

1. FELADAT

K: Végezzünk szimulációkat az egy-dimenziós Ising modellre. A rendszer állapotát egydimenziós rács pontjaiban ($i = 1, 2, \dots, N$) ülő $s_i = \pm 1$ spinek határozzák meg. A spinek szomszédjaikkal ferromágnesesen hatnak kölcsön, azaz egy állapot energiája a következő

$$E(s_1, s_2, \dots, s_N) = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} \quad , \quad J > 0$$

A spinek T hőmérsékletű környezettel vannak kölcsönhatásban, s ennek eredményeképpen átbillenhetnek egyik állapotukból a másikba ($s_i \rightarrow -s_i$).

Válasszunk spin-flip rátának olyan alakot, ami kielégíti a részletes egyensúly elvét. Ilyen lesz például, ha az i -edik spin forgatásának ($s_i \rightarrow -s_i$) rátája a következő ($1/s$ egységben):

$$w_i(s_1, \dots, s_{i-1}, s_i, s_{i+1}, \dots, s_N) = \begin{cases} 1 & \text{ha } \Delta E < 0 \\ 1/2 & \text{ha } \Delta E = 0 \\ e^{-\beta T} & \text{ha } \Delta E > 0 \end{cases}$$

ahol, mint könnyen belátható

$$\Delta E = 2Js_i(s_{i-1} + s_{i+1})$$

Legyen $N = 100$, s kezdjük a rendszer szimulálását teljesen véletlenszerű állapotból, ahol $1/2$ valószínűséggel $s_i = \pm 1$ (az egyensúlyi átlagok nem függhetnek a kezdeti feltételtől, tehát eredményeink helyességét ellenőrizhetjük azzal, hogy teljesen rendezett állapotból indítjuk a rendszert, s megnézzük ugyanazt kapjuk-e).

A szimulálás a következő lépésekből áll:

- (1) Véletlenszerűen kiválasztunk egy spint.
- (2) Megnézzük, hogy ha megforgatjuk, akkor mennyit változik a rendszer energiája, azaz kiszámítjuk ΔE -t.
- (3) Ha $\Delta E < 0$, akkor megforgatjuk a spint, s megyünk az (1)-es ponthoz.
- (4) Ha $\Delta E = 0$, akkor húzunk egy véletlen számot P -t a $[0, 1]$ intervallumból, s ha $P < 1/2$, akkor megforgatjuk a spint, s megyünk az (1)-es ponthoz. Ha $P > 1/2$, akkor forgatás nélkül megyünk az (1)-es ponthoz.
- (5) Ha $\Delta E > 0$, akkor húzunk egy véletlen számot P -t a $[0, 1]$ intervallumból, s ha $P < e^{-\beta \Delta E}$, akkor megforgatjuk a spint, egyébként megyünk az (1)-es ponthoz.

Az (1)-(5) pontokat sokszor, $N \cdot t$ -szer elvégezve azt mondjuk, hogy t idő telt el. Minden rendszernek van általában egy relaxációs ideje, τ , s ha $t > \tau$, akkor a rendszer elérkezik az egyensúlyba, s attól kezdve a különböző mennyiségek, mint például a mágneszettség

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i$$

vagy a mágneszettség fluktuációja m^2 , az egyensúlyi értéke körül fluktuál. Az egyensúlyi átlagokat ($\langle m \rangle$, $\langle m^2 \rangle$) tehát megbecsülhetjük mint időátlagokat. Ez azt jelenti, hogy t időnként kiszámítjuk (megmérjük) az m és az m^2 értékét, majd elég sok ilyen mérésből átlagokat számolunk, s ezek megadják a T hőmérsékleti termodinamikai átlagokat, $\langle m \rangle$ -t és $\langle m^2 \rangle$ -t.

Határozzuk meg az $\langle m \rangle$ és az $\langle m^2 \rangle$ átlagokat az alábbiakban megadott egyéni βJ értékeknek megfelelő hőmérsékleteken. Próbáljuk megmagyarázni az eredményt! Mentsünk el egyegy egyensúlyi spinkonfigurációt $\{s_1, \dots, s_{i-1}, s_i, s_{i+1}, \dots, s_{100}\}$ mind a négy βJ értéknél, egy későbbi feladatban szükség lesz rájuk.

MEGOLDÁS

1.1. Elméleti alapok

Az Ising-modell egy, a ferromágnességet statisztikus fizikai szempontból leíró matematikai modell. Vizsgálatának tárgyát olyan diszkrét elemek képezik, melyek atomi mágneses momentumokat/spineket szimbolizálnak. Ezen elemek $+1$, vagy -1 értéket vehetnek fel, melyek mindegyike a szomszédjával hathat kölcsön. Jelentősége, hogy ezen rendszer 2-dimenziós változata szolgáltatja az egyik legegyszerűbb statisztikus modellt a fázisátalakulások vizsgálatához. A feladat során egy ilyen rendszer időfejlődését kellett vizsgálnunk.

Vizsgáljuk N darab atom viselkedését egy z -irányú H mágneses térben. Ha a fenti definíció alapján a spinek $+1$ és -1 értéket vehetnek fel, akkor rendszer aktuális állapotának Hamilton-függvényéből kapott teljes energiája a következő formában írható:

$$E(s_1, s_2, \dots, s_N) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j - \mu H \sum_{i=1}^N s_i \quad (1)$$

Az eredeti leírás alapján a jelenlegi feladat egyik közelítése, hogy az általunk vizsgált rendszerben most $H = 0$, tehát a második tag zérus. Így a teljes energia a leírásban is látható módon fejezhető ki:

$$E(s_1, s_2, \dots, s_N) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j \quad (2)$$

Ahol J az ún. *kicserélődési energia*, $\langle i, j \rangle$ pedig a szomszédos elemeken végigfutó összegzést jelenti. Az 1-dimenziós esetben ez a fenti $\sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1}$ alakot veszi fel. Megjegyzendő, hogy ez az alak azt takarja, hogy minden párt csupán egyetlen egyszer veszünk bele a teljes energiába, triviális módon. Két dimenziós, zárt határfeltételű rendszer esetében pedig az energiát a $\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} s_{i,j} (s_{i+1,j} + s_{i,j+1} + s_{i+1,j+1})$ alakba írhatjuk át, biztosítva az 1-dimenziós esetben is használt feltételt, miszerint minden párt csak egyszer számolunk.

Feladataink közé tartozott monitorozni a mágnesezettség m fejlődését, valamint vizsgálni annak és négyzetének várható értékét, mint időátlagot. Valójában az $\langle m \rangle$ és $\langle m^2 \rangle$ átlagolás sokaságátlag, több különböző véletlen futtatás eredménye, azonban ezt egyensúlyban jól közelíti az időátlag. Célunk tehát egy olyan rendszert létrehozni, melyet tetszőleges pontból indítva az eléri a - kezdőfeltételektől független - egyensúlyi állapotát, majd akörül fluktuál és így vizsgálhatóvá válnak az egyes mennyiségek várható értékei.

Az $\langle m \rangle$ és $\langle m^2 \rangle$ elméletileg várt értékét könnyen kiszámíthatjuk. Írjuk fel ezen két mennyiséget a várható érték és a P állapot-valószínűség definíciója alapján:

$$\langle m \rangle = \sum_{\sigma} m(s_1, \dots, s_{i-1}, s_i, s_{i+1}, \dots, s_N) \cdot P_{\beta}(s_1, \dots, s_{i-1}, s_i, s_{i+1}, \dots, s_N) \quad (3)$$

$$\langle m^2 \rangle = \sum_{\sigma} m^2(s_1, \dots, s_{i-1}, s_i, s_{i+1}, \dots, s_N) \cdot P_{\beta}(s_1, \dots, s_{i-1}, s_i, s_{i+1}, \dots, s_N) \quad (4)$$

Ahol a szummázás az összes spinkonfiguráción fut végig, σ -val jelölve azokat. Itt a P_{β} valószínűséget a következő módon definiáljuk:

$$P_{\beta}(s_1, \dots, s_{i-1}, s_i, s_{i+1}, \dots, s_N) = \frac{1}{Z_{\beta}} e^{-\beta E(s_1, \dots, s_{i-1}, s_i, s_{i+1}, \dots, s_N)} \quad (5)$$

Ahol Z_{β} a β inverzhőmérsékletű rendszer állapotösszege. Jelöljük $(s_1, \dots, s_{i-1}, s_i, s_{i+1}, \dots, s_N)$ tagot az egyszerűség kedvéért a fentebb is már használt (σ) -val. Ekkor felírhatjuk a következőt:

$$\langle m \rangle = \sum_{\sigma} m(\sigma) \cdot \frac{1}{Z_{\beta}} e^{-\beta E(\sigma)} = \sum_{\sigma} m(\sigma) \cdot \frac{1}{Z_{\beta}} e^{+\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j} \quad (6)$$

$$\langle m^2 \rangle = \sum_{\sigma} m^2(\sigma) \cdot \frac{1}{Z_{\beta}} e^{-\beta E(\sigma)} = \sum_{\sigma} m^2(\sigma) \cdot \frac{1}{Z_{\beta}} e^{+\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j} \quad (7)$$

Várakozásaink szerint az energia egyensúlyi állapotban 0 körül fluktuál, így $\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j$ értéke szintén 0 várható értékkel rendelkezik, és így $\langle m \rangle$ is tartani fog 0-hoz. A mágnesezettségek négyzetének várható értéke, $\langle m^2 \rangle$ viszont kvázi csak β értékétől Z_{β} -n keresztül, valamint m^2 menetétől fognak függeni. Mivel m^2 gyorsan eléri a nullát és azon érték felett „pattog”, ezért $\langle m^2 \rangle$ egy valamivel 0 feletti érték lesz hosszú idő után. Ez azt jelenti, hogy ha ezen átlag időfejlődését vizsgáljuk, akkor az egy konstans görbéhez fog tartani.

A kiszámolt átlagértékek pontosságát az átlagértékek standard hibájának számításával definiáltam, mely a következő mennyiség:

$$\sigma_{\langle x \rangle} = \frac{\sigma_x}{\sqrt{n}} \quad (8)$$

Ahol σ_x az x adat szórása, n pedig az adatpontok száma.

1.2. Megvalósítás

A szimulációt az 1D esetre kellett megírunk, majd abban vizsgálni a fentebb tárgyalt mennyiségek időfejlődését is. Az ellenőrzés és az esetleges mélyebb megértés kedvéért én a szimulációban a 2D esetet is implementáltam. A programkódot egy Jupyter Notebook-ban futó Python 3.7 kernel alatt írtam, az ezen jegyzőkönyvhöz készült ábrákat pedig szintén abban a notebook-ban készítettem. Minden felhasznált kód, és maga a dokumentáció is elérhető GitHub-on[1]. A 2D esetben készült időfejlődésről animációt is készítettem, melyet elérhetővé tettem a YouTube-on[2].

Minden szimulációt homogén kezdeti feltétellel, minden spin értékét egyaránt $+1$ -nek választva indítottam és úgy vizsgáltam annak időbeli alakulását. Ennek oka az volt, hogy így le tudtam ellenőrizni, hogy egy szélső feltételből is az egyensúlyi helyzetbe propagál idővel a rendszer és ott is marad-e.

1.3. 1D Ising-modell

Az 1D Ising-modellről készült grafikonokat az (1) - (10) ábrákon közöltem. Az (1)-es ábra az egyes β értékekkel futtatott végállapotokat mutatja, $N = 200\,000$ szimulációs lépés után, 300 db spinre. Míg a (2) ábrán ugyanezen szimulációk során mért energia időbeli változását ábrázoltam.

A kapott eredmények egyértelműen mutatják több futtatás után is, hogy az egyensúlyi helyzet akkor áll be, amikor a spinek tökéletesen össze vannak keveredve, tehát egyenlő számban tartalmazva $+1$ és -1 spineket. A rendszer ezt az állapotot elérve ekörül oszcillál. A mágnesezettség ebben az állapotban szintén 0 körül fluktuál, ami a (3)-as ábráról olvasható le. A (4)-es ábrán ez a fluktuáció látható kiemelve.

Összefoglalva úgy fogalmazhatjuk meg, hogy tér nélkül egy anyag nem szeret mágnesezett állapotban maradni. Ha a spinek egymással kölcsönhatva, de szabadon elfordulhatnak, a mágnesezettség minden esetben 0-hoz fog tartani, így biztosítva az egyensúlyt.

Ennek megfelelően - szintén a várakozásainkkal megegyező módon - az m^2 érték valamivel a 0 felett fluktuál, melyek a (5) és (6) ábrákon láthatóak. A (6)-os ábrán a (5)-ösön is látható nulla feletti fluktuáció van kiemelve.

A (7) és (8) ábrákon sorrendben a mágnesezettség és a mágnesezettség négyzet időátlagának változását ábrázoltam a lépéshossz függvényében, melyet ezen mennyiségek várható

értékének megbecsüléséhez használtam. A feladat leírásában is szerepel megjegyzésként, miszerint a mágnesezettség értéke csak az egyensúlyi helyzetben értelmezett. Ezt figyelembe véve, egy manuálisan választott pontot kijelöltem az egyensúlyi helyzet alsó határának, és kizárólag az időben utána következő értékeket használtam fel a mágnesezettség és annak négyzetének időátlagát megadó számításokban. Tökéletesen pontos értéket akkor kapnánk mindkét mennyiségre, ha a szimulációt végtelenül hosszú ideig futtatnánk. Ekkor az ábrázolt $\langle m \rangle(n)$ és $\langle m^2 \rangle(n)$ lépések számától függő görbe legutolsó pontja lenne a pontos becslésünk. Mivel ezt megvalósítani nem lehetséges, így szimplán viszonylag hosszú ideig futtattam a szimulációt, majd meghatároztam a (8) képletben is szereplő módszerrel az utolsó pont értékének hibáját. Ez az általam adott becslés az $\langle m \rangle$ és $\langle m^2 \rangle$ értékekre. Ezekre a következő eredményeket kaptam:

Hőmérsékletek [K]	$\langle m \rangle$	$\langle m^2 \rangle$
301.79	0.000 ± 0.0001	0.0033 ± 0.00001
150.90	0.002 ± 0.0001	0.0031 ± 0.00001
48.29	0.004 ± 0.0001	0.0033 ± 0.00001
22.63	-0.004 ± 0.0001	0.0032 ± 0.00001

1. táblázat. Az $\langle m \rangle$ és $\langle m^2 \rangle$ átlagok értékei

Az ezeket bemutató grafikonok sorrendben a (7) és (8) ábrákon láthatóak. Alacsony hőmérsékleten az anyag hajlamos ún. „beakadni” egy szélsőségesebb spinállapotba. Ennek oka, hogy a szomszédos spinek szeretnek azonos állapotban tartózkodni, azonban alacsony hőmérsékleten az átfordulás rátája is nagyon kicsi. Ez azt eredményezi, hogy nagyobb arányban jönnek létre azonos spinállapotban levő domének az anyagok belül, így az $\langle m \rangle$ átlag eltolódik véges távolságon vagy a pozitív, vagy a negatív irányba, ami mind a fenti táblázat adatain, mind pedig a grafikonokon jól látszik. Természetesen végtelenül hosszú időre az átlag ebben az esetben is a 0-hoz tart $\langle m \rangle$ esetén. Ezzel ellentétben magasabb hőmérsékleteken ilyen viselkedést már nem egyre kevésbé lehet megfigyelni, a mágnesezettség átlaga közel 0 körül mozog végig már rövid idő után is.

Továbbiakban vizsgáltam az $\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2$ értékét is. Ennek eredményét a (9)-es ábrán közöltem. A kapott értékeket az alábbi táblázatban foglaltam össze:

Hőmérsékletek [K]	$\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2$
301.79	0.0036 ± 0.00006
150.90	0.0036 ± 0.00006
48.29	0.0034 ± 0.00006
22.63	0.0034 ± 0.00006

2. táblázat. Az $\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2$ fluktuációk értékei

1.4. 2D Ising-modell

A feladat elvégzése után a 2D Ising-modellt is megvizsgáltam, csupán érdekesség gyanánt. Ebben egy 2D rács pontjaiba szórtam le diszkrét, kezdetben teljesen homogén módon $+1$ spinértékeket, és azok időfejlődését vizsgáltam a fentiekhez hasonló módon 100 000 lépésre, mindenféle mágneses tér jelenléte nélkül. Az ebben az esetben készült grafikonok megtekinthetők a (11) - (16) ábrákon, az 1D Ising-moddellel megegyező sorrendben és azonos vizsgálati módszerek szerint. Az egyensúlyi helyzet itt is akkor állt be, amikor a spinállapot nagyjából egyenlő arányban $+1$ és -1 spinekből tevődött össze, és ekkor a mágnesezettség is 0 körül oszcillált.

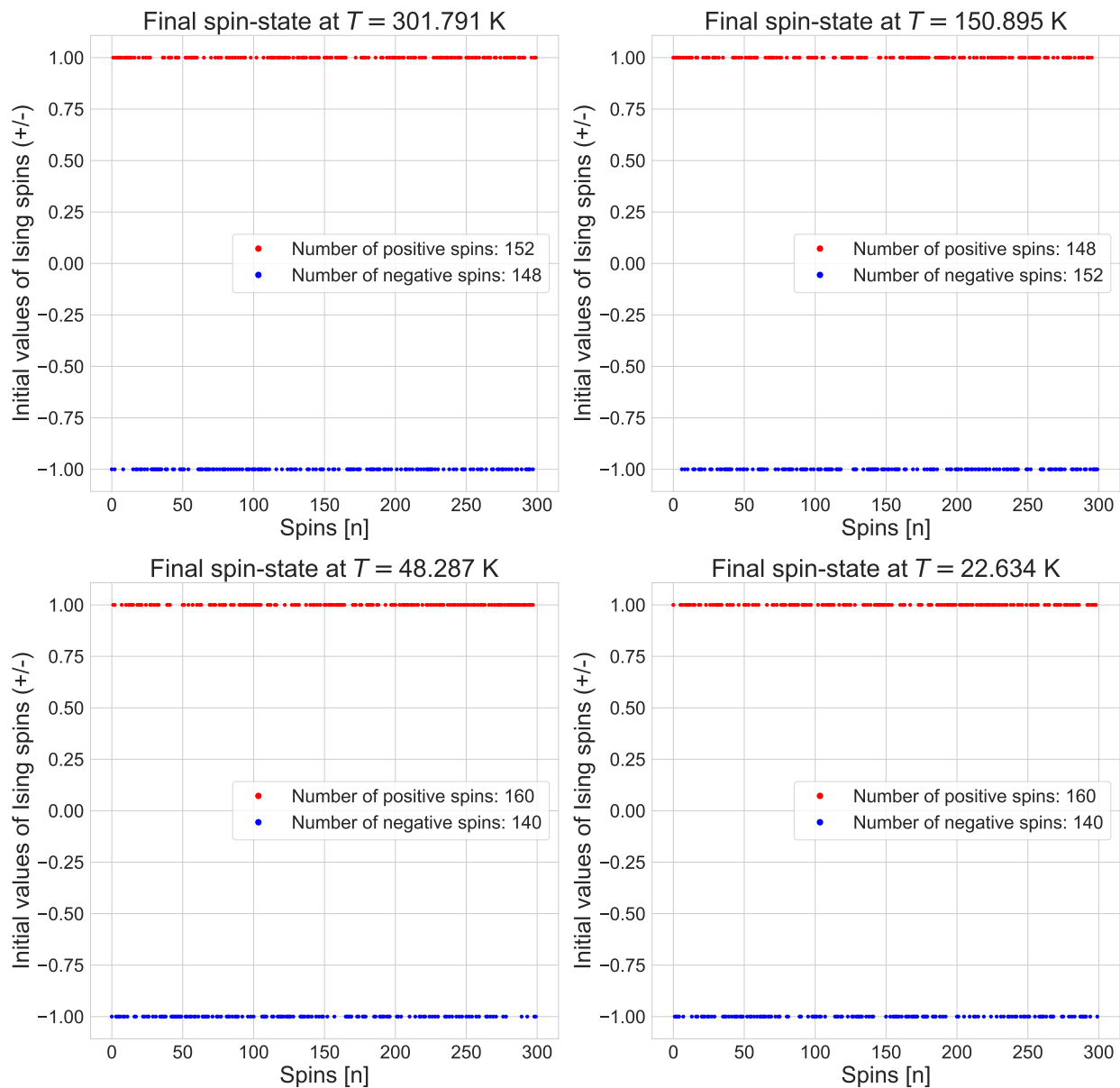
Az erről készült animációt[2] homogén $+1$ értékű spinekkel teli állapotból indítottam és 10000 lépés hosszan futtattam. Végeredményben vizuálisan is a fent tárgyalt eredmények látszódnak a videón.

Felhasznált irodalom

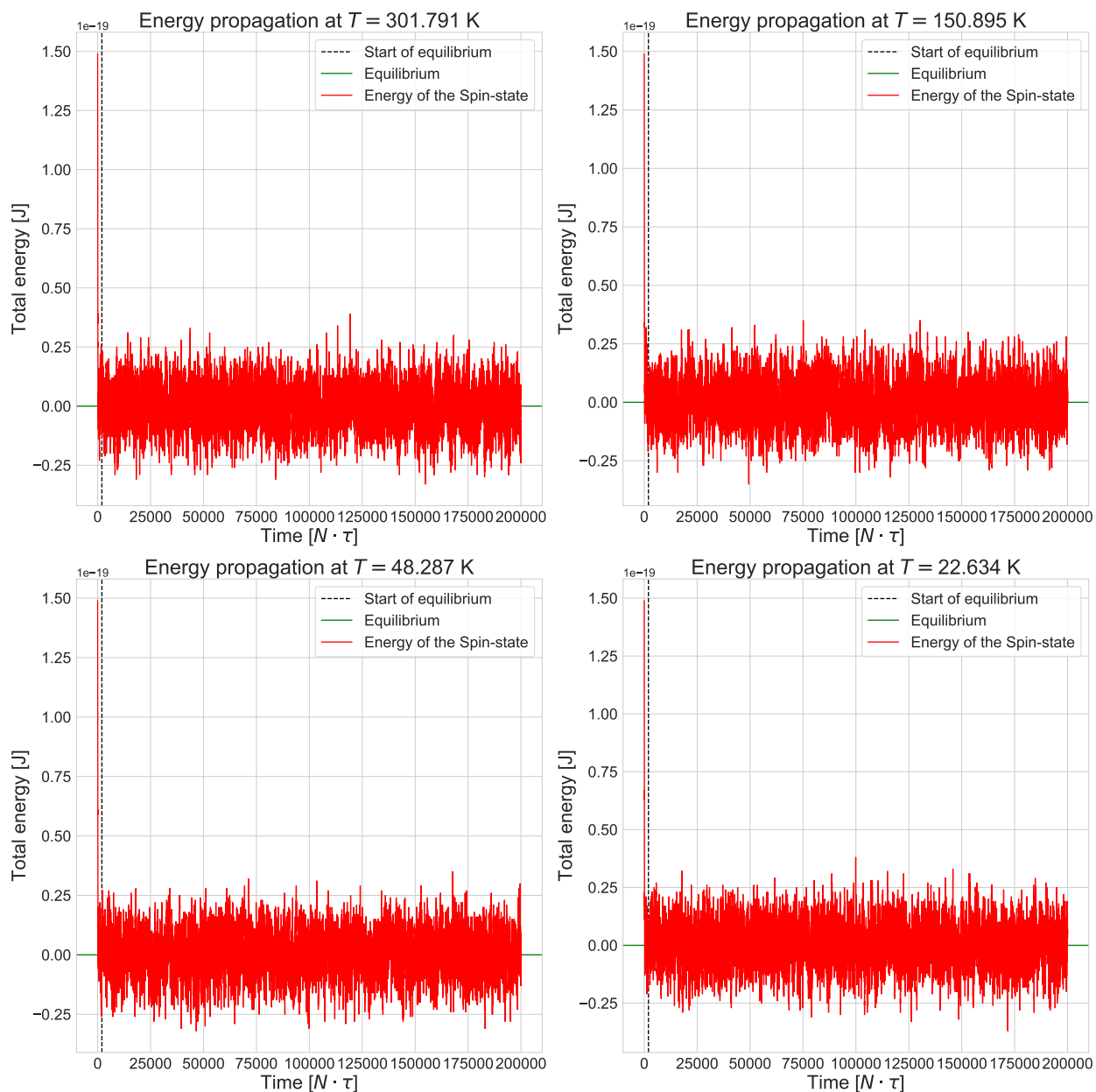
- [1] Pál Balázs. *ELTE Computer Simulations 2019* — *GitHub*. [Online; opened at April 1, 2019]. 2019. URL: https://github.com/masterdesky/ELTE_Comp_Simulations_2019.
- [2] *Pál Balázs's Channel* — *YouTube*. [Online; opened at April 1, 2019]. 2019. URL: <https://www.youtube.com/channel/UCBDSB7PdQ3E9l9WSBsTy7cQ>.

APPENDIX A

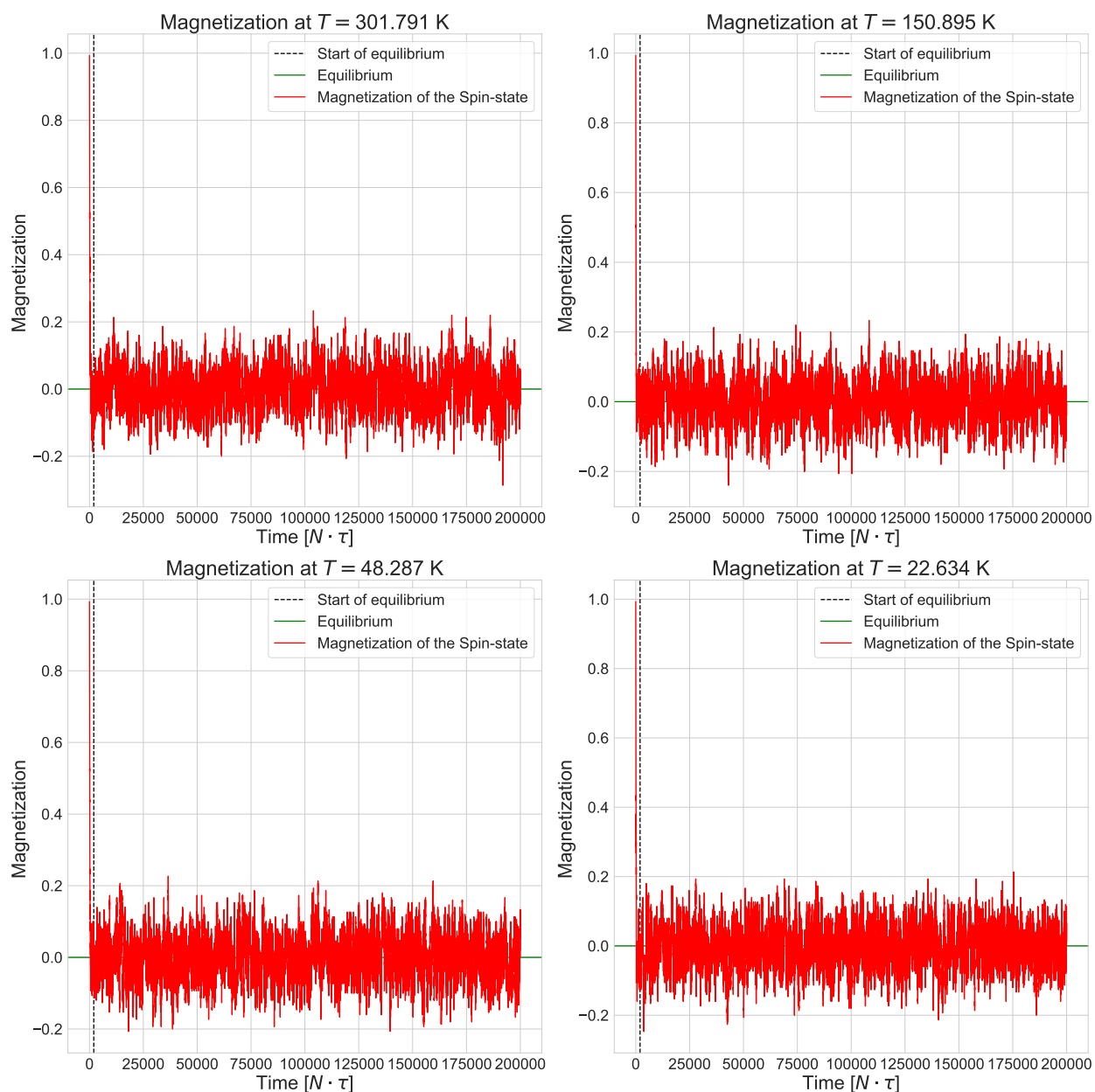
A.1 AZ 1-DIMENZIÓS ISING-MODELL



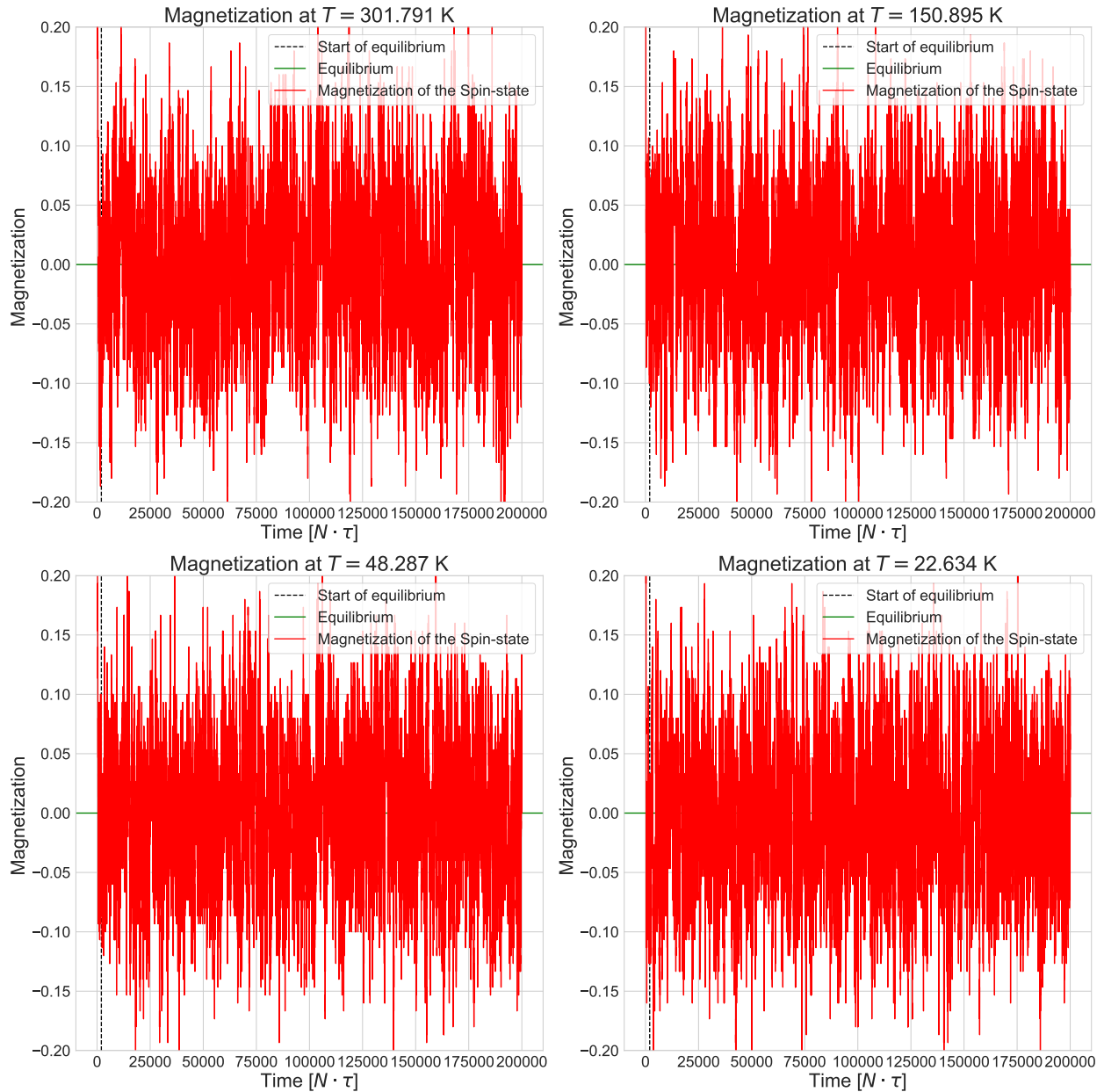
1. ábra. Az 1D Ising-modell végső állapota $N = 200\,000$ lépés szimulálása után



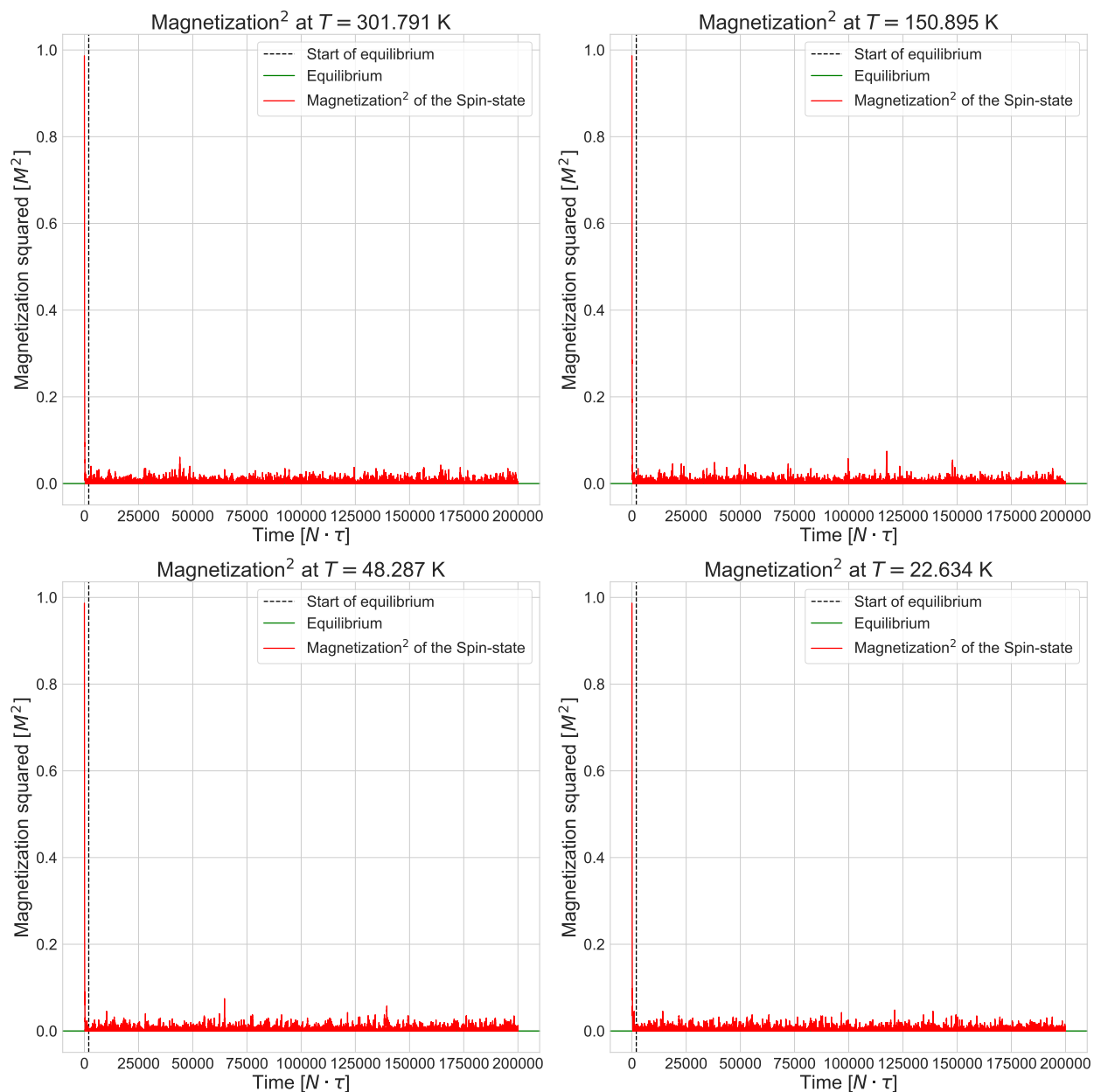
2. ábra. Az 1D Ising-modellben mérhető teljes energia időfejlődése



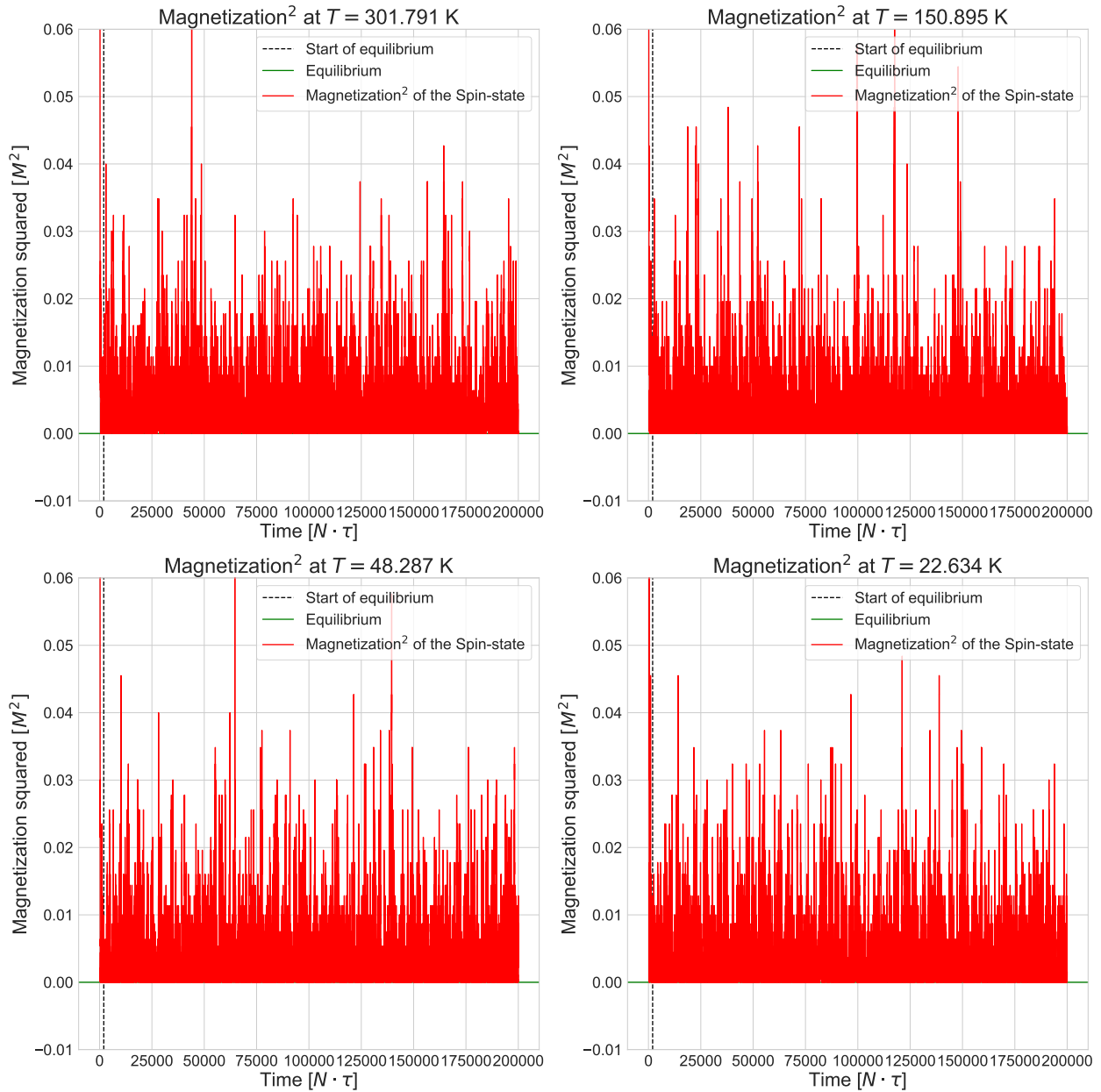
3. ábra. Az 1D Ising-modellben mérhető mágnesszettség időfejlődése



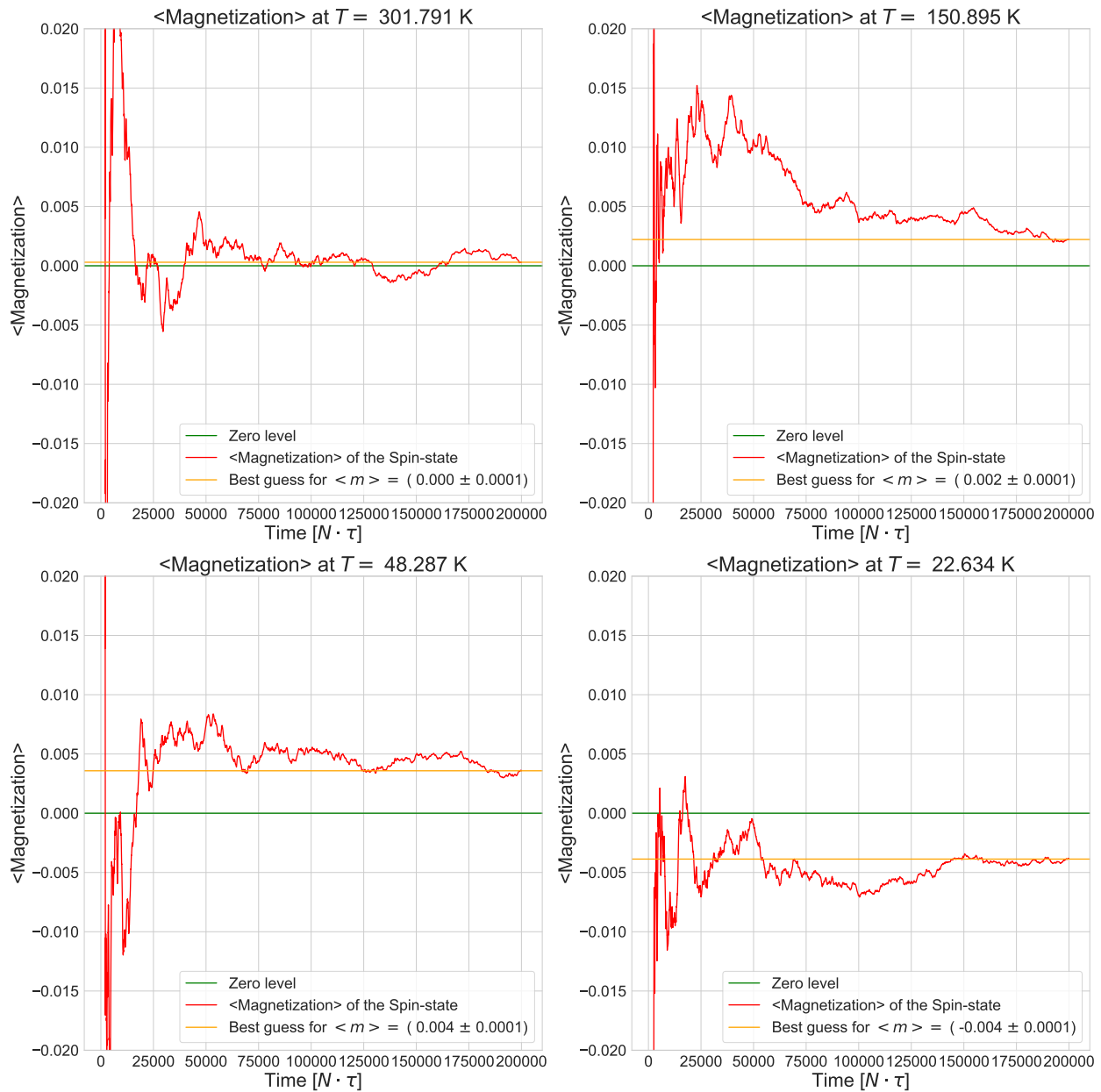
4. ábra. Az 1D Ising-modellben mérhető mágneszettség időfejlődése – Kiemelt fluktuáció



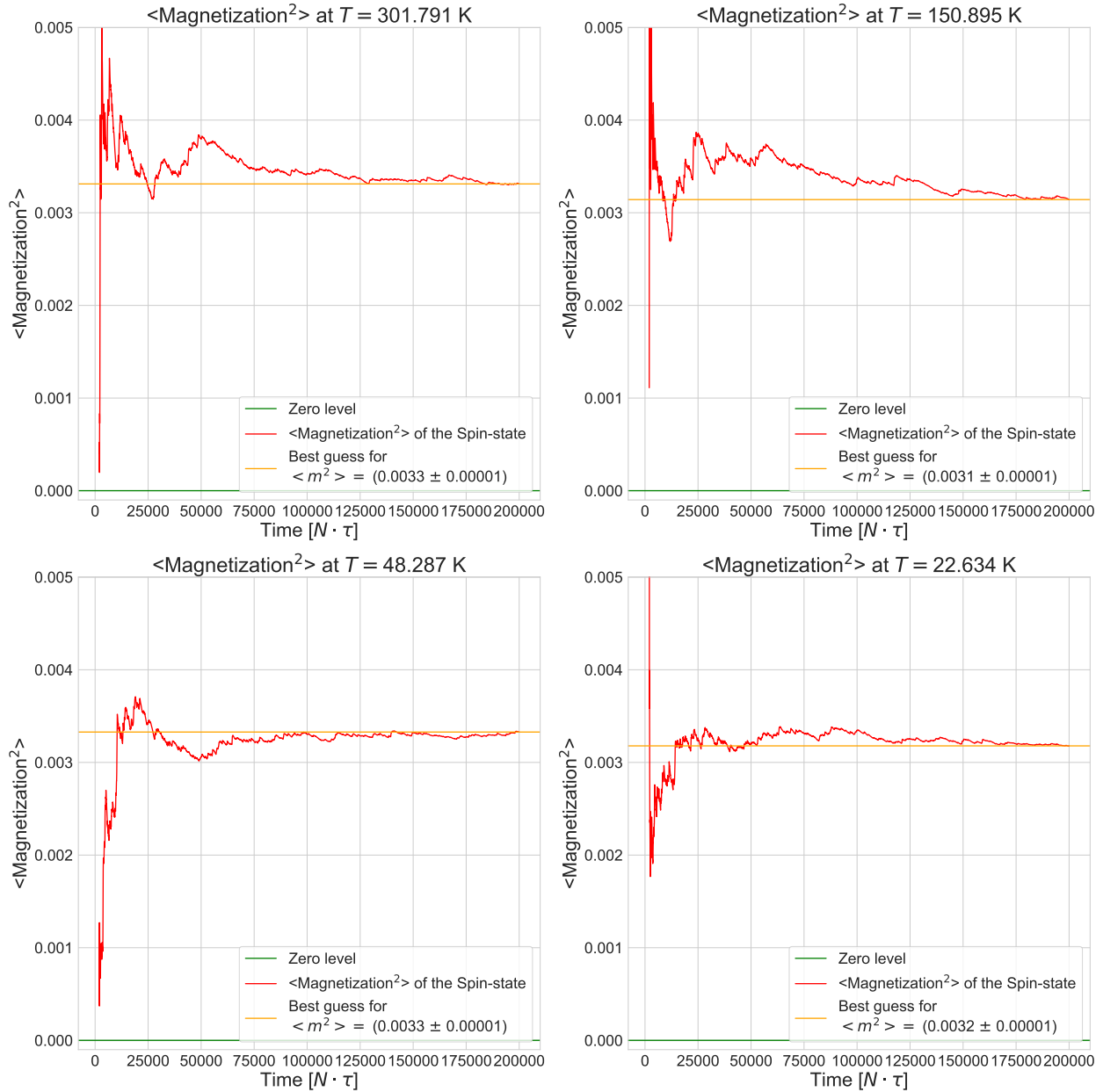
5. ábra. Az 1D Ising-modellben mérhető mágneszettség négyzetének időfejlődése



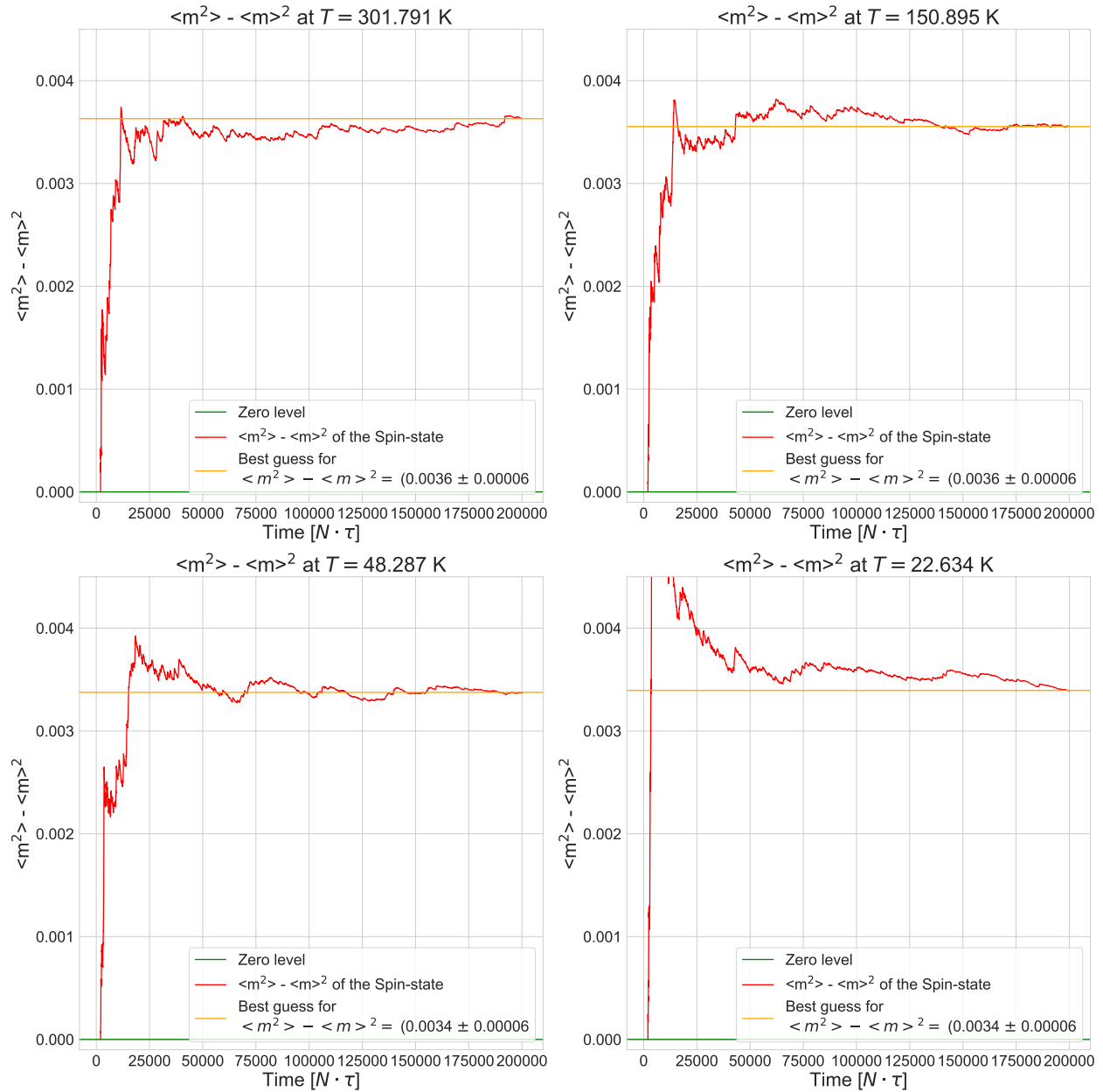
6. ábra. Az 1D Ising-modellben mérhető mágnesezettség négyzetének időfejlődése – Kiemelt fluktuáció



7. ábra. Az 1D Ising-modellben az egyensúlyi helyzet beállta után mérhető mágneszettség időátlaga



8. ábra. Az 1D Ising-modellben az egyensúlyi helyzet beállta után mérhető mágneszettség négyzetének időátlaga

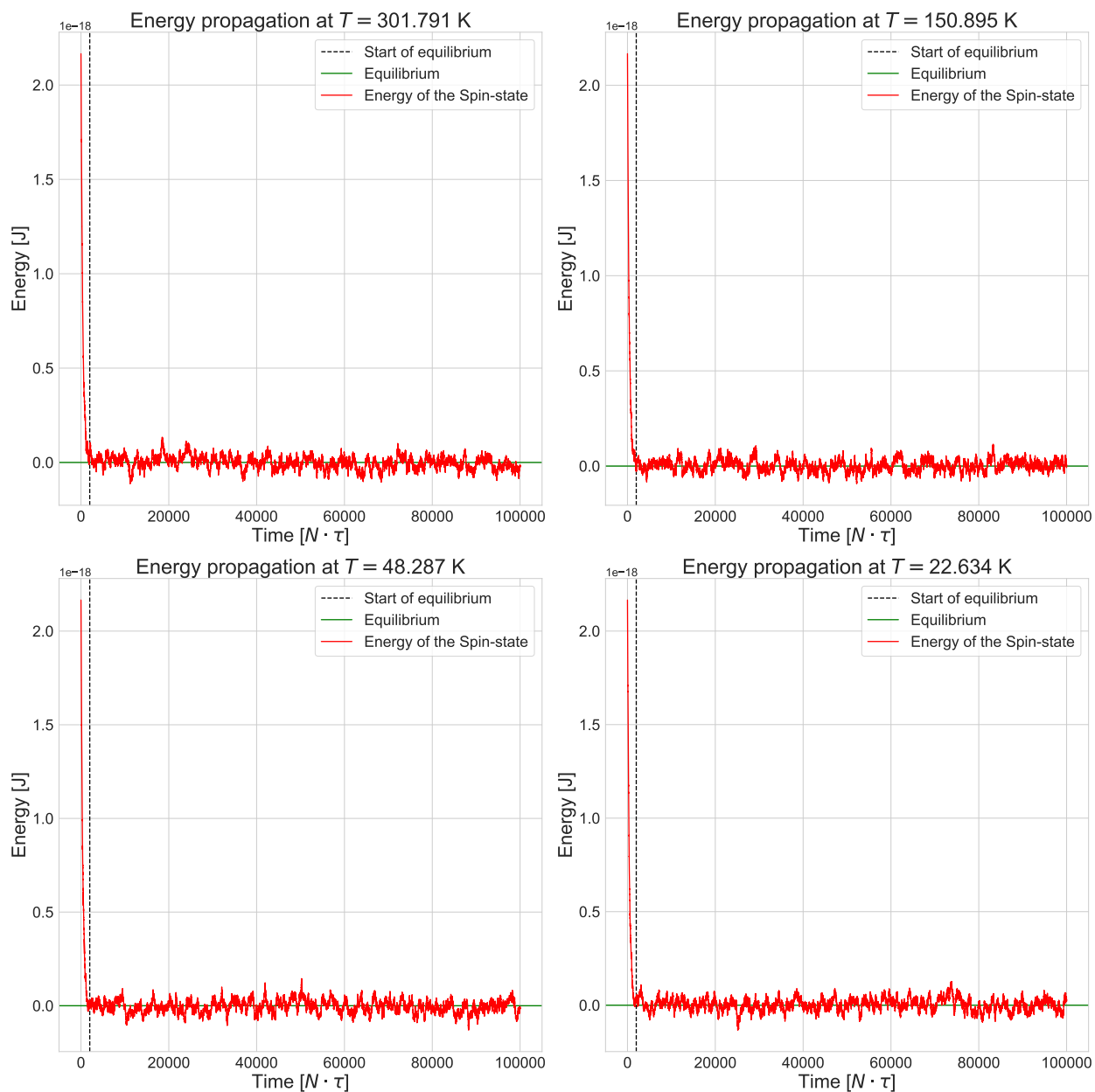


9. ábra. Az 1D Ising-modellben az egyensúlyi helyzet beállta után mérhető $\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2$ mennyiség időátlaga

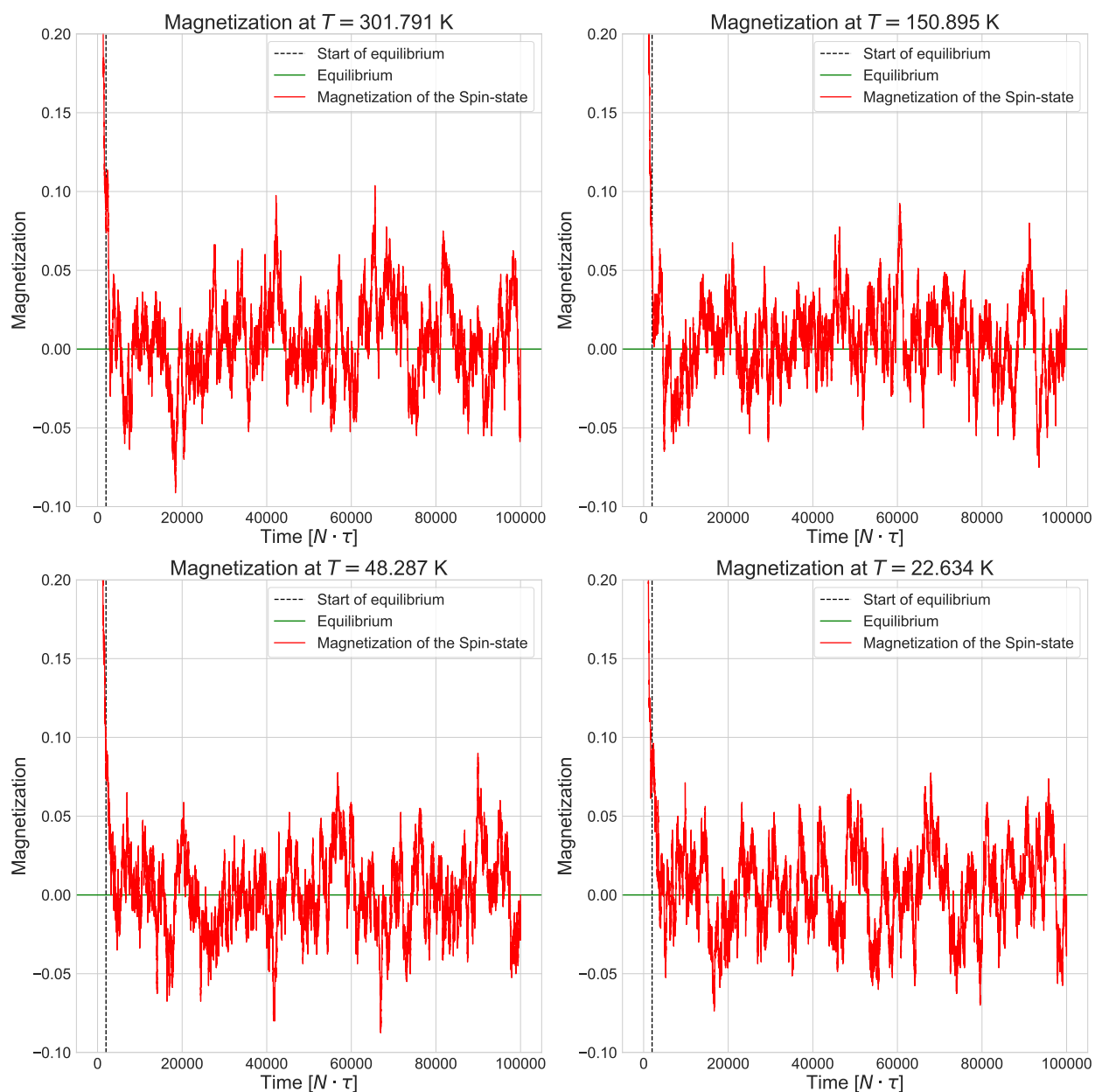
A.1 A 2-DIMENZIÓS ISING-MODELL



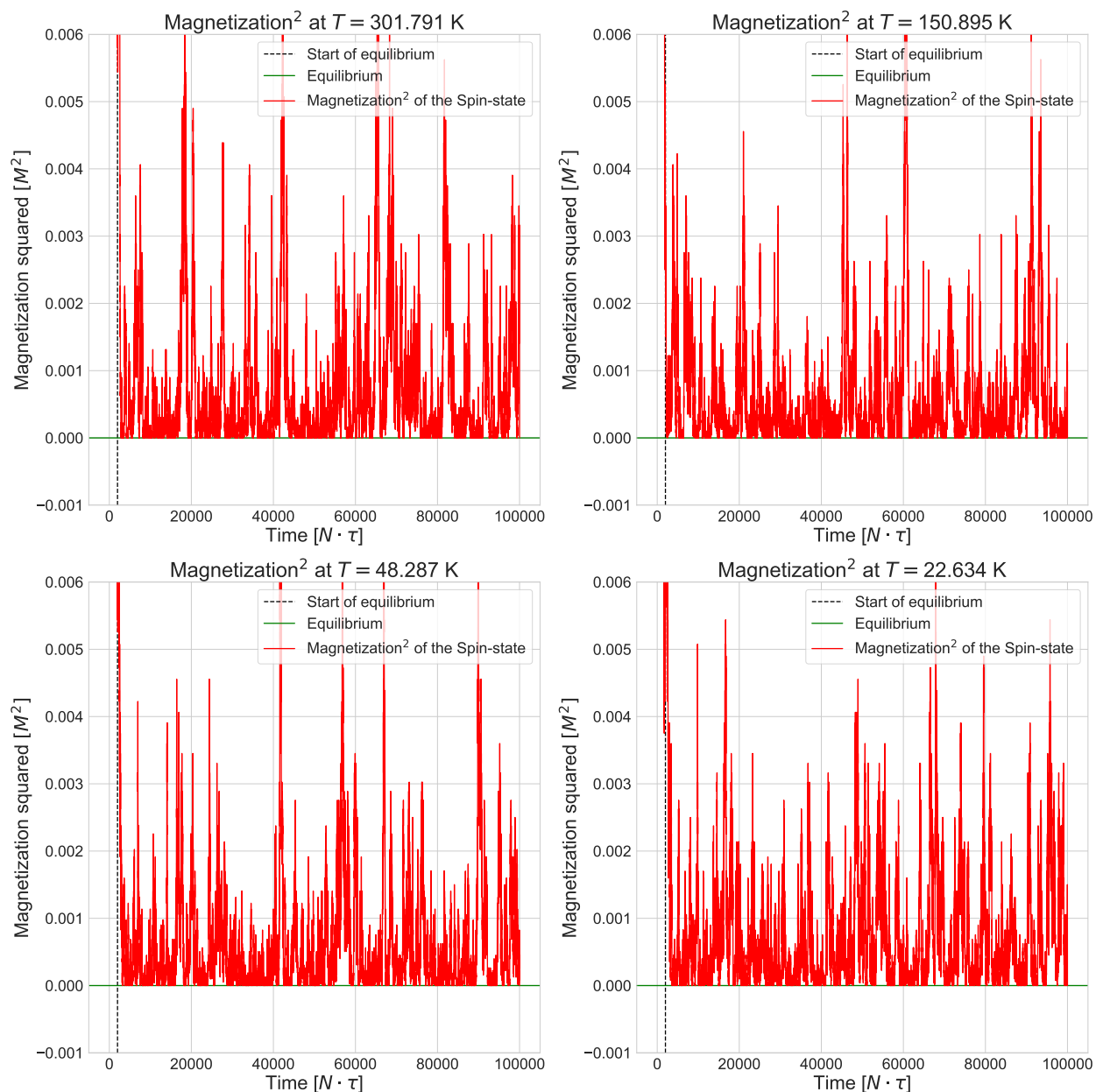
10. ábra. A 2D Ising-modell végső állapota $N = 100\,000$ lépés szimulálása után



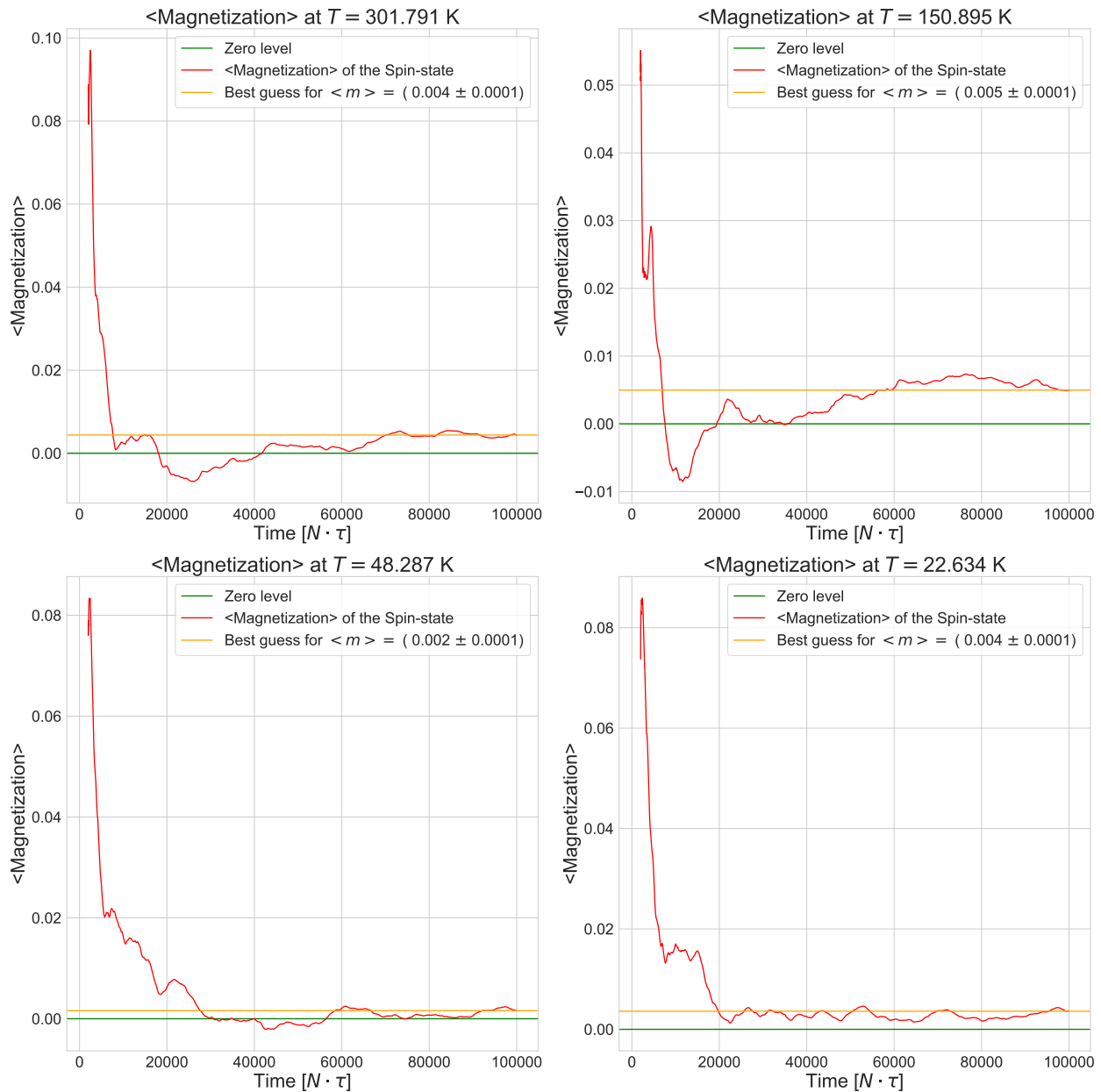
11. ábra. A 2D Ising-modellben mérhető teljes energia időfejlődése



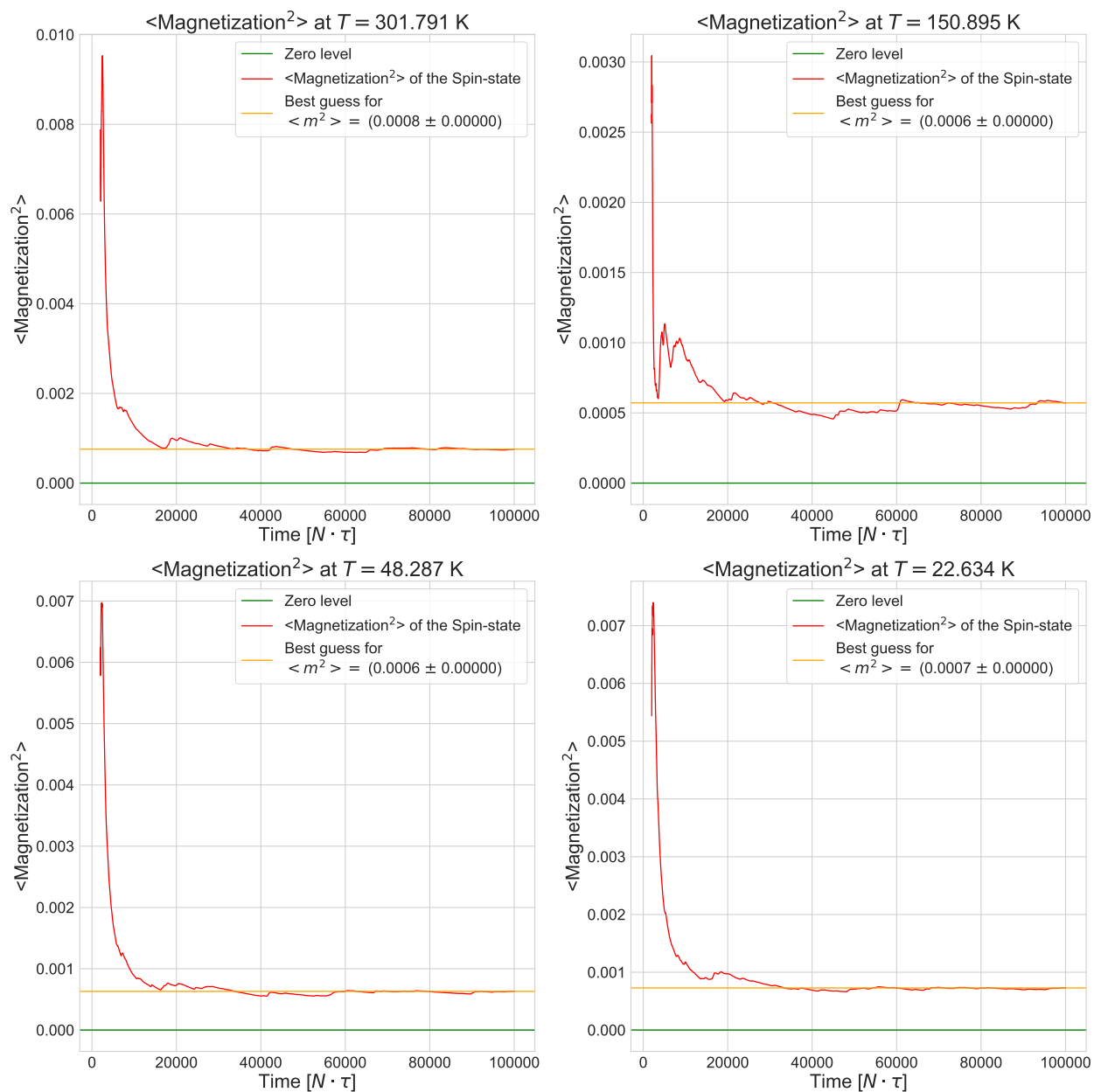
12. ábra. A 2D Ising-modellben mérhető mágneszettség időfejlődése



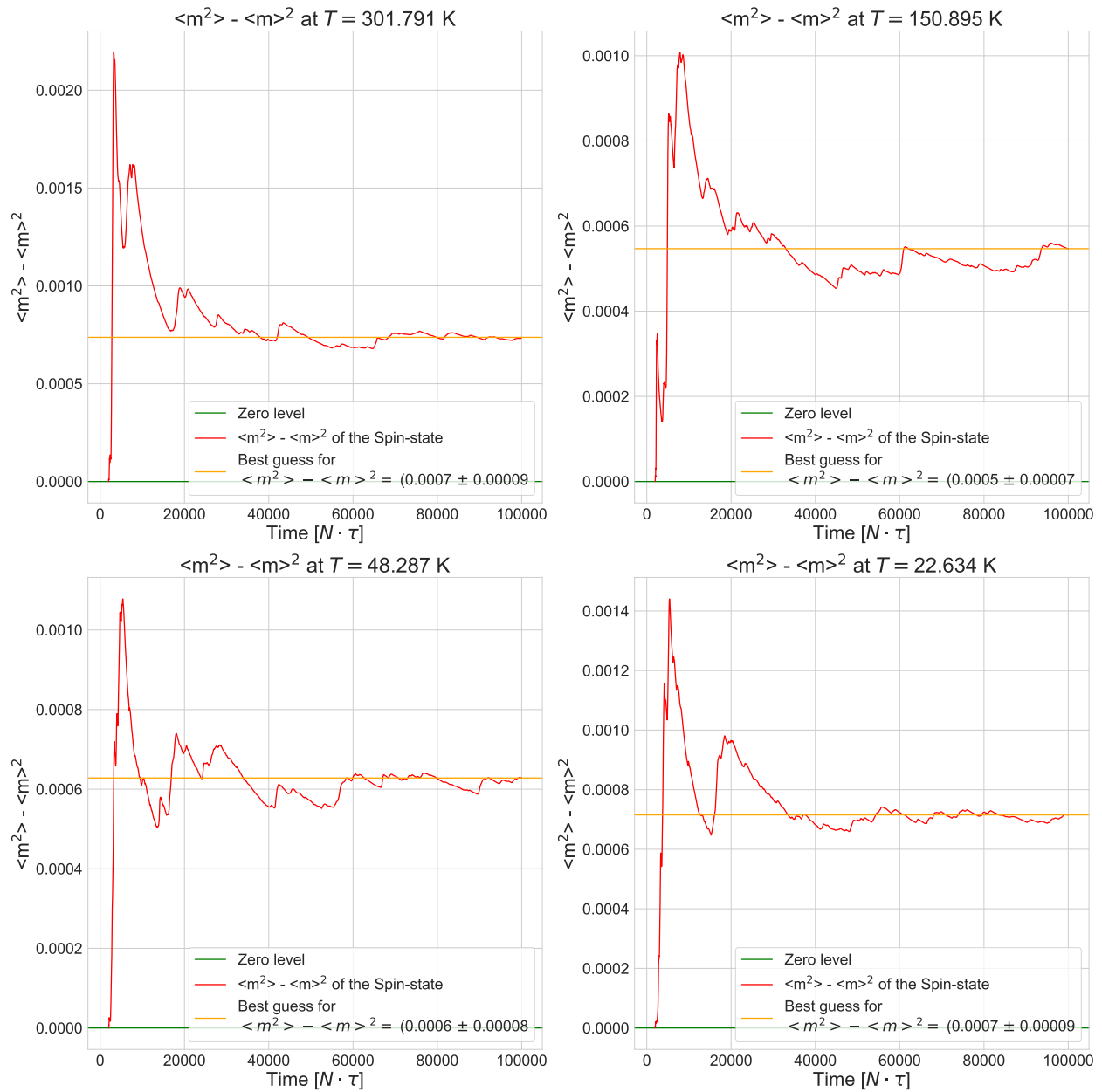
13. ábra. A 2D Ising-modellben mérhető mágnesezettség négyzetének időfejlődése



14. ábra. Az 2D Ising-modellben az egyensúlyi helyzet beállta után mérhető mágnesezettség időátlaga



15. ábra. Az 2D Ising-modellben az egyensúlyi helyzet beállta után mérhető mágnesezettség négyzetének időátlaga



16. ábra. Az 2D Ising-modellben az egyensúlyi helyzet beállta után mérhető $\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2$ mennyiség időátlaga