ÜBUNGEN zu "Monte-Carlo-Simulationen in der Physik" (WS 2004/05)

Prof. Dr. G. Münster, Dr. F. Farchioni, E-Mail: farchion@uni-muenster.de

Übungsblatt 3 **28.10.04**

Abgabe und Besprechung der Übungsaufgaben: 4.11.04

Die Quellendateien der benutzten Programme bitte an die obige E-Mail-Adresse senden!

Aufgabe 6: Detailliertes Gleichgewicht

Ein statistisches System habe zwei Zustände, nummeriert durch $i = 1, 2$, die mit den Wahrscheinlichkeiten $\pi(i)$ angetroffen werden. Die $\pi(i)$ seien beiden ungleich Null. Finden Sie die allgemeinste stochastische Matrix $w = \{w(i \to j)\}$, die die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (keine Summe über wiederholte Indizes!)

$$\pi(i)\, w(i,j) = \pi(j)\, w(j,i) \qquad \text{für } i = 1,2 \text{ und } j = 1,2$$

erfüllt.

Aufgabe 7: Monte-Carlo-Simulation eines Zwei-Niveau-Systems

Ein statistisches System habe zwei Zustände, nummeriert durch $i = 1, 2$. Übergänge zwischen diesen beiden Zuständen seien beschrieben durch die stochastische Matrix

$$w = \begin{pmatrix} w(1 \to 1) & w(1 \to 2) \\ w(2 \to 1) & w(2 \to 2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \exp(-2h) & \exp(-2h) \\ 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

Dabei sei $h > 0$. Finden Sie die Gleichgewichtsverteilung $(\pi(1), \pi(2))$

a. für alle h durch analytisches Lösen der Stationaritätsbedingung

$$\sum_{i=1}^{2} \pi(i)\, w(i,j) = \pi(j) ,$$

b. für den Fall $h = 1$ durch eine Computersimulation des, durch w beschriebenen, stochastischen Prozesses. In diesem Fall wird, ausgehend von einem beliebigen Anfangszustand (1 oder 2), eine Markov-Kette von Zuständen des Systems erzeugt: Das Resultat für $\pi(i)$ ist durch die Eintrittshäufigkeit der zwei Zustände in der Markov-Kette gegeben.

Hinweis: Der Übergang $i \to j \neq i$ mit assoziierter Wahrscheinlichkeit $p < 1$ kann simuliert werden, indem man eine Zufallszahl $r \in [0, 1)$ erzeugt: Der Übergang $i \to j \neq i$ findet nur statt wenn $r < p$ (sonst bleibt der Zustand unverändert).