بسم الله الرحمن الرحیم

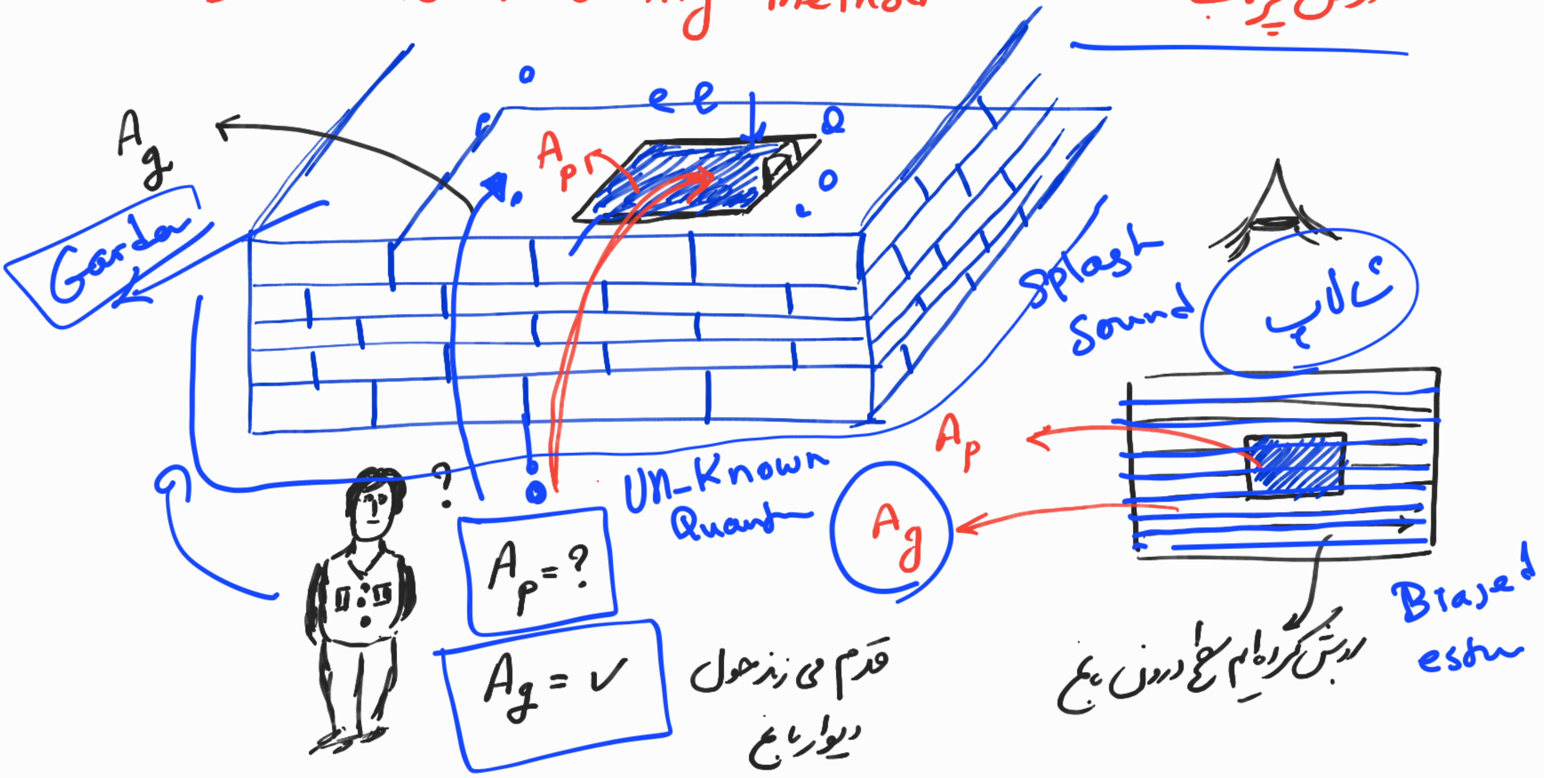
Monte-Carlo Simulation

Numerical Integration : Stochastic approach

$$A = \int_a^b f(x)\,dx$$ Deterministic app. / stoch. ap.

رهیافت تصادفی یعنی غیر تعیینی

① Stone throwing method روش پرتاب سنگ



پرتاب سنگ به داخل باغ از بیرون از باغ. هر سنگی که داخل استخر آب دار بیفتد صدای شالاپ.

① کاملاً به طور تصادفی در همه زاویه ها و جهت ها و سرعت ها پرتاب سنگ داشته باشد (dir)

② حول باغ قدم نزند و سنگ پرتاب کند.

× استراتژی پرتاب سنگ

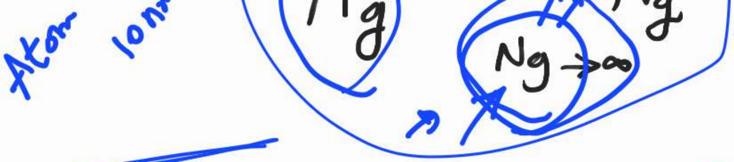
Convergence Test

$A_p = ✓$, $\sigma_{A_p} : ✓$, $A_p = ✓$, $A_p \pm ✓$

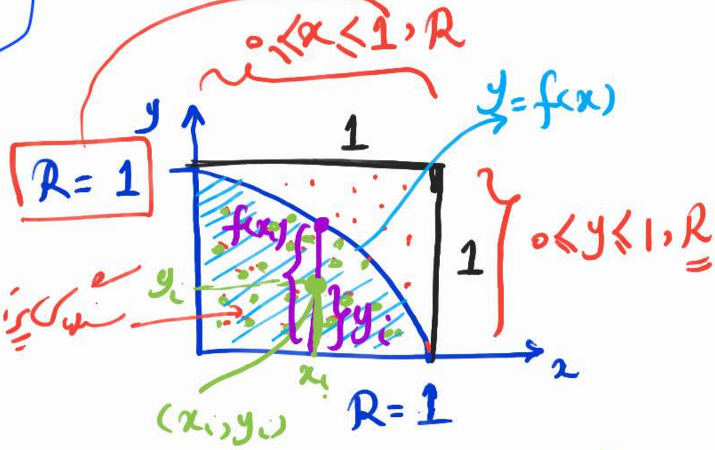
4000 km ± 100 km — Tehran — Okara

1 mm ± 0.1 mm

$$\frac{A_p}{A_g} = \lim \frac{N_p}{N_g} \rightarrow \boxed{A_p = A_g \times \frac{N_p}{N_g}}$$



→ Example $\pi = ?$



$$A_\circ = \frac{\pi R^2}{4}$$

$$A_\square = 1 \times 1$$

$$\Rightarrow \quad \frac{A_\circ}{A_\square} = \frac{\pi}{4} \rightarrow \boxed{\pi = 4\,\frac{A_\circ}{A_\square}}$$

$$\boxed{\pi = 4\,\frac{\tilde{A}_\circ}{A_\square} = 4\,\frac{\tilde{N}_\circ}{N_\square}} = 4\left(\frac{N_\circ}{N_\square}\right) \rightarrow ?$$

زیاد باشد

$N_\square$

- (x_i, y_i) are Random Selected from $\left\{\begin{array}{l} 0 \leqslant x \leqslant R \\ 0 \leqslant y \leqslant R \end{array}\right.$ ($R = 1$)

  با انتخاب دو عدد تصادفی موقعیت فرود سنگ را تعیین می‌کنیم.

- Check the following Condition

  $y_i \leqslant f(x_i) \longrightarrow \boxed{N_\circ = N_\circ + 1}$

  صدای شالاپ splashing sound

- $$\frac{A_\circ}{A_\square} = \frac{N_\circ}{N_\square} \Rightarrow \boxed{\pi = \frac{4}{R^2}\,\frac{N_\circ}{N_\square}\,A_\square}$$

Algorithm $\boxed{N_{total} = \checkmark}$, $N_p = 0$

عدد تصادفی با تابع توزیع یکنواخت $r \in (0,1)$

loop N_{total}

loop $\boxed{i = 1, N_{total}}$

$$\left\{\begin{array}{l} x = a + r(b-a) \\ y = a + r(b-a) \end{array}\right.$$

انتخاب ۲ عدد تصادفی

$(x_i, y_i) \in [a, b] \Rightarrow$ (0, 1)

Select (x_i, y_i)

$$f(x) \qquad \sqrt{1-x^2}$$

شرط

if $y_i \leq \sqrt{R^2 - x^2}$

$$\boxed{N_p = N_p + 1}$$

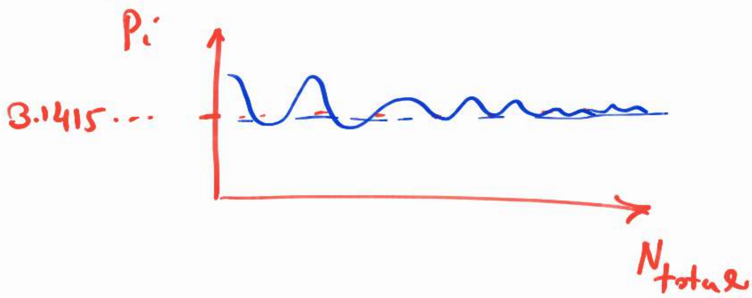
End if

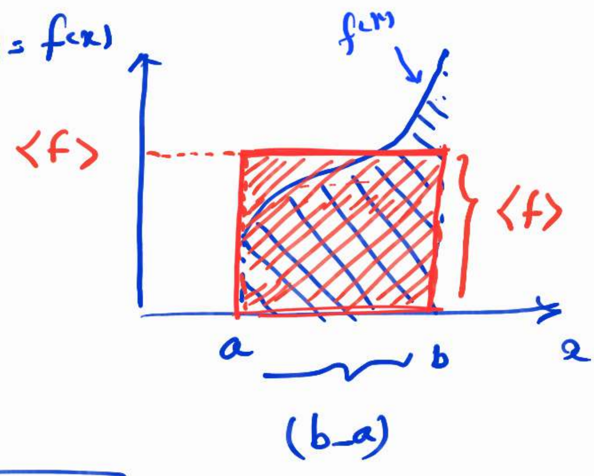
End loop

$$Pi = \frac{4}{R^2} \frac{N_p}{N_{total}} A_{\square}$$

Write N_{total} , Pi

End loop





② Mean Value Theorem

$$A = \int_a^b f(x)\,dx$$

$$\boxed{\langle f \rangle = \frac{1}{b-a} \int_a^b f(x)\,dx}$$

$$\underbrace{\langle f \rangle (b-a)}_{\text{بخش قرمز رنگ}} = \underbrace{\int_a^b f(x)\,dx}_{\text{آبی}} = A$$

$$A = \langle f \rangle (b-a)$$

Valu

Mean

$$A = \int_a^b f(x)\,dx = ?$$

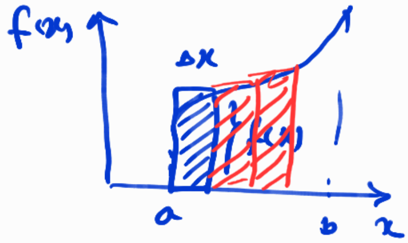
Desired Quantity

Mean Value theorem

$$\underline{A} = \int_a^b f(x)\,dx = (b-a)\langle f\rangle = (b-a)\,\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$

$$A = \frac{(b-a)}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i) = \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\,\Delta x$$

$$\Delta x = \frac{b-a}{N}$$



در روش اول انتگرال‌گیری محاسبه سطح زیر منحنی ما به صورت کاملاً معین x را انتخاب می‌کردیم

$$x \in [a,b], \quad \Delta x = \frac{b-a}{N} \longrightarrow A = \sum f(x_i)\,\Delta x$$

در اینجا می‌خواهیم x را به صورت تصادفی در بازه $\boxed{x \in [a,b]}$ انتخاب کنیم.

$$A \simeq \frac{b-a}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$

$$x_i \longrightarrow \boxed{a + r(b-a)}$$

$$r \in [0,1)$$

کاملاً تصادفی در بازه $x \in [a,b]$ انتخاب می‌کنیم

$\Rightarrow$ تابع توزیع یکنواخت است $\leftarrow$ $\boxed{p(x) = cts}$ White noise

PDF of x

General Case

$$\langle\ \rangle \quad A = \int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b \frac{f(x)\,p(x)}{p(x)}\,dx$$

$$\boxed{\langle f(x)\rangle \neq A}$$

$$\langle f(q,p)\rangle = \int \frac{d^{3N}\ldots}{h^3}\, f(q,p)\,\rho(\ldots)$$

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)}\, p(x)\, dx = \left\langle \frac{f(x)}{p(x)} \right\rangle = A$$

$P(x)$ اصلاً مشخص

$$\boxed{A = \left\langle \frac{f(x)}{p(x)} \right\rangle_x}$$

روی x هایی که دارای تابع توزیع $p(x)$ هستند انجام می‌شود.

درحالت قبلی که x ها به صورت تصادفی و با احتمال یکسان در بازه $[a,b]$ انتخاب می‌شود

در واقع $p(x) = ?$

$$\left.\begin{aligned} &\int_a^b p(x)\,dx = 1 \\ &p(x) = cts \end{aligned}\right\}$$

$$\boxed{p(x) = cts}$$

یکنواخت

$$1 = \int_a^b cts\, dx$$

$$1 = (b-a)\, cts$$

$$\boxed{\frac{1}{b-a} = cts = p(x)}$$

$$\boxed{p(x) = \frac{1}{b-a}}$$

پس

$$A = \left\langle \frac{f(x)}{p(x)} \right\rangle_x = \left\langle \frac{f(x)}{\frac{1}{b-a}} \right\rangle_x$$

$N \to \infty$

$$= (b-a)\langle f(x)\rangle_x$$

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

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

$$A = \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\,\Delta x$$

فقط x ها را پشت سر هم انتخاب نمی‌کنیم و از مولد اعداد تصادفی برای انتخاب x استفاده می‌کنیم.

پس هر چقدر که $N \to \infty$ و $\Delta x \to 0$ ، A دقیق‌تر خواهد بود

یادآوری می‌کنیم: در روش پرتاب سنگ در عدد تصادفی دو تا شرط وجود داشت

الان فقط یک عدد تصادفی تولید می‌شود دیگر شرطی وجود ندارد که بررسی شود

Random Number

③ **Importance Sampling** $\quad A=\int_a^b dx\, f(x)$

منطق این روش این است که x های انتخاب شونده در محاسبه انتگرال سهم قابل توجه داشته باشند

$$A=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{f(x)}{p(x)}\,p(x)\,dx$$

هدف

$$p(x)=\begin{cases} p(x) & x\in[a,b] \\ 0 & \text{otherwise}\end{cases}$$

$$A=\int_a^b f(x)\,dx = ?$$

$$A=\int_a^b f(x)\frac{p(x)}{p(x)}\,dx = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)}\,p(x)\,dx$$

$$U=\langle H\rangle = \int \frac{d^{3N}q\,d^{3N}p}{h^{3N}}\,H(q,p)\,\rho(q,p)$$

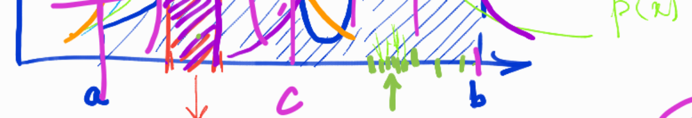
$$=\int dq\, H(q)\,\rho(q) \qquad \langle\ \rangle_q$$

$$A = \left\langle \frac{f(x)}{p(x)} \right\rangle_x$$

p(x) تابع توزیع

$$\text{Gaussian} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{f(x_i)}{p(x_i)} \quad *$$

x_i ها دارای تابع توزیع p(x) هستند



بزرگ باشد Δx

انتخاب x ها در این نواحی محتمل تر باشد

پس با انتخاب p(x) ای که تا حد ممکن شبیه باشند به تابع مورد تعریف f(x) و انتخاب x ها با این تابع توزیع به طور

کنترل شده نواحی که نیاز داریم Δx کوچک باشد یعنی معادل آن انتخاب بیشتر x در آن ناحیه یعنی تعداد x های انتخاب شده در آن ناحیه بیشتر است یعنی محتمل تر است و در نتیجه نواحی که تابع کند تغییرات و مقدارش هم کم است که در مقایسه انتگرال نقش غالبی ندارد انتخاب x کمتر است یعنی Δx بزرگ تر است و نهایتا با تعداد x کمتر به جواب با دقت بیشتری می رسیم.

اما همیشه تولید رشته از x با تابع توزیع p(x) که خیلی شبیه به f(x) باشد ساده نیست و خود این بخش می تواند زمانبر شود

Von_ Neumann Method

یادآوری

p(x) الگوریتم مشخص به صورت تحلیلی داشته باشد انتخاب می کنیم

for a given p(x)

$$\int^{x} p(x')\,dx' = \int_0^{R} dr \quad \text{(Random)}$$

$$\int^{x} p(x')\,dx' = R \longrightarrow \boxed{x(R) = \checkmark}$$

همیشه امکان پذیر نیست { انتگرال ممکن است تحلیلی به دست نیاید
معکوس کردن هم ممکن است انجام نشود

تاملی

MCMC

Importance

HMC

$f(x)$

$\mathcal{L} = e^{-\frac{\chi^2(\theta)}{2}}$

Micro Canonic
Canonic
Grand Can...

Expectation value

احتمال پیدا شدن x

$$\langle f(x) \rangle = \int dx \, f(x) \, p(x)$$

Recall
$$\langle f(\vec{q},\vec{p}) \rangle = \int \frac{d^{3N}q \, d^{3N}p}{h^{3N}} f(\vec{q},\vec{p}) \, \rho(\vec{q},\vec{p})$$

احتمال حضور سیستم در فضای فاز در همسایگی (q,p)

$$\rho(\vec{q},\vec{p}) = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(\vec{q},\vec{p})}}{Z(T,V,N)}$$

---

first approach

وزن

$$\langle f(x) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i) \, p(x_i)$$

تعریف گسسته است: در این x ها به صورت تصادفی انتخاب شده‌اند با توزیع یکنواخت

و بعد وزن دهی می‌شوند. آن دسته از x هایی که هم وزن آنها کم است و هم مقدار

تابع به ازای آنها کم است که در نتیجه نقش غالبی در $\langle f \rangle$ ندارند انتخاب می‌شوند

زمان محاسبات بالا و بازدهی دقت کم است.

مثال: متوسط قد دانشجویان را در یک کلاس حساب کنید.

① $$\langle h \rangle = \sum_{i=1}^{N_{class}} h_i \, p(h_i) = 0 \times p(0) + 1 \times p(1) + \cdots$$

فراوانی آن قد شخص

$$\cdots 150 \times p(150) + 160 \, p(160) + \cdots$$

② $$\langle h \rangle = \frac{1}{N_{Student}} \sum_{i=1}^{N_{Stu}} h_i = \frac{1}{N_{Stu}} \Big[\underbrace{150}_{①} + \underbrace{155}_{②} + 150 + \underbrace{160}_{③} + \underbrace{170}_{④} + 160$$

$+ 160 + 160 + 180$
$+ 190 + 200 \,]$

$$= \sum_{j=1}^{N_{class}} h_j \, p(j)$$

فراوانی

$$= 150 \times 2 + 155 \times 1 + 160 \times 4 + 170 \times 1 + 180 \times 1 + 190 \times 1 + 200 \times 1$$

s_x

درجات تحلیل ترتیب مشخص

$$= 50 \times 0 + 55 \times 0 + \dots$$

$\dots$

* Second approach

$$\langle f(x) \rangle = \frac{1}{N} \sum_i f(x_i)$$

$\boxed{s_x}$ بر اساس تابع توزیع $\underline{p(x)}$ انتخاب می‌شوند

تولیدِ s_x با تابع توزیع دلخواه بحث کرده‌ایم. در بدترین حالت ممکن به صورت Passive

آرایه‌ای از s_x با تابع توزیع دلخواه می‌سازیم و در سایر برنامه‌ها فقط از آن‌ها استفاده می‌کنیم.

1D $\quad e^{-\frac{1}{2}\frac{m v_x^2}{KT}} \qquad \sigma^2 = \frac{KT}{m}$

$$p(v_x) = \frac{\ldots}{\sqrt{2\pi\sigma_v^2}} \qquad \sigma_v$$

$$\langle v \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dv \; v \, p(v)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} v_i$$

Y

اعداد تصادفی هستند v_i
که از این توزیع

$$\langle v^2 \rangle = \int dv \, v^2 \, p(v)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} v_i^2$$

Call Random R_1, R_2

$$v = \left[\sqrt{-2\ln(1-R_1)} \; \cos(2\pi R_2)\right] \left(\frac{K_B T}{m}\right)^{1/2}$$

$$P(v) \propto e^{-\frac{v^2}{2\frac{K_B T}{m}}}$$

$$\sigma^2$$

$$\langle H \rangle = \left\langle E = \frac{1}{2} m v^2 \right\rangle$$

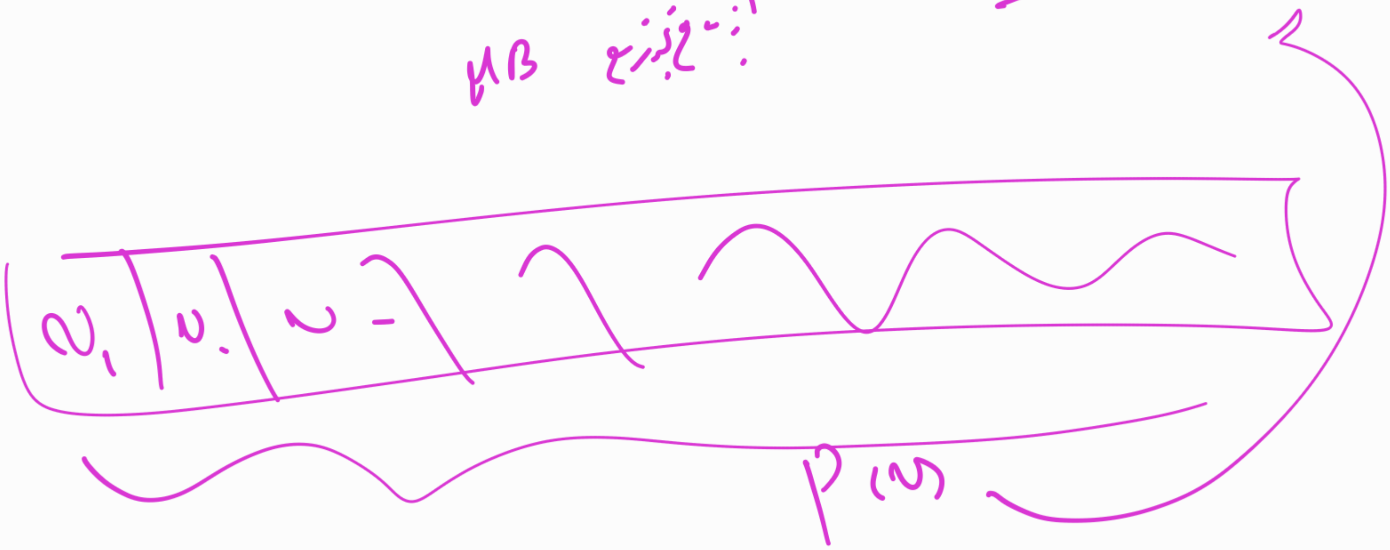
$$\mathrm{Imp} = \int dv \; H(v) \, p(v)$$

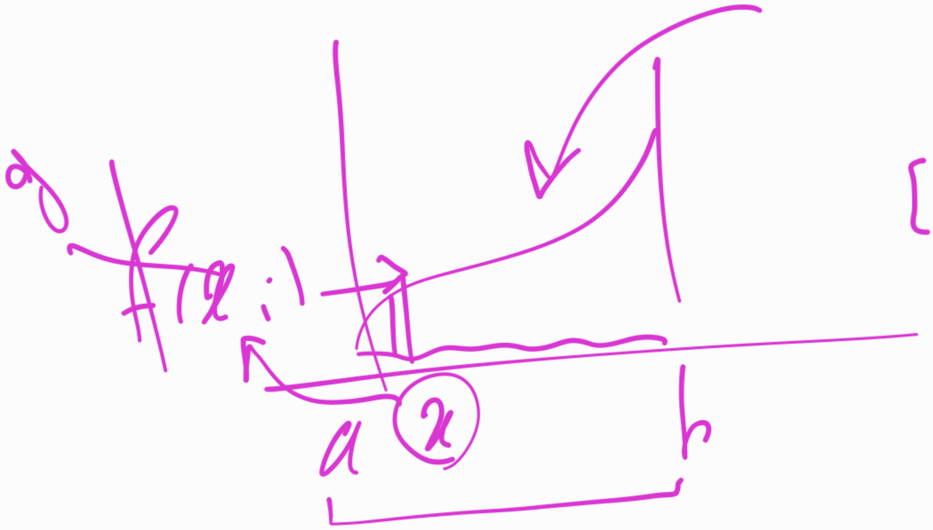
$$= \sum^{N} H(v_i)$$

$= \frac{1}{N} \sum_{i=1}$

Box-Muller

MB



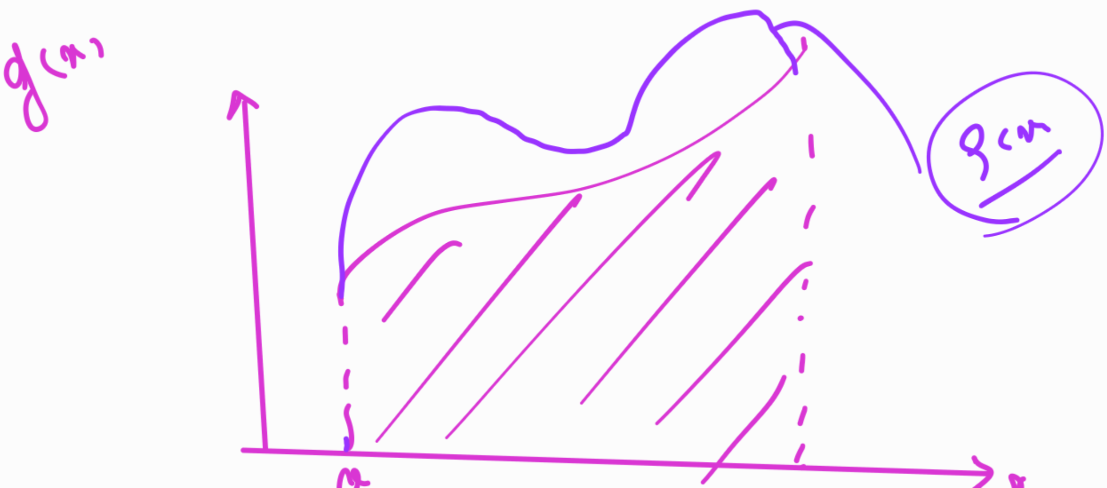


$[\ \alpha \quad \beta \quad c\ ]$

$$\langle f \rangle = \int f(x)\,p(x)\,dx$$

$$\int_a^b g(x)\,dx$$

$g = f\,p$



$$\langle f \rangle = A = \int g(x)\,dx$$

دلخواه $\rho(x)$

$$A = \int \frac{g(x)}{\rho(x)}\,\rho(x)\,dx = \boxed{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{g(x_i)}{\rho(x_i)}}$$

$$= \left\langle \frac{g(x)}{\rho(x)} \right\rangle_x$$

$x \in [a, b]$

$\rho(x)$

$$\int_0^R dR = \int_a^b \rho(x)\,dx$$

$$R = \int_a^x \rho(x)\,dx$$

۱ بتوانیم حساب کنیم تحلیلی

۲

$$x = f(R)$$

$$\langle f \rangle = \int dx\, f(x)\, p(x)$$

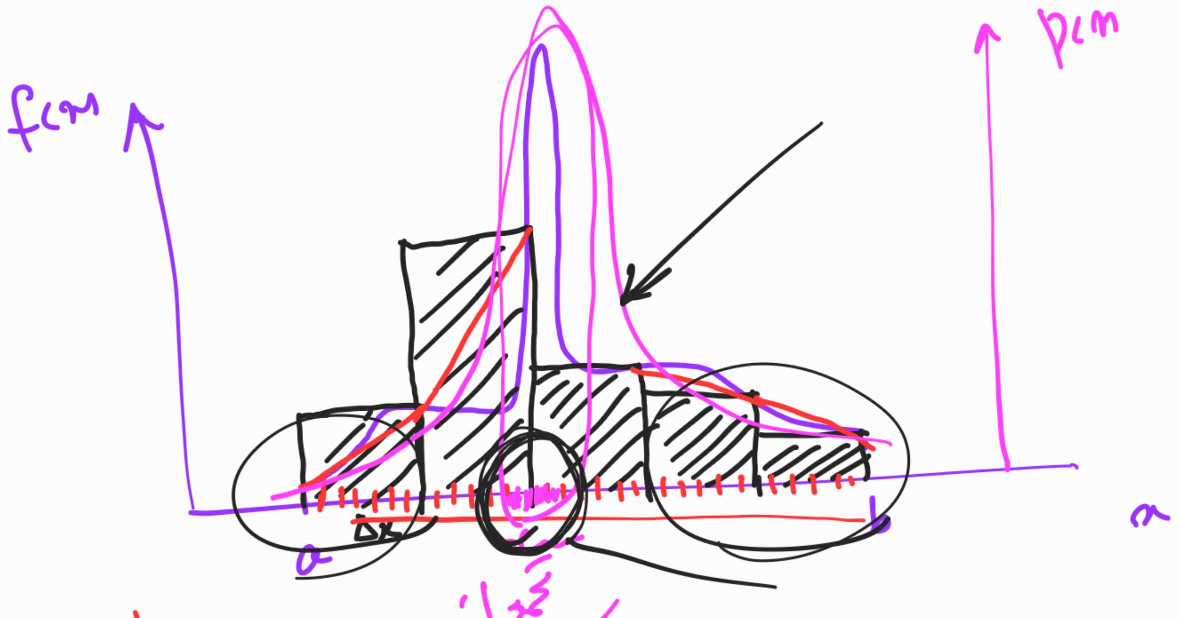
N

$$= \frac{1}{N} \sum_{i=1} f(x_i)$$

x_i به صورت تصادفی با تابع توزیع $p(x)$ هستند

$$x = f(R)$$

$$R = \int_a^x dx' \, p(x') \quad ①$$



$\int_a^b$ جمع انتخاب x بیشتر

$$\Delta x = \frac{b-a}{N}$$

احتمال پیدا شدن x در این ناحیه بیشتر است

$\delta_D(\lambda)$

$$A = \int_{-\infty}^{b \to +\infty} f(x)\, dx = \int^{b} dx \int d\lambda\, e^{i\lambda x} \tilde{f}(\lambda)$$

$a \to -\infty$

$$\int f(x)\,dx = \tilde{f}(0)$$

$$\int dx\, e^{i\lambda x} f(x) = \tilde{f}(\lambda) \longrightarrow$$

$$\bar{f}(x) = \int dx'\, \overbrace{W(x-x')}^{\text{Kernel}}\, f(x')$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \int d\lambda\, e^{i\lambda(x-x')}\, \tilde{W}(\lambda) \int d\lambda'\, e^{i\lambda' x'}\, \tilde{f}(\lambda')$$

$$= \int d\lambda\, d\lambda'\, \tilde{W}(\lambda)\, \bar{f}(\lambda')\, e^{i\lambda x} \underbrace{\int dx'\, e^{ix'(\lambda'-\lambda)}}_{\delta_D(\lambda-\lambda')}$$

$$\bar{f}(x) = \int d\lambda\, \underbrace{\tilde{W}(\lambda)\, \tilde{f}(\lambda)}\, e^{i\lambda x}$$

$$\boxed{\bar{f}(x) = \int d\lambda\, F(\lambda)\, e^{i\lambda x}}$$

ضرب دوتا حاصل می گردد

$$\left\{ F(\lambda) = \tilde{W}(\lambda)\, \tilde{f}(\lambda) \right.$$

$$f(x) = W \otimes f = \int dx\, W(x-x') f(x')$$

$$A = \int dx\, f(x) \neq \langle f(x) \rangle = \qquad p(x)$$

$$= \int dx\, f(x) \frac{p(x)}{p(x)} = \int dx\, \frac{f(x)}{p(x)}\, p(x)$$

$$A = \left\langle \frac{f(x)}{p(x)} \right\rangle_x$$

$$\boxed{p(x) = \frac{1}{b-a}}$$

$$= \sum f(x_i) \Delta x \qquad \frac{b-a}{N}$$

$$= \frac{1}{N} \sum \frac{f(x_i)}{p(x_i)}$$

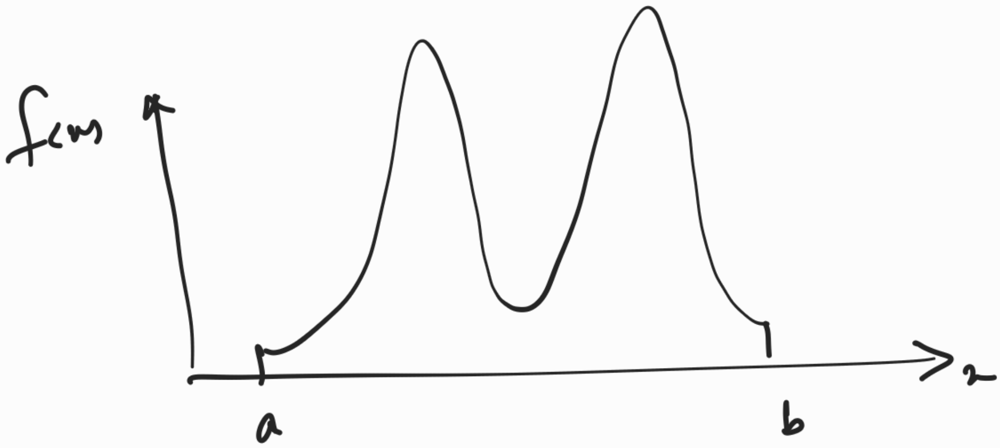
$$= \frac{1}{N p} \sum_i^N f(x_i)$$

$$= \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = \sum_{i=1}^N f(x_i) \Delta x \quad ✓$$

$$\langle x^n \rangle = \int dx\, x^n\, p(x)$$

$$\left\langle \frac{f}{p}^{1} \right\rangle = \int df\, f\, p(f) = \int dx\, f\, p(x)$$

$$=$$



$$\boxed{A} = \int_a^b dx\, f(x) \longrightarrow A = \left\langle \frac{f}{p} \right\rangle = \int \frac{f}{p}\, p\, dx$$

$$A \cancel{\neq} \left\langle \left(\frac{f}{p}\right)^2 \right\rangle = \int \left(\frac{f}{p}\right)^2 p(x)\, dx$$

$$\int dx_1\, dx_2\, dx_3\, dx_4\, f(x_1, x_2, x_4)\, P(x_1, x_2, \ldots)$$

$$X = (x_1, x_2, x_3, x_4)$$

$$P(X) = \frac{1}{(2\pi)^2 \sqrt{\mathrm{Det\ Cov}}}\, e^{-\frac{\boxed{X^T \cdot C^{-1} \cdot X}}{2}}$$

$$(x_1, x_2, x_3, x_4) \begin{pmatrix} \langle x_1 x_1 \rangle & \langle x_1 x_2 \rangle & \langle x_1 x_3 \rangle & \langle x_1 x_4 \rangle \\ \langle x_2 x_1 \rangle & \langle x_2 x_2 \rangle & \langle x_2 x_3 \rangle & \langle x_2 x_1 \rangle \\ \langle x_3 x_1 \rangle & \langle x_3 x_2 \rangle & \langle x_3 x_3 \rangle & \langle x_3 x_4 \rangle \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}$$

σ_1^2 F σ_2^2 σ_3^2 2

$\langle x_4 x_4\rangle \langle x_2 x_2\rangle \langle x_4 x_3\rangle \langle x_4 x_4\rangle$

$$-x_1^2 F_{11} - x_1 x_2 F \ldots x_1 x_3 F_{13} -$$

$$P(X) = e$$

$$X \longrightarrow X' = AX \qquad P(X') = P(X'_1)P(X'_2) -$$

$$x_3, x_4 \longrightarrow x'_3, x'_4$$

$$\int_a^b dx\, f(x) = \quad \text{تقریبی} = 10.95$$

MC → مختلفی بدهد

↓

آزمون همزمان

10.52

10.40

11.02

8.82

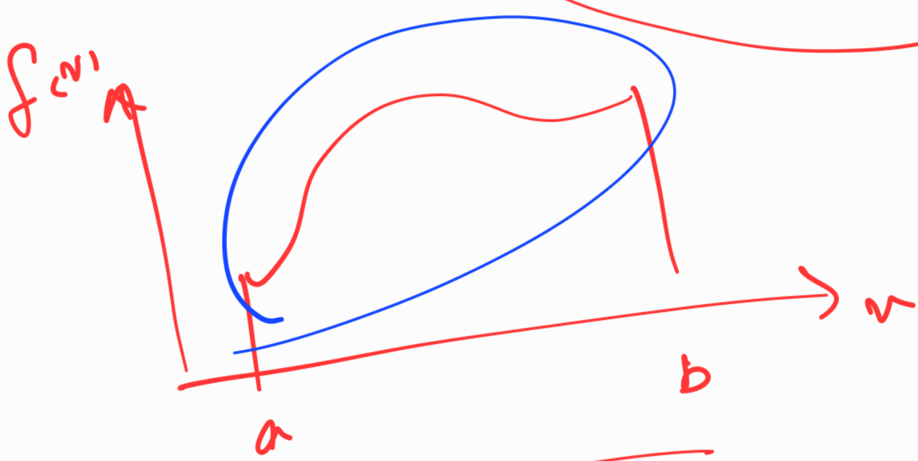
± 0.5

12.26

± 0.01

① $A = \int_a^b dx\, f(x) \longrightarrow \int_a^b dx\, \frac{f(x)}{\boxed{p(x)}}\, p(x) = \left\langle \frac{f(x)}{p(x)} \right\rangle$

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



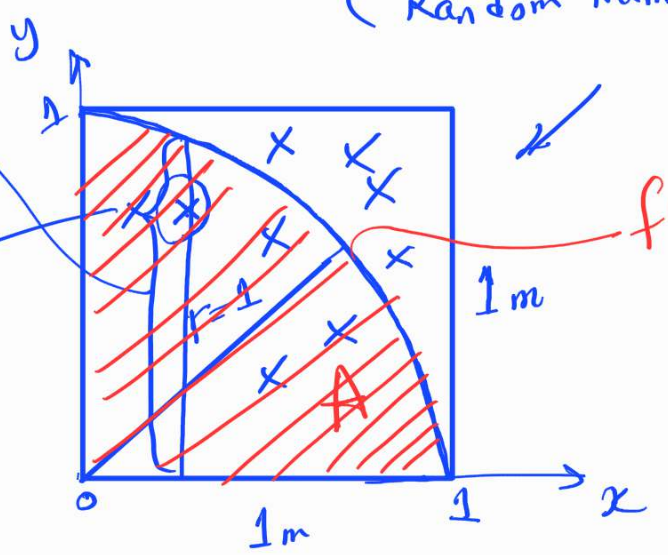
② $\langle f(x) \rangle = \int dx\, \frac{f(x)}{n}\, p(x)$

$$= \frac{1}{N} \sum \frac{f(x_i)}{1}$$

$\pi = ?$ → Monte Carlo approach

(Random Number Generator)

$\boxed{y = \sqrt{1 - x^2}}$



(x_i, y_i)

x_i → Randomly Generated

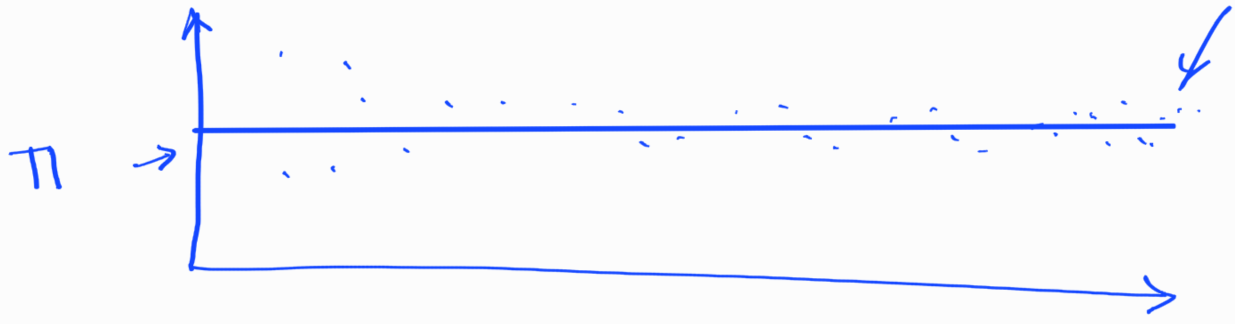
y_i → Randomly Gen

$A_g = 1 \times 1 = 1 = ✓$

$A_p = \frac{\pi r^2}{4}$ ← Analytical approach (Prior Informen)

$$\frac{A_p}{A_g} = \frac{\frac{\pi}{4}}{1} = \frac{\pi}{4} \rightarrow \begin{cases} \pi = 4 \frac{A_p}{A_g} \\ \frac{A_p}{A_g} = \frac{N_p}{N_g} \end{cases}$$

$$\boxed{\pi = 4 \frac{N_p}{N_g}}$$



① We should generate following N_g values Randomly.

$x = [0, 1]$ Randomly ←

$y = [0, 1]$ Random ←

2_Random Generator

③ Check the condition to fall inside the pool →

$$\boxed{y_i \leq \sqrt{1-x_i}}$$ ←

time consuming

$N_p = N_p + 1$

Mean Value

$\sqrt{1-x^2}$

$$A = \int_0^1 dx\, f(x)$$

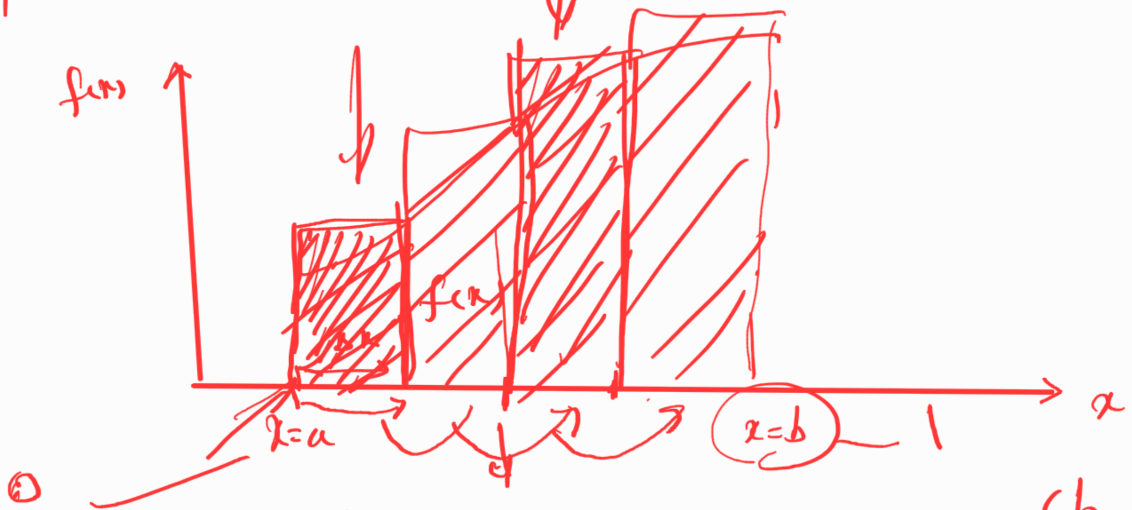
Stochastic

$\frac{1}{N}$

$A = (b-a)\frac{1}{N}\sum_{i=1} f(x_i)$

$x_i \in [0,1]$ Randomly.

Monte Carlo



$$A = \int_a^b dx\, f(x) = \sum_i f(x_i)\,\Delta x = (b-a)\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$

$$\Delta x = \frac{b-a}{N}$$

Deterministic

$\rightarrow \{0.1,\ 0.5,\ 0.8,\ 0.4 \ldots\}$

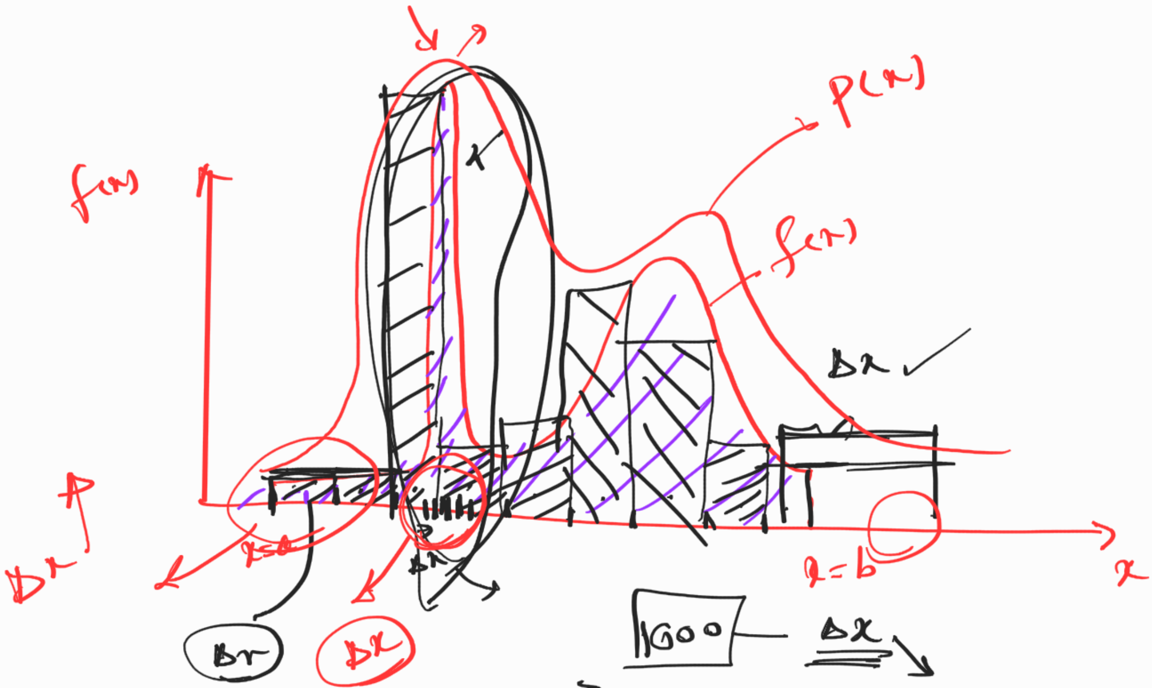
First $A = (b-a)\big(f(x$

$= \frac{(b-a)}{10}\big(f(x=0.1) + f(x=0.5)$

Second app $A = \frac{(b-a)}{10}\big[f(x=0.1$

$f(x=0.2) \ldots \ldots f(x=1.)]$

Regular order



$$A \approx \frac{(b-a)}{9} \sum_{i=1}^{9} f(x_i)$$

$\boxed{\text{an Estimate}}$

Importance Sampling.

$$A = \int_a^b dx\, f(x) = \int_a^b dx\, f(x) \frac{p(x)}{p(x)}$$

PDF of X-sem

$$= \int_a^b dx\, \frac{f(x)}{p(x)}\, p(x)$$

$$A = \left\langle \frac{f(x)}{p(x)} \right\rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_i)}{p(x_i)}$$

x_i should be generate according

to p(x) Distribution

Box-Muller

Passion

p(x)

$$A = \int_a^b f(x)\, dx$$