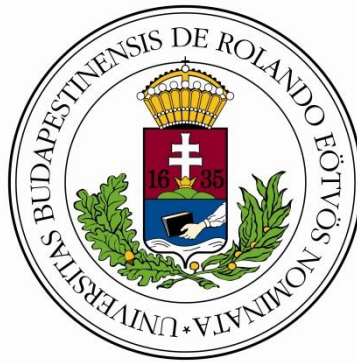


Korrelációk vizsgálata spinűvegeken homogén és inhomogén külső tér mellett szimulációs módszerekkel

- Diplomamunka -



Készítette: Czibalmos Gábor

EHA-kód: CZGOAAT.ELTE

Alapszak: Fizika MSc
Szakirány: Kutató fizikus
Modul: Számítógépes fizika

A szakdolgozat témavezetője: Dr. Kondor Imre

Egyetemi belső konzulensek: Dr. Csabai István és Dr. Papp Gábor

ELTE TTK Fizikai Intézet Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

Budapest, 2012.

Tartalomjegyzék

Tartalomjegyzék	1
1. Bevezetés	3
1.1. Komplex hálózatok a mindennapokban.....	3
1.2. A dolgozat célja	6
2. A spinűvegekről általában	7
2.1. Valódi spinűvegek és tulajdonságaik.....	7
2.2. Elméleti leírás	9
3. A szimuláció megvalósítása	12
3.1. A vizsgált rendszer.....	12
3.2. A fejlesztői környezet	14
3.3. Teljes leszámolás	15
3.4. Metropolis – Monte Carlo algoritmus	16
3.4.1. <i>A Monte Carlo és Metropolis algoritmusok</i>	<i>16</i>
3.4.2. <i>A megvalósított algoritmus</i>	<i>17</i>
3.4.3. <i>Futáshossz becslése</i>	<i>18</i>
3.5. A szimulációk ellenőrzése	19
4. Eredmények	21
4.1. Egyedi minták vizsgálata	21
4.1.1. <i>Külső tér nélküli eset</i>	<i>21</i>
4.1.2. <i>Homogén külső tér bevezetése</i>	<i>23</i>
4.1.3. <i>A de Almeida-Thouless vonal</i>	<i>24</i>
4.2. Minta-független eredmények	25
4.2.1. <i>Külső tér nélküli eset</i>	<i>27</i>
4.2.2. <i>Homogén külső tér bevezetése</i>	<i>27</i>
4.2.3. <i>A korrelációk szórása</i>	<i>29</i>
4.2.4. <i>Magas hőmérsékleten</i>	<i>30</i>
4.3. Inhomogén külső tér alkalmazása	30
4.3.1. <i>Egy spin „rögzítése”</i>	<i>31</i>
4.3.2. <i>Két rendszer párhuzamos futtatása</i>	<i>33</i>
4.4. A rendszer frusztráltságának fontossága.....	36
4.4.1. <i>A frusztráció vizsgálata</i>	<i>36</i>

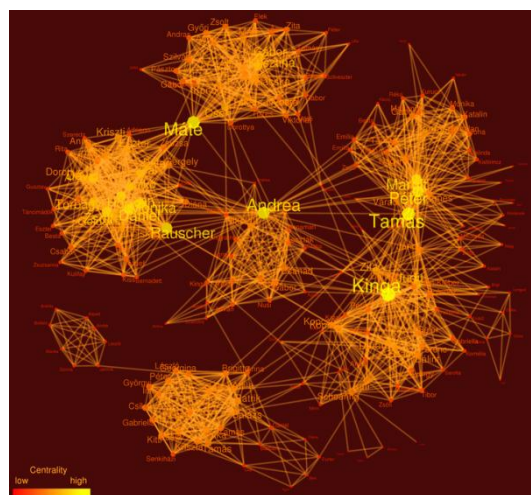
4.4.2. <i>A frusztráltság következményei</i>	37
5. További vizsgálati lehetőségek	41
6. A dolgozat összefoglalása.....	42
6.1. Összegzés.....	42
6.2. Summary.....	43
7. Mellékletek.....	44
7.1. 'A' melléklet: Aszimmetria a korrelációban (példa)	44
7.2. 'B' melléklet: A frusztráltság hatása az energia szintekre (példa)	45
7.3. 'C' melléklet: Csatolási mátrixok	47
7.4. 'D' melléklet: Boole változók alkalmazása	48
7.5. 'E' melléklet: Eredmények egy véletlen választott mintára	49
7.6. 'F' melléklet: Eredmények egy frusztrált mintára	51
8. Irodalomjegyzék.....	54
9. Ábrajegyzék	55
Köszönetnyilvánítás.....	56
Nyilatkozat	57

1. Bevezetés

1.1. Komplex hálózatok a mindennapokban

Az elmúlt húsz-harminc évben sok tudományág területén hódított teret magának a hálózati szemlélet (konnekcionizmus), melynek az a lényege, hogy bizonyos rendszereket gráfokkal, hálózatokkal reprezentálnak. Ilyen modelleket alkalmaztak nagy sikerrel az idegtudományban, a kognitív pszichológiában [1], és természetesen olyan területeken, ahol könnyebb azonosítani a hálózati elemeket, mint például az informatikában, vagy a számítógépes hálózatok vizsgálatában [2], szociális-, üzleti- és pénzügyi hálózatok vizsgálatában. Ezek a modellek általában jól visszaadják a vizsgálni kívánt rendszerek egy vagy több lényeges tulajdonságát. A legtöbb területen, bárhogyan is definiálják vagy építik a hálózatot, elég hamar eljutnak egy olyan szintre, amikor az egyes elemek ismerete nem elégséges a rendszer egészének megértéséhez. Ezeket nevezik komplex rendszereknek, melyek vizsgálatához nagy segítséget nyújtanak a statisztikus fizika módszerei és az informatika.

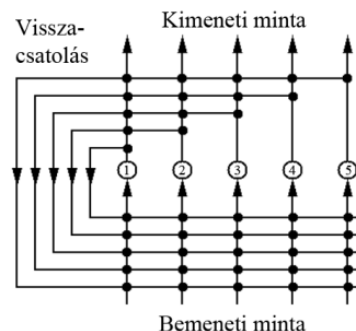
Szemléletes példa a közösségi hálózat esete: az 1960-as években bemutatták, hogy bármely két ember „hat kézfogásnyira” van egymástól, vagyis ennyi köztes ismerősön keresztül érhető el egy tetszőleges személy [3]. (Az elmélet már korábban – 1929-ben is felbukkant [4].) Ez nem más, mint a kisvilág tulajdonság, ami pontosan azt jelenti, hogy a legrövidebb út $\{\ell\}$ a rendszer méretének logaritmusával $\{\log(N)\}$ arányos. Ezt a tulajdonságot mutatja az Erdős (Pál) – Rényi (Alfréd) féle véletlen gráf is [5]. Csakhogy ez utóbbiban a kapcsolatok eloszlása Poisson-eloszlás, míg a közösségi hálók esetén hatványfüggvényt követő eloszlást (skalafüggetlen fokszámeloszlás) mutatnak a mérések. Ilyen szempontból jobb modellnek minősül Barabási (Albert-László) – Albert (Réka) féle preferenciális csatolási modell [6], mely rendelkezik mindkét, előbb említett tulajdonsággal.



1.1.1. ábra: Példa egy szociális hálózatra: közösségi oldalon, saját ismerőseim közti kapcsolatok.

A hálózatos modell azért is kézenfekvő, mert a fentebb említett tudományterületeken a rendszerek hasonló tulajdonságokat mutatnak. Így az egyes modelleket gond nélkül (vagy kisebb-nagyobb módosítással) lehet alkalmazni különböző rendszerek leírására. Például az imént említett preferenciális csatolási modellt alkalmazni lehet közösségi hálók és számítógépes hálózatok szimulációjánál is (mint például Web, Internet...).

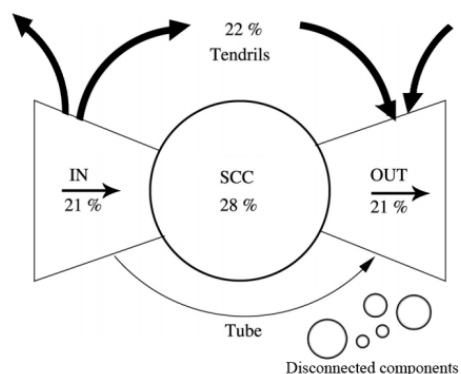
Egy másik jó példa a Hopfield-modell [7], mely egy asszociatív memória modell: az információt a kapcsolatok tárolják a hálózaton elosztva (1.1.2 ábra). Ez egy neurális hálózati modell, mely segít megérteni a memória működését. (A Hopfield-modell mondhatni összeköti a két tudományterületet, mivel formálisan megfeleltethető egy spinűveg modellnek.)



1.1.2. ábra: Hopfield-hálózat

További érdekes példa topológiai hasonlóságra a Web-gráf és a globális vállalati ellenőrzés irányított hálózata: a Web-en végzett mérésekből egy „csokornyakkendő” struktúra (1.1.3 ábra) rajzolódik ki [8]. Itt a gráf központját egy erősen összekapcsolt – közel teljes gráf – komponens (Strongly Connected Component) alkotja. A hálózat közel 1/5-ének az elemei ennek a komponensnek elemeire mutatnak úgy, hogy ellenkező irányba nincs kapcsolat (IN).

Egy másik hasonló méretű részre pedig csak az erősen összekapcsolt komponensből mutatnak kapcsolatok úgy, hogy ezek már nem hivatkoznak visszafelé (OUT). Ezek mellett még megfigyelhetők csatornák (Tube), melyek közvetlenül összekapcsolják a két (IN-OUT) oldalt, valamint „indák” (Tendrils), melyek különböző elemekre hivatkozhatnak a főbb részekon kívülre és kívülről. (Kisebb részben előfordulnak összekapcsolt, különálló csoportok is.) Hasonló struktúrát figyeltek meg a vállalati ellenőrzés irányított hálózatában [9], igaz ott az arányok eltérőek: például az erősen



1.1.3. ábra: A Web struktúrája

kapcsolt központi rész csak kis százalékát (0,7%) teszi ki a rendszernek.

A legtöbb vizsgált hálózat esetén felmerül a kérdés: mennyire robusztus a rendszer? Vagyis mennyire ellenálló külső behatással szemben? Ezt a tulajdonságot „támadásokkal” szembeni ellenálló képességgel szokták vizsgálni (miközben a perkolációt figyelik), ami

lényegében a hálózat módosítását jelenti, jellemzően úgy, hogy éleket vagy csúcsokat távolítanak el. Beszélni lehet véletlen és irányított támadásról. Az előbbi esetről véletlenül választanak „támadási pontot”, az utóbbi esetben pedig többféle stratégia létezik: lehet fokszám-, köztesesség- és egyéb tulajdonságok szerint. Kimutatták modelleken és mért, valós hálózatokon is, hogy a skálafüggetlen rendszerek érzékenyebbek célzott támadásokkal, de ellenállóbbak véletlen meghibásodásokkal szemben. Ehhez képest a véletlen gráf jóformán ugyanolyan sérülékeny véletlen és célzott támadással szemben is [2].

Amennyiben a rendszernek dinamikája is van, fontos kérdéssé válik az információ áramlásának mechanikája, illetve hogy kialakulhatnak-e kaszkádok (az egész rendszerre kiterjedő együttmozgások). Ebbe a kérdéskörbe tartozik a járványterjedés [10], a nagy áramkimaradások, de még a divat is (a közösségi hálózatokban). Hasonlóan jó példa az invazív fajok esete az ökoszisztémában: egy idegen faj általában nem marad fenn egy őshonos közösségben – tehát a rendszer ellenállónak mondható. Viszont előfordulhat, hogy amikor egy idegen faj megjelenik – kis perturbáció a rendszerben – gyorsan és nagy számban elterjed, akár teljes mértékben kiszorítva ezzel az őshonos fajt. (Ilyen invazív faj Magyarországon például a fehér akác is, mely az őshonos növényeket háttérbe szorítja.) Egy ilyen kaszkád kialakulása könnyen érthető, ha topológiaiilag fontos (nagy fokszámú, stb.) elemből indul ki. Az igazán meglepő az, amikor kis zavar keletkezik egy elhanyagolhatónak tűnő pontnál, és az terjed tovább a rendszeren. Ilyen esetekben különösen érdemes megvizsgálni az egyes elemek közti korrelációkat, melyek erős kapcsolatokat mutathatnak, akár a nagy távolságok ellenére is [11] [12]. A korrelációk nem olyan szembeötlőek, mint a topológiai tulajdonságok, de dinamikus rendszerekben fontos információkat hordoznak. Ezért nem újdonság a korrelációk figyelembevételével, vagy épp azok alapján vizsgálni egy aktuális hálózatot [13] [14].

1.2. A dolgozat célja

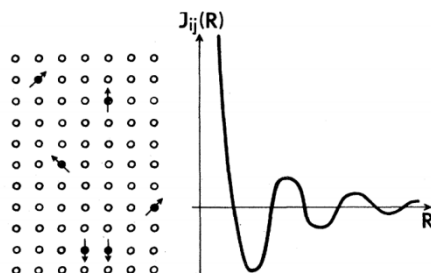
Komplex, heterogén rendszerek, köztük a spinűvegek szimulációjában általában arra törekednek, hogy minél jobban megközelítsék a termodinamikai limeszt, vagyis minél nagyobb rendszereket vizsgáljanak, és hogy minél biztosabban elérjék az egyensúlyi állapotot. Az elméleti vizsgálatok viszont szinte kizárólag csak a termodinamikai limesz esetére koncentrálnak, és leggyakrabban a termodinamikai egyensúly esetét tekintik. A szimulációkban pedig a megjeleníthető rendszer méretének határt szab a számítógép kapacitása, az egyensúlyi állapot elérése pedig sokszor rendkívüli hosszú futási időket követel meg. Tipikusan a rendszert leíró mennyiségek átlagát számolják, és ezután az eredményeket még a véletlen csatolások (a véletlen minták) fölött is átlagolják. Az így kapott eredmények rendkívül fontosak, hogy megértsük az ilyen rendszerek működését, ugyanakkor valós rendszerek vizsgálatakor kevésnek bizonyulhat a az így nyerhető tudás. Ez többek között abból adódik, hogy a valós rendszerek (például pénzügyi, gazdasági hálózatok) jellemzően csak egyetlen konkrét példányban valósulnak meg. Ezért fontos részletesebben megvizsgálni az egyedi minták viselkedését, mert az átlagolás ilyenkor fontos részleteket fedhet el. További probléma, hogy mikor egy vizsgált rendszer egyensúlyba kerül, akkor „elfelejti a múltját”, nem számít az „út”, melyen keresztül elért oda. Sok valódi rendszer hagyományos értelemben soha nem kerül egyensúlyba: mindig alakulnak és fontos az „előéletük”, mely befolyásolhatja az alakulásukat (gondoljunk csak akár a tőzsdei kalkulációkra, amikor meglévő adatok alapján próbálnak becsléseket tenni: az ilyen kollektív várakozások visszahathatnak a rendszerre).

Dolgozatomban teljesen összekötött gráf topológiájú, elsősorban kisebb méretű spinűvegeken vizsgálom a korrelációk alakulását. Kisebb rendszerekben lehetőségem nyílik egzaktul megvizsgálni a teljes fázisteret, és az innen származó eredményeket összevetem a (nagyobb rendszerek esetén megkerülhetetlen) Monte-Carlo szimulációkból származó eredményekkel. Megvizsgálom több mintán kapott eredmények átlagát, melyet összevetek a különböző tulajdonságú egyedi realizációk eredményeivel, továbbá tanulmányozom a rendszer mágneses térbeli viselkedését. Végül megmutatom, hogy alacsony hőmérsékleteken mindig kialakul egy erős korrelációkkal összekötött alrendszer (klaszter, fűrt), és megvizsgálom, hogy az ehhez tartozó spinek mekkora befolyással bírnak a rendszer egészére. Kitekintésként pedig megvizsgálom az általam vizsgált rendszert más topológiájú gráfokon is.

2. A spinüvegekről általában

2.1. Valódi spinüvegek és tulajdonságaik

Valódi mintákat tekintve a spinüvegek olyan ötvözetek, melyekben nem-mágneses anyagokat (klasszikusan színes vagy nemes fémeket: Cu, Au, Ag, Pt) szennyeznek kis mértékben mágneses atomokkal (Mg, Fe). Maga az elnevezés összetett szó, melyben a „spin” a mágneses momentumokra utal, az „üveg” pedig az üveg-szerű tulajdonságokra. Utóbbit a mágneses elemek véletlen eloszlása és az azok közt fellépő mágneses kölcsönhatást leíró csatolási állandó (J_{ij}) oszcilláló-változása okozza (2.1.1 ábra). Az ábrán látható mágneses momentumok eloszlásához az RKKY – kölcsönhatás tartozik [15] (*Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida*):

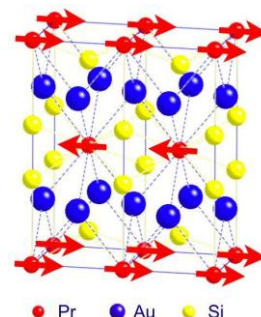


2.1.1. ábra: Sematikus ábra a mágneses momentumok véletlen eloszlására, és az ehhez tartozó RKKY kicserélődési kölcsönhatás a távolság függvényében.

$$J(R) = J_0 \frac{\cos(2k_F R + \varphi_0)}{(k_F R)^3}, R \rightarrow \infty, \quad (2.1)$$

ahol J_0 és φ_0 konstansok, R a távolság, k_F pedig a rács Fermi-hullámszáma. Ez a felépítés hasonlít az üveg véletlen, amorf szerkezetéhez. Ha az i -edik és j -edik spin között J_{ij} pozitív, akkor a csatolás ferromágneses: energetikailag az a kedvezőbb, ha egy irányba állnak. Ha pedig J_{ij} negatív, akkor anti-ferromágneses a csatolás: az a kedvezőbb, ha ellentétes irányba állnak.

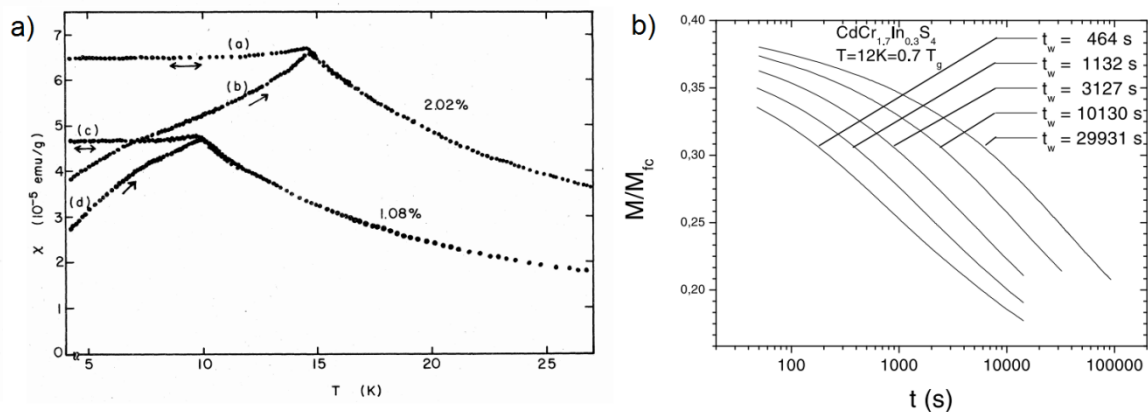
Ilyen anyagok tehát jellemzően (véletlen-szubsztitúciós) ötvözetek: CuMn, AgMn, AuFe. De alacsony hőmérsékleten hasonló tulajdonságokat tudnak mutatni kristályszerkezetes anyagok (2.1.2 ábra) és különböző amorf ötvözetek is.



2.1.2. ábra: PrAu_2Si_2 kristályszerkezete.

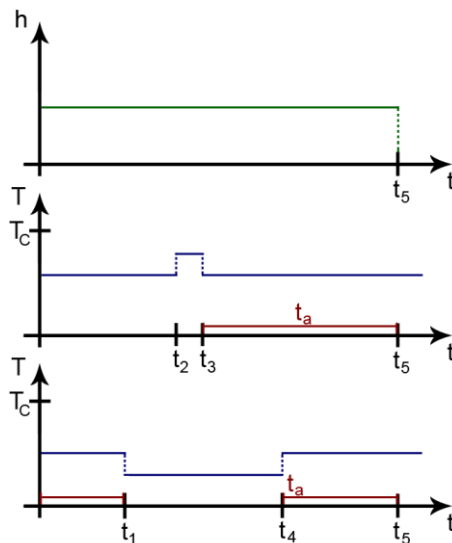
($T=3^\circ\text{K}$ alatt spinüveg)

Az egyik jellemző spinüveg tulajdonság gyenge, külső terek alkalmazásával jelentkezik. A szuszceptibilitás (χ) más értékeket ad egy kritikus (T_C) hőmérséklet alatt, ha az anyagot külső tér jelenlétében hűtik (FC: Field-Cooling) és mást, ha külső tér nélkül hűtik úgy, hogy hűtés után kapcsolják be a külső teret (ZFC: Zero-Field-Cooling) [16]. Erről látható mérési eredmény a 2.1.3 a) ábrán. (Megjegyzendő, hogy a szuszceptibilitás éles esését ZFC esetén már korábban megfigyelték: [17].)



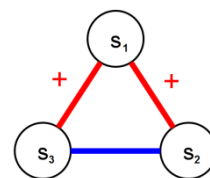
2.1.3. ábra: Az a) ábrán CuMn minták szuszceptibilitásai láthatóak: (a) és (c) jelűek FC, (b) és (d) jelűek ZFC típusú mérések eredményei. A b) ábrán a minta mágnesezettségének lecsengését lehet látni, miután kikapcsolták a külső mágneses teret, a térben eltöltött különböző idők után.

Egy másik fontos tulajdonságuk ezeknek az anyagoknak, hogy gyenge külső mágneses térre lassú választ adnak kritikus hőmérséklet alatt. A külső tér kikapcsolása után a megmaradó termoremanens mágnesezettség lassan cseng le [18]. Ez az időbeli lecsengés függ a rendszernek a mágneses térben töltött idejétől (2.1.3 b) ábra), a viselkedése függ a múltjától: a rendszer „öregszik”. Ehhez további érdekes jelenségek kapcsolódnak. Az egyik, hogy ha a rendszert kis időre felfűtik, akkor az „elfelejti az addig történeteket”, újraindul az öregedés. Ha pedig lehűtjük, akkor a rendszer „befagy”, ez az időszakasz kiesik az öregedésből (2.1.4 ábra). A spinűvegeknek ez a tulajdonsága a rendszer bonyolult és összetett fázisterével és erősen degenerált energiaszintjeivel magyarázható. Ez utóbbi visszavezethető egy másik jelenségre: a rendszerben fellépő frusztrációkra.



2.1.4. ábra: A fűtés és hűtés hatása az öregedési időre. Csak t_a befolyásolja a mágnesezettség lecsengését.

A spinűvegekben lévő spinek között előfordulnak olyan kölcsönható spin-hármasok, melyekben nem lehet a három kölcsönhatási energia egyszerre minimális. Példaképp: ha a 2.1.5 ábrán látható háromszögben s_1 és s_2 spinek egy irányba állnak, akkor s_3 vagy s_1 spinnel áll egy irányba, vagy s_2 spinnel ellentétesen. s_3 spin tehát frusztrált, „nem tudja, merre fele nézzon”. Az ilyen háromszögek behálózzák a rendszert, aminek következtében sok metastabil állapot valósulhat meg, közel azonos



2.1.5. ábra: Egy frusztrált háromszög

energiával. A 'B' mellékletben egy egyszerű példán keresztül is látható, hogy az ilyen frusztráció jelenléte degenerálttá teszi az alacsony energiaállapotokat.

Szabadabb értelmezésben a frusztráció párhuzamba állítható a hagyományos üvegnek egy tulajdonságával, a belső feszültséggel. Ha az üveget gyorsan hűtik, akkor a rendezetlenség úgy fagyhat be, hogy belső feszültségek maradhatnak a rendszerben. Hasonlóan fagynak be a frusztrációk a spinüvegekben. (Az ilyen feszültségek kettőstörővé teszik az anyagot [19]. Ezért keresztezett polárszűrők között láthatóvá válnak az ilyen feszültség-foltok:



2.1.6 ábra.) Az edzett üvegek, mint például a régi szélvédők, az ilyen feszültségeknek köszönhetően ellenállóbbak a külső, mechanikai hatásokkal szem-

2.1.6. ábra: Feszültség-pontok a keret körül. A jobb lencse mögött (és a kamera előtt) polárszűrők vannak.

ben. Erős túlzással ez a tulajdonság összevethető a frusztrált spinüveg modellel, amelyre kisebb hatással van a külső tér, mint a kevésbé frusztráltra (4.4.2 fejezet és 'F' melléklet). Valódi üveg esetén természetesen összetettebb a jelenség. Ha erősebb mechanikai hatás éri, akkor az ilyen feszültségek mentén törik végig, edzett üveg esetén apró darabokra.

2.2. Elméleti leírás

A spinüvegek leírására szolgáló alap-modellt 1975-ben S. F. Edwards és P. W. Anderson vezették be [20]. Az Edwards-Anderson modellnek megfelelő átlagtér-modell D. Sherrington-tól és S. Kirkpatrick-tól származik [21], ennek korrekt megoldása váratlan nehézségek árán, évtizedes erőfeszítések után született meg.

Az Edwards-Anderson modellben (röviden EA – modell) csak a spineket és azok kölcsönhatását (és az esetleges külső mágneses teret) vesszük figyelembe. A spineket „hordozó anyagot” csak közvetetten vesszük figyelembe: tekinthetjük úgy, hogy ez tölti ki a teret, ami miatt a spineknek rögzített a topológiájuk. Ezt a rendszert leíró Hamilton-függvény a következő:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i , \quad (2.2)$$

ahol s_i Ising-spin ($s_i = \pm 1$), h_i pedig (az esetleg inhomogén) külső mágneses tér. Jelen esetben a kölcsönhatásokat csak a legközelebbi szomszédokra számoljuk, ahol a csatolási állandókat általában véletlenszerűen választjuk vagy egy (J_0 átlagú, J^2 szórású) Gauss-eloszlásból ((2.3) egyenlet), vagy egy egyszerű $\pm J$ -ből álló eloszlásból ((2.4) egyenlet).

$$P_1(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J^2}} e^{-\frac{(J_{ij}-J_0)^2}{2J^2}} \quad (2.3)$$

$$P_2(J_{ij}) = p\delta(J_{ij} - J) + (1 + p)\delta(J_{ij} + J) \quad (2.4)$$

Ahhoz, hogy például a rendszer szabadenergiáját meghatározzuk, azt kell meggondolnunk, hogy alacsony hőmérsékleten a véletlen csatolások semmilyen reális megfigyelési időn belül nem változnak meg. A rendezetlenség „belefagyott” a rendszerbe.

Magasabb hőmérsékleteken előfordulhat, hogy a csatolások is termalizálódnak. Ez utóbbi esetben, ha a megfigyelési idő elég hosszú, akkor figyelembe kell venni a kapcsolatok megváltozását és az állapotösszeget (Z) átlagolni kell a csatolások felett. Ezt nevezik „annealed” („lágýtott”) átlagnak és így a szabadenergia:

$$F_{\text{ann}} = -T \ln(\overline{Z}^{(I)}) \quad (2.5)$$

Ha viszont a csatolások be vannak fagyva, és a megfigyelési idő alatt nem tudnak termalizálni, akkor a megfigyelhető szabadenergia függ a csatolások eloszlásától. Megmutatható azonban, hogy a szabadenergia és más extenzív mennyiségek „önátlagolnak”, vagyis a nagy számok limeszében a csatolások majdnem minden realizációjára ugyanazt az értéket veszik fel. Ezért megengedhető, hogy a véletlen csatolásoktól függő szabadenergiát a csatolások felett átlagoljuk. Az így kapott átlagot „quenched” („edzett”) átlagnak nevezik:

$$F_{\text{qu}} = -T \overline{\ln Z}^{(I)} \quad (2.6)$$

Spinűvegek esetén általában az utóbbi átlagolással számolunk, hiszen ezek az anyagok az érdekes tulajdonságokat alacsony hőmérsékleten mutatják, amikor a csatolások rendezetlensége befagy. Egy véletlen változó logaritmusát viszont körülményes számolni. Ezt a problémát kerüli meg a replika-módszer, mely egy matematikai átalakításon alapszik:

$$\overline{\ln Z}^{(I)} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{(\overline{Z^n}^{(I)} - 1)}{n}, \quad (2.7)$$

ahol a rendszer n darab replikáját („független másolatát”) vesszük, és ezek állapotösszegeit átlagoljuk. Ezeket az állapotösszegeket már könnyebb átlagolni, mint a logaritmusokat.

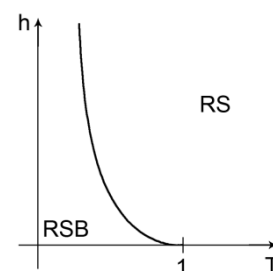
A Sherrington-Kirkpatrick modell (röviden SK-modell) nem más, mint az EA-modellnek a végtelen-hatótávolságú változata. A rendszert leíró Hamilton-függvény:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i < j} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i, \quad (2.8)$$

ahol a kölcsönhatási tagban minden párra összegzünk. Ez összesen $\frac{N(N-1)}{2}$ kapcsolatot jelent, ha N az elemek száma. s_i továbbra is Ising-spin ($s_i = \pm 1$), h_i pedig itt is a külső mágneses tér. A csatolások pedig egy olyan Gauss-eloszlásból származnak, mely függ a rendszer méretétől. (Ez azért szükséges, hogy az extenzív mennyiségek – mint az energia – arányosak legyenek N -nel.)

A szabadenergia kiszámításához itt is a „quenched” átlagolást kell alkalmazni ((2.6) egyenlet), ahol a replika-módszert lehet használni. Mivel a replikák függetlenek és egyenértékűek, ezért a replikákkal kibővített elmélet szimmetrikus lesz a replikák permutációival szemben. Sherrington és Kirkpatrick feltételezték, hogy ezt a szimmetriát az alacsony hőmérsékleti megoldás is megtartja. A modell ezzel a feltevéssel egzaktul megoldható és meghatározható a replika-szimmetrikus megoldás (RS).

A replikaszimmetrikus megoldás azonban nem megfelelő. Alacsony hőmérsékleten az entrópiára negatív értéket ad (ami diszkrét rendszerben nem lehetséges), továbbá instabilnak bizonyul. Egy átfogó stabilitás-analízist készítettek a 70-es években, melynek során egy elméleti vonal rajzolódott ki a hőmérséklet és a külső tér függvényeként: a de Almeida – Thouless vonal (későbbiekben AT-vonal) [22]. A vonal felett jól működik a replika-szimmetrikus megoldás, a vonal alatt viszont instabil, itt tehát replika-szimmetria sértő (RSB) megoldást kell keresnünk (2.2.1 ábra). A problémát először Giorgio Parisi-nak, sikerült megoldania [23]. A Parisi-megoldás ban központi szerepet játszik a replikák közti átfedés:



2.2.1. ábra: de Almeida – Thouless vonal (h - T) térben

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i^{(\alpha)} s_i^{(\beta)} . \quad (2.9)$$

Ennek a mennyiségnek a nem-triviális eloszlása a fázistérben kvázi-degenerált egyensúlyi állapotok kialakulását jelzi. Parisi szokatlan matematikai eljárással kapott elméletét az SK-modell esetében azóta szigorú matematikai eszközökkel is bebizonyították [24] [25]. Hogy ez a struktúra véges dimenziós euklideszi rácsokon is fenn tud-e maradni, az évtizedek óta viták tárgyát képezi az irodalomban.

3. A szimuláció megvalósítása

3.1. A vizsgált rendszer

Munkám során teljesen összekötött gráfokon vizsgáltam a spinűvegek viselkedését egyszerű szimulációs módszerekkel. Ezek a rendszerek jól megfelelnek arra a célra, hogy lássuk a korrelációk szerepét, mivel topológiailag nincsenek kitüntetett elemek (fokszám-eloszlása gyakorlatilag egy Dirac-delta). Egy ilyen gráf látható a 3.1.1 ábrán, az azt leíró csatolási- (vagy szomszédsági-) mátrixszal. A 2.2 fejezetben látottakhoz hasonlóan a rendszert leíró Hamilton-függvény:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i < j} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i, \quad (3.1)$$

ahol s_i Ising-spin ($s_i = \pm 1$), a csatolási állandók két értéket vehetnek fel: $J_{ij} = \pm 1$, és h_i az inhomogén, külső mágneses tér ($h_i = h$ esetén homogén). A kölcsönhatási tagban az összes kapcsolatra összegzünk. Munkám során $k_B = 1$ egységrendszeret használtam. Ahhoz, hogy megkapjuk a rendszert leíró energiát, a kölcsönhatási tagot normálni szükséges a rendszer méretével (N):

$$U = - \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i < j} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i \quad (3.2)$$

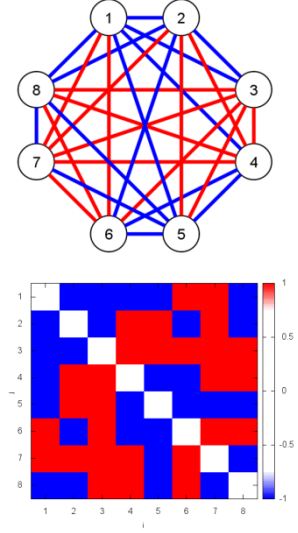
A korrelációk a rendszerben annak a várható értékét fejezik ki, hogy két elem egy irányba áll. Ennek megfelelően két spin között fellépő korrelációt azok értékeinek szorzatának várható értéke adja.

$$C_{ij} = \langle s_i s_j \rangle \quad (3.3)$$

Emellett szokásos vizsgálni a kapcsolt-korrelációt is (connected-correlation):

$$C_{ij}^{(c)} = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle \quad (3.4)$$

Itt megjegyezném, hogy $\langle \dots \rangle$ jelölés alatt mindig termikus átlagolást, $\overline{\dots}^{(J)}$ jelölés alatt pedig különböző véletlen minták felett vett átlagolást értem. Időfejlesztés esetén, a termikus átlag helyett egyszerű időbeli átlagolást tekintünk:



3.1.1. ábra: Példa egy komplett gráfra és annak kapcsolati-mátrixra.

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{t_{\max}} \sum_{t=1}^{t_{\max}} s_i ; \quad \langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{t_{\max}} \sum_{t=1}^{t_{\max}} s_i s_j \quad (3.5)$$

A rendszerben egy adott állapot mágnessége (mely jól láthatóan csak diszkrét értékeket vesz fel, és ennek köszönhetően egzaktul számolható a későbbiekben belőle hisztogram):

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i . \quad (3.6)$$

Bár a szimulációk során nem az egyensúly elérésére törekedtem, mégis érdemes szemmel tartani az ehhez szükséges paramétereket. Jobban lehet értelmezni a kapott eredményeket, ha képet kapunk arról, milyen "messze vagyunk" a teljes fázistér bejárásától. Ezért érdemes bevezetni az Edwards-Anderson rendparamétert:

$$q_{EA} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle s_i \rangle^2 . \quad (3.7)$$

Két rendszer (α és β) adott pillanatbeli átfedésére jól használható a Parisi-féle rendparaméter:

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i^{(\alpha)} s_i^{(\beta)} . \quad (2.9)$$

A vizsgálatok szempontjából további fontos mennyiség a frusztráltság. Definíció szerint a gráfban egy zárt kör frusztrált, ha a kör mentén a csatolások szorzata negatív. Mivel a teljes gráfban minden kör felbontható háromszögekre, ezért csak a háromszögek frusztráltságát nézzük. Ezt számszerűsíti a következő mennyiség, melyet nevezzünk a rendszer frusztráltsági fokának:

$$\varphi_J = \frac{1}{N(N-1)(N-2)} \text{Tr}(J^3) , \quad (3.8.1)$$

vagyis

$$\varphi_J = \frac{1}{N(N-1)(N-2)} \sum_{i,j,k} J_{ij} J_{jk} J_{ik} . \quad (3.8.2)$$

A frusztráltsági fok (-1:1) között vehet fel értékeket, ahol a fontosabb értékek a következőket jelentik:

$$\varphi_J = \begin{cases} +1, & \text{ha nincs frusztrált háromszög} \\ 0, & \text{ha ugyanannyi frusztrált háromszög van, mint nem frusztrált} \\ -1, & \text{ha minden háromszög frusztrált} \end{cases}$$

3.2. A fejlesztői környezet

Az egyenleteket és az algoritmusok alapját témavezetőimmel és évfolyamtársammal, Sándor Máté Csabával¹ beszéltem át, majd ezt követően kódoltam le és valószínűsítem meg a szimulációkat. A kódokat C++ nyelven írtam *Microsoft Visual Studio 2010* fejlesztői környezetben. A programokhoz mind paraméter fájlok tartoznak, melyeken keresztül beállítható a futtatandó rendszer. A programok futtathatók önmagukban, de előre generált elemeket (csatolási mátrixot, kiindulási állapotot) is meg lehet adni nekik. Az egyszerűbb eredményeket több formátumban is kimentik, a későbbi könnyebb ábrázolások elősegítése végett.

A szimulációkhoz a Mersenne Twister véletlenszám-generátort [26] használtam. A programokat saját számítógépen (Acer, AMD Turion X2, 2GB memória) futattam. Az ábrákat *gnuplot* (pm3d terminal) és *yEd Graph Editor* programokban készítettem. A dolgozatomhoz mellékelt adathordozón az alább felsorolt programok találhatók:

Teljes leszámplálást végző programok:

- [01_SG_CG_countWPS]: megvizsgál egy kiválasztott rendszert
- [02_SG_CG_countWPS_avg]: több mintára átlagolja az eredményeket
- [03_SG_CG_countWPS_PinSpin]: rögzít egy kiválasztott spint és úgy számol

Metropolis – Monte Carlo algoritmust használó programok:

- [01_SG_CG_MMC]: megvizsgál egy kiválasztott rendszert
- [02_SG_CG_MMC_avg]: több mintára átlagolja az eredményeket
- [03_SG_CG_MMC_PinSpin]: rögzít egy kiválasztott spint és úgy számol
- [05_SG_CG_MMC_vslinhomField]: két rendszert futtat párhuzamosan, ahol az egyik rendszerre inhomogén teret kapcsolhatunk
- [06_SG_CG_MMC_vsPinSpin]: két rendszert futtat párhuzamosan, ahol az egyik rendszerben rögzíthetjük egy kiválasztott spin irányát

A programok könnyebb futtatása és a vizsgált hálózatok rendszerezése végett írtam további két kisebb programot, melyek részben még fejlesztés alatt állnak:

- ▲ [SG_Generate_J]: meghatározott típusú és paraméterű gráf kapcsolati mátrixát generáló program, melyeket beolvasnak a fentebbi (nem [*_avg]) programok
- ▲ [SG_J_frustration]: véletlen-választott gráfok frusztráltsági-fokait vizsgálja

¹ A programok nagy része a FOC II (Forecasting Financial Crises) projekt keretén belül készült, melyben együtt dolgozunk Sándor Máté Csabával és témavezetőinkkel (WP 8).

A programkódok minimális átalakítással alkalmasak más típusú hálózatokon is spinűvegek szimulációjára (például Erdős-Rényi féle véletlen gráfon). Ehhez szükséges volt némi áttekintés a különböző típusú gráfok mátrix-reprezentációját illetően, melyre egy-két példát mutat a 'C' melléklet.

A futási idő rövidítése végett az egyszerű (± 1 -ből álló) műveleteket visszavezettük logikai műveletekre, melyek kiszámításához kevesebb órajel szükséges. Erről egy rövid összefoglaló látható a 'D' mellékletben.

3.3. Teljes leszámolás

Az már láttuk, hogy a spinűvegek sokszínű és érdekes tulajdonságokkal rendelkeznek, ami annak a következménye, hogy igen sok egyensúlyi állapot tud megvalósulni. Egy ilyen komplikált fázistérbeli struktúrával rendelkező rendszerről sokat elárul, ha minden lehetséges mikroszkópikus állapotáról rendelkezésünkre áll a lehető legtöbb információ. Ez természetesen pusztán elméleti vizsgálat, hiszen valós mintáknál általában nem valósul meg minden állapot, továbbá ott fontos a rendszer időfejlődése. Azonban ha olyan információk birtokában vagyunk, mely a teljes fázisteret jellemzik, az segítséget nyújt más fajta szimulációból származó eredmények értelmezésében is. Egy fázistér bejárása direkt módon megoldható, ha egyszerűen leszámoljuk az összes állapotot („count the Whole Phase Space”, későbbiekben cWPS).

Egy ilyen számításnak a szimulációs ideje exponenciálisan függ a rendszer méretétől, ezért csak kis rendszerekre lehet elvégezni. Az általam vizsgált rendszerben a spinek két értéket vehetnek fel ($s_i = \pm 1$), így összesen 2^N állapot létezik egy N elemből álló rendszer esetén. Nagyobb rendszereknél a futásidő mellett már az adatok tárolása is gondot jelenthet azok nagy mennyisége miatt. Az exponenciálisan növekvő értékek miatt a számítástechnikai számábrázolás is hamar határt szab az adatok egyszerű kezelésének.

Kellően kis (például $N = 20, 25$) rendszerekre azonban gond nélkül és viszonylag gyorsan elvégezhető a teljes fázistér bejárása. A spinek sora $\{s_i\}$ szemléletesen tekinthető egy bináris számnak, mely egy egyszerű léptető algoritmusnak köszönhetően minden lehetséges állapotot felvesz. Így minden állapotban kiszámítható az energia, korreláció és mágnesség. Mivel itt nincs időfejlődés, ezért az időbeli átlagolás értelmét veszti. Helyette az állapottér feletti átlagolást értjük, ahol az állapotokat a hozzájuk tartozó Boltzmann-faktorokkal súlyozzuk. Így a (3.5) egyenletek a következőképp módosulnak:

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{st=1}^{2^N} s_i e^{-\beta U^{(st)}} ; \quad \langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{st=1}^{2^N} s_i s_j e^{-\beta U^{(st)}} , \quad (3.9)$$

ahol $\beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{1}{T}$ és Z az állapotösszeg: $Z = \sum_{st=1}^{2^N} e^{-\beta U^{(st)}}$.

Egy adott állapot mágnességét továbbra is a (3.6) képlet adja meg, de egy mágnesség-érték előfordulási valószínűségét (adott hőmérsékleten) akkor kapjuk meg, ha az adott mágnességet létrehozó állapotokat összegezzük a hozzájuk tartozó Boltzman-faktorral (és normáljuk itt is az állapotösszeggel):

$$P(m_i) = \frac{1}{Z} \sum_{\substack{st \\ \{m=m_i\}}} e^{-\beta U^{(st)}} . \quad (3.10)$$

Ezekből a szimulációkból származó eredmények egyrészt jól használhatók ellenőrzésképp más algoritmusokból származó eredményekhez, másrészt önmagukban is fontos információkat hordoznak, mivel jellemzik a teljes rendszert.

3.4. Metropolis – Monte Carlo algoritmus

3.4.1. A Monte Carlo és Metropolis algoritmusok

A Monte Carlo módszert (melyet N. Metropolis nevezett így el) az 1940-es években fejlesztették ki a Los Alamos-i laborban [27]. A módszer lényege, hogy véletlenszámokat használva többször mintavételeznek egy modellt, és az így kapott eredményeket elemezik. Egy szemléletes példa erre a π kiszámítása [28]: Rajzoljunk egy négyzetet és egy beleírt kört a földre. Ha véletlenszerűen kavicsokat dobálunk erre a felületre, akkor a körben lévő kövek száma úgy aránylik a körben és négyzetben lévő kövek számához (tehát az összeshez), mint a síkidomok területe. Így π közelítőleg felírható egy hányadossal:

$$\pi = 4 \frac{\text{\#körön belüli kövek}}{\text{\#összes kövek}}$$

Itt a kavicsok dobálása megfeleltethető a véletlen mintavételezésnek. Az pedig hamar belátható, hogy minél több követ dobunk, annál pontosabban megkapjuk π értékét. (Ez a módszer azért is érdekes, mert úgy kapható meg π értéke, hogy nem szükségesek hozzá trigonometrikus függvények vagy sorok, mindössze „csak” egy jó véletlenszám generátor.)

A Metropolis algoritmus abban segít, hogy egy bonyolult eloszlást tudjunk előállítani. Ehhez azt szükséges tudni, hogy milyen átmeneti valószínűséggel (W_{AB}) vezérelt (Markov-) folyamat vezet ilyen eloszlásra. Fizikai rendszerekben ezt a módszert általában egyensúlyi eloszlás előállításához használják. Például, ha termodinamikai

egyensúly elérése a cél, akkor az eloszlás a Boltzmann-faktorral arányos. Szemléletesen az algoritmus a következőképp néz ki:

1. Kiindulunk egy 'A' konfigurációból.
2. Előállítjuk a 'B' konfigurációt.
3. Kiszámoljuk 'A' és 'B' konfigurációkra az átmeneti valószínűséget (W_{AB}).
4. Generálunk egy p véletlen számot ($[0,1]$ intervallumon egyenletes eloszlásból).
5. Ha $p < W_{AB}$, akkor a 'B', ellenkező esetben az 'A' konfigurációt tartjuk meg.
6. Ismételjük az 1. lépéstől.

3.4.2. A megvalósított algoritmus

A munkám során egy Metropolis – Monte Carlo típusú (későbbiekben MMC), kombinált algoritmust használtam a rendszer időfejlésére. A rendszer Glauber-dinamikát követ: egy lépés alatt egy spint választunk ki véletlenszerűen (Monte Carlo rész), melyet vagy átbillentünk („spin flop”), vagy nem. Ez az időbeli lépésnek felel meg, mellyel másik állapotba kerülhet a rendszer. Itt az átmeneti valószínűséghez (Metropolis rész) szükségünk van az adott időpillanatbeli és a leendő állapot közötti energiakülönbségre:

$$dU = -2 \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N J_{ij} s_i s_j + h_i s_i \right). \quad (3.11)$$

Ha az új állapot energetikailag kedvezőbb ($dU < 0$), akkor a rendszer biztosan átkerül az új állapotba. Ha nem kedvező ($dU \geq 0$), akkor az energiakülönbséggel arányos valószínűséggel továbbra is átkerülhet a rendszer az új állapotba:

$$P(\text{spin flop}) = e^{-\beta dU}. \quad (3.12)$$

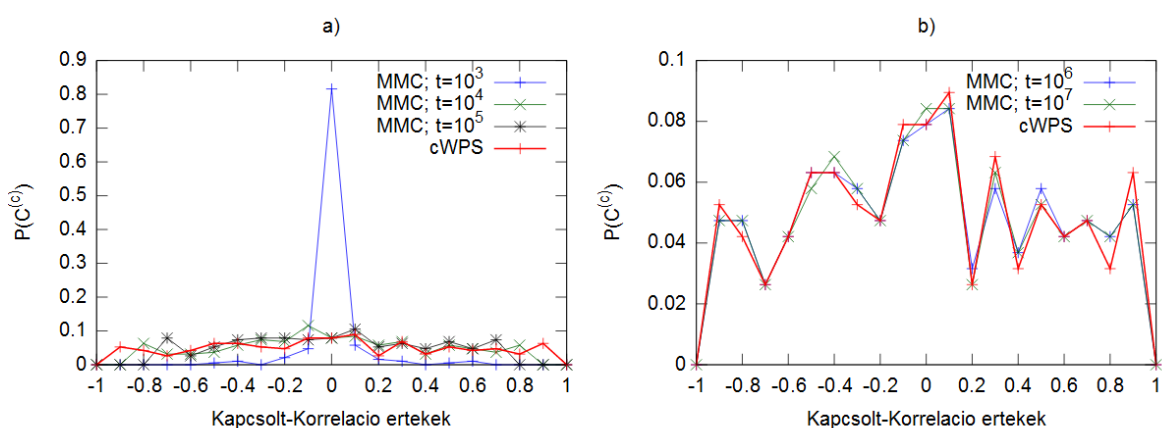
Bizonyos esetekben a spineket szokásos párhuzamosan léptetni, egyszerre többet (például négyzetrács esetén sakktábla-szerűen). Ezek a módszerek nagyságrendekkel lehetnek gyorsabbak, viszont elképzelhető, hogy a dinamika egyszerűsödik és érdekes jelenség veszhet el. Ezért először érdemes olyan időfejlődést definiálni, mely során csak egy elem változik (és az is véletlenszerűen megválasztva).

Hogy minél jobban össze lehessen hasonlítani az eredményeket, a MMC szimulációkat általában az anti-ferromágneses állapotból indítottam. (Alapértelmezetten a program egy véletlen kiválasztott állapotból indul.) A program az indítás után (és az adatok gyűjtése előtt) „elő-futtatást” végez: a kitűzött lépésszám 10%-ának megfelelő lépésben csak időfejlészt a rendszert és nem történik mintavételezés. Így az átlagolt mennyiségeket kevésbé torzítják a kezdeti értékek.

Mivel a program bemenetként tudja fogadni egy korábbi futtatás kimenetét, ezért alkalmazható egyszerűbb *parallel tempering* szimulációkhoz. Példa erre, ha „hűtjük” a rendszert: magasabb hőmérsékleten indított szimuláció kimenetét tovább indítjuk alacsonyabb hőmérsékleten egy másik szimulációban.

3.4.3. Futáshossz becslése

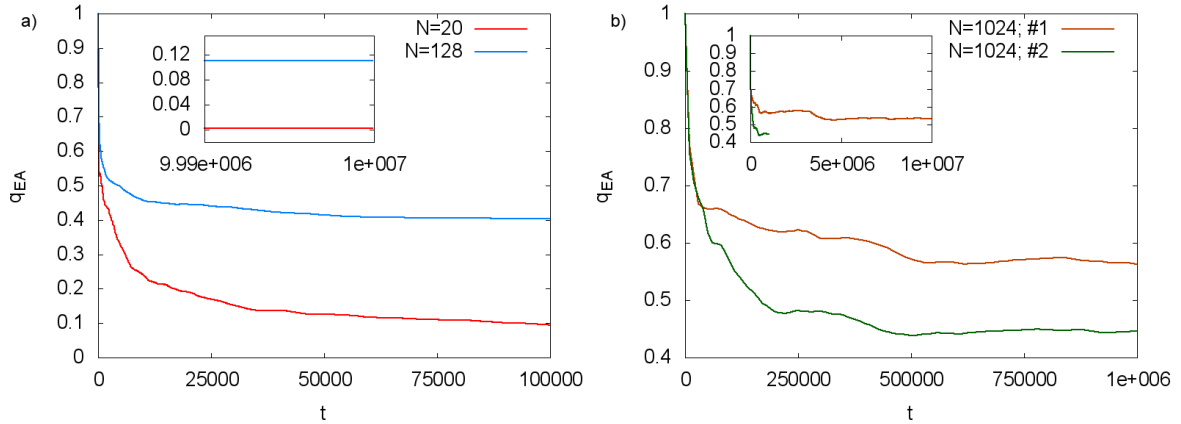
Ahogy az korábban is láttuk, a Monte Carlo módszer annál pontosabb eredményt ad, minél jobban bejárja a vizsgálandó teret, jelen esetben a fázisteret. A fázistér bejárása már viszonylag kis rendszerek esetén is rendkívül hosszú időt vesz igénybe, ezért érdemes megvizsgálni az egyes futások eredményeinek eltérését a cWPS szimulációkból származó eredményektől. A 3.4.1 b) ábrán jól látni, hogy még kis rendszer és viszonylag hosszú futásidő mellett is vannak eltérések.



3.4.1. ábra: MMC szimulációkból származó kapcsolt-korrelációk eloszlásainak összevetése a cWPS-ból származó eredményekkel ($N = 20$; $T = 0.6$), ugyanarra a rendszerre. Az a) ábrán látni, hogy a legrövidebb (10^3) futási idő esetén erősen különböznek az eredmények, a b) ábránál pedig hogy a hosszabb futási idő (10^7) mellett is előfordulnak kisebb eltérések.

A kétféle szimuláció eltérését jól szemlélteti az Edwards-Anderson rendparaméter időfüggése, mely akkor vesz fel zérus értéket, ha a teljes fázistér bejárja az algoritmus. Ez könnyen belátható, mivel a rendparaméter az egyes elemek várható értékeinek négyzetét átlagolja, ami cWPS esetén nulla ($\langle s_i \rangle_{\text{cWPS}} = 0$). A 3.4.2 a) ábrán jól látni, hogy nagyobb rendszernek átlagosan több idő szükséges q_{EA} csökkenéséhez: míg az $N=20$ -as rendszerek átlagosan elérik $q_{\text{EA}} < 0,1$ szintet 10^5 lépés alatt, addig az $N=128$ -as rendszer 10^7 lépés alatt sem éri el. A 3.4.2 b) ábrán pedig egy $N=1024$ -es rendszernek látni két független futtatási eredményét. A rövidebb futás „szerencsésebbnek” bizonyult: tized annyi idő alatt kisebb értéket vett fel q_{EA} , mint a hosszú futás végén. Ez jól tükrözi, hogy mennyire nehéz lépésszámot becsülni nagy rendszerre, mivel méreténél fogva összetettebb

a fázistere és könnyebben „beragad” a kedvezőbb állapotokba, ahonnan nehezen mozdul el. Ha a $q_{EA} < 0,1$ feltételt szabjuk határnak, akkor azt mondhatjuk, hogy kisebb rendszerek ($N \approx 20$) esetén 10^6 - 10^7 lépésszám szükséges, nagyobb ($N \approx 100$) rendszereknél pedig legalább 10^7 lépés szükséges. (A szimulációk lépésszámára a továbbiakban t_{\max} -ként hivatkozom.)



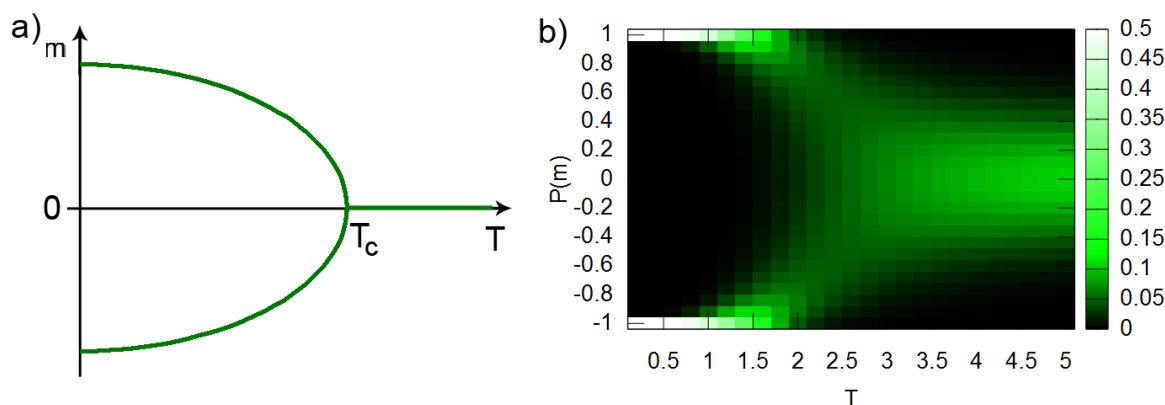
3.4.2. ábra: a) 20-as és 128-as rendszerek átlagolt q_{EA} értékei. Mindkét esetben 50-50 db független realizáció eredményeit átlagoltam az időpillanatokban. b) Ugyanannak az 1024-es rendszernek egy hosszabb (#1) és egy rövidebb (#2) futásból származó q_{EA} értékei.

3.5. A szimulációk ellenőrzése

A kódok ellenőrzése céljából olyan modellt futtattam, melyre ismert egzakt megoldás létezik. A kétdimenziós Ising-modell tekinthető egy olyan EA-modellnek, melyben csak ferromágneses csatolások vannak ($\mathcal{H} = -\sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j$). Ebben a modellben kritikus hőmérsékleten (T_C) fázisátalakulás történik [29]. $T < T_C$ esetén a rendszer ferromágneses, $T > T_C$ esetben pedig paramágneses (3.5.1 a) ábra). Négyzetrács esetén a kritikus hőmérséklet irodalmi értéke:

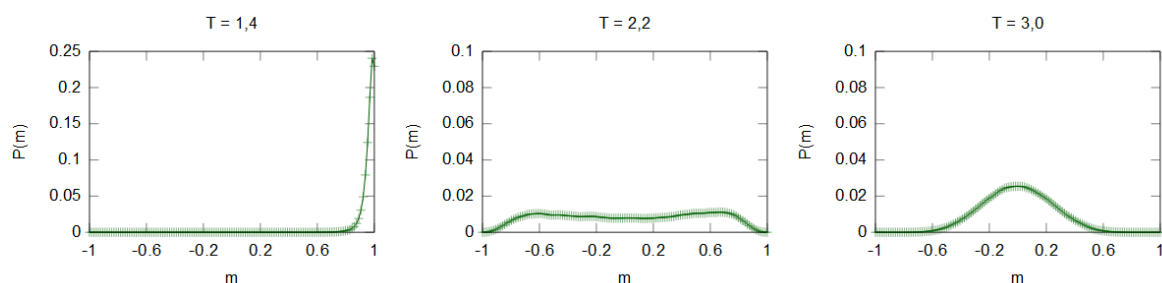
$$T_C = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2,269. \quad (3.13)$$

(Ez a mennyiség a [30] cikkben szerepel, melyet a Kramers–Wannier dualitás [31] felhasználásával lehet ilyen alakra hozni.) Ennek megfelelően különböző hőmérsékletekre kis (5×5 -ös, nyílt peremfeltételű) rendszerre teljes leszámítást végeztem és megnéztem a mágnesség-értékek eloszlását (3.5.1 b) ábra). A szimulációból származó képen látni, hogy az átmenet elmosódott, nem éles. Ez a rendszer kis méretének köszönhető, ugyanakkor látható, hogy a kritikus pont közel az irodalmi értéknél van.



3.5.1. ábra: Fázisátalakulási pontok négyzetláncos elméleti (a) és szimulációs (b) Ising-modellek esetén.

Hasonlóan futtattam egy MMC szimulációt is nagyobb ($N=128; 8 \times 16$) rendszerre is. Itt is látható, hogy a kritikus hőmérséklet körül megváltozik a mágnesség eloszlása (3.5.2 ábra).



3.5.2. ábra: A mágnesség értékek eloszlása $N=128$ -as Ising-modell esetén a kritikus hőmérséklet körül ($t_{\max} = 10^7$; $h = 0$).

Mivel $T = 2,2$ esetén a bifurkáció kezdetleges jelei mutatkoznak, ezért feltételezhető, hogy a $T = 1,4$ -es szimulációnál rövidnek bizonyult a futáshossz. Emiatt rajzolódott ki a várt, tényleges eloszlásnak csak az egyik fele. (Az ilyen Ising-típusú szimulációhoz az energia számításnál a kölcsönhatási tag normálását el kell hagyni.)

Részben az ellenőrzés célját is szolgálja az 'A' mellékletben látható cWPS végigszámolása: a program minden részletében ugyanazokat a rész- és végeredményeket hozta ki, melyeket „papíron” is végigszámoltam.

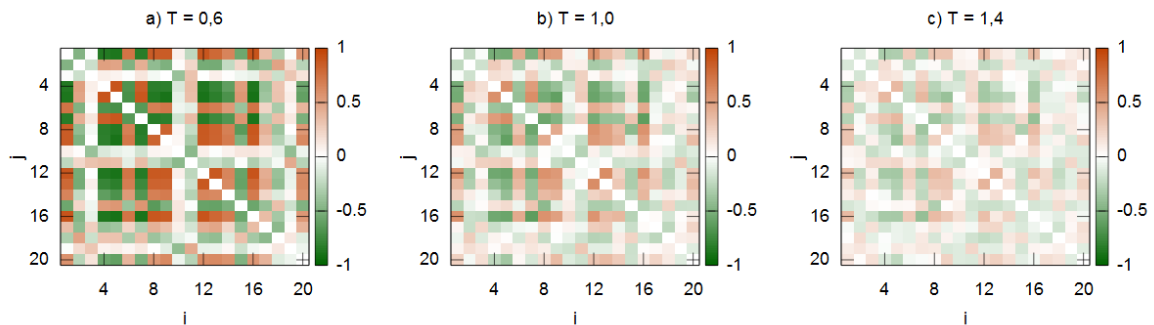
4. Eredmények

4.1. Egyedi minták vizsgálata

Első vizsgált mintaként igyekeztem egy minél inkább „átlagosnak” tekinthető realizációt választani. Ezért egy olyan rendszert választottam, melynek frusztráltsági foka zérus ($\phi_J = 0$) és ugyanannyi ferromágneses csatolást tartalmaz, mint anti-ferromágnesest (véletlenszerűen elosztva őket). Egy ilyen kisebb ($N=20$) rendszerben² vizsgáltam meg cWPS szimulációval a korrelációk eloszlását. Azt várjuk, hogy magas hőmérsékleten a korrelációknak szűk eloszlása kritikus hőmérséklet ($T_c \approx 1$) alatt kiszélesedik (külső tér nélküli esetben) [32].

4.1.1. Külső tér nélküli eset

Tér nélküli esetben, cWPS szimulációnál a kapcsolt-korreláció ($C^{(c)}$) és korreláció (C) értékek megegyeznek ($\langle s_i \rangle_{\text{cWPS}} = 0$ miatt). A korrelációs mátrixokat megvizsgálva (4.1.1 ábra) azt láthatjuk, hogy magasabb hőmérsékleten az elemek egyre kisebb, közel zérus értékeket vesznek fel.

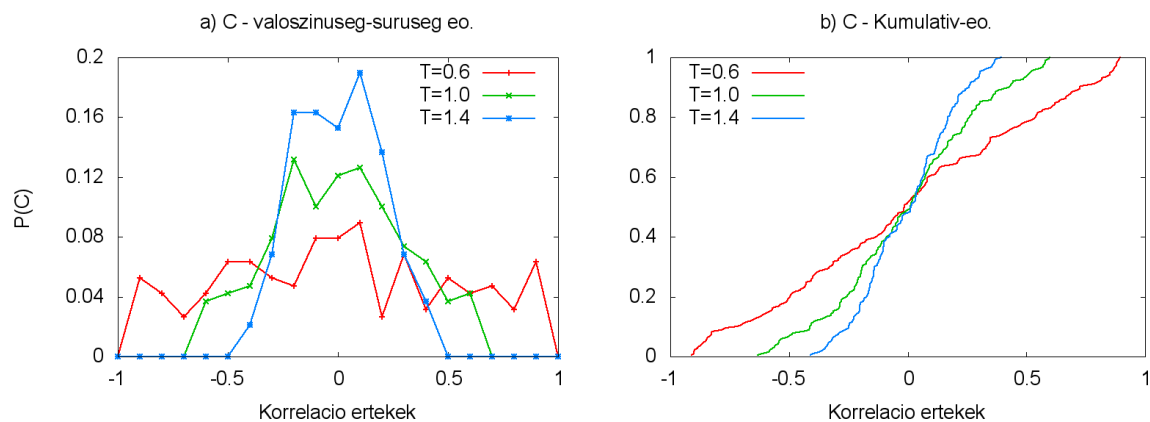


4.1.1. ábra: Korrelációs mátrixok (C_{ij}) különböző hőmérsékleteken.

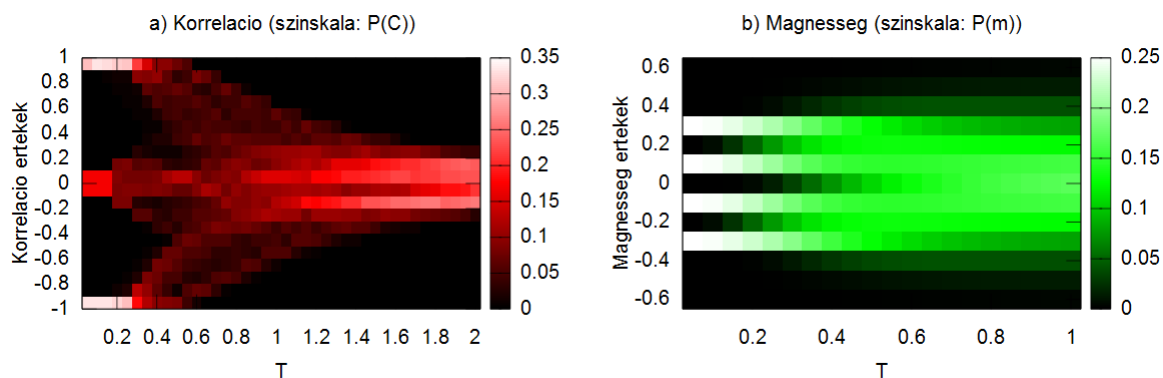
A kritikus pont körül tehát egyértelműen változnak a korrelációk. A korrelációs értékeknek érdemes valamilyen eloszlását ábrázolni, mivel könnyebben értelmezhetőbb képet adnak az átalakulásról. A 4.1.2 a) ábrán látható a korrelációk valószínűség-sűrűség eloszlása, a b) ábrán pedig ugyanezek kumulatív eloszlása (Ugyanazon esetek, melyek a 4.1.1 ábrán is szerepelnek). Az átmenet, ha nem is élesen, de egyértelműen megtörténik. Ezt látni még jobban a 4.1.3 a) ábrán, ahol a valószínűség-sűrűség eloszlások vannak ábrázolva sűrűbben a hőmérséklet függvényében. A mágnesség eloszlásában is látható

² A diplomamunkához csatolt adathordozón a programok mellett különböző bemeneti fájlok is találhatók. Az itt említett kapcsolati mátrix [J_N20_0.0_01.dat] néven található.

átalakulás $T = [0,3; 0,6]$ tartományon (4.1.3 b) ábra). Magas hőmérséklettől az alacsony felé nézve először egy bifurkáció következik be, majd alacsonyabb hőmérsékleten a két ág további két, összesen négy jól elkülönülő ágra esik szét.



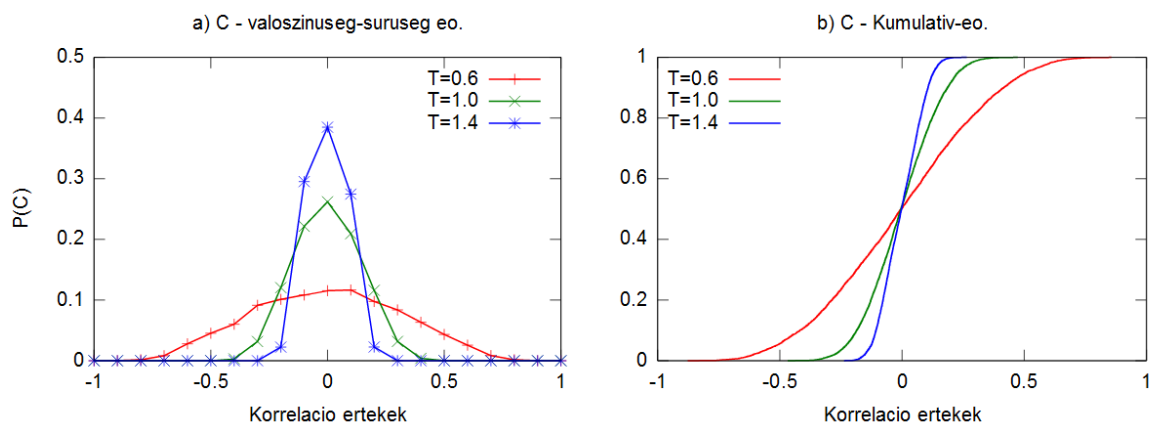
4.1.2. ábra: A korrelációk eloszlásának alakulása a kritikus pont körül ($h = 0$).



4.1.3. ábra: Az a) ábrán a korrelációk eloszlása látható, a b) ábrán pedig a mágnességek eloszlása a hőmérséklet függvényében ($h = 0$).

Amint látható, a korrelációs valószínűség-sűrűség eloszlások nem szimmetrikusak. A szimmetria akkor jelenik meg, ha a csatlások felett átlagolunk (erről bővebben a 4.2 fejezetben lesz még szó). Kis, egyedi mintára ritkán áll elő szimmetrikus eloszlás. Erre láthatunk egy egyszerű példát végigszámolva az 'A' mellékletben.

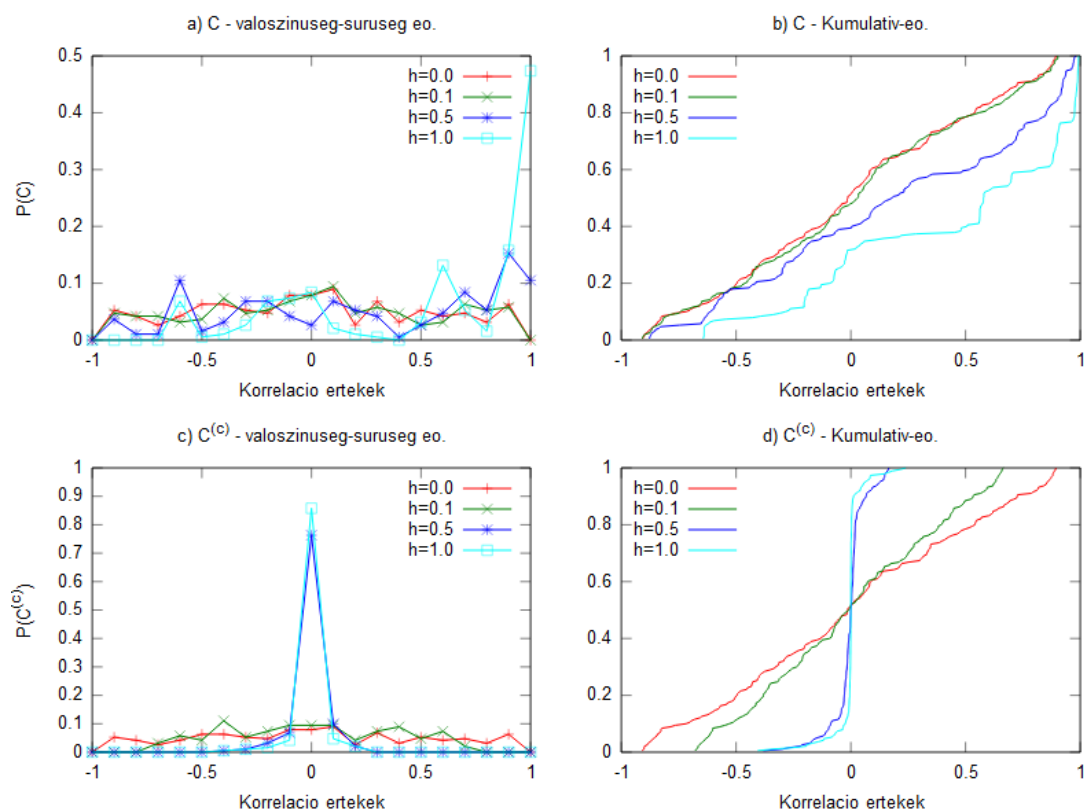
Hasonló, MMC szimulációt futtattam egy nagyobb, egyedi rendszerre ($N = 128$) és azt tapasztaltam, hogy az eloszlás itt is hasonlóan kiszélesedik (4.1.4 ábra). Továbbá az is látható, hogy az eloszlások „simábbak” és szimmetrikusabbak, mint a kisebb minta esetén.



4.1.4. ábra: Korrelációs-eloszlások $N = 128$ rendszerben különböző hőmérsékleteken.
(MMC, $\varphi_J = 0$ rendszer, $t_{\max} = 10^7$; $h = 0$)

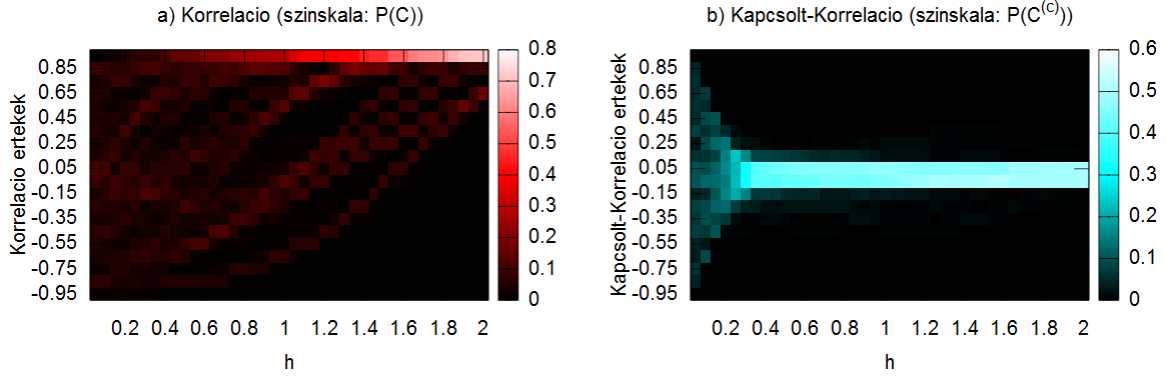
4.1.2. Homogén külső tér bevezetése

A külső tér nélküli esetben vizsgált mennyiségek jól láthatóan megváltoznak, ha (akár csak gyenge) teret kapcsolunk a rendszerre. A korreláció és a kapcsolt-korreláció sem fed át ebben az esetben, teljes leszámítás esetén sem. Az előbbiekhöz hasonlóan vizsgálom a már bemutatott ($N = 20$ -as) rendszert, egy kiválasztott hőmérsékleten cWPS módszerrel a kritikus pont alatt: $T = 0,6$. A különböző korrelációk eloszlásai a 4.1.5 ábrán láthatók,

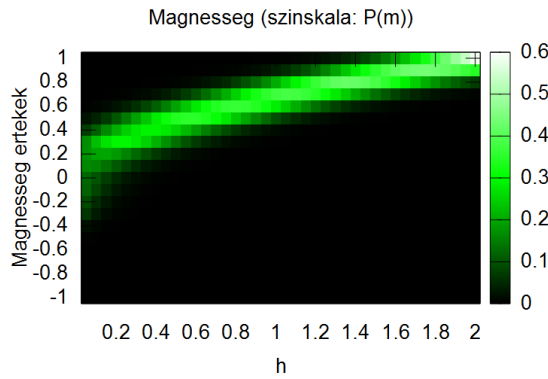


4.1.5. ábra: Korrelációk és kapcsolt-korrelációk eloszlásai különböző nagyságú külső tér jelenlétében.
($T=0,6$)

különböző nagyságú homogén terek esetén. Azt látjuk, hogy a kapcsolt-korreláció (4.1.5 c) és d) ábrák) érzékenyebb a külső térre: $h = 0,5$ -ös tér erősen „összehúzza” a kapcsolt-korrelációt ($C^{(c)}$), míg a korrelációk eloszlásában ez a tér nem okoz ilyen szintű változást. A külső tér korrelációkra gyakorolt hatását még szemléletesebben mutatja a 4.1.6 ábra.



4.1.6. ábra: Korreláció (a) és kapcsolt-korreláció (b) eloszlások a külső tér függvényében. (cWPS, $N = 20$, $\varphi_I = 0$, $T = 0,6$)



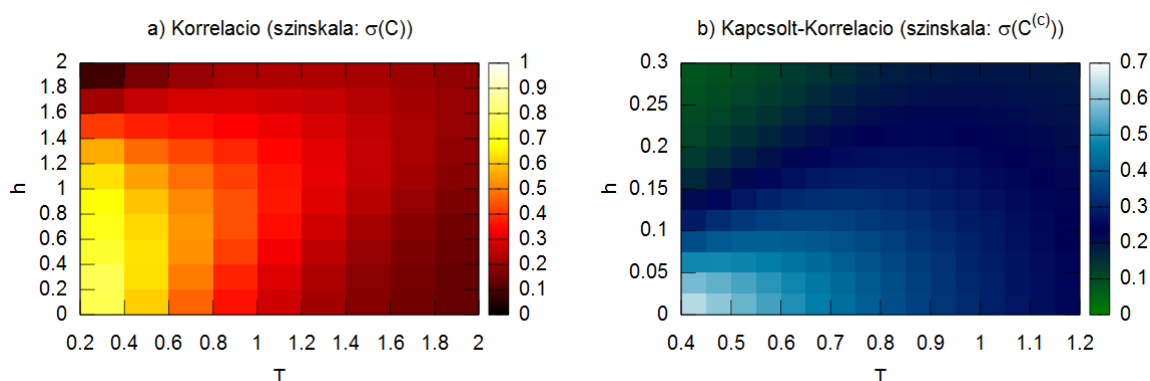
4.1.7. ábra: A mágnesség eloszlásának változása a külső tér függvényében. (cWPS, $N = 20$, $\varphi_I = 0$, $T = 0,6$)

A 4.1.7 ábrán jól látható, amint egyre nagyobb pozitív külső tér hatására egyre jobban eltolódik a rendszer mágnesszettsége a pozitív irányba.

4.1.3. A de Almeida-Thouless vonal

Korábban, a spinűveg-modellek stabilitása révén már szóba került az AT-vonal, mely a $(T-h)$ térben elválasztja egymástól a spinűveg- és a paramágneses-fázist (2.2.1 ábra). Különböző elméletekben ennek a vonalnak még a léte is kérdéses (például háromdimenziós EA-modellben, véletlen tér mellett [33]). Az AT-vonal pontjai tehát a kritikus hőmérsékletek az adott külső tér esetén. Így az volt a feltételezésünk, hogy a korrelációk eloszlásának a kiszélesedése kirajzolhatja ezt az elméleti görbét, hiszen a kritikus hőmérsékletnél változnak meg az eloszlások. Ezért különböző $(T-h)$ értékeknél kiszámoltuk a korrelációs értékek szórását, mely jellemzi az eloszlások szélességét.

Eredményként a 4.1.8 ábrán látható mintázatok adódtak. Erős túlzás lenne azt állítani, hogy „kirajzolódik az AT-vonal”. Ugyanakkor a mintázatokból jól látszik, hogy alacsony (T-h) értékekhez széles, pontosabban nagyobb szórású eloszlás tartozik. Amennyiben mégis egy „kvázi-AT-vonalat” látunk kirajzolódni, akkor érdekes a kapcsolt-korreláció esetén ennek a vonalnak a „visszahajlása”: alacsony hőmérsékleten nem szükséges nagy külső tér, hogy összehúzza az eloszlást, holott ennek az ellenkezőjét várnánk az elmélet alapján. (Természetesen elképzelhető és valószínű, hogy ez egy végesméret-effektus a rendszerben.)



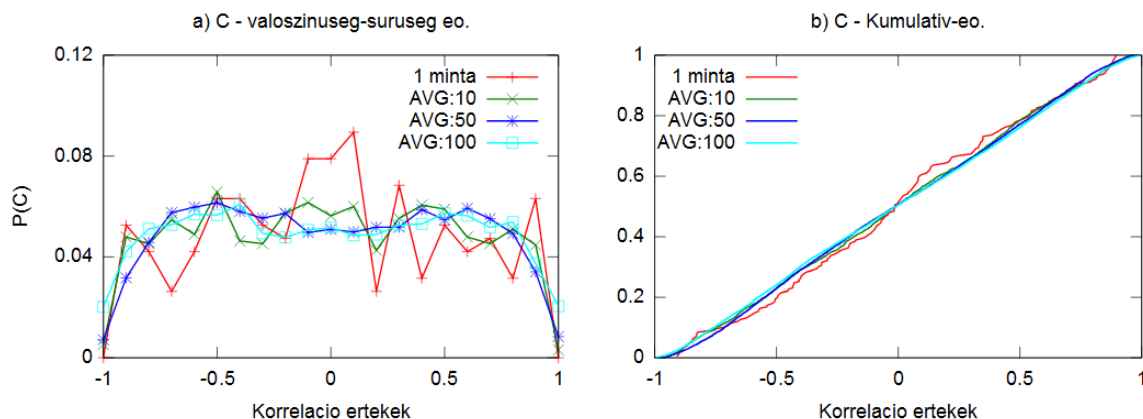
4.1.8. ábra: Korrelációs és kapcsolt-korrelációs értékek szórása (T-h) értékek terében.

Az eddigi 4.1 fejezetben tehát elsősorban egy kiválasztott mintát vizsgáltam meg. Az 'E' mellékletben egy másik, szintén véletlen választott mintának az eredményeit mutatom be (felsorolás szinten) az eddigiekkel egybevigó ábrázolásmóddal, hogy viszonyítási alapot nyújtson.

4.2. Minta-független eredmények

Ahhoz hogy a rendszerről átfogóbb képet kapjunk, érdemes több mintából átlagolni az eredményeket a csatolások felett. Ezért készítettem egy olyan programot, melyben paraméterként megadható, hogy az eredményeket mennyi mintára átlagolja. A szimuláció például 10 mintára úgy átlagol, hogy minden (T-h) paraméterpárra külön generál 10 véletlen kapcsolati-mátrixot. Ezzel is törekedve arra, hogy az eredmények minél kevésbé függjenek a csatolások kiosztásától. A 4.2.1 ábrán látható, hogy átlagolás hatására az eloszlások kisimulnak. Már a 10 véletlen mintára vett átlagolás is jelentős változást mutat, az egyedi mintából származó eloszláshoz képest. Minél több mintára átlagolunk, az eloszlások annál simábbak és szimmetrikusabbak lesznek. A 100 mintára vett átlagolás

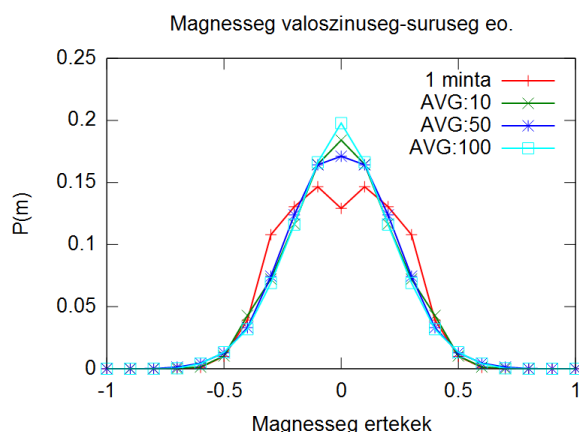
már nem tér el látványosan az 50 mintára vett átlagolástól, ezért szimulációknál leginkább az 50 mintára vett átlagolást használtam.



4.2.1. ábra: Korrelációk eloszlása $T = 0,6$ hőmérsékleten, különböző mennyiségű mintákra átlagolva. ($N = 20$, cWPS szimulációk, $h = 0$)

A program a korrelációk valószínűség-sűrűség eloszlását minden esetben előállítja, majd ezeket átlagolja. Ez a megoldás kevésbé bizonyult sikeresnek, mivel az eloszlás készítésénél a csatornák kiosztása („bin-elés”) befolyásolhatja, torzíthatja az átlagolt képet. Ez esetben pontosabb képet ad a kumulatív-eloszlás, mely előállításához egyszerűen csak a nyers korreláció értékekre van szükség.

A 4.2.2 ábrán látható (a 4.2.1 ábrához hasonlóan) a mágnesség értékek eloszlása. Látható, hogy az átlagolás hatására eltűnnek az esetleges bifurkációk, és előáll a zérus középtértékű eloszlás.

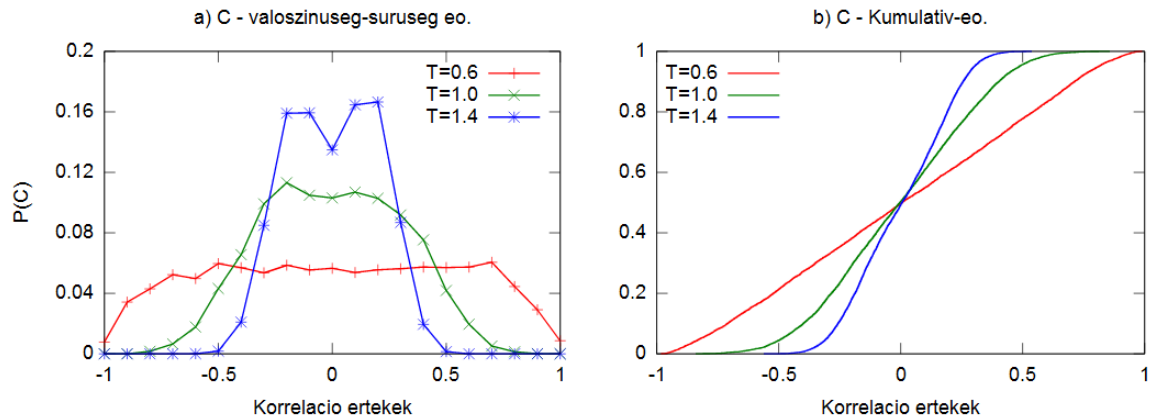


4.2.2. ábra: Mágnesség eloszlása $T = 0,6$ hőmérsékleten, különböző mennyiségű mintákra átlagolva. ($N = 20$, cWPS szimulációk, $h = 0$)

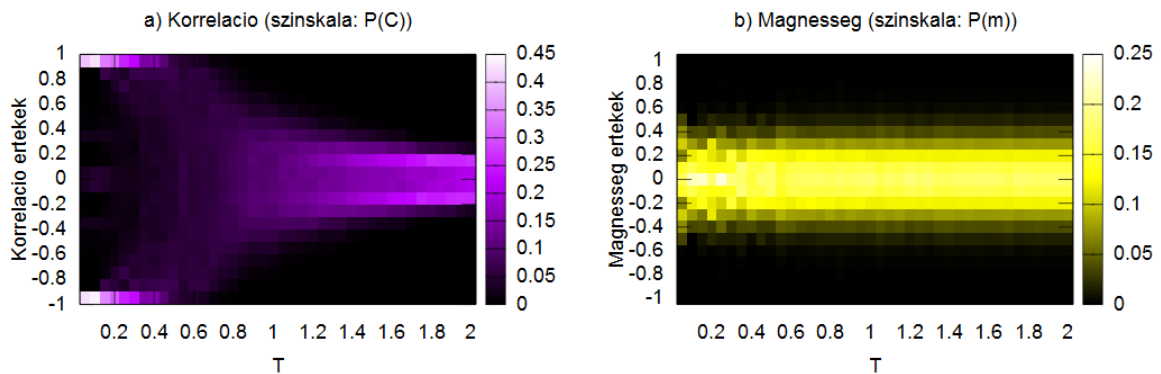
A következő három alfejezetben a 4.1 fejezethez hasonlóan mutatom be az eredményeiket, összevetve így a minták felett vett, átlagolt eredményeket az egyedi mintából származó eredményekkel.

4.2.1. Külső tér nélküli eset

Külső tér nélküli esetben az átlagolás mellett is megmarad az eloszlások átalakulása a kritikus pont körül (4.2.3 és 4.2.4 a) ábrák). Ami szembetűnőbb eltérés az egyedi mintához képest, az a mágnességnél látható (4.2.4 b) ábra): alacsony hőmérsékleten az esetleges bifurkációk kiátlagolódtak. A mágnesség átlagos eloszlása közel invariánsnak mondható a hőmérsékletre



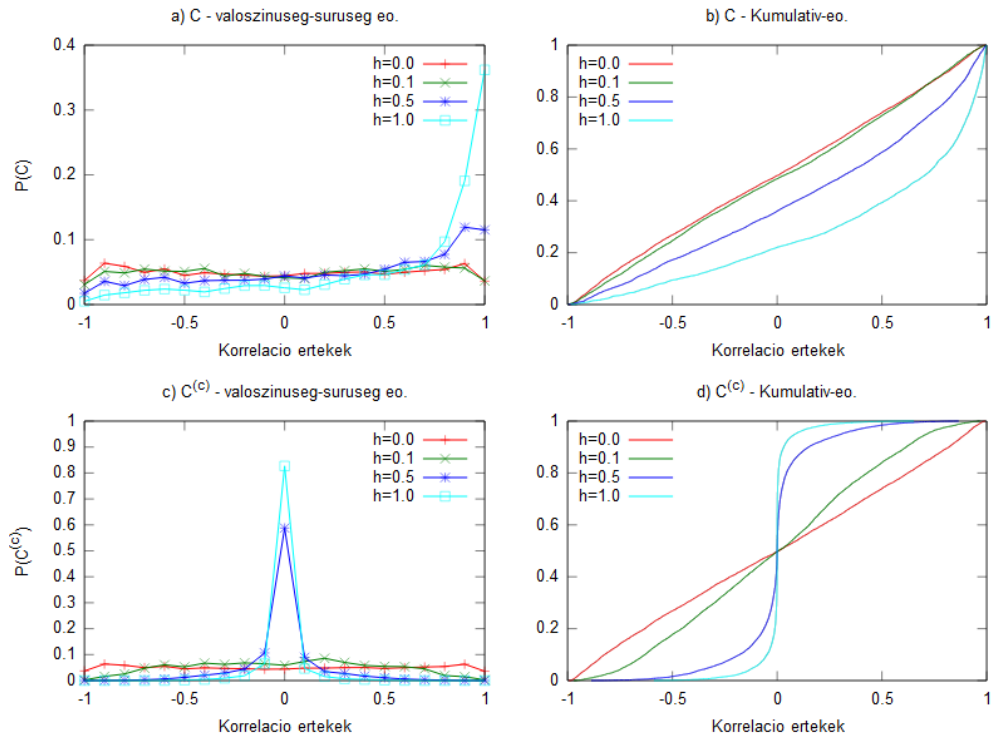
4.2.3. ábra: A korrelációk eloszlásának alakulása a kritikus pont körül (cWPS szimulációk; $N = 20$; 50 mintára vett átlagok, $h = 0$).



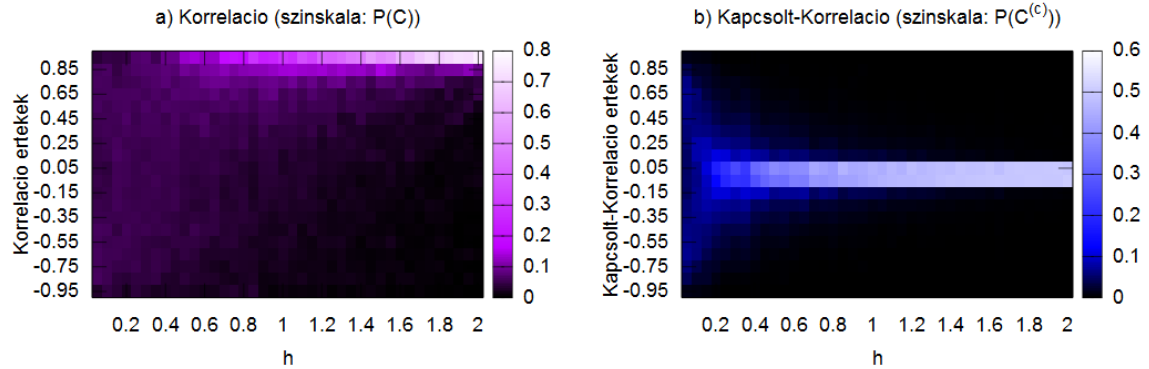
4.2.4. ábra: Az a) ábrán a korrelációk eloszlása látható, a b) ábrán pedig a mágnességek eloszlása a hőmérséklet függvényében (cWPS szimulációk; $N = 20$; 50 mintára vett átlagok; $h = 0$).

4.2.2. Homogén külső tér bevezetése

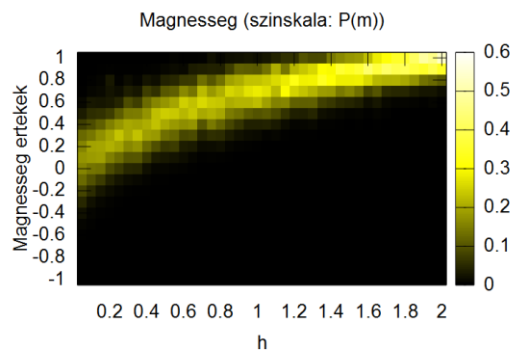
Homogén külső térrel végzett szimulációknál szembetűnő eltérés nincs az átlagolt eredmények és a véletlen választott, egyedi mintából származó eredmények között. Az átlagolás következtében itt is kisimultak az eloszlások.



4.2.5. ábra: Korrelációk és kapcsolt-korrelációk eloszlásai különböző nagyságú külső tér jelenlétében. ($T=0,6$ cWPS szimulációk, $N = 20$, 50 mintára vett átlagok)



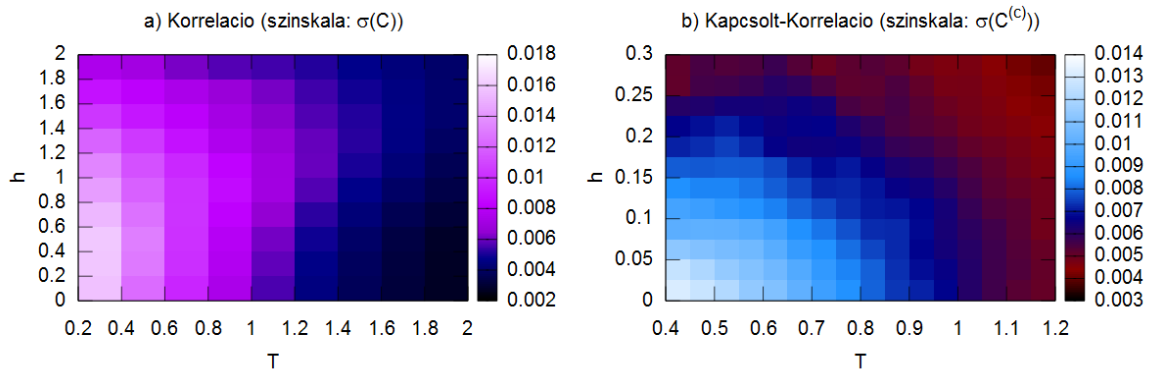
4.2.6. ábra: Korreláció (a) és kapcsolt-korreláció (b) eloszlások a külső tér függvényében. ($T=0,6$ cWPS szimulációk, $N = 20$, 50 mintára vett átlagok)



4.2.7. ábra: A mágnesség eloszlásának változása a külső tér függvényében. ($T=0,6$; cWPS szimulációk; $N = 20$; 50 mintára vett átlagok)

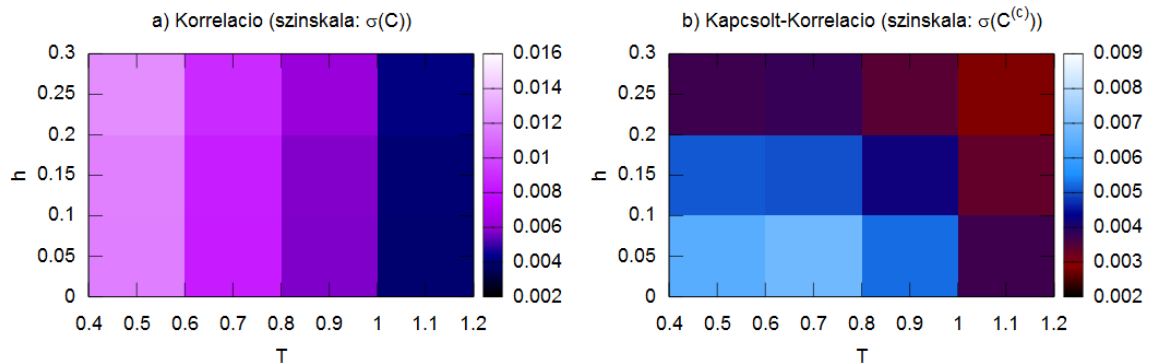
4.2.3. A korrelációk szórása

A 4.1.8 ábrához hasonlóan egy adott (T-h) érték mellett az összes mintához (jelen esetben 50 darab) tartozó korrelációk szórását számoltam, majd az így kapott értékeket ábrázoltam a (T-h) téren (4.2.8 ábra). Az így kapott szórás értékek nagyon kicsik, de a korábban is látott mintázatot így is kirajzolják. A 4.1 fejezetben tárgyalt egyedi minta esetén a kapcsolt-korrelációk szórásánál alacsony hőmérsékleten már kis térenél kis szórás értékeket láttunk. Az átlagolt eredmények esetén (4.2.8 b) ábra) azt látjuk a mintázatban, hogy ez az effektus kevésbé jellemző. (Bár még így sem kapjuk vissza azt a képet, amit az elméleti AT-vonal alapján várnánk.)



4.2.8. ábra: Korrelációs és kapcsolt-korrelációs értékek szórása (T-h) értékek terében. (cWPS szimulációk, 50 mintára vett szórások, $N = 20$)

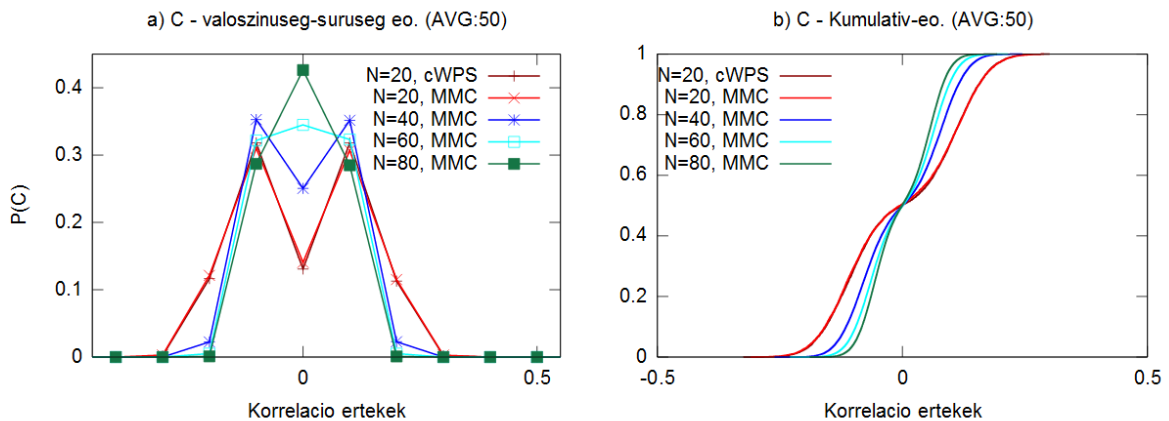
Az előbbiekhöz hasonlóan futtattam egy MMC szimulációt nagyobb rendszerre ($N = 64$). A hosszú futási idő miatt azonban csak kevés pontra tudtam elvégezni ezt a mérést. Eredményül olyan ábrákat kaptam, melyek közel hasonló struktúrát mutatnak a kisebb rendszerből kapott eredményekkel 4.2.9 ábra.



4.2.9. ábra: Korrelációs és kapcsolt-korrelációs értékek szórása (T-h) értékek terében. (MMC szimulációk, 50 mintára vett szórások, $N = 64$, $t_{\max} = 10^6$)

4.2.4. Magas hőmérsékleten

A cWPS szimulációkból származó eredmények megbeszélésekor konzultáción feltűnt, hogy a korrelációk eloszlásában magasabb hőmérsékleten ($T_c < T < 4T_c$) nulla értéknél törés van, egy „beesés” a valószínűség-sűrűség eloszlásban. Ez azt jelenti, hogy a rendszerben kevés olyan elem-pár van, melyek között egyáltalán nincs korreláció (vagy nagyon kicsi). Ilyen eloszlás látható 4.2.3 a) ábrán is $T=1,4$ hőmérsékleten. Mivel ez a jelenség az átlagolt eredményeknél jól kivehetően jelentkezik, egy olyan tulajdonság okozhatja, mely a rendszerre általánosan jellemző. Ugyanazon a hőmérsékleten futtattam több átlagolást végző szimulációt is, különböző rendszerméretekre, melyekből származó eloszlások a 4.2.10 ábrán láthatók. A képen jól látni, hogy ez a jelenség eltűnik a rendszer méretének növelésével. Mivel kis rendszerméreteknél jelentkezik ez az tulajdonság, ezért feltételezhető, hogy ez egy véges-méret effektus. Bár a jelenség pontos okát még nem sikerült megfejtenünk.



4.2.10. ábra: Korreláció értékek eloszlása $T = 2.0$ hőmérsékleten, különböző méretű rendszerek esetén ($h=0$).

4.3. Inhomogén külső tér alkalmazása

Inhomogén külső tér alatt azt az esetet értjük, amikor a Hamilton-függvényben a mágneses teret leíró tag (h_i) elemenként eltérő értékeket vesz fel. A szimulációkban lehetőség van minden elemre külön, eltérő nagyságú külső tér beállítására, mellyel lehetőség nyílik sokféle mágneses tér-mintázat megvizsgálására. Például kiosztható a külső tér egy függvény szerint, vagy hattathatunk teret egy kiválasztott csoportra is. A sok lehetőség közül a legegyszerűbbnek nevezhető esetet vizsgálom meg a következő részben, ahol egy speciálisan kiválasztott elemre hattatok csak különböző nagyságú külső teret.

4.3.1. Egy spin „rögzítése”

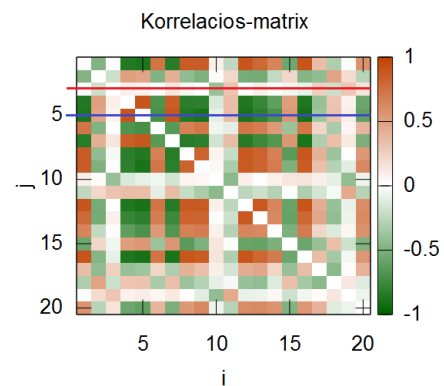
A következőkben olyan szimulációkból szerepelnek eredmények, melyek azt a kérdést hivatottak megvizsgálni, „mennyire érzékeny a rendszer kis perturbációkra?”. Kis perturbációt azzal idézek elő, hogy egy kiválasztott spinnek rögzítem az irányát. Ez megfelel annak az esetnek, mintha nagy külső teret kapcsoltunk volna arra az egy spinre, határesetben: $h_i \rightarrow \infty$ (ahogy később ezt látni is fogjuk). Teret haddatni egy kiválasztott spinre lehet az dolgozat során eddig is használt szimulációkkal, a spinek irányának rögzítéséhez azonban szükséges volt módosítani őket. A MMC kódban úgy oldottam meg, hogy a Monte Carlo algoritmus során ne lehessen kiválasztani a spint léptetésre, így az előre megadott irányban marad a program futása végéig. A cWPS kódban pedig azt kellett megoldani, hogy a program a fázistérnek csak azt a felét számolja le, melyben a kiválasztott spint a kívánt értéket veszi fel.

A rögzítendő spint a korrelációs képük szerint választottam ki: megvizsgáltam, milyen hatást érek el, ha egy erősen- és milyen, ha egy gyengén-korreláló spin irányát rögzítem. Erősen- és gyengén-korreláló spin alatt itt azt értem, hogy a kiválasztott spin korrelációi a rendszerben (abszolút értékben) összegezve maximálisak vagy minimálisak:

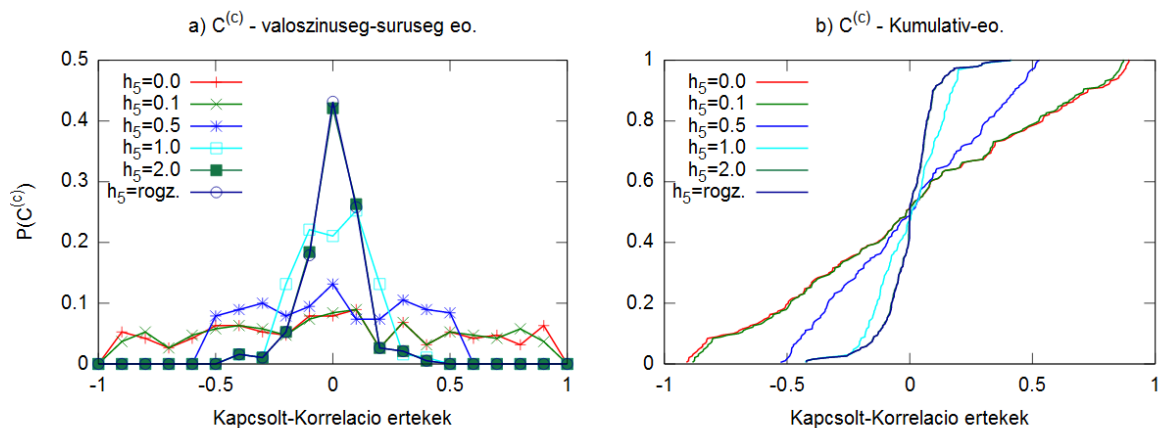
$$C(s_i) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N |c_{ij}|. \quad (4.1)$$

Kis rendszer és cWPS esetén az erősen- vagy gyengén-korreláló spin megegyezik az erősen- vagy gyengén-kapcsoltan korreláló spinnel. Továbbá nem bizonyult fontos tényezőnek a spin iránya: külső tér nélküli esetben ugyanazt az eredményt lehet kapni, bármely irányba is rögzítjük a spint. Ez magyarázható a spinek nulla várható értékével ($\langle s_i \rangle = 0$).

Ilyen elemeknek a megfelelő sorai láthatók kiemelve egy kapcsolati mátrixban a 4.3.1 ábrán, ahol s_5 az erősen- és s_3 a gyengén-korreláló spin. Erre a rendszerre futtattam a következő szimulációkat, melyek során különböző méretű tereket haddattam a kiválasztott spinekre. A 4.3.2 ábrán látható az erősen-korreláló spin esete: a kapcsolt-korrelációk eloszlását erősen befolyásolja, ha ezt a spint perturbálom nagyobb lokális térrel. Kis tér ($h_5 = 0,1$) esetén nem tapasztalható nagy változás. Azonban jól látható, hogy minél nagyobb lokális teret alkalmazunk, annál közelebbi eredményt kapunk a rögzített spines esethez.

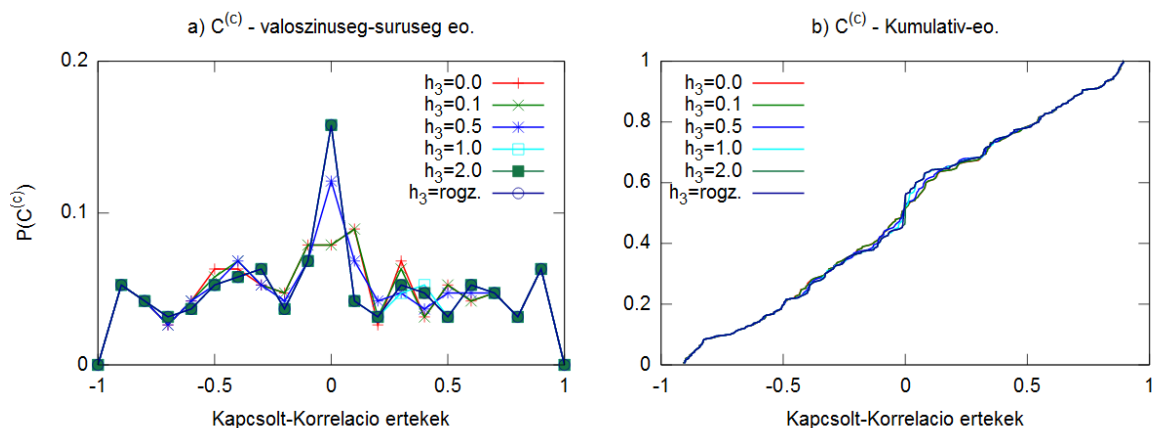


4.3.1. ábra: Kapcsolati mátrix. Piros színnel kiemelve a gyengén-, kézzel az erősen korreláló spin sora.



4.3.2. ábra: Kapcsolt-korrelációs eloszlások, különböző méretű lokális teret hatarva az erősen-korreláló spinre. (cWPS, $N = 20$, $T = 0,6$)

Ha a gyengén-korreláló spinre hatarjuk a különböző lokális tereket, akkor az látható, hogy az eloszlás kissé megváltozik, de nem olyan markánsan, mint az erősen-korreláló spin esetében. Az erősen-korreláló spin szemlátomást jobban befolyásolja az egész rendszert, mint a gyengén-korreláló (4.3.3 ábra).

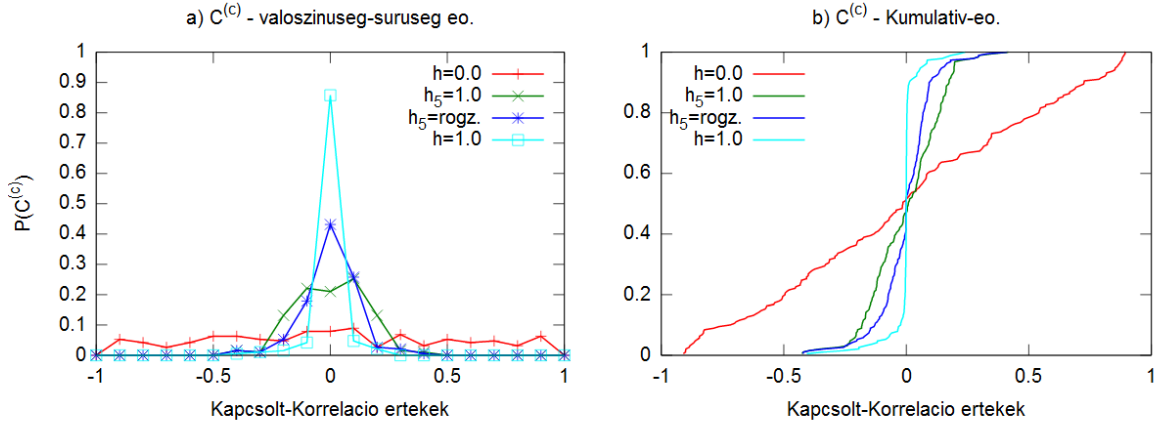


4.3.3. ábra: Kapcsolt-korrelációs eloszlások, különböző méretű lokális teret hatarva a gyengén-korreláló spinre. (cWPS, $N = 20$, $T = 0,6$)

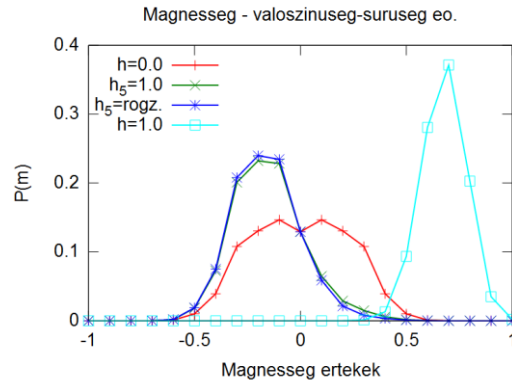
Érdemes összehasonlítani az egy spin rögzítésének esetét a homogén, külső tér hatásával, mivel a teljes gráf topológiája miatt minden spin úgy hat a többire, mint egy külső tér. Ha az erősen-korreláló spin rögzítésének esetét vesszük, akkor azt láthatjuk, hogy nem olyan erős a hatása, mint egy homogén, külső tértől származóé (4.3.4 ábra).

A korrelációk eloszlásában nem okoznak lényegi változásokat ezek a perturbációk, ezért nem ábrázoltam őket. Érdekes jelenség adódik viszont a mágnesség eloszlásánál: pozitív, lokális tér hatására negatív mágnesség generálódhat a rendszerben (4.3.5 ábra). Ennek magyarázata az, hogy a negatív korrelációk vannak túlsúlyban az erősen-korreláló

spin korrelációi között. (Ha a pozitív korrelációk lennének túlsúlyban, akkor pozitív mágnesség jelentkezne.)



4.3.4. ábra: Kapcsolt-korrelációs eloszlások, különböző méretű lokális és homogén teret hajtva az erősen-korreláló spinre. (cWPS, $N = 20$, $T = 0,6$)



4.3.5. ábra: Mágnesség-eloszlások, különböző méretű lokális és homogén teret hajtva az erősen-korreláló spinre. (cWPS, $N = 20$, $T = 0,6$)

4.3.2. Két rendszer párhuzamos futtatása

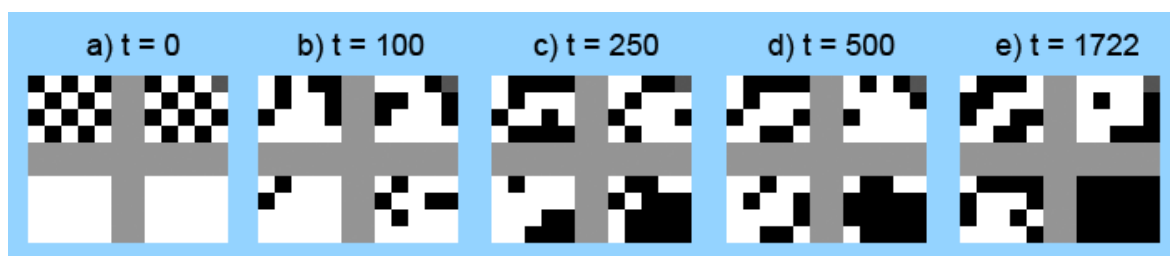
Kis perturbációk esetén megvizsgáltam, hogy a perturbált rendszer mennyire fed át a perturbálatlanul, ami mellett érdemes volt megfigyelni a rendszer önmagával vett átfedését is. Ezt az átfedést a Parisi-rendparaméter számszerűsíti (q_{ab} és q_{aa}). Ehhez egy olyan MMC programot írtam, mely párhuzamosan idő-fejleszti a két rendszert és méri az átfedéseket. A kódban a Monte Carlo módszer alkalmazása során mindkét rendszerben ugyanazt a spint választom ki. Így a rendszereknek a „széttartása” csak a Metropolis algoritmusban szereplő energia-feltétel következménye. A szimulációkban figyeltem a két rendszer átfedésének teljes eltűnésének idejét is (t_K), mely akkor következik be, amikor már minden spin-pár a két rendszerből állt valamikor ellentétes irányban. A futások során (kis rendszer esetén) kimentettem az állapotot minden időpillanatban t_K -ig. Ezeket az

időpillanatokot PBM-formátumba menti ki a program a futás során, mely képeknek a következő a felépítésük (4.3.6 ábra):

- A bal felső rész az egyik rendszert: fekete, ha $s_i = -1$; fehér, ha $s_i = +1$.
- A jobb felső rész a másik rendszert: fekete, ha $s_i = -1$; fehér, ha $s_i = +1$. A rögzített spin esetén sötétszürke, ha $s_r = -1$; világosszürke, ha $s_r = +1$.
- A bal alsó rész a pillanatnyi átfedést mutatja: fekete, ha $s_i^\alpha \neq s_i^\beta$; fehér, ha $s_i^\alpha = s_i^\beta$.
- A jobb alsó rész az abszolút átfedést mutatja: fekete, ha valaha előfordult, hogy $s_i^\alpha \neq s_i^\beta$; fehér, ha addig az időpillanatig mindig megegyeztek: $s_i^\alpha = s_i^\beta$. Ha ez a rész teljesen fekete, akkor $t = t_K$.

(Az állapot képeknél figyelembe kell venni, hogy az ábrázolás nem tükrözi a topológiát: továbbra is teljesen összekötött a rendszer.)

Első példaképp egy kis ($N=20$ -as) rendszert vizsgáltam meg, ahol az erősen-korreláló spin irányát rögzítettem -1 irányba (4.3.6 a) ábrán a jobb felső sarokban látni).

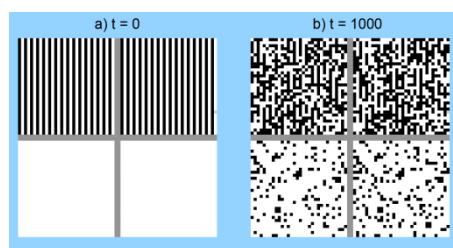


4.3.6. ábra: Egy $N = 20$ -as rendszer párhuzamos futásának időpillanatai, ahol a β -rendszerben rögzített az erősen-korreláló spin. (MMC; $T = 0,6$; $t_{\max} = 10^7$)

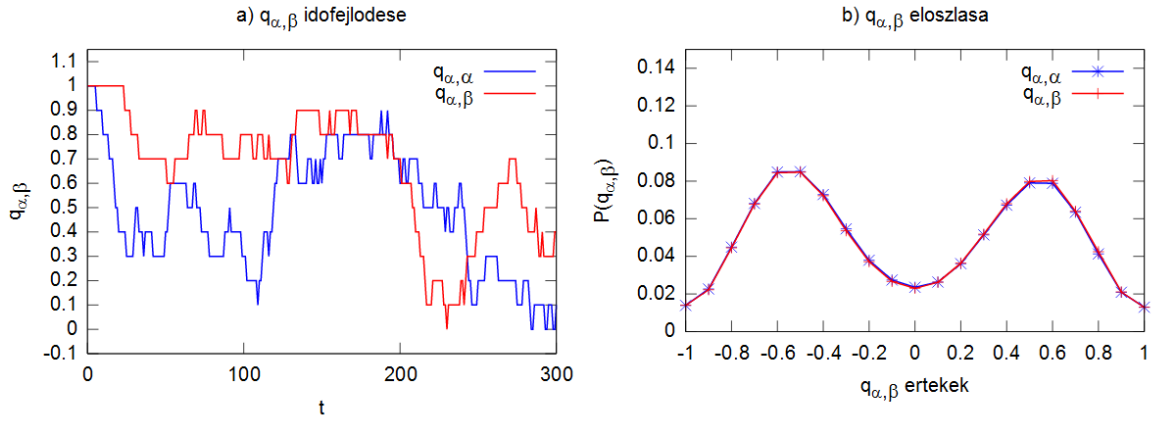
A futtatások során azt tapasztaltam, hogy t_K értéke széles skálán változhat. Kis rendszerek esetén 10^3 , nagyobb rendszereknél pedig 10^5 nagyságrendbe esik. A 4.3.7 ábrán látható, hogy egy nagyobb ($N = 1024$) rendszer szimulációjakor 10^3 lépés után még kevés eltérés történik. Ebben a szimulációban az átfedésnek teljes eltűnésének pontos ideje: $t_K = 214\,491$.

A $q_{\alpha\beta}$ -paraméter időfejlődésén az látható,

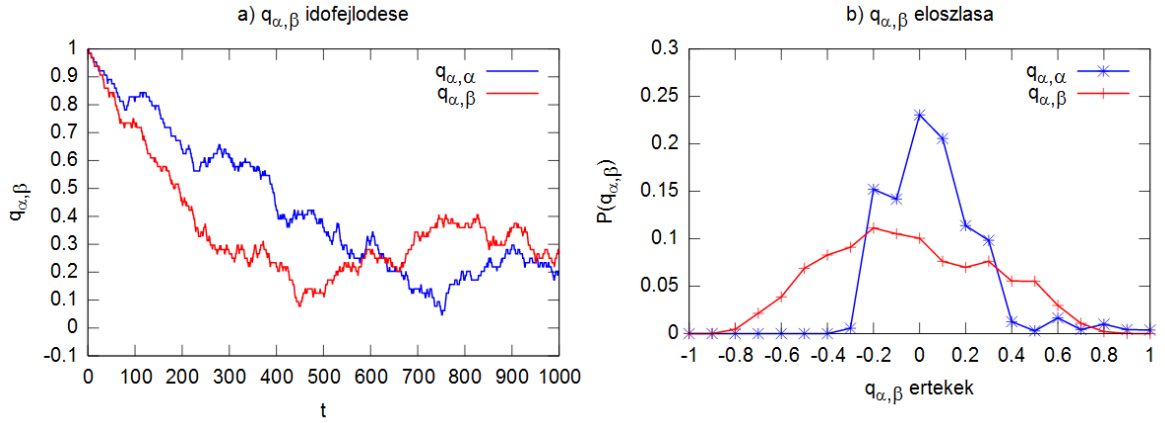
hogy a rendszer méretéhez képest elég hamar nulla közeli értéket vesz fel (4.3.8-10 a) ábrák). A paraméter eloszlására kis rendszer esetén pedig hasonló képet kapunk (4.3.8 b) ábra), mint amit SK-modell szimulációjakor kaptak („ $P(q)$ ” mérések) [34]. Nagyobb rendszer esetén nem rajzolódik ki ez az eloszlás, feltehetőleg a rövid futásidő miatt.



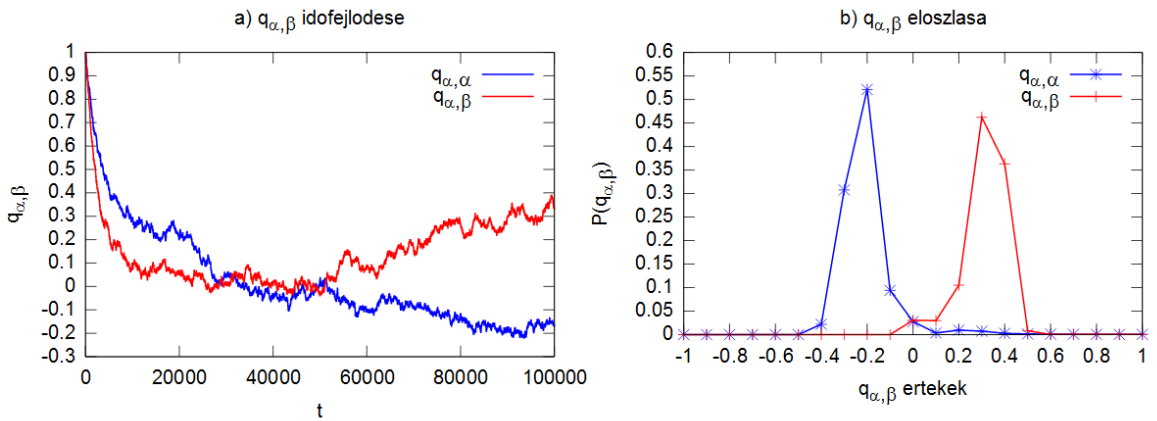
4.3.7. ábra: Egy $N = 1024$ -es rendszer párhuzamos futásának időpillanatai, ahol a β -rendszerben rögzített az erősen-korreláló spin. (MMC; $T = 0,6$; $t_{\max} = 10^6$)



4.3.8. ábra: $q_{\alpha\beta}$ -paraméter időfejlődése és eloszlása. α -rendszer, melyben nincs változtatás, β -rendszerben pedig rögzített az erősen-korreláló spin. (MMC; $N = 20$; $t_{\max} = 10^7$; $T = 0,6$; $\varphi_J = 0$)



4.3.9. ábra: $q_{\alpha\beta}$ -paraméter időfejlődése és eloszlása. α -rendszer, melyben nincs változtatás, β -rendszerben pedig rögzített az erősen-korreláló spin. (MMC; $N = 128$; $t_{\max} = 10^6$; $T = 0,6$; $\varphi_J = 0$)

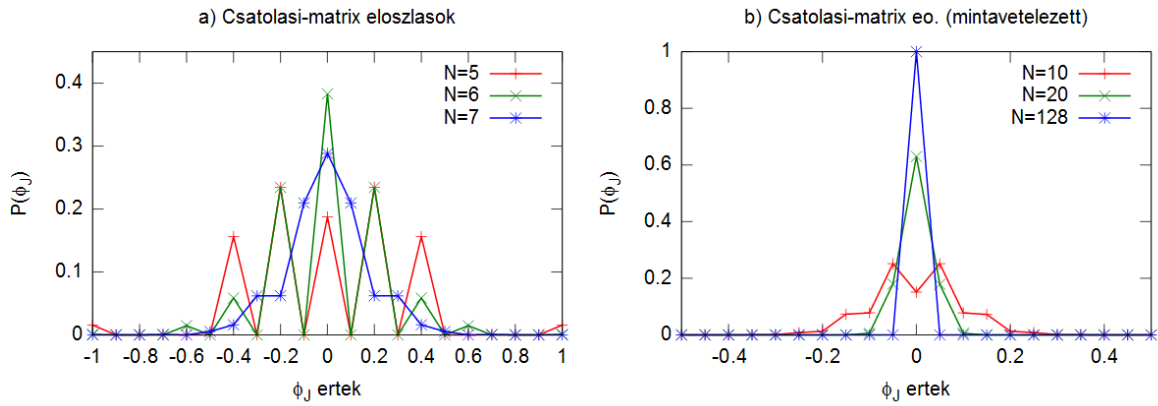


4.3.10. ábra: $q_{\alpha\beta}$ -paraméter időfejlődése és eloszlása. α -rendszer, melyben nincs változtatás, β -rendszerben pedig rögzített az erősen-korreláló spin. (MMC; $N = 1024$; $t_{\max} = 10^6$; $T = 0,6$; $\varphi_J = 0$)

4.4. A rendszer frusztráltságának fontossága

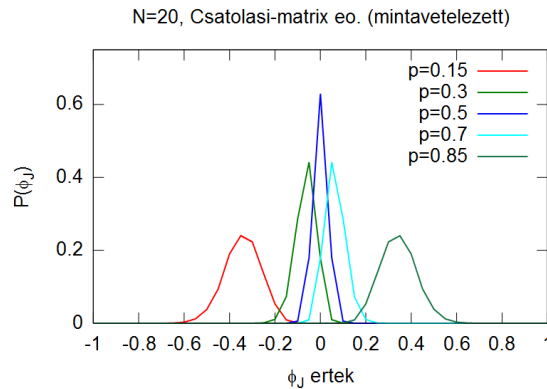
4.4.1. A frusztráció vizsgálata

Ahhoz, hogy adott frusztráltsági-fokú rendszereket tudjunk vizsgálni, előbb meg kell találnunk az ilyen tulajdonságú gráfokat. Véletlen minták generálásakor arra lettem figyelmes, hogy nem nulla frusztráltsági-fokú csatolási-mátrix ritkán adódik. Ezért megvizsgáltam különböző rendszerméreteknél a mátrixok eloszlását frusztráltsági-fok szerint. Adott N-hez összesen $2^{\frac{1}{2}N(N-1)}$ lehetséges kapcsolati mátrix tartozik, ezért elég kicsi rendszernél az összes mátrixot végig tudtam nézni, nagyobb rendszereknél pedig mintavételeztem az eloszlást (4.4.1 ábra). A rendszer növelésével erősen szűkül az eloszlás, tehát ezzel a módszerrel nehéz nagyobb frusztráltsági-fokú rendszert találni.



4.4.1. ábra: Csatolási-mátrixok eloszlása ϕ_J szerint. Az a) ábrán az összes lehetőséget számításba vettem, a b) ábrán pedig mintavételeztem különböző méretű mátrixokat. ($N=10$ és 20 esetén 10^6 , $N=128$ esetben pedig 10^4 véletlen mintát vizsgáltam meg)

A csatolások véletlen kiosztásánál $p = 0.5$ valószínűséggel jön létre pozitív (ferromágneses) kapcsolat és $(1-p) = 0.5$ valószínűséggel negatív (anti-ferromágneses). Ezt a p valószínűséget megváltoztatva torzítani lehet a mátrixok eloszlását (4.4.2 ábra).



4.4.2. ábra: N=20-as rendszerek csatolási-mátrixainak eloszlása ϕ_j szerint, különböző pozitív csatolási-valószínűségek esetén. (Az eloszlások egyenként 10^6 darab mintából készültek.)

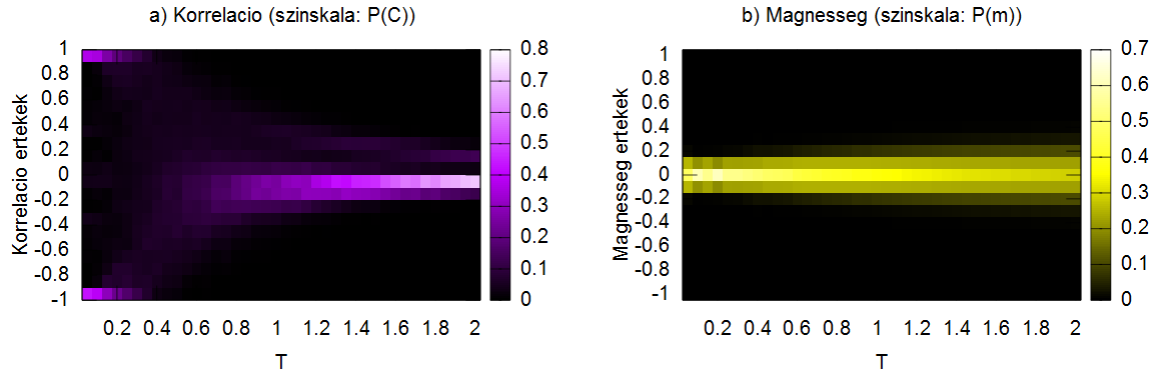
Azt tapasztaltam, hogy kisebb p érték esetén (tehát több anti-ferromágneses csatolás esetén) frusztráltabb lesz a rendszer, magasabb p mellett pedig kevésbé. Így könnyebben lehet találni adott frusztráltsági-fokú rendszereket.

A mátrixoknak az eloszlásának, és a frusztráltsági-foknak a csatolásoktól való függésének mélyebb megértéséhez komolyabb csoportelméleti ismeretekre és vizsgálatokra van szükség.

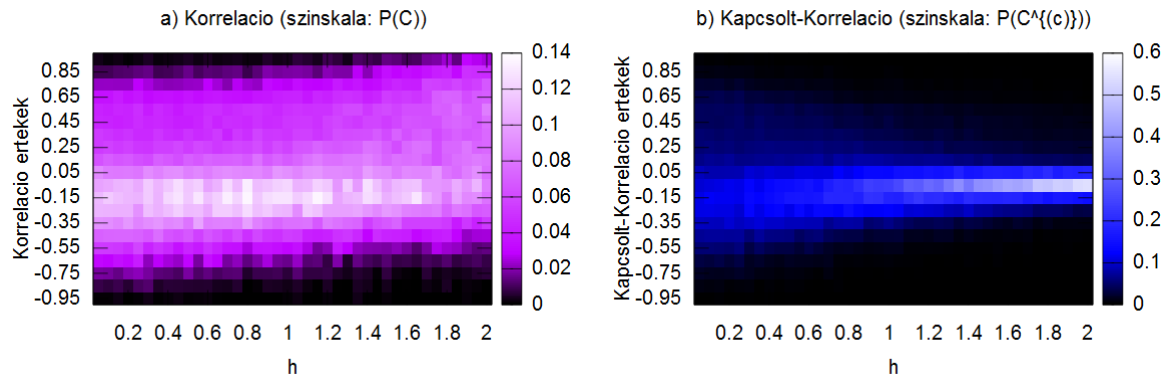
4.4.2. A frusztráltság következményei

Az 'F' mellékletben látható egy véletlen választott, $\phi_j = 0,3$ frusztráltsági-fokú, egyedi rendszernek az eredményei. Ezeket a képeket jól össze lehet vetni a 0 frusztráltsági-fokú egyedi mintából származó, valamint az átlagolt eredményekkel. Azt láthatjuk, hogy a hőmérséklet változására ugyanúgy viselkedik, mint a többi rendszer (7.6.3 ábra), a külső térre azonban kevésbé érzékeny alacsony hőmérsékleten (7.6.5 és 7.6.6 ábrák). Ennek megfelelően ad más képet a korrelációk szórása is a hőmérséklet és a külső tér függvényében (7.6.7 ábra).

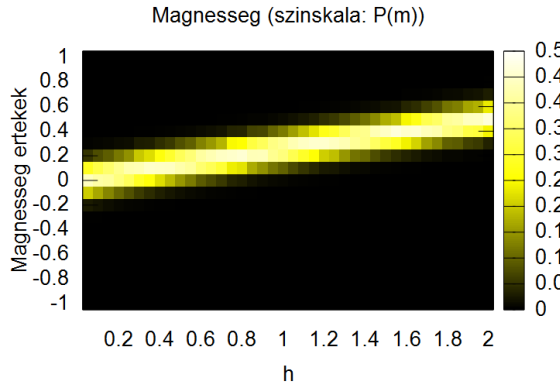
Igyekeztem minta-függetlenül is jellemezni a frusztráció hatását. Ennek érdekében a minták fölötti átlagolást végző programkódot úgy módosítottam, hogy mindig negatív frusztráltsági-fokú csatolási mátrixokat generáljon. A csatolások véletlen kiosztásánál $p = 0,15$ valószínűséggel jött létre $+1$ és $(1-p) = 0,85$ valószínűséggel -1 csatolás. Így a 4.4.2 ábrán látható „ $p=0,15$ ” feliratú mátrix-eloszlásból választott mindig a program. A frusztráltabb rendszerek felett vett átlagolt eredmények is azt mutatják, hogy a hőmérséklet változására hasonlóan reagál a negatív frusztráltsági-fokú rendszer, mint a közel zérus frusztráltsági fokú rendszerek (4.4.3 ábra). Külső jelenlétére, alacsony hőmérsékleten azonban az mondható, hogy átlagosan is kevésbé érzékeny (4.4.4 és 4.4.5 ábrák).



4.4.3. ábra: Az a) ábrán a korrelációk eloszlása, a b) ábrán pedig a mágnességek eloszlása látható a hőmérséklet függvényében, $\varphi_J < 0$ rendszerekre. (cWPS szimulációk; $N = 20$; 50 mintára vett átlagok; $h = 0$).



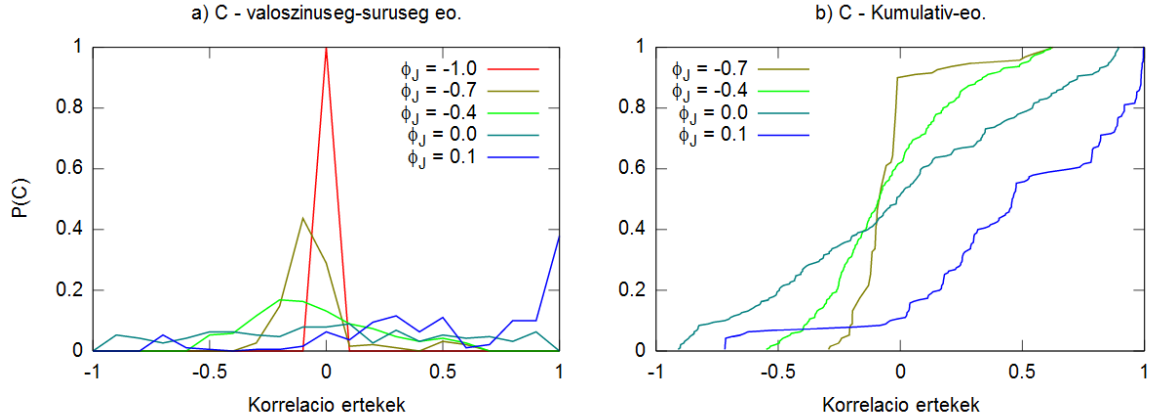
4.4.4. ábra: Korreláció (a) és kapcsolt-korreláció (b) eloszlások a külső tér függvényében, $\varphi_J < 0$ rendszerekre. ($T=0,6$; cWPS szimulációk; $N = 20$; 50 mintára vett átlagok)



4.4.5. ábra: A mágnesség eloszlásának változása a külső tér függvényében. ($T=0,6$; cWPS szimulációk; $N = 20$; 50 mintára vett átlagok)

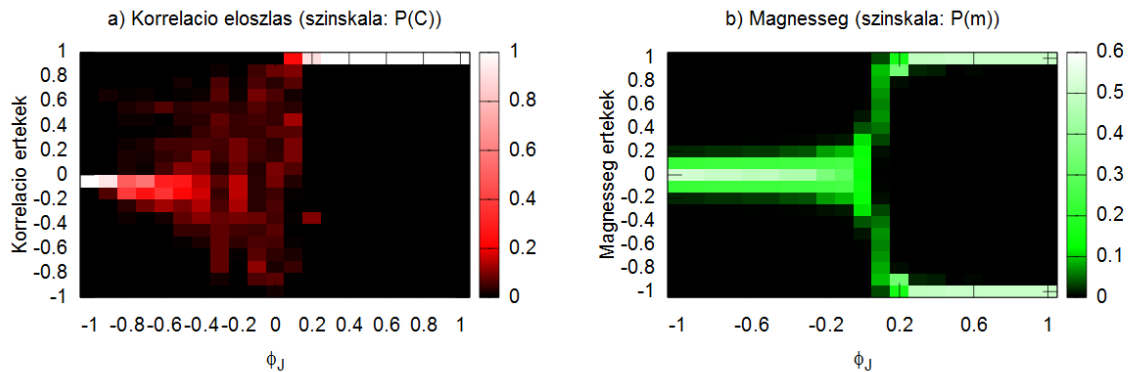
Hogy a frusztráltsági-fok hatását jobban lássuk, ezért egyenletesen választottam (21 darab) különböző frusztráltsági-fokú mintákat a φ_J : $[-1, +1]$ tartományból. A következőkben látható $\varphi_J = -1$ rendszer csak $J_{ij} = -1$ csatolást tartalmaz, így ez az anti-ferromágneses eset, a $\varphi_J = +1$ rendszer pedig csak $J_{ij} = +1$ csatolásokból áll, tehát ez a ferromágneses eset.

A vizsgálatokat kis rendszerekre ($N = 20$) végeztem, cWPS szimulációval, $T = 0,6$ hőmérsékleten, külső tér nélkül ($h = 0$). A korrelációk eloszlását megvizsgálva azt láthatjuk, hogy az erősen negatív frusztráltságú esetben a nem korrelál a rendszer, $\phi_J = 0$ esetben egyenletes az eloszlás, magas pozitív frusztráltsági-fok mellett pedig erősen korrelálnak az elemek (4.4.6 ábra).



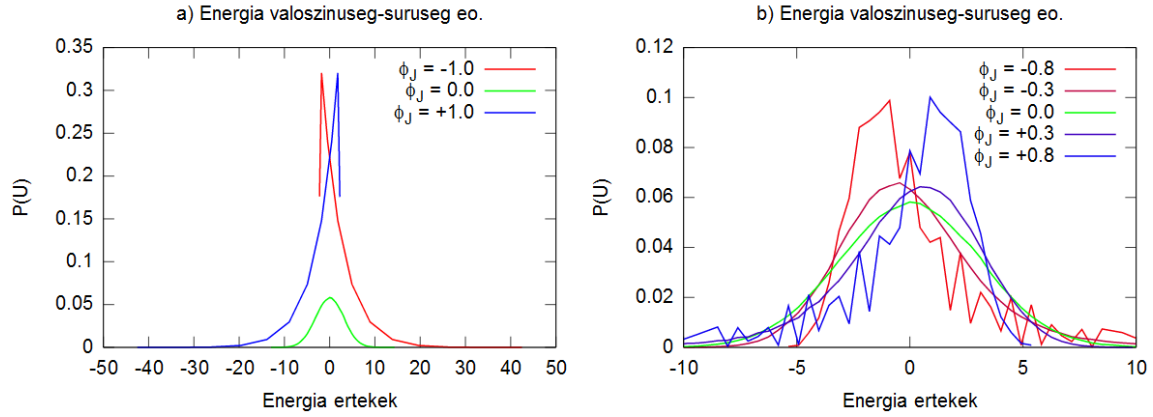
4.4.6. ábra: Korrelációk eloszlásai, különböző frusztráltsági-fokú minták esetén.
(cWPS szimulációk; $N = 20$; $T = 0,6$; $h = 0$)

További érdekesség a korrelációk eloszlásával kapcsolatban az, hogy negatív frusztráltsági-fokú tartományon az eloszlás fokozatosan szélesedik ki (alacsony ϕ_J -tól a magas felé). A pozitív tartományba lépve azonban élesen változik az eloszlás, már a gyengén pozitív frusztráltsági-fokú rendszerben is erős korrelációk lépnek fel a teljes rendszerben (4.4.7 a) ábra). $\phi_J = 0$ -nál a mágnesség eloszlásában is látható ez az éles változás: pozitív frusztráltsági-fokú rendszereknél bifurkáció lép fel (4.4.7 b) ábra).



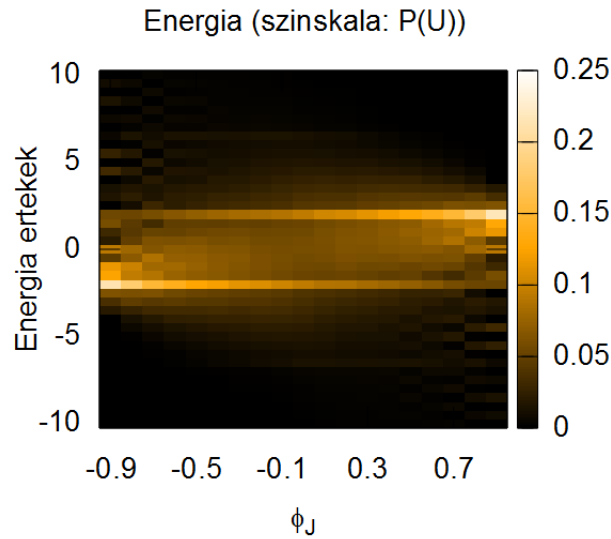
4.4.7. ábra: Korrelációk eloszlásai, különböző frusztráltsági-fokú minták esetén ϕ_J függvényében.
(cWPS szimulációk; $N = 20$; $T = 0,6$; $h = 0$)

Az állapotok energia-eloszlása is erősen eltér különböző frusztráltságú rendszerek esetén. Ezek az eloszlások azonban szimmetrikusak $\phi_J = 0$ -ra (nem úgy, mint C vagy m eloszlása). Egy $-\phi_J$ frusztráltsági-fokú rendszerhez a $+\phi_J$ frusztráltsági-fokú rendszer energia-eloszlásnak a (-1) -szerese tartozik. Erre látható pár példa a 4.4.8 ábrán.



4.4.8. ábra: Az energia eloszlása különböző frusztráltsági-fokú minták esetén.
(cWPS szimulációk; $N = 20$; $T = 0,6$; $h = 0$)

Ez az átmenet folytonosnak tekinthető ϕ_J függvényében (4.4.9 ábra).



4.4.9. ábra: Az energia eloszlása különböző frusztráltsági-fokú minták esetén ϕ_J függvényében.
(cWPS szimulációk; $N = 20$; $T = 0,6$; $h = 0$)

Ezeknek a rendszerek energiaszintjeinek a részletesebb vizsgálatával Sándor Máté Csaba foglalkozik diplomamunkájában [35].

5. További vizsgálati lehetőségek

a) Euklideszi rács

Érdekes lehet megvizsgálni a bemutatott módszerekkel a négyzetrács topológiájú rendszereket. Mivel ez az eset nem más, mint egy EA-modell, ezért a kapott eredményeket jobban össze lehetne vetni a rendelkezésre álló irodalommal. Ebben a modellben (topológiájának köszönhetően) értelmet nyer a „távolság” fogalma. A távolságot definiálhatjuk geometriailag (egy elem r sugarú környezete) és topológiailag (egy elem x -edik szomszédjai) is. Mérhető a rendszerben tehát a korrelációk távolságfüggése [11] [12]. Továbbá még érdekesebbé válik a kis perturbációkra adott válasz tovaterjedése. Ez utóbbira már léteznek olyan szimulációs eredmények, melyekből az látszik, hogy egy nagyobb rendszer egy spin rögzítésére igen érzékeny [36].

b) Véletlen gráf

Nagyobb kihívás lehet spinűvegeket véletlen topológiájú gráfokon vizsgálni a hálózat sokszínűsége miatt. Ebben az esetben a távolságfüggés mellett meg lehetne vizsgálni a jellemző mennyiségek függését a hálózat paramétereitől. Erdős-Rényi féle véletlen gráf esetén például megvizsgálható a korrelációk eloszlása az összekötési valószínűség függvényében. Barabás-Albert féle hálózatban pedig például az új elem kapcsolatainak számától való függés vizsgálható.

c) Valós hálózat

Érdekes eredménnyel szolgálhatnak valós hálózatok topológiáján alapuló szimulációk. Ma már rendelkezésünkre áll több, valós hálózatot leíró adatbázis (Web-et leíró, Internet router-szintű, pénzügyi, szociális, stb. hálózatok), melyeken érdekes méréseket lehet végezni.

d) Egyszerű sejtautomata

Bonyolultabb sejtautomata modellek felé szolgálhat első lépésként az az egyszerű spinűveg modell, melyben megtörjük a csatolások szimmetriáját: $J_{ij} \neq J_{ji}$ (7.3.1 d) ábra).

e) Az inverz probléma

Inverz probléma alatt értjük azt a kérdést, hogy lokális tulajdonságok és a korrelációk ismeretében fel lehet-e deríteni a rendszer elemei közti csatolásokat? Ezt a kérdést a legtöbb (eddig tárgyalt és említett) esetben érdekes lehet megvizsgálni, bár választ találni rá nem triviális.

6. A dolgozat összefoglalása

6.1. Összegzés

Spinűvegek számítógépes szimulációja során általában minél nagyobb rendszer létrehozására törekednek, melyet termodinamikai egyensúlyba igyekeznek hozni. Az ilyen szimulációkhoz jellemzően fejlett, bonyolult (esetleg specifikus) számítási egységek és hosszú futásidő szükséges. Igaz, az így kapott eredmények fontos információkat hordoznak, de ugyanakkor elveszhetnek részletek, mint a rendszer múltja vagy az egyedi minta fontossága.

Dolgozatomban teljes gráfokon vizsgáltam egyszerű, $J_{ij} = \pm 1$ csatolású spinűveg modellt különböző szimulációs módszerekkel (a fázistér teljes leszámlálásával és Metropolis – Monte Carlo módszerrel). Elsősorban kisebb rendszereket vizsgáltam ($N = 20$), amely tartományban a korrelációk eloszlása egyedi mintára nem szimmetrikus. A korrelációk eloszlásában a szimmetria megjelenik a mintákra vett átlagolás során (valamint kialakul egyedi mintában is a rendszer kis növelésével: $N = 128$).

Megvizsgáltam a rendszer viselkedését homogén külső tér hatása mellett egyedi mintákra és több mintára átlagolva is. Azt tapasztaltam, hogy már kis terek is lényegesen befolyásolják a rendszer viselkedését. Hasonlóképp megvizsgáltam egy spin perturbációjának hatását a rendszerre, mely a topológia miatt közvetlen kihat az egész rendszerre, mint a külső tér. Az eredményeken látszik, hogy a rendszer hasonlóképp reagál például egy spin megfogására, mint egy gyengébb, homogén, külső tér jelenlétére.

Végül megvizsgáltam a rendszer frusztráltságának fontosságát. Egyedi mintán vizsgálva és frusztrált minták felett átlagolva is az derült ki, hogy a frusztráltabb rendszer kevésbé reagál a gyengébb külső tér hatására alacsony hőmérsékleten. Továbbá több, különböző frusztráltságú, egyedi mintán néztem a különböző mennyiségek eloszlásának változását. Az eredmények azt mutatják, hogy negatív frusztráltsági-fokú rendszerek lényegesen eltérően viselkednek, mint a pozitív frusztráltsági-fokúak, és jellemzően a zérus frusztráltsági-fokkal rendelkező rendszerek (amilyen a legtöbb minta) viselkednek a „megszokott” módon.

6.2. Summary

In the computer simulations of spin glasses the aim is to create as large systems as possible, which can be brought to thermodynamic equilibrium. These simulations usually need advanced (sometimes specific) hardware and software, and long runtimes. The results of these simulations carry important information about the system, but some details can be lost, such as the past of the system or the importance of individual samples.

In my work, I studied spin glasses on a complete graph (with $J_{ij} = \pm 1$ random coupling) with two main methods: counting the whole phase space and Metropolis – Monte Carlo method. Mainly, I studied smaller systems ($N = 20$), where the distribution of the correlations is usually not symmetric for individual samples. The symmetry in the correlations occurs when we average them over the samples. (It also occurs in larger systems: $N = 128$.)

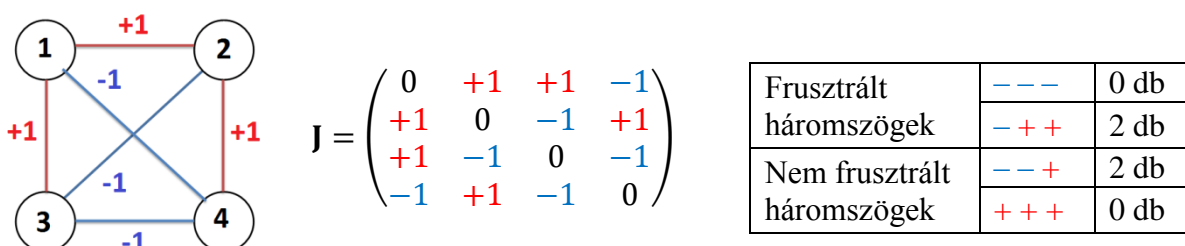
I have run spin glass simulations containing homogenous magnetic field for individual samples, which I later averaged over the samples. The results show that even a smaller magnetic field can change the behavior of the system. Likewise, I studied how one spin's perturbation affects the whole system. Due to the topology, one spin's behavior directly affects all the other spins, like a magnetic field. I found that the system responds almost the same for fixing the orientation of a single spin as for the presence of a smaller magnetic field.

In the end, I studied the importance of the degree of frustration. On an individual sample and averaged over frustrated samples also I found that a system with a lower degree of frustration ("frustrated system") shows weaker response to the presence of a smaller magnetic field. I also found that systems with a negative degree of frustration show strongly different behavior from systems with a positive degree of frustration. It seems that systems with zero degree of frustration behave "regularly": the degrees of frustration of random sampled systems are mostly zero.

7. Mellékletek

7.1. 'A' melléklet: Aszimmetria a korrelációban (példa)

Egy egyszerű példával szeretném szemléltetni a korrelációk eloszlásának „jóslathatatlanságát”: tekintsünk példaképp egy kicsi rendszert, melyben minden elem kölcsönhat az összes többivel. A hálózatot úgy választottam meg, hogy a legtöbb tulajdonsága szimmetrikus legyen: páros elemszám ($N=4$), a pozitív és negatív csatolások száma megegyezik, a frusztrált és nem-frusztrált háromszögek száma szintén megegyezik, a rendszer frusztráltsági-foka 0 ($\varphi_J = 0$).



7.1.1. ábra: A vizsgált rendszer: bal oldalt látható gráf reprezentációban, mellette (középen) a hozzá tartozó kapcsolati mátrix, jobbra pedig a frusztrált és nem-frusztrált háromszögek darabszáma.

Számoljuk ki a rendszer korrelációs mátrixát, és az ehhez tartozó eloszlást $T = 0,6$ hőmérsékleten, $k_B = 1$ egységrendszerben ($\beta = \frac{1}{k_B T} = \frac{1}{0,6} = \frac{5}{3}$). A 3.1 fejezetben leírt egyenleteket felhasználva felírható a teljes állapotter:

Az állapotter:								s _i s _j szorzatok értékei					
(st)	s ₁	s ₂	s ₃	s ₄	$\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j$	$\sqrt{N} \cdot U$	$e^{-\beta U^{(st)}}$	s ₁ s ₂	s ₁ s ₃	s ₁ s ₄	s ₂ s ₃	s ₂ s ₄	s ₃ s ₄
1	-1	-1	-1	-1	0	0	1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
2	+1	-1	-1	-1	-2	1	0,189	-1	-1	-1	+1	+1	+1
3	-1	+1	-1	-1	-2	1	0,189	-1	+1	+1	-1	-1	+1
4	+1	+1	-1	-1	0	0	1	+1	-1	-1	-1	-1	+1
5	-1	-1	+1	-1	2	-1	5,294	+1	-1	+1	-1	+1	-1
6	+1	-1	+1	-1	4	-2	28,032	-1	+1	-1	-1	+1	-1
7	-1	+1	+1	-1	-4	2	0,036	-1	-1	+1	+1	-1	-1
8	+1	+1	+1	-1	2	-1	5,294	+1	+1	-1	+1	-1	-1
9	-1	-1	-1	+1	2	-1	5,294	+1	+1	-1	+1	-1	-1
10	+1	-1	-1	+1	-4	2	0,036	-1	-1	+1	+1	-1	-1
11	-1	+1	-1	+1	4	-2	28,032	-1	+1	-1	-1	+1	-1
12	+1	+1	-1	+1	2	-1	5,294	+1	-1	+1	-1	+1	-1
13	-1	-1	+1	+1	0	0	1	+1	-1	-1	-1	-1	+1
14	+1	-1	+1	+1	-2	1	0,189	-1	+1	+1	-1	-1	+1
15	-1	+1	+1	+1	-2	1	0,189	-1	-1	-1	+1	+1	+1
16	+1	+1	+1	+1	0	0	1	+1	+1	+1	+1	+1	+1

A fenti táblázat alapján az állapotösszeg:

$$Z = \sum_{st} e^{-\beta U^{(st)}} = 82,068$$

Kiszámolhatók a korrelációs mátrix elemei, ahol kihasználjuk az állapottér szimmetriáját:

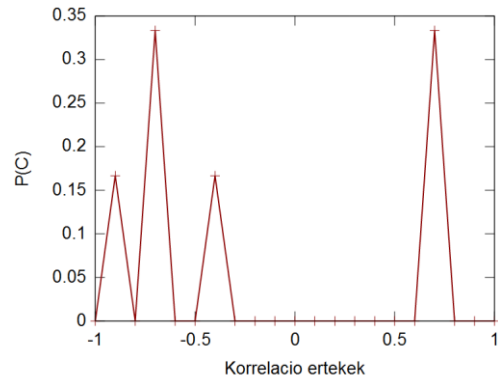
$$C_{ij} = \langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{st=1}^{16} s_i s_j e^{-\beta U^{(st)}} = \frac{2}{Z} \sum_{st=1}^8 s_i s_j e^{-\beta U^{(st)}}$$

Kiszámolva minden elemre, a korrelációs mátrix:

$$C = \begin{pmatrix} 0 & -0,386 & +0,682 & -0,682 \\ -0,386 & 0 & -0,682 & +0,682 \\ +0,682 & -0,682 & 0 & -0,884 \\ -0,682 & +0,682 & -0,884 & 0 \end{pmatrix}$$

Ahogy a 7.2.1 ábrán is látható, a korrelációk eloszlása aszimmetrikus. Annak ellenére, hogy a rendszer sok szimmetriát mutat, a benne fellépő korrelációk nem feltétlenül mutatják ezt a képet.

A szimmetria viszonylag gyorsan kialakul a rendszer növelésével (4.1.4 ábra), valamint a mintákra vett átlagolás következtében (4.2 fejezet).

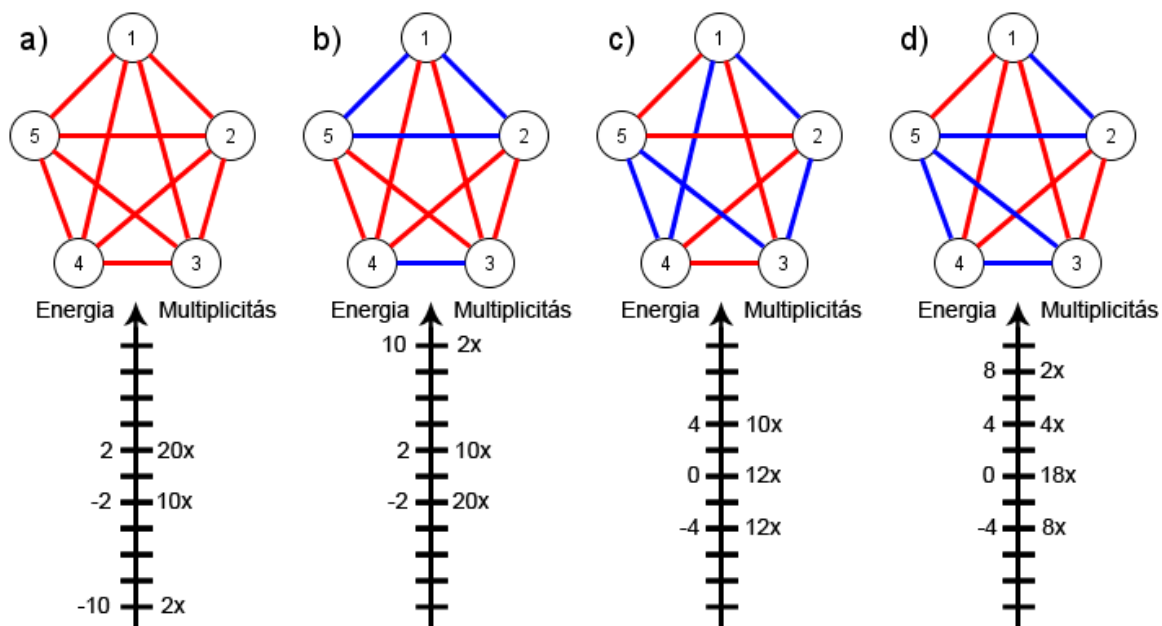


7.1.2. ábra: A korrelációs mátrix alapján felrajzolt valószínűségi eloszlás.

7.2. 'B' melléklet: A frusztráltság hatása az energia szintekre (példa)

A spinűveg rendszerekben fellépő frusztráltságok erősen befolyásolják az energiaszintek alakulását. A következő két egyszerű példán egy kis ($N=5$), teljesen összekötött rendszerben ez a tulajdonság jól láthatóvá válik.

Először vizsgáljuk meg a legegyszerűbb esetet: amikor nincs frusztráció a rendszerben, minden csatolás ferromágneses. Vessük ezt össze egy olyan esettel, amikor a rendszerben minden háromszög frusztrált ($\phi_J = -1$). Ha a 3.1 fejezet egyenletei alapján kiszámoljuk az energiákat, akkor láthatjuk, hogy a frusztrált esetben jelentősen megnőtt az alapállapotok száma (7.2.1 a) és b) ábrák).

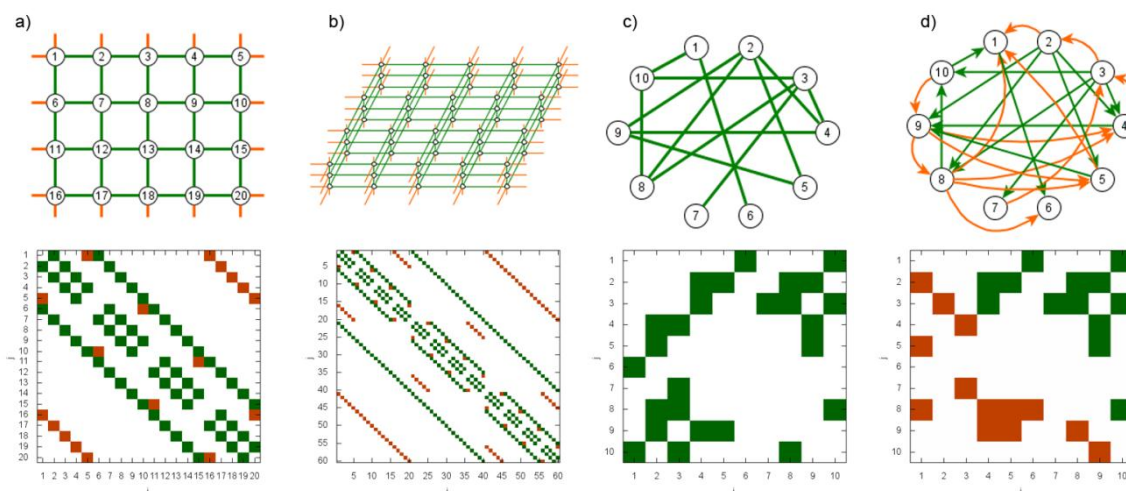


7.2.1. ábra: Teljesen összekapcsolt rendszerek, különböző csatolásokkal és a hozzájuk tartozó energiaszintek. (Az energiák nincsenek normálva a könnyebb áttekinthetőség végett.) a) Ferromágneses eset, nincsenek frusztrált háromszögek. b) Erősen frusztrált eset, minden háromszög frusztrált ($\phi_J = -1$). c) A ferro- és antiferromágneses csatolások, valamint a frusztrált és nem-frusztrált háromszögek száma megegyezik ($\phi_J = 0$). d) A ferro- és antiferromágneses csatolások száma megegyezik, viszont a háromszögek között több a frusztrált, mint a nem-frusztrált ($\phi_J = -0,4$).

A második példában azt láthatjuk, hogy a frusztrált háromszögek számát nem határozza meg egyértelműen az antiferromágneses csatolások száma. Az előbbiekhöz hasonlóan számoljuk ki két rendszer állapot-energiáit. Most úgy választom meg a két rendszert, hogy mindkettőben ugyanannyi legyen a ferromágneses és antiferromágneses kapcsolatok száma, melyeket sokféleképp ki lehet osztani. Az egyik esetben (7.2.1 c) ábra) ugyanannyi frusztrált háromszög van, mint nem-frusztrált, a másik eseten pedig (7.2.1 d) ábra) a frusztrált háromszögek száma a túlnyomó. Látható, hogy az energiaszerkezet eltér: a frusztráltabb rendszerben az alacsonyabb energiák (összességükben) degeneráltabbak, továbbá megjelenik magasabb energiaszint is, hasonlóan, mint az első példában.

7.3. 'C' melléklet: Csatolási mátrixok

Gráfokkal való munka folyamán szemléletes és célravezető a hálózat összekötöttségét kapcsolási (vagy szomszédsági) mátrixszal leírni. Ennek a mátrixnak az i -edik sorának j -edik eleme adja meg az i -edik és j -edik elem közti kapcsolatot és annak súlyát. Ezek a mátrixok kétdimenziósak, jól áttekinthetőek, míg két elem között legfeljebb két kapcsolat van (hurok pedig legfeljebb egy elemenként). A teljesen összekötött gráfra a 3.1.1 ábrán látható egy példa (különböző súlyú csatolással), de minden más gráfnak is létezik mátrix-reprezentációja, melyeket kis rendszer esetén könnyen fel lehet írni. Nagyobb gráfnál pedig ki lehet használni az esetleges szimmetriákat, mint a különböző rácsok esetén. Ha a gráf egyszerű, akkor a kapcsolati mátrixnak csak a fele hordoz információt. Viszont tekinthetjük szimmetrikus mátrixként is, melyben jól láthatóak egy elem kapcsolatai: az i -edik sorban az i -edik elem összes kapcsolata megtalálható. Ezt a szerkezetet kihasználva használhatjuk egyszerűbb irányított gráfok reprezentációjára is: a mátrix egyik fele az $(i \rightarrow j)$, a másik fele pedig a $(j \rightarrow i)$ kapcsolatokat írja le (7.3.1 d) ábra).



7.3.1. ábra: Különböző típusú gráfok, és azok kapcsolati mátrixai. Az a) és b) ábrán két és háromdimenziós rácsok látható. (A zöld színű kapcsolatok a nyílt peremfeltételű rácsok, a zöld és sárga színű kapcsolatok együtt pedig a ciklikus peremfeltételű rácsot mutatják). A c) és d) ábrán egy egyszerű és egy irányított Erdős-Rényi félé véletlen gráf látható ($p = 0.3$ összekötési valószínűséggel).

Meg kell jegyezni, hogy kódolás szempontjából helytakarékosabb megoldás, ha ritka mátrixok esetén nem tároljuk a teljes kapcsolati mátrixot. Ehelyett csak a meglévő kapcsolatokat tároljuk, például egy lista formájában.

7.4. 'D' melléklet: Boole változók alkalmazása

Egyszerű, $[-1,0,+1]$ számokból álló műveletek általában a Boole-algebra segítségével átírhatóak logikai műveletekké. Ilyen műveletek fordulnak elő nagyrészt a 3.1 fejezetben a spinűveg rendszer energiájának számítása kapcsán. Ilyen esetekben érdemes lehet átírni az egyenleteket, mivel a logikai műveletek számításához kevesebb idő szükséges. Az alábbi három táblázatban látni lépésről-lépésre, hogy a (3.2) egyenletben található hármas szorzatot a XOR (^) logikai művelettel hogyan lehet helyettesíteni. A *hamis* (H) mindig megfeleltethető a -1, az *igaz* (I) pedig a +1 értéknek.

XOR művelet

A_b	B_b	$A_b \wedge B_b$
H	H	H
I	H	I
H	I	I
I	I	H

Szorzat átírás XOR-ral és negálással

A_b	B_b	$\neg(A_b \wedge B_b)$	$A * B$	A	B
H	H	I	+1	-1	-1
I	H	H	-1	-1	+1
H	I	H	-1	+1	-1
I	I	I	+1	+1	+1

Hármas szorzat átírása XOR művelettel

A_b	B_b	C_b	$A_b \wedge (B_b \wedge C_b)$	$A * (B * C)$	A	B	C
H	H	H	H	-1	-1	-1	-1
I	H	H	I	+1	+1	-1	-1
H	I	H	I	+1	-1	+1	-1
I	I	H	H	-1	+1	+1	-1
H	H	I	I	+1	-1	-1	+1
I	H	I	H	-1	+1	-1	+1
H	I	I	H	-1	-1	+1	+1
I	I	I	I	+1	+1	+1	+1

A (-1)-gyel való szorzás is könnyen átírható ilyen esetben logikai műveletté:

Negálás

A_b	I_b	$A_b \wedge I_b$	$-1 * A$	A	-1
H	I	I	+1	-1	-1
I	I	H	-1	+1	-1

Mivel a használt kapcsolati-mátrixok is csak $[-1,0,+1]$ értékekből épülnek fel, ezért érdemes volt ezeket is inkább kettő, de Boole-típusú mátrixként tárolni a program futása közben. Az egyik mátrix tárolja a kapcsolat meglétét:

$$J_{ij}^{(\exists)} = \begin{cases} igaz, & \text{ha van kapcsolat} \\ hamis, & \text{ha nincs} \end{cases}$$

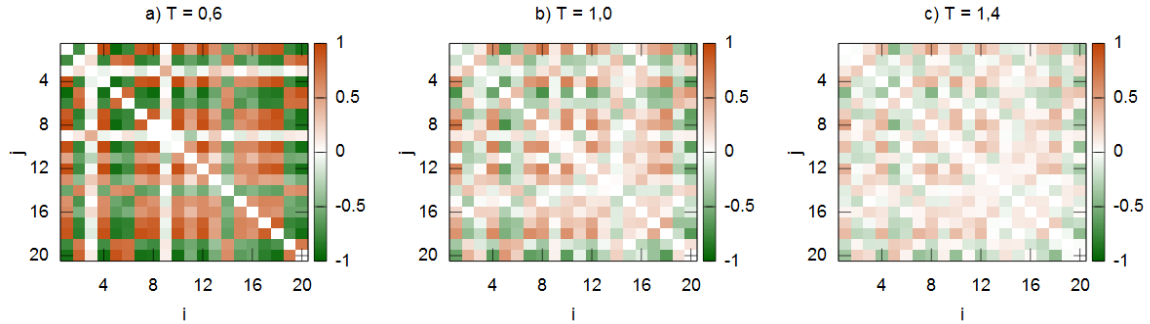
A másik pedig a kapcsolat fajtáját adja vissza:

$$J_{ij}^{(\pm)} = \begin{cases} igaz, & \text{ha } +1 \text{ a csatolás} \\ hamis, & \text{ha } -1 \end{cases}$$

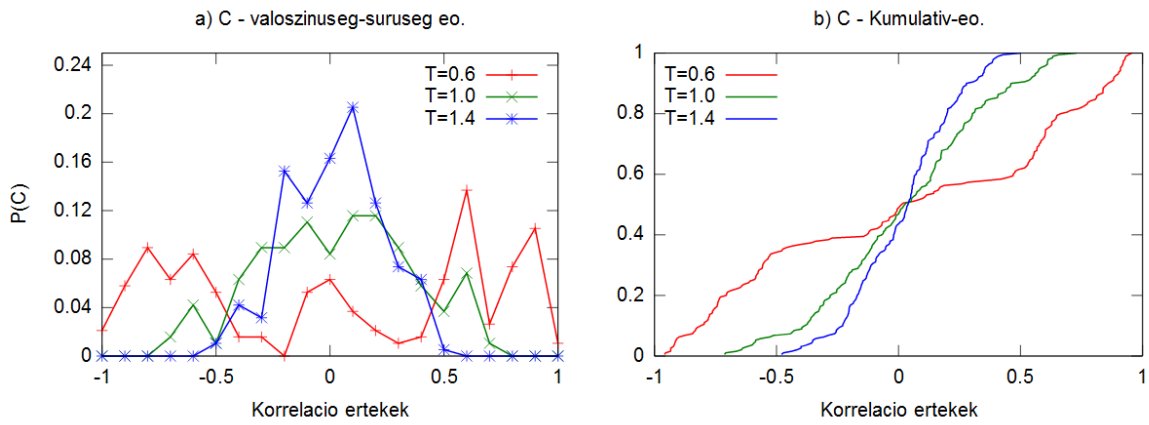
Az utóbbi akkor is hamis, ha nincs kapcsolat. Így adják ki együtt az eredeti kapcsolati mátrixot.

7.5. 'E' melléklet: Eredmények egy véletlen választott mintára

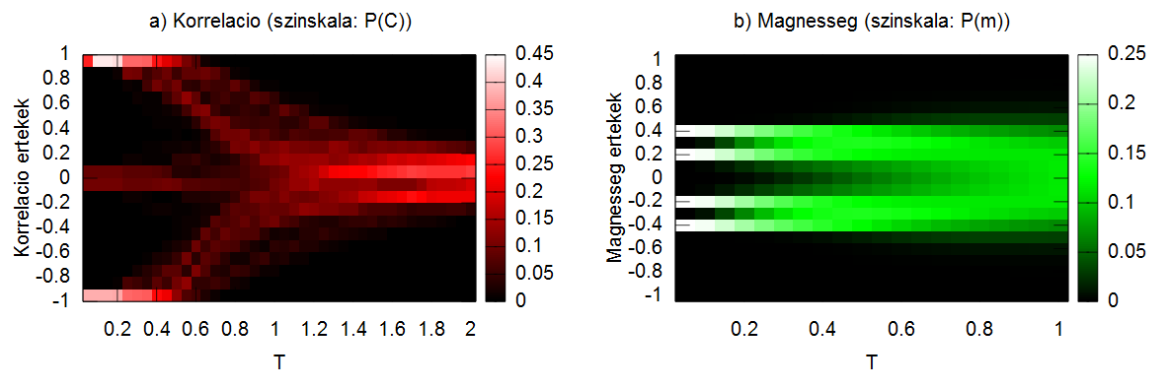
A következő képek a 4.1 fejezetben látottakhoz hasonlóan egy véletlen választott rendszer³ szimulációs eredményeit mutatják ($\varphi_J = 0$).



7.5.1. ábra: Korrelációs mátrixok (C_{ij}) különböző hőmérsékleteken.

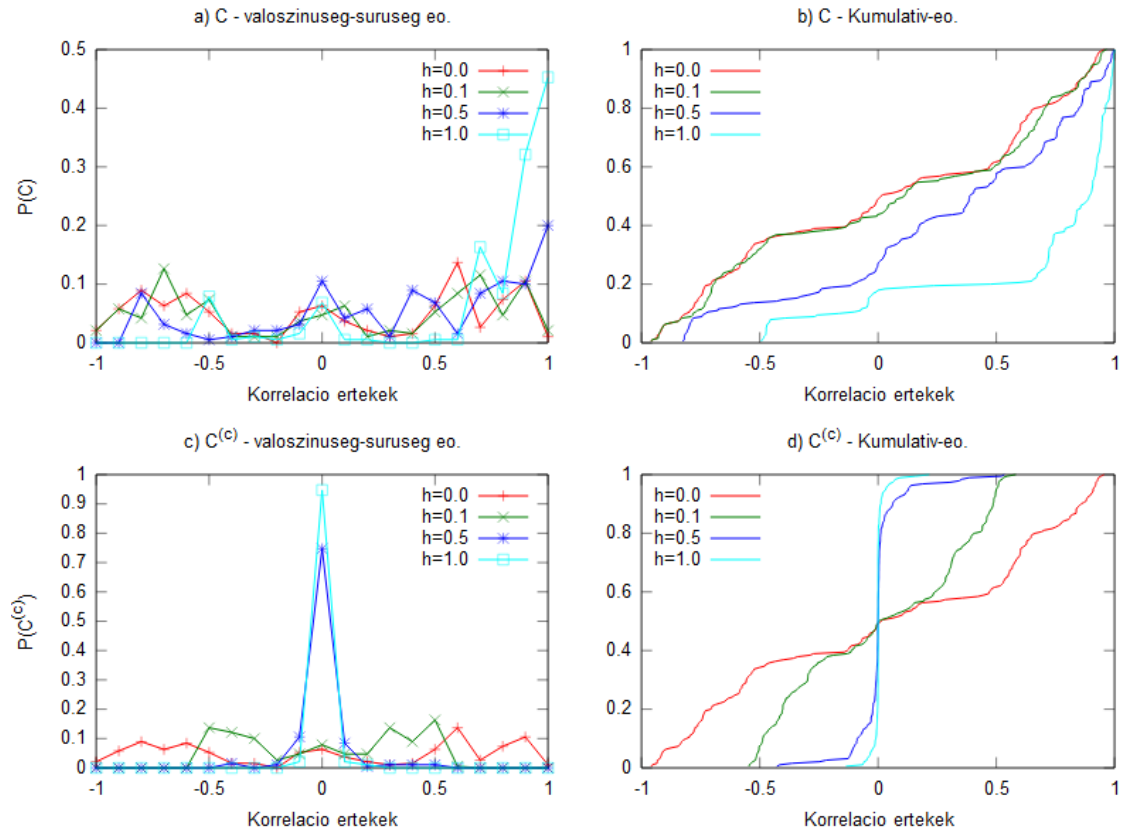


7.5.2. ábra: A korrelációk eloszlásának alakulása a kritikus pont körül ($h = 0$).

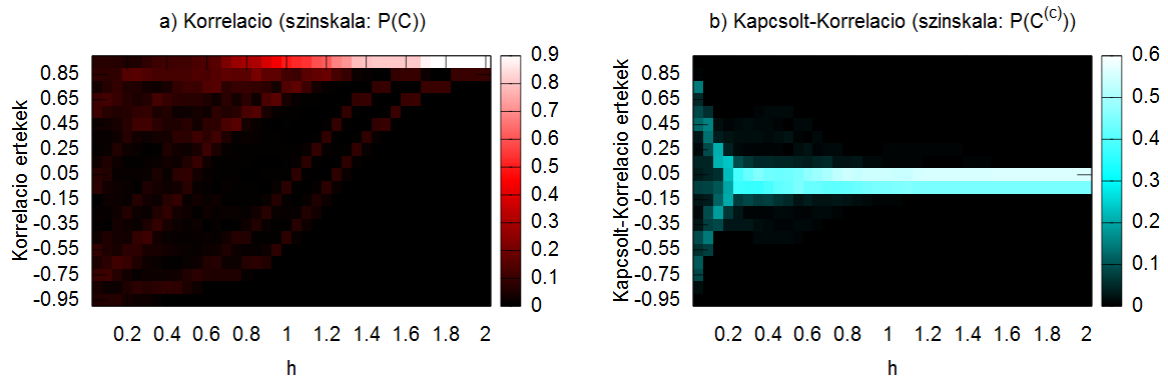


7.5.3. ábra: Az a) ábrán a korrelációk eloszlása látható, a b) ábrán pedig a mágnességek eloszlása a hőmérséklet függvényében ($h = 0$).

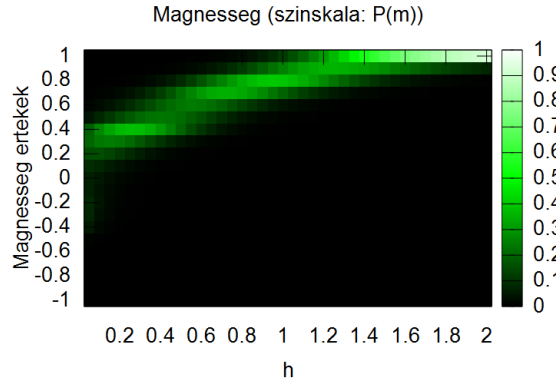
³ A vizsgált rendszer kapcsolati mátrixa megtalálható a csatolt adathordozón [J_N20_0.0_02.dat] néven.



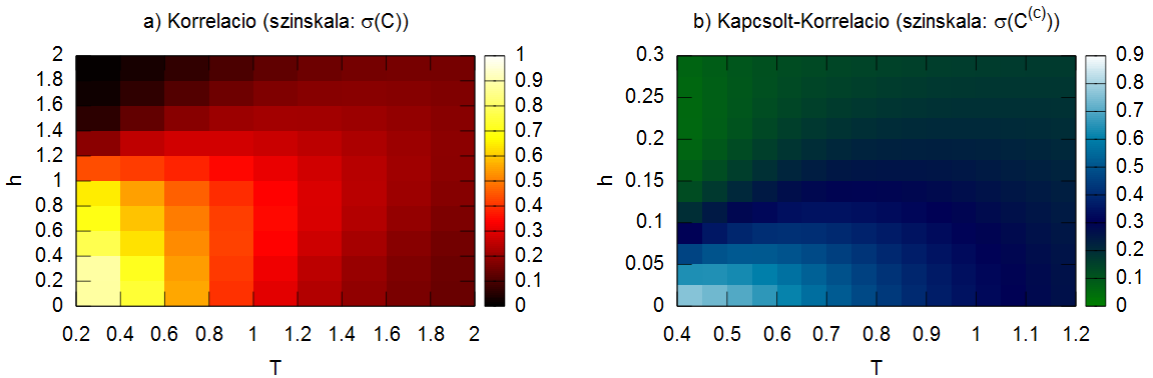
7.5.4. ábra: Korrelációk és kapcsolt-korrelációk eloszlásai különböző nagyságú külső tér jelenlétében. ($T=0,6$)



7.5.5. ábra: Korreláció (a) és kapcsolt-korreláció (b) eloszlások a külső tér függvényében. (cWPS, $N = 20$, $\varphi_J = 0$, $T = 0,6$)



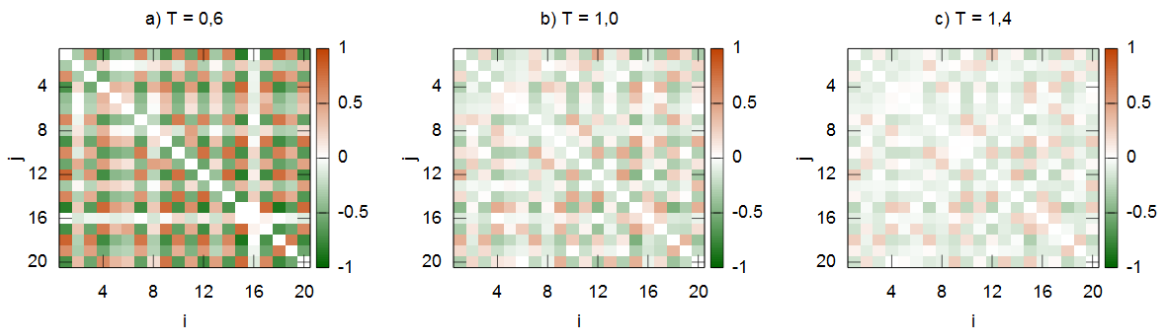
7.5.6. ábra: A mágnesség eloszlásának változása a külső tér függvényében. (cWPS, $N = 20$, $\varphi_I = 0$, $T = 0,6$)



7.5.7. ábra: Korrelációs és kapcsolt-korrelációs értékek szórása (T-h) értékek terében.

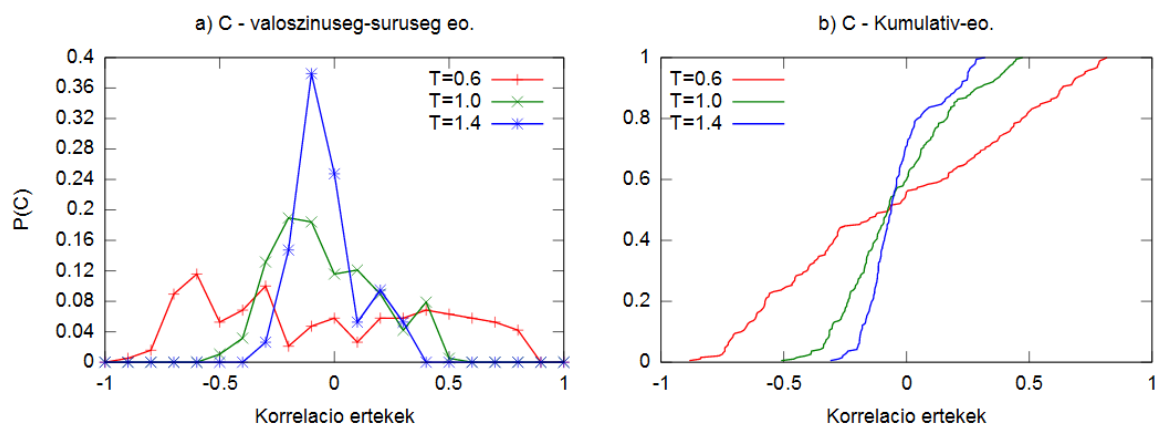
7.6. 'F' melléklet: Eredmények egy frusztrált mintára

A következő képek a 4.1 fejezetben és az 'E' mellékletbe látottakhoz hasonlóan egy véletlen választott, de frusztrált rendszer⁴ szimulációs eredményeit mutatják. Ennek a rendszernek a frusztráltsági-foka: $\varphi_I = -0,3$.

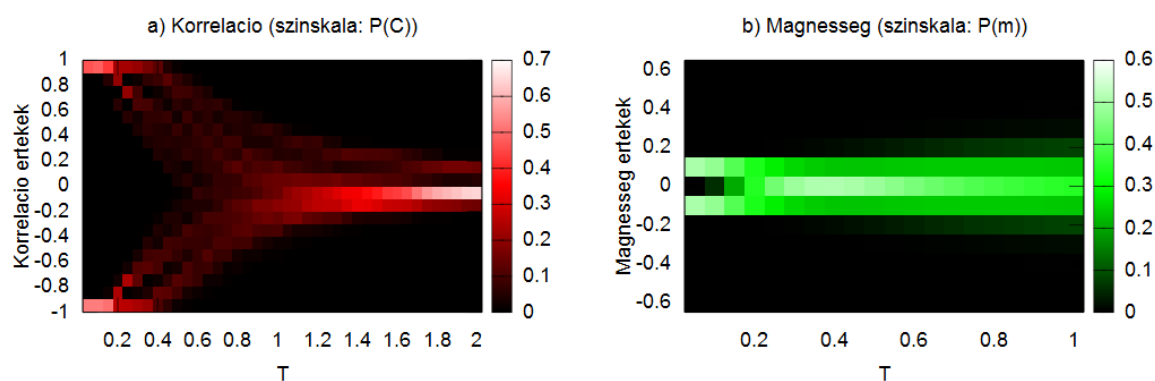


7.6.1. ábra: Korrelációs mátrixok (C_{ij}) különböző hőmérsékleteken.

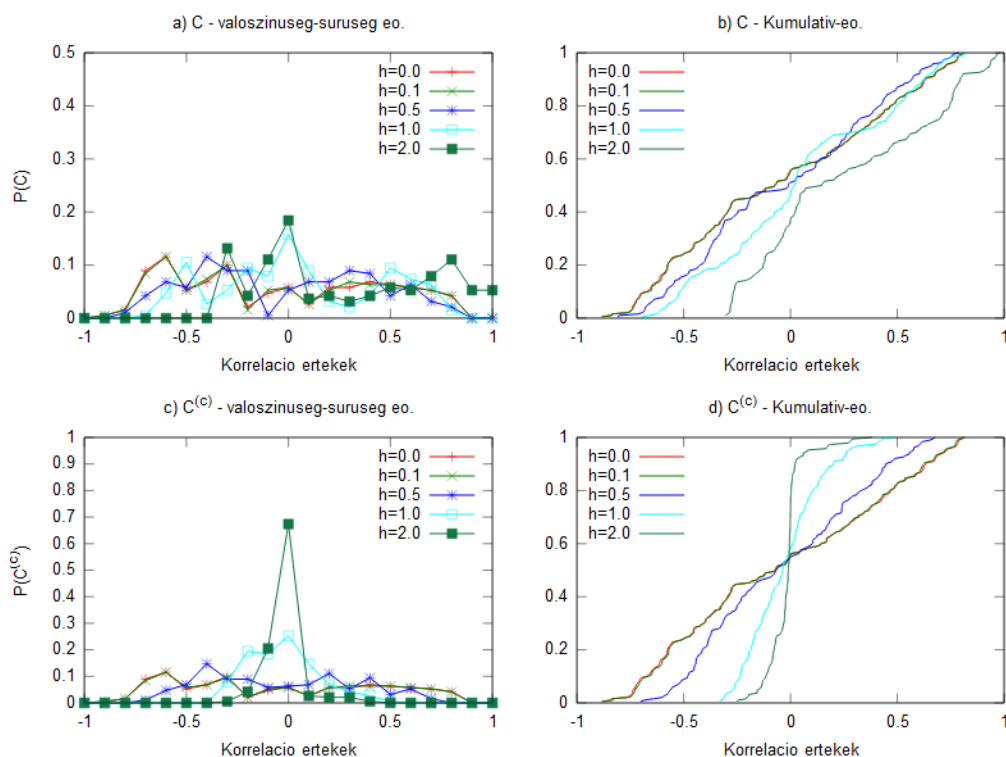
⁴ A vizsgált rendszer kapcsolati mátrixa megtalálható a csatolt adathordozón [J_N20_-0.3_01.dat] néven.



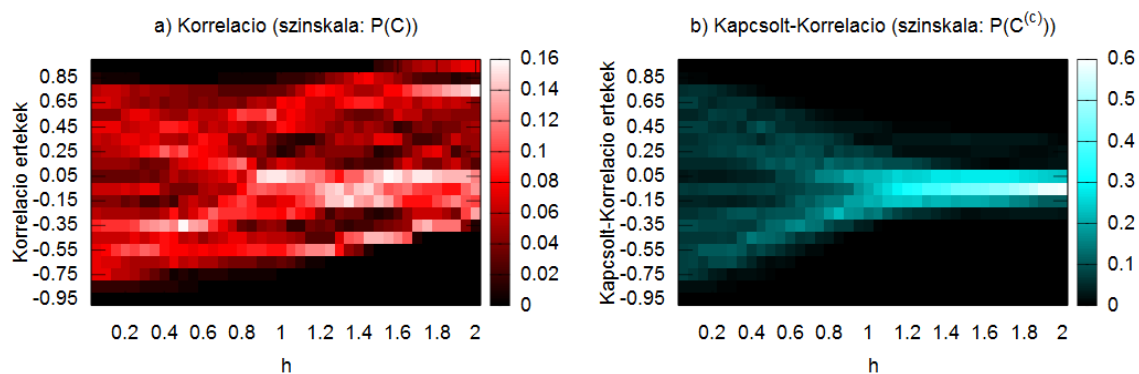
7.6.2. ábra: A korrelációk eloszlásának alakulása a kritikus pont körül ($h = 0$).



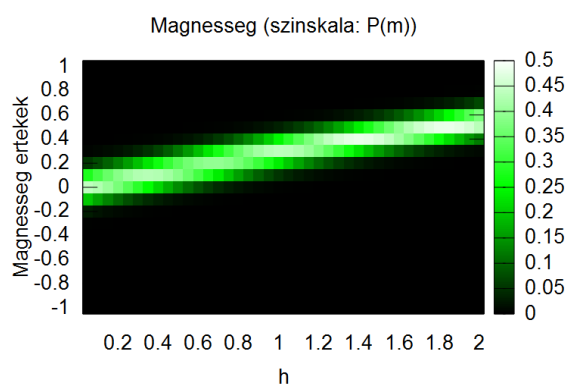
7.6.3. ábra: Az a) ábrán a korrelációk eloszlása látható, a b) ábrán pedig a mágnességek eloszlása a hőmérséklet függvényében ($h = 0$).



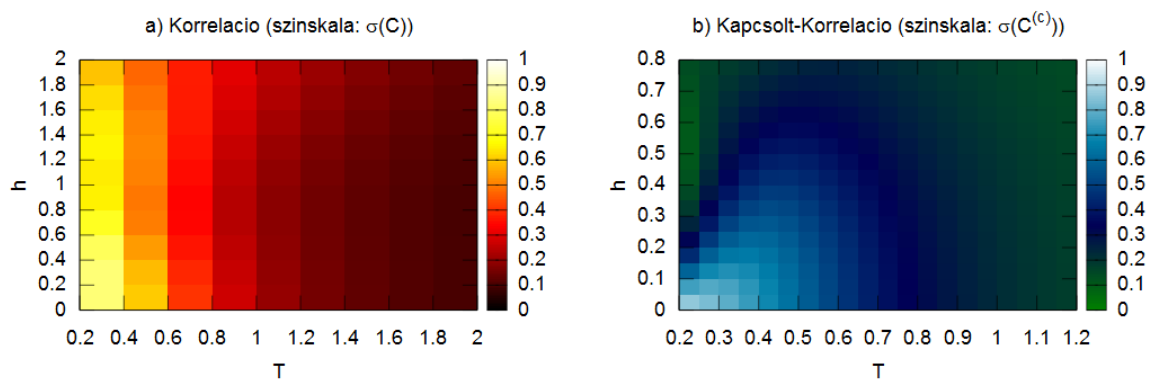
7.6.4. ábra: Korrelációk és kapcsolt-korrelációk eloszlásai különböző nagyságú külső tér jelenlétében. ($T=0,6$)



7.6.5. ábra: Korreláció (a) és kapcsolt-korreláció (b) eloszlások a külső tér függvényében. (cWPS, $N = 20$, $\varphi_J = -0,3$; $T = 0,6$)



7.6.6. ábra: A mágnesség eloszlásának változása a külső tér függvényében. (cWPS, $\varphi_J = -0,3$; $T = 0,6$)



7.6.7. ábra: Korrelációs és kapcsolt-korrelációs értékek szórása (T - h) értékek terében.

8. Irodalomjegyzék

- [1] Csépe Valéria, Győri Miklós, Ragó Anett: **Általános pszichológia 3. (165. o.)**, *OSIRIS*, 2008.
- [2] Romualdo Pastor-Satorras, Alessandro Vespignani: **Evolution and Structure of the Internet**, *Cambridge University Press*, 2007.
- [3] Stanley Milgram: **The Small-World Problem**, *Psychology Today*, Vol. 2, 60–67, 1967.
- [4] Karinthy Frigyes: **Láncszemek**, 1929.
- [5] Erdős Pál, Rényi Alfréd: **On Random Graphs I.**, *Publ. Math. Debrecen* 6, 290–297, 1959.
- [6] Albert Réka Barabási Albert-László: **Emergence of scaling in random networks**, *Science* 286 (5439): 509–512, 1999.
- [7] John J. Hopfield: **Neural networks and physical systems with emergent collective**, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA*, vol. 79 no. 8, 2554–2558, 1982.
- [8] Andrei Broder, Ravi Kumar, Farzin Maghoul, Prabhakar Raghavan, Sridhar Rajagopalan, Raymie Stata, Andrew Tomkins, Janet Wiener: **Graph structure in the Web**, *Computer Networks*, 33, 309–320, 2000.
- [9] Stefania Vitali, James B. Glattfelder, Stefano Battiston: **The network of global corporate control**, *PLoS ONE* 6(10), e25995, 2011.
- [10] Romualdo Pastor-Satorras, Alessandro Vespignani: **Epidemic dynamics and endemic states in complex networks**, *Phys. Rev. E* 63, 066117, 2001.
- [11] Kondor Imre: **Correlations in Complex Systems** ETH Zurich, *International Workshop on Challenges and Visions in the Social Sciences (contributed talk)*, 2008. aug. 18–23.
- [12] Mones Enys: **Korrelációk komplex rendszerekben - BSc szakdolgozat**, 2010.
- [13] Sergei Maslov, Kim Sneppen, Alexei Zaliznyak: **Detection of topological patterns in complex networks: correlation profile of the internet**, *Physica A* 333, 529–540, 2004.
- [14] J.-P. Onnela, K. Kaski, J. Kertész: **Clustering and information in correlation based financial networks**, *THE EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL B*, Volume 38, no. 2, 353–362, 2004.
- [15] K. Binder, A. P. Young: **Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions**, *Rev. Mod. Phys.*, 58, 801–976, 1986.
- [16] Shoichi Nagata, P. H. Keesom, H. R. Harrison: **Low-dc-field susceptibility of CuMn spin glass**, *Phys. Rev. B*, 19, 1633–1638, 1979.
- [17] V. Cannella, J. A. Mydosh: **Magnetic Ordering in Gold-Iron Alloys**, *Phys. Rev. B*, 6, 4220–4237, 1972.
- [18] V. Dupuis, F. Bert, J. P. Bouchaud, J. Hammann, F. Ladieu, D. Parker, E. Vincent: **Aging, rejuvenation and memory phenomena in spin glasses**, *Pramana - journal of physics*, 64, no. 6, 1109–1119, 2005.
- [19] Tasnádi Péter, Skrapits Lajos, Bérces György, Litz József: **Általános fizika I. 2.153. §** Pécs-Budapest, *Dialóg Campus*, 2001.
- [20] S. F. Edwards, P. W. Anderson: **Theory of spin glasses**, *Journal of Physics F: Metal Physics*, 5, 965, 1975.
- [21] David Sherrington, Scott Kirkpatrick: **Solvable Model of a Spin-Glass**, *Phys. Rev. Lett.*, 35, 1792–1796, 1975.
- [22] J. R. L. de Almeida, D. J. Thouless: **Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model**, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 11, 983, 1978.
- [23] G. Parisi: **Toward a mean field theory for spin glasses**, *Physics Letters A*, 73, 203–205, 1979.

- [24] Michel Talagrand: **The generalized Parisi formula**, *Comptes Rendus Mathematique*, 337, no. 2, 111–114, 2003.
- [25] Francesco Guerra: **Broken Replica Symmetry Bounds in the Mean Field Spin Glass Model**, *Communications in Mathematical Physics*, 233, no. 1, 1-12, 2003.
- [26] Makoto Matsumoto , Takuji Nishimura. <http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/~m-mat/MT/emt.html>.
- [27] H.L. Anderson: **Metropolis, Monte Carlo and the MANIAC**, *Los Alamos Science*, 14, 96–108, 1986.
- [28] Werner Krauth: **Introduction To Monte Carlo Algorithms**, in 'Advances in Computer Simulation' J. Kertész and I. Kondor, eds, *Lecture Notes in Physics (Springer Verlag)*, 1996.
- [29] Hidetoshi Nishimori: **Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing (An Introduction)** Oxford, Clarendon Press , 2001.
- [30] Lars Onsager: **Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition**, *Phys. Rev.*, 65, 117–149, 1944.
- [31] H. A. Kramers , G. H. Wannier: **Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I**, *Phys. Rev.*, 60, 252–262, 1941.
- [32] Alain Billoire, Imre Kondor, Jovanka Lukic, Enzo Marinari: **Large random correlations in individual mean field spin glass samples**, *J. Stat. Mech.* P02009, 2011.
- [33] A. P. Young , Helmut G. Katzgraber: **Absence of an Almeida-Thouless Line in Three-Dimensional Spin Glasses**, *Phys. Rev. Lett.*, 93, 207203, 2004.
- [34] Alain Billoire , Barbara Coluzzi: **Magnetic field chaos in the Sherrington-Kirkpatrick model**, *Phys. Rev. E*, 67, 036108, 2003.
- [35] Sándor Máté Csaba: **Kis méretű komplex rendszerek szimulációs vizsgálata spinűveg modelleken** Budapest, ELTE, 2012.
- [36] Csabai István: **Eddig publikálatlan eredmények, egy (GPU-n futtatott) szimulációból.**

9. Ábrajegyzék

- 1.1.1 *ábra*: Az adatokat a Kakadu Works! gyűjtötte és ábrázolta.
- 1.1.3 *ábra*: Az ábrát [8]-as cikkből és [2]-es könyvből vettem át.
- 2.1.1 *ábra*: Az ábrát a K. Binder, (1977.) Festkörper Probleme 17, 55 cikkből vettem át.
- 2.1.2 *ábra*: <http://www.anl.gov/articles/argonne-scientists-discover-new-class-glassy-material>
- 2.1.3 *ábra*: Az a) ábrát a [16]-os, a b) ábrát a [18]-as cikkből vettem át.

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Kondor Imrének, hogy szakértelmével, tanácsaival segítette munkámat; valamint hogy az előadások és beszélgetések során mélyebb betekintést nyerhettem a spinüvegek lelkivilágába.

Szeretném megköszönni Csabai Istvánnak és Papp Gábornak a komplex rendszerek elméletében és a szimulációs módszerekben nyújtott javaslatokat és segítségeket.

Köszönettel tartozom Sándor Máté Csabának a FOC II (Forecasting Financial Crises) projekt keretén belül végzett közös munkájáért; valamint Mones Enysnek, hogy korábbi munkájával segítette kutatásunkat.

Végül, de nem utolsó sorban szeretném megköszönni családomnak és páromnak, hogy bátorítottak és támogattak munkám során; továbbá páromnak külön, hogy segített színesebbé tenni a diplomamunkám.

Nyilatkozat

Név: Czimbalmos Gábor

ELTE Természettudományi Kar, szak: Fizika MSc

ETR azonosító: CZGOAAT.ELTE

Diplomamunka címe: Korrelációk vizsgálata spinűvegeken homogén és inhomogén külső tér mellett szimulációs módszerekkel

A **diplomamunka** szerzőjeként fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem, hogy a dolgozatom önálló munkám eredménye, saját szellemi termékem, abban a hivatkozások és idézések standard szabályait következetesen alkalmaztam, mások által írt részeket a megfelelő idézés nélkül nem használtam fel.

Budapest, 2012. 05. 31.

a hallgató aláírása