

Paralelní tempering

Lukáš Michalec

*Katedra fyziky, Přírodovědecká fakulta Univerzity J.E. Purkyně v Ústí n.L.
ročník, specializace*

Abstract

Seminární práce se zabývá metodou paralelního temperingu, který nám zjednoduší a zefektivní vzorkování v MC (Monte Carlo) simulaci. Simulací je pohyb částice v nějakém předem určeném silovém poli.

1 Úvod

Na začátku máme částici o určité teplotě (T) a silové pole, které je charakterizované potenciálem ($U(x)$). Jako v přírodě, i zde bude mít částice tendenci setrvávat v bodě s nejmenší potenciální energií, ale na druhou stranu bude mít určitou pravděpodobnost ($P(T,U)$), že se dostane do místa s větší potenciální energií. Čím větší teplotu daná částice bude mít, tím méně bude její pohyb určován silovým polem.

Cílem bude zjistit, v jakých místech s určitou teplotou se daná částice bude nejčastěji nalézat.

2 Teorie

Potenciál silového pole je předepsaný následovně:

$$\begin{aligned} U(x) &= \infty, x < -2 \\ &= 1.[1 + \sin(2\pi x)], -2 \leq x \leq -1.25 \\ &= 2.[1 + \sin(2\pi x)], -1.25 \leq x \leq -0.25 \\ &= 3.[1 + \sin(2\pi x)], -0.25 \leq x \leq 0.75 \\ &= 4.[1 + \sin(2\pi x)], 0.75 \leq x \leq 1.75 \\ &= 5.[1 + \sin(2\pi x)], 1.75 \leq x \leq 2 \\ &= \infty, x > 2 \end{aligned} \tag{1}$$

Plot

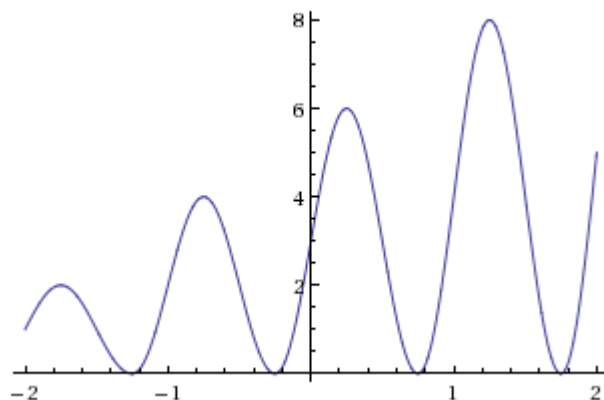


Figure 1: Graf potenciálu silového pole

V grafu 1 vidíme 4 lokální minima, kde se bude naše částice nejpravděpodobněji nejčastěji nalézat. Mezi těmito minimy jsou 4 maxima, které bude muset částice překonat. S vyšší teplotou bude mít i vyšší pravděpodobnost, že se přes vrcholek dostane.

2.1 Postup simulace pohybu částice v poli

K simulaci pohybu naší částice v potenciálním poli, použijeme metodu MC (Monte Carlo). Na začátku inicializujeme částici tím, že jí dáme do nějaké

počáteční polohy (x_0) a přiřadíme jí nějakou teplotu (T). Dále vygenerujeme náhodný posuv a spočteme pravděpodobnost, že se částice v dané poloze zůstane nebo se vrátí zpět. Při každé iteraci si zapíšeme polohu částice a pak z těchto poloh vygenerujeme histogram. Změníme teplotu a simulaci opakujeme.

2.1.1 Podrobný postup simulace

1. **Inicializace:** Zvolíme teplotu $T = 2^\circ\text{K}$ a počáteční polohu $x_0 = -1.25$. Dále nastavíme maximální posuv $maxDx = 0.1$.
2. Přičteme jedničku ke správnému BINu v histogramu, podle polohy částice. Pomocí:

$$I_{index} = INT\left(\frac{x_i - x_{min}}{\delta x}\right) + 1 \quad (2)$$

kde x_i je aktuální pozice částice, x_{min} je nejmenší souřadnice, ve které se částice může nalézat, δx je šířka BINu histogramu a funkce INT je funkce, která převádí datový typ REAL na INT.

Když jsme našli index BINu, můžeme hodnotu daného BINu inkrementovat:

$$HISTOGRAM(I_{index}) = HISTOGRAM(I_{index}) + 1 \quad (3)$$

kde *HISTOGRAM* je pole, které uchovává absolutní četnost výskytu částice v daném rozmezí.

3. Vygenerujeme novou pozici x_{i+1} v intervalu od $\langle x_i - 0.1; x_i + 0.1 \rangle$. Pomocí:

$$x_{i+1} = x_i + (2 * \alpha_1 - 1) * 0.1 \quad (4)$$

kde α_1 je náhodné číslo od (0, 1)

4. Zjistíme, jestli se částice může v nové poloze nalézat. Spočteme potenciální energii v nové poloze $U(x_{i+1})$ a porovnáme s potenciální energií v předchozím bodě $U(x_i)$.

Pokud $U(x_{i+1}) \leq U(x_i)$... novou pozici ihned přijmeme.

Pokud $U(x_{i+1}) > U(x_i)$... spočteme pravděpodobnost přijetí nové polohy pomocí:

$$p = e^{-\beta[U(x_{i+1})-U(x_i)]} \quad (5)$$

a pokud $\alpha_2 > p$, novou pozici přijmeme.

kde α_2 je náhodné číslo od $(0, 1)$

a $\beta = \frac{1}{k_B T}$

5. vracíme se n -krát zpět ke kroku (2), kde n je počet iterací.
6. Ke konci správně nafitujeme pole *HISTOGRAM*, aby nám místo absolutní četnosti dával informaci o relativní četnosti výskytu částice, pomocí:

$$HISTOGRAM(i) = \frac{HISTOGRAM(i)}{n} \quad (6)$$

3 Vylepšení pomocí paralelního temperingu

Hlavní myšlenkou tohoto vylepšení je zefektivnit simulaci při nižších teplotách, kdy částice by měla navštívit všechny minima stejně často krát, ale pravděpodobnost, že velmi studená částice překoná nějaké maximum je strašně malá a bylo by potřeba o několik řádů navýšit počet iterací.

Tohoto se můžeme vyhnout, pokud použijeme paralelní tempering, kde mimo lokální výměny polohy budeme počítat pohyb několik částic najednou s různou teplotou a budeme občas provádět globální výměny pozic částic.

Definujeme si a seřadíme simulace podle teploty:

$$\begin{aligned} C_1 &< C_2 < \dots < C_n \\ T_1 &< T_2 < \dots < T_n \end{aligned} \quad (7)$$

3.1 Implementace paralelního temperingu

1. Ve všech simulacích ($C_i, i \in \langle 1, n \rangle$) provádíme lokální pohyby.
2. Po n_α krocích zastavíme simulace a provedeme test výměny polohy částic.
3. Náhodně vybereme simulaci $C_i, i \in \langle 1, n-1 \rangle$ a zkusíme jí prohodit s následující C_{i+1}

4. Pro test výměny si spočteme parametr Δ :

$$\begin{aligned}\Delta &= \Delta\beta * \Delta U \\ \Delta\beta &= \beta_{i+1} - \beta_i \\ \Delta U &= U_{i+1} - U_i\end{aligned}\tag{8}$$

Vygenerujeme náhodné číslo α_3 a pokud: $\alpha_3 \leq e^{-\Delta}$ provedeme výměnu poloh částic C_i a C_{i+1} .

4 Výsledky a diskuze

Nejdříve si ukážeme, jak by vypadal histogram bez použití metody paralelního temperingu:

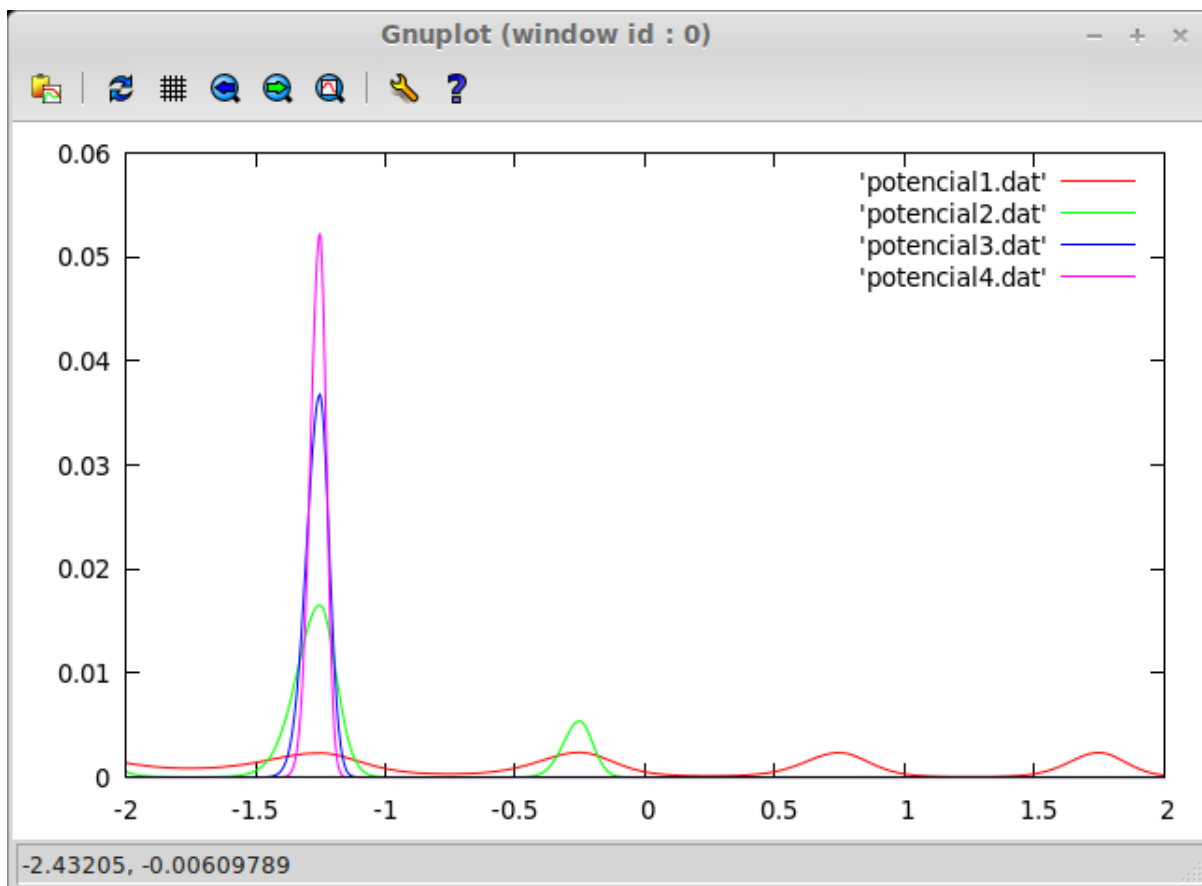


Figure 2: Histogram relativních četností bez paralelního temperingu

kde:

červená... odpovídá 2°K

zelená... odpovídá 0.3°K

modrá... odpovídá 0.1°K

fialová... odpovídá 0.05°K

Jak zde můžeme vidět, jako jediná částice s teplotou (2°K) navštívila všechny 4 minima potenciálního pole. Ostatní částice dokázali překonat maximálně jedno lokální maximum. Pokud implementujeme paralelní tempering, výsledný histogram výjde následovně:

V simulaci jsem použil tyto parametry:

Počet iterací	100 000 000
Prohazovací iterace	100 000.
Počet BINů	1000
Maximální posun	0.1
Oblast	(-2;2)

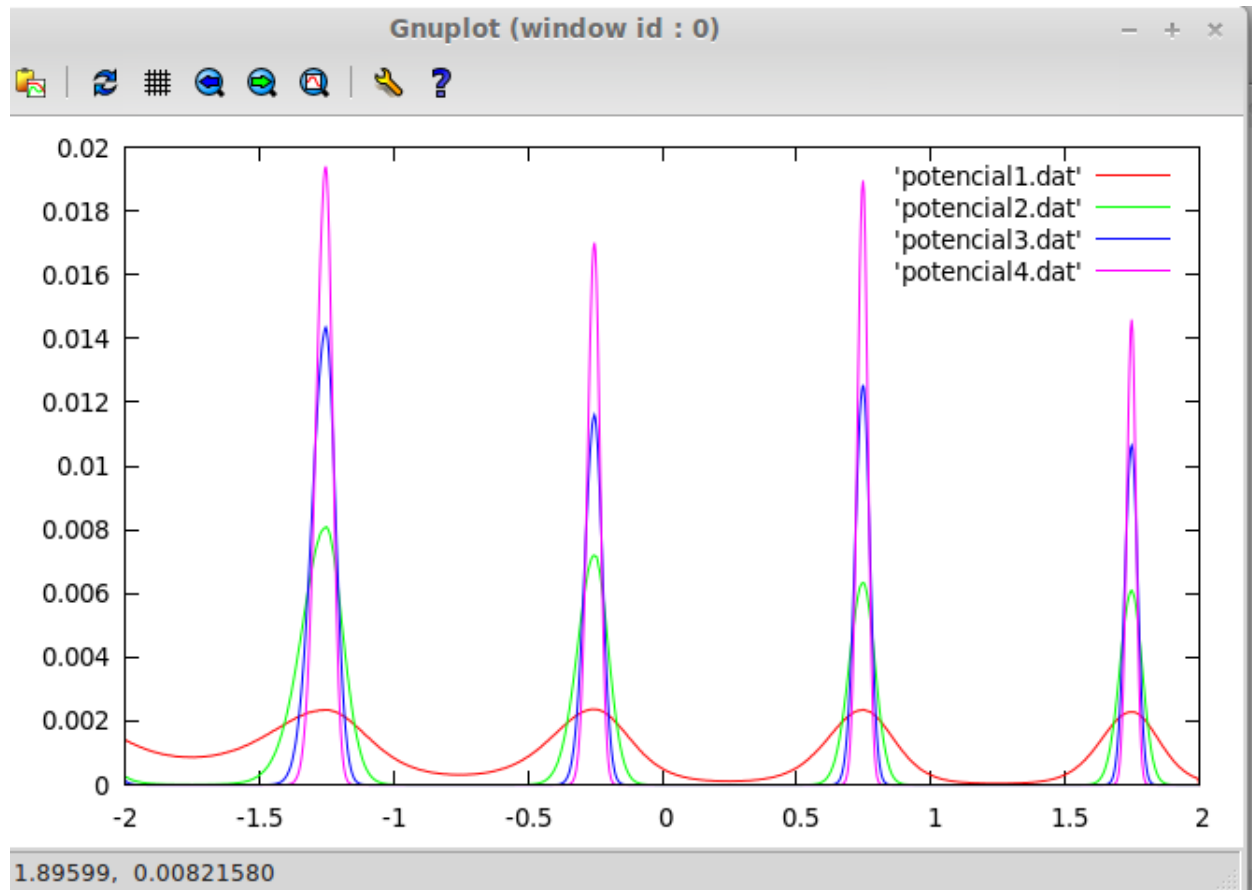


Figure 3: Histogram relativních četností

kde: červená... odpovídá 2°K
zelená... odpovídá 0.3°K
modrá... odpovídá 0.1°K
fialová... odpovídá 0.05°K

Jak lze z grafu 3 vidět, částice s největší teplotou byla nejméně ovlivňována silovým polem a její výskyt polohy byl nejvíce rovnoměrný.

Na dalším grafu 4 vidíme, co se stane, pokud teploty zvětšíme na (20°K, 10°K, 5°K a 2°K).

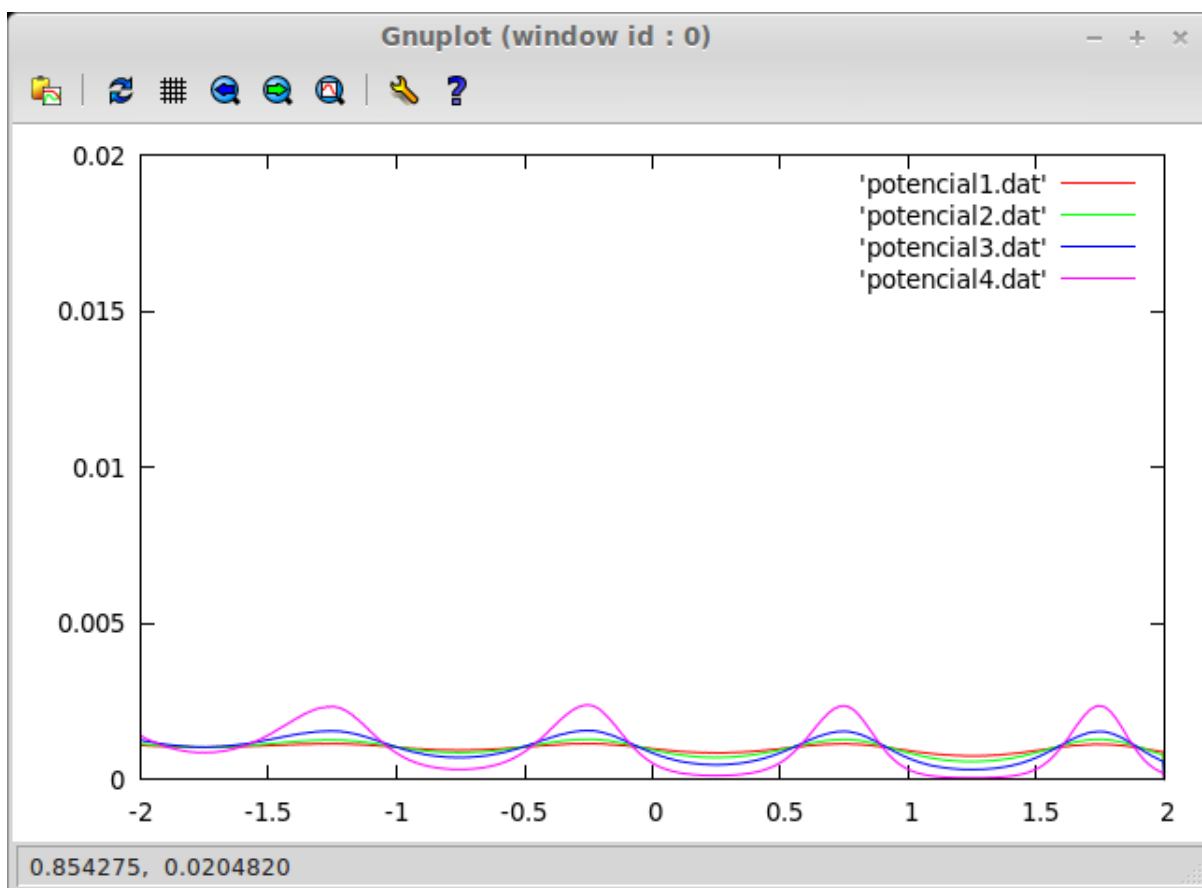


Figure 4: Histogram relativních četností

kde:

červená... odpovídá 20°K

zelená... odpovídá 10°K

modrá... odpovídá 5°K

fialová... odpovídá 1°K

Zde se nám krásně ukázalo, že částice, která měla teplotu 20° už nebyl téměř vůbec potenciálovým polem ovlivněna.

5 Závěr

Úlohou jsme si ověřili, že použití metody paralelního temperingu získáme efektivněji výsledky. A také jsme si ověřily, že částice, které mají větší teplotu tak se chovají rebelněji vůči okolním jevům.