

Übungsblatt 13: Importance Sampling und Metropolis Integration

Alexander Schlaich, Matej Kanduč
23. Januar 2014

Allgemeine Hinweise

Abgabetermin für die Lösungen ist

- Sonntag, 02.02.2014, 24:00 Uhr.

13.1 Importance Sampling (8 Punkte)

Wir betrachten in dieser Aufgabe das Integral über $f(x) = \frac{1}{\sqrt{\log(1+x)}}$ auf dem Intervall $[0, 1]$. Die Funktion divergiert an der linken Intervallgrenze.

- 13.1.1 (3 Punkte) Berechnen Sie $I = \int_{\delta}^1 f(x) dx + R$ für $\delta = 10^{-3}$ direkt mittels hit-or-miss Monte-Carlo-Integration und geben Sie außerdem eine sinnvolle, analytische Abschätzung für $R = \int_0^{\delta} f(x) dx$ an. Führen Sie die Berechnung zehn mal mit jeweils 1000 Schüssen durch und berechnen Sie die Standardabweichung der Ergebnisse. Wie ändert sich das Ergebnis für Berechnung zehn mal mit jeweils 100.000 Schüssen?
- 13.1.2 (5 Punkte) Berechnen Sie $I = \int_0^1 f(x) dx$ mittels Importance Sampling:

Transformieren Sie dazu das Integral als

$$I = \int_0^1 \frac{f(x)}{g(x)} g(x) dx, \quad (1)$$

mit Substitution der Integrationsvariable $dy = g(x)dx$ und $g(x) = 1/\sqrt{x}$. Verwenden Sie die hit-or-miss Monte-Carlo-Integration zur Bestimmung des resultierenden Integrals. Führen Sie auch hier die Berechnung mit derselben Anzahl Schüsse wie in der vorigen Aufgabe durch. Begründen Sie die Streuung der Ergebnisse im Vergleich zu 13.1.1.

Hinweis: Der resultierende Integrand ist bei $y = 0$ undefiniert. Verwenden Sie bei $y = 0$ stattdessen den endlichen Grenzwert.

13.2 Metropolis Sampling: 3/2-Spin Ising Modell (12 Punkte)

Betrachten Sie einen zwei-dimensionalen Ferromagneten in einem Magnetfeld H bei einer Temperatur T . Dieser Ferromagnet kann als zwei-dimensionales $N \times N$ Spin-Gitter modelliert werden.

Wir nehmen im folgenden an, dass die Spins mögliche Werte von $s = \{\pm 1/2, \pm 3/2\}$ annehmen können. Dann sei die Energie des Ferromagneten im Magnetfeld H durch den Ausdruck

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j - H \sum_i s_i, \quad (2)$$

gegeben.

Die J_{ij} sind dabei die Kopplungskonstanten, die die Wechselwirkungsstärke zwischen den Spins i und j angeben. Zur Vereinfachung nehmen wir an, dass die $J_{ij} = 1$ für nächste Nachbarn sind und $J_{ij} = 0$ sonst. Mögliche Spinflips sind dann ± 1 für die Spins mit $s = \pm 1/2$ und -1 bzw. $+1$ für Spins mit $s = 3/2$ bzw. $s = -3/2$.

Betrachten Sie im folgenden eine Systemgröße von $N = 10$, also insgesamt 100 Spins und verwenden Sie periodische Randbedingungen.

- 13.2.1 (6 Punkte) Implementieren Sie eine Monte-Carlo-Simulation mit Metropolis-Sampling für dieses System. Starten Sie von einer zufällig gewählten Spinkonfiguration.

Wichtig ist weiterhin, daß dem System eine gewisse Anzahl von Monte-Carlo-Schritten zur Equilibrierung gegeben wird, während dieser die Observablen noch nicht gemessen werden.

Hinweise:

- Aus Laufzeitgründen sollten Sie die volle Energieberechnung nur einmal am Anfang durchführen und dann in jedem Schritt jeweils nur den Energieunterschied berechnen.
 - Da die Simulationen lange dauern können, fangen Sie mit kleinen Systemen und kurzen Simulationszeiten an und versichern Sie sich so, daß Ihr Code einwandfrei läuft, ehe Sie das volle System in allen Parametern simulieren. Überlegen Sie sich die Physik des Problems und testen Sie anhand von extremen Parametern.
- 13.2.2 (4 Punkte) Führen Sie Simulationen für folgende Temperaturen und Magnetfelder durch:

$$k_B T = [10^{-3}, 10^{-1}, 1, 2, 5, 10, 100] \quad \text{und} \quad H = [0, 0.1, 1]$$

Berechnen Sie außerdem die folgenden Observablen während der Simulation: die Gesamtenergie $\langle E \rangle$, die Magnetisierung $\langle M \rangle$ sowie den Absolutwert der Magnetisierung $\langle |M| \rangle$. Speziell bei niedrigen Temperaturen ist es wichtig, daß Sie dazu außerdem von neuen, zufällig gewählten Startkonfigurationen beginnen. Warum ist dies so?

Die Magnetisierung ist definiert als:

$$M = \sum_i s_i \quad (3)$$

Für dieses System sollten Sie 25.000 Monte-Carlo Schritte simulieren, von denen Sie das erste Viertel zur Equilibrierung verwenden. Pro Parameterkombination (T und H) sollten Sie 50 Wiederholungen mit neuen Startkonfigurationen durchführen.

Tragen Sie für die verschiedenen Magnetfelder die Observablen $\langle E \rangle$, $\langle M \rangle$ und $\langle |M| \rangle$ gegen die Temperatur auf. Wählen Sie eine logarithmische Skala für die Temperatur. Erläutern und erklären Sie Ihre Beobachtungen.

Hinweis: Die komplette Simulation aller Parameterkombinationen dauert auf unseren Rechnern bis zu einer Stunde, planen Sie also genügend Zeit ein. Bitte reichen Sie deshalb unbedingt auch die fertigen Plots als Grafik oder PDF ein.

- 13.2.3 (2 Punkte) Zeigen Sie Snapshots des Systems für repräsentative Zustände.

Hinweis: Wenn X ein zwei-dimensionales $N \times N$ `numpy`-array ist, können Sie mit folgendem Befehl einen 2D-Plot erzeugen, in dem die Spin-Zustände rot/gelb dargestellt sind:

`plt.imshow(X, extent=(0, N, N, 0), interpolation='nearest', cmap=plt.cm.jet)`, wobei `matplotlib.pyplot` als `plt` importiert wurde.