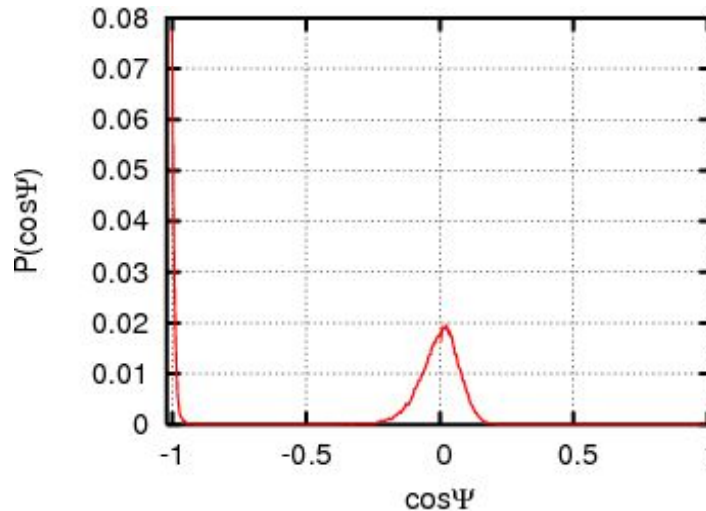


Розрахунок функції кутового розподілу

$$P(\cos \theta)$$



1. Робиться цикл по N частинках : $I=1,N$
2. Розраховуються відстані R_{ij} між I -ю та всіма іншими частинками, що попадають $R_{ij} < R_{\max}$
3. Враховуються періодичні граничні умови
4. Розраховуються кути між різними тріадами атомів
5. При попаданні кута θ_{ijk} у проміжок між θ і $\theta + \Delta\theta$ 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 виборки по 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 $w(x_i \rightarrow x_j)$ 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”:

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

Найпростіший варіант :

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

Даний перехід можна описати наступними кроками:

1. Вибираємо пробну координату $x_t = x_n + \delta_n$, де $\delta_n \in$ 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 $r \leq w$, 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 $r_t = r_n + \Delta$ та розрахувати нову енергію $U(r_t^N)$
3. Прийняти зміщення r_n до r_t з ймовірністю

$$w(r_n \rightarrow r_t) = \min\left[1, e^{-\frac{U(r_t^N) - U(r_n^N)}{k_B T}}\right]$$

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

$$Q = (q_0, q_1, q_2, q_3)$$

$$q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 = 1$$

$$q_0 = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\phi + \varphi}{2}\right)$$

$$q_1 = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\phi - \varphi}{2}\right)$$

$$q_2 = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\phi - \varphi}{2}\right)$$

$$q_3 = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \sin\left(\frac{\phi + \varphi}{2}\right)$$

Застосування методу Монте-Карло для обчислень інтегралів

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a) \langle f \rangle$$

-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 двовірного тіла
визначається розподілом

$$M = \iint \rho(x, y) dx dy$$

При обертанні навколо осі z
його момент інерції рівен

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

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

- МК вираз для генерування n випадкових
координат (x_i, y_i) в проміжках

$$x_1 \leq x \leq x_2$$
$$y_1 \leq y \leq y_2$$