Hochschule München
S. Tornow

Aufgaben zur Vorlesung Modellbildung und Simulation (Statistische Mechanik)

Lösen Sie die Aufgaben, indem Sie in eigenen Worten das Problem, das Modell, die gelösten Gleichungen und den verwendeten Algorithmus beschreiben. Visualisieren und diskutieren Sie die Ergebnisse und führen Sie eine kritische Analyse durch. Geben Sie den verwendeten Code zusammen mit der Lösung ab und führen Sie diesen in den Übungen vor. Sie können in Gruppen von bis zu drei Studierenden zusammenarbeiten. **(Abgabe: 06.07.18)**

1. **Von der Mechanik zur statistischen Mechanik** **(25 Punkte)**

   Betrachten Sie vier Scheiben in einem Quadrat.

   (a) Simulieren Sie die Bewegung der Scheiben mit Hilfe der Molekulardynamik (event driven molecular dynamics). Visualisieren Sie die Bewegung der vier Scheiben mit verschiedenen Genauigkeiten. Wählen Sie verschiedene Anfangsbedingungen. Berechnen Sie bei jedem Zeitschritt die Gesamtenergie und erstellen Sie ein Histogramm der x-Positionen.

   (b) Implementieren Sie den Markov-Monte-Carlo-Algorithmus und erzeugen Sie erlaubte Konfigurationen. Erstellen Sie ein Histogramm der x-Positionen. Vergleichen Sie mit dem Histogramm aus (a).

2. **Monte-Carlo-Verfahren zur Integration** **(25 Punkte)**

   (a) Schreiben Sie einen Zufallsgenerator für Zufallszahlen, die nach den Wahrscheinlichkeitsverteilungen (i) $p(x) = e^{-x}$ und (ii) $p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}$ verteilt sind.

   (b) Bestimmen Sie das Volumen einer Kugel in 10 Dimensionen (Radius 1) mit Hilfe einer Monte-Carlo-Methode

   (c) Bestimmen Sie die folgenden Integrale mit einer Monte-Carlo-Methode

   $$\int_0^2 \sin^2\left(\frac{1}{x(2-x)}\right) dx \tag{1}$$

   $$\int_0^1 \frac{x^{-1/2}}{e^x + 1} dx \tag{2}$$

   und schätzen Sie den Fehler ab.

3. **Ising-Modell** **(25 Punkte)**

   Schreiben Sie eine Metropolis-Monte-Carlo-Simulation für ein quadratisches Gitter von 20×20 Spins für das Ising-Modell mit der Gesamtenergie $E = -\sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j$. J_{ij} sei J wenn i und j nächste Nachbarn sind, sonst null. Am Anfang seien alle Spin-Variablen zufällig gewählt (± 1). Flippen Sie einen Spin und akzeptieren den neuen Zustand mit der Metropolis-Bedingung. Plotten Sie die Magnetisierung ($M = \sum_i s_i$) als Funktion der Zeit (Monte-Carlo-Schritte) für verschiedene Temperaturen und die Gesamtmagnetisierung als Funktion der Temperatur.

4. **Simulierte Abkühlung und Problem des Handlungsreisenden** **(25 Punkte)**

   (a) Bestimmen Sie das globale Minimum der Funktionen
   $f(x) = x^2 - \cos(4\pi x)$
   und
   $f(x) = \cos(x) + \cos(\sqrt{2}x) + \cos(\sqrt{3}x)$
   mit Hilfe der simulierten Abkühlung. Plotten Sie x als Funktion der Zeit (Monte-Carlo-Schritte).

   (b) Finden Sie den kürzesten Weg für das Handlungsreisenden-Problem für 25 Städte mit Hilfe der simulierten Abkühlung.

5. **Restricted Boltzmann Machine (RBM)** **(50 Punkte)**

   Eine RBM ist ein stochastisches künstliches neuronales Netz, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Eingänge (Daten) lernen kann. Mit Hilfe dieser Verteilung erhält man eine komprimierte Repräsentation für den Datensatz.

   Erklären und visualisieren Sie die einzelnen Schritte des RBM-Codes. Führen Sie ein geeignetes Maß für die performance ein und untersuchen Sie dieses als Funktion der Parameter n_{hidden} für den MNIST Datensatz oder einen Datensatz aus Aufgabe 3.