# 5. Monte Carlo - Verfahren

## Beispiel Mehrfachintegral

Berechnung des $n$-dimensionalen Integrals

$$J_n = \int_0^1 ... \int_0^1 dx_1 dx_2 ... dx_n \; (x_1 + x_2 + ... x_n)^2$$

mit Rechteckregel

$$J_n^R \approx (\Delta x)^n \sum_{i_1=1}^{N} .... \sum_{i_n=1}^{N} \left( x_{i_1} + x_{i_2} + ... x_{i_n} \right)^2, \qquad x_i = \Delta x \, (i-1)$$

und nach Monte Carlo - Verfahren (ohne Gewichtung)

$$J_n^M \approx \frac{1}{N_T} \sum_{i_1=1}^{N_T} (\xi_1 + \xi_2 + ... \xi_n)^2$$

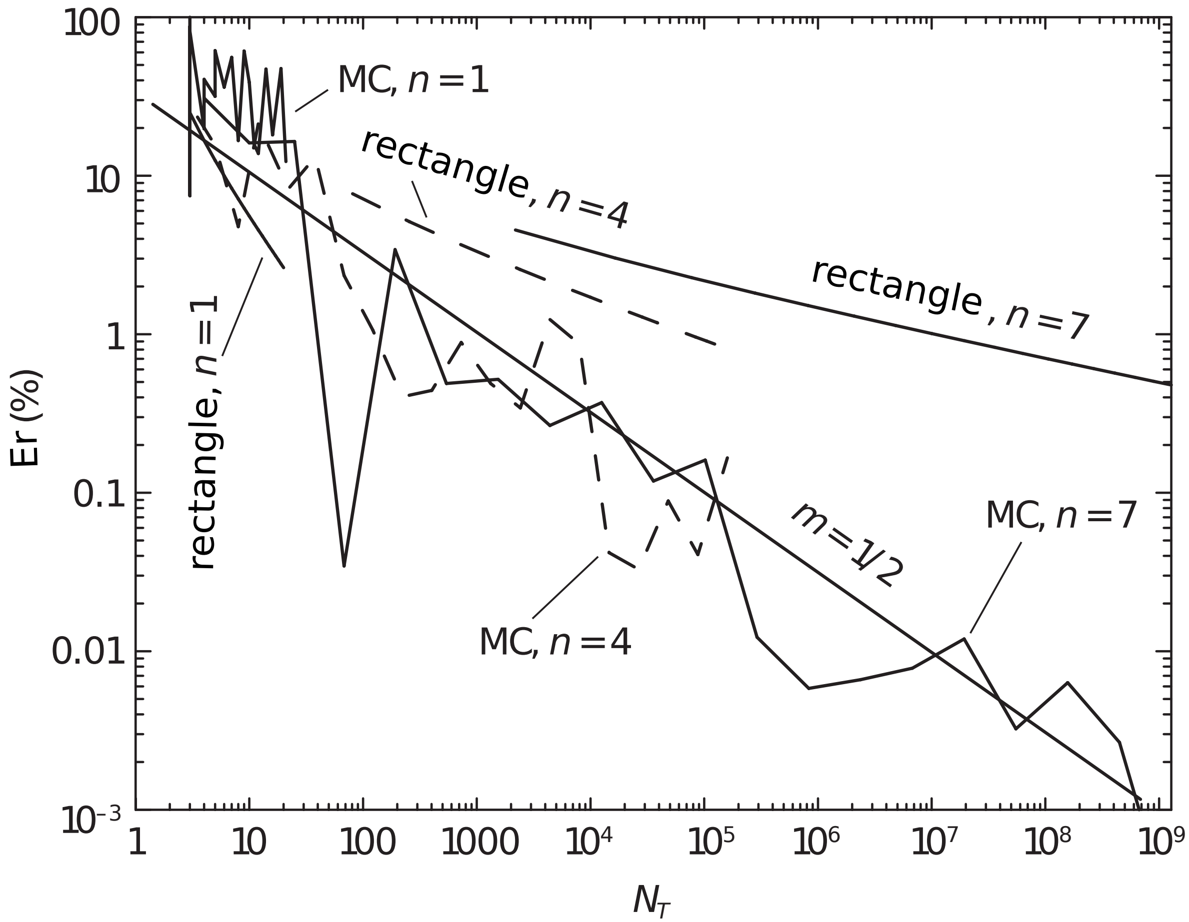
mit gleichverteilten unkorrelierten Zufallsvariablen

$$0 \leq \xi_i \leq 1$$

und $N_T = N^n$.

relative Fehler in Prozent:

$$\mathcal{E}(\%) = 100 \cdot \frac{\left|J_n^{R,M} - J_n\right|}{J_n}, \qquad J_n = \frac{n}{12} + \frac{n^2}{4}$$




– Monte Carlo-Simulation im Vergleich zur Rechteckregel, $n = 1, 4, 7$

– Relativer Fehler in Prozent über der Anzahl der Gesamtstützstellen $N_T$

# Diffusionsgleichung und Metropolis-Algorithmus

$$\partial_t \Phi(\vec{r},t) = D\,\Delta\Phi(\vec{r},t) - Q(\vec{r},t)$$

Funktional

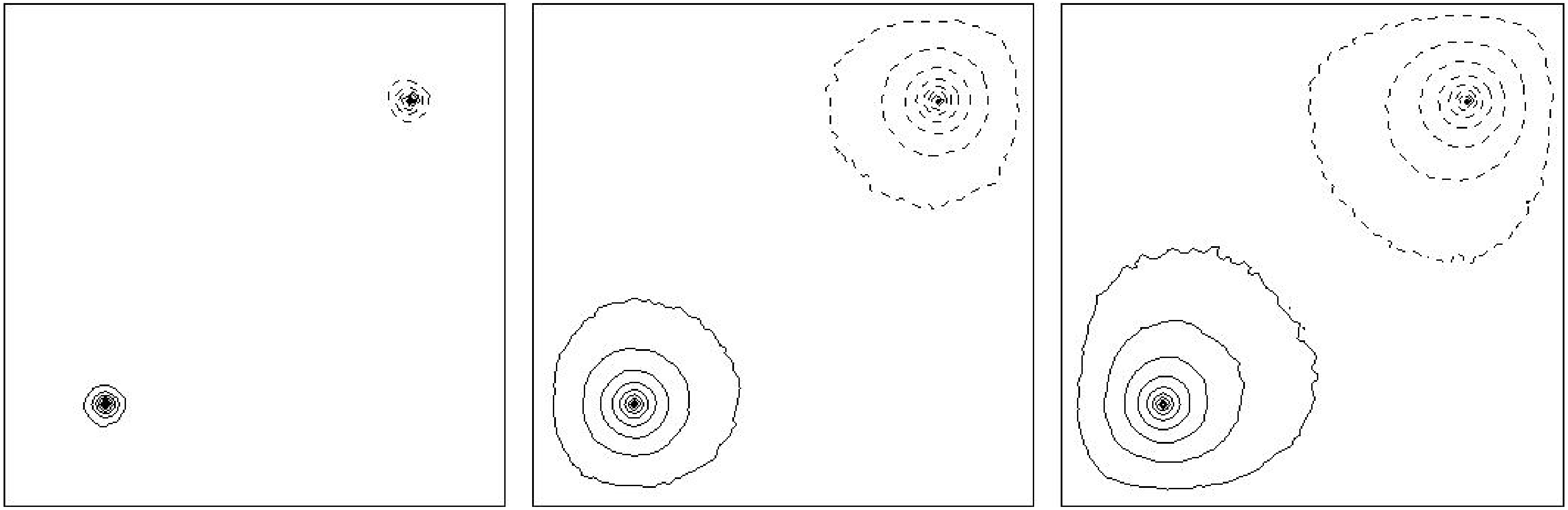
$$F[\Phi] = \int_V d^3\vec{r}\,\left[\frac{D}{2}|\nabla\Phi|^2 + Q\,\Phi\right]$$

– Minimum von $F$ $\longrightarrow$ stationäre Lösung

Finite Diffferenzen (2D): $\Phi(x,y) \to \Phi_{ij}$:

$$F(\Phi_{ij}) = \sum_{ij}^{M}\left[\frac{D}{8}\Big((\Phi_{i+1,j} - \Phi_{i-1,j})^2 + (\Phi_{i,j+1} - \Phi_{i,j-1})^2\Big) + Q_{ij}\,\Phi_{ij}\,\Delta x^2\right]$$

$$\Delta F = \frac{D}{2}\left(\tilde{\Phi}^2_{mn} - \Phi^2_{mn}\right) + \frac{D}{4}\left(\tilde{\Phi}_{mn} - \Phi_{mn}\right)\left(\frac{Q_{mn}}{D}\Delta x^2 - \Phi_{m+1,n} - \Phi_{m-1,n} - \Phi_{m,n+1} - \Phi_{m,n-1}\right)$$



$10^6$ $10^8$ $2 \cdot 10^9$

Variationen der Knotenpunkte

Temperatur $T = 4 \cdot 10^{-5}$, FD-Gitter $100 \times 100$

$Q_{20,20} = 1, \qquad Q_{80,80} = -1$