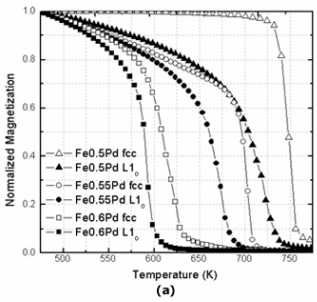
Wykład 2: Modele sieciowe fizyki statystycznej

Fizyka komputerowa 2005
Katarzyna Weron,
kweron@ift.uni.wroc.pl

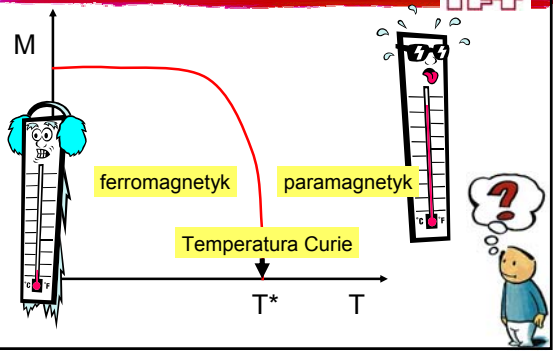
Model Isinga

- Jak to się zaczęło?
- Model Isinga trzeba rozwiązać!
- Symulacja Monte Carlo
- Symulujemy! – zaraz, jeszcze nie wszystko wiemy
- Dobre wyniki i niespodzianki ...
- Model Isinga poza fizyką

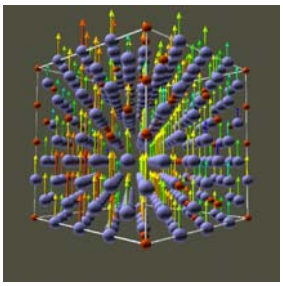
Eksperyment a teoria – jak to wytłumaczyć?



Co się dzieje z magnetykiem?

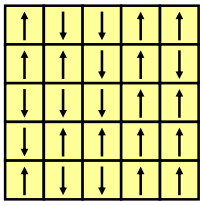


Co wymyślił Wilhelm Lenz?

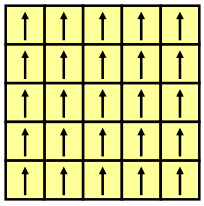


Spiny

1920: Lenz tworzy model

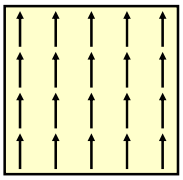


Ciało stałe – sieć
Cząstki – spiny
Spiny – +1,-1



Oddziaływania:
co się dzieje w T=0?

Jak opisać ferromagnetyk?



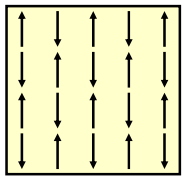
$$S_i = \pm 1$$

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j + h\sum_i S_i$$

$$J > 0$$

Stan podstawowy: $H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j = -JN$

Jak opisać antyferromagnetyk?



$$S_i = \pm 1$$

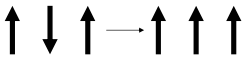
$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j + h\sum_i S_i$$

$$J < 0$$

Stan podstawowy: $H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j = JN$

Temperatura w modelu Isinga

- Siły wewnętrzne



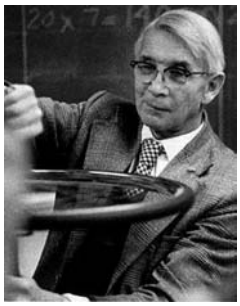
Tak lubimy!

$E_1 > E_2$

- Siły zewnętrzne

$$P = \exp\left(\frac{-\Delta E}{kT}\right)$$

Co zrobił Ising?



- 1925 rozprawa doktorska Ernsta Isinga - ucznia Lenza: rozwiązanie 1D modelu
- Brak przejścia fazowego w 1D
- Jedyna praca Isinga

Dalsze losy modelu Isinga

- Przejście fazowe w 2D bez pola (Onsager, lata czterdzieste)
- Skala mikro tłumaczy zachowania makro
- Symulacje Komputerowe – model Isinga w 3D i z polem
- Jedyna praca Isinga – najczęściej cytowane nazwisko w fizyce statystycznej
- Wykorzystanie poza fizyką

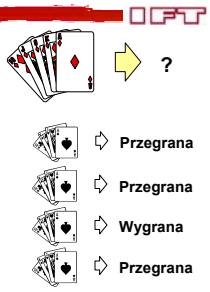
Metoda Monte Carlo

- Metoda **Monte Carlo** (MC) jest techniką rozwiązania problemów, która polega na generowaniu zmiennych losowych w celu oszacowania parametrów ich rozkładu

John von Neumann

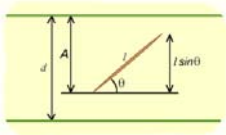
Idea metody Monte Carlo

- Jaka jest szansa ułożenia pasjansa?
- Ciężko to policzyć analitycznie bo wygrana zależy od wielu ruchów
- A gdyby tak parę razy spróbować ułożyć pasjansa i zobaczyć ile razy się to uda



Igła Buffona

- Na kartkę papieru pokrytą liniami równoległymi oddalonymi od siebie o odległość *d* rzucamy losowo igłę o długości *l*



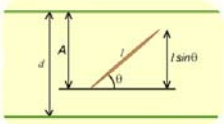
hr. Georges-Louis Leclerc Buffon (1707-1788)

Igła Buffona a liczba π

- Pozycja igły jest opisana wektorem losowym (A,θ) o rozkładzie jednostajnym na $[0,d) \times [0,\pi)$
- Dlatego gęstość jest postaci $1/d\pi$
- A π można szacować jako:

$$\pi = \frac{2nl}{md}$$

gdzie *m* jest liczbą rzutów przecinających linie, a *n* jest liczbą wszystkich rzutów

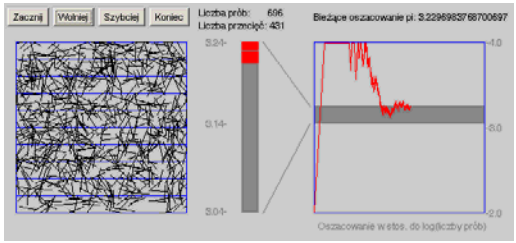


Jak dobre jest to oszacowanie?

- W 1864, kapitan O. C. Fox wykonał ten eksperyment gdy nudził się podczas rekonwalescencji

n	*m*	*l*	*d*	Powierzchnia	*π*
500	236	3	4	nieruchoma	3.1780
530	253	3	4	obracająca się	3.1423
590	939	5	2	obracająca się	3.1416

Sprawdźmy to sami



http://www.zarz.agh.edu.pl/jduda/dydaktyka/mc.html

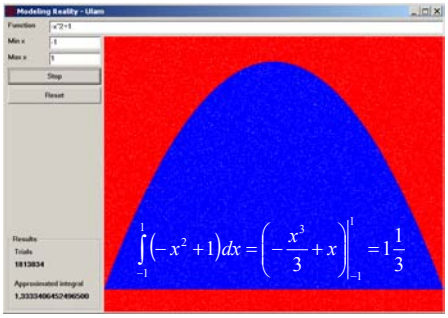
Współczesna historia metody Monte Carlo

- Stanisław Ulam w trakcie ... rekonwalescencji układa pasjanse Canfield
- Nicolas Metropolis nadaje nazwę nowej metodzie – „Monte Carlo" (od kasyna)
- 1949r. – pierwsza publikacja na temat metody Monte Carlo napisana przez Ulama i Metropolisa

Zastosowania metody MC

- Szacowanie prawdopodobieństwa
- Szacowanie pól figur
- Szacowanie stałych
- Obliczanie układów równań liniowych
- Obliczanie równań różniczkowych cząstkowych
- Obliczanie całek
- Interpolacja funkcji wielu zmiennych
- Prognozy pogody
- Wycena instrumentów pochodnych

Szacowanie pól figur



Symulacja Monte Carlo Modelu Isinga

- Przygotuj stan początkowy układu
- Pozwól mu ewoluować
- Poczekaj aż ustali się magnetyzacja
- Zanotuj wartość M
- Powtarzaj to „dużo” razy
- Policz średnią magnetyzację

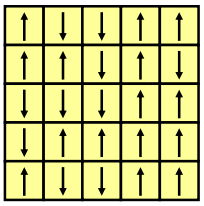
Algorytm Metropolisa

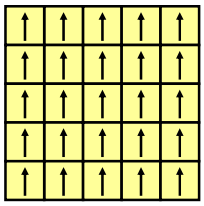
- Stan początkowy
- Zmień konfigurację
- Policz zmianę energii *dE=E'-E*
- Jeżeli *dE<0* to akceptuj nową konfigurację
- Jeżeli *dE>0* to wylosuj *r* z przedziału [0,1] i akceptuj nową konfigurację jeżeli:

$$r < p = \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)$$

Stan początkowy

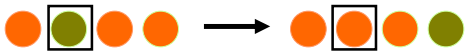
- Losowy
- Wszystkie spiny w jednym kierunku



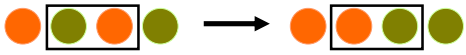


Zmień konfigurację

- Dynamika Glaubera
- Dynamika Kawasakiego
- Algorytm Wolfa



Dynamika Glaubera



Dynamika Kawasakiego

Dynamika Glaubera

$$H = -J\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1}, \quad \sigma_i = \pm 1, (+) \leftrightarrow (-)$$

$$H_1 = -J(\sigma_{i-1}\sigma_i + \sigma_i\sigma_{i+1})$$

$$H_2 = -J(-\sigma_{i-1}\sigma_i - \sigma_i\sigma_{i+1})$$

$$\delta H = 2(\sigma_{i-1}\sigma_i + \sigma_i\sigma_{i+1}) \in \{-4,0,4\}$$

Dynamika Kawasakiego

$$H = -J\sum_i \sigma_i\sigma_{i+1}, \quad \sigma_i = \pm 1$$

$$(+ \quad -) \leftrightarrow (- \quad +)$$

$$\delta H = 2(\sigma_{i-1}\sigma_i + \sigma_{i+1}\sigma_{i+2}) \in \{-4,0,4\}$$

Dlaczego *dE<0* to akceptacja?

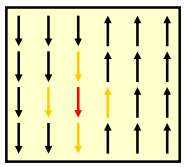
Prawdopodobieństwo obrotu:

$$p = \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)$$

$$= \exp(a > 0) > 1$$

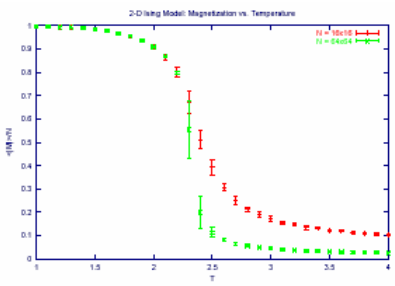
Co się dzieje dla T=0 w dynamice Glaubera?

$$r < p = \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)$$

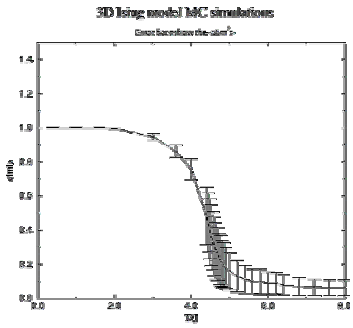


Obrócenie czerwonego spinu podnosi energię – Stany metastabilne „pasy”

Magnetyzacja dla 2D modelu Isinga w zależności od rozmiaru sieci



Wyniki symulacji MC dla 3D modelu Isinga



Zastosowanie modelu Isinga

- Gaz sieciowy – puste, pełne
- Stop podwójny – cząstki dwóch typów
- Genetyka – zły gen i dobry gen
- Socjologia – za i przeciw

Historia modelu Pottsa - model zegarowy

- Uogólnienie modelu Isinga zaproponowane przez Domba jako temat pracy doktorskiej Pottsa w 1952.
- Spin ma dowolny kąt w przestrzeni dwuwymiarowej:

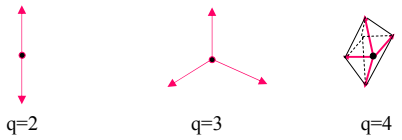
$$\theta_n = \frac{2\pi n}{q} \qquad n = 0,1,\ldots,q-1$$

- Hamiltonian:

$$H = J\sum_{\langle i,j\rangle}\cos(\theta_i - \theta_j)$$

- A na marginesie pracy …

q stanowy model Pottsa



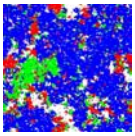
$$\theta_n = \frac{2\pi n}{q} \qquad n = 0,1,\ldots,q-1$$

Dla q=2 mamy model Isinga

Hamiltonian w modelu Pottsa

$$H = J\sum_{\langle i,j\rangle}\delta_{S_i,S_j}$$

$$\delta_{a,b} = \begin{cases} 1 & a = b \\ 0 & a \neq b \end{cases}$$



Model Zegarowy i XY

Spin ma dowolny kąt w przestrzeni dwuwymiarowej:

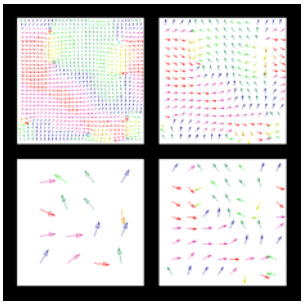
$$\theta_n = \frac{2\pi n}{q} \qquad n = 0,1,\ldots,q-1$$

Hamiltonian:

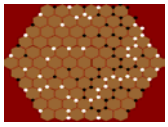
$$H = J\sum_{\langle i,j\rangle}\cos(\theta_i - \theta_j)$$

Jeżeli q jest nieskończone – wówczas mamy XY

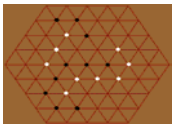
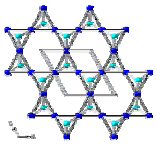
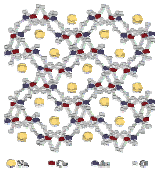
Wiry w modelu XY



Inne siatki regularne



Sieć heksagonalna



Sieć trójkątna