Übungsaufgaben zur Vorlesung

Computerphysik

apl. Prof. Dr. R. Bulla

SS 2018

Blatt 10: Abgabetermin: Montag, der 02.07.2018, 12:00

Aufgabe 1: harmonische Kette – Abbildung auf ein Eigenwertproblem

(8 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.

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

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:

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

b) Bestimmen Sie für dieselben Anfangsbedingungen wie in Aufgabe 1c) von Blatt 9 die Koeffizienten α_n und β_n. Zeigen Sie damit, dass für die Zeitabhängigkeit der Auslenkungen gilt:

$$\xi_m(t) = \sum_{n=1}^{N} (\vec{a}_n)_m (\vec{a}_n)_1 \cos(\omega_n t) \ . \tag{1}$$

Hinweis für die Herleitung: $\vec{a}_n \cdot \vec{a}_m = \delta_{nm}$. (3 Punkte)

c) Schreiben Sie ein Programm, welches die Matrix M belegt, daraus die Eigenvektoren $\vec{a}_n$ und die dazugehörigen Eigenfrequenzen ω_n bestimmt und mit Hilfe von Gl. (1) die Zeitabhängigkeit der Auslenkungen berechnet (für $k = 1$, $m = 1$). Erstellen Sie (analog zu Aufgabe 1 von Blatt 9) ein Diagramm mit den Auslenkungen $\xi_n(t)$ mit $n = 1, \ldots, 5$ und $0 \le t \le 10$ (Zahl der Massenpunkte: $N = 50$). (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 $|\psi\rangle = |\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N\rangle$ ist die z-Komponente des Gesamtspins gegeben durch

$$S^z_{\text{ges}} = \sum_{i=1}^{N} s_i^z$$

mit $s_i^z = \pm\frac{1}{2}$ 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 $S^z_{\text{ges}} = -1$.

Die 2^N Spin-Konfigurationen $|l\rangle$ lassen sich mit einer ganzen Zahl $l = 0, 1, \ldots, 2^N - 1$ durchnummerieren (siehe Vorlesungsskript Seite 34).

Berechnen Sie für alle Zustände $|l\rangle$ eines N-Spin-Systems den Gesamtspin S^z_{ges} und geben Sie die Zustände (nach aufsteigenden Werten von S^z_{ges} geordnet) nach folgendem Schema aus (hier für $N = 4$):

```
Sz_ges = -2.0:
  l = 0, |psi> = |0000>
Sz_ges = -1.0:
  l = 1, |psi> = |1000>
  l = 2, |psi> = |0100>
  l = 4,...
```

Aufgabe 3: Zufallszahlen

(8 Punkte)

Der lineare Kongruenz-Generator erzeugt eine „pseudo-zufällige“ Zahlenfolge $\{u_i\}$ nach der Vorschrift $u_{i+1} = (au_i + c) \bmod m$. Im folgenden wird ein solcher Generator mit den Parametern

$$a = 1664525 \ , \quad c = 1013904223 \ , \quad m = 2^{32}$$

und dem Startwert $u_1 = 7$ untersucht. Daraus ergibt sich die Folge $\{x_i\}$ mit $x_i = u_i/m$.

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 $]0, 1]$).

a) Erstellen Sie ein Histogramm der P_n (Anzahl der x_i im Intervall $]\frac{n}{M}, \frac{n+1}{M}]$, $n = 0, \ldots, M-1$) für $M = 10$ und $N = 1000$. (5 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. (3 Punkte)