



## ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение . . . . .	7
<b>Глава 1. Фазовые переходы и критические явления. Основные представления . . . . .</b>	<b>9</b>
1.1. Определение фазовых переходов . . . . .	9
1.2. Условия равновесия . . . . .	10
1.3. Классификация фазовых переходов . . . . .	11
1.4. Критическая точка. Критические явления . . . . .	13
1.5. Теория описания фазовых переходов II рода . . . . .	14
1.6. Критические показатели (индексы). Соотношения между критическими индексами . . . . .	16
1.7. Гипотеза подобия . . . . .	18
1.7.1. Однородные функции . . . . .	20
1.7.2. Обобщенные однородные функции . . . . .	21
1.7.3. Статическая гипотеза подобия . . . . .	22
1.8. Метод ренормгруппы и $\epsilon$ -разложения . . . . .	26
1.9. Влияние дефектов структуры на критическое поведение . . . . .	34
<b>Глава 2. Компьютерное моделирование фазовых переходов . . . . .</b>	<b>40</b>
2.1. Классические решеточные модели фазовых переходов . . . . .	40
2.1.1. Модель Изинга. История возникновения. Область применения. Определение модели . . . . .	40
2.1.2. Трехмерная XY-модель . . . . .	42
2.1.3. Двумерная XY-модель и фазовые переходы в плоских системах . . . . .	42
2.2. Моделирование методом Монте-Карло канонического ансамбля . . . . .	46
2.2.1. Канонический ансамбль . . . . .	46
2.2.2. Метод Монте-Карло. Алгоритм Метрополиса . . . . .	46
2.2.3. Динамическая интерпретация процесса моделирования . . . . .	49

2.2.4. Граничные условия . . . . .	50
2.2.5. Генераторы случайных чисел . . . . .	50
2.3. Моделирование двумерной модели Изинга . . . . .	52
2.3.1. Реализация алгоритма Метрополиса. Текст программы . . . . .	52
2.3.2. Релаксационные свойства модели. Установление состояния равновесия. Описание демонстрационной программы . . . . .	58
2.3.3. Задания . . . . .	59
2.4. Характеристики ферромагнитного фазового перехода второго рода, определяемого моделью Изинга . . . . .	61
2.4.1. Свойства фазового перехода. Критические индексы . . . . .	61
2.4.2. Влияние конечных размеров моделируемой системы на критические свойства. Конечномерное масштабирование . . . . .	62
2.4.3. Задания . . . . .	64
2.4.4. Текст программы для трехмерной модели Изинга . . . . .	66
2.4.5. Применение кластерного метода Вольфа для уменьшения эффектов критического замедления . . . . .	70
2.5. Характеристики ферромагнитного фазового перехода первого рода, определяемого трехмерной моделью Изинга во внешнем поле . . . . .	75
2.5.1. Свойства фазового перехода первого рода. Метастабильные состояния. Гистерезис . . . . .	75
2.5.2. Задания по моделированию фазовых переходов первого рода . . . . .	76
2.6. Моделирование критического поведения неупорядоченных систем . . . . .	78
2.6.1. Алгоритм выращивания конфигураций со случайным распределением примесей. Модификация метода Монте-Карло для неупорядоченных систем . . . . .	78
2.6.2. Задания по моделированию критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга . . . . .	86
<b>Глава 3. Методы параллельного программирования . . . . .</b>	<b>88</b>
3.1. Введение . . . . .	88
3.2. Терминология . . . . .	90
3.3. Базовые функции MPI . . . . .	94
3.4. Обзор коммуникационных операций типа точка-точка . . . . .	97
3.5. Обзор коллективных операций . . . . .	109
3.6. Глобальные вычислительные операции над распределенными данными . . . . .	120

---

Глава 4. <b>Результаты научных исследований по компьютерному моделированию критического поведения неупорядоченных систем</b> . . . . .	127
4.1. Исследования критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга . . . . .	127
4.1.1. Методика и результаты компьютерного моделирования . . . . .	128
4.1.2. Метод конечноразмерного скейлинга . . . . .	130
4.1.3. Расчет критических характеристик . . . . .	135
4.2. Компьютерное моделирование критической динамики неупорядоченной трехмерной модели Изинга . . . . .	140
4.2.1. Определение критического индекса $\alpha$ для однородной и неупорядоченной модели Изинга . . . . .	140
4.2.2. Обсуждение результатов моделирования . . . . .	145
4.3. Компьютерное моделирование критической динамики неупорядоченной двумерной модели Изинга . . . . .	147
4.3.1. Анализ результатов моделирования однородной и слабо неупорядоченной двумерной модели Изинга . . . . .	154
4.3.2. Анализ результатов моделирования сильно неупорядоченной двумерной модели Изинга . . . . .	155
4.3.3. Исследование влияния конечного размера системы на результаты моделирования неупорядоченной двумерной модели Изинга . . . . .	157
4.4. Особенности фазовых превращений в неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга со случайными полями . . . . .	159
4.4.1. Определение модели . . . . .	159
4.4.2. Методика моделирования . . . . .	162
4.4.3. Результаты моделирования и их анализ. Фазовые диаграммы . . . . .	167
4.4.4. Исследование сильно неупорядоченной антиферромагнитной модели Изинга со случайными полями . . . . .	170
4.5. Исследование влияния дальнедействующей корреляции дефектов на критическое поведение систем методами компьютерного моделирования . . . . .	177
4.5.1. Исследование неравновесной критической релаксации модели Изинга с линейными дефектами из начального полностью упорядоченного состояния . . . . .	181
4.5.2. Исследование критической эволюции модели Изинга с линейными дефектами из начального неупорядоченного состояния . . . . .	188

Приложение. <b>Версии используемых программ на языке СИ</b> . . . . .	193
1. Программа для моделирования критического поведения двумерной однородной модели Изинга . . . . .	193
2. Программа реализации алгоритма Вольфа для трехмерной модели Изинга . . . . .	197
3. Программа для моделирования критического поведения трехмерной однородной модели Изинга . . . . .	201
4. Программа для моделирования критического поведения трехмерной неупорядоченной модели Изинга . . . . .	205
Библиографический список . . . . .	211