազոտված են տարբեր երկարությամբ *1D* չկարգավորված տարածական սպինային շղթաների իդեալական համույթի վիճակագրական հատկությունները: Ապացուցվել է, որ սպին-սպին փոխազդեցության հաստատունը բավարարում է Լեվիի կտրված ալֆա-կայուն բաշխման օրենքին:

Կատարվել է այս խնդրի *MPI* և *CUDA* իրականացումների համեմատությունը, ինչպես նաև առաջարկվել է *MPI* և *GPU* նոր համատեղ արդյունավետ իրականացում:

**§2.1-**ում բերված է *1D* չկարգավորված տարածական սպինային շղթաների իդեալական համույթի համար սպինային ապակի մոդելի մաթեմատիկական խնդրի դրվածքը:

**Մահմանում 2.1:** Միավոր երկարության  $S_i$  վեկտորը, որն *3D* տարածության մեջ ունի պատահական ուղղորդվածություն, կոչվում է տարածական սպին:

**Մահմանում 2.2:** Վերջավոր երկարության պարբերական *1D* ցանցի վրա որոշված պատահական ուղղորդվածությամբ սպինների բազմությունը կոչվում է չկարգավորված տարածական սպինային շղթա:

**Մահմանում 2.3:** Սպինային շղթայում կամայական 2 հարևան  $S_i$  և  $S_{i+1}$  տարածական *1D* սպիններ փոխազդում են միմյանց հետ պատահականորեն:  $J_{i, i+1}$  կոչվում է պատահական փոխազդեցության հաստատուն  $i$  և  $i+1$  սպինների միջև, որը կարող է ընդունել դրական և բացասական արժեքներ: Նշենք, որ  $0 \leq i \leq N_x - 1$ ,  $N_x$ -ն սպինային շղթայում սպինների թիվն է:

**Մահմանում 2.4:** Գասական չկարգավորված տարածական *1D* սպինային շղթաների իդեալական համույթ է կոչվում չկարգավորված տարածական *1D* սպինային շղթաների բազմությունը, երբ սպինային շղթաների միջև փոխազդեցությունը բացակայում է (տես Նկ. 1):

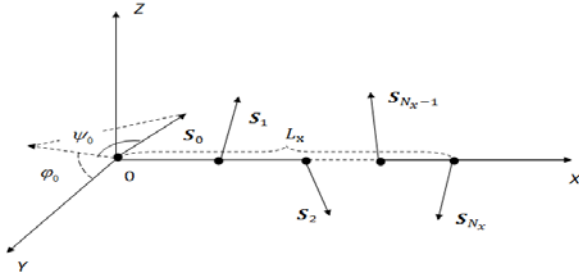
**Մահմանում 2.5:** Հետևյալ արտահայտությունը

$$H_o(N_x) = - \sum_{i=0}^{N_x-1} J_{i, i+1} S_i S_{i+1}$$

կոչվում է Հեյզենբերգի մոտակա-հարևանների *1D* սպինային ապակու Համիլտոնիան առանց արտաքին դաշտի առկայության, որտեղ  $N_x$ -ն շղթայում առկա սպինների թիվն է:

Լոկալ մինիմումի կայունության պայմանը  $i$ -րդ սպինի համար հետևյալն է.





Նկար 1:  $L_x = d_0 N_x$  երկարությամբ չկարգավորված տարածական  $ID$  սպինային շղթա է պատահական փոխազդեցություններով, որտեղ  $d_0$ -ն մոտակա-հարևան սպինների հեռավորությունն է,  $N_x$ -ն շղթայում սպինների քանակն է, իսկ  $(\varphi_i, \psi_i)$ -ն  $S_i$  սպինի տարածական ուղղորդվածությունն է:

$$\frac{\partial H_o}{\partial \psi_i} = 0, \quad \frac{\partial H_o}{\partial \varphi_i} = 0,$$

և համապատասխան Սիլվեստրի անհավասարությունները

$$A_{\psi_i, \psi_i}(\Theta_i^0) > 0, \quad A_{\psi_i, \psi_i}(\Theta_i^0) A_{\varphi_i, \varphi_i}(\Theta_i^0) - A_{\psi_i, \varphi_i}^2(\Theta_i^0) > 0,$$

որտեղ  $\Theta_i = (\psi_i, \varphi_i)$ -ն սֆերիկ կոորդինատային համակարգում  $i$ -րդ սպինի անկյուններն են, իսկ  $A_{\alpha_i, \alpha_i}(\Theta_i) = \partial^2 H_0 / \partial \alpha_i^2$ ,  $A_{\alpha_i, \beta_i}(\Theta_i) = A_{\beta_i, \alpha_i}(\Theta_i) = \partial^2 H_0 / \partial \alpha_i \partial \beta_i$ :

Խնդիրը կայանում է նրանում, որ պահանջվում է կամայական տրված  $L_x = d_0 N_x$  երկարությամբ չկարգավորված տարածական  $ID$  սպինային շղթաների համույթի համար կառուցել համակարգի բոլոր վիճակագրական պարամետրերի բաշխման ֆունկցիաները՝ հաշվի առնելով սպինների համար լրկալ միմիմումի պայմանը (համակարգի *հիմնական վիճակում*):

§2.2-ում դուրս են բերված Համիլտոնիանի ստացիոնար կետի և Սիլվեստրի պայմանների անալիտիկ տեսքերը:

**Լեմմա 2.1:** Սֆերիկ կոորդինատային համակարգում Հեյզենբերգի մոտակա-հարևանների  $ID$  սպինային ապակու Համիլտոնիանն ունի հետևյալ տեսքը.

$$H_o(N_x) = - \sum_{i=0}^{N_x-1} J_{i, i+1} [\cos \psi_i \cos \psi_{i+1} \cos(\varphi_i - \varphi_{i+1}) + \sin \psi_i \sin \psi_{i+1}]:$$

**Պնդում 2.1:** Սֆերիկ կոորդինատային համակարգում լրկալ միմիմումի պայմանը  $i$ -րդ սպինի համար ունի հետևյալ տեսքը.

$$\sum_{v=i-1; v \neq i}^{i+1} J_{v, i} [\sin \psi_v - \tan \psi_i \cos \psi_v \cos(\varphi_i - \varphi_v)] = 0, \quad \sum_{v=i-1; v \neq i}^{i+1} J_{v, i} \cos \psi_v \sin(\varphi_i - \varphi_v) = 0, \quad J_{v, i} \equiv J_{i, v}:$$

**Պնդում 2.2:** Սֆերիկ կոորդինատային համակարգում Հեյզենբերգի մոտակա-հարևան  $ID$  սպինային ապակու Համիլտոնիանի երկրորդ կարգի ածանցյալներն ունեն հետևյալ տեսքը.

$$A_{\psi_i, \varphi_i}(\Theta_i) = \left\{ \sum_{v=i-1; v \neq i}^{i+1} J_{v,i} [\cos \psi_v \cos(\varphi_v - \varphi_i) + \tan \psi_i \sin \psi_v] \right\} \cos \psi_i,$$

$$A_{\theta_i, \varphi_i}(\Theta_i) = \left\{ \sum_{v=i-1; v \neq i}^{i+1} J_{v,i} \cos \psi_v \cos(\varphi_v - \varphi_i) \right\} \cos \psi_i, \quad A_{\psi_i, \theta_i}(\Theta_i) = \left\{ \sum_{v=i-1; v \neq i}^{i+1} J_{v,i} \cos \psi_v \sin(\varphi_v - \varphi_i) \right\} \sin \psi_i :$$

**Հետևանք 2.1:** Սիլվեստրի պայմաններն ունեն հետևյալ տեսքը.

$$A_{\psi_i, \varphi_i}(\Theta_i) > 0, \quad A_{\theta_i, \varphi_i}(\Theta_i) > 0:$$

**Սահմանում 2.6:** Կայուն իդեալական համույթի էներգիայի և բևեռացվածության բաշխման ֆունկցիան ունի հետևյալ տեսքը.

$$F_{L_x}(\varepsilon, p) = M_{L_x}(\varepsilon, p) / M_{L_x}^{full},$$

որտեղ  $\varepsilon = \varepsilon / \delta \varepsilon - \delta$  անչափացված էներգիան է, իսկ  $L_x$ -ը սպինային շղթայի երկարությունն է: Էներգիայի և բևեռացվածության առանցքները բաժանված են հետևյալ հատվածների.

$$(0 > \varepsilon_0 > \dots \varepsilon_n), (0 > p_{0;x} > \dots p_{n;x}), (0 > p_{0;y} > \dots p_{n;y}), (0 > p_{0;z} > \dots p_{n;z}), \text{ որտեղ } n \gg 1:$$

$L_x$  երկարությամբ  $ID$  կայուն տարածական սպինային շղթաների (SUC) կոնֆիգուրացիաների քանակն էներգիայի  $[\varepsilon - \delta \varepsilon, \varepsilon + \delta \varepsilon]$  և համապատասխան բևեռացումների  $[p_x - \delta p_x, p_x + \delta p_x]$ ,  $[p_y - \delta p_y, p_y + \delta p_y]$ ,  $[p_z - \delta p_z, p_z + \delta p_z]$  տիրույթներում նշանակված է  $M_{L_x}(\varepsilon, p)$ -ով, մինչդեռ բոլոր  $ID$  կայուն SUC կոնֆիգուրացիաների քանակը՝

$$M_{L_x}^{full} = \sum_{i,j,k=1}^n M_{L_x}(\varepsilon_i, p_{j;x}, p_{i;y}, p_{k;z}):$$

Անհայտ է, որ  $ID$  SUC համույթի բաշխման ֆունկցիան նորմավորված է.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i,j,k=1}^n F_{L_x}(\varepsilon_i, p_{j;x}, p_{i;y}, p_{k;z}) \delta \varepsilon_i \delta p_{j;x} \delta p_{i;y} \delta p_{k;z} = \int_{-\infty}^0 d\varepsilon \int F_{L_x}(\varepsilon, p) d^3 p = 1:$$

Նշենք, որ  $p_x, p_y, p_z$  բևեռացումների ինտեգրման տիրույթները սահմանափակված են  $\pm N_x$ -ով. այսինքն շղթայում սպինների քանակությամբ:

§2.3-ում  $i$ -րդ սպինի համար դուրս է բերվել լոկալ մինիմումի անհրաժեշտ պայմանը: Դա կարևոր նախադրյալ է  $ID$  SUC իդեալական համույթի գուգահեռ սիմուլյացիայի ժամանակ օգտագործվող ալգորիթմ մշակելիս:

**Թեորեմ 2.1:** Եթե որևէ  $i$ -րդ ( $0 \leq i \leq N_x - 1$ ) սպինի համար  $H_0(N_x)$  Համիլտոնիանը բավարարում է լոկալ մինիմումի պայմանին, ապա անհրաժեշտաբար  $J_{i, i+1}^2 \geq C_i^2 + D_i^2$ , որտեղ

$$C_i = J_{i-1,i} [\sin \psi_{i-1} \cos \psi_i - \sin \psi_i \cos \psi_{i-1} \cos (\varphi_i - \varphi_{i-1})], \quad D_i = J_{i-1,i} \cos \psi_{i-1} \sin (\varphi_i - \varphi_{i-1}):$$

**Հետևանք 2.2:**  $x_i = \cos \psi_{i+1}$ ,  $y_i = \sin (\varphi_i - \varphi_{i+1})$  անհայտ փոփոխականներն ունեն հետևյալ անալիտիկ տեսքը.

$$x_i^2 = \frac{D_i^2}{J_{i,i+1}^2 y_i^2}, \quad y_i^2 = D_i^2 \frac{J_{i,i+1}^2 \cos^2 \psi_i \pm 2C_i \sqrt{J_{i,i+1}^2 - C_i^2 - D_i^2} \sin \psi_i \cos \psi_i + E_i + 2C_i^2 \sin^2 \psi_i}{J_{i,i+1}^4 \cos^4 \psi_i + 2J_{i,i+1}^2 E_i \cos^2 \psi_i + (C_i^2 + D_i^2 \sin^2 \psi_i)^2},$$

որտեղ  $E_i = -C_i^2 + D_i^2 \sin^2 \psi_i$ :

§2.4-ում մշակված է մեթոդ, որի շնորհիվ սպինային շրթան հանգույց առ հանգույց կառուցվում է մեծ հավանականությամբ: Այլ խոսքերով, սպին-սպին փոխազդեցության հաստատունի վրա գտնված է նոր  $J_{i,i+1}^2 \geq C_i^2 + D_i^2$  պայմանը, որը թույլ է տալիս արդյունավետ իրագործել սպինային շրթանների մոդելավորումը: Կատարվել են անկախ առանձին փորձեր, երբ մոտակա-հարևան սպինների միջև պատահական փոխազդեցության հաստատունն ընտրվում է տարբեր հավանականային բաշխման ֆունկցիաներից: Բերվել է Սիլվեստրի պայմանների բավարարման փորձնական հաճախությունների համեմատությունների աղյուսակը տարբեր հավանականային բաշխումների համար:

Բաշխման տեսակ	Սիմուլյացիաների քանակ	Սիլվեստրի պայմանի բավարարման քանակը	Հաճախություն (%)
Նորմալ	296	25	9
Կտրված նորմալ	296	47	16
Լոգնորմալ	270	47	17
Կտրված լոգնորմալ	270	83	31
Ցուցային	221	22	10
Կտրված Լեվի	220	181	82
Գամմա	209	11	5

Աղյուսակ 1: Սիլվեստրի պայմանների բավարարման էմպիրիկ հաճախությունների համեմատությունների աղյուսակը տարբեր հավանականային բաշխումների համար:

§2.5-ում բերված է  $ID$  SUC իդեալական համույթի զուգահեռ սիմուլյացիայի համար մշակված զուգահեռ պարզիթմի մանրամասն նկարագրությունը: Արդյունքում կառուցվում են սպինային ապակու բոլոր վիճակագրական պարամետրերի բաշխման ֆունկցիաները:

§2.6-ում նկարագրված են թվային մոդելավորման արդյունքները: Դիտարկվել են  $25 d_0$ ,  $100 d_0$ ,  $1000 d_0$  երկարությամբ չկարգավորված  $ID$  SUC իդեալական համույթները, որտեղ  $d_0$ -ն մոտակա-հարևան սպինների հեռավորությունն է: Սիմուլյացիայի ընթացքում ենթադրվել է, որ սպինային շրթաները կարող են լինել բևեռացված մինչև 20%, որն էլ համարժեք է, որ սպինային շրթայում սպինների գումարը լինի  $-5 \leq p \leq 5$  տիրույթում, որտեղ  $p$ -ն սպինային շրթայի բևեռացվածությունն է: Հաշվարկվել է համակարգի բևեռացվածությունն ըստ բոլոր կոորդինատների, էներգիայի միջին արժեքը, ինչպես նաև

սպին-սպին փոխազդեցության միջին արժեքն ու դիսպերսիան:

§2.7-ում նկարագրված են *ID SUC* իդեալական համույթի համար տարբեր զուգահեռ հաշվողական մոդելներ: Դրանք իրագործվել են վիդեոքարտերի և համակարգչային կլաստերների վրա: Միմուլյացիայի համար առաջարկվել է նոր *MPI/GPU* համատեղ մոտեցում:

§2.7.1-ում բերված է *MPI* իրականացման պսևոդ-կոդը: Բոլոր փորձերն արվել են կլաստերի վրա, որն ունի 4 հանգույց: Յուրաքանչյուր հանգույցն ունի 2 պրոցեսոր: *C++* լեզուն ընտրվել է որպես *MPI* իրականացման լեզու:

§2.7.2-ում բերված է *GPU* իրականացման պսևոդ-կոդը: Ինչպես ցույց է տրված, դասական Հեյզենբերգի տիպի սպինային ապակու մոդելները կիրառության այն օրինակներն են, որոնց արդյունավետությունը *GPU-ի* հնարավորություններից օգտվելիս խիստ բարձրանում է: Բոլոր փորձերն արվել են *NVIDIA Tesla C1060* քարտի վրա:

§2.7.3-ում առաջարկվել է դինամիկ ծրագրավորման մոտեցմամբ ստանալ ավելի արդյունավետ իրականացում զուգահեռ սիմուլյացիայի համար: Հիմնական գաղափարը կայանում է հետևյալում՝ բաժանել մեծ երկարությամբ սպինային շղթաները ավելի փոքր երկարությամբ առանձին սպինային շղթաների, որոնց հաշվարկները կատարվում են շատ ավելի արդյունավետ: Առանձին կտորների բազմաթիվ հաշվարկներից հետո, մեկ ընդհանուր սպինային շղթայում միավորման ճանապարհով, առաջանում են բազմաթիվ հնարավորություններ՝ տրված երկարությամբ սպինային շղթաներ կառուցելու համար:

Մշակվել է *MPI/GPU* համատեղ իրականացում: Տարբեր *CPU* պրոցեսներ կարող են զուգահեռաբար դիմել վիդեոքարտին, որն էլ իր հերթին վկայում է այն մասին, որ կարող ենք ստանալ լիովին զուգահեռացում այս մոտեցման շնորհիվ:

§2.7.4-ում բերված են *GPU* ընդդեմ *MPI* հաշվարկների արագագործության համեմատական արդյունքները: Փորձերն արվել են  $25 d_0$  երկարությամբ *ID SUC* իդեալական համույթի համար: Փորձերի արդյունքները վկայում են այն մասին, որ *MPI* իրականացումը մոտավորապես 3 անգամ ավելի արագ է, քան *GPU* իրականացումը: Արդյունքները հնարավոր է լավացնել, եթե *Tesla C1060* քարտի փոխարեն օգտագործենք *GeForce GTX 480* վիդեոքարտը, որն ունի 480 զուգահեռ միջուկներ (*GPU cores*):

Բերված են նաև *GPU* աշխատանքի ժամանակային և հիշողության վիճակագրությունները, որոնք ստացվել են “*CUDA Compute Visual Profiler*” գործիքի միջոցով:

**Երրորդ գլխում** նկարագրվում են արտաքին դաշտում չկարգավորված *ID SUC* համույթի վիճակագրական հատկությունները: Կառուցվել են բոլոր վիճակագրական պարամետրերի բաշխումները:

§3.1-ում դիտարկվում է *ID SUC* դասական համույթն արտաքին դաշտում, երբ սպինային շղթաների միջև փոխազդեցությունը բացակայում է:

**Սահմանում 3.1:** Հետևյալ արտահայտությունը

$$H_o(N_x) = - \sum_{i=0}^{N_x-1} J_{i, i+1} S_i S_{i+1} - \sum_{i=0}^{N_x-1} h_i S_i$$

կոչվում է արտաքին դաշտում Հեյզենբերգի մոտակա-հարևանների *ID* սպինային ապակի համակարգի Համիլտոնիան, որտեղ  $h_i$ -ն նկարագրում է  $x$  առանցքով ուղղված արտաքին դաշտը:

Խնդիրը կայանում է նրանում, որ պահանջվում է արտաքին դաշտում կամայական

տրված  $L_x = d_0 N_x$  երկարությամբ չկարգավորված տարածական  $ID$  սպինային շղթաների համույթի համար կառուցել համակարգի բոլոր վիճակագրական պարամետրերի բաշխման ֆունկցիաները՝ համակարգի հիմնական վիճակում:

**§3.2-ում** դուրս են բերված արտաքին դաշտում Համիլտոնիանի ստացիոնար կետի և Սիլվեստրի պայմանների անալիտիկ տեսքերը:

**Լեմմա 3.1:** Սֆերիկ կոորդինատային համակարգում Հեյզենբերգի մոտակահարևանների  $ID$  սպինային ապակու Համիլտոնիանն, հաշվի առնված արտաքին դաշտը, ունի հետևյալ տեսքը.

$$H_0(N_x) = - \sum_{i=0}^{N_x-1} \{ J_{i,i+1} [\cos \psi_i \cos \psi_{i+1} \cos(\varphi_i - \varphi_{i+1}) + \sin \psi_i \sin \psi_{i+1}] + h_i \sin \psi_i \} :$$

**Պնդում 3.1:** Սֆերիկ կոորդինատային համակարգում, հաշվի առնված արտաքին դաշտը, լրկալ միմիումնի պայմանը  $i$ -րդ սպինի համար հետևյալն է.

$$\sum_{v=i-1; v \neq i}^{i+1} J_{v,i} [\sin \psi_v - \tan \psi_i \cos \psi_v \cos(\varphi_i - \varphi_v)] + h_i = 0, \quad \sum_{v=i-1; v \neq i}^{i+1} J_{v,i} \cos \psi_v \sin(\varphi_i - \varphi_v) = 0, \quad J_{v,i} \equiv J_{i,v} :$$

**Պնդում 3.2:** Սֆերիկ կոորդինատային համակարգում Հեյզենբերգի  $ID$  սպինային ապակու Համիլտոնիանի երկրորդ կարգի ածանցյալներն, հաշվի առնված արտաքին դաշտը, ունեն հետևյալ տեսքը.

$$A_{\psi_i, \varphi_i}(\Theta_i) = \left\{ \sum_{v=i-1; v \neq i}^{i+1} J_{v,i} [\cos \psi_v \cos(\varphi_v - \varphi_i) + \tan \psi_i \sin \psi_v] + h_i \tan \psi_i \right\} \cos \psi_i,$$

$$A_{\varphi_i, \psi_i}(\Theta_i) = \left\{ \sum_{v=i-1; v \neq i}^{i+1} J_{v,i} \cos \psi_v \cos(\varphi_v - \varphi_i) \right\} \cos \psi_i, \quad A_{\psi_i, \varphi_i}(\Theta_i) = \left\{ \sum_{v=i-1; v \neq i}^{i+1} J_{v,i} \cos \psi_v \sin(\varphi_v - \varphi_i) \right\} \sin \psi_i :$$

**Հետևանք 3.1:** Սիլվեստրի պայմանները տվյալ դեպքում նույնպես ունեն հետևյալ տեսքը.

$$A_{\psi_i, \varphi_i}(\Theta_i) > 0, \quad A_{\varphi_i, \psi_i}(\Theta_i) > 0 :$$

**§3.3-ում** դուրս է բերվել արտաքին դաշտում  $i$ -րդ սպինի համար լրկալ միմիումնի անհրաժեշտ պայմանը: Ռա շատ կարևոր նախադրյալ է արտաքին դաշտում  $ID$   $SUC$  իդեալական համույթի գուգահեռ սիմուլյացիայի ժամանակ օգտագործվող ալգորիթմ մշակելիս:

**Թեորեմ 3.1:** Եթե արտաքին դաշտում որևէ  $i$ -րդ ( $0 \leq i \leq N_x - 1$ ) սպինի համար  $H_0(N_x)$  Համիլտոնիանը բավարարում է լրկալ միմիումնի պայմանին, ապա անհրաժեշտաբար տեղի ունի  $J_{i,i+1}^2 \geq C_i^2 + D_i^2$ , անհավասարությունը, որտեղ

$$C_i = J_{i-1,i} [\sin \psi_{i-1} \cos \psi_i - \sin \psi_i \cos \psi_{i-1} \cos(\varphi_i - \varphi_{i-1})] + h_i \cos \psi_i, \quad D_i = J_{i-1,i} \cos \psi_{i-1} \sin(\varphi_i - \varphi_{i-1}) :$$

**Հետևանք 3.2:**  $x_i = \cos \psi_{i+1}$ ,  $y_i = \sin(\varphi_i - \varphi_{i+1})$  անհայտ փոփոխականներն ունեն հետևյալ անալիտիկ տեսքը.

$$x_i^2 = \frac{D_i^2}{J_{i, i+1}^2 y_i^2}, \quad y_i^2 = D_i^2 \frac{J_{i, i+1}^2 \cos^2 \psi_i \pm 2C_i \sqrt{J_{i, i+1}^2 - C_i^2} - D_i^2 \sin \psi_i \cos \psi_i + E_i + 2C_i^2 \sin^2 \psi_i}{J_{i, i+1}^4 \cos^4 \psi_i + 2E_i J_{i, i+1}^2 \cos^2 \psi_i + (C_i^2 + D_i^2 \sin^2 \psi_i)^2},$$

որտեղ  $E_i = -C_i^2 + D_i^2 \sin^2 \psi_i$  :

**§3.4-**ում բերված է արտաքին դաշտում  $ID$  SUC իդեալական համույթի զուգահեռ սինուլյացիայի համար մշակված զուգահեռ ալգորիթմի մանրամասն նկարագրությունը: Արդյունքում կառուցվում են արտաքին դաշտում սպինային ապակու բոլոր վիճակագրական պարամետրերի բաշխման ֆունկցիաները:

**§3.5-**ում բերված են թվային փորձերի արդյունքները: Դիտարկվել է  $100d_0$  երկարությամբ արտաքին դաշտում  $ID$  SUC իդեալական համույթը: Մասնավորապես ցույց է տրվել, որ փոխազդեցության հաստատունը չի որոշվում նորմալ բաշխումով, ինչպես ընդունված է մինչ այժմ: Այն Լեվիի կտրված ալֆա-կայուն դասից է:

**§3.6-**ում ցույց է տրվել, որ համույթի բևեռացման և Էդվարդս-Անդերսոնի կարգավորման պարամետրը (ordering parameter) կախված արտաքին դաշտի մեծությունից ցուցաբերում են առաջին կարգի փուլային անցումներ: Հաշվարկների արդյունքներում պարզ է դարձել, որ նույնիսկ թույլ արտաքին դաշտի ազդեցությամբ համակարգում առաջանում են կրիտիկական երևույթներ:

**Չորրորդ գլխում** նկարագրվում են դասական սպինային ապակի համակարգերը արտաքին դաշտում հաշվի առնելով համակարգում ընթացող ռելաքսացիոն երևույթները:

**§4.1-**ում բերված է սպինային համակարգերում դիէլեկտրիկ հաստատունի և մագնիսականացման գործակցի կապը, որը ներկայացված է Կլաուզիուս-Մոսստոյի հավասարման միջոցով:

**Մասնանում 4.1:** Հետևյալ արտահայտությունը

$$\frac{\varepsilon_s - 1}{\varepsilon_s + 2} = \frac{4\pi}{3} \sum_m N_m^0 \alpha_m^0$$

կոչվում է Կլաուզիուս-Մոսստոյի (ԿՄ) հավասարում, որտեղ  $N_m^0$ -ն մասնիկների կոնցենտրացիան է,  $\alpha_m^0$ -ն  $m$  տիպի մագնիսականացումների գործակիցն է, իսկ  $\varepsilon_s$ -ն միջավայրի դիէլեկտրիկ հաստատունը: Արտաքին դաշտի պարագայում վերոնշյալ հավասարումն ընդհանրացվում է հետևյալ տեսքի.

$$\varepsilon_s(g) = \frac{1 + 2\Lambda(g)}{1 - \Lambda(g)} \square \frac{4\pi}{3} \left[ \sum_m N_m^0 \alpha_m^0 + \sigma(g) \right],$$

որտեղ  $g = (\Omega, h_0)$ ,  $\Omega$ -ն և  $h_0$ -ն համապատասխանաբար արտաքին դաշտի հաճախությունն ու ամպլիտուդան են, իսկ  $\sigma(g)$ -ն բևեռացման գործակիցն է: Այն դեպքում, երբ  $\Lambda(g) \rightarrow 1$ , ընդհանրացված ԿՄ հավասարման մեջ առաջանում է աղետ (հայտարարը դառնում է զրո):

**§4.2-**ում ուսումնասիրվում է կոմպլեքս-դասական հետազդերի մեթոդը դասական սպինային ապակի համակարգերի համար՝ ԿՄ հավասարման մեջ ազետի վերացման նպատակով: Դուրս է բերված ռեկորենտ հավասարումների համակարգը և Միլվեստրի ընդլայնված պայմանները, որոնք ունեն հետևյալ տեսքը.

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \left\{ \tilde{\xi}_{i+1}^2 - \tilde{D}_i^2 J_{i, i+1}^{-2} \tilde{\eta}_{i+1}^{-2} \right\} &= 0, & \operatorname{Im} \left\{ \tilde{\xi}_{i+1}^2 - \tilde{D}_i^2 J_{i, i+1}^{-2} \tilde{\eta}_{i+1}^{-2} \right\} &= 0, \\ \operatorname{Re} \left\{ \tilde{\eta}_{i+1}^2 - \tilde{D}_i^2 \tilde{A}_i \tilde{B}_i^{-1} \right\} &= 0, & \operatorname{Im} \left\{ \tilde{\eta}_{i+1}^2 - \tilde{D}_i^2 \tilde{A}_i \tilde{B}_i^{-1} \right\} &= 0, \\ \operatorname{Im} \left\{ \tilde{A} \tilde{\psi}_{i+1}, \tilde{\psi}_{i+1} (\tilde{\Theta}_{i+1}) \right\} &= 0, & \operatorname{Im} \left\{ \tilde{A} \tilde{\varphi}_{i+1}, \tilde{\varphi}_{i+1} (\tilde{\Theta}_{i+1}) \right\} &= 0, \\ \operatorname{Im} \left\{ \tilde{J}_{i, i+1}^2 - \tilde{C}_i^2 - \tilde{D}_i^2 \right\} &= 0, \end{aligned}$$

որտեղ

$$\begin{aligned} A_i &= J_{i, i+1}^2 \cos^2 \psi_i \pm 2C_i \sqrt{J_{i, i+1}^2 - C_i^2 - D_i^2} \sin \psi_i \cos \psi_i + E_i + 2C_i \sin^2 \psi_i, \\ B_i &= J_{i, i+1}^4 \cos^4 \psi_i + 2E_i J_{i, i+1}^2 \cos^2 \psi_i + (C_i^2 + D_i^2 \sin^2 \psi_i)^2, \\ C_i &= J_{i-1, i} [\sin \psi_{i-1} \cos \psi_i - \sin \psi_i \cos \psi_{i-1} \cos(\varphi_i - \varphi_{i-1})] + h_i \cos \psi_i, \\ D_i &= J_{i-1, i} \cos \psi_{i-1} \sin(\varphi_i - \varphi_{i-1}), \end{aligned}$$

իսկ “ $\sim$ ” ցույց է տալիս կոմպլեքս ընդլայնումը, *Re*, *Im*-ն համապատասխանաբար իրական և կեղծ մասերը: Ստացված հավասարումների համակարգի միջոցով հնարավոր է կազմակերպել սպինային շղթայի մոդելավորման ընթացքը՝ հաշվի առնելով սպինային ապակում ընթացող ռելաքսացիոն երևույթները:

§4.3-ում բերված է թվային սիմուլյացիայի արդյունքում համույթի բոլոր վիճակագրական պարամետրերի իրական և կեղծ մասերի բաշխումների ֆունկցիաները, քանի որ կոմպլեքս-դասական հետազոծների մոտեցումը կիրառելի է այն դեպքում, երբ համակարգի բոլոր պարամետրերը կոմպլեքս մեծություններ են:

§4.4-ում տրվել է վիճակագրական գումարի (partition function) նոր, ավելի ճշգրիտ սահմանում:

**Սահմանում 4.2:** Հետևյալ արտահայտությունը

$$Z(\beta) = \int \exp\{-\beta H(\{r\})\} dr_1 dr_2 \dots, \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

կոչվում է դասական բազմամասնիկ համակարգերի վիճակագրական գումար, որտեղ  $k_B$ -ն Բոլցմանի հաստատունն է, իսկ  $T$ -ն ջերմաստիճանը:

**Սահմանում 4.3:** Հետևյալ արտահայտությունը

$$Z_c(\beta; N_x) = \left\langle \int \exp\{\beta H(E, p)\} F(E, p; g, N_x) dEdp \right\rangle, \quad E \leq 0$$

կոչվում է *վիճակագրական գումար* սպինային շղթաների էներգիայի և բևեռացման  $(E, p)$  տարածությունում, որտեղ  $F(E, p; g, N_x)$ -ն համույթի բաշխման ֆունկցիան է,  $dp = dp_x^{(r)} dp_y^{(r)} dp_z^{(r)} dp_x^{(i)} dp_y^{(i)} dp_z^{(i)}$ ,  $H(E, p)$ -ն նոր տարածության մեջ Համիլտոնիանն է, իսկ  $\langle \dots \rangle$ -ն ցույց է տալիս միջինացումն ըստ ֆուակտալ տարածության:

Ըստ նոր սահմանման, վիճակագրական գումարը կոմպլեքս ֆունկցիա է և նրա ածանցյալներն ունեն ռեգուլյար վարք ամենուրեք՝ ներառյալ կրիտիկական կետերում:

**Հինգերորդ գլխում** նկարագրվում են  $3D$  սպինային ապակի համակարգերի վիճակագրական հատկությունները: Ապացուցվել է, որ  $3D$  սպինային ապակի համակարգերը հնարավոր է ձևափոխել և բերել  $1D$   $SUC$   $n_z$  իղեալական համայնքի խնդրին:

§5.1-ում դիտարկվում է  $3D$   $SUC$  դասական համայնքը, երբ սպինային շղթաների միջև առկա է պատահական փոխազդեցություն:

**Սահմանում 5.1:** Հետևյալ արտահայտությունը

$$H(N_x) = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{i,j} S_i S_j,$$

կոչվում է արտաքին դաշտով չխտորված  $3D$  դասական սպինային ապակու Համիլտոնիան, որտեղ  $i$ -ն և  $j$ -ն անցնում են  $3D$  ցանցի բոլոր հանգույցներով:

**Սահմանում 5.2:** Հետևյալ արտահայտությունը

$$H_0(N_x) = - \sum_{i=0}^{N_x-1} J_{i, i+1} S_i S_{i+1} - \sum_{i=0}^{N_x-1} \sum_{\sigma=1}^4 J_{i, i_\sigma} S_i S_{i_\sigma}$$

կոչվում է Հեյզենբերգի մոտակա-հարևանների  $1D$  դասական սպինային ապակու Համիլտոնիան պատահական շրջակայքով:

Խնդիրը կայանում է նրանում, որ պահանջվում է կամայական տրված  $L_x = d_0 N_x$  երկարությամբ չկարգավորված  $3D$  սպինային շղթաների համայնքի համար կառուցել համակարգի բոլոր վիճակագրական պարամետրերի բաշխման ֆունկցիաները՝ համակարգի հիմնական վիճակում:

§5.2-ում դուրս են բերված Համիլտոնիանի ստացիոնար կետի և Սիլվեստրի պայմանների անալիտիկ տեսքերը:

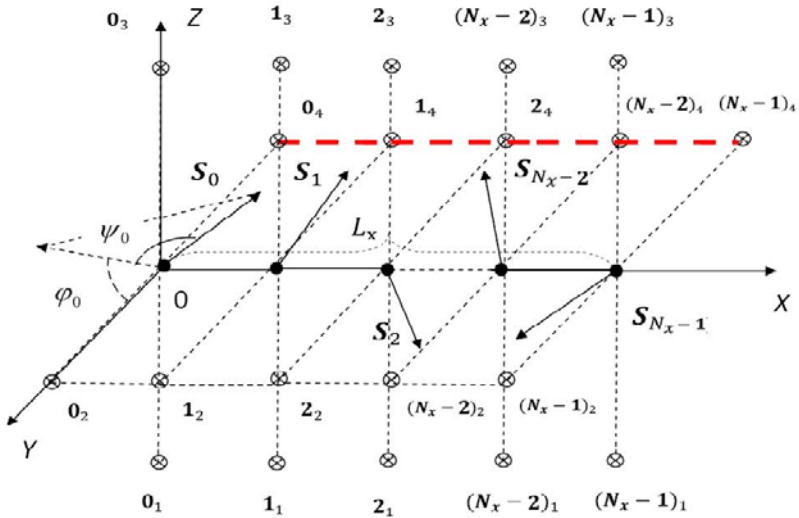
**Լեմմա 5.1:** Սֆերիկ կոորդինատային համակարգում Հեյզենբերգի մոտակա-հարևանների  $1D$  սպինային ապակու Համիլտոնիանն պատահական շրջակայքով ունի հետևյալ տեսքը.

$$H_o(\{r\}; N_x) = - \sum_{i=0}^{N_x-1} \{ J_{i,i+1} [\cos \psi_i \cos \psi_{i+1} \cos(\varphi_i - \varphi_{i+1}) + \sin \psi_i \sin \psi_{i+1}] + \sum_{\sigma=1}^4 J_{i,i_\sigma} [\cos \psi_i \cos \psi_{i_\sigma} \cos(\varphi_i - \varphi_{i_\sigma}) + \sin \psi_i \sin \psi_{i_\sigma}] \} :$$

**Պնդում 5.1:** Սֆերիկ կոորդինատային համակարգում լրկալ միմիմումի պայմանը  $i$ -րդ սպինի համար հետևյալն է.

$$\begin{aligned} & J_{i-1,i} [-\sin \psi_i \cos \psi_{i-1} \cos(\varphi_i - \varphi_{i-1}) + \cos \psi_i \sin \psi_{i-1}] + J_{i,i+1} [-\sin \psi_i \cos \psi_{i+1} \cos(\varphi_i - \varphi_{i+1}) + \cos \psi_i \sin \psi_{i+1}] \\ & + \sum_{\sigma=1}^4 J_{i,i_\sigma} [-\sin \psi_i \cos \psi_{i_\sigma} \cos(\varphi_i - \varphi_{i_\sigma}) + \cos \psi_i \sin \psi_{i_\sigma}] = 0, \\ & \{ [J_{i-1,i} \cos \psi_{i-1} \sin(\varphi_i - \varphi_{i-1}) + J_{i,i+1} \cos \psi_{i+1} \sin(\varphi_i - \varphi_{i+1})] + \sum_{\sigma=1}^4 J_{i,i_\sigma} \cos \psi_{i_\sigma} \sin(\varphi_i - \varphi_{i_\sigma}) \} \cos \psi_i = 0: \end{aligned}$$





Նկար 2: ID SUC պատահական շրջակայքով:

**Պնդում 5.2:** Մֆերիկ կորողինատային համակարգում Հեյզենբերգի մոտակա-հարևանների ID սպինային ապակու պատահական շրջակայքով Համիլտոնիանի երկրորդ կարգի ածանցյալներն ունեն հետևյալ տեսքը.

$$\begin{aligned}
 A_{\psi_i, \psi_i}(\Theta_i) &= J_{i-1, i} \left\{ \cos \psi_i \cos \psi_{i-1} \cos(\varphi_i - \varphi_{i-1}) + \sin \psi_i \sin \psi_{i-1} \right\} \\
 &+ J_{i, i+1} \left\{ \cos \psi_i \cos \psi_{i+1} \cos(\varphi_i - \varphi_{i+1}) + \sin \psi_i \sin \psi_{i+1} \right\} + \sum_{\sigma=1}^4 J_{i, i_\sigma} \left\{ \cos \psi_i \cos \psi_{i_\sigma} \cos(\varphi_i - \varphi_{i_\sigma}) + \sin \psi_i \sin \psi_{i_\sigma} \right\}, \\
 A_{\varphi_i, \varphi_i}(\Theta_i) &= \{ J_{i-1, i} \cos \psi_{i-1} \cos(\varphi_i - \varphi_{i-1}) + J_{i, i+1} \cos \psi_{i+1} \cos(\varphi_i - \varphi_{i+1}) + \sum_{\sigma=1}^4 J_{i, i_\sigma} \cos \psi_{i_\sigma} \cos(\varphi_i - \varphi_{i_\sigma}) \} \cos \psi_i, \\
 A_{\psi_i, \varphi_i}(\Theta_i) &= \{ [J_{i-1, i} \cos \psi_{i-1} \sin(\varphi_i - \varphi_{i-1}) + J_{i, i+1} \cos \psi_{i+1} \sin(\varphi_i - \varphi_{i+1})] + \sum_{\sigma=1}^4 J_{i, i_\sigma} \cos \psi_{i_\sigma} \sin(\varphi_i - \varphi_{i_\sigma}) \} \sin \psi_i :
 \end{aligned}$$

**Հետևանք 5.1:** Միվեատրի պայմաններն ունեն հետևյալ տեսքը.

$$A_{\psi_i, \psi_i}(\Theta_i) > 0, \quad A_{\varphi_i, \varphi_i}(\Theta_i) > 0:$$

§5.3-ում դուրս է բերվել լոկալ մինիմումի անհրաժեշտ պայմանը  $i$ -րդ սպինի համար: Դա շատ կարևոր նախադրյալ է 3D սպինային ապակի համակարգի զուգահեռ սինուլյացիայի ժամանակ օգտագործվող ալգորիթմ մշակելիս:

**Թեորեմ 5.1:** Եթե որևէ  $i$ -րդ ( $0 \leq i \leq N_x - 1$ ) սպինի համար  $H_0(N_x)$  Համիլտոնիանը բավարարում է լոկալ մինիմումի պայմանին, ապա անհրաժեշտաբար տեղի ունի  $J_{i, i+1}^2 \geq C_i^2 + D_i^2$ , անհավասարությունը, որտեղ

$$C_i = J_{i-1,i} [\sin \psi_{i-1} \cos \psi_i - \sin \psi_i \cos \psi_{i-1} \cos (\varphi_i - \varphi_{i-1})] + \sum_{\sigma=1}^4 J_{i,\sigma} [\sin \psi_{i_\sigma} - \tan \psi_i \cos \psi_{i_\sigma} \cos (\varphi_i - \varphi_{i_\sigma})],$$

$$D_i = J_{i-1,i} \cos \psi_{i-1} \sin (\varphi_i - \varphi_{i-1}) + \sum_{\sigma=1}^4 J_{i,\sigma} \cos \psi_{i_\sigma} \sin (\varphi_i - \varphi_{i_\sigma}):$$

**Հետևանք 5.2:**  $\xi_i = \cos \psi_{i+1}$ ,  $\eta_i = \sin (\varphi_i - \varphi_{i+1})$  անհայտ փոփոխականներն ունեն հետևյալ անալիտիկ տեսքը.

$$\xi_i^2 = \frac{D_i^2}{J_{i,i+1}^2 Y_i^2}, \eta_i^2 = D_i^2 \frac{J_{i,i+1}^2 \cos^2 \psi_i \pm 2C_i \sqrt{J_{i,i+1}^2 - C_i^2 - D_i^2} \sin \psi_i \cos \psi_i + E_i + 2C_i^2 \sin^2 \psi_i}{J_{i,i+1}^4 \cos^4 \psi_i + 2E_i J_{i,i+1}^2 \cos^2 \psi_i + (C_i^2 + D_i^2 \sin^2 \psi_i)^2},$$

որտեղ  $E_i = -C_i^2 + D_i^2 \sin^2 \psi_i$ :

### **Թեորեմ 5.2**

Դասական  $3D$  սպինային ապակի համակարգը Բիրկհոֆֆի էրզոդիկ կանխադրույթի կատարման դեպքում վիճակագրական առումով համարժեք է  $1D$  տարածական սպինային շղթաների  $n$  իդեալական համույթին:

**§5.4-**ում բերված է գուգահեռ սինուլյացիայի արդյունքում համույթի բոլոր վիճակագրական պարամետրերի բաշխումների ֆունկցիաները:

**§5.5-**ում տրվել է վիճակագրական գումարի նոր, առավել ճշգրիտ սահմանում և  $10^6$  սինուլյացիա անելուց հետո կառուցվել է ընդունված և նոր ձևով սահմանված Հեյմիուցի ազատ էներգիաների համեմատման կորերը, որոնք իրար մոտենում են միայն շատ ցածր ջերմաստիճաններում:

### **Հիմնական արդյունքներն ու եզրակացությունները**

Աշխատանքի հիմնական արդյունքներն են.

- Անալիտիկորեն ապացուցվել է և թվային հաշվարկների միջոցով ցույց է տրվել, որ սպին-սպին փոխազդեցության հաստատունը բավարարում է Լեվիի կտրված ալֆա-կայուն բաշխման օրենքին [2, 3, 4, 5, 8, 9]:
- Ապացուցվել է  $1D$  տարածական սպինային շղթաների (ՏՄԸ) *իդեալական համույթի* ճշգրիտ հաշվարկի հնարավորությունը արտաքին դաշտի տարածա-ժամանակային պարբերությունների մասշտաբների վրա: Ցույց է տրվել, որ  $1D$  սպինային ապակի համակարգը նույնիսկ թույլ դաշտերի դեպքում խիստ ֆրաստրացված է [3, 5, 9]:
- Ցույց է տրվել, որ  $1D$  սպինային ապակի համակարգում ռելաքսացիոն երևույթները արտաքին դաշտի ազդեցությամբ կարող են դիտարկվել՝ օգտագործելով կոմպլեքս-դասական հետազդների մեթոդը: Ապացուցվել է, որ կոմպլեքս-դասական հետազդների մեթոդը թույլ է տալիս կատարել ֆրաստրացված համակարգի հաշվարկները՝ ներառյալ համակարգի կրիտիկական կետերում [5]:
- Ապացուցվել է, որ Բիրկհոֆֆի էրզոդիկ կանխադրույթի սահմաններում  $3D$  սպինային ապակի համակարգի վիճակագրական հատկությունները համարժեք են  $1D$  ՏՄԸ  $n$  իդեալական համույթի վիճակագրական հատկություններին [4, 6, 8]:

- Մշակվել է յուրօրինակ մաթեմատիկական գործիք 3D սպինային ապակի համակարգերի մոդելավորման համար՝ ելնելով կոմպլեքս-դասական մեխանիկայի հիմնարար սկզբունքներից [4, 6, 8]:
- Ստեղծվել են սկզբունքորեն նոր բարձր արտադրողական զուգահեռ ալգորիթմներ և ծրագրային փաթեթ, որը հնարավորություն է տալիս *կլաստերային հաշվողական համակարգում* և *GPGPU* նոր զարգացող ոլորտում *գրաֆիկական քարտերի* (General-Purpose computing on Graphics Processing Units) վրա կատարել զուգահեռ հաշվարկներ՝ օգտագործելով մշակված բարձր արտադրողական ալգորիթմները, որոնք նախատեսված են դիտարկված մոդելների կարևոր վիճակագրական պարամետրերի բաշխման ֆունկցիաները կառուցելու համար [1,7]:

Ատենախոսության քենայի շրջանակներում հրատարակված աշխատություններ

1. H. G. Abajyan, “Realization of 1D Classic Heisenberg Spin-Glass System on GPU”, Mathematical Problems of Computer Science, vol. 35, pp. 46-52, 2011.
2. A. S. Gevorkyan, H. G. Abajyan, H. S. Sukiasyan, “Statistical Properties of Ideal Ensemble of Disordered 1D Steric Spin-Chains”, Mathematical Problems of Computer Science, vol. 35, pp. 86-98, 2011.
3. A. S. Gevorkyan, H. G. Abajyan, H. S. Sukiasyan, “A new parallel algorithm for simulation of spin-glass systems on scales of space-time periods of an external field”, Journal of Modern Physics, vol. 2, no. 6, pp. 488-497, 2011.
4. A. S. Gevorkyan, H. G. Abajyan, E. A. Ayryan, “On Modeling of Statistical Properties of Classical 3D Spin Glasses”, Bulletin of PFUR. Series Mathematics. Information Sciences. Physics, no. 4, pp. 91-103, 2011.
5. A. S. Gevorkyan, H. G. Abajyan, “Classical spin glasses with consideration of relaxation effects”, Mathematical Problems of Computer Science, vol. 36, pp. 17-27, 2012.
6. A. S. Gevorkyan, H. G. Abajyan, E.A. Ayryan, “A Parallel Algorithm for Simulation of Statistical Properties of 3D Classical Spin Glasses”, LIT Scientific Report 2010-2011, pp. 171-175, 2011.
7. H. G. Abajyan, “Implementation and Benchmarking of Ideal Ensemble of Disordered 1D Spatial Spin-Chains on GPUs and Computer Clusters”, Proceedings of Eighth International Conference on Computer Science and Information Technologies, pp. 231-235, 2011.
8. A. S. Gevorkyan, H. G. Abajyan, E. A. Ayryan, H. S. Sukiasyan, “A New Algorithm for Simulation of Statistical Properties of 3D Classical Spin-Glasses”, Proceedings of Eighth International Conference on Computer Science and Information Technologies, pp. 252-256, 2011.
9. A. S. Gevorkyan, H. G. Abajyan, H. S. Sukiasyan, “A New Parallel Algorithm for Simulation of Spin-Glasses in External Fields”, Proceedings of 34th International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics : Grid and Visualization Systems Conference, vol. 1, pp. 191-196, 2011.

**Hakob Abajyan**

**The Modelling of 3D Spin Glass Taking Into Account Relaxation of the System In External Field**

**RESUME**

The aim of the thesis is the development of approach which allows to calculate 3D spin glasses exactly at the limit of statistic equilibrium or more precisely to calculate all statistic parameters of the system with the given accuracy, on the basis of the first principles of classical and complex-classical mechanics.

Disordered Spin Glass Systems have turned out to be extremely versatile models for a host of phenomena in statistical, condensed matter and high-energy physics, with applications ranging from applied problems of physics, chemistry, material science, biology, evolution, organization dynamics, hard-optimization, environmental and social structures, human logic systems, financial mathematics, etc. which are being well modeled by representations type of a disorder spin system.

Modern development of a science and technologies demand more detailed and exact research of properties of spin glasses that for aforementioned reasons often it is impossible to obtain by Monte-Carlo simulation method of thermodynamic potentials of system. As the modern state of the development of this problem shows, the direct numerical simulation of even small number of spin system is a difficult enough computational problem and the full-scale solution of which is possible to realize only on modern supercomputers. The important class of disordered spin system is spin glasses on the basis of which modern technologies are being developed, in particular technologies and devices which are characterized by nanoscales space-time.

A rather significant effort, therefore, has been invested over the years into optimized implementations of Monte-Carlo simulations of spin models. Additionally, there are a plethora of questions relating to classical spin models which, decades of research notwithstanding, are still awaiting a combination of an increase in available computational resources, better algorithms and clever techniques of data analysis to find generally satisfactory answers. Let us note that in the framework of classical Heisenberg Hamiltonians have been executed many theoretical and numerical investigations, however, all of them basically concern one-dimensional and two-dimensional models. Much less is the number of investigations, which concern to models of three and more dimensions and especially to their quantum variants. Recall that investigations of problems of high dimensionality as a rule are implementing by the way of numerical modeling.

Thus, the development of mathematically well-founded approaches and creation on their basis of high performance algorithms for the modeling of 3D spin glasses with consideration of the external fields' influence is very topical problem.

The goal and objectives of the thesis are:

- To investigate the statistical parameters of unperturbed ideal ensemble (spins interact only within the same chain) of disordered  $1D$  spatial spin chains (without external field) with arbitrary length and construct the distribution functions of the statistical parameters of the system including the distribution of spin-spin interaction constant in *the ground state*.
- To research the statistical properties of  $1D$  ideal ensemble on scales of space-time periods of the external field.
- To research the statistical properties of  $1D$  ideal ensemble with consideration of relaxation effects and develop parallel algorithm for the simulation of frustrated system including in points, where the system demonstrates critical phenomena.
- The possibility of the reduction of  $3D$  spin glass problem to  $1D$  nonideal ensemble (the interaction between spin chains is random) problem.
- Create parallel algorithms and software which will allow to construct the distribution functions of all important statistical parameters of all considered models on the basis of the developed methods.

The main results are:

- It is analytically proved and by numerical calculation is shown that the spin-spin interaction constant satisfies *Levy's* alpha-stable distribution law [2, 3, 4, 5, 8, 9].
- The possibility of exact calculations of  $1D$  spatial spin chains' (SSC) *ideal ensemble* in the *ground state* on the scales of space-time periods of external fields is proved. It is shown that  $1D$  spin glass system even in case of weak external fields is strongly frustrated [3, 5, 9].
- It is shown that the relaxation effects in  $1D$  spin glass under the external field's influence can be considered using the complex-classic trajectories' (CCT) method. It is proved that the method *CCT* allows to carry out calculations of the frustrated system including in critical points [5].
- It is proved that the statistical properties of  $3D$  spin glass system are equivalent to the statistical properties of  $1D$  SSCs *nonideal ensemble* at the limit of performance of the Birkhoff's ergodic hypothesis [4, 6, 8].
- An original mathematical tool is elaborated for simulation of  $3D$  spin glass systems based on the first principles of the classic and complex-classic mechanics [4, 6, 8].
- Created original high performance parallel algorithms and software which allow direct parallel computations using Computer Clusters and GPGPU (General-Purpose computing on Graphics Processing Units) new developing technology in order to construct the distribution functions of all important statistical parameters of all the considered models [1,7].

## Моделирование 3D спинового стекла с учетом релаксации системы во внешнем поле

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Целью данной работы является разработка подхода, который позволит, в пределах статистического равновесия, точно рассчитать 3D спин стёкла, или, исходя из первых принципов классической и комплексно-классической механики, более точно рассчитать все статистические параметры системы с заданной точностью.

Неупорядоченные системы спинового стекла оказались на редкость экстремальной универсальной моделью для целого ряда явлений в статистической и конденсированных сред, физики высоких энергий, с приложениями, начиная от прикладных проблем физики, химии, материаловедении, биологии, эволюции, организации динамики, жесткой-оптимизации, экологических и социальных структур, логических систем человека, финансовой математики, и т.д., которые в настоящее время хорошо моделируются представлением типов неупорядоченных спин систем.

Современное развитие науки и технологии требует более детального и точного исследования свойств спиновых стёкол, что для вышеупомянутых причин, часто невозможно получить методом Монте-Карло для термодинамических потенциалов системы. Как показывает современное состояние развития этой проблемы, симуляция прямого вычисления даже небольшого количества спиновых систем достаточно сложная вычислительная задача, и полномасштабное решение можно реализовать только на современных суперкомпьютерах. Важный класс неупорядоченной спин системы является спин стёкла, на основе которых развиваются современные технологии, в частности, технологии и устройства, которые характеризуются пространственно-временными наномасштабами.

Поэтому, за эти годы довольно значительное усилие было вложено в оптимизированных реализациях метода Монте-Карло для спиновых моделей. Кроме того, есть множество вопросов, связанных с классическими спин моделями, которые, несмотря на десятилетние исследования, все еще требуют колоссальных вычислительных ресурсов, более совершенных алгоритмов и умных методов анализа данных. Отметим, что в рамках классической Гейзенберга Гамильтониана были проведены многие теоретические и численные исследования, однако, все они в основном касаются одномерных и двумерных моделей. Гораздо меньше число исследований, которые относятся к моделям трех и более измерений, и, особенно, их квантовых вариантов. Напомним, что исследования проблемы высокой размерности, как правило, осуществляются путём численного моделирования.

Таким образом, развитие математических обоснованных подходов и создание на их основе алгоритмов высокой производительности для моделирования 3D спин стёкол с учетом влияния внешних полей очень актуальная задача.

### Цель и задачи диссертации:

- Исследовать статистические свойства (при отсутствии внешнего поля) невозмущённого идеального (спины воздействуют только внутри цепочки) ансамбля, неупорядоченного  $1D$  пространственного спинового стекла произвольной длины в основном состоянии, и построить функции распределения всех статистических параметров системы, в том числе для постоянной спин-спин взаимодействия (spin-spin interaction constant).
- Исследовать статистические свойства идеального ансамбля на временно-пространственных периодных масштабах внешнего поля.
- Исследовать статистические свойства идеального ансамбля, учитывая релаксационные эффекты. Разработать параллельный алгоритм для симуляции фрустрационной системы (frustrated system), включая те точки, где система демонстрирует критические явления.
- Возможность приведения  $3D$  спин стекол к  $1D$  неидеальному (когда взаимодействие между цепочками является случайным) ансамблю.
- Создать параллельные алгоритмы и программный пакет, который даст возможность построить функции распределения всех важных статистических параметров для всех рассмотренных моделей.

### Основные результаты:

- Аналитически доказано и численными расчётами показано, что постоянная спин-спин взаимодействия удовлетворяет закону распределения усечённой альфа-устойчивой Леви [2, 3, 4, 5, 8, 9].
- Доказана возможность точного вычисления  $1D$  идеального ансамбля в основном состоянии на временно-пространственных периодных масштабах внешнего поля. Показано, что  $1D$  спин стекло система, даже при слабых полях, сильно фрустрирована [3, 5, 9].
- Показано, что в  $1D$  спин стекло системе релаксационные эффекты, под влиянием внешнего поля, рассматриваются используя метод комплекс-классических траекторий. Доказано, что метод комплекс-классических траекторий позволяет делать вычисления фрустрационной системы, включая в критических точках [5].
- Доказано, что статистические свойства  $3D$  спин стекла системы эквивалентны к статистическим свойствам  $1D$  неидеального ансамбля в пределах эргодической гипотеза Биркхоффа [4, 6, 8].
- Разработан оригинальный математический инструмент для симуляции  $3D$  спин стекло систем, исходя из первых принципов классической механики [4, 6, 8].
- Созданы оригинальные параллельные алгоритмы и программный пакет, который позволит делать параллельные вычисления на компьютерных кластерах и видеокартах, для построения функции распределения всех важных статистических параметров для всех рассмотренных моделей [1,7].

