

Computerphysik

apl. Prof. Dr. R. Bulla

SS 2018

Blatt 12: Abgabetermin: Montag, der 16.07.2018, 12:00

Aufgabe 1: Ising-Modell – Magnetisierung

(7 Punkte)

Gesucht ist die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung, $M(T)$, des eindimensionalen Ising-Modells mit der Hamiltonfunktion

$$H(\{s_i\}) = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1} - h \sum_{i=1}^N s_i . \quad (1)$$

Dabei wurde die Hamiltonfunktion um den Term $h \sum_{i=1}^N s_i$ erweitert. Dieser Term entspricht einem zusätzlichen Magnetfeld und führt dazu, dass (für $h > 0$) die Ausrichtung der Spins in $+S^z$ -Richtung bevorzugt wird.

Berechnen Sie die Magnetisierung durch exakte Summation über alle 2^N Spinkonfigurationen, also

$$M(T) = \sum_{\{s_i\}} w(\{s_i\}) M(\{s_i\}) ,$$

mit

$$w(\{s_i\}) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H(\{s_i\}))$$

und der Zustandssumme

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \exp(-\beta H(\{s_i\}))$$

für die folgenden Parameter: $J = 1$, $N = 12$, T im Bereich $0.1 < T < 5$ und $h \in \{0.1, 0.2, 0.3, 1.0\}$ (k_B wird = 1 gesetzt). Stellen Sie das Ergebnis graphisch dar.

Aufgabe 2: Ising-Modell – Metropolis-Algorithmus

(10 Punkte)

Für das Ising-Modell Gl. (1) soll jetzt mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus eine Markov-Kette aus Spin-Konfigurationen $\{s_i\}^l$, $l = 1, \dots, L$, erzeugt werden. Die einzelnen Schritte des Metropolis-Algorithmus lauten folgendermaßen:

- wähle eine Zufallszahl $k \in \{1, \dots, N\}$;
- drehe den k -ten Spin um („Spin-Flip“): $\{\bar{s}_i\} = (s_1^l, \dots, -s_k^l, \dots, s_N^l)$;

- berechne

$$\alpha = \frac{w(\{\bar{s}_i\})}{w(\{s_i\}^l)}$$

und wähle eine Zufallszahl $\gamma \in [0, 1]$;

- Fallunterscheidung:

- falls $\alpha \geq \gamma$: Spin-Flip wird akzeptiert, d.h. $\{s_i\}^{l+1} = \{\bar{s}_i\}$;
- falls $\alpha < \gamma$: Spin-Flip wird abgelehnt, d.h. $\{s_i\}^{l+1} = \{s_i\}^l$.

Für die Magnetisierung bei der im Metropolis-Algorithmus verwendeten Temperatur T (enthalten in $w(\{s_i\})$) ergibt sich:

$$M(T) = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L M(\{s_i\}^l).$$

- a) Schreiben Sie ein Programm, welches ausgehend von einer zufällig gewählten Spinkonfiguration $\{s_i\}^1$ eine Markov-Kette entsprechend dieser Regeln erzeugt. Berechnen Sie damit die Magnetisierung $M(T)$ für $J = 1$, $h = 0.1$, $N = 12$ und $L = 2^{12}$ und T -Werte im Bereich $0.1 < T < 5$ und vergleichen Sie das Ergebnis mit dem aus Aufgabe 1. (10 Punkte)

Hier wurde also dieselbe Zahl an Summanden gewählt wie in der exakten Aufsummation von Aufgabe 1. Wie man an dem Ergebnis sieht, ist das Monte-Carlo-Verfahren für kleine Werte von N nicht von Vorteil.

Für $N = 100$ ist die exakte Aufsummation jedoch nicht mehr möglich (2^{100} Terme!).

- b) Für welche L -Werte erhält man mit dem Metropolis-Algorithmus bereits gut konvergierte Ergebnisse für $M(T)$ ($N = 100$)?