Block-Analyse (blocking analysis)

Alternative zu expliziter Berücksichtigung der Autokorrelationszeit. Fasse je z Datenpunkte zusammen: $Y_i = \frac{1}{z}\sum_{j=1}^{z} X_{z(i-1)+j}$

Wahrscheinlichkeitsverteilungen

$$P[a \le X \le b] = \int_a^b p(X)\,dX \qquad (X \in \mathbb{R})$$

↑Wahrscheinlichkeit ↑W'-Dichte

differentiell: $dP = p(X)\,dX$

Betrachte nun Abbildung $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R} : X \mapsto Y = f(X)$
Dabei sei f (der Einfachheit halber) monoton steigend.
Offensichtlich gilt dann:

$$P[f(a) \le Y \le f(b)] = P[a \le X \le b] \qquad (Y = f(X))$$

bzw. differentiell: $p_Y(Y)\,dY = p_X(X)\,dX$

$$p_Y(Y) = p_X(X)\,\frac{dX}{dY} = \left.\frac{p_X(X)}{f'(X)}\right|_{X=f^{-1}(Y)}$$

Damit lässt sich für eine gegebene Transformationsfunktion $f(X)$ und eine gegebene W'-Verteilung der Zufallsvariable X die W-Verteilung von Y bestimmen.

Umgekehrt können wir im Prinzip jede gegebene W'-Verteilung in jede andere transformieren. ✗

Beispiel 3) $p_X(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$

nicht in Vorl.

$$f(x) = \tan(\pi x)$$

$$f'(x) = \pi \frac{\cos^2(\pi x) + \sin^2(\pi x)}{\cos^2(\pi x)} = \pi\,(1+\tan^2(\pi x))$$

$$\Rightarrow \quad p_Y(y) = \frac{1}{\pi(1+\tan^2(\pi x))} = \frac{1}{\pi(1+y^2)}$$

Lorentz/Cauchy-Verteilung

Dazu betrachten wir die Verteilungsfunktionen

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^{x} p_X(x')\,dx' \stackrel{!}{=} \int_{-\infty}^{y} p_Y(y')\,dy' = F_Y(y)$$

für $y = f(x)$

Sei nun X standard-gleichverteilt $\Rightarrow F_X(x) = x$

$$\Rightarrow \boxed{x = f^{-1}(y) = F_Y(y) = \int_{-\infty}^{0} dy'\, p_Y(y')}$$

Problem: Das Integral der gewünschten Verteilung muss berechenbar und umkehrbar sein.

Das gilt z. B. nicht für Normalverteilung

Box-Muller-Algorithmus: Seien u_1, u_2 gleichvert. in $[0,1)$. Dann sind die Größen

$$z_1 = \sqrt{-2\ln(1-u_1)}\,\cos(2\pi u_2)$$
$$z_2 = \sqrt{-2\ln(1-u_1)}\,\sin(2\pi u_2)$$

standard-normalverteilt.

Beweis: Hausaufgabe

I.2 Metropolis Monte-Carlo Methode

Generische Aufgabenstellung: Berechnung von Integral (oder Summe), z. B. über Teilgebiet des $\mathbb{R}^d$

$$I = \int_V d^d r \; f(\vec{r}) ; \qquad V \subset \mathbb{R}^d$$

kompakt + endlich

Deterministischer Lösungsansatz: wähle regelmäßiges Gitter, z.B. isotrop mit Schrittweite h

$$\vec{r}_{\vec{n}} = h\,\vec{n} \qquad (\vec{n} \in \mathbb{Z}^d)$$

und approximiere Integral durch diskrete Approximation (numerische Integration):

$$I \approx h^d \sum_{\substack{\vec{n} \\ \vec{r}_{\vec{n}} \in V}} f(\vec{r}_{\vec{n}})$$

Problem: der relative Fehler ist proportional zur Schrittweite h^s (z. B. h oder h^2), der Aufwand t skaliert aber mit der Anzahl der Funktionsauswertungen:

$$t \approx \frac{V}{h^d} \propto h^{-d} \quad \Rightarrow \quad \Delta I \propto h^2 \propto t^{-2/d}$$

fällt für große d nur sehr langsam ab bei Rechenzeit $t \to \infty$

Beispiel 2a: Bei Integration 2. Ordnung und $d = 200$ muss man für Halbierung des Fehlers $2^{100} \approx 10^{30}$ mal länger rechnen.

Alternative: stochastischer Ansatz

(i) Monte Carlo (MC) ohne Gewichtung (simple Monte Carlo)

$$I \approx I_N = V \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\vec{r}_i)$$

mit zufällig, gleichverteilt gezogenen Koordinaten (d.h. konstante Wahrscheinlichkeitsdichte für mögliche Koordinaten):

$$p(\vec{r}_i) = \frac{1}{V}$$ (mittels Standard-Zufallszahlengenerator)

Falls die Varianz σ_f^2 von f auf V existiert (und endlich ist), konvergiert die MC-Auswertung für lange Zeiten laut dem Gesetz der großen Zahl:

$$\Delta I_N = \frac{\sigma_f}{\sqrt{N}} \xrightarrow{N\to\infty} 0$$ [Anmerkung: hier $\tau = 0$; wieso?]

$$\Delta I_N \propto t^{-\frac{1}{2}}$$ (statt $t^{-2/d}$)

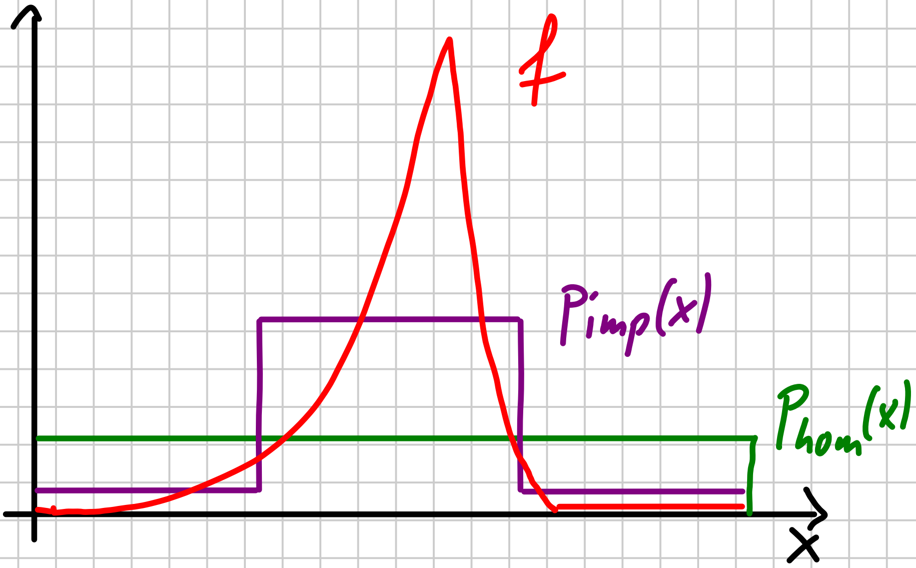
Schon bei $d \geq 5$ konvergiert die MC-Lösung also schneller als ein Integrationsverfahren mit Fehler $\propto h^2$.

Beispiel 2b: Für Beispiel 2a ($d=200$) lässt sich der Fehler (wie in allen Anwendungen) durch 4 Mal höhere Rechenzeit halbieren (statt Faktor 10^{30}).

Problem: die Varianz σ_f^2 ist häufig groß, insbesondere in Anwendungen der Statistischen Physik (Schwankung des Boltzmann-Faktors $e^{-\beta E_i}$ um viele Größenordnungen).

(ii) Monte Carlo mit Gewichtung („importance sampling")

Idee: konzentriere Stichproben $\vec{r}_i$ auf Bereiche, die besonders stark zum Integral beitragen.



Man wählt also eine Verteilungsfunktion $p(x)$, die $|f(x)|$ approximiert.

Formal: zerlege Integrand $f(\vec{r})$ in Wahrscheinlichkeits-anteil $p(\vec{r})$ und Observablenanteil $o(\vec{r})$:

$$I = \int_V d^d r \; f(\vec{r}) = \int_V d^d r \; p(\vec{r})\, o(\vec{r})$$

$$\approx V \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} o(\vec{r}_i) \; ; \quad \vec{r}_i \text{ zufällig mit Wahrscheinlichkeitsv. } p(\vec{r}_i)$$

beachte: Normierung von $\underbrace{p(\vec{r})}_{(=1)}$ muss bekannt sein!

$$\Delta I_N = \frac{\sigma_o}{\sqrt{N}} \; ; \quad \sigma_o \ll \sigma_f$$

für geeignete Wahl von $o(\vec{r})$

Problem: Wie realisiert man inhomogene W.-Verteilungen?

- Variablen-Transformation
- Box-Müller für Gauß-Verteilung
- Von-Neumann „rejection method" – i.A. ineffizient
- ??? (keine allg. gute Methode verfügbar!)