# Termodinamikai mennyiségek számolása az Ising láncra

Kormányos Andor

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

2023 november 28.

# Kérdések

Szeretnénk az Ising lánc bizonyos termodinamikai jellemzőit meghatározni $B = 0$ mágneses térben

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

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

- mekkora a rendszer $\langle M \rangle$ **átlagos mágnesezettsége**?
  - egy adott $|\alpha_j\rangle$ spin konfiguráció mágnesezettsége:

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

Mi kell ahhoz, hogy $\langle E \rangle$-t és $\langle M \rangle$-t számolni tudjuk?

- 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 kell, 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 $|\alpha_0\rangle = \{s_1, s_2, \ldots s_N\}$ spin konfigurációt és kiszámoljuk az $E_{\alpha_0}$ energiát
- ismételjük a következő lépéseket: $k = 1, 2, \ldots$
- generálunk egy következő $|\alpha_{k,tr}\rangle$ próba spin konfigurációt:
    - kiválasztunk egy véletlenszerű $s_i$ spint
    - átfordítjuk: $s_i \to -s_i$
- kiszámoljuk a $|\alpha_{k,tr}\rangle$ energiáját: $E_{\alpha_{k,tr}}$
- ha $E_{\alpha_{k,tr}} \leq E_{\alpha_{k-1}}$ 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:

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

- ha $E_{\alpha_{k,tr}} - E_{\alpha_{k-1}} \leq 0$ akkor $R \geq 1$ 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

## Termodinamikai egyensúly elérése

- válasszunk egy kezdeti $|\alpha_0\rangle$-t
- ezután a futtatjuk a Metropolis-Hastings algoritmus néhányszor $10N$ lépésen keresztül ($N$ az Ising lánc hossza)
- 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

# Implementációval kapcsolatos kérdések

- 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 $|\alpha_\mathbf{0}\rangle$-t válasszunk?
  - ez lehet pl a teljesen rendezett ("hideg" ) állapot:

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

  - vagy lehet rendezetlen ("forró") állapot: $s_i$ értéke véletlenszerűen $\pm 1$
- az egyes $k$ lépésekben $E_{\alpha_\mathbf{k}}$ számoláskor ne végezzük el a újra és újra az összegzést!
  - mivel egy lépésben csak egyetlen spint fordítunk át, könnyen ki tudjuk fejezni a $\Delta_k$ energia változást $\rightarrow E_{\alpha_\mathbf{k}} = E_{\alpha_\mathbf{k-1}} + \Delta_k$