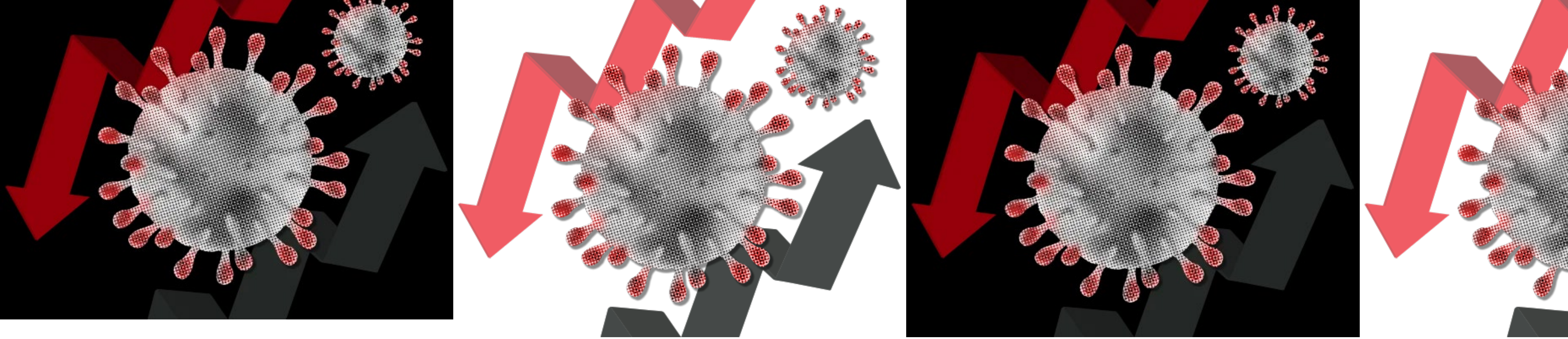
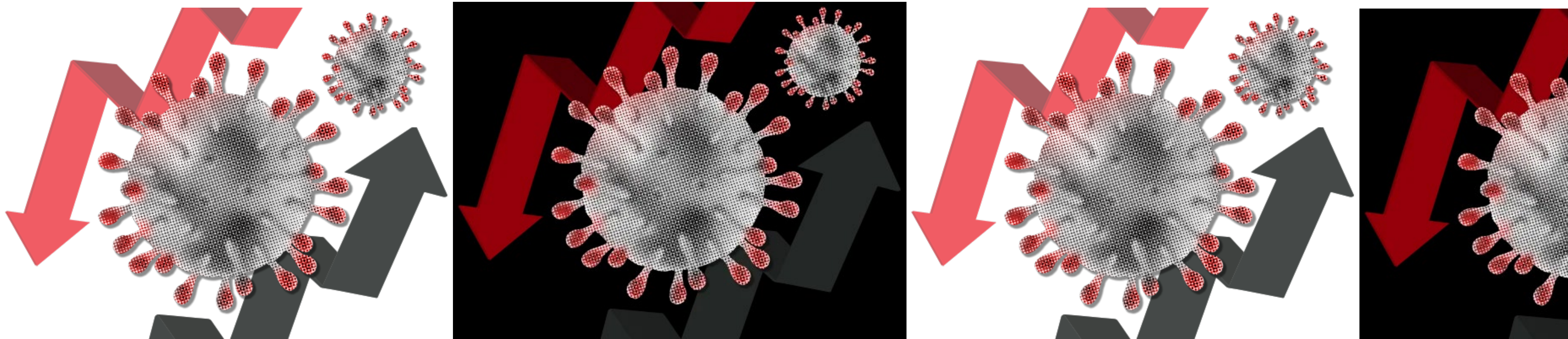


Лекция10-семинар

Алгоритм Метрополиса, Модель Изинга, задача 9



а) Детально обсудить происхождение условия детального баланса и алгоритм Метрополиса.

Рассмотреть одномерную модель Изинга. Как численно найти намагниченность методом Монте-Карло?

*Сделать численный расчёт и сравнить результат с точным решением этой модели (+1 балл за работу в семестре).

б) Пропагатор пуассоновского случайного процесса удовлетворяет уравнению:

$$\partial_t T(n,t\,|\,n',t') = \gamma T(n-1,t\,|\,n',t') - \gamma T(n,t\,|\,n',t').$$

Решить уравнение. Показать, что $\langle n \rangle = \gamma t$.

в) Обсудить метод динамического Монте-Карло. Как численно построить соответствующий случайный процесс по известным вероятностям переходов в единицу времени?

Алгоритм Метрополиса

- Представим себе, что у нас есть функция распределения случайных величин P(x). Хочется построить алгоритм, который давал бы последовательность случайных величин, соответствующих данному распределению.
- Для одномерных функций распределения есть удобные алгоритмы такого типа. Алгоритм Метрополиса не нужен.
- Но если x имеет большую размерность, тогда алгоритм Метрополиса и его аналоги становятся крайне эффективными.
- Зачем это нужно? Решаем задачу стат-физики, где все подчиняется распределению Гиббса… Сколько степеней свободы в стат-физике? Много, да…

https://en.wikipedia.org/wiki/Metropolis%E2%80%93Hastings_algorithm

Формальное описание алгоритма.

- Цель алгоритма Метрополиса состоит в том, чтобы создать набор состояний в соответствии с желаемым распределением P (x).
- Для этого алгоритм генерит марковский процесс, который асимптотически достигает стационарное распределение π(x), такое что π(x) = P (x).
- К марковской цепи предъявляется требование, чтобы π(x) было единственным ее стационарным распределением. Обычно в приложениях требуют дополнительно, чтобы не возникало замкнутых циклов в системе. Система была эргодична.
- На марковскую цепь накладывается условие, чтобы π(x) было не просто стационарным распределением, но удовлетворяло условию так называемого «детального баланса», где W(x,x’) – вероятность перехода в единицу времени:

$$\boxed{W(x'|x)\pi(x) = W(x|x')\pi(x'),} \Rightarrow \boxed{\frac{W(x'|x)}{W(x|x')} = \frac{\pi(x')}{\pi(x)},}$$

- Алгоритм, создающий марковскую цепь, позволяет построить правильную вероятность перехода.
- Идея состоит в том, чтобы разделить переход от *x* к *x’* на два **<u>случайных</u>** подэтапа: “предложение” и “принятие-отклонение”:

$$W(x'\,|x) = g(x'\,|x)A(x',x).$$

- Здесь g(x’|x) – условная вероятность, “предложения” перейти из x’ в x. Как найти эту условную вероятность будет сказано ниже.
- A(x’,x) – условная вероятность принять «предложение», т.е. перейти таки из x в x’.
- g(x’|x) выбирается из соображений удобства. Например, чтобы это было простое распределение, даваемое простой аналитической формулой, например, часто это пропагатор гауссовского случайного процесса…
- Тогда A(x’,x) – можно найти из соотношений:

$$\frac{W(x'\,|x)}{W(x\,|x')} = \frac{\pi(x')}{\pi(x)}, \qquad \Longrightarrow \qquad \boxed{\frac{g(x'\,|x)A(x',x)}{g(x\,|x')A(x,x')} = \frac{\pi(x')}{\pi(x)},}$$

$$\boxed{\frac{g(x' \mid x)A(x', x)}{g(x \mid x')A(x, x')} = \frac{\pi(x')}{\pi(x)},}$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{A(x', x) = \min\left(1, \frac{P(x')}{P(x)} \frac{g(x \mid x')}{g(x' \mid x)}\right).}$$

Алгоритм «для компьютера»

- Выбрать произвольное начальное состояние x_0 в начальный момент времени.
- Метод итераций. Пусть в момент t состояние x. Найдем состояние в следующий момент времени.

1) Сгенерить на компьютере случайное состояние x’, отвечающее вероятностному распределению g(x’|x).

2) Вычислить вероятность выбора A(x’,x) по формуле из предыдущего слайда.

3) Сделать выбор: перейти в состояние x’ или остаться в x.

а)Для этого, используя генератор случайных чисел, равномерно распределённых на [0,1], сгенерим случайное число u.

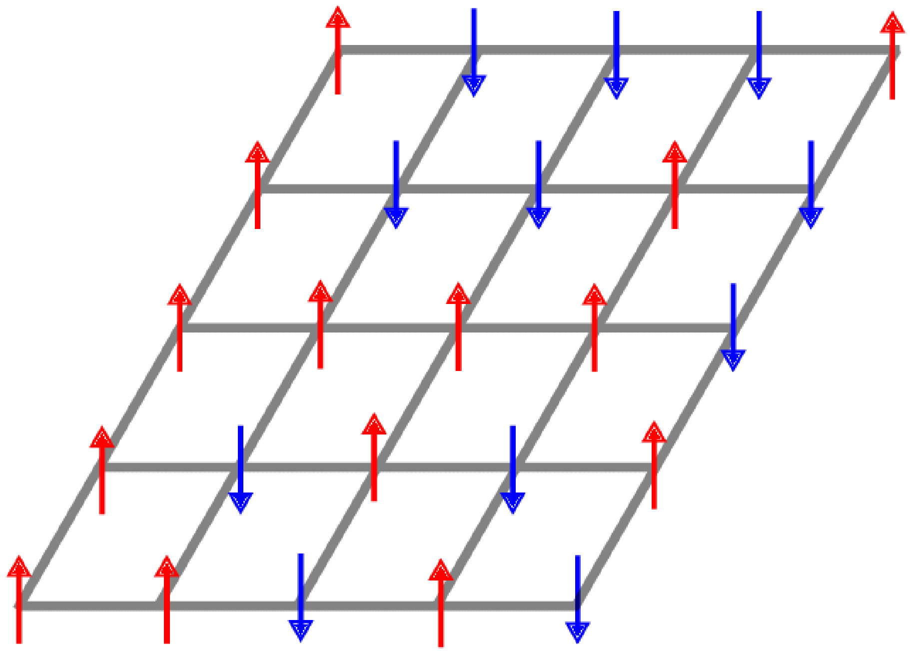
б) Если $u \leq A(x', x)$, перейдем в x’, если нет, то останемся в x.

Так созданная последовательность случайных чисел будет соответствовать распределению P(x). Конечно, желательно удалить часть начальных состояний, проредить последовательность, чтобы исключить корреляции… Но это уже технические детали.

Алгоритм Метрополиса. Модель Изинга

- **МФТИ**
- **Динамические системы и методы математического моделирования**
- **Программа курса Динамические системы и методы математического моделирования**
-
- **Лектор: Притыкин Дмитрий Аркадьевич**
- Его презентации (для интересующихся) можно скачать с сайта МФТИ. Например:
- https://mipt.ru/upload/%D0%9B%D0%B5%D0%BA%D1%86%D0%B8%D1%8F%2010%20%D0%90%D0%BB%D0%B3%D0%BE%D1%80%D0%B8%D1%82%D0%BC%20%D0%9C%D0%B5%D1%82%D1%80%D0%BE%D0%BF%D0%BE%D0%BB%D0%B8%D1%81%D0%B0.%20%D0%9C%D0%BE%D0%B4%D0%B5%D0%BB%D0%B8%20%D0%98%D0%B7%D0%B8%D0%BD%D0%B3%D0%B0%20%D0%B8%20%D0%9F%D0%BE%D1%82%D1%82%D1%81%D0%B0.pdf

Алгоритм Метрополиса. Модель Изинга



$J_{ij} > 0$ -- ферромагнитное взаимодействие

$J_{ij} < 0$ -- антиферромагнитное взаимодействие

$$H(\sigma) = -\sum_{\langle i\ ,j\rangle} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \mu\sum_j h_j\sigma_j, \quad \sigma_i = \pm 1,$$

$\langle i\ ,j\rangle$ -- означает суммирование по всем парам разных идексов,

но один раз по каждой паре!

Вы решали одномерную модель Изинга, изучая Статистическую Физику...

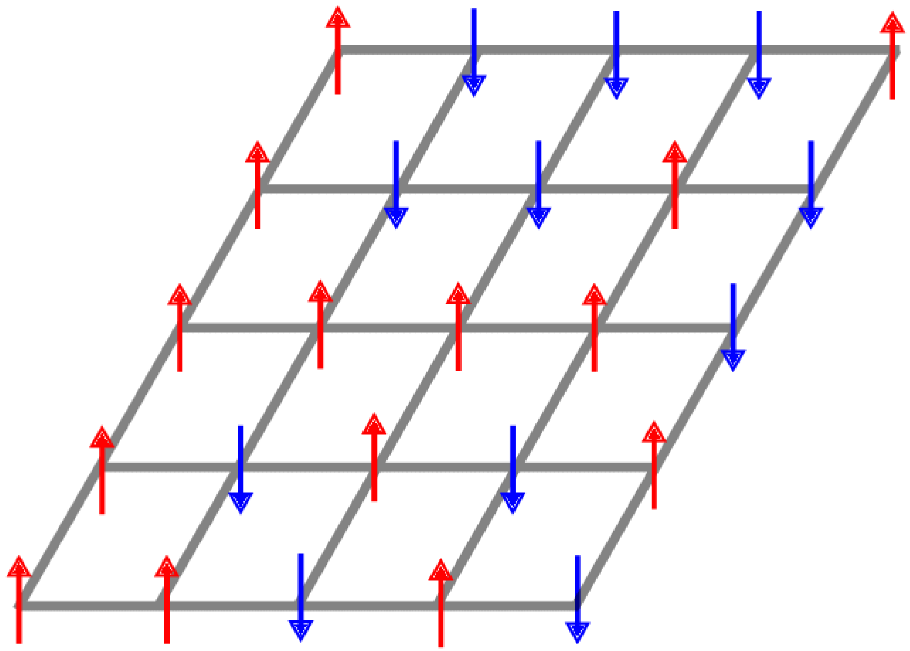
Алгоритм Метрополиса. Модель Изинга

$$P_\beta(\sigma) = \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z_\beta}, \quad \beta = 1/T.$$

$$Z_\beta = \sum_\sigma e^{-\beta H(\sigma)}$$

Наблюдаемая
физическая величина
(observable)

$$\langle O \rangle_\beta = \sum_\sigma O(\sigma) P_\beta(\sigma)$$



$$H(\sigma) = -\sum_{\langle i\ ,j \rangle} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \mu\sum_j h_j\sigma_j, \quad \sigma_i = \pm 1,$$

$\langle i\ ,j \rangle$ -- означает суммирование по всем парам разных идексов,

но один раз по каждой паре!

Вы решали одномерную модель Изинга...

Алгорит Метрополиса. Модель Изинга.

- Переворачивая спины в узлах можно перейти в любое состояние.
- В алгоритме Метрополиса нужно выбрать g (это можно сделать произвольно, но учитывая, что результирующая цепь маркова должна удовлетворять всем требованиям).

$$W(\sigma'|\sigma) = g(\sigma'|\sigma)A(\sigma',\sigma).$$

Пусть $g(\sigma'|\sigma) = \dfrac{1}{N}$, N -- число узлов.

Алгоритм Метрополиса. Модель Изинга.

$$W(\sigma'|\sigma) = g(\sigma'|\sigma)A(\sigma',\sigma).$$

Пусть $g(\sigma'|\sigma) = \dfrac{1}{N}$, N -- число узлов.

$$A(\sigma',\sigma) = \min\left(1, \frac{P_\beta(\sigma')}{P_\beta(\sigma)}\right), \quad P_\beta(\sigma) = \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z_\beta}, \quad \beta = 1/T.$$

$$A(\sigma',\sigma)=\min\left(1,\frac{P_\beta(\sigma')}{P_\beta(\sigma)}\right)=$$

$$=\min\left(1,\frac{\frac{1}{Z}\exp\left(-\beta E_{\sigma'}\right)}{\frac{1}{Z}\exp\left(-\beta E_{\sigma}\right)}\right)=\min\left(1,\exp\left(-\beta\left(E_{\sigma'}-E_{\sigma}\right)\right)\right).$$

Итак, Алгоритм для Модели Изинга

1.Выбрать новый узел решетки согласно распределению $g(\mu,\nu)=\frac{1}{N}$. Так как g=const, выбрать один из узлов, используя равномерное распределение случайных чисел…
2.Посчитать энергию всей системы. Перевернуть спин.
3.Если энергия с после переворота спина стала меньше, спин оставить перевернутым.
4.Если же энергия стала больше, то оставить спин перевернутым с вероятностью $\exp\left(-\beta\left(E_\nu - E_\mu\right)\right)$.
5. Повторить все снова…

Технические детали

Если же энергия стала больше, то оставить спин перевернутым с вероятностью $\mathrm{p} = \exp\left(-\beta\left(E_{\nu} - E_{\mu}\right)\right)$ означает: генерацию одного случайного числа *u* из равномерного распределения [0,1]. Если u<p, то оставляем спин перевернутым, если 1>u>p, то отказываемся от переворота спина и оставляем все как было…

Прога на питоне:

https://rajeshrinet.github.io/blog/2014/ising-model/

Что дальше делать с это Марковской цепью из спиновых состояний? Сгенирили мы достаточно длинную цепь и чего…

Что дальше делать с это Марковской цепью из спиновых состояний? Сгенирили мы достаточно длинную цепь и чего…

- Мы ведь знаем состояние каждого узла, волновую функцию, на каждом шаге марковской цепи. Можно на каждом шаге посчитать намагниченность, энергию, другие наблюдаемые… Далее усреднить по всей марковской цепи – это будет средняя намагниченность, средняя энергия…
- http://mattbierbaum.github.io/ising.js/

Термодинамические величины нужно вычислять только когда система пришла в состояние равновесия. При большом числе опытов среднее значение физической величины O, удобно считать как:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{n} \sum_{step} O_{step}, \text{ где } O_{step} \text{ -- значение наблюдаемой на шаге марковской цепи.}$$

$$\langle O \rangle = \frac{1}{n}\sum_{step} O_{step},$$ где O_{step} -- значение наблюдаемой на шаге "step",

$n -$ число шагов марковской цепи.

$$\langle m \rangle = \frac{1}{n}\sum_{step} m_{step}, \; m_{step} = \frac{1}{N}\sum_{i} \sigma_i -$$ средняя намагниченность одного узла.

- Обратите внимание, что при усреднении нигде явно не вылезают Гиббсовские весовые множители! Они учтены при построении марковской цепи! Состояния с большими весами марковская цепь посещает чаще, чем состояния с малыми весами.
- Шаги марковской цепи можно и нужно воспринимать как время… Случайные перевороты спинов в марковской цепи -- результат действия на систему случайных сил со стороны термостата. Можно и нужно искать флуктуации!

- Обратите внимание, что при усреднении нигде явно не вылезают Гиббсовские весовые множители! Они учтены при построении марковской цепи! Состояния с большими весами марковская цепь посещает чаще, чем состояния с малыми весами.
- Шаги марковской цепи можно и нужно воспринимать как время… Случайные перевороты спинов в марковской цепи -- результат действия на систему случайных сил со стороны термостата. Можно и нужно искать флуктуации!

$$H = -J \sum_{i,j,k=1}^{N} (S_{i-1,j}S_{i,j} + S_{i,j}S_{i+1,j} + S_{i,j-1}S_{i,j} + S_{i,j}S_{i,j+1} + S_{i-1,k}S_{i,k} + S_{i,k}S_{i+1,k} + S_{i,k-1}S_{i,k}$$

$$+ S_{i,k}S_{i,k+1} + S_{j-1,k}S_{j,k} + S_{j,k}S_{j+1,k} + S_{j,k}S_{j,k-1} + S_{j,k}S_{j,k+1}) - \boldsymbol{H}\sum_{\boldsymbol{i}}^{\boldsymbol{N}} \boldsymbol{s_i} \,. \tag{1}$$

$$\chi = J\frac{\langle m^2\rangle - \langle m\rangle^2}{T}, \;\; \langle\ldots\rangle = \frac{1}{n}\sum_{steps}(\ldots)_{steps}.$$

https://sci-hub.si/10.1088/1742-6596/630/1/012057

- Есть в задании вопрос, как с помощью алгоритма Метрополиса искать свободную энергию… Этот вопрос для самых-самых. Он необязателен в связи с коронавирусом. Прямо так сходу найти свободную энергию (стат-сумму) из марковской цепи нельзя. Придется делать термодинамическое интегрирование… Энергию мы найти можем, а где взять энтропию?

Задача 9 из задания. Часть 2. Пропагатор Пуассоновского случайного процесса.

$$\partial_t T(n,t\,|\,n',t') = \gamma T(n-1,t\,|\,n',t') - \gamma T(n,t\,|\,n',t').$$

Будем искать решение, используя дискретное преобразование Фурье:

$$G(k,t,t') = \sum_{n=-\infty}^{\infty} T(n,t\,|\,n',t') \exp\left(ik(n-n')\right).$$

Обычно функцию G называют производящей функцией.

$$\partial_t G(k,t,t') = \gamma\left[e^{ik}-1\right]G(k,t,t').$$

Решаем уравнение на производящую функцию

$$\partial_t G(k,t,t') = \gamma\left[e^{ik} - 1\right] G(k,t,t').$$

Пропагатор удовлетворяет условию:

$$T(n,t\,|\,n',t-0) = \delta_{n,n'} \quad \Longrightarrow \quad G(k,t,t) = 1.$$

Решение дифференциального уравнения
с таким начальным условием:

$$G(k,t,t) = \exp\Big(\gamma(t-t')(e^{ik} - 1)\Big).$$

Раскладываем характеристическую функцию в ряд Тейлора

$$G(k,t,t) = \exp\left(\gamma(t-t')(e^{ik}-1)\right) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{ikn}\,\frac{\gamma^n (t-t')^n}{n!}\,\mathrm{e}^{-\gamma(t-t')} =$$

$$= \sum_{n=n'}^{\infty} e^{ik(n-n')}\,\frac{\gamma^n (t-t')^{n-n'}}{(n-n')!}\,\mathrm{e}^{-\gamma(t-t')} \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} T(n,t\,|\,n',t')\exp\left(ik(n-n')\right).$$

$$\boxed{T(n,t\,|\,n',t') = \begin{cases} \dfrac{\gamma^n (t-t')^{n-n'}}{(n-n')!}\,\mathrm{e}^{-\gamma(t-t')}, n \ge n'. \\ 0, n < n' \end{cases}}$$

- Пуассоновский процесс однороден во времени.
- Он также однороден в пространстве, в том смысле, что пропагатор зависит только от разности *n-n’*.

$$T(n,t\,|\,n',t')=\begin{cases}\dfrac{\gamma^{n}(t-t')^{n-n'}}{(n-n')!}\mathrm{e}^{-\gamma(t-t')}, n\ge n'.\\ 0, n<n'\end{cases}$$

«Стандартное» распределение Пуассоновского процесса – частный случай пропагатора…

$$P(n,t)=\begin{cases}\dfrac{\gamma t^{n}}{n!}\mathrm{e}^{-\gamma t}, n\ge 0.\\ 0, n<0\end{cases}$$

- Пуассоновский процесс однороден во времени.
- Он также однороден в пространстве, в том смысле, что пропагатор зависит только от разности *n-n'*.

«Стандартное» распределение Пуассоновского процесса – частный случай пропагатора…

$$P(n,t)=\begin{cases}\dfrac{\gamma t^{n}}{n!}\mathrm{e}^{-\gamma t}, n\geq 0.\\ 0, n<0\end{cases}$$

Математическое ожидание

$$\langle n\rangle=\sum_{n} nP(n,t)=\gamma t.$$

Обсудим кинетическое уравнение пуассоновского процесса

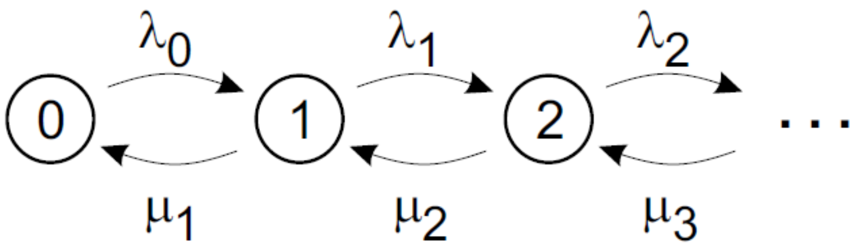
$$\partial_t P(n,t) = \gamma P(n-1,t) - \gamma P(n,t).$$

В общем случае, дискретный случайный марковский процесс удовлетворяет ур. Чемпена-Колмогорова:

$$\partial_t P(n,t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[W(n \mid m,t) P(m,t) - W(m \mid n,t) P(n,t) \right].$$

В случае пуассоновского процесса отличен от нуля
процесс «прихода» с n-1 на n
процесс «ухода» с n на n+1.
Переходов с n на n-1 нет!!!
Следствие такой асимметрии -- у Пуассоновского процесса нет стационарного решения.

Пуассоновский процесс – частный случай марковских процессов типа Birth-Death.
https://en.wikipedia.org/wiki/Birth%E2%80%93death_process
Очень хороший обзор:
https://www.netlab.tkk.fi/opetus/s383143/kalvot/E_bdpros.pdf



Transition rates

$$q_{i,j} = \begin{cases} \lambda_i & \text{when} \quad j = i+1 \\ \mu_i & \text{if} \quad j = i-1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

probability of birth in interval Δt is $\lambda_i \Delta t$
probability of death in interval Δt is $\mu_i \Delta t$
when the system is in state i

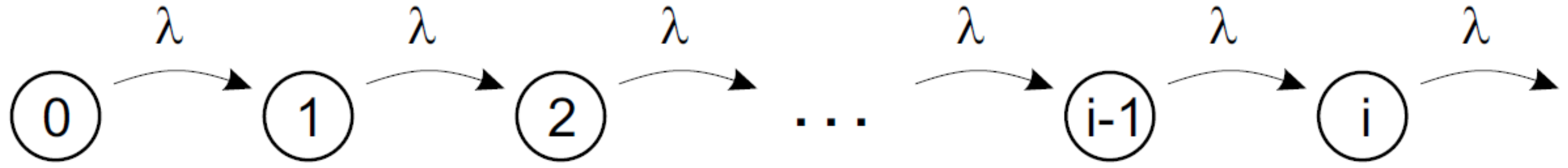
$$\boxed{\frac{d}{dt}\boldsymbol{\pi}(t) = \boldsymbol{\pi}(t) \cdot \mathbf{Q}}$$

where

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} -\lambda_0 & \lambda_0 & 0 & \dots & \dots \\ \mu_1 & -(\lambda_1 + \mu_1) & \lambda_1 & 0 & \dots \\ 0 & \mu_2 & -(\lambda_2 + \mu_2) & \lambda_2 & 0 \\ \vdots & 0 & \mu_3 & -(\lambda_3 + \mu_3) & \lambda_3 \\ \vdots & \vdots & 0 & \mu_4 & -(\lambda_4 + \mu_4) \end{pmatrix}$$

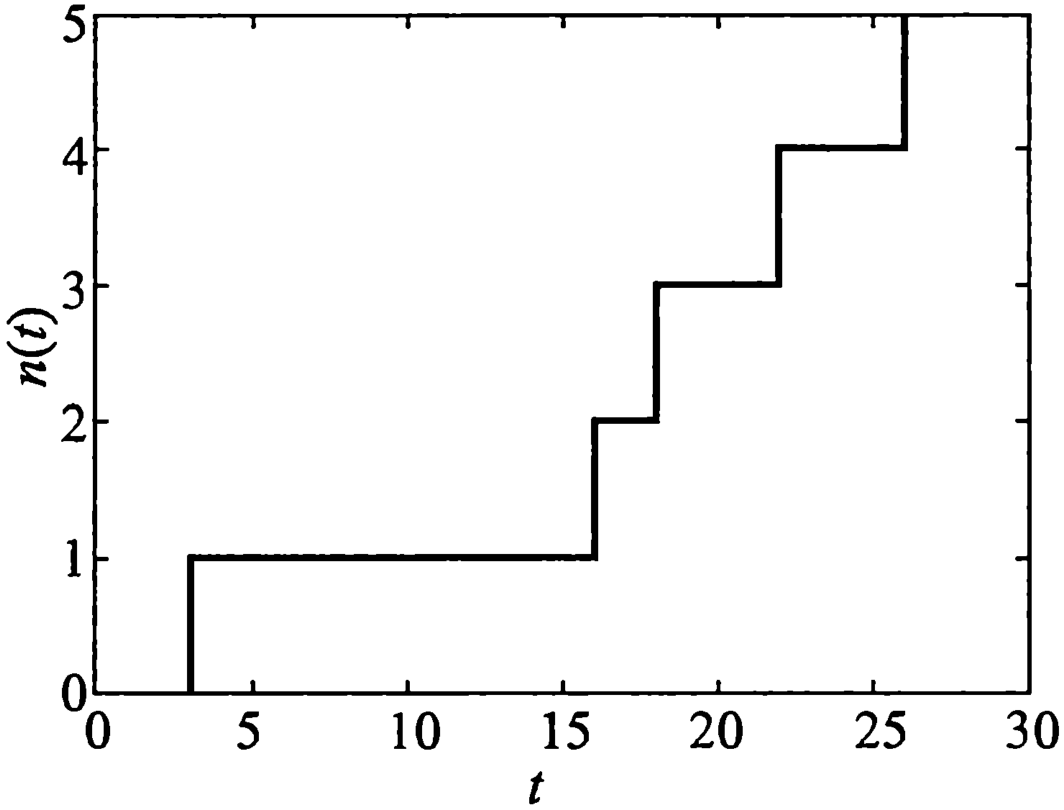
Example 2. Pure birth process (Poisson process)

Пуассоновский процесс на языке диаграмм (здесь роль γ играет λ).



$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\pi_i(t) = -\lambda\pi_i(t) + \lambda\pi_{i-1}(t) & i > 0 \\ \frac{d}{dt}\pi_0(t) = -\lambda\pi_0(t) & \Rightarrow \quad \pi_0(t) = e^{-\lambda t} \end{cases}$$

Осталось обсудить последний вопрос, каким алгоритмом можно сконструировать на компьютере случайный процесс, если известны вероятности переходов… Динамический Монте-Карло.



Осталось обсудить последний вопрос, каким алгоритмом можно сконструировать на компьютере случайный процесс, если известны вероятности переходов… Динамический Монте-Карло.

$n(t)$ – пуассоновский случайный процесс. Пусть в момент t дискретная пуассоновская случайная величина равна $n(t)=N$ – это некое целое число. Чтобы найти $n(t+dt)=N'$, необходимо сгенерить случайное число *u* из равномерного распределения [0,1]. Далее, если $u<\gamma dt$, то $N'=N+1$; если $u>\gamma dt$, то $N'=N$. Почему так, γdt – вероятность перехода за время dt в состояние $N+1$.

Х.-П. Бройер, Ф. Петруччионе

ТЕОРИЯ ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

1.5.2. Распределение времени ожидания и выборочные траектории

Спасибо за внимание!