جلسه یازدهم . روش مونت کارلو تعاریف آماری حل مسأله با روش مونت کارلو

Note Title ۱۳۹۷/۰۳/۰۹

روش مونت کارلو ← روش شبیه سازی آماری است که بر پایه اعداد تصادفی است ← الگوریتم متروپلیس Metropolise

Monte carlo

الگوریتم حمام گرما heat bath

حداقل ۴ عنصر برای یک شبیه سازی مونت کارلو احتیاج است : ۱- اعداد تصادفی

۲- PDF ← تابع توزیع احتمال

۳- حل PDF ها

۴- واریانس جمع

مفهوم اعداد تصادفی

کتاب دو تاس ←

domain $\{2, 3, 4, 5, \dots, 12\}$

احتمال $\left\{\frac{1}{36}, \frac{2}{36}, \dots, \frac{6}{36}, \frac{5}{36}, \dots, \frac{1}{36}\right\}$

فرض کنید تاس ها را ۱۱ بار انداختیم : $\{10, 8, 6, 3, 6, 9, 11, 12, 3, 2, 2\}$

متناسب با نیمه عمر ذره است.

مثال ← رادیواکتیو ← برای مدت زمان طولانی، تعداد ذرات α برحسب زمان را رسم می کنیم :

$PDF = \lambda \exp(-\lambda t)$

تصادفی:

متغیر تصادفی: گسسته یا پیوسته باشد و آن را با حروف بزرگ نمایش می‌دهیم: X و Y

۱- مفهوم دامنه

$$D = \{x\}$$

۲- مفهوم PDF: تابعی است که نشان می‌دهد متغیر X با چه احتمالی مقدار x را می‌گیرد.

$$P(x)$$

در حالت گسسته: $P(x) = \text{Prob}(X = x)$

در حالت پیوسته: $\text{Prob}(a < X < b) = \int_a^b p(x)\,dx$

PDF ها دو شرط را باید برآورده کنند:

$$0 \leq P(x_i) \leq 1 \quad \left\{ \begin{array}{l} \sum_{x_i \in D} P(x_i) = 1 \\ \int_{x \in D} P(x)\,dx = 1 \end{array} \right.$$

uniform distribution: $P(x) = \frac{1}{b-a}\,\Theta(x-a)\,\Theta(b-x)$; $\Theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ 1 & x \geq 0 \end{cases}$

poisson's 〃 : $P(x) \propto \lambda e^{(-\lambda x)}$

Gaussian " : $p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right]$

طان ها

$\langle h \rangle \equiv \int h(x)\,p(x)\,dx$: h مقدار انتظاری

n-th moment of the PDF : $\langle x^n \rangle = \int x^n\, p(x)\, dx$

1st " " " $\langle x \rangle = \int x\, p(x)\, dx$: mean value

2nd " " " $\langle x^2 \rangle = \int x^2\, p(x)\, dx$

$\sigma^2 = Var(x) = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \cdots = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$

اولین تصویر از روش مونت کارلو

$I = \int_a^b f(x)\, dx \approx \sum_{i=1}^{N} w_i\, f(x_i)$ → mesh point

وزن

$w_i = 1$: همه وزن ها را برابر ۱ می گیریم

$I = \int_0^1 f(x)\, dx \approx \underset{1/N}{h} \sum_{i=1}^{N} f(x_{i-1/2})$; $h = \frac{\overset{1-0}{b-a}}{N}$: روش مستطیل

پیوسته : $\langle f \rangle = \int_0^1 f(x)\,dx$ گسسته : $\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\, \cancel{p(x_i)}\ 1$

توزیع یکنواخت در بازه $[0,1]$

$$\langle f \rangle = I$$

$$\sigma_f^2 = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2$$

اگر اندازه‌گیری M بار تکرار شود:

$$\sigma_M^2 = \frac{\sigma_f^2}{M} \rightarrow \sigma_M \propto \frac{1}{\sqrt{M}}$$

مثال:

$$\int_0^1 dx \frac{4}{1+x^2} = \pi$$

الگوریتم : ۱- تعداد نمونه‌گیری‌های مونت کارلو را انتخاب می‌کنیم (M)

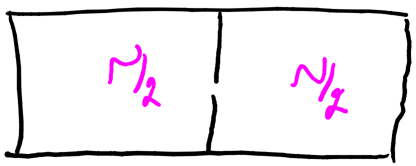
۲- یک لوپ روی M می‌زنیم و برای هر گام یک عدد تصادفی در بازه $[0,1]$ با صدا کردن تابع مولد اعداد تصادفی ایجاد می‌کنیم.

۳- از این عدد استفاده کرده و $f(x_i)$ را پیدا می‌کنیم.

۴- مقدار میانگین و انحراف معیار را برای هر لوپ بدست می‌آوریم.

۵- " " " " را بعد از M نمونه می‌یابیم.

مثال: ذره در جعبه.



فقط یک ذره در واحد زمان می‌تواند از این حفره عبور کند.

شرایط : $N \gg 1$

هر ذرات سمت چپ با احتمال های یکسان به سمت راست می رود.

n_r : تعداد ذرات سمت راست و n_l تعداد ذرات سمت چپ : $n_l = N - n_r$

احتمال این که یک ذره در زمان Δt از سمت چپ به سمت راست برود : $\frac{n_l}{N}$

الگوریتم : ۱- تعداد ذرات را مشخص کنید : $N = 1000$

۲- یک لوپ روی زمان تعریف کنید که ماکزیمم زمان مثلاً ۴ برابر تعداد ذرات باشد.

$for(t=0\ ;\ t<4000\ ;\ t=t+1)$

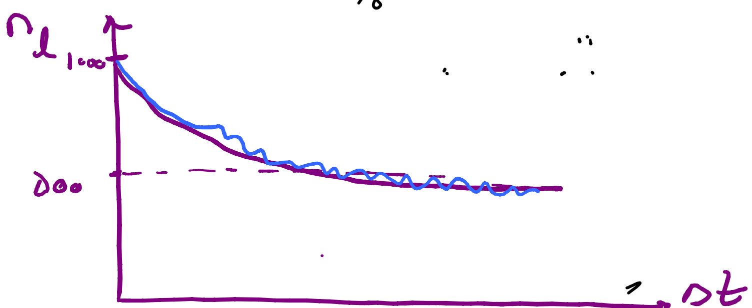
۳- برای هر گام زمانی Δt، احتمال $\frac{n_l}{N}$ برای حرکت به سمت راست وجود دارد. این احتمال را با عدد تصادفی x مقایسه کنید.

۴- اگر $\frac{n_l}{N} > x$ باشد، تعداد ذرات سمت چپ را یکی کاهش دهید: $n_l = n_l - 1$

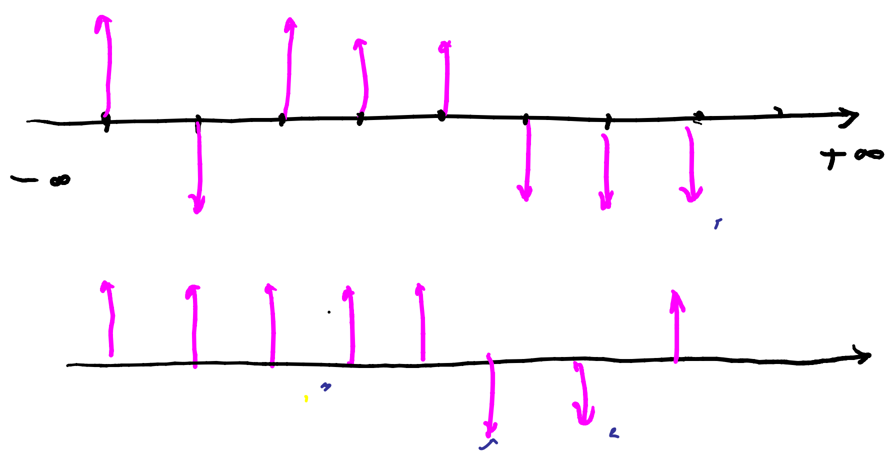
در غیر این صورت $n_l = n_l + 1$

۵- زمان را یک واحد افزایش دهید (لوپ خارجی)

حل مسأله به صورت تحلیلی : $n_l(t) = \frac{N}{2}\left[1 + e^{-2t/N}\right]$

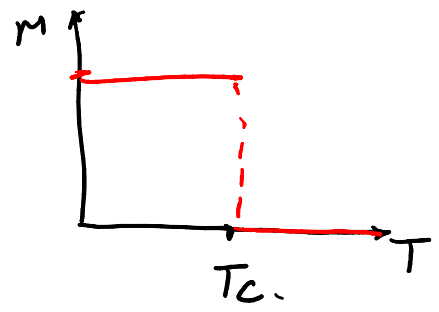


الگوریتم متروپلیس - مدل آیزینگ



$T > T_c$ $M = 0$

$T < T_c$ $M \neq 0$



importance sampling → شکل X معرفی

فضا زمان و N سایت شبکه در هر بعد → تعداد اسپین‌ها $= N^4$

تعداد پیکربندی اسپینی $= 2^{N^4} \xrightarrow{N=16} 2^{16^4} \approx 10^{19728}$

فضای نمونه‌ی ما محدود می‌شود ولی نتایج با نتایج واقعی تطبیق دارد.

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \lim_{N\to\infty} \frac{b-a}{N} \sum f(x_i)$$

۱- مقداردهی اولیه: cold start: همه اسپین‌ها را به صورت منظم مثلاً به سمت بالا ($+1$) می‌نشانیم

hot start: از اعداد تصادفی استفاده می‌کنیم و اسپین‌ها را می‌نشانیم.

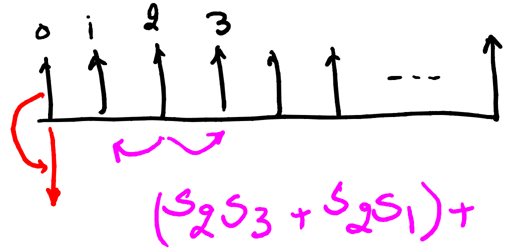
x: random number

if $x < 0.5 \to s = -1$ if $x > 0.5 \to s = +1$

۲- انرژی سیستم را حساب کنید. E_0

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \xrightarrow[\text{نزدیک}]{\text{برهم‌کنش همسایه‌های}} s_{i-1} \quad s_i \quad s_{i+1}$$

و $\left.\begin{array}{l} s[999+1] = s[0] \\ s[0-1] = s[999] \end{array}\right\}$ شرایط مرزی دوره‌ای



۲- یکی از اسپین‌ها را به سمت پایین برمی‌گردانیم.

$$+1 = S[0] \longrightarrow -1 = S[0]$$

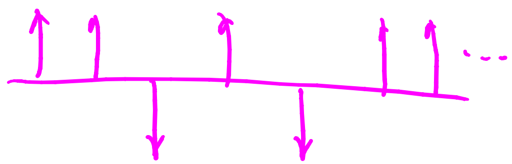
دوباره انرژی سیستم را حساب کنید: E_1

۳- اگر $\Delta E = E_1 - E_0$ کوچکتر از صفر باشد، حالت را قبول کنید $(S[0] = -1)$ در غیر این صورت $S[0]$ را به سمت بالا برگردانید.

۴- یک عدد تصادفی x انتخاب کنید اگر $x < \exp(-\beta \Delta E)$ باشد، حالت را قبول کنید در غیر این صورت اسپین را به حالت اولیه برگردانید.

اگر $\Delta E > 0$ بود

$T = 0/001$ $\qquad \beta = \dfrac{1}{kT}$



$$M = \sum \text{کل اسپین‌ها}$$

$$E = -\sum_i (s_i s_{i+1} + s_i s_{i-1})$$

۵- برای تمامی اسپین‌ها مراحل بالا را انجام دهید.

۶- برای دمای بعدی کل مراحل را تکرار کنید (لوپ خارجی).