

**Symulacje Monte Carlo w mechanice statystycznej
(model Isinga)**

Plan wykładu

- opis statystyczny układu:
 - zbiory, funkcja rozdziału,
 - metody wyznaczania wielkości fizycznych,
 - fluktuacje
- model Isinga:
 - model oddziaływań pary spinów
 - warunki brzegowe
 - symulacje MC dla modelu Isinga:
 - algorytm Metropolisa, heat-bath
 - termalizacja
 - efekty korelacyjne i ich minimalizacja
 - symulacje tworzenia domen magnetycznych

Literatura:

- J.M. Thijssen, „Computational Physics”
- J. F. Boudreau, E.S. Swanson, „Applied computational physics”
- K. N. Anagnostopoulos, „Computational Physics”
FREE: <http://www.physics.ntua.gr/~konstant/ComputationalPhysics/>
- W. Krauth, „Statistical mechanics – Algorithms and computations”
- K. Binder, D.W. Heermann, „Monte Carlo simulation in statistical physics – and introduction”

Elementy fizyki statystycznej

W fizyce statystycznej posługujemy się pojęciem zbioru Gibbsa w celu określenia charakteru układu i jego relacji z otoczeniem:

- **zbiór mikrokanoniczny:**
układ izolowany, stała liczba cząstek, objętość i energia (**$NVE=const$**)
- **zbiór kanoniczny:**
układ o stałej liczbie cząstek (N) i objętości (V) znajduje się w równowadze termodynamicznej z rezerwuarem ciepła (heat bath) o stałej temperaturze (**$NVT=const$**), energia układu nie jest stała, podlega fluktuacjom
- **wielki zbiór kanoniczny:**
układ o stałej objętości (V) znajduje się w równowadze termodynamicznej z rezerwuarem ciepła o ustalonej temperaturze, z którym może wymieniać cząstki, ustalony jest potencjał chemiczny układu (**$\mu VT=const$**)

W Monte Carlo często wykorzystuje się też **zbiór izobaryczno-izotermiczny** (**$NPT=const$**), co odpowiada utrzymywaniu układu pod stałym ciśnieniem.

Zaletą tego rozwiązania jest np. możliwość symulacji przejść fazowych 1-rzędu, zmiana objętości pod stałym ciśnieniem umożliwia przeprowadzenie układu do stanu o najniższej energii swobodnej w sposób ciągły (np. zmiana stanu skupienia lód-woda).

Wykonajmy analizę własności układu opisywanego przy użyciu zbioru kanonicznego (NVT).

- układ N cząstek może znajdować się w **mikroście** μ o energii E_μ ,
zbiór wszystkich mikrostanów stanowi przestrzeń Ω

$$E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots \quad \Omega = \{\mu\} = \{1, 2, 3, \dots, N\}$$

- układ znajduje się w równowadze termodynamicznej z rezerwuarem ciepła co prowadzi do dynamicznej zmiany obsadzeń poszczególnych mikrostanów, dynamikę zmian opisuje **równanie Master**

$$\frac{dp_\mu}{dt} = \sum_{\nu} p_\nu W_{\nu,\mu} - p_\mu W_{\mu,\nu} \quad (p_\mu - \text{prawdopodobieństwo obsadzenia stanu})$$

$$\sum_{\mu} p_\mu = 1 \quad - \text{warunek normalizacji}$$

prawdopodobieństwo obsadzenia stanu opisuje czynnik Boltzmanowski

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu} \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad \begin{array}{l} k_B - \text{stała Boltzmanna} \\ T - \text{temperatura} \end{array}$$

czynnik normalizacyjny stanowi **funkcja rozdziału Z dla zbioru kanonicznego**

$$Z = Z(\beta) = \sum_{\mu} e^{-\beta E_\mu}$$

$Z(\beta)$ zawiera pełną informację statystyczną o układzie

- z funkcją rozdziału związana jest **energia swobodna układu F**

$$F = -\frac{\ln Z}{\beta} \quad \Rightarrow \quad Z = e^{-\beta F}$$

- wartości wielkości fizycznych (obserwabli) wyznaczamy licząc ich wartości oczekiwane

$$\langle O \rangle = \sum_{\mu} O_{\mu} p_{\mu} = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} O_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \quad (O_{\mu} - \text{wartość } O \text{ w stanie } \mu)$$

- energia układu**

$$\langle E \rangle = U = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}$$

$$U = U(\beta) = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

- ciepło właściwe**

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial U}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T} = k\beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}$$

$$C = k\beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}$$

wyniki analityczne w tej postaci nie są przydatne w obliczeniach MC bo zawierają Z (tej nie znamy)

Fluktuacje

Układ znajdując się w stanie równowagi termodynamicznej z rezerwuarem ciepła ma ustaloną temperaturę, ale nie energię – ta podlega fluktuacjom (oraz wszystkie inne wielkości fizyczne), zatem oprócz wartości oczekiwanej możemy obliczyć **wariancję energii**

$$\begin{array}{c}
 \boxed{\sigma_E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} \begin{array}{l} \nearrow \langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \text{ - ten wynik już znamy} \\ \searrow \langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu}^2 e^{-\beta E_{\mu}} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \end{array} \\
 \downarrow \\
 \boxed{\sigma_E^2 = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}} \longleftarrow \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right) = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left(-\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2
 \end{array}$$

- wykorzystajmy ten wynik do policzenia **ciepła właściwego**

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = k_B^2 \sigma_E^2$$

$$C = k_B^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

Ta formuła jest już użyteczna w MC, bo wykonując symulację wyznaczymy 1 i 2 moment, a to pozwoli określić ciepło właściwe układu.

- wynik jaki uzyskaliśmy dla ciepła właściwego jest istotny też z innego powodu, podobny związek (zawierający wariancję) uzyskamy dla dowolnej pary zmiennych sprzężonych w sposób liniowy, np.:

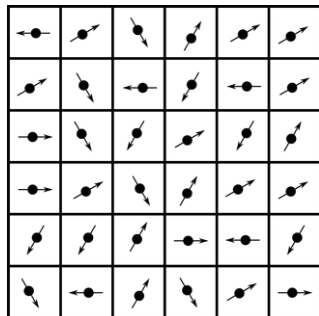
energia – temperatura;

magnetyzacja – pole magnetyczne

- rozważmy drugi przypadek, **układ spinów oddziałujących ze sobą oraz z polem magnetycznym**

aktualny stan określa konfiguracja spinów

$$\mu = \{ \vec{s}_1(\mu), \vec{s}_2(\mu), \dots, \vec{s}_n(\mu) \}$$



hamiltonian układu

$$H_\mu(\vec{B}) = E_\mu - \vec{B} \cdot \vec{M}_\mu$$

$\vec{B}$ – pole magnetyczne

$$E_\mu = \sum_i \sum_{j \neq i} J_{i,j} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$$

$J_{i,j}$ – całka oddziaływania

$$M_\mu = \frac{eh}{mc} \sum_i \vec{s}_i(\mu) \cdot \hat{e}_B$$

M - magnetyzacja układu

dla określonego kierunku $\vec{B}$

$$\vec{B} = B \hat{e}_B$$

hamiltonian

$$H_\mu(B) = E_\mu - B M_\mu$$

funkcja rozdziału

$$Z = \sum_\mu e^{-\beta H_\mu} = \sum_\mu e^{-\beta(E_\mu - B M_\mu)}$$

- obliczmy 1 i 2 moment magnetyzacji

$$Z = \sum_{\mu} e^{-\beta(E_{\mu} - BM_{\mu})}$$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} M_{\mu} e^{-\beta(E_{\mu} - BM_{\mu})} = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial B}$$

$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} M_{\mu}^2 e^{-\beta(E_{\mu} - BM_{\mu})} = \frac{1}{\beta^2 Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B^2}$$

oraz wariancję

$$\sigma_M^2 = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial B^2} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B}$$

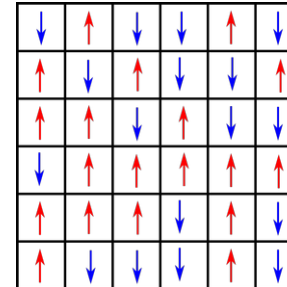
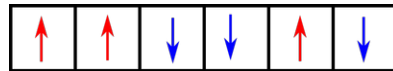
ostatni wynik możemy wykorzystać do obliczenia **podatności magnetycznej** układu

$$\chi = \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$$

Model Isinga

- model Isinga** to uproszczony model klasyczny modelu kwantowego Heisenberga dla oddziaływań ferromagnetycznych
- operator spinu zastępujemy jego klasycznym odpowiednikiem wektorowym, zakładamy że wszystkie spiny układają się wzdłuż jednego wybranego kierunku (może to być kierunek pola B – ale niekoniecznie) z dwoma dozwolonymi rzutami na ten kierunek

$$\underbrace{\hat{\vec{\sigma}} = \frac{\hbar}{2} [\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z]}_{\text{opis kwantowy}} \implies \underbrace{\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z}_{\text{kierunek "z"}} \implies \underbrace{s = \pm 1}_{\text{model Isinga}}$$

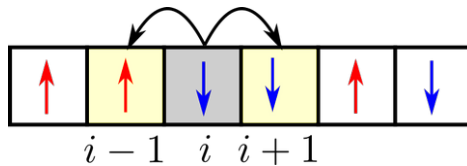


- spiny są zlokalizowane przestrzennie na atomach, oddziaływanie pary spinów oddziaływanie opisuje **całka wymiany** J

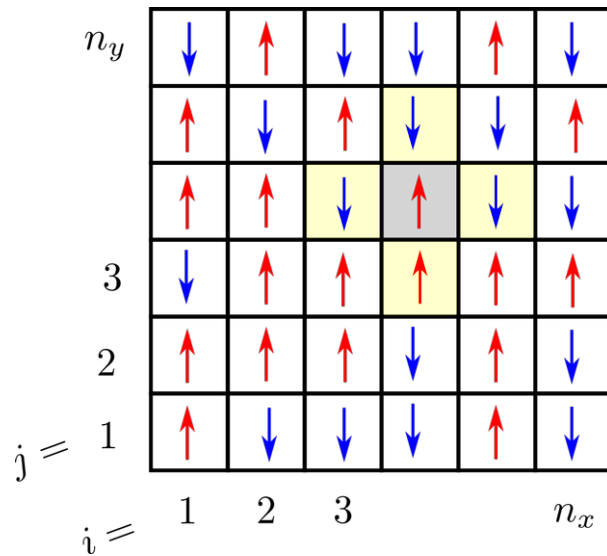
energia pary spinów $E_{i,j} = -J s_i s_j \implies \begin{cases} J > 0 & \text{ferromagnetyzm} \\ J < 0 & \text{antyferromagnetyzm} \end{cases}$

energia układu w stanie o konfiguracji μ (na razie bez pola B) $E_\mu = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} J s_i s_j$ - stała $\frac{1}{2}$ wynika z podwójnego uwzględnienia oddziaływania pary spinów

- ze względu na silną lokalizację przestrzenną spinów oraz dipolowy charakter oddziaływania momentów magnetycznych (energia oddziaływania maleje jak $1/r^2$) w najprostszym modelu **uwzględniamy oddziaływania tylko z najbliższymi sąsiadami**



$$E_{\mu} = -\frac{J}{2} \sum_i \sum_{j=i\pm 1} s_i s_j, \quad (s_i, s_j = \pm 1)$$



$$E(\vec{s}) = -\frac{J}{2} \sum_k \sum_l s_k s_l, \quad (s_k, s_l = \pm 1)$$

$$k = (i, j)$$

$$l = \{(i-1, j), (i+1, j), (i, j-1), (i, j+1)\}$$

- zgodnie z mechaniką statystyczną prawdopodobieństwo realizacji danej konfiguracji zależy od energii oraz temperatury, dlaczego?

temperatura → drgania atomów → zmiana pola E/B w układzie własnym spinu → możliwy obrót spinu

$$p_{\mu}(\beta) = \frac{e^{-\beta E_{\mu}}}{Z(\beta)}$$

k_B - stała Boltzmannna
T - temperatura

$$Z(\beta) = \sum_{s_1=\pm 1, \dots, s_N=\pm 1} e^{-\beta E(s_1, \dots, s_N)} = \sum_E D(E) e^{-\beta E}$$

↑
sumowanie po wszystkich
możliwych konfiguracjach

↑
sumowanie po wszystkich
możliwych energiach układu

D(E) – gęstość stanów, w modelu Isinga to liczba stanów o energii E
(ich liczba określa stopień degeneracji poziomu energii)

Jak duże może być D(E)?

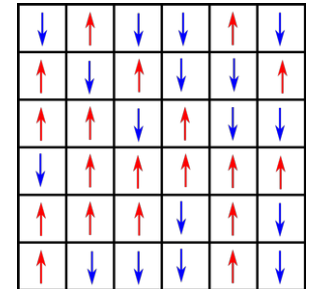
- rozważmy problem gęstości stanów $D(E)$ dla układu 2D

$$Z(\beta) = \sum_E D(E) e^{-\beta E}$$

- liczba wszystkich stanów/konfiguracji spinowych

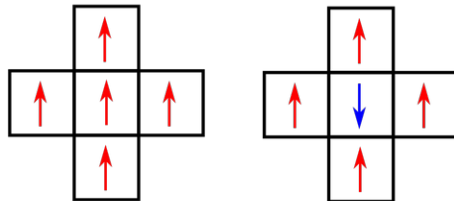
$$K = 2^N = 2^{n_x \cdot n_y}$$

$n_x = n_y =$	2	4	6
$K =$	2^4	2^{16}	2^{36}
	16	65,536	$68,7 \cdot 10^9$

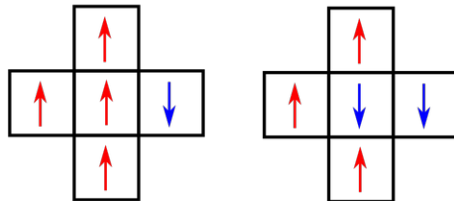


- obrót pojedynczego spinu spowoduje zmianę konfiguracji, może zmienić też energię - o jaką wartość?

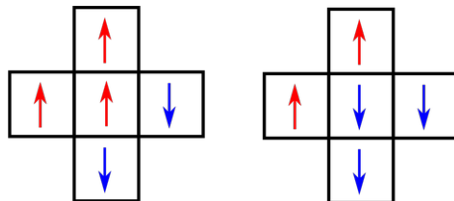
$$E = -4J \leftrightarrow E = +4J \rightarrow \Delta E = \pm 8J$$



$$E = -2J \leftrightarrow E = +2J \rightarrow \Delta E = \pm 4J$$



$$E = 0 \leftrightarrow E = 0 \rightarrow \Delta E = 0$$



$$\Delta E = 0, \pm 4J, \pm 8J$$

$E[J]$	$D_{2 \times 2}$	$D_{4 \times 4}$	$D_{6 \times 6}$
0	12	20 524	13 172 279 424
4	0	13 568	11 674 988 208
8	2	6 688	8 196 905 106
12	—	1 728	4 616 013 408
16	—	424	2 122 173 684
20	—	64	808 871 328
24	—	32	260 434 986
28	—	0	71 789 328
32	—	2	17 569 080
$\vdots$	—	—	$\vdots$

- wiemy, że dla $T > 0$ układ spinów podlega fluktuacjom, spiny mogą zmieniać zwrot co prowadzi do zmiany energii, energia układu będzie średnią ważoną po energiach konfiguracji spinowych, których prawdopodobieństwo realizacji determinuje czynnik Boltzmanowski
- informacji dotyczących układu nie wyznaczymy w sposób dokładny nawet dla układów o małych rozmiarach (6x6), ze względu na olbrzymią liczbę kombinacji
- własności układu możemy określić jedynie przy pomocy **metody Monte Carlo**

Przebieg symulacji MC dla modelu Isinga:

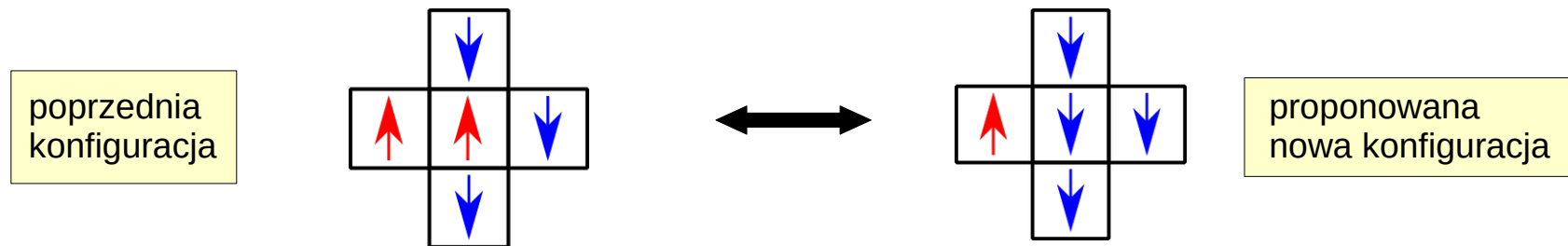
- start od wybranej konfiguracji spinowej:
 - wszystkie spiny równoległe (cold start) - magnetyzacja maksymalna (niska T)
 - spiny ułożone dowolnie (hot start) – brak magnetyzacji (wysoka T)
- dla ustalonej T wykonujemy N_{term} iteracji, w trakcie których zmienia się magnetyzacja - to etap **termalizacji (burn-in)**, na tym etapie nie zbieramy informacji o układzie
- pojedyncza iteracja MC polega na próbie obrotu wszystkich spinów w układzie – jednego na raz, przemiatając tablicę w sposób sekwencyjny (najczęściej) lub losując spiny (rzadko)
- próbę obrotu pojedynczego spinu możemy wykonać przy użyciu algorytmu
 - **Metropolisa** – najczęściej bo bardziej wydajny
 - **kąpieli ciepłej** (ang. heat-bath) – rzadko, bo mniej wydajny
- po przeprowadzeniu termalizacji wykonujemy docelowe N_{max} iteracji w ustalonej temperaturze, w trakcie których energia i magnetyzacja fluktuują, zmiany zachodzące w układzie możemy traktować jako (stochastyczny) proces Markowa, wielkości takie jak energia czy magnetyzacja zmieniają się w sposób losowy czyli tworzą łańcuch Markowa – próbkowanie łańcucha w jego stacjonarnej części umożliwia estymację realnych wartości 1 i 2 momentu
- po zakończeniu symulacji MC obliczamy wartości potrzebnych wielkości fizycznych

Algorytm Metropolisa – wersja podstawowa

- przy użyciu (znanego) algorytmu Metropolisa dokonujemy próby obrotu pojedynczego spinu
- w jednej iteracji podejmujemy próbę obrotu każdego spinu w układzie (n^2 spinów)
- chociaż zmiana (obrót) pojedynczego spinu oznacza zmianę konfiguracji całego układu, to sensowniej jest przyjąć, że jednostką czasu algorytmicznego/symulacji jest ilość operacji/czasu potrzebnych do sprawdzenia wszystkich spinów w układzie (tablica jest „przemiatana” – ang. sweep)

$$n^2 \Rightarrow t_{sweep} \quad - \text{„jednostka czasu obliczeniowego”}$$

- „przemiatanie” tablicy możemy wykonać: (1) sekwencyjnie (szybko), (2) losowo (wolno)
poza szybkością wybór może mieć pewien wpływ na korelację



$$E_{old} = -J(1 - 1 - 1 - 1) = 2J$$

$$E_{new} = -J(-1 + 1 + 1 + 1) = -2J$$

$$\Delta E = E_{new} - E_{old} = -4J$$

$$p_{acc} = \min \left\{ \frac{p(E_{new}; \beta)}{p(E_{old}; \beta)}, 1 \right\} = \min \{ e^{-\beta \Delta E}, 1 \}$$

$$U_2 \sim U(0, 1) \rightarrow \begin{cases} U_2 \leq p_{acc} & s_k^{new} = -s_k^{old} \\ U_2 > p_{acc} & s_k^{new} = s_k^{old} \end{cases}$$

Algorytm Metropolisa – wersja wydajna (optymalna?)

- hamiltonian pojedynczego spinu

$$\begin{aligned} E_i &= -J(s_{left} + s_{right} + s_{top} + s_{bottom})s_i \\ &= -J(n_+ s_+ + n_- s_-)s_i \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} s_i &= \pm 1 \\ s_+ &= +1, s_- = -1 \end{aligned}$$

n_+, n_- - to liczba najbliższych sąsiadów ze spinem +1 lub -1

liczba sąsiadów ustalona: $n_+ + n_- = 4 \longrightarrow n_- = 4 - n_+$

- energia spinu s_i zależy od liczby sąsiadów ze spinem +1

$$E_i = -J(2n_+ - 4)s_i$$

$$n_+ = \frac{1}{2}(s_{left} + s_{right} + s_{top} + s_{bottom}) + 2$$

- zmiana energii podczas obrotu spinu

$$E_i^{old} = -J(2n_+ - 4)s_i$$

$$E_i^{new} = -J(2n_+ - 4)(-1)s_i$$

$$\Delta E_i = E_i^{new} - E_i^{old} = -2 \cdot h_i^{old}$$

- sprawdźmy jakie są możliwe wartości ΔE i jaki mają wpływ na prawdopodobieństwo akceptacji obrotu spinu

$$p_{acc} = \min\{1, \exp(-\beta \Delta E)\}$$

n_+	0	1	2	3	4
$E_i(s_i = +1)$	$4J$	$2J$	0	$-2J$	$-4J$
$\Delta E(s_i = +1 \rightarrow -1)$	$-8J$	$-4J$	0	$4J$	$8J$
$e^{-\beta \Delta E}$	$e^{8\beta J}$	$e^{4\beta J}$	e^0	$e^{-4\beta J}$	$e^{-8\beta J}$
p_{acc}	1	1	1	$e^{-4\beta J}$	$e^{-8\beta J}$

$$s = +1 \rightarrow -1$$

n_+	0	1	2	3	4
p_{acc}	1	1	1	$e^{-4\beta J}$	$e^{-8\beta J}$

$$s = -1 \rightarrow +1$$

n_+	0	1	2	3	4
p_{acc}	$e^{-8\beta J}$	$e^{-4\beta J}$	1	1	1

- jeśli zmiana jest energetycznie korzystna lub neutralna to spin obracamy zawsze
- **w celu określenia p_{acc} w dwóch pozostałych przypadkach wystarczą 2 wartości - wyznaczamy je tylko raz dla danej temperatury**
- dzięki tej analizie unikamy wyznaczania wartości funkcji eksponencjalnej dla każdego sprawdzanego spinu (wyznaczenie wartości $\exp()$ kosztuje)

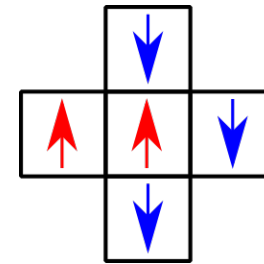
Algorytm kąpieli cieplnej (heat-bath)

- w modelu Isinga spin może być skierowany tylko do góry lub w dół – liczba stanów 2
- obsadzenie stanu wiąże się z określoną energią oddziaływania spinu z najbliższymi sąsiadami

$$E_i = -J(2n_+ - 4)s_i$$

- prawdopodobieństwo obsadzenia stanu opisuje czynnik Boltzmanowski

$$p(E_{s_i}) = \frac{e^{-\beta E_{s_i}}}{\sum_{s_j=\pm 1} e^{-\beta E_{s_j}}}$$



- w algorytmie kąpieli cieplnej aktualna konfiguracja spinowa sąsiadów definiuje lokalne warunki termodynamiczne dla spinu s_i - **nowy kierunek spinu określamy w sposób losowy na podstawie znajomości dwustanowej funkcji rozdziału**, informacja o poprzednim stanie jest nieistotna

$$p_{\pm} = \frac{e^{\beta J (2 n_+ - 4) (\pm 1)}}{e^{\beta J (2 n_+ - 4)} + e^{-\beta J (2 n_+ - 4)}} \quad p_+ + p_- = 1$$

$$U_1 \sim U(0, 1) \rightarrow s_i^{new} = \begin{cases} +1 & \Longleftrightarrow U_1 \leq p_+ \\ -1 & \Longleftrightarrow U_1 > p_+ \end{cases}$$

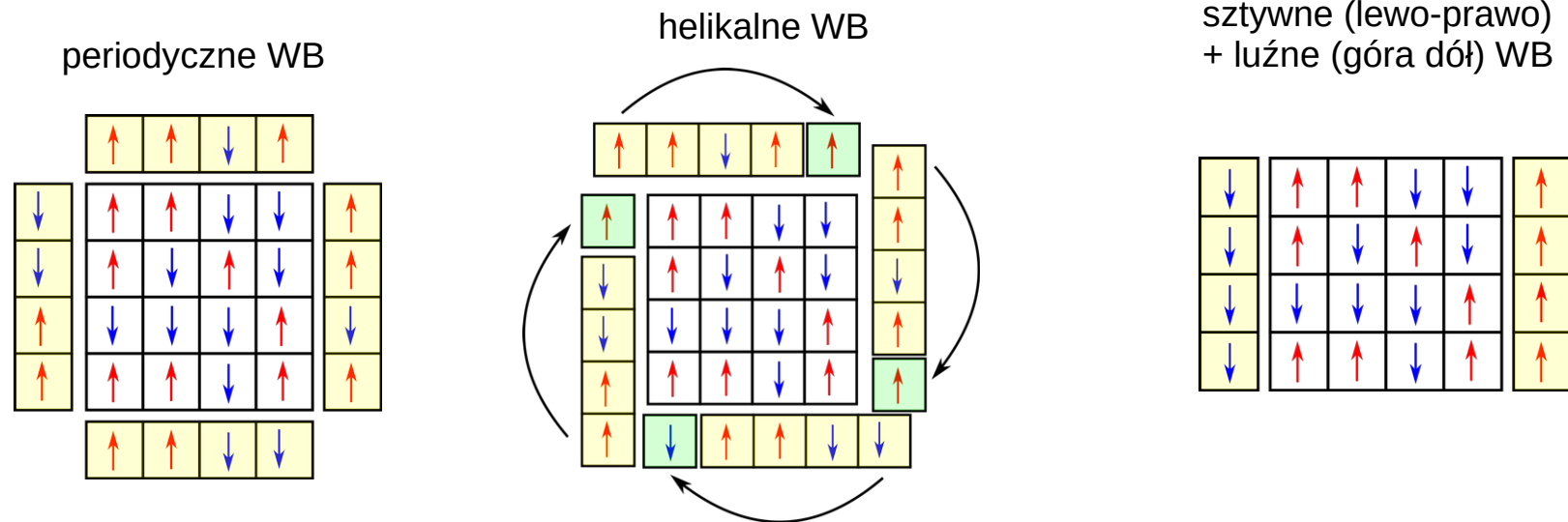
- w algorytmie brakuje informacji o poprzednim stanie, zatem można oczekiwać, że efekty korelacyjne będą mniejsze niż dla algorytmu Metropolis (zaleta)
- algorytm heat-bath jest mniej wydajny niż algorytm Metropolis (wada)

Warunki brzegowe w modelu Isinga

- metodę MC możemy użyć w symulacji układu spinów tylko o skończonym rozmiarze, oczywiście im większy rozmiar układu tym wyniki powinny być bardziej zbliżone do rzeczywistych, ale wiąże się to z wydłużeniem czasu trwania symulacji (koszt nie może przewyższać zysków)
- dla układów o skończonych rozmiarach istotny jest wpływ warunków brzegowych na rozwiązanie, nieumiejętny ich dobór może zniekształcić otrzymany wynik,
 - **im mniejszy układ tym wpływ warunków brzegowych staje się silniejszy**

Rodzaje WB w modelu Isinga:

- periodyczne: sąsiadem spinu na początku układu jest spin leżący na drugim końcu i vice versa
- helikalne: to modyfikacja warunków periodycznych poprzez przesunięcie tych sąsiadów wzdłuż brzegu
- swobodne: spiny na brzegu nie mają zewnętrznych sąsiadów (silny efekt rozmiarowy)
- sztywne/ustalone: kierunki spinów na brzegu są ustalone i nie mogą się zmienić w trakcie symulacji



Pseudokod dla modelu Isinga 2D, wyznaczamy: **energię + ciepło właściwe + podatność magnetyczną**

inicjalizacja: $T, \beta, n, N = n^2, L_{iter}$

```

spin[][] = 1.0 // spiny = +1 (cold start)
M_tot = N // magnetyzacja
E_tot = -J N 4 1/2 // polaryzacja spinowa
iter = 0
E(1) = 0, E(2) = 0, M(1) = 0, M(2) = 0
for (l=1; l <= L_iter; l++){
    for (i=1; i <= n; i++){
        for (j=1; j <= n; j++){
            sμ,ν = spin[i+μ][j+ν] (μ, ν = -1, 0, +1)
            Eold = -J s0,0 (s-1,0 + s1,0 + s0,-1 + s0,1)
            Enew = -Eold

            pacc = min { e-β(Enew - Eold), 1 }
            U1 ~ U(0, 1)
            if (U1 ≤ pacc) {
                spin[i][j] = -s0,0
                M_tot = M_tot - 2 * s0,0
                E_tot = E_tot - Eold + Enew
            }
            iter++;
            E(1) += E_tot, E(2) += E2tot
            M(1) += M_tot, M(2) += M2tot
        }
    }
}

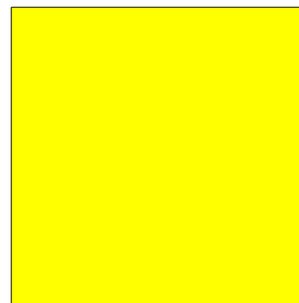
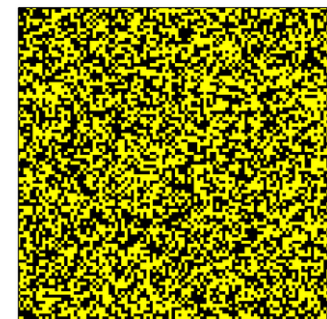
E_bar = E(1) / iter, E2_bar = E(2) / iter
C = β2 (E2_bar - E_bar2)
M_bar = M(1) / iter, M2_bar = M(2) / iter
χ = β (M2_bar - M_bar2)

```

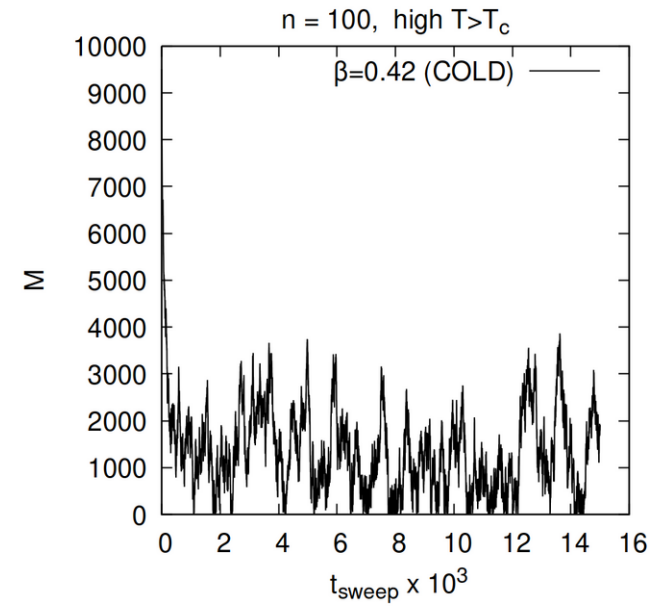
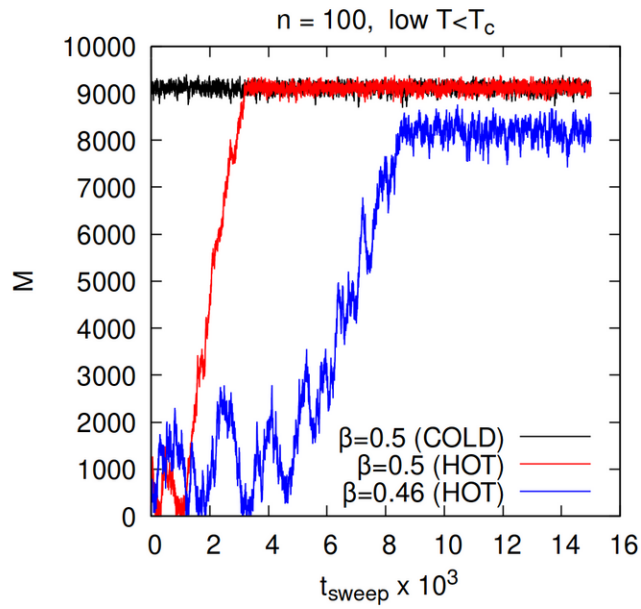
- wybór stanu początkowego jest nieistotny, ale dla spolaryzowanego układu łatwo określić energię
- pamiętamy o periodycznych WB
- algorytm Metropolis

Termalizacja

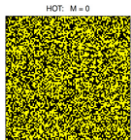
- w modelu Isinga wypadkowa magnetyzacja układu jest wypadkową dwóch przeciwstawnych czynników: fluktuacji termicznych (entropia) oraz tendencji do zwiększenia uporządkowania magnetycznego w celu minimalizacji energii
- nie wiemy więc jaka konfiguracja będzie dominująca w temperaturze, w której prowadzimy symulacje MC
- zakładając pewną konfigurację startową (magnetyzacja), musimy założyć że może ona ulec dużym zmianom w trakcie pierwszych iteracji – to **etap termalizacji** czyli dostosowywania się układu do narzuconych warunków termodynamicznych
- w MC proces termalizacji prowadzimy do momentu wstępnej stabilizacji parametru porządku (magnetyzacji)
- na tym etapie nie zbieramy danych z symulacji, gdyż układ nie znajduje się w równowadze termodynamicznej
- ilość czasu potrzebnego do wykonania termalizacji określamy empirycznie wykonując serię testów
- długość etapu termalizacji zależeć może od:
 - temperatury (wpływ fluktuacji termicznych na obroty spinu)
 - konfiguracji startowej: polaryzacja pełna (**cold**), częściowa, brak polaryzacji (**hot**)

COLD: $M = \max$ HOT: $M = 0$ 

przykład: termalizacja w warunkach niskiej i wysokiej temperatury



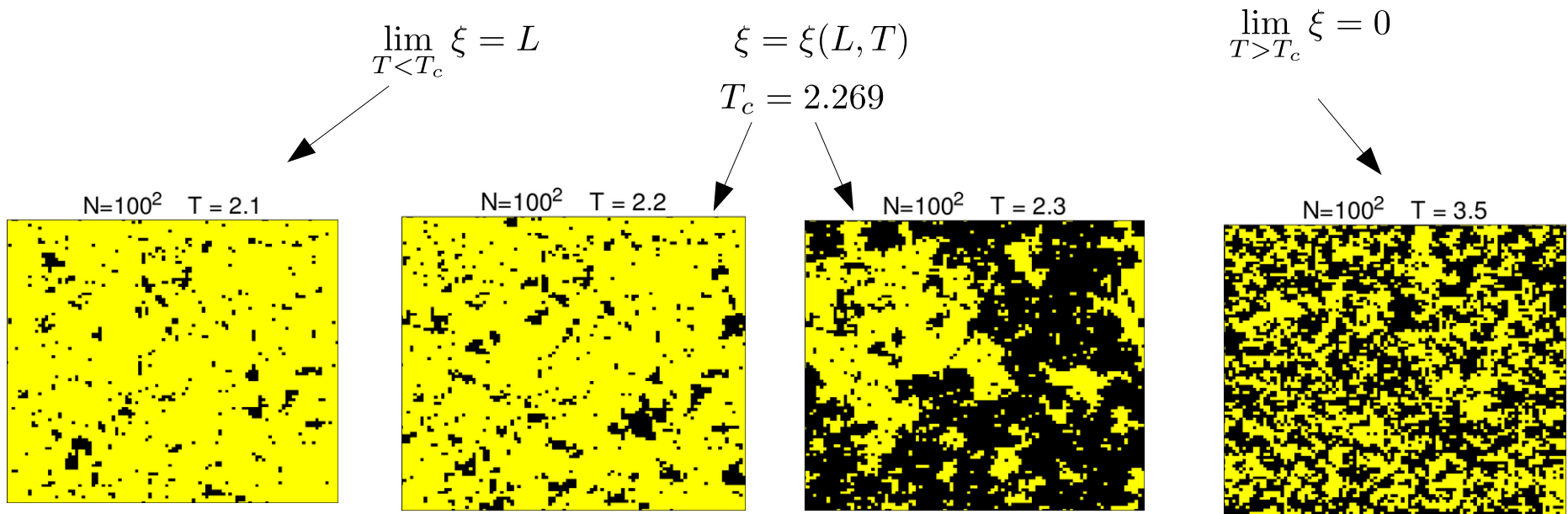
- w niskiej temperaturze preferowane jest uporządkowanie magnetyczne
- start od chaotycznego ustawienia spinów wymaga dłuższej termalizacji
- start dla konfiguracji spolaryzowanej prowadzi do szybkiej termalizacji



- w wysokiej temperaturze fluktuacje szybko niszczą pierwotny porządek

Autokorelacja w modelu Isinga

- w modelu Isinga magnetyzacja, energia i inne wielkości podlegają fluktuacjom termicznym, zatem dla wysokiej temperatury oczekujemy silnych fluktuacji i dużego prawdopodobieństwa obrócenia spinu
- jednak obniżając temperaturę rośnie rola interakcji z najbliższymi sąsiadami, poniżej temperatury krytycznej ($T_c=2.269$) preferowane jest równoległe (**skorelowane**) ustawienie spinów, pojawiają się domeny magnetyczne a ich średni rozmiar określa **długość korelacji ξ**



- jakie są efekty korelacyjne?
 - prawdopodobieństwo odwrócenia spinu w środku domeny jest mało prawdopodobne
 - odwrócenie kierunku spinów w domenie wymaga sukcesywnego odwracania spinów na jej brzegu np. ze względu na (małe) fluktuacje termiczne i dążenie do minimalizacji energii całkowitej
 - odwrócenie wszystkich spinów zajmie tym więcej czasu im większe są domeny
 - **korelacja powoduje, że wyniki gromadzone w trakcie symulacji nie są niezależne**
 - korelacja wyników wpływa na wariancję a tę używamy do wyznaczenia np.:
 - ciepła właściwego
 - podatności magnetycznej

- w czasie symulacji powinniśmy kontrolować wielkość efektów korelacyjnych a dokładniej:

czas korelacji τ

- efekty stają się najsilniejsze dla temperatur zbliżonych do temperatury krytycznej T_c ,

układ staje się sfrustrowany – tendencja do równoczesnego chaotycznego i uporządkowanego ustawienia spinów jest bardzo silna co prowadzi do wydłużenia czasu korelacji

- w modelu Isinga wyznaczamy **funkcje autokorelacji** dla interesujących nas wielkości: magnetyzacji, energii etc.
- z funkcji autokorelacji (jej kształtu) wyciągamy informacje o wielkości czasu korelacji
- dysponując czasem korelacji modyfikujemy wyrażenia zawierające wariancję

- funkcja autokorelacji dla magnetyzacji** (dla innych wielkość postępujemy analogicznie)

$$R_m(t) = \frac{\langle [M(t') - \langle M \rangle][M(t' + t) - \langle M \rangle] \rangle_{t'}}{\langle [M - \langle M \rangle]^2 \rangle}$$

t' – uśredniamy po wszystkich chwilach czasu $t' < t_{\max} - t$
 t – przesunięcie argumentów

wartość oczekiwaną liczymy dla wszystkich chwil czasowych spełniających warunek ($t_{\max}$ – czas trwania symulacji)

$$t' < t_{\max} - t$$

- w początkowej części (małe t) R_m możemy opisać przy pomocy funkcji eksponencjalnej

$$R_m(t) \sim e^{-\frac{t}{\tau}} \quad \tau - \text{czas korelacji}$$

$$R_M(2\tau) = e^{-2} \approx 0.135$$

- jeśli znamy czas korelacji τ a liczba zebranych danych jest proporcjonalna do $t_{\max}$ to możemy oszacować liczbę „**niezależnych**” danych dla magnetyzacji

$$n_m = \frac{t_{\max}}{\tau}$$

co prowadzi do warunku

$$t_{\max} \gg \tau$$

- dysponując funkcją autokorelacji, czas korelacji wyznaczmy całkując funkcję $R_m(t)$

$$\tau_{int} = \int_0^{\infty} R_m(t) dt \sim \int_0^{\infty} e^{-\frac{t}{\tau}} dt = \tau$$

wyznaczona w ten sposób wartość (τ_{int}) może się nieznacznie różnić od wielkości rzeczywistej ze względu na szum spowodowany skończonym rozmiarem układu (efekt rozmiarowy)

- w pobliżu temperatury krytycznej obserwuje się wydłużenie czasu korelacji (czego skutkiem jest tzw. spowolnienie krytyczne) – kolejny efekt rozmiarowy

$$\tau \sim L^z, \quad z = 2.1665 \text{ (dla magnetyzacji)}$$

- wzrost czasu korelacji powoduje wydłużenie czasu obliczeniowego (t_{CPU})

$d = 1, 2, 3$ (wymiarowość problemu)

L - rozmiar układu

$$\tau = 0 \quad \rightarrow \quad t_{CPU} \sim L^d, \quad d = 1, 2, 3 \text{ (efekt rozmiarowy)}$$

$$\tau \neq 0 \quad \rightarrow \quad t_{CPU} \sim L^d \cdot L^z = L^{d+z}, \quad (\text{efekt rozmiarowy} + \text{korelacja})$$

$$L = 100 \quad \rightarrow \quad t_{CPU} = L^2 = 10^4 \quad t_{CPU} = L^{4.17} \approx 2.2 \cdot 10^8$$

Wyznaczanie funkcji autokorelacji

- pierwszy etap to zbieranie danych w kolejnych chwilach czasu/iteracjach (t_{sweep})

$$dane = \{M_0, M_1, M_2, \dots, M_N\}$$

N – liczba iteracji sweep (t_{max})

- dla zbioru danych wyznaczamy wartości średnie

$$R_m(t) = \frac{1}{\sigma_m^2} \frac{1}{N-t} \sum_{t'=0}^{N-1-t} (M_{t'} - \langle M \rangle_0) (M_{t'+t} - \langle M \rangle_t)$$

$$\langle M \rangle_0 = \frac{1}{N-t} \sum_{t'=0}^{N-1-t} M_{t'}$$

$$\underbrace{\{M_0, M_1, M_2, \dots, M_{N-t-1}\}}_{\langle M \rangle_0}, M_{N-t}, \dots, M_{N-1}$$

$$\langle M \rangle_t = \frac{1}{N-t} \sum_{t'=0}^{N-1-t} M_{t'+t}$$

$$\{M_0, M_1, M_2, \dots, \underbrace{M_t, M_{t+1}, \dots, M_{N-1}}_{\langle M \rangle_t}\}$$

- zakres przetwarzanych danych: $t \sim 10^4$, $N \sim 10^{6-8}$
- ze względu na różnicę skal można wyrażenie na funkcję autokorelacji można uprościć

$$\langle M \rangle_0 \approx \langle M \rangle_t \approx \langle M \rangle$$

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N} \sum_{t'=0}^{N-1} M_{t'}$$

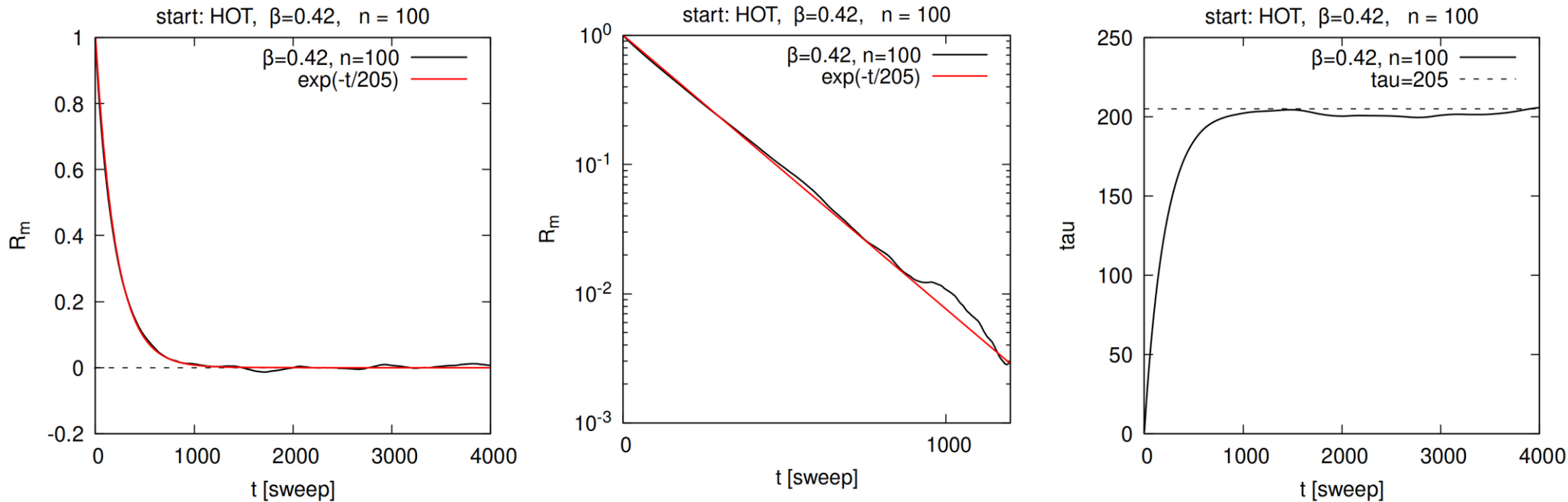
$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{t'=0}^{N-1} M_{t'}^2$$

$$\sigma_m^2 = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$$

$$R_m(t) = \frac{\frac{1}{N-t} \sum_{t'=0}^{N-1-t} M_{t'} M_{t'+t} - \langle M \rangle^2}{\sigma_m^2}$$

Przykład: funkcja autokorelacji magnetyzacji R_m i czas autokorelacji τ

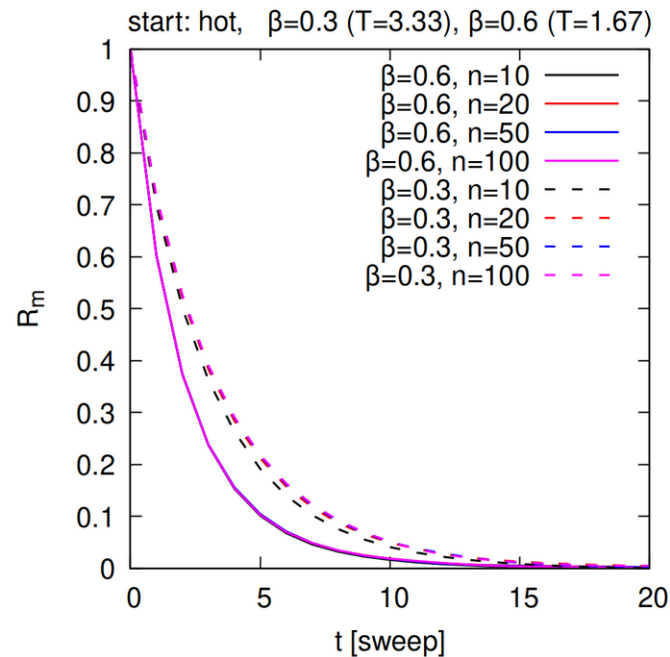
$$n = 100, \quad \beta = 0.42 \quad (\beta_c = 0.4407), \quad \text{start} = \text{HOT}$$



- jednostka „czasu” odpowiada jednokrotnemu przejściu przez wszystkie spiny w układzie i próbie zmiany ich kierunku: t_{sweep}
- funkcja autokorelacji maleje w początkowym zakresie w sposób eksponencjalny, do przebiegu funkcji można dopasować krzywą $\exp(-t/\tau)$ i znaleźć czas autokorelacji τ (lewy i środkowy rysunek), druga możliwość do odczytanie maksimum wartości całki z funkcji autokorelacji R_m (prawy rysunek)
- wyznaczony czas autokorelacji: $\tau = 205$
- wartość R_m nie maleje ściśle do zera, pojawiają się małe fluktuacje wynikające ze skończonych rozmiarów układu (wpływ brzegu na to co dzieje się w środku)

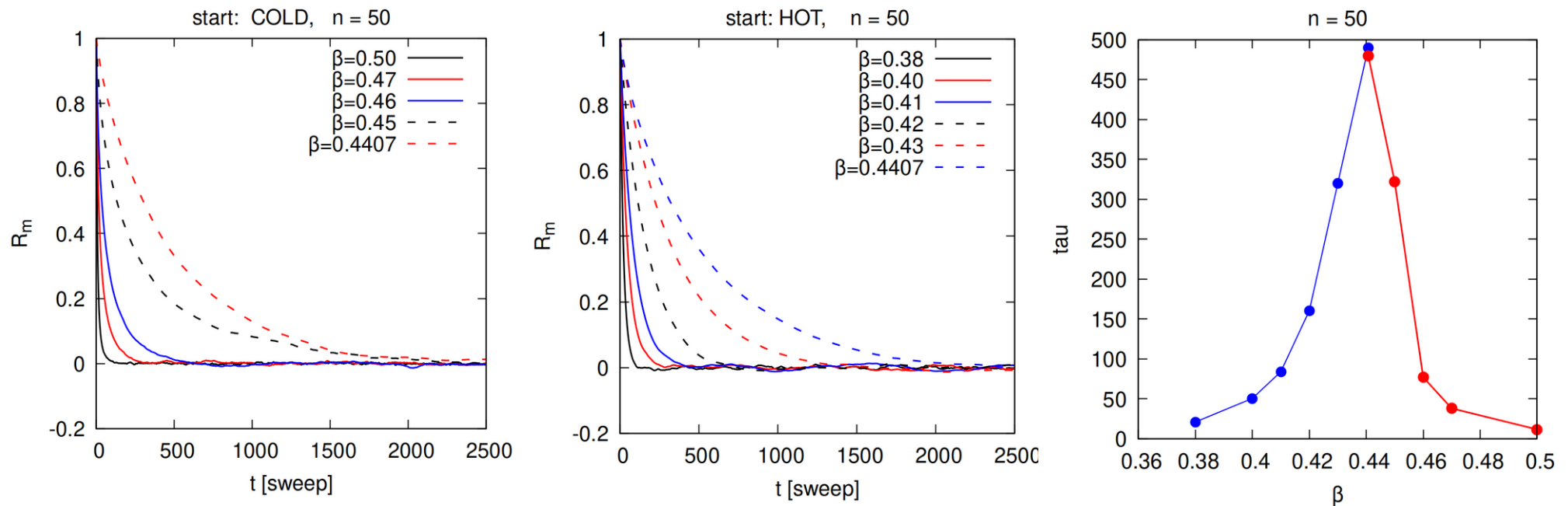
przykład: funkcja autokorelacji magnetyzacji R_m w **niskiej** i w **wysokiej** temperaturze

$n = 10, 20, 50, 100$; $\beta = 0.3/0.6$ ($\beta_c = 0.4407$), start = COLD/HOT



- jeśli symulacja jest prowadzona w niskiej lub w wysokiej temperaturze, z dala od temperatury krytycznej T_c , wówczas czas autokorelacji ulega znacznej redukcji
- co więcej przebieg funkcji autokorelacji staje się w dużym stopniu niezależny od rozmiaru układu - **znika efekt rozmiarowy**
- w niskiej temperaturze dominuje tendencja zwiększania magnetyzacji, w wysokiej dominuje entropia i fluktuacje termiczne – brak uporządkowania

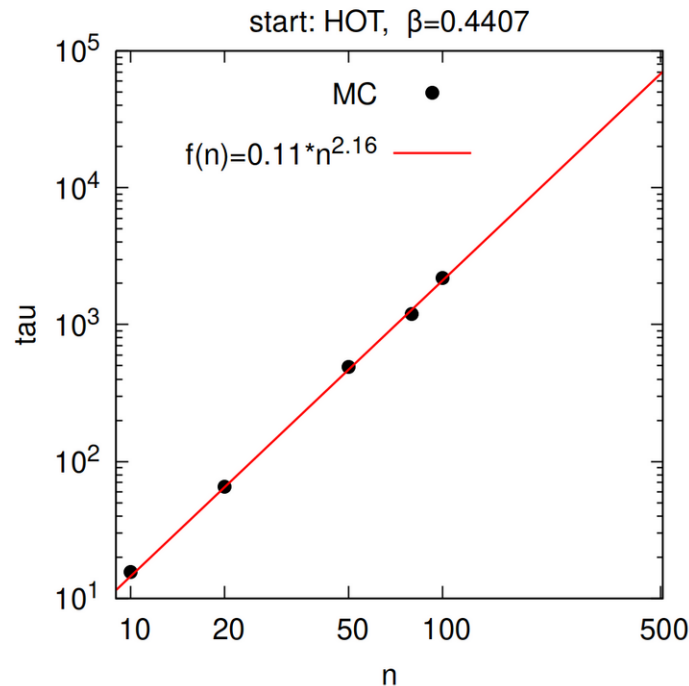
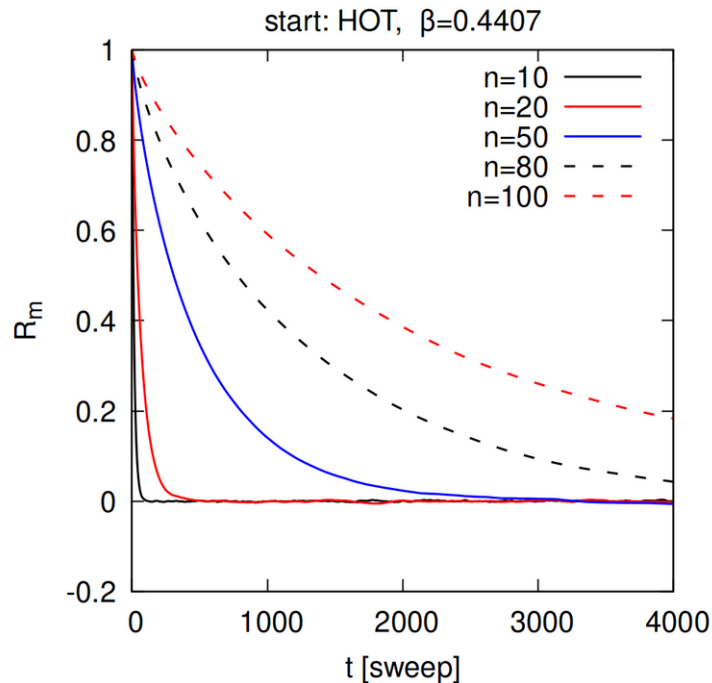
Przykład: wpływ temperatury na funkcję autokorelacji magnetyzacji R_m i czas korelacji τ



- w niskiej i w wysokiej temperaturze czas korelacji jest mały
- τ gwałtownie rośnie, gdy zbliżamy się do T_c o 1-2 rzędy wielkości
- wzrost τ następuje niezależnie od rodzaju startu (COLD/HOT)
- pojawia się problem z wydajnością metody w otoczeniu T_c , ale jest to punkt przejścia fazowego (2 rzędu) i wielkości wyznaczone w otoczeniu T_c są najbardziej interesujące
- szybki wzrost czasu autokorelacji staje się problemem już dla układów o małych rozmiarach, w układach o dużych rozmiarach dodatkowym czynnikiem spowalniającym jest **efekt rozmiarowy**
- wniosek: **duży układ w temperaturze bliskiej T_c $\rightarrow$ krytyczne spowolnienie**

przykład: funkcja autokorelacji magnetyzacji R_m i czas korelacji dla β_c + efekt rozmiarowy
 - **krytyczne spowolnienie**

$$t_{max} = 20 \cdot 10^6 [t_{sweep}]$$



w pobliżu T_c zależność τ od n opisywana jest wykładnikiem z :

$$\tau(n) \sim n^z, \quad z = 2.1665$$

uzyskaliśmy zgodność z wynikiem analitycznym, ale olbrzymim kosztem (obliczeniowym)

- zwiększanie rozmiaru układu prowadzi do wzrostu τ – efekt rozmiarowy
- już dla $n \sim 50-100$ problem autokorelacji staje się istotny, liczba iteracji jaką trzeba wykonać aby w sposób wiarygodny oszacować τ sięga kilkudziesięciu milionów
- **jakiego τ możemy się spodziewać dla dużego układu $n \sim 500$?**
ile iteracji należałoby wykonać, aby uzyskać wiarygodne (statystycznie) dane?
- dotarliśmy do kresu wydajności metody w podstawowej wersji
 – konieczna jest zmiana strategii, aby uniknąć krytycznego spowolnienia

Eliminacja wpływu korelacji – metoda blokowania (binning/blocking method)

$$dane = \{M_0, M_1, M_2, \dots, M_N\}$$

- jeśli znamy czas relaksacji τ to zestaw danych N dzielimy na N_b komórek, każda komórka (bin) zawiera n_b kolejnych wyników

$$n_b = \frac{N}{N_b} > 2\tau$$

- w każdej komórce wyznaczamy wartość średnią z n_b danych M_i^b
- wartości uśrednione w komórkach traktujemy jako niezależne

$$dane\ uśrednione\ w\ binach = \{M_1^b, M_2^b, M_3^b, \dots, M_{N_b}^b\}$$

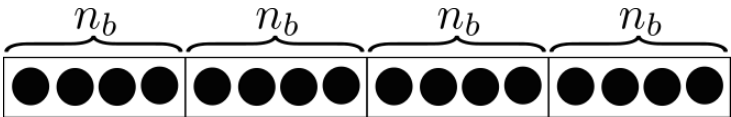
używamy ich do wyznaczenia wariancji

$$\sigma_m^2 = \frac{1}{N_b} \sum_{i=1}^{N_b} (M_i^b - \langle M^b \rangle)^2 \quad \sigma_{\langle M \rangle}^2 = \frac{\sigma_m^2}{N_b - 1}$$

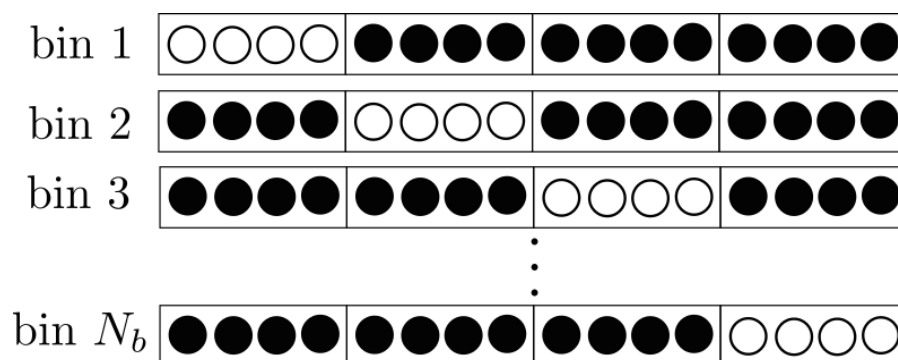
- gdy nie znamy czasu korelacji:
 - dzielimy dane na zestaw n_b przedziałów i wyznaczamy wariancję, jeśli dane z różnych binów są zależne, to wartość wariancji jest zaniżona
 - sukcesywnie zmniejszamy liczbę przedziałów, każdorazowo wyznaczając wartość wariancji, gdy ta osiągnie maksymalną wartość wówczas zatrzymujemy dalszy podział – dane zgromadzone w różnych binach są niezależne

Eliminacja wpływ korelacji - Jackknife method

- pierwszym krokiem jest podział danych na N_b podprzedziałów – identycznie jak w metodzie blokowania

$$n_b = \frac{N}{N_b}$$


- następnie tworzymy N_b nowych zbiorów danych zawierających $N - (N/N_b)$ **usuwając** z pierwotnego zbioru kolejną paczkę n_b danych (puste kółka na rysunku)



- dla każdego binu określamy wartość średnią

$$\text{dane uśrednione w binach} = \{M_1^b, M_2^b, M_3^b, \dots, M_{N_b}^b\}$$

- wyznaczamy wariancję dla tego zestawu (**brak czynnika N_b w mianowniku**)

$$\sigma_m^2 = \sum_{i=1}^{N_b} (M_i^b - \langle M^b \rangle)^2 = N_b (\langle M_b^2 \rangle - \langle M^b \rangle^2)$$

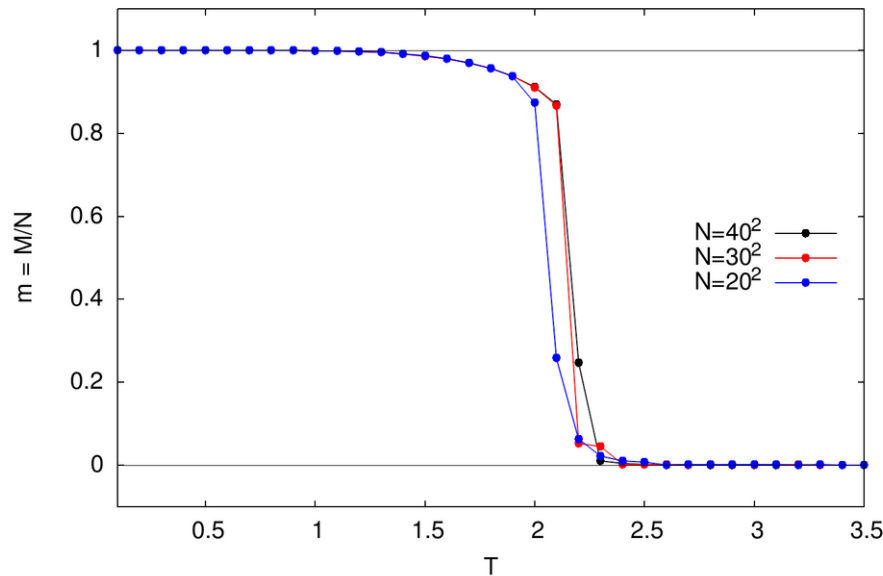
- podobnie jak w metodzie blokowania, wartość wariancji wyznaczamy sukcesywnie zmieniając wartość n_b aż do osiągnięcia stabilizacji wariancji

Temperatura krytyczna – przejście fazowe 2 rodzaju

- w przypadku układów ferromagnetycznych ($J>0$) materiał charakteryzuje temperatura Curie, powyżej której ferromagnetyzm znika
- w modelu Isinga również pojawia się temperatura krytyczna T_c , której wartość uzależniona jest od wielkości całki wymiany

jak wyznaczyć temperaturę krytyczną?

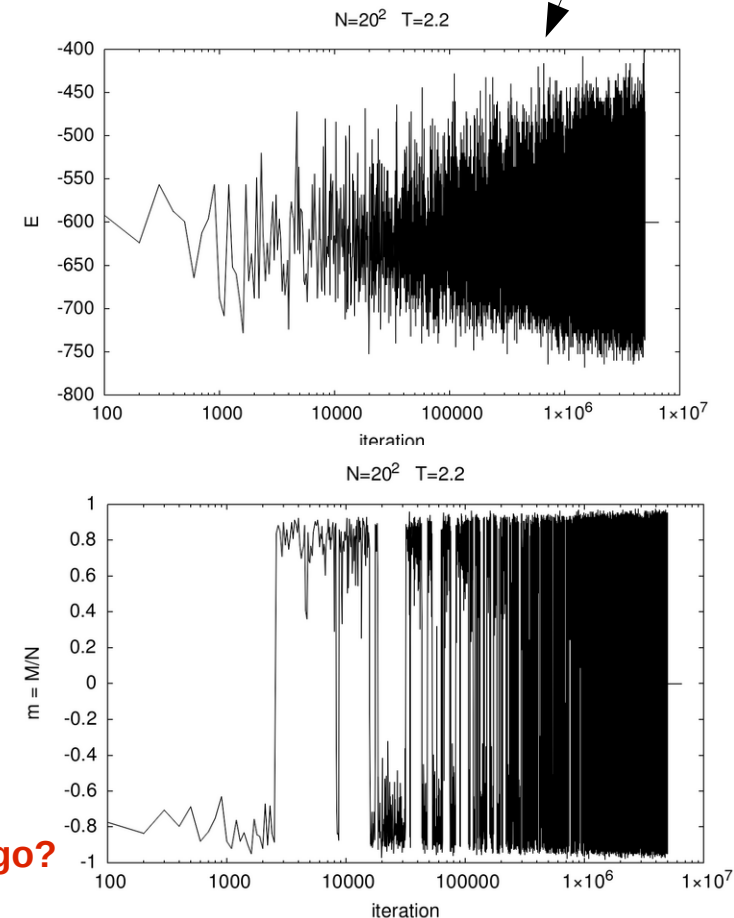
teoretycznie moglibyśmy to zrobić analizując zmiany magnetyzacji w funkcji temperatury



- T_c dla modelu 2D wynosi

$$T_c = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} = 2.2692$$

jednakże w pobliżu T_c wyniki przestają być miarodajne, dlaczego?



układ staje się sfrustrowany

- wyniki modelowania układu spinów 2D (**n=2, 4, 16, 24**)

temperatura krytyczna: $T_c=2.269$
(wynik analityczny)

$T > T_c$ - układ paramagnetyczny
 $T < T_c$ - układ ferromagnetyczny

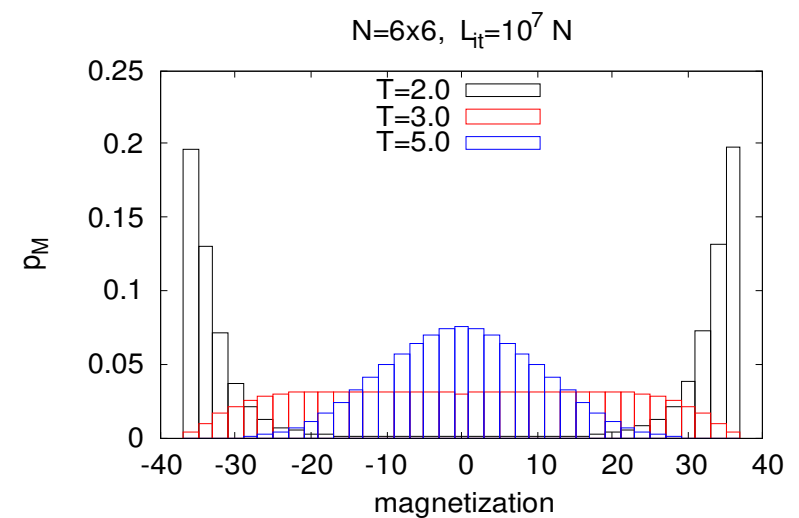
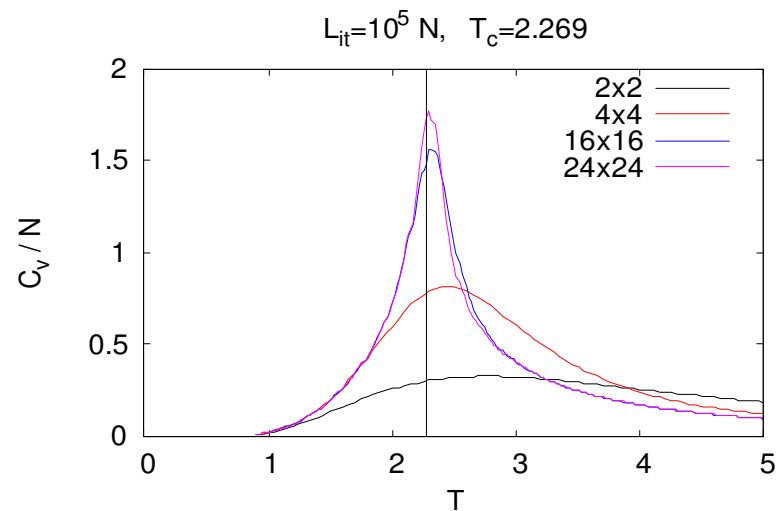
ciepło właściwe na spin

$$c_v = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

magnetyzacja układu

$$M = \left\langle \sum_{i=1}^N s_i \right\rangle$$

$$M = -N, -N + 2, \dots, 0, \dots, N - 2, N$$



- widoczny jest efekt rozmiarowy

- dla $T < T_c$ układ staje się częściowo spolaryzowany

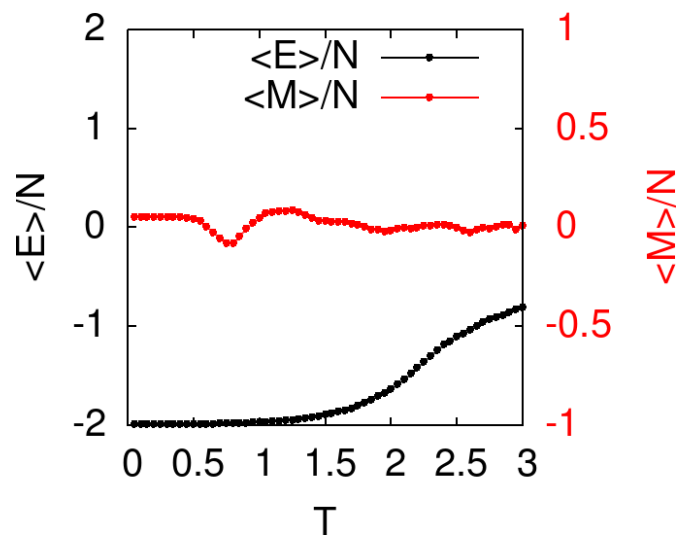
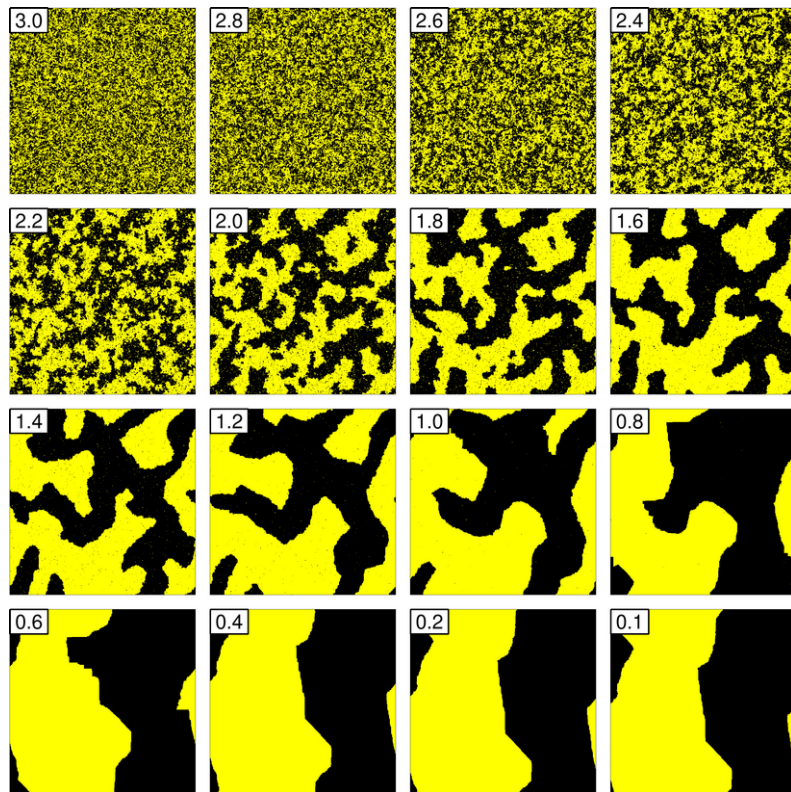
Symulacje wzrostu domen magnetycznych w modelu Isinga

- w modelu Isinga temperatura i „czas symulacji” odgrywają kluczową rolę w „dynamice” symulacji
- tendencja do równoległego ustawienia się sąsiednich spinów osłabiana jest przez fluktuacje termiczne
 - w wysokiej temperaturze silne fluktuacje (wysoka entropia) ograniczają tworzenie się obszarów magnetycznych
 - w niskiej temperaturze, rola fluktuacji jest słabsza, jeśli długość korelacji zrówna się z rozmiarem układu, preferowana będzie konfiguracja spinowa o maksymalnej polaryzacji
- aby uniknąć powyższych efektów i zaobserwować efekt tworzenia się domen, konieczne jest wykonanie symulacji z początkową konfiguracją chaotyczną („gorący start”) oraz stopniowe schładzanie układu w celu zamrożenia końcowej konfiguracji spinowej
 - liczba iteracji w niskiej temperaturze powinna być znacznie mniejsza od czasu autokorelacji

Przykład: symulacja układu spinów $N=500^2$ dla różnej szybkości schładzania oraz **algorytmów Metropolisa i heat-bath**

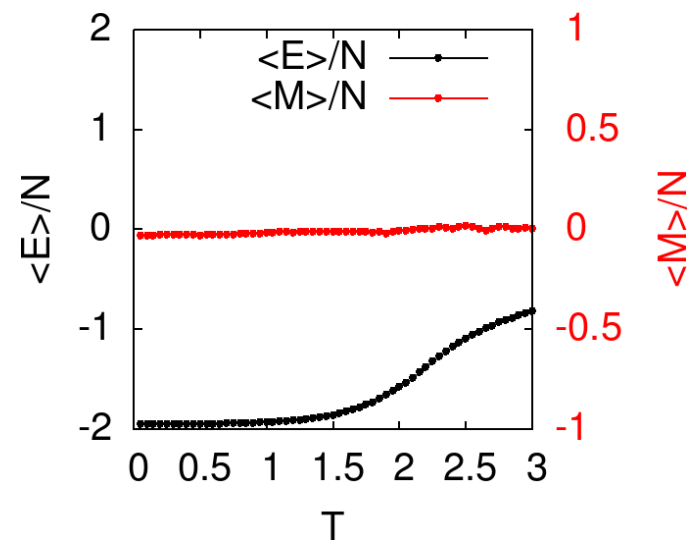
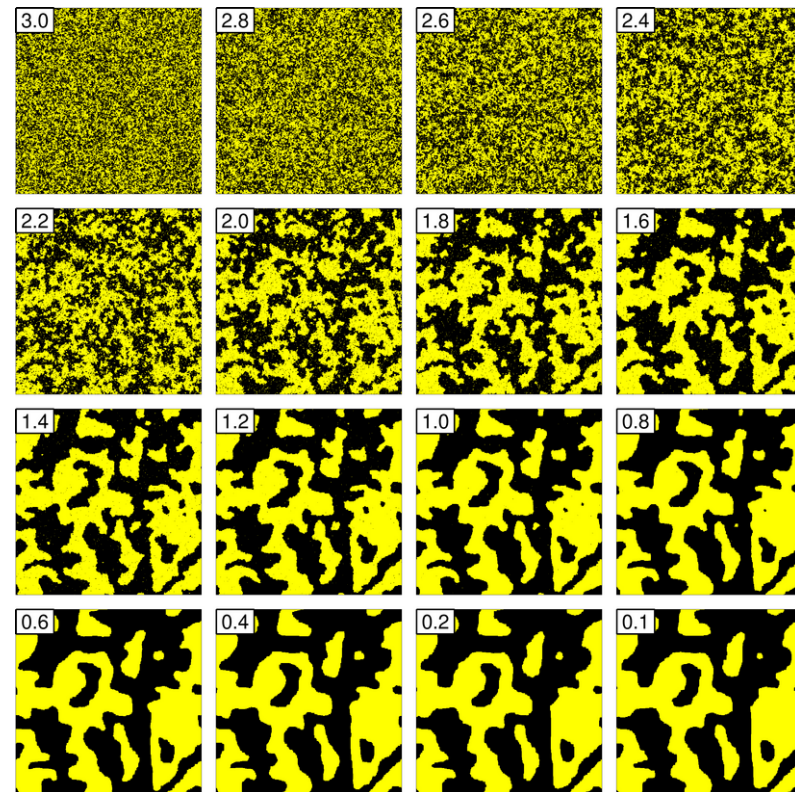
Metropolis,

$T = \text{const}$ dla 10 iteracji sweep, $\Delta T = 0.05$



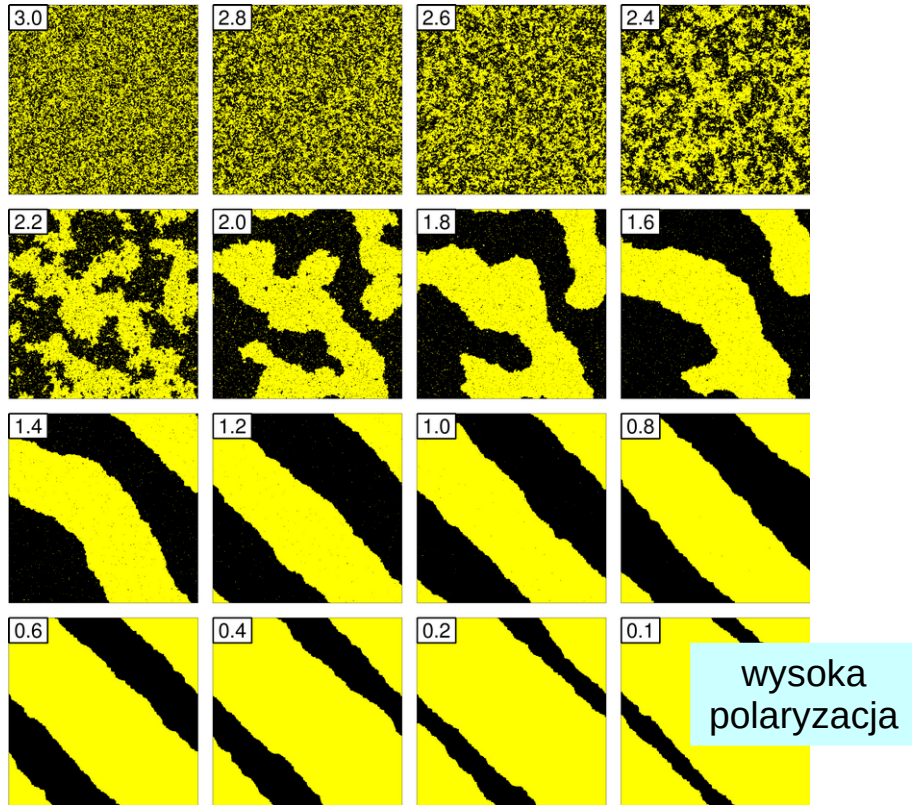
heat-bath,

$T = \text{const}$ dla 10 iteracji sweep, $\Delta T = 0.05$



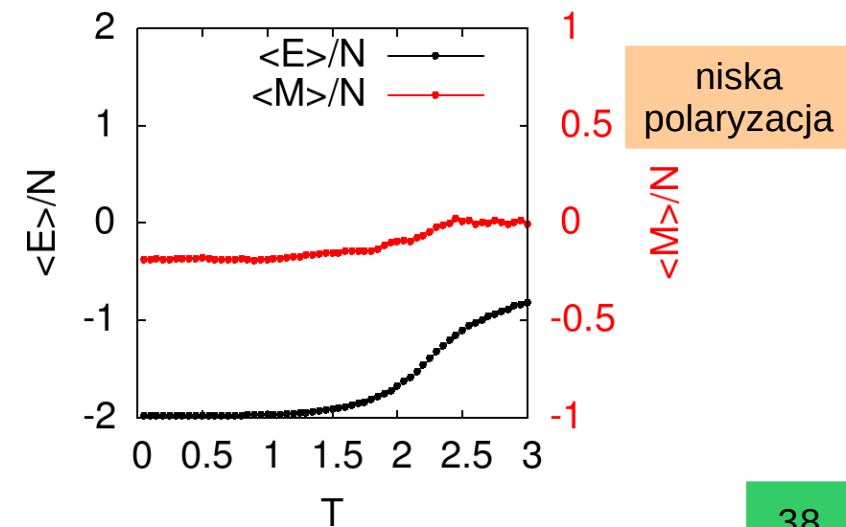
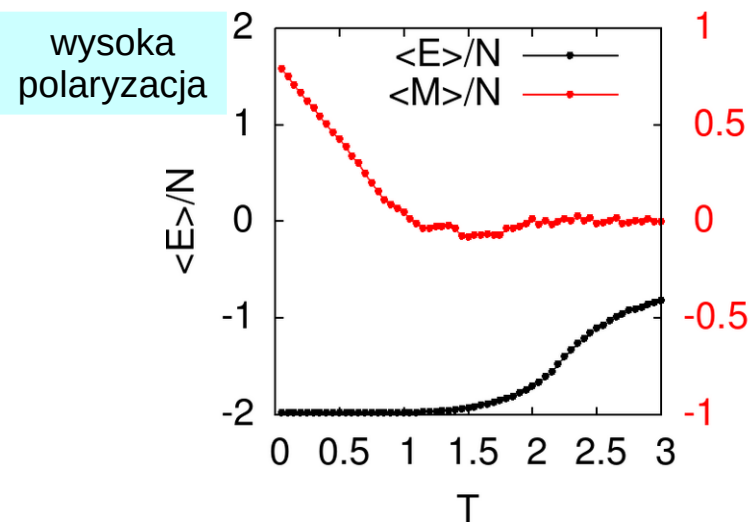
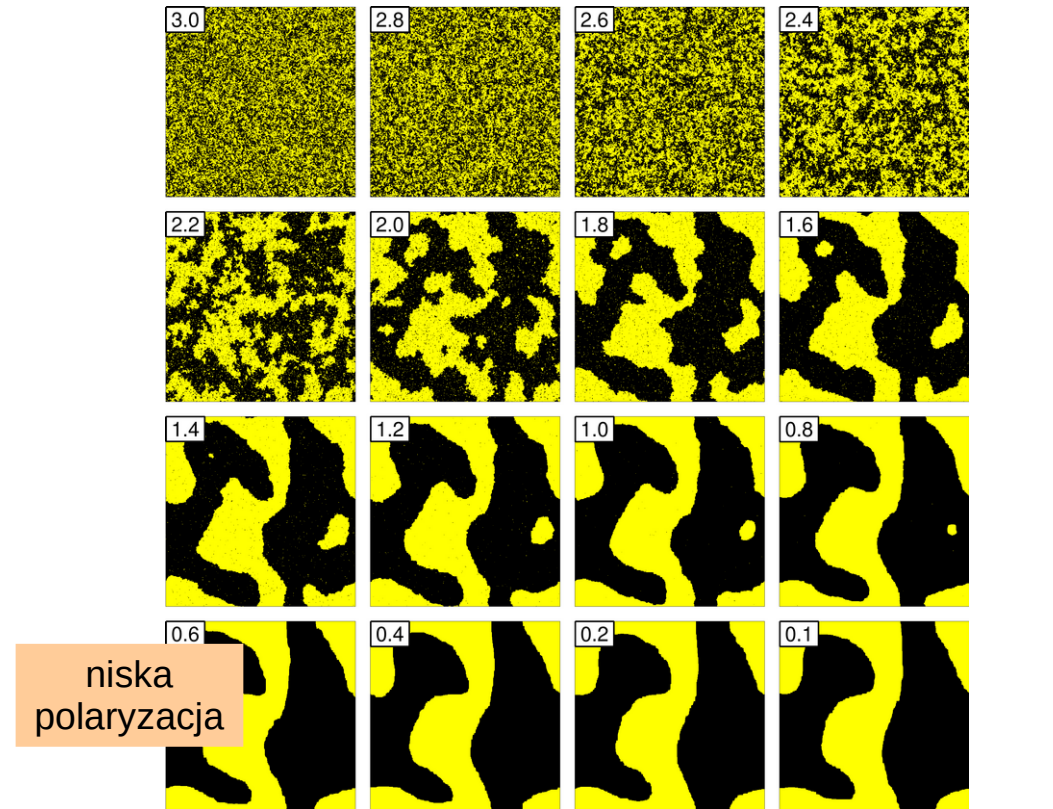
Metropolis,

$T = \text{const}$ dla 100 iteracji sweep, $\Delta T = 0.05$



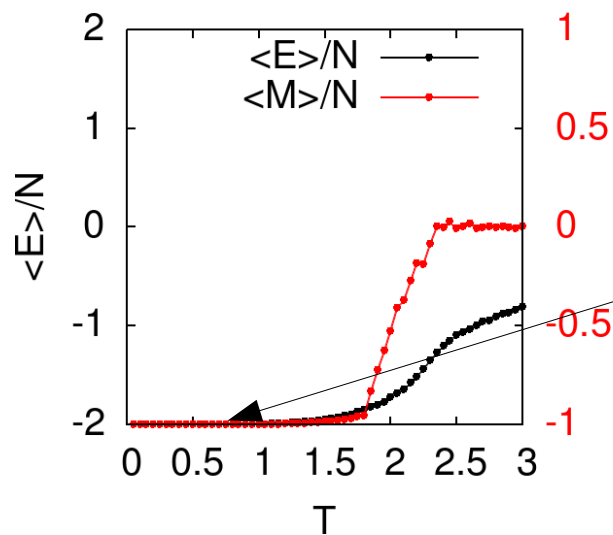
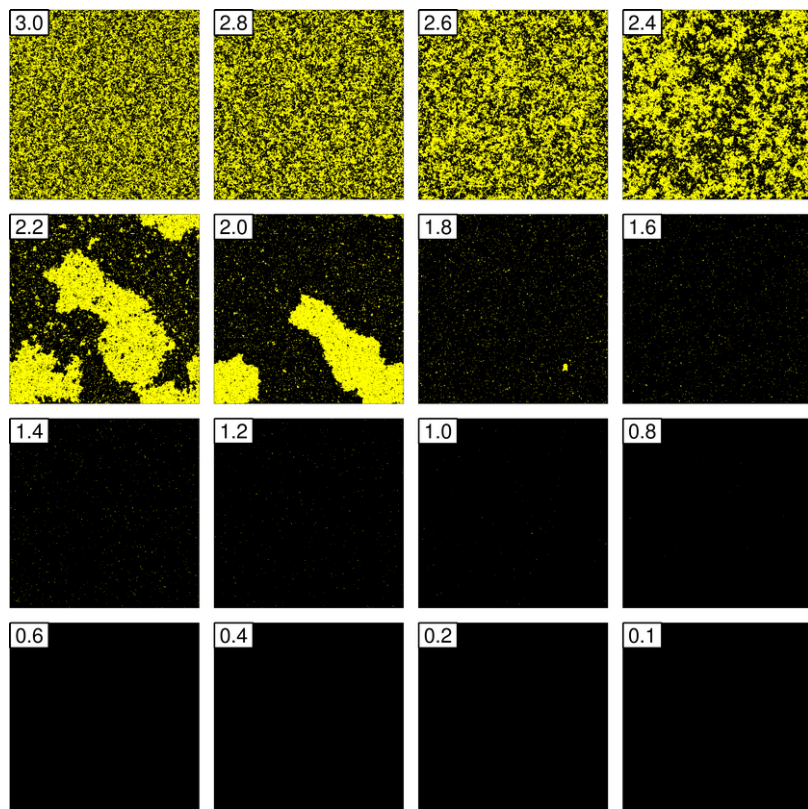
heat-bath,

$T = \text{const}$ dla 100 iteracji sweep, $\Delta T = 0.05$



Metropolis,

$T = \text{const}$ dla 1000 iteracji sweep, $\Delta T = 0.05$



heat-bath,

$T = \text{const}$ dla 1000 iteracji sweep, $\Delta T = 0.05$

