Der Gibbs-Sampler für das Ising-Modell

(eine Anwendung der

Konvergenz von Markovketten)

18. Dezember 2013

Ising-Modell

Ein einfaches thermodynamisches und quantenmechanisches Modell für (Ferro-)Magnetismus von Kristallen (Ernst Ising, 1924)

- Atome sitzen auf den Knoten eines Gitters, wir denken an $\{0, 1, \dots, L-1\}^2$ für ein $L \in \mathbb{N}$
- jedes Atom $(i, j) \in \Lambda$ besitzt ein magnetisches Moment $x_{(i,j)} \in \{-1, +1\}$ („Spin“)
- Atome wechselwirken (nur) mit ihren direkten Nachbarn auf dem Gitter, und sie bevorzugen dieselbe (Spin-)Orientierung wie ihre Nachbarn zu haben

Ising-Modell, II

- Die „Energiefunktion“ eines Zustands $x \in \{\pm 1\}^{\Lambda}$ ist gegeben durch

$$H(x) = -\sum_{(i,j)\sim(i',j')} x_{(i,j)} x_{(i',j')}$$

  ($(i,j) \sim (i',j')$ bedeutet, dass (i,j) und (i',j') benachbarte Gitterpunkte sind)

  Demnach ist die Energie eines Zustands umso kleiner, je mehr „gleichsinnige“ Nachbar-Paare ($+/+$ oder $-/-$) es gibt

- Wegen thermischer Fluktuationen ist der („mikroskopische“) Zustand des Systems bei Temperatur $T > 0$ zufällig

Ising-Modell: Gibbs-Verteilung

$$H(x) = -\sum_{(i,j)\sim(i',j')} x_{(i,j)} x_{(i',j')}, \quad x \in \{\pm 1\}^{\Lambda}$$

Bei Temperatur $T > 0$ hat Zustand x Wahrscheinlichkeit

$$\mu_\beta(x) := \frac{1}{Z_\beta} \exp\big(-\beta H(x)\big)$$

mit $\beta = 1/T$ („inverse Temperatur“) und
Normierungskonstante („Zustandssumme“)

$$Z_\beta := \sum_{y \in \{\pm 1\}^{\Lambda}} \exp\big(-\beta H(x)\big).$$

μ_β ist ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf $\{\pm 1\}^{\Lambda}$, die „Gibbs-Verteilung“ (oft auch „Boltzmann-Verteilung“ genannt)

Gibbs-Verteilung

$$\mu_\beta(x) = \frac{1}{Z_\beta} \exp\big(-\beta H(x)\big), \quad x \in \{\pm 1\}^\Lambda$$

mit $Z_\beta = \sum_{y \in \{\pm 1\}^\Lambda} \exp\big(-\beta H(x)\big)$
Um „typische“ Konfigurationen im thermischen Gleichgewicht zu beschreiben, müssen wir Erwartungswerte bezüglich μ_β ausrechnen.

Problem: Wir können $\mu_\beta(x)$ nur sehr schwer ausrechnen, denn Z_β ist eine Summe über $2^{|\Lambda|}$ Terme
(z.B. für ein Gitter der Größe 100×100 sind dies $2^{10000} \approx 2 \cdot 10^{3010}$ Summanden)

Gibbs-Verteilung

$$\mu_\beta(x) = \frac{1}{Z_\beta} \exp\big(-\beta H(x)\big), \quad x \in \{\pm 1\}^\Lambda$$

mit $Z_\beta = \sum_{y \in \{\pm 1\}^\Lambda} \exp\big(-\beta H(x)\big)$
Um „typische“ Konfigurationen im thermischen Gleichgewicht zu beschreiben, müssen wir Erwartungswerte bezüglich μ_β ausrechnen.

Problem: Wir können $\mu_\beta(x)$ nur sehr schwer ausrechnen, denn Z_β ist eine Summe über $2^{|\Lambda|}$ Terme
(z.B. für ein Gitter der Größe 100×100 sind dies $2^{10000} \approx 2 \cdot 10^{3010}$ Summanden)

Lösungsvorschlag: Finde eine Markovkette $(X_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$, die $\mu_\beta(x)$ als (einziges) Gleichgewicht besitzt, dann besitzt (für $n \gg 1$) X_n (ungefähr) Verteilung μ_β

Gibbs-Sampler

Für $(i,j) \in \Lambda$, $x \in \{\pm 1\}^\Lambda$ sei

$x^{(i,j),+}\{\pm 1\}^\Lambda$ geg. durch $x^{(i,j),+}_{(i',j')} = \begin{cases} +1, & (i',j') = (i,j) \\ x_{(i',j')} & (i',j') \neq (i,j) \end{cases}$

und analog $x^{(i,j),-}$

Gibbs-Sampler

Für $(i,j) \in \Lambda$, $x \in \{\pm 1\}^\Lambda$ sei

$x^{(i,j),+}\{\pm 1\}^\Lambda$ geg. durch $x^{(i,j),+}_{(i',j')} = \begin{cases} +1, & (i',j') = (i,j) \\ x_{(i',j')} & (i',j') \neq (i,j) \end{cases}$

und analog $x^{(i,j),-}$

Definiere $(A(x,y))_{x,y \in \{\pm 1\}^\Lambda}$ durch

$$A(x, x^{(i,j),+}) := \frac{1}{|\Lambda|} \frac{\mu_\beta(x^{(i,j),+})}{\mu_\beta(x^{(i,j),+}) + \mu_\beta(x^{(i,j),-})},$$

$$A(x, x^{(i,j),-}) := \frac{1}{|\Lambda|} \frac{\mu_\beta(x^{(i,j),-})}{\mu_\beta(x^{(i,j),+}) + \mu_\beta(x^{(i,j),-})},$$

$$A(x,y) := 0, \qquad \text{falls } y \notin \cup_{(i,j)} \{x^{(i,j),+}, x^{(i,j),-}\}$$

Beachte: A ist eine (irreduzible und aperiodische) stochastische Matrix, und man braucht Z_β nicht zu kennen, um A zu bestimmen

(Interpretation von A: Wähle zufällig einen Gitterpunkt, flippe den Spin dort gemaß μ_β, bedingt auf alle anderen Spins.)

Gibbs-Sampler, II

$$A(x, x^{(i,j),+}) := \frac{1}{|\Lambda|} \frac{\mu_\beta(x^{(i,j),+})}{\mu_\beta(x^{(i,j),+}) + \mu_\beta(x^{(i,j),-})},$$
$$A(x, x^{(i,j),-}) := \frac{1}{|\Lambda|} \frac{\mu_\beta(x^{(i,j),-})}{\mu_\beta(x^{(i,j),+}) + \mu_\beta(x^{(i,j),-})}$$

Es gilt

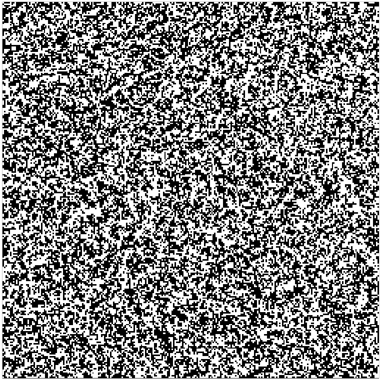
$$\mu_\beta(y)A(y,z) = \mu_\beta(z)A(z,y) \quad \text{für alle} \quad y, z \in \{\pm 1\}^\Lambda$$

(es genügt hier, dies für $y = x^{(i,j),+}$, $z = x^{(i,j),-}$ für alle $x \in \{\pm 1\}^\Lambda$, $(i,j) \in \Lambda$ zu prüfen)
und somit

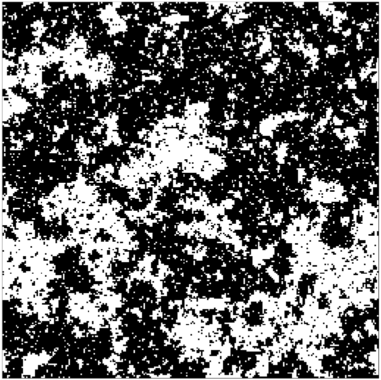
$$\sum_z \mu_\beta(z)A(z,y) = \mu_\beta(y) \quad \text{für alle} \quad y \in \{\pm 1\}^\Lambda$$

μ_β ist ein (reversibles) Gleichgewicht für A

Simulationen eines Zustands gemäß μ_β für $L = 256$



$\beta = 0.2$



$\beta = 0.43$

(Absolute) Magnetisierung

Für einen „Mikro“-Zustand $x\{\pm 1\}^\Lambda$ ist

$$m(x) := \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{(i,j)\in\Lambda} x_{(i,j)}$$

die Magnetisierung (pro Spin),

$$m_\beta := \sum_{x\{\pm 1\}^\Lambda} \mu_\beta(x)\,|m(x)|$$

ist die mittlere (absolute) Magnetisierung bei inverser Temperatur β

Mittlere (absolute) Magnetisierung als Funktion von β
(basierend auf Simulation für $L = 1000$)