Wykorzystanie algorytmu Proppa-Wilsona w modelu Isinga

Janek Wojtas, Oskar Werner

Spis treści

1 Abstrakt

Przedstawienie implementacji algorytmu Proppa-Wilsona w modelu Isinga i omówienie wyników.

2 Model Isinga

2.1 Motywacja

Motywacją do powstania modelu Isinga było przeprowadzenie następującego doświadczenia:

Wyobraźmy sobie, że dysponujemy kulką wykonaną z materiału wykazującego własności ferromagnetyczne (np. z żelaza). Kulkę zawieszamy na sznurku, a w pewnej odległości od niej ustawiamy magnes. Pod magnesem zaś znajduje się świeca (rys.). Podczas przeprowadzenia doświadczenia zaobserwowano ciekawą własność. Po przyciągnięciu przez magnes owej kulki okazywało się, że w wyniku ogrzania ciepłem pochodzącym od świecy kulka wracała do swojego pierwotnego położenia - traciła właściwości magnetyczne. Formalnie, pod wpływem ciepła kulka stawała się paramagnetykiem.

W celu analizowania tego zjawiska powstał model Isinga.

2.2 Model matematyczny

Z fizycznego punktu widzenia zakładamy, że dysponujemy ferromagnetykiem, umieszczonym w izolowanym rezerwuarze termicznym, o stałej temperaturze $T = const$. Dla uproszczenia przyjmujemy również, że ferromagnetyk zbudowany jest wyłącznie z atomów oraz węzłów pomiędzy atomami.

Patrząc na problem od strony matematycznej, rozpatrujemy graf $G = (V, E)$, gdzie V jest zbiorem wierzchołków reprezentujących atomy, zaś E zbiorem krawędzi - węzłów. Ponadto, każdemu z wierzchołków przypisujemy pewną wartość $\sigma_v \in \{-1, 1\}$, tzw. spin. Wprowadzamy oznaczenie $\xi \in \{-1, 1\}^N$ jednoznacznie określające konkretny układ spinów w grafie. Energia wybranego układu ξ zadana jest przez hamiltonian, opisany następującym wzorem:

$$H(\xi) = -\sum_{(i,j)\in E} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_{i\in V} h_i\sigma_i,$$

gdzie J_{ij} jest wartością oddziaływania i z j, zaś h_i opisuje wartość zewnętrznego pola magnetycznego wierzchołka i. W niniejszej pracy rozpatrujemy model uproszczony, gdzie $J_{ij} = J = 1$ dla każdej pary $(i, j) \in E$ oraz $h_i = 0$ dla każdego $i \in V$. Wówczas wzór redukuje się do postaci:

$$H(\xi) = -\sum_{(i,j)\in E} \sigma_i \sigma_j$$

Energi wpływa bezpośrednio na prawdopodobieństwo pojawienia się układu w określonej temperaturze T. Ściślej, prawdopodobieństwo wystąpienia konkretnego układu ξ jest zadane przez rozkład Boltzmanna:

$$\pi_{G,\beta}(\xi) = \frac{1}{Z_{G,\beta}} \exp\{-\beta H(\xi)\}, \tag{1}$$

gdzie $Z_{G,\beta} = \sum_\eta \exp\{-\beta H(\eta)\}$ jest stałą normującą, zaś $\beta = \frac{1}{k_B T}$ jest współczynnikiem odwrotnie proporcjonalnym do temperatury otoczenia (k_B to stała Boltzmanna).

2.3 Cel projektu

Celem projektu jest analiza zachowania się układu spinów ferromagnetyka w ustalonym rezerwuarze termicznym. Sprowadza się to do opracowania algorytmu umożliwiającego próbkowanie z zadanego rozkładu $\pi_{G,\beta}$ dla ustalonego grafu (np. krata, graf pełny) i temperatury otoczenia.

2.4 Algorytmiczne rozwiązanie

Bezpośrednie próbkowanie z rozkładu (1) jest zadaniem trudnym. Liczba możliwych układów wynosi 2^N, więc w szczególności dla modelu o dużej liczbie wierzchołków zadanie może być wręcz niewykonalne. Stąd w praktyce, w celu próbkowania z takiego rozkładu korzysta się z metod Monte Carlo - metod opartych na skonstruowaniu nieprzywiedlnego i nieokresowego łańcucha Markowa o rozkładzie stacjonarnym $\pi_{G,\beta}$, który zapewnia asymptotyczną zbieżność do zadanego rozkładu. W niniejszej pracy wykorzystany został algorytm Proppa-Wilsona, z którego implementację przeanalizujemy w dalszej części pracy.

3 Omówienie algorytmu

3.1 Funkcje Pomocnicze

```
1 def num_to_matrix(num,N):
2     n2 = N**2
3     x = bin(num)[2:]
4 
5     if len(x)<n2:
6         y = (n2-len(x))*'0' + x
7     else:
8         y = x
```

```
    matrix = [int(char) for char in y]
    matrix = np.array(matrix).reshape(N,N)

    return(matrix)
```

Listing 1: Zamiana liczby w macierz

Funkcja dokonuje zamianę liczby z systemu dziesiętnego na dwójkowy, a następnie konstruuje odpowiednią macierz (reprezentująca stan modelu Isinga). Argumenty:

- num: liczba zapisana w systemie dziesiętnym
- N: wymiar wyjściowej macierzy

```
def binary_to_decimal(lista_binarna):
    num = 0
    for value in lista_binarna:
        num = 2 * num + value
    return num
```

Listing 2: Zamiana systemu dwójkowego na dziesiętny

Funkcja zamienia liczbę w systemie dwójkowym na liczbę w systemie dziesiętnym. Argumenty:

- lista_binarna: liczba w systemie dwójkowym zapisana w formie listy

```
def get_hamiltonian(matrix):
    kern = np.array([
        [0,1,0],
        [1,0,1],
        [0,1,0]
    ])

    return((matrix * convolve(matrix, kern, mode = 'constant', cval = 0)).sum↩
   ())
```

Listing 3: Hamiltonian dla kraty

Funkcja oblicza hamiltonian konkretnego stanu modelu Isinga, reprezentowanego przez macierz (dla kraty). Argumenty:

- matrix: macierz spinów reprezentująca stan modelu Isinga

```
def get_hamiltonian2(matrix):
    spin_up_count = matrix[matrix == 1].sum()
    n2 =  (matrix.shape[0])**2
    if spin_up_count == 0 or spin_up_count == n2:
        energy = (n2)*(n2-1)/2
    else:
        energy = spin_up_count*(spin_up_count-1)/2 + (n2 - spin_up_count)*(n2↩
    - spin_up_count-1)/2 - (n2 - spin_up_count)*spin_up_count
```

```
    return energy
```

Listing 4: Hamiltonian dla grafu pełnego

Funkcja oblicza hamiltonian konkretnego stanu modelu Isinga, reprezentowanego przez macierz (dla grafu pełnego). Argumenty:

- matrix: macierz spinów reprezentująca stan modelu Isinga

```
def get_equilibrium_distribution(N,beta,graph_type):
    if graph_type == 'krata':
        g = get_hamiltonian
    elif graph_type == 'pelny':
        g = get_hamiltonian2
    n = 2**(N*N)
    pi_theoretical = np.zeros(n)
    Z = 0

    for i in range(n):
        matrix = num_to_matrix(i,N)
        matrix[matrix == 0] = -1
        pi_theoretical[i] = np.exp(beta * g(matrix))
        Z += pi_theoretical[i]

    pi_theoretical = 1/Z * np.array(pi_theoretical)


    return pi_theoretical
```

Listing 5: Znalezienie teoretycznego rozkładu stacjonarnego

Funkcja wyznacza teoretyczny rozkład stacjonarny modelu Isinga na podstawie wzoru

$$\pi_{G,\beta}(\xi) = \frac{1}{Z_{G,\beta}} \exp\{-\beta H(\xi)\}, \tag{2}$$

gdzie $Z_{G,\beta} = \sum_\eta \exp\{-\beta H(\eta)\}$ jest stałą normującą, zaś $\beta = \frac{1}{k_B T}$ jest współczynnikiem odwrotnie proporcjonalnym do temperatury otoczenia (k_B to stała Boltzmanna). Argumenty:

- N: wymiar macierzy spinów
- beta: współczynnik 1/kT, gdzie T jest temperaturą rozpatrywanego rezerwuaru termicznego
- graph_type: argument określający rodzaj modelu. Przyjmuje wartości 'krata' dla kraty i 'pelny' dla grafu pełnego

```
def update(beta, x, y, krata):
    delta = 0
    if x>0:
        delta += krata[x-1,y]
    if x<N-1:
```

```
        delta += krata[x+1,y]
    if y>0:
        delta += krata[x,y-1]
    if y<N-1:
        delta += krata[x,y+1]

    return(np.exp(2*beta*(delta))/(np.exp(2*beta*(delta))+1))
```

Listing 6: Próbnik Gibbsa dla Kraty

Funkcja wyznacza wartość funkcji akceptacji próbnika Gibbsa, wykorzystywanego w algorytmie Proppa-Wilsona dla kraty. Argumenty:

- beta: współczynnik 1/kT, gdzie T jest temperaturą rozpatrywanego rezerwuaru termicznego
- x: współrzędna x-owa w macierzy spinów
- y: współrzędna y-owa w macierzy spinów
- krata: macierz spinów

Funkcja zwraca taką wartość, ponieważ z [1] wiemy, że

$$\pi_{G,\beta}\left(X(x) = +1 | X(V \setminus \{x\}) = \xi\right) = \frac{exp(2\beta(k_+(x,\xi) - k_-(x,\xi)))}{exp(2\beta(k_+(x,\xi) - k_-(x,\xi))) + 1},$$

gdzie $delta = k_+(x,\xi) - k_-(x,\xi)$, zaś $k_+(x,\xi)$ i $k_-(x,\xi)$ to odpowiednio liczba sąsiadów o spinie $+1$ i liczba sąsiadów o spinie -1 naszego wylosowanego punktu x. V to są wierzchołki z modelu Isinga, $X \in \{-1,+1\}^V$ jest losowym stanem modelu Isinga, a $\xi \in \{-1,+1\}^{V\setminus x}$ to X z wyłączeniem punktu x.

```
def update2(beta, x, y, graf, energia_grafu):
    delta = energia_grafu - graf[x,y]

    return(np.exp(2*beta*(delta))/(np.exp(2*beta*(delta))+1))
```

Listing 7: Próbnik Gibbsa dla grafu pełnego

Funkcja wyznacza wartość funkcji akceptacji próbnika Gibbsa, wykorzystywanego w algorytmie Proppa-Wilsona dla grafu pełnego. Argumenty:

- beta: współczynnik 1/kT, gdzie T jest temperaturą rozpatrywanego rezerwuaru termicznego
- x: współrzędna x-owa w macierzy spinów
- y: współrzędna y-owa w macierzy spinów
- graf: macierz spinów
- energia_grafu: suma spinów

Funkcja działa na tej samej zasadzie jak funkcja **update**, jedyna różnica to sposób zliczania spinów sąsiadów wierzchołka (x,y).

3.2 Algorytm

```
N = 2100
beta = 0.04

KrataP = np.ones((N,N))
KrataN = -1*np.ones((N,N))

start = time.time()

rzuty = [random()]

while (KrataN == KrataP).all() == False:
    for i in range(len(rzuty)):
        x, y = randint(0,N,2)
        KrataP[x,y] = 1 if rzuty[-(i+1)] < update(beta, x, y, KrataP) else -1
        KrataN[x,y] = 1 if rzuty[-(i+1)] < update(beta, x, y, KrataN) else -1
    rzuty +=[random() for i in range(len(rzuty))]

print('czas:', time.time()-start)
```

Listing 8: Algorytm Proppa- Wilsona

Powyżej prezentujemy implementację algorytmu Proppa-Wilsona dla kraty. Stosujemy tutaj metodę sandwichingu, która sprawia, że algorytm Proppa-Wilsona wymaga puszczenia tylko dwóch łańcuchów markowa - startujących ze stanów o wszystkich spinach równych 1 i wszystkich spinach równych -1 odpowiednio - a nie 2^k łańcuchów, gdzie k to liczba konfiguracji w modelu Isinga. Z tego względu sandwiching umożliwia nam realizację algorytmu dla dużych k. Przykładowo, rozpatrzmy model Isinga o macierzy 2100×2100 i $\beta = 0.04$. Losujemy zmienną losową U_{-1} z rozkładu jednostajnego na $[0, 1]$, a następnie punkt, który chcemy potencjalnie zamienić. Zamiany dokonujemy na podstawie odpowiedniej funkcji akceptacji dla macierzy samych $+1$ i macierzy samych -1 oddzielnie. Jeśli w chwili 0 łańcuchy markowa startujące z tych macierzy nie znajdą się w tym samym stanie, podwajamy liczbę zmienną losowych U z rozkładu jednostajnego, jedocześnie pamiętając stare U i puszczamy algorytm ponownie. Pełny opis algorytmu znajdziemy w [1], rozdział **The Propp-Wilson Algorithm**.

W powyższym przykładzie dla macierzy 2100 x 2100 kod liczył się 1 godzinę i trzeba było przechować 134217728 U w pamięci.

```
N = 40
beta = 0.05

KrataP = np.ones((N,N))
KrataN = -1*np.ones((N,N))
energiaP = N**2
energiaN = -N**2
start = time.time()

rzuty = [random()]

while (KrataN == KrataP).all() == False:
    for i in range(len(rzuty)):
        x, y = randint(0,N,2)
        KrataP_xy = KrataP[x,y]
```

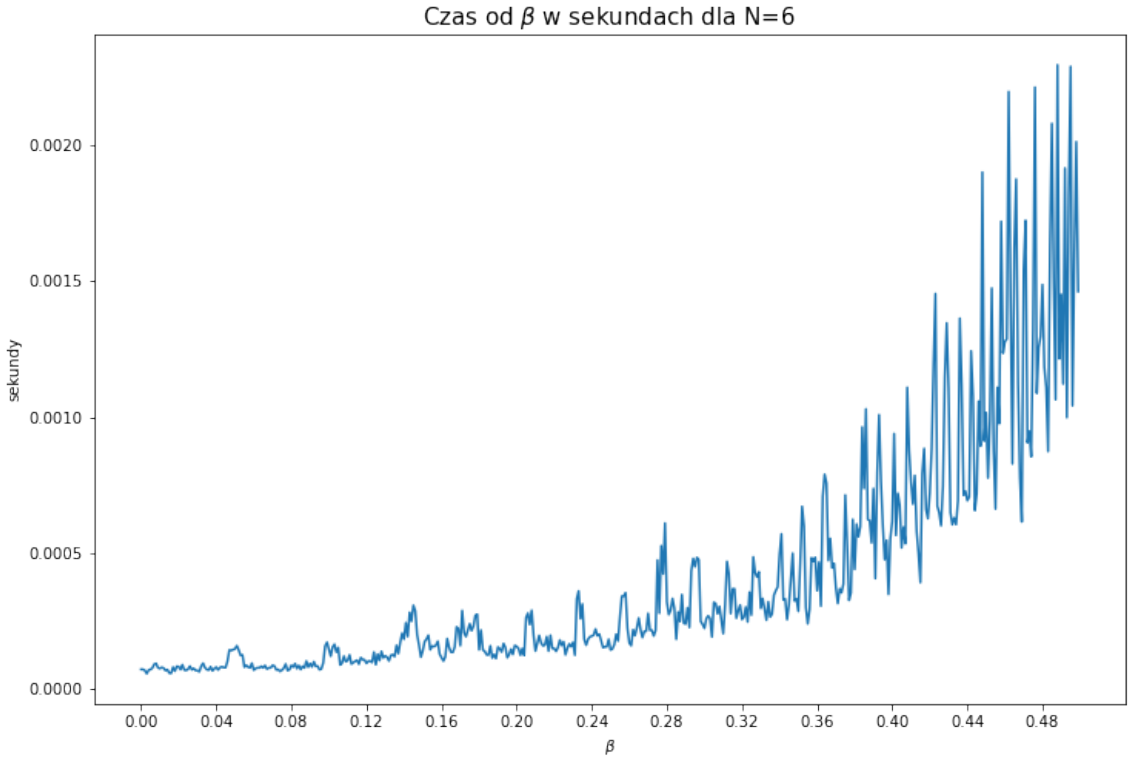
```
        KrataN_xy = KrataN[x,y]
        KrataP[x,y] = 1 if rzuty[-(i+1)] < update2(beta, x, y, KrataP, ↩
    energiaP) else -1
        KrataN[x,y] = 1 if rzuty[-(i+1)] < update2(beta, x, y, KrataN, ↩
    energiaN) else -1

        if KrataP_xy != KrataP[x,y]:
            energiaP += 2*KrataP[x,y]
        if KrataN_xy != KrataN[x,y]:
            energiaN += 2*KrataN[x,y]

    rzuty +=[random() for i in range(len(rzuty))]

print('czas:', time.time()-start)
```

Listing 9: Algorytm Proppa Wilsona

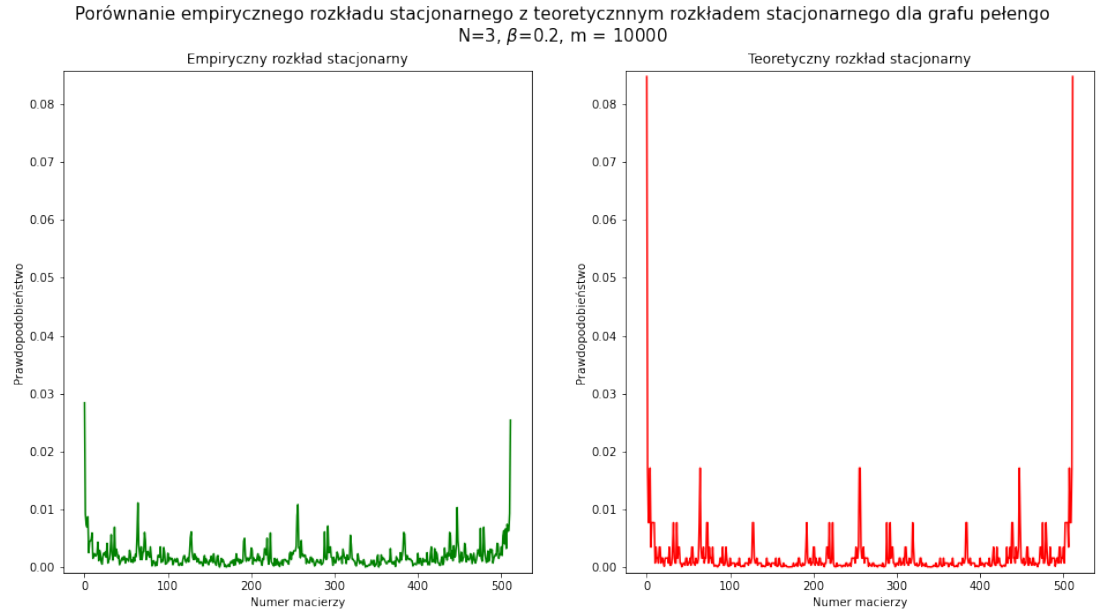
Powyżej przedstawiamy kod algorytmu Proppa-Wilsona dla grafu pełnego. Działa on na tej samej zasadzie co poprzedni, jedyną różnicą jest przechowywanie dodatkowych zmiennych reprezentujących energię odpowiednich układów, która jest potrzebna do wyznaczenia sumy spinów sąsiadów w kolejnych iteracjach.

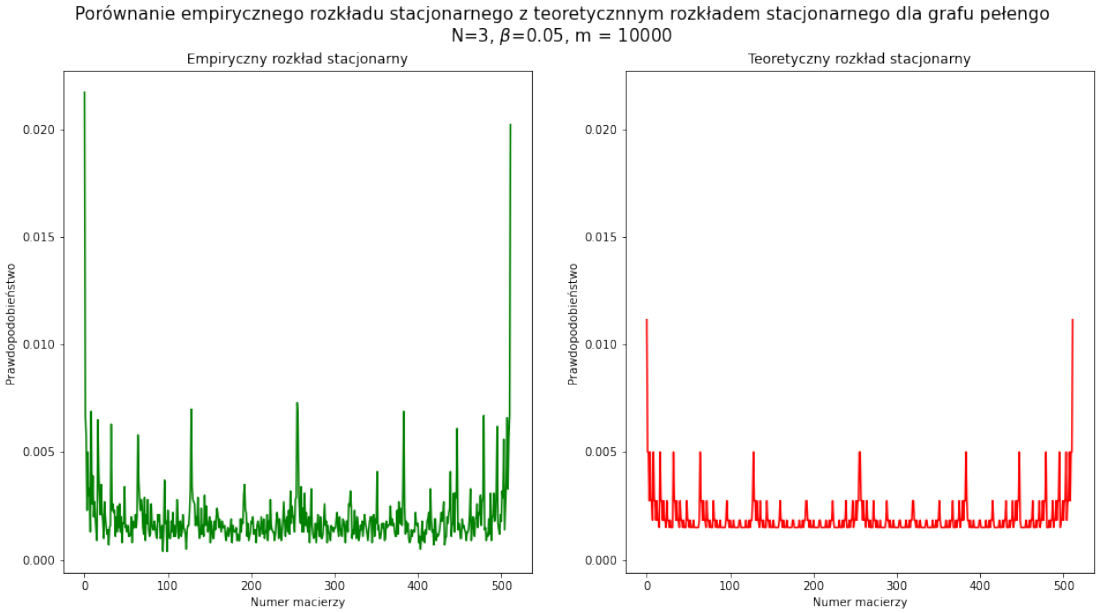
4 Wyniki

W niniejszej sekcji przedstawiamy wykresy, które prezentują działanie algorytmu i pozwalają na analizę własności modelu Isinga na podstawie jego parametrów.

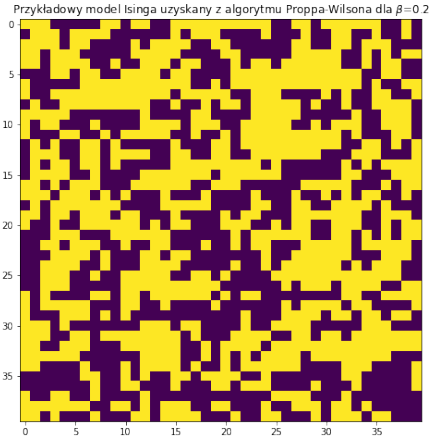


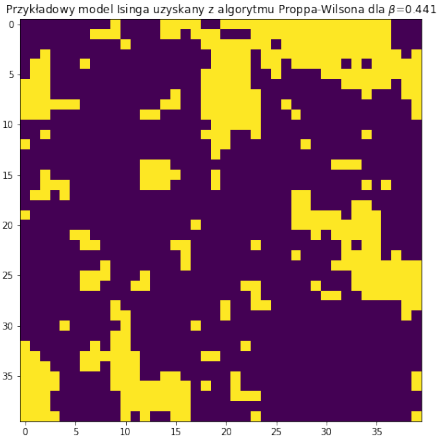
Z powyższego wykresu od razu widać, że wraz ze wzrostem β, czas potrzebny do symulacji łańcucha rośnie wykładniczo. Z teorii wiemy, że od $\beta = 0.441$ czas na wykonanie algorytmu powinien drastycznie wzrosnąć i to też widzimy na wykresie.





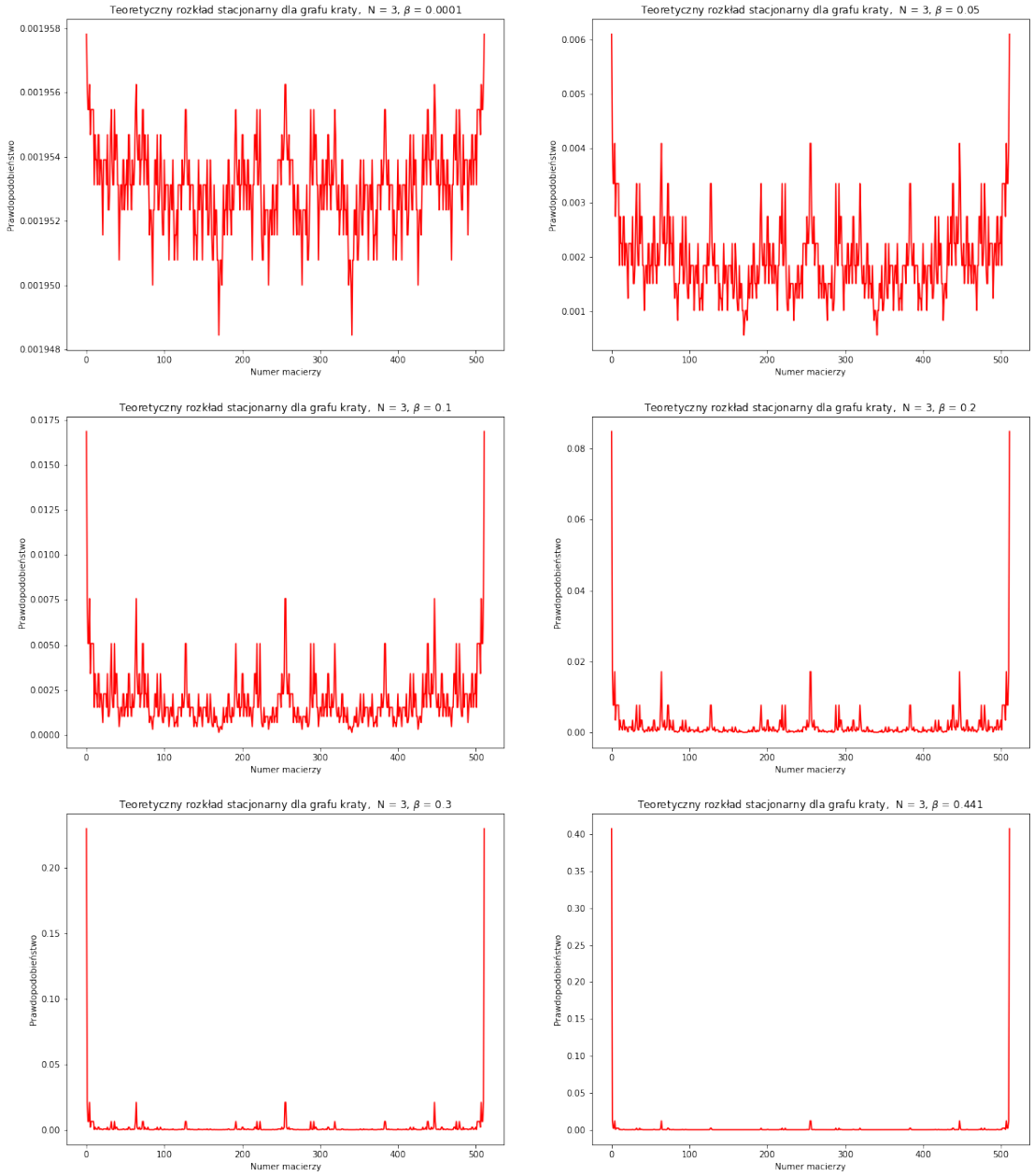
Co prawda celem projektu nie jest znajdywanie dokładnego rozkładu stacjonarnego, tylko możliwość próbkowania z niego, ale chcieliśmy sprawdzić, czy nasz kod rzeczywiście działa. Dla macierzy 3×3 istnieje 512 stanów i wyznaczyliśmy prawdopodobieństwo każdego z nich za pomocą wzoru, wykres po prawej przedstawia te prawdopodobieństwa. Puściliśmy nasz kod 10000 razy i znormalizowaliśmy wyniki występowania łańcucha na końcu algorytmu. Jak widać, rozkłady prawdopodobieństwa mają podobny kształt, więc dobrze zaimplementowaliśmy algorytm.



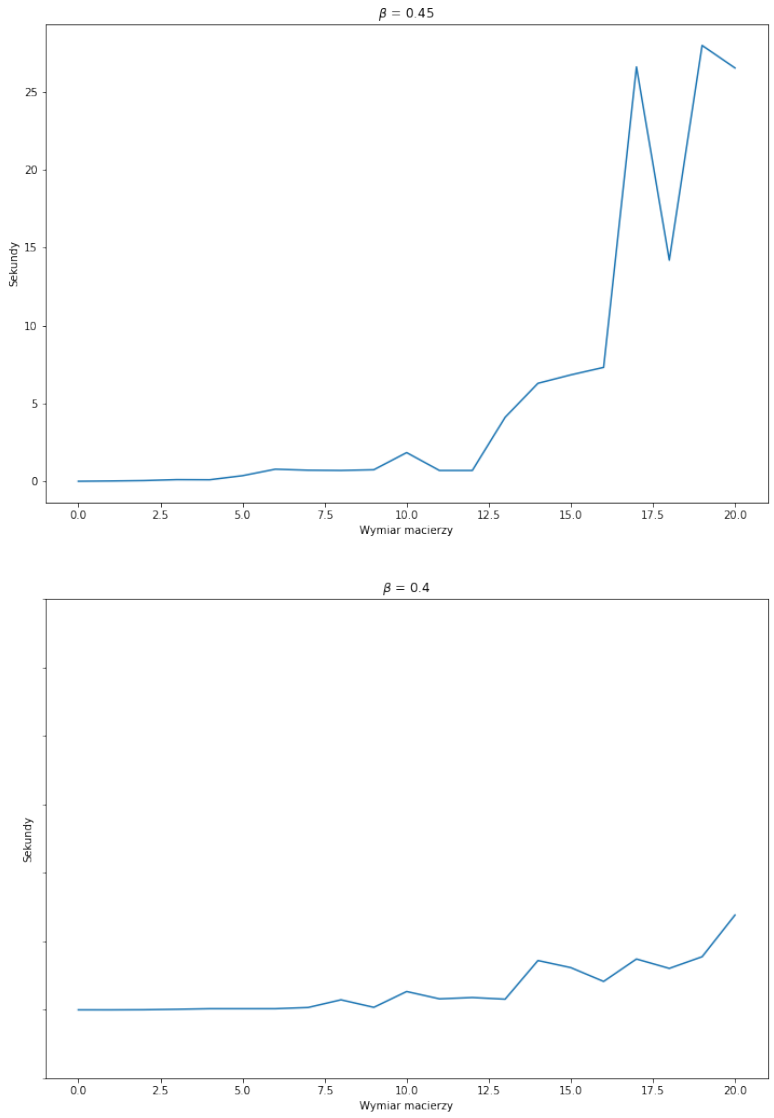


Powyżej przedstawiliśmy przykładowe macierze 20×20, które powstały na końcu algorytmu, dla poszczególnych β. Z fizyki wynika, że dla większych β powinny być większe skupiska jednego spinu, co dobrze obrazują te przykładowe wykresy.

Rozkład stacjonarny w zależności od β



Chcieliśmy też zobaczyć, jaki wpływ ma β na rozkład stacjonarny i sprawdziliśmy to dla macierzy 3×3. Jak widać, wraz ze wzrostem β preferowane są stany ze spinami o takim samym znaku, ponieważ mają mniej energii.



Z teorii wiemy, że dla $\beta > 0.441$ powinny być problemy związane z kompilacją. Dla $\beta = 0.45$ oraz $\beta = 0.4$ zbadaliśmy, jakie macierze będą dłużej się liczyły niż 4 minuty. Dla $\beta = 0.45$, od $N = 16$ czas wykonania rośnie wykładniczo z każdym powiększeniem wymiaru, w przeciwieństwie do przypadku $\beta = 0.4$, gdzie w miarę liniowo zwiększa się czas wykonania. Z tego wynika, że temperatura krytyczna równa $\beta = 0.441$ istnieje, dla $\beta > 0.441$ czas wykonania może być strasznie długi dla większy macierzy, lub algorytm może wcale się nie wykonać.

5 Bibliografia

1 Olle Häggström "Finite Markov Chains and Algorithmic Applications"