CPII - V12

3.1 .6 Nichtgleichverteilte Zufallszahlen

A) Invertierungsmethode

Bsp. Lorentzverteilte Zufallszahlen

$$p(z) = \frac{\gamma}{\pi(\gamma^2 + z^2)}$$

$$P(z) = \int_0^z p(z') dz' = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{atan}\left(\frac{z}{\gamma}\right) = x$$

$$z = \gamma \tan\left(\pi\left(x - \frac{1}{2}\right)\right)$$

Exponentialverteilte Zufallszahlen

$$z = \frac{-1}{a} \ln(1 - x)$$

B) Polarmethode

x_i, y_i gleichverteilt in $[-1, 1]$

$q = (x_i)^2 + (y_i)^2$ solange bis $q \leq 1$

$$a_i = x_i p, b_i = y_i p \text{ mit } p = \sqrt{-2 \frac{\ln q}{q}} \text{ sind normalverteilt}$$

C) Ziggurat-Methode (aktuell bester Algorithmus)

3.1 .7 Implementierung

C-GSL: `gsl_ran_gaussian()` (Box-Mueller)

`gsl_ran_gaussian_ziggurat()` (Ziggurat)

`gsl_ran_exponential()` (Exp-Verteilung)

Python:

`random.gauss( $\mu, \sigma$ )` Normalverteilung

`random.expovariate( $\lambda$ )` Exp-Verteilung

Numpy:

`numpy.random.normal( $\mu, \sigma$ )` Normalverteilung

`numpy.random.exponential( $\lambda$ )` Exponentialverteilung

3.2 Monte - Carlo Simulationen

Simulationen mit Hilfe von Zufallsexperimenten

"Gesetz der großen Zahlen", "zentrale Grenzwertsatz"

Bsp: Berechnung von Integralen, Simulation von stoch. Prozessen (Vielteilchensystem), Molekulardynamik

3.2 .1 MC Integration

Wert des Integral an zufälligen Stützstellen aus.

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

Vorteil: Fehler ist unabhängig von der Dimension $\frac{1}{\sqrt{N}}$: effektiv für höhere Dimension

Num . Integration: Fehler $N^{-k/d}$ (z.B. Simpson - Regel $k = 4$)

Ab $d > 8$ ist MC Integration besser als Simpson .

Ising-Modell $d = 2^n$, d.h. ab $n > 3$ besser MC Integration

Importance sampling :

Verwende zur MC Integration Zufallszahlen, deren Verteilung ca. der Funktionen entsprechen.

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx = \left\langle \frac{f(x)}{p(x)} \right\rangle$$

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{p(x_i)}$$

Metropolis-Algorithmus

Erzeugt eine Folge von Zufallszahlen (Zustände), die eine bestimmte Verteilung haben

Startwert. Akzeptiere Folgewert, wenn dessen Wahrscheinlichkeit größer ist,

oder nur mit einer Wahrscheinlichkeit $p = \frac{w(n+1)}{w(n)}$

Simulierte Abkühlung (simulated annealing)

3.3 Random Walk

diskrete Schrittenach Zufallsprinzip ("Betrunkenener")

$$P(x) = \binom{n}{n_1} p^{n_1} (1-p)^{n-n_1}$$

Binomialverteilung

$$\langle x \rangle = 0, \langle x^2 \rangle = n, \sigma = \sqrt{n}$$