

# Fizyka układów złożonych

## Jednowymiarowy model Isinga

Krzysztof Malarz

Oryginalnie sformułowany przez Lenza w latach dwudziestych zeszłego stulecia model Isinga miał posłużyć modelowaniu układów magnetycznych. Obecnie jego zastosowania pojawiają się od twardej fizyki ciała stałego po modelowanie układów socjo-ekonomicznych.

W przypadku jednowymiarowym, energia całkowita łańcucha  $N$  oddziaływujących spinów  $\sigma_i$  wynosi

$$E = - \sum_{i=1}^N J_{i,i+1} \sigma_i \sigma_{i+1} - \sum_{i=1}^N B \sigma_i, \quad (1)$$

gdzie zmienne spinowe  $\sigma_i$  przyjmują wartości  $\pm 1$ ,  $J_{i,j}$  jest tak zwaną całką wymiany, a  $B$  natężeniem zewnętrznego pola magnetycznego.

Ewolucję układu prowadzimy w kierunku osiągnięcia przez układ minimum energii. Istnieje kilka sposobów prowadzenia symulacji w tym kierunku. Tu wykorzystamy schemat Metropolis'a, który jest uniwersalnym narzędziem (nadaje się do zadań optymalizacyjnych również poza fizyką magnetyzmu, po prostu u nas funkcja celu jest energią z równania (1)).

Dla modelu Isinga algorytm Metropolis'a sprowadza się do powtarzania operacji:

- wybierz losowo węzeł sieci  $i$  i ustaw go na przeciwną wartość  $\sigma'_i = -\sigma_i$ ,
- wyznacz różnicę energii  $\Delta E = E' - E$  między energiami lokalnej konfiguracji ze spinem  $\sigma'_i$  ( $E'$ ) oraz  $\sigma_i$  ( $E$ ),
- jeśli zmiana ta jest ujemna ( $\Delta E < 0$ ), zaakceptuj nową konfigurację zmieniając  $\sigma_i$  na  $\sigma'_i$ ,
- w przeciwnym wypadku zaakceptuj tę konfigurację z prawdopodobieństwem  $\exp(-\Delta E/k_B T)$ .

Po powtórzeniu  $N$ -krotnie powyższych czterech punktów mówimy, że skompletowaliśmy jeden krok procedury Monte Carlo.

Założmy brak pola magnetycznego  $B = 0$ , układ składający się z  $N = 10^3$  spinów i taką samą wartość całek wymiany między parami kolejnych spinów  $J_{i,i+1} = J = 1$  oraz  $k_B = 1$ <sup>1</sup>. Ostatni spin w łańcuchu (dla  $i = N$ ) nie ma „prawego” sąsiada, przyjmijmy, że jest nim spin w pierwszym węźle ( $i = 1$ ). Pierwszy spin w łańcuchu (dla  $i = 1$ ) nie ma „lewego” sąsiada, przyjmijmy, że jest nim spin w ostatnim węźle ( $i = N$ ) — zakładamy więc okresowe warunki brzegowe, to nie jest łańcuch tylko „okrąg” spinów.

**Zadanie 1 (30 pkt.):** Oblicz wszystkie możliwe prawdopodobieństwa

$$p(\text{stara konfiguracja} \rightarrow \text{nowa konfiguracja}) = \min\{1, \exp(-\Delta E/T)\}$$

---

<sup>1</sup>Te dwie ostatnie równości, są tożsame z przyjęciem jednostek, w których temperatura mierzona jest w jednostkach  $[J/k_B]$ .

akceptacji nowej konfiguracji ze spinem  $\sigma'_i = -\sigma_i$  wartości spinu jeśli jego poprzednia wartość była  $\sigma_i$  a sąsiedzi w węzłach  $(i \pm 1)$  przyjmowali wartości  $\sigma_{i \pm 1} = \pm 1$  dla  $1/T = 0,5; 1,0; 1,5; 4,0$ . (Najlepiej do zadania 2 będzie stabilizować sobie te wartości dla danej temperatury  $T$ , by nie liczyć za każdym razem ani zmian energii ani czynników boltzmannowskich).

**Zadanie 2 (30 pkt.):** Obserwujemy ewolucję czasową (gęstości) energii układu

$$e(t) = E(t)/N = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i(t) \sigma_{i+1}(t) \quad (2)$$

dla  $10^4$  kroków MC dla  $1/T = 0,5; 1,0; 1,5; 4,0$ . Dla każdej z temperatur  $T$  symulację rozpoczynamy z losowego rozłożenia wartości  $\sigma_i = \pm 1$  ( $m(0) = 0$ ) oraz z namagnesowaniem  $m(0) = 1$ .

**Zadanie 3 (40 pkt.):** Liczymy średnią czasową  $\langle E(t) \rangle$  i  $\langle E^2(t) \rangle$  z ostatnich  $\tau = 10^3$  kroków symulacji trwającej  $10^4$  MCS. Automatyzujemy proces znajdowania tych wielkości dla  $1/T$  zmieniających się od 0,5 do 4,0 co 0,25 wypisując do pliku trójkę wartości:  $1/T$ ,  $\langle E(t) \rangle$ ,  $\langle E^2(t) \rangle$ .

Sporządzamy wykresy zależności od odwrotności temperatury  $1/T$  gęstości energii  $e = N^{-1} \langle E(t) \rangle$  i  $c = N^{-1} (\langle E^2(t) \rangle - \langle E(t) \rangle^2) / T^2$  nakładając je na rozwiązania analityczne

$$e(1/T) = -\tanh(1/T)$$

i

$$c(1/T) = (1/T)^2 / \cosh^2(1/T).$$