

Fizyka układów złożonych

Jednowymiarowy model Isinga

Krzysztof Malarz

Oryginalnie sformułowany przez Lenza w latach dwudziestych zeszłego stulecia model Isinga miał posłużyć modelowaniu układów magnetycznych. Obecnie jego zastosowania pojawiają się od twardej fizyki ciała stałego po modelowanie układów socjo-ekonomicznych.

W przypadku jednowymiarowym, energia całkowita łańcucha N oddziaływujących spinów σ_i wynosi

$$E = - \sum_{i=1}^N J_{i,i+1} \sigma_i \sigma_{i+1} - \sum_{i=1}^N B \sigma_i, \quad (1)$$

gdzie zmienne spinowe σ_i przyjmują wartości ± 1 , $J_{i,j}$ jest tak zwaną całką wymiany, a B natężeniem zewnętrznego pola magnetycznego.

Ewolucję układu prowadzimy w kierunku osiągnięcia przez układ minimum energii. Istnieje kilka sposobów prowadzenia symulacji w tym kierunku. Tu wykorzystamy schemat Metropolis'a, który jest uniwersalnym narzędziem (nadaje się do zadań optymalizacyjnych również poza fizyką magnetyzmu, po prostu u nas funkcja celu jest energią z równania (1)).

Dla modelu Isinga algorytm Metropolis'a sprowadza się do powtarzania operacji:

- wybierz losowo węzeł sieci i i ustaw go na losową wartość $\sigma'_i = \pm 1$,
- wyznacz różnicę energii $\Delta E = E' - E$ między energiami lokalnej konfiguracji ze spinem σ'_i (E') oraz σ_i (E),
- jeśli zmiana ta jest ujemna ($\Delta E < 0$), zaakceptuj nową konfigurację zmieniając σ_i na σ'_i ,
- w przeciwnym wypadku zaakceptuj tę konfigurację z prawdopodobieństwem $\exp(-\Delta E/k_B T)$.

Po powtórzeniu N -krotnie powyższych czterech punktów mówimy, że skompletowaliśmy jeden krok procedury Monte Carlo.

Założmy brak pola magnetycznego $B = 0$, układ składający się z $N = 10^3$ spinów i taką samą wartość całek wymiany między parami kolejnych spinów $J_{i,i+1} = J = 1$ oraz $k_B = 1$ ¹. Ostatni spin w łańcuchu (dla $i = N$) nie ma „prawego” sąsiada, przyjmijmy, że jest nim spin w pierwszym węźle ($i = 1$). Pierwszy spin w łańcuchu (dla $i = 1$) nie ma „lewego” sąsiada, przyjmijmy, że jest nim spin w ostatnim węźle ($i = N$) — zakładamy więc okresowe warunki brzegowe (to nie jest łańcuch tylko „okrąg” spinów).

Zadanie 1 (30 pkt.): Oblicz wszystkie możliwe prawdopodobieństwa

$$p(\text{stara konfiguracja} \rightarrow \text{nowa konfiguracja}) = \min\{1, \exp(-\Delta E/T)\}$$

¹Te dwie ostatnie równości, są tożsame z przyjęciem jednostek, w których temperatura mierzona jest w jednostkach $[J/k_B]$.

akceptacji nowej konfiguracji ze spinem σ'_i wartości spinu jeśli jego poprzednia wartość była σ_i a sąsiedzi w węzłach $(i \pm 1)$ przyjmowali wartości $\sigma_{i \pm 1} = \pm 1$ dla $\beta = 1/T = 0,5; 1,0; 1,5; 4,0$. (Najlepiej do zadania 2 będzie stabilizować sobie te wartości dla danej temperatury T , by nie liczyć za każdym razem ani zmian energii ani czynników boltzmannowskich).

Zadanie 2 (30 pkt.): Obserwujemy ewolucję czasową (gęstości) energii układu

$$e(t) = E(t)/N = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i(t) \sigma_{i+1}(t) \quad (2)$$

dla 10^4 kroków MC dla $1/T = 0,5; 1,0; 1,5; 4,0$. Dla każdej z temperatur T symulację rozpoczynamy z losowego rozłożenia wartości $\sigma_i = \pm 1$ (namagnesowanie $m(0) = 0$) oraz z jednorodnymi wartościami $\sigma_i = +1$ (namagnesowanie $m(0) = 1$).

Zadanie 3 (40 pkt.): Liczymy średnią czasową $\langle E(t) \rangle$ i $\langle E^2(t) \rangle$ z ostatnich $\tau = 10^4$ kroków symulacji trwającej 10^5 MCS. Automatyzujemy proces znajdowania tych wielkości dla $1/T$ zmieniających się od 0,5 do 4,0 co 0,5 wypisując do pliku trójkę wartości: β , $\langle E(t) \rangle$, $\langle E^2(t) \rangle$.

Sporządzamy wykresy zależności od odwrotności temperatury $1/T$ gęstości energii $e = N^{-1} \langle E(t) \rangle$ i ciepła właściwego $c = N^{-1} (\langle E^2(t) \rangle - \langle E(t) \rangle^2) / T^2$ nakładając je na rozwiązania analityczne

$$e(1/T) = -\tanh(1/T)$$

i

$$c(1/T) = (1/T)^2 / \cosh^2(1/T).$$

