Neue Algorithmen zur Simulation von Zufallsprozessen

Dynamische Monte–Carlo–Methoden für Diffusionssysteme

Von der Mathematisch–Naturwissenschaftlichen Fakultät
– Fachbereich 1 –
der Rheinisch–Westfälischen Technischen Hochschule Aachen
genehmigte Dissertation zur Erlangung des akademischen Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften

von

Diplom–Physiker

Thomas Fricke

aus Olpe in Westfalen

Referent : Universitätsprofessor Dr. J. Schnakenberg

Koreferent : Universitätsprofessor Dr. G. Roepstorff

Tag der mündlichen Prüfung: 27. Juni 1994

D 82 – Diss. RWTH Aachen

Inhalt

Zeichen und Symbole iii

Einleitung v

1 Simulation diskreter und kontinuierlicher stochastischer Prozesse 1

1.1 Simulation diskreter stochastischer Prozesse 4

1.1.1 Exakte Verfahren 5

1.1.2 Die Minimal–process–method – der GILLESPIE–Algorithmus . . 6

1.1.3 Verallgemeinerte Verzweigungsprozesse 15

1.2 Die Simulation kontinuierlicher stochastischer Prozesse 20

1.2.1 LIOUVILLE–Prozesse 20

1.2.2 Diffusions–Prozesse 21

2 Das Einbettungsverfahren 25

2.1 Verwerfungsverfahren und Nullprozesse 27

2.2 Übertragung auf kontinuierliche Prozesse 28

2.3 Diffusion und Zerfall 30

2.4 Der Vorschlagsschritt 33

2.5 Die Iteration von Diffusion und Verzweigung 36

2.6 Das Einbettungsverfahren 38

2.7 Die Darstellung der Dichte im Rechner 47

3 Anwendungen des Einbettungsverfahrens 51

3.1 Entkommen aus einem Gebiet G 52

3.2 Reflektierende Randbedingungen 61

3.3 Überlagerung von Entkommens– und Zerfallsprozessen 62

4 Das Trapping–Problem 67

4.1 Problemstellung 67

4.2 Der Random–walker zwischen Traps 68

4.3 Die Suche der nächsten Trap in multibinären Bäumen 69

4.4 Die verallgemeinerte Ordnungsrelation 71
4.5 Die Datenstruktur 73
4.6 Rekursives Suchen der nächsten Trap 73
4.7 Abbruchkriterium für das Finden des nächsten Nachbarn 74
4.8 Haupt- und Nebensuche 75
4.9 Einfügen einer Trap 78
4.10 Ergebnisse der Simulationen 79

5 Schrödinger–Verzweigungsprozesse **83**
5.1 Die Schrödinger–Gleichung in imaginärer Zeit 84
5.2 Die Schrödinger–Gleichung als Verzweigungsprozeß 86
5.3 Die Implementation 93
5.4 Einfache Beispiele 97
Der harmonische Oszillator 99
Das Wasserstoffproblem 102
Orthohelium 105

6 Fokker–Planck–Gleichungen **111**
6.1 Ornstein–Uhlenbeck–Prozeß und Harmonischer Oszillator 113
6.2 Algorithmische Lösbarkeit der Kramers–Gleichung 113
6.2.1 Die freie Kramers–Gleichung 114
6.2.2 Die Vielteilchen Kramers–Gleichung 117
6.2.3 Das Einbettungsverfahren und Molekulardynamik? 119
6.2.4 Diffundierende harte Scheiben 119
6.3 Eignung des Verfahrens für First–passage–time–Probleme 121

Anhänge **132**
A Fehlerbetrachtung für stochastische Zeitschrittverfahren 132
B Auswertung der Simulationen des Trapping–Problems 135
C Bose und Fermi Statistik 144

Verzeichnis der Abbildungen und Tabellen **151**

Verzeichnis der Algorithmen **154**

Index **156**

Lebenslauf **162**