

Algorytm Metropolis'a do rozwiązania modelu Isinga

prezentacja na modelowanie komputerowe

Natalia Wójcik, Łukasz Siemieniec, Konrad Skutnik

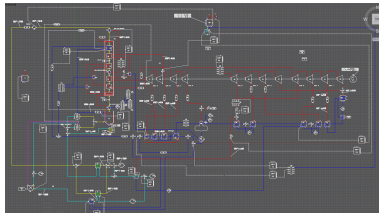
2022-Styczeń-10

Spis treści

- WSTĘP
- MAGNESY JAKO ALGORYTM METROPOLISA
- MODEL ŁAŃCUCHA ISING
- MECHANIKA STATYSTYCZNA
- ROZWIĄZANIA ANALITYCZNE
- ALGORYTM METROPOLII
- RÓWNOWAŻENIE I WŁAŚCIWOŚCI TERMODYNAMICZNE
- PODSUMOWANIE

Wstęp

Prezentowane informacje obejmują sposób symulowania materiałów magnetycznych za pomocą algorytmu Metropolis do rozwiązania modelu Ising.



Rysunek 1: przykładowa symulacja termodynamiczna

Magnesy jako algorytm Metropolisa

Ferromagnetyki zawierają domeny o skończonych rozmiarach, w których spiny wszystkich atomów wskazują ten sam kierunek.

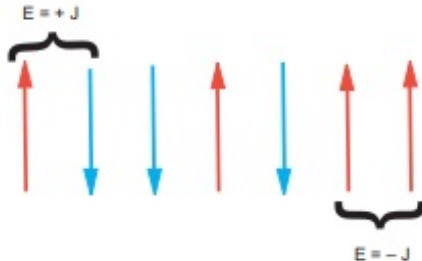
Gdy do tych materiałów zostanie przyłożone zewnętrzne pole magnetyczne, różne domeny wyrównają się, a materiały zostaną „namagnesowane”. Jednak wraz ze wzrostem temperatury całkowity magnetyzm maleje, a w temperaturze Curie system przechodzi przejście fazowe, poza którym znika wszelkie namagnesowanie.



Rysunek 2: spin atomu

Model łańcucha Ising

Za model przyjmujemy N dipoli magnetycznych zamocowanych na ogniwach łańcucha liniowego (model magnetyzmu Isinga). Energia interakcji między sąsiednimi parami to



Model łańcucha Ising

Następnie oblicza się spin według wzorów (Każda konfiguracja cząstek N jest opisana przez wektor stanu kwantowego):

$$s_i \equiv s_{z,i} = \pm \frac{1}{2}.$$

$$|\alpha_j\rangle = |s_1, s_2, \dots, s_N\rangle = \left\{ \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2}, \dots \right\}, \quad j = 1, \dots, 2^N$$

Ponieważ spin każdej cząstki może przyjmować jedną z dwóch wartości, istnieje 2^N różnych możliwych stanów dla cząstek N w układzie. Ponieważ stałych cząstek nie można zamieniać, nie musimy zajmować się symetrią funkcji falowej.

Model łańcucha Ising

Potencjał dipola, który oddziałuje z zewnętrznym polem magnetycznym i najbliższym sąsiadem oblicza się według wzoru:

$$V_i = -J \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_{i+1} - g\mu_b \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B}.$$

Energia układu w stanie α_k jest wartością oczekiwaną sumy potencjału V i spinów cząsteczek:

$$E_{\alpha_k} = \left\langle \alpha_k \left| \sum_i V_i \right| \alpha_k \right\rangle = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} - B\mu_b \sum_{i=1}^N s_i.$$

Model łańcucha Ising

- Paradoks w modelu Isinga pojawia się, gdy wyłączamy zewnętrzne pole magnetyczne, aby wyeliminować preferowany kierunek w przestrzeni
- Odpowiedzią jest to, system z $B = 0$ jest niestabilny.
- $B = 0$ - spiny oddziałują ze sobą. Oznacza to równocześnie, że nie ma preferowanego kierunku w przestrzeni, więc trzeba uważać na obliczenia i obserwować uważnie.
- Wyrównanie równowagi spinów zależy w sposób krytyczny od znaku wymiany energii J .

Model łańcucha Ising

- Jeśli $J > 0$, najniższy stan energetyczny będzie miał tendencję do wyrównania sąsiednich spinów
- Jeśli $J < 0$, najniższy stan energetyczny będzie miał sąsiadów o przeciwnych spinach.
- Jeśli temperatura jest wystarczająco niska, stan podstawowy będzie ferromagnesem z wyrównanymi wszystkimi spinami.
- Jeśli temperatura jest wystarczająco niska, stan podstawowy będzie antyferromagnesem o naprzemiennych spinach.

Model łańcucha Ising

Fascynującym aspektem materiałów magnetycznych jest istnienie temperatury krytycznej - Temperatura Curie, powyżej której namagnesowanie w zasadzie zanika.

Poniżej temperatury Curie stan kwantowy materiału ma uporządkowanie dalekosiężne, rozciągające się na makroskopowe wymiary.

Powyżej temperatury Curie istnieje tylko porządek krótkozasięgowy, rozciągający się na atomowe wymiary.

Mimo, że 1-D model Isinga przewiduje realistyczne zależności temperaturowe dla wielkości termodynamicznych, model jest zbyt prosty, aby wspierać przemianę fazową.

Mechanika statystyczna

Mechanika statystyczna zaczyna się od elementarnych interakcji między cząsteczkami układu i konstruuje makroskopowe właściwości termodynamiczne, takie jak ciepło właściwe.

Kiedy mówi się, że obiekt ma temperaturę, mamy na myśli, że atomy tego obiektu mają w równowadze termodynamicznej w temperaturze T średnią energię proporcjonalną do T .

Mechanika statystyczna

Energia E_{α_j} stanu α_j nie jest stała w zespole kanonicznym, ale rozłożone z prawdopodobieństwem $P(\alpha_j)$ podanymi przez rozkład Boltzmanna:

$$\mathcal{P}(E_{\alpha_j}, T) = \frac{e^{-E_{\alpha_j}/k_B T}}{Z(T)}, \quad Z(T) = \sum_{\alpha_j} e^{-E_{\alpha_j}/k_B T}.$$

- k - Stała Boltzmanna
- T - Temperatura
- $Z(T)$ - funkcja podziału, suma ważona nad stanami.

Rozwiązania analityczne

Czarną czcionką widoczne są wyniki analityczne dla ciepła właściwego w czasie przepływu 1 cząstki i namagnesowanie.

$$U = \langle E \rangle$$

$$\frac{U}{J} = -N \tanh \frac{J}{k_B T} = -N \frac{e^{J/k_B T} - e^{-J/k_B T}}{e^{J/k_B T} + e^{-J/k_B T}} = \begin{cases} N, & k_B T \rightarrow 0, \\ 0, & k_B T \rightarrow \infty. \end{cases}$$

$$C(k_B T) = \frac{1}{N} \frac{dU}{dT} = \frac{(J/k_B T)^2}{\cosh^2(J/k_B T)}$$

$$M(k_B T) = \frac{N e^{J/k_B T} \sinh(B/k_B T)}{\sqrt{e^{2J/k_B T} \sinh^2(B/k_B T) + e^{-2J/k_B T}}}$$

Rozwiązania analityczne

Energia wewnętrzna i pojemność cieplna są wyrażone w postaci eliptycznej całki.

$$\mathcal{M}(T) = \begin{cases} 0, & T > T_c \\ \frac{(1+z^2)^{1/4}(1-6z^2+z^4)^{1/8}}{\sqrt{1-z^2}}, & T < T_c, \end{cases}$$
$$kT_c \simeq 2.269185J, \quad z = e^{-2J/k_B T},$$

Gdzie temperatura jest mierzona w jednostkach **Curie** temperatury T .

Algorytm Metropolisa

Próbując opracować algorytm symulujący równowagę termiczną ważne jest, aby zrozumieć, że rozkład Boltzmann nie wymaga, żeby system pozostawał w najniższym stanie energii, ale mówi o tym, że jest małe prawdopodobieństwo, iż system znajdzie się w stanie o wyższej energii niż niższej.

W symulacji transmisji neutronów przez materię, Metropolis, Rosenbluth i Teller wynaleźli algorytm ulepszający obliczenia Monte Carlo. Ten algorytm jest obecnie podstawą fizyki obliczeniowej. Zmienia losowo poszczególne spiny tak, że prawdopodobieństwo wystąpienia konfiguracji jest zgodne z wnioskami Boltzmann.

Algorytm Metropolisa

Algorytm ten jest kombinacją techniki redukcji wariacji i techniki odrzucania von Neumanna.

Implementacja:

- Zaczynamy od ustalonej temperatury i początkowej konfiguracji spinu
- Zastosowuje się algorytm aż do osiągnięcia równowagi termicznej.
- Dalsze stosowanie algorytmu generuje fluktuacyjną statystykę dotyczącą równowagi, z których wyprowadza się wielkości termodynamiczne
- W kolejnym kroku zmienia się temperatura i cały proces się powtarza, dopóki wyprowadzone zostaną zależności T wielkości termodynamicznych.
- Czas oczekiwania na wyniki zależy od komputera.

Algorytm Metropolisa

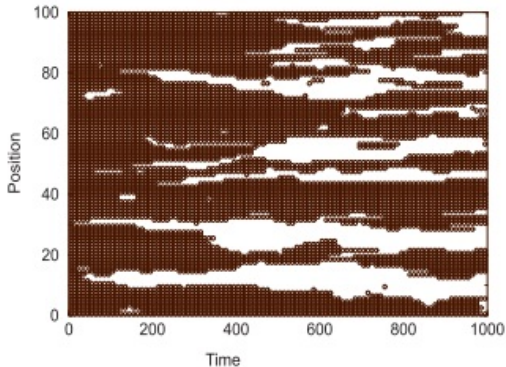
The explicit steps of the Metropolis algorithm are as follows.

1. Start with an arbitrary spin configuration $\alpha_k = \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$.
2. Generate a trial configuration α_{k+1} by
 - a. picking a particle i randomly and
 - b. flipping its spin.¹
3. Calculate the energy $E_{\alpha_{tr}}$ of the trial configuration.
4. If $E_{\alpha_{tr}} \leq E_{\alpha_k}$, accept the trial by setting $\alpha_{k+1} = \alpha_{tr}$.
5. If $E_{\alpha_{tr}} > E_{\alpha_k}$, accept with relative probability $\mathcal{R} = \exp(-\Delta E/k_B T)$:
 - a. Choose a uniform random number $0 \leq r_i \leq 1$.
 - b. Set $\alpha_{k+1} = \begin{cases} \alpha_{tr}, & \text{if } \mathcal{R} \geq r_j \text{ (accept),} \\ \alpha_k, & \text{if } \mathcal{R} < r_j \text{ (reject).} \end{cases}$

Stosunek prawdopodobieństwa dla próbnej konfiguracji energii E_t do początkowej konfiguracji energii E_i to:

$$\mathcal{R} = \frac{\mathcal{P}_{tr}}{\mathcal{P}_i} = e^{-\Delta E/k_B T}, \quad \Delta E = E_{\alpha_{tr}} - E_{\alpha_i}.$$

Algorytmy Metropolisa



Rysunek 3: Symulacja modelu Isinga z wykorzystaniem sieci jednowymiarowej o 100 spinach ułożonych wzdłuż rzędnej. Obroty w górę są oznaczone kótkami, a w dół pustymi miejscami. Numer iteracji i zależność spinów są pokazane wzdłuż odciętej. System tworzy domeny, gdy się równoważy.

Równowazenie i właściwości termodynamiczne

- Obserwacja łańcucha atomów N powinna osiągnąć równowagę termiczną w kontakcie z "kąpielą grzewczą".
- W wysokich temperaturach lub przy małej liczbie atomów obserwuje się zazwyczaj duże wahania, natomiast w niższych temperaturach są mniejsze wahania.
- Szukanie dowodów niestabilności, w których następuje spontaniczne odwrócenie dużej liczby spinów.
- W równowadze termicznej układ jest dynamiczny ze spinami ciągle "obracającymi się".
- Obserwacja powstawanie domen i ich wpływ na całkowitą energię.
- Tworzenie wykresu średniej wielkości domeny w funkcji temperatury.

Równoważenie i właściwości termodynamiczne

Dla danej konfiguracji spinu α_j energia i magniesowanie mają (wzór 15.14).

Energia wewnętrzna to tylko średnia wartość energii (wzór 15.15).

W której średnia jest przejmowana przez układ w równowadze. W wysokich temperaturach oczekuje się przypadkowy zestaw spinów, a więc zanikające namagnesowanie. W niskich temperaturach, gdy spiny są wyrównane, M zbliża się do $N/2$ (wzór 15.16).

Zróżnicowanie numeryczne może być niedokładne. Oblicza się wpiery wahania energii a potem określa ciepło właściwe z wahań (wzór 15.17, 15.18).

Równoważenie i właściwości termodynamiczne

$$E_{\alpha_j} = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1}, \quad \mathcal{M}_j = \sum_{i=1}^N s_i. \quad (15.14)$$

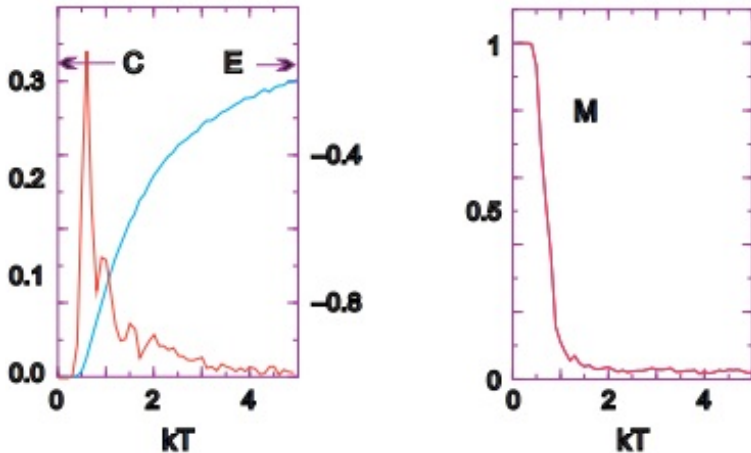
$$U(T) = \langle E \rangle, \quad (15.15)$$

$$C = \frac{1}{N} \frac{dU}{dT}, \quad (15.16)$$

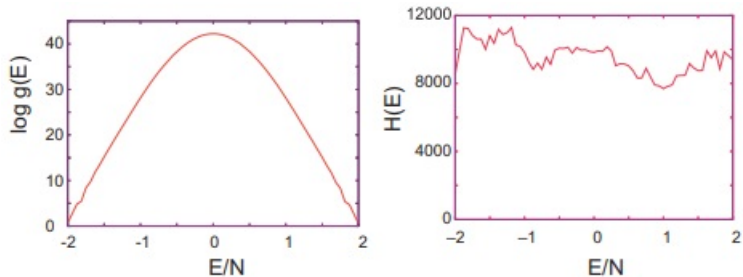
$$U_2 = \frac{1}{M} \sum_{t=1}^M (E_t)^2, \quad (15.17)$$

$$C = \frac{1}{N^2} \frac{U_2 - (U)^2}{k_B T^2} = \frac{1}{N^2} \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (15.18)$$

Równoważenie i właściwości termodynamiczne



Rysunek 4: Wynik symulacji z jednowymiarowego modelu Isinga o 100 spinach dla energii, ciepła właściwego i namagnesowania w funkcji temperatury



Rysunek 5: Próbkowanie Wang-Landau zastosowane w modelu. Po lewej logarytm z gęstości stanów w funkcji energii na cząstkę. Po prawej histogram pokazujący liczbę odwiedzonych stanów jako funkcja energii przypadającej na cząstkę

Podsumowanie

Termodynamika jest nauką o ciepłe. Zajmuje się z makroskopowego punktu widzenia badaniem zjawisk cieplnych i innych procesów, które są związane z przemianą energii.

Model Isinga – model matematyczny wykorzystywany w mechanice statystycznej do badań nad przejściami fazowymi. Został stworzony w roku 1920 przez Wilhelma Lenza jako model ferromagnetyka. A teraz przejdziemy do przedstawienia programu.