

# 1. Beadandó dolgozat

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

Páhoki Tamás  
CP40U3

Fizikus MSc II. év



Eötvös Loránd Tudományegyetem  
2022.10.10.

# Tartalomjegyzék

1. 2D Ising-modell	2
2. Szimuláció $\beta J = 0.5$ -nél	3
3. Szimuláció $\beta J = 0.45$ -nél	5

A dolgozat első fejezetében ismertetjük a vizsgálni kívánt rendszert, nevezetesen, a 2 dimenziós ferromágneses Ising-modellt. Ezután pedig megvizsgáljuk a rendszert a kritikus hőmérséklet alatt két különböző hőmérséklet-érték mellett. A 2. fejezetben a kritikus ponttól távolabb, míg a 3. fejezetben, ahhoz közelebb vizsgálódunk, ahol már nagyobb mértékű fluktuációk érzékelhetők.

## 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 rácscellák mérete), ahol az átlagos mágneszettség 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  $\sum_i s_i / L^2$  mágneszettség függvényében, akkor egy jól lokalizált, keskeny, gyorsan lecsengő görbét kapunk, mely maximumát azonosíthatjuk az átlagos mágneszettséggel. Ez a görbétípus arra enged következtetni, hogy a "fontos", vagyis az átlagos mágneszettséghez jelentős kontribúciót adó konfigurációk az átlagos mágneszettséghez közeli  $\sum_i s_i / L^2$  értékkel rendelkeznek, a távolabbiakkal nem kell foglalkoznunk a kis járuléka 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 mágneszettség kiszámítását számtani középpel végezhetjük el.

Most ismertetjük a szimuláció során alkalmazott módszert, a Metropolis-algoritmust. Ennek során véletlenül kiválasztunk egy spint és átfordítjuk azt  $\min(1, e^{-\beta \Delta E})$  valószínűséggel, ahol  $\Delta E$  jelöli a rendszer energiájának megváltozását, ha megfordítanánk kiválasztott spint.

Néhány megkötés a szimulációval kapcsolatban: i) csak egyensúlyi konfigurációkra fogunk összegezni, ii) hidegen fogjuk indítani a rendszert; ez azt jelenti, hogy kezdetben minden spin értéke azonos, ezt  $+1$ -nek választjuk, iii) valamint periodikus határfeltételt alkalmazunk, így minden spin egyenértékű, mindegyiknek 4 szomszédja van. A periodikus határfeltétel során a következő megfeleltetés igaz  $[i, j] \equiv [i + n_i L, j + n_j L]$ , ahol  $[k, l]$  jelöli a vizsgált spin helyét, valamint  $n_i, n_j$  egész számok.

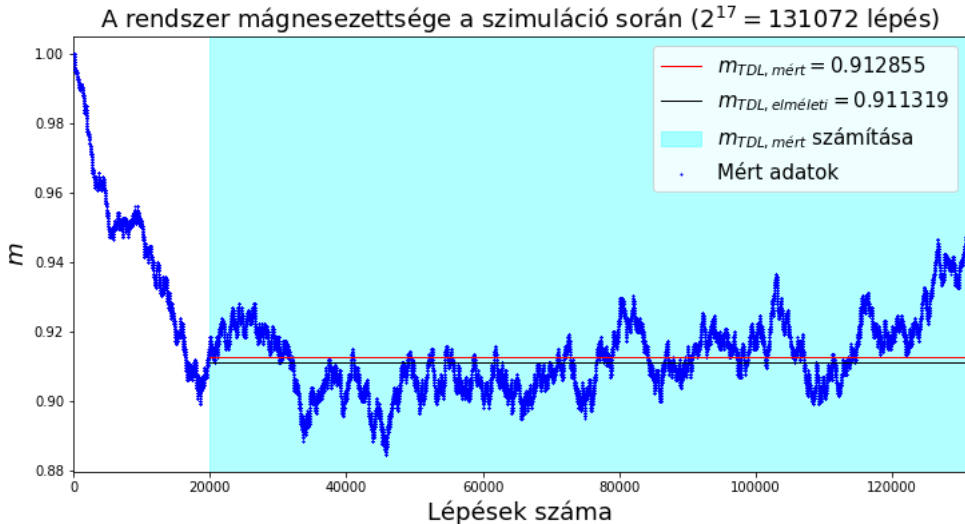
Még mielőtt prezentálnánk az eredményeinket, ejtsünk pár szót a "mérésünk" hibájának kiszámításáról. Minden lépésben 0 vagy 1 spint fordítunk át, így a vizsgált konfigurációkból számolt mágnesezettség értékek bizonytalanságánál figyelembe kell vennünk, hogy (erősen) korrelált mérésekből kapott adatokkal számolunk, vagyis nem tekinthetjük a hibának az adatok szórását. Korrelált adatok bizonytalanságának kiszámításához a blokkolás módszerét alkalmazzuk. Ez azt jelenti, hogy kiszámítjuk az eredeti adatokból az átlagérték  $\Delta m$  bizonytalanságát

$$\Delta m = \sqrt{\frac{\sigma^2}{n-1}} \quad (4)$$

módon, ahol  $\sigma$  az eloszlás szórása,  $n$  pedig a mért értékek száma. Következő lépésben elkezdjük a blokkolást, vagyis több (általában 2) egymás utáni mért érték számtani közepét tekintjük a mért adatnak. A blokkméret növelésével egyre kevesbé korrelált értékeket kapunk, csökken az eloszlást alkotó adatpontok száma, viszont a bizonytalanság egy adott értékhez fog konvergálni, amit az eredeti korrelált adatsorunk bizonytalanságának tekinthetünk. Fontos megjegyeznünk, hogy ez a konvergencia a blokkméret további növelésével elromlik, hiszen néhány adatpont esetén már nagy szórás várható az adatpontok számának kicsi volta miatt, ezért nagyon fontos, hogy a blokkméret lehetőleg legyen pár nagyságrenddel kisebb, mint az adatpontok száma, de mindenképp legyen kisebb nagyságrendű annál.

## 2. Szimuláció $\beta J = 0.5$ -nél

Az 1. ábrán mutatjuk a mágnesezettséget, mint a szimulációs lépések során alakuló központi mennyiséget. Jól látható, hogy kezdetben  $m = 1$  volt, ami a hideg indításnak felel meg (a választott előjelünkkel). A szimulációt  $2^{17}$  lépésig futtattuk (azért érdemes 2-hatványt tekinteni, mivel így a legegyszerűbb a blokkolás). A cian színű tartományra elvégezve az átlagolást, jól látható, hogy a kapott  $m_{TDL, \text{mért}} = 0.912855$  érték jól egyezik az elméleti termodinamikai limeszben (TDL) kapott  $m_{TDL, \text{elméleti}} = 0.911319$ -dal, így tehát elég ilyen hosszán futtatni a szimulációt. (Fontos megemlíteni, hogy mint már korábban rögzítettük csak az egyensúlyi konfigurációkra kell összegeznünk, így az első valahány darab konfigurációt kihagytuk az átlagolásból. Konkrétan, a 20000. lépéstől tekintjük egyensúlyinak az állapotokat, hiszen nagyjából innen lesz egy jól definiált sávon belül a mágnesezettség. Ennek a megválasztása tartalmaz egyfajta önkényt, de a szimulált adatokra ránézve és tudva, hogy szimulációt csinálunk, ami egy predikció csak, így elfogadjuk ezt a választást.) A szimuláció során  $50 \times 50$ -es rácsot tekintettünk. Ez méretben már elegendő, hiszen az 1. ábrán a teljes tartományra való átlagolással (vagyis a kezdeti, erősen inhomogén részt is belevéve) a mágnesezettség értéke 0.917502-nek adódott, ami kevesebb, mint 0.7% hibának felel meg az elméleti értéket tekintve. Az algoritmus konstrukciójából adódóan az



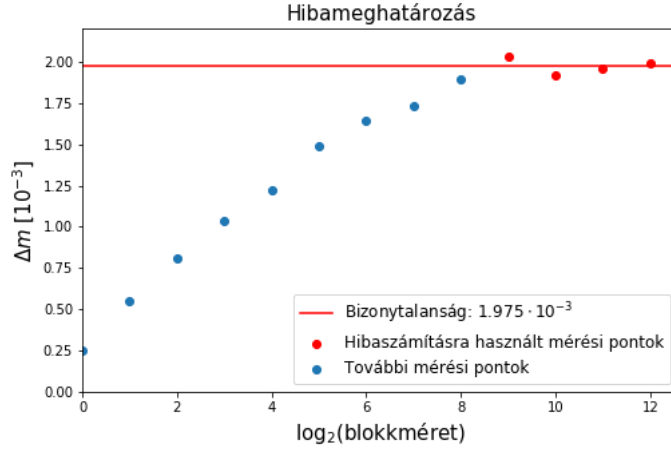
1. ábra. A szimuláció során a mágnesezettség változása a lépések függvényeként.

egymást követő konstrukciók korreláltak, ahogyan ez az 1. ábrán is látható. Ennek okán blokkolást alkalmazunk a hiba kiszámítására. Különböző blokkméretekre kiszámítottuk a  $\Delta m$  bizonytalanságot, ahogyan az a 2. ábrán látható. Látjuk, hogy a blokkméret növelésével a bizonytalanság elkezd egy adott értékhez simulni. Konvenció szerint úgy számoljuk/definiáljuk a bizonytalanságot, hogy a legelső számításba vett pont az, ami után következőhöz tartozó érték már kisebb, viszont nem várjuk meg a blokkméret olyan mértékű megnövekedését, hogy

$\Delta m$  elkezdjen eltérni ettől a konvergens értéktől. A 2. ábrán pirossal látható pontokat használtuk fel a hiba kiszámítására, ezek számtani átlagát tekintjük annak. Végül pedig szimulációnk eredménye a mágnesezettségre:

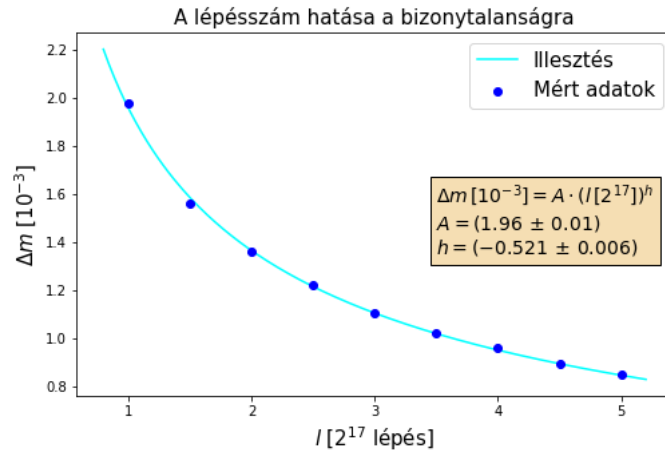
$$m = 0.913 \pm 0.002, \quad (5)$$

ami hibán belül egyezik az  $m_{TDL,elméleti} = 0.911319$  (termodinamikai limeszbeli) elméleti értékkel. Így tehát validáltuk azt, hogy a szimulációnk már a termodinamikai limeszben van.



2. ábra. Blokkméret függvényében konvergáló hiba a mágnesezettségre vonatkozóan.

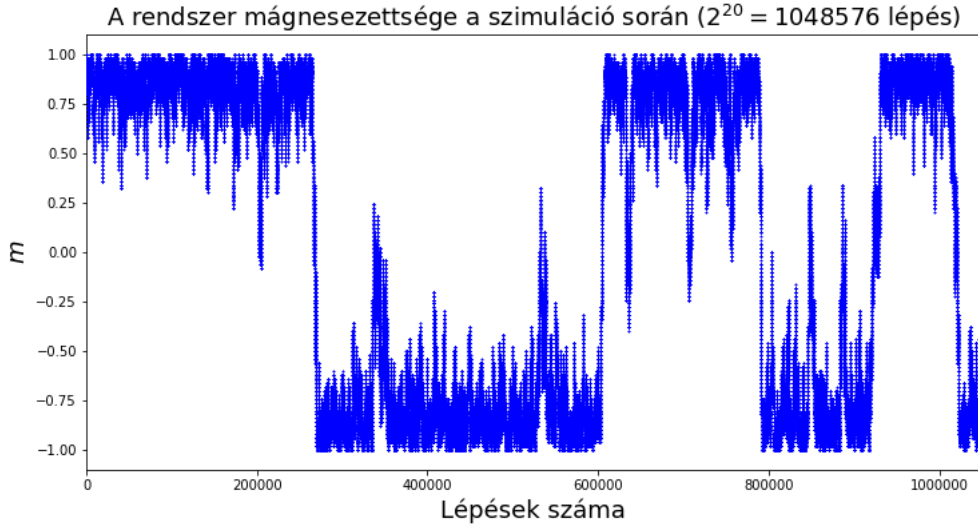
Ezen kívül megvizsgáltuk azt is, hogy a szimuláció hossza, vagyis az alkalmazott lépések száma hogyan befolyásolja a mágnesezettség hibáját. Ennek eredményét a 3. ábra szemlélteti. Itt egy hatványszerűen lecsengő viselkedést fedezünk fel  $\Delta m [10^{-3}] = A \cdot (l[2^{17}])^h$  alakban, ahol  $\Delta m$ -et  $10^{-3}$ ,  $l$ -et pedig  $2^{17}$ -en egységekben értjük. A kapott illesztési paraméterek hibával terhelt értéke:  $A = 1.96 \pm 0.01$ ,  $h = -0.521 \pm 0.006$ . Látható, hogy a mérési pontok jól illeszkednek az illesztett görbére, másrészt pedig az is, hogy a hiba jó közelítéssel a lépésszám reciprokának gyökével skálázódik. Megjegyzések: i) a képletben szereplő  $A$  mennyiség értéke a fent említett egységrendszerben ennyi, rendesen kezelve minden mennyiség értékét, vagyis minden mennyiséget 1 egységben mérve nem ezt kapnánk  $A$ -ra, ii) nem készítettünk minden egyes szimulációs hosszhoz külön ábrát a 2. ábrához hasonlóan, a 3. ábrán foglaljuk össze a kapott eredményeket, iii) a dolgozatban tárgyalt mindkét esetben  $\Delta m = A \cdot l^h$  alakú összefüggést illesztettünk, függőleges irányú konstans eltolást nem vettünk figyelembe.



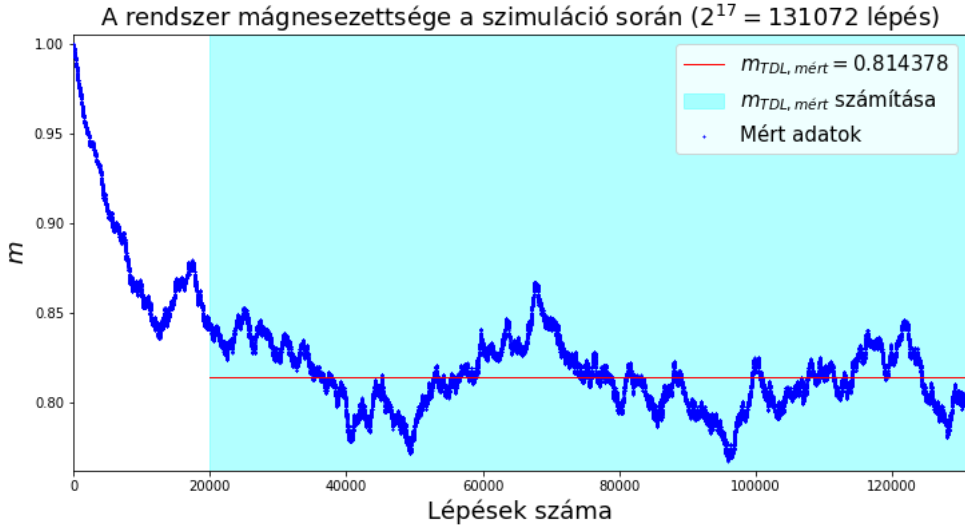
3. ábra. A mágnesezettség hibája a szimuláció hosszának függvényében.

### 3. Szimuláció $\beta J = 0.45$ -nál

A szimulációnk ugyanaz, mint az előző esetben, azonban most körültekintőbbnek kell lennünk, hiszen a kritikus ponthoz közelebb vagyunk (még mindig a hideg fázisban), így nagyobbak a fluktuációk. A 4. ábrán szeretnénk szemléltetni, hogy milyen eredményt is kaphatunk a mágnesezettségre a szimuláció során, ha nem vigyázunk. Itt  $L = 10$ -et választottunk és a szimuláció hossza  $2^{20}$  lépés volt (az átlagos mágnesezettség értéke a szimuláció során 0.04537-nek adódott). Tanulságunk az, hogy kis  $L$  esetén instabil lesz a rendszer, ezért ennek elkerülése érdekében megfelelően nagy érték mellett kell dolgoznunk. A biztonságos szimulálás érdekében visszatértünk a korábban használt  $L = 50$ -hez, amiről az 5. ábrán ki is derül, hogy megfelelően nagy ahhoz, hogy stabilan tudjon futni a szimuláció (nincsenek számottevő fluktuációk), amit  $2^{17}$  lépésig futtattunk.



4. ábra. Instabil viselkedés kis rácson.



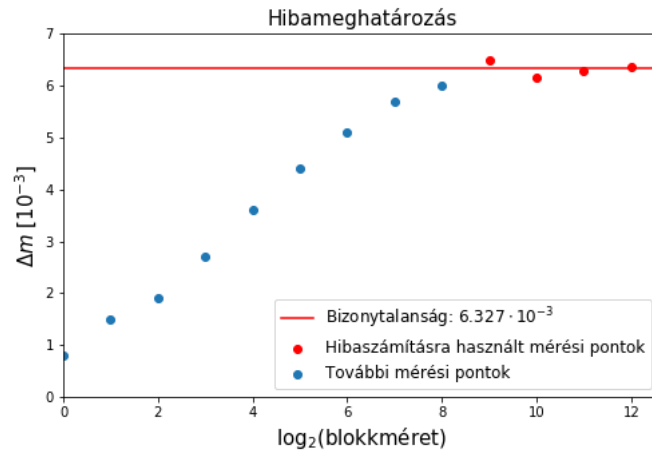
5. ábra. A szimuláció során a mágnesezettség változása a lépések függvényeként.

Innentől kezdve minden ugyanúgy megy, mint az előző fejezetben (hiszen beláttuk, hogy megfelelő rácsméretet használtunk az előző esetben is, mivel ott, kisebb hőmérsékleten kisebbek a fluktuációk és itt helytálló ez a választás, és a rácsméret-változás miatt fellépő hatásokat, szimulációs különbségeket nem kell vizsgálnunk, mivel nincsenek ilyenek). Az 5. ábrán mutatjuk a mágnesezettséget a szimuláció során, ismét ciánnal megkülönböztetve az egyensúlyinak definiált/választott állapotokat, melyekből számoljuk az átlagos mágnesezettséget, mely értéke  $m_{TDL, mért} = 0.814378$ -nak adódott. Ez kisebb a korábban kapottnál, de ezt is várjuk, hiszen kvalitatíve

úgy képzelhetjük el a  $\beta J$  kisebb esetet, hogy magasabb hőmérsékleten vagyunk, ahol nagyobbak a fluktuációk, aminek eredményeként erőteljesebb lesz az eltérés a kezdeti, +1 mágnesezettségű állapottól. A 6. ábrán mutatjuk az ehhez az esethez tartozó, blokkolási procedúra által kapott hibameghatározásunkat ( $2^{17}$  lépés hosszú szimulációra). A kapott bizonytalanság értékét figyelembe véve a mágnesezettség

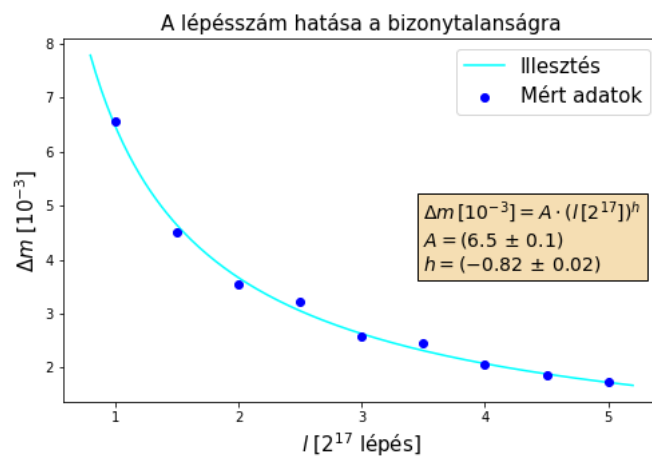
$$m = 0.814 \pm 0.006, \quad (6)$$

ami  $\sim 10\%$ -kal tér el a  $\beta J = 0.5$  esetben kapottól. Most is megvizsgáltuk a hiba alakulását a szimuláció



6. ábra. Blokkméret függvényében konvergáló hiba a mágnesezettségre vonatkozóan.

hosszának függvényében és szintén hatványszerűen lecsengő viselkedést tapasztaltunk  $h = -0.82 \pm 0.02$  értékű kitevővel és  $A = 6.5 \pm 0.1$  értékű amplitúdóval. Megjegyzendő, hogy a kritikus ponthoz közelebb vagyunk, így nagyobbak a fluktuációk, s ezért bármilyen számolt és/vagy illesztett mennyiség hibájára nagyobb értéket várunk, nemkülönben  $\Delta m$ -re,  $h$ -ra és  $A$ -ra is.



7. ábra. A mágnesezettség hibája a szimuláció hosszának függvényében.