

Univerza v Ljubljani
Fakulteta *za matematiko in fiziko*



Metropolisov algoritem

Avtor: Simon Perovnik

Predavatelj: prof. dr. Simon Širca

Asistent: doc. dr. Miha Mihovilovič

Osma naloga pri Modelske analizi I

Ljubljana, avgust 2022

1 Molekularna verižnica

1.1 Naloga

17 členov dolga nitkasta molekula je obešena za oba konca. Vsak članek se lahko povesi od ničelne lege na poljubnega od 19 nivojev in si s tem zmanjša potencialno energijo za eno enoto na nivo. Če pa s tem prenategne vezi do sosedov, plača s prožnostno energijo, ki je za vsakega soseda enaka kvadratu razlike v nivojskem številu. Določi ravnovesno energijo v odvisnosti od temperature. Za poteze lahko uporabiš spremembo za en nivo na izbranem slučajnem mestu.

1.2 Verižnica z omejeno najnižjo lego

Energijo sistema dolge nitkaste molekule opišemo z dvema prispevkoma - prožnostne in potencialne energije:

$$E = \sum_{i=1}^N \alpha h_i + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{2} (h_{i+1} - h_i)^2 \quad (1)$$

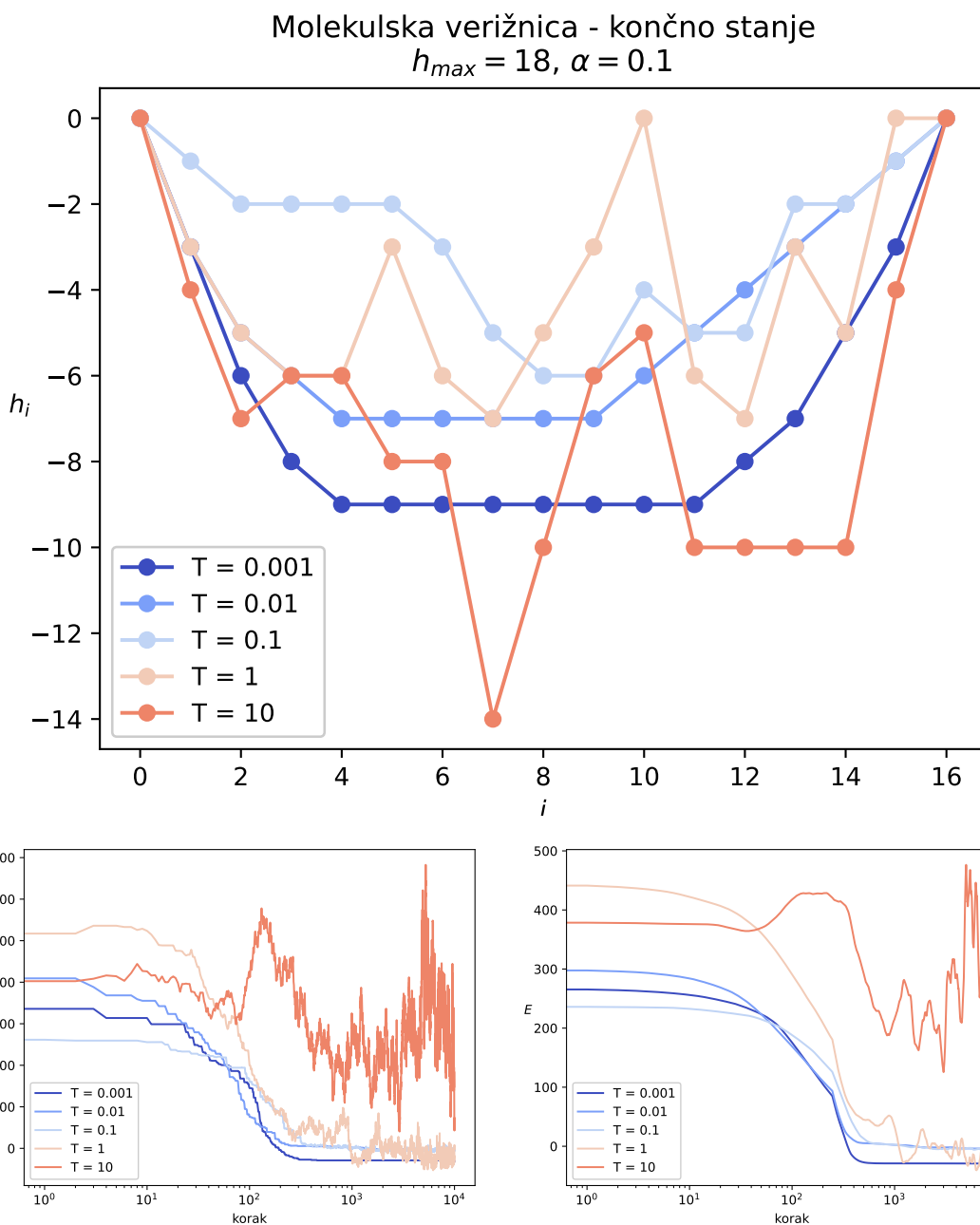
Pri tem zaradi robnih pogojev zahtevamo, da sta $h_1, h_{17} = 0$, saj je molekula na koncih vpeta. Parameter α predstavlja razmerje med močjo prožnostne in potencialne energije.

V nalogi se sprašujemo po ravnovesnem stanju takega sistema. Do ravnovesja bo prišlo, ko bo energija minimizirana. Ker je možnih stanj zelo veliko in bi bilo nemogoče izračunati energijo vseh možnih konfiguracij, nato pa pogledati katera nam da najnižjo energijo, se bomo poslužili simulacije z metropolisovim algoritmom:

1. Žrebamo naključno začetno stanje X_0 , na način, da zadostimo pogojem problema ($h_1, h_{17} = 0$ in za $i \neq 1, 17$, $h_i \in [-18, 0]$).
2. Žrebamo naključen člen v molekuli ($\xi \sim [1, 17]$).
3. Žrebamo spremembo lego izbranega člena ($h_i \rightarrow h_i \pm 1$). Pri tem mora biti pobojem iz točke 1 še vedno zadoščeno - če je izžrebana poteza prepovedana, ponovimo koraka 2 in 3.
4. Potezo sprejmemo, če je $\Delta E = E_{t+1} - E_t < 0$, ali če $\xi \sim (0, 1) \leq e^{-\Delta E/(kT)}$, kjer smo ξ žrebali z intervala $(0, 1)$.
5. Ponavljamo korake 2, 3 in 4. Konec simulacije določimo z maksimalnim številom korakov.

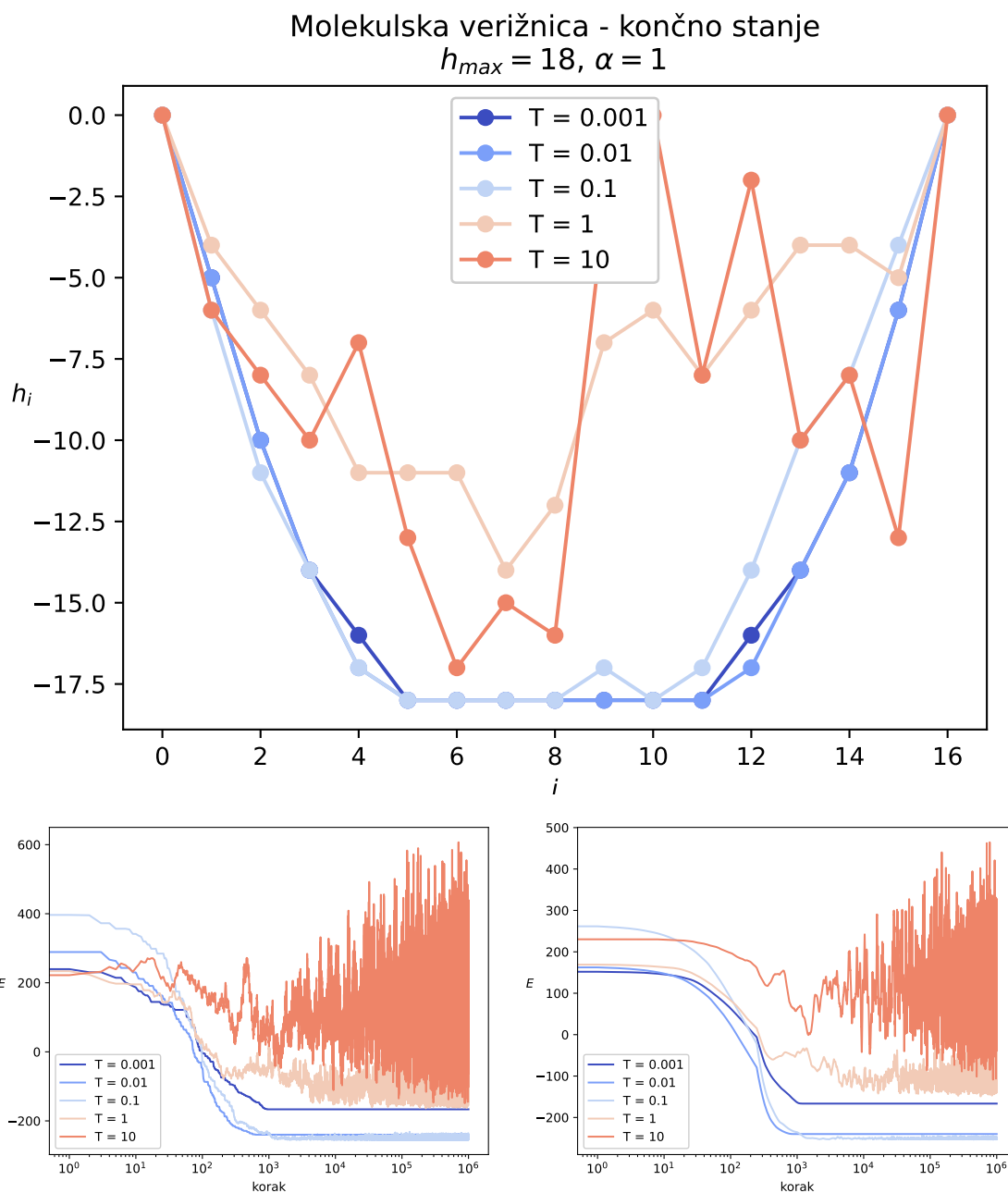
Na tak način bomo skoraj v vsakem sprejem koraku zmanjšali energijo sistema, dokler ne pride ta do minimuma. Razlog, zakaj včasih sprejmemo tudi poteze, ki nam povečajo skupno energijo sistema je v tem, da ne obtičimo v morebitnih lokalnih minimumih, ampak vedno najdemo globalni minimum. Kot lahko vidimo, bomo sprejeli več potez, ki nam povečajo energijo, če bo sistem pri višji temperaturi.

Poglejmo si ravnovesna stanja pri nekaj različnih temperaturah in različnih vrednostih parametra α .



Slika 1: Končna konfiguracija molekulske verižnice za $\alpha = 0.1$ po 10^4 korakov (zgoraj) in pa časovni potek energije sistema pri različnih temperaturah. Na spodnjem desnem grafu je prikazana povprečna energija (povprečje zadnjih 300 korakov). Začetna vrednost povprečnega E ustreza vrednosti E na 300-tem koraku.

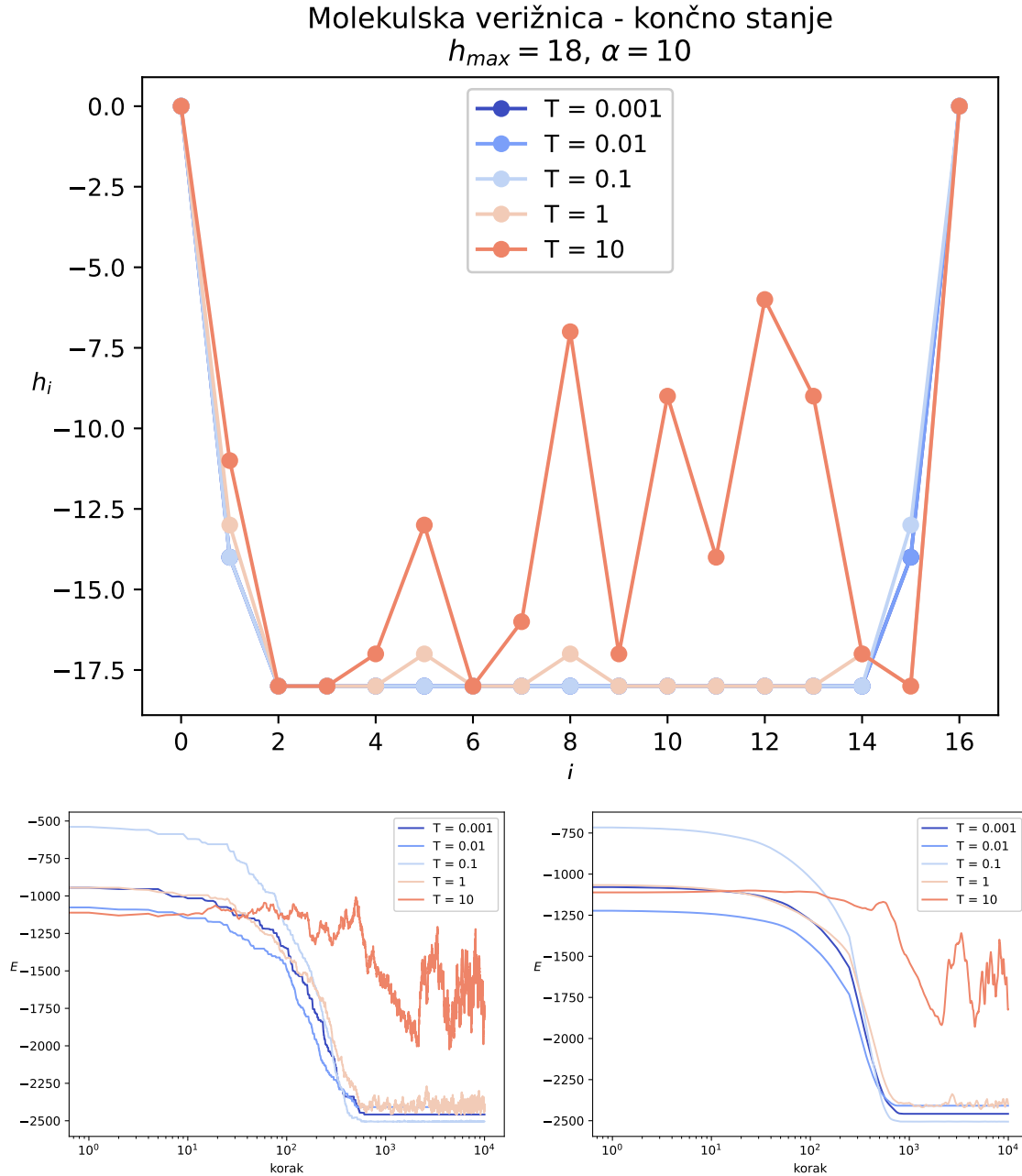
- Ker je α razmeroma majhen, je povsod molekul srednje ugoden, saj sama potencialna energija ne prinese tako veliko k celotni, zaradi česar molekula ni razvlečena v tipično verižnico.
- S povečevanjem temperature vse težje najdemo globalni minimum, saj sprejmemo vse več potez, ki nam povečajo energijo sistema, to lahko opazimo že pri $T = 0.1$, sploh pa pri $T = 10$, ko že ne oko vidimo, da je trenutna konfiguracija daleč od ravnovesne.



Slika 2: Končna konfiguracija molekulske verižnice za $\alpha = 1$ po 10^6 korakov (zgoraj) in pa časovni potek energije sistema pri različnih temperaturah.

- S tem ko smo povečali vrednost parametra α je postalo energijsko bolj ugodno, da se več členkov poseje do najnižjega nivoja. Ker pa je model omejen z najnižjim dovoljenim nivojem, tudi tokrat za rešitev ne dobimo konfiguracije verižnice.
- Videti je, da je model lažje 'našel' stacionarna stanja, oziroma se jim je uspel bolj približat, kar bi lahko pomenilo, da so iskani minimumi postali nekoliko večji (oziroma globlji).
- Vidimo da nam povečanje števila korakov ni prineslo pretirano boljših rezultatov. Pri visokih temperaturah se energijske fluktuacije s časom le še povečujejo in tako sistem na koncu pristane v neki, tudi na oko, precej naključni.

- Zelo zanimivo je največji minimum dosegla konfiguracija pri $T = 0.1$. Videti je, da sta se molekuli pri nekoliko nižjih temperaturah ujeli v lokalna minimuma, iz katerih potem nista več pobegnili, medtem, ko je bila $T = 0.1$ nekako ravno pravšnja, da je sistem uspel pobegniti globlje, vseeno pa se nam glede na obliko zdi, da do pravega minimuma sistemu ni uspelo priti, saj konfiguracija ni simetrična, kar bi najverjetne morala biti.

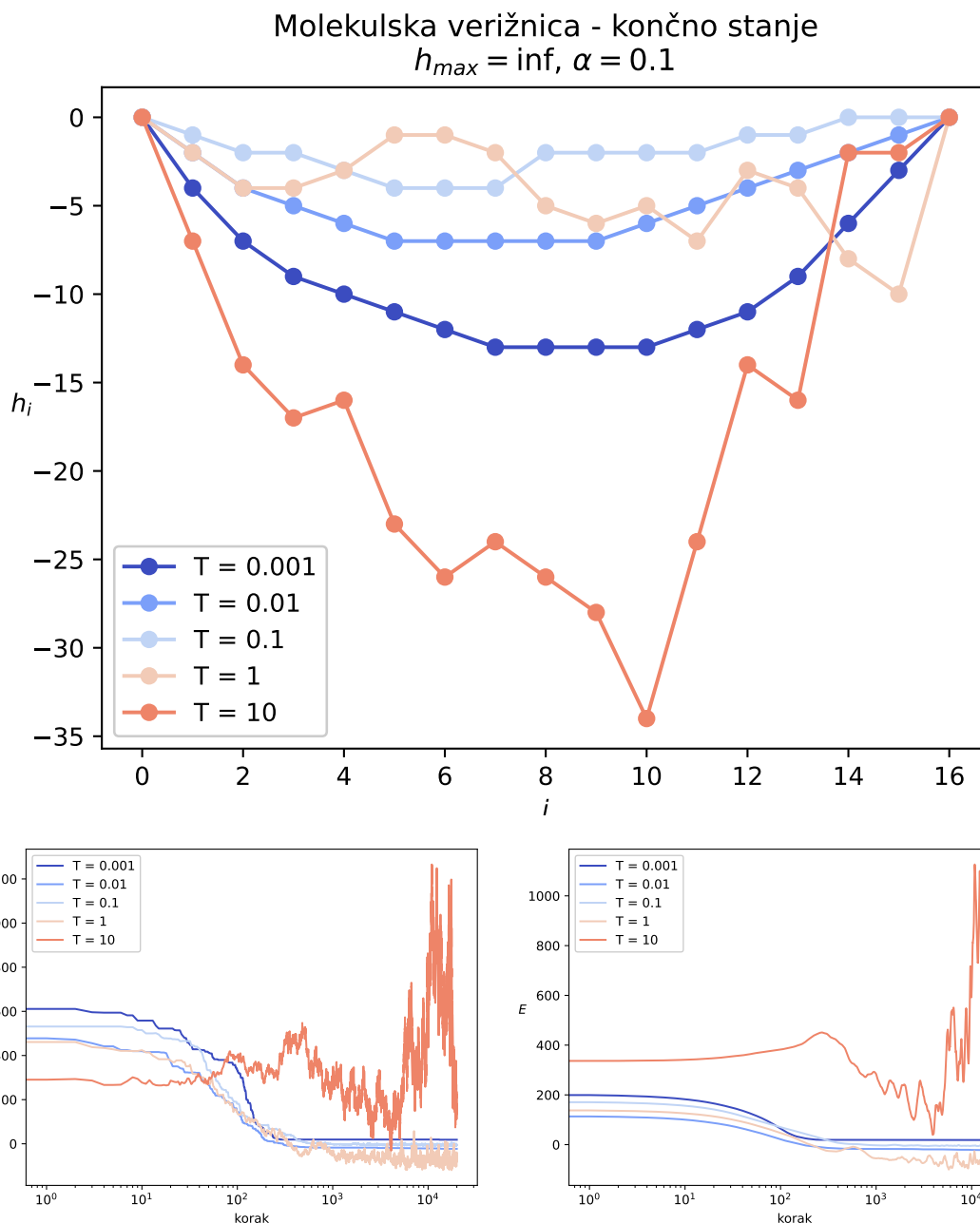


Slika 3: Končna konfiguracija molekulske verižnice za $\alpha = 10$ po 10^4 korakov (zgoraj) in pa časovni potek energije sistema pri različnih temperaturah.

- Efekt povešanja je pričakovano še večji kot prej.
- Podobno kot prej, je pri najnižji energiji pristal sistem pri temperaturi $T = 0.1$.

1.3 Verižnica brez omejitve najnižje lege

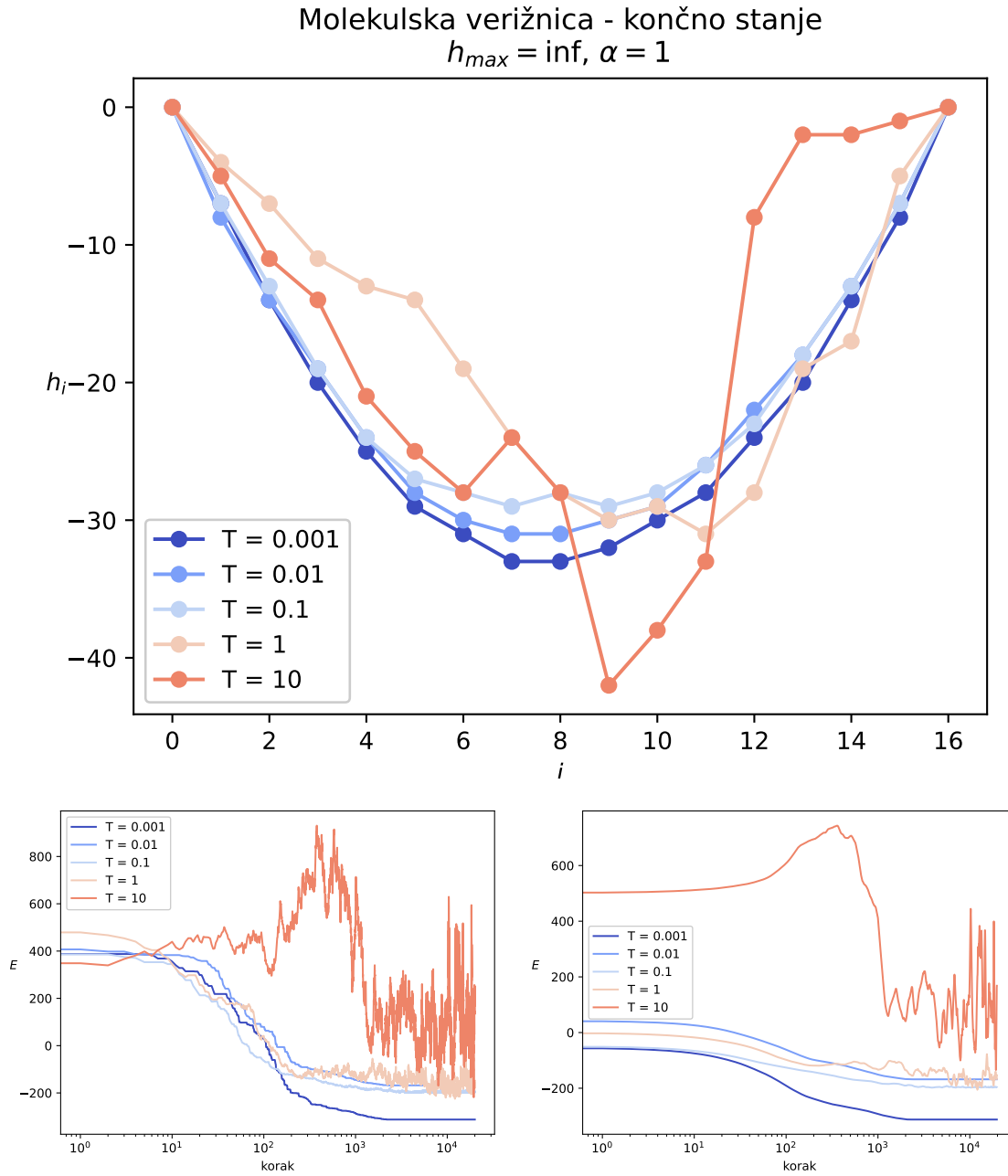
Poglejmo si, kako se rezultati simulacije spremenijo, vkolikor ne omejimo najnižje dovoljene lege posameznega člena. Pri tem, bomo začetno stanje vseeno žrebali na enak način kot prej, saj bi drugače sistem potreboval znatno več korakov, da bi našel optimalno konfiguracijo, ki je najverjetneje takšna, da so členi vsaj razmeroma blizu en drugemu, torej tudi blizu obema vpetima členoma.



Slika 4: Končna konfiguracija molekulske verižnice za $\alpha = 0.1$ po $2 \cdot 10^4$ korakov (zgoraj) in pa časovni potek energije sistema pri različnih temperaturah.

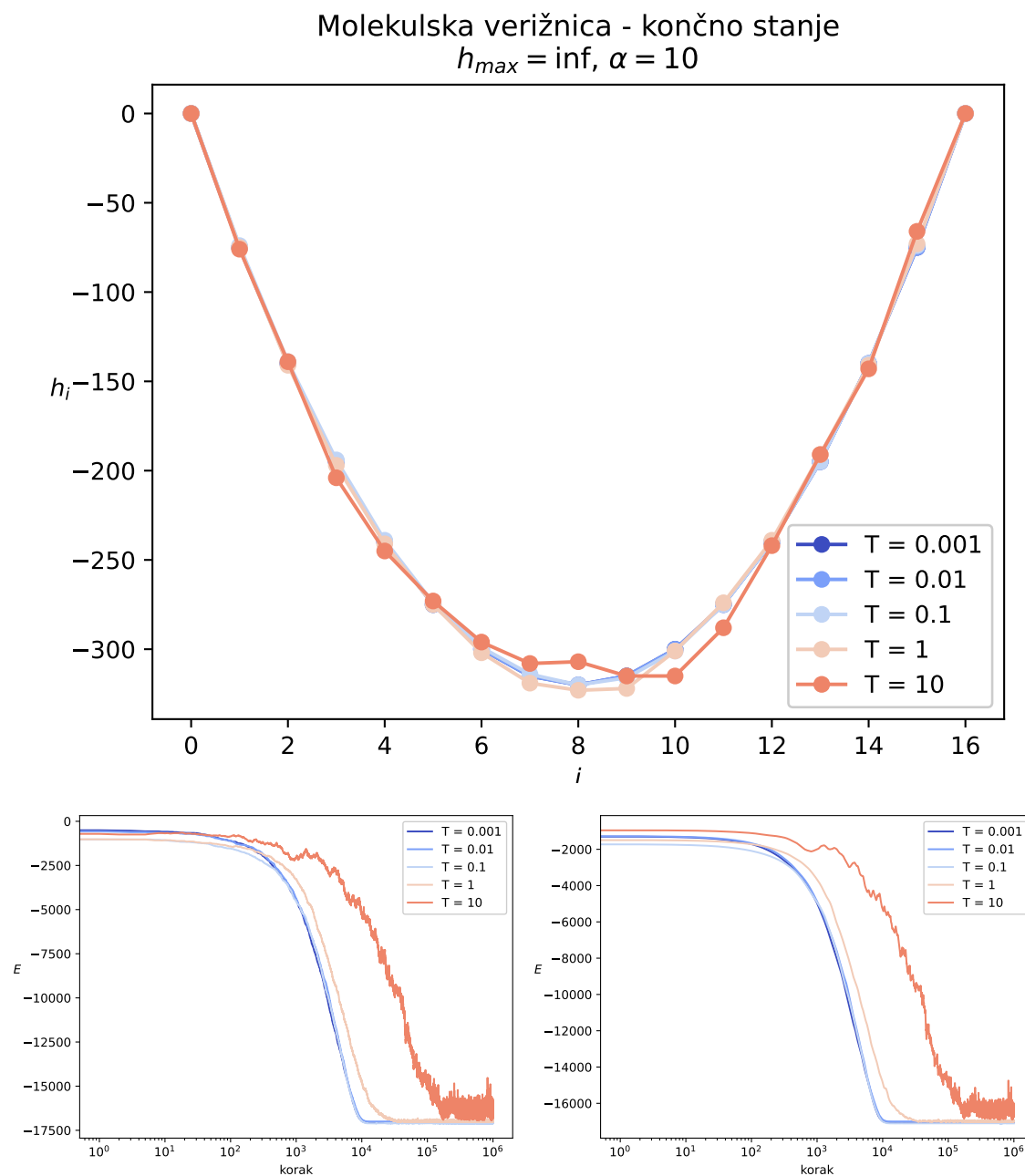
- Zdi se, da brez določene minimalne lege model lažje najde konfiguracijo, ki vsaj na oko zgleda smiselna.

- Pri visoki temperaturi sistem občuti precej močnejše energijske kot prej.



Slika 5: Končna konfiguracija molekulske verižnice za $\alpha = 1$ po $2 \cdot 10^4$ korakov (zgoraj) in pa časovni potek energije sistema pri različnih temperaturah.

- Zdi se, da smo končno našli ustrezne modelske parametre za razporeditev molekule v obliko verižnice.
- Podobno kot prej s povečevanjem α postane povprečje molekule bolj vse bolj ugoden.



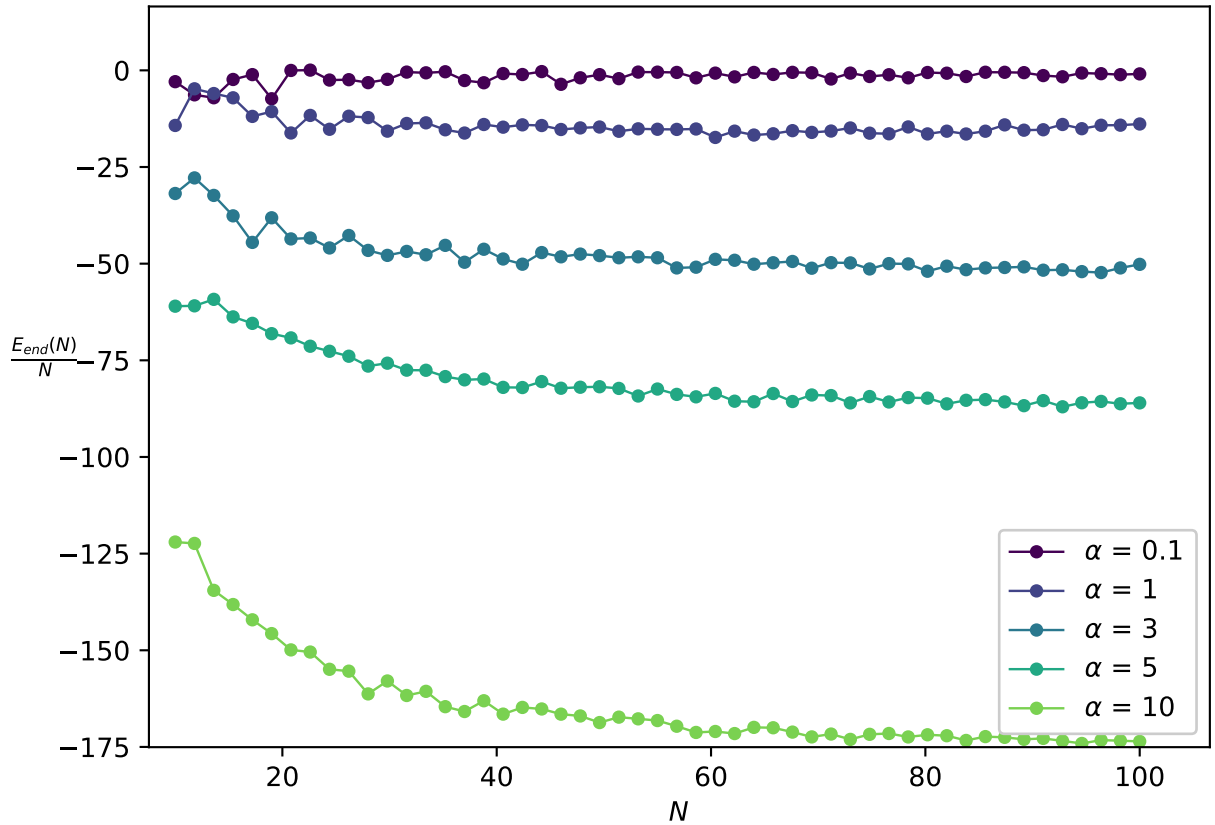
Slika 6: Končna konfiguracija molekulske verižnice za $\alpha = 10$ po 10^6 korakov (zgoraj) in pa časovni potek energije sistema pri različnih temperaturah.

- Ker je sistem začel v konfiguraciji raztrošeni na intervalu $[0, 18]$ je potreboval precej več časa, da je prišel do minimuma, kot v prejšnjih primerih.
- Molekule se sedaj tudi za različne temperature približajo enaki končni konfiguraciji. Sistem celo za visoke temperature konstantno 'leže' proti stacionarnem stanju.

1.4 Odvisnosti od modelskih parametrov

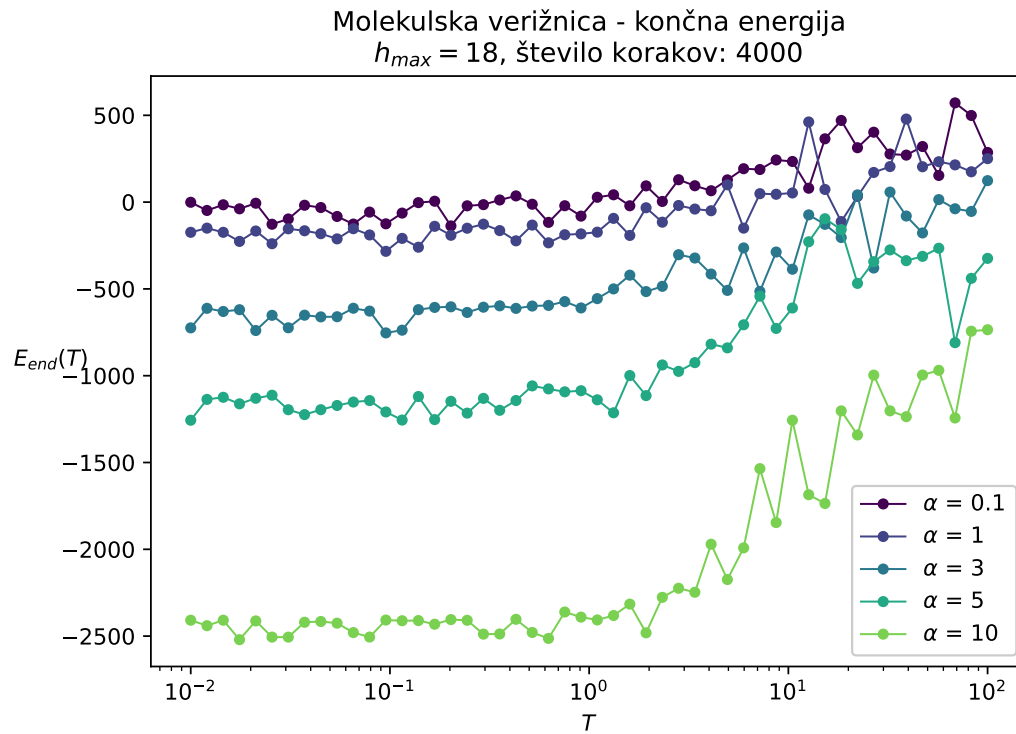
Poglejmo si še odvisnosti končne energije sistema glede na število členov v molekuli in pa temperature.

Molekulska verižnica - končna energija v odvisnosti od števila členov
 $T = 0.01, h_{max} = 18$, število korakov: 4000



Slika 7: Odvisnost povprečnega prispevka vsakega člena h končni energiji (povprečja zadnjih 200 korakov) od števila členov molekule.

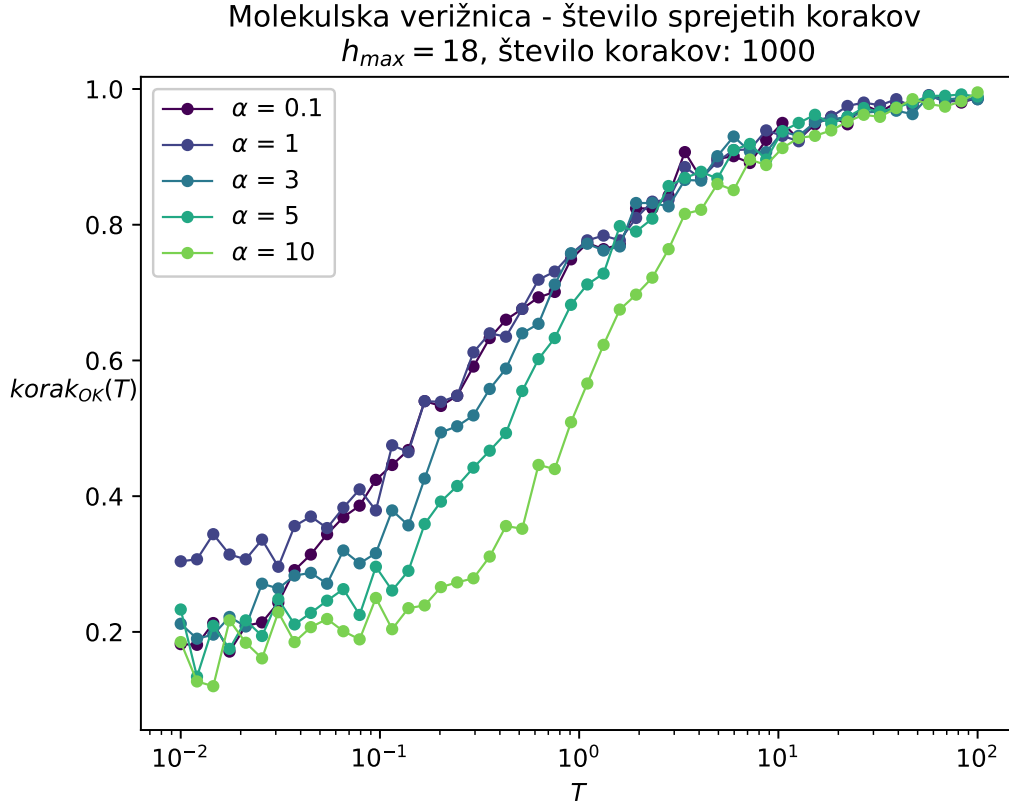
- Zdi se, da je končna energija za nizke α precej neodvisna od števila členov v molekuli, kar je smiselno, saj takrat niso najbolj 'donosna' stanja tista, pri h_{max} . To pa se spreminja z večanjem α , ko lahko torej več atomov zasede najnižji nivo, ki prinese največji prispevek k energiji.
- Opazimo lahko dva trenda - najprej z večanjem števila molekul znižamo končno energijo (iz razloga navedenega zgoraj), nato pa počasi vsak nov člen ne prinese znatnega nižanja energije, kar se zgodi okoli $N = 40$.



Slika 8: Odvisnost končne energije sistema (povprečja zadnjih 200 korakov) od temperature sistema.

- Za T do približno 1 se zdi, da temperatura ne vpliva bistveno na končno energijo sistema.
- Z višanjem T se energija sistema za vse vrednosti parametra α viša. To se ujema s prejšnjimi opaznanji, saj model sprejme vse več korakov, ki povečajo energijo sistema.

Za konec si lahko pogledamo še spreminjanje deleža sprejetih korakov v odvisnosti od temperature.



Slika 9: Odvisnost deleža sprejetih korakov od temperature.

Po pričakovanjih z večanjem temperature sprejmemo vse več žrebanih potez, saj postaja $e^{-\Delta E/(kT)}$ vse večji. Opazimo lahko, da pri višjih α vedno sprejmemo nekoliko manj potez, kar si lahko razlagamo na način, da postaja globalni minimum res vse močnejši in je zato več potez energijsko neugodnih.

2 Isingov model

2.1 Naloga

feromagnetne in antiferomagnetne snovi v dveh dimenzijah v približku dveh stanj opišemo s Hamiltonovim operatorjem

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i, J = \pm 1 \quad (2)$$

kjer je $s_i = \pm 1$ in vsota teče le po vezeh $\langle ij \rangle$ med najbližjimi sosedi. Če ni zunanega polja ($H = 0$), temperatura T_c faznega prehoda pri feromagnetu zadošča enačbi

$$\sinh \frac{2J}{k_B T_c} = 1 \Rightarrow T_c \approx 2.269185 \frac{J}{k_B}. \quad (3)$$

Določi povprečno energijo $\langle E \rangle$ in magnetizacijo $\langle S \rangle$ v odvisnosti od temperature. $S = \sum_i^N s_i$ je celotna magnetizacija sistema. Oglej si tudi spinsko susceptibilnost in specifično toploto pri različnih jakostih magnetnega polja.

$$\begin{aligned}\chi &= \frac{\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2}{Nk_B T} \\ c &= \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{Nk_B T^2}\end{aligned}\tag{4}$$

2.2 Obnašanje spinske mreže

Isingov model predstavlja sistem spinov, ki so naloženi v kvadratno mrežo velikosti $N \times N$ z vzajemno interakcijo s sosednjimi pari. Kot je zapisano v enačbi (2), energijo takšnega sistema opišemo z dvema prispevkoma - prej omenjeno parsko interakcijo med sosedi in pa prispevku zaradi zunanjega polja jakosti H . Ker bomo spet iskali minimum energije (sprva brez zunanjega polja) bo energijsko ugodno, da bodo sosedni spini enakega predznaka, da bo prispevek zares negativen - seveda v primeru, da bo J pozitiven. Izkaže se, da J določa, ali naš model opisuje feromagnetno ali antiiferomagnetno snov. V odsotnosti magnetnega polja, se bo feromagnetna snov ($J = 1$) uredila na način, da bodo vsi spini poravnani drug z drugim, medtem ko se bodo spini v antiiferomagnetni snovi ($J = -1$) orientirali v konfiguracijo šahovnice - vsak ima sosede obratnega predznaka.

Podobno kot prej bomo stacionarna stanja poiskali z uporabo metropolisovega algoritma, ki ga implementiramo na način:

1. Žrebamo naključno začetno stanje A_0 , na način, da vsakemu spinu dodelimo vrednost ± 1 .
2. Žrebamo naključen člen v naši mreži.
3. Izračunamo ΔE po enačbi (5) poteze obrata spina.
4. Potezo sprejmemo, če je $\Delta E = E_{t+1} - E_t < 0$, ali če $\xi \sim (0,1) \leq e^{-\Delta E/(kT)}$, kjer smo ξ žrebali z intervala $(0,1)$.
5. Ponavljamo korake 2, 3 in 4. Konec simulacije določimo z maksimalnim številom korakov.

$$\Delta E = 2JS(i, j)[S(i-1, j) + S(i+1, j) + S(i, j-1) + S(i, j+1)] + 2HS(i, j)\tag{5}$$

V želji po hitrejši konvergenци algoritma in odpravljanju nepravilnosti rešitev na robovih, bomo privzeli periodične robne pogoje.

Isingov model : $J = 1, H = 0, T = 0.1$
 velikost mreže : 50×50 , število korakov: 10^4 , delež sprejetih: 0.11076



Isingov model : $J = 1, H = 0, T = 2.2692$
 velikost mreže : 50×50 , število korakov: 10^4 , delež sprejetih: 0.34474



Isingov model : $J = 1, H = 0, T = 10$
 velikost mreže : 50×50 , število korakov: 10^4 , delež sprejetih: 0.84912



Slika 10: Spremembe spinski mreže tekom simulacije pri različnih T za $J = 1$ in $H = 0$.

- Dobljeni rezultati se dobro ujemajo z našo napovedjo. Razlog, zakaj ne dobimo povsem enako

orientiranih spinov je najverjetneje povezan s temperaturo in pa razmeroma nizkim številom korakov algoritma.

- Ogledamo si lahko kako temperatura vpliva na končno konfiguracijo sistema - za nizke T res dobimo tipične domenske stene med fazami spinov. Ta vzorec se nadaljuje vse do T_c , ko tudi s slike vidimo, da se začnajo področja enakih spinov med seboj prepletati in ne moremo več govoriti o jasnih domenskih stenah.
- Ko temperaturo še povečujemo je končna konfiguracija zelo naključna - zdi se da ni skoraj nič kaj bolj urejena od začetne.

Isingov model : $J = 1, H = 1, T = 0.01$

velikost mreže : 50×50 , število korakov: 10^4 , delež sprejetih: 0.03222



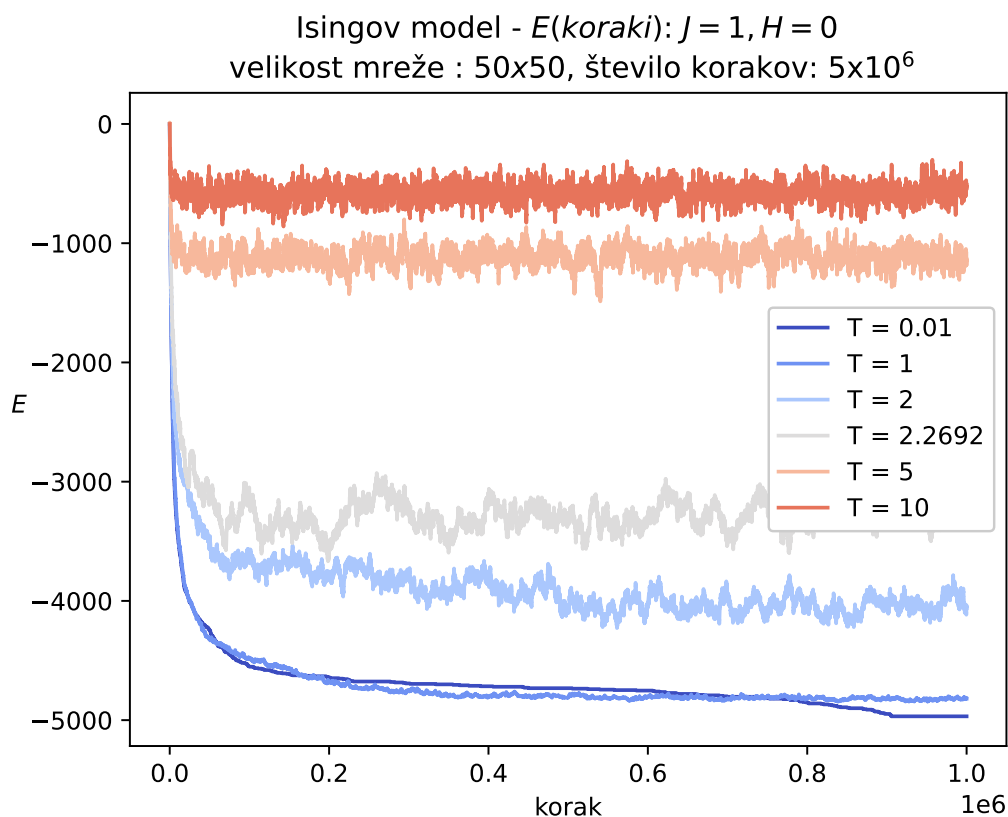
Isingov model : $J = -1, H = 1, T = 0.01$

velikost mreže : 50×50 , število korakov: 10^4 , delež sprejetih: 0.02852



Slika 11: Spremembe spinski mreže tekom simulacije pri različnih T za $J = \pm 1$ in $H = 1$.

- V prisotnosti zunanega polja se v primeru feromagnetnega materiala vsi spini orientirajo v isto smer, kar se sklada s splošnimi zakonitostmi elektromagnetizma.
- Antiferomagnetna snov je v večji meri res razporejena v sistem šahovnice, pojavijo pa se nekakšne črte drugačne ureditve, ki so verjetno spet posledica premajhnega števila korakov algoritma.

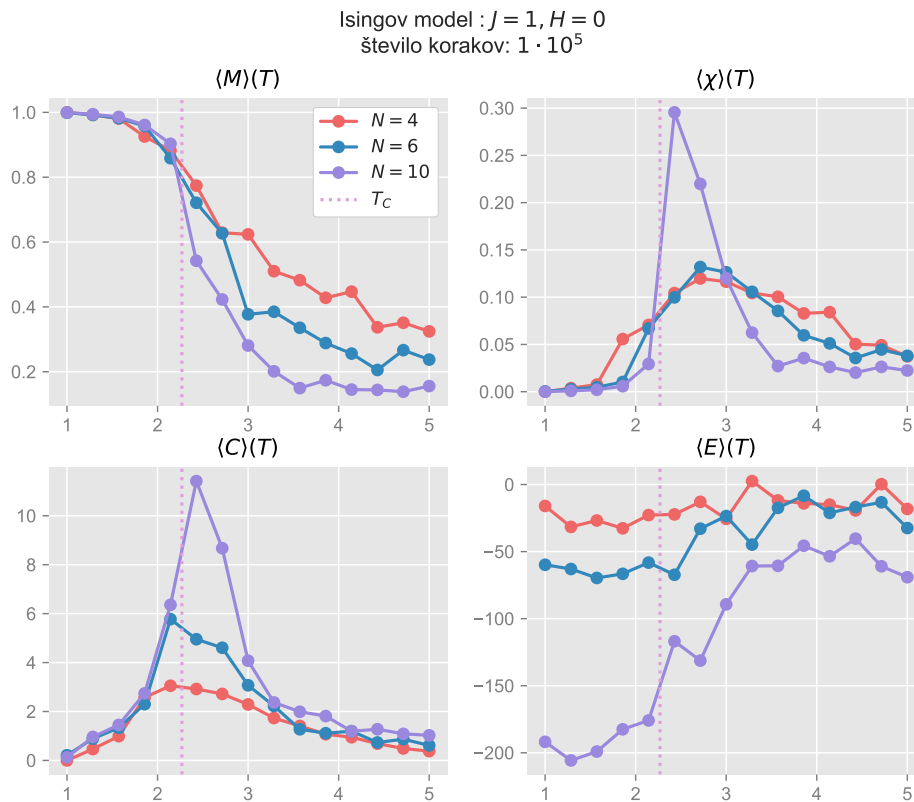


Slika 12: Časovno spreminjanje energije sistema pri različnih temperaturah.

- Podobno kot pri nalogi z verižnico vidimo, kako se energijske fluktuacije povečujejo s tem, ko povečamo temperaturo.

2.3 Termodinamske spremenljivke v Isingovem modelu

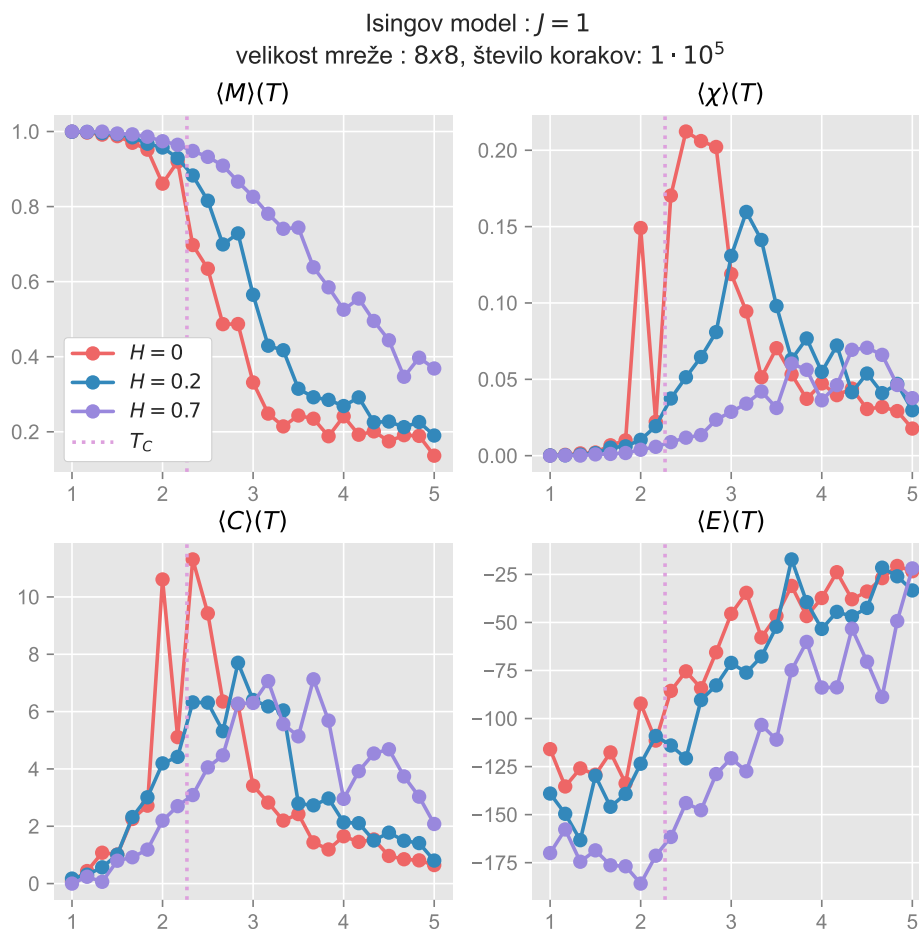
Kot nam predlaga že navodilo naloge, si bomo ogledali nekaj termodinamskih spremenljivk sistema - specično toploto C , magnetizacijo S , povprečno energijo E in spinsko susceptibilnost χ . Termodinamska povprečja smo računali na področju, ko, se je energija nekoliko ustalila in so bile spremembe zgolj posledica termičnih oscilacij. Zaradi omejeno zmogljivega računalnika smo vsak algoritem pognali le za 10^5 korakov, termodinamska povprečja pa smo računali od koraka 90000 dalje, tako da smo vzorčili vsako stoto točko, da meritve ne bi bile preveč korelirane.



Slika 13: Termodinamske spremenljivke za različne velikosti mreže. Magnetizacija je definirana z absolutno vrednostjo, saj so primeri z obratnimi spini ekvivalentni.

- Velikost mreže vpliva na končne rezultate - bolj kot povečujemo mrežo, bližje smo teoretični napovedi T_c in faznega prehoda.
- Magnetizacija po pričakovanjih pada z 1 proti 0 (povsem naključna orientacija spinov).
- Podoben efekt opazimo tudi pri lokaciji faznega prehoda na grafu spinske susceptibilnosti in specifične toplote, ko tudi sam fazni prehod postaja bolj izrazit.
- Energija s povečevanjem temperature seveda narašča, saj sprejemamo več korakov, pri katerih je $\Delta E > 0$.

Sedaj si pogledjmo, kako se termodinamske opazljivke spreminjajo pod vplivom zunanega polja. Za potrebe hitre konvergence smo našo mrežo zmanjšali na velikost 8×8 , da smo hitreje dosegli ravnovesna stanja.



Slika 14: Termodinamske spremenljivke za različne jakosti zunanje polja. Magnetizacija je definirana z absolutno vrednostjo, saj so primeri z obratnimi spini ekvivalentni.

Vsi grafi nam razkrivajo nekako podobno zgodbo - s povečevanjem jakosti zunanje polja se vrhovi krivulj in s tem fazni prehod premika proti višji temperaturi, kar pomeni, da lahko dlje časa material zadržimo v feromagnetni fazi in zakasnimo prehod v paramagnetno.