9. Übung zur Datenverarbeitung für TPHII

Sommersemester 2012

ABGABE: vor Beginn der nächsten Übung.

Alle Materialen zur Übung in */home/EDV2/edv2di00/09Ue2012-05-22/*

1. Monte-Carlo-Integration mit Importance Sampling *1.5 Punkte*

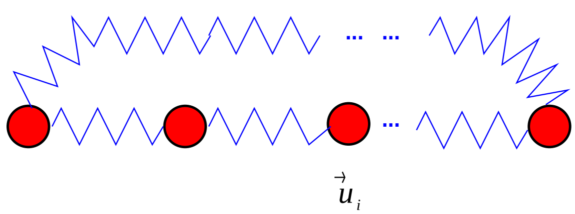
a) Schreiben Sie ein kurzes Programm (in Fortran oder C) zur Monte-Carlo-Berechnung des Integrals über eine N-dimensionale Funktion f der folgenden Form:

$$I = \int \mathrm{d}^{\mathrm{d}}\mathrm{x} \ \underbrace{o(\vec{x}) \times e^{-\beta E(\vec{x})}/Z}_{\equiv f(x_1..x_N)}$$

mit $Z = \int \mathrm{d}^{\mathrm{d}}\mathrm{x} \ e^{-\beta E(\vec{x})}$.

b) Testen Sie das Programm für $I = \int \mathrm{d}^{\mathrm{d}}\mathrm{x} \ \vec{x}^2 \times e^{-(\vec{x}^2)}/\sqrt{\pi}^d$ in $d = 1$ und 200 Dimensionen und vergleichen Sie mit dem exakten Ergebnis. Geben Sie im Protokoll auch die verwendete Schrittweite, die Anzahl der "warm ups", Mess-"runs" bzw. -"sweeps" sowie das Verfahren zur Erzeugung der Markov-Kette an.

2. Physik. Anwendung: klassische Gitterschwingungen *1.5 Punkte*



a) Berechnen Sie nun die spezifische Wärme c_V einer eindimensionalen Kette klassischer Atome. Die Energie ist ($\hbar = m = f = 1$):

$$E = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^{N} f \frac{(u_i - u_{i-1})^2}{2}.$$

Benutzen Sie periodische Randbedingunge, d.h. $u_{N+1} = u_1$, wobei $u_i = x_i - x_i^0$ die Auslenkung der Atome von der Ruhelage x_i^0 ist.
Betrachten Sie 50 Atome und verschiedene Temperaturen inkl. $T = 0.1$ und $T = 10$, plotten Sie c_V vs. T. Diskutieren Sie für $T \gg 1$, ob bzw. warum das Ergebnis Ihren Erwartunmgen entspricht. Geben Sie im Protokoll auch die verwendete Schrittweite, die Anzahl der "warm ups", Mess -"runs" bzw. -"sweeps" sowie das Verfahren, nach dem Sie die spezifische Wärme erzeugt haben, an.