Übungsaufgaben zur Vorlesung

Computerphysik

apl. Prof. Dr. R. Bulla

SS 2018

Blatt 11: Abgabetermin: Montag, der 09.07.2018, 12:00

Aufgabe 1: Monte-Carlo-Integration

(7 Punkte)

Zu berechnen ist das dreidimensionale Integral

$$I = \int_0^1 \mathrm{d}x \int_0^1 \mathrm{d}y \int_0^1 \mathrm{d}z f(x,y,z) \ , \quad \text{mit } f(x,y,z) = \sin\left(x(y+2z)\right) \ . \qquad (1)$$

In der Monte-Carlo-Integration wird der Integralwert genähert durch

$$\bar{I} = \frac{V}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\vec{r}_i) \ ,$$

mit $\{\vec{r}_i\}$ einer Folge von N zufälligen Punkten im Integrationsvolumen. Für das Integral (1) gilt $V = 1$.

a) Schreiben Sie ein Programm, welches den Näherungswert $\bar{I}$ für $N = 10^4$ berechnet. (3 Punkte)

b) Berechnen Sie die Verteilung der $\bar{I}$-Werte für $N = 1000$, 2000 und 4000 und jeweils $M = 5 \cdot 10^4$ Monte-Carlo-Integrationen. Zerlegen Sie dazu das Intervall $[0.5, 0.6]$ in 50 Teilintervalle und stellen Sie das Ergebnis graphisch dar. (4 Punkte)

Aufgabe 2: Volumen der d-dimensionalen Einheitskugel

(6 Punkte)

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

$$I = \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x_1 \ldots \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x_d \, f(\vec{r}) \ , \quad \text{mit } f(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & : \ |\vec{r}| < 1 \ , \\ 0 & : \ \text{sonst} \ , \end{cases} \qquad (2)$$

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):

$$\bar{I} = \frac{2^d}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\vec{r}_i) \ . \tag{3}$$

In dieser Aufgabe soll untersucht werden, wie die Abweichung $\Delta\bar{I}$ des Integralwerts aus Gl. (3) vom exakten Ergebnis:

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

von der Dimension d und der Zahl der Punkte N abhängt. Dazu wird die mittlere relative Abweichung

$$\Delta_r = \frac{1}{V_{\mathrm{e,d}}} \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} \Delta\bar{I}(m)$$

für M Monte-Carlo-Integrationen berechnet.

Berechnen Sie Δ_r für $M = 2000$ Monte-Carlo-Integrationen für $d = 2, \ldots, 5$ und stellen Sie das Ergebnis im Bereich $1000 < N < 5000$ graphisch dar.

Aufgabe 3: Metropolis-Algorithmus

(9 Punkte)

In dieser Aufgabe soll mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus eine Markov-Kette $\{x_i\}$, $i = 1, \ldots, N$, erzeugt werden, deren Verteilung der Gewichtsfunktion

$$w(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \tag{4}$$

entspricht.

a) Erzeugen Sie zunächst eine Markov-Kette der Länge $N = 10^6$ mit maximaler Schrittweite $h = 2$ und Startwert $x_1 = 0.5$. Berechnen Sie für diese Markov-Kette die Verteilung $\bar{w}(x)$. Zerlegen Sie dazu das Intervall $[-3, 3]$ in 50 Teilintervalle und bestimmen Sie die Anzahl P_j der Zahlen x_i im j-ten Teilintervall. Stellen Sie das Ergebnis zusammen mit $w(x)$ graphisch dar. (5 Punkte)

b) Berechnen Sie die Akzeptanzrate als Funktion der maximalen Schrittweite für $N = 10^5$ und $0.1 < h < 5$ und stellen Sie das Ergebnis graphisch dar. (2 Punkte)

c) 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 a) die Verteilung der Folge $\{\bar{x}_i\}$. (2 Punkte)