Theoretische Physik VI: Statistische Physik
Computergestutztes Semesterprojekt

Dr. Javier Cerrillo

WS 2014-2015

In der statistischen Physik begegnet man Fragen die sich analytisch oft nur aproximativ lösen lassen. Mit diesem Semesterprojekt stellt man eine Einführung in eine angewandte Computermethode zur Verfügung, womit man die Eigenschaften von sehr allgemeinen Modellen der statistischen Physik untersuchen kann. Monte-Carlo-Methoden und deren Varianten dienen grundsätzlich der Berechnung von hoch-dimensionalen Funktionalen, was in der Felderformulierung sofort anwendung finden kann, aber auch in Renormierungsgruppe-Methoden und anderen Gebieten.

1 Monte-Carlo-Methode

Hauptsatz der Monte-Carlo-Methode lautet, man darf ein multidimensionales Integral nähern, indem man nur einige Punkte vom Integrationsgebiet wählt. Sei das Integral

$$I = \int_V f(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r}, \tag{1.1}$$

übers Hypervolumen

$$V = \int_V d\boldsymbol{r},$$

wird I mit einer uniform-gewählten Stichprobe des Integrationsgebiets $\{\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_N\} \subset V$ für große N genähert:

$$I = \lim_{N\to\infty} \frac{V}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\boldsymbol{r}_i). \tag{1.2}$$

2 Importance Sampling

Wir kennen schon die Sattelpunktsnäherung

$$Z = \int D[\Phi]\, e^{-S[\Phi]} \approx e^{-S[\Phi_{max}]}$$

wo man den Wert des Funktionales durch einen einzigen ausgesuchten Punkt nähert. Hier sieht man schon, wenn die Stichprobe mit einer geeigneten Wahrscheinlichkeitsverteilung gewählt wird, hat man Chancen, das Integral schneller zu nähern. Deswegen Formulieren wir jetzt (1.1) um, damit die Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(\boldsymbol{r})$ berücksichtigt wird

$$I = \int_V p^{-1}(\boldsymbol{r}) \frac{f(\boldsymbol{r})}{p^{-1}(\boldsymbol{r})} d\boldsymbol{r}.$$

Die Monte-Carlo-Summe (1.2) ist dann als den Erwartungswert der Funktion $f^*(\boldsymbol{r}_i) \equiv \frac{f(\boldsymbol{r})}{p^{-1}(\boldsymbol{r})}$ unter der Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(\boldsymbol{r})$ zu sehen

$$I = \lim_{N\to\infty} \frac{V}{N} \sum_{i=1}^{N} p^{-1}(\boldsymbol{r}_i) f^*(\boldsymbol{r}_i),$$

wo eine Stichprobe mit den meist-wahrscheinlichen Punkten bietet dann eine gute Näherung an.

Als Beispiel kann man thermodynamische Erwartungswerte betrachten

$$\langle A \rangle = \int_V A(\boldsymbol{r}) \frac{e^{-\beta E(\boldsymbol{r})}}{Z} d\boldsymbol{r}.$$

Für die Wahrscheinlichkeitsverteilung wird die Boltzmannverteilung $p(\boldsymbol{r}) = \frac{e^{-\beta E(\boldsymbol{r})}}{Z}$ gewählt, damit

$$\langle A \rangle = \lim_{N\to\infty} \frac{V}{N} \sum_{i=1}^{N} A^*(\boldsymbol{r}_i),$$

den Erwartungswert als Summe von wahrscheinlichen Werten der thermodinamischen Menge dargestellt werden kann.

3 Metropolis-Algorythmus

Diese Importance-Sampling-Erwartungswerte sind aber in der Regel aus einer uniform gewählten Stichprobe $\{\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_N\}$ nicht einfach zu berechnen. Das Metropolis-Algorythmus ermöglicht diesen Schritt, indem zufällig-generierte Punkte nur nach bestand des Metropolistests angenommen werden. Dieser Test berechnet das Verhältnis zwischen den Wahrscheinlichkeiten vom neuen und vorherigen Punkt $\alpha = \frac{p(\boldsymbol{r}')}{p(\boldsymbol{r})}$ und nimmt den neuen Punkt an für $\alpha > 1$ oder widrigenfalls nur gemäß der Wahrscheinlichkeit α. So kann man aus einer uniform-verteilt Stichprobe zu einer beliebigen Verteilung $p(\boldsymbol{r})$ gelangen.

4 Untersuchung des 2D-Ising-Phasenübergangs

Teil 1

Das 2D-Ising-Modell ohne lokales Feld wurde 1944 von Lars Onsager gelöst. Es wurde ein kritischer Punkt an der Stelle

$$\sinh(\beta J_x) \sinh(\beta J_y) = 1$$

hervorsagt. Finden Sie Beweis vom Phasenübergang in der Magnetisation, die Energie, die Wärmekapazität und die magnetische Suszeptibilität mit Hilfe von einer Metropolis-Monte-Carlo-Simulation.

Teil 2 (Weihnachtsbesinnung)

Aus der Theorie der Renormierungsgruppe kann man kritische Exponenten mit Skalentransformationen verbinden (siehe Skript). Denken Sie nach, wie könnte man diese Exponenten aus Monte-Carlo-Simulationen numerisch herleiten. Nach Weihnachten wird die Lösung mitgeteilt.