

Lekce 10

Metoda Monte Carlo I

Úvod

Osnova

1. Princip metody
2. Numerický výpočet integrálů
3. Metropolisův algoritmus
4. „Počáteční“ podmínka
5. Varianty metody MC
6. MC simulace

Princip metody

Termodynamické (makroskopické) parametry počítáme jako souborové střední hodnoty parametrů dynamických (mikroskopických) - viz lekce 4,

$$B = \langle b \rangle \equiv \frac{\int_{\mathbb{R}^{6N}} b(\vec{r}_k, \vec{p}_k) \rho(\vec{r}_k, \vec{p}_k; \dots) d\Gamma}{\int_{\mathbb{R}^{6N}} \rho(\vec{r}_k, \vec{p}_k; \dots) d\Gamma}.$$

V užším slova smyslu s MC spojujeme kanonický soubor

$$\rho(\vec{r}_k, \vec{p}_k; T, V) \sim e^{-\frac{H(\vec{r}_k, \vec{p}_k; V)}{k_B T}}.$$

Obvykle je možná separace integrace přes impulsy a souřadnice, integrace přes impulsy je možno provést analyticky

$$B = B_{\text{KIN}} + \frac{\int_{\mathbb{R}^{3N}} b_{\text{KON}}(\vec{r}_k) \rho_{\text{INT}}(\vec{r}_k, \dots) d^3\vec{r}_1 \dots d^3\vec{r}_N}{\int_{\mathbb{R}^{3N}} \rho_{\text{INT}}(\vec{r}_k, \dots) d^3\vec{r}_1 \dots d^3\vec{r}_N}.$$

V kanonickém souboru

$$\rho_{\text{INT}}(\vec{r}_k; T, V) \sim e^{-\frac{W(\vec{r}_k; V)}{k_B T}}.$$

Výpočet souborové střední hodnoty je matematicky výpočtem $3N$ -rozměrného integrálu.

Numerický výpočet integrálů

Jednorozměrné integrály

Široká škála metod, např. **metoda obdélníková**

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{n} \sum_{i=1}^n f\left(a + \frac{b-a}{n} \cdot i\right)$$

Zobecněním obdélníkové metody je **metoda „crude“ Monte Carlo**

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{n} \sum_i f(x_i),$$

kde body x_i jsou náhodně vybírány z intervalu $\langle a, b \rangle$.

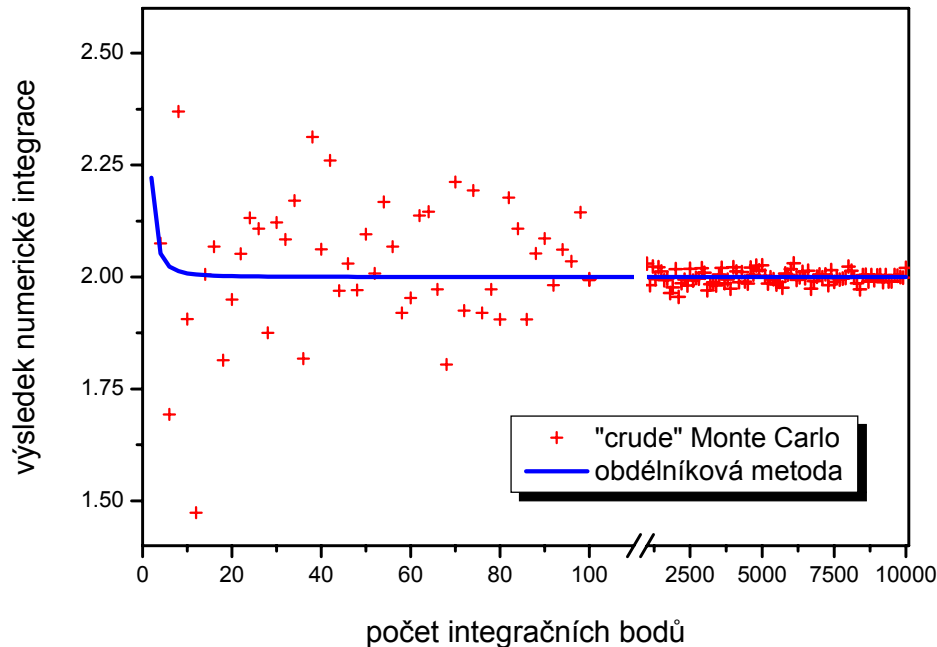
Obdélníková metoda - rovnoměrně rozmístěné body, „crude“ MC metoda - náhodně rozmístěné body.

Problém: Jak náhodně vybrat body ze zadaného intervalu? Viz lekce 12.

Numerický výpočet integrálů

Jednorozměrné integrály

Porovnání výpočtu $\int_0^\pi \sin x \, dx$ metodou obdélníkovou a „crude“ MC.



Závěry

- nevýhoda : „crude“ MC méně přesná než obdélníková metoda,
- výhoda : výpočet možno průběžně monitorovat a operativně ukončit.

Numerický výpočet integrálů

Vícerozměrné integrály

Deterministické metody (zobecnění metody obdélníkové, lichoběžníkové atd.) jsou použitelné jen pro nízké dimenze (≤ 12), v případě mnohorozměrných integrálů nic jiného než MC použít nelze!

Výpočet vícerozměrného integrálu $\int_{\Omega} f(x_1, \dots, x_N) dx_1 \dots dx_N$, kde $\Omega \subset \mathbb{R}^N$, metodou MC

a) zvolíme co nejmenší interval $I \equiv \langle a_1, b_1 \rangle \times \dots \times \langle a_N, b_N \rangle$ takový, že $\Omega \subset I$,

b) vygenerujeme náhodnou posloupnost bodů $\{\vec{x}^{(i)}\}_{i=1}^n$, $\vec{x}^{(i)} \equiv [x_1^{(i)}, \dots, x_N^{(i)}]$ takových, že $x_1^{(i)} \in I$,

$$c) \int_{\Omega} f(\vec{x}) d^N \vec{x} \approx \frac{V(I)}{n} \sum_{\substack{i=1 \\ \vec{x}^{(i)} \in I}}^n f(\vec{x}^{(i)}).$$

Numerický výpočet integrálů

Silně lokalizovaný integrand

tj. integrovaná funkce je nenulová jen na velmi malé části integračního oboru.

Potíž s „crude“ MC - naprostá většina náhodně generovaných bodů padne do oblasti, ve které je funkce nulová, a tedy nijak nepřispěje k hodnotě integrálu → prudké snížení účinnosti metody.

Možné řešení pro jednorozměrné integrály

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)} g(x) dx = \left[\begin{array}{l} f/g \approx 1 \\ y = G(x) \equiv \int g(x) dx \end{array} \right] = \int_{G^{-1}(a)}^{G^{-1}(b)} \frac{f(G^{-1}(y))}{g(G^{-1}(y))} dy \approx \frac{G^{-1}(b) - G^{-1}(a)}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(G^{-1}(y_i))}{g}$$

y_i vybíráme náhodně z intervalu $\langle G^{-1}(a), G^{-1}(b) \rangle$.

Řešení pro vícerozměrné integrály

- Metropolisův algoritmus.

Metropolisův algoritmus

Při výpočtu integrálu $\int_{\Omega} f(\vec{x})\rho(\vec{x})d^N\vec{x}$, kde ρ je silně lokalizovaná funkce na Ω , generujeme náhodné body ne rovnoměrně na $I \supset \Omega$, ale tak, aby jejich hustota byla úměrná ρ .

Naprostá většina bodů takto padne do oblasti, která přispívá k hodnotě integrálu podstatnou měrou, a jen minimum bodů bude vybráno z oblasti, která je pro výpočet integrálu nepodstatná.

$$\text{Pro } \rho \text{ splňující } \int_{\Omega} \rho(\vec{x})d^N\vec{x}=1 \text{ platí } \int_{\Omega} f(\vec{x})\rho(\vec{x})d^N\vec{x} \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\vec{x}^{(i)}).$$

Principiální otázka

Jak správně generovat posloupnosti bodů $\vec{x}^{(i)}$? Zodpovíme v následující lekci.

A ještě jedna otázka

Jak velké musí být n ? V principu $n \rightarrow \infty$, prakticky $n \approx 10^5$ - 10^9 . Závisí na dostupném výpočetním výkonu, studovaném systému a počítaných parametrech.

Metropolisův algoritmus

Výpočet konfiguračních integrálů

$$\mathcal{B}_{\text{INT}} = \int_{\mathbb{R}^{3N}} b_{\text{KON}}(\vec{r}_k) \rho_{\text{INT}}(\vec{r}_k; \dots) d^3 \vec{r}_1 \dots d^3 \vec{r}_N,$$

předpokládáme $\int_{\mathbb{R}^{3N}} \rho_{\text{INT}}(\vec{r}_k; \dots) d^3 \vec{r}_1 \dots d^3 \vec{r}_N = 1.$

Postup

a) vygenerujeme náhodnou posloupnost bodů $[\vec{r}_1^{(i)}, \dots, \vec{r}_N^{(i)}]$ která je v konfiguračním prostoru rozložena s hustotou ρ_{INT} (jak? - ukážeme v následující lekci),

$$\text{b) } \mathcal{B}_{\text{INT}} \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n b_{\text{KON}}(\vec{r}_k^{(i)}).$$

Počáteční podmínka

Podobně jako v případě MD simulace musíme i na začátku MC výpočtu vygenerovat počáteční konfiguraci $[\vec{r}_1^{(0)}, \dots, \vec{r}_N^{(0)}]$.

- pravidelné nebo náhodné rozložení částic uvnitř předem definované nádoby.

Další součásti počáteční podmínky

- počet částic,
- velikost (a tvar) nádoby,
- periodické okrajové podmínky.

Podrobnosti viz lekce 7.

Varianty metody MC

Různé Gibsovy soubory - různé varianty metody MC liší se navzájem distribucemi ρ_{INT}

➤ **kanonický:**
$$\rho_{\text{INT}}(\vec{r}_k; T, V) \sim e^{-\frac{W(\vec{r}_k; V)}{k_B T}},$$

➤ **mikrokanonický:**
$$\rho_{\text{INT}}(\vec{r}_k; E, V) \sim [E - W(\vec{r}_k; V)]^{\frac{3N}{2}-1} \cdot \theta(E - W),$$

➤ **izobaricko-izotermický:**
$$\rho_{\text{INT}}(\vec{r}_k, V; T, P) \sim e^{-\frac{W(\vec{r}_k; V) + PV}{k_B T}},$$

➤ **grand-kanonický.**

MC simulace - shrnutí

Postup

- volba statistického - termodynamického souboru,
- volba interakčního modelu,
- volba počtu částic,
- určení velikosti základní buňky („nádoby“),

- volba počáteční konfigurace,

- generování posloupnosti dalších konfigurací
 - ekvivalence (ustavení termodynamické rovnováhy),
 - simulace (sběr dat),
- vyhodnocení dat (výpočet souborových středních hodnot)
 - záznam konfigurací,
 - průběžný výpočet.

Doporučená literatura

I. NEZBEDA, J. KOLAFKA, M. KOTRLA

Úvod do počítačových simulací, kap. 4, 5, 6, 7
Karolinum, Praha 2003

D. P. LANDAU, K. BINDER

A Guide to MC Simulations in Statistical Physics
Cambridge University Press, Cambridge 2005

M. M. WOOLFSON, G. J. PERT

An Introduction to Computer Simulation, kap. 4
Oxford University Press, New York 1999

A. HINCHLIFFE

Molecular Modelling for Beginners, kap. 10
J. Wiley, Chchester 2006