

Algorytm Metropolisa

25 kwietnia 2023

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS

VOLUME 21, NUMBER 6

JUNE, 1953

Equation of State Calculations by Fast Computing Machines

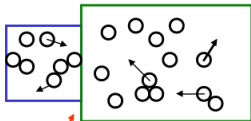
NICHOLAS METROPOLIS, ARIANNA W. ROSENBLUTH, MARSHALL N. ROSENBLUTH, AND AUGUSTA H. TELLER,
Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico

AND

EDWARD TELLER,* *Department of Physics, University of Chicago, Chicago, Illinois*

(Received March 6, 1953)

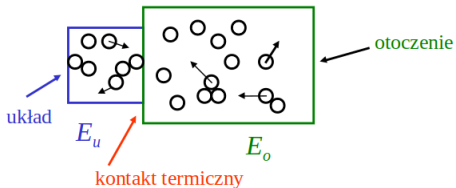
Zachowanie układów o dużej liczbie stopni swobody w równowadze termicznej ze zbiornikiem ciepła

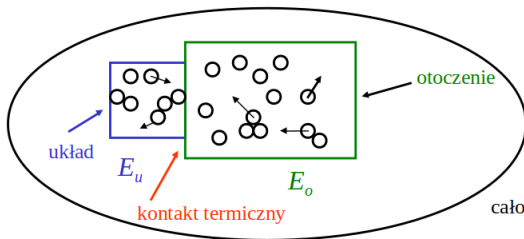


kontakt termiczny

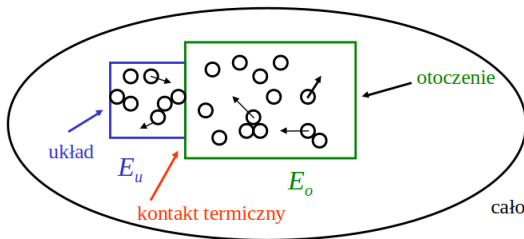
kilka informacji o równowadze termodynamicznej i temperaturze – przyda się dla również dla symulacji transportu ciepła (źródło: F. Reiff Mechanika Statystyczna)

Zachowanie układów o dużej liczbie stopni swobody w równowadze termicznej ze zbiornikiem ciepła



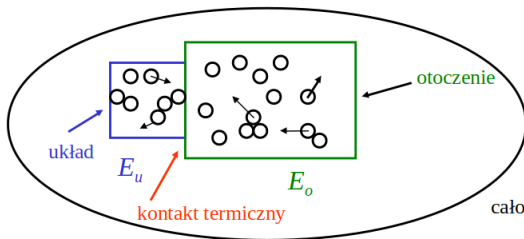


całość izolowana = układ zamknięty



całość izolowana = układ zamknięty

$$E_c = E_u + E_o \text{ (zachowana)}$$

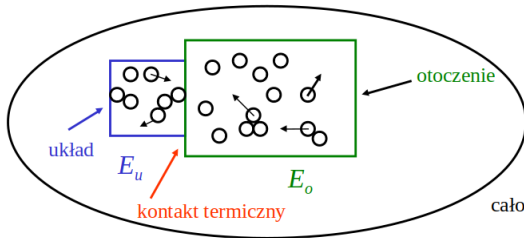


E_c – niezależna od czasu

całość izolowana = układ zamknięty

$$E_c = E_u + E_o \text{ (zachowana)}$$

za F. Reiff
Mechanika Statystyczna



całość izolowana = układ zamknięty

$$E_c = E_u + E_o \text{ (zachowana)}$$

E_c – niezależna od czasu

ale

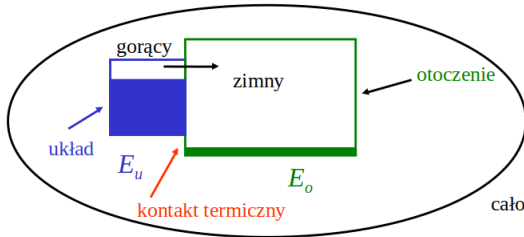
$E_c = E_u(t) + E_o(t)$ – układy wymieniają energię

wymiana energii = w stanie równowagi [równe temperatury zbiorników]
fluktuacje (uśredniające się do zera)

= poza równowagą [różne temperatury]
ukierunkowany transfer ciepła dla wyrównania temperatur
(doprowadzenia do równowagi)

dążenie do równowagi

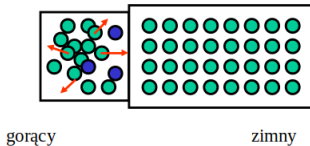
za F. Reiff
Mechanika Statystyczna



całość izolowana = układ zamknięty

$$E_c = E_u + E_o \text{ (zachowana)}$$

przekaz energii między układem „gorącym” i „zimnym”
aż do osiągnięcia równowagi



równowaga: jedna z definicji – stan najbardziej prawdopodobny

Ω liczba stanów mikroskopowych podukładu (stan mikro – położenia i prędkości cząsteczek)

założenie: każdy stan mikroskopowy jest równoprawdopodobny

wtedy: pstwo, że realizowany dany stan makroskopowy = proporcjonalne do liczby stanów mikro odpowiadających danemu stanowi makro

$$P(E_u) = C \Omega(E_u) \Omega'(E_c - E_u)$$

← pstwo, że układ zawiera energię E_u
(że podział energii $E_u, E_o = E_c - E_u$)
(inaczej: że układ w takim stanie makroskopowym, że u ma energię E_u)

mniejszy podukład większy

stan mikroskopowy o minimalnej energii – jeden

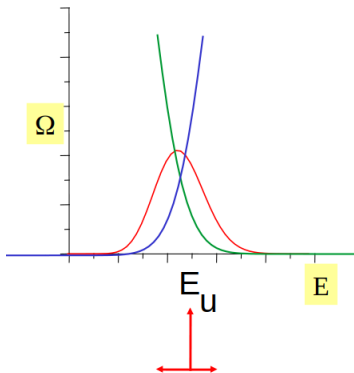


stanów mikro o większej energii – znacznie więcej



$\Omega(E)$ – funkcja silnie rosnąca z E
(oraz liczbą cząstek)

$$P(E_v) = C \Omega(E_v) \Omega'(E_c - E_v)$$



transfer energii (w formie ciepła)
między u a o aż do osiągnięcia równowagi

stan równowagi: maksymalne
prawdopodobieństwo.

Możliwe **fluktuacje** wokół wartości najbardziej prawdopodobnej.

jeśli P_{\max} to również $\log P_{\max}$:

ponižej na tej folii $\log = \ln$

$$E_o = E_c - E_u$$

$$\log(P) = \log(\Omega(E_u)) + \log(\Omega'(E_c - E_u)) + \log(C)$$

w równowadze (stan najbardziej prawdopodobny):

$$\frac{d \log(dP)}{dE_n} = \frac{d \log(\Omega(E_u))}{dE_n} + \frac{d \log(\Omega'(E_c - E_u))}{dE_n} = 0$$

$$\frac{d \log(\Omega(E_u))}{dE_u} + \frac{d \log(\Omega'(E_o))}{dE_u} = 0$$

$$\frac{d \log(\Omega(E_u))}{dE_u} + \frac{d \log(\Omega'(E_o))}{dE_o} \frac{dE_o}{dE_u} = 0$$

w równowadze:

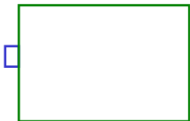
(def. temperature)

$$\frac{d \log(\Omega(E_u))}{dE_u} = \frac{d \log(\Omega'(E_o))}{dE_o} = \beta = \frac{1}{kT}$$

transfer ciepła – napędzany gradientem T
i dążący do jej zrównania

w równowadze:

$$\frac{d \log(\Omega(E_u))}{dE_u} = \frac{d \log(\Omega'(E_o))}{dE_o} = \beta = \frac{1}{kT}$$



układ bardzo mały w porównaniu z **otoczeniem**,
z którym znajduje się w równowadze termicznej

pytanie: jakie jest prawdopodobieństwo, że
układ ma energię E_u : $P(E_u)$?

$$\log(P) = \log(\cancel{\Omega(E_u)}) + \log(\Omega'(E_c - E_u)) + \log(C) \quad E_u \ll E_c, \Omega \ll \Omega'$$

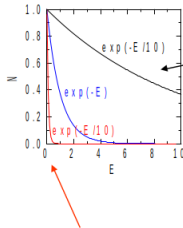
Taylor: $f(x + \Delta x) = f(x) + f'(x)\Delta x + O(\Delta x^2)$

$$\log(\Omega'(E_c - E_u)) = \log(\Omega'(E_c)) - \frac{d \log(\Omega'(E_c))}{dE_c} E_u + O(E_u^2)$$

$$\log(P) = \log(\underset{\nearrow \text{inne}}{C}) + \log(\Omega'(E_c)) - \beta E_u$$

$$P(E_u) = C \exp(-\beta E_u) = C \exp(-E_u/kT) \longleftarrow \text{czynniki Boltzmanna}$$

$$P(E_u) = C \exp(-\beta E_u) = C \exp(-E_u/kT)$$



granica wysokiego T:
układ może znaleźć się z równym
prawdopodobieństwem przechowywać dowolnie
wysoką energię

znalezienie układu w stanie o dużej energii
jest prawdopodobne

niska T- układ będzie przechowywał minimalną
wartość energii

znajdziemy go tylko w stanie o najmniejszej energii



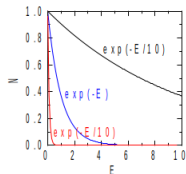
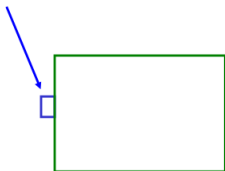
rozkład Boltzmanna: N identycznych nieoddziaływujących układów
średnia liczba układów w stanie o energii E_i

$$\frac{N_i}{N} = \frac{\exp(-E_i/kT)}{Z}$$

$$Z = \sum_j \exp(-E_j/kT) \quad (\text{suma statystyczna})$$

Algorytm Metropolisa – symulacja układu, który fluktuuje termicznie w równowadze z otoczeniem (zbiornikiem ciepła)

kolejne kroki czasowe – zmiany stanu układu
pstwo tego, że w kolejnym kroku pojawi się dany stan zależy od jego energii i T . Ma spełniać rozkład Boltzmanna.



Algorytm Metropolisa

za S.Kooninem

Układ [Funkcja optymalizowana] opisana zbiorem zmiennych
 $X=(x_1, x_2, x_3, \dots, x_N)$ – punkt w wielowymiarowej przestrzeni

chcemy zasymulować fluktuacje termiczne zmiennych,

$$X_1 \rightarrow X_2 \rightarrow X_3 \rightarrow X_4 \rightarrow X_5 \rightarrow$$

tak, żeby układ był w „równowadze” termicznej z otoczeniem o temperaturze T .

prawdopodobieństwo tego, że na „ścieżce” fluktuacji pojawi się stan X
ma wynosić $C \exp(-E(X)/kT) = w(X)$.

Algorytm Metropolisa

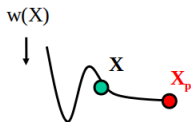


układ jest w stanie X . Do jakiego stanu przejdzie?

wybieramy losowo punkt próbny X_p z pewnego otoczenia punktu X

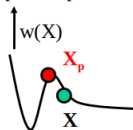
$X_p := X + (\delta x_1, \delta x_2, \dots, \delta x_n) - \delta x_i$ losowane z przedziału $[-d, d]$ z rozkładem równomiernym

możliwości: 1) X_p mniej prawdopodobne



*punkt mniej prawdopodobny
akceptujemy z pstwem $w(X_p)/w(X)$*

2) X_p bardziej prawdopodobne



*zawsze akceptujemy bardziej
prawdopodobny punkt*

liczymy $r = w(X_p)/w(X)$

jeśli $r \geq 1$ [$w(X_p) \geq w(X)$] – akceptujemy punkt próbny $X := X_p$

jeśli $r < 1$ [$w(X_p) < w(X)$] akceptujemy punkt próbny z prawdopodobieństwem r

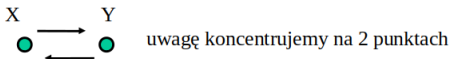
losujemy liczbę losową q z przedziału $[0, 1]$

jeśli $q < r$ – akceptujemy punkt próbny $X := X_p$

jeśli $q \geq r$ – odrzucamy

zobaczyć, że punkty na ścieżce wygenerowanej algorytmem M. istotnie podlegają rozkładowi pstwa w(X):

wyobraźmy sobie, że mamy wielu wędrowców poruszających się zgodnie z algorytmem Metropolisa



$N(X)$ – aktualna liczba wędrowców w punkcie X

zmiana liczby wędrowców w Y w wyniku migracji z i do punktu X

$$\Delta = N(X)P(X \rightarrow Y) - N(Y)P(Y \rightarrow X)$$

$$\Delta = N(Y)P(X \rightarrow Y) \left(\frac{N(X)}{N(Y)} - \frac{P(Y \rightarrow X)}{P(X \rightarrow Y)} \right)$$

w warunkach równowagi (bez zmian w średnim rozkładzie wędrowców $N_r(X)$)

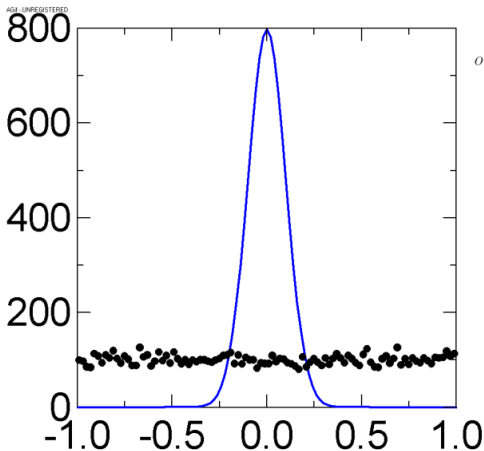
$$\frac{N(X)}{N(Y)} = \frac{N_r(X)}{N_r(Y)} = \frac{P(Y \rightarrow X)}{P(X \rightarrow Y)}$$

równowaga osiągana po odpowiednio
dużej liczbie kroków algorytmu

równowaga w schemacie Metropolis

$N=10\,000$ wędrowców. rozkład $w(x)=C \exp(-50x^2)$

niebieska linia łączy punkty
dane



$$o(x) = N \int_{x-dx/2}^{x+dx/2} w(t) dt \simeq N dx w(x)$$

kropki: liczba
wędrowców w
przedziale $x-dx/2$,
 $x+dx/2$ $dx=0.01$

start: rozkład równomierny

pokaż plik: animacja.ppt

Algorytm Metropolisa

$$\frac{N(\mathbf{X})}{N(\mathbf{Y})} = \frac{N_r(\mathbf{X})}{N_r(\mathbf{Y})} = \frac{P(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X})}{P(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})}$$

pozostaje pokazać, że $N_r(\mathbf{X})$ jest proporcjonalne do $w(\mathbf{X})$

$$P(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) = T(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})A(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})$$

pstwo podjęcia
 próby (wylosowania Y
 jako p.próbnego)

stwo zaakceptowania próby

losujemy punkty próbne z rozkładem równomiernym

$$T(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) = T(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X})$$

$$\text{mamy} \quad \frac{N_r(\mathbf{X})}{N_r(\mathbf{Y})} = \frac{A(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X})}{A(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y})} \longrightarrow$$

2 przypadki: $w(X) > w(Y) : A(Y \rightarrow X) = 1$
 $A(X \rightarrow Y) = w(Y)/w(X)$

$$\frac{N_r(\mathbf{X})}{N_r(\mathbf{Y})} = \frac{w(\mathbf{X})}{w(\mathbf{Y})}$$

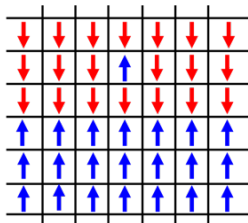
$$w(\mathbf{X}) < w(\mathbf{Y}) : A(\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}) = 1$$

$$A(\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X}) = w(\mathbf{X})/w(\mathbf{Y})$$

co chcieliśmy zobaczyć

Model Isinga

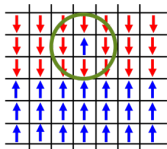
- sieć spinów σ_i , z momentem magnetycznym $m_j = \mu\sigma_j$.
- 2



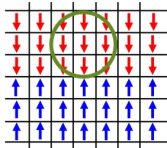
- (rysunek by B. D. Hammel)
- $E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - B\mu \sum_i \sigma_i$ (prim: suma po sąsiadach węzła i)
- J całka wymiany, dla sprzężenia ferro $J > 0$,
 μ moment magnetyczny związany z pojedynczym spinem
 binarna orientacja spinu $\sigma_i = \pm 1$
- okresowe warunki brzegowe

Model Isinga - symulacja algorytmem Metropolis'a

- procedura: losowany spin i



- liczona zmiana energii przy przerzucie spinu



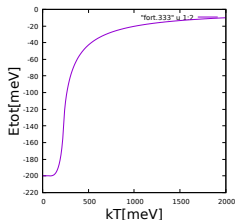
- rysunki spinów: B. D. Hammel,
<https://bdhammel.github.io/2017/06/10/ising-model.html>

- w każdej T wykonuje 25 tysięcy prób przerzutu na każdy spin (losowany spin do obrotu)

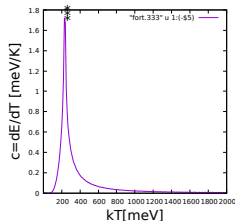
- $E(X) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - B\mu \sum_i \sigma_i$ (prim: suma po sąsiadach węzła i)
- zmiana energii jaka zaszłaby po zmianie orientacji spinu i :
- $\Delta E = 2J\sigma_i \sum_{j'} \sigma_j + 2B\mu\sigma_i$
- $E(Y) = E(X) \exp(-\Delta E/kT)$
- $\frac{w(Y)}{w(X)} = \exp(-\Delta E/kT)$
- Metropolis: jeśli $\Delta E < 0$ albo
wylosowana liczba $q \in [0, 1]$ jest mniejsza od $\exp(-\Delta E/kT)$ przerzuć spin $\sigma_i := -\sigma_i$

Model Isinga - symulacja algorytmem Metropolisisa

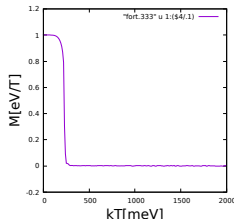
- parametry $B\mu = 0.1$ meV, $J = 100$ meV, siatka 32×32



- energia od temperatury



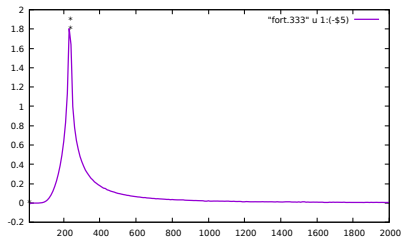
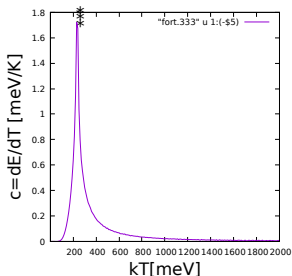
- ciepło właściwe



- magnetyzacja

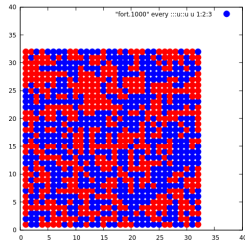
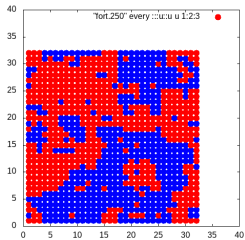
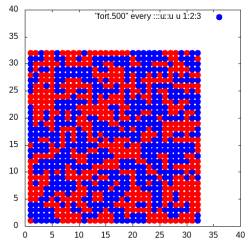
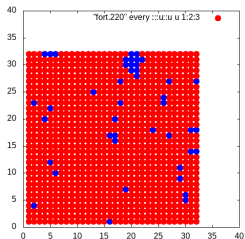
- gwiazdki na rysunku c_v : wynik Onsagera dla $B = 0$ i nieskończonej sieci. temperatura przejścia krytycznego $\frac{kT_c}{J} = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} = 2.269$

Model Isinga - symulacja algorytmem Metropolis'a

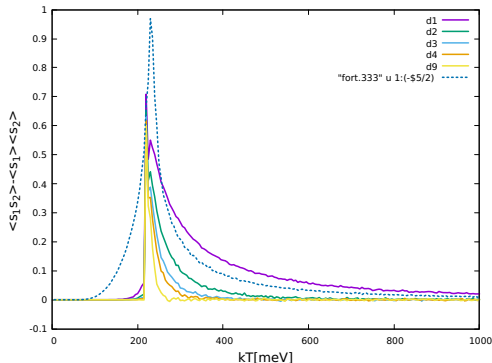


- przejście fazowe a rozmiar siatki. gwiazdki: $kT_c = J \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} = 2.269$, po lewej siatka 32 na 32, po prawej 512 na 512

Model Isinga - symulacja algorytmem Metropolis



Model Isinga - skorelowanie przy przejściu fazowym



- na osi pionowej miara skorelowania: $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$ dla i w środku pudła $\sigma_i = \sigma_{n/2, n/2}$, oraz $\sigma_j = \sigma_{n/2-d, n/2-d}$ na diagonalu (linie ciągłe)
- ciepło właściwe linią przerywaną
- wg teorii Onsagera w okolicach przejścia fazowego zasięg skorelowania ma stawać się nieskończony