

10. naloga - Metropolisov algoritem

Tina Klobas

18. november 2019

1 Opis problema

Pri Metropolis-Hastingovem algoritmu uporabljamo metodo Monte Carlo, da zaporedoma žrebamo vzorce s poljubno verjetnostno porazdelitvijo. Tako lahko dobimo približke porazdelitvenih funkcij (oziroma histograme s tako porazdelitvijo) ali izračunamo integrale (pričakovane vrednosti po izbrani porazdelitvi). Metropolisov algoritem je poseben primer omenjenega algoritma v katerem imamo simetrično porazdelitveno funkcijo. Splošen potek takega algoritma:

1. izberemo začetek spehoda x_0 in verjetnostno gostoto $\rho(x|y)$, po kateri hočemo vzorčiti, in, ki izbere kandidata za naslednjo vrednost x pri trenutni vrednosti y (za Metropolisov algoritem je ta funkcija simetrična - $\rho(x|y) = \rho(y|x)$).

2. Na koraku $t + 1$:

- (a) po gostoti $\rho(x'|x_t)$ generiramo naključnega kandidata x' in izračunamo verjetnost sprejema:

$$\alpha = \min \left\{ 1, \frac{P(x')}{P(x_t)} \frac{R(x_t|x')}{R(x'|x_t)} \right\}, \quad (1)$$

kjer je $R(z)$ predlagana verjetnost (po gostoti $\rho(z)$), $P(z)$ pa verjetnost za izbrano stanje Markove verige.

- (b) Izberemo naključno število γ z intervala $[0, 1]$ in če je $\alpha > \gamma$ zavrnemo kandidata x' in obdržimo prejšnje stanje $x_{t+1} = x_t$, če pa velja $\alpha \leq \gamma$ obdržimo kandidata in novo stanje je $x_{t+1} = x'$.

Poseben primer je tudi neodvisen Metropolisov algoritem, kjer trenutno stanje modela ni odvisno od predhodnega stanja. Tako na vsakem koraku žrebamo kandidata po porazdelitvi $x' \sim \rho(x)$, verjetnost sprejema pa je v tem primeru

$$\alpha = \min \left\{ 1, \frac{P(x')}{P(x_t)} \frac{R(x_t)}{R(x')} \right\}. \quad (2)$$

2 Molekularna verižnica

Nitkasta molekula sestavljena iz 17 členkov je obešena na obeh koncih. Vsak členek se lahko povesi od začetnega ničelnega nivoja na poljubnega od 19 nivojev in si s zmanjša potencialno energijo. Po drugi strani s premikom spremenimo tudi prožnostno energijo med sosedi. Določiti želimo ravnovesno energijo v odvisnosti od temperature. Na vsakem koraku t spremenimo položaj naključnega členska v verigi.

Z vektorjem \mathbf{h} si beležimo višine členkov, za katere velja $h_0 = h_{17} = 0$. Celotna energija E je tako sestavljena iz potencialnega

$$E_{\text{pot}} = \sum_{i=1}^{17} \xi h_i \quad (3)$$

in prožnostnega prispevka

$$E_{\text{pot}} = \sum_{i=1}^{16} \frac{k}{2} (h_{i+1} - h_i)^2. \quad (4)$$

Koeficient $\xi = mg$ je odvisen od mase in gravitacijskega pospeška, k pa je koeficient vzmeti med sosednjimi členki.

Na vsakem koraku t spremenimo položaj naključnega členska h_i . In imamo tako kandidata $h'_i = h_i + \Delta$, kjer je naključen izbran premik tako, da je nova višina še zmeraj znotraj našega nivojskega sistema. Sprememba energije je potem:

$$\Delta E = E' - E = \Delta_i^2 + \Delta_i [\xi + k(2h_i - h_{i+1} - h_{i-1})] \quad (5)$$

Predlagana verjetnost R je v tem primeru $R(h_i) = 1/N$ in je enaka za vsak člen verige. Verjetnost, da je model v stanju z energijo E pa je odvisen on temperature in je enak $P(E) = e^{-\beta E}$ kjer je $\beta = 1/k_B T$. Verjetnost sprejetja je tako

$$\alpha = \min \{1, e^{-\beta \Delta E}\}. \quad (6)$$

Izžrebamo naljučno število $\zeta \sim U[0, 1]$ in če velja $\zeta \leq e^{-\beta \Delta E}$ sprejmemo novo stanje in naredimo premik $h_{i+1} = h'_i$, sicer pa premik zavrnemo in $h_{i+1} = h_i$. Vidimo, da bo za vsak $\Delta E < 0$ eksponentna funkcija vedno večja od 1, torej bo $\alpha = 1$ in so vsi premiki, ki sistemu zmanjšajo energijo, ugodni. V limiti, ko gre $T \rightarrow \infty$ gre eksponentna funkcija proti 1 in sprejmemo vse premike, v drugem primeru ko gre $T \rightarrow 0$ pa sprejmemo le tiste premike, ki znižajo energijo.

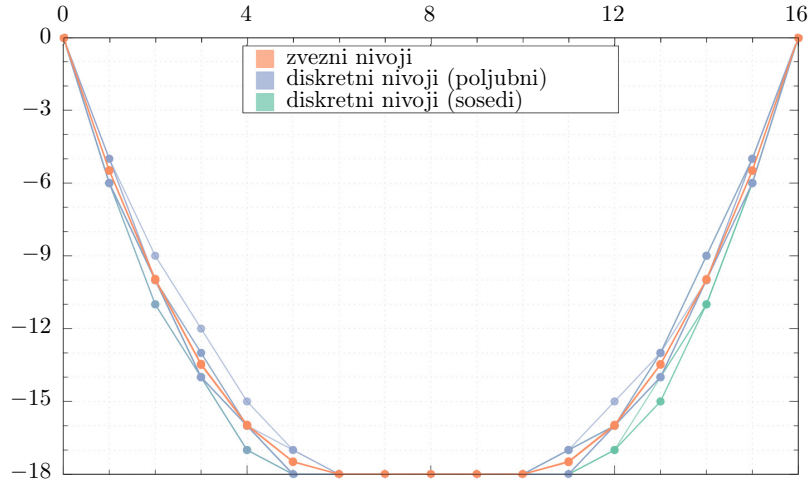
2.1 Rezultati

Nivoje lahko poljubno naredimo diskretne ali zvezne, prav tako lahko omejimo premik na vsakem koraku. Oglejmo si tri različne primere in kako se potem razlikujejo končna stanja takih algoritmov:

1. diskretni nivoji z dovoljenim preskomom le na sosednji ravni: sprememba višine je $\Delta h = (-1)^{2\delta+1}$, kjer je $\delta \in \mathbb{Z}^+ \cup \{0\}$ in jo naključno žrebamo na vsakem koraku. Sprememba energije je potem:

$$\Delta E = E' - E = 1 + (-1)^{2\delta_i+1} [\xi + k(2h_i - h_{i+1} - h_{i-1})]. \quad (7)$$

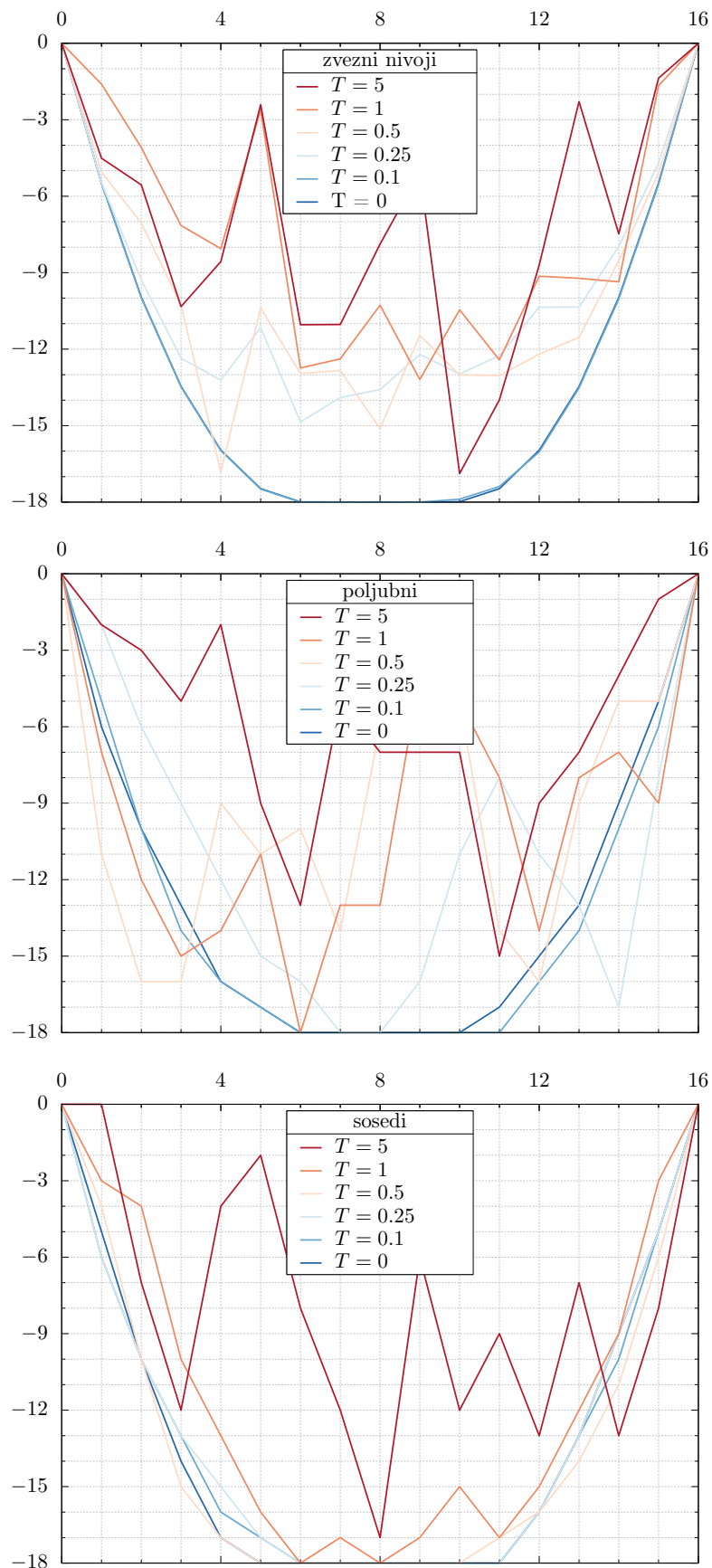
2. Diskretni nivoji s poljubnim premikom in
3. zvezni nivoji s poljubnim premikom.



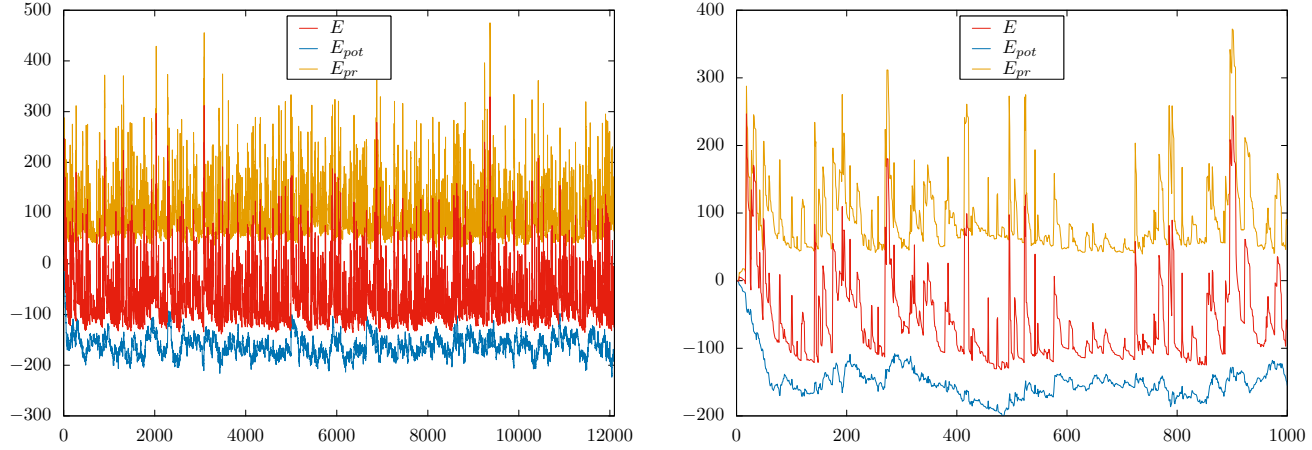
Slika 2.1: Primerjava različnih tipov nivojev pri temperaturi $T = 0K$.

Na grafu 2.1 je prikazano končno stanje za vse tri primere nivojev. Za vsak nivo je narisanih 7 različnih poskusov optimizacije energije, kjer smo za vsak poskus naredili 10^5 korakov. Rezultati so precej konsistentni in razlike med metodo z diskretnimi nivoji, kjer dovolimo preskoke le na sosednji ravni, in med tisto, kjer omogočimo kakršnekoli preskoke, skorajda ni. Za primer z zveznimi nivoji vidimo, da je v vseh 7 poskusih model končal v enakem končnem stanju. V priloženi animaciji (*primera.gif*) je prikazan potek vseh treh različnih primerov.

Z večanjem temperature dovolimo, da na več korakih sprejmemo novo stanje, čeprav energijsko ni nujno bolj ugodno. Na grafih 2.2 so prikazana končna stanja pri različnih temperaturah T (razmerje $k_B T / \Delta E$). Kot lahko predvidimo, se pri višanju temperature oblika odmika od pričakovane za prosto visečo verižnico ($y = a \cosh(x/a)$). Obnašanje si lahko razložimo tudi s spreminjanjem energije. Z grafa 2.3 vidimo, da energija že pri nekje 200 korakih pride do končne vrednosti in potem le še niha okoli te vrednosti. To je opazno tudi v animaciji, ko je model že v končni vrednosti, pa vseeno še naprej skače okoli nje, saj smo v veliko manj korakih dosegli željeno končno vrednost modela, kot smo imeli korakov v algoritmu.



Slika 2.2: Primerjava spreminjanja končnega stanja z večanjem temperature.



Slika 2.3: Spreminjanje energije pri temperaturi $T = 0.25$

3 Isingov model

S Hamiltonijanom

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i, \quad J = \pm 1 \quad (8)$$

opišemo feromagnetne ($J = 1$) in antiferomagnetne ($J = -1$) snovi. Približek velja za dve stanji $s_i = \pm 1$, vsota $\sum_{\langle ij \rangle}$ pa teče po vezeh med najbližjimi sosedi. Če ni zunanega polja $H = 0$, temperatura T_c faznega prehoda pri feromagnetu zadošča enačbi

$$\sinh \frac{2J}{k_B T_c} = 1 \quad \implies \quad T_c \approx 2.269185 \frac{J}{k_B}. \quad (9)$$

Zanima nas povprečna energija $\langle E \rangle$ in lastna magnetizacija $\langle S \rangle$ v odvisnosti od temperature. $S = \sum_i^N s_i$ je celotna magnetizacija sistema. Zanima nas tudi spinska susceptibilnost in specifična toplota pri različnih jakostih magnetnega polja

$$\chi = \frac{\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2}{N k_B T} \quad c = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{N k_B T}. \quad (10)$$

Rešujemo podobno kot pri prejšnji nalogi; mrežo razdelimo na N_x elementov v eni smeri in N_y v drugi, kjer vsakemu spinu pripada točka (i, j) . Na vsakem koraku naključno zberemo par i, j in pogledamo kako ta sprememba spremeni energijo sistema:

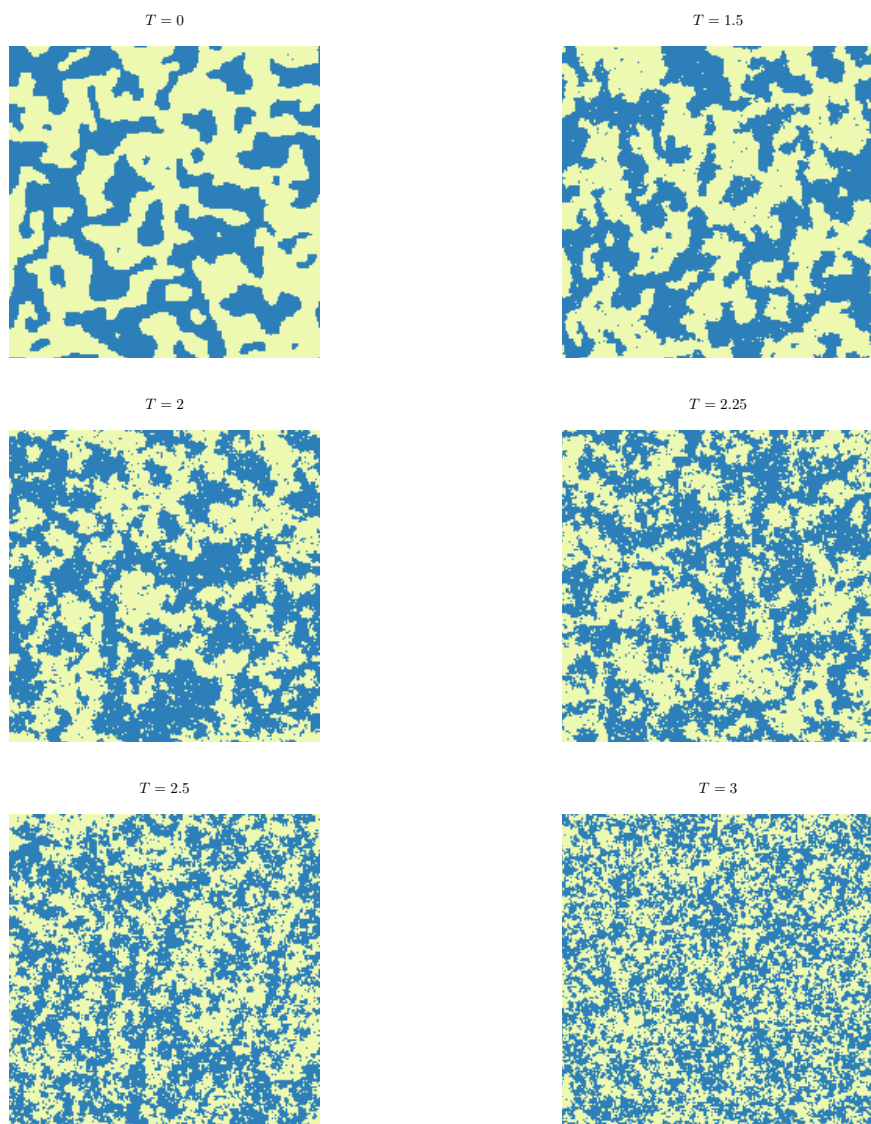
$$\Delta E = 2s_i \left(J \sum_{\langle i,j \rangle} s_j + H \right). \quad (11)$$

3.1 Rezultati

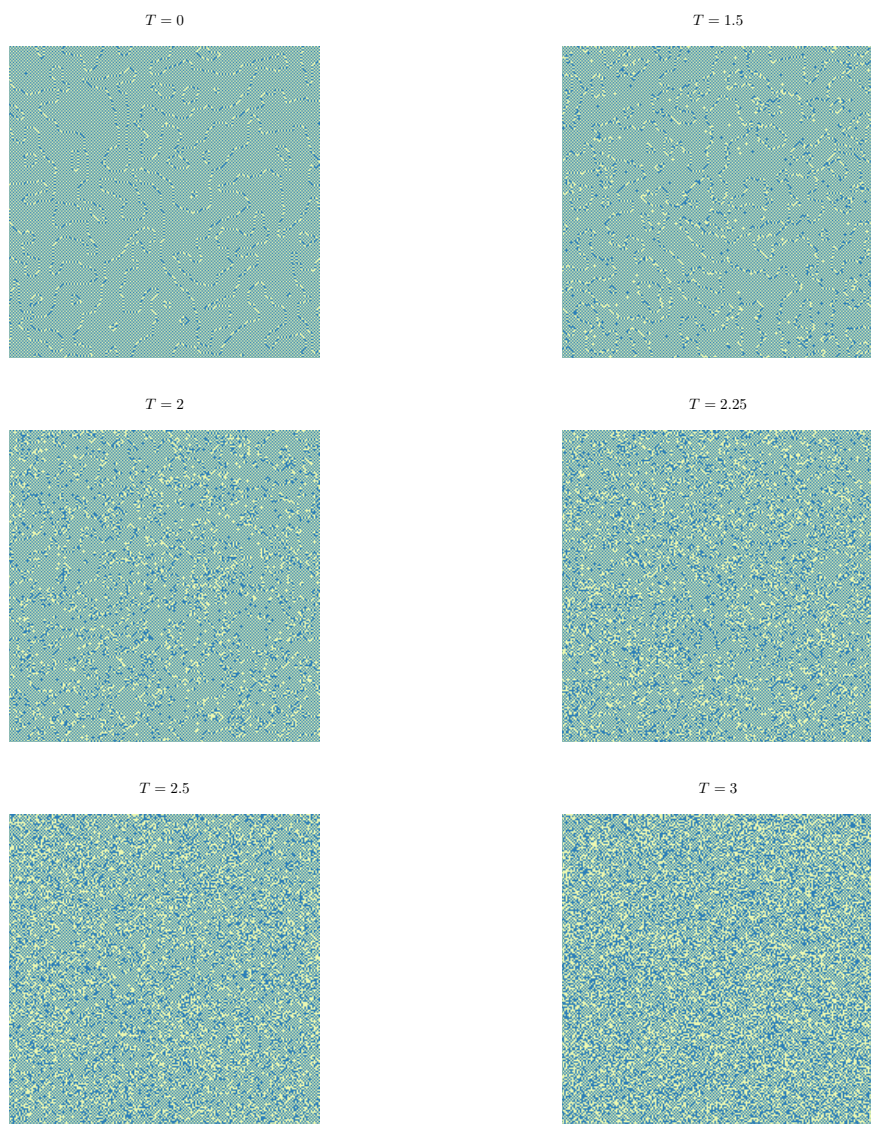
Poglejmo si kako se obnaša sistem brez zunanega polja pri različnih temperaturah. Končna stanja feromagneta so prikazana na grafih 3.1. Vidimo, da se pri nizki temperaturi ustvarijo domene in imamo spontano magnetizacijo. Z naraščanjem temperature se domene začnejo manjšati in

premikati, spini znotraj nje pa obračati. Pri temperaturi $T = T_c$ se zgodi fazni prehod in po tem so spinska stanja naključna in magnetizacija pade na 0.

Podobno lahko tudi pri antiferomagnetu na grafu 3.2 opazimo domene, ki so sicer slabše vidne, vendar se obnašajo enako kot pri feromagnetu in tudi na enak način izginejo.



Slika 3.1: Končna stanja feromagneta pri različnih temperaturah.



Slika 3.2: Končna stanja antiferomagneta pri različnih temperaturah.