Metoda Monte Carlo - úvodní poznámky

- jde o stochastickou metodu - používáme
  náhodná (nebo častěji pseudonáhodná) čísla a veličiny,
  abychom nasimulovali určitý fyzikální systém,
  nebo určili průměrné hodnoty pozorovatelných veličin
  mnohočásticového systému
- používají se různé typy simulací:
  1) MC integrace vícerozměrných integrálů -
     - základní technika
     - lze využít v mnoha oborech
  2) geometrické MC - simulace specifických fyzikálních
     systémů, kde je obtížné použít jiné metody
     - např. simulace difúze pomocí náhodných procházek
       nebo perkolace náhodnou depozicí částic apod.
  3) termodynamické MC - vychází z ergodické hypotézy
     - střední hodnoty veličin přes náhodné konfigurace
       systému, ne přes časový vývoj
     - ilustrace na Isingově modelu
  4) kinetické MC - simulace časového vývoje
     složitého systému náhodným výběrem procesů,
     které se v určitý čas stanou
     - viz letní semestr - Pokročilé simulace ...

  atd.
- lze zvládnout velké počty částic, až 10^6 a více
- není potřeba velká paměť, ale dostatek výpočetního času
  a dobrý generátor (pseudo)náhodných čísel
- nejde o ab initio metodu, pouze aproximace
- je snadná na naprogramování

Metoda Monte Carlo – základní pojmy

- použití metody MC většinou obnáší <u>výpočet určité veličiny</u> (např. integrálu) <u>pomocí průměrování</u> přes <u>stochastické (náhodné) veličiny</u> X_i, které mají určité rozdělení pravděpodobnosti
- díky <u>centrální limitní větě</u> (viz podrobněji níže) <u>chyba výpočtu obecně klesá</u> s rostoucím počtem n průměrovaných veličin jako $\underline{\frac{1}{\sqrt{n}}}$ (alespoň s velkou pravděpodobností)

• <u>základní statistické pojmy</u>:

- <u>pravděpodobnostní funkce</u> náhodné diskrétní veličiny X

  $P[X=x]=P(x)$ udává pravděpodobnost, že náhodná veličina X bude mít hodnotu x,

  musí tedy platit $P(x)\geq 0$ pro $\forall x$ a $\sum_x P(x)=1$

- <u>distribuční funkce</u> náhodné diskrétní veličiny X

  $$F(x)=P[X\leq x]=\sum_{t\leq x}P(t) \quad \text{(též CDF = kumulativní distribuční funkce)}$$

  a tedy $P[x_1\leq X\leq x_2]=F(x_2)-F(x_1)$,

  jde o neklesající funkci s hodnotami $0\leq F(x)\leq 1$

- <u>rozdělení pravděpodobnosti spojité</u> náhodné veličiny X se určuje pomocí <u>hustoty pravděpodobnosti</u> $g(x)\geq 0$ splňující $\int_\Omega g(x)\,dx=1$, kde Ω je definiční obor X,

  pak pravděpodobnost, že X bude mít hodnotu v $\langle x_1,x_2\rangle$ je

  $$P[x_1\leq X\leq x_2]=\int_{x_1}^{x_2} g(x)\,dx=F(x_2)-F(x_1)$$

kde $F(x)$ je distribuční funkce spojité náhodné veličiny X

$$F(x) = P[X \leq x] = \int_{-\infty}^{x} \rho(t)\,dt \quad \text{a tedy} \quad \rho(x) = \frac{dF(x)}{dx}$$

(pozn.: pravděpodobnost nalezení přesné hodnoty x pro spojitou náhodnou veličinu X je nulová)

- střední hodnota veličiny X (vážený průměr přes dané rozdělení)

$$E(X) = \sum_{i=1}^{n} x_i p_i \quad \text{pro diskrétní náhodnou veličinu}$$

$$= \int_{\Omega} x \rho(x)\,dx \quad \text{pro spojitou}$$

- rozptyl, neboli střední kvadratická odchylka (též variance)

$$\sigma^2(X) = D(X) = \mathrm{var}(X) =$$

člen $-2x_i E(x)$ dá $-2E(X)^2$

$$= \sum_{i=1}^{n} [x_i - E(X)]^2 p_i = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 p_i - E(X)^2 \quad \text{pro diskrétní}$$

$$= \int_{\Omega} [x - E(X)]^2 \rho(x)\,dx = \int_{\Omega} x^2 \rho(x)\,dx - E(X)^2 \quad \text{pro spojitou náhodnou veličinu}$$

$$= E(X^2) - E(X)^2$$

- základní vlastnosti $E(X)$ a $D(X)$

$$E(X+c) = c + E(X) \qquad D(X+c) = D(X)$$

$$E(cX) = cE(X) \qquad D(cX) = c^2 D(X)$$

a pro dvě nezávislé náhodné veličiny X a Y

$$E(X+Y) = E(X) + E(Y) \qquad D(X+Y) = D(X) + D(Y)$$

$$E(X \cdot Y) = E(X) \cdot E(Y) \qquad \cancel{D(cX) = c^2 D(X}$$

např. $$D(X+Y) = \iint_{\Omega_x \Omega_y} [x + y - E(X+Y)]^2 \rho(x,y)\,dx\,dy =$$ pro nezávislé X a Y

$$= \iint [x - E(X) + y - E(Y)]^2 \rho_x(x) \rho_y(y)\,dx\,dy =$$

$$= \iint \Big[(x - E(X))^2 + \underbrace{2(x - E(X))(y - E(Y))}_{=0} + (y - E(Y))^2\Big] \rho_x(x) \rho_y(y)\,dx\,dy =$$

$$= D(X) + D(Y)$$

- <u>střední hodnota funkce</u> náhodné veličiny X

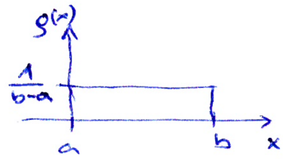
pokud $Y = f(X)$ je nová náhodná veličina, pak

$$E(Y) = E(f(X)) = \int_{\Omega} f(x)\,\varrho(x)\,dx \quad \left(\text{nebo } = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\,p_i\right)$$

a obecně $$E(f(X)) \neq f(E(X))$$

- <u>příklady rozdělení</u>

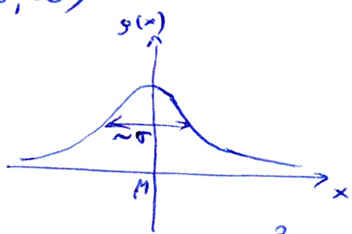
1) <u>rovnoměrné rozdělení</u> na intervalu $\langle a, b\rangle$



$$\varrho(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & \text{na } \langle a,b\rangle \\ 0 & \text{jinde} \end{cases} \qquad \left(\text{pro } \langle 0,1\rangle \text{ bude } \varrho(x) = 1\right)$$

$$E(X) = \frac{a+b}{2}, \quad D(X) = \sigma^2(X) = \frac{(b-a)^2}{12}, \quad F(X) = \frac{x-a}{b-a} \text{ na } \langle a,b\rangle$$

2) <u>normální rozdělení</u> $N(\mu, \sigma^2)$ na $\langle -\infty, \infty\rangle$



$$\varrho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\, e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

$$E(X) = \mu, \quad D(X) = \sigma^2$$

$$F(X) = \int_{-\infty}^{x} \varrho(t)\,dt = \frac{1}{2}\left[1 + \mathrm{Erf}\left(\frac{x-\mu}{\sqrt{2\sigma^2}}\right)\right], \text{ kde } \mathrm{Erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2}\,dt$$

(error function)

a tedy

$$P[x_1 \le X \le x_2] = \int_{x_1}^{x_2} \varrho(t)\,dt = \frac{1}{2}\left[\mathrm{Erf}\left(\frac{x_2-\mu}{\sqrt{2\sigma^2}}\right) - \mathrm{Erf}\left(\frac{x_1-\mu}{\sqrt{2\sigma^2}}\right)\right]$$

<u>pravidlo 3σ</u>

$$P[\mu - 3\sigma \le X \le \mu + 3\sigma] = \mathrm{Erf}\left(\frac{3}{\sqrt{2}}\right) = 0{,}9973\ldots$$

a tedy náhodné měření leží téměř vždy v tomto intervalu

- <u>pravděpodobná chyba</u> náhodné veličiny X (pro normální rozdělení)

- máme-li jediné měření X s normálním rozdělením, pak s velkou pravděpodobností bude ležet v intervalu $\langle \mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma\rangle$ a absolutní chyba (od střední hodnoty μ) bude řádu tzv. <u>pravděpodobné chyby</u> $r \approx 0{,}67\sigma$ určené ze vztahu $P[\mu - r \le X \le \mu + r] = \frac{1}{2}$

- centrální limitní věta

- mějme n nezávislých náhodných veličin $X_1, \dots, X_n$, které mají stejné rozdělení pravděpodobnosti, tj. jejich střední hodnoty a rozptyly jsou stejné:

$$E(X_i) = m, \quad D(X_i) = b^2 \qquad \text{pro } i = 1, \dots, n,$$

pak pro jejich součet (tj. novou náhodnou veličinu)

$$S_n = X_1 + X_2 + \dots + X_n$$

platí (plyne přímo z $E(X+Y) = E(X) + E(Y)$ a obdobně pro $D(X+Y)$)

$$E(S_n) = nm \quad \text{a} \quad D(S_n) = nb^2.$$

Uvažujme dále normální rozdělení $N(\mu, \sigma^2)$, kde $\mu = nm$ a $\sigma^2 = nb^2$, s hustotou pravděpodobnosti $\varrho_n(x)$.

Pak centrální limitní věta říká, že

$$P[s_1 \leq S_n \leq s_2] \simeq \int_{s_1}^{s_2} \varrho_n(x)\, dx$$

pro libovolné s_1 a s_2 a všechna dostatečně velká n.

Neboli rozdělení součtu S_n velkého množství nezávislých náhodných veličin je přibližně normální.

Pozn: existují zobecnění pro mnohem slabší podmínky

např. $X_1, \dots, X_n$ nemusí mít nutně stejné rozdělení a ani nemusí být úplně nezávislé, důležité je, aby jedna z veličin nehrála příliš velkou roli.

Díky tomu se normální rozdělení často objevuje v přírodě, kde má na výsledek často vliv řada náhodných faktorů.

- odhad chyby metody Monte Carlo

- počítáme-li určitou veličinu A jako průměr náhodných veličin $X_1, \dots, X_n$, tj.

$$A_n = \frac{X_1 + X_2 + \dots + X_n}{n}$$

se středními hodnotami $E(X_i) = m$ a rozptyly $D(X_i) = b^2$, pak podle centrální limitní věty bude pravděpodobnostní rozdělení A_n přibližně normální s

$$E(A_n) = \sum_{i=1}^{n} \frac{E(X_i)}{n} = m$$

a

$$D(A_n) = \sum_{i=1}^{n} \frac{D(X_i)}{n^2} = \frac{b^2}{n} \quad \text{neboli} \quad \boxed{\sigma = \frac{b}{\sqrt{n}}}$$

viz $D(cX) = c^2 D(X)$

a tedy $$P\left[m - \frac{3b}{\sqrt{n}} \leq A_n \leq m + \frac{3b}{\sqrt{n}}\right] \cong 0{,}9973 \,.$$

neboli $$P\left[\left|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i - m\right| < \frac{3b}{\sqrt{n}}\right] \cong 0{,}9973$$

a pravděpodobná chyba A_n tedy přibližně je

$$\boxed{r \doteq 0{,}67\,\sigma = 0{,}67\,\frac{b}{\sqrt{n}}}$$

a lze ji tedy očekávat řádu $\frac{1}{\sqrt{n}}$

- pozor!, nejde o horní odhad chyby, ale o pravděpodobnou chybu, tj. skutečná chyba A_n od přesné hodnoty A může být ve skutečnosti větší, ale pravděpodobnost toho je velmi malá