Übung 5
Computational Physics III

Matthias Plock (552335) Paul Ledwon (561764)

20. 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.

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

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

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.