

## Übungen zur Computerorientierten Physik

### 9 Verteilung der Endpunkte von Random Walks

Ein Random Walk ist ein aus Zufallsschritten bestehender zurückgelegter Weg. Hier betrachten wir den  $d = 1$  dimensionalen Raum, also die  $x$ -Achse, mit Start bei  $x = 0$ . Der aus  $n$  Schritten  $\delta = (\delta_1, \dots, \delta_n)$  bestehender Walk ist dann am Ort

$$x(\delta) = \sum_{i=1}^n \delta_i. \quad (1)$$

Hier betrachten wir die Schritte  $\delta_i = \pm 1$  mit Wahrscheinlichkeiten

$$q(\delta) = \begin{cases} \lambda & \text{für } \delta = 1 \\ 1 - \lambda & \text{für } \delta = -1. \end{cases} \quad (2)$$

Die Verteilung der Anzahl  $r$  der Schritte nach rechts ist gegeben durch die Binomialverteilung

$$B(r) = \binom{n}{r} \lambda^r (1 - \lambda)^{n-r}. \quad (3)$$

Aus  $r$  Schritten nach rechts und  $n - r$  Schritten nach links resultiert der Ort  $x = r - (n - r) = 2r - n$ , also gilt  $r = (x + n)/2$ . Damit ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für Ort  $x$  gegeben durch  $P(x) = B((x + n)/2)/2$ .<sup>1</sup>

Für große  $n$  nähert sich  $P(x)$  nach dem zentralen Grenzwertsatz der Gaußverteilung. Ein Einzelschritt  $\pm 1$  hat den Erwartungswert  $E[X] = \lambda - (1 - \lambda) = 2\lambda - 1$  und die Varianz  $\text{Var}(X) = E[X^2] - E[X]^2 = 1 - (2\lambda - 1)^2 = 4(\lambda - \lambda^2)$ , also  $E[X] = 0$  und  $\text{Var}(X) = 1$  für  $\lambda = 1/2$ . Daraus erhält man die entsprechenden Werte der Gaußverteilung zu  $nE[X]$  und  $n\text{Var}(X)$ . Hier sollen Sie  $P(x)$  numerisch mit einem *large-deviation Ansatz* ermitteln. Das erlaubt Ihnen  $P(x)$  auch in Bereichen zu ermitteln in denen die Wahrscheinlichkeit sehr klein ist, wie z.B. auch  $P(x) = 10^{-15}$ .

Dazu implementieren Sie eine Monte Carlo Simulation im Konfigurationsraum der Walks  $\delta = (\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_n)$ . In jedem Monte Carlo Schritt  $t$  generieren Sie, gegeben die aktuelle Konfiguration  $\delta(t)$  mit Ort  $x(t) := x(\delta(t))$  eine Test-Konfiguration  $\delta^*$  indem Sie im Vektor  $\delta(t)$  der Schritte einen Eintrag  $i_0$  zufällig auswählen, den Wert neu gemäß (2) auslosen, und den zugehörigen Endort  $x^* := x(\delta^*)$  ermitteln. Diesen Testzustand akzeptieren ( $\delta(t+1) = \delta^*$ ) Sie dann mit der Metropolis Wahrscheinlichkeit

$$p_{\text{Metr}} = \min\{1, \exp[-(x^* - x(t))/T]\}, \quad (4)$$

---

<sup>1</sup>Der Faktor  $1/2$ , weil die möglichen Werte nur im Abstand 2 vorkommen, also Binbreite 2.

andernfalls wird, wie üblich, die aktuelle Konfiguration beibehalten ( $\delta(t+1) = \delta(t)$ ). Hierbei ist  $T$  eine Art Temperatur, die steuert wie die gewünschte Verteilung aussieht. Die Monte Carlo Simulation realisiert die Boltzmann Verteilung  $\sim \exp(-x/T)$ . Für  $T \rightarrow \infty$  wird der Boltzmann Faktor 1, also werden damit die ursprünglichen Random Walks simuliert. Für  $T \rightarrow 0^+$  werden bevorzugt Walks mit kleinen (negativen) Endpunkten simuliert, für  $T \rightarrow 0^-$  bevorzugt Walks, die weiter nach rechts gehen. Man kann leicht zeigen, dass für die Verteilung der Endpunkte bei Temperatur gilt

$$P_T(x) = \frac{e^{-x/T}}{Z_T} P(x) \quad (5)$$

wobei  $P(x)$  die Verteilung der Endpunkte des ursprünglichen Random Walks ist, und  $Z_T$  ein (erst mal unbekannter) Normierungsfaktor. Die Gleichung besagt, dass man die ursprüngliche Verteilung der Endpunkt über  $P(x) = \exp(x/T) Z_T P_T(x)$  aus mehreren bei verschiedenen Temperaturen  $T$  erhaltenen Verteilungen erhalten kann. Dazu muss man die  $Z_T$  Werte bestimmen. Man sollte auch eine sehr hohe Temperatur, quasi  $T = \infty$ , simulieren. Dazu wählt man  $Z_\infty = 1$ , was eine gute Approximation ist, und wählt dann für andere Werte von  $T$  (beginnend mit denen "nahe" bei  $T = \pm\infty$ ) die anderen Werte von  $Z_T$  so dass sich beim Plotten aller reskalierten Verteilungen eine "glatte" Gesamtverteilung ergibt (das verstehen Sie, wenn Sie es praktisch machen ;-)

- Laden Sie das Programm `random_walk_rare_fragment.c` vom StudIP. Sie können es direkt mit

```
cc -o rw_rare random_walk_rare_fragment.c -lm -Wall -g
```

compilieren. Schauen Sie sich die vorhandenen Funktionen an.

- Vervollständigen Sie die Monte Carlo-Funktion `rw_mc_step()`, so dass das beschriebene Verfahren implementiert wird. (5 Punkte)
- Führen Sie Simulationen für  $n = 100$  Walk Schritte,  $\lambda = 0.5$ , 10000 Monte Carlo Schritte (oder mehr) jeweils für die Temperaturen  $T = 1000$ ,  $T = -2$  und  $T = -1$  durch. Mit diesen drei Temperaturen können Sie fast den ganzen positiven Bereich der Verteilung erhalten. Die Histogramme werden in die `*.histo` Dateien geschrieben. (1 Punkt)
- Sie können während der Simulation die Zeitreihen  $x(t)$  in eine Datei umleiten. Plotten Sie für  $T = -1$  die Zeitreihe für kleine Schrittzahlen. Wie schnell in etwa equilibriert die Simulation? (1 Punkt)
- Plotten Sie die drei Histogramme in einem Plot. (1 Punkt)
- Plotten Sie die mit  $Z_T \exp(x/T)$  reskalierten Histogramme im Bereich  $x > 0$ . Wählen Sie die Parameter  $Z_T$  "per Hand" passend, so dass, mehr oder weniger, EINE zusammenhängende Verteilung entsteht.

Sie können in `gnuplot` eine reskalierte Verteilung plotten, z.B. mit

```
plot "rw_N100_10.50_mcT-2.000.histo" u 1:($2*Z2*exp($1/(T2)))"
```

wobei  $T_2$  die entsprechende Temperatur (hier  $T_2=-2$ ) und  $Z_2$  die per Hand passend gewählte Normierungskonstante ist (initial mit  $Z_2=1$  starten und dann iterativ jeweils plotten und  $Z_2$  ändern). Analog verfahren Sie mit den Daten für  $T = -1$ .

Vergleichen Sie mit der exakten Verteilung  $P(x)$  (hier nur für  $\lambda = 0.5$ ) und die Gaußnäherung zum Vergleich. In **gnuplot** können Sie diese wie folgt definieren:

```
B(x)=gamma(n+1)/(gamma(x+1)*gamma(n-x+1))*2**(-n)
```

```
P(x)=B( (x+n)/2 )/2
```

```
G(x)=exp(-x*x/(2*n))/sqrt(2*pi*n)
```

(2 Punkte)