

Renormálás – 2. beadandó

Asztalos Bogdán

2022. november 28.

1. Bevezetés

Ebben a dolgozatban az előző beadandóban is vizsgált kétdimenziós Ising-moddal foglalkozom. Korábban a Metropolis-algoritmus segítségével mértem meg különböző csatolási értékeknél az egyensúlyi mágnesezettség értékét, de már az ehhez szükséges számítások is elég sok időt igényeltek, így az ennél bonyolultabb mennyiségek meghatározására csak körülményesen lenne alkalmazható. Ezúttal a klaszteralgoritmussal dolgozom, amely számításidőt tekintve a kritikus pont közelében sokkal hatékonyabb a Metropolis-algoritmusnál, ezért a rendszer szuszceptibilitása is kiszámolható elég jó pontossággal különböző csatolási értékek esetén. A dolgozatban a szuszceptibilitás csatolás- és méretfüggését vizsgálva, a renormálási csoportok elméletéből kapott összefüggések segítségével határozom meg a γ és a ν kritikus exponensek értékét.

1.1. Klaszteralgoritmus használata az Ising-modellhez

Az előző beadandóban a kétdimenziós Ising-modell jellemzőit a Metropolis-algoritmus használatával mértem meg, most azonban ennek egy továbbfejlesztését, a klaszteralgoritmust fogom használni. Az Ising-modell a rendszer mágnesezettségét egy rácson elhelyezkedő s_i elemi mágnesezes momentumok segítségével írja le, amelyek kétféle értéket vehetnek fel ($s_i \in \{-1, +1\}$), és az \mathbf{s} vektorral jellemzett konfiguráció energiáját az alábbi képlettel definiálja:

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

A statisztikus fizika szerint egy adott \mathbf{s} konfiguráció előfordulási valószínűségét a Boltzmann-eloszlás adja meg: $p(\mathbf{s}) = \frac{1}{Z} e^{-E[\mathbf{s}]/k_B T}$. Az Ising-modell állapotain értelmezett bármilyen mennyiséget tehát ezekkel a valószínűségekkel kell súlyozni.

Analitikus számolás helyett a gyakorlatban érdekesebb olyan állapotokat mintavételezni a konfigurációs térből, amelyek az eloszlás csúcsa közelében vannak, olyan relatív gyakorisággal, amely arányos a Boltzmann-eloszlás által adott valószínűséggel. A Metropolis-algoritmus egy erre alkalmas eljárást biztosít, amely során az egymás után mintavételezett

spinkonfigurációkat úgy léptetjük, hogy az egyes momentumokat megfelelő valószínűséggel egyesével átfordítjuk, ez az eljárás azonban éppen az egyenkénti fordítgatás miatt nagyon lassúnak bizonyult komolyabb számolások elvégzéséhez. A klaszteralgoritmus ennek az eljárásnak egy gyorsabb megfelelője abban a tekintetben, hogy ugyanúgy fenntartja a részletes egyensúlyt, de lépésenként egy spin átfordítása helyett olyan összefüggő klasztereket keres, amelyek átfordítási valószínűsége 1.

A Metropolis-algoritmus azt használta ki, hogy a konfigurációenergia csupán szomszéd-kölcsönhatásokból áll, így egy darab spin átfordításával az energiaváltozás kiszámítható az átfordított spin szomszédjában lévő elemi momentumok ismeretéből. A klaszteralgoritmus szintén erre támaszkodik, azonban itt a klaszternövelés folyamatában fontos a szomszédosság szerepe. Mivel az energia csak attól függ, hogy az egymással szomszédos rácspontokon megegyező vagy ellentétes irányú spin áll-e, ezért az átfordítandó klaszter belsejében lévő viszonyok nem változtatják az energiát. Egyedül a klaszter határán lévő kölcsönhatások változnak, de ezekről is tudjuk, hogy minden határ menti kölcsönhatás az ellentétére fordul, így két egymás utáni állapot energiakülönbsége a klaszter felülete által okozott energiakülönbséggel lesz arányos. Ezt felhasználva, a klasztereket a felület mentén növelve a megfelelő sztochaszticitás szerint, az átfordítási valószínűség csupán a klaszter megtalálásából fog származni, az átfordítás valószínűsége pedig tisztán 1 lesz.

A klaszteralgoritmus konkrét megvalósulása az alábbi lépésekből áll:

1. Induljunk ki egy tetszőleges spinkonfigurációból!
2. Véletlenszerűen válasszunk egy elemi mágneses momentumot! Ez lesz az átfordítandó klaszter kiinduló állapota.
3. A klaszterrel érintkező, vele egy irányba álló momentumok mindegyikét csatoljuk a klaszterhez $p = 1 - e^{-2\beta}$ valószínűséggel, ahol $\beta = \frac{J}{k_B T}$!
4. Az újonnan hozzáadott spinek klaszteren kívüli szomszédait szintén csatoljuk hozzá a klaszterhez ugyanazzal a p valószínűséggel!
5. Ismételjük a 4. lépést addig, amíg vannak újonnan hozzáadott spinek!
6. Fordítsuk át a kapott klaszter spinjeit!

A tapasztalat szerint, ha a kritikus pont környezetében vagyunk, akkor az átfordított klaszter nagysága sokkal nagyobb, mint a Metropolis-algoritmus esetében látott egy darab momentum, ezért a rendszer sokkal gyorsabban konvergál az egyensúly felé. A későbbi fejezetekben látni fogjuk, hogy tipikusan már néhány tucat lépés után fixálódott a mért mágneszettség és szuszceptibilitás értéke.

1.2. Kritikus pont körüli viselkedés

Ismert, hogy a kétdimenziós Ising-modellben a $\beta = \beta_c \equiv 0,5 \cdot \ln(1 + \sqrt{2})$ paraméterválasztás egy másodrendű fázisátalakulás kritikus pontja, ahol a ξ korrelációs hossz és a χ szuszceptibilitás is divergál. A kritikushoz közeli $\beta < \beta_c$ paraméterek esetén az alábbi skálázódási törvények teljesülnek:

$$\xi \sim (\beta_c - \beta)^{-\nu} \quad (2)$$

$$\chi \sim (\beta_c - \beta)^{-\gamma}. \quad (3)$$

Ezek a relációk viszont csak a termodinamikai limeszben érvényesek, viszont ha véges rendszerben végzünk méréseket, akkor ezek csak aszimptotikusan teljesülnek, vagyis amikor a rendszer L lineáris mérete tart a végtelenbe. Véges rendszer esetében egyrészt a korrelációs hossz sem tud divergálni, másrészt az emiatt megjelenő véges méretű fluktuációk a szuszceptibilitás értékét is csökkentik, így χ is véges lesz.

Ezt az eredményt kapjuk akkor is, ha a renormálási csoport módszerrel számolunk: az L rendszerméretre is csatolási paraméterként tekintve, felírhatjuk, mi történik a kritikusra való hangolás közben (vagyis $L \rightarrow \infty$ esetben), és ezáltal megkaphatjuk, hogyan függenek a mérhető mennyiségek a paramétereiktől. Eszerint egy L méretű rendszerben β paraméter függvényében:

$$\chi(\beta, L) \sim (\beta_c - \beta)^{-\gamma} \cdot g((\beta_c - \beta)^{-\nu} L^{-1}) \quad (4)$$

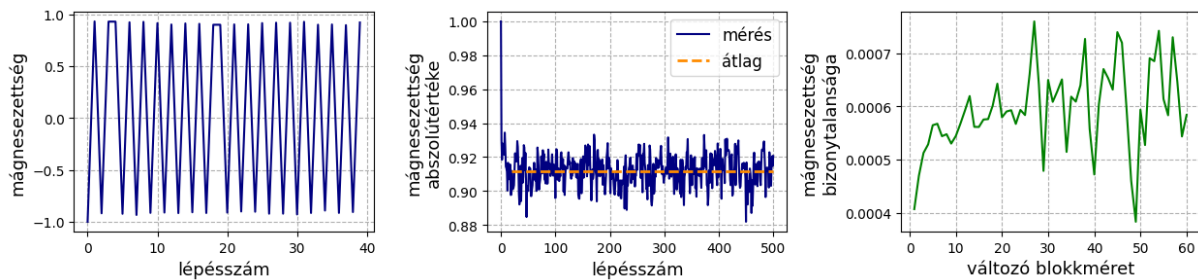
ahol g egy olyan, paraméterében analitikus függvény, amely 0-ban véges értéket vesz fel, tehát nagy rendszer esetén visszkapjuk az aszimptotikus viselkedést, de végtelenben 0-hoz tart olyan módon, hogy véges L esetén $\beta \rightarrow \beta_c$ esetben sem fog χ divergálni. Belátható az is, hogy véges rendszerben a szuszceptibilitás maximuma el is tolódik valamilyen $\beta_{\max}(L) < \beta_c$ értékhez. Mivel a $L^{-\nu/\gamma} \chi(\beta, L)$ függvény kizárólag a $(\beta_c - \beta)^\nu L$ szorzattól függ, és adott L -nél vett maximumhelye ugyanannál a $\beta_{\max}(L)$ -nél van, mint χ -nek, ezért a maximumhely skálázódása az alábbi skálázódással fejezhető ki:

$$(\beta_c - \beta_{\max}(L)) \sim L^{-1/\nu}. \quad (5)$$

Ezt visszahelyettesítve a (4) egyenletbe:

$$\chi_{\max}(L) := \chi(\beta_{\max}(L), L) \sim L^{\gamma/\nu}. \quad (6)$$

Ezt a két összefüggést fogom használni a 3. fejezetben, a γ és ν exponensek méréséhez.



1. ábra. *baloldal*: A mágneszettség értéke az első 40 lépés során. *közép*: A mágneszettség abszolútértéke az 500 lépés során. *jobboldal*: A blokkolt változókon mért mágneszettség bizonytalansága a blokkméret függvényében.

2. Ising-modell vizsgálata a klaszteralgoritmussal

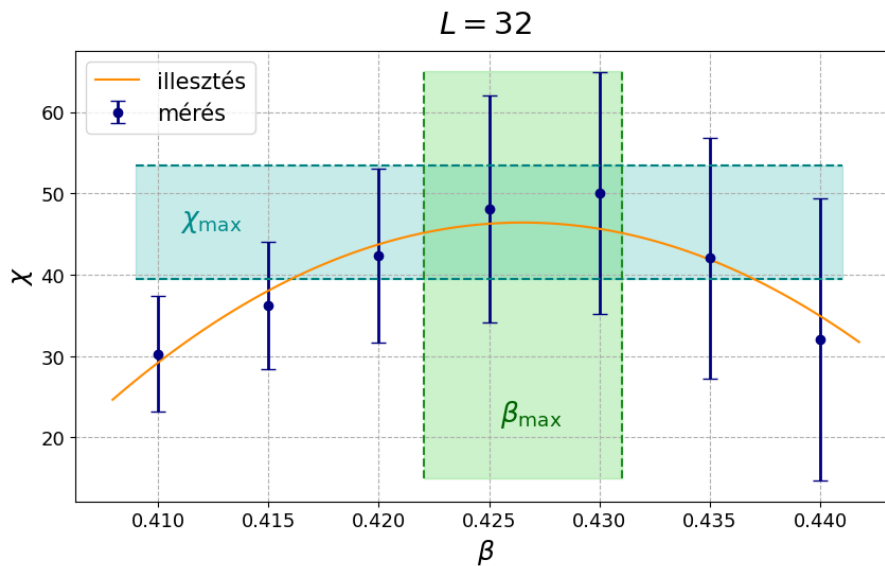
Az 1.1. leírtak alapján írtam egy Python-kódot, amely a klaszteralgoritmus segítségével generál állapotokat kétdimenziós Ising-modell alapján. Ebben a fejezetben a megírt kóddal végzett szimuláció segítségével vizsgálom a kétdimenziós Ising-modell tulajdonságait a kritikus pont környezetében.

2.1. Mágneszettség mérése

Első körben ellenőrzés gyanánt kipróbáltam, hogy a klaszteralgoritmussal is megkaptató-e az Ising-modell alapján várt mágneszettség. Az előző beadandóban is láthattuk, hogy $\beta = 0,5$ értéknél az $m := \frac{1}{N} \sum_i s_i$ módon definiált mágneszettség várható értéke $0,9113\dots$ Ehhez $L = 100$ méretű rendszerben végeztem $N = 500$ lépést a klaszteralgoritmussal, és a kapott eredményt az 1. ábrán ábrázoltam.

Az 1. ábra baloldalán az első néhány lépésben mérhető mágneszettséget ábrázoltam. Ezen jól látható, hogy a Metropolis-algoritmushoz képest sokkal korábban, már 10-20 lépés után beáll a mágneszettség egy állandósult érték köré. A 40. lépés után mért értékek átlaga (amelyet az ábrán a narancssárga vonal jelöl) $\langle m \rangle = 0,9118 \pm 0,0007$.

A mágneszettség átlagának bizonytalanságát az előző beadandóban alkalmazott módszerhez hasonlóan mértem, amelyet az 1. ábra baloldali panelje ábrázol: blokkolva az egymást követő változókat, újra és újra kiszámoltam az empirikus bizonytalanságot, és ennek a trendnek a határértékét tekintettem a függetlenül mért értékek bizonytalanságnak. Ugyan ez eléggé ingadozott, de a $0,0007$ értéket nem jellemzően lépte át, így ezt vettem végül a bizonytalanságnak. A kapott eredmény tehát hibahatáron belül megfelel az egyezt értéknek, ami egyrészt megnyugtató eredmény, másrészt a Metropolis-algoritmushoz képest sokkal kevesebb számítás segítségével elértem ugyanazt a pontosságot.



2. ábra. Különböző β értékek esetén kapott szuszceptibilitásértékek $L = 32$ méretű rendszer esetén. A maximumhely megtalálásához egy másodfokú görbét illesztettem a mérési pontokra, és ennek csúspontját tekintettem a valós maximumhelynek. Az illesztési paraméterek alapján $\beta_{\max} = 0,4265 \pm 0,0045$ és $\chi_{\max} = 46,4 \pm 7,0$.

2.2. Szuszceptibilitásmaximum meghatározása

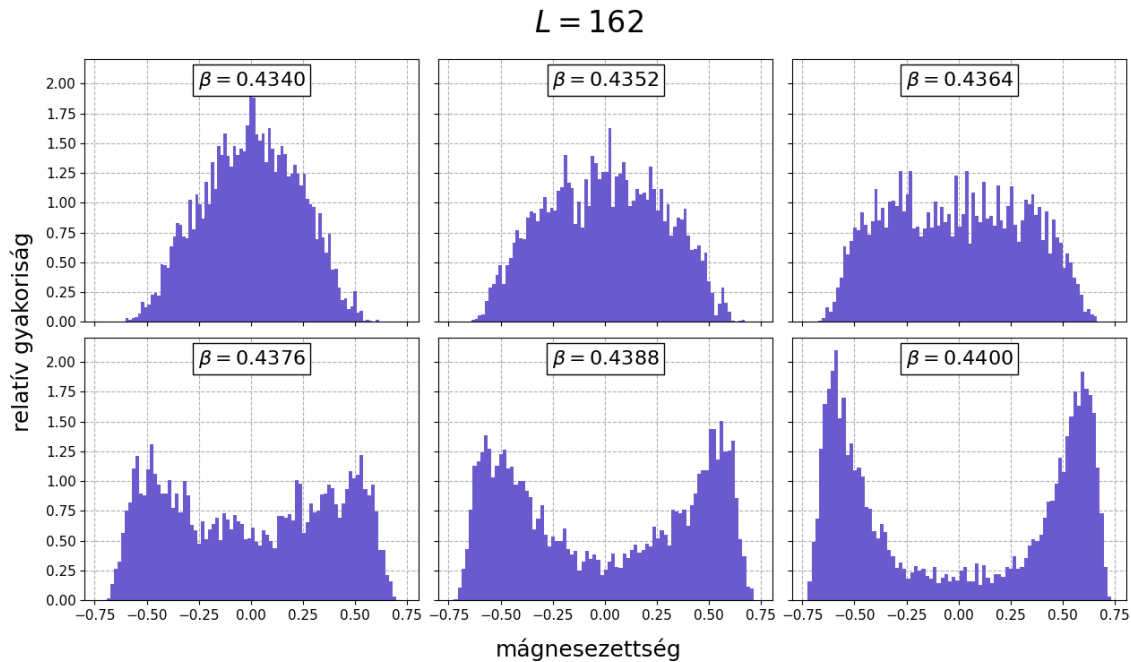
Ezután egy kis méretű rendszerre ($L = 32$ -t használva) kimértem a

$$\chi := (\langle m^2 \rangle - \langle |m| \rangle^2) \cdot L^2 \quad (7)$$

módon definiált szuszceptibilitás értékét különböző β értékek mellett. $\langle m^2 \rangle$ és $\langle |m| \rangle^2$ értékek bizonytalanságát az előző fejezetben látott blokkolós módszerhez hasonlóan számoltam, és ebből kaptam χ bizonytalanságát a hibaöröklődés szabályai szerint. Ahogyan a (4) egyenlet is jósolta, ahelyett, hogy a szuszceptibilitás divergált volna a β_c kritikus pontnál, egy véges maximumhelyet kaptam valamivel β_c alatt. A konkrét mérési eredményeket a 2. ábra ábrázolja.

A méréshez használt β értékeket az alábbi szempontok szerint választottam:

- 7 különböző értéket számoltam, mert ez még nem került sok számolásba, de ennyi adatra már lehetett észszerű illesztést végezni.
- A vizsgált tartományt úgy állítottam, hogy a középső érték nagyjából a maximumhely környékén legyen, a két szélső helyen kapott szuszceptibilitás pedig essen kívül a legnagyobb szuszceptibilitás bizonytalanságán. Erre azért volt szükség, hogy egyértelmű legyen, hogy a maximumhely beleesik a β paraméterek vizsgált tartományába.
- Fontos szempont volt, hogy a kapott értékekre illesztett másodfokú görbe minden adatpontra essen bőven a hibahatáron belülre. Ha ugyanis a maximumhelytől olyan



3. ábra. A mért mágnesezettségértékek eloszlása különböző β értékek esetén az $L = 162$ méretű rendszerben.

távol lettem volna, ahol a kvadratikus közelítés nem alkalmazható, akkor az illesztési paraméterek nem adták volna meg jól a maximumhelyet.

Tapasztalat szerint a fenti pontok mindegyikének meg tudtam felelni $N = 5000$ lépés futtatásával, ráadásul a 3. fejezetben látottak szerint, ez a szám még nagyobb méretek esetén is elég jól alkalmazható volt, csupán a két legnagyobb rendszerméretnél kellett változtatni.

Az illesztés alapján a maximumhely $\beta_{\max} = 0,4265 \pm 0,0045$ -nél volt, és itt a szuszceptibilitás $\chi_{\max} = 46,4 \pm 7,0$ értéket vett fel.

2.3. A mágnesezettség eloszlása

A 2.2. fejezetben írt eljárást nagyobb rendszerméretek esetén is elvégeztem, ezek eredményeit a 3. fejezetben részletezem. Most azt vizsgálom meg, hogy mi történik a szuszceptibilitásmaximumon való áthaladás során. A rendszer változását a β paraméter növelése hatására jól illusztrálja a mágnesezettség eloszlásának alakulása. Tudjuk, hogy végtelen nagy rendszerben β_c alatt a rendszer egyensúlyi mágnesezettsége 0, míg előlött két stabil egyensúlyi állapot van, amelyek egymás ellentettjei. Hogy véges méretű rendszer esetében ez hogyan módosul, és mi történik β hatására, azt a 3. ábra mutatja.

A részletes vizsgálatot az $L = 162$ méretű rendszeren végeztem, mivel itt több adatom volt ($N = 8000$ lépést használtam), illetve ennél sikerült olyan β értéknél is szimulációt végezni, ami nagyon közel volt a maximumhelyhez. A 3. ábrán látható, hogy β_c alatt, az első három panelen még egy határozottan egy csúcsú eloszlást mutatnak a különböző

m értékek, de β növelésével ez kiszélesedik, és az alsó sorban lévő paneleken már két csúc jelenik meg. β_{\max} illesztése alapján a maximumhely ebben az esetben $\beta_{\max} = 0,43771 \pm 0,00063$, ami elég közel esik a 3. ábra negyedik paneljéhez. Az ábra alapján úgy tűnik, hogy ebben a pontban már a két csúcú rész dominál, vagyis a bifurkáció már megtörtént, de ez még nem olyan határozott, mint a későbbi ábrákon.

3. Kritikus kitevők mérése

A klaszteralgoritmus működését, és az Ising-modell fő jellemzőinek megismerése után több különböző rendszerméret esetén is megismételtem a 2.2. fejezetben írt vizsgálatot, és az (5) valamint (6) összefüggések segítségével kiszámoltam a γ és a ν kritikus exponenseket.

3.1. Szimulációk különböző méreteknél

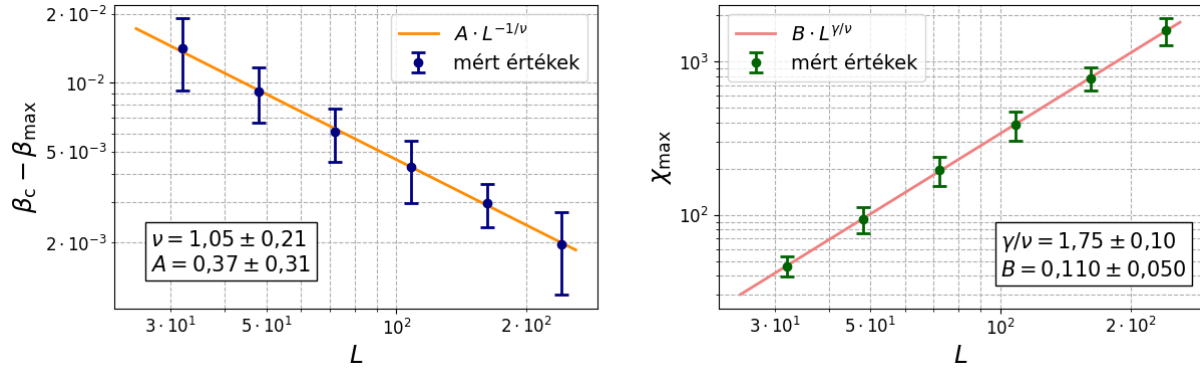
A 2.2. fejezetben leírt eljárást a szuszceptibilitás maximumhelyére különböző L rendszerméreteknél is elvégeztem. A szimulációk konkrét paramétereit az 1. táblázat összegzi. A kiválasztott β értékek szempontjai megegyeztek a 2.2. fejezetben leírtakkal, ezek az első négy esetben kielégíthetők voltak $N = 5000$ lépéssel, ám az utolsó két esetben már olyan nagy lett a bizonytalanság, hogy a kvadratikus közelítés nem tudta hibán belül reprodukálni a szimulációban látott $\chi - \beta$ összefüggést. Annak érdekében, hogy az érvényes közelítés tartományában is elegendően pontos értékeket kapja, a két legnagyobb rendszerméret esetében már több lépést, $N = 8000$ -t alkalmaztam.

L	N	legkisebb β	legnagyobb β	$\Delta\beta$
32	5000	0,4100	0,4400	0,0050
48	5000	0,4220	0,4400	0,0030
72	5000	0,4285	0,4410	0,0025
108	5000	0,4320	0,4410	0,0015
162	8000	0,4340	0,4412	0,0012
241	8000	0,4364	0,4406	0,0007

1. táblázat. A különböző rendszerméreteknél futtatott szimulációk adatai.

3.2. β_{\max} méretfüggése

Minden L esetén illesztéssel meghatároztam a $\chi(\beta)$ kapcsolat maximumhelyét, és ezeket az L rendszerméret függvényében a 4. ábra baloldali paneljén ábrázoltam. Mivel az (5) egyenlet alapján a $(\beta_c - \beta_{\max}(L))$ különbség hatványfüggvény szerű skálázódását vártam, ezért az adatpontokat logaritmikus skálán ábrázoltam, ahol felhasználtam, hogy $\beta_c =$



4. ábra. A $(\beta_c - \beta_{\max}) - L$ és a $\chi_{\max} - L$ kapcsolat grafikusán ábrázolva. A két adatsorra az (5) és (6) egyenletek alapján hatványfüggvényeket illesztettem.

$0,5 \ln(1 + \sqrt{2})$. Szemre is nagyon szépen látszódik, hogy a kapott pontok egy egyenes mentén helyezkednek el. Ezekre ráillesztettem az $A \cdot L^{-1/\nu}$ alakú hatványfüggvényt, és az illesztési paraméterekre az alábbi értékeket kaptam:

$$\nu = 1,05 \pm 0,21 \quad (8)$$

$$A = 0,37 \pm 0,31. \quad (9)$$

3.3. χ_{\max} méretfüggése

Szintén megvizsgáltam a szuszceptibilitásmaximumok függését a rendszermérettől, amit a 4. ábra jobboldali paneljén ábrázoltam, szintén logaritmikus skálán. Az adatpontoknak a hatványfüggvény-szerű összefüggés miatt egyenes-menti elhelyezkedése itt is nagyon jól látszik, így erre az adatsorra is jól illeszthető volt a $B \cdot L^{\gamma/\nu}$ hatványfüggvény. Az illesztési paraméterekre ezúttal az alábbi értékeket kaptam:

$$\gamma/\nu = 1,75 \pm 0,10 \quad (10)$$

$$B = 0,110 \pm 0,050. \quad (11)$$

Felhasználva a (8) eredményt, a γ exponensre $\gamma = 1,83 \pm 0,47$ jött ki.

4. Diszkusszió

A kétdimenziós Ising-modellben mértem meg két kritikus exponens értékét a renormalizációs csoportok elméletével nyert szemlélet és képletek segítségével. Az exponensek értékeire $\nu = 1,05 \pm 0,21$, és $\gamma = 1,83 \pm 0,47$ jött ki. Mivel a modell egzaktul is megoldható, az eredmény összehasonlítható a pontos értékekkel. Az irodalmi értékek $\nu_{\text{egzakt}} = 1$ és $\gamma_{\text{egzakt}} = 1,75$. Az általam kapott eredmény tehát hibahatáron belül megegyezik a pontos eredménnyel,

bár a mérési bizonytalanság nálam mindkét esetben elég nagy lett. Ez csökkenthető lett volna hosszabb futtatásokkal, de önmagában is elég jó eredmény, hogy a 4. ábrán látható adatpontok nemcsak hibahatáron belül, hanem szinte pontosan megegyeznek az elméleti értékekből jósolt függvényekkel.