

Renormálás – 1. beadandó

Asztalos Bogdán

2022. október 10.

1. Bevezetés

1.1. Az Ising-modell

Az Ising-modell ferromágneses anyagok mágneses viselkedésének matematikai modellezésére szolgáló modell, amelyet Wilhelm Lenz javasolt 1920-ban, és először Ernst Ising vizsgált részletesen. A modell előnye, hogy a bonyolult elektromágneses kölcsönhatást pusztán a szomszédjaikkal kölcsönható elemi mágneses momentumokkal közelíti, így numerikusan könnyen vizsgálható, de kvalitatív jellemzőiben mégis visszaadja a mágneses anyagok valódi viselkedését. Ezen kívül, a modell egyszerűsége miatt könnyen általánosítható többféle irányba is (kiterjeszthető például a dimenziók száma, a mágneses spinek állapota, a kölcsönhatás módja), így különböző típusú folyamatok is jól vizsgálhatók hasonló módszerrel.

A modell formális definíciója szerint a rendszert egy adott rács i rácspontjain elhelyezkedő elemi s_i mágneses momentumok alkotják, amelyek kétféle értéket vehetnek fel: $s_i \in \{-1, +1\}$. A modell a mágnesesség azon tulajdonságát valósítja, miszerint egy mágneses momentum az által érzékelt tér irányába igyekszik beállni. A rácspontokon elhelyezkedő elemi momentumokra kétféle forrásból származó tér hathat: egyrészt a többi momentum hatására keletkezik az adott helyen tér, illetve a rendszeren kívülről is érkezik valamilyen H nagyságú tér. Az energia képletében ezen két hatást két különböző összegző taggal vehetjük számításba az alábbi módon:

$$E[\mathbf{s}] = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - H \sum_i \sum_i s_i. \quad (1)$$

Az első tagban minden szomszédos $\langle i, j \rangle$ rácspontpárra összegezzük az $s_i s_j$ szorzatot, amelynek értéke $+1$, ha a két spin azonos, és -1 , ha különbözőek, tehát energetikai szempontból kedvező, ha a szomszédos momentumok azonosak. A második tagban pedig egyszerűen az elemi spinek értékét adjuk össze, ami külön-külön energianyereséget minden olyan momentum után, ami H irányába áll.

Pusztán az (1) képlet alapján a legoptimálisabb elrendeződés az lenne, ha minden spin értéke megegyezne, de a termikus fluktuáció hatására minden \mathbf{s} konfiguráció előfordulhat valamekkora $e^{-\beta E[\mathbf{s}]}$ Boltzmann-tényezővel arányos valószínűséggel. Emiatt, ha definiáljuk a

$$m = \left\langle \frac{1}{V} \sum_i s_i \right\rangle \quad (2)$$

mágnesezettséget, ahol V az elemi momentumok száma, ennek abszolút-értéke nem 1 lesz, hanem annál valamilyen kisebb érték. A hőmérséklet növelésével a mágnesezettség erőssége fokozatosan csökken, és valamilyen T_C kritikus érték felett teljesen eltűnik, és az egyensúlyi érték 0 lesz.

A modell az elmúlt 100 évben az egyik legáltalánosabban tanulmányozott vizsgálati alanyává vált számos alkalmazása miatt. Többek között az Ising-moddellen keresztül jól vizsgálható a fázisátalakulás és a kritikus viselkedés jelensége is, hiszen a kritikus hőmérséklet alatt a mágneses spinek halmaza elsőrendű, felette pedig másodrendű fázisátalakuláson megy át, a két tartomány határán pedig egy jól meghatározható kritikus pont található, amelynek tulajdonságai bonyolultabb rendszerek viselkedésére is rávilágít. Ezen dolgozatban a 2 dimenziós Ising modellel foglalkozom, és a kritikus hőmérséklet alatti tartományban vizsgálom, hogy a stabil egyensúlyi mágnesezettség (amely egy 0-tól különböző érték) hogyan határozható meg a Metropolis-algoritmus segítségével. Numerikus szimulációval fogom megtalálni az egyensúlyi mágnesezettséget két különböző csatolás értékénél, és kvantitatív módon vizsgálni, hogy a kapott eredmény mennyire pontos, és hogy hogyan korlátozza a numerikus eljárás tökéletlensége.

1.2. Metropolis-algoritmus

Ahhoz, hogy kiszámoljuk a mágnesezettség egyensúlyi értékét, az alábbi várható értéket kéne kiszámolni:

$$m = \left\langle \frac{1}{V} \sum_i s_i \right\rangle = \sum_{\{\mathbf{s}\}} \frac{p_{\mathbf{s}}}{Z} \sum_i s_i, \quad (3)$$

ahol $p_{\mathbf{s}} = \frac{e^{-\beta E[\mathbf{s}]}}{Z}$ az adott spinkonfiguráció előfordulási valószínűsége. Mivel azonban a spinkonfigurációk száma 2^V , ez numerikusan csak igen hosszú idő alatt lenne kiszámolható már kisebb méretű rendszer esetén is. Statisztikus fizikai intuíciónál viszont tudjuk, hogy a mágnesezettség értékek fölötti valószínűségi eloszlás a termodinamikai limeszben egy igen keskeny eloszlás, tehát véletlenszerűen választva valamilyen \mathbf{s} konfigurációt $p_{\mathbf{s}}$ valószínűséggel, a konfigurációhoz tartozó normált spinösszeg igen nagy valószínűséggel az egyensúlyi m érték körül lesz. A (3) kifejezés elméleti kiszámítása helyett tehát ugyanúgy elégséges lehet a $p_{\mathbf{s}}$ valószínűségek által meghatározott eloszlásból mintavételezni konkrét megvalósulásokat, és azok értékeit átlagolni.

A Metropolis-algoritmus célja, hogy olyan módon biztosítsa a spinkonfigurációk min-

tavételezését, hogy a mintavételezési valószínűségek a p_s valószínűségeknek feleljenek meg. Ezt az alábbi lépéseken keresztül teszi:

1. Induljunk ki egy tetszőleges spinkonfigurációból!
2. Véletlenszerűen válasszunk egy elemi mágneses momentumot!
3. Számoljuk ki, hogy mekkora ΔE energiaváltozással járna a kiválasztott mágneses momentum megváltoztatása $+1$ -ről -1 -re, vagy -1 -ről $+1$ -re!
4. Változtassuk meg a kiválasztott spin értékét $\min(1, e^{-\beta\Delta E})$ valószínűséggel!
5. Ismételjük a a 2-4 lépéseket!

Belátható, hogy ezt az algoritmust kellő ideig futtatva, a spinkonfigurációk előfordulási valószínűsége a termikus p_s valószínűségekhez tart, így képesek lehetünk az Ising-modell által biztosított egyensúlyi mágnesezettség meghatározására.

1.3. Bizonytalanság számítása

A Metropolis-algoritmust futtatva az érintett spinkonfigurációk mágnesezettsége az idővel az egyensúlyi mágnesezettséghez fog tartani, és akörül ingadozni. Mivel azonban ez csak egy numerikus szimuláció, a pontos egyensúlyi érték nem határozható meg egzaktul, hanem az ingadozás során érintett értékek átlagát tekinthetjük az eredménynek, ám ennek van valamekkora bizonytalansága. Azonos eloszlású, független mintavételezés esetén, egy x_1, x_2, \dots, x_n sztochasztikus sorozat $\langle x \rangle = \frac{1}{n} \sum_i x_i$ átlagának bizonytalansága a $\Delta x = \sqrt{\frac{\sigma^2}{n-1}}$ empirikus szórással számolható, ahol $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$, de jelen esetben a spinkonfigurációk sorozata nem független, hiszen egymásból generálódnak, ezért az ily módon kapott bizonytalanság a valódi értéknél kisebb lesz.

Ahhoz, hogy a korreláltan mintavételezett x_i értékek átlagának valódi bizonytalanságát meghatározzuk, képezzünk m változó átlagából új változókat az alábbi módon:

$$y_i^{(m)} = \frac{\sum_{j=im+1}^{(i+1)m} x_j}{m}. \quad (4)$$

Függetlenül mintavételezett változókra belátható, hogy az új változókra $\langle y \rangle = \langle x \rangle$ és $\sigma_y = \sigma_x / \sqrt{m}$, tehát $\Delta y = \sqrt{\frac{\sigma_y^2}{n/m-1}} = \sqrt{\frac{\sigma_x^2/m}{n/m-1}} \approx \Delta x$, feltéve, hogy $n/m \gg 1$, tehát a mért érték bizonytalanságára vonatkozó információ nem változik a blokkolás hatására. Ugyanakkor korrelált változók esetén az információtartalom változik, hiszen korreláció csak a szomszédos változók között lép fel, de a több változó egymásba olvasztása miatt két szomszédos y között kisebb a korreláció, mint két szomszédos x között. Ennek köszönhetően, ha kiszámoljuk Δy értékeket, akkor m növelésével növekedni fog, de egy bizonyos mérték után konvergál egy értékhez, ahogy az a 2 ábrán is látható. Ez a konvergencia

mutatja azt, hogy bizonyos m fölött az y változók már függetlennek tekinthetők, és azok bizonytalansága a végzett szimulációkban rejlő valódi bizonytalanság.

2. Teszt eset ($J = 0,5kT$)

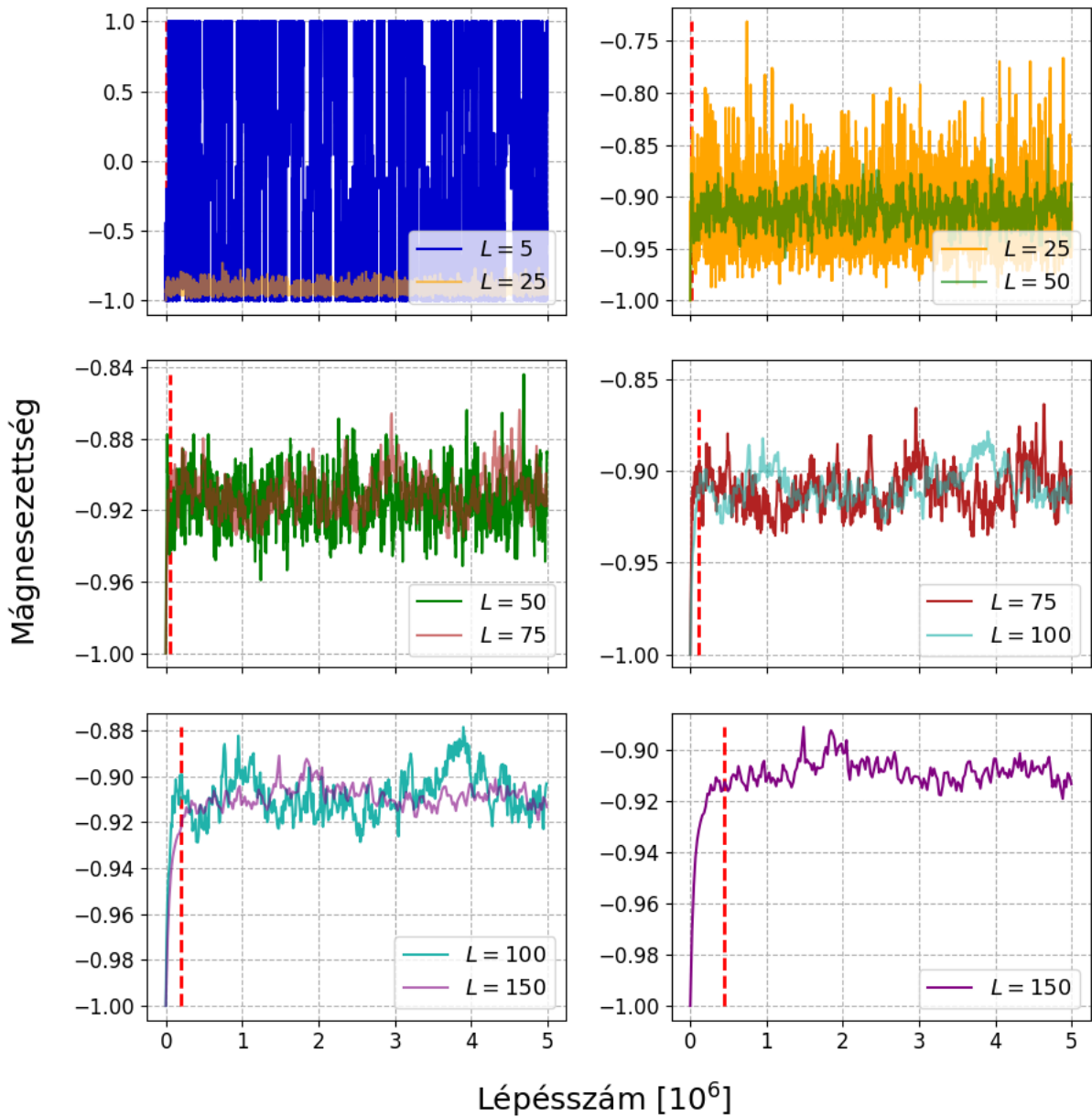
Először teszteltem az algoritmus alkalmazhatóságát egy olyan esetre, ahol az eredmény ismertem. Meg volt adva, hogy a 2 dimenziós Ising-modell egyensúlyi mágnesezettsége a csatolási paraméter $\frac{J}{kT} = 0,5$ értéke mellett a termodinamikai limeszben $m(0,5) = 0,911319\dots$, így először ezen érték mellett vizsgáltam a kapott eredményt.

2.1. A mágnesezettség konvergálása

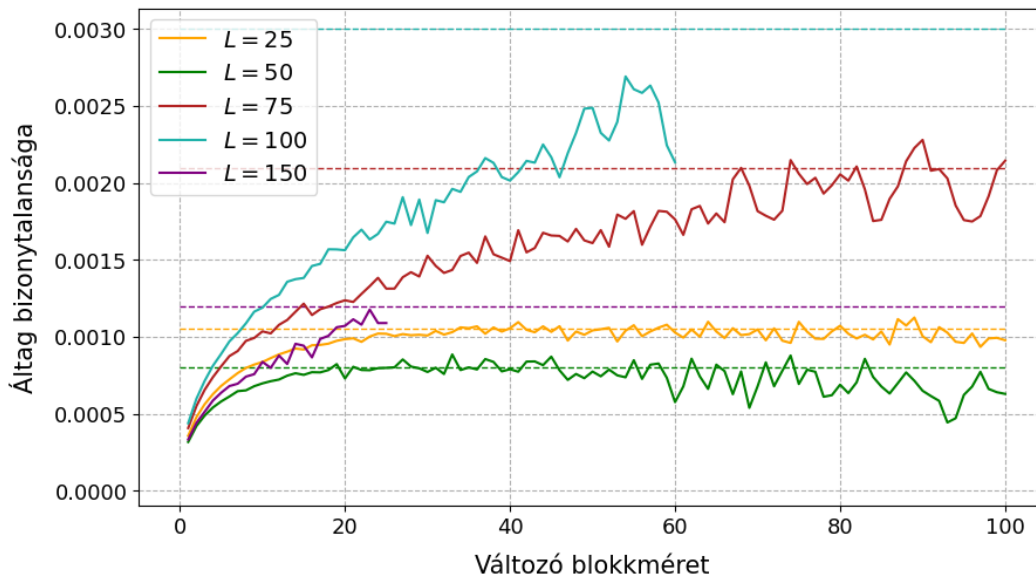
A Metropolis-algoritmus egy olyan eljárást biztosít, ahol az előállított konfigurációk előfordulási valószínűsége hosszú idő után konvergál a kívánt eloszláshoz. Mivel a rendszert mindenképpen egy konkrét elrendezésből kell elindítani, és a mintavételezésben a szomszédos mintavételezések erősen korreláltak, ezért az egyensúlyi mágnesezettség megkapásához jó párszor el kell ismételni az 1.2. fejezetben leírt lépéseket. Mivel a rendszer méretének függvényében exponenciálisan nő a lehetséges konfigurációk száma is, ezért az előzetes várakozás az, hogy a konvergálási idő is egyre hosszabb lesz nagyobb rendszer méreteknél. Ugyanakkor szükséges az, hogy lehetőleg minél nagyobb rendszereket vizsgáljunk, hiszen a mágnesezettség eloszlása csak a termodinamikai limeszben lesz elkeskenyedő eloszlás, tehát kisebb rendszerek esetén az egyensúlyi mágnesezettség meghatározása kevésbé lesz pontos.

Annak érdekében, hogy találjak egy olyan megfelelő rendszer méretet, amelyben a mágnesezettség értéke már jól meghatározható, többféle méretű rendszert is megvizsgáltam, egyre növekvő mérettel. A szimuláció során L rácscellájú oldalhosszúságú, négyzet alakú rendszereket használtam periodikus határfeltétellel, és L értékét fokozatosan növeltem $L = 5$ -től 150-ig. Egy vizsgált rendszer így minden esetben összesen $V = L^2$ darab elemi mágnesezettséget tartalmazott. A szimulációt minden esetben az ún. hideg állapotból indítottam, amikor minden momentum értéke $s_i = -1$ volt, tehát a mágnesezettség $m_0 = -1$ -ről indult, és a szimuláció során egyre növekedett. Minden rendszer méret esetén $N = 5\,000\,000$ -szor mentem végig a szimuláció lépésein.

Az 1. ábra mutatja a mágnesezettség értékének konvergálását a különböző méretű rendszerek esetén. Mivel egy lépés során maximum 1 darab spin változhatott meg, ezért a mágnesezettség értékét nem számítottam ki minden lépés után, csak L^2 darab lépésenként, így két mérés között elvben minden spinnek volt lehetősége megváltozni. Az egyensúlyi mágnesezettség kiszámításához a 20. mért érték utáni adatok átlagát vettem, amelynél mindegyik rendszer méret esetén már a konvergált a szimuláció (lásd, piros szaggatott vonalak).



1. ábra. A Metropolis-algoritmussal kapott mágnesezettségértékek a lépések ismétlésének függvényében különböző rendszerméretek esetén $J/kT = 0,5$ csatolás mellett. Minden panelen halványan látható a következő panelen látható adatsor is az összehasonlíthatóság érdekében.



2. ábra. A blokkolt változókból számolt empirikus bizonytalanság a blokkméret függvényében $J/kT = 0,5$ csatolás mellett.

2.2. A mágnesezettség bizonytalansága

Ahogy arra számítani lehetett, a rendszerméret növelésével a mágnesezettségértékek ingadozása csökkent, ám az egyensúly eléréséhez egyre több lépés volt szükséges. Az egyensúlyi mágnesezettség értékéről láthatjuk, valóban az irodalmi érték környékén van, de a bizonytalanság kiszámításához el kell készíteni a mért változók blokkolását, hogy lássuk, hogy hogyan konvergál. Ennek folyamatát a 2. ábra ábrázolja. A blokkméretet minden rendszerméret esetében addig növeltem, amíg volt legalább 8 darab változó, aminek a szórását ki lehetett számolni, hogy még nagyjából teljesüljön az 1.3. fejezetben tárgyalt $n/m \gg 1$ feltétel. Az ábrán csak 100-as blokkméretig ábrázoltam a bizonytalanság növekedését, az ötből három eset láthatólag már itt is elérte a konvergenciát. Az $L = 100$ és 150 esetekben a maximális blokkméret kisebb volt, mint 100, így a konvergencia elérése nem látszik olyan egyértelműen, mint a többi esetben, de a növekedés korlátjára így is adható nagyságrendi becslés, aminél jobban a görbék tendenciája alapján már nem fog növekedni a bizonytalanság, és ezt tekintettem a mérés bizonytalanságának.

A különböző rendszerméretetek esetén kapott egyensúlyi mágnesezettségértékeket és ezek bizonytalanságát az 1. táblázat tartalmazza.

2.3. Diszkusszió

Ahogy az 1 táblázatból látható, a mért $\langle m \rangle$ értékek a rendszerméret növelésével valóban egyre közelebb kerültek az irodalmi értékhez, és bár a bizonytalansági tartományba nem mindig esett bele (ezt az utolsó két esetben okozhatta akár a bizonytalanság alul-becslése), a mért érték az irodalmi értéktől egyik esetben sem tér el jobban, mint a kapott bizony-

L	$ \langle m \rangle $	Δm
5	0,0	–
25	0,9140	0,0011
50	0,9148	0,0008
75	0,9103	0,0021
100	0,9080	0,0030
150	0,9084	0,0012

1. táblázat. A $J/kT = 0,5$ csatolási érték esetében mért egyensúlyi mágnesezettségértékek és bizonytalanságaik a különböző méretű rendszerekre.

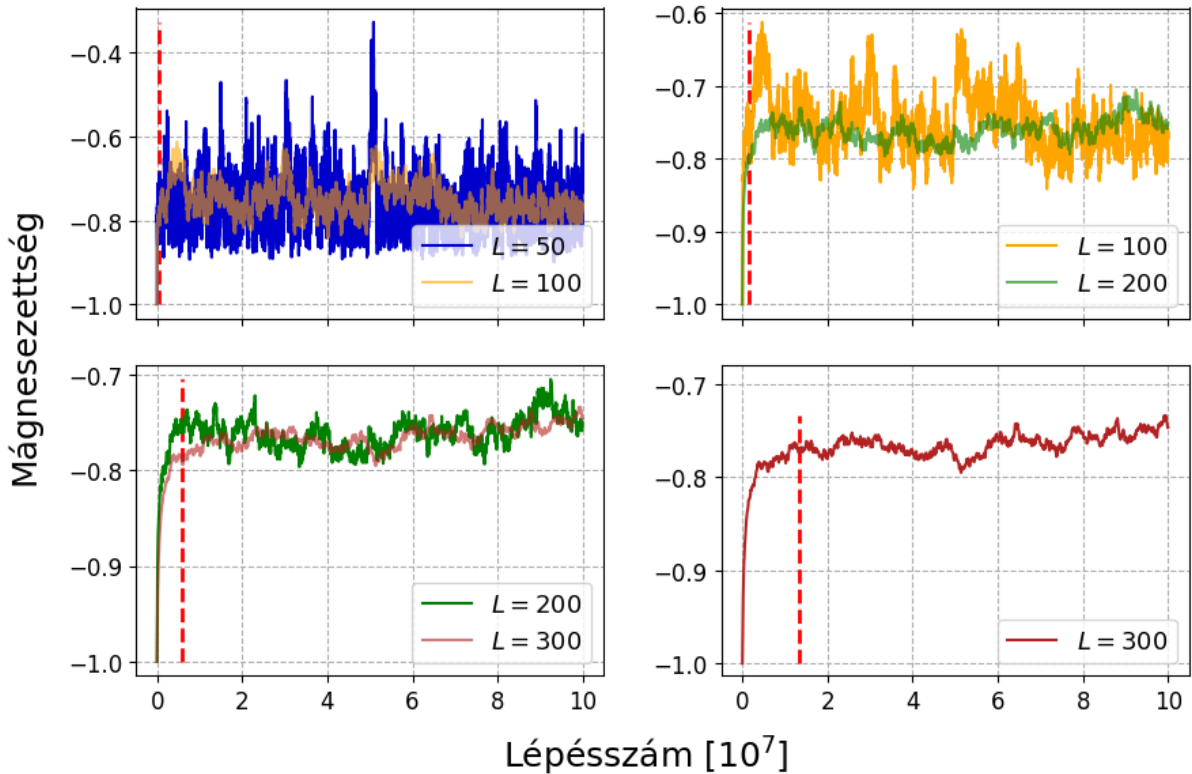
talanság másfélszerese. Ez egyrészt igazolja a számolási eljárás során alkalmazott egyik legnagyobb önkényességet, azaz hogy az átlagolást mely értéktől kezdjük el számolni, de az eredmények az irodalmi érték ismerete nélkül megfelelő igazolást nyújtanak. Egyrészt már az 1. ábra alapján is látható, hogy a függőleges piros vonal utáni adatpontok már nagyjából egy konvergált értékhez tartoznak, de egzaktabb módszer, ha összehasonlítjuk a kapott Δm értékeket azzal, hogy az átlagolás kezdete után mennyit vándorolt az átlag. Leellenőrizhető, hogy ha az átlagolást későbbtől kezdjük el számítani (azaz, ha a szimuláció elején nagyobb részt hagyunk figyelmen kívül), akkor mért egyensúlyi mágnesezettség nem tolódik el jobban, mint a Δm bizonytalanság. Ez azt jelenti, hogy az átlag már nem „vándorol” a konvergenciapont felé, a mért értékek ingadozását már csak a mintavételi fluktuáció okozza. A feladat tehát a következő fejezetben is az, hogy egy ilyen küszöböt találjunk, ami után a mért átlag már nem a konvergencia miatt mozog, hanem a fluktuáció miatt.

3. Ismeretlen eset ($J = 0,45kT$)

Ebben a fejezetben egy másik csatolás esetén vizsgálom meg a 2 dimenziós Ising-modellt ugyanolyan módon. Jelenleg a paraméter értéke $\frac{J}{kT} = 0,45$ lesz, és mivel az ehhez az esethez tartozó irodalmi érték nem áll a rendelkezésre, némileg nehezebb a helyzet, mert nincs egy előzetes referencia.

3.1. A mágnesezettség konvergálása

Mivel ebben az esetben közelebb vagyunk a kritikus ponthoz, ezért a mágnesezettség abszolút-értéke kisebb lesz, így tovább tart, amíg a szimuláció során elérjük a konvergenciát. Emiatt az alkalmazott lépésszámot ebben az esetben felemeltem, és $N = 100\,000\,000$ -szor alkalmaztam az algoritmust. A pontosabb és megbízhatóbb eredmény érdekében nagyobb rendszereket is alkalmaztam, mint az előző esetben, jelenleg $L = 50$ -től 300-ig



3. ábra. A Metropolis-algoritmussal kapott mágnesezettségértékek a lépések ismétlésének függvényében különböző rendszerméretek esetén $J/kT = 0,45$ csatolás mellett.

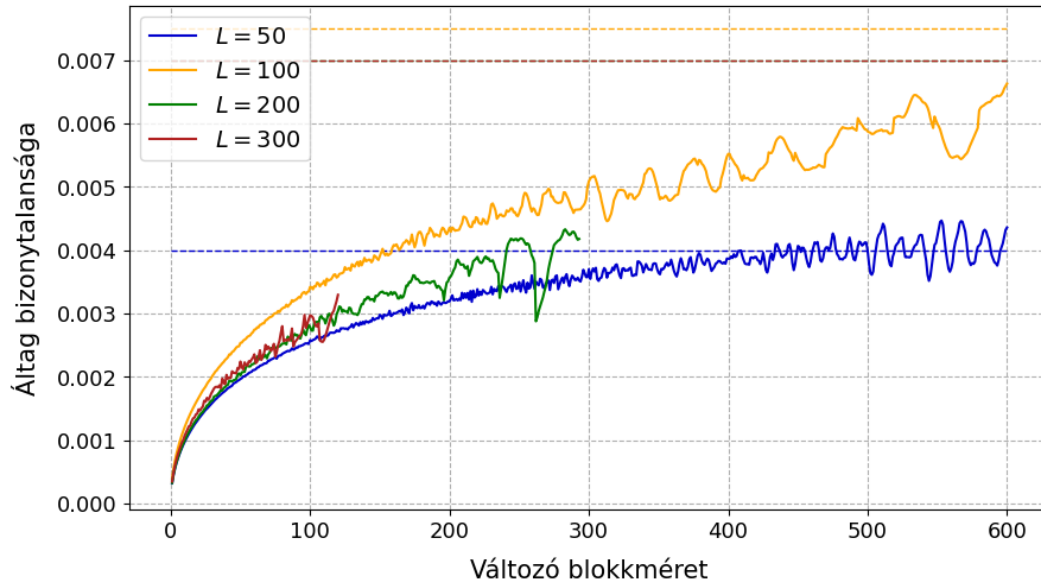
terjedt. A konvergenciát ezúttal a 3. ábra ábrázolja. Az egyensúlyi mágnesezettség kiszámolásához vett átlagolást a 150. mért érték utáni adatokat vettem figyelembe.

3.2. A mágnesezettség bizonytalansága

A mért egyensúlyi mágnesezettségek bizonytalanságát itt is a változóblokkolás módszerével számítottam ki. Ennek folyamatát a 4. ábra mutatja. A blokkméretet ezúttal 600-ig ábrázoltam, ám a két legnagyobb rendszerméret itt sem érte ezt el, viszont a konvergenciájuk itt is megbecsülhető volt a görbék tendenciája alapján. Mivel a $L = 100$ esethez tartozó bizonytalanság már közel volt a konvergenciához, annak abszolút bizonytalansága megbecsülhető volt (én egy kicsit túlbecsültem, hogy biztosan ne legyen téves az eredmény), az $L = 200$ és 300 eset pedig bár még távolabb volt a felső korlátjuktól, de lassabb tendenciát mutattak, mint az $L = 100$ eset, ezért azok hibáját az előző esetnél kicsit kisebbnek vettem. Az így kapott egyensúlyi értékeket, és azok bizonytalanságait a 2. táblázat tartalmazza.

3.3. Diszkusszió

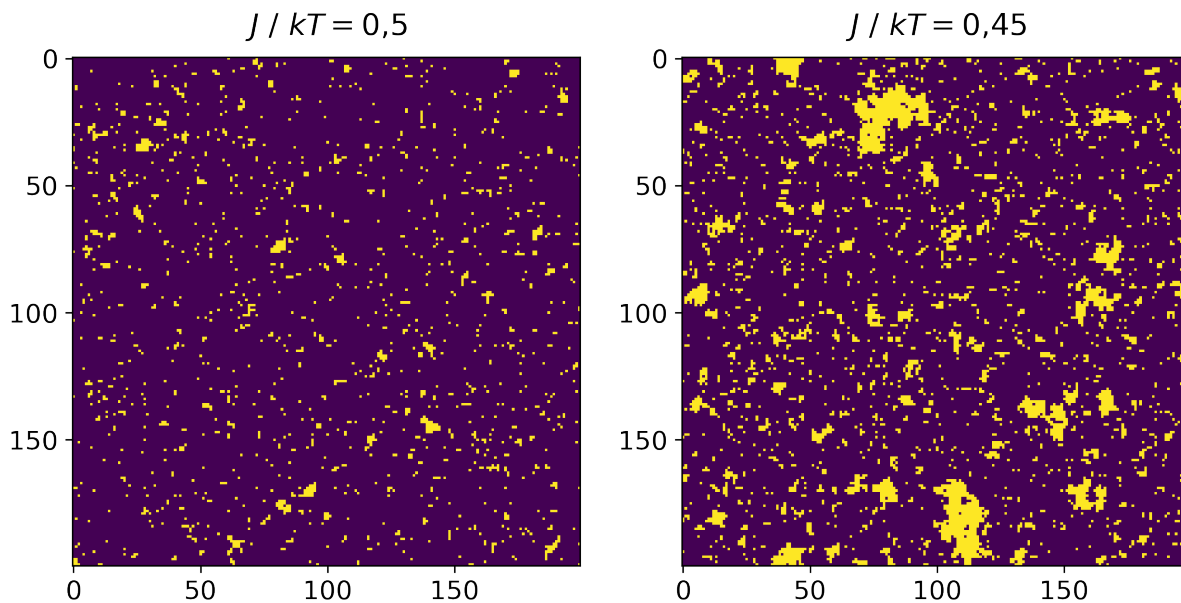
Bár az egzakt végeredmény ebben az esetben nem ismert, a mért értékek itt is elég hasonlóak lettek. Ugyan az előző eset alapján, a valódi eredmény nem biztos, hogy a mérési



4. ábra. A blokkolt változókból számolt empirikus bizonytalanság a blokkméret függvényében $J/kT = 0,45$ csatolás mellett.

L	$ \langle m \rangle $	Δm
50	0,7592	0,0040
100	0,7507	0,0075
200	0,7608	0,0070
300	0,7640	0,0070

2. táblázat. A $J/kT = 0,5$ csatolási érték esetében mért egyensúlyi mágnesezettségértékek és bizonytalanságaik a különböző méretű rendszerekre.



5. ábra. Egy-egy tipikus spinkonfiguráció a $J/kT = 0,5$ és a $J/kT = 0,45$ esetekben.

bizonytalanságon belülre esik, de ha feltesszük, hogy nem tér el jobban egyik értéktől sem, mint a bizonytalanság másfélszerese, akkor az érték a $0,754 - 0,762$ tartományba esik.

Érdekes összehasonlítani egy tipikus konfigurációt az előző eset tipikus konfigurációjával. Az 5. ábra két végállapotú konfigurációt mutat $L = 200$ -as rendszer méret esetén. Jól látható, hogy a $J/kT = 0,45$ esetben a hőmérsékleti fluktuáció miatt kialakuló mágneses domének sokkal nagyobbak, mint az előző esetben szereplő néhány „folt”. Ezen keresztül is jól értelmezhető az, hogy az utóbbi esetben már közelebb vagyunk a kritikus ponthoz, ezért a mágnesezettség orientáltsága már nem annyira egyértelmű, mint az alacsonyabb hőmérsékletű esetben.