

Monte Carlo

Simulační metoda založená na užití stochastických procesů a generace náhodných čísel.

Typy MC simulací

- a) MC integrace
- b) Geometrické MC
- c) **Termodynamické MC**
- d) Modelování vývoje na strukturální úrovni
- e) Výpočet kinetických koeficientů (KMC)

Připomínka MC integrace: prosté vzorkování a zákon velkých čísel

odhad II. prosté vzorkování

$$I_n = \frac{b-a}{n} \sum_{k=1}^n f(x_k)$$

Ze zákona velkých čísel
vyplývá, že v limitě $n \rightarrow \infty$
 $I_n \rightarrow I$

Zákon velkých čísel popisuje skutečnost, že s rostoucím počtem opakovaných nezávislých pokusů se empirické charakteristiky, které popisují výsledky těchto pokusů, blíží k teoretickým charakteristikám.

Monte Carlo integrace ve více dimenzích

Uvažujme množinu Ω , jako podmnožinu $\mathbf{R}^m$ na níž je dán mnohonásobný určitý integrál

$$I = \int_{\Omega} f(\bar{\mathbf{x}}) d\bar{\mathbf{x}}$$

Integrál se počítá pro známý objem V množiny Ω

$$V = \int_{\Omega} d\bar{\mathbf{x}}$$

Nejjednodušší metoda, jak se provádí výpočet, je prostě získat odhad integrálu Q_N pomocí N uniformních vzorků na oblasti Ω v N bodech:

$$\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_N \in \Omega,$$

Integrál I je pak aproximován jako:

$$I \approx Q_N \equiv V \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\bar{\mathbf{x}}_i) = V \langle f \rangle$$

Díky zákonu velkých čísel platí:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} Q_N = I$$

prosté a preferenční vzorkování

V případě ostrého maxima na malé oblasti přímé vzorkování selhává.

Je třeba užít tzv. preferenční vzorkování.

1D příklad

Termodynamické Monte Carlo

Cíl: výpočet termodynamických vlastností, např. střední hodnotu energie etc.

Systém popsán: klasickým hamiltoniánem H a stavy A s rozdělením $\pi(A)$

$$\pi(A) = \exp[-\beta H(A)] / Z, \quad Z = \int \pi(A) DA$$

Střední hodnota:

$$\langle X \rangle = \int X(A) \pi(A) DA$$



souhrně sumace
nebo integrace

Termodynamické Monte Carlo

Cíl: výpočet termodynamických vlastností, např. střední hodnotu energie etc.

Systém popsán: klasickým hamiltoniánem H a stavy A s rozdělením $\pi(A)$

$$\pi(A) = \exp[-\beta H(A)] / Z, \quad Z = \int \pi(A) DA$$

Střední hodnota:

$$\langle X \rangle = \int X(A) \pi(A) DA$$

změna míry pro preferenční vzorkování:

$$\pi(A) = \exp[-\beta H(A)] \frac{1}{Z}$$

$$\langle X \rangle = \int \frac{X(A) \pi(A)}{p(A)} p(A) DA$$

**POTŘEBUJEME
PREFERENČNÍ VZORKOVÁNÍ**

odhad pro MC:

pro $p(A) = \pi(A)$:

$$\langle X \rangle \simeq \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \frac{X(A_k) \pi(A_k)}{p(A_k)}$$

$$\langle X \rangle \simeq \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X(A_k)$$

Jak to vyřešit ?

Správné rozdělení pro vzorkování najdeme pomocí limitního Markovova procesu

K tomu potřebujeme znát náhodné (stochastické) procesy: vědět, kdy existuje tzv. limitní rozdělení.

Stochastické procesy a Markovovy řetězce

N. G. van Kampen Stochastic processes in physics and chemistry Elsevier 1992

Stochastický proces je zobecnění náhodné veličiny realizací procesu je funkce nebo řada, pro každou realizaci jsme schopni popsat pouze její pravděpodobnostní charakter.

Viz. též minulá přednáška M. Předoty

- formální popis systému
- podmíněné pravděpodobnosti řetězců
- **Markovův řetězec**
- **existence limitní rozdělení**
- etc.

Řešení

Limitní rozdělení bude kanonické rozdělení pokud:
Platí podmínka detailní rovnováhy + je splněna
podmínka ergodicity.

Podmínka ergodicity

1. všechny stavy jsou dosažitelné z libovolného stavu v konečném čase s nenulovou pravděpodobností a
2. žádný stav není periodický (stav A_i je periodický, jestliže existuje perioda m taková, že je-li $\pi_i^{(k)} = 0$, pak $\pi_i^{(k+m)} = 0$ a je-li $\pi_i^{(k)} \neq 0$, pak $\pi_i^{(k+m)} \neq 0$),

pak se množina stavů nazývá *ergodická* a pro libovolné počáteční rozložení pravděpodobností $\boldsymbol{\pi}^{(1)}$ existuje limita $\boldsymbol{\pi} = \lim_{k \rightarrow \infty} \boldsymbol{\pi}^{(k)}$ [33, 34]. Rozložení pravděpodobnosti $\boldsymbol{\pi}$ je tedy řešením rovnice

$$\boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{W} = \boldsymbol{\pi} \quad (4.12)$$

a toto řešení je jediné.

■ Jinými slovy, vektor stavů $\boldsymbol{\pi}$ je vlastním levým vektorem stochastické matice $\mathbf{W}$. Lze ukázat, že všechna další vlastní čísla jsou v absolutní hodnotě menší než 1.

Matice přechodu

Metropolis

$$W_{i \rightarrow j} = \begin{cases} \alpha_{i \rightarrow j} & \text{pro } \pi_j > \pi_i \\ \alpha_{i \rightarrow j} \frac{\pi_j}{\pi_i} & \text{pro } \pi_j < \pi_i \\ 1 - \sum_{k \neq i} W_{i \rightarrow k} & \text{pro } i = j \end{cases}$$

kompaktně:

$$W_{i \rightarrow j} = \alpha_{i \rightarrow j} \min \left\{ 1, \frac{\pi_j}{\pi_i} \right\} \text{ pro } i \neq j$$

Jak se konkrétní Markovův řetězec vytváří?

Třeba odpovědět na dvě otázky:

- Jak se konkrétně mezi stavy přechází?
- Jsou následující stavy A_i a A_{k+1} nutně různé?

zkušební nová konfigurace

- pro spojité – posunutí
- pro diskrétní – směna spinu nebo klastru spinů

realizace pomocí

$$p_{prij} = \min \left\{ 1, \frac{\pi_j}{\pi_i} \right\}$$

pro kanonické rozdělení

$$p_{prij} = \min \{ 1, -\beta \Delta(E) \}, \quad \Delta(E) = H(A_j) - H(A_i)$$

$$\Delta(E) < 0: \quad p_{prij} = 1 \qquad \Delta(E) > 0: \quad p_{prij} = \exp \{ -\beta \Delta(E) \}$$

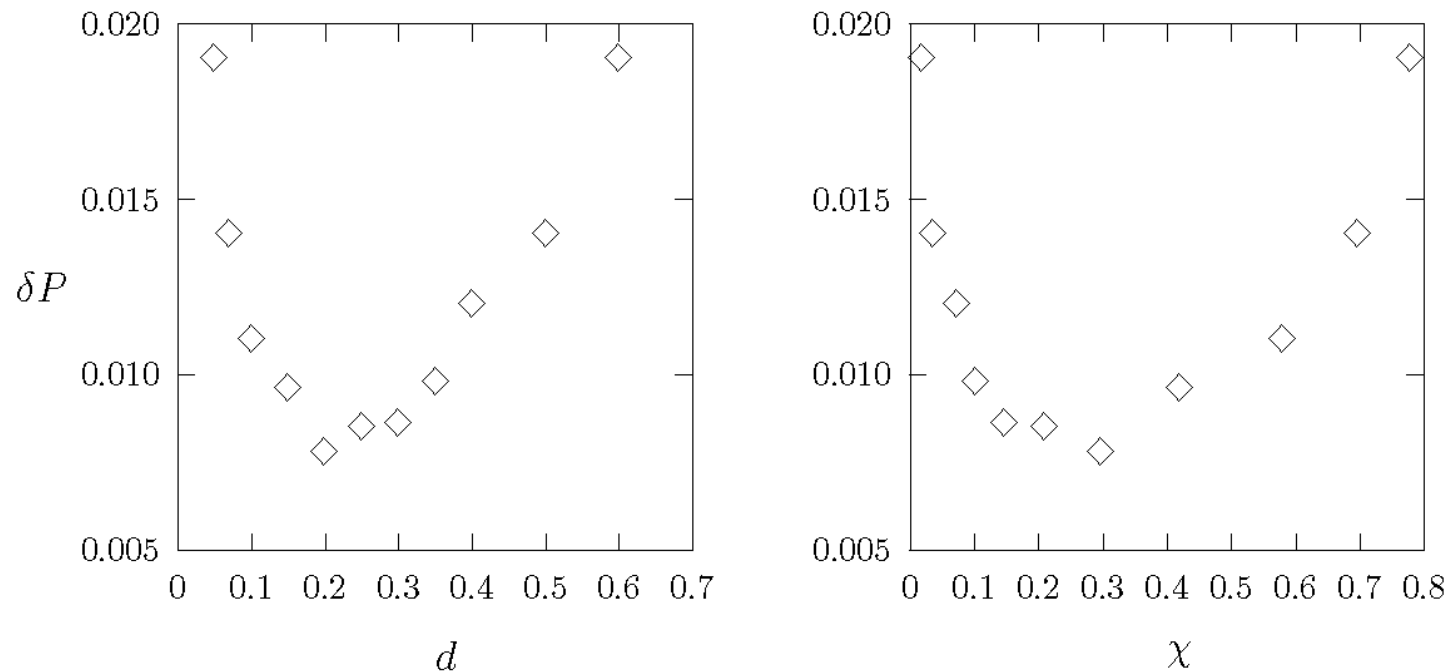
realizace jednoho kroku

$$u < p_{prij} \quad A^{(k+1)} = A^{zkus}$$

zlomek přijetí =

$$= \frac{\text{počet přijatých konfigurací}}{\text{počet generovaných konfigurací}}$$

Zkušební posunutí a chyba



Obrázek 4.1: Závislost směrodatné chyby měření viriálového tlaku δP na maximální délce zkušebního posunutí d (vlevo) a na zlomku přijatých konfigurací χ (vpravo). Každý bod byl získán z 10^7 MC kroků (krok = pokus pohnout jednou částicí) na systému 64 LJ atomů ($\sigma = 1$, $\epsilon = 1$) při $T = 1.2$, $\rho = 0.8$.