Zápočtová práce 1.6.2021

Monte-Carlo simulace Isingova modelu

Isingův model

Isingův model je jednoduchý model magnetických vlastností pevné látky. Model spočívá v sadě n „spinů“ (magnetických dipólů) S_j uspořádaných na pravidelné mříži, přičemž interagují vždy pouze sousední spiny. Podle počtu a uspořádání interakcí se odlišují různé typy a dimenzionality mříží: spiny na řetízku (1D), čtvercová nebo šesterečná mříž (2D), kubická mříž (3D), atd. Každý spin S_j může mít pouze jednu ze dvou hodnot: $+1$ nebo -1 (spin míří nahoru nebo dolů).

Energie systému (Hamiltonián) je dána vztahem

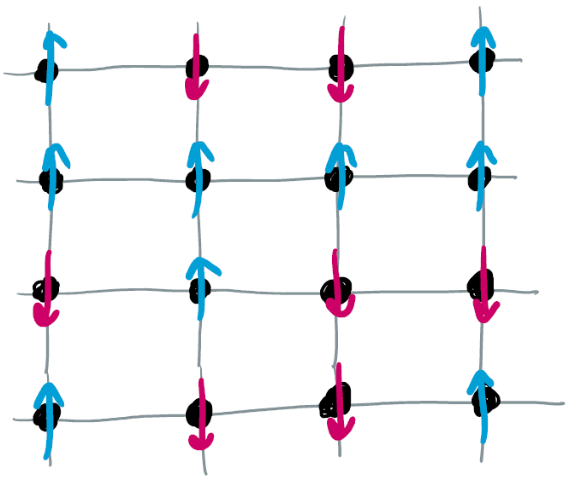
$$E = H = -J \sum_{\text{sousedi } \langle jk \rangle} S_j S_k, \tag{1}$$

kde $J > 0$ je konstanta udávající sílu interakce. Znaménko $-$ zaručuje, že preferované uspořádání spinů při nulové teplotě je paralelní a odpovídá feromagnetické chování.

Střední magnetizace je

$$M = \langle S_j \rangle = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} S_j. \tag{2}$$

Termální fluktuace paralelní uspořádání spinů rozbíjí. Při nekonečné velikosti mříže $n \to \infty$ vykazuje model termodynamický fázový přechod mezi feromagnetickou fází s $|M| > 0$ za teplot $T < T_c$ a paramagnetickou fází s $|M| = 0$ za teplot $T > T_c$, kde T_c je teplota fázového přechodu (kritická teplota, Curieova teplota). Numericky lze fázový přechod pozorovat i pro konečnou velikost mříže.



Obrázek 1: Isingův model na čtvercové 2D mříži. Černé puntíky: jednotlivé spiny. Modrá šipka nahoru: $S_j = +1$. Červená šipka dolů: $S_j = -1$. Šedé čáry: interakce. Zobrazená mříž odpovídá $N = 4$ (rozměr mříže), $n = 16$ (počet spinů v mříži).

Metropolisův algoritmus

Chování Isingova modelu za konečné teploty se simuluje *Metropolisovým algoritmem*, který spočívá následujících krocích:

1. Máme n spinů S_j rozmístěných na mříži.

2. Měníme postupně stav (znaménko) každého spinu. Označme energii před změnou $E_{\text{před}}$, energii po změně E_{po}, rozdíl energií $\Delta E \equiv E_{\text{před}} - E_{\text{po}}$. Podud $\Delta E < 0$, změnu přijmeme. Pokud $\Delta E > 0$, změnu přijmeme s pravděpodobností

$$p = \mathrm{e}^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}, \tag{3}$$

kde k_B je Boltzmannova konstanta.

3. Získáme nový stav mříže a výpočet opakujeme.

Po spuštění Metropolisova algoritmu na náhodně nagenerovanou mříž trvá nějakou dobu, než se teplota mříže ustálí na požadované teplotě T. Tento jev se nazývá *relaxace*. Nás bude zajímat chování systému v *rovnovážném stavu*, tj. po relaxaci.

Úloha

Uvažujte Isingův systém na dvourozměrné čtvercové mříži velikosti $N \times N$ (každý spin interaguje se čtyřmi sousedy, viz obrázek 1, celkový počet spinů je $n = N^2$) za konečné teploty T.

1. *(1 bod)* Zvolte vhodnou realizaci Isingovy čtvercové 2D mříže a napište funkci, která nageneruje náhodně její počáteční konfiguraci.

2. *(2 body)* Napište funkci, která spočítá energii Isingovy čtvercové mříže podle vzorce (1). Předpokládejte cyklické okrajové podmínky.

3. *(1 bod)* Napište funkci, která spočítá střední magnetizaci Isingovy čtvercové mříže podle vzorce (2).

4. *(2 body)* Naprogramujte jeden krok Metropolisova algoritmu.

5. *(2 body)* Vytvořte funkci, která provede následující posloupnost výpočtů pro teplotu T:
   - **Inicializace**: Nageneruje náhodnou mříž (viz bod 1).
   - **Relaxace**: Pro mříž provede r kroků Metropolisova algoritmu (viz bod 4).
   - **Výpočet magnetizace a energie**: Po relaxaci provede m kroků Metropolisova algoritmu. Po každém kroku spočítá magnetizaci M_k podle (2) a energii E_k podle (1).
   - **Výsledek**: Funkce vrátí průměrnou hodnotu

$$M = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^{m} M_k, \qquad E = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^{m} E_k. \tag{4}$$

6. *(2 body)* Využijte funkci z bodu 5 a nakreslete *bodové* grafy funkcí $M = M(T)$, $E = E(T)$ pro $T \in \langle 0; 4 \rangle$. Zvolte dostatečné množství teplot (doporučuji 100 hodnot). Z grafů odhadněte Curieovu teplotu T_c.

Program odlaďte pro mříž velikosti $N = 10$.
Při výpočtech uvažujte $J = 1$, $k_B = 1$, $r = 50$, $m = 50$.