Prof. Dr. Wolfhard Janke, Dr. Elmar Bittner WS2009/10

Einführung in Computersimulationen I

8. Übungsblatt

Abgabetermin: Dienstag, 5. Januar 2010

15. **2D Ising-Modell: Exakte Lösung II**

    Benutzen Sie das MATHEMATICA-Programm von Beale (zu finden auf P. D. Beale's homepage), um die exakte Zustandsdichte g_n (Zahl der Konfigurationen mit Energie $E_0 + 4nJ$, $n = 0, 1, \ldots, L^2$, Grundzustandsenergie $E_0 = -2JL^2$) des ferromagnetischen 2D Ising-Modells bei periodischen Randbedingungen für das 16×16 Quadratgitter zu bestimmen.

    a) Plotten Sie $\ln g_n$ als Funktion von n bzw. $e \equiv E/L^2$.

    b) Plotten Sie die normierte Energieverteilung

    $$P^K(n) = \frac{g_n e^{-4nK}}{\sum_{n=0}^{L^2} g_n e^{-4nK}}$$

    bei $K = 0.375$, $\ln(1+\sqrt{2})/2 = K_c \approx 0.440\,686$ und 0.475.

    c) Stellen Sie die mittlere Energie $\langle E \rangle$ und die spezifische Wärme C_V mit Hilfe von $P^K(n)$ dar und plotten Sie diese Größen als Funktion von K^{-1}. Vergleichen Sie mit Ihren Ergebnissen aus Aufgabe 10.

16. **Single-Histogram Reweighting**

    Messen Sie für das 2D Ising-Modell (period. Randbedingungen) auf einem 16^2-Gitter die Energieverteilung (Histogramm) aus einer Monte-Carlo-Simulation mit lokalem Update (z.B. Metropolis, Glauber oder Wärmebad) bei $J\beta_c \approx 0.440\,686$ ($\beta = 1/k_BT$).

Bestimmen Sie *ohne* erneute Simulation die Energieverteilungen bei $J\beta_1 = 0.375$ und $J\beta_2 = 0.475$ durch einfaches Umgewichten (*single-histogram reweighting*). Vergleichen Sie mit den exakten Ergebnissen aus Aufgabe 15b) (alternativ können die Vergleichshistogramme auch durch separate MC-Simulationen bei β_1 und β_2 bestimmt werden). Wovon hängt die Qualität der umgewichteten Histogramme offenbar wesentlich ab?