man sieht:

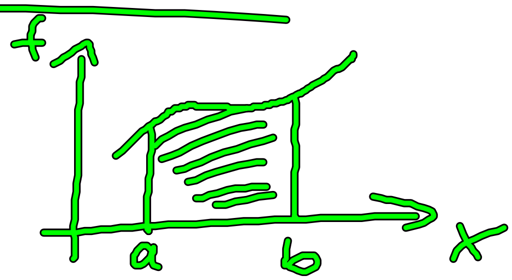
Es geht um die Berechnung
hochdimensionale Integrale

(für große Systeme, d.h. N groß)

Frage: Numerische Behandlung?

III.2.1. "Einfache" Integrationsvariante

betrachte: $I = \int_a^b dx\, f(x)$



Auswertung:

a) Zerlege Intervall $[a, b]$ in Gitter äquidistanter Stützstelle

x_j mit $j = 1, M+1$

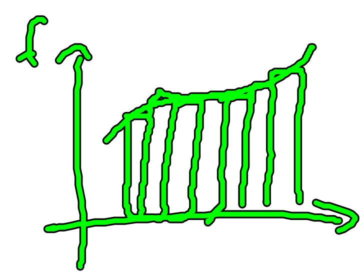
$$x_j = a + (j-1)\Delta x$$

wobei $\Delta x = \frac{b-a}{M}$

$$\Rightarrow x_1 = a$$

$$x_{M+1} = a + M \cdot \Delta x = b$$

Näherung: $I \approx \sum_{j=1}^{M} f(x_j)\Delta x$



wird exakt im Limes $M \to \infty$, d.h. $\Delta x \to 0$

Bemerkung:

betrachte speziell $b - a = 1 \Rightarrow I \approx \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} f(x_j)$

Probleme bei Anwendung auf multidimensionale Integrale:

N Teilchen

f Freiheitsgrade (z.B. $f=3$)

- ~~Funktion~~ Integrand muss auf M^{fN} Stützstellen ausgewertet werden!

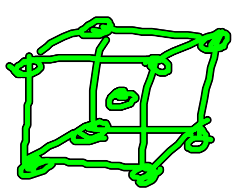
$\Rightarrow$ wird schnell unpraktikabel

z.B. $N = 100$, $\underline{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$

$M = 3$

$\Rightarrow \underbrace{3^{300}}_{10^{143}}$ Punkte, wo man auswerten muss

- Weiterer Nachteil einer Gitteranordnung der Stützstellen



Für große N ~~⇔~~ liegen fast alle Gitterpunkte auf der Oberfläche des Integrationsvolumens

einfaches Argument: (f = 1)

(M groß)

1-dim. Integral

Zahl der Stützstellen im Innern

$$\left(\frac{M-2}{M}\right)^N = \left(1-\frac{2}{M}\right)^N = e^{N\ln\left(1-\frac{2}{M}\right)} \approx e^{N\left(-\frac{2}{M}\right)} \xrightarrow[N\to\infty]{} 0$$

Gesamtzahl der Stützstellen pro Integrationsvariable

→ schlechte Auswertung des Integrals im Innern

<u>Alternative</u>

b) Benutze zur Auswertung von $I = \int_a^b dx\, f(x)$ zufällig gewählte Stützstellen x_j

$$\Rightarrow \quad I \approx \frac{1}{M}\sum_{j=1}^{M} f(x_j) \quad \text{mit } x_j \in [0,1]$$

$b = 1$
$a = 0$

gleichförmige Verteilung

Zufallszahlen

benutze „random number generator“

Anwendung auf Mittelwerte in der Statist. Physik

Ensemble.

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int d\underline{x}\, A(\underline{x})\, e^{-\beta H(\underline{x})}$$

jeweils fN Integrale im Zähler und Nenner

$$\approx \frac{(\Delta x)^{fN} \sum_{j=1}^{M} A(\underline{x}_j)\, e^{-\beta H(\underline{x}_j)}}{(\Delta x)^{fN} \sum_{j=1}^{M} e^{-\beta H(\underline{x}_j)}}$$

mit $\underline{x}_j = (x_j^1, \ldots, x_j^N)$

$\Delta x = \Delta / M$ mit Δ: Länge jedes Integrals

$$\rightarrow \boxed{\langle A \rangle \approx \frac{\sum_{j=1}^{M} A(\underline{x}_j)\, e^{-\beta H(\underline{x}_j)}}{\sum_{j=1}^{M} e^{-\beta H(\underline{x}_j)}}}$$

$\underline{x}_j$: Stützstelle im Konfigurationsraum

mit zufällig gewählten Stützstellen
„simple-sampling Monte Carlo"

→ Ist jedoch praktisch nicht effizient!

III.2.2. Importance Sampling

Wahrscheinlichkeit des ~~a~~ Auftretens einer bestimmten Konfiguration (z.B. kanonisch)

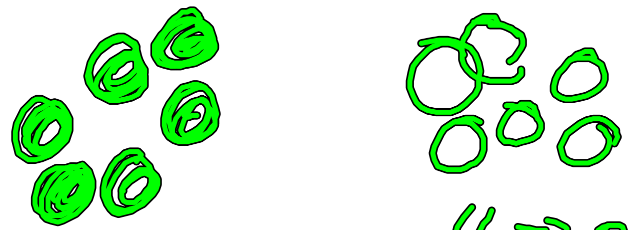
$$\rho(\underline{x}) \sim \frac{1}{Z} \underbrace{e^{-\beta H(\underline{x})}}_{\text{Boltzmannfaktor}}$$

⇒ Energetisch ungünstige Zustände haben ein verschwindendes statistisches „Gewicht"!

Folgerung: Uniform verteilte Stützstellen sind (zufällig oder äquidistant) ineffizient:

... da der Integrand für die meisten Konfigurationen verschwindet (da $e^{-\beta H} \sim 0$)

Beispiel: Dichtes Fluid aus harten Kugeln



$H \to \infty$

$\Rightarrow e^{-\beta H} = 0$

Jede „Überlapp"-Konfiguration führt zu $\rho(\underline{X}) = 0$!

<u>Lösungsstrategie</u>:

Wähle Stützstellen $\underline{X}_i$ aus auf Basis ihrer Wichtigkeit (im Hinblick auf ein nicht-verschwindendes $\rho(\underline{X})$)

„Importance Sampling"

<u>1. Frage</u>: Wie sehen die Mittelwerte bei Durchführung von „Importance Sampling" aus?

betrachte dazu wieder 1-dim. Integration

Wir hatten:

$$I = \int_0^1 dx\, f(x) \approx \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} f(x_j)$$

Diskretisierung

alternativ:

$$I = \int_0^1 dx\, \hat{p}(x) \frac{f(x)}{\hat{p}(x)} \approx \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} \hat{p}(x_j) \frac{f(x_j)}{\hat{p}(x_j)}$$

mit $\hat{p}$ zunächst beliebig

hier können die Stützstellen noch (wie vorher) regulär (äquidistant) oder zufällig sein!

Führe nun eine Verteilungsfunktion der Stützstellen ein:

normierte Verteilung:

$$p(x_j) = \frac{\hat{p}(x_j)}{\sum_{j=1}^{M} \hat{p}(x_j)} = \frac{\hat{p}(x_j)}{\hat{M}}$$

mit $\hat{M} = \sum_{j=1}^{M} \hat{p}(x_j)$

Dann kann man ersetzen:

$$\sum_{j=1}^{M} p(x_j) \,\ldots\ldots \longrightarrow \sum_{j=1}^{M}{}'$$

wobei die Stützstellen jetzt entsprechend der Verteilung $p(x_j)$ gezogen werden!

Anwendung auf das 1-dim. Integral

$$I \simeq \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} \tilde{p}(x_j) \frac{f(x_j)}{\tilde{p}(x_j)}$$

$$= \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} p(x_j) \frac{f(x_j)}{p(x_j)}$$

$$I \simeq \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M}{}' \frac{f(x_j)}{p(x_j)}$$

Anwendung auf Ensemble-Mittelwert

bisher:

$$\langle A \rangle \simeq \frac{\frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} A(\underline{x}_j) e^{-\beta H(\underline{x}_j)}}{\frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} e^{-\beta H(\underline{x}_j)}}$$

simple sampling

$$= \frac{\frac{1}{M}\sum_{j=1}^{M}{}' \frac{A(\underline{x}_j)}{P(\underline{x}_j)} e^{-\beta H(\underline{x}_j)}}{\frac{1}{M}\sum_{j=1}^{M}{}' \frac{1}{P(\underline{x}_j)} e^{-\beta H(\underline{x}_j)}}$$

Typischerweise wählt man nun $P(\underline{x}_j) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\underline{x}_j)}$

(kanon. Wahrscheinlichkeitsdichte!)

$$\Rightarrow \langle A \rangle = \frac{\cancel{\frac{1}{M}}\sum_{j=1}^{M}{}' A(\underline{x}_j)\cdot \cancel{Z}\underbrace{e^{+\beta H} e^{-\beta H}}_{1}}{\cancel{\frac{1}{M}}\sum_{j=1}^{M}{}' \cancel{Z}\underbrace{e^{+\beta H} e^{-\beta H}}_{1}}$$

benutze: $\sum_{j=1}^{M}{}' = M$

$$\Rightarrow \boxed{\langle A \rangle = \frac{1}{M}\sum_{j=1}^{M}{}' A(\underline{x}_j)}$$

Importance Sampling für Ensemble-Mittelwerte (kanonisch)

Stützstellen (d.h. Konfigurationen) werden ausgewählt entsprechend der kanonischen Verteilung!

III, 2.3. Markov-Prozesse, Mastergleichung, Detailed Balance

Sei $\underline{X}_{t_n}$ Zustand (Konfiguration) des Systems zu einer diskreten Zeit t_n

$n = 1, 2, \ldots$

$$\underline{X}_{t_n} \in \{\underline{S}_1, \ldots, \underline{S}_L\}$$

Mögliche Zustände des Systems

(Beachte: Die hier auftauchenden $\underline{S}_i$'s haben nichts mit Spins zu tun)

Betrachte die bedingte Wahrsch. P_B, daß $\underline{X}_{t_n} = \underline{S}_j$ wenn

$$\underline{X}_{t_{n-1}} = \underline{S}_i \qquad i, j = 1, \ldots, L$$

d.h. $P_B = P(\underline{X}_{t_n} = \underline{S}_j \mid \underline{X}_{t_{n-1}} = \underline{S}_i)$

Markov-Prozess:

Diese bedingte Wahrscheinlichkeit P_B ist unabhängig von den früheren Zeiten (vor t_{n-1})!

$\Rightarrow$ Zustand zur Zeit t_n hängt nur vom Zustand bei t_{n-1} ab!

Die damit resultierende Folge von Zustände nennt man Markov-Kette!

Bem.:
Man nennt P_B auch Übergangswahrscheinlichkeit W_{ij} vom Zustand $\underline{S}_i$ zum Zustand $\underline{S}_j$

Betrachte nun die gemeinsame Wahrsch.

$$P(\underline{X}_{t_n} = \underline{S}_j \cup \underline{X}_{t_{n-1}} = \underline{S}_i),$$ daß $\underline{X}_{t_n} = \underline{S}_j$ und $\underline{X}_{t_{n-1}} = \underline{S}_i$

Dann gilt:

$$P(\underline{X}_{t_n}=\underline{S}_j \cup \underline{X}_{t_{n-1}}=S_i) = W_{ij}\cdot \underbrace{P(\underline{X}_{t_{n-1}}=\underline{S}_i)}_{\text{Wahrsch., daß } \underline{X}_{t_{n-1}}=\underline{S}_i}$$

es folgt:

$$P(\underline{X}_{t_n}=\underline{S}_j) = \sum_{i=1}^{L} \underbrace{P(\underline{X}_{t_n}=\underline{S}_j \cup \underline{X}_{t_{n-1}}=S_i)}_{\text{gemeinsam. Wahrsch.}}$$

$$= \sum_{i=1}^{L} W_{ij}\, P(\underline{X}_{t_{n-1}}=\underline{S}_i)$$

Einfachere Notation:

$$\boxed{P(\underline{S}_j,t_n) = \sum_i W_{ij}\, P(\underline{S}_i,t_{n-1})} \qquad (*)$$

Allgemeine Anforderungen an W_{ij} (Übergangswahrsch.)

$W_{ij} \geq 0$ da es Wahrscheinlichkeiten sind

$\sum_{j=1}^{L} W_{ij} = 1$ System muß irgendwo hingehen!

Summiere Gl. (*) über alle j:

$$\sum_{j=1}^{L} P(\underline{S}_j, t_n) \overset{(*)}{=} \sum_j \sum_i W_{ij} P(\underline{S}_i, t_{n-1})$$

$$= \sum_i \Big(\underbrace{\sum_j W_{ij}}_{1} \Big) P(\underline{S}_i, t_{n-1})$$

$$= \sum_i P(\underline{S}_i, t_{n-1}) \; .$$

Das reflektiert die Erhaltung der Wahrscheinlichkeit.

$\Rightarrow$ Gleichung für die Änderung von P als Funktion der Zeit (interpretiere diese jetzt als kontinuierliche Variable)

$$\frac{d P(\underline{S}_j, t)}{dt} = - \sum_i W_{ji} P(\underline{S}_j, t)$$

Prozesse, die weg von $\underline{S}_j$ führen und dadurch $P(\underline{S}_j)$ verringern

Master-Gleichung:

$$+ \sum_i W_{ij} P(\underline{S}_i, t)$$

Prozesse, die hin zu $\underline{S}_j$ führen und dadurch $P(\underline{S}_j)$ erhöhen