



UNIVERZA
V LJUBLJANI

FMF

Fakulteta za matematiko
in fiziko

Metropolisov algoritem

Modelska analiza, vaja 8

Avtor: Urban Pečoler
Vpisna številka: 28242019

December 2024

Kazalo

1	Uvod	1
2	Verižnica	2
2.1	Neomejena višina	5
3	Isingov model	6
3.1	Zunanje magnetno polje	8
4	Potujoči trgovec	11

1 Uvod

V tej nalogi smo uporabili Metropolisov algoritem, ki je ena izmed Monte Carlo metod za simulacije v statistični fiziki. Algoritem omogoča učinkovito vzorčenje konfiguracij sistema pri določeni temperaturi v skladu s kanonično porazdelitvijo. Osnovna ideja algoritma je generiranje novih konfiguracij sistema s postopnimi spremembami trenutne konfiguracije in odločanje o sprejetju teh sprememb na osnovi Boltzmannovega faktorja. Postopek poteka v naslednjih korakih:

1. Izberemo naključno začetno konfiguracijo sistema.
2. Naključno izberemo možen premik ali spremembo konfiguracije.
3. Izračunamo spremembo energije ΔE , ki jo ta premik povzroči.
4. Če je $\Delta E \leq 0$, novo konfiguracijo sprejmemo, saj vodi k nižji energiji.
5. Če je $\Delta E > 0$, novo konfiguracijo sprejmemo z verjetnostjo $\exp(-\Delta E/k_B T)$, kjer je k_B Boltzmannova konstanta in T temperatura sistema.
6. Postopek ponavljamo dovolj dolgo, da sistem doseže termodinamično ravnovesje.

Algoritem se uporablja za modeliranje širokega spektra sistemov, od simulacij magnetnih lastnosti do obravnave kompleksnih molekularnih sistemov. V tej nalogi smo ga uporabili za reševanje dveh različnih problemov: modeliranje molekularne verižice in simulacijo 2D Isingovega modela. Naloga je bila razdeljena na dve ključni točki:

1. **Molekularna verižica:** 17 členkov dolga nitkasta molekula je obešena za oba konca. Vsak členek se lahko povesi od ničelne lege na poljubnega od 19 nivojev, s čimer se zmanjša potencialna energija za eno enoto na nivo. Če pa s tem premaknemo vezi do sosedov, se plača prožnostna energija, ki je za vsakega sosedu enaka kvadratu razlike v nivojskih številih. Cilj naloge je določiti ravnovesno energijo v odvisnosti od temperature. Pri simulacijah lahko za poteze uporabimo spremembo za en nivo na naključno izbranem mestu.
2. **Isingov model:** Simulirali smo feromagnetne in antiferomagnetne snovi v dveh dimenzijah, ki jih v približku dveh stanj opišemo s Hamiltonovim operatorjem:

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

kjer je $s_i = \pm 1$, vsota pa teče po vezeh $\langle ij \rangle$ med najbližjimi sosedi. Če zunanje polje ni prisotno ($H = 0$), fazni prehod pri feromagnetu nastopi pri kritični temperaturi T_c , ki jo določa enačba:

$$\sinh\left(\frac{2J}{k_B T_c}\right) = 1 \implies T_c \approx 2.269185 \frac{J}{k_B}.$$

Cilj naloge je bil določiti povprečno energijo $\langle E \rangle$ in lastno magnetizacijo $\langle S \rangle$ sistema v odvisnosti od temperature, kjer je $S = \sum_i s_i$ celotna magnetizacija sistema. Poleg tega smo raziskovali tudi spin-susceptibilnost χ in specifično toploto c pri različnih jakostih magnetnega polja:

$$\chi = \frac{\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2}{N k_B T}, \quad c = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{N k_B T^2}.$$

Naloga je bila izvedena s pomočjo Metropolisovega algoritma, ki je omogočil učinkovito simulacijo zgoraj opisanih sistemov.

2 Verižnica

Pri prvi nalogi se ukvarjamo z 17 členki dolgo nitkasto molekulo, ki je pritrjena na obeh koncih. Vsak členek se lahko premakne z začetne ničelne lege na katero koli od 19 višin, pri čemer se za vsak premik zniža potencialna energija za eno enoto na nivo. Obenem pa so posamezni členki povezani s sosednjimi členki preko vezi, ki imajo svojo prožnost. Prožnostna energija je sorazmerna kvadratu razlike med nivojskimi višinami sosednjih členkov. Celotno energijo molekule lahko zapišemo kot:

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

kjer parameter $\alpha = mg/(kd^2)$ opisuje razmerje med gravitacijsko silo in prožnostjo vezi.

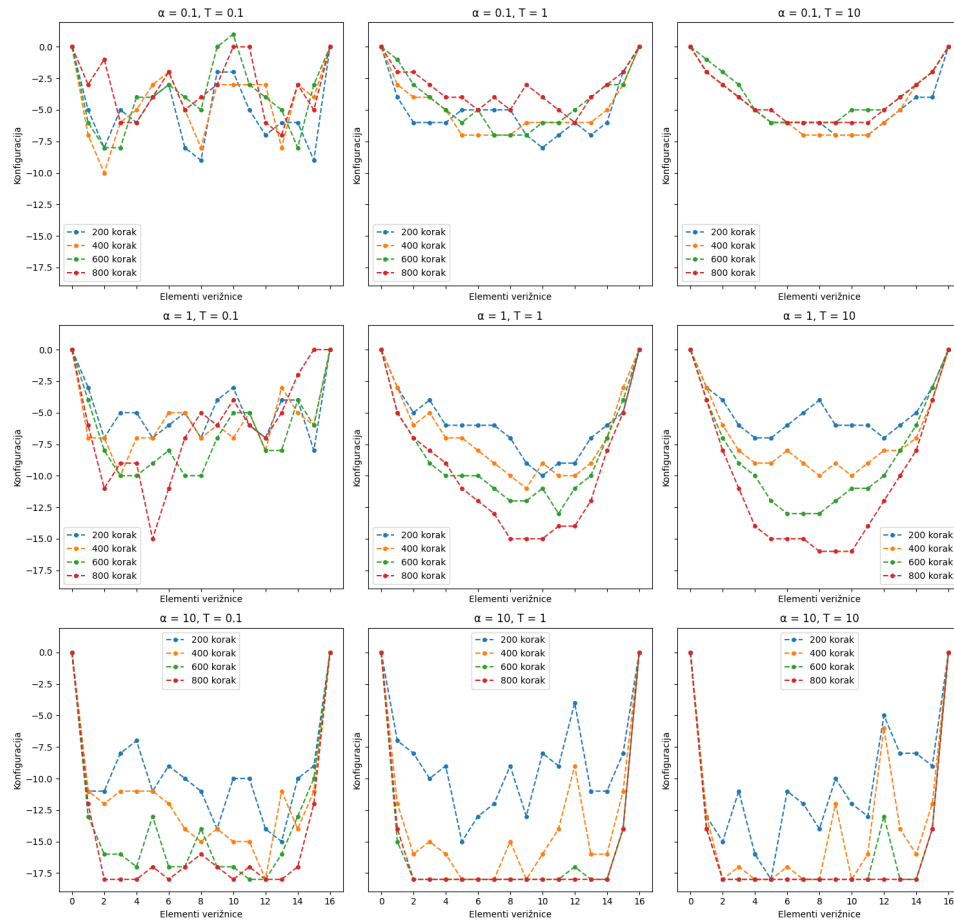
V tej nalogi želimo s pomočjo Metropolisovega algoritma poiskati stanje molekule, pri katerem je energija minimalna. Na začetku vsakemu členku (z izjemo obeh skrajnih členkov) dodelimo naključno začetno višino. V vsaki iteraciji nato naključno izberemo en členek in njegovo višino spremenimo za $\delta = \pm 1$. Energija sistema se zaradi te spremembe spremeni za:

$$\Delta E = \delta^2 - \delta(h_{i+1} - 2h_i + h_{i-1} - \alpha). \quad (2)$$

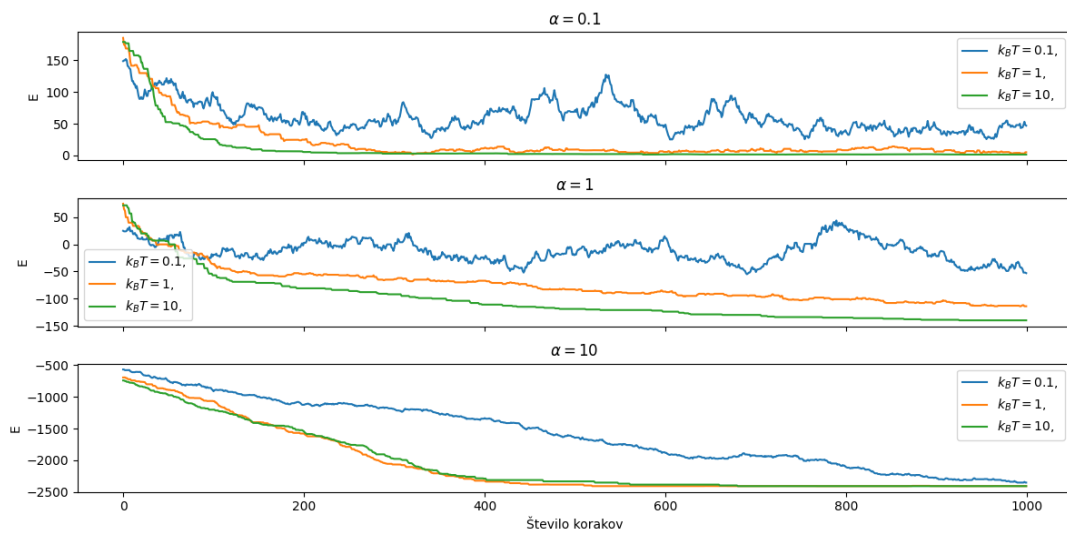
Če je $\Delta E \leq 0$, spremembo vedno sprejmemo, ker zmanjša energijo. Če pa je $\Delta E > 0$, spremembo sprejmemo z verjetnostjo $\exp(-\Delta E/k_B T)$, kjer je k_B Boltzmannova konstanta, T pa temperatura sistema. Naključno število ξ generiramo iz uniforme porazdelitve $U(0, 1)$.

Za lažje računanje in boljše preglednost smo vrednost Boltzmanove konstante k_B postavili na 1. V simulacijah smo nato raziskovali, kako sprememba α in temperature vpliva na ravnovesno stanje verižice. Najprej sem narisal konfiguracije verižnic pri različnih korakih, za različne vrednosti α in $k_B T$.

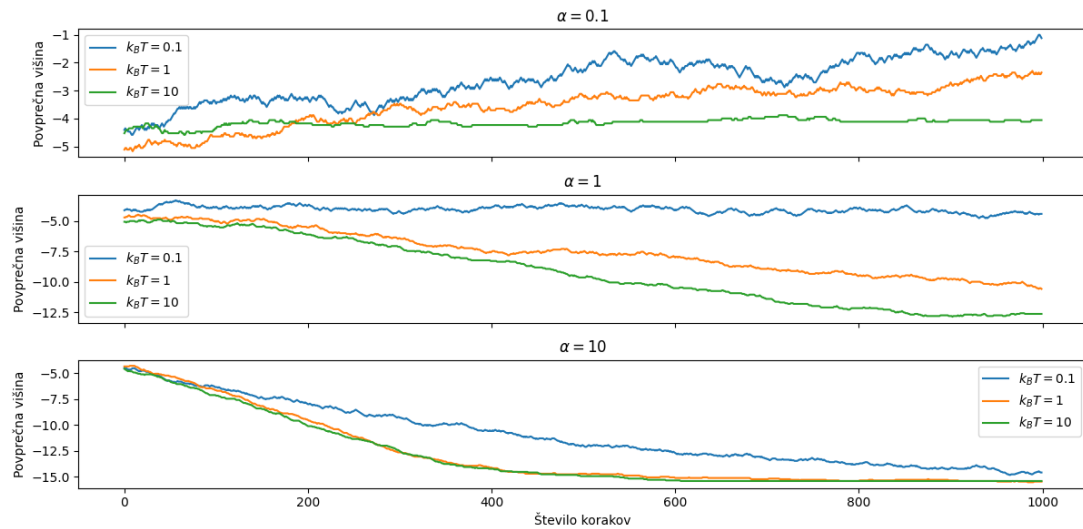
Ugotovili smo, da večje vrednosti α vodijo do bolj raztegnjene verižice, saj gravitacija prevlada nad prožnostjo vezi, prav tako pa je verižnica na sredini konstantna funkcija, ker smo višino omejili na -18. Pri enakih parametrih sem pogledal tudi energijo in povprečno višino v odvisnosti od koraka.



Slika 1: Konfiguracija veržnice po številu korakov algoritma za več parov vrednosti α in $k_B T$. Sklepamo lahko, da za nižje temperature veržnica prej najde ravnovesno stanje. Prav tako vidimo, da za večje vrednosti α členki preferirajo nižje vrednosti h_i .

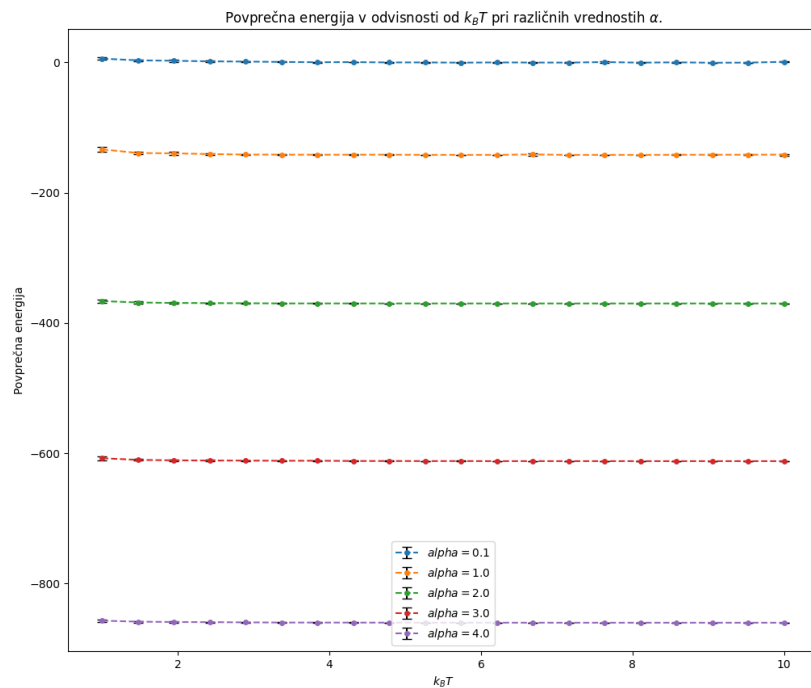


Slika 2: Energije veržnice v odvisnosti od števila korakov za različne vrednosti α in $k_B T$.



Slika 3: Višina verižnice v odvisnosti od števila korakov za različne vrednosti α in $k_B T$.

Opazili smo tudi, da energija sistema doseže ravnovesno vrednost po približno 1000 korakih simulacije. Pri višjih temperaturah so energetske fluktuacije večje, saj so termične vznukanja bolj izrazita. Za analizo smo povprečno energijo sistema in njeno negotovost izračunali tako, da smo vzorčili energijo po tem, in izračunali povprečno vrednost ter standardni odklon.

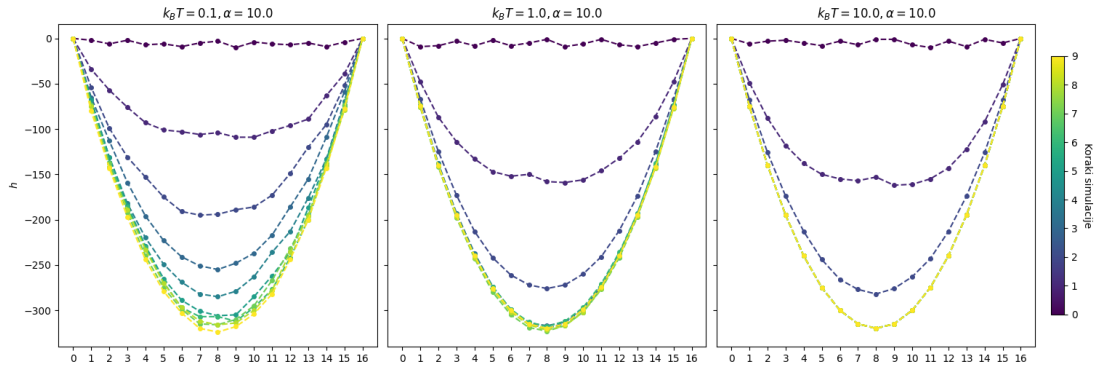


Slika 4: Ravnovesna energija verige v odvisnosti od temperature in narisane vrednosti variance.

Vidimo, da je povprečna energija sistema, pri $k_B T > 2$ konstantna.

2.1 Neomejena višina

Za konec prve naloge pa sem pogledal še, kaj se zgodi, če višine verižnice ne omejimo. Spet sem izrisal nekaj primerov za različne $k_B T$ pri $\alpha = 10$ ob različnih korakih.

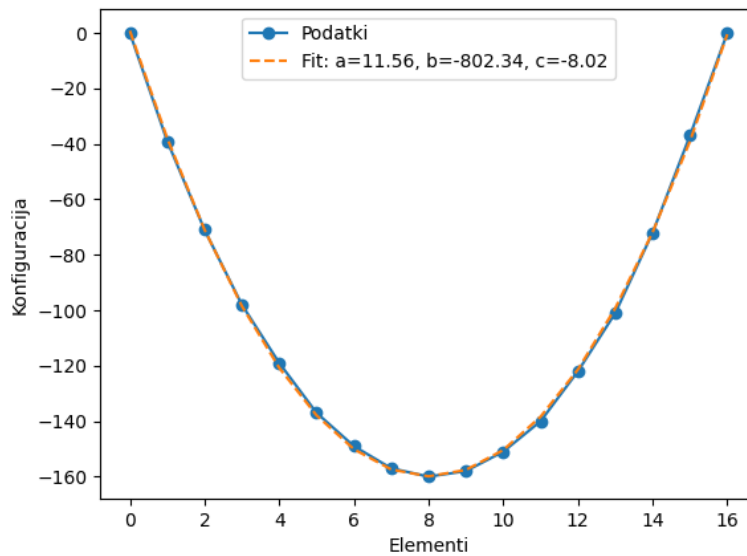


Slika 5: Konfiguracija verižnice pri neomejeno vrednosti h_i . Vidimo, da verižnica dobi obliko verižnice

Vidimo, da verižnica vedno bolj postaja podobna "matematični verižnici". Če je temu res tako sem se prepričal tudi tako, da sem funkcijo z enačbo

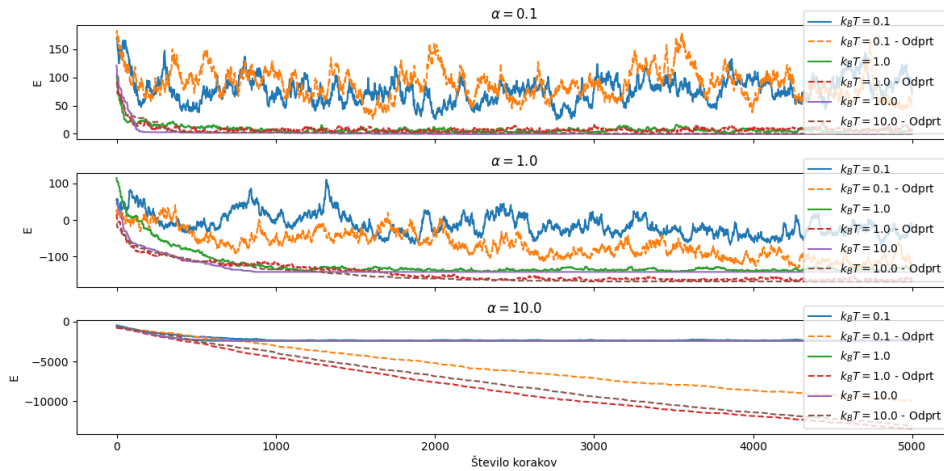
$$y = a \cosh \frac{x}{a},$$

ki je ustrezno premaknjena v x in y smeri, fital na simulirano verižnico z parametri $k_B T = 1, \alpha = 10$.



Slika 6: Narisana verižnica z parametri $k_B T = 1, \alpha = 10$ ter prilagojena funkcija verižnice. Vidimo, da se funkcija ujema z podatki.

Da bi bolje razumel vpliv omejitve višine, sem primerjal energije verižnice z neomejeno višino z energijami verižnice, kjer je bila višina omejena. Rezultati primerjave so prikazani na spodnjem grafu:



Slika 7: Primerjava energije v odvisnosti od koraka za verižnico z omejeno višino in verižnico z neomejeno višino pri različnih vrednostih $k_B T$ in α

Črtkane črte na grafu prikazujejo energijo verižnice, ki nima omejene višine. Vidimo, da je energija verižnice brez omejitve višine pri vseh vrednostih $k_B T$ in α bistveno nižja kot energija verižnice z omejeno višino. Ta razlika je pričakovana, saj sistem z neomejeno višino doseže bolj optimalne konfiguracije, kjer se zmanjša napetost in energija verižnice. Pri omejeni višini so spini prisiljeni v manj ugodne konfiguracije, kar povečuje skupno energijo sistema.

3 Isingov model

Kot že povedano v uvodu, Isingov model opisuje feromagnetne in antiferomagnetne snovi, ki jih v približku dveh stanj opišemo s Hamiltonovim operatorjem (1). Interakcijo, s katero bomo modelirali opisuje energije, ki jo dobimo direktno iz (1)

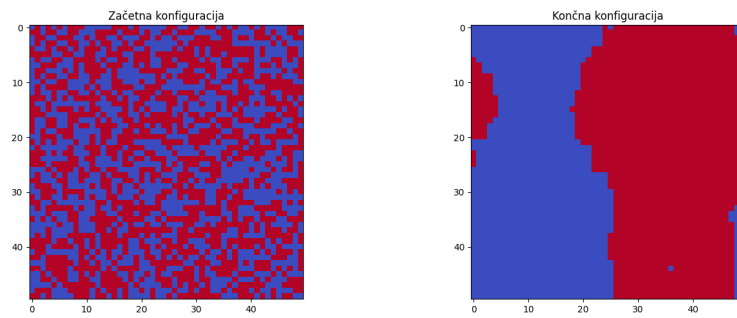
$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i$$

kjer so S_i spini atomov, ki lahko zavzamejo vrednost ± 1 , prva vsota v enačbi pa teče po vezeh med najbližjimi sosedi. H predstavlja zunanje magnetno polje, na katerega se bom osredotočil v drugem delu analize problema. Konstanta J , pa predstavlja interakcijo med delci $J > 0$ - feromagnetne interakcije, $J < 0$ antiferomagnetne interakcije. V tej analizi se bom osredotočil le na $J > 0$.

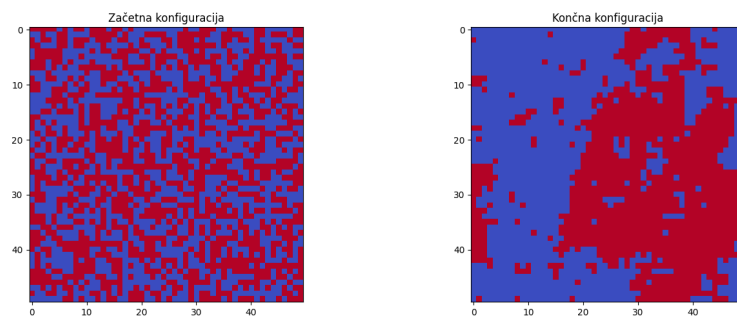
Pri iskanju ravnovesja spet uporabimo Metropolisov algoritem. Problema se lotimo z naslednjim postopkom

1. Naključno izžrebamo pozicijo spina (i, j)
2. Predpostavimo "potezo" $S(i, j) \rightarrow S'(i, j)$
3. Izračunamo energijo $\Delta E = 2JS(i, j)[S(i-1, j) + S(i+1, j) + S(i, j-1) + S(i, j+1) + 2HS(i, j)]$
4. Če $\Delta E < 0$ "potezo" sprejmemo
5. Če $\Delta E > 0$ potezo sprejmemo samo v primeru da $\xi \in U(0, 1) \leq e^{-\Delta E/k_B T}$

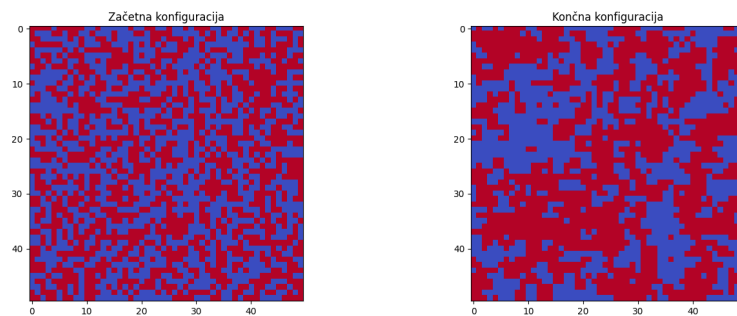
Pri nalogi sem najprej pogledal začetne in končne konfiguracije sistema pri različni vrednosti temperature T , kot pri prejšnji nalogi sem tudi tukaj k_B postavil na 0.



Slika 8: Začetna in končna konfiguracija sistema z $T = 1$

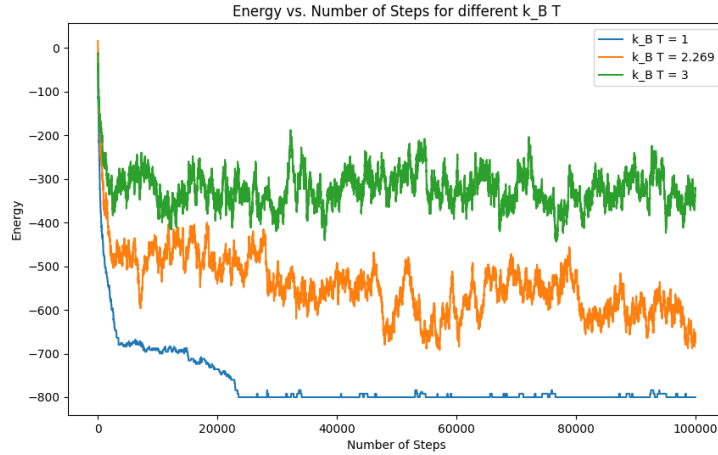


Slika 9: Začetna in končna konfiguracija sistema z $T = T_C = 2.269$

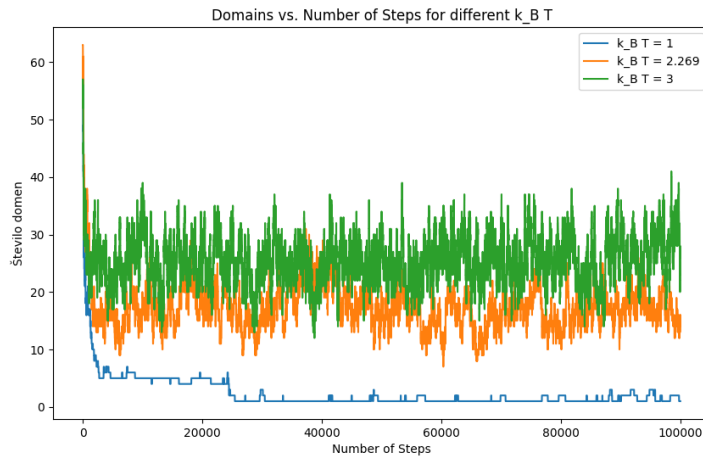


Slika 10: Začetna in končna konfiguracija sistema z $T = 3$

Za enake vrednosti temperature sem nato pogledal še energijo v odvisnosti od časa in število domen.



Slika 11: Energija sistema v odvisnosti od števila korakov pri nekaj različnih vrednostih $k_B T$.



Slika 12: Število domen v snovi v odvisnosti od števila korakov pri nekaj različnih vrednostih $k_B T$.

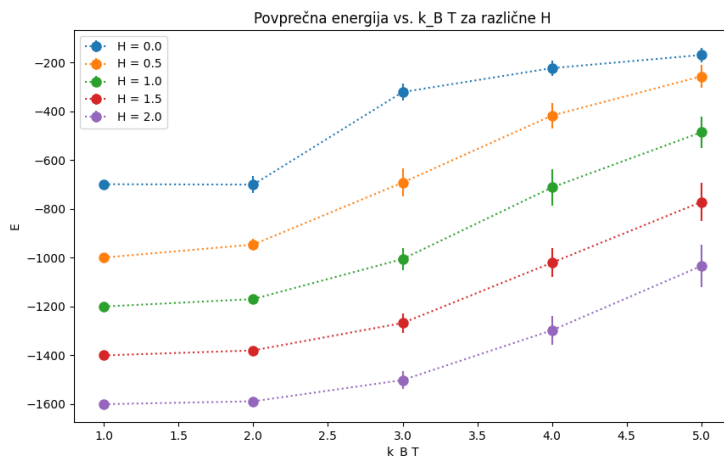
3.1 Zunanje magnetno polje

Problem postane še bolj zanimiv, ko imamo tudi neko zunanje magnetno polje H . Z enakim postopkom in algoritmom sem pogledal povprečno energijo in število domen v odvisnosti od $k_B T$ pri različnih vrednostih H . Izračunal pa sem še magnetno susceptibilnost χ in specifično toploto c .

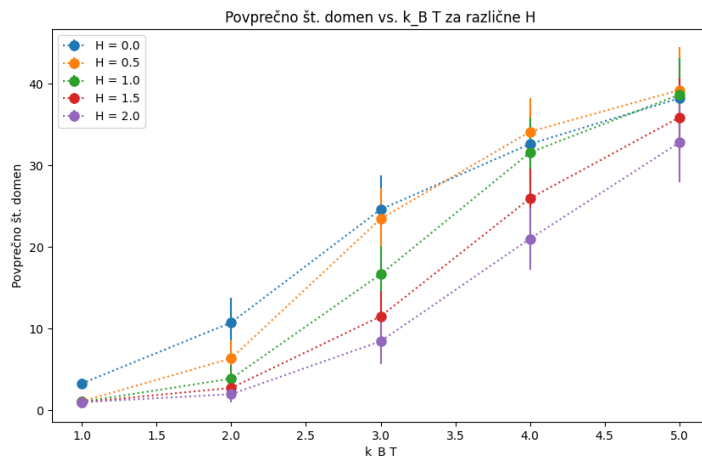
$$\chi = \frac{\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2}{Nk_B T}$$

$$c = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{Nk_B T}$$

Pričakovani vrednosti spina in energije lahko izračunamo kot $\langle S \rangle = 1/N \sum_1^N s_i$. V primeru ko ni zunanjega magnetnega polja, se lahko izračuna kritično temperaturo (temperaturo pri kateri pride do faznega prehoda), ta pa je bila že podana v navodilih $T_C \approx 2.269 J/k_B$. Določil pa sem tudi magnetizacijo, ki je preprosto vsota vseh spinov.



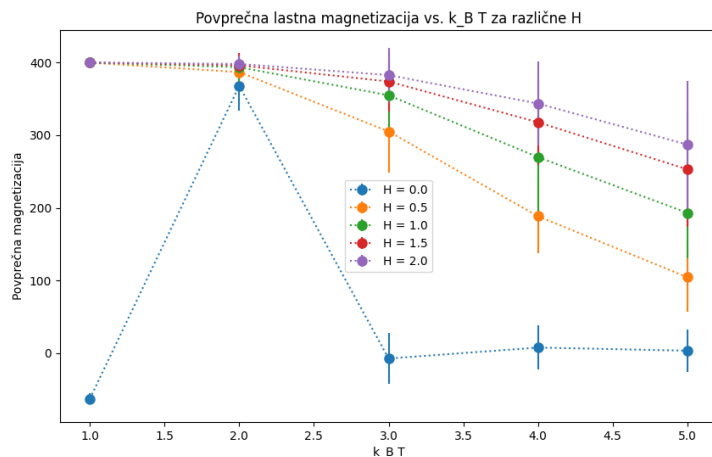
Slika 13: Povprečna energija sistema v odvisnosti od temperature za različne vrednosti zunanjega magnetnega polja H



Slika 14: Povprečno število domen sistema v odvisnosti od temperature za različne vrednosti zunanjega magnetnega polja H

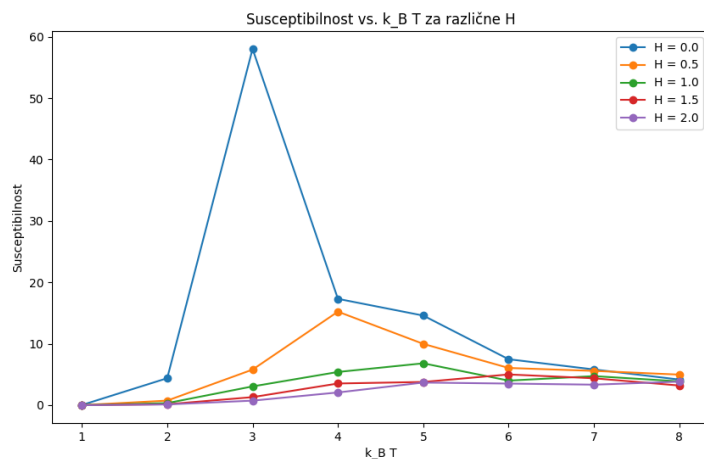
Povprečna energija sistema narašča z višanjem temperature $k_B T$. Pri nizkih temperaturah energija ostane skoraj konstantna, saj sistem večino časa ostaja v bolj urejenem stanju. Z višanjem temperature pa sistem pridobi dovolj energije za prehajanje v bolj naključna stanja, kar vodi do povečevanja povprečne energije.

Število domen v spinski mreži narašča z višanjem temperature $k_B T$. Pri nizkih temperaturah je magnetizacija sistema visoka, kar pomeni, da se skoraj vsi spini poravnajo v isto smer in število domen je majhno. Ko se temperatura povečuje, pa postanejo toplotne fluktuacije močnejše, kar povzroči razbijanje večjih domen v manjše in bolj razpršene regije.

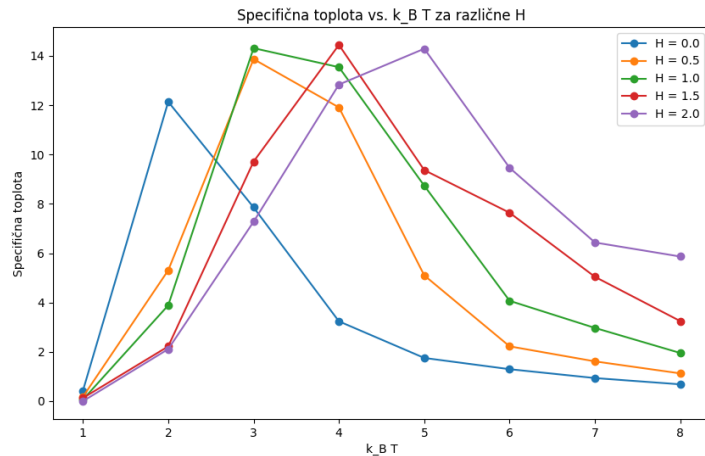


Slika 15: Povprečna magnetizacija sistema v odvisnosti od temperature za različne vrednosti zunanjskega magnetnega polja H

Čeprav graf vsebuje premalo točk za podroben prikaz pri nizkih temperaturah, je jasno razvidno, da magnetizacija upada in se približa ničli pri višjih temperaturah. Ta pojav je skladno s teorijo, saj ob kritični temperaturi T_C pride do faznega prehoda iz magnetiziranega v nemagnetizirano stanje.



Slika 16: Povprečna susceptibilnost χ sistema v odvisnosti od temperature za različne vrednosti zunanjskega magnetnega polja H



Slika 17: Povprečna specifična toplota sistema v odvisnosti od temperature za različne vrednosti zunanjega magnetnega polja H

Grafi za susceptibilnost in specifično toploto prav tako vsebujejo premalo točk za natančno analizo, vendar je razvidno, da obe količini dosežeta svoj maksimum v bližini kritične temperature T_C . To je skladno s pričakovanji, saj se pri T_C pojavijo velike fluktuacije v sistemu, kar povzroči porast obeh količin. Iz maksimumov je tudi lepo razvidno, kako se T_C viša z višanjem zunanjega magnetnega polja.

4 Potujoči trgovec

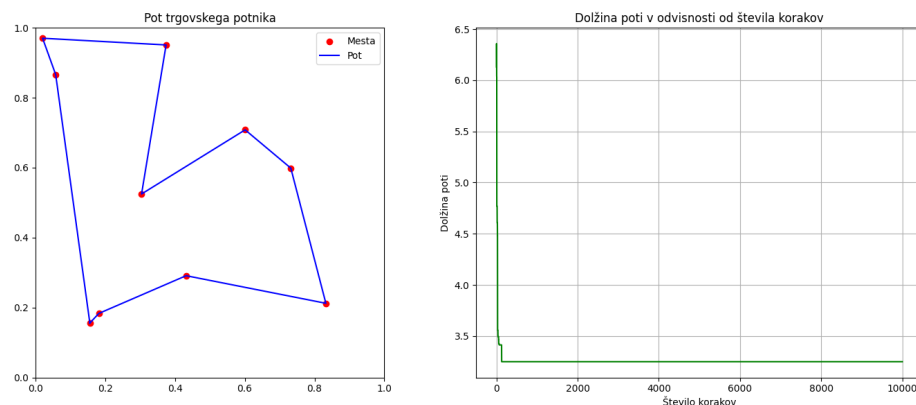
Za konec pa si pogledajmo še model potujočega trgovca (*Travelling Salesman Problem*, TSP) ki je klasičen kombinatorični optimizacijski problem. V tem problemu imamo podan nabor mest in razdalj med vsemi pari mest. Cilj je najti najkrajšo pot, ki obišče vsako mesto natančno enkrat in se vrne v začetno mesto.

Matematično lahko problem zapišemo kot iskanje permutacije mest $\pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_N)$, ki minimizira celotno razdaljo:

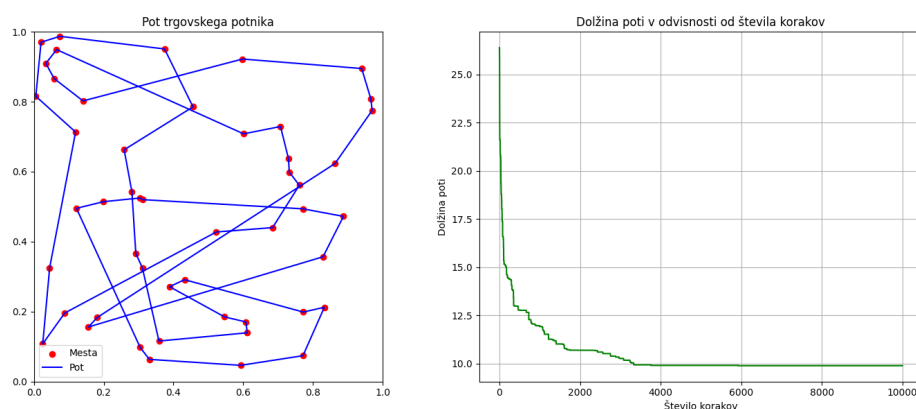
$$D(\pi) = \sum_{i=1}^{N-1} d_{\pi_i \pi_{i+1}} + d_{\pi_N \pi_1},$$

kjer je d_{ij} razdalja med mestoma i in j .

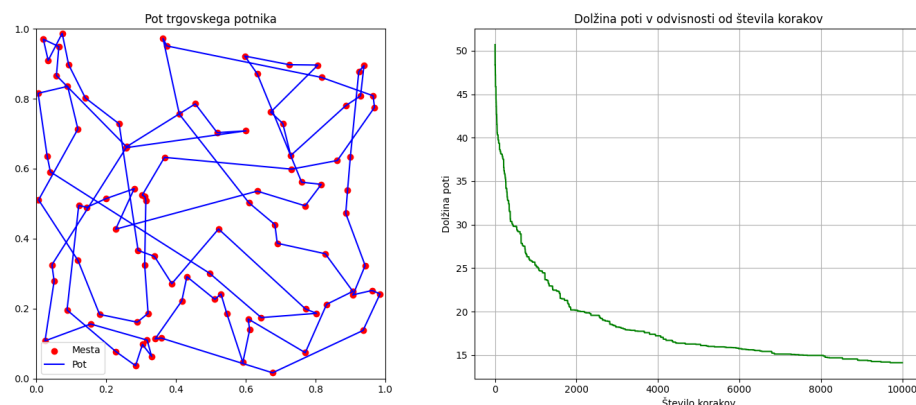
Pogledal sem graf poti, ki jo je opravil trgovec za določeno število naključno generiranih točk in odvisnost dolžine opravljene poti od števila korakov algoritma.



Slika 18: Optimalna pot trgovca pri **10** generiranih točkah in celotna razdalja poti v odvisnosti od števila korakov algoritma



Slika 19: Optimalna pot trgovca pri **50** generiranih točkah in celotna razdalja poti v odvisnosti od števila korakov algoritma



Slika 20: Optimalna pot trgovca pri **100** generiranih točkah in celotna razdalja poti v odvisnosti od števila korakov algoritma

Vidimo, da minimalna razdalja pri manjšem številu mest hitro konvergira k pravi vrednosti, medtem ko pri 100 točkah potrebuje že več kot 10 000 korakov.