Übungsaufgaben zur Vorlesung

Computerphysik

apl. Prof. Dr. R. Bulla

SS 2017

Blatt 11: Abgabetermin: Dienstag, der 18.07.2017, 12:00

Aufgabe 1: Monte-Carlo-Integration

(4 Punkte)

Berechnen Sie das dreidimensionale Integral

$$I = \int_0^1 \mathrm{d}x \int_0^1 \mathrm{d}y \int_0^1 \mathrm{d}z \sin\left(x(y+2z)\right)$$

durch Monte-Carlo-Integration für eine Folge von $N_1 = 10^2$, $N_2 = 10^3$ und $N_3 = 10^4$ zufälligen Punkten $\vec{r}_i$ im Integrationsbereich. Berechnen Sie auch für $M = 100$ Monte-Carlo-Integration den Mittelwert $\langle \bar{I} \rangle$ sowie die mittlere Abweichung vom Mittelwert $\Delta\bar{I} = \langle |\bar{I} - \langle \bar{I} \rangle| \rangle$.

Aufgabe 2: Volumen der d-dimensionalen Einheitskugel

(9 Punkte)

Das Volumen der d-dimensionalen Einheitskugel ergibt sich aus dem d-dimensionalen Integral

$$I = \int_{-1}^1 \mathrm{d}x_1 \ldots \int_{-1}^1 \mathrm{d}x_d \, f(\vec{r}) \ , \quad \text{mit} \quad f(\vec{r}) = \left\{ \begin{array}{lcl} 1 & : & |\vec{r}| < 1 \ , \\ 0 & : & \text{sonst} \ , \end{array} \right. \tag{1}$$

Das exakte Ergebnis lautet:

$$V_{\mathrm{e,d}} = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)} \ .$$

Mit einer Folge zufälliger Punkte $\vec{r}_i$, $i = 1, \ldots, N$ lässt sich das Integral abschätzen als (Monte-Carlo-Integration):

$$\bar{I} = \frac{2^d}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\vec{r}_i) \ . \tag{2}$$

a) Schreiben Sie zunächst ein Programm, welches $\bar{I}$ aus Gl. (2) für beliebige d und N berechnet. (2 Punkte)

Im folgenden soll untersucht werden, wie die Abweichung $\Delta\bar{I}$ des Integralwerts aus Gl. (2) vom exakten Ergebnis

$$\Delta\bar{I} = |\bar{I} - V_{\mathrm{e,d}}|$$

von der Dimension d und der Zahl der Punkte N abhängt. Dazu ist es sinnvoll, den Mittelwert

$$\langle \Delta \bar{I} \rangle = \frac{1}{M} \Delta \bar{I}$$

für M Monte-Carlo-Integrationen zu berechnen.

b) Berechnen Sie den Mittelwert $\langle \Delta \bar{I} \rangle$ für $M = 1000$ Monte-Carlo-Integrationen für $d = 2, \ldots, 5$ und stellen Sie das Ergebnis im Bereich $1000 < N < 5000$ graphisch dar. (3 Punkte)

c) Berechnen Sie jetzt die Riemann-Summe S_{R} (siehe Vorlesungsskript Seite 42) für das Integral I aus Gl. (1). Untersucht werden soll auch hier die Abweichung vom exakten Ergebnis $\Delta S_{\mathrm{R}} = |S_{\mathrm{R}} - V_{\mathrm{e,d}}|$. Berechnen Sie die Abweichung ΔS_{R} für $d = 2, \ldots, 5$ und stellen sie das Ergebnis in Abhängigkeit der Zahl der Terme in der Riemann-Summe graphisch dar ($1000 < N^d < 5000$). Hinweis: N ist hier die Zahl der Punkte bzw. der Intervalle der Zerlegung für jede Raumdimension. (4 Punkte)

Aufgabe 3: Metropolis-Algorithmus

(7 Punkte)

Gegeben sei die Gewichtsfunktion

$$w(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \quad . \tag{3}$$

a) Erzeugen Sie mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus eine Markov-Kette, also eine Folge von Zufallszahlen $\{x_i\}$, $i = 1, \ldots, N$, deren Verteilung der Gewichtsfunktion $w(x)$ entspricht. Wählen Sie als maximale Schrittweite zunächst $h = 2$. (2 Punkte)

b) Berechnen Sie die Verteilung der Zufallszahlen dieser Markov-Kette und vergleichen Sie diese Verteilung für verschiedene N-Werte im Bereich $10^3 < N < 10^6$ mit der Gewichtsfunktion $w(x)$. (2 Punkte)

c) Berechnen Sie die Akzeptanzrate als Funktion der maximalen Schrittweite für $N = 10^5$ und $0.1 < h < 4$. (2 Punkte)

d) Was passiert, wenn man die abgelehnten Fälle (also $x_{i+1} = x_i$) aus der Markov-Kette entfernt, d.h. $\{x_i\} \to \{\bar{x}_i\}$? Berechnen Sie dazu wie in Teilaufgabe b) die Verteilung der Folge $\{\bar{x}_i\}$. (1 Punkt)