Technische Universität Braunschweig

INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK

Prof. Dr. Wolfram Brenig
Alexander Schwenke
Erik Wagner

Abgabe: Di., 11.01.2022 bis 11:30 Uhr in Stud.IP

Übungsblätter gibt es unter `https://lnk.tu-bs.de/HVwt0v`.

Bonusübungsblatt

34. Monte-Carlo-Simulationen: Schlangen und Leitern, Ising-Modell (20 Punkte)

Wie in Aufgabe 29 dargestellt, können Systeme, deren Entwicklung nur vom aktuellen Zustand abhängt, durch sogenannte Markov-Ketten beschrieben werden. In der Praxis geschieht dies durch Matrizen, die Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen den Zuständen des Systems beschreiben. Die explizite Berechnung von Observablen ist mit diesem direkten Verfahren jedoch nur für Systeme mit 'wenigen' Zuständen möglich. Möchte man Systeme mit 'vielen' Zustände (z.B. Spins auf einem $N \times N$-Gitter mit 2^{N^2} Zuständen) betrachten, so werden die vollständigen Matrizen schnell zu groß. In diesem Fall bietet es sich an, eine sogenannte Monte-Carlo-Methode anzuwenden. Dabei werden nicht alle Zustände des Systems gleichzeitig betrachtet, sondern nur ein Zustand stellvertretend und unter zu Hilfenahme von Zufallszahlen so entwickelt, dass er die Eigenschaften des gesamten Systems widerspiegeln kann. Dies funktioniert insbesondere dann gut, wenn das System viele (fast) entartete Zustände besitzt.

Konkret betrachten wir den „Metropolis-Algorithmus", der Zustände gemäß der Boltzmann-Verteilung erzeugt. Bei diesem wird ausgehend von einem aktuellen Zustand des Systems $|\Psi_n\rangle$ wie folgt verfahren:

Metropolis-Algorithmus

1) Bestimme zufällig einen neuen Zustand $|\Psi'_n\rangle$ nahe $|\Psi_n\rangle$. Dies kann beispielsweise ein einzelner Spin-Flip, ein möglicher Zug im 'Schlangen und Leitern'-Spiel oder ein Stoß zweier Teilchen in einem Gas sein.

2) Berechne die Energiedifferenz ΔE zwischen den Zuständen $|\Psi'_n\rangle$ und $|\Psi_n\rangle$.

3) Falls $\Delta E \leq 0$, so wurde ein günstigerer Zustand gefunden und dieser wird angenommen, setze also $|\Psi_{n+1}\rangle = |\Psi'_n\rangle$.
Falls $\Delta E > 0$, so nehme den neuen Zustand nur mit einer Wahrscheinlichkeit $\exp(-\frac{\Delta E}{k_B T})$ an. Dabei ist die Temperatur T ein Parameter. Wird der neue Zustand nicht angenommen, so setze $|\Psi_{n+1}\rangle = |\Psi_n\rangle$.

Durch Wiederholung dieser Schritte entwickelt sich der Zustand zu einem für die Temperatur T 'typischen' Zustand. Der Initialzustand $|\Psi_0\rangle$ sollte ebenfalls zufällig bestimmt werden.

(a) Nutzen Sie den Metropolis-Algorithmus, um den Erwartungswert der Spiellänge des Spiels 'Schlangen und Leitern' aus Aufgabe 29 zu bestimmen.
In diesem Fall gibt es zwischen den Zuständen keine Energiedifferenz und jeder neue Zustand wird automatisch angenommen. Der Algorithmus läuft in diesem Fall bis zum Beenden des Spiels und wird vielfach wiederholt, um eine (akkurate) Bestimmung des Erwartungswerts zu ermöglichen. Mitteln Sie jeweils die Ergebnisse aus M Simulationen (z.B. $M = 5000$) und bestimmen sie die Statistik des gemittelten Erwartungswerts (siehe auch Aufgabe 7).

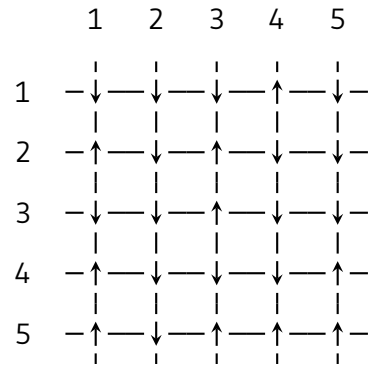
i. Vergleichen Sie etwa die benötigten Rechenoperationen zwischen dem Metropolis-Algorithmus und dem expliziten Rechnen mit Matrizen, um den Erwartungswert mit einer Genauigkeit von ± 1 zu bestimmen.

ii. Nutzen Sie den Metropolis-Algorithmus, um den Erwartungswert für größere Spielbretter ohne Leitern und mit zufällig verteilten Schlangen zu bestimmen. Ab welcher Schlangendichte übersteigt die erwartete Spieldauer die Anzahl der Felder?

Betrachten Sie ein System aus Ising-Spins (ein Spin, der die Werte -1 und $+1$ annehmen kann) auf einem $N \times N$-Quadratgitter mit periodischen Randbedingungen und Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn. Ein solches System besitzt die Energie

$$E = -\sum_{i,j=1}^{N} S_{i,j} \cdot S_{i+1,j} + S_{i,j} \cdot S_{i,j+1} \tag{1}$$

wobei $S_{i,j}$ den Ising-Spin auf Gitterplatz (i,j) beschreibt und die periodischen Randbedingungen $N+1 \equiv 1$ bedeuten.



(b) Berechnen Sie für dieses Ising-Modell die zu erwartende Energie pro Gitterplatz $\epsilon = \langle E \rangle / N^2$ und die durchschnittliche Magnetisierung $m = \langle M \rangle / N^2$, wobei

$$M = \sum_{i,j=1}^{N} S_{i,j} \tag{2}$$

die gesamte Magnetisierung ist, bei verschiedenen Temperaturen $k_B T \in [1,4]$ mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus. Wählen Sie $N \geq 10$ und bilden Sie $\langle \bullet \rangle$ indem Sie nach Einstellung eines annähernden Gleichgewichts über mindestens 10^4 weitere Iterationen des Metropolis-Algorithmus mitteln.

i. Stellen Sie die Abhängigkeit $\epsilon(T)$ graphisch dar.

ii. Visualisieren Sie 'typische' Zustände für verschiedene Temperaturen.

iii. Visualisieren Sie die Entwicklung eines (zufälligen) Zustands bei einer gegebenen Temperatur im Laufe des Metropolis-Algorithmus.

Betrachten Sie nun (siehe auch Aufgabe 27a(iii.)) die Wärmekapazität des Ising-Modells

$$C(T) = \frac{1}{k_B T^2} \left\langle (\Delta E)^2 \right\rangle = \frac{1}{k_B T^2} \left(\left\langle E^2 \right\rangle - \langle E \rangle^2 \right) . \tag{3}$$

iv. Stellen Sie die Abhängigkeit $C(T)$ graphisch dar. Was können Sie daraus folgern?