

計算物理学 第四単元レポート

61908697 佐々木良輔

1 5-A.

1.1 プログラムについて

プログラムはサンプルコードを元に各ブロック毎に計算された物理量をさらに平均化するように修正したものを用いている。プログラムの修正部分をソースコード A.1 に示す。

1.2 結果

1.2.1 乱数の検証

乱数が十分高いエントロピーを持っていることを確認するため、いくつかのシード値に対してシミュレーションを行いシード値と物理量（エネルギー）との相関を調べた。相関係数は gnuplot の stats コマンドを用いて計算した。計算条件は表 1 の通りである。シード値は 3 から 601 までの全奇数 (300 点) とした。結果は図 1 のようになった。シード値と物理量の相関係数は $R = 0.02$ でありこれらの間に相関はほぼ無いと言える。標準偏差は

$$\text{sume} = -1.9511(1 \pm 0.0002) \quad (1)$$

となった。以上から乱数は十分に高いエントロピーを持っていると考えられる。

表 1 計算条件

無次元量	値
格子サイズ	8×8
温度	1.5
M_i	10000
M_f	20000
ブロック数	10

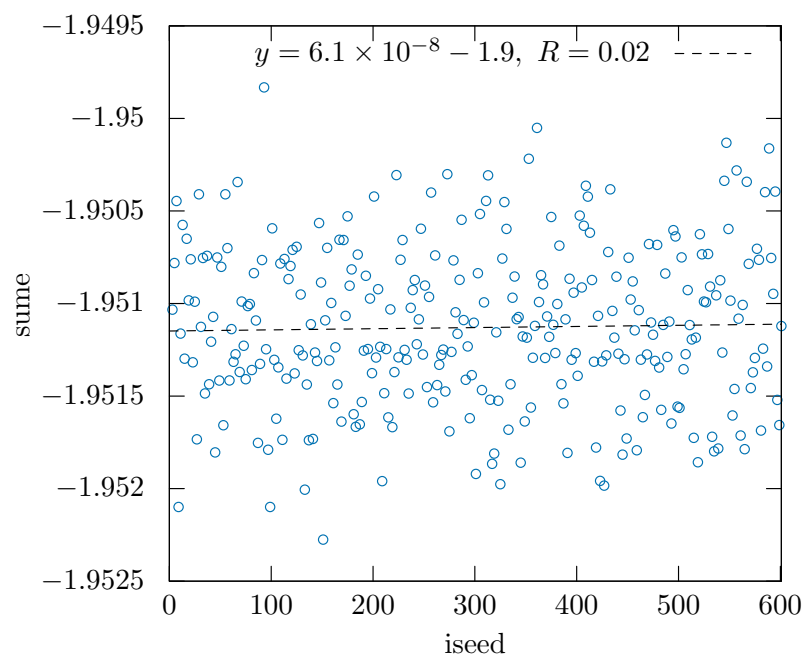


図1 シード値とエネルギーの関係

1.2.2 シミュレーション結果

いくつかの温度で内部エネルギーと比熱のシミュレーションを行った。また同じ温度での厳密解の値を計算した。その結果は表 3 のとおりである。また計算条件は表 2 の通りである。

表 2 計算条件

無次元量	値
格子サイズ	8×8
M_i	10000
M_f	20000
ブロック数	10
シード値	601

表 3 計算結果

温度	スピン初期状態	シミュレーション		厳密解	
		内部エネルギー	比熱	内部エネルギー	比熱
1.5	all up	-1.951	0.1952	-1.951	0.1972
2.3	all up	-1.452	1.176	-1.456	1.170
2.3	random	-1.453	1.174	-1.456	1.170
3.0	random	-0.8420	0.4850	-0.8413	0.4840

1.3 考察

各条件でのシミュレーション結果の相対誤差は表 4 の通りである。このことから全ての条件でシミュレーションの結果と厳密解が良く一致していることがわかる。

また臨海温度 (2.3) の 2 つシミュレーションではスピン初期状態によらずどちらも厳密解に良く一致しており、初期条件によらず平衡状態に収束していると考えられる。

表 4 相対誤差

温度	スピン初期状態	相対誤差 / %	
		内部エネルギー	比熱
1.5	all up	0.0	1.0
2.3	all up	0.2	0.5
2.3	random	0.2	0.4
3.0	random	0.1	0.2

補遺 A ソースコード

ソースコード A.1 5-A のソースコード

```
1  !=====
2  ! block loop
3  !=====
4  sume=0;sumc=0;summ=0;sumx=0;
5  do nb=1,nblock
6      !=====
7      ! block-wa shokika
8      !=====
9      amag =0.0d0
10     amag2=0.0d0
11     aene =0.0d0
12     aene2=0.0d0
13
14     ~~~~~中略~~~~~
15
16     sume = sume + ave
17     sumc = sumc + avc
18     summ = summ + avm
19     sumx = sumx + avx
20 enddo
21 sume = sume / nblock
22 sumc = sumc / nblock
23 summ = summ / nblock
24 sumx = sumx / nblock
25 write(*,'(a10,e24.16)') ' e= ',sume
26 write(*,'(a10,e24.16)') ' c= ',sumc
27 write(*,'(a10,e24.16)') ' m= ',summ
28 write(*,'(a10,e24.16)') ' x= ',sumx
```
