

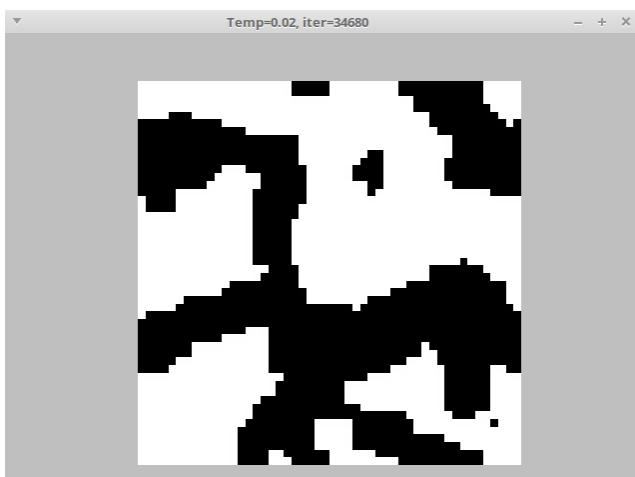
Cvičení 6 - Simulace Isingova modelu magnetismu s využitím Metropolisova algoritmu

Jméno: Katerina Fořtová (xforto00)

Charakteristika experimentu: Jedním z prostředků statistické fyziky pro simulaci přírodních procesů jsou metody Monte Carlo. Chceme-li je využít např. k simulaci vývoje určitého systému v čase, bývají aplikovány tzv. Markov Chain Monte Carlo metody (MCMC), které využívají pro přechody mezi jednotlivými stavy systému Markovovy řetězce a zkoumáním vlastností dvou následných stavů simulovaného systému volí (s určitou pravděpodobností) konkrétní stav systému pro další simulační krok. Jedná se zejména o Metropolisův algoritmus a různé techniky simulovaného žihání. V této úloze využijeme Metropolisův algoritmus pro simulaci vývoje Isingova modelu, což je jeden z nejjednodušších přístupů umožňujících simulovat vlastnosti magnetických materiálů ve statistické fyzice.

Experimentování s nastavením parametrů 1-Ising-simul.sh:

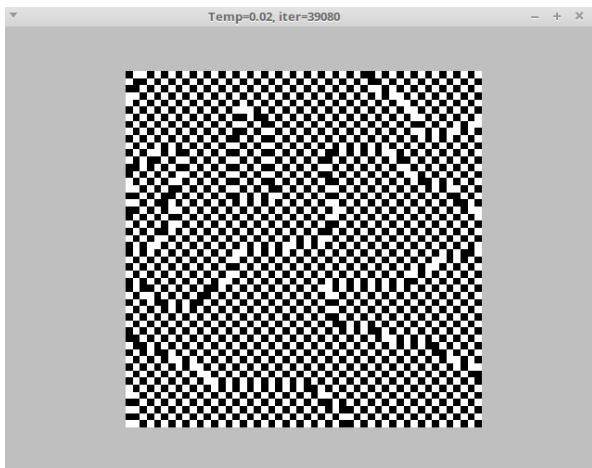
shape: 50, **temp:** 0.02, **interact:** 1.0, **modulo:** 10, tvorba shluků se stejnou hodnotou spinu – materiál vykazuje feromagnetické vlastnosti.



shape: 50, **temp:** 0.02, **interact:** 0.0, **modulo:** 10, tvorba menších shluků se stejnou hodnotou spinu – materiál vykazuje vlastnosti, které leží na pomezí mezi feromagnetickým a antiferomagnetickým materiálem.



shape: 50, **temp:** 0.02, **interact:** -1.0, **modulo:** 10, shluky se netvoří – materiál vykazuje antiferomagnetické vlastnosti.



shape: 50, temp: 5.0, interact: 1.0, modulo: 10, tvorba menších shluků – látka již není čistě feromagnetickou, spíše leží na pomezí mezi feromagnetismem a antiiferomagnetismem.



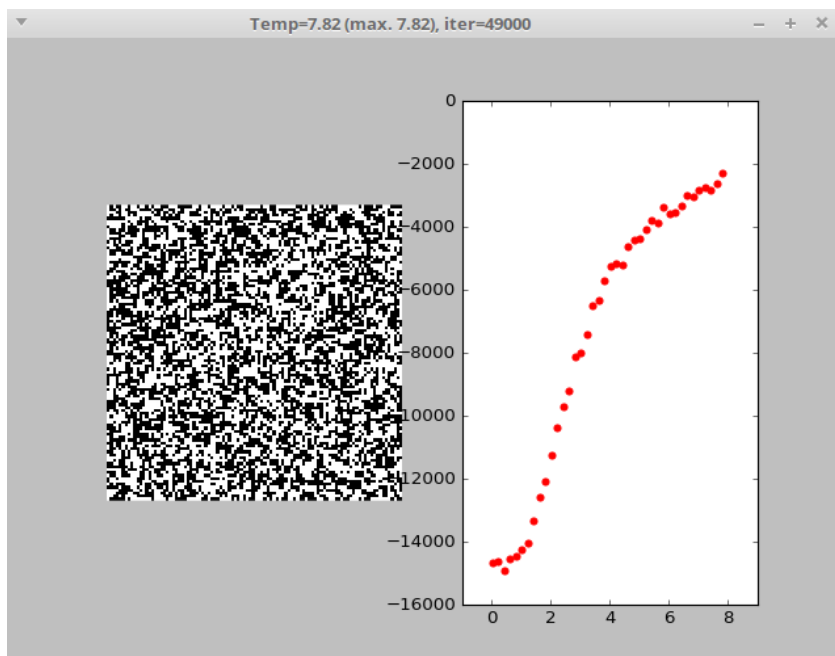
shape: 50, temp: 11.0, interact: 1.0, modulo: 10 – tvorba stále menších shluků, látka ztrácí své feromagnetické vlastnosti.



Experimentování s nastavením parametrů 2-Ising-analysis.sh:

shape: 100, moment: 1.0, temp: 0.02, trange: 8.0, tstep: 0.2, interact: 1.0, iters: 50 000, modulo: 1000

Využito vyšší hodnoty **shape** pro lepší přesnost.



Shrnutí výsledků: V první části úlohy bylo experimentováno s nastavením skriptu pro simulaci Isingova modelu. Dle článku o Isingově modelu (<https://lucasschuermann.com/writing/ising-model>) je interakce kladná, pokud jsou spiny orientovány ve stejném směru a materiál pak vykazuje feromagnetické vlastnosti. Při této situaci se tvoří při simulaci shluky spinů stejné orientace (v grafu znázorněno černou, bílou barvou, spiny se stejnou orientací mají stejnou barvu). Pokud je interakce záporná, pak jsou spiny orientovány v opačném směru a materiál vykazuje antiiferomagnetické vlastnosti, což se v simulaci projevuje tím, že se shluky nevyskytují. Pokud je interakce nulová, pak materiál leží někde na pomezí mezi antiiferomagnetickým a feromagnetickým a tvoří se menší shluky. Nad tzv. Curieho teplotou poté látka ztrácí své feromagnetické vlastnosti.

Tyto skutečnosti se potvrzují v první části simulace, kdy při nastavení parametru `-interact` na hodnotu 1.0 látka vykazuje feromagnetické vlastnosti. Ovšem pouze do určité hodnoty `-temp`, kdy se právě projevuje vliv Curieho teploty.

V druhé části úlohy bylo experimentováno s odvozením fázového diagramu energie systému v závislosti na teplotě. Výstup grafu můžeme porovnat s grafem této závislosti uvedeným v literatuře. Data jsou sbírána v průběhu simulace a energie se zvyšuje se zvyšující teplotou systému. Prudký nárůst nastává v oblasti, kdy dochází k fázovému přechodu. Můžeme vidět, že systém postupně dospěje k rovnovážnému stavu, co má nejnížší energii a je tedy energicky nejvýhodnější.