

Übungen zur Computerorientierten Physik

9 Monte Carlo Simulationen (verdünnter) Ferromagnete

1. Laden Sie sich die Dateien `diluted_sim.c`, `diluted.h`, `diluted_fragment2.c`, `percol.c`, `percol.h`, `stacks.h` und `stacks.c` vom StudIP und speichern sie in einem Verzeichnis.
2. Compilieren Sie, auch wenn Sie Ihre Programmteile geändert haben, mit

```
cc -o diluted_sim diluted_sim.c diluted_fragment2.c percol.c stacks.c -lm
```

3. Schauen Sie sich die vorhandenen Funktionen in `diluted_fragment2.c` an. Die Funktion `diluted_mag_cluster()` ist (hier) nicht so wichtig.
4. Komplettieren Sie die Funktionen

- `double diluted_magnetisation(short int *spin, int N, short int *e)`
Sie berechnet die Magnetisierung

$$m = \frac{1}{N} \sum_i e_i s_i \quad (1)$$

- `void diluted_print(short int *spin, int N, int line, short int *e)`
Die Funktion soll eine Spinkonfiguration (und die Lücken) geeignet nach `stdout` schreiben und nach jeweils `line` Zeichen eine neue Zeile anfangen.
- `***** diluted_mc_T() *****`

```

/** Does metropolis MC-simulation with diluted ferromagnet */
/** at T>0. */
/** PARAMETERS: (*)= return-paramter */
/** (*) spin: spin-configuration [1..N] */
/** num_n: number of neighbours in lattice */
/** N: number of spins */
/** next: gives neighbours next[0..N][0..2*dim+1] (t2) */
/** e: sites are occupied (e[i]=1) or empty (=0) */
/** mc_sweeps: number of MC sweeps */
/** T: temperature in units of j */
/** RETURNS: */
/** nothing */
*****

```

```
void diluted_mc_T(short int *spin, int num_n, int N, int *next,  
                 short int *e, int mc_sweeps, double T)
```

Diese Funktion soll mehrere Sweeps der MC Simulation durchföhrebn.

Benutzen Sie dabei das Makro `NEXT(t, r)` und orientieren Sie sich dabei daran, wie es in der Funktion `diluted_energy()` benutzt wird.

Testen Sie die Funktionen jeweils, indem Sie im Hauptprogramm `main()`, das in `diluted_sim.c` enthalten ist, die Spins geeignet initialisieren (z.B. alle in die gleiche Richtung, abwechselnd hoch/runter, zufällig, etc) und vor der Hauptschleife das zu testende Programm aufrufen (und dann direkt dahinter `return(0)` schreiben).

5. Föhren Sie Simulationen mit dem fertigen Programm `diluted_sim` durch für

- $d = 2$ Dimensionen (voreingestellt)
- Verdünnung $p = 0.0$ (also der reine Ferromagnet, voreingestellt)
- Systemgröße $L = 20$
- Für verschiedene Seeds (`-seed`) 100, 101, ...
- Für mindestens zwei verschiedene geeignete Startkonfigurationen
- Temperaturen $T = 0.2, 0.7, 2.0, 2.5, 10.0$
- Lauflängen $t_{\max} = 100, 10^5$ Sweeps

Betrachten Sie die Endkonfigurationen die ausgegeben werden und plotten Sie mit `gnuplot` die in den gespeicherten Files enthaltenen Daten für Energie $\mathcal{H}(t)$ und Magnetisierung $m(t)$ (Ordnungsparameter) als Funktion der MC Sweeps.

Wie interpretieren Sie die Ergebnisse in Bezug auf Equilibrierung?