

2.5. Расчет интегралов методом Монте-Карло

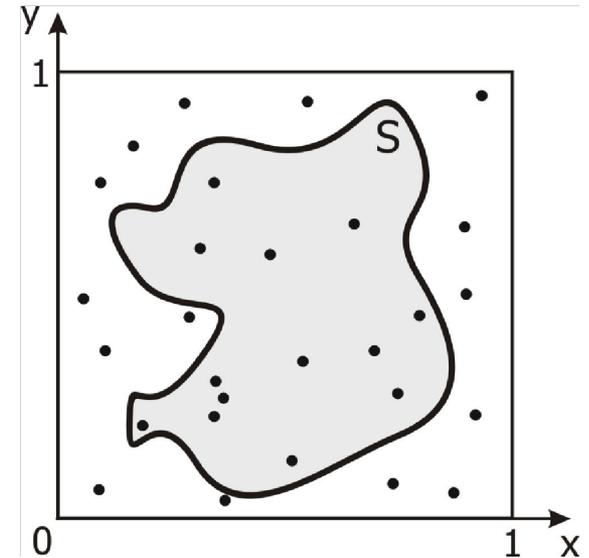
Понятие о методах Монте-Карло.
Расчет интегралов

Понятие о методах Монте-Карло

- При исследовании *взаимодействующих* систем расчет термодинамических средних методом точной диагонализации при достаточно большом размере системы неприменим из-за огромного числа степеней свободы в системе
- Метод Монте-Карло позволяет даже в случае макроскопически большого числа степеней свободы получить асимптотически точные результаты для термодинамических характеристик системы
- Создателями метода считаются Дж. Нейман и С. Улам (1949 г.)
- Методы стохастического моделирования, такие как метод МК, используются как для физических задач, так и для решения сложных математических проблем, где другие аналитические и приближенные подходы не работают

Простейший пример: вычисление площади сложной плоской фигуры

- Поместим фигуру внутри единичного квадрата
- Выберем внутри квадрата N случайных точек
- Площадь фигуры равна отношению числа точек, попавших внутрь фигуры, к полному числу точек
- Преимущество: простота использования (нужен лишь хороший датчик случайных чисел)
- Недостаток: ошибка расчета уменьшается в среднем как ϵ_1/\sqrt{N}
- Для более эффективной сходимости нужен алгоритм, учитывающий особенности задачи



$$S \approx \frac{N'}{N}$$

Расчет интегралов

- Требуется вычислить интеграл

$$I = \int_a^b g(x) dx$$

- Выберем произвольную плотность распределения, удовлетворяющую условию

$$\int_a^b p(x) dx = 1$$

- Определим случайную величину

$$\eta = \frac{g(\xi)}{p(\xi)}$$

- ξ – случайная величина, распределенная с плотностью

$p(x)$

- Тогда

$$M\eta = \int_a^b \frac{g(x)}{p(x)} p(x) dx = I$$

- Применяя центральную предельную теорему к серии случайных величин, имеем:

$$P \left\{ \left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta_i - I \right| < 3 \sqrt{\frac{D\eta}{N}} \right\} \approx 0.997$$

- Таким образом, при достаточно большом N

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{g(\xi_i)}{p(\xi_i)} \approx I$$

$$D\eta = M\eta^2 - I^2 \cong \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{g^2(\xi_i)}{p(\xi_i)} - I^2$$

Расчет интегралов

- Для оптимального расчета интеграла с минимальной погрешностью следует выбирать распределение $p(x)$, пропорциональное $|g(x)|$ или, по возможности, близкое к этому
- Такой выбор распределения приводит к наименьшей статистической ошибке и быстрой скорости расчета
- Такой расчет интеграла с наиболее близкой к $|g(x)|$ плотностью распределения называется *существенной выборкой*
- В методе Монте-Карло вместо всех возможных значений степеней свободы *используются существенные выборки*

Расчет интегралов

- Рассчитаем методом Монте-Карло интеграл

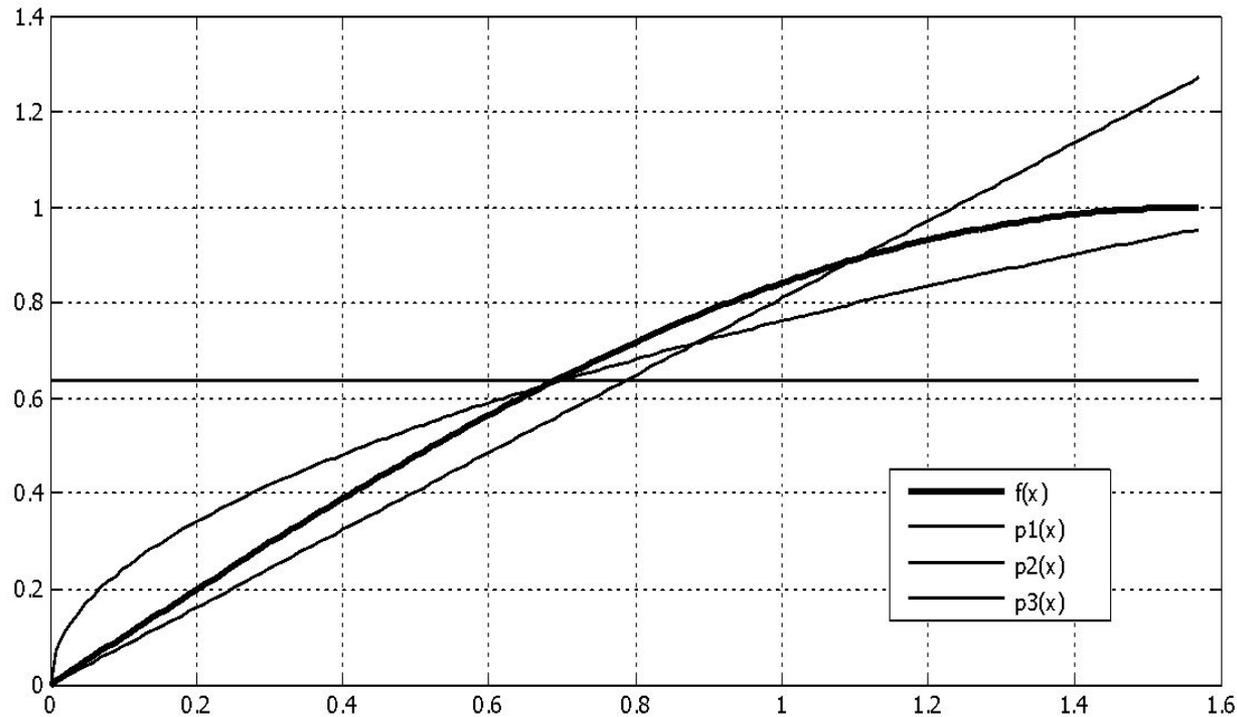
$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x \, dx = 1$$

- Используем для расчета интеграла различные нормированные функции распределения:

$$p_1(x) = \frac{2}{\pi}; \quad p_2(x) = \frac{8x}{\pi^2}; \quad p_3(x) = \frac{3\sqrt{2}}{\pi\sqrt{\pi}}\sqrt{x}$$

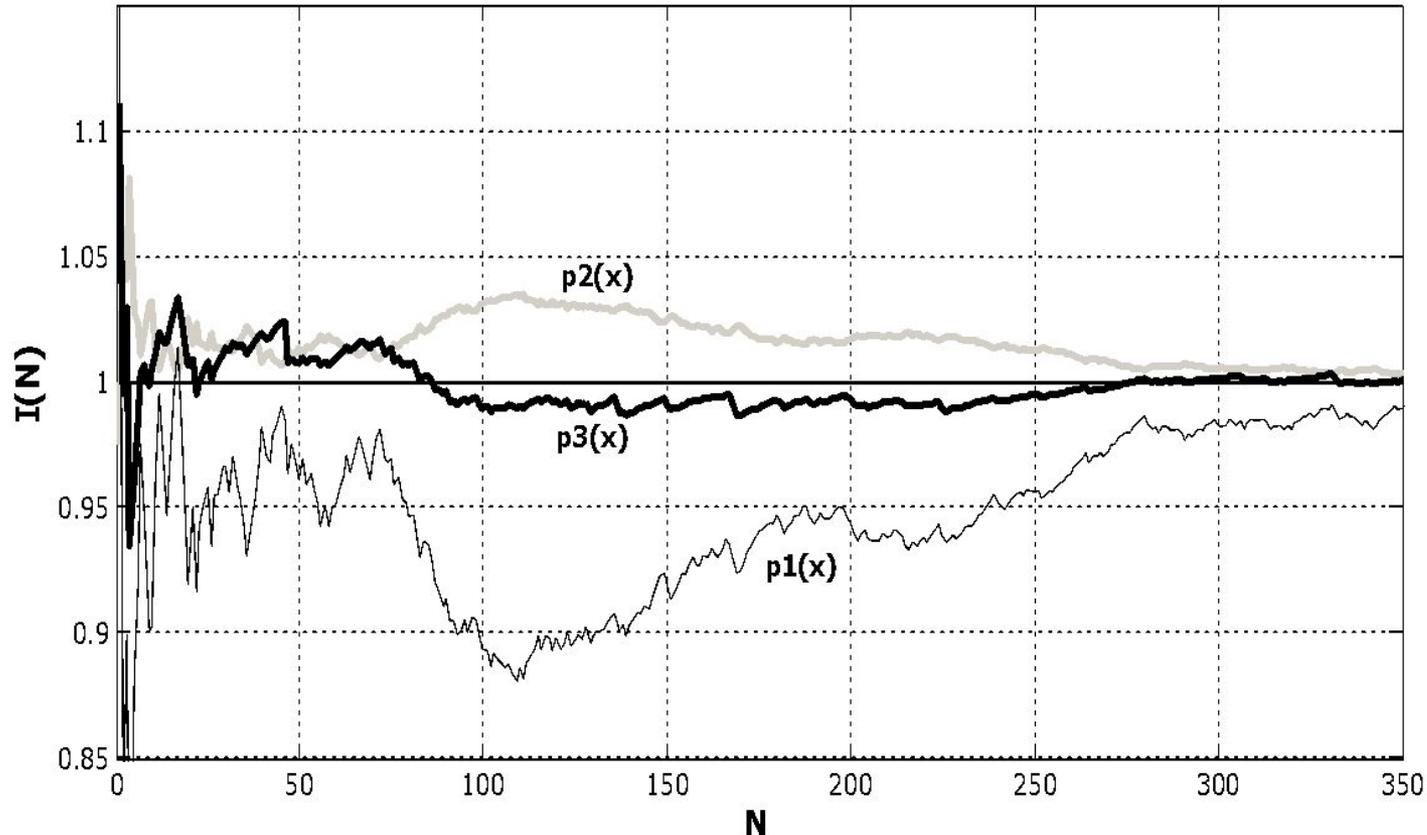
| Функция распределения $p(x)$ | Случайные числа, распределенные по закону $p(x)$ | Расчетное значение интеграла в зависимости от числа итераций |
|--|--|--|
| $p_1(x) = \frac{2}{\pi}$ | $\xi = \frac{\pi}{2}R$ | $I(N) = \frac{\pi}{2N} \sum_{i=1}^N \sin \xi_i$ |
| $p_2(x) = \frac{8x}{\pi^2}$ | $\xi = \frac{\pi}{2}\sqrt{R}$ | $I(N) = \frac{\pi^2}{8N} \sum_{i=1}^N \frac{\sin \xi_i}{\xi_i}$ |
| $p_3(x) = \frac{3\sqrt{2}}{\pi\sqrt{\pi}}\sqrt{x}$ | $\xi = \frac{\pi}{2}R^{3/2}$ | $I(N) = \frac{\pi^{3/2}}{3\sqrt{2}N} \sum_{i=1}^N \frac{\sin \xi_i}{\sqrt{\xi_i}}$ |

Расчет интегралов



- Распределение $p_3(x)$ наиболее близко к подынтегральной функции
- Сходимость при равномерном распределении должна быть наихудшей

Расчет интегралов



- Процесс сходимости расчетного значения интеграла к точному значению в зависимости от числа сгенерированных случайных точек

Эффективность метода Монте-Карло

- Эффективность алгоритма МК напрямую зависит от удачного выбора функции распределения моделируемой случайной величины
- Эффективность метода МК растет с размерностью рассчитываемого интеграла. Расчет двумерных и трехмерных интегралов методом МК более эффективен, чем расчет при помощи разностных схем
- Метод МК с успехом используется для различных физических и математических задач и процессов: для моделирования систем массового обслуживания, информационных потоков, процессов протекания, процессов распространения нейтронов в средах и т.д.
- Все вышеизложенное касается только классических задач. Для квантовых моделей и термодинамики существуют более совершенные алгоритмы, специально адаптированные под конкретные проблемы