

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO

MODELSKA ANALIZA I
8. naloga: Metropolisov algoritem

Žiga Šinigoj, 28222025

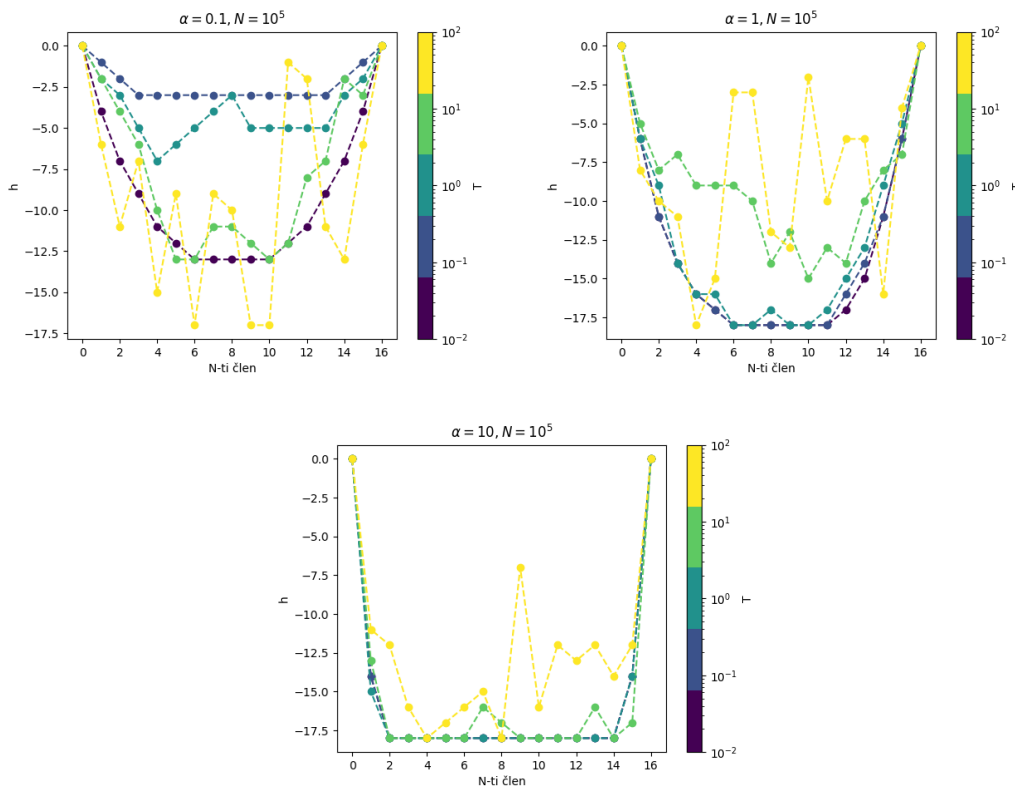
Ljubljana, december 2022

1 Molekularna verižnica

Obravnavam 17 členov dolgo molekularno verižnico, ki ima fiksirana oba konca. Vsi členi $h_i, i = 1, \dots, 15$ razen prvega in zadnjega ($h_0 = h_{16} = 0$) se lahko postavijo na 19 različnih nivojev in si s tem zmanjšajo potencialno energijo. Med členi imamo vzmeti, ki spreminjajo prožnostno energijo. Energija verižnice je

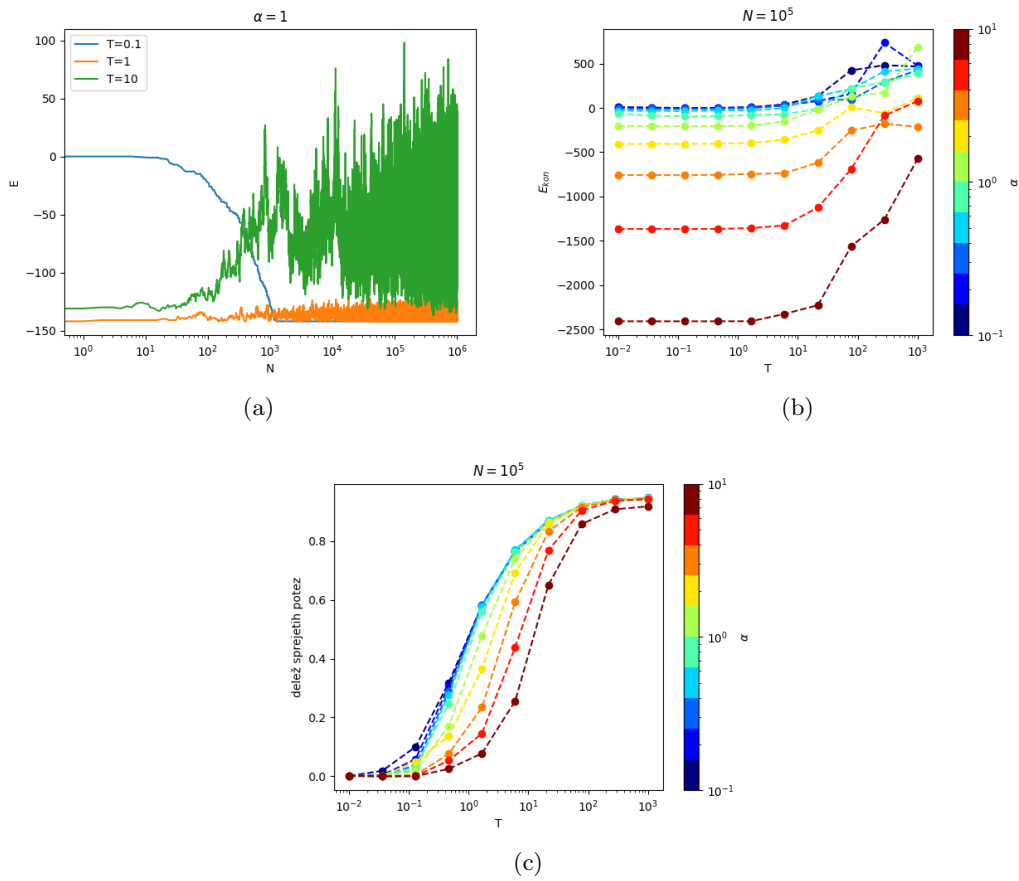
$$E = \sum_{i=1}^{15} (\alpha h_i + \frac{1}{2} (h_{i+1} - h_i)^2), \quad (1)$$

kjer je α parameter, ki pove razmerje med prožnostno in potencialno energijo. Konfiguracija verižnice je odvisna tudi od termične energije $k_B \tilde{T}$ oziroma od razmerja $T = \frac{\tilde{T}}{T_0}$, kjer je T_0 neka referenčna temperatura. Konfiguracije verižnice v odvisnosti od temperature in parametra α prikazuje slika 1. Za začetno konfiguracijo sem vzel naključno izbrano stanje. Pri majhnem parametru α in najmanjši temperaturi se verižnica povesi samo do 13. nivoja, saj je prispevek prožnostne energije v tem primeru velik in ni ugodno, da se verižnica preveč raztegne. Z večanjem temperature postaja verižnica vedno bolj raztresena. Z višanjem parametra α oziroma večanjem potencialnega člena, postaja ugodno, da se verižnica spusti do končnega nivoja $h = -18$. V primeru ko je $\alpha = 1$ se na najnižji nivo postavi samo 6 členov, ko je $\alpha = 10$ pa 13 členov.



Slika 1: Konfiguracije verižnice v odvisnosti od temperature za tri različne vrednosti parametra α . N predstavlja število korakov Metropolisovega algoritma.

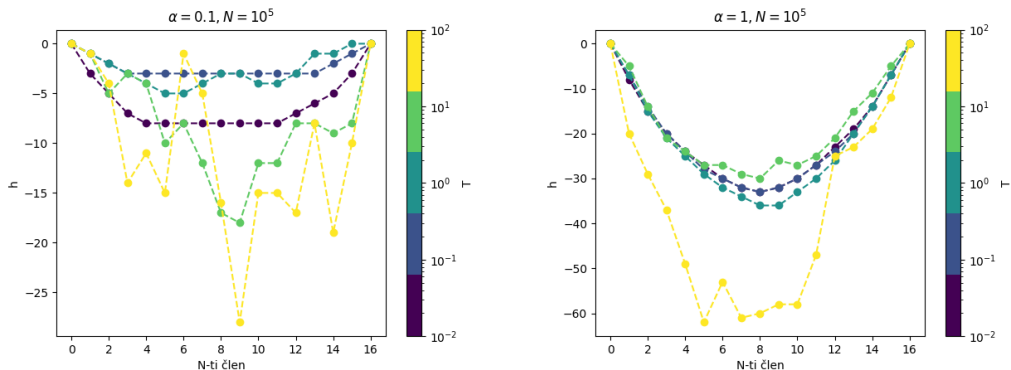
Zanimivo je pogledati tudi kaj se dogaja z energijo sistema pri različnih vrednosti parametrov (slika 2 (a) in (b)). Energija sistema hitro konvergira proti minimalni vrednosti za majhne temperature. Zaradi majhne termične energije ni veliko fluktuacij. Z višanjem temperature se višajo fluktuacije energije in za visoke temperature $T = 10$ je verižnica zelo raztresena in izven ravnovesne lege. Energija sistema (slika 2(b)) se pričakovano manjša z večanjem parametra α , saj se členi verige postavijo na najnižji nivo. Z večanjem temperature se tudi energija sistema veča in največjo spremembo energije povzroči ravno na sistemu z najnižjim parametrom α . Delež sprejetih potez (slika 2 (c)) se precej spreminja s parametrom α , kar je mogoče malo presenetljivo.



Slika 2: a) Energija sistema v odvisnosti od števila iteracij algoritma pri treh različnih temperaturah. b) Energija sistema v odvisnosti od temperature in parametra α . c) Delež sprejetih potez v odvisnosti od temperature in parametra α .

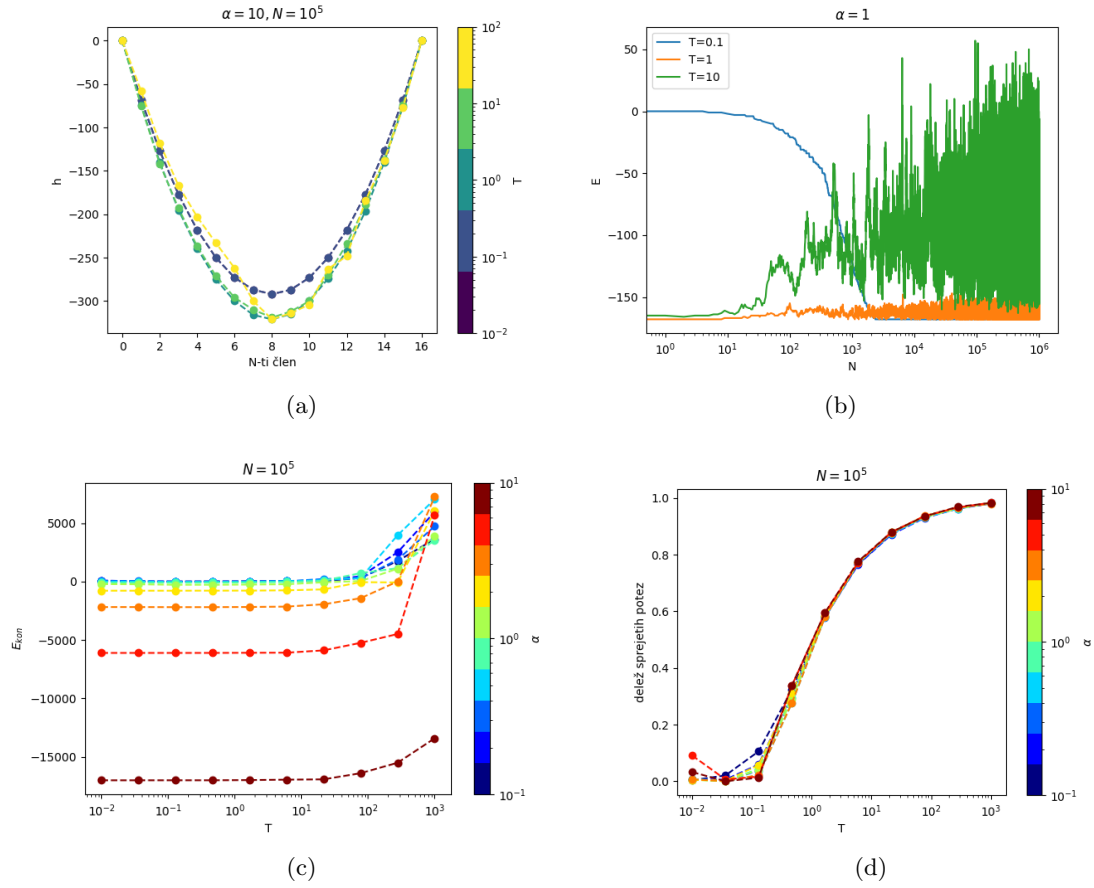
1.1 Neomejena verižnica

Če ne omejimo spodnje meje višinskih nivojev se obnašanje verižnice spremeni. Konfiguracije verižnice v tem primeru prikazuje slika 3 in 4(a). V primeru ko je $\alpha = 0.1$ se pri temperaturi $T = 0.01$ in $T = 0.1$ več členov postavi na enak višinski nivo. V tem primeru je to ugodno, saj je prožnostna energija veliko večja od potencialne in ni ugodno, da se verižnica bolj raztegne. Ko večamo parameter $\alpha = 1, 10$ pa ni več členov, ki bi imeli sosede na enakem energijskem nivoju. V tem primeru je ugodno, da se verižnica čim bolj ukrivi. V tem primeru dobi obliko funkcije *cosh*. V primeru ko je $\alpha = 10$ je potencialna energija zelo velika in tudi največji prispevek termične energije ($T = 100$) ne vpliva veliko na obliko verižnice.



Slika 3: Konfiguracije verižnice v odvisnosti od temperature za dve različni vrednosti parametra α . N predstavlja število korakov Metropolisovega algoritma.

Energijska odvisnost od števila iteracij algoritma (slika 4 (b)) je podobna kot v primeru omejene verižnice. Energija sistema v primeru neomejene verižnice (slika 4 (c)) doseže večje spremembe energije pri višanju



Slika 4: a) Energija sistema v odvisnosti od števila iteracij algoritma pri $\alpha = 10$. b) Energija sistema v odvisnosti od števila iteracij algoritma pri treh različnih temperaturah. c) Energija sistema v odvisnosti od temperature in parametra α . d) Delež sprejetih potez v odvisnosti od temperature in parametra α .

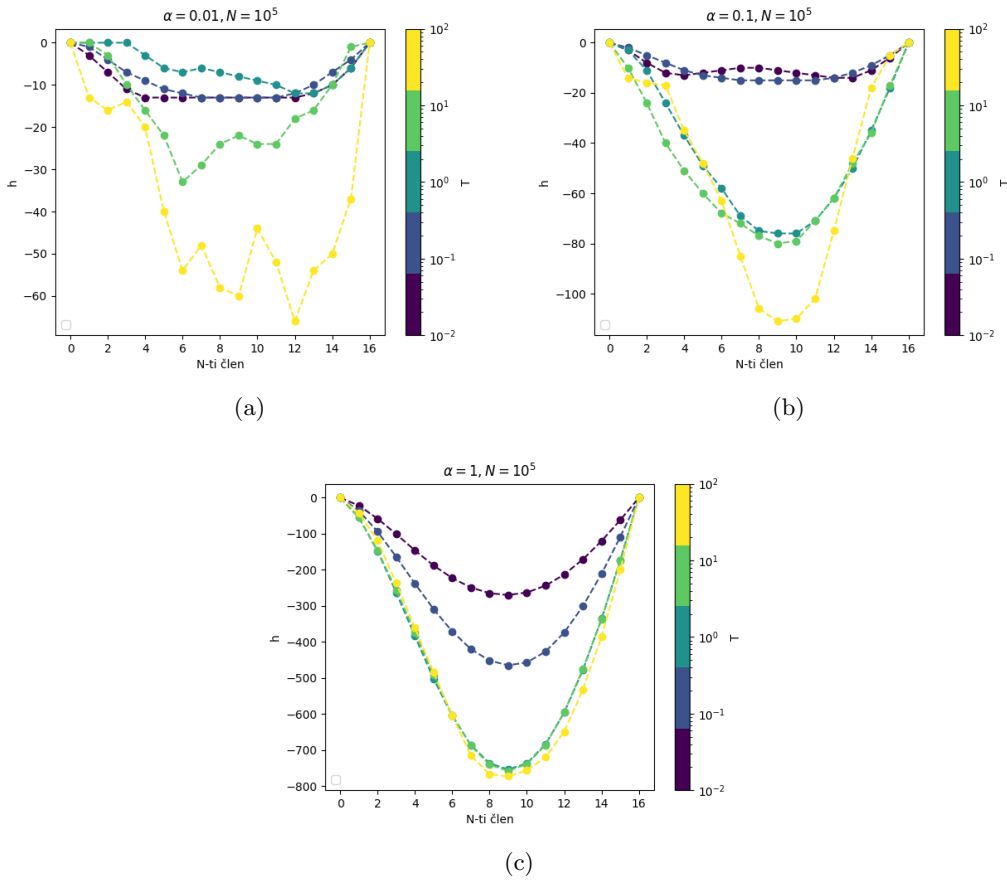
temperature kot pri neomejeni verižici. Zelo zanimiva je tudi odvisnost deleža sprejetih potez od parametra α (slika 4 (d)), saj je v primeru neomejene verižnice neodvisna od α . To se precej razlikuje od omejene verižnice, saj je bila tam kar velika odvisnost.

1.2 Neomejena verižnica 2

Zanimivo bi bilo pogledati obliko verižnice če dodam še energijo ukrivljenosti. V tem primeru bi imel model 2 prosta parametra in bi moral najti pravo razmerje energij. Da si nalogo poenostavim sem zamenjal prožnostno energijo z energijo ukrivljenosti, ki je sorazmerna z drugim odvodom krivulje. Energijo verižnice lahko sedaj zapišem kot

$$E = \sum_{i=1}^{15} (\alpha h_i + \frac{1}{4} (h_{i-1} - 2h_i + h_{i+1})^2). \quad (2)$$

Pogledal sem samo končne konfiguracije verižnice v odvisnosti od parametra α , ki sedaj predstavlja razmerje med potencialno energijo in energijo ukrivljenosti verižnice (slika 5). Zanimiva je konfiguracija pri najnižji temperaturi in $\alpha = 0.1$, saj se verižnica ne upogne navzdol kot bi pričakoval (simulacijo sem pognal več krat). Oblika verižnice se razlikuje od oblike neomejene verižnice v prejšnjem primeru.



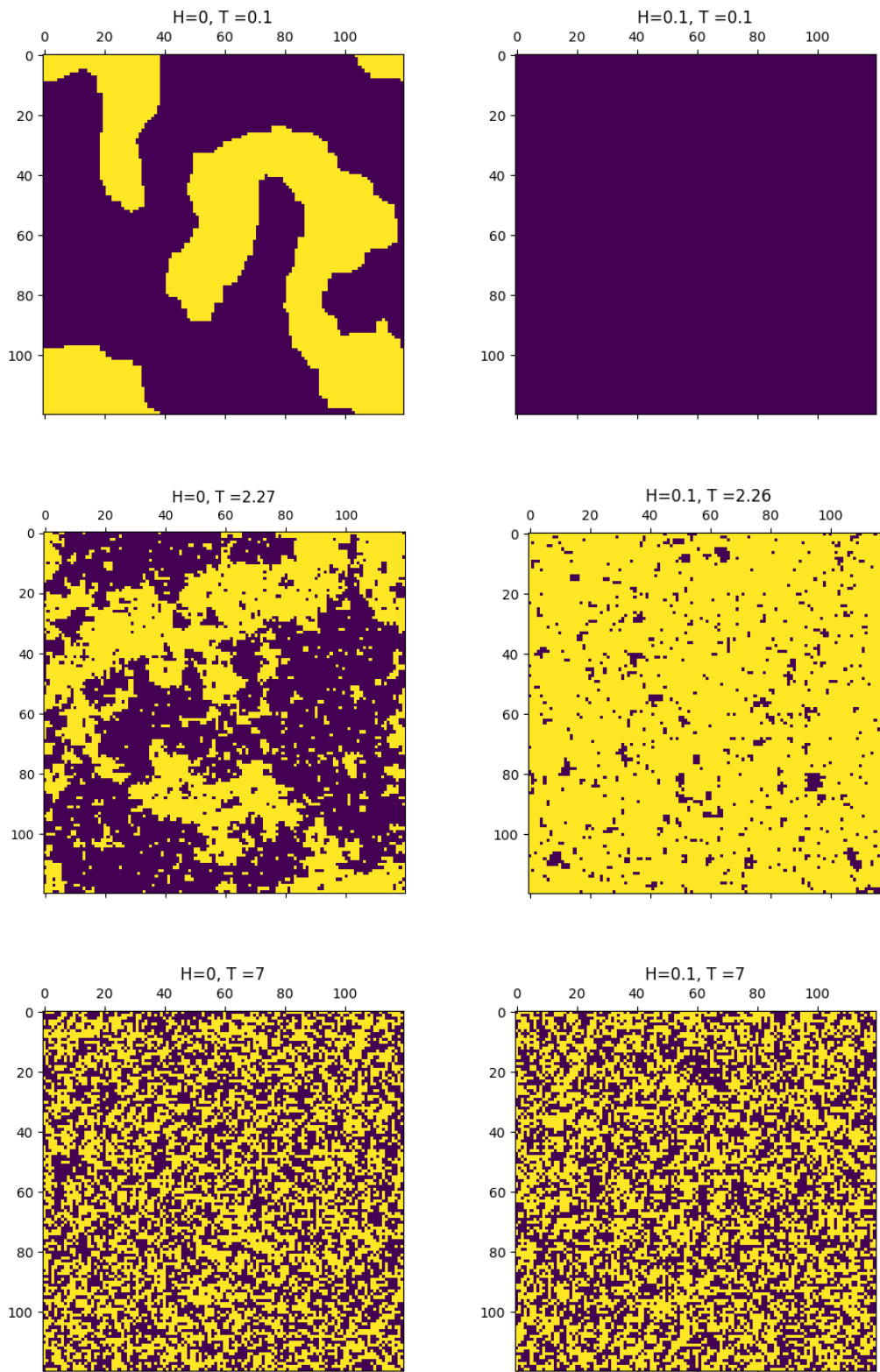
Slika 5: Konfiguracije verižnice v odvisnosti od temperature za dve različni vrednosti parametra α . N predstavlja število korakov Metropolisovega algoritma.

2 Isingov model

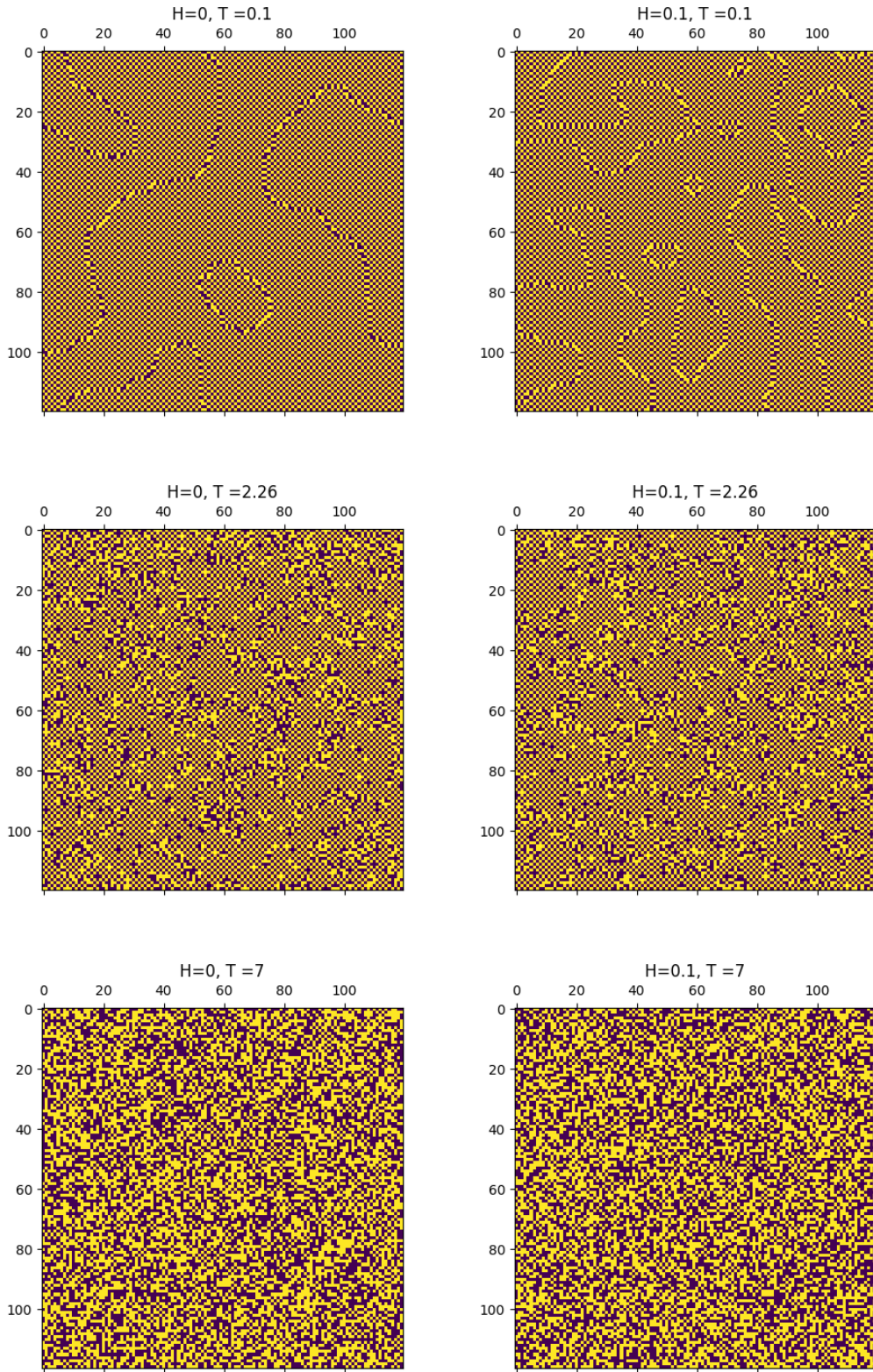
Feromagnetne in antiferomagnetne snovi v dveh dimenzijah v približku dveh stanj opišemo z Isingovim modelom. Hamiltonov operator za ta model je

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i, \quad (3)$$

, kjer je $J = 1$ za feromagnetne snovi in $J = -1$ za antiferomagnetne, $s_i = \pm 1$, prva vsota teče po najbližjih sosedih. H označuje zunanje magnetno polje. Začetno stanje mreže sem naključno izžrebal. Konfiguracije spinskih mrež pri različnih temperaturah sem naredil v Pythonu, odvisnosti opazljivk od temperature pa v C++, saj bi potreboval Python preveč časa. V modelu sem uporabil periodične robne pogoje. Če ni zunanega magnetnega polja, se pojavi fazni prehod pri vrednosti $T_c = \frac{T_c}{T_0} = 2.269J$, kjer je $T_0 = 1/k_B$. Konfiguracije feromagnetne spinske mreže pri različnih "temperaturah" T brez in z magnetnim poljem prikazuje slika 6. Pri feromagnetnih snoveh se pri nizkih temperaturah ($T = 0.1$) ustvarijo domene oziroma območja, kjer spini kažejo v eno smer in območja kjer kažejo v drugo. Če dodam magnetno polje se vsi spini poravnajo v eno smer. Ko temperaturo večam ($T = T_c$) se domene manjšajo. Če dodam magnetno polje se večina spinov obrne v eno smer, termične fluktuacije pa vseeno povzročijo, da imajo nekateri spini obratno orientacijo. Pri temperaturah višjih od kritične temperature so termične fluktuacije tako velike, da so spini naključno orientirani in majhno magnetno polje ($H = 0.1$) ne vpliva veliko na njihovo orientacijo. Pri antiferomagnetnih snoveh (slika 7) je energijsko najbolj ugodna konfiguracija, ko sta sosednja spina nasprotno obrnjena. Pri nizki temperaturi ($T = 0.1$) je domen zelo malo. Njihovo število se malo poveča če dodam zunanje magnetno polje ($H = 0.1$). Pri kritični temperaturi ni več take ureditve kot pri ($T=0.1$) in termične fluktuacije vplivajo na razporeditev spinov. Ko je temperatura visoka ($T=7$) se, tako kot pri feromagnetu, spini naključno orientirajo.



Slika 6: Spinska mreža pri različnih temperaturah in jakostih zunanjega magnetnega polja. Število iteracij algoritma: $N = 20^5$, velikost mreže: 120×120 .

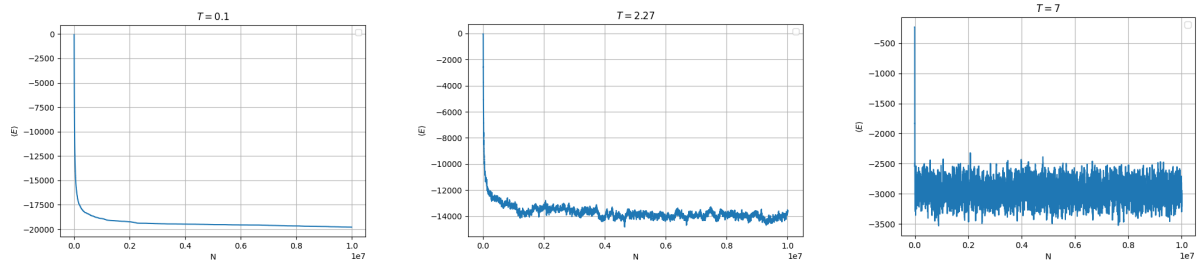


Slika 7: Spinska mreža pri različnih temperaturah in jakostih zunanjega magnetnega polja. Število iteracij algoritma: $N = 20^5$, velikost mreže: 120×120 .

2.1 Opazljivke

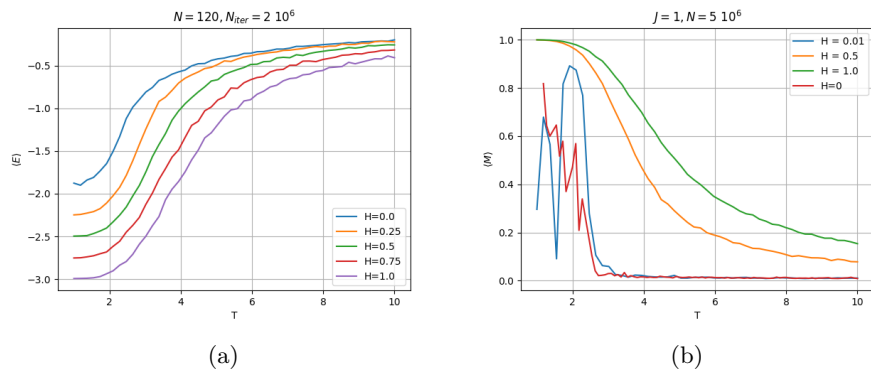
Za pridobitev temperaturne odvisnosti energije, magnetizacije, specifične toplote in susceptibilnosti sem se lotil izračuna v C++, saj je bilo potrebno za vsako točko na grafu najprej priti v minimum sistema in potem povprečiti količine. Število iteracij, da pridemo na plato minimalne energije sistema, prikazuje slika

8. Sistem pri ima pri nizki temperaturi dobro definiran minimum, ki fluktuira veliko. Ko temperaturo povečujem pa začne vedno bolj fluktuirati. Vseeno pa izgleda, da bom v minimumu če naredim najprej N iteracij in potem vzamem vzorce za povprečenje. Po N korakih sem vzel 1000 točk, ki so za 1000 iteracij razmaknjene med sabo in jih povprečil.

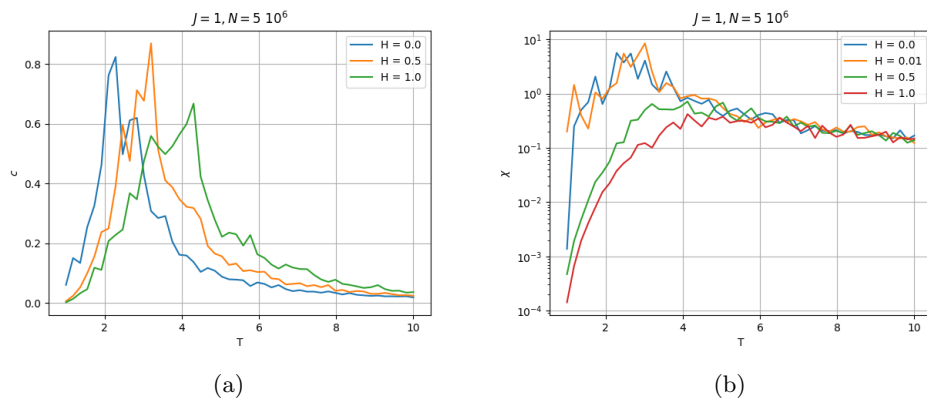


Slika 8: Energija sistema v odvisnosti od števila iteracij pri treh različnih temperaturah. Velikost mreže: 100×100 .

Vsi grafi razen energijskega so precej nazobčeni, in niso taki, kot sem jih videl na listu iz predavanj. Prvi pomislek je ta, da je nekaj v implementaciji narobe, ampak potem se pojavi vprašanje, zakaj krivulje magnetizacije za večje zunanje magnetno polje izgledajo v redu. V primeru, ko imam prisotno zunanjo magnetizacijo, je tudi susceptibilnost sistema precej dobro opisana. Poskusil sem vzorčiti več točk in tudi razširiti interval med točkami, a to ne bistveno spremeni grafov.



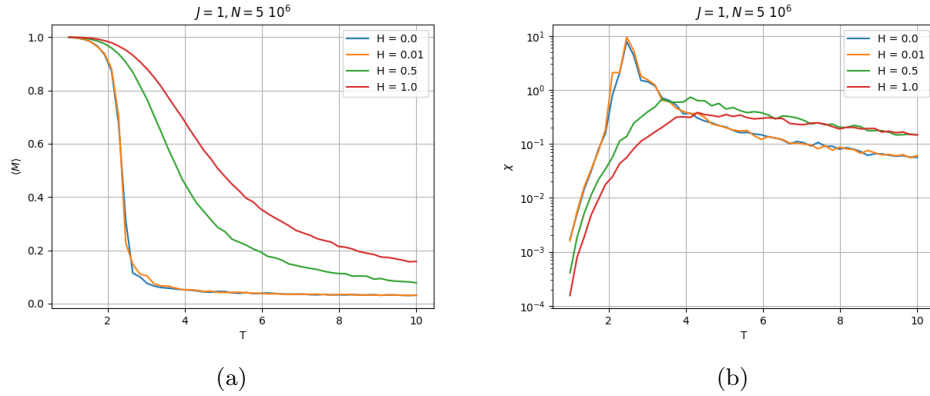
Slika 9: a) Povprečna energija na spin v odvisnosti od temperature pri različnih vrednostih magnetnega polja. Velikost mreže: 120×120 . b) Povprečna magnetizacija v odvisnosti od temperature pri različnih zunanjih magnetnih poljih. Velikost mreže: 100×100 .



Slika 10: Velikost mreže: 100×100 . a) Odvisnosti od specifične toplote od temperature pri različnih H . b) Odvisnosti susceptibilnosti od temperature pri različnih H .

Izračun magnetizacije je bolj občutljiv kot izračun energije, kljub temu, da dosežem plato po $N = 5 \cdot 10^6$

očitno to ni dovolj dobro. Mogoče je težava to, da sem vzorčil preveč točk in s tem pokril prevelik interval, na katerem je energija sistema dovolj padla, da dobim žagast graf, vendar ni. Če vzamem 100 toči, ki so oddaljene za 1000 ali 100 dobim še vedno žagast graf. Ko vklopim magnetno polje je konvergenca energije sistema hitrejša in graf je posledično bolj gladek. Ob ugotavljanju razlogov za nezveznost grafov sem poskusil izračunati opazljivke na manjšem sistemu (slika 11). Očitno je, da je konvergenca energije sistema prosti minimumu odvisna od velikosti mreže spinov. Kljub temu, da na sliki 8 zglada, da dosežem minimum, energija počasi pada. To je najverjetneje razlog, da sem dobil žagaste grafe. V primeru manjšega sistema, pa definitivno dosežem plato pri takem številu iteracij in rezultati so precej boljši. Poskusil sem narediti 10^7 iteracij preden sem vzorčil, vendar to ni rešilo težave. Očitno bi moral vzeti še več iteracij, da bi dosegel plato, kjer se energija ne spreminja. Večji kot je sistem, več iteracij potrebujem, da najdem njegov minimum.



Slika 11: Velikost mreže: 32×32 . a) Odvisnosti od specifične toplote od temperature pri različnih H . b) Odvisnosti susceptibilnosti od od temperature pri različnih H .

Ker sem porabil veliko časa, da sem odpravil nezveznosti in najverjetneje ugotovil razlog za to in ker je programiranje v C++ in uvažanje v Python za izdelavo grafov časovno potratno, bom tukaj zaključil. Če bi imel več časa bi lahko preučil tudi korelacije in delovanje Wolffovega algoritma.

3 Zaključek

Metropolisov algoritem se je izkazal za zelo uporabnega pri preučevanju spinske mreže in določanju ravnovesnega stanja verižnice. Pri uporabi algoritma je potrebno paziti, da najprej dosežemo plato minimuma in šele nato začnemo pridobivati za nas zanimive opazljivke.