Schemat Metropolisa
Całkowanie Monte Carlo
Sprawozdanie

Paweł Lipiór

2 maja 2020

1 Wstęp

W trakcie trwania zajęć laboratoryjnych naszym zadaniem było praktyczne zastosowanie poznanych metod numerycznych. Tym razem tematem zajęć był algorytm Metropolisa. W trakcie zajęć zrealizowano zadania:

- Zastosowano schemat Metropolisa do oszacowania stochastycznego całek - kolejnych momentów zwykłych rozkładu prawdopodobieństwa
- Za pomocą algorytmu Metropolisa wygenerowano ścieżkę wędrowca dla rozkładu prawdopodobieństwa funkcji falowej stanu podstawowego dwuwymiarowego kwantowego oscylatora harmonicznego
- Za pomocą schematu Metropolisa dokonano oszacowania wartości oczekiwanej energii potencjalnej opisanego powyżej oscylatora kwantowego

Algorytm

Schemat Metropolisa wykonywano wg. kolejnych kroków:

1. Mamy funkcję gęstości prawdopodobieństwa daną $\rho(\vec{r})$
2. Ustalamy dowolny punkt początkowy $\vec{r}$
3. Z rozkładu jednorodnego losujemy przesunięcie $\Delta\vec{r}$
4. Definiujemy $\vec{r}_w = \vec{r} + \Delta\vec{r}$
5. Z rozkładu jednorodnego [0, 1] losujemy wartość z
6. Sprawdzamy warunek $z < \frac{\rho(\vec{r}_w)}{\rho(\vec{r})}$. Jeżeli warunek prawdziwy to przypisujemy $\vec{r} := \vec{r}_w$. Jeśli nieprawdziwy to nie zmieniamy $\vec{r}$.
7. Wracamy do punktu 3

2 Rozkład jednowymiarowy

Pierwszym zadaniem było wykorzystanie schematu Metropolisa do generacji ścieżki z rozkładu jednowymiarowego:

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}$$

Przyjęto następujące warunki:

- Δx - losowanie z rozkładu jednorodnego na przedziale [-0.25, 0.25]
- $x_0 = 0$

W trakcie przechodzenia po ścieżce liczono przybliżenia kolejnych momentów zwykłych rozkładu. Moment zwykły n-tego rzędu dany jest wzorem:

$$I_n =< x^n >= \int_{\Omega} x^n \rho(x) dx$$

Dla naszych celów dokonamy jego przybliżenia danego jako:

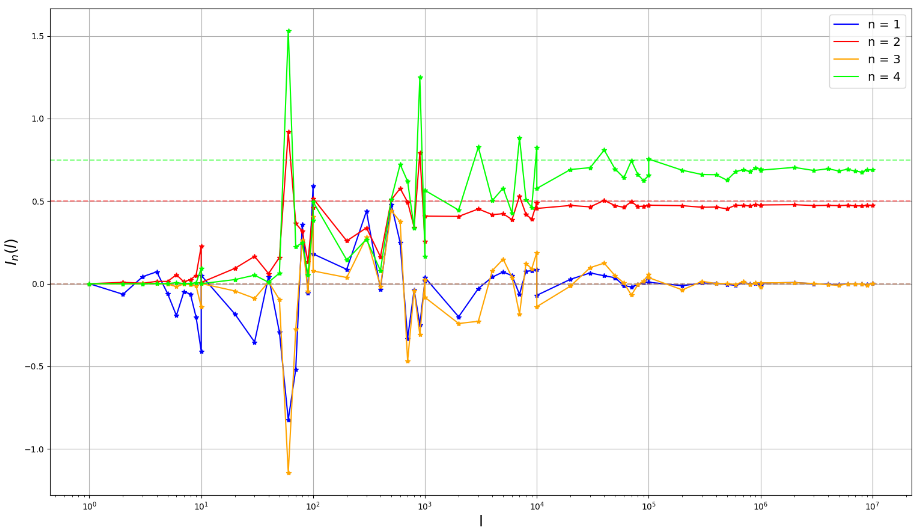
$$I_n(l) \approx \frac{1}{l} \sum_{k=1}^{l} x^n \tag{1}$$

gdzie za x przyjmujemy wartość przed punktem 6 z algorytmu.

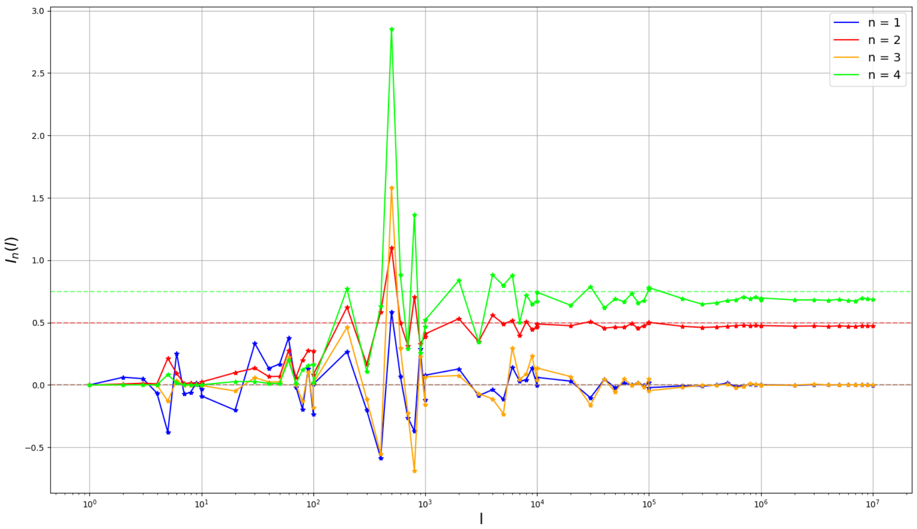
Wykonując obliczenia w sposób analityczny możemy ustalić iż momenty zwykłe dla kolejnych $n = 1, 2, 3, 4$ wynoszą kolejno:

- $I_1 = 0$
- $I_2 = 0.5$
- $I_3 = 0$
- $I_4 = 0.75$

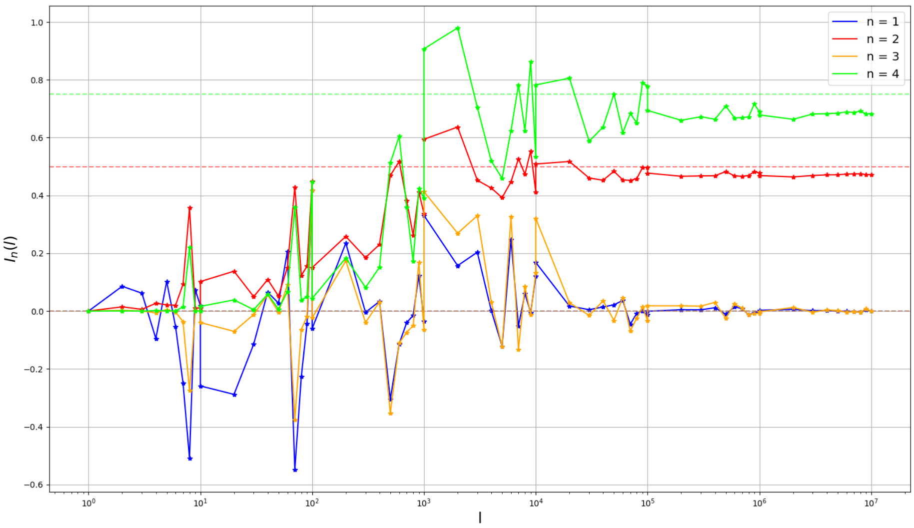
Korzystając z programu komputerowego wygenerowano, w zależności od liczby wykonań algorytmu, zestaw ścieżek i obliczono dla nich kolejne momenty zwykłe. Wyniki tych symulacji przedstawiono na rysunkach 1, 2, 3.



Rysunek 1: Wykres $I_n(l)$ dla kolejnych momentów zwykłych rozkładu wraz z oczekiwanymi wartościami analitycznymi



Rysunek 2: Wykres $I_n(l)$ dla kolejnych momentów zwykłych rozkładu wraz z oczekiwanymi wartościami analitycznymi



Rysunek 3: Wykres $I_n(l)$ dla kolejnych momentów zwykłych rozkładu wraz z oczekiwanymi wartościami analitycznymi

Dla uzyskania lepszego obrazu poprawności i zasadności wykonywanej symulacji postanowiono wykonać trzy rysunki.

Komentarz

Na podstawie powyższych rysunków możemy wywnioskować, iż metoda Schematu Metropolisa jest odpowiednia do określenia oszacowania wartości całek, szczególnie takich jak momenty rozkładu. Wymaga ona jednak stosunkowo dużej liczby zadanych kroków, gdyż w naszym przypadku zadowalające przybliżenie pojawia się dopiero przy około 10^6 liczbie wykonań algorytmu.

Na podstawie trzech dokonanych symulacji możemy też stwierdzić, iż każda z wykonanych symulacji różni się od siebie. Każda z symulacji jest zmienną losową więc dla większej dokładności otrzymanych oszacowań można by policzyć estymator wartości oczekiwanej z obliczonych w każdej symulacji momentów rozkładu.

3 Rozkład dwuwymiarowy

Drugim zadaniem było wykorzystanie schematu Metropolisa do generacji ścieżki z rozkładu dwuwymiarowego:

$$\rho(x, y) = |\Psi(x, y)|^2$$

gdzie funkcja:

$$\Psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{1}{2}(x^2+y^2)}$$

jest funkcją falową stanu podstawowego dwuwymiarowego kwantowego oscylatora harmonicznego o Hamiltonianie, dla ω - częstość, zadanym jako:

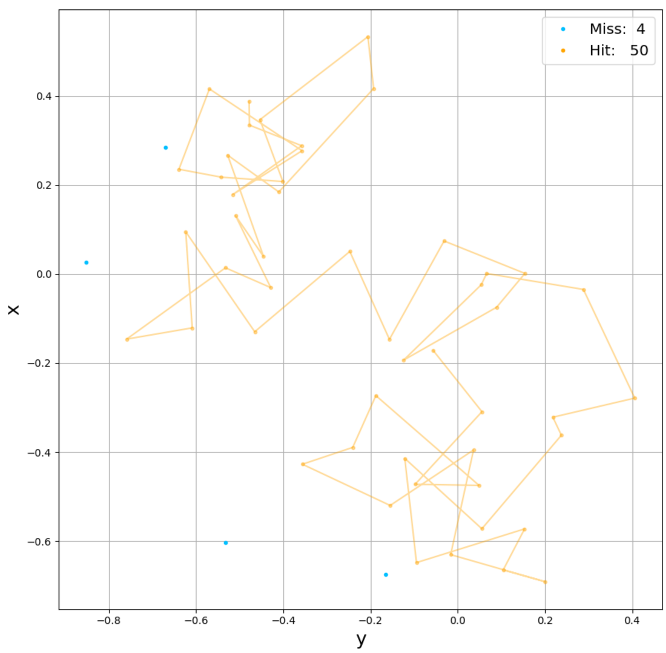
$$H = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}\omega^2 y^2$$

Przyjęto następujące warunki:

- Δx - losowanie z rozkładu jednorodnego na przedziale [-0.25, 0.25]
- $x_0 = 0$
- Δy - losowanie z rozkładu jednorodnego na przedziale [-0.25, 0.25]
- $y_0 = 0$

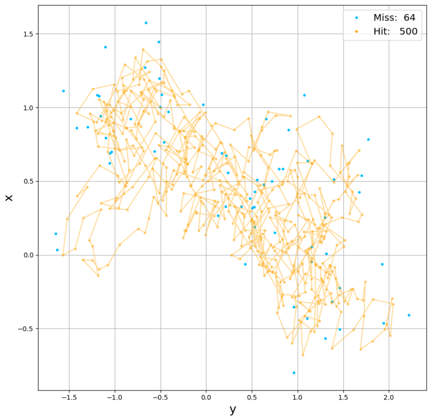
3.1 Generowanie ścieżki

Korzystając z programu komputerowego dokonano symulacji ścieżki uzyskanej po zastosowaniu Schematu Metropolisa dla rozkładu $\rho(x, y)$. Wyniki generowania ścieżki przedstawiono na rysunku 4.

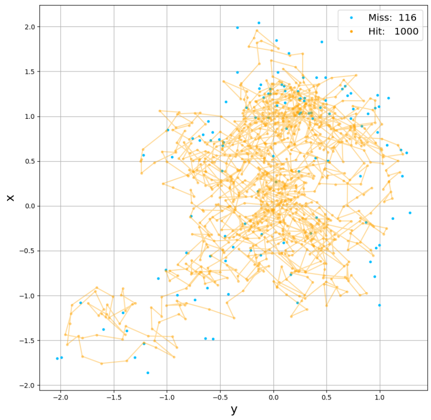


(a) N = 50

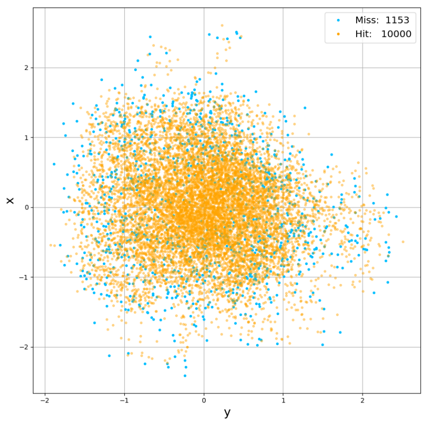
Rysunek 4: Wykresy przedstawiające ścieżkę punktów (x,y) wygenerowaną za pomocą Schematu Metroplisa



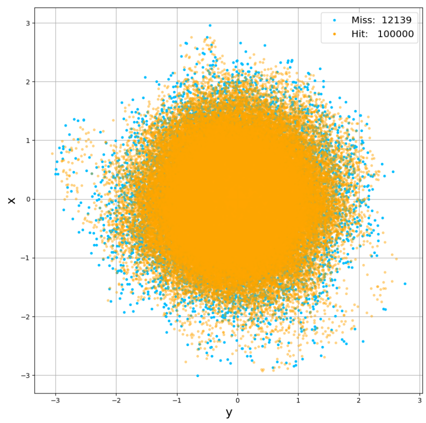
(b) N = 500



(c) N = 1000



(d) N = 10^4



(e) N = 10^5

Rysunek 4: Wykresy przedstawiające ścieżkę punktów (x,y) wygenerowaną za pomocą Schematu Metroplisa

Komentarz

Na podstawie poniższych wykresów przedstawionych na rysunku 4 możemy stwierdzić iż otrzymana za pomocą Schematu Metropolisa ścieżka punktów (x,y) odpowiada zadanemu rozkładowi. Po pierwsze koncentruje się wokół początku układu współrzędnych (0,0) - takich wartości $< x >$ i $< y >$ oczekujemy. Po drugie jest prawdziwie dwuwymiarowy - punkty są rozproszone po całej powierzchni.

3.2 Wartość oczekiwana energii potencjalnej

Kolejnym zadaniem związanym z opisywanym powyżej rozkładem dwuwymiarowym było znalezienie wartości oczekiwanej energii potencjalnej oscylatora zadanej wzorem:

$$< E_p > = < \frac{x^2 + y^2}{2} > = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^2 + y^2}{2} \rho(x, y) dx dy$$

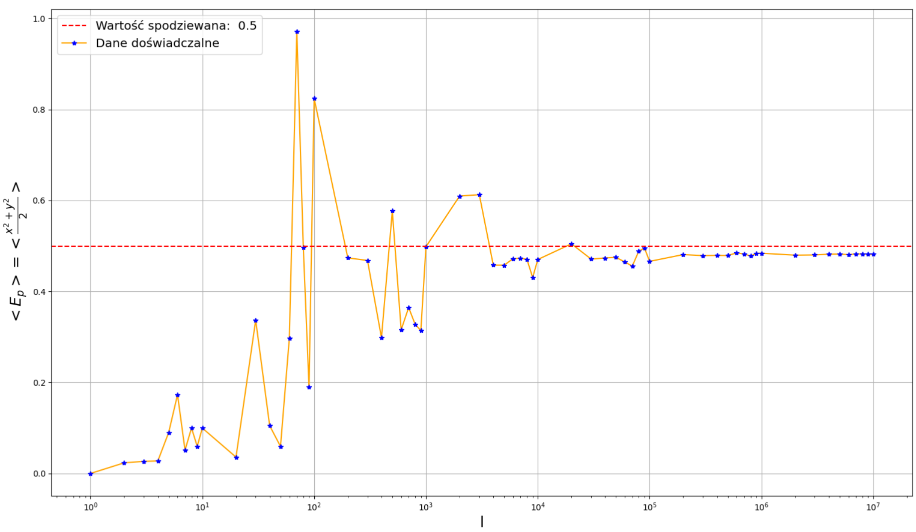
Do naszych celów dokonamy przybliżenia:

$$< E_p > = < \frac{x^2 + y^2}{2} > \approx \frac{1}{l} \sum_{k=1}^{l} \frac{x_k^2 + y_k^2}{2}$$

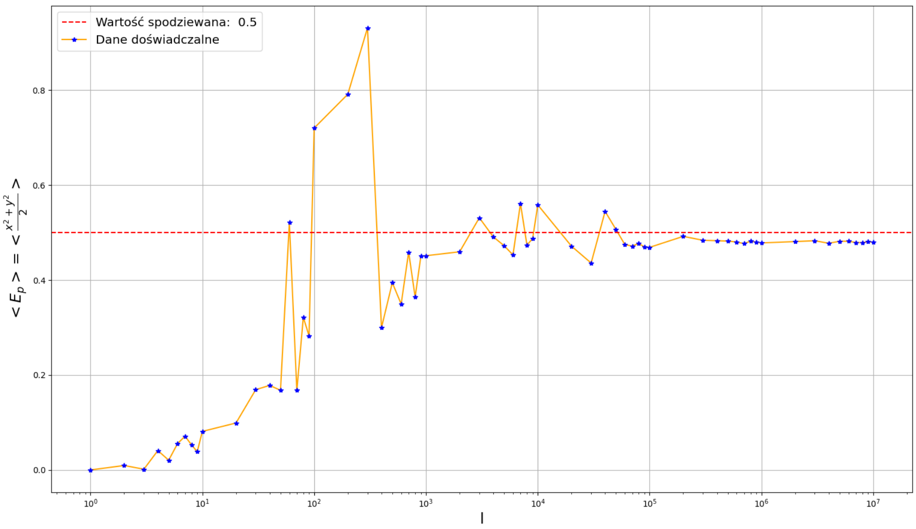
Wykonując obliczenia w sposób analityczny otrzymujemy:

$$< E_p > = 0.5$$

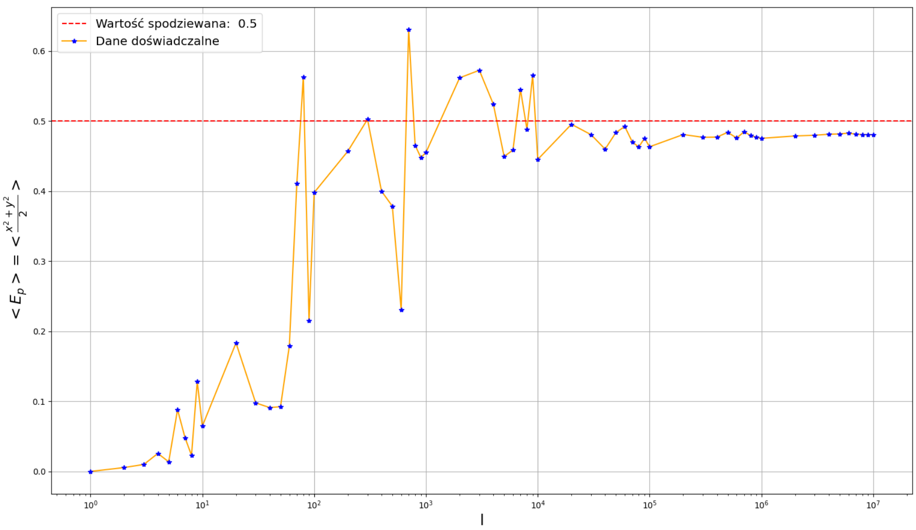
Korzystając z programu komputerowego dokonano symulacji ścieżek uzyskanych po zastosowaniu Schematu Metropolisa dla rozkładu $\rho(x, y)$. W czasie generowania ścieżek dokonano obliczenia $< E_p >$. Wyniki symulacji przedstawiono na rysunkach 5, 6, 7.



Rysunek 5: Wykres $< E_p >$ w zależności od liczby symulacji l



Rysunek 6: Wykres $< E_p >$ w zależności od liczby symulacji l



Rysunek 7: Wykres $< E_p >$ w zależności od liczby symulacji l

Dla uzyskania lepszego obrazu poprawności i zasadności wykonywanej symulacji postanowiono wykonać trzy rysunki.

Komentarz

Na podstawie powyższych rysunków możemy wywnioskować, iż metoda Schematu Metropolisa jest odpowiednia do określenia oszacowania wartości całek, szczególnie takich jak momenty rozkładu. Metoda ta jest jak widać szczególnie przydatna w symulacji rozkładów wielowymiarowych, gdzie policzenie całek wielokrotnych jest sprowadzone do prostej sumy. Wymaga ona jednak stosunkowo dużej liczby zadanych kroków, gdyż w naszym przypadku zadowalające i stabilne przybliżenie pojawia się dopiero przy około 10^6 liczbie wykonań algorytmu.

Na podstawie trzech dokonanych symulacji możemy też stwierdzić, iż każda z wykonanych symulacji różni się od siebie. Każda z symulacji jest zmienną losową więc dla większej dokładności otrzymanych oszacowań można by policzyć estymator wartości oczekiwanej z obliczonej w każdej symulacji $< E_p >$.

4 Podsumowanie

W trakcie zajęć zapoznano się ze Schematem Metropolisa. Pozyskano umiejętność generowania ścieżki punktu z rozkładu jednowymiarowego jak i dwuwymiarowego.
Potwierdzono iż metoda dla sprawdza się szczególnie dobrze w obliczaniu całek takich jak momenty rozkładów. Dokonano obliczeń dla czterech pierwszych momentów zwykłych rozkładu jednowymiarowego.
Dokonano generacji ścieżki dla rozkładu dwuwymiarowego opisującego dwuwymiarowy harmoniczny oscylator kwantowy. Za pomocą Schematu Metropolisa oszacowani oczekiwaną wartość energii potencjalnej takiego oscylatora.

5 Źródła

1 - Instrukcja do laboratorium prof. dr hab. inż. B. Szafran "Schemat Metropolisa i całkowanie Monte Carlo"

2 - Wykład prof. dr hab. inż. B. Szafran "Całkowanie. Schemat Metropolisa"