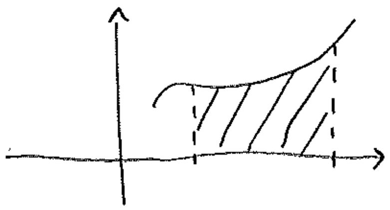
Monte Carlo-metoder, sammanfattning

- Determenistisk / Stokastisk
- Hur genereras slumptal?
- Experiment med integral.
- Två tentauppgifter.

Determenistisk modell

Modell där resultatet ska bero på indata
ex. Integral av en funktion ev. med ändligt många punkter.



Stokastisk modell

Modell där slumpmoment förekommer. Samma indata ska kunna ge olika resultat.

ex. Modell för Brownsk rörelse.
Modell för reaktioner på molekylnivå (Miniproj 2)

Determenistisk metod

En metod som alltid ger samma resultat för samma indata.
ex. Simpsons formel för integral.

Stokastisk metod

Kan ge olika resultat för samma indata pga att slumpmoment (slumptal) används.

ex. Beräkning av integral som

(intervallängd) * (medelv. av slumpmässiga funktionsvärden).

Gillespies algoritm för stokastisk reaktions-modell.

Monte Carlo-metod

En stokastisk metod upprepas ett (stort) antal gånger. Man får en mängd olika resultat och drar slutsatser av dessa (grundat på statistisk teori).

T. ex. integralberäkning

Väntevärdet av resultaten är den önskade integralen.

Medelvärdet av de erhållna resultaten är då intressant.

Storheter som standardavvikelsen kan ge en uppskattning av felet.

Genering av slumptal

De slumptal man får i ett datorprogram är i allmänhet inte "slumpmässiga" utan "kända på förhand". (utom ev. det första)

De genereras ofta beroende på föregående slumptal.

T.ex. med linjära kongruensmetoden

$$X_0 \quad (\text{ev. slumpmässigt})$$

$$X_{k+1} = (a X_k + c) \bmod m$$

a, c, m är (stora) heltal, X_k är heltal. Användaren får som resultat X_k/m.

En slumptalsgenerator måste genomgå många test för att godkännas.

Endast ändligt många tal kan genereras, de kommer alltså någon gång att upprepas.

I MATLAB finns rand: ger ett slumptal i [0,1)

Med anropet (t ex)

```
rand('seed', 127)
```

kan man starta på ett annat tal

ex.

```
rand('seed', sum(100*clock))
```

ger "verklig" slump.

Slumpmässigt heltal $0 \leq P < N$

$r = \text{fix}(N * \text{rand})$

Normalfördelade tal

$r = \text{randn}$

Normalfördelade med väntevärde 0, standardavvikelse 1.

Normalfördelning med väntevärde μ, standardavvikelse s.

$r = \mu + s * \text{randn}$.

Tenta 15/3 2010

Givet propensiteter för 5 st kemiska reaktioner

$w = [3 \quad 8 \quad 2 \quad 14 \quad 5]$

och två slumptal

$u = 0.962$

$v = 0.371$

Genomför Gillespies algoritm för att beräkna

- tiden till nästa reaktion
- vilken reaktion inträffar

Propensiteterna anger förväntat antal reaktioner per tidsenhet.

Totalt förväntat antal är

$\Sigma(\text{propensiteter}) = 3 + 8 + 2 + 14 + 5 = 32$

Tiden till nästa reaktion är en slumpvariabel med exponentialfördelning.

Täthetsfunktion: $f_E(t) = 32e^{-32t}$, $t > 0$

Fördelningsfunktion: $F_E(T) = \int_{-\infty}^{T} 32e^{-32t}\,dt = \int_{0}^{T} 32e^{-32t}\,dt$

$= \left[-e^{-32t}\right]_0^T = 1 - e^{-32T}$

"Invers transform sampling"

Givet u ur likformig fördelning, hitta det T som uppfyller $F_E(T) = u$

$$1 - e^{-32T} = 0.962 \iff e^{-32T} = 0.038$$

$$\Rightarrow T = -\frac{\ln 0.038}{32} = \underline{0.102}$$

Vilken reaktion inträffar?

Sannolikheten för en viss reaktion är (propensitet / summa)

För reaktionerna blir detta

$\frac{3}{32}$ $\frac{8}{32}$ $\frac{2}{32}$ $\frac{14}{32}$ $\frac{5}{32}$

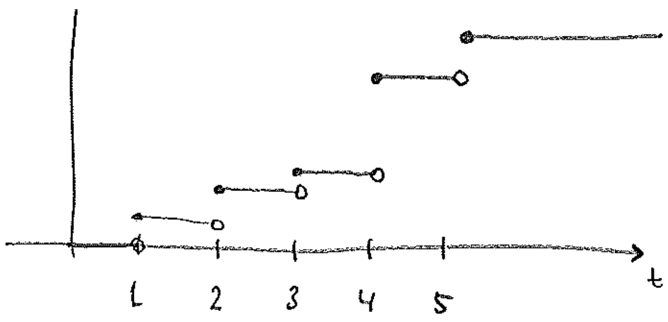
eller

0.099 0.250 0.062 0.458 0.156

Bilda den kumulativa fördelningsfunktionen

0.99 0.344 0.406 0.844 1.000

Denna ser ut som



Vi har slumptalet $v = 0.371$, Vi ser att

$F_{\xi}(t) > 0.371$ då $t = 3$ (reaktion 3 inträffar)

Tenta 1/6 2009

Givet N städer $s_1, s_2, \ldots, s_N$

Givet t_{ij} tiden för en resa mellan städerna s_i och s_j

Beskriv hur man med en Monte Carlo-metod kan beräkna minimal restid för besök i alla städer om man börjar i stad s_k.

Upprepa många gånger

- Slumpa ut numren på städerna började med k.
- Beräkna restiden med städerna i denna ordning
- Spara som en element i en array v.

Tag sedan minimum av v:s element.

Slumpa olika nummer

Array $\boxed{1|2|\ldots|N}$, skapa ett heltal $1 \leq x < N$

Flytta detta tal till första platsen i en annan array.

Upprepa för kvarvarande tal.