نمونه برداری با اهمیت

همانطور که ذکر شد، خطای انتگرال گیری به روش مونت کارلو را می‌توان با $\sigma/\sqrt{n}$ تخمین زد. بنابراین برای کاهش خطا می‌توان دو کار انجام داد:

۱- افزایش تعداد نقاط نمونه برداری (یعنی n)

۲- کاهش مقدار واریانس (σ)

مشخص است که کاهش σ، زمان کمتری برای ما می‌برد در حالی که افزایش تعداد نقاط نمونه برداری نیاز به زمان بیشتری برای ما می‌برد.

در اینجا ما تکنیکی را معرفی می‌کنیم که به هم نمونه گیری با اهمیت (importance sampling) معروف است و هدف آن کاهش مقدار σ است.

تابع چگالی $P(x)$ را طوری در نظر بگیرید که:

$$\int_a^b P(x)\,dx = 1$$

حال انتگرال $F = \int_a^b f(x)\,dx$ را به صورت زیر بازنویسی می‌کنیم:

$$F = \int_a^b \left[\frac{f(x)}{P(x)}\right] P(x)\,dx$$

حال نقاط x_i را طبق توزیع احتمال $P(x)$ انتخاب می‌کنیم و بنابراین F به صورت زیر تخمین زده می‌شود:

$$F_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \frac{f(x_i)}{P(x_i)}$$

توجه کنید که برای تقریب یکنواخت یعنی $P(x) = \frac{1}{b-a}$ رابطه بالا به رابطه قبلی تبدیل می‌شود:

$$F_n = \frac{(b-a)}{n} \sum_{i=1}^{n} f(x_i)$$

حال سئوالی که پیش می‌آید این است که تابع $P(x)$ را چه طور انتخاب کنیم. در حقیقت هرچه $P(x)$ را نزدیک به $f(x)$ انتخاب کنیم جواب‌های بهتری خواهیم گرفت. به عبارتی اگر تابع $P(x)$ رفتار تابع $f(x)$ را تقلید کند بهترین نتیجه را می‌توان بدست آورد. مخصوصاً جاهایی که تابع $f(x)$ مقدار بزرگی دارد.

الگوریتم متروپلیس (Metropolis Algorithm)

در برخی از مسائل فیزیک تابع شبیه $P(x)$ به طور طبیعی در انتگرال وجود دارد مانند انتگرال‌های شبیه:

$$\langle f \rangle = \frac{\int f(x) P(x) dx}{\int P(x) dx}$$

به عبارتی جملهٔ $\frac{P(x)}{\int P(x) dx}$ نقش همان $P(x)$ در معادلات قبلی را بازی خواهد کرد.

بنابراین کافی است با استفاده از روش "نمونه‌گیری با اهمیت" مقدار $\langle f \rangle$ را حساب کنیم. برای این کار یک روش استفاده از توزیع نقاطی است که طبق $P(x)$ توزیع شده‌اند و روش عملی آن استفاده از الگوریتم متروپلیس است.

الگوریتم متروپولیس در سال ۱۹۵۴ توسط متروپولیس و دیگران برای محاسبه انتگرال‌های چندبعدی معرفی شد. در حقیقت الگوریتم متروپولیس یک نمونه از فرایند نمونه‌گیری با اهمیت است.

توضیح الگوریتم متروپولیس (برای انتگرال یک‌بعدی)

فرض کنید که ما می‌خواهیم از نمونه‌گیری با اهمیت برای تولید اعداد رندم مطابق با $P(x)$ استفاده کنیم. الگوریتم متروپولیس یک رندم واک (random walk) از نقاط $\{x_i\}$ است بعد از تعداد زیادی گام به توزیع $P(x)$ نزدیک می‌شوند. این رندم واک با یک احتمال گذار $T(x_i \to x_j)$ تعریف می‌شود که نشان دهنده احتمال گذار از نقطه x_i به x_j است به طوری که توزیع نقاط x_0، x_1، x_2، ... به توزیع $P(x)$ همگرا شود.

برای اینکه چنین شرایطی بوجود آید، کافی است شرط تعادل جزء به جزء (detailed balance) به صورت زیر برقرار باشد:

$$P(x_i)\,T(x_i \to x_j) = P(x_j)\,T(x_j \to x_i) \qquad \text{(شرط تعادل جزء به جزء)}$$

در معادله بالا $T(x_i \to x_j)$ مشخص نمی‌شود. یک انتخاب ساده برای احتمال گذار که با معادله بالا سازگار است به صورت زیر خواهد بود:

$$T(x_i \to x_j) = \min\left[1, \frac{P(x_j)}{P(x_i)}\right]$$

آن فرض کنیم که واکر (walker) در نقطه x_i قرار دارد و می خواهیم تکلیم بعد آن که x_{i+1} است را تولید کنیم. ما انتخابی که برای $T(x_i \to x_{i+1})$ به صورت باز انجام داده ایم را به صورت زیر اعمال می کنیم (الگوریتم متروپلیس):

۱- یک نقطه اتفاقی نظیر $x_{trial} = x_i + \delta_i$ انتخاب می کنیم که δ_i یک عدد رندم است که به صورت یکنواخت در بازه $[-\delta, \delta]$ انتخاب می شود.

۲- مقدار $w = \frac{P(x_{trial})}{P(x_i)}$ را محاسبه می کنیم.

۳- اگر $w \geq 1$ باشد، آنگاه این تغییر را پذیرفته و $x_{i+1} = x_{trial}$

۴- اگر $w < 1$، یک عدد رندم r را تولید می کنیم.

۵- اگر $r \leq w$ این تغییر را می پذیریم و $x_{i+1} = x_{trial}$

۶- اگر این تغییر اتفاقی پذیرفته نمی شود ($r > w$) پس $x_{i+1} = x_i$

برای اینکه نقاط این رندم واک به حالت توزیع $P(x)$ نزدیک شود، در ابتدا باید تعداد زیادی نقاط به این طریق تعویض می شود.

سوالی که ممکن است مطرح شود این است که مقدار δ را چگونه انتخاب کنیم؟ اگر δ خیلی بزرگ باشد، تعداد کمی از نقاط پذیرفته می شوند و تعویض داری $P(x)$ ناقص و ناکافی خواهد بود. از طرفی اگر δ خیلی کوچک باشد درصد بالایی از نقاط پذیرفته می شوند و از تعویض داری $P(x)$ ناقص از آب در می آید. یک معیار تقریبی برای اندازه δ این است که به طور تقریبی باید بین یک سوم الی نصف نقاط پذیرفته شوند.

برای اینکه توزیع نقاط سریع‌تر به $P(x)$ همگرا شوند بهتر است نقطه‌ی شروع یعنی x_0 ها جایی باشند که در آن $P(x)$ نیز بزرگ است می‌شود.

مونت کارلوی کوانتومی (@Quantum Monte carlo)

مونت کارلوی کوانتومی (QMC) در واقع شامل روش‌هایی است که با استفاده از روش مونت کارلو مسائل مربوط به مکانیک کوانتومی را حل می‌کند. در اینجا ما فقط به روش مونت کارلوی وردشی اشاره خواهیم کرد.

مونت کارلوی وردشی (VMC)

طبق اصل وردش می‌دانیم که برای هر تابع موج دلخواه انتگرال رابطه‌ی زیر بزرگتر خواهد بود:

$$\langle H \rangle = E[\psi] = \frac{\int \psi^*(x)\hat{H}\psi(x)\,dx}{\int \psi^*(x)\psi(x)\,dx} \geq E_0$$

که E_0 انرژی حالت پایه‌ی هامیلتونی $\hat{H}$ است. بنابراین، اگر $\psi(x)$ تابعی باشد که می‌توانیم به E_0 نزدیک شویم. پس با تغییر پارامترهای آزاد داخل یک تابع موج می‌توان بهترین حالت را برای حالت پایه به دست آورد.

در روش VMC هدف ما به انتگرال بالا به روش MC است و مقایسه جواب‌ها با ψ های مختلف و به دست آوردن کمترین برای تابع موج حالت پایه است.

(۹)

برای محاسبه $E[\psi]$ می‌توانیم به صورت زیر بازنویسی کرد (قسمت‌های سبز):

$$E[\psi] = \frac{\int \psi^*(x)\,\psi(x)\,\frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)}\,dx}{\int \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx}$$

$$= \frac{\int \psi^2(x)\,E_L(x)\,dx}{\int \psi^2(x)\,dx}$$

که $E_L(x)$ را انرژی موضعی (Local energy) نامگذاری می‌کنند که به صورت زیر است:

$$E_L(x) = \frac{\hat{H}\psi(x)}{\psi(x)}$$

همانطور که مشاهده می‌شود می‌توانیم $P(x) = \psi^2(x)$ در نظر بگیریم و طبق روش مونت کارلو $E[\psi]$ را به دست آوریم:

$$E[\psi] = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} E_L(x_i)$$

که n تعداد x_i های نمونه برداری است که طبق توزیع ψ^2 نمونه برداری شده‌اند.

تمرین ۸- حل سه انرژی نوسانگر هارمونیک یک بعدی با تابع موج آزمون $\psi \propto e^{-\lambda x^2}$ و بدست آوردن بهترین مقدار λ (با استفاده از اصل وردشی).

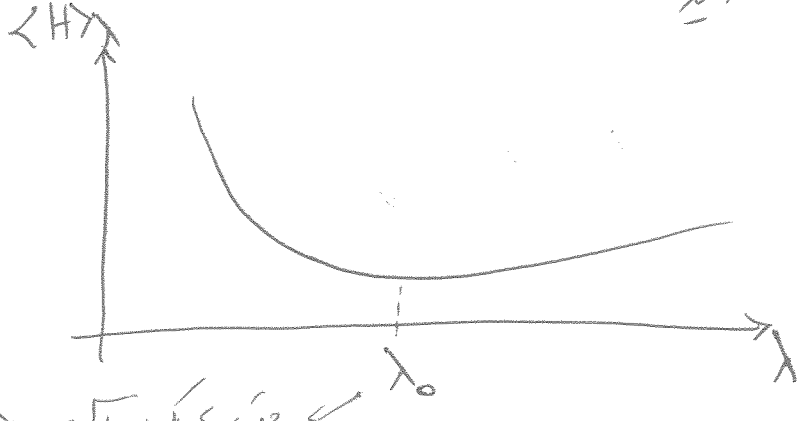
هدف این تمرین حل سه انرژی نوسانگر هارمونیک با استفاده از تابع موج $\psi \propto e^{-\lambda x^2}$ است.
بدین منظور ما هامیلتونی نوسانگر هارمونیک را در واحدهای بدون بُعد به صورت زیر می نویسیم (برای آسان کردن مسئله):

$$H = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2$$

پس مقدار $E_L = \frac{H\psi}{\psi}$ به صورت زیر خواهد شد:

$$E_L = \frac{H\psi}{\psi} = \lambda + x^2\left(\frac{1}{2} - 2\lambda^2\right)$$

الف- مقدار $\langle H \rangle_\lambda = \langle E_L \rangle_\lambda$ برای $\psi \propto e^{-\lambda x^2}$ به روش متغیرپوشی به دست آورید و با استفاده از اصل وردشی ($\langle H \rangle_\lambda \geq E_0$) مقدار بهینه λ را بدست آورید. یعنی مقداری که در آن $\langle H \rangle_\lambda$ به کوچکترین مقدار خود (که به عبارتی به E_0 (انرژی حالت پایه) نزدیک‌ترین است). در حقیقت، به نمودار شبیه نمودار زیر می‌رسید:



← مقداری که در آن $\langle H \rangle_\lambda$ کمینه است.

برای انجام این قسمت چنین عمل می‌کنیم (الگوریتم متروپولیس)

۱- نقطه‌ی اولیه‌ی آزمون $x_{trial} = x_n + \delta_n$ را انتخاب می‌کنیم به طوری‌که δ یک عدد رندم یکنواخت بین $[-\delta, \delta]$ باشد.

۲- مقدار $w = \frac{P(x_{trial})}{P(x_n)}$ را محاسبه می‌کنیم که $P(x) = e^{-2\lambda x^2}$

۳- اگر $w \geq 1$ این تغییر را می‌پذیریم و $x_{n+1} = x_{trial}$

۴- اگر $w < 1$، یک عدد رندم r تولید می‌کنیم و اگر $r \leq w$ بود سپس $x_{n+1} = x_{trial}$

۵- اگر تغییر پذیرفته نشد ($r > w$) سپس $x_{n+1} = x_n$

نکته۱- برای انتخاب نقاط باید به این نکته دقت کنیم که باید تعدادی گام برداریم تا احتمالاً سیستم به تعادل برسد، یعنی نقاط بتوانند $|\psi|^2$ طی کنند. برای اینکار مقدار $\langle E_L \rangle$ را برحسب n نگاه می‌کنیم و جایی که تقریباً مقدار $\langle E_L \rangle$ ثابت شده است را به عنوان نقطه‌ی شروع برای جمع‌آوری E_L ها انتخاب می‌کنیم.

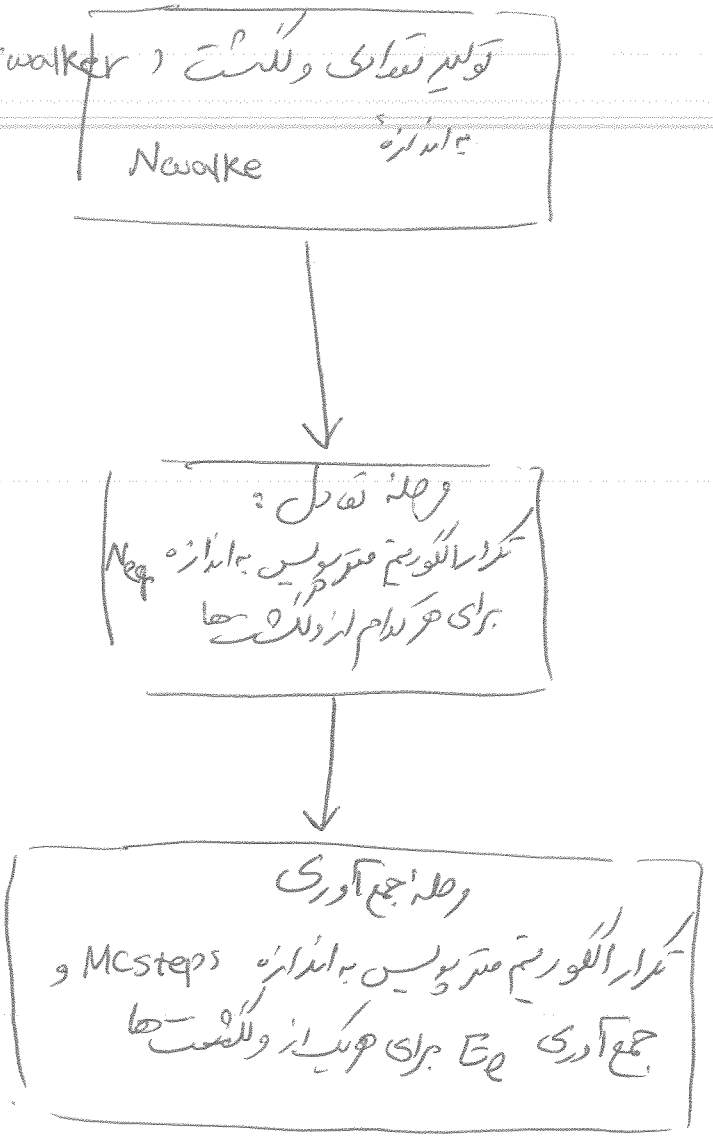
نکته۲- انتخاب δ: مقدار δ را باید طوری انتخاب کنیم که مقدار قابل معقولی پذیرش نقطه داشته باشیم (بین یک سوم تا نصف)

ب- برای اینکه خطای $\langle E_L \rangle$ را پیدا کنید ابتدا مقدار

$$\sigma_L^2 = \langle E_L^2 \rangle - \langle E_L \rangle^2$$

را پیدا کنید. این مقدار در حد N های بزرگ به صفر میل می‌کند.

الگوریتم VMC به صورت فلوچارت زیر خواهد بود:



بنابراین انرژی موضعی به صورت زیر درخواهد آمد:

$$E_L = \frac{1}{\psi_{T,\alpha}} H \psi_{T,\alpha} = -\frac{1}{2}\left[\alpha^2 - 2\frac{\alpha}{r}\right] - \frac{1}{r}$$

چند نکته:

۱- E_L در $\alpha = 1$ مستقل از r می‌شود که درحقیقت جواب دقیق نیز در همین α راضیت انتظاری است.

۲- برای $\alpha \neq 1$ یک تکینگی در $r=0$ وجود دارد که در آن پتانسیل واگرا می‌شود.

تمرین ۹- می‌خواهیم انرژی برای اتم هیدروژن با استفاده از $\psi \propto e^{-\alpha r}$ و به دست آوردن کمینه انرژی (می‌خواهیم α)

حرکت کاملاً دو ذره‌ای برای اتم هیدروژن

هامیلتونی اتم هیدروژن به صورت زیر است:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}$$

که $r = r_e - r_p$ ، $m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$ جرم کاهش یافته است.

با توجه به اینکه سیستم دارای تقارن کروی است می‌توانیم هامیلتونی را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right] - \frac{e^2}{r}$$

انرژی دقیق حالت پایه برابر خواهد بود با

$$E_0 = -\frac{e^2}{2a_0} \qquad \psi_0 \sim e^{-r/a_0}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

برای آسان شدن محاسبات و همچنین از بین رفتن دقت محاسبات ما از دستگاه واحد اتمی استفاده می‌کنیم که در این دستگاه $\hbar = m = e = 1$ است. بنابراین

$$H = -\frac{1}{2}\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right] - \frac{1}{r} \quad , \quad E_0 = -\frac{1}{2}$$
$$\psi_0 \sim e^{-r}$$

بنابراین ساده‌ترین انتخاب برای تابع موج اتمی به صورت زیر خواهد بود:

$$\psi_{T,\alpha}(r) = e^{-\alpha r}$$