Lekce 11

Metoda Monte Carlo II

Metropolisův algoritmus

<u>Osnova</u>

1. Řešený problém
2. Základní pojmy
3. Markovovy řetězce
4. Konstrukce matice přechodu
5. Metropolisův algoritmus pro kanonický soubor

Řešený problém

Výpočet konfigurační části integrálů, kterými statistická termodynamika definuje vztah mezi mikroskopickými a makroskopickými parametry

$$B_{\mathrm{KON}} = \int_{\mathbb{R}^{3N}} b_{\mathrm{KON}}(\vec{r}_k)\, \rho_{\mathrm{INT}}(\vec{r}_k;\ldots)\, \mathrm{d}^3\vec{r}_1 \ldots \mathrm{d}^3\vec{r}_N$$

pomocí vhodně *generovaných* posloupností konfigurací

$$B_{\mathrm{KON}} \approx \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} b_{\mathrm{KON}}(\vec{r}_k^{\,(i)})\, \rho_{\mathrm{INT}}(\vec{r}_k^{\,(i)};\ldots).$$

Nedořešená otázka z předchozí lekce

Jak generovat konfigurace $[\vec{r}_1^{\,(i)},\ldots,\vec{r}_N^{\,(i)}]$?

Ukážeme v této lekci, nejdříve ale ještě jeden krátký výlet do teorie pravděpodobnosti.

Základní pojmy

Pro jednoduchost předpokládáme, že konfigurační prostor studovaného systému je konečný, $S = \{s_1,\ldots,s_N\}$.

Mikrostav

element konfiguračního prostoru, konfigurace (s_i).

Makrostav

normované rozdělení (distribuce) pravděpodobnosti nalezení systému v jednotlivých mikrostavech

$$\rho = [\rho_1, \ldots, \rho_N].$$

Vlastnosti ρ: $\rho_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^{N} \rho_i = 1.$

Pravděpodobnostní distribuce statistické termodynamiky jsou jednoznačně určeny vybranými makroskopickými parametry definujícími makrostav systému, můžeme je proto s makrostavem ztotožnit.

Základní pojmy

Matice přechodu (stochastická matice)

matice Π, jejíž element π_{ij} udává pravděpodobnost přechodu systému z mikrostavu s_i do mikrostavu s_j.

Implicitní předpoklad
Systém nemá paměť, pravděpodobnost přechodu závisí jen na aktuálním mikrostavu, ne na mikro-stavech, v nichž se systém nacházel dříve.

Vlastnosti matice přechodu

$$\pi_{ij} \geq 0, \quad \sum_{j=1}^{N} \pi_{ij} = 1.$$

Změna makrostavu

$$\boxed{\rho'_j = \sum_{i=1}^{N} \pi_{ij} \rho_i \quad \Rightarrow \quad \rho' = \rho \cdot \Pi.}$$

Základní pojmy

Postulát ergodicity

Pravděpodobnost dosažení mikrostavu s_j z mikrostavu s_i je pro každdou dvojici (i, j) nenulová v konečném počtu kroků. Přesněji

$$\boxed{\forall i, j \in \{1, \ldots, N\}\ \exists k \in N: \quad \text{pro}\ \ \rho' = \rho \cdot \Pi^k\ \ je\ \ \rho'_j > 0,\ \text{je-li}\ \ \rho_i = 1.}$$

Rovnovážná distribuce

$$\boxed{\rho_0 = \rho_0 \cdot \Pi}$$

Platí $\rho_0 = \lim\limits_{k \to +\infty} \left(\rho \cdot \Pi^k \right)$, kde ρ je libovolná distribuce.

Markovovy řetězce

Náhodné posloupnosti mikrostavů $\{s^{(1)},s^{(2)},\dots,s^{(n)}\}$ vygenerované pomocí jisté matice přechodu Π.

Pravděpodobnost přechodu $s^{(i)} \to s^{(i+1)}$ závisí jen na $s^{(i)}$, ne na stavech předcházejících ($s^{(i-1)},\dots, s^{(i+1)}$)!

Věta

Pro $n \to +\infty$ jsou mikrostavy $s^{(i)}$ rozloženy ve stavovém (konfiguračním) prostoru S s relativními četnostmi odpovídajícími rovnovážné distribuci ρ_0 matice přechodu Π, tj.

$$\lim_{n\to+\infty} \frac{n(s_i)}{n} = \rho_{0i}.$$

Jak tedy generovat konfigurace během MC výpočtu?

Jako Markovovy řetězce pomocí jakékoli matice přechodu, jejíž rovnovážnou distribucí je distribuce odpovídající danému statisticko-termodynamickému souboru.

Konstrukce matice přechodu

Problém při použití Markovových řetězců v MC výpočtech: Neznáme matici přechodu, jen její rovnovážnou distribuci.

Je možno matici přechodu pro danou rovnovážnou distribuci zkonstruovat?

Ano, a to dokonce více způsoby. Matematicky to znamená řešit soustavu rovnic

$$\sum_{i=1}^{N} \rho_{0i}\,\pi_{ij} = \rho_{0j}; \quad j = 1,\ldots,N.$$

Obvykle se používá silnější verze - **princip detailní rovnováhy**

$$\boxed{\rho_{0i}\pi_{ij} = \rho_{0j}\pi_{ji}.}$$

Konstrukce matice přechodu

Metropolisovo řešení

a) $\pi_{ij} = \tau_{ij}\,\alpha_{ij}$,

b) τ_{ij} … matice pravděpodobnosti návrhu nového mikrostavu,

c) α_{ij} … matice pravděpodobnosti přijetí nového mikrostavu,

d)

$$\boxed{\alpha_{ij} = \min\left[1, \frac{\rho_{0j}}{\rho_{0i}} \frac{\tau_{ji}}{\tau_{ij}}\right].}$$

Obvykle volíme $\tau_{ij} = \tau_{ji}$, pak platí

$$\boxed{\alpha_{ij} = \min\left[1, \frac{\rho_{0j}}{\rho_{0i}}\right].}$$

Metropolisův algoritmus pro kanonický soubor

Postup při generování konfigurace $\vec{x}^{(i+1)} \equiv \left[\vec{r}_1^{(i+1)},\ldots,\vec{r}_N^{(i+1)}\right]$ **z konfigurace předcházející,** $\vec{x}^{(i)}$ **:**

a) konfiguraci $\vec{x}^{(i)}$ změníme přičtením náhodných posunutí $\Delta\vec{x} \equiv \left[\Delta\vec{r}_1,\ldots,\Delta\vec{r}_N\right]$

$$\vec{x}^{(+)} \equiv \vec{x}^{(i)} + \Delta\vec{x} \equiv \left[\vec{r}_1^{(i)} + \Delta\vec{r}_1,\ldots,\vec{r}_N^{(i)} + \Delta\vec{r}_1\right],$$

kde $\Delta\vec{r}_j$ volíme náhodně z nějaké izotropní distribuce kolem počátku souřadnic (např. náhodné izotropní posunutí uvnitř koule o daném poloměru),

b) určíme $W^{(+)} = W(\vec{x}^{(+)})$ a $\Delta W \equiv W^{(+)} - W^{(i)}$ ($W^{(i)}$ známe z předcházejícího kroku),

c) je-li $\Delta W \leq 0$, položíme $\vec{x}^{(i+1)} = \vec{x}^{(+)}$,

je-li $\Delta W > 0$, položíme $\vec{x}^{(i+1)} = \vec{x}^{(+)}$ s pravděpodobností $e^{-\Delta W / k_B T}$ a $\vec{x}^{(i+1)} = \vec{x}^{(i)}$ s pravděpodobností $1 - e^{-\Delta W / k_B T}$.

Doporučená literatura

I. NEZBEDA, J. KOLAFA, M. KOTRLA
Úvod do počítačových simulací, kap. 4
Karolinum, Praha 2003

D. P. LANDAU, K. BINDER
A Guide to MC Simulations in Statistical Physics
Cambridge University Press, Cambridge 2005

M. M. WOOLFSON, G. J. PERT
An Introduction to Computer Simulation, kap. 4
Oxford University Press, New York 1999