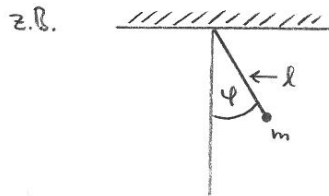


# Vorlesung Computerphysik

→ Lösung physikalischer Probleme mit Hilfe des Computers

genauer: gegeben → ein physikalisches Problem



Pendel variabler Fadenlänge  $l(t)$   
 ↳ sei gegeben

gesucht:  $\psi(t)$

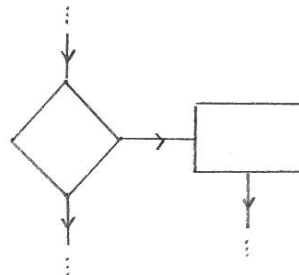
Computerphysik = Lösung der mathematischen Gleichungen, die das physikalische Problem beschreiben ...

hier:

$$\ddot{\psi}(t) + \frac{g}{l(t)} \sin \psi(t) + 2 \frac{\dot{l}(t)}{l(t)} \dot{\psi}(t) = 0$$

→ gewöhnliche Differentialgleichung für  $\psi(t)$

... durch Entwicklung geeigneter Algorithmen ...



... welche mit Hilfe einer Programmiersprache ...

```

:
:
for n = 1:5
    s = s + n
end
:

```

... von einem Computer abgearbeitet werden.

diese Aufgabe ist also folgendermaßen strukturiert:

# 1. mathematische Beschreibung des physikalischen Problems

→ Aufgabe der Vorlesungen Theor. Physik I - IV

- |                      |    |          |
|----------------------|----|----------|
| - klass. Mechanik    | 3. |          |
| - Quantenmechanik    | 4. | Semester |
| - klass. Feldtheorie | 5. |          |
| - stat. Physik       | 5. |          |

## 2. Entwicklung von Algorithmen

z.B.: Lösung der Dgl., d.h. Berechnung von  $\psi(t)$

→ finde eine Lösungsstrategie, bestehend aus wohldefinierten Einzelschritten, die nacheinander ausgeführt werden

⇒ Algorithmus

## 3. Umwandlung Algorithmus → Programtext

dazu benötigen wir eine sog. Programmiersprache

in dieser Vorlesung → Julia

wichtig: Programmierkurs ist Teil dieser Vorlesung!

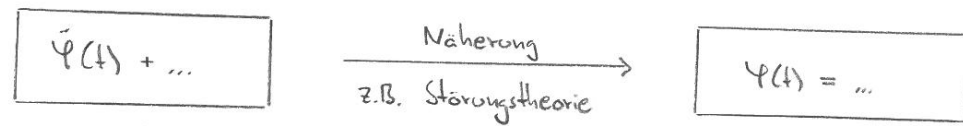
## 4. Ausführen des Programms auf einem Computer

- juliabox.com (Web-Browser)
- Ciplab
- eigener laptop / PC, etc.

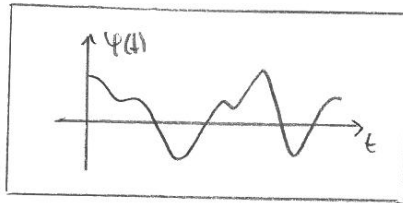
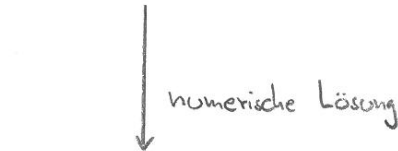
wann ist eine solche 'numerische' Lösung eines physikalischen Problems sinnvoll?

die Ausnahme:  $\ddot{\psi}(t) + \dots$  →  $\psi(t) = \dots$   
 exakte, analytische Lösung

Falls keine analytische Lösung möglich ist:



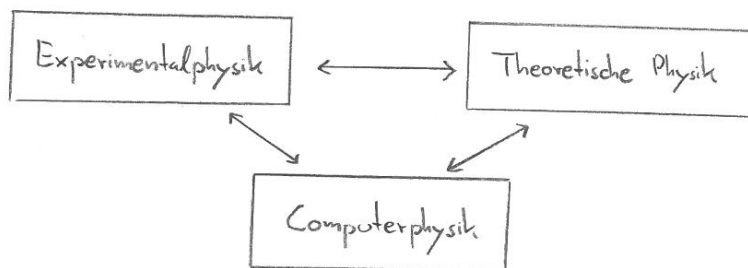
Problem: Gültigkeitsbereich der Näherung



Probleme:

- numerische Fehler
- Systemgröße
- Rechenzeit

Computerphysik als 'dritte Säule' der Physik



Themen dieser Vorlesung:

- Algorithmen
- elementare Programmiertechniken
- Elemente der Programmiersprache Julia

anhand von mathematischen und physikalischen Problemen

# 1. Einführung: (einfache) mathematische Probleme

## 1.1 Berechnung von Summen

zum Einstieg: numerische Berechnung von Summen  $\rightarrow$  for-Schleife

z.B.: 
$$S = \sum_{n=1}^M n \quad \xrightarrow{\text{analytisch}} \quad S = \frac{1}{2} M(M+1)$$

oder 
$$S = \sum_{n=1}^M \sin^2(\sqrt{n}) \quad \rightarrow \text{numerisch}$$

Anwendungen: — Integration: Riemann-Summe

$$S = \sum_i f(x_i) \Delta x_i$$

— Matrix-Operationen: z.B.  $M = AB$

$$\rightarrow M_{ij} = \sum_n A_{in} B_{nj}$$

— statistische Physik (siehe Kap. 4)

$$\text{Mittelwert} = \sum_{\text{alle Konfigurationen}} \dots$$

## 1.2 Umrechnung von Dezimalzahlen in Dualzahlen

die Dezimalzahl 13 lässt sich schreiben als:

$$\begin{aligned} 13 &= 1 + 4 + 8 = 1 \cdot 2^0 + 0 \cdot 2^1 + 1 \cdot 2^2 + 1 \cdot 2^3 \\ &= \sum_{i=1}^4 z_i 2^{i-1} \quad \text{mit} \quad \underbrace{z_1=1, z_2=0, z_3=1, z_4=1}_{\text{die vier Stellen der Dualzahl}} \end{aligned}$$

Schreibweise:

$$[z_n z_{n-1} \dots z_1]_b$$

$b$ : Basis

$$\begin{aligned} [z_4 z_3 z_2 z_1]_2 &= [1101]_2 = [13]_{10} = 3 \cdot 10^0 + 1 \cdot 10^1 \\ &\quad \downarrow \quad \quad \downarrow \\ &\quad \text{Dualzahl} \quad \quad \text{Dezimalzahl} \end{aligned}$$

Dualzahl  $\rightarrow$  Dezimalzahl

berechne

$$M = \sum_{i=1}^n z_i 2^{i-1} = z_1 \cdot 1 + z_2 \cdot 2 + \dots + z_n \cdot 2^{n-1}$$

Dezimalzahl  $\rightarrow$  Dualzahlzunächst: Berechnung der Zahl der Stellen ( $=n$ ) der Dualzahl

es gilt

$$n = \lfloor \lg(M) \rfloor + 1 \quad \text{mit } \lg(x) : \text{Logarithmus zur Basis 2}$$

 $\lfloor x \rfloor$  : Abrundungsfunktion

z.B.:  $M = 8 \rightarrow \lg(8) = 3$

$$\rightarrow n = \underbrace{\lfloor 3 \rfloor}_{=3} + 1 = 4$$

$$[8]_{10} = \underbrace{[1000]_2}_{4 \text{ Stellen}}$$

$M = 7 \rightarrow \lg(7) = 2.807\dots$

$$\rightarrow n = \underbrace{\lfloor 2.807\dots \rfloor}_{=2} + 1 = 3$$

$$[7]_{10} = \underbrace{[111]_2}_{3 \text{ Stellen}}$$

 $\rightarrow$  der Subtraktionsalgorithmus

z.B.  $M = 13 \rightarrow n = 4$

Idee: subtrahiere iterativ  $2^3, 2^2, \dots, 2^0$ 

$$\rightarrow 13 - 2^3 = \boxed{5} \geq 0 \Rightarrow z_4 = 1 : 2^3 \text{ ist in } 13 \text{ enthalten}$$

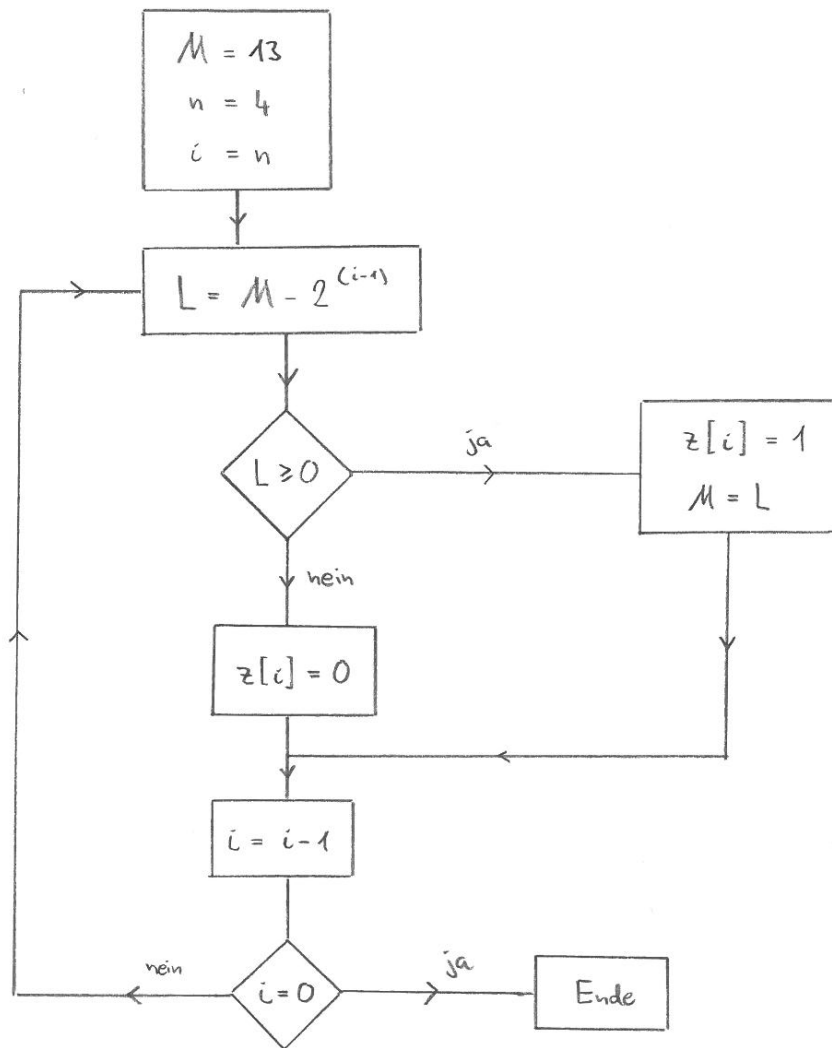
$$\downarrow 5 - 2^2 = \boxed{1} \geq 0 \Rightarrow z_3 = 1$$

$$\downarrow \boxed{1} - 2^1 = -1 < 0 \Rightarrow z_2 = 0 : 2^1 \text{ ist in } 1 \text{ nicht enthalten}$$

$$\downarrow \boxed{1} - 2^0 = 0 \geq 0 \Rightarrow z_1 = 1$$

damit folgt:  $[13]_{10} = [1101]_2$

jetzt: Darstellung des Algorithmus als „Programmablaufplan“  
(auch: „Flussdiagramm“)



### 1.3 Nullstellen

gegeben: eine Funktion  $f(x)$

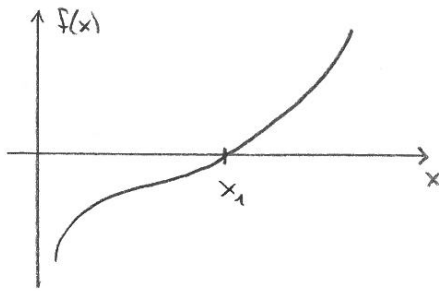
gesucht: die Nullstellen  $x_i$  mit  $f(x_i) = 0$   $i = 1, \dots, N$

Beispiele:

$$\bullet \quad f(x) = x^2 + 3x + 2 = (x+1)(x+2)$$

$$\Rightarrow x_1 = -1, x_2 = -2 \quad \text{analytisch lösbar}$$

•  $f(x) = e^x \ln x - x^2, x > 0$



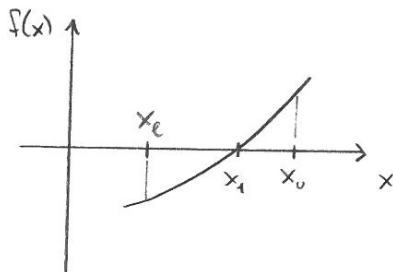
$f(x) = 0 \rightarrow$  lässt sich nicht nach  $x$  auflösen!

numerisch: genau eine Nullstelle im Intervall  $]0, \infty[$

$\rightarrow x_1 = 1.69460...$

### Bisektion (Intervallhalbierungsverfahren)

Annahme: im Intervall  $[x_e, x_u]$  befindet sich genau eine (einfache) Nullstelle



außerdem soll gelten:

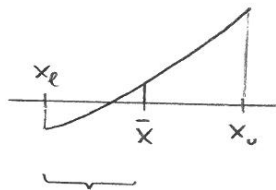
$l$ : lower  
 $u$ : upper

$f(x_e) < 0, f(x_u) > 0$

$\rightarrow$  bilde  $\bar{x} = \frac{1}{2}(x_e + x_u)$  und berechne  $f(\bar{x})$

$\rightarrow$  Fallunterscheidung

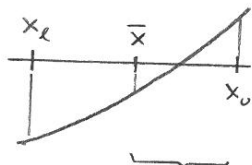
i,  $f(\bar{x}) > 0$



$\Rightarrow x_e \rightarrow x_e$   
 $x_u \rightarrow \bar{x}$

Nullstelle im Intervall  $[x_e, \bar{x}]$

ii,  $f(\bar{x}) < 0$



$\Rightarrow x_e \rightarrow \bar{x}$   
 $x_u \rightarrow x_u$

Nullstelle im Intervall  $[\bar{x}, x_u]$

[iii,  $f(\bar{x}) = 0 \rightarrow$  Nullstelle gefunden, d.h.  $x_1 = \bar{x}$ ]

iteriere dieses Verfahren:

$\bar{x}(i) \rightarrow x_1$   
 $\uparrow$   
 $i$ -te Iteration

## Konvergenz des Bisektions-Verfahrens

numerischer Wert für die Nullstelle nach  $i$  Iterationen:

$$\boxed{x_1(i) = \bar{x}(i) \pm \frac{1}{2} \Delta x(i)} \quad \text{mit dem Fehler } \Delta x(i) = x_u(i) - x_e(i)$$

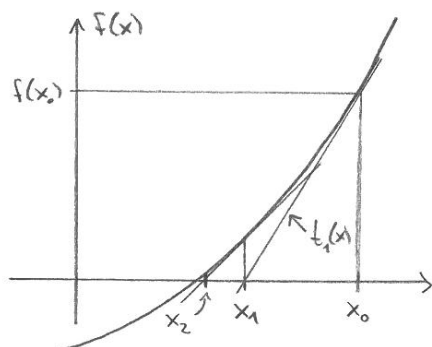
Startwert für den Fehler:  $\Delta x(0) = x_u - x_e$

es gilt:  $\Delta x(i) = \Delta x(0) \cdot 2^{-i} \Rightarrow \lim_{i \rightarrow \infty} \Delta x(i) = 0$

und  $\lim_{i \rightarrow \infty} x_1(i) = x_1$

d.h.: unter den genannten Voraussetzungen konvergiert das Verfahren immer!

## Newton-Verfahren



Startwert:  $x_0$

→ Tangente an die Funktion  $f(x)$  im Punkt  $(x_0, f(x_0))$

$$t_1(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

$x_1$ : Nullstelle von  $t_1(x)$

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

iteriere dieses Verfahren:

→  $t_{n+1}(x)$ : Tangente an die Funktion  $f(x)$  im Punkt  $(x_n, f(x_n))$

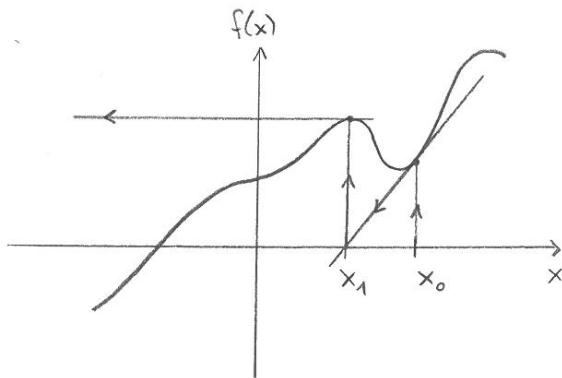
$$t_{n+1}(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n)$$

→  $x_{n+1}$ : Nullstelle von  $t_{n+1}(x)$

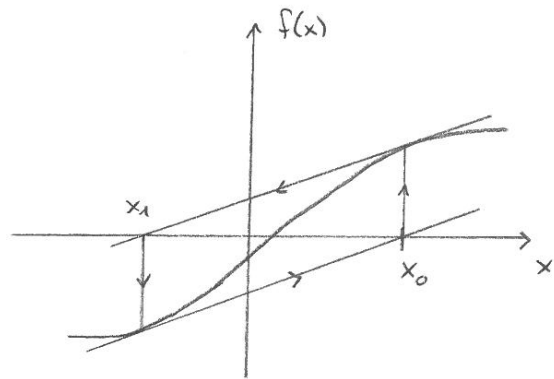
$$\boxed{x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}}$$

Falls das Verfahren konvergiert: wesentlich schnellere Konvergenz  
(im Vergleich zum Bisektions-Verfahren)

aber: Konvergenz ist nicht garantiert!

Beispiele

$f'(x_1)$  sehr klein  $\Rightarrow x_2$  weit außerhalb  
des relevanten Bereichs



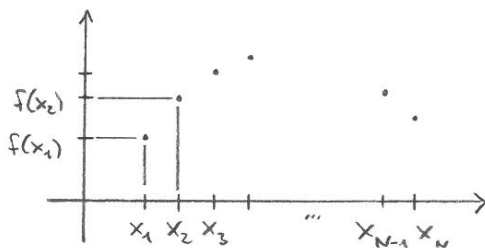
$x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow x_0 \rightarrow x_1$  etc

1.4 Differentiation

gegeben: die Funktion  $f(x)$

a, in analytischer Form, z.B.  $f(x) = \sin(x)$

oder b, tabelliert als Wertepaare  $(x_i, f(x_i))$   $i = 1, 2, \dots, N$



Annahme:  $x_{i+1} - x_i = \Delta x$

unabh. von  $i$

gesucht:  $f'(x)$ : Ableitung der Funktion  $f(x)$

es gilt:

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

Differenzenquotient  $\rightarrow$  Näherung für die  
Ableitung

Vorwärtsdifferenzenquotient

$$f'_v(x_i) = \frac{1}{\Delta x} (f(x_{i+1}) - f(x_i))$$

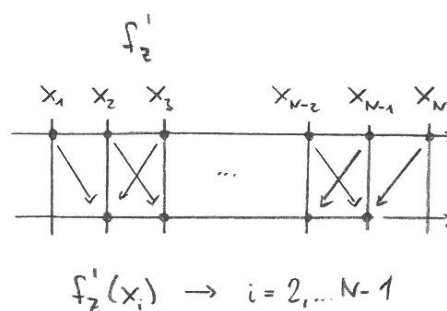
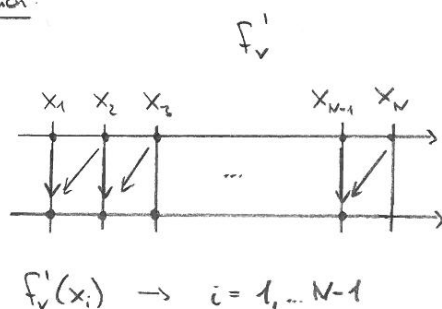
$i = 1, 2, \dots, N-1$

alternativ: 
$$f'(x) = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x}$$

$\Rightarrow$  zentraler Differenzenquotient

$$f'_z(x_i) = \frac{1}{2\Delta x} (f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})))$$

Vergleich:

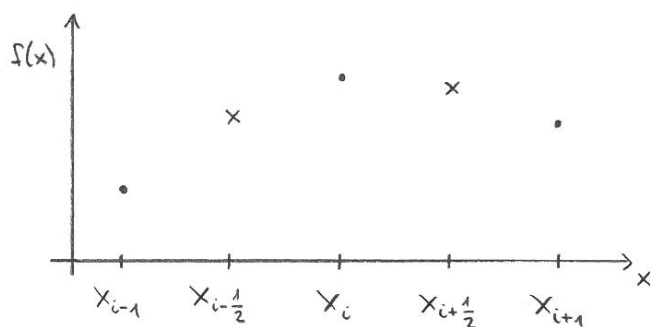


Fehler  $\rightarrow$  Beispiel  $f(x) = x^3$

$$\Rightarrow f'_v(x_i) = 3x_i^2 + 3x_i \Delta x + \dots \quad \text{d.h. Fehler} \propto \Delta x$$

$$f'_z(x_i) = 3x_i^2 + (\Delta x)^2 \quad \text{--- " ---} \propto (\Delta x)^2$$

Näherung für die zweite Ableitung



$$f'_z(x_{i-\frac{1}{2}}) = \frac{1}{\Delta x} (f(x_i) - f(x_{i-1}))$$

$\uparrow$   
zentraler Diff. quotient

$$f'_z(x_{i+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{\Delta x} (f(x_{i+1}) - f(x_i))$$

$$f''_z(x_i) = \frac{1}{\Delta x} (f'_z(x_{i+\frac{1}{2}}) - f'_z(x_{i-\frac{1}{2}}))$$

$\uparrow$   
zentrale Diff. quotient

$$\Rightarrow f''_z(x_i) = \frac{1}{(\Delta x)^2} (f(x_{i+1}) + f(x_{i-1}) - 2f(x_i))$$

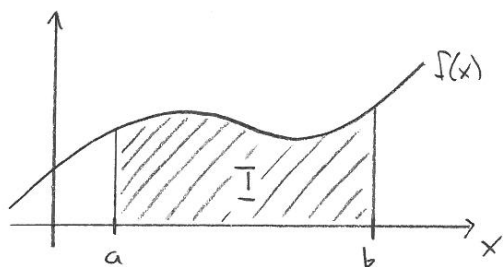
## 1.5 Integration

gegeben: die Funktion  $f(x)$

$a$ , in analytischer Form  $\rightarrow$  Stammfunktion  $F(x)$  jedoch unbekannt

oder  $b$ , tabelliert als Wertepaare  $(x_i, f(x_i)) \quad i=1, 2, \dots, N$

gesucht:



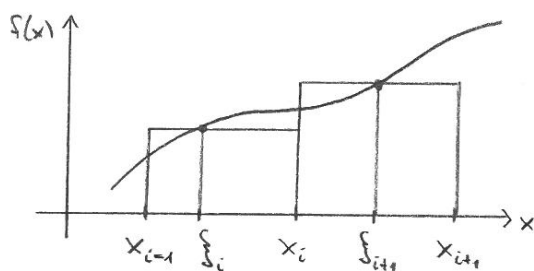
das Integral

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

### Definition des bestimmten Integrals

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{Z \rightarrow \infty} S(Z)$$

$$\text{mit } S(Z) = \underbrace{\sum_i f(\xi_i) \Delta x_i}_{\text{Riemann-Summe}}$$

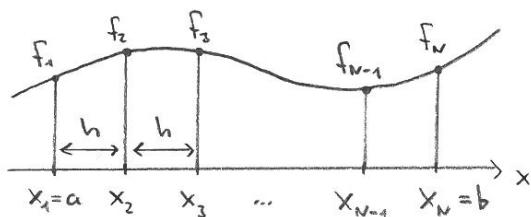


$Z \rightarrow \infty$ : immer feinere Unterteilungen

$$\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$$

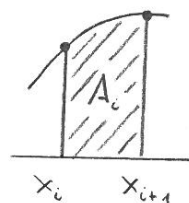
im Folgenden:

- Unterteilung des Intervalls  $[a, b]$  in  $N-1$  gleiche Teile  $\rightarrow \Delta x_i = h$
- verwende die Funktionswerte  $f_i = f(x_i)$  zur numerischen Berechnung des Integrals



$$h = \frac{1}{N-1} (b-a)$$

Strategie: Abschätzung der Teilflächen  $A_i$



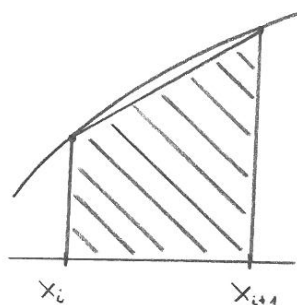
$i = 1, 2, \dots, N-1$

z.B.:  $A_i \rightarrow h f_i$  oder  $A_i \rightarrow h f_{i+1}$

besser:

Trapez-Regel

$$A_i = \frac{1}{2} h (f_i + f_{i+1})$$



$$\Rightarrow \bar{I} = \sum_{i=1}^{N-1} A_i = \frac{1}{2} h f_1 + \frac{1}{2} h f_2 + \frac{1}{2} h f_2 + \dots + \frac{1}{2} h f_N$$

$$\boxed{\bar{I} = \frac{h}{2} (f_1 + f_N) + \sum_{i=2}^{N-1} h f_i}$$

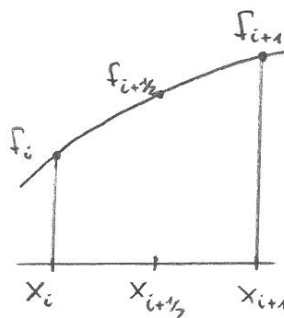
lässt sich schreiben als  $\bar{I} = \sum_{i=1}^N w_i f_i$  mit  $w_1 = w_N = \frac{h}{2}$   
 $w_i = h, \quad i = 2, \dots, N-1$

Fehlerabschätzung

→ Taylor-Entwicklung um den Punkt

$$x_{i+1/2} = x_i + \frac{1}{2} h$$

$$\rightarrow f(x_{i+1/2}) = f_{i+1/2}$$



$$\rightarrow f(x_i + \frac{1}{2} h + \gamma) = f_{i+1/2} + \gamma f'_{i+1/2} + \frac{1}{2} \gamma^2 f''_{i+1/2} + \dots$$

a, Integration der Taylor-Reihe

$$\underbrace{\int_{-h/2}^{h/2} d\gamma f(x_i + \frac{1}{2} h + \gamma)}_{= A_{i, \text{exact}}} = h f_{i+1/2} + \underbrace{\left[ \frac{1}{2} \gamma^2 \right]_{-h/2}^{h/2} f'_{i+1/2}}_{= 0} + \frac{1}{6} \left[ \gamma^3 \right]_{-h/2}^{h/2} f''_{i+1/2} + \dots$$

$$= h f_{i+1/2} + \frac{1}{24} h^3 f''_{i+1/2} + O(h^5)$$

b,  $A_{i, \text{Trapez}} = \frac{1}{2} h (f_i + f_{i+1})$

← ↑  
hier wird die Taylor-Reihe eingesetzt

$$f_i = f_{i+1/2} - \frac{h}{2} f'_{i+1/2} + \frac{1}{2} \left(\frac{h}{2}\right)^2 f''_{i+1/2} + \dots$$

↑  
setze  $y = -\frac{h}{2}$

$$f_{i+1} = f_{i+1/2} + \frac{h}{2} f'_{i+1/2} + \frac{1}{2} \left(\frac{h}{2}\right)^2 f''_{i+1/2} + \dots$$

↑  
setze  $y = +\frac{h}{2}$

$$\Rightarrow A_{i, \text{Trapez}} = h f_{i+1/2} + \frac{1}{8} h^3 f''_{i+1/2} + O(h^5)$$

damit folgt für den Fehler:

$$\Delta A_i = A_{i, \text{Trapez}} - A_{i, \text{exact}} = \underbrace{\left(\frac{1}{8} - \frac{1}{24}\right)}_{= \frac{1}{12}} h^3 f''_{i+1/2} + O(h^5)$$

d.h. Fehler in  $A_i : O(h^3)$

Fehlerabschätzung für das gesamte Integral

$$\begin{aligned} \underline{I} = \sum_{i=1}^{N-1} A_i &\Rightarrow \Delta \underline{I} = \sum_{i=1}^{N-1} \Delta A_i \\ &= \frac{1}{12} h^3 \sum_{i=1}^{N-1} f''_{i+1/2} + \dots \\ &= (N-1) \underbrace{\langle f'' \rangle}_{\text{Mittelwert der zweiten Ableitungen}} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Delta \underline{I} = \frac{1}{12} h^2 \underbrace{h(N-1)}_{= (b-a)} \langle f'' \rangle + \dots$$

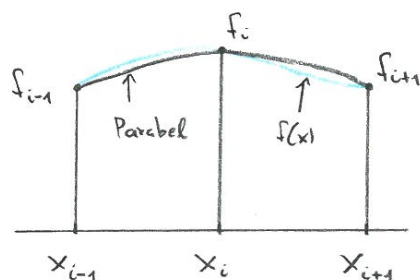
$$= \frac{1}{12} (b-a) \langle f'' \rangle h^2 + \dots$$

das bedeutet: Fehler der Integralberechnung mit der Trapezregel  $\rightarrow O(h^2)$

Simpson-Regel

Idee: Approximation der Funktion  $f(x)$  im Intervall  $[x_{i-1}, x_{i+1}]$  durch eine Parabel

$$\bar{f}(x_i + y) = f_i + ay + by^2$$



Annahme: gerade Anzahl an Intervallen  
d.h.  $N-1$  gerade

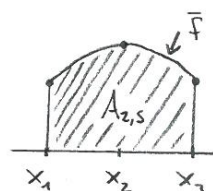
$$i = 2, 4, \dots, N-1$$

es soll gelten:  $\bar{f}(x_i + h) = f_i + ah + bh^2 = f_{i+1}$

$$\bar{f}(x_i - h) = f_i - ah + bh^2 = f_{i-1}$$

$$\Rightarrow b = \frac{1}{2h^2} (f_{i+1} + f_{i-1} - 2f_i)$$

$$\begin{aligned} A_{i, \text{Simpson}} &= \int_{-h}^h dy \bar{f}(x_i + y) \\ &= \frac{h}{3} (f_{i-1} + f_{i+1} + 4f_i) \end{aligned}$$



$$\Rightarrow \boxed{I = \sum_{\substack{i=2 \\ i \text{ gerade}}}^{N-1} A_{i, \text{Simpson}} = \frac{h}{3} \left( f_1 + f_N + 4 \sum_{\substack{i=2 \\ i \text{ gerade}}}^{N-1} f_i + 2 \sum_{\substack{i=3 \\ i \text{ ungerade}}}^{N-2} f_i \right)}$$

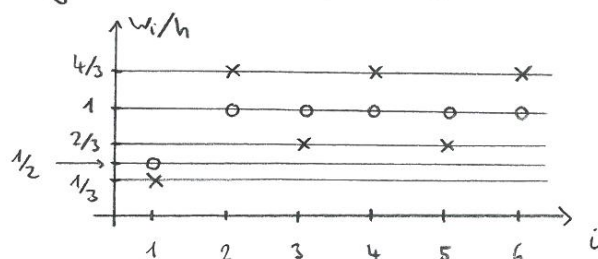
auch hier:  $I = \sum_{i=1}^N w_i f_i$  mit den Gewichten

$$w_1 = w_N = \frac{1}{3} h$$

$$w_i = \frac{4}{3} h \quad i = 2, 4, \dots, N-1$$

$$w_i = \frac{2}{3} h \quad i = 3, 5, \dots, N-2$$

Vergleich mit der Trapez-Regel:



O : Trapez

x : Simpson

## 2. Differentialgleichungen

### 2.1 gewöhnliche Differentialgleichungen

zunächst: Dgl. 1. Ordnung

$$\text{allg.: } \dot{x}(t) = f(x, t)$$

$f$ : beliebige Funktion von  $x$  und  $t$

z.B.:  $\boxed{\dot{x}(t) = a x(t)} \quad (*)$

gesucht: die Lösung der Dgl:  $x(t)$

→ hier für diskrete Werte  $t_i = i \Delta t \quad i = 1, 2, \dots$

$$x(t_i) = x_i$$

→ Näherung der Ableitung als Vorwärtsdifferenzenquotient:

$$\boxed{\dot{x}(t_i) = \frac{1}{\Delta t} (x(t_{i+1}) - x(t_i)) = \frac{1}{\Delta t} (x_{i+1} - x_i)}$$

Dgl. (\*) für  $t = t_i$ :  $\dot{x}(t_i) = a x_i$

$$\Rightarrow \frac{1}{\Delta t} (x_{i+1} - x_i) = a x_i$$

$$\boxed{x_{i+1} = x_i + \Delta t a x_i}$$

→ Euler-Methode

$$\text{allg.: } x_{i+1} = x_i + \Delta t f(x_i, t_i)$$

- Dgl. als Anfangswertproblem, d.h.  $x(t=0) = x_0$  vorgegeben
- bestimme iterativ die Funktionswerte  $x_i$ :

$$x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow \dots$$

in diesem Beispiel:

$$x_{i+1} = (1 + \Delta t a) x_i \quad \Rightarrow \quad x_i = x_0 (1 + \Delta t a)^i$$

für  $t = N \Delta t$ :

$$x(t) = x_0 \left(1 + \frac{ta}{N}\right)^N$$

im Limes  $\Delta t \rightarrow 0$ :

$$x(t) = x_0 \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{ta}{N}\right)^N = x_0 e^{at} \quad \checkmark$$

### Euler-Methode für gekoppelte Dgl. 1. Ordnung

$$x(t) \longrightarrow \vec{x}(t) = \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \\ \vdots \\ x_n(t) \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} \dot{x}_1(t) &= f_1(\vec{x}, t) \\ \dot{x}_2(t) &= f_2(\vec{x}, t) \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$\boxed{\dot{\vec{x}}(t) = \vec{f}(\vec{x}, t)} \quad \vec{f}(\vec{x}, t) = \begin{pmatrix} f_1(\vec{x}, t) \\ \vdots \\ f_n(\vec{x}, t) \end{pmatrix}$$

Euler-Methode:  $\dot{\vec{x}}(t_i) = \frac{1}{\Delta t} (\vec{x}_{i+1} - \vec{x}_i)$

$$\Rightarrow \boxed{\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i + \Delta t \vec{f}(\vec{x}_i, t_i)}$$

### Differentialgleichungen höherer Ordnung

$$\boxed{\frac{d^M}{dt^M} x(t) = g(x(t), \dot{x}(t), \dots, \frac{d^{M-1}}{dt^{M-1}} x(t), t)} \quad (*)$$

→ lässt sich auf ein System von  $M$  gekoppelten Dgl. 1. Ordnung abbilden!

### Substitution:

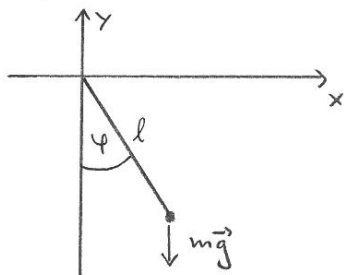
$$\begin{aligned} u_1(t) &= x(t) & \longrightarrow & \frac{d}{dt} u_1(t) = u_2(t) \\ u_2(t) &= \dot{x}(t) & \longrightarrow & \frac{d}{dt} u_2(t) = u_3(t) \\ &\vdots & & \vdots \\ u_{M-1}(t) &= \frac{d^{M-2}}{dt^{M-2}} x(t) & \longrightarrow & \frac{d}{dt} u_{M-1}(t) = u_M(t) \\ u_M(t) &= \frac{d^{M-1}}{dt^{M-1}} x(t) & \longrightarrow & \frac{d}{dt} u_M(t) = g(u_1(t), u_2(t), \dots, u_M(t), t) \\ & & & \uparrow \\ & & & (*) \end{aligned}$$

$$\rightarrow \vec{u}(t) = \begin{pmatrix} u_1(t) \\ u_2(t) \\ \vdots \\ u_M(t) \end{pmatrix}, \quad \vec{f}(\vec{u}, t) = \begin{pmatrix} u_2(t) \\ u_3(t) \\ \vdots \\ u_M(t) \\ g(\vec{u}(t), t) \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \boxed{\dot{\vec{v}}(t) = \vec{F}(\vec{v}, t)}$$

Euler-Methode  $\rightarrow \vec{v}_{i+1} = \vec{v}_i + \Delta t \vec{F}(\vec{v}_i, t_i)$

Beispiel: ebenes Pendel



Bewegungsgleichung:

$$\boxed{\ddot{\psi}(t) + \frac{g}{l(t)} \sin \psi(t) + 2 \frac{\dot{l}(t)}{l(t)} \dot{\psi}(t) = 0}$$

setze  $u_1(t) = \psi(t)$

$u_2(t) = \dot{\psi}(t)$

$\Rightarrow$

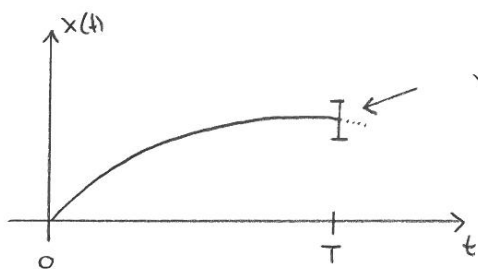
$$\frac{d}{dt} u_1(t) = u_2(t)$$

$$\frac{d}{dt} u_2(t) = -\frac{g}{l(t)} \sin(u_1(t)) - 2 \frac{\dot{l}(t)}{l(t)} u_2(t)$$

Euler-Methode (hier für  $\dot{l}(t) = 0$ )

$$\boxed{\begin{pmatrix} u_{1,i+1} \\ u_{2,i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{1,i} \\ u_{2,i} \end{pmatrix} + \Delta t \begin{pmatrix} u_{2,i} \\ -\frac{g}{l} \sin(u_{1,i}) \end{pmatrix}}$$

Fehler der Euler-Methode



wie groß ist der Fehler zur Zeit T?

setze  $\Delta t = \frac{T}{N}$

zunächst für einen Iterationsschritt:

$\rightarrow$  Taylor-Entwicklung  $x_{i+1} = x(t_i + \Delta t)$

$$= x_i + \underbrace{\Delta t \dot{x}(t_i)}_{\text{siehe Dgl}} + \underbrace{\frac{1}{2} (\Delta t)^2 \ddot{x}(t_i)}_{\text{Fehler}} + \dots$$

$\hat{=}$  Euler-Methode

$\Rightarrow$  Fehler nach einer Iteration :  $\propto (\Delta t)^2$

$$\text{nach } N \text{ Iterationen : } \propto N(\Delta t)^2 = \underbrace{N \Delta t}_{=T} \Delta t$$

d.h. Fehler zur Zeit  $T$  :  $\propto T \Delta t$

Verbesserung : z.B. Runge-Kutta-Verfahren  $\rightarrow$  Fehler  $\propto T(\Delta t)^2, T(\Delta t)^3, \dots$

### Runge-Kutta-Verfahren

hier für  $\dot{x}(t) = f(x, t)$

Taylor-Reihe :  $x_{i+1} = x_i + \Delta t \underbrace{f(x_i, t_i)}_{=f_i} + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \ddot{x}(t_i) + \dots$

dabei gilt :  $\ddot{x}(t_i) = \left[ \frac{d}{dt} \dot{x}(t) \right]_{t_i} = \left[ \frac{d}{dt} f(x, t) \right]_{t_i}$

$$= \left[ \underbrace{\frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt}}_{=f} + \frac{\partial f}{\partial t} \right]_{t_i} = f_i \left[ \frac{\partial f}{\partial x} \right]_{t_i} + \left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_{t_i}$$

$$\Rightarrow x_{i+1} = x_i + \Delta t f_i + \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \left( f_i \left[ \frac{\partial f}{\partial x} \right]_{t_i} + \left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_{t_i} \right) + \dots \quad (*)$$

### Ansatz:

$$x_{i+1} = x_i + \alpha_1 \Delta t f_i + \alpha_2 \Delta t f(x_i + \beta_2 \Delta t f_i, t_i + \beta_1 \Delta t) \quad (**)$$

bestimme die Parameter  $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$  so, dass Gl. (\*\*) bis zur Ordnung  $(\Delta t)^2$  mit Gl. (\*) übereinstimmt.

$\rightarrow$  Taylor Entwicklung von  $f(x_i + \dots, t_i + \dots)$  in Gl. (\*\*)

$$f(x_i + \beta_2 \Delta t f_i, t_i + \beta_1 \Delta t) = \underbrace{f(x_i, t_i)}_{=f_i} + \left[ \frac{\partial f}{\partial x} \right]_{t_i} \beta_2 \Delta t f_i + \left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_{t_i} \beta_1 \Delta t + \dots$$

Einsetzen in (\*\*) und Koeffizientenvergleich mit (\*) ergibt :

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 + \alpha_2 &= 1 \\ \alpha_2 \beta_2 &= \frac{1}{2} \\ \alpha_2 \beta_1 &= \frac{1}{2} \end{aligned} \right\} \quad \begin{aligned} &\text{drei Gleichungen für vier Unbekannte} \rightarrow \text{setze } \alpha_1 = \frac{1}{2} \\ &\Rightarrow \alpha_2 = \frac{1}{2}, \beta_1 = \beta_2 = 1 \end{aligned}$$

Einsetzen in (\*\*) ergibt:

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{2} \Delta t f_i + \frac{1}{2} \Delta t f(x_i + \Delta t f_i, t_i + \Delta t)$$

zum Vergleich: Euler-Methode

$$\rightarrow x_{i+1} = x_i + \Delta t f_i$$

↳ Runge-kutta bis Ordnung  $(\Delta t)^2$

Wie sieht die Iteration aus?

Euler:

$$\begin{aligned} f_i &= f(x_i, t_i) \\ x_{i+1} &= x_i + \Delta t f_i \\ t_{i+1} &= t_i + \Delta t \\ &\vdots \end{aligned}$$

R-k (Ordnung  $(\Delta t)^2$ ):

$$\begin{aligned} f_i &= f(x_i, t_i) \\ a &= f(x_i + \Delta t f_i, t_i + \Delta t) \\ x_{i+1} &= x_i + \frac{1}{2} \Delta t f_i + \frac{1}{2} \Delta t a \\ t_{i+1} &= t_i + \Delta t \end{aligned}$$

das bedeutet: eine kleine Änderung im Programm ergibt einen Faktor  $\Delta t$  in der Genauigkeit!

jetzt: Runge-kutta für gekoppelte Dgl (ohne Herleitung)

Euler:  $\vec{v}_{i+1} = \vec{v}_i + \Delta t \vec{F}(\vec{v}_i, t_i)$

R-k bis Ordnung  $(\Delta t)^2$ :

$$\vec{v}_{i+1} = \vec{v}_i + \frac{1}{2} \Delta t \vec{F}(\vec{v}_i, t_i) + \frac{1}{2} \Delta t \vec{F}(\vec{v}_i + \Delta t \vec{F}(\vec{v}_i, t_i), t_i + \Delta t)$$

analog: Runge-kutta bis Ordnung  $(\Delta t)^3, (\Delta t)^4, \dots$

$(\Delta t)^4 \rightarrow$  berechne:

$$\begin{aligned} c_1 &= \Delta t f(x_i, t_i) \\ c_2 &= \Delta t f(x_i + \frac{1}{2} c_1, t_i + \frac{1}{2} \Delta t) \\ c_3 &= \Delta t f(x_i + \frac{1}{2} c_2, t_i + \frac{1}{2} \Delta t) \\ c_4 &= \Delta t f(x_i + c_3, t_i + \Delta t) \end{aligned}$$

$$\rightarrow \boxed{x_{i+1} = x_i + \frac{1}{6} (c_1 + 2c_2 + 2c_3 + c_4)}$$

### Differentialgleichungen in der Quantenmechanik

die zeitabhängige Schrödingergleichung:

$$\boxed{\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right] \bar{\psi}(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \underbrace{\bar{\psi}(\vec{r}, t)}_{\text{Wellenfunktion}}}$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$\rightarrow$  partielle Dgl (wird später behandelt)

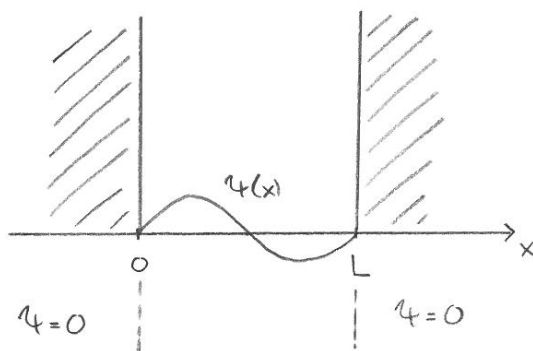
speziell: zeitunabhängiges Potential, Dimension = 1

$\Rightarrow$  die „stationäre“ Schrödingergleichung hat die folgende Form

$$\boxed{\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x)} \quad \rightarrow \text{gewöhnliche Dgl 2. Ordnung für } \psi(x)$$

Beispiel: Teilchen im unendlich hohen Potentialtopf

$$\rightarrow V(x) = \begin{cases} 0 & : 0 < x < L \\ \infty & : \text{sonst} \end{cases}$$



$$\text{Randbedingungen: } \psi(0) = 0 \\ \psi(L) = 0$$

$\hookrightarrow$  in diesem Bereich gilt die SG für  $V=0$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) = E \psi(x)$$

$$\psi''(x) = -\alpha \psi(x)$$

$$\text{mit } \alpha = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Substitution:

$$\begin{aligned}
 \psi_1(x) &= \psi(x) & \rightarrow & \quad \frac{d}{dx} \psi_1(x) = \psi_2(x) \\
 \psi_2(x) &= \psi'(x) & \rightarrow & \quad \frac{d}{dx} \psi_2(x) = \psi_1''(x) = -\alpha \psi_1(x)
 \end{aligned}$$

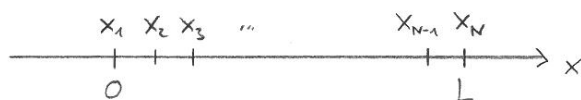
$$\rightarrow \boxed{\frac{d}{dx} \vec{\psi}(x) = \begin{pmatrix} \psi_2(x) \\ -\alpha \psi_1(x) \end{pmatrix} = \vec{g}(\vec{\psi}, x)}$$

↳ Ausgangspunkt für das Euler- bzw. Runge-Kutta-Verfahren

Startwerte:  $\psi_1(0) = \psi_{1,1} = 0$   $(\psi_{j,i} = \psi_j(x_i))$   
 $\psi_2(0) = \psi_{2,1}$  beliebig

aber: wie erfüllt man die Randbedingung bei  $x=L$ ?

Diskretisierung der  $x$ -Werte



$$\rightarrow x_1 = 0, \quad x_N = L, \quad x_i = \frac{i-1}{N-1} L, \quad i = 1, 2, \dots, N$$

$$\psi(L) = 0 \quad \hat{=} \quad \psi_1(x_N) = \psi_{1,N} = 0$$

analytische Lösung der stationären SG (ohne Herleitung)

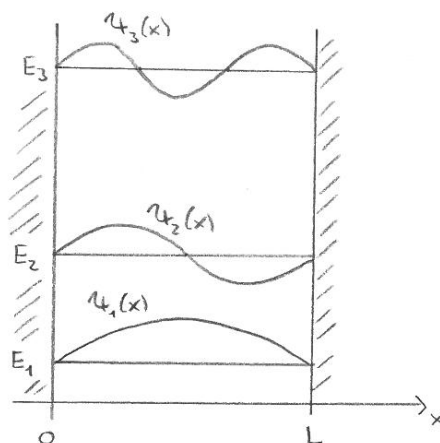
→ Quantisierung!  $H\psi_n(x) = E_n \psi_n(x) \quad n = 1, 2, 3, \dots$

mit den normierten Eigenfunktionen:

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{1}{L} n\pi x\right) & : 0 < x < L \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases}$$

und den Energieeigenwerten

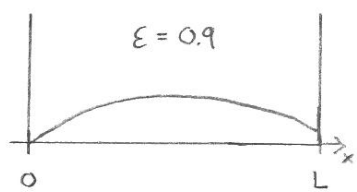
$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$



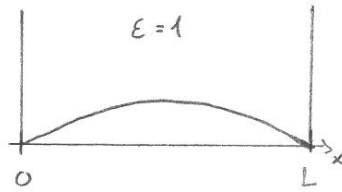
Für die numerische Lösung bedeutet das:

→ Finde die Energiewerte  $E$ , für die die Iteration ergibt:  $\psi(L) = 0$

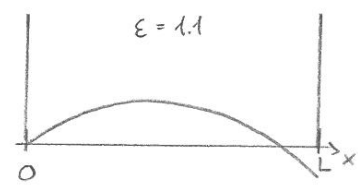
mit  $\epsilon = E \cdot \frac{2mL^2}{\hbar^2 \pi^2}$



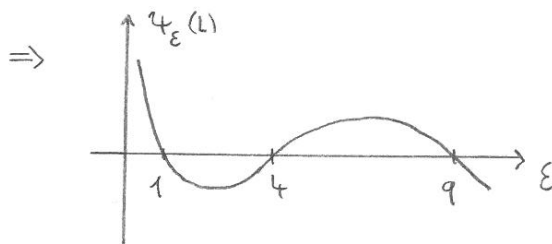
$$\psi(L) > 0$$



$$\psi(L) = 0$$



$$\psi(L) < 0$$

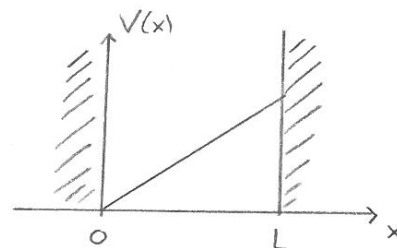


→ Nullstellensuche (z.B. Bisektion)  
ergibt das Spektrum der Eigenenergien

Vorteil des numerischen Verfahrens

→ anwendbar für beliebige  
 $V(x)$  innerhalb des Potentialtopfs

z.B.:



## 2.2 partielle Differentialgleichungen

Beispiel: Diffusionsgleichung (Wärmeleitungsgleichung) für die Temperaturverteilung  $u(\vec{r}, t)$

in  $d=3$

$$\frac{\partial}{\partial t} u(\vec{r}, t) = \Delta u(\vec{r}, t)$$

mit  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$

speziell in  $d=1$ :

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t)$$

gesucht:  $u(x, t)$

analytische Lösung → Separation der Variablen

Diskretisierung (von Ort und Zeit)

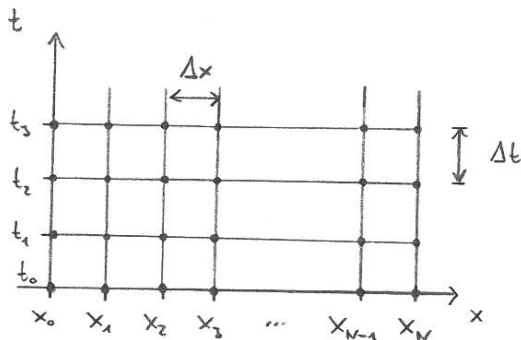
mit der Einschränkung  $0 \leq x \leq L$ ,  $t \geq 0$

$$\rightarrow x_i = i \cdot \Delta x \quad \text{mit} \quad i = 0, 1, \dots, N, \quad x_0 = 0$$

$$x_N = \underbrace{N \cdot \Delta x = L}_{\Delta x = \frac{L}{N}}$$

$$t_j = j \cdot \Delta t \quad \text{mit} \quad j = 0, 1, \dots$$

d.h.,  $u(x, t)$  ist definiert auf einem zweidimensionalen Netz  $u(x_i, t_j) = u_{i,j}$



Randbedingungen:

$$\left. \begin{aligned} u(x=0, t) &= u_l \\ u(x=L, t) &= u_r \end{aligned} \right\} \text{ für alle } t > 0$$

$$\hat{=} u_{0,j} = u_l, \quad u_{N,j} = u_r \quad \text{für } j = 0, 1, 2, \dots$$

Anfangsbedingungen:

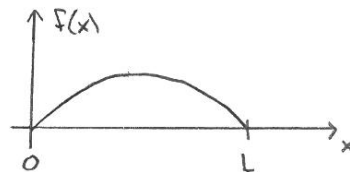
$$u(x, t=0) = f(x) \quad \text{ist vorgegeben}$$

$$\hat{=} u_{i,0} = f(x_i) = f_i, \quad i = 1, 2, \dots, N-1$$

Beispiel:

$$u_l = u_r = 0$$

$$f(x) = \sin\left(\pi \frac{x}{L}\right)$$



jetzt  $\rightarrow$  Diskretisierung der Ableitungen

FTCS - Verfahren (forward time, centered space)

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) \Big|_{x_i, t_j} \rightarrow \frac{1}{\Delta t} (u_{i,j+1} - u_{i,j}) : \text{I} \quad (\text{siehe Euler-Methode})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) \Big|_{x_i, t_j} \rightarrow \frac{1}{(\Delta x)^2} (u_{i+1,j} + u_{i-1,j} - 2u_{i,j}) : \text{II}$$

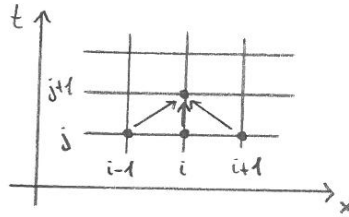
$$\text{I} = \text{II} \quad \text{und} \quad \text{Auflösen nach } u_{i,j+1}$$

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (u_{i+1,j} + u_{i-1,j} - 2u_{i,j})$$

$$i = 1, 2, \dots, N-1$$

$$j = 0, 1, \dots$$

Struktur der Rekursion:



Problem: die Rekursion ist nur stabil für

$$\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} < \frac{1}{2}$$

Hinweis: analytische Lösung für  $f(x) = \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$

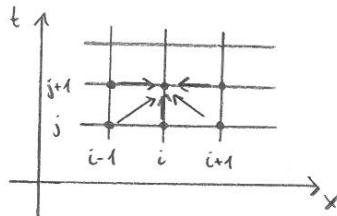
$$u(x,t) = \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \exp\left(-\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 t\right)$$

Crank - Nicholson - Verfahren

stabil auch für  $\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \geq \frac{1}{2}$

$$\text{Idee: } \left. \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x,t) \right|_{x_i, t_j} \longrightarrow \frac{1}{2} \left[ \left. \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x,t) \right|_{x_i, t_{j+1}} + \left. \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x,t) \right|_{x_i, t_j} \right]$$

Struktur der Rekursion



erfordert die Lösung  
eines linearen Gleichungssystems

Übersicht: Methoden zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

in  $d=1$ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi}(x,t) = H \bar{\psi}(x,t)$$

A, Differenzenverfahren

→ FTCS für  $V(x)=0 \leadsto H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$  (setze  $\hbar=1, m=1$ )

$$\bar{\psi}_{i,j+1} = \bar{\psi}_{i,j} + \frac{i}{2} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (\bar{\psi}_{i+1,j} + \bar{\psi}_{i-1,j} - 2\bar{\psi}_{i,j})$$

### B. Separation der Variablen

für  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ , d.h.  $V(x)$  zeitunabhängig

$\Rightarrow$  die allgemeine Lösung der zeitabh. SG lässt sich schreiben als:

$$\bar{\psi}(x,t) = \sum_n C_n \psi_n(x) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right)$$

mit  $E_n, \psi_n(x)$  aus der Lösung der zeitunabh. SG  $\rightarrow H\psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$

### Anfangsbedingung

$\bar{\psi}(x,t=0) = f(x)$  ist vorgegeben  $\Rightarrow f(x) = \sum_n C_n \psi_n(x)$

$\rightarrow$  Bestimmung der Koeffizienten  $C_n$ :

$$\begin{aligned} \text{bilde } \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^*(x) f(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^*(x) \sum_n C_n \psi_n(x) \\ &= \sum_n C_n \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_m^*(x) \psi_n(x)}_{= \langle m|n \rangle \stackrel{!}{=} \delta_{mn}} = C_m \end{aligned}$$

### C. Abbildung auf ein Matrix-Problem

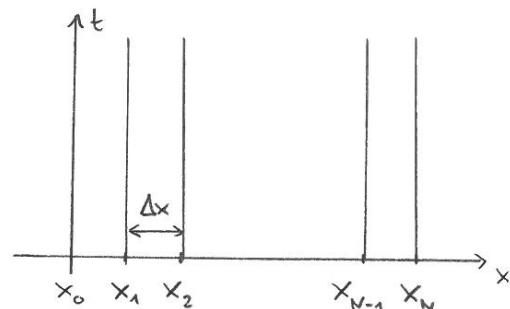
Diskretisierung der Ortskoordinate (wie zuvor)

$$x_i = i \Delta x, \quad i = 0, 1, \dots, N, \quad x_0 = 0 \\ x_N = N \Delta x = L$$

aber: die Zeit wird nicht diskretisiert

$$\text{d.h. } \psi(x,t) \rightarrow \psi(x_i, t) = \psi_i(t)$$

$\psi_i(t)$  definiert für alle  $t$



Schrödingergleichung für  $x = x_i$ :

$$\boxed{H \psi(x,t) \Big|_{x=x_i} = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \Big|_{x=x_i}} \quad (*)$$

linke Seite:

$$\begin{aligned}
 \hbar \psi(x_i, t) \Big|_{x=x_i} &= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) \Big|_{x=x_i}}_{\downarrow} + \underbrace{V(x) \psi(x, t) \Big|_{x=x_i}}_{= V(x_i) \psi_i(t)} \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(\Delta x)^2} (\psi_{i+1}(t) + \psi_{i-1}(t) - 2\psi_i(t)) \\
 &\rightarrow \text{Diskretisierung der zweiten Ableitung}
 \end{aligned}$$

rechte Seite:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_i, t) \Big|_{x=x_i} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_i(t)$$

→ schreibe Gl. (\*) für  $i=1, 2, \dots, N-1$  als lineares Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}
 i=1 : & \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(\Delta x)^2} (\psi_2(t) + \psi_0(t) - 2\psi_1(t)) + V(x_1) \psi_1(t) = i\hbar \dot{\psi}_1(t) \\
 & \quad \vdots \\
 i=N-1 : & \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(\Delta x)^2} (\psi_N(t) + \psi_{N-2}(t) - 2\psi_{N-1}(t)) + V(x_{N-1}) \psi_{N-1}(t) = i\hbar \dot{\psi}_{N-1}(t) \quad (**)
 \end{aligned}$$

Randbedingungen:  $\psi_0(t) = 0$ ,  $\psi_N(t) = 0$  für alle  $t$

→ schreibe  $\vec{\psi}(t) = \begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \vdots \\ \psi_{N-1}(t) \end{pmatrix}$

⇒ Gl. (\*\*) lässt sich schreiben als:

$$M \vec{\psi}(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \vec{\psi}(t)$$

mit der Matrix

$$M = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & \dots \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ & & \ddots & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V(x_1) & & & 0 \\ & V(x_2) & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & V(x_{N-1}) \end{pmatrix}$$

Tridiagonalmatrix

$$\Rightarrow \vec{\psi}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} M t} \vec{\psi}(0)$$

→ erfordert die Berechnung von  $\exp(\text{Matrix})!$

## Relaxationsmethode

ein Beispiel aus der Elektrodynamik:

Poisson-Gleichung:

$$\Delta \Phi(\vec{r}) = -4\pi \rho(\vec{r})$$

$\rho(\vec{r})$ : Ladungsdichte (gegeben)

$\Phi(\vec{r})$ : elektrostatisches Potential (gesucht)

hier für  $d=2$ :

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Phi(x,y) = -4\pi \rho(x,y)$$

Diskretisierung:  $x_i = i \Delta x$ ,  $y_j = j \Delta y$   $\rightarrow$  setze  $\Delta x = \Delta y$

$$\rightarrow \Phi(x_i, y_j) = \Phi_{i,j} ; \rho(x_i, y_j) = \rho_{i,j}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{(\Delta x)^2} (\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1} - 4\Phi_{i,j}) = -4\pi \rho_{i,j}$$

Auflösen nach  $\Phi_{i,j}$ :

$$\Phi_{i,j} = \pi (\Delta x)^2 \rho_{i,j} + \frac{1}{4} (\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1})$$

Strategie:

$\rightarrow$  starte mit einem Potential  $\Phi_{i,j}^{(k=0)}$  (Randbedingungen beachten)

$\rightarrow$  bestimme  $\Phi_{i,j}^{(k)}$  iterativ:

$$\Phi_{i,j}^{(k+1)} = p \left[ \pi (\Delta x)^2 \rho_{i,j} + \frac{1}{4} (\Phi_{i+1,j}^{(k)} + \Phi_{i-1,j}^{(k)} + \Phi_{i,j+1}^{(k)} + \Phi_{i,j-1}^{(k)}) \right] + (1-p) \Phi_{i,j}^{(k)}$$

d.h. alte und neue Lösung werden gemischt

$0 < p < 1$ ;  $p$  bestimmt die Konvergenzgeschwindigkeit

$\rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} \Phi_{i,j}^{(k)}$ : die Lösung der Poisson-Gleichung

### 3. Lineare Algebra

#### 3.1 Gauß-Verfahren (gaußsches Eliminationsverfahren)

→ lineares Gleichungssystem:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2$$

⋮

$$a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m$$

in Matrixschreibweise:

$$\boxed{A \vec{x} = \vec{b}}$$

mit der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

gegeben:  $A, \vec{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$

gesucht:  $\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$

Gauß-Verfahren = iteratives Verfahren zur Berechnung des Vektors  $\vec{x}$

Beispiel: ( $N=2$ )

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{I: } x_1 + x_2 = 1 \\ \text{II: } 2x_1 - 2x_2 = 3 \end{array}}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -2 \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Teil 1: bilde  $\text{II}^{(1)}: \text{II} - 2 \cdot \text{I} \rightarrow \underbrace{2x_1 - 2x_2 - 2(x_1 + x_2)}_{= -4x_2} = 3 - 2$

das Gleichungssystem hat dann die Form:

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{I: } x_1 + x_2 = 1 \\ \text{II}^{(1)}: -4x_2 = 1 \end{array}}$$

→ die Variable  $x_1$  wurde eliminiert!

$$\hookrightarrow \hat{=} A^{(1)} \vec{x} = \vec{b}^{(1)} \quad \text{mit} \quad A^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -4 \end{pmatrix}, \quad \vec{b}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Teil 2: aus  $\text{II}^{(1)}$  folgt:  $x_2 = -\frac{1}{4}$

Einsetzen in I:  $x_1 - \frac{1}{4} = 1 \Rightarrow x_1 = \frac{5}{4}$

$$\Rightarrow \vec{x} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 5 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Für den allgemeinen Fall

→ Sequenz von Transformationen des Gleichungssystems

$$\begin{array}{lcl} A \vec{x} = \vec{b} & \hat{=} & A^{(0)} \vec{x} = \vec{b}^{(0)} \quad \rightarrow \text{Matrizelemente } a_{ij}^{(0)} \\ & \downarrow & \downarrow \\ & A^{(1)} \vec{x} = \vec{b}^{(1)} & a_{ij}^{(1)} \\ & \downarrow & \downarrow \\ & \vdots & \vdots \\ & A^{(N-1)} \vec{x} = \vec{b}^{(N-1)} & a_{ij}^{(N-1)} \end{array}$$

das Ergebnis dieser Transformationen ist eine obere Dreiecksmatrix:

$$A^{(N-1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(N-1)} & a_{12}^{(N-1)} & \dots & a_{1N}^{(N-1)} \\ & a_{22}^{(N-1)} & \dots & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & a_{NN}^{(N-1)} \end{pmatrix} \quad \text{d.h. } a_{ij}^{(N-1)} = 0 \text{ für } i > j$$

Teil 1:

1. Schritt:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}}_{A^{(0)}} \rightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}}_{A^{(1)}}$$

→ von den Zeilen  $i = 2, 3, \dots, N$  wird das  $\frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}$ -fache der ersten Zeile abgezogen:

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij}^{(0)} - \frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} a_{1j}^{(0)} \quad j = 1, \dots, N$$

$\uparrow$   $i$ -te Zeile       $\uparrow$   $1$ -te Zeile

$\Rightarrow$  für die erste Spalte gilt:  $a_{i1}^{(1)} = 0$  für  $i = 2, \dots, N$

denn:  $a_{i1}^{(1)} = a_{i1}^{(0)} - \frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} a_{11}^{(0)} = 0$

Transformation von  $\vec{b}$ : 
$$b_i^{(1)} = b_i^{(0)} - \frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} b_1^{(0)} \quad i = 2, 3, \dots, N$$

2. Schritt

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}}_{A^{(1)}} \rightarrow \underbrace{\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}}_{A^{(2)}}$$

→ von den Zeilen  $i = 3, \dots, N$  wird das  $\frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$ -fache der zweiten Zeile abgezogen:

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - \frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} a_{2j}^{(1)} \quad j = 1, \dots, N$$

⇒ für die zweite Spalte gilt:  $a_{i2}^{(2)} = 0$  für  $i = 3, \dots, N$

allgemein → nter Schritt  $n = 1, 2, \dots, N-1$

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(n)} &= a_{ij}^{(n-1)} - \frac{a_{in}^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}} a_{nj}^{(n-1)} \\ b_i^{(n)} &= b_i^{(n-1)} - \frac{a_{in}^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}} b_n^{(n-1)} \end{aligned} \quad \begin{aligned} i &= (n+1), \dots, N \\ j &= 1, \dots, N \end{aligned}$$

→  $N-1$  Transformationen

Teil 2: Berechnung von  $\vec{x}$

1. Schritt: die  $N$ te Zeile des linearen Gleichungssystems  $A^{(N-1)} \vec{x} = \vec{b}^{(N-1)}$  nach  $x_N$  auflösen:

$$a_{NN}^{(N-1)} x_N = b_N^{(N-1)} \Rightarrow x_N = \frac{b_N^{(N-1)}}{a_{NN}^{(N-1)}}$$

2. Schritt Einsetzen von  $x_N$  in die  $(N-1)$ te Zeile:

$$a_{N-1,N-1}^{(N-1)} x_{N-1} + a_{N-1,N}^{(N-1)} x_N = b_{N-1}^{(N-1)} \Rightarrow x_{N-1} = \dots$$

usw. bis zum Einsetzen in die erste Zeile

Problem:  $\rightarrow$  Falls  $a_{11}^{(0)} = 0 \rightarrow$  vertausche die Zeilen, so dass  $a_{11}^{(0)} \neq 0$ ;

$\rightarrow$  im Laufe der Iteration kann ein  $a_{nn}^{(n-1)} = 0$  werden,

Lösung:- sog. Pivottisierung: Zeilen vertauschen, so dass  
 $a_{11} > a_{22} > a_{33} \dots$

### 3.2 Determinanten

hier: Berechnung der Determinante einer Matrix mit Hilfe des Gauß-Verfahrens

es gilt: die Addition des  $\lambda$ -fachen der  $m$ -ten Zeile zur  $l$ -ten Zeile ändert den Wert der Determinante nicht.

$$\text{d.h.: } \det(A^{(0)}) = \det(A^{(1)}) = \dots = \det(A^{(N-1)})$$

Für die Determinante einer oberen Dreiecksmatrix gilt:

$$\det(M) = \prod_{i=1}^N M_{ii}$$

denn: Entwicklung nach der ersten Spalte, etc

$$\begin{pmatrix} M_{11} & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & M_{22} & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \ddots & \cdot \\ \vdots & \vdots & & M_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \det(A) = \prod_{i=1}^N a_{ii}^{(N-1)}$$

### 3.3 Eigenwertprobleme

$$M \vec{x} = \lambda \vec{x}$$

gegeben:  $n \times n$ -Matrix  $M$

gesucht: die Eigenvektoren  $\vec{x}_i$  mit den dazugehörigen Eigenwerten  $\lambda_i$

$$\rightarrow M \vec{x}_i = \lambda_i \vec{x}_i \quad i = 1, \dots, N$$

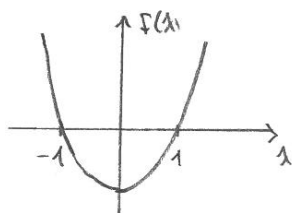
Bedingung für die Existenz nicht-trivialer Eigenvektoren:

$$\boxed{f(\lambda) = \det(M - \lambda \mathbb{1}) = 0} \quad f(\lambda): \text{ charakteristisches Polynom}$$

Beispiel:

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow M - \lambda \mathbb{1} = \begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow f(\lambda) = \lambda^2 - 1 \rightarrow \text{gesucht sind also die Nullstellen von } f(\lambda)$$



$$\lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = -1$$

Berechnung von  $f(\lambda) \rightarrow$  Gauß-Verfahren für  $A = M - \lambda \mathbb{1}$

Hamilton-Matrix

Ausgangspunkt  $\rightarrow$  die stationäre Schrödingergleichung

$$\boxed{H|\psi\rangle = E|\psi\rangle} \quad (*)$$

gegeben: eine vollständige Basis  $\{|n\rangle\}$  des Hilbertraums

$$\hookrightarrow \text{es gilt: } \mathbb{1} = \sum_n |n\rangle\langle n|$$

$\Rightarrow$  die Schrödingergleichung lässt sich auf ein Eigenwertproblem abbilden!

aus (\*) folgt:  $H \mathbb{1} |\psi\rangle = E |\psi\rangle$

$$\sum_n H |n\rangle \langle n | \psi \rangle = E |\psi\rangle \quad \left| \text{ von links: } \langle m | \dots \right.$$

$$\begin{aligned} \sum_n \underbrace{\langle m | H | n \rangle}_{= (\bar{H})_{mn}} \underbrace{\langle n | \psi \rangle}_{= (\vec{\psi})_n} &= E \underbrace{\langle m | \psi \rangle}_{= (\vec{\psi})_m} \\ &= (\bar{H})_{mn} = (\vec{\psi})_n = (\vec{\psi})_m \end{aligned}$$

mit der Hamiltonmatrix  $\bar{H} \rightarrow$  Matrixelemente  $(\bar{H})_{mn} = \langle m | H | n \rangle$

und dem Vektor  $\vec{\psi} \rightarrow (\vec{\psi})_n = \langle n | \psi \rangle$

$$\rightarrow \boxed{\bar{H} \vec{r} = E \vec{r}}$$

Beispiel 1: der verschobene harmonische Oszillator

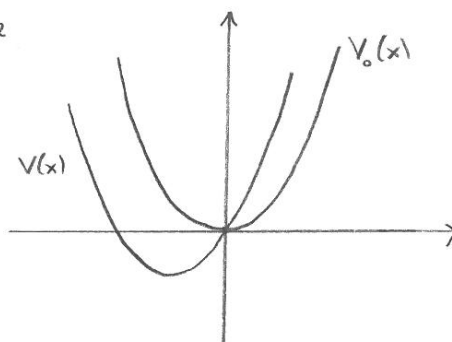
Ausgangspunkt  $\rightarrow$  der quantenmechanische harmonische Oszillator

$$\boxed{H_0 = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)} \quad a^\dagger, a : \text{Auf- und Absteigeoperatoren}$$

$\rightarrow$  harmonisches Potential :  $V_0(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$

$$+ \text{ "Störung" : } V'(x) = \Theta \sqrt{\frac{1}{\hbar}} 2m\omega x \\ = \Theta (a + a^\dagger)$$

$$\rightarrow V(x) = V_0(x) + V'(x)$$



es gilt:  $\boxed{H_0 |n\rangle = E_n^0 |n\rangle} \quad n = 0, 1, 2, \dots$

mit  $\{|n\rangle\} \rightarrow$  Eigenzustände des harmonischen Oszillators

$$\mathbb{1} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|$$

$$E_n^0 = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

sei  $H = H_0 + V'(x)$

$\rightarrow$  Hamiltonmatrix  $\bar{H} : (\bar{H})_{mn} = \langle m | H | n \rangle =$

$$= \underbrace{\langle m | H_0 | n \rangle}_{= E_n^0 \delta_{mn}} + \Theta \left[ \underbrace{\langle m | a | n \rangle}_{= \sqrt{n} \delta_{m, n-1}} + \underbrace{\langle m | a^\dagger | n \rangle}_{= \sqrt{n+1} \delta_{m, n+1}} \right]$$

$$= \Theta \sqrt{n} \delta_{m, n-1} + \Theta \sqrt{n+1} \delta_{m, n+1}$$

damit folgt für die Hamiltonmatrix:

$$\bar{H} = \begin{pmatrix} E_0^0 & \Theta & & & 0 \\ \Theta & E_1^0 & \sqrt{2}\Theta & & \\ & \sqrt{2}\Theta & \ddots & \ddots & \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

## Beispiel 2: Heisenberg-Modell

betrachte ein System aus  $N$  quantenmechanischen Spins in folgender Anordnung:



Spinoperator für Platz  $i$ :

$$\vec{S}_i = \begin{pmatrix} S_i^x \\ S_i^y \\ S_i^z \end{pmatrix}$$

Achtung  $\rightarrow$  Vertauschungsrelationen!

$$\text{z.B.: } [S_i^x, S_j^y] = i\hbar S_i^z \delta_{ij}$$

Wechselwirkung zwischen benachbarten Spins:

$$-J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} = -J (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + S_i^z S_{i+1}^z)$$

$\rightarrow$  der Hamilton-Operator hat folgende Form:

$$\boxed{H = -J \sum_{i=1}^{N-1} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}} \quad \text{Heisenberg-Modell}$$

Basis des Hilbertraums:

$$\begin{aligned} & \{ |\uparrow\rangle_1, |\downarrow\rangle_1 \} \otimes \{ |\uparrow\rangle_2, |\downarrow\rangle_2 \} \otimes \dots \otimes \{ |\uparrow\rangle_N, |\downarrow\rangle_N \} \\ &= \{ |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle \} \quad \text{mit } \sigma_i = \uparrow, \downarrow \\ &= \{ |l\rangle \} \quad \text{mit } l = 0, 1, \dots, 2^N - 1 \\ &\Rightarrow 2^N \text{ Zustände} \end{aligned}$$

$\rightarrow$  verwende die Zahl  $l$  zur Nummerierung der Basiszustände  
die entsprechende Spinkonfiguration ergibt sich aus:

$$[l]_{10} = [z_N \dots z_2 z_1]_2 \quad \text{mit } z_i = 0, 1 \quad \rightarrow \quad \begin{array}{l} 0 = \downarrow \\ 1 = \uparrow \end{array}$$

$$\begin{aligned} \text{z.B.: } N=4, l=13 &: [13]_{10} = [1101]_2 \\ &\rightarrow |l=13\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

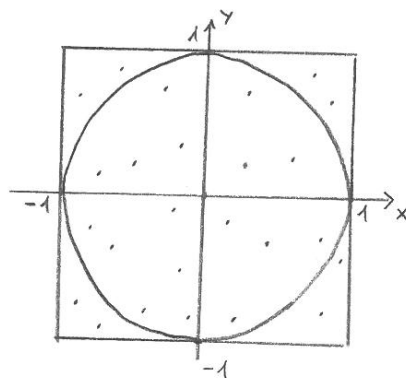
$\rightarrow$  Hamilton-Matrix:  $2^N \times 2^N$ -Matrix

$\hookrightarrow$  wächst exponentiell mit der Systemgröße!

#### 4. Monte-Carlo-Methoden

Beispiel: Bestimmung der Zahl  $\pi$

mit Hilfe von Zufallszahlen



→ wähle zufällig  $N$  Punkte  $\vec{r}_n = \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix}$ ,  $n = 1, \dots, N$  innerhalb des Quadrats  
 $-1 < x_n < 1$ ,  $-1 < y_n < 1$

→  $N_{\text{hits}}$ : Zahl der Punkte innerhalb des Kreises, d.h.  $x_n^2 + y_n^2 < 1$

$$\Rightarrow \frac{N_{\text{hits}}}{N} \approx \frac{\text{Kreisfläche}}{\text{Quadratfläche}} = \frac{\pi}{4}$$

damit ergibt sich eine Abschätzung für  $\pi$ :

$$\pi \approx 4 \frac{N_{\text{hits}}}{N}$$

→ was sind Zufallszahlen?

→ wie erzeugt man Zufallszahlen?

#### 4.1 Zufallszahlen

hier: eine Folge reeller Zahlen  $\{x_i\} = x_1, x_2, \dots, x_N$

mit  $x_i \in ]a, b]$  (im folgenden:  $a=0$ ,  $b=1$ )

und den folgenden Eigenschaften:

a, die Zufallszahlen sind gleichverteilt im Intervall  $]a, b]$

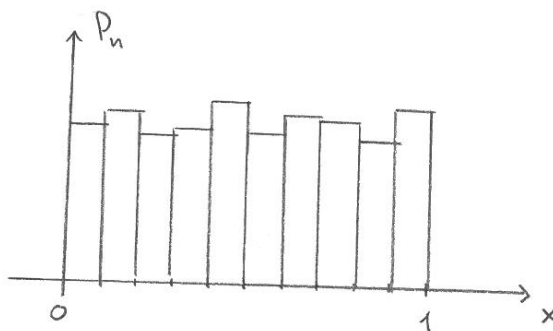
→ unterteile  $]0, 1]$  in  $M$  Teilintervalle  $]t_n, t_{n+1}]$

$$\text{mit } t_n = \frac{n}{M}$$

→  $P_n$ : Anzahl der  $x_i$  im

Intervall  $]t_n, t_{n+1}]$

$$n = 0, 1, \dots, M-1$$



$$\rightarrow p_n = \frac{P_n}{N} \Rightarrow \sum_{n=0}^{M-1} p_n = \frac{1}{N} \underbrace{\sum_{n=0}^{M-1} P_n}_{= N} = 1$$

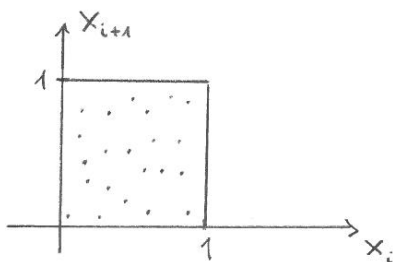
Gleichverteilung bedeutet:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} p_n = \frac{1}{M}$$

für jedes  $n$

b) keine Korrelationen zwischen aufeinanderfolgenden Zufallszahlen

zweidimensionale Darstellung:



→ eventuelle Korrelationen erzeugen ein Muster in dieser Darstellung

Maß für die Korrelationen:

$$X = \langle x_i x_{i+1} \rangle - \langle x_i \rangle^2$$

mit den Mittelwerten

$$\rightarrow \langle x_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i, \text{ es gilt (bei Gleichverteilung):}$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle x_i \rangle = \frac{1}{2} (b+a) \quad (= \frac{1}{2})$$

$$\rightarrow \langle x_i x_{i+1} \rangle = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} x_i x_{i+1}$$

$$\text{falls es keine Korrelationen gibt: } \langle x_i x_{i+1} \rangle = \langle x_i \rangle \underbrace{\langle x_{i+1} \rangle}_{= \langle x_i \rangle} = \langle x_i \rangle^2$$

es muss also gelten:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} X = 0$$

Beispiel: sei  $\{x_i\}$ ,  $i=1, \dots, N$  eine Folge von Zufallszahlen

→ gleichverteilt im Intervall  $[0, 1]$ , nicht korreliert

Konstruiere daraus die Folge  $\{y_j\}$ ,  $j = 1, \dots, 2N$  nach folgender Vorschrift:

$$y_j = \begin{cases} x_{(j+1)/2} & : j \text{ ungerade} \\ 1 - x_{j/2} & : j \text{ gerade} \end{cases}$$

d.h.  $\{y_j\} = \underbrace{x_1, 1-x_1}_{\text{korreliert}}, \underbrace{x_2, 1-x_2}_{\text{nicht korreliert}}, x_3, \dots, 1-x_N$

Berechnung von  $\chi$ :

$$\rightarrow \langle y_j \rangle = \frac{1}{2} \quad (\text{im Limes } N \rightarrow \infty)$$

$$\rightarrow \langle y_j y_{j+1} \rangle = \frac{1}{2} \left( \underbrace{\langle y_j y_{j+1} \rangle}_{j \text{ ungerade}} + \underbrace{\langle y_j y_{j+1} \rangle}_{j \text{ gerade}} \right) = \dots$$

$$= \langle z(1-z) \rangle \text{ mit } z \in ]0,1[$$

$$= \int_0^1 (z - z^2) dz = \frac{1}{2} - \frac{1}{3} = \frac{1}{6}$$

$$\dots = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{6} + \frac{1}{4} \right) = \frac{5}{24}$$

$$\Rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} \chi = \frac{5}{24} - \frac{1}{4} = -\frac{1}{24} \neq 0 \quad \text{d.h. die Folge } \{y_j\} \text{ ist korreliert}$$

C, Verallgemeinerung von b,

→ keine Korrelationen zwischen beliebiger Anzahl von Zufallszahlen mit beliebigen Abständen innerhalb der Folge:

$$\chi_{[j_0, j_1, \dots, j_{k-1}]} = \langle x_{i+j_0} x_{i+j_1} \dots x_{i+j_{k-1}} \rangle - \langle x_i \rangle^k$$

auch hier:  $\lim_{N \rightarrow \infty} \chi_{[\dots]} = 0$

Beispiel:  $\chi_{[0,1,4]} = \langle x_i x_{i+1} x_{i+4} \rangle - \langle x_i \rangle^3$

$$\cdot \cdot \underbrace{\circ \circ}_{\text{}} \cdot \cdot \circ \cdot \cdot$$

## Erzeugung von Zufallszahlen

a, physikalische Prozesse:

- nicht-deterministisch, z.B. quantenmechanische Dynamik  
→ atomarer Zerfall, etc.
- deterministisch, z.B. klassische Systeme mit vielen Freiheitsgraden

b, deterministische Algorithmen

- Zufallszahlengeneratoren: erzeugen „pseudozufällige“ Zahlen  
z.B. über  $x_{i+1} = f(x_i)$   
⇒ die Zahlenfolge ist reproduzierbar

### der lineare Kongruenz-Generator

erzeuge iterativ eine Folge ganzer Zahlen  $\{u_i\}$ ,  $i = 1, \dots, N$ ,  
mit  $0 \leq u_i < m$  gemäß

$$u_{i+1} = (a u_i + c) \bmod m \quad (\text{„modulo } m\text{“})$$

$a$ : Multiplikator  $a \in \mathbb{Z}$

$c$ : Inkrement  $c \in \mathbb{Z}$

$m$ : Modul  $m \in \mathbb{Z}$

Startwert:  $u_1 \in \mathbb{Z}$

mit  $0 \leq u_1 < m$

dann: bilde  $x_i = \frac{u_i}{m} \rightarrow 0 \leq x_i < 1$

$\{x_i\}$ : Folge von „Pseudo-Zufallszahlen“  
gleichverteilt im Intervall  $[0, 1[$

Beispiel:  $a=5, c=3, m=4, u_1=1 \rightarrow u_{i+1} = (5u_i + 3) \bmod 4$   
→  $x_1 = 0.25$

$$\Rightarrow u_2 = 8 \bmod 4 = 0 \rightarrow x_2 = 0$$

$$u_3 = 3 \bmod 4 = 3 \rightarrow x_3 = 0.75$$

$$u_4 = 18 \bmod 4 = 2 \rightarrow x_4 = 0.5$$

$$u_5 = 13 \bmod 4 = 1 \stackrel{!}{=} u_1 \rightarrow x_5 = 0.25 \stackrel{!}{=} x_1$$

→ Sequenz wiederholt sich mit Periode  $p$

- in diesem Beispiel:  $p = m = 4$

- allgemein:  $p \leq m$

⇒ wähle sehr große Werte für  $m$  und  $N \ll m$

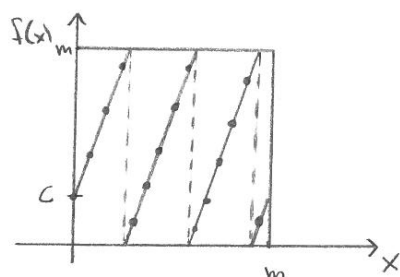
Liste mit typischen Werten für  $a, c, m$

→ siehe [en.wikipedia.org](http://en.wikipedia.org)

z.B.:  $m = 2^{32}$ ,  $a = 1664525$ ,  $c = 1013904223$

### Korrelationen

→ betrachte die Funktion  $f(x) = (ax + c) \bmod m$



⇒ wähle große Werte für die Steigung  $a$

### 4.2 Monte-Carlo-Integration

zunächst: Berechnung der Summe

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

a, alle  $a_j$  aufsummieren → problematisch, wenn  $M$  sehr groß

b, Stichprobe (engl. 'sample' → 'sampling')

→ wähle  $N$  Zufallszahlen  $u_i$ ,  $i = 1, \dots, N$

mit  $u_i \in \{1, 2, \dots, M\}$ , wobei  $N \ll M$

⇒ Näherung für die Summe:

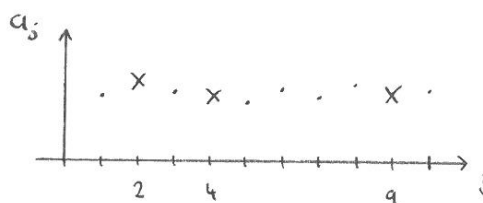
$$\bar{S} = \frac{M}{N} \sum_{i=1}^N a_{u_i}$$

Beispiel:

$M = 10$ ,  $N = 3$

$u_1 = 2$ ,  $u_2 = 4$ ,  $u_3 = 9$

→  $\bar{S} = \frac{10}{3} (a_2 + a_4 + a_9)$



jetzt : Riemann-Summe eines eindimensionalen Integrals

$$\bar{I} = \int_a^b f(x) dx \rightarrow S_R = \sum_{i=1}^M f(\xi_i) \Delta x_i$$

$$\text{setze } \Delta x_i = \Delta x = \frac{b-a}{M} \quad ; \quad f(\xi_i) = f_i$$

$$\Rightarrow S_R = \frac{b-a}{M} \sum_{i=1}^M f_i$$

Stichprobe:

$$\bar{S}_R = \frac{M}{N} \frac{b-a}{M} \sum_{i=1}^N f_{u_i}$$

$$= \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

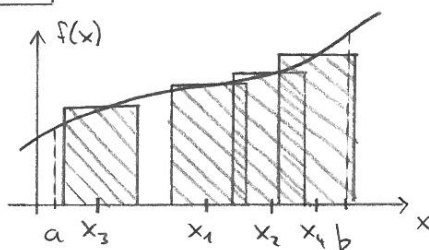
mit  $\{x_i\}$  einer Folge von Zufallszahlen,  
gleichverteilt im Intervall  $[a, b]$

$\Rightarrow$  Näherung für das Integral :  $\bar{I} = \bar{S}_R$

$$\bar{I} = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

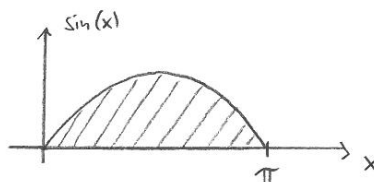
$\rightarrow$  Monte-Carlo-Integration

$\hat{=}$  (für  $N=4$ )



Beispiel:

$$\bar{I} = \int_0^{\pi} \sin(x) dx$$



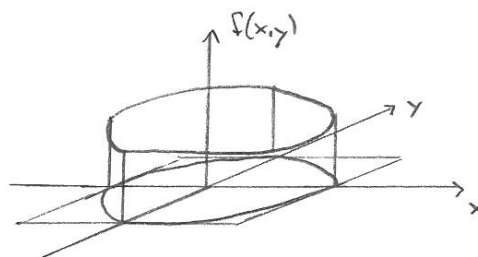
$$b-a = \pi$$

$$\Rightarrow \bar{I} = \frac{\pi}{N} \sum_{i=1}^N \sin(x_i) \quad \text{mit } 0 \leq x_i \leq \pi$$

Monte-Carlo-Integration für mehr-dimensionale Integrale

Beispiel:  $d=2$  
$$\bar{I} = \int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 dy f(x,y)$$

$$\text{mit } f(x,y) = \begin{cases} 1 & : x^2 + y^2 < 1 \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases}$$



$$\Rightarrow \bar{I} = \pi$$

Stichprobe: wähle  $N$  Punkte  $\vec{r}_i = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix}$   $i = 1, \dots, N$   
mit  $-1 \leq x_i \leq 1$ ,  $-1 \leq y_i \leq 1$

$$\Rightarrow \bar{I} = \frac{(b-a)^2}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i, y_i) = 4 \frac{N_{\text{hits}}}{N}$$

$\underbrace{\quad}_{= \frac{4}{N}} \quad \underbrace{\quad}_{= N_{\text{hits}}}$ , siehe p. 35

d.h. das Beispiel auf Seite 35 (Abschätzung für  $\pi$ ) entspricht der MC-Integration eines zweidimensionalen Integrals

allgemein:

$$\bar{I} = \int_{a_1}^{b_1} dx_1 \int_{a_2}^{b_2} dx_2 \dots \int_{a_d}^{b_d} dx_d f(\vec{r}) \quad \text{mit } \vec{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_d \end{pmatrix}$$

$\rightarrow$   $d$ -dimensionales Integral

$$V = \prod_{i=1}^d (b_i - a_i) : \text{Volumen des Integrationsbereichs}$$

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

$\vec{r}_i$ : Folge von zufälligen Punkten im Integrationsvolumen,  $i = 1, \dots, N$

Beispiel: Volumen der  $d$ -dimensionalen Einheitskugel  $\rightarrow V_{e,d}$

$$\rightarrow \text{setze } a_i = -1, b_i = 1 \Rightarrow V = 2^d$$

$$f(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & : |\vec{r}| < 1 \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \Rightarrow \bar{I} = \frac{2^d}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{r}_i) = 2^d \frac{N_{\text{hits}}}{N}$$

$= N_{\text{hits}}$

exakt:

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

$\Gamma(x)$ : Gamma-Funktion

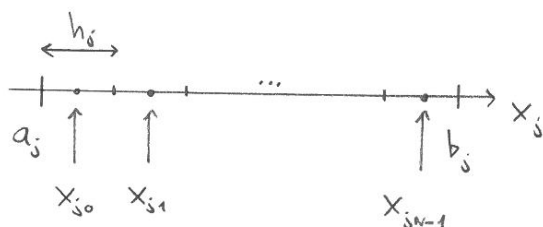
$$\rightarrow \Gamma(x+1) = x \Gamma(x)$$

$$\rightarrow \Gamma(1) = 1, \Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$$

Einschub: mehrdimensionale Integration

$\rightarrow$  Berechnung über die Riemann-Summe

Führe in jeder Dimension die folgende Diskretisierung durch:



$$\text{mit } h_j = \frac{b_j - a_j}{N_j}$$

$N_j$  : Zahl der Intervalle  
(im folgenden  $N_j = N$ )

und berechne die Funktionswerte an den Punkten

$$x_{ji} = a_j + (i + \frac{1}{2})h_j \quad i = 0, 1, \dots, N-1$$

Riemann-Summe:

$$S_R = \Delta V \sum_{i_1=0}^{N-1} \sum_{i_2=0}^{N-1} \dots \sum_{i_d=0}^{N-1} f(x_{1i_1}, x_{2i_2}, \dots, x_{di_d})$$

$$\text{mit } \Delta V = \prod_{j=1}^d h_j$$

$$\rightarrow \bar{I} = \lim_{N \rightarrow \infty} S_R$$

Zahl der Terme in der Riemann-Summe =  $N^d$  !

### 4.3 Metropolis - Algorithmus

Zunächst: eindimensionale Integrale der Form

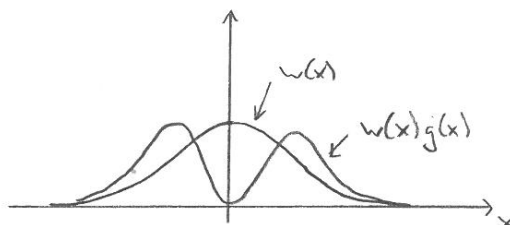
$$\bar{I} = \int_{-\infty}^{\infty} w(x) g(x) dx$$

mit der Gewichtsfunktion  $w(x)$

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} w(x) dx = 1$$

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

$$g(x) = x^2$$



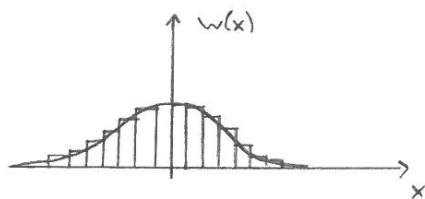
$\rightarrow$  MC - Integration (siehe Kap. 4.2)

$$\bar{I} = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

$\rightarrow$  erfordert die Einschränkung des Integrationsbereichs

z.B.:  $a = -10, b = 10$

alternativ: erzeuge eine Folge von Zufallszahlen  $\{x_i\}$ ,  $i = 1, \dots, N$ , deren Verteilung durch die Gewichtsfunktion  $w(x)$  gegeben ist.



d.h.: keine Gleichverteilung!

Für das Integral ergibt sich dann die folgende Abschätzung:

$$\bar{I} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i)$$

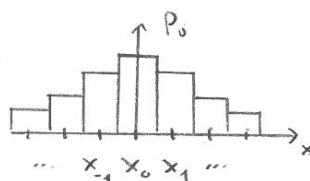
sog. „importance sampling“

→ Stichprobe, die die wichtigen Beiträge zum Integral bevorzugt



denn: Unterteilung des Integrationsbereichs in Intervalle der Breite  $\Delta x$

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i) \approx \sum_j p_j g(x_j) = \dots$$



$$\sum_j p_j = 1$$

es gilt  $w(x_j) \cdot \Delta x = p_j$

$$\dots = \sum_j \Delta x w(x_j) g(x_j) \rightarrow \text{Riemann-Summe des Integrals } I$$

jetzt: wie erzeugt man eine solche Folge  $\{x_i\}$ ?

### Metropolis - Algorithmus

Konstruiere iterativ die Folge  $x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow x_3 \rightarrow \dots$  nach folgendem Schema:

→  $x_i \in \mathbb{R}$  sei gegeben

1. wähle Zufallszahl  $\delta$ , gleichverteilt im Intervall  $[-1, 1]$

$$\rightarrow \bar{x}_{i+1} = x_i + h\delta$$

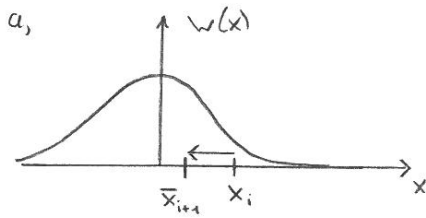
$h$ : maximale Schrittweite

2. berechne  $\alpha = \frac{w(\bar{x}_{i+1})}{w(x_i)}$  und wähle Zufallszahl  $\gamma$ , gleichverteilt im Intervall  $[0, 1]$

### 3. Fallunterscheidung

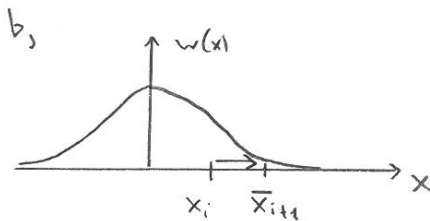
$$\begin{aligned} \alpha &\geq \gamma \rightarrow \bar{x}_{i+1} \text{ wird akzeptiert, d.h. } x_{i+1} = \bar{x}_{i+1} \\ \alpha &< \gamma \rightarrow \bar{x}_{i+1} \text{ wird abgelehnt, d.h. } x_{i+1} = x_i \end{aligned}$$

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



$$\rightarrow \alpha = \frac{w(\bar{x}_{i+1})}{w(x_i)} > 1$$

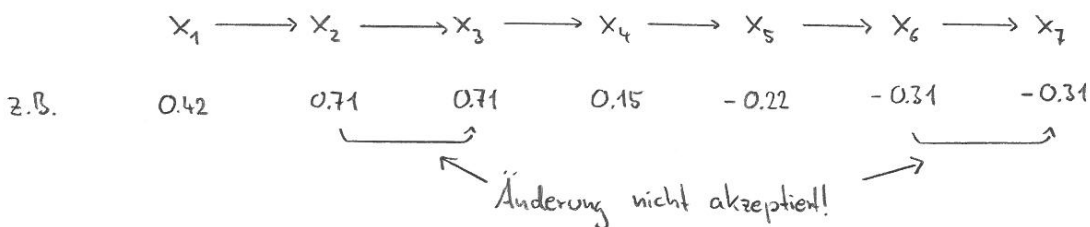
d.h.  $\alpha > \gamma \Rightarrow$  die Änderung wird auf jeden Fall akzeptiert



$$\rightarrow 0 < \alpha < 1$$

$\Rightarrow$  die Änderung wird akzeptiert, falls  $\alpha \geq \gamma$ , d.h. mit Wahrscheinlichkeit  $\alpha$

der Metropolis-Algorithmus erzeugt eine sog. Markov-kette



wichtig: die abgelehnten Fälle, d.h.  $x_{i+1} = x_i$ , sind Teil der Markov-kette!

### Akzeptanzrate

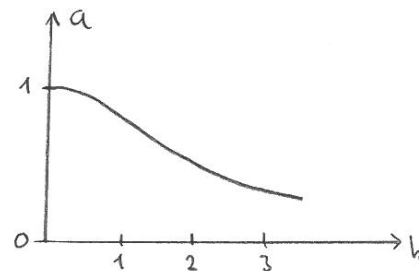
für die Markov-kette  $x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow \dots \rightarrow x_N$

Zahl der Schritte insgesamt:  $N-1$

Zahl der akzeptierten Änderungen:  $N_{acc}$

$$\rightarrow \text{Akzeptanzrate } a = \frac{N_{acc}}{N-1}$$

optimal:  $a \approx 0.5$



zu beachten: die Zahlenfolge  $\{x_i\}$  ist korreliert!

$$\text{d.h. } \lim_{N \rightarrow \infty} X_{[0,1]} \neq 0, \quad \lim_{N \rightarrow \infty} X_{[0,2]} \neq 0, \text{ etc.}$$

detailliertes Gleichgewicht (engl. „detailed balance“)

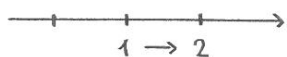
Vereinfachung  $\rightarrow$  diskrete Version der Markov-Kette

$$\rightarrow x_i \in \mathbb{Z}, \quad h=1, \quad \delta = \pm 1$$

$$\Rightarrow \bar{x}_{i+1} = x_i \pm 1$$

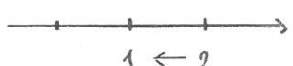
betrachte jetzt die Übergangswahrscheinlichkeit  $p(x_i \rightarrow x_j)$

z.B.:  $x_i = 1, \quad x_j = 2$



$$p(1 \rightarrow 2) = \frac{1}{2} \alpha = \frac{1}{2} \frac{w(2)}{w(1)} \quad (w(2) < w(1))$$

↑  
wegen  $\delta = \pm 1$



$$\rightarrow p(2 \rightarrow 1) = \frac{1}{2} \quad \text{Falls } \delta = -1 \text{ wird die Änderung auf jeden Fall akzeptiert}$$

$$\Rightarrow \frac{p(1 \rightarrow 2)}{p(2 \rightarrow 1)} = \frac{w(2)}{w(1)} \quad \hat{=} \quad \boxed{w(1) p(1 \rightarrow 2) = w(2) p(2 \rightarrow 1)}$$

allgemein:

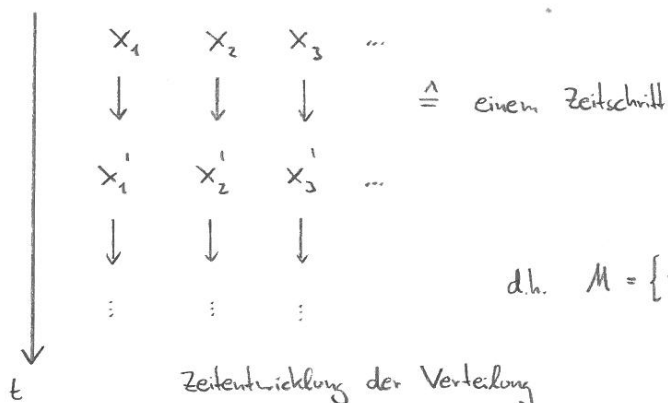
$$\boxed{w(x) p(x \rightarrow x') = w(x') p(x' \rightarrow x)}$$

„detailed balance“

was bedeutet „Gleichgewicht“ in diesem Zusammenhang?

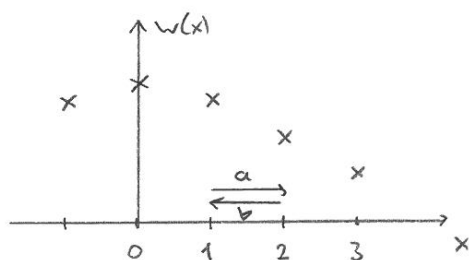
betrachte eine Menge (Verteilung) von  $x$ -Werten  $M = \{x_i\}$

$\rightarrow$  Dynamik: für jedes  $x_i \in M \rightarrow x_i \rightarrow x_i'$   
gemäß Metropolis-Algorithmus



$$\text{d.h. } M = \{x_i\} \longrightarrow M' = \{x_i'\} \text{ etc}$$

Wann ist die Verteilung  $w(x)$  der  $x$ -Werte im Gleichgewicht?



Zahl der Übergänge  $\Delta N$  pro Zeitschritt

$$a, \Delta N(1 \rightarrow 2) \propto w(1) p(1 \rightarrow 2)$$

$$b, \Delta N(2 \rightarrow 1) \propto w(2) p(2 \rightarrow 1)$$

Falls  $\Delta N(1 \rightarrow 2) = \Delta N(2 \rightarrow 1)$  ( $\hat{=}$  detailed balance)

→ die Verteilung ist zeitlich konstant

→ das „System“ ist im Gleichgewicht

#### 4.4 Monte-Carlo für das Ising-Modell

Ausgangspunkt: Heisenberg-Modell (siehe Kap. 3.3)

$$H_H = -J \sum_{i=1}^{N-1} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} = - \sum_{i=1}^{N-1} (J_x S_i^x S_{i+1}^x + J_y S_i^y S_{i+1}^y + J_z S_i^z S_{i+1}^z)$$

$$\text{mit } J_x = J_y = J_z = J$$

Ising-Modell setze  $J_x = 0, J_y = 0, J_z = J$

$$\Rightarrow \boxed{H_{\text{Ising}} = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z}$$

Basis des Hilbertraums:  $\{|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle\} \rightarrow 2^N$  Zustände

$$|l\rangle = |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle \quad l = 0, 1, \dots, 2^N - 1$$

es gilt: die Zustände  $|l\rangle$  sind Eigenzustände zum Hamiltonoperator  $H_{\text{Ising}}$ !

$$\text{d.h. } \boxed{H_{\text{Ising}} |l\rangle = E_l |l\rangle} \quad (\text{die Hamiltonmatrix ist diagonal})$$

Beweis: für einen einzelnen Spin gilt:

$$S_i^z |\sigma_i\rangle = s_i^z |\sigma_i\rangle \quad \text{mit} \quad S_i^z = \pm \frac{\hbar}{2} \quad \text{für } \sigma_i = \uparrow/\downarrow$$

$$\Rightarrow H_{\text{Ising}} |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle = -J \underbrace{\sum_{i=1}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z}_{= E_l} |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle$$

alternativ: betrachte das Ising-Modell als klassisches Modell mit den klassischen Spin-Variablen  $S_i^z = \pm \frac{1}{2}$  (setze  $\hbar=1$ ) und der Hamilton-Funktion

$$H(\{S_i^z\}) = -J \sum_{i=1}^{N-1} S_i^z S_{i+1}^z$$

$\{S_i^z\}$ : die (klassische) Spinkonfiguration  $(S_1^z, S_2^z, \dots, S_N^z)$

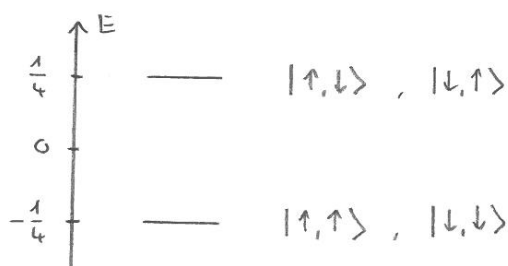
Beispiele:

a)  $N=2, J=1$   $\rightarrow 2^2 = 4$  Basiszustände (Spin-Konfigurationen)

$$\rightarrow H = -S_1^z S_2^z$$

$$E_e = -S_1^z S_2^z$$

$\Rightarrow$  Spektrum der (Eigen-)Energien:



b) Grundzustand für  $J=1$ ,  $N$  beliebig

wie erhält man die niedrigste Energie?

$\rightarrow$  jede Term in  $H$  ergibt  $-S_i^z S_{i+1}^z = -\frac{1}{4}$

d.h.: benachbarte Spins sind parallel ausgerichtet

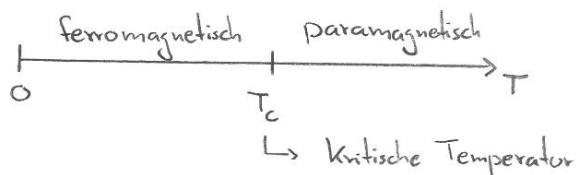
$\Rightarrow$  Grundzustandsenergie  $E_g = -\frac{1}{4} \underbrace{(N-1)}_{\text{Zahl der Kopplungsterme in } H}$

$$H|\psi_g\rangle = E_g|\psi_g\rangle \quad \text{für} \quad |\psi_g\rangle = \begin{cases} |\uparrow, \uparrow, \uparrow, \dots, \uparrow\rangle \\ |\downarrow, \downarrow, \downarrow, \dots, \downarrow\rangle \end{cases}$$

d.h.: der Grundzustand ist ferromagnetisch

$\rightarrow$  das Ising-Modell ist ein Modell zur Beschreibung von Magnetismus und magn. Phasenübergänge

Phasendiagramm (vereinfacht)



Definition : Magnetisierung der Spin-Konfiguration  $\{s_i\} = (s_1, s_2, \dots, s_N)$

[ Notation :  $s_i$  statt  $S_i^z$  ]

$$M(\{s_i\}) = \sum_{i=1}^N s_i$$

z.B. :  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2})$  also  $s_i = +\frac{1}{2}$  für alle  $i$

$$\rightarrow M = \frac{N}{2}$$

Wie berechnet man die Temperaturabhängigkeit der Magnetisierung?

$\rightarrow$  statistische Physik!

$M(T)$  wird berechnet als Mittelwert über alle möglichen Spin-Konfigurationen:

$$M(T) = \sum_{\{s_i\}} w(\{s_i\}) M(\{s_i\})$$

mit  $w(\{s_i\})$  : Wahrscheinlichkeit für das Auftreten der Spin-Konfiguration  $\{s_i\}$

es gilt:

$$w(\{s_i\}) = \frac{1}{2} e^{-\beta H(\{s_i\})} \quad \text{„ Boltzmann-Statistik “}$$

mit  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  ,  $k_B$  : Boltzmannkonstante

$T$  : Temperatur

und der sog. Zustandssumme  $Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta H(\{s_i\})}$

$\hookrightarrow$  Normierung :  $\sum_{\{s_i\}} w(\{s_i\}) = 1$

Berechnung von  $M(T)$

a, exakte Summation

d.h. Berechnung und Summation aller  $2^N$  Terme in  $\sum_{\{s_i\}} \dots$

$\rightarrow$  Nummerierung der Spin-Konfigurationen  $l = 0, 1, \dots, 2^N - 1$

$\rightarrow$  für jedes  $l$  : - Umwandlung  $l \rightarrow \{s_i\}$

- Berechnung von  $H(\{s_i\})$  ,  $M(\{s_i\})$

## b, Metropolis - Algorithmus

Konstruiere iterativ eine Folge von Spin-Konfigurationen  $\{s_i\}^L$   $l = 1, \dots, L$

$$\{s_i\}^1 \rightarrow \{s_i\}^2 \rightarrow \{s_i\}^3 \rightarrow \dots \{s_i\}^L$$

deren Verteilung durch die (temperaturabhängige) Gewichtsfunktion  $w(\{s_i\})$  gegeben ist.

→ Startkonfiguration  $\{s_i\}^1 = (s_1^1, s_2^1, \dots, s_N^1)$ , zufällig gewählt

1. wähle Zufallszahl  $k \in \{1, \dots, N\}$  und drehe den  $k$ -ten Spin um

$$\{\bar{s}_i\} = (s_1^l, \dots, -s_k^l, \dots, s_N^l) \quad \text{„Spin-Flip“}$$

2. berechne  $\alpha = \frac{w(\{\bar{s}_i\})}{w(\{s_i\}^l)}$  und wähle Zufallszahl  $\gamma$ , gleichverteilt im Intervall  $[0, 1]$

3. Fallunterscheidung

$$\begin{aligned} \alpha \geq \gamma &\rightarrow \text{Spin-Flip wird akzeptiert: d.h. } \{s_i\}^{l+1} = \{\bar{s}_i\} \\ \alpha < \gamma &\rightarrow \text{Spin-Flip wird abgelehnt: d.h. } \{s_i\}^{l+1} = \{s_i\}^l \end{aligned}$$

→ verwende die Markov-Kette  $\{s_i\}^L$  zur Berechnung der Magnetisierung

$$M(T) = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L M(\{s_i\}^l)$$

d.h. Summation über  $L$  statt  $2^N$  Spin-Konfigurationen ( $L \ll 2^N$ )

zur Berechnung von  $\alpha$ :

$$\alpha = \frac{w(\{\bar{s}_i\})}{w(\{s_i\}^l)} = \frac{\exp(-\beta H(\{\bar{s}_i\}))}{\exp(-\beta H(\{s_i\}^l))} = e^{-\beta \Delta E}$$

mit  $\Delta E = H(\{\bar{s}_i\}) - H(\{s_i\}^l)$ : Energieänderung aufgrund des Spin-Flips

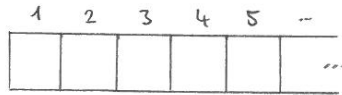
für  $H(\{s_i\}) = -J \sum_{i=1}^{N-1} s_i s_{i+1}$  ergibt sich:

$$\Delta E = 2J s_k^l (s_{k-1}^l + s_{k+1}^l)$$

## 4.5 zelluläre Automaten

### Modellierung der Zeitentwicklung diskreter Systeme

→ betrachte eine Anordnung von Zellen ( $d=1$  oder  $d=2$ )



→ Zustand der Zelle  $i$  zur (diskreten) Zeit  $t$ :

$$z_i(t) \in \{q_1, \dots, q_k\}, \text{ diskrete Zustandsmenge}$$

$$\text{z.B.: } q_1 = 0, q_2 = 1$$

→ Zeitentwicklung:  $z_i(t+1)$  wird bestimmt durch die Zustände benachbarter Zellen zur Zeit  $t$

$$\text{z.B.: } z_i(t+1) = f(z_{i-1}(t), z_i(t), z_{i+1}(t))$$

→ Unterscheidung: a, deterministische zelluläre Automaten

b, stochastische — " —

↳ „Monte-Carlo-Simulation diskreter Systeme“

### Beispiel für a: „Regel 30“

$$z_i(t) \in \{0, 1\}$$

$f(z_a, z_b, z_c)$  gegeben durch folgende Tabelle:

| $(z_a, z_b, z_c)$  | 111 | 110 | 101 | 100 | 011 | 010 | 001 | 000 |
|--------------------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| $f(z_a, z_b, z_c)$ | 0   | 0   | 0   | 1   | 1   | 1   | 1   | 0   |

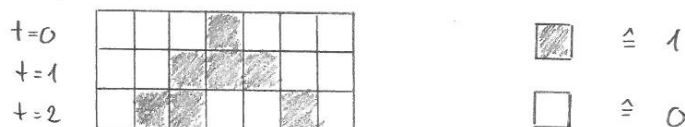
→  $n_r = [00011110]_2 = [30]_{10}$

zur Bezeichnung: es gibt  $2^8 = 256$  solcher Regeln

$$n_r = 0, 1, \dots, 255$$

$$\text{mit } n_r = \sum_{i=0}^7 a_i 2^i \quad \text{und } a_i \text{ den Ziffern der entsprechenden Dualzahl}$$

z.B.:



### Beispiel für $b$ : „ASEP“

- asymmetric simple exclusion process  
(asymmetrischer einfacher Austausch-Prozess)
- Beschreibung von „Teilchenhüpfprozessen“ in  $d=1$

$$z_i(t) \in \{0,1\} \quad z_i = 1 \text{ bedeutet:}$$

→ auf Platz  $i$  befindet sich ein Teilchen

### Parameter des Modells:

$$\begin{aligned} N &: \text{Zahl der Zellen} \\ M &: \text{Zahl der Teilchen} \quad (M \leq N) \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} N &: \text{Zahl der Zellen} \\ M &: \text{Zahl der Teilchen} \end{aligned}} \right\} \rho = \frac{M}{N} : \text{Teilchendichte}$$

$p_r$ : Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen nach rechts hüpf  
entsprechend  $p_l = 1 - p_r$

„Update“ d.h. ein Zeitschritt  $\{z_i(t)\} \rightarrow \{z_i(t+1)\}$

nach folgenden Regeln:

1. wähle zufällig ein Teilchen aus:  $k \in \{1, \dots, M\}$  mit  $z_k(t) = 1$
2. wähle Zufallszahl  $\gamma$ , gleichverteilt im Intervall  $[0,1]$
3. Fallunterscheidung
  - falls  $p_r > \gamma$  und  $z_{k+1}(t) = 0$   
→ Teilchen hüpf einen Platz nach rechts:  $z_k(t+1) = 0$   
 $z_{k+1}(t+1) = 1$
  - falls  $p_r < \gamma$  und  $z_{k-1}(t) = 0$   
→ Teilchen hüpf einen Platz nach links:  $z_k(t+1) = 0$   
 $z_{k-1}(t+1) = 1$
  - in allen anderen Fällen:  
→  $z_i(t+1) = z_i(t)$  für alle  $i$ , d.h. keine Änderung

z.B.:

|       |       |   |   |   |   |   |   |                     |
|-------|-------|---|---|---|---|---|---|---------------------|
|       | $i =$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |                     |
| $t=0$ |       |   | ■ | ■ | ■ | ■ |   | $k=2, p_r > \gamma$ |
| $t=1$ |       |   | ■ | ■ | ■ | ■ |   | $k=3, p_r > \gamma$ |
| $t=2$ |       |   | ■ | ■ | ■ | ■ |   |                     |