

مدل ایزینگ

پیمان خادم القرانی

۹۷۱۱۰۳

peymankhadem@iasbs.ac.ir

چکیده:

در این گزارش کار بر آن هستیم تا مدل ایزینگ را شبیه سازی کنیم و مطابق سوال دمای بحرانی گذار فاز را در حد ترمودینامیک بررسی کنیم و توجه داریم که این کار با استفاده از تکنیک مقیاس محدود یا finit size scaling انجام دهیم. سپس ظرفیت گرمایی ویژه و پذیرفتاری مغناطیسی را محاسبه و رفتار آن را بر حسب دما بررسی کنیم. توجه داریم که برنامه با استفاده الگوریتم متروپولیس نوشته شده و شرط مرزی برای وجود دارد ولی شرط مرزی دوره ای به طور مستقیم در آن وارد نشده است. این برنامه با زبان ++C نوشته شده. از شرح دادن مدل ایزینگ خودداری میکنیم چرا که با وجود مقالات متعدد گفتن تاریخچه در حوصله این جناب نمیشد.

کلمات کلیدی: مدل ایزینگ؛ الگوریتم متروپولیس؛ تکنیک مقیاس محدود؛ ظرفیت گرمایی؛ پذیرفتاری مغناطیسی

مقدمه:

مدل ایزینگ ابتدا در یک بعد توسط ایزینگ که در آن زمان دانشجوی لنز بود حل شد. این مدل یکی از مدل های بسیار پرکاربرد در فیزیک آماری هست و همچنین در حوزه سیستم های پیچیده جز اولین مدل ها برای بررسی شبکه و دینامیک نتورک بود که مدل رای دهندگان یا voter model برگرفته از این مدل میباشد. شماتیک کار بسیار ساده هست یک شبکه مربعی با N راس که هر راس مقادیر $(+1)$ یا (-1) را میگیرد. نکته مهم این هست که این مدل میتواند به خوبی رفتار بحرانی و تغییر فاز

پیوسته را نشان دهد. که در واقع این مدل ساده شده می باشد. انرژی یا هامیلتونی سیستم از این طریق حساب میشود:

$$E(S) = -J \sum S_i S_j - h \sum S_i$$

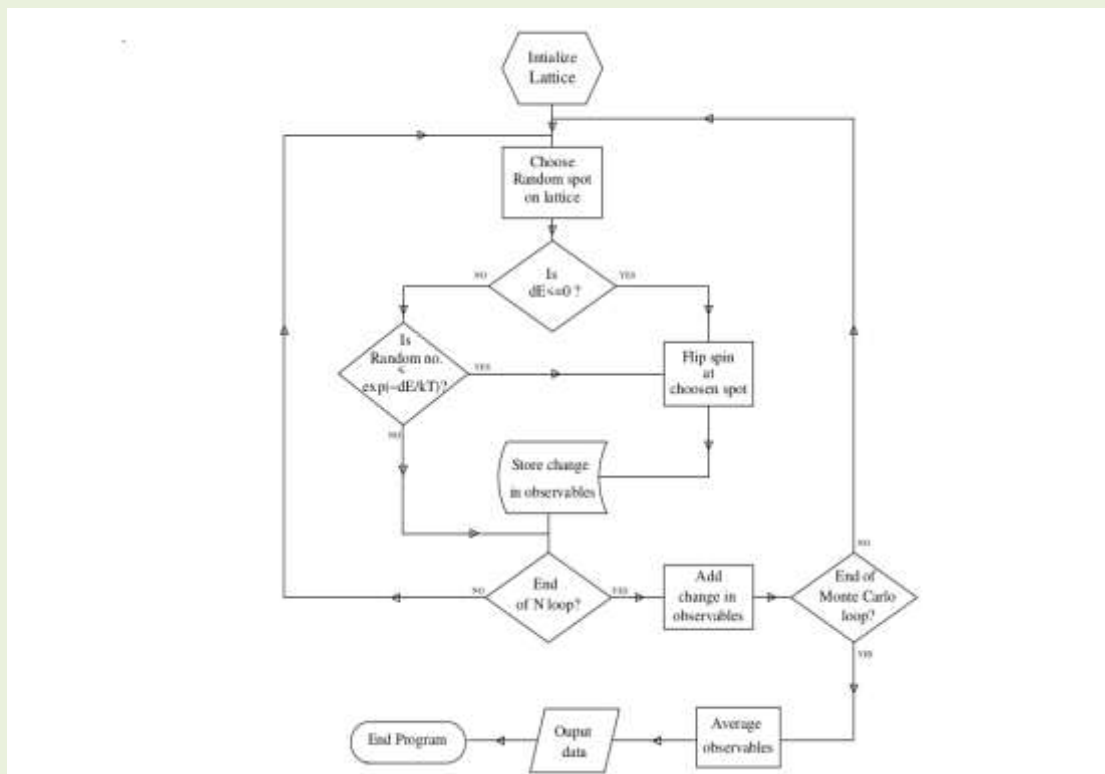
که در آن J ماهیت انرژی برهمکنش مقداری مثبت است و $\langle ij \rangle$ به معنی جمع بر روی تمام همسایه های اول هست. عبارت دوم برهمکنش میان دو قطبی ها با میدان خارجی h است. در ادامه بحث بدون آنکه از کلیت بحث کاسته شود مقدار میدان خارجی را برابر صفر در نظر میگیریم.

شرایط اولیه :

برای شروع بهتر است که همه اسپین ها به یک سمت باشد که من جهت بالا یعنی $(+1)$ را انتخاب کردیم. میتوانیم جهت تصادفی را برگزینیم که باز با توجه به الگوریتم مشکلی بوجود نمیآورد. در اینجا به دلیل گسسته بود فضای فاز دست ما برای انتخاب طول قدم در جابجایی باز نیست. بهتر است که طول کوتاه ترین قدم را در نظر بگیریم. کوتاه ترین طول قدم معادل است با تغییر یکی از اسپین ها. یعنی کافی است یکی از اسپین ها به صورت کتره ای برداشته شود و در یک یک منفی دمایی ضرب شود. البته این کار نباید تا امتحان متروپولیس و قبول شرط نهایی شود.

الگوریتم چیست؟

الگوریتم و روش کار به صورت شکل زیر خلاصه میشود:



از آنجا که برای محاسبه احتمال قبول قدم نیاز به محاسبه عامل بولتزمن یعنی $e^{B \cdot \Delta \text{energy}}$ داریم در تمام محاسبات این ضرایب باهمم اشکار میشوند برای کاهش محاسبات میتوانیم از هاملی استفاده کنیم که در آن کاهش تعداد عملیات ضرب و تقسیم به عوامل کوچکتر را داریم پس من ثابت بولتزمن را برابر یک در نظر میگیرم و در ادامه میبینیم که این ساده سازی هیچ خللی در طول محاسبات وارد نمیکند.

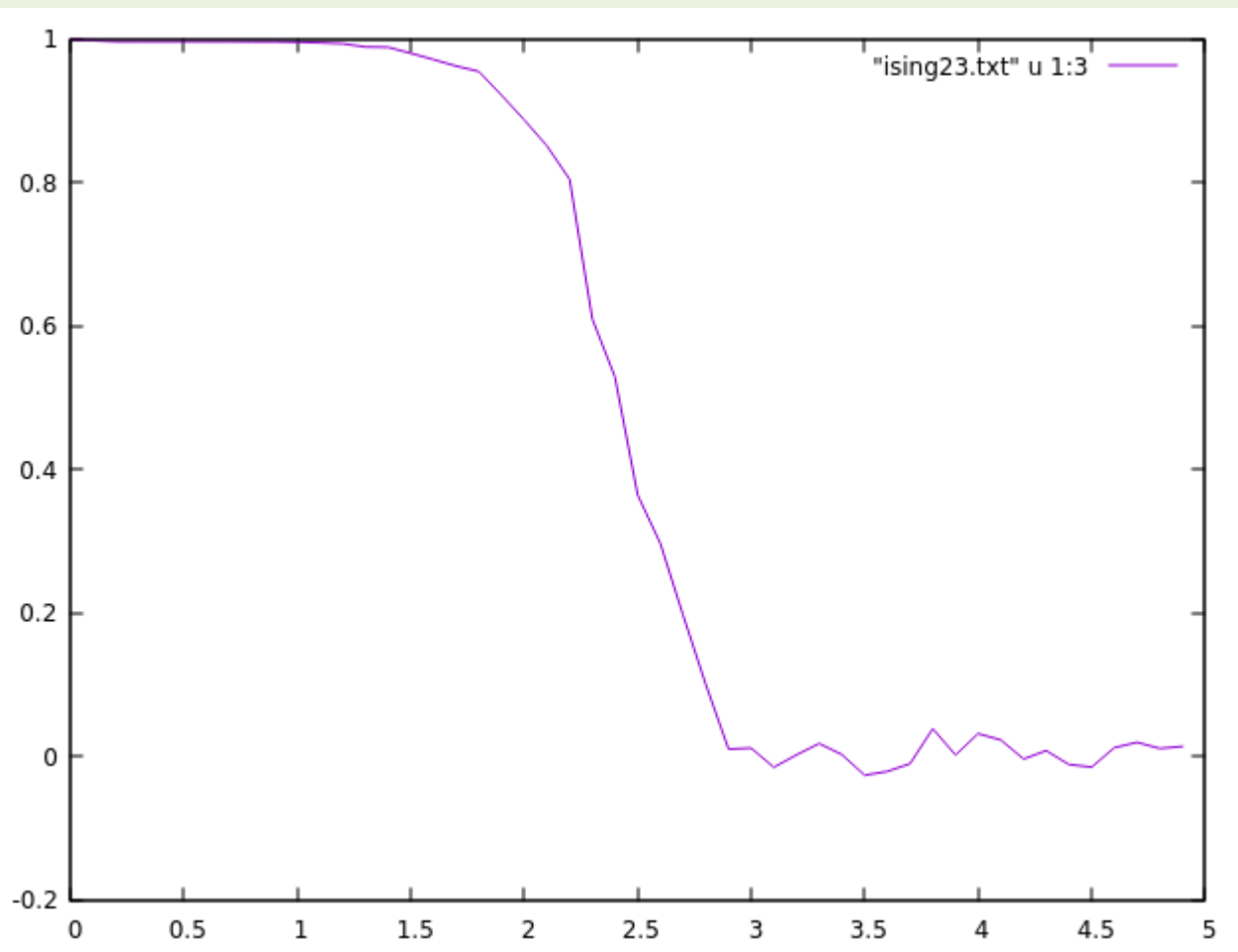
چرا finit size scaling؟

در هنگامی که دما برابر دمای بحرانی هست طول همبستگی معادل L میشود پس به عنوان نتیجه زمانی که اسکیل سیستم مشخص باشد میتوان نقطه بحرانی واقعی را مشاهده کرد.

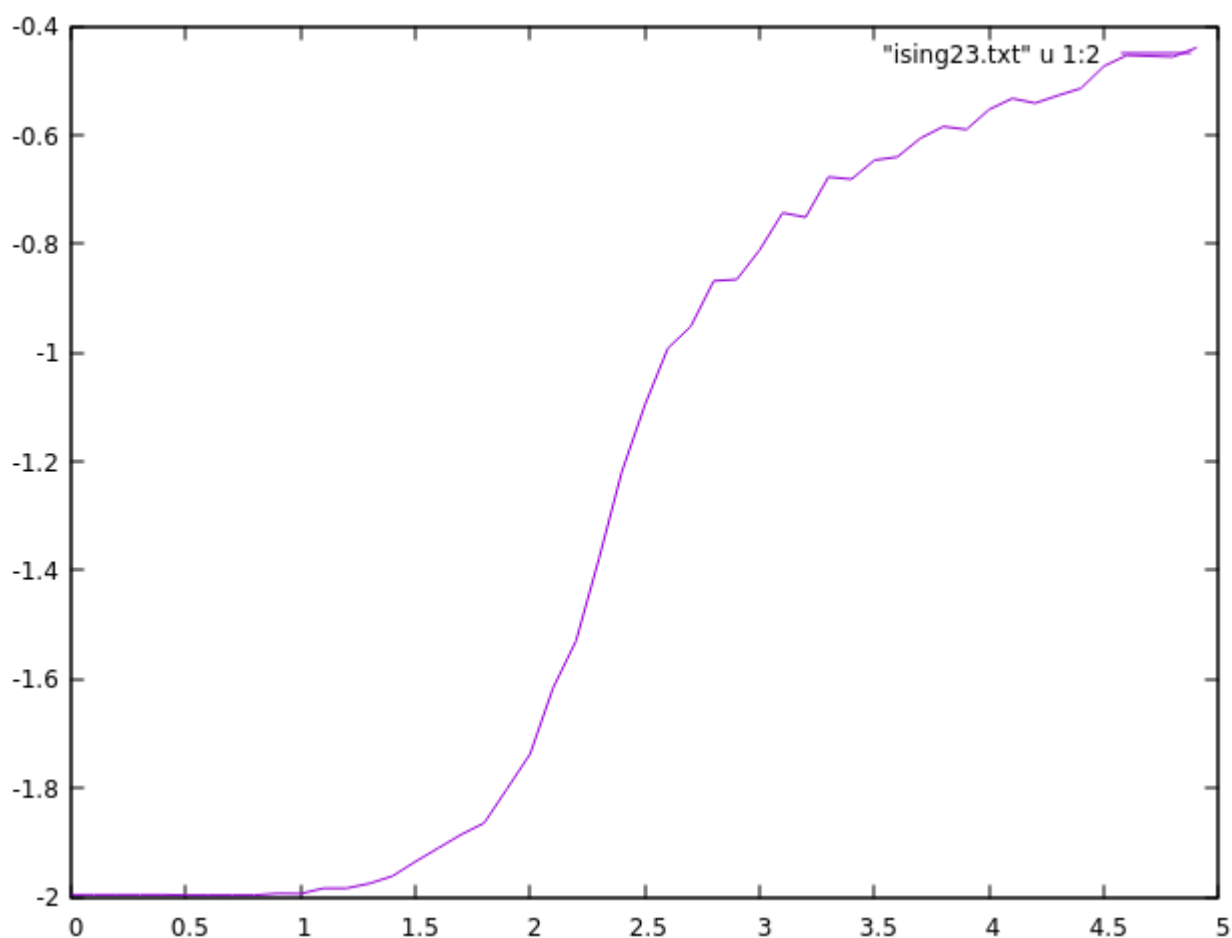
جزئیات کد برنامه :

در ابتدا باید اشاره کنم شبکه ما 100×100 هست و دلیل این انتخاب این بود با توجه به سائز شبکه ممکن است در سائز کوچک با رفتار اندک متفاوت مواجه بشیم.

پس از نوشتن برنامه اولین مشکلی که به آن برخورد کردیم این بود این بود که نتایج ما با آن مورد انتظاری متفاوت بود و آن تفاوت این بود که سیستم در همان دمای اولیه سیستم که برابر ۰/۱ کلوین بود سیستم با افت شدید مغناطش مواجه میشد که این مشکل از آنجا شکل میگرفت که من در انتخاب تابع راندم اشتباه میکردم و آن تابع خود تابع راندم خود c بود که حتی با seed متفاوت که در واقع همان زمان کامپوتر بود باز با مشکل مواجه میشدیم و پس از تابع راندم را عوض کردم و متوجه درستی کارکرد سیستم خود شدم و مشکل این بود که تابع راندم خود c نمیتواند همه بخش فضای فاز را پوشش دهد و این یک مشکل هست برای همین بود که سیستم در یک بخش خاص با افت شدید مغناطش مواجه میشد. نکته مهم در این قسمت برنامه این تابع راندم نباید به صورت عدد گاوسی تولید کند. تابع راندم درست شد و برنامه به خوبی کار میکرد و حال نیاز بود که قدم های مونت کارلو را افزایش دهیم که باز متوجه شدیم هرچه قدم سیستم را افزایش دهیم نویز از سیستم حذف نمیشود و این یعنی نیاز بود به یک میان گیری از داده ها در استپ دمایی متفاوت و این کار باعث شد نویز از سیستم تا حد قابل قبول حذف شود. بدون میانگیری برای مغناطش شاد این نمودار بودیم.



که این یعنی رفتار درست را داشت ولی دوتا مشکل دارد:
۱- رفتار بحرانی و نقطه بحرانی را خوب نشان نمیدهد.
۲- با توجه به توضیحات خود استاد باید خوب میانگیری شود.
همچنین برای انرژی شاهد نمودار زیر بودیم:



در گام دوم به نکته عجیبی که برخورد کردیم این بود که سیستم از حافظه کافی برخوردار نبود و این یعنی نیاز بود از `pointer` استفاده کنیم که این کار تا حد کافی مشکل را برطرف کرد و مشکلی برای ران های طولانی مدت نبود.

نکته ی دیگر در محاسبه ظرفیت گرمایی این بود چون من از داده ها میانگین گیری میکنم باید عدد های به دست آمده را در مورد ظرفیت گرمایی تقسیم بر ۱۰۰ و در مورد ظرفیت گرمایی تقسیم بر ۱۰۰۰ بکنم.

نکته بعدی که به آن برخورد کردیم این بود که در هر مرحله میان گیری دمایی باید باید اسپین ها را به سمت `up` برگردانیم و این کاری بود که ما نمی کردیم. و متوجه اعداد عجیب غریب شدیم.

فرمول محاسبه ی ظرفیت گرمایی ویژه (c) و پذیرفتاری مغناطیسی (x) به صورت زیر است:

$$\langle E \rangle - \langle E \rangle^2$$

$$X = 1/Kbt^* \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2$$

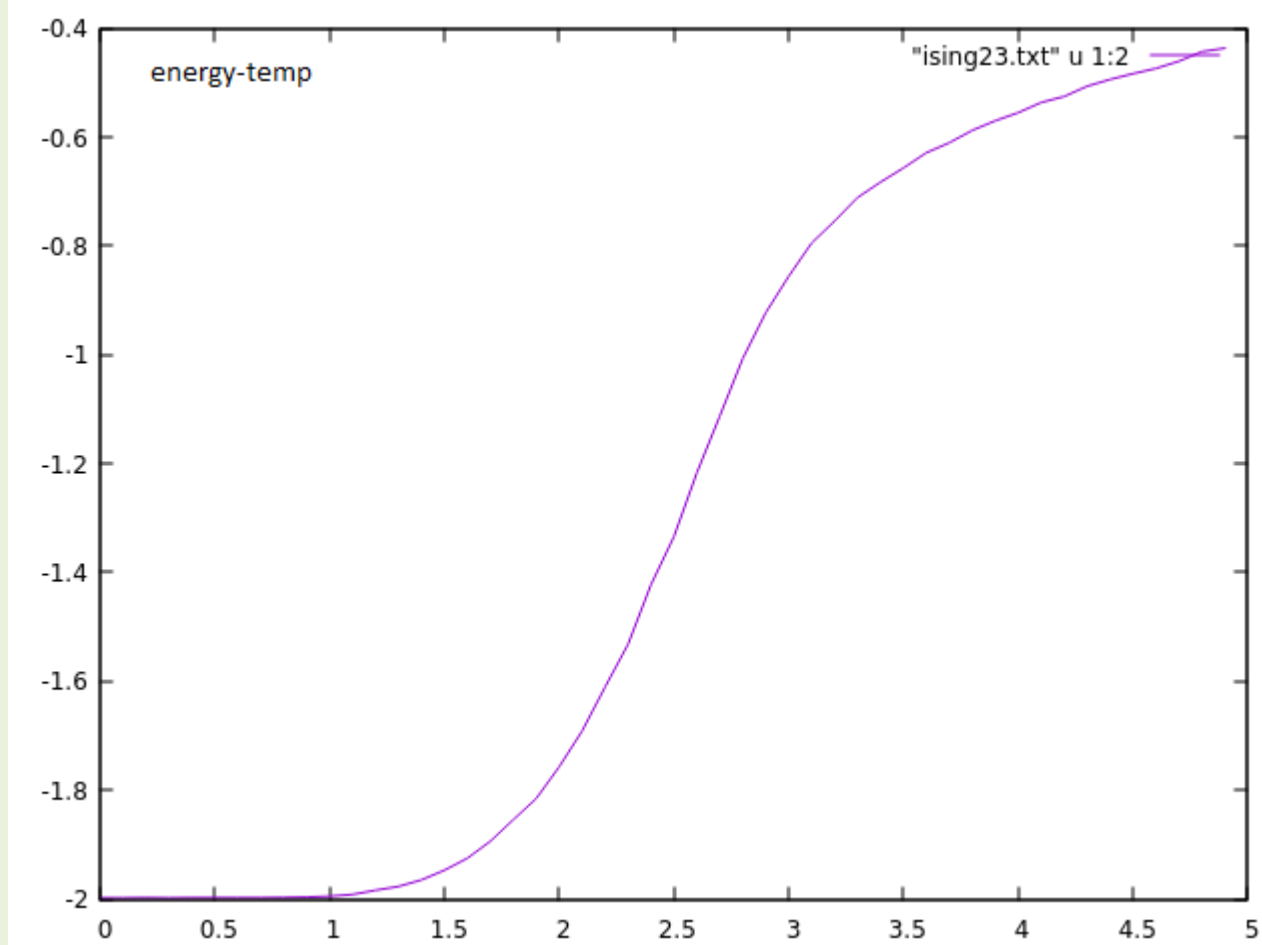
که این یعنی در نقطه گذار فاز باید با افزایش ناگهانی ظرفیت گرمایی مواجه بشویم و همچنین در نقطه بحرانی باید باز این افزایش ناگهانی دیده شود.

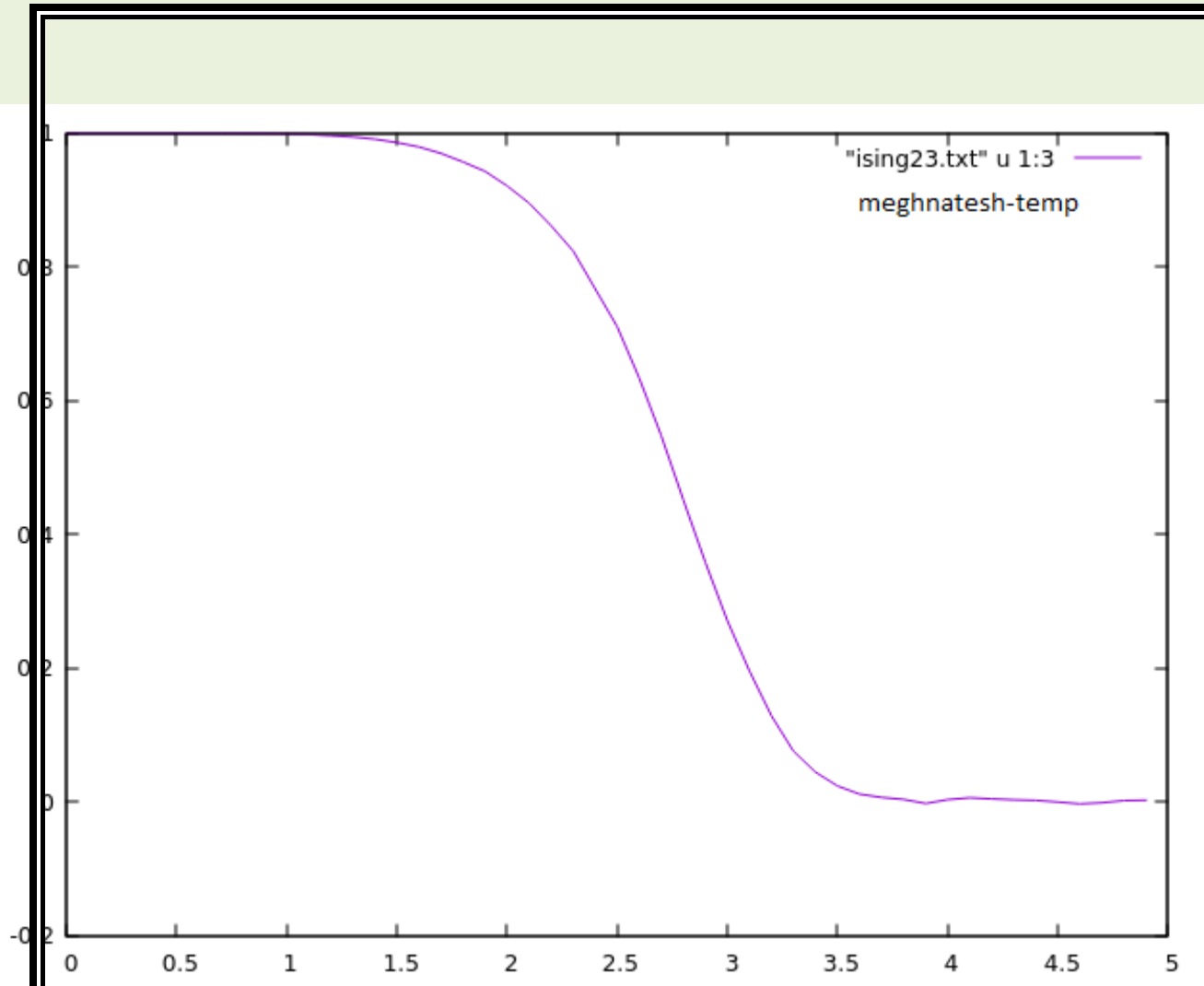
- بررسی نقطه تعادل:

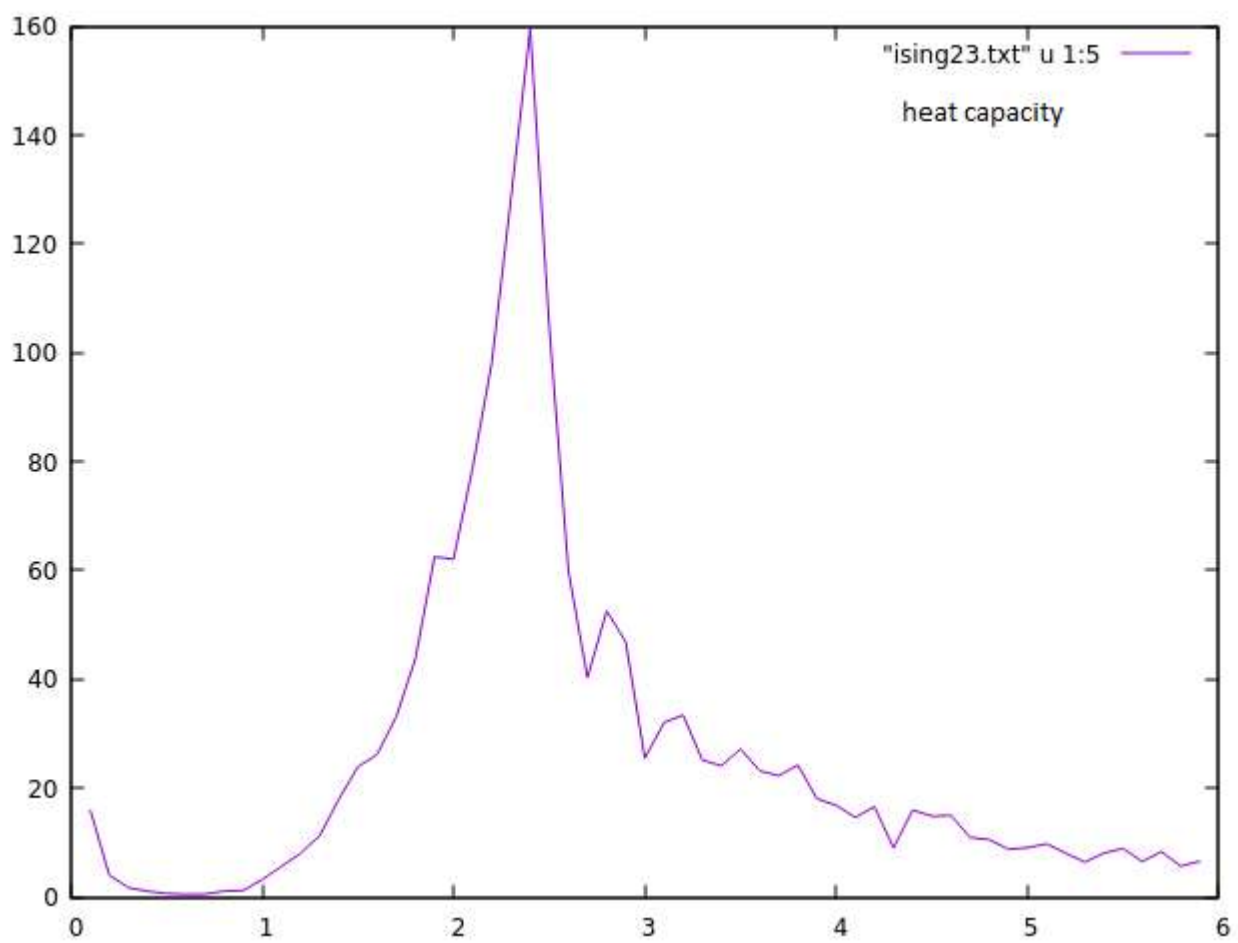
در این قسمت که در یک مجزا نوشته شده امدیم و به صورت تک دما به قضیه نگاه کردیم و بررسی کردیم که در نقطه تعادل برحسب افزایش استپ های مونت کارلو چه اتفاقی در سیستم میفتد که با افزایش گام به گام استپ های مونت کارلو مشاهده کردیم سیستم از رفتار یکنواخت به پرش یک مرتبه به سمت صفر سیستم تغییر رفتار میدهد که با افزایش گام های مونت کارلو ان را به صورت یک فایل متحرک تصویری در آوردیم که میتوانید مشاهده کنید. آخرین استپ مورد بررسی ما در ان از مرتبه 10^6 هست. و با افزایش گام های مونت کارلو نویزی بودن سیستم افزایش میکند. که فایل متحرک ان قابل دسترسی در [github](#) نویسنده میباشد.

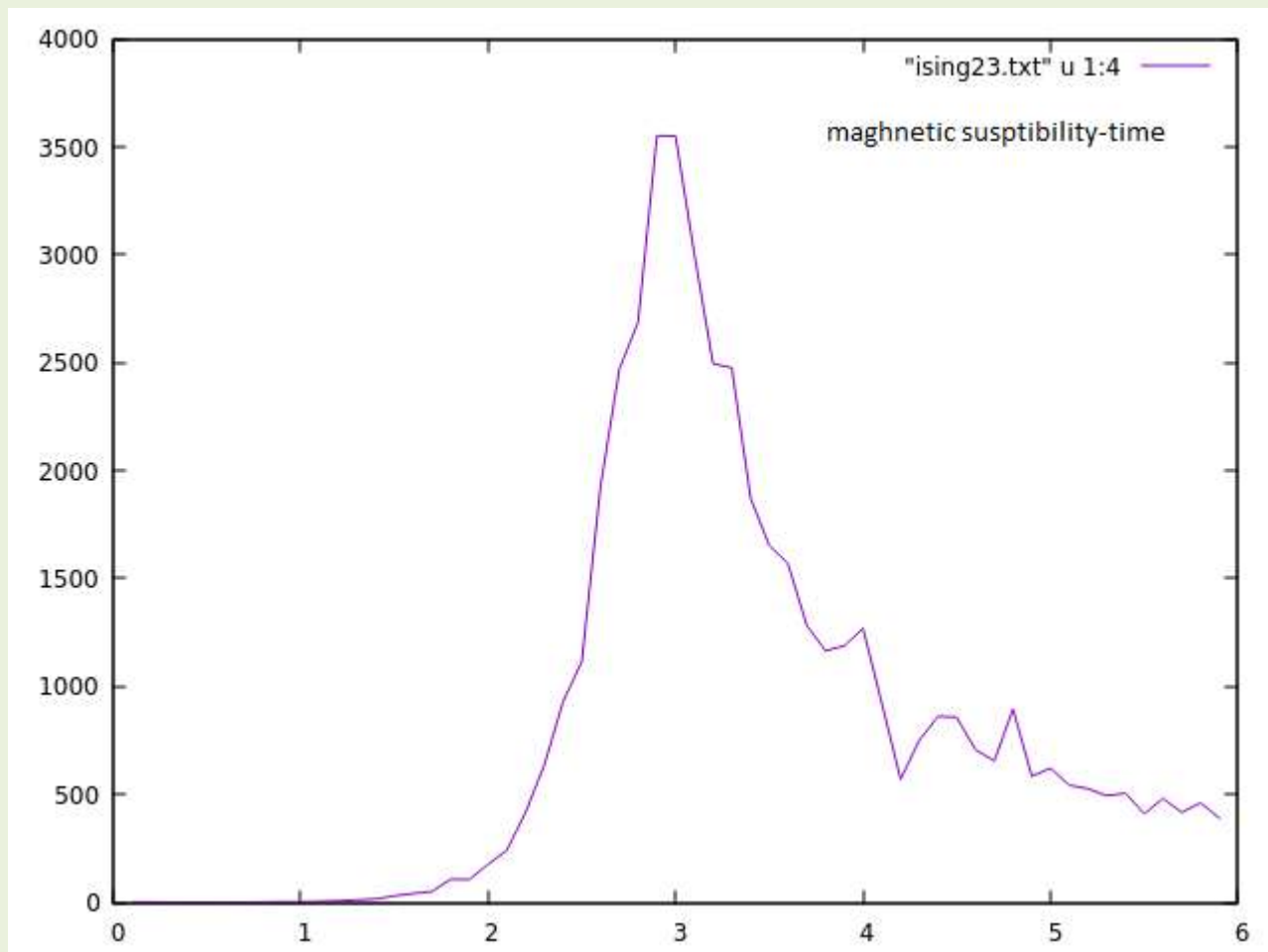
۳. نتیجه گیری

در ادامه با رفع اشکال های توانستیم پلات مورد نظر را رسم کنیم:









بدیهی است که دو نمودار آخر در حالتی به دست آمده که امکان ران بیشتر برای سیستم من فراهم نبود.
با توجه به مقادیر به دست آمده مقدار اعداد به دست آمده برای من به شرح زیر است:

دمای بحرانی = $2/25$
ظرفیت گرمایی = $0/16$
پذیرفتاری مغناطیسی $\approx 0/35$

نکته آخر در مورد پلات آخر این هست که باید از صفر شروع شود

- ۱- فایل تدریس مدل ایزینگ دکتر اجتهادی از دانشگاه صنعتی شریف
- ۲- numerical analysis of ۲D ising model
- ۳- ۲D ising model the metropolis algorithm: siddharth sourabh sahu
- ۴- simulation of the ising model :Michel sova
- ۵- the analytical expression for finite-size ۲D ising model