

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za *matematiko in fiziko*



10. naloga Metropolisov algoritem

MIHA SRDINŠEK

Povzetek

I. MOLEKULARNA VERIŽNICA

Imamo verigo sestavljeno iz 17 kroglic, ki je napeta med dvema koncema. Pri tem se lahko vsak členek nahaja na 19 nivojih. Energijo, ki jo sistem plača, da se nahaja na nekem nivoju, opisuje enačba

$$E = \sum_{i=1}^N \alpha h_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (h_{i+1} - h_i)^2, \quad (1)$$

kjer kaznujemo prevelike razdalje z drugim členom, ki je vedno pozitiven in hkrati preferiramo nižje nivoje s prvim členom, ki je vedno negativen. α je neka poljubna neznana konstanta, ki ji bomo večino časa privzeli vrednost 1, h_i pa je nivo na katerem se nahaja i -ti členek.

Zanima nas kako se bo uredil tak sistem, če želimo minimizirati energijo, pri tem pa želimo upoštevati verjetnost, da se sistem nahaja pri neki energiji, iz statistične fizike $e^{-E/k_b T}$. Vprašanje je kako upoštevati takšno verjetnostno porazdelitev. Ta problem nam reši matropolisov algoritem, ki je sestavljen iz teh preprostih korakov:

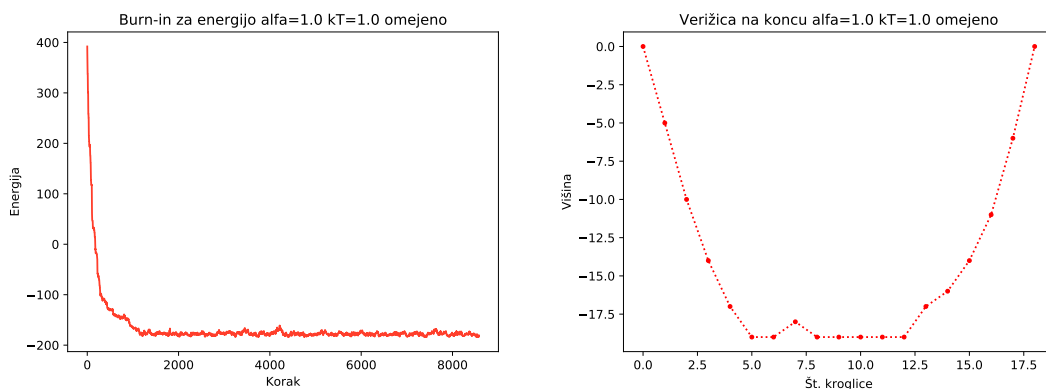
1. Izžrebamo začetno porazdelitev. Torej vsakemu členku enakomerno naključno izžrebamo nivo na recimo intervalu $[0, -19]$. Označimo jo z X .
2. Sedaj izžrebamo novo porazdelitev, na podlagi porazdelitve iz točke 1. Označimo jo z Y .
3. Določimo ali ohranimo novo porazdelitev Y , ali ohranimo staro porazdelitev X na podlagi zahtevane porazdelitve. V našem primeru velja

$$\rho = \frac{P(Y)}{X} = \frac{e^{-E_X/k_b T}}{e^{-E_Y/k_b T}} = e^{-\Delta E/k_b T}. \quad (2)$$

Ta pogoj sedaj upoštevamo z žrebanjem naključnega števila na intervalu $U[0, 1]$ in preverimo, če je manjši od ρ , ali večji. V preimru, da je manjši ali enak kot ρ , novo porazdelitev sprejmemo, v primeru da ni, pa jo zavrnamo.

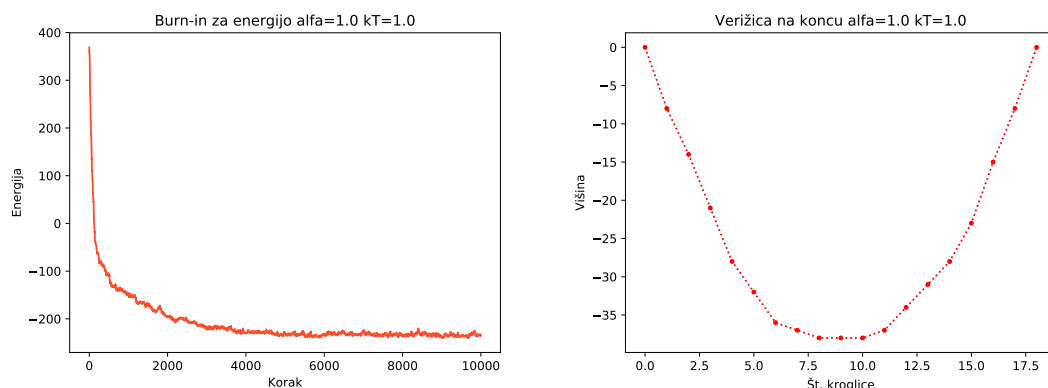
4. Ponovimo postopek od koraka 2. dalje.

V našem primeru novo porazdelitev žrebamo tako, da izžrebamo naključni člen in nato izžrebamo, ali naj ta člen premaknemo gor ali dol. Na tak način dobimo spodnji sliki 1, pri čemer je končna energija okoli -164 .



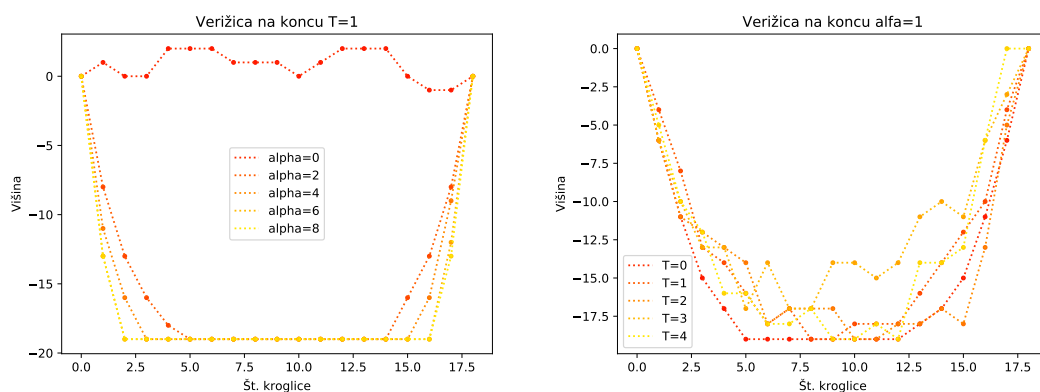
Slika 1: Leva slika prikazuje kako se s koraki zmanjšuje energija. Desna slika prikazuje, kako na koncu izgleda naša verižnica.

Igramo se še naprej in pogledamo, kaj se zgodi, če nimamo omejitve glede globine, ohranimo, pa začetni žreb med 19-imi nivoji. Rezultat tekšnega poskusa vidimo na sliki 2. Vidimo, da je bil burn-in malo počasnejši in da verižnica naravno zasede dosti nižje točke. Neskončno nizkih točk si ne more privoščiti, ker bi to preveč povečalo drugi člen v enačbi za energijo.



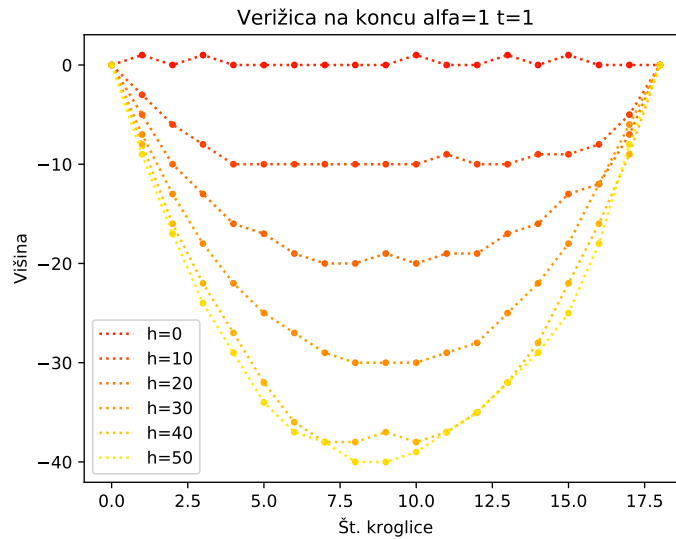
Slika 2: Leva slika prikazuje kako se s koraki zmanjšuje energija. Desna slika prikazuje, kako na koncu izgleda naša verižnica.

Očitno se s spreminjanjem raznih tovrstnih pravil, da spremeniti marsikatero karakteristiko naše rešitve, zato si pogledamo, kako je oblika verižnice odvisna od spreminjanja temperature in parametra α . To je prikazano na sliki 3.



Slika 3: Leva slika prikazuje kako se s koraki zmanjšuje energija. Desna slika prikazuje, kako na koncu izgleda naša verižnica.

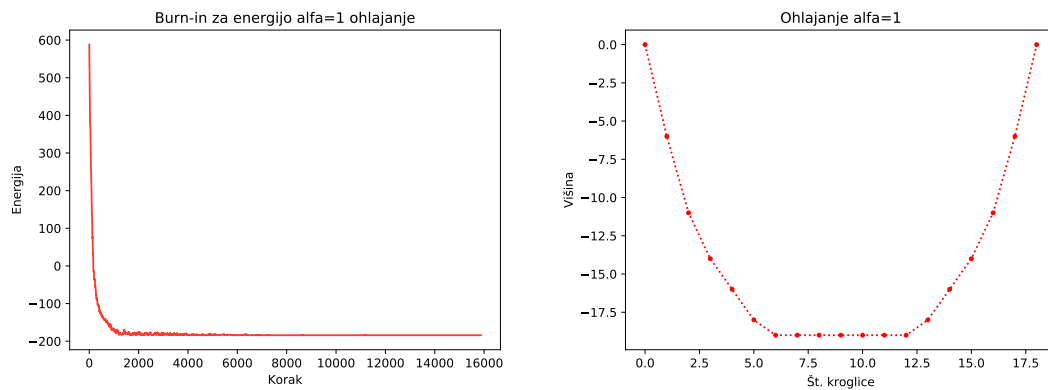
Na sliki 3 desno vidimo, da z energijo rešitev postaja vse bolj nejasna, tako kot bi si lahko intuitivno predstavljali v naravi. Temperatura torej odloča o tem kako stabilna oz. kinetična bo naša rešitev. Na sliki 3 levo pa vidimo, kakšen vpliv ima na obliko verižnice parameter α . Če tega parametra ni, se bo verižnica enostavno nahajala na enaki višini - takšna rešitev je namreč fizikalno ekvivalentna verižnici v sistemu brez sile težnosti. Z povečevanjem α pa se verižnica želi pomakniti vse bolj navzdol, kar je zopet ekvivalentno povečevanju gravitacijske konstante v sistemu. Glede na to, da smo že videli, kaj se zgodi, če ne zahtevamo, da ostaja največ 19 možnih nivojev, lahko predpostavimo, da je odvisnost od te omejitve enostavno premikanje teh tal, ki jih lahko opazimo predvsem na sliki 3 levo v smeri spreminjanja naše omejitve h . Dokaz tega vidimo na sliki 4, kjer smo spreminjali to omejitev in pri tem tudi žrebali začetno postavitev na širšem intervalu h .



Slika 4: Slika prikazuje kako na koncu algoritma izgleda verižnica, če spreminjamo omejitve najnižjega nivoja.

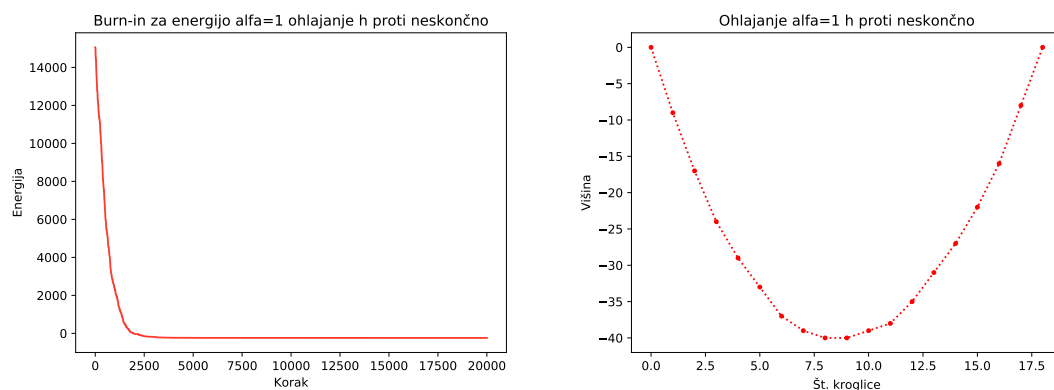
Na sliki 4 nas še posebej impresionira oblika verižnice pri omejitvi $h = 30$, saj izgleda izredno gladka in zatorej realna. Čisto možno, da je to zgolj naključje.

Naslednji iziv, ki si ga postavimo, je simulacija počasnega ohlajanja. Kot že ime sporoča, gre za to, da sistemu znižujemo temperaturo vsakič, ko se vsaj delno umiri, ter nadeljujemo optimiziranje tam ker smo s prejšnjo temperaturo končali. Na tak način dobimo prav konstantne rešitve, kot je to prikazano na slikah 5, kjer končna energija znaša $E = -184$.



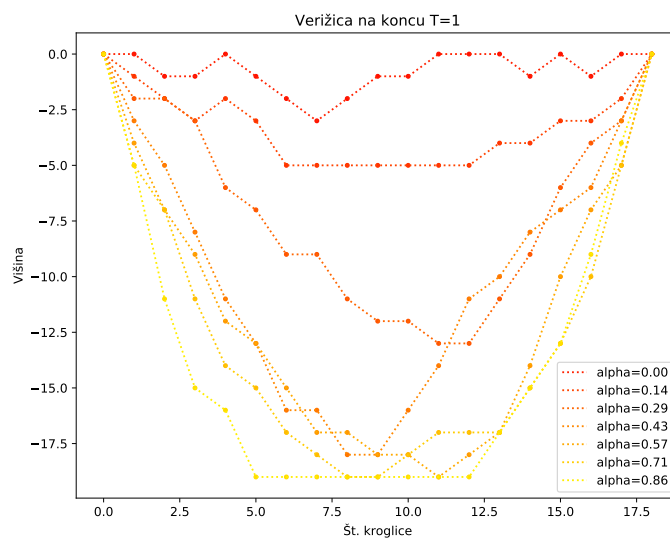
Slika 5: leva slika prikazuje kako se s koraki zmanjšuje energija. Desna slika prikazuje, kako na koncu izgleda naša verižnica. Končna energija je konstanta $E = -184$.

Kot nas je zanimalo že poprej, tudi zdaj preverimo, kako bi izgledala končna rešitev pri sistemu ohlajanja, če sistem ne omejimo s številom nivojev na $h = 19$, ampak ga sprostimo. Dobimo rešitev prikazano na sliki 6, ki ima konstantno temperaturo $E = -240$. To je torej bolj ugoden sistem, zato lahko h razumemo kot omejevanje sistema, ki sistemu onemogoči, da si be nahajal pri najnižji temperaturi.



Slika 6: Leva slika prikazuje kako se s koraki zmanjšuje energija. Desna slika prikazuje, kako na koncu izgleda naša verižnica. Končna energija je konstanta $E = -240$.

Še ena zanimivost se pojavi, če si pogledamo racinalne vrednosti parametra α , zato si pogledjmo še to na sliki 7. Mislim, da smo s tem kar dobro spoznali obnašanje takšne molekularne verižnice.



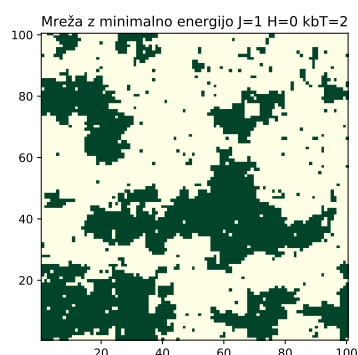
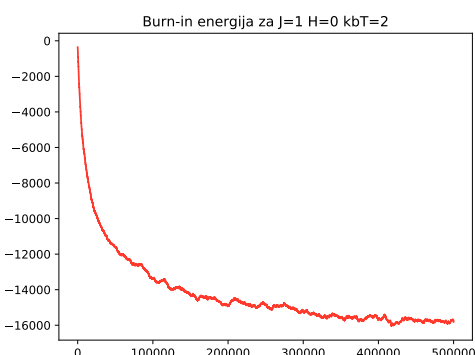
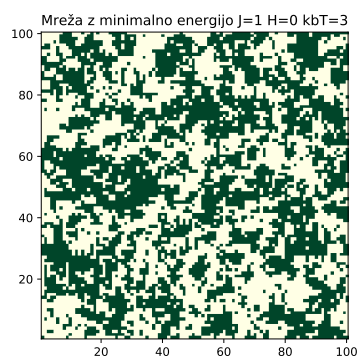
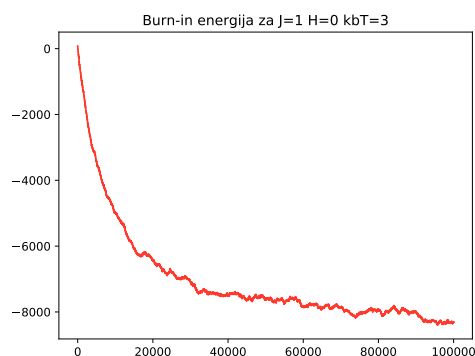
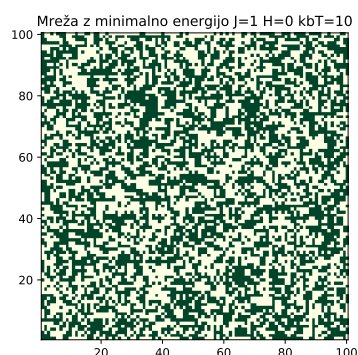
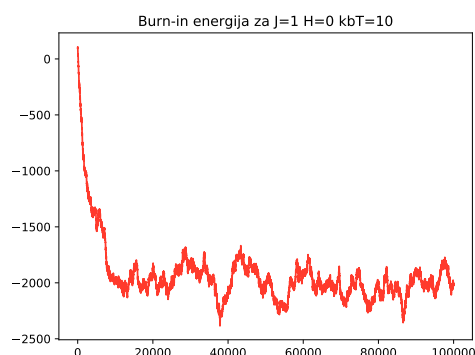
Slika 7: Slika prikazuje kako na koncu algoritma izgleda verižnica, če α zasede vrednosti na intervalu $(0,1)$.

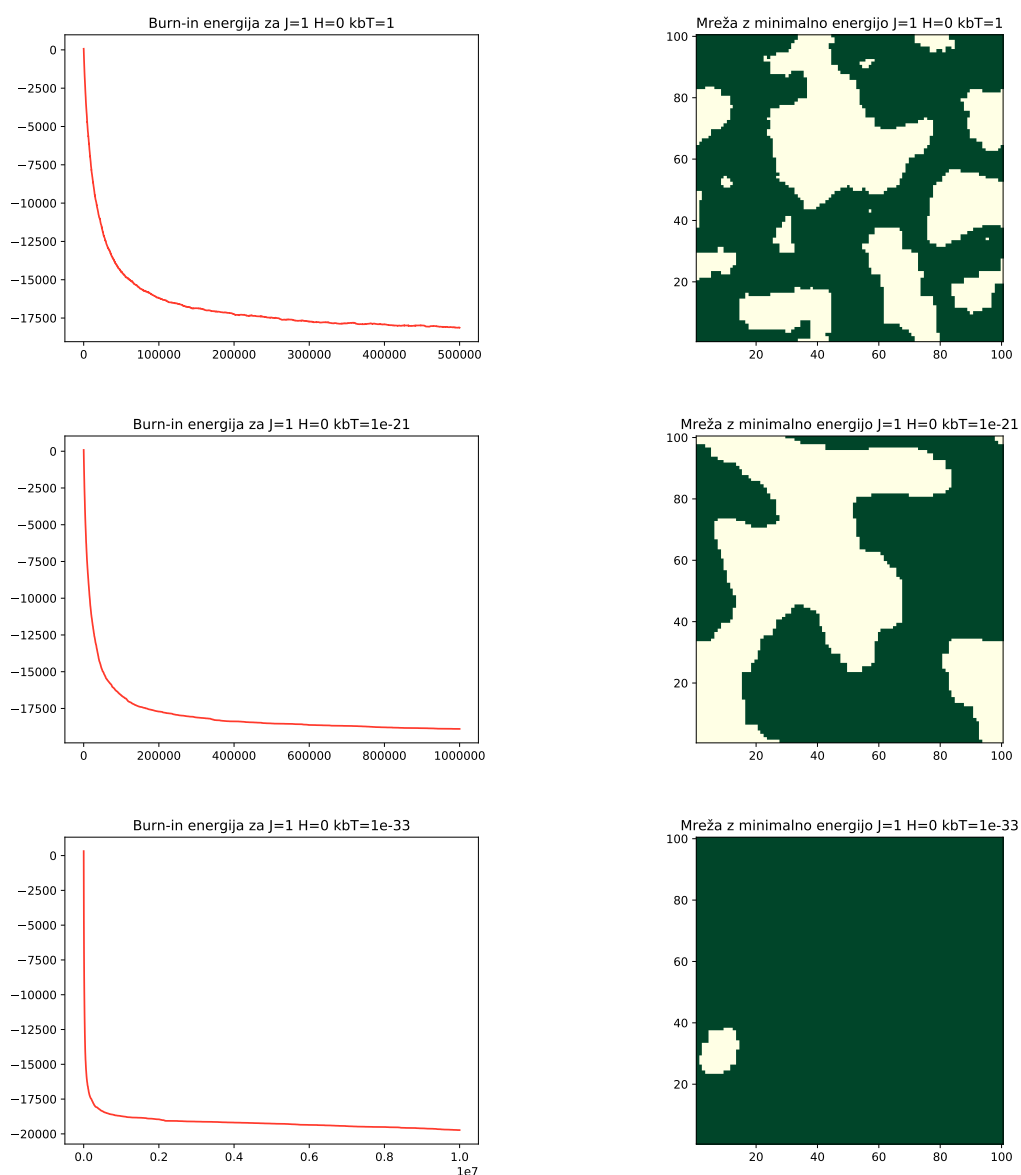
II. ISINGOV MODEL

Zelo podoben model prejšnjemu modelu, je Isingov model. Kjer imamo dvodimenzijsko mrežo delcev s spini gor ali dol. Po prejšnji analogiji, smo torej 19 nivojev zamenali z zgolj dvema. Reševanje bo za začetek popolnoma identično reševanju prejšnje naloge, le energija, ki jo bomo računali bo drugačna

$$E = - \sum_{i,j}^{\text{sosedi}} J S_i S_j - H \sum_{i=1}^N S_i, \quad (3)$$

pri čemer je J neka interakcijska konstanta (ki je v končni fazi povezana s tem o kakšni vrsti magneta govorimo), H pa jakost magnetnega polja. Pri tem uvedemo periodične robne pogoje za vsako vrstico in stolpec. Ta preprosti algoritem zelo hitro zapišemo in dobimo rešitve kot so prikazane na slikah

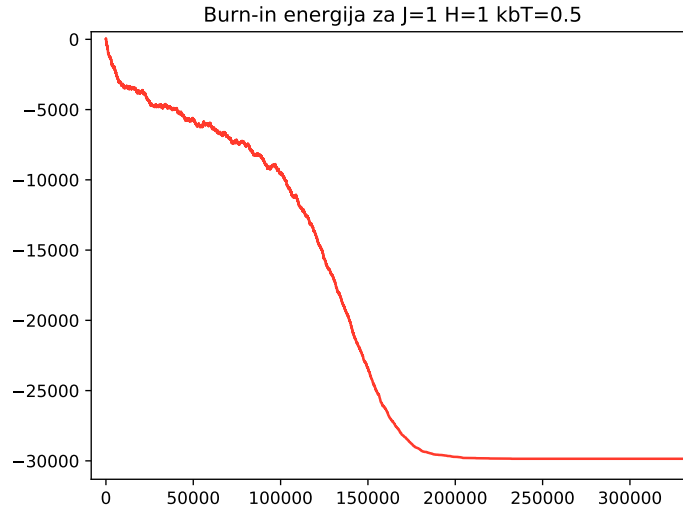




Slika 8: (

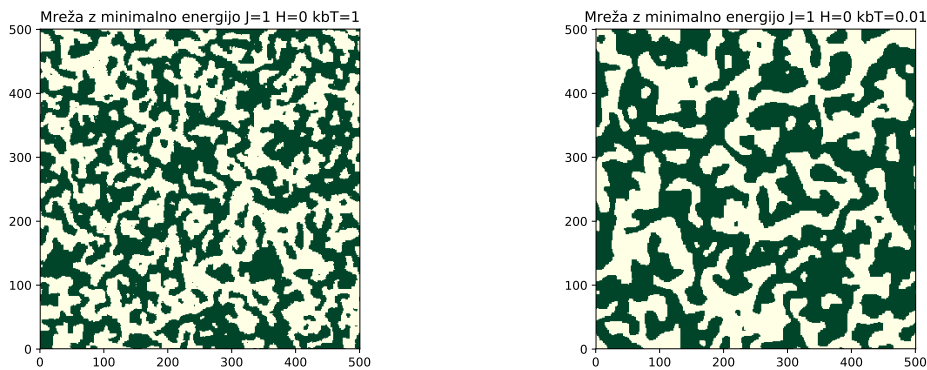
Slike prikazujejo mrežo spinov pri različnih temperaturah. Prikazano je "ohlajanje", in zraven pripadajoče krivulje spreminjanja energije. Temno zelena predstavlja spine gor, svetlo zelena pa spine dol.)

Če vklopimo magnetno polje dosti hitreje dosežemo stanje, kjer je celotna mreža po faznem prehodu v enem spinskem stanju, med tem ko vidimo a primeru iz slike 8 vidimo, da je to brez polja takole na roke skoraj nemogoče doseči. Dobimo pa otoke kakršne predvidi tudi teorija. Preden se spustimo v opazovane raznih lastnosti takšnega sistema, kot so recimo magetizacija, si poglejmo rezultate ohlajanja še v takem sistemu. Kako se spreminja energija vidimo na sliki 9, med tem ko mreže nisem risal, saj je pač rešitev trivialna - vsi spini so obrnjeni v eno smer.



Slika 9: Slika prikazuje kako se pri procesi simuliranega ohlajanja spreminja energija sistema.

Takole na hitro pa si pogledjmo še rešitve za večje mreže 500x500. Rezultate lahko vidimo na sliki 10.

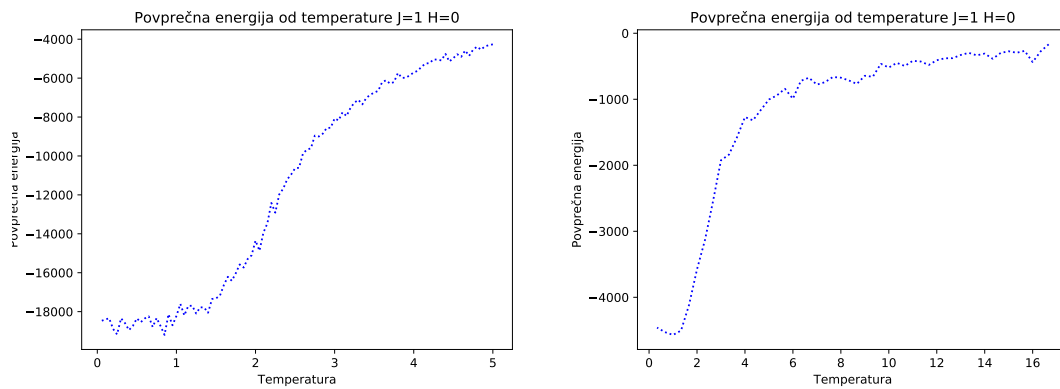


Slika 10: Sliki prikazujeta ravnovesno stanje pri danih energijah za mrežo spinov velikosti 500x500.

Po vsem tem opazovanju mrež, si želimo pogledati še razne termodinamične lastnosti take mreže. Zanima nas odvisnost povprečne energije, magnetizacije, specifične prevodnosti in spinske sumbscetibilnosti od temperature blizu faznega prehoda. Omenjene količine bomo izračunali kot

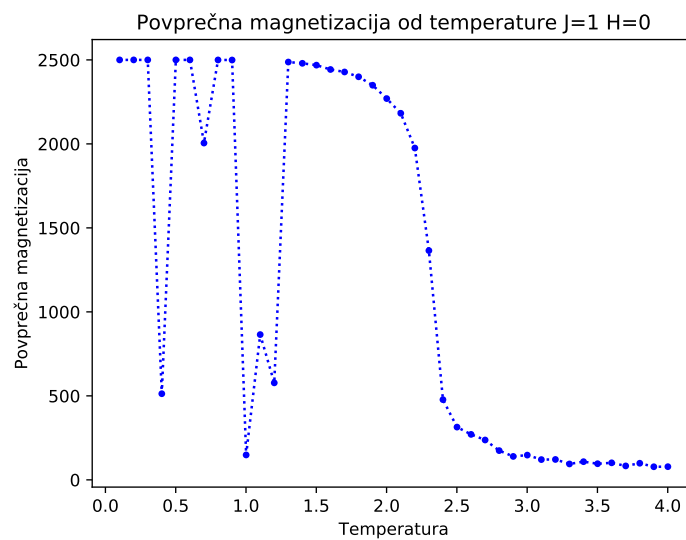
$$\chi = \frac{\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2}{Nk_b T} \quad c = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{Nk_b T^2}, \quad (4)$$

pri čemer je $\langle S \rangle$ megnatizacija, torej povprečna vsota po vseh spinih v mreži, ki jih je N . Za vse te količine imamo iz teorije že poznane odvisnosti od temperature, zato si jih želimo izrisati. Na slikah 11 si lahko pogledmao povprečno energijo.



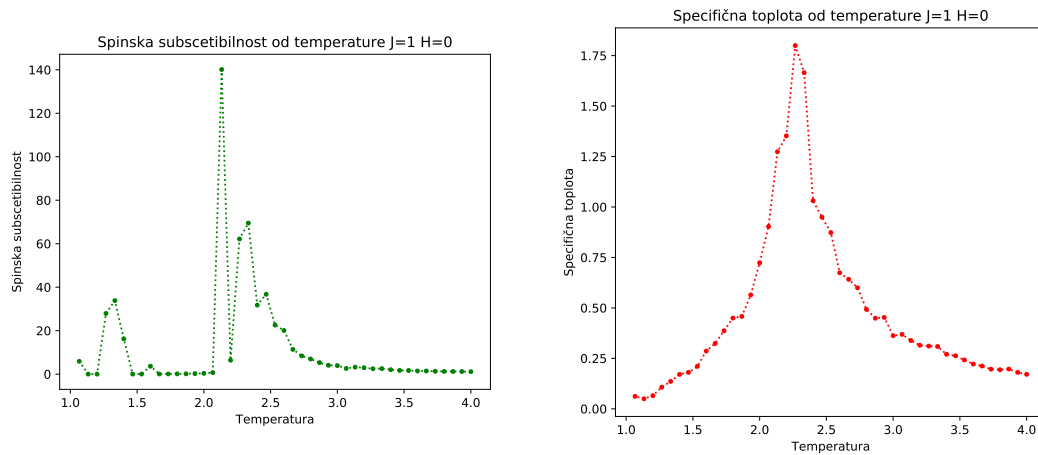
Slika 11: Sliki prikazujeta $\langle E \rangle$ v odvisnosti od temperature, leva za mrežo 100x100, desna pa za mrežo 50x50. Nobena od slik ni preveč natančna, ampak večje natančnosti niti ne potrebujemo.

Na sliki 12 vidimo odvisnost $\langle S \rangle$ od temperature, ki je takšna kot bi pričakovali, s priakovanim faznim preходом okoli 2.3.



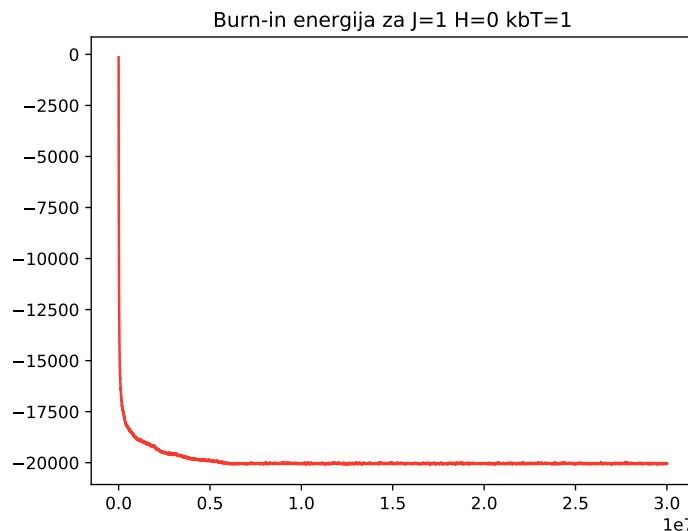
Slika 12: Slika prikazuje $\langle E \rangle$ v odvisnosti od temperature. Zopet nismo pretiravali z natančnostjo, zat imamo malo skokov izven pričakovane linije. Mreža 50x50.

Nekaj zanimanja nam vzbujata še s in χ , ki si ju izrišemo na slikah 13. S tem pa smo pravzaprav pokrili že vse kar je zares zanimivega pri tem modelu. Lahko si ogledamo še animacijo, ali pa izboljšamo zadne štiri slike. Ker je algoritem res počasen, bi si želeli algoritem raje prepisati v programski jezik C, s čimer bi lahko z lahkoto dosegali večje natančnosti.



Slika 13: Slike prikazujeta χ in c v odvisnosti od temperature za mrežo 100x100. Tudi ti dve nista pretirano natančni.

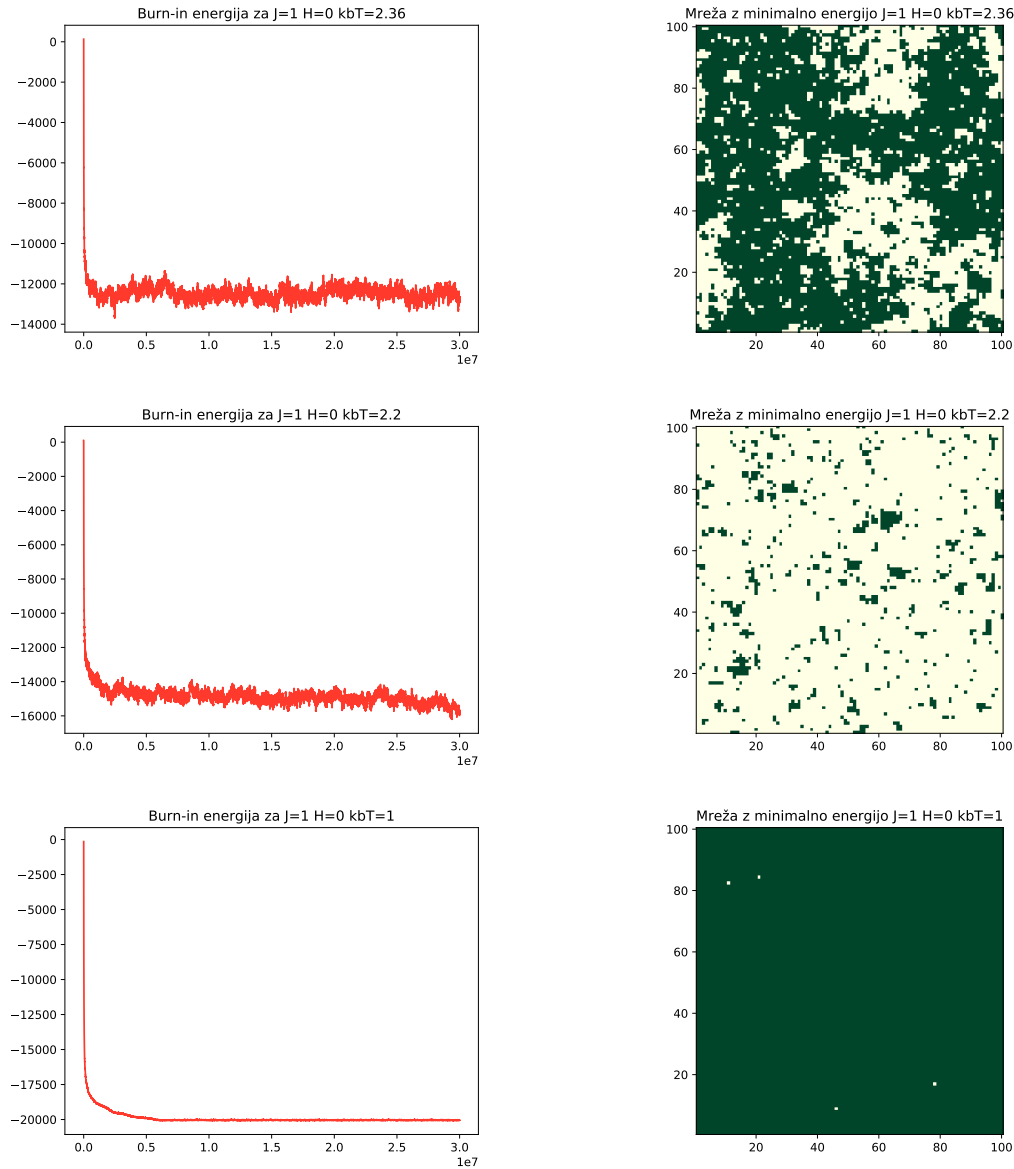
Sedaj ko smo že vse poračunli, je čas za razmislek. Pri računanju na začetku namreč nismo prešli čez celotni "burn-in". Ustvaili smo se pred ravnovesjem in s tem dobili lepe slikce. Na nek način smo prikazali ohlajanje. A ravnovesna stanja pri teh temperaturah so drugačna. Na sliki 12 vidimo, da bi morala biti stanja nižje od 1.5 vsa enaka, torej vsi spini obrnjeni v isto smer. Poglejmo si sliko 14, kjer smo dovolili programu da nardi več korakov kot poprej.



Slika 14

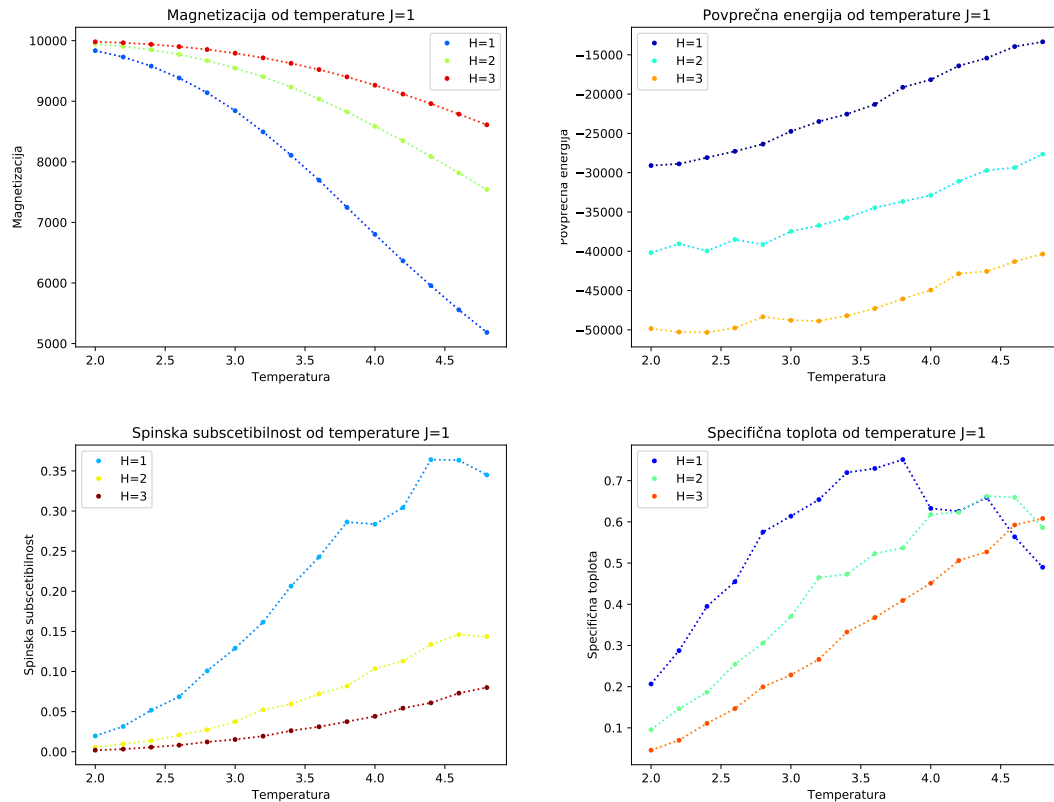
Vidimo, da smo se na slikah 8 ves čas nahajali še na repku, bolj položnem delu "burn-in-a". S tem smo še vseeno dobili prave grafe za magnetizacijo, to je graf na sliki 12 in povprečno energijo, to je graf 11, nismo pa s tem dobili pravih grafov za specifično toploto in spinsko

subscetibilnost, saj to enostavno niso bila ravnovesna stanja. V primeru ohlajanja bi torej videli takšne otočke kot smo jih prikazali pri ohlajanju, a v revnovesnem stanju pri določeni temperaturi bi verjetno videli bolj to kar je prikazano na slikah 15. Torej dosti bolj dolgočasne pojave. Zanimive otočke bi opazili zgolj čisto znotraj faznega prehoda. Ampak pri tem se je potrebno zavedati da bi bila ta stanja lepša. Otočki nebi imeli lukenj kot na prvi sliki. Te luknje so zaradi programa, ki mora pač ves čas obračati spine.



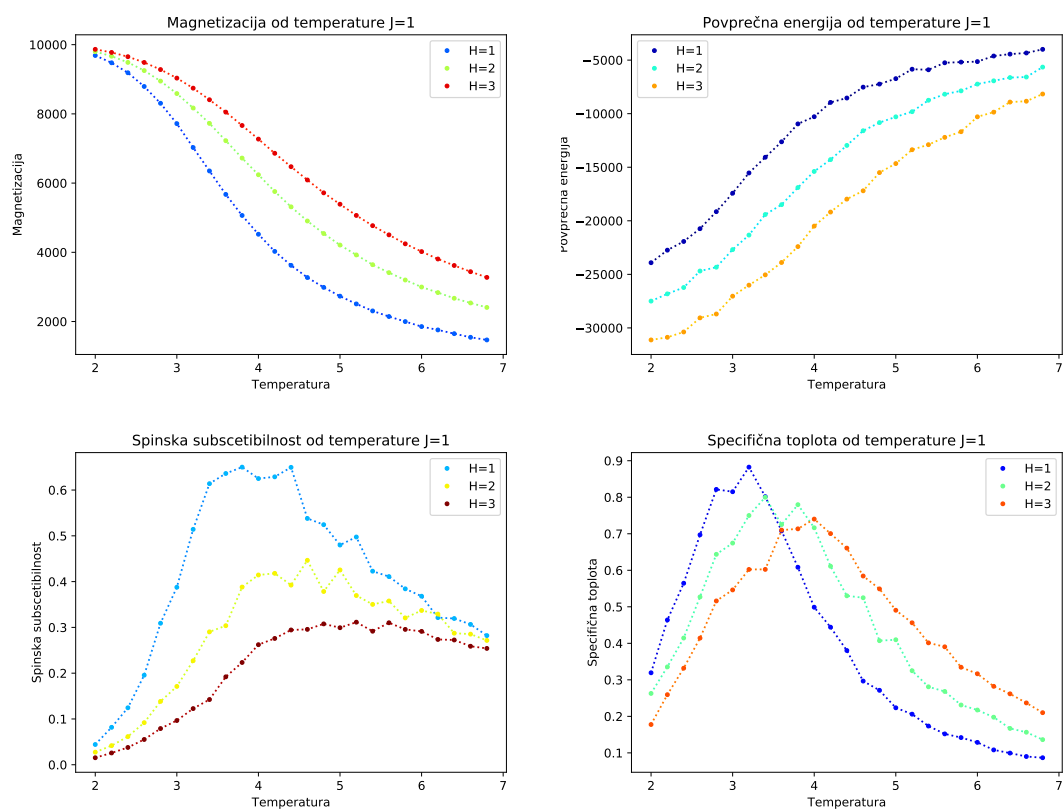
Slika 15: Slike prikazujejo mrežo spinov pri različnih temperaturah. Prikazana so ravnovesna stanja pri različnih temperaturah. Temno zelena predstavlja spine gor, svetlo zelena pa spine dol. Ker sem risal ločeno in ne gre za ohlajanje, vmes preidemo iz stanja z več spini dol v stanje z več spini gor.

Spet se ne ustavimo samo pri tem. Zanima nas kakšen vpliv ima na te štiri količine magnetno polje. Problem z magnetnim poljem namreč nima analitične rešitve, zato je zanimivo numerično potipati teren in ugotoviti, kaj se zgodi ob prisotnosti magnetnega polja. Naprej izrišemo 16, kjer vidimo, da se temperatura prehoda počasi zvišuje, že itako hitro, da nam uide iz pogleda.



Slika 16: Slike prikazujejo štiri iskane količine pri različnih jakostih zunanjega magnetnega polja H . Vidimo, da nam prehod pobegne izven okna.

Zato pripravimo nov numerični poskus, prikazan na slikah 17. Zopet pridemo do istih zaključkov. Pri čemer lahko s pomočjo grafa za specifično toploto odčitamo približne temperature faznega prehoda (3,3.5,4) za jakosti zunanjega magnetnega polja H (0.5,1,1.5). Če to primerjamo še s prejšnjim grafom na sliki 16 desno spodaj, vidimo, da kar dobro drži približek, da se kritična temperatura premika linearno z naklonom 1.



Slika 17: Slike prikazujejo štiri iskane količine pri različnih jakostih zunanjega magnetnega polja H . Vidimo, da nam prehod pobegne izven okna. Pri tem pazi! $1 = 0,5$, $2 = 1$, $3 = 1,5$!

III. KITAJSKI TRGOVEC

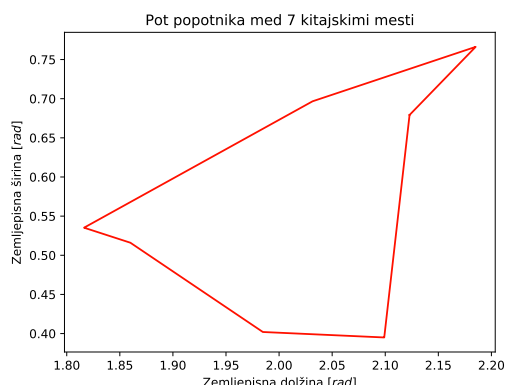
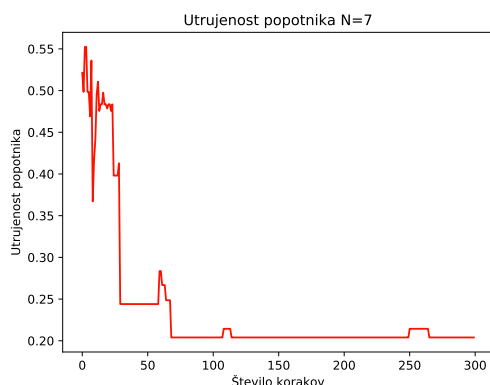
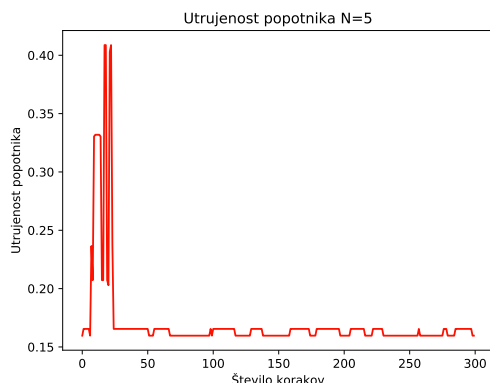
Naslednji primer, ki ga obravnavam v tej nalogi je precej bolj zapleten in mi zanj ni uspelo najti najboljših rešitev. Gre za nalogo, ko iščemo najugodnejšo pot med večimi mesti, pri čemer ne smemo nobeno mesto obiskati večkrat. To zapišemo tako, da minimiziramo nekaj podobnega akciji:

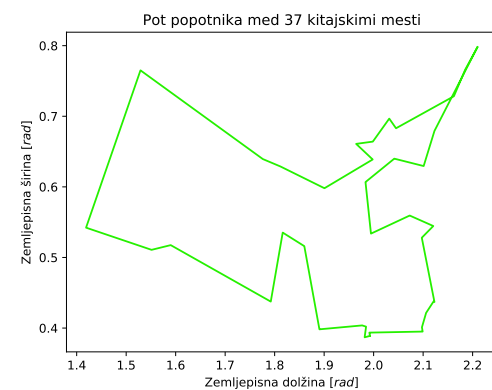
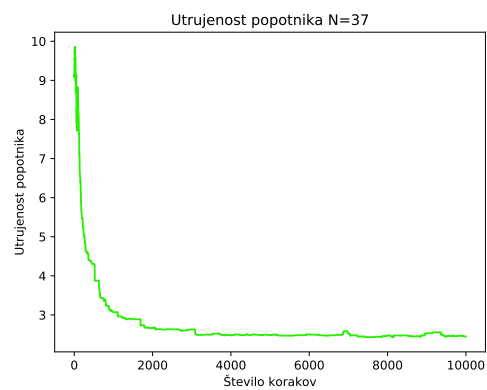
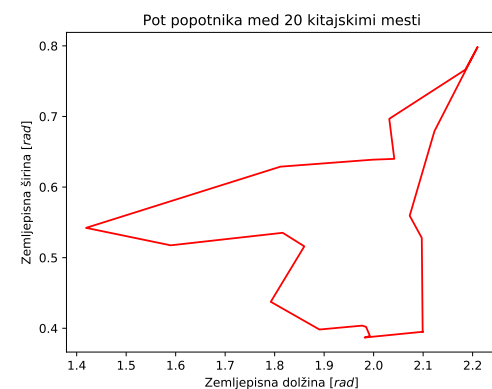
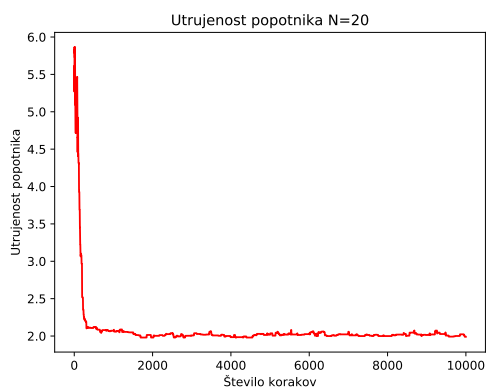
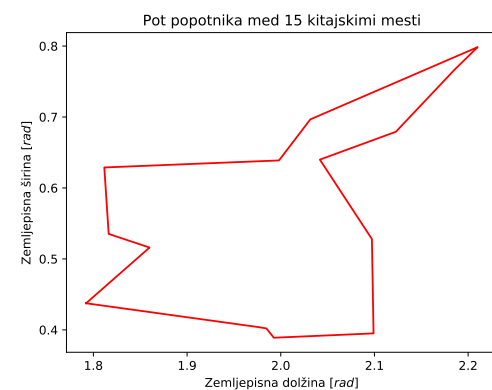
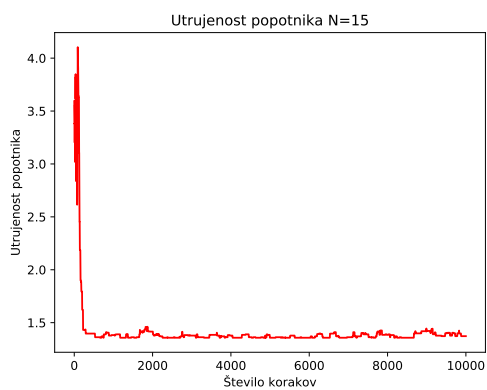
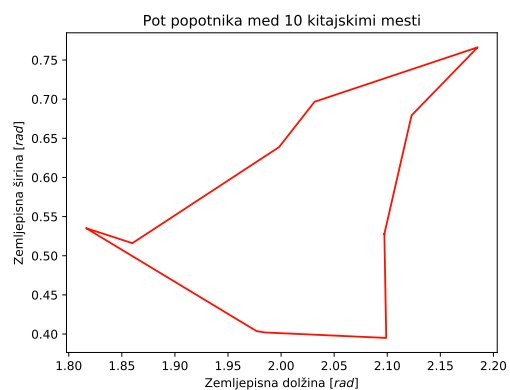
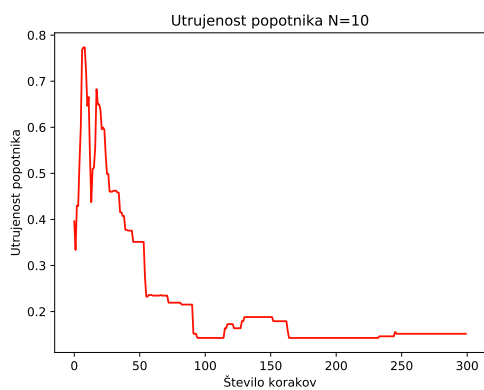
$$L = \text{razdalja} + \text{prepreke}. \quad (5)$$

V našem primeru smo si izbrali 37 večjih Kitajskih mest pri čemer smo poznali zgolj njihove geografske širine in dolžine, zato smo razdalje namesto evklidsko, računali na sferi. Izračunali smo razdaljo, nato pa smo na podlagi nasvetov iz zbirke *Numericalrecepies* žrebali določen odseg poti, ter na njem popotniku spremenili smer. Tu tudi razložimo tako veliko pogostost zank v naših rešitvah. Nato smo zopet s pomočjo nekaj pametnih nasvetov izžrebali naključna števila tako kot poprej po ključu

$$\xi \leq e^{-\Delta L/T}. \quad (6)$$

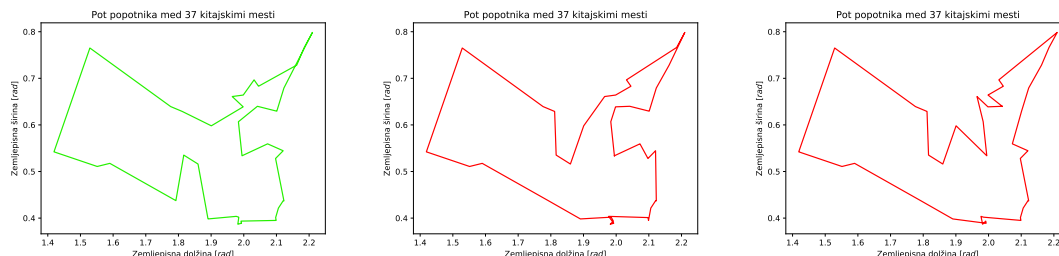
Sprva sem imel probleme s samo kodo, ker sem ves čas kakšno stvar pozabil in zamešal. Zato smo šele čisto na koncu dobili rezultate prikazane na naslednjih slikah. Pri tem naj si bralec prosim pomaga s sliko 20. Žal moje programerske sposobnosti niso dovolj dobre za risanje točk na slike.





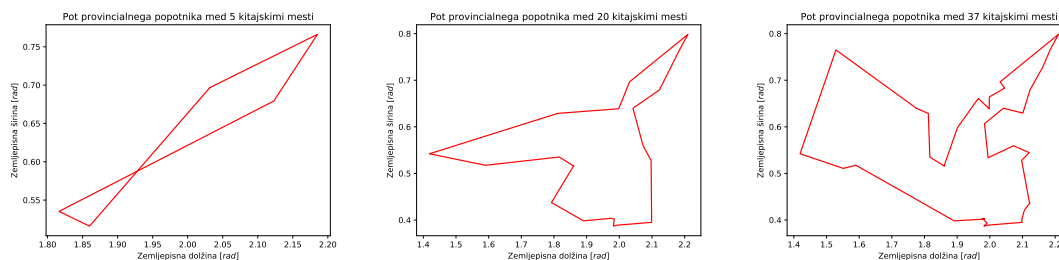
Tu pa se znajdemo pred problemom, ki sem ga že omenil - pred nerešljivostjo. Ko namreč

zadanemo število 37 se več rešitev kaže kot enakovrednih. Ni nam namreč uspelo popolnoma ohladiti sistema. Zato si pogledimo različne rezultate na slikah 18, kjer vidimo, da so poti očitno različne, a energije so praktično nerazločljive. Vsaj delno lahko rečemo, da je problem torej rešen, saj so variacije med temi rešitvami tako majhne, da trgovca verjetno niti ne zanimajo take razlike.

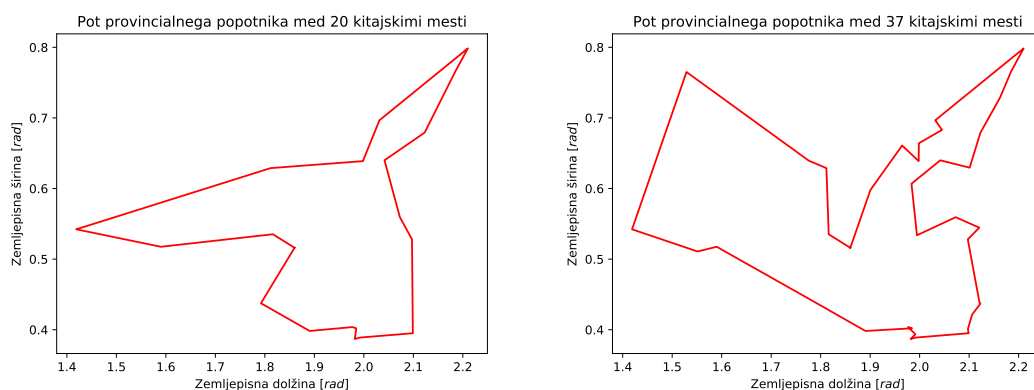


Slika 18

Kljub temu majhnemu spodrsčaju, pravzaprav padcu, si pogledimo še druge primere, ko sistemu dodajamo ovire. Na mojem seznamu kitajskih mest imam namreč zapisano tudi to v kateri provinci se mesto nahaja. Ker verjetno popotnik ne želi prevečkrat prečiti mej provinc, saj so zamudne in predvsem zvišujejo stroške na carini. Če upoštevamo to, dobimo za različne jakosti zelo zanimive rezultate. Celo pot s petimi mesti se drastično spremeni, kar vidimo na slikah ??.

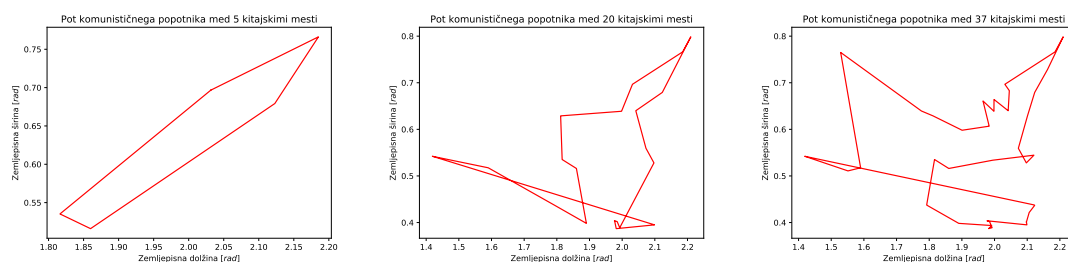


Še bolj drastično to opazimo, če carino podražimo, kar vidimo na sliki ??.



Čprav te spremembe za bralca ne izgledajo tako izrazite, so zame, ki sem videl ogromno tovrstnih rešitev, zelo izrazite. Takih rešitev prej nisem videlval. A vseeno se to pač ne pozna, saj je provinc zelo veliko in večina mest je znotraj provinc tako ali tako skupaj, zato se ta rešitev mora v veliki meri ujemati z navadno rešitvijo.

Bolj zanimiv problem bi bil nek poseben profil kitajskega človeka. Vemo namreč kakšna je Kitajska zunanja politika in kakšen je kitajski človek. Kitajski človek je v veliki meri tudi komunist in in stališče komunistične kitajske, do ostalih separatističnih delov države je zelo strogo. Zato upoštevamo, da mora trgovec hudo plačati in tvegati, če je sam po svojih načelih komunist in noče obiskati takih težel in jim prinesiti komunističnega izobilja, poleg tega pa se lahko ves čas sooča še s sankcijami med rivalnimi silami. Kaznujemo torej prehod med Ljudske republike kitajsko in Republiko kitajsko. Zaradi mešanih občutkov kaznujemo še prehod v Tibet. Komunista je lahko recimo strah obiska tibeta. Tako dobimo naslednje rešitve prikazane na slikah 19. Vidimo, da problem petih mest ni prizadet, saj so vsa znotraj Ljudske republike Kitajske, Med tem ko so ostale karte močno spremenljene. Obisk tibeta je močno zakompliciran, obisk tajvana pa tudi. Tajvan popotnik obišče v enem kosu in potem odidte. Tako omejitev lahko upravičimo tudi drugače. Pot do tajvana je težka, ker poteka po vodi, in pot do tibeta je težka, ker je kitajska s povezovanjem Tibeta intenzivno začela šele pred pol leta in bo povezava dobra šele čez kakšen mesec.



Slika 19



Slika 20