Symulacje komputerowe w fizyce: metoda Monte Carlo (równowagowa)

Jakub Tworzydło

Instytut Fizyki Teoretycznej

6 i 7/12/2022 Pasteura, Warszawa

Plan

Plan

Plan

Plan

Przypomnienie metod statystycznych

- układ składa się z wielu prostych części (cząsteczek)
- praktycznie i fundamentalnie:
  ściśle rozwiązania niemożliwe (chaos)
- makroskopowe własności gazu są dobrze określone,
  przewidywalne

Przypomnienie metod statystycznych

- układ składa się z wielu prostych części (cząsteczek)
- praktycznie i fundamentalnie:
  ścisłe rozwiązania niemożliwe (chaos)
- makroskopowe własności gazu są dobrze określone, przewidywalne

$\Longrightarrow$ centralna idea: pracujmy z prawdopodobieństwem znalezienia układu w pewnym stanie

Statystyczne metody symulacyjne

- REALISTYCZNA DYNAMIKA (MD): układ hamiltonowski, poddany działaniu termostatu
- FIKCYJNA DYNAMIKA (Monte Carlo): przygotowuje układ w stanie przypadkowym, reprezentatywnym dla parametrów makroskopowych

Układ w stanie równowagi

- zespół kanoniczny: temperatura T ustalana przez duży rezerwuar
- prawdopodobieństwo obsadzenia stanu wg. rozkładu Boltzmana

$$p_X = \frac{1}{Z} e^{-E_X/k_B T},$$

gdzie X jest stanem układu, E_X jego energią

- stała normalizacji nazywana jest funkcją partycji (rozdziału)

$$Z = \sum_X e^{-E_X/k_B T},$$

lub po prostu sumą statystyczną

Obserwable

- warości oczekiwane wielkości fizycznych
- energia wewnętrzna

$$U = \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_X E_X e^{-\beta E_X},$$

gdzie $\beta = 1/k_B T$

Obserwable

- warości oczekiwane wielkości fizycznych
- energia wewnętrzna

$$U = \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_X E_X e^{-\beta E_X},$$

gdzie $\beta = 1/k_B T$

- ciepło właściwe

$$C = \frac{\partial U}{\partial T}$$

jest średnią kwadratową fluktuacją (wariancją) energii

$$\frac{C}{k\beta^2} = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$$

Plan

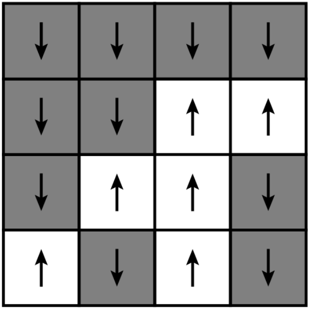
Model Isinga

Energia momentów magnetycznych (Hamiltonian)

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i$$

- spin $s_i = \pm 1$ w węzłach sieci i
- J – oddziaływanie pomiędzy najbliższymi sąsiadami $\langle ij \rangle$
- $X = \{s_i\}_{i=1...N}$ – stan układu, całkowita liczba stanów 2^N
- zewnętrzne pole magnetyczne B

Fizyka modelu Isinga



- fizycznie umotywowany model układu magnetycznego
- gaz sieciowy w zespole wielkim kanonicznym, absorbcja atomów na powierzchni, termodynamika stopu (mapują się na model Isinga)

Znaczenie modelu Isinga

- ścisłe rozwiązanie przejścia fazowego w 2D przez Onsagera (1944)
- analitycznie w 3D — ważne wyzwanie (np. gaz strun fermionowych Poliakova)
- zabawka w ręku teoretyków do testowania pomysłów, podejść i metod: sieciowe teorie pola

Wielkości obliczane w modelu Isinga

- funkcja rozkładu

$$Z = \sum_X e^{-\beta E(X)}$$

- średnie termodynamiczne

$$\langle Q \rangle = \frac{1}{Z} \sum_X Q(X) e^{-\beta E(X)}$$

Wielkości obliczane w modelu Isinga

- średnia magnetyzacja na spin

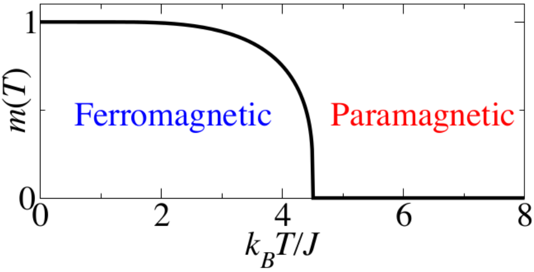
$$\langle m \rangle = \tfrac{1}{N} \langle \sum_i s_i \rangle$$

- podatność magnetyczna

$$\chi = \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial B} = \beta N (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2)$$

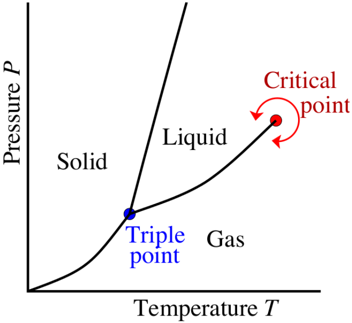
(odpowiedź na małe zaburzenie polem B)

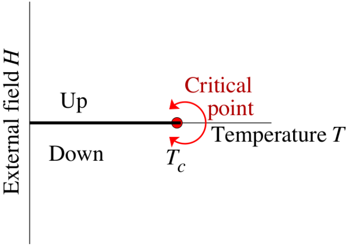
Jakościowe zachowanie modelu Isinga



- niskie temperatury:
  spiny zorientowane, wszystkie w tym samym kierunku
- wysokie temperatury:
  spiny fluktują, brak magnetyzacji

Związek z fazą ciecz–gaz





- spin do góry $\equiv$ obecność atomu
- faza ciekła: wszędzie atomy, z nielicznymi wakancjami
- interesują nas własności w pobliżu punktu krytycznego

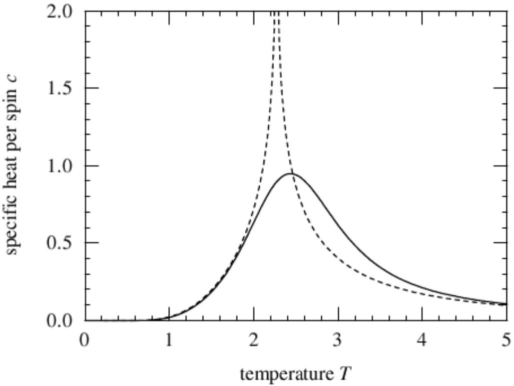
Jak rozwiązać?

Szkielet skryptu Pythona

```
for X in tqdm(range(2**Nbig)):

    # binary decomposition; fill with zeros; return numpy array
    s = np.array( list(np.binary_repr(X,width=Nbig)), dtype=np.int)
    s = (s*2-1).reshape(Lbig,Lbig)

    # sum all neighbouring spins
    a = np.roll( s  , 1,axis=0)
    a += np.roll( s ,-1,axis=0)
    a += np.roll( s , 1,axis=1)
    a += np.roll( s ,-1,axis=1)

    # calculate Boltzmann factor
    boltz[X] = np.exp(beta*np.sum( s * a )/2.)
    # magnetization
    mag[X]   = np.sum(s*1.0/Nbig)
```

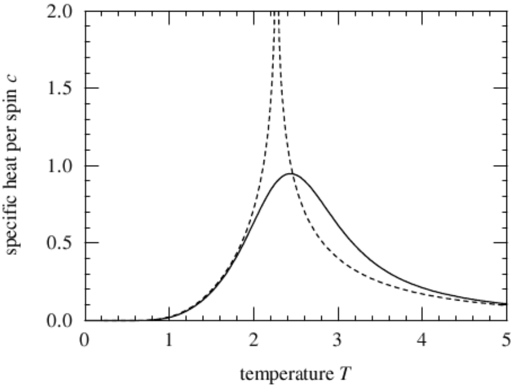
Ścisłe sumowanie

Sieć 5×5, liczba stanów: $2^{25} = 33\,554\,432$



Ścisłe sumowanie

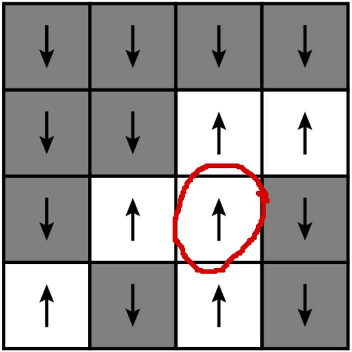
Sieć 5×5, liczba stanów: $2^{25} = 33\,554\,432$



Uwaga: 6×6 wymaga $2^{36}/2^{25} = 2048$ więcej obliczeń

Idea algorytmu kąpieli cieplnej (heat-bath)

- termalizujemy pojedynczy (losowo wybrany) spin
- ustaw spin zgodnie z rozkładem termicznym przy założeniu, że orientacje spinów sąsiednich są ustalone



Kąpiel cieplna (heat-bath) dla modelu Isinga

1. Wybierz losowo spin w węźle i
2. Oblicz liczbę sąsiadów "do góry"

$$h_i = \sum_{j:<ij>} s_j$$

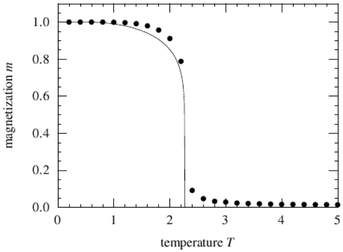
3. Oblicz energię konfiguracji ze spinem i
   (albo do góry $+1$ albo do dołu -1)

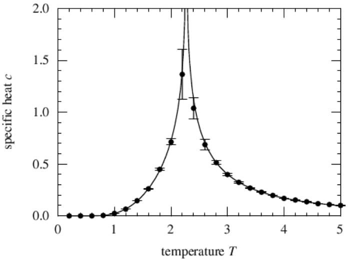
$$E_+ = -Jh_i - B; \quad E_- = +Jh_i + B$$

4. Ustaw spin jako $+1$ z prawdopodobieństwem $p = \frac{e^{-\beta E_+}}{e^{-\beta E_+} + e^{-\beta E_-}}$
   (lub -1 z prawd. $1 - p$)
5. Obliczaj średnie z obserwabli dla konfiguracji wygenerowanych co 1MCS (krok MC)
   1MCS – po odwiedzeniu (średnio) każdego spinu w układzie

Plan

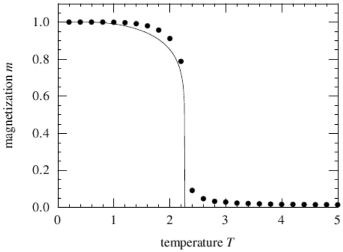
Przykładowe wyniki: sieć 100x100

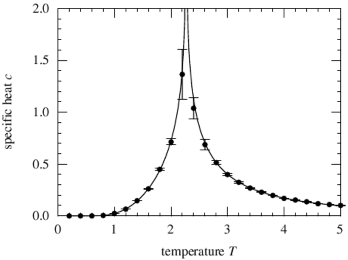




- przejście ostre (rozbieżność) w granicy termodynamicznej
- temperatura krytyczna T_c rozdziela fazy: paramagnetyczną i ferromagnetyczną
- dla m. Isinga $T_c = \frac{2}{\log(1+\sqrt{2})} \simeq 2.27$

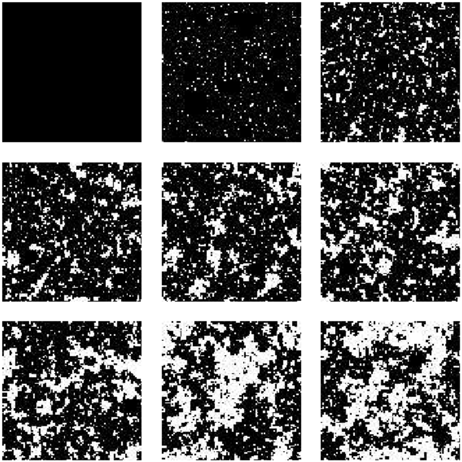
Przykładowe wyniki: sieć 100x100





- przejście ostre (rozbieżność) w granicy termodynamicznej
- temperatura krytyczna T_c rozdziela fazy: paramagnetyczną i ferromagnetyczną
- dla m. Isinga $T_c = \frac{2}{\log(1+\sqrt{2})} \simeq 2.27$
- linie ciągłe – rozwiązanie Onsagera

Model Isinga w pobliżu punktu krytycznego



- powstają klastry uporządkowanych spinów o typowym rozmiarze ξ
- symulacja dla: 10, 20, 40, 60, 100, 200, 400, 1000 MCS

Własności krytyczne

- rozbieżna skala długości $\xi \propto |t|^{-\nu}$, gdzie temp. zredukowana $t = \frac{T - T_c}{T_c}$
- tzw. klasa uniwersalności modelu Isinga (w 2D oraz 3D).

Wykładniki krytyczne: $m \propto t^{\beta}$, $\chi \propto t^{-\gamma}$, $C \propto t^{-\alpha}$

D	2	3	4 (MF)
ν	1	0.63	$1/2$
β	$1/8$	0.32	$1/2$
α	0	0.11	0
γ	$7/4$	1.23	1

- wymiar fraktalny klastra w punkcie krytycznym $D_f = \frac{1}{2}(D + \frac{\gamma}{\nu})$

Podsumowanie

- Metoda symulacji układów w równowadze termodynamicznej
- Pomocnicza konstrukcja procesów Markowa (za tydzień)
- Model Isinga: najprostsza teoria pola i krytyczność