Def. Metoda Monte Carlo (MC) polega na przedstawieniu postawionego problemu w postaci parametru pewnej hipotetycznej populacji i używaniu losowej sekwencji liczb do tworzenia próbki tej populacji, na podstawie której można dokonać statystycznego oszacowania wartości badanego parametru.

Zakres MC: DUŻY

Idea: Próbkowanie wartości wnoszących główny wkład do interesującej nas obserwabli (parametru).

Przykład: $f(x) \quad (a \le x \le b)$

$$I = \int_a^b f(x)\,dx$$

$$\langle f(x) \rangle = \frac{I}{b-a}$$

Całkę możemy obliczyć przez losowy wybór n punktów x_i o rozkładzie równomiernym na przedziale $[a,b]$ i utworzenie na podstawie wybranej próbki średniej z wartości funkcji $f(x)$

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

Jest to tzw "próbkowanie bezpośrednie"

Jeżeli funkcja zmienia się gwałtownie, to niepewność oszacowania metodą MC będzie duża. Stąd "próbkowanie ważone"

$$\int_a^b p(x)\,dx = 1 \qquad p(x) > 0$$

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)}\, p(x)\,dx$$

Punkty x_i możemy wybrać zgodnie z miarą $p(x)\,dx$, i zastosować właściwą wagę do wartości funkcji obliczonych w punktach x_i.

$$\langle f(x)\rangle \cong \frac{1}{n}\sum_{i}^{n}\frac{f(x_i)}{p(x_i)}$$

z wariancją:

$$\sigma^2 = \int_a^b \left(\frac{f(x)}{p(x)}\right)^2 p(x)\,dx - \left[\int_a^b \frac{f(x)}{p(x)}\,p(x)\,dx\right]^2$$

Wybieramy

$$p(x) \cong f(x) \Big/ \int_a^b f(x)\,dx$$

wtedy wariancja jest praktycznie zerowa.

<u>Fizyka statystyczna</u>

N - liczba cząstek

s_i - stopnie swobody

Przestrzeń fazowa $((s_1), \dots (s_N))$

Hamiltonian $\mathcal{H}(x)$

$$\langle A\rangle = Z^{-1}\int_{\Omega} A(x)\, f(\mathcal{H}(x))\,dx$$

$$Z = \int_{\Omega} f(\mathcal{H}(x))$$

Zespół kanoniczny

$$f(\mathcal{H}(x)) \sim \exp\left[-\mathcal{H}(x)/kT\right]$$

$$\langle A \rangle \cong \sum_{i=1}^{n} A(x_i) f(\mathcal{H}(x_i)) \Big/ \sum_{i=1}^{n} f(\mathcal{H}(x_i))$$

Jeżeli wybór stanów dokonywaliśmy z prawdopodobieństwem $P(x)$, to:

$$\langle A \rangle \cong \frac{\sum_{i=1}^{n} A(x_i) P^{-1}(x_i) f(\mathcal{H}(x_i))}{\sum_{i=1}^{n} P^{-1}(x_i) f(\mathcal{H}(x_i))}$$

Przy wyborze $P(x) = Z^{-1} f(\mathcal{H}(x))$, przyjęliśmy rozkład prawdopodobieństwa równowagowy dla zespołu kanonicznego

Wtedy obliczanie wartości A redukuje się do prostego uśrednienia arytmetycznego

$$\langle A \rangle \cong \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} A(x_i)$$

Prawdopodobieństwo przejścia w metodzie MC Metropolisa

$$W(x, x') = \begin{cases} w_{xx'} \exp(-\Delta\mathcal{H}/kT), & \Delta\mathcal{H} > 0 \\ w_{xx'} & \text{w pozostałych przypadkach} \end{cases}$$

$w_{xx'}$ – możemy wybierać dowolnie.

Algorytm:

(1) Określ konfigurację początkową

(2) Wygeneruj nową konfigurację x'

(3) Oblicz zmianę energii $\Delta\mathcal{H}$

(4) Jeżeli $\Delta\mathcal{H} \leq 0$ zaakceptuj nową konfigurację i wróć do (2)

(5) Oblicz $\exp(-\Delta\mathcal{H}/kT)$

(6) Wygeneruj liczbę losową $R \in [0,1]$

(7) Jeżeli $R < \exp(-\Delta\mathcal{H}/kT)$, zaakceptuj nową konfigurację i wróć do (2)

(8) W przeciwnym razie pozostaw starą konfigurację [illegible] i wróć do (2)