

# Metropolis algoritam

Petar Stipanović

pero@pmfst.hr

2021/22

## 1 Metropolis algoritam

- Srednje vrijednosti
- Dijagram toka
- Postupak računanja
- Optimizacija koraka
- Blokiranje
- Vodikov atom
- Numerički rezultati za r
- Grafički prikaz ponašanja
- Z6

# Metropolis algoritam, integrali i srednje vrijednosti

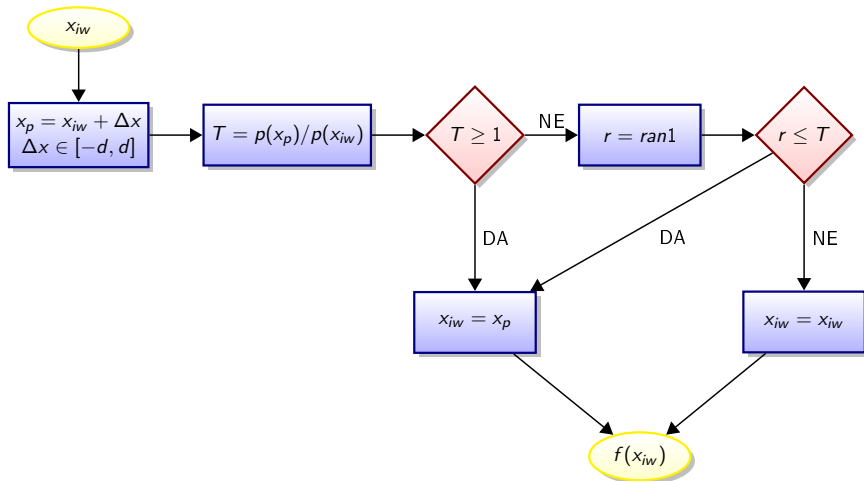
- poseban slučaj postupka značajnog odabira u kojem se neki mogući pokušaji uzorkovanja odbacuju
- koristimo često pri računanju srednjih vrijednosti danih integralom

$$\langle f \rangle = \frac{\int f(x)p(x)dx}{\int p(x)dx} \quad (1)$$

- koristimo značajni odabir kako bismo generirali slučajne položaje  $x$  prema gustoći vjerojatnosti  $p(x)$
- Metropolis algoritam stvara slučajni hod točaka određivanjem vjerojatnosti prijelaza  $T(x_i \rightarrow x_j)$  od jedne točke  $x_i$  do druge točke  $x_j$  tako da raspodjela točaka  $x_0, x_1, x_2, \dots$  konvergira prema  $p(x)$
- oznaka  $x$  u integralu (1) može biti i točka iz  $\mathbb{R}^n$ , brzina, točka iz bilo kojeg prostora u kojem provodimo integraciju
- radi boljeg uzorkovanja prostor integracije prelazimo većim brojem neovisnih šetača

## Dijagram toka Metropolis algoritma

- u svakom koraku  $ik$  (index koraka) za svakog šetača  $iw$  (index walker-a) na položaju  $x[iw] \equiv x_{iw}$  biramo probni položaj  $x_p$  te prijelaz prihvaćamo s vjerojatnošću  $T(x_{iw} \rightarrow x_p)$



# Postupak računanja

- u početku:
  - ▶ šetače rasporedimo nasumično u položaje  $x_{iw}$  gdje je vjerojatnost nalaženja  $p(x_{iw})$  značajna
  - ▶ odaberemo maksimalnu duljinu koraka  $d$
- u svakom koraku za svakog šetača:
  - ▶ bирамо корак насумичне дужине  $\Delta x \in [-d, +d]$
  - ▶ одређујемо пробни положај шетача  $x_p = x_{iw} + \Delta x$  те према Metropolis algoritmu одређујемо хоће ли бити прихваћен  $x_{iw} = x_p$  или ће шетач остати у старом положају  $x_{iw} = x_{iw}$
  - ▶ провјеравамо налази ли се унутар подручја интеграције
  - ▶ ако је, акумулирамо вриједности функције  $f(x_{iw})$  што је најбоље почети тек након неколико првих корака како би се сутав почео понашати према распоdjели  $p(x)$
- усреднјимо акумулиране вриједности по шетаčима, корацима, ...

# Prihvatanje i optimizacija koraka

- u početku simulacije biramo maksimalne duljine koraka (maksimalne promjene koordinata)  $d$
- $d$  nisu nužno iste, ovise o tome kako izgleda  $p(x)$
- postotak prihvaćenih koraka ovisi o maksimalnoj duljini koraka
- maksimalne duljine koraka podešavamo kako bi bilo prihvaćeno oko 50% probnih položaja
- ako je  $d$  prevelik, samo će mali broj probnih koraka biti prihvaćen pa će uzorkovanje od  $p(x)$  biti neefikasno
- ako je  $d$  premalen, velik postotak probnih koraka bit će prihvaćen pa će uzorkovanje od  $p(x)$  opet biti neefikasno
- jedno od jednostavnijih rješenja:
  - ▶ u početku odaberemo  $d$
  - ▶ računamo prihvaćenost tijekom simulacije i provjeravamo ju nakon nekoliko koraka
  - ▶ ako je veća od 50% povećamo maksimalnu duljinu koraka za npr. 5%
  - ▶ ako je manja od 50% smanjimo maksimalnu duljinu koraka za npr. 5%
- na kraju provjerimo i ukupan postotak prihvaćenih koraka

# Blokiranje

- novi položaj određujemo uvijek na osnovu prethodnog pa su dobiveni podaci u nekoj mjeri korelirani
- kako bismo izbjegli utjecaj korelacija na proračun standardne devijacije

$$\sigma_f = \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{n - 1}} \quad (2)$$

i sličnih veličina, podatke ćemo blokirati

- blokiranje provodimo dijeleći cjelokupnu simulaciju na blokove gdje svaki blok sadrži nekoliko (100, 1000, 5000, ...) koraka
- nakon svakog bloka pohranjujemo:
  - ▶ indeks bloka  $ib$
  - ▶  $\langle f \rangle$  - usrednju vrijednost veličine  $f$  koju smo akumulirali od početka cijele simulacije
  - ▶  $\langle f \rangle_b$  - usrednjenu vrijednost veličine  $f$  koju smo akumulirali samo unutar jednog bloka

# Vodikov atom

- valne funkcije: <http://employees.csbsju.edu/hjakubowski/classes/ch123/Quantum/EquationsOrbitalsH.htm>
- srednja udaljenost elektrona od jezgre u stanju  $|nlm\rangle$

$$\langle \hat{r} \rangle = \langle nlm | \hat{r} | nlm \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi_{nlm}^*(\vec{r}) \hat{r} \Psi_{nlm}(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$\langle \hat{r} \rangle_{nlm} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} dz \Psi_{nlm}^*(x, y, z) \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \Psi_{nlm}(x, y, z)$$

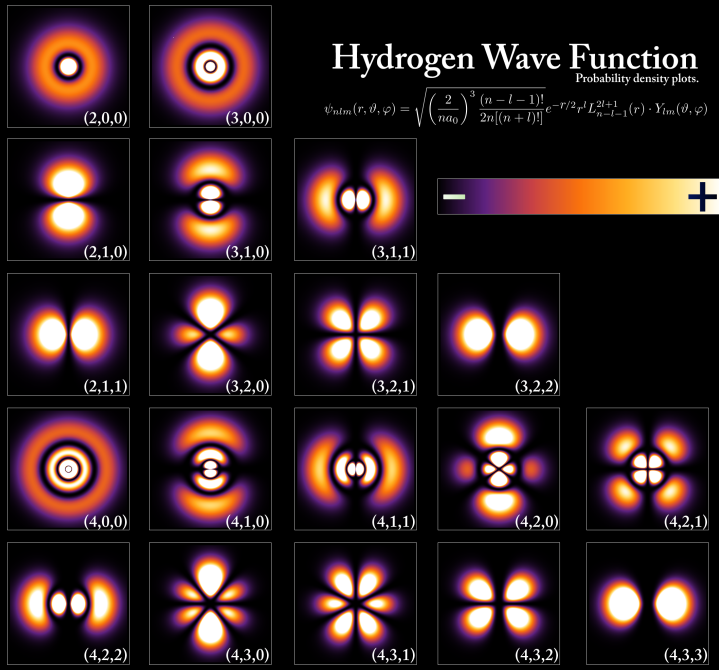
$$\langle \hat{r} \rangle_{nlm} = \int_0^{+\infty} r R_{nl}^2(r) r^2 dr \int_0^\pi \sin \vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} |Y_{lm}(\vartheta, \varphi)|^2 d\varphi$$



# Hydrogen Wave Function

Probability density plots.

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]}} e^{-r/2a_0} r^l L_{n-l-1}^{2l+1}(r) \cdot Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$



## Srednja udaljenost - numerički podaci

- računamo srednju udaljenost elektrona od jezgre u stanju  $|n = 2, l = 1, m = 0\rangle$

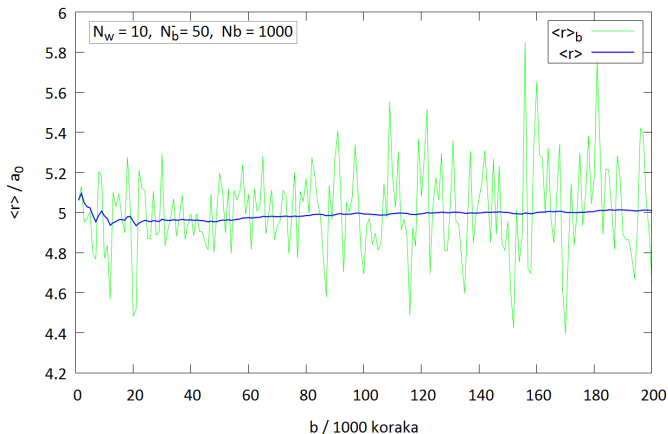
$$\Psi_{210}(x, y, z) = ze^{-\frac{r(x,y,z)}{2}} \quad ; \quad r(x, y, z) = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \quad (3)$$

- kod: "metropolis\_H\_xyz.c"
- rezultati proračuna za početnu razdiobu Nw šetača unutar  $[-7, 7]^3$ ; odbačeno  $N_b^- = 50$  prvih blokova; uzeto N<sub>b</sub> blokova, svaki N<sub>k</sub> koraka:

Nb	Nk	Nw	$\bar{r}/a_0$	prihvatanje
20	100	10	$4.94 \pm 0.05$	50%
200	100	100	$4.987 \pm 0.008$	50%
200	1000	10	$5.01 \pm 0.02$	50%
2000	1000	10	$4.995 \pm 0.007$	50%
200	1000	100	$4.996 \pm 0.005$	50%

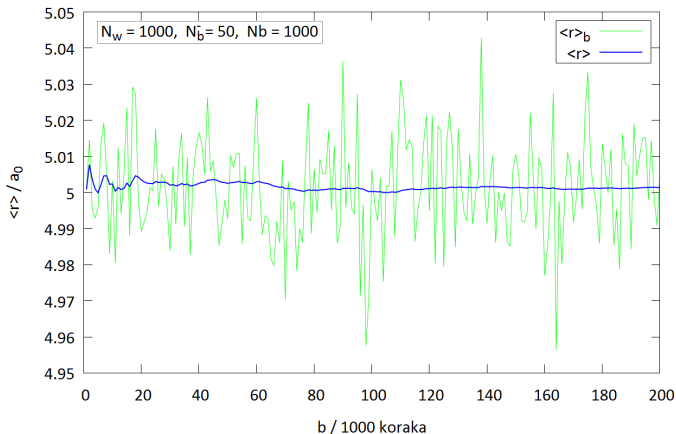
## Srednja udaljenost - grafički prikaz

- srednje udaljenosti dobivene u pojedinom bloku  $\langle r \rangle_b$  osciliraju oko ukupne srednje vrijednosti  $\langle r \rangle$  koja konvergira prema analitički dobivenoj vrijednosti  $5a_0$



## Srednja udaljenost - grafički prikaz

- srednje udaljenosti dobivene u pojedinom bloku  $\langle r \rangle_b$  osciliraju oko ukupne srednje vrijednosti  $\langle r \rangle$  koja konvergira prema analitički dobivenoj vrijednosti  $5a_0$



- Dovršite priloženi kod.
- Provjerite njegovu ispravnost producirajući prethodna rješenja.
- Uzorkujte položaje elektrona u vodikovom stanju  $|n = 3, l = 0, m = 0\rangle$ :
  - ▶ provjerite ispravnost uzorkovanja crtanjem položaja elektrona;
  - ▶ procijenite  $\langle r \rangle$ .
- Priložite kodove, skripte i grafove.