

Computersimulation

Was?

→ Berechnung makroskopischer (und mikroskopischer) Eigenschaften von Vielteilchensystemen!

↳ mit Wechselwirkung in Hamiltonian (d.h. die Zustandssumme ist sehr selten analytisch zugänglich!)

↳ aber endlich Systemgröße!

↳ Bei ausreichender Systemgröße quasi-exakte Resultate!

Skript folgt im wesentlichen der

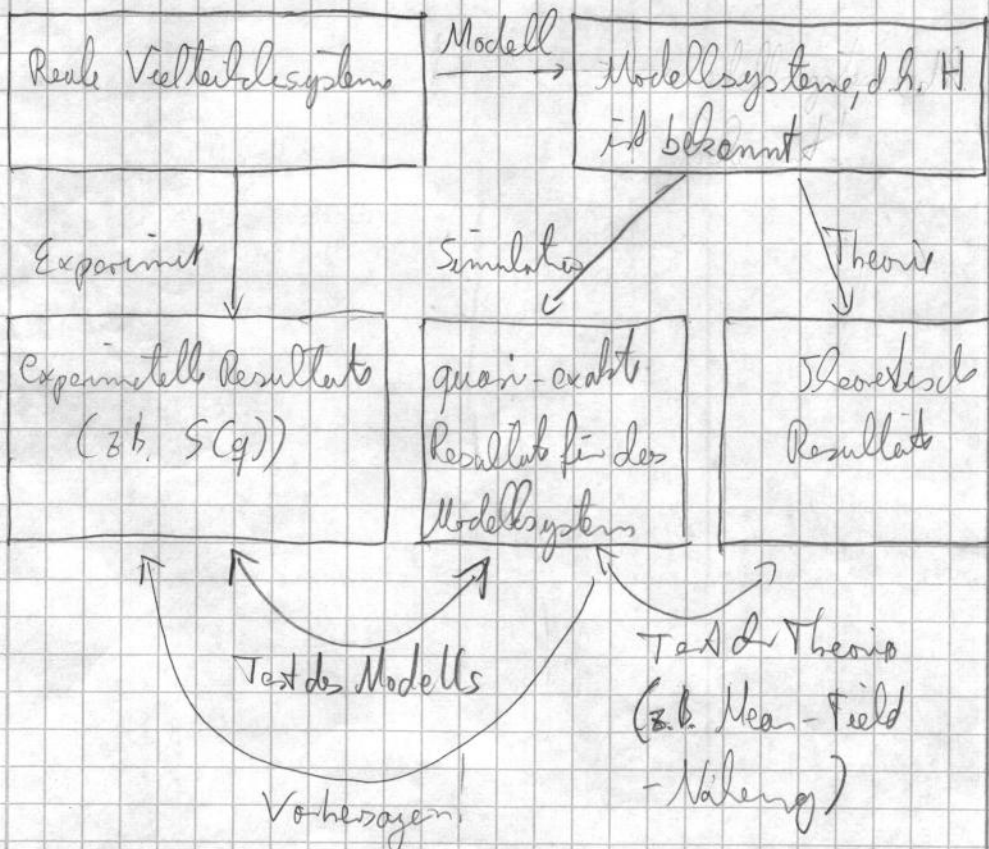
E-Karte der VL aus dem

WS 2010/11

bei Prof. Dr. Klapp!

Bedeutung heute?

Siehe auch



→ Simulation als verbindendes und eigenständige Technik zwischen dem Experiment und der Theorie!

Ziel der Computersimulation ist häufig Erwartungswert
zu berechnen z.B.

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{Z^N N!} \int d\mathbf{r} e^{-\beta H} H \cdot \frac{1}{Z_N}$$

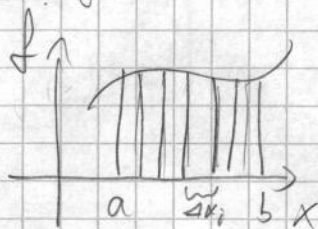
$$Z_N = \frac{1}{Z^N N!} \int d\mathbf{r} e^{-\beta H}$$

→ Es geht um die Berechnung hochdimensionaler Integrale!

↳ Wie kann das numerisch geschehen?

1. „Einfache“ Integrationsvorsatz (feste Stützstellen)

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



Bilde Näherung: $I \approx \sum_{i=1}^N f(x_i) \Delta x_i$

→ Das wird exakt im Limes $M \rightarrow \infty \Delta x \rightarrow 0$

Reiman Summe!

→ Probleme bei Anwendung auf multidimensionalen
Integral!

z.B.

N Teilchen

f Freiheitsgrad

↳ $M^{N \cdot f}$ Stützstellen

↳ wird schnell unpraktisch!

→ Wobei Nachteil: Für große N liegen die meisten
Stützstellen im Randbereich des Volumens!

(Kette wie
ganz ähnliche
Beispiel in der
Übung!)

2. Alternative (zufällige Stützstelle)

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

?
gleichförmig verteilt!

Für die Ensemble-Mittelwerte (z.B. kanonisch):

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \frac{1}{Z} \frac{1}{h^{3N}} \int d\Gamma e^{-\beta H(\Gamma)} A(\Gamma) \quad ; \quad \Gamma: 3N\text{-di} \\
 &\quad \text{Konfigurationen-} \quad \Gamma = (\underline{x}, \underline{p}) \\
 &\quad \text{vekt.} \\
 &= \frac{\int d\Gamma e^{-\beta H} A(\Gamma)}{\int d\Gamma e^{-\beta H(\Gamma)}} \\
 &= \frac{\int d\underline{x} e^{-\beta H_{\text{pot}}(\underline{x})} A(\underline{x})}{\int d\underline{x} e^{-\beta H_{\text{pot}}(\underline{x})}}
 \end{aligned}$$

Hier sei vorausgesetzt $A(\Gamma) = A(\underline{x})$ (A hängt nur von der Konfiguration ab!)

$$b) \quad H(\Gamma) = H_{\text{kin}}(\underline{p}) + H_{\text{pot}}(\underline{x})$$

$$\text{Dann } \langle A \rangle \approx \frac{(\underline{x}_0)^N \sum_i A(\underline{x}_i) e^{-\beta H(\underline{x}_i)}}{(\underline{x}_0)^N \sum_i e^{-\beta H(\underline{x}_i)}}$$

$\underline{x}_i$: Stützstelle in Konfigurationsraum!

mit zufällig gewählte $\underline{x}_0$!
 $\Rightarrow$ ist praktisch nicht effizient

3. Importance Sampling

* Wobei der Schritt des Aufheben einer beliebigen Konfigurationen (z.B. kanonisch)

$$g(\underline{x}) \sim \frac{1}{Z} e^{-\beta H_{\text{pot}}(\underline{x})}$$

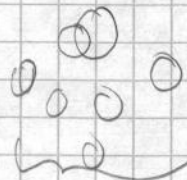
↳ Energie & ungünstige Zustände haben ein verändertes statistisches Gewicht!

↳ Gleichverteilung Stützstelle nicht effizient!

Beispiel: Harde Kugel,



$S(x) \neq 0$



Kugel überlappe $\Rightarrow e^{-\beta U} = 0!$

↑ Jede überlappende Konfiguration liefert $S(x) = 0!$

Lösung: Wähle wichtig Zustände oft!
(wichtig = hohe Beiträge durch $S(x) \neq 0!$)

Wie ist das zu machen? Wie in der Phys. besprochen:

z.B. 1d:

$$I = \int dx f(x) = \int \tilde{p}(x) \frac{f(x)}{\tilde{p}(x)} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \tilde{p}(x_i) \frac{f(x_i)}{\tilde{p}(x_i)}$$

Nun sei die Zustände selber ungleich verteilt.
Verteilung für die Zustände.

$$p(x_0) = \frac{\tilde{p}(x_0)}{\sum_{j=1}^N \tilde{p}(x_j)} = \frac{\tilde{p}(x_0)}{N}$$

Dann können wir ersetzen:

$$\sum_{j=1}^N p(x_j) \dots \longrightarrow \sum_{j=1}^{N'} \dots$$

Wobei bei N' die Zustände nach $p(x_0)$ verteilt sind!
 $\Rightarrow I = \int dx f(x) = \dots = \frac{1}{N'} \sum_{j=1}^{N'} \frac{f(x_j)}{p(x_j)}$

Für den Ensemble-Mittelwert:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{j=1}^N A(x_j) e^{-\beta H(x_j)}}{\sum_{j=1}^N e^{-\beta H(x_j)}} = \frac{\sum_{j=1}^{N'} \frac{A(x_j)}{p(x_j)} e^{-\beta H(x_j)}}{\sum_{j=1}^{N'} \frac{1}{p(x_j)} e^{-\beta H(x_j)}}$$

simple-sampling importance-sampling

Noch ist $p(x_0)$ beliebig!

Ist also glückwahr: $p(x_0) = e^{-\beta H(x_0)}$
(für diese kanonische Verteilung!)

$$\Rightarrow \langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N A(x_j)$$

* Importance Sampling für Ensembles-Mittelwert

* Gibbs: Statist. (d.h. Konfigurationen) gemäß der kanonischen Verteilung bestimmen!

* Abz.: Wie bekomme ich die Statist. gemäß dieser Verteilung??

Lösung des Problems

* Wir konstruieren uns eine Markov-Kette der Konfigurationen derart, dass die Gesamtheit dieser Konfigurationen die gewünschte Verteilung hat!

Erinnerung: Markov-Kette

* Markov-Prozess

→ Zustand S_n zum Zeitpunkt t_n hängt nur von Zustand bei t_{n-1} , also S_{n-1} , ab!

→ Die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen den Zuständen ist fest!

→ Damit ergibt sich die Markov-Kette (siehe VL vom 8.12.)

$$\underbrace{\frac{dP(S_0, t)}{dt}}_{\text{I}} = - \underbrace{\sum_{i \in \text{II}} W_{0i}}_{\text{II}} P(S_0, t) + \underbrace{\sum_i W_{i0}}_{\text{III}} P(S_i, t)$$

I) Zeitl. Änderung der Wahrscheinlichkeit des Zustands S_0

II) Alle Zustände, in die S_0 "springen" kann
 $\rightarrow P(S_0, t)$ wird dadurch gemindert!

III) Alle Zustände, aus denen S_0 "heraus" springen kann
 $\rightarrow P(S_0, t)$ wird dadurch erhöht!