ЧЕТВЕРТОЕ ЗАДАНИЕ

Автор: Маллаев Руслан

4

		От:	16 мая 2022 г.
Содержание			
1	Сравнение метода Симпсона с методом Монте-Карло		2
2	Зависимость среднего спина и энергии на спин в модели Изинга		2
3	Визуализация системы		4

4 Изменение инициализации системы

1 Сравнение метода Симпсона с методом Монте-Карло

В четвертом знаке интегрирование методо Симпсона сходится при разбиении >500 . Интегрирование же методом Монте-Карло у меня так и не сошлось(делал 100000 итераций).

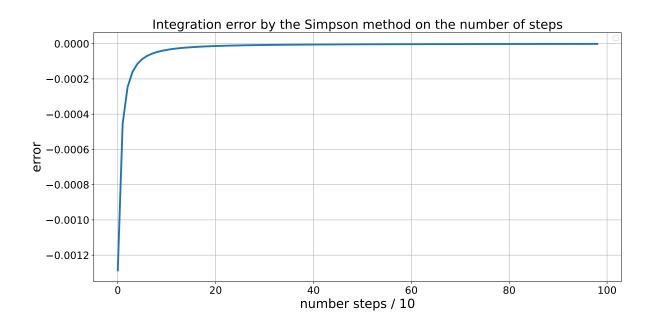


Рис. 1: Зависимость ошибки интегрирования от количества шагов интегрирования в методе Симпсона

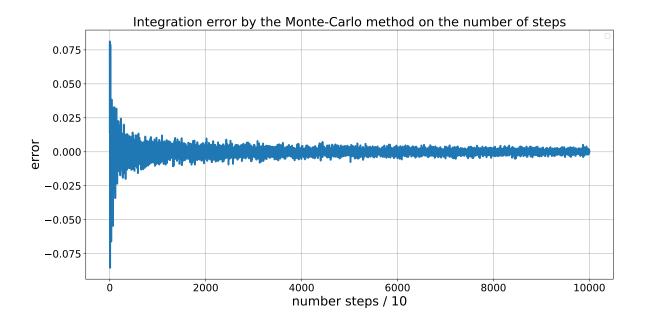


Рис. 2: Зависимость ошибки интегрирования от количества шагов интегрирования в методе Монте-Карло

2 Зависимость среднего спина и энергии на спин в модели Изинга

При помощи метода Монте-Карло была получена зависимость значений среднего спина и энергии на спин от температуры в модели Изинга.

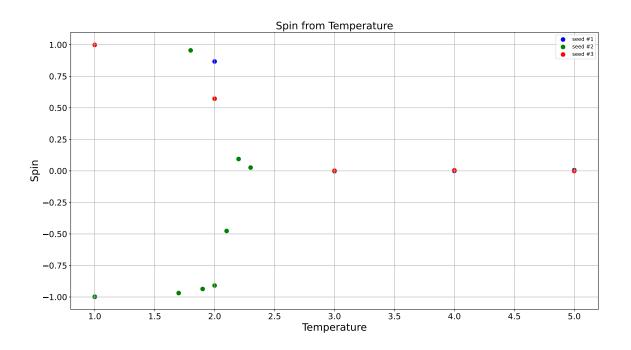


Рис. 3: Зависимость среднего спина от температуры

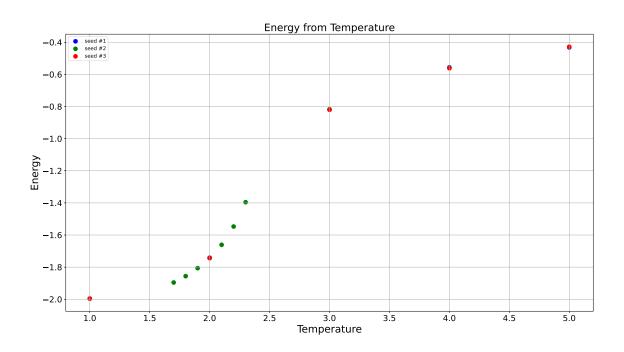


Рис. 4: Зависимость энергии на спин от температуры

По графикам видно, что при температуре 2 спины начинают разворачиваться туда-сюда и ситуация неустойчивая. Думаю, это обусловленно фазовым переходом второго рода (Видим, что энергия при этой температуре все еще меняется плавно).

3 Визуализация системы

Доработал код, чтобы он выводил данные в формате значение.cпина координата.в.массиве.1 координата.в.массиве.2 0. Это формат хуz для ovito, где в первой колонке находится Molecule ID. Далее строим градиент по этому параметру и получаем такую картину:

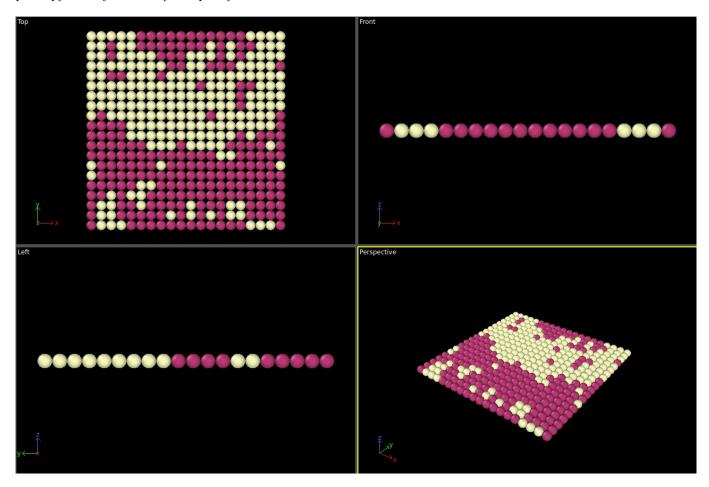


Рис. 5: Визуализация модели Изинга

4 Изменение инициализации системы

Изначально в коде значчения спинов в начальный момент задаются рандомно. Это соответсвует большой температуре. Нас просили реализовать инициализацию, в которой половина спинов отрицательные, а остальная половина положительные. Повторил запуски и могу заметить, что "размораживание системы"началось чуть раньше, а при температурах немного более 2 получается что то типа двух доменов. Но, в целом, ситуация не особо изменилась. Анимации будут показаны на сдаче.