

Python. Модель Изинга, алгоритм Метрополиса. (25 баллов)

Ферромагнетики могут состоять из доменов конечного размера, в которых спины атомов имеют одинаковое направление (по-другому говорят, что существует дальний порядок магнитных моментов атомов). Если к такому материалу приложить магнитное поле, разные домены перестраиваются, и материал становится намагниченным. При повышении температуры намагниченность уменьшается, а при прохождении точки Кюри система испытывает фазовый переход, при котором намагниченность пропадает. Ваша задача — смоделировать поведение ферромагнетиков и найти температуру Кюри.

1 Введение

В качестве модели ферромагнетика можно рассмотреть линейную цепочку или прямоугольную решетку из N фиксированных в пространстве частиц, а спины которых (проекции спинов на ось z) могут принимать два значения:

$$s_i = s_{z,i} = \pm \frac{1}{2}. \quad (1)$$

Тогда состояние цепочки из N частиц будет описываться вектором¹

$$|\alpha\rangle = |s_1, s_2, \dots, s_N\rangle = \left\{ \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}, \dots, \pm \frac{1}{2} \right\}. \quad (2)$$

Всего возможно 2^N состояний, и для достаточно больших N это число велико, например, для $N = 20$ число состояний $2^{20} > 10^6$, что уже не так просто смоделировать “в лоб”, а для реалистичных случаев с числом состояний $\sim 10^{23}$ это вообще невозможно, поэтому для моделирования используется статистический подход, причем даже для небольших N . Отдельный вопрос — насколько большим должно быть N , чтобы результат статистического моделирования был достаточно точным.

¹Так как мы считаем, что положение частиц фиксировано, нет необходимости рассматривать волновую функцию N тождественных частиц.

Рассмотрим одномерную цепочку. Будем считать, что спины взаимодействуют с внешним магнитным полем и друг с другом, причем каждый спин взаимодействует только с ближайшим соседом, так что потенциал взаимодействия одной частицы выражается как

$$V_i = -J\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1} - g\mu_b\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B}. \quad (3)$$

J называют энергией обмена — мера силы взаимодействия спинов, g — гиромагнитное отношение (отношение механического момента частицы к магнитному моменту), $\mu_b = e\hbar/2m_e c$ — магнетон Бора. Интересно отметить, что $J > 0$ описывает поведение ферромагнетиков, в то время как $J < 0$ будет соответствовать антиферромагнетикам. Можно изучать оба случая, но в первую очередь нас будет интересовать первый.

Энергия системы в состоянии α_k есть среднее значение суммы V_i по всем частицам:

$$E_{\alpha_k} = \left\langle \alpha_k \left| \sum_i V_i \right| \alpha_k \right\rangle = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} - B\mu_b \sum_{i=1}^N s_i \quad (4)$$

При моделировании температура T , объем и число частиц фиксированы, поэтому для статистического описания следует использовать *канонический ансамбль*. То есть вероятность обнаружить систему в состоянии с энергией E_{α_j} определяется распределением Больцмана:

$$P(E_{\alpha_j}) = \frac{e^{-E_{\alpha_j}/kT}}{Z(T)}, \quad Z(T) = \sum_{\alpha_j} e^{-E_{\alpha_j}/kT} \quad (5)$$

где k — постоянная Больцмана. Обратите внимание, что суммирование производится по *состояниям*. Можно было бы суммировать по *энергиям* (с учетом кратности вырождения), что тоже можно использовать для моделирования системы, но в данной задаче мы не будем рассматривать такое определение статсуммы $Z(T)$.²

В статистическом подходе системы рассматриваются при термодинамическом равновесии при температуре T , то есть средняя энергия одной частицы пропорциональна T . При этом энергия системы флуктуирует, так как постоянно происходит обмен с окружающей средой. Одним из основных аспектов моделирования является реализация постоянного случайного изменения энергии вокруг равновесного значения. Основная идея статистического моделирования методом Монте-Карло заключается в том, чтобы разыгрывать состояния α_j системы (в нашем случае — переворачивать спины случайным образом) по заданному распределению (5) при фиксированной температуре T с энергией E_{α_j} вблизи равновесия, вычислять наблюдаемые величины в этих состояниях, такие

²Вообще говоря, использование суммирования по энергиям является более эффективным с точки зрения численного моделирования, но довольно сильно усложняет алгоритм.

как намагниченность \mathcal{M}_{α_j} и др., а потом усреднять полученные значения. Таким образом мы получим среднее значение нужных нам термодинамических величин при данной температуре. Потом следует изменить температуру и повторить эту операцию, так мы получим зависимость термодинамических величин от температуры.

2 Алгоритм Метрополиса

Центральной задачей является создание и реализация алгоритма, который симулирует равновесное положение системы. Важно понимать, что распределение Больцмана (5) не означает, что система будет все время находиться в нижнем состоянии, а отражает тот факт, что система находится в нижнем состоянии с большей вероятностью, чем в верхнем. Для конечных температур kT энергия система должна флуктуировать вокруг некоторого равновесного значения.

Алгоритм Метрополиса как раз и выполняет эту задачу. Он был изобретен для моделирования прохождения нейтронов через среду, но используется в очень широком круге задач, например, в физике твердого тела. Алгоритм комбинирует два метода Монте-Карло (МК), которые называются *variance reduction technique* и *von Neumann rejection technique*. Первый используется, например, для повышения эффективности вычисления интеграла методом МК от функции, основной вклад которой в интеграл задан лишь на некотором небольшом интервале внутри пределов. Второй позволяет разыграть случайную величину, распределенную по заданному закону, если у вас есть генератор случайных чисел для равномерного распределения.

Итак, у нас есть система спинов, которые могут переворачиваться случайным образом, но так, что можно достичь состояния с любой энергией за конечное число шагов (условие эргодичности), у нас есть распределение Больцмана. Предположительно изначально цепочка не находится в состоянии равновесия. Необходимо разыгрывать изменения состояния цепочки таким образом, чтобы она пришла в равновесие за какое-то разумное время. После этого можно вычислить термодинамические величины (теплоемкость и намагниченность) для набора для некоторого числа равновесных состояний (то есть мы продолжаем разыгрывать состояния цепочки, но теперь все они уже являются равновесными) и усреднить по ним.

Алгоритм Метрополиса можно разбить на следующие шаги:

1. Выбрать начальную конфигурацию $\alpha_k = \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$.
2. Сгенерировать пробное состояние α_{tr} , для чего нужно выбрать случайный спин i и перевернуть его.
3. Вычислить энергию пробного состояния $E_{\alpha_{tr}}$.

4. Если $E_{\alpha_{\text{tr}}} \leq E_{\alpha_k}$, принять состояние $\alpha_{k+1} = \alpha_{\text{tr}}$.
5. $E_{\alpha_{\text{tr}}} > E_{\alpha_k}$, принять состояние с вероятностью $\mathcal{R} = \exp(-(E_{\alpha_{\text{tr}}} - E_{\alpha_k})/kT)$
 - Выбрать случайное число $0 \leq r \leq 1$.
 - Положить $\alpha_{k+1} = \begin{cases} \alpha_{\text{tr}}, & R \geq r, \\ \alpha_k, & R < r. \end{cases}$

После того, как решено, каким будет новое состояние, для него вычисляются искомые величины (энергия, намагниченность и т.д.). Затем необходимо повторить всю процедуру, взяв в качестве начального состояние α_{k+1} .

Идея алгоритма состоит в том, чтобы разыгрывать состояния с вероятностью $\mathcal{P}(E_{\alpha_j}, T) \propto e^{-E_{\alpha_j}/kT}$. Как в алгоритме фон Неймана, мы принимаем или отбрасываем состояние с относительной вероятностью

$$\mathcal{R} = \frac{\mathcal{P}_{\text{tr}}}{\mathcal{P}_i} = e^{-\Delta E/kT}, \quad \Delta E = (E_{\alpha_{\text{tr}}} - E_{\alpha_k}). \quad (6)$$

Если $\Delta E < 0$, относительная вероятность будет больше 1, тогда состояние сразу принимается. В обратном случае состояние может быть принято с относительной вероятностью \mathcal{R} , для чего и используется метод Неймана.

Начальное состояние может быть далеким от равновесного. Алгоритм Метрополиса обеспечивает сходимость состояний к равновесному за разумное число шагов, и нет необходимости изучать все 2^N состояний, как правило достаточно приблизительно $\simeq 10N$ итераций. В принципе, состояния можно было бы разыгрывать другим способом, например, сразу используя распределение (5), и должен получаться правильный результат, но для этого потребуется больше вычислительного времени. В этом и заключается преимущество алгоритма Метрополиса.

3 Термодинамические величины и точное решение

Термодинамические величины следует вычислять только тогда, когда система пришла в состояние равновесия. В данной модели нас будут интересовать следующие величины: средняя энергия $U(T) = \langle E \rangle$, теплоемкость $C(T)$ и намагниченность $\mathcal{M}(T)$.

Обычно среднее значение какой-то величины определяется как $\langle Q \rangle = \sum_{\mu} P_{\mu} Q_{\mu}$, где P_{μ} определено (5), а Q_{μ} — среднее значение наблюдаемой в состоянии μ . При большом числе “опытов” в состояниях, близких к равновесному, это выражение можно заменить на

$$\langle Q \rangle = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{t=1}^M Q(t), \quad (7)$$

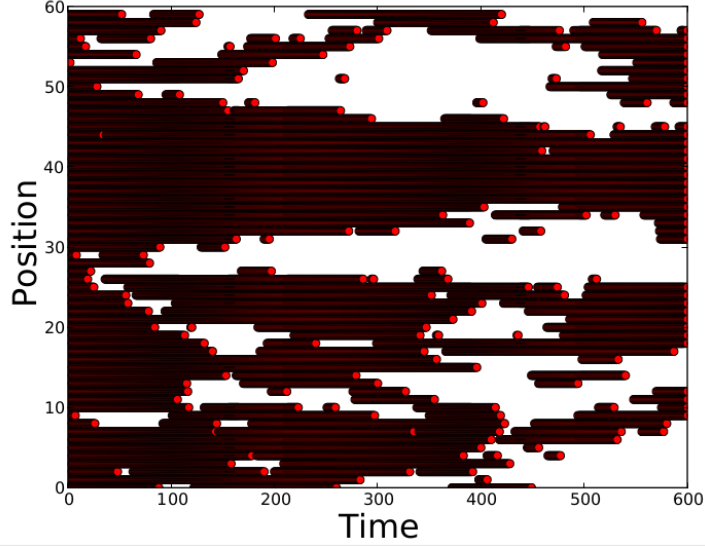


Рис. 1: Эволюция состояний α_k для цепочки из $N = 60$ частиц при $J = 1$, $B = 0$, $kT = 1.6$. Закрашенные точки соответствуют спинам, повернутым вверх, отсутствие точки — вниз. По оси y отложено положение частицы i в цепочке, по оси x — номер состояния k .

где t нумерует опыты (t не имеет какого-то физического значения, это просто параметр), а M — полное число опытов. Именно такое определение удобно использовать в нашей модели.

Теплоемкость определяется как

$$C = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{1}{N} \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{kT^2}. \quad (8)$$

Намагниченность определяется выражением $M = -kT \frac{\partial \ln Z}{\partial B}$, но в данной задаче удобнее пользоваться спонтанной намагниченностью на единичный спин:

$$\mathcal{M} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i. \quad (9)$$

В одномерном случае существует точное решение для модели Изинга:

$$\frac{U}{J} = -N \tanh \frac{J}{kT} = \begin{cases} N, & kT \rightarrow 0, \\ 0, & kT \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (10)$$

$$C = \frac{(J/kT)^2}{\cosh^2(J/kT)}, \quad (11)$$

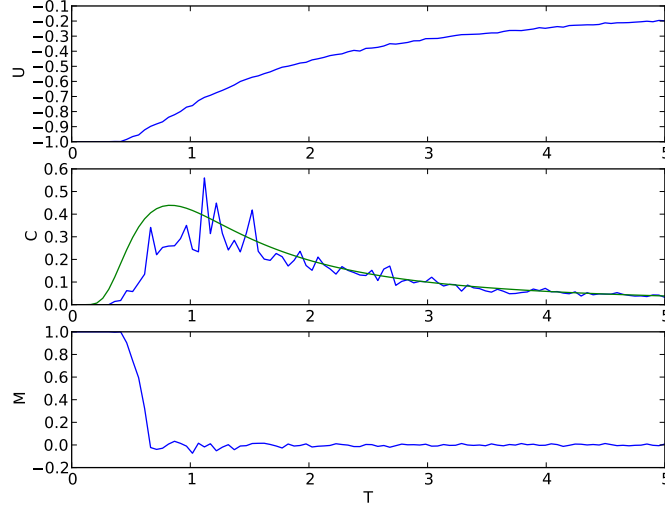


Рис. 2: Результат моделирования одномерной цепочки из $N = 2000$ спинов.

$$M = \frac{N e^{J/kT} \sinh(B/kT)}{\sqrt{e^{2J/kT} \sinh^2(B/kT) + e^{-2J/kT}}}. \quad (12)$$

Однако в одномерном случае не наблюдается фазовый переход. Фазовый переход существует в двумерном случае, например, его можно наблюдать как разрыв функции $C(T)$ при температуре Кюри T_c . Точное решение для двумерной модели Изинга также существует, но оно имеет существенно более сложную форму. Выражение для спонтанной намагниченности на одну частицу имеет достаточно простой вид:

$$\mathcal{M}(T) = \begin{cases} 0, & T > T_c \\ \frac{(1+z^2)^{1/4}(1-6z^2+z^4)^{1/8}}{\sqrt{1-z^2}}, & T < T_c, \end{cases} \quad (13)$$

где $T_c \simeq 2.269185J$, а $z = e^{-2J/kT}$.

4 Задание 1, одномерная цепочка.

Смоделируйте цепочку спинов при отсутствии магнитного поля ($B = 0$).

1. Создайте структуру данных для хранения состояния цепочки спинов s_i (удобный вариант — массив $\mathbf{s}[N]$, содержащий -1 и +1). Напишите функцию, которая вычисляет энергию состояния. При вычислении энергии (4) для последнего спина можно наложить периодическое граничное условие (цепочка превратится в кольцо).

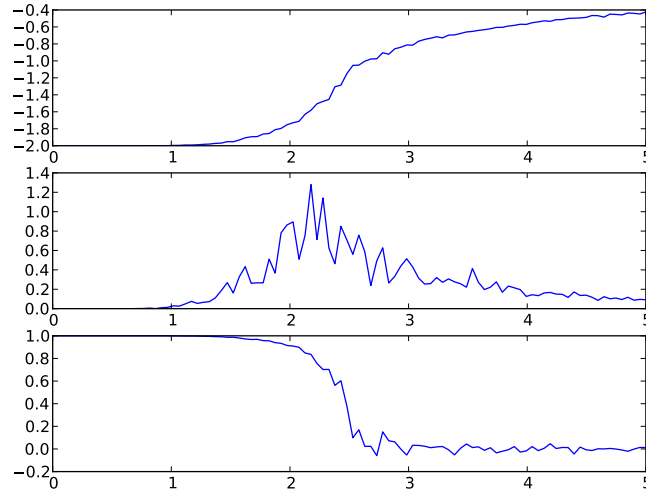


Рис. 3: Результат моделирования двумерной решетки из $N = 1600$ спинов, $J = 1$.

2. Напишите функцию, которая реализует алгоритм Метрополиса, то есть функцию, которая создает новую конфигурацию α_{k+1} исходя из старой α_k .
3. Для определенности положите $J = 1$ и $T = 1$ (постоянную Больцмана можно положить $k = 1$), а число частиц $N \sim 20$. Изучите, как эволюционирует цепочка по шагам, как образуются доменная структура. Вам потребуется выбрать начальное состояние цепочки, для этого есть несколько вариантов, например, можно выбрать такое состояние, что все спины сонаправлены (“холодный” старт), а можно их распределить случайным образом (“горячий” старт). Посмотрите, как эволюционирует система в зависимости от выбора начальных условий. Сделайте вывод состояний на экран (см. Рис. 1) для проверки того, что независимо от выбора начального условия цепочка приходит в равновесие. Попробуйте менять J (в том числе рассмотрите случай $J < 0$) и включать магнитное поле B .
4. Постройте график зависимости энергии от номера опыта t , посмотрите, когда энергия начинает колебаться около некоторого среднего значения (достигается равновесие). Попробуйте менять число частиц N и температуру T . Как меняется характер флуктуаций в зависимости от этих параметров?

5. Вычислите среднюю энергию U , теплоемкость C и среднюю намагниченность M по ансамблю состояний. Как говорилось выше, при вычислении средних нужно пользоваться **состояниями вблизи равновесия**, то есть не надо учитывать состояния в начале моделирования. Придумайте способ отсеять лишние неравновесные состояния. От него будет зависеть скорость работы программы. Например, если отбрасывать первые $10N$ состояний, вы будете практически гарантированно усреднять по равновесным состояниям, но с большой вероятностью система придёт к равновесию за существенно меньшим количеством шагов, и алгоритм будет долго работать вхолостую.
6. Все вычисления выше предполагали фиксированную температуру T . Теперь вычислите термодинамические величины на интервале температур, например $0 < kT < 5$, постройте графики $U(T)$, $C(T)$, $M(T)$. Для ускорения работы алгоритма при изменении T в качестве начального состояния имеет смысл взять состояние, которым завершилось вычисление для предшествующего значения T .
7. Для того, чтобы статистический подход был реалистичным, число частиц должно быть достаточно велико. Чтобы программа работала быстро, можно проводить вычисления с $N \sim 200$, для реалистичных вычислений можно брать $N \sim 2000$.
8. Сравните численное решение для $C(T)$ с аналитическим (11).

5 Задание 2, двумерная решётка.

Усовершенствуйте свой алгоритм на случай двумерной спиновой решетки в приближении ближайшего соседа, для чего необходимо модифицировать выражение для энергии:

$$V_{i,j} = -J s_{i,j} s_{i+1,j} - J s_{i,j} s_{i,j+1} - g \mu_b s_{i,j}. \quad (14)$$

Помимо этого, следует учесть, что вычислительная сложность задачи существенно возрастает, поэтому можно ограничиться маленькими решетками со стороной порядка $\sqrt{N} \sim 10 - 40$.

1. Сгенерируйте квадратную решетку из N спинов.
2. Переопределите функцию для вычисления энергии.
3. Исследуйте среднее значение энергии, теплоемкости и намагниченности при фиксированной температуре.
4. Постройте теплоемкость и намагниченность как функцию температуры. Проследите, как упорядоченная система превращается в неупорядоченную с ростом температуры.

5. Теплоемкость должна расходиться в точке $T = T_c$. На графике $C(T)$ приблизительно в T_c должен наблюдаться резкий пик. Оцените приближенно (по графику) значение T_c и сравните с аналитическим значением $T_c \simeq 2.269185J$.