Einführung in die Computersimulation II

7. Übungsblatt

Abgabetermin: Montag, 09. Juni 2025

13. **Clusterschätzer für die Korrelationsfunktion des 2D Ising-Modells**

    In der Hochtemperaturphase des Ising-Modells kann die Korrelationsfunktion $G(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = \langle s_{\vec{x}_i} s_{\vec{x}_j} \rangle$ durch den Mittelwert von $s_{\vec{x}_i} s_{\vec{x}_j}$ geschätzt werden, wobei bei periodischen Randbedingungen (Translationsinvarianz) auch alle $\vec{x}_i$, $\vec{x}_j$ miteinbezogen werden können, die denselben (vektoriellen) Abstand $\vec{R}_{ij} \equiv \vec{x}_i - \vec{x}_j$ haben. Alternativ kann $G(\vec{x}_i, \vec{x}_j)$ durch den Clusterschätzer $\hat{G}(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = \frac{V}{|C|} \Theta_C(\vec{x}_i) \Theta_C(\vec{x}_j)$ bestimmt werden, wobei $|C|$ die Anzahl der Spins in einem Cluster und $\Theta_C(\vec{x}_i)$ die charakteristische Funktion ($= 1$ wenn $\vec{x}_i$ im Cluster und 0 sonst) bezeichnen.

    Implementieren Sie beide Meßvorschriften für das 2D Ising-Modell auf einem quadratischen Gitter der linearen Ausdehnung $L = 64$ und 128 mit periodischen Randbedingungen für den Spezialfall, dass $\vec{R}_{ij} = \vec{x}_i - \vec{x}_j$ entlang der x-Achse zeigt. Verwenden Sie für die Simulationen den Single-Cluster-Algorithmus aus Aufgabe 4. Vergleichen Sie die Genauigkeit der beiden Meßvorschriften.

    Für genügend große Abstände $|\vec{R}_{ij}|$ fällt die Korrelationsfunktion exponentiell ab, $G \propto \exp(-|\vec{R}_{ij}|/\xi)$, wobei $\xi = \xi(\beta)$ die (räumliche) Korrelationslänge ist. Schätzen Sie ξ ab für $\beta = 0.42, 0.40, 0.35$ und 0.30.

14. **Statistische Fehler von Histogrammen**

    Simulieren Sie das 2D Ising-Modell für ein 16×16 Gitter mit periodischen Randbedingungen bei $\beta_c = \ln(1 + \sqrt{2})/2 = 0.440\,686\ldots$ mit dem Metropolis-Algorithmus (5 000 Sweeps für Thermalisierung, $2^{16} = 65\,536$ Sweeps für Messungen) und bestimmen Sie die Energie und das Energiehistogramm als unnormiertes Anzahlhistogramm $H(E)$. Für beide Größen sollen 16 Blöcke herausgeschrieben werden, um damit die statistischen Fehler bestimmen zu können. Schätzen Sie daraus für die Energie die integrierte Autokorrelationszeit $\tau_{\mathrm{int},E}$ ab und vergleichen Sie die statistischen Fehler des Anzahlhistogramms mit dem asymptotischen Ergebnis $\sqrt{H(E)}$ für unkorrelierte Daten. Ist der gemessene statistische Fehler um einen Faktor $\sqrt{2\tau_{\mathrm{int},E}}$ größer?