

## 計算物理学実習 2021 年度課題 No. 4

1. 理工学 ITC のワークステーション・ルームのワークステーションにログインし、作業用ディレクトリディレクトリ `~/comp-phys/j4` を作成する。作業はこのディレクトリで行う。
2. テキスト 93 頁の課題 5-A
  - (a) ディレクトリ `/home/kyozai/jy/comp-phys/sec5` の下のファイル `ising.f90`, `rnd.f90`, `exact.f90` を作業用ディレクトリ `~/comp-phys/j4` にコピーする。
  - (b) テキスト 79–83 頁の説明、84–86 頁のプログラムのリストを読み、`ising.f90` の各ブロックでの処理を理解する。以下の点に注意すること。
    - `call rndini(iseed)` は乱数の種 `iseed` を用いて、乱数生成のための準備を行う。サブルーチン `rndini` は `rnd.f90` に含まれている。
    - `call rndu(rnd)` は  $[0, 1)$  の区間に一様に分布する乱数を生成し、倍精度実数型の変数 `rnd` に格納する。サブルーチン `rndu` は `rnd.f90` に含まれている。
    - `lsize*rnd` は区間  $[0, \text{lsize})$  に一様に分布した乱数を与えるが、`ix=lsize*rnd` のように整数型の変数 `ix` に代入することにより切り捨てにより整数化される。そのため、`ix` は  $0, 1, 2, \dots, \text{lsize} - 1$  の整数値を等確率でとることになる。
    - `ip(ix)` は周期的境界条件のもとで、格子点の  $x$  座標 `ix` を 1 増やした座標を与えている。  
`im(ix)` は周期的境界条件のもとで、格子点の  $x$  座標 `ix` を 1 減らした座標を与えている。
  - (c) `ising.f90`, `rnd.f90` をコンパイル、リンクして実行ファイルをつくる。無次元化された温度  $\text{temp} = k_B T / J$  が 1.5(臨界温度より下), 2.3(臨界温度付近), 3(臨界温度より上) の場合に  $8 \times 8$  の格子に対して、初期に捨てるステップ数を 10000、1 ブロック当たりのステップ数を 10000、ブロック数を 10 としてプログラムを実行してみる。ただし、初期スピン配置を、臨界温度より下の場合は全ての  $\sigma_i = 1$  にとり、臨界温度以上の場合は確率  $1/2$  で  $\sigma_i = \pm 1$  とする。

- (d) ブロックごとの結果 `ave`, `avc`, `avm`, `avx` をさらに平均するように、プログラムを書き直す。

- ブロックごとのループ

```
do nb=1,nblock
```

```
  ⋮
```

```
enddo
```

の前に `ave`, `avc`, `avm`, `avx` の総和を計算するための変数 `sume`, `sumc`, `summ`, `sumx` を 0 にしておく。

- ブロックごとのループの中で、`ave`, `avc`, `avm`, `avx` を出力する代わりに、その値をそれぞれ `sume`, `sumc`, `summ`, `sumx` に加える。

- ブロックごとのループ

```
do nb=1,nblock
```

```
  ⋮
```

```
enddo
```

の後で `sume`, `sumc`, `summ`, `sumx` をブロック数 `nblock` で割って出力する。

- (e) (c) と同じ条件でモンテカルロ・シミュレーションを実行し内部エネルギー、比熱を計算する。

- (f) `exact.f90` をコンパイル、実行し、(c) と同じ条件に対する内部エネルギー、比熱の厳密解を求め、モンテカルロ・シミュレーションの結果と比較する。

### 3. テキスト 93 頁の課題 5-B

- (a) ブロックごとの結果 `ave`, `avc`, `avm`, `avx` の平均とその統計誤差を計算するように、プログラムを書き直す。

- ブロックごとのループ

```
do nb=1,nblock
```

```
  ⋮
```

```
enddo
```

の前に `ave`, `avc`, `avm`, `avx` の総和を計算するための変数 `sume`, `sumc`, `summ`, `sumx` と、それらの2乗 `ave*ave`, `avc*avc`, `avm*avm`, `avx*avx` の総和を計算するための変数 `sume2`, `sumc2`, `summ2`, `sumx2` を 0 にしておく。

- ブロックごとのループの中で、`ave`, `avc`, `avm`, `avx` を計算した後で、それらの値をそれぞれ `sume`, `sumc`, `summ`, `sumx` に加える。`ave*ave`, `avc*avc`, `avm*avm`, `avx*avx` の値をそれぞれ `sume2`, `sumc2`, `summ2`, `sumx2` に加える。

- ブロックごとのループ
 

```
do nb=1,nblock
  ⋮
enddo
```

 の後で `sume`, `sumc`, `summ`, `sumx`, `sume2`, `sumc2`, `summ2`, `sumx2` から、ブロック数 `nblock` を用いて、平均と統計誤差を計算し、出力する。
  - 統計誤差の計算法はテキスト 82 頁 5.4.6 を参照。
- (b) 3(c) のパラメータでモンテカルロ・シミュレーションを実行し、内部エネルギー、比熱を計算し、厳密解と比較する。
- (c)  $16 \times 16$  の格子の磁場のない場合に、無次元化された温度  $\text{temp} = k_B T / J$  が 1 から 4 までの範囲を 0.1 間隔で調べ、内部エネルギー、比熱、磁化、帯磁率の温度変化を計算し、グラフにプロットする。統計誤差をエラーバー (誤差棒) としてグラフに表示する。
- 初期に捨てるステップ数を 10000、1 ブロック当たりのステップ数を 10000、ブロック数を 10 とする。各ブロックの統計的独立性は今回は確認しなくてよい。
  - ファイルの各行に  $x \ y \ \Delta y$  を書き、gnuplot で
 

```
plot 'ファイル名' using 1:2:3 with errorbars
```

 とタイプすると、 $(x, y)$  に点を打ち、 $(x, y - \Delta y)$  から  $(x, y + \Delta y)$  までエラーバーを描く。
  - それぞれの温度を独立に調べてもよいが、高温の  $\text{temp} = 4$  から始めて 0.1 ずつ温度を下げて調べていくと良い。このとき、前の温度での最終のスピン配置を次の温度に対する初期スピン配置として用いる。ただし、 $\text{temp} = 4$  の初期スピン配置は確率  $1/2$  で  $\sigma_i = \pm 1$  にとる。そのためには、次のようにすると良い。
    - ▷ 4(a) に書いてあるように、一つの温度に対して、ブロックごとの結果 `ave`, `avc`, `avm`, `avx` の平均とその統計誤差を計算するように、プログラムを書き直す。
    - ▷ そのプログラムの内、遷移確率の初期化以降の部分で、温度を変化させるループの中に入れる。
  - プログラムの実行には時間がかかるので、初期に捨てるステップ数を 1000、1 ブロック当たりのステップ数を 1000 にしてプログラムを実行し、正しく動くかどうかを確認しておくこと。

#### 4. レポート

- テキスト 93 頁の課題 5-A と課題 5-B のレポートとして以下のものを提出してください。
  - (a) 自分で書いたプログラムのソース・ファイルと説明
  - (b) 計算に用いたパラメター
  - (c) 課題 5-A は 3 つの温度に対する計算結果 (シミュレーション、厳密解) を表にしたもの
  - (d) 課題 5-B は出力のグラフを印刷したもの
  - (e) 考察と感想
- pdf 形式のファイルとして、[keio.jp/](http://keio.jp/)授業支援/レポートから提出してください。  
締切りは 1/12(水) です。
- 余裕のある人は課題 5-C のレポートも提出してください。