
3.1 Klasični Monte-Carlo

MIHA SRDINŠEK

I. UVOD

Tokrat sem se ukvarjal z Metropolisovim algoritmom. Z njim sem ocenil nekaj termodinamskih opazljivk, kot sta korelacija in energija. Del naloge je bilo tudi reševanje 2D Isingovega modela z metropolisovim algoritmom, vendar sem tak primer poglobljeno reševal že pri drugem predmetu in zato poročilo prilagam kar od tam. Tokrat sem se potem lotil Heisenbergovega modela, pri katerem energijo zapišemo kot

$$H = - \sum_{j=1}^N \left(J \vec{\sigma}_j \vec{\sigma}_{j+1} - h \sigma_j^z \right). \quad (1)$$

Kjer je N veliksot verige, J sklopitvena konstante, h magnetno polje $\vec{\sigma}_j$ pa vrtilna količina vrtavke na j -tem mestu. Uporabil sem robne pogoje in se zanimal predvsem za korelacije, ki jih zapišemo kot

$$C(r) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \langle \sigma_j^z \sigma_{j+r}^z \rangle. \quad (2)$$

To sem računal tako, da sem na vsakih recimo $3N$ korakov algoritma poračunal

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sigma_j^z \sigma_{j+r}^z \quad (3)$$

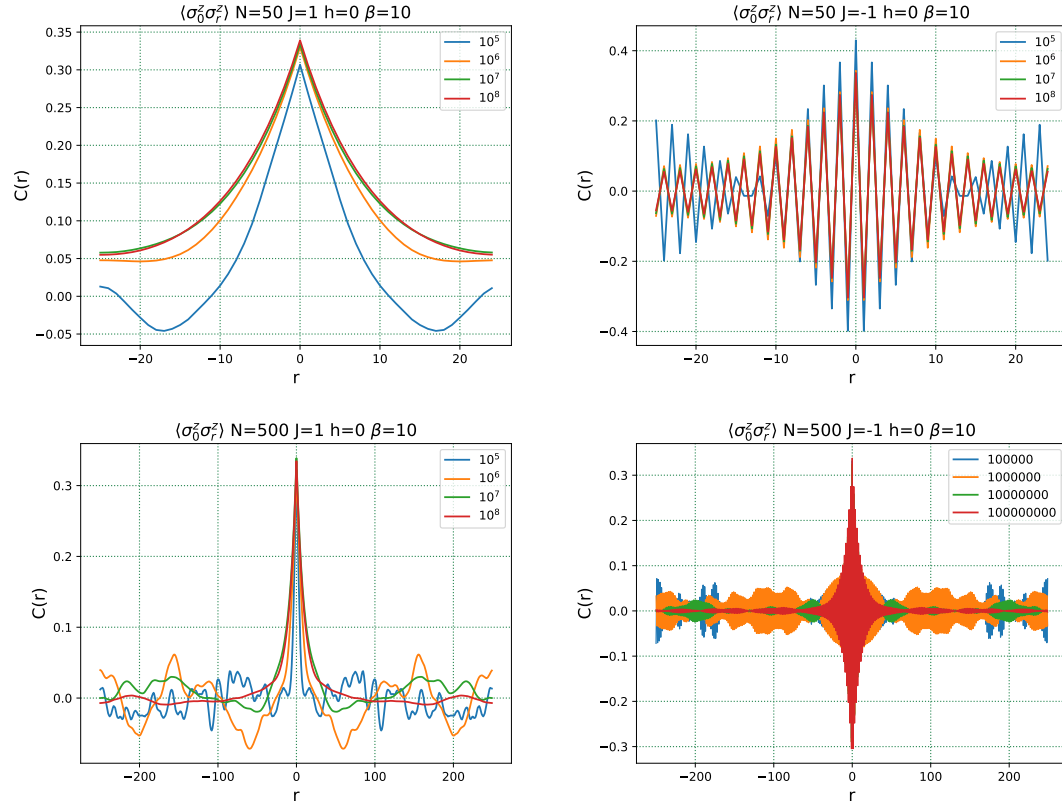
za vsak r . Potem pa sem vse te rezultate seštel in delil s številom izračunov.

II. 1D HEISENBERG

Najprej sem se potem lotil Heisenbergovega modela s cikličnimi robnimi pogoji. Potekalo je tako, da sem najprej izžrebal naključne položaje vrtilnih količin na celotni verigi in s tem stanjem začel algoritem. Vrtilne količine sem žrebal tako, da sem izžrebal dve naključni števili na intervalu $x_1, x_2 \in [0, 1]$ in potem določil naključna kota, enakomerno porazdeljena po sferi kot

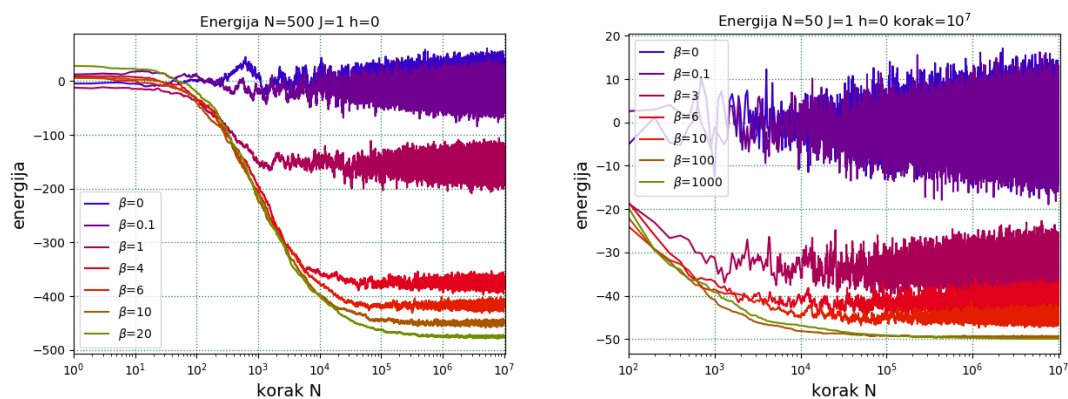
$$\phi = 2\pi x_1 \quad \theta = \arccos(2x_2 - 1) \quad (4)$$

Od tu dalje sem na vsakem koraku izžrebal naključno mesto na verigi in potem na tem naključnem mestu izžrebal novo vrtilno količino. Nato sem preveril, če je energija s to novo vrtilno količino nižja od prejšnje in jo v tem primeru sprejel. Če pa je bila nova energija višja, nove vrtilne količine še nisem zavrgel. V tem primeru sem izžrebal še eno naključno število na intervalu $[0, 1]$ in pogledal, če je to število večje ali manjše od $\exp(-\beta\Delta E)$, kjer je ΔE pač sprememba energije po izžrebanju nove vrtilne količine. Z notraj tega algoritma sem potem lahko še opazoval katere druge opazljivke in jih povprečeval.



Slika 1: Najprej me je zanimalo kako natančen je algoritem pri izbraen številu potez. Tako vidimo korelacijske funkcije izračunane pri različnem številu potez ($10^5, 10^6, 10^7, 10^8$). Levo imamo sklopitev $J > 0$, desno pa $J < 0$, zgoraj pri $N = 50$, spodaj pri $N = 500$.

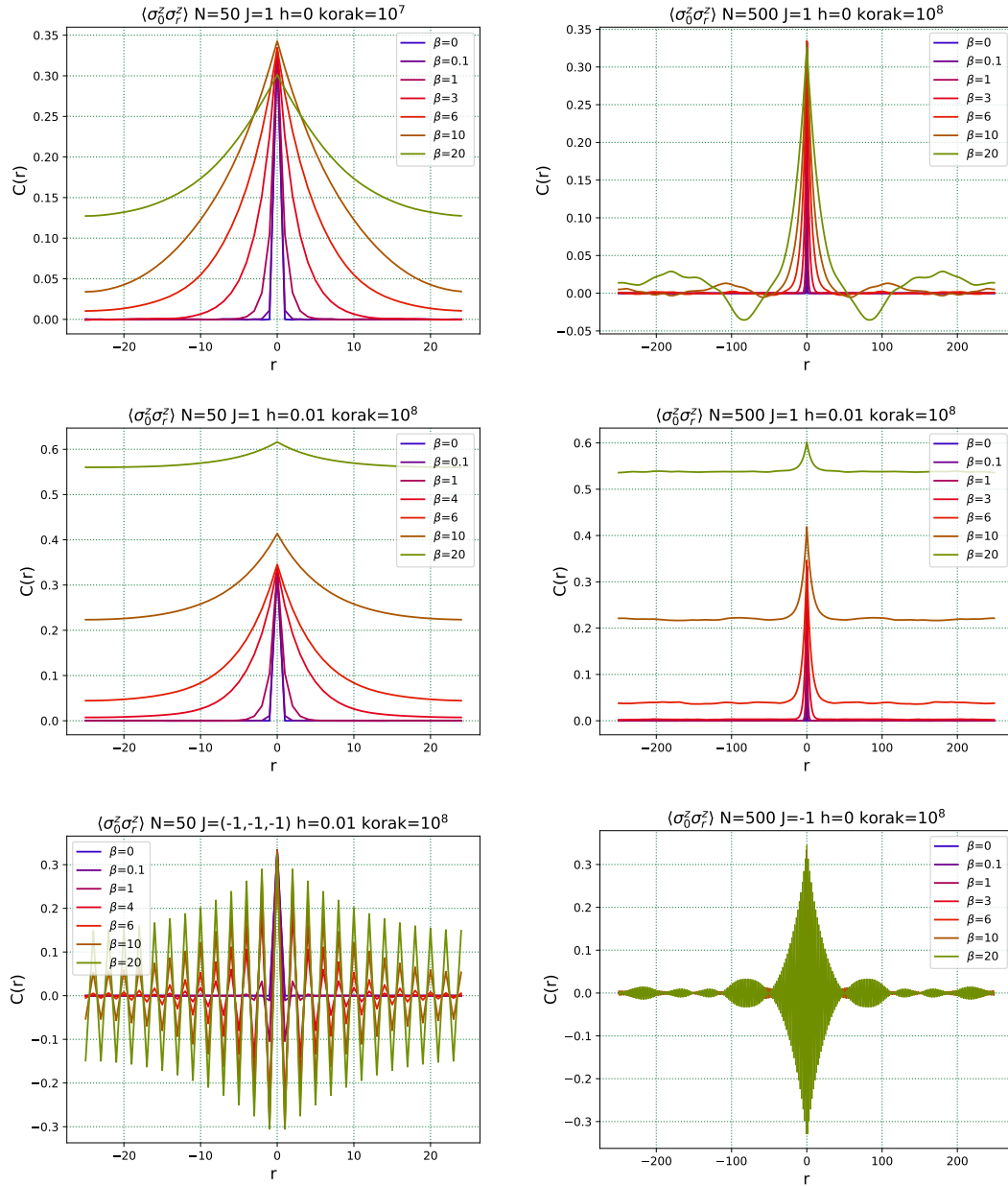
Iz slik 1 sem ocenil, da je najbolje izbrati 10^8 potez pri veliki verigi in 10^7 potez pri mali verigi. Kljub temu sem raje izvajal algoritem pri večjih verigah, saj se drugače korelacijska funkcija žaleti v robove verige. Načeloma velja tudi, da je treba vzeti dosti več korakov, če imamo večji β , oz nizko temperaturo, zato se kdaj na grafih vidi da začne napaka naraščati ko zvišujem β , saj nisem primerno podaljševal koraka.



Slika 2: Na slikah lahko opazujemo kako se energija spreminja ko izvajamo poteze metropolisovega algoritma. Energije sem izrisal za različne β . Na levi imamo veliksot verige $N = 500$, na desni pa $N = 50$. Vidimo da se energije približujejo $-JN$, nižja kot je energija.

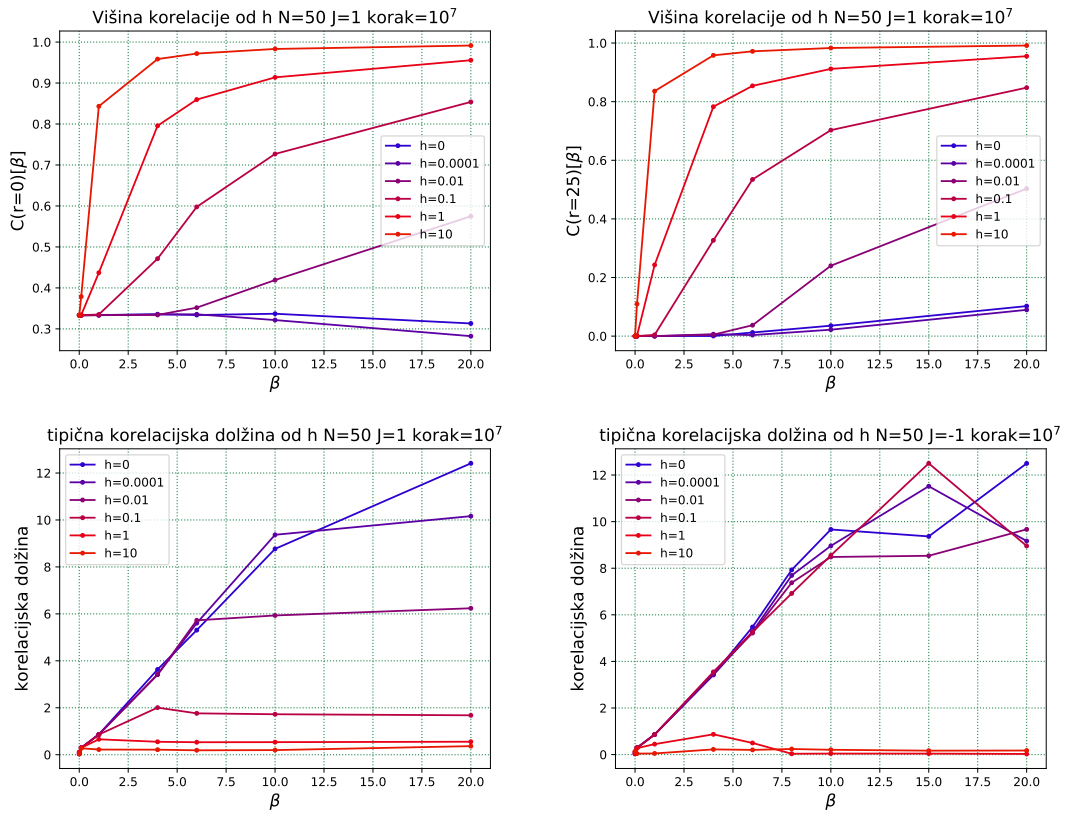
Na sliki 2 lahko tudi vidimo, kako se obnaša energija tekom algoritma. Kot smo pričakovali, se energija začne spuščati in približevati ravnovesni energiji. Glede na to kako smo sistem zapisali se mora energijsko najbolj ugodni položaj nahajati pri $\approx -JN$, kar tudi opazimo na slikah.

Od tu dalje se zopet posvetim korelacijskim funkcijam za različne morda potencialno zanimive primere. To lahko vidimo na slikah 3. Načeloma lahko opazimo, da se korelacijska dolžina povečuje skupaj z β , kar pomeni, da je pri nižjih temperaturah korelacijska dolžina daljša. Ko vklopimo magnetno polje, nam korelacijsko funkcijo dvigne, saj si lahko verjetno mislimo da magnetno polje prinaša dodaten red v sistem. Pri tem se moramo spomniti da to ne pomeni, da bi zdaj nekateri delci močnejše vplivali na druge, to pomeni samo da imajo bolj podobne položaje kot so jih imeli dosedaj. Na koncu lahko vidimo da se nekaj podobnega dogaja tudi v primeru $J = -1$.



Slika 3: Na slikah zgoraj lahko vidimo pri različnih velikostih verige, kako se za $J = 1$, $h = 0$ korelacija spreminja s temperaturo. Na srednjih slikah isto ob vklopi magnetnega polja $h = 0.01$, in spodaj za magnetno polje $h = 0.01$ pri $J = -1$. Pri $J = -1$ nisem opazil nobenih sprememb v odvisnosti od h , zato nisem raziskoval dalje.

Kar sem opazil na slikah 3 sem si želel malo bolje kvantificirati. Najprej me je zanimalo če lahko enostavno pogledam kako se z zviševanjem h dviguje vrednost korelacijske funkcije. Tako sem se odločil, da za izbrani h pogledam kako visoko je repek korelacijske funkcije ali pa vrh korelacijske funkcije v odvisnosti od β . To vidimo na slikah 4 zgoraj. Mogoče bi bilo bolje če bi risal odvisnost od h pri izbranem β , ampak zaradi teh slik lahko opazimo to, da se rezultati razlikujejo tudi za različne β . Zato sem se odločil, da kar na vsako rešitev prilegam eksponent, ker sme pričakoval, da korelacija pada eksponentno, potem pa sem izrisal kako je parameter ξ iz eksponenta $\exp(-x/\xi)$ odvisen od izbire β in h . Tako sem dobil sponja dva grafa, ki nam prikazujeta kako se tipična korelacijska dolžina definirana kot ξ spreminja z β pri različnih h . Vidimo, da pri velikih h vse skupaj postane že nesmiselno, sicer pa je precej zanimivo, ker vidimo da se očito korelacijska dolžina povečuje linearno z β . Skleпам, da pri se zavoj zgodi, ker je potem veriga že premajhna, lahko pa da sem samo vzel premalo korakov, ali pa da je naraščanje linearno samo pri majhnih β .

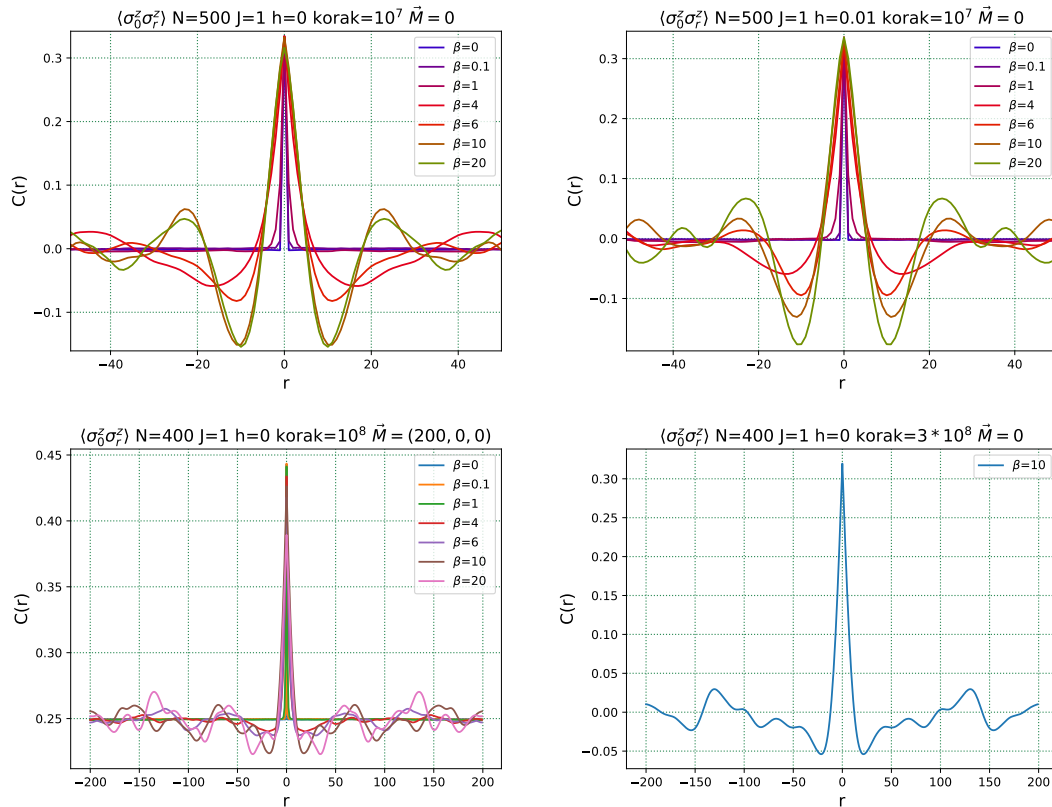


Slika 4: Na slikah zgoraj vidimo kako se višina korelacijske funkcije na robu ali na sredini spreminja s temperaturo in h . Na slikah spodaj pa vidimo kako se korelacijska dolžina ξ iz $\exp(-x/\xi)$ spreminja s temperaturo. Pri tem sem poskusil isto narediti še za $J = -1$, kjer sem potem gledal absolutno vrednost korelacijske funkcije.

III. 1D HEISENBERG Z VEZJO

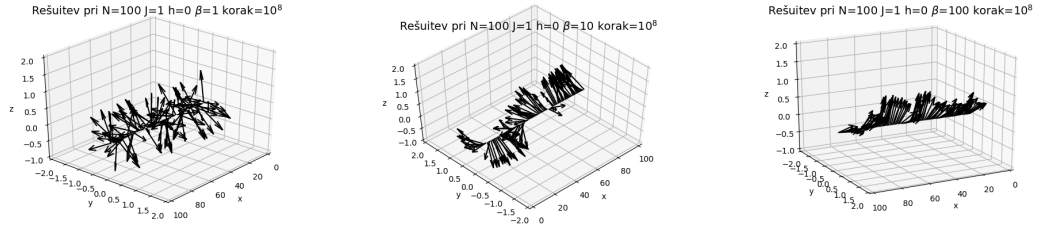
V tem primeru sem reševal Heisenbergov model ob prisotnosti vez, da mora biti celotna magnetizacija sistema ničti vektor $\vec{M} = \vec{0}$. Za to sem poskrbel tako, da sem na vsakem koraku izžrebal novo vrtilno količino tako, da sem zahteval da te vrtilne količine in vrtilne količine na enem mestu nazaj ostane ista. Ker sem imel hkrati zahtevo, davelikost vektorjev ostane 1,

sem lahko enostavno izžrebal nek kot $\phi = 2\pi x$, kjer je $x \in [0, 1)$ naključna sremenljivka. Nato pa sem oba vektorja enostavno zavrtel za ta kot okoli njune vsote. Za vrtenje vektorjev sem uproabil Euler–Rodriguesovo formulo. Najprej sem zavrtel en vektor, nato pa sem drugega izračunal kot razliko $\vec{\sigma}_{j-1} = \vec{M}_2 - \vec{\sigma}_j$, kjer je \vec{M}_2 vsota prvotnih dveh vektorjev. Vsoto celotne magnetizacije pa sem določil enostavno tako, da sem pripravil začento stanje, ki je imelo ničto magnetizacijo. Pri tem sem moral paziti da nisem vzel samo vrtilnih količin v smeri z obrnjenih izmenično gor in dol, ker bi se zaklenil v to stanje. Zato sem izbral stanje kjer sem izmenično dajal vrtilno z, vrtilno x, vrtilno mins z, vrtilno minus x.

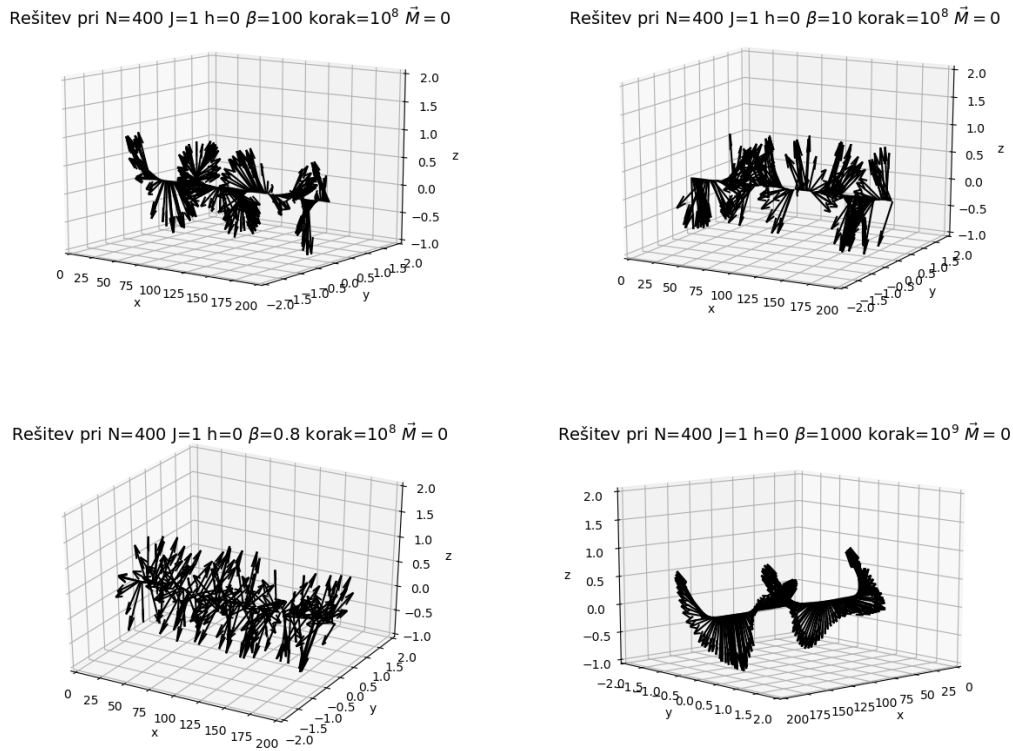


Slika 5: Slike prikazujeta kako se obnaša koralcijska funkcija če uvedemo vez. Vidimo da ni več eksponentne korelacije, vsaj jaz bi temu tako rekel. Pri velikih β je napaka že zelo velika. Slikah spodaj, kjer sem ravno v ta namen izrisal korelacijske funkcije pri večjem številu potez. Če povečamo število potez dobimo lepši rezultat, a širina špice ostaja ista. Na spodnjih slikah vidimo, da pri povečanem številu korakov dobimo lepši rezultat za korelacije pri vezi $\vec{M} = 0$

Na tej točki rata zanimivo opazovati, kaj se zgodi, če pogledamo dejanske konfiguracije teh vrtilnih količin v prostoru. To vidimo na slikah 6 in 7. Vidimo da v primeru brez vesi pri nizkih beta dobimo razmetano porazdelitev, ki se močno uredi v naključno smer pri veliki β . Ko pa uvedemo vez, kar vidimo na slikah 7, pa se zgodi, da se spini pri nizkih temperaturah uredijo v nekakšno spiralo. Pri tem je ta spirala lahko razdeljena v več domen, več spiralic ki se med seboj stikajo. Morda bi dobil lepši rezultat z večjim številom korakov.



Slika 6: Slike prikazujejo kako so postavljeni spini pri različni β v primeru da nimamo vezi. Vidimo da pridobijo neko urejenost in smer pri veliki β , zato pa tudi dobimo limto k energiji $-JN$.



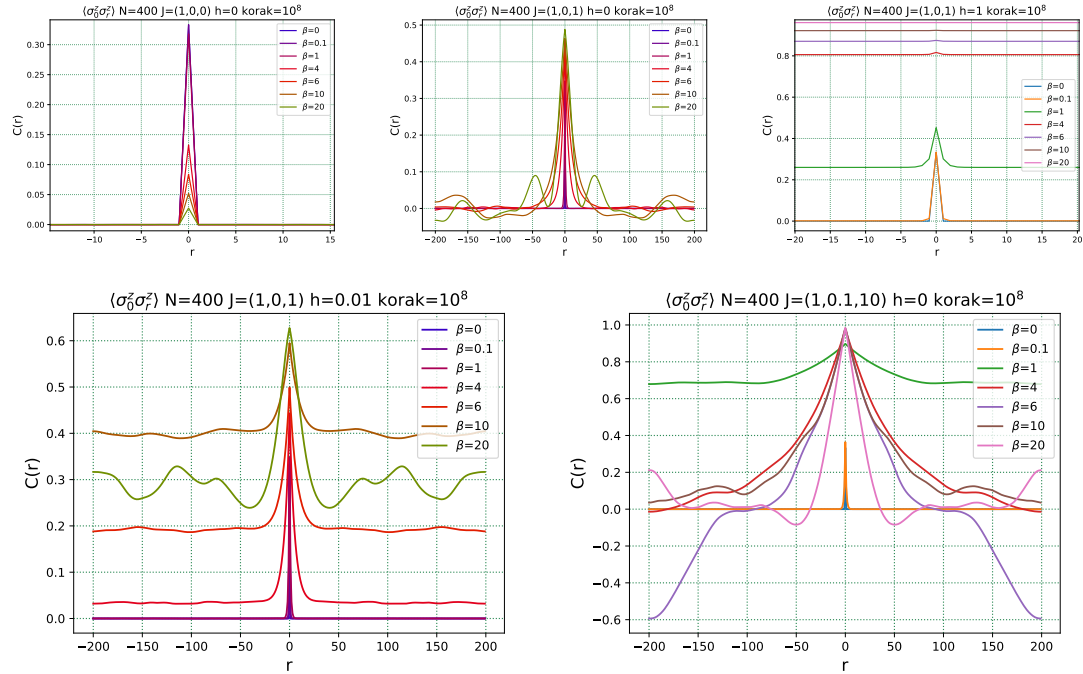
Slika 7: Na teh slikah vidimo kako izgleda veriga, če uvedemo neko vez. V tem primeru se začne pojavljati preferena k nekakšni spiralasti obliki. Pri velikih temperaturah je rezultat še vedno precej kaotičen.

IV. 1D HEISENBERGOV MODEL Z MATRIČNO INTERAKCIJO

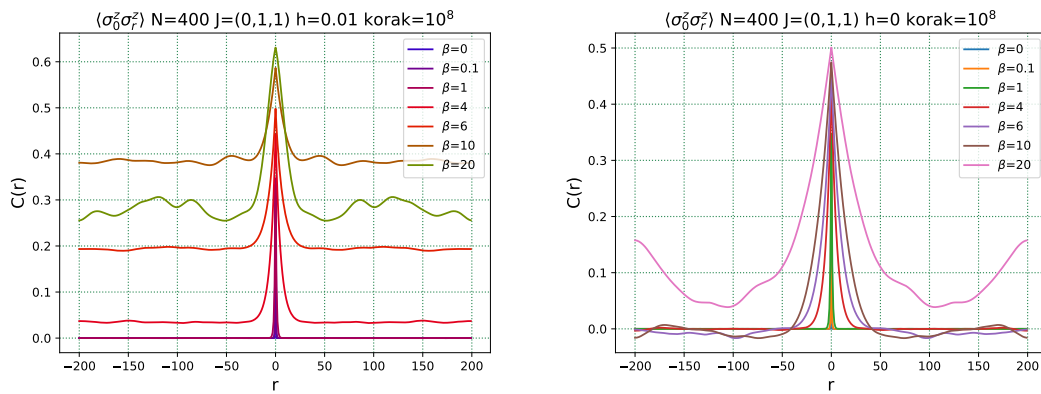
V pričakovanju zanimivih rezultatov, ki jih potem nisem dobil, sem si pogledal kajs e zgdi če vzamemo zalično interakcijo vzdolž razičnih osi. To pomeni da sem uvedel

$$H = - \sum_{j=1}^N \left(\vec{\sigma}_j J \vec{\sigma}_{j+1} - h \sigma_j^z \right), \quad (5)$$

kjer je sedaj J matrika. Zanimivo bi bilo pogledati kakšne rezultate dobimo, če je matrika diagonalna. Tako sem dobil različne korelacijske funkcije, kis si jih lahko ogledate na slikah 8 in 9. Je nekaj zanimivosti, aamok nimama časa razpravljati o njih.



Slika 8: Na slikah vidimo kako izgleda koralacijska fuinkcija, če vzamemo matrični model. Zgoraj imamo od leve proti desni $J = (1,0,0), h = 0$, $J = (1,0,1), h = 0$ in $J = (1,0,1), h = 1$. Spodaj pa imamo pri velikih β verjento že tudi preveliko napako, tako da se nebi zanašal na tisti krivoulji.



Slika 9: Podoben opis kot za sliko 8