Prof. Dr. Wolfhard Janke, Fabio Müller SS2025

Einführung in die Computersimulation II

8. Übungsblatt

Abgabetermin: Montag, 16. Juni 2025

15. **"Least-Squares" Fits**

Die M Parameter $a_1, a_2, \ldots, a_M$ eines "Least-Squares" Fits $y(x_i) = y(x_i; a_1, \ldots, a_M)$ an N Datenpunkte (x_i, y_i) mit statistischen Fehlern $\sigma_i \equiv \epsilon_i$ werden durch Minimierung der Größe

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - y(x_i; a_1, \ldots, a_M)}{\sigma_i} \right)^2$$

bestimmt, das sogenannte "chi-square". Für einen Fit mit einer Geraden, $y(x_i) = y(x_i; a, b) = a + bx_i$, können die beiden Parameter a und b noch relativ einfach explizit bestimmt werden. Vollziehen Sie diese analytische Rechnung nach.

Die folgenden Daten stammen aus einer Forschungsarbeit zusammen mit Marco Müller und Prof. Desmond A. Johnston (Edinburgh) über das sogenannte "gonihedrische" Ising-Modell (Nucl. Phys. B **888** (2014) 214), für das aus theoretischen Überlegungen für große Gittergrößen L eine Abhängigkeit $\beta_{\max}(L) = a + b/L^2$ erwartet wurde. Testen Sie diese Annahme mit Hilfe von "least-squares" Fits (manchmal auch "chi-square" Fits genannt) an die N Datenpunkte von $L_{\min} = 8, 10, \ldots$ bis $L_{\max} = 24$. Der Fitansatz ist akzeptabel, wenn $\chi^2/\text{dof} \approx 1$, wobei dof die Anzahl der Freiheitsgrade, hier also $N - 2$, bezeichnet.

L	$\beta_{\max}$	ϵ
08	0.51818	0.00010
10	0.52932	0.00010
12	0.53562	0.00011
14	0.53967	0.00010
16	0.54232	0.00008
18	0.54421	0.00009
20	0.54533	0.00008
22	0.54649	0.00005
24	0.54726	0.00007

16. **Fits an die Suszeptibilität des 2D Ising-Modells**

    Simulieren Sie mit Hilfe des Single-Cluster-Algorithmus die Suszeptibilität des 2D Ising-Modells (unter Verwendung des "improved estimators") für ein 128×128 Gitter in der Hochtemperaturphase von etwa $0.99\beta_c$ bis $0.85\beta_c$ in Schritten von $0.01\beta_c$ (dies läßt sich sehr schnell auch noch zu höheren Temperaturen, z.B. bis $0.70\beta_c$ erweitern).

    Versuchen Sie dann durch "Least-Squares" Fits mit dem Ansatz

    $$\chi(\beta) = a(1 - \beta/\beta_c)^{-\gamma}$$

    und als bekannt vorausgesetzten Übergangspunkt $\beta_c = \ln(1 + \sqrt{2})/2$ den kritischen Exponenten γ abzuschätzen.