

Сравнительный анализ методов тензорной ренормализационной группы для моделирования двумерных конденсированных систем*

А.В. Карпова, С.С. Акименко

ФГАОУ ВО «Омский государственный технический университет»

Исследование двумерных конденсированных систем, учитывающих молекулярную структуру и сложные взаимодействия, является одной из ключевых задач современной науки о материалах. Это обусловлено потребностью в создании новых материалов с улучшенными электрическими, оптическими или каталитическими свойствами [1]. Ввиду экспериментальных трудностей и ограничений традиционных методов, применение новых подходов, в частности метода тензорной ренормализационной группы (ТРГ), относится к перспективным направлениям. Особый интерес представляет недавно предложенная авторами из Японии модификация метода ТРГ со взвешенными связями (ТРГВС) [2], где за счет учета влияния окружения системы обеспечивается сопоставимая точность результатов по сравнению с другими подходами при аналогичных вычислительных затратах. Однако оценка эффективности ТРГВС, представленная авторами, ограничена простыми спиновыми моделями, что не позволяет сделать однозначные выводы о ее применимости к более сложным адсорбционным системам.

Программная реализация разработана на языке программирования python 3.12.3. Распараллеливание расчетов осуществлялось с применением библиотек numpy 1.26.4 и scipy 1.13.0. Вычисления проводились на рабочей станции с процессором AMD Ryzen Threadripper 3970X и 256 Гб оперативной памяти.

Алгоритм ТРГВС верифицирован на примере модели Изинга на квадратной решетке при $\chi = 24$ (число оставляемых сингулярных значений). Полученные результаты согласуются с литературными данными [2]. Сравнение подходов ТРГ и ТРГВС проводилось на треугольной решетке на примере модели жестких гексагонов (модели моноцентриковой адсорбции с запретом на ближайшее соседство). Использование этой модели, имеющей аналитическое решение и некратную двум структуру, обеспечивает объективную оценку. Анализ эффективности распараллеливания разработанной реализации позволил установить, что оптимальное число потоков растет с увеличением параметра χ (рис. 1). При этом ТРГВС демонстрирует минимальную относительную ошибку и наименьшие вычислительные затраты при любом χ .

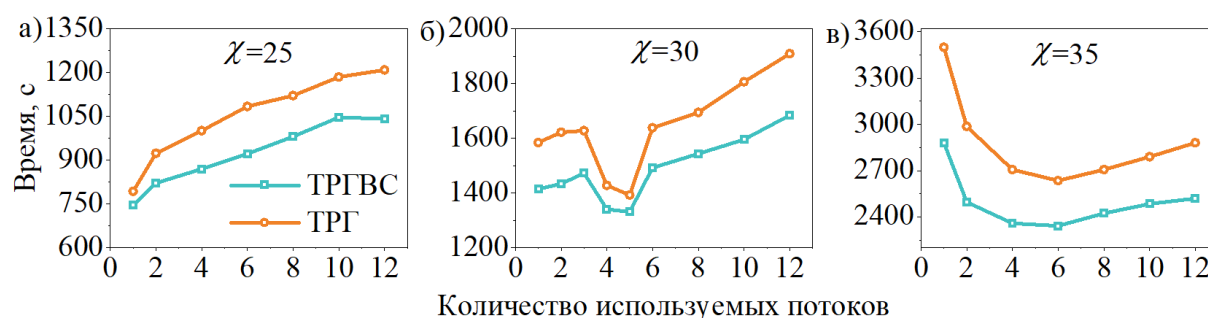


Рис. 1. Сравнение эффективности распараллеливания алгоритмов при различном параметре χ

Литература

1. Zhang L., Wang N., Li Y. Design, synthesis, and application of some two-dimensional materials // Chem. Sci. 2023. Vol. 14, no. 20. P. 5266–5290. DOI: 10.1039/D3SC00487B.
2. Adachi D., Okubo T., Todo S. Bond-weighted tensor renormalization group // Phys. Rev. B. 2022. Vol. 105, no. 6. P. L060402. DOI: 10.1103/PhysRevB.105.L060402.

* Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-71-10040).