

Automaty komórkowe

v. 2.718281828459045235360287

Model Isinga

<http://home.agh.edu.pl/malarz/dyd/ak/>

Krzysztof Malarz

16 kwietnia 2024

Wprowadzenie I

Oryginalnie sformułowany przez Lenza [1] i rozwiązany dla jednowymiarowego ferromagnetyka w E. Ising. "Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus". *Zeitschrift für Physik* 31 (1925), 253–258.

Całkowita energia układu

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - H \sum_i S_i,$$

gdzie zmienna spinowa S_i przyjmuje tylko dwie wartości $S_i = \pm 1$ (czasami $S_i = \pm 1/2$, czasami $S_i = 0, 1$)

Wprowadzenie II

Całka oddziaływania wymiany

$$J_{ij} = \begin{cases} J_{ji} = J, & \text{dla } ij \text{ będących najbliższymi sąsiadami;} \\ 0, & \text{w przeciwnym wypadku.} \end{cases}$$

(W magnetyzmie jest to prawie zawsze prawdą.)

- $J > 0$ — sprzężenie ferromagnetyczne — preferowane ustawienie $\uparrow - \uparrow$ i/lub $\downarrow - \downarrow$
- $J < 0$ — sprzężenie antyferromagnetyczne — preferowane ustawianie $\downarrow - \uparrow$ i/lub $\uparrow - \downarrow$

Wprowadzenie III

Na H możemy patrzeć jak na energię oddziaływania spinów z zewnętrznym polem magnetycznym bądź wprost jak na pole \mathbf{H} . Wówczas $H \sum_i S_i$ jest sumą energii zeemmannowskich $\mathbf{H} \circ \mathbf{S}_i$. Pole \mathbf{H} stara się ustawić spiny zgodnie ze sobą.

Reguła DAK = tendencja układu do zmniejszania energii:

$$S_i(t+1) = \text{sign} \left(\sum_j J_{ij} S_j + H \right). \quad (1)$$

Fizycznie odpowiada to $T = 0$.

Dowód Derridy I

- Dla prostoty dowodu założmy $H = 0$.
- $g_i(t) = \sum_j J_{ij} S_j(t)$
- *Funkcja pracy:*

$$W(t) = - \sum_{ij} J_{ij} S_i(t) S_j(t+1)$$

- $W(t)$ można zapisać na dwa sposoby:

$$\begin{aligned} W(t) &= \\ &= - \sum_i g_i(t) S_i(t+1) \\ &= - \sum_i g_i(t+1) S_i(t) \end{aligned} \tag{2}$$

Dowód Derridy II

- Z reguły (1) DAK mamy:

$$S_i(t+2) = \text{sign}(g_i(t+1))$$

- Z pierwszej równości w (2):

$$W(t+1) = - \sum_i g_i(t+1) S_i(t+2) = - \sum_i |g_i(t+1)|$$

- Z drugiej równości w (2):

$$\begin{aligned} W(t) &= \\ &= - \sum_i |g_i(t+1)| \cdot \text{sign}[g_i(t+1)] S_i(t) \\ &= - \sum_i |g_i(t+1)| \cdot S_i(t+2) S_i(t) \end{aligned}$$

Dowód Derridy III

- Różnica

$$W(t+1) - W(t) = - \sum_i |g_i(t+1)| \cdot [1 - S_i(t+2)S_i(t)]$$

jest **niedodatnia**.

- Z tego wnioskujemy, że $W(t)$ jest **nierosnąca**.
- Dla układów skończonych wiecznie maleć nie może, więc $S_i(t+2) = S_i(t)$.
- Mamy więc do czynienia z AK klasy II. A gdy $S_i(t \rightarrow \infty) \rightarrow \text{const}$ — z AK klasy I.

Metody Monte Carlo I

- Do obliczania równowagowych wartości charakterystycznych wielkości układu opisanego modelem Isinga możemy się posłużyć formalizmem sumy statystycznej:

$$Z = \sum_{\sigma} \exp[-\beta E(\sigma)].$$

Sumowanie odbywa się po **wszystkich stanach** układu σ .

- Odwrotność energii termicznej:

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

Metody Monte Carlo II

- Dla układu N spinów mamy jednak 2^N możliwych stanów układu i tyle samo składników Z — problem jest więc klasy NP.
- Ścisłe obliczenia (oprócz pracy doktorskiej Isinga dla 1D) powiodły się dla sieci dwuwymiarowej pod nieobecność pola magnetycznego [3].
- Dlatego w celu obliczenia *magnetyzacji* w zależności od pola H i temperatury T musimy posłużyć się *probabilistycznymi automatami komórkowymi*.
- Niech p_i będzie prawdopodobieństwem, że i -ty spin jest zwrócony w górę.

Metody Monte Carlo III

- Zmiana tego p_i może być zapisana w czasie:

$$\frac{dp_i}{dt} = -p_i w_i(\uparrow \rightarrow \downarrow) + (1 - p_i) w_i(\downarrow \rightarrow \uparrow),$$

gdzie $w_i(\uparrow \rightarrow \downarrow)$ jest prawdopodobieństwem odwrócenia i -tego spinu z \uparrow na \downarrow .

- W równowadze

$$\frac{dp_i}{dt} = 0.$$

- A samo p_i dane jest rozkładem Gibbsa $p_i \propto \exp[-\beta E(\uparrow)]$.
- Skąd

$$\frac{w_i(\uparrow \rightarrow \downarrow)}{w_i(\downarrow \rightarrow \uparrow)} = \exp\{\beta[E(\uparrow) - E(\downarrow)]\} = \exp[2\beta E(\uparrow)]$$

niezależnie czy w równowadze czy nie (bo w_i nie zależą od p_i).

Schemat Metropolisia

W schemacie Metropolisia [4], prawdopodobieństwo akceptacji nowej konfiguracji jest dane poprzez

$$p_{\mu_i \rightarrow \eta_i}^M = \min\{1, \exp[-(E_{\eta_i} - E_{\mu_i})/k_B T]\}. \quad (3)$$

W przeciwieństwie jednak do dynamiki glauberowskiej spiny są odwiedzane w losowej kolejności (losowa permutacja etykiet spinów strzeże by każdy spin był odwiedzony i to dokładnie raz na MCS).

- Wybieramy losowo komórkę i .
- Tworzymy konfigurację próbną z losowo wybranym spinem $S'_i = \pm 1$ i obliczamy z wiązaną z tym wyborem zmianę energii ΔE :

$\Delta E \leq 0$ — akceptujemy konfigurację próbną;

$\Delta E > 0$ — akceptujemy ją z prawdopodobieństwem $\exp(-\beta \Delta E)$.

Dynamika Glaubera I

Dla każdego spinu i znajdującego się w otoczeniu (rozumianym „razem z nim”) o konfiguracji μ_i , nowa konfiguracja η_i powstała poprzez wylosowanie ($S'_i = \pm 1$) jest tworzona i akceptowana z prawdopodobieństwem

$$p_{\mu_i \rightarrow \eta_i}^G = \frac{\exp(-E_{\eta_i}/k_B T)}{\exp(-E_{\mu_i}/k_B T) + \exp(-E_{\eta_i}/k_B T)}, \quad (4)$$

gdzie E_{η_i} jest energią konfiguracji η_i , E_{μ_i} jest energią konfiguracji μ_i a k_B jest stałą Boltzmanna [5].

- Dla każdego i obliczamy:

$$r_i(t) = \frac{1}{1 + \exp\{-2\beta[\sum_j J_{ij} S_j(t)]\}}$$

Dynamika Glaubera II

- Losujemy liczbę $R \in [0; 1]$
- Jeśli $S_i(t) = -1$
 - $R \leq r_i(t) \rightarrow S_i(t+1) = +1$
 - $R > r_i(t) \rightarrow S_i(t+1) = -1$
- Jeśli $S_i(t) = +1$
 - $R \leq 1 - r_i(t) \rightarrow S_i(t+1) = +1$
 - $R > 1 - r_i(t) \rightarrow S_i(t+1) = -1$

Kąpiel cieplna

- Komórki modyfikujemy jedna za drugą.
- Dla każdej obliczamy:

$$r_i(t) = \frac{1}{1 + \exp\{-2\beta[\sum_j J_{ij}S_j(t)]\}}$$

- Losujemy liczbę $R \in [0; 1]$. Jeśli

$$\begin{cases} R \leq r_i(t) & \text{to } S_i(t+1) = +1; \\ R > r_i(t) & \text{to } S_i(t+1) = -1. \end{cases}$$

Kilka uwag natury technicznej I

- Dla $T = 0$ wszystkie te trzy metody sprowadzają się do reguły deterministycznej (1).
- Dla niskich temperatur algorytm “lubi” się zawiesić na metastabilnej konfiguracji spinów (np. dla temperatury poniżej T_C i w polu równym zero $H = 0$ jeśli zaczniemy symulację od stanu z $m = 0$).
- Układ będzie dążył do stanu równowagi w sposób niewyobrażalnie powolny.
- Wprowadza się “demony Creutz’a” — błądzące po siatce i odwracające “domeny” niezależnie od reguł.
- Najlepiej więc rozpoczynać symulacje z $m = 1$.

Kilka uwag natury technicznej II

- Dla najbardziej interesującego tj. 3D przypadku nie ma rozwiązań analitycznych i symulacja jest jedynym podejściem teoretycznym.
- “*Multispin coding*” jest techniką pozwalającą na przyspieszenie obliczeń poprzez operowanie na 32-bitach jednocześnie.
- Przy sprzężeniu antyferromagnetycznym w celu ominięcia przerzucania wszystkich stanów sieci z \uparrow na \downarrow przy początkowej $m = 1$ należy przechodzić przez siatkę rozsądnie (tj. co drugi węzeł).

Kilka uwag natury technicznej III

- Energia spinu na siatkach regularnych jest „skwantowana”: nie ma co jej za każdym razem obliczać. To oznacza, że zmiana energii związana z odwróceniem spinu również przyjmuje kilka wielkości w zależności do liczby koordynacyjnej wężła sieci w której umieszczony jest spin. Wystarczy stworzyć tablicę prawdopodobieństw akceptacji nowej konfiguracji/odwrócenia spinu r w zależności od „zwrotu” spinu i ilości spinów skierowanych w określoną stronę w jego otoczeniu (nie licząc jego).

1d

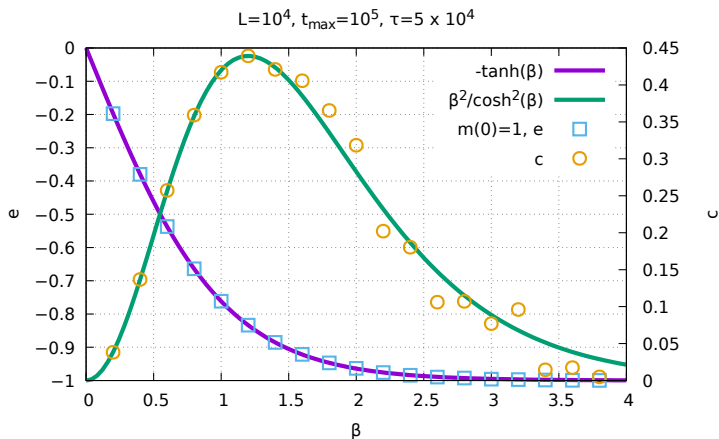


Figure: Gęstość energii i ciepło właściwe

2d

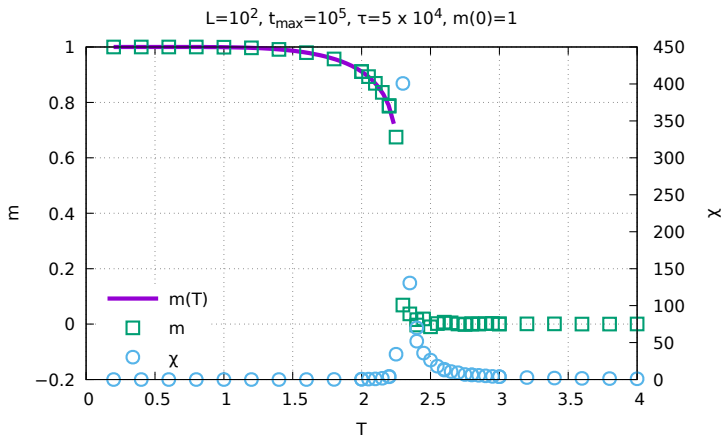


Figure: Namagnesowanie i podatność

3d

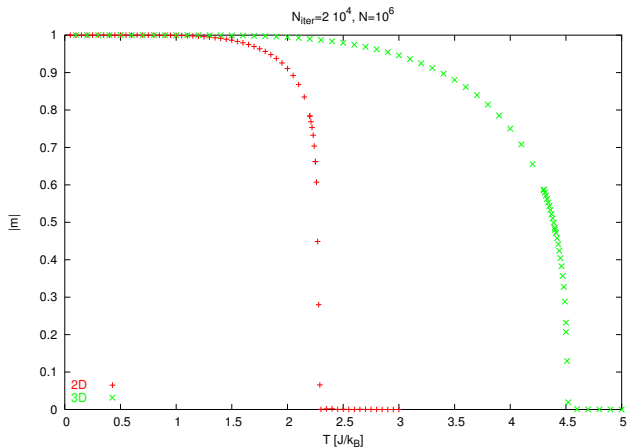


Figure: $T_C^{2D} = 2.27[J/k_B]$, $T_C^{3D} = 4.51[J/k_B]$

T_C na sieciach regularnych z dodatkowymi sąsiadami

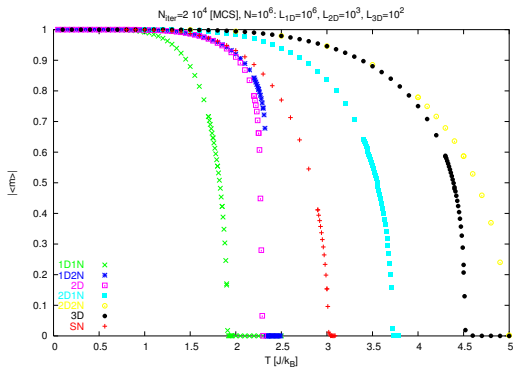


Figure: Wróćmy do tego [6] i nadamy wynikowi (nad)interpretację socjologiczną...

T_C na sieciach Archimedesesa I

Siatki Archimedesesa to grafy translacyjne wierzchołków, które można osadzić na płaszczyźnie tak, aby każda ściana była wielokątem foremnym [7]. Kepler pokazał, że istnieje dokładnie jedenaście takich grafów. Nazwy sieci nadawane są według wielokątów przypadających na dany wierzchołek. Liczby boków tych wielokątów są wymieniane w takiej kolejności aby utworzona sekwencja była możliwie najmniejsza w porządku leksykograficznym. W ten sposób siatka kwadratowa otrzymuje nazwę $(4, 4, 4, 4)$, w skrócie (4^4) , plaster miodu nazywa się (6^3) , a siatka Kagomé to $(3, 6, 3, 6)$.

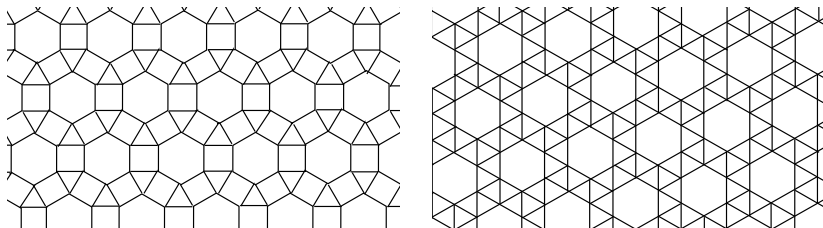
T_C na sieciach Archimedesesa II

Figure: Sieci Archimedesesa $(3, 4, 6, 4)$ i $(3^4, 6)$

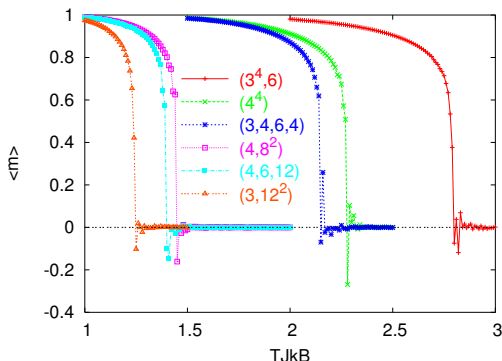
T_C na sieciach Archimedesa III

Figure: Zależność $\langle m \rangle$ od temperatury T dla sieci Archimedesa $(3^4, 6)$, $(3, 4, 6, 4)$, $(4, 6, 12)$, $(4, 8^2)$ i (4^4) . $N \approx 6 \cdot 10^4$ spinów, po $N_{\text{iter}} = 2 \cdot 10^5$ [MCS]. $\langle m \rangle$ jest uśrednione po ostatnich 10^5 [MCS].

T_C na sieciach Archimedesa IVTable: Temperatuty Curie T_C na sieciach Archimedesa [8–10]

z	sieć	$T_C [J/k_B]$	źródło
3	$(3, 12^2)$	1,25	[11]
	$(4, 6, 12)$	1,40	[11]
	$(4, 8^2)$	1,45	[11]
	(6^3)	1,52	
4	$(3, 4, 6, 4)$	2,15	[11]
	(4^4)	$2 / \operatorname{arcsinh} 1 \approx 2,27$	
	$(3, 6, 3, 6)$	2,27	
5	$(3^4, 6)$	2,80	[11]
	$(3^3, 4^2)$	$2 / \ln 2 \approx 2,89$	
	$(3^2, 4, 3, 4)$	2,93	
6	(3^6)	3,64	

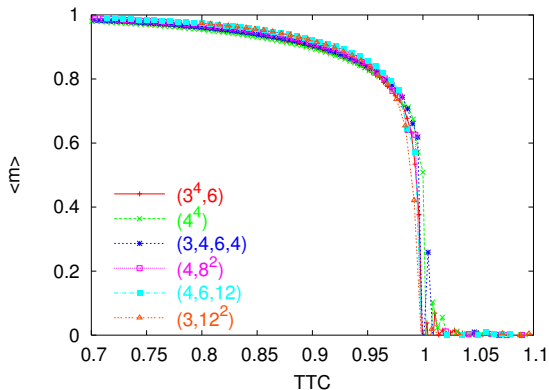
T_C na sieciach Archimedesa V

Figure: Zależność $\langle m \rangle$ od zredukowanej temperatury T/T_C dla sieci $(3^4, 6)$, $(3, 4, 6, 4)$, $(4, 6, 12)$, $(4, 8^2)$ i (4^4)

T_C na sieciach Archimedesesa VI

Dla każdej z rozważanych sieci, zależność $m(T/T_C)$ jest zgrubsza taka sama jak dla sieci kwadratowej [11]. W tym ostatnim przypadku znamy zaś przepis analityczny

$$|m(\kappa)| = \sqrt[8]{\frac{\cosh^2(2/\kappa)}{\sinh^4(2/\kappa)} [\sinh^2(2/\kappa) - 1]},$$

gdzie $\kappa \equiv T/T_C$.

W przeciwieństwie do półdokładnego wzoru Galama–Maugera na zależność T_C od wymiaru przestrzeni d i liczby koordynacyjnej sieci z , pokazujemy, że temperatura krytyczna dla IM różni się nieznacznie dla kilku AL (gdzie $d = 2$) z tymi samymi wartościami z . Podobnie jak w przypadku zjawiska perkolacji, także dla IM wymiar d i liczba koordynacyjna z **nie** są wystarczające do wyznaczenia punktu krytycznego T_C .

Efektywny algorytm obliczania sumy statystycznej I

- n — liczba spinów do góry ($S_i = +1$)
- k — liczba wiązań antyrównoległych ($S_i S_j = -1$)
- L — rozmiar sieci
- $N = L^2$ — liczba wszystkich spinów
- $\Omega(n, k)$ — liczba konfiguracji siatki $L \times L$ o zadanej liczbie n i k
- $1/\beta = k_B T$

Efektywny algorytm obliczania sumy statystycznej II

$$E(n, k) = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i = 2J(k - L^2 + L) - H(L^2 - 2n) \quad (5)$$

$$Z = \sum_{n, k} \Omega(n, k) \cdot \exp[-\beta E(n, k)] \quad (6)$$

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \sum_{n, k} A(n, k) \cdot \Omega(n, k) \cdot \exp[-\beta E(n, k)] \quad (7)$$

$$\chi = \beta[\langle S_i^2 \rangle - \langle S_i \rangle^2] = \beta[\langle (2n - L^2)^2 \rangle - \langle 2n - L^2 \rangle^2] \quad (8)$$

M	10^5	10^6	10^7	10^8	10^9	10^{10}
t_{CPU} [sec]	0,86	6,90	66,4	660	6648	65752

Efektywny algorytm obliczania sumy statystycznej III

na SGI 2800 metodą brutalnej siły $\rightarrow 2^{64} \approx 10^{19}$ — 4.6 milionów lat!

$$\Omega_{8 \times 4}(b^8, n_1+n_2, k_1+k_2+k') = \sum_{\substack{b_1^7, n_1, k_1 \\ b_2^7, n_2, k_2}} \Omega_{4 \times 4}(b_1^7, n_1, k_1) \cdot \Omega_{4 \times 4}(b_2^7, n_2, k_2),$$

gdzie $0 \leq k' \leq 4$ jest dodatkową liczbą wiązań antyrównoległych na „zgrzewie” dwóch sieci 4×4 a b^8 tworzy się na podstawie b_1^7 i b_2^7 .

Podobnie

$$\Omega_{8 \times 8}(n_1+n_2, k_1+k_2+k'') = \sum_{\substack{b_1^8, n_1, k_1 \\ b_2^8, n_2, k_2}} \Omega_{8 \times 4}(b_1^8, n_1, k_1) \cdot \Omega_{8 \times 4}(b_2^8, n_2, k_2),$$

Efektywny algorytm obliczania sumy statystycznej IV

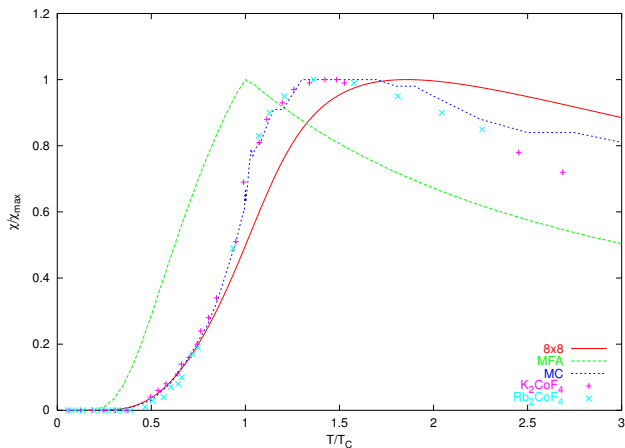
i znów $0 \leq k'' \leq 8$ jest dodatkową liczbą wiązań antyrównoległych na złączu dwóch siatek 8×4 .

Na SGI 2800 procedura ta pozwala określić $\Omega_{8 \times 8}$ w zaledwie 22 godziny, co daje przyspieszenie **1 831 636 363** $\approx 2 \cdot 10^9$ [12].

Podójście średniopolowe $J < 0$ i $\chi = (m_\alpha + m_\gamma)/H$ ($H \rightarrow 0$):

$$\begin{cases} m_\alpha = \tanh(\beta(Jm_\gamma + H)) \\ m_\gamma = \tanh(\beta(Jm_\alpha + H)) \end{cases} \quad (9)$$

Efektywny algorytm obliczania sumy statystycznej V

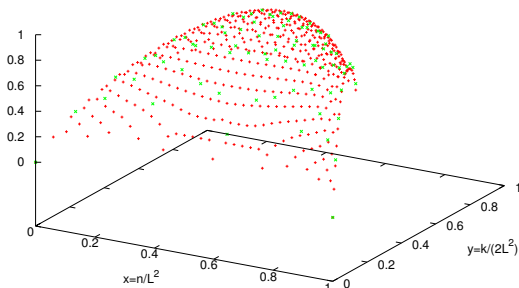


Efektywny algorytm obliczania sumy statystycznej VI

periodic boundary conditions

6x6 ·
4x4 ×

$z = \log \Omega(n,k) / \log \max \Omega(n,k)$



- [1] W. Lenz. “Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in festen Körpern”. *Zeitschrift für Physik* **21** (1920), 613–615.
- [2] E. Ising. “Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus”. *Zeitschrift für Physik* **31** (1925), 253–258.
- [3] L. Onsager. “Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition”. *Physical Review* **65** (3-4 1944), 117–149.
- [4] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines”. *The Journal of Chemical Physics* **21.6** (1953), 1087–1092.

- [5] R. J. Glauber. “Time-Dependent Statistics of the Ising Model”. *Journal of Mathematical Physics* 4.2 (1963), 294–307.
- [6] K. Malarz. “Social phase transition in Solomon network”. *International Journal of Modern Physics C* 14.5 (2003), 561–565.
- [7] Wikipedia. *Euclidean tilings by convex regular polygons*.
- [8] J. M. Dixon, J. A. Tuszyński, and E. J. Carpenter. “Analytical expressions for energies, degeneracies and critical temperatures of the 2D square and 3D cubic Ising models”. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 349.3 (2005), 487–510.
- [9] J. Adler. “Series expansions versus simulations”. *Annual Reviews of Computational Physics IV*. Ed. by D. Stauffer. World Scientific, 1996, 241–266.

- [10] C. J. Thompson and M. J. Wardrop. “Critical points of two-dimensional Ising models”. *Journal of Physics A: Mathematical, Nuclear and General* 7.5 (1974), L65.
- [11] K. Malarz, M. Zborek, and B. Wróbel. “Curie temperatures for the Ising model on Archimedean lattices”. *TASK Quarterly* 9.4 (2005), 475–480.
- [12] K. Malarz, M. S. Magdoń-Maksymowicz, A. Z. Maksymowicz, B. Kawecka-Magiera, and K. Kułakowski. “New algorithm for the computation of the partition function for the Ising model on a square lattice”. *International Journal of Modern Physics C* 14.5 (2003), 689–694.