Ising-Modell

Computational Physics Praktikum WS24/25

Sascha Eckstein, Jannis Hollmann

Version 1

Inhaltsverzeichnis

1 Aufgabe 1

1.1 Aufgabe 1a: Bestimmung von π

In dieser Aufgabe sollte der Wert von π mittels Monte-Carlo-Simulation ermittelt werden. Hierzu betrachtet man den ersten Quadranten eines 2d Koordinatensystems. In dem Koordinatensystem befinden ein Einheitskreis sowie ein Einheitsquadrat, letzteres mit Mittelpunkt (0.5, 0.5). Es werden nun zufällig Punkte im Quadrat platziert. Die Punkte werden kategorisiert, je nachdem, ob $x^2 + y^2 < 1$ für den jeweiligen Punkt erfüllt ist oder nicht, also ob sich die Punkte im Einheitskreis befinden oder nicht. Wir betrachten nun das Flächenverhältnis des Einheitskreises und des Einheitsquadrats:

$$\frac{A_{\text{Viertelkreis}}}{A_{\text{Einheitsquadrat}}} = \frac{\frac{1}{4}\pi r^2}{1} = \frac{\pi r^2}{4} \overset{\text{hier}}{=} \frac{\pi}{4} \tag{1}$$

$$\pi = \frac{A_{\text{Viertelkreis}}}{A_{\text{Einheitsquadrat}}} \cdot 4. \tag{2}$$

Das Verhältnis $A_{\text{Viertelkreis}}/A_{\text{Einheitsquadrat}}$ haben wir numerisch bestimmt: Es entspricht dem Verhältnis der Anzahl Punkte im Kreis/außerhalb des Kreises. Ein Vergleich der Ergebnisse bei verschiedenen Stichprobengrößen ist in Abb. 1 dargestellt.

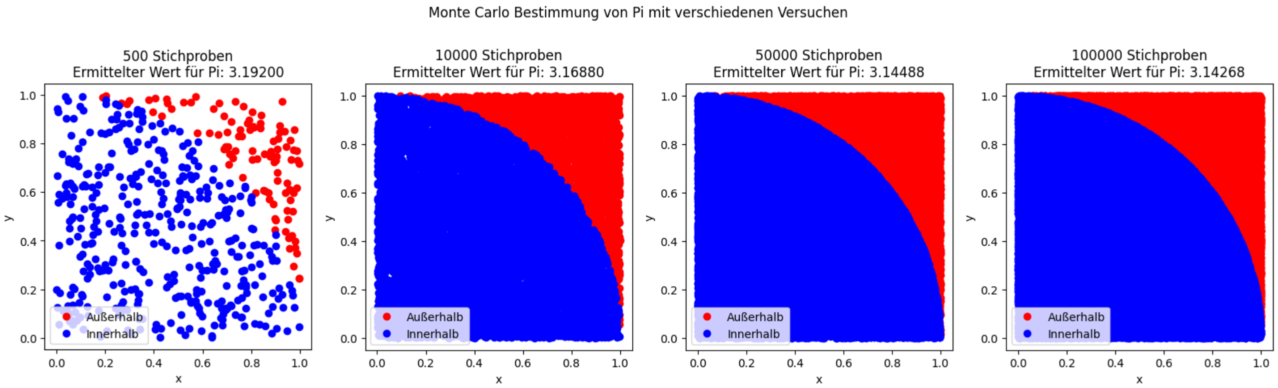

Abbildung 1: Ermittlung von π mittels Monte-Carlo

1.2 Aufgabe 1b: Monte-Carlo-Integration

In dieser Teilaufgabe sollte mit einem Zufallszahlengenerator für normalverteilte reelle Zahlen mittels Monte-Carlo-Integration das folgende Integral berechnet werden:

$$\int_{-\inf}^{\inf} \exp(-t^2/2)\, dt \tag{3}$$

Hierzu werden zunächst n normalverteilte Samples gezogen, dann wird der Integrand bei diesen Samples ausgewertet und dann über die Resultate summiert und anschließend durch die Anzahl Samples n dividiert. Zur korrekten Normierung muss noch mit $2\sqrt{\pi}$ multipliziert werden. Die berechneten Werte sind in Tab. 1 dargestellt. Wie man sieht, nähern sie sich dem erwarteten Ergebnis $\sqrt{2\pi} = 2.506\,628$ immer weiter an.

Anzahl Samples	Resultat
1000	2.484 868
100000	2.507 152
1000000	2.506 488
100000000	2.506 537

Tabelle 1: Ergebnisse des Integrals für verschiedene Samplezahlen

2 Aufgabe 2

In dieser Aufgabe sollten für 2d-Gitter der Größe $L = 2, 3, 4$ ohne externes Magnetfeld $h = 0$ die innere Energiedichte sowie $\langle m \rangle$ und $\langle |m| \rangle$ als Funktion der inversen Temperatur $\beta \in [0, 1]$ durch direkte Summe über alle

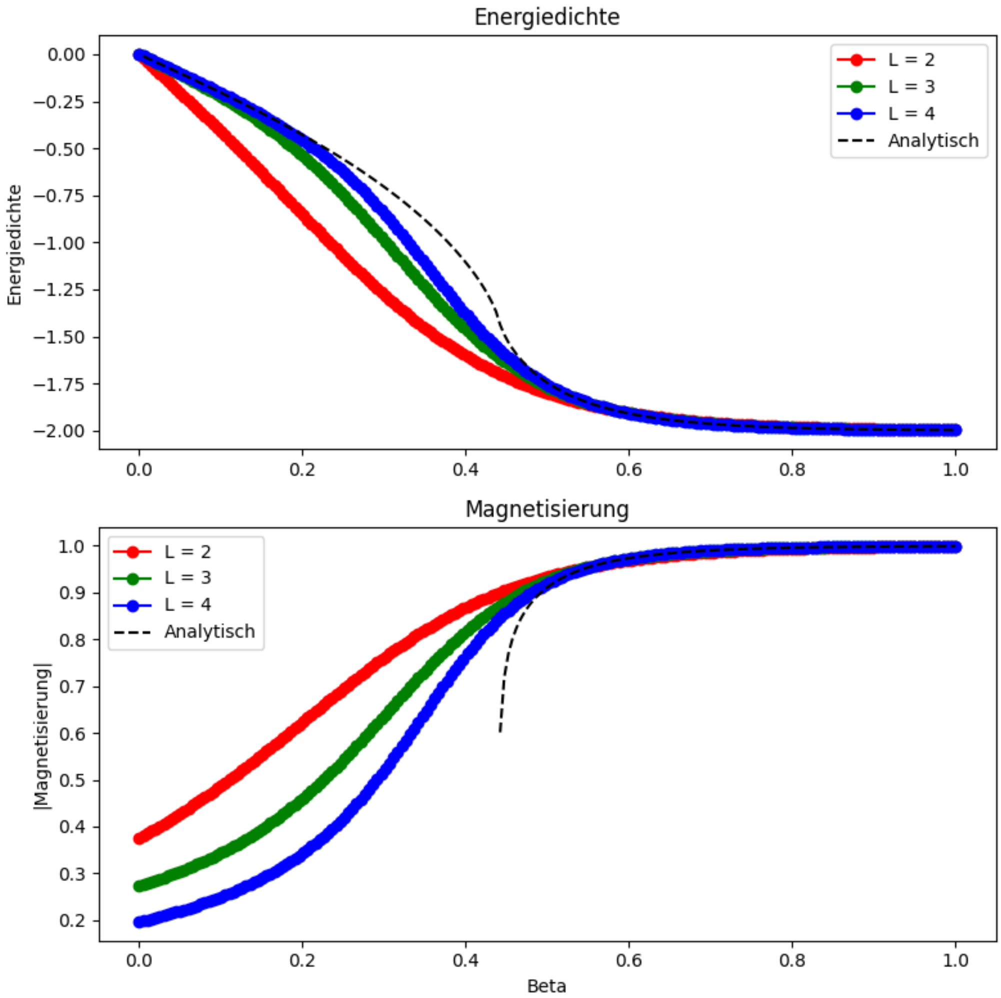

Abbildung 2: Energiedichte und Magnetisierung für kleine Gitter

Konfigurationen berechnet werden. Zudem sollten die Ergebnisse mit den analytischen Vorhersagen verglichen werden. Die Ergebnisse von $\langle m \rangle$ waren wie erwartet 0 bzw. sehr nahe an null, da ohne externes Magnetfeld keine Magnetisierung entsteht. Die kleinen Abweichungen von 0 lassen sich durch float-Ungenauigkeiten bei der Berechnung erklären. Die numerischen und analytischen Ergebnisse sind in Abb. 2 dargestellt. Die analytische Lösung der Magnetisierung beginnt erst bei etwa 0.44, da dies die Curie-Temperatur ist, oberhalb welcher keine Magnetisierung möglich ist.

3 Aufgabe 3

Zur Vorbereitung von Aufgabe 3 sollen selbst ermittelt werden, mit welchen multihit-Parametern die Thermalisierung bei welcher Anzahl von Thermalisierungsschritten N_{therm} abgeschlossen ist. Hierzu wurden für verschiedene β zufällige Gitter erzeugt und thermalisiert und dabei pro Schritt die Energiedichte berechnet. Am Plot in Abb. 3 sieht man, dass die Thermalisierung bei etwa 3000 Schritten abgeschlossen ist. Da dieser Punkt statistisch schwankt, werden für die weiteren Berechnungen 4000 Thermalisierungsschritte durchgeführt.

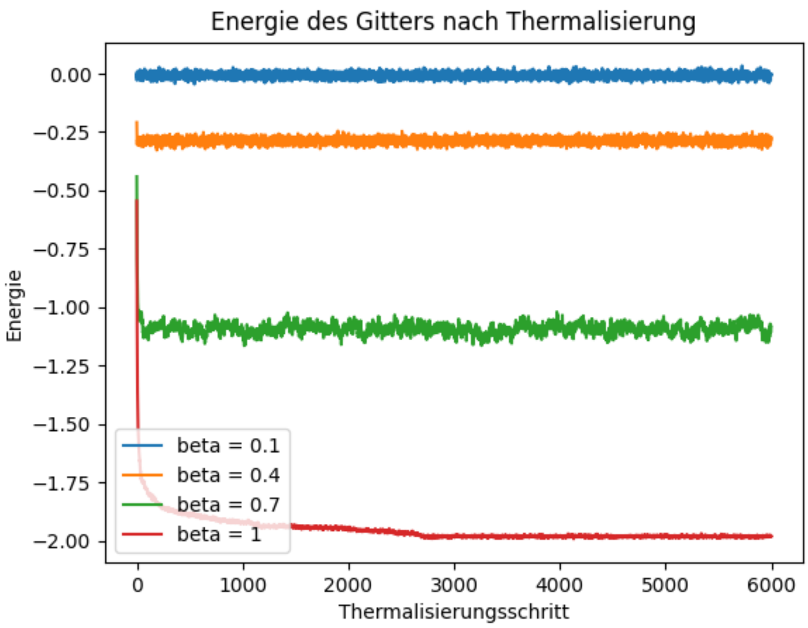

Abbildung 3: Energiedichte im Verlauf der Thermalisierungsschritte

3.1 Aufgabe 3a: 128x128-Gitter

In Aufgabe 3a wurde der Multihit-Metropolis-Algorithmus implementiert. Hierbei werden nicht alle möglichen Spingitter betrachtet, sondern zufällige Gitter erzeugt und dann anhand des Metropolis-Algorithmus physikalisch sinnvoll verändert. Dann wurden die Observablen Energie und Magnetisierung bestimmt und daraus die spezifische Wärme berechnet. Dies wird für 100 verschiedene Werte von $\beta \in [0, 1]$ wiederholt. Die Anzahl der sweeps N_{sweep} betrug hierbei 100. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 4, 5 und 6 dargestellt.

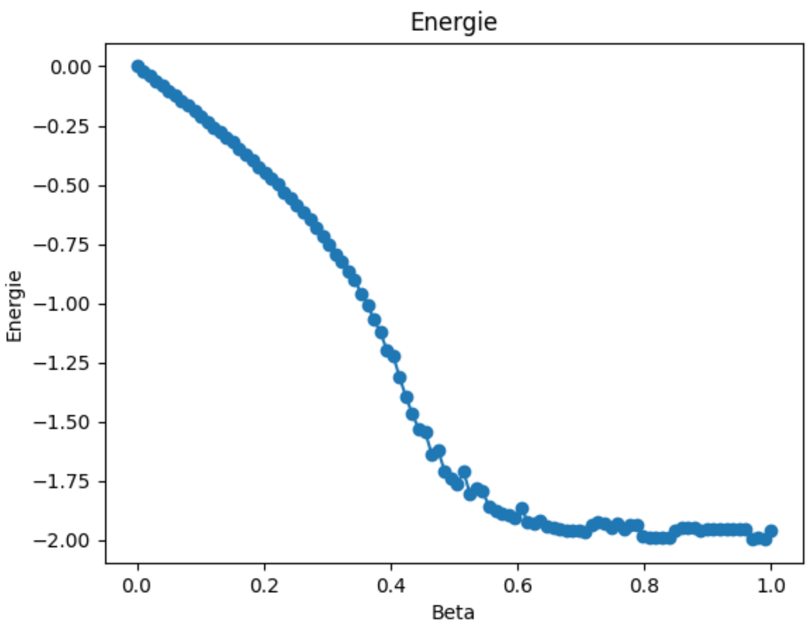

Abbildung 4: Energie in Abhängigkeit von β (Metropolis)

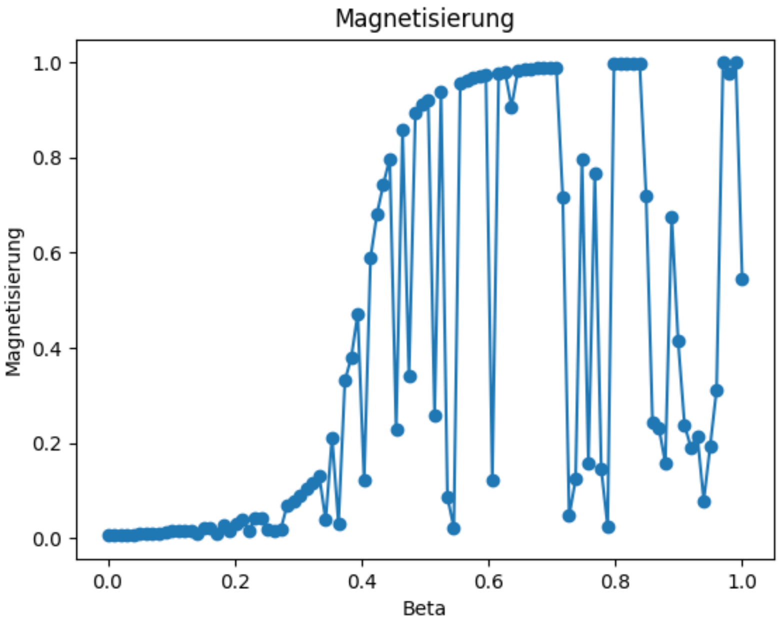

Abbildung 5: Magnetisierung in Abhängigkeit von β (Metropolis)

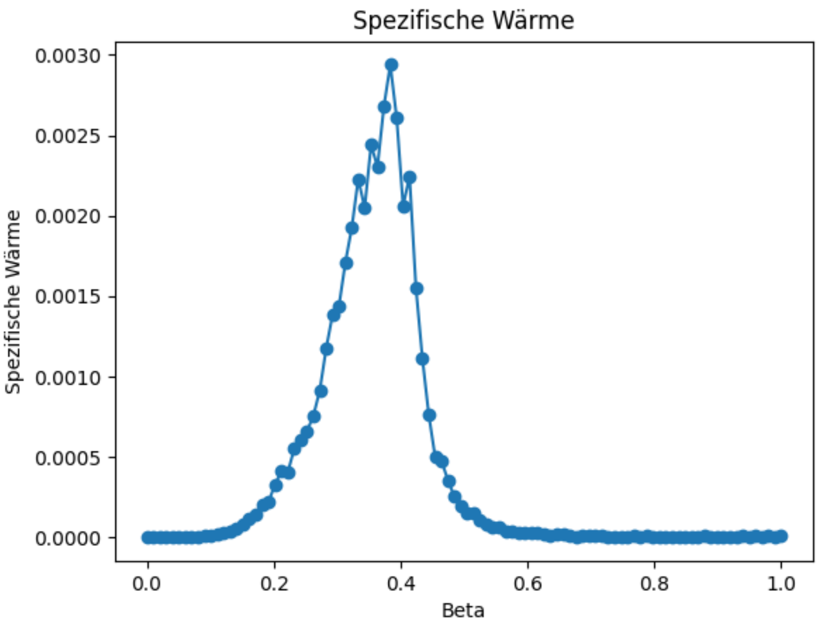

Abbildung 6: Spezifische Wärme in Abhängigkeit von β (Metropolis)

3.2 Aufgabe 3b: Observablen bei kleineren Spingittern

Für die zweite Teilaufgabe sollte $\beta = 0.4406868$ gesetzt werden. Dann sollten die Observablen Energie, $\langle|m|\rangle$ sowie $\langle m^2\rangle$ bestimmt werden, wobei $N_{\text{sweep}} = 200\,000$ betragen sollte. Die Simulation sollte auf Gittern der Größe (4×4), (8×8) und (32×32) durchgeführt werden. Die Ergebnisse dieser Simulation sind in Tabelle 2 aufgeführt. Verglichen mit den Werten, die durch direkte Summation für das (4×4)-Gitter bestimmt wurden,

Observable	(4×4)	(8×8)	(32×32)
Energie	$-1.592\,50$	$-1.555\,62$	$-1.538\,55$
$\langle\|m\|\rangle$	$0.841\,25$	$0.819\,69$	$0.817\,54$
$\langle m^2\rangle$	$0.763\,90$	$0.693\,92$	$0.670\,72$

Tabelle 2: Ergebnisse der Simulation für verschiedene Gittergrößen

stimmen die Werte sehr gut überein. Diese betragen:

$$\begin{aligned} E &= -1.565\,62 \\ \langle|m|\rangle &= 0.843\,86 \\ \langle m^2\rangle &= 0.761\,35. \end{aligned} \tag{4}$$

4 Aufgabe 4

4.1 Aufgabe 4a: Simulation mit Wärmebad-Algorithmus

Zunächst sollten die Simulationen, die in Aufgabe 3 durchgeführt wurden, für den Wärmebad-Algorithmus wiederholt werden. Die Ergebnisse der Wärmebad-Simulation sind in den Abbildungen 7, 8 und 9 dargestellt.

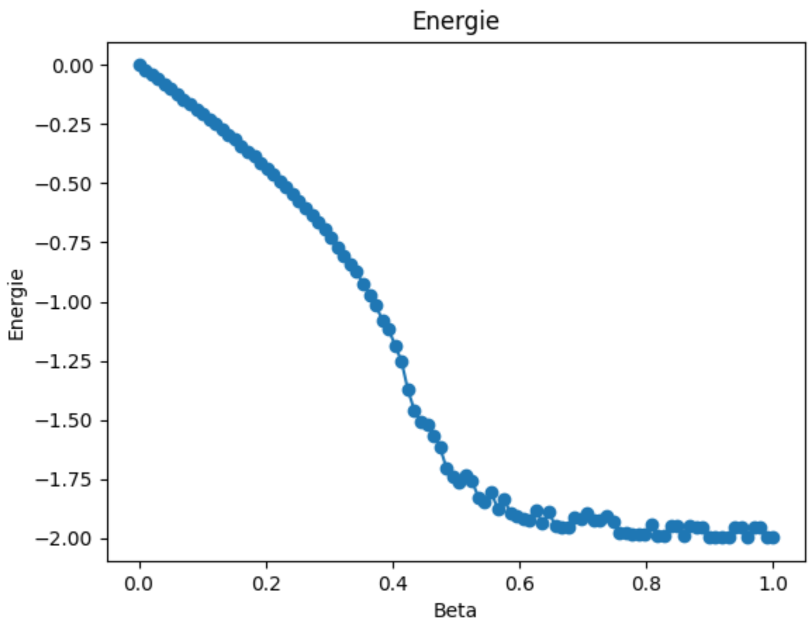

Abbildung 7: Energie in Abhängigkeit von β (Wärmebad)

Auch die Berechnung der Observablen Energie, $\langle|m|\rangle$ sowie $\langle m^2\rangle$ wurden erneut berechnet. Sie werden in Tab. 3 dargestellt. Auch hier stimmen die Werte wieder gut mit den Ergebnissen der direkten Summation siehe (4)

Observable	(4×4)	(8×8)	(32×32)
Energie	$-1.566\,58$	$-1.489\,29$	$-1.434\,09$
$\langle\|m\|\rangle$	$0.844\,71$	$0.775\,62$	$0.654\,44$
$\langle m^2\rangle$	$0.762\,21$	$0.644\,67$	$0.459\,06$

Tabelle 3: Ergebnisse der Simulation für verschiedene Gittergrößen

überein.

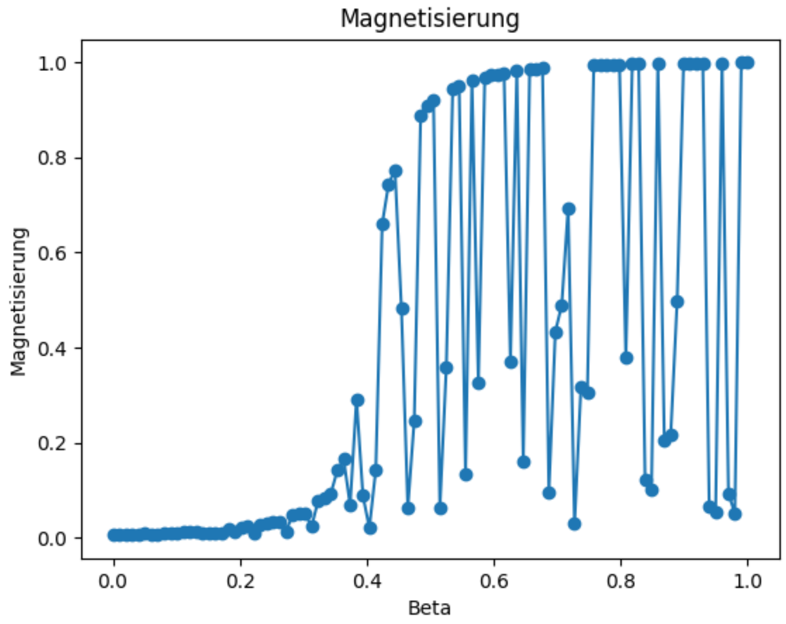

Abbildung 8: Magnetisierung in Abhängigkeit von β (Wärmebad)

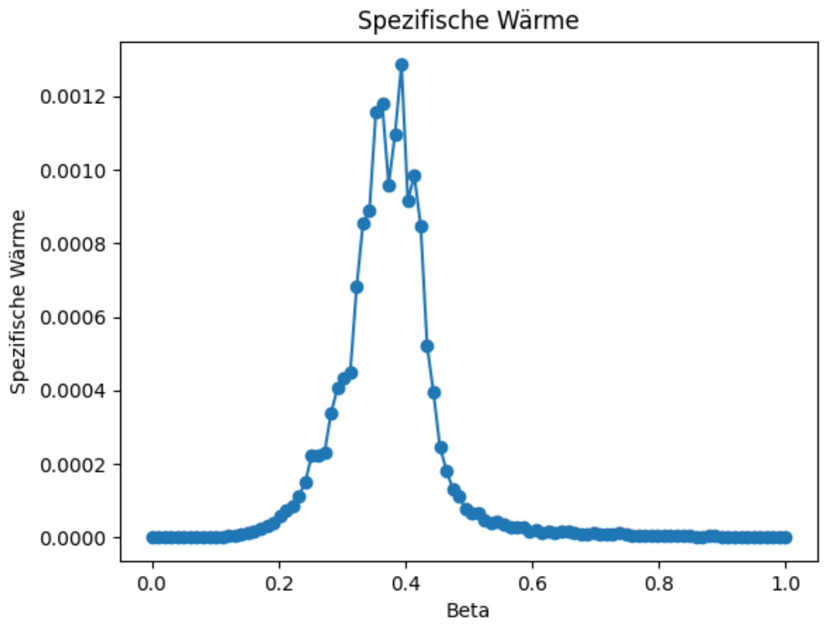

Abbildung 9: Spezifische Wärme in Abhängigkeit von β (Wärmebad)

4.2 Aufgabe 4b: Untersuchung der Hysterese

Zur Untersuchung der Hysterese der Magnetisierung wurde ein Spingitter bei $\beta = 0.8$ zunächst bei $h = 0$ thermalisiert. Dann wurde h zuerst in insgesamt 400 Schritten schrittweise auf 1 erhöht, dann auf -1 gesenkt und zum Schluss wieder auf 0 erhöht. Dabei wurden nach jedem Schritt 1000 sweeps durchgeführt. Die ermittelten Magnetisierungen zeigen eindeutig eine Hysterese; diese ist in Abb. 10 dargestellt.

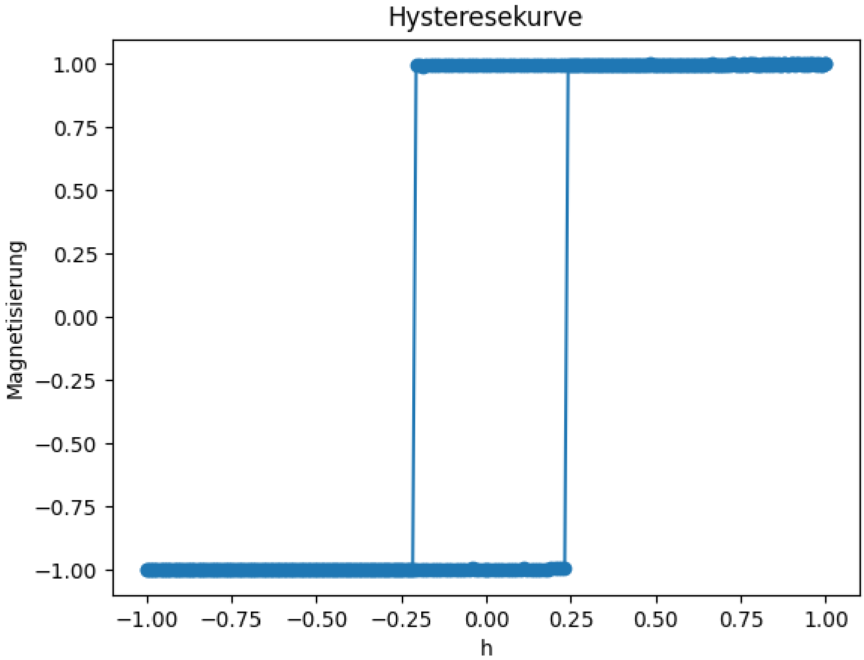

Abbildung 10: Hysteresekurve

4.3 Aufgabe 4c: Phasendiagramm in Abhängigkeit von β und h

In dieser Aufgabe sollte die Magnetisierung in Abhängigkeit von sowohl h als auch β berechnet werden. Hierzu wird für je 50 Werte von $h \in [-1, 1]$ und $\beta \in [0, 1]$ ein Spingitter thermalisiert und dann die Magnetisierung ermittelt. Die Ergebnisse dieser Berechnung sind in Abb. 11 abgebildet.

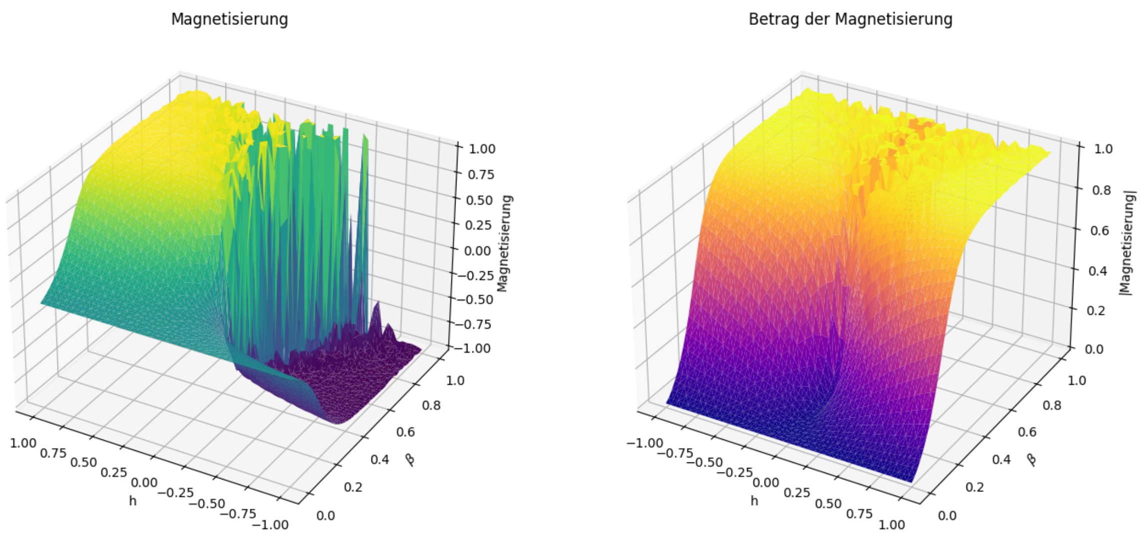

Abbildung 11: m und $|m|$ in Abhängigkeit von h und β