Computergestütztes wissenschaftliches Rechnen SS 2007

Übungsblatt 11

Georg-August-Universität Göttingen
Institut für Theoretische Physik
PD Dr. A. Honecker, S. Fuchs, J. Lampe

Aufgabe 1

Die Energie des Ising-Modells auf dem $L \times L$ Quadratgitter ist gegeben durch

$$E(s_1, \ldots, s_{L^2}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i \, s_j \, ,$$

wobei $\langle i, j \rangle$ die $2\,L^2$ Paare auf dem Quadratgitter sind (wir wählen periodische Randbedingungen entlang der x- und y-Richtung).
Wir wollen den magnetischen Ordnungsübergang mit einer Monte-Carlo-Simulation untersuchen. Dazu messen wir neben der Energie auch die Magnetisierung

$$M = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^{L^2} s_i \, .$$

a. Implementieren Sie den Einzel-Spin-Flip-Metropolis-Algorithmus für das Ising-Modell sowie die Messungen von E und M ! Da einige der folgenden Simulationen nicht-vernachlässigbare Zeit in Anspruch nehmen werden, sollten Sie auf eine effiziente Implementierung achten. Die Spins s_i dürfen Sie großzügig in einer `int`-Variable speichern, so dass der Zustand des Modells in einem zweidimensionalen Array gespeichert werden kann.

b. Wählen Sie als Anfangszustand zufällig $s_i = +1$ oder -1 mit jeweils gleicher Wahrscheinlichkeit !

c. Wir betrachten zunächst den Fall $k_B\,T = 2\,J$. Führen Sie Simulationen für $L = 6, 8, 10$ und 12 durch, wobei Sie im Abstand von jeweils $10\,L^2$ Einzel-Spin-Aktualisierungen insgesamt $n = 10\,000$ Messungen von E und M ausführen ! Schreiben Sie Ihre Messergebnisse in eine Datei, plotten Sie die Messwerte als Funktion Ihrer Monte-Carlo-Schritte und diskutieren Sie sowohl das Verhalten zu Beginn der Simulation als auch im späteren Verlauf !

d. Führen Sie nun Simulationen für $L = 8$, 16, 32 mit $k_B\,T/J = 0.5$, 1, 1.5, 1.75, 2, 2.25, 2.75, 3, 3.5, 4 und 4.5 sowie $L = 64$ und $k_B\,T/J = 1.5$, 1.75, 2, 2.25, 2.75, 3 und 3.5 durch ! Nehmen Sie jeweils $n = 10\,000$ Messungen von M im Abstand von $10\,L^2$ Einzel-Spin-Aktualisierungen vor ! Verwerfen Sie einen hinreichend langen Teil der Anfangsphase der Simulation (Equilibrieren) und mitteln Sie M^2 über den Rest der Simulation ! Plotten Sie schließlich $\sqrt{\langle M^2 \rangle}$ als Funktion von $k_B\,T/J$ und schätzen Sie die Position des Phasenübergangs !
Hinweis: Die Simulationen für die größeren L werden etwas Zeit in Anspruch nehmen. Diese Zeit sollten Sie nutzen, um die Ergebnisse für die kleineren L auszuwerten.