

# QMC Weltlinien-Algorithmus

mit lokalen Updates

Im Rahmen der Veranstaltung  
„Computersimulationen in der Statistischen Physik“  
Prof. Dr. Nils Blümer

Von Benjamin Niepelt

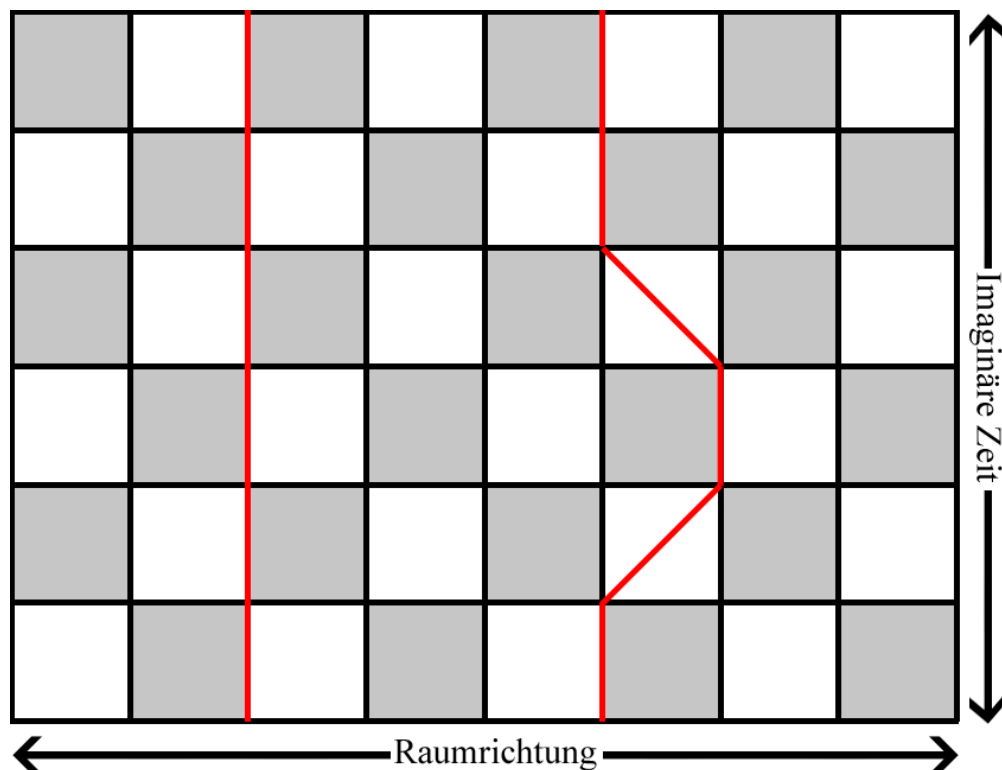
---

---

---

## ◆ Algorithmus

### ◆ Allgemeines



◆ **Trotter-Diskretisierung** ( $\Delta\tau = \beta/M$ ) und Zerlegung des Hamilton-Operators in 2 Summanden (Reduktion auf 2-Platz-Problem)

◆ **d+1-Dimensionales System** (d Raum- eine Imaginäre Zeit Dimension)

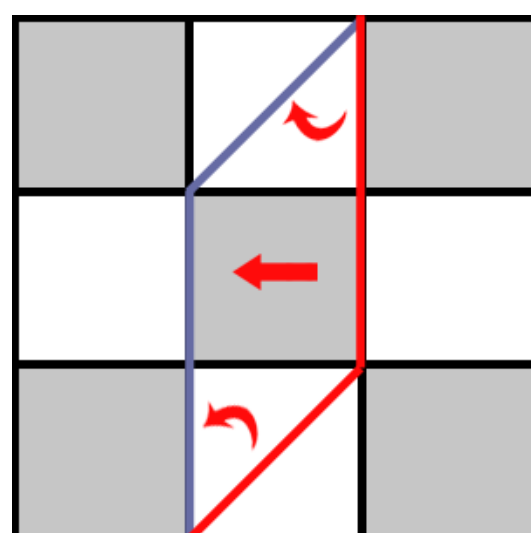
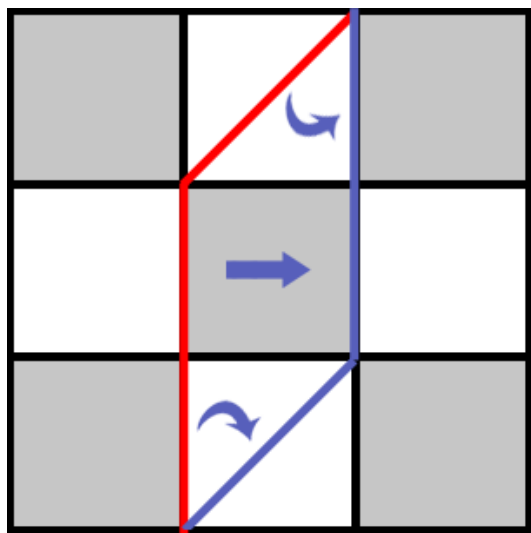
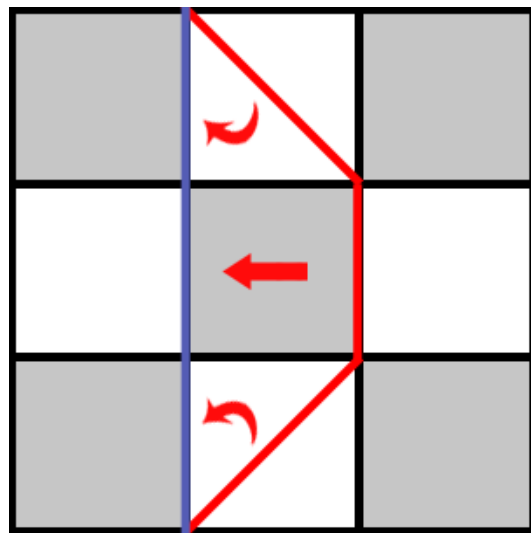
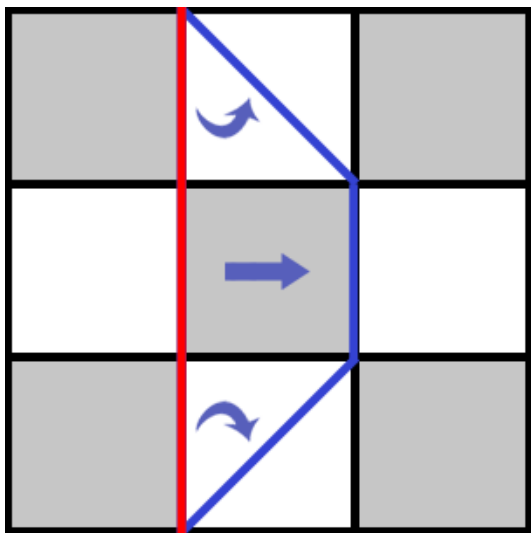
◆ Gitter in allen Dimensionen  
**Gradzahlig**

◆ Periodische Randbedingungen

◆ Beschreibt Evolution von Spin-Up-Zuständen

## ◆ Algorithmus

### ◆ Mögliche Wechsel



- ◆ Wechsel finden nur in grauen Feldern statt
- ◆ Nur dann, wenn im jeweiligen Feld nur **ein** Up-Spin ist.
- ◆ Nachbarfelder müssen den Wechsel zulassen (dürfen also z.B. keine Diagonalen haben)
- ◆ Entscheidung ob gewechselt wird hängt von den Gewichten ab

## ◆ Algorithmus

### ◆ Wechselwahrscheinlichkeiten und Gewichte

	N	
W		O
	S	

◆ Das Gewicht der Konfiguration, des hier dunkelgrauen Feldes, ergibt sich aus dem Produkt der Matrixelemente der umliegenden weissen Felder

◆ Das relative Gewicht  $r$  erhält man aus Division der neuen, vorgeschlagenen und der alten Konfiguration

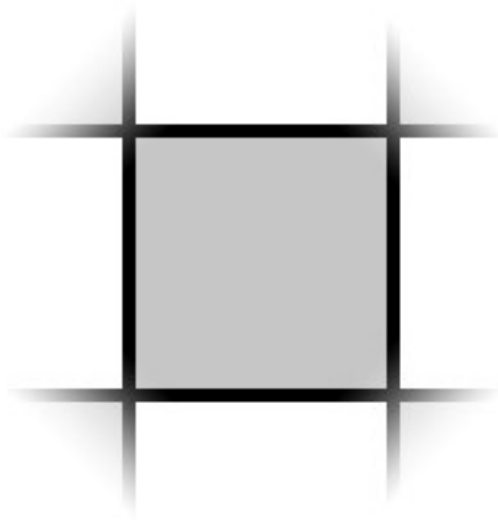
$$r = \frac{N_{neu} S_{neu} O_{neu} W_{neu}}{N_{alt} S_{alt} O_{alt} W_{alt}}$$

◆ Die Wahrscheinlichkeit das eine neue Konfiguration akzeptiert wird (nach Heath-Bath) lautet dann:

$$p = \frac{r}{r + 1}$$

## ◆ Implementierung

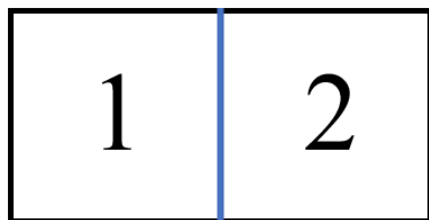
### ◆ Datenstruktur



```
typedef struct field {  
    boolean Left;  
    boolean *Right;  
    boolean Diag_Left;  
    boolean Diag_Right;  
  
    color Color;  
} FIELD;
```

### ◆ Verknüpfung

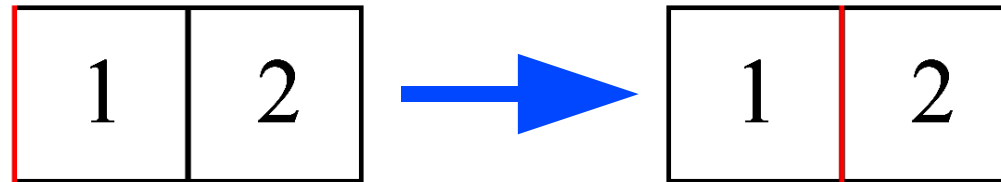
Pointer der rechten Kante von Feld 1 auf linke Kante von Feld 2 (unter Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen) setzen:



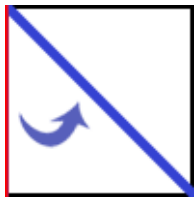
```
Feld1.Right = &Feld2.Left;
```

## ◆ Implementierung

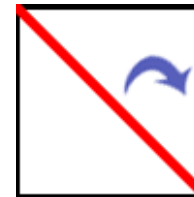
### ◆ Einfacher Wechsel



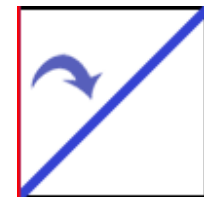
```
if(Feld1.Left == true)
    if (Feld2.Diag_Right == false && Feld2.Diag_Left == false) {
        Feld1.Left = false;
        *Feld1.Right = true;
    }
```



oder



oder



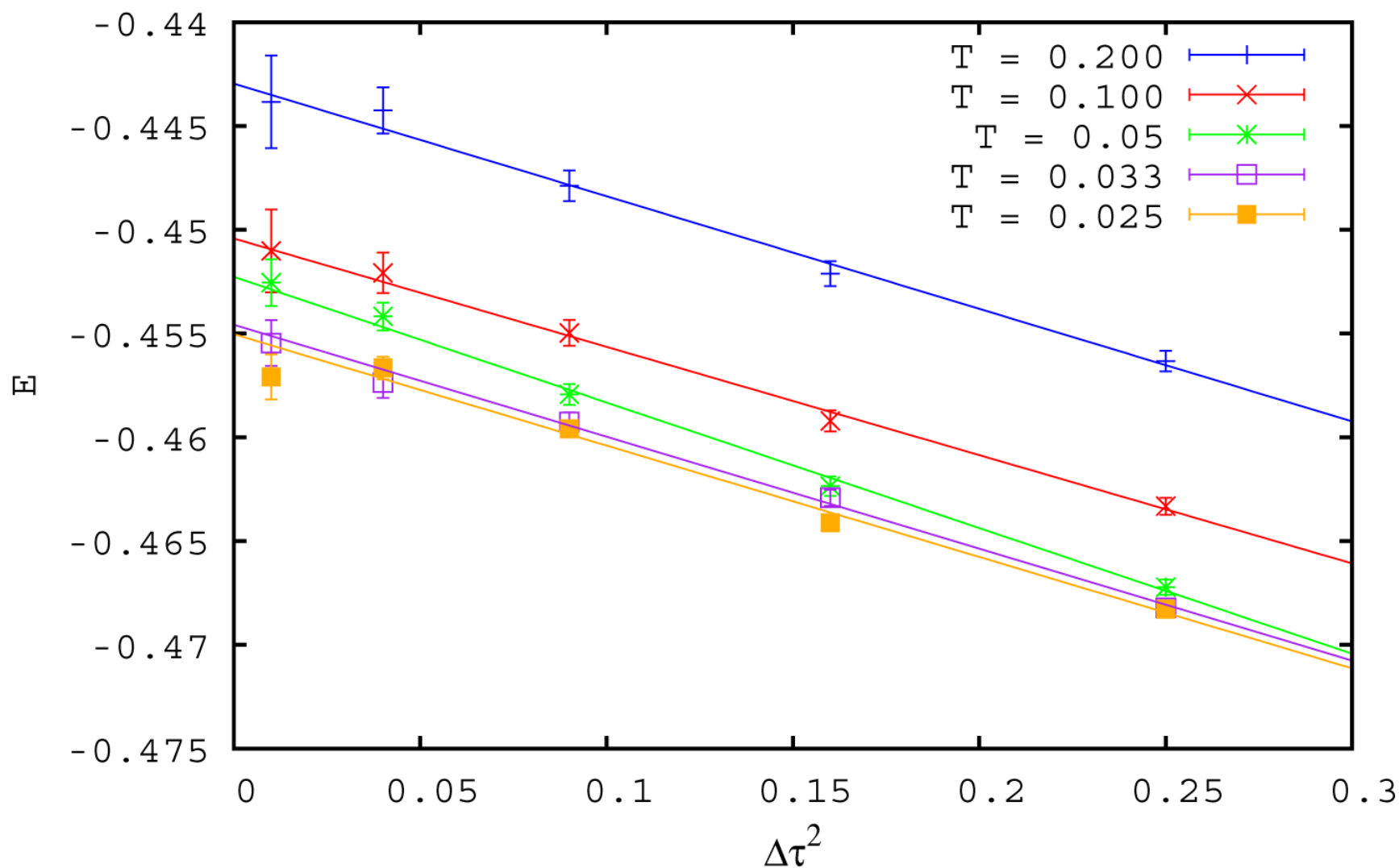
```
if(Oben.Left == true){
    Oben.Left = false;
    Oben.Diag_Left = true;
}
else if(Oben.Diag_Right == true){
    Oben.Diag_Right = false;
    *Oben.Right = true;
}
```

```
if(Unten.Left == true){
    Unten.Left = false;
    Unten.Diag_Left = true;
}
else if(Unten.Diag_Right == true){
    Unten.Diag_Right = false;
    *Unten.Right = true;
}
```

## ◆ Auswertung

### ◆ Energie/T Zusammenhang

Energie in Abhängigkeit von  $\Delta\tau^2$  und T



Parameter: T = 0.025 bis 0.2

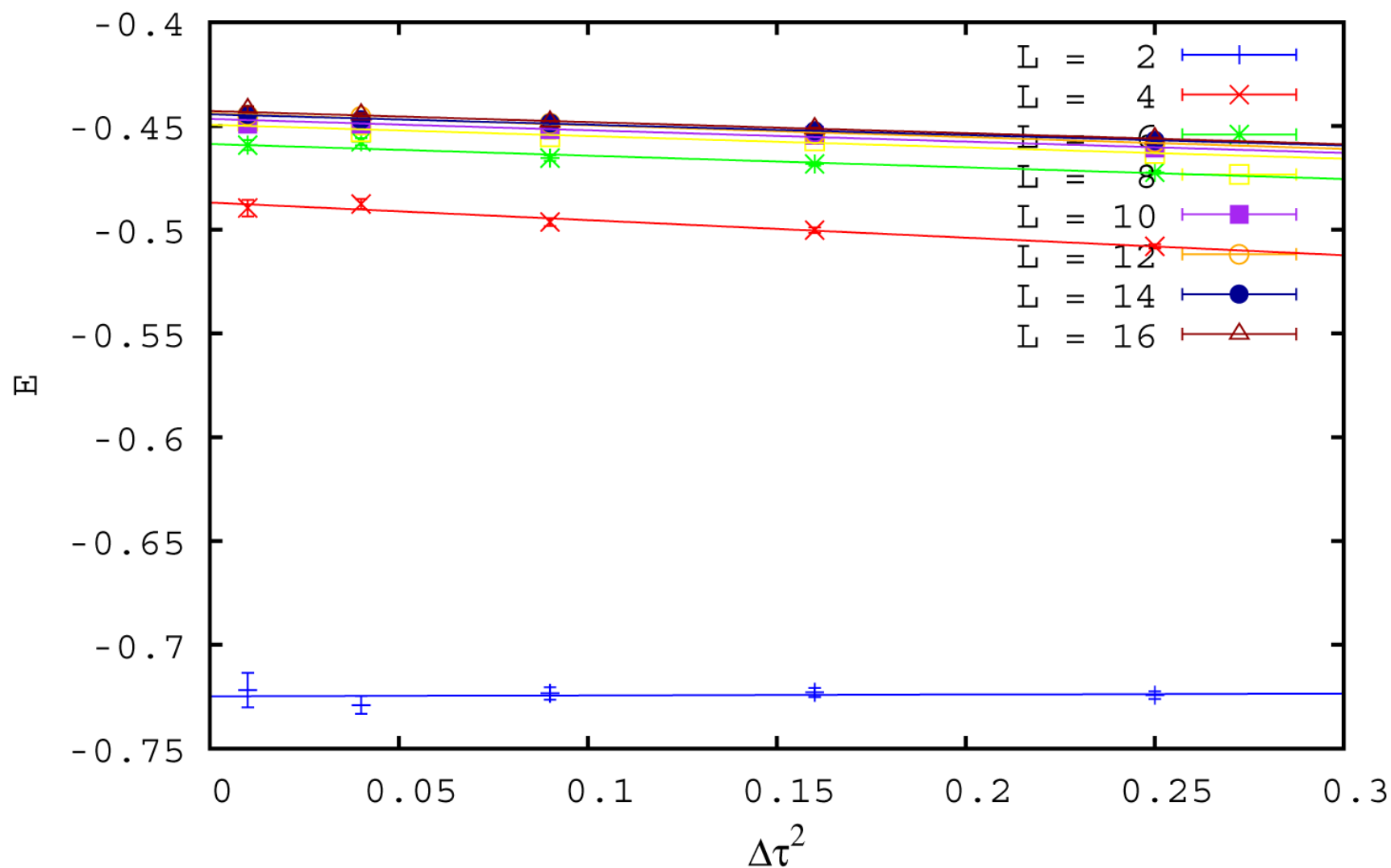
L=8

bei 40000 Sweeps

## ◆ Auswertung

### ◆ Energie/L Zusammenhang

Energie bei verschiedener Spinanzahl  $L$  und  $\Delta\tau^2$



Parameter:  $T = 0.1$

$L=2$  bis  $L=16$

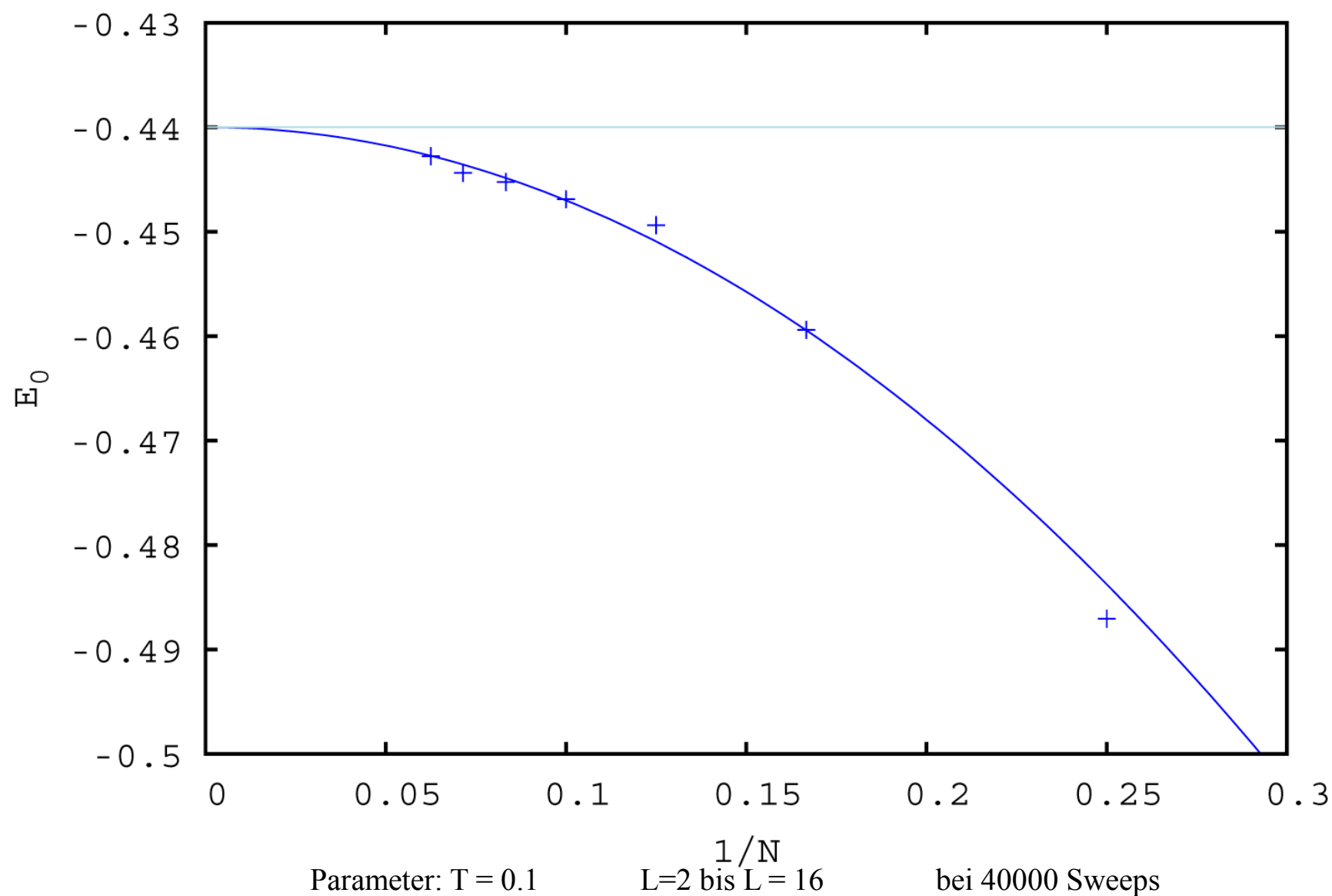
bei 40000 Sweeps



## ◆ Auswertung

### ◆ Extrapolation zur Grundzustandsenergie

Extrapolation der Grundzustandsenergie fuer  $L \rightarrow \infty$



## ◆ Auswertung

### ◆ NN-Spin-Korrelation

NN-Spinkorrelation (abh. von  $\Delta\tau$  und Temperatur)

