Ćwiczenia XI
Model Isinga – dynamiczne formowanie domen

Jakub Tworzydło

Instytut Fizyki Teoretycznej

13 i 14/12/2021 Pasteura, Warszawa

Plan

Plan

1. Gwałtowne schładzanie układu

2. Rozmiary domen

Temat ćwiczenia

Dzisiaj zmodyfikujemy odrobinę symulację układu spinów Isinga na sieci kwadratowej tak, aby zilustować segregowanie się faz w czasie.

Przetestujemy ilościowo przewidywanie teorii dynamicznej $R \propto t^{1/2}$ dla modelu z nieustalonym parametrem porządku oraz (dodatkowo) $R \propto t^{1/3}$ dla modelu z zachowanym parametrem porządku.

Algorytm Metropolisa

1. wybierz losowo spin i, z prawd. $1/N$ (liczba spinów $N = L^2$)
2. oblicz zmianę energii

$$\Delta E = E(Y) - E(X) = 2Js_i \sum_{j \text{ n.n. dla } i} s_{j(i)}$$

   gdzie s_i – **nie**-odwrócony wybrany spin, $s_{j(i)}$ sąsiednie spiny
3. dla $\Delta E <= 0$ akceptuj tj. odwróć s_i.
4. dla $\Delta E > 0$ odwróć spin z prawdopodobieństwem $e^{-\beta \Delta E}$

Zadanie 1 (0.3 pkt)

Wykonać symulację Monte Carlo dla spinów Isinga tak, jak na poprzednich ćwiczeniach.

- Zastosować algorytm Metropolisa zamiast heath-bath.
- Obowiązkowo przyspieszyć procedurę `sweep` dekoratorem `@jit(nopython=True)` z pakieru `numba`. Przyjąć rozmiar układu $L = 500$.
- Przygotowując układ w **przypadkowej** początkowej konfiguracji wykonać symulację przez $10, 100, 1000, 5000$ MCS kroków w temperaturze $T = 2$; narysować stany końcowe (`imshow` lub podobne).

Funkcja korelacji

Robocza definicja funkcji korelacji (dla zadanej konfiguracji układu):

$$\chi(r) = \frac{1}{L}\sum_{r_0=0}^{L-1} s(r_0)s(r_0+r),$$

gdzie s reprezentuje nasz układ na siatce, r obliczamy w kierunku poziomym (czyli po indeksie kolumny), ponadto $r_0 + r$ bierzemy z periodycznym warunkiem brzegowym (niech $0 \leq r < L/2$).
Warto też uśrednić całe $\chi(r)$ po wierszach.

Zadanie 2 (A) 0.4 pkt, (B) 0.3 pkt

- (A) Obliczyć i wykreślić funkcję korelacji przestrzennej $\chi(r)$ po $10, 100, 1000$ i 5000 krokach MCS (niech $r < L/2$, nadal $L = 500$).
- (B) Obliczyć typowy rozmiar domen R na podstawie $\chi(r)$ (wg. wzorów z następnego slajdu).
- (B) Wykonać wykres R w zależności od czasu t (w jednostkach MCS) w skali logarytmiczno-logarytmicznej, nanieść prostą $R \propto t^{1/2}$ (przeprowadzić przez ostatni punkt lub dopasować); przykładowo przyjąć $t = 20, 50, 100, 200, 500, 1000, 2000, 5000$

Rozmiar domen

Zanik wykładniczy funkcji korelacji $\chi(r) = e^{-r/R}$ jest scharakteryzowany typową skalą długości R. Wtedy $-\log\chi = r/R$, a po wysumowaniu stronami $\sum_0^{r_{\max}}$ i uporządkowaniu dostaniemy

$$R = r_{\max}(r_{\max}+1)/(2C),$$

gdzie $C = -\sum_{r=0}^{r_{\max}} \log\chi(r)$. Możemy ustalić np. $r_{\max}$ największy, dla którego jeszcze $\chi(r) > 0.3$.

Zadanie Ekstra

Wykonać zad. 1 oraz zad. 2 dla modelu z zachowanym parametrem porządku, zastosować algorytm Kawabaty.

Przekonać się, że symulację należy przeprowadzić dla nieco mniejszego układu ($L = 200$), ale dla dziesięciokrotnie dłuższych czasów t. Porównać uzyskane wyniki z prawem potęgowym $R \propto t^{1/3}$.