



Universität Bielefeld

Fakultät für Physik

Arbeit zur Erlangung des Bachelor-Grades

# **Markovketten-Monte-Carlo-Analyse der kosmischen Hintergrundstrahlung**

Henrik Gebauer

Bielefeld, Sommersemester 2010

Gutachter: Prof. Dr. Dominik Schwarz,  
Prof. Dr. Dietrich Bödeker

## **Erklärung**

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst habe. Dabei wurden keine weiteren als die angegebenen Hilfsmittel verwendet.

Bielefeld, 22. September 2010

---

Henrik Gebauer

## Inhaltsverzeichnis

<b>1 Übersicht</b>	<b>4</b>
<b>2 Physikalische Grundlagen</b>	<b>5</b>
2.1 Das expandierende Universum, kosmologische Parameter . . . . .	5
2.2 Kosmische Hintergrundstrahlung . . . . .	7
2.3 Anisotropien der Hintergrundstrahlung . . . . .	8
2.4 Dichteschwankungen im frühen Universum . . . . .	9
2.5 Das Leistungsspektrum . . . . .	11
2.6 Schluss auf kosmologische Parameter . . . . .	11
<b>3 Mathematische Grundlagen</b>	<b>14</b>
3.1 Stochastische Grundlagen . . . . .	14
3.1.1 Monte-Carlo-Abschätzungen . . . . .	15
3.2 Markov-Ketten . . . . .	16
3.2.1 Definition des Begriffs . . . . .	16
3.2.2 Eigenschaften von Markov-Ketten . . . . .	16
3.2.3 Konstruktion von Markov-Ketten . . . . .	19
3.2.4 Der Metropolis-Algorithmus . . . . .	20
3.3 Stochastische Modelle und Schlüsse auf Modellparameter . . . . .	22
3.3.1 Modellparameter der Gauß-Verteilung . . . . .	22
3.3.2 Die Maximum-Likelihood-Methode . . . . .	22
3.3.3 Statistische Schlüsse auf Modellparameter . . . . .	23
<b>4 Das Programm COSMOMC</b>	<b>24</b>
4.1 Funktionsweise . . . . .	24
4.2 Installation auf dem Linux-Cluster der Theoretischen Physik der Uni- versität Bielefeld . . . . .	25
4.2.1 Login . . . . .	25
4.2.2 Fortran-Lizenz kopieren . . . . .	25
4.2.3 Pakete herunterladen und entpacken . . . . .	27
4.2.4 CFITSIO installieren und testen . . . . .	27
4.2.5 WMAP7-Daten installieren und testen . . . . .	28
4.2.6 COSMOMC installieren . . . . .	28
4.3 Ausführung . . . . .	29
4.4 Auswertung der Ergebnisse . . . . .	30
<b>5 Resultate</b>	<b>31</b>
<b>6 Fazit und Zusammenfassung</b>	<b>34</b>
<b>7 Danksagung</b>	<b>35</b>
<b>Literatur</b>	<b>36</b>

## 1 Übersicht

In dieser Arbeit wird eine numerische Methode zur Untersuchung der kosmischen Hintergrundstrahlung beschrieben, die sogenannte Markov-Ketten-Monte-Carlo-Analyse. Dazu werden zufällige Daten generiert und hinterher über diese Daten gemittelt, um Abschätzungen für kosmologische Parameter zu erhalten. Das Verfahren stellt sicher, dass diese Abschätzungen gegen die gewünschten Werte konvergieren.

Dazu werde ich zunächst den physikalischen Hintergrund zusammenfassen und dann nach einem kurzen Einstieg in die Stochastik rein mathematisch die Algorithmen beschreiben. Danach werden Physik und Mathematik zusammengeführt und das Programm COSMOMC<sup>1</sup> beschrieben, das die Analyse durchführt. Dort findet sich auch eine Anleitung, wie das Programm auf dem Linux-Cluster der Theoretischen Physik an der Universität Bielefeld installiert wird. Zum Schluss stelle ich kurz einige Ergebnisse vor, die mit dem Programm berechnet wurden.

---

<sup>1</sup>Cosmological MonteCarlo, <http://cosmologist.info/cosmomc/>

## 2 Physikalische Grundlagen

### 2.1 Das expandierende Universum, kosmologische Parameter

In der Kosmologie wird angenommen, dass das Universum auf großen Skalen homogen und isotrop ist. Daraus folgt, dass sich bei der Expansion des Universums alle Abstände gleichmäßig verändern. Die Expansion kann daher durch einen für das ganze Universum geltenden **Skalenfaktor**

$$a(t) := \frac{r(t)}{r_0} \quad (1)$$

beschrieben werden [1, S. 2], wobei  $r(t)$  der physikalische Abstand zwischen zwei Punkten zur Zeit  $t$  ist. Die Zeit  $t = 0$  entspricht dem Urknall. Der Index 0 an einer Größe bedeutet, dass der heutige Wert gemeint ist.  $r_0 = r(t_0)$  ist also ein heutiger Abstand und  $t_0$  das Alter des Universums.

Da sich jede Information höchstens mit der endlichen Lichtgeschwindigkeit ausbreiten kann, kann jede Information seit der Entstehung des Universums auch nur eine endliche Entfernung zurück gelegt haben. Die maximale Entfernung, die eine Information zurückgelegt haben kann, d.h. der größte Abstand, aus der uns jemals Informationen erreichen können, ist der **Beobachtungshorizont**. Vorgänge, deren Abstand größer als der Beobachtungshorizont ist, können sich gegenseitig nicht beeinflussen.

Durch die Expansion wird auch die Wellenlänge  $\lambda$  von Photonen gestreckt. Für ein zur Zeit  $t_e$  emittiertes und heute, zur Zeit  $t_0$ , beobachtetes Photon definiert man die **Rotverschiebung** [2, S. 10]

$$z := \frac{\lambda(t_0) - \lambda(t_e)}{\lambda(t_e)} = \frac{\lambda(t_0)}{\lambda(t_e)} - 1. \quad (2)$$

Mit Gl. (1) folgt  $\lambda(t_e) = a(t_e)\lambda(t_0)$  und somit

$$1 + z = \frac{1}{a(t_e)}.$$

Für ein expandierendes Universum wächst  $a$  monoton an, daher kann auch die Rotverschiebung anstelle von  $t$  angegeben werden, um einen Zeitpunkt zu bezeichnen. Dies ist häufig zweckmäßiger, da die Rotverschiebung direkt experimentell zugänglich ist.

Die **Hubble-Rate** (oder Expansionsrate) ist definiert [2, S. 15] als

$$H(t) := \frac{\dot{a}(t)}{a(t)}. \quad (3)$$

$H_0$  heißt auch **Hubble-Konstante**. Die Auswertung von in sieben Jahren mit der

Raumsonde WMAP<sup>2</sup> gemessenen Daten ergibt den Wert [3, S. 3]

$$H_0 = 71,0 \pm 2,5 \text{ km s}^{-1} \text{ Mpc}^{-1}.$$

$H_0$  wird häufig über einen Faktor  $h$  parametrisiert, sodass [2, S. 16]

$$H_0 = 100h \text{ km s}^{-1} \text{ Mpc}^{-1}.$$

Mit dem obigen Wert für  $H_0$  gilt also  $h = 0,710 \pm 0,025$ .

$H(t)$  verändert sich gemäß der **Friedmann-Gleichung** [4, S. 37]

$$H^2(t) = \frac{8\pi G}{3}\epsilon(t) - \frac{k}{a^2(t)},$$

wobei  $G$  die Gravitationskonstante und  $\epsilon$  die mittlere Energiedichte des Universums ist.  $k$  ist eine Konstante, die die Krümmung des Universums beschreibt.  $k = 0$  entspricht einem flachen,  $k = 1$  einem positiv und  $k = -1$  einem negativ gekrümmten Universum.

Die Friedmann-Gleichung folgt aus den Einsteinschen Feldgleichungen

$$R_{\mu\nu} = -8\pi G \left( T_{\mu\nu} - \frac{1}{2} g_{\mu\nu} T^\lambda{}_\lambda \right),$$

wobei  $R_{\mu\nu}$  der Ricci-Tensor,  $T_{\mu\nu}$  der Energie-Impuls-Tensor und  $g_{\mu\nu}$  der metrische Tensor ist. Für ein isotropes und homogenes Universum lassen sich die Gleichungen zu

$$-\frac{2k}{a^2} - \frac{2\dot{a}^2}{a^2} - \frac{\ddot{a}}{a} = -4\pi G(\epsilon - p), \quad (4)$$

$$\frac{3\ddot{a}}{a} = -4\pi G(3p + \epsilon) \quad (5)$$

vereinfachen [4, S. 34ff.], wobei  $p$  der Druck ist. Wenn das Dreifache von Gl. (4) zu Gl. (5) addiert wird, folgt die Friedmann-Gleichung.

Die **kritische Dichte** ist die Dichte eines flachen Universums, also [2, S. 21]

$$\epsilon_c := \frac{3H^2}{8\pi G}. \quad (6)$$

Der **Dichteparameter** ist das Verhältnis zwischen der mittleren Energiedichte und der kritischen Dichte [2, S. 21],

$$\Omega := \frac{\epsilon}{\epsilon_c}. \quad (7)$$

<sup>2</sup>Wilkinson Microwave Anisotropy Probe, siehe Abschnitt 2.3

Für ein flaches Universum folgt mit Gl. (6)  $\Omega = 1$ . Die Abweichung von diesem Wert,

$$\Omega_K := 1 - \Omega, \quad (8)$$

ist daher ein Maß für die räumliche Krümmung des Universums [5, S. 2].

Zur gesamten Energiedichte tragen die Energiedichte der Materie  $\epsilon_m$ , der Strahlung  $\epsilon_r$  und die der sogenannten dunklen Energie  $\epsilon_\Lambda$  bei,  $\epsilon = \epsilon_m + \epsilon_r + \epsilon_\Lambda$  [2, S. 22]. Somit ist auch der Dichteparameter aus mehreren Beiträgen zusammengesetzt,

$$\Omega = \Omega_m + \Omega_r + \Omega_\Lambda. \quad (9)$$

Bei der Materie wird zwischen baryonischer und dunkler Materie unterschieden [5, S. 2],

$$\Omega_m = \Omega_b + \Omega_{dm}. \quad (10)$$

Dunkle Materie unterliegt nur der Schwerkraft und nimmt insbesondere nicht an elektromagnetischen Wechselwirkungen teil, weswegen sie nicht direkt beobachtet werden kann.

$H_0$ ,  $\Omega_{b,0}$ ,  $\Omega_{dm,0}$ ,  $\Omega_{\Lambda,0}$ ,  $\Omega_{r,0}$ ,  $\Omega_{K,0} := 1 - \Omega$ ,  $t_0$  und weitere Größen sind **Modell-Parameter**, die experimentell bestimmt werden können. Diese Arbeit beschreibt eine Methode zur Ermittlung der Werte einiger Parameter.

## 2.2 Kosmische Hintergrundstrahlung

Die kosmische Mikrowellen-Hintergrundstrahlung (CMB), 1965 von Arno Penzias und Robert Wilson an den AT&T Bell Laboratories entdeckt, ist elektromagnetische Strahlung, die mit einer konstanten Intensität nahezu isotrop am ganzen Himmel messbar ist. Die Strahlung hat ihren Ursprung in der erstmaligen Bildung von neutralen Atomen. Ca. 250.000 Jahre nach dem Urknall war die Hälfte der Elektronen an Protonen gebunden, aber durch die hohe Temperatur des Universums wurden die frei gewordenen Photonen so häufig gestreut, dass das Universum undurchsichtig war. Materie und Strahlung bildeten ein Fluid. Als sich das Universum auf etwa 3000 Kelvin abgekühlt hatte und weniger freie Elektronen vorhanden waren, entkoppelte sich die Strahlung von der Materie. Dies geschah ca. 380.000 Jahre nach dem Urknall, was einer Rotverschiebung von  $z_{\text{dec}} = 1089 \pm 1$  [6, S. 1] entspricht. Der Index „dec“ steht hier für „decoupling“.

Ein typisches CMB-Photon wurde seitdem nicht mehr gestreut. Die Punkte, die eine Entfernung zur Erde haben, welche der Rotverschiebung dieser Photonen entspricht, liegen auf einer Kugeloberfläche. Sie wird als Fläche der letzten Streuung (engl. *last scattering surface*) bezeichnet.

Wegen der Homogenität und Isotropie des Universums entspricht das Spektrum der Hintergrundstrahlung dem eines schwarzen Körpers, d.h. die Energiedichte der Pho-

tonen mit einer Frequenz zwischen  $\nu$  und  $\nu + d\nu$  ist

$$\epsilon(\nu)d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1} d\nu. \quad (11)$$

Dabei ist  $T$  die Temperatur,  $c$  die Lichtgeschwindigkeit,  $k$  die Boltzmann- und  $h$  die Planck-Konstante. Das chemische Potential  $\mu_\gamma$  der Photonen ist null, denn

$$\gamma = \bar{\gamma} \Rightarrow \mu_\gamma = -\mu_{\bar{\gamma}} = -\mu_\gamma.$$

Infolge der Rotverschiebung der Photonen wird das emittierte Spektrum verzerrt. Es behält dabei die Form eines Schwarzkörperspektrums, aber die zugeordnete Temperatur nimmt gemäß

$$T \propto \frac{1}{a} = \frac{1}{z + 1}$$

ab [2, S. 51]. Auf Grund der hohen Rotverschiebung entspricht das Spektrum der Hintergrundstrahlung einer mittleren Temperatur von  $2,725 \pm 0,001\text{K}$  [7].

### 2.3 Anisotropien der Hintergrundstrahlung

Zwischen 1989 und 1993 ist die Hintergrundstrahlung von dem Satelliten COBE<sup>3</sup> der NASA vermessen worden. Dabei wurden die Spektren von Strahlungsquellen im Vordergrund, beispielsweise von Supernova-Explosionen, sowie eine Temperaturverschiebung im Spektrum, die durch die Bewegung der Milchstraße vor dem isotropen Mikrowellenhintergrund verursacht wird, modelliert und abgezogen. So konnte das erwartete Schwarzkörperspektrum mit dem COBE-Instrument FIRAS<sup>4</sup> bestätigt werden und in keiner Richtung wurde eine signifikante Abweichung von einem solchen Spektrum gemessen.

Zur Angabe von Orten am Himmel eignen sich Kugelkoordinaten. Es ist dabei nicht erforderlich, den Radius bzw. die Rotverschiebung anzugeben, da alle CMB-Photonen ihren Ursprung in der Fläche der letzten Streuung haben.  $(\theta, \varphi)$  bezeichnet also einen Punkt dieser Fläche.

Es sei  $T(\theta, \varphi)$  die Temperatur der Strahlung am Punkt  $(\theta, \varphi)$ . Die mittlere Temperatur der Strahlung ist

$$T_0 := \frac{1}{4\pi} \int d\varphi \int d\theta \sin \theta T(\theta, \varphi).$$

Von besonderem Interesse sind kleine Anisotropien im Temperaturspektrum, quantifiziert durch die relative Abweichung

$$\frac{\delta T}{T}(\theta, \varphi) := \frac{T(\theta, \varphi) - T_0}{T_0}$$

<sup>3</sup>Cosmic Background Explorer

<sup>4</sup>Far Infrared Absolute Spectrometer



vom Mittelwert.

Die Messungen haben gezeigt, dass die Temperatur nahezu isotrop ist, d.h.

$$\forall \theta, \varphi : T(\theta, \varphi) \approx T_0.$$

Das bedeutet, dass das Universum zum Zeitpunkt der letzten Streuung nahezu isotrop war. Die Größenordnung der Anisotropien, d.h. die Standardabweichung  $\sigma_T$ , wurde von dem COBE-Instrument DMR<sup>5</sup> ermittelt, das eine volle Halbwertsbreite von 7° hatte [6, S. 1]. Gemessen wurde

$$\sigma_T = \sqrt{\left\langle \left( \frac{\delta T}{T} \right)^2 \right\rangle} = 1,1 \cdot 10^{-5}.$$

2001 wurde die Raumsonde WMAP der NASA gestartet, um Daten in höherer Auflösung zu messen. Die Ergebnisse, die für die vorliegende Arbeit mit dem Programm COSMOMC berechnet wurden, basieren auf Daten, die WMAP innerhalb von sieben Jahren gesammelt hat. Diese Daten werden daher auch als WMAP7-Daten bezeichnet und sind am 26. Januar 2010 veröffentlicht worden.

Eine Karte der Anisotropien ist in Abb. 1 dargestellt. Sie ist eine gewichtete Linearkombination von fünf WMAP-Karten, die jeweils ein anderes Frequenzspektrum darstellen. Der Himmel wird in zwölf Regionen unterteilt und für jede Region wird ein Satz von Gewichten so bestimmt, dass die Varianz der resultierenden Karte und damit der Beitrag des galaktischen Vordergrunds im Signal minimiert wird [8]. Die resultierende Karte hat daher nur eine geringe Vordergrund-Störung.

Seit dem 13. August 2009 sammelt das Weltraumteleskop Planck der ESA Daten in noch höherer Auflösung. Mit der Veröffentlichung der Daten wird Ende 2012 gerechnet.

## 2.4 Dichteschwankungen im frühen Universum

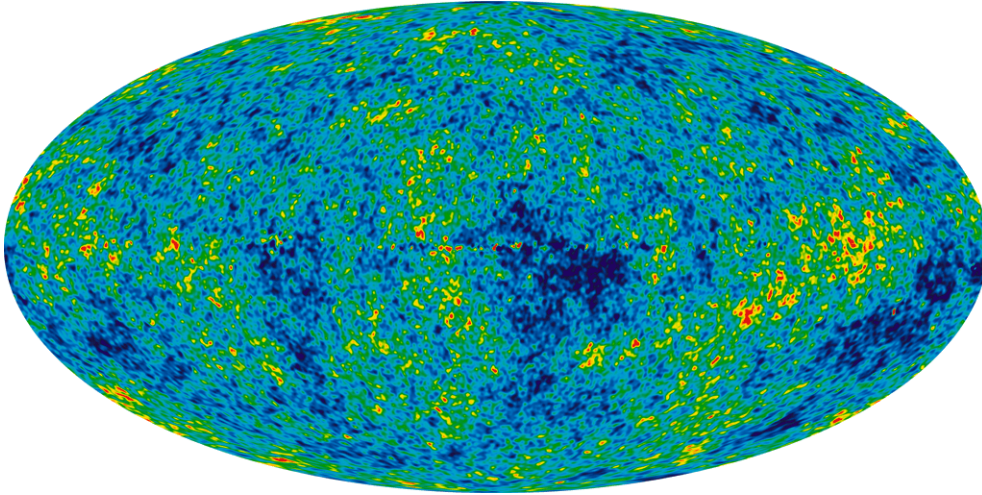
Die Anisotropien werden durch Dichteschwankungen verursacht, die bereits zum Zeitpunkt der letzten Photon-Streuung vorhanden waren. Die Temperaturschwankungen geben also einen Zugang zu den Dichteschwankungen im frühen Universum.

Dunkle Materie setzt dem Einfluss der Gravitation keinen Druck entgegen, da dieser seinen Ursprung in einer abstoßenden Wechselwirkung der Teilchen hat. Die ursprünglichen Dichteschwankungen werden durch die Schwerkraft also verstärkt und die dunkle Materie verdichtet sich.

Baryonische Teilchen mit einem Abstand, der größer als der Beobachtungshorizont  $d_{\text{hor}}$  zur Zeit der letzten Streuung ist, können nicht miteinander wechselwirken. Auf

---

<sup>5</sup>Differential Microwave Radiometer



**Abb. 1:** Temperaturfluktuationen des kosmischen Mikrowellenhintergrundes — WMAP Internal Linear Combination-Karte [8]

dieser Skala gibt es somit auch keinen Druck. Bei großen Längenskalen folgt die baryonische Materie daher aufgrund der gravitativen Wirkung der dunklen Materie.

Im Gegensatz dazu kann baryonische Materie bei kleineren Abständen der gravitativen Anziehung einen Druck entgegen setzen, sodass es zu Schwingungen kommt: Die Gravitation der verdichteten dunklen Materie führt zu einer Verdichtung des Gemisches aus baryonischer Materie und Photonen. Durch die höhere Dichte steigt der Druck, der wiederum zu einer Expansion führt. Ab einem gewissen Punkt ist der Druck wieder so gering, dass der Kollaps von Neuem einsetzt.

Ob sich das Fluid aus Materie und Strahlung an einem gegebenen Punkt bei  $z_{\text{dec}}$  gerade ausdehnt oder zusammenzieht, ändert durch den Dopplereffekt die beobachtete Temperatur. Am stärksten ist dieser Effekt für Teilchen, die im Abstand vom Beobachtungshorizont zur Zeit der letzten Streuung voneinander getrennt sind.

Nach der Entkopplung der Photonen gibt es kein Fluid von baryonischer Materie und Photonen mehr. Unter dem Einfluss der Gravitation verdichtet sich die Materie in den dichteren Regionen weiter, sodass schließlich Sterne und Galaxien entstehen. Die gemessenen Dichteschwankungen haben die nötige Größenordnung, um die heutigen Strukturen des Universums entstehen zu lassen [9, S. 46].

## 2.5 Das Leistungsspektrum

Da  $\frac{\delta T}{T}(\theta, \varphi)$  auf einer Kugeloberfläche definiert ist, ist es zweckmäßig, die Störungen in Kugelflächenfunktionen zu entwickeln:

$$\frac{\delta T}{T}(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

mit

$$a_{lm} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta Y_{lm}^*(\theta, \varphi) \frac{\delta T}{T}(\theta, \varphi),$$

wobei  $Y_{lm}^*$  die zu  $Y_{lm}$  komplex konjugierte Funktion bezeichnet.

Die Korrelation der Temperaturschwankung zwischen zwei Punkten wird durch die Winkelkorrelationsfunktion

$$c(\theta) := \left\langle \frac{\delta T}{T}(\vec{x}) \frac{\delta T}{T}(\vec{y}) \right\rangle_{\vec{x} \cdot \vec{y} = \cos \theta}$$

beschrieben. Dabei ist  $\theta$  der vom Beobachter aus gemessene Winkel zwischen zwei Punkten,  $\vec{x}$  und  $\vec{y}$  sind Einheitsvektoren in Richtung der beobachteten Punkte und  $\langle \cdot \rangle_{\vec{x} \cdot \vec{y} = \cos \theta}$  bedeutet, dass über alle  $\vec{x}$  und  $\vec{y}$  mit Öffnungswinkel  $\theta$  gemittelt wird. Es gilt

$$c(\theta) = \frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) C_l P_l(\cos \theta), \quad \text{mit} \quad C_l = \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l |a_{lm}|^2,$$

wobei  $P_l$  das  $l$ -te Legendre-Polynom ist. Die  $C_l$  bezeichnet man als das (Winkel-)Leistungsspektrum.

Ein größeres  $l$  entspricht einem kleineren Winkel,  $\theta \sim \frac{180^\circ}{l}$ . In Abb. 2 sind die mit den WMAP-Daten ermittelten Werte von  $l(l+1)C_l/2\pi$  gegen  $l$  aufgetragen. Dieses Spektrum wird als Temperaturspektrum bezeichnet.

## 2.6 Schluss auf kosmologische Parameter

Kosmologische Parameter wirken sich auf das Spektrum aus.

Beispielsweise ist  $d_{\text{hor}}(z_{\text{dec}})$  unabhängig von der Vermessung des Spektrums bekannt und entspricht in einem flachen Universum einem Winkel von ca.  $1^\circ$  bzw.  $l \approx 200$ . Aus der Tatsache, dass das gemessene Spektrum den größten Peak bei  $l \approx 200$  hat, kann gefolgert werden, dass das Universum (zumindest nahezu) flach ist.

Wie oben dargelegt, werden für größere Winkel (d.h. größere Abstände als der Beobachtungshorizont) keine Schwingungen erwartet. Tatsächlich weist das Spektrum für  $l < 200$  keine Peaks auf.

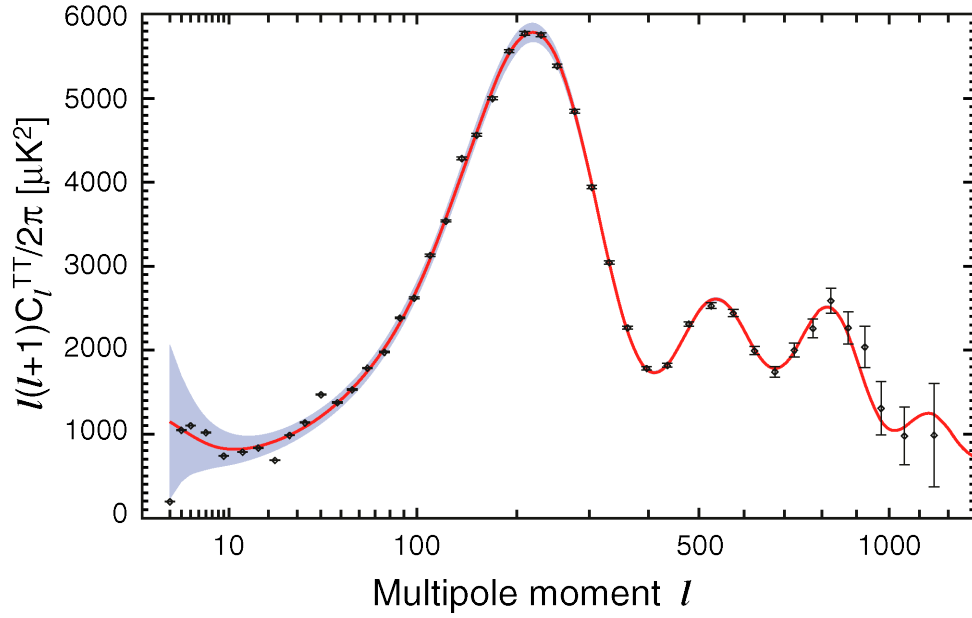


Abb. 2: Mit WMAP gemessene Werte von  $l(l+1)C_l/2\pi$  [8]

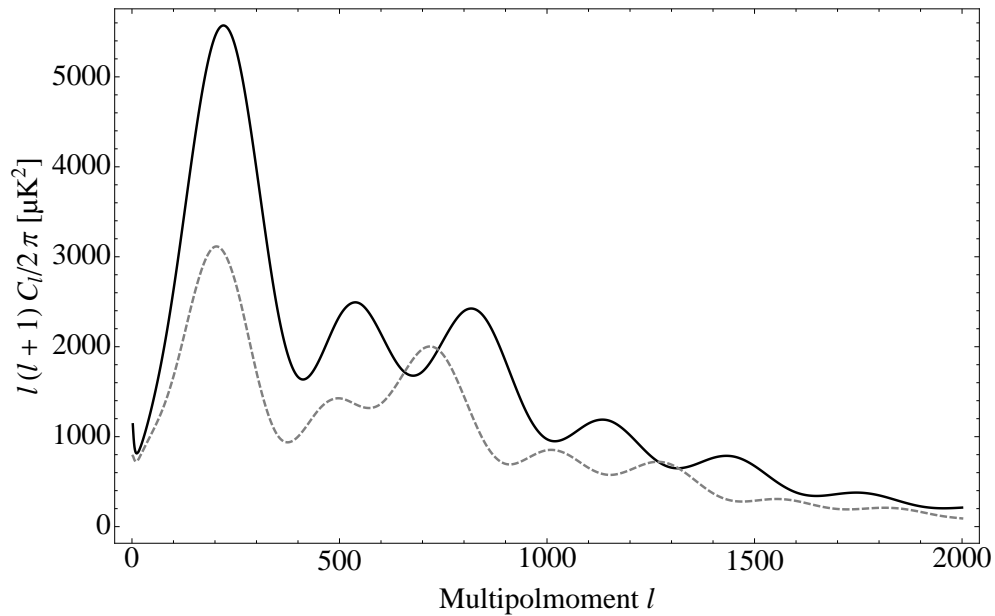


Abb. 3: Mit CAMB bestimmte Werte von  $l(l+1)C_l/2\pi$ . Die dunkle Linie entspricht den Standardeinstellungen. Die hellere Linie zeigt die Auswirkung einer Verdreifachung von  $\Omega_{\text{dm},0}h^2$ .

Das Programm **CAMB**<sup>6</sup> berechnet die  $C_l$  für einen gegebenen Satz kosmologischer Parameter, siehe Abb. 3.

Andersherum können aus der Analyse des Spektrums Rückschlüsse auf kosmologische Parameter gemacht werden. Die vorliegende Arbeit beschreibt eine Methode, um mit Hilfe einer Markovketten-Monte-Carlo-Analyse des Temperaturspektrums auf kosmologische Parameter zu schließen.

---

<sup>6</sup>Code for Anisotropies in the Microwave Background, <http://camb.info/>

### 3 Mathematische Grundlagen

#### 3.1 Stochastische Grundlagen

Sei  $X = \{X_1, \dots, X_n\}$  ein Satz von Zufallsvariablen, die jeweils Werte aus einem kontinuierlichen Zustandsraum  $\Omega_n$  annehmen. Schreibe  $\vec{X} = (X_1, \dots, X_n)$  für den ganzen Satz an Variablen,  $\vec{x} = (x_1, \dots, x_n)$  für einen speziellen Punkt im  $n$ -dimensionalen Zustandsraum  $\Omega$  und  $\vec{x} = (\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n)$  als Integrationsvariable, wenn über den Zustandsraum oder eine Untermenge integriert wird. Wenn nicht anders angegeben, laufen Integrale über den gesamten Zustandsraum.

Ein statistisches Modell ist definiert über die **gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte** von  $\vec{X}$ ,  $P(\vec{X} = \vec{x}) = P(X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n)$ . Dabei ist  $\int_A d\vec{x} P(\vec{X} = \vec{x})$  die Wahrscheinlichkeit dafür, dass  $\vec{X}$  einen Wert in  $A \subset \Omega$  annimmt. Wenn keine Missverständnisse auftreten können, wird abkürzend auch  $P(\vec{x}) = P(x_1, \dots, x_n)$  geschrieben [10, S. 5].

**Randwahrscheinlichkeitsdichten** für einen Teilsatz  $\{X_i\}_{i \in I}$  der Variablen ergeben sich, indem über alle möglichen Werte der anderen Variablen integriert wird [10, S.6]. Dabei ist  $I \subset \{1, \dots, n\}$  eine Indexmenge.

$$P(\{x_i \mid i \in I\}) = \int d\tilde{x}_{j_1} \cdots \int d\tilde{x}_{j_m} P(\{x_i \mid i \in I\} \cup \{\tilde{x}_j \mid j \in I^c\}), \quad (12)$$

wobei  $I^c = \{j_1, \dots, j_m\} = \{1, \dots, n\} \setminus I$  die Komplementärmenge zu  $I$  ist.

Ein Teilsatz  $\{X_i\}_{i \in I}$  der Variablen heißt **unabhängig** [10, S. 8], falls

$$P(\{x_i \mid i \in I\}) = \prod_{i \in I} P(x_i).$$

Die **bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte** für einen Teilsatz  $\{X_i\}_{i \in I}$  der Variablen, wenn Werte für einen disjunkten Teilsatz  $\{X_j\}_{j \in J}$  gegeben sind, ist [10, S. 6]

$$P(\{x_i \mid i \in I\} \mid \{x_j \mid j \in J\}) = \frac{P(\{x_i \mid i \in I \cup J\})}{P(\{x_j \mid j \in J\})}. \quad (13)$$

Mit  $P(\{x_i \mid i \in I \cup J\}) = P(\{x_j \mid j \in J\} \mid \{x_i \mid i \in I\})P(\{x_i \mid i \in I\})$  folgt der **Satz von Bayes** [11, S. 118],

$$P(\{x_i \mid i \in I\} \mid \{x_j \mid j \in J\}) = \frac{P(\{x_j \mid j \in J\} \mid \{x_i \mid i \in I\})P(\{x_i \mid i \in I\})}{P(\{x_j \mid j \in J\})} \quad (14)$$

Häufig ist man an der Wahrscheinlichkeit für eine bestimmte Wertekombination für einen Teilsatz der Variablen (Indexmenge  $I$ ) unter der Bedingung interessiert, dass Werte für einen anderen Teilsatz (Indexmenge  $J$ ) der Variablen festgelegt sind, beispielsweise durch Beobachtungen. Mit den Gleichungen (12) und (13) folgt

$$P(\{x_i \mid i \in I\} \mid \{x_j \mid j \in J\}) \\ = \int d\tilde{x}_{k_1} \cdots \int d\tilde{x}_{k_m} P(\{x_i \mid i \in I\} \cup \{\tilde{x}_k \mid k \in K\} \mid \{x_j \mid j \in J\}), \quad (15)$$

wobei  $K = \{k_1, \dots, k_m\} = \{1, \dots, n\} \setminus (I \cup J)$  [10, S. 7].

Der **Erwartungswert** einer Funktion  $a(\vec{X})$  ist [11, S. 93]

$$\langle a \rangle := \int d\vec{x} a(\vec{x}) P(\vec{x}). \quad (16)$$

Die **Varianz** einer Funktion  $a(\vec{X})$  ist [11, S. 167]

$$\text{Var}[a] := \langle (a - \langle a \rangle)^2 \rangle = \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2. \quad (17)$$

### 3.1.1 Monte-Carlo-Abschätzungen

In Gl. (15) wird über alle möglichen Werte der Variablen in  $\{X_k \mid k \in K\}$  und alle möglichen Kombinationen dieser Werte integriert, sodass der Rechenaufwand häufig nicht praktikabel ist. Mit **Monte-Carlo-Methoden** können solche Integrale abgeschätzt werden.

Sei  $\vec{x}^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)}$  eine Menge von  $N$  unabhängig voneinander ermittelten Messdaten. Dann ist das arithmetische Mittel

$$\bar{a} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a(\vec{x}^{(i)})$$

ein erwartungstreuer Schätzwert für  $\langle a \rangle$ , d.h.

$$\langle \bar{a} \rangle = \langle a \rangle. \quad (18)$$

Nach dem Gesetz der großen Zahlen gilt

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \bar{a} = \langle a \rangle.$$

$\bar{a}$  ist eine Monte-Carlo-Abschätzung für  $\langle a \rangle$  [10, S. 1].

Eine erwartungstreue Abschätzung für die Varianz ist die empirische Varianz  $s^2$ ,

$$\text{Var}[a] \approx s^2 := \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (a(\vec{x}^{(i)}) - \bar{a})^2$$

## 3.2 Markov-Ketten

Zur Berechnung von Monte-Carlo-Abschätzungen werden Daten benötigt. Zur numerischen Berechnung können aber nicht einfach beliebige Datensätze generiert und dann gemittelt werden, da nicht notwendigerweise alle Werte mit gleicher Wahrscheinlichkeit auftreten.

Es ist also eine Methode nötig, um Datensätze zu ermitteln, sodass die Häufigkeitsdichte der Datensätze im Zustandsraum in etwa der Wahrscheinlichkeitsdichte entspricht.

### 3.2.1 Definition des Begriffs

Eine **Markov-Kette** ist eine Folge von Zufallsvektoren,  $\vec{X}^{(0)}, \vec{X}^{(1)}, \vec{X}^{(2)}, \dots$ , wobei die Wahrscheinlichkeit für  $\vec{X}^{(t+1)}$  vollständig durch  $\vec{X}^{(t)}$  festgelegt ist [10, S. 36], d.h.

$$P(\vec{x}^{(t+1)} | \{\vec{x}^{(\tau)} | \tau \leq t\}) = P(\vec{x}^{(t+1)} | \vec{x}^{(t)}), \quad (19)$$

Der Index  $t$  wird auch Zeit genannt.

Schreibe  $p_t(\vec{x}) := P(\vec{X}^{(t)} = \vec{x})$  für die Wahrscheinlichkeitsdichte des  $t$ -ten Kettengliedes und schreibe  $T_t(\vec{x}, \vec{x}') := P(\vec{X}^{(t+1)} = \vec{x}' | \vec{X}^{(t)} = \vec{x})$  für die **Übergangswahrscheinlichkeitsdichte** von  $\vec{x}$  zu  $\vec{x}'$  zur Zeit  $t$ .

Die Markovkette kann über die **Anfangsverteilung**  $p_0$ , d.h. die Randverteilung von  $\vec{X}^{(0)}$ , sowie über die Übergangswahrscheinlichkeitsdichten spezifiziert werden.

### 3.2.2 Eigenschaften von Markov-Ketten

Falls die Übergangswahrscheinlichkeitsdichten nicht von der Zeit abhängen, d.h.

$$\forall(t, t') : T_t(\vec{x}, \vec{x}') = T_{t'}(\vec{x}, \vec{x}'),$$

heißt die Markov-Kette **homogen** und der Index  $t$  wird weggelassen.

Mit gegebenen Übergangswahrscheinlichkeitsdichten ergibt sich mit Gl. (12) [10, S. 37]

$$p_{t+1}(\vec{x}) = \int d\vec{x} p_t(\vec{x}) T_t(\vec{x}, \vec{x}) \quad (20)$$

Eine **invariante** Zustandsverteilung [10, S. 37] bleibt bestehen, sobald die Kette diese Verteilung einmal erreicht. Das heißt, falls  $\pi$  eine invariante Verteilung ist, gilt

$$\forall t, \vec{x} : \pi(\vec{x}) = \int d\vec{x} \pi(\vec{x}) T_t(\vec{x}, \vec{x}). \quad (21)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeitsdichten erfüllen das **detaillierte Gleichgewicht** [10, S. 37], falls die Wahrscheinlichkeitsdichte, dass ein Zustand  $\vec{x}$  vorliegt und in den



Zustand  $\vec{x}'$  übergeht, die gleiche wie für den umgekehrten Vorgang ist:

$$\pi(\vec{x})T(\vec{x}, \vec{x}') = \pi(\vec{x}')T(\vec{x}', \vec{x}) \quad (22)$$

**Satz 1.** [10, S. 37] *Falls für eine Kette das detaillierte Gleichgewicht gilt, dann ist  $\pi$  eine invariante Verteilung.*

*Beweis.*

$$\int d\vec{x} \pi(\vec{x})T(\vec{x}, \vec{x}) \stackrel{(22)}{=} \int d\vec{x} \pi(\vec{x})T(\vec{x}, \vec{x}) = \pi(\vec{x}) \underbrace{\int d\vec{x} T(\vec{x}, \vec{x})}_{=1} = \pi(\vec{x}). \quad \square$$

Eine Markov-Kette heißt **ergodisch** [10, S. 38], falls die Verteilungen für jede Anfangsverteilung gegen die invariante Verteilung konvergiert, d.h. falls

$$\exists \pi \forall p_0, \vec{x} : \lim_{t \rightarrow \infty} p_t(\vec{x}) = \pi(\vec{x}).$$

Eine ergodische Markov-Kette kann offensichtlich nur eine einzige invariante Verteilung besitzen, die auch **Gleichgewichtsverteilung** genannt wird [10, S. 38].

**Fundamentalsatz.** [10, S. 38f.] *Falls eine homogene Markov-Kette mit Übergangswahrscheinlichkeitsdichten  $T(\vec{x}, \vec{x}')$  die invariante Verteilung  $\pi$  hat und*

$$\nu := \min_{\vec{x}} \min_{\vec{x}': \pi(\vec{x}') > 0} \frac{T(\vec{x}, \vec{x}')}{\pi(\vec{x}')} > 0, \quad (23)$$

*dann ist die Kette ergodisch und  $|\pi(\vec{x}) - p_t(\vec{x})| \leq (1 - \nu)^t$ .*

*Falls außerdem  $a(x)$  eine reelle Funktion des Zustands ist, dann konvergiert der Erwartungswert  $E_t[a]$  von  $a$  bzgl.  $p_t$  gegen den Erwartungswert  $\langle a \rangle$  von  $a$  bzgl.  $\pi$  und es gilt*

$$|\langle a \rangle - E_t[a]| \leq (1 - \nu)^t \max_{\vec{x}, \vec{x}'} |a(\vec{x}) - a(\vec{x}')|.$$

*Beweis.* Es gilt  $\nu \leq 1$ , sonst wäre  $\forall \vec{x}' : T(\vec{x}, \vec{x}') > \pi(\vec{x}')$  und mit Gl. (21) würde der Widerspruch  $\pi(\vec{x}') > \pi(\vec{x}')$  folgen.

Es wird gezeigt, dass

$$\forall \vec{x} : p_t(\vec{x}) = [1 - (1 - \nu)^t] \pi(\vec{x}) + (1 - \nu)^t r_t(\vec{x}), \quad (24)$$

wobei  $r_t$  eine gültige Wahrscheinlichkeitsverteilung ist. Daraus folgt die Ergodizität, da

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (1 - \nu)^t = 0.$$

Der Anteil der invarianten Verteilung an  $p_t(\vec{x})$  konvergiert also gegen 1.

Für  $t = 0$  kann  $r_0(\vec{x}) = p_0(\vec{x})$  gesetzt werden. Für  $t > 0$  wird die Gültigkeit der Formel per vollständiger Induktion gezeigt. Sie gelte bereits für  $t$ . Dann folgt

$$\begin{aligned}
p_{t+1}(\vec{x}) &= \int d\vec{x} p_t(\vec{x}) T(\vec{x}, \vec{x}) \\
&= \int d\vec{x} \left( [1 - (1 - \nu)^t] \pi(\vec{x}) + (1 - \nu)^t r_t(\vec{x}) \right) T(\vec{x}, \vec{x}) \\
&= [1 - (1 - \nu)^t] \int d\vec{x} \pi(\vec{x}) T(\vec{x}, \vec{x}) + (1 - \nu)^t \int d\vec{x} r_t(\vec{x}) T(\vec{x}, \vec{x}) \\
&\stackrel{(21)}{=} [1 - (1 - \nu)^t] \pi(\vec{x}) + (1 - \nu)^t \int d\vec{x} r_t(\vec{x}) \left[ T(\vec{x}, \vec{x}) - \nu \pi(\vec{x}) \right] \\
&\quad + (1 - \nu)^t \underbrace{\int d\vec{x} r_t(\vec{x}) \nu \pi(\vec{x})}_{=1} \\
&= [1 - (1 - \nu)^{t+1}] \pi(\vec{x}) + (1 - \nu)^{t+1} \underbrace{\int d\vec{x} r_t(\vec{x}) \frac{T(\vec{x}, \vec{x}) - \nu \pi(\vec{x})}{1 - \nu}}_{r_{t+1}(\vec{x})}
\end{aligned}$$

Im letzten Schritt wurde benutzt, dass  $(1 - \nu)^t - (1 - \nu)^t \nu = (1 - \nu)^{t+1}$  gilt. Dies sieht man leicht, wenn man beide Seiten der Gleichung durch  $(1 - \nu)^t$  teilt.

Es gilt

$$\forall \vec{x}, \vec{x}' : \frac{T(\vec{x}, \vec{x}')}{\pi(\vec{x})} \geq \min_{\vec{x}^*} \min_{\vec{x}' : \pi(\vec{x}') > 0} \frac{T(\vec{x}^*, \vec{x}')}{\pi(\vec{x}')} = \nu$$

und damit  $\forall \vec{x}, \vec{x}' : T(\vec{x}, \vec{x}') - \nu \pi(\vec{x}') \geq 0$ .

Es folgt

$$r_{t+1}(\vec{x}) = \int d\vec{x}' r_t(\vec{x}') \frac{T(\vec{x}, \vec{x}') - \nu \pi(\vec{x}')}{1 - \nu} \geq 0.$$

Es gilt außerdem

$$\begin{aligned}
\int d\vec{x} r_{t+1}(\vec{x}) &= \int d\vec{x} \int d\vec{x}' r_t(\vec{x}') \frac{T(\vec{x}, \vec{x}') - \nu \pi(\vec{x}')}{1 - \nu} \\
&= \underbrace{\int d\vec{x}' r_t(\vec{x}')}_{=1} \frac{\overbrace{\int d\vec{x} T(\vec{x}, \vec{x}') - \nu \int d\vec{x} \pi(\vec{x}')}_{=1}}{1 - \nu} = 1.
\end{aligned}$$

Die  $r_{t+1}$  genügen also den Anforderungen einer Wahrscheinlichkeitsverteilung. Gleichung (24) ist damit gezeigt.

Es folgen

$$\begin{aligned}
|\pi(\vec{x}) - p_t(\vec{x})| &= |\pi(\vec{x}) - [1 - (1 - \nu)^t]\pi(\vec{x}) - (1 - \nu)^t r_t(\vec{x})| \\
&= |(1 - \nu)^t \pi(\vec{x}) - (1 - \nu)^t r_t(\vec{x})| = (1 - \nu)^t \underbrace{|\pi(\vec{x}) - r_t(\vec{x})|}_{\in (0,1)} \\
&\leq (1 - \nu)^t
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
| \langle a \rangle - E_t[a] | &= \left| \int d\vec{x} a(\vec{x}) \pi(\vec{x}) - \int d\vec{x} a(\vec{x}) p_t(\vec{x}) \right| = \left| \int d\vec{x} a(\vec{x}) (\pi(\vec{x}) - p_t(\vec{x})) \right| \\
&= \left| \int d\vec{x} a(\vec{x}) ((1 - \nu)^t \pi(\vec{x}) - (1 - \nu)^t r_t(\vec{x})) \right| \\
&= (1 - \nu)^t \left| \int d\vec{x} a(\vec{x}) \pi(\vec{x}) - \int d\vec{x} a(\vec{x}) r_t(\vec{x}) \right| \\
&\leq (1 - \nu)^t \max_{\vec{x}, \vec{x}'} \left| \int d\vec{x} a(\vec{x}) \pi(\vec{x}) - \int d\vec{x} a(\vec{x}') r_t(\vec{x}) \right| \\
&= (1 - \nu)^t \max_{\vec{x}, \vec{x}'} \left| a(\vec{x}) \int d\vec{x} \pi(\vec{x}) - a(\vec{x}') \int d\vec{x} r_t(\vec{x}) \right| \\
&= (1 - \nu)^t \max_{\vec{x}, \vec{x}'} |a(\vec{x}) - a(\vec{x}')|. \quad \square
\end{aligned}$$

### 3.2.3 Konstruktion von Markov-Ketten

Ziel ist es, eine ergodische Markov-Kette zu konstruieren, die möglichst schnell gegen eine gegebene Gleichgewichtsverteilung konvergiert. Häufig ist es zweckmäßig, die Übergangswahrscheinlichkeitsdichten durch einen Satz von einfacher zu beschreibenden Basis-Übergangswahrscheinlichkeitsdichten  $B_1, \dots, B_s$  zu definieren [10, S. 44f.], sodass

$$T(\vec{x}, \vec{x}') = \sum_k \alpha_k B_k(\vec{x}, \vec{x}') \quad (25)$$

wobei  $\alpha_k > 0$ ,  $\sum_k \alpha_k = 1$ .

**Satz 2.** Wenn die  $B_k$  die gewünschte Verteilung invariant lassen, d.h.

$$\forall k, \vec{x} : \int d\vec{x}' \pi(\vec{x}') B_k(\vec{x}, \vec{x}') = \pi(\vec{x}),$$

dann lässt auch  $T$  die Verteilung invariant.

*Beweis.*

$$\begin{aligned} \int d\vec{x} \pi(\vec{x}) T(\vec{x}, \vec{x}) &= \int d\vec{x} \pi(\vec{x}) \sum_k \alpha_k B_k(\vec{x}, \vec{x}) = \sum_k \alpha_k \int d\vec{x} \pi(\vec{x}) B_k(\vec{x}, \vec{x}) \\ &= \sum_k \alpha_k \pi(\vec{x}) = \pi(\vec{x}) \underbrace{\sum_k \alpha_k}_{=1} = \pi(\vec{x}) \quad \square \end{aligned}$$

**Satz 3.** Wenn die  $B_k$  detailliertes Gleichgewicht erfüllen, erfüllt auch  $T$  detailliertes Gleichgewicht.

*Beweis.*

$$\begin{aligned} \pi(\vec{x}) T(\vec{x}, \vec{x}') &= \pi(\vec{x}) \sum_k \alpha_k B_k(\vec{x}, \vec{x}') = \sum_k \alpha_k \pi(\vec{x}) B_k(\vec{x}, \vec{x}') \\ &\stackrel{\text{n.V.}}{=} \sum_k \alpha_k \pi(\vec{x}') B_k(\vec{x}', \vec{x}) = \pi(\vec{x}') \sum_k \alpha_k B_k(\vec{x}', \vec{x}) \\ &= \pi(\vec{x}') T(\vec{x}', \vec{x}) \quad \square \end{aligned}$$

### 3.2.4 Der Metropolis-Algorithmus

Der Metropolis-Algorithmus generiert zufällige Änderungen an den  $n$  Komponenten von  $\vec{X}$  und akzeptiert diese Änderungen oder lehnt sie ab, je nachdem wie die Wahrscheinlichkeit des Zustands  $\vec{X}$  dadurch beeinflusst wird. Die Übergangswahrscheinlichkeitsdichten können durch einen Satz von Basis-Übergangswahrscheinlichkeitsdichten  $B_1, \dots, B_n$  beschrieben werden, wobei  $B_k$  nur die  $k$ -te Komponente verändert.  $B_k$  generiert einen neuen Zustand  $\vec{x}'$ , ausgehend vom aktuellen Zustand  $\vec{x}$  [10, S. 54f.]:

1. Ein Kandidat  $\vec{x}^*$  wird ausgewählt.  $\vec{x}^*$  unterscheidet sich von  $\vec{x}$  nur in der  $k$ -ten Komponente  $x_k^*$ .  $x_k^*$  wird gemäß einer **Vorschlagsdichte**  $S_k(\vec{x}, x_k^*)$  zufällig bestimmt.
2. Der Kandidat wird mit der Wahrscheinlichkeit  $A(\vec{x}, \vec{x}^*)$  akzeptiert, andernfalls bleibt der bisherige Zustand erhalten. Dies kann erreicht werden, indem eine Zufallszahl  $u$  zwischen 0 und 1 generiert wird (wobei jede Zahl gleich wahrscheinlich ist) und dann

$$\vec{x}' = \begin{cases} \vec{x}^* & \text{falls } u < A(\vec{x}, \vec{x}^*) \\ \vec{x} & \text{sonst} \end{cases}$$

gesetzt wird.

*Bemerkung:* Es ist durchaus möglich, dass in einem Schritt mehr als eine Komponente geändert wird. Dies entspricht lediglich einer Koordinatentransformation.

Für die Basis-Übergangswahrscheinlichkeitsdichten bedeutet dieses Verfahren [10, S. 55]

$$B_k(\vec{x}, \vec{x}') = S_k(\vec{x}, x'_k) A(\vec{x}, \vec{x}') \prod_{i \neq k} \delta(x_i - x'_i) \\ + \delta(\vec{x} - \vec{x}') \left[ 1 - \int d\vec{x} S_k(\vec{x}, \vec{x}_k) A(\vec{x}, \vec{x}') \prod_{i \neq k} \delta(x_i - \vec{x}_i) \right].$$

Etwas übersichtlicher ist dies in der Form

$$B_k(\vec{x}, \vec{x}') = \begin{cases} 0 & \text{falls } \exists i \neq k : x_i \neq x'_i \\ S_k(\vec{x}, x'_k) A(\vec{x}, \vec{x}') & \text{falls } \forall i \neq k : x_i = x'_i \text{ und } \vec{x} \neq \vec{x}' \\ 1 - \int_{\vec{x} \neq \vec{x}'} d\vec{x} B_k(\vec{x}, \vec{x}') & \text{falls } \vec{x} = \vec{x}' \end{cases} \quad (26)$$

Der erste Fall bedeutet, dass  $B_k$  nur auf der  $k$ -ten Komponente operiert. Der zweite Fall bedeutet, dass ein Kandidat mit Wahrscheinlichkeit  $S_k(\vec{x}, x'_k)$  ausgewählt und mit Wahrscheinlichkeit  $A(\vec{x}, \vec{x}')$  akzeptiert wird. Der dritte Fall steht für die Möglichkeit, dass ein Kandidat abgelehnt wird.

Im Folgenden sei  $A$  die **Metropolis-Akzeptanz-Funktion** [10, S. 55]. Diese ist so definiert, dass  $\vec{x}'$  akzeptiert wird, falls  $\pi(\vec{x}') > \pi(\vec{x})$ . Andernfalls wird  $\vec{x}'$  mit der Wahrscheinlichkeit  $\frac{\pi(\vec{x}')}{\pi(\vec{x})}$  akzeptiert:

$$A(\vec{x}, \vec{x}') = \min \left\{ 1, \frac{\pi(\vec{x}')}{\pi(\vec{x})} \right\}. \quad (27)$$

**Satz 4.** [10, S. 55] *Falls für alle  $\vec{x}, \vec{x}'$ , die sich nur in der  $k$ -ten Komponente unterscheiden, die Vorschlagsdichte symmetrisch ist, d.h.  $S_k(\vec{x}, x'_k) = S_k(\vec{x}', x_k)$ , dann gilt für die  $B_k$  detailliertes Gleichgewicht [Gl. (22)].*

*Beweis.* Der Fall  $\vec{x} = \vec{x}'$  ist trivial. Falls sich  $\vec{x}$  und  $\vec{x}'$  in einer anderen als der  $k$ -ten Komponente unterscheiden [Fall 1 in Gl. (26)] sind beide Seiten in Gl. (22) gleich 0. Ansonsten:

$$\pi(\vec{x}) B_k(\vec{x}, \vec{x}') \stackrel{\text{Fall 2}}{=} \pi(\vec{x}) S_k(\vec{x}, x'_k) A(\vec{x}, \vec{x}') \stackrel{(27)}{=} \pi(\vec{x}) S_k(\vec{x}, x'_k) \min \left\{ 1, \frac{\pi(\vec{x}')}{\pi(\vec{x})} \right\} \\ \stackrel{\text{n.V.}}{=} S_k(\vec{x}', x_k) \min \{ \pi(\vec{x}'), \pi(\vec{x}) \} \stackrel{(27)}{=} \pi(\vec{x}') S_k(\vec{x}', x_k) A(\vec{x}', \vec{x}) \\ = \pi(\vec{x}') B_k(\vec{x}', \vec{x}) \quad \square$$

Mit Satz 1 folgt auch die Invarianz von  $\pi$ .

Falls  $\forall \vec{x}, x'_k : S_k(\vec{x}, x'_k) > 0$  und  $\pi(\vec{x}) > 0$ , dann ist die Übergangswahrscheinlichkeitsdichte von jedem beliebigen Zustand  $\vec{x}$  in jeden endlich großen Bereich um jeden anderen beliebigen Zustand größer als 0, d.h.  $\nu > 0$  in Gl. (23). Mit dem Fundamentalsatz folgt die Ergodizität der Kette.

### 3.3 Stochastische Modelle und Schlüsse auf Modellparameter

Um die Wirklichkeit mathematisch zu beschreiben, werden Modelle entworfen. Stochastische Modelle lassen Wahrscheinlichkeitsaussagen zu. Diese Modelle können Parameter haben, beispielsweise um sie an Messergebnisse anzupassen. So kann ein Münzwurf mit einem einzigen Parameter modelliert werden, der die Wahrscheinlichkeit für Kopf bzw. Zahl angibt.

Manchmal ist es sinnvoll, zwischen *latenten* (oder *versteckten*) und *observablen* (oder *sichtbaren*) Variablen zu unterscheiden. Dabei erhält man die Wahrscheinlichkeiten der sichtbaren Variablen als Randwahrscheinlichkeiten der versteckten Variablen. Die Werte der versteckten Variablen sind nicht beobachtbar, aber ihre Einführung lässt teilweise ein einfacheres zu Grunde liegendes Modell zu.

#### 3.3.1 Modellparameter der Gauß-Verteilung

Eine gaußverteilte Zufallsvariable  $X$  hat eine Dichtefunktion in der Form [11, S. 220]

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{x - \mu}{\sigma} \right)^2 \right].$$

Der Mittelwert  $\mu = \langle x \rangle$  und die Standardabweichung  $\sigma = \sqrt{\text{Var}[x]}$  sind Beispiele für Modellparameter.

Die mehrdimensionale Verallgemeinerung ist

$$P(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n \det \Sigma}} \exp \left[ -\frac{1}{2} (\vec{x} - \vec{\mu})^T \Sigma^{-1} (\vec{x} - \vec{\mu}) \right], \quad (28)$$

wobei  $\Sigma = \langle (\vec{x} - \vec{\mu})(\vec{x} - \vec{\mu})^T \rangle$  die symmetrische **Kovarianz-Matrix** ist [10, S. 9].  $\vec{\mu}$  und  $\Sigma$  sind ebenfalls Beispiele für Modellparameter.

#### 3.3.2 Die Maximum-Likelihood-Methode

Die Wahrscheinlichkeit, dass bestimmte Parameter die beobachteten Daten tatsächlich beschreiben, ist die **Likelihood** [10, S. 14]. Wenn beispielsweise genau die Daten  $\vec{x}^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)}$  in  $N$  unabhängigen Messungen beobachtet wurden, ist die Likelihood

$$L(\vec{\theta} | \vec{x}^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)}) = P(\vec{x}^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)} | \vec{\theta}) = \prod_{i=1}^N P(\vec{x}^{(i)} | \vec{\theta}).$$

Schreibe kurz  $L(\vec{\theta})$ , wenn klar ist, auf welche Daten Bezug genommen wird.

Gesucht sind die Werte für Parameter, die das Modell am besten beschreiben, also die Parameter für die  $P(\vec{\theta})$  maximiert wird. Da dies nur auf Grundlage der beobachteten Daten geschehen soll, muss  $P(\vec{\theta} | \vec{x}^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)})$  maximiert werden. Mit Gl. (14) gilt

$$P(\vec{\theta} | \vec{x}^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)}) = \frac{P(\vec{x}^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)} | \vec{\theta}) P(\vec{\theta})}{P(\vec{x}^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)})} = \frac{L(\vec{\theta}) P(\vec{\theta})}{P(\vec{x}^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)})}.$$

Hier besteht aber das Problem, dass  $P(\vec{\theta})$  eine a priori-Wahrscheinlichkeit ist, d.h. keinen Bezug zu den Messwerten hat, und  $P(\vec{x}^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(N)})$  unbekannt ist. Somit kann nur  $L(\vec{\theta})$  maximiert werden.

Der **Maximum-Likelihood-Methode** liegt die Annahme zu Grunde, dass die Parameter mit der größten Likelihood das Modell am besten beschreiben. Es werden also diejenigen Parameter gewählt, die die Likelihood maximieren. In der Praxis wird häufig der natürliche Logarithmus der Likelihood maximiert. Wegen der Monotonie des Logarithmus ist diese Methode äquivalent [10, S. 15].

### 3.3.3 Statistische Schlüsse auf Modellparameter

Gesucht sind Methoden, die Modellparameter abzuschätzen, wenn empirische Daten vorliegen.

Der Bayes'sche Ansatz fasst die Parameter  $\theta_1, \dots, \theta_p$  als zusätzliche (latente oder observable) Zufallsvariablen des Modells auf.  $\vec{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_p)$  ist ein Vektor im Parameterraum. Die **A-posteriori-Wahrscheinlichkeitsverteilungen** für die observablen und latenten Variablen  $\vec{x}$  sind dann bedingte Wahrscheinlichkeiten:  $P_{\text{post}}(\vec{x}) = P(\vec{x} | \vec{\theta})$ .

Eine Markov-Ketten-Monte-Carlo-Analyse der empirischen Daten eignet sich, um die Parameter zu bestimmen. Dazu wird eine Markov-Kette im Parameterraum erstellt, anschließend wird über die ermittelten Kettenglieder gemittelt oder der *Best-Fit*-Datensatz ausgewählt, d.h. das Kettenglied mit der größten Likelihood.

Zur Konstruktion der Markov-Kette eignet sich der Metropolis-Algorithmus mit der Metropolis-Akzeptanz-Funktion

$$A(\vec{x}, \vec{x}') = \min \left\{ 1, \frac{L(\vec{\theta}')}{L(\vec{\theta})} \right\}. \quad (29)$$

## 4 Das Programm COSMOMC

### 4.1 Funktionsweise

Das Programm COSMOMC führt eine Markov-Ketten-Monte-Carlo-Analyse einiger kosmologischer Parameter durch.

Die Bestimmung eines Kandidaten  $\vec{\theta}^*$  weicht von der auf Seite 20 beschriebenen insofern ab, dass nicht nur eine einzelne Komponente, d.h. ein einzelner Parameter, verändert wird. Stattdessen wird eine zufällige Basis aus Eigenvektoren der Kovarianzmatrix [Gl. (28)] gewählt [Datei `propose.f90`]. In jedem Schritt des Metropolis-Verfahrens wird eine zufällige Änderung entlang genau eines dieser Eigenvektoren vorgeschlagen und dann eventuell akzeptiert. Nachdem entlang jedes Eigenvektors eine Änderung vorgeschlagen wurde, wird eine neue zufällige Eigenbasis gewählt, die für die folgenden Metropolis-Schritte benutzt wird. Dieses Verfahren erhöht die Akzeptanzrate. Falls die Kovarianzmatrix nicht bekannt ist, wird eine zufällige Basis gewählt.

Mit Hilfe von CAMB wird berechnet, welche  $C_l$  für diese Parameter zu erwarten sind.

WMAP `likelihood` berechnet die Likelihood  $L(\vec{\theta}^*)$  der so bestimmten  $C_l$  anhand der in sieben Jahren gemessenen WMAP-Daten. Diese Daten liegen im FITS-Format<sup>7</sup> vor. FITS ist ein von der NASA entwickeltes Dateiformat, das in der Astronomie häufig eingesetzt wird. Um die Daten verarbeiten zu können, wird das Programm CFITSIO benötigt.

Gemäß Gl. (27) wird der Vorschlag akzeptiert, falls die so bestimmte Likelihood größer ist als die Likelihood  $L(\vec{\theta})$  des aktuellen Parametersatzes. Andernfalls wird der Vorschlag mit der Wahrscheinlichkeit  $\frac{L(\vec{\theta}^*)}{L(\vec{\theta})}$  akzeptiert [Datei `MCMC.f90`, Zeile 220].

Die einzelnen Punkte im Parameterraum werden fortlaufend zeilenweise in eine Textdatei gespeichert. Es ist möglich, mehrere Ketten gleichzeitig laufen zu lassen. Wenn COSMOMC mit MPI-Unterstützung<sup>8</sup> kompiliert wurde, können die Ketten miteinander kommunizieren und die Berechnung kann automatisch beendet werden, sobald eine konfigurierbare Konvergenzgrenze unterschritten wird.

Dazu werden nach jeweils 100 Aufrufen von CAMB die Mittelwerte der Parameter in Bezug auf jede einzelne Kette und in Bezug auf alle Ketten gebildet. Damit werden die mittlere Kovarianzmatrix der Parameter und die Kovarianzmatrix der Parametermittelwerte gebildet [Datei `paramdef.F90` ab Zeile 625]. Nach einer Koordinatentransformation, die die letztere Matrix diagonalisiert [ab Zeile 655], wird

$$R := \max_j \frac{A_{jj}}{\max\{10^{-12}, B_{jj}\}}$$

<sup>7</sup>Flexible Image Transport System

<sup>8</sup>Message Passing Interface



berechnet, wobei  $A$  die diagonalisierte Kovarianzmatrix der Parametermittelwerte und  $B$  die mittlere Kovarianzmatrix der Parameter in der gleichen Basis ist.  $j$  ist ein Index, der von 1 bis zur Anzahl der Parameter läuft.

Mithilfe von  $R$  werden also die Varianzen der Kettenmittelwerte mit den Mittelwerten der Varianzen verglichen. Wenn  $R$  kleiner als die konfigurierte Konvergenzgrenze ist, wird die Berechnung gestoppt.

Die Abbildungen 4 und 5 zeigen die Projektion einer Markovkette auf die Parameter  $\Omega_{m,0}$  und das Alter der Universums. In Abb. 5 ist gut zu erkennen, dass es Regionen mit höherer und Regionen mit niedrigerer Punktdichte gibt. Außerdem ist zu sehen, dass die Parameter nicht statistisch unabhängig sind, denn die Punktwolke ist keine Ellipse mit Halbachsen parallel zu den Koordinatenachsen.

## 4.2 Installation auf dem Linux-Cluster der Theoretischen Physik der Universität Bielefeld

### 4.2.1 Login

Zunächst ist es nötig, sich per SSH<sup>9</sup> auf der Maschine `bam2` anzumelden:

```
home$ ssh gebauer@bam2.physik.uni-bielefeld.de
```

Von dort besteht Zugriff auf den Cluster. Wegen einer anderen Prozessor-Architektur muss auf einem Rechner im Cluster kompiliert werden, hier als Beispiel `ic101`. Die Anmeldung erfolgt wieder per SSH:

```
bam2$ ssh ic101
```

Hier und im Folgenden ist zu Beginn jeder Kommandozeile der Name der Maschine angegeben, von welcher aus der Befehl eingegeben werden muss.

Verbindung zum Internet hat nur `bam2`, das Herunterladen muss also von dort erfolgen. `bam2` und die `ic1`-Nodes haben dasselbe Netzlaufwerk als Homeverzeichnis eingebunden, sodass es keine Rolle spielt, von welcher Maschine aus Dateien, zum Beispiel Makefiles, editiert werden.

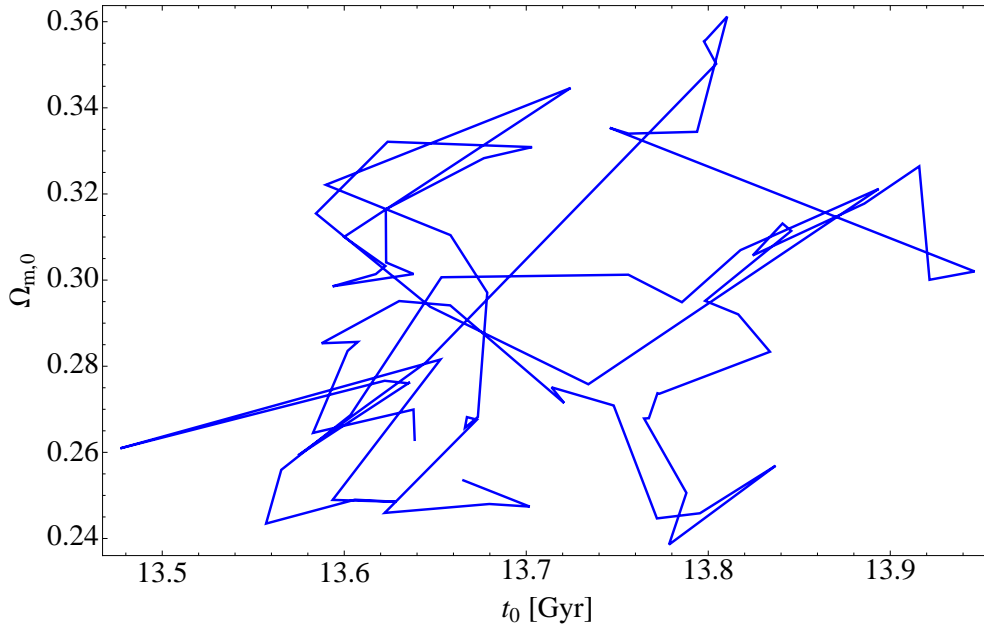
### 4.2.2 Fortran-Lizenz kopieren

Zunächst muss eine Lizenzdatei für den Fortrancompiler kopiert werden, damit dieser sich starten lässt:

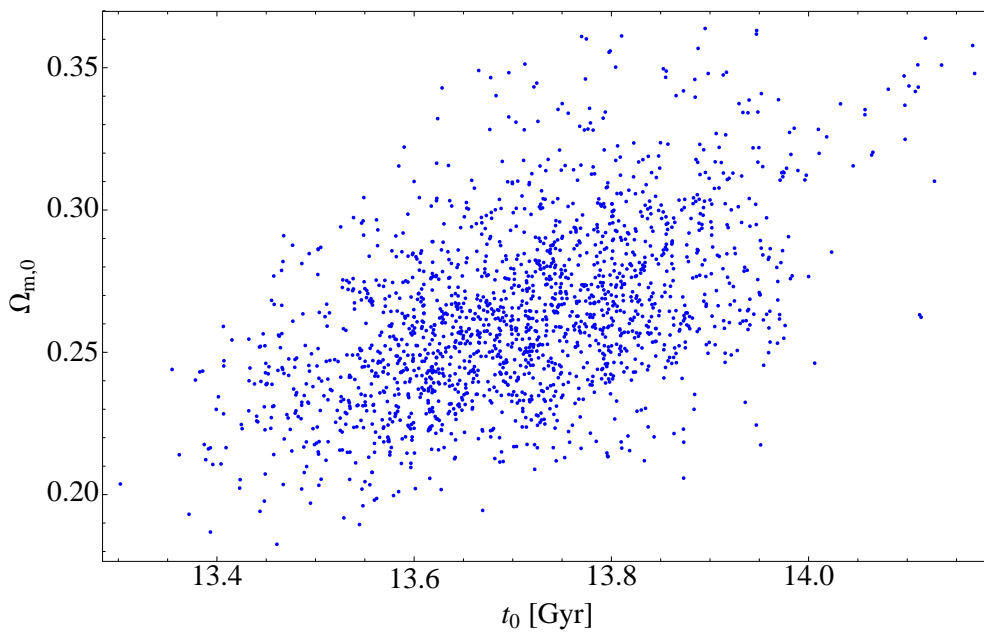
```
bam2$ mkdir ~/.licenses
bam2$ cp /opt/intel/licenses.old/l_for_35933917.lic ~/.licenses
```

---

<sup>9</sup>Secure Shell



**Abb. 4:** Projektion der Trajektorie auf die Parameter  $\Omega_{m,0}$  und  $t_0$  (80 aufeinanderfolgende Glieder der Markovkette)



**Abb. 5:** Die Punktwolke (1847 Glieder) lässt die statistische Abhängigkeit der Parameter erahnen.

### 4.2.3 Pakete herunterladen und entpacken

Im COSMOMC-Readme [12] ist unter dem Punkt „Compiling“ angegeben, welche Softwarepakete heruntergeladen werden müssen. Der Link „Download“ führt zu einem Formular. Nach dem Ausfüllen und Absenden des Formulars wird eine E-Mail mit dem eigentlich Download-Link zugestellt. Das Paket wird mit

```
bam2$ wget http://cosmologist.info/cosmomc/cosmomc.tar.gz
bam2$ tar xzvf cosmomc.tar.gz
```

heruntergeladen und entpackt. Der Code befindet sich dann im Verzeichnis `cosmomc`. Download und Dekompression von CFITSIO erfolgen mit

```
bam2$ wget http://heasarc.gsfc.nasa.gov/FTP/ ↵
software/fitsio/c/cfitsio3240.tar.gz
bam2$ tar xzvf cfitsio3240.tar.gz
```

Dabei wird das Verzeichnis `cfitsio` erstellt.

WMAP likelihood, das die WMAP-Daten mitliefert, wird mit

```
bam2$ wget http://lambda.gsfc.nasa.gov/data/map/ ↵
dr4/dcp/wmap_likelihood_full_v4.tar.gz
bam2$ tar xzvf wmap_likelihood_full_v4.tar.gz
```

heruntergeladen und entpackt. Daten und Quellcode befinden sich dann Verzeichnis `likelihood_v4`.

### 4.2.4 CFITSIO installieren und testen

CFITSIO wird mit

```
icl01$ cd ~/cfitsio
icl01$ ./configure
icl01$ make
```

installiert. Danach kann geprüft werden, ob das Programm fehlerfrei läuft. Dazu werden zunächst die Befehle

```
icl01$ make testprog
icl01$ testprog > testprog.lis
```

aufgerufen. Falls die Aufrufe

```
icl01$ diff testprog.lis testprog.out
icl01$ cmp testprog.fit testprog.std
```

*keine* Ausgabe erzeugen, ist kein Fehler aufgetreten.

### 4.2.5 WMAP7-Daten installieren und testen

Um die WMAP7-Daten nutzen zu können, müssen einige Änderungen durchgeführt werden. Zunächst wird ein Editor gestartet, hier `emacs`:

```
icl01$ cd ~/likelihood_v4
icl01$ emacs WMAP_7yr_options.F90
```

In Zeile 12 muss „data/“ durch den vollständigen Pfad ersetzt werden, bei mir also „/home/gebauer/likelihood\_v4/data/“.

Dann muss die Datei `Makefile` bearbeitet werden:

```
icl01$ emacs Makefile
```

Folgende Änderungen sind nötig:

```
Zeile 7:  CFITSIO=/home/gebauer/cfitsio
Zeile 10: LAPACKDIR=/opt/intel_mkl_81/lib/em64t
Zeile 11: LAPACLLIB=-lguide -lmkl_lapack -lmkl_solver -lmkl_em64t
Zeile 53: F90      = mpif90
Zeile 57: LIBS     = -L. -L$(CFITSIO) -L$(LAPACKDIR)  ↶
           $(LAPACLLIB) $(CFITSLIB) -lpthread
```

Danach kann der Quellcode kompiliert und das Programm getestet werden:

```
icl01$ make all
icl01$ make check
```

### 4.2.6 COSMOMC installieren

Der Quellcode befindet sich im Unterverzeichnis `source`. Auch hier müssen einige Änderungen vorgenommen werden. Zunächst wird wieder ein Editor gestartet:

```
icl01$ cd ~/cosmomc/source
icl01$ emacs Makefile
```

Es müssen einige Zeilen angepasst werden:

```
Zeile 9:  WMAP = /home/gebauer/likelihood_v4
Zeile 12: cfitsio = /home/gebauer/cfitsio
Zeile 23: FFLAGS = -O2 -ip -WO -WB -openmp -fpp -DMPI -vec_report0
Zeile 24: LAPACKL = -L/opt/intel_mkl_81/lib/em64t -lmkl_lapack ↶
           -lmkl_em64t -lmkl_solver -lguide
Zeile 143: LINKFLAGS += -L$(cfitsio) -L$(WMAP) -lcfitsio
```

Der Code kann dann kompiliert werden:

```
icl01$ make all
```

### 4.3 Ausführung

COSMOMC kann mit

```
icl01$ ./cosmomc params.ini &
```

gestartet werden. Das Zeichen `&` am Ende des Befehls sorgt dafür, dass der Prozess im Hintergrund abläuft und das Konsolenfenster geschlossen werden kann. Nach dem Start werden einige Informationen zum Initialisierungsprozess ausgegeben:

```
Number of MPI processes:          1
Random seeds: 3049, 11960 rand_inst: 1
Computing tensors: F
Doing CMB lensing: T
lmax          = 2100
Number of C_ls = 3
Varying 7 parameters (0 fast)
starting Monte-Carlo
Initialising BBN Helium data...
reading WMAP7 data
Initializing WMAP likelihood, version v4
```

Das Programm rechnet mit einer einzelnen Markov-Kette, die abbricht, wenn die in `params.ini` über `samples` eingestellte Anzahl an Kettengliedern erzeugt wurde.

Unabhängige Ketten, die nicht kommunizieren, aber das Linux-Cluster nutzen, können gestartet werden, indem zunächst ein Skript `gridjob.sh` mit dem Inhalt

```
#!/bin/sh
#$ -N cosmomc
#$ -now y
#$ -q icl.q

cd /home/gebauer/cosmomc
./cosmomc params.ini $1
```

erstellt und dann mit

```
bam2$ qsub gridjob.sh 1
```

bzw. einer anderen Zahl für eine zusätzliche Kette aufgerufen wird. Die Berechnung wird ebenfalls beendet, wenn die über `samples` eingestellte Anzahl an Kettengliedern erreicht ist.

Um vier Ketten zu starten, die parallel ausgeführt werden und per MPI kommunizieren, kann COSMOMC mit

```
icl01$ mpirun -n 4 ./cosmomc params.ini &
```

aufgerufen werden. Hier wird allerdings nur ein einziger Knoten im Linux-Cluster genutzt. Die Ketten werden automatisch beendet, sobald die Konvergenzgrenze, die in `params.ini` über die Einstellung `MPI_Converge_Stop` konfiguriert werden kann, unterschritten wird.

#### 4.4 Auswertung der Ergebnisse

Die Auswertung erfolgt mittels

```
icl01$ ./getdist distparams.ini
```

Dieser Befehl erstellt einige Dateien, die Datenpunkte enthalten, welche von einem anderen Programm genutzt werden können, um Plots zu erstellen. Dabei werden auch einige Skript-Dateien für `Matlab` erstellt, um die Plots zu erzeugen. In der Datei mit der Endung `.covmat` befindet sich die errechnete Kovarianz-Matrix, die Datei mit der Endung `.likestats` enthält das Best-Fit-Ergebnis, d.h. das Kettenglied mit der größten Likelihood, und die Datei mit der Endung `.margestats` enthält die gemittelten Werte der Parameter.

## 5 Resultate

Es wurden einige Ketten mit den Standardeinstellungen `COSMOMC` generiert. In der Standardeinstellung werden die Parameter  $\Omega_{b,0}h^2$ ,  $\Omega_{dm,0}h^2$ ,  $\theta$  (das hundertfache Verhältnis des Beobachtungshorizonts zur Winkeldurchmesserdistanz),  $\tau$  (optische Dichte),  $n_s$  (Spektralindex des ursprünglichen Leistungsspektrums nach der Inflation),  $\log[10^{10} A_s]$  ( $A_s$  ist die Amplitude der ursprünglichen Leistungsspektrums) und  $A_{SZ}$  (Amplitude des Sunjajew-Seldowitsch-Effekts) variiert. Aus diesen Parametern werden die Werte von  $\Omega_{\Lambda,0}$ ,  $t_0$ ,  $\Omega_{m,0}$ ,  $\sigma_8$  (quadratisches Mittel der Massenfluktuationen in Kugeln mit dem Radius  $8/h$  Mpc),  $z_{re}$  (Rotverschiebung der Reionisierung),  $r_{10}$  (das Verhältnis von Tensor- zu skalarem  $C_l$  für  $l = 10$ ) und  $H_0$  abgeleitet [12].

Es wird ein flaches Universum vorausgesetzt, also  $\Omega_{K,0} = 0$ . Die Startwerte und Grenzen der Parameter sind in Tab. 1 dargestellt [`params.ini`]<sup>10</sup>. Damit nicht alle parallel ausgeführten Ketten vom gleichen Punkt aus starten, werden die tatsächlichen Startwerte der Parameter zufällig normalverteilt (mit der Einschränkung, dass die Grenzen für den Wert eingehalten werden) bestimmt. Dabei ist der in der Tabelle angegebene Startwert der Erwartungswert und die Startbreite die Standardabweichung der Anfangsverteilung.

Die vorgeschlagene Kovarianzmatrix der Parameter ist in `params_CMB.covmat` definiert.

Parameter	Startwert	untere Grenze	obere Grenze	Startbreite	$\sigma$
$\Omega_{b,0}h^2$	0,0223	0,005	0,1	0,002	0,001
$\Omega_{dm,0}h^2$	0,105	0,01	0,99	0,01	0,01
$\theta$	1,04	0,5	10	0,002	0,002
$\tau$	0,09	0,01	0,8	0,03	0,03
$n_s$	0,95	0,5	1,5	0,02	0,01
$\log[10^{10}A_s]$	3	2,7	4	0,01	0,01
$A_{SZ}$	1	0	2	0,4	0,4

**Tab. 1:** Startwerte und Grenzen der Parameter in der Voreinstellung.  $\sigma$  ist der Schätzwert für die Standardabweichung der a posteriori-Verteilung.

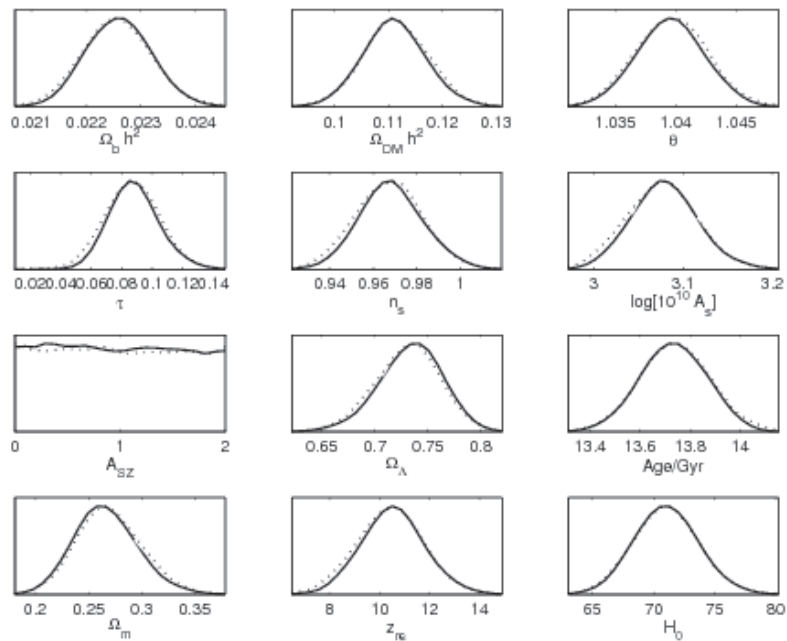
Zur Berechnung wurden vier mittels MPI kommunizierende Ketten gestartet. Als Abbruchkriterium war `MPI_Converge_Stop=0.03` gesetzt. Die Berechnung war nach 10 Stunden und 25 Minuten abgeschlossen. Außer `COSMOMC` lief in dieser Zeit kein rechenintensives Programm auf der genutzten Maschine `ic101`, sodass diese Dauer auch in etwa der tatsächlichen CPU-Zeit entspricht.

Es wurden insgesamt 20530 Kettenglieder erzeugt, in jeder einzelnen Kette zwischen

<sup>10</sup>Zusätzlich zu den in `params.ini` konfigurierten Grenzwerten sind einige (großzügig bemessene) Grenzen im Quellcode vorgegeben [12].

5047 und 5272. Somit wurden durchschnittlich 0,54 Glieder pro Sekunde erzeugt. Wie im Metropolis-Algorithmus vorgesehen wurden Punkte mehrfach gezählt, wenn ein Kandidat für einen neuen Punkt verworfen wurde. Durchschnittlich wurde jeder Punkt 2,84-mal gezählt, d.h. jedem erfolgreichen Kandidaten gingen im Mittel 1,84 verworfene Kandidaten voraus.

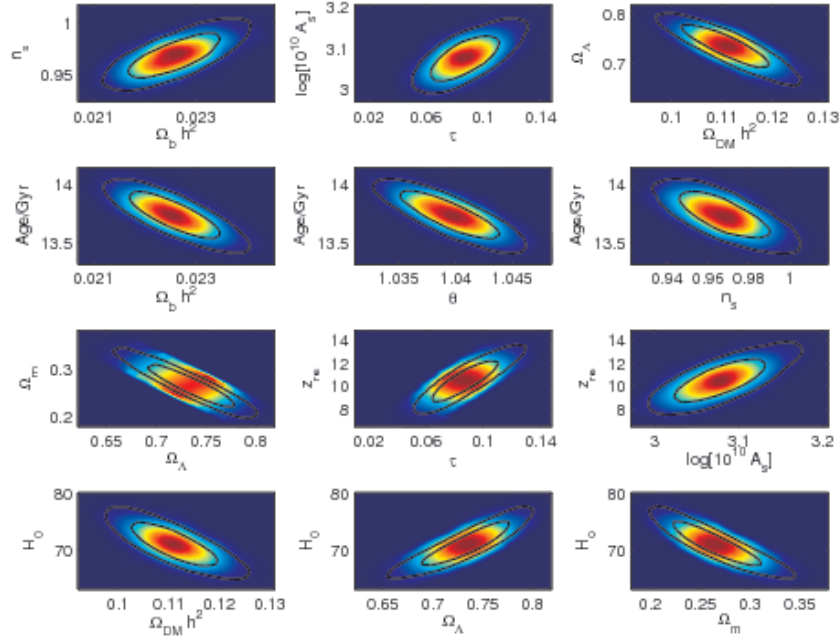
Abb. 6 zeigt die ermittelten Wahrscheinlichkeitsdichten für die berechneten Modellparameter, Abb. 7 zeigt einige ausgewählte Korrelationen zwischen jeweils zwei Parametern.



**Abb. 6:** Mit COSMOMC ermittelte Wahrscheinlichkeitsdichten. Die durchgezogene Linie zeigt die erhaltene Abschätzung für die marginalisierte Wahrscheinlichkeitsdichte des jeweiligen Parameters. Die gepunktete Linie stellt die mittlere Likelihood von Kettengliedern mit dem jeweiligen Parameterwert dar [5, S. 18].

Die ermittelten Werte (`.margstats`) sind in Tabelle 2 angegeben. Bis auf den Wert für  $A_{SZ}$  stimmen alle Werte sehr gut mit den Literaturwerten überein. Wie aber in Abb. 6 zu erkennen ist, lassen die Messdaten keinen Schluss auf  $A_{SZ}$  zu.





**Abb. 7:** Mit COSMOMC ermittelte Korrelationen zwischen einigen Parametern. Die Farben sind eine Funktion der zweidimensionalen marginalisierten Wahrscheinlichkeitsdichte [12]. Die eingezeichneten Konturen umrahmen den 68-Prozent- und den 95-Prozent-Konfidenzbereich [5, S. 8].

Parameter	Werte	Literaturwert
$100\Omega_{b,0}h^2$	$2,26 \pm 0,06$	$2,258^{+0,057}_{-0,056}$
$\Omega_{dm,0}h^2$	$1,11 \pm 0,06$	$1,11 \pm 0,01$
$\tau$	$0,088 \pm 0,015$	$0,088 \pm 0,015$
$n_s$	$0,968 \pm 0,014$	$0,963 \pm 0,014$
$A_{SZ}$	$0,986 \pm 0,577$	$0,37 \pm 0,17$
$\Omega_{\Lambda,0}$	$0,733 \pm 0,029$	$0,734 \pm 0,029$
$t_0/\text{Gyr}$	$13,73 \pm 0,13$	$13,75 \pm 0,13$
$\Omega_{m,0}$	$0,267 \pm 0,029$	$0,265 \pm 0,011$
$z_{re}$	$10,5 \pm 1,2$	$10,4 \pm 1,2$
$H_0$	$71,0 \pm 2,6 \text{ km s}^{-1} \text{ Mpc}^{-1}$	$71,0 \pm 2,5 \text{ km s}^{-1} \text{ Mpc}^{-1}$

**Tab. 2:** Mit COSMOMC ermittelte Werte und Literaturwerte [3, S. 3]

## 6 Fazit und Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde beschrieben, wie die Markov-Ketten-Monte-Carlo-Analyse zur Untersuchung der kosmischen Hintergrundstrahlung genutzt werden kann, um kosmologische Parameter zu ermitteln. Dazu wurde der notwendige physikalische und mathematische Hintergrund beschrieben.

Das Programm COSMOMC konnte auf dem Linux-Cluster der Theoretischen Physik der Universität Bielefeld installiert und Literaturwerte gut reproduziert werden.

Spannend war für mich, dass es sich um ein sehr aktuelles Forschungsthema handelt. Die untersuchten Daten sind erst vor einigen Monaten veröffentlicht worden. Um  $A_{SZ}$  mit dieser Methode zu bestimmen, sind genauere Daten notwendig. Auch die anderen Werte haben zum Teil eine sehr hohe Messungengenauigkeit. Der Satellit Planck wird in der Zukunft viel genauere Daten liefern, die Forschung auf diesem Bereich ist also noch nicht abgeschlossen.

Das Verfahren eignet sich aber nicht nur zur Untersuchung der kosmischen Hintergrundstrahlung. Es ist eine sinnvolle Methode, falls die Wahrscheinlichkeit eines einzelnen Datenpunktes relativ leicht, Integrale über den Zustandsraum aber nicht mit angemessenem Aufwand errechnet werden können. Im Fall der kosmologischen Parameter ist die Berechnung der  $C_l$  und der Vergleich mit Messdaten, um eine Wahrscheinlichkeit zu bestimmen, relativ schnell möglich. Eine Integration über alle Parameter wäre aber zu aufwändig.

## 7 Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen Menschen und Gruppen bedanken, die mir beim Erstellen dieser Bachelor-Arbeit Unterstützung geleistet haben.

Zunächst danke ich Herrn Prof. Dr. Dominik Schwarz, in dessen Arbeitsgruppe ich dieses interessante Thema bearbeiten konnte, für seine Hilfsbereitschaft und die Begutachtung der Arbeit.

Herrn Prof. Dr. Dietrich Bödeker danke ich für das zweite Gutachten.

Zong-Kuan Guo danke ich für nützliche Hinweise und Denkanstöße beim Umgang mit COSMOC und Ann-Kristin Möller für das Lesen der Arbeit.

Meinem Büro danke ich für die freundliche Atmosphäre.

Ein herzlicher Dank gilt meinen Eltern, die mir ein sorgenfreies Studium ermöglichen. Außerdem bedanke ich mich bei der Studienstiftung des deutschen Volkes und dem Studienfonds OWL für die Förderung und die fruchtbaren Diskussionen mit anderen Studierenden über das Thema meiner Arbeit.

Außerdem danke ich den Forschungs- und Arbeitsgruppen, deren Ergebnisse ich verwendet habe.

Das Projekt LAMBDA<sup>11</sup> des NASA Office of Space Science stellt die Daten und den Programmcode für die Likelihood-Berechnungen bereit.

Die Abbildungen 1 und 2 wurden vom WMAP Science Team erstellt.

Das HEASARC<sup>12</sup> des Goddard Space Flight Center der NASA stellt den Quellcode von CFITSIO zur Verfügung.

CAMB wird von Dr. Antony Lewis und Dr. Anthony Challinor und COSMOC ebenfalls von Dr. Antony Lewis bereit gestellt.

---

<sup>11</sup>Legacy Archive for Microwave Background Data Analysis

<sup>12</sup>High Energy Astrophysics Science Archive Research Center

## Literatur

- [1] S. DODELSON, *Modern cosmology*, Academic Press (2003)
- [2] D. J. RAINE, R. THOMAS, *An introduction to the science of cosmology*, Academic Press (2003)
- [3] E. KOMATSU ET AL., *Seven-Year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) Observations: Cosmological Interpretation*, arXiv:1001.4538v2 (2010)
- [4] S. WEINBERG, *Cosmology*, Oxford University Press Inc., New York (2008)
- [5] A. LEWIS, S. BRIDLE, *Cosmology parameters from CMB and other data: a Monte-Carlo approach*, arXiv:astro-ph/0205436v3 (2002)
- [6] C. L. BENNETT ET AL., *First Year Wilkinson Microwave Anisotropy Probe (WMAP) Observations: Preliminary Maps and Basic Results*, arXiv:astro-ph/0302207v3 (2003)
- [7] J.C. MATHER ET AL., *Astrophys. J.* 512, 511 (1999).
- [8] NASA / WMAP SCIENCE TEAM, *LAMBDA - WMAP Images*, [http://lambda.gsfc.nasa.gov/product/map/current/m\\_images.cfm](http://lambda.gsfc.nasa.gov/product/map/current/m_images.cfm) (24. Juni 2010)
- [9] W. HU, M. WHITE, *The Cosmic Symphony*, Scientific American 290N2 44 (2004)
- [10] R. M. NEAL, *Probabilistic Inference Using Markov Chain Monte Carlo Methods*, Toronto (1993)
- [11] K. L. CHUNG, *Elementary Probability Theory*, Springer-Verlag, New York (1979)
- [12] A. LEWIS, *COSMOMC ReadMe*, <http://cosmologist.info/cosmomc/readme.html>