

Velmi hrubá specifikace možného zápočtového programu - Isingův model (Jakub Nierostek)

Isingův model slouží k simulaci chování magnetických látek. V reálném světě kovové materiály obsahují magnetické domény. Ty mohou být buď uspořádané, nebo neuspořádané. Pokud jsou uspořádané, vykazuje látka magnetické vlastnosti, pokud ne tak daný materiál magnetický není. Isingův model simuluje chování domén v takovémto materiálu. Domény a jejich orientaci v Isingově modelu simulujeme hodnotami +1 a -1 (spiny), umístěnými v matici (říkáme také mřížce). Převaha jednoho druhu spinů značí, že má simulovaná mřížka magnetické vlastnosti.

Popis Algoritmu

1. Vytvoříme čtvercovou matici $A(n \times n)$. Prvky matice (dále jen spiny) jsou pouze hodnoty +1 nebo -1 a symbolizují orientaci spinu v magnetu. Každý spin je generován náhodným procesem, pravděpodobnost každé varianty je 50%. Příklad:

$$A_{n,n} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

2. Spočteme celkovou energii mřížky. Energie konkrétního spinu σ_i je $E(\sigma_i) = -konstanta * \sum_j \sigma_i * \sigma_j$, kde σ_j je velikost sousedního spinu. Sousední spiny pro σ_i jsou spiny, které jsou o jeden spin v pravo/levo/nahore/dole od σ_i . Celková energie mřížky je pak: $E = \sum_i E(\sigma_i)$, kde i jsou jednotlivé spiny v mřížce.
3. Nyní n krát skusíme změnit náhodný spin: Spočteme počáteční E mřížky (E_{poc}), převrátíme náhodný spin (jeho hodnotu vynásobíme -1) a spočteme novou E mřížky (E_{nova}). Dojde-li ke snížení energie, změnu vždy přijmeme, jinak ji přijmeme s pravděpodobností $p : \exp^{-\Delta E/T} > \text{random.random}()$. Tento vzorec vyplývá ze statistické termodynamiky a zaručuje správné chování mřížky. T je teplota, jde o konstantu pro danou simulaci. Po každém takovémto kroku si uložíme hodnotu (E_{nova}).
4. Spočítáme ($E_{prumerna}$) pro simulaci při dané teplotě z uložených hodnot (E_{nova}). Kroky 1 až 3 provedeme pro velké množství různých teplot T_i .
5. Vyneseme graf závislosti $E_{prumerna} = E_{prumerna}(T_i)$. Dostaneme poměrně dobrou aproximaci chování energie magnetických látek, jako fce. teploty. To, že jsme získali rozumný výsledek lze ověřit porovnáním s publikovanými grafy na internetu.

Podobným algoritmem lze zkoumat nejenom energii, ale i například celkovou magnetizaci ($M = \sum_i \sigma_i$), nebo tepelnou kapacitu ($C = dE/dT$).

Na vstupu jsou tedy parametry simulace, jako rozsah teplot, velikost mřížky, kolikrát zkusíme změnit spin. Výstupem jsou grafy měřených veličin jako funkce teploty, případně i zajímavé naměřené hodnoty. Jelikož může simulace běžet i řádově v hodinách, je součástí práce na programu snaha počítat a měřit veličiny co nejefektivněji.