26/4 Berret II

Matematiskt problem

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \iff (b-a)\cdot(\text{medelvärdet av \underline{alla} funktionsvärden})$$

<u>Determenistisk</u> modell för detta:

$$I \approx (b-a)(\text{medelvärdet av \underline{vissa} funktionsvärden})$$

<u>Determenistisk</u> metod för detta:

T. ex trapetsformeln, Simpsons formel.

$$(b-a)\cdot(\text{medelvärdet av utvalda funk.värden})$$

<u>Stokastisk</u> metod:

$$(b-a)\cdot(\text{medelvärdet av slumpmässiga funk.värden})$$

<u>Deterministisk</u> metod:

Värdet beror entydigt på indata.
Samma indata ger samma resultat varje gång.

<u>Stokastisk</u> metod:

Resultatet beror slumpmässigt på indata.
Kan ge varierande resultat med identiska indata.

Om man vet att den slumpvariabel, som är resultatet av den stokastiska metoden, har ett väntevärde som är det samma resultatet så kan en Monte-Carlo-metod tillämpas.
Kör den stokastiska metoden många gånger och tag medelvärdet av resultaten.

Just problemet $\int_a^b f(x)dx$ ger ett fel $O(\frac{1}{\sqrt{N}})$ om en Monte Carlo-metod med N punkter används.

Trapetsformeln fel $O(h^2)$, men $h = \frac{(b-a)}{N}$ så blir felet $O(N^{-2})$.
p.s.s. felet i Simpsons formel är $O(N^{-4})$.

Monte-Carlo kan inte konkurrera för $\int_a^b f(x)dx$

Men, integration i t. ex. 10 variabler

$$\int\int\int\int\int\int\int\int\int\int f(x_1, x_2, \ldots, x_{10})\, dx_1 dx_2 \ldots dx_{10}.$$

Monte Carlo-metod ger fortfarande ett fel på $O(\frac{1}{\sqrt{N}}) = O(N^{-0.5})$

Simpson ger ett fel $O(h^4)$, antal punkter

$$N = \frac{(b_1 - a_1)}{h_1} \cdots \frac{(b_{10} - a_{10})}{h_{10}} \Rightarrow N = c\frac{1}{h^{10}} \Rightarrow h = O(N^{-0.1})$$

$$\Rightarrow O(h^4) = O(N^{-0.4})$$ sämre än Monte Carlo.

Framställning av ett slumptal ur den önskade fördelningen:

- generera ett slumptal y likformigt fördelat på $[0,1)$.
- avgör för vilket t som $F_X(t) = y$

Måste lösa ekv.

$$F_X(t) = y \iff F_X(t) - y = 0$$

Om inversa funktionen F^{-1} är känd så fås $t = F_X^{-1}(y)$, "Inverse transform sampling".

Diskret slumptalsfördelning

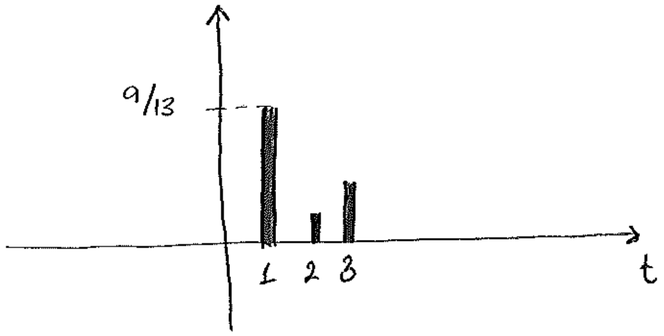
Antar endast ändligt många värden.

ex. Drag kort ur kortlek

- om det är 2, 3, ..., 10 "fall 1"
- om det är E "fall 2"
- om det är Kn, D, K "fall 3"

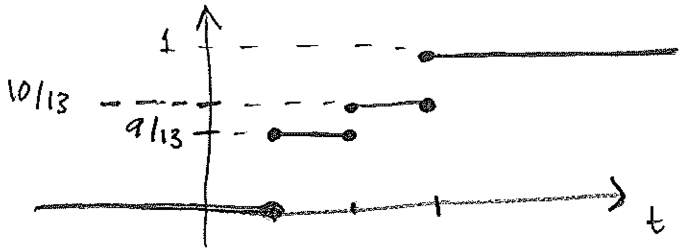
Fall	sannolikhet
1	9/13
2	1/13
3	3/13

Sannolikhetsfunktion (i st.f. täthetsfunktion)



Fördelningsfunktion

$F_X(t)$, $F_X(a)$ = sannolikheten att $X \leq a$.



Kan nu även här slumpa tal y likformigt mellan 0 och 1 och avgöra var $F_X(t) > y$

I praktiken används en array som innehåller

9/13	10/13	1

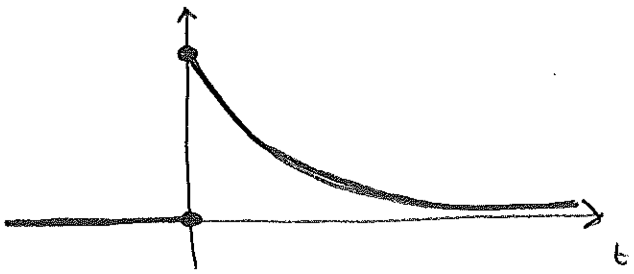
Söker sedan i arrayen efter ett tal som är $> y$.

Slumptalsfördelning

Exponentialfördelning $Exp(\beta)$, $Y(\beta)$

Täthetsfunktion

$$f_Y(t) = \begin{cases} \beta e^{-\beta t} & t \geq 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$$



Fördelningsfunktion

$$F_Y(t) = \int_{-\infty}^{T} f_Y(t)\,dt = \begin{cases} 1 - e^{-\beta t} & t \geq 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$$

Väntevärde

$$E(Y) = \frac{1}{\beta}$$, β är intensiteten av fördelningen.

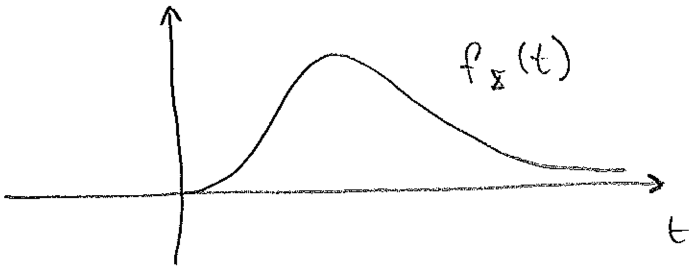
Om något slumpmässigt inträffar ett visst antal gånger per tidsenhet. så är tidpunkterna för nästa händelse exponentialfördelade.

Ex På en gata förväntas det komma 3 bilar per minut.

Tidsintervallen mellan bilarna är fördelade som $\gamma(3)$.

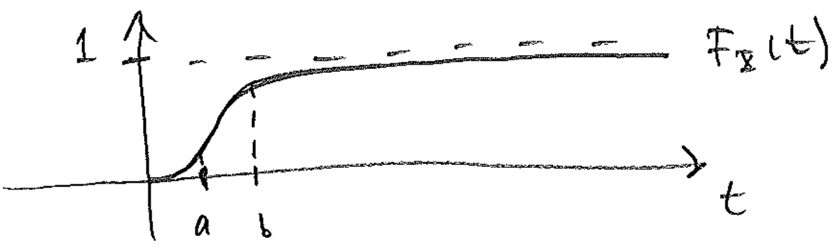
<u>Generering av en slumptalsfördelning utgående från likformig fördelning.</u>

Ex. Slumptalsfördelning med täthetsfunk.



Fördelningsfunktion

$$F_X(t) = \int_{-\infty}^{t} f_X(t)\,dt$$



Sannolikheten att hamna i intervallet $[a,b]$ är

$F_X(b) - F_X(a)$

Modell för kemiska reaktioner

ex. $$\frac{dA}{dt} = -K_1 AB - K_2 A$$

$$\frac{dB}{dt} = K_2 A - K_3 B$$

$$\frac{dC}{dt} = K_3 B - K_4 C$$

Deterministisk modell består av diff. ekv. som har en entydig lösning om indata givna.

A, B, C är koncentrationer.

Bygger på att antal molekyler är så stort att reaktioner alltid sker.

Om mängderna små (endast ett fåtal molekyler) så blir det ganska slumpmässigt om reaktioner äger rum eller inte.

Lämplig enhet för A, B, C är antal molekyler.

Bryter nu ned modellen i enskilda händelser

$A + B \xrightarrow{K_1 AB} \emptyset$ av A och B blir "inget" med benägenhet $K_1 AB$ (propensitet $K_1 AB$)

$$A \xrightarrow{K_2 A} B$$

$$B \xrightarrow{K_3 B} C$$

$$C \xrightarrow{K_4 C} \emptyset$$

Nu har vi 4 st händelser (reaktioner) som med viss "sannolikhet" $k_1 AB$, $k_2 A$, $k_3 B$, $k_4 C$ kan inträffa.

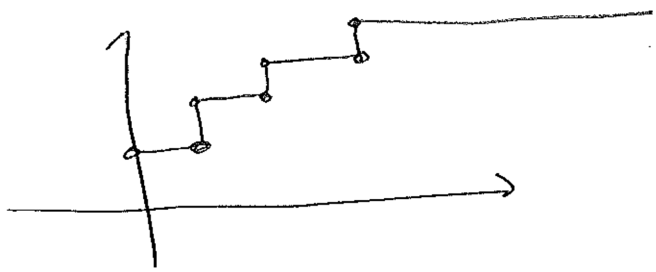
Ska tolkas s.a. händelse 1 inträffar $k_1 AB$ gånger/tidsenhet

Denna modell kan nu beräknas med den s.k. Gillespies algoritm.

- summera propensiteterna ger förväntat antal händelser under en tidsenhet.

  Tiden tills den första av dessa inträffar slumpas fram (exponentialfördelning)

- Vilken reaktion inträffar? Avgörs genom en diskret fördelning baserad på inbördes sannolikhet.



- Vad händer i reaktionen?

  Reaktion 1: A - 1, B - 1

  —"— 2: A - 1, B + 1