

Übungsblatt 13: Monte-Carlo Metropolis Sampling

Julian Kappler, Markus Mietтинен
21. Januar 2016

Allgemeine Hinweise

Abgabetermin für die Lösungen ist

- Sonntag, 31.01., 24:00 Uhr.

Aufgabe 13: Monte-Carlo Metropolis Sampling: Das Ising Modell in 2 Dimensionen (20 Punkte)

Das diskrete Ising Spin Modell ist das einfachste System, welches in zwei Dimensionen einen Phasenübergang zeigt. Der Hamiltonian für ein quadratisches Gitter mit N_s^2 Spins ist definiert durch

$$H = -J \sum_{(i,j)} \sum_{(k,l)} s_{i,j} s_{k,l} \quad (1)$$

wobei die (i,j) Summe über alle N_s^2 Gitterelemente ist, $(i,j) \in \{0, \dots, N_s - 1\}^2$, und die (k,l) Summe jeweils über die 4 nächsten Nachbarn eines (i,j) Tupels auf dem quadratischen Gitter. Jedes Teilchen wechselwirkt also nur mit seinen nächsten Nachbarn, und die Stärke dieser Wechselwirkung ist durch die Kopplungskonstante J charakterisiert. Für positives J ist dies ein einfaches Modell für Ferromagnetismus. Wir nehmen an, dass jeder Spin nur 2 Werte annehmen kann, $s_{i,j} = +1$ oder $s_{i,j} = -1$.

Die Magnetisierung des Gitters ist gegeben durch

$$M = \frac{1}{N_s^2} \sum_{i,j=0}^{N_s-1} s_{i,j}. \quad (2)$$

- **13.1 Implementieren der Monte-Carlo Methode (5 Punkte):** Implementieren Sie den Monte-Carlo Metropolis Algorithmus für ein quadratisches Gitter der Kantenlänge N_s , d.h. für ein System aus N_s^2 Spins. Verwenden Sie periodische Randbedingungen.

Schreiben Sie Ihren Monte-Carlo Algorithmus als Funktion, die als Eingabeparameter die reskalierte Kopplungskonstante $J/k_B T$, die Anzahl an Monte-Carlo Schritten N_{step} , sowie ein `numpy.array` mit der Anfangskonfiguration des Spingitters hat.

Ihre Funktion soll Folgendes zurückgeben: Die Spinkonfigurationen zu jedem Monte-Carlo Schritt (MCS), sowie ein Array mit der Magnetisierung M in jedem MCS, und ein Array mit dem Absolutbetrag der Magnetisierung, $|M|$, in jedem MCS.

Hinweise:

- Die Anfangskonfiguration soll durch ein zweidimensionales Array der Dimension (N_s, N_s) mit Einträgen ± 1 dargestellt werden.
- In einem MCS soll jeder Spin einmal probeweise geflippt (d.h. das Vorzeichen wird gewechselt) und dann die Energiedifferenz zwischen altem und neuem Zustand berechnet werden. Wird z.B. der Spin an der Stelle (i, j) geflippt, so ergibt sich als Energiedifferenz

$$\Delta H = H_{\text{neu}} - H_{\text{alt}} = \quad (3)$$

$$= 2J s_{i,j} [s_{i+1,j} + s_{i-1,j} + s_{i,j+1} + s_{i,j-1}], \quad (4)$$

wobei die Indizes modulo N_s zu verstehen sind. Jeder Spinflip wird dann mit einer Wahrscheinlichkeit

$$P = \min \left\{ 1, \exp \left(-\frac{\Delta H}{k_B T} \right) \right\} \quad (5)$$

akzeptiert. Ein MCS besteht also aus N_s^2 Spinflip-Versuchen. Beachten Sie, dass der einzige Parameter die reskalierte Kopplungskonstante $J/(k_B T)$ ist: Dies ist der Grund, warum Ihre Funktion $J/(k_B T)$, also das Verhältnis zwischen Wechselwirkungsenergie und thermischer Energie, als Eingabeparameter hat, und nicht $J, k_B T$ separat.

- Eine Standardmethode um ein Ereignis mit Wahrscheinlichkeit P numerisch zu simulieren ist, eine Zufallszahl X aus der Gleichverteilung in $[0,1)$ zu ziehen und diese dann mit P zu vergleichen: $X < P$ gilt genau mit Wahrscheinlichkeit P . In $[0,1)$ gleichverteilte Zufallszahlen können Sie mit `numpy.random.random()` erzeugen.
 - Zur Implementierung der periodischen Randbedingungen kann der Modulo-Operator (%) verwendet werden.
 - Als Ausgabeformat für die Spinkonfigurationen bietet sich z.B. ein `numpy.array S` vom Datentyp Ganzzahl (integer) der Dimension $(N_{\text{steps}}, N_s, N_s)$ an, sodass `S[i]` ein Array der Dimension (N_s, N_s) mit der Spinkonfiguration beim i -ten MCS ist.
- **13.2 Visualisieren eines Systems (2 Punkte):** Wir betrachten nun ein System aus 40×40 Ising Spins. Erstellen Sie eine geordnete Anfangskonfiguration, in der alle Spins den Wert $+1$ haben, und führen Sie mithilfe Ihrer Funktion aus der vorherigen Teilaufgabe 100 Monte-Carlo Schritte mit $J/(k_B T) = 0.2$ aus.

Laden Sie sich von der Vorlesungswebsite die Vorlage zur Visualisierung eines Spingitters herunter und benutzen Sie diese, um eine Animation ihrer Spinkonfigurationen zu erstellen.

- **13.3 “Abkühlen” eines Spingitters (3 Punkte):** Wir betrachten weiterhin ein System aus 40×40 Ising Spins und wollen nun wissen, wie sich $M, |M|$ verhalten, wenn der Parameter $J/k_B T$ langsam erhöht wird:

Erhöhen Sie $J/k_B T$ in 100 Schritten von 0 bis 1 und führen Sie für jeden Wert 100 MCS aus. Starten Sie bei $J/k_B T = 0$ mit der geordneten Anfangskonfiguration (siehe vorherige Teilaufgabe) und verwenden Sie danach für jeden neuen Wert von $J/k_B T$ die letzte Spinkonfiguration der vorherigen Simulation.

Berechnen Sie die Mittelwerte von M und $|M|$ für jede der reskalierten Kopplungskonstanten und plotten Sie diese Mittelwerte jeweils als Funktion der reskalierten Kopplungskonstanten. Was beobachten Sie?

Hinweis: Da für die Monte-Carlo Simulation nur die reskalierte Kopplungskonstante $J/k_B T$ relevant ist, kann eine Änderung dieser als eine Temperaturänderung bei fixiertem J interpretiert werden kann. Diese Interpretation motiviert die Titel dieser und der folgenden Teilaufgaben.

- **13.4 “Erwärmen” eines Spingitters (4 Punkte):** Gehen Sie nun in 100 Schritten von $J/(k_B T) = 1$ nach $J/(k_B T) = 0$ und plotten wieder die Mittelwerte von M und $|M|$ als Funktion von $J/(k_B T)$.

Sehen Sie Abweichungen von den Ergebnissen aus 13.3?

Hinweis: Verwenden Sie wie in der vorherigen Teilaufgabe $N_{steps} = 100$ und wieder die letzte Spinkonfiguration des vorherigen Wertes von $J/(k_B T)$ als Anfangsbedingung für den nächsten Wert von $J/(k_B T)$. Fangen Sie bei $J/(k_B T) = 1$ mit der geordneten Anfangskonfiguration (alle Spins +1) an.

Zur Beantwortung der letzten Frage macht es Sinn, die Mittelwerte für M bzw. $|M|$ aus Teilaufgaben 11.3 und 11.4 jeweils zusammen in einem gemeinsamen Plot darzustellen.

- **13.5 Verhalten bei hohen Temperaturen (2 Punkte):** Welche Werte von M und $|M|$ beobachten Sie in Ihrem 40×40 System für kleine reskalierte Kopplungskonstanten? Warum sind M und $|M|$ unterschiedlich? Welchen Wert erwartet man für $|M|$ für kleine reskalierte Kopplungskonstanten (z.B. $J/(k_B T) = 0.1$)?
- **13.6 Verhalten in der Nähe eines Phasenübergangs (4 Punkte):** Der Nobelpreisträger Lars Onsager fand in den 1940ern als erster die Lösung des zweidimensionalen Ising Modells (d.h. er berechnete die Freie Energie analytisch). In seiner exakten Rechnung erhielt er für den kritischen Punkt des 2D Ising Modells den Wert $J/(k_B T) \approx 0.441$. Führen Sie nun eine Reihe von Simulationen eines 100×100 Spingitters bei den reskalierten Kopplungskonstanten

$$J/(k_B T) \in \{0.1, 0.3, 0.42, 0.5\} \quad (6)$$

durch.

Starten Sie jeweils mit einem geordneten Anfangszustand (alle Spins +1) und verwenden Sie jeweils $N_{step} = 100$.

Erstellen Sie einen Plot mit den Magnetisierungen M aller Systeme als Funktion des MCS, und einen Plot mit dem Betrag der Magnetisierungen $|M|$ aller Systeme als Funktion des MCS.

Schauen Sie sich die Animationen der jeweiligen Spingitter an. Was können Sie qualitativ über die beobachteten Strukturen aussagen?

Anmerkung: Kritische Opaleszenz bezeichnet die experimentelle Tatsache, dass Stoffe am kritischen Punkt sehr großskalige Strukturen bilden, die Licht stark streuen. Eine Flüssigkeit erscheint trübe am kritischen Punkt.