Ankündigung:

Di, 10.02.15 in der VL:

Vorstellung der Projekte durch kurze Präsentationen

Historische Bemerkungen zu Computersimulation

"Geburtsstunde" von Vielteilchen-Computersimulation

1952 "MANIAC" in Los Alamos wurde zugänglich gemacht für nicht-militärische Nutzung

benutzt bei Entwicklung der ersten Atombomben und zum Code-Knacken während des 2. Weltkriegs

1953 Erste MC Simulation eines einfachen Fluides

→ Berechnung von Zustandsgleichungen $p(g, T)$

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

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

B. Alder, A. Wainwright

1957 Erste MC / MD - Studien der Kristallisation
harter Kugeln

Weitere wichtige Namen

- Kurt Binder (Mainz)

  Computersimulation: Spinsysteme, Spingläser, Flüssigkeiten

  insbes. Finite Size Scaling

- Daan Frenkel
- Mike Allen

} Computersimulation von Flüssigkristalle (u.a. komplexen Fluide)

⇒ Bücher !

IV.2. Monte-Carlo-Simulationen

- Ziel: Berechnung von Ensemble-Mittelwerten

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

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

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

$$\text{mit } \int d\underline{x} = \text{z.B.} \begin{cases} \int d\Gamma = \int dp_1 \ldots \int dp_N \int dq_1 \ldots \int dq_N \\ \overset{\text{Spur}}{\mathrm{Tr}} \qquad \text{Ising: } \mathrm{Tr} \ldots = \sum_{S_1=\pm 1} \sum_{S_2=\pm 1} \ldots \sum_{S_N=\pm 1} \\ \{S\} \text{ Spinkonfiguration}, \quad XY: \mathrm{Tr} \ldots = \int d\theta_1 \int d\theta_2 \ldots \end{cases}$$

Man sieht:

Es geht um die Berechnung hochdimensionaler Integrale (für große Systeme (N groß))

Numerische Lösung?

Betrachte zunächst eindimensionalen Fall

IV.2.1. Einfache Integrationsarten

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

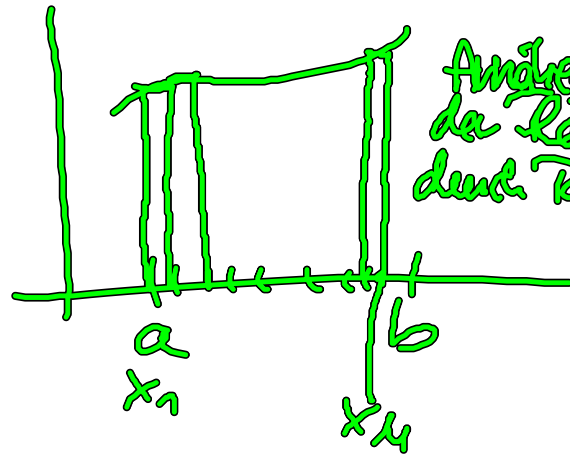
a) Zerlege Intervall $[a,b]$ in Gitter mit äquidistanten Stützstellen (Diskretisierung)

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

$x_1 = a$

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

M : Zahl der Stützstellen



Näherung:

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

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

Falls speziell:

$a = 0,\ b = 1$

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

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

insgesamt hat man die Dimension

$f \cdot N$

N: Teilchenzahl

f: Zahl der Freiheitsgrade pro Teilchen

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

z.B. $N = 100$, $f=3$ $\left(\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i), \; i=1,..N \right)$

$\Rightarrow$ Funktion muss auf

M^{300} Stützstellen ausgewertet werden (zur Berechnung des Ortsintegrals!)

z.B. 3 Stützstellen:

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

- Weiterer Nachteil eines äquidistanten Gitters bei der Auswertung:

  Für große N sind ~~fast~~ alle Gitterpunkte auf der Oberfläche des multidimensional Integrationsvolumens!

betrachte der Einfachheit halber $f=1$

$\Rightarrow$ Funktion muss auf M^N Stützstellen ausgewertet werden

betrachte den Ausdruck

$$\left(\frac{M-2}{M}\right)^N$$

Interpretation:

M^N : Gesamtzahl der Stützstellen

$(M-2)^N$: Zahl der Stützstellen im „Innern" des Intervalls

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

benutze $\ln(1-x) \underset{x \text{ klein}}{\approx} -x$

$\Rightarrow$ schlechte Auswertung der Integrale!

b) Alternative:
Benutze zur Auswertung von I zufällig gewählte Stützstellen x_i

⇒ "Random Number Generator"
(Zufallsgenerator)

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

mit $x_j \in [0,1]$ gleichförmig verteilt

setze hier fakt. $\Delta x = \frac{1}{M}$

→ $\boxed{\text{"simple sampling Monte Carlo"}}$

Anwendung auf Ensemble-Mittelwert

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

äquidistant Gitter →

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

Riemann Summe; $\Delta x = \frac{L}{M}$; $\underline{x}_j = (x_j^1, \dots, x_j^{dN})$

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

jetzt Stützstelle zufällig gewählt!

IV.2.2. Importance Sampling

Problem bei Simple Sampling

Wahrsch. für das Auftreten einer Konfiguration

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

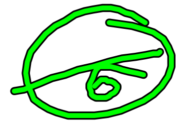
Kanon. Verteilung

Phasenraumdichte (Verteilungsfunktion für Mikrozustände)

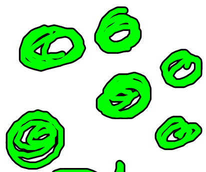
$\Longrightarrow$ energetisch ungünstige Zustände haben verschwindendes statist. Gewicht

Folgerung:

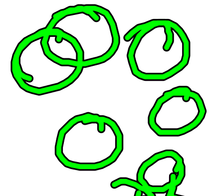
gleichförmig verteilte Stützstellen sind ineffizient, da die Funktion für die meisten Konfigurationen verschwindet!

Beispiel: Dichtes Fluid aus Harten Kugeln 

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

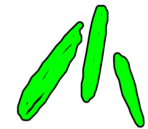


Potentielle Energie $U^{Pot} = 0$



$U^{Pot} = \infty$ $\quad \rho(\underline{x}) = 0$!

Noch komplizierter



Jede Überlappkonfiguration führt zu

$$\rho(\underline{x}) = 0$$

$\Rightarrow$ ineffizient!

Lösungsstrategie

Wähle Stützstellen aus auf Basis ihrer "Wichtigkeit"

$\Rightarrow$ "Importance Sampling".

Betrachte dazu wieder 1-dim. Integral

1

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

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

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

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

hier können die x_j noch regulär oder uniform verteilt sind

Führe die normierte Verteilungsfunktion der Stützstellen ein:

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

Spezialfall $\tilde{p} = 1$ gleichförmige Verteilung

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

Idee:

Man kann wie folgt ersetzen

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

← wobei hier die Stützstellen anhand der normierten Verteilung $p(x)$ gezogen werden

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

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

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

vgl.: vorher

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

Anwendung auf Ensemble-Mittelwert

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

Simple Sampling

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

Importance Sampling

Typischerweise wählt man:

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

Einsetzen:

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

beachte: 1/Z kürzt sich heraus

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

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

bei Importance Sampling bleibt die Zahl von Stützstellen erhalten!

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

Importance Sampling für Ensemble-Mittelwert

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

Frage:

Wie führt man Importance Sampling praktisch durch??

Kurz-Antwort:

„Random Walk" durch den Konfigurationsraum

(Markov-Kette)