

## Metody Monte Carlo - laboratorium 6

### **Temat: Model Isinga**

#### **Zadanie 1**

Proszę zapoznać się z implementacją modelu Isinga, a następnie wyznaczyć zależność średniej magnetyzacji  $\langle m \rangle$  od temperatury  $T$  oraz średniej energii układu  $E_{sr}$  od temperatury  $T$  stosując symulację MC w zespole mikrokanonicznym.

Podczas implementacji przyjęto następujące założenia:

- okresowe warunki brzegowe,
- $h = 0$ ,
- średnia magnetyzacja w przeliczeniu na jeden spin obliczona w oparciu o  $N_k$  obserwacji

$$\text{wynosi } \langle m \rangle = \frac{1}{N_k} \sum_{l=1}^{N_k} \left( \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} s_i \right),$$

- zależność pomiędzy średnią energią duszka i temperaturą  $k_B T = \frac{4J}{\ln(1 + 4J/\langle E_d \rangle)}$ ,
- energia i temperatura są wielkościami zredukowanymi i wyrażonymi w jednostkach:  
 $T' = k_B T/J$  i  $E' = E/J$ .
- konfiguracja początkowa  $R_o$  ma wszystkie spiny skierowane „do góry” ( $s_i = 1$ ),
- badając układ charakteryzujący się energią  $E$  przyjęto energię początkową duszka:

$$E_d = E - E_T, \text{ gdzie } E_T = -2 L^2.$$

Obliczania wykonać dla następujących wartości energii:

$$E \in [-184, -24] \text{ z krokiem } 8 \quad \text{dla } L = 10,$$

$$E \in [-768, -32] \text{ z krokiem } 32 \quad \text{dla } L = 20,$$

$$E \in [-3072, -128] \text{ z krokiem } 128 \quad \text{dla } L = 40,$$

- liczba kroków MC użyta do doprowadzenia układu do stanu równowagi  $> 1000$ ,
- liczba kroków MC użyta do zliczania średnich  $> 1000$ .

#### **Przypomnienie**

**Model Isinga** – jest to siatkowy układ oddziałujących wzajemnie (cząsteczek – spinów), którego właściwości opisuje Hamiltonian:

$$H = -J \sum_{i,j} s_i s_j - h \sum_{i=1}^{\infty} s_i,$$

## Metody Monte Carlo - laboratorium 6

gdzie  $s_i$  jest zmienną charakteryzującą stan  $i$ -tego węzła sieci,  $J$  – stałą charakteryzującą siłę oddziaływań pomiędzy parą sąsiednich spinów, a  $h$  – natężeniem jednorodnego zewnętrznego pola.

**Zespół mikrokanoniczny** opisuje izolowane od otoczenia układy zamknięte, w których liczba cząsteczek  $N$ , objętość  $V$  oraz energia  $E$  są stałe.

Algorytm ewolucji takiego układu w czasie (od konfiguracji startowej  $R_0$  do stanu równowagi) można zrealizować w oparciu o poniższy algorytm Creutz'a:

1. Ustalić początkową energię duszka  $E_d$ .
2. Wybrać w sposób losowy spin układu, a następnie dokonać zmiany stanu układu  $R_i \rightarrow R_j$ .
3. Obliczyć różnicę energii między stanami  $i$  oraz  $j$ :  $\Delta E = E_i - E_j$ .
4. Jeżeli  $\Delta E < 0$ , to nowa konfiguracja układu zostaje zaakceptowana, a różnica energii przekazana duszkowi. Powrót do punktu 2.
5. Jeżeli  $\Delta E > 0$ , to akceptacja nowej konfiguracji układu następuje jedynie w przypadku, gdy  $\Delta E + E_d > 0$ . Wówczas konieczną energię pobiera się od duszka. Powrót do punktu 2.
6. Jeżeli  $\Delta E = 0$  to nowa konfiguracja jest akceptowana bez zmiany energii duszka po czym następuje powrót do punktu 2.

Po doprowadzeniu układu do stanu odpowiadającemu energii  $E$  można przejść do obliczenia średnich wybranych wielkości fizycznych. Jako jeden krok MC należy rozumieć próbę zmiany przynajmniej raz (statystycznie) stanu każdego spinu.

### **Zadanie 2**

Proszę zmodyfikować kod wykorzystywany w *Zadaniu 1*, tak by umożliwił on przeprowadzenie obliczeń symulacyjnych w modelu kanonicznym a następnie proszę wyznaczyć zależność średniej magnetyzacji  $\langle m \rangle$  oraz średniej energii układu  $E_{sr}$  od temperatury  $T$  dla rozmiarów siatki 10x10, 20x20 i 40x40 w zakresie temperatur podobnym do tego uzyskanego w *Zadaniu 1*.