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)

Úlohy

a) MC integrace

b) Geometrické MC

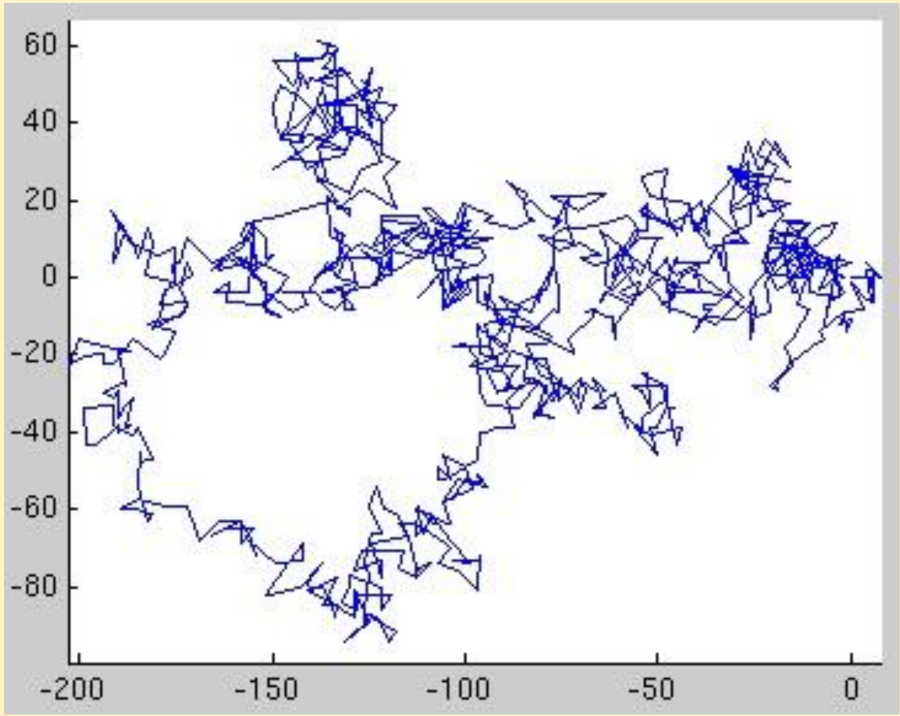
- **uzlová perkolace – práh perkolace**
- **uzlová perkolace – rozdělení klastrů**
- **srovnání náhodných procházek – exponenty**
- **růst sněhové vločky – fraktální dimenze**

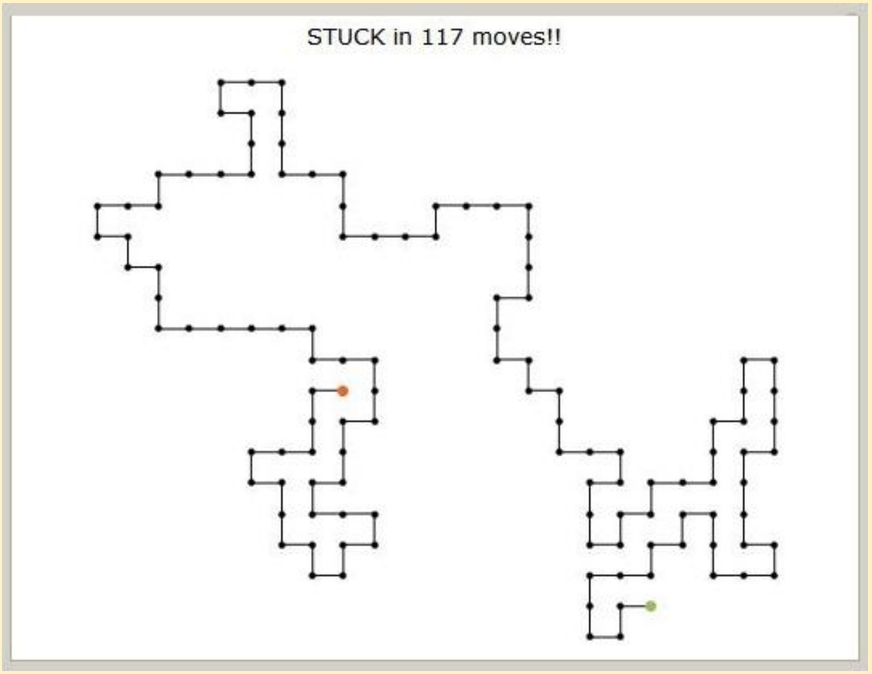
c) Termodynamické MC

- **2D Isingův model – magnetizace vs. T**
- **3D Isingův model – hystereze**
- **Wolfův algoritmus**
- **tekutiny s různými potenciály: LJ, tuhé koule etc.**

Náhodné procházky

- prostá
- bez návratů
- samovyhýbající se (self-avoiding walk-SAW)



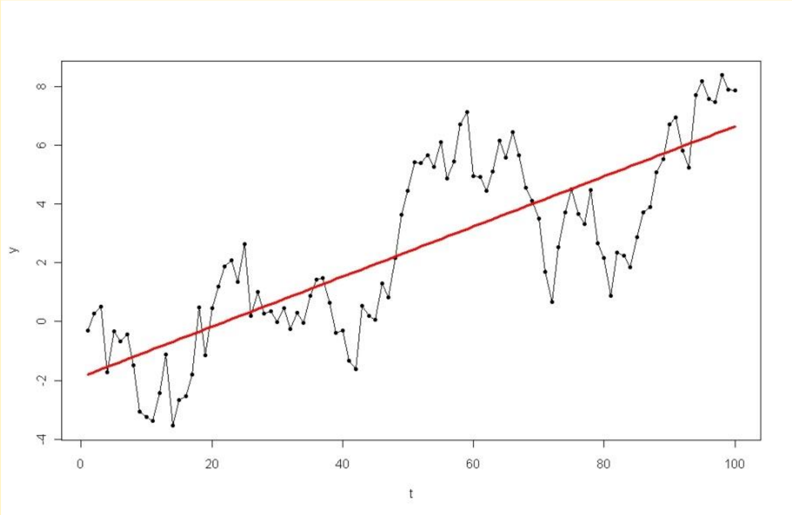


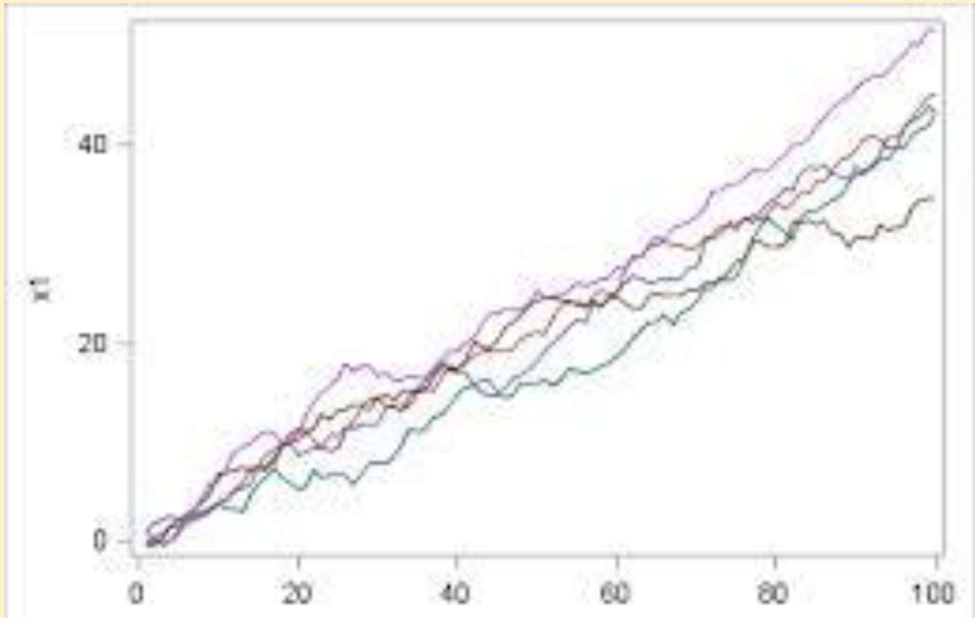
úloha o náhodných procházkách

I-4 Srovnání typů náhodných procházek v 2D
Simulujte náhodnou procházku na dvou-dimenzionální čtvercové mřížce. Určete závislost vzdálenosti počátečního a koncového bodu na počtu kroků pro různé typy procházek: prostá náhodná procházka, procházka bez okamžitých návratů, procházka bez protínání.
(V posledním případě se lze omezit na menší počet kroků.)
Určete exponenty pro jednotlivé typy procházek, udejte chyby získaných exponentů.

Náhodné procházky

Měřme vzdálenost R od počátku v závislost na čase a určeme příslušnou funkci $R(t)$.



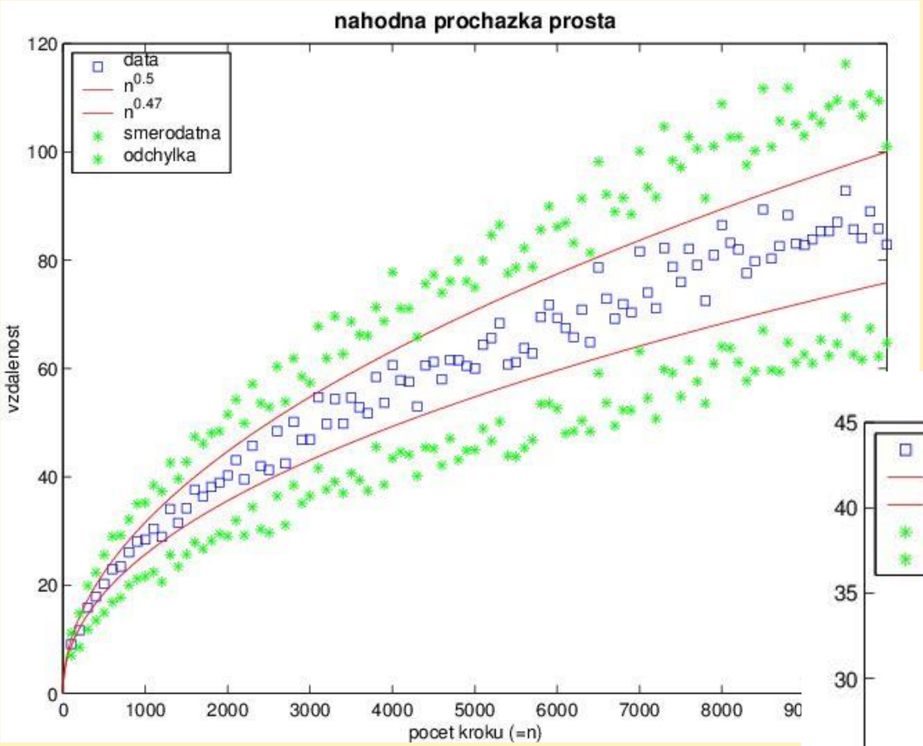


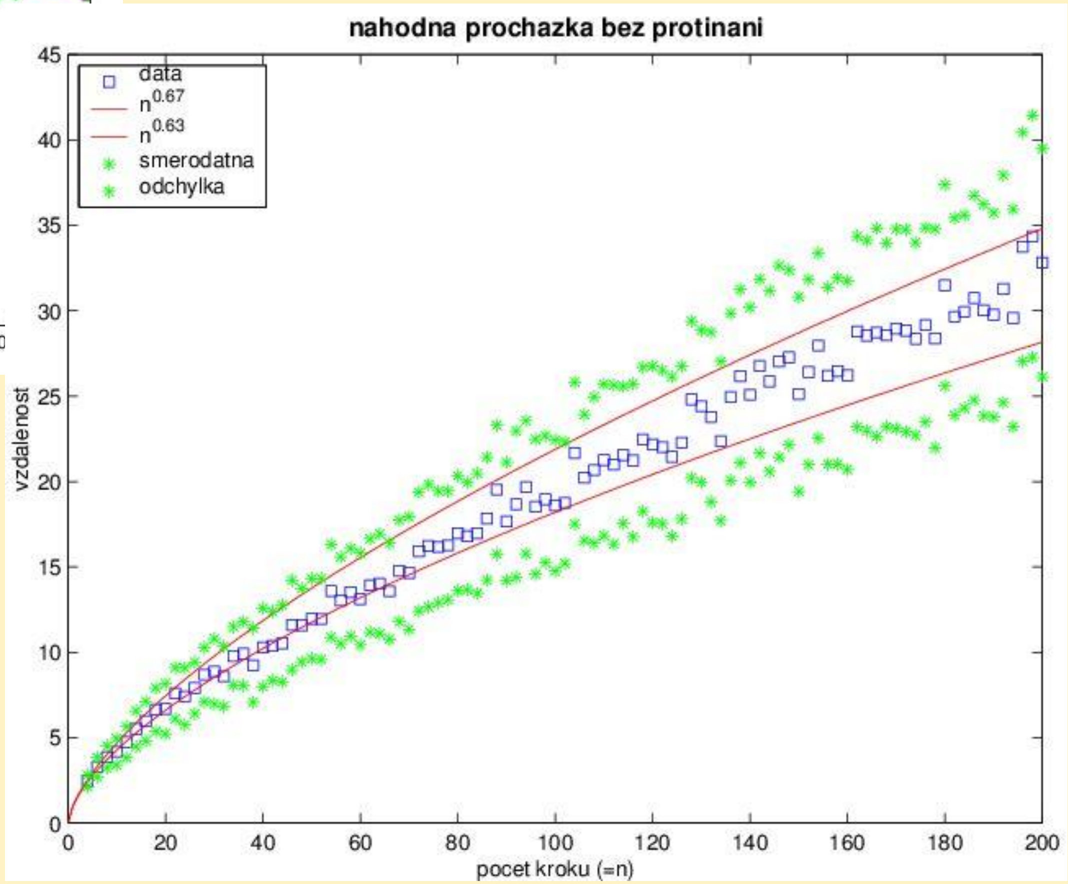
Různé běhy je třeba vystředovat a pak závislost fitovat.

Určit exponent α v $R \sim t^{\alpha}$.

Náhodné procházky - řešení

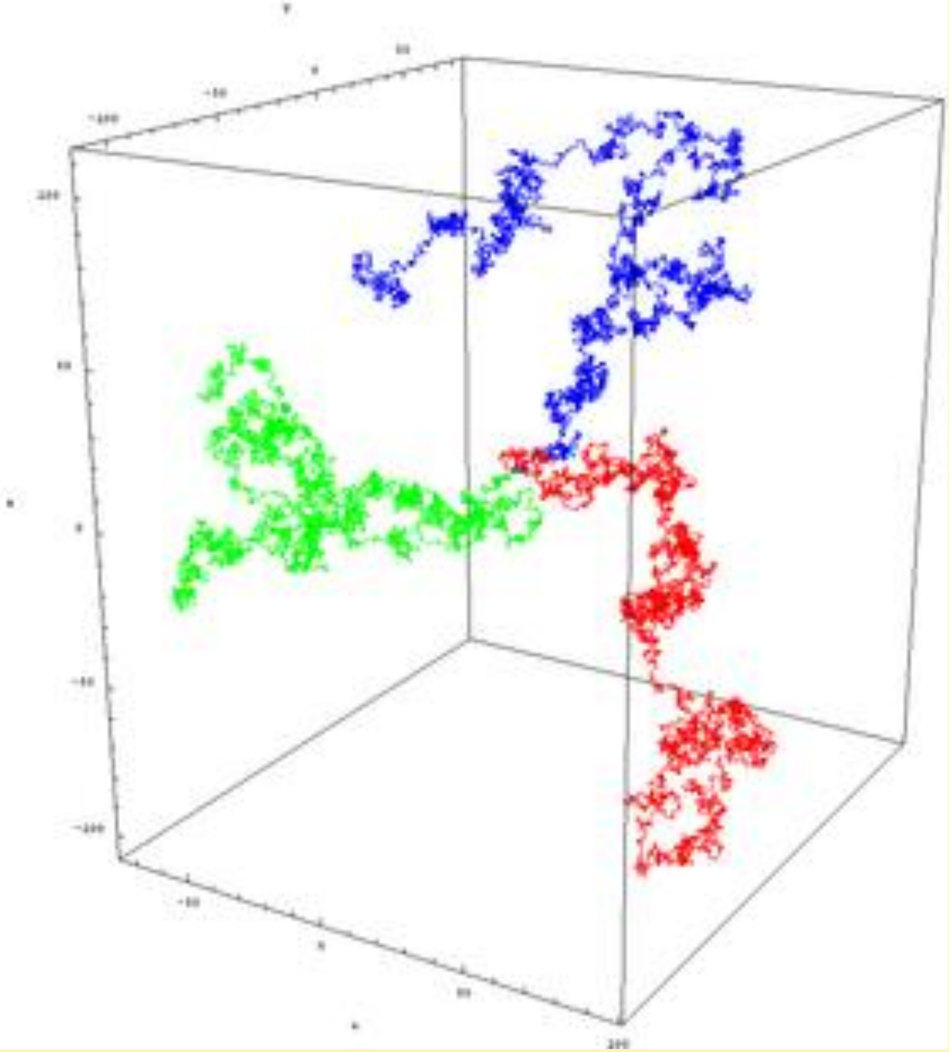
p. Psíkal





Náhodné procházky

též pro tři dimenze



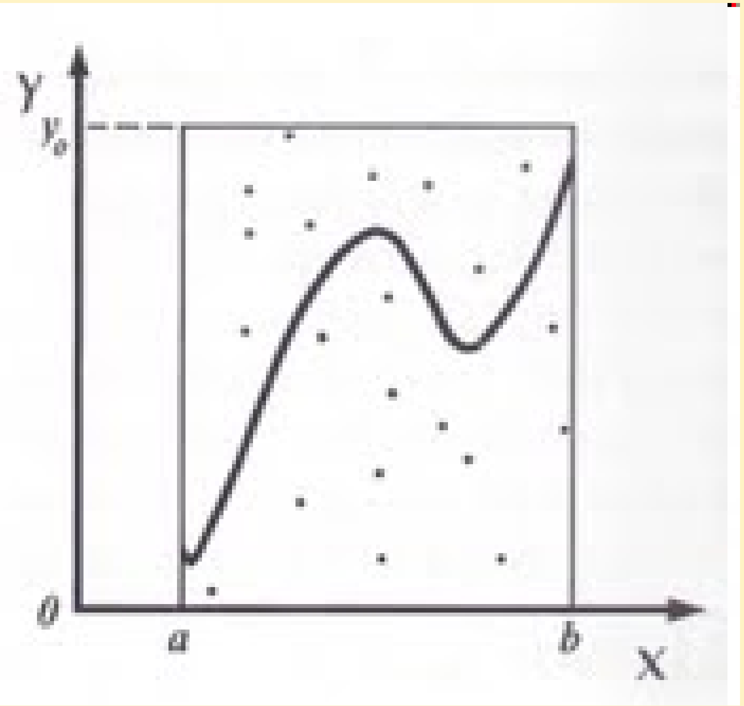
samovýbající se
self-avoiding walk (SAW) -
není omezení na délku

http://en.wikipedia.org/wiki/Random_walk#Gaussian_random_walk

Monte Carlo integrace

Zadán konečný určitý integrál $I = \int F(x)dx$, ale neznáme analytickou řešení a nelze použít standardní metody numerické integrace – singularita, složité hraniční podmínky.

Metodou MC nespočteme integrál přesně, ale získáme odhad výsledku.

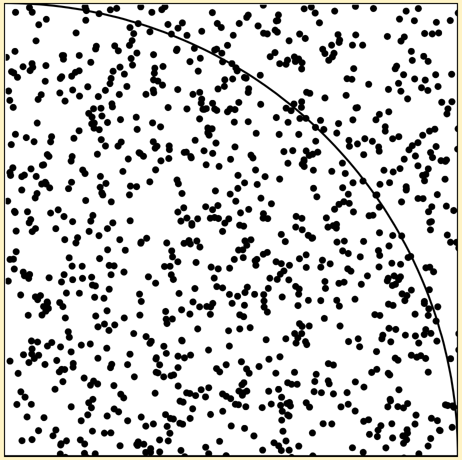


<u>odhad I. metoda střílení</u>

$$I_n = Y(b-a)\, M_n / n$$

Určení čísla π střílením

$$\pi/4 = M_n/n$$

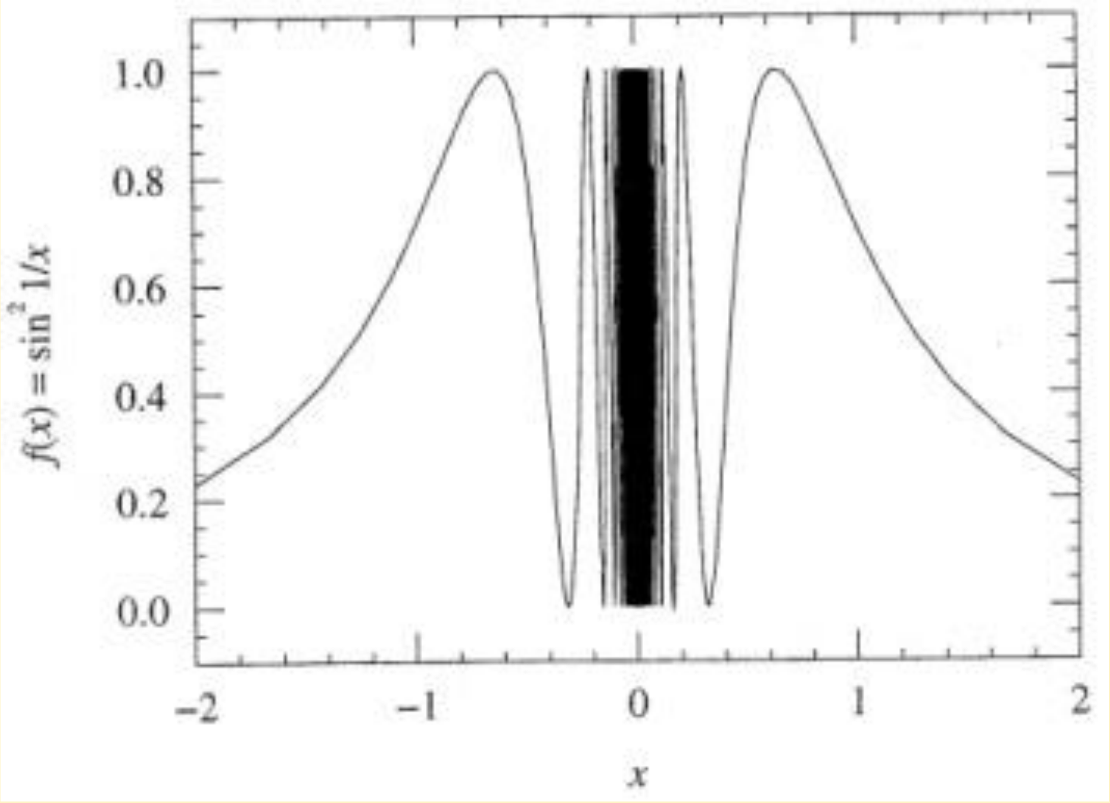


n	výsledek
1000	3,0800
2000	3,0720
3000	3,1147
4000	3,1240
5000	3,1344
6000	3,1426
7000	3,1343
8000	3,1242
9000	3,1480
10000	3,1440

100	3,1600
200	3,0400
300	3,1067
400	3,0800
500	3,0560
600	3,0800
700	3,0743

Další příklad

$$I = \int_a^b \sin^2 {}^1\!/\!_x \, dx$$



Ze zákona velkých čísel vyplývá, že v limitě n -> ∞ $I_n \to I$

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 -> ∞ $I_n \to I$

zákon velkých čísel:

Jsou dány nezávislé náhodné veličiny X_1, X_2 ..., X_n se stejným rozdělením a střední hodnotou

$$\mu = \overline{X_1} = \overline{X_2} = \cdots = \overline{X_n}$$

pak pro n -> ∞ se aritmetický průměr veličin

$$S_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} X_k$$

blíží střední hodnotě náhodné veličiny

$$\mu = \int_a^b f(x)dx$$

http://en.wikipedia.org/wiki/Monte_Carlo_integration

Monte Carlo integrace

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

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

Integrál se počítá pro známý objem V množiny Ω

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

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

$$\overline{\mathbf{x}}_1, \cdots, \overline{\mathbf{x}}_N \in \Omega,$$

Integrál I je pak aproximován jako:

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

Díky zákonu velkých čísel platí:

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

http://en.wikipedia.org/wiki/Law_of_large_numbers

prosté a preferenční vzorkování

výklad pro 1D příklad

Příklad úlohy

Výpočet funkce v jedné dimenzi pomocí MC

Vykreslete funkci I(x) danou integrálem

$$I(x) = \int_0^x \sin^2 \frac{1}{y}\, dy$$

v intervalu od x= -1 do x= 1.

Monte Carlo vs. numerická integrace

chyba MC: Centrální limitní teorém $1/\sqrt{n}$

podle variance náhodných veličin - odvození pro střílení

U numerické integrace dělíme interval (a,b) na N_b sub-intervalů, bodů.
Místo počtu n pokusů v případě MC je zde rozhodujím parametrem počet dělení (bodů) $N_b = N$.

Celkový počet dělení N_x dramaticky roste s počtem proměnných $N_p = N_{castic}\,d$, jako $N_x = (N_b)^{(N_p)}$.

Chyby numerické integrace vs. MC

Pro srovnání je třeba znát závislost chyby numerické integrace na parametru *N*.

Metoda	**1 dimenze**	**d dimenzí**
lichoběžíková	$1/N^2$	$1/N^{2/d}$
Simsonova	$1/N^4$	$1/N^{4/d}$

Pro integrál v dimenzi d > 8 je MC výhodnější než numerická integrace.

Náhodná čísla

Skutečně náhodná jsou v přírodě nebo jsou získaná pomocí technických aplikací.

- pro použití třeba zaznamenat a pak načíst do programu
- nepraktické, nereprodukovatelné, pomalé

Proto generujeme sami pomocí programu

- generátory náhodných čísel přesněji pseudonáhodných čísel
- program je deterministický

například v C/C++ standardně pomocí funkcí **rand** a **srand**

http://physics.ujep.cz/~mmaly/vyuka/oporaPrgB/010.html

Náhodná čísla pokračování

Sekvence čísel, každé je generované pomocí *n* předchozích.

$$r_i = F(r_{i-1}, r_{i-2}, \dots r_{i-m})$$

Požadavky:

- co největší perioda
- minimální korelace
- efektivní = rychlý výpočet
- přenositelnost na různé platformy

Typy:

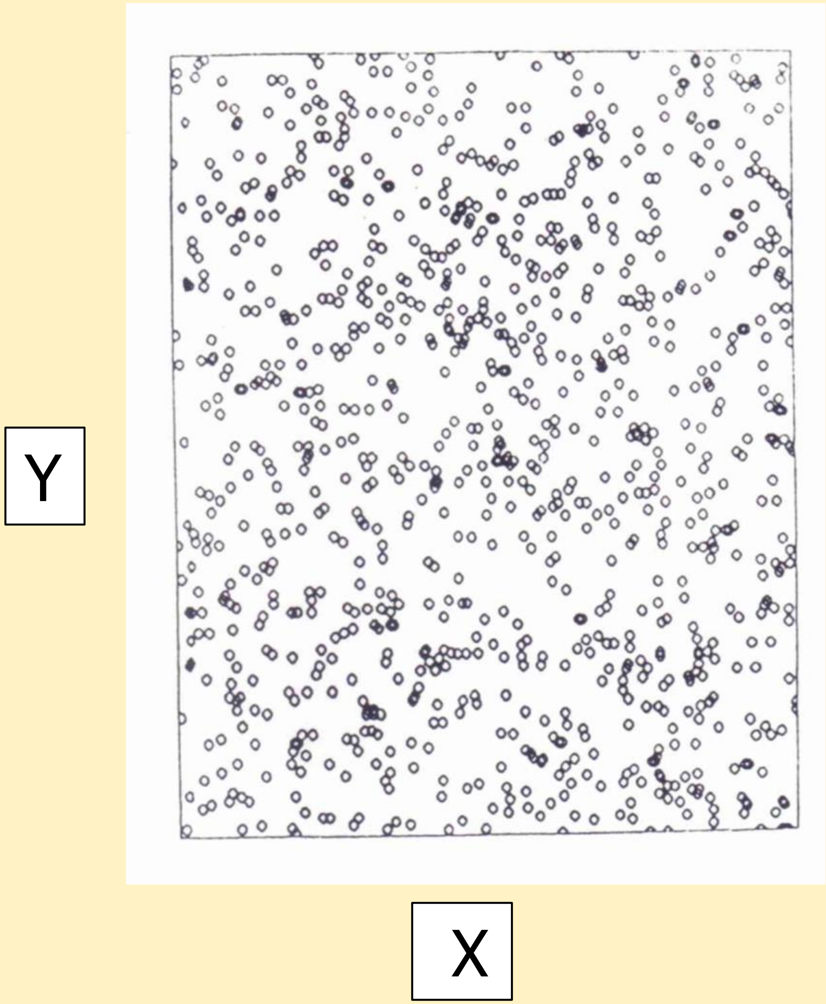
- kongruentní K(C,M) ……
- s posuvným registrem R(A,B,C,…) ……

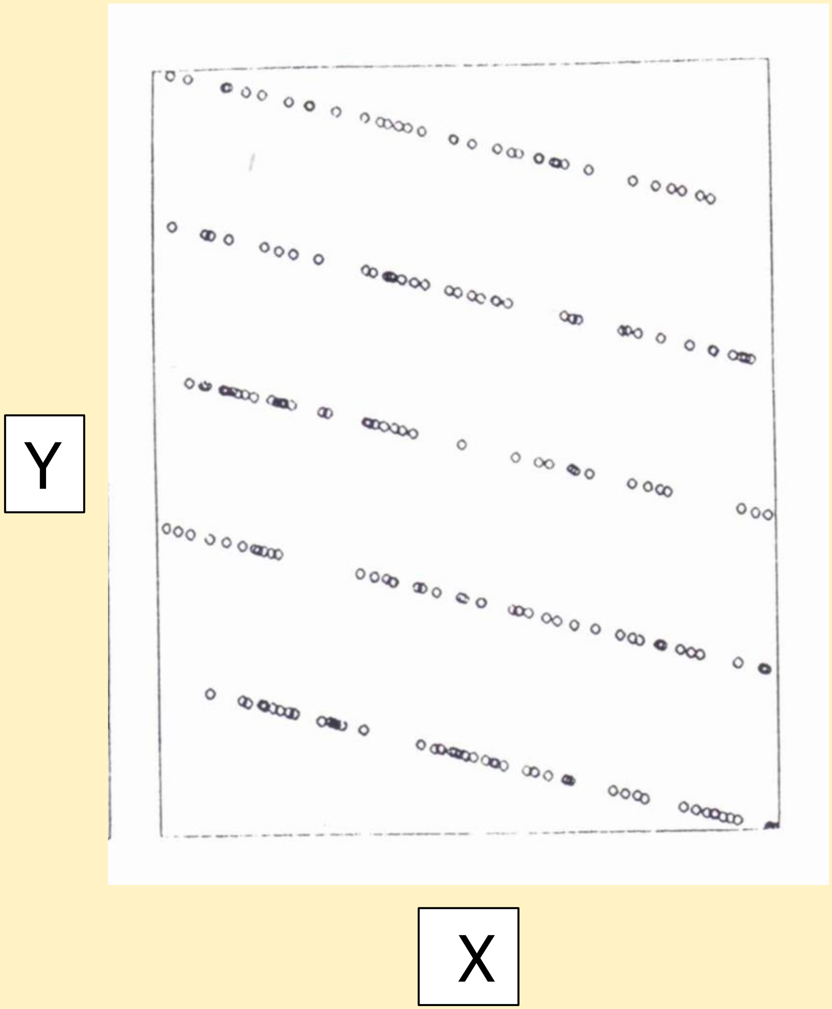
Testy generátorů

Generujme náhodná čísla v hyperkrychli v d dimenzích o hraně L.

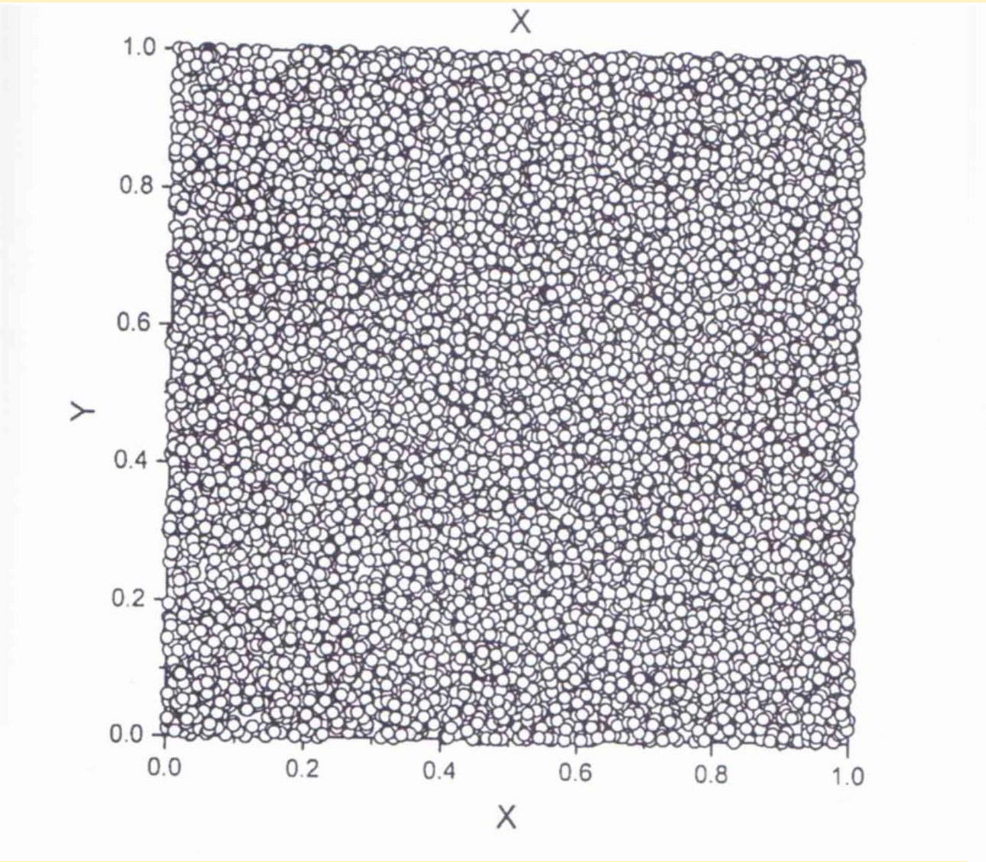
$$\overrightarrow{\mathrm{x}_{\mathrm{i}}} = \left\{ \mathrm{x}_1, \ldots, \mathrm{x}_d \right\}, \quad \mathrm{x}_i = \in \left(0, L \right)$$

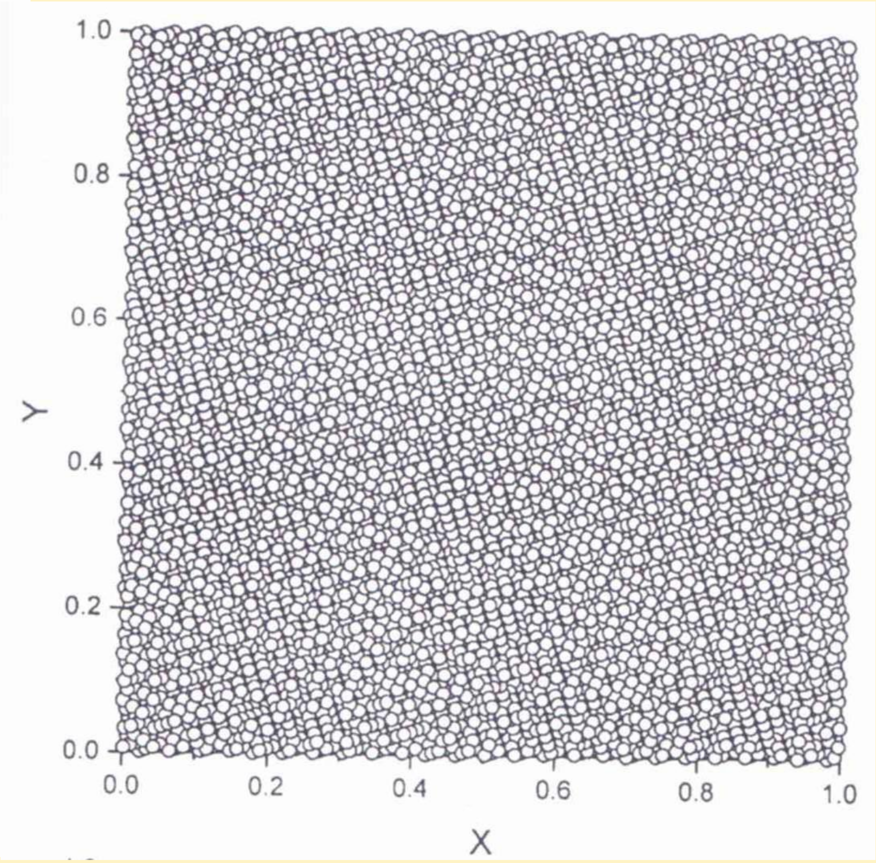
Testy generátorů v 2D





Testy generátorů v 2D





Náhodná čísla - realizace

Existují kódy generátorů v různých programovacích jazycích.

Generátor je vhodné inicializovat např. pomocí času v počítači – time() .

Začátek: jednoduchý prográmek pro výpis zvoleného počtu náhodných čísel.

Náhodná čísla - realizace

Začátek: jednoduchý prográmek pro výpis zvoleného počtu náhodných čísel při volání generátoru RAND.

```
 program rngtest
 print *, 'vloz pocet pokusu '
 read *, npokus
 print *, '  pocet pokusu ', npokus
do 10 i=1,npokus
    rndtest=RAND()
    write(6,*) i,rndtest
10 continue
    end program rngtest
```

```
vloz pocet pokusu
10
   pocet pokusu           10
           1  0.61411285
           2  0.39798999
           3  1.78151131E-02
           4  0.41991234
           5  0.46889496
           6  0.71923804
           7  0.23525500
           8  0.93125153
           9  0.54643750
          10  0.97659349
```