Übung 5
Computational Physics III

Matthias Plock (552335)   Paul Ledwon (561764)

20. Juni 2018

Inhaltsverzeichnis

1 Spin-Modell

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

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

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

Wegen der Normierung gilt

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

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

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

2.2 Detailliertes Gleichgewicht der Metropolis-Übergangswahrscheinlichkeit

Die Metropolis-Übergangswahrscheinlichkeit ist definiert als

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

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

$$P[\Phi]w_m(\Phi \to \Phi') = P[\Phi']w_m(\Phi' \to \Phi). \tag{1}$$

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

$$P[\Phi]w_v(\Phi \to \Phi) + [1 - A(\Phi)] = P[\Phi]w_v(\Phi \to \Phi) + [1 - A(\Phi)]$$

und das detaillierte Gleichgewicht ist erfüllt.
Für den Fall $\Phi \neq \Phi'$ und ohne Beschränkung der Allgemeinheit $P[\Phi'] > P[\Phi]$ wird Gleichung 1 zu

$$P[\Phi]w_v(\Phi \to \Phi')\frac{P[\Phi']}{P[\Phi]} = P[\Phi']w_v(\Phi' \to \Phi) \Leftrightarrow w_v(\Phi \to \Phi') = w_v(\Phi' \to \Phi)$$

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