

# Metropolis-Algorithmus

Wn: imputatio samples

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(x_i)$$

Metropolis:

- Start mit einer Konfiguration  $\underline{x}_1$

- Wähle die folgende Konfiguration auf Basis einer lokalen Prop.

- Dabei werde die Übergangswahrs.  $w_{ij}$  so gewählt,

dass

$$\lim_{M \rightarrow \infty} P = P_{eq}(\underline{x}_1) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\underline{x}_1)}$$

$\overline{H, V, T}$   
Ersatz

$$w_{ij} P_{eq}(\underline{x}_i) = w_{ji} P_{eq}(\underline{x}_j)$$

Detailed Balance  $\Leftrightarrow$  strenge Definitio des Gleiches wird!

$$\frac{w_{ij}}{w_{ji}} = \frac{P_{eq}(\underline{x}_j)}{P_{eq}(\underline{x}_i)} = e^{-\beta(H(\underline{x}_j) - H(\underline{x}_i))} = e^{-\beta \Delta H}$$

Es geht also nur das Kehhältnis der Zustandsanteile ein, Zustandsumme ~~keine~~ sich nach!

Was ist  $w_{ij}$  selbst?

Es gibt versch. Möglichkeiten!

Allgemeiner Ansatz

$$w_{ij} = \alpha_{ij} P_{ij}^{\text{acc}}$$

$\alpha_{ij}$  : Wksh. bei dem Teilschritt  
 $x_i \rightarrow x_j$

$P_{ij}^{\text{acc}}$  : acceptance probability,  
(Akzeptanzwahsch.)

"Metropolis-Lösung" :

$$P_{ij}^{\text{acc}} = \begin{cases} 1, & \text{falls } P_{eq}(x_j) \geq P_{eq}(x_i) \\ \frac{P_{eq}(x_j)}{P_{eq}(x_i)}, & \text{sonst} \end{cases}$$

Zusammenfassend:

$$P_{ij}^{\text{arc}} = \min\left(1, \frac{P_{eq}(x_j)}{P_{eq}(x_i)}\right)$$

beachte:  $\frac{P_{eq}(x_j)}{P_{eq}(x_i)} = e^{-\beta(H(x_j) - H(x_i))}$

$\Rightarrow$  falls  $x_j$  mit einem geringeren Energie verknüpft ist, dann ist  $P_{ij}^{\text{arc}} = 1$

Beachte auch

Die Matrix  $\alpha$  mit Elementen  $\alpha_{ij}$  heißt "underlying matrix of the Markov chain"

sog. "stochastische Matrix"

Anforderungen:  $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$  = "Symmetrie"

$$\sum_j \alpha_{ij} = 1$$

Erhaltung der Unklarheit

Zeige nun, dass die Metropolis-Lösung (als d.h. die) Bedingung  $w_{ij} P_{eq}(x_i) = w_{ji} P_{eq}(x_j)$  und  $\sum_i w_{ji} = 1$  erfüllt (Detailed balance)

betrachte 3 Fälle

$$a) P_{eq}(x_i) = P_{eq}(x_j)$$

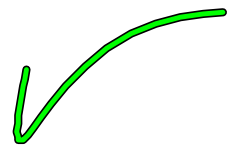
(d.h.  $H(x_i) = H(x_j)$ )  
Energie ändert sich nicht!

$$\text{Einkreis: } w_{ij} = \alpha_{ij} P_{ij}^{acc}$$

$$\text{Wieder: } P_{ij}^{acc} = 1 = P_{ji}^{acc}$$

$$\text{aus } \textcircled{*} \quad w_{ij} = \alpha_{ij} = \alpha_{ji} = w_{ji}$$

$$\sum_i w_{ji} = \sum_i \alpha_{ji} \left( \sum_i \alpha_{ij} \right) = 1$$



und

$$w_{ij} P_{eq}(x_i) = w_{ji} P_{eq}(x_j) \quad \checkmark$$

$$b) \text{ sei } P_{eq}(x_j) < P_{eq}(x_i)$$

$$(also H(x_j) > H(x_i))$$

$$\begin{aligned}
 \text{and } (*) : W_{ij} &= \alpha_{ij} P_{ij}^{arc} = \alpha_{ij} \frac{P_{eq}(x_j)}{P_{eq}(x_i)} \quad \leftarrow \text{Kategoriis bei} \\
 W_{ji} &= \alpha_{ji} \frac{P_{eq}(x_i)}{1} = \alpha_{ji}
 \end{aligned}$$

$$\sum_i W_{ji} = \sum_i \alpha_{ji} = 1 \quad \checkmark$$

$$\frac{W_{ij}}{W_{ji}} = \frac{\alpha_{ij} \frac{P_{eq}(x_j)}{P_{eq}(x_i)}}{\alpha_{ji} \cdot 1}$$

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$$

$$= \frac{P_{eq}(x_j)}{P_{eq}(x_i)} \quad \checkmark$$

$$\begin{aligned}
 c) \text{ sei } P_{eq}(x_j) > P_{eq}(x_i) &\rightarrow \begin{aligned} W_{ij} &= \alpha_{ij} \\ W_{ji} &= \alpha_{ji} \frac{P_{eq}(x_i)}{P_{eq}(x_j)} \end{aligned} \\
 \text{analog zu b) !} &
 \end{aligned}$$

# IV. Z.5. Metropolis für Spinsysteme

Betrachte Ising-System in Konv. Gest.

$$\text{d.h. } \underline{X} = \{s_1, \dots, s_N\}$$

↑  
Stabile  
Konfig!

$$s_i = \pm 1, \quad i = 1, \dots, N$$

$$H = -J \sum_{i=1}^N s_i \sum_{j \in \mathcal{Z}_i} s_j$$

Z.B.  $J > 0$   
ferromagnet.

Summe über die nächsten Nachbarn  
(dimensionabhängig)  
Z. Nachbar in  $D=1$  (Kette)  
& " " in  $D=2$  (Quadratgitter) → Randeffekte

Praktisch :

1) Wähle Anfangskonfiguration für die  $N$  Spins

2) Wähle einen Spin  $s_i$  aus

(Zwei Möglichkeiten)

Entweder alle die Nachbarn  $s_j$  oder  
Zufällig so, dass alle mit gleicher Wahrsch.  
daran kommen!)

3) Berechne die Größe  $\Delta H = H^{\text{neu}} - H^{\text{alt}}$ , die sich ergibt, wenn man  $S_i$  fortweise umdreht ("flipp")

#### 4) Metropolis - Entscheidung

$$\bullet \Delta H \leq 0 \Leftrightarrow \frac{P_{\text{eq}}(x^{\text{neu}})}{P_{\text{eq}}(x^{\text{alt}})} \geq 1$$

$$\Rightarrow P_{\text{alt} \rightarrow \text{neu}}^{\text{acc}} = 1$$

$\Rightarrow$  akzeptiere den "Move", d.h. ändere die Zustandsgleichung

$$\bullet \Delta H > 0 \rightarrow P_{\text{alt} \rightarrow \text{neu}}^{\text{acc}} = \frac{P_{\text{eq}}(x^{\text{neu}})}{P_{\text{eq}}(x^{\text{alt}})} = e^{-\beta \Delta H}$$

Erzeuge Zufallszahl

$$\xi \in [0, 1]$$

gleichförmige Verteilung

falls  $\xi < e^{-\beta \Delta H}$   $\therefore$  Akzeptiere den Move

$$\int > e^{-\beta \epsilon_{\text{eff}}}$$

: Abbildung des Konv.,  
d.h. alle Konfigurat.  
mit  $\epsilon_{\text{eff}}$  sind erlaubt!

Illustration.

Sei z.B.  $e^{-\beta \epsilon_{\text{eff}}} = 0.8$

Die Wahsch. eine Zufallszahl  $\leq 0.8$  zu erzeugen  
ist gerade 80%!

5) Wiederhole 2) mit dem  
nächsten Spin

⋮  
Seite!

Bemerkung

i) Berechnung von Mittelwert

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(x_i)$$

M: Zahl der MC-Schritte, nach  
Metropolis' generiert.



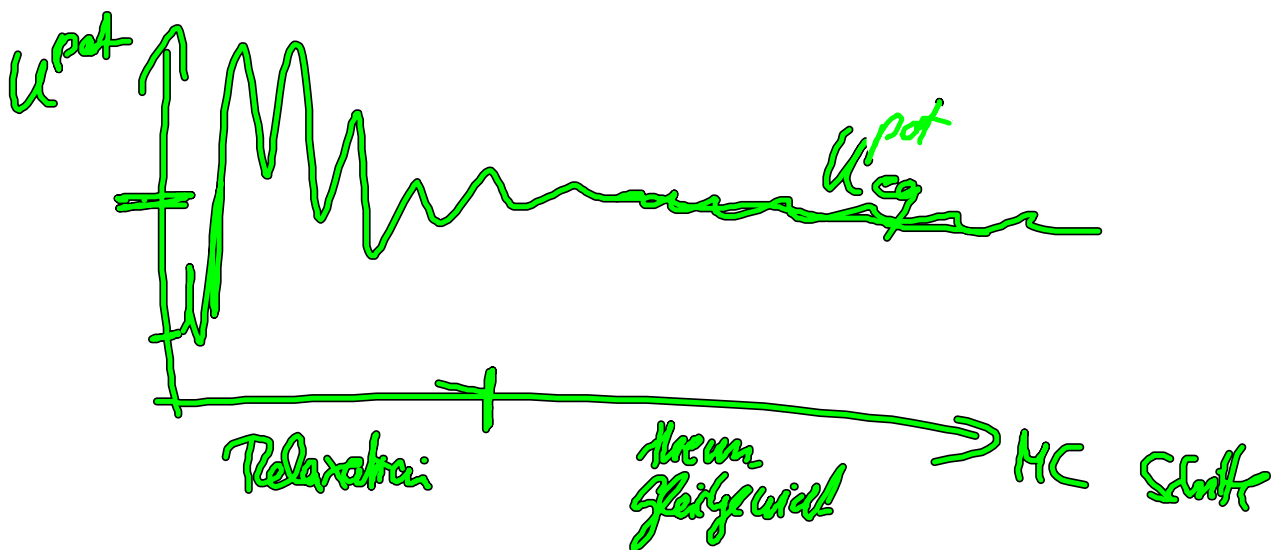
Dabei müssen (nach "Equilibrium"  
( $\rightarrow$  später))

alle Schnitt, auch abgedeckt

einbezogen werden, da auch Selbst Schnitt  
ein stat. Gewicht haben !!)

i) Praktisch beginnt ~~mit~~ man mit der Bildung erst  
nach "Equilibrium" (Relaxation ins Gleichgewicht)

— d.h. dann, wenn das System die "Einwirkung"  
an die Anfangskonfiguration verloren hat!



(ii) Auch im Gleichgewicht bezieht man meist nicht jeden Schritt in drei Hitzeln ein, sondern z.B. nur jeden 10. Schritt (dabei darf auch dann, wenn es abgelehnt wurde)

→ Vermeidung von Gedächtnisverlust

## IV.2.6. MC für kontinuierliche Systeme

Zunächst: Ein faches Fluid ohne  
neue Schutzgase (Kugeln)

### MC-Schritt:

- Auswahl eines Teilchens (Zufällig oder da Teil vorhanden)
- Verschiebung dieses Teilchens

$$N_i^{\text{alt}} \rightarrow N_i^{\text{neu}} = N_i + \underline{d}$$

Dabei ist die Verschiebungswerte d eine Zufallsvariable aus einem ~~stetigen~~ stetigen Verschiebungskubus

Karlsrad:

Zu Beginn der Simulation

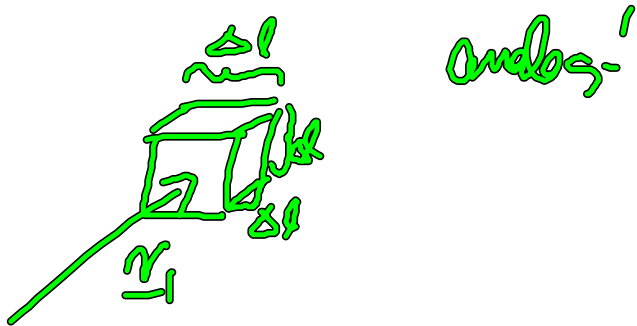
Wähle feste Länge  $\Delta t = (\Delta U)^{1/3}$

Werte des Versuchspeters

$$(N_i^{\text{neu}})_X = (N_i^{\text{alt}})_X + \frac{\Delta t}{Z} (1 - 2\eta_X)$$

$$(N_i^{\text{neu}})_Y, (N_i^{\text{neu}})_Z$$

$\eta_X \in [0, 1]$   
Zufallszahl



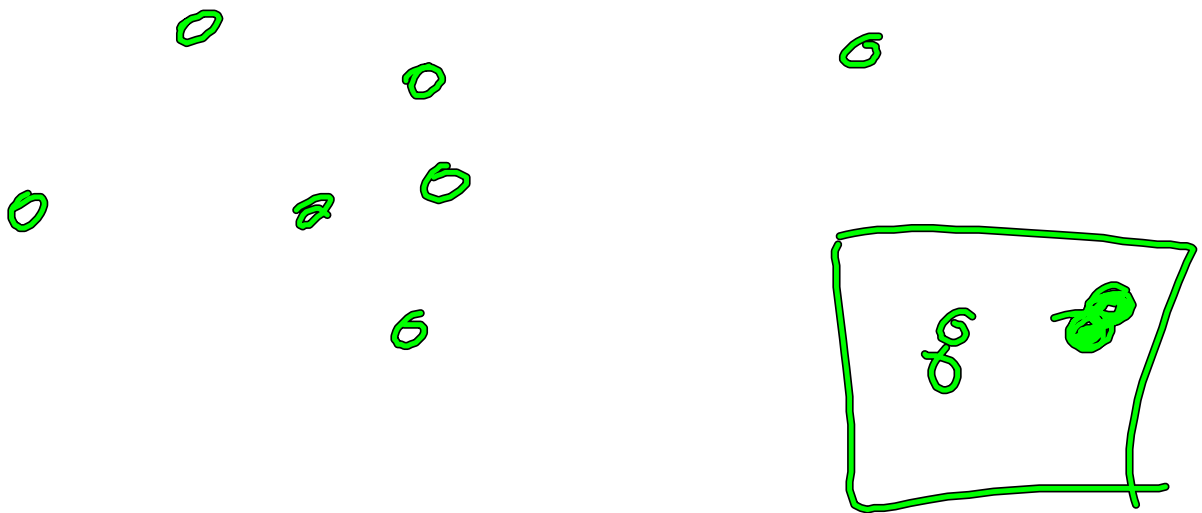
Akzeptanzkriterium:

$$P_{ij}^{\text{acc}} = \begin{cases} 1, & \Delta U < 0 \\ e^{-\beta \Delta U}, & \Delta U > 0 \end{cases}$$

$$\text{hier } \Delta U = H_{\text{neu}}^{\text{pot}} - H_{\text{alt}}^{\text{pot}}$$

$$t_1^{\text{pot}} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} u(r_{ij})$$

Zur Wahl der Anfangskonfiguration für Fluid  
 verdichtet System (Gas) Verteile die Anfangspartikel zufällig



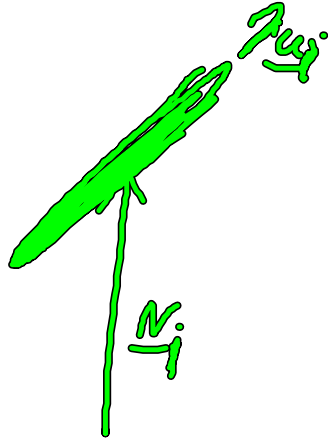
dichtes Fluid.

Wähle Konfiguration auf Gitter, z.B. FCC

→ Durch Vergleich der Energieergebnisse mit versch.  
 Anfangskonfiguration kann man die Energie des  
 Algorithmus überprüfen

# Kartesisches System mit einem Freiheitsgrad

z.B. Stäbe



Charakterisierung der Konfiguration:  $(N_1, \dots, N_N, u_1, \dots, u_N)$

"Einbauen" in die MC Struktur

Jeder MC Schritt ist entweder Translation oder Rotation (jeweils mit Wahrsch. 50%)

(Erinnerung:

$$\sum_j \alpha_{ij} = 1$$

Elemente der stochast. Matrix, die die Wahrsch. für die Test statt ergibt..")

Praktische Auslösung der Potenti:

Zeit  
Zusätzliche  
auf der Eingangs

$$\underline{u}_i^{\text{alt}} \rightarrow \underline{u}_i^{\text{neu}} = \frac{\underline{u}_i^{\text{alt}} + \gamma \underline{v}}{\|\underline{u}_i + \gamma \underline{v}\|}$$



$\gamma$  wird in Laufe der Simulation adaptiert so dass es ca. 0-0,1% der Schrittweite ist.