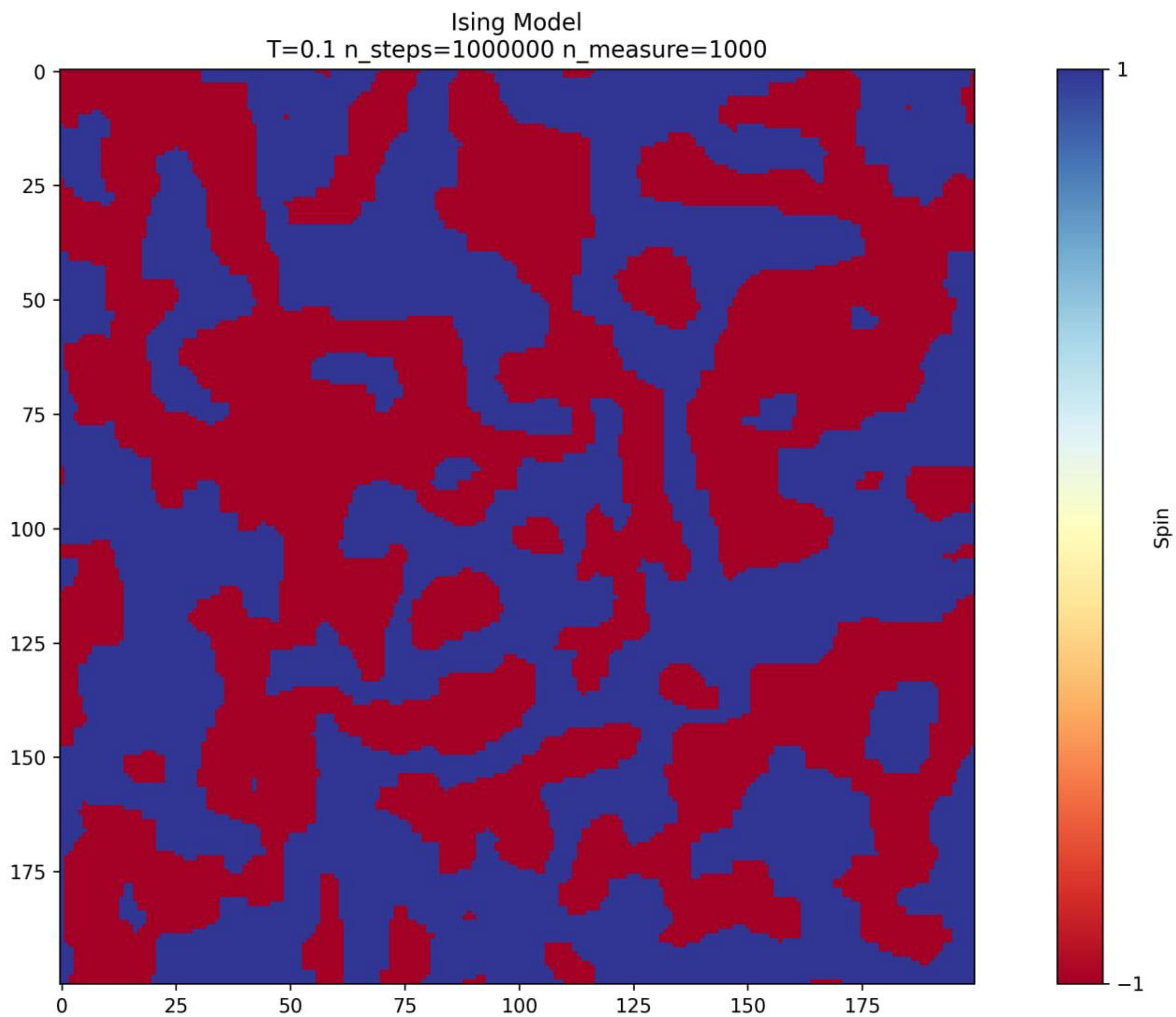
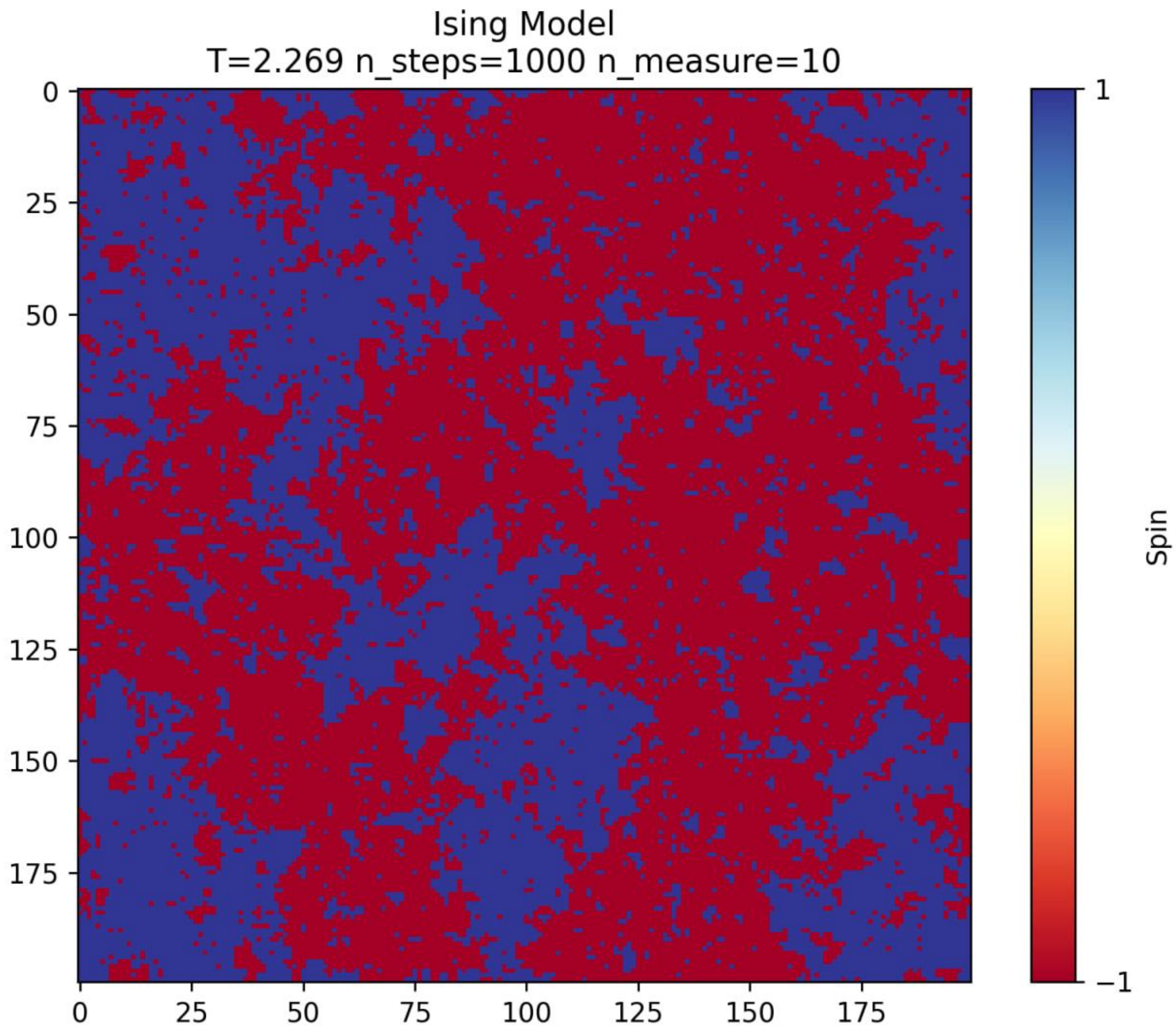
Ising Model

Question1.py -1

برای مدل آیزینگ از اگوریتم قدیمی استفاده شده است. تلاش هایی برای پیاده سازی الگوریتم جدید (بهینه تر) انجام شد ولی به دلیل نویزی بودن نتایج و دیباگ نشدن، تصمیم به پیاده سازی الگوریتم قدیمی شد. برای مشاهده بهتر، تصویر اسپین ها را رسم کرده ایم.



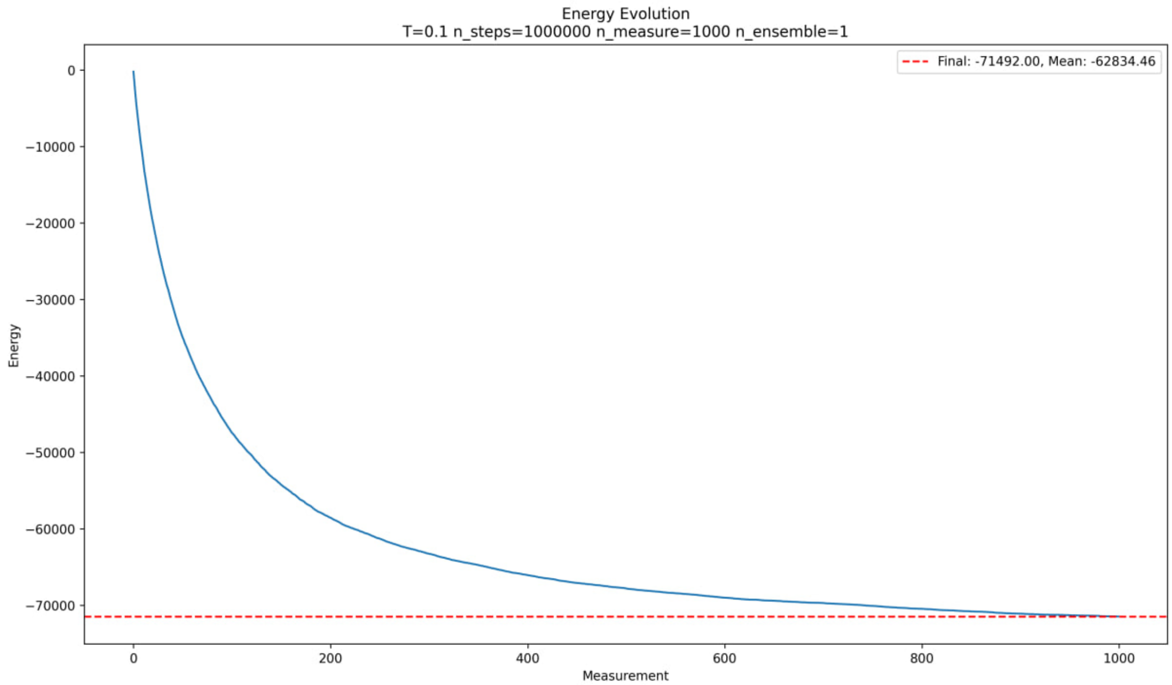
الگوریتم قدیمی



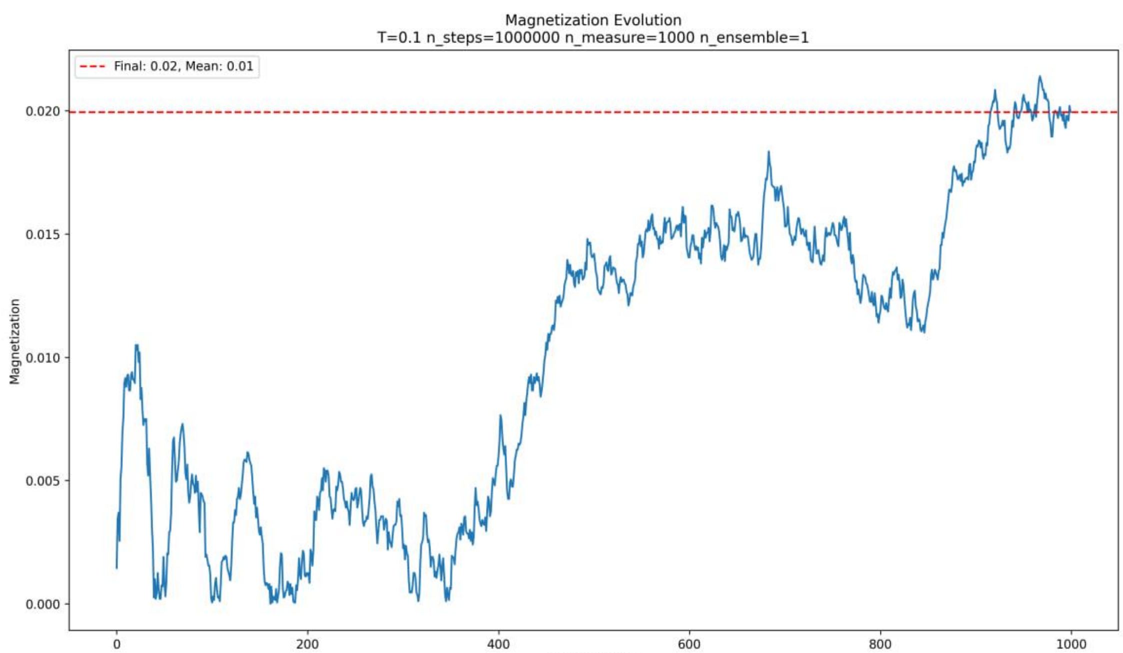
الگوریتم جدید (بهینه تر)

مشاهده می شود که الگوریتم بهینه تر دارای مشکل است و نویز دارد.

برای تایید بیشتر صحت الگوریتم، نمودار های انرژی کل و مغناطش کل برحسب اندازه گیری ها رسم شده است. **باید توجه داشت که در این نمودارها سیستم به پایداری کامل نرسیده است.**



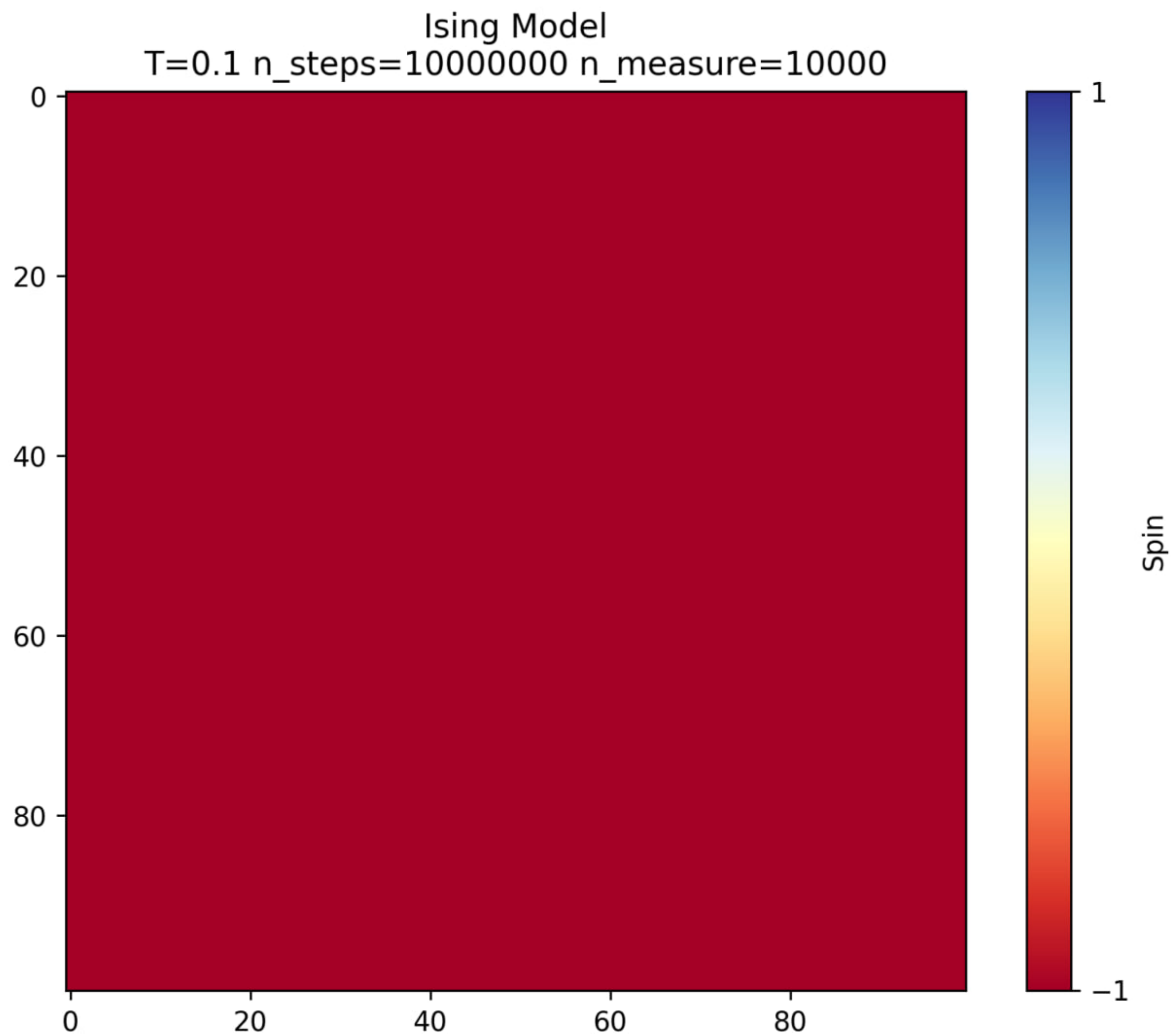
طبق انتظار انرژی به صورت یکنواخت پایین می آید.

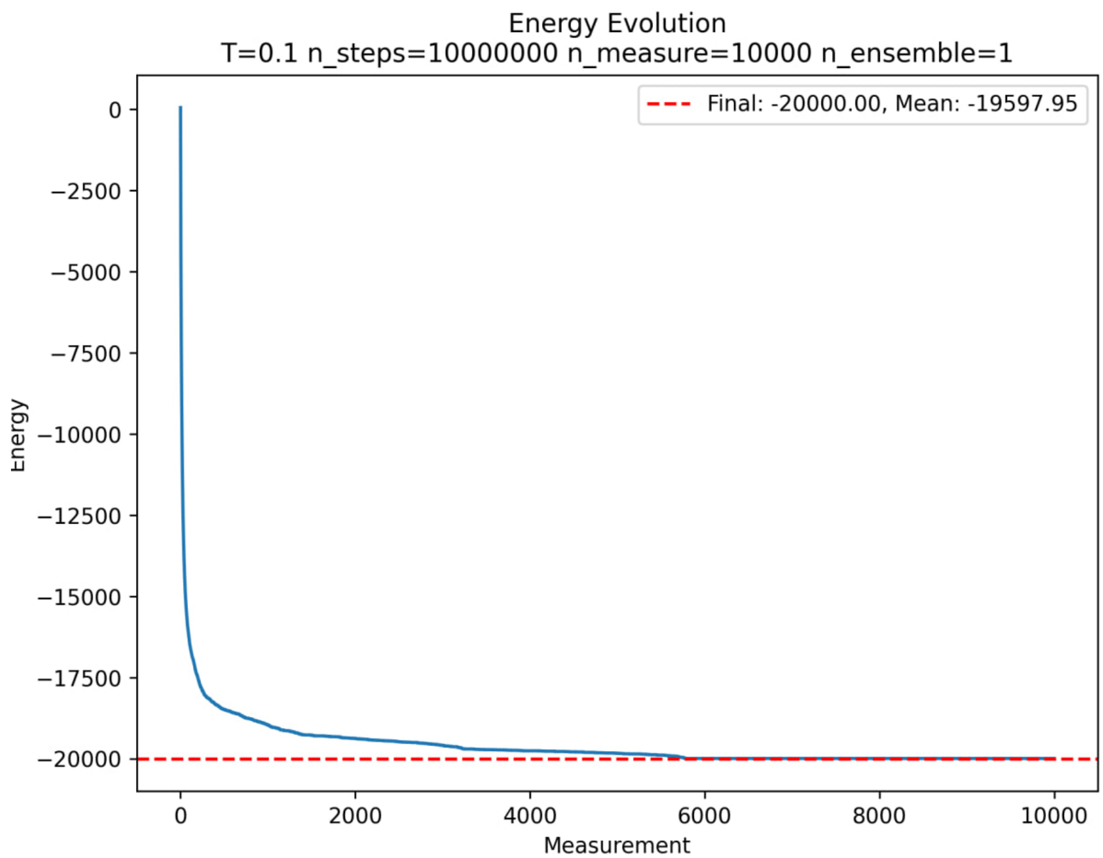


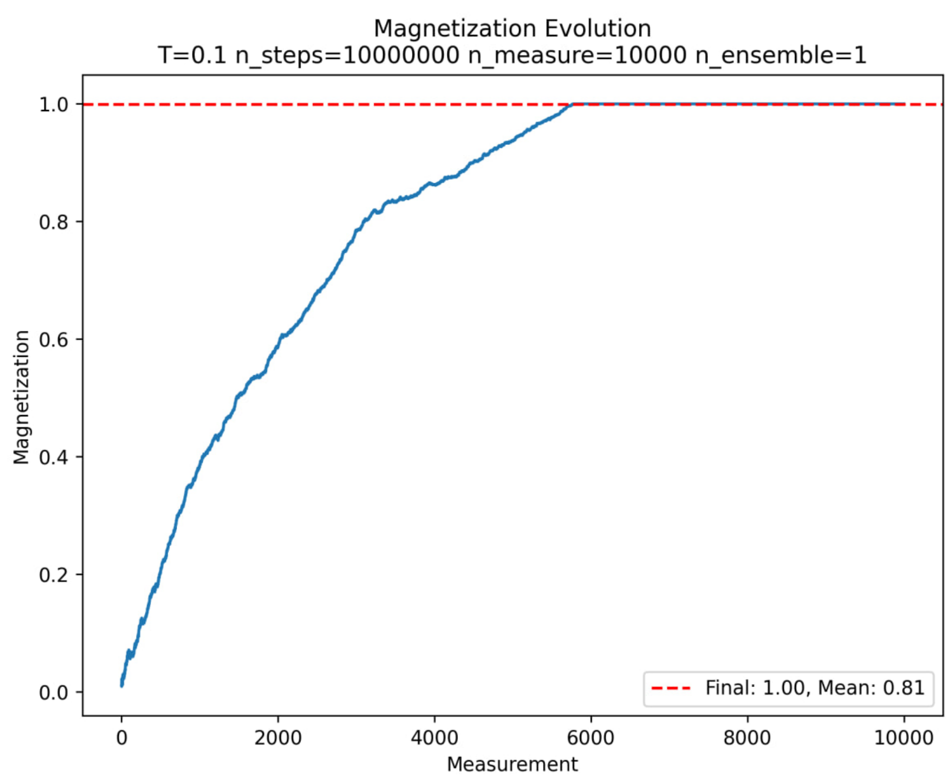
چون سیستم به پایداری نرسیده است، مغناطش هنوز ثابت نشده است.

در ادامه سیستم هایی که به پایداری رسیده اند را بررسی می کنیم.

سیستم پایدار در دمای کم:

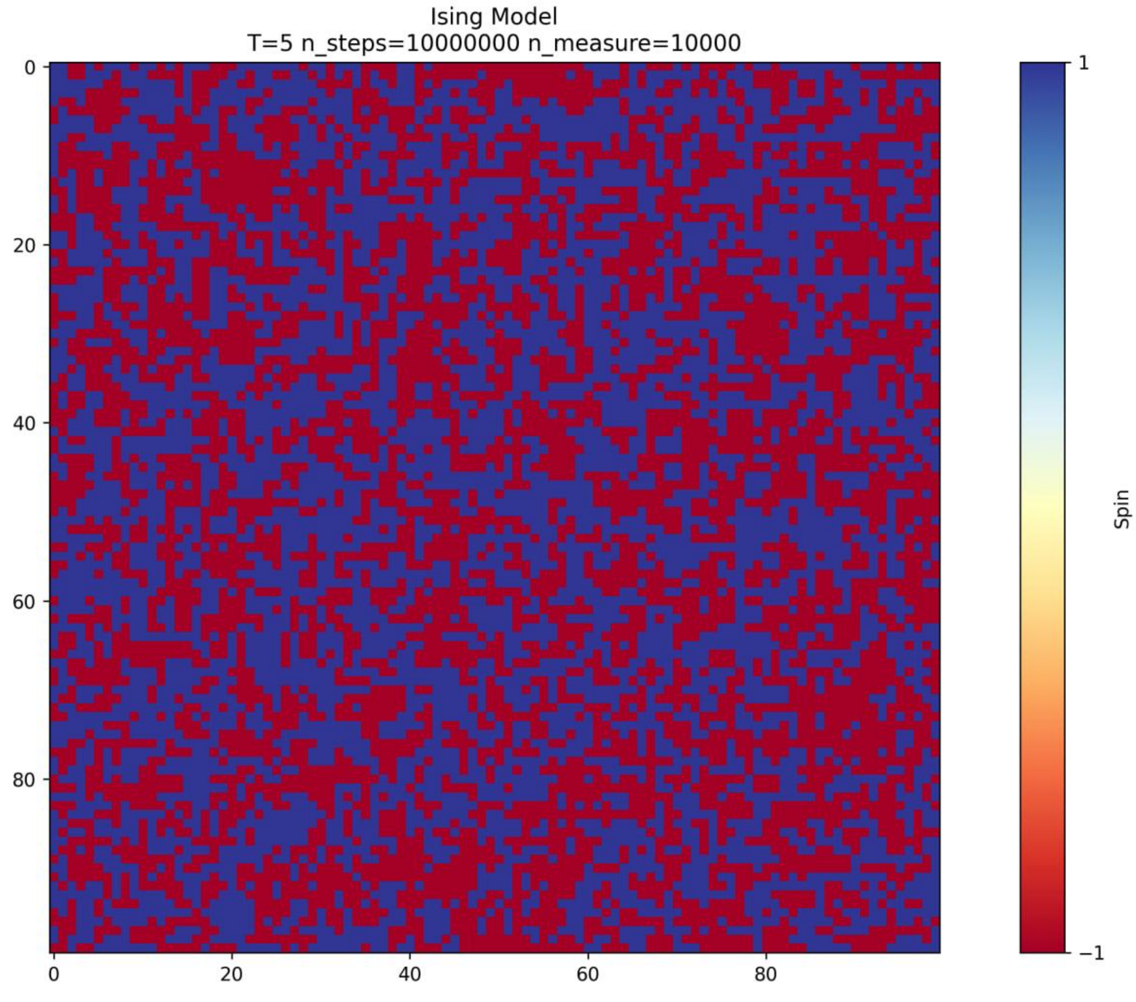


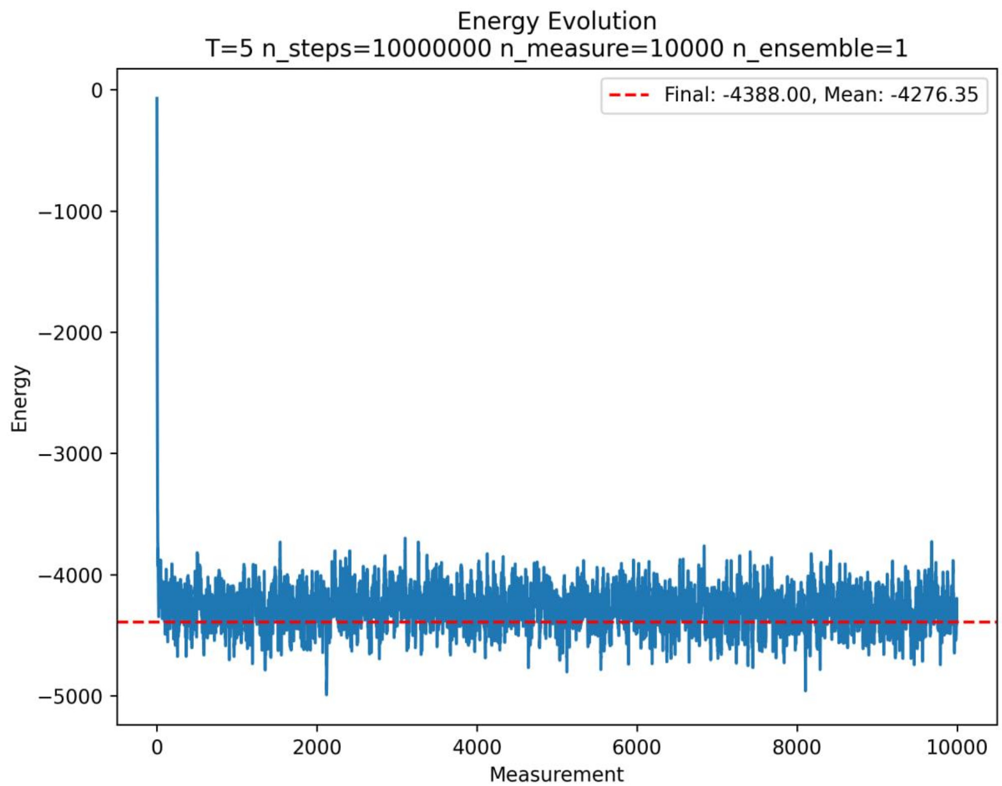

Energy Evolution
T=0.1 n_steps=10000000 n_measure=10000 n_ensemble=1
Final: -20000.00, Mean: -19597.95
Energy
Measurement
0
−2500
−5000
−7500
−10000
−12500
−15000
−17500
−20000
0
2000
4000
6000
8000
10000


Magnetization Evolution
T=0.1 n_steps=10000000 n_measure=10000 n_ensemble=1
Final: 1.00, Mean: 0.81
Magnetization
Measurement
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0
2000
4000
6000
8000
10000

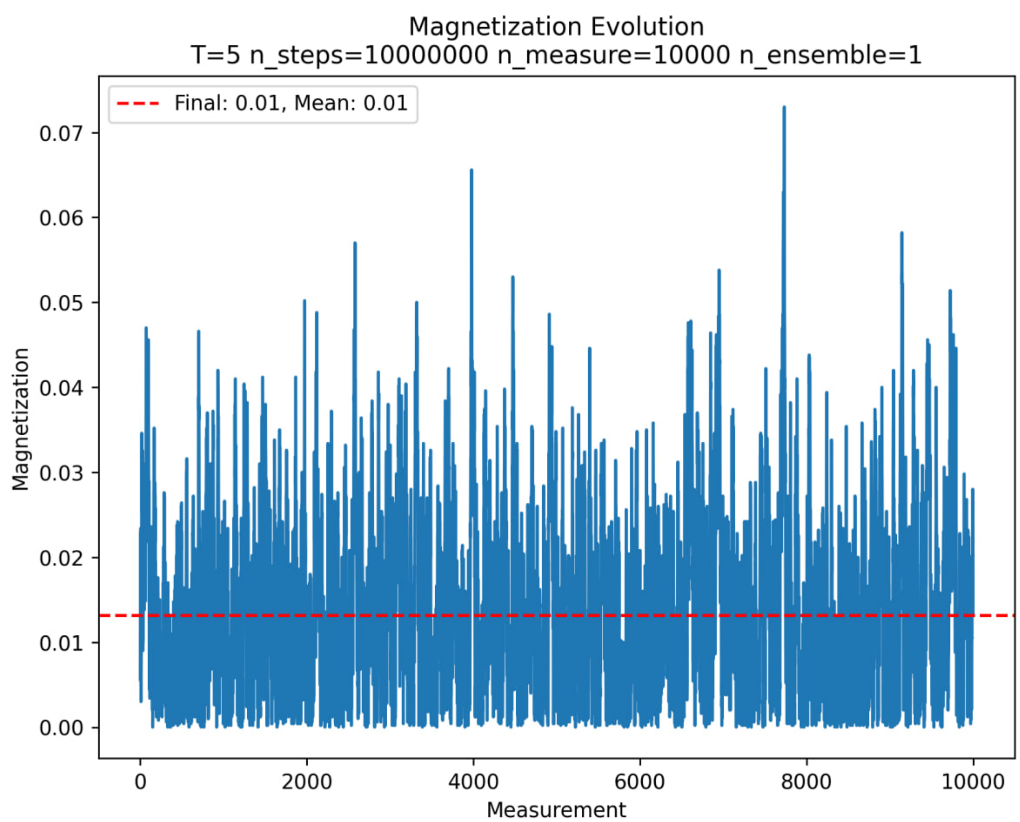
طبق انتظار همه اسپین ها در یک جهت شده اند و مغناطش 1 شده است.

سیستم پایدار در دمای بالا:





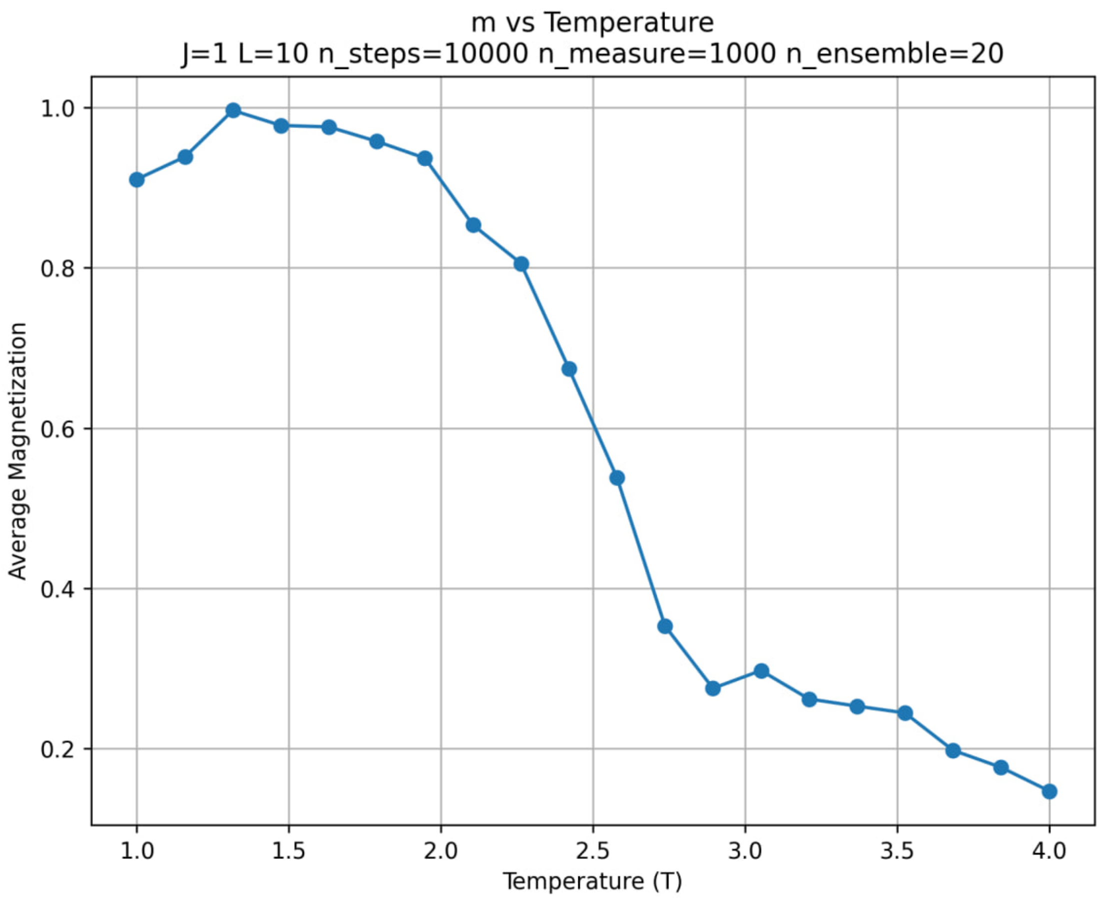
Energy Evolution
T=5 n_steps=10000000 n_measure=10000 n_ensemble=1
Final: -4388.00, Mean: -4276.35
0
−1000
−2000
−3000
−4000
−5000
Energy
0
2000
4000
6000
8000
10000
Measurement



Magnetization Evolution
T=5 n_steps=10000000 n_measure=10000 n_ensemble=1
Final: 0.01, Mean: 0.01
0.07
0.06
0.05
0.04
0.03
0.02
0.01
0.00
Magnetization
0
2000
4000
6000
8000
10000
Measurement

طبق انتظار مغناطش سیستم صفر شده است. بهتر بود برای کم کردن نواسانات نمودار آنسامبل گیری می کردیم ولی به دلیل طولانی بودن زمان اجرا این کار مقدور نبود.

حال برای مشاهده رفتار تغییر فاز نمودار مغناطش برحسب دما را رسم می کنیم.



تغییر فاز در دمای نزدیک 2.5 قابل مشاهده است.

2- رابطه پذیرفتاری مغناطیسی

Subject :

Year : Month : Date :

$$\langle m\rangle = \frac{1}{Z}\sum_i m_i e^{-\beta E_i} = \frac{1}{Z}\sum_i m_i e^{-\beta E_i^0 + \beta H m_i} \quad \mathrm{I}$$

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} = \sum_i e^{-\beta E_i^0 + \beta H m_i} \quad \mathrm{II}$$

$$\chi = \frac{\partial \langle m\rangle}{\partial H} \quad \mathrm{III}$$

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial H} = \frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial H} \overset{\mathrm{II}}{=} \frac{1}{Z}\sum_i \beta m_i e^{-\beta E_i^0 + \beta H m_i}$$

$$\overset{\mathrm{I}}{=} \beta\langle m\rangle \quad \mathrm{IV}$$

$$\Longrightarrow \langle m\rangle = \frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln Z}{\partial H}$$

$$\mathrm{III} \rightarrow \chi = \frac{1}{\beta}\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial H^2} \quad \mathrm{V}$$

$$\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial H^2} = \frac{\partial}{\partial H}\left(\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial H}\right)$$

$$= \frac{-1}{Z^2}\left(\frac{\partial Z}{\partial H}\right)^2 + \frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial H^2}$$

$$\overset{\mathrm{IV}}{=} -\beta^2\langle m\rangle^2 + \frac{1}{Z}\sum \beta^2 m_i^2 e^{-\beta E_i^0 + \beta H m_i}$$

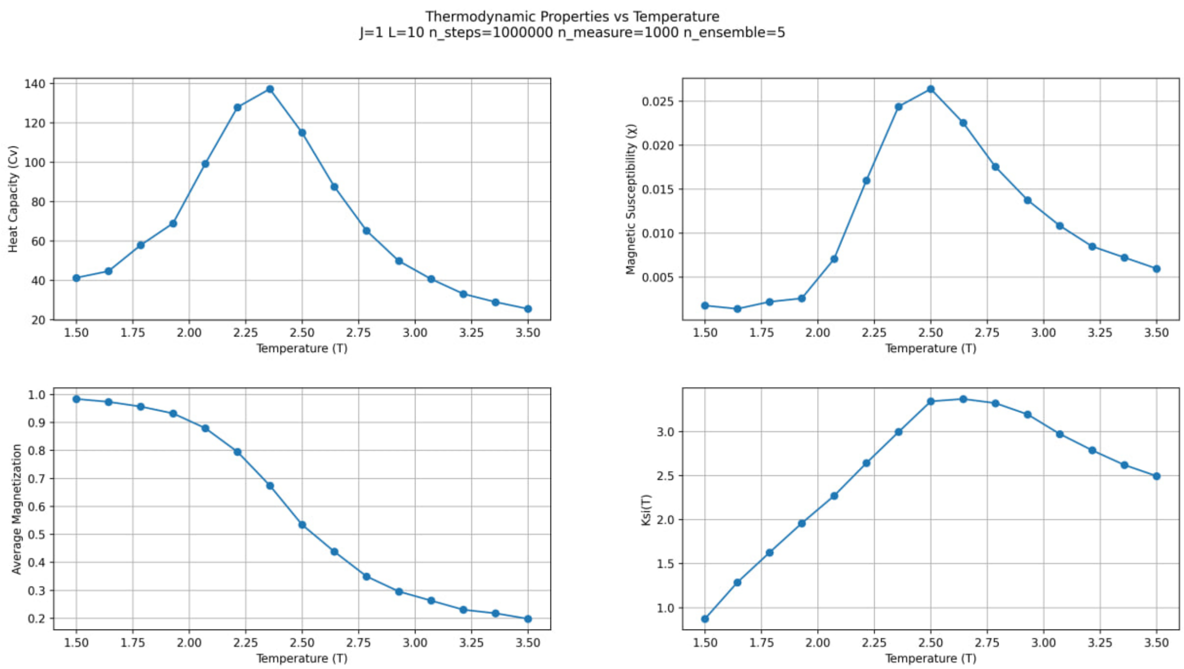
$$= \underbrace{-\beta^2\langle m\rangle^2 + \beta^2\langle m^2\rangle}_{} = \beta^2\sigma_m^2$$

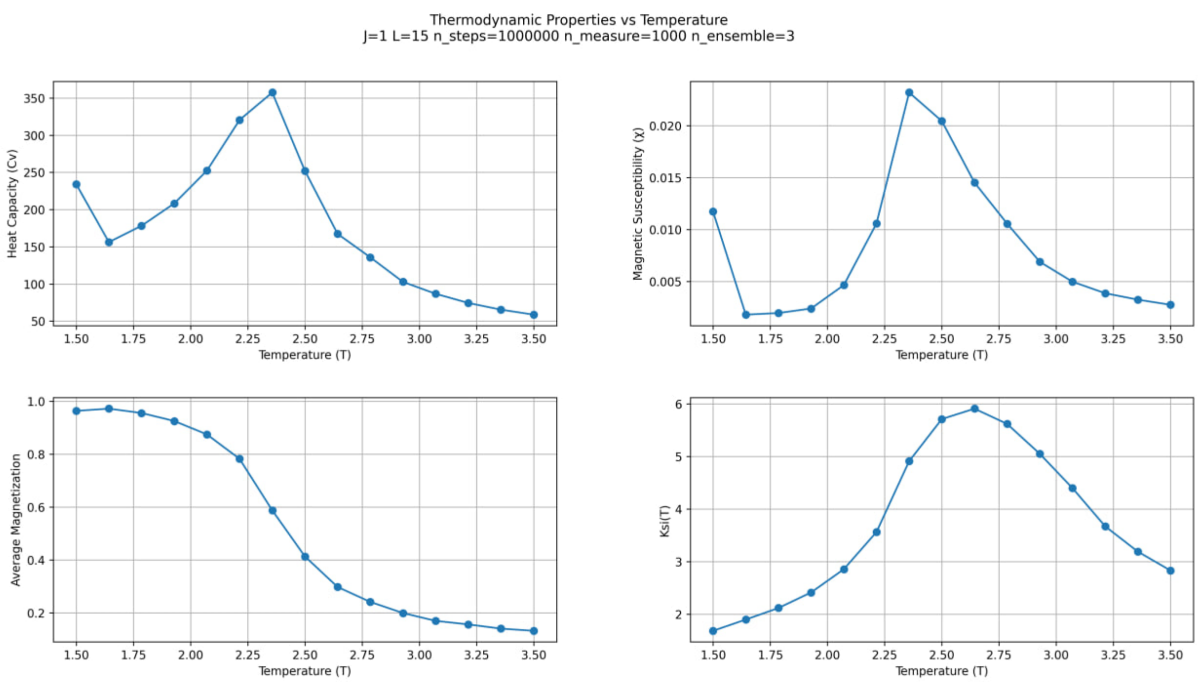
$$\mathrm{V} \rightarrow \boxed{\chi = \beta\sigma_m^2 = \frac{\sigma_m^2}{k_B T}}$$

Question3.py -3

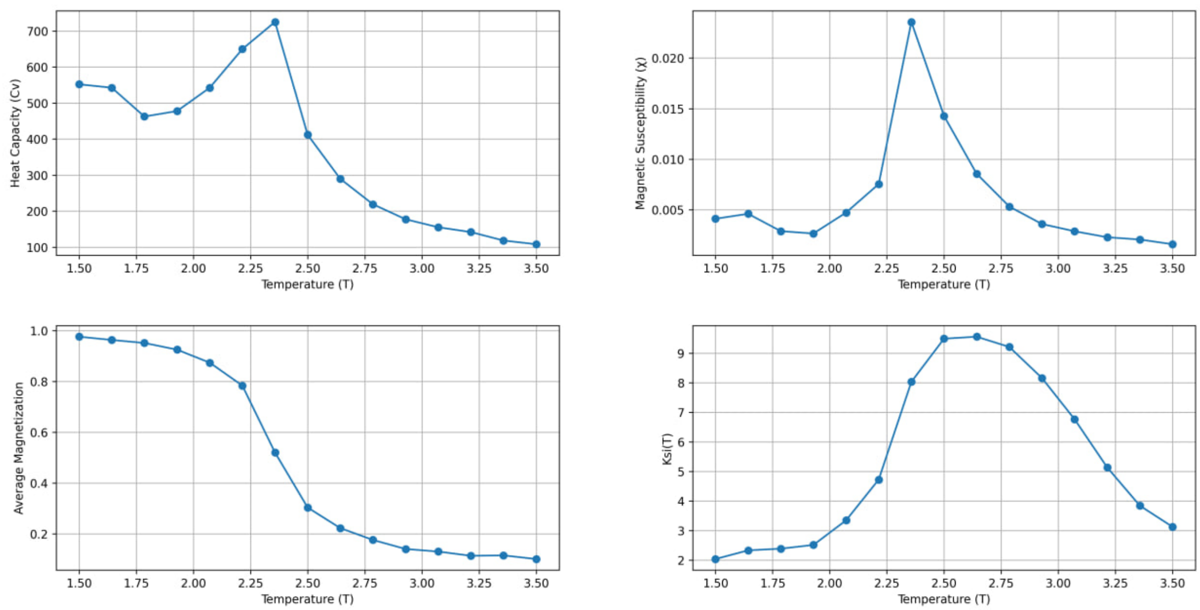
تنها نتکه قابل توجه در کد این است که هنگامی که همه اسپین ها یکسان هستند واریانس صفر است، پس باید برای جلوگیری از مخرج صفر همبستگی را برابر یک قرار داد.

رفتار کمیت ها برحسب دما برای طول های مختلف رسم شده است.

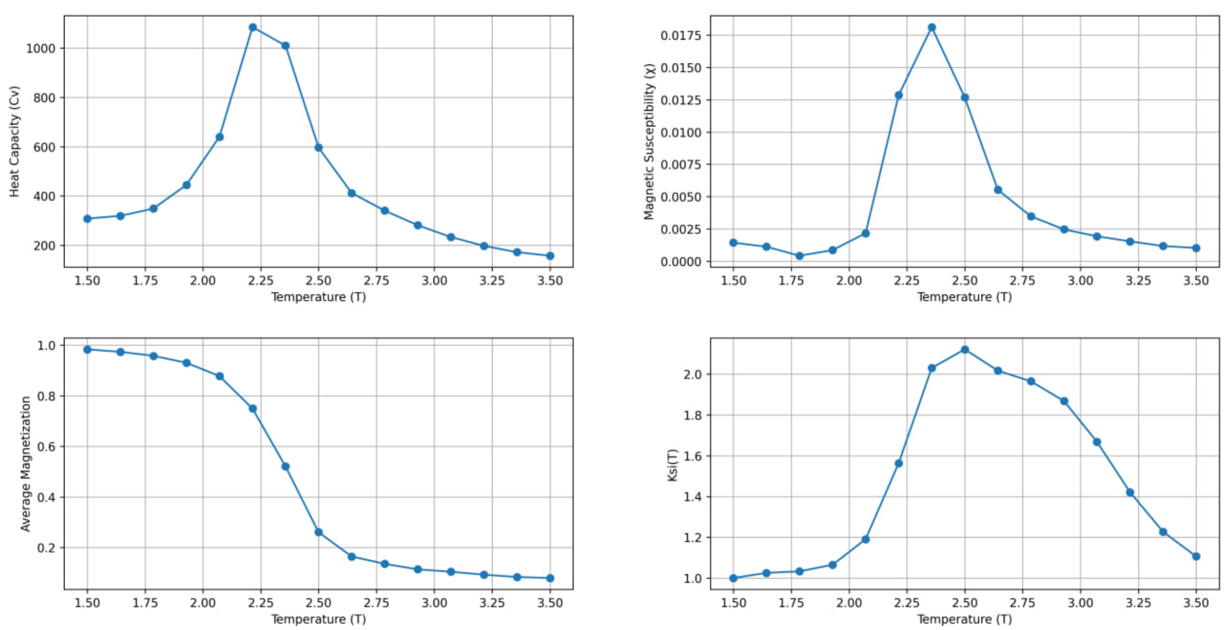


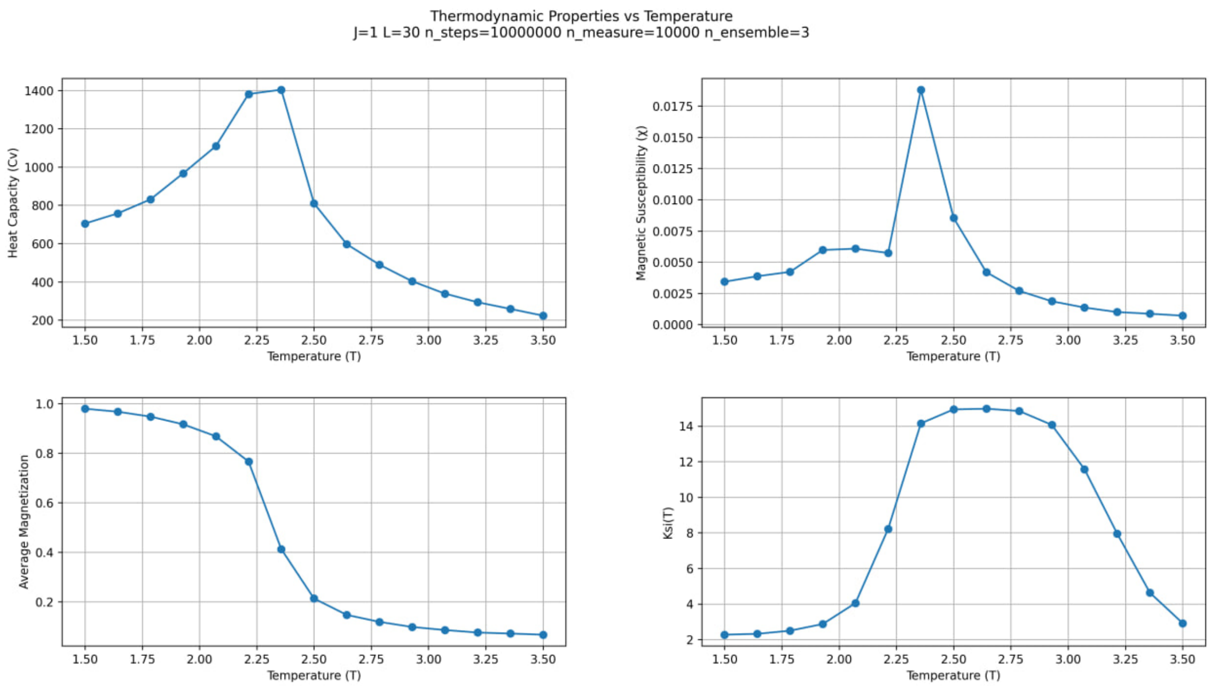


Thermodynamic Properties vs Temperature
J=1 L=20 n_steps=1000000 n_measure=1000 n_ensemble=3



Thermodynamic Properties vs Temperature
J=1 L=25 n_steps=10000000 n_measure=10000 n_ensemble=1





رفتار تغییر فاز کاملا برای هر چهار پارامتر مشهود است. بجز مغناطش پارامترهای دیگر در نزدیکی نقطه تغییر فاز به سمت بینهایت میل می کنند.

مقدار بیشینه C_v, ξ با افزایش طول، بیشتر می شود.
ولی مقدار بیشینه χ با افزایش طول، کمتر می شود.

حال می خواهیم نما های بحرانی را حاسبه کنیم.
ابتدا دمای بحرانی بیهنهایت را از حل تحلیلی محاسبه می کنیم.

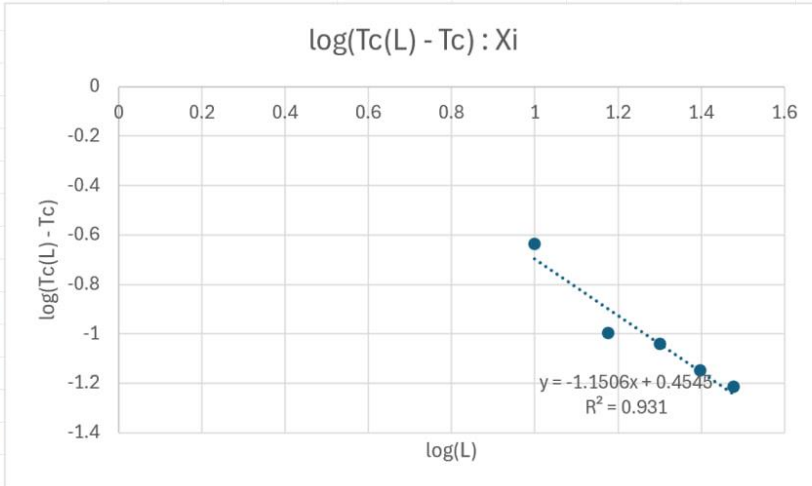
$$\frac{J}{k_B T_c} = \frac{1}{2}\ln\left(1+\sqrt{2}\right) \quad , \quad J = 1 \quad , \quad k_B = 1$$

$$T_c = 2.269$$

حال مقدار دما های بحرانی شبیه سازی را در اکسل وارد کرده و نمودار لگاریتمی اختلاف دمای بحرانی بینهایت وطول محدود را رسم می کنیم. شیب این نمودارها نماهای بحرانی را می دهند. باید توجه داشت که دمای بحرانی بینهایت و طول محدود جابجا هستند و باید شیب را در یک منفی ضرب کرد.

: χ

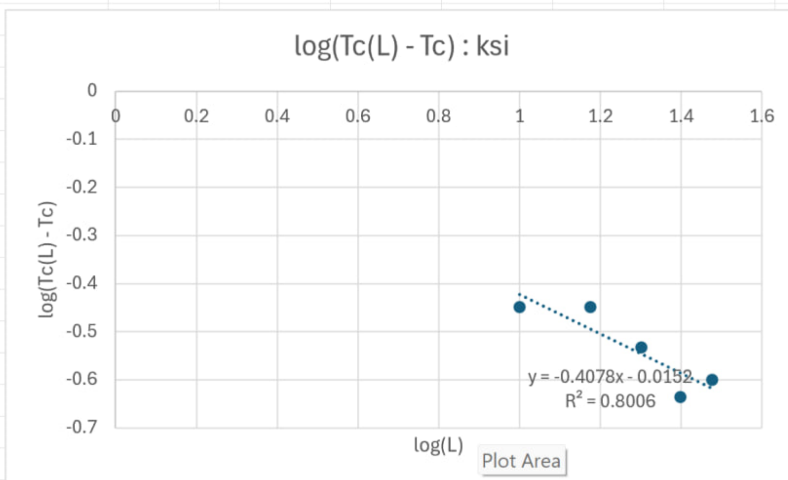
Xi		Tc = 2.269
L	Tc(L)	Tc(L) - Tc
10	2.5	0.231
15	2.37	0.101
20	2.36	0.091
25	2.34	0.071
30	2.33	0.061
	log(L)	log(Tc(L) - Tc)
	1	-0.63638802
	1.176091	-0.995678626
	1.30103	-1.040958608
	1.39794	-1.148741651
	1.477121	-1.214670165



$$\gamma = 1.15$$

: ξ

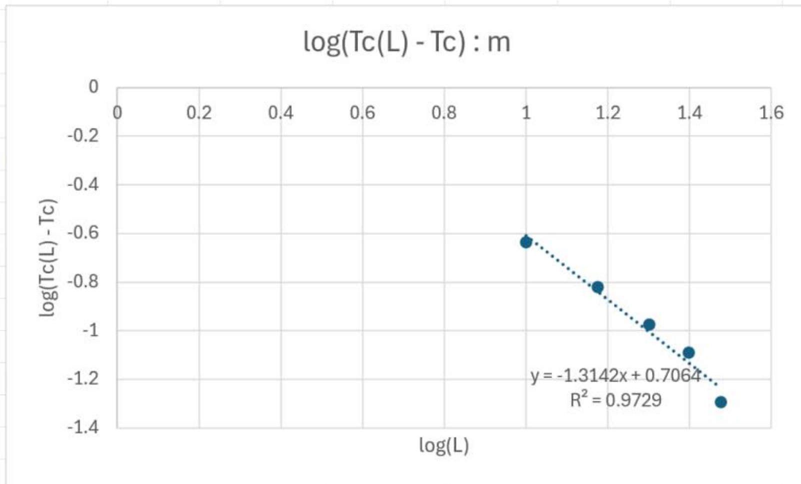
37	ksi		Tc = 2.269
38	L	Tc(L)	Tc(L) - Tc
39	10	2.625	0.356
40	15	2.625	0.356
41	20	2.5625	0.2935
42	25	2.5	0.231
43	30	2.52	0.251
44			
45		log(L)	log(Tc(L) - Tc)
46		1	-0.448550002
47		1.176091	-0.448550002
48		1.30103	-0.532391894
49		1.39794	-0.63638802
50		1.477121	-0.600326279
51			
52			



$$\nu = 0.41$$

:m

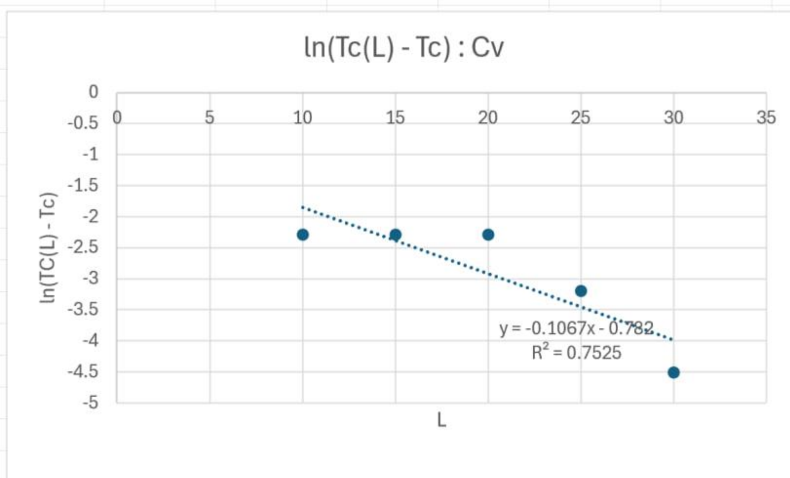
m		Tc = 2.269
L	Tc(L)	Tc(L) - Tc
10	2.5	0.231
15	2.42	0.151
20	2.375	0.106
25	2.35	0.081
30	2.32	0.051
	log(L)	log(Tc(L) - Tc)
	1	-0.63638802
	1.176091	-0.821023053
	1.30103	-0.974694135
	1.39794	-1.091514981
	1.477121	-1.292429824



$$\beta = 1.31$$

:Cv

Cv		Tc = 2.269
L	Tc(L)	Tc(L) - Tc
10	2.37	0.101
15	2.37	0.101
20	2.37	0.101
25	2.31	0.041
30	2.28	0.011
	L	ln(Tc(L) - Tc)
	10	-2.292634762
	15	-2.292634762
	20	-2.292634762
	25	-3.194183212
	30	-4.509860006



چون تابعیت لگاریتمی دارد، نمودار نیم لگ رسم شده است.

$$C_0 = 0.11$$