

**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 demona  $E_D$ , 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 odzwierciedlenia 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 równaniatrzymujemy 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  $\Delta E$  po odwróceniu spinu  $s_i$ :

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

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  $\Delta E$ ,
- 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 komplikowano 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

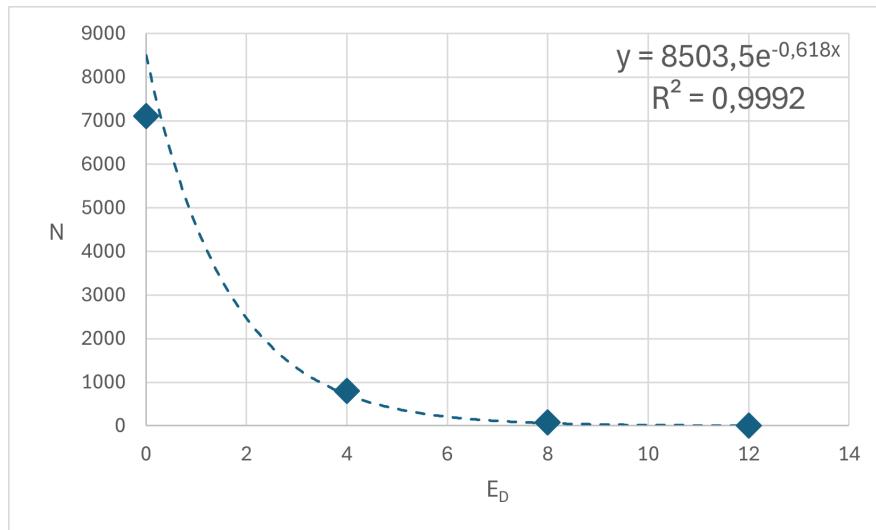
Siatka  $37 \times 37$

Parametry symulacji:

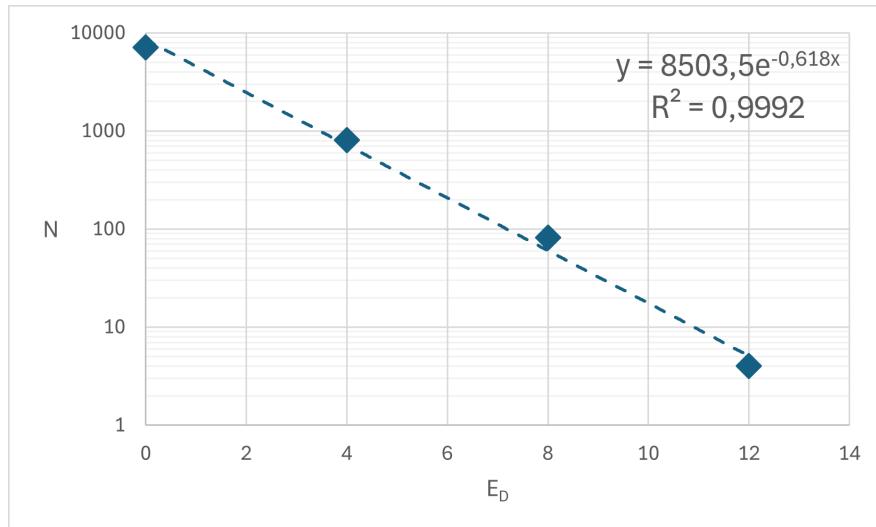
Liczba kroków Monte Carlo:  $n_{\text{steps}} = 10,000$

Zakres energii demona:  $E_D = 56 - 1520$

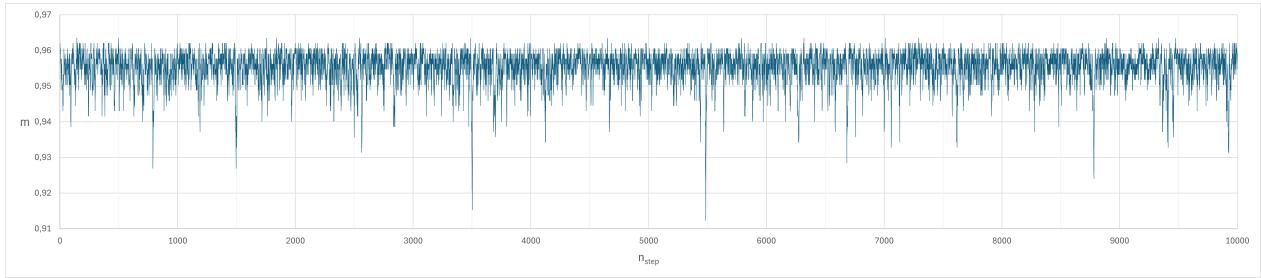
Krok energii demona:  $\Delta E_D = 8$



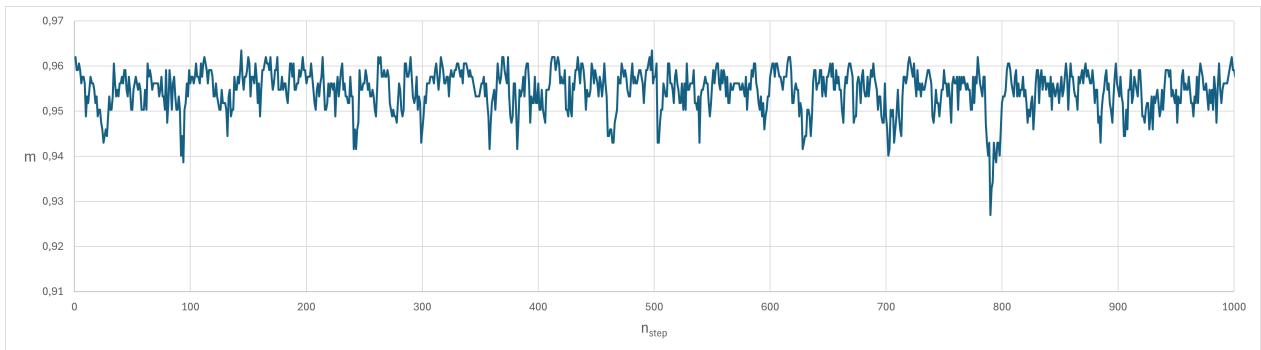
Rysunek 1: Histogram w skali liniowej energii demona dla siatki  $37 \times 37$  i  $E_D = 200$ .



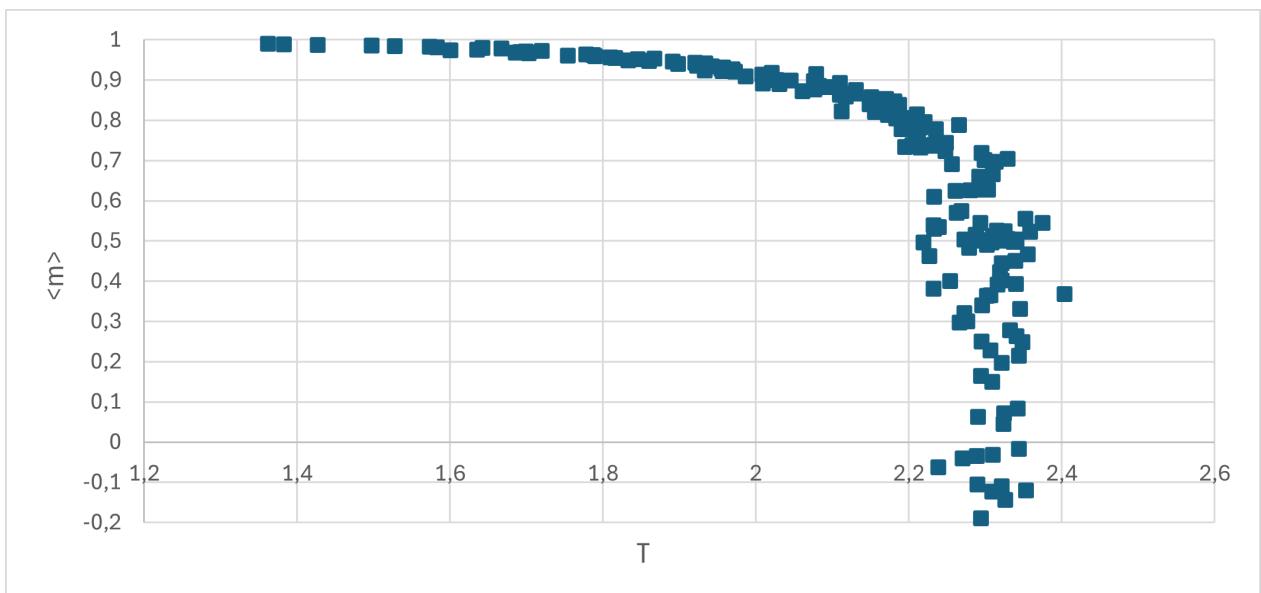
Rysunek 2: Histogram w skali logarytmicznej energii demona dla siatki  $37 \times 37$  i  $E_D = 200$ .



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



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



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

## 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.