

Metody numeryczne

Wykład nr 11

Dr Piotr Fronczak

Metody Monte Carlo

Nazwa „Metody Monte Carlo” pochodzi od metod próbkowania statystycznego znanego z gier losowych granych w kasynach np. w Monte Carlo.

Choć nazwa “Monte Carlo” została ukuta niedawno (1949) i związana jest z wykorzystaniem komputerów, metody próbkowania statystycznego są znacznie starsze.

W czasach, gdy obliczenia numeryczne wykonywano na kartce papieru, metody te wykorzystywano do obliczania całek, których nie można policzyć analitycznie.



Rozważmy funkcję

$$f(x) = \sin^2 \frac{1}{x}$$

Zatem całka

$$I(x) = \int_0^x f(x') dx'$$

mająca sens pola pod funkcją przybiera wartości skończone.

Jeśli wylosujemy na wykresie punkt (a,b) leżący wewnątrz pokazanego prostokąta, to prawdopodobieństwo, że punkt ten leży poniżej krzywej $f(x)$ wyniesie

$$P(\downarrow) = \frac{I(x)}{S_{\text{prostokata}}} = \frac{I(x)}{x \cdot 1}$$

Zatem

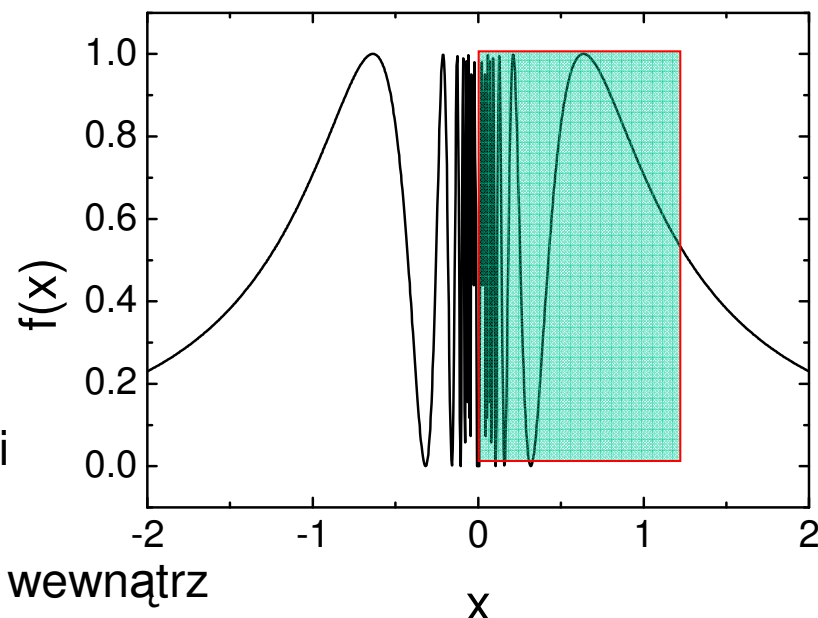
$$I(x) = x \cdot P(\downarrow)$$

Ponieważ

$$P(\downarrow) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\text{liczba punktów, dla których } b < f(a)}{\text{liczba wszystkich punktów}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{M}{N}$$

otrzymujemy

$$I(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} x \cdot \frac{M}{N}$$



Igła Buffona – prawdopodobnie najbardziej znany przykład zastosowania metod Monte Carlo

Eksperyment w którym wartość π jest przybliżana poprzez wielokrotne rzucanie igły na powierzchnię pokrytą równoległymi liniami

W 1777 Georges-Louis Leclerc, Comte de Buffon pokazał, że jeśli igła o długości L jest rzucona przypadkowo na równoległe odległe o d linie, to prawdopodobieństwo, że igła upadnie na jedną z linii jest równe

$$P(\times) = \frac{2L}{\pi d} \quad (d \geq L)$$

Laplace w 1820 zaproponował eksperyment, w którym $P(\times)$ oszacowane jest jako stosunek rzutów, w których igła przecięła linię do wszystkich rzutów.

$$P(\times) = \frac{2L}{\pi d} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{M}{N}$$

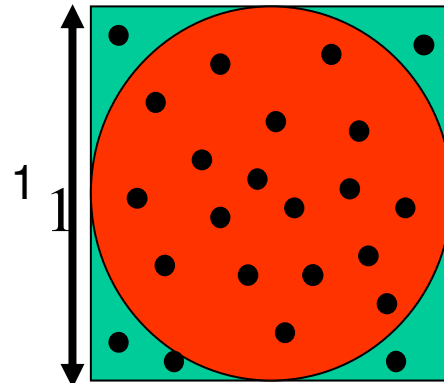
Czyli

$$\pi = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2NL}{Md}$$

Wśród najbardziej znanych eksperymentatorów był Mario Lazzarini, który w 1901 roku ogłosił, że obliczył wartość $\pi=3.1415929$ z eksperymentu, w którym 2,5 cm igłę rzucał 3408 razy na kartkę papieru o liniach odległych o 3 cm.

Dokładność rzędu milionowych!

Inny sposób obliczenia liczby π :



$$\frac{S_{\circ}}{S_{\square}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_{\circ}}{N} = \frac{\pi(1/2)^2}{1} = \frac{\pi}{4}$$

Oszacowanie błędów

Metoda prostokątów (przypomnienie z wykładu 7)

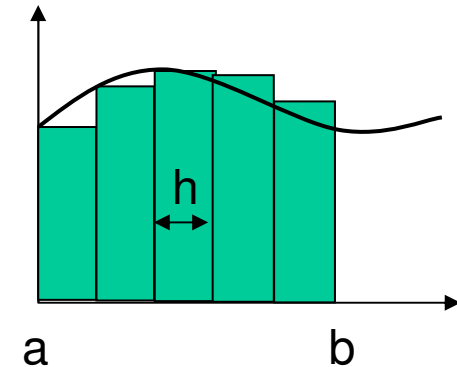
$$I(f) \approx h \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

Błąd wynikał z rozwinięcia w szereg Taylora funkcji $f(x)$ w podobszarze o szerokości h (ta część miała błąd $O(h^2)$) i uwzględnienia dużej liczby podobszarów (ta część dawała błąd $O(h^{-1})$).

Ogółem błąd wynosił $O(h^2) \times O(h^{-1}) = O(h)$

Ponieważ liczba podprzedziałów $N \sim h^{-1}$,

$$I(f) \approx h \sum_{i=1}^N f(x_i) + O(N^{-1})$$



Metoda prostokątów w dwóch wymiarach

Dzielimy powierzchnię na N kwadratów o boku h .

Powierzchnia krzywej A jest równa

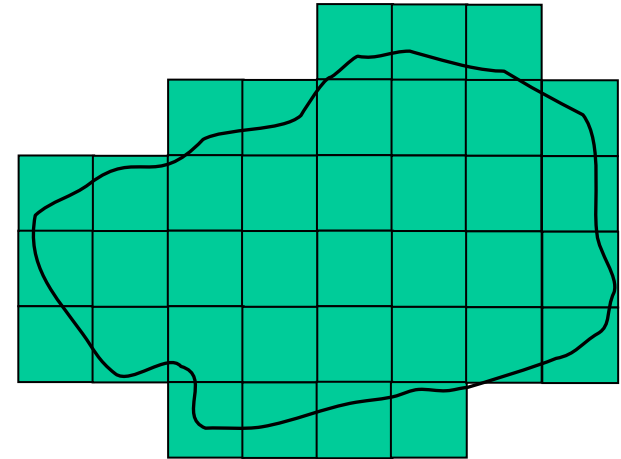
$$A = Nh^2$$

Błąd wynika z powierzchni kwadratu na krawędzi krzywej, h^2 , (ta część daje wkład $O(h^2)$) i z liczby kwadratów na krawędzi krzywej (ta część daje wkład $O(h^{-1})$)

$$O(h^2) \times O(h^{-1}) = O(h)$$

Ponieważ liczba kwadratów $N \sim h^{-2}$

$$A = Nh^2 + O(N^{-1/2})$$

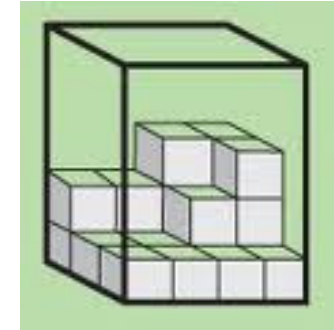


Metoda prostokątów w trzech wymiarach

Wypełniamy trójwymiarowy obszar N sześcianami o boku h .

Objętość obszaru V jest równa

$$V = Nh^3$$



Błąd wynika z objętości kwadratu na powierzchni obszaru, h^3 , (ta część daje wkład $O(h^3)$) i z liczby kwadratów na powierzchni obszaru (ta część daje wkład $O(h^{-2})$)

$$O(h^3) \times O(h^{-2}) = O(h)$$

Ponieważ liczba kwadratów $N \sim h^{-3}$

$$V = Nh^3 + O(N^{-1/3})$$

W ogólności objętość $d-1$ hiperpowierzchni w d wymiarach

$$V = Nh^d + O(N^{-1/d})$$

Czyli dla ustalonej liczby komórek N wraz ze wzrostem wymiaru wzrasta rozmiar podprzedziałów oraz błąd obliczeń.

Błąd metody Monte Carlo

Rozważmy powierzchnię A leżącą wewnątrz prostego obszaru o powierzchni A' .

Wybierzmy w sposób losowy N' punktów leżących wewnątrz obszaru A' .

N z nich leży wewnątrz powierzchni A . Zatem oszacowanie pola powierzchni:

$$A = \frac{N}{N'} A'$$

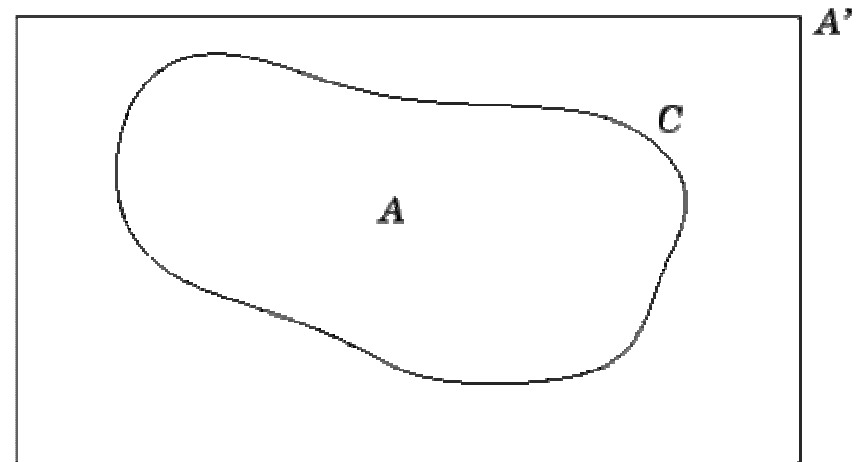
Każdy punkt ma prawdopodobieństwo znajdowania się w obszarze A :

$$p = \frac{A}{A'}$$

Zatem, określenie, czy dany punkt leży wewnątrz obszaru A jest jak pomiar zmiennej losowej mającej dwie możliwe wartości:

1 (punkt leży wewnątrz obszaru A) z prawdopodobieństwem p

0 (punkt leży poza obszarem A) z prawdopodobieństwem $1-p$



Jeśli przeprowadzimy N' pomiarów zmiennej losowej x , to liczba punktów leżących w obszarze A wynosi

$$N = \sum_{i=1}^{N'} x$$

Średnia wartość

$$\bar{N} = \sum_{i=1}^{N'} \bar{x} = N' \bar{x}$$

gdzie

$$\bar{x} = 1 \times p + 0 \times (1 - p) = p$$

czyli

$$\bar{N} = N' p = N' \frac{A}{A'}$$

Zatem pomiar N prowadzi średnio do właściwego wyniku.

Wariancja

Dla niezależnych zmiennych losowych wariancja sumy zmiennych równa jest sumie wariancji pojedynczej zmiennej

$$\delta^2\left(\sum x\right) = \sum\left(\delta^2(x)\right)$$

Zatem:

$$\delta^2(N) = \delta^2\left(\sum_{i=1}^{N'} x\right) = \sum_{i=1}^{N'} \delta^2(x) = N' \delta^2(x)$$

$$\delta^2(x) = \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2 - 2x\bar{x} + \bar{x}^2} = \overline{x^2} - 2\bar{x}\bar{x} + \bar{x}^2 = \overline{x^2} - \bar{x}^2$$

$$\overline{x^2} = 1^2 \cdot p + 0^2 \cdot (1 - p) = p \quad \longleftarrow \uparrow$$

$$\delta^2(x) = p - p^2$$

$$\delta^2(N) = N' p(1 - p)$$

$$N = \frac{N' A}{A'} \pm \sqrt{N' p(1 - p)}$$

$$N = \frac{N' A}{A'} \pm \sqrt{N' p(1-p)}$$

$$\frac{A' N}{N'} = A \pm \frac{A'}{N'} \sqrt{N' p(1-p)}$$

$$A = \frac{A' N}{N'} \pm \frac{A'}{\sqrt{N'}} \sqrt{p(1-p)}$$

Czyli błąd pomiaru powierzchni skaluje się jak $N'^{(-1/2)}$

Nasze rozumowanie dotyczyło powierzchni, ale nic nie stoi na przeszkodzie, by podobnie rozważać przestrzenie d -wymiarowe. W dalszym ciągu dysponując N' losowo wybranymi punktami otrzymujemy to samo skalowanie się błędu.

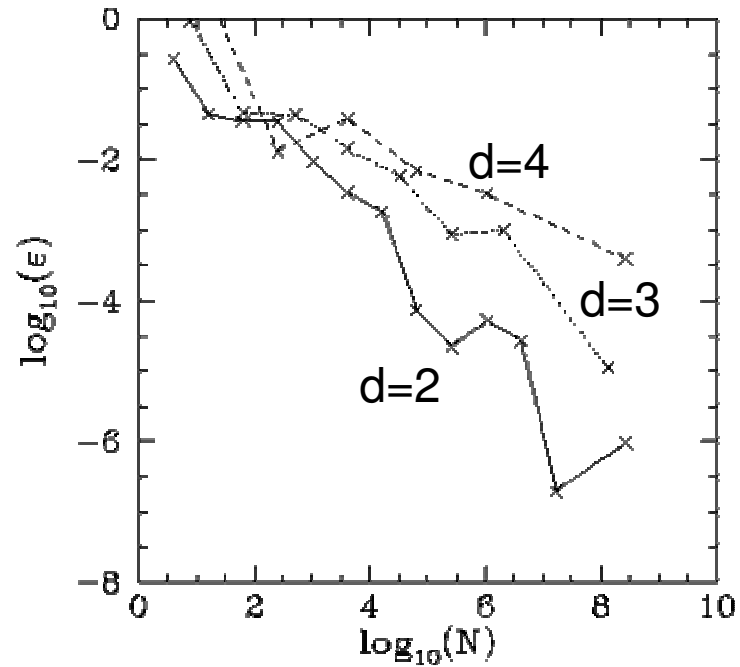
W metodzie prostokątów

$$O(N^{-1/d})$$

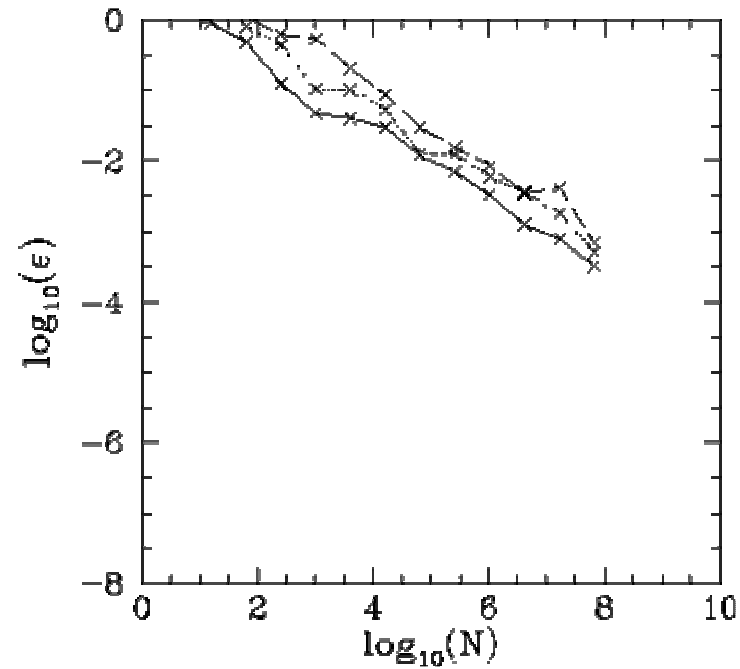
Zatem dla $d > 2$ błąd w metodzie Monte Carlo będzie mniejszy niż w metodzie tradycyjnej.

Wniosek: Metoda Monte Carlo nadaje się do całkowania całek wysokowymiarowych.

Obliczmy objętość metodami objętość d-wymiarowej kuli ($d = 2, 3, 4$) o promieniu = 1. Obszarem obejmującym kulę jest d-wymiarowy sześcian.



Metoda prostokątów



Metoda Monte Carlo

Trochę historii

Stanisław Marcin Ulam (ur. 1909 we Lwowie, zm. 1984 w Santa Fe)

Współtwórca bomby wodorowej, członek projektu Manhattan

“Pomysł ten, nazwany później metodą Monte Carlo, wpadł mi do głowy, kiedy podczas choroby stawiałem pasjansa. Zauważyłem, że znacznie praktyczniejszym sposobem oceniania prawdopodobieństwa ułożenia pasjansa jest wykładanie kart, czyli eksperymentowanie z tym procesem i po prostu zapisywanie procentu wygranych, niż Próba obliczenia wszystkich możliwości kombinatorycznych, których liczba rośnie wykładniczo”



“Jest to zaskakujące z intelektualnego punktu widzenia, I choć może nie całkiem upokarzające, to jednak zmusza do skromności i pokazuje granice tradycyjnego, racjonalnego rozumowania. Jeśli problem jest wystarczająco złożony, próbowanie jest lepszym sposobem niż badanie wszystkich łańcuchów możliwości.”

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS

VOLUME 21, NUMBER 6

Equation of State Calculations by Fast Computing Machine

NICHOLAS METROPOLIS, ARIANNA W. ROSENBLUTH, MARSHALL N. ROSENBLUTH, AND AUGUSTA H. TELLER,

Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico

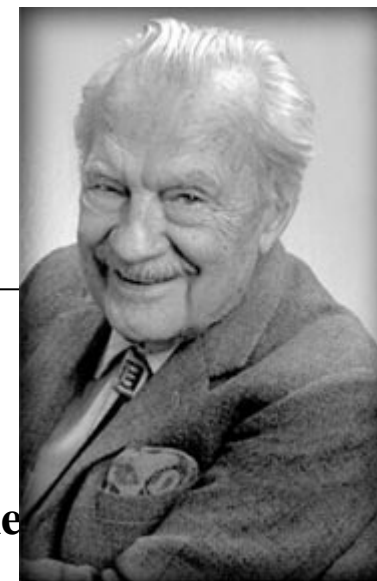
AND

EDWARD TELLER, * *Department of Physics, University of Chicago, Chicago, Illinois*

(Received March 6, 1953)

A general method, suitable for fast computing machines, for investigating such properties as equations of state for substances consisting of interacting individual molecules is described. The method consists of a modified Monte Carlo integration over configuration space. Results for the two-dimensional rigid-sphere system have been obtained on the Los Alamos MANIAC and are presented here. These results are compared to the free volume equation of state and to a four-term virial coefficient expansion.

1087



Jeden z najczęściej cytowanych artykułów naukowych w historii (ok. 12,500 cytowań w bazie Web of Knowledge do roku 2010)

Podstawy równowagowych symulacji Monte Carlo

Celem symulacji Monte Carlo jest obliczenie wartości oczekiwanej pewnej wielkości mechanicznej $\langle Q \rangle$. Najlepiej zrobić to uśredniając badaną wielkość po wszystkich stanach μ układu, ważąc składniki średniej przez odpowiadające im prawdopodobieństwo Boltzmanna:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}$$

W dużych układach możemy uśredniać badaną wielkość tylko po pewnym podzbiore wszystkich dostępnych stanów. Zatem mamy dany estymator

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^M e^{-\beta E_{\mu_j}}}$$

Gdy $M \rightarrow \infty$, to $Q_M = \langle Q \rangle$.

Weźmy na przykład trójwymiarowy model Isinga 10x10x10 spinów.

Liczba dostępnych stanów $2^{1000} \sim 10^{300}$

Liczba stanów, które możemy wziąć pod uwagę przy niezłym komputerze 10^8 .

Estymator może zawieść (szczególnie w niskich temperaturach)

Gdybyśmy wiedzieli, które stany są ważne, a które można pominąć, dostalibyśmy dobry estymator Q_M już dla małych M .

Oto właśnie chodzi w metodach Monte Carlo:

W jaki sposób wybierać stany do naszego estymatora, by pojawiały się one w nim zgodnie z ich prawdopodobieństwem boltzmannowskim.

Może losować stan zupełnie losowo i akceptować go lub odrzucać z prawdopodobieństwem proporcjonalnym do $e^{-\beta E}$?

Lepiej skorzystać z silnika do generowania właściwych stanów – procesu Markowa.

Procesy Markowa

- **Proces stochastyczny**
 - Ruch poprzez szereg dobrze zdefiniowanych stanów w sposób, który zawiera pewien element losowości
- **Proces Markowa**
 - Proces stochastyczny bez pamięci
 - Wybór następnego stanu zależy tylko od aktualnego stanu, nie zależy od poprzednich
 - Proces jest całkowicie zdefiniowany poprzez zbiór prawdopodobieństw przejść π_{ij}
 - π_{ij} = prawdopodobieństwo wyboru następnego stanu j , będąc obecnie w stanie i .
 - Macierz prawdopodobieństw przejść Π - elementy π_{ij}

Przykład: układ z trzema stanami:

$$\Pi \equiv \begin{pmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{13} \\ \pi_{21} & \pi_{22} & \pi_{23} \\ \pi_{31} & \pi_{32} & \pi_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.1 & 0.5 & 0.4 \\ 0.9 & 0.1 & 0.0 \\ 0.3 & 0.3 & 0.4 \end{pmatrix}$$

Układ w stanie 1 pozostanie w stanie 1 z prawdopodobieństwem 0.1

Układ w stanie 1 przejdzie do stanu 3 z prawdopodobieństwem 0.4

Układ w stanie 2 nigdy nie przejdzie do stanu 3

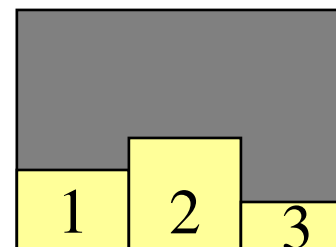
Warunki macierzy prawdopodobieństw przejść:

- Wszystkie elementy są nieujemne i nie większe niż 1
- Suma elementów w wierszu równa się 1
- Prawdopodobieństwo pozostania w danym stanie może być niezerowe.

Rozkład częstości odwiedzin stanów

- Rozważmy proces, w którym przechodzimy ze stanu do stanu zgodnie z macierzą Π
 - $1 \rightarrow 2 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 3 \rightarrow 1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow \text{itd.}$
- Histogram odwiedzin każdego stanu
 - $n_1 = 3$
 - $n_2 = 5$
 - $n_3 = 4$

$\pi_1 = 0.33$
$\pi_2 = 0.42$
$\pi_3 = 0.25$
- Po wielu krokach otrzymujemy rozkład graniczny



- Rozważmy iloczyn dwóch takich samych macierzy Π

$$\Pi^2 \equiv \begin{pmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{13} \\ \pi_{21} & \pi_{22} & \pi_{23} \\ \pi_{31} & \pi_{32} & \pi_{33} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{13} \\ \pi_{21} & \pi_{22} & \pi_{23} \\ \pi_{31} & \pi_{32} & \pi_{33} \end{pmatrix}$$

Wszystkie sposoby przejścia ze stanu 1 do stanu 2 w dwóch krokach

$$= \begin{pmatrix} \pi_{11}\pi_{11} + \pi_{12}\pi_{21} + \pi_{13}\pi_{31} & \pi_{11}\pi_{12} + \pi_{12}\pi_{22} + \pi_{13}\pi_{32} & \text{etc.} \\ \pi_{21}\pi_{11} + \pi_{22}\pi_{21} + \pi_{23}\pi_{31} & \pi_{21}\pi_{12} + \pi_{22}\pi_{22} + \pi_{23}\pi_{32} & \text{etc.} \\ \pi_{31}\pi_{11} + \pi_{32}\pi_{21} + \pi_{33}\pi_{31} & \pi_{31}\pi_{12} + \pi_{32}\pi_{22} + \pi_{33}\pi_{32} & \text{etc.} \end{pmatrix}$$

Prawdopodobieństwo przejścia ze stanu 3 do stanu 2 w dwóch krokach

W ogólności Π^n jest macierzą prawdopodobieństw przejść między stanami w n krokach

$$\Pi^n \equiv \begin{pmatrix} \pi_{11}^{(n)} & \pi_{12}^{(n)} & \pi_{13}^{(n)} \\ \pi_{21}^{(n)} & \pi_{22}^{(n)} & \pi_{23}^{(n)} \\ \pi_{31}^{(n)} & \pi_{32}^{(n)} & \pi_{33}^{(n)} \end{pmatrix}$$

- Zdefiniujemy $\pi_i^{(0)}$ jako wektor stanu

$$\pi_1^{(0)} = (1 \ 0 \ 0) \quad \pi_2^{(0)} = (0 \ 1 \ 0) \quad \pi_3^{(0)} = (0 \ 0 \ 1)$$

- Zatem $\pi_i^{(n)} = \pi_i^{(0)} \Pi^n$ jest wektorem prawdopodobieństw znalezienia się w danym stanie po n krokach zaczynając od stanu i

$$\pi_1^{(n)} = \pi_1^{(0)} \Pi^n \equiv (1 \ 0 \ 0) \begin{pmatrix} \pi_{11}^{(n)} & \pi_{12}^{(n)} & \pi_{13}^{(n)} \\ \pi_{21}^{(n)} & \pi_{22}^{(n)} & \pi_{23}^{(n)} \\ \pi_{31}^{(n)} & \pi_{32}^{(n)} & \pi_{33}^{(n)} \end{pmatrix} = (\pi_{11}^{(n)} \quad \pi_{12}^{(n)} \quad \pi_{13}^{(n)})$$

- Rozkład graniczny dla $n \rightarrow \infty$ - niezależny od stanu początkowego

$$\pi_1^{(\infty)} = \pi_2^{(\infty)} = \pi_3^{(\infty)} \equiv \pi$$

- Własność stacjonarności rozkładu granicznego p

$$\begin{aligned}\pi &= \lim_{n \rightarrow \infty} [\pi_i^{(0)} \Pi^n] \\ &= \left(\lim_{n \rightarrow \infty} [\pi_i^{(0)} \Pi^{n-1}] \right) \Pi \\ &= \pi \Pi\end{aligned}$$

π jest lewostronnym wektorem własnym macierzy Π z wartością własną równą 1

Taki wektor własny zawsze istnieje dla macierzy, w których elementy w wierszach sumują się do jedności

Równanie na elementy wektora rozkładu granicznego

$$\pi_i = \sum_j \pi_j \pi_{ji}$$

$$\Pi = \begin{pmatrix} 0.1 & 0.5 & 0.4 \\ 0.9 & 0.1 & 0.0 \\ 0.3 & 0.3 & 0.4 \end{pmatrix} \begin{aligned} \pi_1 &= 0.1\pi_1 + 0.9\pi_2 + 0.3\pi_3 \\ \pi_2 &= 0.5\pi_1 + 0.1\pi_2 + 0.3\pi_3 \\ \pi_3 &= 0.4\pi_1 + 0.0\pi_2 + 0.4\pi_3 \\ \hline \pi_1 + \pi_2 + \pi_3 &= \pi_1 + \pi_2 + \pi_3 \end{aligned}$$

↑
Nie są niezależne

Równanie na elementy wektora rozkładu granicznego

$$\pi_i = \sum_j \pi_j \pi_{ji}$$

Wystarczający (ale nie konieczny) warunek na rozwiązanie

$$\pi_i \pi_{ij} = \pi_j \pi_{ji}$$

Warunek równowagi szczegółowej

Odwracalność mikroskopowa

$$\Pi = \begin{pmatrix} 0.1 & 0.5 & 0.4 \\ 0.9 & 0.1 & 0.0 \\ 0.3 & 0.3 & 0.4 \end{pmatrix}$$

Dla danej macierzy Π nie
zawsze można spełnić
warunek równowagi
szczegółowej, np.:

$$\pi_3 \pi_{32} \neq \pi_2 \pi_{23}$$

← zero

- Odwróćmy problem
- ...mając dany rozkład graniczny π , jakie prawdopodobieństwa przejścia doprowadzą do uzyskania tego rozkładu?
- *Należy skonstruować prawdopodobieństwa, które spełniają warunek równowagi szczegółowej*
- Jest wiele możliwości

$$\pi = (0.25 \quad 0.5 \quad 0.25)$$

$$\Pi = \begin{pmatrix} 0.97 & 0.02 & 0.01 \\ 0.01 & 0.98 & 0.01 \\ 0.01 & 0.02 & 0.97 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \textit{Najmniej} \\ \textit{wydajna} \end{array}$$

$$\Pi = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0.5 & 0 & 0.5 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \textit{Najbardziej} \\ \textit{wydajna} \end{array}$$

$$\Pi = \begin{pmatrix} 0.0 & 0.5 & 0.5 \\ 0.25 & 0.5 & 0.25 \\ 0.5 & 0.5 & 0.0 \end{pmatrix}$$

Metropolis

Algorytm Metropolisa

Będąc w stanie i ...

- Z prawdopodobieństwem τ_{ij} , wybierz następny stan j ($\tau_{ij} = \tau_{ji}$)
- jeśli $\pi_j > \pi_i$, zaakceptuj j jako nowy stan
- Jeśli $\pi_j \leq \pi_i$, zaakceptuj stan j z prawdopodobieństwem π_j/π_i
 - Wylosuj liczbę R z rozkładu jednorodnego $(0,1)$; akceptuj, gdy $R < \pi_j/\pi_i$
- Jeśli nie zaakceptowałeś j jako nowego stanu, następnym stanem będzie znowu stan i ($\pi_{ii} \neq 0$)

Najprostszy wybór prawdopodobieństw τ_{ij} wyboru stanu spośród N dostępnych stanów

$$\tau_{ij} = \frac{1}{N}$$

*Metropolis, Rosenbluth, Rosenbluth, Teller and Teller,
J. Chem. Phys., 21 1087 (1953)*

- Jakie są prawdopodobieństwa przejść w tym algorytmie?
 - Niech i będzie stanem o większym prawdopodobieństwie $\pi_i > \pi_j$

$$\pi_{ij} = \tau_{ij} \times \frac{\pi_j}{\pi_i}$$

$$\pi_{ji} = \tau_{ji}$$

$$\pi_{ii} = 1 - \sum_{j \neq i} \pi_{ij}$$

W ogólności $\pi_{ij} = \tau_{ij} \min\left(\frac{\pi_j}{\pi_i}, 1\right)$

- Czy jest spełniony warunek równowagi szczegółowej?

$$\pi_i \pi_{ij} \stackrel{?}{=} \pi_j \pi_{ji}$$

$$\pi_i \tau_{ij} \frac{\pi_j}{\pi_i} \stackrel{?}{=} \pi_j \tau_{ji}$$

$$\tau_{ij} = \tau_{ji}$$

- Tak, pod warunkiem, że macierz T prawdopodobieństw wyboru stanu jest symetryczna
 - Jeśli tak nie jest, to trzeba zmienić prawdopodobieństwa akceptacji

W klasycznych układach równowagowych prawdopodobieństwo (Boltzmann) zaistnienia stanu i

$$\pi_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}$$

W algorytmie mamy

jeśli $\pi_j > \pi_i$, zaakceptuj j jako nowy stan

Jeśli $\pi_j \leq \pi_i$, zaakceptuj stan j z prawdopodobieństwem π_j/π_i

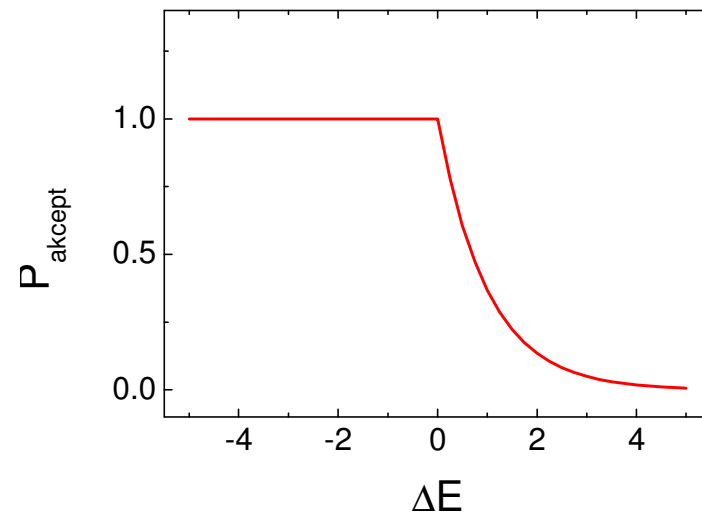
Zatem

$$\frac{\pi_j}{\pi_i} = \frac{e^{-\beta E_j} / Z}{e^{-\beta E_i} / Z} = e^{-\beta(E_j - E_i)} = e^{-\beta \Delta E}$$

Wyrażenie zależy tylko od zmiany energii.

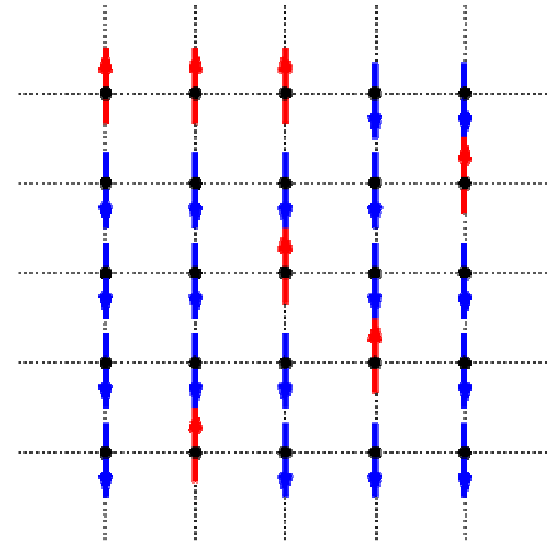
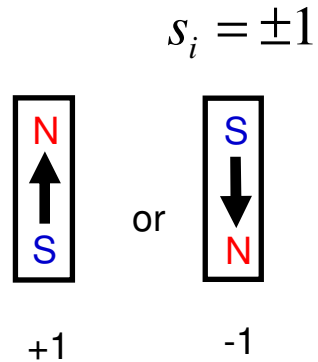
Zmiany, które prowadzą do zmniejszenia energii zawsze akceptujemy.

Zmiany zwiększające energię akceptujemy z danym prawdopodobieństwem.



Model Isinga

Model opisuje prosty materiał magnetyczny składający się ze zbioru spinów na siatce regularnej. Możliwe wartości spinów



Energia układu zdefiniowana jest poprzez Hamiltonian

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + h \sum_i s_i$$

Energia oddziaływań
miedzyspinowych

Zewnętrzne pole magnetyczne

Stan podstawowy (o najniższej energii)

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (1) \cdot (1) \quad \text{lub} \quad H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (-1) \cdot (-1)$$

Model Isinga - implementacja

- ✓ Macierz N zmiennych ± 1
- ✓ Warunki brzegowe periodyczne – wszystkie spiny mają tę samą liczbę sąsiadów (symetria translacyjna).
- ✓ Wybieramy temperaturę (czyli β)
- ✓ Wybieramy warunki początkowe
- ✓ Uruchamiamy symulację
- ✓ Wybieramy losowo jeden spin i liczymy zmianę energii układu przy odwróceniu spinu

$$E_\nu - E_\mu = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i^\nu s_j^\nu + J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i^\mu s_j^\mu$$

Uwaga: większość par $s_i s_j$ nie zmienia się – tylko sąsiedztwo wybranego spinu.

$$E_\nu - E_\mu = -J \sum_{i \in S(k)} s_i^\mu (s_k^\nu - s_k^\mu)$$

$s_i^\nu = s_i^\mu$

$$\begin{array}{l} \text{Jeśli } s_k^\mu = +1 \text{ to } s_k^\nu = -1 \\ \text{Jeśli } s_k^\mu = -1 \text{ to } s_k^\nu = +1 \end{array} \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{l} s_k^\nu - s_k^\mu = -2 \\ s_k^\nu - s_k^\mu = +2 \end{array} \quad \Rightarrow \quad s_k^\nu - s_k^\mu = -2s_k^\mu$$

$$s_k^v - s_k^\mu = -2s_k^\mu$$

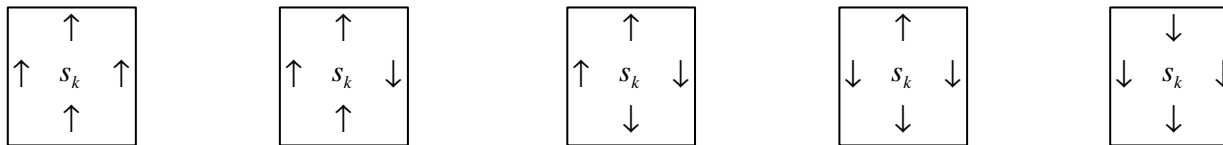
$$E_v - E_\mu = -J \sum_{i \in S(k)} s_i^\mu (s_k^v - s_k^\mu) = 2J \sum_{i \in S(k)} s_i^\mu s_k^\mu = 2J s_k^\mu \sum_{i \in S(k)} s_i^\mu$$

$$P(\mu \rightarrow v) = \begin{cases} e^{-\beta(E_v - E_\mu)} & \text{jesli } E_v - E_\mu > 0 \\ 1 & \text{w przeciwnym wypadku} \end{cases}$$

Wylosuj liczbę R z rozkładu jednorodnego $[0,1)$ i zaakceptuj zmianę stanu, gdy

$$R < e^{-\beta(E_v - E_\mu)}$$

Uwaga: liczba kombinacji $E_v - E_\mu$ jest skończona. Dla siatki kwadratowej



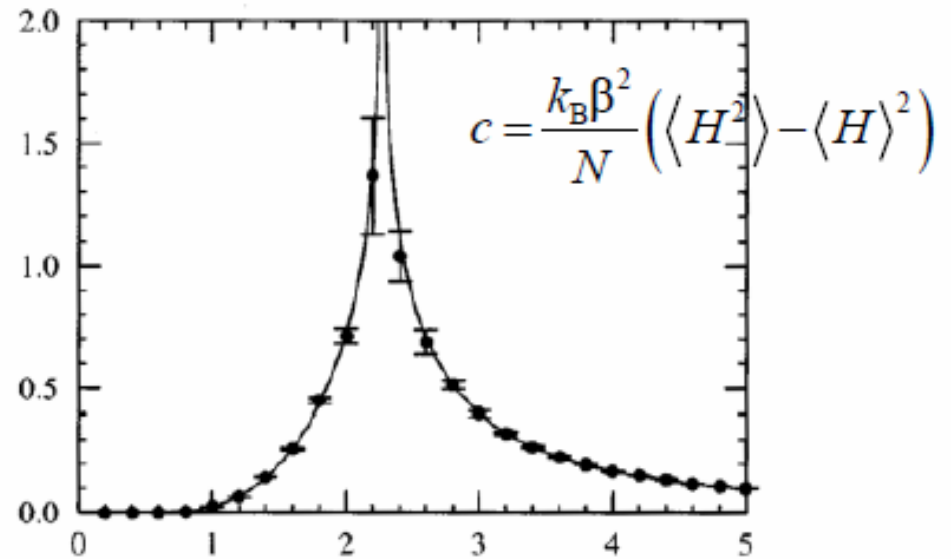
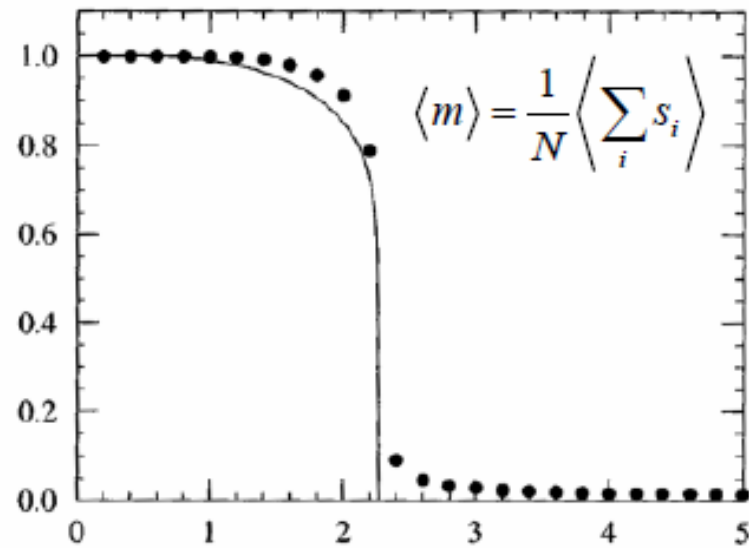
$$\sum_{i \in S(k)} s_i^\mu = \quad 4 \quad \quad 2 \quad \quad 0 \quad \quad -2 \quad \quad -4$$

Zatem $E_v - E_\mu = 2J(\pm 1)(4 \vee 2 \vee 0 \vee -2 \vee -4)$

Wartości $\Delta E > 0$: $2J4 \vee 2J2$

Czyli musimy zapamiętać dwa wykładniki: $e^{-2\beta J 4}$ i $e^{-2\beta J 2}$

Wyniki



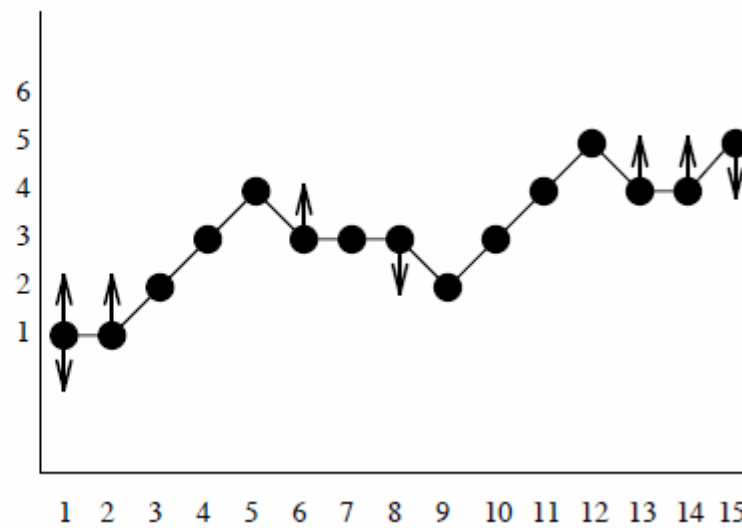
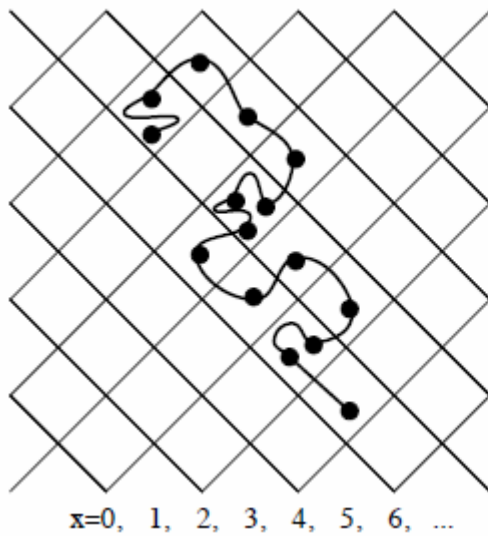
Reduced temperature ($k_B T / \epsilon$)

<http://www.pha.jhu.edu/~javalab/ising/ising.html>

Model elektroforezy



Chrom&Elpho.swf

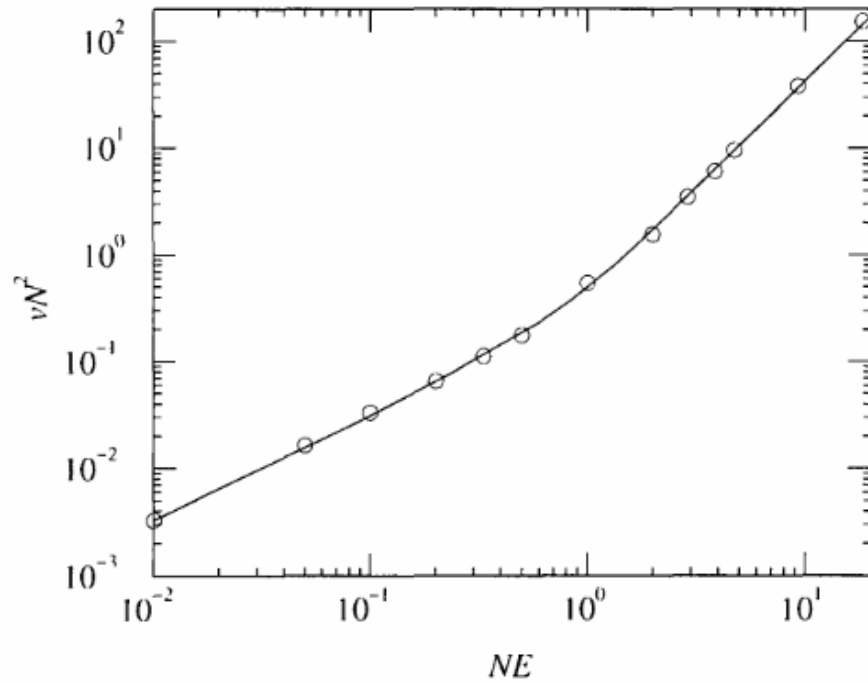


$$E=0 \quad \frac{\pi(\uparrow)}{\pi(\downarrow)} = 1$$

$$E>0 \quad \frac{\pi(\uparrow)}{\pi(\downarrow)} = \frac{e^{E/2}}{e^{-E/2}}$$

Zależność prędkości dryftu od natężenia pola elektrycznego i długości łańcucha DNA

Symulacje Monte Carlo



Eksperyment

