

ГЕНЕРАЦИЯ СЛУЧАЙНЫХ СОСТОЯНИЙ В СПИНОВЫХ СИСТЕМАХ С НЕПРЕРЫВНОЙ СИММЕТРИЕЙ: АСПЕКТЫ ПРИМЕНЕНИЯ АЛГОРИТМА ВАНГА–ЛАНДАУ

Д.А. Друзьев

аспирант, e-mail: druzjevda@stud.omsu.ru

О.А. Терентьева

канд. техн. наук, доцент, e-mail: anatole4ka@yandex.ru

П.В. Прудников

доктор физ.-мат. наук, профессор, e-mail: prudnikovpv@omsu.ru

Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия

Аннотация. В работе показано, что методы генерации случайных состояний, дающие неравномерно распределённые точки на сфере, приводят к систематическим искажениям при моделировании методами Монте–Карло. На примере алгоритма Ванга–Ландау, предназначенного для прямого вычисления плотности состояний и микроканонической энтропии, продемонстрировано, что некорректный выбор метода генерации спиновых конфигураций вызывает смещение в оценке энтропии, что приводит к ошибкам в расчёте термодинамических характеристик. Сравнение с корректными методами генерации подтверждает критическую важность равномерного покрытия конфигурационного пространства при энтропийном моделировании.

Ключевые слова: Методы Монте–Карло, спиновые системы, случайные блуждания, модель Гейзенберга, алгоритм Метрополиса, алгоритм Ванга–Ландау.

Введение

Моделирование спиновых систем с непрерывной симметрией, таких как трёхмерная модель Гейзенберга, уже долгое время представляет значительный интерес в статистической физике и материаловедении. Модель позволяет эффективно описывать фазовые превращения в реальных магнетиках, учитывая непрерывное распределение спинов в пространстве и их взаимодействие между собой [1–3]. В классической модели Гейзенберга каждый спин представляется единичным трёхмерным вектором, лежащим на поверхности сферы S^2 :

$$\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z) \in \mathbb{R}^3, \quad \|\mathbf{S}_i\| = 1.$$

Гамильтониан классической изотропной модели без внешнего поля имеет вид:

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

где S_i – спин в i -той ячейке трёхмерной решётки, а $\langle i, j \rangle$ означает, что сумма идёт по парам ближайших соседей, $J > 0$ соответствует ферромагнетизму. При критической температуре $T_c/Jk_B = 1.44292(8)$ [4] система испытывает фазовый переход второго рода ферромагнетик-парамагнетик.

1. Методы Монте–Карло

Методы Монте–Карло объединяет группу методов статистического моделирования, каждый из которых базируется на замене стохастических переменных сгенерированными случайными значениями и последующем усреднении результатов многих испытаний. Расчёт характеристик магнитных систем возможен на основе реализации различных алгоритмов.

Алгоритм Метрополиса [5] образует марковский процесс, на основе равновесного распределения Больцмана $P(E) \propto e^{-E/k_B T}$. Расчёт термодинамических величин происходит генерацией канонического распределения для фиксированной температуры T путём принятия/отказа нового случайного состояния B из состояния A с вероятностью:

$$P_{\text{accept}} = \min \left(1, \frac{P(E_B)}{P(E_A)} \right) = \min \left(1, e^{-(E_B - E_A)/k_B T} \right).$$

После достижения равновесия проводится наблюдение за интересующими величинами в течении τ_{obs} , затем усреднение:

$$\langle f(T) \rangle = \frac{\sum_{t=0}^{\tau_{obs}} f_t}{\tau_{obs}},$$

Подход, реализованный в **методе Ванга–Ландау** [6] позволяет напрямую рассчитать плотность состояний системы $g(E)$ – количество состояний с заданной энергией E . В процессе симуляции алгоритм адаптивно оценивает $g(E)$, блуждая по энергетическому спектру и уменьшая модификационный фактор. Вероятность принятия перехода не использует температуру напрямую, а задаётся как:

$$P_{\text{accept}} = \min \left(1, \frac{g(E_{\text{old}})}{g(E_{\text{new}})} \right).$$

После завершения работы алгоритма среднее значение термодинамической величины можно рассчитать проводя перевзвешивание по всевозможным уровням энергии:

$$\langle f(T) \rangle = \frac{\sum_E f(E) g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}},$$

Генерация случайного спина для пробного переворота это базовая операция, которая происходит на каждом элементарном шаге численного моделирования методами Монте–Карло и занимает основную часть вычислительных ресурсов, поэтому выбор метода генерации является важной частью исследования. В работе рассматриваются три метода генерации случайных спинов на единичной сфере, приведённые в таблице 1.

Выбор методов не случаен – **сферические координаты** являются очевидным представлением трёхмерного вектора единичной длины с помощью двух углов, но ввиду становления при переходе элемента площади ds пропорциональным $\sin \theta$:

$$ds = \sin \theta d\theta d\phi,$$

тогда плотность вероятности тоже должна быть пропорциональна $\sin \theta$, если же θ равномерна, то плотность постоянна: $p(\theta) = \frac{1}{\pi}$. В следствии чего точки будут накапливаться вблизи полюсов, где $\sin \theta \approx 0$ (рис. 1a).

Метод **Marsaglia** [7] был революционным в своё время из-за простоты и эффективности. Он основан на отображении единичного диска из $\mathbb{R}^2$ на сферу S^2 с сохранением равномерности и эквивалентен проекции из нормального распределения, но вычислительно эффективнее и является более предпочтительным среди других методов, ввиду генерации равномерно распределённых точек на сфере (рис. 1с) без использования медленных тригонометрических функций.

При **нормализации точек, равномерно распределённых внутри куба**, на сфере возникает неравномерность, так как точки скапливаются в направлениях главных диагоналей куба. Это связано с тем, что объём куба в этих направлениях больше (максимальное расстояние от центра до границы куба равно $\sqrt{3}$ против 1 вдоль осей), что приводит к большей плотности проецируемых точек после нормализации (рис. 1b).

Таблица 1. Способы генерации случайного спина. Где $\mathcal{U}[a, b]$ означает генерацию случайного равномерно распределённого вещественного числа в $[a, b]$.

Сферические координаты	Marsaglia	Нормализация точек в кубе
$\theta \sim \mathcal{U}[0, \pi], \phi \sim \mathcal{U}[0, 2\pi];$ $S_x = \sin \theta \cos \phi,$ $S_y = \sin \theta \sin \phi,$ $S_z = \cos \theta;$	$u_1, u_2 \sim \mathcal{U}[-1, 1];$ если $s = u_1^2 + u_2^2 \leq 1$: $S_x = 2u_1\sqrt{1-s},$ $S_y = 2u_2\sqrt{1-s},$ $S_z = 1-2s;$	$x, y, z \sim \mathcal{U}[-1, 1];$ $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ $S_x = x/r,$ $S_y = y/r,$ $S_z = z/r.$

2. Результаты

Для анализа влияния метода генерации случайных спинов в методах Монте–Карло был проведён численный расчёт теплоёмкости классической трёхмерной изотропной модели Гейзенберга:

$$C(T) = \frac{\langle E^2(T) \rangle - \langle E(T) \rangle^2}{k_B T^2};$$

В качестве оптимальных линейных размеров системы был выбран $L = 8$ и периодические граничные условия, для минимизации эффектов связанных с влиянием конечного размера решётки. Во время работы алгоритма Метрополиса выделялось 10^6 шагов Монте–Карло на спин (MCS/s) для достижения равновесия системы и

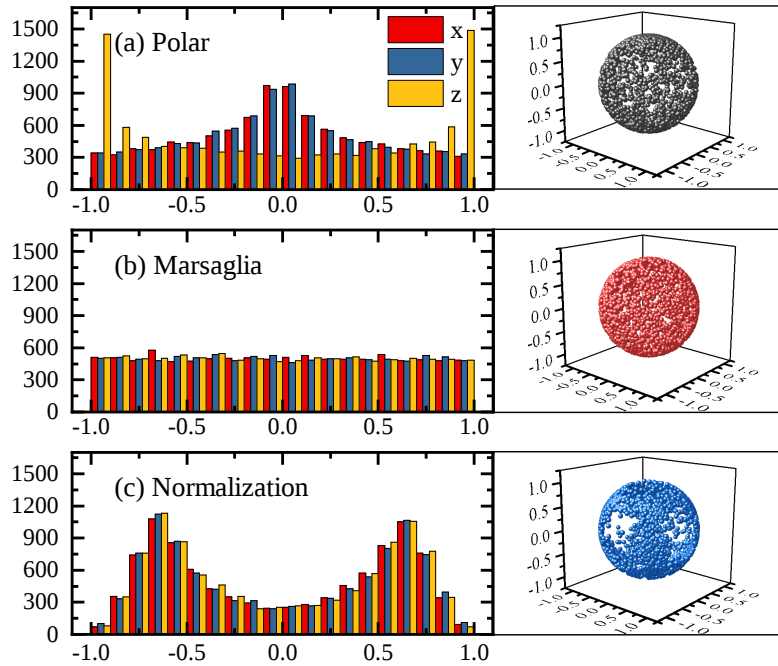


Рис. 1. Гистограммы распределения координат при генерации 10^5 точек на единичной сфере для различных методов генерации: (a) Сферические координаты, (b) Marsaglia, (c) Нормализация точек в кубе

10^3 шагов накопления данных для усреднения внутри одной статистической конфигурации, так же было проведено усреднение по 10^3 статистическим конфигурациям с различными инициализирующими значениями генератора случайных чисел. Для эффективного использования метода Ванга–Ландау была использована модификация $1/t$ [8], энергетический спектр был обрезан до $E_{min}/L^3 = -2.8J$ и разделён на отрезки размером $dE = 0.1J$, проведено 20 итераций алгоритма до достижения фактора сходимости $f_{finish} \approx 10^{-7}$. Данные были дополнительно усреднены по 20 независимым конфигурациям.

Результаты демонстрируют значительное расхождение в плотности состояний $g(E)$, полученной различными методами генерации, при приближении к низкотемпературной области (рис. 2a). В то же время, при использовании алгоритма Метрополиса различия между методами находятся в пределах статистической погрешности, которая уменьшается с ростом числа усредняемых конфигураций (рис. 2b). Особенно выделяются в алгоритме Ванга–Ландау неравномерные методы генерации, приводящие к смещению положения пиков теплоёмкости относительно результатов, полученных алгоритмом Метрополиса, тогда как метод Marsaglia, обеспечивающий равномерное распределение на сфере, демонстрирует хорошую сходимость (рис. 2c).

Это связано с фундаментальным различием в работе алгоритмов Метрополиса и Ванга–Ландау. Алгоритм Метрополиса устойчив к неравномерной генерации благодаря механизму детального баланса, который корректирует распределение через вероятность принятия/отклонения шага. Напротив, алгоритм Ванга–Ландау напря-

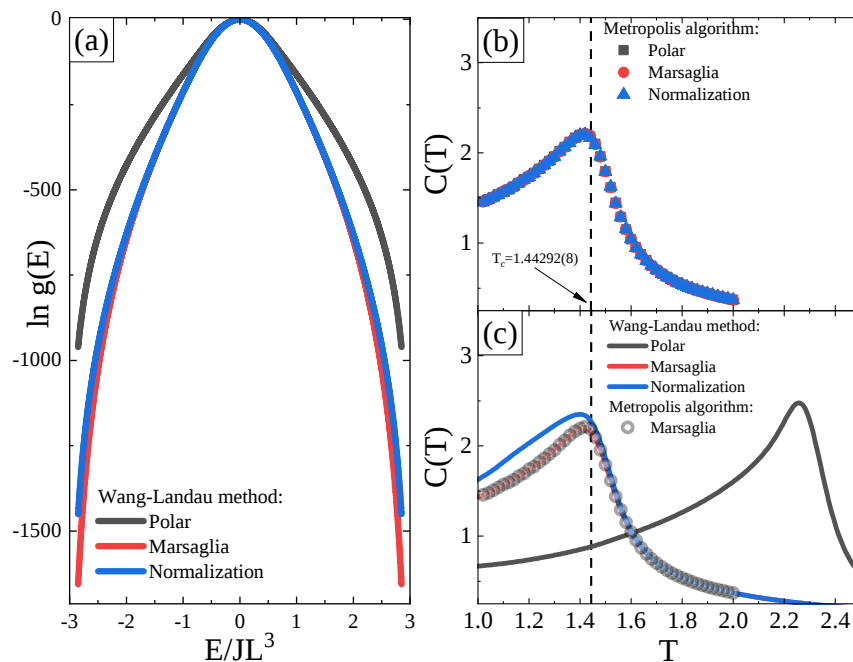


Рис. 2. Результаты работы методов Монте-Карло для различных методов генерации случайных спинов: (a) Плотности состояний, рассчитанные алгоритмом Ванга–Ландау, (b) Теплоёмкости $C(T)$, полученные алгоритмом Метрополиса, (c) Теплоёмкости $C(T)$, полученные алгоритмом Ванга–Ландау в сравнении с алгоритмом Метрополиса

мую рассчитывает $g(E)$, и его корректная работа требует равновероятного посещения всех микросостояний с фиксированной энергией. Вследствие нарушения этого условия методы с неравномерным распределением генерации продемонстрировали систематические ошибки в расчёте плотности состояний и описании пика теплоёмкости $C(T)$ вблизи критической точки модели. Такие же свойства можно ожидать для других алгоритмов, напрямую вычисляющих $g(E)$, таких как моделирование мультиканонического ансамбля [9] или методы гистограмм [10, 11].

Заключение

В данной работе были рассмотрены три различных способа генерации случайного спина на поверхности трёхмерной сферы в контексте моделирования спиновых систем методами Монте-Карло.

Благодаря механизму детального баланса, который гарантирует достижение распределения Больцмана вне зависимости от начальных условий, алгоритм Метрополиса устойчив к неравномерному посещению фазового пространства. Это свойство следует из фундаментальных принципов эргодичности и перемешивания в статистической механике [12]. Нарушение этих принципов может указывать на неприменимость методов к исследуемой модели [13].

Алгоритм Ванга–Ландау напрямую рассчитывает плотность состояний системы $g(E)$, и его применение требует равновероятного посещения всех микросостояний с фиксированной энергией. Как было показано, нарушение этого условия приводит

к систематическим ошибкам в оценке $g(E)$ и описании пика теплоёмкости вблизи критической температуры. Для таких алгоритмов метод Marsaglia [7] обеспечивает равномерное распределение точек на сфере и показывает свою высокую эффективность и надёжность. Этот способ также широко используется и в других методах Монте–Карло, включая генерацию случайных ориентаций и направлений, а также построение матриц вращения [14].

Выявление и анализ таких критически важных аспектов алгоритмов моделирования необходимо для глубокого понимания физических процессов в спиновых системах и разработки корректных теоретических моделей для описания фазовых переходов.

Литература

1. Janke W. Monte Carlo Simulations of Spin Systems // Computational Physics: Selected Methods, Simple Exercises, Serious Applications / ed. by K. H. Hoffmann, M. Schreiber. Berlin; Heidelberg: Springer, 1996. P. 10–43.
2. Druzev D.A., Chubarova A.A., Prudnikov P.V. Phase Transitions in Heisenberg Magnets Induced by Uniaxial Anisotropy: Wang–Landau and Machine Learning Simulations // JETP Letters. 2025. V. 122. P. 156–161.
3. Iakovlev I.A., Sotnikov O.M., Mazurenko V.V. Supervised learning approach for recognizing magnetic skyrmion phases // Physical Review B. 2018. V. 98, No. 17. P. 174411.
4. Chen K., Ferrenberg A.M., Landau D.P. Static critical behavior of three-dimensional classical Heisenberg models: A high-resolution Monte Carlo study // Physical Review B. 1993. V. 48, No. 5. P. 3249.
5. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines // The Journal of Chemical Physics. 1953. V. 21, No. 6. P. 1087–1092.
6. Wang F., Landau D.P. Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to Calculate the Density of States // Physical Review Letters. 2001. V. 86, No. 10. P. 2050–2053.
7. Marsaglia G. Choosing a Point from the Surface of a Sphere // The Annals of Mathematical Statistics. 1972. V. 43, No. 2. P. 645–646.
8. Belardinelli R.E., Pereyra V.D. Fast algorithm to calculate density of states // Physical Review E. 2007. V. 75, No. 4. P. 046701.
9. Berg B.A., Neuhaus T. Multicanonical ensemble: A new approach to simulate first-order phase transitions // Physical Review Letters. 1992. V. 68, No. 1. P. 9–12.
10. Kastner M., Promberger M., Muñoz J.D. Broad histogram method: Extension and efficiency test // Physical Review E. 2000. V. 62, No. 5. P. 7422–7429.
11. Ferrenberg A.M., Swendsen R.H. New Monte Carlo technique for studying phase transitions // Physical Review Letters. 1988. V. 61, No. 23. P. 2635–2638.
12. Brazhkin V.V. Why does statistical mechanics 'work' in condensed matter? // Phys. Usp. 2021. V. 64, No. 64. P. 1049–1057.
13. Стронгин В.С., Шевченко Ю.А., Нефедев К.В. Нарушение эргодичности фрустрированных спиновых систем // Дальневосточный математический журнал. 2026. Вып. 26, № 2. (в печати).

14. Schnabel S., Janke W. A simple algorithm for uniform sampling on the surface of a hypersphere. arXiv preprint arXiv:2204.14004. 2022. URL: <https://arxiv.org/abs/2204.14004> (дата обращения: 30.01.2026).

RANDOM STATE GENERATION IN CONTINUOUS SPIN SYSTEMS: ASPECTS OF THE WANG–LANDAU ALGORITHM APPLICATION

D.A. Druzev

Ph.D. Student, e-mail: druzjevda@stud.omsu.ru

O.A. Terentyeva

Ph.D. (Techn.), Associate Professor, e-mail: anatole4ka@yandex.ru

P.V. Prudnikov

Dr.Sc. (Phys.-Math.), Professor, e-mail: prudnikovpv@omsu.ru

Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia

Abstract. This paper demonstrates that random state generation methods that produce nonuniformly distributed points on a sphere lead to systematic errors in Monte Carlo simulations. Using the Wang–Landau algorithm, designed for directly calculating the density of states and microcanonical entropy, it is demonstrated that an incorrect choice of spin configuration generation method leads to a bias in the entropy estimate, leading to errors in the calculation of thermodynamic characteristics. A comparison with correct generation methods confirms the critical importance of uniformly covering the configuration space in entropy methods.

Keywords: Monte–Carlo methods, spin systems, random walks, Heisenberg model, Metropolis algorithm, Wang–Landau method .

Дата поступления в редакцию: 30.01.2026