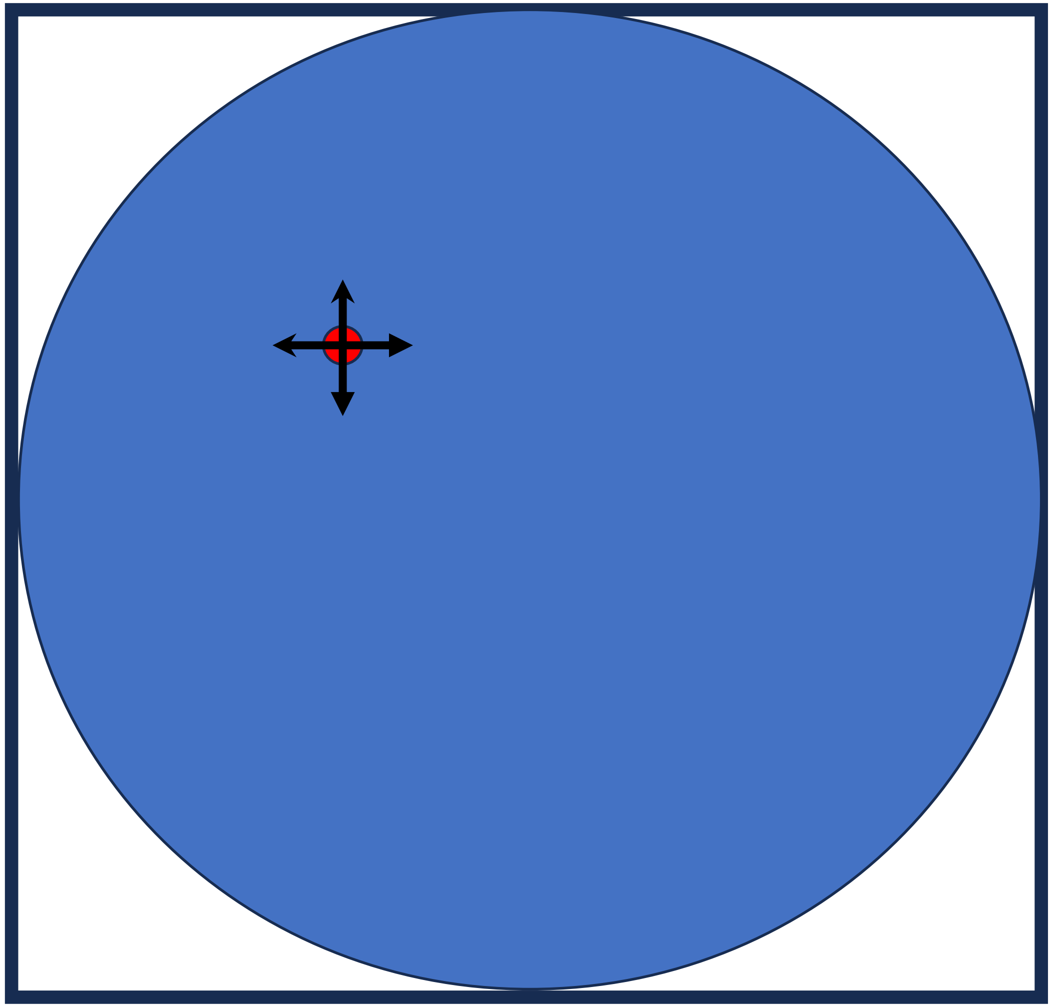
蒙特卡洛算法：随机游走

计算物理b
高阳

回顾



假如圆的面积过大（圆形球场！）
或者你的力气太小

采取投石（投点）法

在某个点的位置时，前后投的距离随机分布在$(-\epsilon,\epsilon)$，并且左右投的距离也随机分布在$(-\epsilon,\epsilon)$。前后与左右投是不相关的。此距离比圆和方形的尺寸要小很多。

投好点之后移动到那个点，然后接着投点。

这是一个马尔可夫过程，也即下一步的位置只与当前步相关（虽然当前步与前一步相关）。

算法思路与目标

- 从区域内随机某个点出发。
- 按照随机规则往左右投，再往前后投。
- 走到新的位置。如果此位置在圆内则计数器加1.
- 重复N步。
- 用计数器的值除以N，此即为点在圆内的概率。
- 用随机游走的方法抽样出了在正方形内的均匀分布！

一维随机游走(1)

- 考虑一个一维的晶格，有一个醉汉从x=0处开始行走，每次有p的概率向右一格，或者q的概率向左一格(p+q=1)。当醉汉行走N步时：
- 醉汉位置在第k个格点（k的奇偶性一定与N相同）：向右的步数为$\frac{N+k}{2}$,向左的步数为$\frac{N-k}{2}$，
- 故概率为$p(k,N)=2^{-N}p^{(N+k)/2}q^{(N-k)/2}C_N^{(N+k)/2}=2^{-N}p^{(N+k)/2}q^{(N-k)/2}\frac{N!}{\frac{N+k}{2}!\frac{N-k}{2}!}$
- 醉汉的平均位置

$$\langle k\rangle=\sum_k kp(k,N)=\sum_k 2^{-N}p^{(N+k)/2}q^{(N-k)/2}k\frac{N!}{\frac{N+k}{2}!\frac{N-k}{2}!}=I(p)$$

定义$1=T(p)=\sum_k 2^{-N}p^{(N+k)/2}q^{(N-k)/2}\frac{N!}{\frac{N+k}{2}!\frac{N-k}{2}!}$

$$0=\frac{dT}{dp}=\frac{N}{2p}T(p)+\frac{I(p)}{2p}-\frac{N}{2q}T(p)+\frac{I(p)}{2q}\ \Rightarrow I(p)=N(p-q)$$

一维随机游走(2)

- 同法可算平方平均:

$$\frac{dT}{dp}=\frac{N}{2p}T(p)+\frac{I(p)}{2p}-\frac{N}{2q}T(p)+\frac{I(p)}{2q}$$

$$\frac{dI}{dp}=\frac{N}{2p}I(p)+\left(\frac{1}{2p}+\frac{1}{2q}\right)\left\langle k^2\right\rangle-\frac{N}{2q}I(p)=2N$$

$\left\langle k^2\right\rangle=4Npq+(p-q)^2N^2$ 方差为$\left\langle k^2\right\rangle-\langle k\rangle^2=4Npq$

- 左右均匀的情况下

$$\langle k\rangle=0$$

$$\left\langle k^2\right\rangle-\langle k\rangle^2=N$$

标准差$\sqrt{N}$ 与扩散运动相同

是否均匀抽样?

- 考察极限情况：当抽样次数足够多时，假设有某种“平衡”分布p_i
  $$p_i = p\, p_{i-1} + q p_{i+1}$$
- 采取试探解
  $$p_i \propto \lambda^i$$
- 从而有
  $$1 = \frac{p}{\lambda} + q\lambda \quad \Rightarrow \lambda_1 = 1, \lambda_2 = \frac{p}{q}$$
- 所以$p_i \propto 1$或者 $p_i \propto \left(\frac{p}{q}\right)^i$
- 若p=q显然只有均匀解，否则应该是哪个解呢?
- 从有限N来看应该是第二个
- 所以为了获得均匀抽样，必须p=q=1/2

与布朗运动的关系

- 考察N足够大的时候的概率密度 (p=q=1/2时）

$$p(k,N) = 2^{-N} p^{(N+k)/2} q^{(N-k)/2} \frac{N!}{\frac{N+k}{2}!\frac{N-k}{2}!}$$

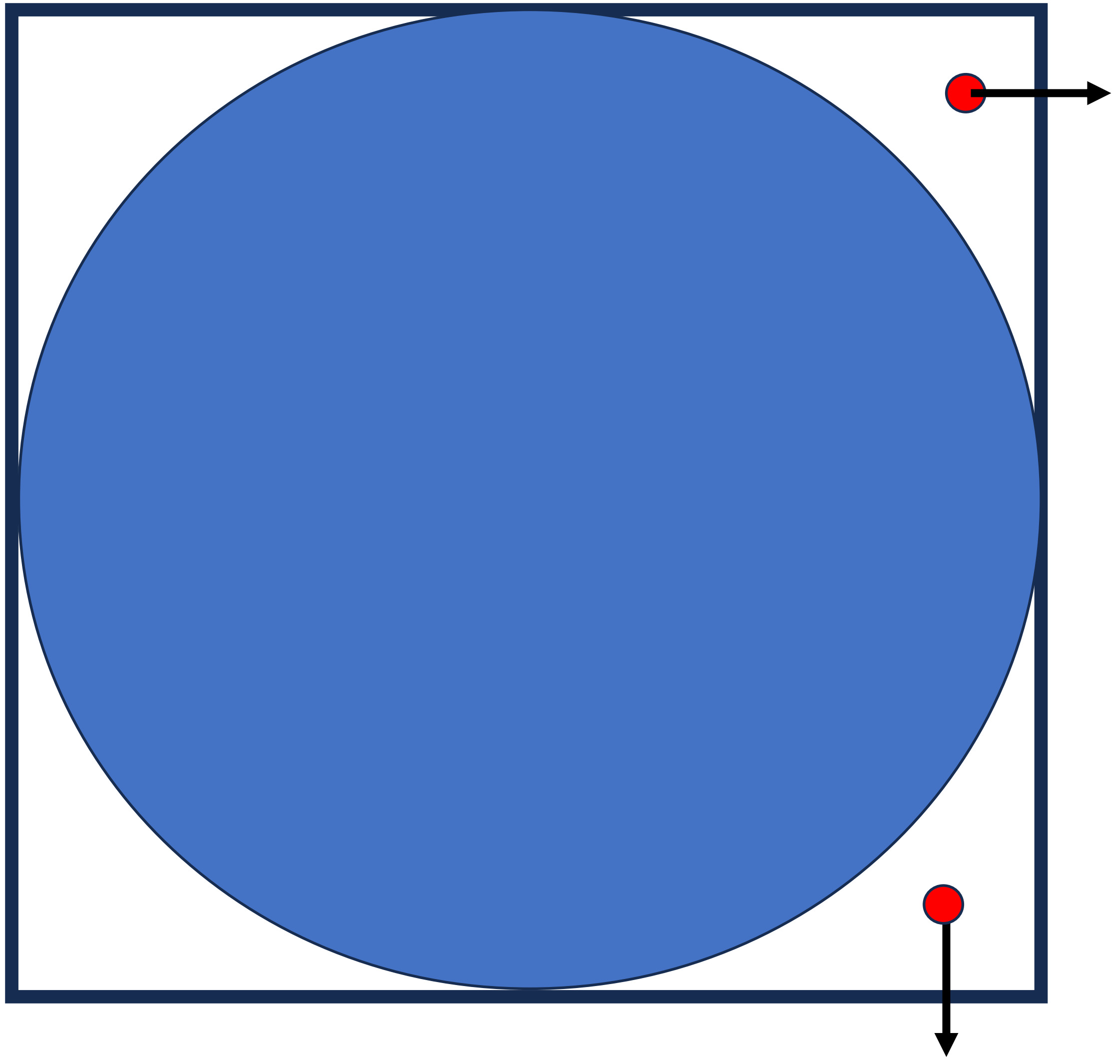
- 利用斯特林公式$N! \approx \left(\frac{N}{e}\right)^N$

$$p(k,N) = 2^{-N} p^{(N+k)/2} q^{(N-k)/2} \frac{N^N}{\left(\frac{N+k}{2}\right)^{(N+k)/2}\left(\frac{N-k}{2}\right)^{(N-k)/2}}$$

$$\begin{aligned}\ln p(k) &= -N\ln 2 + \frac{N+k}{2}\ln p + \frac{N-k}{2}\ln q + \frac{N+k}{2}\ln\frac{2N}{N+k} + \frac{N-k}{2}\ln\frac{2N}{N-k} \\ &= \frac{N+k}{2}\ln p + \frac{N-k}{2}\ln q - \frac{N+k}{2}\ln\left(1+\frac{k}{N}\right) - \frac{N-k}{2}\ln\left(1-\frac{k}{N}\right) \\ &= \frac{N+k}{2}\ln p + \frac{N-k}{2}\ln q - \frac{\mathrm{k}^2}{2\mathrm{N}} \approx -\frac{k^2}{2N}\end{aligned}$$

- $p(k) \propto e^{-\frac{k^2}{2N}}$ 高斯分布。此即为布朗运动

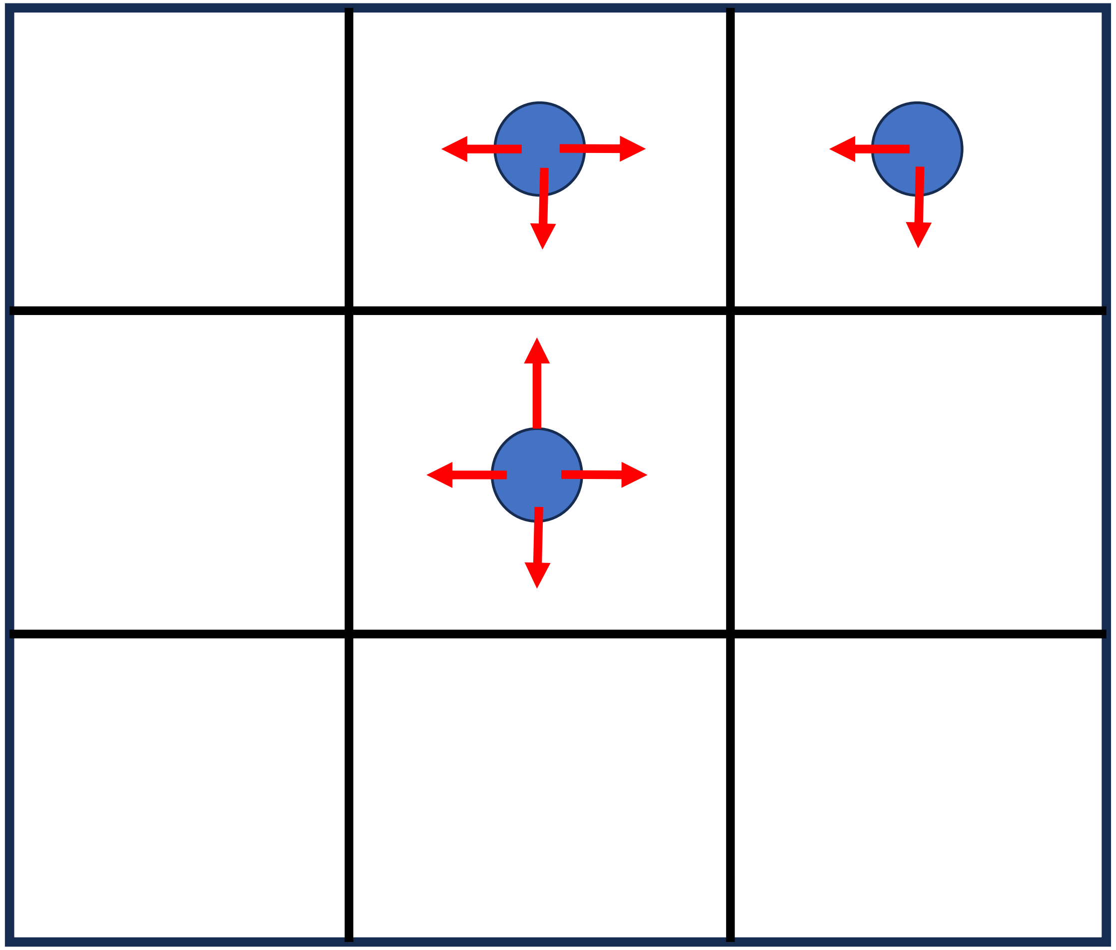
边界处理：回顾



策略3：此投点仍有效，仍记入总投点数（堆石法），但位置不变继续投，直至位置可以变化。

这是Metropolis算法，其本质是细致平衡条件。

边界处理：简化



如何选定游走策略，使得当行走步数足够多时，粒子在每个方格的概率相同？也即如何获得一个对离散型均匀分布的抽样？

边界处理：细致平衡1

- 对每个方格进行编号，1-9. 我们希望获得在很多次游走之后的稳定分布（平衡分布）$\pi(a)$
- 我们希望定出的是当粒子在一个方格a时，其下一步可到的格点（假设相邻）的概率$p(a \rightarrow b)$
- 简化起见，我们先考虑位于边上的方格a，其相邻有三个格点b,c,d.
- 显然有归一化方程
  $1 = p(a \rightarrow a) + p(a \rightarrow b) + p(a \rightarrow c) + p(a \rightarrow d)$
- 以及转移方程
  $\pi(a) = \pi(a)p(a \rightarrow a) + \pi(b)p(b \rightarrow a) + \pi(c)p(c \rightarrow a) + \pi(d)p(d \rightarrow a)$
- 结合二者，我们可获得
  $\pi(a)p(a \rightarrow b) + \pi(a)p(a \rightarrow c) + \pi(a)p(a \rightarrow d) = \pi(b)p(b \rightarrow a) + \pi(c)p(c \rightarrow a) + \pi(d)p(d \rightarrow a)$
- 细致平衡条件显然可提供一个解

$\pi(a)p(a \rightarrow b) = \pi(b)p(b \rightarrow a)$ $\pi(a)p(a \rightarrow c) = \pi(c)p(c \rightarrow a)$ $\pi(a)p(a \rightarrow d) = \pi(d)p(d \rightarrow a)$

边界处理：细致平衡2

- 若我们希望均匀分布，则$p(a \to b) = p(b \to a)$， 即去和回的概率一样
- 这在一维也被验证过
- 上述方法也可处理角落的方格，所得结果相同
- 此结论可给出堆石法的原因

中心处有4个方向，$\frac{\text{每个概率为}1}{4}$，而边处要满足细致平衡，故需$p(a \to a) = 1/4$， 也即在边上的方格有1/4的概率留在原地；同理，角落处的方格有1/2的概率留在原地。这样获得的平衡分布才是均匀分布。

边界处理：转移矩阵

- 对方格进行顺序的1-9标号，之后可将所有的过程组成一个矩阵

$$\{p(a \to b)\} = \begin{bmatrix} p(1 \to 1) & \cdots & p(9 \to 1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ p(1 \to 9) & \cdots & p(9 \to 9) \end{bmatrix}$$

$$\{p(a \to b)\} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

本征值

$$\begin{matrix} -0.5000 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.0000 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0.0000 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.2500 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.2500 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5000 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.7500 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.7500 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1.0000 \end{matrix}$$

本征矢量

$$\begin{matrix} 0.1667 & 0.1164 & -0.3913 & 0.1171 & -0.3121 & 0.5000 & -0.5236 & -0.2432 & -0.3333 \\ -0.3333 & 0.2750 & 0.5077 & 0.4096 & 0.3316 & 0.0000 & -0.1402 & -0.3834 & -0.3333 \\ 0.1667 & -0.3913 & -0.1164 & 0.1171 & -0.3121 & -0.5000 & 0.2432 & -0.5236 & -0.3333 \\ -0.3333 & -0.5077 & 0.2750 & -0.5267 & -0.0195 & 0.0000 & -0.3834 & 0.1402 & -0.3333 \\ 0.6667 & 0.0000 & 0.0000 & -0.2341 & 0.6242 & 0.0000 & -0.0000 & 0.0000 & -0.3333 \\ -0.3333 & 0.5077 & -0.2750 & -0.5267 & -0.0195 & -0.0000 & 0.3834 & -0.1402 & -0.3333 \\ 0.1667 & 0.3913 & 0.1164 & 0.1171 & -0.3121 & -0.5000 & -0.2432 & 0.5236 & -0.3333 \\ -0.3333 & -0.2750 & -0.5077 & 0.4096 & 0.3316 & -0.0000 & 0.1402 & 0.3834 & -0.3333 \\ 0.1667 & -0.1164 & 0.3913 & 0.1171 & -0.3121 & 0.5000 & 0.5236 & 0.2432 & -0.3333 \end{matrix}$$

边界处理：转移矩阵2

- 本征方程

$$\mathrm{p}\,\psi_i = \lambda_i\,\psi_i$$

- 对于任意一个初始状态ψ_{ori},它可按照本征矢进行分解

$$\psi_{org} = \sum_i a_i \psi_i$$

- 从而，我们可以将转移矩阵多次作用其上来获得演化过程

$$\mathrm{p}\,\psi_{org} = p\sum_i a_i \psi_i = \sum_i a_i \lambda_i \psi_i$$

$$p^n\,\psi_{org} = p^n \sum_i a_i \psi_i = \sum_i a_i \lambda_i^n \psi_i$$

- 注意到，转移矩阵的本征值最大的为1，其次为3/4，当n很大时，我们有

$$p^n\,\psi_{org} = \sum_i a_i \lambda_i^n \psi_i \approx a_1 \psi_1 + 0.75^n\, a_2 \psi_2$$

多次转移之后，分布会以指数趋于均匀分布（平衡分布）

引申： Metropolis算法

- 在之前计算圆周率的算法中，构型要么可取要么不可取，对于这种简单的情况，我们已有讨论
- 随机游走抽样可推广至一般情形，也即不同构型有确定的概率分布$\pi(a)$
- 此时，转移矩阵需满足

$$p(a \to b) = \min\left(1, \frac{\pi(b)}{\pi(a)}\right)$$

- 证明:

情形	$\pi(a) > \pi(b)$	$\pi(b) > \pi(a)$
$p(a \to b)$	$\pi(b)/\pi(a)$	1
$\pi(a)p(a \to b)$	$\pi(b)$	$\pi(a)$
$p(b \to a)$	1	$\pi(a)/\pi(b)$
$\pi(b)p(b \to a)$	$\pi(b)$	$\pi(a)$

算法步骤

- 1.选取试探位置，$x_t = x_n + \eta_n$,其中η_n可为在$(-\delta, \delta)$区间内的随机数。
- 2. 计算$r = \pi(x_t)/\pi(x_n)$
- 3. 若$r \geq 1$，则应接受此改变，也即$x_{n+1} = x_t$.
- 4. 否则，产生一个（0,1）内的随机数ξ,若$\xi < r$,则亦接受此改变，也即$x_{n+1} = x_t$。否则,$x_{n+1} = x_n$。
- 5.从新的位置出发走下一步，直到达到预定的总步数。

讨论

- 对于简单的正方形区域，做周期性边条件是可以的。但此方法对于一般区域很难扩展；对于平衡分布不均匀的情况，即使在正方形区域，也应按照Metropolis算法做推广。
- 对于原问题，在点到边界外的时候$\frac{\pi(b)}{\pi(a)}=0,$所以此点需抛弃。在边界内的时候$\frac{\pi(b)}{\pi(a)}=1$（均匀分布），故肯定接受。
- 特别注意：细致平衡仅仅是充分条件，不是必要的！

先验概率

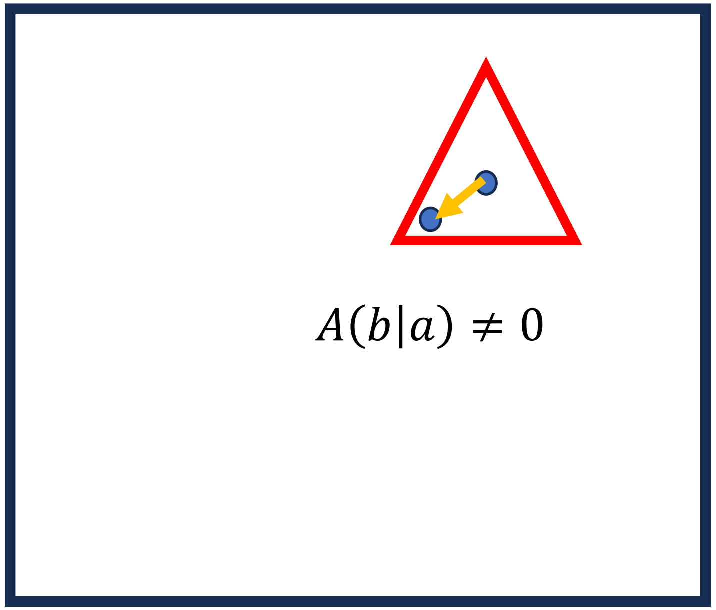
- 在前面的例子中，从某个点移至下个点时，其移动有范围要求，或者更严谨的说，当粒子位于某个点x_0时，其之后的选点满足某个概率分布$A(x|x_0)$。这个概率分布是提前给出而不是后续推导获得的，也即先验概率。

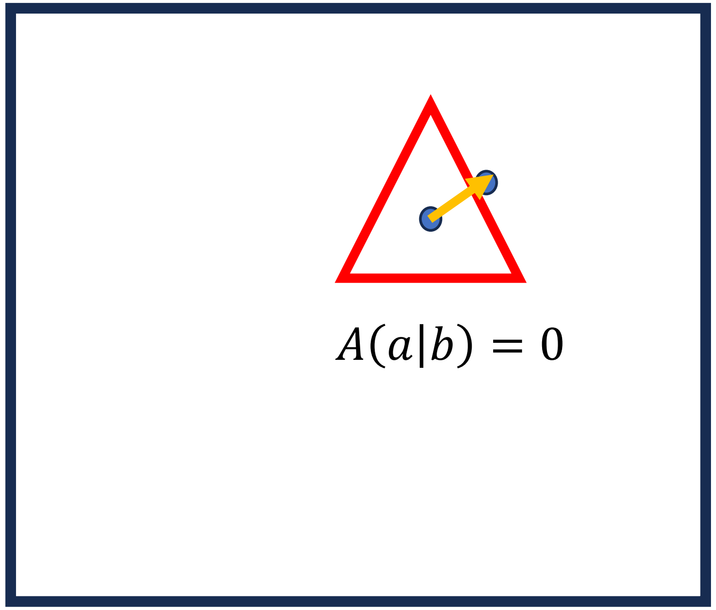
- 先验概率在随机游走抽样中普遍存在。

- 存在先验概率时，Metropolis算法需基于条件概率做进一步修改
  $P(a \to b) = A(b|a)\,p(a \to b)$（转移 = 选择 ＊ 接受）
- 细致平衡：$\pi(a)P(a \to b) = \pi(b)P(b \to a)$
- Metropolis条件：

$$p(a \to b) = \min\left[1, \frac{\pi(b)}{\pi(a)} * \frac{A(a|b)}{A(b|a)}\right]$$

先验概率示例：三角形算法





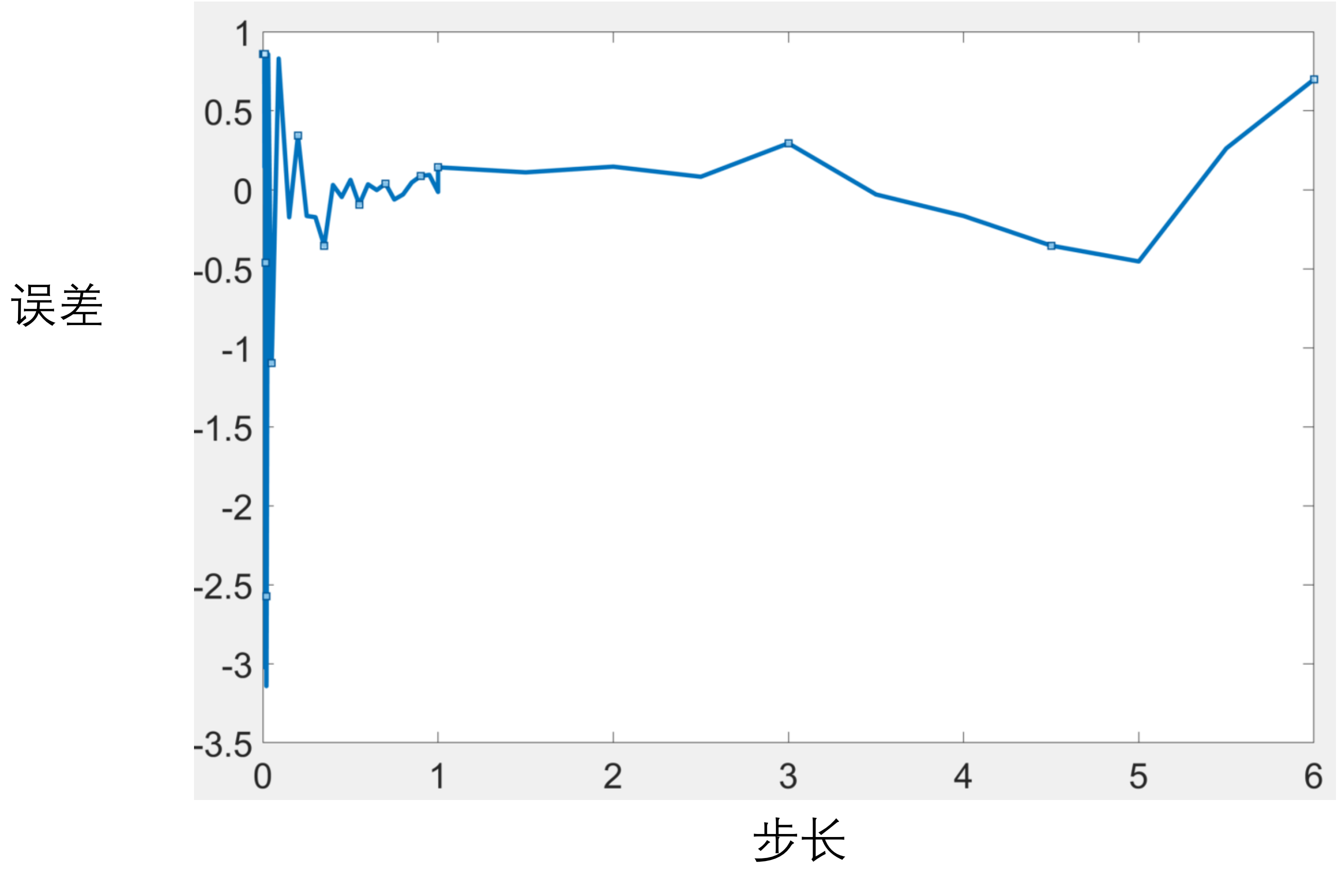
- $p(a \to b) = \min\left[1, \frac{\pi(b)}{\pi(a)} * \frac{A(a|b)}{A(b|a)}\right] = 0$ 此位移不可接受！

特殊情况

- $p(a \to b) = \min\left[1, \frac{\pi(b)}{\pi(a)} * \frac{A(a|b)}{A(b|a)}\right]$
- 若$A(a|b) = \pi(a)$, $A(b|a) = \pi(b)$ 也即粒子到某个位点的先验概率与当前位点完全无关，则有
  $p(a \to b) = 1$ 永远成立
- 此时随机游走抽样完全变为直接抽样（也即在正方形内随机取点）
- 先验概率最有用的场景：我们大致可以做直接抽样，或对于某个子系统大致可以做。此时先验概率的作用大致和微扰处理相似。

步长选择

- 步长不可太大，否则投点很容易出界，没有有效的位移点。
- 步长不可太小，否则投点会局域在初始点附近，无法在整个区域均匀分布。
- 步长应保证，大致1/2的位移被接受。



N=1000

应用1：变分蒙特卡罗算法

- 一般的哈密顿量本征值问题
  $$\hat{H}\,\psi = E\,\psi$$
- 对于基态能量，我们有
  $$\langle E \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0$$
- 在多数物理问题中，确定基态起到关键作用。而对于多体问题，由于构型数的指数增长，基态的求解较为困难。
- 根据上式，可采用变分蒙卡，将基态求解化为求参量空间的某个最小值，从而我们从指数型的构型空间退化到线性增长的构型空间。

算法描述

- 此算法的核心是计算能量平均值，此处可用随机游走的方法获得。

$$\langle E\rangle = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0$$

- 重写能量均值

$$\langle E\rangle = \frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \int dxdydz\, \rho_\psi\, E_\psi$$

$$\rho_\psi = \frac{|\psi|^2}{\int dxdydz|\psi|^2}\,, \quad E_\psi = \frac{\hat{H}\psi}{\psi}$$

- ρ_ψ可看做带抽样的概率分布。
- 变分法的核心：猜想一个波函数的可能形式$\psi(\boldsymbol{\alpha})$,其中$\boldsymbol{\alpha}$代表一系列可变参量。我们则应该在对波函数施加此限制之下，改变$\boldsymbol{\alpha}$，找到对应于最小平均能量的参量值。其对应的波函数则是我们对精确基态波函数的近似。

蒙卡算法步骤

- 产生一个初始位置x_0，计算$E_{\psi(x_0)}$
- 在$(-\delta,\delta)$内产生一个随机数η（注意，此步骤是一维情形，在高维要把取值区间相应扩展），因当前位置为x_n，下一个位置的试探值为$x_t = x_n + \eta$
- （Metropolis算法）计算$\lambda = \frac{|\psi(x_t)|^2}{|\psi(x_n)|^2}$，如果$\lambda > 1$，则接受位置改变$x_{n+1} = x_t$；否则，产生一个(0,1)内的随机数$\xi$，若$\xi < \lambda$，则接受改变，$x_{n+1} = x_t$；再否则，$x_{n+1} = x_n$. 计算$E_{\psi(x_{n+1})}$。
- 从新位置出发继续游走，直到达到预定的步数。
- 求平均$\langle E\rangle = 1/N\sum_i E_{\psi(x_i)}$，我们应该在参数空间最小化次平均值。
- 注意：上述求平均的过程从原理上只要产生一个初始位置即可。但实际操作时，有可能碰到一个位置周围被多个峰包围从而走不出去的情况，此时可产生多个初始位置分别独立行走来计算均值。

总算法步骤

- 选择初始参量值，从而确定初始试探波函数$\psi(\boldsymbol{\alpha_0})$。
- 利用上述随机游走方法计算此试探波函数下的能量均值$\langle E_0\rangle$。
- 在参数空间变化一个值，也即将$\boldsymbol{\alpha_0}$ 变为$\boldsymbol{\alpha_1}$，获得新的能量均值$\langle E_1\rangle$,若$\langle E_1\rangle < \langle E_0\rangle$,则接受变化，以新的参量值作为起始替换$\boldsymbol{\alpha_0}$ 。重复此步，直到能量均值的改变小于某个给定值。

- 注意：参量空间的变化可采用随机游走。此时，应用随机游走产生均匀分布。

应用2：统计力学

- 目标：计算平衡态时某物理量的测量值（期望值）；
- 方法：1.选择系综。2.根据系综写出分布函数$\rho\left(\hat{H}\right)$. 3. 计算平均值

$$\langle A\rangle = Tr\left(\hat{A}\rho\left(\hat{H}\right)\right)$$

- 注：在明确本征态的情况下，分布函数能直接解析写出，此时只需计算对所有态的求和或积分即可；

在有相互作用的复杂系统，本征态不知，我们只能从每个状态的概率$f(H)$出发，计算配分函数：$\mathrm{Z} = \sum f(H)$ 。从而$\rho = f/Z$

- 由于是求期望，自然可用概率算法。
- 关键：产生满足$\rho\left(\hat{H}\right)$的状态构型抽样。
- 方法：随机游走+Metropolis算法

算法思路（1）

- 1.选择初始状态x_0.(注：按照教材所说，此状态最好在分布密度较大的区域。若担心初始状态会限于一个区域，也可产生一个初始状态的合集，对里面的值分别独立进行游走)
- 2.若游走至第n步，需到第n+1步。则首先用随机方法产生一个试探状态$x_t = x_n + \eta_n$，其中$\eta_n \in [-\delta, \delta]$。（注：这里假设了连续状态，给出了一个特例。但连续性不是必须的，只需把握两点：（1）下个状态在某个范围内取值；（2）进入这个范围内的状态需要一个预先给定的已知概率，也即先验概率。）
- 3.计算过渡概率$w(x_n, x_t)$，注意，可以不是metropolis算法。在Metropolis算法下，我们有

$$w(x_n, x_t) = \min\left[1, \frac{f(H(x_t))}{f(H(x_n))}\right]$$

- 4.产生[0,1]内的随机数r

算法思路（1）

- 5. 若$r \le w$,则接受改变，也即$x_{n+1} = x_t$；否则， $x_{n+1} = x_n$;
- 6. 在第n+1个构型上计算估计值
  $A_{n+1} = A(x_{n+1})$
- 7.回到第2步往下执行，直到重复N次，共获得N个对A的估计值。
- 8. 将所有估计值相加除以N，此即为A的期望值。

例子：伊辛模型

- 模型的哈密顿量：

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{\langle ij\rangle} S_i S_j - B\sum_i S_i$$

- 每个点的自旋只有两个选择，+1或-1，代表向上或向下。第一项为各向同性交换场，第二项为外磁场引入的塞曼能。$\langle ij\rangle$代表最近邻的两个位点。
- 配分函数：

$$Z = \sum_S e^{-\beta H}$$

- 磁化强度

$$M = \frac{1}{\beta}\frac{\partial \ln Z}{\partial B} = \frac{1}{Z}\sum_S M(S) e^{-\beta H}, \quad M(S) = \sum_i S_i$$

- 通常，我们会关注M，也即$M(S)$的期望值，来看是否有自发磁化（相变），或者关注$M(S)$的涨落，根据涨落-耗散定理，这和磁化率乘正比，其发散行为也预示相变。

算法思路

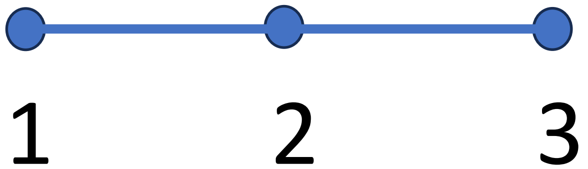
- 选择初始构型，$S_0 = \{s_1, s_2, \cdots, s_n\}$.
- 有了第m个位型S_m后，需游走获得第m+1个位型。方法：产生一个1到n之间的整数随机数i,将s_i翻转，也即$s_i = -s_i$。记此构型为试探构型S_t。
- 根据哈密顿量计算能量差$\Delta E = E(S_t) - E(S_m)$.
- 若$\Delta E \leq 0$,则$S_{m+1} = S_t$.
- 否则，产生一个[0,1]内的随机数ξ，若$\xi \leq e^{-\beta\Delta E}$则$S_{m+1} = S_t$；否则$S_{m+1} = S_m$。
- 在每一步监控ΔE的值，若在若干步内ΔE的均值小于某个预设值，则我们可说系统已到平衡态。
- 在达到平衡态之后，继续游走L步。在每一步计算$M(S_i)$.最后获得

  $$\langle M \rangle = \frac{1}{L}\sum_{i \in Equal} M(S_i)$$

- 由于位型增长过快，体系可能整体大小不大。为消除边界效应，可采用周期边条件。

作业

1.三点问题：



假设我们需使得粒子在这三个点上的概率分别为0.2,0.5,0.3. 请设计随机游走过程加以实现，其中，每个粒子最多只能运动到和它当前位置直接相连的格点。（1）请给出算法步骤；（2）编写相应程序；（3）用程序游走N步（设N=1000），统计不同格点出现的频数（画出频数直方图即可）。