численные методы и математическое моделирование

Ю.Н. Прошин

кафедра теоретической физики

Казанского государственного университета

yurii.proshin@ksu.ru

2004-2011, Казань

1804-2004

200

Kazan University

Методы Монте Карло

Монте Карло

- Одна из пяти областей Монако
- Основана в 1866 году принцем Чарльзом III
- Всемирно известные казино, роскошные отели, пляжи

The Monte Carlo Grand Hotel

Монте Карло

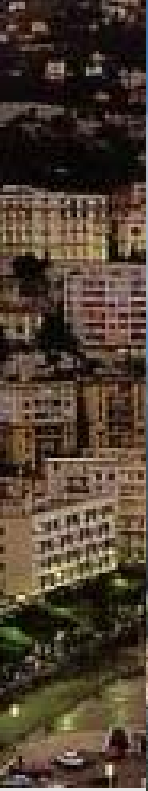
- Всемирно известные казино, роскошные отели, пляжи

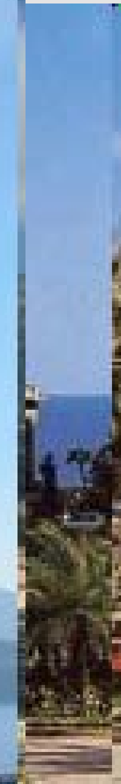
The casino at night.

David Tomlinson - Lonely Planet Images

Port de Monaco and Monte Carlo.

Manfred Gottschalk - Lonely Planet Images



Monte Carlo,Monaco-where the rich and famous people live

Методы Монте Карло

- Монте Карло – это множество статистических методов, используемых для решения физических и математических задач.
- В этих методах для моделирования используются последовательности случайных чисел.
- Методы Монте Карло наиболее удобны для моделирования случайных и вероятностных процессов.

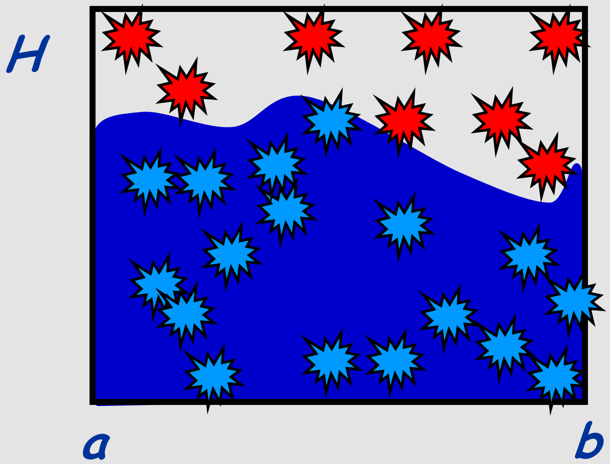
Монте Карло Методы

Рождение

- Los Alamos National Laboratory
- Robert R. Wilson, Monte Carlo Study of Shower Production, Phys. Rev. 86, 261 (1952)
- C. L. Longmire and M. N. Rosenbluth, Diffusion of Charged Particles across a Magnetic Field, Phys. Rev. 103, 507 (1956)
- N. Metropolis et al., Monte Carlo Calculations on Intranuclear Cascades, Phys. Rev. 110, 185 (1958)
- Metropolis, Rosenbluth, Teller

Пример 1. Площадь пруда (интегрирование)

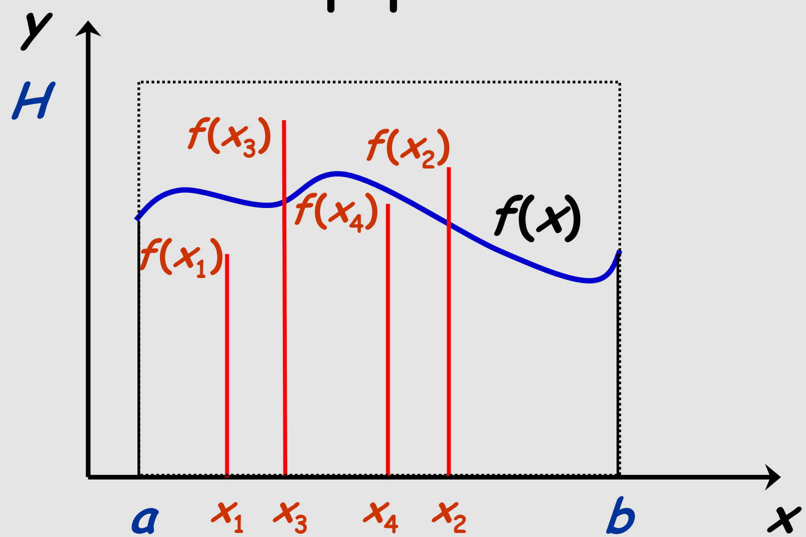
Площадь пруда S



$S_0 = (b - a)*H$

$S = S_0 * n_{\text{попаданий}} / n_{\text{полное}}$

Интегрирование I



Генерируем __случайным образом__ *n пар точек (x_1,y_1), (x_2,y_2),... (x_N,y_N), на интервале $[a,b]$*

$$F(a,b) = S_0 \frac{n_s}{n},$$

n_s - число точек i, для которых

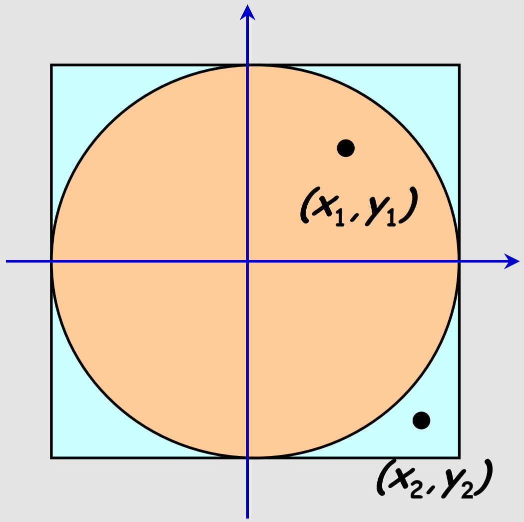
$$y_i \le f(x_i) \qquad (1)$$

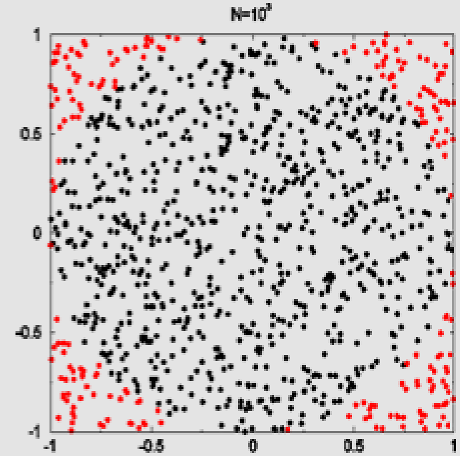
Пример 2. Расчет числа π

- Set N_{in}=0
- Do N times
  - —Calculate 3 random numbers, r_1, r_2, r_3
  - —Let $x=r_1$ [0,1]
  - —Let $y=r_2$ [0,1]
  - —Use r_3 to choose quadrant (change signs of x and y), int [1,2,3,4]
  - —If $x^2+y^2 \leq 1$ set $N_{in} = N_{in} + 1$
- Estimate for $p = \pi = 4N_{in}/N$

Пример 2. Расчет числа π

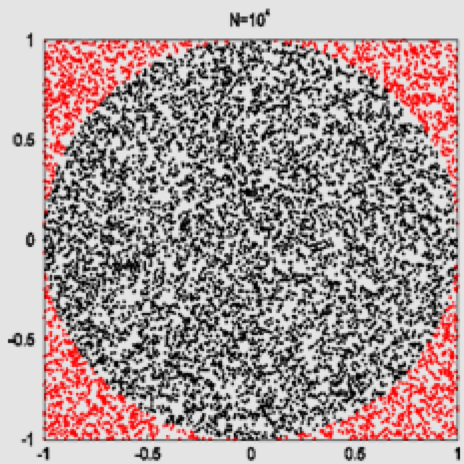
$N = 2$

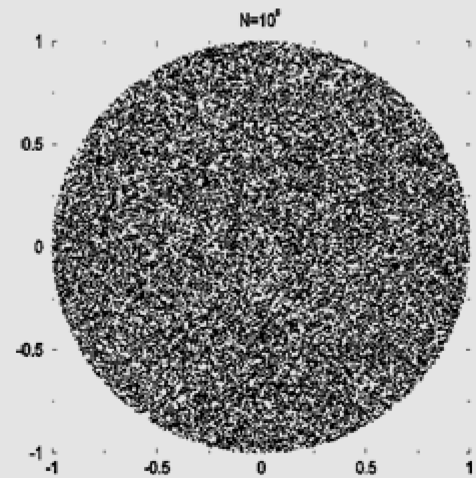




$N = 10^3$

$N = 10^4$

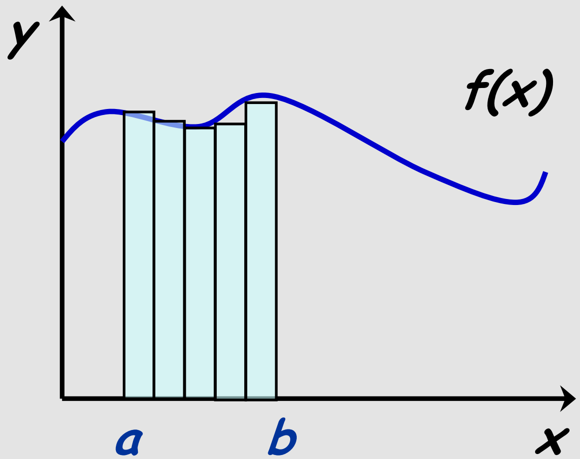




$N = 10^5$

Пример 3. Интегрирование

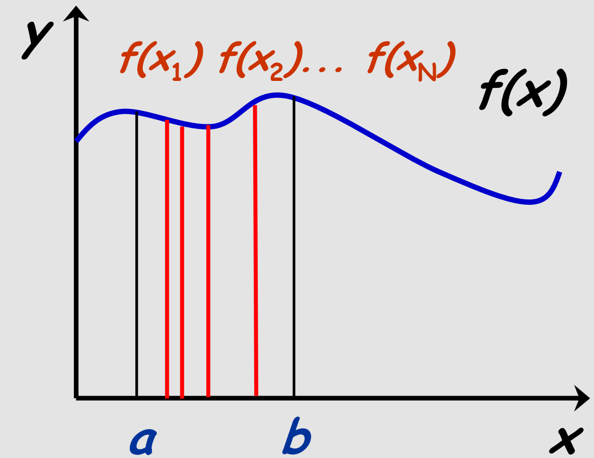
Метод прямоугольников



$x_1\ x_2 ...\ x_N$ – задаются как $x_i = x_1 + (i-1)\Delta x$

$$F(a,b) = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\Delta x_i \quad (2)$$

Метод Монте Карло (*II*)

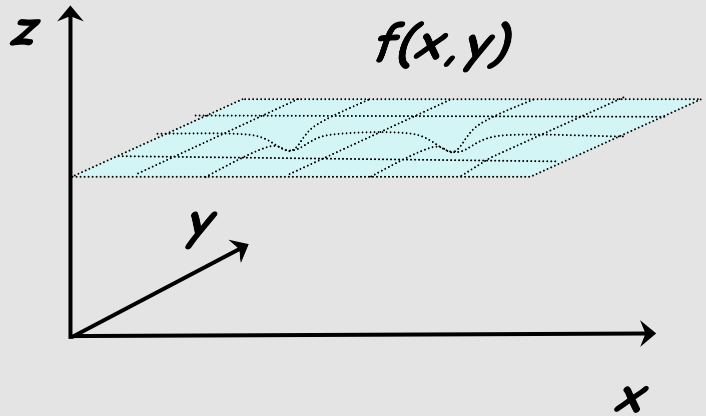


$x_1\ x_2 ...\ x_N$ – выбираются случайным образом на интервале $[a,b]$

$$F(a,b) = (b-a)\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i) \quad (3)$$

Пример 3. Интегрирование

Многомерная функция *f(x,y,z,a,b,c…)*



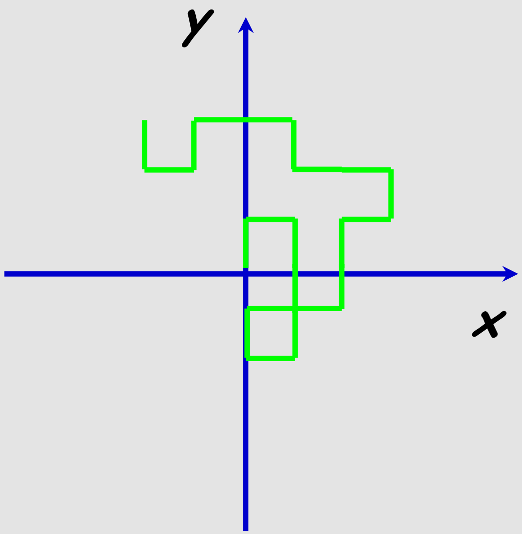
Интегрирование методом прямоугольников, трапеций, Симпсона,... усложняется.
На каждом шаге надо пересчитывать все координаты.

Метод Монте Карло:

$$F(a,b)=(\beta_x-\alpha_x)(\beta_y-\alpha_y)(\beta_z-\alpha_z)\ldots\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i,y_i,z_i,\ldots)$$

Примечание: число точек *N* должно быть достаточно большим.

Пример 4. Случайное блуждание

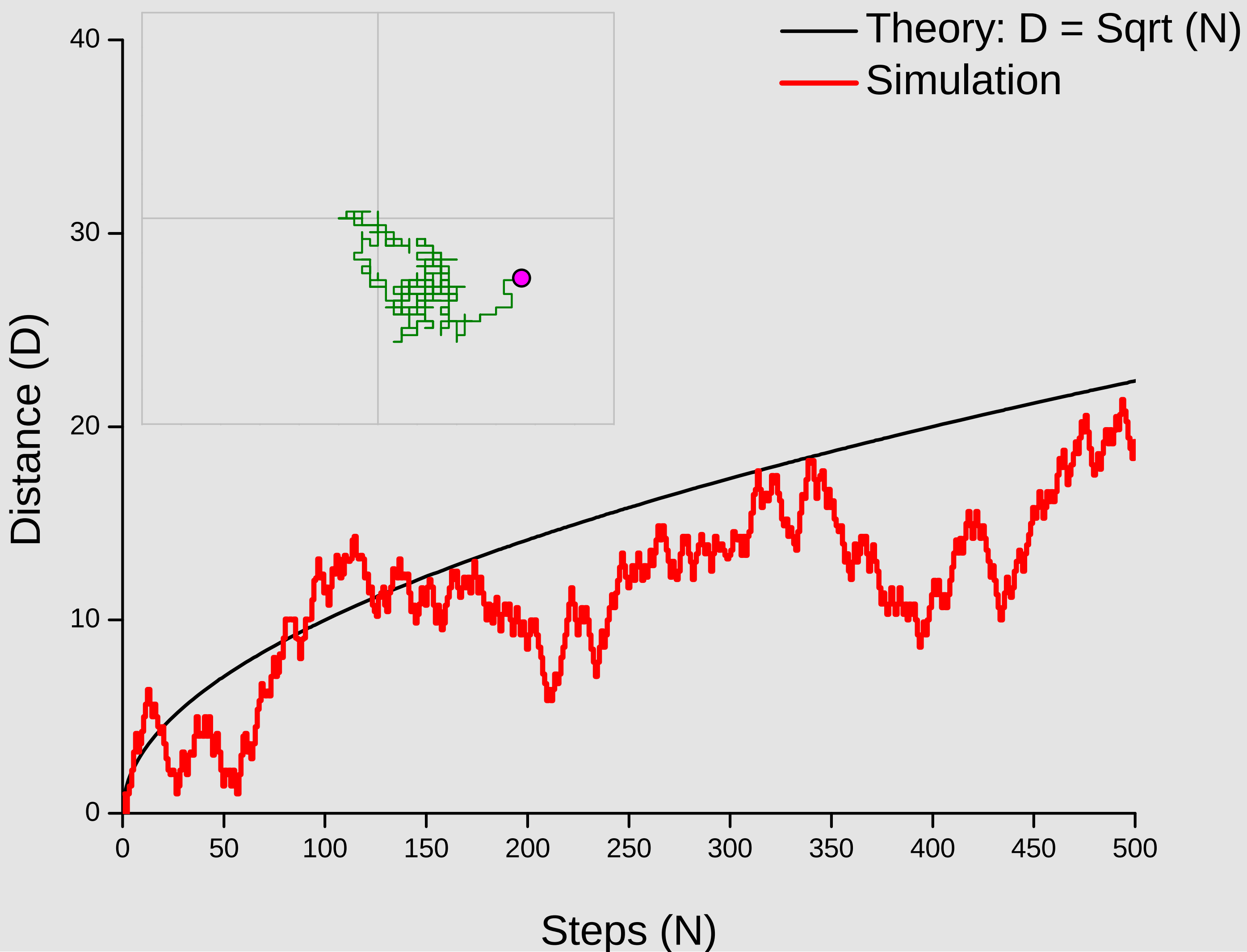



```
do sample = 1 to N
begin
   x = 0; y = 0;
   do step = 1 to n
   begin
        ir = 4*rand( );
        case ir
         0 : x = x + 1.0;
         1 : y = y + 1.0;
         2 : x = x - 1.0;
         3 : y = y - 1.0;
        end
end; {accumulate results} end
```

Примечание: можно усложнить проблему, задав траекторию без самопересечений, возвратов, и т.д.

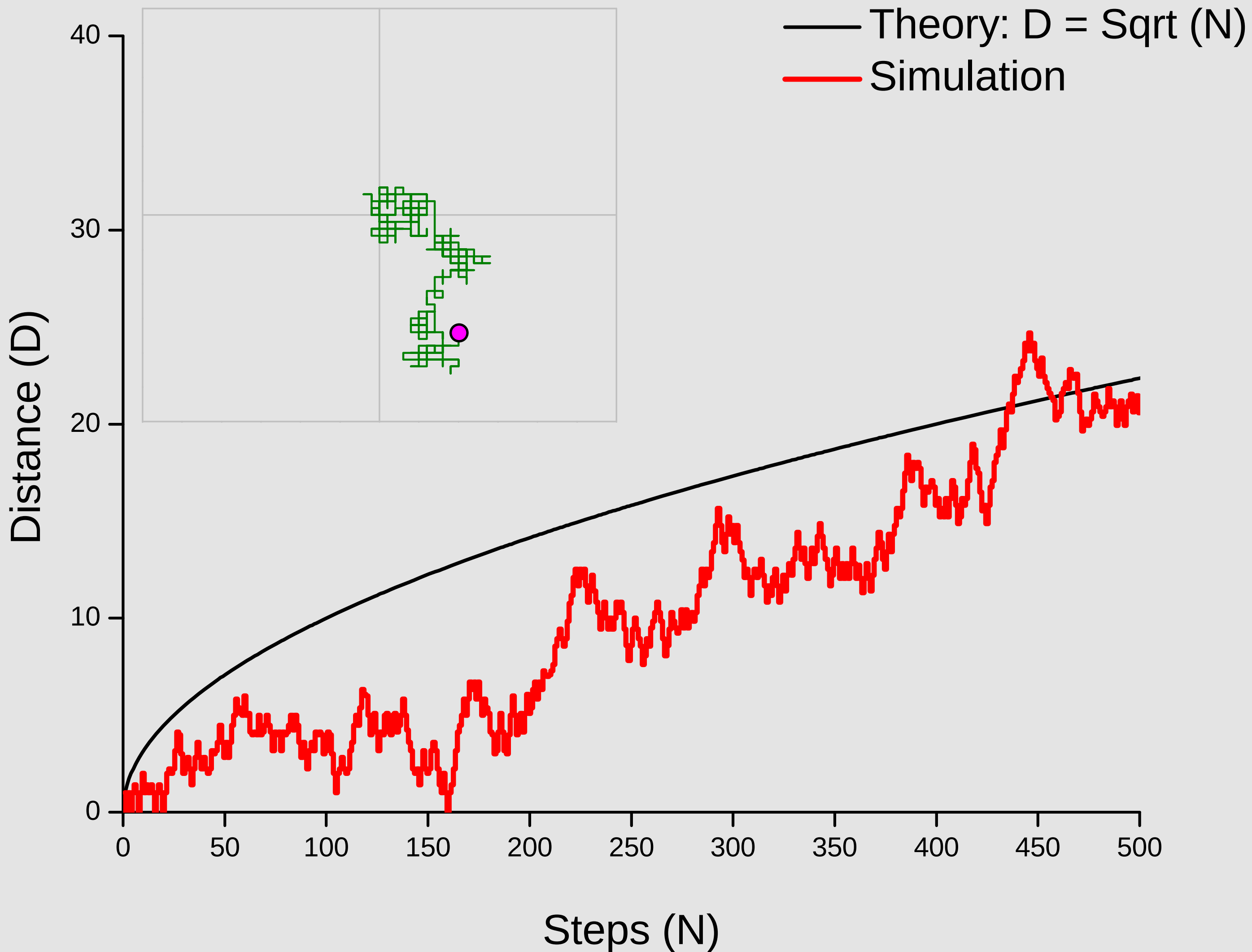
Пример 4. Случайное блуждание

Origin
Попытка раз



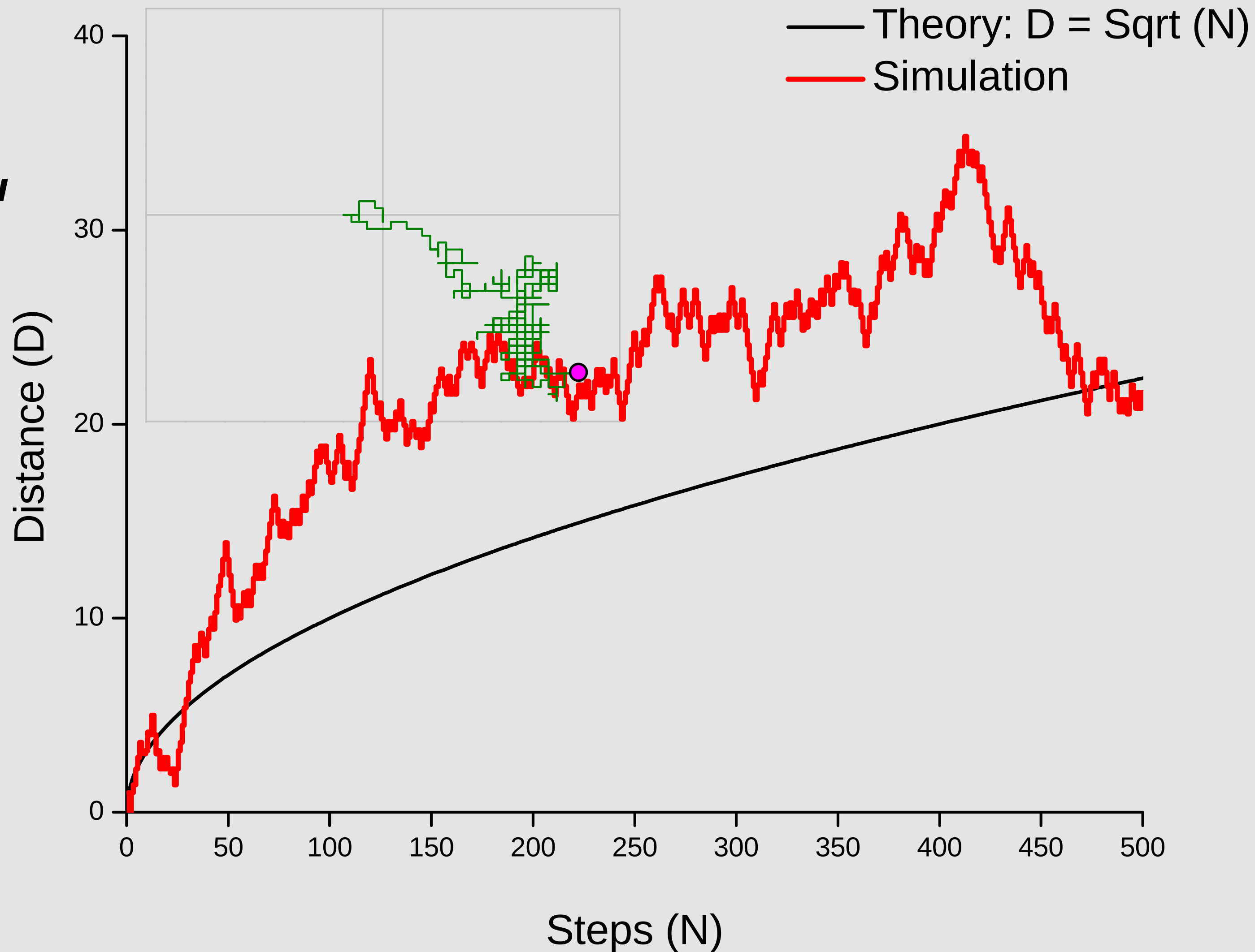
Пример 4. Случайное блуждание

Origin
Попытка два



Пример 4. Случайное блуждание

Origin
Попытка три



Генератор случайных чисел

Насколько случайно случайное?

Простой линейный генератор

$$x_{n+1} = (ax_n + b) \bmod m$$

x_0 задается при инициализации
m - модуль, a – множитель,
b – инкремент суть целочисленные константы
Например:

$x_0 = 1$, $a = 3$, $b = 4$, $m = 32$
$\Rightarrow$1, 7, 25, 15, 17, 23, 9, 31, 1, 7, 25, …
$\Rightarrow$Период равен 8 !?

$\{X_{n+1}/m\}$ от 0 до 1

Генератор случайных чисел

Насколько случайно случайное?

Простой линейный генератор

$$x_{n+1} = (a x_n + b) \bmod m$$

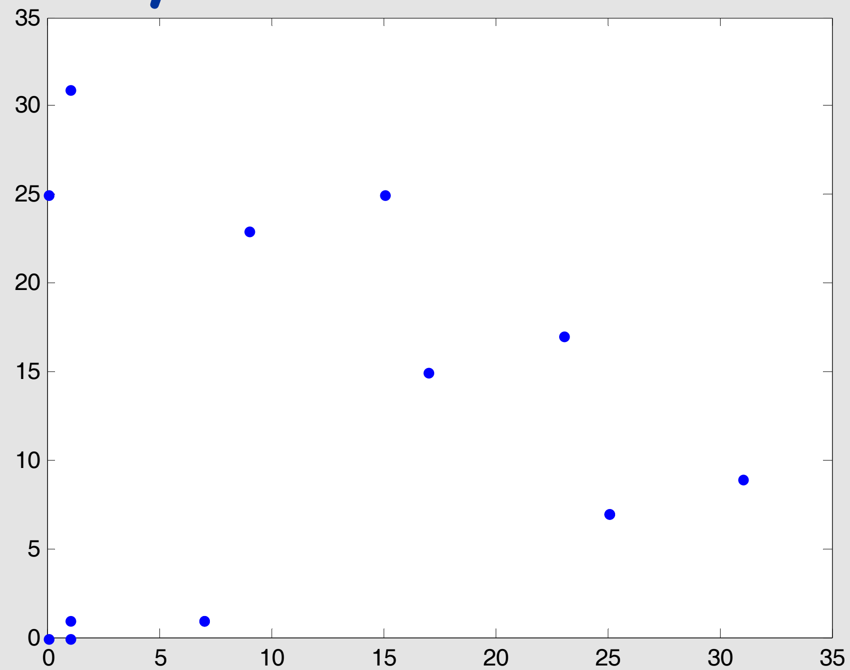
x_0 задается при инициализации
m - модуль, a – множитель,
b – инкремент суть целочисленные константы
Например:
a = 7141, b = 54733, m = 259200
Выбор констант определяет периодичность в повторении "случайных" чисел.

Проверка парных корреляций

- Строим на плоскости множество точек $X_i(x_n, x_{n+1})$.
- Точки равномерно заполняют пространство – "хороший" генератор.
- Точки ложатся в хаотическом порядке на несколько прямых – "плохой" генератор.

Генератор случайных чисел

Насколько случайно случайное?



Простой линейный генератор

$$x_{n+1} = (ax_n + b) \bmod m$$

x_0 задается при инициализации
m - модуль, a – множитель,
b – инкремент суть целочисленные константы
Например:

$x_0 = 1$, $a = 3$, $b = 4$, $m = 32$
$\Rightarrow$1, 7, 25, 15, 17, 23, 9, 31, 1, 7, 25, …
$\Rightarrow$Период равен 8 !?

$\{X_{n+1}/m\}$ от 0 до 1

Генератор случайных чисел

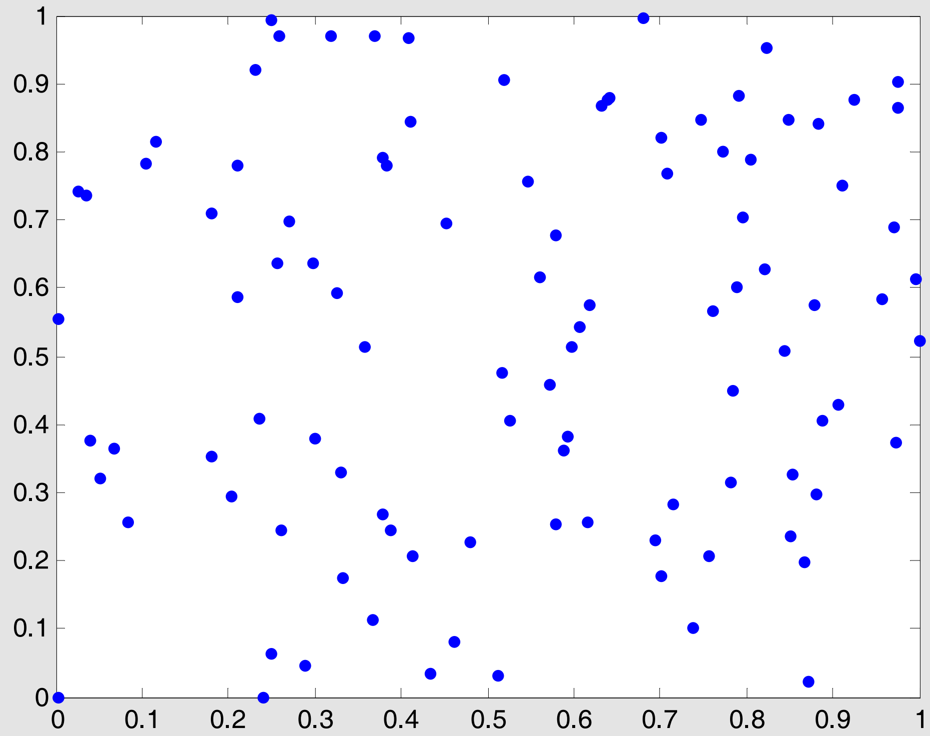
Насколько случайно случайное?

Простой линейный генератор

$$x_{n+1} = (ax_n + b) \bmod m$$

x_0 задается при инициализации
m - модуль, a – множитель,
b – инкремент суть целочисленные константы
Например:
a = 7141, b = 54733, m = 259200
Выбор констант определяет периодичность в повторении “случайных” чисел.

Проверка парных корреляций N=100



Генератор случайных чисел

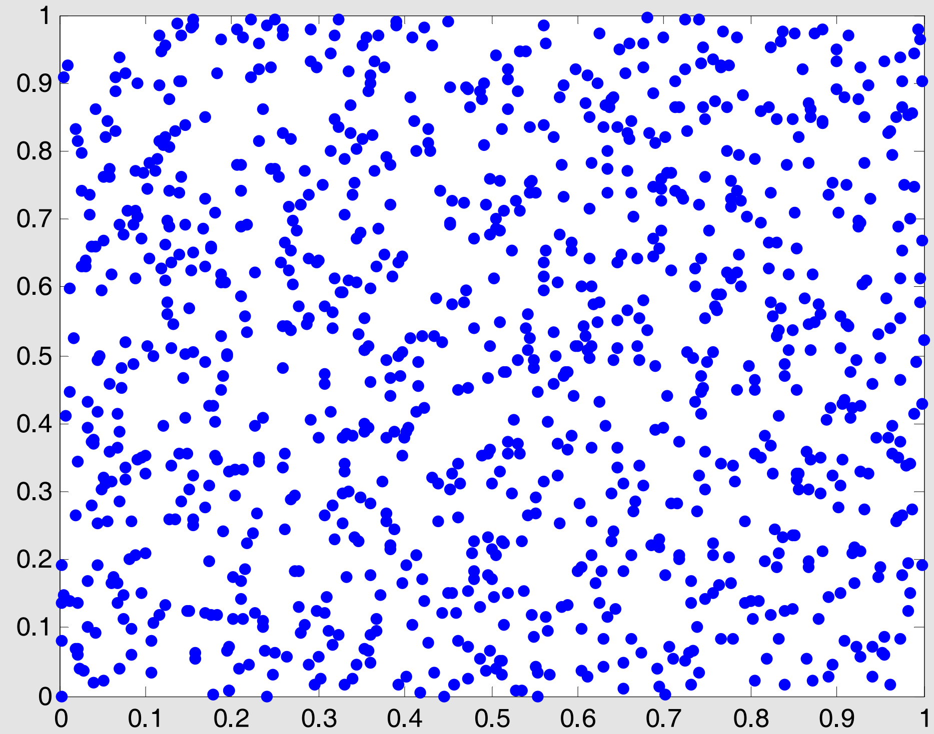
Насколько случайно случайное?

Простой линейный генератор

$$x_{n+1} = (ax_n + b) \bmod m$$

x_0 задается при инициализации
m - модуль, a – множитель,
b – инкремент суть целочисленные константы
Например:
a = 7141, b = 54733, m = 259200
Выбор констант определяет периодичность в повторении "случайных" чисел.

Проверка парных корреляций N=1000



Генератор случайных чисел

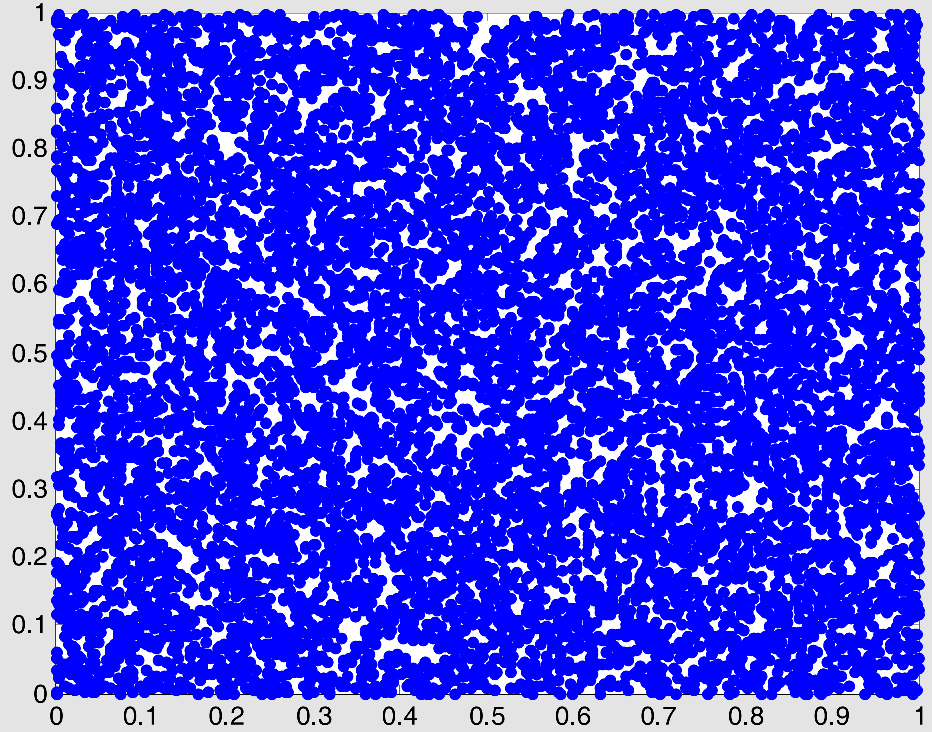
Насколько случайно случайное?

Простой линейный генератор

$$x_{n+1} = (ax_n + b) \bmod m$$

x_0 задается при инициализации
m - модуль, a – множитель,
b – инкремент суть целочисленные константы
Например:
a = 7141, b = 54733, m = 259200
Выбор констант определяет периодичность в повторении "случайных" чисел.

Проверка парных корреляций
N=10000



Генератор случайных чисел

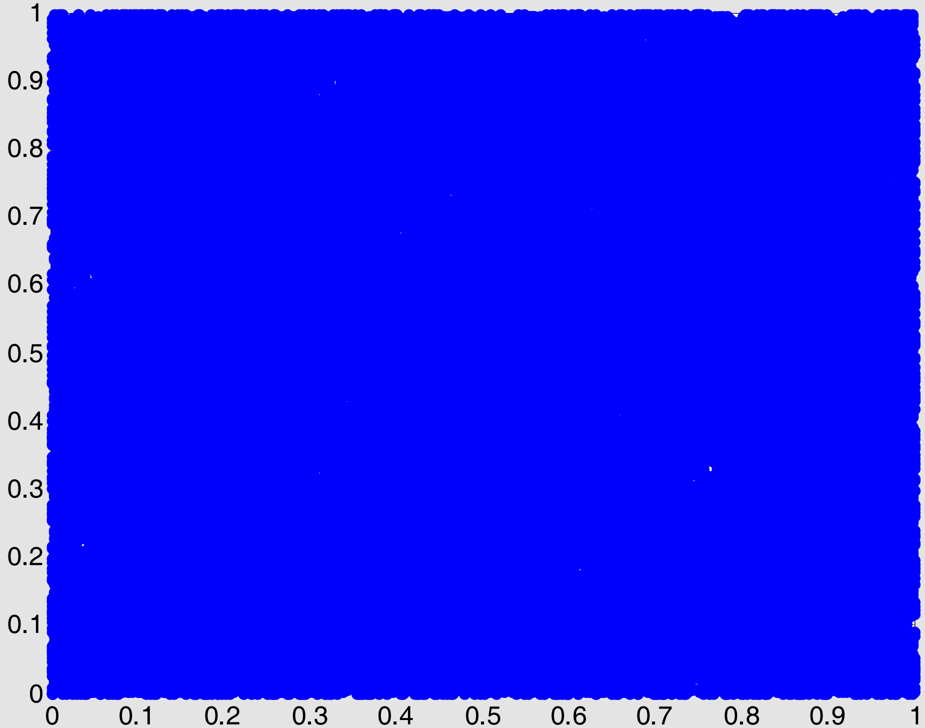
Насколько случайно случайное?

Простой линейный генератор

$$x_{n+1} = (ax_n + b) \bmod m$$

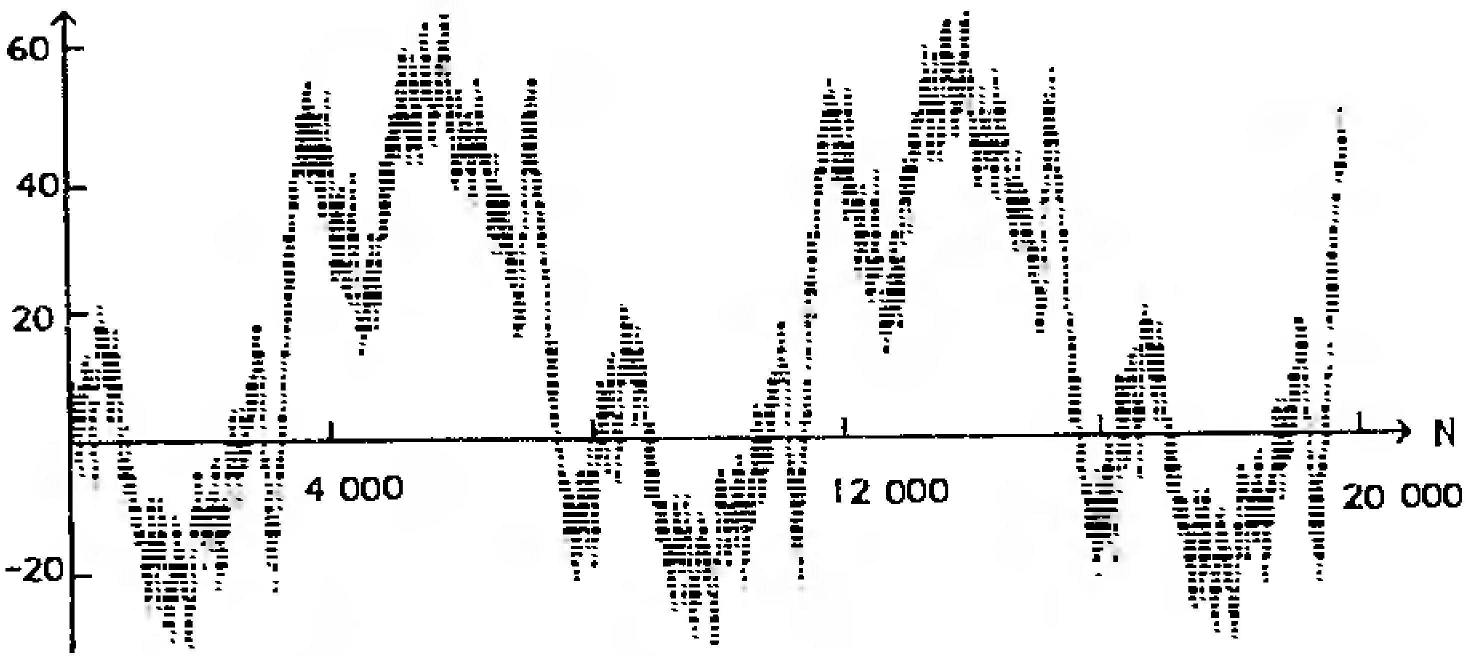
x_0 задается при инициализации
m - модуль, a – множитель,
b – инкремент суть целочисленные константы
Например:
a = 7141, b = 54733, m = 259200
Выбор констант определяет периодичность в повторении "случайных" чисел.

Проверка парных корреляций
N=50000



Генератор случайных чисел

Насколько случайно случайное?



. Случайное блуждание, генерируемое с помощью соотношения $a = 899$, $c = 0$, $m = 32\,768$ и начальным числом $x_0 = 12$.

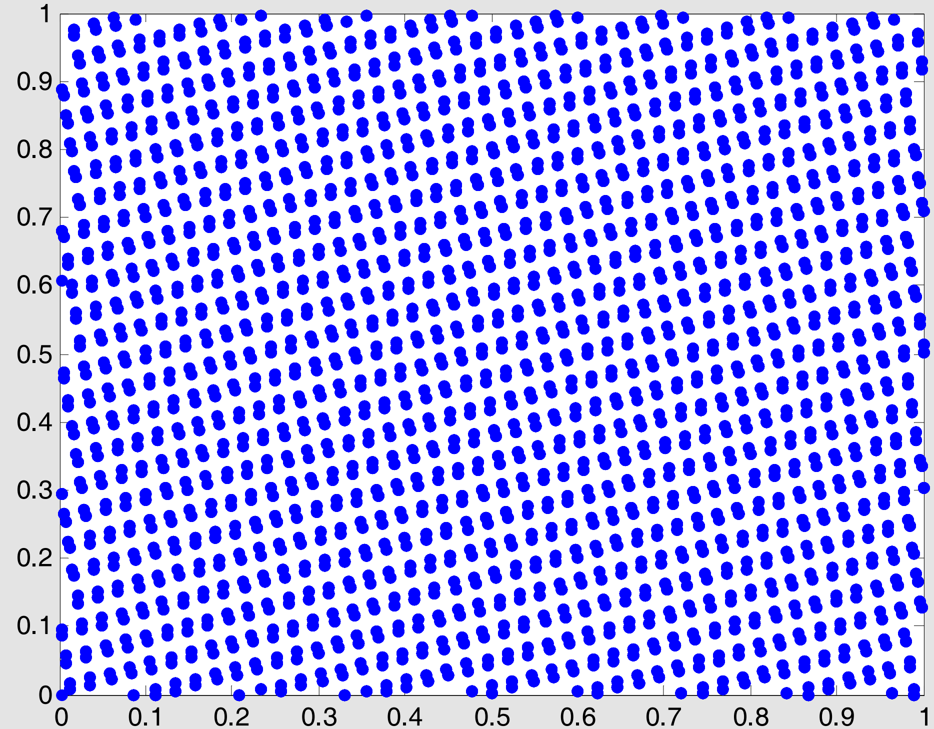
Генератор случайных чисел

Насколько случайно случайное?

Простой линейный генератор

$$x_{n+1} = (ax_n + b) \bmod m$$

a = 899, b = 0, m = 32768, x0=12



Генератор случайных чисел

Как улучшить?

- **Перемешивание порядка выдачи чисел. Основной генератор заполняет буфер случайными числами. Дополнительный генератор выбирает числа из буфера.**
- **Два основных генератора создают случайные числа $N = n_1 + n_2/z$ или $N = |n_1 - n_2|$. Можно тоже использовать буфер и дополнительный генератор.**
- **Можно создать другой генератор. Существует множество генераторов, например, “Xorshift”,“Lagged Fibonacci”, “Multiply-With-Carry”…**

Генератор случайных чисел

Генерация случайных чисел с заданным распределением

- **Нужно генерировать случайные числа с плотностью вероятности *f(x)* (Det:=> *f(x) dx в интервале от x до x + dx*)**

и (интегральной) функцией распределения

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(x)dx$$

с нормировкой *F*(∞) = 1. (Det:=> *вероятность выпадения сл. числа <= x*)

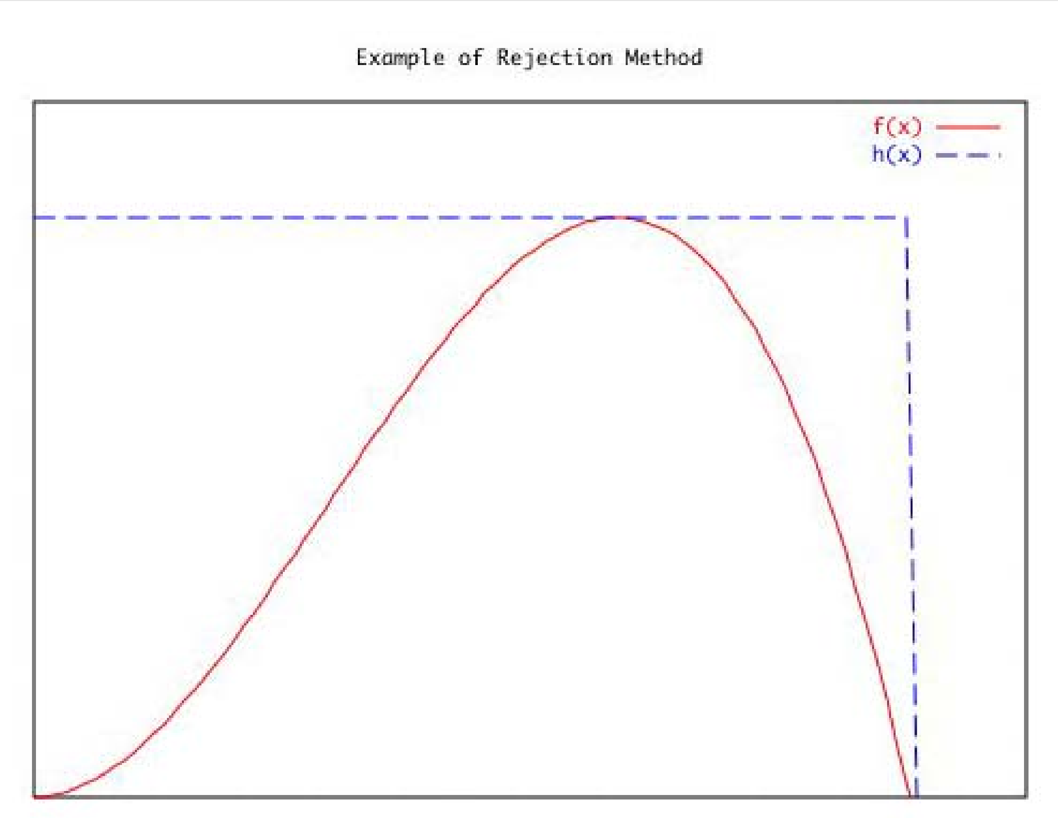
Генерация случайных чисел с заданным распределением

Inverse transformation method (метод обратного преобразования)

- Генерируется равномерное распределение x_i на интервале [0,1].
- Решается обратная задача $y_i = F^{-1}(x_i)$.
- Величина y_i распределена с плотностью вероятности $f(x)$.
- Пример: Генерация частиц с энергиями согласно распределению Больцмана $f(E) \sim e^{-E/kT}$.
  Энергия i-й частицы запишется как $E_i = -kT\ln(r)$, где r - случайное число на интервале [0,1].
- Во многих случаях не так просто представить $F^{-1}(x_i)$.

Генерация случайных чисел с заданным распределением

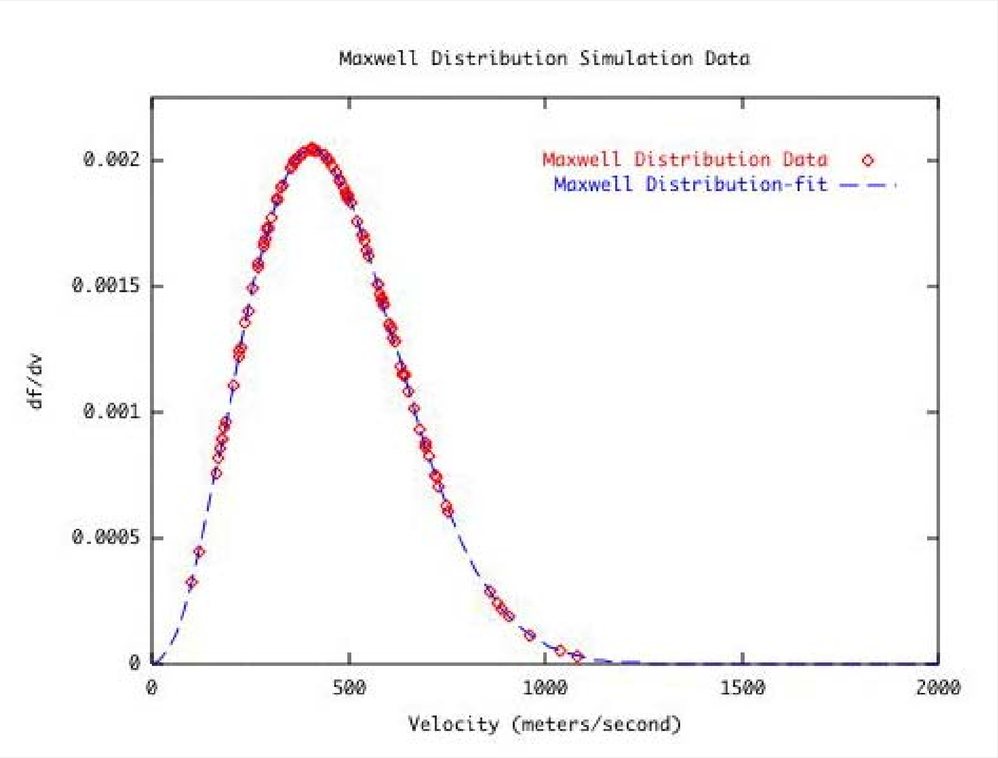
Rejection method (метод отбора- отказа)



- Выбираем промежуточную функцию для сравнения, *h(x)*, которая “перекрывает” искомую функцию *f(x)* . В данном примере *h(x)* это прямоугольная функция.
- Равномерно заполняем точками область под *h(x)*.
- Из всех точек выбираем только те, которые находятся под кривой *f(x)* .

Rejection method
(метод отбора- отказа)

Генерация точек (x_i, y_i) и еще один пример



- Значение x_i генерируется согласно методу обратного преобразования для функции $h(x)$.
- *Значение* y_i определяется как $h(x_i)$*rand(A), где случайная величина задана на интервале [0,1].
- На примере $h(x)$ задана квадратичной функцией. $f(x)$ – распределение Максвелла.

To be continued