TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

Institut für Kern- und Teilchenphysik Dr. Frank Siegert

MONTE-CARLO-SIMULATION MITTELS METROPOLIS-/HASTINGS-ALGORITHMUS

Hauptseminar-Vortrag

Robert Wolff

Dresden, 27.01.2014

DRESDEN concept
Exzellenz aus Wissenschaft und Kultur

Ausgangssituation Metropolis, 1953

- kanonisches System von Teilchen, z. B. Boltzmann-Gas
- Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung
- Beispiel: N Teilchen, radiales Potential, Dimension D
- potentielle Energie des Systems:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,\, j \neq i}^{N} V(r_{ij})$$

- Gleichgewichtserwartungswert einer Variable F mit $\beta = \dfrac{1}{k_B T}$

$$F = \frac{\int F \exp(-\beta E)\, \mathrm{d}^{2DN} q}{\int \exp(-\beta E)\, \mathrm{d}^{2DN} q}$$

Metropolis-Algorithmus

1. Starte mit zufälligem Zustand θ_0 der Dimension $2DN$.
2. Wähle weiteren zufälligen Zustand θ_{n+1}, ausgehend vom Zustand θ_n, wobei Wahrscheinlichkeiten.

$$p(\theta_n \to \theta_{n+1}) = p(\theta_{n+1} \to \theta_n)$$

3. Akzeptiere Zustand θ_{n+1} mit der Wahrscheinlichkeit.

$$\alpha = \min(1, \frac{p(\theta_{n+1})}{p(\theta_n)})$$

   sonst: Belasse System in Zustand θ_n als neuen Zustand θ_{n+1}.

4. Wiederhole Schritte 2 und 3, bis stationärer Zustand erreicht ist.

- Mit der Wahrscheinlichkeit $p(\theta)$, dass das System im Zustand θ ist

$$p(\theta) = \frac{1}{Z_k} \exp(-\beta E_\theta)\,,$$

wobei Z_k die kanonische Zustandssumme des Systems ist, ergibt sich

$$\frac{p(\theta_{n+1})}{p(\theta_n)} = \frac{\exp(-\beta E_{\theta_{n+1}})}{\exp(-\beta E_{\theta_n})} = \exp(-\beta \Delta E)$$

mit

$$\Delta E = E_{\theta_{n+1}} - E_{\theta_n}$$

- also Akzeptanzwahrscheinlichkeit

$$\alpha = \min(1, \exp(-\beta \Delta E))$$

- das heißt:
  - System wird bei Erniedrigung der Energie stets geändert,
  - bei potentieller Erhöhung der Energie wird das System mit einer Wahrscheinlichkeit von $\exp(-\beta \Delta E)$ geändert.

Beispiel: Punktladungen auf einer Kreisscheibe

- 2D-Modell eines kanonischen Ensembles von N Teilchen mit Koordinaten innerhalb eines Kreises mit Radius R.
- normierte Koordinaten $q_i = (x_i, y_i)$ mit $x_i^2 + y_i^2 < 1$
- normierte Abstände $r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$
- normierte potentielle Energie:

$$v = \beta V = \frac{\beta q^2}{R} \frac{1}{2} \sum_{i, j \neq i}^{N} \frac{1}{r_{ij}}$$

- Konstante $v_2 := \frac{\beta q^2}{R}$

- Gleichverteilte Koordinaten auf Einheitskreis:
  - gleichverteilte Zufallszahlen $a \in [0, 1)$ und $b \in [0, 1)$
  - Koordinatentransformation

$$x = \sqrt{a}\cos(2\pi b)$$

$$y = \sqrt{a}\sin(2\pi b)$$

- Realisierung der Akzeptanzbedingung $\alpha = \min(1, \exp(\Delta v))$, $\Delta v = \beta \Delta V$:
  - Akzeptiere neue Position für $\Delta v < 0$
  - andernfalls bestimme gleichverteilte Zufallszahl $c \in [0, 1)$ und akzeptiere neue Position wenn $c < \exp(\Delta v)$

Hastings' Verallgemeinerung, 1970
MCMC, 90er Jahre

- Entfallen der Bedingung $p(\theta_n \to \theta_{n+1}) = p(\theta_{n+1} \to \theta_n)$
- Damit neue Akzeptanzbedingung für $q(x, y) = p(x \to y)$

$$\alpha = \min(1, \frac{p(\theta_{n+1})q(\theta_{n+1}, \theta_n)}{p(\theta_n)q(\theta_n, \theta_{n+1})})$$

  und Übergangswahrscheinlichkeit

$$Pr(x \to y) = q(x, y)\alpha(x, y)$$

- ab 1990 „MCMC“ im Rahmen der Bayesschen Statistik, wobei „MCMC“ für „Markov-Chain-Monte-Carlo“ steht
- Markow-Kette: stochastischer Prozess

$$\theta_0 \to \ldots \to \theta_n \to \theta_{n+1} \to \ldots$$

einige Anwendungen von MCMC

- klassische Statistik: Molekülanordnungen (50er Jahre).
- Teilchenbewegung: Brownsche Bewegung, „Importance Sampling".
- „Reversible-Jump-MCMC": Markow-Kette, variabel in Modell und Dimension des Parameterraums.
- Kosmologie: z. B. Zusammensetzung von Supernovä und Suche nach Exoplaneten.
- Teilchenphysik: „pMSSM" („phenomenological Minimal Supersymmetric Standard Model")
  MSSM: 120 freie Parameter, pMSSM: 19 Parameter nach einigen Annahmen.
  Parameterraum θ, Anpassung an Higgs-Fund.
- Berechnung von Pfadintegralen der QFT (Quantenfeldtheorie)
- Entwicklungen am Aktienmarkt.
- . . .

Literatur

- G. Casella, Chr. Robert: *A Short History of Markov Chain Monte Carlo: Subjective Recollections from Incomplete Data*. Statistical Science 2011, Vol. 26, No. 1, 102-115, 2012. (`http://arxiv.org/abs/0808.2902v7`)
- B. Dumont, J. F. Gunion, S. Kraml: *The phenomenological MSSM in view of the 125 GeV Higgs data*. High Energy Physics – Phenomenology (hep-ph), 2013. (`http://arxiv.org/abs/1312.7027`)
- W. K. Hastings: *Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications*. Biometrika. 57, S. 97-109, 1970. (`http://dx.doi.org/10.1093/biomet/57.1.97`)
- A. Heavens: *Supernova MCMC and HMC exercise*. University of Edinburgh, UK, SCMA V workshops, 2011. (`http://astrostatistics.psu.edu/su11scma5/SN_project.pdf`)

- W. Kernbichler, Chr. Theis: *Grundlagen der Monte Carlo Methoden*. TU Graz – Institut für Theoretische Physik, 2002. (`http://www.itp.tu-graz.ac.at/MML/MonteCarlo/MCIntro.pdf`)
- Metropolis u. a.: *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*. J. Chem. Phys 21, 1087, 1953. (`http://dx.doi.org/10.1063/1.1699114`)
- T. A. Ottosen: *Markov-Chain Monte-Carlo – A Bayesian Approach to Statistical Mechanics*. Galaxy Astrophysics (astro-ph.GA), 2012. (`http://arxiv.org/abs/1206.6905v1`)
- B. Walsh: *Markov Chain Monte Carlo and Gibbs Sampling*. University of Arizona – Department of Ecology and Evolutionary Biology, 2004. (`http://nitro.biosci.arizona.edu/courses/EEB596/handouts/Gibbs.pdf`)