Humboldt-Universität zu Berlin
Bereich Stochastik und Finanzmathematik

Peter Frentrup

Stochastik-Praktikum
Wintersemester 2017/2018

Projektaufgaben Block 5

Aufgabe 1 (Ising-Modell)
Das Ising-Modell beschreibt den Ferromagnetismus in Festkörpern. Jedes Atom i ist entweder positiv ($x_i = 1$) oder negativ geladen ($x_i = 0$). Die Verteilung der Magnetisierung (Konfiguration) $(x_i)_i$ eines Festkörpers (ohne externes magnetisches Feld) hat Zähldichte

$$f(x) = C \exp\Big(-\beta \sum_{i \sim j} \mathbb{1}_{x_i \neq x_j}\Big).$$

Hierbei heißt $\beta \geq 0$ *inverse Temperatur* und $i \sim j$ bedeutet, dass die Atome i und j benachbart sind. C ist Normalisierungskonstante, sodass $\sum_x f(x) = 0$.

Unser Festkörper sei ein 2-dimensionales quadratisches Gitter aus $L \times L$ Atomen, also

$$i \in \Lambda := \{1, 2, \dots, L\}^2 \subset \mathbb{R}^2$$

Die Nachbarn von $i = (i_1, i_2)$, $j \sim i$ sind $j = (i_1 - 1, i_2)$, $j = (i_1 + 1, i_2)$,$j = (i_1, i_2 - 1)$ und $j = (i_1, i_2 + 1)$. An den Rändern gibt es entsprechend weniger Nachbarn (alternativ: Torus $\Lambda := \mathbb{Z}_L^2$).

Wir wollen Magnetisierungskonfigurationen $x \in \{0, 1\}^\Lambda$ mittels Metropolis-Hastings-Algorithmus simulieren und so Samples $(X^{(n)})_{n \in \mathbb{N}_0}$ generieren. Dazu schlagen wir in jedem Schritt <u>ein</u> zufälliges (gleichverteilt) Atom k zur Änderung seiner Magnetisierung vor, d.h.

$$q(y \mid x) = \begin{cases} 1/L^2, & \text{falls sich } x, y \in \{0,1\}^\Lambda \text{ in genau einem Atom unterscheiden,} \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die neue Konfiguration, falls sie akzeptiert wird, ist also y mit $y_k = 1 - x_k$ und $y_i = x_i$ für $i \neq k$.

a) Sei $L = 50$ und $\beta = 0.5$. Plotten Sie die relative Anzahl $m(X^{(n)})$ der positiv geladenen Atome als Funktion von n je einmal für Startwerte
(i) alles Nullen, $X^{(0)} \equiv 0$, (ii) alles Einsen, $X^{(0)} \equiv 1$ und (iii) zufällig, $X^{(0)} \sim \mathcal{U}_{\{0,1\}^\Lambda}$.

b) Plotten Sie die zu $X^{(0)} \equiv 0$ so erzeugten Konfigurationen zu den Zeitpunkten $n = kL^2$, für $k = 2, 4, 8, 10, 20$, mit `matplotlib.imshow(X, cmap='Greys', interpolation='nearest')`

c) Verringern Sie nun die Temperatur, d.h. wählen Sie größere β, z.B. $\beta = 1$, $\beta = 2$. Nutzen Sie als Anfangskonfiguration für diesen Aufgabenteil das zuletzt erzeugte $X^{(n)}$ aus Teil b).

   Plotten Sie wieder $m(X^{(n)})$ und plotten Sie wieder die so erzeugten Konfigurationen $X^{(n)}$ zu verschiedenen Zeitpunkten n.

d) Erhöhen Sie die Temperatur erneut (β kleiner), startend mit der zuletzt erzeugten Konfigurationen aus Aufgabenteil c).

   Plotten Sie wiederum die erzeugten Konfigurationen zu verschiedenen Zeitpunkten.

e) Interpretieren Sie ihre Beobachtungen bezüglich unterschiedlicher Parameter β.

f) **freiwillig:** Schreiben Sie eine Funktion `countClusters(X)`, die die Anzahl der Zusammenhangskomponenten von benachbarten 1-en in einer Konfiguration X zählt. Plotten Sie $\left(\texttt{countClusters}(X^{(n)})\right)_n$ für verschiedene Parameter β.

Aufgabe 2 (Challenger-Absturz)
In [RC04, Beispiele 1.13 und 7.11] wird die Ausfallwahrscheinlichkeit $\mathbb{P}[Y = 1]$ von Dichtungsringen der Challenger Raumfähre in Abhängigkeit von der Außentemperatur X als logistische Regression modelliert, also

$$\mathbb{P}[Y = 1] = 1 - \mathbb{P}[Y = 0] = \frac{\exp(\alpha + \beta X)}{1 + \exp(\alpha + \beta X)}\,.$$

Aus früheren Starts sind Messungen X_i, Y_i bekannt:

Probleme Y_i	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
Temperatur X_i	53	57	58	63	66	67	67	67	68	69	70	70

Probleme Y_i	1	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0
Temperatur X_i	70	70	72	73	75	75	76	76	78	79	81

a) Simulieren Sie $N = 10\,000$ Samples $(\alpha_n, \beta_n)_{n=1}^N$ der Parameter (α, β) mittels Metropolis-Hastings-Algorithmus, wie in [RC04, Beispiel 7.11] bzw. den Vorlesungsfolien beschieben.

b) Plotten Sie $(\alpha_n)_n$ gemeinsam mit dem laufenden Mittel $(\bar{\alpha}_n)_n := \left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^n \alpha_k\right)_n$, sowie $(\beta_n)_n$ gemeinsam mit seinem laufenden Mittel $(\bar{\beta}_n)_n$ als Funktion von $n = 1, \dots, N$.

Entscheiden Sie sich für die folgenden Aufgaben für die Dauer n_0 der *Burn-In-Phase*, so dass dann nur noch $(\alpha_n, \beta_n)_{n=n_0+1}^N$ betrachtet wird. Begründen Sie ihre Wahl. Probieren Sie dazu im Folgenden ggf. auch andere n_0 und $n_0 = 0$.

c) Erstellen Sie je ein Histogramm für die Samples von α und β.

d) Erstellen Sie je ein Histogramm für die simulierte Ausfallwahrscheinlichkeit $\mathbb{P}[Y = 1]$ zu den Außentemperaturen $X = 65\,°F$, $X = 55\,°F$ und $X = 45\,°F$. Interpretieren Sie.

Literatur

[RC04] Robert, Christian P. und George Casella: *Monte Carlo statistical methods*. Springer Texts in Statistics. Springer-Verlag, New York, second Auflage, 2004, ISBN 0-387-21239-6. `https://doi.org/10.1007/978-1-4757-4145-2`.

Hinweise zur Abgabe:
Alle Dateien (PDF der Auswertung, Python-Code für jede einzelne Aufgabe) gepackt als Zip-Archiv mit dem Namen *UE5_Student1_Student2.zip* bis zum 6. 2. per E-Mail an *frentrup@math.hu-berlin.de* schicken.