

110: Metropolisov algoritem

Peter Rupnik

5. september 2019

1 Prva naloga

1.1 Naloga

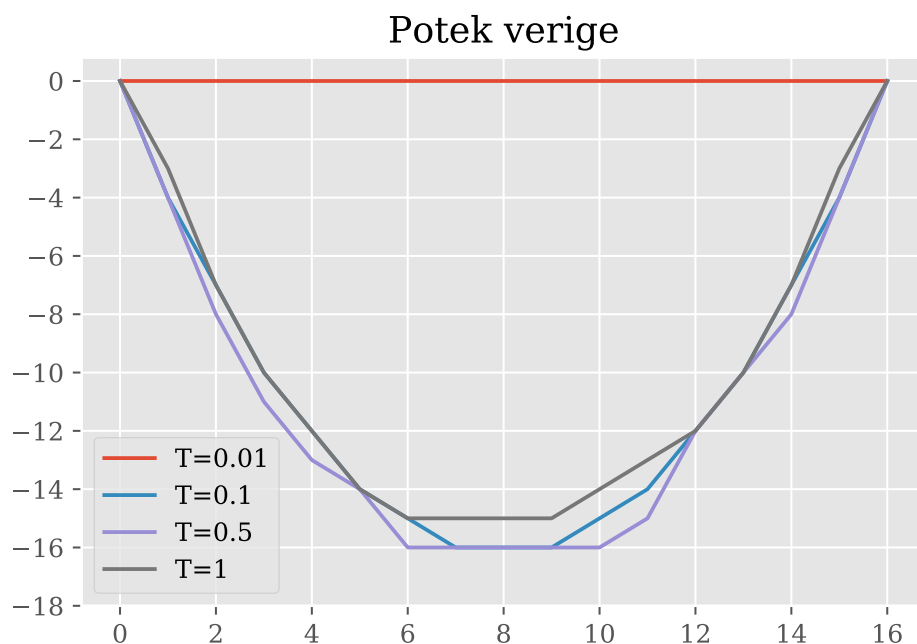
17 členkov dolga nitkasta molekula je obešena za oba konca. Vsak členek se lahko povesi od ničelne lege na poljubnega od 19 nivojev in si s tem zmanjša potencialno energijo za eno enoto na nivo. Če pa s tem prenategne vezi do sosedov, plača s prožnostno energijo, ki je za vsakega sosedu enaka kvadratu razlike v nivojskem številu. Določi ravnovesno energijo v odvisnosti od temperature. Za poteze lahko uporabiš spremembo za en nivo na izbranem slučajnem mestu.

1.2 Pristop

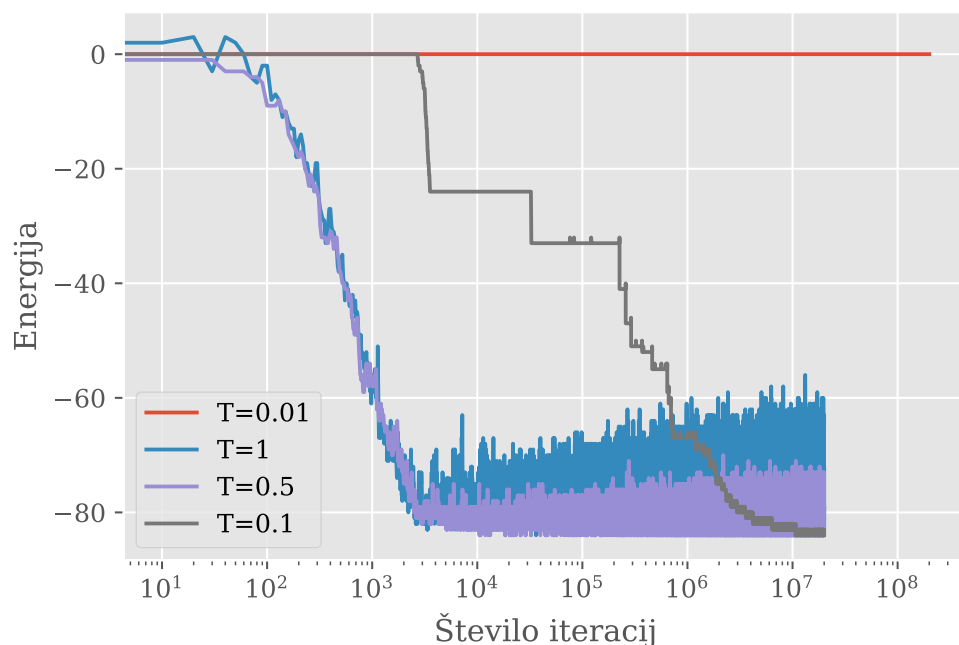
Napisal sem funkcijo, ki iz poteka verige izračuna njeno energijo, nato pa še funkcijo, ki je spremenila potek verige v skladu z Metropolisovim algoritmom. Na vektorju, ki predstavlja višine členov v molekuli, sem jo klical zaporedoma, število iteracij pa sem spreminjal po potrebi. Spremljal sem energijski potek in ocenil, kdaj nastopi faza, ko se energija ustali.

1.3 Opazka

Retrospektivno sem ugotovil, da sem daljnega decembra, ko sem to nalogo z zanemarljivim uspehom reševal prvič, v enačbe dodal še faktor α , ki je spreminjal vlogo prožnostne energije. Ob vnovičnem reševanju tega nisem vključil, ker navodila tega niso zahtevala.



Slika 1: Verižnice, oblike molekule po $2 \cdot 10^7$ iteracijah. Pri temperaturi $T = 0.01$ sem naredil $2 \cdot 10^8$ iteracij.



Slika 2: Energijski potek v odvisnosti od temperature. Celotnega poteka nisem mogel narisati zaradi prevelike količine podatkov, zato sem risal samo vsako deseto točko (za primer $T = 0.01$ pa vsako stoto.) Opazimo, da višje energije prej najdejo minimum, a nato tudi bolj opletajo okrog njega. V tem primeru bi lahko začeli s simuliranim ohlajanjem in temperaturo zmanjšali, spet pustili iterirati, in spet zmanjšali temperaturo, iterirali...

2 Druga naloga

Isingov model feromagnetne in antiferomagnetne snovi v dveh dimenzijah v približku dveh stanj opišemo s Hamiltonovim operatorjem

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i, \quad J = \pm 1$$

kjer je $s_i = \pm 1$ in vsota teče le po vezeh $\langle ij \rangle$ med najbližjimi sosedi. Če ni zunanjega polja ($H = 0$), temperatura T_c faznega prehoda pri feromagnetu zadošča enačbi

$$\sinh \frac{2J}{k_B T_c} = 1 \longrightarrow T_c \approx 2.269185 \frac{J}{k_B}.$$

2.1 Naloga

Določi povprečno energijo $\langle E \rangle$ in lastno magnetizacijo $\langle S \rangle$ v odvisnosti od temperature. $S = \sum_i^N s_i$ je celotna magnetizacija sistema. Oglej si tudi spinsko susceptibilnost in specifično toploto pri različnih jakostih magnetnega polja.

$$\chi = \frac{\langle S^2 - \langle S \rangle^2 \rangle}{N k_B T} \quad c = \frac{\langle E^2 - \langle E \rangle^2 \rangle}{N k_B T}$$

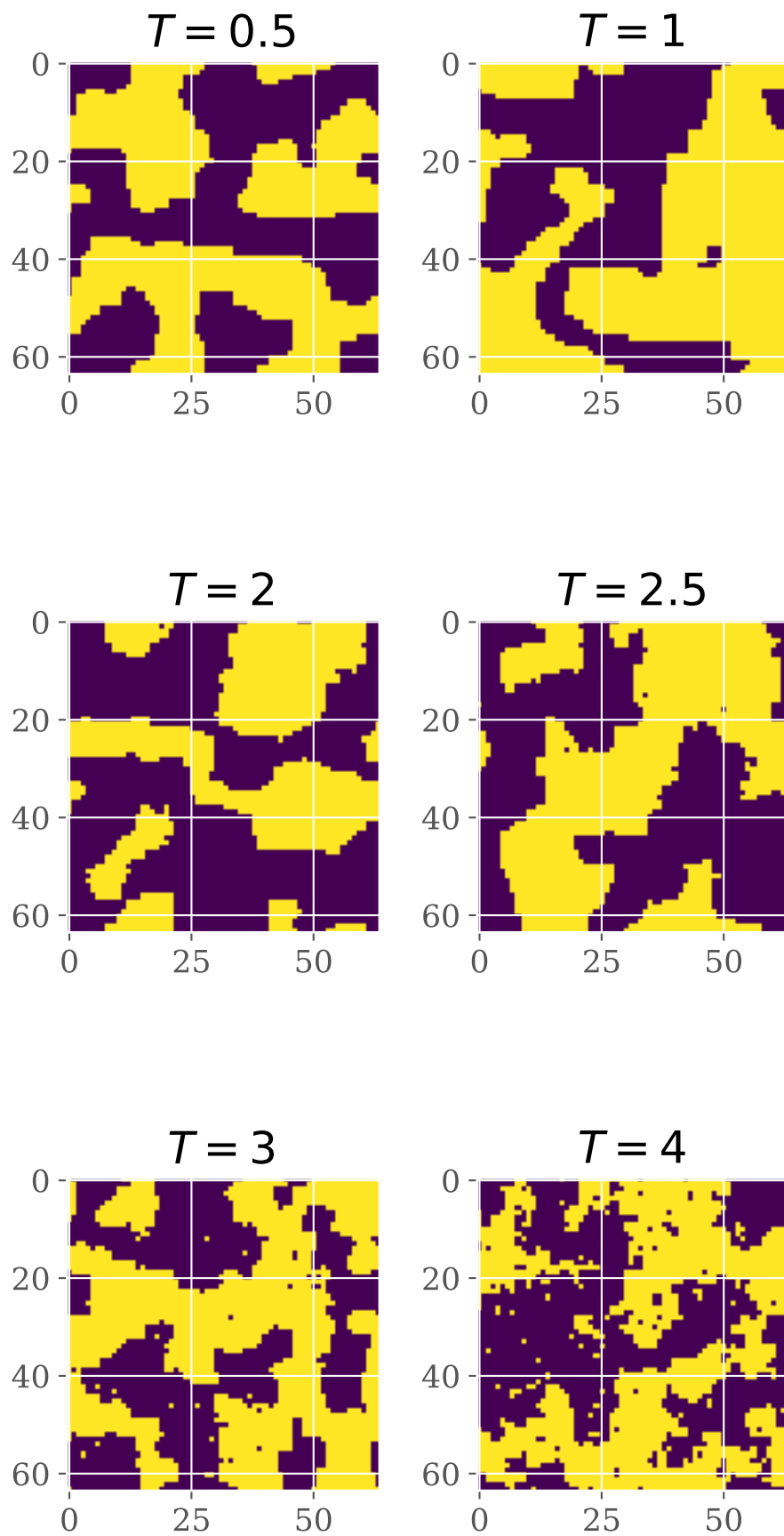
2.2 Pristop k reševanju

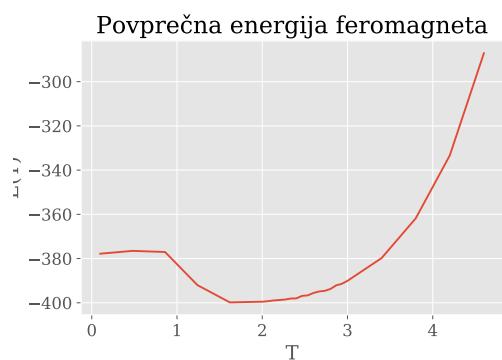
Pripravi sem si funkcije, ki izračunajo energijo in lastno magnetizacijo, izvedejo eno potezo in iterirajo poteze na dvodimenzionalnem seznamu. Pri računanju prvega člena energije sem uporabil modularno aritmetiko, tako vzpostavim nekesortne periodične robne pogoje.

Najprej sem preveril, da vse deluje kot bi moralo. Narisal sem nekaj rezultatov algoritma za različne temperature za feromagnetno snov. Za polje 64x64 celic sem uporabil 10^5 iteracij, za kar sem potreboval okrog 30 minut.

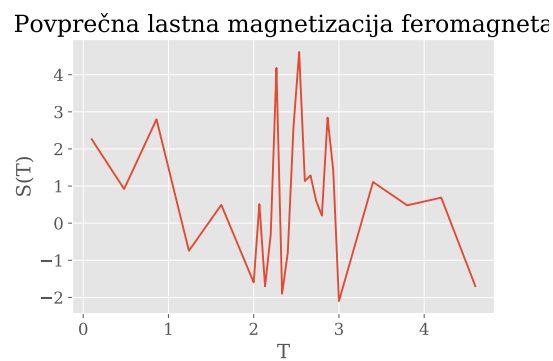
Sledila je rahla optimizacija kode; namesto dvojne `for` zanke v funkciji za računanje energije sem uporabil le eno. Testiral sem na testnem polju dimenzij 1000x1000. Namesto 2.58 s sem čas zmanjšal na 2.19 s. Naslednji korak je bila uporaba paketa `numba`, ki vključuje funkcijo `jit`. Z njo sem dekoriral obe funkciji in s funkcijo z dvojnimi zankami dosegel rezultat: 8.81 ms. Funkcija z enojno zanko doseže 35 ms. Tako sem z eno vrstico izboljšal časovno zahtevnost za faktor 277. Za sliko 3 tako namesto nekaj ur potrebujemo le minutko.

Izračun količin iz druge podnaloge je bil daljši. Na mreži 10x10 sem 2000-krat izračunal energijo in lastno magnetizacijo po 10^5 iteracijah Metropolisovega algoritma. Po 25 h lahko ugotovim le, da podatki niso niti približno lepi. Prikazujem jih na slikah 4, 5, 6 in 7. Za rešitev tega problema bi bržčas moral povečati število izračunanih energij in magnetizacij pri vsaki temperaturi.

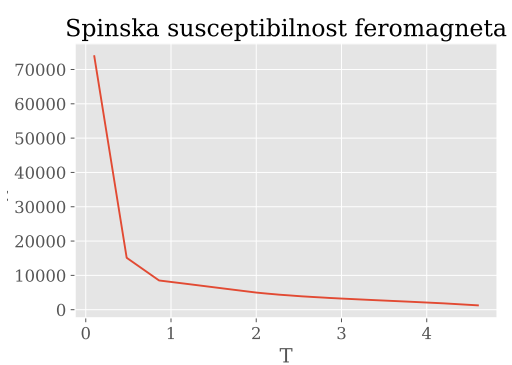




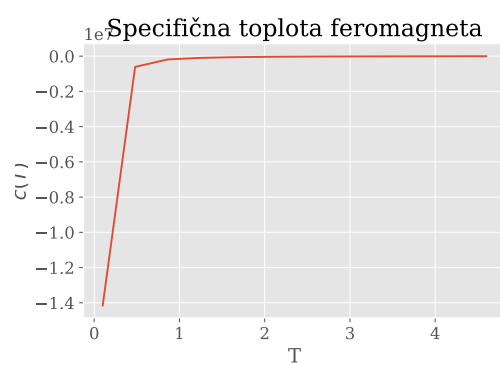
Slika 4: Povprečna energija feromagneta.



Slika 5: Povprečna lastna magnetizacija feromagneta.



Slika 6: Povprečna spinska susceptibilnost feromagneta.



Slika 7: Povprečna toplotna kapaciteta feromagneta.