

ISING MODEL

for fiber wetting study

Počítačová simulace – Isingův model

Je děleno do dvou přednášek s následnými příklady.

Doc. Ing . Eva Kuželová Košťáková, Ph.D.

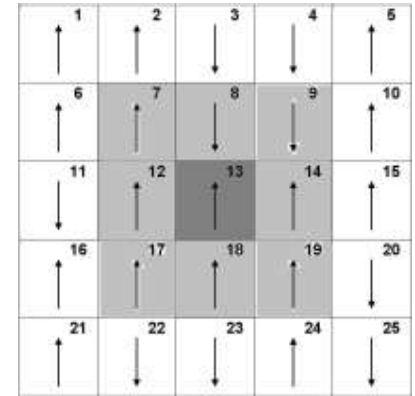
Katedra chemie, FP, TUL

Eva.kostakova@tul.cz

Tel.: 48 535 3489

Budova C, 3. patro

Automodel (Ising model) and Monte Carlo as a means of simulating wetting phenomena of porous (fibrous) materials

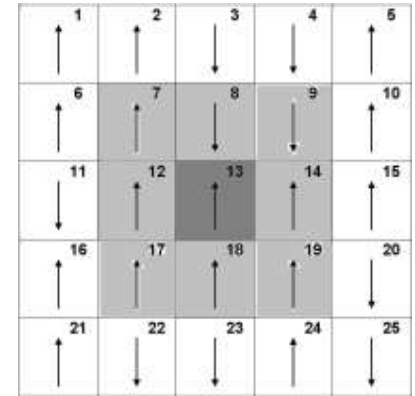


The word *simulation* comes from the Latin word *simulare* and its synonyms are mainly related to medicine as pretending to be a healthy person.

Thus, the *simulators* imitate or pretend have gained great importance with the advent of computer technology. In the field of computer technology, the term simulation means imitation of a process or object by means of a mathematical description.

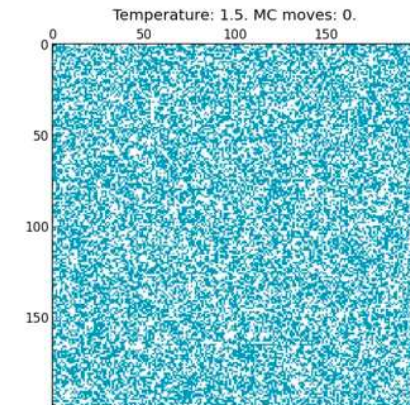
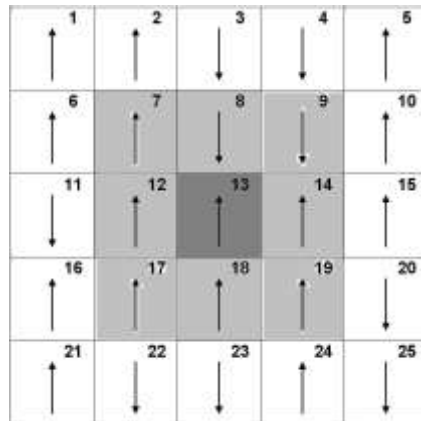
The simulation allows you to explore changes in the behavioral behavior of an object by changing input or other conditions to pretend its real behavior or form.

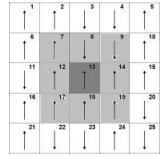
Automodel (Ising model) and Monte Carlo as a means of simulating wetting phenomena of porous (fibrous) materials



One method of this study was to use the Ising model [1, 2], which was originally designed by Lenz to investigate the transition of ordered and disordered ferromagnetic state in 1920 [3].

- [1]MANNA, S.S.- HERMANN, H.J. - LANDAU, D.P.: A stochastic method to determine the shape of a drop on a wall, Journal of Statistical Physics, Vol.66, Nos. 3/4, 1992, 1155.
 [2]De CONICK, J.- DUNLOP, F. - RIVESEAV, V.: On the microscopic validity of the Wuelff Construction and of the generalized Young equation, Commun. Math Phys. 121, 401 - 419 (1989)
 [3]BRUSH, S.G.: History of the Lenz-Ising model, Reviews of modern physics, Vol.39, No.1, 1967, 83-893

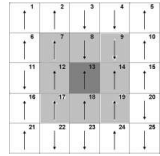




Simulation (description)

The computer simulation used is based on a two-dimensional or three-dimensional automodel (specifically a modified **Ising model**) using **Kawasaki kinetics** and the **Monte Carlo method**.

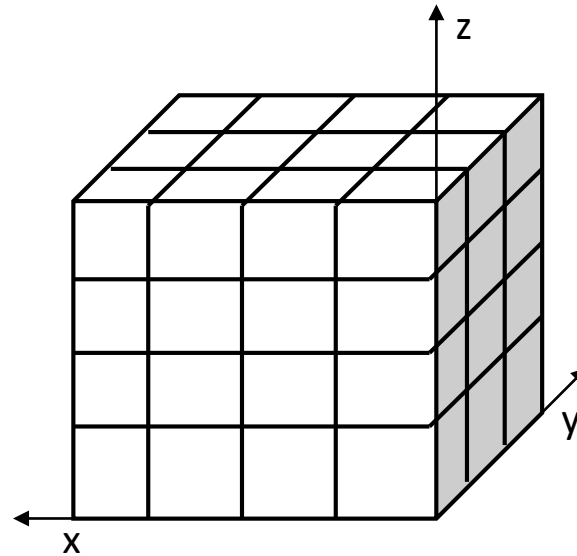
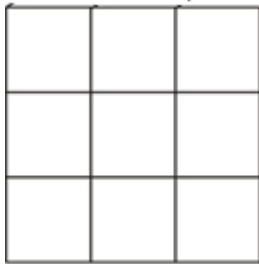
Lukas, D., Kostakova, E., Sakar, A.: Computer simulation of moisture transport in fibrous materials, *Thermal and moisture transport in fibrous materials*, edited by N. Pan and P. Gibson, Woodhead Publishing Limited, Cambridge, pp. 469-541. ISBN-13: 978-1-84569-057-1, 2006

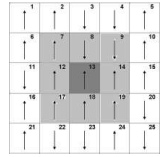


Simulation (description)

The computer simulation used is based on a two-dimensional or three-dimensional automodel (specifically a modified Ising model) using Kawasaki kinetics and the Monte Carlo method.

1. Creating a two-dimensional or three-dimensional lattice composed of a finite number of elementary cells

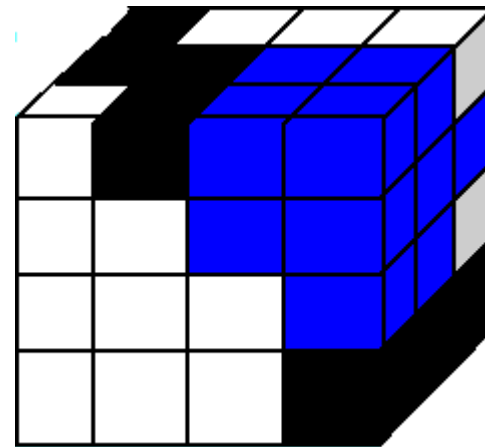
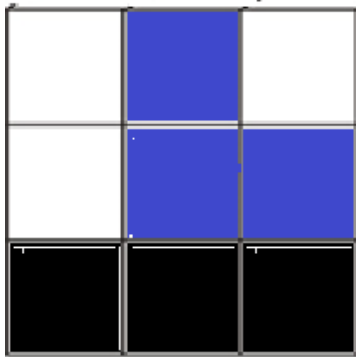




Simulation (description)

The computer simulation used is based on a two-dimensional or three-dimensional automodel (specifically a modified Ising model) using Kawasaki kinetics and the Monte Carlo method.

Each cell is given an **Ising Variable value a** and what type of environment it is supposed to represent in the initial configuration.



Liquid $a=1$

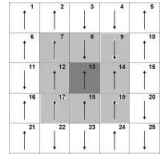


gas $a=0$



fiber $a=2$

If we look at the visual model, the value of Ising's variable COLOR cell (blue, white, black) is actually for us. In computer simulation, however, we move only in numeric matrices, and thus individual cells are assigned their and - thus the values of the Ising variable (0; 1; 2) for resolution. Of course, colors and numbers may be different.



Simulace (popis)

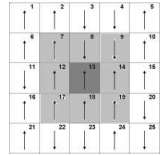
The computer simulation used is based on a two-dimensional or three-dimensional automodel (specifically a modified Ising model) using Kawasaki kinetics and the Monte Carlo method.

In the initial configuration, the real system is in an unbalanced state, and during the simulation, the configuration associated with the system's energy reduction is reshaped.

Computer simulation takes place in steps repeated until the simulation is completed. The simulation process ends when a stable state is reached that should be the lowest energy state, although it must not be forgotten that if the statistical temperature τ is greater than zero, the system equilibrium may not be the minimum energy state (thermal contact between the system and the reservoir).

It is a system and exchanges with the energy reservoir, particle exchange is not allowed ===== CANONICAL SYSTEM (thermal contact)

(see Polymer Physics - p.168)



Simulation (description) – explanation of terms

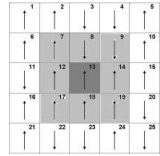
The computer simulation used is based on a two-dimensional or three-dimensional automodel (specifically a modified Ising model) using **Kawasaki kinetics** and the **Monte Carlo** method.

Kawasaki kinetics

Kawasaki kinetics is related to the selection of cells in the Ising model.

Short Distance Kawasaki Kinetics -Kawasaki kinetics for short distances = selection of direct neighbors. The first cell is selected randomly from the liquid gas interface and the other randomly from its direct neighborhood.

Long Distance Kawasaki Kinetics - Kawasaki kinetics for long distances = allows the selection of a second cell outside the direct neighborhood of the first selected cell.



Simulace (popis) – vysvětlení pojmů

*Použitá počítačová simulace je založena na trojrozměrném automodelu (konkrétně modifikovaném **Isingově modelu**) s využitím **Kawasakiho kinetiky** a metody **Monte Carlo**.*

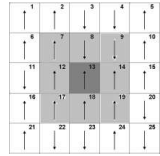
Monte Carlo method

Metoda Monte Carlo představuje skupinu algoritmů pro simulaci systémů. Je založena na využití náhodných čísel. Metoda Monte Carlo je založena na provádění **náhodných pokusů** s modelovým systémem a s jejich vyhodnocením.

Metoda využívá **generátor pseudonáhodných čísel**.

Metoda Monte Carlo je v Isingově modelu využívání k vzorkování podle podmínek Kawasakiho kinetiky a k rozhodování o změně konfigurace související se teplotními fluktuacemi systému.

Pseudorandom numbers are numbers creating a succession, which appears to be random, but in reality these numbers are generated by deterministic algorithm. The prefix pseudo- is used for separation this type of random numbers from “real random” numbers, which rising as a random physical processes results. This thesis used the word “random” but with the “pseudorandom” meaning.



Simulace (popis)

Použitá počítačová simulace je založena na trojrozměrném automodelu (konkrétně modifikovaném **Isingově modelu**) s využitím **Kawasakiho kinetiky** a metody **Monte Carlo**.

4. Krok počítačové simulace

Simulační proces probíhá v následujících krocích:

1) Z rozhraní kapalina-plyn je vybrána jedna buňka obsahující kapalinu a jedna buňka obsahující plyn.

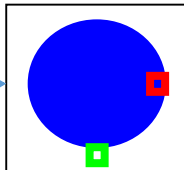
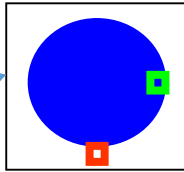
Je spočítána jejich energie $E_{před}$.

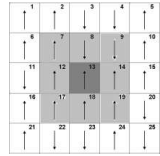
2) Buňky vybrané v bodě 1 si vymění své pozice – systém vytvoří novou konfiguraci.

3) Je spočítána energie systému v nové konfiguraci E_{po} .

4) Rozdíl energií systému před a po výměně buněk je $\Delta E = E_{po} - E_{před}$.

Dále je nutné postup rozdělit do dvou postupů dle volby velikosti teploty T v Isingově modelu.





Simulace (popis)

Použitá počítačová simulace je založena na trojrozměrném automodelu (konkrétně modifikovaném **Isingově modelu**) s využitím **Kawasakiho kinetiky** a metody **Monte Carlo**.

Krok počítačové simulace

Simulační proces probíhá v následujících krocích:

1) Z rozhraní kapalina-plyn je vybrána jedna buňka obsahující kapalinu a jedna buňka obsahující plyn.

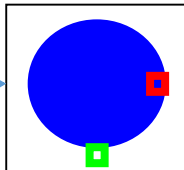
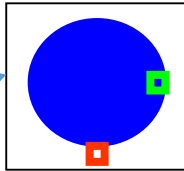
Je spočítána jejich energie $E_{před}$.

2) Buňky vybrané v bodě 1 si vymění své pozice – systém vytvoří novou konfiguraci.

3) Je spočítána energie systému v nové konfiguraci E_{po} .

4) Rozdíl energií systému před a po výměně buněk je $\Delta E = E_{po} - E_{před}$.

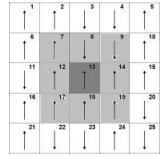
5) Rozhodnutí



VÝPOČET ENERGIE BUŇKY

Energie jedné elementární buňky i možné vyjádřit v simulaci takto:

$$E_i = \sum_{j=1}^{N_j} C_{ij}$$



Simulace (popis)

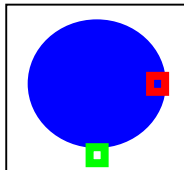
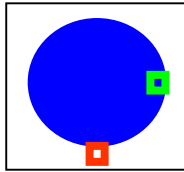
Použitá počítačová simulace je založena na trojrozměrném automodelu (konkrétně modifikovaném **Isingově modelu**) s využitím **Kawasakiho kinetiky** a metody **Monte Carlo**.

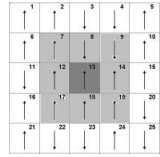
VÝPOČET ENERGIE BUŇKY

Energie jedné elementární buňky i možné vyjádřit v simulaci takto:

$$E_i = \sum_{j=1}^{N_j} C_{ij}$$

Natavení výměnných energií (interakčních energií C_{ij} (i -je index vybrané buňky a j je index buňky z jejího okolí).





Simulace (popis) výpočet energie

Energie jedné elementární buňky i možné vyjádřit v simulaci takto:

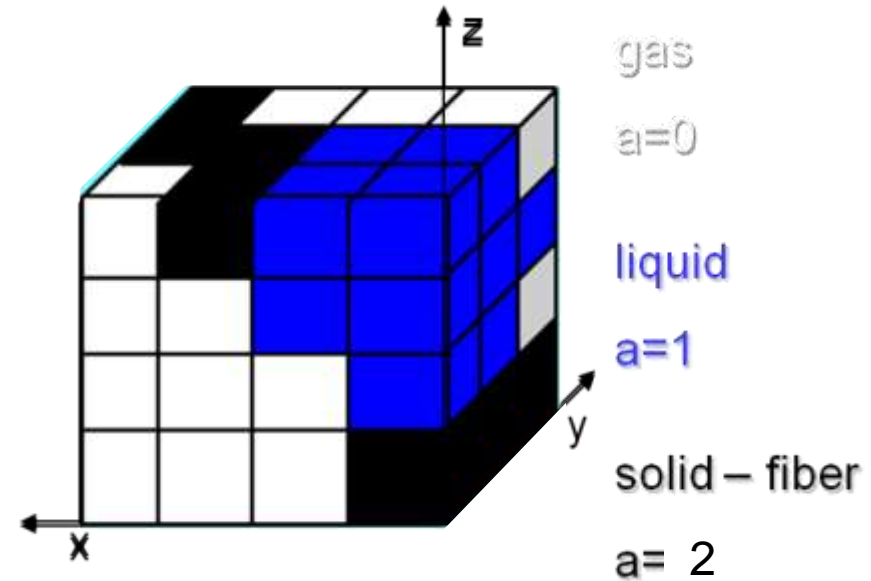
$$E_i = C_g z_i + \sum_{j=1}^{N_j} C_{ij}$$

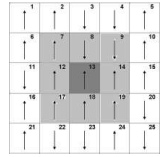
Celková energie systému se vypočítá jako součet energií všech elementárních buněk. Celková energie může mít dvě složky.

Gravitační složka energie je charakterizovaná gravitační konstantou C_g a její velikost závisí na pozici buňky v mříži vzhledem ke svislé ose z . Čím vyšší je hodnota souřadnice z , tím vyšší je gravitační energie G_i buňky i :

$$G_i = C_g \cdot z_i,$$

Gravitační energie je počítána jen pro kapalinové buňky.





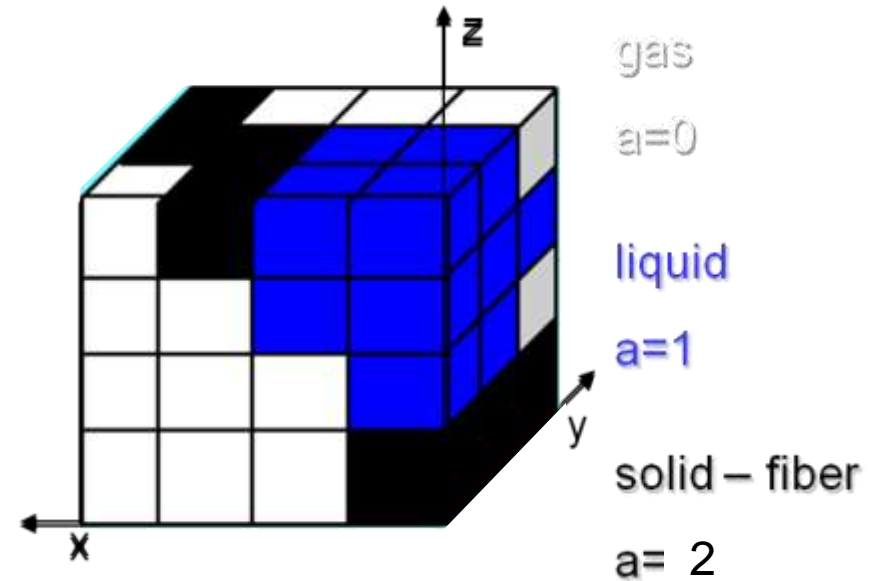
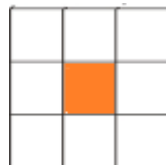
Simulace (popis) výpočet energie

Energie jedné elementární buňky i možné vyjádřit v simulaci takto:

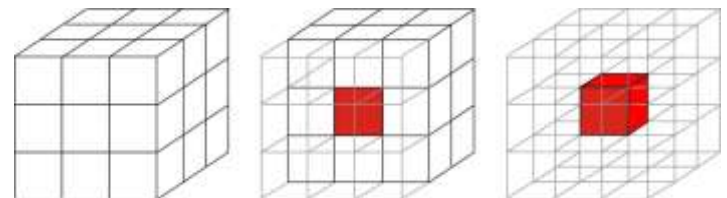
$$E_i = C_g z_i + \sum_{j=1}^{N_j} C_{ij}$$

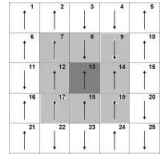
Další složka energie souvisí s interakcemi v nejbližším okolí i -té buňky. V okolí každé buňky se mohou nacházet tři typy prostředí. Podle povahy **kohezních a adhezních sil** se bude celý systém chovat. Intenzita kohezních a adhezních sil a vzájemného působení mezi dvěma sousedními buňkami je daná hodnotami tzv. **výměnné energie C_{ij}** , kde i je index vybrané buňky a j je index buňky z jejího okolí.

2D



3D





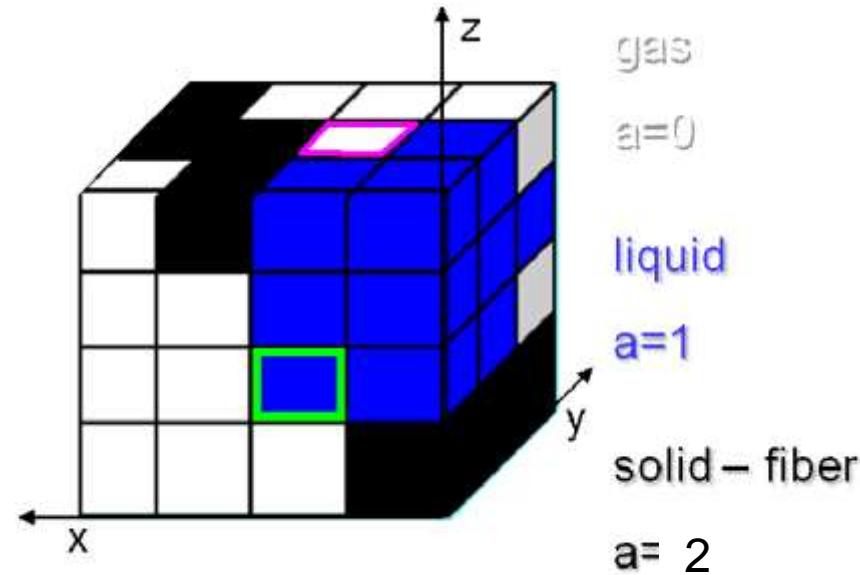
Simulace (popis)

Postup simulace – krok simulace - MCS (1/2)

- Náhodný výběr dvou buněk z rozhraní kapalina – plyn (jedna obsahující **kapalinu** a druhá obsahující **plyn**)

- Výpočet celkové energie systému

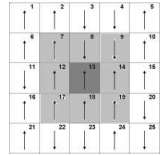
$$E_{pred} = \sum_{i=1}^N E_i = C_g \sum_{i=1}^N z_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1; i \neq j}^{N_j} C_{ij}$$



- Pozice buněk jsou vyměněny

- Opětovný výpočet celkové energie systému

$$E_{po} = \sum_{i=1}^N E_i = C_g \sum_{i=1}^N z_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1; i \neq j}^{N_j} C_{ij}$$



Simulace (popis)

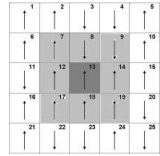
Použitá počítačová simulace je založena na trojrozměrném automodelu (konkrétně modifikovaném **Isingově modelu**) s využitím **Kawasakiho kinetiky** a metody **Monte Carlo**.

Krok počítačové simulace - rozhodnutí

T=0

6) Je nutné porovnat velikost energií před a po výměně buněk. Jestliže výměna buněk způsobila snížení energie, tedy ($E_{\text{před}} > E_{\text{po}}$) jedná se o změnu žádoucím směrem do energeticky výhodnější konfigurace. Buňky dále zůstanou ve svých **nových pozicích**. Simulace pokračuje dále znovu od kroku 1.

Pokud výměna buněk způsobila naopak zvýšení energie ($E_{\text{před}} < E_{\text{po}}$) jedná se o změnu nežádoucí. Buňky se vrátí zpět do **svých původních pozic** a simulační proces začíná znovu od bodu 1.



Simulace (popis)

Použitá počítačová simulace je založena na trojrozměrném automodelu (konkrétně modifikovaném **Isingově modelu**) s využitím **Kawasakiho kinetiky** a metody **Monte Carlo**.

Krok počítačové simulace - rozhodnutí

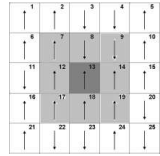
T≠0

6) V simulaci je zavedena teplota různá od nuly. Pokud při porovnávání energií před a po výměně buněk bylo zjištěno, že výměna buněk vedla ke snížení energie systému ($E_{\text{před}} > E_{\text{po}}$), jedná se o změnu žádoucí. Buňky tedy zůstávají na svých **nových pozicích** a simulace pokračuje dále znovu od bodu 1.

Změna oproti simulaci s nulovou teplotou nastává pokud bylo zjištěno, že po výměně pozic buněk došlo k nárůstu energie ($E_{\text{před}} < E_{\text{po}}$). V tomto případě je třeba zavést další rozhodovací kritérium založené na poznatcích statické fyziky. Tedy platí-li, že $E_{\text{před}} < E_{\text{po}}$ rozhodování zda buňky zůstanou či nezůstanou na svých nových pozicích je dáno přechodovou pravděpodobností **P** vycházející z **Boltzmanova faktoru (Fyzika polymerů str. 173-174)**.

$$P = \exp\left(-\frac{\Delta E}{\tau}\right)$$

kde $\tau = Tk$ je statistická teplota, k je Boltzmanova konstanta, T je termodynamická teplota.



Simulace (popis)

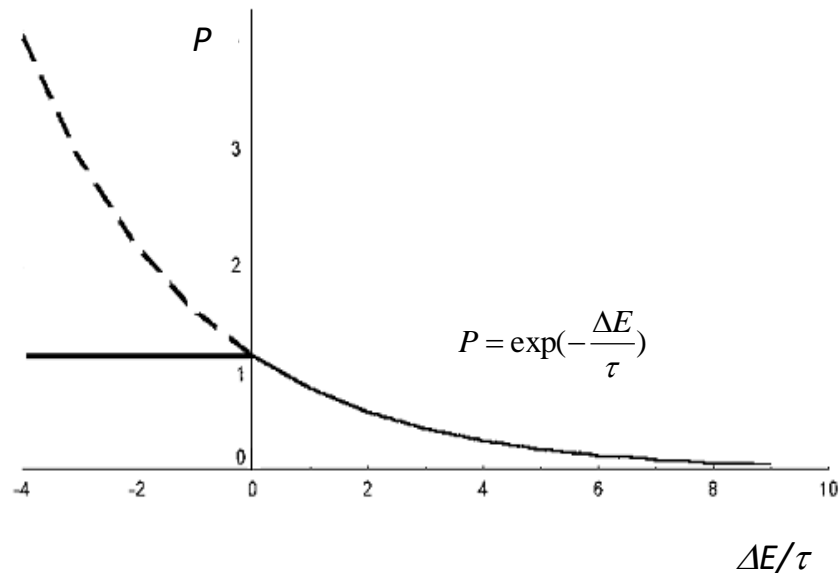
Použitá počítačová simulace je založena na trojrozměrném automodelu (konkrétně modifikovaném **Isingově modelu**) s využitím **Kawasakiho kinetiky** a metody **Monte Carlo**.

4. Krok počítačové simulace přechodová pravděpodobnost pro $E_{\text{před}} < E_{\text{po}}$ tedy $\Delta E = E_{\text{po}} - E_{\text{před}} > 0$

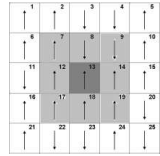
$$P = 1 \quad \text{if } \Delta E < 0$$

$$P = \exp[-\Delta E/\tau] \quad \text{if } \Delta E \geq 0$$

$T \neq 0$



Dále je vygenerováno náhodné číslo z intervalu $\langle 0,1 \rangle$. V případě, že toto náhodné číslo je menší než pravděpodobnost přechodu buněk P , zůstávají buňky na svých **nových pozicích**. Je-li ale náhodné číslo větší než přechodová pravděpodobnost P , vrací se buňky zpět na svá **původní místa**. Proces pokračuje znovu od bodu 1.



Simulace (popis)

Postup simulace – ukončení simulace

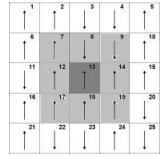
- Simulace je ukončena pokud systém dosáhne **rovnovážného stavu** (celková energie systému se pohybuje okolo konstanty na minimální hodnotě).

- Simulace je ukončena po určitém počtu **MCSPS** dle uvážení experimentátora.

$$MCSPS = MCS/N$$

MCSPS (monte carlo step per site)

MCSPS reprezentuje v „tikání“ hodin.



Simulace (popis)

Postup simulace – ukončení simulace

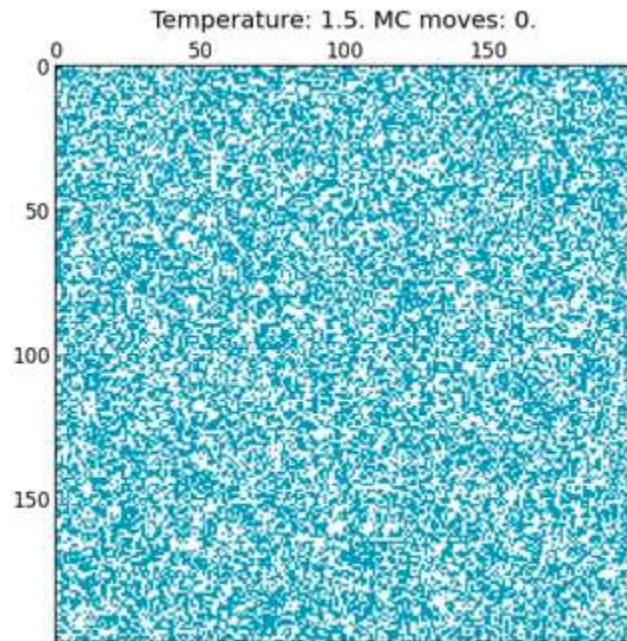
- Simulace je ukončena pokud systém dosáhne **rovnovážného stavu** (celková energie systému se pohybuje okolo konstanty na minimální hodnotě).

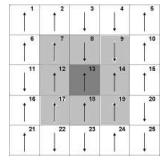
- Simulace je ukončena po určitém počtu **MCSPS** dle uvážení experimentátora.

$$MCSPS = MCS/N$$

MCSPS (monte carlo step per site)

MCSPS reprezentuje v „tikání“ hodin.

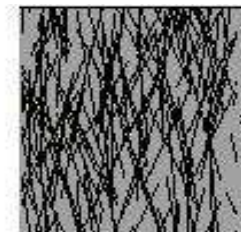
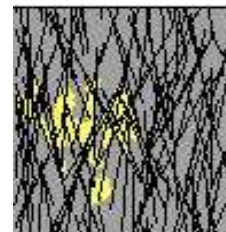
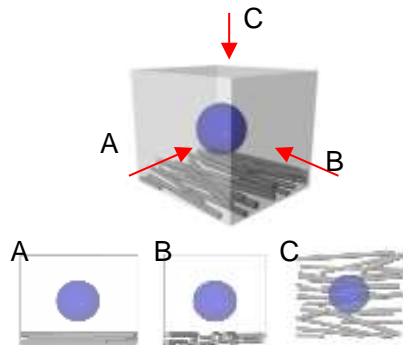
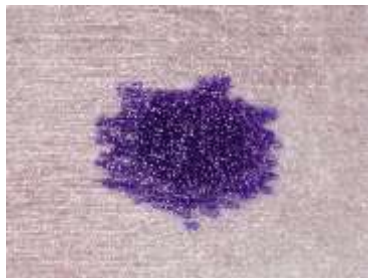
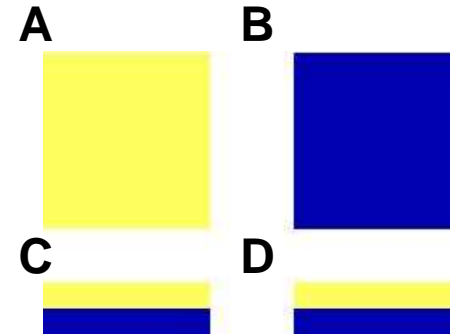
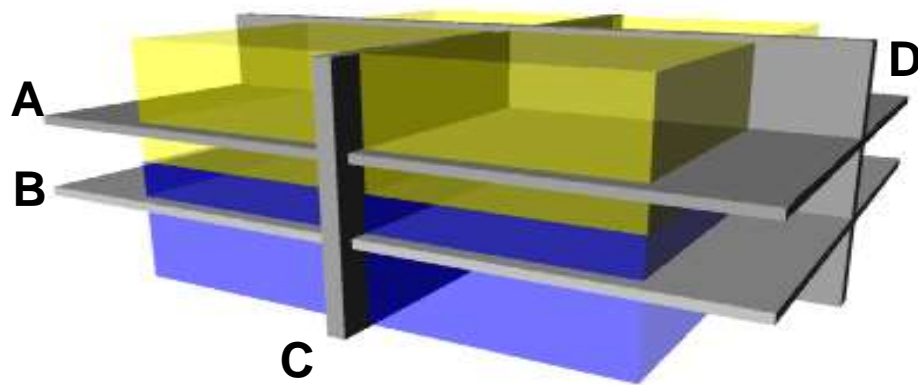




Simulace (popis)

Postup simulace – výstupy ze simulace

2D grafické výstupy

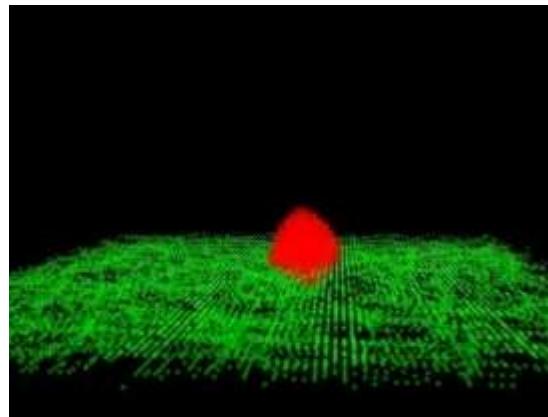
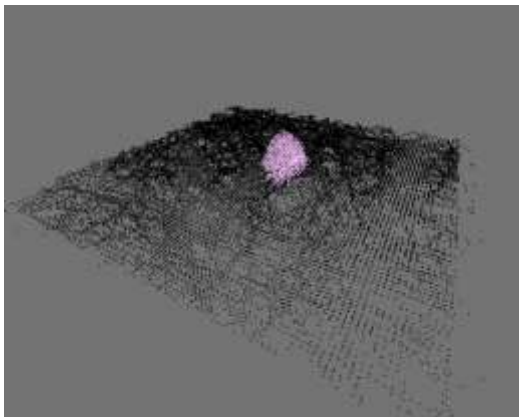
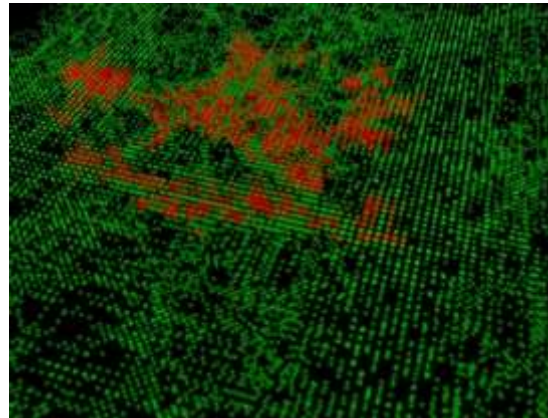
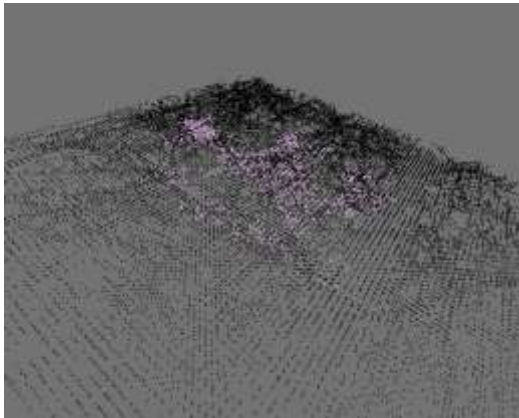


1	2	3	4	5
6	7	8	9	10
11	12	13	14	15
16	17	18	19	20
21	22	23	24	25

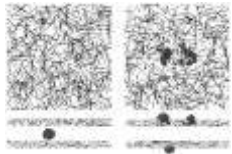
Simulace (popis)

Postup simulace – výstupy ze simulace

3D grafické výstupy



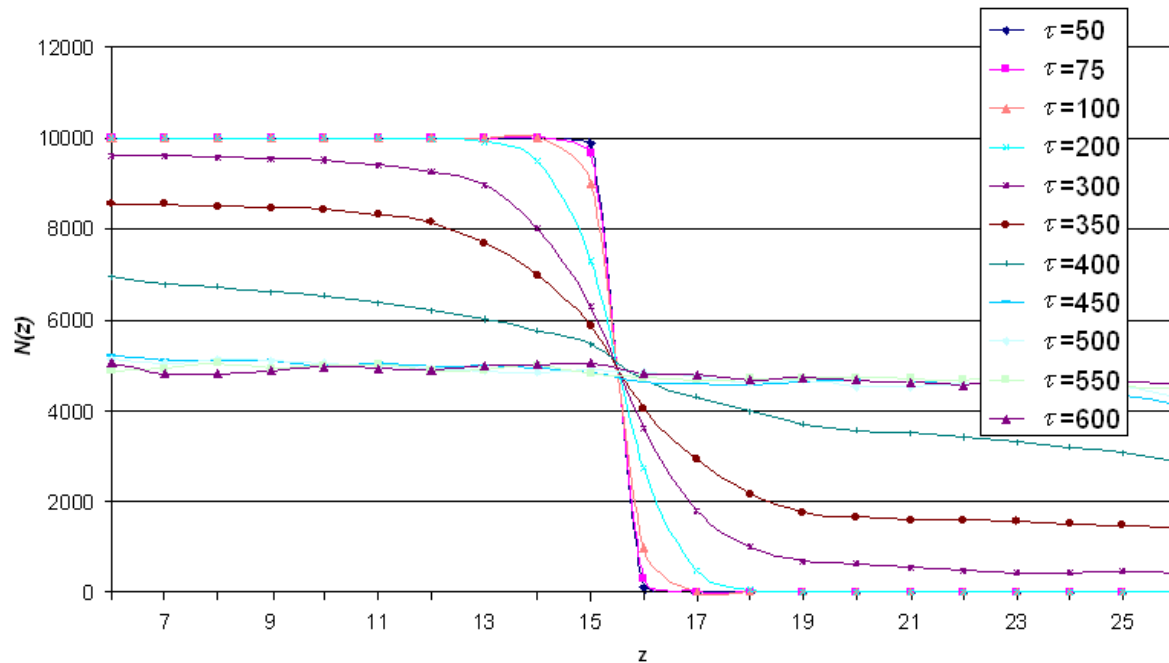
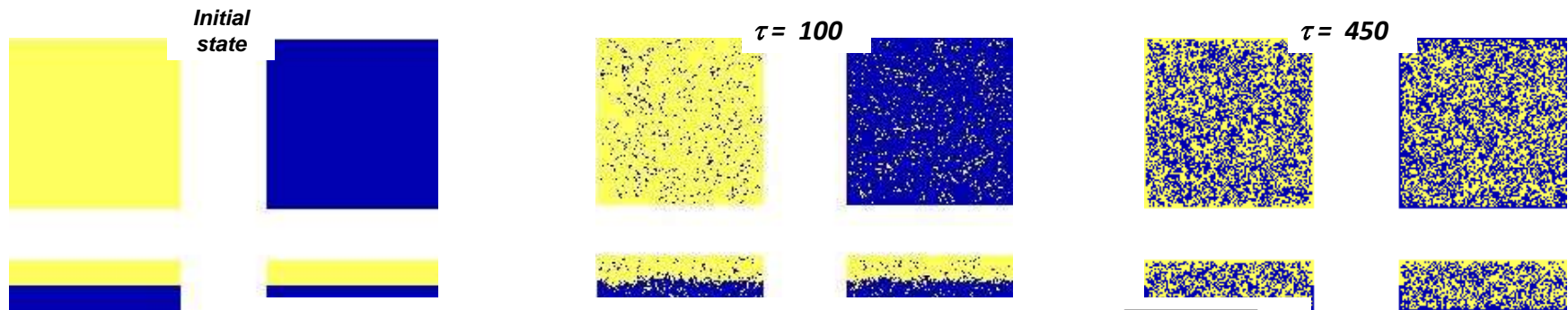
Charvát, R., Kostakova, E., Lukas, D.: Computer simulation and modeling of Liquid droplets deposition on nanofibers, 7th international conference – TexSci 2010, Liberec, Czech Republic, pg.103-108 ISBN:978-80-7372-635-5

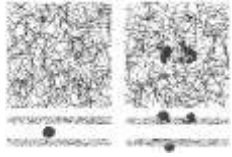


Simulace rovnovážných stavů



Simulace - Rozhraní kapalina-plyn při různých teplotách





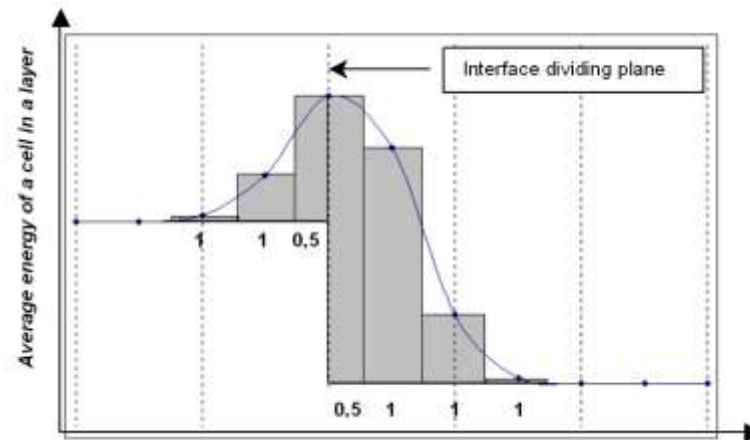
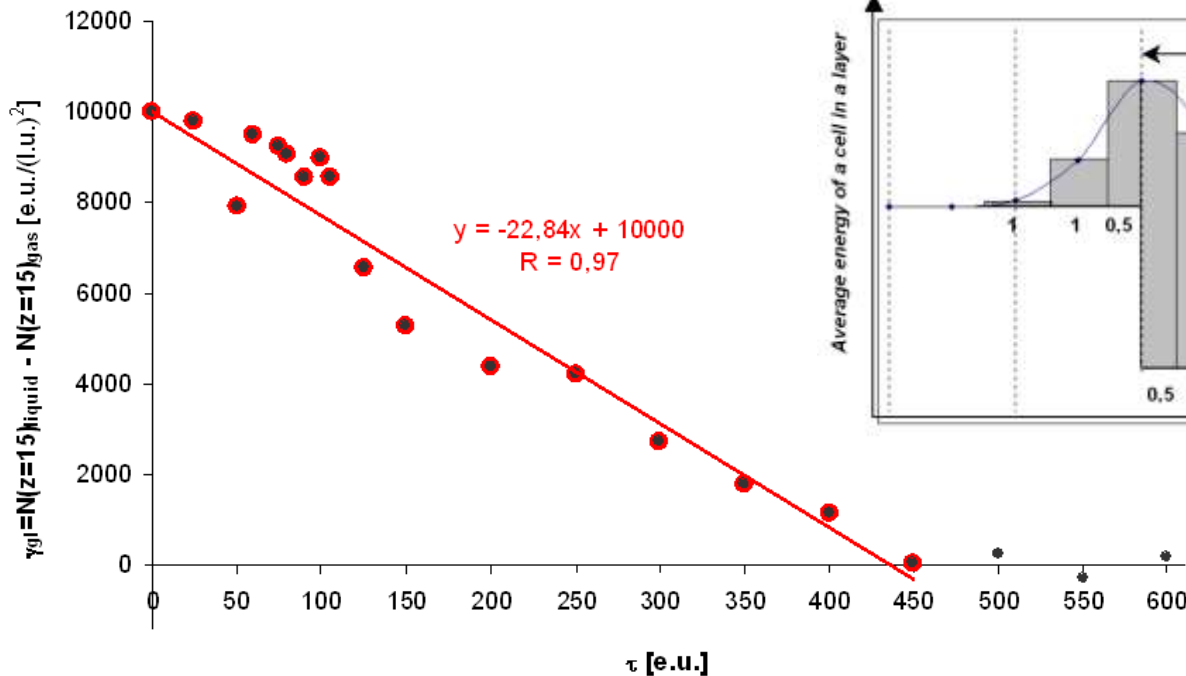
Simulace rovnovážných stavů



Simulace - Rozhraní kapalina-plyn při různých teplotách

Odhad kritické teploty

Odhad termodynamické teploty T odpovídající určité statistické teplotě τ systému.



The critical temperature is $\tau_c = 438 \text{ e.u.}$

For additional simulations introduced in this thesis the statistical temperature $\tau = 30$ is used as a thermodynamic temperature corresponding with water temperature about $T=10^\circ\text{C}$

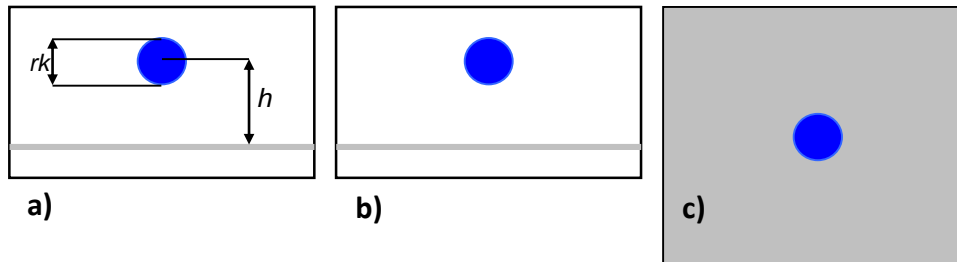


Simulace rovnovážných stavů



Simulace – Kapka na rovném substrátu

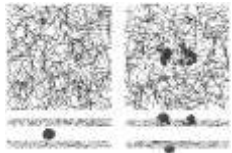
POČÁTEČNÍ STAV



KONEČNÝ STAV

JAK DOSÁHNOUT ZMĚNY NASTAVENÍ
KONTAKTNÍHO ÚHLU MEZI KAPALINOU A
PEVNOU LÁTKOU?

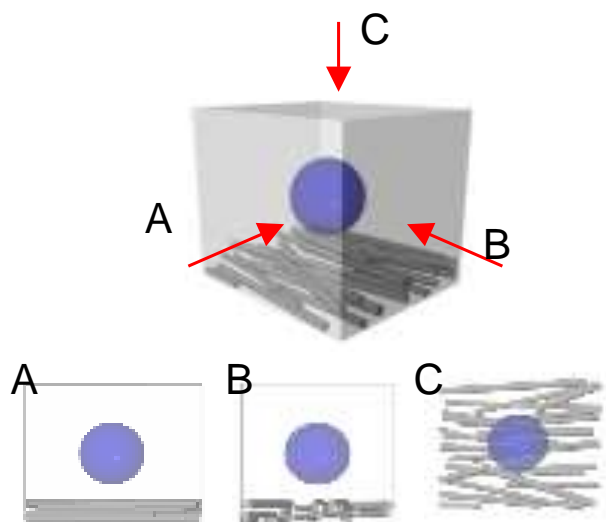
$\theta [^\circ]$	Final graphical output
90	
84,3	
78,4	
72,5	
60	
53	
45,6	
36,9	
25,8	
0	



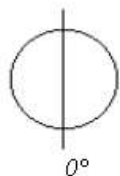
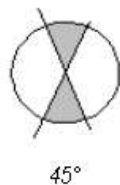
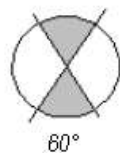
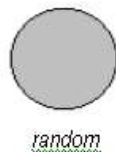
Simulace rovnovážných stavů



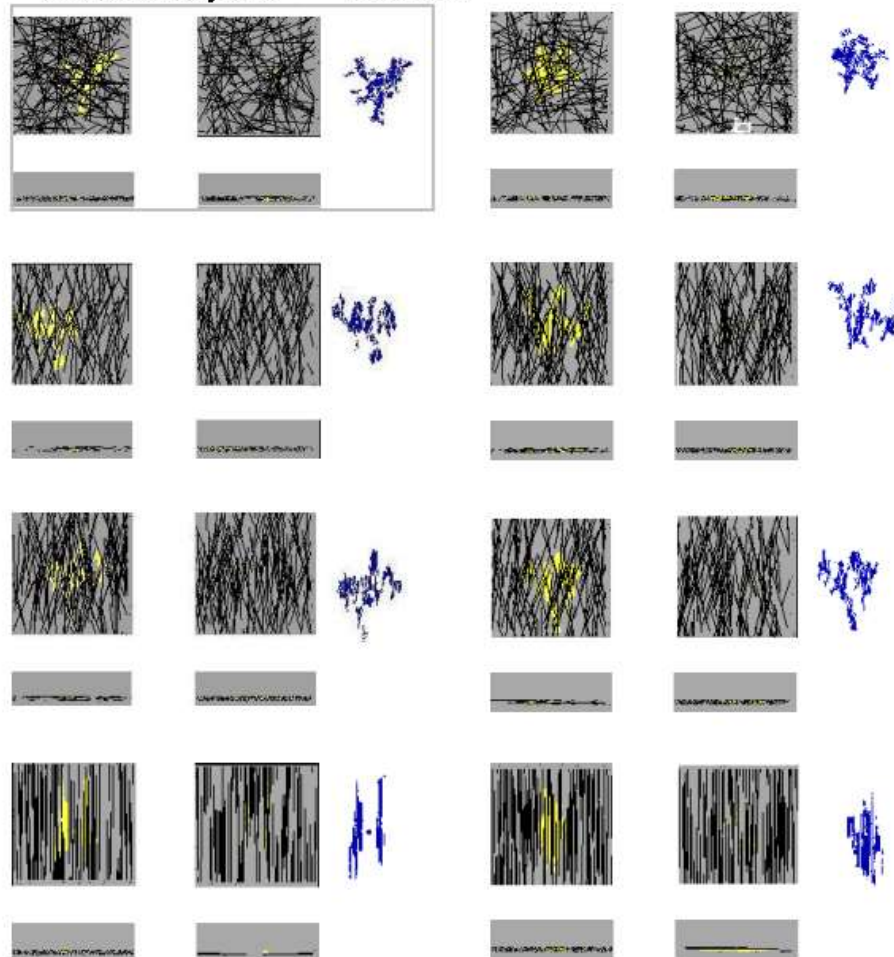
Simulace – Kapka ve vlákněném materiálu o různých orientacích vláken

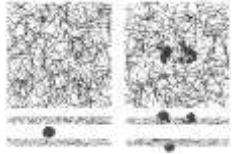


Orientation of fibers



Outputs of computer simulation – all systems – liquid bodies.





Simulace rovnovážných stavů



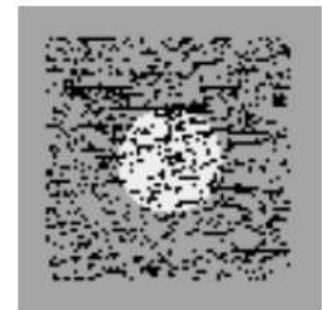
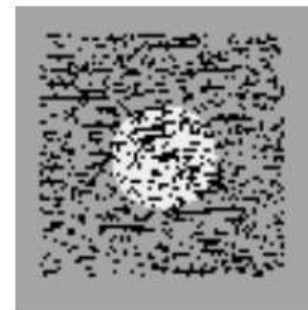
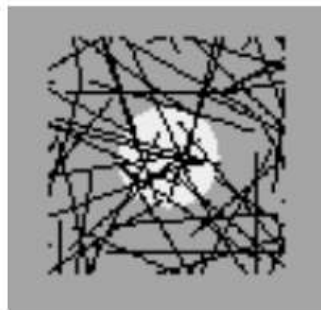
Simulace – „Záhady“ ve smáčení vláknenných materiálů

$$\theta = 180^\circ$$

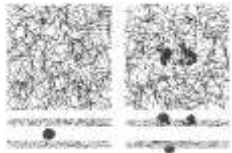
Kapalinové těleso umístěno dovnitř vláknenného materiálu – **Initial states**



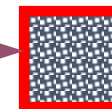
Tenký vláknenný materiál



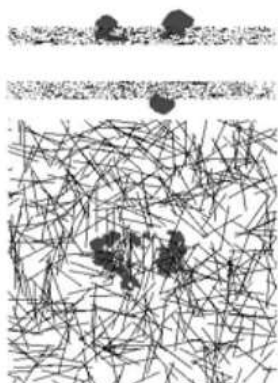
Objemný vláknenný materiál



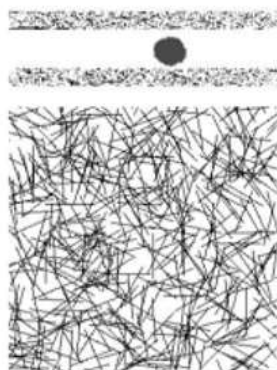
Simulace rovnovážných stavů



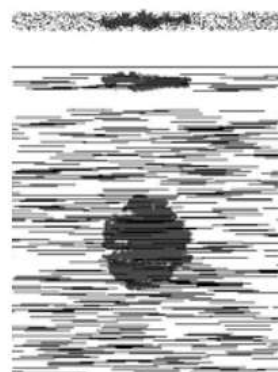
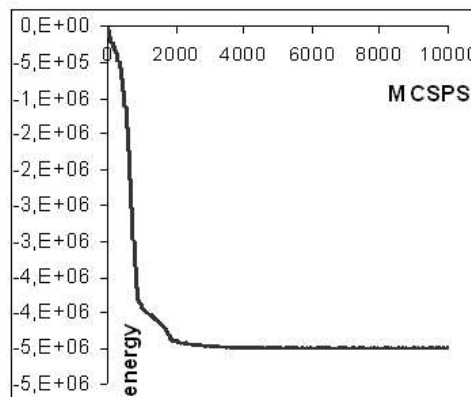
Simulace – „Záhady“ ve smáčení vláknenných materiálů



MCSPS=1000



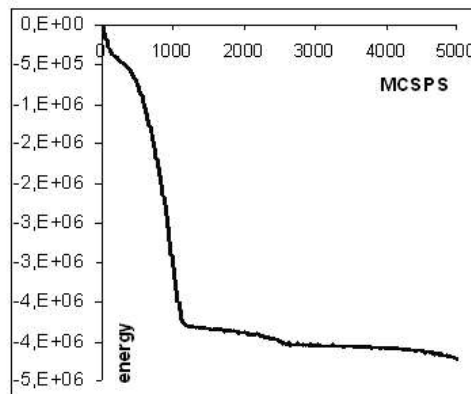
MCSPS=10000



MCSPS=200



MCSPS=5000

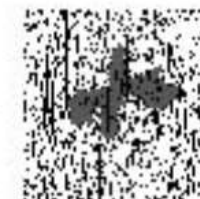


Kapka unikla

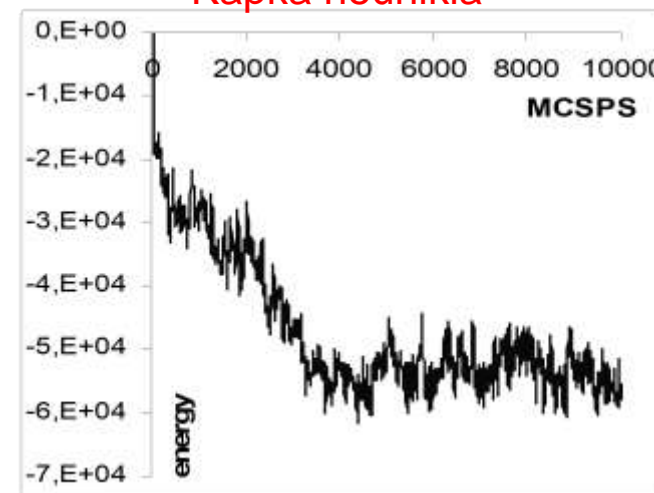
Tenký vláknenný materiál

$\theta = 180^\circ$

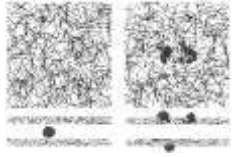
MCSPS=10 000



Kapka neunikla



Objemný vláknenný materiál



Simulace rovnovážných stavů



Interaction energies are symmetric functions of their two variables $E(x_i, x_j) = E(x_j, x_i)$ and represent the energies belonging to mutual interaction of neighbouring nodes i and j where random variables X_i and X_j have values x_i and x_j .

Interaction energies $E(x_i, x_j)$ in (e.u.)	Gas $x_i = 0$	Liquid $x_i = 1$	Fibre $x_i = 2$
Gas $x_j = 0$	-40	-10	20
Liquid $x_j = 1$	-10	-26	-10
Fibre $x_j = 2$	20	-10	0

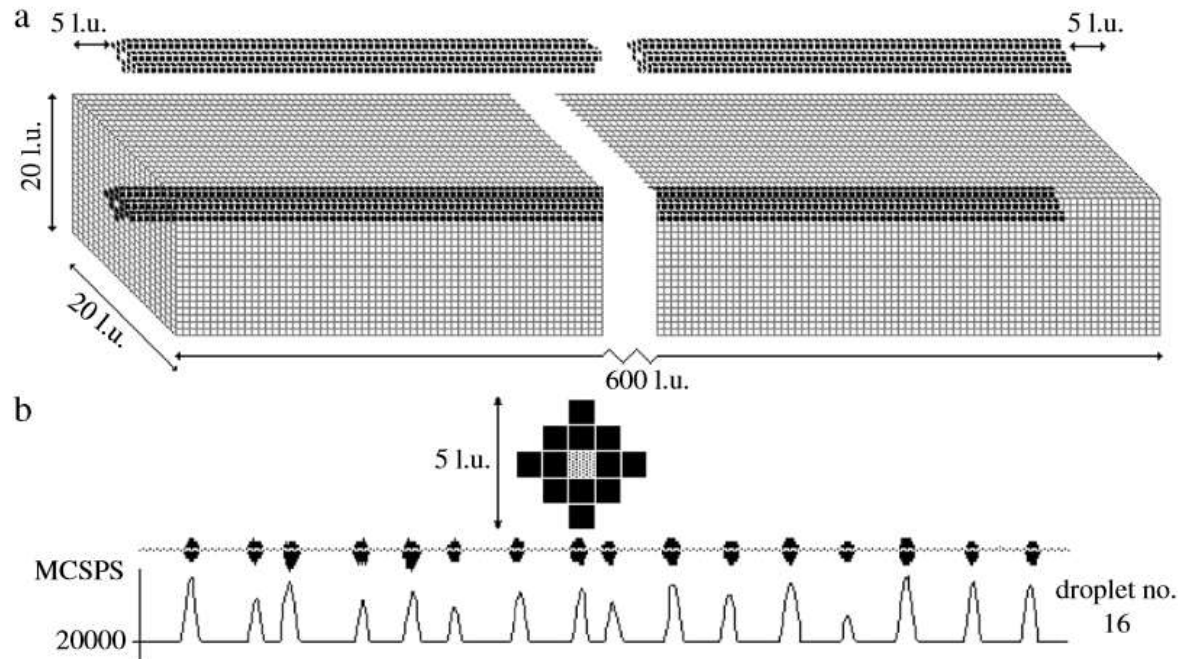
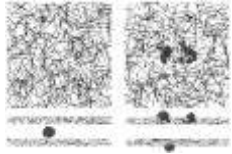


Fig. 2. (a) The original longitudinal and cross sectional configurations of the liquid coated fibre; the cubical simulation box of lattice-nodes has dimensions of $N = N_x \times N_y \times N_z = 600 \text{ l.u.} \times 20 \text{ l.u.} \times 20 \text{ l.u.} = 24 \times 10^4 \text{ (l.u.)}^3$. (b) Detailed cross sectional shape of the original liquid layer on a fibre and the liquid nodes distribution along the fibre axis after the detachment into individual unduloids at the time of $\text{MCSPS} = 20,000$.



Simulace rovnovážných stavů

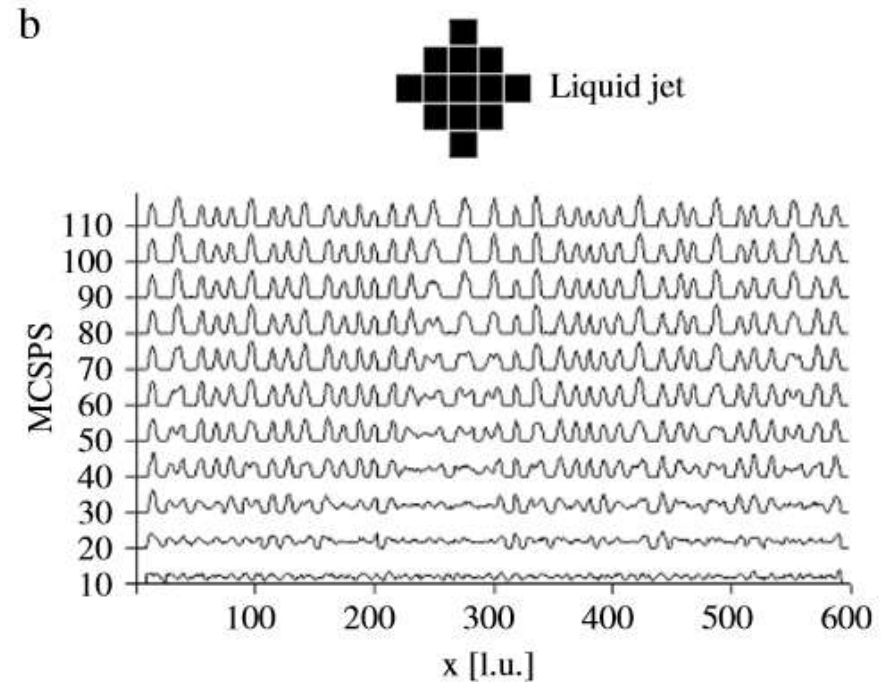
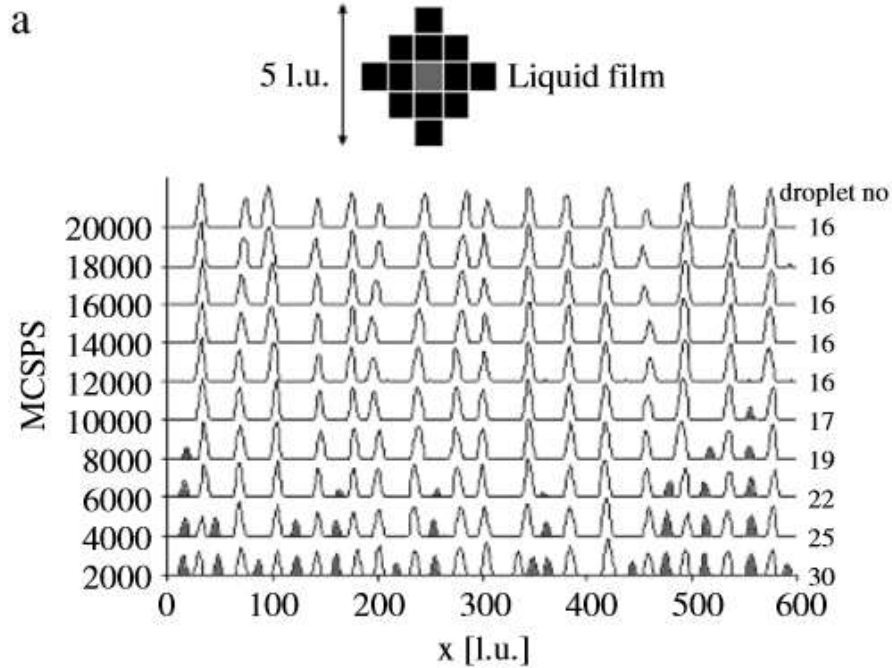
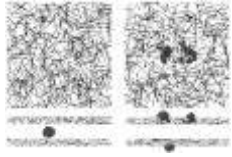
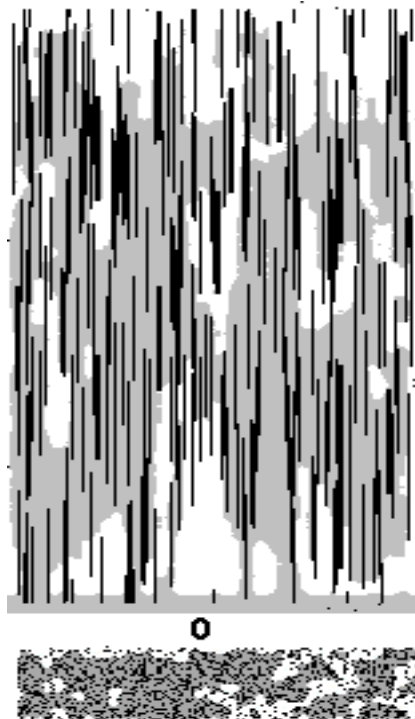


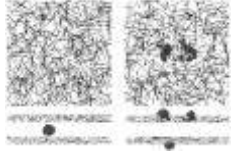
Fig. 3. The time versus the droplet numbers for (a) the liquid coating the fibre; (b) the pure liquid jet. Unduloids on the fibre merge and those, which disappeared, are marked in grey.



Simulace rovnovážných stavů



Výsledky simulace nasávání kapaliny do textilie. Kapalina je nasávána od spodního okraje vzorku. Vzorky svírají s vertikální osou úhly 0° , 45° a 90° . Obrázky vrchní zachycují výšku nasáté kapaliny do textilie, obrázky spodní jsou příčné řezy textilií ve třetině její výšky a ukazují nasávání kapaliny uvnitř textilie.



Simulace dynamiky smáčení



Simulace primárně pro sledování rovnovážných stavů, což je teoreticky i prakticky jednoznačně prokázáno.

Je možné použít tento „nástroj“ i pro sledování **dynamických jevů** smáčení?

Manna, S., S., Herrmann, H., J., Landau, D.,P.: A Stochastic Method to Determine the Shape of a Drop on a Wall, Journal of Statistical Physics, Vol. 66, No.3/4, 1992

PRVNÍ UKÁZALI, ŽE ZŘEJMĚ LZE V URČITÝCH PŘÍPADECH MODELOVAT DYNAMICKÉ JEVY