

## Symulacje komputerowe w fizyce

### Zjawiska krytyczne. Algorytmy klastrowe

W przejściach fazowych drugiego rodzaju, parametr porządku znika w sposób ciągły w  $T_c$ , np. spontaniczne namagnesowanie w ferromagnetyku.

W pobliżu  $T_c$  obserwuje się zachowanie krytyczne wielkości takich wielkości jak parametr porządku, długość korelacji, ciepło właściwe, podatność itd. Np. namagnesowanie maleje z nieskończonym nachyleniem zbliżając się do punktu krytycznego od strony niższych temperatur. Natomiast długość korelacji, podatność i ciepło właściwe są rozbieżne w  $T_c$ , oczywiście w granicy termodynamicznej.

Zachowanie krytyczne w ferromagnetyku w pobliżu  $T_c$

Namagnesowanie	$M(T) \approx (T - T_c)^\beta$
----------------	--------------------------------

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

Ciepło właściwe  $C(T) \approx |T - T_c|^{-\alpha}$

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

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

## Spowolnienie krytyczne

W algorytmie Metropolis'a ( i innych) bazującym na generowaniu testowej konfiguracji poprzez wprowadzenie lokalnej zmiany w bieżącej konfiguracji, np. przewrócenie jednego spinu, pojawia się problem spowolnienia krytycznego.

Średniokwadratowe odchylenie wielkości  $A$  na  $n$ -elementowej próbie wygenerowanej za pomocą algorytmu Metropolis'a z odstępem czasowym  $\delta t$

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{n} \left[ \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \left( 1 + \frac{2\tau_A}{\delta t} \right) \right]$$

zależy od czasu relaksacji  $\tau_A$

$$\tau_A = \int_0^{\infty} \Phi_A(t) dt, \quad \Phi_A(t) = \frac{\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

Czas relaksacji  $\tau$  rośnie gwałtownie w pobliżu temperatury krytycznej  $T_c$

$$\tau \sim \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\nu_z} \quad \text{a w układzie o skończonym rozmiarze } L, \quad \tau \sim L^z$$

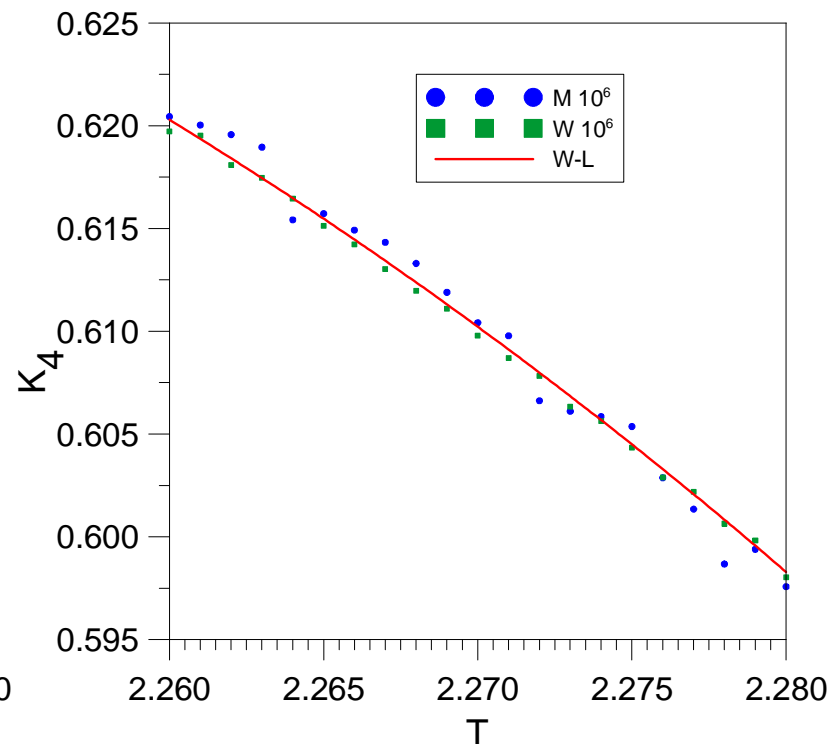
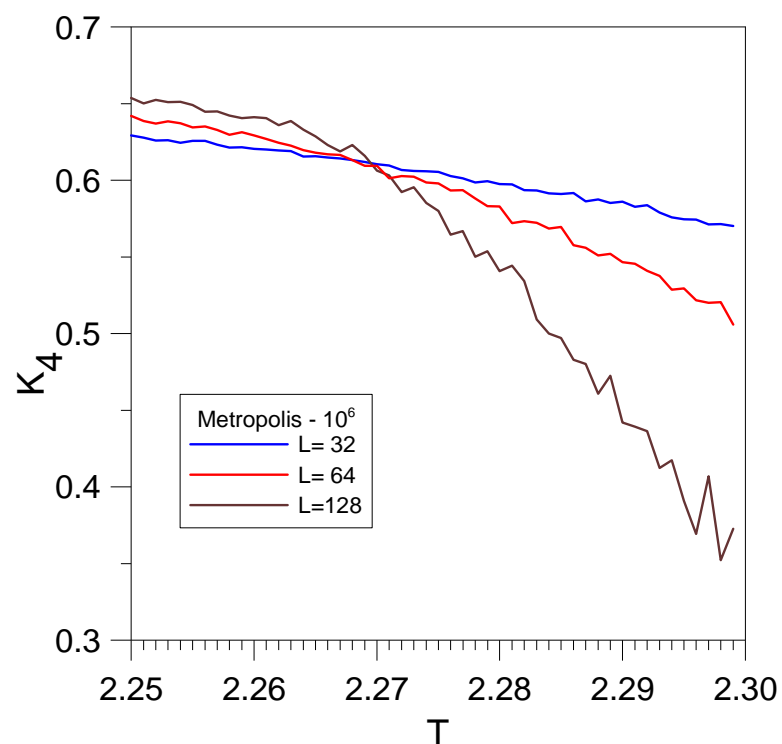
gdzie

$\nu$  – wykładnik zasięgu korelacji (  $\nu=1$  dla 2d Isinga)

$z$  –dynamiczny wykładnik krytyczny (  $z \approx 2.1$  dla 2d Isinga i alg. Metropolis).

Proste wytłumaczenie spowolnienia krytycznego - zasięg korelacji dąży do nieskończoności w  $T_c$ , a informacja o przewróceniu spinu przekazywana jest poprzez najbliższych sąsiadów, czyli dyfuzyjnie. W ruchu dyfuzyjnym  $\langle r^2(t) \rangle \sim t$ , więc przebycie drogi  $L$  wymaga czasu  $t \sim L^2$

Z analizy błędów statystycznych wynika, że dokładny pomiar, np. namagnesowania, nie jest możliwy w  $T_c$  za pomocą algorytmu Metropolis.



Kumulanta Bindera jako funkcja  $T$  otrzymana za pomocą algorytmu Metropolisa dla trzech rozmiarów liniowych (lewy panel). W prawym panelu, zestawienie wyników dla  $L=32$  otrzymanych metodami: Metropolisa (M), Wolfa (W) i Wanga-Landau (W-L).

Problemy z obliczeniami za pomocą algorytmu Metropolisa są przedstawione na powyższych rysunkach. Obliczenia kumulanty Bindera w pobliżu  $T_c$  są obarczone dużymi błędami nawet dla  $10^6$  - elementowej próby.

Usunięcie lub ograniczenie spowolnienia krytycznego można uzyskać poprzez zastosowanie kolektywnych zmian spinów. Omówimy tutaj dwa algorytmy tego typu: algorytm Swendsena-Wanga (S-W) i algorytm Wolfa.

Algorytm S-W bazuje na idei perkolacji typu wiązań. W bieżącej konfiguracji tworzy się wirtualne klastry poprzez wstawienie wiązań pomiędzy sąsiednimi węzłami o jednakowych spinach, z prawdopodobieństwem

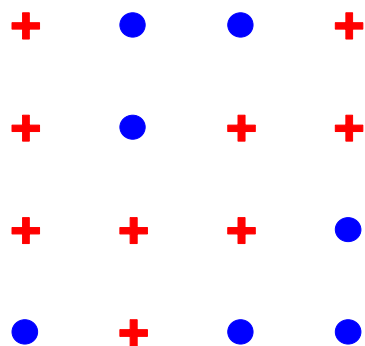
$$p = 1 - \exp\left(-\frac{2J}{kT}\right),$$

Każdy klaster typu wiązań zawiera więc odrębne węzły z jednakowymi spinami. Ostatnim etapem jest losowe wybranie wartości spinu dla każdego klastra.

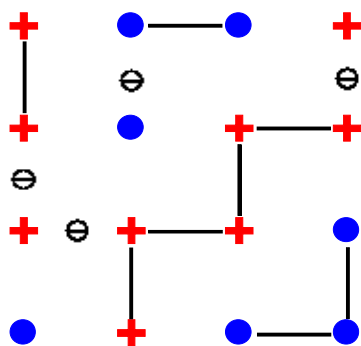
## Algorytm Swendsena – Wanga

1. Startujemy z konfiguracji  $\{S\}$
2. Przeglądamy po kolei wszystkie pary najbliższych sąsiadów. Jeśli wystąpi para o jednakowych spinach to wstawiamy wiązanie z prawdopodobieństwem  $p$ .
3. Identyfikujemy klastry typu wiązań (pojedynczy spin to też klaster !).
4. Losujemy z prawdopodobieństwem  $1/2$  wartość spinu dla każdego klastra i ustawiamy spinom wylosowane wartości.
5. Powtarzamy czynności od punktu nr2.

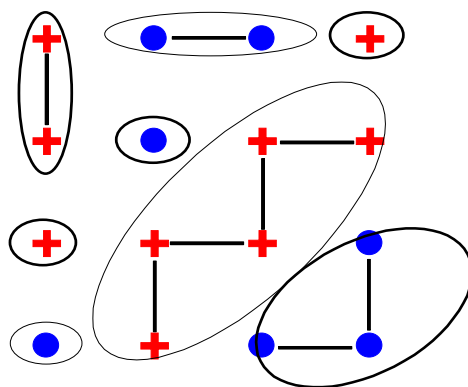
1 Konfiguracja startowa



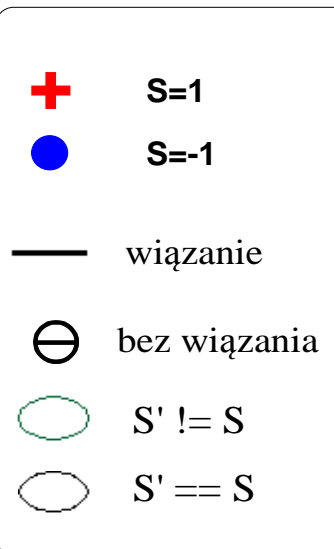
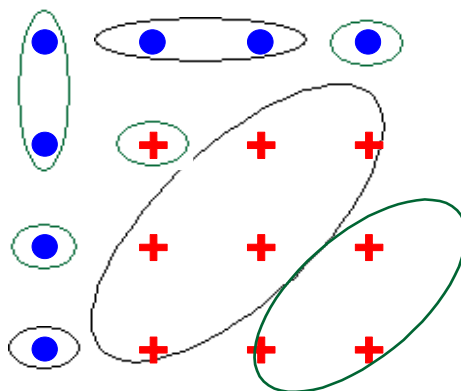
2 Wstawianie wiązań z  $P=1-\exp(-2J/kT)$



3 Identyfikacja klastrów wiązań



4 Losowy znak spinu w klastrze z  $p=1/2$



Ilustracja działania algorytmu Swendsena-Wanga.

Zastosowanie algorytmu S-W do symulacji modelu Isinga prowadzi do znacznej redukcji czasu relaksacji. Dynamiczny wykładnik krytyczny przyjmuje wartość  $z_E=0.27$ ,  $z_\chi=0.20$  dla  $d=2$  oraz  $z_E=0.27$ ,  $z_\chi=0.20$  dla  $d=3$ .

## Algorytm Wolfa.

Innym algorytmem, który tu omówimy jest znacznie prostszy algorytm Wolfa. Tworzony jest jeden klaster typu wiązań metodą wzrostu, poprzez dołączanie węzła z prawdopodobieństwem  $p$  takim samym jak w algorytmie S-W (w przypadku modelu Isinga  $p=1-\exp(-2J/kT)$ ). Klaster powstaje z węzłów o jednakowych spinach, równych spinowi losowo wybranego węzła (zarodka). Po utworzeniu klastra, wszystkim spinom go tworzącym zmienia się znak na przeciwny.



## Algorytm

1. Wybieramy losowo węzeł sieci  $i$ , z  $S_i$  jako zarodkiem.
2. Odwiedzając najbliższych sąsiadów  $j$  węzła  $i$ , przyłączamy do klastra węzły ze spinem  $S_j = S_i$  z prawdopodobieństwem  $p = 1 - \exp(-2J/kT)$ . Tak naprawdę, to dodajemy wiązanie pomiędzy węzły  $j$  i  $i$  z prawdopodobieństwem  $p$ .
3. Dla każdego dołączonego spinu powtarzamy procedurę z p.2.
4. Po zakończeniu budowy klastra zmieniamy znak jego spinom.

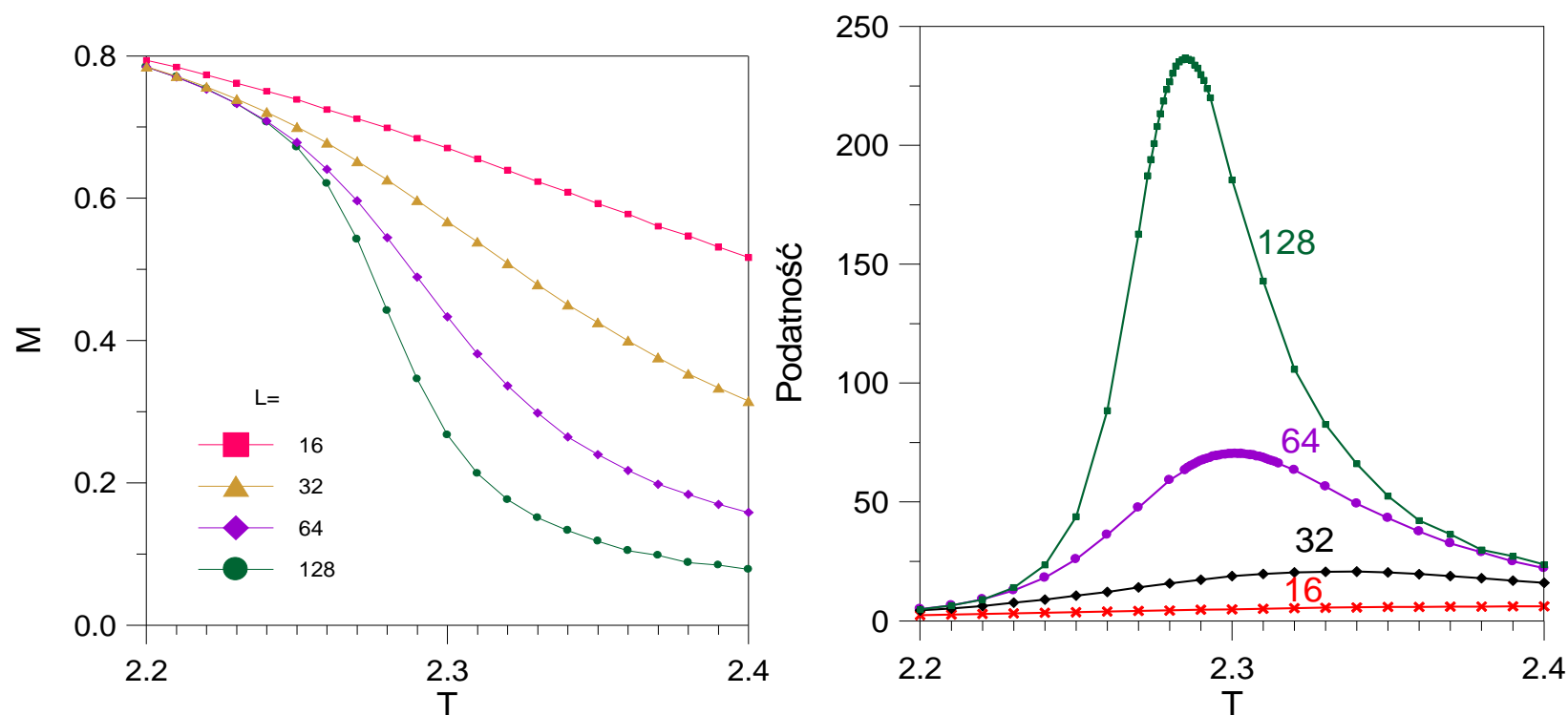
Widzimy, że jest to algorytm wzrostu klastra typu wiązań, którego wielkość będzie zależeć głównie od temperatury.

Zaletą algorytmu Wolfa jest jego prostota. Można go również zaimplementować w takiej postaci, że przyłączanym do klastra spinom od razu zmieniany jest znak. Ważne jest, aby tylko raz testować dodanie wiązania pomiędzy parą sąsiednich spinów o takim samym znaku, jak znak zarodka.

Dynamiczny wykładnik krytyczny w przypadku algorytmu Wolfa przyjmuje wartość  $z_E = 0.28$ ,  $z_\chi = 0.13$  dla  $d=2$  oraz  $z_E = 0.28$ ,  $z_\chi = 0.14$  dla  $d=3$ .

## Skalowanie. Finite-size scaling

Zasięg korelacji  $\xi$  w skończonym układzie jest ograniczony do rozmiaru liniowego układu  $L$ . Z drugiej strony  $\xi$  jest rozbieżne w  $T_c$ . Więc, wyniki symulacji w pobliżu  $T_c$  zależą od rozmiarów układu  $L$ .



Namagnesowanie i podatność magnetyczna dla kilku rozmiarów liniowych  $L$

Teoria skalowania skończonych układów daje nam ogólny opis zależności każdej z tych wielkości od  $T$  i  $L$  za pomocą uniwersalnych funkcji skalujących. Zakłada się, że liniowy rozmiar  $L$  skaluje się z długością korelacji  $\xi$ ,  $\xi \sim t^{-\nu}$ ,  $t = (T - T_c)/T_c$

Prawdopodobieństwo obserwowania namagnesowania  $m$  w układzie o objętości  $L^d$  przyjmuje w tej teorii postać

$$P_L(m, t) = \xi^{\frac{\beta}{\nu}} P(L/\xi, m \xi^{\frac{\beta}{\nu}}) = L^{\frac{\beta}{\nu}} \tilde{P}(L/\xi, mL^{\frac{\beta}{\nu}})$$

dla  $L \rightarrow \infty$ ,  $\xi \rightarrow \infty$ ,  $L/\xi = \text{const}$

Czynnik skalujący  $L^{\beta/\nu}$  występujący przed funkcją skalującą  $\tilde{P}$  pochodzi z warunku unormowania  $P_L$  do jedynki, a  $t$  zastąpione jest przez  $\xi^{-1/\nu}$ .

Z definicji  $k$ -tego momentu  $\langle m^k \rangle$  otrzymuje się następujący związek

$$\langle m^k(T, L) \rangle = L^{-\frac{k\beta}{\nu}} \tilde{M}_k \left( t L^{\frac{1}{\nu}} \right)$$

Teraz możemy przedstawić skalowanie namagnesowania i podatności

$$m(T, L) = L^{-\frac{\beta}{\nu}} \tilde{M} \left( t L^{\frac{1}{\nu}} \right)$$

$$\chi(T, L) = L^{\frac{\gamma}{\nu}} \tilde{\chi} \left( t L^{\frac{1}{\nu}} \right)$$

Do oszacowania punktu krytycznego wygodnie jest rozważać kumulantę 4-tego rzędu

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

która w  $T_c$  przyjmuje uniwersalną wartość.

$$K_4(T, L) = \tilde{K}_4 \left( t L^{\frac{1}{\nu}} \right)$$

Wartość  $K_4$  zależy od relacji między rozmiarem liniowym  $L$ , a długością korelacji  $\xi$ .

$K_4$  dąży do zera dla  $T > T_c$  i  $L \gg \xi$ .

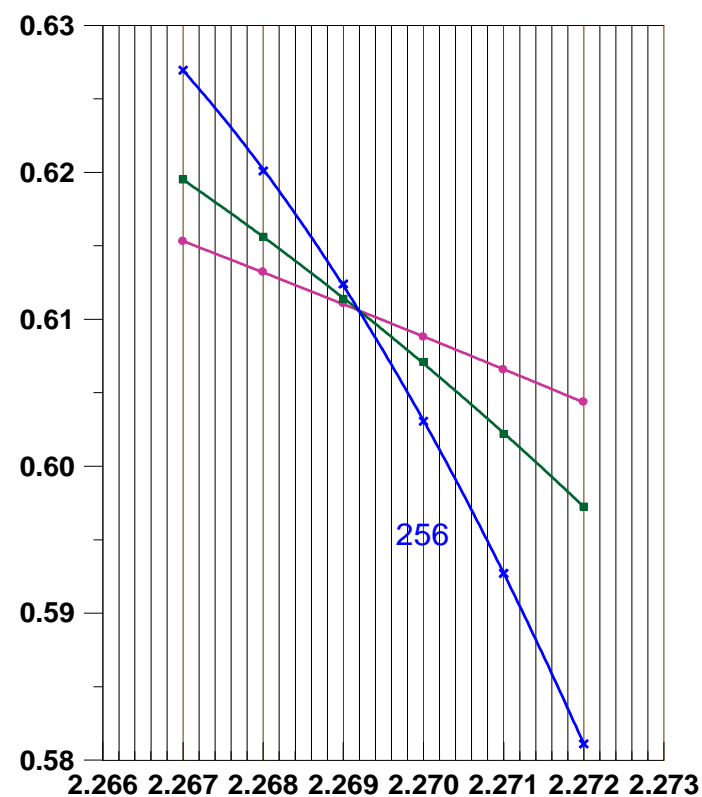
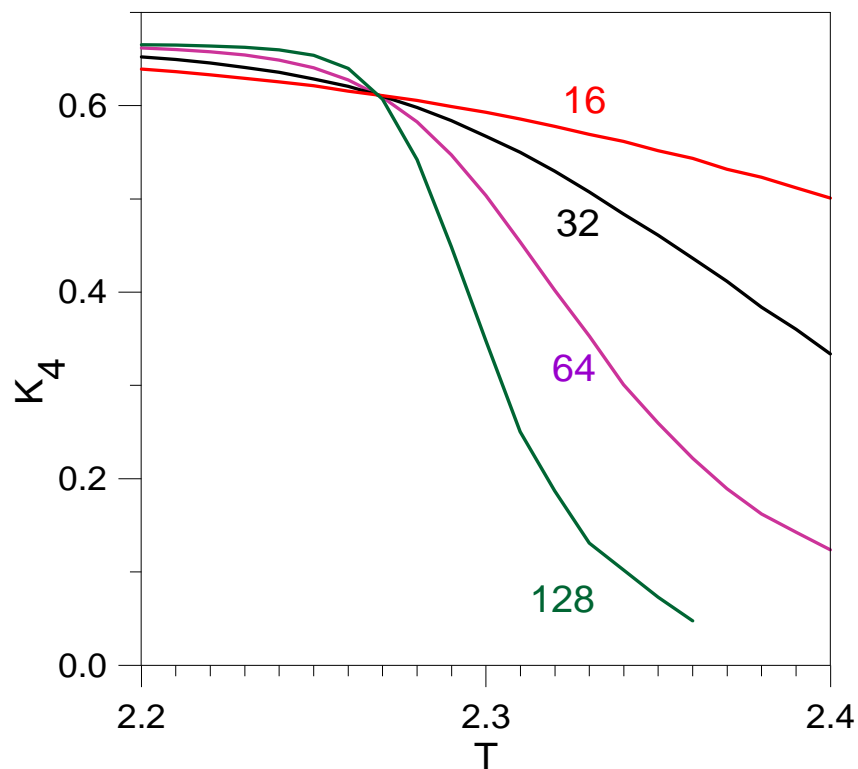
$K_4$  dąży do  $2/3$  dla  $T < T_c$  i  $L \gg \xi$

Z drugiej strony, dla  $L \ll \xi$ , kumulanta  $K_4$  słabo zależy od  $L$ , i  $\xi$ , a jej wartość jest bliska wartości uniwersalnej  $K_4^*$

Wyznaczenie  $T_c$  - z przecięcia się krzywych  $K_4(L, T)$

W celu wyznaczenia temperatury krytycznej i wykładników krytycznych dwuwymiarowego modelu Isinga przeprowadziliśmy symulacje Monte Carlo z użyciem algorytmu Wolfa. Badano układy o rozmiarze liniowym  $L=16, 32, 64, 128$  i  $256$ . Pomiary wykonano na  $10^6$  konfiguracjach.

Otrzymano, że kumulanty Bindera dla  $L > 32$  przecinają się w jednym punkcie  $T_c = 2.26919$ . Dla mniejszych rozmiarów poprawki do skalowania wpływają na odchylenia punktów przecięcia



Kumulanty Bindera dla kilku rozmiarów liniowych  $L$ . Na powiększeniu dodano wyniki dla  $L=256$ .

Odchylenie tak oszacowanej temperatury krytycznej  $T_c$  od wartości dokładnej (2.26918531) wynosi około  $0.4 \cdot 10^{-5}$ .

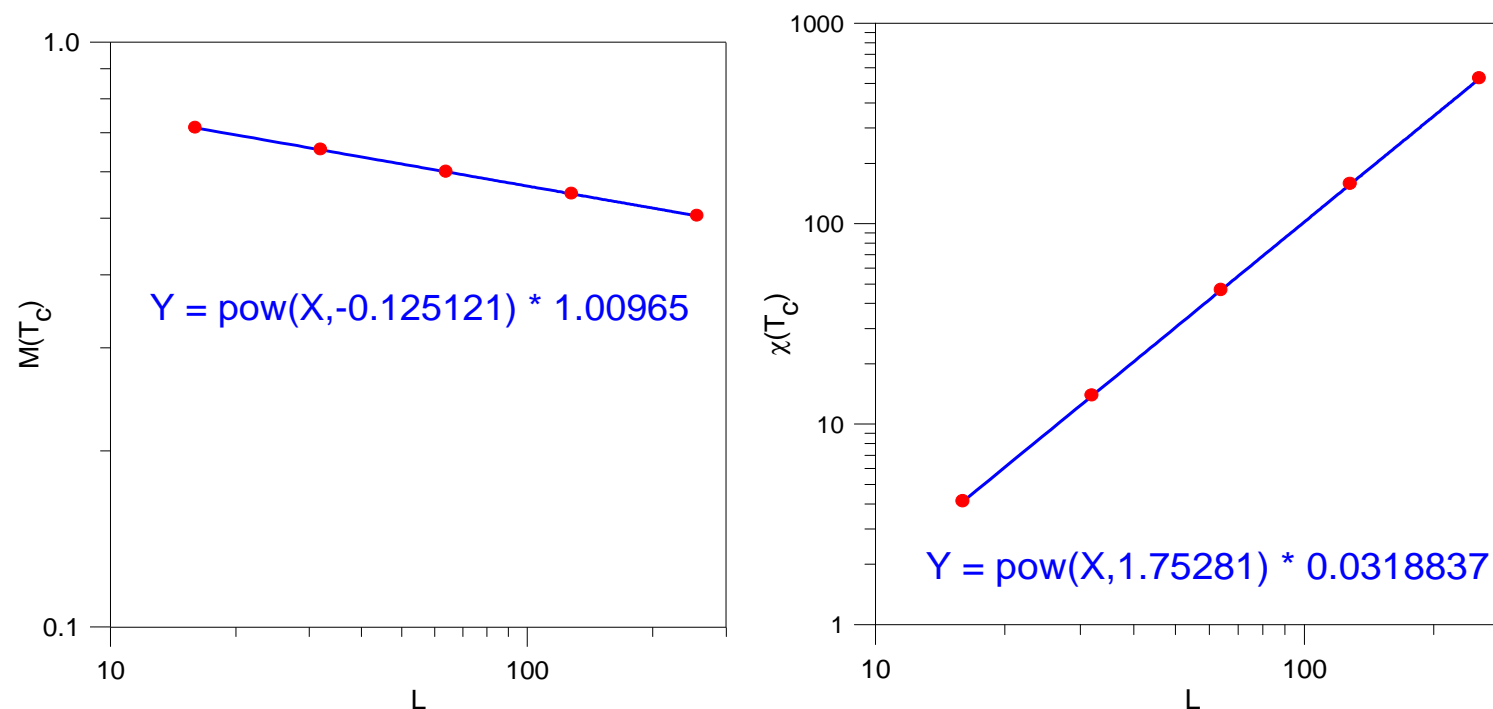
Oszacowanie wykładników krytycznych.

Mając obliczone  $T_c$  można, na podstawie teorii skalowania, obliczyć wykładniki krytyczne przeprowadzając symulacje dla różnych  $L$  w temperaturze  $T_c$ .

$$dK_4/dT \Big|_{T_c} \approx L^{1/\nu}$$

$$M(T_c) \approx L^{-\beta/\nu}$$

$$\chi(T_c) \approx L^{\gamma/\nu}$$



Wykresy log-log namagnesowania i podatności w  $T=T_c$  jako funkcje rozmiaru  $L$ .

Znalezienie wykładnika  $\nu$  wymaga badania pochodnych kumulantów  $K_4$  w  $T_c$ . Pozostałe wykładniki znajdujemy aproksymując wyniki symulacji w  $T_c$  funkcjami potęgowymi.



### Porównanie z dokładnymi wynikami

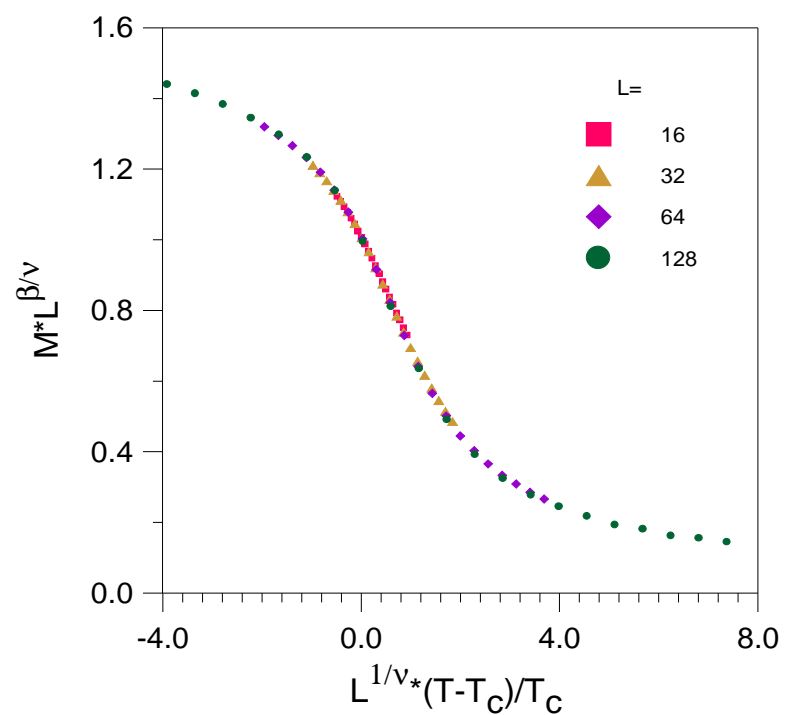
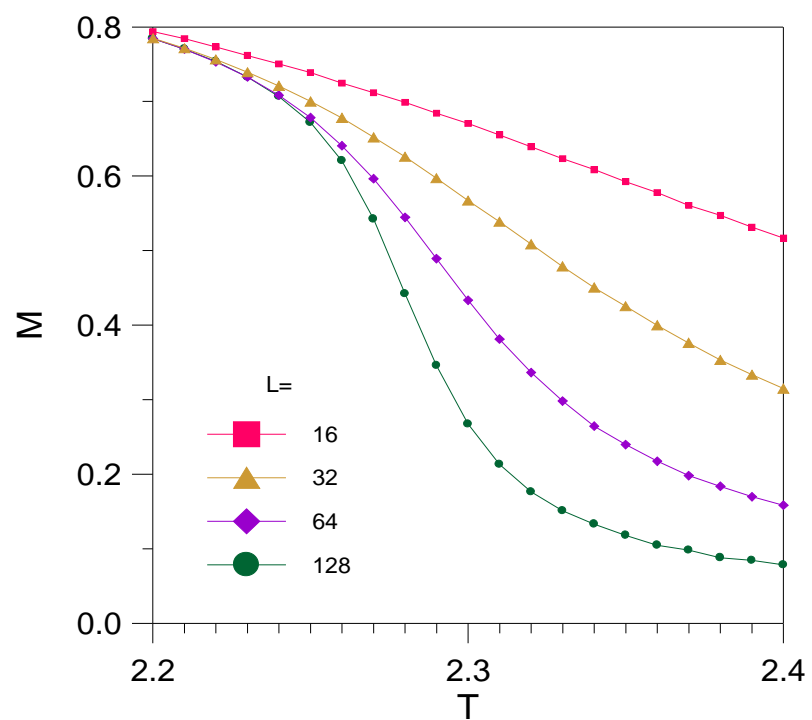
	$T_c$	$\nu$	$\beta$	$\gamma$
Dokładne	2.269185...	1	1/8	7/4
Obliczone	2.26919	1.0013	0.12528	1.7551

Sprawdzenie skalowania.

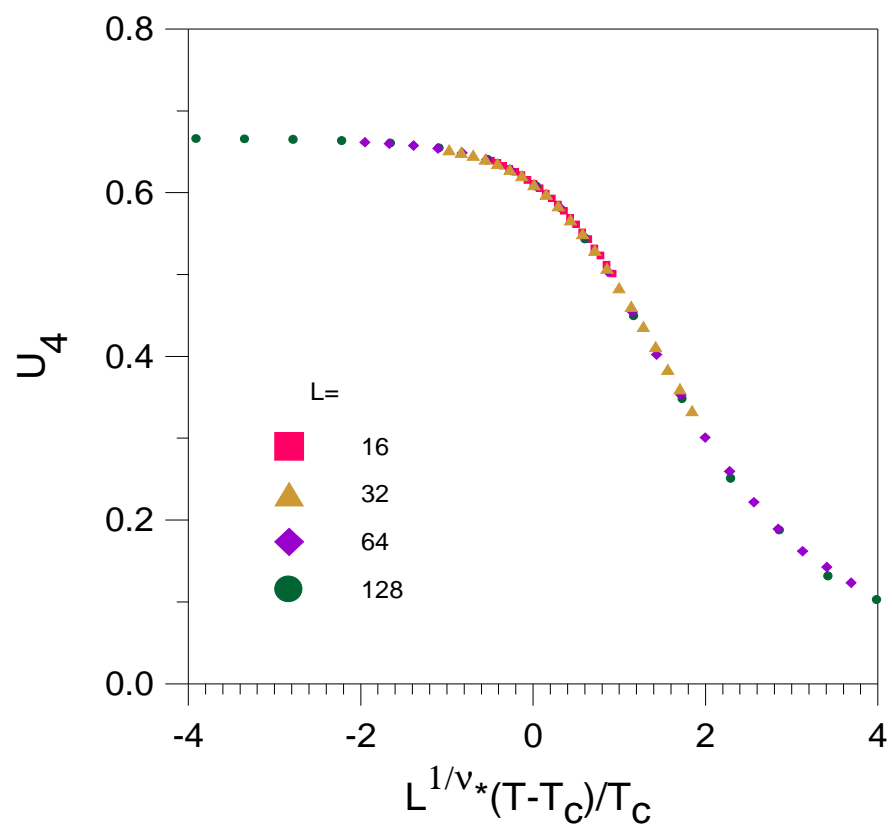
Mając obliczone wykładniki i temperaturę krytyczną wykreślimy namagnesowania i

kumulanty jako funkcje  $\frac{T - T_c}{T_c} L^{\frac{1}{\nu}}$  mnożąc obliczone wielkości przez odpowiednią potęgę  $L$ .

Jak widać z poniższych wykresów, otrzymujemy (z dokładnością do błędów statystycznych) funkcje skalujące dla tych dwóch wielkości.

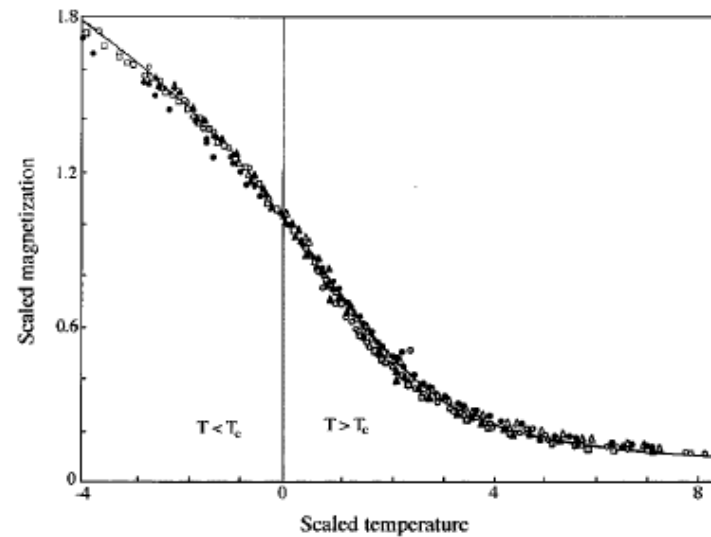


Skalowanie namagnesowania.



Skalowanie kumulant Bindera.

## Uniwersalność



Skalowanie eksperymentalnych wyników MHT dla 5 materiałów CrBr<sub>3</sub> , EuO, Ni, YIG i Pd<sub>3</sub>Fe.  
(za H.E.Stanley):

Klasy uniwersalności.

Układy z takimi samymi wykładnikami krytycznymi należą do tej samej klasy uniwersalności.

Wykładniki krytyczne zależą od wymiaru przestrzeni i symetrii parametru porządku.

Najczęściej nie zależą od rodzaju oddziaływania. Temperatura krytyczna nie jest wielkością uniwersalną