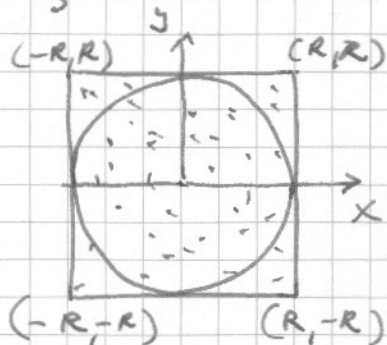


METODY MONTE CARLO

- Pochodzi z fizyki statystycznej
- Metoda Monte Carlo polega na obliczaniu całek używając przypadkowych konfiguracji (samples)
- Metody Monte Carlo są niezwykle ogólne, stosowane w szerokim zakresie problemów fizycznych (zwłaszcza dotyczących nanostruktur)

"Dziesięć" metoda obliczania π



πR^2 pow. okręgu
 $4R^2$ pow. kwadratu

- Rzucamy N razy przypadkowo prochy (kugielki)
- Liczymy ile razy kugielki pada wewnątrz okręgu

np. N_{hits}

$$\frac{\pi R^2}{4R^2} = \frac{N_{hits}}{N} \Rightarrow \pi = 4 \frac{N_{hits}}{N}$$

Jak to policzyć na komputerze?

WAŻNE ŻE BY
 ROZKŁAD TRAFIEŃ
 BYŁ JEDNORODNY

Meta code

procedure direct-pi

$N_{hits} \leftarrow 0$ wartość początkowa

for $i = 1, \dots, N$ do

$\begin{cases} x \leftarrow \text{ran}(-1, 1) \\ y \leftarrow \text{ran}(-1, 1) \end{cases} \leftrightarrow \text{generator liczb losowych na (całkowicie) komputerze}$
 if $(x^2 + y^2 < 1)$ $N_{hits} \leftarrow N_{hits} + 1$

output N_{hits}

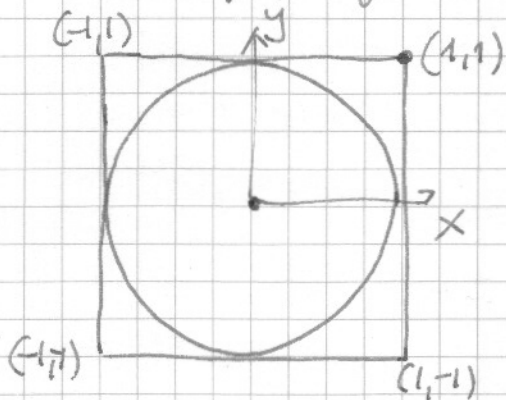
dla $N = 4000$ dostajemy w różnych runs wartości π 3.156, 3.150, 3.127 itp.



Opisana powyżej procedura nazywa się 'direct sampling'

Co zrobić kiedy średnica drugiego jest tyle duża, że nie jesteśmy w stanie 'muchać' tak daleko, żeby pokryć cały kwadrat?

Musimy przyjąć inną strategię



Bez straty ogólności możemy przyjąć, że $R=1$

Załóżmy, że startujemy z punktem $(1,1)$ i że jesteśmy w stanie machać na odległość $\delta < 1$

- Ogólna strategia będąc w punkcie (x, y) machamy przypadkowo linijk

$$\Delta x = \text{ran}(-\delta, \delta)$$

$$\Delta y = \text{ran}(-\delta, \delta)$$

- przesuwamy się do punktu

$$(x, y) \rightarrow (x + \Delta x, y + \Delta y)$$

- liczymy, czy leży wewnątrz drugiego i jeżeli tak to dodajemy do zliczeń

$$N_{\text{hits}} = N_{\text{hits}} + 1$$

PYTANIE: co robimy, gdy $(x + \Delta x, y + \Delta y)$ wypada poza kwadratem?

⇒ NIE OPOSZCZAMY PUNKTU (x, y) i machamy dalej

mówimy, że ta próbka konfiguracji została odrzucona (rejected)

TAKI SPOSÓB WYZNACZANIA π (TAKĄ PROCEDURĘ) nazywamy

łańcuchem Markowa (Markov-chain Monte Carlo algorithm)



Jak to zrobić na komputerze?

(10-3)

procedure markov-pi

$Nhits \leftarrow 0$; $\{x, y\} \leftarrow \{1, 1\}$! warunki początkowe

for $i = 1, \dots, N$ do

$\Delta x \leftarrow \text{ran}(-\delta, \delta)$

$\Delta y \leftarrow \text{ran}(-\delta, \delta)$

if $(|x + \Delta x| < 1 \text{ and } |y + \Delta y| < 1)$ then

$x \leftarrow x + \Delta x$

$y \leftarrow y + \Delta y$

if $(x^2 + y^2 < 1)$ $Nhits \leftarrow Nhits + 1$

output $Nhits$

Dla $N = 4000$ otrzymamy wyrażenie górne
oszacowania liczby π
np. 3.123; 3.040, 3.068

Dlaczego?

W procesach Markowa zakładamy, że
prawdopodobieństwo przejścia od
konfiguracji " i " do konfiguracji " $i+1$ "
zależy tylko od konfiguracji " i " a nie
od poprzednich.

Musimy pamiętać pewną liczbę kroków, żeby
proces wędrowania "zapominał" o historii
(odwrotnie o punkcie początkowym).

Jak dobrać δ ?

Nie za duże i równocześnie nie za małe
np. $\delta = 0.3$.

~~Zasadnicza~~ Istota algorytmu, właściwie definicja
łańcucha Markowa

procedure markov-step

input $\{x, y\}$! configuration " i "

$\Delta x \leftarrow \text{ran}(-\delta, \delta)$

$\Delta y \leftarrow \text{ran}(-\delta, \delta)$

if $(|x + \Delta x| < 1 \text{ and } |y + \Delta y| < 1)$ then

$x \leftarrow x + \Delta x$

$y \leftarrow y + \Delta y$

output $\{x, y\}$

configuration " $i+1$ "



Monte Carlo Metoda

10-4

- dwa podejścia (i) direct sampling
(ii) Markov chain sampling

Metody próbkiowania służą do znalezienia rozkładu prawdopodobieństwa $\pi(\vec{x})$ ciągłej lub dyskretnej zmiennej $\vec{x}$.

Obie metody obliczają obserwabę (funkcję) $O(\vec{x})$

W naszych przykładach $O(\vec{x}) = \begin{cases} 1 & \vec{x} \in O \\ 0 & \vec{x} \notin O \end{cases}$

W obu przypadkach obliczamy

$$\frac{N_{\text{hits}}}{N_{\text{trials}}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O_i \approx \langle O \rangle = \frac{\int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 dy u(x,y) O(x,y)}{\int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 dy u(x,y)}$$

Sampling
próbkiwanie

Całkowanie

↖ nie ma całek po lewej stronie

Szerególnie użyteczna metoda dla całek wielowymiarowych

(i) direct sampling, kiedy możliwe idealna metoda

- ▷ generuje wektory $\vec{x}$ z rozkładem prawdopodobieństwa $\sim \pi(\vec{x})$
- ▷ dostarcza bezpośredniego oszacowania $\pi(\vec{x})$
- o nie ma problemu ~~wybrania~~ punktu startowego $\vec{x}_0$, czy zasięgu metody.

Wprowadzona przez Stanisława Ulama

"Adventures of Mathematician"
(Ulam 1991)

(ii) Łańcuch Markowa
trzeba być ostrożnym

Krytyczny punkt: trzeba czekać dużo ~~okresów~~,
żeby pozbyć się korelacji pomiędzy

konfiguracji "i" i pomiedziui,
 724. Zeby Tancuach zapomniat, o
 wartosci pomiedziowej $\bar{x}_0$.

Historia Metody Monte Carlo

Count of Buffon (1707-1788)

pienwsze zarejestrowane symulacje Monte-Carlo
 w roku 1977.



Szpany w podtodze
 odlegte o "b"

Rzucany igty o
 dlugosc a

$$\underline{a \leq b}$$

Igty jednorodnie rozmieszczone na podtodze

- kty ϕ jednorodnie rozmieszczone w przedziale $[0, \pi]$
- Srodek $\bar{x}_c$ rowniez jednorodnie rozmieszczone na podtodze

Istnieje symetrie pozwalajce na redukcj istotnego
 obsaru ladowanie igiel do

$$0 < \phi < \frac{\pi}{2}$$

$$0 < x_{\text{center}} < \frac{b}{2}$$

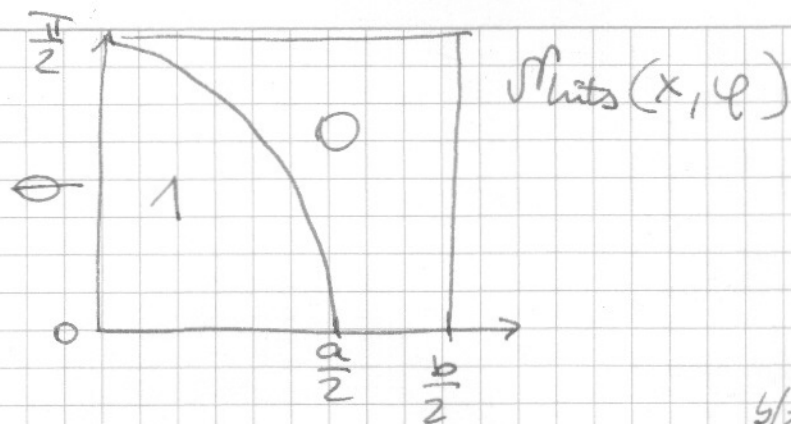
$$x_{\text{tip}} = x_c - \frac{a}{2} \cos \phi$$

$$x_{\text{tip}} < 0 \quad \text{igta udeala szpane}$$

Observable - N_{hits} = liczba dotknie szpany
 przez igty o srodku w placie x (x_c) i kcie ϕ

$$\mathcal{O}(x, \phi) \equiv N_{\text{hits}}(x, \phi) = \begin{cases} 1 & x < \frac{a}{2} \text{ \& } |\phi| < \arccos\left[\frac{x}{a/2}\right] \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$





$$\left\{ \begin{array}{l} \text{średnia liczba} \\ \text{trafień wspany} \\ \text{pozi igrs} \end{array} \right\} = \langle N_{hits} \rangle = \frac{\int_0^{b/2} dx \int_0^{\pi/2} d\phi N_{hits}(x, \phi)}{\int_0^{b/2} dx \int_0^{\pi/2} d\phi}$$

$$\langle N_{hits} \rangle = \frac{a}{b} \cdot \frac{2}{\pi}$$

średnia liczba trafień wspany (art równa $\frac{2}{\pi}$ dla $a=b$)
 Inny sposób na policzenie liczby 8.

Całkowanie przy pomocy Metody Monte-Carlo

$$I = \int_0^a f(x) dx = a \langle f \rangle \pm \Delta I$$

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

gdzie x_i jest wybierane
 przypadkowo w
 przedziale $[0, a]$

$$\Delta I = A \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{N}}$$

Błąd zmniejsza się jak $\frac{1}{\sqrt{N}}$

Dla 1D jest to górną niż up. metodą trapezów
 regular Simpsona itp.

Dla wielkiej liczby wymiarów MC
 poprawia się względem innych metod.

Statystyczny opis układów fizycznych

Suma statystyczna

$$H(\vec{x}, \vec{p}) = H(s)$$

$\{s\}$ - opisuje zbiór stanów układu

$$Z = \sum_{\{s\}} e^{-\beta H(s)}$$

$$\beta \equiv \frac{1}{k_B T}$$

Rozkład prawdopodobieństwa

$$p(s) = \frac{e^{-\beta H(s)}}{Z}$$

Obserwable

Średnia energia $\bar{E} = \sum_{\{s\}} p(s) H(s)$

Ciepota właściwa $C_B = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{1}{k_B T^2} \langle (\Delta E)^2 \rangle$

Namagnesowanie

$$M = \sum_s p(s) \left(\sum_{\alpha} S_{\alpha} \right)$$

W następnym wykładzie model Isinga

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$$

Prosty algorytm dla generatora liczb losowych (random numbers generator)

$$I_{j+1} = \text{mod}(I_j a + C, m)$$

$$\text{mod}(A, B) = A - \text{INT}\left(\frac{A}{B}\right) * B$$

- a, m, C - integers

- maksymalny okres - m

- liczba losowa $r_{j+1} = \frac{I_{j+1}}{m} \in [0, 1]$

dobre wartości a, C, m

m	a	C
6075	106	1283
11979	430	2531
14406	967	3041
714025	1366	150889

Numerical Recipes

Test sprawdzający funkcję korelacji

$$C(k) = \frac{\langle x_j x_{j+k} \rangle - \langle x_j \rangle^2}{\langle x_j^2 \rangle - \langle x_j \rangle^2}$$

$$\langle x_j x_{j+k} \rangle = \frac{1}{N-k} \sum_{j=1}^{N-k} x_j x_{j+k}$$