Modelska analiza I
1999/2000
4. naloga - Metropolisov algoritem

Andrej Studen, MA-FI

4. november 1999

1 Metropolisov algoritem in simulirano ohlajanje

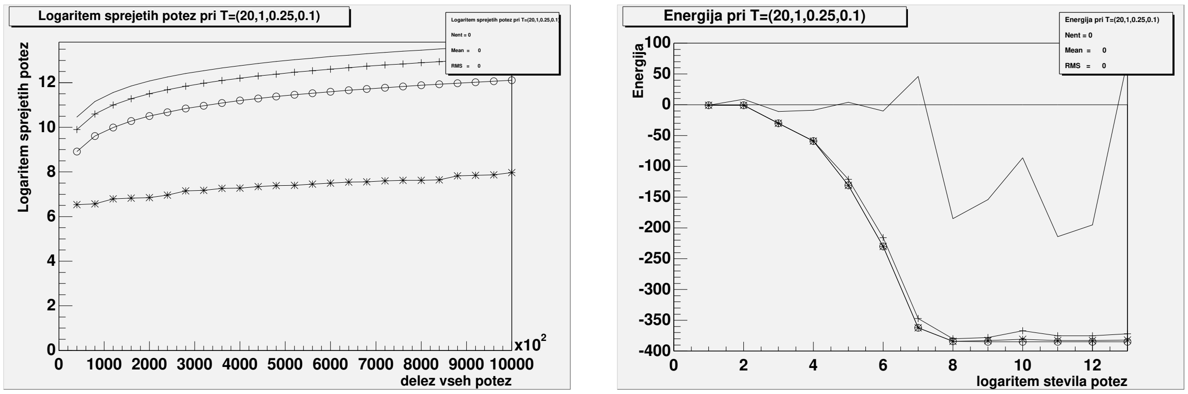
Algoritem s tem imenom poskuša najti rešitev sistema s podano energijo. Pravzaprav je to postopek, ki od vseh možnih stanj poskuša kar najhitreje najti tista, ki so energijsko najbolj ugodna. Bistveno pa je, da lahko vsakemu stanju priredimo nek skalar, katerega minimum iščemo. Postopek sam gre takole:

- Stanje sistema naj opiše vektor spremenljivk $\vec{\rho}$. Poznamo tudi funkcijo $E(\vec{\rho})$ za vsako stanje $\vec{\rho}$ sistema.
- Izmislimo si potezo $\vec{\Delta\rho}$. Ta naj bo taka, do bo z njo možno prehoditi cel prostor možnih stanj. To je hkrati tudi edina zahteva, ki naj ji ustreza poteza.
- Izračunajmo energijo ΔE, za katero se spremeni energija sistemu, ko se premaknemo v stanje $\vec{\rho} + \Delta\vec{\rho}$. Ker poznamo funkcijo $E()$, lahko vedno določimo tudi ΔE.
- Izberemo naključno število ξ med 0 in 1. Potezo sprejmemo (premaknemo se v novo stanje), če je :

$$\xi \leq \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right).$$

S tem smo opisali postopek. Očitno je, da sprejmemo vsako potezo, katere ΔE je negativna, saj gre tam eksponent preko 1 in je vsak ξ pač manjši. Vzamamo pa tudi nekatere poteze, ki nam dvigujejo energijo, vendar le včasih. Lahko se zgodi, da vzamemo celo potezo, ki dvigne nivo za velik korak, če je naključno število dovolj blizu 1. Pri izbiranju igra veliko vlogo tudi temperatura. Vidi se, da z večanjem temperature raztegujemo eksponenetno krivuljo in je vedno več potez sprejemljivih, saj so verjetnosti tudi za pozitivne premike vedno večje. V limiti neskončne temperature bomo vzeli vsako potezo in naš sistem se bo selil po prostoru stanj neodvisno od energijske funkcije. Metropolisov izrek sledi ravno iz tega razmišljanja. Pravi, da bo re'itev konvergirala k rešitvi, katere verjetnost, da se bo pojavila v naravi, je kar enaka verjetnosti poti do nase rešitve. Tako bomo tudi z računalniško simulacijo prišli do nekaterih rešitev, ki se v naravi skoraj nikoli ne zgodijo, a le v redkih primerih. Sicer pa bomo z večjo verjetnostjo našli bolj verjetne rešitve. Smisleno. Blizu Metropolisovega algoritma pa je tudi postopek simuliranega ohlajanja. Gre za enak postopek kot pri MEtropolisu, le da zdaj hkrati s tem še znižujemo temperaturo in iščemo lego, v kateri bo stanj zamrznilo. Tu ne gre več za verjetnost, pač pa za iskanje minimuma. Skrbi nas namreč konvergenca h globalnemu minimumu. Če bi takoj začeli z nizko temperaturo (in bi sprejemali le negativne energijske premike), bi se lahko ustavili v lokalnem miniumum, ki pa bi alhko bil višje od globalnega. Zato najprej pri viskoi temperaturi dobro otipamo sistem, nato ap počasi ohlajmo in s tem manjsšamo prostor, v katerega lahko zaide rešitev. Končno ohladimo sistem tako nizko, da ne moremo storiti niti koraka več. Našli smo približno rešitev. Ta postopek se seveda uporablja le za težke probleme, ki niso rešljivi v realnem času ($O(\exp^N)$). Takrat sicer ne govorimo, da smo našli pravo rešitev, pač pa re'itev v realnem času.

2 Molekularna verižnica



Slika 1: Obnašanje energije in števila sprejetih potez, ko iščemo nove in nove poteze. Na levi sliki gledamo, koliko potez sprejmemo. Vidimo, da na začetku vzamamo skoraj vse poteze, vendar se s tem odpeljemo v kak minimum in iz lunje težko spet uidemo. Spodnja krivulja je očitno pri najnižji temperaturi, zgornja pri najvišji. Celotna skala je ravno logaritem vseh potez, tako da se vidi, da pri T=20 vzamemo skoraj vse. Desno pa gledamo temperaturo na isti poti. Spodnj krivulje počasi zmarzujejo, zgornja pa je povsem živahna. To pa je ravno to, kar smo videli na levi sliki. Če si namreč visoko, vzameš vse.

Tu gre za fizikalni problem, torej se ne bomo ukvarjali s simuliranim ohlajanjem, pač pa bomo gledali rešitve pri različnih temperaturah. Imamo verigo iz N členov. Vsak od členov lahko sedi na enem od diskretnih nivojev. To število lahko omejimo, ali pa pustimo, da jih je neskončno. Vsak člen je podvržen gravitaciji, med členi pa so tudi molekulske vezi, ki so sorazmerne kvadratu razdalje med členi. Zdaj pa po Metropolisu:

- Stanje opišemo z vektorjem $\vec{h} = (h_1, \ldots, h_N)$
- Energijo stanja opišemo z enačbo:

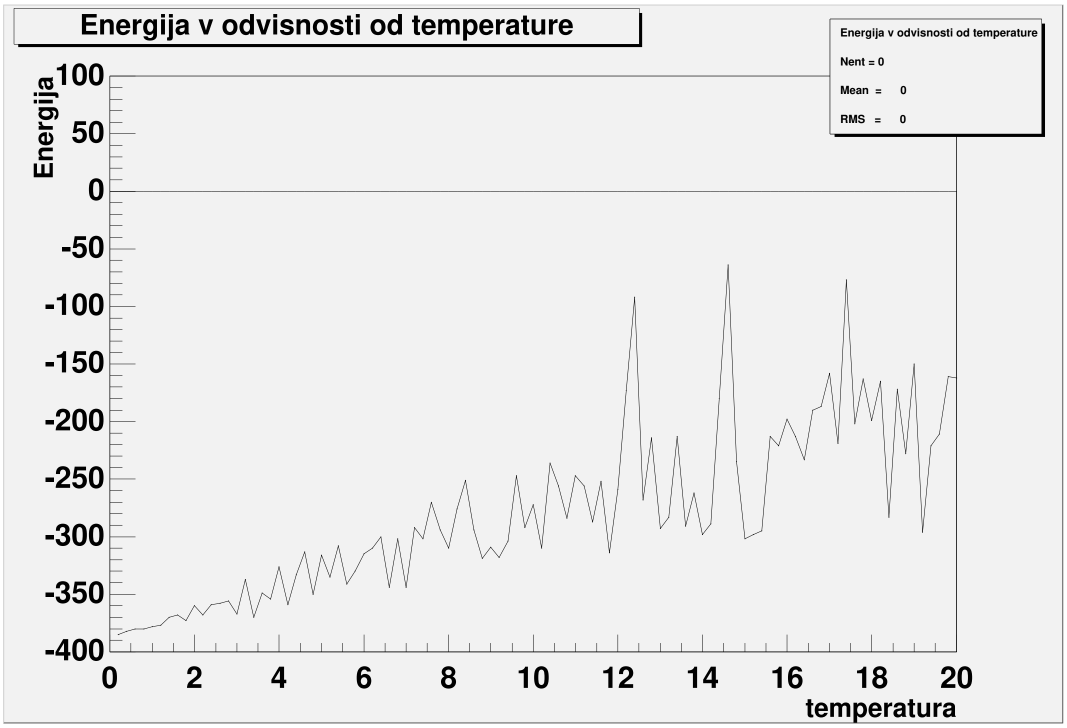
$$E = -\alpha \sum_{i=1}^{N} m_i h_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N+1} (h_i - h_{i-1})^2,$$

  kjer smo uvedli brezdimenzijski parameter $\alpha = \frac{m_1 g}{k d^2}$, kjer je m_1 tipična masa kroglic, g je polje, v katerem so kroglice, k je koeficient vzmeti in d je tipična medsebojna razdalja. V vektorju $\vec{m}$ so zbrane mase kroglic (če kroglice pač niso enake - le posplošitev), uvesti pa sem moral še dva robna pogoja h_0 in h_{N+1}, ki označujeta višino pritrdišča verige. Možnosti za igranje torej kar dovolj.

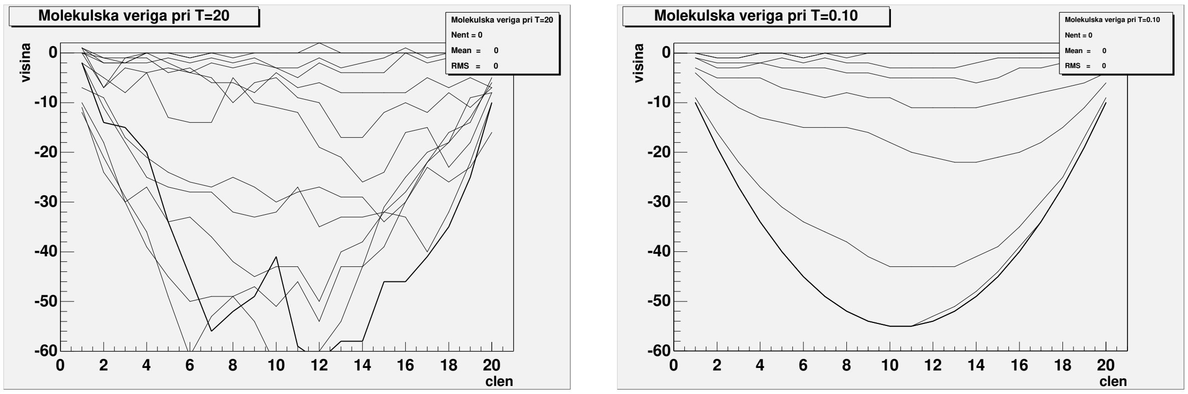
- Spremembo $\vec{\Delta h}$ bomo opravili na dva načina. Pri prvem bomo naključno izbrali eno kroglico (k) in jo premaknili za eno mesto navzgor ali navzdol - smer spet žrebamo. Druga poteza pa bo premik vrstice. Izbrali bomo niz elementov naključne dolžine (z), ki se bo začel pri naključnem členu (k) in ga premaknili v naključno smer (gor ali dol). Da lahko s temi premiki opišemo cel prostor, verjetno ni treba posebej dokazovati.

Vse ostalo opravi računalnik. Drugo potezo sem izbral z verjetnostjo $p = 0.1$, da sistem ne bi zamrznil v previsoko postavljenem stanju. Tako lahko s samo dvema spremenjenima napetostima v vezeh premaknem veliko elementov navzdol in tako mogoče s potencialno energijo premagam prožnost. Vzel sem kar preprost primer z $\alpha = 1$ in enakimi masami (in zato vsi $m_i = 1$).

Na slikah je verižnica za različne temperature, dodana pa je še odvisnost energije od temperature (naklon je kar specifična toplota) in še konvergenca k pravi rešitvi za različne temperature.



Slika 2: Takole pa pada energija za nizke temperature. V nasprotju z Isingom tu ni zaznati faznega prehoda, kjer bi se zgodil prevoj, pač pa skoraj povem klasično padamo s temperaturo linearno. Nihanja minimuma naraščajo, kar je pričakovano. Počakal sem na milijon potez, delež sprejetih je na zgornjem grafu, 20 členska veriga z neskončno nivoji. Zato tudi ni faznega prehoda.



Slika 3: Oblika vrvi za močno različni temperaturi in njena konvergenca. Končno stanje sem poudaril z debelejšo črto. Ker nisem omejil nivojev, je molekulska veriga pri nizki temperaturi zelo podobna hiperboličnem kosinusu, z omejenim številom nivojev pa bi imeli na sredi raven del. Vmesne slike so narisne v eksponentnem času, tako da so gostejše blizu začetka in redkeje proti koncu, ko dodam le redkokatero potezo. Enako je tudi na levi sliki, le da tu eksponent skorajda ni potreben, ko naraščaštevilo sprejetih potez malodane linearno.

3 Uravnoteženje turbine

Tu gre sicer še vedno za fizikalni problem, a bomo ohlajali. Na obod turbine moramo na N določenih ekvidistantnih točk privariti N lopatic z neenakimi, podanimi masami. Radi pa bi, da bi bilo težišče čim bližje

osi turbine, ki je popoln valj. Ker imamo N diskretnih točk, ne moremo premakniti težišča za infitezimalno majhno vrednost, pač pa le za element diskretnega spektra vrednosti. Ta spekter je sicer zelo bogat (nekako N! črt) in ravno zato je to problem, ki točno ni rešljiv v realnem času in ga moramo rešiti (v realenm času) približno.
Razloge za simulirano ohlajanje imamo. Torej bomo ohlajali. Najprej prevedimo sistem v Metropolisov jezik:

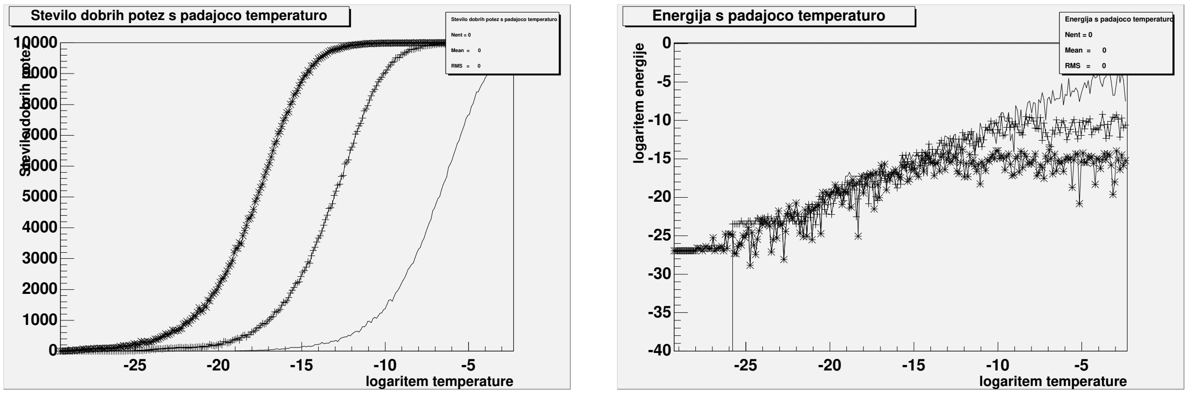
- Stanje opišemo z vektorjem $\vec{m}$ mas, kjer pomeni indeks lego mase na obodu.
- Energija je kar oddaljenost težišča od osi, torej:

  $$E = \overline{x}^2 + \overline{y}^2,$$

  za vsako težišče pa še:

  $$\overline{x} = \frac{R}{M}\sum_{i=1}^{N} m_i \cos\left(\frac{2\pi i}{N}\right) \quad \overline{y} = \frac{R}{M}\sum_{i=1}^{N} m_i \sin\left(\frac{2\pi i}{N}\right).$$

- Premik bo kar menjava dveh mas. Izberem torej naključno mesto (k) med 1 in N in grem še za naključno mest (l) (1..N-1) naprej po obodu in nato l-to in k-to maso zamenjam. Spet je poteza vseobsegajoča ali ergodična.



Slika 4: Simulirano ohlajanje. Krivulje predtavljajo različno napako mas na obodu turbine (·100%, +10% in ∗1%). Začnemo pri neki temperaturi z butastim nastavkom. Ker je temperatura visoka, so vse poteze sprejete (levi graf) energija (oddaljenost od osi) pa velika. Seveda je oddaljenost pri visokih temperaturah manjša, če masa le malo odstopa od normirane. Nato ohlajamo. Najprej doseže minimum sistem z zelo različnimi masami, a ta minimum ostane visoko. Pač, spekter se lahko neha že pri tej razdalji. Ker je energija malo napačnih mas zelo majhna, se mora tudi temperatura močno zmanjšati, da bomo začutili razliko v postavitvah mas, zato so dolgo časa poteze sprejemljive. Vidimo, da lahko pomeni že majhna razlika v napakah mas veliko pridobitev v manjšanju izosnosti. Tako je natčnost spodnjih krivulj grozovito boljša kot natačnost zgornje, ko gre za določanje težišča.

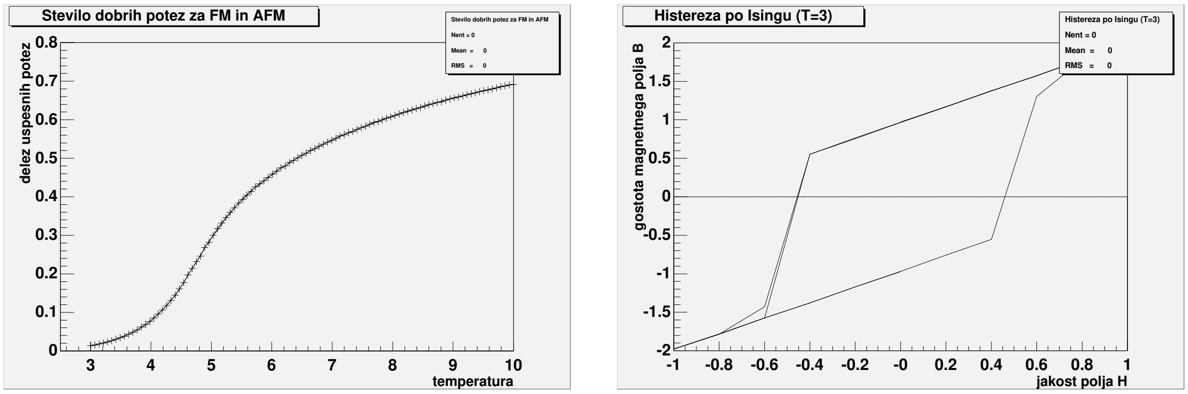
Metropolisov algoritem torej imamo. Ostane nam le pazljivo ohlajanje. Začeti moramo dovolj visoko, nato pa le počasi manjšati temperaturo, da se ne znajdemo v lokalnem minimumu. Vzel sem, da se temperatura spreminja s faktorjem 0.9 na vsakem koraku, ohlajati pa neham, ko ne zmoremo več sprejemljive poteze. Seveda je kovergenca bistveno odvisna od števila potez pri vsaki temperaturi. Če jih namreč vzamem premalo, ne bom pregledal celega prostora in se bom ustavil v enem od okalnih minimumov. Če jih vzamem preveč bo računanje predolgo trajalo.
Zanimalo me je še, kako je, če so mase razporejene okrog neke vrednosti. Namreč kako to vpliva na bližino najbližjega težišča. Seveda se izkaže, da z manjšanjem realtivne napake pri masah tudi manjšamo odstopanje težišča od središča. Poskusil sem za 100%, 10% in 1% napačno določene mase in razlike so očitne.

4 Isingov model

Spet gre za fiziko in imamo običajen Metropolis. Torej prevedimo:

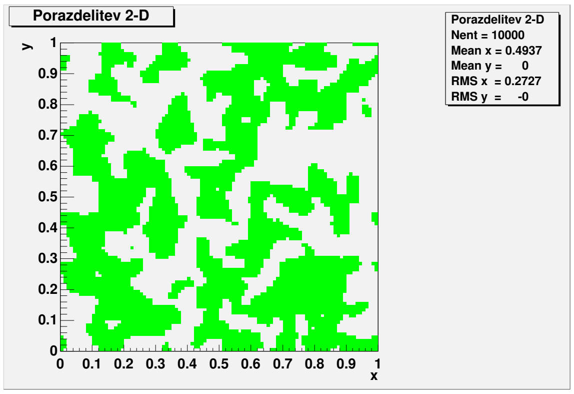
- Stanje opišemo z matriko spinov $s_{i,j}$, z vrednostmi ± 1. Matrika je dimenzije $(m \times m)$, vseh spinov je N$(= m^2)$.
- Poteza je sprememba predznaka enega spina. Seveda je to ergodična sprememba.
- Energijo podaja Isingov Hamiltonian:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j=n.s} s_i s_j - H \sum_i s_i$$



Slika 5: Uvod v Isingov model. Na levi vidimo, kako se spreminja delež dobrih potez, ko manjšamo temmperaturo. Jasno, močno pada, saj se znamo spravit v kaksen lokalni ali celo globalni minimum. Desno pa je histerezna zanka pri T=3. Ker so mi ostale meritve pokazale, da je T_c nekje okrog 4.5, je to sorazmerno daleč v FM coni. Dobim neke vrste histerezo, a verjetno taka definicija polja ni dobra.

Isingov sistem opiše tako feromagnete(FM) kot antiferomagnete(AFM), seveda za različno predznačene vrednosti J. Ko je J negativen, dosežemo manjšo energijo za nasprotno obrnjene spine (AFM), ravno nasprotno pa velja za pozitiven J (FM). Zanimivo je, da nam že tako preprost model omogoča opazovanje faznega prehoda. Pri visokih energijah ne kaznujemo pozitivne energije več tako strogo in jemlejemo tudi poteze, ki zvišujejo energijo. Zato je slika bolj razmešana pri visokih temperaturah, povprečen spin pa je 0. Pri nizkih temperaturah pa so energijsko potratne poteze kaznovane in se bližamo lokalnemu minimumu, ki pa preferira urejene spine. Seveda različne urejensoti za različne sorazmernostne koeficente J.



Slika 6: Slika polja magnetnih momentov pri T=0.5 (ultra nizko) za N=10000. Vidimo, da se magetne domene nikakor ne morejo izničiti, a spini so že dovolj grupirani, da lahko verjamem, da gre za FM fazo. Težko je prepričati toliko spinov k poslušnoti, še posebej, če nočemo čakati večnosti. A slika domen je na tej sliki dovolj verna.

Na faznem prehodu pa se s snovjo dogaja marsikaj zanimivega. Pod T_c se pojavi sponatna magnetizacija, na samem prehodu pa imata izrazite maksimume (ali celo divergenco) sukceptibilnost in specifična toplota.

Seveda moramo paziti pri AFM, ko so povprečni spini 0, če pa razdelimo mrežo na dve podmreži, lahko dobimo za vsako mrežo od niž različen spin in njuna vsota je seveda od 0 različna. A gremo lepo po vrsti. Energijo lahko izračunamo v vsakem stanju. Oglejmo si spin. Pri vsaki konfiguraciji ga izračunamo z vsoto:

$$S = \sum_i s_i,$$

oziroma:

$$S = \sum_{i,j} (-1)^{i+j} s_{i,j},$$

če gre za AFM, kjer par (i,j) pomeni lego v spinski mreži.
Definiramo $\langle\rangle$ kot povprečje po konfiguracijah. Tako velja:

$$\langle S \rangle = \frac{1}{N_C} \sum_C S,$$

kjer so C konfiguracije. Podobno lahko določimo tudi $\langle S^2 \rangle$,$\langle E \rangle$ in $\langle E^2 \rangle$. S tem orožjem pa se lahko lotimo specifične toplote in sukceptibilnosti:

$$c = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{NT^2} \quad \chi = \frac{\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2}{NT},$$

če merimo temperaturo v enotah $1/k_B$. To je že preprosto. Vendar pa konfiguracije ne rastejo ravno na drevesih. Da ne bi povprečil po enakih, lahko vzamemo le tiste, pri katerih se stanje spremeni. A spremeni se zelo malo, le za en spin. Tako da je bolje počakati, da se med stanji zabriše sled, recimo da se obrne N spinov, kjer je N število vseh spinov v mreži. Tako dobimo verne prikaze povprečij, čeprav na to stane malo računalniškega časa. Povprečil sem po 16000 konfiguracijah, tj, 1.6 milijona uspelih potez, kar nanese kar 160 miljonov potez pri temperaturah manjših od T_c. A ksreči se ta številka z naraščanjem temperature zmanjšuje. Kar je logično, saj zviševanje temprature poveča prostor, za katerega je verjetnost dostopa končna.

Lahko opazujemo tudi histerezo. Definiral sem magnetizacijo kot povprečen spin, gostoto polja pa kot vsoto magnetizacije in zunajega polja in dobil histerezo. Spet presentljiv rezultat preprostega modela:

$$M = \frac{1}{N} S \quad B = M + H$$

Na koncu sem gledal še korelacijski čas. Definirali smo ga kot razmerje med povprečnim σ, računanem na intervalu dolžine L in σ vseh rezultatov. σ intervala dolžine L izračunamo kot:

$$\sigma_x^2(L_i) = \frac{1}{L} \sum_{j \in L_i} x_j^2 - \left(\frac{1}{L} \sum_{j \in L_i} x_j \right)^2,$$

kjer je L_i i-ti interval dolžine L, vseh intervalov dolžine L pa je ravno M, tako da velja $LM = N$, če je N število podatkov. Celoten σ dobimo z:

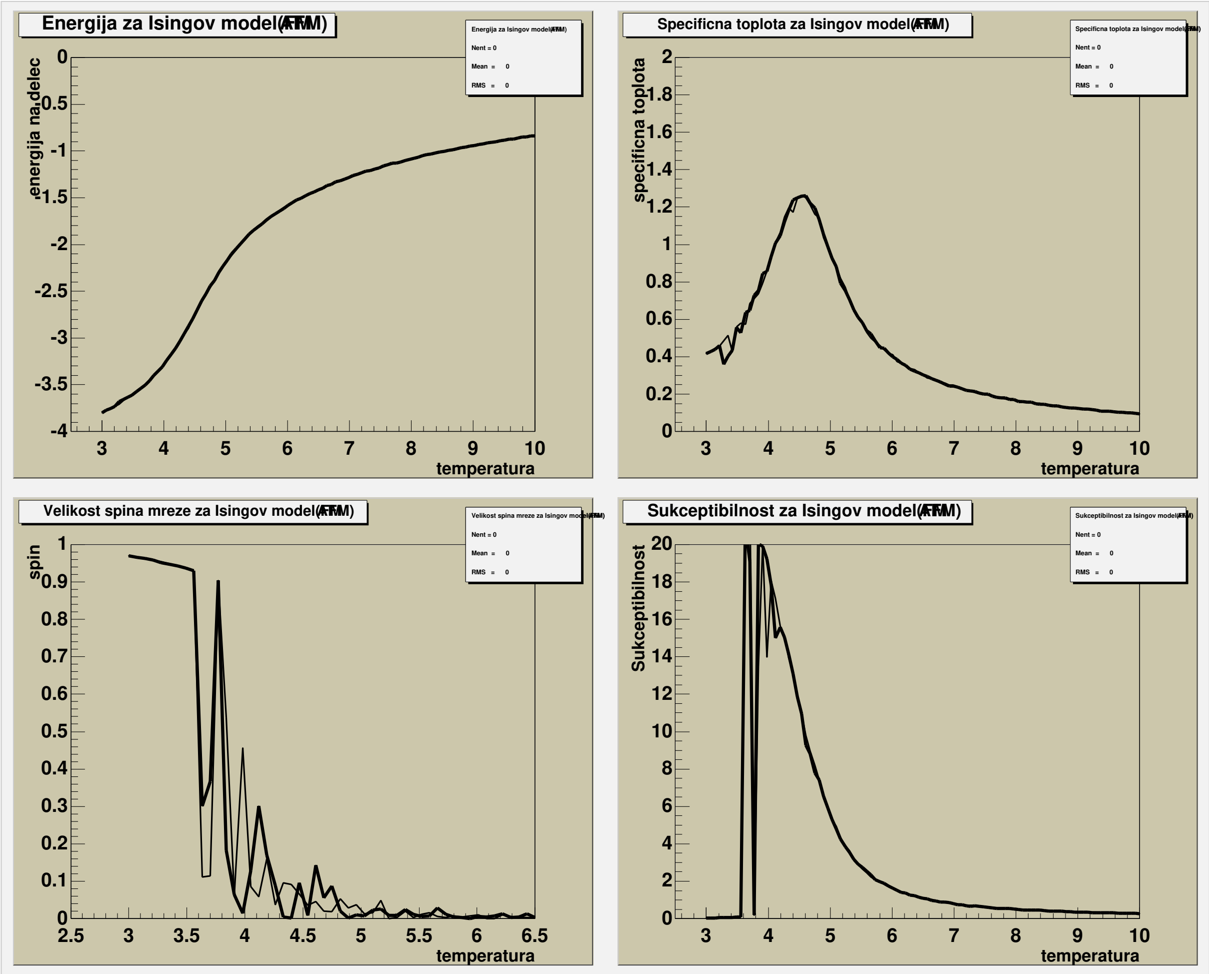
$$\sigma_x^2 = \frac{1}{N} \sum_j x_j^2 - \left(\frac{1}{N} \sum_j x_j \right)^2.$$

Primerjamo povprečje prvih:

$$\overline{\sigma_x^2(L)} = \frac{1}{M} \sum_{L_i} \sigma_x^2(L_i)$$

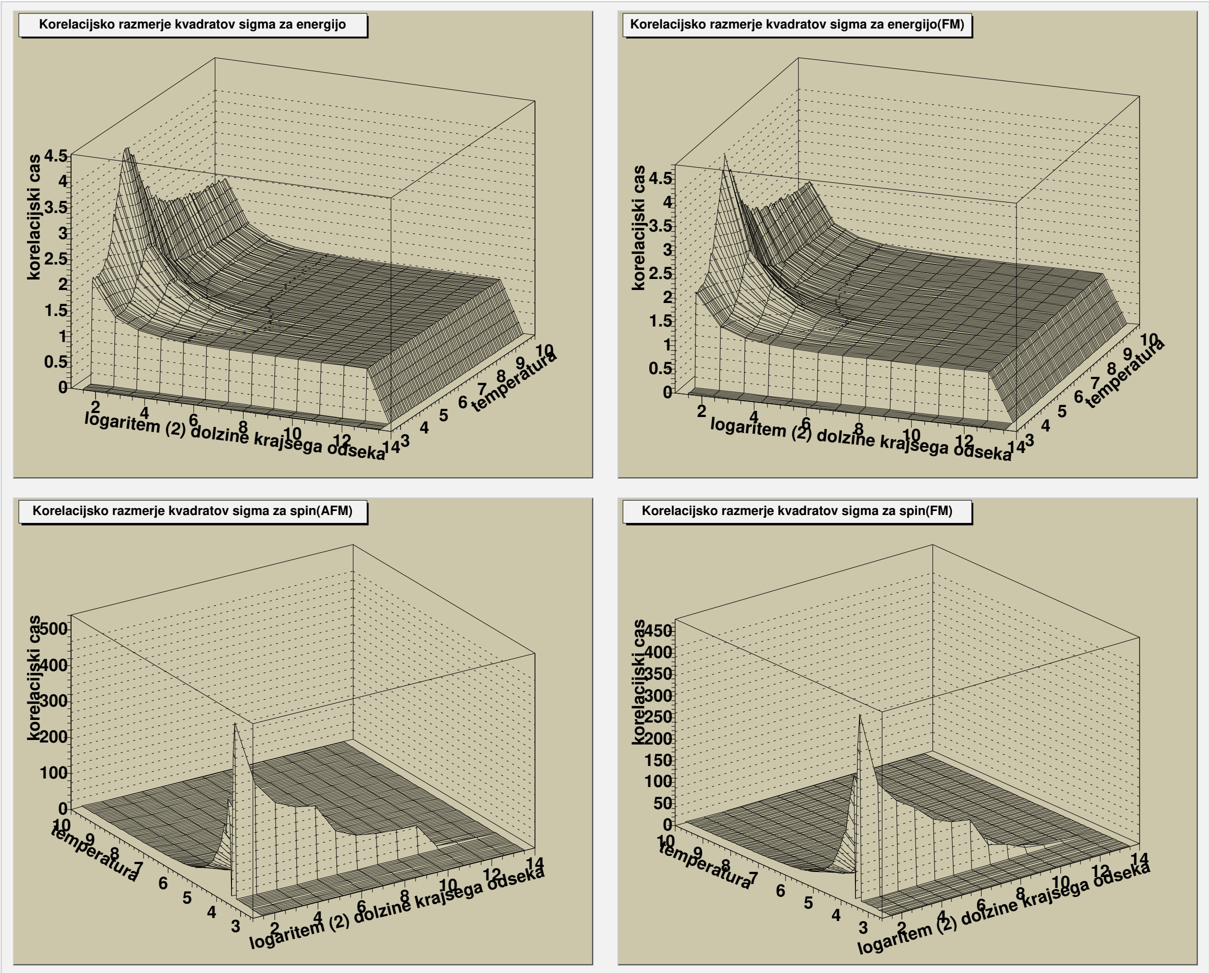
s pravo σ:

$$t = \frac{\sigma_x^2}{\overline{\sigma_x^2(L)}}.$$



Slika 7: PRimerjava med FM in AFM v nekaterih glavnih značilnostih sistema. Seveda gledamo energijo (zgoraj levo), ki za oba teče skoraj enako. Gledamo tudi absolutni spin oziroma spontanto magnetizacijo pri obeh. Tu se pokaže tista slabost Metropolisovega algoritma, da se ne more odločiti, v kater režim prevzaprav spada. Kt da bi imeli dvofazni seistem, kjer je pol stanj že FM oziroma AFM, pol pa še ne. Daleč pod T_c dobimo spontano magnetizacijo blizu velikosti spina. Specifična toplota ima res kupček okrog faznega prehoda, ki se sklada s prevojem energije in koncem spontane magnetizacije, tako da je to res T_c za naš sistem. Močno divergenco pri obeh pa doživi tudi sukceptibilnost, bi ima spet nekaj težav na prehodu. Seveda za AFM kar se spinov tice gledamo vsoto podmrežnih spinov in sukceptibilnosti.

Ko bo ta čas ravno 1, bo razpršenost v posameznih odsekih enaka razpršenosti celotne rešitve in bodo odseki reprezentativni. Dobili bomo nek L_c, korelacijsko dolžino. Za manjše odseke velja, da so njihova povprečja med seboj še korelirana in nam zato ne morejo služiti kot prava, daljši pa povedo enako kot cel odsek. Zanimivo je, da tako korelacijska dolžina kot korelacijski čas v okolici faznega prehoda divergirata. “se bolj se poveča korelacija spinov, manj pa energije. Vzrok je verjetno nihanje med dvema podobno verjetnima stanjema (ravnovesno stanje pod T_c z urejenimi spini in ravnovesno stanje nad T_c s povprečnim spinom 0). V vsakem se zadrži kar precej časa, kar nam da majhne odmike na drobni skali, vendar pa med obema preskakuje, kar nam da veliko razpršenost na veliki skali. Korelacijska dolžina pa ravno pove, kakšna je valovna dolžina (v enotah potez) takega preskakovanja.



Slika 8: Na koncu še korelacijski čas. To je pravzaprav razmerje med odmikom povprečja na globalni skali in odmikom povprečja na drobni skali. LAhko se namreč pojavijo nekakšni valovi, ki so znotraj svojega konteksta le malo razpršeni, kar zazna tudi drobna sigma, a nam dajo v globalni skali ravno zaradi svoje valovitosti sorazmerno velik razpon. Očitno je, da bo razmerje vedno večje od 1, ko pa bo 1, bo razpršenost na drobni skali enaka razpršenosti v globalu in drobni odsek bo reprezentativen. Zaradi dvojnega težišča blizu prehoda je tam zelo pogost pojav valov, kar nam kaže velik dvig korelacijskega časa. In še en indikator T_c, ki ni nujno neodvisen od prejšnjih. Spini so ravno zaradi svoje diskretne narave še posebej nagnjeni k velikim korelcaijskim časom blizu prehoda, celo 400 in več. Primerjava med različno predznačenimi J pa ne da pametnejših rezultatov.