



HÁSKÓLI ÍSLANDS

SÉRVERKEFNI Í EÐLISFRÆÐI

Tölulegir reikningar á Ising líkani

Höfundur:
Árni Johnsen

Leiðbeinandi:
Viðar Guðmundsson

21. apríl 2013

Efnisyfirlit

1	Inngangur	2
2	Líkan	3
2.1	Stefnuháð líkan	3
2.2	Monte-Carlo reiknirit	3
2.3	Reiknirit fyrir samhliða vinnslu	4
2.4	Fasaskipti og þekktar niðurstöður	4
3	Útfærsla	6
3.1	Uppbygging forrita	6
3.2	Röðun grindar og yfirferð þráða	6
3.3	Vélbúnaður og samanburður reiknitíma	8
4	Niðurstöður úr tvívíðu líkani	9
4.1	Meðalgildi og dreifni stærða	9
4.2	Staða grindar	10
5	Niðurstöður úr þrívíðu líkani	14
5.1	Meðalgildi og dreifni stærða	14
5.2	Staða grindar	15
6	Lokaorð	27
7	Heimildir	28

Myndaskrá

1	Skýringarmynd af sérstöðupunkti	10
2	Tvívíð grind við $B = 0$	11
3	Tvívíð grind við $B = 0.2$	12
4	Staða tvívíðrar grindar við $B = 0$	13
5	Þrívíð grind við $Q_z = 1$	16
6	Þrívíð grind við $Q_z = 0.5$	17
7	Þrívíð grind við $Q_z = 0$	18
8	Þrívíð grind við $Q_z = -0.5$	19
9	Þrívíð grind við $Q_z = -0.5$, stækkuð	20
10	Þrívíð grind við $Q_z = -1$	21
11	Staða þrívíðrar grindar við $Q_y = 0.5$ og $Q_z = 1$	22
12	Staða þrívíðrar grindar við $Q_y = -0.5$ og $Q_z = 1$	23
13	Staða þrívíðrar grindar við $Q_y = -0.5$ og $Q_z = 1$, stækkuð	24
14	Staða þrívíðrar grindar við $Q_y = 0.5$ og $Q_z = -1$	25
15	Staða þrívíðrar grindar við $Q_y = -0.5$ og $Q_z = -1$	26

1 Inngangur

Ising-líkanið er líkan í safneðlisfræði, sem notað er til þess að lýsa járnseglandi efnum. Í einföldu máli lýsir líkanið spunum á grind og getur hver spuni snúið upp eða niður. Sérhver spuni víxlverkar jafnframt við næstu nágranna á grind og við ytra segulsvið. Í líkaninu geta komið fram fasabreytingar milli járnseglandi fasa, þar sem mikill meirihluti spuna vísar í sömu stefnu, og óseglandi fasa, þar sem stefur spuna eru handahósfkenndar.

Wilhelm Lenz er höfundur líkansins, hann lét nemanda sínum Ernst Ising eftir að fjalla um líkanið í doktorsritgerð sinni. Ising gaf nákvæma lausn á líkaninu í einni vídd en þar kemur ekki fram nein fasabreyting. Lars Onsager gaf nákvæma lausn á tvívíðu Ising-líkani og þar kemur fram áður nefnd fasabreyting. Nákvæm lausn í hærri víddum hefur ekki fundist.

Í þessu verkefni verður leitast við að nota Monte-Carlo reiknirit til þess að lýsa líkaninu með tölulegum reikningum. Monte-Carlo reiknirit nota slembitölur á einn eða annan hátt til þess að fá tölulega niðurstöðu í reikningum þar sem erfitt er að leiða út nákvæma lausn. Eðli þessara reikninga er slíkt að þeir krefjast mikillar reiknigetú miðað við minnisnotkun. Skjákort eru því tilvalinn vélbúnaður til slíkra reikninga, þar sem þau bjóða upp á hraða samhliða vinnslu en hafa nokkuð takmarkað minni, miðað við vinnslu á hefðbundnari vélbúnaði.

Reikningar í verkefninu eru útfærðir í CUDA C, forritunarumhverfi úr smiðju Nvidia. Leitast er við að gera sem stærstan hluta reikninganna samhliða þannig að hinn mikli fjöldi reiknieininga á skjákortinu nýtist sem best.

2 Líkan

Ising-líkanið lýsir spunum á grind. Hér verður aðeins fjallað um einfalda teningsgrind í tvemur og þremur víddum, þar sem hver spuni s_i getur tekið gildin ± 1 . Hamilton-virki þessa kerfisins er

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - \sum_i B_i s_i, \quad (1)$$

þar sem $\langle i, j \rangle$ táknar summu yfir næstu nágranna, hvert par er talið einu sinni. J_{ij} er víxlunarorka spuna i og j , B_i er ytra segulsvið við spuna i . Við takmörkum okkur nú við það tilfelli að grindin sé einsleit, það er að J_{ij} sé eins fyrir öll i (en þó hugsanlega ólík fyrir mismunandi j , það er fyrir mismunandi stefnur) og að B_i sé eins fyrir öll i . Þá einfaldast H í

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_j s_i s_j - B \sum_i s_i. \quad (2)$$

2.1 Stefnuháð líkan

Skoðum tvívíða grind, tilgreinum sérhvern spuna á grindinni með (x, y) hnit, s_{xy} . Takmörkum okkur við tilfellið þar sem J_j hefur mismunandi gildi fyrir víxlverkun í x og y stefnu, J_x og J_y . Hamilton-virki staks spuna s_{xy} er

$$H_{xy} = -\frac{1}{2} s_{xy} [J_x (s_{x-1,y} + s_{x+1,y}) + J_y (s_{x,y-1} + s_{x,y+1})] - B s_{xy}, \quad (3)$$

þar sem $1/2$ bætist við þannig að þör séu ekki tvítalin í heildar Hamilton-virkja kerfis.

Umritum nú H í einingum J_x og skilgreinum víxlunarstuðul $Q = J_y/J_x$. Ritum B jafnframt í einingum J_x . Þá einfaldast H_{xy} í

$$H_{xy} = -\frac{1}{2} s_{xy} [s_{x-1,y} + s_{x+1,y} + Q (s_{x,y-1} + s_{x,y+1}) + 2B]. \quad (4)$$

Skoðum jafnframt samskonar þrívítt kerfi, með mismunandi víxlverkun í x , y og z -stefnu. Tilgreinum sérhvern spuna með (x, y, z) hnit og notum tvo mismunandi víxlunarstuðla í y og z stefnu, Q_y og Q_z . Hamilton-virki staks spuna s_{xyz} er

$$H_{xyz} = -\frac{1}{2} s_{xyz} [s_{x-1,yz} + s_{x+1,yz} + Q_y (s_{x,y-1,z} + s_{x,y+1,z}) + Q_z (s_{xy,z-1} + s_{xy,z+1}) + 2B]. \quad (5)$$

Heildar Hamilton-virki kerfisins í báðum tilfellum er því, í einingum J_x ,

$$H = \sum_{x,y,(z)} H_{xy(z)}. \quad (6)$$

2.2 Monte-Carlo reiknirit

Reikniritið sem hér er notað til að fá tölulegar niðurstöður byggir á Metropolis Monte-Carlo reikniritinu, sem má í grófum dráttum lýsa á eftirfarandi máta:

1. Búin er til endanlega stór grind með N spunum, öllum í fyrirfram ákveðna stefnu.
2. Spuni í grindinni er valinn af handahófi.
3. Reiknuð er orkubreyting ΔE við að snúa spunanum.

4. Ef $\Delta E < 0$ þá er spunanum snúið við.
5. Ef $\Delta E > 0$ þá er spunanum snúið við með líkum $p = e^{-\Delta E/T}$. Þetta er úfært með því að búa til slembitölu $r \in [0, 1]$ og snúa spunanum ef $r < p$. T er í einingu J_x , eins og aðrir stikar.
6. Skref 2 til 5 eru ítruð í fyrirfram ákveðið mörg skipti n .

Haldið er utan um heildarorku grindar E og heildarseglun grindar M í hverri umferð. Framkvæmdur er einhver fjöldi ítrana, n_{bal} , til að láta grindina ná jafnvægisástandi. Þegar grindin er komin í jafnvægi er haldið utan um meðalgildi orku og seglunar (E_{mean} og M_{mean}) ásamt dreifni þeirra stærða (E_{var} og M_{var}). Þær stærðir eru yfirleitt settar fram sem meðalgildi eða dreifni á spuna (t.d. sem E_{mean}/N).

Lotubundin jaðarskilyrði eru notuð, þ.e.a.s. að næstu grannar spuna á jaðri grindarinnar eru tilsvarendi spunar á gagnstæðum jaðri.

Metropolis reikniritið hefur einn stóran ókost, það er engin augljós leið til að flýta fyrir reikningum með samhliða vinnslu. Það er því óhentugt til að ná miklum fjölda ítrana á sömu grind á skynsamlegum tíma.

2.3 Reiknirit fyrir samhliða vinnslu

Gerum breytingu á Metropolis reikniritinu þannig að það bjóði upp á samhliða reikninga. Skiptum grindinni í svarta og hvíta reiti, þannig að allir hvítir reitir séu umkringdir svörtum og öfugt. Í tvívídd er grindin því lituð eins og skáborð. Með þessu móti eru allir næstu nágrannar svartra reita hvítir, og öfugt. Notum síðan eftirfarandi reiknirit:

1. Fyrsti hvíti spuni valinn og skref 3 til 5 úr Metropolis reikniritinu framkvæmd fyrir þann spuna. Þetta er síðan gert koll af kolli fyrir alla hvíta spuna.
2. Skref 1 endurtekin fyrir alla svarta spuna á grindinni.
3. Skref 1 og 2 eru ítruð í fyrirfram ákveðið mörg skipti

Hér er hægt að flýta umtalsvert fyrir reikningum með samhliðavinnslu. Þar sem hvítir spunar eru aðeins háðir stöðu svartra spuna geta margir mismunandi þræðir uppfært marga hvíta spuna samtímis án þess að breyta umhverfi annarra hvíta spuna. Þannig eru mögulegt, ef nógu margar reiknieiningar eru fyrir hendi, að uppfæra alla hvíta spuna á grindinni samtímis og síðan uppfæra alla svarta spuna samtímis.

2.4 Fasaskipti og þekktar niðurstöður

Niðurstöður reikninga verða bornar saman við þekkt gildi, bæði nákvæmu lausn Onsager og þekkt gildi úr Metropolis reikningum.

Skilgreinum eftirfarandi fasa spuna á grindinni:

- Járnseglandi fasi: Nær allir spunar snúa í sömu stefnu, $M_{\text{mean}} \simeq 1$.
- Óseglandi fasi: Spunar hafa handahófskennd gildi og hafa enga sérstaka röðun, $M_{\text{mean}} \simeq 0$

- Andseglandi fasa: Spunar hafa greinilega röðun en $M_{\text{mean}} \simeq 0$. Spunar (eða raðir/sléttur spuna) í andseglandi fasa raða sér þannig að spunar eru til skiptis upp og niður. Röðun spunanna getur breyst mjög ört og einkennist þessi fasi af háum gildum á dreifni orku.

Stikarnir T , Q og B skilgreina þann fasa sem spunar á grind eru í, við ákveðin gildi stikanna verður fasabreyting úr einum fasa í annan. Curie-hitastig T_c er skilgreint sem það gildi T þar sem fasabreyting verður úr járnseglandi í óseglandi fasa, við fast gildi B og Q .

Eftirfarandi Curie-hitastig eru þekkt fyrir $B = 0$ og $Q = 1$ eða $Q_y = Q_z = 1$:

- Í einni vídd er engin fasabreyting úr járnseglandi fasa í óseglandi fyrir $T > 0$. [1]
- Í tvemur víddum gefur nákvæm lausn Onsager gildið [2]

$$T_{c,2D} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \simeq 2.269 \quad (7)$$

- Í þremur víddum hafa Metropolis Monte-Carlo reikningar gefið matið [3]

$$T_{c,3D} \simeq 4.511 \quad (8)$$

3 Útfærsla

Hér verður stuttlega gert grein fyrir tæknilegri útfærslu á reikningu, með því reikniriti sem kynnt var í kafla 2.3, ásamt samanburði á reiknitíma milli samhliðareikninga á skjákorti og raðreikninga á örgjörva. Forritin eru öll skrifuð í CUDA C og gerir þessi umfjöllun því ráð fyrir því númerakerfi sem C notar, að byrja talningu á 0.

3.1 Uppbygging forrita

Fjögur forrit voru notuð í verkefninu, tvö meðalgildisforrit og tvö stöðuforrit, eitt fyrir hvora vídd grindar.

Tvívíða meðalgildisforritið tekur inn hámarks og lágmarksgildi B , T og Q ásamt skrefstærð fyrir þá stika, þessi gildi skilgreina eitthvað ákveðið (B, T, Q) rúm. Fyrir sérhver hnit í (B, T, Q) rúminu býr það til nýja grind, framkvæmir n ítranir á Monte-Carlo reikniritinu og skrifar síðan meðalgildi og dreifni orku og seglunar í gagnaskrá.

Þrívíða meðalgildisforritið virkar eins, nema að það hefur fjórvítt stikarúm, (B, T, Q_y, Q_z) .

Stöðuforritin eru að mestu leiti eins og meðalgildisforritin, nema þau skoða aðeins einn ákveðinn punkti í stikarúminu. Eftir að ítrunum er lokið, eru engin meðalgildi skrifuð í gagnaskrá, heldur staða spuna á grindinni eftir síðustu ítrun. Þessi forrit eru því hugsuð til að gefa notanda mynd af því í hvaða fasa spunar grindarinnar eru, í einhverjum punkti í stikarúminu.

3.2 Röðun grindar og yfirferð þráða

Forritin fjögur byggja öll á sama grunni:

1. Grindin er búin til
2. Ítrað er yfir grindina og hver þráður heldur utan um þær breytingar sem hann gerir
3. Breyting allra þráða er lögð saman og notuð til að reikna meðalgildi og dreifni
4. Skref 2 og 3 endurtekin þar til að réttum fjölda ítrana er náð

Til að útskýra betur hvernig grindinni er skipti milli þráða, skulum við taka sem dæmi tvívíða ferningslaga grind með hliðarlengdir `grid_dim_x`, heildarfjölda spuna `grid_size` og fjölda þráða sem sjá um reikninga `tread_num`.

Grindin er geymd sem einvíður vigur með lengd `grid_size`. Mikilvægt er að velja heppilega vörpun milli tvívíðra hnita (x, y) á grindinni og einvíðu hniti i í vigrinum. Einfaldast væri að láta

$$i = x + y \cdot \text{grid_dim_x} \tag{9}$$

sem gefur eftirfarandi röðun (númer innan reits táknar hvaða gildi i svarar til þess reits):

0	1	2	3
4	5	6	7
8	9	10	11
12	13	14	15

Þetta er hinsvegar óheppilegt í ljósi þess að við viljum skipta grindinni á einfaldan máta í svarta og hvíta reiti, sbr. kafla 2.3. Heppilegra er að nota röðun þar sem að önnur hver lína er númeruð í öfugri röð:

0	1	2	3
7	6	5	4
8	9	10	11
15	14	13	12

Með þessari röðun gildir um alla hvíta reiti að $i \bmod 2 = 0$ og alla svarta reiti að $i \bmod 2 = 1$.

Eftir að þessi röðun grindar hefur valið, liggur beinast við að skipta reitum milli þráða á eftirfarandi hátt:

- Yfirferð hvítra reita:
 - Þráður 0 ítrar reiti:
 - $i = 0$
 - $i = 2 \cdot \text{thread_num}$
 - $i = 4 \cdot \text{thread_num}$
 - ...
 - Þráður 1 ítrar reiti:
 - $i = 2$
 - $i = 2 + 2 \cdot \text{thread_num}$
 - $i = 2 + 4 \cdot \text{thread_num}$
 - ...
 - Þráður k ítrar reiti:
 - $i = 2 \cdot k$
 - $i = 2 \cdot k + 2 \cdot \text{thread_num}$
 - $i = 2 \cdot k + 4 \cdot \text{thread_num}$
 - ...
- Yfirferð svartra reita:
 - Þráður 0 ítrar reiti:
 - $i = 1$
 - $i = 1 + 2 \cdot \text{thread_num}$
 - $i = 1 + 4 \cdot \text{thread_num}$
 - ...
 - Þráður 1 ítrar reiti:
 - $i = 1 + 2$
 - $i = 1 + 2 + 2 \cdot \text{thread_num}$
 - $i = 1 + 2 + 4 \cdot \text{thread_num}$
 - ...
 - Þráður k ítrar reiti:

- $i = 1 + 2 \cdot k$
- $i = 1 + 2 \cdot k + 2 \cdot \text{thread_num}$
- $i = 1 + 2 \cdot k + 4 \cdot \text{thread_num}$
- ...

Hér sjást kostir þess númerakerfis sem er notað fyrir grindina, val á þeim reitum sem hver þráður ítrar verður mjög einfalt.

Þetta númerakerfi má síðan framlengja á þrívíða grind. Litið er á grindina sem stafla tvívíðra grinda, hver þeirra fylgir áður greindu númerakerfi, en númering annarrar hvernar grindar byrjar á öfugum enda hennar. Þannig eru neðstu tvö lögin í þrívíðri grind

0	1	2	3	31	30	29	28
7	6	5	4	24	25	26	27
8	9	10	11	23	22	21	20
15	14	13	12	16	17	18	19

3.3 Vélbúnaður og samanburður reiknitíma

Reikningar voru framkvæmdir á einu Nvidia Tesla M2090 skjákorti. Kortið hefur 6GB minni og 512 reiknieiningar með klukkutíðni 1.3 GHz. Við reikninga voru aðeins um 2% minnisins nýtt, en nálægt 100% reiknigetu korsins.

Til að fá samanburð við reikninga á örgjörva (CPU) var tvívíða meðalgildsforritið umritað í útgáfu sem ekki keyrði á skjákorti (GPU). Samhliðavinnslu var því í öllum tilfellum skipt út fyrir `for`-lykkju og teljari hennar kom í stað númera þráða. Við þessa reikninga var notaður Intel Xeon E5-2648L örgjörvi með klukkutíðni 1.8 GHz.

GPU útgáfan uppfærði um $1.8494 \cdot 10^8$ spuna á sekúndu, CPU útgáfan uppfærði um $5.3 \cdot 10^6$ spuna á sekúndu. GPU útgáfan var því um 35 sinnum hraðari en CPU útgáfa án samhliðavinnslu.

Heildar reiknitími í verkefninu á skjákorti voru um 8 sólarhringar og skiptist um það bil jafnt milli tvívíðs og þrívíðs líkans. Ef sömu reikningar hefðu verið framkvæmdir án samhliðavinnslu hefðu reikningar því tekið rúmlega 9 mánuði.

4 Niðurstöður úr tvívíðu líkani

Reikningar á tvívíðu líkani voru framkvæmdir með grind af stærð 1024×1024 . Hver spuni var ítraður 500 sinnum, fyrstu 100 ítranir voru notaðar til að láta kerfið ná jafnvægi og næstu 400 til að telja saman meðalgildi og dreifni.

Kerfið var skoðað með eftirfarandi gildi stikanna B , Q og T :

- $B \in [0, 1]$ með skrefstærð 0.1
- $Q \in [-1, 1]$ með skrefstærð 0.025
- $T \in [0.5, 5]$ með skrefstærð 0.05

Þessi gildi stikanna skilgreina nokkuð stórt stikarúm. Ef ekki væri fyrir þá styttingu reiknitíma sem skjákort bjóða upp á væri ekki hægt að vinna með svo stórt rúm, enda er venjan í Monte-Carlo reikningum á Ising líkani að halda sig við föst gildi allra stika annarra en T .

4.1 Meðalgildi og dreifni stærða

Hugum fyrst að engu segulsviði, $B = 0$. Á mynd 2 sjást meðalgildi og dreifni orku og seglunar, sem fall af Q og T við $B = 0$.

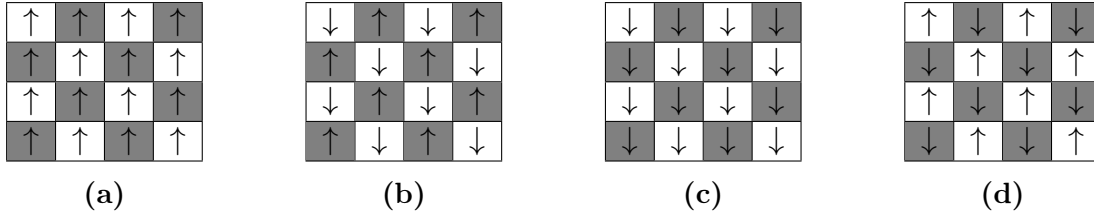
Af mynd 2b er ljóst hvar spunarnir eru í járnseglandi fasa. Járnseglandi fasi er einungis til staðar fyrir gildi $Q > 0$, eins og við er að búast. Af myndum 2c og 2d má lesa hvar skilin milli járnseglandi og óseglandi fasa eiga sér stað, en þau einkennast af mikill dreifni í orku og seglun. Við $Q = 1$ eru skilin milli járnseglandi og andseglandi fasa við Curie-hitastigið $T_c \simeq 2.3$, sem ber ágætlega saman við nákvæmt gildi úr reikningum Onsager.

Af myndum 2c og 2d má jafnframt sjá hvar spunarnir eru í andseglandi fasa, sem gerist eingöngu við $Q < 0$. Í andseglandi fasa liggja raðir spuna á grindinni til skiptis upp og niður, og lítið þarf til að koma heilli röð til að snúast við. Þetta veldur mikilli dreifni í orku, sem greinilega sést á áfmörkuðu svæði við $Q < 0$.

Við lág hitastig sést að mörk milli járnseglandi og andseglandi fasa eru við $Q \simeq 0$.

Á myndum 2c og 2d sést að við $Q = -1$ kemur fram mjög mikil dreifni í orku og seglun, óháð hitastigi. Þessi sérstöðupunktur stafar af vankanti í gerð reikniritisins og á sér ekki eðlisfræðilegar skýringar.

Í því reikniriti sem er notað snúa allir spunar upp áður en ítranir hefjast. Ef $Q = -1$ og allir næstu nágrannar tiltekens spuna snúa í sömu stefnu, þá er $\Delta E = 0$ og spunanum því snúið með líkum 1 þegar hann er ítraður. Þegar hvítir reitir á grindinni eru ítraðir í fyrsta skipti snúa allir næstu nágrannar þeirra upp og því er öllum hvítum spunum snúið niður við fyrstu ítrun. Þegar svartir spunar eru ítraðir í fyrsta skipti snúa því allir næstu grannar þeirra niður og þeim er því öllum snúið niður. Þannig halda reikningarnir áfram og öllum spunum er snúið við í hverri umferð, sem veldur mjög mikilli dreifni í orku og seglun. Á mynd 1 má sjá skýringarmynd af þessu ferli.



Mynd 1: Gangur reiknirits við $Q = -1$; (a) Áður en ítranir hefjast snúa allir spunar upp, (b) eftir fyrstu ítrun hvítra spuna snúa þeir allir niður, (c) eftir fyrstu ítrun svartra spuna allir spunar grindar niður, (d) eftir aðra ítrún hvítra spuna snúa þeir allir upp.

Skodum nú kerfið við lágt segulsvið, $B = 0.2$. Tilsvarandi niðurstöður má sjá á mynd 3. Fyrir $Q > 0$ eru skilin milli járnseglandi og óseglandi fasa mun minna skörp heldur en áður var. Fyrir $Q < 0$ er andseglandi fasinn enn til staðar en er nú á minna svæði, enda leitast segulsviðið við að raða spununum öllum í sömu stefnu. Við lág hitastig hafa mörkin milli járnseglandi og andseglandi fasa færst neðar, enda þarf nú sterkari neikvæða víxlverkun til að geta brotið upp járnseglandi fasann.

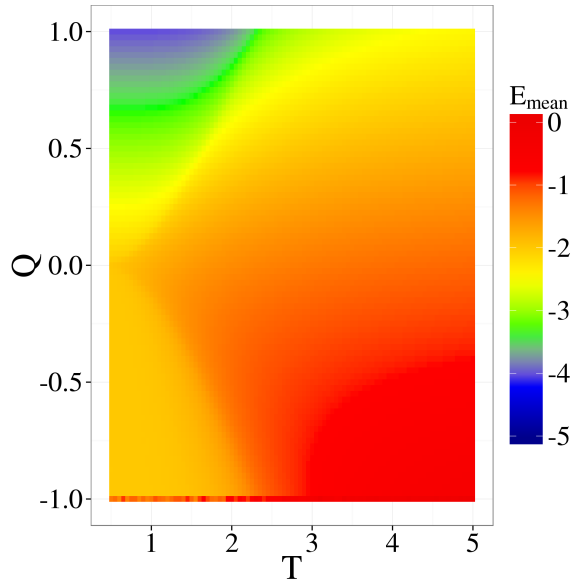
Sé segulsvið aukið frekar magnast þessi áhrif, en ekki koma fram neinir nýjir fasar eða önnur áhugaverð hrif. Því verða ekki birtar fleiri myndir fyrir meðalgildi og dreifni stærða í tvívídd.

4.2 Staða grindar

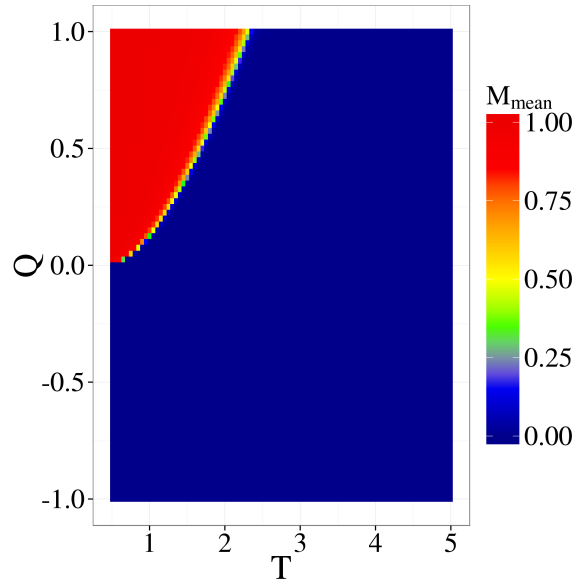
Fróðlegt getur verið að skoða stöðu grindar við einhver föst gildi (B, Q, T) til þess að átta sig betur á því í hvaða fasa kerfið er. Einfaldast er að skoða kerfið við $B = 0$, þar sem að þær niðurstöður gefa mynd af öllu mismunandi fösum sem gætu komið fram við hærri segulsvið.

Á mynd 4 má sjá stöðu grindarinnar við 16 mismunandi gildi á (Q, T) . Valin voru gildi $T \in [1, 1.7, 2.3, 4]$ og $Q \in [-1, -0.5, 0.5, 1]$ til að sýna stöðu grindarinnar við sem flesta fasa og fasaskil. Svæði af stærð 250×250 er birt, ef öll grindin er birt væri ómögulegt að greina milli einstakra spuna í grindinni.

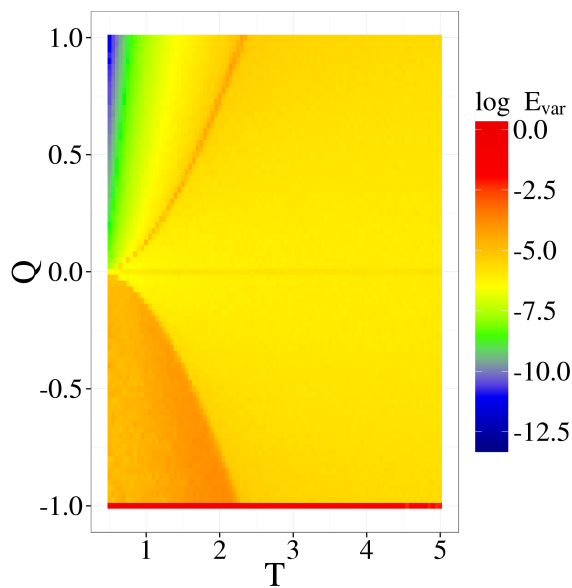
Á myndinni er auðvelt að sjá járnseglandi, andseglandi og óseglandi fasa. Á fasaskilum við óseglandi fasa skiptist grindin í svæði sem sum eru í óseglandi fasa og sum ekki. Ör tilfærsla þessara svæða veldur þeirri miklu dreifni í orku og seglun sem einkennir fasaskilin.



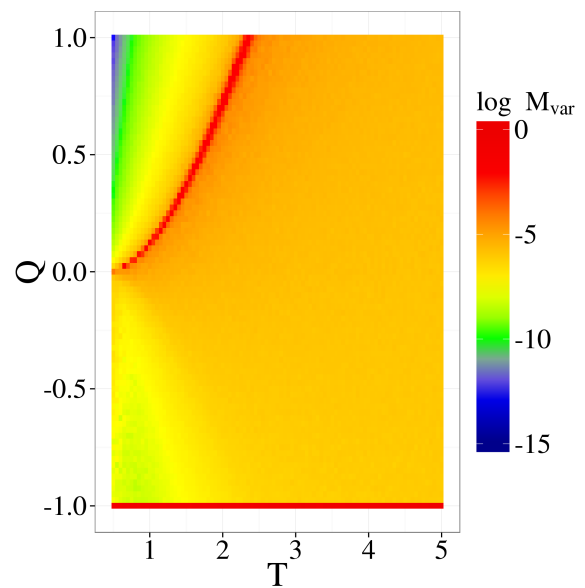
(a) Meðalgildi orku



(b) Meðalgildi seglunar

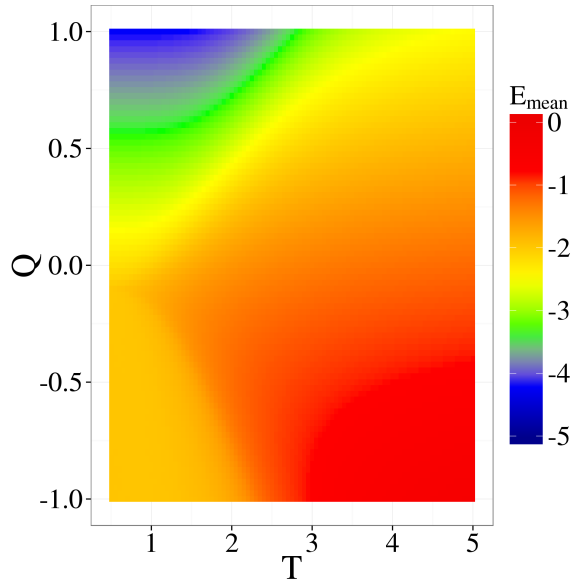


(c) Logri af dreifni orku

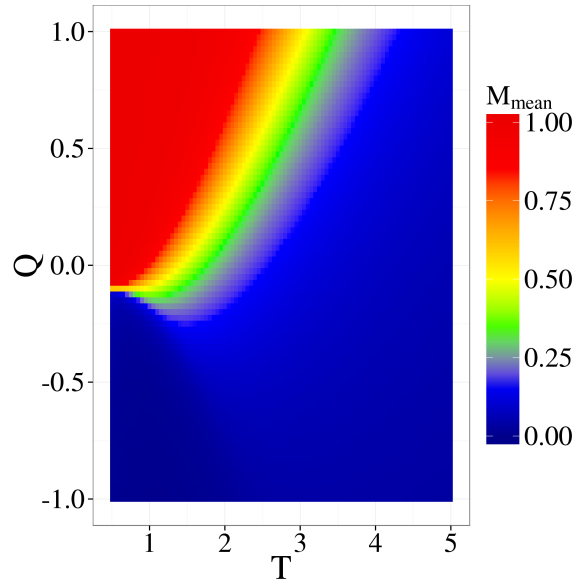


(d) Logri af dreifni seglunar

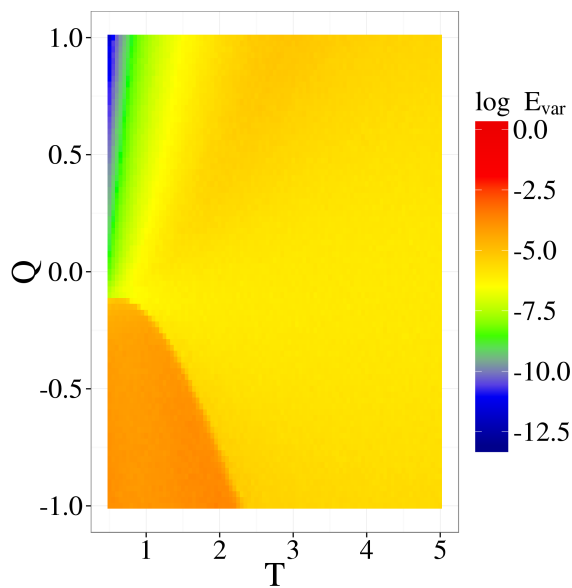
Mynd 2: Meðalgildi og dreifni orku og seglunar í tvívíðu, við segulsvið $B = 0$, sem fall af hitastigi T og víxlunarstuðli Q .



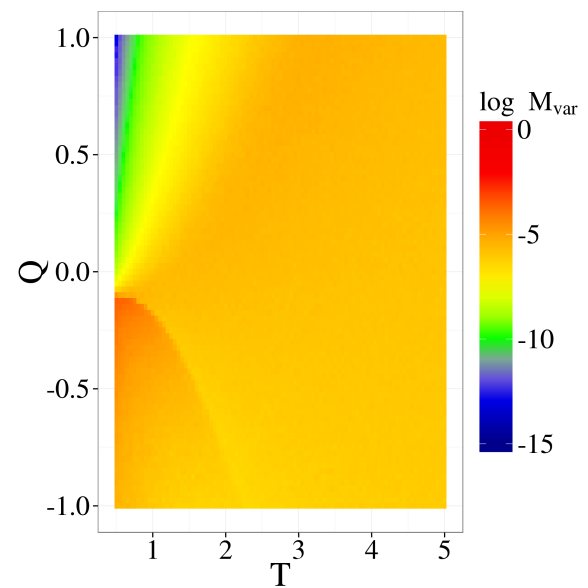
(a) Meðalgildi orku



(b) Meðalgildi seglunar

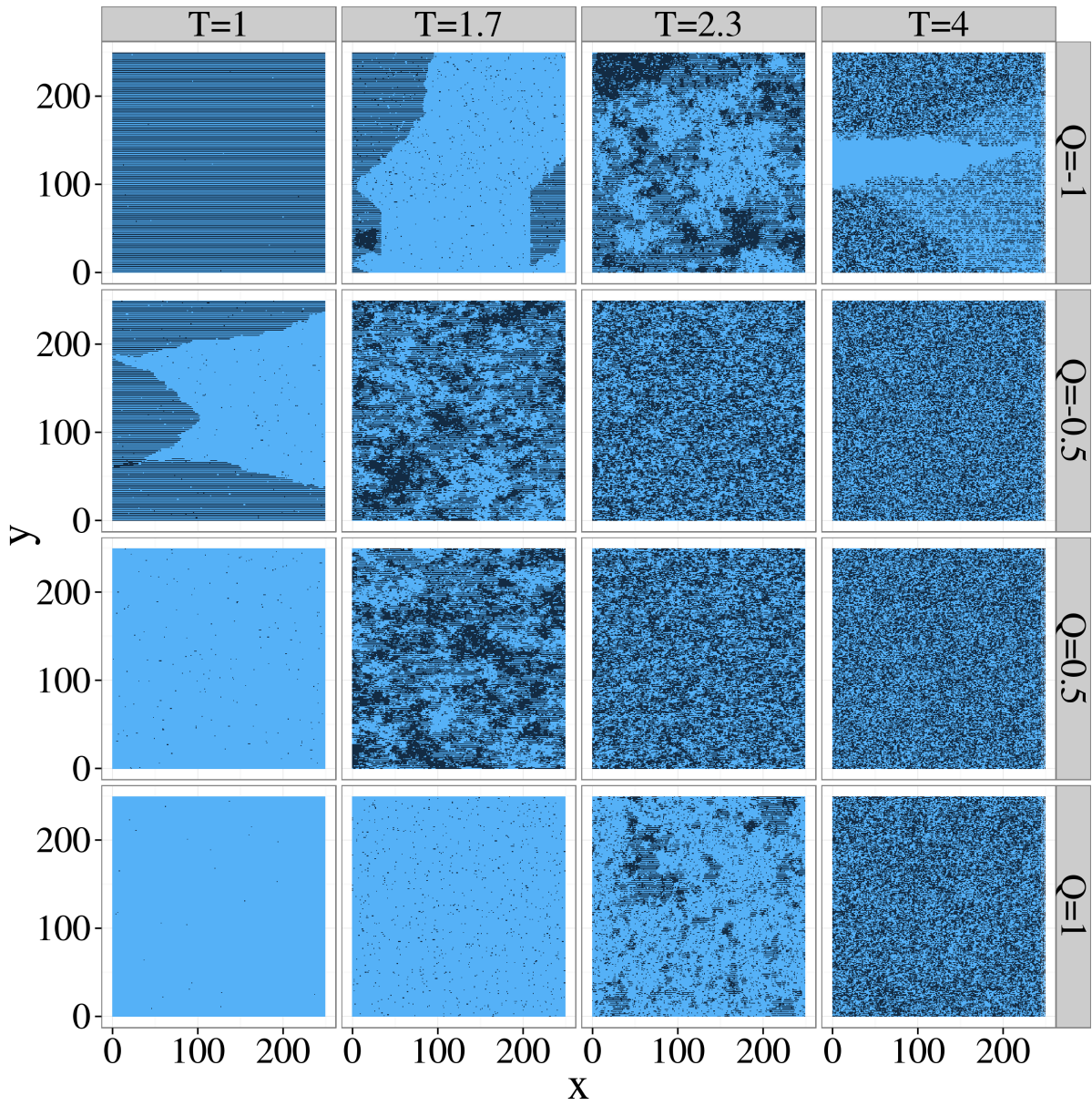


(c) Logri af dreifni orku



(d) Logri af dreifni seglunar

Mynd 3: Meðalgildi og dreifni orku og seglunar í tvívíðu líkani, við segulsvið $B = 0.2$, sem fall af hitastigi T og víxlunarstuðli Q .



Mynd 4: Staða tvívíðrar grindar við $B = 0$ og 16 mismunandi gildi (Q, T)

5 Niðurstöður úr þrívíðu líkani

Reikningar á þrívíðu líkandi voru framkvæmdir með grind af stærð $128 \times 128 \times 128$. Hver spuni var ítraður 250 sinnum, fyrstu 50 ítranir voru notaðar til að láta kerfið ná jafnvægi og næstu 200 til að telja saman meðalgildi og dreifni.

Kerfið var skoðað með eftirfarandi gildi stikanna B , Q_y , Q_z og T :

- $B = 0$ í öllum tilfellum
- $Q_y \in [-1, 1]$ með skrefstærð 0.05
- $Q_z \in [-1, 1]$ með skrefstærð 0.05
- $T \in [0.5, 7]$ með skrefstærð 0.1

Allir reikningar í þrívíðu líkani voru gerðir við segulvið $B = 0$ vegna takmarkað reiknitíma, frekar var leitast við að ná lítilli skrefstærð í hinum stikum líkansins.

5.1 Meðalgildi og dreifni stærða

Hugum fyrst að kerfi með eins víxlverkun í x og z -stefnu, $Q_z = 1$. Á mynd 5 sjást meðalgildi og dreifni orku og seglunar, sem fall af T og Q_y við $Q_z = 1$.

Af mynd 5b er ljós hvar spunarnir eru í járnseglandi fasa. Við $Q_y = Q_z = 1$ er Curie-hitastigið $T_c \simeq 4.5$, sem er í samræmi við þekktar niðurstöður. Athugum jafnframt að ef $Q_y = 0$ og $Q_z = 1$ er þrívíða grindin í raun stafli af óvíxlverkandi tvívíðum grindum, svo Curie-hitastig þess kerfis ætti að vera hið sama og í tvívíðu kerfi. Á mynd 5b sést að það er raunin, við $Q_y = 0$ og $Q_z = 1$ er Curie-hitastigið $T_c \simeq 2.3$.

Af myndum 5c og 5d má jafnframt sjá hvar spunarnir eru í andseglandi fasa, það gerist eingöngu við $Q_y < 0$. Eins og í tvívíðu líkani einkennist það svæði af mikilli dreifni í orku og seglun.

Skoðum nú kerfið með veikari víxlverkun í z -stefnu, $Q_z = 0.5$. Á mynd 6 sjást meðalgildi og dreifni orku og seglunar, við fall af T og Q_y við $Q_z = 0.5$.

Ástand kerfisins svipar mjög til þess að $Q_z = 1$, nema að öll fasaskil gerast við lægri hita, enda þarf nú minni orku til að yfirvinna víxlverkun spunanna og koma þeim í óseglandi fasa.

Skoðum næst kerfið með enga víxlverkun í z -stefnu, $Q_z = 0$. Á mynd 7 sjást meðalgildi og dreifni orku og seglunar, sem fall af T og Q_y við $Q_z = 0$. Kerfið er í raun lög af óvíxlverkandi tvívíðum kerfum og því ættu meðalgildi og dreifni orku og seglunar að vera eins og í tvívíðu líkani. Það má sjá að svo sé, með samanburði á mynd 2 (tvívítt) og mynd 7 (þrívítt).

Skoðum að lokum kerfið með neikvæða víxlverkun í z -stefnu, $Q_z = -0.5$. Á mynd 7 sjást sömu stærðir, sem fall af T og Q_y við $Q_z = -0.5$.

Af mynd 7b sést að járnseglandi fasi er enn til staðar fyrir lág T og há Q_y . Af myndum 5c og 5d má jafnframt sjá hvar spunarnir eru í andseglandi fasa. Andseglandi fasinn er nú til staðar fyrir öll gildi Q_y og hvergi eru skil milli járnseglandi og óseglandi fasa, svo Curie-hitastig er hvergi skilgreint.

Við $Q_y = -0.5$ kemur fram sama sérstaða og sást í tvívíðu líkani við $Q = -1$. Í þrívíðu líkani kemur hún raunar fram þegar $Q_y + Q_z + 1 = 0$, það er þegar summa víxlunarstuðla í allar stefnur er 0. Til nánari athugunar á því hversu skarpur sérstöðupunkturinn er, var framkvæmd keyrsla á meðalgildisforriti með $Q_y \in [-0.501, -0.499]$, skrefstærð $2 \cdot 10^{-5}$

og $T \in [2.5, 3.5]$, skerfstærð 0.01 við $Q_z = -0.5$. Á mynd 9 má sjá niðurstöður þeirra reikninga, hún sýnir umrætt svæði stækkað upp og í mun betri upplausn. Þar sést að líkanið ræður vel við gildi mjög nærri sérstöðupunkti, þar sem að sérstaða kemur ekki fram við gildi $Q_y = -0.5 \pm 2 \cdot 10^{-5}$.

Við enn sterkari víxlverkun í z -stefnu, $Q_z = -1$ (mynd 10) er kerfið svipað, nema að öll fasaskil gerast við hærra hitastig (myndir 10c og 10d) og járnseglandi fasi er ekki lengur til staðar (mynd 10b), neikvæð víxlverkun í z -stefnu nú nógu stór til að koma í veg fyrir að sá fasi komi fyrir.

5.2 Staða grindar

Skoðum nú stöðu grindarinnar í þrívíðu líkani fyrir einhver föst gildi (B, Q_y, Q_z, T) , til að fá betri hugmynd um í hvaða fasa kerfið er og hvaða uppröðun spuna einkennir fasana. Líkt og áður skoðum við kerfið aðeins við $B = 0$.

Ólíkt því sem var í tvívíðu líkani, þá er erfitt að birta þrívíða grind í heilu lagi á blaði. Hér er því farin sú leið að birta þrjá þverskurði: í xy -plani við $z = 0$, í xz -plani við $y = 0$ og í yz -plani við $x = 0$.

Ljóst er að hér vær hægt að teikna ógrynni mynda, en hér verður reynt að halda skefjum á fjölda þeirra og birta tiltölulega fáar myndir sem sýna helstu fasa:

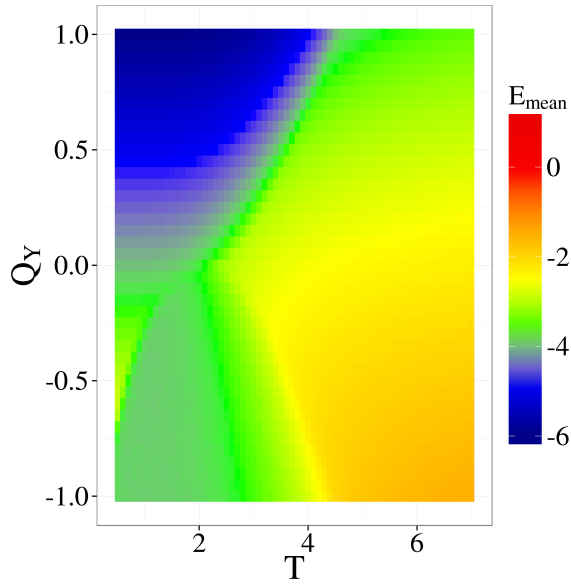
- Mynd 11: $Q_y = 0.5$ og $Q_z = 1$, við 3 mismunandi gildi T
- Mynd 12: $Q_y = -0.5$ og $Q_z = 1$, við 3 mismunandi gildi T
- Mynd 14: $Q_y = 0.5$ og $Q_z = -1$, við 3 mismunandi gildi T
- Mynd 15: $Q_y = -0.5$ og $Q_z = -1$, við 3 mismunandi gildi T

Í öllum tilfellum voru notuð gildin $T = 2$, $T = 3.5$ og $T = 5$.

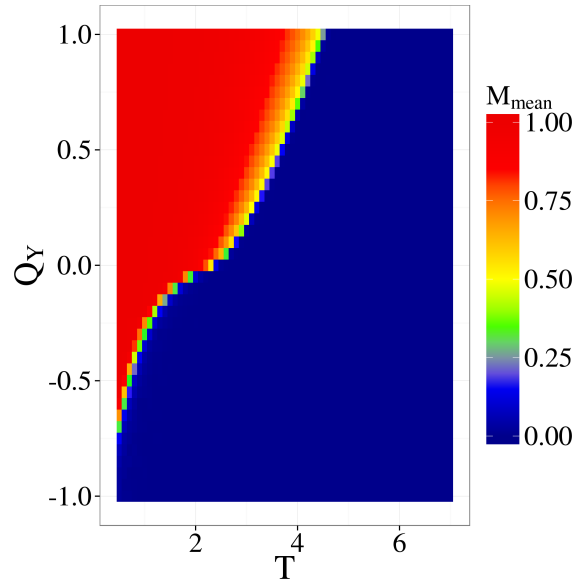
Af myndunum má sjá að við lág hitastig geta myndast *segulóðul* (e. *magnetic domains*), svæði sem spunar eru í tilteknum fasa og milli þeirra eru skörp skil. Aðliggjandi segulóðöl geta bæði verið í sama fasa (td. mynd 12, xz -plan við $T = 2$) eða í ólíkum fasa (td. mynd 14, yz -plan við $T = 2$).

Á mynd 13 má sjá stækkaða mynd af hluta þverskurða grindar við $Q_y = -0.5$ og $Q_z = 1$. Þar sést greinilega að einstakir spunar raðast upp og niður til skiptis, frekar en spunar myndi samstefna hópa sem síðan myndi skipulagða uppröðun.

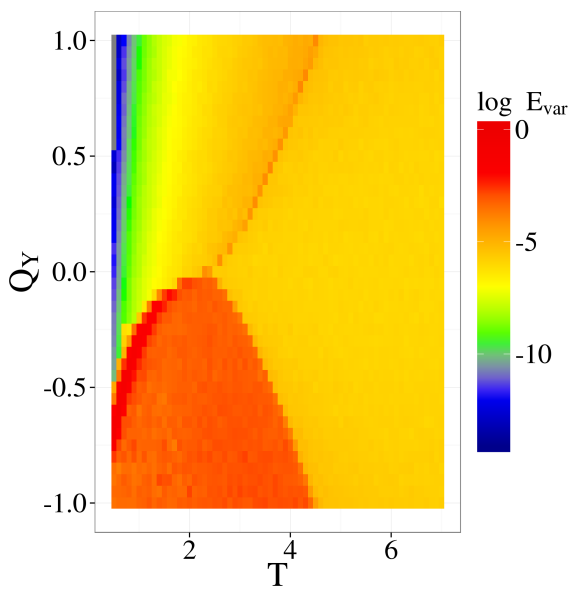
Við hærri hitastig má sjá óljósari skil milli segulóðala, sem hverfa við enn hærri hita.



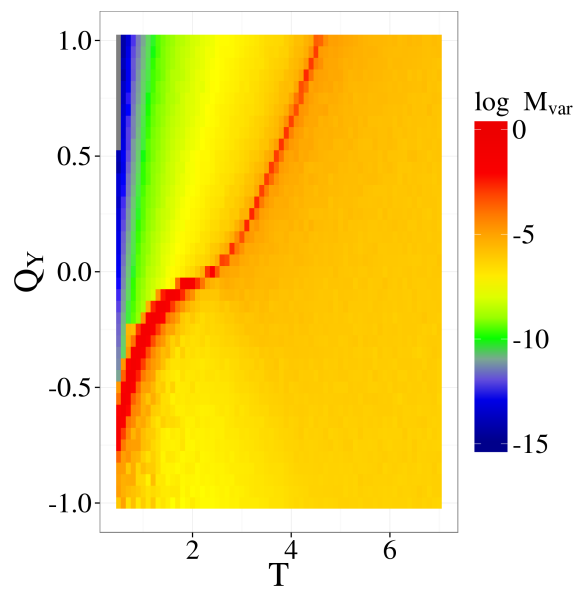
(a) Meðalgildi orku



(b) Meðalgildi seglunar

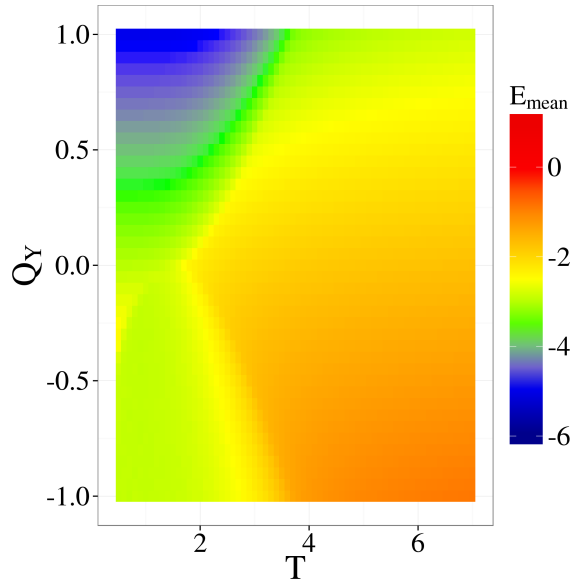


(c) Logri af dreifni orku

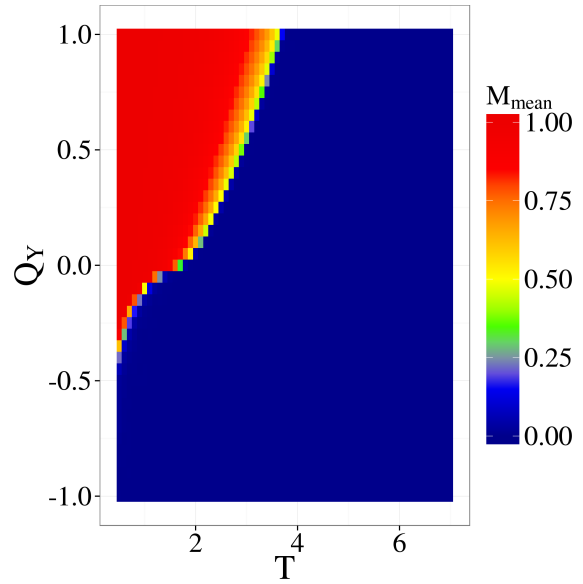


(d) Logri af dreifni orku

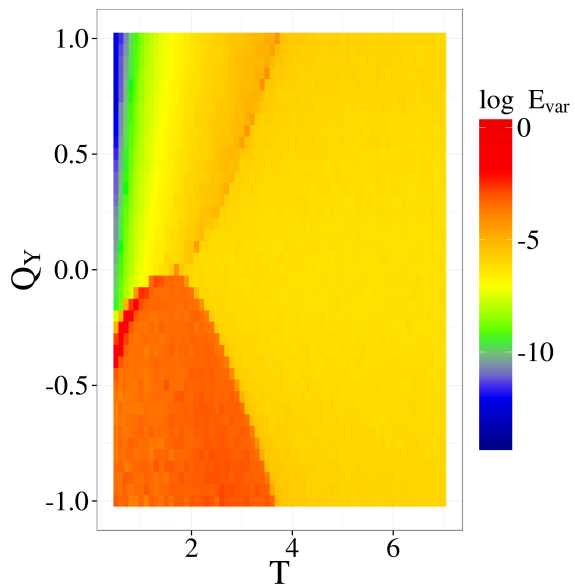
Mynd 5: Meðalgildi og dreifni orku og seglunar í þrívíðu líkani, við segulsvið $B = 0$ og víxlunarstuðul í z -stefnu $Q_z = 1$, sem fall af hitastigi T og víxlunarstuðli í y -stefnu Q_y .



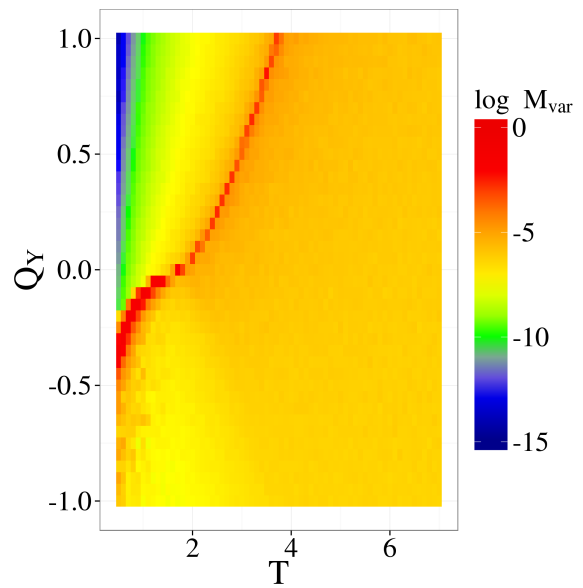
(a) Meðalgildi orku



(b) Meðalgildi seglunar

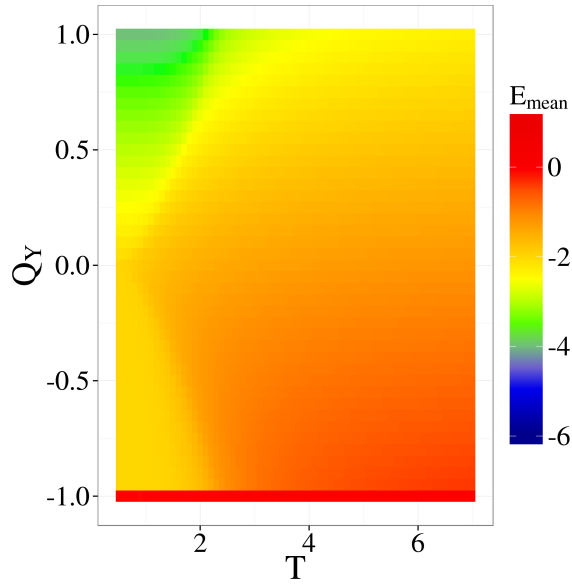


(c) Logri af dreifni orku

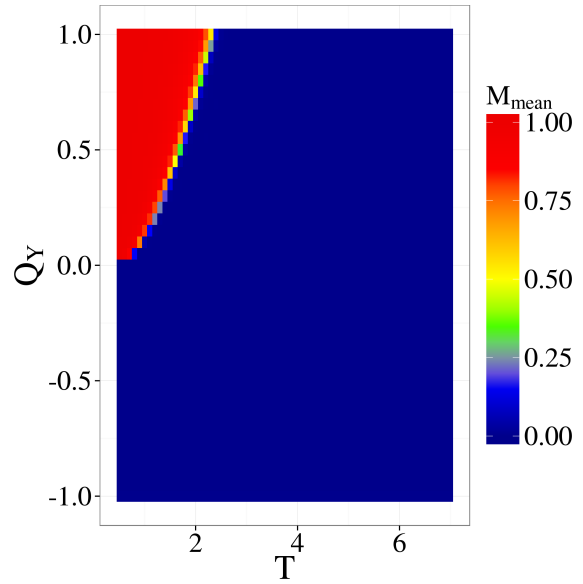


(d) Logri af dreifni orku

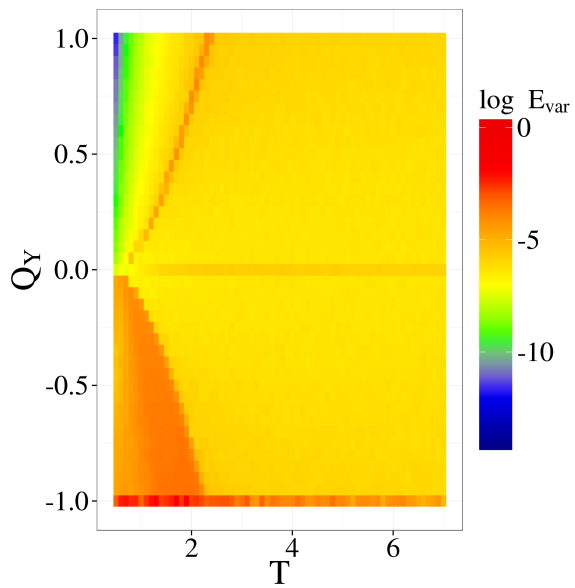
Mynd 6: Meðalgildi og dreifni orku og seglunar í þrívíðu líkani, við segulsvið $B = 0$ og víxlunarstuðul í z -stefnu $Q_z = 0.5$, sem fall af hitastigi T og víxlunarstuðli í y -stefnu Q_y .



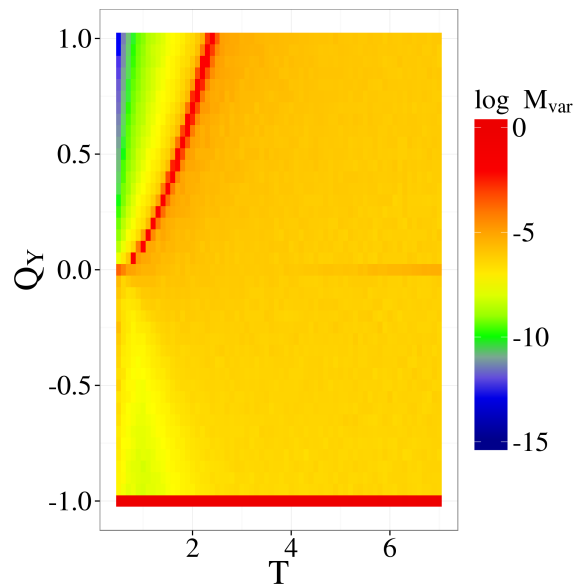
(a) Meðalgildi orku



(b) Meðalgildi seglunar

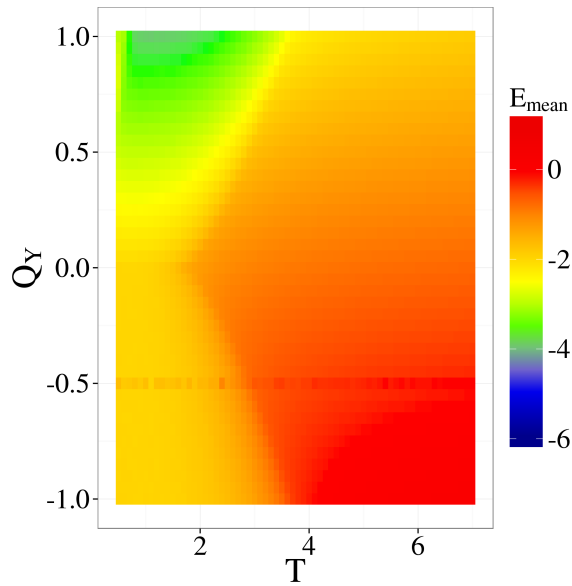


(c) Logri af dreifni orku

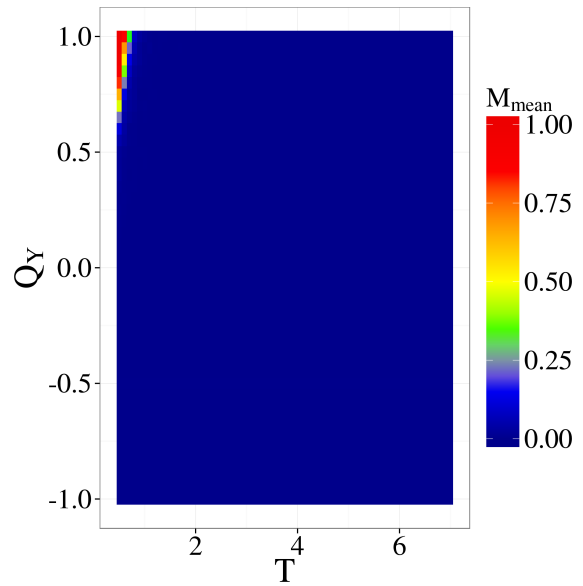


(d) Logri af dreifni orku

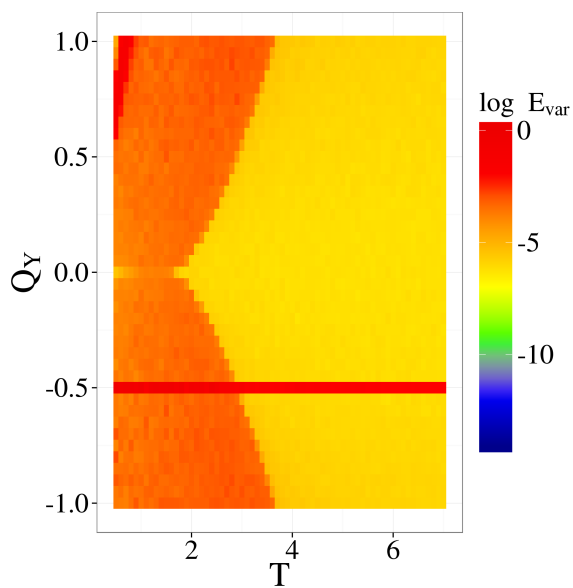
Mynd 7: Meðalgildi og dreifni orku og seglunar í þrívíðu líkani, við segulsvið $B = 0$ og víxlunarstuðul í z -stefnu $Q_z = 0$, sem fall af hitastigi T og víxlunarstuðli í y -stefnu Q_y .



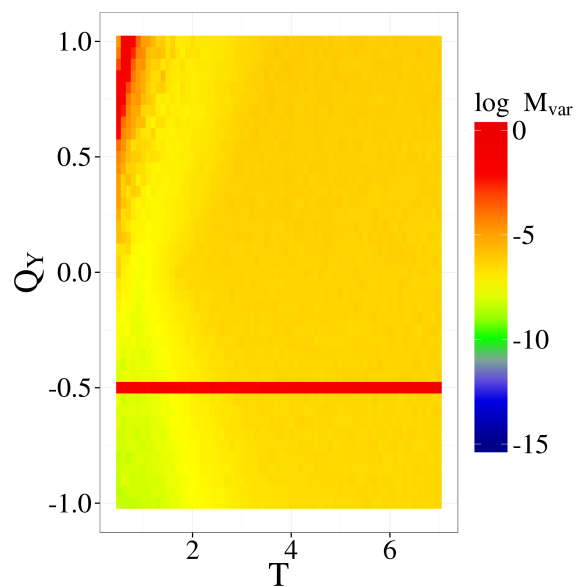
(a) Meðalgildi orku



(b) Meðalgildi seglunar

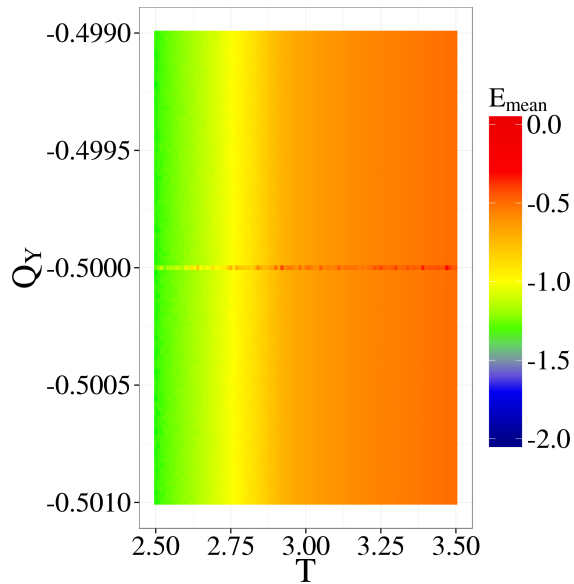


(c) Logri af dreifni orku

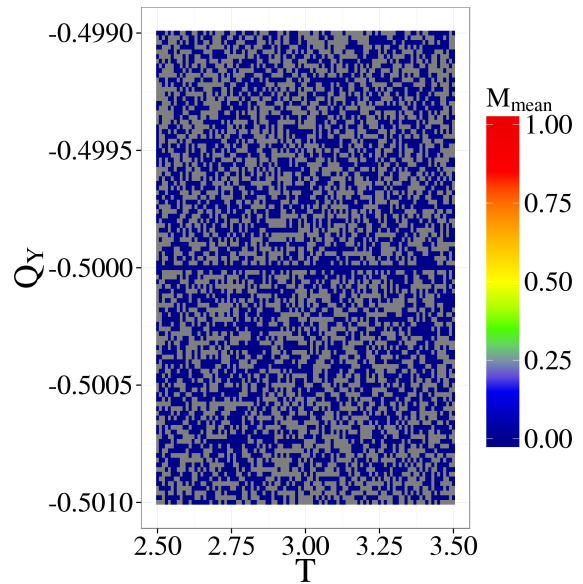


(d) Logri af dreifni orku

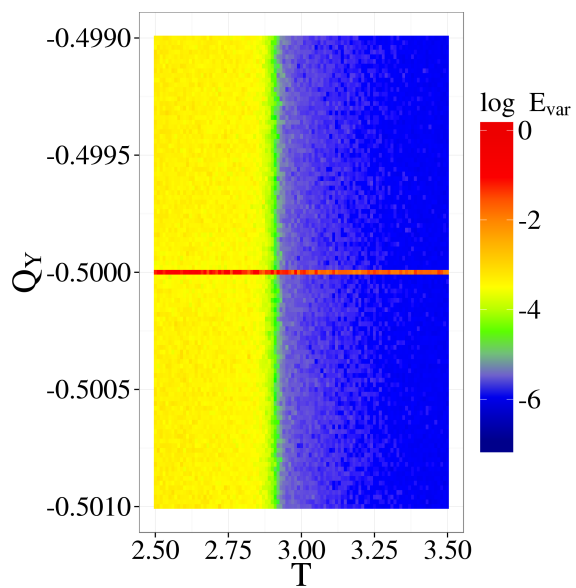
Mynd 8: Meðalgildi og dreifni orku og seglunar í þrívíðu líkani, við segulsvið $B = 0$ og víxlunarstuðul í z -stefnu $Q_z = -0.5$, sem fall af hitastigi T og víxlunarstuðli í y -stefnu Q_y .



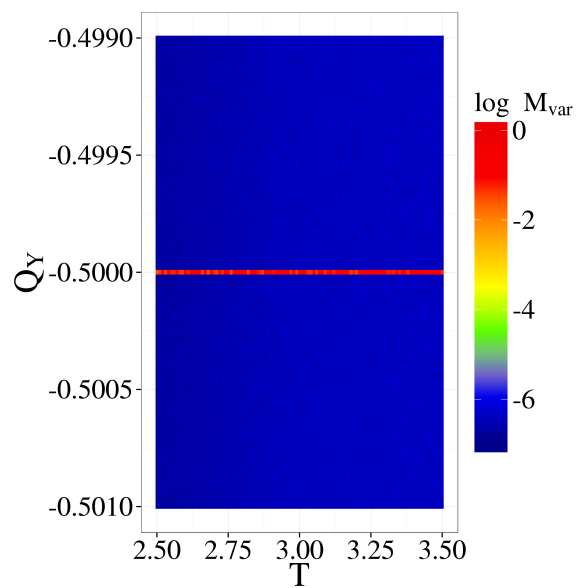
(a) Meðalgildi orku



(b) Meðalgildi seglunar

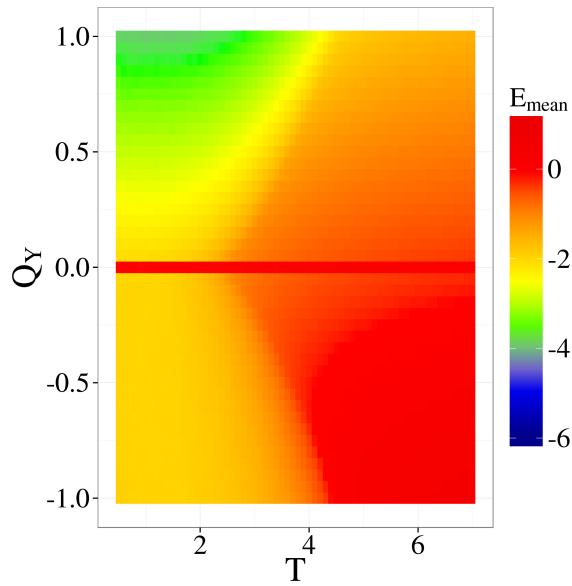


(c) Logri af dreifni orku

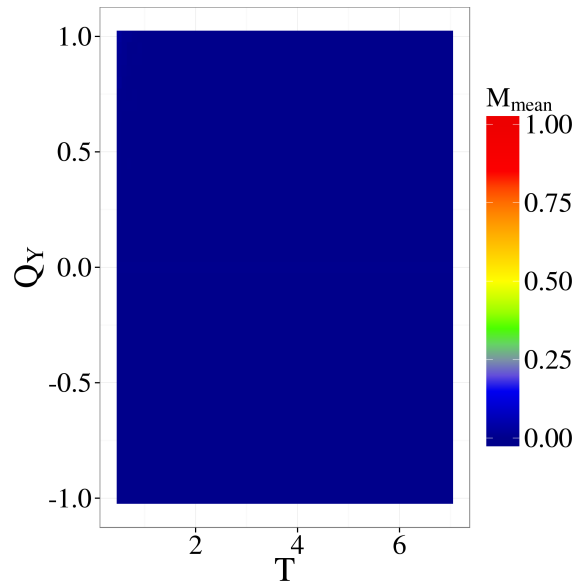


(d) Logri af dreifni orku

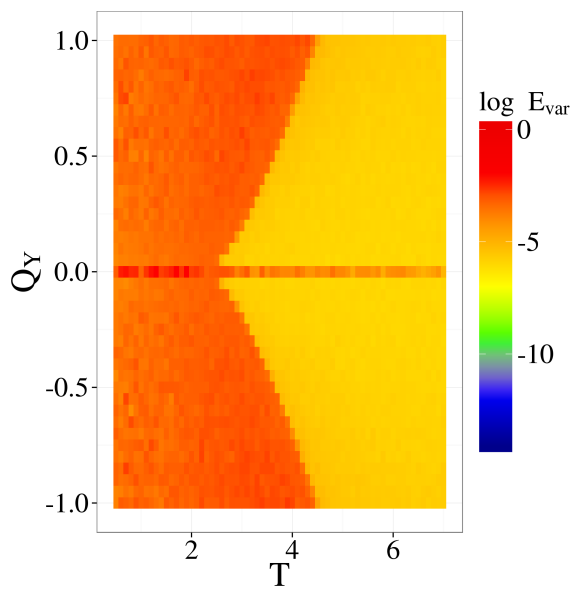
Mynd 9: Stækkuð mynd í betri upplausn, af meðalgildi og dreifni orku og seglunar í þrívíðu líkani, við segulsvið $B = 0$ og víxlunarstuðul í z -stefnu $Q_z = -0.5$, sem fall af hitastigi T og víxlunarstuðli í y -stefnu Q_y .



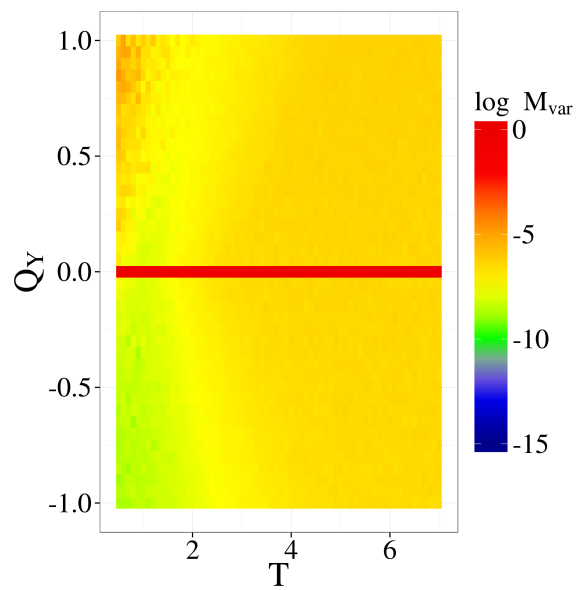
(a) Meðalgildi orku



(b) Meðalgildi seglunar

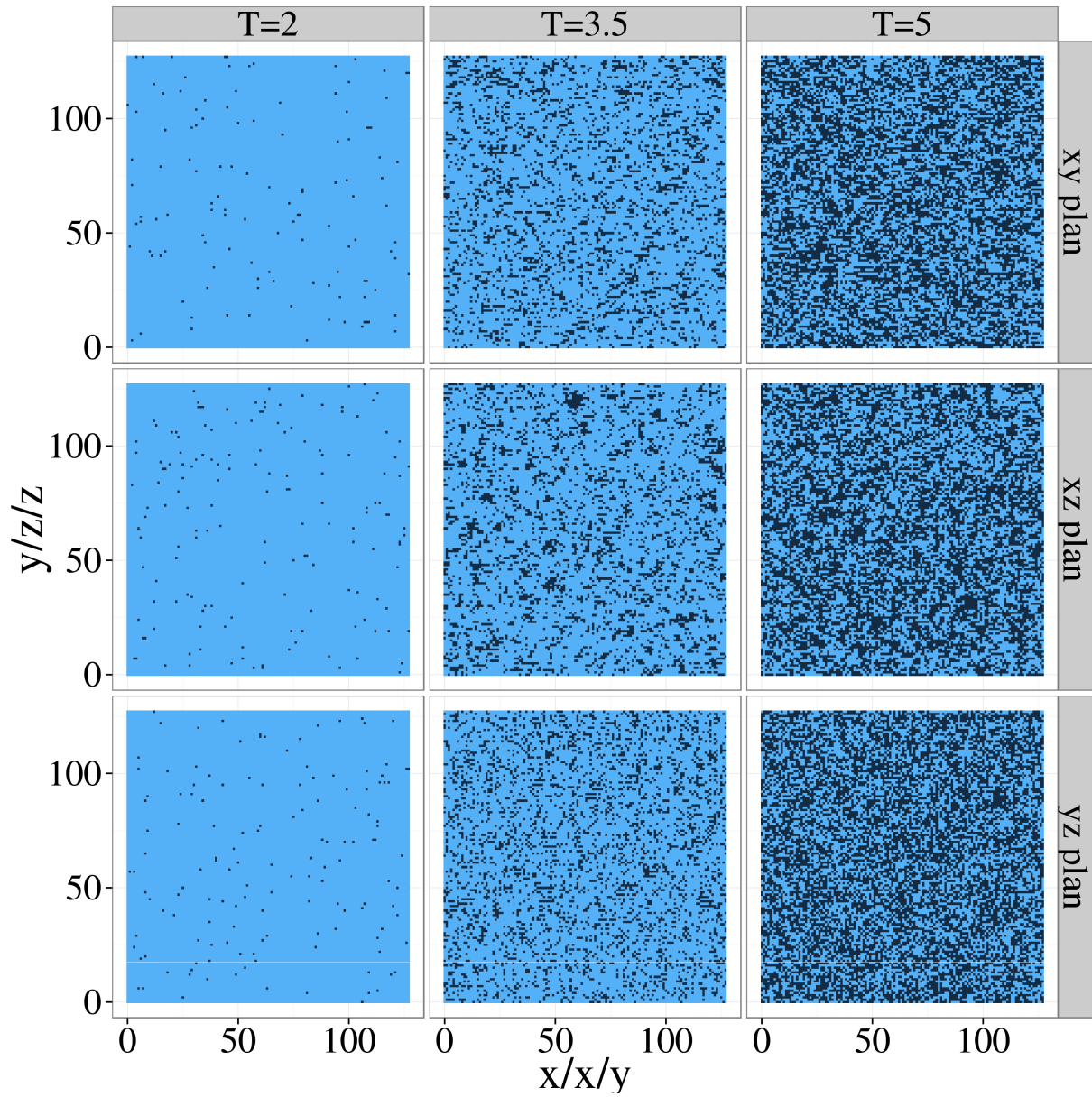


(c) Logri af dreifni orku

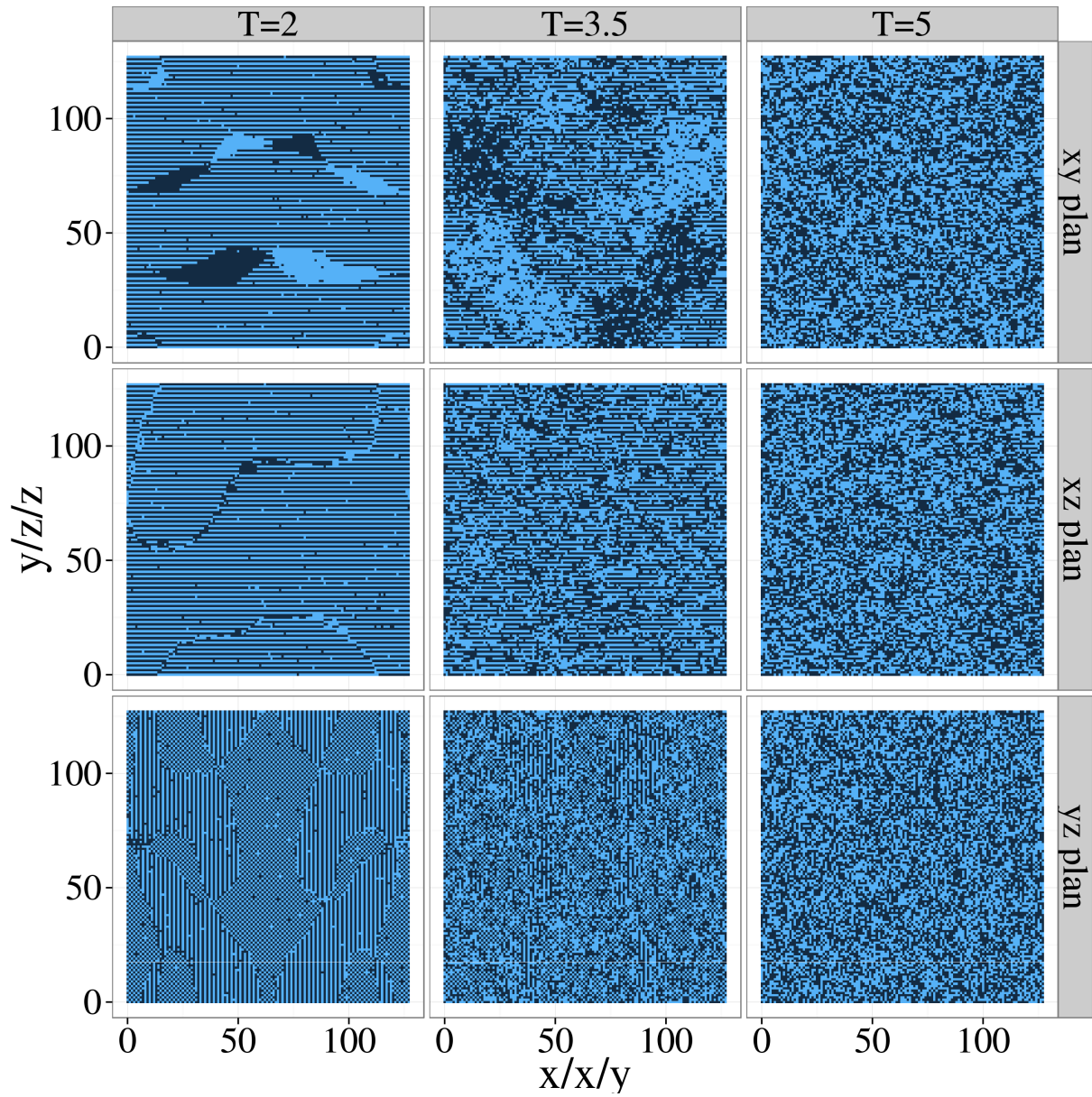


(d) Logri af dreifni orku

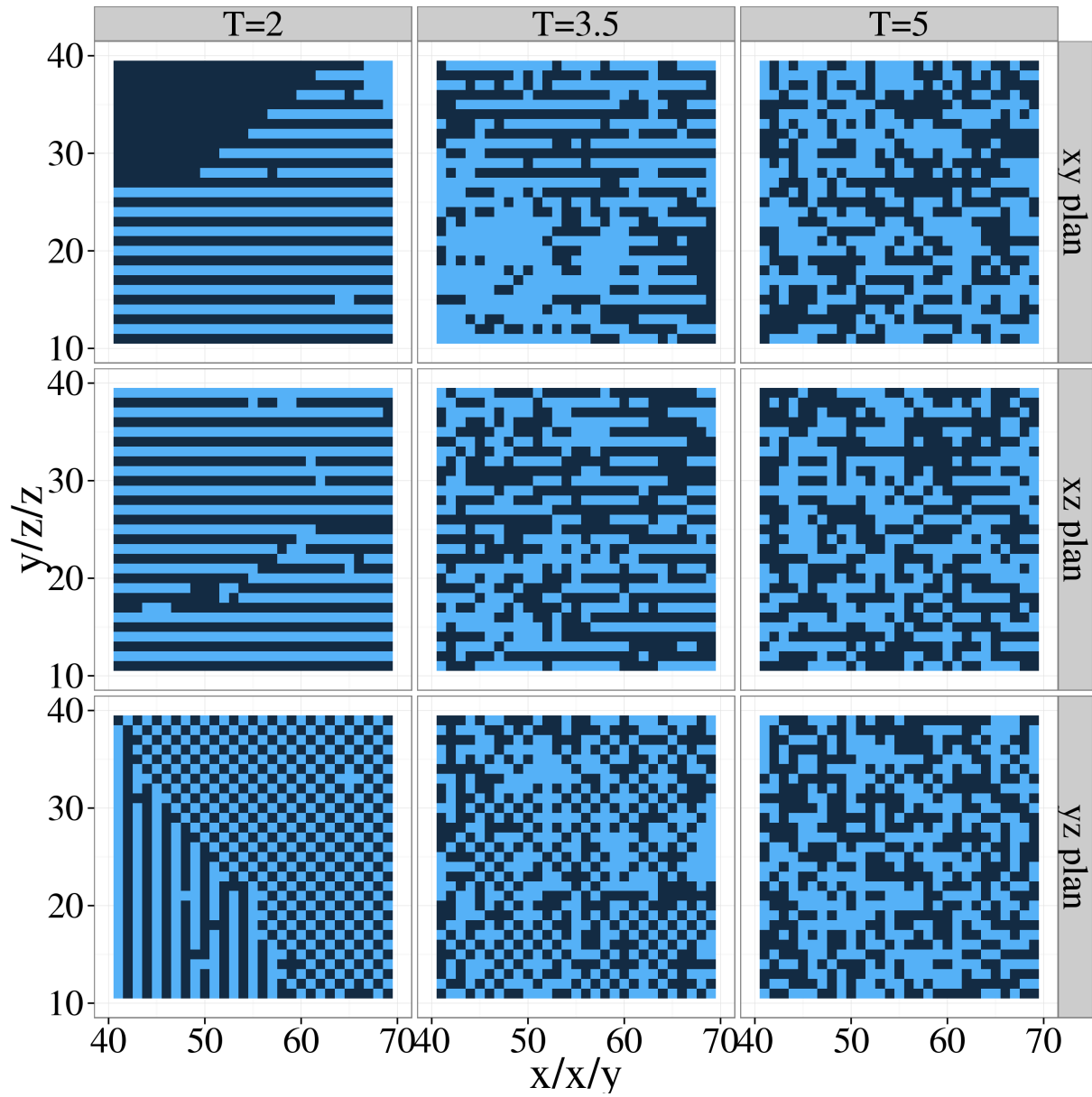
Mynd 10: Meðalgildi og dreifni orku og seglunar í þrívíðu líkani, við segulsvið $B = 0$ og víxlunarstuðul í z -stefnu $Q_z = -1$, sem fall af hitastigi T og víxlunarstuðli í y -stefnu Q_y .



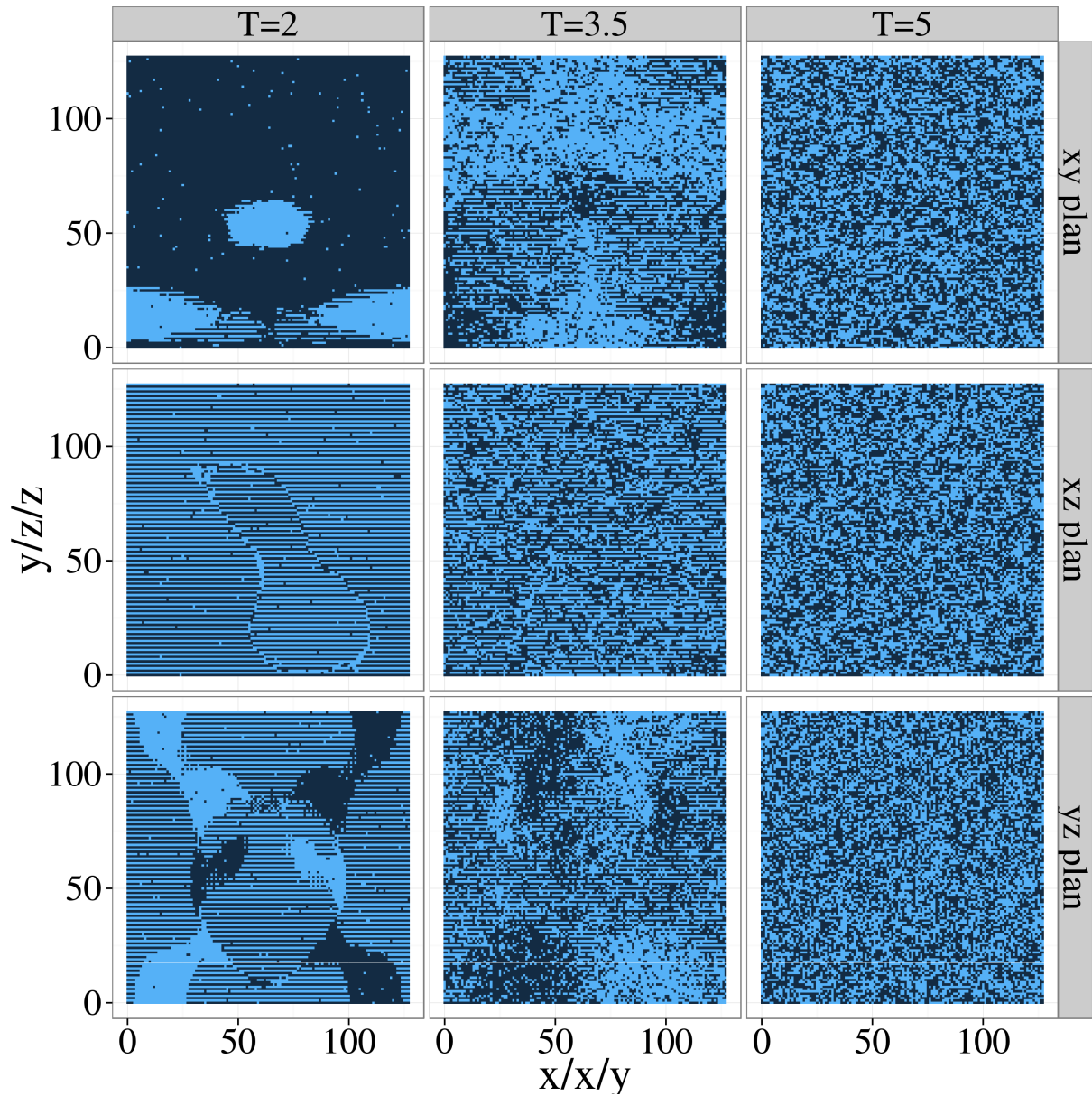
Mynd 11: Staða þrívíðrar grindar, við $Q_y = 0.5$ og $Q_z = 1$, við þrjú mismunandi gildi T . Þrívíðskurðir grindarinnar eru sýndir.



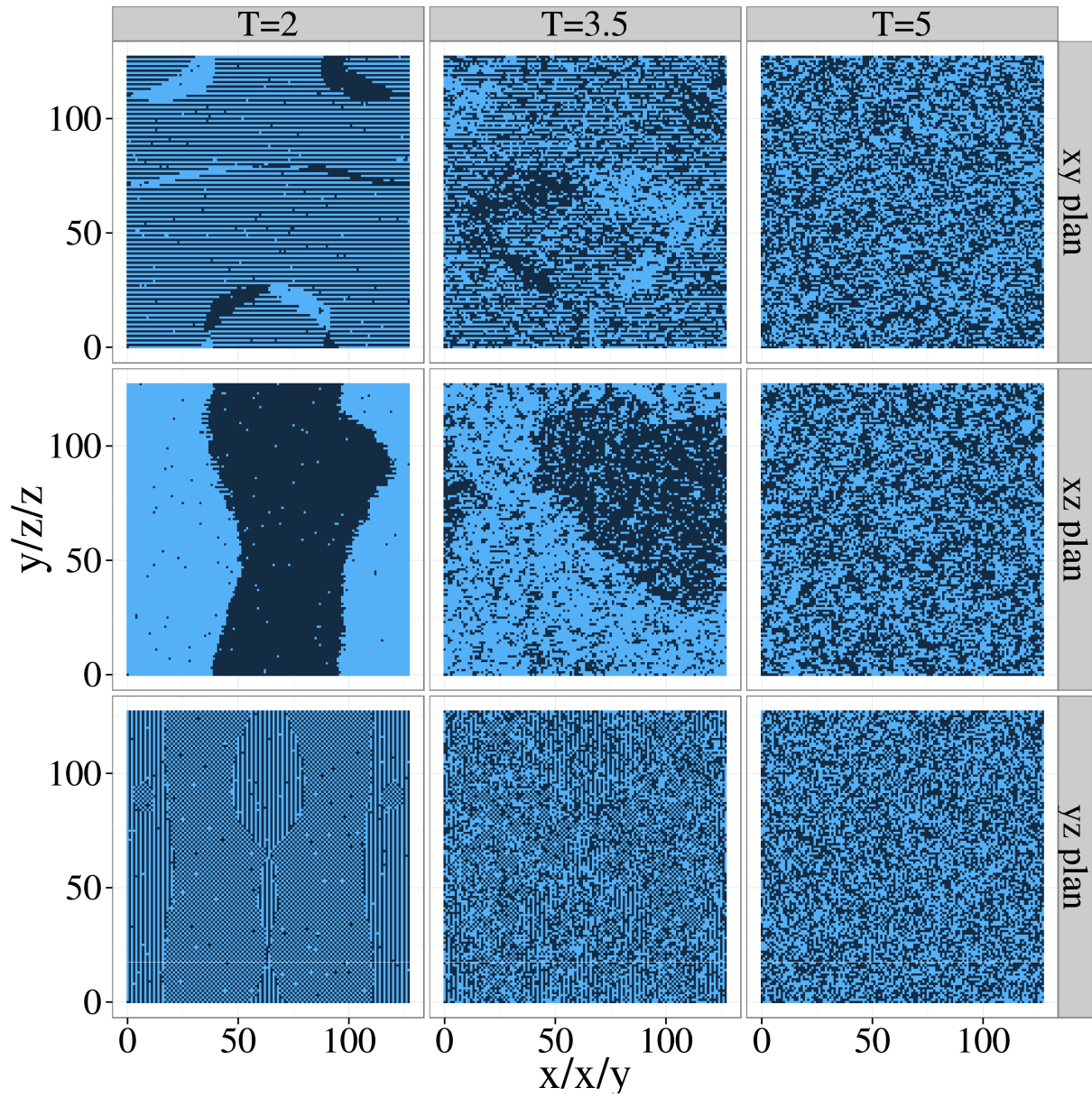
Mynd 12: Staða þrívíðrar grindar, við $Q_y = -0.5$ og $Q_z = 1$, við þrjú mismunandi gildi T . Þrjú þverskurðir grindarinnar eru sýndir.



Mynd 13: Stækkuð mynd ad stöðu þrívíðrar grindar, við $Q_y = -0.5$ og $Q_z = 1$, við þrjú mismunandi gildi T . Þrjár þverskurðir grindarinnar eru sýndir.



Mynd 14: Staða þrívíðrar grindar, við $Q_y = 0.5$ og $Q_z = -1$, við þrjú mismunandi gildi T . Þrjú þverskurðir grindarinnar eru sýndir.



Mynd 15: Staða þrívíðrar grindar, við $Q_y = -0.5$ og $Q_z = -1$, við þrjú mismunandi gildi T . Þrjár þverskurðir grindarinnar eru sýndir.

6 Lokaorð

Hér hafa verið skoðaðir ýmsir eiginleikar Ising-líkansins með hjálp tölulegra Monte-Carlo reikninga.

Þrátt fyrir einfaldleika líkansins koma fram ýmsir áhugaverðir eiginleikar seglandi efna: Fasaskil milli mismunandi fasa spuna og tilvist segulóðala. Niðurstöður þessara reikninga eru jafnframt í samræmi við nákvæmar niðurstöður og þekktar niðurstöður tölulegra reikninga. Samhliðavinnsla á skjákortum kom að góðum notum við reikninga og gaf um 35-falda hraðaaukningu miðað við ósamhliða vinnslu á örgjörva. Án mikillar samhliðavinnslu hefði því verið óraunhæft að ljúka öllum reikningum á því misseri sem verkefnið var unnið.

Að endingu vil ég nota tækifærið og þakka Viðari Guðmundssyni, umsjónarmanni þessa sérverkefnis, fyrir ábendingar og leiðsögn við úrvinnslu verkefnisins. Jafnframt vil ég þakka Raunvísindastofnun Háskóla Íslands fyrir aðgang að þeim tölvubúnaði sem notaður var við vinnslu verkefnisins.

7 Heimildir

- [1] Y. M. Yeomans. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford University Press, 1992.
- [2] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65:117–149, Feb 1944.
- [3] Alan M. Ferrenberg and D. P. Landau. Critical behavior of the three-dimensional ising model: A high-resolution monte carlo study. *Phys. Rev. B*, 44:5081–5091, Sep 1991.
- [4] Nvidia. *CUDA C Programming Guide*.
- [5] Jason Sanders and Edward Kandrot. *CUDA by Example: An Introduction to General-Purpose GPU Programming*. Addison-Wesley Professional, 1st edition, 2010.