

Einführung in die Programmierung

Blatt 6

(Abgabe: 28. Juni)

Aufgabe 16 (16 Punkte). *Ising*

Das Ising-Modell beschreibt die Magnetisierung eines Körpers. Gegeben sei (für ein 2d-Modell) ein Zustand $S = (\sigma_{ij})_{i,j=1}^N$, wobei $\sigma_{ij} \in \{-1, 1\}$ die Magnetisierung eines einzelnen Atoms (dessen Spin) beschreibt. Einem solchen Zustand kann nun eine Energie zugeordnet werden, indem man es als energetisch günstiger annimmt, wenn benachbarte Spins in dieselbe Richtung zeigen. Für $J > 0$ ist ein geeigneter Energieterm gegeben durch

$$E(S) = \sum_{i,j=1}^N \sum_{\hat{i}, \hat{j} \sim i,j} -J \sigma_{i,j} \sigma_{\hat{i}, \hat{j}},$$

wobei ‘ $\sim$ ’ bedeutet, dass die innere Summe über alle nächsten Nachbarn $(\hat{i}, \hat{j})$ von (i, j) läuft, und vorgegebene Randbedingungen beachtet werden sollten.

Insgesamt sind 2^{N^2} Zustände möglich. Bei gegebener Temperatur $T = \frac{1}{\beta}$ besagt die Boltzmann-verteilung, dass die Wahrscheinlichkeit einen bestimmten Zustand S aufzufinden, gegeben ist durch

$$P(S) = \frac{\exp\{-\beta E(S)\}}{Z}$$

mit der Zustandssumme $Z = \sum_{\bar{S}} \exp\{-\beta E(\bar{S})\}$, wobei die Summe über alle 2^{N^2} möglichen Zustände läuft.

Wir wollen nun für gegebene J und β einen zufälligen Zustand nach dieser Verteilung bestimmen. Dies geschieht mittels des Metropolis-Hastings-Algorithmus, beginnend mit einem (beliebigen) Anfangszustand S_0 :

- (1) Gegeben sei ein Zustand S_k , $k \geq 0$, wir wollen den Zustand S_{k+1} bestimmen.
- (2) Wähle dazu (uniform verteilt) zufällige Indizes i und j .
- (3) Berechne die Energie $E(S_k)$ des Zustandes S_k sowie die Energie $E(\hat{S})$ des Zustandes $\hat{S}$, welcher durch Umklappen von σ_{ij} auf $-\sigma_{ij}$ entsteht.
- (4) Falls $E(\hat{S}) < E(S_k)$ setze $S_{k+1} = \hat{S}$ („Annahme des Testzustandes $\hat{S}$ “). Ansonsten setze $S_{k+1} = \hat{S}$ mit Wahrscheinlichkeit $p = \exp\{-\beta(E(\hat{S}) - E(S_k))\}$ (wiederum „Annahme des Testzustandes $\hat{S}$ “) und $S_{k+1} = S_k$ mit Wahrscheinlichkeit $q = 1 - p$ („Ablehnung des Testzustandes $\hat{S}$ “).
- (5) Falls $k \geq K$ terminiere, ansonsten inkrementiere k um eins und gehe zu Punkt 1.

Implementieren Sie diesen Algorithmus für $J = 1$ und verschiedene β zwischen 0.1 und 1.0. Ein vernünftiger Wert für N ist 100, für K etwa 10^5 bis 10^6 . Versuchen Sie verschiedene Randbedingungen, zum Beispiel „obere Hälfte +1, untere Hälfte -1“ oder verschiedene Seiten des Quadrates jeweils ± 1 .

Tipp: Randbedingungen sind am einfachsten zu implementieren, indem Sie eine Zusätzliche Lage an Spins um das Quadrat erzeugen und im Algorithmus nur die Spins im strikten Inneren ändern. Wählen Sie als Startzustand dann einen Zustand, der die Randbedingungen erfüllt.

Hinweis: Programmieren Sie effizient – zur Berechnung des Energieunterschiedes aus Schritt 4 müssen Sie *nicht* die ganze Summe in E ausführen.

Abgabe der Lösungen per Email nach Absprache mit dem Tutor.