گزارش تمرین هشتم

نام: محمد جمشیدی

شماره دانش‌جویی: ۹۸۱۰۰۷۱۸

شبیه‌سازی مدل آیزینگ

در این تمرین قصد داریم مدل آیزینگ دو بعدی را با استفاده از روش متروپولیس شبیه‌سازی کنیم. در واقع یک شبیه‌سازی مونت کارلو از مدل آیزینگ را می‌توان با تکرار مراحل زیر انجام داد (نمادهای لاتین بکار رفته در این گزارش کار نمادهای متعارف مکانیک آماری هستند).

۱. از یک آرایش رندوم ابتدایی شروع می‌کنیم. در این مرحله یک آرایه‌ی دو بعدی از اعداد ۱+ و ۱- داریم که یکی از این اسپین‌ها را به صورت رندوم انتخاب می‌کنیم و جهت آن را برعکس می‌کنیم، یعنی مقدار خانه را در یک منفی ضرب می‌کنیم.

۲. اگر تغییر انرژی در شبکه منفی باشد تغییر جهت اسپین قبول می‌شود.

۳. اگر تغییر انرژی در شبکه نامنفی باشد در این صورت تغییر جهت اسپین با احتمال $\exp(-\beta\Delta E)$ پذیرفته می‌شود.

بنابراین الگوریتم کلی که برای شبیه‌سازی استفاده شده است الگوریتم آشنا و مشخصی است. در ادامه باید این الگوریتم را پیاده‌سازی کنیم و تاحد امکان کد آن را بهینه کنیم.

برای پیاده سازی مدل، کلاس Ising_2d_model را تعریف می‌کنم. در تابع __init__ آبجیکتی که از این کلاس می‌سازیم را با دادن طول لتیس و مقدار بتا و همچنین تعداد نمونه‌برداری، مقداردهی اولیه می‌کنیم. توجه شود که به طور کلی در پیاده‌سازی مدل آیزینگ از واحدهای کاهیده استفاده کرده‌ایم. همچنین در این شبیه سازی از آنزامبل مکانیک آماری NVT (آنزامبل کانونیک) استفاده کرده‌ایم. در ادامه توابعی تعریف کرده‌ام که سیستم را تحول دهند و داده‌های مورد نیاز (انرژی، مغناطش و طول همبستگی مکانی اسپین‌ها) را جمع آوری کنند. توجه می‌کنیم که برای جمع‌آوری داده نیاز داریم سیستم را تا رسیدن به حالت تعادل آن تحول دهیم؛ پس باید برای به تعادل رسیدن سیستم هم عملیاتی را پیاده‌سازی کنیم. برای این منظور یک متد relax_lattice تعریف کرده‌ام. این متد از توابعی که سیستم را به روش متروپولیس تحول می‌دهند استفاده می‌کند و این کار را برای تعداد num_of_samples=100 انجام می‌دهد. دقت شود که عدد ۱۰۰ چیزی است که به عنوان پیش‌فرض برای این آرگومان تابع __init__ در نظر گرفته شده است. در این بین، با هر قدم متروپولیس مقدار انرژی سیستم را در یک لیست ذخیره می‌کند و سپس اگر خودهمبستگی این انرژی‌ها (j=0.1* num_of_samples) کم‌تر از exp(-2) باشد، آنگاه سیستم به حالت تعادل رسیده است. در غیر این صورت سیستم به تعادل نرسیده است. این معنایش این است که تا رسیدن به تعادل فاصله‌ی بیش‌تری داریم و در نتیجه باید تعداد قدم‌های متروپولیس بیش‌تری برداشته شود. برای اینکار در صورتی که سیستم به تعادل نرسیده باشد، این بار num_of_samples دیگر تحول سیستم را تکرار می‌کند و دوباره وضعیت تعادل را بررسی می‌کند و اگر باز هم به تعادل نرسیده باشیم باز دوباره به همان تعداد، تکرار را ادامه می‌دهیم و این‌کار را تا وقتی که به تعادل برسیم تکرار می‌کنیم. در ادامه که سیستم سرانجام به تعادل رسید باید لیست انرژی‌هایی که داریم را بررسی کنیم تا ببینیم با چه‌گامی انرژی‌ها را انتخاب کنیم که تا حد امکان به هم همبستگی اندکی داشته باشند. البته این‌کار را می‌توان به جای بررسی کردن برای انرژی با بررسی مغناطش هم انجام داد اما من در کد خود برای انرژی بررسی را انجام داده‌ام. پیاده سازی این عملیات توسط تابع find_corr_length انجام شده است. خروجی این تابع همان طول گام مناسب است که بعداً از آن برای جمع‌آوری داده‌های نهایی استفاده می‌کنیم.

همه‌ی فرایند توضیح داده شده را برای تعدادی طول شبکه و بتای مختلف تکرار می‌کنم. طول‌های شبکه را به صورت زیر گرفته‌ام.

```
length_s = np.array([١٠٠ ,١٣٦ ,١٨٤ ,٢٥٠])
```

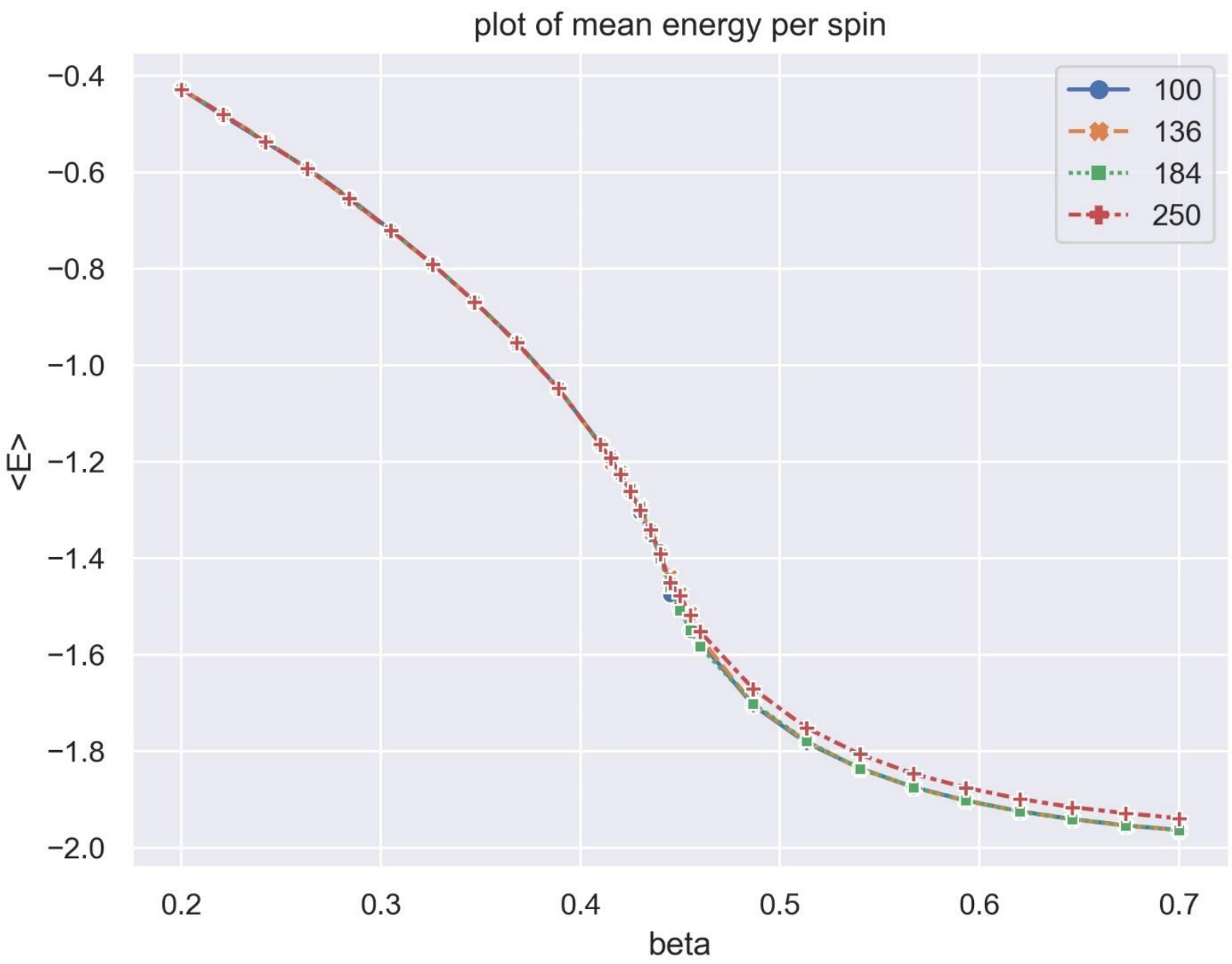
دلیل این‌که طول‌ها را به این صورت انتخاب کرده‌ام این است که به صورت نمایی از ۱۰۰ تا ۲۵۰ رشد می‌کنند(با ضریب ۱,۳۶). فایده‌ی این کار این است که در نهایت که قصد داریم بعضی نمودارهای لگاریتمی برحسب طول داشته باشیم، پراکندگی نقاط یکنواخت خواهد بود.

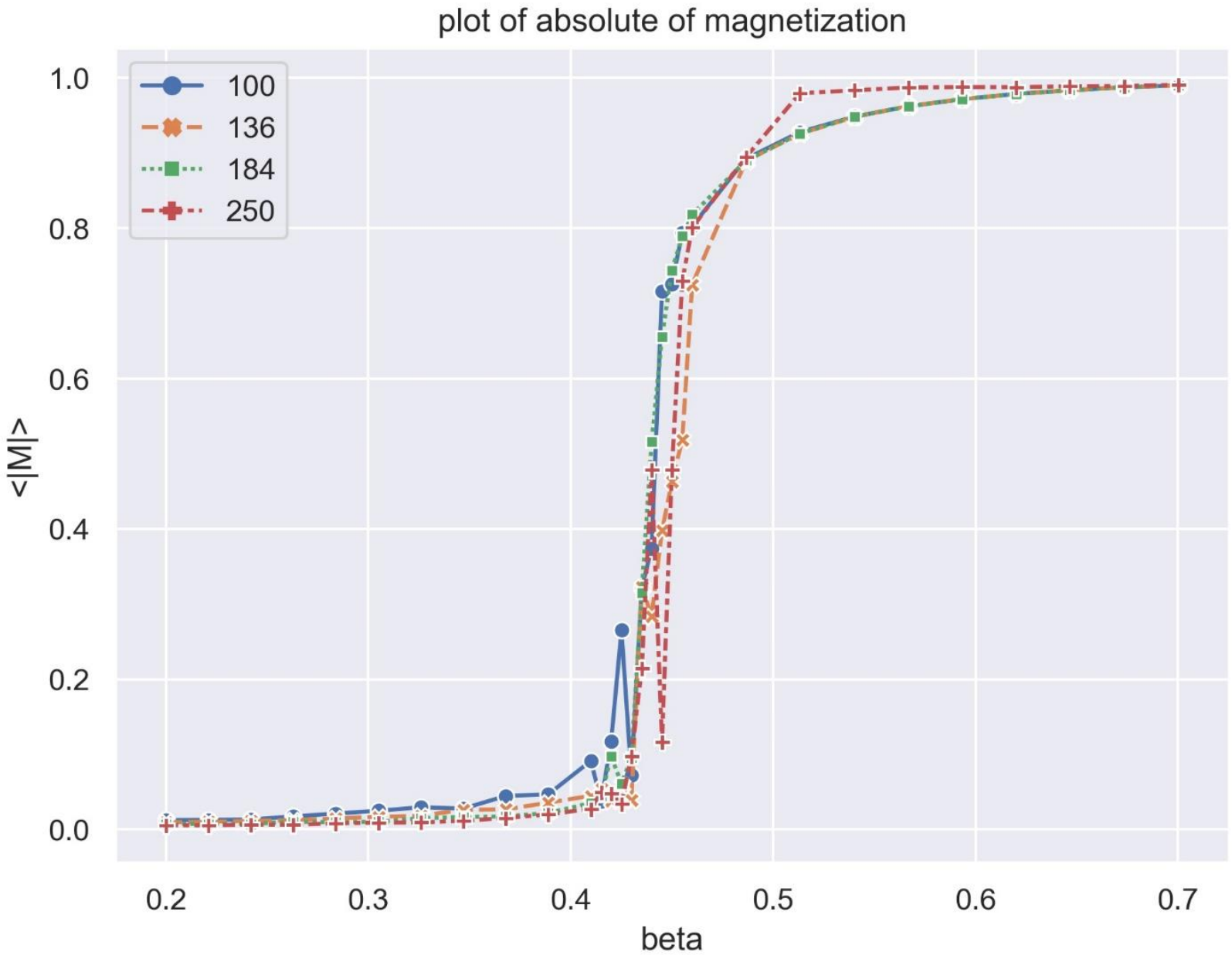
بتاهای مورد نظر را هم به صورت زیر انتخاب کرده‌ام.

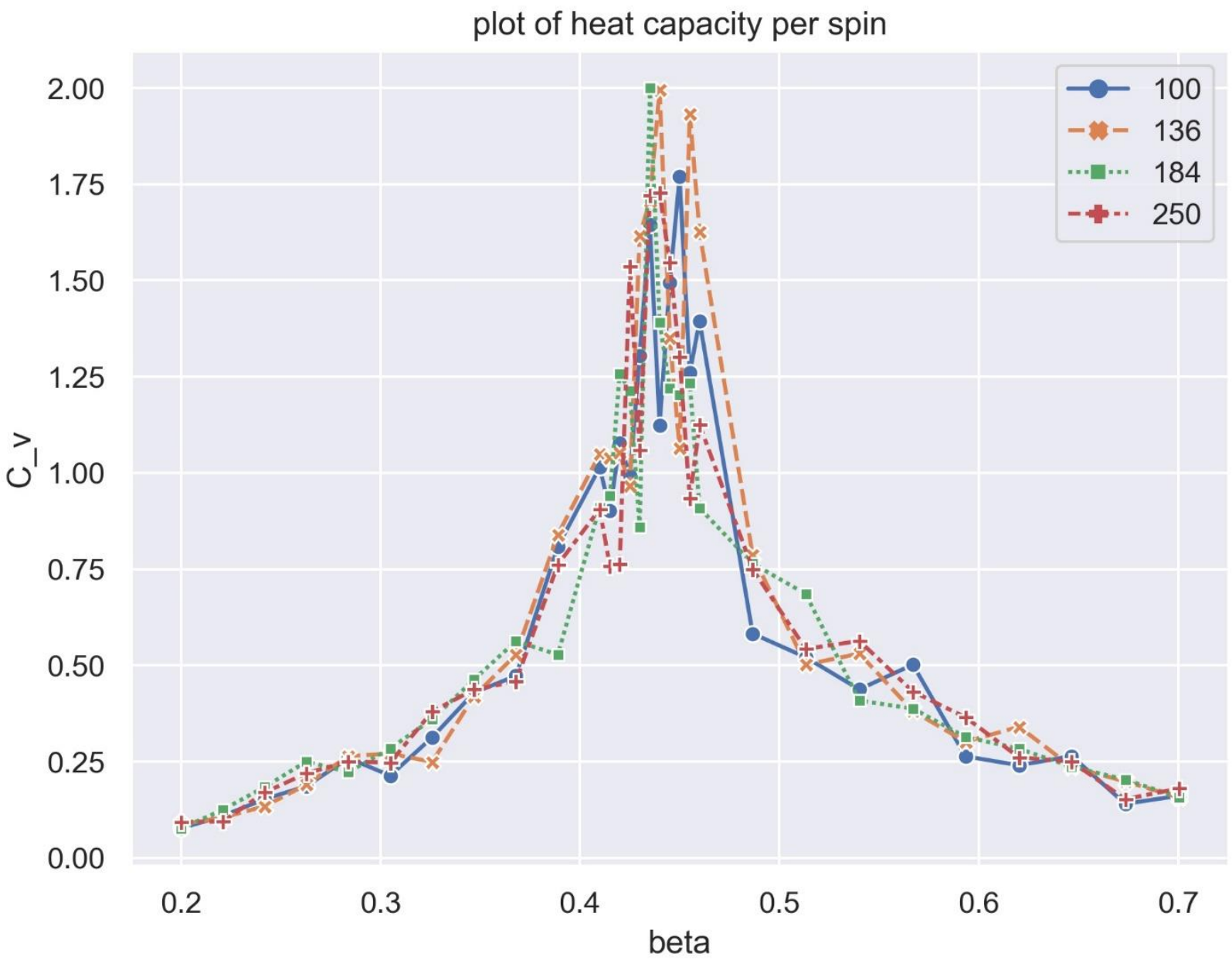
```
beta_s =  np.concatenate((np.linspace(0.2, 0.41, 10, endpoint=False, dtype=np.float16),
                          np.linspace(0.41, 0.46, 10, endpoint=False, dtype=np.float16),
                          np.linspace(0.46, 0.7, 10, endpoint=True, dtype=np.float16))
```

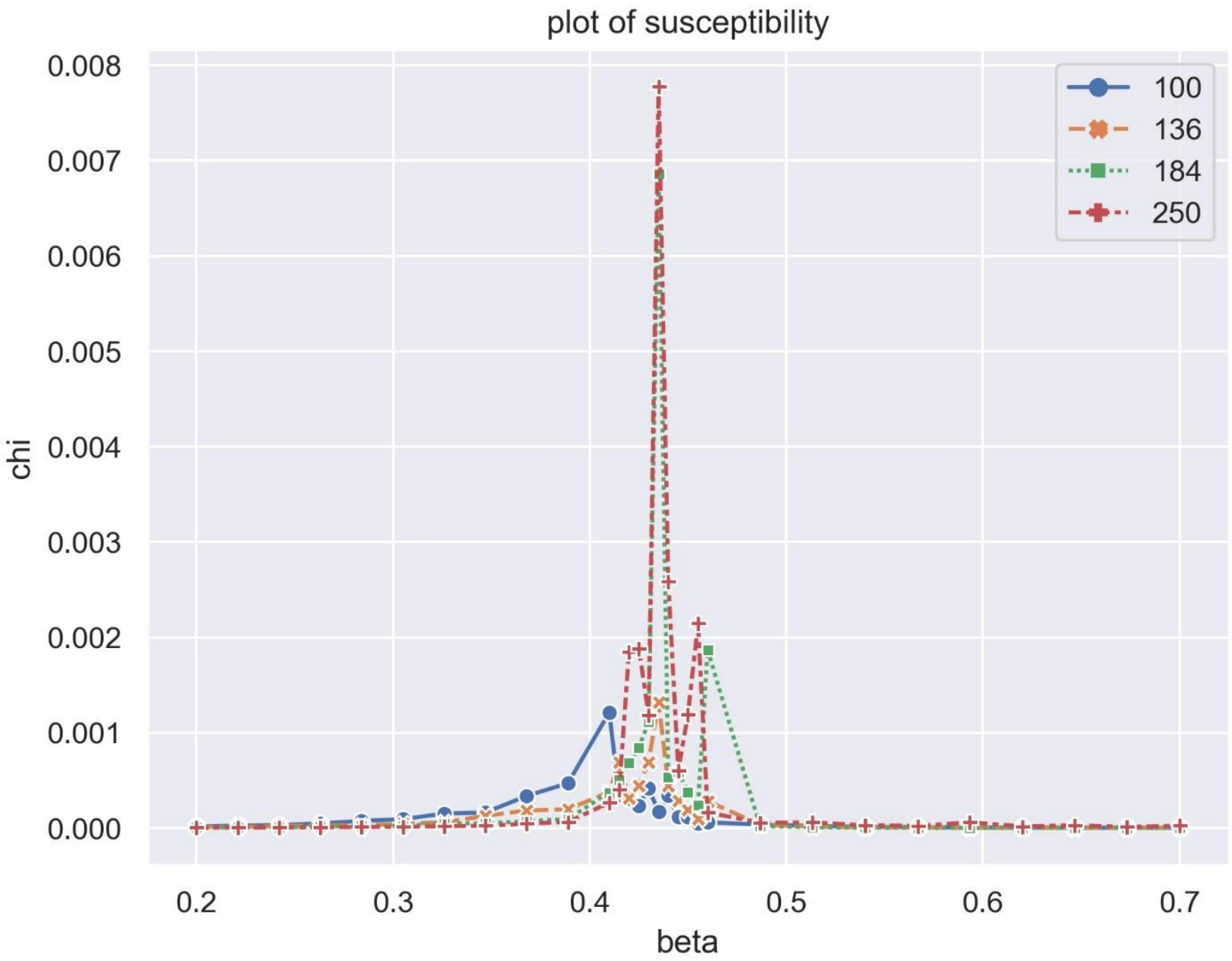
همان‌طور که دیده می‌شود طول بازه‌ها را حول و حوش مقدار بتای بحرانی (که از تئوری می‌دانیم حدوداً 0.44 است) کوچک‌تر گرفته‌ام تا در این محدوده‌ی بحرانی داده‌ی بیش‌تری داشته باشیم. یک نکته‌ی دیگر که ذکر آن خالی از لطف نیست این است که در راستای کم‌تر شدن زمان اجراها، هربار که سیستم به ازای بتای مثلاً n ام به تعادل رسید، این وضعیت سیستم را به عنوان شرایط اولیه برای بتای n+1 ام در نظر می‌گیریم به جای آن‌که دوباره از یک شرایط اولیه‌ی کاتوره‌ای شروع کنیم. این موضوع باعث کم‌تر شدن زمان رسیدن به تعادل می‌شود. همه‌ی داده‌های نهایی به دست آمده به صورت فایل‌های csv. ذخیره شده است. در نهایت با استفاده از تابع load_and_plot نمودار کمیت‌های ترمودینامیکی خواسته شده برحسب بتا را می‌توانیم رسم کنیم.

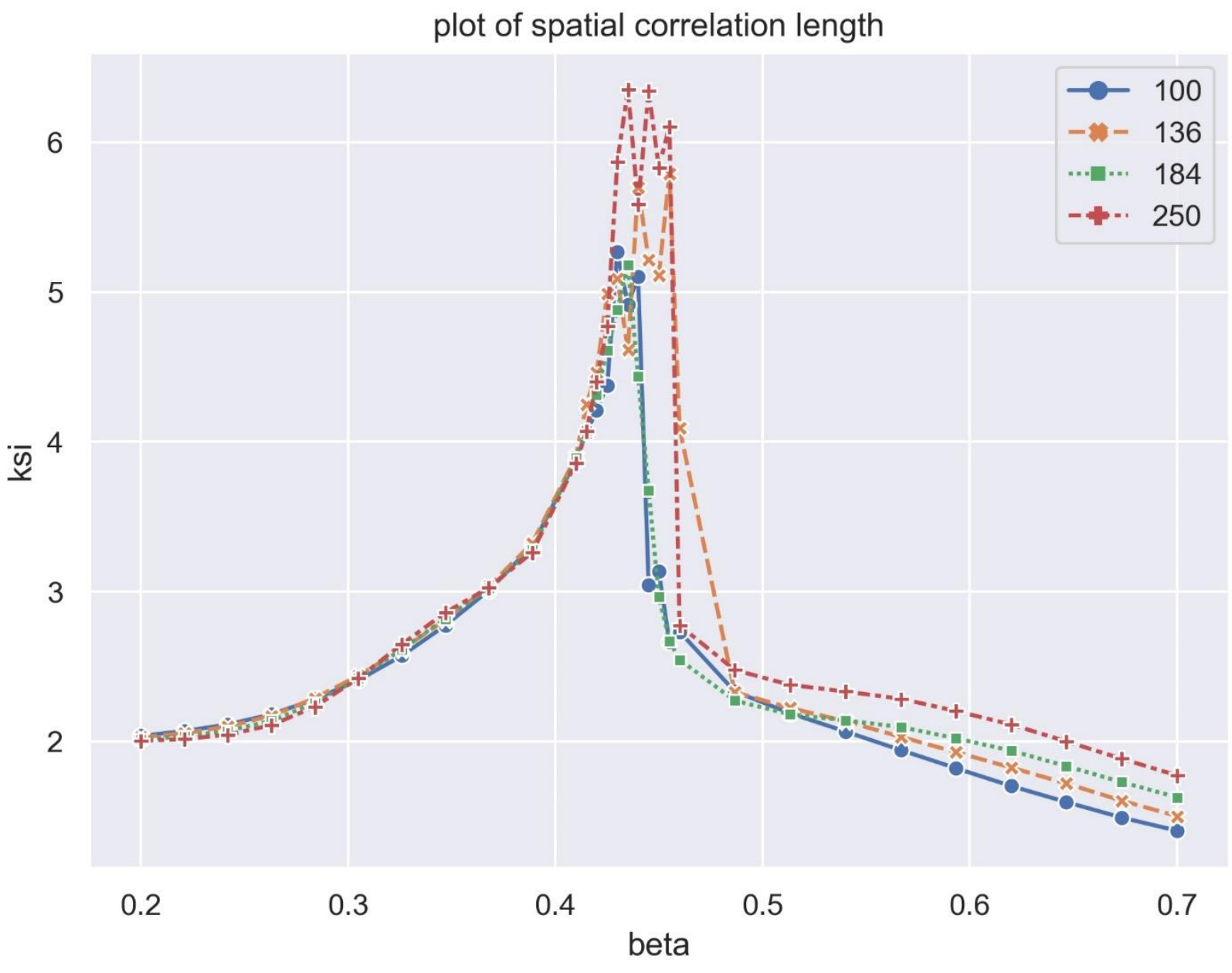
در ادامه نمودارهای کمیت‌های ترمودینامیکی خواسته شده آمده است.




plot of absolute of magnetization
100
136
184
250
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
<|M|>
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
beta


plot of heat capacity per spin
100
136
184
250
2.00
1.75
1.50
1.25
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
C_v
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
beta

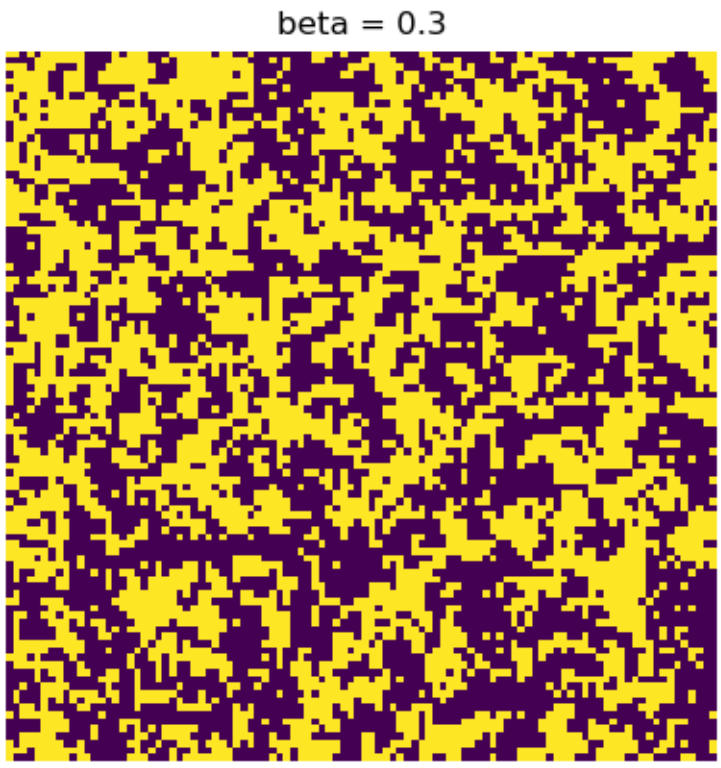

plot of susceptibility
chi
beta
100
136
184
250
0.008
0.007
0.006
0.005
0.004
0.003
0.002
0.001
0.000
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7

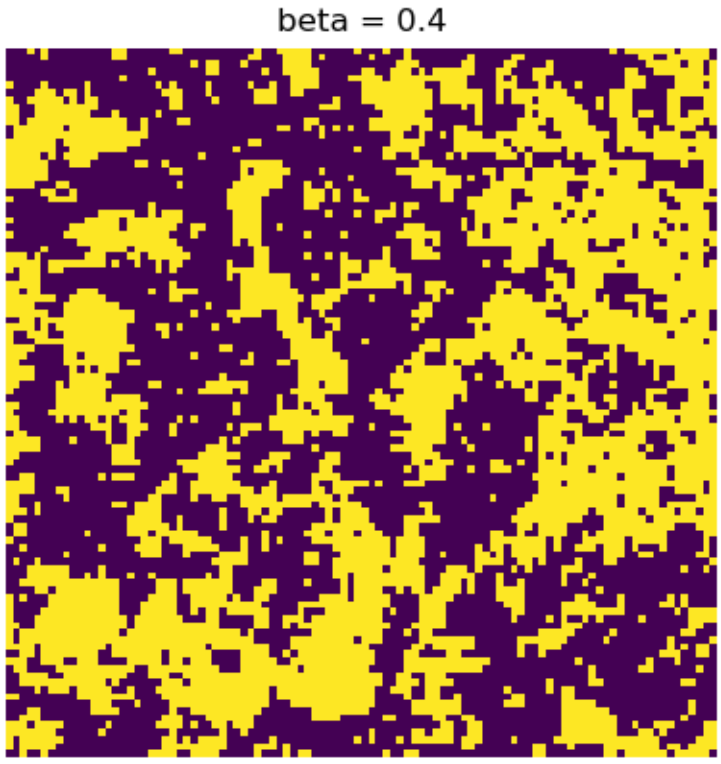

plot of spatial correlation length
ksi
beta
100
136
184
250
6
5
4
3
2
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7

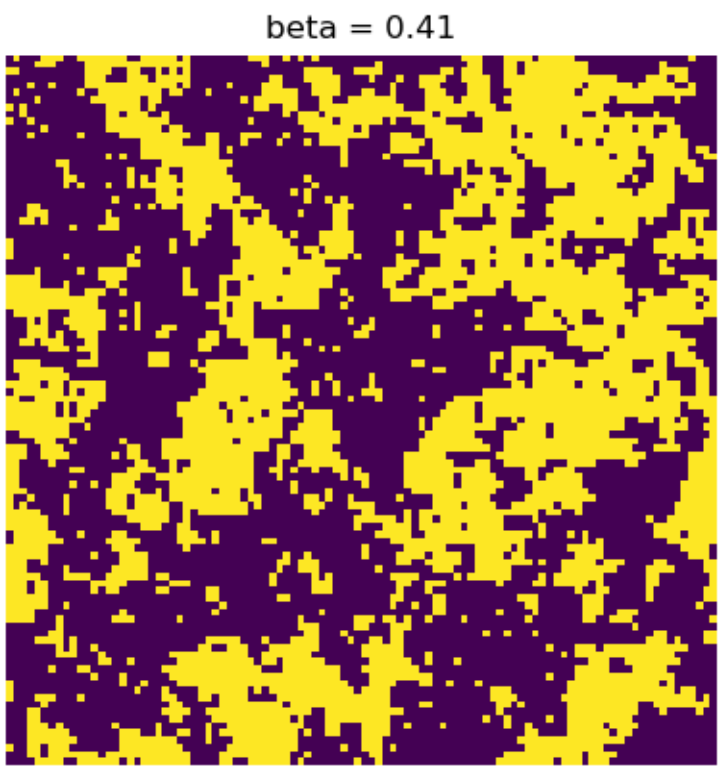
ناگفته نماند که جعبه خطاهای مربوط به نمودارهای بالا را هم در کد حساب کرده و ذخیره کرده‌ام. اما در نمودار نمایش ندادم چون به نظرم خیلی نمودار شلوغ می‌شد! در ادامه برای بدست آوردن نماهای بحرانی، از داده‌هایی که در فایل‌ها گرد آورده‌ام و رسم نمودار لگ–لگ آن‌ها حول نقطه‌ی بحرانی برحسب طول شبکه استفاده می‌کنیم (N تعداد اسپین‌های شبکه است). برای خواندن داده‌ی بیشینه، به صورت دستی و با یک جستجوی ساده در فایل مربوطه داده‌خوانی کرده‌ام. نتیجه به صورت زیر است.

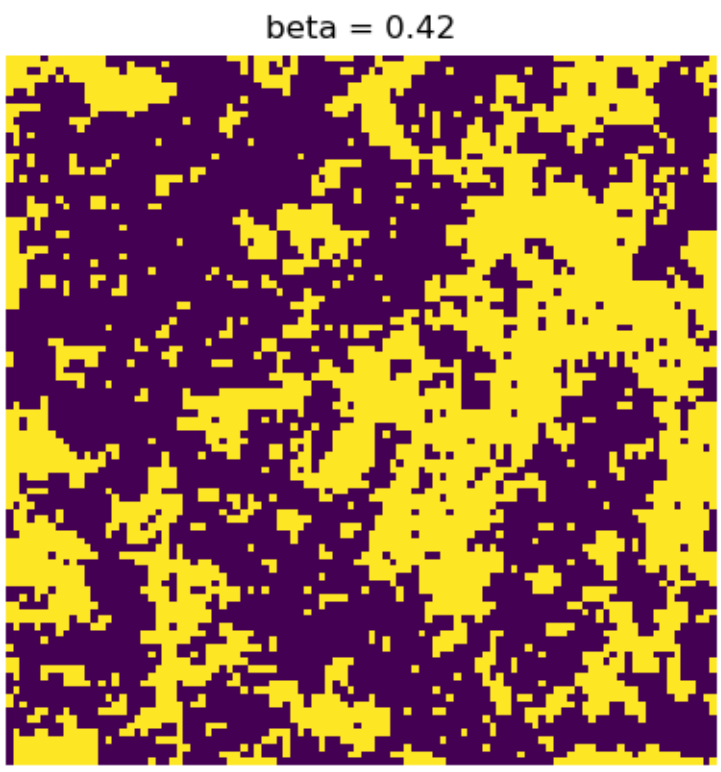
Theoretical Relation	Critical Exponents			$T_c(\infty)$
		Theoretical value	Simulation value	
$\xi \sim L \sim \lvert T_c - T \rvert^{-\nu}$	ν	1	0.84	*2.273*
$c \sim c_0 \ln \lvert T_c - T \rvert$	c_0	0.44	-0.37	*2.247*
$\chi \sim \lvert T_c - T \rvert^{-\gamma}$	γ	1.75	1.96	*2.273*
$< \lvert m \rvert > \sim \lvert T_c - T \rvert^{\beta}$	β	0.125	0.19	*2.222*

در ادامه نمایش گرافیکی شبکه را برای چند مقدار بتا و طول لتیس ۱۰۰ آورده‌ام.

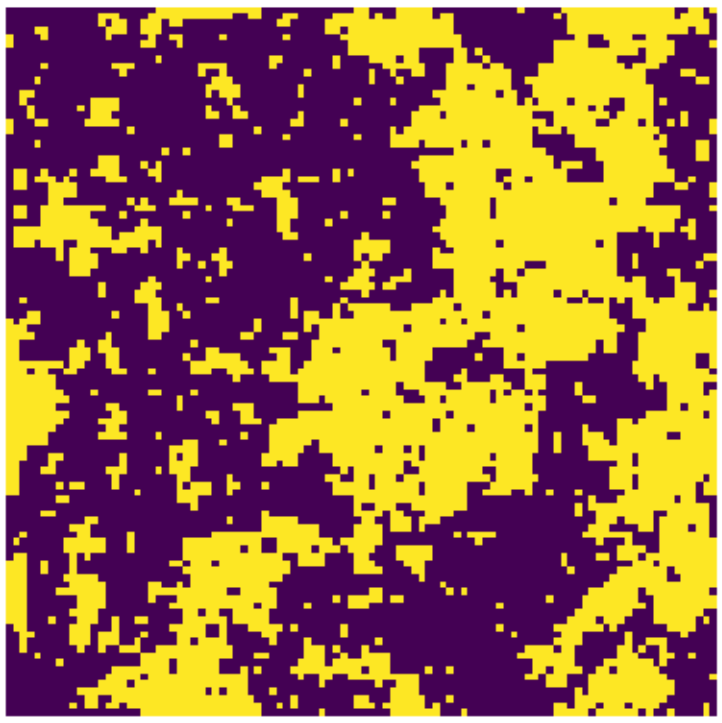



beta = 0.4

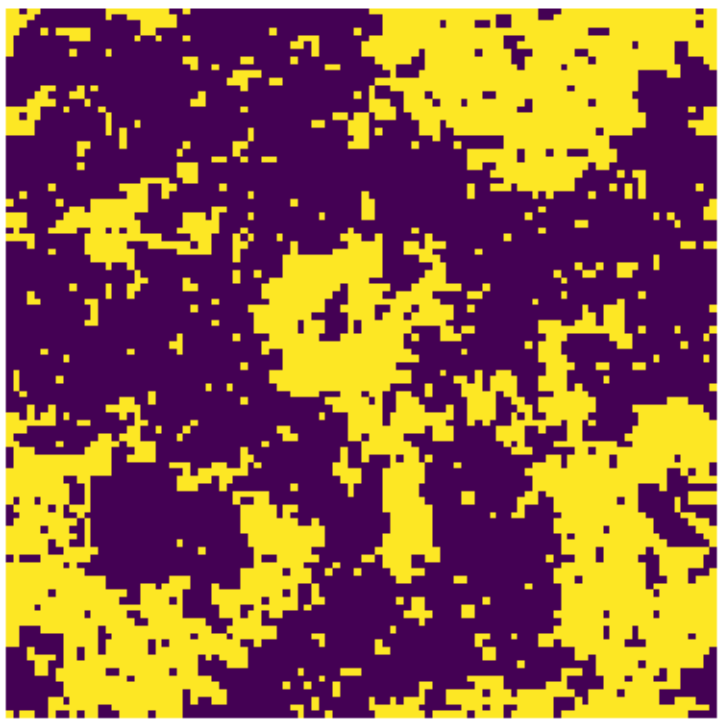

beta = 0.41


beta = 0.42

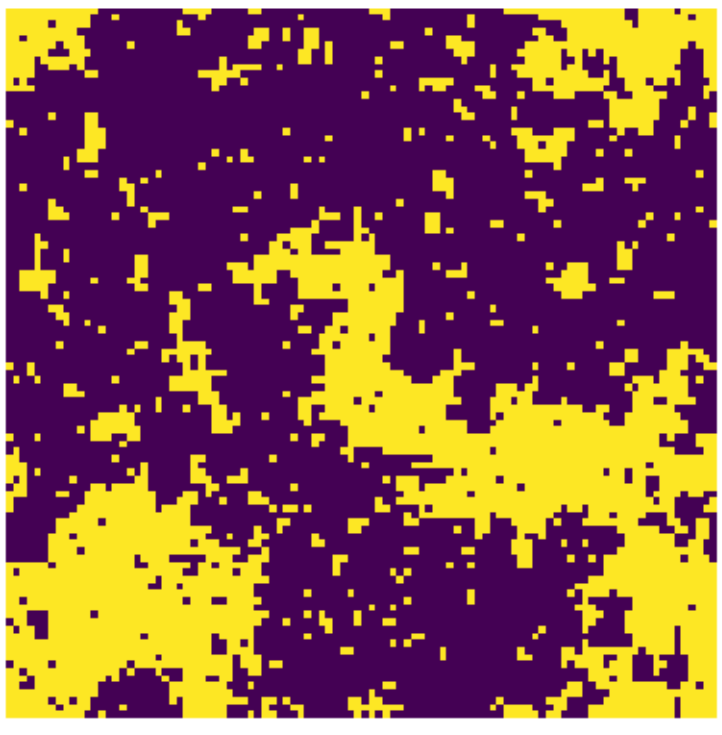
beta = 0.43

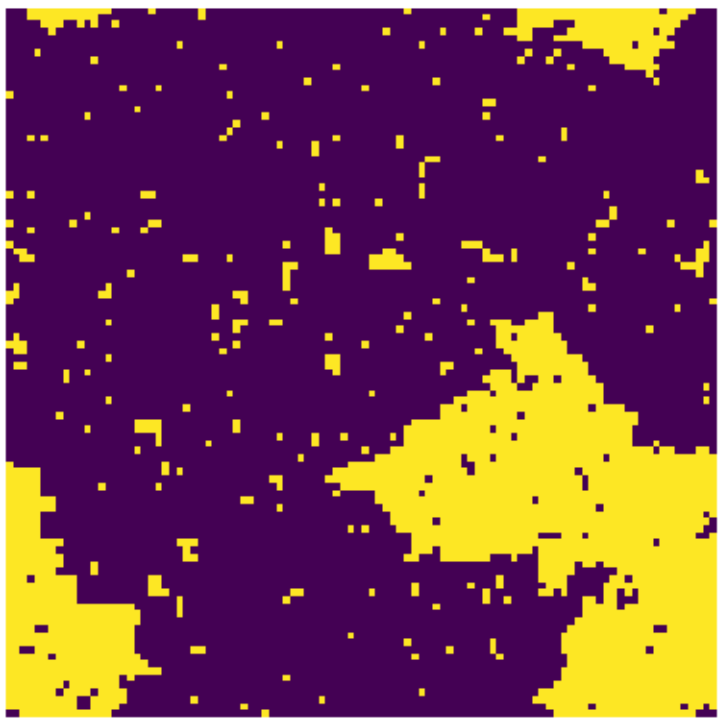


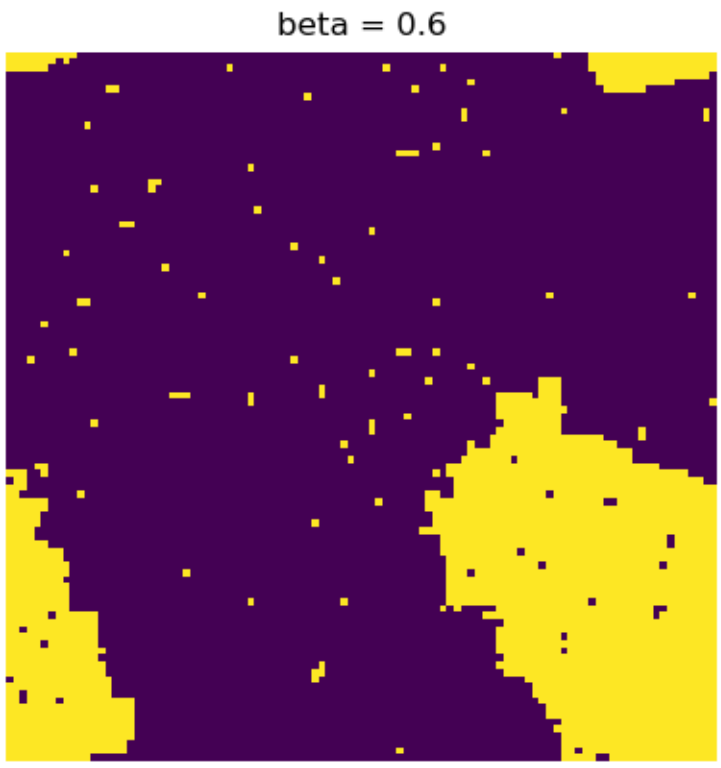
beta = 0.44



beta = 0.45







ناگفته نماند که به طور کلی از نمونه‌گزارش‌ها و کدهای مربوطه در گیت‌هاب دستیاران هم بهره گرفتم و نکات آموزنده‌ای دستگیرم شد.