Universität des Saarlandes
Fakultät 7 – Physik und Mechatronik

Fachrichtung 7.1–Theoretische Physik
Prof. Dr. H. Rieger
Geb. E2.6, Zi. 4.17
Tel.: 0681 / 302-3969

Saarbrücken, 19.12.2007

Übungen zur Computerphysik, WS 2007/08

9.Übung

(Besprechung am 09.01.2008)

Aufgabe 28 *„naive box path“*

Benutzenn Sie den Algorithmus „ naive box path“ um Pfade zu samplen, die einen Beitrag zu $\rho^{box}(x, x', \beta)$ liefern. Verallgemeinern Sie ihr Programm, um Pfade zu sampeln, die einen Beitrag zu $Z^{box}(\beta)$ liefern. (Samplen Sie zuerst x_0 und x_N aus der Dichte-Matrix wie es in Abbildung 1 dargestellt ist; danach benutzen Sie den Algorithmus „ naive box path“)

$$\begin{aligned} (1) \qquad \rho^{h.o}(x, x, \beta) &= sqrt(1/2\pi sinh(\beta)) * exp(-2tanh(\beta/2)) \\ \text{mit} \qquad Z &= 1/(2sinh(\beta/2)) \end{aligned}$$

Aufgabe 29 *„levy free path“*

Implementieren Sie die Levy Konstruktion (Algorithmus „ levy free path“) um Pfade für die Dichtematrix zu bestimmen. Benutzen Sie die Subrutine in einer verbesserten Pfad-Integral Simulation des harm. Oszillators (vgl. Aufg. 28) : Schneiden Sie zwischen den time slices (Abschnitten) k und k' ein Stück des Pfades heraus und fügen Sie es in ein neues Stück, generiert mittels Alg. „ levy free path“, ein. Beachten Sie dabei periodische RB. Bestimmen Sie die Akzeptanz-Wahrscheinlichkeit des Metropolis Algorithmus, wobei Sie berücksichtigen müssen, daß der Freie-Teilchen Hamiltonian schon Teil der Levy-Konstruktion ist. Überprüfen Sie die Richtigkeit Ihres Programms, indem Sie die Ergebnisse mit den exakt zu erwartenden Ergebnissen aus Gleichung (1) Übungsbatt 8 vergleichen.

Aufgabe 30 *„fourier - and trivial-free-path“*

Implementieren Sie die Algorithmen „ fourier-free-path“ und „ trivial-free-path“. Erzeugen Sie mit beiden Algorithmen Pfade zu $\rho^{free}(0, 0, \beta)$. Bestimmen Sie mittels dieser beiden Methoden und mittels „ levy free path“ die Korrelationsfunktion $G(k, l)$ um zu zeigen, dass die 3 Methoden unabhängig voneinander sind.
Hinweis: Korrelationsfunktion $G(i, j) = \; < x_i x_j >$ ist hier eine Matrix.

http://www.uni-saarland.de/fak7/rieger/HOMEPAGE/LECTURES/WS2007_2008.htm
bei Fragen Tel: 0681-3023967;

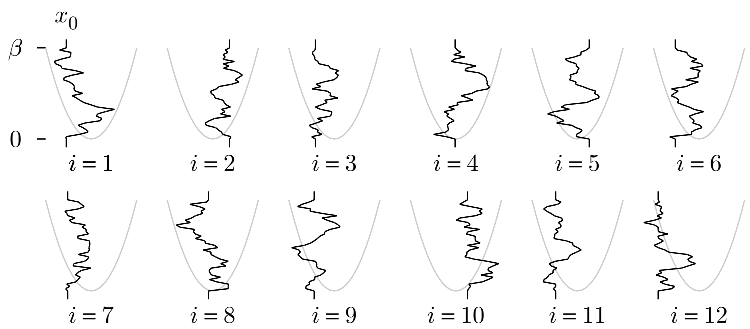

Abbildung 1: Levy free path