Übung 5
Computational Physics III

Matthias Plock (552335)   Paul Ledwon (561764)

21. Juni 2018

Inhaltsverzeichnis

1 Spin-Modell

1.1 Über das Programm

Der Programmcode liegt im Verzeichnis `src`, dort wurden zwei Dateien erstellt. In der Datei `boltzmann.{cu,h}` sind die Programmfunktionen implementiert, in der Datei `cases.{cu,h}` sind die Testfälle/Aufgabenstellungen implementiert.

Das Programm wird mit Hilfe des Makefiles kompiliert und kann dann durch Aufruf der Datei im Verzeichnis `bin` aufgerufen werden. Die Aufgaben 1 bis 3 werden dann ausgeführt. Jedes Ergebnis wird durch ein `assert()` getestet. Als Genauigkeitsgrenze wird konservativ $N_{\text{Vol}} * \varepsilon$ gesetzt.

1.2 Aufgabe 1

Wir wählen als Dimension $N_{\text{Dim}} = 3$ und setzen für jede Dimension 5 Gitterpunkte, erhalten also $N_{\text{Vol}} = 125$. Dies wird gemacht um die Routinen zügig zu prüfen.

In einer Schleife über fünf Elemente setzen wir jeweils z, h, λ und κ auf zufällige Werte. Anschließend wird die Wirkung $S[\phi, h]$ berechnet und mit dem analytischen Wert $S_{\text{Analytisch}}$ verglichen.

Die analytische Funktion lässt sich wie folgt darstellen:

$$\begin{aligned}
S(z,h,\lambda,\kappa) &= \sum_x \left[|z|^2 + \lambda \left(|z|^2 - 1 \right)^2 - \kappa \sum_1^d (z^* z + z z^*) - (h^* z + h z^*) \right] \\
&= \sum_x \left[|z|^2 + \lambda \left(|z|^2 - 1 \right)^2 - 2\kappa d |z|^2 - (h^* z + h z^*) \right] \\
&= N_{\text{Vol}} \left[|z|^2 + \lambda \left(|z|^2 - 1 \right)^2 - 2\kappa d |z|^2 - (h^* z + h z^*) \right] .
\end{aligned}$$

Übereinstimmung der analyischen und der Monte-Carlo Funktion ist ausgezeichnet:

```
wirkung monte carlo 0.318527
wirkung analytisch 0.318527
assert:
abs((S_MC - S_ANA) / S_ANA) = 3.485493e-16

wirkung monte carlo 0.213218
```

```
wirkung analytisch 0.213218
assert:
abs((S_MC - S_ANA) / S_ANA) = 5.206982e-16

wirkung monte carlo 0.242190
wirkung analytisch 0.242190
assert:
abs((S_MC - S_ANA) / S_ANA) = 3.323475e-15

wirkung monte carlo 0.175598
wirkung analytisch 0.175598
assert:
abs((S_MC - S_ANA) / S_ANA) = 1.580635e-15

wirkung monte carlo 0.198665
wirkung analytisch 0.198665
assert:
abs((S_MC - S_ANA) / S_ANA) = 1.955945e-15
```

Die relative Abweichung liegt jeweils in einer Größenordnung von 1×10^{-15} bis 1×10^{-16}.

1.3 Aufgabe 2

Wir modifizieren einen zufälligen ϕ-Vektor mit einer zufälligen Phase α,

$$\phi' = (\cos(\alpha) + \mathrm{i}\sin(\alpha))\,\phi\,.$$

Wir berechnen die Wirkung mit ϕ und ϕ'. Die Abweichung hier ist nicht von 0 verschieden.

```
originale wirkung 0.286771
modifizierte wirkung 0.286771

assert:
abs((S_mc_orig - S_mc_mod) / S_mc_orig) = 0.000000e+00
```

Eine komplexe Phase hat also keinen Einfluss auf die Wirkung.

1.4 Aufgabe 3

Es wird die Richtigkeit der Gleichung

$$\frac{P[\phi']}{P[\phi]} = \frac{p(\phi'_x)}{p(\phi_x)}$$

überprüft, wobei

$$P[\phi] = \exp(-S[\phi, h])\ .$$

Da Ergebnisse von E-Funktionen mitunter sehr groß werden können und es dann schwierig ist, diese numerisch ordentlich zu behandeln, berechnen wir zunächst die Argumente der E-Funktionen und bilden den Quotienten durch Subtraktion der Argumente in einer E-Funktion. Diese Methode ist als alternativ gekennzeichnet. Als Vergleich berechnen wir den Quotienten auch direkt. Auch hier ist die Übereinstimmung hervorragend.

```
p(1) 0.371438
p(2) 0.368600
P(1) 0.000000
P(2) 0.000000
S(1) 124.313789
S(2) 124.321459
p(1)/p(2) 1.007700
P(1)/P(2) 1.007700
p(1)/p(2) alternativ 1.007700
```

```
P(1)/P(2) alternativ 1.007700

assert:
abs((div_p1_by_p2 - P_div_S1_by_S2) / div_p1_by_p2) = 2.644175e-15
```

2 Markov-Kette

2.1 Wahrscheinlichkeitsverteilung

Jede Konfiguration der Markov-Kette $\Phi^{(1)} \to \Phi^{(2)} \to \cdots \to \Phi^{(N)}$ folgt der angestrebten Wahrscheinlichkeitsverteilung, unter der Vorraussetzung, dass $P[\Phi^{(1)}]$ der Wahrscheinlichkeitsverteilung folgt, denn

$$\int \prod_{k\neq n} D\Phi^{(k)} \mathcal{P}[\Phi^{(1)}, ..., \Phi^{(N)}] = \int \prod_{k\neq n} D\Phi^{(k)} P[\Phi^{(1)}] W[\Phi^{(1)} \to \Phi^{(2)}] ... W[\Phi^{(N-1)} \to \Phi^{(N)}] =$$

$$= \int \prod_{k<n} D\Phi^{(k)} P[\Phi^{(1)}] W[\Phi^{(1)} \to \Phi^{(2)}] ... W[\Phi^{(n-1)} \to \Phi^{(n)}] \int \prod_{k>n} D\Phi^{(k)} W[\Phi^{(n)} \to \Phi^{(n+1)}] ... W[\Phi^{(N-1)} \to \Phi^{(N)}].$$

Wegen der Normierung gilt

$$\int \prod_{k>n} D\Phi^{(k)} W[\Phi^{(n)} \to \Phi^{(n+1)}] ... W[\Phi^{(N-1)} \to \Phi^{(N)}] = 1.$$

Zusammen mit dem Gleichgewicht $\int D\Phi P[\Phi] W[\Phi \to \Phi'] = P[\Phi']$ gilt dann

$$\begin{aligned}
\int \prod_{k\neq n} D\Phi^{(k)} \mathcal{P}[\Phi^{(1)}, ..., \Phi^{(N)}] &= \int \prod_{k<n} D\Phi^{(k)} P[\Phi^{(1)}] W[\Phi^{(1)} \to \Phi^{(2)}] ... W[\Phi^{(n-1)} \to \Phi^{(n)}] \\
&= \int \prod_{1<k<n} D\Phi^{(k)} P[\Phi^{(2)}] W[\Phi^{(2)} \to \Phi^{(3)}] ... W[\Phi^{(n-1)} \to \Phi^{(n)}] \\
&= ... \\
&= \int \prod_{n-2<k<n} D\Phi^{(k)} P[\Phi^{(n-1)}] W[\Phi^{(n-1)} \to \Phi^{(n)}] \\
&= \int D\Phi^{(n-1)} P[\Phi^{(n-1)}] W[\Phi^{(n-1)} \to \Phi^{(n)}] = P[\Phi^{(n)}]
\end{aligned}$$

2.2 Detailliertes Gleichgewicht der Metropolis-Übergangswahrscheinlichkeit

Die Metropolis-Übergangswahrscheinlichkeit ist definiert als

$$w_m(\Phi_x \to \Phi'_x) = w_v(\Phi_x \to \Phi'_x) \min\left(1, \frac{p(\Phi'_x)}{p(\Phi_x)}\right) + [1 - A(\Phi_x)] \delta(\Phi_x, \Phi'_x)$$

Die Vorschlagswahrscheinlichkeit soll symmetrisch sein, daher $w_v(\Phi_x \to \Phi'_x) = w_v(\Phi'_x \to \Phi_x)$.
Damit das detaillierte Gleichgewicht erfüllt ist, muss gelten

$$p(\Phi_x) w_m(\Phi_x \to \Phi'_x) = p(\Phi'_x) w_m(\Phi'_x \to \Phi_x). \tag{1}$$

Für den Fall $\Phi_x = \Phi'_x$ wird Gleichung 1 zu

$$p(\Phi_x) w_v(\Phi_x \to \Phi_x) + [1 - A(\Phi_x)] = p(\Phi_x) w_v(\Phi_x \to \Phi_x) + [1 - A(\Phi_x)]$$

und das detaillierte Gleichgewicht ist erfüllt.
Für den Fall $\Phi_x \neq \Phi'_x$ und ohne Beschränkung der Allgemeinheit $p(\Phi'_x) > p(\Phi_x)$ wird Gleichung 1 zu

$$p(\Phi_x) w_v(\Phi_x \to \Phi'_x) \frac{p(\Phi'_x)}{p(\Phi_x)} = p(\Phi'_x) w_v(\Phi'_x \to \Phi_x) \Leftrightarrow w_v(\Phi_x \to \Phi'_x) = w_v(\Phi'_x \to \Phi_x)$$

Auch in diesem Fall ist wegen der Symmetrie der Vorschlagswahrscheinlichkeit das detaillierte Gleichgewicht erfüllt.

2.3 Gleichgewicht

Wenn W_1 und W_2 im Gleichgewicht mit P sind, dann ist auch
$W[\Phi \to \Phi'] = \int D\Phi'' W_1[\Phi \to \Phi''] W_2[\Phi'' \to \Phi']$ im Gleichgewicht mit P, denn

$$\int D\Phi' P[\Phi] W[\Phi \to \Phi'] = \int D\Phi D\Phi'' P[\Phi] W_1[\Phi \to \Phi''] W_2[\Phi'' \to \Phi'] = \int D\Phi'' P[\Phi''] W_2[\Phi'' \to \Phi'] = P[\Phi'].$$