Anwesenheitsaufgaben 3

zur Vorlesung „Einführung in die Gittereichtheorie“ im Sommersemester 2018

Dozent: PD Dr. G. von Hippel

1. *Markov-Ketten*

   Sei X eine endliche Menge von Zuständen, P eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf X, $O_i : X \to \mathbb{R}$ eine Familie von Funktionen (Observablen). Um

   $$\langle O_i \rangle \equiv \sum_{s \in X} O_i(s) P(s)$$

   zu bestimmen, wird ein Verfahren gesucht, das N Zustände $s_k \in X$ generiert, die gemäß P verteilt sind, so dass

   $$\overline{O}_i \equiv \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} O_i(s_k) = \langle O_i \rangle + \mathrm{O}(N^{-1/2})\,.$$

   Eine Möglichkeit, dies zu erreichen, ist mit Hilfe einer Markov-Kette.
   Eine Markov-Kette $(s_k)_{k \in \mathbb{N}}$ auf X ist eine Folge von Zuständen $s_k \in X$, bei der s_{k+1} aus s_k durch einen stochastischen Prozess mit konstanter Übergangswahrscheinlichkeit für jedes Zustandspaar generiert wird. Wir repräsentieren den stochastischen Prozess durch eine Matrix T, deren Elemente $T_{s's}$ die Wahrscheinlichkeit eines Übergangs von s nach s' angeben.
   Offensichtlich muss

   $$T_{s's} \geq 0 \text{ für alle } s, s' \text{ und } \sum_{s'} T_{s's} = 1 \text{ für alle } s \tag{1}$$

   gelten. Wir wollen ferner fordern, dass

   $$\sum_s T_{s's} P_s = P_{s'} \text{ für alle } s', \text{ und} \tag{2}$$

   $$T_{ss} > 0 \text{ für alle } s. \tag{3}$$

   (Letztere Eigenschaft bezeichnet man als Aperiodizität). Schließlich wollen wir, dass unser Prozess ergodisch ist, d.h. für jede nicht-leere echte Teilmenge S von X gibt es ein Paar s, s' von Zuständen mit $s \in S$, $s' \notin S$ und $T_{s's} > 0$.

(a) Zeigen Sie, dass die Übergangswahrscheinlichkeit

$$T^0_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{3} \text{ für } i = j, i = j \pm 1 \bmod |X|\,, \\ \hfill 0 \text{ sonst}\,, \end{cases}$$

auf $X = \{0, \dots, |X|-1\}$ unseren Forderungen bezüglich der Verteilung $P_0(s) = \frac{1}{|X|}$ genügt.

(b) Zeigen Sie ferner, dass die Übergangswahrscheinlichkeit

$$T_{ij} = T^0_{ij} A_{ij} + \delta_{ij} \sum_k T^0_{kj}(1 - A_{kj})$$

mit

$$A_{ij} = \min\{1, P(i)/P(j)\}$$

auf $X = \{0, \dots, |X|-1\}$ unseren Forderungen bezüglich der (beliebigen) Verteilung $P(s)$ genügt.

(c) Sei T im folgenden ein Prozess, der all unseren Forderungen genügt. Sei ferner $\mathcal{H}$ der Raum aller Funktionen $f : X \to \mathbb{R}$ mit der Norm $\|f\|_1 = \sum_{s \in X} |f(s)|$. Durch

$$(\hat{T} f)(s') = \sum_{s \in X} T_{s's} f(s)$$

ist ein Operator $\hat{T}$ auf $\mathcal{H}$ definiert. Zeigen Sie: Für alle $f \in \mathcal{H}$ gilt $\|\hat{T} f\|_1 \leq \|f\|_1$. (Hinweis: Zerlegen Sie $f = f_+ - f_-$ mit $f_\pm \geq 0$.)

(d) Zeigen Sie ferner: $P \in \mathcal{H}$ ist der einzige Eigenvektor zum Eigenwert 1 von $\hat{T}$. (Hinweis: Betrachten Sie die Wirkung von $\hat{T}$ auf $f_\pm$.)

(e) Sei nun ein Skalarprodukt auf $\mathcal{H}$ durch

$$(f, g) = \sum_{s \in X} \frac{f(s) g(s)}{P(s)}$$

definiert, und sei $\|f\| = \sqrt{(f, f)}$ die zugehörige Norm. Zeigen Sie: wenn T unseren Forderungen genügt, so tut dies auch der Prozess, dem der Operator $\hat{Q} = \hat{T}^\dagger \hat{T}$, mit $\hat{T}^\dagger$ bezüglich dieses Skalarproduktes definiert, zugeordnet ist.

(f) Sei nun $\mathcal{H}_0 = \{f \in \mathcal{H} | \sum_{s \in x} f(s) = 0\}$. Zeigen Sie: es existiert ein $\rho \in [0; 1)$ so dass $\|\hat{T} f\| \leq \rho \|f\|$ für alle $f \in \mathcal{H}_0$. (Hinweis: Betrachten Sie das Spektrum von $\hat{Q}$ auf $\mathcal{H}_0$).

(g) Betrachten Sie nun eine Markov-Kette mit Startzustand s_1. Zeigen Sie: Die Wahrscheinlichkeit $P_k(s)$, dass $s_k = s$, tendiert für $k \to \infty$ gegen $P(s)$ gemäß

$$P_k(s) = P(s) + \mathrm{O}(\mathrm{e}^{-k/\tau})$$

mit der sogenannten exponentiellen Autokorrelationszeit $\tau = -1/\log \rho$.

(h) Folgern Sie, dass die Elemente $(s_k)_{k \gg \tau}$ einer Markov-Kette eine geeignete Stichprobe im Sinne der Ausgangsfragestellung darstellen.