

# Szakdolgozat

Láz József András

2010

Eötvös Lóránd Tudományegyetem  
Természettudományi Kar  
Elméleti Fizikai Tanszék

# **Monte-Carlo szimulációk**

Készítette:

Láz József András  
fizika BSc szakos hallgató

Témavezető:

Dr. Katz Sándor

Budapest, 2010

# Tartalomjegyzék

<b>1. Bevezetés</b>	<b>2</b>
1.1. A Monte-Carlo módszerek története . . . . .	2
1.2. Felhasználásai egyéb területeken . . . . .	2
1.3. Térelméleti alkalmazás . . . . .	3
<b>2. Elmélet</b>	<b>4</b>
2.1. Monte-Carlo szimulációkról általában . . . . .	4
2.2. Markov láncok . . . . .	4
2.3. Algoritmusok . . . . .	6
2.3.1. A Metropolis algoritmus . . . . .	6
2.3.2. A hőfürdő (heatbath) . . . . .	6
2.3.3. Over-relaxáció . . . . .	7
2.3.4. Molekuláris dinamika . . . . .	7
2.4. Modellek . . . . .	8
2.4.1. Ising modell . . . . .	8
2.4.2. $O(N)$ modell . . . . .	9
2.4.3. Jellemzők . . . . .	9
2.5. Autokorreláció . . . . .	10
2.5.1. Példák . . . . .	10
<b>3. Eredmények</b>	<b>13</b>
3.1. Mágneszettség függése hőmérséklettől . . . . .	13
3.2. Hiszterézis . . . . .	13
3.3. Ising modell szuszceptibilitása . . . . .	14
3.4. $O(2)$ és $O(3)$ szimulációja . . . . .	18
3.4.1. Szuszceptibilitás . . . . .	18
3.4.2. Termalizáció . . . . .	18
3.4.3. Az $O(2)$ modell megoldása hőfürdővel . . . . .	19
3.4.4. Az $O(3)$ modell megoldása hőfürdővel . . . . .	20
3.5. Korrelációs függvények . . . . .	21
<b>4. Összefoglalás</b>	<b>24</b>
<b>A. Jackknife módszer</b>	<b>26</b>

# 1. Bevezetés

Szakdolgozatom témájául a Monte-Carlo módszereket választottam, mert ez a témakör a szimulációkban mind fontosabb lesz. Ezt a szimulációs technikát egyre több és több helyen használják, úgy mint fizikában, kémiában, biológiában, közgazdaságtanban és egyéb helyeken. A módszert használják pusztán elméleti számolásokhoz is, de gyakorlati alkalmazásai is nagy számmal akadnak. Sok területen akadnak olyan feladatok, melyeknek egzakt megoldása vagy nem ismeretes vagy nem is létezik, ezért ezeket csak numerikus szimulációkkal lehet kezelni. Ilyen feladatok megoldásához kínálnak a Monte-Carlo módszerek hatékony technikát.

## 1.1. A Monte-Carlo módszerek története

Az ötlet, hogy a véletlen felhasználásával bizonyos mennyiségeket kiszámíthatunk már a 18. században felvetődött, amikor Comte de Buffon rájött, hogy ha egy kötőtűt dobál egy vonalas szőnyegre, akkor statisztikai megfontolásokkal meghatározható a  $\pi$  értéke.

A modern korban ismét felvetődött a véletlen használatának lehetősége. Az ötlet Enrico Fermitől és Stanislaw Ulamtól származik, de kifejlesztéséhez jelentősen hozzájárult Neumann János is. A 40-es években a Los Alamos-i laboratóriumban azt a problémát vizsgálták, hogy a neutronsugárzás miképpen halad át bizonyos anyagokon. Megvolt a problémához fontos minden adat, a megoldást mégsem lehetett analitikusan megadni. Ekkor Neumann és Ulam felvetették, hogy a problémát oldják meg számítógépen valószínűségi módszerekkel. Mivel Los Alamosban minden projekt titkos volt, ennek is kellett egy fedőnév, a választás a "Monte-Carlo"-ra esett.

A legelső alkalmazások a Manhattan projekt keretein belül történtek, ám számítógépek nélkül ekkor még igen kezdetlegesen. 1945-től már rendelkezésre álltak számítógépek, és elkezdheték tanulmányozni a módszereket részletesebben. Az 50-es években (szintén Los Alamosban) a hidrogénbomba kifejlesztéséhez is használták. A módszer ezek után kezdett elterjedni. Kezdetben véletlen számokat tartalmazó táblázatokat használtak, ezért a véletlenszám generátorok megjelenése nagy lökést jelentett a módszer használatában. [1]

## 1.2. Felhasználásai egyéb területeken

Az első alkalmazások katonai területen történtek Los Alamosban. Később is sokat használta az amerikai katonaság, így a U.S. Air Force és a hozzá kapcsolódó RAND Corporation (Research and Development Corp.) . Ez a két szervezet talált olyan területeket, ahol hasznosíthatóak voltak ezek a módszerek és el is kezdték szélesebb körben alkalmazni.

A kémia területén komplex elegyek viselkedését vizsgálják, ami kiterjed például az önszerveződés jelenségére, sajátságos mintázatok kialakulására, oszcillációkra, kaotikus viselkedésre. Irreverzibilis fázisátalakulások vizsgálatára is lehetőség van, ami hasonlóságot mutat a fizikai fázisátalakulásokkal. Jelentős alkalmazás továbbá az irreverzibilis polimerizáció vizsgálata.

Mivel az evolúció maga is véletlen folyamat, szimulálásához elengedhetetlen a véletlen bevonása. Populációgenetikában vizsgálható különböző vagy azonos területen élő populációk biológiai tulajdonságainak változása. Rácson modellezett makromolekulák, fehérjék geometriája, térbeli elrendeződése számítható ki (lattice protein).

Ezeket kívül felhasználásai vannak még a közgazdaságban, tőzsdei szimulációkban, orvosi területeken és egyéb, olyan komplex területeken, mint például a hálózatok vagy a közlekedés. [3]

### 1.3. Tételmeleti alkalmazás

Elméleti számításokhoz a fizika területén többek közt a tételmeletek témakörében talált felhasználásra a Monte-Carlo módszer. A tételmeletekben olyan rendszert vizsgálunk, amelyet több tér és egy idő dimenzióban egy ismert Lagrange-sűrűség ír le. A klasszikus megoldás a hatás minimalizálásával kapható meg. A kvantált eset lényegesen bonyolultabb. Ekkor minden lehetséges térkonfiguráció szerepet kap, ami funkcionálintegrálra vezet. Euklideszi téridő használata esetén az egyes konfigurációk  $e^{-S}$  súllyal jelennek meg, ahol  $S$  a klasszikus hatás. Az ehhez hasonló problémák analitikusan csak speciális esetekben oldhatók meg, ezért egyszerűsítésekhez kell folyamodnunk. A folytonos tér és idő koordináták helyett egy rácsot vezetünk be. A rácsot egy rácsállandónak nevezett paraméter jellemzi ( $a$ ), amely megadja, hogy az egyes rácsponatok egymástól milyen távol esnek. Így a rácsot az alábbi halmaz értelmezi:

$$\Lambda = \left\{ x \mid \frac{x_\mu}{a} \in \mathbb{Z} \right\}$$

ahol  $x_\mu$  az  $x$  vektor egy komponense. Ezen a rácson egy skalármező hatása a következő módon írható fel

$$S = \frac{1}{2} \sum_x a^4 \{ \Delta_\mu \phi(x) \Delta_\mu \phi(x) + m^2 \phi(x)^2 \} + g \sum_x a^4 \phi(x)^4$$

ahol  $\phi(x)$  a rács pontjaihoz rendelt térmennyiség,  $\Delta_\mu \phi(x)$  pedig a szomszédos rácsponatok  $\mu$ -edik koordinátája mentén vett differenciahányadosa. Ilyen hatás mellett felírhatjuk a rendszer funkcionál integrálját

$$Z = \int \prod_x d\phi(x) e^{-S}$$

Ezzel a rendszer egy statisztikus fizikai modell alakját ölti, ahol a hatás megfeleltethető  $\beta E$ -nek (ahol  $E$  a rendszer teljes energiája) és  $Z$  az állapotösszeg. Így a tételmeleti funkcionálintegrál ekvivalens egy statisztikus fizikai rendszer állapotösszegének meghatározásával. Ilyen módon a statisztikus fizikai számításokhoz használt módszerek megfelelőek a tételmeleti számítások során is.

A folytonos mennyiségek ilyen módon történő diszkretizálását hívjuk a tételmelet rácsregularizációjának. Ez lehetővé teszi, hogy numerikusan kezelhessük a problémát és így számítógépekkel kereshessük meg a megoldást.

Szakterületemben Monte-Carlo algoritmusokat mutatok be és vizsgálom meg. Azonban a tételmeleti modellek bonyolultsága, illetve megfelelő ismeretek hiányában ezeket a módszereket egyszerűbb statisztikus fizikai modelleken vizsgálom: az Ising modellen és az  $O(N)$  modell speciális esetein.

## 2. Elmélet

### 2.1. Monte-Carlo szimulációkról általában

Legyen adott egy tetszőleges dimenziójú és méretű rács, melyben minden rácsponthoz egy vagy több fizikai mennyiséget rendelünk. Ezeket a fizikai mennyiségeket valamilyen módon sorbarendehezhetjük, ezért általánosan csak egy indexszel hivatkozunk rájuk ( $S_i$ ). Ha minden rácspontban minden fizikai mennyiség határozott értéket vesz, akkor ezt egy rácskonfigurációnak nevezzük, és  $\{S_i\}$ -vel jelöljük. Úgy is mondhatjuk, hogy a rácskonfiguráció (mikroállapot) egy teljes részletességgel meghatározott állapot. A rácsban az egyes rácspontok kölcsönhatnak. A kölcsönhatás eredményeképpen a rendszerhez rendelhetünk egy energiát. Ezt az energiát az energiafüggvény adja meg, amely a rácspontokhoz rendelt fizikai mennyiségek függvénye (a rácskonfiguráció függvénye):  $E(\{S_i\})$ . Az energiafüggvény határozza meg, hogy milyen fizika modellt vizsgálunk.

Ezekben a szimulációkban általában feltesszük, hogy a rendszer egy  $T$  hőmérsékletű hőtartállyal érintkezik. Egy ilyen rendszer viselkedését szeretnénk Monte-Carlo módszerekkel vizsgálni. A numerikus szimulációkban az elsődleges célunk, hogy bizonyos mennyiségek várható értékét határozzuk meg, amelyek majd későbbi számolás alapjául szolgálnak.

Legyen egy ilyen keresett mennyiség  $A$ , ekkor a várható értéke:

$$\hat{A} = \langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}} A(\{S_i\}) e^{-\beta E(\{S_i\})} \quad (1)$$

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta E(\{S_i\})}$$

ahol  $Z$  az állapotösszeg,  $\beta = 1/k_B T$  és  $\{S_i\}$  egy adott rácskonfiguráció. Mivel a gyakorlatban ez a szumma a rácskonfigurációk nagy száma miatt nem végezhető el, ezért az összes rácskonfigurációk halmazából mintavételeznünk kell. Mivel  $\{S_i\}$  előfordulásának valószínűsége  $Z^{-1} \cdot \exp(-\beta E(\{S_i\}))$ , ezért bizonyos rácskonfigurációk előfordulása adott hőmérsékleten valószínűbb mint másoké. Meg kell találni a módját, hogy a mintavételezett rácskonfigurációkhoz tartozó  $A$  mennyiség eloszlása ugyanolyan legyen mint az (1)-es egyenlet szummájában. Ha gyűjtöttünk  $N$  különböző mintát a rácskonfigurációkból és így az  $A$  mennyiségből a megfelelő eloszlással, akkor ezen mennyiség egy becslését egyszerű átlagképzéssel számíthatjuk ki:

$$\bar{A} = \frac{1}{N} \sum_i A_i$$

A várható értéket pedig végtelen sok minta segítségével kaphatnánk meg:

$$\hat{A} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_i A_i$$

### 2.2. Markov láncok

Mivel új rácskonfigurációkat megfelelő eloszlással generálni nehéz, ezért numerikus szimulációkban Markov folyamatokkal generálunk újakat. A Markov folyamat olyan sztochasztikus folyamat, ahol az egymást követő állapotokra igaz az, hogy egy állapot csak

az azt megelőzőtől függ, korábbiaktól nem. Egy Markov folyamat egymás utáni állapotainak összességét nevezzük Markov láncnak. A láncra kétféleképpen is gondolhatunk: tekinthetünk rá úgy, hogy a lánc elemei a rendszer időben egymás után következő állapotai, de felfoghatjuk úgy is, mint egy adott idő pillanatban levő konfigurációeloszlásból vételezett minták.

Egy Markov folyamatra jellemző az átmeneti valószínűség, ami azt a valószínűséget adja meg, hogy a folyamat a  $\{S_k\}$  állapotból az  $\{S_l\}$  állapotba kerül, ahol a Markov folyamat egyes állapotai a különböző rácskonfigurációk. Jelöljük  $P(\{S_l\} \leftarrow \{S_k\})$ -val az átmeneti valószínűséget. Az átmeneti valószínűségekből egy átmeneti mátrixot készíthetünk, amelynek elemei

$$W_{lk} = P(\{S_l\} \leftarrow \{S_k\})$$

Tekintsünk a Markov folyamatra most úgy, hogy nem tudjuk egy adott lépésben melyik rácskonfigurációban van a rendszer, csak az egyes rácskonfigurációk valószínűségét ismerjük az adott lépésben. Rendezzük továbbá az egyes állapotok eloszlásbeli valószínűségét egy vektorba, tehát legyen  $\mathbf{P}(i)$   $l$ -edik komponense az  $\{S_l\}$  állapot előfordulásának valószínűsége a Markov lánc  $i$ -edik lépésében. Ekkor az állapotok egy új eloszlását a  $\mathbf{P}(i+1) = \mathbf{WP}(i)$  adja.

Egy ilyen Markov-folyamat egymás után következő állapotait használjuk fel arra, hogy mintát vegyünk a megfelelő rácskonfiguráció eloszlásból. Azonban csak bizonyos átmeneti valószínűségű folyamatokra lesz igaz az, hogy az állapotai a kívánt eloszlásúak. Az átmeneti valószínűségekre a következőknek kell teljesülniük<sup>1</sup>:

1. **részletes egyensúly:**

$$P(\{S_l\} \leftarrow \{S_k\}) e^{-\beta E(\{S_k\})} = P(\{S_k\} \leftarrow \{S_l\}) e^{-\beta E(\{S_l\})}$$

2. **erős ergodicitás:**

$$P(\{S_l\} \leftarrow \{S_k\}) > 0$$

minden  $k, l$ -re. Ezen feltétel szerint tetszőleges rácskonfigurációból elérhető bármelyik másik nem 0 valószínűséggel.

3. **normáltság:**

$$\sum_l P(\{S_l\} \leftarrow \{S_k\}) = 1$$

vagyis a rendszer biztosan átmegy valamilyen rácskonfigurációba.

A részletes egyensúly feltétele azt fejezi ki, hogy azon állapotok közül, amelyek az  $\{S_l\}$ -ben vannak, ugyanannyi kerül át az  $\{S_k\}$  állapotba, mint az  $\{S_k\}$  állapotban levők közül az  $\{S_l\}$ -be. Ez feltétel azért szükséges, mert ha a rendszer minden makroszkópikus paramétere állandó, akkor elvárjuk, hogy az újonnan generált konfigurációk eloszlása maradjon végig ugyanaz. Esetünkben az  $\exp(-\beta E(\{S_k\}))$  kifejezés egy  $1/Z$  szorzótól eltekintve megadja azt a valószínűséget, hogy a rendszer az  $\{S_k\}$  állapotban tartózkodik, vagyis nem más mint  $P_k$ , tehát a részletes egyensúly feltételét úgy is írhatjuk, hogy

$$W_{lk} P_k = W_{kl} P_l \quad (2)$$

<sup>1</sup>A megadott feltételek elégségesek, de nem szükségesek a helyes eloszlás eléréséhez.

Szummázzuk ki a (2)-es egyenletet  $k$ -ra. Majd jobboldalon kihasználva az átmeneti valószínűség normáltságát kapjuk, hogy

$$\mathbf{WP} = \mathbf{P}$$

A részletes egyensúly feltételéből tehát következik, hogy a Markov folyamat során a rácskonfigurációk eloszlása nem változik meg. Ezért az eloszlás állandóságához ez a feltétel nem szükséges, de elégséges.

## 2.3. Algoritmusok

### 2.3.1. A Metropolis algoritmus

Ez a legegyszerűbb algoritmus, amellyel úgy is lehet új rácskonfigurációkat generálni, hogy szinte semmi közelebbit nem tudunk a rendszert alapvetően jellemző fizikai mennyiségeiről. Mindössze az energiafukcionált kell tudnunk kiszámítani egy adott rácskonfigurációban.

Az algoritmus a következő: legyen adott az  $i$ -edik rácskonfiguráció. Számítsuk ki a rácskonfiguráció energiáját, ez legyen  $E_i$ . Válasszunk ki egy tetszőleges (véletlen) rácspontot. Változtassuk meg a rácspont paramétereit tetszőlegesen (véletlen módon) úgy, hogy a rácspont minden lehetséges állapota egyenlő valószínűséggel választható. Számítsuk ki az teljes rács energiáját ezzel az új megváltoztatott rácsponttal, ez legyen  $E_{i+1}$ . Ezek után döntünk, hogy elfogadjuk-e az új rácskonfigurációt, vagy nem. Az átmeneti valószínűség a következő lesz:

$$P(S_{i+1} \leftarrow S_i) = \begin{cases} 1 & \text{ha } E_{i+1} < E_i \\ e^{-\beta(E_{i+1}-E_i)} & \text{ha } E_{i+1} \geq E_i \end{cases} \quad (3)$$

Belátható, hogy ez az átmeneti valószínűség normált. Az (erős) ergodicitás sérül az algoritmusban, hiszen egy rácspont megváltoztatásával nem juthatunk el tetszőleges rácskonfigurációhoz. Azonban algoritmus véges sokszori alkalmazásával már igen, hiszen így minden rácspont sorra kerül legalább egyszer és ha ezt tekintjük a Markov folyamat egy lépésének, akkor már nem sérül az ergodicitás. A részletes egyensúly triviálisan teljesül.

### 2.3.2. A hőfürdő (heatbath)

Az algoritmusban kiválasztunk egy tetszőleges rácspontot, amelynek új értéket szeretnénk adni. Kiszámítjuk a rendszer állapotösszegét úgy, hogy a kiválasztott rácsponton kívül az összeset változatlanul hagyjuk. Legyen a kiválasztott spin lehetséges állapotainak halmaza  $C$ .

1. Ha a spin lehetséges állapotai diszkréték, akkor

$$Z = Z_0 \sum_{S \in C} e^{-\beta E(S)}$$

2. Ha a spin lehetséges állapotai folytonosak, akkor

$$Z = Z_0 \int_{S \in C} dS e^{-\beta E(S)}$$



Itt  $Z_0$  a többi rácspont járulékanak  $S$  független része. Ezután

$$P(S) = \frac{Z_0 e^{-\beta E(S)}}{Z}$$

valószínűség eloszlással választunk a rácspontnak új paramétereit. Ezzel az algoritmusmal kevesebb lépésből kaphatunk jobban eltérő, új konfigurációkat, azonban megfelelő eloszlással adni új értékeket a rácspont paramétereinek gyakran nehéz feladat.

### 2.3.3. Over-relaxáció

Tegyük fel, hogy van a vizsgált rendszernek egy olyan szimmetriája, amelyet felhasználva úgy tudunk egy vagy több rácspont paramétert megváltoztatni, hogy a teljes rendszer energiája nem változik meg. Ezt a tulajdonságot felhasználva, egyéb számítások nélkül tudunk új rácskonfigurációkat generálni. Az algoritmus annyiból áll, hogy egy véletlenszerűen választott rácspont paramétereit megváltoztatjuk az említett módon. Ez a módszer egy olyan Metropolis algoritmus szerinti lépésnek felel meg, amelynél a rácspont paraméterének értékét nem véletlenszerűen választjuk, hanem egy adott szabály szerint irányítottan. Mivel egy ilyen lépésnél az energia nem változik, a (3)-ban szereplő átmeneti valószínűség mindig 1. Az algoritmus használatának feltétele még, hogy a spin régi és új helyén egyezzen meg az integrálási mérték.

Ez az algoritmus önmagában nem használható, mivel nem ergodikus, ezért általában hőfürdővel keverve szokták használni, így azonban rendkívül gyorsan járja be a rendszer a rácskonfigurációk széles skáláját.

### 2.3.4. Molekuláris dinamika

Ezen algoritmus az előbbiektől eltérő abban a tekintetben, hogy míg az előzőek egy lépésben egy-egy rácspontot változtattak meg, ez utóbbi a teljes rácskonfigurációt megújítja egy lépésben. Ezért nevezzük az előbbieket lokális algoritmusoknak, ezt pedig globálisnak.

Az algoritmust csak olyan rendszer esetén lehet használni, amelyben a térmennyiségek folytonos értékeket vehetnek fel. Az  $S_i$  rácspontbeli térmennyiségek mellé vezetünk be egy segédteret, amit  $\pi_i$ -vel jelölünk ( $\pi_i \in (-\infty; +\infty)$ ). Ez az új mennyiség olyan szerepet tölt be, mint az  $S_i$  térmennyiség kanonikusan konjugált párja. A rendszer állapotösszege a következő:

$$Z_1 = \int \prod_i dS_i \exp(-\beta E(S_i))$$

Képezzük a következő konstanst:

$$Z_2 = \int \prod_i d\pi_i \exp\left(-\sum_i \frac{\pi_i^2}{2}\right)$$

ezzel szorozva  $Z_1$ -t

$$Z = Z_1 Z_2 = \int \int \prod_i dS_i d\pi_i \exp\left(-\left(\beta E(S_i) + \sum_i \frac{\pi_i^2}{2}\right)\right)$$

A kitevőben levő kifejezést tekintjük egy (új) rendszer  $\mathcal{H}$  Hamilton-függvényének, ahol  $\beta E$  a potenciális energia, és  $\sum_i \pi_i^2/2$  a mozgási energia.  $Z$  éppen ezen új rendszer állapotösszege. Ebben a rendszerben az  $S_i$  illetve  $\pi_i$  változók hipotetikus, klasszikus részecskék koordinátáinak és impulzusainak felelnek meg. Mivel a klasszikus mozgás során az energia nem változik, így a Hamilton-féle mozgásegyenletek megoldása egy overrelaxációs (mikrokanonikus) lépést valósít meg.

$$\frac{\partial \pi_i}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial S_i} \quad \frac{\partial S_i}{\partial t} = +\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_i}$$

Speciálisan  $\partial \mathcal{H} / \partial \pi_i = \pi_i$ .

Ezek után az algoritmus a következő.  $\pi_i$ -knek hőfürdővel új értékeket adunk a rács minden pontjában, ami könnyen megtehető, mert  $\pi_i$ -nek egyszerű Gauss-eloszlása van

$$P(\pi_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\pi_i^2}{2}\right)$$

Ezzel meghatározhatjuk a rendszer energiáját a Hamilton-függvényből. A következőkben megoldjuk a mozgásegyenleteket egy bizonyos ideig, ezzel új értékeket adunk  $S_i$ -knek minden rácsponiban. Ha a mozgásegyenleteket meg tudnánk oldani egzaktul,  $\mathcal{H}$  állandó maradna, azonban a megoldás során véges  $\Delta t$  idejű lépésekkel fejlesztjük az egyenletet egy előre meghatározott ideig, ezért  $\mathcal{H}$  változik valamennyit. Ha túl sokat változik, az új rácskonfigurációt nem fogadhatjuk el. Az elfogadás valószínűsége

$$P = \begin{cases} 1 & \text{ha } \Delta \mathcal{H} < 0 \\ e^{-\beta \Delta \mathcal{H}} & \text{ha } \Delta \mathcal{H} \geq 0 \end{cases}$$

Fontos, hogy a kanonikus egyenletek megoldásakor megmaradjon a fázistérfogat. A kanonikus egyenletek egzakt megoldásakor ez teljesülne, ám az idő diszkrétizációja miatt nem feltétlenül. A leapfrog algoritmus egy olyan algoritmus, amellyel úgy oldhatjuk meg a kanonikus egyenleteket diszkrét időlépések mellett, hogy a fázistérfogat állandó marad. Tegyük fel, hogy ismerjük  $S_i(t)$ -t és  $\pi_i(t)$ -t. Ezek után a következő kifejezéseket kell kiszámítanunk ebben a sorrendben:

$$\begin{aligned} S_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) &= +\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_i} \Big|_t \cdot \frac{\Delta t}{2} + S_i(t) \\ \pi_i(t + \Delta t) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial S_i} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} \cdot \Delta t + \pi_i(t) \\ S_i(t + \Delta t) &= +\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_i} \Big|_{t+\Delta t} \cdot \frac{\Delta t}{2} + S_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) \end{aligned}$$

Ezt elvégezve  $\Delta t$ -vel léptettük előre az időt. Ezt folytatjuk az előre meghatározott ideig, ami általában 1. Minél sűrűbben osztjuk fel az 1-et  $\Delta t$  időközökre, annál pontosabban marad meg  $\mathcal{H}$  ( $\Delta \mathcal{H} \sim \Delta t^2$ ), ezért nő a valószínűsége, hogy az újonnan generált konfigurációt megtartjuk.

## 2.4. Modellek

### 2.4.1. Ising modell

Tekintsünk egy  $D$  dimenziós négyzetes rácsot, melynek rácspontjaiban kétállapotú objektumok vannak. Erre a rácsra gondolhatunk úgy, hogy a rácsponthoz rendelt fizikai mennyiség a spin két állapota (+1 vagy -1). A rácsponthoz rendelt fizikai mennyiség a spin két állapota (+1 vagy -1). A rácsponthoz rendelt fizikai mennyiség a spin két állapota (+1 vagy -1). A rácsponthoz rendelt fizikai mennyiség a spin két állapota (+1 vagy -1).

elsősomszédjával. Ilyen módon a rendszerhez rendelhetünk egy  $E$  energiát a következő kifejezéssel

$$E = - \sum_{\langle i,j \rangle} JS_i S_j - \sum_i BS_i$$

ahol  $J$  a csatolási állandó, és  $B$  a külső mágneses tér.  $\langle i, j \rangle$  arra utal, hogy az összegzést a szomszédos spinekre kell elvégezni. Ha a modell fázisátmenetét vizsgáljuk, akkor a külső mágneses téret 0-nak kell választanunk. A  $J$  csatolási állandó többféle értéket vehet fel.

- Ha  $J > 0$ , a modell ferromágneses anyagnak lesz modellje. Ekkor az csökkenti az energiát, ha a szomszédos spinek egy irányban állnak.
- Ha  $J < 0$ , a modell antiferromágneses anyagnak lesz modellje. Ekkor az a kedvezőbb állapot, ha a szomszédos spinek ellentétesen állnak.

A modellnek 1 és 2 dimenziós rács esetén van egzakt megoldása, azonban egy 2000-es eredmény valószínűvé tette, hogy magasabb dimenziókban nincs egzakt megoldás [5].

### 2.4.2. O(N) modell

Ezen modellt szintén egy  $D$  dimenziós rácson értelmezzük. A rácspontokban levő spinek azonban egy  $N$  dimenziós gömbfelületen helyezkedhetnek el úgy, hogy minden spin hossza 1, vagyis

$$\sum_j S_{ij}^2 = 1$$

ahol  $S_{ij}$  az  $i$ -edik spin  $j$ -edik Descartes-koordinátája. Mivel a spinek  $N$  dimenziós egységvektorok, polárkoordinátarendszerben leírhatók  $N - 1$  darab szöggel. A spinek kölcsönhatásaként az energiafunkcionál a szomszédos spinek skalárisszorzataiként áll elő:

$$E = - \sum_{\langle i,j \rangle} JS_i S_j - \sum_i BS_i$$

### 2.4.3. Jellemzők

A számolásokban többféle határfeltételt is alkalmazhatunk. Lehetséges, hogy a rács szélére "falat" teszünk vagyis előírjuk, hogy a legszélső spin azon szomszédja, amelyik nem a rácspanban van, határozott értékkel rendelkezzen, de használhatunk periodikus határfeltételt is. Ha  $S(x, y, z, \dots)$  egy spin koordinátái a rácspanban  $(x, y, z, \dots = 0, \dots, N - 1)$  és  $N$  a rács egy oldaléle, akkor  $S(N, y, z, \dots) = S(0, y, z, \dots)$ , stb.

Az egyik fontos mennyiség amit kiszámíthatunk, az a mágnesezettség. Ising modell esetén

$$M = \frac{\sum_i S_i}{V}$$

O(N) modell esetén pedig

$$\mathbf{M} = \frac{\sum_i \mathbf{S}_i}{V}$$

A mágnesezettség jellemezi az spinkonfigurációk statisztikus viselkedését. A 2 és magasabb dimenziós Ising modellekben a fázisátalakulást a mágnesezettség vizsgálatával határozhatjuk meg. Mind a két modellre igaz, hogy az alacsony hőmérsékletű fázis

jellemzője, hogy a spinek többsége egy irányba áll. Ilyenkor a mágnesezettség 0-tól jelentősen különböző szám. Magas hőmérsékleten a spinek rendezetlenül állnak, ezért a mágnesezettség közel lesz 0-hoz. A két fázis között általában fázisátalakulás figyelhető meg, melynek rendje  $D$ -től függ.

Mivel fázisátalakulás során a rendszer érzékenyebb lesz, a mágnesezettség szórása megnövekszik. A mágnesezettség szórásának térfogatszorososa a szuszceptibilitás

$$\chi = V (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$$

## 2.5. Autokorreláció

Numerikus szimulációkban rendkívül fontos, hogy egy algoritmus mennyire hatékony. Ideális esetben olyan módon kell új konfigurációt generálni, hogy az ne függjön az előző konfigurációtól, csak a legutóbbtól, ami követelménye annak, hogy a generálás Markov-láncban menjen végbe. Általában egy eloszlásból úgy választunk ki új konfigurációkat Markov-láncok segítségével, hogy az előzőn csak egy kicsit módosítunk. A gyakorlatban ezért mindig fognak függni a láncban egymástól távolabb levő konfigurációk is. Legyen  $M$  egy olyan mennyiség, amelyet egy konfigurációhoz rendelhetünk, valamilyen  $M = M(\{S_j\})$  függvény szerint. Kiszámíthatjuk ezen mennyiség autokorrelációs függvényét abban a sokaságban, amelyet generáltunk.

$$F(n) = \sum_i (M_i M_{i+n} - M_i^2)$$

Ez általában exponenciálisan lecsengő függvény lesz, amelyet jellemez egy karakterisztikus hossz:

$$F(n) = A \cdot \exp(-n/\xi)$$

Ezt a  $\xi$ -t nevezzük autokorrelációnak. Ha az autokorreláció nagy, az azt jelenti, hogy az egymás után következő konfigurációk egymástól csak kevéssé térnek el. Ilyenkor általában a rendszer a használt algoritmussal csak lassan járja be a lehetséges konfigurációk halmazát. Ilyen algoritmusokat nem tekintünk hatékonyak.

### 2.5.1. Példák

Autokorreláció vizsgálatakor fontos, hogy a különböző algoritmusok ugyanazzal a sebességgel generálják a mágnesezettséget, hiszen csak így vethető össze az eredményük. Ha egy kevésbé hatékony algoritmust hosszabb ideig hagyunk futni mielőtt a generált spinkonfigurációból kiszámítanánk az  $M$  mágnesezettséget, akkor látszólag olyan autokorrelációt érhetünk el, mintha egy sokkal hatékonyabb algoritmust futtattunk volna rövidebb ideig.

$O(2)$  és Ising modell autokorrelációját számoltam. Ising modell autokorrelációja látható az 1. ábrán. Megfigyelhető, hogy Ising modell esetén a Metropolis algoritmus jobb hatásfokú, de csak a kritikus hőmérséklet környékén különbözik jelentősen a hőfürdőtől.  $O(2)$  modell esetén (2. ábra) már a hőfürdő algoritmus produkál kisebb autokorrelációs hosszt, amely szerint ez az algoritmus hatékonyabb.

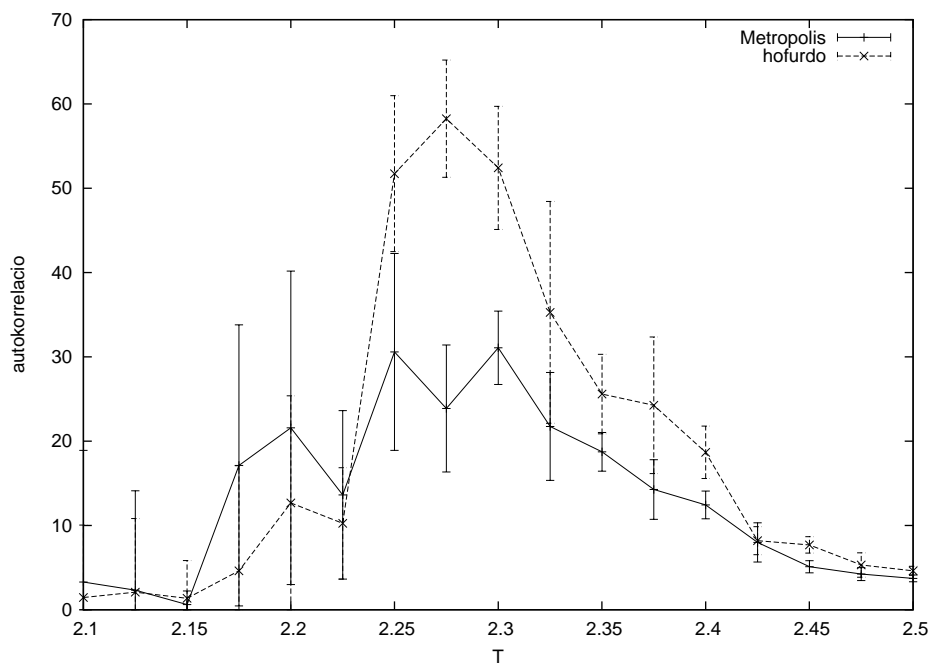
Vizsgálhatjuk az autokorrelációt másképp is. Legyen  $S_i(t)$  az  $i$ -edik helyen levő spin a  $t$  időben, ahol  $t$  most a szimulációs időt méri, vagyis egy időegység arányos a térfogattal. Ekkor a korrelációs függvény, amelyet minden rácspontban kiszámítunk

$$C(i, \Delta t) = \langle S_i(t) S_i(t + \Delta t) \rangle - \langle S_i(t) \rangle \langle S_i(t + \Delta t) \rangle$$

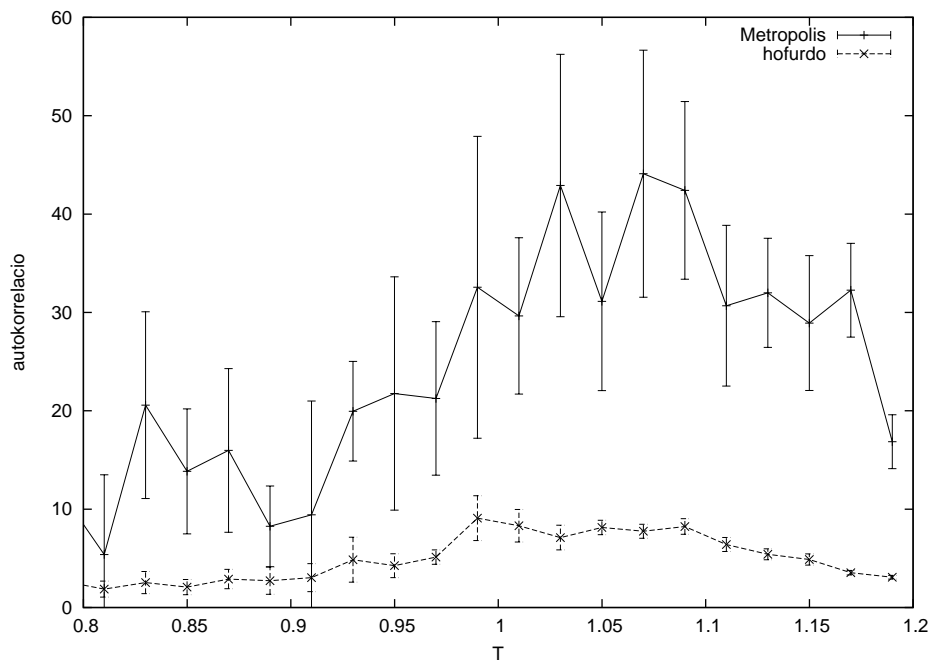
és ezt a teljes rácsra kiátlagolva

$$C(\Delta t) = \frac{1}{V} \sum_i C(i, \Delta t)$$

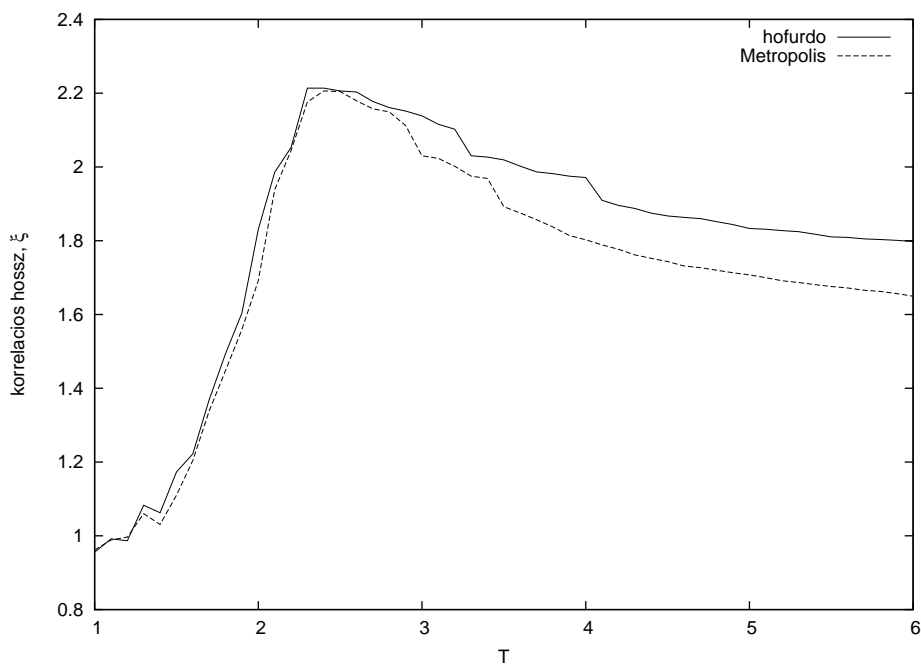
Erre a függvényre szintén exponenciális lecsengést várunk  $\Delta t$ -ben, így itt is megadható egy korrelációs hossz. Ez a korrelációs hossz szintén azt fejezi ki, hogy mennyire gyorsan változik meg a fizikai mennyiség (itt mágnesezettség) időben. A 3. ábrán látható, hogy az autokorrelációt így számítva Ising modell esetén a Metropolis algoritmus bizonyul jobbnak. Az ábráról kiderül, hogy az így számított autokorreláció más jellegű, például a fázisátmenet környékén a két algoritmus ugyanazt az autokorrelációt adja. Látható az is, hogy az autokorreláció a fázisátmenet közelében a legnagyobb, nagy térfogatra divergál. Ez a kritikus lelassulás jelensége.



1. ábra. 2 dimenziós Ising modell autokorrelációja Metropolis és hőfürdő algoritmusokkal  $V = 60^2$  esetén



2. ábra. 2 dimenziós  $O(2)$  modell autokorrelációja Metropolis és hófürdő algoritmusokkal  $V = 30^2$  esetén



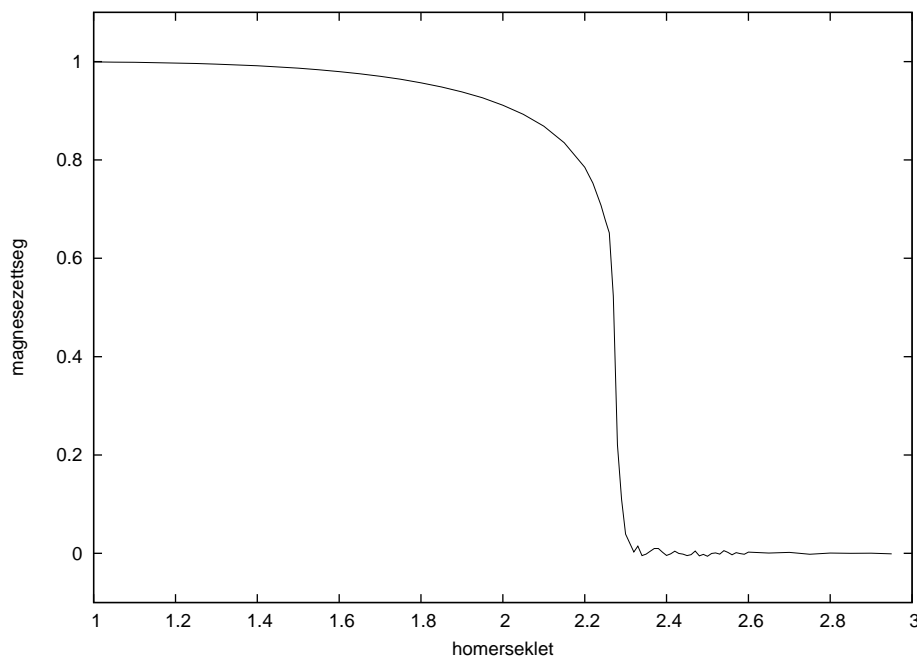
3. ábra. Autokorreláció a 2 dimenziós Ising modellnél  $30^2$  térfogaton

### 3. Eredmények

Az alábbiakban az Ising és az  $O(N)$  modell szimulációja során elért eredményeimet ismertetem. A továbbiakban a csatolási állandó  $J = 1$  és a külső tér  $B = 0$ .

#### 3.1. Mágneszettség függése hőmérséklettől

A mágneszettség Ising modell esetén  $M = \frac{1}{V} \sum_i S_i$ . Alacsony hőmérsékleten minden spin egy irányba áll, ezért a mágneszettség összeadódik, míg magas hőmérsékleten, rendezetlenül állnak, és kioltják egymást. A kettő között 2 dimenziós modell esetén másodrendű fázisátmenet zajlik. A 4. ábrán 2 dimenziós Ising modell mágneszettsége látszik a hőmérséklet függvényében. A  $T = 2.25$  hőmérséklet környékén történő levágás a térfogat növekedtével egyre élesebb lesz.



4. ábra. A mágneszettség a hőmérséklet függvényében 2 dimenziós Ising modell esetén  $V = 100^2$  térfogaton

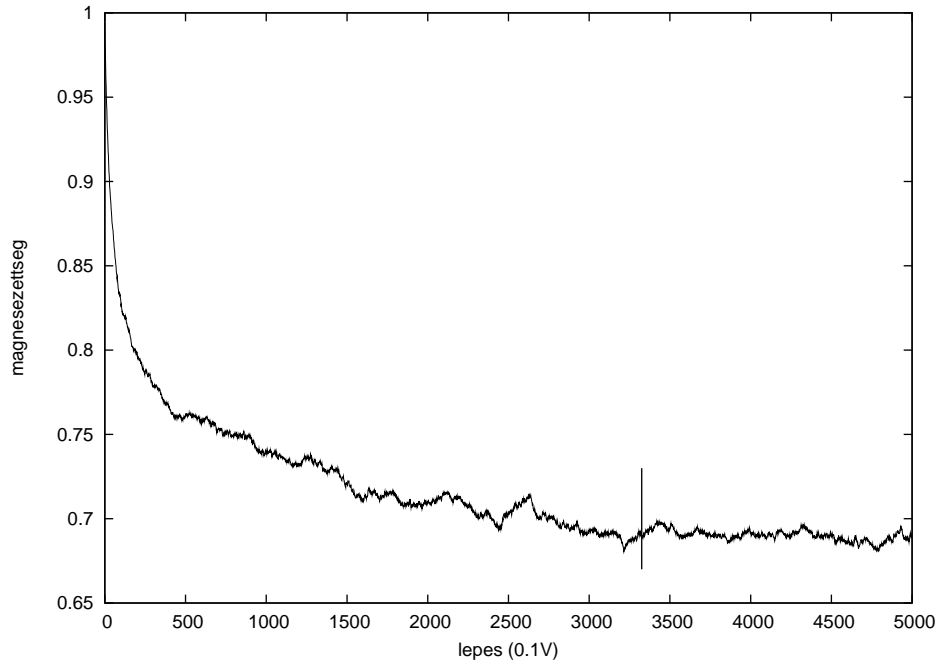
#### 3.2. Hiszterézis

Hiszterézist a egy rendszer általában akkor produkál, ha egy folyamat olyan gyorsan játszódik le, hogy a rendszer egyensúly állapotát nem képes felvenni. Ezt a jelenséget spinrendszerek esetében is elő lehet idézni. Tekintsük a generált spinkonfigurációk láncát egy időbeli folyamatnak. Akkor tekintünk egy spinkonfigurációt újnak, ha várhatóan már a teljes térfogatban minden spin legalább egyszer új értéket kapott. Nagyobb térfogatú spinrendszer esetén több lépést kell Metropolis vagy hőfürdő algoritmusokból elvégezni, hogy ugyanolyan mértékű változást érzünk el, ezért az időegységet célszerű a térfogattal arányosnak választani. Mivel az alkalmazott lokális algoritmusok egy spint csak bizonyos valószínűséggel fordítanak át, ezért az időegységet a térfogat néhányszorosának kell választanunk. Hogy pontosan mit választunk időegységnek, az nagyban függ a konkrét algoritmustól.

A termalizáció az a folyamat, ami alatt a rendszer eléri a termikus egyensúlyát. Ehhez idő kell, amelynek nagysága változatos, függ a rendszer kezdeti állapotától, térfogatától, az alkalmazott algoritmustól és a hőmérséklettől. A termalizáció általában káros, mert a folyamat során a rendszer nem az adott hőmérséklethez tartozó egyensúlyi spinkonfigurációkat veszi fel, ezért ilyenkor nem mintavételezünk. Az 5. ábrán látható a 2 dimenziós Ising modell termalizációja rendezett állapotból. Az ábrán látható vonaltól balra levő mágnesezettségeket a későbbi számítások során nem használjuk fel. A teljesen rendezetlen állapotból a rendszer nehezen tud átmenni a teljesen homogén állapotába, mert előbb doménesedik. Hiszterézis megfigyelését a doménesedés ellehetetleníti, ezért célszerű egy kis külső mágneses teret alkalmazni, hogy a doménesedést elkerüljük.

3 dimenziós Ising modell hiszterézisét vizsgáltam hőfürdő algoritmussal. A rendszer térfogata  $V = 40^3$  volt. A fentiek alapján a gyorsan változó folyamat most azt jelenti, hogy  $\Delta T = 0.025$  hőmérsékletlépésekben haladva minden hőmérsékleten a  $0.3 \cdot V$ -vel egyező mennyiségű spinre futtattam le az algoritmust. Az eredmény a 6. ábrán látható.

Fontos megjegyezni, hogy véges térfogaton a hiszterézis léte nem fizikai jelenség, hanem az alkalmazott algoritmus hatékonyságát jellemzi. Jelen esetben megállapíthatjuk, hogy az alkalmazott  $0.3V$  lépés nem elegendő az egyensúly eléréséhez.



5. ábra. 2 dimenziós Ising modell termalizációja rendezett állapotból  $V = 500^2$  és  $T = 2.26$  esetén

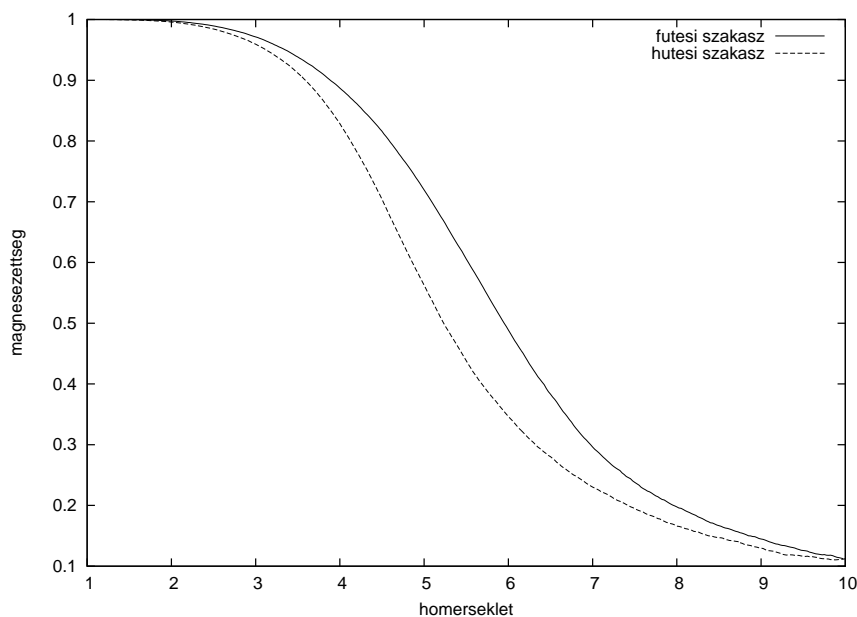
### 3.3. Ising modell szuszceptibilitása

Ising modell esetén a szuszceptibilitást a mágnesezettség szórása adja a következőképpen

$$\chi = V (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$$

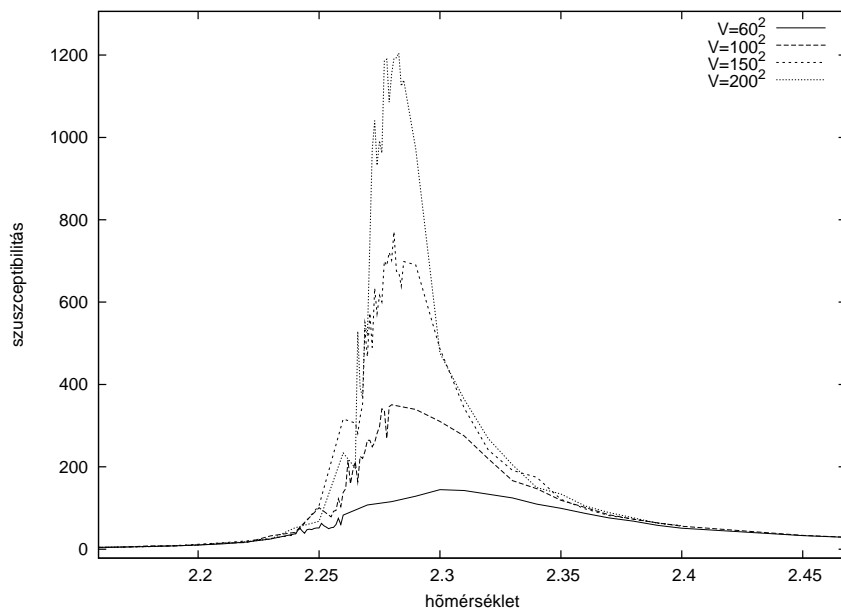
A jobb kiértékelhetőségért a szuszceptibilitást a mágnesezettség abszolútértékének szórásából számoltam. A szuszceptibilitáson jól megfigyelhető a fázisátmenet, illetve a



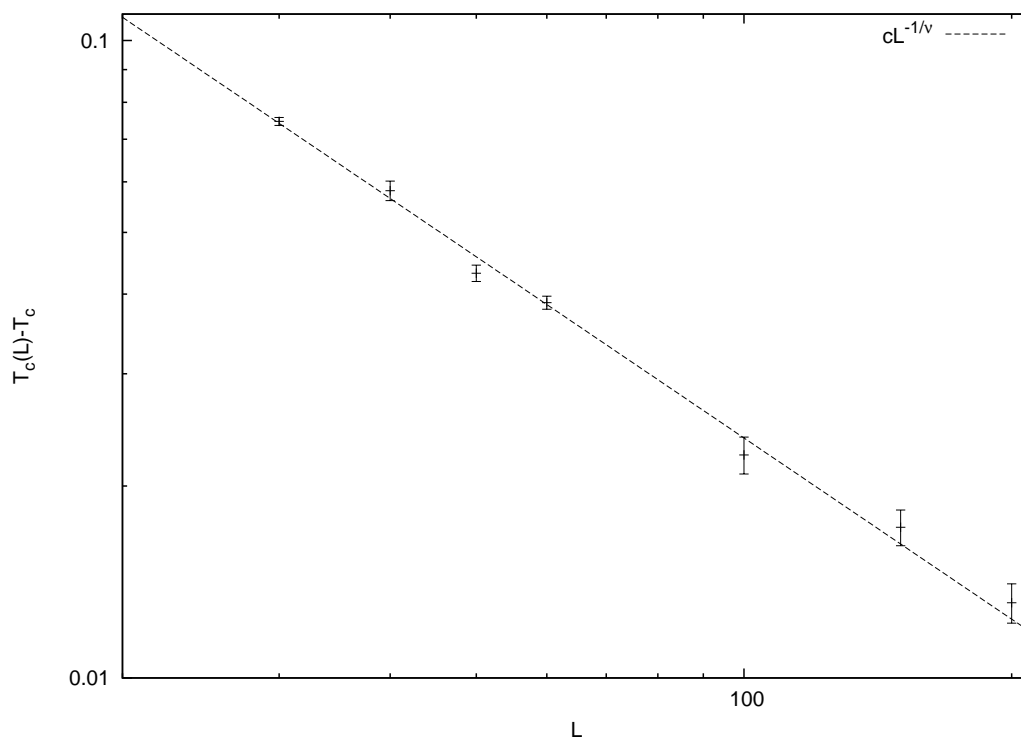


6. ábra. A hiszterézis jelensége Ising modellben

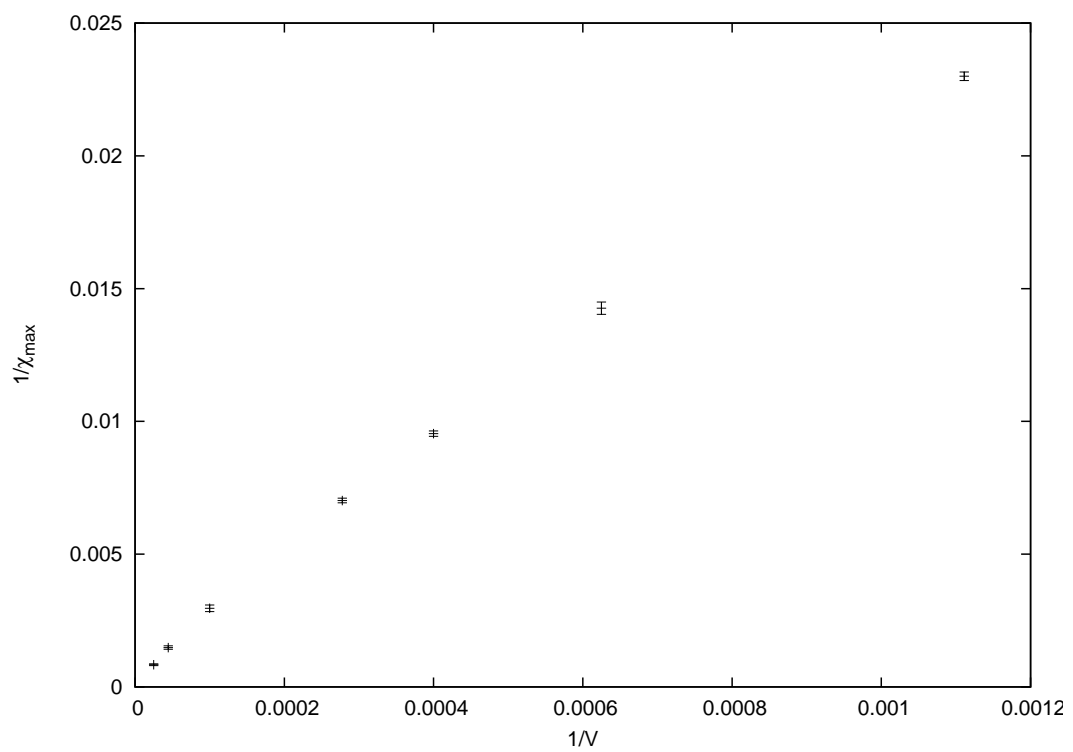
kritikus hőmérséklet körüli divergencia a térfogat növekedésével. Kritikus hőmérsékletnek nevezzük azt a hőmérsékletet, amelyen a végtelen térfogatú rendszer fázisátmenete végbemegy. A 7. ábra mutatja a 2 dimenziós Ising modell különböző térfogatokhoz tartozó szuszceptibilitását a hőmérséklet függvényében. A maximum helyeket és maximum értékeket Gauss-görbe illesztésével határoztam meg. A kritikus hőmérséklet meghatározása úgy történt, hogy a szuszceptibilitások maximum helyeit ábrázoltam  $1/V$  függvényében, majd extrapoláltam az  $1/V = 0$ -ba. Így  $T_c = 2.280 \pm 0.001$ -nek adódott. A végesméret skálázási elmélet szerint a kritikus hőmérséklet nagy térfogaton a  $T_c(L) - T_c \sim L^{-1/\nu}$  képlet szerint viselkedik, ahol  $L$  a rács oldaléle,  $T_c(L)$  az a hőmérséklet, ahol a szuszceptibilitásnak maximuma van  $L$  oldal élű rácsban, és  $\nu$  egy a rendszerre jellemző paraméter [4]. A  $T_c(L) - T_c$  görbe  $L$  függvényében a 8. ábrán látható, erre  $L^{-1/\nu}$  alakú görbét illesztve  $\nu = 1.06 \pm 0.03$ . Az elmélet szerint a szuszceptibilitás a kritikus hőmérséklet közelében a végtelenhez tart, ha a térfogat nő. A 9. ábrán látható, hogy ha  $1/V \rightarrow 0$ , akkor  $1/\chi_{max} \rightarrow 0$ . Az egzakt érték  $T_c = 2/\sinh^{-1}(1) = 2.269$  és  $\nu = 1$  [6]. A kritikus hőmérsékletet nem sikerült pontosan visszaadni, aminek oka valószínűleg a abban keresendő, hogy az alkalmazott térfogatok nem voltak elég nagyok.



7. ábra. A 2 dimenziós Ising modell szuszeptibilitása



8. ábra. A kritikus hőmérséklet az élhossz függvényében logaritmikus skálán a 2 dimenziós Ising modellnél



9. ábra. A szuszeptibilitás maximumának reciproka a térfogat reciprokának függvényében a 2 dimenziós Ising modellnél

### 3.4. $O(2)$ és $O(3)$ szimulációja

#### 3.4.1. Szuszeptibilitás

Az  $O(2)$  modellt 2 dimenziós rácson vizsgáltam. Mivel most a mágnesezettség egy vektor, melynek  $O(N)$  modell esetében  $N$  komponense van, ezért a szuszeptibilitás egy tenzor lesz, melynek komponensei

$$\chi_{ij} = V (\langle M_i M_j \rangle - \langle M_i \rangle \langle M_j \rangle)$$

Azonban, hogy jól tudjuk kezelni a szuszeptibilitást, érdemes a mágnesezettség vektor szórásaként értelmezni:

$$\chi = V (\langle \mathbf{M}^2 \rangle - \langle \mathbf{M} \rangle^2)$$

Belátható, hogy az így definiált szuszeptibilitás éppen a fenti tenzor spurja.

A modellt Metropolis és hőfürdő algoritmusokkal vizsgáltam. Azt szeretnénk, hogy amikor a lehetséges konfigurációk halmazából mintavételezünk, a rendszer járja be a teljes konfigurációs teret. Emiatt várjuk, hogy  $\langle \mathbf{M} \rangle = \mathbf{0}$ , hiszen a rendszernek fel kell vennie az adott hőmérséklethez tartozó nagyságú mágnesezettség vektort minden irányban. A Metropolis algoritmusnak megvan az a hátrányos tulajdonsága, hogy ha a rendszert rendezett állapotból indítjuk, a hőmérséklet csökkenésével megtartja a mágnesezettség irányát, míg a hőfürdő algoritmusnál ez nem következik be, és a mágnesezettség vektor iránya változik. Ez a spontán szimmetriasértés jelensége, ami miatt Metropolis algoritmusnál  $\langle \mathbf{M} \rangle \neq \mathbf{0}$ , míg hőfürdő esetén közel  $\langle \mathbf{M} \rangle = \mathbf{0}$ , alacsonyabb hőmérsékletek esetén is. Ez ahhoz vezet, hogy a szuszeptibilitás nem ugyanakkora a két algoritmus esetében. Ezt kiküszöbölhetjük, ha a szuszeptibilitást átdefiniáljuk a mágnesezettség abszolútértékével a következőre:

$$\chi = V (\langle |\mathbf{M}|^2 \rangle - \langle |\mathbf{M}| \rangle^2)$$

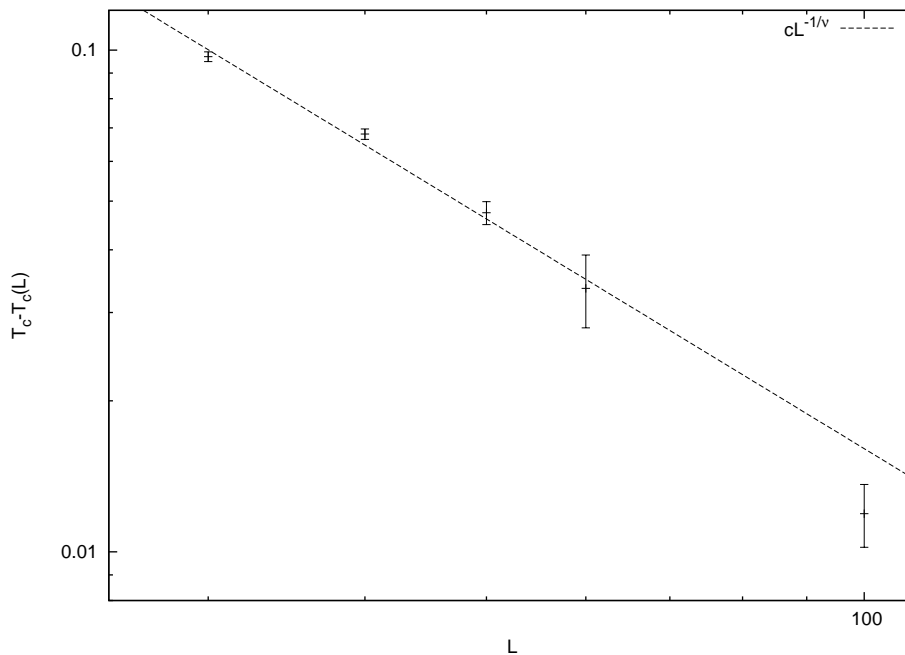
A mágnesezettség nagysága már ugyanaz mindkét algoritmus esetén. Ez némiképp megváltoztatja a szuszeptibilitás viselkedését, de a kritikus hőmérsékletet nem, hiszen ugyanazon a hőmérsékleten fog a rendszer minden paramétere divergálni.

A kritikus hőmérsékletet szintén úgy határoztam meg, hogy a szuszeptibilitások maximumhelyeit ábrázolva  $1/V$  függvényében  $1/V = 0$ -ba extrapoláltam. Ez alapján a kritikus hőmérséklet  $T_c = 0.9939 \pm 0.0002$ -nek adódott. A 10. ábrán látható az egyes élhosszakhoz tartozó kritikus hőmérséklet, amelyre a fent leírt módon igaz, hogy  $T_c(L) - T_c \sim L^{-1/\nu}$ . Az illesztés szerint  $\nu = 0.66 \pm 0.06$ . Az irodalmi érték  $T_c = 0.89$  [8], az eltérés valószínűleg a kis térfogatokban keresendő.

$O(3)$  modell esetén az előzőekhez hasonló módon elvégezhetőek az illesztések, eszerint  $T_c = 0.6007 \pm 0.0002$  és  $\nu = 0.596 \pm 0.03$ .

#### 3.4.2. Termalizáció

Az  $O(2)$  modell esetén a szimulációt véletlenszerű spinelrendeződésből, ugyanakkor alacsony hőmérsékletre indítottam. A rendszer ilyenkor megpróbálja felvenni a külső hőmérséklethez tartozó egyensúlyi állapotát, amit termalizációnak hívunk. Speciálisan itt az egyensúlyi állapot a homogén állapot. Mivel azonban nincs kitüntetve semmilyen irány, a rendszer bizonytalan és nem tudja, milyen irányú vegye fel a homogén mágnesezettség állapotát. A termalizáció nagyon sokáig elhúzódhat, ugyanis a véletlenszerű elrendeződésben domének jönnek létre, melyekben a mágnesezettség nagy területen homogén.



10. ábra. A kritikus hőmérséklet az élhossz függvényében logaritmikus skálán a 2 dimenziós  $O(2)$  modellnél

Itt a spinek lokálisan egyensúlyban vannak, ezért tömegesen nehezen fordulnak át egy másik irányba. Elég sok idő (a térfogat több százszorosa, akár ezerszerese) elteltével azonban ez megtörténik, és a rendszer teljesen homogén lesz (11. ábra). Ha alacsony hőmérsékletről indítjuk a szimulációt, a termalizáció elkerülése miatt optimálisabb lenne minden spint azonos irányból indítani, azonban ez spontán szimmetriasértést jelentene, amit általában ugyancsak el kell kerülnünk. A doménésedés jelensége minden modell esetén problémát okoz.

### 3.4.3. Az $O(2)$ modell megoldása hőfürdővel

A szimulációban  $\mathbf{B} = 0$ -t használtam. A megoldás során nem tételezünk fel semmit arról, hogy hány dimenziós a rács, a szimulációban  $D = 2$  volt.

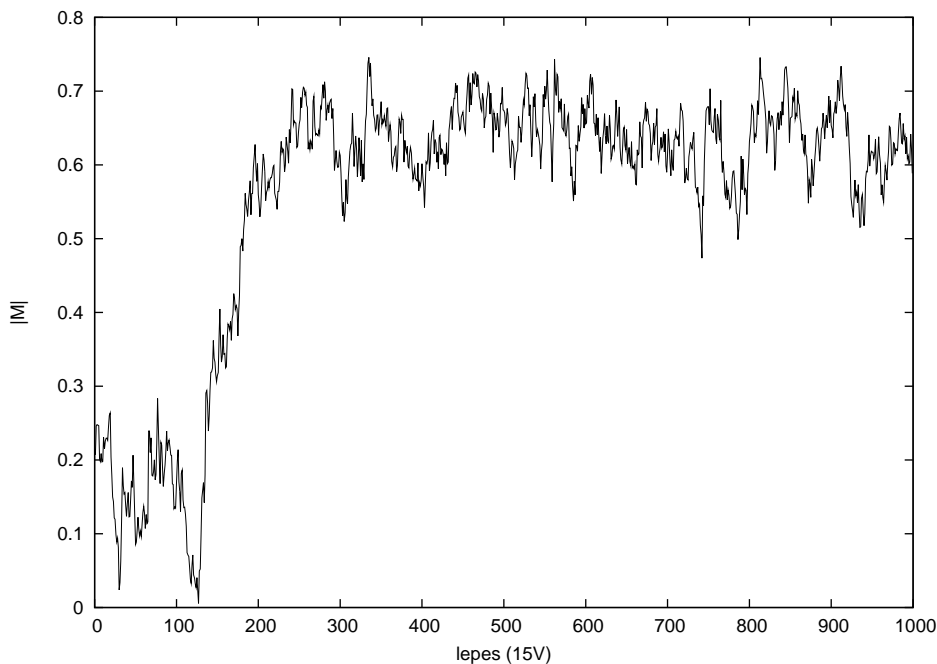
A hőfürdő algoritmus alkalmazásakor először véletlenszerűen kiválasztunk egy spint. Ezen spin állapotösszegét kell kiszámítanunk úgy, hogy rendszer többi spinjét változtatlanul hagyjuk. Legyen a kiválasztott spin  $S_i$ , az állapotösszege

$$\frac{Z}{Z_0} = \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-\beta E} = \int_0^{2\pi} d\varphi \exp \left( +\beta J S_i \sum_{\langle i,j \rangle} S_j \right)$$

ahol  $Z_0$  az állapotösszeg  $S_i$  független része és  $\sum_{\langle i,j \rangle} S_j$  a kiválasztott spin szomszédjainak összege, amit jelöljünk  $\Sigma$ -val. A  $\varphi$  változóról térjünk át egy olyan elforgatott  $\chi$  szögre, amit  $\Sigma$ -tól mérünk, valamint figyelembe vesszük, hogy  $|S_i| = 1$ , ekkor

$$\frac{Z}{Z_0} = \int_0^{2\pi} d\chi \exp(\beta J |\Sigma| \cos \chi) = 2\pi I_0(\beta J |\Sigma|)$$

ahol  $I_0(x)$  az első fajú módosított Bessel-függvény, valamint kihasználtuk, hogy  $I_0(-x) = I_0(x)$ . Ezek után a választott spin helyére a  $f(\vartheta) = \frac{Z_0}{Z} \exp(\beta J |\Sigma| \cos \chi)$  eloszlással



11. ábra. A doménésedés jelensége termalizáció során  $O(2)$  modellnél  $T = 0.95$  hőmérsékletnél

kell egy új szöveget választanunk, majd  $\chi$ -t visszaforgatni az eredeti  $\varphi$ -vel jellemzett koordinátarendszerbe. Az új szög generálását megfelelő eloszlással a következőképpen tehetjük meg. Megkeressük  $f(\chi)$  maximumát (ez  $f_{max} = f(0) = \frac{Z_0}{Z} \exp(\beta J |\Sigma|)$ ) és képezzük az  $\frac{f(\chi)}{f_{max}}$  hányadost, amivel bevezettünk egy olyan új  $g(\chi)$  függvényt, amely értéke készlete már a  $[0 : 1]$  intervallum ( $g(\chi) = \exp(\beta J |\Sigma| (\cos \chi - 1))$ ). Ezek után generálunk véletlenszerűen egy  $(\chi_r, g_r) \in [0 : 2\pi] \times [0 : 1]$  számpárt és megnézzük, hogy a számpár teljesíti-e a  $g_r < g(\chi_r)$  feltételt. Ha teljesíti, a  $\chi_r$  szöveget elfogadjuk a spin új szögének, ha nem új számpárt generálunk. Ezzel adott eloszlású számok generálását visszavezettük a geometriai valószínűség fogalmára. Azonban ez a módszer egyre kevésbé hatékony magasabb dimenziókban, illetve olyan jellegű eloszlásokra, amelyek egy érték körül csúcsosodnak, másutt pedig elenyésző valószínűségűek.

#### 3.4.4. Az $O(3)$ modell megoldása hófürdővel

Ismét  $B = 0$ -t használunk, és megtartjuk a  $\Sigma = \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_j$  jelölést. Az állapotösszeg kiszámításához elforgatjuk a koordinátarendszerünket úgy, hogy az új koordinátarendszer  $z$ -tengelye  $\Sigma$  irányú legyen, így a  $\vartheta$  szög ezen vektorral bezárt szöveget jelenti. Ebben a koordinátarendszerben egy tetszőleges vektor skalárszorzata  $\Sigma$ -val nem függ az előbbi vektor  $\varphi$  szögétől.

Az állapotösszeg a következő lesz

$$\frac{Z}{Z_0} = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} d\varphi \sin \vartheta d\vartheta \exp(\beta J |\Sigma| \cos \vartheta)$$

bevezetve az  $u = \cos \vartheta$  változót az integrálás elvégezhető és a  $K = \beta J |\Sigma|$  jelöléssel

$$\frac{Z}{Z_0} = 2\pi \frac{e^K - e^{-K}}{K}$$

Ezzel a sűrűségfüggvény, amely szerint az új szögeket generálnunk kell a

$$f(\vartheta, \varphi) = \frac{Z_0}{Z} \exp(K \cos \vartheta) \sin \vartheta$$

Látszik, hogy a  $\varphi$  szög eloszlása egyenletes lesz a  $[0 : 2\pi]$ -ben, ezért elég csak a  $\vartheta$  szög eloszlásával foglalkoznunk. Készítsük el a  $\vartheta$  szög kumulatív eloszlás függvényét:

$$F(\vartheta) = \int_0^{\vartheta} \frac{Z_0}{Z} \exp(K \cos \vartheta') \sin \vartheta' d\vartheta'$$

ismét áttérve az  $u$  változóra kapjuk, hogy

$$F(u) = \frac{e^K - e^{Ku}}{e^K - e^{-K}}$$

Az  $F(u) = y$  kifejezést invertálva kapjuk, hogy

$$u = \cos \vartheta = \frac{1}{K} \ln [e^K - y (e^K - e^{-K})]$$

Ezzel a kifejezéssel éppen megfelelő eloszlású  $\vartheta$  szöget generálhatunk, ha egyenletesen választunk  $y$ -t a  $[0 : 1]$  intervallumból. Miután megkaptuk az új  $\vartheta$  és  $\varphi$  szögeket, a hozzájuk tartozó vektort egy lineáris transzformációval vissza kell forgatnunk az eredeti koordinátarendszerbe.

### 3.5. Korrelációs függvények

Értelmezzük egy rácson a kétpont-korrelációs függvényt:

$$C(i, j) = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle$$

ahol az átlagolást a rácskonfigurációk sokaságára kell elvégezni. Ezen függvény megadja, hogy az  $i$ -edik és  $j$ -edik spin mennyire van szoros kölcsönhatásban egymással. Fázisátalakulás esetén ezen kölcsönhatás hatótávolsága megnő és két távoli rácspont között is jelentős lehet a korreláltság.

A korrelációt a szimulációban úgy számoltam, hogy egy adott rácskonfigurációban minden rácspontban kiszámítottam a

$$C(i, \Delta x) = \langle S_i S_{i+\Delta x} \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_{i+\Delta x} \rangle$$

mennyiséget, ahol az átlagolást az összes olyan szomszédra kell elvégezni, amelyik az  $S_i$  spintől  $\Delta x$  távolságra van. Ez  $D$  dimenziós rács esetén  $2D$  szomszéd. Ebből előállítható átlagolással a

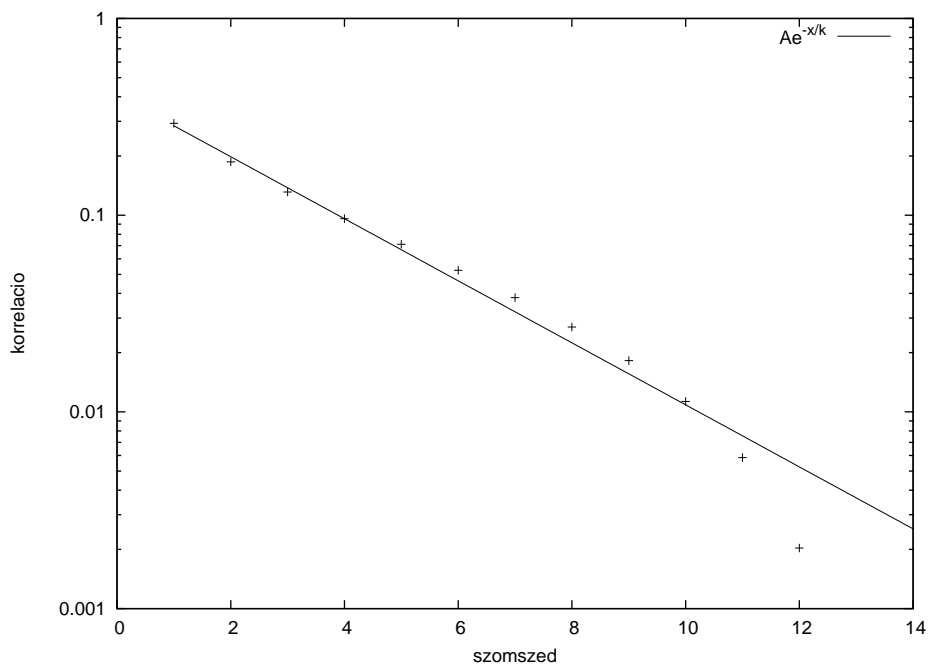
$$C(\Delta x) = \frac{1}{2DV} \sum_i C(i, \Delta x)$$

függvény, ami azt adja meg, hogy átlagosan mi lesz két olyan spin korrelációja, amelyik egymástól  $\Delta x$  távolságra van.

A  $C(\Delta x)$  korreláció a távolsággal exponenciálisan csökken, vagyis közelíthető

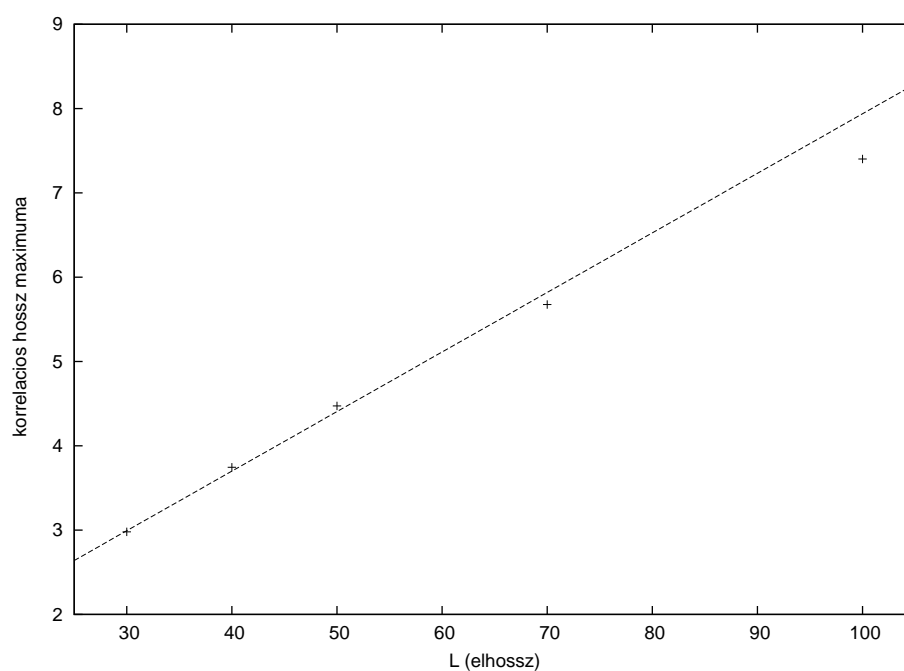
$$A \exp(-\Delta x/\xi)$$

alakú függvénnyel, ahol  $\xi$ -t korrelációs hosszának hívjuk. Ez a hossz függ a hőmérséklettől, illetve a vizsgált rács térfogatától, a kritikus hőmérséklet környékén divergál. Minden térfogaton más hőmérsékletnél veszi fel a maximumát, végtelen térfogaton pedig éppen a kritikus hőmérsékleten válik szingulárissá. A 12. ábrán látható az  $O(2)$  modell  $C(\Delta x)$  függvényére illesztett exponenciális alak  $T = 0.9$  esetén. Végesméret skálázási elmélet szerint ha  $L \rightarrow \infty$ , akkor a korrelációs hossz maximuma a rács élhosszával lineárisan nő. A 13. ábrán látható, hogy 2 dimenziós Ising modell esetén a korrelációs hosszak maximumai az élhosszal nagyjából lineárisan változnak.



12. ábra. Az  $O(2)$  modell korrelációs függvényére illesztett exponenciális  $T = 0.9$  hőmérsékleten és  $V = 30^2$  térfogaton





13. ábra. A korrelációs hosszak maximuma a hőmérséklet függvényében 2 dimenziós Ising modell esetén  $V = 60^2$  térfogattal

## 4. Összefoglalás

Szakedolgozatomban bemutattam a Monte-Carlo módszerek alapvető algoritmusait és egyszerű alkalmazásait néhány fizikai modellen. Tettem ezt azért, mert ezek a szimulációs módszerek napjaink számítási kapacitásai mellett mind több helyen találnak alkalmazásra, ezért mindenképpen hasznos megismerkedni velük. Szakedolgozatom megírása során a motivációt mégis a fizika adta, hiszen nagy számban fordulnak elő olyan problémák, melyeknek nem ismerjük az egzakt megoldását, esetleg nincs is, ezért ezeket a problémákat csak numerikusan tudjuk kezelni, illetve megoldani. Ilyen számítások fordulnak elő például a kvantumtérelméletben, amelynek kutatása napjaink élvonalába tartozik. A kvantumtérelméletet a gyakorlatban egy rácson szimulálják, ezért lehetnek az általam vizsgált egyszerű spinmodellek jó alternatívák, amelyeken Monte-Carlo módszereket tanulmányozhatom. Általában 2 dimenziós rácsokat vizsgáltam, a kvantumtérelméletben azonban szükség lesz tér és idő dimenziókra, amelyek a rács méretét jelentősen megnövelik.

A szakedolgozat elkészítése közben megtanultam az itt bemutatott módszerek lényegét, elméleti megalapozását. A dolgozatban bemutatott modelleket több algoritmussal is vizsgáltam, ezáltal megtanultam a módszereket alkalmazni, miközben kiismertem tulajdonságaikat és az alkalmazásuk közben felmerülő problémákat, illetve lehetséges megoldásaikat. Foglalkoztam különböző módszerek autokorrelációjának számításával, ami legjobb mérőszáma az algoritmusok hatékonyságának. Ez alapján lehet levonni következtetéseket arra vonatkozóan, hogy egy-egy modell vagy probléma számításainál melyik a legmegfelelőbb algoritmus.

A dolgozat elkészítése során megszerzett ismeretek jó alapot adnak a további vizsgálódásokra a Monte-Carlo szimulációk irányában.

## Hivatkozások

- [1] Wikipedia: Monte Carlo methods ([http://en.wikipedia.org/wiki/Monte\\_carlo\\_methods](http://en.wikipedia.org/wiki/Monte_carlo_methods))
- [2] I. Montvay and G. Münster: Quantum Fields on a Lattice (Cambridge University Press, 1994)
- [3] David P. Landau, Kurt Binder: A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics (Cambridge University Press, 2009, third edition)
- [4] Akira Ukawa: Lectures on lattice QCD at finite temperature, Uehling Summer School 1993:0211-304
- [5] Istrail, Sorin (2000), "Statistical mechanics, three-dimensionality and NP-completeness. I. Universality of intractability for the partition function of the Ising model across non-planar surfaces (extended abstract)", Proceedings of the Thirty-Second Annual ACM Symposium on Theory of Computing, ACM, pp. 87–96, MR2114521
- [6] L. Onsager: A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition, Phys. Rev., Vol. 65, 1944, p.117
- [7] S. H. Schenker, J. Tobochnik: Monte Carlo renormalization-group analysis of the classical Heisenberg model in two dimensions, Phys. Rev. B, Vol. 22, Nov. 1980, p.4462
- [8] P. Olsson: Monte Carlo analysis of the two-dimensional XY model. II. Comparison with the Kosterlitz renormalization-group equations, Phys. Rev. B, Vol. 52, Aug. 1995, p.4526
- [9] N. D. Mermin, H. Wagner: Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models, Phys. Rev. Lett., Vol.17, 1966, p. 1133

## A. Jackknife módszer

Numerikus szimulációkban a célunk egy fizikai mennyiség meghatározása. A fizikai mennyiséghez hiba is tartozik melynek meghatározása fontos feladat. Ezen bizonytalanság meghatározása lehetőség szerint minél több adat szórásából történik, amely adatokat a szimuláció többszöri megismétlésével nyerhetnénk. A gyakorlatban gyakran nem áll rendelkezésre elegendő erőforrás ahhoz, hogy a szimulációt megismételjük. A jackknife módszer lényege, hogy a szimuláció egyszeri futtatása során keletkezett adatokat úgy használhatjuk fel, mintha több futtatásból keletkeztek volna. Ez lehetővé teszi, hogy kiszámíthassuk bizonyos mennyiségek bizonytalanságát.

Legyen egy mennyiségünk  $A$  amelyet a szimuláció során  $N$ -szer mintavételeztünk  $(A_1, A_2, \dots, A_N)$ . Ezen mennyiségek átlaga

$$\bar{A} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N A_i$$

Bevezetjük a jackknife átlagot, amit minden egyes mintához hozzárendelhetünk úgy, hogy az átlagból kihagyjuk azt az egy mintát:

$$A_{J(s)} = \frac{1}{N-1} \sum_{i \neq s} A_i$$

Ezzel kaptunk  $N$  különböző átlagot. Ha az  $A$  mennyiségnek valamilyen  $y(A)$  függvényét szeretnénk meghatározni, akkor a legjobb becslése  $\bar{y} = y(\bar{A})$ . Érdekel minket  $y$  szórása  $\bar{y}$  körül. Ennek meghatározásához elkészítjük  $y$  jackknife becsléseit is:

$$y_{J(s)} = y(A_{J(s)})$$

ezekkel pedig  $y$  jackknife átlaga:

$$\bar{y}_J = \frac{1}{N_J} \sum_{i=1}^{N_J} y_{J(i)}$$

ahol  $N_J$   $y$  jackknife becsléseinek száma. Itt úgy számoltunk, hogy a jackknife átlagból csupán egy  $A_s$  mintát hagyunk ki, de kihagyhatunk több mintát is. Ha például 5 mintát hagyunk ki, akkor a jackknife átlagok száma  $N_J = N/5$  lesz. Az  $y$  mennyiség szórásának egy becslését számíthatjuk ki a jackknife átlagok segítségével

$$\sigma_J^2 = \frac{N_J - 1}{N_J} \sum_{i=1}^{N_J} (y_{J(i)} - \bar{y}_J)^2$$

Speciális esetben, ha  $y(A) = A$ , akkor  $\sigma_J^2$  pont az  $A$  mennyiség szórása lesz. [2]

# NYILATKOZAT

**Név:** Láz József András

**ELTE Természettudományi Kar, szak:** fizika BSc

**ETR azonosító:** LAJPAAT.ELTE

**Szakdolgozat címe:**

Monte-Carlo szimulációk

A **szakdolgozat** szerzőjeként fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem, hogy a dolgozatom önálló munkám eredménye, saját szellemi termékem, abban a hivatkozások és idézések standard szabályait következetesen alkalmaztam, mások által írt részeket a megfelelő idézés nélkül nem használtam fel.

Budapest, 2010 május

---

*a hallgató aláírása*