

Computational Physics

Übungsblatt 9

Miriam Simm

miriam.simm@tu-dortmund.de

Katrin Bolsmann

katrin.bolsmann@tu-dortmund.de

Mario Alex Hollberg

mario-alex.hollberg@tu-dortmund.de

Abgabe: 10. Juli 2020

Simulation des zweidimensionalen Ising-Modells

In dieser Aufgabe mit dem Metropolis-Algorithmus als Monte-Carlo-Methode ein Ising-Modell in zwei Dimensionen ohne externes Magnetfeld simuliert. Das Modell hat die Energie

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j \text{ n.N.}} \sigma_i \sigma_j,$$

wobei nur über nächste Nachbarn summiert wird. Es wird ein zweidimensionales System der Größe $A = L \times L$ mit periodischen Randbedingungen, die in der Funktion `randbedingungen` implementiert sind, betrachtet. Hier verwendet wird ein System der Größe 100×100 mit entsprechend 10000 Teilchen.

Initialisierung

Vor Beginn der Messung erfolgt eine Initialisierung. Die Teilchen werden dazu den Gitterplätzen zugeordnet, was in der Funktion `initialisierung` implementiert ist. Die Teilchen werden in einer $3 \times N$ -Matrix gespeichert, wobei die ersten beiden Zeilen jeweils die x - und y -Koordinate und die dritte Zeile die Spinausrichtung angibt. Die Spins können zu Beginn entweder vollständig geordnet sein, oder eine zufällige Ausrichtung haben, was über den Übergabewert `ordnung` gesteuert wird.

Äquilibration

Dem System werden mit dem Metropolis-Algorithmus Spin-Flips angeboten, was in der Funktion `aequilibration` und `metropolis` implementiert ist. Nach einer Äquilibrationsphase mit 10^5 Schritten werden für die drei Temperaturen $k_B T = 1.5$, $k_B T = 2.27$ und $k_B T = 3$ Momentaufnahmen erstellt, die in Abbildung 1, 2 und 3 dargestellt sind.

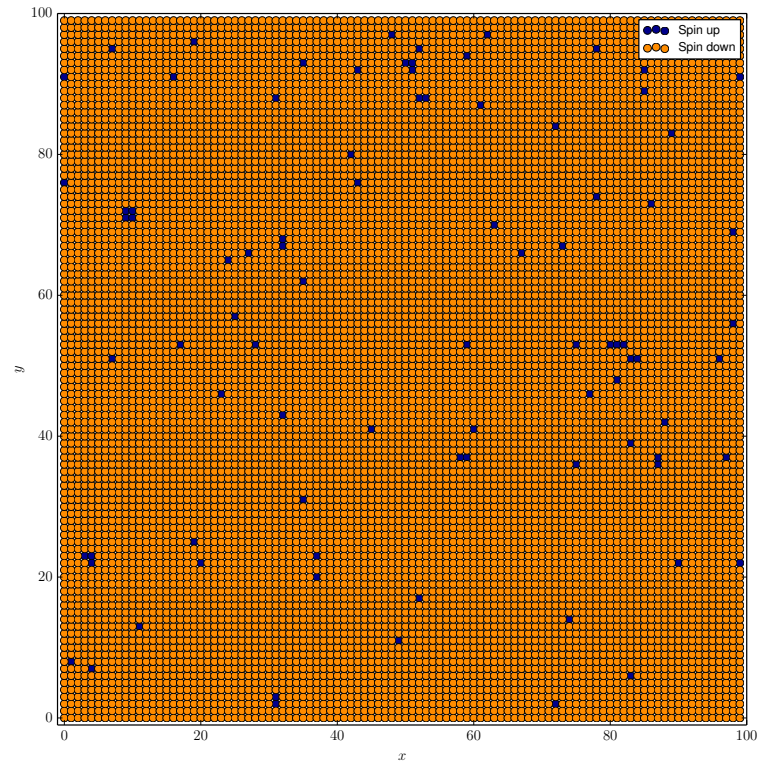


Abbildung 1: Momentaufnahme des Systems bei $k_{\text{B}}T = 1.5$.

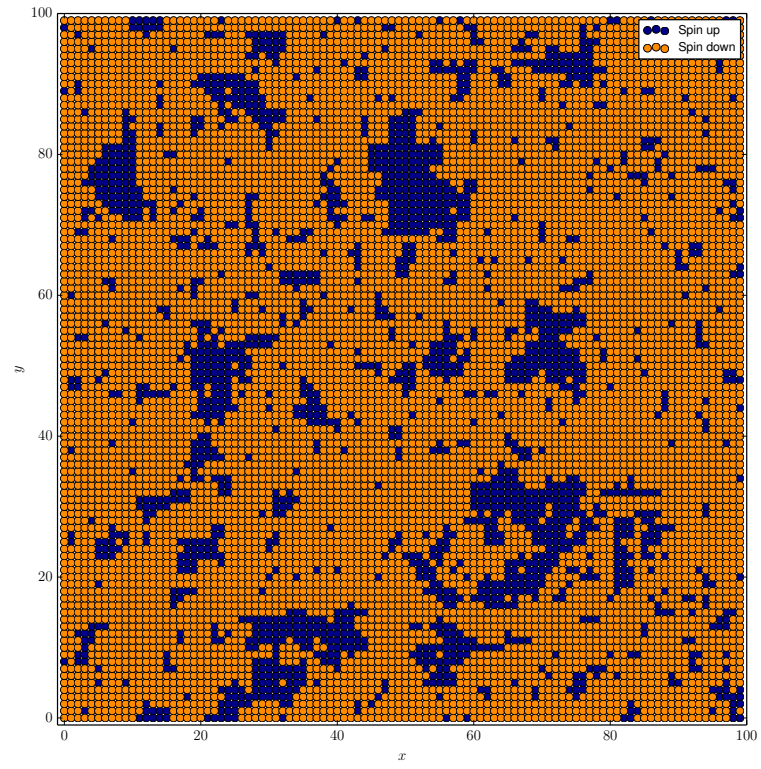


Abbildung 2: Momentaufnahme des Systems bei $k_{\text{B}}T \approx 2.27$.

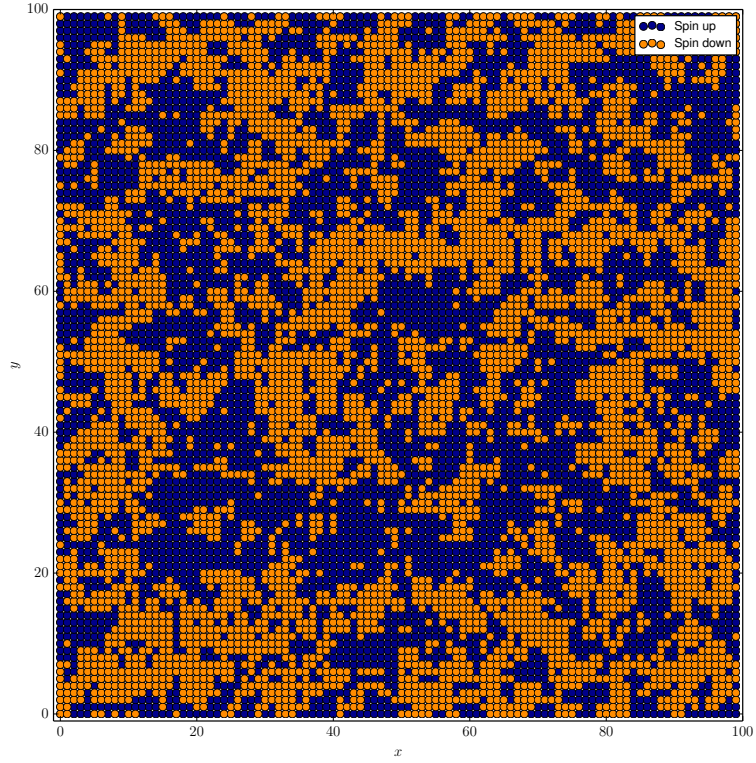


Abbildung 3: Momentaufnahme des Systems bei $k_{\text{B}}T = 3$.

In Abbildung 1 ist deutlich die spontane ferromagnetische Ordnung sichtbar, die sich bei $T < T_c$ ausbildet, da nahezu alle Spins in eine Richtung zeigen. Abbildung 2 zeigt, dass sich im Bereich der kritischen Temperatur T_c Bereiche ausbilden, in denen die Spins entweder nach oben oder nach unten zeigen. Bei höherer Temperatur $T > T_c$ wird das System aufgrund thermischer Fluktuationen ungeordnet, wie in Abbildung 3 ersichtlich ist.

Anschließend wird in der Äquilibrierungsphase die mittlere Energie pro Spin als Funktion der Simulationszeit gemessen

$$e(t) = \frac{E(t)}{N} = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N}.$$

Die Ergebnisse für geordnete Anfangsbedingungen sind in Abbildung 4 dargestellt.

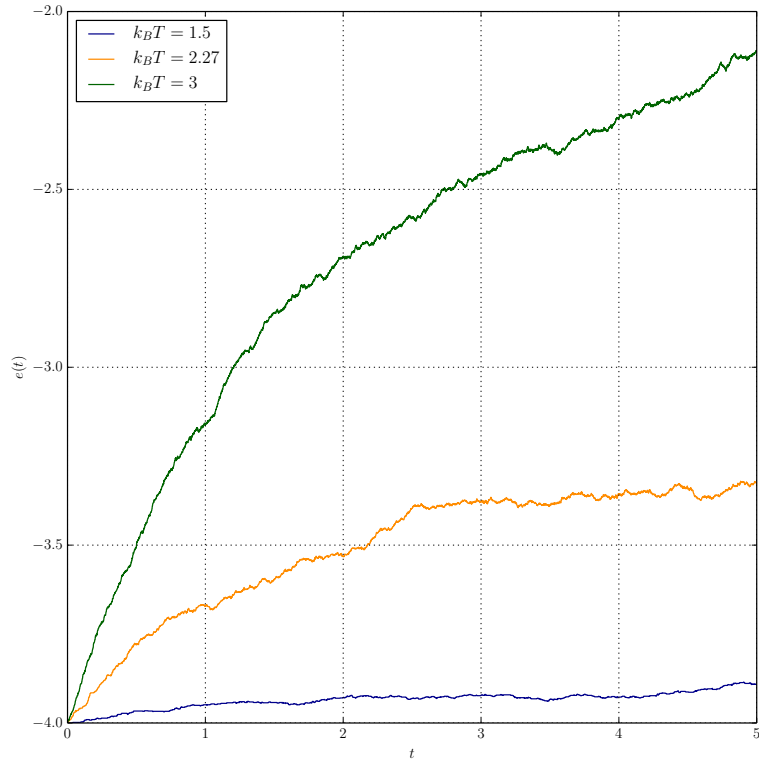


Abbildung 4: Mittlere Energie pro Spin als Funktion der Simulationszeit t in der Äquilibrierungsphase mit geordneter Spinausrichtung als Anfangsbedingung.

Dasselbe wird zusätzlich für völlig ungeordnete Spins als Anfangsbedingung durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung ?? dargestellt.

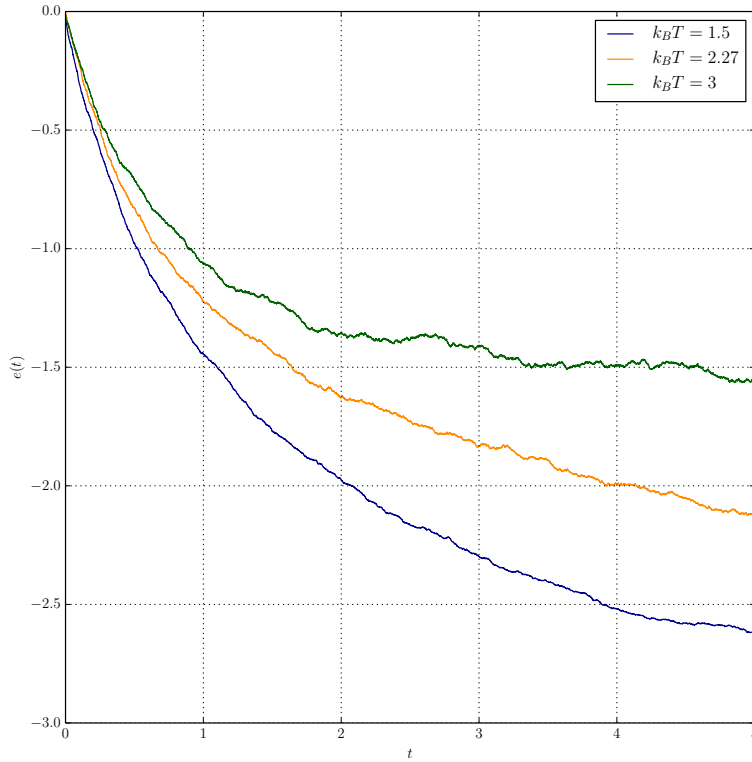


Abbildung 5: Mittlere Energie pro Spin als Funktion der Simulationszeit t in der Äquilibrationsphase mit zufälliger Spinausrichtung als Anfangsbedingung.

Die Anfangsbedingungen beeinflussen die Simulation offenbar stark. Unabhängig von den Anfangsbedingungen äquilibriert das System, sobald es einen annähernd konstanten Wert erreicht, also nach etwa 4-5 Zeitschritten bei zufälliger Ausrichtung der Spins als Anfangsbedingung und etwa 3 Zeitschritten bei geordneten Anfangsbedingungen, jedoch mehr für $k_B T = 3$. Da bei dieser Simulation die Äquilibrationszeit etwas zu kurz gewählt wurde, wie in den Abbildungen auch ersichtlich ist, sind diese Ergebnisse noch einmal im Anhang aus einer Simulation mit 6400 Teilchen dargestellt.

Messung

Nun wird die Zeit nach der Äquilibrationsphase betrachtet, wobei als Anfangsbedingung eine zufällige Spinausrichtung gewählt wird. Die Messung erfolgt nun nach jedem Sweep. Pro Sweep wird jedem Spin im Mittel einmal ein Spinflip angeboten. Gemessen wird die

Magnetisierung

$$\langle m \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \right\rangle ,$$

und der Betrag der Magnetisierung

$$\langle |m| \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \left| \sum_i \sigma_i \right| \right\rangle ,$$

pro Spin sowie die Energie für die gleichen Temperaturen wird bei der in den vorherigen Messungen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 6, 7 und 8 dargestellt.

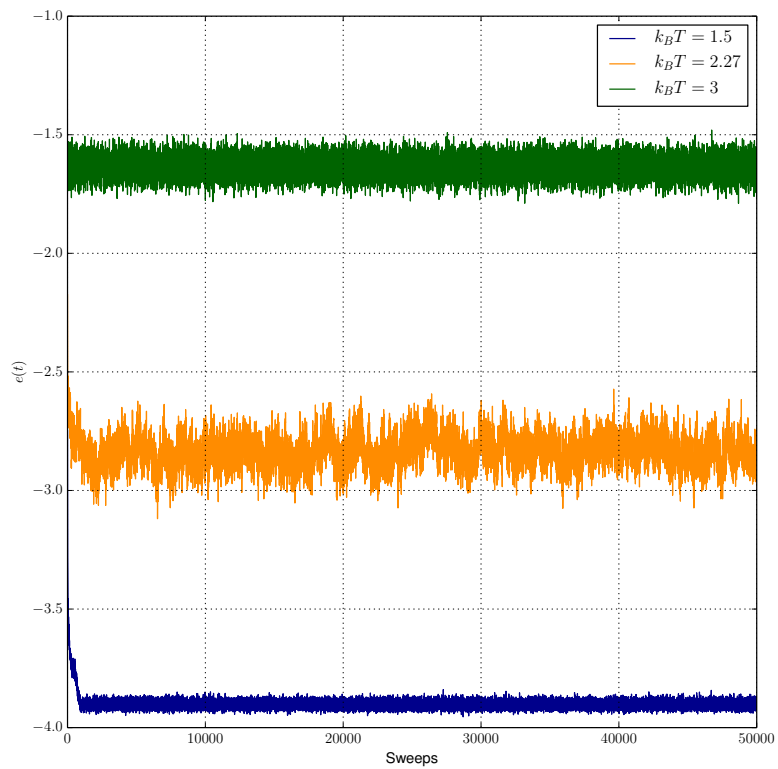


Abbildung 6: Mittlere Energie pro Spin als Funktion der Simulationszeit t .

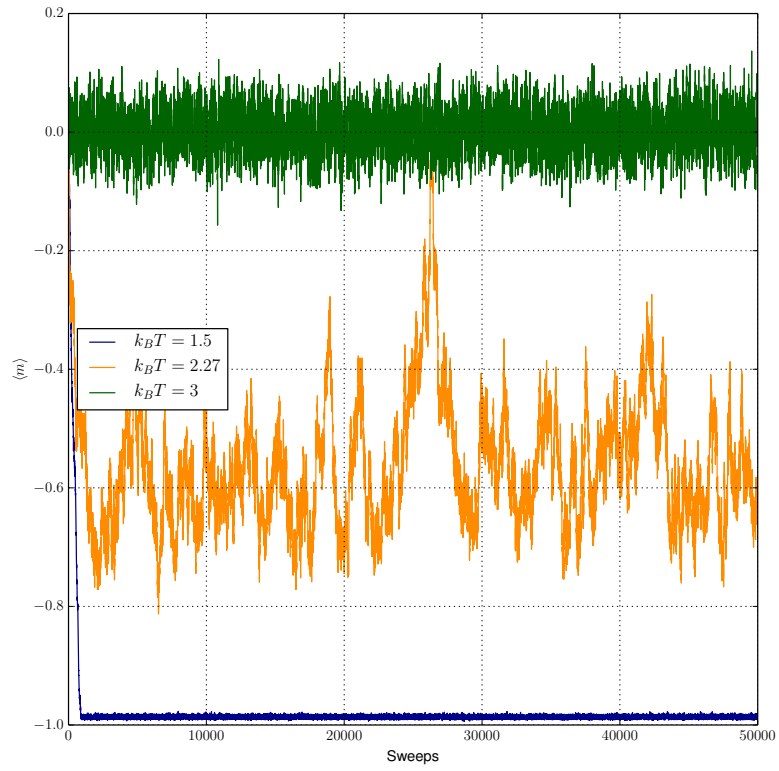


Abbildung 7: Magnetisierung pro Spin als Funktion der Simulationszeit t .

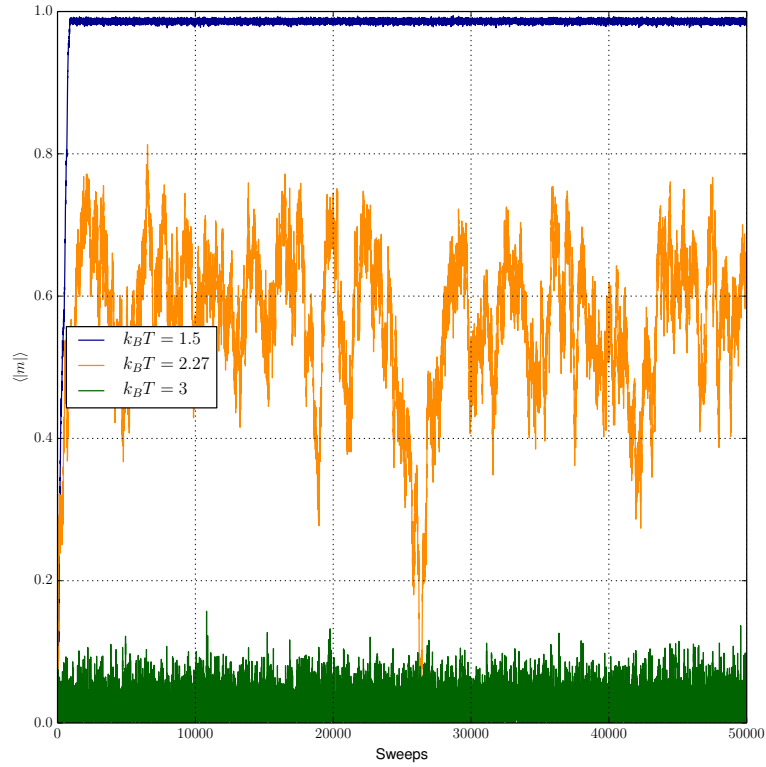


Abbildung 8: Betrag der Magnetisierung pro Spin als Funktion der Simulationszeit t .

Alle Messungen sind in der Funktion `spinflip` implementiert. In Abbildung 7 und 8 ist deutlich der Phasenübergang bei $T = T_c$ sichtbar, da die Magnetisierung stark zwischen den Werten für $k_B T = 1.5$ und $k_B T = 3$ fluktuiert. Außerdem ist erkennbar, dass unterhalb der kritischen Temperatur eine nicht-verschwindende Magnetisierung auftritt, da sich das System spontan magnetisch ordnet. Der Verlauf der Energie in Abbildung 6 zeigt, dass die Energie nach der kurzen Äquilibrationsphase um einen konstanten Wert fluktuiert.

Aufgabe 3: Simulated Annealing

Gegeben seien N 2-dimensionale Ortsvektoren \vec{r}_i und eine initiale Permutation π_0 der Indizes der Ortsvektoren. Die geschlossene Weglänge einer Permutation ist gegeben durch

$$L(\pi) = \sum_{i=2}^N |\vec{r}_{\pi(i)} - \vec{r}_{\pi(i-1)}| + |\vec{r}_{\pi(1)} - \vec{r}_{\pi(N)}|.$$

Ziel der Aufgabe ist es jene Permutation zu finden, die die Weglänge minimiert.

1. Implementierung des Algorithmus

Das Problem, welches in der Vorlesung als *Travelling Salesman Problem* behandelt wurde, wird mit einer Variante des Metropolis Algorithmus gelöst.

- Halte Anfangs- und Endpunkt fest
- Starte mit beliebiger Strecke und hoher fiktiver Temperatur T_{start}
- Wiederhole S mal: Tausche zwei zufällige Ortsvektoren und berechne Streckenänderung ΔL
 - * $\Delta L \leq 0 \rightarrow$ Annahme der Veränderung
 - * $\Delta L > 0 \rightarrow$ ziehe $P \in (0, 1)$ und nehme an wenn $P < e^{-\beta \Delta L}$
- Verringere Temperatur um den Dämpfungsfaktor $d \in (0, 1)$ bis Endtemperatur T_{end} erreicht

2. Initialisierung der Startkonfiguration

Die Ortsvektoren werden wie in Abbildung 9 angeordnet. Diese Reihenfolge entspricht zugleich der des kürzesten Weges.

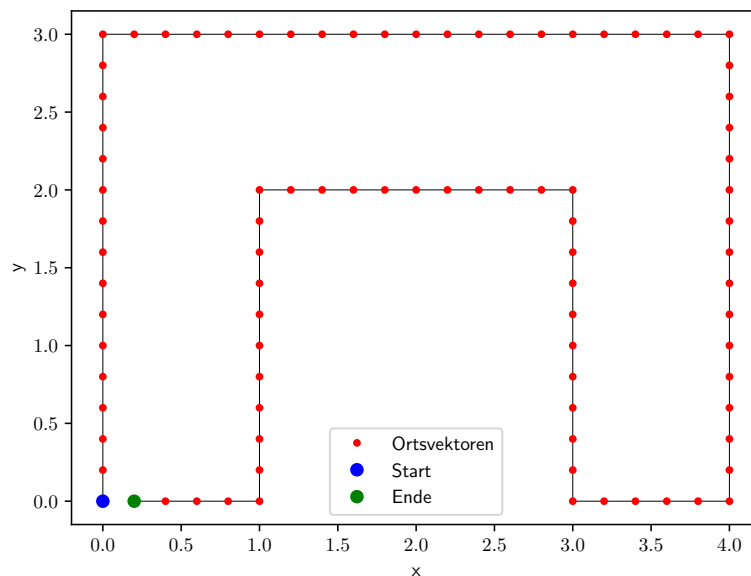


Abbildung 9: Verteilung der Ortsvektoren mit der kürzesten Strecke von 17.

Um die initiale Startpermutation zu erhalten wird der zu 9 gehörende Permutationsvektor zufällig angeordnet. Die erhaltene Startkonfiguration ist in Abbildung 10 dargestellt.

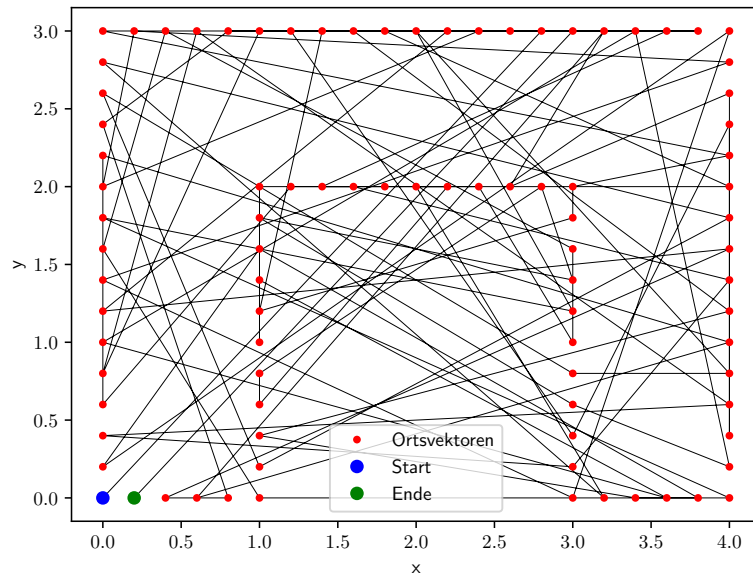


Abbildung 10: Startkonfiguration, Start- und Endpunkt wurden festgehalten. Diese entsprechen also den gleichen wie in Abbildung 10. Die Strecke beträgt hier 208.965.

3. Berechnung der optimalen Permutation

Der Algorithmus sollte für die in 2. berechnete Startkonfiguration angewendet werden. Dazu wurden die Parameter

$$\begin{aligned}
 T_{\text{start}} &= 10 \\
 T_{\text{end}} &= 10^{-2} \\
 d &\in \{0.9, 0.99, 0.999\} \\
 S &\in \{10, 100, 1000, 10000\}
 \end{aligned}$$

verwendet. Die sich ergebenden Strecken sind in den Plots 11 12 13 14 zu sehen.

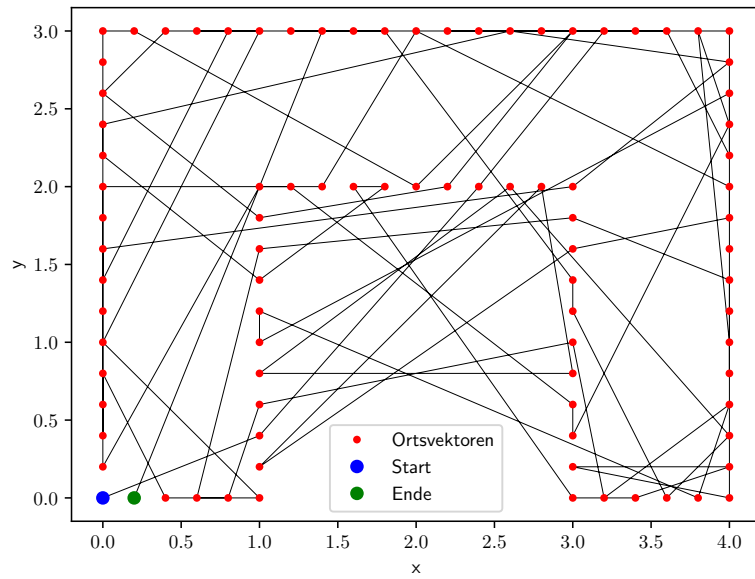


Abbildung 11: Die optimale Strecke welche sich nach der Ausführung des Algorithmus mit $d = 0.9$ und $S = 10$ ergibt. Die Gesamtstrecke beträgt 106.71. Sie wurde also im Vergleich zur Startkonfiguration um circa 49% um reduziert.

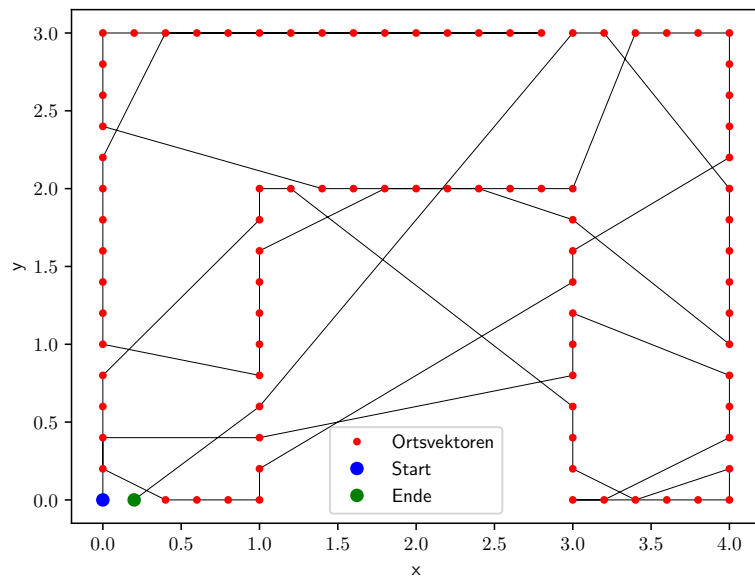


Abbildung 12: Die optimale Strecke welche sich nach der Ausführung des Algorithmus mit $d = 0.9$ und $S = 1000$ ergibt. Die Gesamtstrecke beträgt 44.19. Sie wurde also im Vergleich zur Startkonfiguration um circa 79% um reduziert.

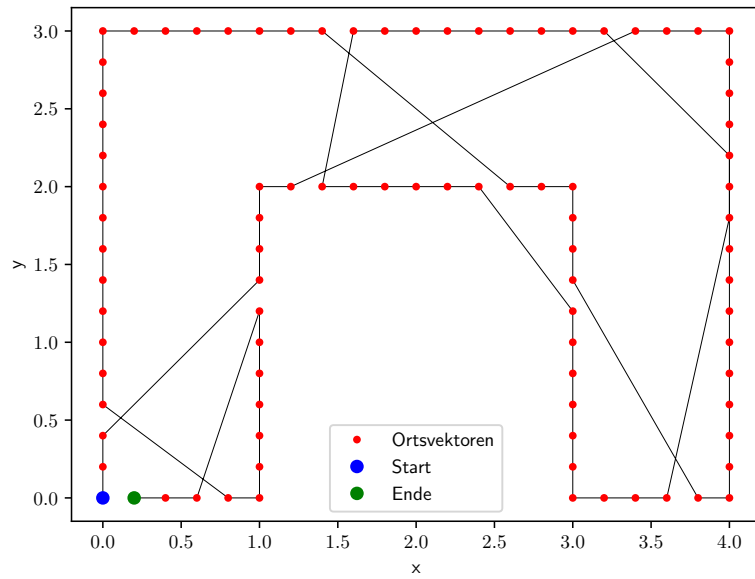


Abbildung 13: Die optimale Strecke welche sich nach der Ausführung des Algorithmus mit $d = 0.99$ und $S = 1000$ ergibt. Die Gesamtstrecke beträgt 30.87. Sie wurde also im Vergleich zur Startkonfiguration um circa 85% um reduziert.

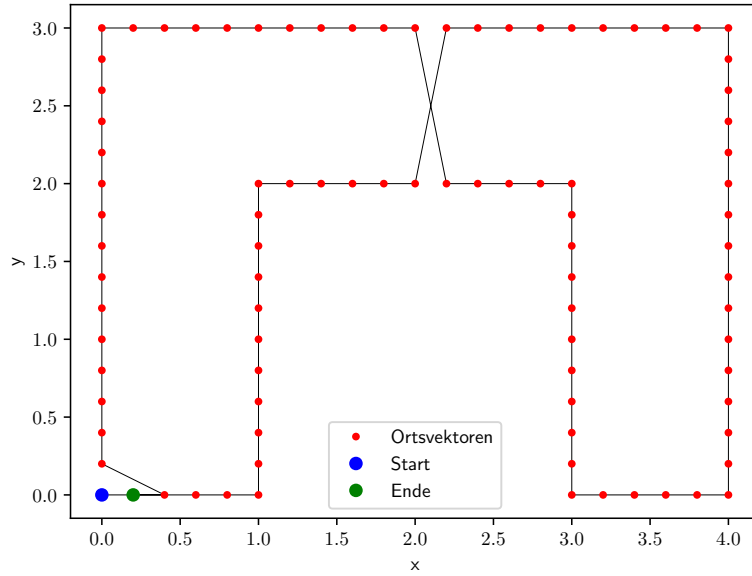


Abbildung 14: Die optimale Strecke welche sich nach der Ausführung des Algorithmus mit $d = 0.999$ und $S = 10000$ ergibt. Die Gesamtstrecke beträgt 20.29. Sie wurde also im Vergleich zur Startkonfiguration um circa 90% um reduziert.

Bei dem letzten Plot beträgt die Abweichung der minimalen Strecke noch circa 19% von der optimalen Strecke. Auffällig ist, dass die Strecke sich bereits für geringe Parameter $d = 0.9$ $S = 10$ stark reduziert. Jedoch kann für sehr viele Vorschläge S und sehr schwache Dämpfung d immer noch nicht die optimale Strecke erreicht werden. Das liegt vermutlich daran, dass zu Beginn des Algorithmus die Annahmewahrscheinlichkeit noch sehr hoch ist, während sie gegen Ende sehr klein wird. So ist die Wahrscheinlichkeit eine weitere Optimierung zu erzielen, sobald ein Zustand wie in Abbildung 14 erreicht ist, sehr gering, da die Wahrscheinlichkeit genau die beiden richtigen Ortsvektoren auszuwählen verschwindend klein ist ($\frac{1}{90^2} \approx 0.012\%$).

Anhang

Äuilibrierungsphase in der Simulation mit 6400 Teilchen

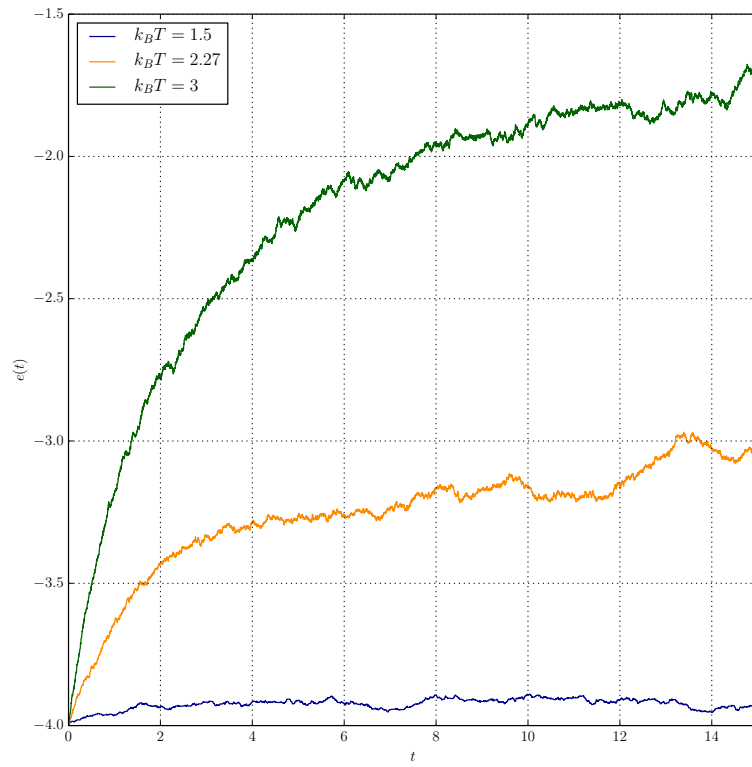


Abbildung 15: Mittlere Energie pro Spin als Funktion der Simulationszeit t in der Äquibrierungsphase mit geordneter Spinausrichtung als Anfangsbedingung für 6400 Teilchen.

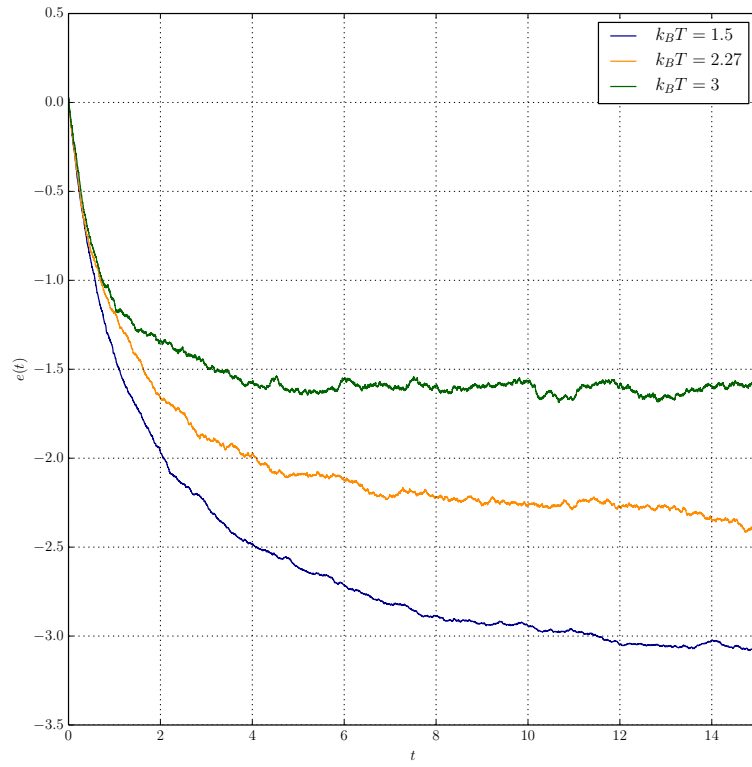


Abbildung 16: Mittlere Energie pro Spin als Funktion der Simulationszeit t in der Äquilibrationierungsphase mit zufälliger Spinausrichtung als Anfangsbedingung für 6400 Teilchen.