

شبیه سازی شبکه آیزینگ دوبعدی با روش مونته-کارلو

محمد همتی
استاد: دکتر نیری
دکتر فرنودی

دانشکده فیزیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، صندوق پستی ۴۵۱۹۵-۱۱۵۹، زنجان، ایران

چکیده

ما یک سیستم فرومغناطیسی را شبیه سازی کردیم. شبیه سازی آیزینگ سیستم فرومغناطیسی از طریق الگوریتم متروپلیس صورت گرفته است. برای مطالعه و بررسی این شبیه سازی ما اطلاعاتی کیفی از مسئله را داریم که از روش تقریب میدان متوسط به دست آمده است. این شبیه سازی با شرایط اولیه خاصی شروع به کار می کند و بعد از این که سیستم در دمای مشخص به تعادل رسید، مقادیر کمی مورد نظر را برای سیستم به دست می آوریم.

۱ الگوریتم متروپلیس

شبیه سازی انجام شده برای آیزینگ با الگوریتم متروپلیس صورت گرفته است. این الگوریتم به شکل زیر است:

۱. سیستم در حالت A باشد.

۲. حالت مقصد به صورت تصادفی از بین همسایه های نزدیک انتخاب شود. مثلاً فرص کنید این حالت B باشد.

۳. اگر $E_B < E_A$ باشد، آن گاه احتمال انتخاب این حالت برابر ۱ می باشد، پس سیستم در حالت B می باشد و به قدم ۱ برمی گردیم.

۴. اگر $E_B > E_A$ باشد در این صورت:

$$\omega_{transition} = e^{-\beta(E_B - E_A)}, \quad \beta = \frac{1}{k_B T},$$

آن گاه یک عدد تصادفی بین صفر و یک انتخاب می کنیم:

$r = \text{Random number between one and zero.}$

$$\begin{cases} \text{if } r < \omega & \longrightarrow \text{Accept B as a destination.} \\ \text{if } r > \omega & \longrightarrow \text{System remains in A spot.} \end{cases}$$

۵. به قدم ۱ برگردیم.

ما از الگوریتم متروپلیس استفاده می کنیم و در مدل آیزینگ الگوریتمی می نویسیم که واحد زمانی آن گام های مونته-کارلو است.

¹Email: Mhemmati@iasbs.ac.ir

۲ مدل آیزینگ

از آنجا که مطالعه برهمکنش‌های بین تعداد 10^{23} اتم، جهت بررسی رفتار ماکروسکوپی سیستم بسیار مشکل است. مکانیک آماری با استفاده از ابزار آماری و ریاضی و دانستن مکانیک مولکول‌های یک سیستم فیزیکی مفروض، روش‌های خاصی برای درک رفتار ماکروسکوپی سیستم بر مبنای رفتار ماکروسکوپی سیستم ذرات فراهم می‌آورد. مدل آیزینگ ساده‌ترین و مشهورترین مدل سیستم اسپینی مکانیک آماری است. این مدل می‌تواند به خوبی پدیده‌های گوناگون از جمله مواد مغناطیسی و همزیستی گاز-مایع و آلیاژی دو فلزی را توصیف کند. این مدل از جمله مدل‌هایی است که برای مطالعه گذارهای یک سیستم به کار می‌رود.

مدا آیزینگ اولین بار توسط لنز و آیزینگ در سال ۱۹۲۵ به عنوان یک مدل فرومغناطیسی ارائه شد. ما با استفاده از این مدل به دنبال توصیف ماکروسکوپی سیستم هستیم. این کار از طریق رفتار ماکروسکوپی ذرات و برهم کنش‌های آن‌ها بررسی می‌شود. در این مدل می‌توان گذارهای مواد را توصیف کرد.

۳ الگوریتم آیزینگ

هامیلتونی که برای سیستم اسپینی آن را بررسی می‌کنیم به صورت زیر است:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mu h \sum_i s_i.$$

۱. مشخص کردن شرایط اولیه دما، میدان، ضریب جفت‌شدگی و مقدار μ .

۲. یک شبکه $L \times L$ از اسپین‌ها داریم که شامل سطرهای i و ستون‌های j است. در این شبکه یک مقدار اولیه به همگی اسپین‌ها می‌دهیم. مثلاً همه اسپین‌ها جهت بالا داشته باشند، به عبارتی مقدار یک را به آن‌ها نسبت می‌دهیم.

۳. انجام تعدادی قدم مونته-کارلو برای رسیدن به تعادل. هر قدم مونته-کارلو شامل انتخاب تصادفی L^2 اسپین و بررسی امکان تغییر آن‌ها.

به طور تصادفی یک اسپین مثلاً s_{ij} را اختیار می‌کنیم.

اگر این اسپین انتخابی رو به بالا بود، آن را می‌چرخانیم و رو به پایین می‌شود (و برعکس). در اینجا می‌خواهیم وضعیت تغییر انرژی این فلیپ کردن را بررسی کنیم.

اگر $\Delta E_{flip} \leq 0$ باشد، آن‌گاه:

$$s_{ij} = -s_{ij}.$$

اگر $\Delta E_{flip} > 0$ بود، آن‌گاه یک عدد تصادفی بین صفر و یک انتخاب شود و

$$\begin{cases} \text{if } r \leq \frac{e^{-\beta \Delta E_{flip}}}{1 + e^{-\beta \Delta E_{flip}}} & \longrightarrow s_{ij} = -s_{ij} \\ \text{else} & \longrightarrow s_{ij} = s_{ij} \end{cases}$$

هر قدم مونته-کارلو شامل L^2 بار انجام مرحله سوم الگوریتم بالا است. حال باید تعدادی قدم مونته-کارلو برداریم تا سیستم به تعادل برسد. برای یک دمای خاص، در ابتدا تعدادی قدم مونته-کارلو برمی‌داریم تا سیستم به تعادل برسد. بعد از به تعادل رسیدن سیستم دوباره گام‌هایی از مونته-کارلو را انجام می‌دهیم و در هر گام مقادیر و کمیت‌های فیزیکی مورد نظر را محاسبه می‌کنیم. پس در این الگوریتم با هر بار عوض کردن دمای سیستم باید تعدادی گام مونته-کارلو گذرانده شود تا به حالت پایداری برای سیستم برسیم.

تعداد گام‌هایی که برای به تعادل رسیدن نیاز است را می‌توان از روی مغناطش سیستم متوجه شد. این کار به این صورت انجام می‌شود که ما تعدادی گام مونته-کارلو را انجام می‌دهیم (۱۰۰۰)، و نمودار تغییرات مغناطش بر حسب این گام‌ها را رسم می‌کنیم. مشاهده می‌شود که بعد از گذشت تعدادی گام مغناطش به یک مقدار تعادلی می‌رسد و حول آن مقدار نوساناتی دارد. از آن گامی که مغناطش به تعادل رسیده می‌توان به تعادل رسیدن سیستم را نتیجه گرفت.

در این شبیه‌سازی ما از واحدهای کاهش یافته استفاده کردیم. به این معنی که برای راحتی تفسیر نتایج به دست آمده یک سری از ثابت‌ها را با یک برابر قرار دادیم. به طور مثال ضریب جفت‌شدگی و ثابت پلاتک را برابر یک قرار دادیم. انرژی سیستم نیز به صورت متناظر کاهش پیدا می‌کند.

۴ روابط شبیه‌سازی

روابط شبیه‌سازی را با استفاده از محاسبات آماری و تابع پارش به‌دست می‌آوریم. از آنجایی که در این سیستم ما به راحتی می‌توانیم انرژی، مغناطش و میانگین این دو دارمتر را به‌دست آوریم، پس سعی بر این داریم که کمیت‌های فیزیکی دیگر را نیز برحسب این پارامترها به دست آوریم.

اگر بخواهیم در یک دمای خاص انرژی را محاسبه کنیم، از تابع پارش کمک می‌گیریم. کمیت‌هایی چون ظرفیت گرمایی، پذیرفتاری سیستم نیز بر سب تابع پارش بیان می‌شود.

$$C = k_B \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) = k_B \beta^2 \sigma_E^2$$

$$\chi = \beta \sigma_m^2, \quad \sigma_m = \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2$$

همان‌طور که گفتیم محاسبه مقادیر متوسط در روش متروپلیس خیلی ساده است، به این دلیل که ما یک شبکه اسپینی داریم و آرایش کل اسپین‌ها را می‌دانیم. برای به دست آوردن مغناطش کافی است که کل اسپین‌های آرایش شبکه را با هم جمع کنیم و میانگین‌گیری انجام دهیم. این موضوع برای انرژی نیز صادق است. پس داریم:

$$\overline{M} = \frac{1}{N_m} \sum_{m=1}^{N_m} M(\{s_i\}),$$

$$\overline{E} = \frac{1}{N_m} \sum_{m=1}^{N_m} E(\{s_i\}),$$

در روابط بالا N_m تعداد کل قدم‌هایی است که برای مونته-کارلو داریم.

۵ مقدار دهی اولیه

در برنامه‌ای که شبیه‌سازی کردیم یک شرایط اولیه حاکم است که به صورت زیر است:

۱. یک سیستم 256×256 اسپینی داریم.

۲. همه اسپین‌ها در جهت بالا هستند.

۳. دما از ۰ تا ۵ تغییر می‌کند.

۴. گام‌های به تعادل رسیدن ۴۰۰ است.

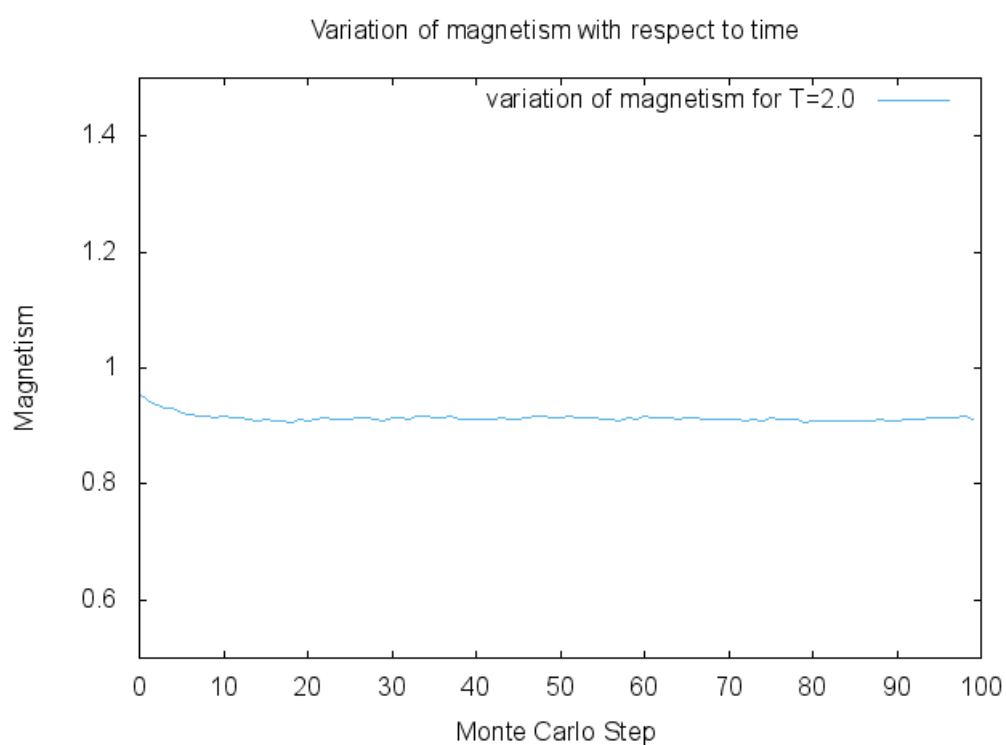
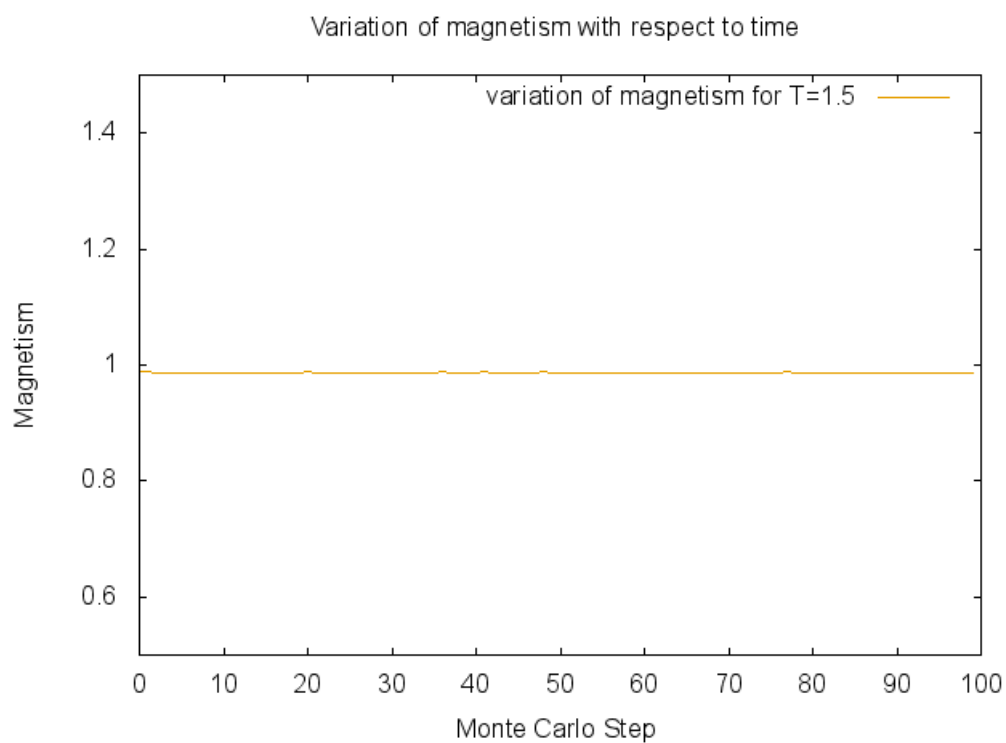
۵. تعداد گامی که برای محاسبات انجام می‌دهیم ۱۰۰۰ است.

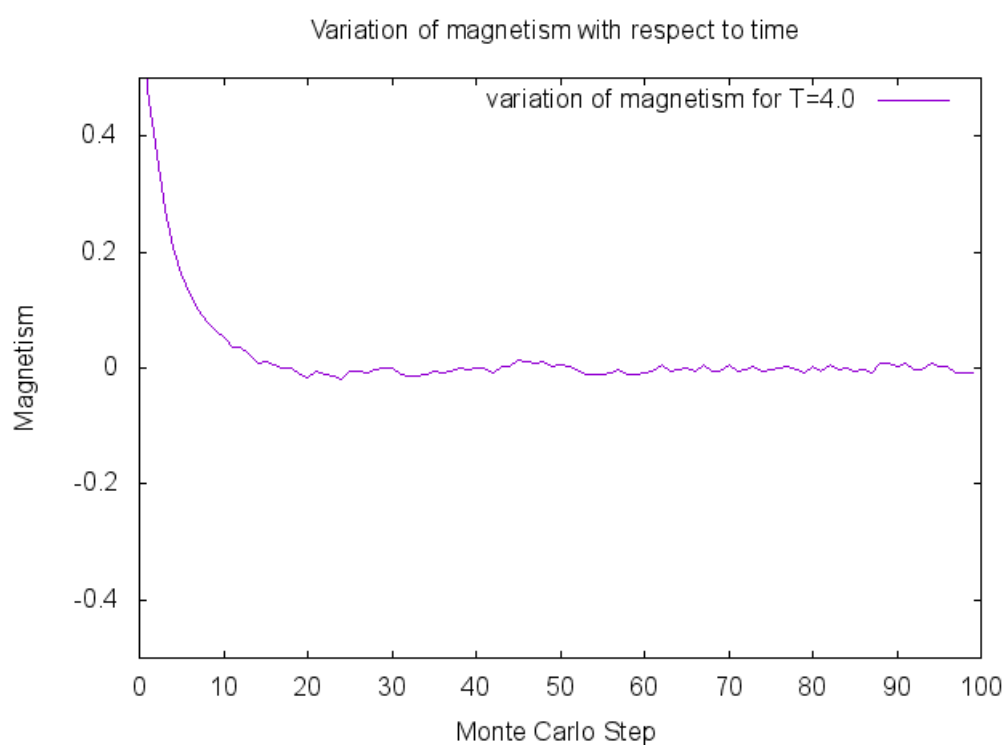
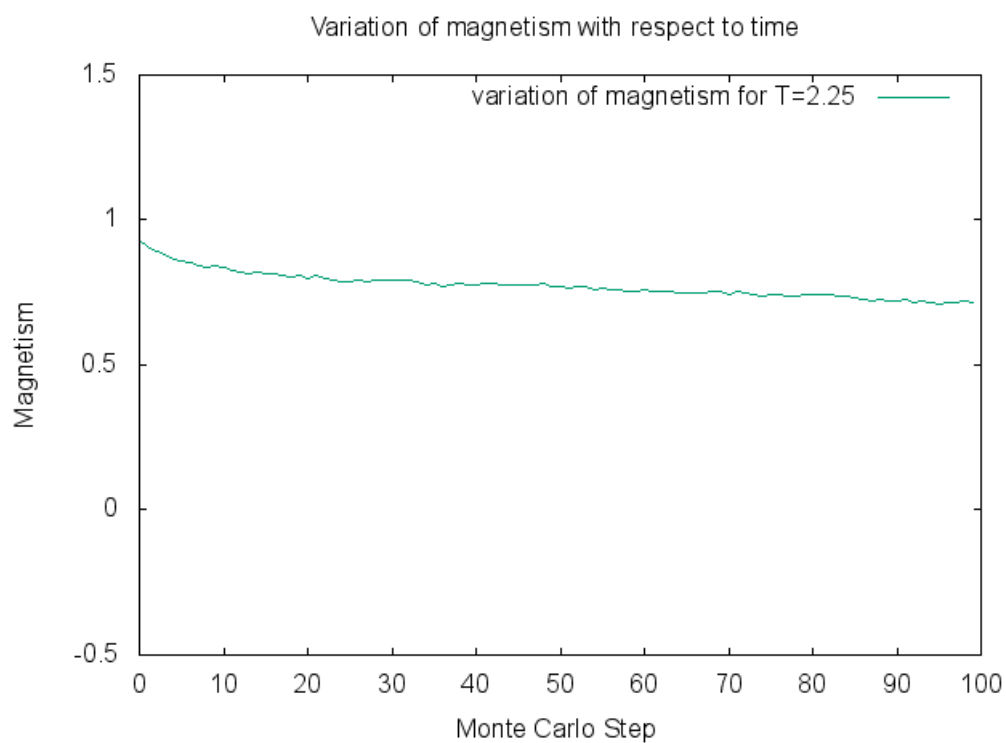
۶. میدان مغناطیسی در ابتدا صفر است.

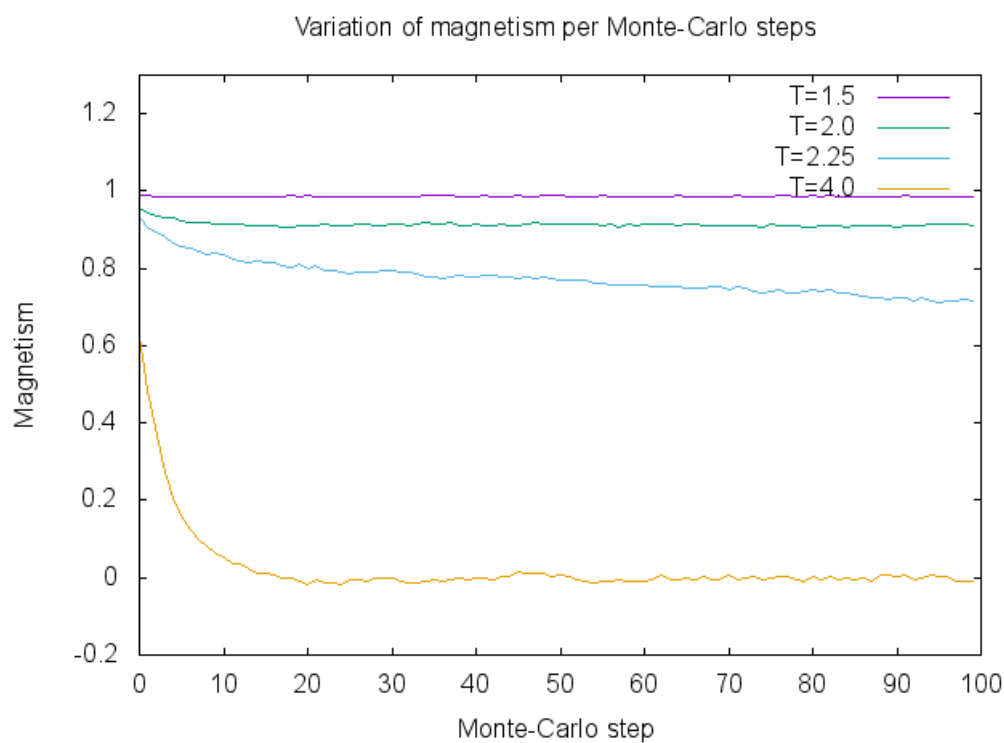
۶ نتایج و نمودارها

۱.۶ سیستم تعادلی

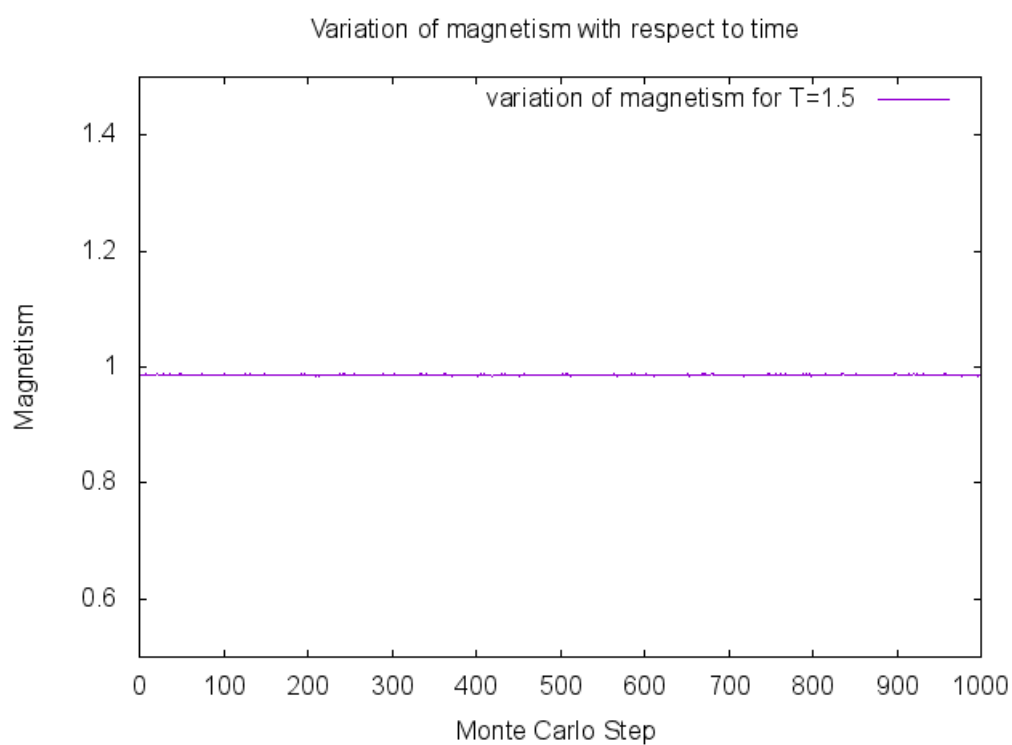
همان‌طور که گفتیم به تعادل رسیدن سیستم مستلزم این است که سیستم تعدادی قدم مونته کارلو را طی کند. قدم‌های مونته کارلو در اینجا همان معنی زمان را دارند. پس با گذشت زمان سیستم اسپینی به تعادل می‌رسد. تعادل در اینجا به این معنی است که پس از گذشت زمان سیستم به مغناطش خاص برسد و حول این متوسط نوسان کند. ما این کار را برای چند دمای مختلف انجام داده‌ایم. همان‌طور که انتظار داریم، به تعادل رسیدن سیستم در دماهای مختلف در زمان‌های متفاوتی صورت می‌گیرد. نتایج برای ۱۰۰ گام به صورت زیر است:

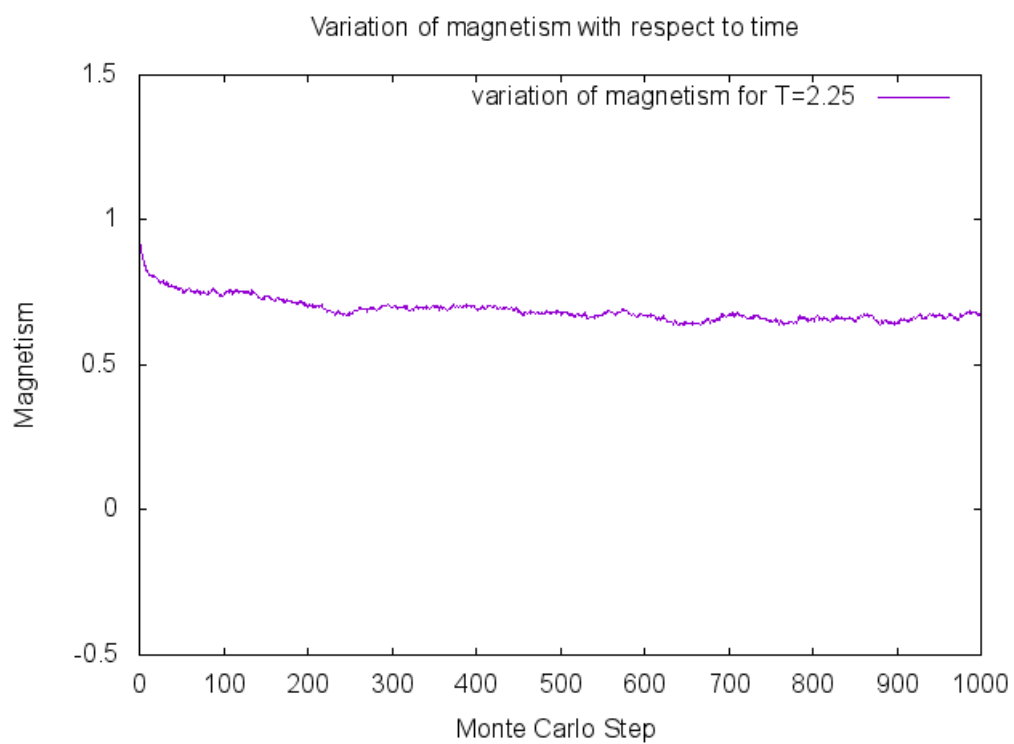
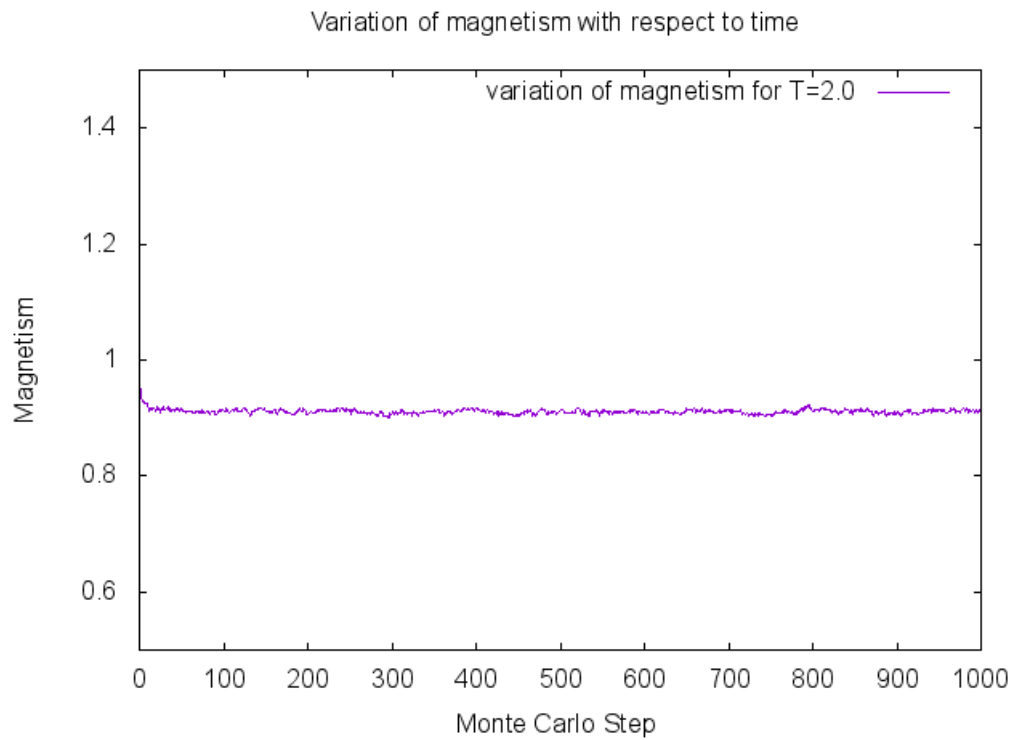


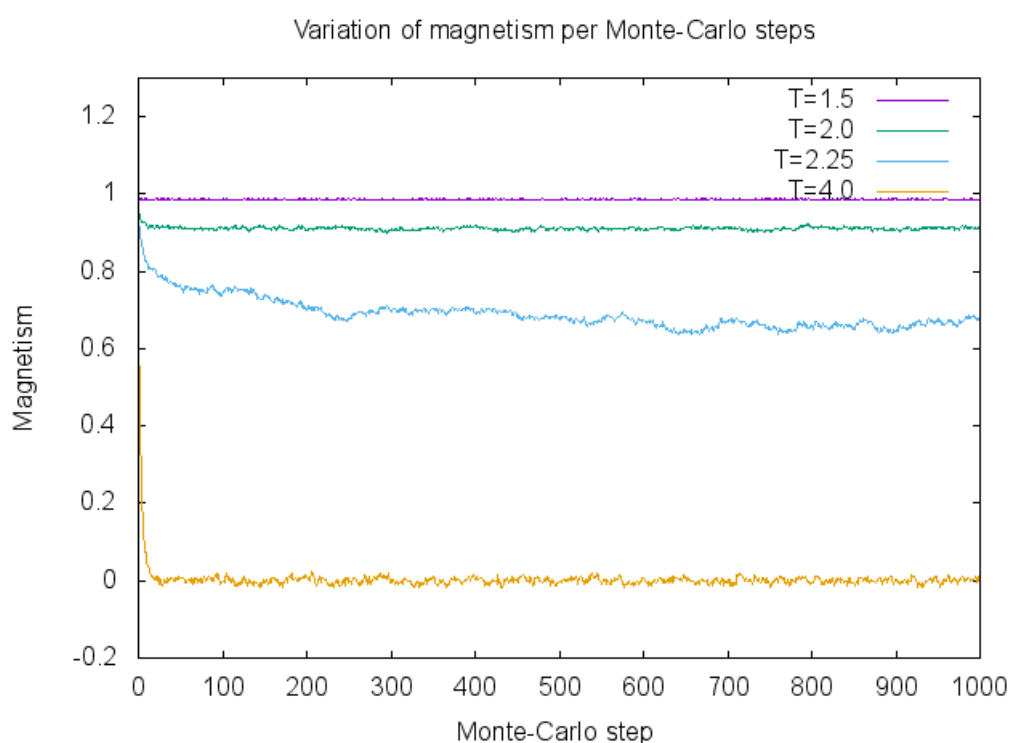
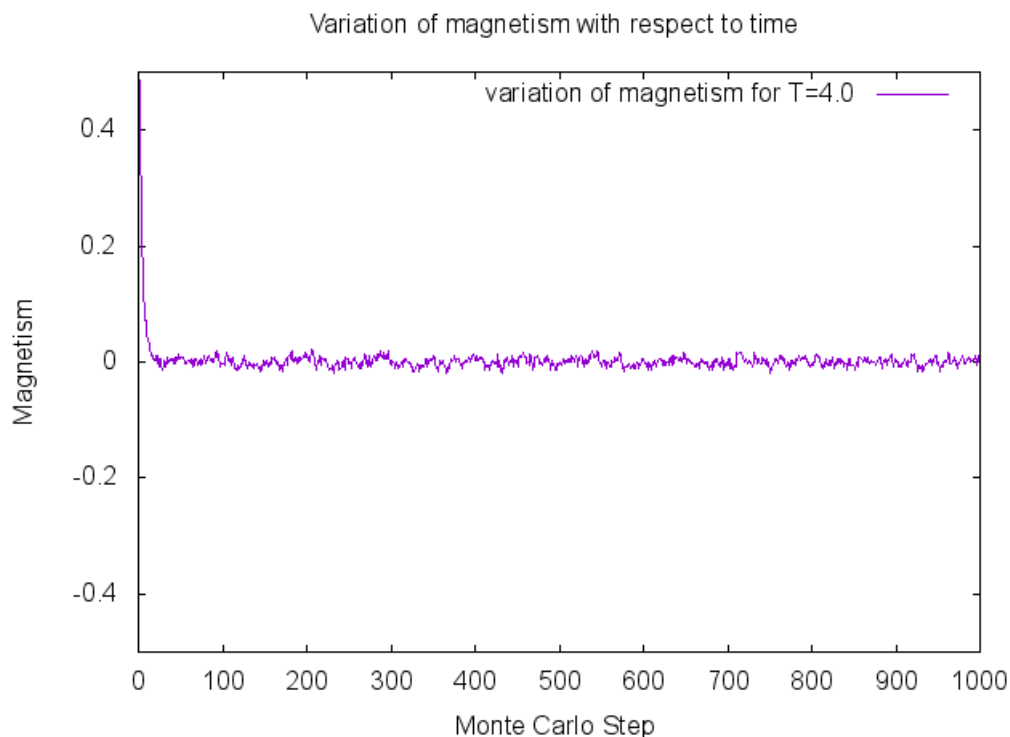




نتایج برای ۱۰۰۰ گام به صورت زیر است.

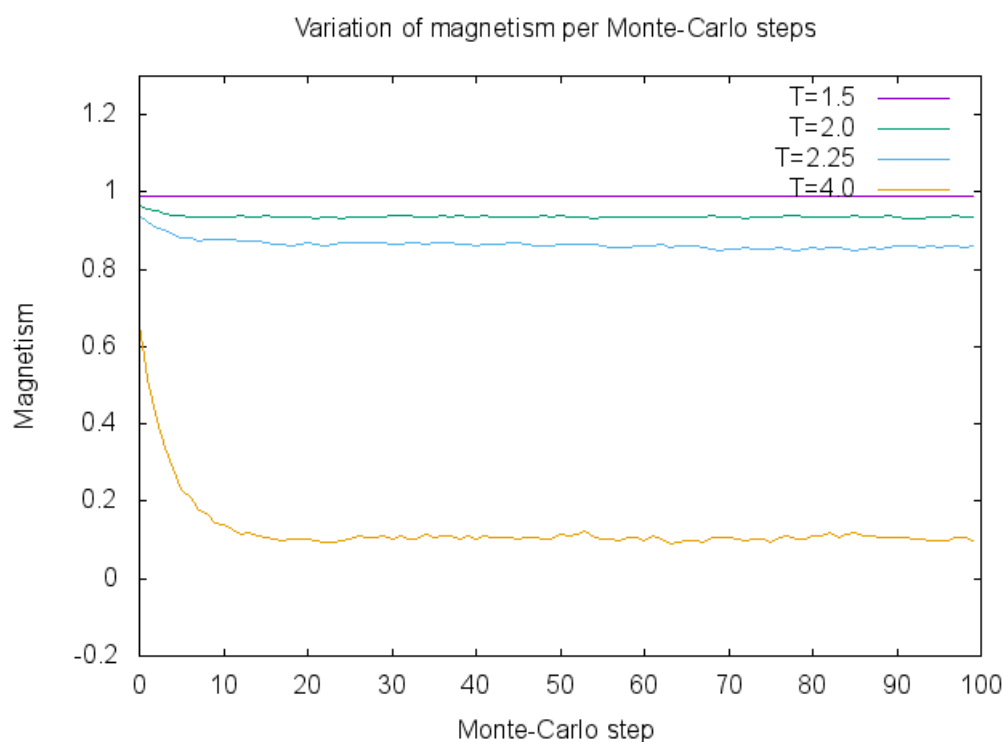




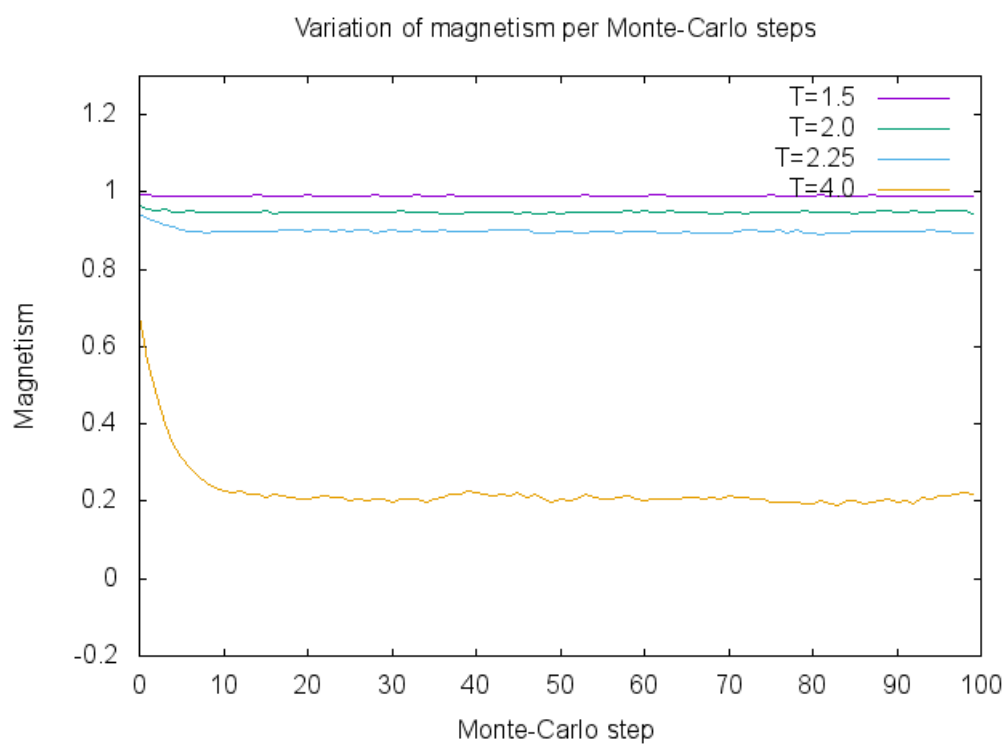


۷ میدان مخالف صفر

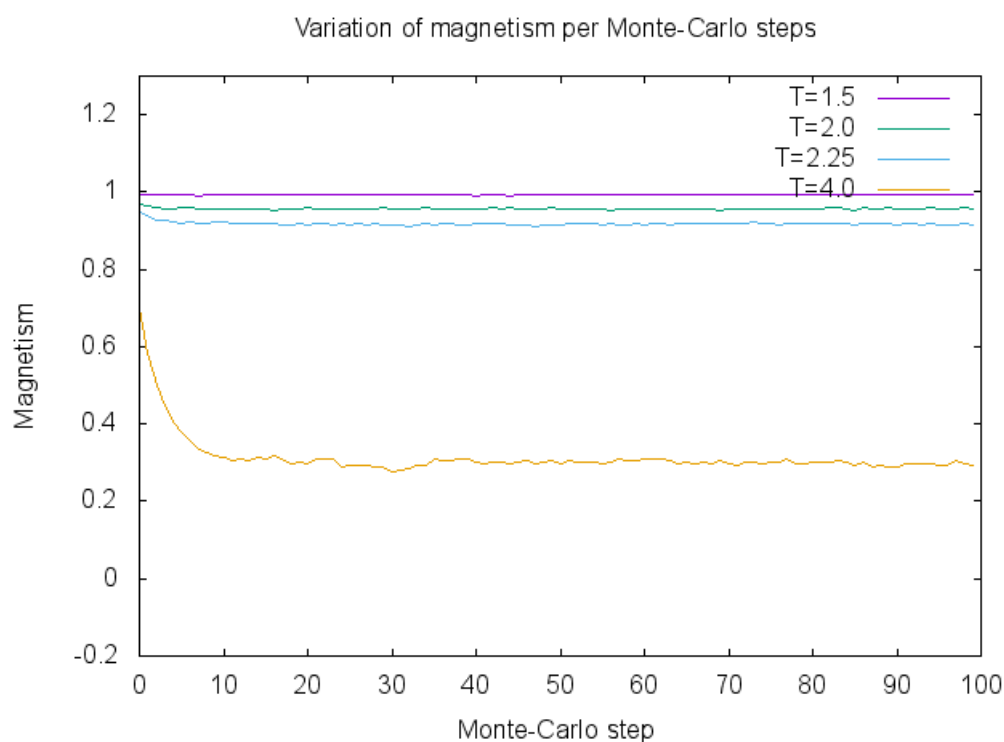
این نتایج برای میدان مغناطیسی صفر و شرایط اولیه‌ای که همه‌ی اسپین‌ها بالا هستند بود. حال ما میدان مغناطیسی را غیر صفر فرض می‌کنیم و در این بررسی میدان را ۱.۰، ۲.۰، ۳.۰، ۴.۰، ۵.۰، ۶.۰ و ۷.۰ قرار دادیم که منجر به نتایج زیر می‌شود. با توجه به نمودارهای بالا همان‌طور که مشخص است در حالت تعادل سیستم در دمای ۴ مغناطش غیر صفر دارد. هرچه میدان افزایش پیدا کند، در دمای ۴ درجه حالت تعادلی مغناطش بالاتری خواهیم داشت. این موضوع باعث می‌شود که ما برای دماهای بالاتری حالت تعادلی با مغناطش صفر خواهیم داشت. میدان به عنوان یک عامل مقاومتی در سیستم ظاهر می‌شود که



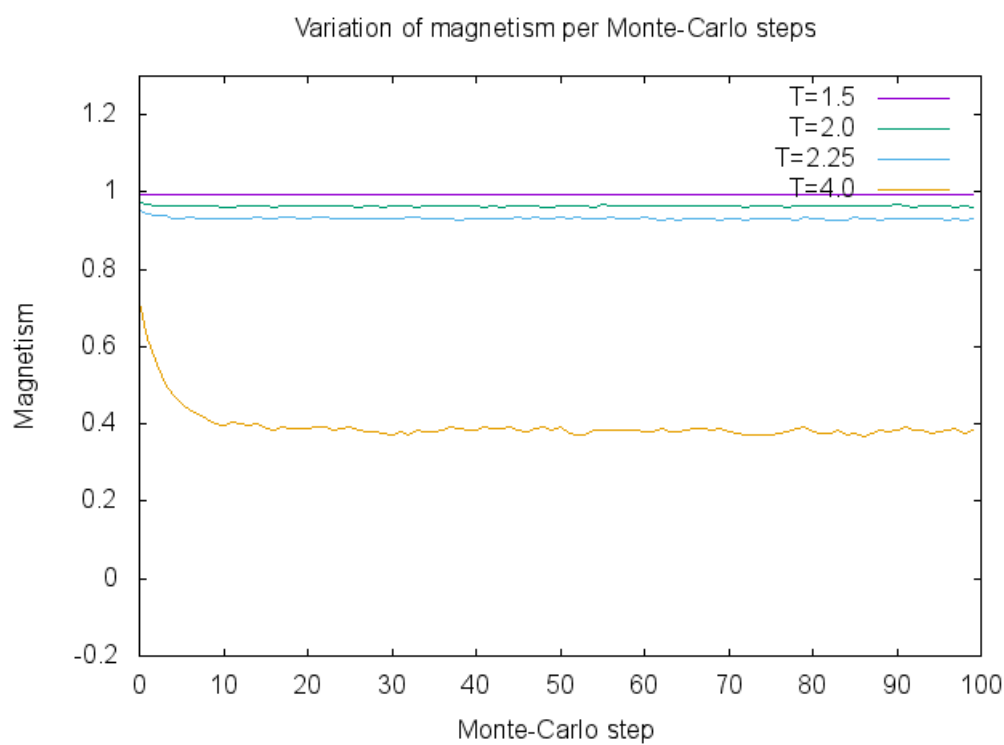
شکل ۱: میدان ۱.۰



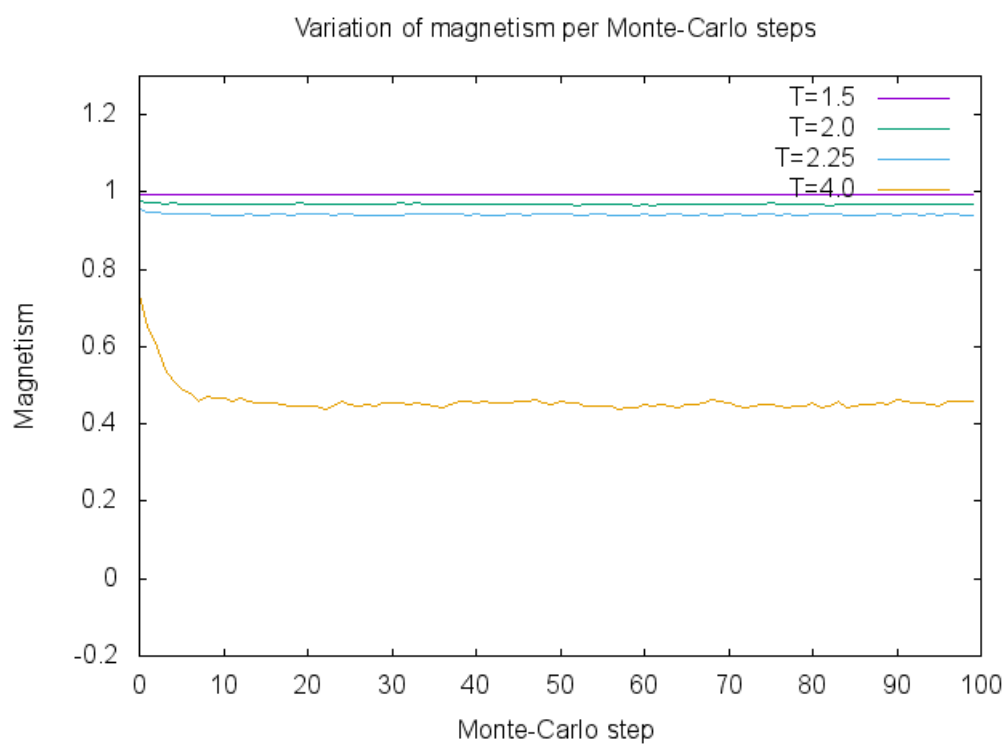
شکل ۲: میدان ۲.۰



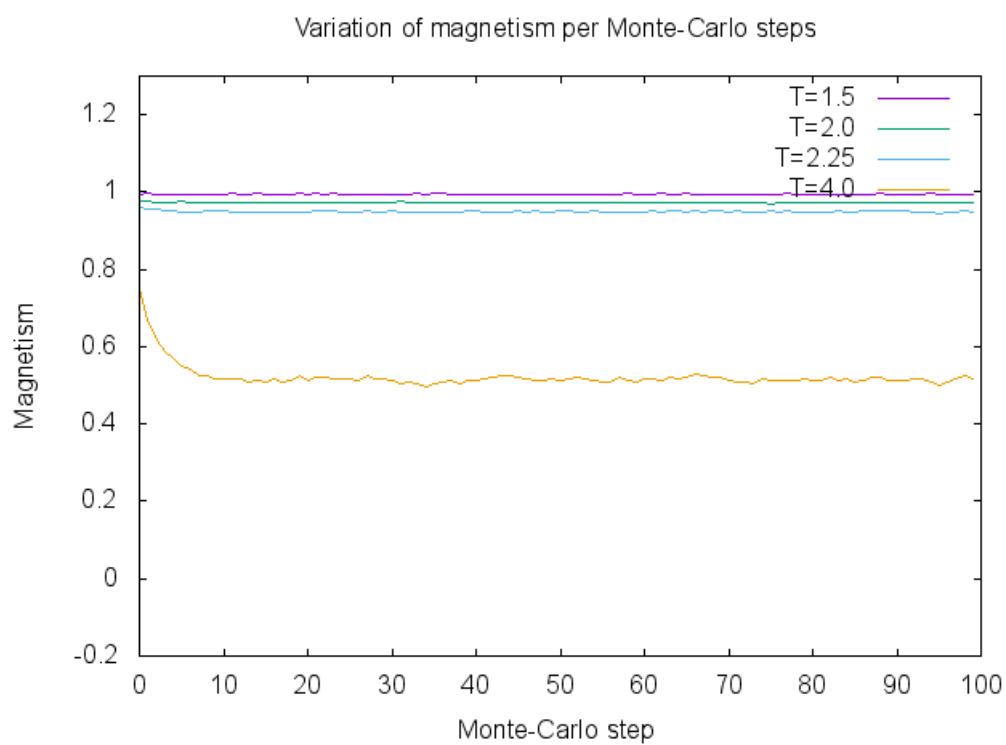
شکل ۳: میدان ۳.۰



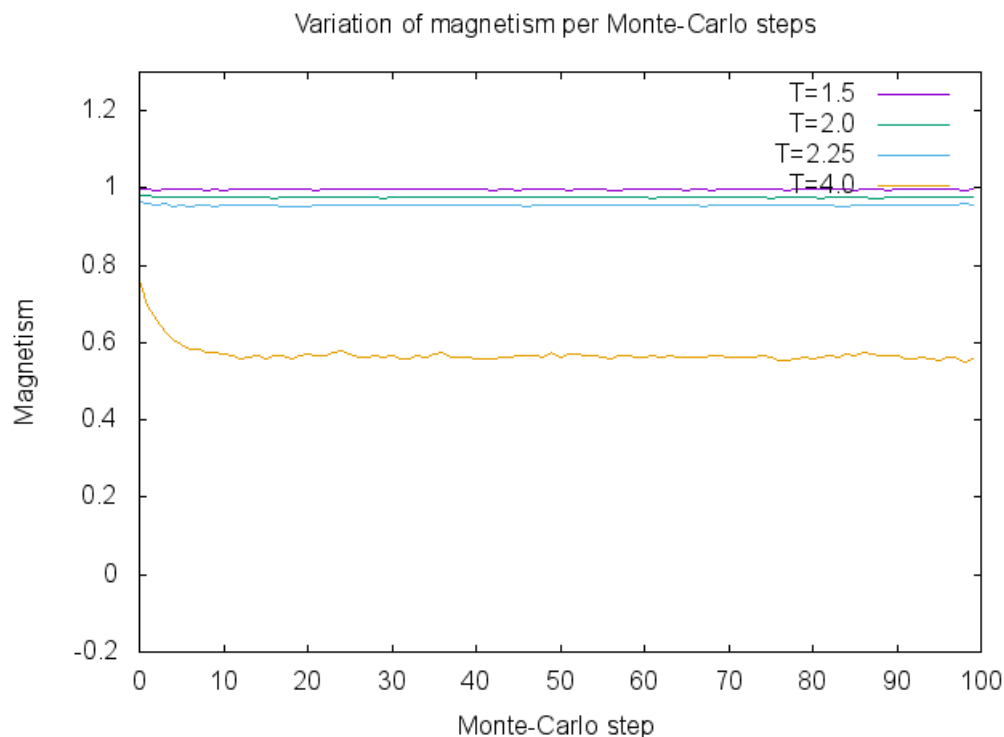
شکل ۴: میدان ۴.۰



شکل ۵: میدان ۵.۰



شکل ۶: میدان ۶.۰

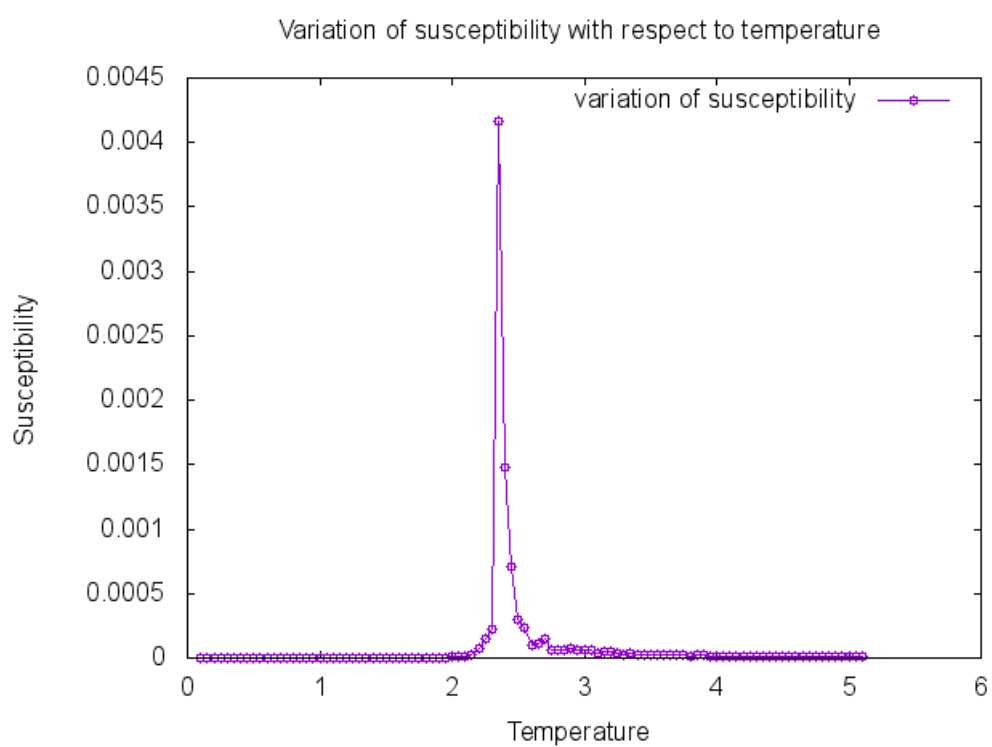
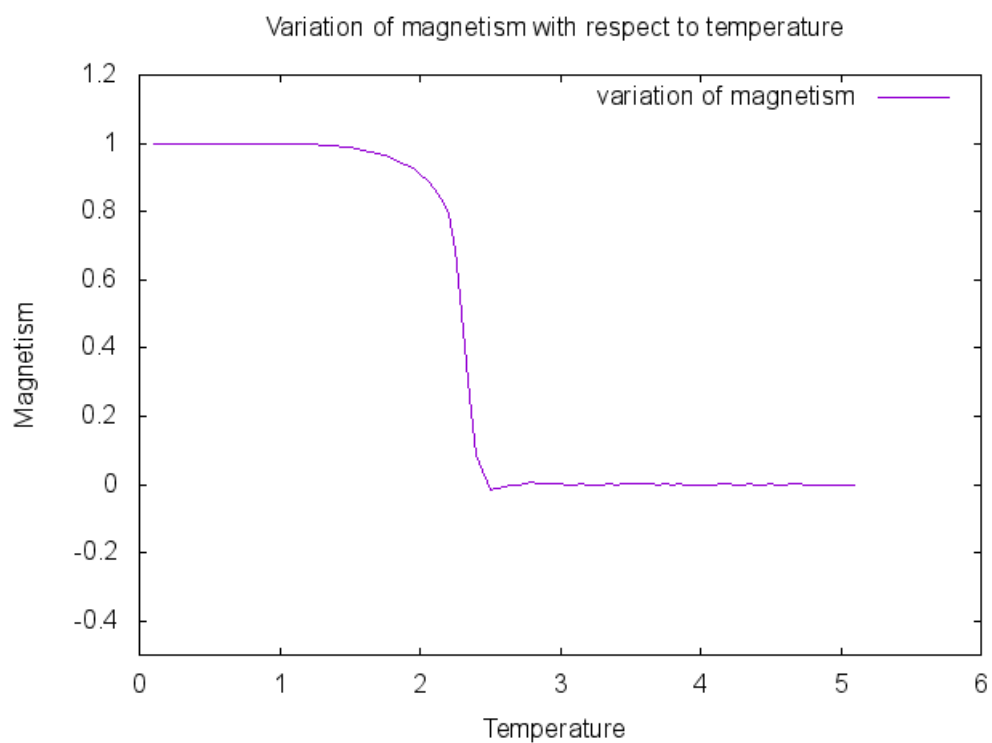


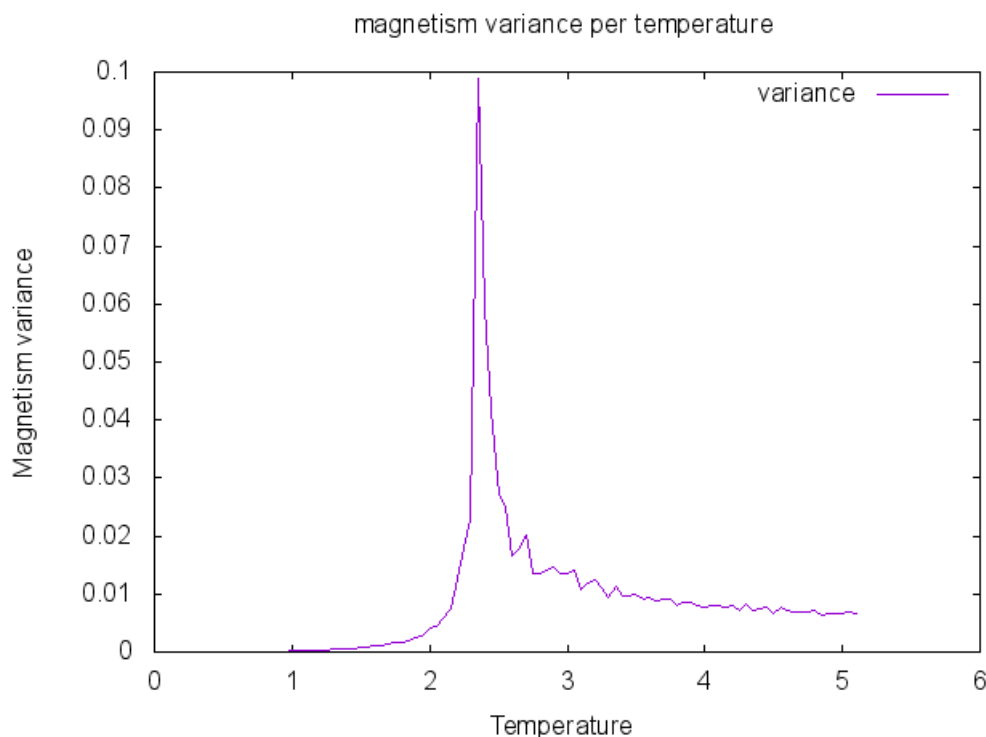
شکل ۷: میدان ۷.۰

باعث می‌شود در دماهای بالاتری دما بتواند بر این مولفه‌ی مقاومتی غلبه کند.

۸ نتایج پارامترهای فیزیکی

حال که دیدیم سیستم با توجه به دمایی که در آن است، در چه گامی به تعادل می‌رسد، یک حلقه در کد قرار می‌دهیم و به سیستم اجازه می‌دهیم به تعادل برسد. بعد از به تعادل، یک حلقه‌ی دیگر در برنامه قرار می‌دهیم و به اندازه‌ی ۱۰۰ قدم مونته کارلو اجازه‌ی اجرا می‌دهیم. در هر کدام از این گام‌ها مقادیر فیزیکی مورد نظر را محاسبه می‌کنیم. بعد از تمام شدن این حلقه از کمیت‌های فیزیکی که در هر گام به دست آمد متوسط گیری می‌کنیم. این متوسط گیری شامل تقسیم کردن نتیجه به تعداد قدم‌های مونته کارلو است. نتایج به شکل زیر است:





در این نتایج متوجه می‌شویم که در یک دمای خاص که بین ۲۵.۲ و ۵.۲ است یک تغییر در سیستم رخ می‌دهد. مغناطش در این دما به صفر می‌رسد که این موضوع گذار متبه اول سیستم را نشان می‌دهد. در این گذار ما یک شکست تقارن برای سیستم داریم که مغناطش از یک مقدار خاص به صورت ناگهانی به صفر می‌رسد. در نمودار پذیرفتاری نیز مشاهده می‌شود که یک پیک در دمای بحرانی برای سیستم داریم. پس در دمای بحرانی سیستم رفتار خاصی از خود نشان می‌دهد و نمی‌توان کمیت‌های فیزیکی را به خوبی بررسی کرد.

۱.۸ دمای بحرانی

در این بررسی برای پذیرفتاری سیستم ما تلاش کردیم تا برای سیستم دمای بحرانی را پیدا کنیم. دمای بحرانی نقطه‌ای از نمودار پذیرفتاری بر حسب دما است که مقدار پذیرفتاری ماکزیمم است. پیک قله‌ای این نمودار به ما دمای بحرانی را می‌دهد. در این بررسی مقداری که ما برای دمای بحرانی پیدا کردیم ۴.۲ بود. در این دما و همسایگی آن به دنبال پیدا کردن نمای بحرانی هستیم. این کار را با کد زیر در gnuplot انجام می‌دهیم. کد این کار به صورت زیر است و نتیجه نیز در شکل پایین آمده است.

```

۱      magnTemp<<"set title\"Variation of magnetism with respect
      to temperature\"\\n"
۲      <<"set terminal png \\n"
۳      <<"set output \"FIT.png\"\\n"
۴      <<"set ylabel \"Magnetism\"\\n"
۵      <<"set xlabel\"Temperature\"\\n"
۶      << "set autoscale \\n"
۷      << "beta=0.12 \\n"
۸      << "g(x)=x>0?(x<2.4?a*(2.4-x)**beta:0):0 \\n"
۹      << "fit g(x) '-' using 1:2 via a,beta \\n"
۱۰     << "set term x11" << endl;
```

```

iter   chisq      delta/lin  lambda  a          beta
0 3.9458219342e+00  0.00e+00  3.67e-01  1.000000e+00  1.250000e-01
1 8.1036711470e-01 -3.87e+05  3.67e-02  1.252697e+00  3.543997e-01
2 4.8380883410e-01 -6.75e+04  3.67e-03  1.396429e+00  5.246913e-01
3 4.5327678327e-01 -6.74e+03  3.67e-04  1.614923e+00  5.131656e-01
4 4.5323183993e-01 -9.92e+00  3.67e-05  1.619256e+00  5.153176e-01
5 4.5323118930e-01 -1.44e-01  3.67e-06  1.618512e+00  5.149870e-01
iter   chisq      delta/lin  lambda  a          beta
After 5 iterations the fit converged.
Final sum of squares of residuals : 0.453231
rel. change during last iteration : -1.43553e-06
degrees of freedom (FIT_NDF) : 198
rms of residuals (FIT_STDFIT) = sqrt(WSSR/ndf) : 0.047844
variance of residuals (reduced chisquare) = WSSR/ndf : 0.00228905
Final set of parameters      Asymptotic Standard Error
=====
a = 1.61851 +/- 0.0367 (2.268%)
beta = 0.514987 +/- 0.01526 (2.964%)
correlation matrix of the fit parameters:
      a      beta
a      1.000
beta    0.944  1.000

```

همان طور که دیده می شود این نمای بحرانی ۵۱۴۹۸۷.۰ به دست می آید.

۹ ثبت تغییرات سیستم و ایجاد فیلم

در یک قسمت از این بررسی ما به دنبال ایجاد یک روش برای مشاهده بصری سیستم بودیم. به این منظور ما به دنبال ثبت و ضبط حالت سیستم در دماهای مختلف بودیم. در این کار ما با تغییر جزئی دمای سیستم، به سیستم اجازه دادیم تا به تعادل برسد و در نهایت اندازه‌ی اسپین ها را ثبت کردیم. در این حالت به تعداد زیادی فایل متنی ایجاد کردیم که هر کدام یک موقعیت از سیستم را در دمای خاص توصیف می کنند. حال باید این فایل های متنی را به صورت یک عکس درست کنیم. فایل ایجاد شده در اینجا یک فایل متنی است که یک ماتریس 256×256 است که درایه های آن صفر و یک هستند. تولید عکس از یک فایل متنی را میتوان در نرم افزار متلب یا اکتاو با یک دستور `imagesc(A)` انجام داد، که `A` در اینجا همان فایل متنی بارگذاری شده است. در نهایت می توان همه عکس ها را به هم وصل کرد و یک فایل ویدیویی تولید کرد. به دلیل زیاد بودن این فایل های متنی ما از یک دستور دیگر در نرم افزار `gnuplot` استفاده کردیم و همه فایل های متنی را با هم به عکس تبدیل کردیم. و در نهایت در لینوکس با دستور `convert` این عکس ها را به فیلم تبدیل کردیم. کدی که برای تبدیل فایل متنی به عکس نوشتیم به شکل زیر است:

```

۱  #!/usr/bin/gnuplot
۲  set terminal png
۳  set cbrange [0:1]
۴  set key left
۵  set palette defined (0 "red", 0.4999 "red", 0.5 "blue", 1 "blue")
۶  set cbtics ("↓" 0.25, "↑" 0.75)
۷  do for [T=25:500:10] {
۸  do for [s=1:199:5] {
۹  temp=T/100.
۱۰ set output sprintf('pic/snapshot-%.2f-%d.png',temp,s)
۱۱ print sprintf('snapshot/snapshot-%.2f-%d.txt',temp,s)
۱۲ plot sprintf('snapshot/snapshot%.2f-%d.txt',temp,s) matrix with image
    title sprintf('T=%.2f step=%d',temp,s)
۱۳ }
۱۴ }

```

۱۰ همبستگی سیستم

در این قسمت ما به دنبال این هستیم که که همبستگی سیستم را محاسبه کنیم. همبستگی سیستم به دما بستگی دارد، پس در دماهای متفاوت باید نتایج متفاوتی برای همبستگی داشته باشیم. رابطه‌ی همبستگی به شکل زیر است:

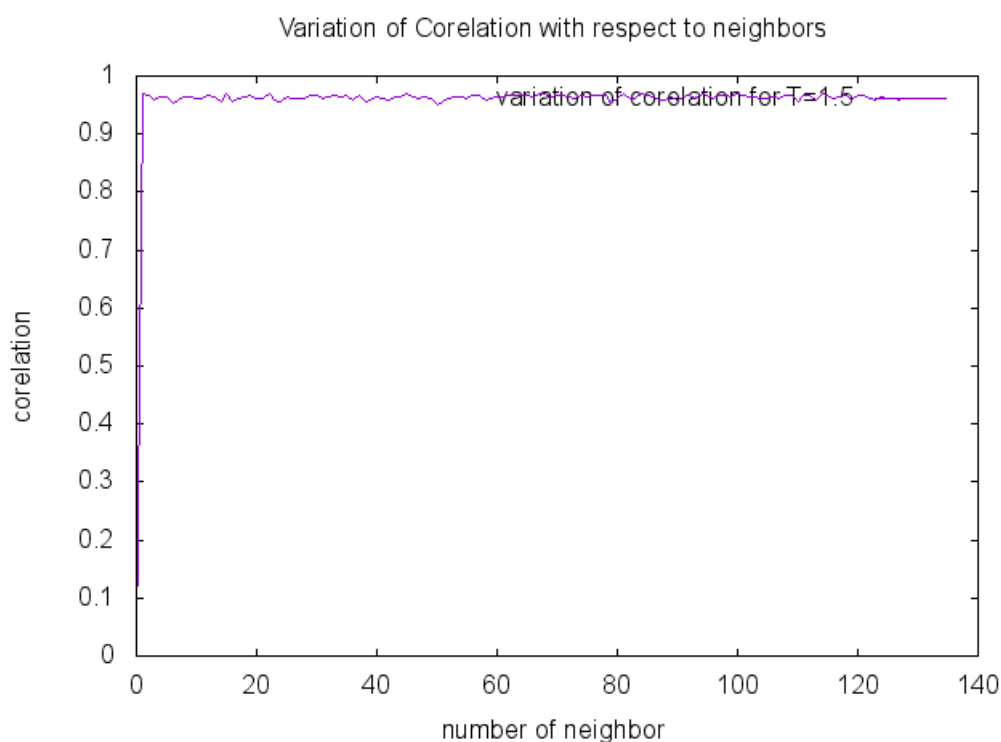
$$f(i) = \langle s_0 s_i \rangle$$

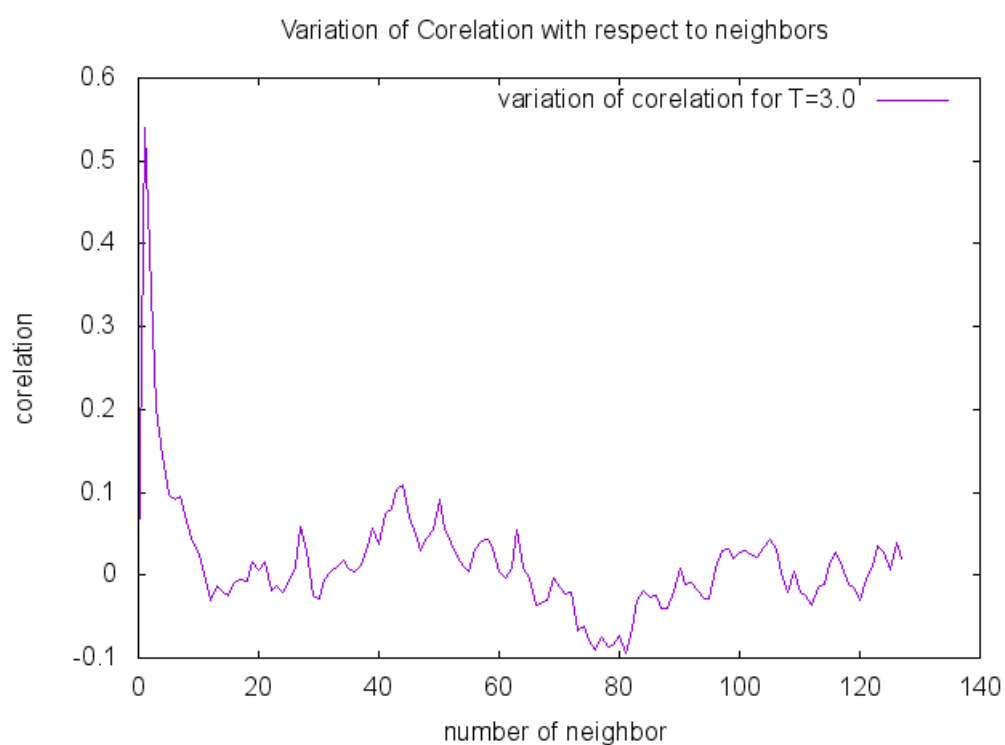
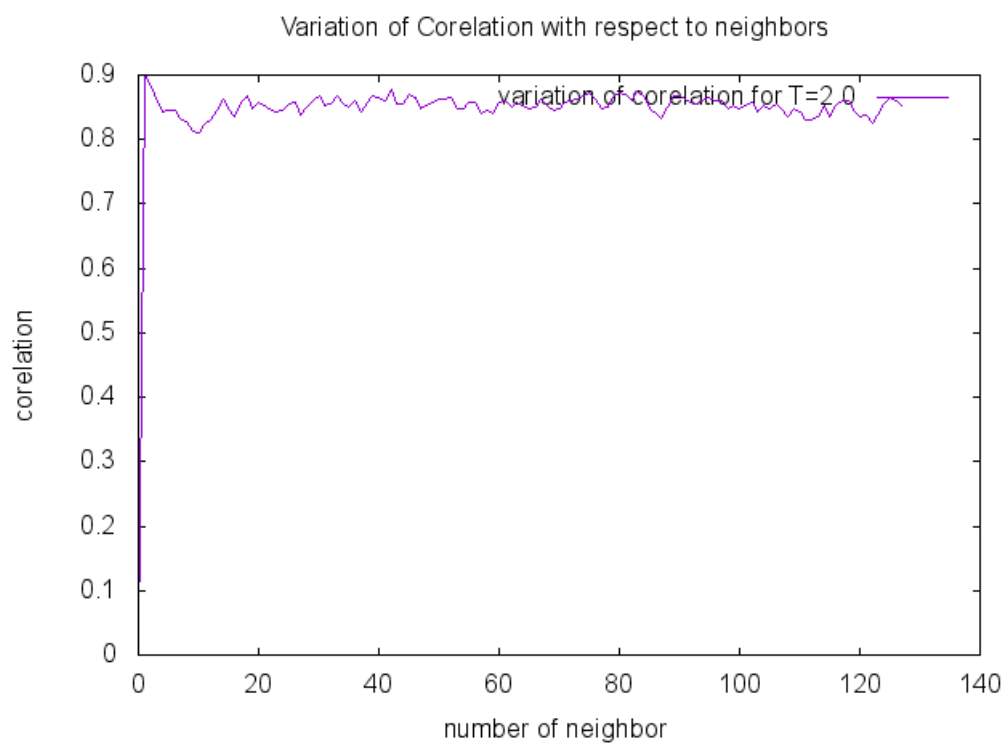
$$f(i) \propto e^{-r_i/\xi}$$

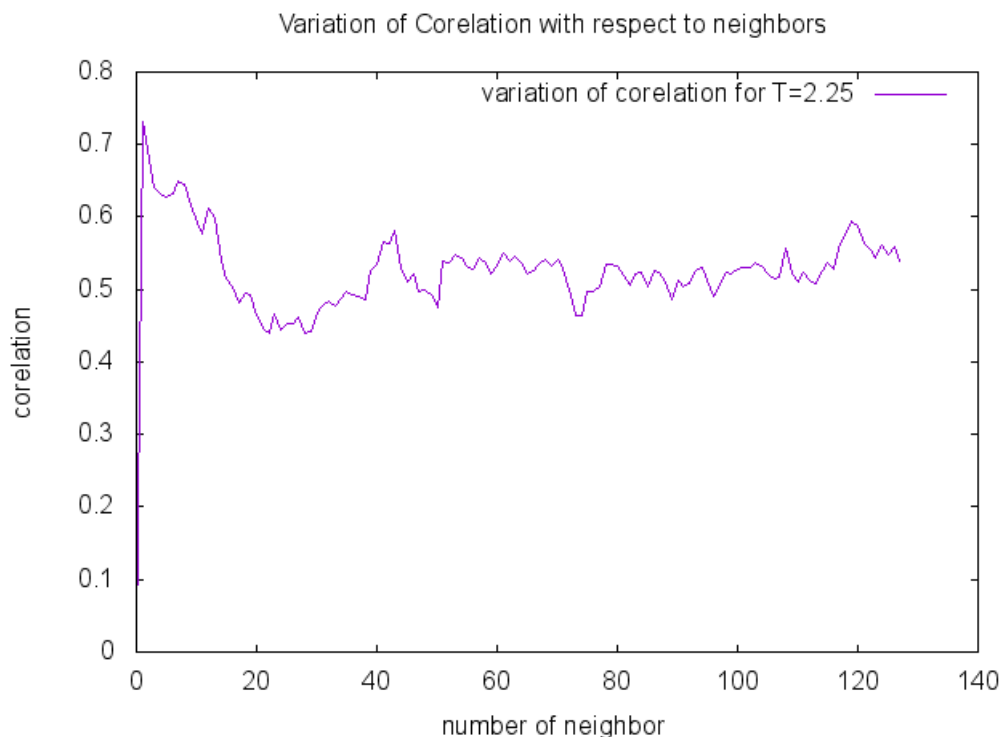
$$\xi \sim \frac{1}{|T - T_c|^\nu}$$

در رابطه‌ی بالا ξ طول همبستگی را برای ما مشخص می‌کند. این پارامتر را می‌توان از روی نمودار همبستگی بر حسب همسایه‌ها به‌دست آورد.

محاسبات ما برای همبستگی به این صورت است که اسپین با اندیس ۱۲۸ را انتخاب کردیم و همبستگی آن را با همه‌ی همسایه‌هایش محاسبه کردیم. این همبستگی را در هر قدم مونته کارلو محاسبه کردیم و در نهایت یک میانگین‌گیری روی کل این قدم‌ها انجام دادیم. لازم به ذکر است که سیستم ما در این جا 256×256 است و ما اسپین ۱۲۸ را برای بررسی انتخاب کردیم. از آنجایی که این همبستگی به دما بستگی دارد پس می‌توان این کار را برای دماهای متفاوت انجام داد. ما این کار را برای دماهای ۵.۱، ۲، ۲۵.۲ و ۳ انجام دادیم. نتیجه این بررسی به شکل زیر است:







همان گونه که از نمودارهای بالا مشخص است در دماهای پایین همبستگی زیاد است و تا همسایه‌های خیلی دور هم مقدار زیادی دارد. با افزایش دما همبستگی برای همسایه‌های دورتر کاهش پیدا می‌کند. برای مثال در دمای ۳ این مقدار برای همسایه‌های خیلی دور به صفر می‌رسد. این موضوع را می‌توان به صورت حوضه‌های مغناطیسی تغییر کرد. در دماهای کم حوضه‌های مغناطیسی بزرگ است، به صورتی که در دمای یک همه‌ی اسپین‌ها در یک جهت هستند و مغناطش سیستم بزرگ است. با افزایش دما همبستگی کاهش پیدا می‌کند و متناظر با این کاهش همبستگی می‌توان گفت که حوضه‌های مغناطیسی کوچک می‌شوند. در دماهای بالا این مقدار به صفر می‌رسد چرا که همه‌ی اسپین‌ها به صورت تصادفی جهت‌گیری می‌کنند. در دمای بحرانی مقدار همبستگی باید بی‌نهایت شود. ولی چون سیستم در حد ترمودینامیکی نیست این اتفاق نمی‌افتد. در ادامه ما همبستگی را در دمای بحرانی حساب کردیم. همبستگی در دمای ۴.۲ به شکل زیر است:

