Vorlesung 5.12

Donnerstag, 5. Dezember 2024 11:34

Metropolis-Algorithmus

Simulation von Systemen mit vielen Freiheitsgraden

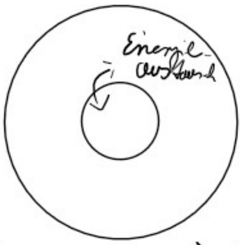
Proteinfaltung Zufallsweg $X_j = \{(x_{j1}, y_{j1}), \dots, (x_{jN}, y_{jN})\}$

Magnetismus: Spin-Konfigurationen

Energieausdruck $E(x_j)$

Kanon. Gesamtheit, natürliche Variable T

System Kontakt mit Wärmebad



$x_0 \to x_1 \to x_2 \to \dots$

Zentrale Größe, kanon. Zustandssumme Z

$$Z = \sum_{x_j} \exp\{-\beta H(x_j)\}$$

Freie Energie $F = -k_B T \ln(Z)$

$$S(x_j) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H(x_j))$$

Erwartungswerte von Observable O

$$\langle O \rangle (T) = \sum_{x_j} O(x_j) S(x_j)$$

Problem: kann nur endlich viele Zustände berücksichtigen

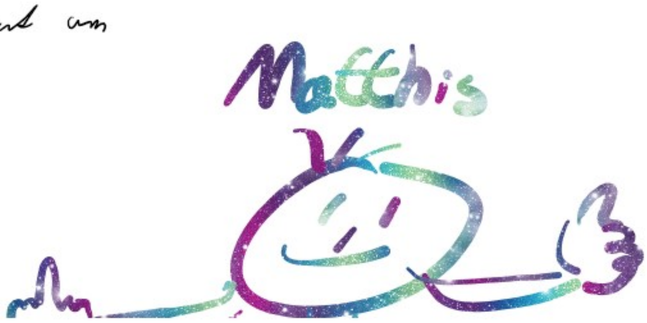
Die meisten statistischen Zustände sind nicht relevant (stat. Gewicht ist gering)

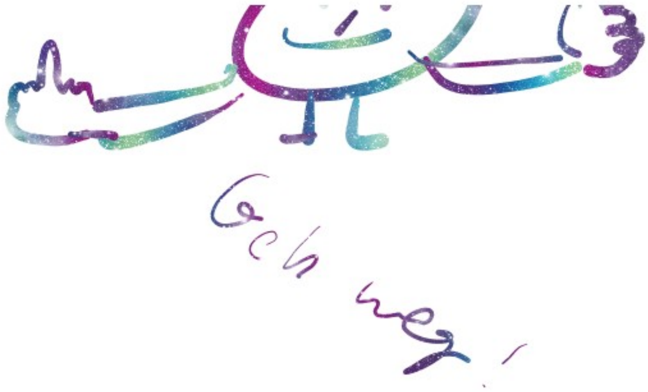
Importance sampling

Wichtig: S ist sehr stark konzentriert um

$$\langle E \rangle (T) = \sum_{x_j} H(x_j) S(x_j)$$

Ziel: suche x_j mit $H(x_j) \sim \langle E \rangle$





starte mit x_0 und versuche Anfangszustand zu "verbessern"

System soll sich in Richtung therm. GG bewegen.

Konstruiere Folge

$$x_0 \longrightarrow x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow \dots x_n$$

die möglichst schnell ins therm. GG führt

Konstruktion der Folge:

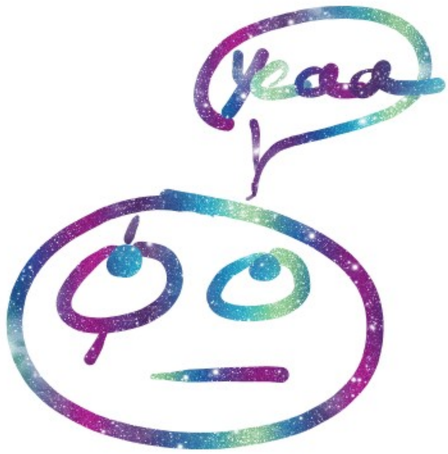
Zustand x_{n+1} bestimmt durch x_n

Markov-Kette

Brauche Übergangswahrscheinlichkeit $P(x_i \to x_{i+1})$

Zeitliche Änderung

$$\frac{d}{dt} S(x_i) = \sum_j \left[S(x_j) P(x_j \to x_i) - S(x_i) P(x_i \to x_j) \right]$$



Gleichgewicht:

stationäre Verteilung

$$S(x_i) P(x_i \to x_j) - S(x_j) P(x_j \to x_i) = 0$$

$$P(x_i \to x_j) = \frac{S(x_j)}{S(x_i)} P(x_j \to x_i)$$

$$P(x_i \to x_j) = \exp(-\beta(H(x_j) - H(x_i))) P(x_j \to x_i)$$

Forderung:

Falls $H(x_i) > H(x_j) \Rightarrow P(x_i \to x_j) = 1$

$$P(x_j \to x_i) = \exp(-\beta(H(x_i) - H(x_j)))$$

$$x_0 \to \dots \; x_n$$