»COMPUTATIONAL PHYSICS« PRAKTIKUM
VERSUCH 6
WS 2015/16

Großkanonische Monte-Carlo Simulationen eines Modells harter Stäbchen

Miriam Klopotek, Malte Lütje und Martin Oettel
20. Januar 2016

1 EINFÜHRUNG

1.1 DAS ISING–MODELL ALS BEISPIEL FÜR EIN KANONISCHES ENSEMBLE

Im Versuch 5 haben Sie ein einfaches Gittermodell zur Beschreibung des Magnetismus, das Ising–Modell, mit Monte–Carlo–Methoden im thermischen Gleichgewicht simuliert. Wir wollen Sie kurz an die wesentlichen Elemente erinnern.
Die mikroskopischen "Teilchen" des Ising–Modells sind einzelne Spins s_i ($i = 1, ..., N$), die jeweils nur zwei Zustände einnehmen können: $s_i = \pm 1$. Diese leben auf einem Gitter (quadratisch in 2 Dimensionen [2d], kubisch in 3 Dimensionen [3d]). Es wurden äußere Kontrollparameter definiert, die in einer Simulation nicht verändert wurden:

Kontrollparameter

1. Volumen V = Größe des Gitters (bspw. $M \times M$ in 2d)
2. Anzahl N der Spins. Speziell wurde $N = M^2$ (2d) gewählt.
3. Temperatur T des Systems.
4. Externes Potenzial V_j^{ext} = äußeres Magnetfeld h_j. Der Index j gibt dabei einen Punkt im Volumen an (einen Gitterpunkt). Demzufolge kann das externe Potenzial i.a. vom Ort abhängen. Im Ising–Modell sind die Indizes i (Teilchen) und j (Gitterplatz) identisch.

Einen bestimmten mikroskopischer Zustand nennt man Konfiguration. Diese ist im Ising–Modell bestimmt durch den Wert aller Spins:

Konfiguration: $\omega = \{s_1, ..., s_N\}$

Die kollektiven Eigenschaften des Systems sind bestimmt durch die mikroskopische Energie einer Konfiguration (Hamilton–Funktion). Diese wird auch oft potenzielle Energie einer Konfiguration genannt

Potenzielle Energie: $U(\omega) = -J\sum_{\langle i_1,i_2\rangle} - \sum_i h_i s_i$

Hierbei bezeichnet $\langle i_1, i_2\rangle$ benachbarte Gitterplätze.
Ein statistisches System mit fixierten Kontrollparametern N, V, T nennt man *kanonisches Ensemble*. Wenn $V^{\text{ext}} = 0$, spricht man von einem *homogenen* oder *Bulk–System*, andernfalls von einem *inhomogenen System*. Für das thermische Gleichgewicht ist die kanonische Zustandssumme die zentrale Größe, um alle makroskopischen Eigenschaften des Systems zu bestimmen:

Kanonische Zustandssumme: $Z = \sum_\omega \exp(-\beta U(\omega))$

Dabei ist $\beta = 1/k_{\text{B}}T$, wobei k_{B} die Boltzmann–Konstante ist. Die Summe geht über alle möglichen Konfigurationen des Systems. Eng verknüpft mit Z ist der Begriff der kanonischen Zustandsdichte oder der kanonischen Wahrscheinlichkeit einer Konfiguration:

Kanonische Wahrscheinlichkeit: $p_{\text{kan}}(\omega) = \frac{1}{Z}\exp(-\beta U(\omega))$

Diese gibt nun in der Tat an, wie wahrscheinlich eine bestimmte Konfiguration ω im thermischen Gleichgewicht ist. Die Konfigurationen mit niedrigster potenzieller Energie sind dabei am wahrscheinlichsten, und für $T \to 0$ ist das System alleinig im Zustand niedrigster potenzieller Energie (warum?). Die kanonischen Zustandsdichte ist auf 1 normiert, $\sum_\omega p_{\text{kan}}(\omega) = 1$, wie es sich für eine Wahrscheinlichkeitsdichte gehört. Die Verbindung zur Thermodynamik ergibt sich durch den Zusammenhang von Z mit der Helmholtz Freien Energie F:

$$F = -k_{\text{B}}T \ln Z\,. \tag{1.1}$$

1.2 Andere Ensembles

Das Ising–Modell wurde oben in einer Form zusammengefasst, die beliebig verallgemeinerbar auf andere Systeme ist. Nehmen Sie z.B. ein System, das aus N starren Molekülen (etwa Wasser) besteht. Eine bestimmte mikroskopische Konfiguration wird nun spezifiziert in der Angabe des Ortes $\mathbf{r}_i$ und der Orientierung Θ_i (bestehend aus 3 Euler–Winkeln) für jedes Molekül i: $\omega = \{\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_n, \Theta_1, ..., \Theta_N\}$. Das Volumen V wäre das Volumen des Gefäßes, in die Sie die Wassermoleküle einsperren. Die Temperatur T geben Sie durch die Temperatur der Gefäßwände vor. Ein externes Potential ist beispielsweise durch die Wechselwirkung mit den Gefäßwänden gegeben (hier spricht man oft von einem *Substratpotenzial*).
Sie könnten jedoch anstelle der Kontrollparameter N, V, T andere Kontrollparameter fixieren. So könnten Sie Ihr Gefäß mit einem beweglichen Kolben als Deckel versehen und den äußeren Druck p konstant halten. Ein System mit fixierten N, p, T nennt man *isotherm–isobares*

Ensemble. Für eine mikroskopische Konfiguration muß nun auch das (momentane) Volumen V zusätzlich spezifiziert werden. Dadurch treten gegenüber dem kanonischen Ensemble im thermischen Gleichgewicht folgende Änderungen auf. Die Zustandssumme wird zu:

Isotherm–isobare Zustandssumme: $Z_p = \int dV \sum_\omega \exp(-\beta U(\omega)) \exp(-\beta p V)$

Die Wahrscheinlichkeit einer bestimmten Konfiguration ist nun

Isotherm–isobare Wahrscheinlichkeit: $p_{\text{isobar}}(\omega, V) = \frac{1}{Z_p} \exp(-\beta U(\omega)) \exp(-\beta p V)$

Sie könnten aber auch in einem riesigen Wasserreservoir das Volumen V gedanklich abtrennen (oder nehmen Sie einfach eine starre Membran, die das Volumen V einschließt, aber durchlässig für Wassermoleküle ist). In diesem System sind V, T noch fixierte Kontrollparameter, aber N ist es nicht mehr. Der dafür fixierte Kontrollparameter ist das *chemische Potenzial* μ. Die physikalische Bedeutung ist folgende: μ ist gleich der Arbeit, die es kostet, ein Molekül Wasser zusätzlich in das System einzufügen. Laut Thermodynamik entspricht dies genau der Änderung der Helmholtz Freien Energie F des Systems: $\mu = F(N+1, V, T) - F(N, V, T)$ ("freie" Energie ist ja genau diejenige Energie, die vollständig konvertierbar in mechanische Arbeit ist). Das System mit fixierten Kontrollparametern μ, V, T nennt man ein *großkanonisches Ensemble*. Eine mikroskopische Konfiguration ist im großkanonischen Ensemble vollständig spezifiziert durch $\omega_{\text{gk}} = \{N, \omega_N\}$, wobei ω_N die Konfiguration von genau N Molekülen ist (bestehend aus den Orts- und Orientierungskoordinaten). Die großkanonische Zustandssumme ist gegeben durch

Großkanonische Zustandssumme: $\Xi = \sum_{N=0} \frac{\exp(\beta \mu N)}{N!} \sum_{\omega_N} \exp(-\beta U(\omega_N))$

Die Wahrscheinlichkeit einer bestimmten Konfiguration ω_{gk} ist gegeben durch

Großkanonische Wahrscheinlichkeit: $p_{\text{gk}}(N, \omega_N) = \frac{1}{\Xi} \frac{\exp(\beta \mu N)}{N!} \exp(-\beta U(N, \omega_N))$

Auch die großkanonische Wahrscheinlichkeit ist auf 1 normiert: $\sum_N \sum_{\omega_N} p_{\text{gk}}(N, \omega_N) = 1$. Die Verbindung zur Thermodynamik ergibt sich durch den Zusammenhang von Ξ mit dem großkanonischen Potential Ω:

$$\Omega = -pV = -k_{\text{B}} T \ln \Xi \,. \tag{1.2}$$

Die Wichtigkeit und die Bedeutung des großkanonischen Ensembles liegt im Studium von *Phasenübergängen*. Zwei Phasen (beispielsweise Wasserdampf und Wasser) können koexistieren, wenn für beide Phasen T, μ und p gleich sind (warum?). Findet man also im großkanonischen Ensemble den geeigneten Wert $\mu = \mu_{\text{coex}}(T)$, an dem beide Phasen koexistieren, dann sollte man (in Experiment und Simulation gleichermaßen) über einen längeren Zeitraum auch beide Phasen beobachten können. Falls die zwei Phasen sich in ihrer Dichte unterscheiden (evident bei Wasserdampf und Wasser), dann bedeutet dies, dass man bei Koexistenz große Fluktuationen der Teilchenzahl N beobachten soll (mal ist im Systemvolumen Wasser, mal Wasserdampf, mal auch beide Phasen). Zudem ist auch aus theoretischer Sicht bedeutsam, dass bei Koexistenz das großkanonische Potential Ω beider Phasen gleich ist.

2 Monte–Carlo–(MC)–Simulationen und Importance Sampling

Die Idee von MC–Simulationen besteht darin, durch einen Zufallsalgorithmus eine limitierte Anzahl N_c an Konfigurationen zu erzeugen und mittels dieser Konfigurationen Erwartungswerte physikalischer Messgrößen $\langle G(\omega')\rangle$ zu berechnen (wobei ω' eine Konfiguration in einem beliebigen Ensemble ist). Ein solcher Erwartungswert ist definiert als

$$\langle G(\omega')\rangle = \sum_{\omega'} p'(\omega') G(\omega') \,. \tag{2.1}$$

Hier ist $p'(\omega')$ die Wahrscheinlichkeit im entsprechenden Ensemble (kanonisch, isotherm–isobar, großkanonisch,...). Naiv könnte man jetzt alle N_K möglichen Konfigurationen geeignet "durchnummerieren" und zufällig aus dieser "Nummerierung" N_c Konfigurationen würfeln. Damit wäre

$$\langle G(\omega')\rangle \approx \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} p'(\omega'_i) G(\omega'_i) \,. \tag{2.2}$$

Diese Methode funktioniert überhaupt nicht. Üblicherweise ist $N_K \gg N_c$, und Sie werden höchstwahrscheinlich nur Konfigurationen ω'_i würfeln, deren Wahrscheinlichkeit $p'(\omega'_i)$ sehr klein ist. Die wirklich wichtigen Konfigurationen in der Nähe des Maximums von $p'(\omega')$ erwischen Sie nicht (siehe Daan Frenkels Nil–Beispiel). Damit wird der obige Erwartungswert stark vom wahren Erwartungswert abweichen.
Also ist es ratsam, durch einen Zufallsalgorithmus Konfigurationen zu erzeugen, *die schon gemäß der Wahrscheinlichkeit $p'(\omega')$ verteilt sind.* Damit wird

$$\langle G(\omega')\rangle \approx \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} G(\omega'_i) \,, \tag{2.3}$$

(siehe auch Theorem 1 in Versuch 5). Man kann also die Messgröße einfach an den gewürfelten Konfigurationen auswerten und dann mitteln.
Die Erzeugung von Zufalls–Konfigurationen, die mit $p'(\omega')$ verteilt sind, bezeichnet man als *»importance sampling«*. Sehr beliebt sind dafür Algorithmen, die von einer vorhandene Konfiguration ω'_i ausgehen, eine oder einige wenige Konfigurationsvariablen darin durch Würfeln ändern und damit eine neue Konfiguration ω'_j erzeugen. Dieser Würfelprozess definiert eine Übergangsrate $q_{i\to j}$. Damit der Algorithmus funktioniert, muss folgendes gelten: Angenommen, diese Prozedur wird für ganz viele Konfigurationen durchgeführt. Diese Konfigurationen seien schon gemäß der Wahrscheinlichkeit $p'(\omega')$ verteilt. Dann darf dieser Würfelprozess nicht Konfigurationen erzeugen, die $p'(\omega')$ nicht gehorchen. Also muß die Rate dafür, eine Konfiguration i durch Würfeln zu verlassen gleich sein der Rate, von einer beliebig anderen Konfiguration j durch Würfeln zu Konfiguration i zu gelangen. Diese Bedingung heißt *»balance condition«*:

$$\textbf{balance condition:} \quad \begin{array}{c} \sum_{j\neq i} p'(\omega'_i) q_{i\to j} \\ \text{Rate, mit der} \\ \text{Konfiguration } i \\ \text{verlassen wird} \end{array} \;=\; \begin{array}{c} \sum_{j\neq i} p'(\omega'_j) q_{j\to i} \\ \text{Rate, mit der} \\ \text{Konfiguration } i \\ \text{erreicht wird} \end{array} \,. \tag{2.4}$$

Damit ist sichergestellt, dass der Würfelprozess uns nicht wieder aus der Verteilung $p'(\omega')$ herausführt. *Balance* ist jedoch nicht sehr praktikabel: Um ein geeignetes $q_{i\to j}$ zu bestimmen, muss man immer die obige Summe überprüfen. Das bedeutet de facto, dass man eigentlich alle möglichen $q_{i\to j}$ kennen muss, um *balance* sicherzustellen. Jedoch gilt trivialerweise *balance*, wenn man die folgende, viel strengere Bedingung fordert, die *»detailed balance condition«* heißt:

$$\textbf{detailed balance condition:} \qquad p'(\omega'_i)\,q_{i\to j} = p'(\omega'_j)\,q_{j\to i}\,. \tag{2.5}$$

In Versuch 5 wurde der entsprechende Würfelprozess als Markov–Kette eingeführt und *detailed balance* für diese und konkrete Beispiele (Metropolis, Wärmebad) diskutiert. Außerdem wurden über Theorem 2 motiviert, dass für geeignete Markov–Ketten man wirklich bei der gewünschten Verteilung $p'(\omega')$ landet.
Für praktische Zwecke ist es noch sinnvoll, die Übergangsrate $q_{i\to j}$ wie folgt zu zerlegen:

$$\begin{aligned} q_{i\to j} \;&=\; \pi_{i\to j}\,\alpha_{i\to j}\,, \\ &\quad\; \pi_{i\to j}: \;\; \textbf{Vorschlagswahrscheinlichkeit für} \;\; \omega'_i \to \omega'_j \\ &\quad\; \alpha_{i\to j}: \;\; \textbf{Akzeptanzwahrscheinlichkeit für} \;\; \omega'_i \to \omega'_j\,. \end{aligned} \tag{2.6}$$

Im einfachsten Metropolismus–Algorithmus von Versuch 5 ist $\pi_{i\to j} \neq 0$ für zwei Konfigurationen, die sich nur durch den Wert des Spins an einer Gitterposition unterscheiden (*spin flip*). Da für jede Gitterposition immer ein *spin flip* probiert wird, ist in diesem Falle $\pi_{i\to j} = 1$. Etwas aufpassen muss man also nur dann, wenn von der Startkonfiguration i mehrere Konfigurationen j erreicht werden können.
Ein verallgemeinerter Metropolis–Algorithmus fordert nun für die Akzeptanzwahrscheinlichkeiten:

$$\alpha_{i\to j} \;=\; \min\left(1, \frac{\pi_{j\to i}}{\pi_{i\to j}}\,\frac{p'(\omega'_j)}{p'(\omega'_i)}\right), \tag{2.7}$$

und erfüllt dadurch *detailed balance*. (Bitte nachprüfen!)

2.1 Grosskanonisches Monte Carlo: Harte Stäbchen in 2D auf einem Gitter

Wir illustrieren großkanonisches *importance sampling* anhand eines sehr einfachen Modells für anisotrope Moleküle. Dazu betrachten wir harte Stäbchen mit Abmessungen $L_1 \times L_2$ auf einem quadratischen Gitter (s. Abb. 2.1 für die Definition des Modells).
Für genügend großes Aspektverhältnis L_2/L_1 und genügend große Dichte zeigt dieses Modell im thermischen Gleichgewicht eine Entmischung in senkrechte und waagerechte Stäbchen, die wir untersuchen wollen.
Wir arbeiten auf einem $M \times M$–Gitter. Eine Konfiguration ist spezifiziert durch $\omega_{\mathrm{gk}} = \{N, \omega_N\}$ und die kanonische Konfiguration für N Stäbchen besteht aus $\omega_N = \{\mathbf{x}_1, ..., \mathbf{x}_N, s_1, ..., s_N\}$, wobei $\mathbf{x}_i = (x_{1,i}, x_{2,i})$ die Gitterkoordinaten des Stäbchens i sind und $s_i = \pm 1$ die Orientierung des Stäbchens i angibt (z.B. $+1$ für waagerecht und -1 für senkrecht).
Die zwei grundlegenden MC Schritte zur Veränderung von Konfigurationen ($i \to j$) sind nun *Hinzufügen (»insertion«)* und *Entfernen (»deletion«)* eines Teilchens. Bei *insertion* mit

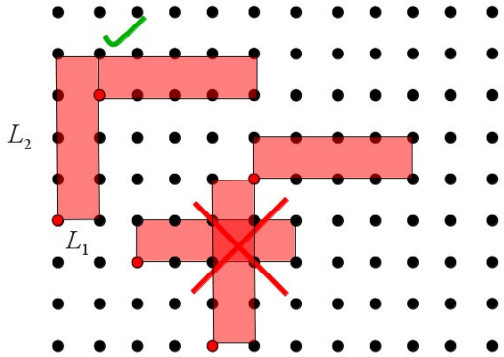

Abbildung 2.1: Harte Stäbchen mit Kantenlänge $L_1(=1)$ und $L_2(=4)$ auf einem quadratischen Gitter. Dieses erlaubt zwei Orientierungen der Stäbchen (waagerecht und senkrecht). Die Position der Stäbchen wird durch die Koordinaten der linken unteren Ecke angegeben. Sich berührende Kanten zweier Stäbchen sind erlaubt, Überlapp ist verboten. (Bei Überlapp ist die potenzielle Energie $+\infty$.)

$N \to N+1$ gibt es viele Konfigurationen j, die erreicht werden können: das Teilchen kann an beliebiger Gitterposition mit beliebiger Orientierung eingefügt werden (alle möglichen Gitterpositionen/Orientierungen sollten gleichwahrscheinlich ausgewählt werden). Also finden wir für die Vorschlagswahrscheinlichkeit

$$\pi^{\text{ins}}_{i\to j} = \underbrace{\frac{1}{2}}_{\substack{\text{Vorschlag}\\ \textit{ins/del}}} \times \underbrace{\frac{1}{2}}_{\substack{\text{Vorschlag}\\ \text{waagerecht/senkrecht}}} \times \underbrace{\frac{1}{M^2}}_{\substack{\text{Vorschlag}\\ \text{Gitterplatz}}} \tag{2.8}$$

Bei *deletion* mit $N+1 \to N$ wählt man ein Teilchen aus den im System vorhandenen aus und entfernt es. Damit gibt es keine Wahlmöglichkeit bezüglich Gitterposition und Orientierung, denn diese liegen ja fest für das ausgewählte Teilchen. Man erwartet jetzt eigentlich in der Vorschlagswahrscheinlichkeit $\pi^{\text{del}}_{j\to i}$ einen Faktor $1/(N+1)$, weil man ja ein Teilchen aus der Liste der $N+1$ Teilchen auswählt. Jedoch beinhaltet das großkanonische Ensemble, dass die Teilchen ununterscheidbar sind (das ist die Essenz des Faktors $1/N!$ in $p_{\text{gk}}(N,\omega_N)$). Wenn man also ein Teilchen an einer bestimmten Position entfernt, muss man eigentlich auch alle anderen Konfigurationen entfernen, an denen die anderen N Teilchen an dieser Position sind. Somit erhält $\pi^{\text{del}}_{j\to i}$ wieder einen Faktor $N+1$, und wir finden:

$$\pi^{\text{del}}_{j\to i} = \underbrace{\frac{1}{2}}_{\text{Vorschlag } \textit{ins/del}} \tag{2.9}$$

Mithilfe von Gl. (2.7) und der Definition von $p_{\text{gk}}(N,\omega_N)$ ergeben sich nun folgende Akzeptanz-

wahrscheinlichkeiten:

$$\textbf{insertion: } N \to N+1 \qquad \alpha^{\text{ins}}_{i\to j} = \min\left(1, \frac{2M^2}{N+1} e^{\beta\mu}\, e^{-\beta\Delta U}\right) \tag{2.10}$$

$$\textbf{deletion: } N+1 \to N \qquad \alpha^{\text{del}}_{j\to i} = \min\left(1, \frac{N+1}{2M^2} e^{-\beta\mu}\, e^{+\beta\Delta U}\right) \tag{2.11}$$

$$\Delta U = U(\omega_{N+1}) - U(\omega_N)\,. \tag{2.12}$$

Die großkanonische Simulation beginnt nun mit einem leeren Gitter. Der schematische Ablauf der Haupt-Monte-Carlo-Schleife sieht wie folgt aus:

```
//hier long unsigned integers verwenden
for(long unsigned i=1L; i <= MAX_ITERATIONEN; i++){
  GCMC_Schritt();    //Die Monte-Carlo Iteration durchfuehren
  Observablen_Messen(i);  //Observablen in diesem "Zeitschritt" messen
}
```

Listing 1: Haupt-Monte-Carlo-Schleife im Programm. Wir empfehlen die Verwendung von long unsigned integers um Overflow zu vermeiden.

Der Ablauf der Funktion “GCMC_Schritt” wird im folgender Abbildung 2.2 dargestellt:

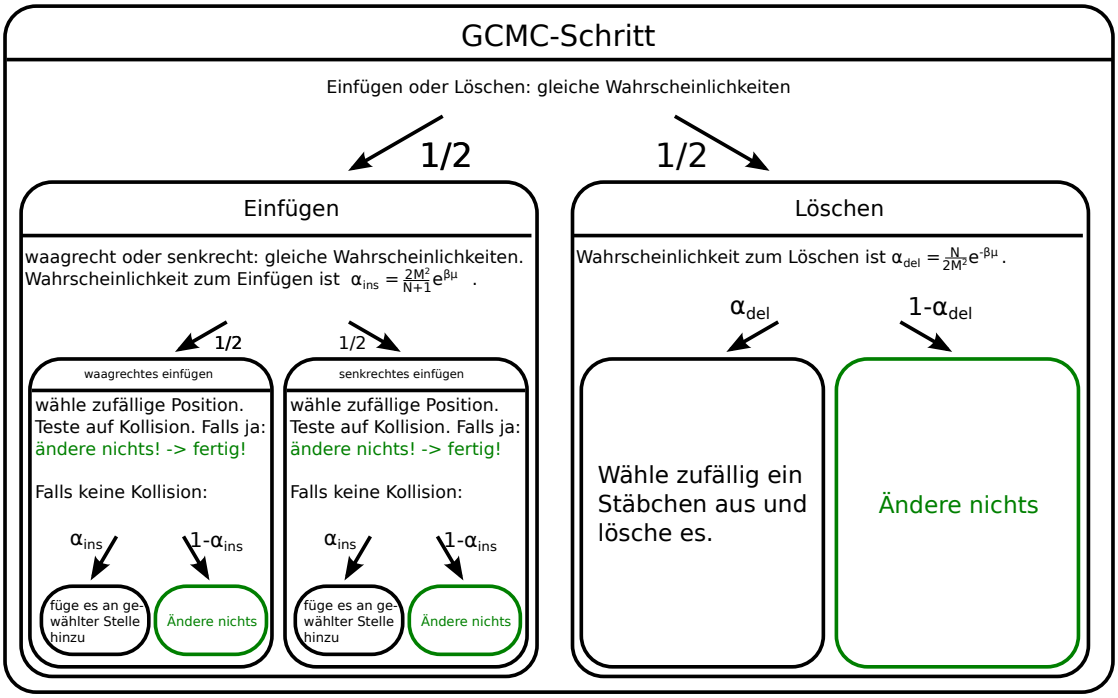

Abbildung 2.2: Flussdiagramm für eine Monte-Carlo-Iteration im Programm.

3 Aufgaben

Das Programm soll Konfigurationen von Stäbchen auf dem Gitter erzeugen, und Messdaten aufnehmen. Die Konfigurationen ω werden mit dem Algorithmus für großkanonisches Monte-Carlo wie oben erzeugt.
Kurz gesagt, müssen also die Datenstrukturen im Programm das Hinzufügen und Entfernen harter Stäbchen verwalten und gleichzeitig Observablen messen.

Ein Stäbchen mit Aspektverhältnis $L_2/L_1 \equiv L \in \mathbb{N}$ belegt $L \times 1$ oder $1 \times L$ Gitterplätze, Überlapp zweier Stäbchen ist nicht möglich. Formal entspricht das einem Wechselwirkungspotential wie folgt:

$$U(\omega) = \sum_{i<j} u_{ij}$$

$$u_{ij} = \begin{cases} \infty, & \text{falls Stäbchen } i \text{ und } j \text{ überlappen} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{3.1}$$

Dazu soll das Programm "genügend lange" messen, um gute Statistik sämtlicher Observablen zu erhalten. Wir diskutieren diese Aspekte im Abschnitt 3.2.1.

Wir definieren die Observablen:

N_+	Anzahl waagerechter Stäbchen
N_-	Anzahl senkrechter Stäbchen
$N = N_+ + N_-$	Anzahl Stäbchen gesamt
$\eta := \frac{LN}{M^2}$	Packungsdichte
$S := \frac{N_+ - N_-}{N}$	Ordnungsparameter

Verwenden Sie für die Messungen die folgenden Parameter:

Größe der Box	$M \times M$	64×64
Stäbchenlänge	L	8
Aktivität	$z = e^{\beta\mu}$	$0.56, 0.84, 1.1$

Tabelle 3.1: Parameterwerte, für die das System untersucht wird

3.1 Algorithmen

3.1.1 Entwurf, Unterroutinen

Hinweis: Es hilft, wenn Sie den Programmablauf in Pseudocode oder als Flussdiagram (vgl. Abbildung 2.2) skizzieren.
Sie brauchen folgende Grundbausteine:

(a) periodische Randbedingungen
Da wir kein unendlich großes Gitter behandeln können, wählen wir einen ganz üblichen Trick, um Randeffekte auszuschließen: Wir verwenden ein periodisches Gitter. Es muss also möglich sein, dass ein Stäbchen einige Plätze am linken Rand und einige Plätze am rechten Rand belegt.

(b) Kollisionstest
Ihr Programm muss prüfen können, ob ein Stäbchen ohne Kollision an eine gegebene Position eingefügt werden kann.

(c) Einfügen eines Stäbchens
Ihr Programm muss eine zufällige Position wählen, den Kollisionstest aufrufen, und falls keine Kollision passiert, ein Stäbchen an die Position einfügen können.

(d) Entfernen eines Stäbchens
Ihr Programm muss ein zufällig gewähltes Stäbchen aus dem Gitter entfernen können.

(e) aktuelle Stäbchenzahlen
Ihr Programm muss mitzählen, wie viele Stäbchen es gerade gibt. Das wird für die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten und für die Auswertung gebraucht.

Hinweis: Überlegen Sie sich jetzt, welche Datenstrukturen Sie verwenden wollen. Wie wird der aktuelle Zustand im Programm gespeichert? Redundanz ist hier hilfreich.

Aufgabe: Dokumentieren Sie Ihre Überlegungen kurz. Entwerfen Sie Routinen, die die obigen Aufgaben erledigen. Kommentieren Sie diese im Programmcode.

3.1.2 »Detailed balance«

Aufgabe: Zeigen Sie, dass die Akzeptanzwahrscheinlichkeiten für Einfügen und Entfernen (Gleichung 2.10ff.) die »detailed balance condition« erfüllen.

3.2 Phasentrennung: Koexistenzpunkt finden

3.2.1 Teilchenzahlen messen

Wir müssen das System zunächst thermalisieren lassen, bevor wir die Gleichgewichtsstatistik mit dem Monte-Carlo-Algorithmus erkunden können. Dazu müsssen wir uns Größen ausdenken, die dafür geeignet sind. Die Größen $\{N, N_+, N_-\}$ sind in der Simulation fundamentale Zufallsvariablen und damit gut geeignet. Wir können also hier anfangen, den “zeitlichen”

Verlauf dieser Größen uns anzuschauen.

Wir erwarten, dass es in Abhängigkeit von z ein Einphasen- und ein Zweiphasengebiet gibt. Das Einphasengebiet entspricht einem ungeordneten Zustand ($N_+ \approx N_-$) zu fast allen Zeiten. Das Zweiphasengebiet entspricht einem gut geordneten Zustand ($N_+ \gg N_-$ oder $N_+ \ll N_-$) zu fast allen Zeiten. Für alle z im Zweiphasengebiet sind beide Phasen stabil, man spricht von Koexistenz.

Wir müssen Indikatoren finden, an denen wir erkennen können, ob das System im thermischen Gleichgewicht ist. Die Anzahl Stäbchen (Summe, oder waagerecht/senkrecht getrennt) über "Zeit" (= Monte-Carlo-Schritte), also $N(t), N_+(t), N_-(t)$, sind gute Indikatoren.

Aufgabe: Führen Sie Monte-Carlo-Schritte durch und messen Sie die Anzahl Stäbchen (waagerechte, senkrechte, gesamt). Plotten Sie den zeitlichen Verlauf $N(t)$ und $N_+(t), N_-(t)$ für die Parameter in Tabelle 3. Begründen Sie, ab wann man von einem thermalisierten System sprechen kann.
Hinweis: Die nötige Anzahl Schritte ist sehr groß. Es kann hilfreich sein, nur alle 100 (oder noch mehr) Schritte einen Punkt aufzunehmen. Sie ist möglicherweise sogar so groß, dass eine normale Integer-Variable nicht ausreicht, um die Schritte zu zählen.

Ab jetzt sollten Sie immer erst nach der Thermalisierung Messdaten aufnehmen.

3.2.2 Histogramme aufnehmen

Wir können nun den Phasenübergang mit Hilfe der Simulation suchen. Der Kontrollparameter ist das chemische Potential μ (die inverse Temperatur $\beta \equiv 1$ und das Volumen sind fixiert). Wir definieren die Aktivität $z := e^{\beta\mu}$.

Aufgabe: Nehmen Sie (nach Thermalisierung) Histogramme von N und von N_+, N_- auf. Sie sollten ca. $2^{32} \approx 4 \cdot 10^9$ Schritte nach der Thermalisierung es laufen lassen. Was passiert, wenn Sie zu kurz simulieren? Plotten Sie die Histogramme und interpretieren Sie sie.

3.2.3 Ordnungsparameter messen

Wir führen einen neuen Indikator ein, der sensitiv darauf ist, in welcher Phase das System ist:

$$S := \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-} \tag{3.2}$$

Aufgabe: Welche Werte kann S annehmen? Welche Phasen entsprechen welchen Werten von S? Nehmen Sie für alle drei vorgegebenen Aktivitäten Histogramme von S auf. Diskutieren Sie anhand der Histogramme, welcher Wert von z zu welcher Phase gehört.

3.2.4 Resultat: Ordnung vs Dichte

Wir möchten die Frage beantworten, ob es einen Zusammenhang zwischen Ordnung und Dichte gibt. Das entspricht eine Art Zustandsgleichung des Systems, und kann als zentraler Resultat der Untersuchung betrachtet werden.

Aufgabe: Messen Sie bei jedem gegebenen Aktivität den Absolutwert der Ordnung $\langle \|S\| \rangle$ als einer Funktion der durchschnittlichen Dichte $\langle \eta \rangle$. Tragen Sie die Messpunkte auf in einem Plot für die drei vorgegebenen z und weitere, nämlich $\{0.05, 0.125, 0.25, 1.15, 1.5\}$. Sie sollen auch Fehler definieren und Fehlerbalken in X- und Y-Richtung angeben. Sie sollten einen ausgeschmierten »Kink« erkennen: Interpretieren Sie dies.

3.3 Visualisierung

Für die Interpretation ist eine Visualisierung oft hilfreich. Führen Sie das bereitgestellte Python-Skript aus, um eine typische Konfiguration darzustellen.

Aufgabe: Schauen Sie sich das Skript an und beschreiben Sie kurz, was es tut.

Aufgabe: Schreiben Sie eine Prozedur, die die aktuelle Konfiguration in einem für das Python-Skript lesbaren Format ausgibt. Führen Sie das Skript aus, um eine Visualisierung zu erzeugen. Machen Sie das beides am Koexistenzpunkt und im einphasigen Bereich.

Hinweis: Das Skript ist für Python2 geschrieben worden.