

## 2. Beadandó dolgozat

### A 2D Ising-modell vizsgálata klaszter algoritmussal

Páhoki Tamás  
CP4OU3

Fizikus MSc II. év



Eötvös Loránd Tudományegyetem  
2022.11.29.

# Tartalomjegyzék

<b>1. Elméleti háttér</b>	<b>2</b>
1.1. 2D Ising-modell . . . . .	2
1.2. Klaszter algoritmus . . . . .	3
<b>2. Rendezetlen fázis vizsgálata</b>	<b>3</b>
<b>3. Kritikus exponensek meghatározása</b>	<b>5</b>

A dolgozat első fejezetében ismertetjük a vizsgálni kívánt rendszert, nevezetesen, a 2 dimenziós ferromágneses Ising-modellt és a dolgozatban alkalmazott szimulációs módszert, a klaszter algoritmust. A 2. fejezetben megvizsgáljuk a rendszert a kritikus hőmérséklet felett, vagyis a rendezetlen fázisban, adott rácsméret mellett meghatározzuk  $\beta_{max}$  és  $\chi_{max}$  numerikus értékét, míg a 3. fejezetben ezen mennyiségek rácsméret-függésének vizsgálatával határozzuk meg a kritikus exponenseket.

## 1. Elméleti háttér

### 1.1. 2D Ising-modell

A 2 dimenziós Ising-modell az azonos dimenziós ferromágneses rendszerek leírására szolgáló modell, mely kritikus viselkedést mutat. A modellben spineket tekintünk egy négyzetrács rácspontjaiban. Konvenció szerint a spinek értéke  $\pm 1$  lehet. A rendszer  $E$  energiája a következőképpen írható fel:

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

A fenti formulában szereplő  $J$  és  $H$  mennyiségek a spinek közti (homogén) elsőszomszéd kölcsönhatás erősségét leíró csatolás és a külső mágneses mező erőssége. Jelen esetben nem a legáltalánosabb modellt fogjuk vizsgálni, konkrétan, csak elsőszomszéd kölcsönhatásokat tekintünk (homogén csatolás esetén), illetve zérus külső mágneses mező mellett vizsgálódunk ( $H = 0$ ). A modellben  $s_i$ -vel jelöljük az  $i$ -edik spin értékét, valamint az első szummában található  $\langle i, j \rangle$  összegzés az elsőszomszéd kölcsönhatást jelöli, vagyis csak azokat a spin-spin kölcsönhatásokat összegezzük, melyeknél a vizsgált két spin rácsszomszédos egymással. A modellt egy  $L \times L$  méretű négyzetrácson tekintjük ( $L$  itt egy dimenziótlan mennyiség, a rendszer fizikai lineáris kiterjedése ráczállandóban mérve), ahol az átlagos mágnesezettség értékét a következőképp számíthatjuk ki:

$$m = \langle s \rangle = \left\langle \frac{\sum_i s_i}{L^2} \right\rangle. \quad (2)$$

Mint minden statisztikus fizikai rendszernél a központi meghatározandó mennyiség a  $Z$  állapotösszeg, mely

$$Z = \sum_{[s]} e^{-\beta E[s]} = \sum_{[s]} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j} \equiv Z(\beta J) \quad (3)$$

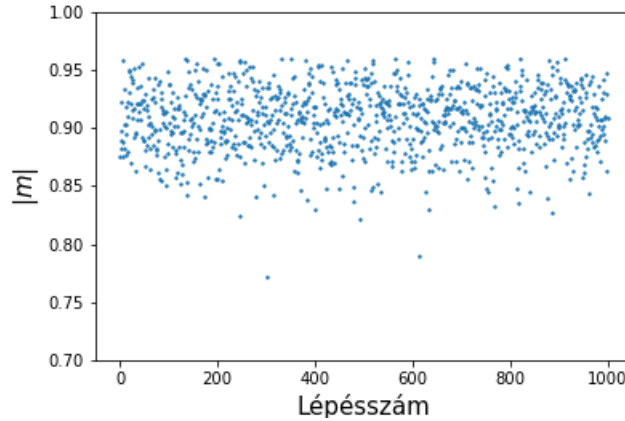
alakban írható, ahol  $[s]$  az összes lehetséges spinkonfigurációra való összegzést, míg  $\beta = (kT)^{-1}$  az inverz hőmérsékletet jelenti. Ez összesen  $2^{L^2}$  konfiguráció, ami egy kolosszálisan nagy szám. Ennek pontos kiszámításához rengeteg számítási kapacitásra lenne szükség. Szimulálni szeretnénk ezt a rendszert, ezért próbáljuk meg ügyesen lecsökkenteni a tekinteni szükséges konfigurációk számát! Kiderül, hogy ha ábrázoljuk a különböző konfigurációk számát a  $\sum_i s_i / L^2$  mágnesezettség függvényében, akkor egy jól lokalizált, keskeny, gyorsan lecsengő görbét kapunk ( $L \gg 1$  esetén), mely maximumát azonosíthatjuk az átlagos mágnesezettséggel. Ez a görbétípus arra enged következtetni, hogy a "fontos", vagyis az átlagos mágnesezettséghez jelentős kontribúciót adó konfigurációk az átlagos mágnesezettséghez közeli  $\sum_i s_i / L^2$  értékkel rendelkeznek, a távolabbiakkal nem kell foglalkoznunk a kis járulék miatt. Hogyan találjuk meg ezeket? A mintavételezéshez egy véletlen bolyongást tekinthetünk a konfigurációs térben, ahol egy adott  $[s_k]$  konfiguráció megvalósulásának valószínűsége  $Z^{-1} e^{-\beta E[s_k]}$ . Mivel a konfigurációk megvalósulásánál már figyelembe vettük az energiafüggő Boltzmann-faktor hatását, így az átlagos mágnesezettség kiszámítását számtani középvel végezhetjük el.

## 1.2. Klaszter algoritmus

Most ismertetjük a szimuláció során alkalmazott módszert, a klaszter algoritmust. (1) Véletlenszerűen kiválasztunk egy  $s_i$  spint, aminek eltávolítjuk az értékét  $s = s_i$  módon. Ez lesz majd a klaszter spinje. (2) Megnézzük, hogy  $s_i$  szomszédai közül melyik spin egyezik meg az ő spinjével, és a megegyezőket  $p = 1 - \exp(-2\beta)$  valószínűséggel hozzávesszük a kezdetben  $s_i$  által definiált klaszterhez, ahol most  $\beta = J/kT$ . (3) Ezután az újonnan hozzávett spinek első szomszédait tekintjük, majd ezekre alkalmazzuk a 2. lépést. (4) Addig folytatjuk az algoritmust, amíg egy lépésben már nem veszünk hozzá a klaszterhez újabb spint. (5) Átfordítjuk a klasztert.

## 2. Rendezetlen fázis vizsgálata

Mielőtt még rátérnénk a rendezetlen fázis, vagyis a kritikus hőmérséklet feletti tartomány vizsgálatára, ejtsünk pár szót a rendezett fázisról, amely az előző beadandóban szerepelt. Ott a szimulációra a Metropolis-algoritmust használtuk, mely során minden lépésben pontosan 1 spint fordítunk át. Itt a mágnesezettség várható értékére  $32 \times 32$ -es rácsméret mellett  $\beta = 0.5$  hőmérsékleten  $\langle m \rangle = 0.912 \pm 0.001$  adódott<sup>1</sup>. Ugyanezen elrendezésben a klaszteralgoritmus  $\langle |m| \rangle = 0.912$ -nek adódott. A hibát itt nem határoztuk meg, viszont a kapott érték hibán belül megegyezik a Metropolis-algoritmussal kapottal. Fontos megemlíteni, hogy a klaszter algoritmus során egyenlő valószínűséggel mintavételezünk felfelé, illetve lefelé álló spineket kezdetben, így fontos, hogy az átlagolást a mágnesezettségek abszolútértékére végezzük, annak érdekében, hogy fizikai tartalommal rendelkező eredményt kapjunk. Az átlagolást itt 1000 lépésig futtattuk. A szimuláció eredményét a 1. ábrán láthatjuk.



1. ábra. Mágnesezettség abszolút értéke a lépésszám függvényében a rendezett fázisban  $\beta = 0.5$ -nél.

Most térjünk rá a rendezetlen fázis vizsgálatára! A rendezetlen fázist  $\beta$  kritikus értéke definiálja, vagyis az az állapot kritikus, ahol  $\beta < \beta_c = 0.5 \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.441$ . Meghatároztuk a rendszer

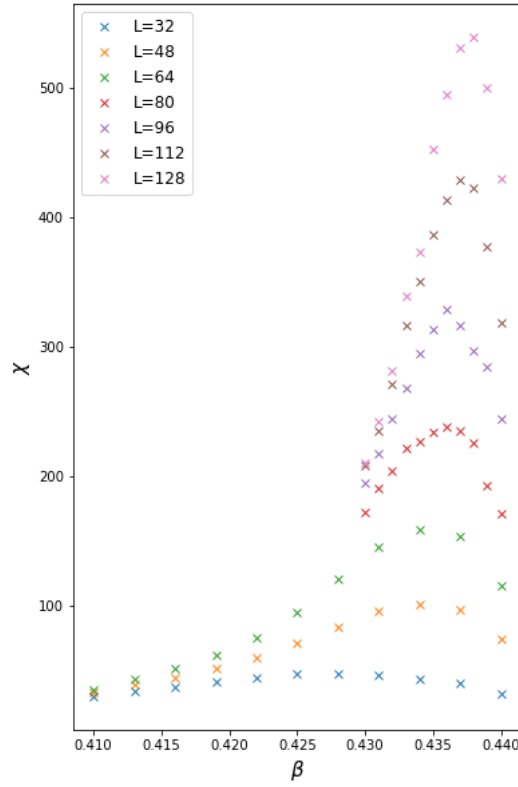
$$\chi = (\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2) L^2, \quad m = \frac{\sum_i s_i}{L^2} \quad (4)$$

$\chi$  szuszceptibilitását adott rácsméret esetén különböző hőmérsékletértékek mellett, majd pedig különböző rácsméreteket tekintve is elvégeztük ezt. Az eredményt a 2. ábra mutatja. Leolvashatjuk, hogy a  $\beta$  függvényében a szuszceptibilitás maximummal rendelkezik, ami a rendszerméret növelésével a nagyobb  $\beta$ , vagyis kisebb hőmérséklet értékek irányába tolódik el, valamint értéke is nő. A szuszceptibilitásmaximumok helyét és értékét parabolaillesztéssel ( $\chi(\beta) = a + b\beta + c\beta^2$ ) határoztuk meg minden rácsméret esetén. Az illesztéshez használt pontokat "szemmel" választottuk. A  $\chi(\beta, L)$  görbék  $\beta$ -beli maximum helyeit és értékeit a rácsméret függvényében az 1. táblázat tartalmazza.

$L$	32	48	64	80	96	112	128
$\beta_{max}$	0.4273	0.4341	0.4346	0.4360	0.4360	0.4370	0.4374
$\chi_{max}$	47.9	101.2	159.3	237.7	321.8	430.1	536.7
Illesztéshez használt pontok	3-8	7-9	7-9	4-8	5-9	5-11	5-11

1. táblázat. Maximumok rácsméret-függése.

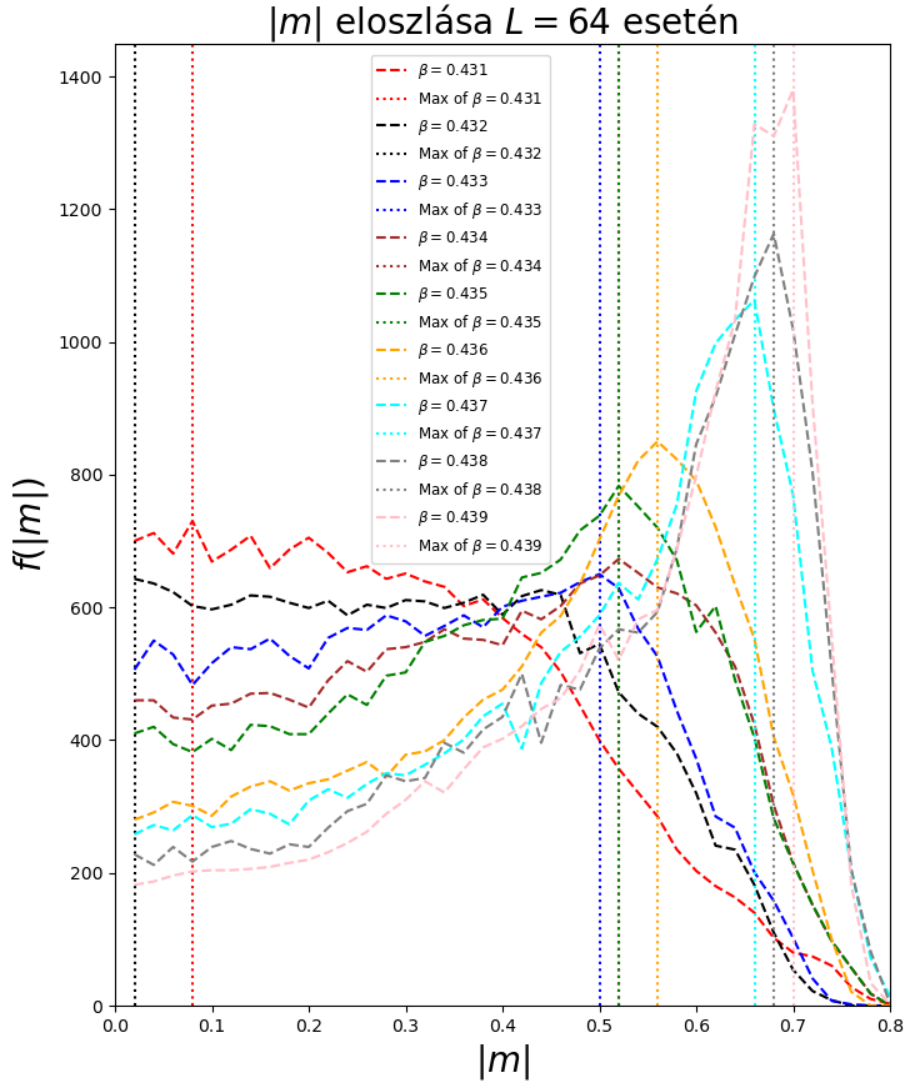
<sup>1</sup>Itt nem az előző beadandóból vett értéket tüntettük fel, mivel az más rácsméretre vonatkozott.



2. ábra. A szuszceptibilitás inverz hőmérséklettől való függése eltérő rácsméretetek esetén.

Megjegyzés: kisebb rácsméret esetén szélesebb  $\beta$  tartományon tekintettük a mintavételezést, hiszen nem tudtuk előre azt, hogy hol várható a maximum, viszont a nagyobb méretek felé haladva láttuk a tendenciát, így szűkebb tartományon végeztük el a mintavételezést ugyanannyi ponttal, vagyis sűrűbben. Fontos, továbbá megjegyezni, hogy a szimulációnk paraméterei mellett (minthogy a lépések száma 10000-50000 lépés volt) még mindig relatíve nagy fluktuációk voltak tapasztalhatók, melyek csökkentése a futtatási lépések számának növelésével javítható.

Ezután adott rendszerméret mellett ( $L = 64$ -et választottunk) vizsgáltuk meg a mágnesezettség abszolút értékének  $f(|m|)$  eloszlását a  $\beta$  változtatása mellett. Ezt szemlélteti a 3. ábra. Leolvasható, hogy  $\beta$  növelésével, vagyis a kritikus ponthoz való közelítéssel az eloszlás csúcsosodik, jobban lokalizált eloszlást ad a mágnesezettségre, valamint eltolódik a nagyobb  $|m|$  értékek irányába. Az eloszlás szórását pedig a szuszceptibilitás határozza meg, ami csökken  $\beta$  növelésével.



3. ábra. Mágneszettség abszolút értékének eloszlása különböző  $\beta$ -kra ( $L = 64$ ).

### 3. Kritikus exponensek meghatározása

A végesméret-skálázás alapján tudjuk, hogy a rácsméret függvényében a  $\beta_{max}$  hatványszerűen változik, így módon:

$$\beta_{max}(L) = \beta_c - AL^{-1/\nu}, \quad (5)$$

ahol  $\nu$  a korrelációs hossz kritikus exponense ( $\xi \sim [(T - T_c)/T_c]^{-\nu}$ ), valamint  $\beta_c = 0.5 \ln(1 + \sqrt{2})$ . Az 1. táblázatban szereplő értékeket ábrázoltuk a rácsméret függvényében és az (5) összefüggést illesztettünk rá, amit a 4. ábra szemléltet.

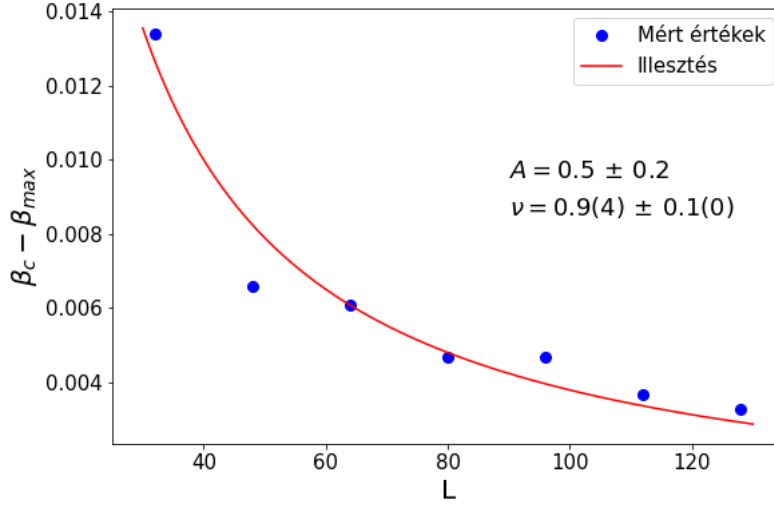
A  $\nu$  kritikus exponens illesztett értéke

$$\nu = 0.9(4) \pm 0.1(0). \quad (6)$$

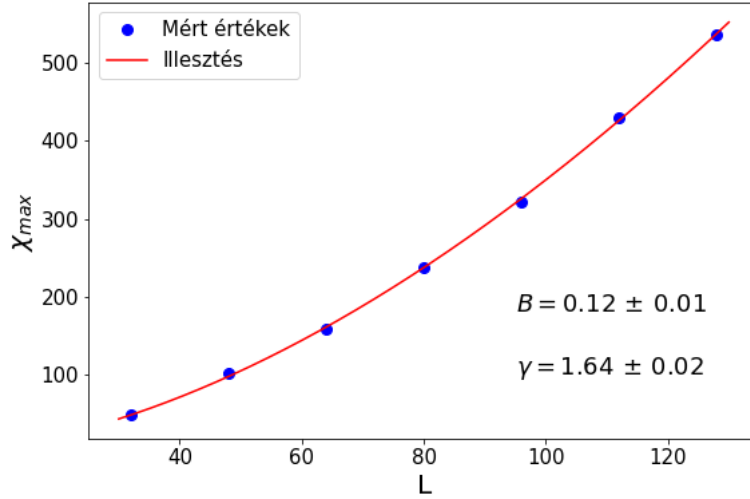
Hasonlóan, a  $\beta_{max}$  szuszceptibilitás-maximum is hatványszerű függést mutat:

$$\chi_{max}(L) = BL^{-\gamma/\nu}, \quad (7)$$

ahol  $\gamma$  a szuszceptibilitás kritikus exponense ( $\chi \sim [(T - T_c)/T_c]^{-\gamma}$ ). Az 1. táblázatban szereplő értékeket ábrázoltuk a rácsméret függvényében és a (7) összefüggést illesztettük rá, amit az 5. ábra szemléltet.



4. ábra.  $\beta_{max}$  rácsmérettől való függése.



5. ábra.  $\chi_{max}$  rácsmérettől való függése.

A  $\gamma$  kritikus exponens illesztett értéke

$$\gamma = 1.64 \pm 0.02. \quad (8)$$

Fontos megjegyezni, hogy az illesztésből kapott értékek hibájára mindenképpen nagyobbat várunk, mint amit kaptunk, hiszen több hibaforrást nem vettünk figyelembe, például az illesztésnél nem vettük figyelembe, hogy az illesztendő értékeknek van hibája is.

A kritikus exponensek elméleti értékei:  $\nu = 1$  és  $\gamma = 7/4 = 1.75$ . Jól látható, hogy az általunk kapott értékek az egzaktaknál kicsit kisebbek. A mért  $\nu$  hibahatáron belül megegyezik az elméleti értékkel, viszont  $\gamma$  nem, de az eltérés nem túl nagy. Vegyük észre, hogy jóval kisebb relatív hibát kaptunk  $\gamma$ -ra mint az annak meghatározásához felhasznált  $\nu$ -re. Ez meglepő, de igazából nem valódi. A mögöttes indok az, hogy az illesztést csak az adatpontokra végeztük el, a pontok hibáját nem tekintettük az illesztés során az egyszerűség kedvéért. Fontos, hogy az egzakt értékek az aszimptotikus értékek, viszont a szimulációt csak  $\mathcal{O}(10^2 - 10^3)$  nagyságrendű rácsméretre futtattuk le. Másik forrása az eltérésnek az, hogy a maximum értékek pontosabb meghatározásához a maximum körül sűrűbb mintavételezésre lenne szükség, optimalizálni lehetne a parabola illesztéshez (Taylor-sor másodrendig) használt pontok kiválasztását, valamint a szimuláció hosszának növelése is a precitás érdekét szolgálná.