

Termodinamikai mennyiségek számolása

Kormányos Andor

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

2022 november 29.

Szeretnénk az Ising lánc bizonyos termodinamikai jellemzőit meghatározni

- mekkora a rendszer $\langle E \rangle$ átlagos energiája adott hőmérsékleten?
 - egy α_j spin konfiguráció energiája:

$$E_{\alpha_j} = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} |_{\alpha_j}$$

- mekkora a rendszer átlagos $\langle M \rangle$ mágnesezettsége?
 - egy α_j spin konfiguráció mágnesezettsége:

$$M_{\alpha_j} = \sum_{i=1}^N s_i |_{\alpha_j}$$

Szeretnénk az Ising lánc bizonyos termodinamikai jellemzőit meghatározni

- mekkora a rendszer $\langle E \rangle$ átlagos energiája adott hőmérsékleten?
 - egy α_j spin konfiguráció energiája:

$$E_{\alpha_j} = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} |_{\alpha_j}$$

- mekkora a rendszer átlagos $\langle M \rangle$ mágnesezettsége?
 - egy α_j spin konfiguráció mágnesezettsége:

$$M_{\alpha_j} = \sum_{i=1}^N s_i |_{\alpha_j}$$

- fel kell térképezni, hogy milyen energiájú állapotok lehetségesek a rendszerben
- minden lehetséges energiájú állapotot elő kell tudni állítani véges számú lépésben
- az energiaértékek eloszlása Boltzman eloszlás kellene, hogy legyen
- a rendszer viszonylag gyorsan eljusson a termikus egyensúlyi állapotba (ennek jelentését alább magyarázzuk meg)

A termodinamikai mennyiségek számolására használható algoritmus:

- választunk egy induló hőmérsékletet
- választunk egy induló $|\alpha_0\rangle = \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$ spin konfigurációt és kiszámoljuk az E_{α_0} energiát
- ismételjük a következő lépéseket: $k = 1, 2, \dots$
- generálunk egy következő $|\alpha_{k,tr}\rangle$ próba spin konfigurációt:
 - kiválasztunk egy véletlenszerű s_i spint
 - átfordítjuk: $s_i \rightarrow -s_i$
- kiszámoljuk a $|\alpha_{k,tr}\rangle$ energiáját: $E_{\alpha_{k,tr}}$
- ha $E_{\alpha_{k,tr}} < E_{\alpha_{k-1}}$ akkor elfogadjuk az $|\alpha_{k,tr}\rangle$ konfigurációt $|\alpha_k\rangle = |\alpha_{k,tr}\rangle$
 - a következő, $k + 1$ lépésben ezt használjuk az új, $|\alpha_{k+1,tr}\rangle$ próba konfigurációval való összehasonlításra
- ha $E_{\alpha_{k,tr}} > E_{\alpha_{k-1}}$ akkor $|\alpha_{k,tr}\rangle$ -t $R = e^{-\Delta E/k_B T}$ valószínűséggel fogadjuk el ($\Delta E = E_{\alpha_{k,tr}} - E_{\alpha_{k-1}}$)
 - választunk egyenletes valószínűséggel egy $0 \leq r_k \leq 1$ véletlen számot

$$|\alpha_{k,tr}\rangle \begin{cases} \text{megtartjuk és } |\alpha_k\rangle = |\alpha_{k,tr}\rangle & \text{ha } R > r_k \\ \text{elvetjük és } |\alpha_k\rangle = |\alpha_{k-1}\rangle & \text{ha } R < r_k \end{cases}$$

Mit jelent az utolsó, elfogadás/elvetés lépés?

- a $k - 1$ -ik lépésben használt $|\alpha_{k-1}\rangle$ és a k -ik lépésben generált $|\alpha_{k,tr}\rangle$ próba konfiguráció **relatív** valószínűsége a Boltzman eloszlás szerint:

$$R = \frac{P_{k,tr}}{P_{k-1}} = e^{-\Delta E/k_B T}, \quad \Delta E = E_{\alpha_{k,tr}} - E_{\alpha_{k-1}}$$

- ha $E_{\alpha_{k,tr}} - E_{\alpha_{k-1}} < 0$ akkor $R > 1$ és az új $|\alpha_{k,tr}\rangle$ konfigurációt minden további nélkül elfogadjuk
- ha $E_{\alpha_{k,tr}} - E_{\alpha_{k-1}} > 0$ akkor $R < 1$. A $|\alpha_{k,tr}\rangle$ -t azonban nem vetjük el kapásból, hanem $R = e^{-\Delta E/k_B T}$ valószínűséggel elfogadjuk

- válasszunk egy kezdeti $|\alpha_0\rangle$ -t
- ezután a futtatjuk a Metropolis-Hastings algoritmus néhányszor $10N$ lépésen keresztül
- tovább futtatva az algoritmus, azt találjuk, hogy
 - az egyes lépésekben számolt E_k és M_k egy átlagos $\langle E \rangle$ és $\langle M \rangle$ érték körül fluktuál
 - ez az érték független attól, hogy milyen $|\alpha_0\rangle$ -t használtunk
 - de $\langle E \rangle$ és $\langle M \rangle$ függ a T hőmérséklettől!
- termodinamikai egyensúly nem azt jelenti, hogy az algoritmust futtatva csak egy spin konfiguráció lesz jelen!
- a spinek továbbra is átfordulnak és a konfiguráció állandóan változik

- tároljuk a spin láncot egy $s[n]$ vektorban!
- kétféle határfeltételt tekinthetünk:
 - periódikus spinlánc: a spinek egy gyűrűn helyezkednek el, tehát a 0-ik és az N -ik spin szomszédok, és ezért kölcsönhatnak!
 - nem periódikus spinlánc: a 0-ik és az N -ik spin nem hat kölcsön
- a határfeltételt vegyük figyelembe a spinlánc energiájának számolásakor!
- tekintsük a ferromágneses esetet, vagyis $J > 0$!
- az energiát J egységekben mérjük. Használjunk $J = 1$ -t! A hőmérsékletet (vagyis a $k_B T$ termikus energiát) is ilyen egységben mérjük!
- Milyen $|\alpha_0\rangle$ -t válasszunk?
 - ez lehet pl a teljesen rendezett (“hideg”) állapot:

$$|\alpha_0\rangle = \begin{cases} \text{minden spin paralel, ha } J > 0 \\ \text{szomszédos spinek mindig antiparallelek, ha } J < 0 \end{cases}$$

- vagy lehet rendezetlen (“forró”) állapot: s_i értéke véletlenszerűen ± 1

- termodinamikai egyensúlyban számolt $\langle E \rangle$ és $\langle M \rangle$ értéke nem függ $|\alpha_0\rangle$ -tól
- az egyes k lépésekben az E_{α_k} számolásakor ne végezzük el a újra és újra az összegzést!
 - mivel egy lépésben csak egyetlen spint fordítunk át, könnyen ki tudjuk fejezni a Δ_k energia változást
 - ennek segítségével $E_{\alpha_k} = E_{\alpha_{k-1}} + \Delta_k$