

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

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

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 mágnesezettség

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

vagy a mágnesezettség 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:

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

Jelöljük $(s_1, \dots, s_{i-1}, s_i, s_{i+1}, \dots, s_N)$ tagot az egyszerűség kedvéért a többi helyen is alkítsuk át a fentebb használt (σ) -vá. Ekkor felírhatjuk a következőt:

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

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

Ezen egyenletek, a szimuláció során felvett értékét illesztés segítségével meghatározhatjuk. 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. Így $\langle m \rangle$ és $\langle m^2 \rangle$ értékek kvázi csak Z_{β} és m , valamint m^2 menetétől fognak függeni.

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, egyaránt minden spin értékét $+1$ -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, $N = 10000$ szimulációs lépés után, 1000 db spinre. Míg a (2) ábrán ugyanezen szimulációk soránt 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, egyenlő számban tartalmazva $+1$ és -1 spineket. A rendszer ezt az állapotot elérve ekörül oszcillál. A mágnesezettség ebben az állapotban szintén 0 körül oszcillál, ami a (3)-as ábráról olvasható le.

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.

A (5) és (6) ábrákon sorrendben a mágnesezettség és a mágnesezettség négyzetének időátlagának változását ábrázoltam a lépéshossz függvényében, melyet ezen értékek várható értékének megbecsüléséhez használok. Első körben a mágnesezettségek teljes szimulációra vett időátlagát vizsgáltam. A (6) - (7) egyenletekben is láthatóan, ilyen esetben ez a két érték egy lecsengő e -ados függvényt követ, a mágnesezettség időben tehát folyamatosan csökken, várható értéke egy adott értékhez propagál. Optimálisan végtelenül hosszú futásidő esetén a függvény legutolsó pontja mutatná $\langle m \rangle$ és $\langle m^2 \rangle$ pontos értékét. Ezt illesztéssel határoztam meg, amihez egy $A \cdot e^{B \cdot N} + C$ paraméteres függvényt használtam. Ezen függvény értéke $N = \infty$ -ben $A \cdot 0 + C = C$. Így kezdő illesztési paraméternek C -t, mint az megillesztendő görbe utolsó pontját vehetjük. $N = 0$ -ban a függvény $A \cdot e^0 + C = A + C$ értéket vesz fel, melyből A -t az ismert C alapján kifejezhetünk úgy, hogy az illesztendő függvény első pontjából vonjuk ki C -t. Az illesztett görbe értéke végtelenben lesz az $\langle m \rangle$, valamint második esetben $\langle m^2 \rangle$ értékre adott becslésünk. Ez végtelenben C . Az illesztett görbék a (7) és (8) ábrákon láthatóak.

Az illesztések elvégzése után az alábbi értékeket kaptam eredményül:

Fitted parameters for $\langle m \rangle$ – 1D			
Cases	A	B	C = $\langle m \rangle$
$T = 603.581$ K	0.9589	-0.00051	0.0391
$T = 301.791$ K	0.9527	-0.00049	0.0453
$T = 96.573$ K	0.9607	-0.00052	0.0373
$T = 45.269$ K	0.9492	-0.00056	0.0488

1. táblázat. Az $\langle m \rangle$ egyik futtatásának és illesztésének paraméterei és eredményei

Fitted parameters for $\langle m^2 \rangle$ – 1D			
Cases	A	B	C = $\langle m^2 \rangle$
$T = 603.581$ K	0.9704	-0.00063	0.0256
$T = 301.791$ K	0.9688	-0.00063	0.0272
$T = 96.573$ K	0.9709	-0.00064	0.0251
$T = 45.269$ K	0.9703	-0.00063	0.0258

2. táblázat. Az $\langle m^2 \rangle$ egyik futtatásának és illesztésének paraméterei és eredményei

Második variációban a feladat leírásában is szereplő megjegyzést is figyelembe vettem, miszerint a mágnesezettség értéke csak az egyensúlyi helyzetben értelmezett. Egy manuálisan választott pontot kijelöltem az egyensúlyi helyzet alsó határának, és csupán az időben utána következő értékeket használtam fel a mágnesezettség és annak négyzetének időátlagát megadó számításokban. Ilyen esetben ezen görbék már nem voltak illeszthetők, így szimplán az utolsó pontjukat vettem az $\langle m \rangle$ és $\langle m^2 \rangle$ értékeinek. Ezekről készült grafikonok a (9) és (10) ábrákon láthatóak.

Ezen utóbbi, egyensúlyi helyzet beállta után vizsgált esetre megvizsgáltam az $\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2$ értékét is. Ennek eredményét a (11)-es ábrán közöltem.

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, mindenféle mágneses tér jelenléte nélkül. Az ebben az esetben készült grafikonok megtekinthetők a (12) - (22) 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,

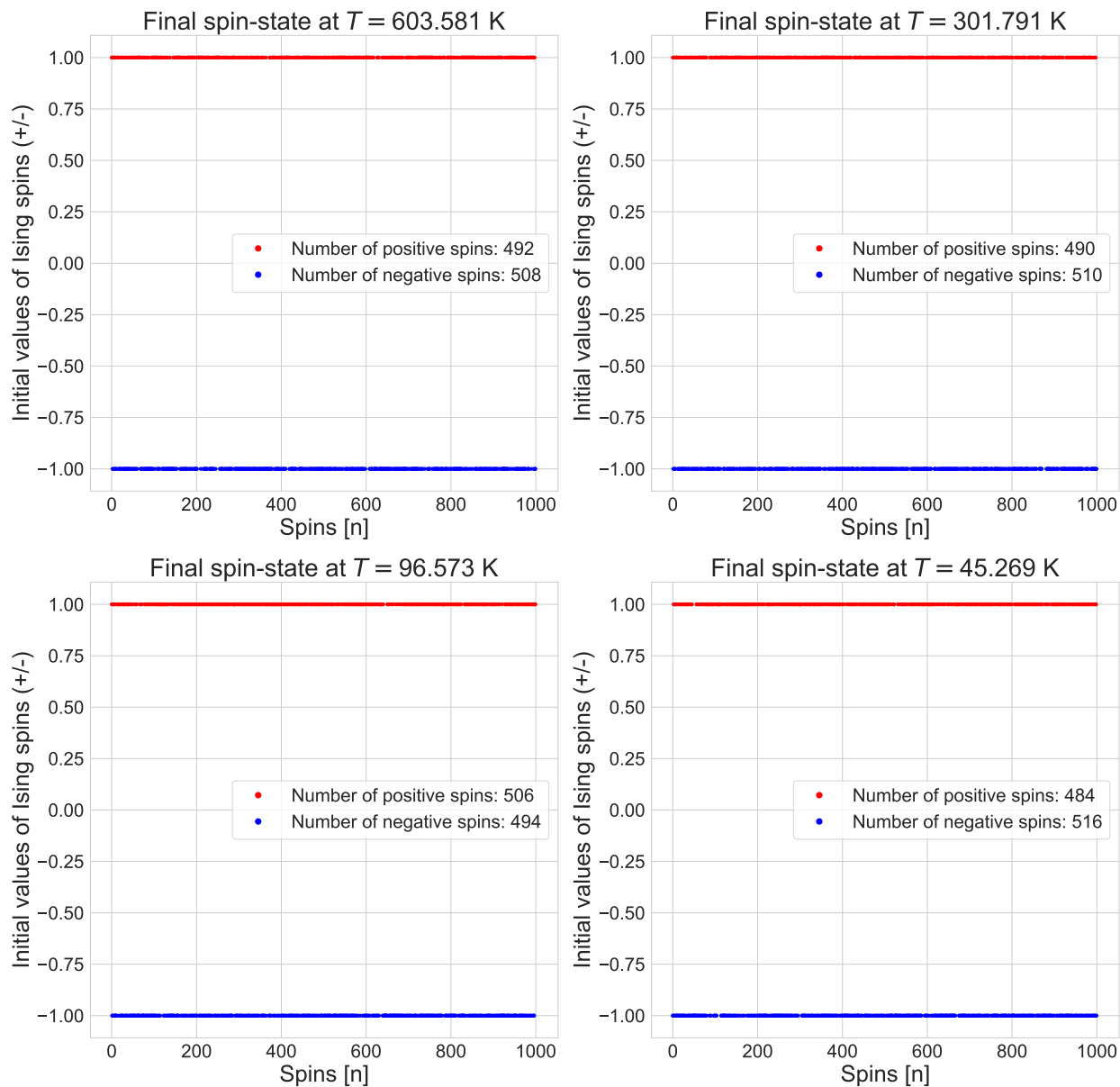
és 10000 lépés hosszan futtattam. Végeredményben vizuálisan is a fent tárgyalt eredmények látszódnak a videón.

Felhasznált irodalom

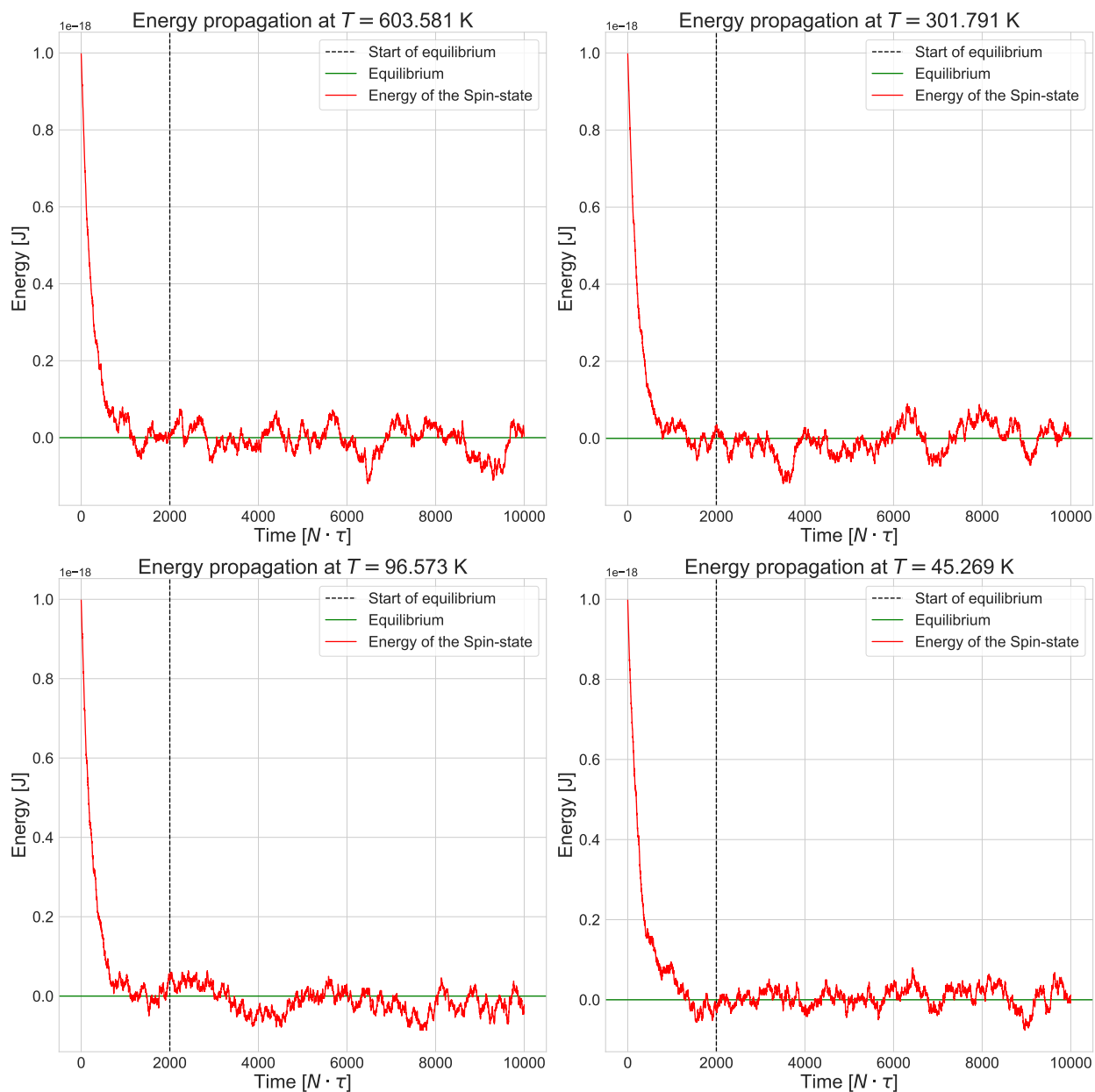
- [1] Pál Balázs. *ELTE Computer Simulations 2019 — GitHub*. [Online; opened at April 1, 2019]. 2019. URL: https://github.com/masterdesky/ELTE_Comp_Simulations_2019.
- [2] *Pál Balázs's Channel — YouTube*. [Online; opened at April 1, 2019]. 2019. URL: <https://www.youtube.com/channel/UCBDSB7PdQ3E9l9WSBsTy7cQ>.

APPENDIX A

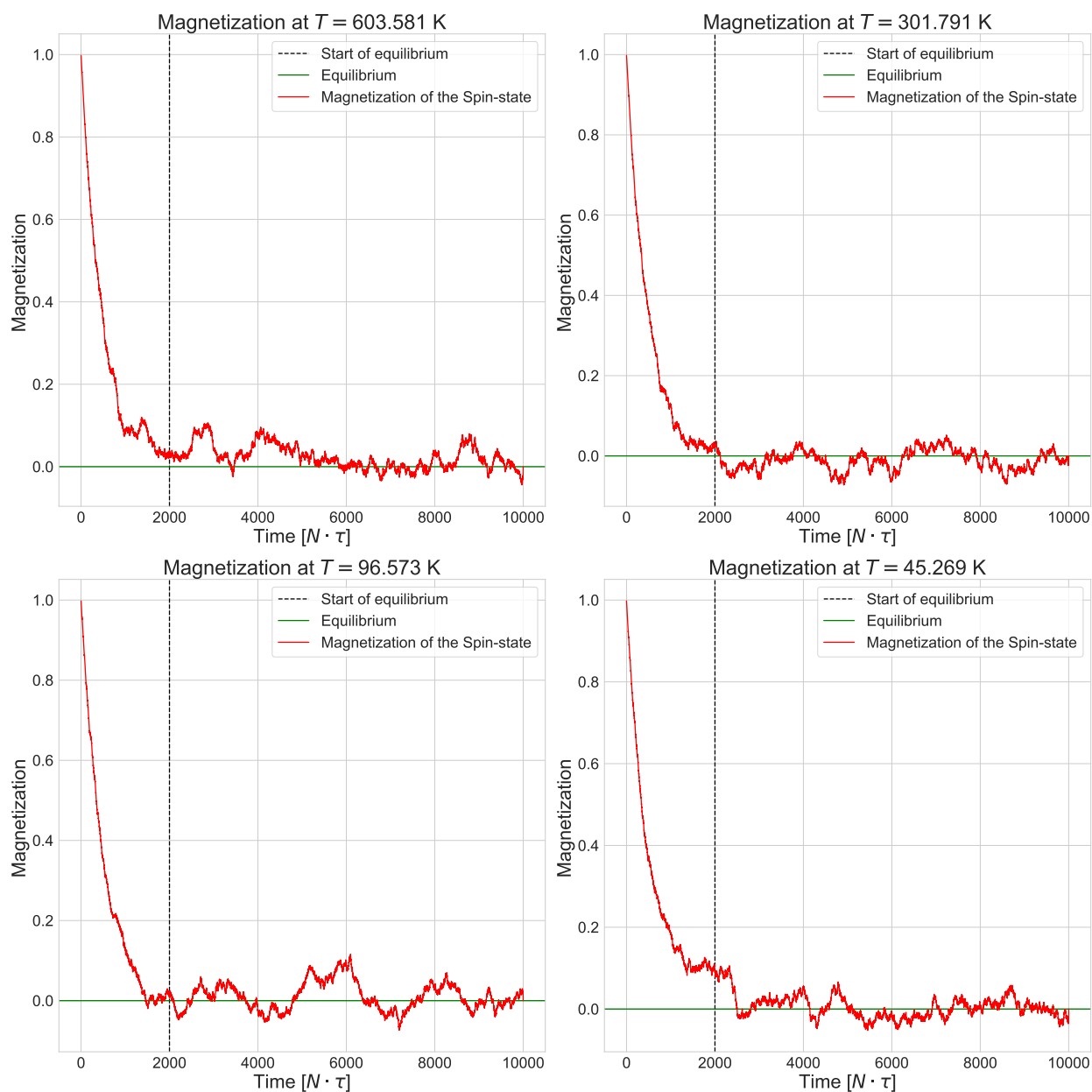
A.1 AZ 1-DIMENZIÓS ISING-MODELL



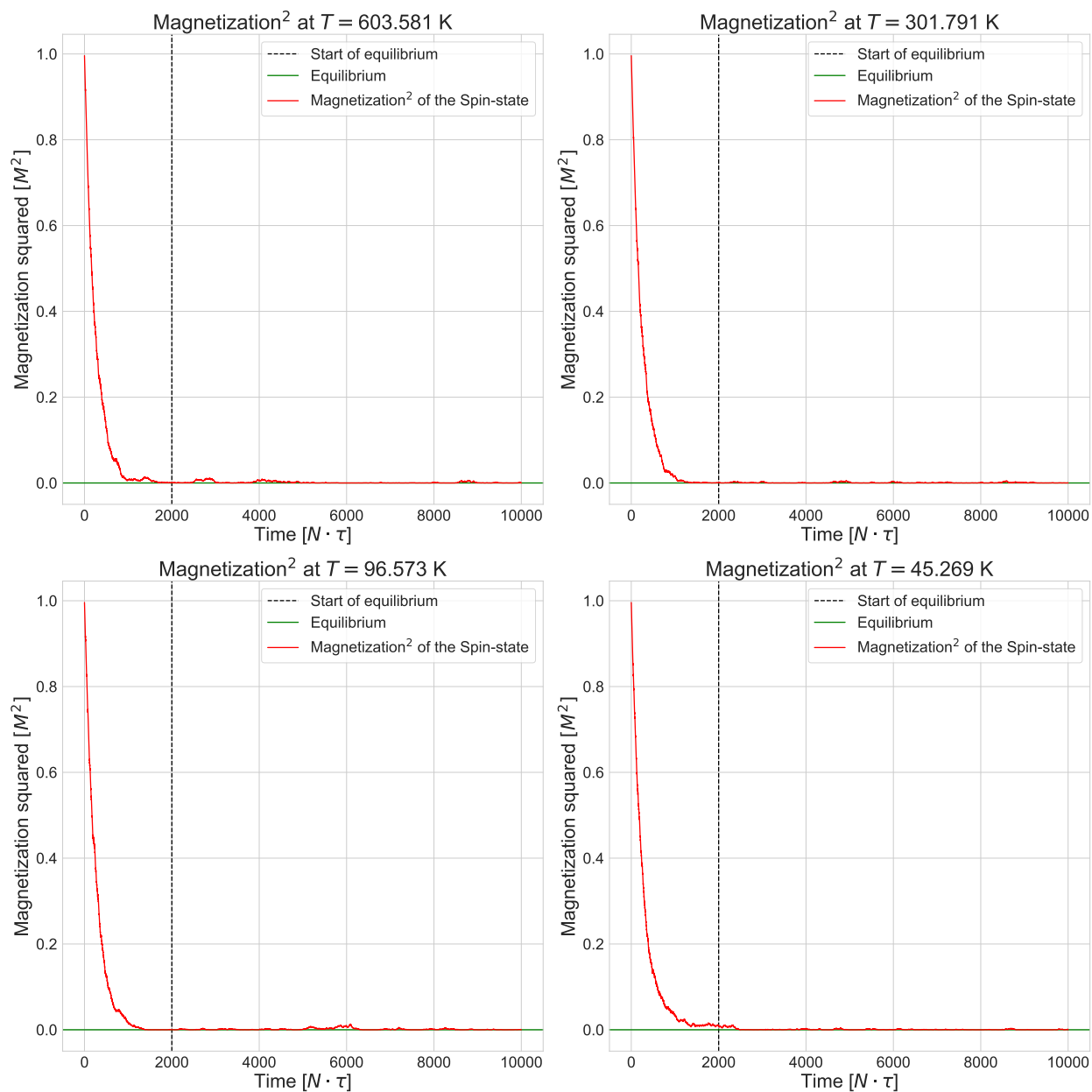
1. ábra. Az 1D Ising-modell végső állapota $N = 10000$ lépés szimulálása után



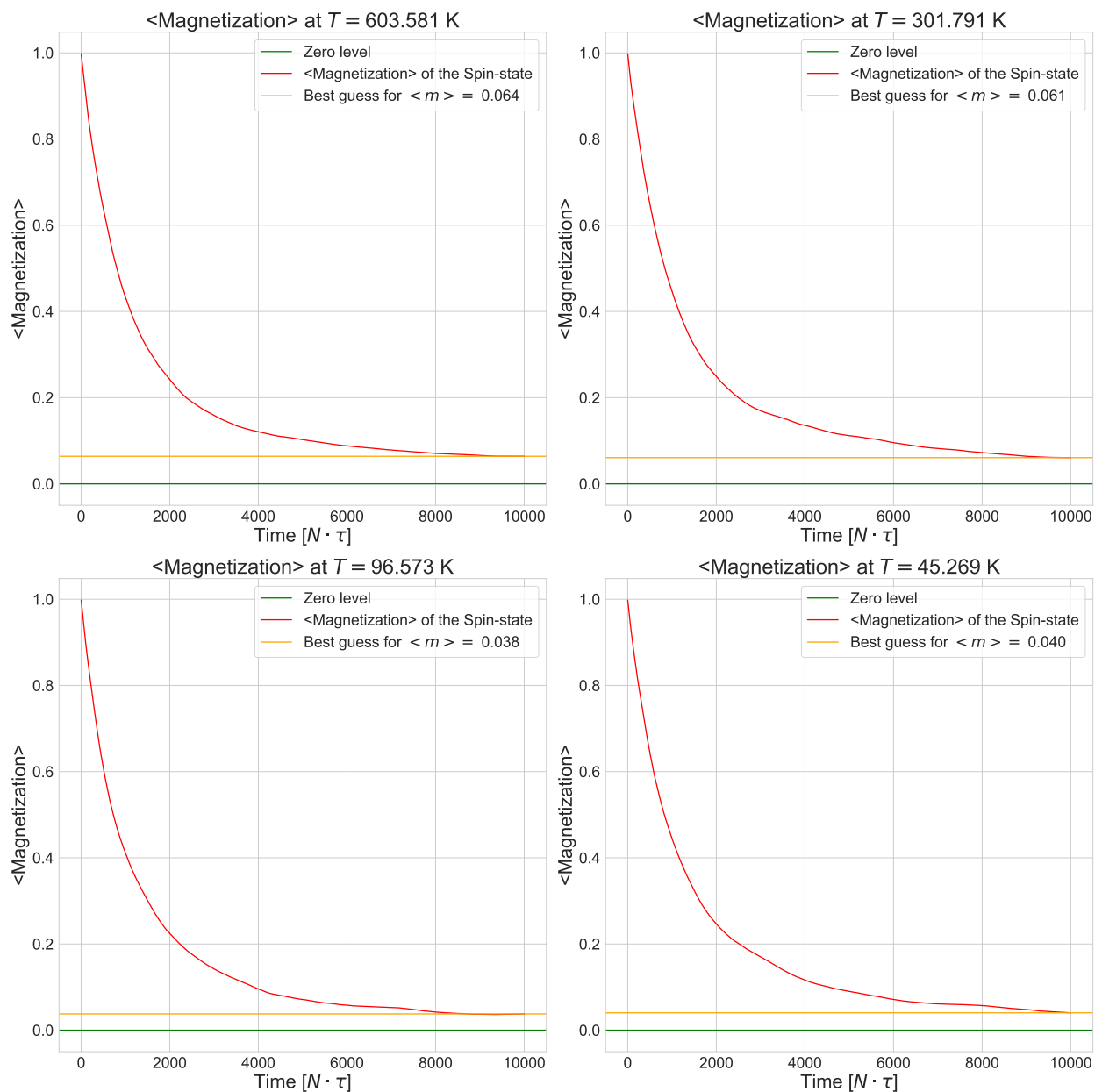
2. ábra. Az 1D Ising-modellben mérhető teljes energia időfejlődése



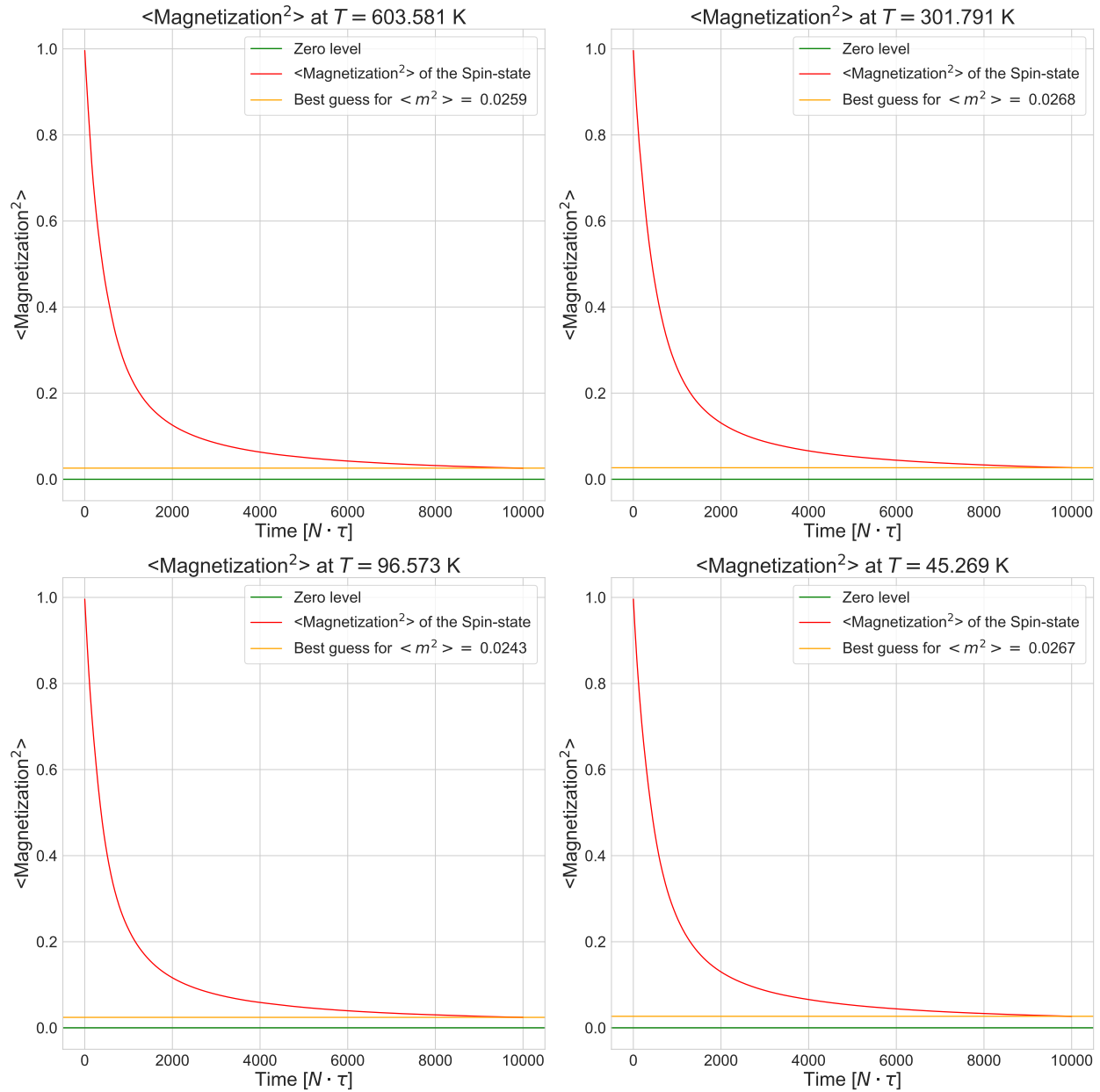
3. ábra. Az 1D Ising-modellben mérhető mágnesezettség időfejlődése



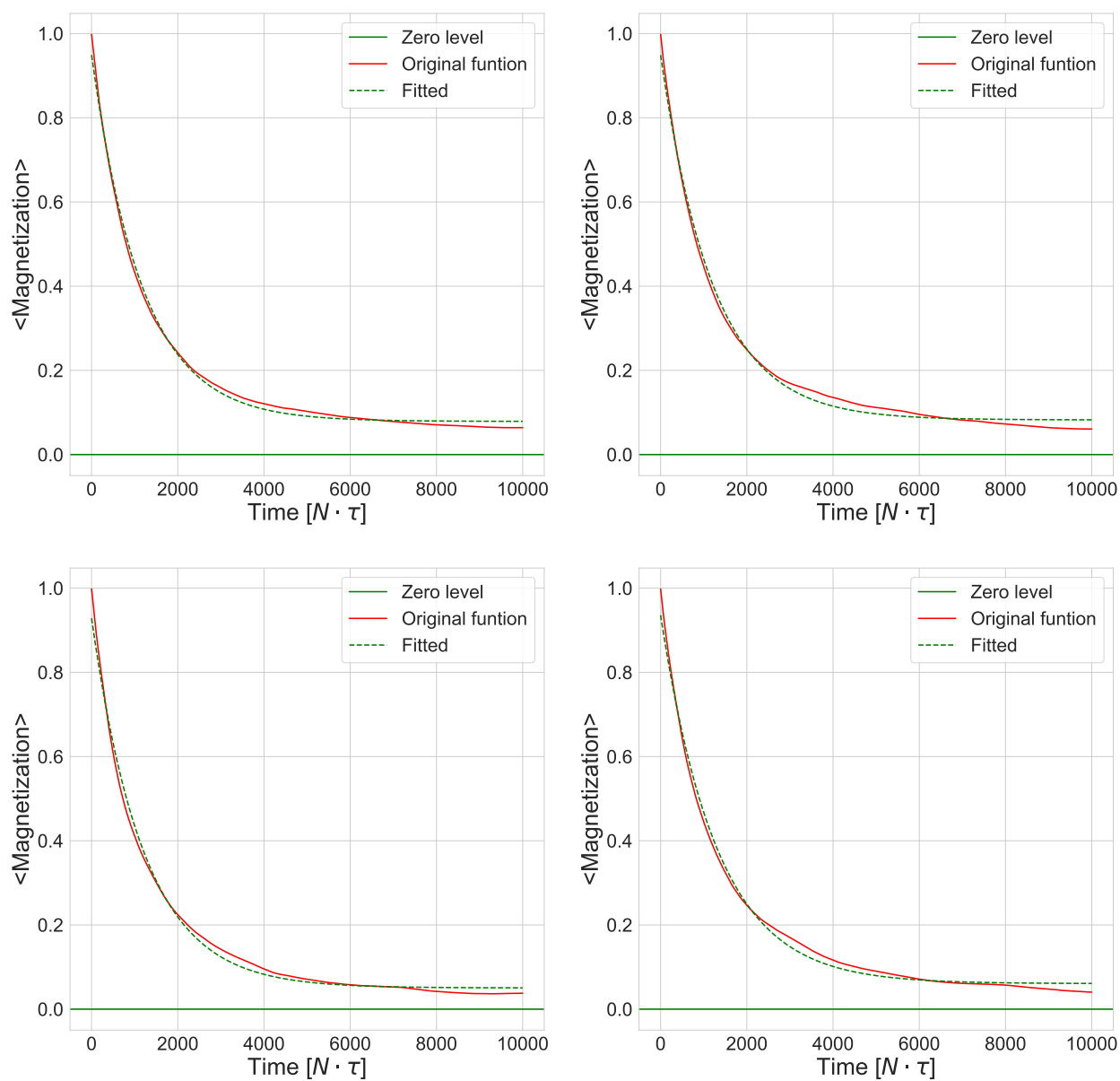
4. ábra. Az 1D Ising-modellben mérhető mágnesezettség négyzetének időfejlődése



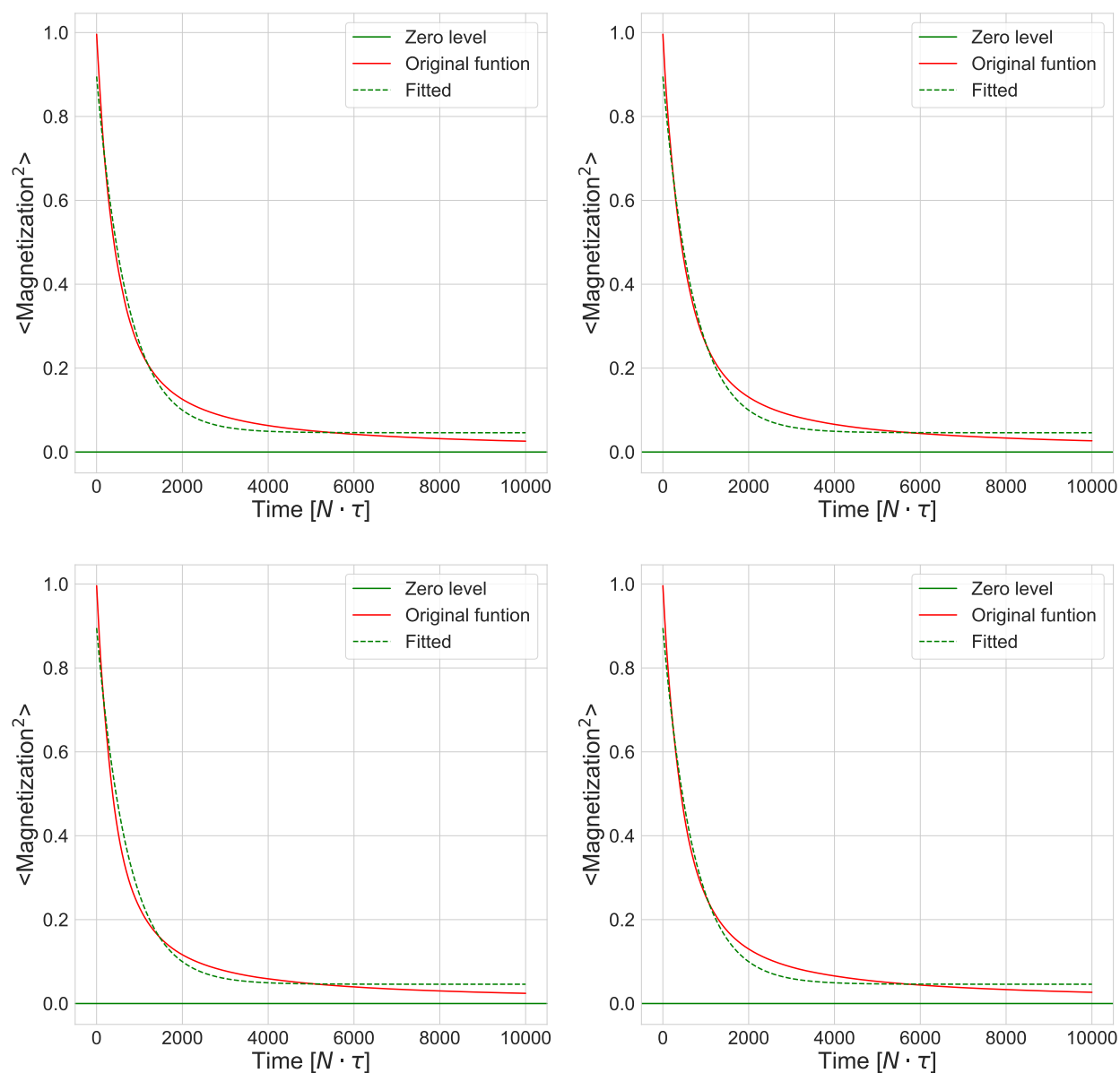
5. ábra. Az 1D Ising-modelben mérhető mágneszettség időátlaga



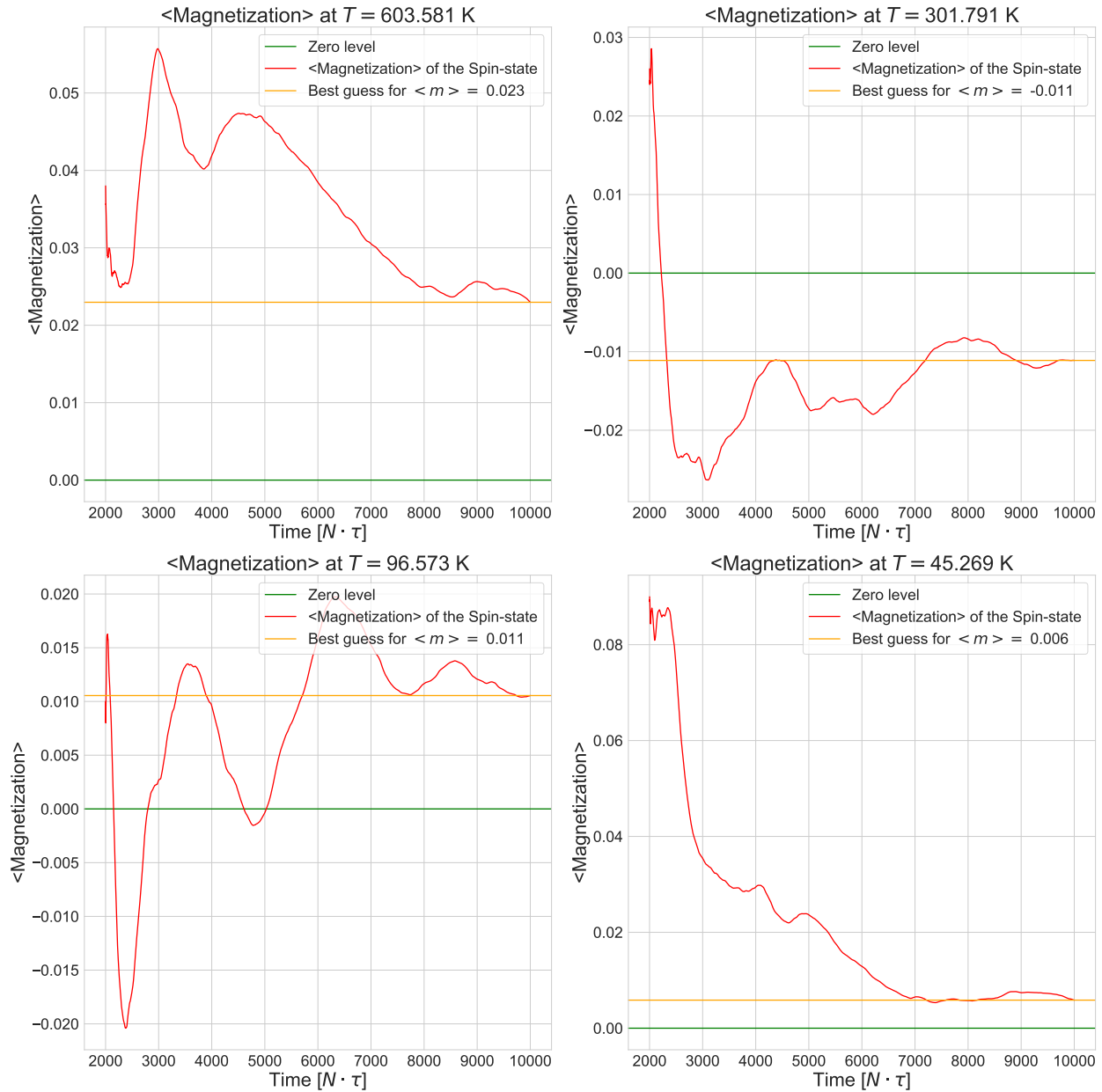
6. ábra. Az 1D Ising-modellben mérhető mágneszettség négyzetének időátlaga



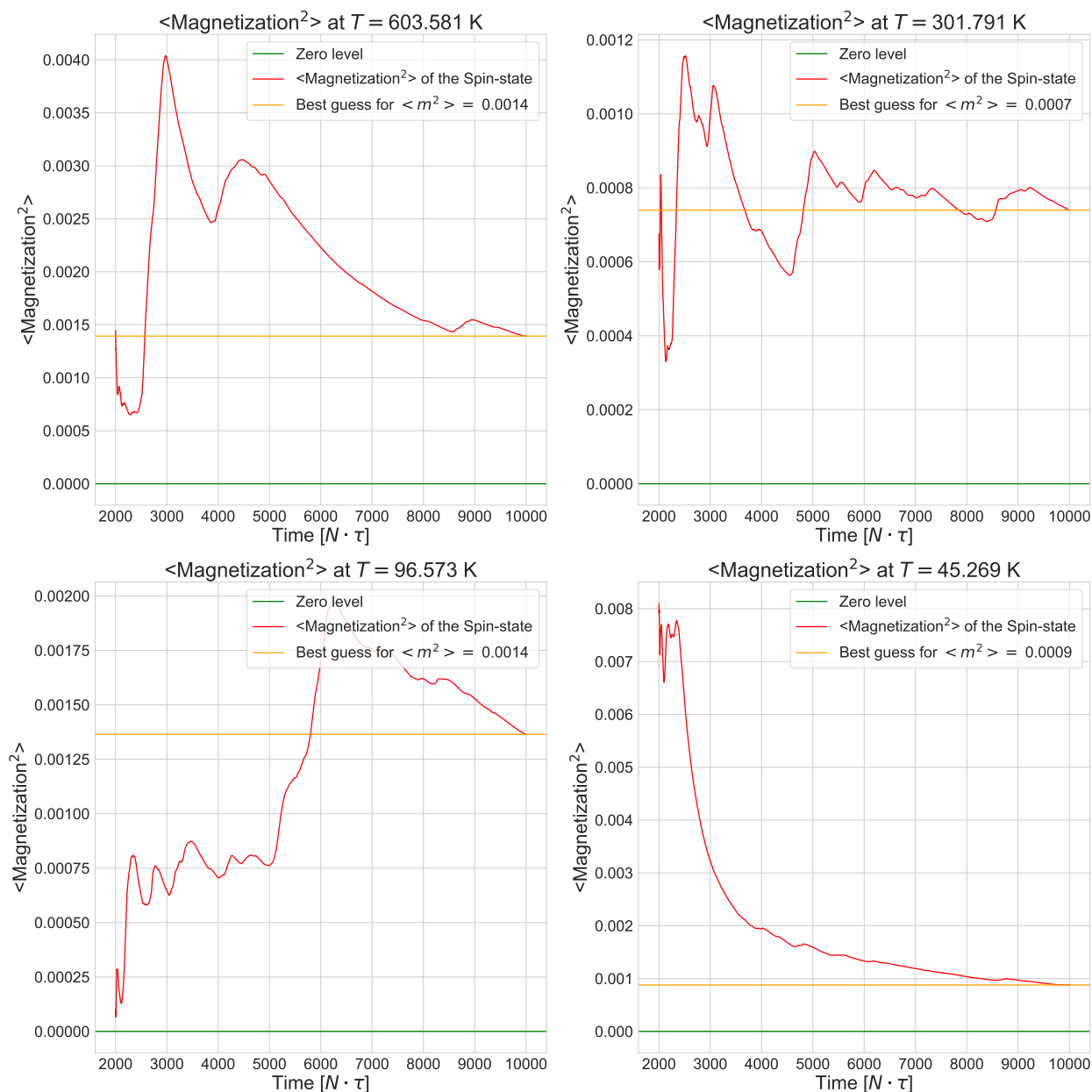
7. ábra. Az 1D Ising-modellben mérhető mágneszettség időátlaga és az illesztett exponenciális



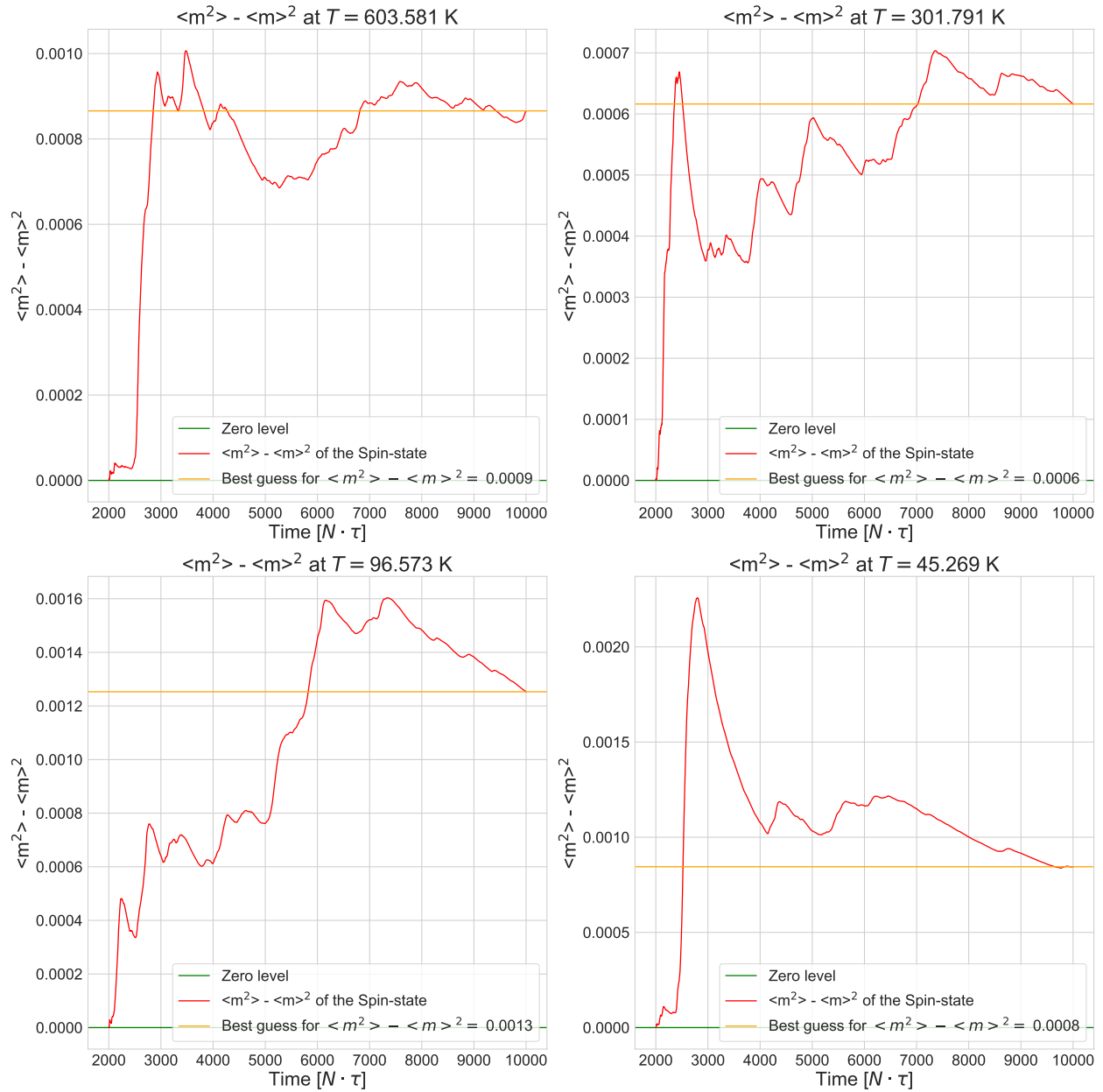
8. ábra. Az 1D Ising-modellben mérhető mágneszettség négyzetének időátlaga és az illesztett exponenciális



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



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

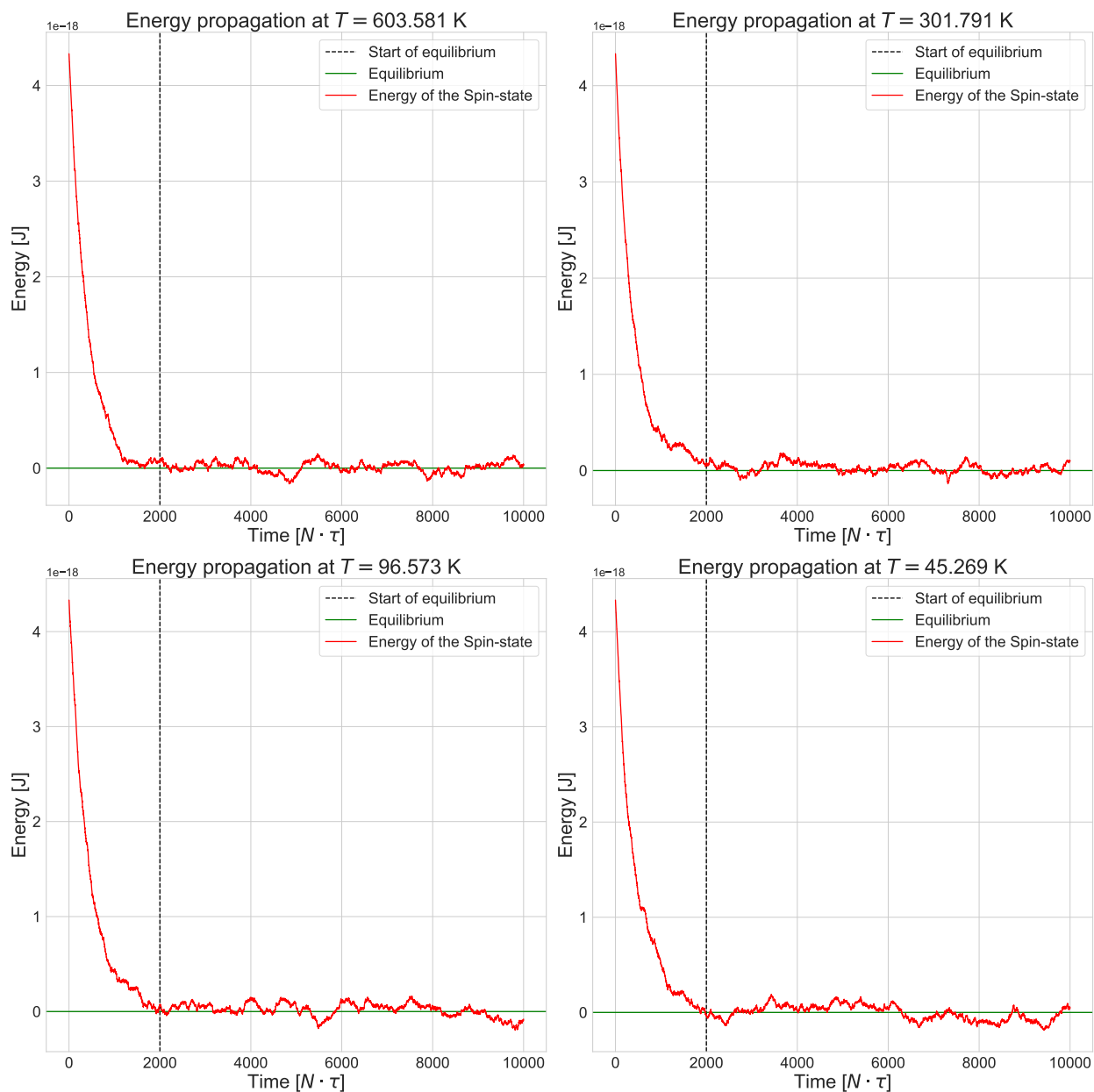


11. ábra. Az 1D Ising-modellben az egyensúlyi helyzet beállta után mérhető $\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2$ mennyiség időátlaga

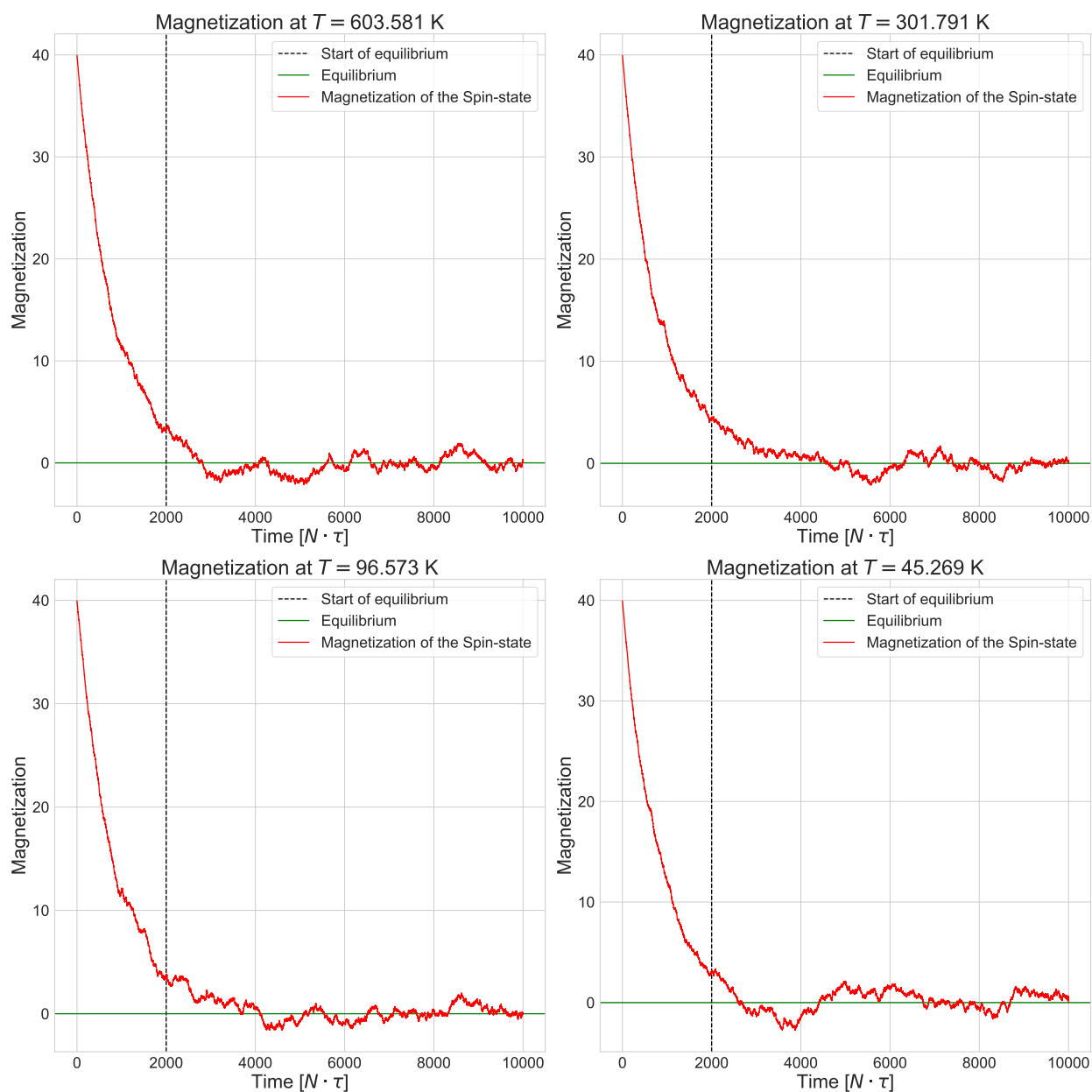
A.1 A 2-DIMENZIÓS ISING-MODELL



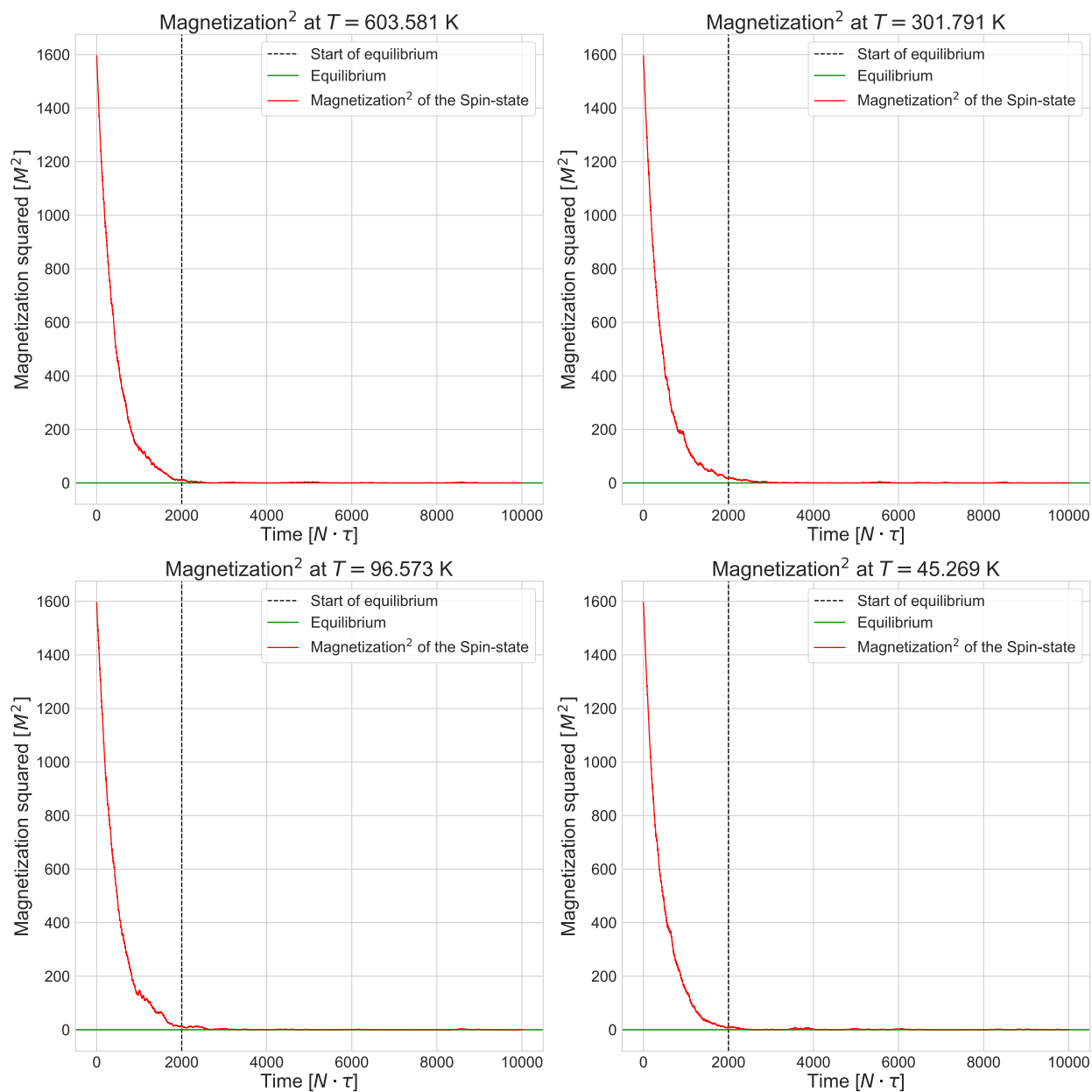
12. ábra. A 2D Ising-modell végső állapota $N = 10000$ lépés szimulálása után



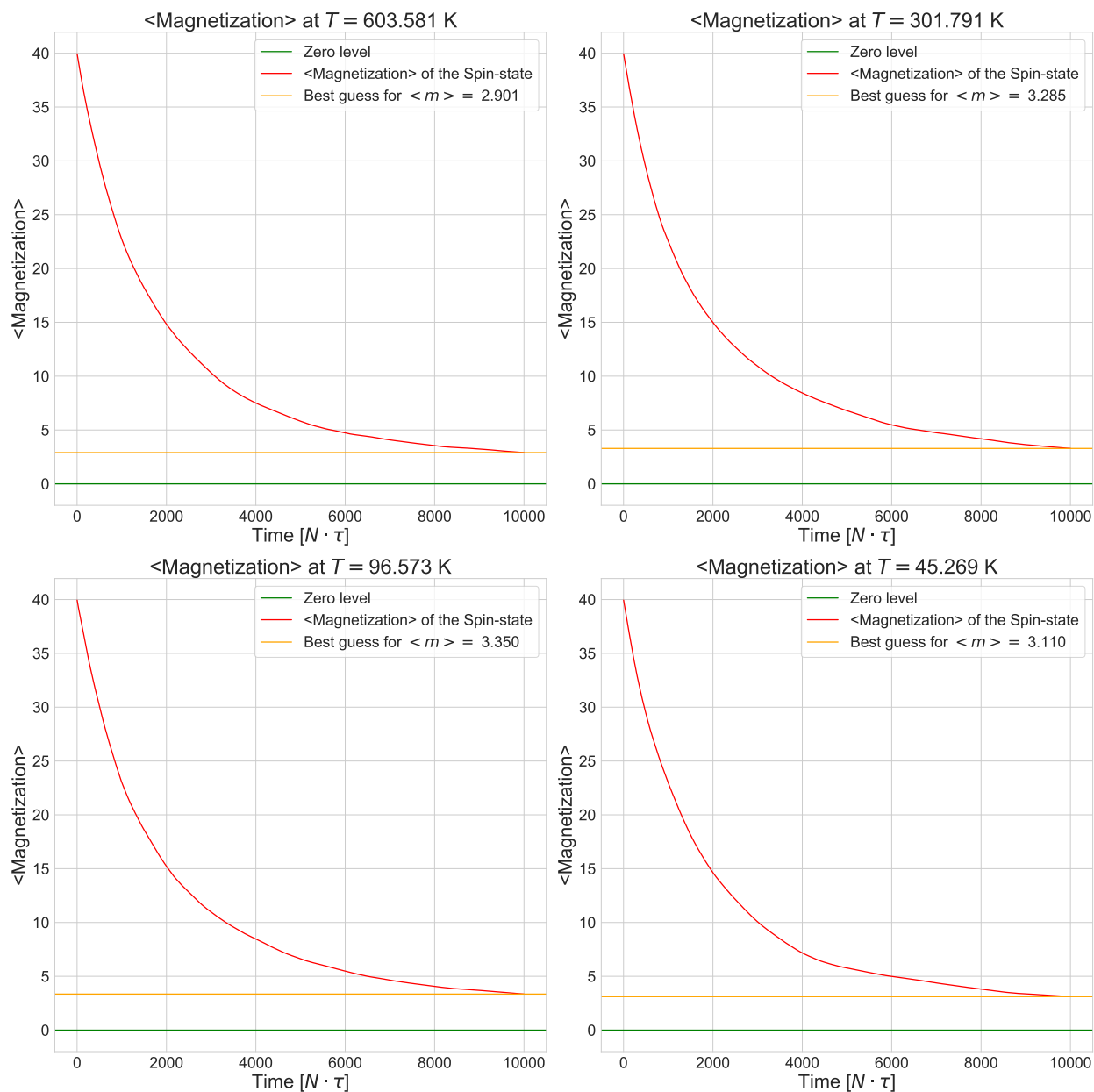
13. ábra. A 2D Ising-modellben mérhető teljes energia időfejlődése



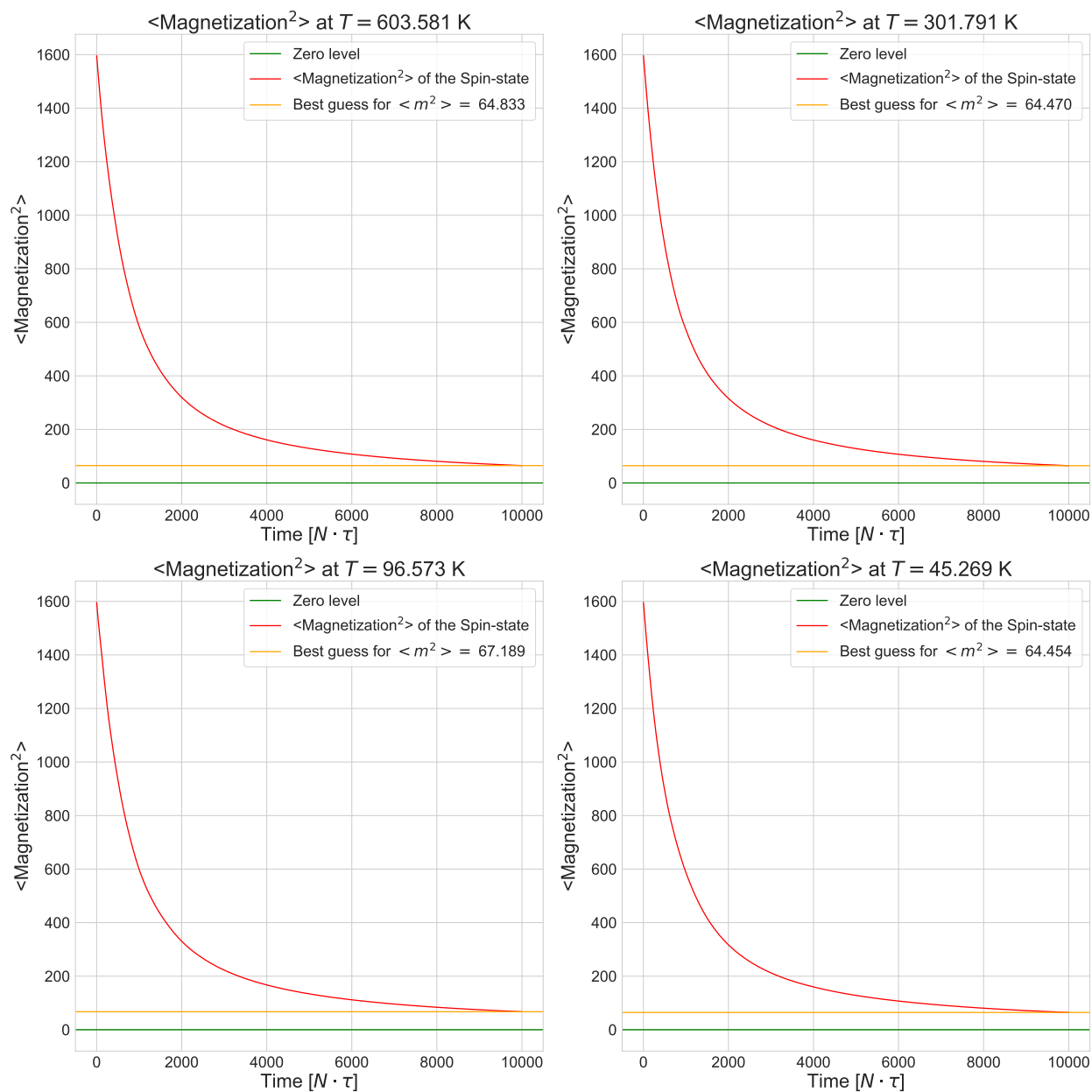
14. ábra. A 2D Ising-modellben mérhető mágnesezettség időfejlődése



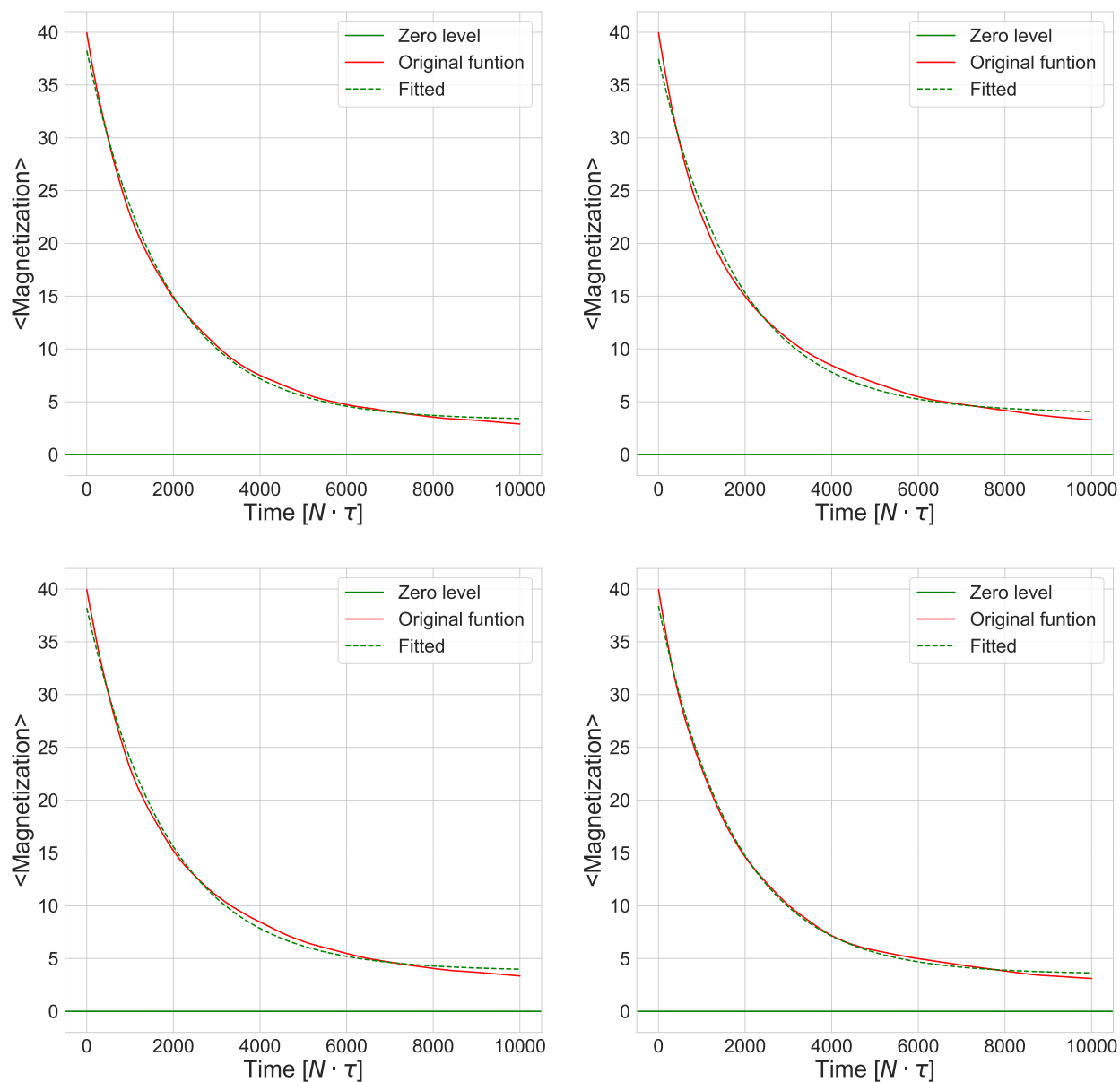
15. ábra. A 2D Ising-modellben mérhető mágneszettség négyzetének időfejlődése



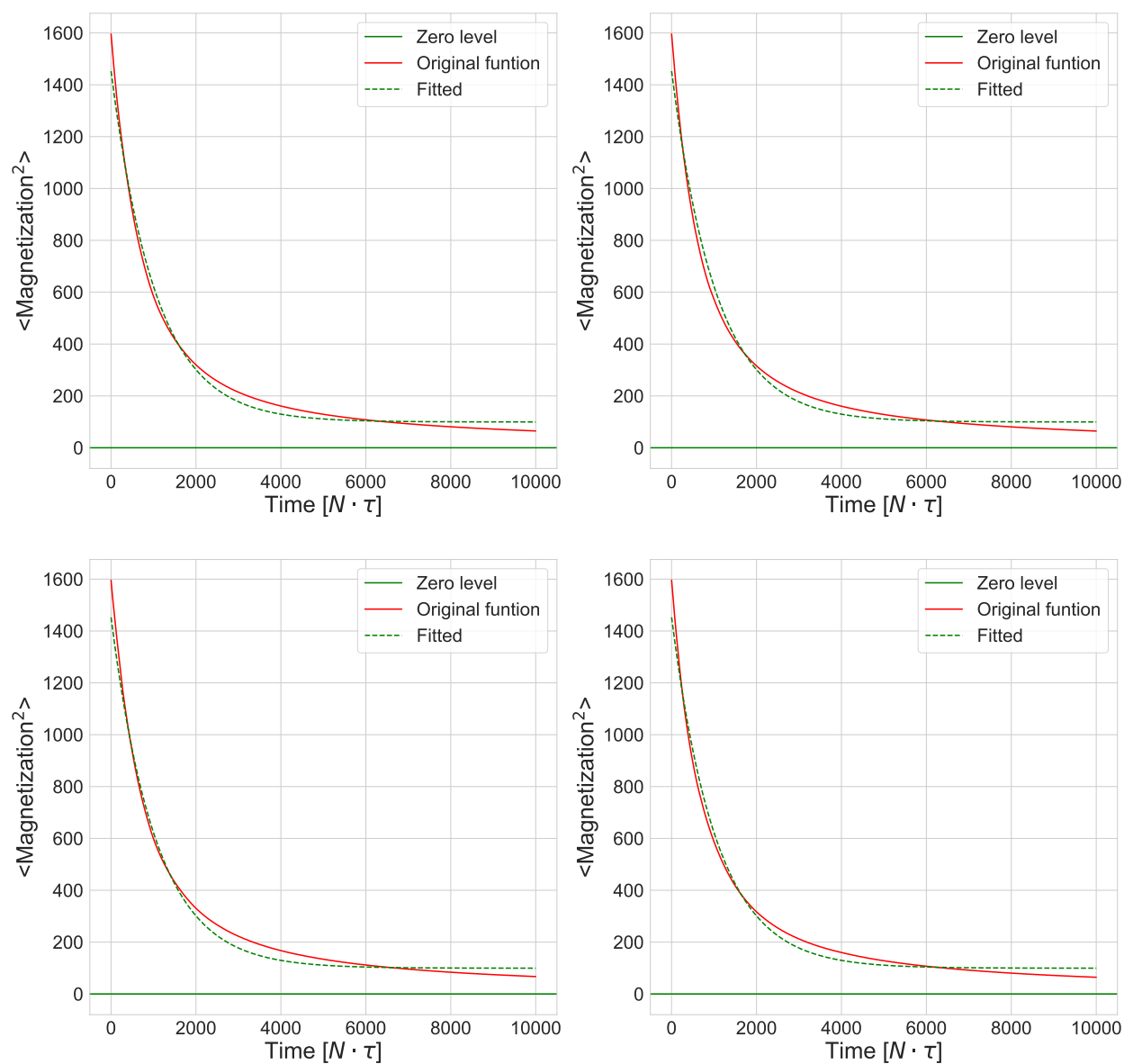
16. ábra. Az 2D Ising-modellben mérhető mágneszettség időátlaga



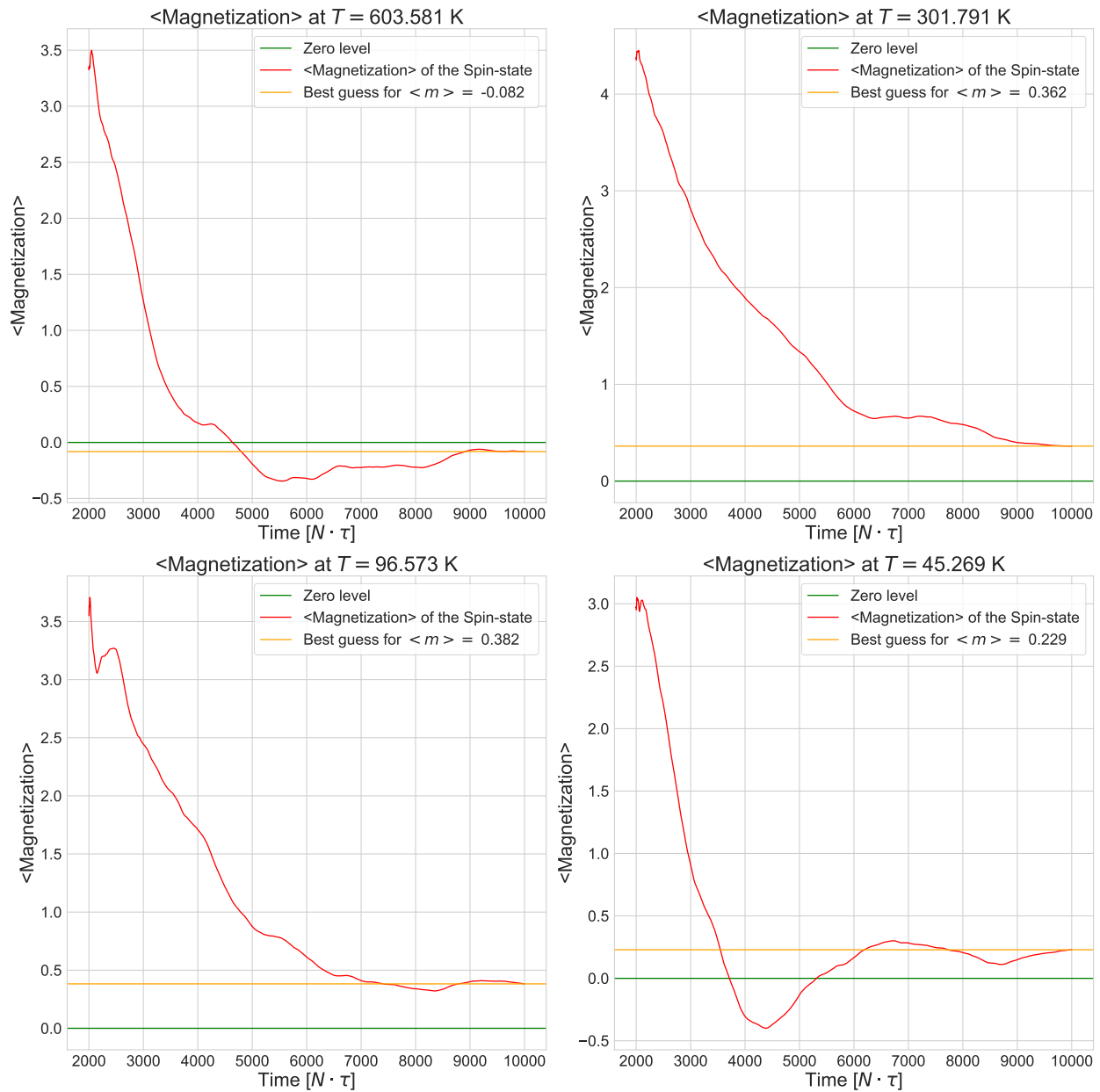
17. ábra. Az 2D Ising-modellben mérhető mágneszettség négyzetének időátlaga



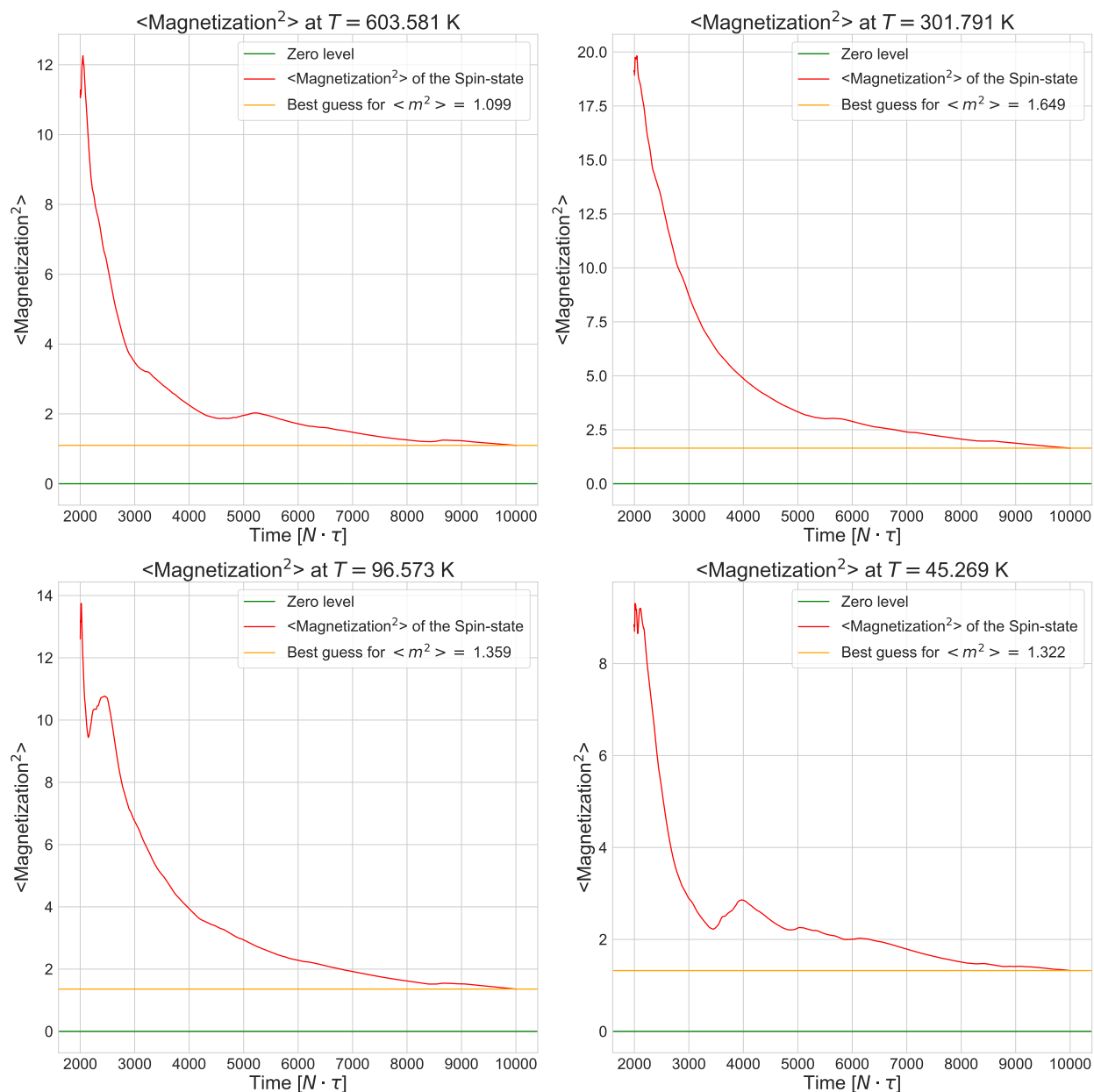
18. ábra. Az 2D Ising-modellben mérhető mágneszettség időátlaga és az illesztett exponenciális



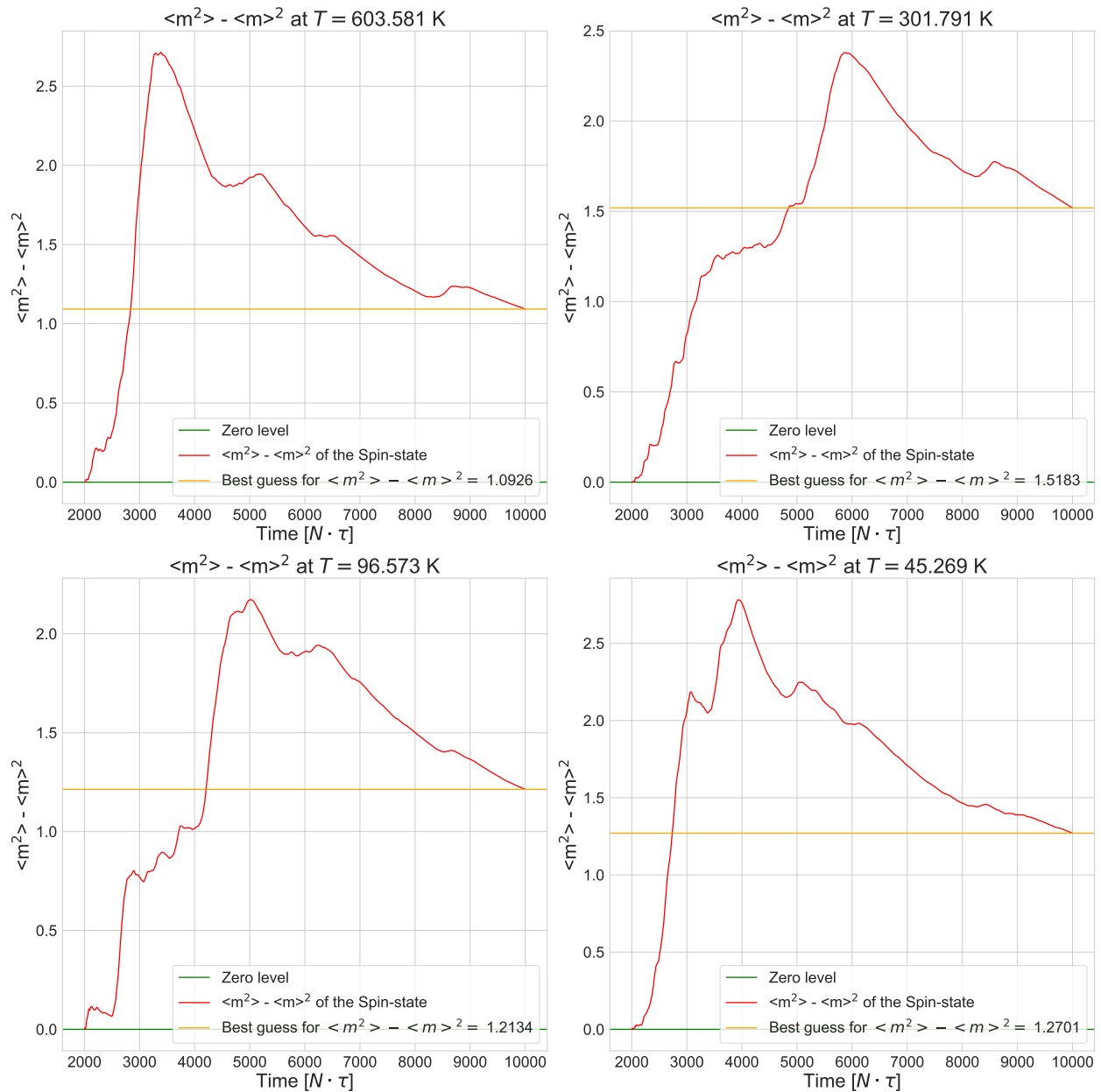
19. ábra. Az 2D Ising-modellben mérhető mágneszettség négyzetének időátlaga és az illesztett exponenciális



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



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



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