

Ćwiczenia X

Model Isinga – symulacja

Jakub Tworzydło

Instytut Fizyki Teoretycznej

6/12 i 7/12/2022 Pasteura, Warszawa

Plan

- 1 Termiczne, równowagowe Monte Carlo

Temat ćwiczenia

Naszym zadaniem na dzisiaj jest zaprogramowanie symulacji układu spinów Isinga na sieci kwadratowej $L \times L$ w zadanej temperaturze T . Mamy wykonać symulację Monte Carlo wg. algorytmu heat-bath podanego na wykładzie.

Algorytm “heat-bath”

1. wybierz losowo spin i (liczba spinów $N = L^2$)
2. oblicz różnicę energii

$$\Delta = E_- - E_+ = 2J \sum_{j \text{ n.n. dla } i} s_{j(i)}$$

gdzie $s_{j(i)}$ sąsiednie spiny do węzła i

3. wylosuj $r \in [0, 1]$
4. dla $r < \frac{1}{1 + \exp(-\beta\Delta)}$ ustaw $s[i] = 1$,
w przeciwnym przypadku $s[i] = -1$

Zadanie 1

Wykonać symulację Monte Carlo

- układ spinów Isinga na sieci kwadratowej $L \times L$, z periodycznymi warunkami brzegowymi, bez pola magnetycznego
- stała energii $J = 1$, bezwymiarowa temperatura $T = 1/\beta = [5, 4, 3, 2, 1]$
- wykonać 1000 kroków MCS termalizacji (bez pomiarów) oraz 5000 kroków MCS dla pomiarów, oddzielnie w każdej temperaturze
- porównać średni moduł magnetyzacji z wynikiem ścisłym dla siatki 5×5

temp	1.	2.	3.	4.	5.
mag	0.998	0.912	0.512	0.334	0.275

Zadanie 2

Symulacja Monte Carlo spinów Isinga na sieci kwadratowej $L \times L$ tak jak w Zad. 1 dla $L = 10$ oraz $L = 20$. Wykonać 2000 MCS termalizacji oraz 5000 MCS pomiarów, oddzielnie w każdej temperaturze.

- Wykreślić średni moduł magnetyzacji w funkcji temperatury $T \in (1, 5)$ dla obu wartości L **na jednym wykresie**. Nanieść na wykres zależność analityczną (rozwiązanie Onsagera):

$$\langle m \rangle = \left(1 - \frac{1}{\sinh^4(2J/T)} \right)^{1/8} \quad \text{przy } T < T_c,$$

gdzie $T_c = \frac{2}{\log(1+\sqrt{2})}$.

- Wykreślić podatność w funkcji temperatury $T \in (1, 5)$ dla obu wartości L **na jednym wykresie** (nie ma rozwiązania analitycznego).

Magnetyzacja: `np.mean(np.abs(MagnetizationTable))`

Podatność: `np.var(MagnetizationTable) *beta*L**2`

Pakiet numba

Można znacznie przyspieszyć symulacje korzystając z pakietu `numba`.

Przeanalizuj przykład [https:](https://numba.pydata.org/numba-doc/dev/user/5minguide.html)

[//numba.pydata.org/numba-doc/dev/user/5minguide.html](https://numba.pydata.org/numba-doc/dev/user/5minguide.html).

Napisz funkcję `sweep(spins, beta, L)`, która wykonuje 1MCS na tablicy `numpy` spinów `spins` i przyspiesz ją dekoratorem `@jit(nopython=True)`. Funkcja może zawierać wszystkie operacje arytmetyczne, funkcje matematyczne z `numpy` oraz operacje na tablicach `numpy`.

Instalacja pakietu jest najprostsza przy pomocy `pip3 install numba`.

W pracowni komputerowej trzeba wykonać

```
pip3 install llvmlite==0.31 --user a następnie
```

```
pip3 install numba==0.46 --user.
```

Zadanie dodatkowe – ciepło właściwe

Wykonaj wykres ciepła właściwego (na spin) w funkcji temperatury $T \in [1, 5]$ dla układu 50×50 .

Ciepło właściwe obliczamy ze wzoru $c = \beta^2 (< E^2 > - < E >^2) / N$.
Uwaga: można użyć triku `np.roll` do obliczenia energii wszystkich wiązań.

Porównaj wynik z rozwiązaniem analitycznym

$$c = \frac{2}{\pi} (\beta \coth 2\beta J)^2 \left[2K_1(\kappa^2) - 2E_1(\kappa^2) - (1 - \kappa') \left(\frac{\pi}{2} + \kappa' K_1(\kappa^2) \right) \right].$$

Fukcje K i E są zupełnymi całkami eliptycznymi pierwszego i drugiego rodzaju (obie funkcje łatwo znaleźć w `scipy.special`). Stałe występujące we wzorach wynoszą $\kappa = 2 \tanh 2\beta J / \cosh 2\beta J$ oraz $\kappa' = 2 \tanh^2 2\beta J - 1$.