Übungsaufgaben zur Vorlesung

Computerphysik

Priv.-Doz. Dr. R. Bulla

SS 2012

Blatt 11: Abgabetermin: Montag, der 02.07.2012, in der Vorlesung; [E-Mails an Tutoren bis 02.07.2012, 12:00]

Aufgabe 1: Volumen der $2n$-dimensionalen Einheitskugel

In Aufgabe 3b von Blatt 10 wurde das Volumen V_{2n} der $2n$-dimensionalen Einheitskugel mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode berechnet. In dieser Aufgabe soll für V_2 und V_4 die Konvergenz dieses Verfahrens mit der Konvergenz der direkten Berechnung der Riemann-Summe verglichen werden.

Der Einfachheit halber werden dazu die Integrationsintervalle $[-1,1]$ auf jeder Achse in N gleiche Teilintervalle der Breite $\frac{2}{N}$ aufgeteilt, und als Stützstellen für die Riemann-Summen jeweils die Mittelpunkte der Teilintervalle gewählt. Für ein eindimensionales Integral erhält man also

$$\int_{-1}^{1} f(x)\mathrm{d}x \approx \frac{2}{N}\sum_{i=0}^{N-1} f\left(-1+(i+\tfrac{1}{2})\tfrac{2}{N}\right) \ .$$

a) Wie lauten die entsprechenden Riemann-Summen für die mehrdimensionalen Integrale V_{2n}?

b) Berechnen Sie numerisch die Riemann-Summen für V_2 und V_4.

c) Untersuchen Sie die Abweichung der numerischen Werte vom exakten Ergebnis, $\Delta I = |I - V_{2n}|$, als Funktion der Integrationspunkte. Was lässt sich damit über die Konvergenz der beiden Verfahren aussagen?

[Abgabe: `v2n.c` per E-Mail an Tutoren] (6 Punkte)

Aufgabe 2: Metropolis-Algorithmus

Gegeben sei die Gewichtsfunktion

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

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 $h = 2$.

b) Berechnen Sie die Verteilung der Zufallszahlen dieser Markov-Kette und zeigen Sie, dass im Limes $N \to \infty$ diese Verteilung tatsächlich die Gewichtsfunktion $w(x)$ ergibt.

c) Berechnen Sie die Akzeptanzrate als Funktion der maximalen Schrittweite für $N = 10^6$ und $0.1 < h < 4$.

[Abgabe: `metropolis1.c` per E-Mail an Tutoren]

(6 Punkte)

Aufgabe 3: Monte-Carlo-Integration mit dem Metropolis-Algorithmus

a) Berechnen Sie mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus das Integral

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} w(x) g(x) \mathrm{d}x \ ,$$

mit der Gewichtsfunktion $w(x)$ aus Gl. (1) und $g(x) = 1 + 0.1 \sin(x)$. [Abgabe: `metropolis2.c` per E-Mail an Tutoren]

b) Berechnen Sie mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus das zweidimensionale Integral

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, f(x,y) \quad \text{mit} \quad f(x,y) = \frac{1}{\pi} e^{-(x^2+y^2)} \ .$$

Für die Aufteilung des Integranden $f(x,y) = w(x,y) g(x,y)$ können Sie $g(x,y) = 1$ setzen. [Abgabe: `metropolis3.c` per E-Mail an Tutoren]

(5 Punkte)