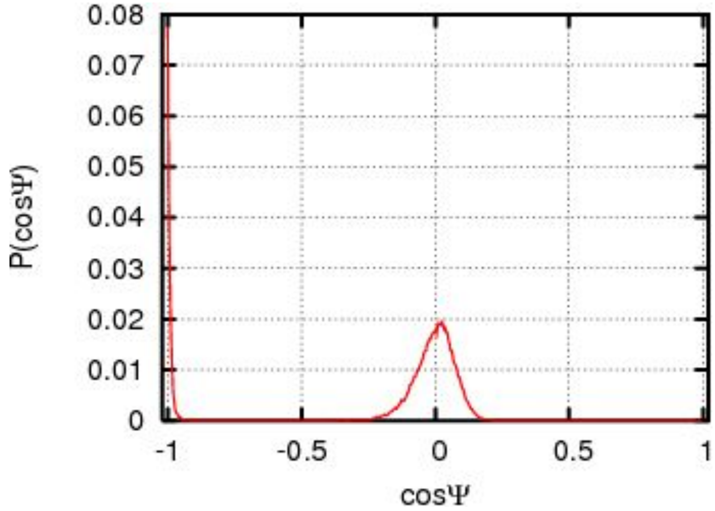
Розрахунок функції кутового розподілу

$$P(\cos\theta)$$



1. Робиться цикл по N частинках : I=1,N
2. Розраховуються відстані Rij між I-ю та всіма іншими частинками, що попадають Rij<Rmax
3. Враховуються періодичні граничні умови
4. Розраховуються кути між різними тріадами атомів
5. При попаданні кута θjik у проміжок між θ і θ+Δθ сума збільшується на 1
6. Кінцеву сумарну функцію від θ усереднити по N частинках та N_{conf} конфігурацій

Л.15 Метод Монте-Карло

Метрополіс, Розенблат, Теллер, 1953

Метод Метрополіса генерування нерівномірного розподілу ймовірності являє собою частковий випадок процедури виборкипо значенню, в якій деякі моливі виборки відкидаються.

Одномірний випадок:

Потрібно згенерувати випадкові змінні (наприклад x) з довільною густиною ймовірності $p(x)$. В методі Метрополіса моделюється "випадкове блукання" точок $\{x_i\}$, розподіл яких після великої кількості кроків асимптотично прямує до розподілу ймовірності $p(x)$. Випадкове блукання визначається заданням ймовірності переходу $w(x_i\text{->}x_j)$ від одного значення x_i до іншого x_j для того, щоб розподіл точок $x_0, x_1, x_2, \dots$ збігався до $p(x)$.

Алгоритм одномірних випадкових блукань

Достатньо задовольнити умові “детального балансу”:

$$p(x_i)w(x_i \to x_j) = p(x_j)w(x_j \to x_i)$$

Найпростіший варіант :

$$w(x_i \to x_j) = \min[1, \frac{p(x_j)}{p(x_i)}]$$

Даний перехід можна описати настуними кроками:

1. Вибираємо пробну координату $x_t = x_n + \delta_n$, де δ_n є випадковим числом на відрізку $[-\delta : \delta]$
2. Розраховуємо $w = \frac{p(x_t)}{p(x_n)}$
3. Якщо $w \geq 1$, то перехід приймається і покладаємо $x_{n+1} = x_t$
4. Якщо $w < 1$, генеруємо випадкове число r.

Алгоритм одномірних випадкових блукань

5. Якщо $r \le w$, то перехід приймається і покладаємо $x_{n+1} = x_t$
6. Якщо пробний перехід не прийнятий, покладаємо $x_{n+1} = x_n$

Асимптотичний розподіл *p(x)* буде отриманий після достатньо великої кількості пробних переходів.

Яка роль "розміру кроку" δ ? Якщо δ буде великим, то буде прийматись лише мала частина пробних кроків і вибірка *p(x)* буде неефективною. Якщо δ буде занадто малим, то буде прийматись більша частина пробних кроків і вибірка *p(x)* буде знову неефективною. Критерій вибору величини δ : **повинно прийматись від третини до половини пробних кроків**. Бажано також починати початкове значення x_0 так, щоб розподіл x_i якнайшвидше досягав асимптотичного розподілу.

Алгоритм Метрополіса

$$w = e^{-\frac{U(r_t^N) - U(r_n^N)}{k_B T}}$$

1. Випадково вибирається частинка та розраховується її енергія $U(r_n^N)$
2. Дати частинці випадкове зміщення $\vec{r}_t = \vec{r}_n + \vec{\Delta}$ та розрахувати нову енергію $U(r_t^N)$
3. Прийняти зміщення $\vec{r}_n$ до $\vec{r}_t$ з ймовірністю

$$w(\vec{r}_n \to \vec{r}_t) = \min[1, e^{-\frac{U(r_t^N) - U(r_n^N)}{k_B T}}]$$

Найпростіша реалізація методу Монте-Карло

```
SUBROUTINE MCMOVE
IP=INT(RANF()*NPART)+1
CALL ENERGY(X(IP),U)
XN=X(IP)+(RANF()-0.5)*DELX
CALL ENERGY(XN,UN)
IF(RANF().LT.EXP(-(UN-U)/(BK*T)) X(IP)=XN
RETURN
END
```

Найпростіша реалізація методу Монте-Карло

Для трансляційних рухів

$$x_i' = x_i + \Delta(Ranf() - 0.5)$$

$$y_i' = y_i + \Delta(Ranf() - 0.5)$$

$$z_i' = z_i + \Delta(Ranf() - 0.5)$$

Для орієнтаційних рухів – випадкові ротації кватерніонів

$$Q = (q_0, q_1, q_2, q_3) \qquad q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 = 1$$

$$q_0 = \cos(\frac{\theta}{2})\cos(\frac{\phi+\varphi}{2}) \qquad q_1 = \sin(\frac{\theta}{2})\cos(\frac{\phi-\varphi}{2})$$

$$q_2 = \sin(\frac{\theta}{2})\sin(\frac{\phi-\varphi}{2}) \qquad q_3 = \cos(\frac{\theta}{2})\sin(\frac{\phi+\varphi}{2})$$

Застосування методу Монте-Карло для обчислень інтегралів

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a) < f >$$

-визначення інтегралу через середнє значення

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x_i)$$

-визначення інтегралу через генерування випадкових координат x_i

Застосування методу Монте-Карло для обчислень багатократних інтегралів

Нехай маса двомірного тіла визначається розподілом

$$M = \iint \rho(x, y)dxdy$$

При обертанні навколо осі z його момент інерції рівен

$$I_z = \iint (x^2 + y^2)\rho(x, y)dxdy$$

$$I_{z,n} = (x_2 - x_1)(y_2 - y_1)\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i^2 + y_i^2)\rho(x_i, y_i)$$

- МК вираз для генерування n випадкових координат $(x_i y_i)$ в проміжках $x_1 \le x \le x_2$

$$y_1 \le y \le y_2$$