Übungen zur Einführung in die Computerphysik

Klessen / Spurzem

Sommersemester 2009

Blatt 13 (Abgabe bis 10. Juli 2009 oder nach Vereinbarung mit Übungsleiter)

<u>Präsenzübung Zufallszahlen</u>

- Schreiben Sie einen einfachen Zufallszahlengenerator, der lineare Kongruenzen

$$I_{j+1} = aI_j + c \pmod{m}$$

  verwendet, um gleichverteilte Zahlen $r_j = I_j/(m-1)$ zwischen 0 und 1 zu erzeugen (die I_j sind zwischen 0 und $m-1$ gleichverteilt). Wählen Sie zunächst $a = 106$, $m = 6075$, $c = 1283$, aus Num. Rec. empfohlen. Experimentieren Sie mit anderen Werten.

- Überzeugen Sie sich davon, daß Ihr Generator gleichverteilte Zahlen erzeugt, indem Sie zu zwei verschiedenen Startwerten I_0, J_0 Paare von normierten Zufallszahlen (r_i, s_i) erzeugen ($r_0 = I_0/(m-1)$, $s_0 = J_0/(m-1)$, $0 \leq r_i, s_i \leq 1$). Plotten Sie diese gegeneinander auf einem Quadrat $0 \leq r \leq 1$, $0 \leq s \leq 1$.

- Überzeugen Sie sich vom deterministischen Character eines solchen Zufallszahlengenerators indem Sie I_{j+1} gegen I_j plotten.

- Wiederholen Sie die vorigen beiden Punkte unter Verwendung der Routine `ran2` aus den Numerical Recipes.

- Demonstrieren Sie das Gesetz der großen Zahl ("Central Limit Theorem"), indem Sie mit Zufallszahlen die Augenzahl beim Würfeln simulieren (Augenzahl zwischen 1 und 6, ermittelt jeweils durch eine Zufallszahl (`ran2`) gleichverteilt zwischen 0 und 1). Bei 10 Würfen liegen die möglichen Werte der Summe aller Augenzahlen zwischen 10 und 60. Plotten Sie die Häufigkeit der Werte bei insgesamt 10000 Experimenten (ein Experiment gleich 10 Würfe) und vergleichen Sie mit der theoretisch erwarteten Verteilung.

Eine weitere Präsenzübung zur Vorbereitung der Bearbeitung der Aufgabe zum Ising-Modell folgt weiter unten.

<u>Hausaufgabe Zufallszahlen 5 Punkte</u>
(Weitere 15 Punkte Hausaufgabe Ising-Modell siehe unten)

Monte Carlo Integration – Importance Sampling: Berechnen Sie das Integral

$$I = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-y_1^2 - y_2^2) dy_1 dy_2$$

numerisch mit Hilfe von Monte Carlo Verfahren.
Verwenden Sie dabei:

- gleichverteilte Zufallszahlen im Bereich $[-a, +a]$. Variieren Sie a und die Zahl der Zufallszahlen, die Sie verwenden. Welches sind die optimalen Parameter um ein zuverlässiges Ergebnis (einfache, doppelte Genauigkeit) zu bekommen?
- Importance Sampling nach den in der Vorlesung gegebenen Funktionen

  $$\begin{aligned} y_1 &= \sqrt{-2 \ln x_1} \cos(2\pi x_2) \\ y_2 &= \sqrt{-2 \ln x_1} \sin(2\pi x_2) \end{aligned}$$

  mit $x_1, x_2 \in [0, 1]$.

Vergleichen Sie die benötigte Anzahl von Zufallszahlen der beiden Methoden um ein Ergebnis vergleichbarer Genauigkeit zu bekommen.

Präsenzübung Ising-Modell

Programmierung des Metropolis-Algorithmus für das Ising-Modell

Das Ising Modell ist ein einfaches Modell für ein ferromagnetisches Material in 2 Raumdimensionen. Wir nehmen dazu ein quadratisches Gitter mit jeweils n Gitterplätzen in x und y Richtung an. Auf jedem dieser Gitterplätze α befindet sich ein Spin s_α (ein magnetisches Moment), der sich entweder parallel $s_\alpha = 1$ oder antiparallel zur z-Achse $s_\alpha = -1$ orientieren kann. Die Energie einer solchen Konfiguration (eines Spinzustandes S) schreibt man dann in der Form

$$H(S) = -B \sum_\alpha s_\alpha - J \sum_{\langle\alpha\beta\rangle} s_\alpha s_\beta \tag{1}$$

Der Summationsindex $\langle\alpha\beta\rangle$ bezeichnet die Summation über alle Paare von Gitterplätzen, die direkt benachbart sind (nicht diagonal). Man beachte, daß $M = \sum_\alpha s_\alpha$ gerade das magnetische Moment des Spingitters in einem festgelegten Zustand S ist, $m = M/n$ das magnetische Moment pro Spinplatz (um die Ergebnisse für verschieden große Spingitter vergleichen zu können, ist es sinnvoll, die Meßgrößen auf die Zahl der Spins n zu normieren). Wir nehmen periodische Randbedingungen an: ein Spin am unteren Rand des Gitters besitzt einen direkten Nachbarn am entsprechenden Gitterplatz des oberen Randes. Das gleiche gilt für den linken und den rechten Rand. Man kann nun bei vorgegebenen Werten für Temperatur T, Spin-Wechselwirkung J und Magnetfeld B (in z-Richtung) den Erwartungswert $\langle m\rangle$ der Magnetisierung dieses Spingitters (pro Spin) approximieren durch ein Monte Carlo-Integral nach

$$\langle m\rangle = \frac{1}{n}\sum_i w(S_i)M_i = \frac{1}{nN}\sum_i M_i = \frac{1}{nN}\sum_i \left(\sum_\alpha s_\alpha\right)_i \tag{2}$$

Dabei geht die i-Summe über N erlaubte Spinzustände (Anzahl der Sweeps im Experiment) des Gesamtsystems, die der kanonischen oder Gibbs-Boltzmann Verteilung genügen sollen (Wahrscheinlichkeit eines Zustandes i ist $w(S_i)$). Die α-Summe berechnet bei vorgegebenem Spinzustand S_i die gesamte Spinprojektion in z-Richtung (das magnetische Moment m_i). Die Gewichtsfunktion ergibt sich aus den Regeln der Thermodynamik als

$$w(S_i) = \frac{\exp\left(-\beta H(S_i)\right)}{\mathcal{Z}}\ ;\ \mathcal{Z} = \sum_i \exp\left(-\beta H(S_i)\right) \tag{3}$$

mit $\beta = 1/kT$ und der Zustandssumme $\mathcal{Z}$. Wir können die Zustandssumme (und damit die Gewichtsfunktion) nicht direkt berechnen, stattdessen erzeugen wir eine Verteilung von Zuständen mit dem Metopolis-Verfahren, welche der Wahrscheinlichkeits-Verteilung $w(S_i)$ genügen. Entsprechend kann man auch die mittlere Energie des Systems (Energie pro Gitterplatz) ausrechnen als

$$\langle e\rangle = \frac{1}{n}\sum_i w(S_i)H(S_i) = \frac{1}{nN}\sum_i H(S_i). \tag{4}$$

Nun führen Sie die folgenden Schritte aus:

1. Generieren Sie eine Zufallskonfiguration, indem Sie für jeden Gitterplatz eine Spinorientierung auswürfeln. Wählen Sie $b = \beta B$, und $j = \beta J$ als dimensionslose Variable, und testen Sie den Algorithmus anhand der Werte von z.B. $b = 0.2$, $j = 0.25, 0.6$.

2. Für jeden der Gitterplätze führen Sie dann die folgende Prozedur aus:

   - Würfeln Sie einen neuen Spin für den Gitterplatz aus.
   - Ist der neue Spin gleich dem alten, gehen Sie zum nächsten Gitterplatz.
   - Hat der neue Spin das umgekehrte Vorzeichen, so berechnen Sie die Energiedifferenz ΔE zwischen der alten und der neuen Konfiguration. Ist $\Delta E < 0$, hat die neue Konfiguration ein größeres Gewicht und der Spinflip wird akzeptiert. Ist $\Delta E > 0$ wird die neue Konfiguration mit einer Wahrscheinlichkeit $\exp(-\beta\Delta E)$ akzeptiert. Wählen Sie $h = \beta H$, $b = \beta B$, und $j = \beta J$ als dimensionslose Variable.

3. Ist diese Prozedur für alle Gitterplätze durchgeführt (dies bezeichnet man als einen Sweep), so haben Sie eine neue Gesamtkonfiguration S_i generiert, die in der Summe (2) oder auch (4) aufgenommen wird

4. Berechnen Sie, nachdem Sie eine hinreichende Zahl von S_i generiert haben, die Mittelwerte (Erwartungswerte) für die Magnetisierung pro Spin und die Energie pro Spin. Ob die Zahl der Sweeps hinreichend ist können Sie am Schwankungsquadrat der Werte abschätzen (Fehlerabschätzung).

5. Zu Beginn sollten erst jeweils einige Sweeps durchgeführt werden, damit man mit einer "typischen Konfiguration startet.

<u>Hausaufgabe Ising-Modell 15 Punkte</u>

- Ising-Modell in der "mean-field" Näherung

  $$b_{\mathrm{mf}} = b + 4j \left(\frac{e^{b_{\mathrm{mf}}} - e^{-b_{\mathrm{mf}}}}{e^{b_{\mathrm{mf}}} + e^{-b_{\mathrm{mf}}}} \right) \quad ; \quad m_{\mathrm{mf}} = \tanh(b_{\mathrm{mf}})$$

  Setzen Sie $j = 0.6$ und berechnen Sie die Magnetisierung m als Funktion des externen Magnetfeldes (Hysterese, Plot) (6 Punkte)

- Ising Modell mit dem Metropolis-Algorithmus (auch: MRRTT-Algorithmus). Berechnen Sie dazu die Energie $\langle e \rangle$ und Magnetisierung m pro Gitterplatz als Funktion des Magnetfeldes (eine sinnvolle Gitterlänge ist 30, d.h. $n = 900$). Überprüfen Sie das Programm zunächst einmal für $j = 0$. In diesem Fall liefert die mean-field Näherung das exakte Ergebnis. Lösen Sie dann für wenigstens zwei weitere Werte von j das Ising-Modell (und zwar einmal für $j \leq 0.4$ und einmal für $j \geq 0.5$). Plotten Sie wieder die Energie pro Gitterplatz und die Magnetisierung als Funktion des externen Magnetfeldes. Beschreiben Sie Ihre Beobachtungen. (9 Punkte)