
MONTE CARLO 방법을 이용한 2차원 ISING MODEL의 상전이 연구

박경민
물리학과
서울시립대학교

ABSTRACT

Monte Carlo 방법을 이용하여 2차원 (128x128) 사각 격자에서 자기장이 없는 Ising 모형을 구현한다. 온도에 따른 시스템의 에너지, 자화도 밀도, 비열, 자기 감수율을 계산하고, 이를 통해 상전이 온도와 임계 지수를 구해본다. 계산에는 Python 3.6.8과 소속 라이브러리 Numpy 패키지를 주로 사용하도록 한다.

1 Introduction

2차원 Ising 모형, 또는 square lattice Ising 모형은 물질의 자성을 기술하는 매우 간단한 모형이다. 이는 물질을 스핀을 가진 입자들의 모임으로 가정하고, 가장 인접한 입자들 간의 스핀 상호작용만을 고려한다. 이러한 2차원 Ising 모형에 대해서는 해석적인 해가 알려져있으며, 상전이를 예측할 수 있다. 1차원 Ising 모형보다 스핀의 자유도가 높은 2차원 Ising 모형을 다루는데 있어서 Monte Carlo 기법을 사용하는 것이 유리하다. 따라서 이번 연구에서는, Monte Carlo 기법을 사용하여 2차원 Ising 모형의 상전이 연구를 하도록 한다. 이 때, 자기장이 없는 2차원 Ising 모형에 대하여 에너지 식은 다음과 같이 주어지며, 전류밀도는 $J = 1$ 로 둔다. 또한, 모든 계산 속 볼츠만 상수 역시 1로 두기로 한다.

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad (1)$$

계산에 사용된 소스 코드 및 생성된 계산 결과 데이터는 아래의 두 링크에서 얻을 수 있다.^{1,2}

2 Monte Carlo Method and Algorithms

Monte Carlo 기법은 난수(random number)를 이용하여 함수의 값을 확률적으로 계산하는 알고리즘이다. 이는 확률론적 해석을 가진 문제를 해결하거나 자유도가 높은 모델을 기술하는데에 유용하다. 특히나, 원하는 특정 확률 분포를 따르도록 하는 Markov chain 샘플링을 통하여 모델을 설계함으로써 분포의 좋은 근사치를 얻을 수 있다.

2.1 Spin Flip

이번 연구에서는 Markov chain 샘플링에 속하는 Metropolis algorithm을 사용한다. 선택한 스핀을 뒤집었을 때, 시스템의 에너지 변화에 대한 Boltzmann factor 가 무작위로 선택한 난수보다 클 때, 스핀을 뒤집는다.

Single spin flip 한 번에 스핀 한 개 씩만 뒤집는다.

Sublattice update 한 번에 스핀을 여러개 씩 뒤집는다.

¹<https://github.com/kyungminparkdrums/Ising2D>

²<https://colab.research.google.com/drive/1KjQVJv3Gzeor1ZD8Hb88n1S-5w5i9XKv#scrollTo=1ZsigP6Jgmj5>

Odd, Even Sublattice update LxL 사각 격자에서 홀수번 째 인덱스 스핀들과 짝수번 째 인덱스의 스핀들로 그룹을 나눈다. 홀수, 짝수 스핀 그룹을 번갈아가며 뒤집게 되는데, 그 중에서 뒤집었을 때 시스템의 에너지 변화에 대한 Boltzmann factor가 난수보다 커지는 스핀들만 뒤집도록 한다. Single spin flip보다 더 효율적이며, 이번 연구에 사용되었다.

3 Energy and Magnetization Density to Time ($T = 1K$)

2차원 Ising 모델에 대해서, $T = 1K$ 의 온도에서 시간에 따른 에너지 밀도 및 자화도 밀도를 구해본다. Monte Carlo 시간 t 는 $0 \leq t \leq 1000$, 시간 간격은 $dt = 1$ 로 정한다. 이 때, 자화도 밀도의 경우 그 절댓값을 구하도록 한다.

3.1 Initial Condition

온도가 0도일 때와 같은 강자성(Ferromagnetic) 스핀 초기 조건과, 온도가 충분히 지나 무한대일 때와 같은 랜덤 스핀 초기 조건으로부터 시작한다. 한 시간 간격 $dt = 1$ 마다 스핀들을 한 번 씩 뒤집는다. 이 때, 관심있는 물리량을 .dat 파일로 저장한다.

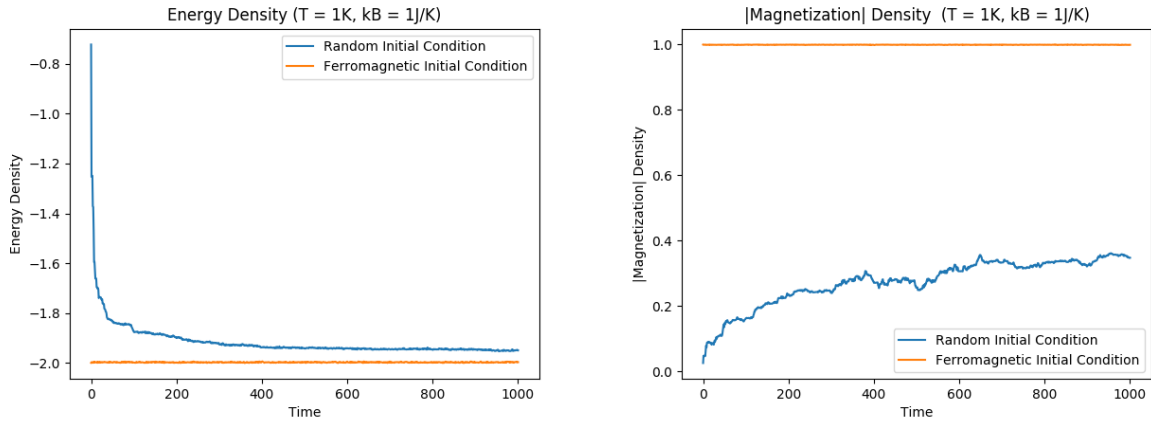


Figure 1: Energy and |magnetization| density from MC time [0,1000] with time step 1

Thermal Equilibrium Monte Carlo 기법으로 시스템의 스핀을 업데이트시키면서 에너지 및 자화도 밀도를 계산할 때 중요한 것은, 시스템이 열평형을 도달한 뒤부터의 값만을 물리량의 평균값 계산에 포함시켜야한다는 것이다. 따라서, 시스템이 열평형에 도달하기까지 걸리는 Monte Carlo 시간을 아는 것이 이번 계산에서 매우 중요하다.

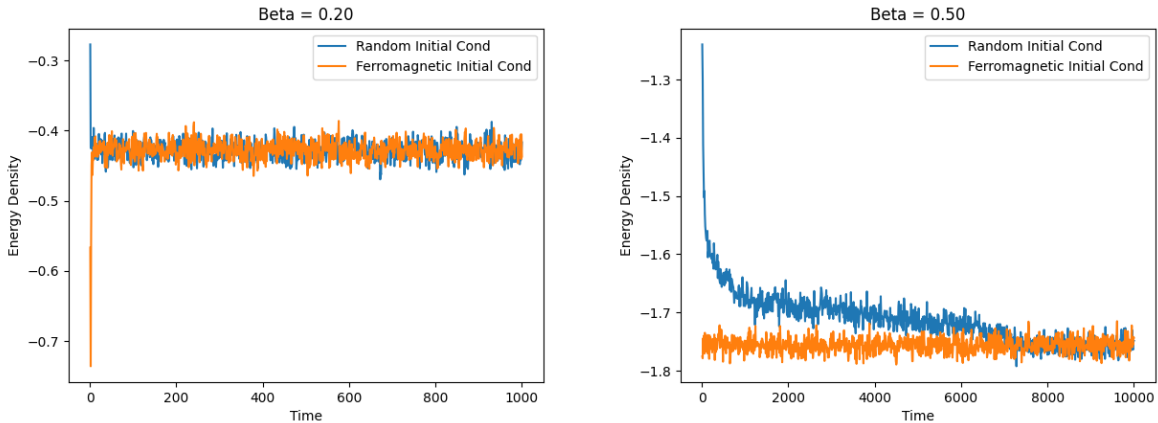


Figure 2: Thermal equilibrium for random and ferromagnetic spin initial condition for $\beta = 0.2$ and $\beta = 0.5$

Fig.2는 $L = 128$ 및 $\beta = 1/k_b T$ 에 대하여, β 가 각 0.2와 0.5일 때의 그림이다. $\beta = 0.2$ 에서는 랜덤 스핀 초기 조건과 강자성 스핀 초기 조건의 그래프가 $t = 0$ 부근부터 만나는 것을 보아, Monte Carlo 시뮬레이션이 시작하자마자 거의 바로 열평형에 도달했음을 알 수 있다. 열평형에 도달하기까지의 시간을 t_0 라고 한다면, 이 때 t_0 는 0에 매우 가까운 지점이다. 반면 $\beta = 0.5$ 에서는 두 지점이 약 $t = 800$ 에서 만난다. 하지만 이 때의 t_0 는 두 지점이 만나는 부근이 아니라, 랜덤 스핀 초기 조건 그래프가 급격히 꺾이는 때, 즉 $t = 200$ 근처로 봐도 무관하다. $200 \leq t \leq 800$ 까지는 스핀이 모두 하나로 뒤집어지기 전, 두 반대 스핀이 양쪽에서 팽팽하게 대립하고 있기 때문이다. 이 후에 spontaneous symmetry breaking에 의하여 시스템이 완전히 ordered phase로 전이가 일어나게 된다.

Fig.2를 통하여, 강자성 스핀으로 모델을 초기화하는 것이 열평형에 빨리 도달하는 데에 유리함을 알 수 있다. 또한 $L = 128$ 의 경우, 다양한 β 값에 대해 에너지 밀도 - 시간 그래프를 그려서 확인하며 t_0 가 $t = 1000$ 기준 300 부근을 넘지 않음을 확인하였다.

4 Energy, Magnetization Density, and Susceptibility to Temperature

물리량의 평균값을 구할 때, 위에서의 설명에 의하여 t_0 이후부터의 계산값을 더하는 것이 중요하다. 위에서 얻은 값에 근거하여 최소 $t = 300$ 이후의 값을 더하도록 한다. 이 때, 안정적으로 열평형 값을 얻기 위해서 t_0 보다 훨씬 큰 $t = 1000$ 으로 스핀을 업데이트한다. 그 후, 업데이트된 스핀을 가지고 다시 시간 0부터 1000까지 에너지 및 자화도 밀도를 계산해서 평균값을 얻어낸다. 각 온도값에 대하여, $dt = 1$, $0 \leq t \leq 1000$ 동안 Monte Carlo 시뮬레이션을 하되, 각 온도에 대해 5번의 독립적인 시뮬레이션을 돌리면서 통계적 오차 $1/\sqrt{N}$ 을 줄임으로써 더 정확한 값을 얻어낸다. β 는 $\Delta\beta = 0.0125$, $0.2 \leq \beta \leq 5.2$ 로 한다.

4.1 Energy and Magnetization Density

위에서 설명한 방법을 이용하여 Fig.3에서와 같이 온도에 따른 에너지 밀도와 자화도 밀도를 얻는다. 온도가 높아짐에 따라, 에너지 밀도가 높아지는 것을 확인할 수 있다. 온도가 0.2에서 높아질수록, 위 Fig.1의 에너지 밀도 그래프에서 주황색(강자성 스핀 초기 조건, $T = 0$) 개형에서 파란색 개형(랜덤 스핀 초기 조건, $T = \infty$)으로 가까워지는 것을 볼 수 있다. 자화도 밀도의 절댓값의 그래프 역시 같은 경향을 보이며, 온도가 높아질수록 스핀이 하나로 몰리지 않고 고루 분포되면서, ordered phase에서 disordered phase로 옮겨가는 것을 볼 수 있다.

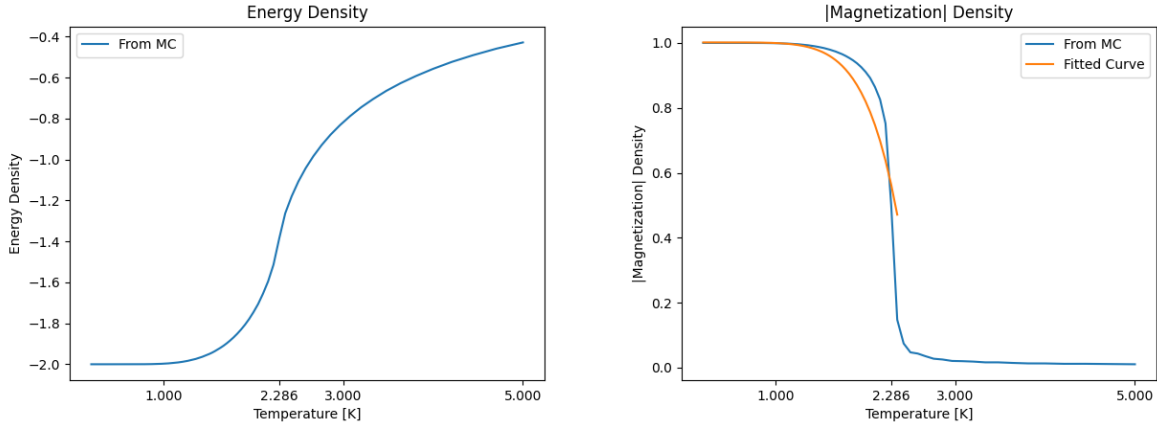


Figure 3: Energy and |magnetization| density to temperature

4.2 Specific Heat and Susceptibility

비열과 자기감수율의 경우, 미분을 이용한 일반적인 식인

$$C_v = \frac{\partial U}{N \partial T} \quad (2)$$

$$\chi = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} \Big|_{B=0} \quad (3)$$

을 사용하는 것을 지양해야 한다. Monte Carlo 시뮬레이션으로 얻은 값을 미분하게 되면, 분자가 아주 작은 수로 나뉘는 과정에서 Monte Carlo의 통계적 오차 $1/\sqrt{N}$ 이 급격히 커지게 되기 때문이다. 따라서, 비열과 자기감수율을 계산할 때에는 위 (2),(3) 식이 아닌 Fluctuation Dissipation Theorem을 사용하도록 한다.

Specific Heat and Susceptibility from Fluctuation Dissipation Theorem

$$C_v = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{Nk_B T^2} \quad (4)$$

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{Nk_B T} \quad (5)$$

4.1과 같은 방법의 Monte Carlo 시뮬레이션을 실행하고, 식 (4),(5)를 이용하여 비열과 자기감수율을 구한다. Fig.4는 이렇게 얻은 두 물리량의 온도에 따른 분포이다.

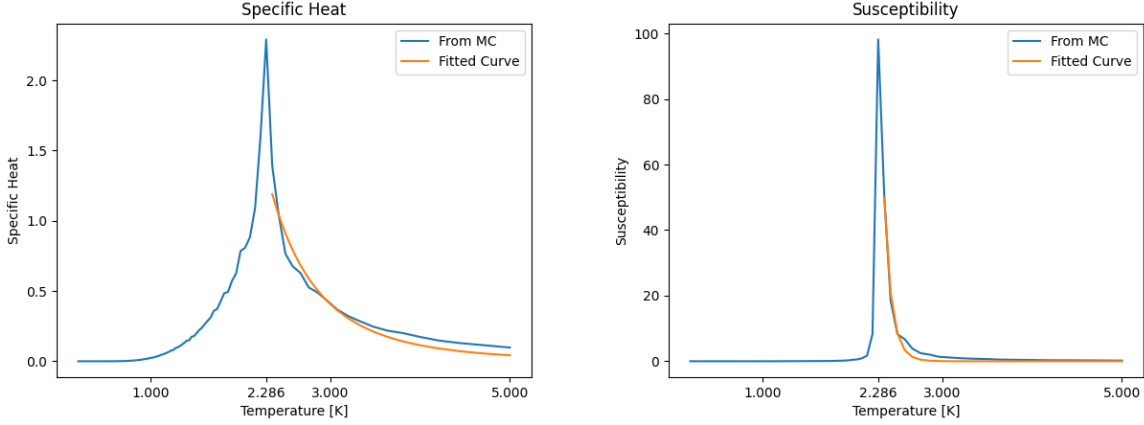


Figure 4: Specific heat and susceptibility to temperature

상전이가 일어나는 온도(critical temperature)에서 비열과 감수율 모두 급격히 발산하는 것을 확인할 수 있다. 이는 ordered phase 혹은 disordered phase로부터 상전이 온도로 가까워갈수록 도메인 간의 correlation이 급속도로 커지면서, 결국 correlation length가 발산하기 때문이다.

4.2.1 Critical Temperature

Fig.4를 통하여 시스템의 상전이 온도를 계산할 수 있다. 비열과 감수율이 발산하는 지점, 즉 그래프 상에서 최대가 되는 지점을 찾으면 그것이 상전이 온도가 될 것이다. 이 때, 비열과 감수율이 상전이 온도에 다가갈 때에 증가하는 정도가 다르고, 이에 따라 그래프의 피크의 폭도 다르다. 또한, 결국 수치적으로 얻은 데이터이기 때문에 두 그래프를 통해 얻은 상전이 온도는 다를 수 있으므로, 두 물리량을 각각 최대를 만드는 온도를 구한 후, 그 둘을 평균냄으로써 상전이 온도를 구하기로 한다. $L = 128, 0.2 \leq \beta \leq 5.2$ with $d(\beta) = 0.0125$ 에 대하여, 즉 $0.19 \leq T \leq 5$ 의 경우 상전이 온도가 약 2.29K로 계산된다. 이는 이론값 2.26K과 약 0.88%의 상대오차를 갖는다.

상전이 온도를 더욱 정확하게 계산하기 위해서는, 다음과 같은 방법을 실행할 수 있다.

- Monte Carlo를 돌릴 때 β , 즉 온도를 더욱 잘게 나눈다. 이렇게 되면 T_c 에 더욱 가까운 온도를 샘플링할 수 있고, 피크가 더욱 좁고 높아질 것이다.
- 격자 사이즈 L 을 다양하게 바꿔가며, 각각 구한 상전이 온도를 평균내본다.
- Monte Carlo 총 시간, 독립 시행을 반복하는 횟수 등을 늘려가며 시뮬레이션을 돌린다. 이 때, 각각 구한 상전이 온도를 평균내도록 한다. Monte Carlo는 결국 시행 횟수(N)이 커질수록 그에 따른 통계적 오차 $1/\sqrt{N}$ 이 줄기 때문이다.

4.2.2 Critical Exponents

Fig.3과 Fig.4의 자화도 밀도, 비열, 감수율 그래프는 상전이 온도보다 낮은 혹은 높은 온도 구간에서 power law를 따른다. 비열의 그래프에서 $|T - T_c|$ 의 제곱수를 $-\alpha$, 자화도 밀도의 그래프에서 $|T - T_c|$ 의 제곱수를 β , 감수율의 그래프에서 $|T - T_c|$ 의 제곱수를 $-\gamma$ 라고 한다. 각 임계 지수는, $|T - T_c|$ 의 제곱수로 함수 피팅을 함으로써 찾아낼 수 있다. scipy 패키지의 curve fit 함수를 사용하여 피팅을 실행할 수 있다.

표 1은 이렇게 구한 임계 지수의 값이다. 해석적인 해와는 차이가 있는데, 이는 다음과 같은 이유에 따른다.

Table 1: Critical temperature and exponents from MC simulation

$T_C = 2.29K$	
Critical Exponent	Value
α	4.25
β	6.64
γ	25.78

- 상전이 온도가 정확하지 않다.
- Monte Carlo 기법을 통해 발산하는 듯한 비열과 감수율 그래프를 얻었지만, 실제로 그래프가 진짜로 발산한 것은 아니고, 그저 다른 지점에 비해 훨씬 큰 유한한 값을 얻은 것이다. 온도 구간을 더 잘게 나누어 더욱 정확한 상전이 온도를 얻고, 더욱 좁고 높게 솟은 피크를 얻으면서 발산을 더 잘 흉내낼 수 있다면, 임계 지수 피팅도 상대적으로 더 정확해질 것이다.
- 데이터가 정확하지 않은 상태에서, power law로 피팅을 하게 되면, 그 power exponent가 이론적 예측값에서 다소 크게 벗어난 값을 띠게 된다.

5 Conclusion

Monte Carlo 방법을 이용하여 2차원 (128x128) 사각 격자에서 자기장이 없는 Ising 모형을 구현하였다. 온도를 고정시켰을 때 시간에 따른 시스템의 에너지 및 자화도 밀도, 그리고 열평형에 도달한 시간 이후 온도에 따른 에너지 및 자화도 밀도를 얻었다. 또한 Fluctuation dissipation theorem을 이용하여, 온도에 따른 시스템의 비열, 자기 감수율을 계산하였다. 이 두 값이 발산하는 지점을 통해 상전이 온도를 구하고, 데이터 피팅을 통해서 임계 지수를 구해보았다.