

Dokumentace k zápočtovému programu - Isingův model

JAKUB NIEROSTEK

1. ÚVOD

Isingův model je matematický model sloužící k simulaci chování magnetických látek, vyřešený v roce 1925 Ernstem Isingem. Magnetické vlastnosti látek lze vysvětlit pomocí představy, že se každá částice látky chová jako miniaturní magnet. Pokud jsou tyto minimagnety uspořádány souhlasně, vykazuje látka magnetické vlastnosti. Pokud nejsou, tak se magnetická pole okolních částic vyruší a látka magnetické vlastnosti mít nebude. Isingův model se snaží simulovat chování jednotlivých minimagnetů obsažených v látce. Jejich prostorovou orientaci zjednodušeně reprezentujeme pouze hodnotami $+1$ a -1 (spiny), umístěnými v matici (říkáme také mřížce). Převaha jednoho druhu spinů značí, že má simulovaná mřížka magnetické vlastnosti. Vývoj systému v čase je diskutovaný v následujícím oddíle.

2. POPIS TŘÍDY MŘÍŽKA

Program obsahuje jedinou třídu s názvem `mrizka`. Některé její metody si popíšeme:

- I. `__init__(self)`: Vytváří 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:

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

- II. `energie(self, x, y)`: Vrací energii konkrétního spinu σ_i : $E(\sigma_i) = -J \sum_j \sigma_i \sigma_j$, kde σ_j je velikost sousedního spinu a J je nejčastěji jednotková konstanta. Sousední spiny pro σ_i jsou spiny, které jsou o jeden spin vpravo/vlevo/nahore/dole od σ_i . Seznam sousedních spinů nám vrací metoda `sousedne(self, x, y)`. Celková energie mřížky je pak: $E = \sum_i E(\sigma_i)$, kde i jsou jednotlivé spiny v mřížce.
- III. `MC(self, beta)`: Provádí samotnou simulaci, β je převrácená hodnota termodynamické teploty: $\beta = 1/T$. N krát zkusíme 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}). Spočítáme ($E_{prumerna}$) pro simulaci při dané teplotě z uložených hodnot (E_{nova}). Tento postup provedeme pro velké množství různých teplot T_i , abychom pak mohli vynášet závislosti různých veličin na teplotě.
- IV. `mereni_magnetizace(self, beta)`: Pracuje téměř stejně jako `MC(self, beta)`, avšak pro každý krok algoritmu počítá i celkovou magnetizaci mřížky: $M = \sum_i \sigma_i$. Výstupem je graf změny magnetizace v závislosti na průběhu simulace.
- V. `statistika(self, E, pocetkroku)`: Tuto funkci si volá `MC(self, beta)` pro spočtení chyby měření. Počítání chyby je problematické v tom, že stav mřížky v kroku k_{n+1} je závislý na stavu k_n , který je zase závislý na stavu k_{n-1} atd. . . Pokud jsou na sobě jednotlivé stavy takto závislé, lze chybu spočítat pomocí blokové metody. Nejprve spočteme průměr

a odchylku měření pro jednotlivé vzorky a pak vzorky zblokujeme (tedy zprůměrujeme hodnoty po sobě jdoucích dvojic): $x_1, x_2, x_3, x_4 \dots \rightarrow (x_1 + x_2)/2, (x_3 + x_4)/2, \dots$. Tím získáme $n/2$ nových vzorků, na které znovu aplikujeme stejný postup. To opakujeme, dokud změna chyby po dvou po sobě jdoucích zblokováních nebude téměř nulová. Takto získané chyby zobrazíme ve výsledných grafech.

VI. `graf_E_beta`, `graf_dE_dbeta`: S chybami vynese graf závislosti $E_{prumerna} = E_{prumerna}(T_i)$, respektive $C = dE_{prumerna}/dT_i$, kde C je měrná tepelná kapacita mřížky. To, že jsme získali rozumné výsledky lze ověřit porovnáním s publikovanými výsledky. Např. *Figure 115. a 116.* z článku <http://farside.ph.utexas.edu/teaching/329/lectures/node110.html>. *Figure 115* odpovídá našemu grafu $E_{prumerna} = E_{prumerna}(T_i)$, protože E je přímo úměrná celkové magnetizaci M .

VII. `simulace(self)`: Připravuje seznamy naměřených hodnot pro vynášení grafů a diriguje většinu výše uvedených funkcí tak, aby si správně předávaly výstupy.

3. OVLÁDÁNÍ PROGRAMU, VÝSTUP

Program stačí pouze spustit. Výstupem programu jsou grafy diskutované v sekci 2, jakož i výsledky simulací pro zkoumaný rozsah teplot (energie mřížky, počet přijatých kroků a chyba měření). Pro defaultně nastavené parametry simulace běží program na běžném notebooku pár minut. V sekci programu konstanty a parametry simulace je možné měnit jejich hodnotu, ale pro příliš vysoký počet kroků běží simulace opravdu dlouho.

4. VÝSLEDKY

Z grafu generovaného metodou `graf_E_beta` jde vidět, že s klesající teplotou simulace klesá energie mřížky, a proto i její celková magnetizace. Z grafu tepelné kapacity jde vyčíst, že nejvyšší hodnota C nastává při teplotě asi 2,2 K, což je pro 2D mřížku takzvaná *kritická teplota*. Při této teplotě také často dochází ke změně orientace magnetického pole mřížky, jak jde vidět z grafu změny magnetizace (naměřeném při $\beta = 0,45$).