



AGH

AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Praca doktorska

Anna Mańka-Krasoń

Wpływ frustracji na własności sieci Erdős-Rényi z oddziaływaniem antyferromagnetycznym w modelu Isinga

Promotor: **prof. dr hab. Krzysztof Kułakowski**

Kraków, 2010

Oświadczenie autora rozprawy:

Oświadczam, świadoma odpowiedzialności karnej za poświadczenie nieprawdy, że niniejszą pracę doktorską wykonałam osobiście i samodzielnie i że nie korzystałam ze źródeł innych niż wymienione w pracy.

Oświadczenie promotora rozprawy:

Niniejsza rozprawa jest gotowa do oceny przez recenzentów.

Badania były finansowane przez MNiSzW w ramach grantu promotorskiego N N202 238237.
Obliczenia przeprowadzono w ACK Cyfronet w Krakowie.

Pragnę złożyć serdeczne podziękowania promotorowi prof. dr. hab. Krzysztofowi Kułakowskiemu za okazaną życzliwość, zrozumienie oraz cenne uwagi przekazywane w trakcie przygotowywania niniejszej pracy.

Szczególne podziękowania składam rodzicom i mężowi.

Spis treści

1	Wstęp	7
2	Sieci przypadkowe — teoria	11
2.1	Model Erdős-Rényi	11
2.2	Sieć Watts-Strogatza	13
2.3	Grafy ze sterowanym stopniem klasteryzacji	15
2.3.1	Sterowanie współczynnikiem klasteryzacji w modelu sieci Barabasi’ego-Alberta (BA)	16
2.3.2	Zwiększenie stopnia klasteryzacji w sieciach przypadkowych	16
3	Sieci dekorowane spinami — teoria	18
3.1	Ferromagnetyzm i model Isinga	18
3.2	Model niezależnych par	20
3.2.1	Łańcuch spinów, czyli model jednowymiarowy	21
3.2.2	Regularna sieć Bethego	22
3.2.3	Drzewo przypadkowe	23
3.3	Antyferromagnetyzm	24
3.3.1	Ciepło właściwe	25
3.3.2	Podatność magnetyczna	25
3.4	Szko spinowe	25
3.4.1	Parametr Edwardsa-Andersona	27
3.4.2	Parametr przekrywania	27
4	Algorytmy numeryczne	29
4.1	Metoda Monte Carlo	29
4.1.1	Algorytm Metropolis	30
4.1.2	Algorytm kąpielii ciepłej	31
4.2	Modelowanie sieci	31
4.3	Symulacje własności magnetycznych sieci – algorytmy obliczeń	31
4.3.1	Ciepło właściwe	32
4.3.2	Podatność	32
4.3.3	Parametr Edwardsa-Andersona	32
4.3.4	Parametr przekrywania	33
5	Sieć przypadkowa — wyniki numeryczne	34
5.1	Budowa grafu	34
5.2	Rozkład stopnia wierzchołka	34
5.3	Spiny sprzężone ferromagnetycznie	35

5.3.1	Badanie stanu równowagi	35
5.3.2	Temperatura Curie	38
5.4	Spiny sprzężone antyferromagnetycznie	40
5.4.1	Badanie stanu równowagi	40
5.4.2	Ciepło właściwe	44
5.4.3	Podatność magnetyczna	44
5.4.4	Parametr Edwardsa-Andersona	47
5.4.5	Parametr przekrywania	49
5.5	Porównanie wyników symulacji z teoretycznymi przewidywaniami temperatury przejścia fazowego	49
5.6	Podsumowanie	50
6	Sieć regularna	51
6.1	Budowa sieci	51
6.2	Magnetyzm sieci regularnej	52
6.2.1	Badanie stanu równowagi	53
6.2.2	Ciepło właściwe	55
6.2.3	Podatność	57
6.2.4	Parametr Edwardsa-Andersona	59
6.2.5	Parametr przekrywania	60
6.3	Temperatura przejścia	62
6.3.1	Teoretyczne przewidywania	62
6.3.2	Wyniki symulacji	62
6.4	Podsumowanie	63
7	Sieć pseudoregularna	65
7.1	Budowa sieci	65
7.2	Magnetyzm sieci	67
7.2.1	Badanie stanu równowagi	67
7.2.2	Ciepło właściwe	67
7.2.3	Podatność magnetyczna	70
7.2.4	Parametr Edwardsa-Andersona	71
7.2.5	Parametr przekrywania	71
7.3	Temperatury przejścia	73
7.3.1	Teoretyczne przewidywania	73
7.3.2	Wyniki symulacji i porównanie z teorią	73
7.4	Podsumowanie	74
8	Sieć przestrzenna	76
8.1	Budowa sieci	76
8.2	Badanie stanu równowagi	79
8.3	Magnetyzm sieci przestrzennej	82
8.3.1	Ciepło właściwe	82
8.3.2	Podatność magnetyczna	85
8.3.3	Parametr Edwardsa-Andersona	87
8.3.4	Parametr przekrywania	88
8.4	Temperatury przejścia	90
8.5	Rzeczywiste próbki magnetyczne	91
8.6	Podsumowanie	93

9	Grafy linków	94
9.1	Budowa sieci	94
9.1.1	Rozkład stopnia wierzchołka	96
9.1.2	Klasteryzacja	96
9.1.3	Asortatywność	98
9.2	Magnetyzm sieci przetransformowanej	100
9.2.1	Badanie stanu równowagi	100
9.2.2	Ciepło właściwe	102
9.2.3	Podatność magnetyczna	105
9.2.4	Parametr Edwardsa-Andersona i parametr przekrywania	106
9.2.5	Temperatury przejścia - teoretyczne przewidywania i wyniki symulacji . .	108
9.3	Podsumowanie	108
10	Podsumowanie	109

Rozdział 1

Wstęp

Sieci są wszędzie. Tworzymy je my, budując sieć kontaktów międzyludzkich i tworzą ją organizmy żywe wchodzące w skład ekosystemu. Istnieją w nas (sieć neuronowa w mózgu, krwioobieg) i korzystamy z ich dobrodziejstwa każdego dnia (sieć energetyczna, Internet). Takie przykłady możnaby mnożyć; faktem jest, że sieci odgrywają w naszym życiu ogromną rolę. Czasami niosą ze sobą zagrożenia¹, innym razem — pomoc i rozwój. Dlatego też nowa gałąź nauki, jaką jest teoria sieci (czy biorąc pod uwagę ich wielopoziomowość — teoria układów złożonych, ang. *complex systems*) rozwija się obecnie bardzo gwałtownie (zob. prace przeglądowe [4, 10, 15, 17, 22, 47, 52, 55]), a ze względu na swój interdyscyplinarny charakter dotyka różnych dziedzin m.in. fizyki, informatyki, biologii a także ekonomii i socjologii.

Jeden z większych przełomów dotyczących badań nad sieciami należy przypisać pracom Paula Erdősa i Alfreda Rényi [18, 19], którzy w latach sześćdziesiątych ubiegłego wieku wprowadzili do analizy sieci rachunek prawdopodobieństwa. Ta dwójka węgierskich matematyków założyła, że sieci powstają w sposób losowy. W efekcie stworzyli oni model sieci (dziś znany jako *klasyczny graf przypadkowy*) charakteryzujący się poissonowskim rozkładem stopnia wierzchołka (zob. rozdział 2.1), który przez wiele lat był punktem odniesienia w badaniu mechanizmów rządzących sieciami rzeczywistymi. Obecnie model ten zaliczamy do grupy modeli jednorodnych o konstrukcji statycznej (ang. *equilibrium networks*, za [15, 22]) i właśnie tego typu sieci będą rozważane w niniejszej pracy.

Warto jednak zaznaczyć, że największy rozkwit nauki o sieciach zawdzięczamy pracom Barabásiego i Alberta [2], którzy odkryli, że większości sieci rzeczywistych nie cechuje pełna przypadkowość. W ich modelu powiązania pomiędzy węzłami ustalane są na zasadzie preferencji (tzw. *huby*, czyli węzły o wielu sąsiadach, wybierane są częściej), a sieć ciągle rośnie i ewoluuje. Ta grupa sieci, zwanych ewoluującymi (ang. *evolving networks* [15, 22]) ze względu na obecność usieciowionych węzłów-hubów wprowadza do analizy pewne komplikacje, które — gdybyśmy chcieli badać wpływ frustracji, będący tematem tej pracy — powinny być rozważane dopiero w kolejnym etapie, po rozpatrzeniu sieci jednorodnych.

Sama topologia sieci nie odzwierciedla jednak wielu aspektów, z którymi często spotykamy się w sieciach rzeczywistych. Dlatego też wprowadzamy do układu więcej stopni swobody, przypisując węzłom dodatkowe zmienne, mogące w najprostszym przypadku przyjmować dwie różne wartości. Taki zabieg pozwala na interpretację stanów węzłów przykładowo jako opinię „tak” i „nie”, pleć czy stan „on” i „off” w sieciach genetycznych. Informacja o stanie stacjonarnym ta-

¹Jeden z intensywniej rozwijających się kierunków badający zagadnienia sieci zajmuje się mechanizmem rozprzestrzeniania się epidemii [45], a ostatnio również – globalnego kryzysu [35]. Coraz częściej dokonywane są też analizy sieci przestępczych [25, 31].

kiego systemu ma wówczas zastosowanie w całej klasie problemów w różnych dziedzinach nauki. W wielu zagadnieniach węzły dekoruje się spinami Isinga o wartościach $S = \pm 1$, które oddziałują ze sobą ferromagnetycznie lub antyferromagnetycznie. Takie oddziaływanie prowadzi do preferencji odpowiednio zgodnych lub przeciwnych orientacji sąsiednich spinów [11].

Oddziaływanie magnetyczne pomiędzy węzłami może współzawodniczyć z pewnym szumem, często opisywanym jako szum termiczny. Zmiany intensywności tego szumu prowadzą do przejścia fazowego układu: z fazy uporządkowanej, charakteryzującej się niskim poziomem szumu do fazy nieuporządkowanej, o dużych zakłóceniach. Poziom szumu, dla którego uporządkowanie zanika, jest porównywalny do temperatury krytycznej w magnetykach; w przypadku oddziaływań ferromagnetycznych będzie to temperatura Curie. Jeżeli rozpatrujemy problem w kontekście sieci społecznych, takie uporządkowanie spinów może być traktowane jako zdolność grupy do podjęcia wspólnego działania [38]. Magnetyzm można więc traktować jako modelowe narzędzie (ang. *toy model*), którym możemy się posłużyć do opisu różnego rodzaju zachowań sieci.

W niniejszej pracy rozpatrywano sieci przypadkowe, których węzły udekorowano spinami Isinga oddziaływanymi antyferromagnetycznie. Preferowanie antyrównoległego ułożenia spinów można odnieść do pewnego rodzaju dychotomicznych zachowań społecznych takich jak strategia jastrzębia i gołębia, czy też kupna-sprzedaży [37]. Jednakże, w przypadku układów będących tematem tej pracy obecna w sieciach frustracja geometryczna dodatkowo utrudnia osiągnięcie stanu równowagi termodynamicznej. Topologia sfrustrowanej sieci może być więc traktowana – obok temperatury – jako dodatkowy mechanizm rozporządkowujący spiny dążące do antyrównoległych konfiguracji, co komplikuje zagadnienie ale jednocześnie czyni je bardziej ciekawym.

Problem stanu podstawowego systemu węzłów o antyferromagnetycznych oddziałyvaniach może być przedstawiony jako *MAX-CUT problem* [13] należący do grupy problemów optymalizacyjnych NP-zupełnych. Jeżeli weźmiemy pod uwagę fakt, że w stanie podstawowym wszystkie sąsiadujące spiny powinny być antyrównoległe względem siebie, to osiągnięcie takiego stanu możemy potraktować jako spełnienie K warunków przez N zmiennych, gdzie N jest liczbą węzłów w sieci, a K – liczbą krawędzi. Dlatego też antyferromagnetyzm na sieci przypadkowej możemy traktować jako przykład problemu K -spełnialności (ang. *K-satisfiability problem*), który również należy do klasy problemów NP-zupełnych [23, 43].

Te związki sugerują, że sieć antyferromagnetycznych spinów jest modelem o potencjalnie wielu zastosowaniach.

Cel badań

Celem pracy jest określenie temperatury przejścia fazowego w magnetycznych sieciach przypadkowych typu Erdős-Rényi z regulowaną gęstością frustracji geometrycznej. Frustracja w układzie jest sterowana poprzez zmiany współczynnika klasteryzacji (zob. rozdział 2.1), który wprowadza do sieci dużą liczbę węzłów tworzących grupy trzech wierzchołków będących dla siebie wzajemnie sąsiadami. Spiny, które zostały przypisane do węzłów zlokalizowanych w tych trójkątach oddziałują antyferromagnetycznie, ale ze względu na ich ułożenie nie jest możliwe, aby każda z par była antyrównoległa do siebie. Dlatego też im większy współczynnik klasteryzacji, tym większa liczba tych trójkątów i jednocześnie większa frustracja sieci.

Stan wiedzy

Do opisu magnetyków w sieciach może być stosowana *teoria Bethego*, która opisuje sieci typu drzewa [6, 13]. Niestety nie obejmuje ona układów z podwyższonym stopniem klasteryzacji, gdyż takie modele wprowadzają do sieci zamknięte ścieżki (trójkąty), nieobecne w drzewach. Ponieważ jednak teoria drzew Bethego jest jedyną, z jaką możemy porównać wyniki naszych

symulacji, będziemy ją traktować tylko jako punkt odniesienia. Szczegóły dotyczące przewidywań tej teorii oraz wyprowadzenie wzorów analitycznych znajdują się w rozdziale trzecim. Obliczenia numeryczne skonfrontowane zostaną z teorią drzew Bethego dla każdego z modeli sieci rozpatrywanych w niniejszej pracy.

Zbliżone badania temperatury przejścia fazowego w funkcji frustracji przeprowadzone były w literaturze dla sieci regularnej typu małego świata poddanej pewnym modyfikacjom [26]. W tych rozważaniach nieporządek, który był źródłem frustracji miał charakter dalekozasięgowy, a jego wzrost powodował obniżenie temperatury krytycznej.

Temperatura przejścia fazowego szacowana była również m. in. dla dwuwarstwowej sieci Bethego, której spiny oddziałują antyferromagnetycznie [1]. Podobne obliczenia przeprowadzono także dla układu dwóch połączonych ze sobą systemów złożonych (o topologii regularnej sieci przypadkowej i sieci bezskalowej Barabasi'ego–Albert), które zawierały wiązania ferromagnetyczne [58].

Narzędzia do badania przejścia fazowego

Symulacje magnetyzmu dla poszczególnych modeli sieci jest każdorazowo poprzedzone testem na równowagę układu wykorzystującym czasową zależność podatności, zgodnie z literaturą [51]. Ponadto, przeprowadzane są również analizy energii w funkcji czasu celem ustalenia czasu, po którym układ osiąga stan stacjonarny.

Określenie temperatury przejścia fazowego w pierwszym kroku sprowadza się do stwierdzenia występowania fazy niskotemperaturowej. I tak w przypadku układów o zerowym lub małym współczynniku klasteryzacji (czyli dla układów niesfrustrowanych albo o małym stopniu frustracji) spodziewamy się, że poniżej temperatury krytycznej pojawia się faza antyferromagnetyczna. Dla układów mocno sfrustrowanych możliwe jest jednak wystąpienie fazy szkła spinowego. Problem szkła spinowego jest trudny i pozostaje nierozwiązany [8, 20, 9]. W niniejszej pracy nie będziemy zajmować się indetyfikacją fazy niskotemperaturowej, ale poprzestaniemy na określeniu temperatury poniżej której taka faza występuje. Spodziewamy się, że przejście fazowe powinno być widoczne w zależnościach temperaturowych ciepła właściwego, podatności magnetycznej i parametru Edwardsa-Andersona, który przybiera niezerowe wartości w fazie uporządkowanej niezależnie od rodzaju tej fazy [49]. Pewne nadzieje można też wiązać z parametrem przekrywania Q [51], który w stanie podstawowym powinien przyjmować dwie wartości ± 1 .

Rozważane sieci

Pierwsze szacowania temperatury przejścia fazowego przeprowadzono dla *grafu przypadkowego*, do którego wprowadzono frustrację poprzez zwiększenie współczynnika klasteryzacji [38]. W tym celu zaadoptowano algorytm sterowania klasteryzacją zaproponowany przez Holme i Kima dla sieci bezskalowej [27]. Tak skonstruowana sieć charakteryzuje się jednak występowaniem dużej liczby swobodnych spinów, które mogą zmieniać swój stan bez zmiany energii, a ich wpływ może zakłócać m. in. krzywe temperaturowe podatności.

Dlatego też w drugim etapie stworzono nieskorelowaną *sieć regularną*, w której każdy węzeł posiada dokładnie trzech sąsiadów [39]. Taka konstrukcja pozwoliła wyeliminować swobodne spiny z sieci. Klasteryzację sieci regularnej przeprowadzono dodając do istniejących węzłów nowe wierzchołki, ale w taki sposób aby pierwotny węzeł i dwa nowe tworzyły klaster – trójkąt wzajemnie połączonych węzłów.

Kolejną rozważaną sieć, nazwaną *siecią pseudoregularną* była pewną modyfikacją poprzedniej – tutaj dowolny węzeł sieci może łączyć się z trzema lub pięcioma innymi węzłami. Wprowadzenie tego modelu do symulacji, poprzez jednoczesną regulację stopnia klasteryzacji oraz liczby

węzłów posiadających pięciu sąsiadów pozwala na uzyskanie topologii o różnym współczynniku klasteryzacji a tym samym współczynniku B (stosunku liczby drugich do pierwszych sąsiadów). Określenie, czy temperatura przejścia fazowego zmienia się dla takich układów jest istotna szczególnie w kontekście przewidywań teoretycznych, które jednoznacznie wskazują tylko na zależność temperatury uporządkowania od parametru B .

Następnie sprawdzono, jaki wpływ na temperaturę przejścia fazowego układów sfrustrowanych będzie miało zanurzenie ich w trójwymiarowej przestrzeni. W tym celu stworzono model *sieci przestrzennej* – sieci przypadkowej ze sterowaną klasteryzacją, której węzłom przypisano współrzędne [41]. Taka sieć nie charakteryzuje się własnością małego świata, co zbliża otrzymane wyniki symulacji do rzeczywistych próbek magnetycznych.

Przeprowadzono również badania temperatury przejścia fazowego dla *grafu linków* (ang. *line graph*) – sieci, której konstrukcja opiera się na przetransformowaniu krawędzi pierwotnego układu na węzły nowej sieci [42, 40]. Tak skonstruowana topologia tworzy układy o bardzo dużym stopniu frustracji; interesujące więc będzie oszacowanie dla takiego modelu temperatury przejścia fazowego. Warto również zaznaczyć, że antyferromagnetyzm sieci linków nie był wcześniej rozważany w literaturze.

Rozdział 2

Sieci przypadkowe — teoria

Matematyczna reprezentacja sieci

W matematycznej terminologii sieć jest reprezentowana za pomocą *grafów*. Graf definiujemy jako zbiór punktów (zwanymi także *wierzchołkami* lub *węzłami*) oraz *wiązań* (*krawędzi*, *linii*), które mogą łączyć dwa dowolne wierzchołki [3]. Węzły te nie są opisywane przestrzennie (np. poprzez podanie ich lokalizacji), gdyż nie są rozpatrywane jako punkty położone w przestrzeni (czy na płaszczyźnie).

Kompletny obraz grafu dostarczony jest poprzez podanie macierzy połączeń: graf o N wierzchołkach opisujemy macierzą o rozmiarach $N \times N$, a każdy element macierzy a_{ij} jest równy 1, jeśli istnieje krawędź pomiędzy i -tym i j -tym węzłem lub 0 w przeciwnym wypadku. Inny sposób reprezentacji to macierz o stałej liczbie wierszy N będących listą kolejnych numerów sąsiadów j danego węzła i i zmiennej liczbie kolumn (uzależnionej od liczby sąsiadów danego wierzchołka).

2.1 Model Erdősa-Rényi

Klasyczny model przypadkowych sieci został przedstawiony przez Erdősa i Rényi w roku 1959 ([14] za [18], [19]). W tym modelu konstrukcja sieci przypadkowej przebiega następująco:

1. Dana jest całkowita liczba węzłów N .
2. Prawdopodobieństwo, że dwa dowolne wierzchołki są połączone wynosi p .

Warto zaznaczyć, że powiązania te nie są skierowane, ani też nie zapętłają się (nie ma połączeń węzła z samym sobą), a każde połączenie węzłów jest równoprawdopodobne (nie występuje zjawisko preferencyjnego przyłączania). Z powyższych warunków wynika także, że:

- średnia liczba krawędzi wynosi $\frac{pN(N-1)}{2}$
- maksymalna liczba krawędzi wynosi $\frac{N(N-1)}{2}$
- średnia liczba sąsiadów (wierzchołków, z którymi dany węzeł ma połączenie) wynosi $p(N-1)$

Rozkład stopnia wierzchołka (degree distribution)

Wierzchołek grafu scharakteryzowany jest często poprzez tzw. *stopień* – liczbę węzłów, z którymi jest połączony (liczbę sąsiadów) [16]. *Rozkład stopnia wierzchołka* $P(k)$ określa prawdopodobieństwo, że dowolnie wybrany węzeł ma k sąsiadów. Dla sieci Erdős-Rényi to prawdopodobieństwo wyraża się wzorem Bernoulliego:

$$P(k) = \binom{N-1}{k} p^k (1-p)^{N-1-k} \quad (2.1)$$

skąd średni stopień wierzchołka $\langle k \rangle = p(N-1)$ [14]. W granicy dużych N wyrażenie przyjmuje postać rozkładu Poissona:

$$P(k) = \frac{e^{-\langle k \rangle} \langle k \rangle^k}{k!}. \quad (2.2)$$

Własność małego świata

Zgodnie z koncepcją „małego świata” pomimo stosunkowo dużych rozmiarów sieci faktyczna odległość pomiędzy dowolnymi węzłami jest relatywnie mała. Odległość ta nie jest rozumiana w sensie geodezyjnym; w „języku grafów” oznacza po prostu liczbę wierzchołków wzdłuż najkrótszej łączącej je drogi [3].

Sieć wykazuje własność małego świata, jeśli wartość średniej odległości \bar{l} (także liczonej jako liczba węzłów) pomiędzy parą wierzchołków rośnie logarytmicznie albo wolniej z rozmiarem sieci N dla ustalonego średniego stopnia wierzchołka [16]:

$$\bar{l} \sim \ln N \quad (2.3)$$

Własność ta została także zademonstrowana przez Erdős’a i Rényi dla modelu klasycznej sieci przypadkowej [3], przy czym dodatkowo oszacowano, że:

$$\bar{l} \sim \frac{\ln N}{\ln \langle k \rangle} \quad (2.4)$$

Przybliżenie to opiera się na argumentacji [48], która w ścisłej formie odnosi się do drzewa Cayley’a¹. Zaczynając od danego węzła, który uważamy za centralny zliczamy ilość węzłów w odległości n . Dla $n = 1, 2, 3, \dots$ mamy kolejno $k, k(k-1), k(k-1)^2, \dots$ węzłów; w odległości l mamy $k(k-1)^{l-1}$ węzłów. Ta liczba jest porównywalna z ilością wszystkich węzłów N :

$$N = 1 + k \sum_{n=0}^{l-1} (k-1)^n \quad (2.5)$$

Sumując wyrazy ciągu geometrycznego w wyrażeniu 2.5 otrzymujemy wzór na średnią drogę pomiędzy dwoma węzłami w sieci Erdős’a i Rényi:

$$\bar{l} = \frac{\ln [(N-1)(k-2) + 1] - \ln k}{\ln(k-1)}. \quad (2.6)$$

Wynik 2.6 dla $N \gg k$ przybiera postać przybliżenia 2.3.

¹W drzewie Cayley’a każdy węzeł jest połączony z dokładnie k innymi węzłami (za wyjątkiem węzłów brzegowych, gdzie $k = 1$) a graf nie zawiera żadnych zamkniętych obwodów [6] (ang. *cyclic or tradic closure* [32]). Liczba węzłów na kolejnej powłoce r drzewa jest proporcjonalna do $(k-1)^r$

Ze względu na skończony wymiar drzewa Cayley'a policzono także jaki jest stosunek ilości węzłów brzegowych k_l (z ostatniej powłoki) do wszystkich węzłów N . Korzystając ze wzoru 2.5 możemy zapisać:

$$\frac{k_l}{N} = \frac{k(k-1)^{l-1}}{1 + k \sum_{n=0}^{l-1} (k-1)^n}. \quad (2.7)$$

Po wykonaniu sumowania postępu geometrycznego i po przeprowadzeniu dalszych przekształceń otrzymujemy stosunek liczby brzegowych węzłów do wszystkich węzłów sieci wyrażony jako:

$$\frac{k_l}{N} = \frac{k(2-k)(k-1)^{l-1}}{2 - k(k-1)^l}. \quad (2.8)$$

Dla $l \rightarrow \infty$ i $k > 2$ stosunek 2.8 jest rzędu $\frac{k-2}{k-1}$, z czego wynika że udział węzłów brzegowych jest bardzo duży w stosunku do całej sieci i nie powinien być zaniedbywany.

Współczynnik klasteryzacji

Opisując sieć bardziej lokalnie wprowadza się często tzw. *współczynnik klasteryzacji*, określający prawdopodobieństwo, że dwa węzły sąsiadujące z danym wierzchołkiem są również dla siebie sąsiadami [14].

Matematycznie współczynnik C_i możemy zapisać jako stosunek faktycznej liczby y_i istniejących krawędzi pomiędzy najbliższymi sąsiadami danego węzła i , do całkowitej liczby możliwych połączeń między nimi (gdzie z_i jest liczbą najbliższych sąsiadów węzła) [5]:

$$C_i = \frac{2y_i}{z_i(z_i - 1)}. \quad (2.9)$$

Gdy $z_i = 0, 1$ przyjmujemy $C_i = 0$. Całkowity współczynnik klasteryzacji C jest średnią po wszystkich N węzłach. Dla sieci przypadkowych prawdopodobieństwo, że dwa sąsiednie węzły danego wierzchołka są również ze sobą połączone jest takie samo jak prawdopodobieństwo połączenia dwóch dowolnie wybranych węzłów [3], stąd zachodzi:

$$C_{rand} = p. \quad (2.10)$$

Sieć rozproszona i „gigantyczny” klastery

Sieć nazywamy *rozproszoną*, jeśli zbudowana jest głównie z izolowanych drzew (klastrow niezapętlnych). Jej średnica (maksymalna odległość pomiędzy dowolną parą węzłów) jest równa średniej wartości średnicy drzewa, z których zbudowana jest sieć (liczonej także jako najdłuższa droga pomiędzy dwoma dowolnymi węzłami należącymi do drzewa). Odpowiada to wartościom $\langle k \rangle = pN < 1$ w granicy $N \rightarrow \infty$.

Jeśli wartość średniej liczby krawędzi wychodzących z dowolnego wierzchołka $\langle k \rangle = pN > 1$ w klasycznej sieci przypadkowej pojawia się „gigantyczny” klastery zawierający większą część połączonych wierzchołków sieci. Wówczas średnica grafu jest równa średnicy tego klastra [3]. Dla $p < \frac{1}{N}$ w sieci pojawia się dużo węzłów izolowanych [14].

2.2 Sieć Watts-Strogatza

Rzeczywiste sieci (np. WWW czy sieć powiązań neuronów w mózgu) charakteryzują się wprawdzie własnością „małego świata” (podobnie do sieci przypadkowych opisywanych w poprzednim

modelu), jednocześnie jednak są opisane współczynnikiem klasteryzacji C rzędu 0.1 lub większym. Przykładowo, dla sieci przypadkowych współczynnik C jest kilka rzędów wielkości mniejszy od tych spotykanych w rzeczywistości. Natomiast w przypadku klasycznych sieci przestrzennych, jak kubiczna sieć d -wymiarowa spotykamy się wprawdzie z podobnymi współczynnikami klasteryzacji jak te opisywane w przyrodzie, jednak nie posiadają one własności małego świata.

Model wprowadzony przez Watts i Strogatza w 1998r [61] generuje grafy z wysokim współczynnikiem klasteryzacji przy jednoczesnym zachowaniu charakteru małego świata. Zaproponowane rozwiązanie jest więc czymś pośrednim pomiędzy całkowicie przypadkowym grafem a regularną siecią o skończonych wymiarach.

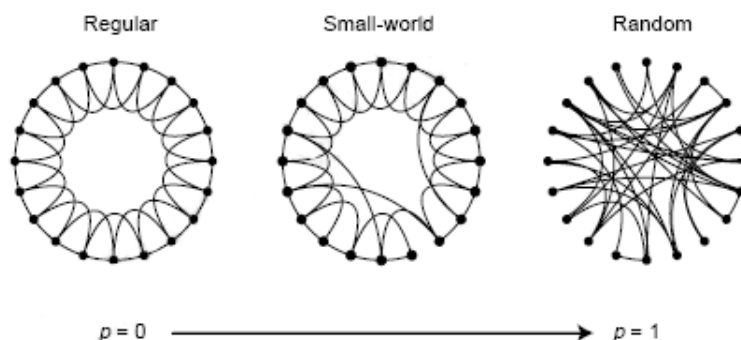
Algorytm

Interpolacji pomiędzy regularną siecią o skończonych wymiarach i siecią przypadkową dokonano przy użyciu następujących procedur [61]:

1. Algorytm startuje od okręgu zbudowanego z N węzłów, z których każdy połączony jest krawędzią z k najbliższymi sąsiadami. Aby uniknąć sytuacji, w której graf stałby się rozproszony, zakładamy:

$$N \gg k \gg \ln N \gg 1 \quad (2.11)$$

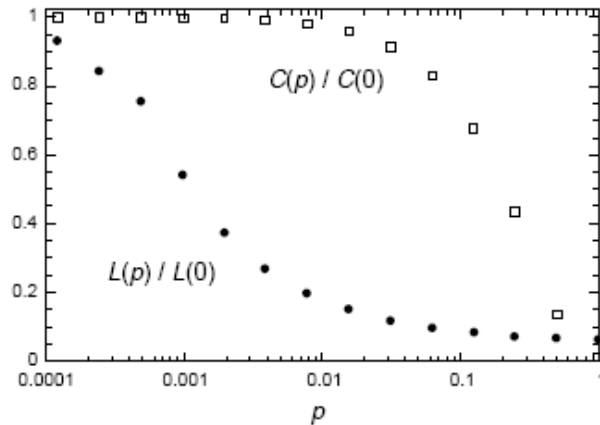
2. Idąc na przykład zgodnie z ruchem wskazówek zegara wybieramy węzeł i krawędź, która łączy go z najbliższym sąsiadem.
3. Z prawdopodobieństwem p odłączamy wybraną krawędź od sąsiada wybranego węzła i łączymy z nowym, losowo wybranym węzłem. Wykluczamy istnienie podwójnych krawędzi.
4. Powtarzamy proces „idąc” zgodnie z ruchem wskazówek zegara, dopóki nie rozważymy wszystkich krawędzi w jednej pętli.
5. Następnie rozważamy linie, które łączą węzły ze swoimi drugimi w kolejności sąsiadami i powtarzamy punkty 2–4. Po przejściu kolejnego cyklu rozważamy coraz to dalszych sąsiadów do momentu, w którym wszystkie krawędzie początkowej sieci będą wzięte pod uwagę.



Rysunek 2.1: Efekt działania algorytmu dla różnych wartości p obrazujący pośrednią postać – sieć typu „małego świata” – pomiędzy siecią regularną ($p = 0$) i przypadkową ($p = 1$) dla $N = 20$ i $k = 4$. Źródło: [61].

Przedstawiony powyżej proces wprowadza do początkowo regularnej sieci $pNk/2$ „długozasięgowych” krawędzi, niewiążących bliskich sąsiadów znajdujących się na pętli (rys. 2.1). Takie powiązania mają jednak swoje odzwierciedlenie w rzeczywistych sieciach, np. łączących przyjaciół: większość ludzi utrzymuje bardzo bliskie kontakty z osobami znajdującymi się w ich najbliższym sąsiedztwie, ale często zdarza się, że przyjacielskie stosunki utrzymują także ludzie oddaleni od siebie o wiele kilometrów. I właśnie te sytuacje opisują długozasięgowe krawędzie [3].

Największe osiągnięcie sieci typu „małego świata” prezentuje rys. 2.2:



Rysunek 2.2: Zależność współczynnika klasteryzacji C oraz średniej najkrótszej odległości L (liczba węzłów łączących dwa wierzchołki wzdłuż najkrótszej drogi pomiędzy nimi) od prawdopodobieństwa p . Wielkości C i L unormowano wartościami $C(0)$ oraz $L(0)$ dla regularnej sieci ($p = 0$). Źródło: [61]

Dla bardzo małych wartości p unormowany współczynnik klasteryzacji praktycznie nie zmienia się, podczas gdy średnia najkrótsza odległość L szybko spada w miarę pojawiania się nowych „długozasięgowych” krawędzi. Nieco większym wartościom prawdopodobieństwa p (por. rys. 2.1) odpowiadają tak małe wartości $L(p)$ jak dla sieci przypadkowych (i rzeczywistych), pomimo tego jednak wartość współczynnika klasteryzacji pozostaje dużo większa niż dla grafów przypadkowych.

Fenomen sieci Watts-Strogatza przedstawia się więc następująco:

$$L \geq L_{random} \text{ i } C \gg C_{random} \quad (2.12)$$

Model wygenerowany przez Watts i Strogatza zdecydowanie lepiej oddaje charakter sieci rzeczywistych: o dużym stopniu klasteryzacji, ale względnej małej odległości pomiędzy dowolnymi węzłami.

2.3 Grafy ze sterowanym stopniem klasteryzacji

Inne rozwiązanie problemu zbyt małego stopnia klasteryzacji przedstawili Holme i Kim [27]. Tym razem jednak modyfikacji podlegały sieci bezskalowe (a dokładniej model sieci Barabasi’ego–Alberta), które obok własności małego świata charakteryzują się potęgowym rozkładem stopnia

wierzchołka² właściwym dla wielu sieci rzeczywistych. Jednocześnie jednak grafy tego typu posiadają niewielki współczynnik klasteryzacji i w związku z tym zawodzą w opisie dużej liczby realnych sieci. I właśnie rozwiązanie tego problemu proponują autorzy [27].

2.3.1 Sterowanie współczynnikiem klasteryzacji w modelu sieci Barabasi’ego–Alberta (BA)

Holme i Kim rozszerzyli model sieci bezskalowej BA (zob. punkty 1-4) poprzez wprowadzenie pewnego dodatkowego kroku w procesie tworzenia sieci – „formowania triady” [27]:

1. Stan początkowy: sieć zbudowana jest z m_0 wierzchołków i nie zawiera żadnych krawędzi.
2. Wzrost sieci odbywa się poprzez dodanie do grafu jednego wierzchołka v z m krawędziami w każdym kroku czasowym.
3. Każda krawędź m wierzchołka v jest przyłączana do pewnego wężła w z prawdopodobieństwem proporcjonalnym do jego stopnia (tzw. *preferencyjne przyłączanie* (PA))
4. *Formowanie triady* (FT): Po każdym kroku PA (po dodaniu każdej kolejnej krawędzi m) dołączane jest z prawdopodobieństwem P_t dodatkowe, nowe połączenie pomiędzy wężłem v i losowo wybranym sąsiadem wierzchołka w (z którym v połączył się w poprzednim kroku). Jeśli wszyscy sąsiedzi w mieli już możliwość przyłączenia do v , wykonuje się ponownie krok preferencyjnego przyłączania, a po „zagospodarowaniu” wszystkich połączeń wierzchołka v wraca się do punktu 2.

Kiedy przyłączany jest dany wierzchołek z m krawędziami do sieci, najpierw wykonywany jest więc krok preferencyjnego przyłączania, później następuje formowanie triady z pewnym prawdopodobieństwem P_t . Średnia liczba kroków FT wynosi:

$$m_t = (m - 1)P_t \quad (2.13)$$

i jest ona jednocześnie parametrem „kontrolującym” i sterującym stopień klasteryzacji sieci (dla wartości $m_t = 0$ zaproponowane rozwiązanie powraca do podstawowego modelu BA).

Wprowadzenie dodatkowego kroku FT ma przykładowo dość silne uzasadnienie w realnych sieciach socjologicznych: jeśli osoba A zna B i C spodziewamy się, że B i C także się znają. Ponadto opisany tutaj model charakteryzuje się dodatkowo bezskalowością, co w połączeniu z wysokim współczynnikiem klasteryzacji daje algorytm, który lepiej niż rozwiązanie zaproponowane przez Watts’a i Strogatza (zob. rozdział 2.2) nadaje się do opisu wielu rzeczywistych sieci [46].

2.3.2 Zwiększenie stopnia klasteryzacji w sieciach przypadkowych

Rozwiązanie przedstawione przez Holme’a i Kima [27] można zaadoptować także dla sieci przypadkowych. Wówczas algorytm generacji sieci przypadkowej o wysokim stopniu klasteryzacji możnaby opisać następująco:

1. Początkowo sieć zbudowana jest z N węzłów.
2. Dla każdej pary węzłów i oraz j tworzone są połączenia z prawdopodobieństwem p .

²W sieciach bezskalowych prawdopodobieństwo $P(k)$ znalezienia wierzchołka z k krawędziami jest proporcjonalne do $k^{-\gamma}$, gdzie γ jest stałą charakterystyczną dla danej sieci.

3. *Klasteryzacja*: dla każdego węzła mającego conajmniej dwóch sąsiadów wstawiamy z prawdopodobieństwem pC krawędź pomiędzy tymi sąsiadami (kolejno dla każdej pary danego węzła) – analogicznie do kroku „formowania triady” w modelu zaproponowanym przez Holme’a i Kima [27].

Powyższy przepis tworzy sieć przypadkową, która obok własności małego świata charakteryzuje się także regulowanym współczynnikiem klasteryzacji. Efekt jest więc podobny do tego uzyskanego przez Watts’a i Strogatza [61], jednakże w przeciwieństwie do tamtego uzyskujemy graf „od razu” przypadkowy.

Rozdział 3

Sieci dekorowane spinami — teoria

Skonstruowanie uproszczonego modelu często pomaga zastąpić rzeczywisty, bardzo złożony układ prostszym, który zachowuje się jakościowo w ten sam sposób i który może dawać całkiem dobre przybliżenia. Jednym z nich jest *model Isinga*¹ – wstępnie stworzony do rozwiązania zagadki przejść fazowych w ferromagnetyku, obecnie znajdujący zastosowania także w modelowaniu gazu sieciowego czy stopu podwójnego [28], a także w innych dziedzinach takich jak np. socjologia (formułowanie się opinii publicznej – „za” i „przeciw”), genetyka (aktywny i nieaktywny gen) czy ekonomia.

3.1 Ferromagnetyzm i model Isinga

Materiał ferromagnetyczny charakteryzuje się występowaniem tzw. domen magnetycznych – spiny atomowe ustawiają się spontanicznie wzdłuż jednego kierunku w obszarach zawierających wiele atomów². Po umieszczeniu ferromagnetyka w zewnętrznym polu magnetycznym wszystkie lokalne obszary o takim samym kierunku namagnesowania będą miały dodatkowo tendencję do ustawienia swoich momentów magnetycznych wzdłuż jednego kierunku. Stan ten nie zmienia się po wyłączeniu pola magnetycznego – w rezultacie powstaje stan namagnesowania resztkowego, kiedy próbka sama wytwarza zewnętrzne pole magnetyczne.

Właściwości ferromagnetyczne zanikają jednak powyżej temperatury Curie³ – spontaniczna magnetyzacja domen zanika, a ferromagnetyk całkowicie się rozmagnesowuje. Jak wytłumaczyć takie nagłe przejście przez punkt Curie? Czy poniżej tej temperatury występują pewne długozasięgowe korelacje pomiędzy spinami? Na te pytania odpowiada właśnie model Isinga [11, 33].

Definicja modelu Isinga

W ramach modelu Isinga rozpatruje się pewną periodyczną d -wymiarową sieć ($d = 1, 2, 3$) w węzłach której umieszczono oddziaływujące spiny (zastępujące momenty magnetyczne atomów

¹Model Isinga faktycznie został zaproponowany przez Lenza a rozwiązany przez jego ucznia Ernesta Isinga dla przypadku jednowymiarowego w 1925r. [36]

²W paramagnetyku spiny nie tworzą żadnych lokalnych grup skierowanych w tą samą stronę, każdy z nich ustawia się w losowo wybranym kierunku.

³Przykładowo dla żelaza $T_C = 1039K$

w magnetyku), mogące przyjmować dwie wartości: 1 (spin „w górę” \uparrow) i -1 (spin „w dół” \downarrow). Całkowita energia takiego układu spinów wynosi:

$$E = - \sum_{\langle ij \rangle} JS_i S_j - H \sum_i S_i \quad (3.1)$$

gdzie zmienna spinowa S_i przyjmuje wartości ± 1 , $\langle ij \rangle$ oznacza pary najbliższych sąsiadujących spinów, J jest całką wymiany, a H jest energią oddziaływania spinu z polem magnetycznym (w skrócie można mówić, że H jest zewnętrznym polem magnetycznym). Za całkę wymiany przyjmujemy pewną stałą wartość, większą od zera w przypadku układu o sprzężeniu ferromagnetycznym (preferowane zgodne ustawienia sąsiednich spinów), a mniejszą od zera dla antyferromagnetyka (gdzie preferowane są stany spinów przeciwnie skierowanych).

Magnetyzacja

Magnetyzacja (namagnesowanie) opisuje moment magnetyczny próbki materiału w jednostce objętości [33]. Numerycznie można ją wyznaczyć jako średnią w czasie sumę wszystkich spinów podzieloną przez ich liczbę, tzn.:

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i. \quad (3.2)$$

Poniżej temperatury Curie uporządkowana faza ferromagnetyczna będzie generowała niezerową magnetyzację; dla $T > T_C$ magnetyzacja będzie wynosiła zero.

Rozwiązanie modelu Isinga

Jak dotąd analityczne rozwiązanie modelu Isinga podano tylko dla przypadku jedno- i dwuwymiarowego.

W modelu jednowymiarowym⁴ zjawisko ferromagnetyzmu nie występuje – dążenie do uporządkowania spinów jest zbyt słabe, ponieważ liczba oddziaływujących najbliższych sąsiadów jest zbyt mała [28].

Dla dwuwymiarowego modelu Isinga, pierwsze rozwiązanie (w nieobecności pola magnetycznego) podał Onsager w 1944r. Zgodnie z jego obliczeniami temperaturę krytyczną określają równania (za [28]):

$$kT_C = (2.269185) \cdot J \quad (3.3)$$

$$e^{-\frac{J}{kT_C}} = \sqrt{2} - 1 \quad (3.4)$$

Natomiast spontaniczne namagnesowanie (które jest miarą uporządkowania dalekiegozasięgu) wyznaczył Yang [63]. Średnia wartość spinu wynosi:

$$m = \begin{cases} 0 & T > T_C \\ \frac{(1+z^2)^{\frac{1}{4}}(1-6z^2+z^4)^{\frac{1}{8}}}{\sqrt{1-z^2}} & T < T_C \end{cases} \quad (3.5)$$

gdzie:

$$z \equiv e^{-\frac{2J}{kT}}. \quad (3.6)$$

W ramach dwuwymiarowego modelu udało się zaobserwować występowanie długozasięgowych korelacji: pomimo tego, że każdy spin oddziałuje tylko z najbliższymi sąsiadami, poniżej

⁴Węzły sieci dla $d = 1$ tworzą łańcuch N spinów, które oddziałują tylko z dwoma najbliższymi sąsiadami i z polem H . Łańcuch ten po nałożeniu periodycznych warunków brzegowym ma postać okręgu.

pewnej temperatury momenty magnetyczne w ramach tzw. domen będą preferowały tylko jeden wyróżniony kierunek. Rzeczywiście zachodzi więc przejście fazowe, powyżej T_C spiny układają się w taki sposób, że występują tylko krótkozasięgowe korelacje, natomiast po przejściu przez punkt Curie mamy do czynienia z uporządkowaniem dalekozasięgowym.

3.2 Model niezależnych par

Model niezależnych par dla przypadku drzew w zerowym polu jest równoważny przybliżeniu Bethego-Peierlsa [28]. W tym modelu sieć spinów Isinga rozpada się na zbiór par oddziałujących spinów. To założenie może być podstawą pewnych przybliżonych rozumowań dla układu jednowymiarowego i dla regularnej sieci Bethego. Zastosowanie tej koncepcji dla drzew wymaga dalszych przybliżeń, podobnie jak i dla sieci z wzmocnioną klasteryzacją, które to będziemy rozpatrywać w dalszych rozdziałach.

Model

Model niezależnych par polega na tym, że stany poszczególnych wiązań są od siebie niezależne. Oznacza to, że dla dowolnej pary spinów w sieci można zmieniać stany tej pary nie zmieniając jednocześnie stanów pozostałych par.

Funkcja korelacji

Ogólnie, funkcja korelacji f dwóch spinów S_i oraz S_j określana jest przez wyrażenie:

$$f_{ij} = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \quad (3.7)$$

gdzie $\langle S_i \rangle$ oznacza średnią po stanach i -tego spinu. Ponieważ w fazie paramagnetycznej średnia po stanach dowolnego spinu wynosi zero, można zapisać funkcję korelacji jako średnią po stanach iloczynu rozpatrywanych spinów, tzn.:

$$f_{ij} = \langle S_i S_j \rangle. \quad (3.8)$$

Funkcja korelacji dla dwóch sąsiednich spinów S_0 i S_1 będzie więc wynosiła $\langle S_0 S_1 \rangle$. Wykorzystując formalizm sumy statystycznej⁵ Z możemy zapisać:

$$\langle S_0 S_1 \rangle = \sum_{\sigma} \frac{1}{Z} e^{-\beta E_{01}(\sigma)} S_0(\sigma) S_1(\sigma) \quad (3.9)$$

Po obliczeniu wyrażenia 3.9 otrzymujemy funkcję korelacji spin-spin dla pary spinów będących najbliższymi sąsiadami równą:

$$\langle S_0 S_1 \rangle = th(\beta J). \quad (3.10)$$

Ponieważ dla układów nieskończonych (takich jak sieć Bethego, czy dwuwymiarowy model Isinga) przyjmuje się, że średnia po stanach każdej pary sąsiadów jest taka sama, możemy założyć, że wzór 3.10 poprawny będzie dla każdej pary sąsiadujących spinów.

Analogicznie, dla spinów odległych o dwa wiązania możemy zapisać:

$$\langle S_0 S_2 \rangle = \langle S_0 S_1 S_1 S_2 \rangle \quad (3.11)$$

⁵Sumę statystyczną definiujemy jako $Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta E_{\sigma}}$, gdzie sumowanie przebiega po stanach σ , E_{σ} oznacza energię stanu σ , a $\beta = \frac{1}{kT}$

a ponieważ stany par są niezależne:

$$\langle S_0 S_2 \rangle = \langle S_0 S_1 \rangle \langle S_1 S_2 \rangle. \quad (3.12)$$

Przyjmując ponownie założenie o takiej samej średniej po stanach każdej pary sąsiadów otrzymujemy:

$$\langle S_0 S_2 \rangle = \langle S_0 S_1 \rangle^2. \quad (3.13)$$

Podstawiając wynik 3.10 otrzymujemy funkcję korelacji dla drugich sąsiadów równą $th^2(\beta J)$. Ogólnie, dla spinów odległych o r wiązań funkcja korelacji spin-spin będzie wynosiła:

$$f_{i,i+r} = th^r(\beta J). \quad (3.14)$$

Temperatura krytyczna

Wykorzystując założenia modelu niezależnych par możemy policzyć temperaturę przejścia fazowego T_X obliczając podatność dla fazy paramagnetycznej i sprawdzając dla jakiej temperatury dąży ona do nieskończoności⁶.

Podatność obliczamy jako iloczyn funkcji korelacji i wielkości β , a wykorzystując wzór 3.8 możemy zapisać:

$$\chi = \beta \sum_{i,j} \langle S_i S_j \rangle \quad (3.15)$$

Poniżej przedstawiono obliczenia temperatury Curie dla jednowymiarowego modelu sieci, dla regularnej sieci Bethego oraz dla drzewa przypadkowego.

3.2.1 Łańcuch spinów, czyli model jednowymiarowy

W przypadku nieskończonego łańcucha spinów sumę po wszystkich parach ij obecną we wzorze 3.15 zamieniono na sumę po kolejnych węzłach oraz po promieniu r (czyli po kolejnych odległościach od węzła i):

$$\chi = \beta \sum_{i=1}^N \sum_{r=0}^N \langle S_i S_{i+r} \rangle \quad (3.16)$$

Wykorzystując założenia modelu niezależnych par otrzymujemy:

$$\begin{aligned} \chi &= \beta N \sum_{r=0}^N \langle S_1 S_{1+r} \rangle \\ &= \beta N \sum_{r=0}^N th^r(\beta J) \end{aligned}$$

W granicy $N \rightarrow \infty$ wykorzystujemy definicję sumy ciągu geometrycznego i obliczamy podatność na spin:

$$\chi_1 = \frac{\chi}{N} = \beta \frac{1}{1 - th(\beta J)} \quad (3.17)$$

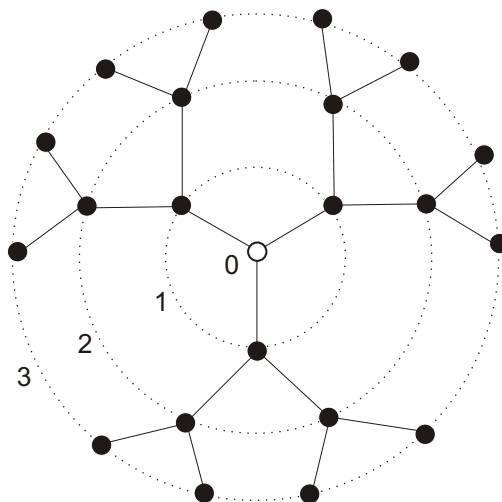
Podatność łańcucha spinów wyrażona wzorem 3.17 będzie nieskończona dla $th(\beta J) = 1$, czyli dla $T_C = 0$.

⁶W temperaturze przejścia fazowego do stanu ferromagnetyka lub antyferromagnetyka dla układu nieskończonego $\frac{\chi}{N}$ przyjmuje wartość nieskończoną

3.2.2 Regularna sieć Bethego

Model sieci

Regularna sieć Bethego jest połączonym grafem o strukturze drzewa, gdzie każdy węzeł posiada dokładnie k sąsiadów. Graficznie sieć tę można przedstawić jako gałęzie drzewa rozprzestrzeniające się z centralnego punktu, gdzie kolejne grupy węzłów (pierwszych, drugich itd. sąsiadów) tworzą powłoki otaczające centralny wierzchołek (zob. rys. 3.1).



Rysunek 3.1: Pierwsze trzy powłoki regularnej sieci Bethego o $k = 3$.

Konstrukcja regularnej sieci Bethego przebiega następująco (za [6]).

1. Rozpoczynając od centralnego punktu 0 dodajemy k nowych węzłów i wszystkie przyłączamy do centralnego. Tak powstaje pierwsza powłoka.
2. Kolejne powłoki tworzymy przez przyłączenie do każdego z węzłów powłoki poprzedniej $k - 1$ nowych wierzchołków. Każda powłoka r będzie zawierała dokładnie $k(k - 1)^{r-1}$ węzłów.

W ten sposób tworzymy regularną sieć Bethego, gdzie każdy węzeł ma dokładnie k pierwszych sąsiadów, $k(k - 1)$ drugich sąsiadów, a ilość węzłów odległych o r wiązań jest $k(k - 1)^{r-1}$.

Podatność i temperatura krytyczna

Umieszczając w węzłach sieci Bethego spiny obliczamy podatność wykorzystując ponownie wzór 3.15. Mając na uwadze rozmieszczenie węzłów w kolejnych powłokach możemy zapisać:

$$\chi = \beta N [\langle S_0 S_0 \rangle + k \langle S_0 S_1 \rangle + k(k - 1) \langle S_0 S_2 \rangle + k(k - 1)^2 \langle S_0 S_3 \rangle + \dots]$$

Wykorzystując funkcję korelacji 3.8 i oznaczając $th(\beta J) = v$:

$$\begin{aligned} \chi &= \beta N [1 + kv + k(k - 1)v^2 + k(k - 1)^2 v^3] \\ &= \beta N [1 + kv [1 + (k - 1)v + (k - 1)^2 v^2 + \dots]] \\ &= \beta N \left[1 + \frac{kv}{1 - (k - 1)v} \right]. \end{aligned} \tag{3.18}$$

Natępnie obliczamy podatność na spin i badamy, kiedy jej wartość będzie nieskończona. Zerowanie się mianownika we wzorze 3.18 odpowiada wyrażeniu:

$$th(\beta J) = \frac{1}{k-1} \quad (3.19)$$

które pozwoli nam obliczyć temperaturę krytyczną przejścia fazowego. Po przekształceniach możemy zapisać:

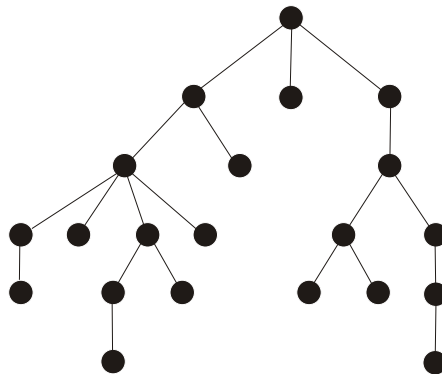
$$T_C = \frac{2J}{k\beta \ln \frac{k}{k-2}} \quad (3.20)$$

Wzór 3.20 jest zgodny z literaturą [6, 12] i pozwala analitycznie wyznaczyć temperaturę Curie dla regularnej sieci Bethego.

3.2.3 Drzewo przypadkowe

Model sieci

Model drzewa przypadkowego jest często używany do zobrazowania ewolucji populacji z pokolenia na pokolenie [21] (zob. rys 3.2).



Rysunek 3.2: Model drzewa przypadkowego.

W grafie tym liczba pierwszych, drugich i kolejnych sąsiadów są różne w całej sieci (każdy z węzłów jest połączony z dowolną liczbą wierzchołków). Ponieważ liczba sąsiadów danego węzła i jest losowa, nie można przewidzieć ile będzie sąsiadów w odległości r . Dlatego też model drzewa przypadkowego jest modelem przybliżonym. Przybliżenie to polega na oszacowaniu liczby węzłów $u(r)$ w odległości r :

$$u(r) = z_1 \left(\frac{z_2}{z_1} \right)^{r-1} \quad (3.21)$$

gdzie z_1 , z_2 jest średnią liczbą odpowiednio pierwszych i drugich sąsiadów. Wtedy w odległości $r = 1$ sąsiadów będzie z_1 , w odległości $r = 2$ będzie ich z_2 , a dalej tak, jak wynika z przybliżenia 3.21.

Model ten, choć nie zawiera pętli dobrze opisuje strukturę sieci przypadkowej Erdősa-Rényi.

Podatność i temperatura krytyczna

Dekorując węzły drzewa przypadkowego spinami obliczamy podatność wykorzystując wzór 3.15:

$$\begin{aligned}
\chi &\sim \beta N \left[\langle S_0 S_0 \rangle + z_1 \langle S_0 S_1 \rangle + z_1 \left(\frac{z_2}{z_1} \right) \langle S_0 S_2 \rangle + z_1 \left(\frac{z_2}{z_1} \right)^2 \langle S_0 S_3 \rangle + \dots \right] \\
&\sim \beta N \left[1 + z_1 v + z_1 \left(\frac{z_2}{z_1} \right) v^2 + z_1 \left(\frac{z_2}{z_1} \right)^2 v^3 + \dots \right] \\
&\sim \beta N \left[1 + z_1 v \left[1 + \left(\frac{z_2}{z_1} \right) v + \left(\frac{z_2}{z_1} \right)^2 v^2 + \dots \right] \right] \\
&\sim \beta N \left[1 + \frac{z_1 v}{1 - \left(\frac{z_2}{z_1} \right) v} \right]. \tag{3.22}
\end{aligned}$$

Obliczamy ponownie podatność na spin i sprawdzamy, kiedy podatność dąży do nieskończoności. Zerowanie się mianownika we wzorze 3.22, które odpowiada $\chi \rightarrow \infty$ jest równoznaczne z wyrażeniem:

$$th(\beta J) = \frac{z_1}{z_2}. \tag{3.23}$$

Po przekształceniach wartość temperatury krytycznej dla drzewa przypadkowego jest równa:

$$T_C = \frac{2J}{k_\beta \cdot \ln \frac{B+1}{B-1}}, \tag{3.24}$$

gdzie $B = \frac{z_2}{z_1}$.

3.3 Antyferromagnetyzm

Antyferromagnetyk charakteryzuje się występowaniem wzajemnie antyrównoległego uporządkowania sąsiednich spinów, w związku z czym jego wypadkowy moment magnetyczny jest zerowy [33]. Faza to występuje poniżej pewnej temperatury, nazywanej *temperaturą Néela* T_N . Dla $T > T_N$ uporządkowanie antyferromagnetyczne znika, a układ przechodzi w fazę paramagnetyczną.

Zarówno dla fazy paramagnetycznej jak i uporządkowanej antyferromagnetycznej wypadkowa magnetyzacja jest zerowa, w związku z czym nie może być ona wykorzystana do oszacowania temperatury krytycznej. Temperaturę przejścia fazowego w sieci antyferromagnetycznej można natomiast odczytywać z zależności termicznej *ciepła właściwego* oraz *podatności magnetycznej*.

Tak otrzymaną numerycznie wartość możemy porównać z przewidywaniami teoretycznymi dla drzewa przypadkowego.

Drzewo jest przypadkiem grafu dwudzielnego (ang. *bipartite*), w którym każdy węzeł w jednej podsieci sąsiaduje z węzłem tylko z drugiej podsieci. Istnieje wobec tego równoważność fazy ferromagnetycznej i fazy antyferromagnetycznej, którą można zademonstrować zmieniając jednocześnie znaki spinów w jednej podsieci i znaki wszystkich wiązań magnetycznych J_{ij} . Z tego wynika w szczególności, że temperatura Neela dla drzew jest taka sama jak temperatura Curie (zob. wzór 3.24). Wzór 3.24 można więc stosować wstawiając wartość bezwzględną całki wymiany (czyli wstawiając całkę J dla antyferromagnetyka ze znakiem przeciwnym).

3.3.1 Ciepło właściwe

Dla przypadku antyferromagnetyka, to co może świadczyć o istnieniu przejścia fazowego w sieci to maksimum ciepła właściwego powyżej temperatury krytycznej [56]. Wielkość tą można obliczać za pomocą dwóch metod:

1. Ciepło właściwe jako pochodna całkowitej energii po temperaturze:

$$C_v = \frac{\delta E}{\delta T} \quad (3.25)$$

2. Ciepło właściwe jako wariancja energii układu:

$$C_v = k\beta^2[\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad (3.26)$$

3.3.2 Podatność magnetyczna

Badanie przejścia fazowego przy użyciu podatności magnetycznej sprowadza się także do poszukiwania maksimum tej wielkości w danej temperaturze (analogicznie jak w przypadku ciepła właściwego).

Wartość podatności dla danej temperatury można uzyskać w oparciu o dwie metody:

1. Podatność jako wariancja magnetyzacji dla układu nie oddziaływującego z polem:

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT}, \quad (3.27)$$

gdzie $\langle M \rangle$ oznacza średnią czasową magnetyzacji.

2. Podatność liczona jako iloraz różnicowy magnetyzacji dla układu w zewnętrznym polu magnetycznym dodatnim h_+ oraz w polu przeciwnym h_- :

$$\chi = \frac{M_{h_-} - M_{h_+}}{\Delta h} \quad (3.28)$$

3.4 Szkoło spinowe

Szkoła spinowe są materiałami, które w przeciwieństwie do ferromagnetyków i antyferromagnetyków nie posiadają uporządkowania dalekiego zasięgu. Podstawowe własności szkieł spinowych to nieporządek oraz konkurencja oddziaływań [7], która powoduje, że układ posiada wiele stanów podstawowych. W szczególności w modelu $\pm J$ Edwardsa-Andersona dana para spinów może z równym prawdopodobieństwem oddziaływać ferromagnetycznie lub antyferromagnetycznie, stąd oddziaływanie pomiędzy spinami jest przypadkowe (ang. *quenched randomness*, za [57]). W materiałach tego typu taka konkurencja oddziaływań pojawia się m.in. na skutek jednoczesnej obecności oddziaływań antyferromagnetycznych i ferromagnetycznych pochodzących od domieszek w stopach (np. *CuMn*, *AuFe* [57]).

Temperaturę, poniżej której obserwować można fazę szkła spinowego nazywamy temperaturą szkła spinowego T_{SG} lub *temperaturą zamarzania*. Poniżej tej temperatury spiny zastygają w przypadkowych kierunkach i właśnie ten „magnetyczny nieporządek” odniesiono do amorficznej struktury szkła, stąd nazwa — *szkoło spinowe*.

Frustracja

Szkło spinowe charakteryzuje się *frustracją* – w układzie występuje nieporządek wiązań tzn. obecne są jednocześnie wiązania ferromagnetyczne i antyferromagnetyczne (średnia wartość całki wymiany wynosi zero, zob. rys. 3.3 a)). Nie istnieje wówczas taka konfiguracja spinów, która jednocześnie „usatysfakcjonuje” wszystkie oddziaływania pomiędzy węzłami sieci [57].

Frustracja geometryczna pojawia się, kiedy to geometria (topologia spinów w sieci) wyklucza jednoczesną minimalizację wszystkich oddziaływań pomiędzy spinami sieci [44]. Najprostszym przykładem takiej topologii jest sieć trójkątna, w której węzłach sieci umieszczono spiny oddziaływujące antyferromagnetycznie. Wówczas w obrębie jednego trójkąta wszystkie pary spinów nie mogą jednocześnie przyjąć konfiguracji wzajemnie antyrównoległej (zob. rys. 3.3 b)).



Rysunek 3.3: a) Nieporządek wiązań jest źródłem *frustracji*. b) Frustracja geometryczna w sieci trójkątnej z antyferromagnetycznym oddziaływaniem pomiędzy węzłami sieci.

W przyrodzie, frustracja geometryczna dotyczy głównie tlenków metali przejściowych lub ziem rzadkich, których struktura krystalograficzna zawiera komórki elementarne w postaci trójkątów (sieć Kagome’a) lub tetraedrów (struktura pirochloru) [34].

Podatność i temperatura krytyczna

W celu analitycznego wyznaczenia temperatury zamarzania T_{SG} po raz kolejny wykorzystamy model niezależnych par i policzymy kiedy podatność szkła spinowego przyjmuje wartość nieskończoną. Dla szkła spinowego mierzy się podatność nieliniową jako [20]:

$$\chi = \frac{\beta^2}{N} \sum_{ij} \langle S_i S_j \rangle^2. \quad (3.29)$$

Przyjmując teraz za model sieci drzewo przypadkowe (zob. rozdział 3.2.3) i oznaczając $th\beta J = v$ możemy rozpisać wzór 3.29:

$$\begin{aligned} \chi &\sim \frac{\beta^2}{N} \left[\langle S_0 S_0 \rangle^2 + z_1 \langle S_0 S_1 \rangle^2 + z_1 \left(\frac{z_2}{z_1} \right) \langle S_0 S_2 \rangle^2 + z_1 \left(\frac{z_2}{z_1} \right)^2 \langle S_0 S_3 \rangle^2 + \dots \right] \\ &\sim \frac{\beta^2}{N} \left[1 + z_1 v^2 + z_1 \left(\frac{z_2}{z_1} \right) v^4 + z_1 \left(\frac{z_2}{z_1} \right)^2 v^6 + \dots \right] \\ &\sim \frac{\beta^2}{N} \left[1 + z_1 v^2 \left[1 + \left(\frac{z_2}{z_1} \right) v^2 + \left(\frac{z_2}{z_1} \right)^2 v^4 + \dots \right] \right] \\ &\sim \frac{\beta^2}{N} \left[1 + \frac{z_1 v^2}{1 - \left(\frac{z_2}{z_1} \right) v^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Aby zbadać, dla jakich wartości podatność jest nieskończona, wystarczy sprawdzić zerowanie się mianownika w wyrażeniu 3.30. W wyniku otrzymujemy:

$$th^2\beta J = \frac{z_1}{z_2}, \quad (3.31)$$

skąd obliczamy wartość temperatury krytycznej T_{SG} dla modelu drzewa przypadkowego:

$$T_{SG} = \frac{2J}{k_\beta \cdot \ln \frac{\sqrt{B+1}}{\sqrt{B-1}}}. \quad (3.32)$$

3.4.1 Parametr Edwardsa-Andersona

Parametrem porządku szkieł spinowych jest *parametr Edwardsa-Andersona* [8], który definiujemy jako sumę po spinach średnich czasowych wartości spinu:

$$q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{\tau} \sum_{t=1}^{\tau} S_i(t) \right)^2 \quad (3.33)$$

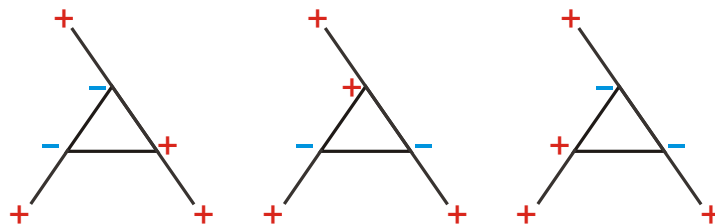
gdzie $S_i(t)$ oznacza i -ty spin w czasie t . Niezerowa wartość parametru q oznaczać będzie fazę szkła spinowego, a wartość temperatury dla której q znika można przyjmować jako temperaturę przejścia T_{SG} szkło spinowe \rightarrow paramagnetyk.

3.4.2 Parametr przekrywania

Parametr przekrywania Q definiuje się w następujący sposób [51]. Rozważane są dwie identyczne pod względem topologii sieci, które dążą do równowagi osobno (tzn. wykorzystując inny zestaw liczb pseudolosowych — algorytm kąpieli cieplnej dla sieci i jej kopii wykonywany jest osobno). Następnie obliczana jest suma iloczynów tych samych spinów pochodzących z dwóch wyżej wymienionych realizacji tej samej sieci:

$$Q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^I S_i^{II}. \quad (3.34)$$

Wartość tak wyznaczonego parametru zmienia się od -1 do $+1$. Stan paramagnetyczny cechuje $Q = 0$.



Rysunek 3.4: Trzy możliwe stany podstawowe dla układu zawierającego zamkniętą ścieżkę.

Nawiązując do koncepcji, zgodnie z którą w fazie szkła spinowego istnieją tylko dwa stany podstawowe różniące się wartościami wszystkich spinów [9, 57, 24] należałoby się spodziewać, że w stanie podstawowym $Q = \pm 1$. W istocie w literaturze dotyczącej szkieł spinowych napotykamy rozkład prawdopodobieństwa $P(Q)$ charakteryzujące się obecnością dwóch ostrych pików odpowiadających wartościom $Q = \pm a$, gdzie a przybiera wartości z zakresu od 0.5 do 1 [50]. Z tego względu średnia wartość bezwzględna parametru Q mogłaby służyć jako parametr porządku w badaniu przejścia od fazy paramagnetycznej do fazy szkła spinowego.

Ten wybór parametru porządku dla celów tej pracy okazuje się jednak bezużyteczny. Przyczyna jest następująca. W układach ze zwiększoną klasteryzacją, które będziemy rozważać w dalszych rozdziałach, występuje duża liczba trójkątów, gdzie trzy wierzchołki są swoimi sąsiadami. Ilość stanów podstawowych rośnie z ilością trójkątów n_t jak 3^{n_t} (przykładowo, dla jednego trójkąta w układzie mamy trzy stany podstawowe – zob. rys. 3.4). W takich układach nie można się spodziewać dużych wartości parametru Q w fazie szkła spinowego. Dlatego nie prowadzimy systematycznych obliczeń średniej wartości Q , a jedynie obliczamy po jednej wartości tego parametru w funkcji temperatury.

Rozdział 4

Algorytmy numeryczne

Dużo prostsze rozwiązanie modelu Isinga (choć mniej precyzyjne) otrzymujemy przy użyciu pewnych algorytmów numerycznych. W powszechnie stosowanym podejściu numerycznym korzysta się z metody Monte Carlo.

4.1 Metoda Monte Carlo

Metoda Monte Carlo jest – najogólniej rzecz biorąc – algorytmem komputerowym, wykorzystującym liczby losowe do rozwiązania problemu¹. Podstawą analizy jest statystyka liczona na wygenerowanym zbiorze wartości.

W symulacji Monte Carlo tworzy się kolejne elementy zespołu statystycznego pojedynczo, a średnią po zespole zastępuje się średnią po czasie². Jakość uzyskanych wyników będzie więc uzależniona od liczby kroków symulacji.

Rozpatrzmy pewien układ, którego stan oznaczamy jako C , a energię $E(C)$. W zespole kanonicznym³ względne prawdopodobieństwo wystąpienia stanu C wynosi

$$P_C(E) = e^{-\beta E(C)}, \quad (4.1)$$

gdzie $\beta = \frac{1}{kT}$ a T jest temperaturą układu. Kolejne etapy symulacji Monte Carlo będą polegały na generacji ciągu stanów

$$C_1 \longrightarrow C_2 \longrightarrow \dots C_n \longrightarrow C_{n+1} \longrightarrow \dots \quad (4.2)$$

o rozkładzie kanonicznym, w którym stany powstają z prawdopodobieństwem opisanym wzorem 4.1. Szereg kolejnych stanów jest ciągiem stanów równowagowych.

Tak zdefiniowany przepis Monte Carlo można osiągnąć za pomocą pewnego procesu stochastycznego zwanego procesem Markowa, gdzie prawdopodobieństwo znalezienia układu w stanie n , jeśli wcześniej był w stanie $1, 2, \dots, n-1$ wynosi:

$$P(1, 2, \dots, n-1|n) = P(n-1|n) \quad (4.3)$$

¹Pierwsze na dużą skalę rachunki oparte o liczby losowe miały miejsce w trakcie prac nad bombą atomową (lata 40. ubiegłego stulecia). Prowadzone były przez Neumanna, Metropolis i Feynmana, a dotyczyły rozpraszania i absorpcji neutronów w ramach projektu „Manhattan” [54].

²Cały wywód dotyczący metod Monte Carlo oparty jest na podstawie [29]

³Zespół kanoniczny opisuje układ otwarty o ustalonej liczbie cząstek, będących w kontakcie ze zbiornikiem cieplnym o temperaturze T (możliwe są fluktuacje energii)

czyli nie zależy od historii układu – wartość procesu zależy tylko od wartości w chwili poprzedniej [29]. Warunek szczegółowej równowagi definiujemy jako:

$$W(1)P(1|2) = W(2)P(2|1), \quad (4.4)$$

gdzie $W(1)$ i $W(2)$ są prawdopodobieństwami stanu odpowiednio 1 i 2, a prawdopodobieństwo warunkowe znalezienia układu w stanie 2 jeśli początkowo był on w stanie 1 wynosi $P(C_1|C_2)$ (przejście $C_1 \rightarrow C_2$). Gdy układ jest zespołem kanonicznym, warunek równowagi szczegółowej (4.4) można przepisać następująco:

$$e^{-\beta E(C_1)} P(C_1|C_2) = e^{-\beta E(C_2)} P(C_2|C_1). \quad (4.5)$$

Ponadto z własności prawdopodobieństwa wynika, że:

$$P(C_1|C_2) \geq 0 \quad (4.6)$$

$$\sum_{C_2} P(C_1|C_2) = 1. \quad (4.7)$$

Algorytmy numeryczne, odnoszące się do stanów równowagi, powinny spełniać warunki 4.5 – 4.7. Przykładem algorytmu, opartego na metodzie Monte Carlo jest algorytm Metropolis'a, a także algorytm kąpielii cieplnej.

4.1.1 Algorytm Metropolis'a

W ogólnym przypadku schemat Metropolis'a można opisać następującymi krokami [29]:

1. Zakładamy, że dany jest stan C_1
2. Przechodzimy do stanu C_2
3. Jeśli $E(C_2) < E(C_1)$ akceptujemy nowy stan
4. Jeśli $E(C_2) \geq E(C_1)$ akceptujemy przejście do stanu C_2 z prawdopodobieństwem równym $e^{-\beta[E(C_2)-E(C_1)]}$.

Przykładowo metodę Metropolis'a możemy zastosować do numerycznych obliczeń przejść fazowych w ferromagnetyku opisywanych modelem Isinga (zob. rozdział 3.1). Wówczas algorytm „odwraca” spiny w zależności od przyłożonego pola zewnętrznego oraz temperatury tak, aby układ uzyskał równowagę termodynamiczną:

1. Wybieramy losowy węzeł i z sieci spinów,
2. Obliczamy energię oddziaływania E_0 wybranego spinu z sąsiadami,
3. Odwracamy spin tego węzła $S_i = -S_i$ i obliczamy nową energię oddziaływania E_k ,
4. Jeżeli $\Delta E = E_k - E_0 < 0$ to akceptujemy to odwrócenie,
5. Jeżeli $\Delta E = E_k - E_0 \geq 0$ to losujemy liczbę x z przedziału $(0, 1)$,
6. Dla $x < e^{-\beta\Delta E}$ przyjmujemy zmianę spinu, w przeciwnym wypadku spinu nie odwracamy.

Powyższą procedurę wykonujemy dopóki układ nie osiągnie stanu stacjonarnej energii przy danej temperaturze i polu zewnętrznym.

4.1.2 Algorytm kąpieli cieplnej

Alternatywny do algorytmu Metropolis jest algorytm kąpieli cieplnej. Tutaj prawdopodobieństwo akceptacji zmiany spinu wynosi:

$$r_i(t) = \frac{1}{1 + \exp[\frac{2\Delta E}{T}]} \quad (4.8)$$

W kolejnych krokach algorytm przebiega następująco:

1. Wybieramy kolejne węzły i a następnie obliczamy E_o .
2. Odwracamy wybrany spin i ponownie obliczamy energię jego oddziaływania ze spinami E_k .
3. Obliczamy wartość r_i i losujemy dowolną liczbę x z przedziału $(0, 1)$.
4. Jeżeli wylosowana liczba $x \leq r_i$ to akceptujemy odwrócenie spinu.

Następnie procedura wraca do punktu pierwszego i rozważa kolejny spin sieci.

W symulacjach, jakie przeprowadzono w tej pracy najbardziej stabilne wyniki uzyskano wykorzystując algorytm kąpieli cieplnej.

4.2 Modelowanie sieci

Numerycznie, dowolną sieć można zapisać jako macierz $N \times S$, gdzie numer kolejnego wiersza odpowiada węzłowi sieci, a liczba kolumn S jest zmienna i uzależniona od ilości sąsiadów danego wierzchołka i [10]. Element c_{ij} tej macierzy podaje numer j -tego sąsiada węzła i . Dekorowanie węzłów spinami odbywa się za pomocą wektora o rozmiarze N , którego kolejne wskaźniki $i = 1, 2, \dots, N$ odpowiadają węzłom sieci, a wartości $-$ wartościom spinu przyporządkowanego do danego węzła ($S = \pm 1$). Początkowy znak każdego spinu ustalano w dwojaki sposób:

1. Wszystkie spiny przyjmują wartość $+1$ (wszystkie skierowane w górę).
2. Spiny przyjmują przypadkowe wartości (skierowane są albo w górę albo w dół).

Jak później udowodniono, początkowy znak spinu nie wpływa na końcowe wyniki przeprowadzonych symulacji ciepła, podatności czy parametru Edwardsa-Andersona lub parametru przekrywania; nie ma więc znaczenia, którą z dwóch wyżej wymienionych metod zastosowano.

Po ustaleniu stanu początkowego układ w czasie t dąży do stanu równowagi termodynamicznej wykorzystując algorytm kąpieli cieplnej. Całkowita energia układu dana jest wzorem 3.1.

4.3 Symulacje własności magnetycznych sieci – algorytmy obliczeń

Dla każdej z omawianych w późniejszych rozdziałach sieci wszystkie symulacje Monte Carlo przeprowadzono kilkakrotnie. Początkowo, algorytmy obliczające ciepło właściwe, podatność, parametr porządku q oraz parametr przekrywania Q były testowane dla różnych początkowych ustawień spinów. Następnie, w celu sprawdzenia poprawności metody oraz ewentualnych błędów numerycznych algorytmy liczące kolejne wielkości przebiegały dla sieci o rozmiarach 10-krotnie mniejszych niż docelowe. W kolejnym etapie rozmiary sieci były zwiększane, a programy zawierające algorytmy liczące C_v , χ , q oraz Q ponownie wykonywały serie obliczeń, które są prezentowane w niniejszej pracy. Na żadnym etapie pracy nie stwierdzono wpływu rozmiarów sieci na ostateczne wyniki (rezultaty symulacji dla rozmiarów sieci mniejszych i większych były identyczne).

4.3.1 Ciepło właściwe

Ciepło właściwe obliczono dwoma metodami: wariancji energii (wzór 3.25) oraz metodą ilorazu różnicowego (wzór 3.26). Dla obu przypadków obliczenia przeprowadzono na dwóch sieciach o identycznej topologii.

Dla każdej temperatury algorytm obliczania ciepła właściwego przebiegał następująco. Początkowo, wszystkie spiny ustawiono w przypadkowych kierunkach. Następnie układ relaksował wykorzystując algorytm kąpieli cieplnej przez tzw. *czas relaksacji* N_t rzędu minimum $10^3 MC$ *kroków*. Jeden *krok* oznaczać będzie zawsze sytuację, w której N -razy (gdzie N oznacza liczbę spinów) losowane są spiny a następnie z pewnym prawdopodobieństwem odwracane. Wartość czasu relaksacji będzie zawsze uzależniona od rezultatu badania stanu równowagi układu.

Po wstępnych iteracjach obliczona zostaje średnia energia po stanach, tzn.: przez $10^3 MC$ zliczana jest w każdym *kroku* całkowita energia układu, oraz jej kwadrat a następnie obliczana jest średnia obu wielkości (wartość $N_{t_2} = 10^3 MC$ jest wartością domyślną, tzn. zastosowano ją dla wszystkich sieci, chyba że podano inaczej).

Końcowe obliczenia skupiają się na obliczeniu wartości ciepła właściwego dwoma metodami w oparciu o wzory 3.25 oraz 3.26.

4.3.2 Podatność

Podatność układu obliczono również wykorzystując dwie metody: wariancji magnetyzacji 3.27 i ilorazu różnicowego 3.28. Tym razem wyniki uzyskano korzystając z dwóch różnych sieci – układów węzłów (dla każdej metody inna sieć). Dla danej temperatury wszystkie spiny startują od wartości $S = +1$, a układ wstępnie relaksuje przez czas relaksacji $N_t \geq 10^3 MC$.

W metodzie pierwszej następnie wykonywanych jest 10^3 iteracji, w których obliczane są średnie magnetyzacje układu (oraz jej kwadratu - z $10^2 MC$ *kroków*) a także wartości podatności według wzoru 3.27. Każda taka iteracja zwraca jedną wartość podatności, wartości te są przekazywane do zewnętrznych plików. W końcowym etapie obliczona zostaje średnia podatności z powyższych 10^3 iteracji dla danej temperatury. Następnie całość powyższego algorytmu przeprowadzona zostaje dla kolejnej temperatury.

W przypadku metody ilorazu różnicowego do układu „włączane” jest zewnętrzne pole magnetyczne o wartościach $h = \pm 0.1$. Najpierw dla dodatniego pola h , a następnie dla ujemnego wykonanych zostaje 10^3 iteracji. W każdej tej iteracji obliczana jest średnia magnetyzacja układu ze $10^2 MC$ *kroków*; średnie te zwracane są do zewnętrznych plików, z podziałem na dodatnie i ujemne pole zewnętrzne. Następnie, dla danej temperatury obliczany jest iloraz różnicowy magnetyzacji na podstawie wzoru 3.28.

4.3.3 Parametr Edwardsa-Andersona

Parametr porządku szkieł spinowych q zdefiniowany wzorem 3.33 obliczono wykorzystując następujący algorytm:

1. Startujemy od sieci ze średnią magnetyzacją $M = 0$ (początkowe spiny ustawione przypadkowo).
2. Poddajemy układ wstępnej symulacji przez czas $N_{t_1} = 10^4$.
3. Po czasie N_{t_1} obliczamy sumę po spinach kwadratów średnich czasowych spinu (czas potrzebny do obliczenia tej średniej to tzw. okno czasowe $q - N_{t_2}$):
 - (a) liczymy średnią czasową wartości każdego spinu (suma wartości spinu podczas N_{t_2} kroków symulacji podzielona przez liczbę kroków),

- (b) każdą średnią podnosimy do kwadratu,
- (c) sumujemy średnie i dzielimy przez liczbę spinów N .

4.3.4 Parametr przekrywania

Parametr przekrywania Q (wzór 3.34) obliczamy pracując na dwóch kopiach sieci o tej samej topologii. W pierwszym kroku losujemy wspólny stan początkowy ustawienia spinów dla obu sieci – spiny przyjmują losowo wartość ± 1 . Następnie sieć spinów dąży do równowagi wykorzystując algorytm kąpeli cieplnej, który osobno jest generowany dla każdej z kopii sieci:

1. Każda z sieci relaksuje przez czas $N_t = 10^4$.
2. Obliczana jest suma kolejnych iloczynów tych samych spinów pochodzących z dwóch realizacji sieci tak jak podano we wzorze 3.34.

W ostatnim kroku obliczamy wartość parametru przekrywania na spin, tzn. dzielimy otrzymany parametr Q przez liczbę wszystkich węzłów N .

Rozdział 5

Sieć przypadkowa — wyniki numeryczne

Rozważano sieć przypadkową, w węzłach której umieszczono spiny ± 1 , oddziaływujące ze sobą ferromagnetycznie (całka wymiany $J = 1$) lub antyferromagnetycznie ($J = -1$). Układ wejściowy zbudowany jest z N spinów, powiązanych przypadkowo z prawdopodobieństwem p , sklasteryzowanych z prawdopodobieństwem pC . Obliczenia dotyczące ferromagnetyka wykonano dla przetestowania poprawności obliczeń.

5.1 Budowa grafu

Opis budowy grafu podjęto w rozdziale 2.3.2. Algorytm tworzenia sieci przebiegał w następujących krokach (zob. rys. 5.1):

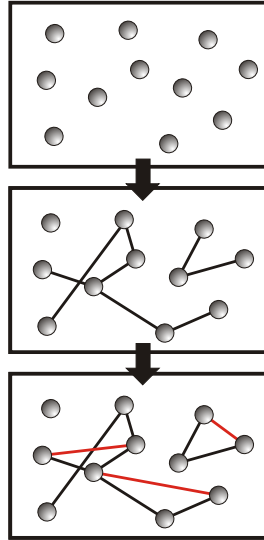
1. Początkowo rozważono układ N niepowiązanych węzłów.
2. Dla każdej pary węzłów losowana jest krawędź z prawdopodobieństwem równym p (przy czym węzeł $i_1 \neq i_2$ - w układzie nie pojawiają się pętle)
3. Z prawdopodobieństwem pC połączono te wierzchołki, które posiadają wspólnego sąsiada.
4. Każdy wierzchołek jest dekorowany spinem ± 1 .

W przedstawionych w tym rozdziale rozważaniach przyjęto układ o średniej liczbie sąsiadów $\langle k \rangle = 4 \pm 0.05$; taki stan rzeczy uzyskiwano sterując odpowiednio parametrami p i pC tak, aby końcowa, średnia liczba sąsiadów danego węzła k wynosiła 4 przy jednoczesnym zachowaniu liniowej zmiany współczynnika klasteryzacji C . Parametry obliczeń przedstawia tabela 5.1

5.2 Rozkład stopnia wierzchołka

Dla tak zbudowanej sieci badano rozkład stopnia wierzchołka (zob. rys. 5.2 i 5.3). Porównano rozkład sieci niesklasteryzowanej (przypadek $C = 0$) oraz mocno sklasteryzowanej dla $C = 0.18$. Obliczenia przeprowadzono dla liczby węzłów $N = 10^7$.

Zgodnie z przypuszczeniami, układ niesklasteryzowany dąży do rozkładu Poissona – mamy do czynienia z całkowicie przypadkową siecią. Wprowadzenie jednak do układu tzw. trójkątów, czyli węzłów, których sąsiedzi są również dla siebie sąsiadami „obniża” i jednocześnie „poszerza”



Rysunek 5.1: Algorytm budowania sieci przypadkowej ze sterowaną klasteryzacją.

Tablica 5.1: Wartości odpowiednich parametrów budujących sieć o $\langle k \rangle = 4 \pm 0.05$.

C	p	pC	z_2
~ 0	$4.00/N$	0	16.0
0.05	$3.60/N$	0.030	17.3
0.09	$3.25/N$	0.060	18.8
0.14	$2.85/N$	0.100	19.1
0.18	$2.50/N$	0.145	22.1

wykres stopnia wierzchołka. Dla tego przypadku nie może być więc mowy o poissonowskim przebiegu rozkładu.

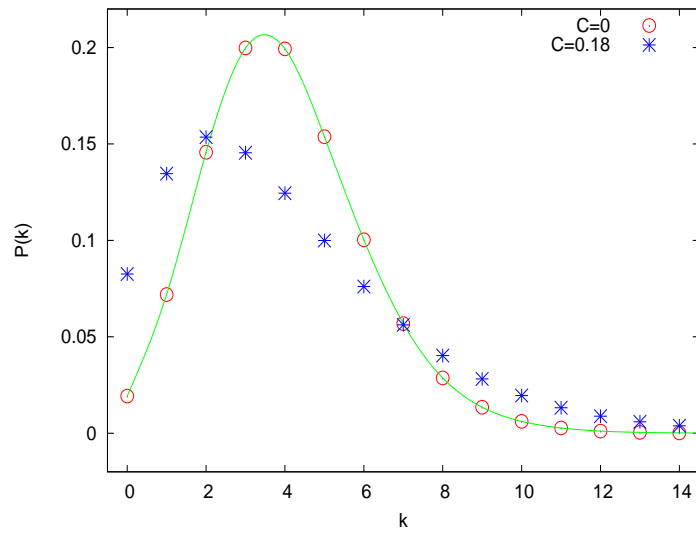
5.3 Spiny sprzężone ferromagnetycznie

5.3.1 Badanie stanu równowagi

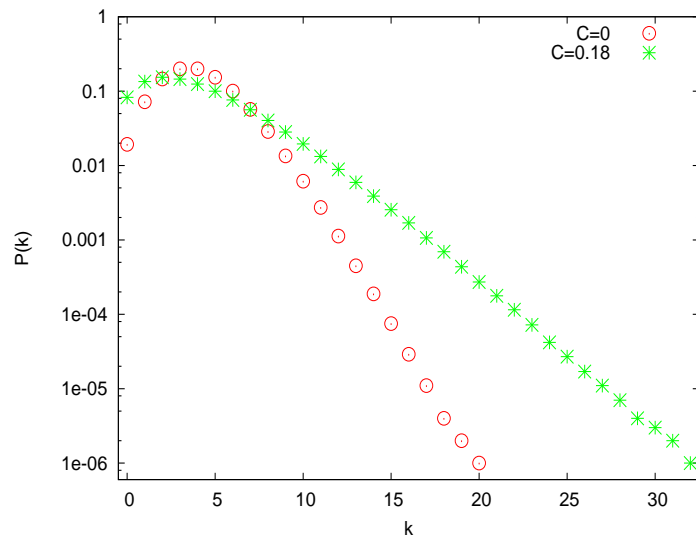
W pierwszym kroku zbadano energię układu spinów oddziaływujących pomiędzy sobą z całą wymianą $J = 1$ (układ preferuje równoległe ułożenie sąsiednich spinów). Rysunek 5.4 pokazuje relaksację energii w czasie dla sieci sklasteryzowanej ($C = 0.18$).

Początkowy znak wszystkich spinów ustawiono jako dodatni. Z rysunku 5.4 można odczytać, że energia rośnie wraz ze wzrostem temperatury.

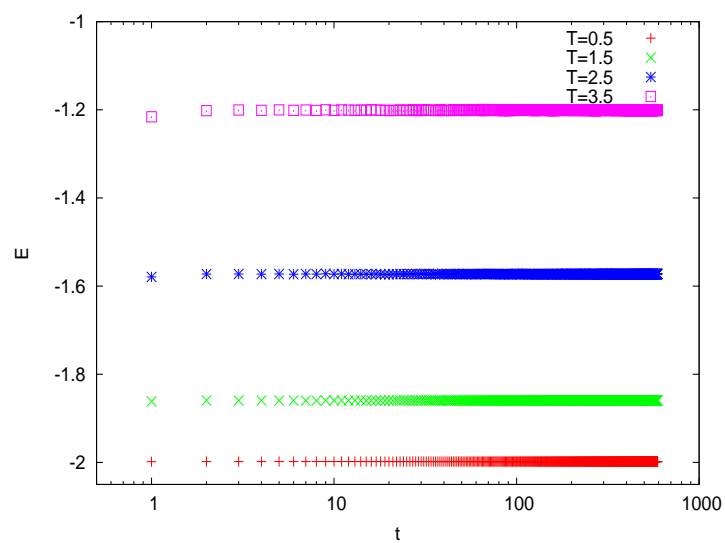
Natomiast wykres 5.5 pokazuje zależność czasową energii dla różnych wartości współczynnika klasteryzacji i przy stałej temperaturze $T=0.5$. Dla tak zadanych warunków obserwuje się bardzo słabą zależność energii od współczynnika klasteryzacji.



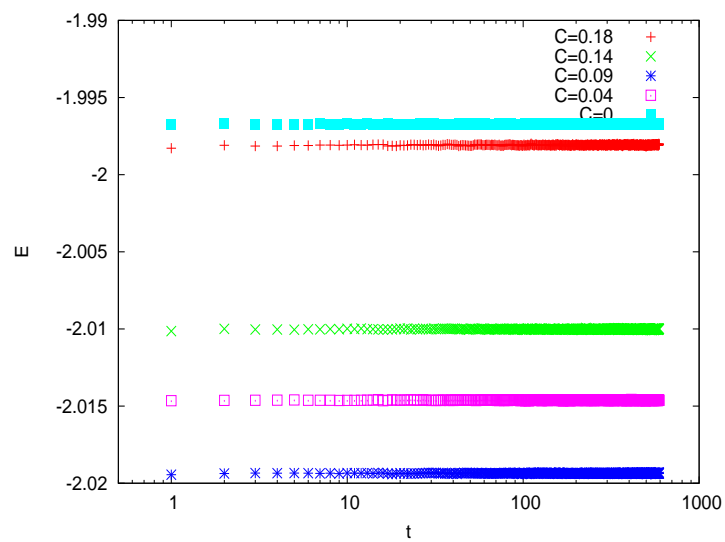
Rysunek 5.2: Rozkład stopnia wierzchołka dla $C = 0$ i $C = 0.18$; $N = 10^7$.



Rysunek 5.3: Rozkład stopnia wierzchołka dla $C = 0$ i $C = 0.18$, $N = 10^7$.



Rysunek 5.4: Całkowita energia układu ferromagnetycznego na spin w polu $h = 0$ dla $C = 0.18$, $N = 10^6$ w funkcji czasu.

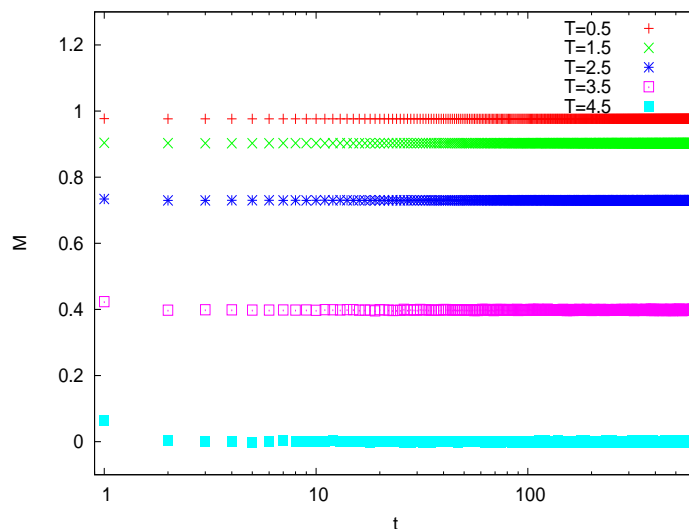


Rysunek 5.5: Całkowita energia układu ferromagnetycznego na spin w polu $h = 0$ i temperaturze $T = 0.5$ dla różnych wartości współczynnika klasteryzacji; $N = 10^6$.

5.3.2 Temperatura Curie

Dla układów o różnym stopniu klasteryzacji zbadano temperaturę Curie T_C przejścia fazowego ferromagnetyk-paramagnetyk. W tym celu obliczono *magnetyzację*, czyli średnią w czasie sumę wszystkich spinów podzieloną przez ich liczbę (zob. wzór 3.2). Magnetyzacja sieci, która stopniowo przechodzi w stan nieuporządkowany maleje z temperaturą, natomiast zerowa wartość magnetyzacji dla sprzężenia ferromagnetycznego będzie oznaczała, że układ znalazł się w fazie nieuporządkowanej – spiny przyjmują przypadkowe znaki.

Relaksację magnetyzacji dla różnych wartości temperatur przedstawia wykres 5.6.

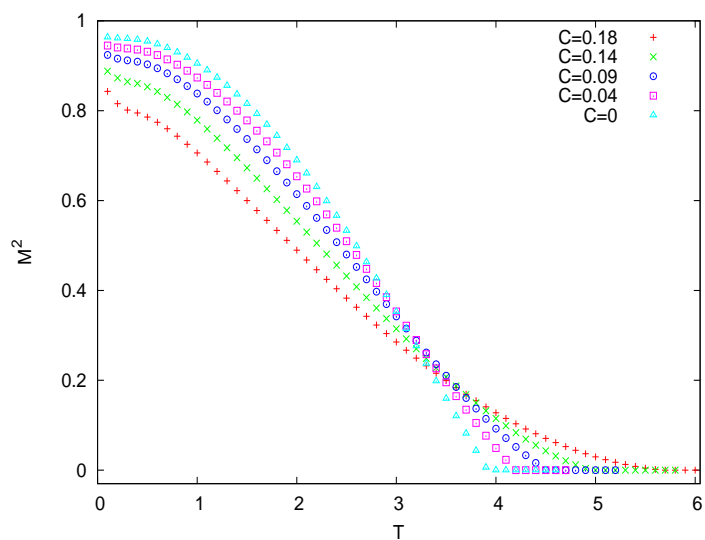


Rysunek 5.6: Czasowa zależność magnetyzacji dla różnych temperatur $C = 0.09$, $N = 10^6$.

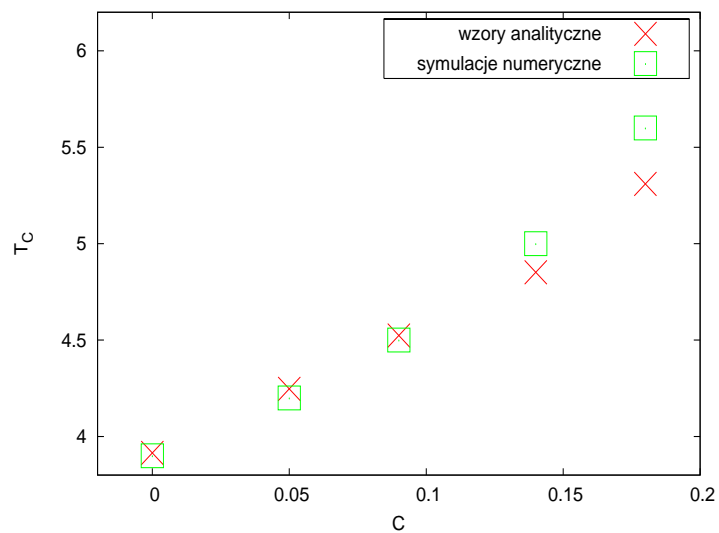
Aby otrzymać konkretny zbiór wartości temperatur dla których układ zmienia fazę zbadano zależność kwadratu magnetyzacji od temperatury dla różnych wartości współczynnika klasteryzacji. Czy klasteryzacja układu będzie miała jakikolwiek wpływ na dążenie układu do stanu bardziej uporządkowanego?

Rysunek 5.7 wskazuje jednoznacznie, że temperatura Curie rośnie wraz ze wzrostem współczynnika klasteryzacji C . Konkretnie wartości temperatury Curie zebrano w tabeli 5.2. Ponadto, kształt krzywych $M^2(T)$ sugeruje, że teoria średniego pola pracuje tylko dla $C < 0.1$ (dla wyższych stopni klasteryzacji kwadrat magnetyzacji nie jest już liniową funkcją temperatury).

Otrzymane wyniki temperatury przejścia porównano z analitycznymi rozwiązaniami. Dla sieci przypadkowych nieskorelowanych o poissonowskim rozkładzie stopnia wierzchołka temperaturę Curie możemy policzyć ze wzoru 3.24, gdzie za liczbę pierwszych sąsiadów przyjęto $z_1 = \langle k \rangle = 4$, a z_2 jest średnią liczbą sąsiadów sąsiada danego węzła, którą wyznaczono numerycznie (zob. tabela 5.2). Rysunek 5.8 i tabela 5.2 pokazują, że wyniki symulacji odbiegają nieco od przewidywań teoretycznych. Dla układu słabo i niesklasteryzowanego wartości są niemalże identyczne, ale wprowadzenie większego stopnia klasteryzacji zaburza tę zgodność.



Rysunek 5.7: Zależność kwadratu magnetyzacji dla różnych wartości C przy $N = 10^6$ spinach.



Rysunek 5.8: Temperatura Curie otrzymana z symulacji oraz ze wzoru 3.24.

Tablica 5.2: Wyniki symulacji T_C i przewidywania teoretyczne dla sieci przypadkowej o $\langle k \rangle = 4 \pm 0.05$ ze sterowaną klasteryzacją.

C	z_2	T_C	
		wzór 3.24	symulacja $M^2(T)$
~ 0	16.0	3.92	3.90
0.05	17.3	4.25	4.20
0.09	18.7	4.52	4.50
0.14	19.1	4.85	5.00
0.18	22.1	5.31	5.60

5.4 Spiny sprzężone antyferromagnetycznie

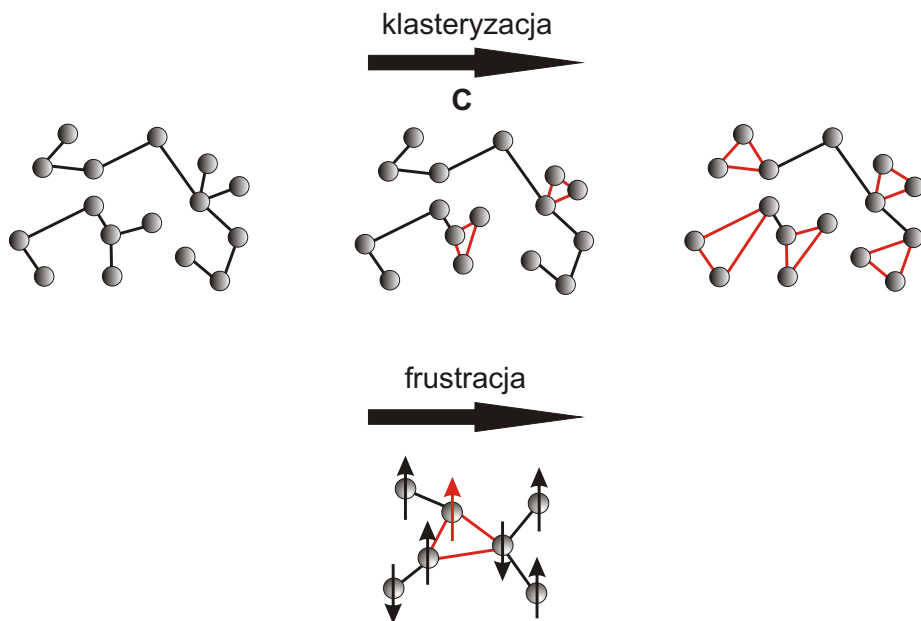
Dla przypadku antyferromagnetycznego ułożenia spinów ($J < 0$) nie można rozważać magnetyzacji jako parametru porządku. Ze względu na preferowany przez oddziaływanie przeciwny znak sąsiednich spinów ($\uparrow\downarrow$) magnetyzacja zawsze będzie równa zeru. Temperaturę przejścia fazowego w sieci antyferromagnetycznej można natomiast odczytywać z zależności termicznej *ciepła właściwego* oraz *podatności magnetycznej*.

Ponadto, ze względu na nieporządek struktury sieci oraz pojawiającą się ze wzrostem klasteryzacji frustrację w „trójkątach” (rys. 5.9) spodziewamy się, że poniżej temperatury krytycznej może pojawić się faza szkła spinowego (zob. rozdział 3.4). Dlatego też wydaje się być uzasadnione przeprowadzone w dalszych rozdziałach badanie parametru porządku szkieł spinowych q oraz parametru przekrywania Q .

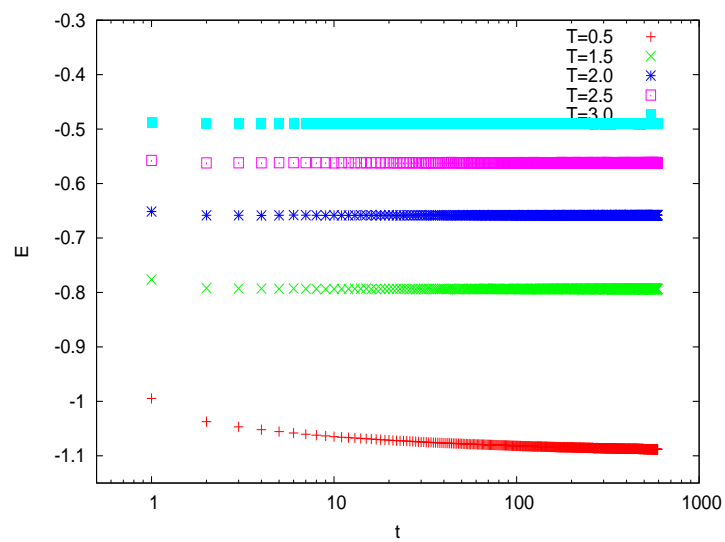
5.4.1 Badanie stanu równowagi

Początkowo zbadano energię układu o antyferromagnetycznym ułożeniu spinów (rys. 5.10 i 5.11). Podobnie jak dla przypadku ferromagnetyka, również tutaj początkowo ustawiono wszystkie spiny w górę (stan początkowy dla $M_0 = 1$). Przedstawione wykresy wskazują na wzrost energii wraz ze wzrostem temperatury; na wzrost energii układu ma także wpływ większy stopień klasteryzacji. Z wykresów 5.10 i 5.11 możemy także wywnioskować, że energia stabilizuje się bardzo szybko – już po około $N_t = 10^3 MC$ układ osiąga stan stacjonarny. Wartość tę, zwiększoną 100-krotnie przyjęto za liczbę początkowych relaksacji, przez które musi przejść układ, aby w kolejnym kroku dopiero rozpocząć symulacje ciepła właściwego i podatności.

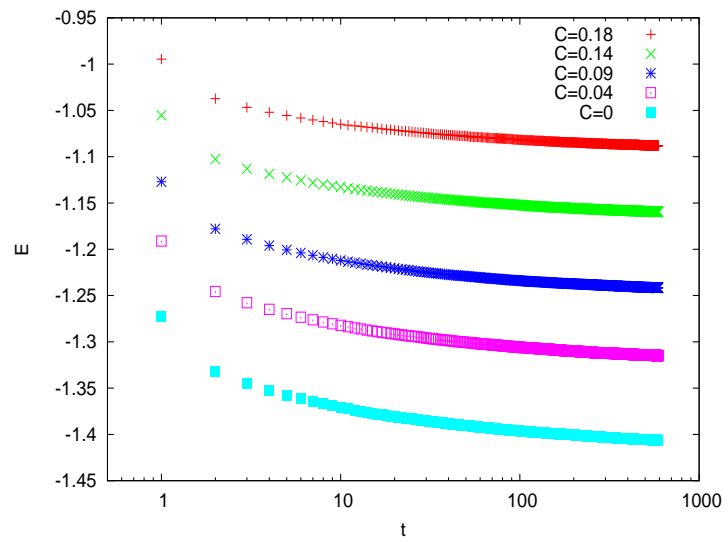
Ponadto udowodniono, że energia nie zależy od stanu początkowego ($M_0 = 1$ lub $M_0 = 0$). Widoczne na rys. 5.12 krzywe odpowiadające dwóm różnym stanom początkowym: start od przypadkowego znaku spinu ($M_0 = 0$) oraz przypadek, gdy wszystkie początkowe spiny ustawiono „w górę” pokrywają się dokładnie.



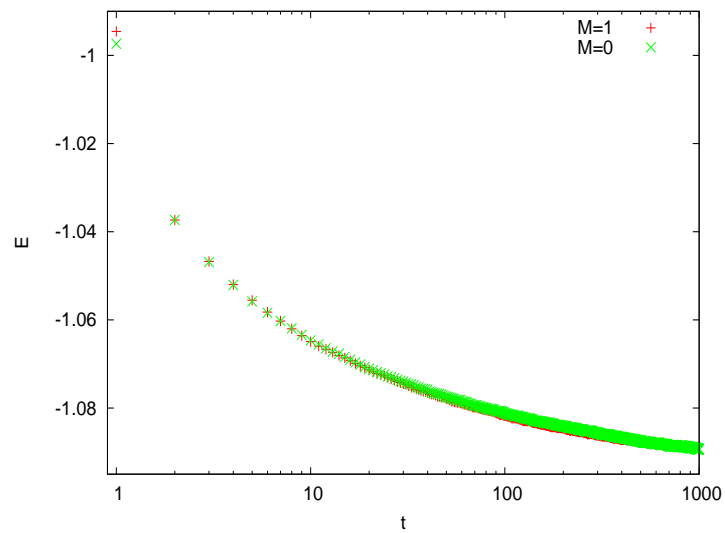
Rysunek 5.9: Wzrost klasteryzacji w sieci przypadkowej pociąga za sobą wzrost frustracji w układzie.



Rysunek 5.10: Całkowita energia układu o $J = -1$, $C = 0.18$ i $N = 10^6$.

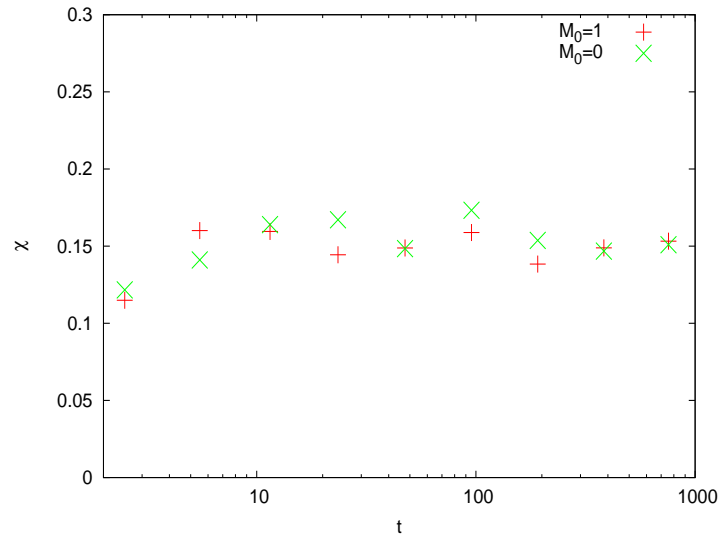


Rysunek 5.11: Relaksacja energii układu o $J = -1$, $T = 0.5$ i $N = 10^6$ dla różnych wartości C .



Rysunek 5.12: Wpływ początkowego ułożenia spinów na całkowitą energię układu – $T = 0.5$, $C = 0.18$, $N = 10^6$.

Odrębnym testem na równowagę termodynamiczną jest zbieżność podatności z dwoma stanami początkowymi ustawienia spinów: 1) wszystkie spiny „w górę” – $M_0 = 1$, 2) spiny skierowane w losowych kierunkach – $M_0 = 0$ [51]. Dla sieci przypadkowej ze sterowanym współczynnikiem klasteryzacji czasowa zależność podatności przedstawiona została na rysunku 5.13. Każdy punkt na wykresie oznacza $N_{t_2} = 10$ przejść przez całą siatkę spinów (N -razy odwracane są przypadkowo wybierane spiny). Średnie magnetyzacje układu oraz jej kwadratu przeprowadzone są właśnie z $N_{t_2} = 10$ kroków). Jak widać, na wartość podatności nie wpływa stan początkowy spinów.



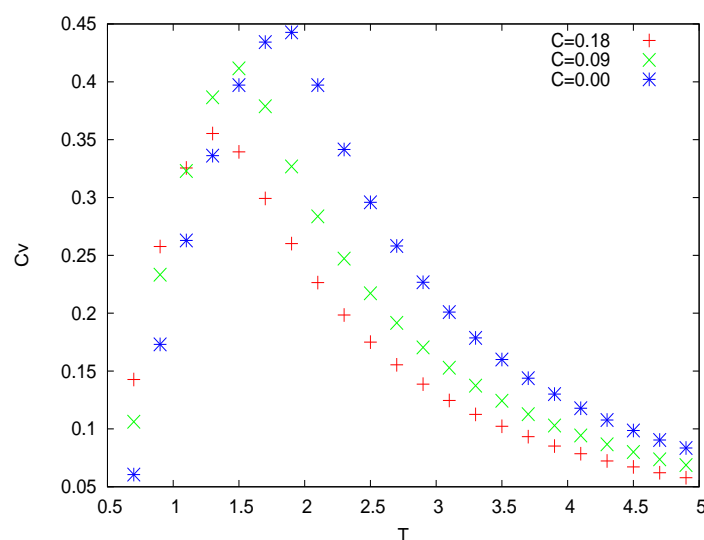
Rysunek 5.13: Czasowa zależność podatności z wariacji magnetyzacji dla sieci przypadkowej o $\langle k \rangle = 4$ dla $C = 0.09$ i $T = 1$; $N_{t_2} = 10MC$; $N = 10^5$.

5.4.2 Ciepło właściwe

Dla przypadku antyferromagnetyka, to co może świadczyć o istnieniu przejścia fazowego w sieci to maksimum ciepła właściwego dla danej temperatury. Ciepło właściwe obliczono za pomocą dwóch metod omówionych w rozdziale 3.3.1; rysunek 5.15 prezentuje wyniki symulacji ciepła właściwego obliczonego tymi dwoma sposobami.

Zarówno metoda wariacji energii jak i metoda pochodnej jednoznacznie wskazują na obecność maksimum ciepła właściwego w danej temperaturze dla trzech różnych wartości współczynnika klasteryzacji: 0, 0.09 oraz 0.18. Temperatura T_X krytyczna układu maleje ze wzrostem stopnia klasteryzacji i wynosi odpowiednio 1.9, 1.5 oraz 1.3 (zob. rysunek 5.14).

Oznaczenie T_X wiąże się z faktem, że nie wiemy czy faza niskotemperaturowa jest fazą antyferromagnetyczną czy fazą szkła spinowego. W literaturze spotyka się sygnały o możliwości współistnienia tych dwóch faz [62].

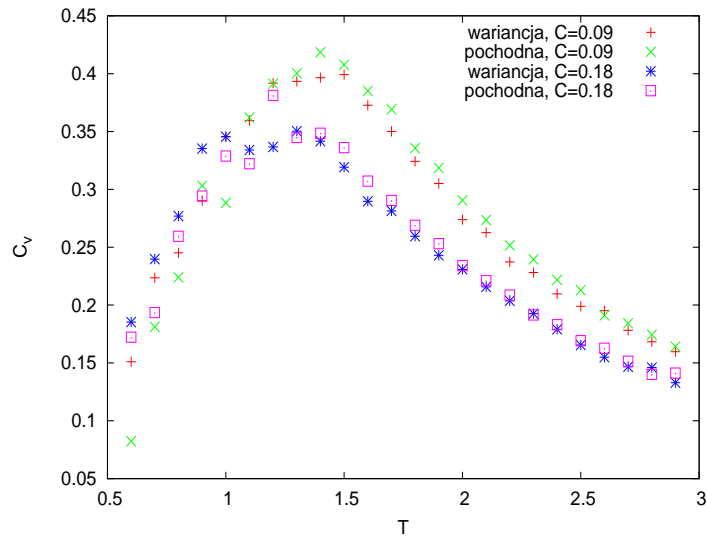


Rysunek 5.14: Termiczna zależność ciepła właściwego liczonego z pochodnej energii dla różnych wartości współczynnika klasteryzacji C i $N = 10^6$.

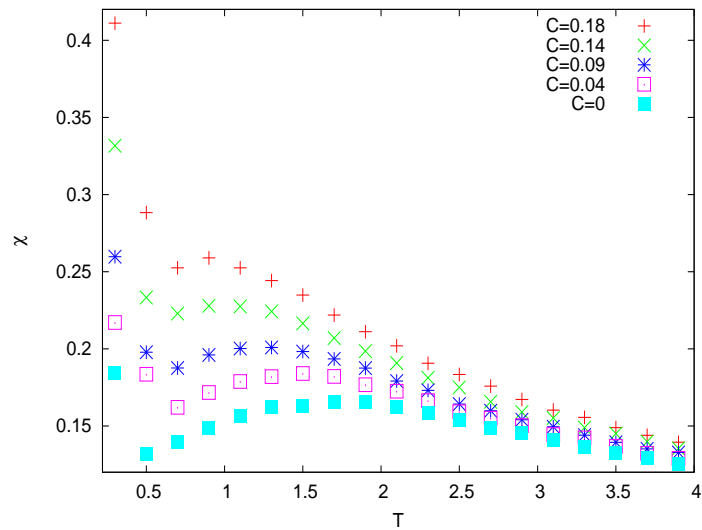
5.4.3 Podatność magnetyczna

Badanie przejścia fazowego przy użyciu podatności magnetycznej sprowadza się także do poszukiwania maksimum tej wielkości w danej temperaturze (analogicznie jak w przypadku ciepła właściwego). Wartość podatności dla danej temperatury można uzyskać również w oparciu o dwie metody (zob. rozdział 3.3.2).

Podatność liczona metodą wariacji magnetyzacji (rys. 5.16) wskazuje na obecność pewnego słabego maksimum, które ze wzrostem klasteryzacji przesuwa się w stronę niższych temperatur. Maksimum to jest prawdopodobnie osłabione poprzez niezwiązane spiny (nie posiadające żadnego sąsiada), których podatność opisuje prawo Curie $\chi \sim 1/T$. Natomiast jeśli chodzi o iloraz różnicowy magnetyzacji układu z zewnętrznym polem dodatnim i ujemnym trudno mówić o widocznym maksimum podatności w danej temperaturze (zob. rys. 5.17).



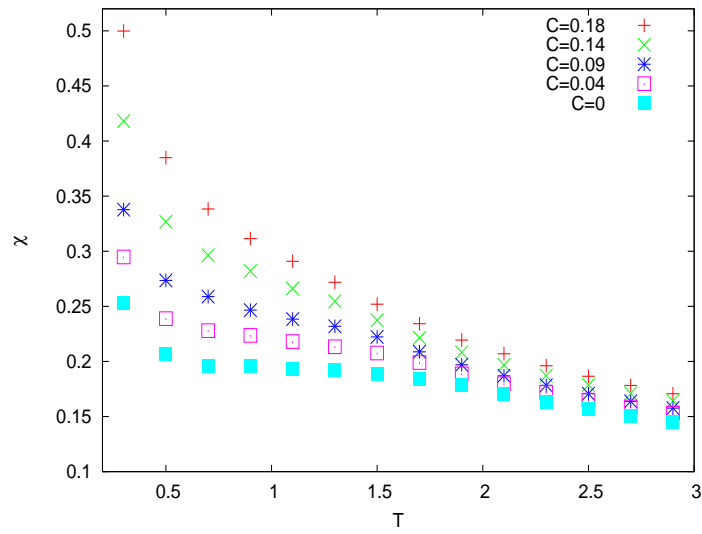
Rysunek 5.15: Ciepło właściwe - porównanie metod dla dwóch wartości współczynnika klasteryzacji C i $N = 10^4$.



Rysunek 5.16: Temperaturowa zależność podatności magnetycznej liczonej metodą wariacji magnetyzacji dla układu $N = 10^6$ spinów o różnym stopniu klasteryzacji.

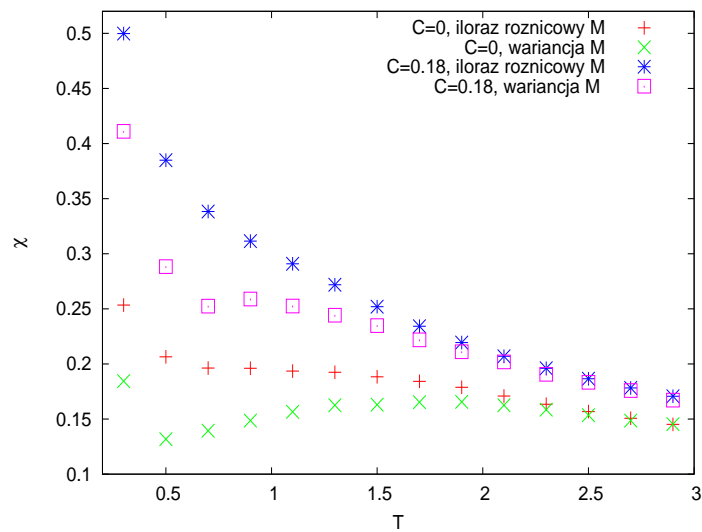
Ponadto, zaobserwowano niezgodność obu wspomnianych powyżej metod poniżej pewnej temperatury, zależnej od stopnia klasteryzacji (zob. rys. 5.18).

Brak zgodności obu metod może świadczyć o braku równowagi termodynamicznej w tym zakresie, co z kolei wskazywać by mogło na obecność fazy szkła spinowego. Temperatura „niezgodności” przesuwa się ze wzrostem klasteryzacji w stronę niższych wartości i dla $C \sim 0$ pokrywa



Rysunek 5.17: Podatność magnetyczna liczona metodą ilorazu różnicowego magnetyzacji dla układu $N = 10^6$ spinów o różnym stopniu klasteryzacji.

się z maksimum otrzymanym dla ciepła właściwego liczonego z pochodnej energii.



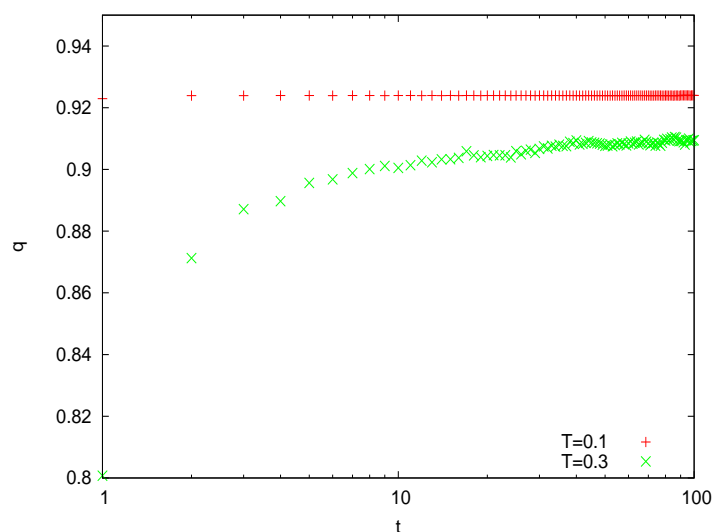
Rysunek 5.18: Porównanie podatności magnetycznej liczonej dwoma metodami dla $C \sim 0$ i $C = 0.18$ przy $N = 10^6$.

5.4.4 Parametr Edwardsa-Andersona

Wartości temperatury T_X przejścia fazowego otrzymane w rezultacie poszukiwania maksimum ciepła właściwego dla określonej temperatury zostały potwierdzone także w oparciu o analizę parametru Edwardsa-Andersona q (zob. wzór 3.33).

Relaksacja parametru porządku

W pierwszej kolejności zbadano relaksację parametru q , co pozwoliło sprawdzić poprawność założeń co do wartości wstępnych relaksacji N_{t_1} układu. Zależność $q(t)$ pokazano na rysunku 5.19 dla sieci niesklasteryzowanej o $N = 10^4$ spinach i okna czasowego $N_{t_2} = 10^2$ i przy braku jakichkolwiek iteracji wstępnych. Otrzymane zależności wskazują na to, że q osiąga plateau już



Rysunek 5.19: Relaksacja parametru Edwardsa-Andersona dla układu o $N = 10^4$, $N_{t_1} = 10^4$ i klasteryzacji $C = 0$.

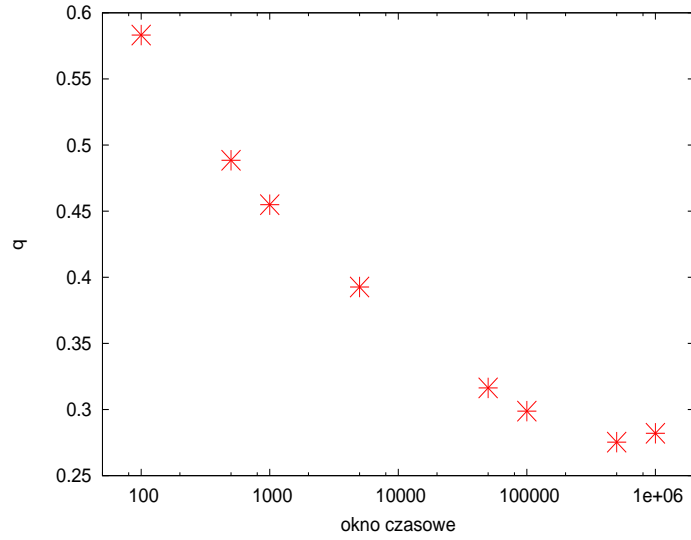
po ok. 30 krokach symulacji. Uwzględniając zależność od okna czasowego uzyskuje się stabilność q już po ok. $3 \cdot 10^3$ kroków symulacji. Ostatecznie, wartość $N_{t_1} = 10^4$ uwzględniono jako liczbę wstępnych iteracji układu w dalszych badaniach q .

Zależność q od okna czasowego

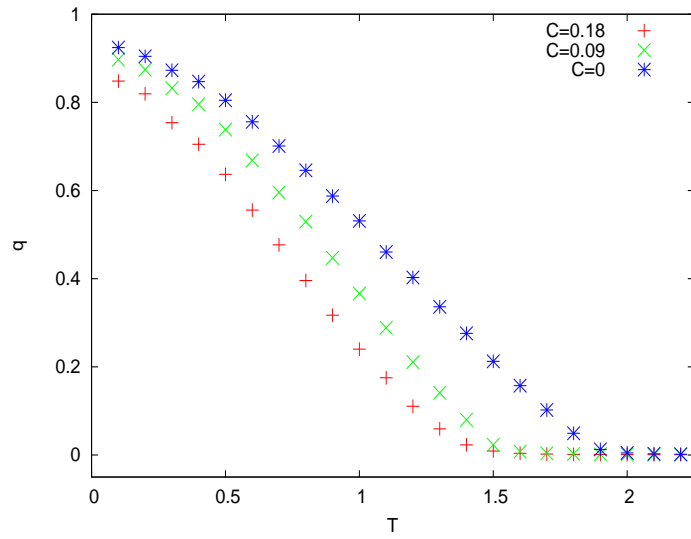
Okazuje się, że nie bez znaczenia dla uzyskania dokładnych wartości q jest także dobranie odpowiedniej wielkości okna czasowego N_{t_2} . Rysunek 5.20 pokazuje jaki wpływ na wartość q ma wielkość okna N_{t_2} . Jak widać wartość q stabilizuje się na poziomie okna $N_{t_2} = 10^6$ i dla takiej wartości powinny być przeprowadzone symulacje.

Temperatura przejścia w stan szkła spinowego

Podobnie jak maksimum ciepła właściwego dla danej temperatury wskazuje na przejście fazowe, w przypadku parametru Edwardsa-Andersona to zanikanie q będzie wskazywać na temperaturę przejścia.



Rysunek 5.20: Parametr Edwardsa-Andersona q dla różnych okien czasowych (układ $N = 10^6$ spinów o $C = 0.08$ w temperaturze $T = 1.0$).

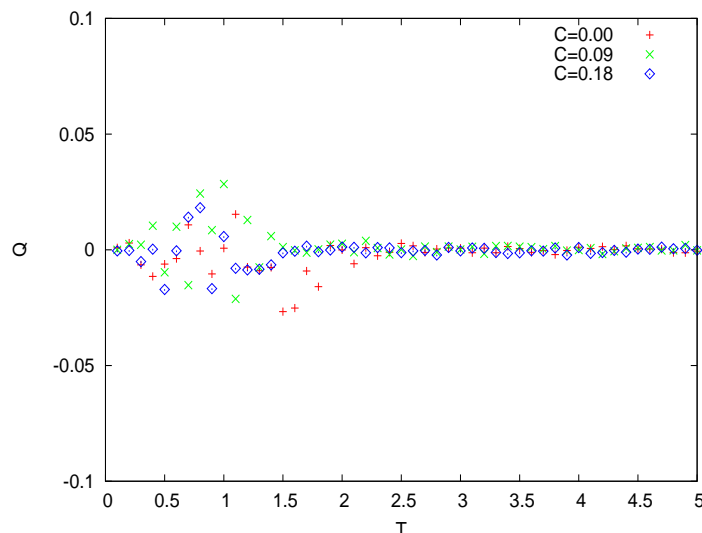


Rysunek 5.21: Parametr Edwardsa-Andersona $q(T)$ dla układu $N = 10^6$ spinów o różnym stopniu klasteryzacji; okno $N_{t_2} = 10^6$.

Zależność $q(T)$ pokazana na rysunku 5.21 potwierdza poprzednie wyniki otrzymane w rozdziale 5.4.2: temperatura, w której zanika parametr q maleje ze stopniem klasteryzacji i wynosi odpowiednio: 2.0, 1.5 i 1.4.

5.4.5 Parametr przekrywania

Dla sieci przypadkowej ze sterowaną klasteryzacją zbadano również zachowanie się parametru przekrywania Q . Zależność temperaturowa tego parametru przedstawia wykres 5.22.



Rysunek 5.22: Parametr przekrywania $Q(T)$ dla układu $N = 10^6$ spinów o różnym stopniu klasteryzacji.

Jak widzimy, badając parametr przekrywania dla sieci ze sterowaną klasteryzacją nie uzyskamy informacji o temperaturze krytycznej, gdyż wartości Q są niewielkie (największe rzędu 0.03). Za zmniejszenie Q z jednej strony odpowiedzialne będą swobodne spiny, które mogą przyjmować dowolnie wartość ± 1 , a w sieciach przypadkowych ich liczba jest znaczna. Z drugiej strony, dla układów ze zwiększoną klasteryzacją na wartość Q będzie wpływała obecność dużej liczby sfrustrowanych zamkniętych ścieżek (trójkątów).

5.5 Porównanie wyników symulacji z teoretycznymi przewidywaniami temperatury przejścia fazowego

Odczytane wartości temperatury krytycznej T_X z symulacji ciepła właściwego, podatności oraz parametru q można porównać z przewidywaniami teoretycznymi dla drzewa przypadkowego, które rozważane zostały w rozdziałach 3.2.3 oraz 3.4. Zgodnie z formułą 3.32 T_{SG} rośnie wraz ze wzrostem współczynnika klasteryzacji, podobnie jak i wartość temperatury Néela T_N (wzór 3.24). Zależność ta wynika z faktu, że rosnący współczynnik klasteryzacji pociąga za sobą wzrost liczby drugich sąsiadów z_2 , od których zależy teoretyczna wartość temperatury krytycznej (por. tabela 5.2). Tymczasem wyniki numeryczne mówią o innej zależności (zob. tabela 5.3).

Tablica 5.3: Porównanie wartości temperatur przejścia fazowego otrzymanych z symulacji z wartościami teoretycznymi. W przypadku symulacji $C_v(T)$ użyto metody ilorazu różnicowego, a dla podatności magnetycznej T_X odczytano z krzywych wariacji magnetyzacji.

C	T_N wzór 3.24	T_{SG} wzór 3.32	T_X symulacja $C_v(T)$	T_X symulacja $\chi(T)$	T_X symulacja $q(T)$
~ 0	3.92	1.82	1.9	1.9	1.9
0.09	4.52	1.97	1.5	1.3	1.4
0.18	5.31	2.17	1.3	0.9	1.5

5.6 Podsumowanie

Sieć przypadkową rozważano tylko dla średniego stopnia wierzchołka $\langle k \rangle = 4$, gdzie współczynnik klasteryzacji zmienia się od $C = 0$ do $C = 0.18$.

Termiczna zależność ciepła właściwego liczonego z pochodnej energii jak i również metodą wariacji pokazuje wyraźny pik (rys. 5.14) dla różnych wartości C . Krzywe obliczone dwoma metodami pokrywają się w całym zakresie temperaturowym – zob. rys. 5.15.

Podatność magnetyczna sieci przypadkowej liczona metodą wariacji magnetyzacji daje słabe maksima (rys. 5.16), które w przypadku ilorazu różnicowego magnetyzacji (rys. 5.17) praktycznie zanikają: bardzo delikatny łuk zaobserwować można tylko dla zerowego współczynnika klasteryzacji. W obu przypadkach, maksima są prawdopodobnie osłabione poprzez niezwiązane spiny, opisane prawem Curie w niskich temperaturach. Do prawa Curie stosują się też spiny, których oddziaływanie z sąsiadami w danej konfiguracji znika. Obydwie metody liczenia podatności magnetycznej są zgodne tylko dla wyższych temperatur (rys. 5.18); rozbieżne stają się w okolicach maksimów wariacji magnetyzacji (patrząc od strony niskich temperatur, raczej za maksimum).

Dla sieci przypadkowej ze sterowanym współczynnikiem klasteryzacji wyniki numeryczne stoją w opozycji do teorii: wzrost klasteryzacji pociąga za sobą spadek temperatury przejścia fazowego podczas gdy teoria mówi o zależności odwrotnej.

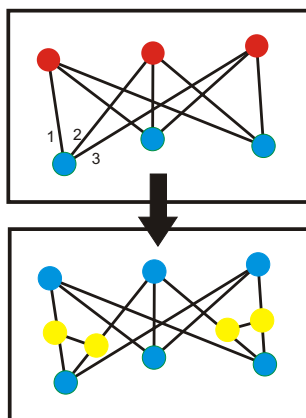
Rozdział 6

Sieć regularna

Sieć przypadkowa, skonstruowana w rozdziale 5 zawierała swobodne spiny, które mogły zmieniać swój stan bez strat energii. Utrudniało to analizę wyników (zob. rozdział 5.4.3). Dlatego też, aby pozbyć się wpływu takich spinów stworzono sieć regularną, w której każdy węzeł posiada dokładnie trzech sąsiadów.

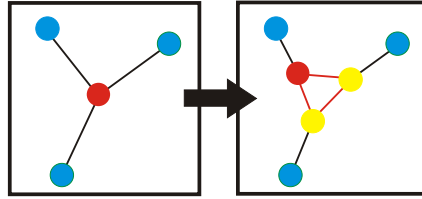
6.1 Budowa sieci

Algorytm konstrukcji sieci regularnej o $\langle k \rangle = 3$ przebiegał następująco (zob. rys. 6.1). Początkowo, układ N_o ponumerowanych węzłów podzielono na połowę. Dla każdego węzła z przedziału $\langle 1, \frac{N_o}{2} \rangle$ wylosowane zostały dokładnie 3 wierzchołki z przedziału $\langle \frac{N_o}{2} + 1, N_o \rangle$. W ten sposób została skonstruowana nieskorelowana sieć dwudzielna o zerowym współczynniku klasteryzacji, w której stopień każdego wierzchołka jest równy zawsze 3 ($k_i = 3$).



Rysunek 6.1: Algorytm budowania sieci regularnej o $k = 3$

Kolejny krok budowy sieci, to klasteryzacja (rys. 6.2). W tym celu wprowadzono N_1 dodatkowych węzłów, ale w taki sposób, aby uzyskać z kolejnych wierzchołków trójkąty (stary węzeł plus dwa nowe węzły będące jego nowymi sąsiadami).



Rysunek 6.2: Klasteryzacja sieci regularnej — formowanie zamkniętych ścieżek („trójkątów”).

Faktyczna, końcowa liczba takich węzłów będzie wynosiła:

$$N = N_o + 2 \cdot N_o \cdot pC \quad (6.1)$$

gdzie pC jest prawdopodobieństwem z jakim losujemy i dodajemy nowe węzły do układu. Wpływ parametru pC na topologię sieci reprezentowaną poprzez współczynnik klasteryzacji i liczbę drugich sąsiadów z_2 pokazuje tabela 6.1.

Tablica 6.1: Wpływ pC na wartość współczynnika klasteryzacji C i liczbę drugich sąsiadów z_2 dla $N = 9 \cdot 10^5$ węzłów.

pC	C	z_2
0	0.00	6.00
0.1	0.08	5.50
0.2	0.14	5.16
0.3	0.19	4.88
0.5	0.25	4.50
0.7	0.29	4.25
1.0	0.33	4.00

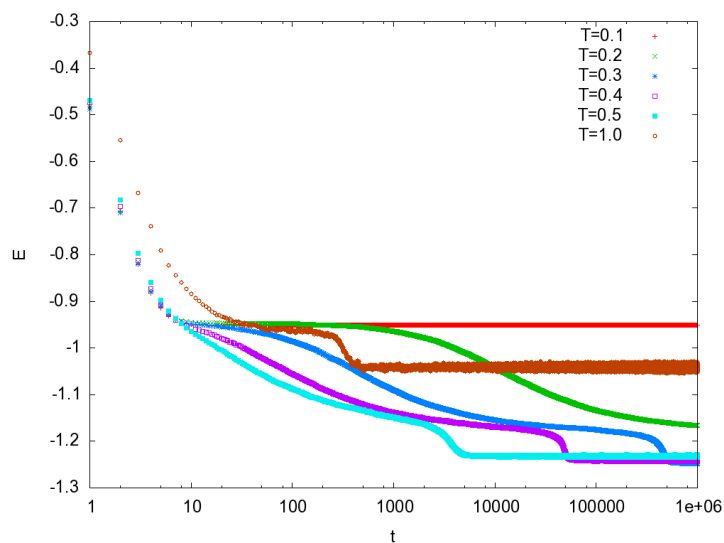
6.2 Magnetyzm sieci regularnej

Dla sieci regularnej rozważono tylko antyferromagnetyczne ułożenie spinów, tzn. za całąk wymiany przyjęto wartość ujemną $J = -1$. Wszystkie obliczenia numeryczne dotyczące przebiegów temperaturowych ciepła właściwego, podatności magnetycznej i parametru Edwardsa-Andersona wykonano dla sieci o $N = 9 \cdot 10^4$ spinów.

6.2.1 Badanie stanu równowagi

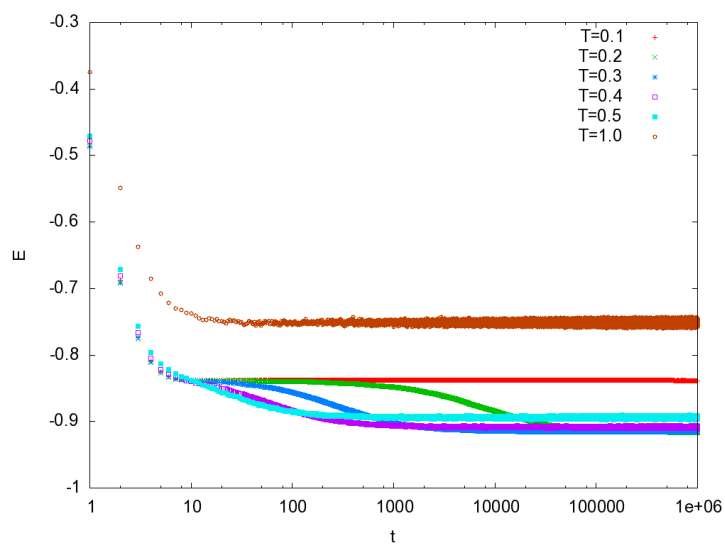
Dla tak skonstruowanej sieci sprawdzono przebiegi czasowe dla układów o różnych wartościach współczynnika klasteryzacji C (zob rys. 6.3 i 6.4).

Przypadki o małym stopniu klasteryzacji bardzo wolno uzyskują równowagę – szczególnie dla niskich temperatur potrzebne są czasy relaksacji rzędu $N_t = 10^6$. Układy o większym stopniu klasteryzacji szybciej osiągną stan równowagi termodynamicznej. Dla przypadku z $C > 0.2$ dla stosunkowo małej liczby iteracji można już zaobserwować wzrost energii wraz z temperaturą oraz brak zależności wartości energii od czasu. Ze względu na fakt, że w dalszych rozważaniach będziemy brali pod uwagę zachowanie się układu dla temperatur $T > 0.4$, ostatecznie za minimalną wartość wstępnego czasu relaksacji przyjęto $N_t = 10^5$ (w przypadku ciepła właściwego $N_t = 5 \cdot 10^5$; dla podatności $N_t = 10^6$ a dla parametrów q i Q : $N_t = 10^5$).

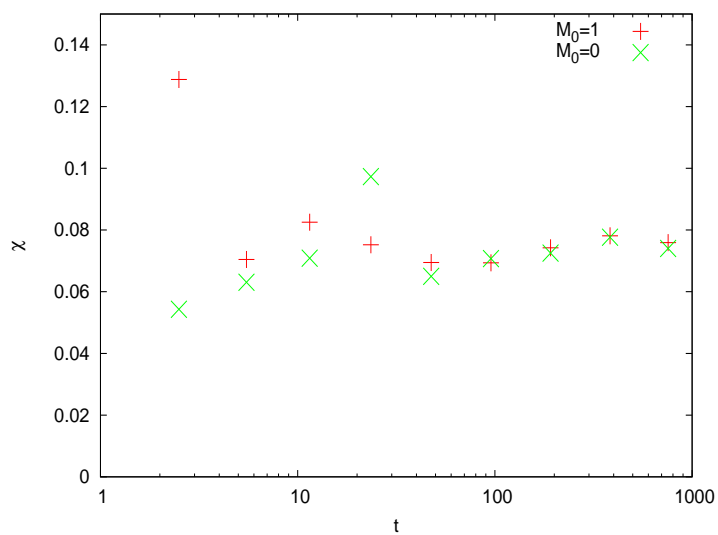


Rysunek 6.3: Zależność czasowa energii dla układu o $C = 0.08$, $N = 9 * 10^4$. Magnetyzacja początkowa $M_0 = 0$.

Dla sieci regularnej o $k = 3$ czasowa zależność podatności przedstawiona została na rysunku 6.5 dla dwóch różnych warunków początkowych magnetyzacji ($M_0 = 0$ lub $M_0 = 1$). Widać wyraźnie, że układ już po $N_t = 10^5$ krokach symulacji osiąga stan stacjonarny – symulacja zwraca identyczną wartość dla różnych warunków początkowych.



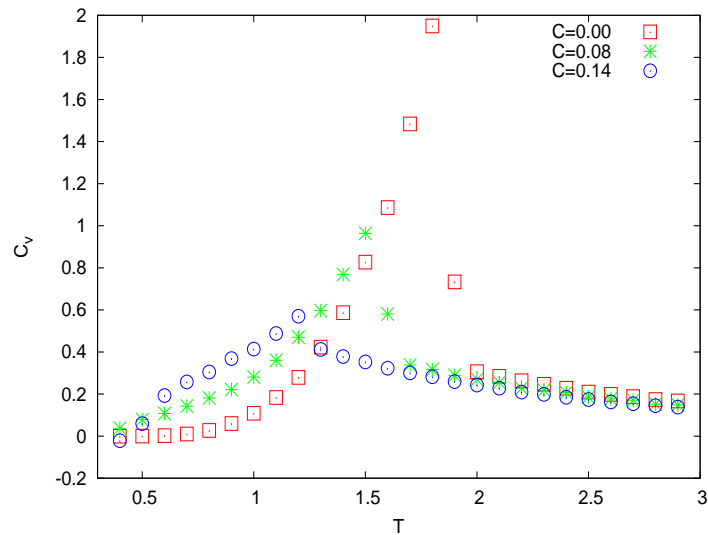
Rysunek 6.4: Zależność czasowa energii dla układu o $C = 0.29$, $N = 9 * 10^4$, $M_0 = 0$.



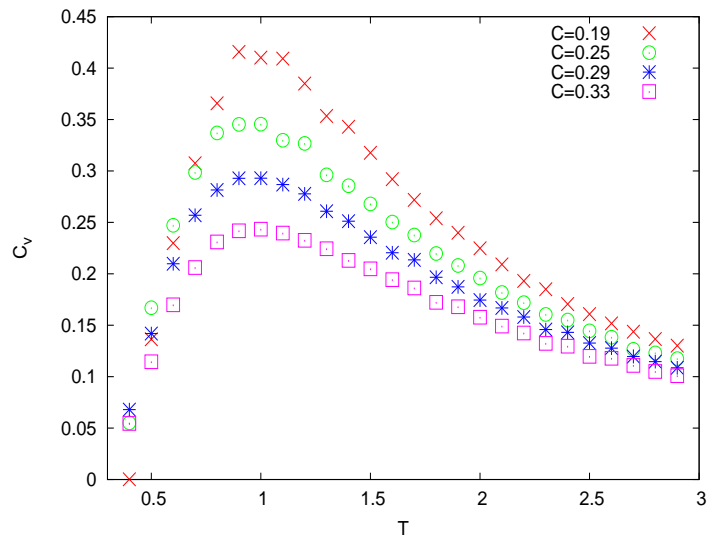
Rysunek 6.5: Czasowa zależność podatności z wariacji magnetyzacji dla sieci regularnej o $k = 3$ dla $C = 0.25$ i $T = 0.6$; $N_{t_2} = 10MC$; $N = 9 * 10^4$.

6.2.2 Ciepło właściwe

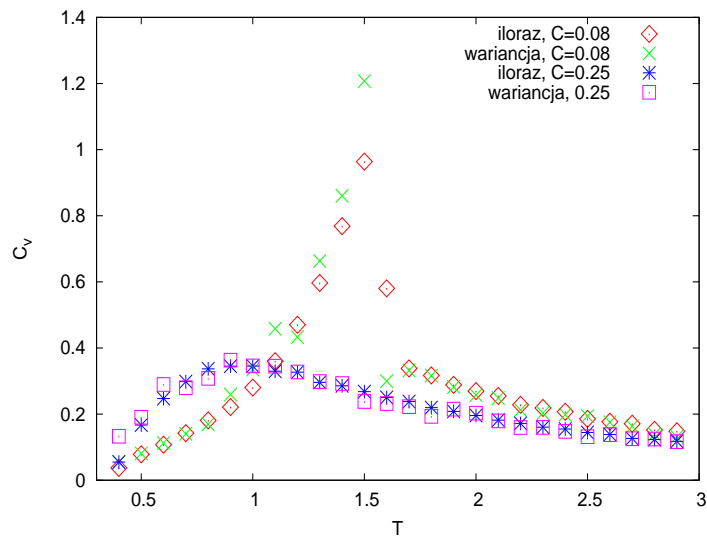
Zbadano temperaturową zależność ciepła właściwego dla różnych wartości stopnia klasteryzacji. W tym celu obliczono ciepło właściwe dwoma metodami – z wariancji energii układu (zob. wzór 3.26) oraz z pochodnej energii po temperaturze (zob. wzór 3.25). Obliczenia numeryczne wykonano dla sieci o $N = 9 * 10^4$ węzłów, po wykonaniu $N_{t_1} = 10^6$ iteracji wstępnych, gdzie średnią po kolejnych stanach energetycznych obliczono z $N_{t_1} = 10^3$ (rysunki 6.6 oraz 6.7). Dodatkowo, w celu sprawdzenia poprawności obliczeń porównano obie metody – są one zgodne, przy czym iloraz różnicowy generuje krzywą $C_v(T)$ o bardziej łagodnym przebiegu (zob. rys 6.8).



Rysunek 6.6: Ciepło właściwe obliczone z ilorazu różnicowego energii układu dla współczynnika $C < 0.15$.



Rysunek 6.7: Ciepło właściwe obliczone metodą ilorazu różnicowego energii układu dla współczynnika $C > 0.15$.



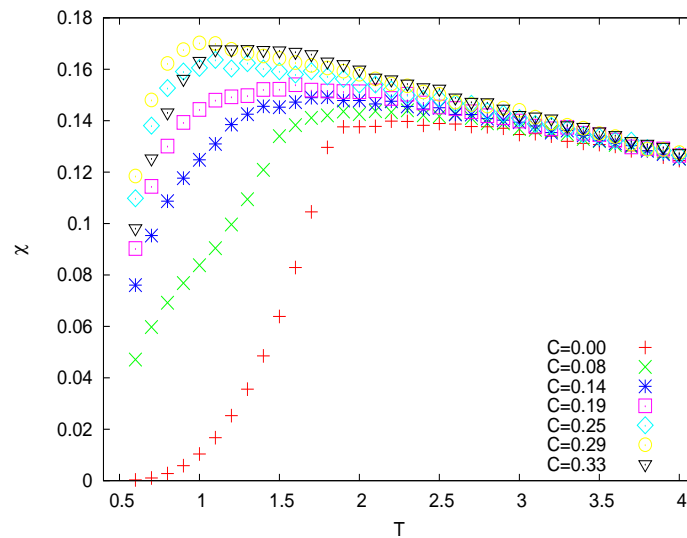
Rysunek 6.8: Porównanie dwóch metod obliczania ciepła właściwego dla $C = 0.08$ i $C = 0.25$.

6.2.3 Podatność

Podatność magnetyczną zbadano również dwoma metodami:

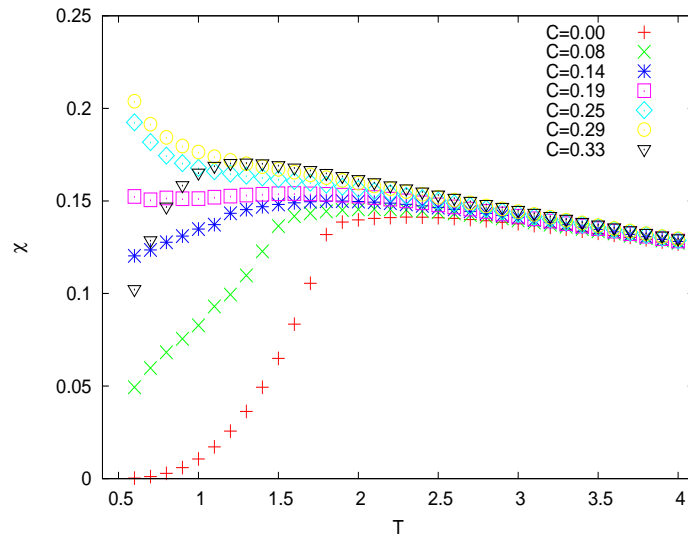
1. Z wariancji magnetyzacji pod nieobecność zewnętrznego pola magnetycznego (zob. wzór 3.27).
2. Z ilorazu różnicowego magnetyzacji dla układu z zewnętrznym polem magnetycznym o $h = \pm 0.1$ (zob. wzór 3.28).

Obliczenia przeprowadzono uśredniając magnetyzację po przeprowadzeniu $N_{t_1} = 5 * 10^5$ kroków relaksacji całego układu. Wyniki pokazują rysunki 6.9 oraz 6.10. Można zaobserwować, że wraz ze wzrostem klasteryzacji do wartości $C \sim 0.3$ maksimum podatności przesuwa się w stronę niskich temperatur. Natomiast dla przypadku $C = 0.33$ (gdzie układ jest w pełni sklasteryzowany) maksimum cofa się w stronę wyższych temperatur.

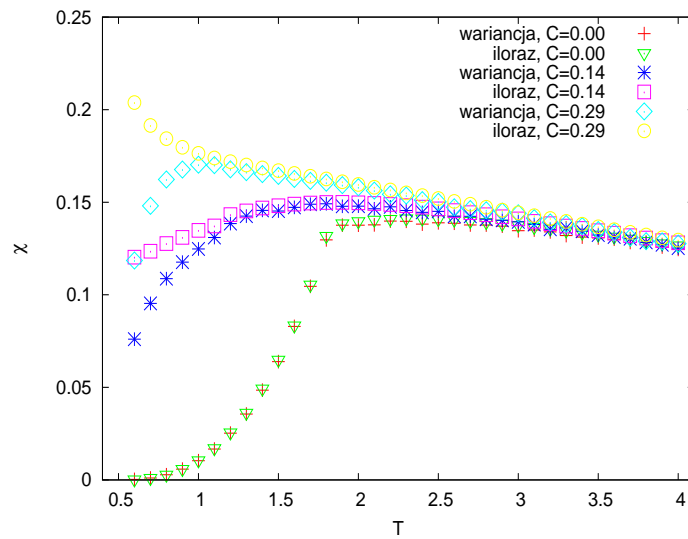


Rysunek 6.9: Podatność liczona metodą wariancji magnetyzacji dla układu o $N = 9 * 10^4$.

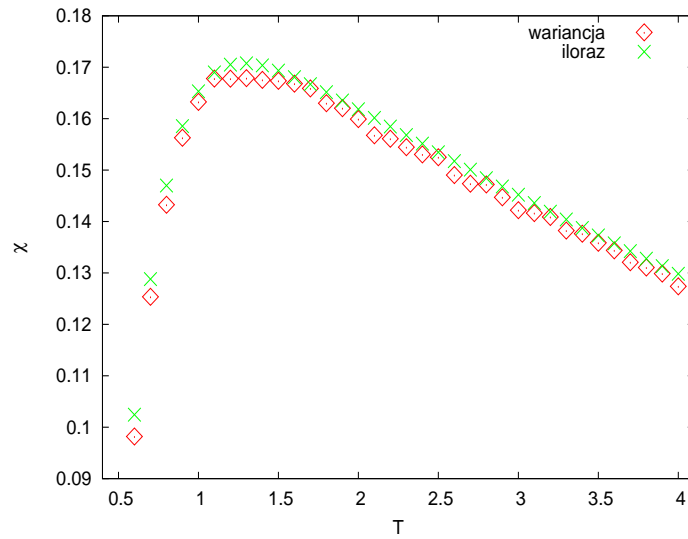
Obie metody otrzymywania podatności są zbieżne dla skrajnych wartości współczynnika klasteryzacji (tzn. dla $C = 0$ i $C = 0.33$ — rys. 6.11 i 6.12). Jednakże w niskich temperaturach podatność magnetyczna dla pośrednich wartości C pokazuje pewne rozbieżności pomiędzy krzywymi $\chi(T)$ wariancji i ilorazu różnicowego.



Rysunek 6.10: Iloraz różnicowy magnetyzacji w zależności od temperatury dla $N = 9 * 10^4$.



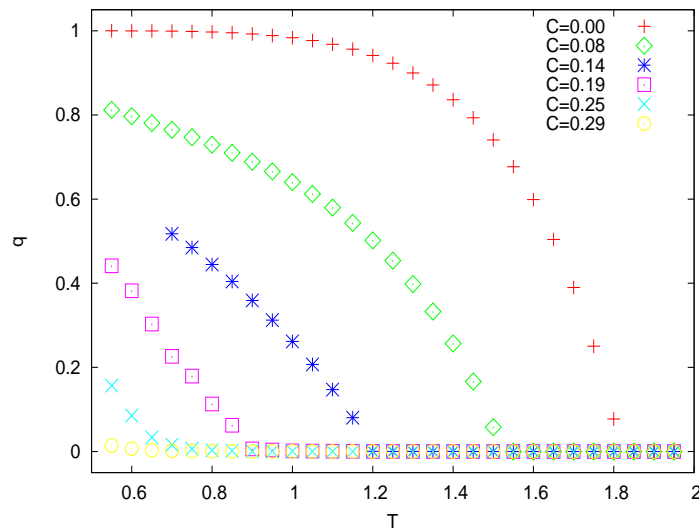
Rysunek 6.11: Porównanie dwóch metod obliczania podatności dla $C \in (0; 0.3)$.



Rysunek 6.12: Porównanie dwóch metod obliczania podatności dla $C = 0.33$.

6.2.4 Parametr Edwardsa-Andersona

Dla tak zbudowanej sieci badano także zachowanie parametru q w zależności od temperatury. Krzywe $q(T)$ pokazują, że zerowanie się parametru q w miarę wzrostu współczynnika klasteryzacji następuje dla coraz to niższych temperatur (zob. rys 6.13).

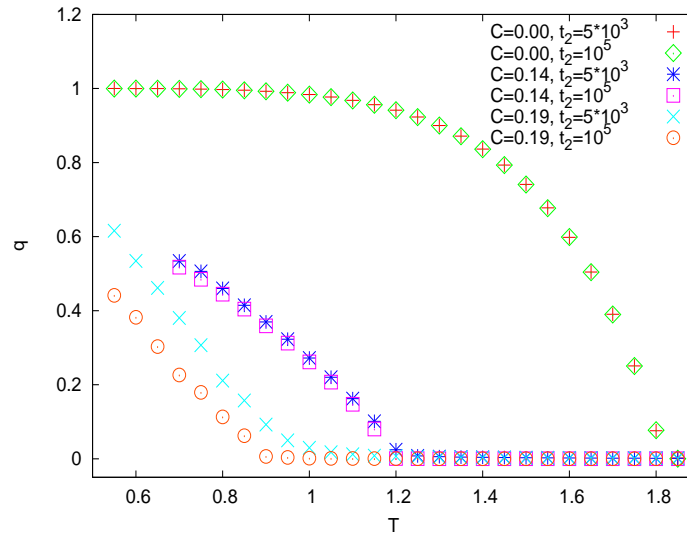


Rysunek 6.13: Parametr Edwardsa-Andersona q w układzie o różnym stopniu klasteryzacji dla okna $N_{t_2} = 10^5$ przy liczbie spinów $N = 9 * 10^4$.

Zależność od okna czasowego

Zbadano także zależność parametru q od średniej czasowej wartości jednego spinu t_2 (tzw. okna czasowego, zob. rozdział 5.4.4). Przykładowe takie zależności ilustruje rysunek 6.14.

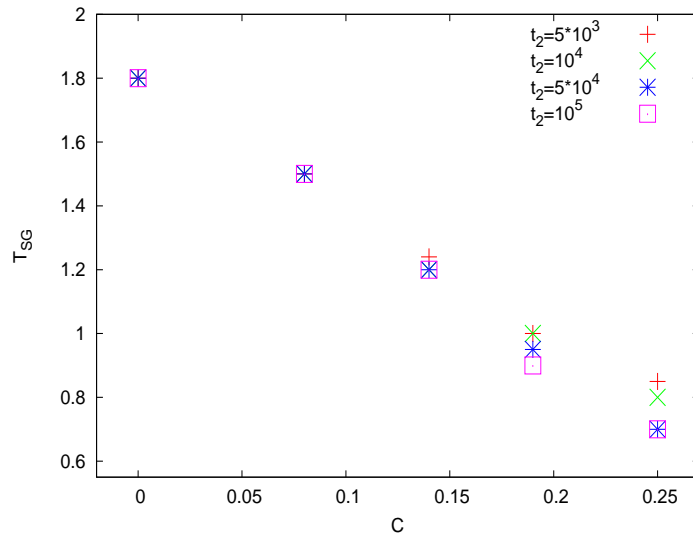
Dla pełnych przebiegów temperaturowych można zauważyć, że różnice wartości parametru q wynikające z różnych okien czasowych objawiają się dla układów o większym stopniu klasteryzacji. Dlatego też na wartość temperatury przejścia fazowego T_{SG} wyznaczoną poprzez ekstrapolację krzywej $q(T)$ wpływać będzie wartość okna czasowego (rys. 6.15).



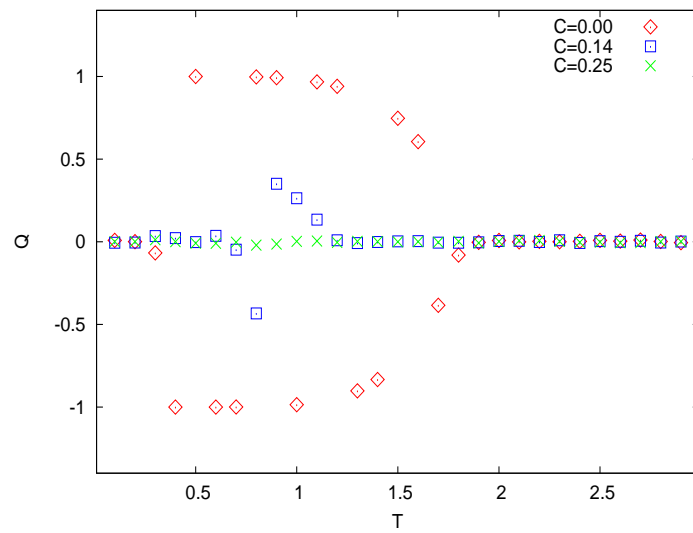
Rysunek 6.14: Wpływ okna czasowego na przebieg krzywej $q(T)$ dla układu o różnym C .

6.2.5 Parametr przekrywania

Zależność termiczna parametru przekrywania została zademonstrowana na rysunku 6.16. Dla sieci niesklasteryzowanej o $C = 0$ poniżej temperatury $T = 1.9$ pojawia się faza szkła spinowego – układ wybiera jeden z dwóch stanów podstawowych $Q = \pm 1$. Dla przypadku o większym C wartość Q zostaje zmniejszona przez obecne w sieci sklasteryzowanej „trójkąty”, a dla $C = 0.25$ niemożliwe już jest odczytanie temperatury przejścia fazowego.



Rysunek 6.15: Wpływ okna czasowego na temperatura przejścia fazowego dla układów o różnym stopniu klasteryzacji.



Rysunek 6.16: Parametr przekrywania Q w układzie o różnym stopniu klasteryzacji dla okna $N_{t_2} = 10^4$ przy liczbie spinów $N = 9 \cdot 10^4$.

6.3 Temperatura przejścia

6.3.1 Teoretyczne przewidywania

Dla sieci regularnej o $k = 3$ uzyskane numerycznie wyniki zostały skonfrontowane z przewidywaniami teoretycznymi (zob. rozdział 3.2.3). Średnią liczbę drugich sąsiadów potrzebną do obliczenia T_X uzyskano z symulacji sieci o $N = 9 \cdot 10^5$ węzłów (tab. 6.1). Otrzymane analitycznie temperatury krytyczne przedstawia tabela 6.2.

Tablica 6.2: Przewidywania teoretyczne temperatury krytycznej T_X dla sieci regularnej o $k = 3$.

C	T_N wzór 3.24	T_{SG} wzór 3.32
0.00	1.82	1.13
0.08	1.64	1.05
0.14	1.50	0.99
0.19	1.39	0.95
0.25	1.25	0.87
0.29	1.14	0.82
0.33	1.02	0.76

6.3.2 Wyniki symulacji

Temperaturę przejścia fazowego obliczono badając maksimum ciepła właściwego oraz zerowanie się parametru Edwardsa-Andersona oraz parametru przekrywania w danej temperaturze. Wyznaczenie temperatury przejścia z temperaturowych przebiegów podatności sprowadza się również do zbadania maksimum funkcji $\chi(T)$. Tabela 6.3 oraz wykres 6.17 prezentuje temperaturę krytyczną otrzymaną w wyniku powyższych symulacji wraz z krzywymi teoretycznymi.

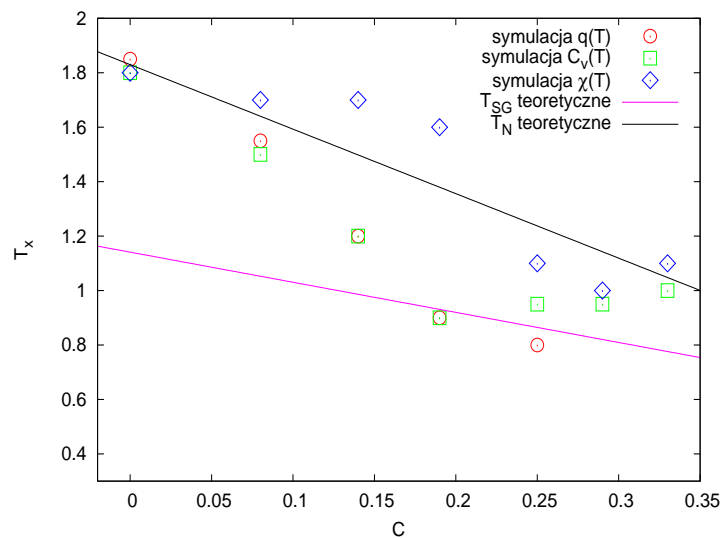
Tablica 6.3: Wyniki symulacji temperatury przejścia. W przypadku symulacji $C_v(T)$ rozważono metodę ilorazu różnicowego, a dla podatności magnetycznej T_X odczytano z krzywych wariacji magnetyzacji.

C	T_X symulacja $C_v(T)$	T_X symulacja $\chi(T)$	T_X symulacja $q(T)$	T_X symulacja $Q(T)$
0.00	1.80	1.80	1.85	1.90
0.08	1.50	1.70	1.55	-
0.14	1.20	1.70	1.20	1.20
0.19	0.90	1.60	0.90	-
0.25	0.95	1.10	0.80	-
0.29	0.95	1.00	-	-
0.33	1.00	1.10	-	-

Obliczenia numeryczne ciepła właściwego i parametru Edwardsa-Andersona sugerują, że dla $C = 0$ oraz $C = 0.33$ w niskich temperaturach pojawia się faza antyferromagnetyczna. Natomiast dla wartości pośrednich współczynnika C temperatura przejścia jest bliska teorii dla szkła spinowego.

Przypadki $C = 0$ i $C = 0.33$ są szczególne. W pierwszym z nich sieć jest dwudzielna, co sprawia, że możliwa jest faza antyferromagnetyczna. Do obliczenia temperatury przejścia można więc użyć wzoru 3.24. W drugim przypadku ($C = 0.33$) sieć jest podobna do *sieci Husimi* [59], w której nie ma nieporządku, dlatego też nie jest obecna faza szkła spinowego.

Wyniki uzyskane z symulacji podatności różnią się od pozostałych metod dla $C = 0.14$ i $C = 0.19$. Być może przyczyną tych różnic jest fakt, że maksima podatności są w tych przypadkach bardzo szerokie (rys. 6.9, 6.10).



Rysunek 6.17: Temperatura przejścia fazowego w zależności od współczynnika klasteryzacji obliczona numerycznie (punkty) i analitycznie (linie ciągłe).

Porównując rozbieżności teorii z numeryką dla tej sieci z poprzednimi rezultatami dotyczącymi sieci przypadkowej (zob. rozdział 5), można zauważyć, że tym razem nie chodzi tutaj o niezgodności jakościowe, a raczej ilościowe. Teoria zachowuje się zależnie od liczby drugich sąsiadów; w tym przypadku z_2 maleje ze wzrostem klasteryzacji (zob. tabela 6.1), podczas gdy dla sieci przypadkowej obserwujemy wzrost z_2 z C .

6.4 Podsumowanie

W przypadku omówionej tu sieci regularnej stopień każdego wężła wynosił dokładnie $k = 3$; C zmieniało się od 0 do $\frac{1}{3}$.

W sieci regularnej o $k = 3$ wyeliminowaliśmy wpływ wolnych spinów. Kształt krzywej $C_v(T)$ uzależniony jest od stopnia klasteryzacji. Dla $C < 0.15$ przejście fazowe znaczy ostry pik, natomiast dla $C > 0.15$ widać łagodne maksimum (zob. rys. 6.6 i 6.7). Ta różnica przypomina przebiegi ciepła właściwego $Fe_{1-x}Mg_xCl_2$ opublikowane w [62], gdzie ostry pik $C_v(T)$ charakteryzował fazę antyferromagnetyczną, a płaskie maksimum $C_v(T)$ fazę szkła spinowego. Dodajmy, że obydwie metody obliczania ciepła właściwego $C_v(T)$ generują zgodne krzywe $C_v(T)$ w całym zakresie temperatur (rys. 6.8).

Obliczając podatność dla sieci regularnej widzimy, że metoda wariacji magnetyzacji zwraca krzywe w postaci charakterystycznych maksimum, o ostrej krawędzi od strony niskich temperatur

i łagodnym przebiegu od strony wyższych T (rys. 6.9). Konkurencyjna metoda (rys. 6.10) tylko dla $C > 0.15$ pokazuje maksima o podobnym kształcie (zbieżne z drugą metodą tylko powyżej przejścia fazowego). Sieć o wyższym stopniu klasteryzacji generuje krzywe typu $\frac{1}{T}$ (za wyjątkiem układu w pełni sklasteryzowanego o $C = 0.33$ gdzie występuje wyraźne maksimum). Tylko dla przypadku z współczynnikiem klasteryzacji $C = 0$ i $C = 0.33$ obydwie metody generują identyczne wyniki. Sieć o pośrednich wartościach współczynnika klasteryzacji pokazuje niezgodności obydwu metod, które pojawiają się poniżej prawdopodobnej temperatury przejścia – zob. rys. 6.11 i 6.12.

Podsumowując, zarówno teoria jak i obliczenia numeryczne wskazują na spadek temperatury krytycznej wraz ze wzrostem współczynnika klasteryzacji.

Rozdział 7

Sieć pseudoregularna

Aby nie ograniczać wniosków z poprzedniego rozdziału do sieci regularnej, stworzono sieć, w której każdy węzeł ma dokładnie 3 lub dokładnie 5 sąsiadów. Oznacza to, że stopień wierzchołka dowolnego węzła będzie mógł przyjmować tylko jedną z dwóch wartości: $k = \{3, 5\}$.

7.1 Budowa sieci

Algorytm budowy nowej sieci przebiega następująco:

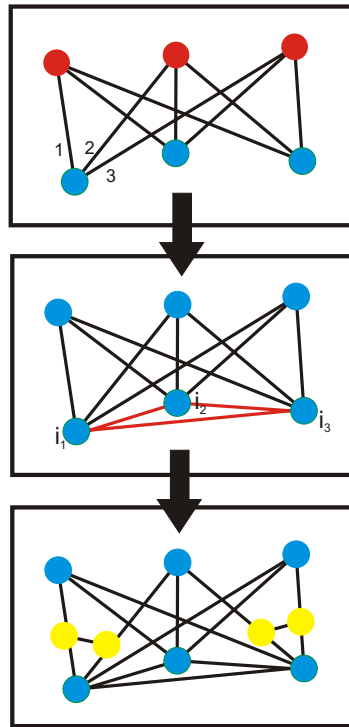
1. Tworzona jest sieć o $k = 3$ w sposób identyczny jak opisano w rozdziale 6 (sieć o N_o wierzchołkach podzielono na połowę, a następnie dla każdego węzła z przedziału $\langle 1, \frac{N_o}{2} \rangle$ wylosowane zostały dokładnie 3 wierzchołki z przedziału od $\langle \frac{N_o}{2} + 1, N_o \rangle$).
2. $N_5 = p_5 \cdot N_o$ losowych węzłów zyskuje dwóch kolejnych sąsiadów (gdzie $p_5 \in \langle 0, 1 \rangle$):
 - (a) Losowo wybrany węzeł i_1 połączono z losowo wybranym węzłem i_2 (pod warunkiem, że nie byli wcześniej sąsiadami)
 - (b) Węzeł i_2 z poprzedniego kroku łączy się z kolejnym dowolnym węzłem i_3 (i tak dalej, powiązanie zostaje ustalone pomiędzy każdym losowym i_n oraz i_{n+1})
 - (c) Ostatni węzeł łączy się z pierwszym.
3. Klasteryzacja — z prawdopodobieństwem pC wprowadzono do układu N_1 dodatkowych węzłów, ale w taki sposób, aby uzyskać z kolejnych wierzchołków trójkąty (podobnie jak dla sieci regularnej o $k = 3$ - por. rozdział 6.1 oraz rys. 6.2).
4. Końcowa liczba węzłów wynosi: $N = N_o + 2N_o p$

Wartości parametrów budujących sieć

Obliczenia numeryczne wykonano dla różnych parametrów p_5 i pC budujących sieć. Wartości tych parametrów dobrano w taki sposób, aby uzyskać trzy grupy grafów, w obrębie których stały byłyby stosunek drugich do pierwszych sąsiadów, tzn.:

$$B = \frac{z_2}{z_1} = const. \quad (7.1)$$

Tabele 7.1, 7.2 i 7.3 pokazują wartości parametrów budujących sieć kolejno o $B = 2$; 2.5 oraz 3.



Rysunek 7.1: Algorytm budowania sieci regularnej o $k = \{3, 5\}$.

Tablica 7.1: Parametry budujące sieć o $B = 2$.

p_5	p_C	C
0.00	0.00	0.00
0.03	0.05	0.04
0.06	0.10	0.08
0.10	0.16	0.12
0.20	0.33	0.19
0.30	0.50	0.23
0.60	1.00	0.29

Tablica 7.2: Parametry budujące sieć o $B = 2.5$.

$p\bar{5}$	pC	C
0.17	0.00	0.00
0.25	0.08	0.065
0.30	0.133	0.096
0.35	0.18	0.12
0.43	0.266	0.155
0.50	0.33	0.175
0.60	0.435	0.199
0.70	0.53	0.215
0.90	0.73	0.23

Tablica 7.3: Parametry budujące sieć o $B = 3$.

$p\bar{5}$	pC	C
0.376	0.00	0.0001
0.50	0.08	0.06
0.60	0.15	0.10
0.75	0.25	0.137
0.90	0.35	0.16
1.00	0.415	0.17

7.2 Magnetyzm sieci

Wszystkie obliczenia numeryczne dotyczące magnetyzmu sieci wykonano dla końcowej liczby węzłów $N = 9 * 10^4$. Badano tylko sieci z antyferromagnetycznym sprzężeniem spinów ($J = -1$).

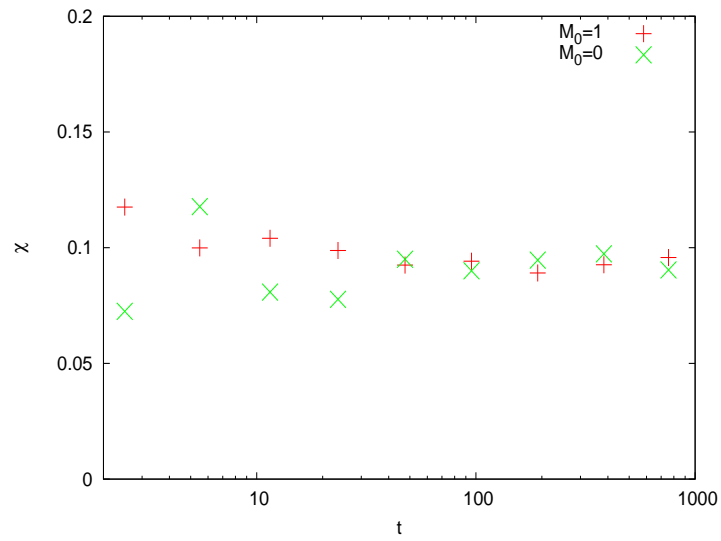
7.2.1 Badanie stanu równowagi

Dla sieci regularnej o $k = \{3, 5\}$ ze względu na podobieństwo do sieci regularnej o $k = 3$ nie badano już czasów relaksacji energii całkowitej układu. Dla wszystkich symulacji przyjęto za wstępny czas relaksacji $N_t = 10^5$.

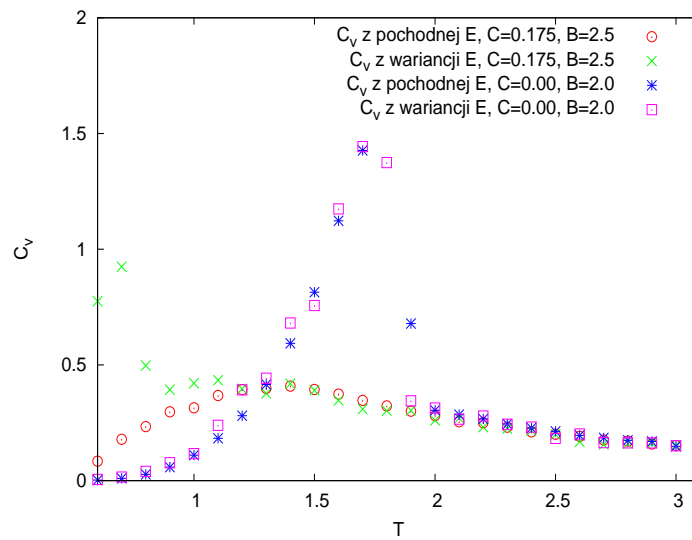
Natomiast na rysunku 7.2 sprawdzono czasową zależność podatności dla dwóch różnych warunków początkowych: 1) $M_0 = 1$, 2) $M_0 = 0$. Można zauważyć, że już po około 100 pierwszych krokach relaksacji pojawia się zbieżność podatności z dwoma stanami początkowymi.

7.2.2 Ciepło właściwe

Ciepło właściwe policzono dwoma metodami: wariacji energii i pochodnej po temperaturze. Dla wyższych temperatur obydwie metody generowały niemal identyczne krzywe (por. rys. 7.3), jednakże dla temperatur poniżej przewidywanego przejścia fazowego w przypadku niektórych topologii (o różnym współczynniku klasteryzacji) krzywe stają się rozbieżne.

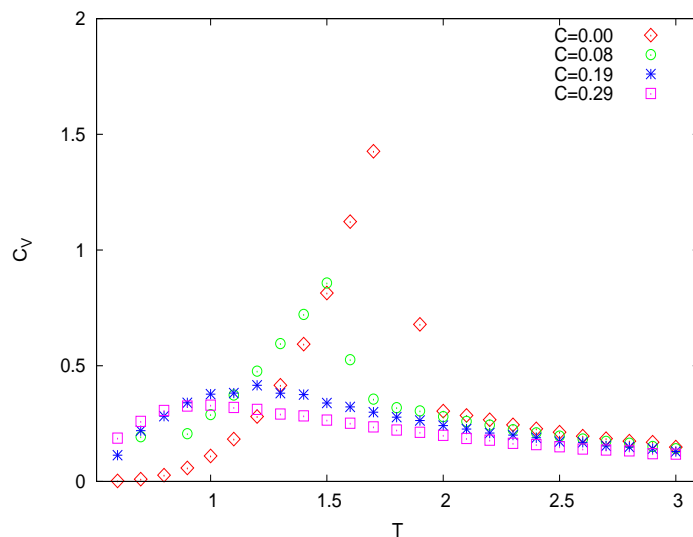


Rysunek 7.2: Czasowa zależność podatności z wariacji magnetyzacji dla sieci regularnej o $k = \{3, 5\}$ dla $C = 0.23$ ($pC = 0.5$ i $p5 = 0.3$) i $T = 0.7$; $N_{t_2} = 10MC$; $N = 9 * 10^4$.

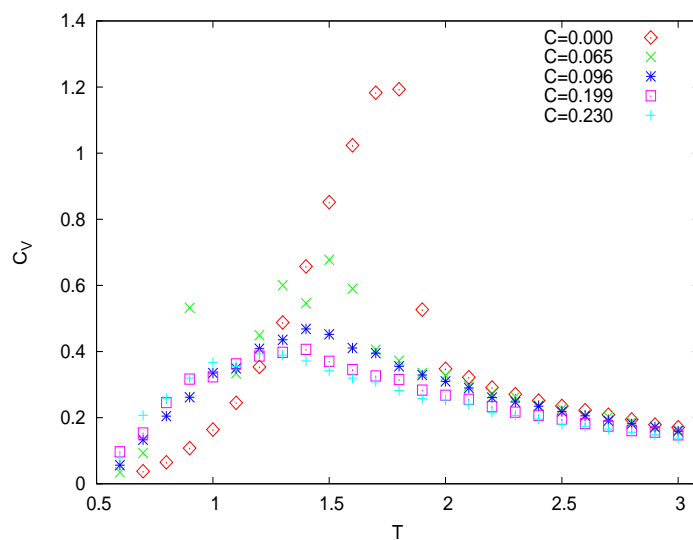


Rysunek 7.3: Porównanie dwóch metod liczenia ciepła właściwego.

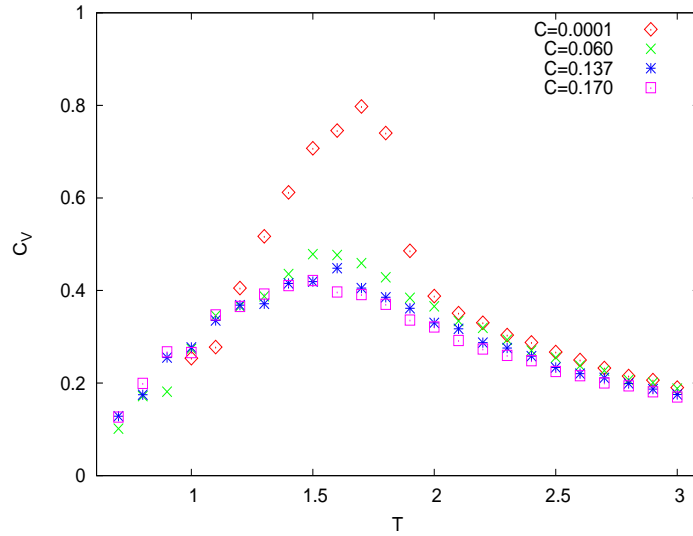
Zestawienia dla różnych wartości stopnia klasteryzacji przy zachowaniu tego samego stosunku drugich do pierwszych sąsiadów $B = 2; 2.5; 3$ prezentują odpowiednio wykresy 7.4, 7.5 oraz 7.6. Dla układów o niskim współczynniku klasteryzacji widzimy ostre maksimum ciepła właściwego (widoczne dla obu metod), podczas gdy dla wyższych C maksimum to jest bardzo łagodne.



Rysunek 7.4: Zależność ciepła właściwego liczonego metodą pochodnej energii od temperatury dla $B = 2$.



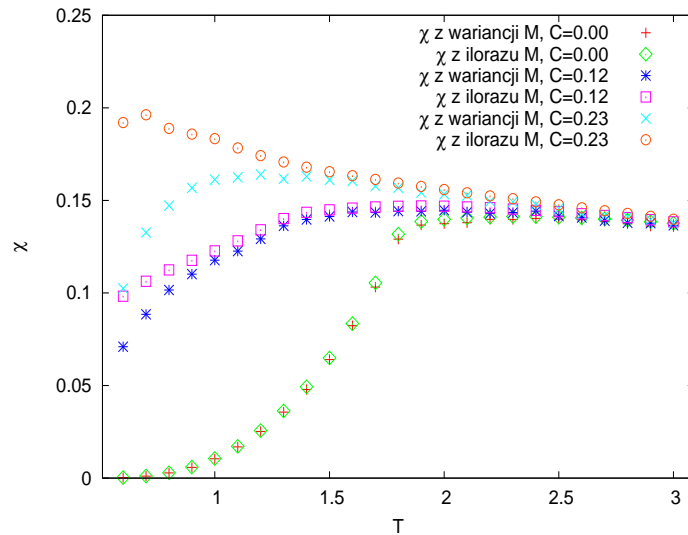
Rysunek 7.5: Zależność ciepła właściwego liczonego metodą pochodnej energii od temperatury dla $B = 2.5$.



Rysunek 7.6: Zależność ciepła właściwego liczonego metodą pochodnej energii od temperatury dla $B = 3$.

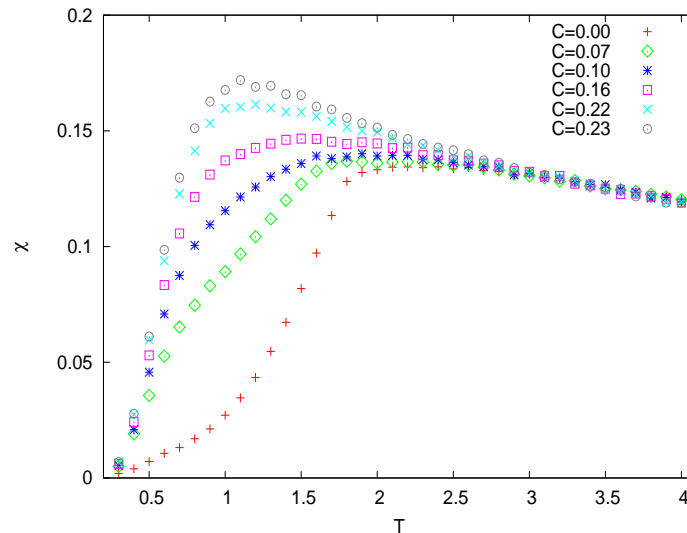
7.2.3 Podatność magnetyczna

Podatność magnetyczna sieci została również obliczona dwoma metodami: ilorazem różnicowym i wariancją magnetyzacji — obydwie metody dają ten sam przebieg krzywej dla zerowej wartości współczynnika klasteryzacji (zob. rys 7.7). Wyższy stopień C powoduje, że krzywe stają się rozbieżne w niskich temperaturach. Efekt ten jest tym większy (niezgodność rozpoczyna się od wyższej temperatury), im wyższy jest współczynnik klasteryzacji.



Rysunek 7.7: Porównanie dwóch metod liczenia podatności magnetycznej; $B = 2$.

Dla $B = 2.5$ i różnych wartości współczynnika C przebieg krzywych $\chi(T)$ obrazuje wykres 7.8 dla podatności liczonej metodą wariancji. Jeżeli za położenie maksimum wybrać punkt, kiedy początkowy (dla wysokich T) brak zależności χ od T kończy się spadkiem to temperatura przejścia fazowego maleje ze wzrostem współczynnika klasteryzacji C .



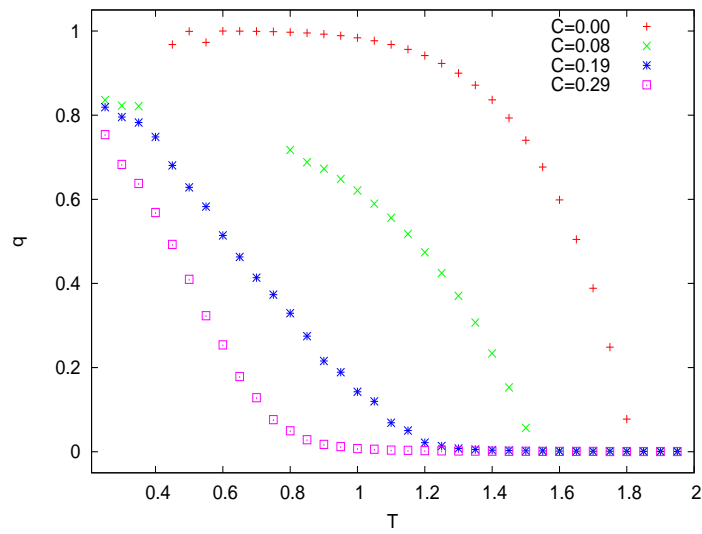
Rysunek 7.8: Podatność liczona metodą wariancji dla różnych wartości współczynnika C przy stosunku $B = 2.5$.

7.2.4 Parametr Edwardsa-Andersona

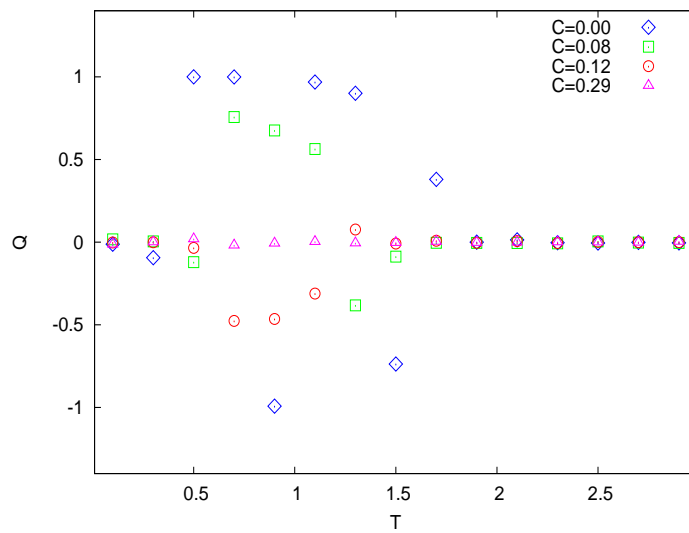
Dla sieci pseudoregularnej zbadano również zachowanie się parametru Edwardsa-Andersona. Rysunek 7.9 pokazuje zależność temperaturową q dla układów o różnym stopniu klasteryzacji przy stosunku drugich do pierwszych sąsiadów równym $B = 2$. Zerowanie się parametru porządku szkieletu spinowych przy wzrastającym współczynniku klasteryzacji C następuje dla coraz to niższych temperatur.

7.2.5 Parametr przekrywania

Parametr przekrywania Q w funkcji temperatury pokazano na rysunku 7.10. Podobnie jak dla sieci regularnej o $k = 3$, przypadki z niskim współczynnikiem klasteryzacji pozwalają na odczytanie temperatury przejścia fazowego, które dla $C = 0$ i $C = 0.08$ wynoszą odpowiednio 1.9 oraz 1.6 (przypadek z $C = 0$ jest równoważny sieci regularnej o $k = 3$ z zerową klasteryzacją).



Rysunek 7.9: Parametr Edwardsa-Andersona q w układzie o różnym stopniu klasteryzacji dla okna $N_{t_2} = 10^4$ i $B = 2$.



Rysunek 7.10: Parametr przekrywania Q w układzie o różnym stopniu klasteryzacji dla okna $N_{t_2} = 10^4$ i $B = 2$.

7.3 Temperatury przejścia

7.3.1 Teoretyczne przewidywania

Wykorzystując model niezależnych par dla drzewa przypadkowego temperaturę przejścia w stan antyferromagnetyczny T_N obliczono ze wzoru 3.24, a temperaturę szkła spinowego T_{SG} według wzoru 3.32. W tabeli 7.4 przedstawiono otrzymane wartości temperatur wykorzystujące wspomniane wzory analityczne. Liczbę pierwszych i drugich sąsiadów otrzymano z symulacji sieci o $N = 9 * 10^4$ sterując odpowiednio parametrami pC i $p5$. Ponieważ z równania 3.24 oraz 3.32 wynika, że temperatura krytyczna zależy tylko od wielkości B , otrzymane temperatury przejścia dla stałego B nie zależą od współczynnika klasteryzacji — są identyczne w całym przedziale C dla którego dokonano obliczeń.

Tablica 7.4: Teoretyczne wartości temperatury przejścia.

B	T_N	T_{SG}	C
2.0	1.82	1.13	(0;0.29)
2.5	2.36	1.34	(0;0.23)
3.0	2.88	1.52	(0;0.17)

7.3.2 Wyniki symulacji i porównanie z teorią

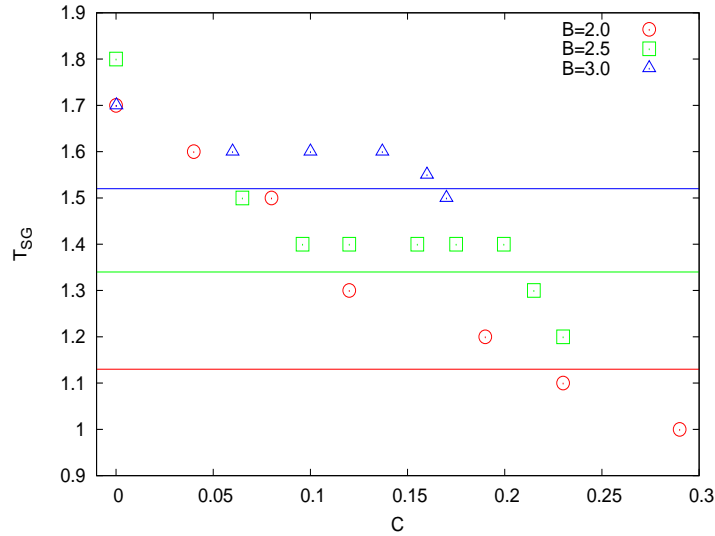
Temperaturę przejścia w stan szkła spinowego odczytano z wykresów zależności podatności magnetycznej od temperatury oraz ciepła właściwego liczonego metodą wariacji energii od temperatury. Za temperaturę krytyczną przyjęto tę wartość, dla której wykresy $C_v(T)$ oraz $\chi(T)$ osiągają maksimum w danej temperaturze, a w przypadku symulacji $q(T)$ oraz $Q(T)$ odczytano temperaturę, dla której następowało zerowanie się parametrów q i Q (zob. tab. 7.5).

Tablica 7.5: Wyniki symulacji temperatury przejścia dla $B = 2$. W przypadku symulacji $C_v(T)$ wykorzystano metodę ilorazu różnicowego, a dla podatności magnetycznej T_X odczytano z krzywych wariacji magnetyzacji.

C	T_X symulacja $C_v(T)$	T_X symulacja $\chi(T)$	T_X symulacja $q(T)$	T_X symulacja $Q(T)$
0.00	1.8	1.8	1.9	1.9
0.08	1.5	1.6	1.7	1.6
0.19	1.2	1.2	1.3	-
0.29	1.0	1.0	1.0	-

Wykorzystany algorytm, dzięki jednoczesnej możliwości sterowania liczbą węzłów o $k = 5$ (poprzez $p5$) i współczynnikiem klasteryzacji (poprzez pC), pozwala na skonstruowanie takich grafów, które mają jednocześnie ten sam stosunek drugich do pierwszych sąsiadów (B) i zmienny współczynnik klasteryzacji. Tymczasem teoria wskazuje na zależność wyłącznie od parametru B .

Dla sieci z topologią o $B = 3$ wzór analityczny nieznacznie tylko zaniża wartość temperatury krytycznej w stosunku do tego co pokazują wyniki symulacji. Dla układu o maksymalnej



Rysunek 7.11: Zestawienie wyników symulacji (C_v) oraz przewidywań teoretycznych (ciągłe linie) dla trzech różnych wartości $B = 2; 2.5; 3$.

wartości współczynnika klasteryzacji (przy zachowaniu $B = 3$) wartość ta pokrywa się z wartością teoretyczną $T_{SG} = 1.52$. Ponadto, otrzymany numerycznie charakter zależności $T_X(C)$ jest prawie stały (tak jak przewiduje teoria) dla $0 < C < 0.15$.

Wyniki symulacji ciepła właściwego dla przypadku $B = 2.5$ układają się w charakterystyczne „kolano” (rys. 7.11): dla $C < 0.1$ temperatura przejścia maleje ze wzrostem współczynnika klasteryzacji aż do osiągnięcia wartości bliskiej wartości otrzymanej analitycznie. Następnie T_X pozostaje stałe ze wzrostem C i powyżej $C = 0.2$ znowu zaczyna spadać.

Największe rozbieżności teorii i symulacji można zauważyć dla $B = 2$ (rys. 7.11). Tutaj temperatura krytyczna spada od wartości $T_X = 1.7$ dla zerowego współczynnika klasteryzacji do $T_X = 1.1$ (dla $C = 0.23$), której wartość jest bliska przewidywaniom teoretycznym; a dla układu w pełni sklasteryzowanego ponownie staje się rozbieżna z wartością teoretyczną.

7.4 Podsumowanie

Przebieg krzywych $C_v(T)$ jest podobny do tego, jaki zaobserwowano dla sieci regularnej o $k = 3$. Dla $C < 0.1$ kształt krzywej przypomina ostry pik, podczas gdy ciepło właściwe bardziej sklasteryzowanego układu przechodzi w bardzo rozciągnięte maksimum (por. rys 7.7). Podobnie jak dla sieci regularnej, to zachowanie odtwarza przebiegi eksperymentalne $Fe_{1-x}Mg_xCl_2$ [62].

Sieć pseudoregularna wykazuje krzywe podatności zgodne w całym zakresie temperatur tylko dla stosunkowo niewielkiego stopnia klasteryzacji sieci (rys. 7.7). Dla $C > 0.1$ krzywe te stają się rozbieżne dla niskich temperatur; im większy współczynnik klasteryzacji tym ta niezgodność pojawia się wcześniej (tzn. począwszy od wyższej temperatury).

Teoretyczne przewidywania temperatury przejścia fazowego dla dowolnej sieci wskazują jednoznacznie, że T_X zależy tylko od stosunku drugich do pierwszych sąsiadów (parametr B), a tylko pośrednio od współczynnika klasteryzacji.

Ze względu na możliwość jednoczesnego sterowania liczbą węzłów o pięciu (lub trzech) sąsiadach

i stopniem klasteryzacji udało się uzyskać sieć o stałym B i zmiennym współczynniku C , której teoretyczna wartość T_{SG} jest stała. Analiza krzywych $C_v(T)$ i $\chi(T)$, a także $q(T)$ i $Q(T)$ wskazuje na początkowy spadek T_X ze wzrostem C . Dla wyższych wartości C temperatura T_x stabilizuje się na pewnym poziomie, bliskim wartości teoretycznej T_{SG} .

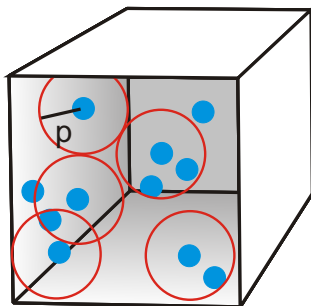
Rozdział 8

Sieć przestrzenna

W tym rozdziale omawiamy sieć zanurzoną w trójwymiarowej przestrzeni – sieć przestrzenną. Tak zbudowany graf nie charakteryzuje się własnością małego świata: średnica grafu rośnie potęgowo z ilością węzłów, co jest nawiązaniem do rzeczywistych układów magnetycznych.

8.1 Budowa sieci

Układ N węzłów umieszczono w trójwymiarowej komórce elementarnej o wymiarach $1 \times 1 \times 1$ (zob. rys. 8.1). Położenie każdego węzła jest wybrane w sposób przypadkowy – losowane są



Rysunek 8.1: Algorytm budowania sieci regularnej o $k = 3$

kolejne współrzędne x, y, z danego węzła i . Powiązanie pomiędzy dwoma dowolnie wybranymi węzłami i oraz j ustala się wtedy, kiedy dzieląca je odległość jest mniejsza niż pewna wielkość p (maksymalnie ta wartość może wynosić 1.73 – jest to odległość jaka może pojawić się w układzie pomiędzy dwoma wierzchołkami znajdującymi się w punktach $[0, 0, 0]$ i $[1, 1, 1]$). Po spełnieniu tego warunku węzeł i staje się sąsiadem węzła j .

Na komórkę nałożono periodyczne warunki brzegowe we wszystkich trzech wymiarach.

Tworzy się więc sieć przypadkową, umieszczoną w trójwymiarowej przestrzeni, a każdy węzeł opisany jest przez zestaw współrzędnych x, y, z oraz przez odległość dzielącą go od innych wierzchołków. Średnia liczba sąsiadów (węzłów, z którymi dany wierzchołek jest połączony) zależy od promienia p i przy wartościach rzędu $p \simeq 1$ nasyca się (prawie wszystkie węzły są ze sobą połączone).

Dla tak zbudowanej sieci można zapisać przybliżony wzór:

$$\frac{N}{V} = \frac{\langle k \rangle}{p^3} \quad (8.1)$$

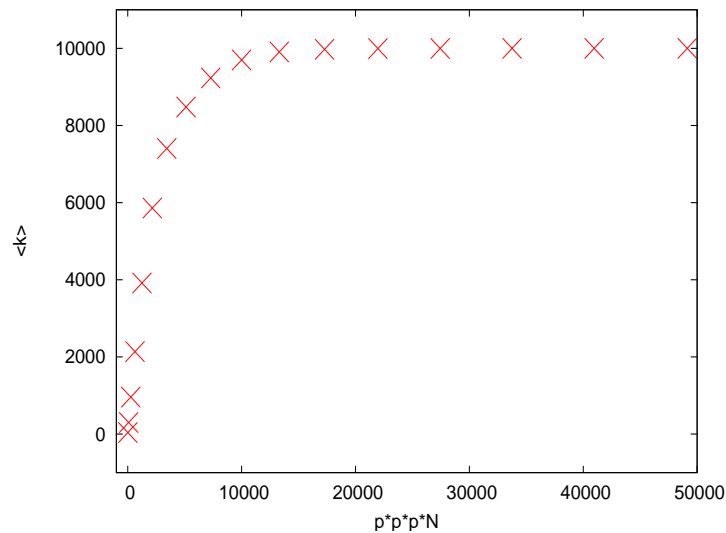
z czego wynika, że dla komórki o boku $a = 1$:

$$\langle k \rangle = p^3 \cdot N. \quad (8.2)$$

Powyższy wynik można skonfrontować z rysunkiem 8.2. W szczególności, w wyniku zlogarytmowania równania 8.2 można otrzymać:

$$\log \langle k \rangle = 3 \cdot \log p + \log N. \quad (8.3)$$

Zależność logarymiczna $\log \langle k \rangle$ ($\log p$) powinna wskazać na współczynnik kierunkowy prostej równy 3 i przesunięcie rzędu 4 jednostek (dla $N = 10^4$). Fitowanie tych danych z zakresu $p \in [0.02, 0.5]$ widoczne na rysunku 8.3 daje w przybliżeniu takie właśnie wartości.



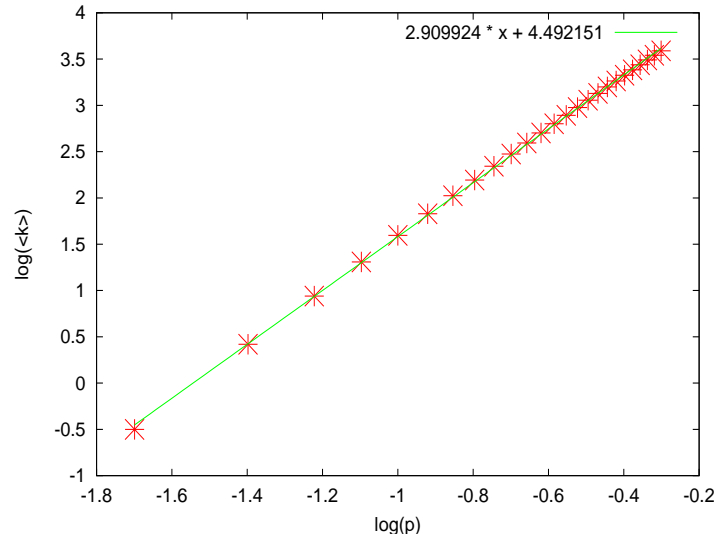
Rysunek 8.2: Zależność średniej liczby sąsiadów od $p^3 N$, $N = 10^4$.

Klasteryzacja

Kiedy badamy współczynnik klasteryzacji tak skonstruowanej sieci okazuje się, że jest on niezwykle wysoki. Przykładowo, dla $\langle k \rangle = 4$ wynosi on około $C = 0.42$, podczas gdy dla sieci nie umieszczonej w przestrzeni (patrz budowa grafu w rozdziale 5.1) o tym samym średnim $\langle k \rangle$ współczynnik ten jest bliski zeru.

Tym razem również podwyższano klasteryzację sieci metodą opisaną w rozdziale 5.1. Ta modyfikacja nie jest tak efektywna jak w poprzednich przypadkach, ale okazuje się że w sposób istotny wpływa na parametry sieci opisane w poniższych rozdziałach.

Tabele 8.1 i 8.2 przedstawiają zestawienie różnych wielkości budujących sieć przestrzenną dla dwóch przypadków: $\langle k \rangle = 4$ i $\langle k \rangle = 9$. Parametr p określa próg powyżej którego dwa



Rysunek 8.3: Fitowanie zależności $\log \langle k \rangle$ ($\log p$) dla $N = 10^4$ i $p \in [0.02, 0.5]$.

węzły nie są już ze sobą związane, pC określa prawdopodobieństwo klasteryzacji, a C – uzyskany współczynnik klasteryzacji.

Wszystkie symulacje zaprezentowane w tym rozdziale zostały przeprowadzone dla sieci przestrzennej o $N = 10^5$ węzłach.

Tablica 8.1: Wartości parametrów budujących sieć o $\langle k \rangle = 4$ i dla $N = 10^5$.

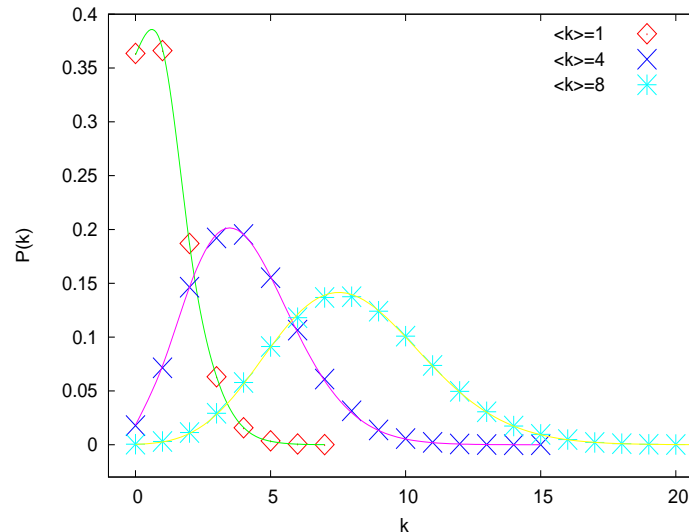
C	p	pC	z_2
0.42	0.0212	0	16.0
0.43	0.0208	0.030	16.6
0.44	0.0204	0.060	17.4
0.45	0.0200	0.094	18.3
0.46	0.0196	0.120	18.7

Tablica 8.2: Wartości parametrów budujących sieć o $\langle k \rangle = 9$ i dla $N = 10^5$.

C	p	pC	z_2
0.47	0.0278	0	81
0.48	0.0260	0.045	86
0.49	0.0250	0.070	88
0.50	0.0240	0.104	98
0.53	0.0220	0.179	113
0.56	0.0200	0.282	143

Rozkład stopnia wierzchołka

Sieć przypadkowa uwięziona w komórce wykazuje zgodność rozkładu stopnia wierzchołka z rozkładem Poissona dla dowolnej średniej liczby sąsiadów $\langle k \rangle$ (patrz rysunek 8.4). Wprowadzenie do sieci klasteryzacji wprowadza znaczne odchylenia od rozkładu Poissona, tym większe, im większy współczynnik C . Zmiany te ilustruje wykres 8.5.

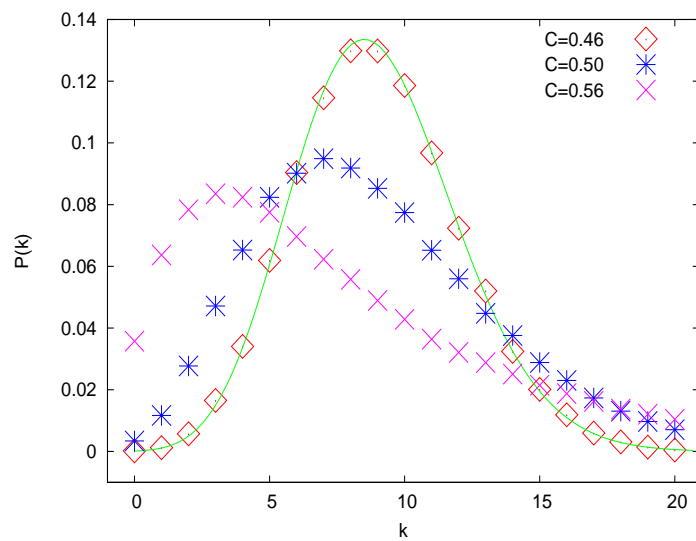


Rysunek 8.4: Rozkłady stopnia wierzchołka dla różnych $\langle k \rangle$; $N = 10^5$, $pC = 0$. Ciągłe linie oznaczają rozkład Poissona dla ustalonej wartości $\langle k \rangle$.

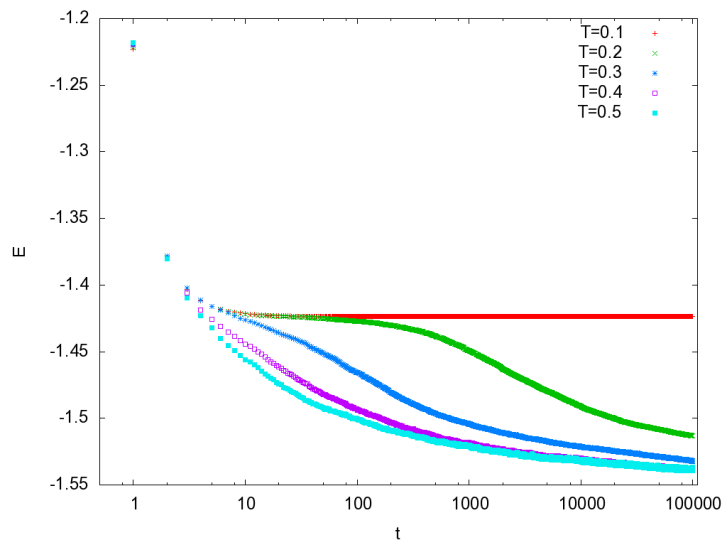
8.2 Badanie stanu równowagi

Dla sieci przestrzennej rozważono układ o antyferromagnetycznym ułożeniu spinów, przyjmując za całość wymiany $J = -1$. Energia układu stabilizuje się po $N_t = 10^3$ przejściach po całej siatce spinów (jedno przejście oznacza, że każdy spin ma możliwość zmiany swojego znaku – algorytm N razy losowo chodzi po siatce i wybiera spiny, które może „przerzucić”). Ten wynik jest jednak prawdziwy tylko dla temperatury powyżej $T = 0.5$, gdyż niższe temperatury – nawet dla czasów rzędu $N_t = 10^5$ – wskazują, że układ jest daleki od równowagi termodynamicznej (por. rysunki 8.6 i 8.7). Ze względu na ten fakt, badając magnetyzm sieci przestrzennej skupiono się na temperaturach powyżej $T = 0.5$, a za wstępny czas relaksacji przyjęto $N_t = 10^4$.

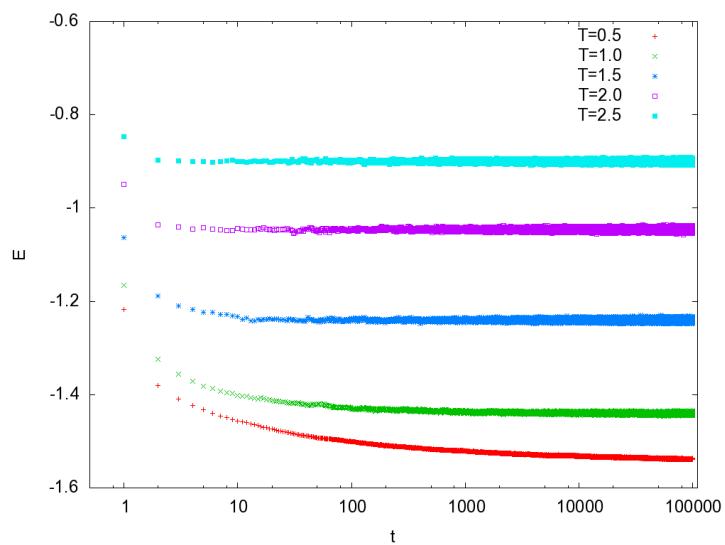
Stan stacjonarny układu, podobnie jak w poprzednich rozdziałach sprawdzono również wykonując relaksację podatności startującej od magnetyzacji równej $M = 0$ i $M = +1$ (rys. 8.8). Test ten pozwala stwierdzić, że przyjęty wstępny czas $N_t = 10^4$ jest wystarczający dla $T > 0.5$



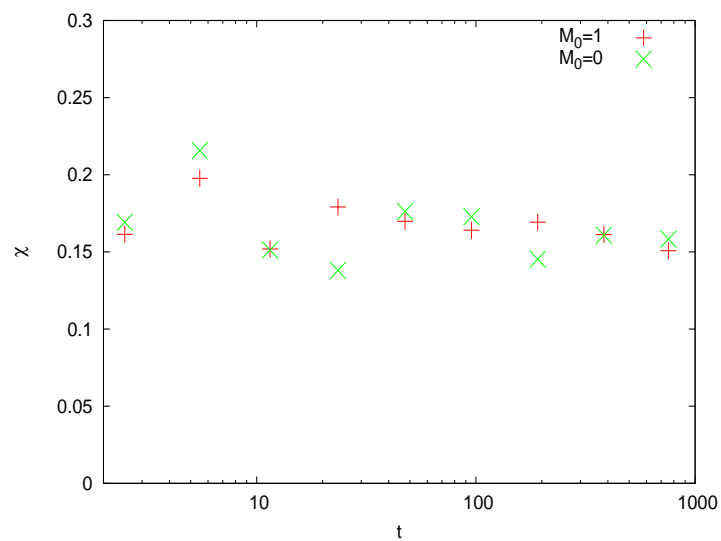
Rysunek 8.5: Rozkłady stopnia wierzchołka dla przypadku $\langle k \rangle = 9$ i różnym stopniu klasteryzacji. Ciągła linia oznacza rozkład Poissona dla $\langle k \rangle = 9$.



Rysunek 8.6: Zależność czasowa całkowitej energii układu antyferromagnetycznego o $\langle k \rangle = 9$ i $N = 10^5$.



Rysunek 8.7: Całkowita energia układu antyferromagnetycznego o $\langle k \rangle = 9$ i $N = 10^5$.

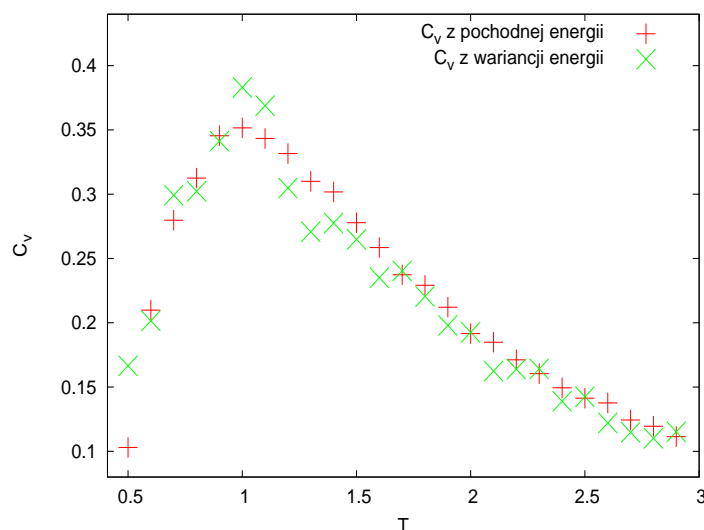


Rysunek 8.8: Czasowa zależność podatności z wariacji magnetyzacji dla sieci przestrzennej o $\langle k \rangle = 4$ dla $C = 0.44$ i $T = 0.7$; $N_{t_2} = 10MC$; $N = 10^5$.

8.3 Magnetyzm sieci przestrzennej

8.3.1 Ciepło właściwe

Dla antyferromagnetycznego układu sprawdzono zależność ciepła właściwego od temperatury. Do policzenia tej wielkości użyto dwóch metod omówionych w rozdziale 3.3.1: metody wariancji i pochodnej energii. Jak widać na rysunku 8.9 obydwa podejścia są zgodne, jednakże dla metody ilorazu różnicowego energii wyniki układają się w bardziej gładką krzywą (nie fluktuują).



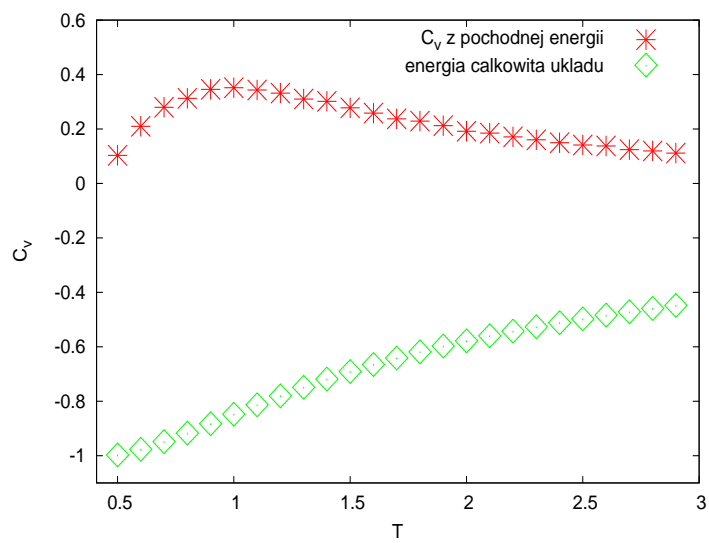
Rysunek 8.9: Porównanie dwóch metod liczenia ciepła właściwego dla $\langle k \rangle = 4$ i $N = 10^5$.

Szukając maksimum ciepła właściwego dla sieci przestrzennej niesklasteryzowanej widzimy, że dla układu spinów o $\langle k \rangle = 4$ rysunek 8.11 wskazuje na temperaturę $T = 1.0$, a dla $\langle k \rangle = 9$ temperaturę około $T = 1.6$.

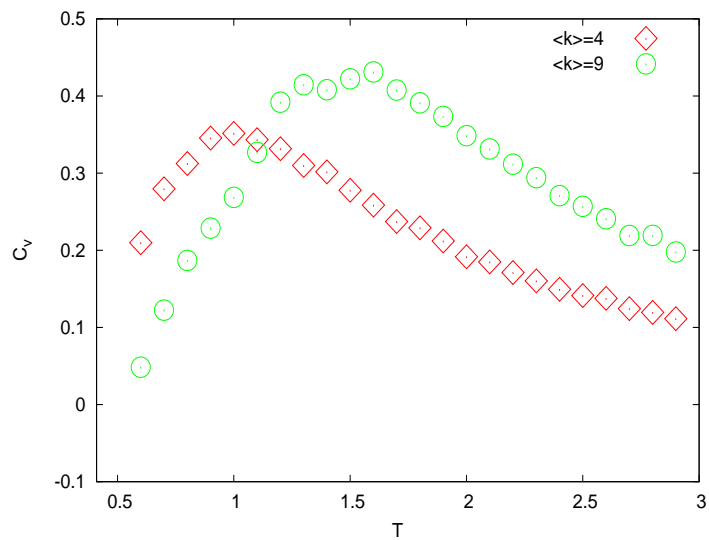
Wpływ klasteryzacji

Ciepło właściwe układów o różnym stopniu klasteryzacji, przy zachowaniu tego samego średniego $\langle k \rangle$ wykazuje pewne zmiany, szczególnie widoczne jest to dla przypadku $\langle k \rangle = 9$ (por. rysunki 8.12 i 8.13). Maksimum ciepła, które może wskazywać na przejście fazowe przesuwa się delikatnie ze wzrostem współczynnika C w stronę niższych temperatur (np. dla $C = 0.47$ przypada ono na temperaturę $T = 1.6$, dla $C = 0.56 - T = 1.3$).

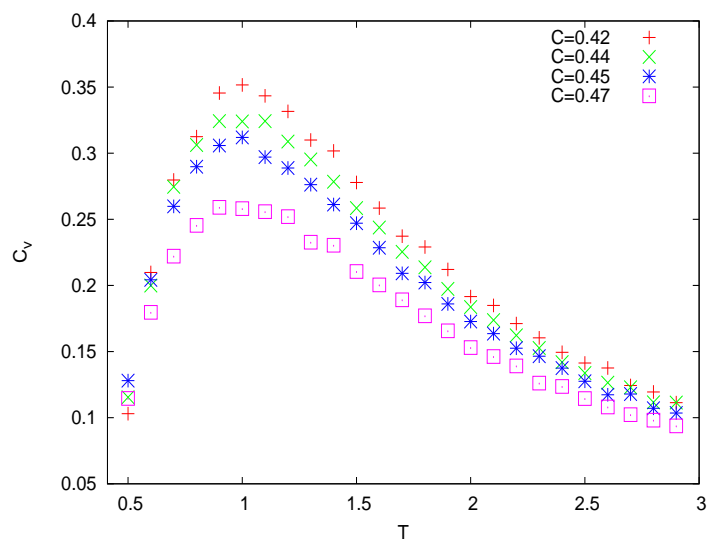
Przypadek o $\langle k \rangle = 4$ cechuje zbyt mała zmiana współczynnika C pod wpływem działania klasteryzacji, dlatego też nie jest możliwe zaobserwowanie znaczących przesunięć maksimumów wykresów $C_v(T)$.



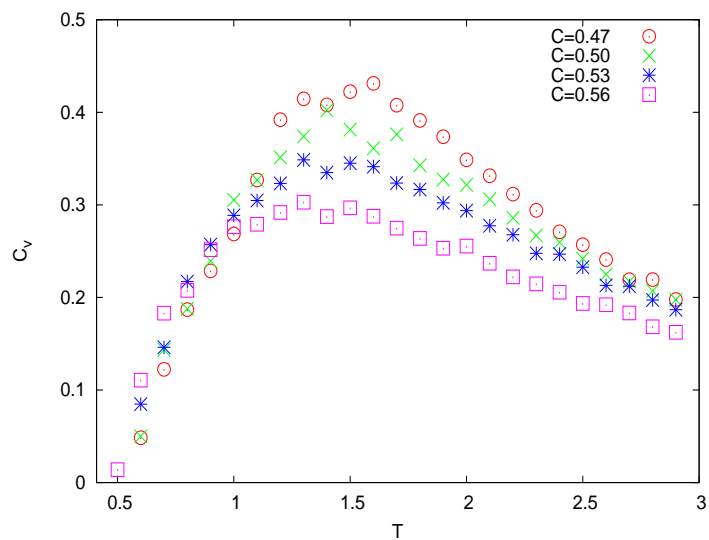
Rysunek 8.10: Zależność ciepła właściwego i energii od temperatury dla $\langle k \rangle = 4$.



Rysunek 8.11: Temperaturowa zależność ciepła właściwego dla $\langle k \rangle = 4$ i $\langle k \rangle = 9$.



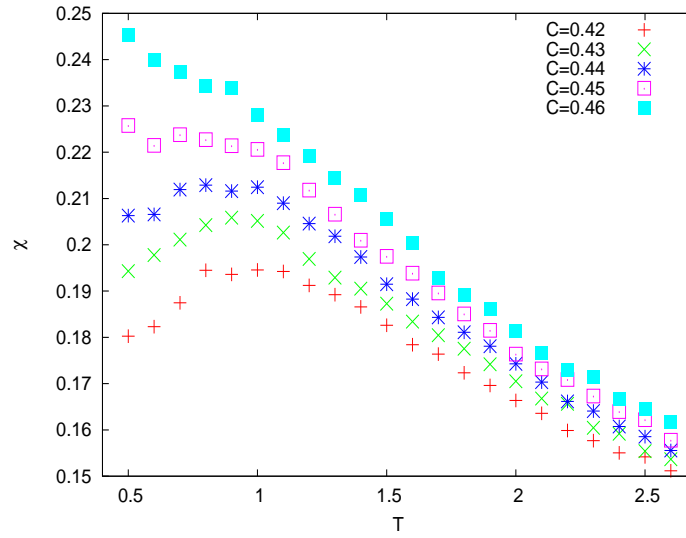
Rysunek 8.12: Wpływ współczynnika klasteryzacji C na temperaturową zależność ciepła właściwego dla $\langle k \rangle = 4$.



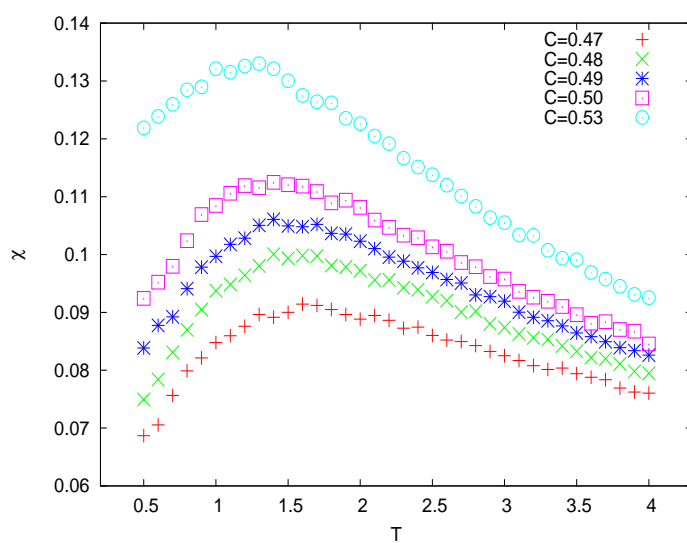
Rysunek 8.13: Wpływ współczynnika klasteryzacji C na temperaturową zależność ciepła właściwego dla $\langle k \rangle = 9$.

8.3.2 Podatność magnetyczna

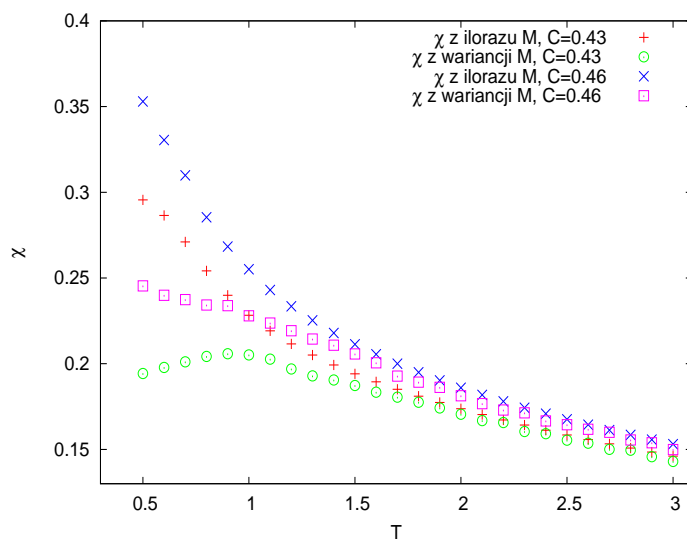
Wykorzystując doświadczenia w liczeniu podatności z poprzednich rozdziałów, dla przypadku sieci przestrzennej podatność policzono wstępnie tylko metodą wariacji magnetyzacji, która to okazywała się być nieco precyzyjniejsza dla sieci przypadkowych. Uzyskane wyniki pokazują wykresy 8.14 i 8.15. Tym razem, obliczenia przeprowadzono uśredniając magnetyzację po przeprowadzeniu $N_{t_1} = 5 * 10^5$ relaksacji całego układu. W kolejnym kroku dokonano jednak porównania dwóch metod liczenia podatności, które ilustruje rysunek 8.16 i 8.17 (w tym przypadku uśrednienie wynosiło $N_{t_1} = 10^4$).



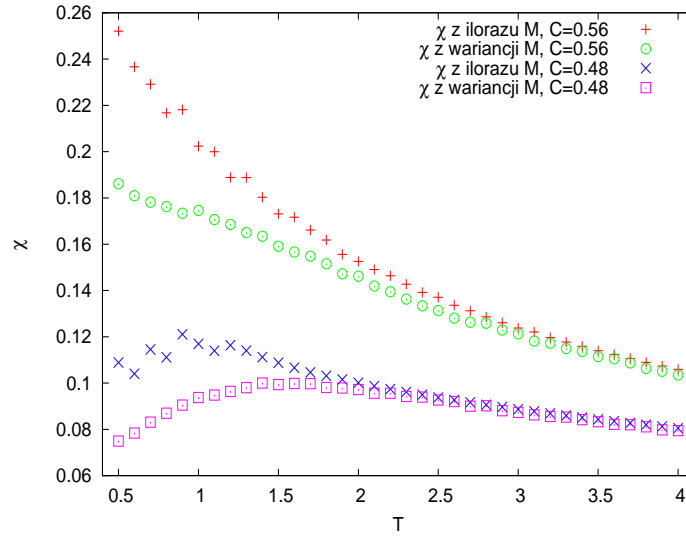
Rysunek 8.14: Podatność z wariacji magnetyzacji dla $\langle k \rangle = 4$.



Rysunek 8.15: Podatność z wariacji magnetyzacji dla $\langle k \rangle = 9$.



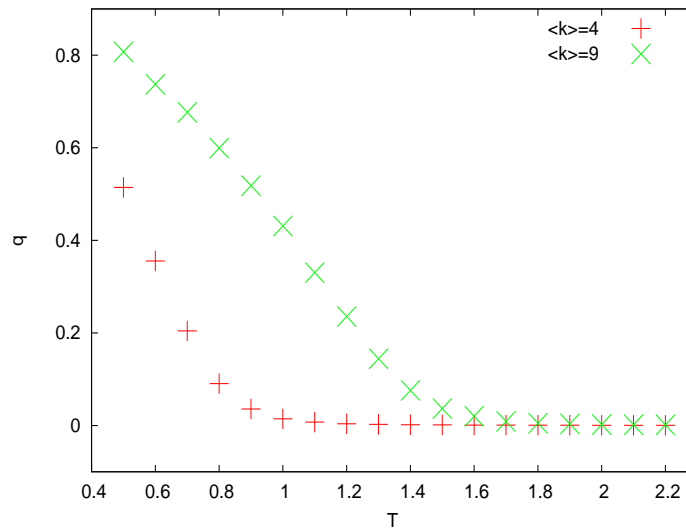
Rysunek 8.16: Porównanie dwóch metod liczenia podatności dla $\langle k \rangle = 4$, $C = 0.43$ i $C = 0.46$.



Rysunek 8.17: Porównanie dwóch metod liczenia podatności dla $\langle k \rangle = 9$, $C = 0.48$ i $C = 0.56$.

8.3.3 Parametr Edwardsa-Andersona

Sprawdzono także zachowanie się parametru Edwardsa-Andersona zdefiniowanego wzorem 3.33 dla układu o $N = 10^5$ przy oknie czasowym $N_{t_2} = 10^4$ i iteracjach wstępnych $N_{t_1} = 10^4$. Wyniki prezentuje wykres 8.18.

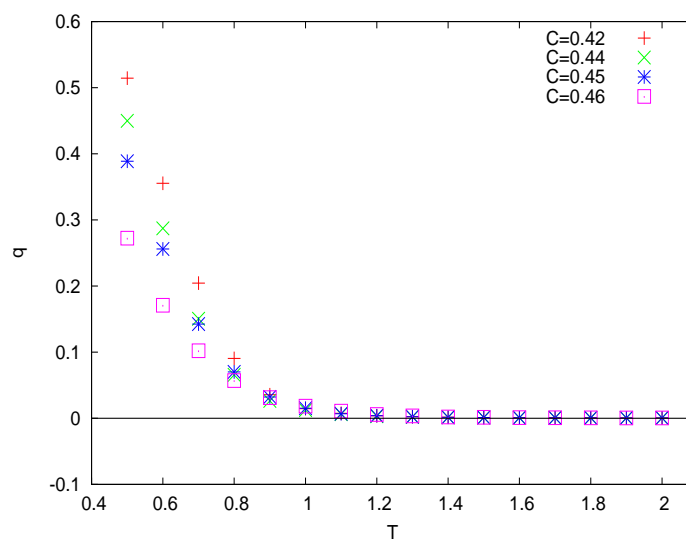


Rysunek 8.18: Temperaturowa zależność parametru Edwardsa-Andersona dla $\langle k \rangle = 4$ i $\langle k \rangle = 9$.

Okazuje się, że ekstrapolacja krzywej $q(T)$ dla $\langle k \rangle = 4$ i $\langle k \rangle = 9$ daje w przybliżeniu temperatury $T = 1.0$ i $T = 1.6$ co pokrywa się z temperaturą przejścia, jaką przewidziały temperaturowe zależności ciepła właściwego.

Wpływ klasteryzacji

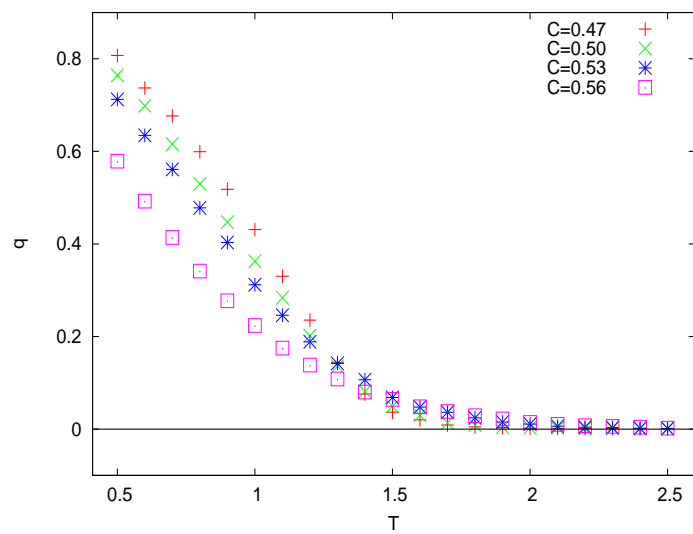
Badając wpływ klasteryzacji na zachowanie się parametru Edwardsa-Andersona trudno zauważyć istotne zmiany. Wprawdzie współczynnik klasteryzacji wpływa delikatnie na kształt krzywej $q(T)$, niemożliwe jest jednak odczytanie jakichkolwiek zmian temperatury przejścia nawet dla układu o $\langle k \rangle = 9$ (zob. rys. 8.19 i 8.20).



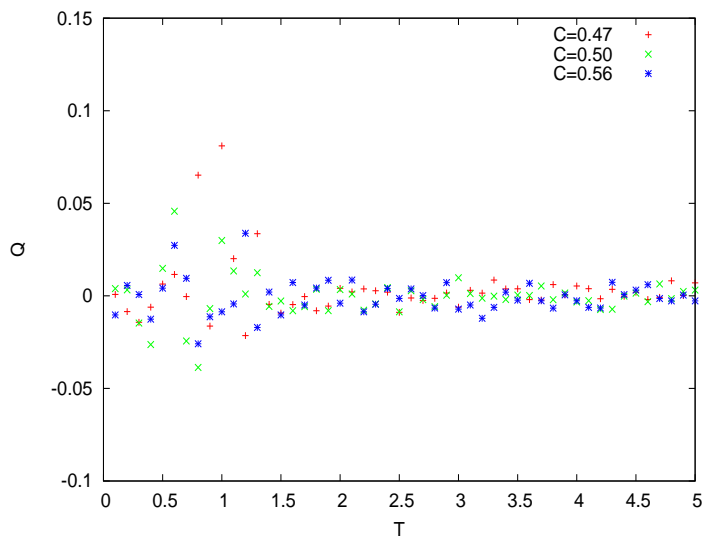
Rysunek 8.19: Wpływ klasteryzacji na parametr Edwardsa-Andersona dla $\langle k \rangle = 4$.

8.3.4 Parametr przekrywania

Ze względu na dużą klasteryzację sieci, również parametr przekrywania okazuje się być nieprzydatny do określenia temperatury przejścia fazowego. Dla sieci przestrzennej na obniżenie wartości Q wpływ ma zarówno obecność wolnych spinów, jak i duża liczba tzw. trójkątów wynikających z wysokiego współczynnika C (zob. rys. 8.21).



Rysunek 8.20: Wpływ klasteryzacji na parametr Edwardsa-Andersona dla $\langle k \rangle = 9$.



Rysunek 8.21: Parametr przekrywania Q w układzie o różnym stopniu klasteryzacji dla sieci o $\langle k \rangle = 9$.

8.4 Temperatury przejścia

Teoretyczne przewidywania

Do wyznaczenia teoretycznej wartości temperatury Néela oraz temperatury przejścia w stan szkła spinowego użyto wzorów 3.24 oraz 3.32, które zostały wyprowadzone w rozdziale drugim. Dokładną liczbę pierwszych i drugich sąsiadów wyliczono z symulacji układu $N = 10^5$ spinów. Otrzymane teoretyczne wartości temperatury krytycznej zamieszczono w tabelach 8.3 i 8.4.

Wyniki symulacji

Przeprowadzone wcześniej symulacje ciepła właściwego, podatności magnetycznej oraz parametru Edwardsa-Andersona pozwalają na oszacowanie temperatury przejścia fazowego w zależności od stopnia klasteryzacji. Tabele 8.3 i 8.4 pokazują zebrane wyniki symulacji wraz z przewidywaniami teoretycznymi T_N i T_{SG} . Ze względu na trudności z odczytaniem niektórych wartości maksimum np. dla krzywych $\chi(T)$ nie wyznaczono temperatury przejścia (w tabeli pojawiają się znaki „-”).

Tablica 8.3: Wyniki symulacji temperatury przejścia i przewidywania teoretyczne dla $\langle k \rangle = 4$.

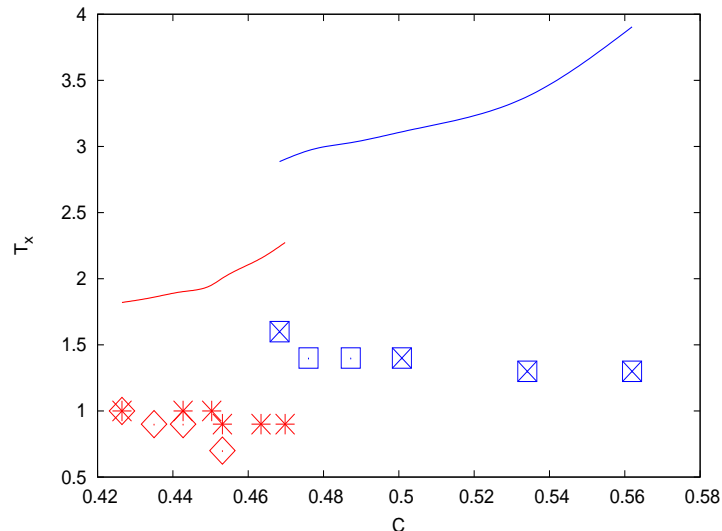
C	T_X symulacja $C_v(T)$	T_X symulacja $\chi(T)$	T_X symulacja $q(T)$	T_N wzór 3.24	T_{SG} wzór 3.32
0.426	1.0	1.0	1.0	3.92	1.82
0.435	-	0.9	-	4.06	1.86
0.443	1.0	0.9	1.0	4.23	1.90
0.450	1.0	-	1.0	4.42	1.95
0.453	0.9	0.7	1.0	4.63	2.01
0.463	0.9	-	1.0	5.26	2.15
0.470	0.9	-	1.0	5.79	2.27

Tablica 8.4: Wyniki symulacji temperatury przejścia i przewidywania teoretyczne dla $\langle k \rangle = 9$.

C	T_X symulacja $C_v(T)$	T_X symulacja $\chi(T)$	T_X symulacja $q(T)$	T_N wzór 3.24	T_{SG} wzór 3.32
0.47	1.6	1.6	1.6	8.96	2.89
0.48	-	1.4	-	9.48	2.97
0.49	-	1.4	1.6	9.81	3.03
0.50	1.4	1.4	1.6	10.32	3.11
0.53	1.3	1.3	1.6	12.05	3.38
0.56	1.3	1.3	1.6	15.89	3.90

Dodatkowo, sporządzono wykres zbiorczy (rys. 8.22) ilustrujący temperatury przejścia odczytane z powyższych symulacji wraz z danymi teoretycznymi T_{SG} dla $\langle k \rangle = 4$ i $\langle k \rangle = 9$. Zaprezentowane wyniki wskazują jednoznacznie, że wzrost współczynnika klasteryzacji nie pociąga za sobą wzrostu temperatury krytycznej tak, jak opisuje to teoria Bethego. W przypadku sieci o $\langle k \rangle = 9$ widoczny jest nawet odwrotny trend tej zależności, tzn. temperatura przejścia fazowego

maleje ze wzrostem klasteryzacji. Ten spadek T_X może być interpretowany jako konsekwencja wzrostu frustracji w układzie (większe C , więcej sfrustrowanych spinów w „trójkątach”), czego nie opisuje teoria Bethego.



Rysunek 8.22: Wartości temperatury T_{SG} dla $\langle k \rangle = 4$ (lewa strona, kolor czerwony) i dla $\langle k \rangle = 9$ (prawa strona, kolor niebieski) w zależności od klasteryzacji C . Linie prezentują dane teoretyczne T_{SG} , punkty - wyniki symulacji: gwiazdki i X'y z symulacji $C_v(T)$, romby i kwadraty z symulacji $\chi(T)$.

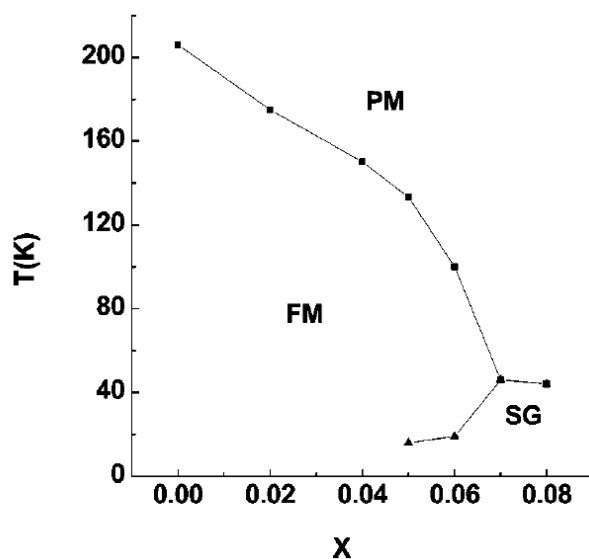
8.5 Rzeczywiste próbki magnetyczne

Model sieci przestrzennej jaki opisano w niniejszym rozdziale (nie posiadający własności małego świata; węzły umieszczone w przestrzeni trójwymiarowej oraz zachowane warunki brzegowe) pozwala odnieść numerycznie otrzymane wyniki do rzeczywistych próbek magnetycznych. Dokonując takiego porównania zakładamy, że węzły modelowanej sieci odpowiadają atomom w magnetyku, podczas gdy krawędzie – istniejącym w materiale oddziaływaniom pomiędzy atomami sieci. Ponieważ jednak nie jesteśmy w stanie ocenić z całą pewnością, jakie atomy oddziałują ze sobą w próbce magnetycznej, ani też rozróżnić słabszych i mocniejszych oddziaływań, porównanie jakiego dokonamy nie będzie miało charakteru ilościowego. Skupimy się głównie na obserwacji, jaki wpływ na przejście fazowe w rzeczywistych materiałach ma wzrost frustracji (zob. rozdział 3.4).

W sieci przypadkowej pojawienie się frustracji zawdzięczamy obecności węzłów połączonych zamkniętą ścieżką (trójkątem, zob. rys 3.3 b) i rys. 5.9), ze spinami oddziałującymi antyferromagnetycznie. Jest to więc przykład frustracji geometrycznej. Wpływ tego rodzaju frustracji będziemy konfrontowali z zachowaniem się magnetyków, w których frustracja wynika z konkurencji oddziaływań ferromagnetycznych i antyferromagnetycznych.

Stop $La_{0.5}(Fe_{1-x}Mn_x)_{11.4}Si_{1.6}$

W pierwszym przykładzie stop lantanu, żelaza i krzemu został wzbogacony manganem, którego koncentrację zmieniano od $0 \leq x \leq 0.08$ kosztem udziału żelaza w próbce [60]. Atomy żelaza, które wypadały z próbki były wybierane przypadkowo. Wraz ze wzrostem koncentracji manganu w stopie obok ferromagnetycznych oddziaływań pomiędzy atomami żelaza, pojawiają się oddziaływania antyferromagnetyczne pomiędzy atomami manganu oraz pomiędzy manganem i żelazem. Jednoczesne współlistnienie ferro- i antyferromagnetycznych oddziaływań, a także podmienianie żelaza manganem w losowych miejscach prowadzi do pojawienia się frustracji w układzie, a w konsekwencji – fazy szkła spinowego dla $x > 0.06$.



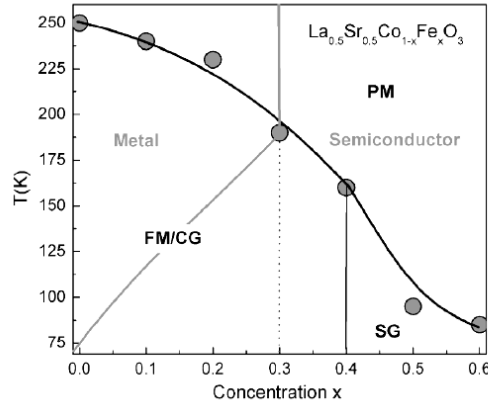
Rysunek 8.23: Diagram fazowy stopu $La_{0.5}(Fe_{1-x}Mn_x)_{11.4}Si_{1.6}$ w funkcji koncentracji Mn . Źródło: [60].

Rysunek 8.23 pokazuje diagram fazowy $La_{0.5}(Fe_{1-x}Mn_x)_{11.4}Si_{1.6}$ w funkcji koncentracji $x Mn$. Widzimy, że wzrost koncentracji manganu, który pociąga za sobą wzrost frustracji w układzie powoduje delikatny spadek temperatury przejścia fazowego. Zależność tę możemy porównać do wyników, uzyskanych dla sieci przestrzennej, dla których również obserwujemy nieznaczny spadek T_X ze wzrostem klasteryzacji, odpowiedzialnej za frustrację w modelowanym układzie.

Stop $La_{0.5}Sr_{0.5}Co_{1-x}Fe_xO_3$

Drugi przykład dotyczy materiału, w którym koncentracja żelaza wzrastała od $x = 0$ do $x = 0.6$ kosztem kobaltu [53]. Każdorazowa podmiana atomów kobaltu skutkowałą pojawieniem się silnych oddziaływań antyferromagnetycznych w wiązaniu $Co-O-Fe$ współzawodniczących z pierwotnym oddziaływaniem ferromagnetycznym w próbce. Ta konkurencja oddziaływań jest źródłem frustracji, która odpowiedzialna jest za wystąpienie fazy szkła spinowego powyżej $x = 0.4$.

Rozważając diagram fazowy $La_{0.5}Sr_{0.5}Co_{1-x}Fe_xO_3$ widzimy tym razem silny spadek temperatury krytycznej wraz ze wzrostem koncentracji żelaza w próbce (zob. rys. 8.24). Te dane



Rysunek 8.24: Diagram fazowy stopu $La_{0.5}Sr_{0.5}Co_{1-x}Fe_xO_3$ w funkcji koncentracji Fe . Źródło: [53].

doświadczalne potwierdzają wyniki, jakie do tej pory otrzymywaliśmy dla każdej z rozważanych sieci: T_{SG} maleje ze wzrostem klastryzacji (frustracji) w sieci.

8.6 Podsumowanie

Sieć przestrzenną zbadano dla przypadku o $\langle k \rangle = 4$ oraz $\langle k \rangle = 9$; wprowadzono do sieci również sterowanie współczynnikiem klastryzacji: C zmienia się od 0.42 do 0.46 dla sieci o $\langle k \rangle = 4$ oraz od 0.47 do 0.56 dla $\langle k \rangle = 9$.

Wyraźne maksima ciepła właściwego w danej temperaturze wykazuje sieć przestrzenna dla obu metod; widoczne jest ono zarówno dla $\langle k \rangle = 4$, jak i $\langle k \rangle = 9$ (por. rys. 8.12 i 8.13). Wariancja energii i jej pochodna zwracają identyczne wartości C_v dla całego przedziału temperaturowego (zob. rys. 8.9).

Dla symulacji podatności metoda wariancji magnetyzacji generuje krzywe z widocznym maksimum, przy czym dla $\langle k \rangle = 4$ i większych C jest ono osłabiane przez spiny, których podatność rośnie w niskich temperaturach jak $\frac{1}{T}$ (rys. 8.14). Dla $\langle k \rangle = 9$ nie mamy tych zakłóceń (zob. rys. 8.15).

Metoda ilorazu różnicowego dla $\langle k \rangle = 4$ nie pokazuje żadnych maksimów, aczkolwiek obydwie metody liczenia podatności pokrywają się dla wyższych temperatur.

Parametr Edwardsa-Andersona q dla sieci przestrzennej, która jest mocno sklasteryzowana nawet bez włączenia dodatkowej klastryzacji nie potrafi wskazać zmiany temperatur przejścia dla sieci różniących się nieznacznie wartością C . Z kolei parametr przekrywania Q po raz kolejny przyjmuje bardzo małe wartości, ze względu na wysoki współczynnik C .

Dla sieci przestrzennej wzrost współczynnika klastryzacji nie pociąga za sobą wzrostu temperatury krytycznej tak, jak opisuje to wzory analityczne (zob. rys. 8.22). Dla układu o $\langle k \rangle = 9$ można nawet mówić o delikatnym spadku T_{SG} ze wzrostem C .

Porównując zjawisko frustracji geometrycznej występujące w symulowanym modelu sieci przyrodzawiej z frustracją pochodzącą od konkurencji oddziaływań w rzeczywistych magnetykach zauważamy, że dla obu przypadków wzrost stopnia frustracji pociąga za sobą spadek temperatury przejścia fazowego.

Rozdział 9

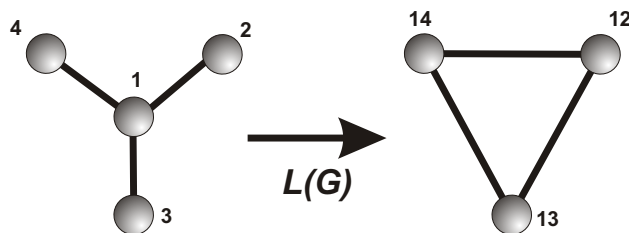
Grafy linków

Transformację $L(G)$ grafu G do tzw. sieci „linków” (*line graphs, edge graphs*) można zobrazować opierając się o transformację typu „gwiazda-trójkąt”, w której podgraf w kształcie litery Y (węzeł z trzema sąsiadami) jest przekształcany w podgraf Δ , gdzie poprzednie wiązania łączą się ze sobą podczas gdy węzły zostają usunięte.

9.1 Budowa sieci

W przypadku omawianej w tym rozdziale przetransformowanej sieci przypadkowej, przekształcenie $G \rightarrow L(G)$ powoduje transformację podgrafu Y również w układ trzech węzłów połączonych ze sobą. W wyniku tej operacji wszystkie krawędzie (powiązania między węzłami) pierwotnej, przypadkowej sieci przekonwertowane zostaną w węzły budujące docelową sieć. W nowym, przetransformowanym grafie dwa węzły będą ze sobą powiązane, jeśli były wygenerowane z krawędzi, które miały wspólny wierzchołek.

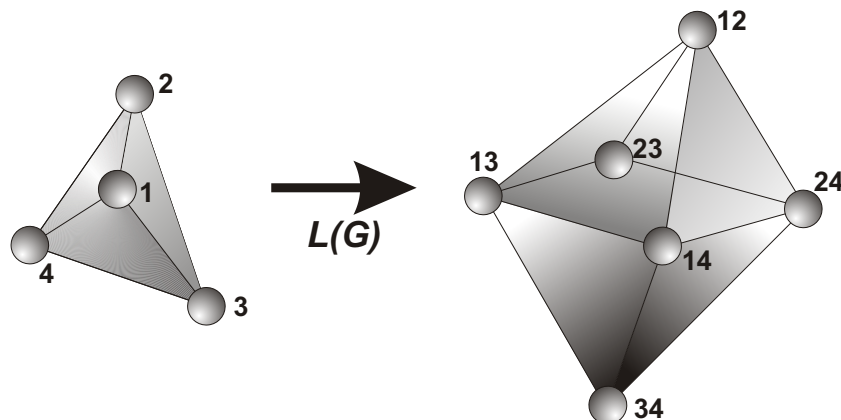
Przykładowo, dla pierwotnej sieci o $N = 4$ gdzie tylko węzeł 1 jest połączony z pozostałymi węzłami transformacja $G \rightarrow L(G)$ tworzy układ, w którym węzeł 12 nowej sieci łączy się z węzłem 14 i 13, który również są ze sobą powiązane (zob. rys. 9.1).



Rysunek 9.1: Transformacja $G \rightarrow L(G)$ sieci dla $N = 4$.

W przypadku w pełni połączonego grafu każda para dowolnie wybranych węzłów jest połączona ze sobą, wówczas układ posiada $N(N-1)/2$ krawędzi, które po transformacji dają liczbę węzłów nowej sieci. Jednakże transformacja $G \rightarrow L(G)$ w pełni połączonego pierwotnego grafu nie buduje również całkowicie połączonego grafu nowej sieci. Dla $N = 4$ link 12 jest połączony z linkiem 13 i 14, ale nie z linkiem 34 (zob. rys. 9.2). W pierwotnej sieci o dowolnym N każdy

węzeł ma dokładnie $N - 1$ sąsiadów, a każde powiązanie ma wspólny węzeł z $N - 2$ innymi linkami. Wówczas w przetransformowanej sieci każdy węzeł ma dokładnie $2(N - 2)$ sąsiadów powiązanych ze sobą $N(N - 1)(N - 2)/2$ krawędziami. Pierwotna sieć o $N = 4$, gdzie istnieje połączenie pomiędzy każdymi dwoma węzłami ma dokładnie 6 krawędzi, które w wyniku transformacji stają się sześcioma węzłami nowego grafu powiązanymi 12 krawędziami. Przy założeniu, że długości krawędzi pomiędzy wierzchołkami są wszędzie takie same transformację $G \rightarrow L(G)$ można obrazowo przedstawić jako przejście czworościanu w oktaedr (ośmiościan foremny, zob. rys. 9.2).



Rysunek 9.2: Transformacja $G \rightarrow L(G)$ sieci dla $N = 4$ w pełni połączonej przy założeniu, że długości krawędzi są wszędzie takie same.

Obliczenia numeryczne – algorytm transformacji $G \rightarrow L(G)$

Numerycznie, topologia sieci początkowej, jak i przetransformowanej jest opisana poprzez macierz połączeń $X(i, j)$, w której każdy element macierzy x_{ij} jest równy 1 jeżeli istnieje połączenie pomiędzy węzłem i -tym i j -tym lub $x_{ij} = 0$ w przeciwnym wypadku. Przetransformowany graf jest budowany z sieci początkowej poprzez wykonanie kilku operacji arytmetycznych na macierzach połączeń w kilku krokach opisanych poniżej.

W macierzy połączeń $C(i, j)$ pierwotnej sieci przypadkowej każda jedyńska nad główną diagonalą zamieniana jest na kolejną liczbę $r = 1, 2, \dots, r_m$. Ostatnia liczba r_m jest równa liczbie krawędzi, jakie występują w początkowej sieci i jednocześnie określa rozmiar przetransformowanej sieci. Z tak powstałej macierzy $R(i, j)$ budowana jest macierz połączeń $C_t(i, j)$ przetransformowanej sieci: węzły i oraz j są połączone, jeśli ich współrzędne i i j występują w macierzy R w tym samym rzędzie lub w tej samej kolumnie.

Obliczenia prezentowane w tym rozdziale przeprowadzono dla rozmiaru początkowej sieci równego zawsze $N = 10^4$. Liczba węzłów przetransformowanej sieci będzie zależna od gęstości powiązań p pierwotnej sieci (zob. rozdział 2.1) i będzie wynosiła ok. $pN^2/2$. Dla wartości $p = 10^{-3}$ średni stopień wierzchołka $\langle k \rangle$ początkowej sieci jest bliski $Np = 10$. Liczba węzłów przetransformowanej sieci przypadkowej będzie więc wynosiła ok. $5 \cdot 10^4$; dla przykładu prezentowanego na rys 9.3 rozmiar sieci wynosi dokładnie 50147. Przykładowe wartości parametru p tworzące graf linków o średnim stopniu $\langle k \rangle$, współczynnika klasteryzacji C i liczbie węzłów N pokazuje tabela 9.1.

Tablica 9.1: Wartości parametrów budujących graf linków.

p	$\langle k \rangle$	C	N
0.0002	4	0.455	$\sim 10^4$
0.0004	8	0.497	$\sim 2 \cdot 10^4$
0.0006	12	0.500	$\sim 3 \cdot 10^4$
0.0010	20	0.500	$\sim 5 \cdot 10^4$

9.1.1 Rozkład stopnia wierzchołka

Aby uzyskać rozkład stopnia wierzchołka transformowanej sieci rozważono układ pierwotnej sieci przypadkowej, w którym dwa nieskorelowane węzły o stopniu k_1 i k_2 powiązane są ze sobą krawędzią l_{12} . Dla dużych rozmiarów sieci rozkład stopnia $P(k)$ przypadkowej sieci Erdős-Rényi jest rozkładem Poissona (zob. rozdział 2.1).

W wyniku działania transformacji $G \rightarrow L(G)$ wiązanie l_{12} staje się wierzchołkiem nowej sieci, której stopień $k = k_1 + k_2 - 2$. Wówczas rozkład stopnia $P_t(k)$ transformowanej sieci można zapisać jako:

$$P_t(k) = \frac{\sum_{k_1=1, k_2=1} k_1 P(k_1) k_2 P(k_2) \delta_{k, k_1+k_2-2}}{\sum_{k_1=1}^{\infty} k_1 P(k_1) \sum_{k_2=1}^{\infty} k_2 P(k_2)} \quad (9.1)$$

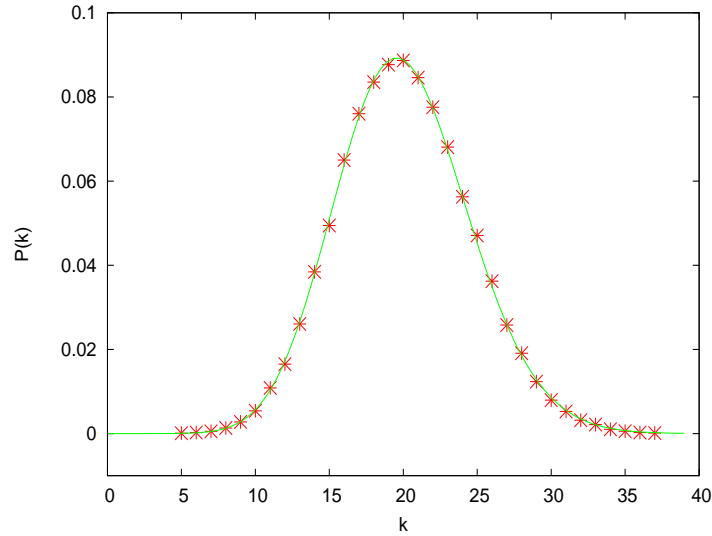
i dalej, upraszczając:

$$\begin{aligned} P_t(k) &= \frac{\sum_{k_1=1}^{k+1} k_1 P(k_1) (k - k_1 + 2) P(k - k_1 + 2)}{\lambda^2} = \\ &= \frac{e^{-2\lambda} \sum_{k_1=1}^{k+1} k_1 \frac{\lambda^{k_1}}{k_1!} (k - k_1 + 2) \frac{\lambda^{k-k_1+2}}{(k-k_1+2)!}}{\lambda^2} = \\ &= \frac{\lambda^{k+2} e^{-2\lambda} \sum_{k_1=1}^{k+1} \frac{1}{(k_1-1)!(k-k_1+1)!}}{\lambda^2} = \\ &= \frac{\lambda^{k+2} e^{-2\lambda} \frac{2^k}{k!}}{\lambda^2} = \\ &= \frac{(2\lambda)^k e^{-2\lambda}}{k!}. \end{aligned} \quad (9.2)$$

Wynik 9.2 jednoznacznie wskazuje, że transformacja $G \rightarrow L(G)$ sieci przypadkowej o poissonowskim rozkładzie stopnia wierzchołka z średnim $\langle k \rangle = \lambda$ tworzy również sieć o rozkładzie Poissona, przy czym dla $\langle k \rangle = 2\lambda$. Ten sam wynik uzyskano również numerycznie – rozkład nowej sieci o początkowym $\langle k \rangle = 10$ pokrywa się z krzywą rozkładu Poissona ze średnią $\lambda = 20$ (zob. rys. 9.3).

9.1.2 Klasteryzacja

Stopień klasteryzacji transformowanej sieci można zbadać za pomocą współczynnika klasteryzacji C . Lokalnie, współczynnik ten określić można jako stosunek faktycznej liczby istniejących krawędzi pomiędzy najbliższymi sąsiadami danego węzła, do całkowitej liczby możliwych połączeń między nimi (zob. rozdział 2.1).



Rysunek 9.3: Rozkład stopnia wierzchołka transformowanej sieci przypadkowej. Wyniki numeryczne zaznaczono gwiazdami (dla początkowego $\langle k \rangle = 10$ sieci pierwotnej); ciągła krzywa to rozkład Poissona dla $\lambda = 20$.

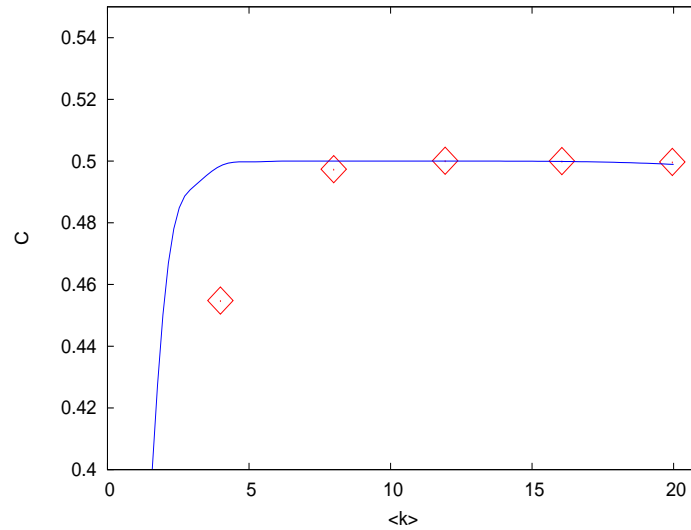
W przypadku grafu w pełni połączonego o N węzłach każda krawędź w wyniku transformacji $G \rightarrow L(G)$ jest zamieniana na węzeł, którego stopień jest równy $2(N - 2)$. Maksymalna możliwa liczba powiązań pomiędzy tak skonstruowanymi $2N + 4$ wierzchołkami nowej sieci wynosi $(N - 2)(2N - 5)$. Faktyczna liczba powiązań wewnątrz każdego klastra jest równa $\frac{(N-2)(N-3)}{2}$. Jednakże do niej należy doliczyć jeszcze $N - 2$ powiązań pomiędzy węzłami, które powstały z linii nie połączonych pierwotnie z wierzchołkami 1 lub 2, co daje: $(N - 2)(N - 3) + N - 2 = (N - 2)^2$ krawędzi. Wówczas współczynnik klasteryzacji każdego węzła i w pełni połączonego grafu wynosi:

$$C_i = \frac{(N - 2)^2}{(N - 2)(2N - 5)} = \frac{N - 2}{2N - 5} \quad (9.3)$$

Współczynnik klasteryzacji C dla sieci $L(G)$ zbudowanej na dowolnym grafie G o rozkładzie $P(k)$ opisanej zmiennymi tak jak w rozdziale 9.1.1 jest średnią:

$$C = \frac{\sum_{k_1, k_2} k_1 P(k_1) k_2 P(k_2) \cdot \frac{\frac{1}{2}(k_1 - 1)(k_1 - 2) + \frac{1}{2}(k_2 - 1)(k_2 - 2)}{\frac{1}{2}(k_1 + k_2 - 2)(k_1 + k_2 - 3)}}{\sum_{k_1} k_1 P(k_1) \sum_{k_2} k_2 P(k_2)} \quad (9.4)$$

Na rysunku 9.4 porównano wyniki obliczeń numerycznych współczynnika klasteryzacji z wartościami otrzymanymi teoretycznie z powyższego wzoru 9.4. Jak widać, transformowana sieć przypadkowa charakteryzuje się bardzo dużym współczynnikiem klasteryzacji nawet dla sieci o małym $\langle k \rangle$ (stopień klasteryzacji początkowej sieci przypadkowej jest bliski zeru). Dla grafów powyżej $\langle k \rangle = 5$ przyjmuje on stałą wartość równą ok. $C = 0.5$, którą potwierdzają zarówno dane teoretyczne, jak i numeryczne.



Rysunek 9.4: Zależność współczynnika klasteryzacji C od średniego stopnia wierzchołka $\langle k \rangle$ dla sieci $L(G)$ na grafie Erdősa-Rényi. Punkty oznaczają wyniki numeryczne; linia ciągła to przewidywane wartości teoretyczne otrzymane bezpośrednio ze wzoru 9.4.

9.1.3 Asortatywność

Graf charakteryzuje się asortatywnością (ang. *assortativity mixing*) jeżeli korelacje stopień-stopień są dodatnie, tzn. wtedy, gdy powiązania w sieci tworzone są częściej pomiędzy węzłami, które mają podobną liczbę sąsiadów. Przykładowo, węzły o dużym stopniu utworzą powiązanie z tymi wierzchołkami, które mają również dużą liczbę sąsiadów¹.

Asortatywność transformowanej sieci przypadkowej sprawdzono więc badając korelacje stopień-stopień. W tym celu obliczono średni stopień sąsiada węzła o stopniu k , tzn. wyrażenie $\langle k'(k) \rangle$, gdzie $k'(k)$ jest stopniem sąsiada węzła o stopniu k .

Obliczenia analityczne

Rozważono nieskorelowany układ trzech węzłów pierwotnej sieci przypadkowej o stopniu odpowiednio k_1 , k_2 i k_3 , gdzie węzeł 2 jest powiązany z węzłem 1 i 3. W wyniku działania transformacji $G \rightarrow L(G)$ pierwsze wiązanie łączące wierzchołek o stopniu k_1 i k_2 oraz drugie łączące węzły o stopniu k_2 i k_3 stają się połączonymi ze sobą węzłami nowej sieci. Powstałe tak wierzchołki mają liczbę sąsiadów równą odpowiednio $k_1 + k_2 - 2$ i $k_2 + k_3 - 2$.

Wówczas średni stopień $\langle k'(k) \rangle$ sąsiada węzła o stopniu k w przetransformowanej sieci wynosi:

¹Ogólnie, termin *assortativity mixing* określa tendencję sieci do występowania powiązań między wierzchołkami, które są w pewien sposób do siebie podobne lub niepodobne.

$$\begin{aligned}
\langle k'(k) \rangle &= \frac{\sum_{k_1, k_2, k_3} k_1 P(k_1) k_2 P(k_2) k_3 P(k_3) \delta_{k, k_2+k_3-2} (k_1 + k_2 - 2)}{\sum_{k_1, k_2, k_3} k_1 P(k_1) k_2 P(k_2) k_3 P(k_3) \delta_{k, k_2+k_3-2}} = \\
&= \frac{\sum_{k_1} \sum_{k_3} k_1 P(k_1) (k - k_3 + 2) P(k - k_3 + 2) k_3 P(k_3) (k_1 + k - k_3)}{e^{-3\lambda} \sum_{k_1=1}^{\infty} \sum_{k_3=1}^{\infty} \frac{\lambda^{k_1}}{(k_1-1)!} \frac{\lambda^{k_3}}{(k_3-1)!} \frac{\lambda^{k-k_3+2}}{(k-k_3+1)!}} = \\
&= \frac{e^{-3\lambda} \sum_{k_1=1}^{\infty} \sum_{k_3=1}^{\infty} \frac{\lambda^{k_1}}{(k_1-1)!} \frac{\lambda^{k_3}}{(k_3-1)!} \frac{\lambda^{k-k_3+2}}{(k-k_3+1)!} (k_1 + k - k_3)}{e^{-3\lambda} \lambda^{k+2} \sum_{k_1=1}^{\infty} \frac{\lambda^{k_1}}{(k_1-1)!} \sum_{k_3=1}^k \frac{1}{(k-k_3+1)!(k_3-1)!}} = \\
&= \frac{e^{-3\lambda} \lambda^{k+2} \sum_{k_1=1}^{\infty} \frac{\lambda^{k_1}}{(k_1-1)!} \sum_{k_3=1}^k \frac{k_1+k-k_3}{(k_3-1)!(k-k_3+1)!}}{e^{-3\lambda} \lambda^{k+2} e^{\lambda} \lambda \left(\frac{2^k}{k!} - \frac{1}{k!} \right)} = \\
&= \frac{e^{-3\lambda} \lambda^{k+2} \lambda e^{\lambda} \frac{-2\lambda+2^{1+k}\lambda+2^k k}{2k!}}{e^{-3\lambda} \lambda^{k+2} \lambda e^{\lambda} \frac{2^k-1}{k!}} = \frac{(2^k - 1)\lambda + 2^{k-1}k}{2^k - 1} = \\
&= \lambda + \frac{2^{k-1}k}{2^k - 1} \tag{9.5}
\end{aligned}$$

gdzie $P(k)$ jest rozkładem stopnia wierzchołka początkowej sieci (dla sieci przypadkowej jest rozkładem Poissona o $\langle k \rangle = \lambda$). Dla dużych k wzór 9.5 można przybliżyć wyrażeniem:

$$\langle k'(k) \rangle \sim \lambda + \frac{k}{2}. \tag{9.6}$$

Obliczenia numeryczne

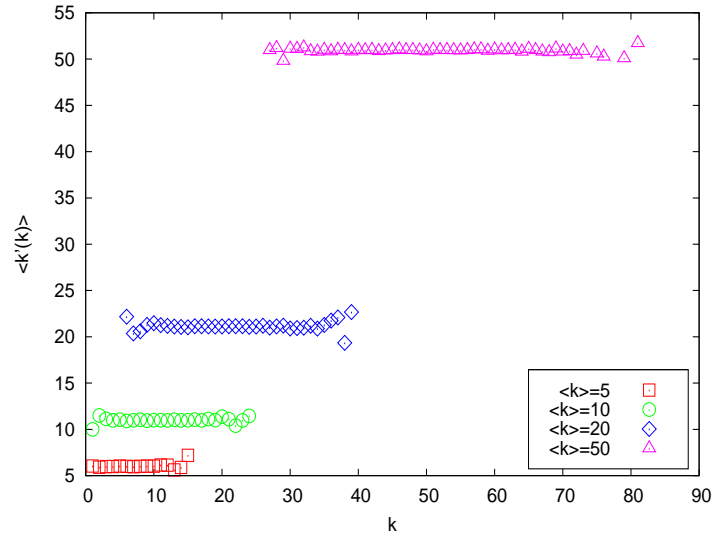
Aby sprawdzić obecność korelacji w sieci zbadano w jaki sposób średni stopień k' najbliższych sąsiadów węzłów o stopniu k zależy od k .

Obliczenia numeryczne startują od „wyłapania” z sieci wszystkich węzłów, które mają określony stopień k (w pierwszym kroku sieć zostaje przeszukana pod kątem znalezienia węzłów o $k = 1$, w kolejnej iteracji o $k = 2$ itd.). Następnie obliczona zostaje średnia liczba sąsiadów, jaką posiadają najbliżsi sąsiedzi wierzchołków o danym k . Te kroki powtarzają się dla wszystkich możliwych stopni k , jakie posiadają wierzchołki sieci.

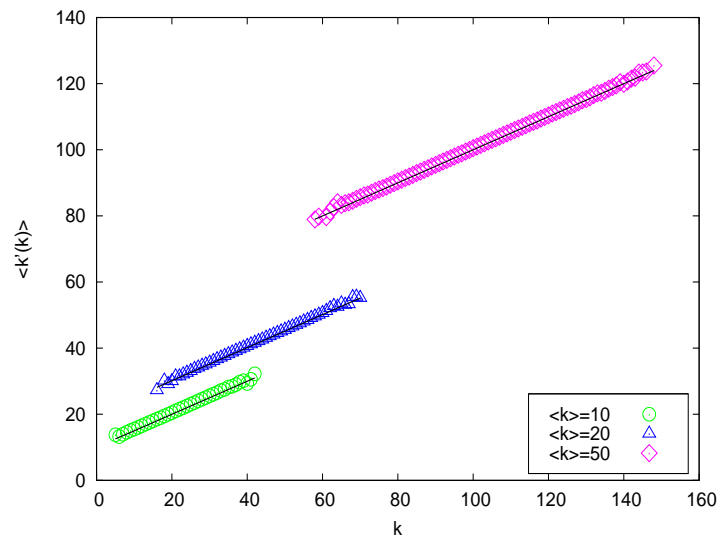
Monotoniczność otrzymanego wykresu zależności $\langle k'(k) \rangle$ wskazuje na charakter korelacji: jeżeli krzywa jest rosnąca to występuje dodatnia korelacja między węzłami (huby się przyciągają), jeśli malejąca – korelacja ujemna. Stały charakter funkcji $\langle k'(k) \rangle$ oznacza brak korelacji pomiędzy wierzchołkami w badanej sieci.

Dla sieci przypadkowej Erdősa-Rényi nie zaobserwowano żadnego nachylenia krzywej $\langle k'(k) \rangle$ (zob. rys 9.5), co oznacza że tego typu grafy nie posiadają skorelowanych węzłów i nie są asortatywne (założenie o braku korelacji w sieci przypadkowej podjęto również przy okazji wyprowadzenia analitycznego wzoru na korelację w przetransformowanej sieci przypadkowej i jak się okazało – nie było ono błędne). Biorąc pod uwagę konstrukcję sieci, wynik ten jest zgodny z przewidywaniami.

Jednakże przetransformowana sieć przypadkowa charakteryzuje się assortatywnością – pomiędzy węzłami sieci występuje korelacja dodatnia (zob. rys. 9.6). Ponadto, analityczny wzór 9.5 otrzymany w poprzednim podrozdziale pokrywa się w pełni z obliczeniami numerycznymi.



Rysunek 9.5: Korelacje pomiędzy węzłami sieci Erdős-Rényi.



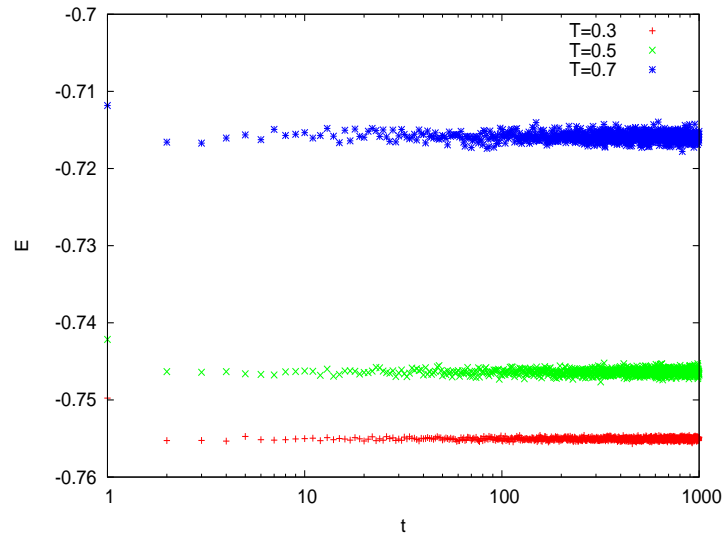
Rysunek 9.6: Korelacje pomiędzy węzłami grafu linków na sieci Erdős-Rényi.

9.2 Magnetyzm sieci przetransformowanej

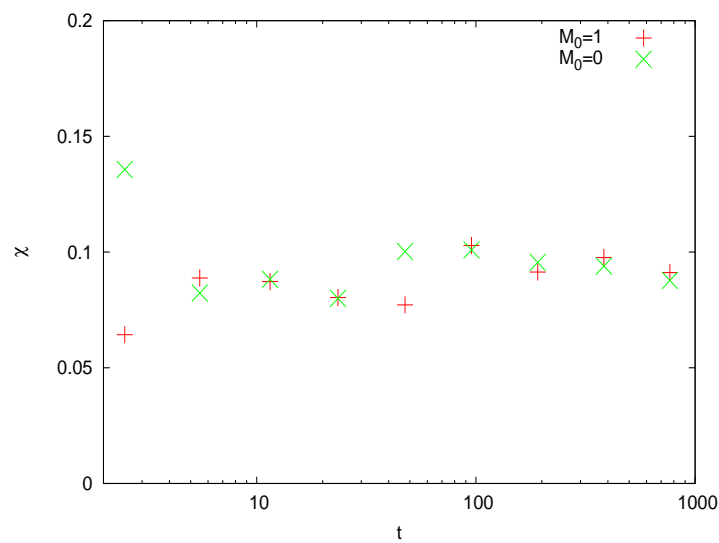
9.2.1 Badanie stanu równowagi

Dla przypadku grafu linków układ osiąga stan równowagi bardzo szybko, co możemy zobaczyć badając relaksację całkowitej energii (zob. rys. 9.7). Badając czasową zależność podatności startującą od dwóch różnych konfiguracji spinów (w pierwszym kroku wszystkie spiny ustawione losowo lub w jednym kierunku $S = +1$) widzimy, że już po około $100MC$ krokach symulacji

podatności różniące się stanem początkowym stają się zbieżne (rys. 9.8). Biorąc pod uwagę doświadczenia z relaksacji energii sieci przypadkowych, w dalszych obliczeniach dla pewności przyjęto $N_t = 10^4$.



Rysunek 9.7: Relaksacja energii sieci linków o $\langle k \rangle = 4$, $N = 10^4$.

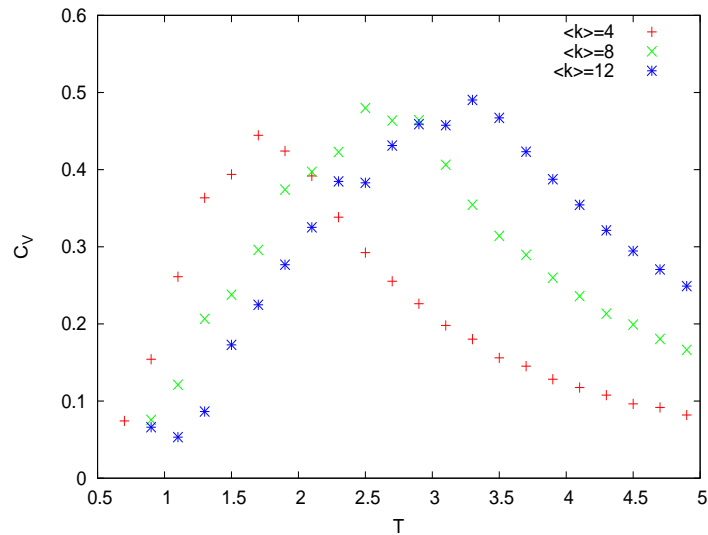


Rysunek 9.8: Czasowa zależność podatności z wariancji magnetyzacji dla sieci transformowanej dla $\langle k \rangle = 8$ i $T = 1.5$; $N_{t_2} = 10MC$; $N = 2 * 10^4$.

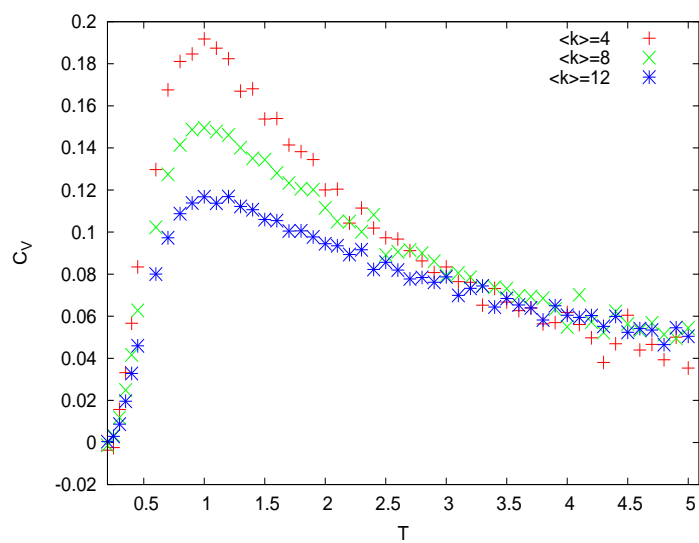
9.2.2 Ciepło właściwe

Ciepło właściwe obliczono dla różnych $\langle k \rangle$, na rysunkach 9.10 oraz 9.11 można zauważyć maksima wskazujące na obecność przejścia fazowego. Obserwowane piki pojawiają się dla temperatury ok. $T = 0.8$.

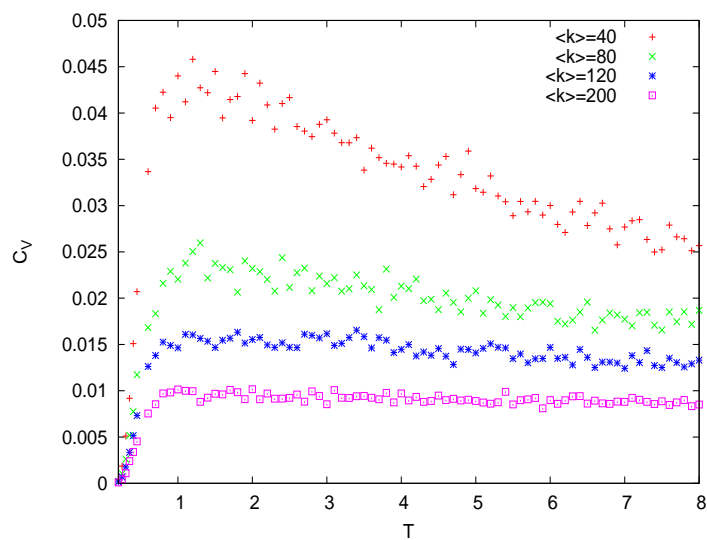
Ponieważ już powyżej $\langle k \rangle = 3$ współczynnik C jest stały, nie ma żadnego przesunięcia pików ze wzrostem średniego stopnia wierzchołka $\langle k \rangle$ dla przetransformowanej sieci (zob. rysunki 9.10 i 9.11). Natomiast przesunięcie takie jest obecne w sieci Erdős-Rényi – rys. 9.9. Obydwie metody liczenia ciepła właściwego pokrywają się (rys. 9.12).



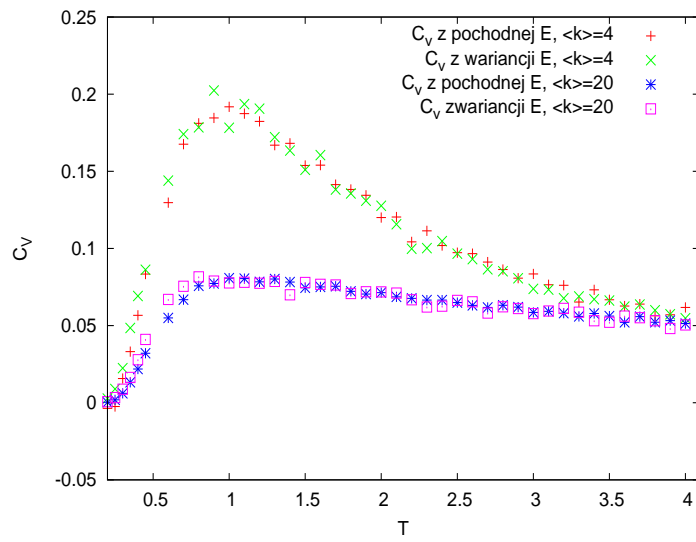
Rysunek 9.9: Ciepło właściwe otrzymane metodą pochodnej dla sieci przypadkowej.



Rysunek 9.10: Ciepło właściwe otrzymane metodą pochodnej dla przetransformowanej sieci przypadkowej.



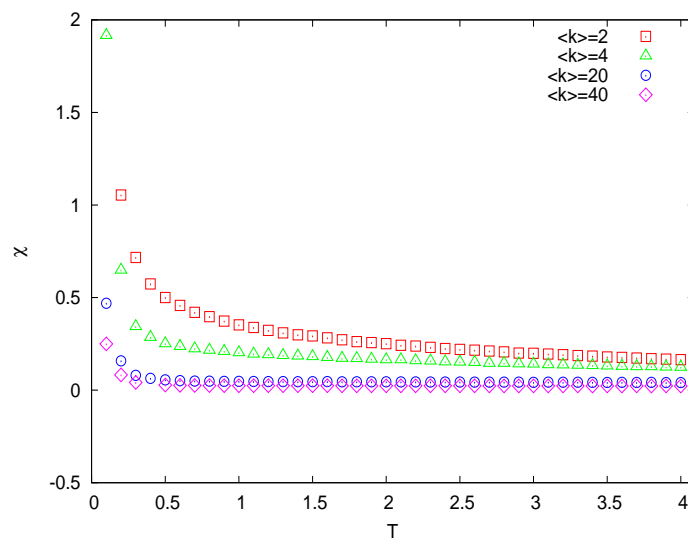
Rysunek 9.11: Ciepło właściwe otrzymane metodą wariancji energii dla przetransformowanej sieci przypadkowej.



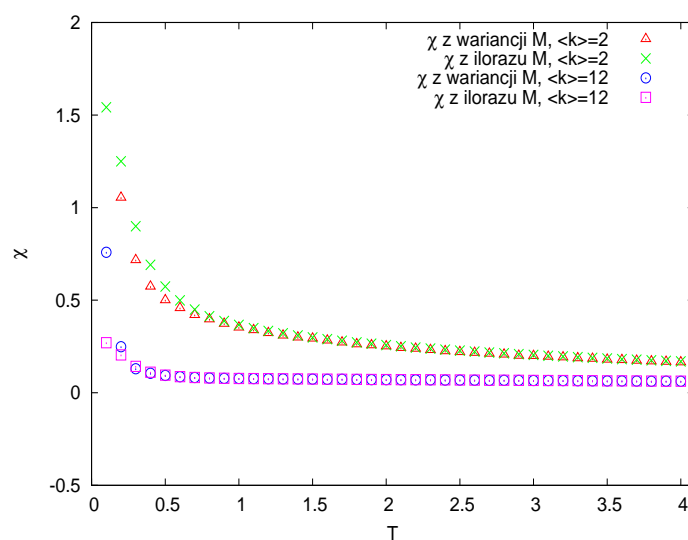
Rysunek 9.12: Ciepło właściwe dla przetransformowanej sieci przypadkowej - porównanie metod.

9.2.3 Podatność magnetyczna

Krzywa podatności niestety nie pokazuje żadnego maksimum (rys 9.13) i obydwie metody jej obliczania są w tym zgodne (zob. rys. 9.14):

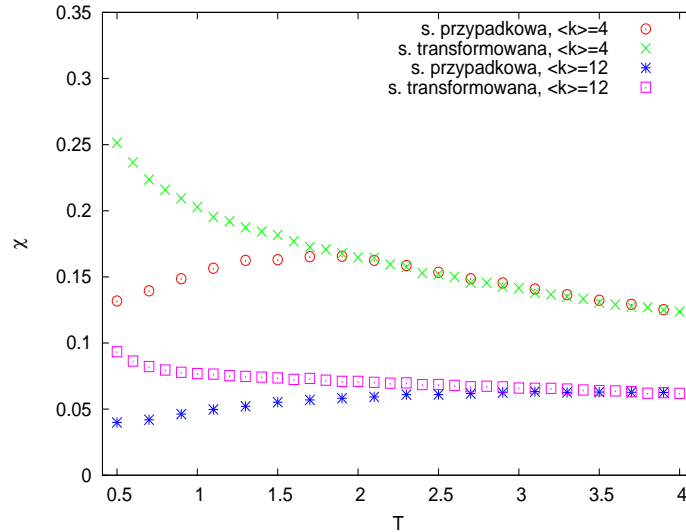


Rysunek 9.13: Zależność temperaturowa podatności otrzymanej metodą wariacji magnetyzacji.



Rysunek 9.14: Podatność dla przetransformowanej sieci przypadkowej - porównanie metod.

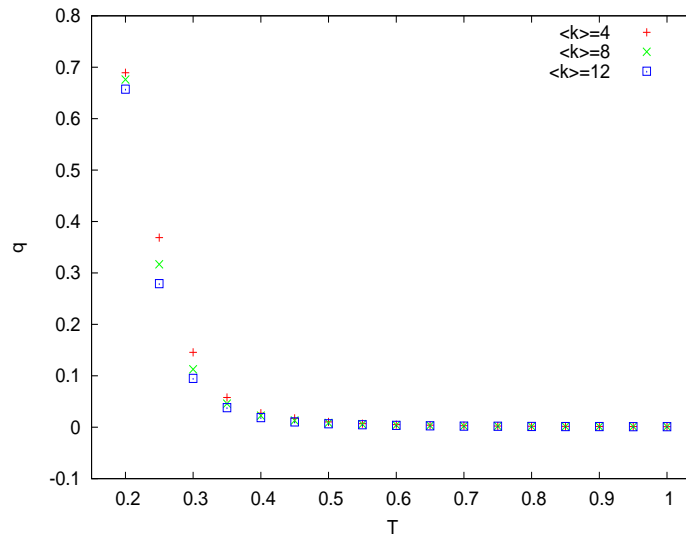
Dokonano również porównania krzywych podatności magnetycznej przypadkowej sieci Erdős-Rényi'ego i transformowanej sieci przypadkowej o takim samym średnim stopniu wierzchołka (rys. 9.15). Krzywe te pokrywają się dla wyższych temperatur, ale stają się rozbieżne w pobliżu maksimum $\chi(T)$ sieci Erdős-Rényi'ego, czyli w pobliżu przewidywanego przejścia fazowego. Stąd można wnioskować, że podatność magnetyczna sieci Erdős-Rényi i sieci linków w temperaturze przewyższającej temperaturę krytyczną zależy tylko od średniego stopnia wierzchołka $\langle k \rangle$.



Rysunek 9.15: Podatność dla sieci przypadkowej i przetransformowanej sieci przypadkowej.

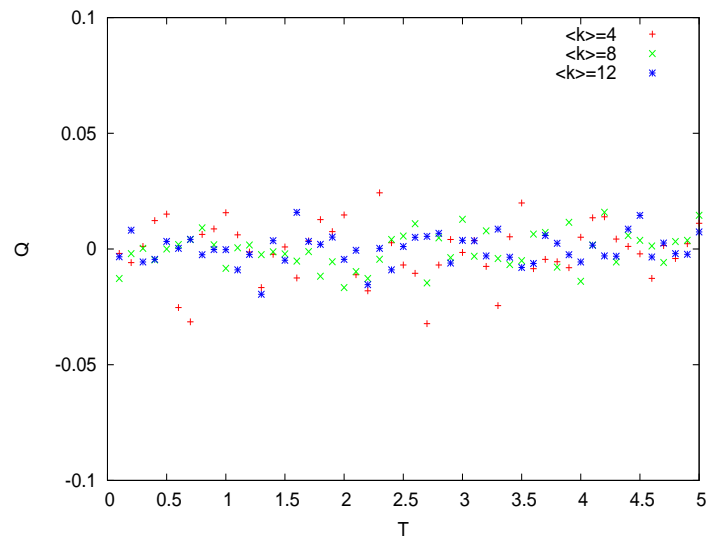
9.2.4 Parametr Edwardsa-Andersona i parametr przekrywania

Zarówno parametr Edwardsa-Andersona q , jak i parametr przekrywania Q w przypadku grafu linków zbudowanego na sieci przypadkowej zawodzą. Już sieć o $\langle k \rangle = 4$ jest silnie sklasteryzowana ($C \sim 0.46$), każda większa wartość $\langle k \rangle$ wskazuje C już na poziomie $C = 0.5$. Duża klasteryzacja oraz subtelne różnice w C dla różnych $\langle k \rangle = 4, 8, 12$ w kolejnych badanych układach wpływają słabo na kształt przebiegu $q(T)$ (rys. 9.16; por. z kształtem krzywej $q(T)$ dla silnie sklasteryzowanej np. sieci regularnej na rys. 6.13).



Rysunek 9.16: Parametr Edwardsa-Andersona q w układzie o różnym średnim stopniu wierzchołka dla okna $N_{t_2} = 10^4$.

Duża klasteryzacja wpływa także na parametr przekrywania; rys. 9.17 prezentuje Q z wartościami oscylującymi wokół zera. Niemożliwe jest więc odczytanie dla żadnego $\langle k \rangle$ temperatury szkła spinowego.



Rysunek 9.17: Parametr Edwardsa-Andersona Q w układzie o różnym średnim stopniu wierzchołka dla okna $N_{t_2} = 10^4$.

9.2.5 Temperatury przejścia - teoretyczne przewidywania i wyniki symulacji

Badając magnetyczne własności przetransformowanej sieci przypadkowej uzyskano numerycznie tylko dwie temperatury krytyczne $T = 0.8$ (z symulacji C_v) oraz $T = 0.4$ (z symulacji q). Wyniki te dotyczyły każdego sprawdzanego $\langle k \rangle$.

Obliczając analitycznie temperaturę Neela oraz temperaturę szkła spinowego ze wzorów 3.24 oraz 3.32 uzyskujemy wartości inne niż ta, na którą wskazuje maksimum $C_v(T)$ czy zerowanie się parametru q (tab. 9.2).

Tablica 9.2: Teoretyczne wartości temperatury przejścia dla sieci linków.

$\langle k \rangle$	z_2	T_N	T_{SG}
4	8	1.85	1.15
8	32	3.90	1.81
12	72	5.93	2.30
20	198	9.92	3.05

9.3 Podsumowanie

Przetransformowana sieć przypadkowa wykazuje bardzo duży współczynnik klasteryzacji: dla sieci linków o $\langle k \rangle = 4$ wynosił on ok. $C = 0.45$, a dla większych $\langle k \rangle$ był już stały i równy $C = 0.5$ (zob. rys. 9.4). Współczynnik klasteryzacji pierwotnej sieci przypadkowej dla tych samych $\langle k \rangle$ był równy prawie zero.

Zależność ciepła właściwego od temperatury dla sieci linków opartej o sieć przypadkową wykazuje wyraźne maksima (zob. rys. 9.10 i 9.11). Krzywe $C_v(T)$ obliczone metodą wariacji energii i ilorazu różnicowego są zbieżne (rys. 9.12).

Podatność magnetyczna dla przetransformowanej sieci przypadkowej naśladuje w przybliżeniu krzywą $\frac{1}{T}$; nie zaobserwowano maksimów mogących wskazywać na przejście fazowe dla żadnej z dwóch metod (zob. rys. 9.13). Przetransformowana sieć przypadkowa generuje krzywe $\chi(T)$ zgodne dla obu metod w całym zakresie temperaturowym (zob. rys. 9.14).

Ponieważ krzywe $\chi(T)$ nie wykazywały żadnych maksimów, analiza przejścia fazowego skupiła się tylko na badaniu przebiegów ciepła właściwego oraz parametru q . Temperatura, dla której pojawiał się pik krzywej $C_v(T)$ wynosiła zawsze ok. $T_X = 0.8$ i była ona identyczna dla sieci o różnym $\langle k \rangle$ (zob. rys. 9.10). Ponieważ, jak już wcześniej wspomniano, dla sieci o średnim stopniu $\langle k \rangle$ powyżej 4 współczynnik klasteryzacji jest stały, nie zaobserwowano żadnych przesunięć maksimów wraz z dalszym wzrostem $\langle k \rangle$.

Z kolei zależność temperaturowa parametru q wskazywała na temperaturę szkła spinowego w okolicach $T = 0.4$ dla każdej badanej wartości $\langle k \rangle$. Parametr przekrywania po raz kolejny okazał się być nieużyteczny ze względu na wysokie C badanej sieci.

Teoretyczne przewidywania temperatury przejścia zupełnie odbiegają od $T_X = 0.8$ wskazanej przez maksimum ciepła właściwego i $T_X = 0.4$ otrzymanej z symulacji $q(T)$.

Dla tych samych wartości $\langle k \rangle$ i N sieci pierwotnej i przetransformowanej przeprowadzono porównanie krzywych $C_v(T)$ – wyniki wskazują, że w sieciach transformowanych maksimum jest zawsze przesunięte względem sieci pierwotnych w stronę niższych temperatur. Zjawisko to można tłumaczyć dużym współczynnikiem klasteryzacji, który (jak wykazano dla sieci przypadkowej ze sterowanym C) pociąga za sobą spadek temperatury przejścia.

Rozdział 10

Podsumowanie

Temperaturę przejścia fazowego T_X szacowano wykorzystując kilka metod.

W szczególności badano zachowanie się krzywych temperaturowych ciepła właściwego i podatności magnetycznej, a także – ze względu na spodziewaną w niskich temperaturach obecność fazy szkła spinowego – parametru porządku szkieł spinowych i parametru przekrywania. Zarówno ciepło właściwe, jak i podatność magnetyczną obliczono za pomocą dwóch metod, których wyniki zawsze były zgodne powyżej temperatury przejścia fazowego. W fazie niskotemperaturowej, zależnie od sieci prezentowały one mniejszą lub większą niezgodność, przy czym w przypadku ciepła właściwego tylko dla sieci pseudoregularnej pojawiają się pewne odchylenia.

Nie zaobserwowano żadnej reguły wskazującej na to, która z metod mogłaby najtrafniej określać temperaturę przejścia fazowego. Faktem jest, że *parametr Edwardsa-Andersona* nie wykazywał różnic w rozpoznawaniu temperatury przejścia T_X w sieciach różniących się nieznacznymi zmianami frustracji (krzywa $q(T)$ zerowała się w tym samym miejscu dla sieci tego samego typu o różnych wartościach współczynnika C , np. w przypadku sieci przestrzennej oraz grafu linków). Z kolei *parametr przekrywania* Q – jak już odnotowano w rozdziale 3.4 – w ogóle nie sprawdzał się w sieciach z podwyższoną klasteryzacją, a także w sieciach z dużą ilością swobodnych spinów zmieniających swój stan bez strat energii. Dlatego też, dla modeli rozważanych w niniejszej pracy okazał się bezużyteczny.

Jeśli chodzi o wyznaczenie T_X z krzywych temperaturowych *podatności*, wpływ swobodnych spinów objawił się również dla tej metody, ale tylko w modelu sieci przypadkowej i przestrzennej. Został on wyeliminowany poprzez konstrukcję sieci regularnej, w której każdy węzeł posiadał dokładnie trzech sąsiadów, a później również dla sieci pseudoregularnej o $k = \{3, 5\}$. I właśnie dla tych przypadków można było określić maksimum podatności wskazujące na temperaturę przejścia fazowego dla różnego stopnia klasteryzacji układu. Wartości temperatur przejścia fazowego T_X z krzywych zależności podatności od temperatury odczytano dla wszystkich modeli sieci, z tym że dla sieci przypadkowej i przestrzennej traktujemy je jako nieściśle ze względu na obecność swobodnych spinów.

Zdecydowanie najmniej zawodną metodą szacowania temperatury krytycznej okazało się być badanie *ciepła właściwego* w funkcji temperatury. Maksima ciepła właściwego były czułe na nawet niewielkie zmiany stopnia klasteryzacji układu i łatwo można było odczytać temperatury uporządkowania dla tych sieci, w których klasteryzacja była mniej efektywna (np. w modelu sieci przestrzennej). Dla ciepła właściwego nie obserwujemy też zakłócającego wpływu swobodnych spinów.

Jednakże jak wskazują dane literaturowe [20, 56] maksimum funkcji ciepła właściwego w funkcji temperatury daje górne ograniczenie temperatury zamarzania T_{SG} ; krytyczny punkt znajduje

się poniżej maksimum, w kierunku niższych temperatur. Symulacje własności magnetycznych sieci pokazały, że faktycznie, dla sieci przypadkowej i przestrzennej wartości temperatur krytycznych otrzymanych z ciepła właściwego są wyższe niż te, na które wskazują krzywe podatności. Natomiast dla sieci pseudoregularnej temperatury przejścia fazowego T_X otrzymane obydwoma metodami są niemalże identyczne, a dla grafu regularnego relacja się odwraca (temperatura krytyczna otrzymana z zależności temperaturowej ciepła właściwego jest niższa od tej jaką otrzymano badając podatność w funkcji temperatury).

Rozważając całościowo powyższe problemy z jakimi się stykaliśmy *nie wyróżniamy żadnej z wymienionych metod jako najlepiej przewidującej temperaturę krytyczną sieci przypadkowych ze sterowaną klasteryzacją*. Warto jednak zaznaczyć, że temperatury krytyczne oszacowane z wyżej wymienionych symulacji ciepła właściwego, podatności magnetycznej oraz parametru porządku q są zbliżone.

Dla sieci przypadkowych o podwyższonej klasteryzacji z oddziaływaniem antyferromagnetycznym nie istnieje żadna spójna teoria opisująca zachowanie się tego typu układów w pobliżu temperatury przejścia fazowego. Dlatego też, w niniejszej pracy do porównania wyników symulacji wykorzystano teorię Bethego dla drzew przypadkowych (zob. rozdział 3.2). Teoria ta jednak opisuje sieci typu drzewa, tj. bez zamkniętych ścieżek, w których trzy węzły są dla siebie sąsiadami. Tymczasem liczba takich trójkątów wzrasta ze wzrostem współczynnika klasteryzacji. *Nieznana jest metoda analitycznego określenia wpływu frustracji na temperaturę przejścia fazowego, a teoria z jaką porównujemy wyniki numeryczne jest tylko punktem odniesienia*.

Zestawienie temperatur przejścia fazowego otrzymanych numerycznie z symulacji magnetycznych własności sieci z przewidywaniami teorii Bethego wskazuje jednoznacznie, że nie możemy zaniedbać wpływu klasteryzacji na T_X . Teoretyczne wartości temperatury krytycznej zależą tylko od stosunku ilości drugich do ilości pierwszych sąsiadów (tzw. parametru B). Wyniki symulacji natomiast wskazują, że temperatura przejścia fazowego zależna jest od współczynnika klasteryzacji układu, a nie tylko od topologii sieci.

Przykładem tej zależności jest przypadek sieci pseudoregularnej, której konstrukcja pozwoliła na stworzenie układów o stałym parametrze B a zmiennym współczynnikiem klasteryzacji. Zgodnie z teorią temperatura T_X dla takich grafów powinna być stała, podczas gdy symulacje zarówno ciepła właściwego, podatności jak i parametru Edwardsa-Andersona wskazują na zależność temperatury przejścia fazowego od gęstości frustracji.

Dla sieci przypadkowej, regularnej oraz przestrzennej temperatury przejścia fazowego różnią się bardziej od teorii dla układów o większym współczynnikiem klasteryzacji – każdorazowo *symulacja wskazuje na spadek* (czasem nieznaczny, jak dla sieci przestrzennej) *temperatury krytycznej ze wzrostem klasteryzacji, podczas gdy teoria pokazuje dokładnie odwrotną zależność*. Ponieważ wzrost klasteryzacji ze względu na oddziaływania antyferromagnetyczne w sieci pociąga za sobą wzrost frustracji geometrycznej układu, wysuwamy wniosek o *spadku temperatury krytycznej dla układów o większej gęstości frustracji*.

Zwiększenie gęstości frustracji prowadzi do zmniejszenia temperatury przejścia fazowego. Odnosi się to do prawie wszystkich rozważanych w niniejszej pracy modeli sieci. Zależność ta najbardziej widoczna jest dla grafów, w których sterowanie klasteryzacją było efektywne, tzn. pozwalało na stworzenie topologii różniących się znacznie współczynnikiem klasteryzacji w obrębie sieci tego samego typu. Dotyczy to modeli sieci przypadkowej, regularnej oraz pseudoregularnej. Dla sieci przestrzennej możemy mówić raczej o nierosnącym charakterze zależności temperatury krytycznej od stopnia frustracji (lub o delikatnym spadku T_X z klasteryzacją C). Natomiast jeśli chodzi o graf linków, nie zaobserwowano jakiegokolwiek przesunięcia temperatury przejścia fazowego; z drugiej strony jednak, pojawiające się tutaj różnice w gęstości frustracji były niewielkie

(współczynnik klasteryzacji C mieścił się w granicach od 0.46 do 0.5).

Powyższy wniosek zgadza się z danymi doświadczalnymi, dostępnymi w literaturze [60, 53, 30]. W zaprezentowanych w rozdziale 8.5 przykładach, frustracja regulowana jest poprzez stopień gęstości wiązań antyferromagnetycznych. Magnetyki te są domieszkowane innymi atomami, których oddziaływania stają się konkurencyjne w stosunku do poprzednio istniejących.

Dla materiału $La_{0.5}(Fe_{1-x}Mn_x)_{11.4}Si_{1.6}$ [60] stopniowe zastępowanie żelaza manganem powoduje wzrost udziału antyferromagnetycznych oddziaływań w próbce, które stają się porównywalne do liczby ferromagnetycznych. Takie połączenie przeciwstawnych oddziaływań jest źródłem frustracji, która powoduje przejście układu w stan szkła spinowego. Im większa liczba zastępowanych atomów, tym frustracja większa i mniejsza temperatura krytyczna T_{SG} .

Podobna sytuacja ma miejsce w innym stopie – $La_{0.5}Sr_{0.5}Co_{1-x}Fe_xO_3$ [53]. Tutaj konkurencja oddziaływań ma swoje źródło w podmianie atomów kobaltu żelazem. I tym razem w fazie niskotemperaturowej pojawia się szkło spinowe, a *temperatura przejścia jest niższa dla układów bardziej sfrustrowanych* (rys. 8.24).

Warto jednak zaznaczyć, że porównanie z rzeczywistymi magnetykami jakiego dokonaliśmy odnosi się do frustracji różnego pochodzenia: w modelowanych sieciach mamy do czynienia z frustracją geometryczną, podczas gdy w omawianych próbkach pojawia się frustracja, której źródłem jest konkurencja oddziaływań.

Wyniki dotyczące ciepła właściwego (dla sieci regularnej i pseudoregularnej) wskazują, że *charakter fazy niskotemperaturowej w układach modelowanych zmienia się w miarę zwiększania gęstości frustracji*. Dla niskiego współczynnika klasteryzacji C , krzywa $C_v(T)$ w pobliżu temperatury krytycznej przybiera postać ostrego piku, a w miarę wzrostu klasteryzacji (czyli frustracji) pik ten przechodzi w łagodne maksimum (zob. rysunki 6.6 i 6.8 dla sieci regularnej oraz rysunki 7.4, 7.5 i 7.6 dla sieci pseudoregularnej). Taka nagle zmiana charakteru temperaturowej zależności ciepła właściwego może wskazywać na przejście od fazy antyferromagnetycznej do szkła spinowego. Na korzyść tej tezy wskazuje również fakt, że gdy współczynnik klasteryzacji jest mały, struktura sieci jest bliska drzewu, a drzewa można przedstawić jako grafy dwudzielne. W takich układach frustracja jest nieobecna i stan podstawowy jest fazą antyferromagnetyczną.

Bibliografia

- [1] E. Albayrak, A. Yigit, and S. Akkaya. The antiferromagnetic Ising model for a bilayer Bethe lattice. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 320:2241–2248, 2008.
- [2] R. Albert and A.-L. Barabási. Emergence of scaling in random networks. *Science*, 286:509–512, 1999.
- [3] R. Albert and A.-L. Barabási. Statistical mechanics of complex networks. *Reviews of Modern Physics*, 74:47–97, 2002.
- [4] A.-L. Barabási. *Linked: How Everything Is Connected to Everything Else and What It Means for Business, Science, and Everyday Life*. Plume Books, 2002.
- [5] M. Bartolozzi, D. B. Leinweber, T. Surungan, A. W. Thomas, and A. G. Williams. Scale-free networks in complex system. arXiv:cond-mat/0511273, 2005.
- [6] R. J. Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics*. Academic Press, 1982.
- [7] M. Bałanda. Własności relaksacyjne i fazy magnetyczne niskowymiarowych magnetyków molekularnych. *rozprawa habilitacyjna, Instytut Fizyki Jądrowej PAN*, 2006.
- [8] K. Binder and A. P. Young. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Reviews of Modern Physics*, 58:801–976, 1986.
- [9] A. Bray and M. Moore. The nature of the spin-glass phase and finite size effects. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 18:L699–L705, 1985.
- [10] G. Caldarelli. *Scale-free networks. Complex webs in nature and technology*. Oxford University Press, 2007.
- [11] B. A. Cipra. An introduction to the Ising Model. *The American Mathematical Monthly*, 94:937–959, 1987.
- [12] S. Dorogovtsev, A. V. Goltsev, and J. F. F. Mendes. Ising model on networks with an arbitrary distribution of connections. *Physical Review E*, 66:016104, 2002.
- [13] S. Dorogovtsev, A. V. Goltsev, and J. F. F. Mendes. Critical phenomena in complex networks. *Reviews of Modern Physics*, 80:1275, 2007.
- [14] S. Dorogovtsev and J. F. F. Mendes. Evolution of networks. *Advances in Physics*, 51:1079, 2002.
- [15] S. Dorogovtsev and J. F. F. Mendes. *Evolution of networks. From biological nets to the Internet and WWW*. Oxford University Press, 2003.

- [16] S. Dorogovtsev and J. F. F. Mendes. The shortest path to complex networks. arXiv:cond-mat/0404593, 2004.
- [17] R. Durrett. *Random graph dynamics*. Cambridge University Press, 2006.
- [18] P. Erdős and A. Rényi. On random graphs. *Publications Mathematicae*, 6:290, 1959.
- [19] P. Erdős and A. Rényi. On the evolution of random graphs. *Publ. Math. Inst. Hung. Acad. Sci.*, 5:17, 1960.
- [20] K. H. Fisher and J. A. Hertz. *Spin glasses*. Cambridge University Press, 1993.
- [21] M. Franceschetti and R. Meester. *Random networks for Communication*. Cambridge University Press, 2007.
- [22] A. Fronczak and P. Fronczak. *Świat sieci złożonych. Od fizyki do Internetu*. PWN, 2009.
- [23] M. R. Garey and D. S. Johnson. *Computers and Intractability. A Guide to the Theory of NP-Completeness*. W. H. Freeman and Co., 1979.
- [24] A. K. Hartmann. Ground-state landscape of 2d $\pm J$ Ising spin glasses. *The European Physical Journal B*, 8:619–626, 1999.
- [25] R. Hauck, H. Atabakhsk, P. Onguasith, H. Gupta, and H. Chen. Using Coplink to analyse Criminal-Justice Data. *IEEE Computer*, 35:32–37, 2002.
- [26] C. P. Herrero. Antiferromagnetic Ising model in small-world networks. *Physical Review E*, 77:041102, 2008.
- [27] P. Holme and B. J. Kim. Growing scale-free networks with tunable clustering. *Physical Review E*, 65:026107, 2002.
- [28] K. Huang. *Mechanika statystyczna*. PWN, 1978.
- [29] K. Huang. *Wstęp do fizyki statystycznej*. PWN, 2006.
- [30] S. Katsura and I. Nagahara. Frustration effect and the spin glass transition temperature in the bond mixtures of the Ising model in the face-centred cubic lattice. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 13:4995–5007, 1980.
- [31] V. Kerbs. Mapping networks of terrorist cells. *Connections*, 24:43–52, 2002.
- [32] J. Kertesz. Small but slow world: how topology and burstiness slow down spreading. *APCTP, BK21 and NIMS International Conference: New Frontiers in Complex Networks*, Seoul National University, Korea, 12.07.2010-16.07.2010.
- [33] C. Kittel. *Wstęp do fizyki ciała stałego*. PWN, 1999.
- [34] C. Lacroix. Magnetic properties of strongly frustrated and correlated systems. *Physica B: Physics of Condensed Matter*, 404:3038–3041, 2009.
- [35] K.-M. Lee, J.-S. Yang, G. Kim, J. Lee, K.-I. Goh, and I.-M. Kim. Modeling economic crisis in global macroeconomics. *APCTP, BK21 and NIMS International Conference: New Frontiers in Complex Networks*, Seoul National University, Korea, 12.07.2010-16.07.2010.
- [36] K. Malarz. *Automaty komórkowe. notatki z wykładów, 2001-2006*.

- [37] K. Malarz, W. Antosiewicz, J. Karpińska, K. Kułakowski, and B. Tadić. Avalanches in complex spin networks. *Physica A*, 373:785–795, 2007.
- [38] A. Mańka, K. Malarz, and K. Kułakowski. Clusterization, frustration and collectivity in random networks. *International Journal of Modern Physics*, 18:1765–1773, 2007.
- [39] A. Mańka-Krasoń and K. Kułakowski. Magnetism of frustrated regular networks. *Acta Physica Polonica B*, 40:1455–1461, 2009.
- [40] A. Mańka-Krasoń and K. Kułakowski. Assortativity in random line graphs. *Acta Physica Polonica B Proc. Suppl.*, 3:259, 2010.
- [41] A. Mańka-Krasoń and K. Kułakowski. Frustration and collectivity in spatial networks. *Lecture Notes in Computer Science*, 6068:539–546, 2010.
- [42] A. Mańka-Krasoń, A. Mwijage, and K. Kułakowski. Clustering in random line graphs. *Computer Physics Communications*, 110:118–121, 2010.
- [43] M. Mézard, G. Parisi, and R. Zecchina. Analytic and algorithmic solution of random satisfiability problems. *Science*, 297:812–815, 2002.
- [44] R. Moessner and A. P. Ramirez. Geometrical frustration. *Lecture Notes in Physics*, 59:24–29, 2006.
- [45] Y. Moreno. Recent approaches to epidemic spreading on complex networks. *APCTP, BK21 and NIMS International Conference: New Frontiers in Complex Networks*, Seoul National University, Korea, 12.07.2010–16.07.2010.
- [46] M. E. J. Newman. Structure and function of complex networks. *SIAM Review*, 45:167–256, 2003.
- [47] M. E. J. Newman, A.-L. Barabási, and D. J. Watts. *The Structure and Dynamics of Networks*. Princeton University Press, 2006.
- [48] M. E. J. Newman, S. H. Strogatz, and D. J. Watts. Random graphs with arbitrary degree distributions and their applications. *Physical Review E*, 64:026118, 2001.
- [49] G. Parisi. Order parameter for spin glasses. *Physical Review Letters*, 50:1946–1948, 1983.
- [50] G. Parisi. Some considerations of finite dimensional spin glasses. *Journal of Physics A*, 41:324002, 2008.
- [51] G. Parisi, J. J. Ruiz-Lorenzo, and D. A. Stariolo. Crossovers in the two-dimensional Ising spin glass with ferromagnetic next-nearest-neighbour interactions. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 31:4657, 1998.
- [52] R. Pastor-Satorras and A. Vespignani. *Evolution and Structure of the Internet: A Statistical Physics Approach*. Cambridge University Press, 2004.
- [53] T.-L. Phan, S.-C. Yu, N. V. Khiem, M.-H. Phan, J. R. Rhee, and N. X. Phuc. Electronic and magnetic phase diagram of $La_{0.5}Sr_{0.5}Co_{1-x}Fe_xO_3$. *Journal of Applied Physics*, 97:10A508, 2005.
- [54] W. Płaczek. Modelowanie komputerowe. *Wykłady FAIS UJ*, <http://th-www.if.uj.edu.pl/placzek/dydaktyka/MMC/wyklady/>, 2005.

- [55] J. Reichardt. *Structure in Complex Networks*. Series: Lecture Notes in Physics , Vol. 766, 2009.
- [56] R. W. Reid, S. K. Bose, and B. Mitrović. Spin glass behaviour of frustrated two dimensional Penrose lattice in the classical planar model. *Physical Review B*, 54:740–743, 1996.
- [57] D. L. Stein. Spin glasses: Still complex after all these years? *Lecture Notes in Physics*, 633:349–361, 2003.
- [58] K. Suchecki and J. A. Hołyst. Bistable-monostable transition in the Ising model on two connected complex networks. *Physical Review E*, 80:031110, 2009.
- [59] P. N. Timonin. Thermodynamics of strongly frustrated magnet in a field: Ising antiferromagnet on triangular Husimi lattice. arXiv:1005.2650v1, 2010.
- [60] F. Wang, J. Zhang, Y.-F. Chen, G.-J. Wang, J.-R. Sun, S.-Y. Zhang, and B.-G. Shen. Spin glass behaviour in $La_{0.5}(Fe_{1-x}Mn_x)_{11.4}Si_{1.6}$ compounds. *Physical Review B*, 69:094424, 2004.
- [61] D. J. Watts and S. H. Strogatz. Collective dynamics of „small-world” networks. *Nature*, 393:440–442, 1998.
- [62] P.-Z. Wong, S. von Molnar, T. T. M. Palstra, J. A. Mydosh, H. Yoshizawa, S. M. Shapiro, and A. Ito. Coexistence of spin-glass and antiferromagnetic orders in the Ising system $Fe_{0.55}Mg_{0.45}Cl_2$. *Physical Review Letters*, 55:2043–2046, 1985.
- [63] C. N. Yang. The spontaneous magnetization of a two-dimensional Ising model. *Physical Review*, 85:808–816, 1952.