9. Übungsblatt zu Computersimulationen
SS 2006

Entwickeln Sie ein Programm zur Simulation des **zweidimensionalen Ising Modelles**. Nehmen Sie dazu an, dass die Spins auf den Gitterpunkten eines quadratischen Gitters der Kantenlänge L lokalisiert sind. Der Spin kann nur zwei Werte annehmen: +1 für *spin up* und -1 für *spin down*. Die zugehörige Hamiltonfunktion ist durch

$$\mathcal{H}(h, \mathbf{s}) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{N}{}' J_{ij} s_i s_j - h \sum_{i=1}^{N} s_i$$

gegeben. Hier ist s_i der Spin am Gitterpunkt i, $N = L^2$, h bezeichnet ein externes Magnetfeld, s $= (\{s_i\}|i = 1, N)$ symbolisiert eine mögliche Spinkonfiguration des Gitters und J_{ij} ist das gitterplatzabhängige Austauschpotential. In der ersten Summe gilt $i \neq j$. Thermodynamische Mittelwerte einer Observablen $\mathcal{O}$ des Systems, welche nur von der Spinkonfiguration abhängen, werden durch

$$\langle \mathcal{O} \rangle_T = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\mathbf{s}} \mathcal{O}(\mathbf{s}) \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(h, \mathbf{s})}{k_B T} \right),$$

beschrieben, mit T der Temperatur, k_B der Boltzmann Konstanten und $\mathcal{Z}$ der Zustandssumme. Berücksichtigt wurde hier bereits, dass s nur diskrete Werte annehmen kann, weshalb über die möglichen Spinkonfigurationen summiert wird. Insbesonders erhalten wir für die Magnetisierung

$$M(h) = \langle m(h) \rangle_T = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\mathbf{s}} m(\mathbf{s}) \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(h, \mathbf{s})}{k_B T} \right),$$

mit

$$m(\mathbf{s}) = \sum_{i=1}^{N} s_i.$$

Analog gilt für die Energie des Systems

$$E(h) = \langle \mathcal{H}(h) \rangle_T = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\mathbf{s}} \mathcal{H}(h, \mathbf{s}) \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(h, \mathbf{s})}{k_B T} \right).$$

In der Simulation spezialisieren Sie sich auf ein quadratisches Gitter mit periodischen Randbedingungen. Die Hamiltonfunktion des Systems wird in der *nearest neighbor approximation* zu

$$\frac{\mathcal{H}(h, \mathbf{s})}{k_B T} = -\frac{J}{k_B T} \sum_i s_i \sum_{j = \mathrm{nn}(i)} s_j - \frac{h}{k_B T} \sum_i s_i,$$

mit $\mathrm{nn}(i)$ den Indizes der (vier) nächsten Nachbarn des Gitterpunktes i. In Einheiten von (J/k_B) erhalten wir schließlich für die Hamiltonfunktion

$$\frac{\bar{\mathcal{H}}(h,\mathbf{s})}{T} = -\frac{1}{T}\left[\sum_i s_i \sum_{j=\mathrm{nn}(i)} s_j - \bar{h}\sum_i s_i\right],$$

mit $\bar{\mathcal{H}}(h,\mathbf{s}) = \mathcal{H}(h,\mathbf{s})/J$ und $\bar{h} = h/J$. Als optimale Dichtefunktion zur Berechnung thermodynamischer Mittelwerte bietet sich die Boltzmannverteilung

$$p(\mathbf{s}) = \frac{1}{\mathcal{Z}}\exp\left(-\frac{\bar{\mathcal{H}}(h,\mathbf{s})}{T}\right)$$

an. Schließlich finden wir für die Margnetisierung pro Gitterpunkt

$$\mathcal{M}(\mathbf{s}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} s_i. \tag{1}$$

Ist nun s_i die Spinkonfiguration im i-ten Simulationsschritt und ist $\Delta\bar{\mathcal{H}}$ die Differenz in den Hamiltonfunktionen aufgrund einer neu vorgeschlagenen Testkonfiguration s_t der Spins, so finden wir die bereits wohlbekannte Akzeptanzwahrscheinlichkeit

$$P(\mathbf{s}_{i+1} = \mathbf{s}_t|\mathbf{s}_i) = \min\left[1, \exp\left(-\frac{\Delta\bar{\mathcal{H}}}{T}\right)\right] \tag{2}$$

des Metropolis Algorithmus für die Akzeptanz der Testkonfiguration s_t als neue Spinkonfiguration s_{i+1} des Gitters. Die im Zuge der Simulation generierten Spinkonfigurationen bilden also eine Markov Kette.

Die Simulation

1. Initialisierung: Es bestehen grundsätzlich zwei Möglichkeiten die Spinkonfiguration zu initialisieren: (a) die ferromagnetische Konfiguration (alle Spins sind zueinander parallel ausgerichtet) und (b) die Zufallskonfiguration.

2. In einem Simulationsschritt (Monte Carlo Schritt) werden die Gitterpunkte entweder sequenziell oder zufällig besucht. Der Spin des aktuellen Gitterpunktes wird umgedreht und die dadurch entstehende Änderung $\Delta\bar{\mathcal{H}}$ wird berechnet. Die neue Konfiguration wird auf der Basis der Akzeptantwahrscheinlichkeit (2) im Sinne eines Metropolis Algorithmus akzeptiert oder verworfen. Wurden N Gitterpunkte besucht, so ist der MC-Schritt beendet und eine neue Spinkonfiguration liegt vor.

3. Es wird nun $\mathcal{M}(\mathrm{s})$ entsprechend (1) berechnet. Das Ergebnis wird abgespeichert. Wurde die gewünschte Maximalzahl von MC-Schritten noch nicht erreicht, geht man zu Punkt 2 zurück.

4. Nach Erreichen der gewünschten Zahl von MC-Schritten berechnet man den Erwartungswert der Magnetisierung, die Varianz und die Standardabweichung.

5. Überlegen Sie, dass es im gewählten Modell nur eine beschränkte Zahl unterschiedlicher Werte für die Akzeptanzwahrscheinlichkeit geben kann. Nützen Sie dies aus um diese Werte bereits vor Beginn der Simulation zu berechnen und abzuspeichern.

Durchführung der Übung

1. Bestimmen Sie die Magnetisierung des Ising Modelles im Temperaturbereich $1.5 \leq T \leq 3.4$ für unterschiedliche Kantenlängen $20 \leq L \leq 80$. Stellen sie das Ergebnis graphisch (mit Fehlerbalken) dar. Nahe $T_c = 2.269$ sollte ein 'Phasenübergang' vom Ferromagnetismus zum Paramagnetismus beobachtbar sein.

2. Während des Simulationsablaufes ist die Veränderung der Spinkonfiguration graphisch darzustellen. (Nicht notwendiger Weise in jedem Schritt ...)

3. Untersuchen Sie das Verhalten des Systems (etwa $L = 4$) nahe T_c. Was wird beobachtet?

4. Untersuchen Sie schließlich den Einfluß eines äußeren Magnetfeldes auf die Magnetisierung als Funktion der Temperatur. Wie unterscheidet sich das Ergebnis vom Fall ohne äußeres Magnetfeld?

5. **Optional!** Untersuchen Sie für eine feste Temperatur T $(1.5 \leq T \leq 3.4)$ das grundsätzliche Verhalten des Algorithmus für unterschiedliche Werte von L. Hier sind vor allem Untersuchungen im Sinne von Kapitel 7.2 und 7.3 der Vorlesungsunterlage von Bedeutung: (a) Wann ist 'Stabilität' des Metropolis Algorithmus erreicht? (b) Wie wirken sich Korrelationen zwischen den einzelnen Spinkonfigurationen auf das Ergebnis für die Magnetisierung aus? (c) Wie kann man diese Einflüße reduzieren? (d) Welchen Einfluß hat die gewählte Initialisierungsmethode auf das Verhalten der Simulation? (e) Welchen Einfluß hat die Abarbeitung der Gitterpunkte (sequentiell oder zufällig)? All diese Fragen sind für unterschiedliche Temperaturen und Gittergrößen zu untersuchen. Stellen Sie dazu die Magnetisierung als Funktion des Index des MC-Schrittes dar.