

Исследование модели Изинга методом Монте-Карло по схеме Гиббса

Ромов Петр, 202 группа

Задание 2, Вариант 1

1 Модель Изинга

Рассматривается модель Изинга. Вершины кристаллической решетки располагаются в ячейках таблицы заданного размера с двумя возможными системами соседства.

Состояние системы описывается вектором $X = (x_1, x_2, \dots, x_N)$, где N — число вершин решетки, $x_i \in \{+1, -1\}$, $i = \overline{1, N}$ — спины вершин. Состоянию приписывается энергия:

$$E(X) = - \left(\frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E} J x_i x_j + \sum_{i=1}^N H_i x_i \right) \quad (1)$$

Вероятность нахождения в состоянии X :

$$P(X) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E(X)) \quad (2)$$

Общей намагниченностью модели называется

$$\mu = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N x_i \right) \quad (3)$$

2 Генерация выборки по схеме Гиббса

Генерация выборки из распределения (2) ведется по схеме Гиббса. Для получения очередной точки выборки требуется вычислять распе-

ления $p(x_k | x_1^i, \dots, x_{k-1}^i, x_{k+1}^{i-1}, \dots, x_N^{i-1})$. Введем обозначения:

$$\begin{aligned} X'_+ &= (x_1^i, \dots, x_{k-1}^i, +1, x_{k+1}^{i-1}, \dots, x_N^{i-1}) \\ X'_- &= (x_1^i, \dots, x_{k-1}^i, -1, x_{k+1}^{i-1}, \dots, x_N^{i-1}) \\ b_k &= \sum_{(k,i) \in E} Jx_i + H_k \end{aligned}$$

Выведем формулы для этих распределений:

$$\begin{aligned} E(X'_-) - E(X'_+) &= \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E; i,j \neq k} Jx_i x_j - \sum_{(k,i) \in E} J(-1)x_i - \sum_{i \neq k} H_i x_i - (-1)H_k \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in E; i,j \neq k} Jx_i x_j + \sum_{(k,i) \in E} J(+1)x_i + \sum_{i \neq k} H_i x_i + (+1)H_k = \\ &= 2 \left(\sum_{(k,i) \in E} Jx_i + H_k \right) = 2b_k, \end{aligned}$$

$$\text{подразумевая здесь } x_j = \begin{cases} x_j^i, & \text{если } j < k; \\ x_j^{i-1}, & \text{если } j > k. \end{cases}$$

$$\begin{aligned} p(x_k = +1 | x_1^i, \dots, x_{k-1}^i, x_{k+1}^{i-1}, \dots, x_N^{i-1}) &= \\ &= \frac{P(X'_+)}{P(X'_+) + P(X'_-)} = \frac{\exp(-\beta E(X'_+))}{\exp(-\beta E(X'_+)) + \exp(-\beta E(X'_-))} \\ &= \frac{1}{1 + \exp(-\beta(E(X'_-) - E(X'_+)))} = \boxed{\frac{1}{1 + \exp(-2\beta b_k)}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p(x_k = -1 | x_1^i, \dots, x_{k-1}^i, x_{k+1}^{i-1}, \dots, x_N^{i-1}) &= \\ &= 1 - p(x_k = +1 | x_1^i, \dots, x_{k-1}^i, x_{k+1}^{i-1}, \dots, x_N^{i-1}) = \boxed{\frac{\exp(-2\beta b_k)}{1 + \exp(-2\beta b_k)}} \end{aligned}$$

3 Реализация алгоритма

При реализации, конфигурацию кристаллической решетки логично было представить в виде матрицы, поэтому здесь и далее x_{ij} есть зна-

чение спина элемента решетки, находящегося в строке i , столбце j . В случае четырехугольной системы соседства, соседями вершины (i, j) являются вершины $(i - 1, j)$, $(i, j - 1)$, $(i + 1, j)$, $(i, j + 1)$. В случае треугольной системы соседства, соседями (i, j) также являются $(i + 1, j - 1)$, $(i + 1, j + 1)$.

Конфигурации системы будут изображаться в виде диаграмм, на которых черные клетки соответствуют отрицательному значению спина, белые — положительному.

В качестве начальных конфигураций берется:

- $x_i = +1$, $i = \overline{1, N}$ для случая $J = 1$;
- $x_{ij} = \begin{cases} +1, & i \equiv j \pmod{2}; \\ -1, & \text{иначе} \end{cases}$ для случая $J = -1$.

Легко показать, что в случае четырехугольной системы соседства, на этих конфигурациях достигается наибольшее значение вероятности (2). В случае шести связей у каждого спина и $J = -1$ используется вторая начальная конфигурация.

В условиях

- размер решетки 20×20 ,
- 96 значений температуры

на компьютере автора имели место следующие показатели времени работы:

Условие	Время (с)
1'000 итераций, 4 соседа	92
1'000 итераций, 6 соседей	111
10'000 итераций, 4 соседа	932
10'000 итераций, 6 соседей	1128

4 Исследование фазового перехода

По современным представлениям физики¹, *ферромагнетики* и *антиферромагнетики* — вещества, обладающие при температуре выше некоторой критической T_c свойствами *парамагнетиков*, проявляющие особые свойства при температуре ниже T_c . *Парамагнетики* — вещества, которые

¹Из прочитанного в Википедии.

намагничиваются во внешнем магнитном поле в его направлении; в отсутствие внешнего магнитного поля парамагнетик не намагничен, так как из-за теплового движения собственные магнитные моменты атомов ориентированы совершенно беспорядочно.

4.1 Без внешнего магнитного поля

Были исследованы четыре модели с решеткой размера 20×20 в отсутствие внешнего поля. На Рис. 1 – 4 приведены графики зависимости

- математического ожидания энергии на один спин $\frac{1}{N}EE$ (зеленая кривая),
- стандартного отклонения энергии на один спин $\frac{1}{N}\sqrt{DE}$ (красная кривая),
- средней намагнитизации $\sqrt{E(\mu^2)}$ (синяя кривая)

от температуры T . Вертикальная пунктирная линия показывает точку T_0 , в которой наблюдается пик дисперсии энергии.

На графиках средней намагнитизации для ферромагнетиков (Рис. 1 – 2) можно наблюдать, как при достаточно низких температурах $T < T_0$, кристаллическая решетка спонтанно намагничивается. Такое самопроизвольное намагничивание при низких температурах — свойство класса ферромагнетиков. По достижению критической температуры T_0 , происходит резкое падение намагнитченности — вещество превращается в парамагнетик.

При достаточно низких температурах система переходит в состояние наименьшей энергии и не выходит из него, спины почти полностью

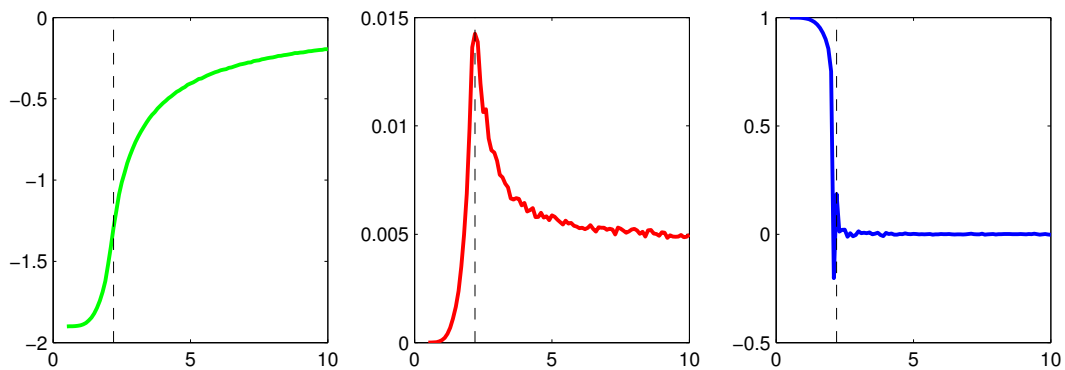


Рис. 1: Ферромагнетик, четырехугольная система соседства. $T_0 = 2.2$

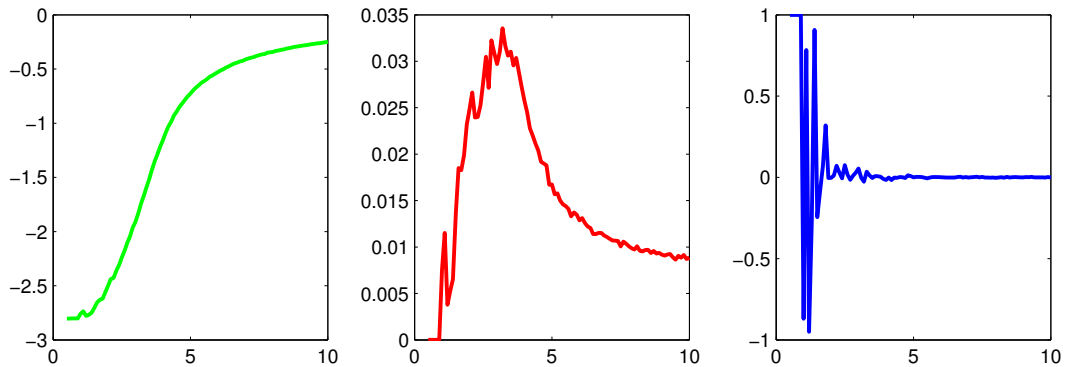


Рис. 2: Ферромагнетик, шестиугольная система соседства.

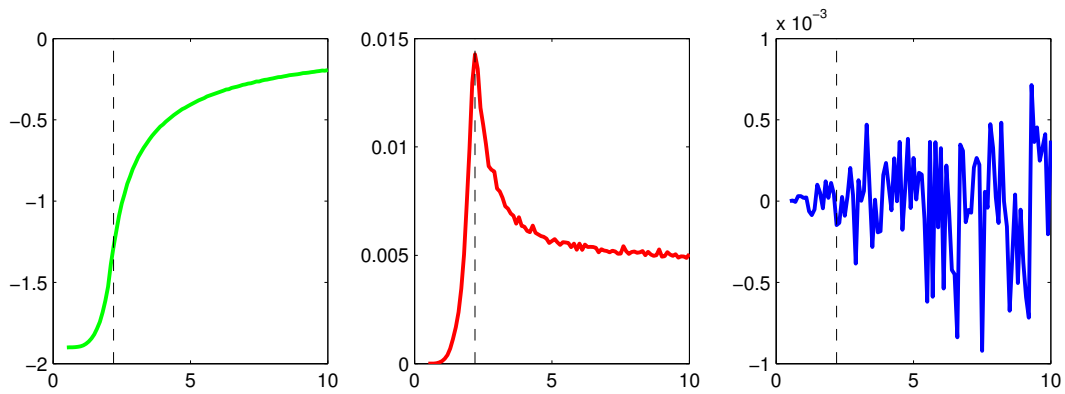


Рис. 3: Антиферромагнетик, четырехугольная система соседства. $T_0 = 2.2$

упорядочены (см. Рис. 5а). При $T > T_0$ наблюдаются хаотичные конфигурации (Рис. 5е).

Антиферромагнетики (Рис. 3 – 4) плохо намагничиваются: при любой температуре их средняя намагниченность близка к нулю.

Далее будут рассматриваться только модели ферромагнетика с четырехугольной системой соседства.

4.2 Постоянное магнитное поле

Были рассмотрены модели ферромагнетика, помещенного в постоянное магнитное поле $H_i = h$ для $h = -2, -1, 0, 1, 2$. Ожидаемая энергия $E(X)$ и ее отклонение не зависят от знака h . На Рис. 6 представлены графики для случаев:

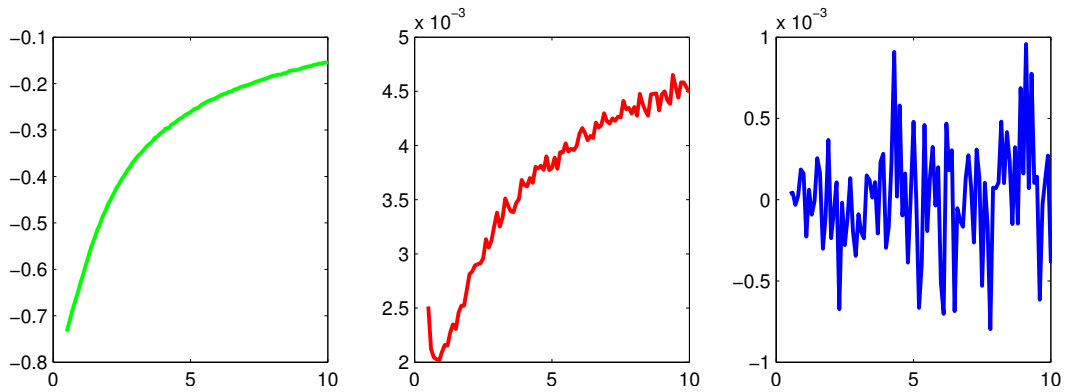


Рис. 4: Антиферромагнетик, шестиугольная система соседства.

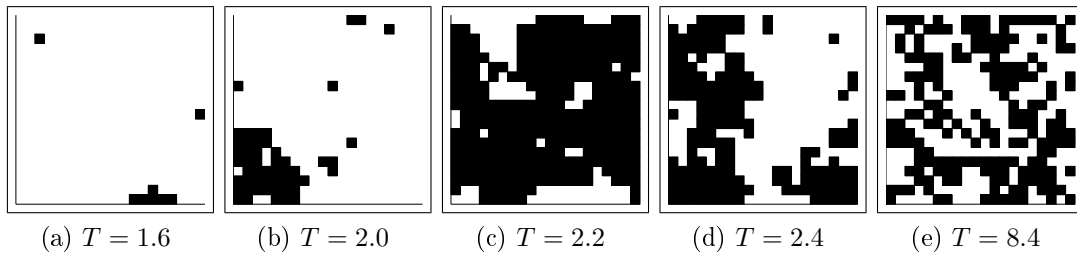


Рис. 5: Характерные конфигурации модели Изинга (четырёхугольная система соседства) для температур, отдаленных от T_0 (5а, 5е); в окрестности фазового перехода (5b, 5с, 5d).

- $h = 0$ (красные кривые),
- $|h| = 1$ (зеленые кривые),
- $|h| = 2$ (синие кривые).

Пунктирной линией обозначены графики намагниченностей для $h < 0$, а также для $h = 0$ в случае, если в отсутствии внешнего поля система устремилась к стабильному состоянию с отрицательной намагниченностью (все спины равны -1). Можно сказать, что сплошная и пунктирная синие кривые являются графиками средней намагниченности в пределах, соответственно $h \downarrow 0$ и $h \uparrow 0$.

В постоянном магнитном поле кристаллическая решетка, как и в его отсутствии, полностью намагничивается при $T < T_0$, при $T > T_0$ намагнетизация тем выше, чем магнитное поле выше по модулю — так ведут себя парамагнетики.

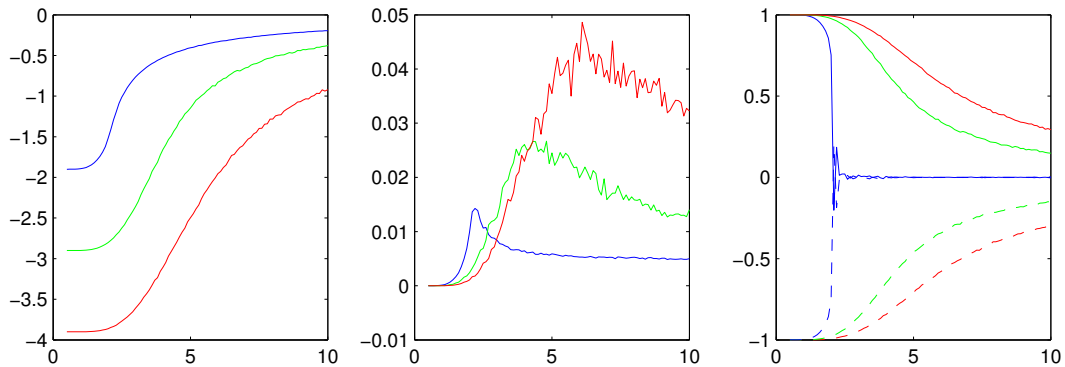
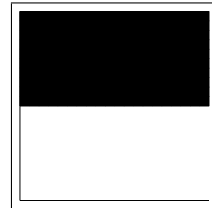


Рис. 6: Графики зависимости $\frac{1}{N}EE$, $\frac{1}{N}\sqrt{DE}$, $\sqrt{E(\mu^2)}$ от T (в таком порядке, начиная с левого) для ферромагнетика, помещенного в постоянное магнитное поле.

4.3 Магнитное поле особого вида

Рассмотрена модель кристаллической решетки 20×20 ферромагнетика, помещенного во внешнее магнитное поле.

$$H_{ij} = \begin{cases} +1, & 1 \leq i \leq 10; \\ -1, & 11 \leq i \leq 20. \end{cases}$$



В таком магнитном поле ферромагнетик теряет свои свойства, что хорошо видно на Рис. 7 (красной кривой обозначен график для модели с внешним магнитным полем). На Рис. 8 приведены примеры конфигураций кристаллической решетки. Наиболее вероятным, стабильным состоянием здесь является конфигурация 8а, общая магнетизация которой равна нулю.

5 Сравнение с вариационным подходом

Для сравнения, на Рис. 9 приведены графики, построенные с использованием вариационного подхода.

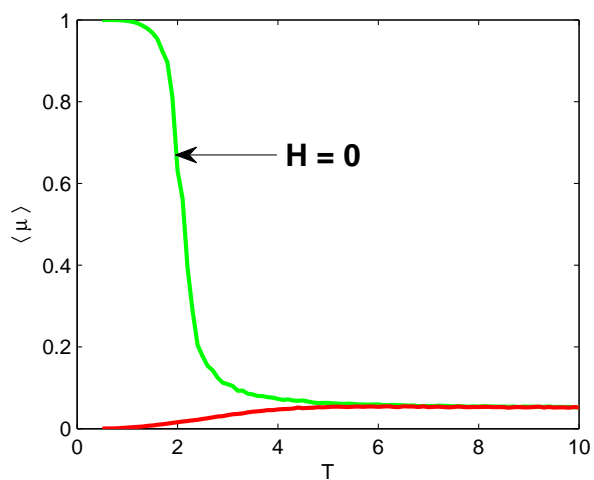


Рис. 7: График зависимости $\sqrt{E(\mu^2)}$ от T

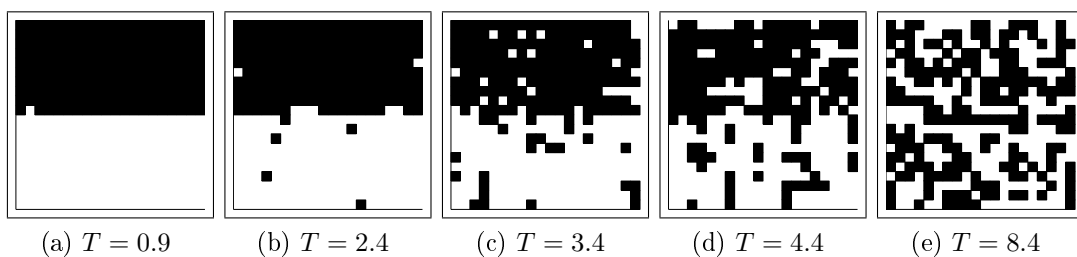


Рис. 8: Характерные конфигурации кристаллической решетки, помещенной в магнитное поле H для различных температур.

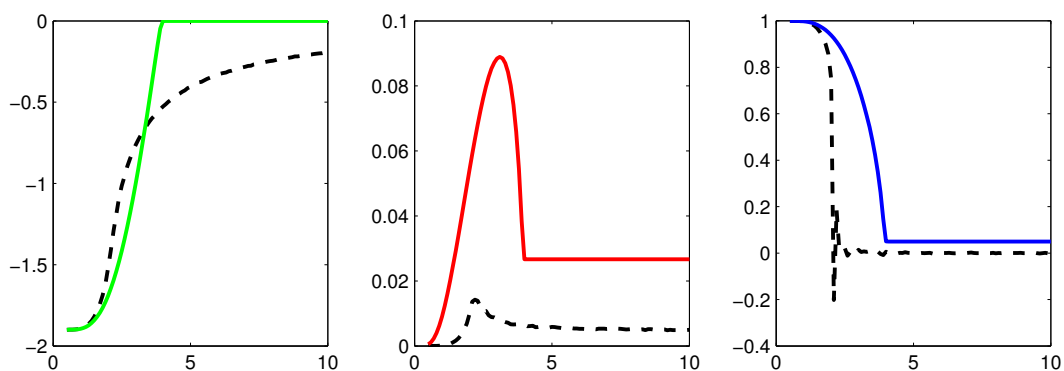


Рис. 9: Графики зависимости $\frac{1}{N}EE$, $\frac{1}{N}\sqrt{DE}$, $\sqrt{E(\mu^2)}$ от T , построенные с использованием вариационного подхода (сплошные) и метода Монте-Карло (пунктирные).