VII. Monte Carlo - Methode

Berechnung von Ensemble-Mittelwerten im kanon. Ensemble

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

$$Z = \int d\underline{x}\; e^{-\beta H(\underline{x})}$$

Freiheitsgrade

Wir wollen $N = 1000$ Teilchen betrachten

$\Rightarrow 3N$ Orts-Freiheitsgrade $\Rightarrow 3 \cdot 1000$ eindimensionale Integrale

Monte-Carlo (MC):
Kunst der Lösung hochdimensionaler Integrale

Zunächst: Diskretisieren

$$\langle A \rangle = \frac{\cancel{(\Delta x)^{3N}} \sum_{j=1}^{M} A(\underline{x}_j)\, e^{-\beta H(\underline{x}_j)}}{\cancel{(\Delta x)^{3N}} \sum_{j=1}^{M} e^{-\beta H(\underline{x}_j)}} \quad \text{mit} \quad \Delta x = \frac{\overset{\text{Länge jedes Einzelintegrals}}{\Delta}}{\underset{\text{Zahl der Stützstelle}}{M}}$$

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

<u>"simple sampling"</u>: Direkte der Summe, aber mit zufällig gewählten Stützstellen

Grund: Bei regelmäßiger Verteilung der Stützstellen sind für große N fast alle Stützstellen auf der <u>Oberfläche</u> des Integrationsvolumens angesiedelt betrachte dazu den Bruch (eindim. Integration!!)

$$\underbrace{\left(\frac{M-Z}{M}\right)^N}_{\substack{M-Z:\ \text{Zahl der Stützstellen im Inneren des Intervalls}\\ M:\ \text{Gesamtzahl der Stützstellen}}} = \left(1-\frac{Z}{M}\right)^N = e^{N\ln\left(1-\frac{Z}{M}\right)}$$

$$\underset{M \text{ groß}}{\approx} e^{N\left(-\frac{Z}{M}\right)} \xrightarrow[N\to\infty]{} 0$$

Importance Sampling

Problem des simple sampling in der Statistischen Physik

Wahrsch. für das Auftreten einer Konfiguration: (Gewicht des Zustandes)

$$\rho(\underline{x}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\underline{x})}$$

energetisch ungünstige Zustände haben verschwindendes statistisches Gewicht!

z.B. Dichtes System aus harten Kugeln