گزارش کار تمرین شماره ۸

ارمیا اعتمادی بروجنی

مقدمه

در این تمرین مدل آیزینگ دوبعدی مربعی را به کمک الگوریتم متروپلیس شبیه سازی می‌کنیم و رفتار کمیت های ترمودینامیکی مختلف را حول دمای بحرانی بررسی می‌کنیم. این سری تمرین با زبان زیبا و کاربردی go نوشته شده است.

نظریه

مدل آیزینگ به وسیله هامیلتونی زیر توصیف می‌شود:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i \tag{۱}$$

که جمع اول روی اسپین های مجاور است. ما توجه خود را به حالت $h = 0$ معطوف می‌کنیم. همچنین تنها مدل شبکه مربعی دوبعدی با شرایط مرزی تناوبی را بررسی می‌کنیم. طبق مکانیک آماری احتمال هر حالت در آنسامبل کانونیک متناسب با وزن بولتزمن است:

$$p(\{\sigma_i\}) \propto e^{-\beta \mathcal{H}} \tag{۲}$$

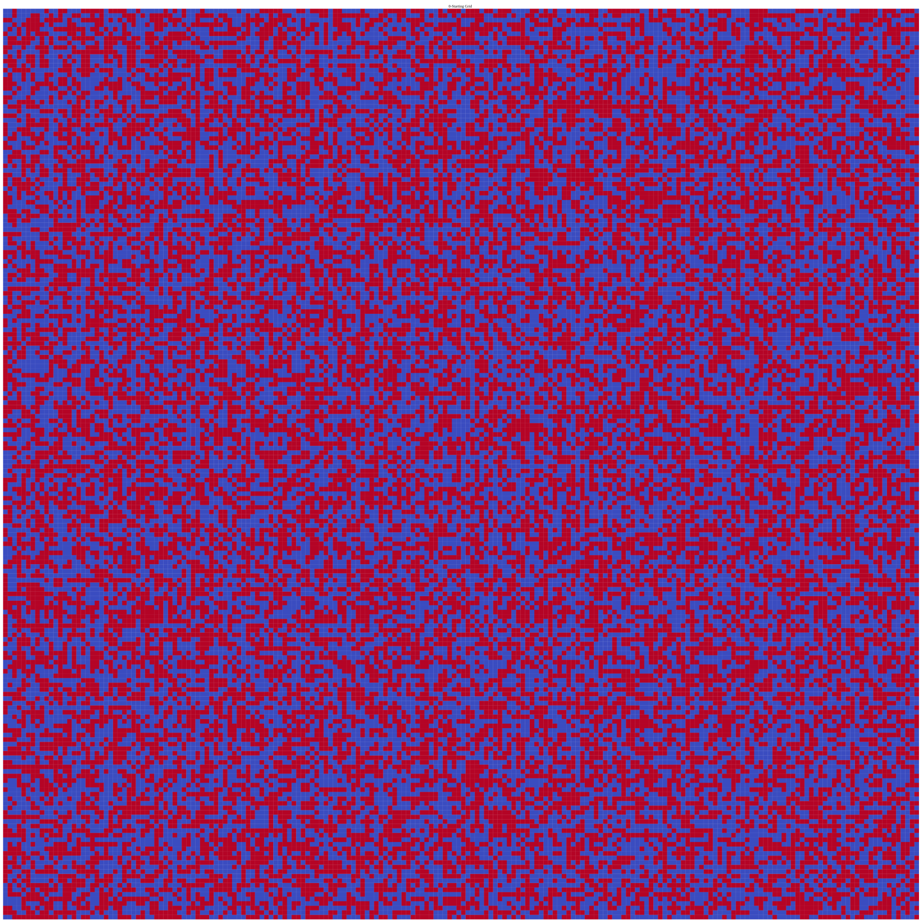
در الگوریتم متروپلیس توجه ما تنها معطوف به نسبت احتمال دو حالت است:

$$\frac{p(\{\sigma_i\})}{p(\{\sigma_i'\})} = e^{-\beta \Delta E} \tag{۳}$$

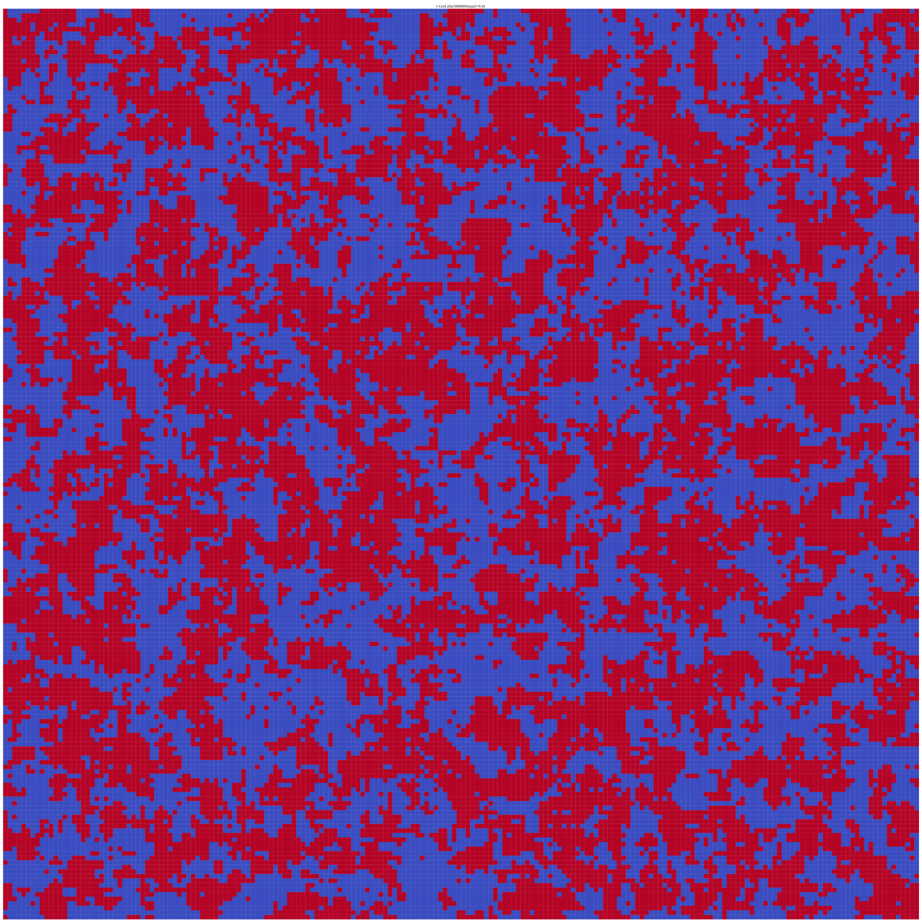
به کمک این عبارت احتمال گذار در زنجیر مارکوف به دست می‌آید. در این کد دما و ثابت بولتزمن و در نتیجه β برابر با یک قرار داده شده اند. این کار از عمومیت مسئله کم نمی‌کند زیرا با تبدیل واحد و تغییر J قابل تبدیل به یک دیگر هستند.

شبیه سازی

کد های شبیه سازی مدل آیزینگ در ماژول $\mathrm{Ising\ Model}$ نوشته شده و در فایل $\mathrm{main.go}$ از این توابع استفاده شده. یک شبکه آیزینگ به وسیله استراکت $\mathrm{IsingGrid}$ در فایل $\mathrm{IsingModel.go}$ تعریف می‌شود که شامل طول شبکه، تعداد اسپین ها(طول شبکه به توان ۲)، J، حالت اسپین ها و تابع نمایی ۵ عدد مورد استفاده است (به دلیل محدودیت حالت ها در شبکه دو بعدی این ۵ حالت ذخیره شده تا از پیچیدگی محاسبه کاسته شود) . توابع مختلفی از جمله ایجاد کننده شبکه، تصادفی ساز و محاسبه گر احتمال بین دو حالت نیز در این فایل قرار دارند. الگوریتم متروپلیس در فایل $\mathrm{Metropolis.go}$ پیاده سازی شده است . به عنوان مثال یک شبکه به طول 200 و $J = 0.4$ قبل و بعد از 500000 قدم به نمایش درآمده (شبکه به کمک تابع $\mathrm{HeatmapGrid}$ در فایل $\mathrm{Plots.go}$ به تصویر کشیده شده).

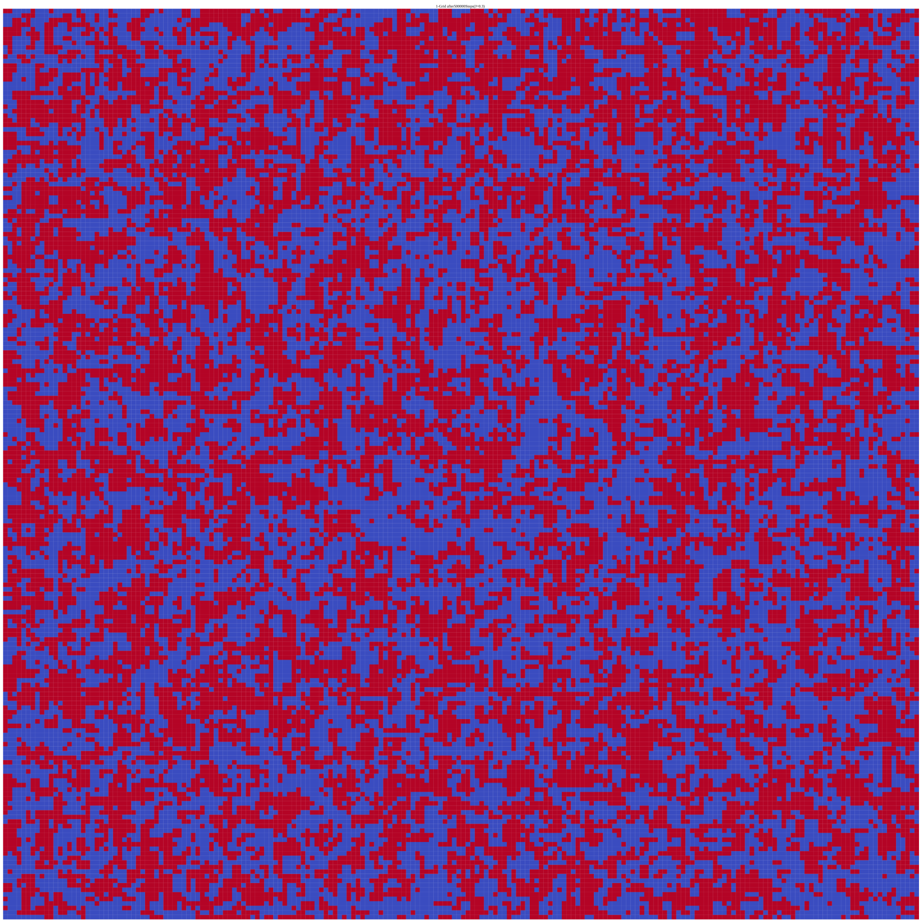


شکل ۱: شبکه تصادفی اولیه

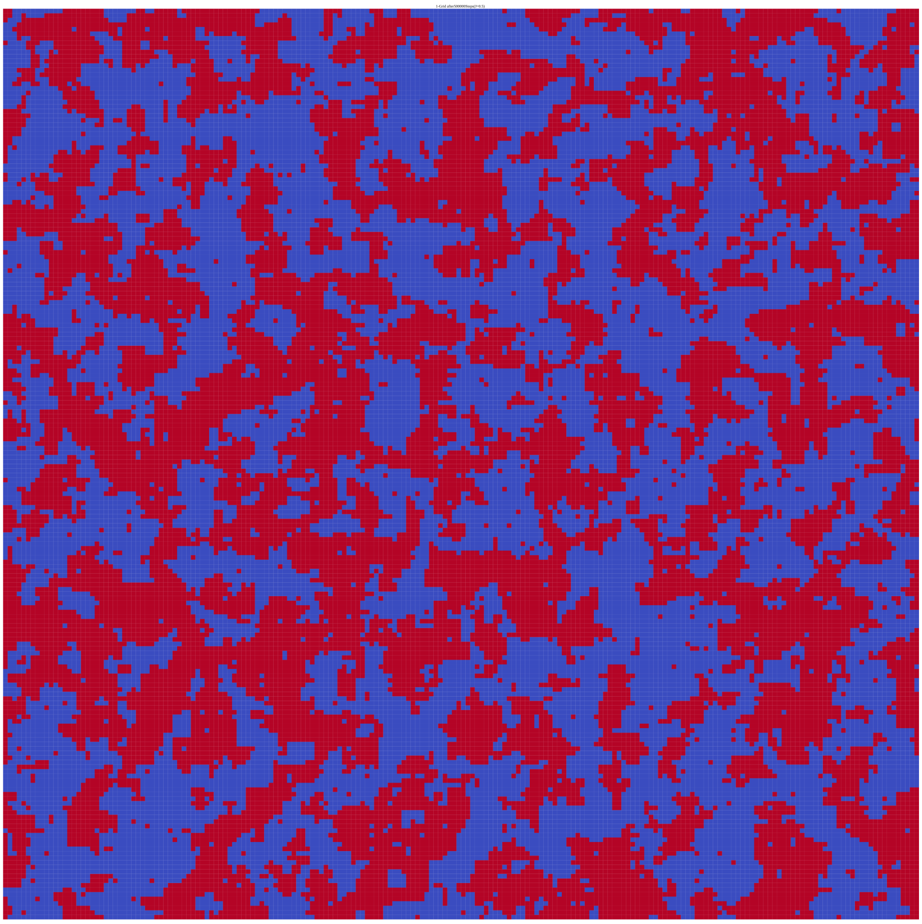


شکل ۲: شبکه پس از 500000 قدم در $J = 0.4$

برای دو دمای دیگر زیر نیز شبکه نهایی به تصویر کشیده شده:



شکل ۳: شبکه پس از 500000 قدم در $J = 0.3$



شکل ۴: شبکه پس از 500000 قدم در $J = 0.5$

کمیت های ترمودینامیکی

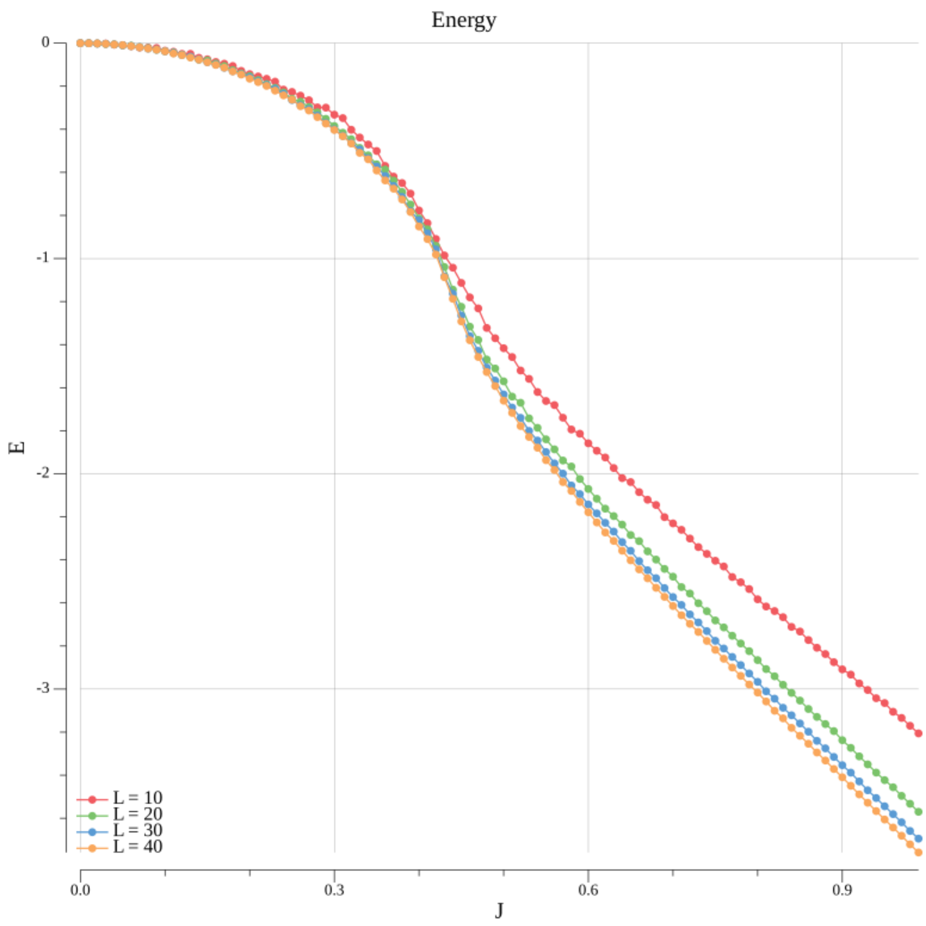
برای یک شبکه آیزینگ درون فایل Observables.go دو کمیت انرژی و قدر مطلق مغناطش در واحد اندازه شبکه محاسبه می‌شوند. برای محاسبه دو کمیت ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی نیز داریم از واریانس انرژی و مغناطش در آنسامبل کانونیک استفاده کنیم. در فایل Runners.go تابع RunSimL یک شبکه به طول مشخص را به دفعات مشخص در بازه J میان ۰ و ۱ به دفعات متعدد اجرا می‌کند و کمیت های ترمودینامیکی ذکر شده را گزارش می‌کند. همچنین برای شبیه سازی نیاز داریم تعداد قدم های مشخصی در زنجیر مارکوف حرکت کنیم. تعداد این قدم ها در شبکه ای به طول N با رهیافت آنی زیر انتخاب شده است:

$$\text{Steps} = 100 \times N \times \exp(8J) \tag{۴}$$

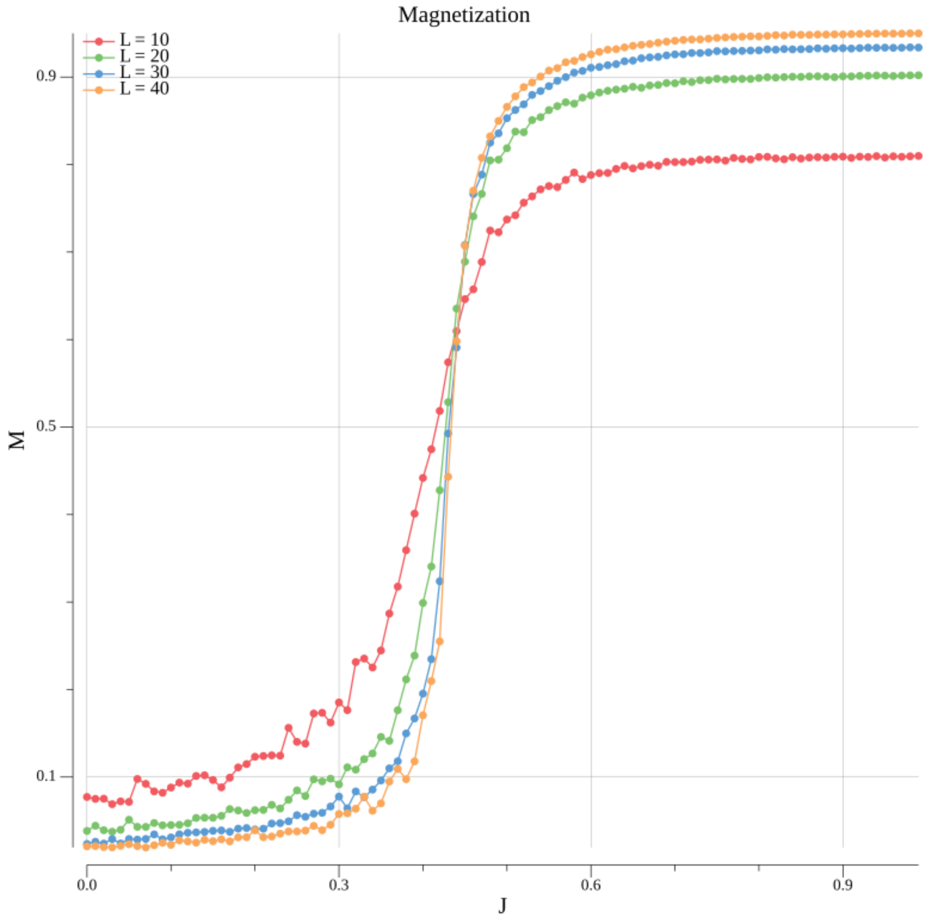
عبارت نمایی برای جلوگیری از مسئله یخ زدگی در دما های پایین است. جمله مرتبه N نیز با الهام از میانگین تعداد قدم لازم برای دیدن تمام اسپین ها ($N \log N$) نوشته شده که با توجه به مرتبه طول شبکه های اجرا شده جمله لگاریتمی با جمله ثابت بزرگتری جایگزین شده. همچنین برای اجرا های اصلی از تابع RunSimLThreads استفاده شده که اجرا های دما های متفاوت را درون یک Thread Pool قرار می‌دهد تا با استفاده از پردازش موازی سرعت الگوریتم بیشتر شود.

نتایج

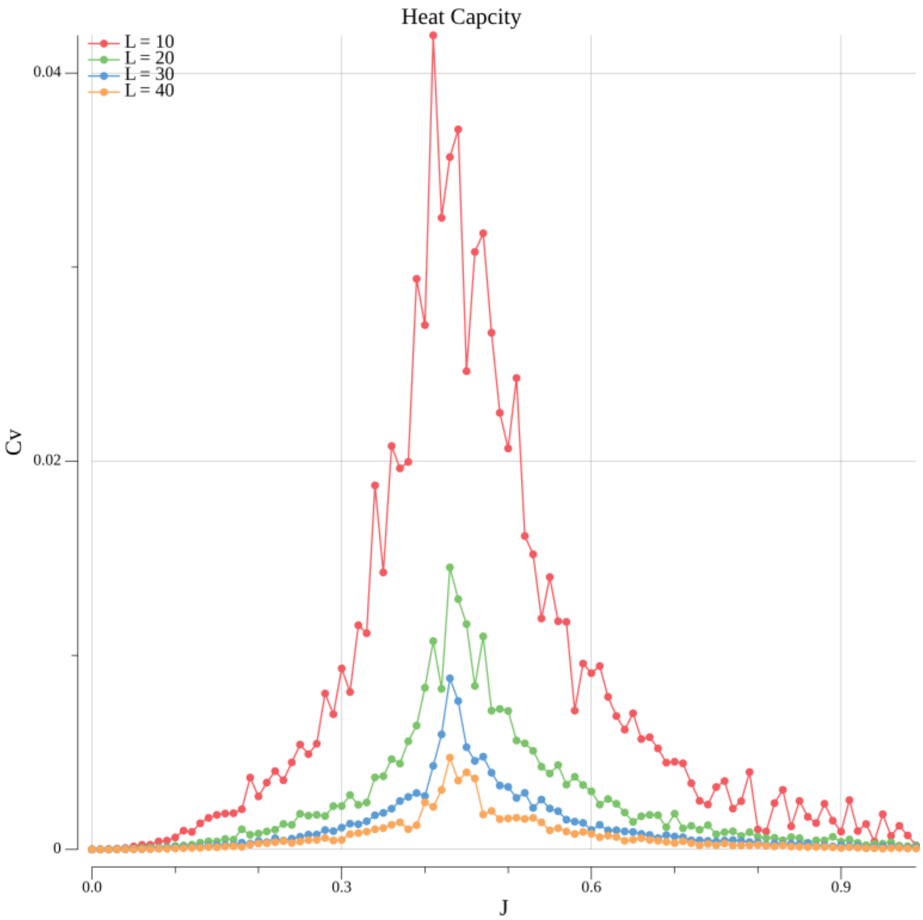
نمودار های به دست آمده برای چهار طول شبکه ۱۰، ۲۰ ، ۳۰ و ۴۰ به صورت زیر است:



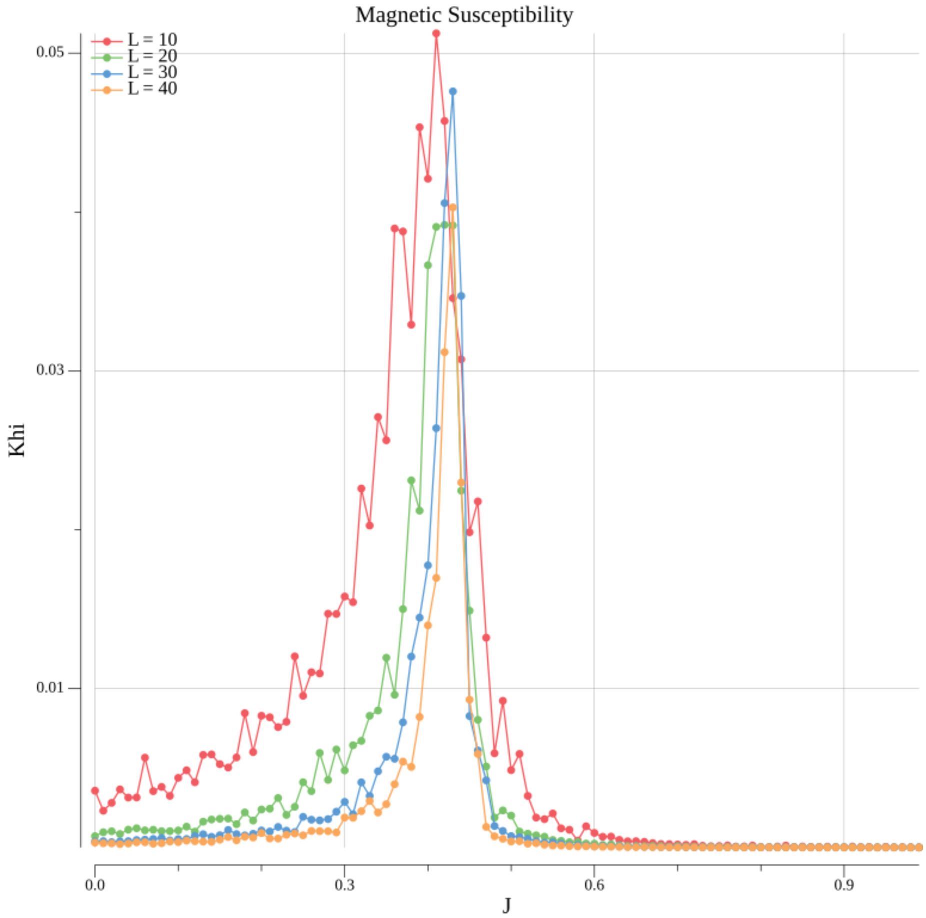
شکل ۵: انرژی



شکل ۶: مغناطش



شکل ۷: ظرفیت گرمایی



شکل ۸: پذیرفتاری مغناطیسی

دمای بحرانی از نمودار های بالا به چندین طریق قابل محاسبه است. از جمله نقطه بیشینه در ظرفیت گرمایی و پذیرفتاری مغناطیسی یا نقطه میانی در مغناطش. این سه روش برای طول شبکه ۴۰ که بالاترین دقت را دارد نتیجه یکسان $J_c = 0.43 \pm 0.01$ را می‌دهند که نتیجه خوبی است. همچنین با تبدیل آن به $T_c = 2.33 \pm 0.05$ می‌رسیم. لازم به ذکر است در حل دقیق مدل آیزینگ برای شبکه بینهایت داریم $J_c \approx 0.441$ و $T_c \approx 2.269$. برای بالاتر بردن دقت این محاسبه می‌توان بازه حول دمای بحرانی را به قسمت های کوچکتری تبدیل کرد و از شبکه های بزرگتری استفاده کرد.

نماهای بحرانی

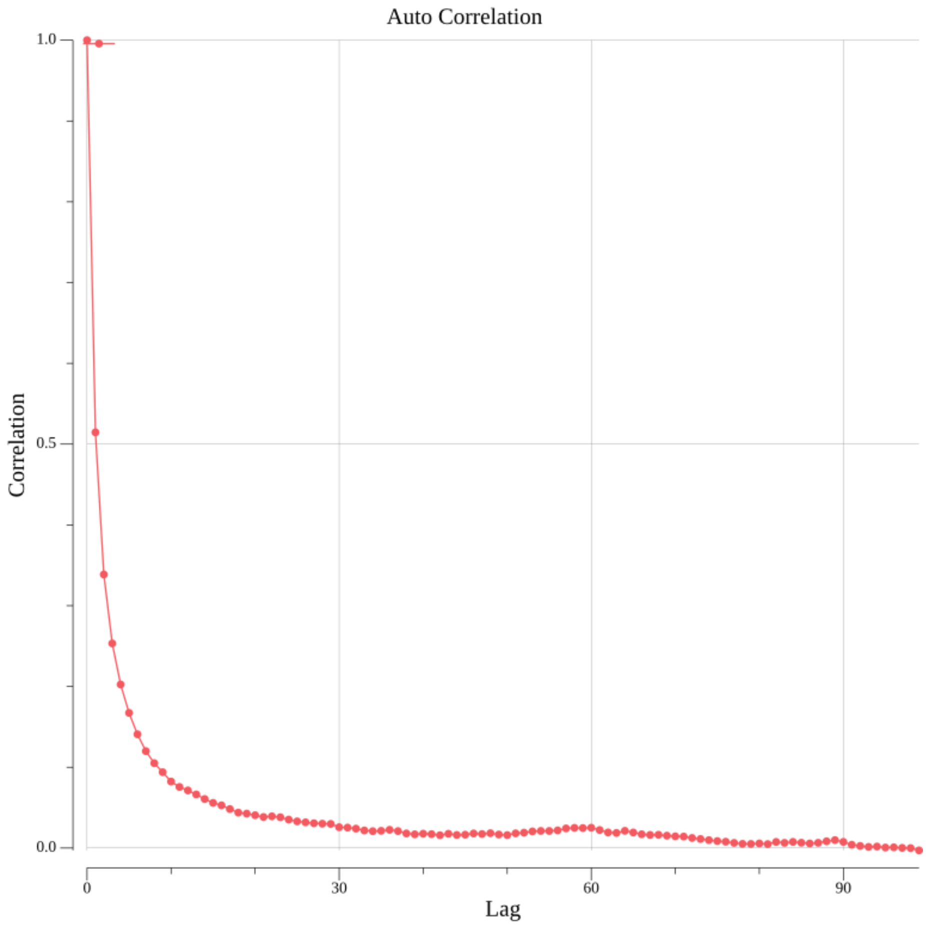
با نگاه به رفتار توانی توابع پاسخ می‌توانیم تقریبی از نماهای بحرانی مدل آیزینگ داشته باشیم. برای این کار به داده ها حول نقطه بحرانی نگاه می‌کنیم. این کار را در دو طرف نقطه بحرانی انجام می‌دهیم. داده های به دست آمده از برازش

نمودار نمایی به صورت زیر هستند:

L	β_-	β_+	α_-	α_+	γ_-	γ_+
10	0.423	-0.177	0.706	0.413	0.611	1.474
20	0.586	-0.135	0.740	0.562	0.967	1.885
30	0.589	-0.164	0.608	0.605	1.142	2.233
40	0.640	-0.170	0.615	0.605	1.175	2.452

طول همبستگی

یکی از مشخصه های نقطه بحرانی واگرایی طول همبستگی است. تابع خودهمبستگی برای یک شبکه خاص نمودار نمایی ایجاد می‌کند. با بررسی نمای افت این تابع می‌توان طول همبستگی را پیدا کرد. متاسفانه برای طول شبکه های کم این طول زفتار مورد انتظار را ندارد و نمای μ قابل محاسبه نیست.



شکل ۹: خودهمبستگی در شبکه با $J = 0.445$