

(iii) Markov-Ketten - Monte Carlo, Metropolis - Algorithmus

Idee: erzeuge Kette $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \dots$ von Zuständen, wobei die Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(\vec{r}_n)$ asymptotisch gegen eine gewünschte Verteilung $p(\vec{r})$ konvergiert.

Definition: Ein Stochastischer Prozess ist eine Familie von Zufallsvariablen $(X_t)_{t \in I}$, wobei die Indexmenge geordnet ist: $I = \{t_0 < t_1 < \dots\}$. Für eine abzählbare Menge I (typisch $I = \mathbb{N}$) heißt der Prozess **zeitdiskret**, sonst **zeitstetig** (z. B. für $I = \mathbb{R}_0^+$).

Bemerkung: Die Wertemengen der Zufallsvariablen können in beiden Fällen diskret oder stetig sein.

Wichtig: Zur vollständigen Charakterisierung eines Stochastischen Prozesses müssen neben den Wahrscheinlichkeitsverteilungen für festes t (1-Punkt-Verteilungen)

$$p_n(x_{t_n}) \equiv p(x_{t_n}, t_n)$$

i.a. auch alle n -Punkt-Verteilungen spezifiziert werden, z. B. $p(x_{t_n}, t_n; x_{t_{n-1}}, t_{n-1}; \dots; x_{t_1}, t_1)$

Beispiel 3a: Wiederholter Münzwurf; bei „Zahl“ steigt der Kontostand des Spielers um 1, bei „Wappen“ sinkt er um 1.

$$p_0(x) = \delta_{x,0} ; \quad p_1(x) = \frac{1}{2}(\delta_{x,-1} + \delta_{x,1}); \quad (\text{hier } t_n = n)$$

$$p_2(x) = \frac{1}{4} (\delta_{x,2} + 2 \delta_{x,0} + \delta_{x,-2}) \equiv p(x_2, 2) \dots$$

aber: $p(x_n, n | x_{n-1}, n-1) = \frac{1}{2} (\delta_{x_n, x_{n-1}-1} + \delta_{x_n, x_{n-1}+1})$
 \uparrow bedingte W'

(Allgemein gilt: $p(x_n, n; x_m, m) = p(x_n, n | x_m, m) p(x_m, m)$)

Beispiel 3b: ein modifiziertes Spiel, in dem nach jedem Wurf das Vorzeichen des Kontostandes invertiert wird, hat zwar die gleiche 1-Punkt-Verteilung wie Bsp. 3a, aber andere n -Punkt-Verteilungen für $n \geq 2$.

Definition: Einen stochastischen Prozess, in dem die bedingte W' -Verteilung nur vom letzten bekannten Zustand abhängt, nennt man **Markov-Prozess**:

$$p(x_n, t_n | x_{i_1}, t_{i_1}, \dots, x_{i_k}, t_{i_k}) = p(x_n, t_n | x_{i_s}, t_{i_s}) \text{ für } t_{i_s} = \max_{1 \leq j \leq k} \{t_{i_j}\}$$

Beispiel: Zufallsbewegungen (Random Walks) wie Bsp. 3a sind Markov-Prozesse; auch 3b ist Markov-Prozess.

Ein Markov-Prozess hat also ein minimales „Gedächtnis“; Prozesse ohne Gedächtnis nennt man **unkorreliert**.

Wichtiger Spezialfall: Markov-Prozesse mit stationären (zeitlich translationsinvarianten) Übergangswahrscheinlichkeiten

$$p(x_n, t_n | x_k, t_k) = p_t(x_n | x_k); \quad t = t_n - t_k$$

Jetzt: zeitdiskreter Fall mit $t_n = n$ und stationären Übergangswahrscheinlichkeiten. Betrachte speziell einzelnen Zeitschritt: $p_1(x_{n+1} | x_n) \equiv W(x_{n+1} | x_n)$ "Übergangsrates"

Es gilt die **Master-Gleichung**

$$p_{n+1}(x) = p_n(x) + \sum_{x'} W(x | x') p_n(x') - \sum_{x'} W(x' | x) p_n(x)$$

Die W -Verteilung ist genau dann **stationär**, falls sich für jedes x die Zu- und Abflüsse die Waage halten. **Beispiel: Wasserleitungen + Reservoirs**

Hinreichende Bedingung für die Stationarität einer gewünschten Gleichgewichtsverteilung $p_{eq}(x)$ ist

$$\text{Detailliertes Gleichgewicht: } \frac{W(x | x')}{W(x' | x)} = \frac{p_{eq}(x)}{p_{eq}(x')} \quad \forall x, x'$$

Markov-Ketten-Monte-Carlo-Algorithmen konstruieren Markov-Ketten, für die (i) eine vorgegebene W -Verteilung stationär ist (detailliertes Gleichgewicht wird erfüllt) und die (ii) ergodisch sind (alle Zustände mit $p_{eq}(x) > 0$ sind erreichbar).

Vereinfachung: betrachte in jedem Zeitschritt nur "Umgebung" von gegebenem Zustand x . Teile dazu auf:

$$W(x'|x) = W_{\text{Vorschlag}}(x'|x) W_{\text{Akzeptanz}}(x'|x)$$

und wähle Vorschlagsw' symmetrisch: $W_{\text{Vorschlag}}(x'|x) = W_{\text{Vorschlag}}(x|x')$

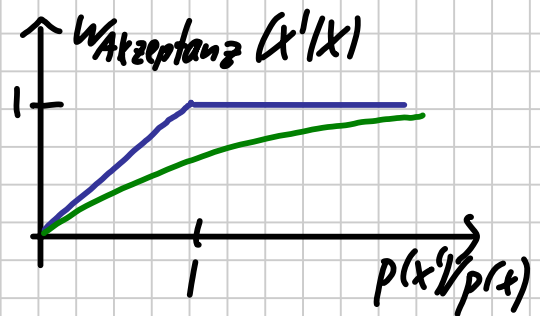
(**Beispiele:** Intervall/Hyperkubus im kontinuierlichen Fall, z.B. $W_{\text{Vorschlag}}(x'|x) = \frac{1}{a} \Theta(\frac{a}{2} - |x - x'|)$ oder Einzel-Spin-Flip im Ising-Modell \uparrow (hier: W'dichte) (oder d-dim Gauß-Vert.)

Dann reicht detailliertes Gleichgewicht für die Akzeptanzraten aus. Möglichkeiten:

(i) $W_{\text{Akzeptanz}}(x'|x) = \min \left\{ 1, \frac{P_{\text{eq}}(x')}{P_{\text{eq}}(x)} \right\}$ **Metropolis-Regel**

(ii) $W_{\text{Akzeptanz}}(x'|x) = \frac{P_{\text{eq}}(x')}{P_{\text{eq}}(x) + P_{\text{eq}}(x')}$ **heat bath**

Dabei hat der Metropolis-Algorithmus den Vorteil der höchstmöglichen Akzeptanzrate, der heat bath - Algorithmus stellt dagegen instantan das lokale Gleichgewicht her.



Allgemeiner Metropolis-Algorithmus (Vorschlagsw' nicht notwendig symmetrisch):

$$W_{\text{Akzeptanz}}(x'|x) = \min \{ 1, r \}, \quad r = \frac{P_{\text{eq}}(x')}{P_{\text{eq}}(x)} \frac{W_{\text{Vorschlag}}(x|x')}{W_{\text{Vorschlag}}(x'|x)}$$

Beachte: Im Grenzfall optimaler Vorschlagsw' werden alle Vorschläge akzeptiert.

Typische Realisierung des Metropolis-Algorithmus' in der (klassischen) Statistischen Physik:

Boltzmanngewicht $p_i \propto e^{-\beta E_i}$ für Zustand i mit Energie E_i ($\beta = (k_B T)^{-1}$)

(0) Initialisiere Konfiguration

(i) Wähle Teilchen (in Kontinuum oder auf Gitter) bzw. Spin n aus ($1 \leq n \leq N$) - entweder zufällig oder bei jedem Durchgang (sweep) alle in fester Reihenfolge.

(ii) Schlage Veränderung von Teilchen n vor: Umklappen oder Verdrehen des Spins, Hüpfen oder Verschieben des Teilchens; berechne Energiedifferenz ΔE

$$r = e^{-\beta \Delta E} \frac{W_{\text{vorschlag}}(x_{\text{neu}} | x_{\text{alt}})}{W_{\text{vorschlag}}(x_{\text{alt}} | x_{\text{neu}})}$$

(iii) Akzeptiere Update mit $W' \min\{1, r\}$, sonst behalte alte Konfiguration.

(iv) Messe Observablen (z.B. Ausgabe in Datei)

#sweeps erreicht?	
nein	ja

→ (v) Berechne Mittelwerte mit Standardabweichung, Verteilungen, ...

Wichtig: (i) Die ersten Durchgänge, bei denen die W' -verteilung noch zu weit von der Stationarität entfernt ist, dürfen nicht für Observablenmittelwerte verwendet werden.

Typische Wahl: 1% - 10% warm-up sweeps.

(ii) Zustandssumme / Freie Energie nicht messbar!

I.3 Statistische Physik im kanonischen Ensemble

Zustandssumme: $Z = \text{Spur} \{ e^{-\beta \mathcal{H}} \}; \quad \beta = \frac{1}{k_B T}$

Hamiltonoperator \mathcal{H} , z.B. für Ising-Modell (mit Magnetfeld):
$$\mathcal{H}_{\text{Ising}} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mu_B B \sum_i \sigma_i$$

Im klassischen Fall bzw. für diagonalisierbares \mathcal{H} lässt sich die Zustandssumme vereinfachen:

$$Z = \sum_{\text{alle Zustände}} e^{-\beta \mathcal{H}_i} \quad \leftarrow \equiv E_i$$

Allg. Mittel/Erwartungswerte: $\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i O_i e^{-\beta \mathcal{H}_i}$

Helmholtzsche Freie Energie: $F = -k_B T \ln Z$

Innere Energie: $E = \langle \mathcal{H} \rangle = \frac{\sum_i \mathcal{H}_i e^{-\beta \mathcal{H}_i}}{\sum_i e^{-\beta \mathcal{H}_i}} = \frac{-\partial Z / \partial \beta}{Z}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \beta}{\partial T} &= -\frac{1}{k_B T^2} \rightarrow \\ &= -\frac{\partial (\ln Z)}{\partial \beta} = \frac{\partial (\beta F)}{\partial \beta} = F + \beta \frac{\partial F}{\partial \beta} \\ &= F - T \frac{\partial F}{\partial T} = F - TS \end{aligned}$$

Entropie: $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$

Spezifische Wärme: $C = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\partial E}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T}$
$$= \frac{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2}{k_B T^2}$$

Sehr nützlich in MC-Kontext, erspart numerische Differentiation.

Magnetisierung (hier konkret für Ising-Modell):

$$m = \langle \mu_B \sum_i \sigma_i \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial (\ln Z)}{\partial B}; \quad M = \frac{m}{N \mu_B}$$

Phasenübergänge: Singularitäten thermodynamischer Größen (an Punkten/Linien/Flächen im Phasenraum)

Klassifikation nach Ehrenfest (F immer stetig)

Übergang 1. Ordnung: 1. Ableitung von F unstetig

Übergang 2. Ordnung: 1. Ableitungen von F stetig, 2. Ableitung unstetig (ggf. auch divergent)

Beachte: In Systemen mit einer endlichen Zahl von Zuständen können keine Phasenübergänge auftreten:

$$Z = \sum_{s=1}^{s_{\max} < \infty} e^{-\beta \chi_s} \quad \text{ist analytisch.}$$

Daher ist bei MC-Untersuchungen zu Phasenübergängen i. A. eine sorgfältige Finite-Size-Analyse essentiell.

Kritische Exponenten charakterisieren Systeme in der Nähe von Übergängen 2. Ordnung, sind **universell!**

$$\left. \begin{array}{l} \text{Magnetisierung} \\ \text{Suszeptibilität} \\ \text{Spez. Wärme} \\ \text{Korrelationslänge} \end{array} \right\} \begin{array}{l} m = m_0 \epsilon^\beta \\ \chi = \chi_0 \epsilon^{-\gamma} \\ C = C_0 \epsilon^{-\alpha} \\ \xi = \xi_0 \epsilon^{-\nu} \end{array} \quad \epsilon = \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|$$

Magnetisierung bei T_c : $m \propto B^{1/\delta}$