

Der Metropolis - Algorithmus

Wir hatten: Markov - Kette, (discret)

$$(*) \quad \frac{d}{dt} P(x_0, t) = - \sum_j w_{ji} P(x_0, t) + \sum_j w_{ij} P(x_i, t)$$

Nun $P(x_0, t)$: Wahrsch. das System im Zustand x_0 zum Zeitpunkt t zu finden

w_{ij} : Übergangswahrscheinlichkeit $x_i \rightarrow x_0$

* konstant

* normiert: $\sum_j w_{ij} = 1$ (System geht irgendwo hin)
wahr!

Wir suchen Werte für die w_{ij} , so dass

$$1 \quad \frac{d}{dt} P(x_0, t \rightarrow \infty) = P_{eq}(x_0) \quad (\text{Gleichgewichtsverteilung ist statisch!})$$

$$= 0$$

$$2 \quad \sum_j w_{ij} = 1 \quad (\text{Normierung erfüllt})$$

$$3 \quad P_{eq}(x_0) = \frac{1}{Z_k} e^{-\beta H} \quad \text{Verteilung d. kanon. Ensemble!}$$

1 in (*) ergibt dann:

$$\sum_j w_{ji} P_{eq}(x_0) = \sum_j w_{ij} P_{eq}(x_i)$$

Wir schränken uns zusätzlich ein, und fordern bereits für jede Summanden:

$$\boxed{w_{ji} P_{eq}(x_0) = w_{ij} P_{eq}(x_i)} \quad \text{"detailed balance"}$$

Warum hilft das? Wir wollen erreichen:

$$P_{eq}(x_i) = \frac{1}{Z_k} e^{-\beta H}$$

Dann: "detailed balance" $\Leftrightarrow \frac{w_{ji}}{w_{ij}} = \frac{P_{eq}(x_i)}{P_{eq}(x_j)}$

$$\Rightarrow \frac{w_{ji}}{w_{ij}} = e^{-\beta(H(x_i) - H(x_j))} = e^{-\beta \Delta H}$$

Ist nur von ΔH abhängig!

Konkrete Darstellung fehlt noch (w_{ij} immer noch unbekannt).

Metropolis-Lösung

$$\begin{aligned} w_{ij} &= \alpha_{ij} \cdot P_{ij}^{acc} \text{ für } i \neq j \\ w_{ii} &= 1 - \sum_{j \neq i} w_{ij} \text{ (Normierung)} \end{aligned}$$

α_{ij} : Wahrs. den Schritt $x_i \rightarrow x_j$

zu versuchen. Ist eine stochastische

Matrix mit $\sum_j \alpha_{ij} = 1$ und $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$

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

P_{ij}^{acc} : Wahrs. den Schritt $x_i \rightarrow x_j$

dann auch in akzeptanz (acceptance)

spezielle Wahl:

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

Also:

$$w_{ij} = \alpha_{ij} \cdot \min\left(1, \frac{P_{eq}(x_j)}{P_{eq}(x_i)}\right) \quad i \neq j$$

1 Die Metropolis-Lösung erfüllt detailed balance!

$$\begin{aligned} \omega_{ij} \cdot P_{eq}(X_j) &= \alpha_{ij} \cdot \min\left(1, \frac{P_{eq}(X_j)}{P_{eq}(X_i)}\right) \cdot P_{eq}(X_i) \\ &= \alpha_{ji} \min\left(P_{eq}(X_j), P_{eq}(X_i)\right) \\ &= \alpha_{ji} \min\left(\frac{P_{eq}(X_i)}{P_{eq}(X_j)}, 1\right) \cdot P_{eq}(X_j) \\ &= \omega_{ji} P_{eq}(X_j) // \end{aligned}$$

2 Die ω_{ji} sind normiert!

$$\sum_j \omega_{ji} = \omega_{ii} + \sum_{j \neq i} \omega_{ji} = 1 - \sum_{i \neq j} \omega_{ji} + \sum_{i \neq j} \omega_{ji} = 1 //$$

Bemerkung: Die Normierung über ω_{ji} hat die wichtige Konsequenz, dass wir, wenn wir ein Schritt $X_i \rightarrow X_j$ ablehnen, dies als Schritt $X_i \rightarrow X_i$ zu interpretieren haben!
 X_i wird nach der Ablehnung wie ein neuer Zustand behandelt! (Wichtig für die Mittelwerte!)

Für die Grenzwerte behalten wir also insgesamt:

$$\omega_{ij} = \alpha_{ij} \cdot \min\left(1, e^{-\beta(H(X_j) - H(X_i))}\right) \quad i \neq j$$

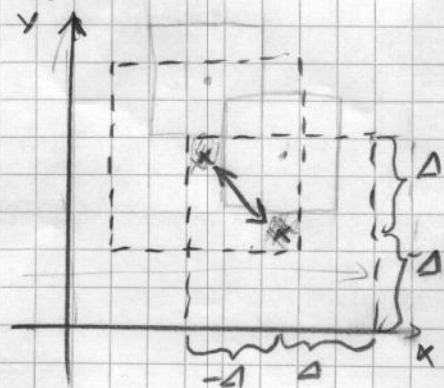
$$\omega_{ii} = 1 - \sum_j \omega_{ij}$$

In der Praxis (basis Algorithmus)

- 1 gegeben sei eine Konfiguration X aus N Teilchen
- 2 wähle ein Teilchen mit den Koordinaten $\mathbf{r}_k$
- 3 Bilde $\mathbf{r}_{\text{neu}} = \mathbf{r}_k + \delta \mathbf{r}$
wobei $\delta \mathbf{r} = (\delta x, \delta y, \delta z)$ ein Vektor mit
mit $\delta x, \delta y, \delta z \in [-1, 1]$ zufällig, gleichverteilt
sei.
- 4 Berechne $\Delta H = H_{\text{neu}} - H_{\text{alt}}$ mit der
(H_{neu} mit der neuen Position des Teilchens!)
- 5 Berechne $p_{\text{acc}} = \min(1, e^{-\beta \Delta H})$
- 6 Wähle $p^{\text{try}} \in [0, 1]$ zufällig, gleichverteilt
- 7 Wenn $p^{\text{try}} > p_{\text{acc}}$: Behalte die alte Konfiguration
Wenn $p^{\text{try}} \leq p_{\text{acc}}$: Setze $\mathbf{r}_k = \mathbf{r}_{\text{neu}}$
(Akzeptiere also die Änderung)
- 8 Berechne die interessanten Größen ($\langle E \rangle, S(q), g(r)$ u.)
- 9 gehe zu 1

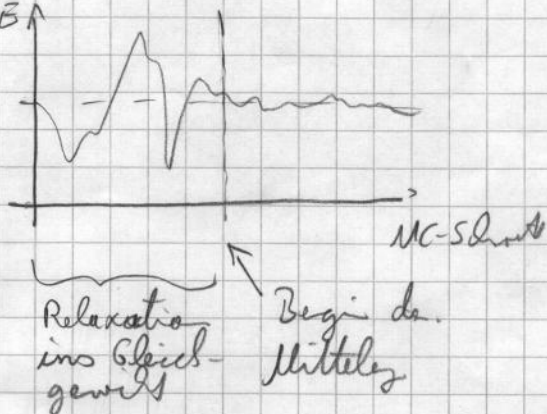
Bemerkung: * Mittelwerte werden auch gebildet, wenn
verworfen wurde!

* 3 liefert ein sym. α_g , denn:
jeder Punkt in dem "shifted" Volumen
ist gleichwahrsch!



* Praktisch wird die Mittelung erst nach der „Relaxation ins Gleichgewicht“ begonnen

Bsp: $E \uparrow$



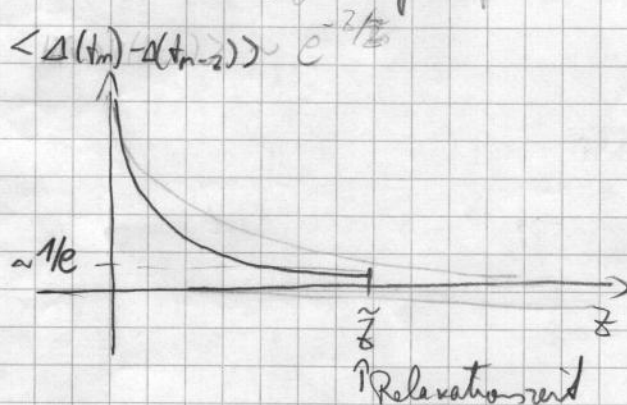
Hier wird
40% - 50% der
Zeit ausgegeben
das Equilib.
aufgefordert!
(Wahrscheinlich!)

* Beachtender Autokorrelation!

Bsp: $\langle \Delta(t_n) - \Delta(t_{n-2}) \rangle$, $\Delta(t_n) = H(t_n) - \langle H \rangle$

$\uparrow$
Zam aktuelle Zustand!

$\downarrow$
Zu einem früheren Zustand!



* $\rightarrow$ Die einzelne Zustände sind nicht unkorreliert, was
in einer „rechten“ Statistik leicht zu sehen. Rechenauf-
wand fñhre dann!

* Daher wird nach der Relaxationsphase oft nicht
mehr jede fte Konfiguration, sondern nur jede fte Konfiguration
für die Mittelwert verwendet (optimal f $\sim \tilde{t}$!). (f $\geq \tilde{t}$!).