

Kapitel 4

Simulationen

Im diesem Kapitel sollen Simulationsverfahren erläutert werden, die für die Untersuchungen in Spin- und Quantensystemen verwendet wurden und werden. Wir wenden sie auf einfache quantenmechanische Systeme, zum Beispiel den anharmonischen Oszillator, an. In späteren Kapiteln finden sich Anwendungen der hier besprochenen Methoden zur Untersuchung von nichtstörungstheoretischen Eigenschaften von Spinsystemen und quantenfeldtheoretischen Modellen. Wir beginnen mit der Besprechung von Markovprozessen, da alle Simulation derartige Prozesse realisieren.

4.1 Markovprozesse

Wir diskutieren nun eine Realisierung der in Kapitel 3 bereits besprochenen Methode des „important sampling“. Dazu betrachten wir ein System mit f Freiheitsgraden. Wir bezeichnen die Zustände mit $s \in 1, 2, \dots, f$. Die nach P -verteilten Konfigurationen werden nun mit Hilfe eines geeigneten Markovprozesses erzeugt. Bei einem derartigen Prozess hängt die Übergangswahrscheinlichkeit $W(s, s') = W(s \rightarrow s')$ in den Zustand s' nur vom unmittelbar „früheren“ Zustand s ab. Das System hat ein Kurzzeitgedächtnis und erinnert sich nicht daran, was früher geschah. Da $W(s, s')$ eine Übergangswahrscheinlichkeit ist, muss die *stochastische Matrix* W positiv und normiert sein,

$$W(s, s') \geq 0 \quad \text{und} \quad \sum_{s'} W(s, s') = 1. \quad (4.1)$$

Bei einem Zweistufenprozess von s nach s' durchläuft das System irgend einen Zwischenzustand s_1 . Deshalb ist die Wahrscheinlichkeit für den Übergang $s \rightarrow s'$ in zwei Schritten

$$W^{(2)}(s, s') = \sum_{s_1} W(s, s_1)W(s_1, s') = (W \cdot W)(s, s'). \quad (4.2)$$

Ähnlich gilt für einen n -Stufen-Prozess

$$W^{(n)}(s, s') = \sum_{s_1 \cdots s_{n-1}} W(s, s_1)W(s_1, s_2) \cdots W(s_{n-1}, s') = (W^n)(s, s'). \quad (4.3)$$

Das Langzeitverhalten des System wird von W^n mit $n \rightarrow \infty$ bestimmt. Man versucht nun einen Markovprozess zu konstruieren, für den die Konfigurationen für grosse „Zeiten“ n nach der Boltzmannverteilung (3.37) verteilt sind.

Stochastische Matrizen transformieren *stochastische Vektoren*, also Vektoren \mathbf{P} mit nicht-negativen Elementen P_s die zu Eins addieren, $\sum P_s = 1$, in stochastische Vektoren,

$$\sum_{s'} (\mathbf{P}W)(s') = \sum_{ss'} P_s W(s, s') = \sum_s P_s = 1.$$

Das Element P_s des stochastischen Vektors ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das System im Zustand s zu finden. Zum Beispiel konvergieren die Potenzen der stochastischen Matrix

$$W = \begin{pmatrix} a & 1-a \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

mit Eigenwerten 1 und $a < 1$ exponentiell schnell gegen eine stochastische Matrix,

$$W^n = \begin{pmatrix} a^n & 1-a^n \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Später werden wir zeigen, dass unter gewissen Bedingungen an W die W^n gegen eine stochastische Matrix mit *identischen Zeilen* konvergiert. Ein zweites einfaches Beispiel ist

$$W = \begin{pmatrix} a & \frac{1}{2}(1-a) & \frac{1}{2}(1-a) \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit } a \leq 1. \quad (4.5)$$

Die geraden Potenzen von W sind

$$W^n = \begin{pmatrix} a^n & \frac{1}{2}(1-a^n) & \frac{1}{2}(1-a^n) \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad n \text{ gerade}$$

und die ungeraden Potenzen

$$W^n = \begin{pmatrix} a^n & \frac{1}{2}(1-a^n) & \frac{1}{2}(1-a^n) \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad n \text{ ungerade.}$$

Für $a < 1$ wird ein stochastischer Vektor \mathbf{P} in

$$\begin{aligned} \mathbf{P}W^{2n} &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} \left(0, P_2 + \frac{P_1}{2}, P_3 + \frac{P_1}{2}\right) \\ \mathbf{P}W^{2n+1} &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} \left(0, P_3 + \frac{P_1}{2}, P_2 + \frac{P_1}{2}\right) \end{aligned}$$

abgebildet. Die Folge $\mathbf{P}W^n$ nähert sich exponentiell schnell einer periodischen Bahn mit der Periode 2. Wir werden weiter unten zeigen, dass die Folge deshalb nicht konvergiert weil jede Spalte von W mindestens eine Null enthält.

Jede stochastische Matrix hat den Eigenwert 1. Der entsprechende Rechtseigenvektor ist $\sim (1, 1, \dots, 1)^T$. Zur Bestimmung des Linkseigenvektors betrachten wir die Folge

$$\mathbf{P}_n = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{P}W^j. \quad (4.6)$$

Stochastische Vektoren bilden eine kompakte Menge und deshalb hat die Folge (4.6) eine konvergente Teilfolge,

$$\frac{1}{n_k} \sum_{j=0}^{n_k-1} \mathbf{P}W^j \longrightarrow \mathbf{P}^{\text{eq}}.$$

Wir multiplizieren von rechts mit W und finden

$$\frac{1}{n_k} \sum_{j=1}^{n_k} \mathbf{P}W^j \longrightarrow \mathbf{P}^{\text{eq}}W.$$

Lassen wir nun in der Differenz der beiden letzten Formeln, also in

$$\frac{1}{n_k} (\mathbf{P} - \mathbf{P}W^{n_k}) \longrightarrow \mathbf{P}^{\text{eq}} - \mathbf{P}^{\text{eq}}W$$

n_k gegen ∞ streben, dann folgt

$$\mathbf{P}^{\text{eq}}W = \mathbf{P}^{\text{eq}}. \quad (4.7)$$

Damit hat jede stochastische Matrix W mindestens einen *Fixpunkt* \mathbf{P}^{eq} , d.h. einen Linkseigenvektor mit Eigenwert 1.

Wir nehmen nun an, W habe mindestens eine Spalte, deren minimales Element größer gleich einer positiven Zahl δ ist. Dann können *alle* Zustände mit nicht-verschwindender Wahrscheinlichkeit in einen bestimmten Zustand übergehen. Matrizen mit dieser Eigen-

schaft heissen *attraktiv*. M in (4.4) ist attraktiv während dasjenige in (4.5) nicht attraktiv ist. Wir notieren noch, dass für zwei reelle Zahlen p und p' gilt

$$|p - p'| = p + p' - 2 \min(p, p'),$$

so dass für zwei stochastische Vektoren

$$\|\mathbf{P} - \mathbf{P}'\| = 2 - 2 \sum_s \min(P_s, P'_s). \quad (4.8)$$

Nun beweisen wir, dass ein attraktives W auf Vektoren $\mathbf{\Delta} = (\Delta_1, \dots, \Delta_f)$ mit

$$\|\mathbf{\Delta}\| \equiv \sum |\Delta_s| = 2 \quad \text{und} \quad \sum \Delta_s = 0 \quad (4.9)$$

kontraktiv ist. Zuerst beweisen wir diese Eigenschaft für die Differenz zweier kartesischer Basisvektoren \mathbf{e}_s , $s = 1, \dots, f$ (alle Einträge bis auf den s 'ten verschwinden). Dazu wenden wir die Identität (4.8) auf die stochastischen Vektoren $\mathbf{e}_s W$ und $\mathbf{e}_{s'} W$ an, also auf Zeilen von W mit den Nummern s und s' . Für ein attraktives W finden wir für $s \neq s'$

$$\begin{aligned} \|\mathbf{e}_s W - \mathbf{e}_{s'} W\| &= 2 - 2 \sum_{s''} \min \{W(s, s''), W(s', s'')\} \\ &\leq 2 - 2\delta = (1 - \delta) \underbrace{\|\mathbf{e}_s - \mathbf{e}_{s'}\|}_{=2} \quad \text{mit} \quad 0 < \delta < 1, \end{aligned} \quad (4.10)$$

was beweist, dass W auf den Differenzvektoren $\mathbf{e}_s - \mathbf{e}_{s'}$ kontraktiv ist. Wir haben

$$\min_{s''} \{W(s, s'') W(s', s'')\} \geq \min \{W(s, s^*) (W(s', s^*))\} \geq \delta$$

benutzt, wobei s^* zur Spalte mit Elementen größer oder gleich δ gehört.

Nun beweisen wir diese Eigenschaft für alle Vektoren $\mathbf{\Delta}$ in (4.9). Wegen

$$\begin{aligned} \sum_{s: \Delta_s \geq 0} \Delta_s - \sum_{s: \Delta_s < 0} \Delta_s &= \|\mathbf{\Delta}\| = 2 \\ \sum_{s: \Delta_s \geq 0} \Delta_s + \sum_{s: \Delta_s < 0} \Delta_s &= 0 \end{aligned}$$

folgt unmittelbar

$$\sum_{\Delta_s \geq 0} \Delta_s = 1 \quad \text{und} \quad \sum_{\Delta_s < 0} \Delta_s = -1. \quad (4.11)$$

Um die Notation einfach zu halten bezeichnen wir in den folgenden Formeln die nicht-

negativen Elemente von Δ mit Δ_s und die negativen Elemente mit $\Delta_{s'}$. Man beachte, dass die Indextmengen $\{s\}$ und $\{s'\}$ eine leere Schnittmenge haben. Wegen (4.11) gilt

$$\|\Delta\| = 2 = -2 \sum \Delta_s \sum \Delta_{s'} = - \sum \Delta_s \Delta_{s'} \underbrace{\|e_s - e_{s'}\|}_{=2}, \quad (4.12)$$

wobei $s \neq s'$ angenommen wurde. Um die Norm von ΔW abzuschätzen benutzen wir

$$\sum \Delta_s e_s = - \sum \Delta_{s'} \sum \Delta_s e_s \quad , \quad \sum \Delta_{s'} e_{s'} = + \sum \Delta_s \sum \Delta_{s'} e_{s'},$$

wobei wir von (4.11) Gebrauch machten, und dies führt auf die Ungleichung

$$\begin{aligned} \|\Delta W\| &= \left\| \sum \Delta_s e_s W + \sum \Delta_{s'} e_{s'} W \right\| = \left\| - \sum \Delta_{s'} \Delta_s (e_s - e_{s'}) W \right\| \\ &\leq - \sum \Delta_s \Delta_{s'} \|(e_s - e_{s'}) W\| \leq - \sum \Delta_s \Delta_{s'} \|e_s - e_{s'}\| (1 - \delta), \end{aligned} \quad (4.13)$$

wobei wir die Abschätzung (4.10) benutzten. Der Vergleich mit (4.12) führt dann auf die gesuchte Ungleichung,

$$\|\Delta W\| \leq (1 - \delta) \|\Delta\| \quad (4.14)$$

die besagt, dass W auf den Vektoren (4.9) kontraktiv ist. Da die Ungleichung linear in Δ ist, können wir die Bedingung $\|\Delta\| = 2$ aufgeben. Damit ist W kontraktiv auf allen Vektoren deren Elemente zu Null addieren und insbesondere auf Differenzen von zwei stochastischen Vektoren.

Iterieren wir die Ungleichung, so erhalten wir

$$\|\Delta W^n\| \leq (1 - \delta)^n \|\Delta\|. \quad (4.15)$$

Nun wenden wir diese Abschätzung auf $\mathbf{P} - \mathbf{P}^{\text{eq}}$ an, wobei \mathbf{P}^{eq} den Fixpunkt in (4.7) bezeichnet und \mathbf{P} ein beliebiger stochastischer Vektor ist. Da die Elemente von $\mathbf{P} - \mathbf{P}^{\text{eq}}$ zu Null addieren, gilt offensichtlich (4.15) und wir folgern

$$\|(\mathbf{P} - \mathbf{P}^{\text{eq}}) W^n\| = \|\mathbf{P} W^n - \mathbf{P}^{\text{eq}}\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

oder, dass

$$\mathbf{P} W^n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}^{\text{eq}}. \quad (4.16)$$

Für die stochastischen Vektoren e_s ist die linke Seite die s 'te Zeile von $\lim W^n = W^{\text{eq}}$ und deshalb hat W^{eq} identische Zeilen. Also sind alle Elemente in einer Spalte von W^{eq}

gleich, wie im obigen ersten Beispiel,

$$W^{\text{eq}}(s, s') = \lim_{n \rightarrow \infty} W^n(s, s') = P_{s'}^{\text{eq}}, \quad (4.17)$$

wobei $P_{s'}^{\text{eq}}$ das Element s' von \mathbf{P}^{eq} bezeichnet. Nun folgt, dass die Gleichgewichtsgrößen \mathbf{P}^{eq} und W^{eq} *eindeutig* sind: Es sei $\mathbf{P}^{\text{eq}'}$ ein zweiter Fixpunkt des Markovprozesses. Dann ist

$$P_{s'}^{\text{eq}'} = \sum_s P_s^{\text{eq}'} W(s, s') = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_s P_s^{\text{eq}'} W^n(s, s') = \sum_s P_s^{\text{eq}'} P_{s'}^{\text{eq}} = P_{s'}^{\text{eq}},$$

und dies beweist, dass \mathbf{P}^{eq} der eindeutige Fixpunkt ist.

Es sollte klar sein, wie man auf Systeme mit kontinuierlichen Freiheitsgraden, zum Beispiel ein mechanisches System, dessen reine Zustände durch Punkte $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$ gegeben sind, verallgemeinert: Anstelle der Elemente P_s von stochastischen Vektoren führt man *Wahrscheinlichkeitsdichten* $P(\mathbf{q})$ ein. Summen über den diskreten Index s werden zu Integralen über die kontinuierliche Variable \mathbf{q} . Für derartige System haben die Bedingungen (4.1) die Form

$$W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \geq 0 \quad \text{und} \quad \int \mathcal{D}\mathbf{q}' W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = 1. \quad (4.18)$$

Bezeichnet $P^{\text{eq}}(\mathbf{q})$ die Gleichgewichtsverteilung, so lautet die Bedingung (4.7)

$$P^{\text{eq}}(\mathbf{q}') = \int \mathcal{D}\mathbf{q} P^{\text{eq}}(\mathbf{q}) W(\mathbf{q}, \mathbf{q}'). \quad (4.19)$$

4.2 Detailliertes Gleichgewicht

In der Euklidischen Quantenmechanik oder der Quantenstatistik ist $P^{\text{eq}}(\mathbf{q})$ die Boltzmannverteilung (3.37). Eine einfache Gleichung, welche die Bedingung (4.7) beziehungsweise (4.19) impliziert, ist die *detaillierte Bilanzgleichung*: Die Wahrscheinlichkeit P_s^{eq} einer Konfiguration s , multipliziert mit der Übergangswahrscheinlichkeit $W(s, s')$ in eine Konfiguration s' , ist gleich der Wahrscheinlichkeit für den inversen Prozess, beginnend mit der Konfiguration s' mit $P_{s'}^{\text{eq}}$ und Übergangswahrscheinlichkeit $W(s', s)$, so dass

$$P_s^{\text{eq}} W(s, s') = P_{s'}^{\text{eq}} W(s', s) \quad (\text{keine Summe}). \quad (4.20)$$

Der Übergang von s nach s' ist wahrscheinlicher als der umgekehrte Prozess, wenn die Gleichgewichtsdichte bei s' größer ist als bei s . Die Wahrscheinlichkeitsverteilung \mathbf{P}^{eq} ist in der Tat ein Fixpunkt von W ,

$$\sum_s P_s^{\text{eq}} W(s, s') = \sum_{s'} P_{s'}^{\text{eq}} W(s', s) = P_{s'}^{\text{eq}}. \quad (4.21)$$

Die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (4.20) legt W noch nicht fest. Man benutzt diese Freiheit in der Wahl um einen möglichst einfachen und schnellen Algorithmus zu finden. *Metropolis-* und *Wärmebadalgorithmus* sind besonders beliebt, weil sie fast immer einsetzbar sind. In den letzten Jahren spielen allerdings die sogenannten *Cluster-Algorithmen* eine zunehmend wichtige Rolle, da sie das „critical slowing down“ berücksichtigen. Eine Einführung in die Monte-Carlo Methode finden sie im Lehrbuch von NEWMAN und BARKENNA [30].

4.2.1 Akzeptanzrate

Die Übergangswahrscheinlichkeit $W(s, s')$ wird durch (4.20) nicht eingeschränkt und wir können eine Änderung der $W(s, s')$ durch Anpassung von $W(s, s)$ die Summenregel in (4.1) beibehalten. Wir schreiben nun die Übergangswahrscheinlichkeit als Produkt einer Selektions- oder Testwahrscheinlichkeit und einer Akzeptanzrate,

$$W(s, s') = T(s, s')A(s, s'). \quad (4.22)$$

Dabei ist $T(s, s')$ die Wahrscheinlichkeit, bei einem gegebenem Anfangszustand s den neuen Zustand s' zu testen. Starten wir mit s und testen s' , dann ist $0 \leq A(s, s') \leq 1$ die Wahrscheinlichkeit, dass die Änderung nach s' auch akzeptiert wird. Die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht,

$$\frac{T(s, s')A(s, s')}{T(s', s)A(s', s)} = \frac{P_{s'}^{\text{eq}}}{P_s^{\text{eq}}}, \quad (4.23)$$

legt das Verhältnis der Akzeptanzraten nicht fest. Ein effizienter Monte-Carlo Algorithmus bedingt eine möglichst gute Wahl für dieser Raten. Sind sie nämlich sehr klein, dann werden nur wenige Änderungen angenommen und man bleibt im Anfangszustand „hängen“. Man verschwendet wertvolle Rechenzeit ohne den Zustandsraum zu durchlaufen. In der Praxis setzt man die grössere der Akzeptanzraten $A(\mu, \nu)$ und $A(\nu, \mu)$ gleich Eins und wählt die kleinere so, dass die Bilanzgleichung (4.23) erfüllt wird.

4.2.2 Hasting und Metropolis Methode

Bei diesem Algorithmus wird die Selektionswahrscheinlichkeit $T(s, s')$ für alle von s aus erreichbaren Zustände s' gleich gewählt [31]. Die Selektionswahrscheinlichkeiten der an-

deren Zustände ist Null. Bezeichnet $N \leq f$ die Anzahl erreichbarer Zustände, dann gilt

$$T(s, s') = \begin{cases} 1/N & s \rightarrow s' \text{ möglich} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.24)$$

Als Akzeptanzrate wählt man

$$A(s, s') = \min \left(\frac{P_{s'}^{\text{eq}} \cdot T(s', s)}{P_s^{\text{eq}} \cdot T(s, s')}, 1 \right) \quad (4.25)$$

und dann erfüllt W in (4.22) die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht,

$$P_s^{\text{eq}} T(s, s') \cdot \min \left(\frac{P_{s'}^{\text{eq}} T(s', s)}{P_s^{\text{eq}} T(s, s')}, 1 \right) = P_{s'}^{\text{eq}} T(s', s) \cdot \min \left(\frac{P_s^{\text{eq}} T(s, s')}{P_{s'}^{\text{eq}} T(s', s)}, 1 \right),$$

wie man durch die Fallunterscheidung $P_{s'}^{\text{eq}} T(s', s)$ kleiner oder größer als $P_s^{\text{eq}} T(s, s')$ leicht nachprüft. Eine Verallgemeinerung dieser Methode stammt von Hasting [32]. Gegenüber dem einfachen und universell einsetzbaren Metropolis-Algorithmus kann damit unter Umständen eine beträchtliche Verbesserung erreicht werden.

Beim Metropolis-Algorithmus beginnt man mit einer Startkonfiguration s . Eine gute Anfangsbedingung kann unter Umständen viel Rechenzeit ersparen. Bei hohen Temperaturen wird man anfänglich die Variablen zufällig wählen, bei tiefen Temperaturen und in einer geordneten Phase dagegen stark korreliert.

Wir stellen nun eine Implementierung des Algorithmus für die Simulation von Gittersystemen, zum Beispiel eines diskretisierten quantenmechanischen Systems auf n Gitterpunkten, vor. Man wählt eine anfängliche Konfigurationen $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n)$ und verändert oder belässt die Variable q_1 auf dem ersten Gitterpunkt gemäß folgenden Regeln:

1. Zuerst ersetzt man q_1 versuchsweise durch eine zufällig ausgewähltes q'_1 .
2. Nimmt die Wirkung beim Übergang $q_1 \rightarrow q'_1$ ab, $\Delta S < 0$, so wird q_1 durch q'_1 ersetzt.
3. Nimmt die Wirkung zu, dann wählt man eine gleichverteilte Zufallszahl $r \in [0, 1]$ und der Vorschlag q'_1 wird nur angenommen wenn $\exp(-\Delta S) > r$ ist. Andernfalls ändert man die Gittervariable q_1 nicht.
4. Nun verfährt man mit den Variablen q_2, q_3, \dots auf den anderen Gitterplätzen analog, bis alle Variablen getestet sind.
5. Ist der letzte Gitterplatz erreicht, so ist ein „sweep“ über das Gitter oder eine *Monte-Carlo-Iteration* beendet und man fängt wieder mit dem ersten Gitterplatz an.

Bei einer realistischen Simulation streicht man zig-tausend mal übers Gitter, um statistische Fehler zu verkleinern.

Um nachzuprüfen, ob der Markovprozess in der Nähe der Gleichgewichtsverteilung ist, „misst“ man Erwartungswerte als Funktionen der Monte-Carlo-Zeit mit einer MC-Iteration als Zeiteinheit. Nachdem die Erwartungswerte nur noch statistisch schwanken, beginnt man die Observablen gemäß (3.38) zu messen.

2-Zustandssystem: Wir betrachten ein System mit zwei Zuständen,

$$H|1\rangle = E_1|1\rangle \quad \text{und} \quad H|2\rangle = E_2|2\rangle, \quad \Delta E = E_2 - E_1 > 0. \quad (4.26)$$

Beim Übergang $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$ wird die Energie erniedrigt, so dass $W(2, 1) = 1$ ist. Andererseits ist die Anregungswahrscheinlichkeit $W(1, 2)$ gleich dem Boltzmannfaktor

$$b_{21} = e^{-\beta(E_2 - E_1)} < 1.$$

Deshalb ist die stochastische Matrix

$$W = \begin{pmatrix} 1 - b_{21} & b_{21} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Die Potenzen dieser Matrix lauten

$$W^n = \frac{1}{1 + b_{21}} \begin{pmatrix} 1 + (-b_{21})^{n+1} & b_{21}(1 + (-b_{21})^n) \\ 1 + (-b_{21})^n & b_{21}(1 + (-b_{21})^{n-1}) \end{pmatrix},$$

und sie konvergieren exponentiell schnell gegen die stochastische Matrix

$$W^\infty = \frac{1}{1 + b_{21}} \begin{pmatrix} 1 & b_{21} \\ 1 & b_{21} \end{pmatrix} = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} \\ e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} \end{pmatrix}. \quad (4.28)$$

Hier bezeichnet Z die Zustandssumme des 2-Zustandssystems $Z = \exp(-\beta E_1) + \exp(-\beta E_2)$. Entsprechend konvergiert jede anfängliche Wahrscheinlichkeitsverteilung $\mathbf{P} = (P_1, P_2)$ gegen die Boltzmannverteilung

$$\mathbf{P} \longrightarrow \mathbf{P}^{\text{eq}} = \frac{1}{Z} (e^{-\beta E_1}, e^{-\beta E_2}). \quad (4.29)$$

3-Zustandssystem: Es seien $|i\rangle$ die drei Energieeigenzustände mit Energien $E_1 < E_2 < E_3$. Die stochastische Matrix hat die Form

$$W = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 - b_{21} - b_{31} & b_{21} & b_{31} \\ 1 & 1 - b_{32} & b_{32} \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad b_{pq} = e^{-\beta(E_p - E_q)}, \quad (4.30)$$

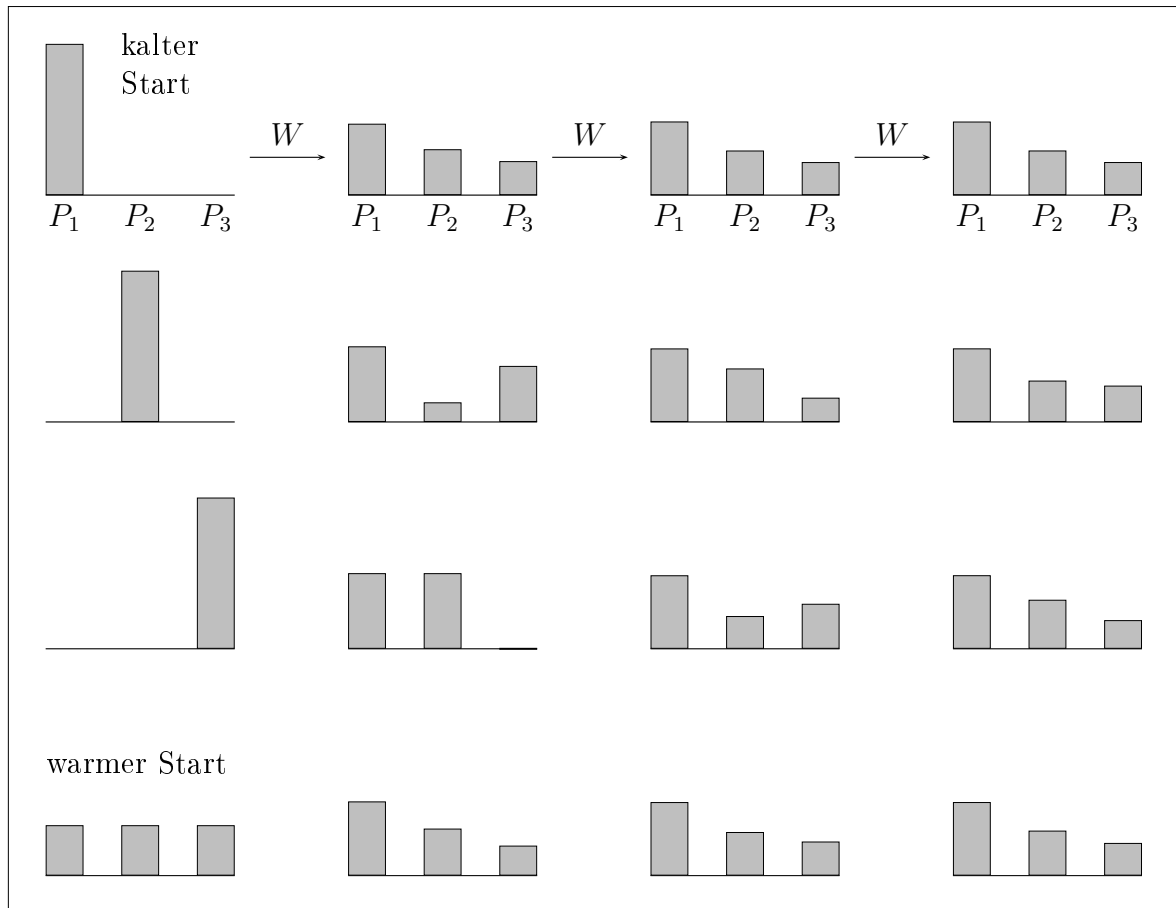
und ihre Potenzen konvergieren gegen

$$W^\infty = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} & e^{-\beta E_3} \\ e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} & e^{-\beta E_3} \\ e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} & e^{-\beta E_3} \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

Deshalb konvergiert jede Anfangsverteilung gegen die Boltzmannverteilung.

$$\mathbf{P}^{\text{eq}} = \frac{1}{Z} (e^{-\beta E_1}, e^{-\beta E_2}, e^{-\beta E_3}). \quad (4.32)$$

Die folgende Abbildung zeigt das Streben ins Gleichgewicht für vier unterschiedliche Anfangsverteilungen. Es wurden die Energiedifferenzen $E_2 - E_1 = 0.5$ und $E_3 - E_2 = 0.3$ gewählt.



Für den „kalten Start“ mit Grundzustand als Anfangszustand und den „warmen Start“ mit gleichverteilten Anfangswahrscheinlichkeiten ist die Konvergenz besonders gut. Startet man im Zustand mit größter Energie, dann ist die Konvergenz am schlechtesten.

4.2.3 Wärmebad-Methode

Bei dieser Methode hängt die Übergangswahrscheinlichkeit $W(s, s')$ nur vom Endzustand s' ab. Wegen der Bilanzgleichung (4.20) ist dann $W(s, s') \propto P_{s'}^{\text{eq}}$ und mit den Normierungsbedingungen an P^{eq} und W folgt

$$W(s, s') = P_{s'}^{\text{eq}}. \quad (4.33)$$

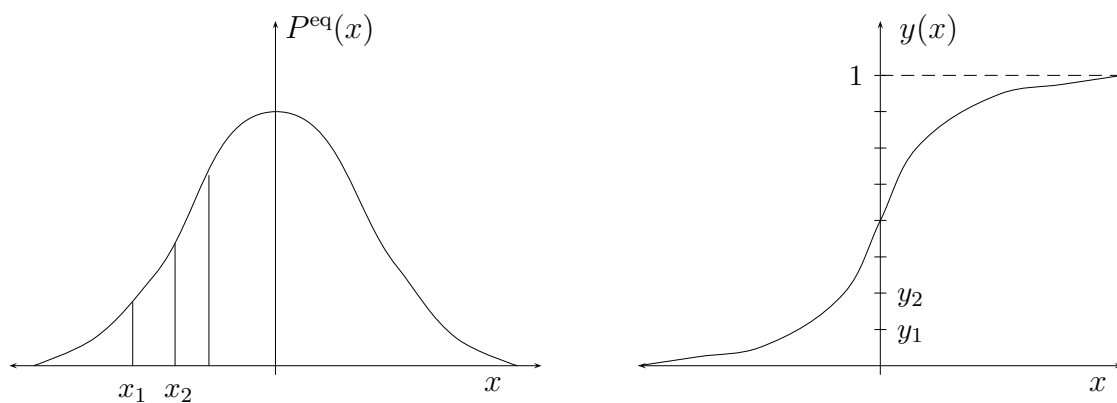
In dieser Form eignet sich die Methode besonders gut wenn die Gleichgewichtsverteilung leicht integriert beziehungsweise summiert werden kann. Wir illustrieren dies anhand der Berechnung der eindimensionalen Integrale $\langle O \rangle = \int O(x) P^{\text{eq}}(x) dx$, wozu wir nach $P^{\text{eq}}(x)$ verteilte Zufallszahlen generieren wollen. Zu deren Erzeugung betrachten wir die monoton wachsende Stammfunktion

$$y(x) = \int_{-\infty}^x P^{\text{eq}}(x') dx' \in [0, 1]$$

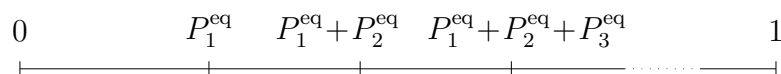
der Wahrscheinlichkeitsdichte und erzeugen gleichverteilte Zufallszahlen y_i im Wertebereich $[0, 1]$ von $x \rightarrow y(x)$. Wegen

$$dy = P^{\text{eq}}(x) dx$$

sind deren Urbilder $\{x_i = x(y_i)\}$ nach P^{eq} verteilt, wie in folgender Abbildung skizziert.



Für ein System mit einer endlichen Anzahl Zustände ist die Stammfunktion eine Treppenfunktion. Wir ordnen die Systemzustände $s = \{1, 2, \dots, n\}$ nach ihren Wahrscheinlichkeiten, $P_1^{\text{eq}} \geq P_2^{\text{eq}} \geq \dots \geq P_n^{\text{eq}}$.



Bei der direkten Wärmebadmethode lautet dann eine mögliche Implementierung wie folgt:

1. Ziehe eine gleichverteilte Zufallszahl $r \in [0, 1]$.
2. Ist $r < P_1^{\text{eq}}$, dann wird die erste Konfiguration mit $s = 1$ gewählt. Gehe zu 1.
3. Andernfalls, falls $r < P_1^{\text{eq}} + P_2^{\text{eq}}$, wird die zweite Konfiguration gewählt. Gehe zu 1.
4. und so weiter.

Die stochastische Matrix für diesen einfachen Algorithmus ist ideal,

$$W = \begin{pmatrix} P_1^{\text{eq}} & P_2^{\text{eq}} & \dots & P_n^{\text{eq}} \\ P_1^{\text{eq}} & P_2^{\text{eq}} & \dots & P_n^{\text{eq}} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ P_1^{\text{eq}} & P_2^{\text{eq}} & \dots & P_n^{\text{eq}} \end{pmatrix} \implies W^2 = W. \quad (4.34)$$

Der Algorithmus hat aber einen grossen Nachteil: Er ist in dieser Form nur auf diskrete und relativ kleine Systeme anwendbar und wird langsam für eine zunehmende Anzahl Zustände. Sind die Konfigurationen Boltzmann-verteilt, so muss man die Zustandssumme kennen, um die Wahrscheinlichkeiten zu berechnen.

Für kontinuierliche Variablen kann der Algorithmus modifiziert werden. Dazu wählt man den Metropolis-Algorithmus für die bedingten Wahrscheinlichkeiten der gemeinsamen Verteilung $P^{\text{eq}}(\mathbf{q})$. Man beginnt mit der Dichte $P(q_1|q_2, \dots, q_n)$ für die Wahrscheinlichkeit von q_1 bei festgehaltenen q_2, \dots, q_n . Eine einfache Iteration, ausgehend von der Konfiguration \mathbf{q} zur MC-Zeit $t = 1$, wäre zum Beispiel zur Zeit $t = 2$

$$\begin{aligned} q_1(2) &\sim P(q_1|q_2(1), q_3(1), \dots, q_n(1)) \\ q_2(2) &\sim P(q_2|q_1(2), q_3(1), \dots, q_n(1)) \\ q_3(2) &\sim P(q_3|q_1(2), q_2(2), \dots, q_n(1)) \\ &\vdots \quad \sim \quad \vdots \\ q_n(2) &\sim P(q_n|q_1(2), q_2(2), \dots, q_{n-1}(2)). \end{aligned}$$

Hier bedeutet $q_1(2) \sim P(q_1|q_2(1), q_3(1), \dots, q_n(1))$, dass das neue q_1 entsprechend der bedingten Wahrscheinlichkeit $P(\dots)$ zu wählen ist. Wir werden später eine Implementierung dieses Algorithmus für spezielle Systeme, zum Beispiel Spinmodelle, besprechen.

4.3 Anharmonischer Oszillator

Wir untersuchen eindimensionale Systeme mit diskretisierter Euklidischer Wirkung

$$S = \epsilon \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ \frac{m}{2} \frac{(q_{j+1} - q_j)^2}{\epsilon^2} + V(q_j) \right\}. \quad (4.35)$$

Insbesondere betrachten wir hier den anharmonischen Oszillator

$$V(q) = \mu q^2 + \lambda q^4. \quad (4.36)$$

Bei den Simulationen, deren Resultate unten angegeben werden, hatte das Raumgitter etwa 1000 Gitterpunkte. Die Wahl von n und ϵ ist durch zwei Gesichtspunkte eingeschränkt:

- ϵ muss genügend klein sein um dem Kontinuums-Limes nahe zu kommen.
- Die Größen von Interesse müssen ins Volumen $n\epsilon$ passen. Zum Beispiel sollte die Breite des Grundzustandes kleiner als $n\epsilon$ sein.

Definiert man eine typische physikalische Skala λ_0 des Systems, so werden wir

$$\epsilon \leq \frac{\lambda_0}{10} \quad \text{und} \quad n\epsilon \geq 10\lambda_0 \quad (4.37)$$

fordern. Ein weiteres Problem ist die Größe der *statistischen Fluktuationen*. Für eine Observable O sind die relativen Streuungen um den Mittelwert $\langle O \rangle$ etwa

$$\Delta_O = \sqrt{\frac{\langle O^2 \rangle}{\langle O \rangle^2} - 1} \sim (\text{Anz. Gitterpunkte})^{-1/2}. \quad (4.38)$$

Zur Schätzung der Erwartungswerte mitteln wir nach (3.38) über identische Gitter,

$$\bar{O} = \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M O(\mathbf{q}_\mu). \quad (4.39)$$

Es braucht einige Zeit, gemessen in Metropolis-Iterationen, bis das Gleichgewicht erreicht ist, d.h. bis der Markovprozeß konvergiert. Für den anharmonischen Oszillator und die gewählten Gitterabstände ϵ ist bei vernünftiger Wahl der Anfangsbedingung das Gleichgewicht nach etwa 10 – 100 Iterationen erreicht. Die danach erzeugten Gitterkonfigurationen werden bei der Auswertung berücksichtigt. Da aber die Konfigurationen aufeinander folgender Sweeps korreliert sind, wird nur jeder MA 'te Sweep durch das Gitter ausgewertet. Will man M Konfigurationen auswerten dann müssen also $M \cdot MA$ Konfigurationen erzeugt werden. Mit wachsender *Autokorrelationszeit* muss MA grösser gewählt werden. Für

den anharmonischen Oszillator und die unten gewählten Modellparameter ist $MA = 5$ eine sinnvolle Wahl. Die Autokorrelationszeit hängt auch von der zu betrachteten Observablen ab. In Gitterfeldtheorien kann sie für räumlich gemittelte Grössen gross werden.

Gemessen werden die Korrelationsfunktionen

$$\overline{q_i^2}, \quad \overline{q_i^4} \quad \text{und} \quad \overline{q_i q_{i+m}}.$$

Damit kann man schon die niedrigsten Energien bestimmen. Zur Berechnung der Grundzustandsenergie benutzen wir den *Virialsatz* (wir folgen hier Creutz und Freedman [34])

$$\frac{1}{2m} \langle 0 | \hat{p}^2 | 0 \rangle = \frac{1}{2} \langle 0 | \hat{q} V'(\hat{q}) | 0 \rangle, \quad (4.40)$$

so dass gilt

$$E_0 = \langle 0 | \frac{1}{2} \hat{q} V'(\hat{q}) + V(\hat{q}) | 0 \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}q e^{-S[q]} \left(\frac{1}{2} q V'(q) + V(q) \right). \quad (4.41)$$

Für die Energie des ersten angeregten Zustands finden wir mit (2.66) den Ausdruck

$$E_1 = -\frac{1}{\Delta\tau} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \log \frac{\langle 0 | \hat{q}_E(\tau + \Delta\tau) \hat{q}_E(0) | 0 \rangle}{\langle 0 | \hat{q}_E(\tau) \hat{q}_E(0) | 0 \rangle} + E_0. \quad (4.42)$$

Um die Wellenfunktion des Grundzustandes zu berechnen, benutzen wir

$$K(\tau, q', q) = \sum_n e^{-\tau E_n} \psi_n(q') \psi_n(q), \quad (4.43)$$

wobei ψ_n die reellen und normierten Eigenfunktionen von H sind. Für grosse euklidische Zeiten und festgehaltene Endpunkte $q' = q$ kann man aus

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{K(\tau, q, q)}{\int dq K(\tau, q, q)} = |\psi_0(q)|^2 \quad (4.44)$$

die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens (im Grundzustand) im Intervall $[q, q + \Delta q]$ berechnen. Dazu zählt man in jeder gemessenen MC-Konfiguration den Anteil Koordinaten q_i die im untersuchten Intervall liegen. Diese relative Häufigkeit bestimmt man für jeden Bin in der Unterteilung des interessierenden q -Gebiets in kleine Intervalle der Länge Δ und für viele Konfigurationen.

Reskalieren wir die Konstanten (m, μ, λ) in (4.35, 4.36) und die Koordinaten mit Potenzen von ϵ und führen die dimensionslosen Gittergrößen (m_L, μ_L, λ_L) ein

$$q_L = q/\epsilon, \quad m_L = \epsilon m, \quad \mu_L = \epsilon^3 \mu \quad \text{und} \quad \lambda_L = \epsilon^5 \lambda, \quad (4.45)$$

dann vereinfacht sich der Ausdruck für die Gitterwirkung,

$$S(\mathbf{q}) = \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ \frac{m_L}{2} (q_{j+1} - q_j)_L^2 + \mu_L q_{j,L}^2 + \lambda_L q_{j,L}^4 \right\}. \quad (4.46)$$

Die Differenz der Wirkungen zweier Konfigurationen \mathbf{q}' und \mathbf{q} , welche sich nur in der j 'ten Variablen unterscheiden, ist

$$S(\mathbf{q}') - S(\mathbf{q}) \approx (q'_j - q_j)_L \left\{ -m_L (q_{j+1} + q_{j-1})_L + (q'_j + q_j)_L \{ m_L + \mu_L + \lambda_L (q_j'^2 + q_j^2)_L \} \right\}. \quad (4.47)$$

Der Nachteil dieser Methode ist, dass wir physikalische Grössen in Einheiten der unphysikalischen und in $S(\mathbf{q})$ nicht mehr auftretenden Länge ϵ messen. Man muss zuerst eine physikalische Grösse (zum Beispiel eine Masse oder Energie) berechnen und mit dem „experimentellen“ Wert vergleichen und kann erst danach eine Skala festlegen.

Alternativ können wir alle dimensionsbehafteten Größen in Einheiten einer festen Einheitslänge ℓ messen:

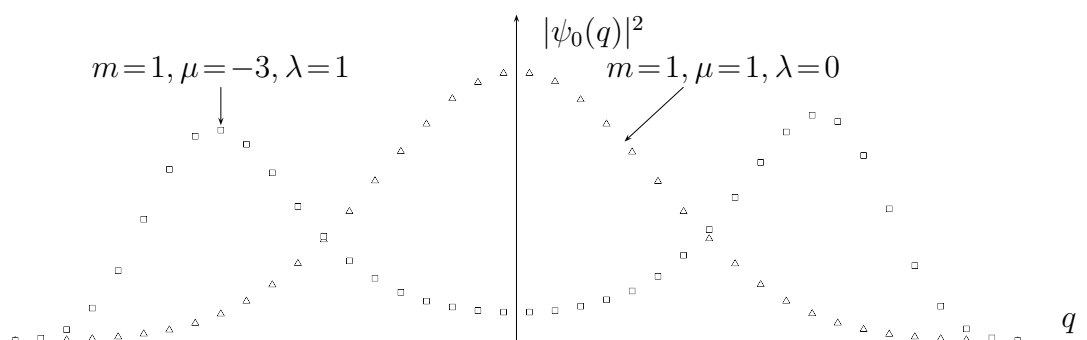
$$\epsilon = a\ell, \quad q = \tilde{q}\ell, \quad m = \tilde{m}/\ell, \quad \mu = \tilde{\mu}/\ell^3 \quad \text{und} \quad \lambda = \tilde{\lambda}/\ell^5. \quad (4.48)$$

Dann ist

$$S(\mathbf{q}') - S(\mathbf{q}) = (\tilde{q}'_j - \tilde{q}_j) \left\{ -\frac{\tilde{m}}{a} (\tilde{q}_{j+1} + \tilde{q}_{j-1}) + (\tilde{q}'_j + \tilde{q}_j) \left(\frac{\tilde{m}}{a} + a\tilde{\mu} + a\tilde{\lambda} (\tilde{q}_j'^2 + \tilde{q}_j^2) \right) \right\}. \quad (4.49)$$

Diese Formel wurde im Programm `anharmonic1.c` auf Seite 72 bei der Definition der Funktion `deltaS` in der Header-datei `stdanho.h` auf Seite 75 benutzt. Die Modellparameter m, μ und λ , die Anzahl Gitterpunkte N und die Gitterkonstante a sind in `constants.h` auf Seite 74 als Konstanten abgelegt und können leicht geändert werden. Nur jede MA 'te Iteration wird gemessen, und zwar erst ab der $MA \cdot MG$ 'ten Iteration. Das Quadrat der Wellenfunktion wird auf $[-INTERV, INTERV]$ gebinnt, und die Anzahl Bins ist BIN . Mit dem Parameter `DELTA` stellt man ein, wie sehr eine Koordinate versuchsweise abgeändert wird, $q' = q + DELTA \cdot (1 - 2r)$, wobei r eine gleichverteilte Zufallszahl in $[0, 1]$ ist. Das Programm gibt als Wertepaare das Histogramm der Wahrscheinlichkeitsverteilung aus. Der q -Bereich geht von $-INTERV$ bis $INTERV$, auf BIN Bins verteilt. Die Anzahl Punkte im Histogramm ist gleich der Anzahl N der Gitterpunkte.

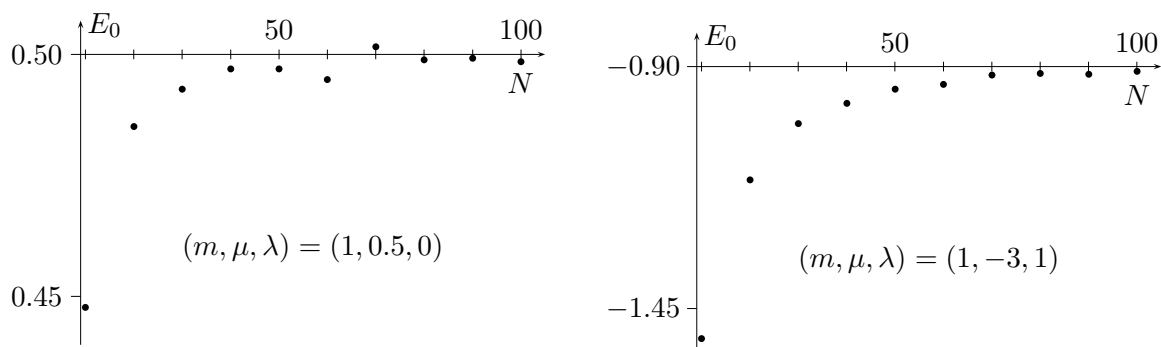
In der folgenden Abbildung haben wir die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_0(q)|^2$ für den harmonischen und anharmonischen Oszillator geplottet.



Das sehr ähnliche Programm `anharmonic2.c` auf der Seite 73 berechnet die Grundzustandsenergie E_0 mit Hilfe des Virialsatzes (4.41). Bei festgehaltener physikalischer Länge Na (in Einheiten von ℓ) wurde die Anzahl Gitterpunkte oder äquivalent dazu die Gitterkonstante verändert. Bei allen Rechnungen sind für das Volumen $aN = 10$ und die Kopplungskonstanten $(m, \mu, \lambda) = (1, 0.5, 0)$ beziehungsweise $(m, \mu, \lambda) = (1, -3, 1)$. Offensichtlich ist man bereits für $a \sim 0.2$ dem Kontinuumslimes $a \rightarrow 0$ relativ nahe. Die Abhängigkeit der Grundzustandsenergien des harmonischen- und anharmonischen Oszillators von der Gitterkonstante finden sie in der folgenden Tabelle. Die Werte der Gitterkonstante sind dabei $a = 1, 1/2, 1/3, \dots, 1/10$.

a	$E_0(1, 0.5, 0)$	Wick	$E_0(\text{exakt})$	$E_0(1, -3, 1)$
1	0.4477	-0.0008	0.4473	-1.4624
1/2	0.4851	0.0010	0.4851	-1.1339
1/3	0.4928	0.0016	0.4932	-1.0177
1/4	0.4926	0.0014	0.4962	-0.9758
1/5	0.4970	0.0040	0.4976	-0.9466
1/6	0.4948	0.0006	0.4983	-0.9369
1/7	0.5016	0.0003	0.4988	-0.9173
1/8	0.4989	0.0067	0.4991	-0.9144
1/9	0.4992	0.0012	0.4993	-0.9160
1/10	0.4985	0.0009	0.4994	-0.9097

Die folgenden zwei Abbildungen zeigen, dass sich die Grundzustandsenergien für $a < 0.2$ nur noch wenig ändern. Die Extrapolation zum Kontinuum $a \rightarrow 0$ ergeben für die gewählten Massen und Kopplungskonstanten die Schätzwerte $E_0(\text{harm. Osz}) \approx 0.50$ und $E_0(\text{anharm. Osz.}) \approx -0.91$. Der exakte Wert für den harmonischen Oszillator ist $E_0 = 0.5$.



Für den harmonischen Oszillator gilt die Wick-Relation

$$\langle 0 | \hat{q}^4 | 0 \rangle - 3 \langle 0 | \hat{q}^2 | 0 \rangle^2 = 0.$$

In der obigen Tabelle haben wir den Schätzwert für die linke Seite in der Spalte mit dem Namen „Wick“ gelistet. Die Abweichung von Null ist ein Maß für die Güte der Monte-Carlo-Simulation.

4.4 Hybrid-Monte-Carlo Algorithmus

Der Hybrid-Monte-Carlo (HMC) Algorithmus wurde erstmalig von S. Duane et al. in [26] vorgestellt. Wir folgen hier den Darstellungen in [27] und [28]. Der HMC-Algorithmus ist eine Kombination aus der Molekulardynamik-Methode und dem Metropolis Algorithmus. Ziel ist es, ein globales update der Konfigurationen durchzuführen und gleichzeitig eine vernünftige Akzeptanzrate zu erhalten, damit der Rechenaufwand für die Generierung unabhängiger Konfigurationen möglichst klein ist.

Die Molekular-Dynamik (MD) Methode wird erfolgreich bei der Untersuchung von klassischen Vielteilchensystemen eingesetzt. Anwendungen findet sie zum Beispiel in der Materialwissenschaft, Astrophysik oder der Untersuchung von Biomolekülen. Dabei werden die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen numerisch integriert und die ergodische Hypothese vorausgesetzt, nach der das statistische Ensemblemittel durch das Zeitmittel ersetzt werden kann. Aus einem Anfangszustand (q_0, p_0) erhält man durch Integration der Bewegungsgleichungen im Phasenraum

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (4.51)$$

den eindeutigen Zustand zu jedem späteren Zeitpunkt. Ohne numerische Fehler wäre für konservative Systeme die Energie eine Konstante der Bewegung.

Um nun bei einem Makroprozess globale Updates und hohe Akzeptanzrate zu ver-

binden, benutzt man die Modell-Hamiltonfunktion

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n p_i^2 + S(\mathbf{q}), \quad \mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n), \quad (4.52)$$

in einem erweiterten Phasenraum. In der diskretisierten Quantenmechanik mit n Gitterpunkten in der euklidischen Zeitrichtung hat der künstlich eingeführte Phasenraum die Dimension $2n$. Jedem diskretisierten Weg \mathbf{q} und jedem Impuls \mathbf{p} im erweiterten Phasenraum wird die „Energie“ H zugeordnet. Bei der Zeit in der Hamiltonschen Dynamik handelt es sich nicht um die physikalische Zeit des Systems wie bei der molekularen Dynamik, sondern um eine fiktive „Computer-Zeit“.

Durch die Integration der Bewegungsgleichungen über die „künstliche Zeit“ u wird aus der Konfiguration (\mathbf{q}, \mathbf{p}) die Konfiguration $(\mathbf{q}', \mathbf{p}')$ deterministisch berechnet. Das Paar $(\mathbf{q}', \mathbf{p}')$ wird dann mit der Wahrscheinlichkeit

$$A(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') = \min \{1, \exp(H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - H(\mathbf{q}', \mathbf{p}'))\} \quad (4.53)$$

akzeptiert. Für eine exakte Integration wäre diese Wahrscheinlichkeit immer gleich 1 und die neue Konfiguration $(\mathbf{q}', \mathbf{p}')$ würde akzeptiert werden. Bei einer numerischen Integration ist der Wert von H allerdings nur bis auf einen Diskretisierungsfehler erhalten und A kann kleiner 1 werden. Wir werden weiterhin fordern, dass die Impulse Gaußsch verteilt sind,

$$P_G(\mathbf{p}) = \mathcal{N} e^{-\frac{1}{2} \sum_x p_x^2} \quad (4.54)$$

mit einer Normierungskonstanten \mathcal{N} . Dann kann gezeigt werden, dass der entsprechende Markovprozeß die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht erfüllt. Dies wollen wir jetzt beweisen.

Zunächst müssen wir die Übergangswahrscheinlichkeit von \mathbf{q} nach \mathbf{q}' berechnen. Wegen der Zeitumkehrinvarianz der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen gilt für die Wahrscheinlichkeit T durch die Integration der Bewegungsgleichungen von der Konfiguration (\mathbf{q}, \mathbf{p}) zur Konfiguration $(\mathbf{q}', \mathbf{p}')$ zu gelangen, folgende Gleichheit:

$$T(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') = T(\mathbf{q}', -\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{q}, -\mathbf{p}). \quad (4.55)$$

Diese Bedingung wird für den Beweis benötigt, und deshalb sollte der in den Simulationen eingesetzte Integrator reversibel sein. Nun berechnen wir aus mit (4.53) und (4.54) die Übergangswahrscheinlichkeiten $W(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$ wie folgt,

$$W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \int \mathcal{D}\mathbf{p} \mathcal{D}\mathbf{p}' P_G(\mathbf{p}) T(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') A(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}'). \quad (4.56)$$

Die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht lautet

$$e^{-S(\mathbf{q})} W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = e^{-S(\mathbf{q}')} W(\mathbf{q}', \mathbf{q}). \quad (4.57)$$

Die linke Seite der Bedingung ist

$$e^{-S(\mathbf{q})} W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\mathbf{p} \mathcal{D}\mathbf{p}' e^{-H(\mathbf{q}, \mathbf{p})} T(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') A(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}'). \quad (4.58)$$

Ähnlich wie beim Beweis der Bedingung im Monte-Carlo-Algorithmus im Unterabschnitt 4.2.2 kann man wegen der Form von A zeigen, daß gilt

$$e^{-H(\mathbf{q}, \mathbf{p})} A(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') = e^{-H(\mathbf{q}', \mathbf{p}')} A(\mathbf{q}', \mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{q}, \mathbf{p}).$$

Verwendet man diese Beziehung in (4.58) und berücksichtigt noch, dass H und A gerade Funktionen der Impulse sind, dann folgt mit (4.55)

$$\begin{aligned} e^{-S(\mathbf{q})} W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') &= \mathcal{N} \int \mathcal{D}\mathbf{p} \mathcal{D}\mathbf{p}' e^{-H(\mathbf{q}', \mathbf{p}')} T(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') A(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') \\ &= \mathcal{N} \int \mathcal{D}\mathbf{p} \mathcal{D}\mathbf{p}' e^{-H(\mathbf{q}', \mathbf{p}')} T(\mathbf{q}', \mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{q}, \mathbf{p}) A(\mathbf{q}', \mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{q}, \mathbf{p}) \\ &= e^{-S(\mathbf{q}')} W(\mathbf{q}', \mathbf{q}). \end{aligned}$$

Der Beweis macht deutlich, warum die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Impulse nicht beliebig sein darf. $P_G(\mathbf{p}) \cdot \exp(-S(\mathbf{q}))$ muss proportional zu $\exp(-H(\mathbf{q}, \mathbf{p}))$ sein. Wegen der Form der Hamiltonfunktion müssen die Impulse gaussverteilt sein.

Wir haben betont, dass der Integrator zur numerischen Lösung der fiktiven Hamiltonschen Dynamik reversibel sein sollte um die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht zu erfüllen. Ein reversibler Algorithmus ist der *leap-frog Algorithmus*. Dabei werden zunächst die Impulse einen halben Zeitschritt integriert. Dann werden jeweils abwechselnd die Impulse und Koordinaten integriert, um abschließend noch einmal einen Halbschritt im Impulsraum zu berechnen. Die diskretisierten Bewegungsgleichungen mit Vorwärtsableitung $\dot{f}(u)\Delta u = f(u + \Delta u) - f(u)$ führen auf

$$\begin{aligned} \mathbf{q}(u + \Delta u) &= \mathbf{q}(u) + \Delta u \mathbf{p}(u) \\ \mathbf{p}(u + \Delta u) &= \mathbf{p}(u) - \Delta u S_{,q}(\mathbf{q}(u)) \end{aligned} \quad (4.59)$$

Implementierung des HMC-Algorithmus: Die Integration soll über ein „Zeitintervall“ $u = N\Delta u$ ausgeführt werden. Aus einer anfänglichen Konfiguration $(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0))$ werden $\mathbf{q}(n\Delta u) \equiv \mathbf{q}(n)$ und $\mathbf{p}((n + \frac{1}{2})\Delta u) \equiv \mathbf{p}(n + \frac{1}{2})$ wie folgt generiert:

1. Man beginne mit einer anfänglichen Konfiguration $\mathbf{q}(0)$. Je nach Temperatur oder Stärke der Kopplungskonstante wählt man meist einen warmen oder kalten Start.
2. Erzeugung von kanonisch konjugierten Impulskomponenten (p_1, \dots, p_n) die mit Varianz 1 und Mittelwert 0 gaussverteilt sind.
3. Berechnung eines Halbschrittes für \mathbf{p} :

$$\mathbf{p}(\tfrac{1}{2}) = \mathbf{p}(0) - \frac{\Delta u}{2} S_{,\mathbf{q}}(\mathbf{q}(0)). \quad (4.60)$$

4. Iteration der beiden folgenden Schritte

$$\begin{aligned} a) \quad & \mathbf{q}(k) = \mathbf{q}(k-1) + \Delta u \mathbf{p}(k - \tfrac{1}{2}), \quad k = 1, 2, \dots, N \\ b) \quad & \mathbf{p}(k + \tfrac{1}{2}) = \mathbf{p}(k - \tfrac{1}{2}) - \Delta u S_{,\mathbf{q}}(\mathbf{q}(k)), \quad k = 1, \dots, N-1. \end{aligned} \quad (4.61)$$

5. Berechnung des abschließenden Halbschrittes:

$$\mathbf{p}(N) = \mathbf{p}(N - \tfrac{1}{2}) - \frac{\Delta u}{2} S_{,\mathbf{q}}(\mathbf{q}(N)). \quad (4.62)$$

6. Akzeptiere die neue Konfiguration $(\mathbf{q}', \mathbf{p}') = (\mathbf{q}(N), \mathbf{p}(N))$ mit der Wahrscheinlichkeit (4.53).
7. Beginne wieder mit der neuen oder der alten Konfiguration bei Schritt zwei.

Der so generierte Markovprozess strebt gegen die Boltzmannverteilung. Allerdings ist wegen der unvermeidlichen Rundungsfehler die Reversibilität des leap-frog Integrators nicht exakt gegeben. Ein Test für die Korrektheit der Impementation macht davon Gebrauch, dass die Abbildung $\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}'$ im Phasenraum volumenerhaltend ist, $\mathcal{D}\mathbf{q}\mathcal{D}\mathbf{p} = \mathcal{D}\mathbf{q}'\mathcal{D}\mathbf{p}'$. Deshalb gilt

$$\int \mathcal{D}\mathbf{q}'\mathcal{D}\mathbf{p}' e^{-H(\mathbf{q}', \mathbf{p}')} = \int \mathcal{D}\mathbf{q}\mathcal{D}\mathbf{p} e^{-H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - \Delta H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}, \quad (4.63)$$

wobei $\Delta H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = H(\mathbf{q}', \mathbf{p}') - H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ die Endergieänderung nach N Zeitschritten ist. Daraus folgt nun unmittelbar

$$1 = \langle e^{-\Delta H} \rangle \geq e^{-\langle \Delta H \rangle}, \quad (4.64)$$

wobei die *Jensen-Ungleichung* aus der Konvexität der Exponentialfunktion folgt.

Beim HMC gibt es zwei einstellbare Parameter, mit deren Hilfe sich die Effizienz bei gegebenen Volumen beeinflussen lässt: Dies sind die Trajektorienlänge $u = N\Delta u$ und die Schrittweite Δu .

In einem leap-frog Integrationsschritt wird die Energieerhaltung wegen der Diskretisierungsfehler verletzt [29],

$$\Delta H \propto (\Delta u)^3 + O((\Delta u)^4), \quad (4.65)$$

und der Erwartungswert von ΔH bei konstantem u zeigt folgende Abhängigkeit vom Volumen V und der Schrittweite Δu ,

$$\langle \Delta H \rangle \propto V(\Delta u)^4, \quad u \text{ konstant.} \quad (4.66)$$

Über die Schrittweite lässt sich bei festem Volumen die Akzeptanzrate des HMC so einstellen, und zwar für beliebiges u . Je größer u gewählt wird, desto unkorrelierter sind die erzeugten Konfigurationen. Gleichzeitig steigt der Rechenaufwand zur Erzeugung einer Konfiguration. Wie immer gilt es, hier einen vernünftigen Kompromiss zu finden.

HMC für den anharmonischen Oszillator: Die Übertragung des HMC Algorithmus auf den anharmonischen Oszillator ist einfach, da der Modell-Hamiltonian die einfache Form

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N p_i^2 + S(\mathbf{q}) \quad \text{mit} \quad S(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_i ((q_{i+1} - q_i)^2 + \omega^2 q_i^2 + 2q_i^4) \quad (4.67)$$

hat. Bei der Integration der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen mit der leap-frog Methode nach (4.60-4.62) sind die Komponenten von $S_{,q}$ gleich

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = \frac{\tilde{m}}{a}(2q_i - q_{i-1} + q_{i+1}) + 2a\tilde{\mu}q_i + 4a\tilde{\lambda}q_i^3. \quad (4.68)$$

4.5 Programme zu Kapitel 4

Hier finden sie die im Kapitel benutzten Programme `anharmonic1.c`, `anharmonic2.c` und `constants.h`, `stdanho.h`.

anharmonic1.c: Es wird die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_0(q)|^2$ für den harmonischen und anharmonischen Oszillator mit dem Monte-Carlo Verfahren berechnet. Die Modellparameter sind in den header-Dateien abgelegt.

```
/* Programm anharmonic.c */
```

```

/* MC Simulation des anharmonischen Oszillators */
/* L=MASSE/2 v^2+MU q^2+LAMBDA*q^4 */
/* Metropolis Algorithmus */
/* Berechnung des Quadrates der Grundzustandswellenfunktion */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <time.h>
#include "constants.h" /* Definition von N,A,MG,MA,BIN,INTERV */
/* MASSE,MU,LAMBDA,DELTA */
/* Initialisierung von q[N], qneu */
/* massel, lambdal, mueleff, abg, streck, versch */
#include "stdanho.h" /* Funktion deltaS(qneu, qalt, summenn) */
/* MA MC-Iterationen: mcsweep(*zgr,*q) */

int main(void)
{
    unsigned int i,j;
    int *zgr,p,bin[BIN];
    zgr=&abg; srand48(time(NULL));
    /* Initialisierung des Systems */
    for (i=0;i<N;i++)
        q[i]=DELTA*(1-2*drand48());
    for (i=0;i<BIN;i++)
        bin[i]=0;
    /* Thermalisierung des Systems */
    for (i=0;i<MG;i++)
        mcsweep(zgr,q);
    /* Berechnung und Binning */
    abg=0;
    for (i=0;i<M;i++)
        { mcsweep(zgr,q); binning(bin,q); };
    /* Ausgabe der W'keitsdichte und Ablehnungsrate */
    for (i=0;i<BIN;i++)
        printf("(%i,%0.3f)",i,20*bin[i]/(double)M);
    printf("\nabgelehnt_wurden_%0.2f\n", (float) abg/(N*M*MA));
    return 0;
}

```

anharmonic2.c: Es wird die Grundzustandsenergie E_0 für den anharmonischen Oszillator mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus und Virialsatzes (4.41) berechnet. Die Modellparameter sind in den header-Dateien abgelegt.

```

/* Programm anharmonic2.c */
/* MC Simulation des anharmonischen */
/* Oszillators mit Metropolis Algorithmus */
/* L=MASSE/2 v^2+MU q^2+LAMBDA*q^4 */

```

```

/* Berechnung der Grundzustandsenergie */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <time.h>
#include "constants.h"
#include "stdanho.h"
int main(void)
{
    unsigned int i, j;
    int *zgr, p; double mittel1=0, mittel2=0;
    zgr=&abg;
    srand48(time(NULL));
    /* Initialisierung des Systems */
    for (i=0; i<N; i++)
        q[i]=DELTA*(1-2*drand48());
    /* Thermalisierung des Systems */
    for (i=0; i<MG; i++)
        mcsweep(zgr, q);
    /* Simulation und Momentenberechnung */
    abg=0;
    for (i=0; i<M; i++)
    {
        mcsweep(zgr, q);
        mittel1=mittel1+moments(2, q);
        mittel2=mittel2+moments(4, q);
    };
    /* Berechnung der Grundzustandsenergie, Wick-Test, Ausgabe */
    mittel1=mittel1/M;
    mittel2=mittel2/M;
    printf("q2=%0.4f q4=%0.4f E0=%0.4f wick=%0.4f\n",
           mittel1, mittel2,
           2*MU*mittel1+3*LAMBDA*mittel2,
           3*mittel1*mittel1-mittel2);
    printf("\nabgelehnt wurden %0.2f\n", (float) abg/(N*M*MA));
    return 0;
}

```

4.5.1 Headerdateien

Die folgenden Headerdateien werden in `anharmoini1.c` und `anharmoini2.c` eingebunden.

constants.h: Hier werden die Konstanten N , A , MG , MA , BIN , $INTERV$, $MASSE$, MU , $LAMBDA$, $DELTA$ und die Variablen $q[N]$, $qneu$, $massel$, $lambdal$, $mueleff$, abg , $streck$, $versch$ definiert und teilweise initialisiert:

```

/* Programm constants.h */
/* Konstanten: N,A,MG,MA,BIN,INTERV */
/* MASSE,MU,LAMBDA,DELTA */
/* Initialisierung von q[N],qneu */
/* massel,lambdal,mueleff,abg,streck,versch */
#define N 10 /* Anzahl Gitterpunkte */
#define A 1.0 /* Gitterkonstante */
#define M 500000 /* Anzahl Iterationen */
#define MG 100 /* bis zum Gleichgewicht */
#define MA 5 /* jede MA-te Konfiguration gemessen */
#define BIN 40 /* Anzahl Bins fuer Wellenfunktion */
#define INTERV 2 /* Intervall fuer Binning [-INTERV,INTERV] */
#define MASSE 1.0
#define MU 1.0
#define LAMBDA 0.0
#define DELTA 0.5 /* Variablenaenderung = DELTA(1-2 random) */
/* Umrechnung in Gittergroessen */
double massel=MASSE/A;
double lambdal=A*LAMBDA;
double mueleff=MASSE/(A+A*MU);
double qneu,q[N];
unsigned int abg=0;
double versch=(double)BIN/2.0;
double streck=0.5*(double)BIN/(double)INTERV;

```

stdanho.h: Hier werden mehrere und oft gebrauchte Funktionen für die Simulationen in der Quantenmechanik bereitgestellt:

Die erste Funktion $\text{deltaS}(\text{double } y, \text{double } x, \text{double } xs)$ berechnet die Änderung der Wirkung wenn x versuchsweise in y abgeändert wird. xs ist die Summe der Variablen auf den benachbarten Gitterplätzen. Es werden die Variablen $mueleff$, $lambdal$ und $massel$ gebraucht.

Die zweite Funktion $\text{mcsweep}(\text{int } *zgr, \text{double } *q)$ vollführt MA Monte-Carlo-sweeps. $*q$ zeigt auf den Array $q[N]$ und $*zgr$ auf die Variable abg , welche zählt, wie oft eine Änderung abgelehnt wurde. Es werden die Werte der Konstanten N , MA und $DELTA$ gebraucht.

Die dritte Funktion $\text{binning}(\text{int } *bin, \text{double } *q)$ binnt die Werte von $q[N]$ im Intervall $[-INTERV, INTERV]$ im Array $bin[BIN]$. Die Variablen $q[N]$, $bin[BIN]$, $streck$, $versch$ und BIN sollten definiert und initialisiert sein.

Die vierte Funktion $\text{moments}(\text{short } n, \text{double } *q)$ berechnet die Summen

$$\frac{1}{N} \sum q_i^n.$$

```

/* Programm stdanho.m */

```



```

/* Aenderung der Wirkung */
double deltaS(double y, double x, double xs)
{ return (y-x)*((y+x)*(mueff+lambdal*(y*y+x*x))-massel*xs); };
/* MA sweeps durch das Gitter */
/* Erwartet Konstanten N,MA,DELTA */
/* Argumente: Array q[N], Zeiger auf abg */
void mcsweep(int *zgr, double *q)
{ int i, j; double qneu, dS;
  for (i=0; i<MA; i++)
    for (j=0; j<N; j++)
      { qneu=q[j]+DELTA*(1-2*drand48());
        dS=deltaS(qneu, q[j], q[(j+1)%N]+q[(j+N-1)%N]);
        if (dS<0) q[j]=qneu;
        else
          if (exp(-dS)>drand48()) q[j]=qneu;
          else *zgr=*zgr+1;
      };
}
/* Binning der Werte in q[N] */
void binning(int *bin, double *q)
{ int i, p;
  for (i=0; i<N; i++)
    {p=(int)(q[i]*streck+versch); if ((0<=p)&&(p<BIN)) bin[p]++;};
}
/* Berechnung der Momente */
double moments(int n, double *q)
{ int i; double sum=0;
  for (i=0; i<N; i++)
    sum=sum+pow(q[i], n);
  return sum/N;
}

```

4.6 Aufgaben

Aufgabe 8: Detailliertes Gleichgewicht

Ein statistisches System habe zwei Zustände, die mit den Wahrscheinlichkeiten P_s , $s = 1, 2$ angetroffen werden. Die P_s seien beide ungleich Null. Finden Sie die allgemeinste stochastische Matrix $W(s, s')$, die die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts

$$P(s)W(s, s') = P(s')W(s', s) \quad \text{für } s, s' \in \{1, 2\}$$

erfüllt. Was ist die optimale Wahl für W damit W^n möglichst schnell gegen W^{eq} konvergiert.

Aufgabe 9: Markov Prozess

Betrachte ein System mit 3 Energie-Eigenzuständen mit Energien $E_1 < E_2 < E_3$. Die erlaubten Übergänge sind von $\mu \rightarrow (\mu+1) \bmod 1$. Ein derartiger Prozess kann nicht die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht erfüllen. Zeige, dass es trotzdem möglich ist, eine Übergangswahrscheinlichkeit $W(\mu, \nu)$ mit der Boltzmannverteilung als Gleichgewichtszustand zu konstruieren.