

Einführung in die Computersimulation I

12. Übungsblatt

Abgabetermin: Mittwoch, 28. Januar 2026

23. Reweighting “on the flight”

- a) Berechnen Sie für das zweidimensionale Ising-Modell mit $L = 16$ aus den umgewichteten Histogrammen bei $\beta_1 = 0.375$ und $\beta_2 = 0.475$ aus Aufgabe 22 die mittlere Energie und spezifische Wärme. Vergleichen Sie mit den exakten Ergebnissen.
- b) Verwenden Sie nun genau dieselben Simulationsdaten bei $\beta_0 = \beta_c = \ln(1 + \sqrt{2})/2$ wie in Aufgabe 22 und bestimmen Sie für $\beta = \beta_1$ und β_2 die mittlere Energie und spezifische Wärme “on the flight” aus ($k = 1, 2$)

$$\overline{e^k} = (1/L^2) \sum_{i=1}^N E_i^k \exp(-(\beta - \beta_0)E_i) / \sum_{i=1}^N \exp(-(\beta - \beta_0)E_i),$$

wobei E_i , $i = 1, \dots, N$, die Energiemessungen (mit i in Einheiten von Sweeps) sind.

- c) Die Energieverteilungen $P_\beta(e)$ ($e = E/L^2$) bei $\beta = \beta_1$ und β_2 können ebenfalls “on the flight” bestimmt werden, indem man die “Treffer” von $E_i = E$ ($= -2L^2, \dots, 2L^2$) nicht wie am Simulationspunkt β_0 mit Gewicht $+1$ zählt sondern mit $\exp(-(\beta - \beta_0)E_i)$. Testen Sie diese Behauptung (für einen direkten Vergleich mit den Histogrammen aus Aufgabe 22 muss dieselbe Normierung verwendet werden, z.B. $\sum_E P_\beta(e) = N$).

24. Nichterhaltene Dynamik

Verwenden Sie Ihr Computerprogramm für Metropolis-Simulationen des 2D Ising-Modells mit nichterhaltener Dynamik (fluktuierender Magnetisierung) auf einem Quadratgitter der Größe $L^2 = 32^2$ mit periodischen Randbedingungen. Starten Sie die Simulation mit einer Anfangskonfiguration, in der die Spins s_i die Werte ± 1 mit Wahrscheinlichkeit 0.5 annehmen, so dass die totale Magnetisierung fast verschwindet. Dies modelliert eine Spinkonfiguration bei unendlicher Temperatur.

- a) Lassen Sie die Simulation dann bei der Temperatur $T = 0.1T_c$ über 10^4 Monte-Carlo-Sweeps (MCS) laufen und plotten Sie Schnappschüsse der Spinkonfigurationen zu den Zeiten $t = 10, 10^2, 10^3$ und 10^4 MCS. Was beobachtet man?
- b) Wiederholen Sie diese Simulation dann weitere 4 Mal jeweils mit einer anderen Anfangskonfiguration und unabhängigen Zeitentwicklungen durch Verwendung anderer Initialisierungen (“Seeds”) der (Pseudo-)Zufallszahlen. Schätzen Sie die mittlere Länge $\ell(t)$ der sich entwickelnden Domänen von “up” und “down” Spins durch die mittlere Anzahl der “kinks” entlang der x - und y -Richtung ab (bei einem “kink” wechselt die Richtung der Spins). Wie hängt die mittlere Anzahl der “kinks” mit der Energie des Systems zusammen? Plotten Sie $\ell(t)$, die Energie und die mittlere Akzeptanzrate als Funktion der Zeit (= MCS) und verifizieren Sie, dass sich jeweils ein Potenzverhalten entwickelt.