

---

---

# Методы Монте Карло продолжение



# 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;
```

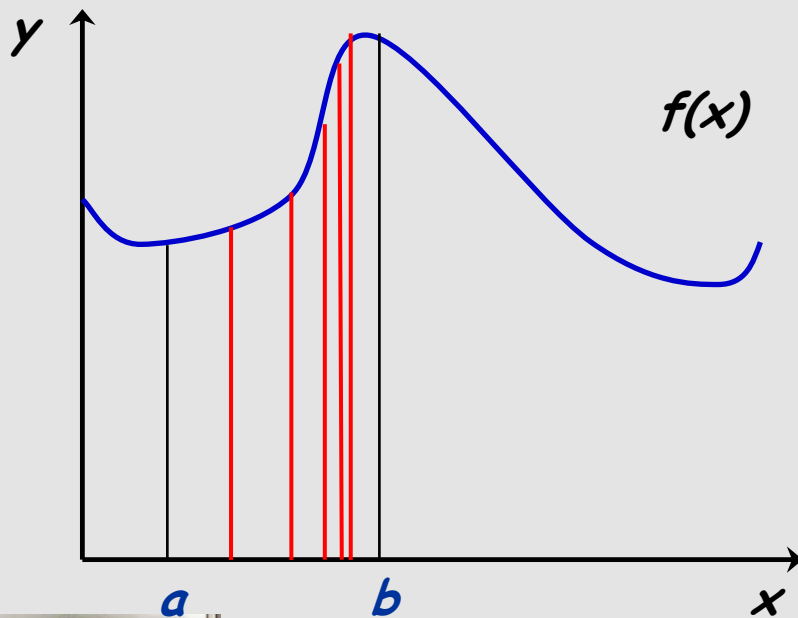
```
do sample = 1 to n
begin
  step = 0;
  repeat
    generate-valid-list
    if list = empty then
      terminate = true
    else
      generate-step-from-the-list;
      step = step + 1
  until (terminate or step = N)
  accumulate-results; end;
```



# Выборка по значимости

## Еще раз об интегрировании

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



- Тогда интеграл может быть записан как

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

где  $y_i$  генерируется согласно функции  $p(x_i)$



# Выборка по значимости

## Алгоритм Метрополиса

Получим распределение  $p(x)$  "случайным блужданием" точек  $x_i$

```
generate point  $x$ 
for  $i = 1$  to  $N$ 
  generate  $step = rand( )$ 
   $x_1 = x + step$ ;
   $w = p(x_1)/p(x)$ ;
  if  $w \geq 1$  then
     $x = x_1$ 
  else  $r = rand( )$ ;
    if  $r \leq w$  then
       $x = x_1$ 
end
```

- Функция Метрополиса

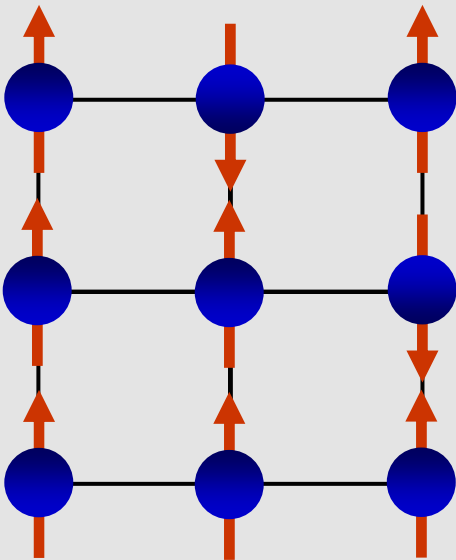
$$w = \min(1, p(x_{n+1}) / p(x_n))$$

- $N$  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

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

- $\Delta E$  складывается из энергии Зеемана во внешнем поле и обменной энергии.
- Процессы с уменьшением энергии принимаются все.
- Процессы с увеличением энергии принимаются согласно распределению Больцмана.



# Транспорт частиц

## Задача

Решить уравнение Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial V}{\partial \mathbf{x}} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_c$$

Это интегро-дифференциальное уравнение.

**Существует множество приближенных решений для частных случаев!**

А что если добавить еще уравнение Пуассона для заряда частиц?

$$\nabla^2 V = -\frac{e^2}{\epsilon_s} (n(\mathbf{r}) - N_{\text{eq}})$$

Сделать среду неоднородной, ограниченных размеров, ...?



# Транспорт частиц

## Модель

- Генерируется  $N$  частиц (**representation particles**). Обычно, это не реальные частицы. Каждая из representation particles может представлять множество реальных частиц. Начальные условия координаты частиц, их скорости, часто не влияют на конечный результат. Задаются граничные условия, которые определяют возникновение, исчезновение частиц в системе.
- Координаты, скорости, ... каждой из частиц пересчитываются через интервал времени  $dt$  (**sampling time**). Перемещения частиц описывается методом молекулярной динамики. *На самом деле это немного сложнее, если ввести рассеяние частиц.* Появляется еще один интервал времени  $\delta t$  (**scattering time**).
- Рассеяния моделируются используя метод Монте Карло.

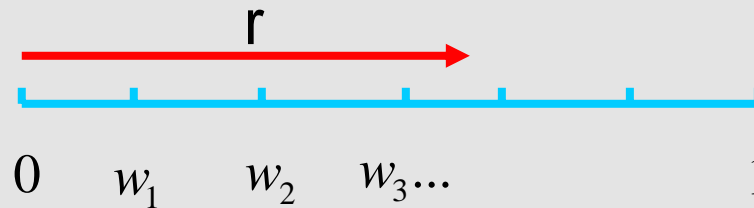




# Транспорт частиц

## Рассеяние

- Пусть есть несколько механизмов рассеяния, которые определяются вероятностями  $w_1(E)$ ,  $w_2(E)$ ,  $w_3(E)$ , .... Введем  $w_{\text{self}}(E) = 1 - w_1 - w_2 - \dots$
- Строим шкалу

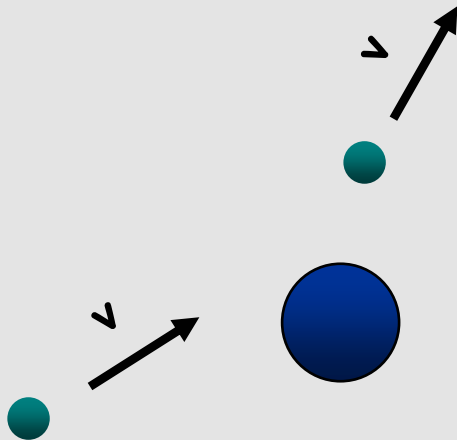


- Генерируем случайное число  $r$  которое определяет механизм рассеяния включая и саморассеяние.
- Когда механизм выбран переходим к генерации новых параметров частицы -  $v_x, v_y, v_z \dots$
- **Примечание:** хорошо бы иметь таблицу интегральных вероятностей рассеяния в зависимости от энергии.



# Транспорт частиц

## Выбор конечного состояния



- Проверяем изменяется ли энергия частицы при рассеянии. Например, рассеяние электронов на примесях не изменяет энергии, а рассеяние на фононах изменяет на  $\hbar\omega$ .
- Генерируем новую энергию частицы соответствующую данному типу рассеяния.
- Генерируем новое направление движения согласно формуле рассеяния.

Пример: выбор произвольного угла рассеяния

$$\frac{dS}{4\pi} = \sin\theta d\theta d\psi = p(\theta, \psi) d\theta d\psi$$

$$p(\theta) = \int_0^{2\pi} p(\theta, \psi) d\psi = \frac{\sin\theta}{2}$$

$$p(\psi) = \int_0^\pi p(\theta, \psi) d\theta = \frac{1}{2\pi}$$

или

$$r_1 = \int_0^\psi p(\psi') d\psi' = \frac{\psi}{2\pi}$$

$$r_2 = \int_0^\theta p(\theta') d\theta' = \frac{1 - \cos\theta}{2}$$



# Литература

---

---

- Х. Гулд, Я. Тобочник, Компьютерное моделирование в физике.
- К. Биндер, Д. В. Хеерман, Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике.
- D. W. Heerman, Computer simulations methods in theoretical physics.

Some materials have been adapted from presentations by M. A. Novotny and M. Schram



---

---

The End

