

# **Određivanje energije Isingovog spinskog stakla korištenjem metode simuliranog kaljenja**

Stella Boić

Studentica I. godine diplomskog studija Astrofizike I fizike elementarnih čestica

PROJEKTNI ZADATAK

iz kolegija

Stohastičke simulacije u klasičnoj I kvantnoj fizici

Split, 8. Lipnja 2023.

Odjel za fiziku

Prirodoslovno-matematički fakultet

Sveučilište u Splitu

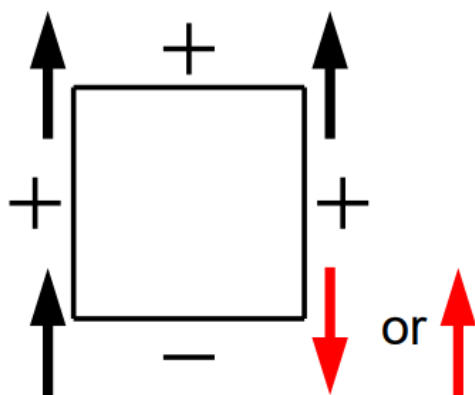


## Sadržaj

Uvod.....	2
Metoda.....	4
Rezultati.....	6
Literatura.....	10

## 1. Uvod

Isingovo spinsko staklo je klasični sustav kojeg karakterizira frustracija i nasumičnost. Kao i kod primjera klasičnog Isingovog modela, imamo rešetku sa  $L * L$  čestica koje mogu poprimiti vrijednosti spina  $-1$  (orijentacija dolje) i  $+1$  (orijentacija gore). Razlika je u tome što u regularnom Isingovom modelu spinovi su feromagnetični i imaju tendenciju da se međusobno paralelno orijentiraju, odnosno, konstanta izmjene energije  $J$ , koja mjeri interakciju susjednih spinova, je veća od nule. Stoga, u stanju najniže energije (osnovno stanje) očekujemo da su svi spinovi orijentirani u istom smjeru. Kod modela spinskog stakla konstanta izmjene energije je nasumično odabrana da bude ili pozitivna ili negativna za svaki par najbližih susjeda te je sada označavamo sa  $J_{ij}$ . U slučaju kada je  $J_{ij} > 0$  sustav ima feromagnetično ponašanje i očekujemo da se spinovi orijentiraju paralelno u stanju najniže energije, a za  $J_{ij} < 0$  imamo antiferomagnetično ponašanje u kojem se spinovi orijentiraju antiparalelno. Prema tome, u stanju najniže energije očekujemo frustraciju ili poremećaj. Na slici 1. vidimo primjer takve frustracije. Promatramo utjecaje susjednih spinova na donji desni spin označen s crvenim strelicama. U isto vrijeme gornji susjed traži da se taj spin orijentira paralelno s njim (put gore) jer je konstanta interakcija između njih pozitivna, dok je konstanta između ovog spina i lijevog susjeda negativna te ona teži da se spin orijentira antiparalelno s tim susjednom (put dolje).



Slika 1. Prikaz interakcije spinova s različitim konstantama izmjene energije [1]

Drugim riječima, u osnovnom stanju sustava nemoguće je minimalizirati svaki doprinos energije interakcije najbližih susjeda u izrazu:

$$E = - \sum_{i < j} J_{ij} s_i s_j. \quad (1)$$

Na niskim temperaturama sustav se zamrzne u nekom poremećaju, tj. ima konfiguraciju s opisanom frustracijom i spinovi ostaju zarobljeni u metastabilnom stanju.

Cilj ovog projekta je odrediti energiju osnovnog stanja Isingovog spinskog stakla korištenjem simulacije. Teoretska vrijednost usrednjene energije osnovnog stanja po čestici sustava je:

$$\frac{E_0}{N} = -1.4. \quad (2)$$

Pronalaženje ove energije je vrlo izazovno upravo zbog poremećaja u konfiguraciji koji ostaje zamrznut u osnovnom stanju sustava i znanstvenici ovaj problem nazivaju problemom kombinatorne optimizacije za čije je rješavanje potreban dobar i efikasan algoritam. Osim toga, zbog same prirode ovog modela pri svakoj konačnoj temperaturi funkcija energije pokazuje veliki broj lokalnih minimuma u kojima algoritam može zapeti. Proučavanje cijelog sustava je posebno zanimljivo na niskim temperaturama jer je dinamika sustava jako spora. Snižavanjem temperature konfiguracija se mijenja do kritične temperature koju zovemo temperatura spinskog stakla  $T_{ss}$  i za temperature manje od  $T_{ss}$  sustav je zamrznut u nasumičnoj orijentaciji.

## 2. Metoda

Na početku simulacije odabiremo nasumičnu početnu konfiguraciju spinova u rešetci veličine  $L * L$  i nasumične konstante interakcije  $J_{ij}$ . Matrica interakcija  $J_{ij}$  je veličine  $[2 * L][L]$  i u nju spremamo nasumično odabrane vrijednosti -1 i 1 koje odgovaraju interakcijama između susjednih spinova.

U svrhu pronalaženja globalnog minimuma energije koristimo metodu simuliranog kaljenja. Krećemo s dovoljno visoke temperature sustava za koju su gotovo sve promjene sustava prihvaćene te postepeno snižavamo temperaturu. U ovom radu korištena su dva rasporeda kaljenja. Linearni raspored kaljenja:

$$kT = kT0 - it * dkT, \quad (3)$$

gdje je  $kT$  trenutna temperatura u iteraciji,  $kT0$  je početna temperatura,  $it$  je korak iteracije i  $dkT$  je promjena temperature. Eksponencijalni raspored kaljenja:

$$kT = kT0 - \exp\left(-\frac{5.0}{it}\right) * kT0. \quad (4)$$

Na svakoj temperaturi izračunamo vrijednost energije i generiramo nasumičnu promjenu energije  $dE$  tako da odaberemo nasumični spin i promijenimo mu orijentaciju. Promjenu prihvaćamo ukoliko je  $dE < 0$ , a ako je  $dE > 0$  tada provjeravamo vjerojatnost takve promjene korištenjem izraza:

$$\cdot \quad (5)$$

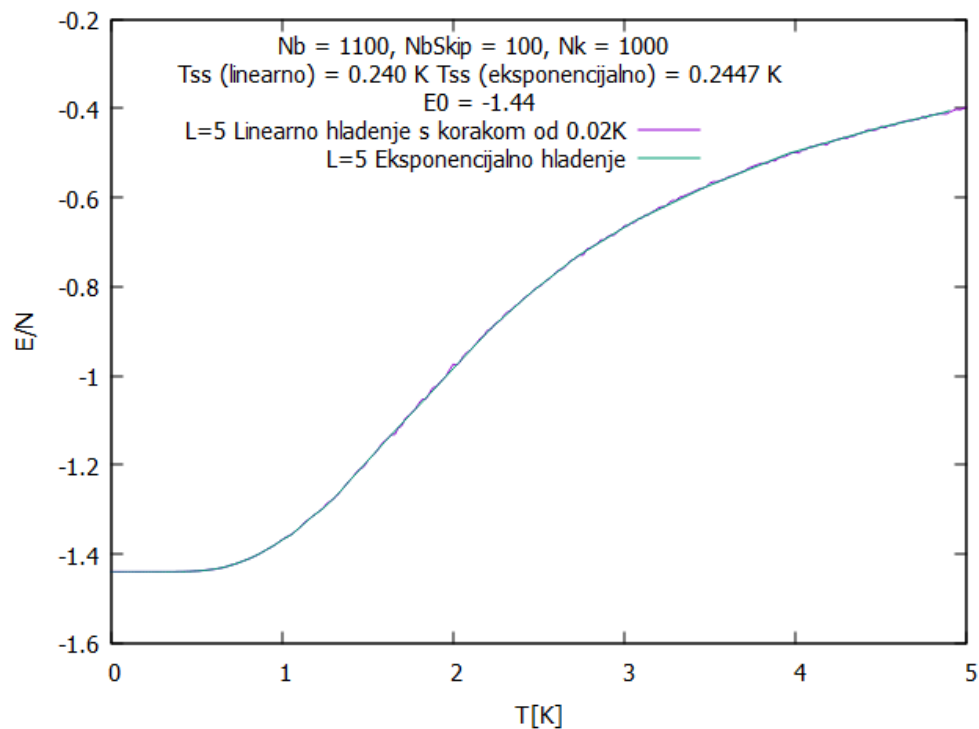
Uvjet prihvaćanja promjene energije direktno ovisi o trenutnoj temperaturi sustava i opisana metoda se naziva Metropolisov algoritam. Prihvaćanjem pozitivne promjene energije sustava i dovoljno sporim snižavanjem temperature osiguravamo se kako bi izašli iz područja lokalnog minimuma i pronašli globalni minimum funkcije. Na svakoj temperaturi, tj. koraku simuliranog kaljenja provodimo niz ovakvih provjera dok sustav ne postigne kvazi-ravnotežu te uzimamo usrednjenu vrijednost energije. Kvaliteta konačnog rješenja ovisi o rasporedu i brzini hlađenja. Sporijim snižavanjem temperature dolazimo do optimalnijeg rješenja.

Još jedan način pronalaženja optimalne energije na određenoj temperaturi je korištenjem demon algoritma. U ovoj metodi promjena energije je prihvaćena ukoliko sustav demon ima dovoljno energije za izmjenu s promatranim sustavom. Vjerojatnost za pronalaženje energije demona u intervalu od  $E_d$  do  $E_d + dE$  je proporcionalna s  $e^{-dE/kT}$  što nas dovodi do zaključka da je srednja energija demona jednaka

temperaturi promatranog sustava. Na ovaj način možemo koristiti energiju sustava demon da prati temperaturu. Za svaki korak simuliranog kaljenja smanjujemo početnu energiju demona tako da je ona uvijek jednaka trenutnoj temperaturi sustava što smanjuje prihvaćenost slučajnih promjene energije s snižavanjem temperature.

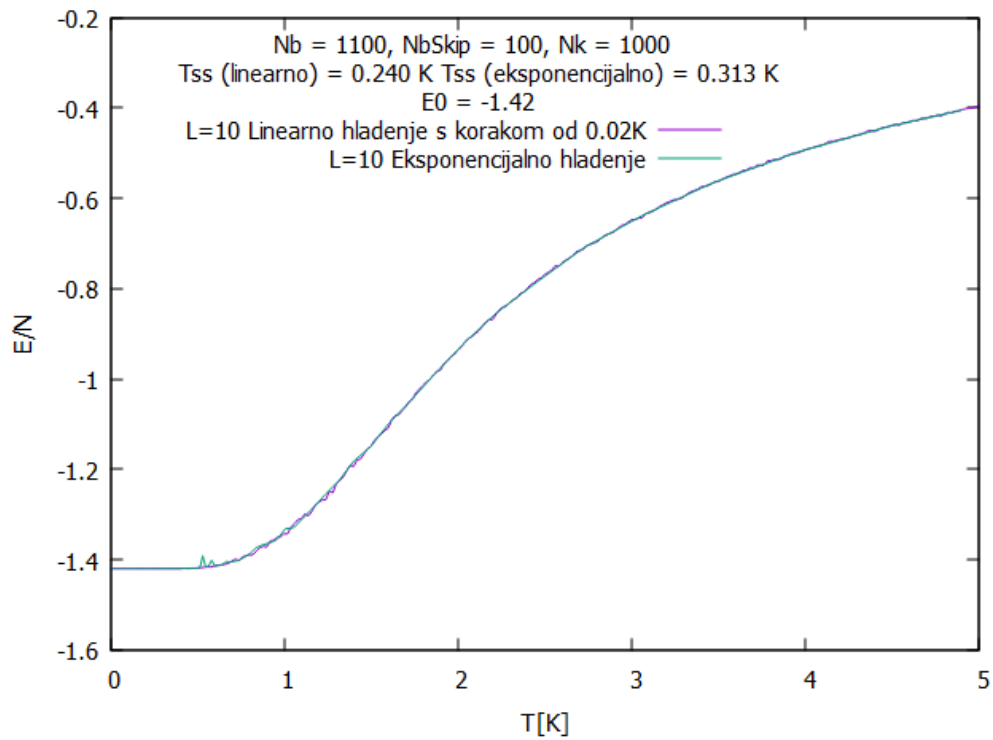
### 3. Rezultati

Za fiksni nasumični skup interakcijskih konstanti  $J_{ij}$  tražimo najnižu energetska konfiguraciju koristeći dva različita rasporeda simuliranog kaljenja i Metropolisov algoritam za svaku fazu. Korišteni parametri u provedenim simulacijama su postavljeni na grafovima. Na slici 2. je prikazana ovisnost energije po čestici u odnosu na temperaturu za raspored linearnog i eksponencijalnog kaljenja simuliranog za rešetku veličine  $L = 5$ . U oba slučaja dobivena je energija osnovnog stanja vrijednosti  $-1.44$ , pri gotovo istim  $T_{ss}$  oko  $0.24 K$ .

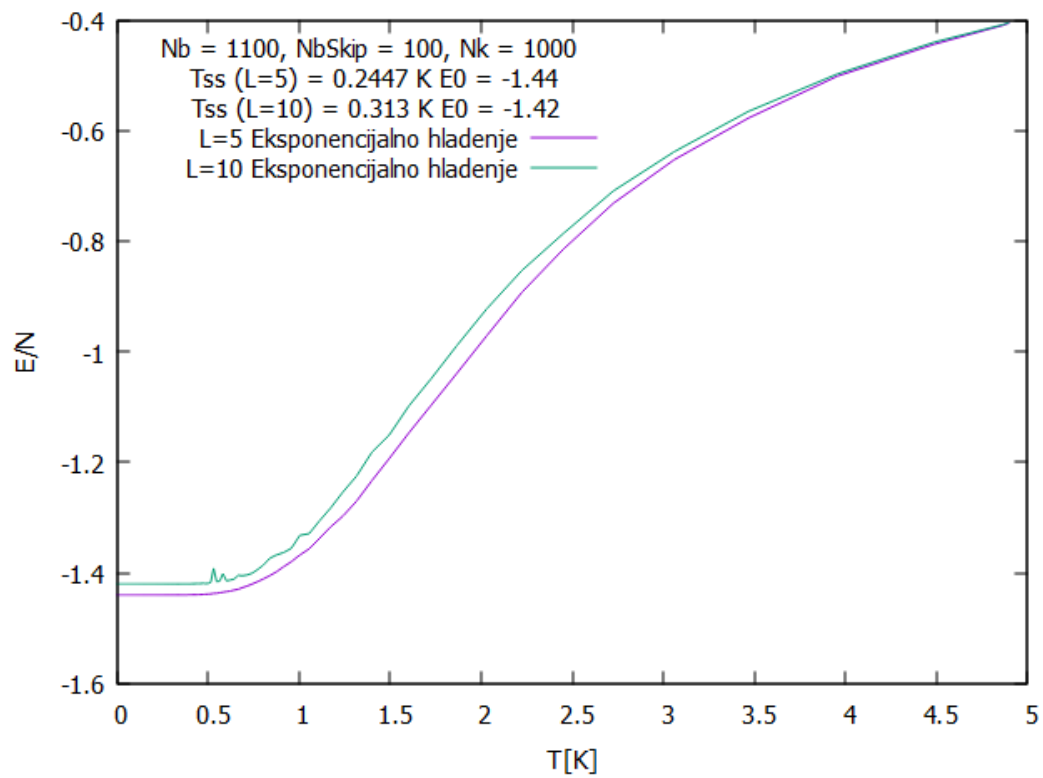


Slika 2. Odnos energije i temperature za sustav veličine  $L = 5$  s dva različita rasporeda hlađenja.

Na slici 3. graf pokazuje ponašanje energije za iste parametre kao i na prošlom s jedinom razlikom što smo rešetku povećali na  $L = 10$ . Korištenjem većeg broja čestica dolazimo do veće preciznosti i dobivena energija osnovnog stanja po čestici je  $-1.42$ . Za sve sljedeće simulacije koristim eksponencijalni raspored hlađenja jer je promjena temperature u nama zanimljivom intervalu dovoljno spora kako bi uočili zamrzavanje sustava.



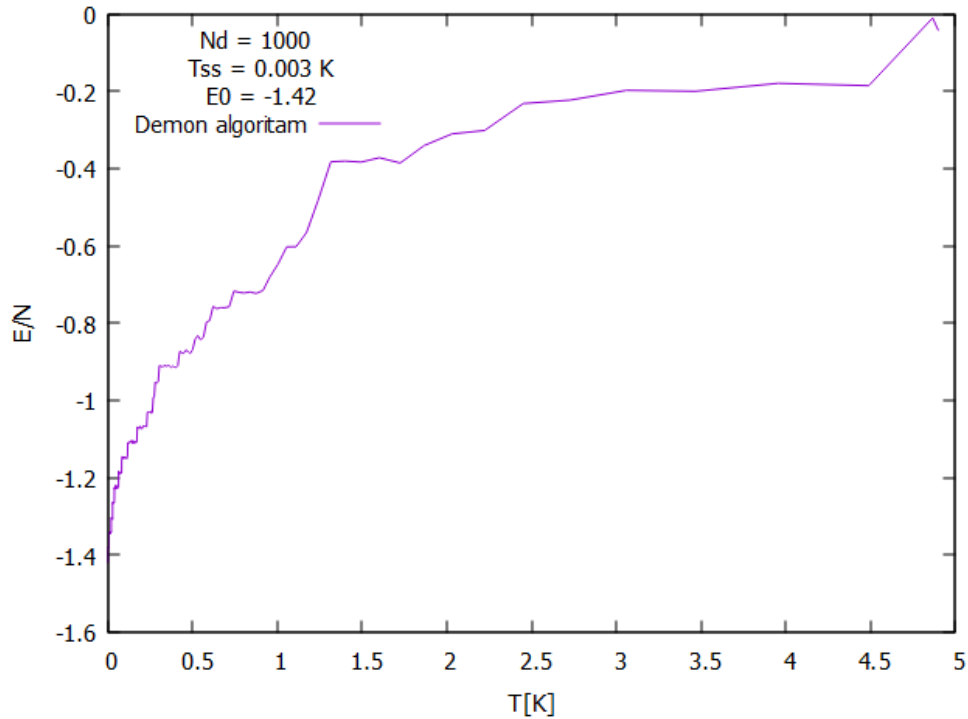
Slika 3. Odnos energije i temperature za sustav veličine  $L = 10$  s dva različita rasporeda hlađenja.





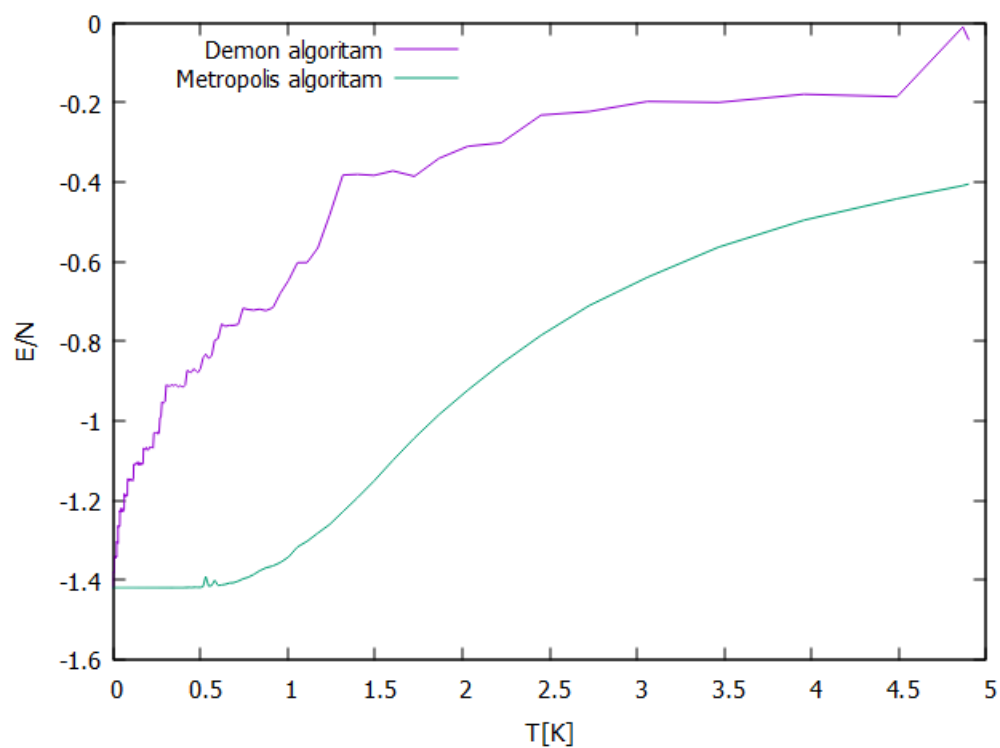
Slika 4. Odnos energije i temperature za eksponencijalni raspored hlađenja kod sustava  $L=5$  i  $L=10$ .

Na slici 4. napravljena je usporedba za korištenje manjeg broja čestica u rešetki  $L = 5$  te većeg broja čestica za  $L = 10$ . U svim daljnjim simulacijama koristim rešetku veličine  $L = 10$  jer rezultira vrijednostima osnovne energije koje su bliže referentnim vrijednostima iz literature.

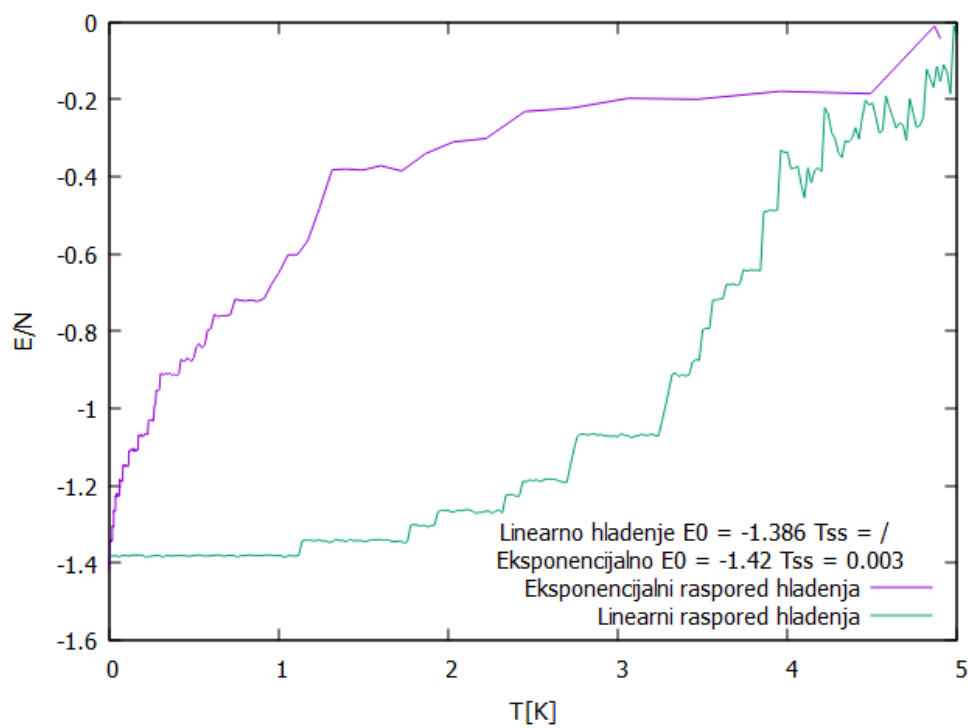


Slika 5. Odnos energije i temperature za eksponencijalni raspored hlađenja korištenjem demon algoritma.

Na slici 5. prikazan je graf ovisnosti energije po čestici o temperaturi za simulaciju provedenu demon algoritmom. Korištenjem ove metode sustav ima više slobode te na grafu vidimo kako funkcije energije pokazuje veću dinamiku sustav u usporedbi s korištenjem metropolis algoritma. Sustav se zamrzava na dosta nižoj temperaturi nego do sada,  $T_{ss} = 0.003$  K. Na slici 6. imamo usporedbu korištenja oba algoritma s jednakim rasporedom simuliranog kaljenja gdje se još jasnije vidi kako se sustav dinamičnije ponaša korištenjem demon algoritma. Na slici 7. napravljena je usporedba linearnog i eksponencijalnog rasporeda hlađenja. Za linearni raspored hlađenja uopće nemamo zamrznuti sustav već energija oscilira oko minimalne.



Slika 6. Odnos energije i temperature za metropolis i demon algoritam.



Slika 7. Odnos energije i temperature za linearno i eksponencijalno hlađenje kod demon algoritma.

## Literatura

[1] A. P. Young: „*Numerical simulations of spin glasses: methods and some recent results*“, Physics Department, University of California Santa Cruz,  
URL : <http://physics.ucsc.edu/~peter/papers/erice.pdf>

[2] Hong Guo, Martin Zuckermann, R. Harris i Martin Grant: „*A fast Algorithm for Simulated Annealing*“, Centre for the Physics of Materials, Department of Physics, McGill University, 1990.,  
URL : [http://www.physics.mcgill.ca/~grant/Papers/Fast\\_algorithm.pdf](http://www.physics.mcgill.ca/~grant/Papers/Fast_algorithm.pdf)

[3] Leandra Vranješ Markić i Petar Stipanović: „*Stohastičke simulacije u klasičnoj i kvantnoj fizici*“, Odjel za fiziku, Prirodoslovno-matematički fakultet u Splitu, 2016.