Выборки

- Простая. На каждом шаге выбор идет из максимального набора различных вариантов. При этом многие из вариантов могут быть отклонены дополнительными правилами.

- Ограниченная. На каждом шаге создается свой список вариантов, который включает дополнительные ограничения.

- По значимости. Преимущественно выбираются варианты, дающие наибольший вклад.

Простая и Ограниченная выборки
Примеры

Случайное блуждание без самопересечений

```
do sample = 1 to n
begin
  step = 0;
  repeat
    generate-one-step;
    step = step + 1
  until (step-invalid or step = N)
  accumulate-results
end;
```

Проблемы: быстрое обрывание, сложно набрать статистику…

```
do sample = 1 to n
begin
  step = 0;
  repeat
    generate-valid-list
    if list = empty then
      terminate = true
    else
      generate-step-from-the-list;
     step = step + 1
  until (terminate or step = N)
  accumulate-results; end;
```

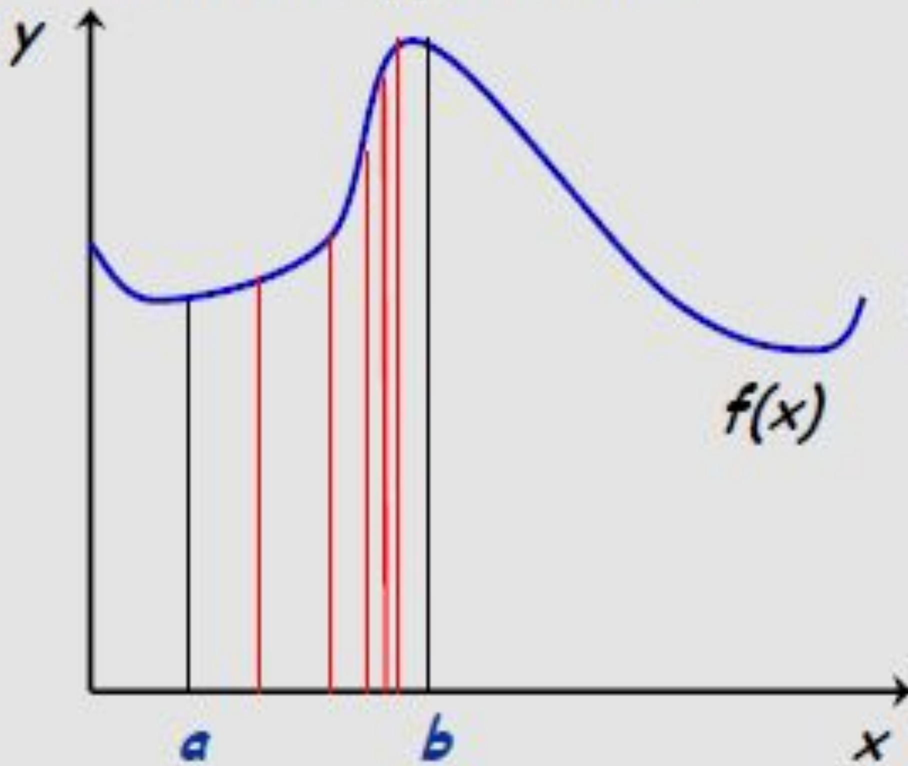
Выборка по значимости

Еще раз об интегрировании

- Часто при интегрировании удобно выбирать точки с большей плотностью в области быстрого изменения функции.

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

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



- Тогда интеграл может быть записан как

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

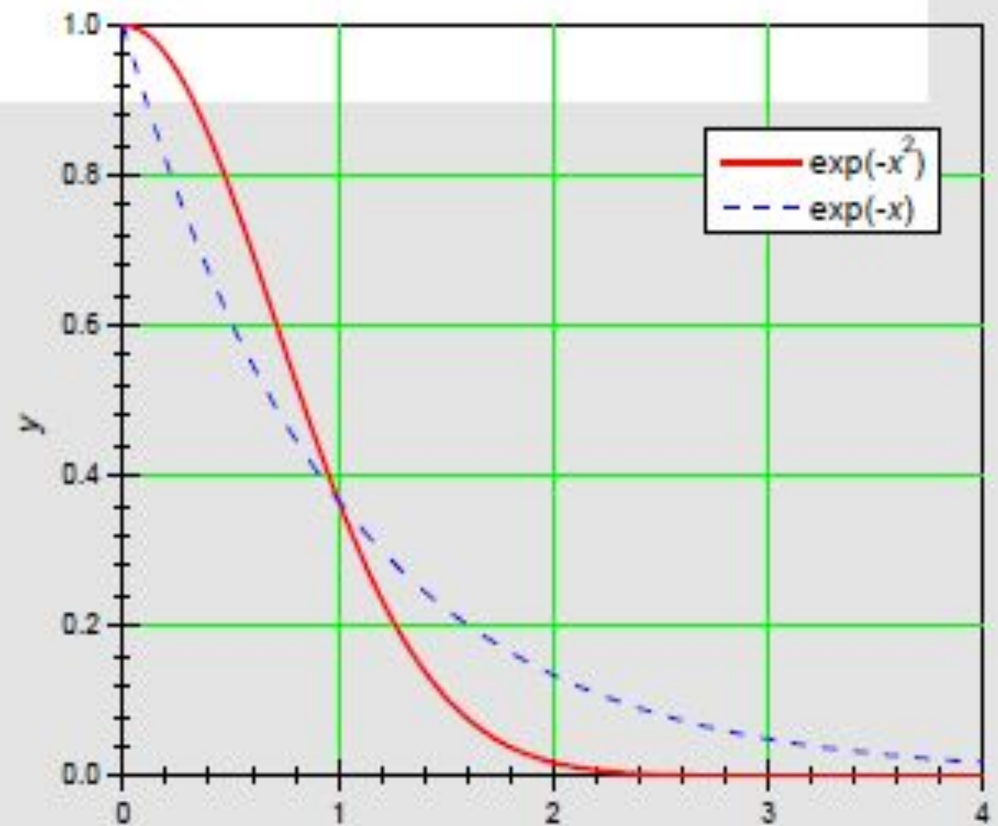
где x_i генерируется согласно функции $p(x_i)$

Выборка по значимости

Оценки интеграла с однородной $p(x) = 1$ и неоднородной $p(x) = A\exp(-x)$ плотностями вероятности. Постояииая A выбрана из условия нормировки $p(x)$ на едииичном отрезке. Точиое значение интеграла приблизительно равно 0.7468. Приведены оценки F_n, стандартное отклонеиие σ и вероятная ошибка $\sigma/n^{1/2}$. Время ЦП (с) дано только для сравнеиия

$$F(a,b) = \int_0^1 e^{-x^2} dx$$

$$p(x) = 1; \quad p(x) = Ae^{-x}$$



Выборка по значимости

Алгоритм Метрополиса

Получим распределение *p(x)* “случайным блужданием” точек x_i

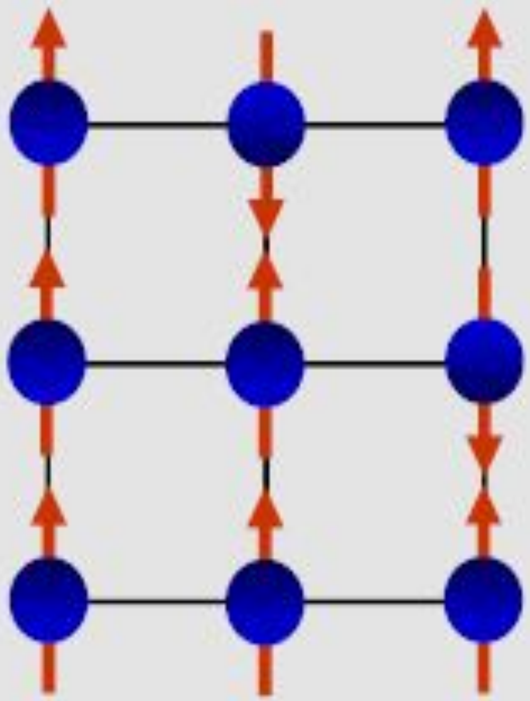
```
generate point x
for i = 1 to N
  generate step = rand( )
  x1 = x + step;
  w = p(x1)/p(x);
  if w >= 1 then
     x = x1
  else r = rand ( );
      if r <= w then
         x = x1
end
```

- Функция Метрополиса

$$w(x_{n+1} | x_n) = \min\left(1, \frac{p(x_{n+1})}{p(x_n)}\right)$$

- *N* должно быть достаточно большим.
- Максимальный шаг должен быть выбран “правильно”. 1/2 - 1/3 всех шагов должно приниматься.

Пример. Двумерная модель Изинга



- Гамильтониан

$$H = \sum_i g\mu_B H S_i - J\sum_{i,j} S_i S_j$$

- Функция Метрополиса

$$w = \min\left(1, e^{-\frac{\Delta E}{kT}}\right)$$

- ΔE складывается из энергии Зеемана во внешнем поле и обменной энергии.
- Процессы с уменьшением энергии принимаются все.
- Процессы с увеличением энергии принимаются согласно распределению

Пример. Метод Монте-Карло для микроканонический ансамбль

- Ансамбль систем, характеризуемый величинами *E, T, V*, и описываемый распределением вероятностей вида (1), называется микроканоническим ансамблем.

$$P_s = \begin{cases} \dfrac{1}{\Omega}, & \text{если } s - \text{ достижимо} \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases} \qquad (1)$$

- Эффективная вычислительная процедура метода Монте-Карло для микроканонического ансамбля была предложена М. Кройцем с сотрудниками: выделение двух подсистем (исходная система + подсистема-"демон", состоящая из одного элемента).

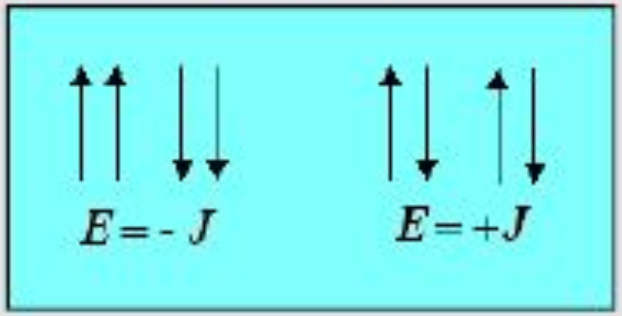
Пример. Метод Монте-Карло для микроканонический ансамбль

1. Сгенерировать начальную конфигурацию системы с заданным значением полной энергии.
2. Выбрать случайным образом частицу и произвести пробное изменение ее состояния.
3. Вычислить полную энергию системы в новом состоянии.
4. Если в новом состоянии энергия системы оказывается меньше, то система отдает энергию демону и новая конфигурация принимается.
5. Если в новом состоянии энергия системы оказывается больше, то новая конфигурация принимается только в том случае, если энергии демона достаточно, чтобы передать ее системе. В противном случае новая конфигурация не принимается, и частица сохраняет свое старое состояние.
6. Если пробное изменение не меняет энергию системы, то новая конфигурация принимается.

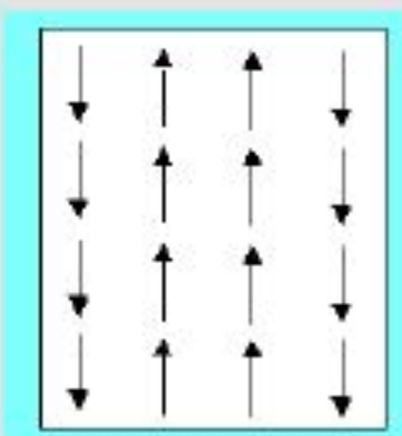
Пример. Двумерная модель Изинга

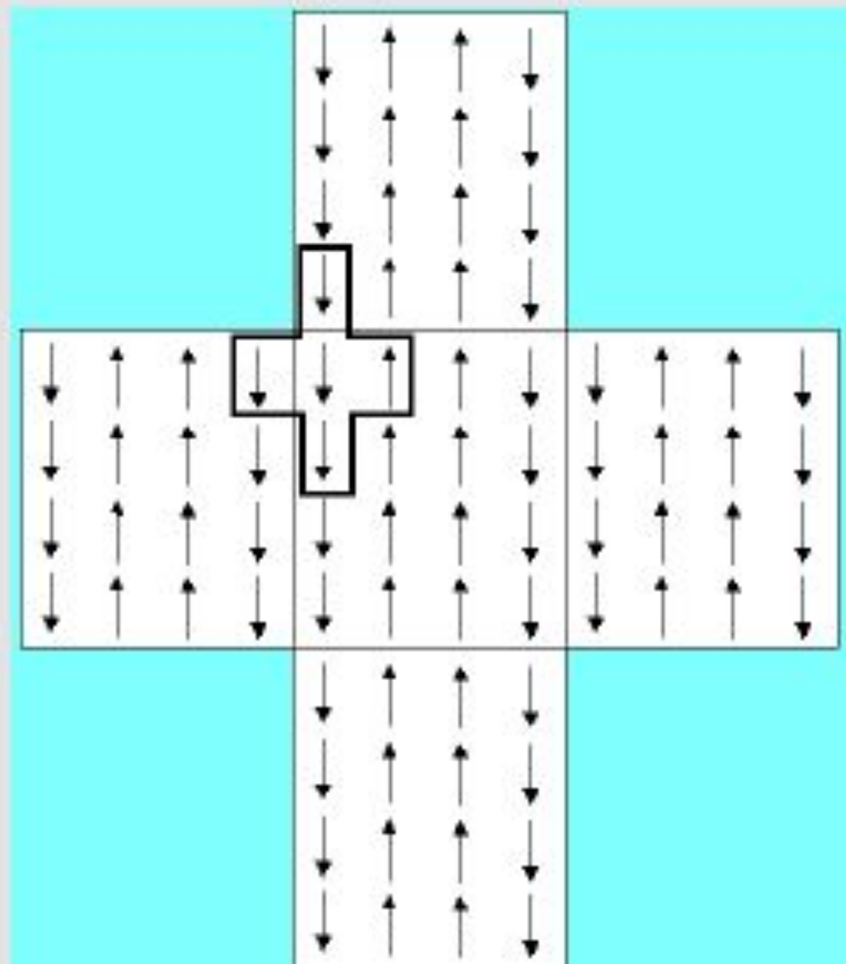
- Гамильтониан

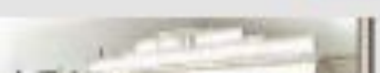
$$H = -J\sum_{i,j} S_i S_j - h\sum_i S_i$$



- Система
  и граничные условия







Пример. Метод Монте-Карло для микроканонический ансамбль

1. Задание числа спинов решетки N_s.
2. Задание числа шагов метода Монте-Карло на спин N_{trial}..
3. Задание начальной конфигурации системы.
4. Выбор случайным образом одного из спинов системы.
5. Вычисление пробного изменения энергии.
6. Если пробное изменение приводит к уменьшению энергии системы, то система отдает энергию демону и новая конфигурация принимается.
7. Если пробное изменение увеличивает энергию системы, то новая конфигурация принимается в том случае, если демон имеет достаточную энергию для передачи ее системе.
8. Если пробное изменение не меняет энергию системы, то принимается новая конфигурация.
9. Повторение пп. 4-8 (число повторений равно N_s).
10. Повторение пп. 4-9 (число повторений равно N_{trial}).