

Ankündigung:

Di, 10.02.15 in der VL:

Vorstellung der Projekte durch
kurze Präsentationen

Historische Bemerkung zu Computersimulation

"Geburtsstunde" von ^{Vielfachen -} Computersimulation

1952 "MANIAC" in Los Alamos ^{wurde} zugänglich gemacht
(für nicht-militärische Nutzung)
benutzt bei Entwicklung der ersten Atombombe
und zum Code - Kacke während des 2. Weltkriegs

1953 Erste MC Simulation
eines einfachen Fluides

→ Berechnung von Zustandsgleichungen
(PST)

N. Metropolis, Rosenbluth, A. Teller,
E. Teller, J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953)

~~1953~~ 1956 Erste MD Simulation eines
Harte-Kugel-Fluids

B. Alder, A. Wainwright

1957 Erde MC/MD - Studien der Kristallisation
Asteris Kugel

Weiter wichtige Namen

• Kurt Binder (Marie)

Computersimulation: Spinsysteme, Spingläser,
flüssig

insbes. Finite Size Scaling

• Daan Frenkel

• Mike Allen

} Computersimulation von
flüssigkristalle (u.a. komplexes
Fluid)

⇒ Binder!

IV.2. Mark-Cole-Simulation

• Ziel: Berechnung von Ensemble-Mittelwerten

z.B. im kanon. Ensemble (N, V, T)

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

mit $Z = \int dx e^{-\beta H(x)}$

mit $\int dx =$ z.B. $\begin{cases} \int d\vec{r} = \int dp_1 \dots \int dp_n \int dq_1 \dots \int dq_n \\ \int_{\mathbb{S}^n} \text{Spaltenintegration} \end{cases}$

$\int_{\mathbb{S}^n} = \sum_{s_1=\pm 1} \dots \sum_{s_n=\pm 1} \dots$
 $XY = \int dp_1 \int dp_2 \dots$

Man sieht:

Es geht um die Berechnung
hochdimensionaler Integrale

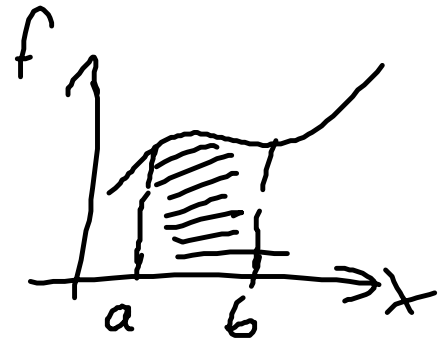
(für große Systeme (N groß))

Numerische Lösung?

Betrachte zunächst eindimensionale Fall

IV.2.1. Einfache Integrationsarten

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



a) Zerlege Intervall $[a, b]$ in Gitter
mit äquidistante Stützstelle (Diskretisierung)

$$x_j = a + (j-1) \Delta x \quad \text{mit} \quad \Delta x = \frac{b-a}{M}$$

$$x_1 = a$$

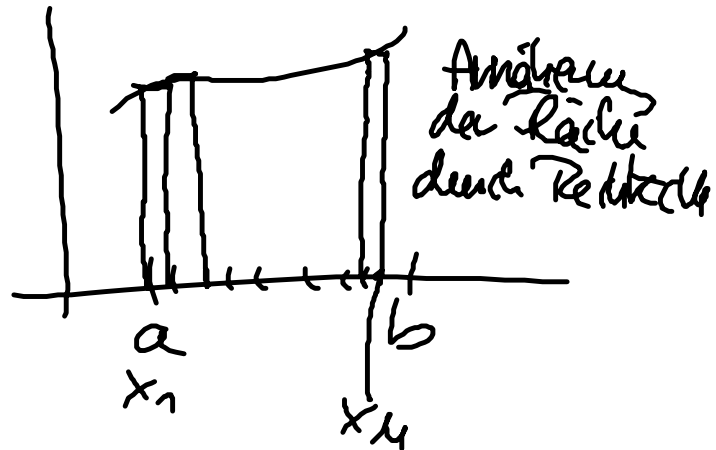
$$x_M = a + (M-1) \Delta x$$

M : Zahl der
Stützstelle

Näherung:

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

wird exakt im Limes $M \rightarrow \infty$
($\Delta x \rightarrow 0$)



falls speziell:

$$a=0, b=1$$

aus dieser Formel.
 \Rightarrow

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

Aber: Diese Prozedur wird problematisch
bei Anwendung auf hochdimensionale Integrale!

insgesamt hat man die Dimension

$f \cdot N$

Teilchenzahl

Zahl der Freiheitsgrade pro Teilchen

Z.B. $f=3$ (Kugel in 3 Raumdimensionen)

Z.B. $N=100$, $f=3$ ($N_i = (x_i, y_i, z_i)$
 $i=1, \dots, N$)

→ Funktion muss auf

M^{300} Stützstellen ausgewertet werden (zur Bestimmung der Oszillationsfrequenz!)

Z.B. 3 Stützstellen.

$M^{300} \sim 3^{300} \sim 10^{143}$ Punkte!

- Weiterer Nachteil eines äquidistanten Gitters bei der Auswertung:

Bei große N sind fast alle Gitterpunkte auf der Oberfläche des multidimensionalen Hyperkubus!

betrachte die Einfachheit halber $f=1$

⇒ Funktion muss auf M^N Stützstellen ausgewertet werden

betrachte die Anzahl

$$\left(\frac{M-Z}{M}\right)^N$$

Interpretation:

M^N : Gesamtzahl der Sitzstellen

$(M-Z)^N$: Zahl der Sitzstellen im "Lernen" der Integrale

$$\left(1 - \frac{Z}{M}\right)^N$$

M groß

$$\approx e^{-N \frac{Z}{M}}$$

$$= e^{N \ln\left(1 - \frac{Z}{M}\right)} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0$$

benutze $\ln(1-x) \approx -x$
 x klein

\Rightarrow schlechte Auswertung der Integrale!

Alternative:

b) Benutze zur Auswertung von I zufällig gewählte Sitzstelle x_i

⇒ "Random Number Generator"
(Zufallsgenerator)

$$I = \int_a^b dx f(x) \stackrel{a=0, b=1}{=} \int_0^1 dx f(x) \approx \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M f(x_j)$$

mit $x_j \in [0,1]$
gleichförmige Verteilung

Satz hier fest:
 $\Delta x = \frac{1}{M}$

⇒ "simple sampling Mark-Sale"

Anwendung auf Ensemble-Mittelwert

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

äquidistant
Gitter

$$\begin{aligned} &\Rightarrow \frac{1}{Z} \sum_{j=1}^M A(x_j) e^{-\beta H(x_j)} \\ &\frac{1}{Z} \sum_{j=1}^M e^{-\beta H(x_j)} \\ &\approx \frac{\sum_{j=1}^M A(x_j) e^{-\beta H(x_j)}}{\sum_{j=1}^M e^{-\beta H(x_j)}} \end{aligned}$$

$\Delta x = \frac{1}{M}$
 $x_j = (x_j^1, \dots, x_j^d)$

"jedat Gitterstelle
Zufällig gewollt"

IV. 2.2. Importance Sampling

Problem bei Simple Sampling

Wahrsch. für das Auftreten einer Konfiguration

$$g(x) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(x)} \quad \text{Konfig.-verteil.}$$

Phasenraumdicke
(Verteilungsfunktion für Mikrozustände)

⇒ energetisch ungünstige Zustände haben verschwindendes statist. Gewicht

Tafel:

gleichförmig verteilte Sitzstelle

sind ineffizient, da die Funktion

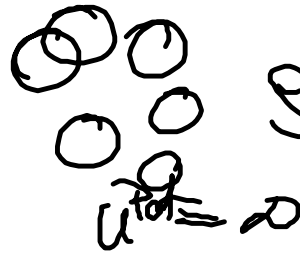
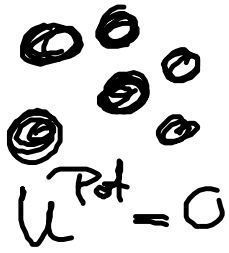
für die meisten Konfigurationen verschwindet!

Beispiel: Dichtes Fluid aus Harten Kugeln

$$u_{HS}(r) = \begin{cases} \infty, & r < \sigma \\ 0, & r \geq \sigma \end{cases}$$



Poteniale
Energie



$$g(x) = 0!!$$

Nach Verfeinerung



Jede Überlappungsstruktur führt zu
 $g(x) = 0$

\Rightarrow "verboten"

Lösungsstrategie

Wähle Sitzstellen aus auf Basis
ihrer "Wichtigkeit"

\Rightarrow "Importance Sampling"

Betrachte dazu wieder 1-dim. Integral

$$I = \int_0^1 dx f(x)$$

$$= \int_0^1 dx \tilde{p}(x) \frac{f(x)}{\tilde{p}(x)}$$

hier ~~ist~~ $\tilde{p}(x)$
beliebig
(dort nicht null sein)

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

hier können die x_j noch regulär oder
uniform verteilt sein

siehe die normierte Verteilungsfunktion
der Stichprobe em =

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

fall
speziell $\tilde{p} = 1$ gleichförmige
Verteilung
 $M = \sum_{j=1}^M 1 = M$

Idee:

Man kann wie folgt setzen \leftarrow

wobei hier die Stich-
stellen anhand der
normalen Verteilung
 $p(x)$ gezogen sind!

$$\begin{aligned} I &\approx \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \tilde{p}(x_j) \frac{f(x_j)}{\tilde{p}(x_j)} \\ &= \frac{\hat{M}}{M} \sum_{j=1}^M p(x_j) \frac{f(x_j)}{\tilde{p}(x_j)} \\ &= \frac{\hat{M}}{M} \sum_{j=1}^{M'} \frac{f(x_j)}{\tilde{p}(x_j)} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M'} \frac{f(x_j)}{p(x_j)} \end{aligned}$$

$(\hat{M} = M \cdot p)$

vor: vorher M

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

Anwendung auf Ensemble-Mittelwert

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

Single Sampling

$$= \frac{\sum_{j=1}^M \frac{A(x_j) e^{-\beta H(x_j)}}{P(x_j)}}{\sum_{j=1}^M \frac{1}{P(x_j)} e^{-\beta H(x_j)}}$$

$$\frac{\sum_{j=1}^M \frac{A(x_j) e^{-\beta H(x_j)}}{P(x_j)}}{\sum_{j=1}^M \frac{1}{P(x_j)} e^{-\beta H(x_j)}}$$

Importance Sampling

Typischerweise wählt man:

$$P(x_j) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(x_j)} = Q(x_j)$$

Ersetze -

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

beachte:
1/2 liest
sich
von
unten

$$\sum_{j=1}^M 1 = M$$

bei Importance Sampling
bleibt die Zahl
von Sitzstellen
erhalten!

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

Importance Sampling für Ensemble-Mittelwert

Sitzstellen (Konfiguration der Teilchen)
werden ausgewählt entsprechend der kanon.
Verteilung!!

Frage:

Wie fühl man hyperbore Saupfing
praktisch denn??

Kurz - Antwort.

„Pondan Walk“ denn de
Konfigurationraum

(Marka - Kette)