

Uniwersytet Łódzki
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

SPRAWOZDANIE Z LABORATORIUM
Zaawansowane metody obliczeniowe

Demon Creutza w dwuwymiarowym modelu Isinga

Autor: Katarzyna Stańczyk
Kierunek studiów: Informatyka
Data wykonania: 6 listopada 2025
Rok akademicki: 2025/2026

Łódź, 2025

1 Wstęp

Celem ćwiczenia było zbadanie działania algorytmu Creutza w dwuwymiarowym modelu Isinga z wykorzystaniem metody Monte Carlo [3, 2], a także otrzymanie wykresu zależności średniej magnetyzacji $\langle m \rangle$ od temperatury T i porównanie go z wartościami teoretycznymi.

W ramach symulacji analizowano przebieg zmian Energii demonu E_D , średnią magnetyzację $\langle m \rangle$ na dany krok Monte Carlo oraz zależność średniej magnetyzacji $\langle m \rangle$ od obliczonej temperatury T , co pozwoliło ocenić poprawność działania algorytmu i jego zdolność do odtworzenia przejścia fazowego w modelu Isinga.

1.1 Model Isinga

Model Isinga stanowi jedno z podstawowych narzędzi w fizyce statystycznej i służy do opisu zjawisk magnetycznych, takich jak przejście między stanem uporządkowanym (ferromagnetycznym) a nieuporządkowanym (paramagnetycznym).

W rozpatrywanym przypadku spiny $s_i = \pm 1$ są rozmieszczone w punktach dwuwymiarowej siatki, a energia układu wyraża się zależnością:

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad (1)$$

gdzie

- suma przebiega po parach sąsiednich spinów $\langle i, j \rangle$,
- $J > 0$ dla układu ferromagnetycznego.

Podstawową wielkością charakteryzującą uporządkowanie układu jest magnetyzacja, definiowana jako średnia wartość wszystkich spinów:

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i, \quad (2)$$

gdzie $N = L_x \times L_y$ oznacza całkowitą liczbę spinów w siatce.

W niskiej temperaturze siatka jest uporządkowana (duża magnetyzacja $\langle m \rangle$), natomiast powyżej temperatury krytycznej uporządkowanie zanika.

Dla modelu dwuwymiarowego wartość tej temperatury wynosi [3]:

$$T_c^{\text{teor}} \approx 2.269 \frac{J}{k_B}. \quad (3)$$

1.2 Metoda Monte Carlo i demon Creutza

Metoda Monte Carlo pozwala symulować procesy statystyczne, dla których uzyskanie rozwiązania analitycznego jest trudne lub niemożliwe. Demon Creutza to jej wariant, wprowadza się w nim dodatkowy element — tzw. demona, który pełni rolę pomocniczego „magazynu” energii E_d . Demon może przekazywać lub odbierać energię od układu, dzięki czemu całkowita energia (układ + demon) pozostaje stała. Zasada działania tego mechanizmu wymiany energii została szczegółowo opisana w kolejnym podrozdziale.

Prawdopodobieństwo wystąpienia stanu o danej energii E_d opisuje rozkład Gibbsa[3]:

$$P(E_d) \propto e^{-E_d/(k_B T)}, \quad (4)$$

gdzie k_B - stała Boltzmanna, T — temperatura układu.

Zatem wykres $\ln P(E_d)$ względem E_d powinien być liniowy. Po przekształceniu równania otrzymujemy zależność liniową:

$$\ln P(E_d) = aE_d + b, \quad a = -\frac{1}{k_B T}. \quad (5)$$

Dlatego temperaturę można wyznaczyć na podstawie współczynnika kierunkowego a :

$$T = -\frac{1}{ak_B}. \quad (6)$$

1.3 Algorytm symulacji

W każdej iteracji losowo wybierany jest spin s_i ; następnie liczymy zmianę energii ΔE po odwróceniu spinu s_i :

$$\Delta E = 2Js_i \sum_{nn} s_j, \quad (7)$$

gdzie suma obejmuje sąsiednie spiny s_j , czyli te, które znajdują się bezpośrednio obok rozważanego spinu w siatce. Zasady akceptacji są następujące:

- jeśli $\Delta E \leq 0$, zmiana jest zawsze akceptowana (układ traci energię, którą przejmuje demon),
- jeśli $\Delta E > 0$ i demon ma energię $E_d \geq \Delta E$, zmiana jest akceptowana, a demon traci energię ΔE ,
- w przeciwnym przypadku zmiana jest odrzucana.

W kolejnych częściach pracy zaprezentowano wyniki symulacji, które pozwalają prześledzić zmiany temperatury oraz magnetyzacji, a także wskazać moment zaniku uporządkowania.

Przedstawiono wyniki : histogram energii demona wykorzystany do dopasowania liniowego, przebieg średniej magnetyzacji w kolejnych krokach Monte Carlo oraz zależność średniej magnetyzacji od temperatury.

2 Rozwinięcie

2.1 Środowisko i konfiguracja programu

Implementację programu wykonano w środowisku CLion 2024.3.4 (JetBrains). Kod źródłowy napisano w standardzie C++17 i kompilowano przy użyciu kompilatora gcc.

Wykorzystano biblioteki:

`<vector>`, `<map>`, `<random>`, `<cmath>`, `<fstream>`, `<iostream>`, `<string>` oraz `<algorithm>`.

Wybór standardu C++17 umożliwił wykorzystanie biblioteki `<filesystem>` do automatycznego tworzenia katalogów do zapisu danych.

Program został przystosowany do uruchamiania z poziomu terminala.

Dane wejściowe wczytywano z pliku `dane.txt`, który zawierał parametry symulacji: rozmiary siatki (L_x, L_y) , liczbę kroków Monte Carlo n_{steps} , liczbę początkowych energii demona oraz zestaw ich wartości E_d .

Podczas działania programu dane były zapisywane automatycznie:

- co 200 kroków Monte Carlo zapisywano histogram energii demona i przebieg magnetyzacji do osobnych plików:
 - `histogram/histogram_E=...txt` – histogram energii demona zawierający wartości E , liczby wystąpień $N(E)$ oraz $\ln N(E)$, wykorzystywane do wyznaczania temperatury,
 - `magnetization/magnetization_E=...txt` – chwilowa magnetyzacja $m(t)$ w kolejnych krokach symulacji.
- po zakończeniu symulacji dla każdej wartości energii demona wyniki zbiorcze (średnia magnetyzacja, nachylenie i obliczona temperatura) zapisywano do pliku:
 - `mT.txt`.

Dzięki takiemu sposobowi zapisu możliwa była analiza przebiegu magnetyzacji w czasie, histogramu energii demona oraz zależności $\langle m \rangle(T)$ po zakończeniu całej serii symulacji.

2.2 Przetwarzanie danych symulacyjnych

Podczas symulacji monitorowano:

- zmianę energii demona w czasie (transfery energii między demonem a układem),
- zmiany magnetyzacji układu w kolejnych krokach Monte Carlo,
- średnią magnetyzację $\langle m \rangle$ w funkcji temperatury T , wyznaczoną z rozkładu energii demona.

Średnią magnetyzację obliczano po fazie relaksacji, odrzucając pierwsze 20% kroków jako niestabilne.

2.3 Wyniki

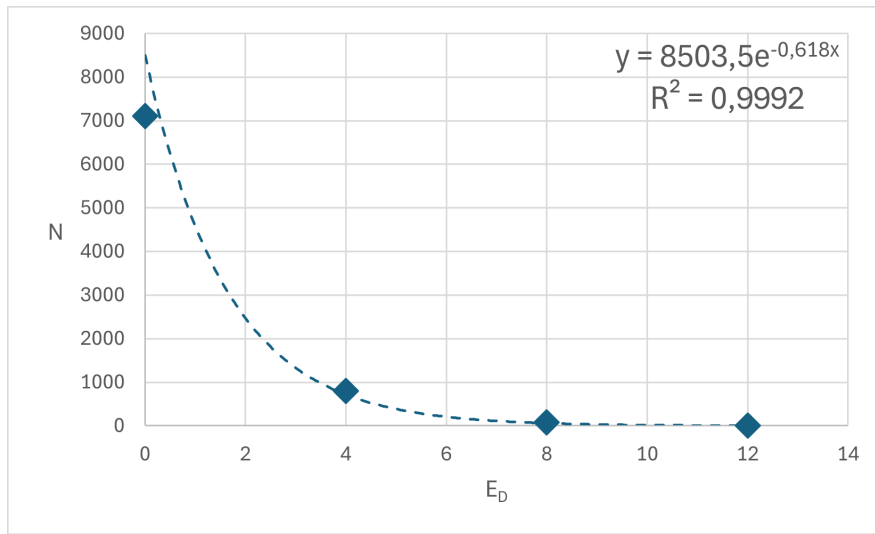
Siatka 37×37

Parametry symulacji:

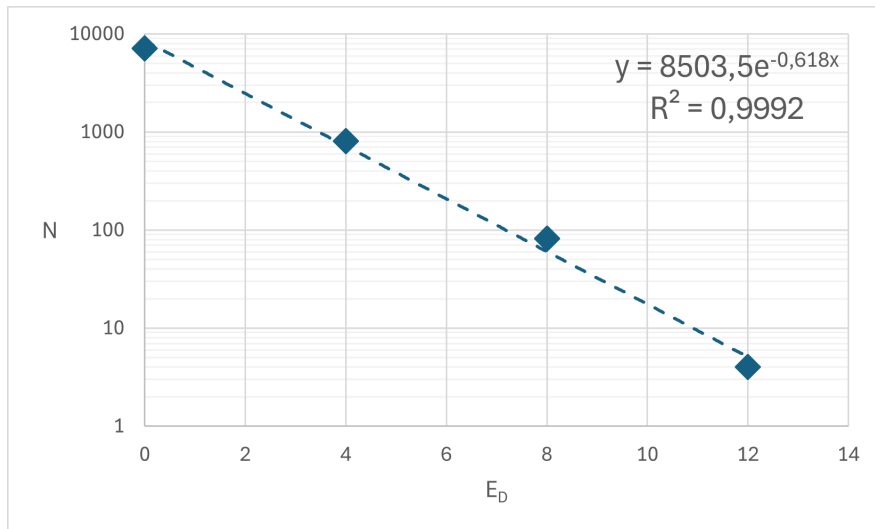
Liczba kroków Monte Carlo: $n_{\text{steps}} = 10,000$

Zakres energii demona: $E_D = 56 - 1520$

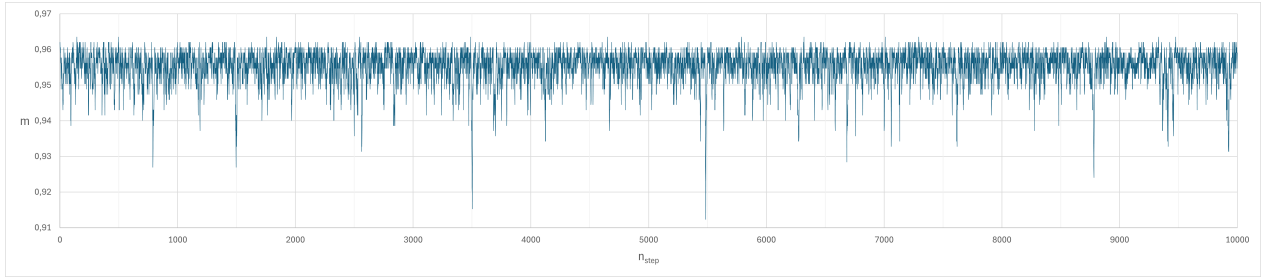
Krok energii demona: $\Delta E_D = 8$



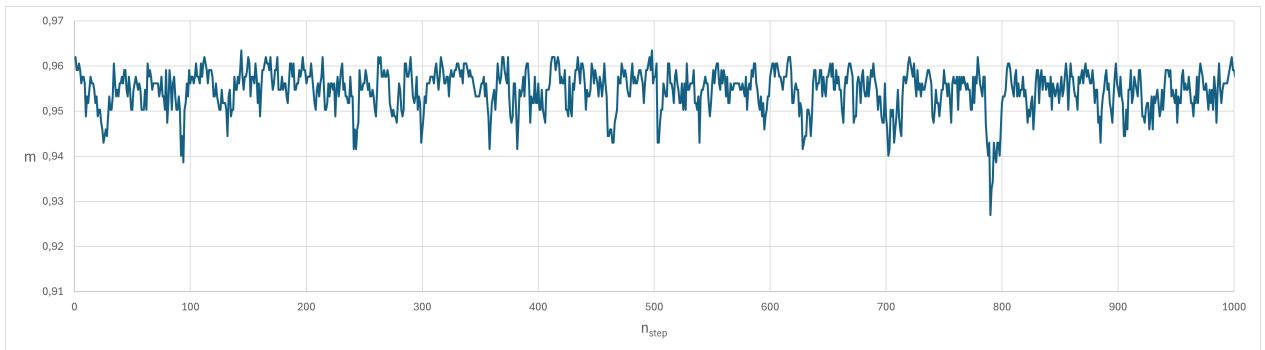
Rysunek 1: Histogram w skali liniowej energii demona dla siatki 37×37 i $E_D = 200$.



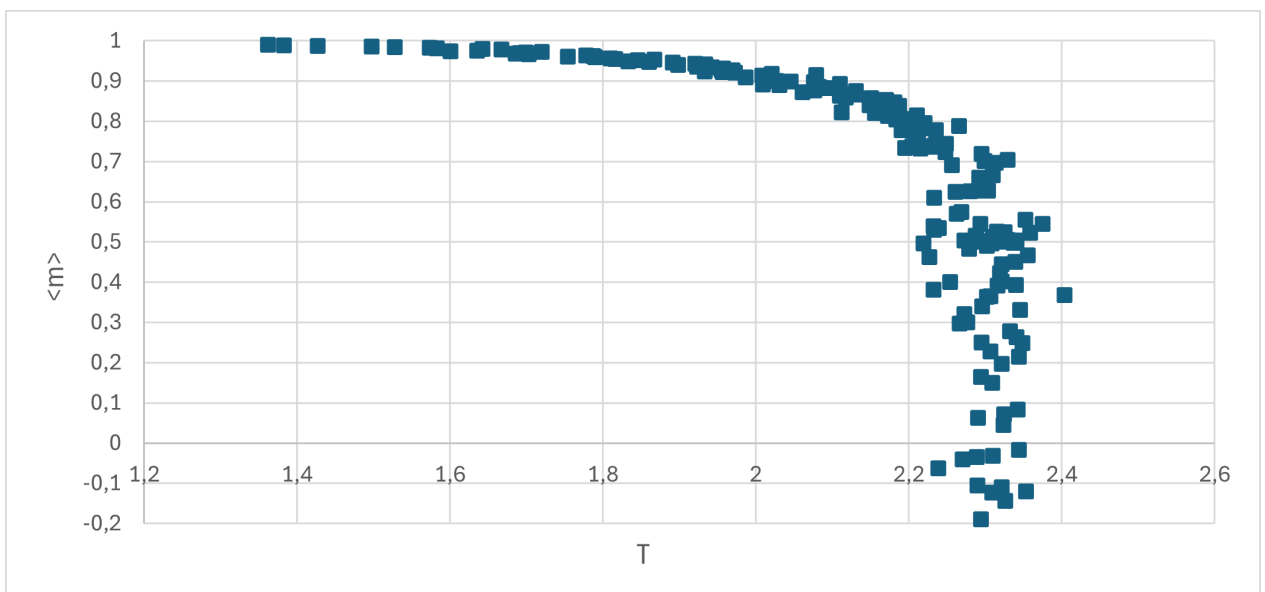
Rysunek 2: Histogram w skali logarytmicznej energii demona dla siatki 37×37 i $E_D = 200$.



Rysunek 3: Cały przebieg średniej magnetyzacji $m(t)$ w kolejnych krokach Monte Carlo dla siatki 37×37 $E_D = 200$.



Rysunek 4: Fragment przebiegu średniej magnetyzacji $m(t)$ obejmujący 1000 kroków Monte Carlo n_{steps} dla siatki 37×37 i $E_d = 200$.



Rysunek 5: Zależność średniej magnetyzacji $\langle m \rangle$ od temperatury T dla siatki 37×37 .

2.4 Komentarz do wyników

Na podstawie uzyskanych wyników przeanalizowano zachowanie układu spinów w funkcji temperatury oraz wpływ rozmiaru siatki na kształt przejścia fazowego.

Histogram energii demona.

Rozkład energii demona ma postać wykładniczą, zgodną z równaniem (4). Dane dopasowano do funkcji [1] $N(E) = Ae^{-aE}$, co potwierdza poprawność działania algorytmu. Współczynnik A pełni rolę czynnika normalizacyjnego, natomiast parametr a odpowiada nachyleniu w skali logarytmicznej. Na podstawie histogramu energii demona $N(E_d)$ przeprowadzono dopasowanie liniowe (5) metodą najmniejszych kwadratów [1]. W tym celu obliczono sumy:

$$S_x = \sum_k x_k, \quad S_y = \sum_k y_k, \quad S_{xx} = \sum_k x_k^2, \quad S_{xy} = \sum_k x_k y_k, \quad (8)$$

gdzie $x_k = E_k$, a $y_k = \ln N(E_k)$. Na ich podstawie wyznaczono współczynniki regresji liniowej:

$$a = \frac{nS_{xy} - S_x S_y}{nS_{xx} - S_x^2}, \quad b = \frac{S_{xx} S_y - S_x S_{xy}}{nS_{xx} - S_x^2}, \quad (9)$$

gdzie n oznacza liczbę punktów histogramu.

Uzyskane współczynniki posłużyły następnie do wyznaczenia temperatury (6).

Niewielkie odchylenia od wartości teoretycznych wynikają z ograniczonej liczby próbek oraz statystycznego charakteru metody Monte Carlo.

Ewolucja magnetyzacji w czasie.

Po początkowym etapie relaksacji układ osiąga stan równowagi, w którym magnetyzacja oscyluje wokół stałej wartości. Niewielkie, chwilowe zmiany magnetyzacji wynikają z losowych zmian orientacji pojedynczych spinów, które pojawiają się w trakcie symulacji. Nie wpływają one jednak znacząco na ogólny stan uporządkowania układu.

Zależność średniej magnetyzacji od temperatury.

Jednym z kluczowych wyników przeprowadzonej symulacji jest zależność średniej magnetyzacji $\langle m \rangle$ od temperatury T . Na wykresie (5) widać wyraźny spadek magnetyzacji wraz ze wzrostem temperatury oraz jej wahania w pobliżu temperatury krytycznej. Te wahania wynikają z losowego charakteru metody Monte Carlo: kolejne konfiguracje układu powstają na podstawie decyzji probabilistycznych, dlatego w obszarze przejścia fazowego obserwujemy dużą zmienność wyników. Punkty na wykresie układają się wtedy w charakterystyczną „mgłę” przy przejściu fazowym — oznacza to, że układ łatwo przechodzi między różnymi konfiguracjami spinów, a stany generowane przez algorytm stają się wzajemnie powiązane.

Teoretyczna temperatura krytyczna dla modelu Isinga 2D wynosi $T_c^{\text{teor}} = 2.269 \frac{J}{k_B}$. Najbliższą tej wartości temperaturę uzyskano dla $T = 2.3237 \frac{J}{k_B}$ (początkowa energia demona $E_d = 1112$); w tym punkcie $\langle m \rangle \approx 4.53 \times 10^{-2}$, co odpowiada niewielkiej, dodatniej magnetyzacji bliskiej zeru. Względna różnica względem wartości teoretycznej wynosi

$$\delta = \frac{|2.3237 - 2.269|}{2.269} \times 100\% \approx 2.4\%,$$

co jest dość dobrym wynikiem jak na symulacje Monte Carlo przeprowadzone na ograniczonych małych rozmiarach siatki. W małych układach przejście fazowe bywa „rozmyte” i może przesunąć się względem wartości teoretycznej, stąd nieznaczne odchylenie jest spodziewane.

3 Zakończenie

Uzyskane wyniki wykazują oczekiwany przebieg charakterystyczny dla przejścia fazowego — wzrost temperatury prowadzi do stopniowego zaniku uporządkowania i gwałtownego spadku magnetyzacji w pobliżu temperatury krytycznej.

Wynik symulacyjny $T_c^{\text{sym}} \approx 2.3237 \frac{J}{k_B}$ (dla $E_d = 1112$) jest bliski wartości teoretycznej $T_c^{\text{teor}} = 2.269 \frac{J}{k_B}$, a różnica $\delta \approx 2.4\%$ mieści się w akceptowalnym zakresie błędu. Drobne odchylenia można przypisać ograniczonemu rozmiarowi siatki oraz losowemu charakterowi procesu Monte Carlo, który w pobliżu temperatury krytycznej prowadzi do wahań magnetyzacji i niewielkich przesunięć obserwowanej temperatury przejścia.

Literatura

- [1] A. Bielski and R. Ciuryło. *Podstawy metod opracowania pomiarów*. Wydawnictwo Uniwersytetu Mikołaja Kopernika. wyd. 2, s. 69–83, 2001, Toruń.
- [2] Sigmund Brandt. *Metody statystyczne i obliczeniowe: Analiza danych*. Wydawnictwo Naukowe PWN. s. 62–114, 1988, Warszawa.
- [3] Tomasz Gwizdała. *Własności algorytmów genetycznych w zastosowaniu do zagadnień magnetyzmu*. Rozprawy habilitacyjne Uniwersytetu Łódzkiego. Wydawnictwo Uniwersytetu Łódzkiego. s. 11–108, 2010, Łódź.