

Модель Изинга — это математическая модель статистической физики, которая описывает ферромагнетизм и является одной из классических моделей спиновых систем. Она была предложена Вильгельмом Ланде в 1920-х годах и названа в честь Эрнста Изинга, который изучал её как часть своей докторской диссертации в 1924 году.

Основные понятия модели Изинга:

1. **Спины:** В модели Изинга система состоит из решётки (обычно двумерной, но может быть и трёхмерной), в узлах которой находятся спины. Спин — это квантово-механическая величина, которая может принимать одно из двух значений: +1 (направлен вверх) или -1 (направлен вниз).
2. **Взаимодействие соседних спинов:** Соседние спины взаимодействуют друг с другом. Энергия взаимодействия минимальна, если спины направлены одинаково (например, оба вверх или оба вниз), и максимальна, если они противоположны. Это взаимодействие стремится выровнять спины, приводя к коллективному поведению (например, ферромагнетизму).
3. **Гамильтониан:** Общая энергия системы описывается через Гамильтониан, который выражается как:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i$$

Здесь:

- J — коэффициент взаимодействия между соседними спинами.
- $\langle i, j \rangle$ — обозначает сумму по парам соседних спинов.
- s_i и s_j — спины на узлах i и j .
- h — внешний магнитный момент.



Первый член выражает энергию взаимодействия спинов друг с другом, второй — взаимодействие спинов с внешним полем.

4. **Температура и фазовые переходы:** Одним из ключевых аспектов модели Изинга является её способность описывать фазовые переходы. При низких температурах система демонстрирует спонтанную намагниченность (все спины выровнены), тогда как при высоких температурах намагниченность исчезает (спины ориентированы случайным образом). В точке фазового перехода система переходит из упорядоченного состояния (ферромагнитного) в беспорядочное (парамагнитное).

5. **Размерность:** Модель Изинга особенно хорошо изучена в одной и двух измерениях. Для одномерной модели Изинга доказано, что фазового перехода нет. В то время как двумерная модель, решённая Ларсом Онсагером в 1944 году, показывает фазовый переход при конечной температуре.

Применения модели Изинга:

Хотя модель была изначально предложена для описания ферромагнетизма, её применяют во многих других областях:

- **Биофизика:** для моделирования поведения белков и мембран.
- **Социология:** для описания коллективного поведения в группах людей (например, распространение мнений).
- **Теория вероятностей:** для исследования случайных процессов и систем с взаимодействующими элементами.

Модель Изинга является важной для понимания коллективных явлений в различных областях науки.

Алгоритм Метрополиса для двумерной модели Изинга — это один из методов Монте-Карло для моделирования статистических систем. Он используется для изучения равновесных свойств спиновой системы при различных температурах. Алгоритм помогает находить состояния системы, которые соответствуют минимальной свободной энергии, что особенно полезно для моделирования фазовых переходов и поведения спиновых систем при разных температурах.

Задачи и цели:

Основная цель — оценить, как меняется распределение спинов и намагниченность системы, моделируя её эволюцию к термодинамическому равновесию.

Исходные данные:

1. **Решётка спинов:** Задаем двумерную решётку $N \times N$, где в каждом узле находится спин S_i , принимающий значения $+1$ или -1
2. **Энергия системы:** Гамильтониан системы выражает её полную энергию:

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} s_i s_j$$

где J — коэффициент взаимодействия между соседними спинами, а сумма ведётся по всем соседним парам $\langle i, j \rangle$.

3. **Температура T :** Один из важнейших параметров системы, определяющий её тепловое поведение. При высокой температуре система находится в состоянии высокой энтропии (беспорядок), а при низкой — в упорядоченном состоянии (ферромагнитное поведение).

Шаг 1: Инициализация системы

1. Задайте двумерную решётку размером $N \times N$, где каждый спин s_i случайным образом принимает значение $+1$ или -1 (например, равновероятно).
2. Определите начальные параметры:
 - Температура T ,
 - Величина обменного взаимодействия J ,
 - Число шагов Монте-Карло M для моделирования.

Шаг 2: Вычисление изменения энергии

На каждом шаге выбирается случайный узел решётки, и его спин переворачивается (то есть $s_i \rightarrow -s_i$). Необходимо вычислить изменение энергии ΔE , вызванное переворотом этого спина.

Изменение энергии для одного спина выражается как:

$$\Delta E = 2Js_i \sum_{\langle i,j \rangle} s_j$$

Шаг 3: Принятие или отклонение изменения

Используя критерий Метрополиса, мы решаем, будет ли переворот спина принят или отклонён:

- Если $\Delta E \leq 0$, то переворот спина понижает энергию системы, и мы **принимаем** это изменение.
- Если $\Delta E > 0$, то изменение энергии положительно, и переворот принимается с вероятностью $P = \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right)$, где k_B — постоянная Больцмана.

Для принятия этого решения генерируется случайное число r в диапазоне $[0,1]$. Если $r \leq P$, то переворот принимается, иначе — отклоняется.

Шаг 4: Обновление системы

Если переворот спина принят, обновляем состояние решетки. Переходим к следующему узлу и повторяем шаги 2-3 для другой случайно выбранной ячейки.

Шаг 5: Множество шагов Монте-Карло

Повторяем шаги 2-4 для всех узлов решетки в одном "циклоне" (называемом одним шагом Монте-Карло). Обычно выполняется несколько тысяч шагов Монте-Карло для обеспечения достаточной статистической выборки.

Шаг 7: Усреднение по времени

Для получения статистически значимых результатов усредняем измеренные значения энергии и намагниченности по множеству шагов, чтобы определить средние характеристики системы при данной температуре.

Шаг 2: Формула для теплоёмкости

Теплоёмкость C при постоянном объёме в статистической физике можно вычислить через флуктуации энергии в каноническом ансамбле с помощью следующей формулы:

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}$$

Где:

- $\langle E^2 \rangle$ — среднее значение квадрата энергии,
- $\langle E \rangle$ — среднее значение энергии,
- k_B — постоянная Больцмана.

Шаг 3: Выполнение симуляции

1. **Запуск симуляции:** Запустите алгоритм Метрополиса на некоторое количество шагов для каждой температуры T , чтобы позволить системе достичь равновесия. Осуществите несколько шагов Монте-Карло, чтобы собрать статистику.
2. **Измерение энергии:** После того как система достигла равновесия, на каждом шаге вычисляйте полную энергию системы E и собирайте статистические данные: $\langle E \rangle$ и $\langle E^2 \rangle$.
3. **Вычисление теплоёмкости:** После завершения симуляции используйте собранные данные для вычисления теплоёмкости по формуле выше.