

FX7 Nabitá bublina

Ivo vzal bublinu (pri atmosférickom tlaku p a teplote T) s polomerom R a naniesol na ňu náboj Q . Ako sa tým zmenil polomer bubliny?

FX8 Rotujúca pružina

Majme pružinu o hmotnosti m , pokojovej dĺžke L a tuhosti k . Chytíme ju za jeden koniec a začneme ňou rotovať uhlovou rýchlosťou ω . Aké bude jej výsledné predĺženie? Tiažovú silu zanedbajte.

FX9 Isingov model, zase raz

S Isingovým modelom ste sa mohli zoznámiť v 8. ročníku. Na zopakovanie, je to najjednoduchší model feromagnetizmu zo začiatku 20. storočia, no vedcov dodnes neprestáva fascinovať.¹

Na mriežke máme niekoľko magnetiek, ktoré sú otočené nahor alebo nadol, a podľa toho majú magnetický moment (spin) s $+1$ alebo -1 . Každá magnetka pôsobí len na svojho suseda, nie ďalej. Keď sú dve susedné magnetky orientované rovnakým smerom, sú v energetickom minime a ich energia je záporná, $-J$, keď opačným smerom, ich energia je kladná. Celková energia mriežky je tak

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j,$$

kde J je nejaká pozitívna konštanta a $\langle \rangle$ značí sumáciu cez susedné body je to jednoducho

$$E = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} + s_N s_1.$$

Uvažujeme periodické okrajové podmienky, čo znamená, že z priamky spravíme ako keby kruh, aby N -tá magnetka susedila s prvou. Tento koncept slúži na potlačenie okrajových podmienok – chceme, aby mala každá magnetka rovnaký počet susedov (v 1d dvoch, v 2d štyroch a tak ďalej).

Cieľom tejto úlohy je numericky nasimulovať správanie mriežky a zistiť, ako závisí energia E a priemerná magnetizácia² mriežky $\langle m \rangle_t$ od teploty, kde $m = \sum_{i=1}^N s_i / N$ je priemerný spin na jednu magnetku.³ Na simulovanie sa využívajú takzvané Monte Carlo metódy,⁴ špecificky Metropolisov algoritmus, ktorý pozostáva z nasledujúcich krokov:

1. Vyberte náhodný spin na mriežke.
2. Otočte tento spin a spočítajte zmenu energie ΔE oproti pôvodnému stavu.
3. Ak energia klesla, prijmite túto zmenu a opakujte krok 1.
4. Ak energia stúpla, vygenerujte náhodné číslo p medzi 0 a 1. Ak $p < e^{-\Delta E/k_B T}$, prijmite túto zmenu a opakujte krok 1. V opačnom prípade zmenu ignorujte a opakujte krok 1.

- a) **1d model.** Naprogramujte simuláciu 1d mriežky s periodickými okrajovými podmienkami, ktorej výstupom bude závislosť energie a magnetizácie od teploty, pre $N = 10$ až 20. Vhodne zvolte rozmedzie pre teplotu T . Na každý teplotný bod zopakujte Metropolisov algoritmus otáčania spinov niekoľkotisíc krát a predtým, ako začnete „merať“, nechajte systém vyekvilibrovať, teda prvých cca 1000 otočení nezaznamenávajúte do priemeru.

¹Pre zaujímavosť, jeden z posledných príspevkov je od Dalimila Mazáča, bývalého riešiteľa FX.

²Priemerovaná vzhľadom na čas.

³Ten je napr. rovný 1 v prípade, že sú všetky magnetky otočené nahor.

⁴Monte Carlo v informatickom kontexte znamená náhodný, nič viac a nič menej.

- b) **2d model.** Analyticky vyriešiť 2d model je omnoho ťažšie ako 1d model.⁵ Nasimulovať ho na počítači je však približne rovnako zložité. Vytvorte druhý program, ktorého výstupom bude opäť závislosť energie a magnetizácie od teploty. Ako naznačujú grafy, 2d model sa od 1d modelu zásadne, priam prelomovo líši. V čom presne?

Poznámky na záver

1. Z programovacích jazykov odporúčame C/C++, Fortran, Python alebo Matlab. Konštantu k_B môžete položiť rovnú 1.
2. Nezabudnite na komentovanie toho, čo robíte, rozumné a pochopiteľné názvy premenných, odsádzanie riadkov, a ukladanie čo najväčších kusov kódu do funkcií. Veľmi to oceníme, a aj vy pri opätovnom čítaní vlastného kódu s odstupom niekoľko týždňov :)
3. Ak nebudete niečo vedieť naprogramovať, napr. generovanie náhodných čísel, gúgl je plne k vašej dispozícii. Ak budete naozaj bezradní, napíšte nám email a my vám skúsime pomôcť.

⁵Prišiel na to Lars Onsager až v roku 1944, zatiaľ čo 1d verziu vyriešil sám Ising s vyhlásením, že na „jeho“ modeli nie je nič zaujímavé. Ako uvidíte, mýlil sa.