**2023 DGIST Summer Intern Report  
Quantum Many-body Theory Group. with professor Aram Kim**

202111178 조수호

목차

1. Pure Ising Model
2. Modeling
3. Advanced technic
4. Magnetization graph
5. Cluster Ising Model
6. Algorithm
7. Plot all according to variable lattice size
8. Fractal Structure
9. Magnetic Susceptibility
10. Time Complexity with vector or basic array
11. Disordered Ising Model
12. Basic concept
13. Advanced goal
14. Improvement
15. Reference and code
16. **Pure Ising Model**
17. **Modeling**

Ising Model은 통계역학적인 상전이 모델로서 물체의 자성을 나타내는 간단한 격자이다. 격자에는 -1 혹은 1로 spin값이 결정되며 이는 IsingModel의 알고리즘에 따라 결정된다. IsingModel이 흥미로운 점은 다른 상전이 모델에도 적용할 수 있다는 것이다. 예를 들면 물에서 수증기로 변하는 상전이(liquid to gas) 등이 있다.

Pure Ising모델에서는 아래와 같은 알고리즘을 이용하여 c++에 코딩하였다.

1. Lattic 위의 무작위 한 지점인 k를 선택한다.
2. k spin이 flip이 되었을 때의 hamiltonian의 변화량을 비교하여, k spin을 flip할 지 정한다. Pure IsingModel에서 Hamiltonian은 이다. 값이 1보다 크면 무조건 flip하고 1보다 작으면 의 확률로 k spin을 flip한다. 이때, 이고 J의 값은 변할 수 있으나 이번에는 J = -1로 고정한다. J = -1 일 때는 강자성체의 경우로 알려져 있다.
3. 위 1~2 의 과정을 매우 많이 반복한다. 이는 MonteCarlo algoritm의 원리에 따른 것으로, 무수히 많은 시행을 한다면 이 사건은 평균에 수렴하는 것이 된다. 예를 들어 한 변의 길이가 1인 정사각형과 지름의 길이가 1인 원을 중심이 일치하도록 그려둔다. 이후 다트를 무작위로 아주 많이 던진다. 이 경우 정사각형 내부에 꽃힌 다트의 개수와 원 내부에 꽃힌 다트의 개수를 비교하여 원주율을 구할 수 있다 (). 마찬가지로 IsingModel의 경우에도 아주 많은 횟수의 1~2과정을 시행한다면, 이는 가능한 경우가 각 확률에 따라 고려되기 때문에 실제로 lattice가 아주 큰 물체의 magnetization을 예상할 수 있다.
4. 의 식으로 평균 magnetization을 구할 수 있다. 이때 는 MonteCarlo number이고, 로 N은 lattice number이다.
5. **Advanced** **techenic**

위와 같은 알고리즘을 그대로 코드에 구현하면 한 MonteCarlo step에 따라 소요되는 연산시간이 중요하다. 왜냐하면 이 시간이 줄어들수록 더 많은 MonteCarlo step을 한정된 시간 안에 할 수 있기 때문이다.   
위의 알고리즘에서 연산시간을 결정하는 주요 요인은 random generate와 if문이 있다. Random generate는 k site를 결정하는 과정에서 한 번, 의 확률로 k spin을 flip할 지 결정하는 과정에서 한 번 쓰인다. 이 두 random generate를 하나로 합칠 수 있다. Random generate를 rand\_float(0, N)으로 호출하면 0에서 N(lattice size)사이의 실수를 저장할 수 있다. 이 값을 int로 바꿔주면 k site를 random하게 구할 수 있고, 이 값을 이 값을 int로 바꿔준 값으로 빼면 0~1사이의 실수를 저장할 수 있어서 두 번째 random generate에 사용할 수 있다. 두 번째 random generate에 대해 자세히 설명하면 다음과 같다. 값이 0~1 사이 실수보다 크면 k spin을 flip하면 된다. 이 1보다 큰 경우에는 0~1사이 실수 값보다 무조건 크기 때문에 알고리즘에 맞게 1의 확률로 flip하는 것이다. 이 1보다 작은 경우 0~1사이 실수 값보다 이 클 확률이 이기 때문에 알고리즘에 맞게 확률로 k spin이 flip한다.  
다음으로 if문의 수를 줄여야 한다. if문의 경우 이 random\_float(0,1)보다 작은지 확인하는 경우에는 무조건 사용되어야 한다. 그러므로 다른 경우에 if문 사용을 최소화해야 한다. 예를 들어 k site의 인접 site를 확인할 때 spin lattice의 한 변의 길이를 초과하는 인접 site의 경우 if문을 써야 한다고 생각할 수 있다. 그러나 나머지 연산자(c++의 경우 ‘%’)를 쓰면 불필요한 if문을 줄일 수 있다.

1. **Magnetization graph**

위와 같은 알고리즘으로 pureIsingModel을 c++에 구현하였을 때 결과 그래프는 아래와 같다. 빨간 점선은 데이터 10개의 표준편차를 나타낸 것이고, T값은 높은 값에서 낮은 값으로 내려가며 코드를 실행하였고, T가 최대값에서 MonteCarlo Step을 5000\*lattice\_size 만큼 실행하여 시작 T에서의 평균값에서 magnetization 계산을 시작하였다.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  |  |

Pure IsingModel의 알려진 <m> - T graph는 아래와 같다.

텍스트, 도표, 폰트, 라인이(가) 표시된 사진

자동 생성된 설명

Reference 추가

1. Cluster Algorithm