شبیه سازی رایانه ای در فیزیک
تمرین ۷

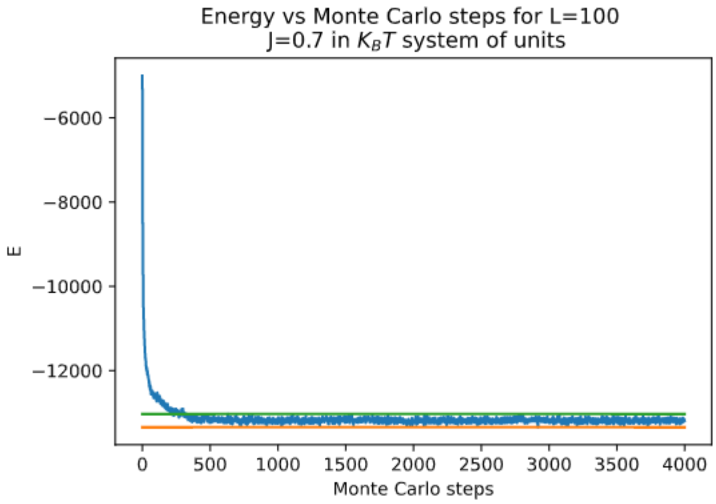
علی ستاره کوکب
شماره دانشجویی: ۹۵۱۰۰۴۹۱

۲۱ آذر ۱۳۹۹

۱ مقدمه

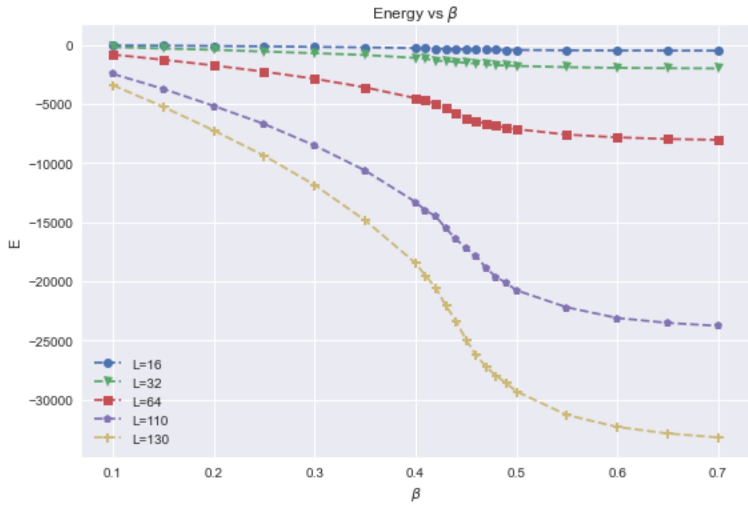
در این تمرین می خواهیم مدل آیزینگ دو بعدی را با استفاده الگوریتم مونت کارلو شبیه سازی کنیم. در کد ارائه شده تعدادی تابعی برای کار های مختلف تعریف شده که در اینجا به اختصار آنها را شرح می دهیم.
در ابتدا تابع initial تعریف شده که وظیفه ی آن تولید حالت اولیه ی شبکه می باشد. برای حالت اولیه اسپین ها انتخاب های گوناگونی وجود دارد که ما در اینجا حالت اسپین ها را بصورت تصادفی ۱ و −۱ قرار می دهیم. تابع بعدی، تابع energy می باشد که وظیفه ی آن برگرداندن انرژی سیستم می باشد. در این تابع سعی شده تا با استفاده از ویژگی های آرایه های کتابخانه ی numpy از حلقه برای محاسبه ی انرژی استفاده نشود. تابع بعدی magnetization می باشد. این تابع مغناطش کل شبکه را محاسبه می کند. مغناطش برابر حاصل جمع درایه های ماتریس شبکه می باشدو دقت کنید که در این جا عدد حاصل شده را به تعداد درایه ها نرمال نمی کنیم. تابع بعدی cor می باشد. این تابع وظیفه دارد تا همبستگی میان داده های تولید شده توسط روش متروپلیس را بررسی کند و در صورتی که این همبستگی کمتر از $\frac{1}{e}$ شد، طول همبستگی را برگرداند. در این تابع برای محاسبه ی طول همبستگی از تابع pearsonr در کتابخانه ی scipy استفاده شده است. تابع بعدی spin spin می باشد که وظیفه ی آن محاسبه ی طول همبستگی فضایی میان اسپین ها می باشد. طول همبستگی اسپین ها از رابطه ی ارائه شده در کلاس محاسبه می شود. در این تابع ماتریس شبکه به عنوان ورودی گرفته می شود و همبستگی در میان درایه های ماتریس محاسبه می شودو به علت وجود تقارن در راستای عمودی و افقی در شبکه کافی است که طول همبستگی را در راستای ردیف ماتریس محاسبه کنیم. برای آنکه آمارمان قوی تر شود همین کار را برای تمام ردیف های دیگر نیز انجام می دهیم. تابع بعدی،

تابع relax می باشد. وظیفه این تابع آن است که اطمینان حاصل کند که شبکه به شرایط تعادل خود رسیده است. همان طور که می دانیم مدل آیزینگ تنها در شرایط تعادل گرمایی برقرار می باشد. هنگامی که ما شرایط اولیه را بصورت تصادفی قرار می دهیم، سیستم از وضع تعادلی خود فاصله دارد و بنابراین اعدادی که از روش متروپلیس بدست می آیند از تابع توزیع مورد نظر (توزیع بولتزمن) پیروی نمی کنند و بنابراین در صورت داده گیری در این شرایط، داده های مورد نظر فاقد اعتبار می باشند. در شکل ۱ نمودار انرژی برحسب طول قدم مونت کارلو را می بینید. همان طور که دیده می شود در ابتدا انرژی افت می کند و پس از مدتی حول یک مقدار مشخص به نوسان های کوچک می پردازد. بنابراین ابتدا باید اجازه دهیم که سیستم به وضع تعادلی خود برسد و سپس شروع به داده گیری کنیم که این کار توسط تابع relax انجام می شود. این تابع به اندازه یrelax limit که به عنوان ورودی به آن داده می شود، الگوریتم متروپلیس را اجرا می کند. در حلقه ی اصلی برنامه برای بتا های میان ۱.۰ تا ۴.۰ این عدد برابر ۱۰۰ برابر L^2 می باشد و برای بتا های بزرگتر این عدد برابر ۱۰۰۰ برابر L^2 می باشد. بدین ترتیب اطمینان حاصل می کنیم که سیستم در تعادل گرمایی قرار دارد. تابع بعدی get corr می باشد که وظیفه اش یافتن طول همبستگی میان انرژی ها می باشد. برای این کار ابتدا به اندازه ی ۶ برابر L^2 عدد به روش متروپلس تولید می کنیم سپس تابع □□□ را با قدم های l*1 صدا می زنیم. این انتخاب بدان جهت است که دست کم باید حداقل یک بار به تمام اسپین ها شانس تغییر داده شود. اگر در میان این اعداد همبستگی به کمتر از $\frac{1}{e}$ رسیده باشد تابع get corr بیرون می آییم و در غیر اینصورت این کار را آنقدر ادامه می دهیم تا طول همبستگی را بدست آوریم. تابع بعدی، تابع main می باشد. این تابع بخش اصلی برنامه می باشد. در این تابع به اندازه ی sample number و در فواصل طول همبستگی که از تابع get corr بدست آورده ایم، داده می گیریم و در نهایت لیست انرژی و مغناطش به همراه واریانس آنها و همچنین طول همبستگی فضایی و خطای آن بر می گردانیم. تابع بعدی sv excel می باشدو این تابع یک data frame کتابخانه ی pandas را به عنوان ورودی می گیرد و در یک فایل اکسل در مسیر fname ذخیره می کند.

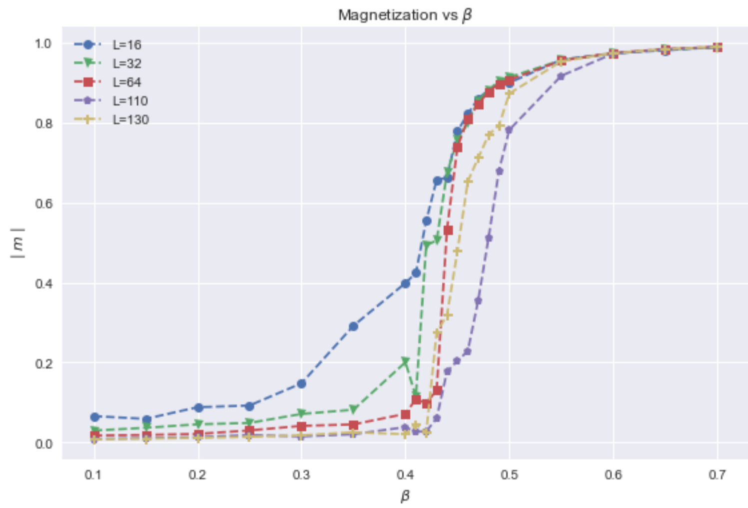


شکل ۱: نمودار انرژی برحسب قدم مونت کارلو برای شبکه ای به ضلع ۱۰۰. واحد محور افقی $L * L$ می باشد.

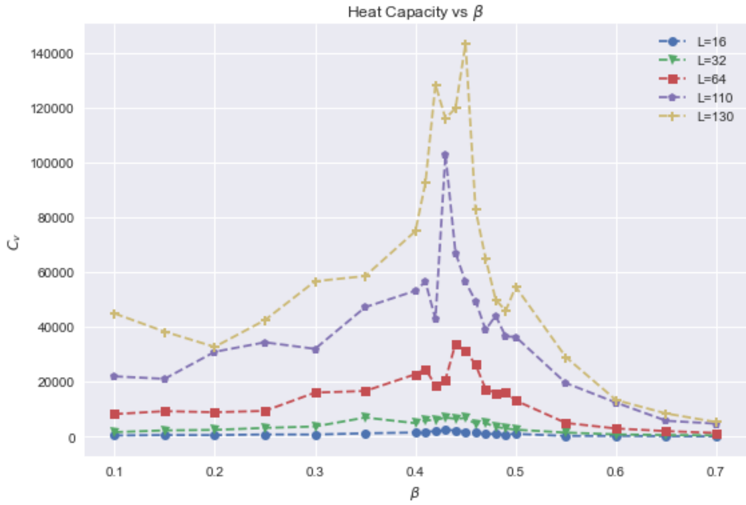
در حلقه ی اصلی برنامه لیستی از مقادیر مختلف بتا را می سازیم. سپس در یک حلقه برای مقادیر مختلف بتا در ابتدا با استفاده از تابع initial شرایط اولیه را می سازیم و سپس از توابع relax، get corr و main استفاده می کنیم و در آخر داده های بدست آمده را در یک data frame کتابخانه ی pandas ذخیره می کنیم. سپس این data frame را با استفاده از تابع sv excel در یک فایل اکسل ذخیره می کنیم. حال این فرآیند را برای طول های مختلف انجام می دهیم و داده ها را ذخیره می کنیم. این داده در فایل data آمده اند. دقت کنید که تمام اعداد گزارش شده در این فایل ها بدون ضرب کردن ضرایب مربوطه می باشد.
برای رسم داده تابع plot تعریف شده است. این تابع مسیر یک فایل اکسل می گیرد و داده های موجود در ردیف های فایل را رسم می کند. نمودار های بدست آمده از این تابع را در شکل های ۲ تا ۶ می بینید.



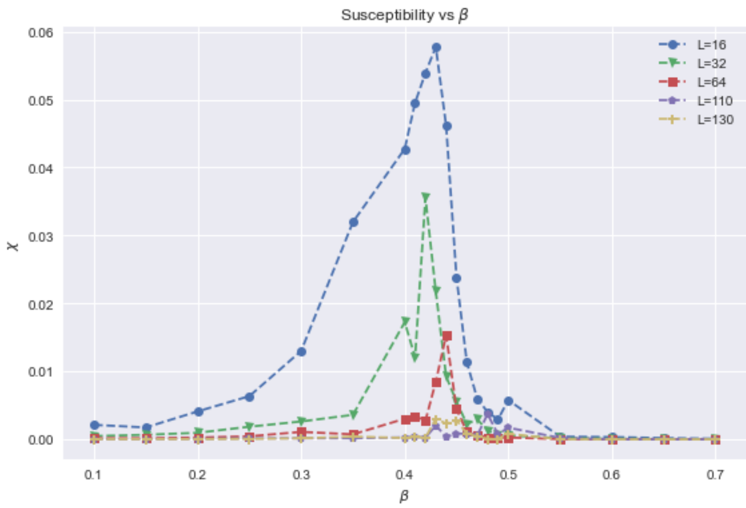
شکل ۲: نمودار انرژی برحسب بتا برای طول های مختلف



شکل ۳: نمودار مغناطش برحسب بتا برای طول های مختلف

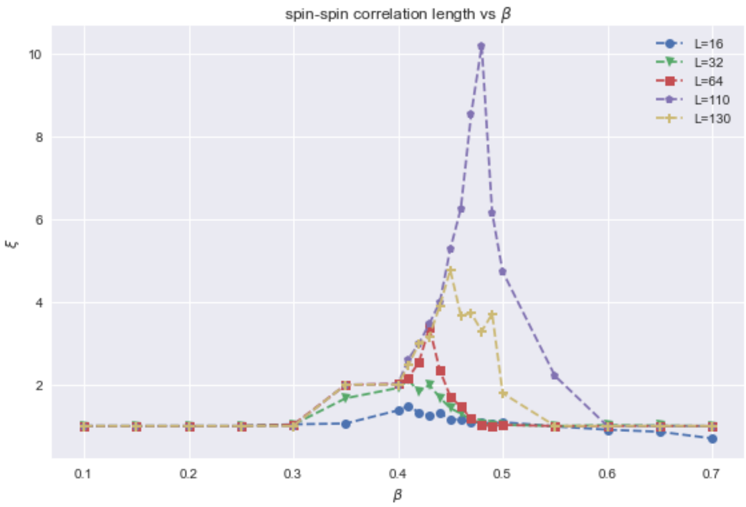


شکل ۴: نمودار ظرفیت گرمایی برحسب بتا برای طول های مختلف



شکل ۵: نمودار پذیرفتاری مغناطیسی برحسب بتا برای طول های مختلف

$$\xi(T) \sim |T - T_c|^{-\nu}$$
$$M(T) \sim (T_c - T)^{\beta}$$
$$C \sim |T - T_c|^{-\alpha}$$
$$\chi \sim |T - T_c|^{-\gamma}$$

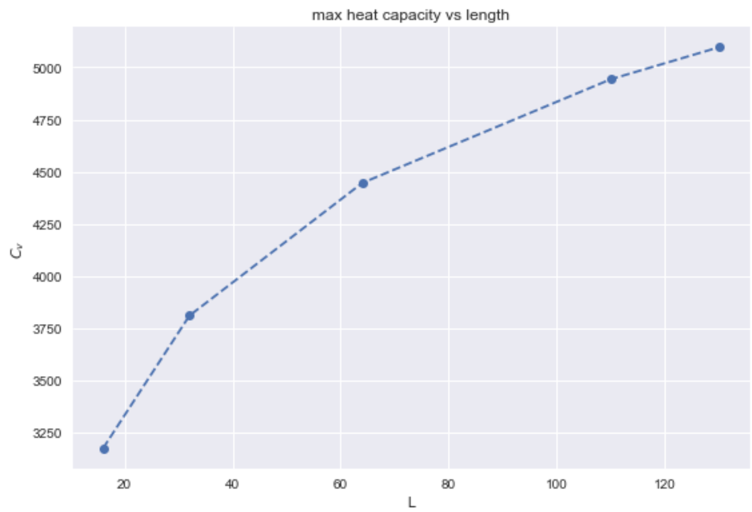


شکل ۶: نمودار طول همبستگی اسپین–اسپین برحسب بتا برای طول های مختلف

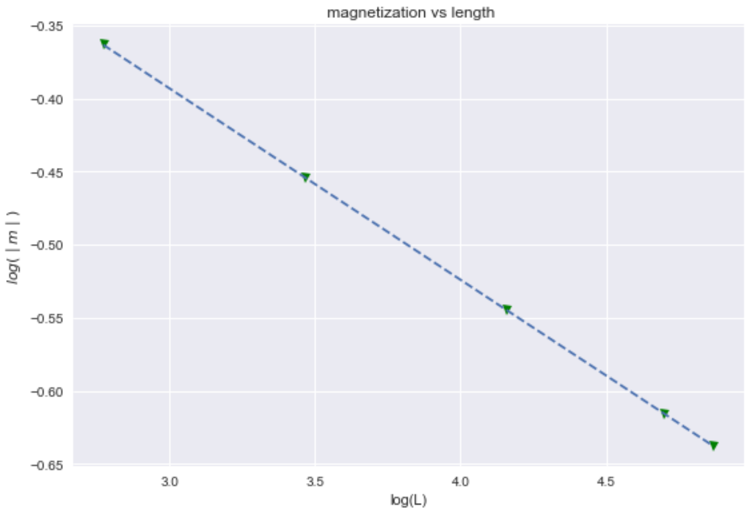
مشکلی که در این شبیه سازی وجود دارد آن است که برای آنکه سیستم به تعادل برسد گاها باید برای تعداد زیادی قدم مونت کارلو برنامه را اجرا کرد. برای آنکه سیستم زودتر به حالت تعادل خود برسد می توان از دما های گرم شبیه سازی را شروع کرد و با آرام سرد کردن سیستم داده های دما های مختلف را بدست آورد. با این کار به جای آنکه هر بار از حالت اولیه رندم شروع کنیم، حالت نهایی سیستم در دمای قبلی را به عنوان حالت اولیه دما ی بعدی قرار می دهیم و با توجه به اینکه حالت تعادل ها به یکدیگر نزدیک می باشد، با اینکار سیستم زودتر به وضعیت تعادل خود می رسد و شبیه سازی در مدت کمتری اجرا می شود. در این شبیه سازی از این روش استفاده شده است.

برای بدست آوردن نماهای بحرانی روابط زیر را می دانیم: با دانستن آنکه برای شبکه ی دوبعدی، نمای نو برابر یک می باشد، با رسم لگاریتم بیشینه ی کمیت های مختلف برحسب طول شبکه و برازش یک خط می توان نسبت نما ها را با استفاده از روابط بالا بدست آورد و با دانشتن نو می توان سایر نما ها را نیز بدست آورد. در شکل های تا نمودار های این خطوط به همراه معادلات آنها می بینید. شیب این خطوط بیانگر نما ی بحرانی می باشد که در جدول ۱ آورده شده است. نکته ای که باید به آن توجه کرد آن است که برای مدل آیزینگ دو بعدی واگرایی ظرفیت به شکل لگاریتمی می باشد و با دانستن این حقیقت می توان با برازش

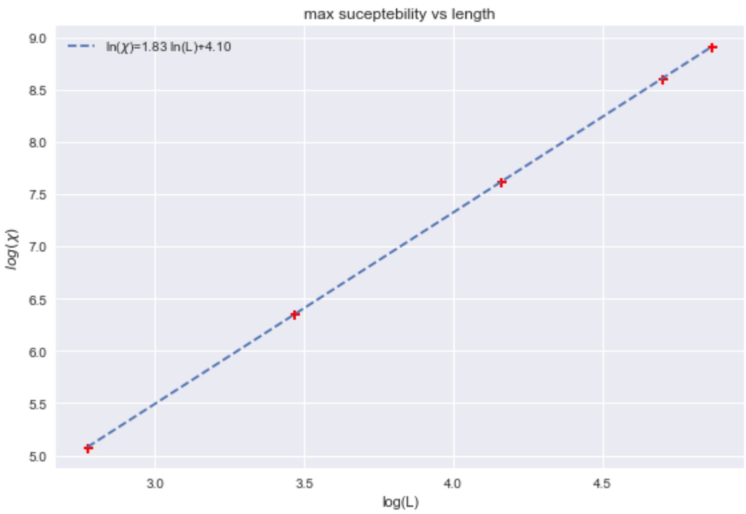
یک نمودار لگاریتمی به داده های ظرفیت گرمایی، C_0 را بدست آورد که در جدول آورده شده است. برای برازش خط ها از تابع linregress کتابخانه ی scipy استفاده می کنیم و برای بدست آوردن شکل تابع لگاریتمی ظرفیت گرمایی از تابع curve fit استفاده می کنیم. برای آنکه بتوانیم نمودار مغناطش را رسم کنیم، باید نقطه ای که مقناطش از محور افقی جدا می شود را بیابیم. از آنجایی که پیدا کردن این نقطه دشوار است بجای آن به خطای مغناطش که بیانگر پذیرفتاری مغناطیسی می باشد نگاه می کنیم و جایی که این خطا ماکسیمم می شود را به عنوان نقاط مورد نظر در برای رسم نمودار استفاده می کنیم. دقت کنید که در این نمودار ها تمام ضرایب و ثابت ها در اعدا بدست آمده ضرب شده و سپس نمودار ها رسم شده است. برای یافتن ماکسیمم سایر کمیت ها در هر طول تابع exponent تعریف شده است که این تابع به فایل اکسل ذخیره شده ی داده ها می رود و مقادیر ماکسیمم را در هرطول بر می گرداند. این نمودار ها را در شکل های ۷ تا ۱۰ می بیند.



شکل ۷: نمودار ماکسیمم ظرفیت گرمایی برحسب طول



شکل ۸: نمودار مغناظش برحسب طول



شکل ۹: نمودار ماکسیمم پذیرفتاری برحسب طول

Table 1: critical exponents for 2d ising

β	0.131
μ	1.83
C_0	0.6124

در نهایت برای آنکه تصویر بهتری از تکامل شبکه ی آیزینگ به هنگام تغییر دما داشته

باشیم فیلمی از این شبکه به هنگام تغییر دما درست می کنیم. برای این کار شبکه ای به طول ۲۰۰ درست می کنیم و در یک حلقه دما را تغییر می دهیم و مشابه قسمت اصلی برنامه، می گذاریم تا سیستم به تعادل برسد و در آخر به کمک تابع graphic شکل شبکه را نمایش می دهیم. سپس با استفاده از سایت ezgif.com عکس ها را به گیف تبدیل می کنیم که در فایل ارائه شده موجود است.