Набір 2 – Моделювання та числові методи у ФКС
(аспірантура ННЦ ХФТІ, 2023 р.)

Лекції/практичні: А.Г. Сотніков

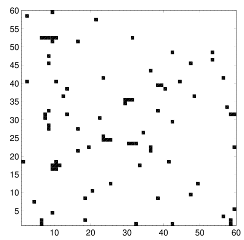

Рис. 1: $T = 0.8\,T_c$
практично повна поляризація

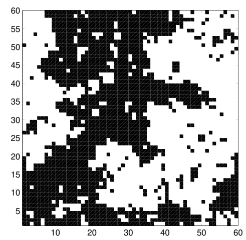

Рис. 2: $T = T_c$
кластери на «усіх» масштабах

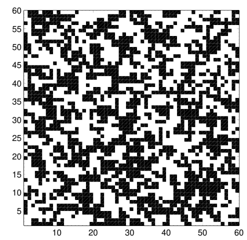

Рис. 3: $T = 2\,T_c$
називай мене «uncorrelated»

- **Завдання 2: Монте-Карло симуляція для 2d-моделі Ізінга** (20+2 балів)

Дослідимо 2d-модель Ізінга зі взаємодією між найближчими сусідами.

модель Ізінга: гамільтоніан, або енергія $E(\boldsymbol{S}) = -J \sum_{<\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'>} S_{\boldsymbol{r}} S_{\boldsymbol{r}'} - h \sum_{\boldsymbol{r}} S_{\boldsymbol{r}}$.

Стан $\boldsymbol{S}$ має ймовірність $p(\boldsymbol{S}) = \frac{1}{Z}\, e^{-\beta E(\boldsymbol{S})}$, де Z – статистична сума $Z \equiv \sum_{\boldsymbol{S}} e^{-\beta E(\boldsymbol{S})}$. Таким чином, величина $O = O(\boldsymbol{S})$ має середнє $\langle O \rangle = \sum_{\boldsymbol{S}} O(\boldsymbol{S}) p(\boldsymbol{S})$.

Монте-Карло симуляція: Для наближення процесу підсумовування ми будемо використовувати *Монте-Карло симуляцію.* Замість того, щоб розглядати *кожну* можливу конфігурацію спінів, тут утворюється *одиничний «представник»* – таким чином, що кожна конфігурація $\boldsymbol{S}$ має ймовірність $p(\boldsymbol{S})$. Це забезпечується, наприклад, алгоритмом *Метрополіса–Гастінгса.*

Алгоритм Метрополіса–Гастінгса:

1. Згенеруйте випадковим чином конфігурацію спинів $\boldsymbol{S}$. Обчисліть величини ($M(\boldsymbol{S})$,$E(\boldsymbol{S})$).
2. Оберіть випадковим чином один конкретний спін (`x = ceil(rand*Nx); y = ceil(rand*Ny)`).
3. За допомогою обертання (flip) цього спіну обчисліть *потенційну* зміну ΔE повної енергії. $\diamondsuit$[1]
4. У випадку $\Delta E < 0$: Оберніть обраний спін (у конфігурації $\boldsymbol{S}$).
   У випадку $\Delta E > 0$: Оберніть обраний спін з імовірністю $e^{-\beta \Delta E}$ (у конфігурації $\boldsymbol{S}$).
5. У випадку, якщо спін був обернений, обчисліть відповідні зміни величин (E, M, ...).
6. Збережіть величини ($M(\boldsymbol{S})$, $E(\boldsymbol{S}), \ldots$ які, наприклад, визначаються в термінах $\Delta M, \Delta E$).

   Зауваження: ви маєте зберігати величини незалежно від того, чи пропозиція зміни орієнтації спіну була прийнята або відхилена.
7. Продовжуйте з пункту 2 до моменту досягнення крітерію зупинки ітерацій.

Завдання: (для простоти покладаємо $h = 0$ і одиниці $J = 1$, $k_B = 1$)

a) Ініціалізація (4 б.)

Побудуйте функцію `init_config(Nx,Ny,h)`, яка утворює випадкову конфігурацію спінів у *глобальних*(!) змінних `cfg` і яка зберігає в *глобальних* змінних відповідну намагніченість M і енергію E. Зобразіть конфігурацію графічно за допомогою контурного графіку (типу `pcolor` у разі Matlab). $\diamondsuit$[2] Хоча ми використовуємо тут $h = 0$, збережіть h також як глобальну змінну.

[1] $\Delta E = 2 \cdot S_{x,y} h + 2 \cdot S_{x,y} \cdot \sum_j S_j$ де j пробігає індекси тільки найближчих сусідів $(x, y \pm 1), (x \pm 1, y)$.

[2] Випадкова конфігурація може бути отримана, наприклад, за допомогою `cfg = 2*(rand(Nx,Ny)>0.5) - 1;`.

b) Алгоритм Метрополіса і анімаційні картинки (8 б.)

Побудуйте функцію `[Eobs,Mobs] = metropolis(nSteps,T)`, яка виконує `nSteps` кроків Метрополіса конфігурації `cfg` за температури T і зберігає вектори величин M і E у масиви `Eobs` і `Mobs` (довжини `nSteps` кожен).

Візуалізуйте Монте-Карло симуляцію:

– викличте `init_config(16,16,0)`;

– побудуйте `pcolor`-зображення конфігурації `cfg`;

– викличте `metropolis(50,Tc)` 1000 разів і для кожного оновлюйте `cfg`-рисунок. Наступні команди є корисними: `set(gca,'NextPlot','replacechildren')`, `drawnow`, `pause`.♢[3]

Як тільки все буде працювати задовільно, збільшіть розміри системи до 100×100 (одночасно збільшуючи кількість кроків Метрополіса з 50 до 5000). Згенеруйте анімацію (необов'язково використовувати тут команду `movie`, достатньо просто оновлювати зображення всередині циклу `for`) за температур $T = 0.5T_c$, $T = T_c$ і $T = 2T_c$. Порівняйте і проаналізуйте поведінку системи на зображеннях.

c) Температурні залежності намагніченості m і питомої теплоємності c (8 б.)

Побудуйте функцію `Tsweep(Tv,h)`, яка для кожної температури з вектору `Tv` виконує повну Монте-Карло симуляцію і для кожної температури обраховує *з виведенням похибки* як намагниченість $\langle |m| \rangle$ так і питому теплоємність $c = dE/dT = \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2\right) / T^2$:

У цьому завданні для покращення результатів обчислень рекомендовано додатково проводити групування. Насамкінець, нам бажано провести достатньо велику кількість вимірювань з гарною статистикою. Для цього ми збираємо 100 "гарних" значень, які передаємо до статистичних функцій `mean` і `std`. Ці "гарні" значення є результатом надання можливості кожному спіну на ґратці > 500 шансів обернутись. Утворюючи групи таким чином, ми сподіваємось уникнути проблем з автокореляційними ефектами, що виникають за низьких температур.

– Встановіть довжину `bL` кожного Монте-Карло блоку;

– викличте (тільки один раз!) `init_config(Nx,Ny,h)`;

– Для кожної температури T з `Tv`:

  * викличте `metropolis( bL,T)` один раз (для «термалізації»)

  * викличте `metropolis( bL,T)` 100 разів (`i=1:100`) і після кожного разу зберігайте `m(i)=mean(abs(Mobs))/(Nx*Ny)`, а також `c(i)=(mean(Eobs.^2)-mean(Eobs)^2)/T^2`.

  * Після 100-го кроку обчислюються середні значення і середньоквадратичні відхилення `mAvg(T)=mean(m)`, `mStdev(T)=std(m)` і аналогічно для c.

– Після проходження усіх значень з `Tv` побудуйте `errorbar`-графіки величин $\langle |m| \rangle$ і c.

Параметри для тестових обчислень: `h=0`, `Tv=(0.7:0.05:1.3)*Tc`, `Nx=Ny=8`, `bL=500*Nx*Ny`
Параметри для більш серйозних: `h=0`, `Tv=(0.7:0.05:1.3)*Tc`, `Nx=Ny=10`, `bL=5000*Nx*Ny`
Параметри для ще серйозніших: `h=0`, `Tintv=(0.7:0.05:1.3)*Tc`, `Nx=Ny=50`, `bL=200*Nx*Ny`

d) Бонус: Антиферомагнітна модель Ізінга (+ 2 б.)

Як зміняться особливості характерних конфігурацій з пункту (b), якщо ми змінимо знак обмінної взаємодії ($E(\boldsymbol{S}) = \sum_{<\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'>} S_{\boldsymbol{r}} S_{\boldsymbol{r}'} - h \sum_{\boldsymbol{r}} S_{\boldsymbol{r}}$) ?

[3] Для нескінченно великої 2d-системи аналітичний результат Онсагера: $T_c = \frac{2}{\ln(\sqrt{2}+1)}$.