
Modelowanie komputerowe

Raport

Magnets via Wang-Landau sampling

Katarzyna Gajewska

Michał Kreft

Tomasz Biel

25 styczeń 2022

1. Wstęp

Jako przedmiot naszego projektu wybraliśmy przanalizowanie zagadnienia próbkowania Wanga-Landaua. Jest to jedna z metod Monte-Carlo dająca wynik w dużo szybszym czasie niż algorytm Metropolis.

2. Algorytm próbkowania Wanga-Landaua

Algorytm Wanga-Landaua jest to metoda Monte Carlo przeznaczona do szacowania gęstości stanów układu. Metoda polega na wykonaniu niemarkowskiego błędzenia losowego w celu zbudowania gęstości stanów poprzez szybkie zbadanie wszystkich dostępnych widm energetycznych. Algorytm ten jest ważną metodą uzyskiwania gęstości stanów wymaganych do przeprowadzenia symulacji wielokanonicznej. Algorytm Wanga-Landaua można zastosować do dowolnego systemu, który charakteryzuje się funkcją kosztu (lub energii). Na przykład został zastosowany do rozwiązywania całek numerycznych i fałdowania białek. Próbki Wanga-Landaua jest powiązane z algorytmem metadynamiki.

Algorytm Wanga-Landaua służy do oszacowania gęstości stanów układu charakteryzującego się funkcją kosztu. Wykorzystuje niemarkowski proces stochastyczny, który asymptotycznie zbiega się w wielokanoniczny zespół (tj. do algorytmu Metropolis-Hastings z rozkładem próbkowania odwrotnym do gęstości stanów). Główną konsekwencją jest to, że ten rozkład próbkowania prowadzi do symulacji, w której bariery energetyczne są niewidoczne. Oznacza to, że algorytm sprawdza wszystkie dostępne stany (korzystne i mniej korzystne) znacznie szybciej niż algorytm Metropolis.

3. Metodologia w ćwiczeniu

Kroki w WLS są podobne do tych w algorytmie Metropolis, ale teraz wykorzystuje się funkcję gęstości stanów $g(E_i)$ zamiast współczynnika Boltzmanna:

1. Zaczynamy od dowolnej konfiguracji spinu $\alpha_k = s_1, s_2, \dots, s_N$ oraz z dowolnymi wartościami gęstości stanów $g(E_i) = 1, i = 1, \dots, M$, gdzie $M = 2^N$ to liczba stanów układu.

2. Generujemy próbną konfigurację α_{k+1} przez:

- wybieranie cząstki i losowo
- obracanie spinu i .

3. Wyliczamy energię $E_{\alpha_{tr}}$ konfiguracji próbnej.

4. Jeśli $g(E_{\alpha_{tr}}) \leq g(E_k)$, akceptujemy próbę, czyli ustawiamy $\alpha_{k+1} = \alpha_{tr}$.

5. Jeśli $g(E_{\alpha_{tr}}) > g(E_k)$, akceptujemy próbę z prawdopodobieństwem $P = g(E_{\alpha_k})/g(E_{\alpha_{tr}})$:

- wybieramy jednolitą liczbę losową $0 \leq r_i \leq 1$.
- ustawiamy α_{k+1} równe α_{tr} gdy $P \geq r_j$ lub α_k gdy $P < r_j$.

Ta zasada akceptacji może być zwięźle wyrażona jako:

$$P(E_{\alpha_k} \rightarrow E_{\alpha_{tr}}) = \min\left[1, \frac{g(E_{\alpha_k})}{g(E_{\alpha_{tr}})}\right], \quad (6)$$

która w sposób oczywisty zawsze akceptuje stany o niskiej gęstości (nieprawdopodobne). 6. Gdy mamy nowy stan, modyfikujemy aktualną gęstość stanów $g(E_i)$ za

pomocą multi-współczynnika składania f :

$$g(E_{\alpha k+1}) \rightarrow f \cdot g(E_{\alpha k+1}),$$

i dodajemy 1 do kosza w histogramie odpowiadającym nowej energii:

$$H(E_{\alpha k+1}) \rightarrow H(E_{\alpha k+1}) + 1.$$

7. Wartość mnożnika jest empiryczna. Zaczynamy od liczby Eulera $f = e = 2,71828$, która wydaje się zapewniać dobrą równowagę między bardzo dużą liczbą małych kroków (małe f) a zbyt szybkimi skokami w przestrzeni energetycznej (duże f). Ponieważ entropia $S = k_B \cdot \ln[g(E_i)] \rightarrow k_B[\ln[g(E_i)] + \ln f]$, odpowiada jednostajnemu wzrostowi entropii o k_B .

8. Nawet przy rozsądnych wartościach f , powtarzane mnożenia prowadzą do wykładniczego wzrostu wielkości g . Może to spowodować przepełnienia zmiennoprzecinkowe i zgodną z tym utratę informacji (ostatecznie wielkość $g(E_i)$ nie ma znaczenia, ponieważ funkcja jest znormalizowana). Tych przepełnień można uniknąć poprzez pracę z logarytmami wartości funkcji, w którym to przypadku aktualizacja gęstości stanów staje się

$$\ln[g(E_i)] \rightarrow \ln[g(E_i)] + \ln[f].$$

9. Trudność z przechowywaniem $\ln[g(E_i)]$ polega na tym, że do obliczenia prawdopodobieństwa potrzebny jest stosunek wartości $g(E_i)$. Można to obejść, wykorzystując tożsamość $x = \exp(\ln[x])$ do wyrażenia stosunku jako:

$$\frac{g(E_{\alpha k})}{g(E_{\alpha tr})} = \exp[\ln \frac{g(E_{\alpha k})}{g(E_{\alpha tr})}] = \exp[\ln[g(E_{\alpha k})] - \ln[g(E_{\alpha tr})]]. \quad (7)$$

Z kolei $g(E_k) = f \cdot g(E_k)$ jest modyfikowane do

$$\ln[g(E_k)] \rightarrow \ln[g(E_k)] + \ln[f].$$

10. Spacer losowy w E_i trwa do momentu uzyskania płaskiego histogramu odwiedzonych wartości energii. Płaskość histogramu jest regularnie testowana (co 10 000 iteracji), a spacer kończy się, gdy histogram jest wystarczająco płaski. Wartość f jest następnie zredukowana, aby następny spacer zapewniał lepsze przybliżenie do $g(E_i)$. Płaskość mierzy się, porównując wariancję w $H(E_i)$ do jej średniej. Chociaż w przypadku małych problemów, takich jak nasz, można uzyskać płaskość 90%-95%, wymagane jest tylko 80%:

Jeśli $\frac{H_{max} - H_{min}}{H_{max} + H_{min}} < 0,2$ to przerywamy, a $f \rightarrow \sqrt{f}(\ln[f] \rightarrow \ln[f/2])$

11. Następnie zachowujemy wygenerowane $g(E_i)$ i resetujemy wartości histogramu $h(E_i)$ do zera.

12. Spacer jest zakończony i rozpoczynane są nowe, dopóki nie zostanie osiągnięta znacząca korekta gęstości stanów. Jest to mierzone przez wymaganie mnożnika $f \simeq 1$ w ramach pewnego poziomu tolerancji; na przykład $f \leq 1 + 10^{-8}$. Jeśli algorytm się powiedzie, histogram powinien być płaski w swoich granicach.

13. Ostatnim etapem symulacji jest normalizacja wydedukowanej gęstości stanów

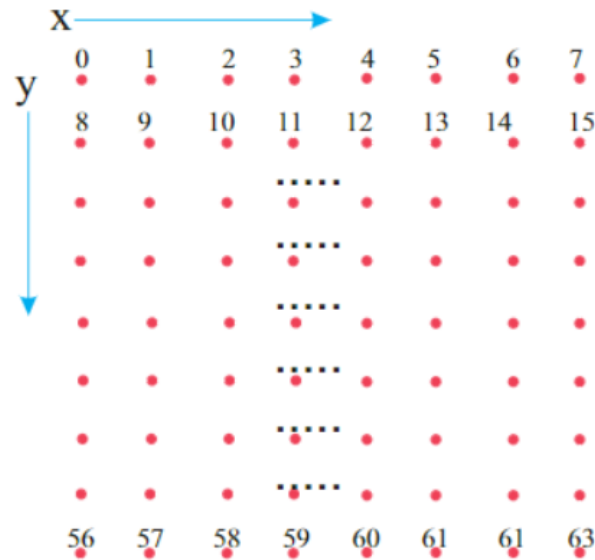
$g(E_i)$. Dla modelu Isinga z N spinami w górę lub w dół, warunek normalizacji wynika ze znajomości całkowitej liczby stanów:

$$\sum_{E_i} g(E_i) = 2^N g^{(norm)}(E_i) = \frac{2^N}{\sum_{E_i} g(E_i)} g(E_i) \quad (8)$$

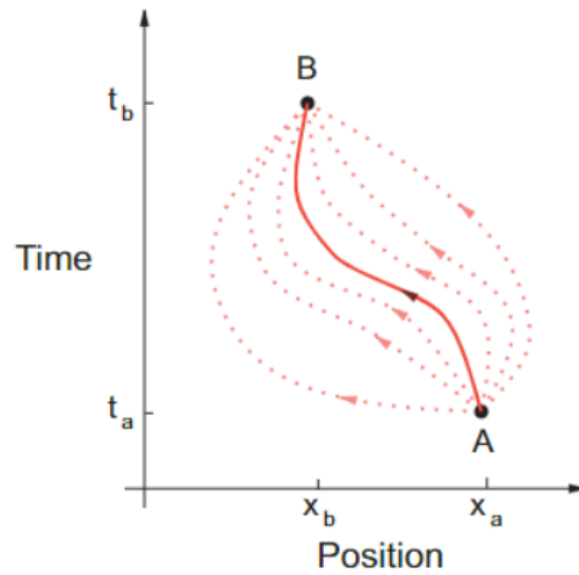
Ponieważ na sumę największy wpływ mają te wartości energii, w których $g(E_i)$ jest duże, może nie być dokładne dla gęstości o niskim E_i , które mają niewielki wpływ na sumę. W związku z tym, bardziej precyzyjna normalizacja, przynajmniej jeśli symulacja wykonała dobrą robotę w zajmowaniu wszystkich stanów energetycznych, polega na wymaganiu, aby istniały tylko dwa stany podstawowe o energiach $E = 2N$ (jeden ze wszystkimi obrotami i jeden ze wszystkimi obrotami w dół):

$$\sum_{E_i=-2N} g(E_i) = 2 \quad (9)$$

W obu przypadkach dobrą praktyką jest znormalizowanie $g(E_i)$ z jednym warunkiem, a następnie użycie drugiego jako sprawdzenia.



Rysunek 1: Schemat numeracji zastosowany w naszej implementacji WLS modelu 2-D Ising ze spinami siatki 8 x 8



Rysunek 2: W ujęciu mechaniki kwantowej z całką ścieżkową Feynmana zbiór ścieżek łączy początkowy punkt czasoprzestrzenny A z końcowym punktem B. Linia ciągła to trajektoria, po której podąża cząstka klasyczna, podczas gdy linie przerywane to dodatkowe ścieżki próbkowane przez cząstkę kwantową. Klasyczna cząstka w jakiś sposób „wie” z wyprzedzeniem, że podróż po klasycznej trajektorii minimalizuje akcję S .

4. Bibliografia

W raporcie nie posłużyliśmy się żadną bibliografią. Całość jest na podstawie prezentacji, która z kolei była na podstawie dokumentu PDF odnośnie tejże metody.