

Vysoká škola chemicko-technologická, Praha
Fakulta chemického inženýrství
Ústav fyzikální chemie (403)

Isingův model ve 3D

P02-ISING

Jakub Vencel
Semestrální práce
Počítačová chemie (B403011)



Praha 2026
vedoucí práce: prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.

Obsah

1	Zadání	2
2	Úvod	2
2.1	Isingův model	2
2.2	Monte Carlo	2
2.2.1	Typy algoritmů	3
3	Program	3
3.1	Simulace	3
3.2	Grafické uživatelské rozhraní	4
4	Výsledky	4
4.1	Konstantní teplota	5
4.2	Zahřívání	5
4.3	Ochlazování	5
4.4	Tepelný cyklus	6
4.5	Antiferomagnet	6
4.6	Hystereze – vliv počátečních podmínek na průběh simulace	6
4.7	Vliv velikosti mřížky na průběh simulace	7
5	Závěr	7
A	Pseudokód MC	9

1 Zadání

Dostupné z <https://github.com/mhkoscience/pchem/blob/main/projekty/P02-ISING/README.yaml>.

2 Úvod

2.1 Isingův model

Předpokládejme kubickou mřížku \mathbb{Z}^3 o velikosti $L \times L \times L$. V takové mřížce se nachází $N = L^3$ prvků, které mají spin $\sigma = \{-1; +1\}$ [1]. Pro tuto mřížku můžeme definovat Hamiltonián $H(\sigma)$ (platí pro případ, kdy je nulové vnější magnetické pole)

$$H(\sigma) = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i \sigma_j), \quad (1)$$

kde J je interakční energie, která nabývá hodnot $J > 0$ pro feromagnety a $J < 0$ pro antifermagnety.

Pro feromagnetické látky musí platit, že konfigurace spinů je taková, aby vznikl nenulový magnetický moment M , který lze vypočítat jako součet všech spinů v mřížce

$$M(\sigma) = \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (2)$$

Obdobně lze vypočítat energii spinové konfigurace mřížky E [2]

$$e_i = -\frac{J}{2} \sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i \sigma_j), \quad (3)$$

$$E(\sigma) = \sum_{i=1}^N e_i. \quad (4)$$

Spiny v mřížce mají uspořádání podle Boltzmannova rozdělení dané partiční funkcí

$$p(\sigma|T) = \exp\left(-\frac{E(\sigma)}{\mathbf{k}_B T}\right), \quad (5)$$

kde \mathbf{k}_B je Boltzmannova konstanta a T je teplota [3]. Do kritické teploty T_c (někdy zvané i jako Curieova teplota) jsou spiny v dostatečném uspořádání, aby magnetický moment $M(\sigma)$ měl nenulovou hodnotu. Při teplotě T_c dochází k fázové přeměně druhého druhu a v teplotách $T > T_c$ se moment ztrácí [4]. Pro 3D Isingův model byla inverzní kritická teplota numericky vypočtena s výsledkem $\beta_c = 0.2216595 \pm 0.0000026$ [5].

2.2 Monte Carlo

Jelikož neexistuje přijímané analytické řešení Isingova modelu pro 3D mřížku, používá se k simulaci numerická metoda Monte Carlo (MC simulace).

2.2.1 Typy algoritmů

Metropolisův algoritmus je založen na generování náhodného čísla představující pravděpodobnost $p(\sigma_i|T)$ (přepsáno pro stavy a a b $p_{a \rightarrow b}$). Pokud platí $\Delta E(\sigma_i) < 0$, proveď změnu stavu $a \rightarrow b$ s pravděpodobností $p_{a \rightarrow b} = 1$. V opačném případě proveď změnu stavu, pokud vygenerovaná pravděpodobnost je menší partiční funkci $p_{a \rightarrow b} < \exp(-E(\sigma)/\mathbf{k_B}T)$ [2].

Heat Bath algoritmus na rozdíl od Metropolisova algoritmu, který sestává ze tří částí (navrhnutí změny, vyhodnocení přijetí, změna stavu $a \rightarrow b$), rovnou přepisuje stav na základě Boltzmannova rozdělení podle pravděpodobností [6]

$$\Delta E(\sigma) = 2J \sum_{<ij>} (\sigma_i \sigma_j), \quad (6)$$

$$P(\sigma = +1) = \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{\Delta E(\sigma)}{\mathbf{k_B}T}\right)}, \quad (7)$$

$$P(\sigma = -1) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\Delta E(\sigma)}{\mathbf{k_B}T}\right)}. \quad (8)$$

Jiné algoritmy, kterých je celá řada, například mění celé klastry spinů.

3 Program

Ačkoliv samotný MC algoritmus je jednoduchý, 3D prostor s sebou přináší vysoký počet iterací, které je potřeba napočítat: $i = 2 \cdot L^3 \cdot t \cdot eq$. Při použitých parametrech $L = 50$, počet iterací $t = 4096$, ekvilibrační kroky $eq = 10$ se dostáváme k cca deseti miliardám iteracím. Z tohoto důvodu jsem se rozhodl rozdělit program na dvě části.

Simulaci samotnou jsem proto implementoval do programovacího jazyka C a konfiguraci, export a vizualizaci výpočtu do Pythonu. Python při spuštění vytvoří několik binárních souborů, které přímo čte simulační program spuštěný jako subproces (eliminuje se nutnost konverze):

1. atoms.bin (8 bit integer) – 1D pole o délce L^3 ;
2. config.bin (struct) – L, t, J , inicializační metoda;
3. temp_cycle.bin (32 bit float) – teplotní cyklus.

```
# Linux
$ ./bin/simulant path_to_simulation
# Windows
$ ./bin/simulant.exe path_to_simulation
```

3.1 Simulace

Byl napsán simulační program v programovacím jazyce C, do kterého byl implementován Heat Bath algoritmus. Metoda počítá s redukovanými veličinami: interakční energie $J = 1$, Boltzmannova konstanta $\mathbf{k_B} = 1$, redukovaná teplota $t = T/T_c$.

Aby bylo zaručeno, že se energie a magnetizace začnou počítat pro mřížku, jejíž konfigurace odpovídá Boltzmannovu rozdělení, byl přidán kromě možnosti náhodného rozdělení spinů i scénář WARM-UP. Na začátku jsou všechny spiny rovny -1 . Pro tuto mřížku se provede počet iterací t , které odpovídají počtu iterací kýžené simulace. Teplotní cyklus WARM-UP začíná v nadkritické oblasti a pomalu se ochlazuje k teplotě, kterou začíná temp_cycle.bin [3].

Pro prevenci hystereze se v každé iteraci MC výpočet opakuje po definovaný počet ekvilibrčních kroků $eq = 10$ při stejně teplotě. Systém má tak čas přizpůsobit se nové teplotě.

3.2 Grafické uživatelské rozhraní

Grafické uživatelské rozhraní (GUI) bylo naprogramováno v Pythonu s využitím modulů NumPy (generování mřížky, teplotních cyklů a export do binárních souborů), customtkinter (grafické rozhraní) a matplotlib (vizualizace sledovaných vlastností a export animace).

Uživatel má možnost měnit typ a intenzitu teplotního cyklu:

1. konstantní teplota;
2. ohřev;
3. ochlazování;
4. pomalý ohřev a pomalé ochlazování;
5. rychlý ohřev a pomalé ochlazování;
6. pomalý ohřev a rychlé ochlazování;

dále hodnotu interakční energie, velikost mřížky a může si zvolit výše vysvětlenou WARM-UP metodu, nebo nechat NumPy vygenerovat náhodnou mřížku.

Grafické prvky použité v aplikaci byly buď převzaty z volně licencovaných příspěvků na IconScout¹, nebo dotvořeny v programu GIMP. Jako pozadí hlavního okna aplikace jsem zvolil Obrázek 3: Schematická reprezentace konfigurace 2D Isingova modelu na čtvercové mřížce².

4 Výsledky

Tabulka 1: Parametry simulací

Parametr	Hodnota
L	50
eq	10
J	1
t	4096
T_{\min}	1.0
T_{\max}	6.0
inicializace	WARM-UP

Není-li řečeno jinak, simulace jsem nastavoval podle tabulky 1.

¹<https://iconscout.com/>

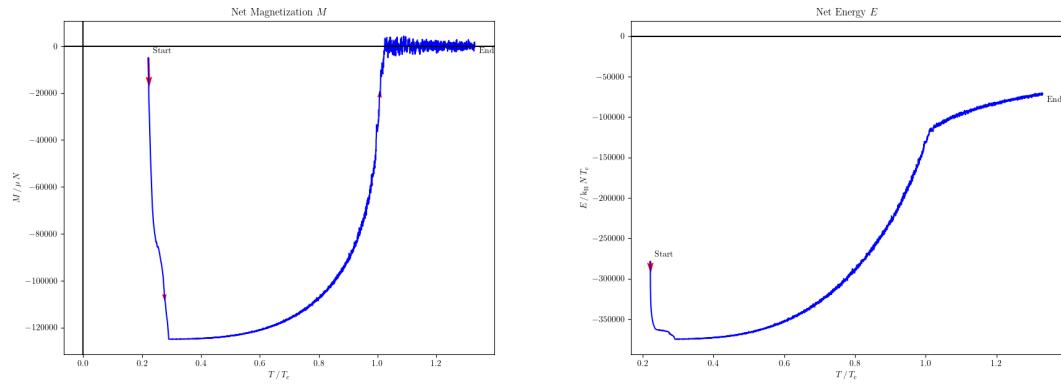
²Obrázek dostupný z https://www.researchgate.net/figure/Schematic-representation-of-a-configuration-of-the-2D-Ising-model-on-a-square-lattice_fig2_321920877

4.1 Konstantní teplota

Při udržování konstantní teploty lze sledovat, že hodnota magnetizace i energie se v průběhu času v průměru nemění. Čím více se ale teplota blíží ke kritické teplotě, tím se zvyšuje energie a klesá uspořádanost mřížky.

4.2 Zahřívání

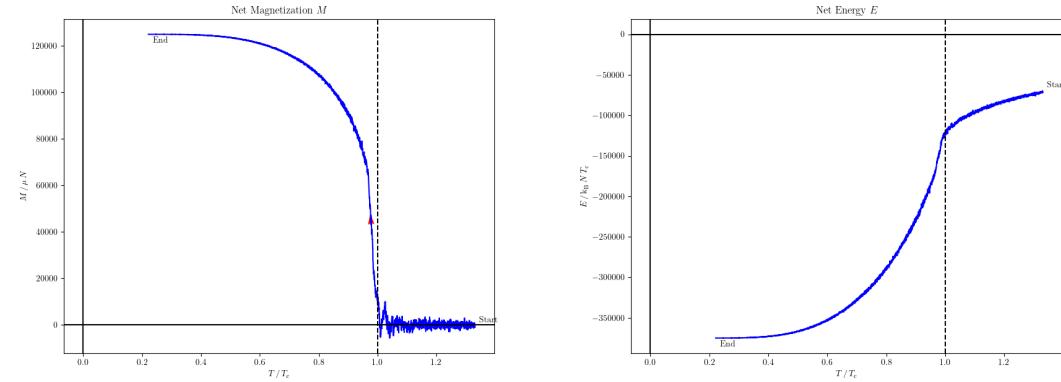
Energie postupně stoupá, po kritické teplotě dochází ke zlomu. Magnetizace po překročení kritické teploty osciluje kolem nuly.



(a) Vývoj magnetického momentu v závislosti na teplotě (b) Vývoj energie v závislosti na teplotě

4.3 Ochlazování

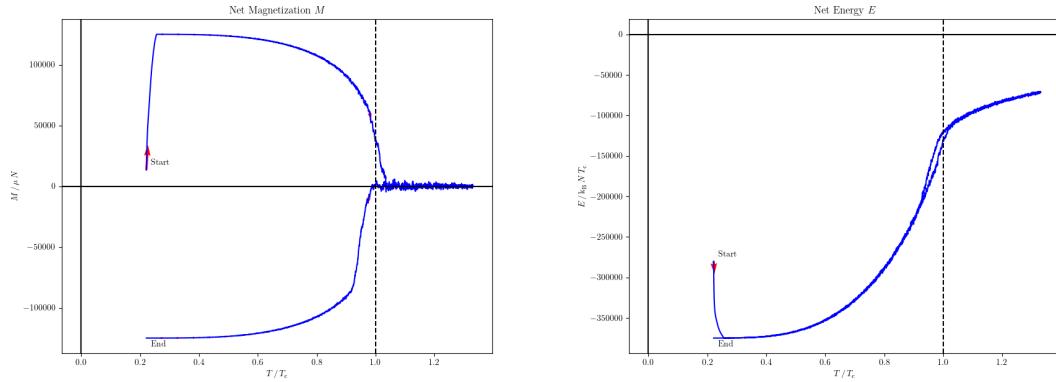
Během ochlazování postupně přechází neuspořádaný systém zpět do uspořádaného. Energie klesá a magnetický moment celé mřížky se náhodně ustálí v kladném, nebo záporném směru.



(a) Vývoj magnetického momentu v závislosti na teplotě (b) Vývoj energie v závislosti na teplotě

4.4 Tepelný cyklus

Tepelný cyklus byl nastaven na náhodnou počáteční konfiguraci.

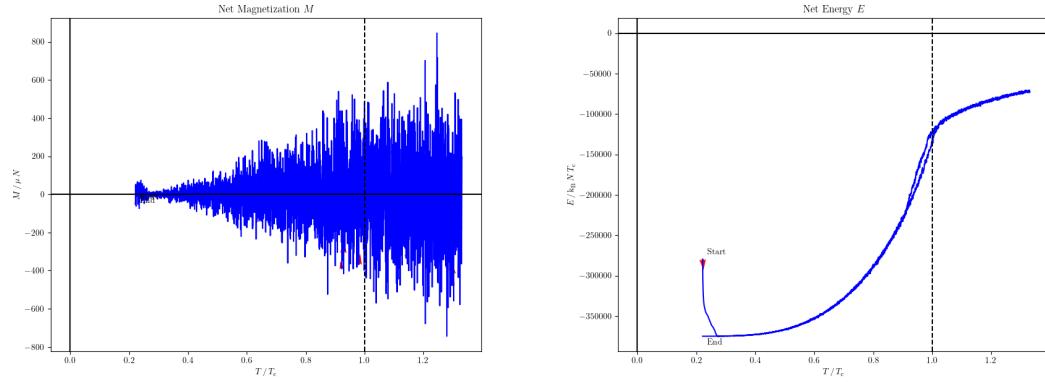


(a) Vývoj magnetického momentu v závislosti na teplotě

(b) Vývoj energie v závislosti na teplotě

4.5 Antiferomagnet

Pro simulaci antiferomagnetu jsem nastavil $J = -1$. Magnetizace po celou dobu simulace nevykazuje jednoznačný magnetický moment. V animaci je vidět, že žádné 2 spiny vedle sebe v ustáleném stavu nesměřují stejným směrem.



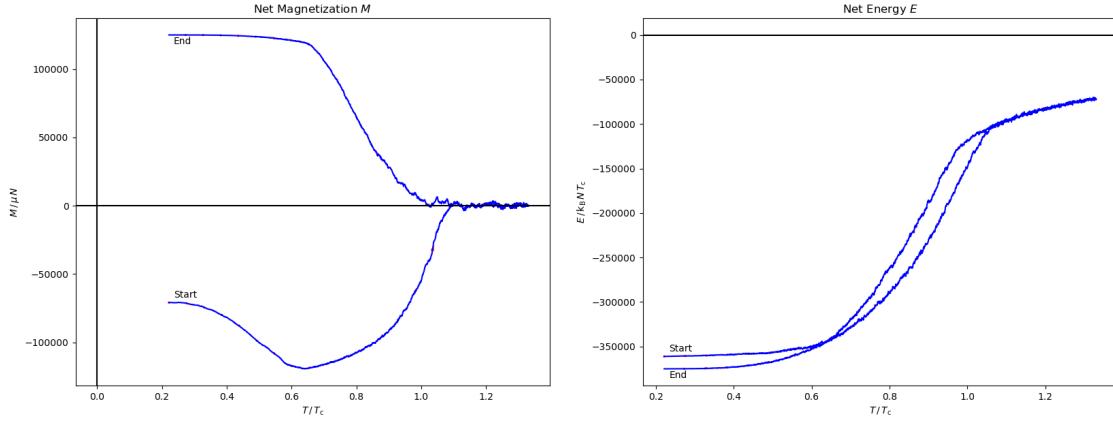
(a) Vývoj magnetického momentu v závislosti na teplotě

(b) Vývoj energie v závislosti na teplotě

4.6 Hystereze – vliv počátečních podmínek na průběh simulace

Tepelný cyklus je závislý na počátečních podmínkách. Na začátku tohoto cyklu se v mřížce vyskytovalo několik metastabilních oblastí. Ty byly příčinou vzniku hysterezní křivky. Pro eli-

minaci tohoto jevu u dalších simulací jsem přidal pro každý iterační krok několik ekvilibračních mezikroků při stejné teplotě, aby se systém stihl nové teplotě přizpůsobit.³



(a) Vývoj magnetického momentu v závislosti na teplotě

(b) Vývoj energie v závislosti na teplotě

4.7 Vliv velikosti mřížky na průběh simulace

Provedl jsem 5 simulací s velikostmi mřížky 10, 20, 30, 40 a 50. Velikost mřížky má vliv na přesnost odečítání kritické teploty.

5 Závěr

Napsal jsem program pro MC simulaci Isingova feromagnetu na kubické mřížce v periodických okrajových podmínkách s nulovým vnějším magnetickým polem. Na této mřížce jsem monitoroval energii a celkovou magnetizaci. Simulaci jsem provedl pro různé termální cykly a různé velikosti mřížky.

Z poměru T/T_c jsem stanovil, že k fázovému přechodu došlo v $T/T_c \approx 1$, čili simulace správně odhadla $T_c \approx 4.5$.



Obrázek 6: Odkaz na GitHub úložiště (https://github.com/vencelj/MC_Ising)

Odkaz na zdrojové kódy a složkami s kompletními simulovanými daty i animacemi naleznete na odkazu výše.

³Hysterezi by pak také měl eliminovat WARM-UP, avšak s největší pravděpodobností z důvodu chyby paměťové segmentace při přechodu mezi WARM-UP a měřením dochází na začátku simulace k chybné konfiguraci.

Reference

1. VISWANATHAN, Gandhimohan M.; PORTILLO, Marco Aurelio G.; RAPOSO, Ernesto P.; LUZ, Marcos G. E. da. What Does It Take to Solve the 3D Ising Model? Minimal Necessary Conditions for a Valid Solution. *Entropy*. 2022, roč. 24, č. 11. ISSN 1099-4300. Dostupné z DOI: 10.3390/e24111665.
2. FITZPATRICK, Richard. *Computational Physics: The Ising Model* [<https://farside.ph.utexas.edu/teaching/329/lectures/node105.html>]. 2006. [cit. 2025-12-26].
3. UNIVERSITY OF CAMBRIDGE. *Computational Projects, Part II: 11.2 The Ising Model* [online]. 2024. [cit. 2025-12-26]. Tech. zpr. Faculty of Mathematics. Dostupné z: <https://www.maths.cam.ac.uk/undergrad/catam/II/11pt2.pdf>. Mathematical Tripos, Undergraduate Manual.
4. HASENBUSCH, M; PINN, K. , , , and from 3D Ising energy and specific heat. *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1998, roč. 31, č. 29, s. 6157. Dostupné z DOI: 10.1088/0305-4470/31/29/007.
5. FERRENBERG, Alan M.; LANDAU, D. P. Critical behavior of the three-dimensional Ising model: A high-resolution Monte Carlo study. *Phys. Rev. B*. 1991, roč. 44, s. 5081–5091. Dostupné z DOI: 10.1103/PhysRevB.44.5081.
6. LIPOWSKI, Adam; FERREIRA, António L.; LIPOWSKA, Dorota. Heat-Bath and Metropolis Dynamics in Ising-like Models on Directed Regular Random Graphs. *Entropy*. 2023, roč. 25, č. 12. ISSN 1099-4300. Dostupné z DOI: 10.3390/e25121615.

A Pseudokód MC

```
1 #include "monte_carlo.h"
2
3 float totalEnergy(struct SimConfig *sim, struct SimMeas *meas){
4     energyTotal = 0;
5     L = sim->L;
6     J = sim->J;
7
8     float energyLUT[7]; // look-up table for energy
9     for (int s = -6; s <= 6; s += 2) {
10         energyLUT[(s + 6) / 2] = -J/2.0f * (float)s;
11     }
12
13     for (all atoms in lattice){
14         // periodic boundary conditions
15         spin = meas->atoms[a*L*L + b*L + c];
16         spinNeighbours = meas->atoms[(a-1)*L*L + j*L + k]
17         + meas->atoms[(a+1)*L*L + j*L + k]
18         + ...;
19
20         spinConfiguration = spin * spinNeighbours;
21         energyTotal += energyLUT[(spinConfiguration + 6) / 2];
22     }
23     return energyTotal;
24 }
25
26 void monteCarlo(struct SimConfig *sim, struct SimMeas *meas, iterCounter){
27     L = sim->L;
28     J = sim->J;
29     N = (uint64_t)L*L*L;
30     temp = meas->temp[iterCounter];
31     energyIter;
32     magnetizationIter;
33
34     /*
35      * if this is the first iteration ->
36      * -> energyIter = totalEnergy()
37      * if this is the first iteration after WARM-UP ->
38      * -> energyIter = meas->energy[last]
39      * else ->
40      * -> energyIter = meas->energy[iterCounter - 1]
41      * analogy for magnetizationIter
42     */
43
44     float energyLUT[7]; // look-up table for energy
45     float probLUT[7]; // look-up table for probability
46     for (int s = -6; s <= 6; s += 2) {
```

```

47         float dE = 2.0f * J * (float)s;
48         probLUT[(s + 6) / 2] = 1/(1+exp(-dE/(bolzmannConst*temp)));
49     }
50
51     for (eq = 0; eq<10; eq++){ // equilibrium steps
52         for (i=0; i<N;i++){
53             a, b, c = rand() % L;
54
55             // periodic boundary conditions
56             spin = meas->atoms[a*L*L + b*L + c];
57             spinNeighbours = meas->atoms[(a-1)*L*L + j*L + k]
58             + meas->atoms[(a+1)*L*L + j*L + k]
59             + ...;
60
61             if (PROB() < probLUT[(spinNeighbours + 6) / 2]) {
62                 meas->atoms[a*L*L + b*L + c] = 1;
63             } else {
64                 meas->atoms[a*L*L + b*L + c] = -1;
65             }
66
67             dE = -J * spinNeighbours * (newSpin - spin);
68             energyIter += dE;
69             magnetizationIter += (newSpin - spin);
70         }
71     }
72     // save energyIter and magnetizationIter into struct meas
73 }
74
75 int main(int argc, char **argv){
76     // load path to dir if argc == 2, else return 1;
77     const char *dirPath = argv[1];
78     // configure simulation -> load all binaries
79
80     // call all monteCarlo() for i < iterations
81     if (sim.init == WARM_UP){
82         monteCarlo(&sim, &meas, i); // run MC at WARM-UP temp. cycle
83         monteCarlo(&sim, &meas, i); // run simulation
84     }
85     else{
86         monteCarlo(&sim, &meas, i); // run simulation
87         // after every 10 iterations save state of atoms in atoms.bin
88     }
89
90     // create *.bin with calculated magnetization and energy
91     // free allocated memory
92     return 0; // end program
93 }
```