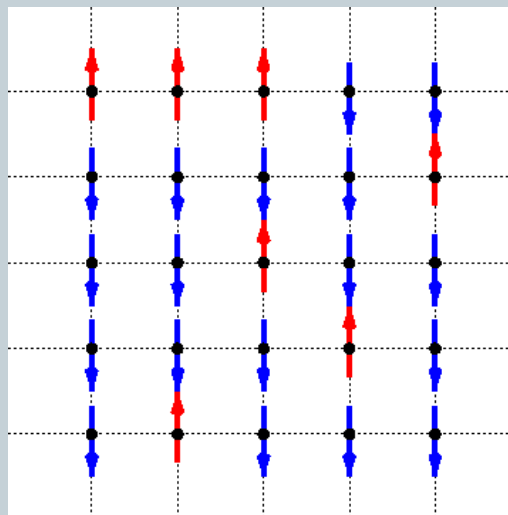


# Wykład 5



SYMULACJE MONTE CARLO W STAŁEJ  
TEMPERATURZE. ALGORYTM METROPOLISA.  
MODEL ISINGA



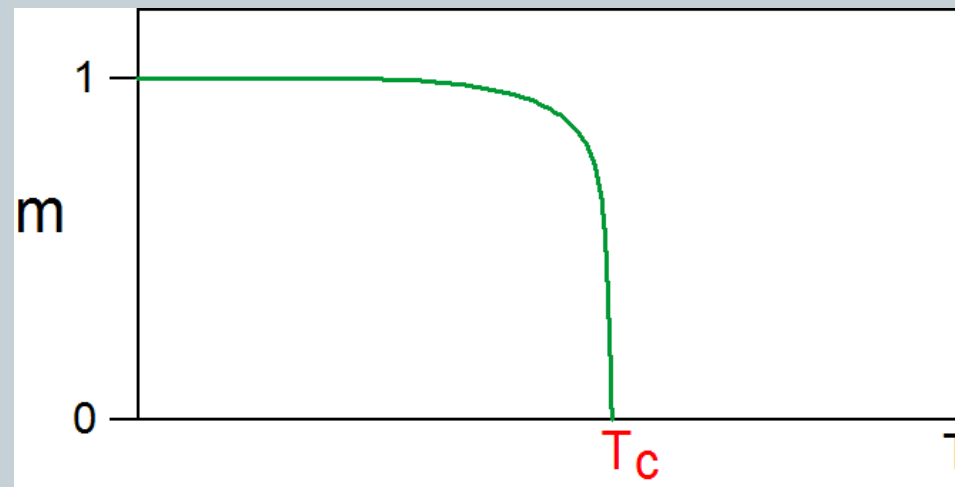
# Model Isinga



Model Isinga jest prostym modelem ferromagnetyka o spinie  $1/2$ , w którym spiny rozmieszczone w węzłach sieci oddziałują między sobą i z zewnętrznym polem magnetycznym  $H$ .

W ferromagnetyku pojawia się spontaniczne namagnesowanie w niskich temperaturach. Powyżej pewnej charakterystycznej temperatury  $T_c$  namagnesowanie znika.

W temperaturze  $T_c$  zachodzi przejście fazowe między fazą ferromagnetyczną ( $T < T_c$ ), a fazą paramagnetyczną ( $T > T_c$ ).



# Model Isinga



W d-wymiarowym modelu Isinga spiny  $s_i$  rozmieszczone są w węzłach sieci o rozmiarze liniowym  $L$ . Liczba węzłów  $N=L^d$ . Każdy spin może przyjmować wartość  $+1$  lub  $-1$ .

Hamiltonian

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - \mu H \sum_i s_i$$

Sumowanie w pierwszym składniku ograniczone jest do najbliższych sąsiadów,  $J$  jest całką wymiany, a  $\mu$  momentem magnetycznym spinu.

# Model Isinga



Energia wewnętrzna

$$U = \langle \mathcal{H} \rangle_T$$

gdzie

$$\langle A \rangle_T = Z^{-1} \sum_{s_1=\pm 1, s_2=\pm 1, \dots} A(s_1, s_2, \dots) \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(s_1, s_2, \dots)}{k_B T}\right)$$

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1, s_2=\pm 1, \dots} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(s_1, s_2, \dots)}{k_B T}\right)$$

# Model Isinga



Namagnesowanie  $M(T)$ , na spin  $m$

$$M(T) = \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle_T, \quad m = \frac{M}{N}$$

Ciepło właściwe na spin

$$C_V = \frac{1}{N} \frac{dU}{dT} = \frac{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2}{Nk_B T^2}$$

Podatność magnetyczna

$$\chi = \frac{N}{k_B T} \begin{cases} \langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2 & T < T_c \\ \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 & T > T_c \end{cases}$$

# Model Isinga



## Własności krytyczne

W pobliżu temperatury przejścia fazowego  $T_c$  obserwuje się zachowanie krytyczne wielkości takich wielkości jak

Ciepło właściwe  $M(T) \approx (T - T_c)^\beta$

Podatność magnetyczna  $\chi(T) \approx |T - T_c|^{-\gamma}$

Długość korelacji  $\xi(T) \approx |T - T_c|^{-\nu}$

gdzie  $\beta$ ,  $\gamma$  i  $\nu$  są wykładnikami krytycznymi

Długość korelacji jest nieskończona w punkcie krytycznym !

# Algorytm Metropolisa



W obliczaniu średnich w stałej temperaturze – w zespole kanonicznym, konfiguracji spinów  $s_1, s_2, \dots, s_N$  odpowiada prawdopodobieństwo

$$P(s_1, s_2, \dots) = Z^{-1} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(s_1, s_2, \dots)}{k_B T}\right)$$

Gdybyśmy z takim rozkładem wybrali konfiguracje spinowe  $\mathcal{K}_1, \mathcal{K}_2, \dots, \mathcal{K}_n$  to moglibyśmy oszacować średnią dowolnej wielkości  $A$  w temperaturze  $T$  następująco

$$\langle A \rangle_T \approx \bar{A} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A(\mathcal{K}_i)$$

Problem generowania konfiguracji spinowych z rozkładem  $P$  rozwiązuje algorytm Metropolisa

# Algorytm Metropolisa



Algorytm Metropolisa wykorzystuje koncepcję łańcucha Markowa, w którym w dyskretnym kroku czasowym układ przechodzi ze stanu  $\bar{X}_i$  do stanu  $\bar{X}_j$  z prawdopodobieństwem  $W_{ij}$ . Przejście do nowego stanu nie zależy od przeszłości.

Jeśli zadamy w chwili początkowej  $t=0$  rozkład na przestrzeni stanów

$$R_i^{(0)} \equiv R^{(0)}(\bar{X}_i)$$

to rozkład ten w chwili  $t=k$  zmieni się następująco

$$R_j^{(k)} = \sum_i R_i^{(k-1)} W_{ij} \qquad \mathbf{R}^{(k)} = \mathbf{R}^{(0)} \mathbf{W}^k$$

Warunkiem na istnienie jedynego rozkładu stacjonarnego  $\mathbf{R} = \mathbf{R}\mathbf{W}$  jest ergodyczność łańcucha Markowa - łańcuch z nieprzywiedlną macierzą przejścia, którego stany są stanami powracającymi, aperiodycznymi i o skończonym czasie powrotu.



# Algorytm Metropolisa



Konstrukcja macierzy przejścia **W**

Jaka powinna być macierz **W** aby rozkładem stacjonarnym był rozkład

$$P(s_1, s_2, \dots) = Z^{-1} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(s_1, s_2, \dots)}{k_B T}\right)$$

Z warunku równowagi szczegółowej na stacjonarność rozkładu

$$P(\bar{X}_i)W_{ij} = P(\bar{X}_j)W_{ji}$$

otrzymujemy

# Algorytm Metropolisa



$$W_{ij} = \Gamma_{ij} \min\left(1, \frac{P(\bar{X}_j)}{P(\bar{X}_i)}\right)$$

gdzie  $\Gamma_{ij}$  jest prawdopodobieństwem wyboru stanu  $j$  zwykle „bliskiego”, stanowi  $i$ ,  
a drugi czynnik - grający rolę prawdopodobieństwa akceptacji, można zapisać w postaci

$$\min\left(1, \frac{P(\bar{X}_j)}{P(\bar{X}_i)}\right) = \min\left(1, e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}\right), \quad \Delta E = \mathcal{H}(\bar{X}_j) - \mathcal{H}(\bar{X}_i)$$

# Algorytm Metropolisa



Algorytm.

1. Zadać stan początkowy  $X_0$  w chwili  $i=0$ .
2. Wygenerować testowy stan  $X_t$  z rozkładu  $\Gamma_{i,t}$ .
3. Obliczyć  $\Delta E = \mathcal{H}(X_t) - \mathcal{H}(X_i)$
4. Jeśli  $\Delta E \leq 0$  lub  $\text{random}() < \exp(-\Delta E / kT)$   
to  $X_{i+1} = X_t$ , a w przeciwnym razie  $X_{i+1} = X_i$ .
5.  $i++$ ; go to 2.

# Algorytm Metropolisa



Zastosowanie do układu spinów .

Bieżąca konfiguracja spinów  $\mathcal{K}_b = (s_1, s_2, \dots, s_N)$  o energii  $E_b$  ,

Nową konfigurację wybierzemy spośród tych różniących się tylko jednym spinem :

- poprzez wylosowanie numeru spinu , przyjmijmy  $p$
- i zamianę  $S_p \rightarrow -S_p$ .

Otrzymamy zatem konfigurację  $\mathcal{K}_n = (s_1, s_2, \dots, -s_p, \dots, s_N)$  o energii  $E_n$

Akceptacja nowej konfiguracji zależy od różnicy energii  $\Delta E = E_n - E_b$  .

Jeśli  $\Delta E \leq 0$  to akceptujemy  $\mathcal{K}_n$

W przeciwnym razie (  $\Delta E > 0$  ) akceptacja zachodzi z prawdopodobieństwem  $\exp(-\Delta E / kT)$

# Algorytm Metropolisa



Zastosowanie do układu spinów  $\Delta E$  nie wymaga obliczania energii nowej konfiguracji, gdyż przewrócenie jednego spinu w węźle  $p$ ,  $S_p \rightarrow -S_p$ , powoduje zmianę oddziaływania tego spinu z jego najbliższymi sąsiadami.

$$\Delta E = 2JS_p \left( \sum_{\text{po sąsiadach } p} S_j \right)$$

Przykład kodu obliczającego zmianę energii przy przewróceniu spinu w węźle  $(i,j)$  sieci kwadratowej z uwzględnieniem periodycznych warunków brzegowych

```
const int L=128, Lm1=L-1;
```

```
int DE( int i, int j)
```

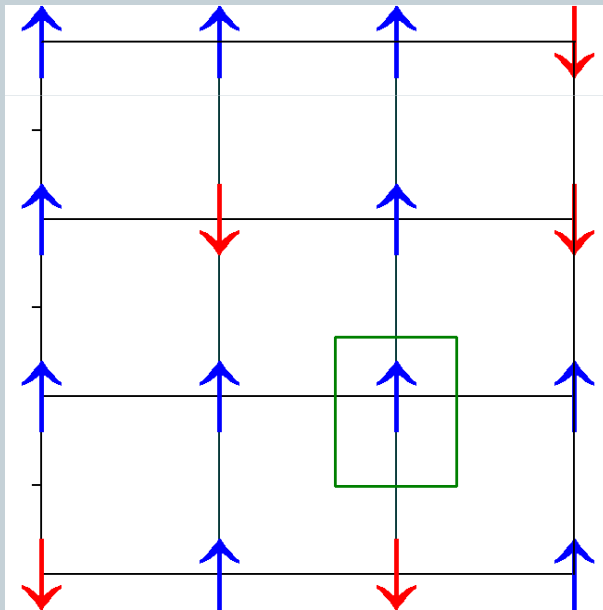
```
{int tym= S[i][(j+1)%L] + S[i][(j+Lm1)%L] + S[(i+Lm1)%L][j] + S[(i+1)%L][j];  
return( 2*tym *S[i][j]);}
```

# Algorytm Metropolisa

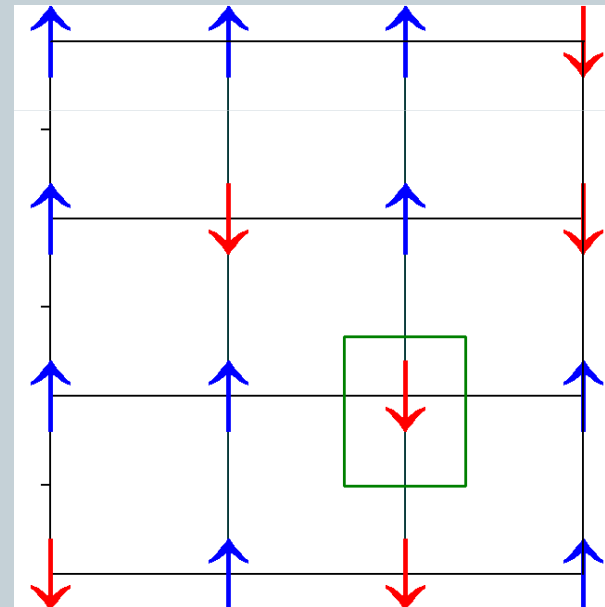


## Przewrócenie jednego spinu – losowo wybranego

Bieżąca konfiguracja



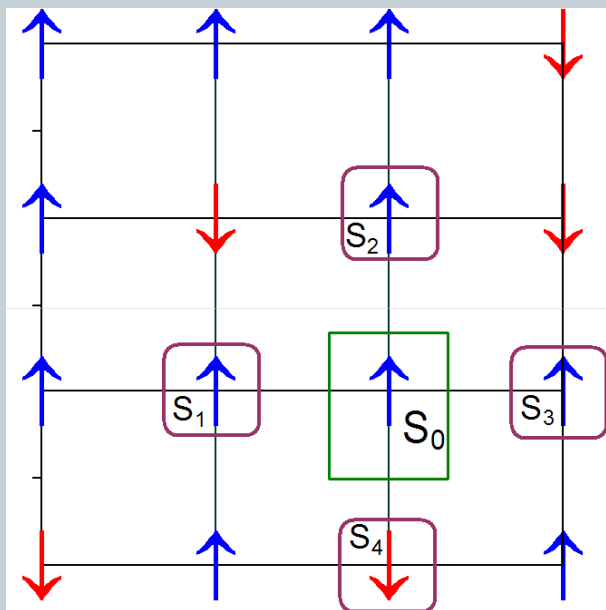
Testowana konfiguracja



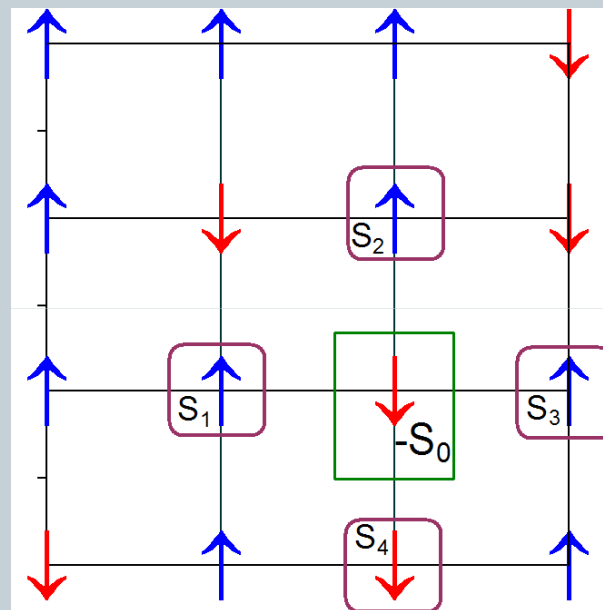
# Algorytm Metropolisa



## Zmiana energii



$$E_b = -JS_0(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)$$



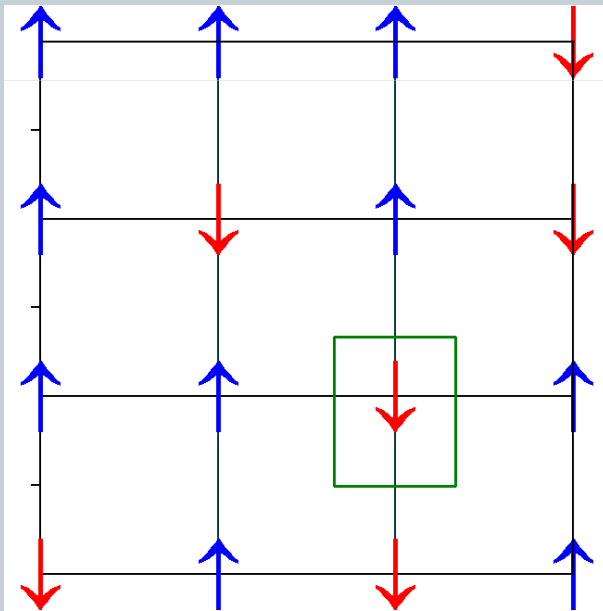
$$E_t = JS_0(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)$$

$$\Delta E = E_t - E_b = 2JS_0(S_1 + S_2 + S_3 + S_4)$$

# Algorytm Metropolisa

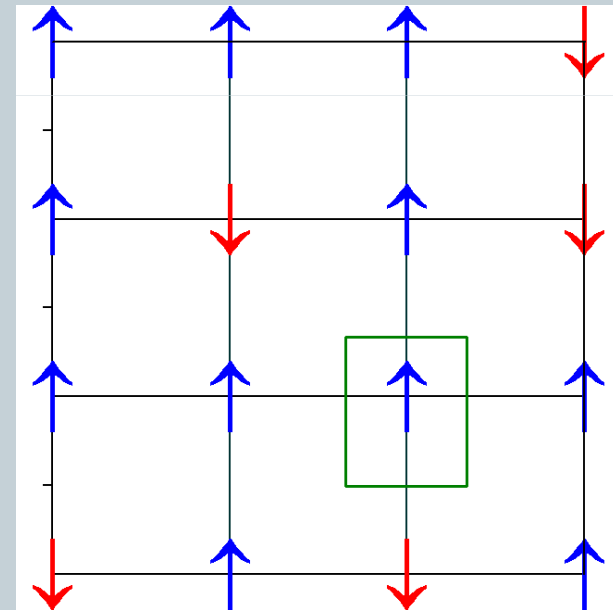
## Akceptacja

Jeśli  $\Delta E \leq 0$  lub  
 $\text{rng}() < \exp(-\Delta E/kT)$



## Brak akceptacji

$\Delta E > 0$  i  
 $\text{rng}() > \exp(-\Delta E/kT)$





# Algorytm Metropolisa



Symulacja Monte Carlo korzystająca z algorytmu Metropolisa składa się z 3 etapów

1. Inicjalizacji układu w chwili  $t=0$ .
2. Termalizacji w czasie  $t=\tau_R$ .
3. Pomiarów od chwili  $\tau_R$  co odstęp czasowy  $\delta\tau$ .

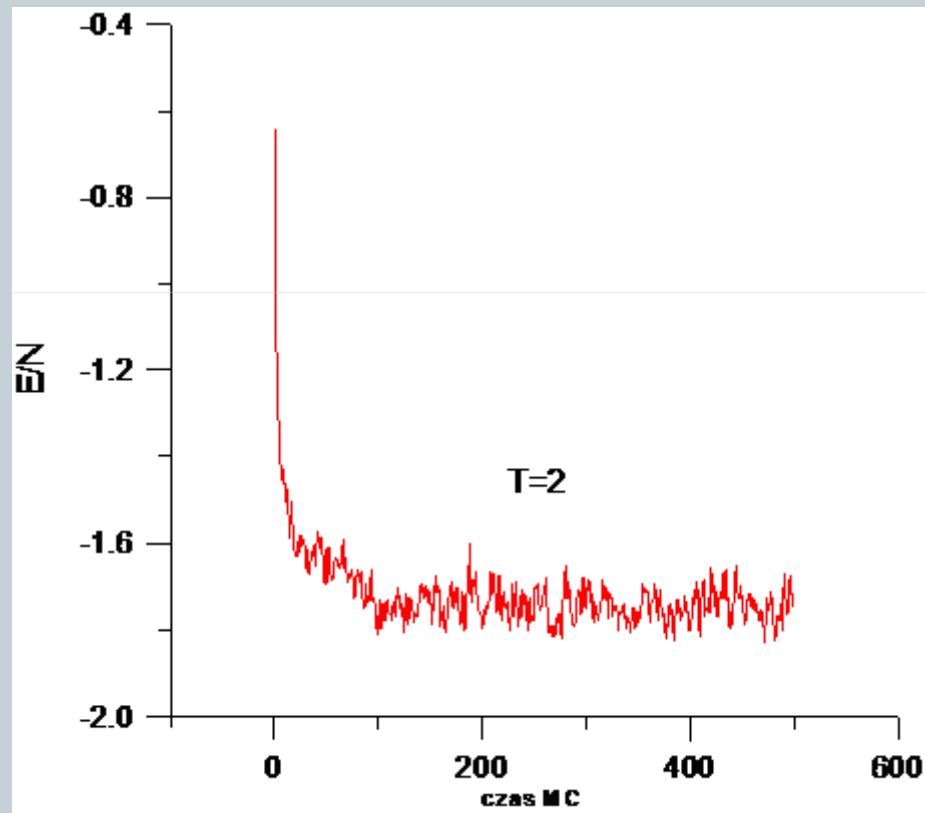
Czas  $t$  mierzony jest w krok MC.

1 krok MC w modelu Isinga z  $N$  spinami odpowiada testowaniu kolejnych  $N$  konfiguracji spinowych.

# Algorytm Metropolisa



Termalizacja



# Algorytm Metropolisa



Pomiary interesującej nas wielkości  $A$  polegają na obliczeniu średniej arytmetycznej

$$\langle A \rangle_T = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} A_i$$

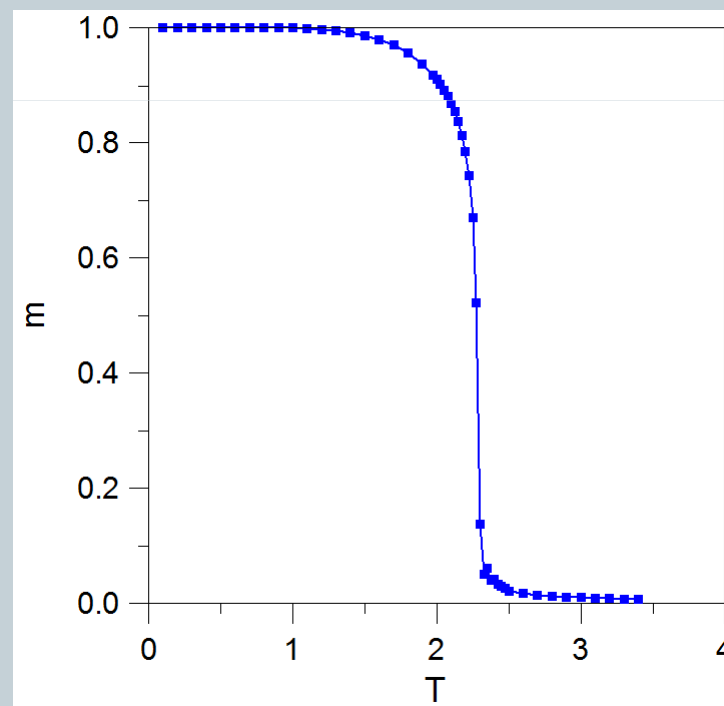
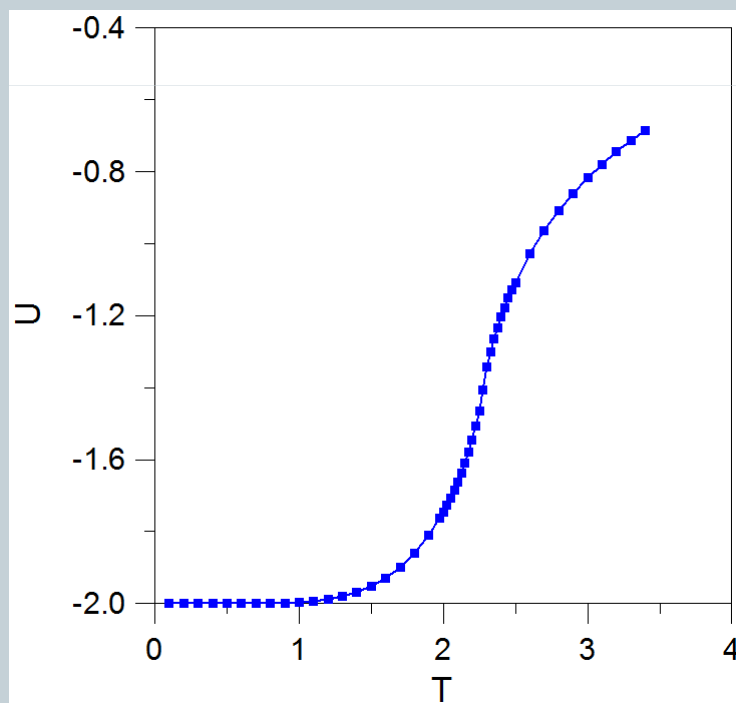
gdzie  $A_i$  jest wartością  $A$  obliczoną na konfiguracji  $\mathcal{K}_i$  w chwili  $t = \tau_R + i^* \delta\tau$

Konieczność uwzględnienia odstępu czasowego  $\delta\tau$  w pomiarach wynika z faktu, iż kolejne konfiguracje w łańcuchu Markowa są silnie skorelowane.

# Model Isinga – wyniki symulacji



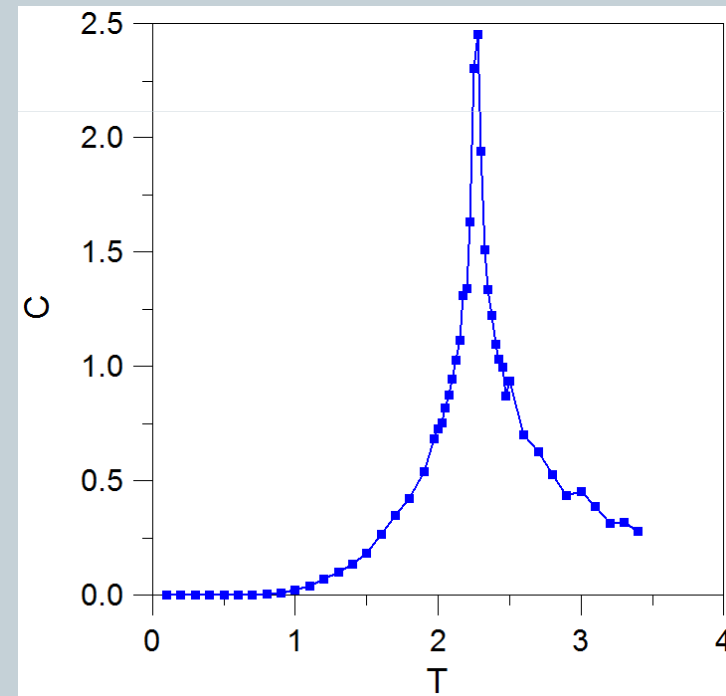
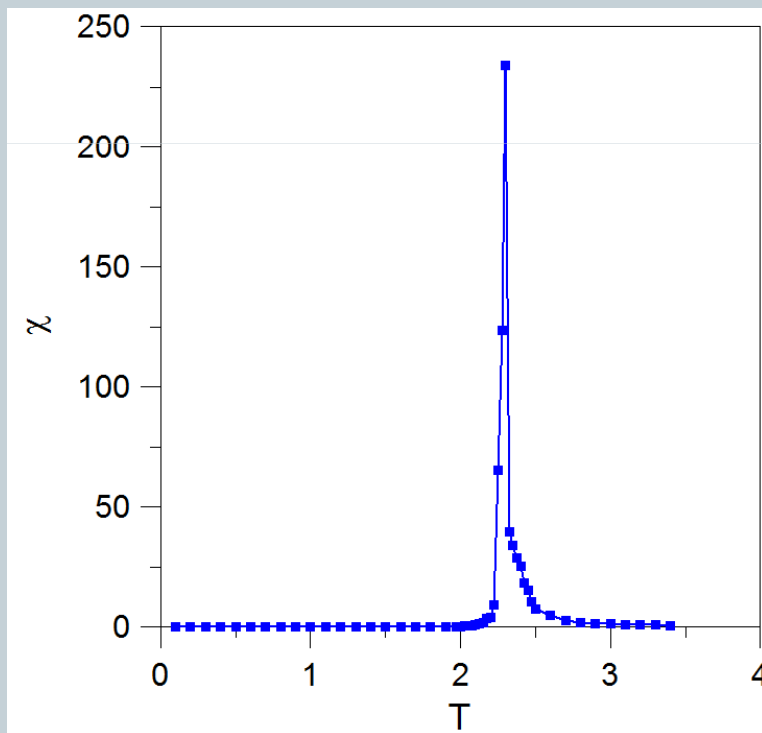
Zastosujemy teraz algorytm Metropolis'a do zbadania zależności temperaturowych energii wewnętrznej  $U$ , namagnesowania  $m$ , podatności magnetycznej  $\chi$  i ciepła właściwego  $C$  w dwuwymiarowym modelu Isinga na sieci kwadratowej o  $L=256$ .



# Model Isinga – wyniki symulacji



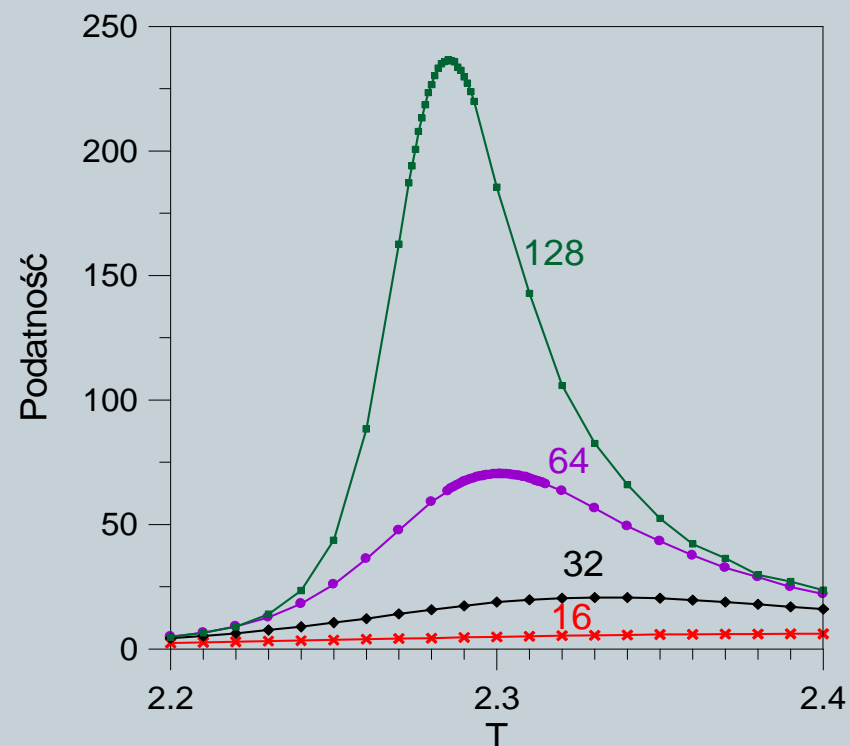
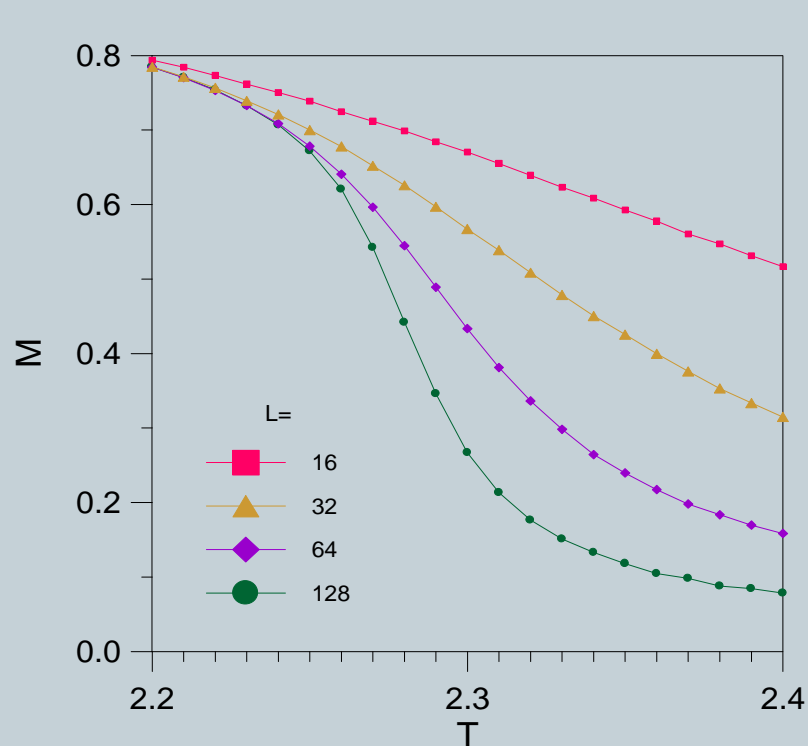
Podatność i ciepło właściwe w skończonym mają maksima w pobliżu  $T_c$  nieskończonego układu (pobliżu  $T_c \approx 2.269$ )



# Model Isinga – wyniki symulacji



Wyniki symulacji skończonym układzie zależą w pobliżu  $T_c$  od o rozmiaru liniowego  $L$  ponieważ długość korelacji  $\xi$  jest większa od  $L$



# Model Isinga – wyniki symulacji



Ważną rolę w wyznaczeniu punktu krytycznego  $T_c$  gra kumulanta Bindera

$$K_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2}$$

Wielkość ta powyżej  $T_c$  dąży do zera – fluktuacje namagnesowania są gaussowskie, a w niskich temperaturach osiąga wartość  $2/3$ .

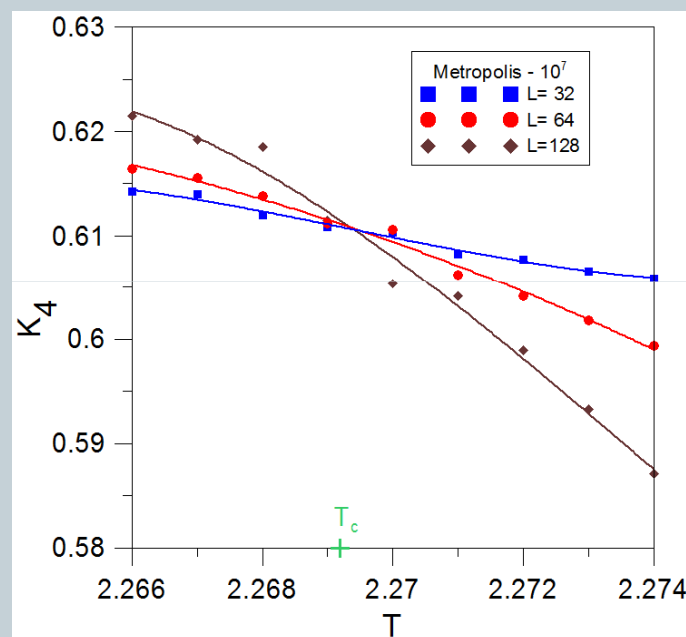
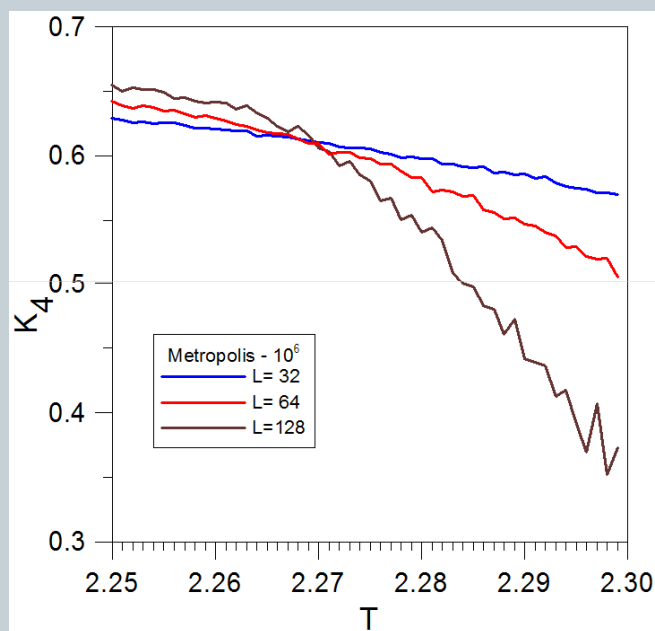
Binder pokazał, że  $K_4$  skończonego układu o rozmiarze  $L$  osiąga uniwersalną wartość  $K_4^*$  w  $T=T_c$

$$K_4(T = T_c, L) = K_4^*$$

# Model Isinga – wyniki symulacji



Kumulanty Bindera w pobliżu  $T_c$  dla 3 rozmiarów  $L=32, 64$  i  $128$



Widoczne duże błędy statystyczne dla  $L=128$  to efekt spowolnienia krytycznego – wada algorytmu Metropolis. Do wyznaczenia  $T_c$  stosuje się algorytmy klastrowe (np. algorytm Wolfa) lub metodę Wanga-Landaua – wolną od spowolnienia krytycznego.



# Model Isinga – wyniki symulacji



Wyznaczenie  $T_c$  z przecięcia się kumulant Bindera obliczonych metodą Wanga-Landaua.

