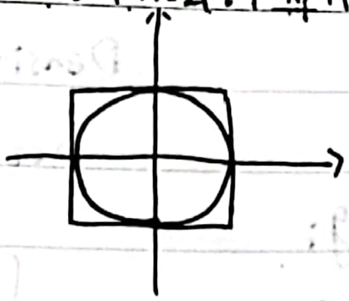
蒲丰投针.

另一个方法计算π



随机生成点:

圆 $S=\pi r^2$　　正方形: $S=4r^2$

$N_内 / N = \frac{\pi}{4}$.　　$N_内$: 位置在圆内的点的数目.

随机数做具体计算.

1) 积分
2) 求配分函数 } 高维.

为什么使用 MC?

传统方法: d维, 每个维度 L. $N_1 = \frac{L}{h}$ } N_1^d 个

$O(h^4)$

高维的计算时间非常长.

给定N $\Rightarrow h \propto N^{-1/d} \Rightarrow$ 误差 $\propto N^{-4/d}$ 误差收敛很慢.

随机数. 中心极限定理大数定理. 误差 $\propto \frac{1}{\sqrt{N}}$. 和维度无关.

$\sigma_N = \frac{\sigma_1}{\sqrt{N}}$

$\forall \varepsilon > 0 \ \lim_{N\to\infty} P(|\bar{x}_N - \mu| < \varepsilon) = 1$.

目标 1) 产生任意分布 $P(x)$
2) 高维积分 $d \geq 5$
3) Ising Model 相变

掌握关键代码.

Density of States

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{N}\sum_i \delta(\varepsilon-\varepsilon_i)$$

$$\int \rho(\varepsilon)\, d\varepsilon = 1.$$

$$\int_a^b f(x)\underbrace{p(x)}_{\text{已知概率分布}} dx = \underbrace{\frac{b-a}{N}\sum_i f_i g_i}_{\text{等间距}}.$$

$$p(x) = \frac{1}{N}\sum_i \delta(x-x_i).$$

$I = \frac{1}{N}\sum_i f(x_i)$ $x_i \sim P(x)$，非等间距.

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)} p(x)\,dx = \frac{1}{N}\sum_i \frac{f(x_i)}{p(x_i)}$$

其中 x_i 满足 $P(x)$ 的分布.

统计物理:

① $Z = \int \frac{dx\,dp}{2\pi\hbar} e^{-\beta H(\vec{x},\vec{p})}$ 高维.

②. $Z = \mathrm{Tr}(e^{-\beta H})$ 高维.

③. 显著特点: $\bar{O} = \int O(x,p)\, e^{-\beta H(x,p)}\, dx\,dp$.

Metropolis. 1953. Markovian Chain Method.

$$P(x_{t+\Delta t} \mid x_t)$$

函数: rand( ). $U(0,1)$. uniform. 均匀分布于 $[0,1]$.

e.g. $P(x) = \begin{cases} \frac{1}{2W} & |x| \le W \\ 0 & |x| > W \end{cases}$ $P(x) = -0.5 + 2W\,\mathrm{rand}()$

2) Gauss 分布 Box-Muller 变换.

$$x_{n+1} = [(a x_n + c) \bmod m]/m \to U(0,1)$$

Metropolis 方法. 暂不区分差别.

Gibbs 方法.

$\xi = \text{rand}()$

$$x_1 \to x_2 \to x_3 \to \dots \to x_n \to x_{n+1} = \begin{cases} x' & \xi < r = \dfrac{P(x')}{P(x_n)} \\ x_n & \text{保持不变. } \xi > r \end{cases}$$

$\alpha = \min\{1, r\}$.

x_{n+1}: 什么分布.

$n > N_c$ 时 x_n 的分布符合预期.

~~e.g.~~ $\cancel{I = \int_a^b f(x)\,dx}$

序列 $\Rightarrow I = \frac{1}{n} \sum_i f(x_i)$

$$\frac{dP_n}{dt} = \sum_m \left(P_m T_{m\to n} - P_n T_{n\to m} \right)$$

精细平衡: $\frac{dP_n}{dt} = 0$. 细致平衡. $P_m T_{m\to n} = P_n T_{n\to m}$

双道随机模型.

a P_a $P_a > P_b$

b P_b.

x个a. y个b.

$\frac{x}{2}$a $\frac{x}{2}$b. $\frac{y}{2}$a $\frac{y}{2}$b.

$X_n \to X_{n+1}$.

$a \to a$. $\cancel{p = \frac{P(a)}{P_f}}$