Übungsaufgaben zur Vorlesung

Computerphysik

apl. Prof. Dr. R. Bulla

SS 2017

Blatt 10: Abgabetermin: Dienstag, der 11.07.2017, 12:00

Aufgabe 1: harmonische Kette – Abbildung auf ein Eigenwertproblem

(7 Punkte)

Die Bewegungsgleichungen der harmonischen Kette mit offenen Randbedingungen (siehe Aufgabe 1 von Blatt 9) lassen sich folgendermaßen auf ein Eigenwertproblem abbilden. Mit den Komponenten des Vektors $\vec{\xi}(t)$: $(\vec{\xi}(t))_n = \xi_n(t)$, erhält man:

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\vec{\xi}(t) = kM\vec{\xi}(t) \ .$$

Dabei wurden die Massen $m_i = m$ gesetzt. Mit dem Ansatz $\vec{\xi}(t) = \vec{a}e^{\lambda t}$ ergibt sich ein Eigenwertproblem in der Form

$$M\vec{a} = \gamma\vec{a} \ , \quad \text{mit } \gamma = \frac{m}{k}\lambda^2 \ .$$

Für die Eigenwerte gilt: $\gamma_n < 0$, deshalb wird $\lambda_n = i\omega_n$ gesetzt, mit den reellen Eigenfrequenzen ω_n. Die allgemeine Lösung der gekoppelten Differentialgleichungen lässt sich schreiben als:

$$\vec{\xi}(t) = \sum_{n=1}^{N} \vec{a}_n \left(\alpha_n \cos(\omega_n t) + \beta_n \sin(\omega_n t)\right) \ .$$

a) Wie lautet die Matrix M? (1 Punkt)

b) Berechnen Sie die Eigenvektoren $\vec{a}_n$ und die dazugehörigen Eigenfrequenzen ω_n. (2 Punkte)

c) Bestimmen Sie für dieselben Anfangsbedingungen wie in Aufgabe 1c) von Blatt 9 die Koeffizienten α_n und β_n und berechnen Sie daraus die Zeitabhängigkeit der $\xi_n(t)$ (Parameter siehe Aufgabe 1c) von Blatt 9). Hinweis: es gilt $\vec{a}_n \cdot \vec{a}_m = \delta_{nm}$. (4 Punkte)

Aufgabe 2: Spin-Konfigurationen

(4 Punkte)

Die Basis des Hilbertraums eines Systems aus N Spin-$\frac{1}{2}$-Teilchen lässt sich schreiben als $\{|\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N\rangle\}$, mit $\sigma_i = \uparrow, \downarrow$. Für einen gegebenen Zustand $|\psi\rangle =$

$|\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N\rangle$ lässt sich die z-Komponente des Gesamtspins leicht angeben als $S^z_{\text{ges}} = \sum_{i=1}^N s^z_i$, mit $s^z_i = \pm\frac{1}{2}$ für $\sigma_i = \uparrow / \downarrow$ ($\hbar$ wird hier $= 1$ gesetzt). Damit ergibt sich z.B. für den Zustand $|\psi\rangle = |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$ der Wert $S^z_{\text{ges}} = -1$.

Berechnen Sie für alle Zustände $|l\rangle$ eines N-Spin-Systems die Werte S^z_{ges} und schreiben Sie das Ergebnis nach folgendem Schema aus (hier für $N = 4$):

```
Sz_ges = 2:
  l = 15, |psi> = |1111>
Sz_ges = 1:
  l = 7, |psi> = |1110>
  l = 11, ...
```

Aufgabe 3: Zufallszahlen

(12 Punkte)

Wie in Kap. 4.1 der Vorlesung diskutiert, ist eine der Eigenschaften, die man an eine Sequenz von Zufallszahlen $\{x_i\}$, $i = 1, \ldots, N$ stellt, die Gleichverteilung im Intervall $]a, b]$ (hier $]0, 1]$). Im folgenden soll untersucht werden, ob die Zufallszahlen, die die Funktion `rand(...)` der Programmiersprache Julia liefert, diese Gleichverteilung erfüllen.

a) Erstellen Sie ein Histogramm der P_n (Anzahl der x_i im Intervall $]\frac{n}{M}, \frac{n+1}{M}]$) für $M = 10$ und $N = 1000$. (3 Punkte)

b) Berechnen Sie die mittlere Abweichung von der Gleichverteilung

$$\Delta = \sum_{n=0}^{M-1} \left| \frac{P_n}{N} - \frac{1}{M} \right|$$

für $M = 10$ und N zwischen $N = 10^2$ und $N = 10^4$. Stellen Sie Δ als Funktion von N graphisch dar. (2 Punkte)

Betrachten Sie nun den linearen Kongruenz-Generator, der eine „pseudo-zufällige“ Zahlenfolge $\{u_i\}$ nach der Vorschrift $u_{i+1} = (a u_i + c) \bmod m$ erzeugt. Die zu untersuchende Zahlenfolge $\{x_i\}$ mit $0 \leq x_i < 1$ ergibt sich dann aus $x_i = \frac{u_i}{m}$. Wählen Sie drei verschiedene Generatoren, d.h. drei verschiedene Parametersätze (a_k, c_k, m_k), $k = 1, 2, 3$, mit den Startwerten $u_{0,k}$ und $0 < a_k < m_k$, $0 \leq c_k < m_k$, $0 \leq u_{0,k} < m_k$, $10^2 < m_k < 10^8$ und untersuchen Sie folgende Eigenschaften dieser drei Generatoren:

c) Die Periode p. (2 Punkte)

d) Die Häufigkeiten P_n (wie in Teilaufgabe a) für $M = 20$ und $N = 10^4$. (2 Punkte)

e) Untersuchen Sie für $10 < N < 10^6$ die N-Abhängigkeit der Korrelationsfunktionen $\chi_{[0,1]}$ und $\chi_{[0,1,2]}$. (3 Punkte)