

Übung 2

Das Ising Modell

Ihnen wird die Klasse `IsingSimulator` zur Verfügung gestellt, mit der Sie zufällige Spin-Konformationen ± 1 auf einem zweidimensionalen Gitter der Größe $L \times L$ erstellen können. Sie ist noch nicht vollständig.

1. Implementieren Sie die Funktion zur Berechnung der Magnetisierung M .
2. Implementieren Sie die Funktion zur Berechnung der Gesamtenergie E . Beachten Sie periodische Randbedingungen.

Simple Sampling

1. Nutzen Sie die Klasse, um eine große Anzahl an unabhängigen Konformationen (etwa 10^6) zu erzeugen. Wir betrachten die Fälle $B = 0$ und $B = 1$ auf einem Gitter $L = 20$. Zur Vereinfachung setzen wir $J = 1$.
2. Ermitteln Sie $\langle M \rangle$, $\langle E \rangle$ und C (aus den Fluktuationen von E) als Funktion von T aus diesen Konformationen und variieren Sie T dahingehend, dass Sie den Datenbereich $T > T_c$ und $T \rightarrow 0$ abdecken. Tragen Sie ihre Ergebnisse für $B = 0$ und $B = 1$ geeignet auf und vergleichen Sie mit den verschiedenen Ergebnissen aus der Vorlesung - soweit möglich. Was beobachten Sie?

Importance Sampling

1. Erweitern Sie das Programm um den Metropolis Algorithmus. Vervollständigen Sie dazu die Funktion `performMCS(...)`.
2. Wir betrachten zunächst den Fall $B = 0$. Beginnen Sie mit einer zufällig erstellten Konformation und equilibrieren Sie das System mit Hilfe von Metropolis. Ermitteln Sie die Magnetisierung M als Funktion der Simulationsdauer t für 100 unabhängige Startkonformationen und tragen Sie $\langle M(t) \rangle$ gegen t auf. Was beobachten Sie und welche Schlussfolgerungen ziehen Sie für die Equilibrierung des Systems?
3. Wiederholen Sie Punkt 2 des Simple Sampling wobei Sie nun für jede Temperatur zunächst equilibrieren und anschließend eine ausreichende Zahl an Konformationen bei gegebener Temperatur zur Auswertung ermitteln. Beginnen Sie mit hohen Temperaturen und kühlen Sie schrittweise weiter ab. Vergleichen Sie ihre Ergebnisse mit den Resultaten von Simple Sampling und erklären Sie die Unterschiede. Vergleichen Sie ebenfalls mit den Lösungen aus der Vorlesung.