

Monte Carlo -menetelmät Hallittua satunnaisuutta

Tapio Rantala
Tampereen teknillinen yliopisto
tapio.rantala@tut.fi

MC-simulointeja on luontevin käyttää satunnaisten ilmiöiden ja tapahtumien mallintamiseen. Tällöin ei tarkastella sitä mistä satunnaisuus johtuu, vaan pyritään löytämään satunnaisuuden seurauksia ja erityisesti sen säännönmukaisuuksia. Tyypillisimmillään tällöin mallinnetaan suuria joukkoja, lukuisia tapahtumia tai ollaan tekemisissä muuten niin suurten lukujen kanssa, että statistiset eli tilastolliset tarkastelut ovat mielekkäitä. Paradoksaalisesti siis etsitäänkin satunnaisuutta käyttäen tarkasteltaviin kohteisiin liittyvien ilmiöiden jakautumien täsmällisiä parametreja tai lainalaisuuksia.

Esimerkkeinä MC-simulointien sovellutuksista luonnontieteiden ja tekniikan piirissä voitaisiin mainita jo edellä mainittu ydinreaktiot, avaruuden hiukkassäteilyn mallintaminen, eräät pitkän aikavälin säätötilan vaihteluun liittyvät ilmiöt tai suuriin atomijoukkoihin ja aineen ominaisuuksiin liittyvät asiat. Fysiikan entropian käsite, joka kuvaa tarkasteltavan kohteen epäjärjestyksen astetta, on oiva esimerkki pohjimmiltaan satunnaisuutta kuvaavasta täsmällisestä käsitteestä ja suureesta. MC-simulointi onkin ehkä parhaimmillaan tarkasteltaessa entropian maksimiarvoon liittyviä vakaita tasapainotilanteita.

Kokeellista ja teoreettista Monte Carloa

Sekä satunnaisilmiöiden että myös determinististen prosessien mallinnukset voidaan jakaa kokeellisiin ja teoreettisiin. Tällöin tiettyjen yksinkertaisten lähtökohtien tai alkeistapahtumien perusteella suoritettu simulointi on kuin koe, josta tehdään ha-

Monte Carlo (MC) -menetelmiin luetaan perinteisesti satunnaisuutta tai satunnaislukuja ja -jakautumia käyttävät laskenta- ja simulointimenetelmät. Menetelmän nimet juuret ovat tunnetussa samannimisessä pelikasinossa. Sieltä se otettiin 2. maailmansodan aikaiseen Manhattan-projektiin, jossa menetelmää ensimmäisen kerran sovellettiin systemaattisesti käyttöön ydinpommin neutronivuon mallinnuksessa. Tämän jälkeen nimi vakiintui nykyiseen käyttöönsä.



vaintoja ja mitataan tuloksia. Usein tällainen koe täytyy toistaa joko statistiikan parantamiseksi tai siksi, ettei kaikkea mielenkiintoista tai tarpeellista osattu heti ensimmäisellä kerralla rekisteröidä. Siis tyypillinen koe.

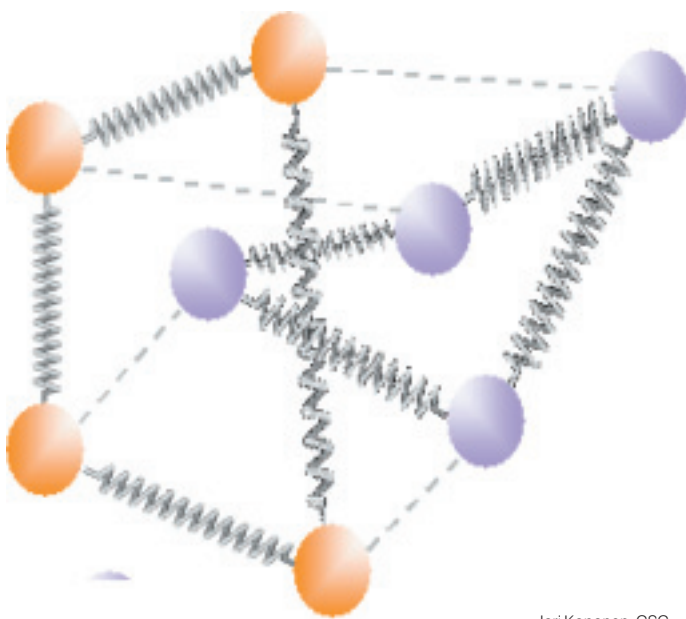
Teoreettinen tarkastelu puolestaan on statistista fysiikkaa, jonka puitteissa pyritään selittämään tai ennustamaan simuloinnin tulokset. Tarkasteltavan systeemin ominaisuuksien tai siihen liittyvien jakautumien parametrien laskeminen voidaan tavallisesti palauttaa summauksiksi tai integraaleiksi, joiden numeerista laskemista simulointi itse asiassa vain onkin. Toki myös MC-simuloinnin etenemistä voidaan joissakin tapauksissa seurata ajasta riippuvana, samoin kuin molekyyldynamiikan simulointia-

"MC-simulointeja on luontevinta käyttää satunnaisten ilmiöiden ja tapahtumien mallintamiseen."

kin, jotta tasapainoon johtavasta tapahtumasarjasta saataisiin havainnollinen kuva.

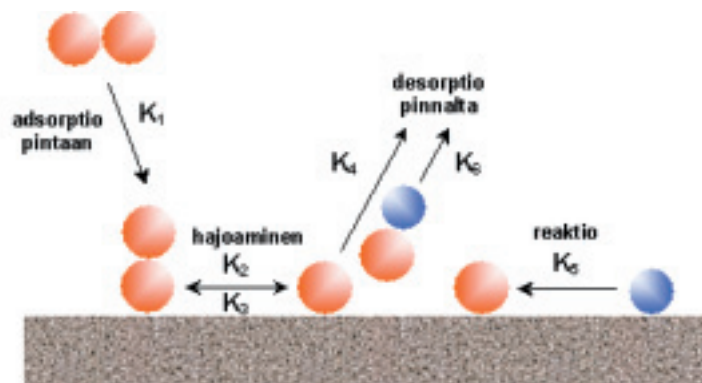
Suuria joukkoja kuvaavissa jakautumissa on tyypillisesti hyvin suuri määrä vapausasteita tai muuttujia. Näin moniulotteisten avaruuksien yli suoritettava numeerinen integrointi on tavallisesti mahdoton tehtävä muilla algoritmeilla suoritettavaksi. Numeerisena menetelmänä MC-integrointi suppenee vain verran-

nollisena tekijään $N^{-1/2}$, missä N on integrointiverkon koko. Laskennan suppeneminen tarkoittaa tuloksen tarkentumista kohti lopullista arvoaan, ja siihen pyritään mahdollisimman pienellä laskenta-askelien lukumäärällä. MC-laskenta suppenee paljon hitaammin kuin monissa kehittyneemmissä algoritmeissa. MC-integrointi on kuitenkin helppo toteuttaa, ja se toimii myös silloin kun säännöllisen integrointiverkon käyttö on vaikeaa, esimerkiksi geometrisista syistä, tai ei tule lainkaan kysymykseen, esimerkiksi suuren muuttujatai vapausastelukumäärän vuoksi.



Jari Koponen, CSC

Polkuintegraali-MC-menetelmässä kvanttihiukkaset esitetään helminauhoina, joiden helmet on kytketty toisiinsa jousia kuvaavilla harmonisilla voimilla. Helmien väliset vuorovaikutukset on esitetty katkoviivoilla. Kuvassa on kaksi keskenään vuorovaikuttavaa kvanttihiukkasta, jotka on kuvattu neljällä helmellä.



Jari Koponen, CSC

Kineettistä MC-simulointia voidaan käyttää ajasta riippuvien tai epätasapainotilojen aikakehityksen tarkasteluun. Kuvassa on mallinnettu kiinteällä pinnalla tapahtuva kemiallinen reaktio, joka on kuvattu reaktion alkeistapahtumien ja niiden reaktionopeusvakioiden K_i avulla.

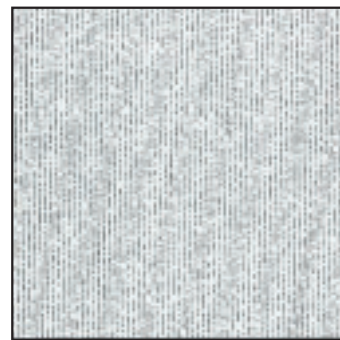
Vaikeasti tavoitettava satunnaisuus

MC-simuloinnin tai -integroinnin toteuttamiseen tarvitaan satunnaislukuja jostakin hyvin määritellystä jakautumasta. Tavallisesti käytetään satunnaislukupseudogeneraattoria, joka on algoritmi tai tietokoneohjelma itse satunnaisuuden simuloimiseksi. Tällainen algoritmi laskee aluksi

siemenlukuun ja sitten jo lasketuihin satunnaislukuihin perustuen sarjan uusia lukuja, joiden satunnaisuuden voikin perustellusti kyseenalaistaa. Tällaisten satunnaislukupseudogeneraattorien tuottamien pseudo- eli valesatunnaislukusarjojen sisäiset korrelaatiot on aina syytä selvittää ennen tällaisten lukujen käyttöä. Täysin oikean jakautuman antavien

pseudosatunnaislukujen keskinäinen korrelaatio eli riippuvuus saattaa paljastua jo piirrettäessä pisteiksi kaksi- tai useampiulotteiseen koordinaatistoon peräkkäisten lukujen muodostamat vektorit.

Satunnaislukuja voidaan tuottaa tietysti muullakin tavoin, vaikkapa lottoarvontakoneella, noppaa tai rahaa heittämällä, tai jotakin luonnonilmiötä kuten esimerkiksi puiden lehtien putoilua rekisteröimällä. Lähekkäin tapahtuvissa luonnonilmiöissäkin piilevän korrelaatioiden vaaran minimoimiseksi on esimerkiksi avaruuden hiukkassäteilyhavaintoja taulukoitu satunnaisluvuiksi. Myös kvanttisatunnaisuuteen perustuvia satunnaislukupseudogeneraattoreita on kehitelty.



Useiden käyttöjärjestelmien (esimerkiksi UNIX) mukana tulevan RAND-satunnaislukupseudogeneraattorin peräkkäiset pisteparit tulkittuna xy-tason vektoreiksi. Näiden pseudosatunnaislukujen keskinäinen korrelaatio on ilmeinen.

Molekyylidynamiikka ja Monte Carlo

Molekyylidynamiikan (MD) simuloinneissa tarkastellaan atomijoukon atomien klassista käyttäytymistä annetussa voimakentässä. Vakaan tasapainotilanteen dynamiikan aikakeskiarvoina voidaan tällöin laskea tasapainojakautumaan liittyviä parametreja, kuten esimerkiksi energiasuureita, hiukkastiheyksiä, hiukkasten välisiä korrelaatiofunktioita, sekä mahdollisten molekyylin rakenneparametrien keskiarvoja jakautumia.

Vakaan tasapainotilanteen tapauksessa annetulle atomijoukolle ja sille määritellylle voimakentälle voidaan aivan yhtä hyvin tehdä myös MC-simulointi, josta saadaan samoja parametreja kuin MD-simuloinnistakin. Jos tarkastellaan molemmissa tapauksissa täsmälleen samaa systeemiä antavat molemmat menetelmät samat tulokset, kun statistiikka on riittävän hyvä eli simuloinnit ovat riittävän pitkiä. Siten MC-simuloinnin tuloksista on luettavissa vaikkapa kaksiatomisen molekyylin keskipakoisvenymä, vaikka se on tyypillinen pyörimisdynamiikkaan liittyvä suure. Ehkä yllättävää, sillä tasapainotilanteita simuloivana menetelmänä MC-menetelmän ei arvaksi antavan dynamiikkaan liittyviä tuloksia.

Tasapainotilojen MD-simuloinnin perussysteemi on mikrokanooninen eli NVE- joukko (engl. microcanonical ensemble), jossa kokonaisenergia säilyy,

sillä MD:n toteuttaminen on vain klassisen mekaniikan Newtonin liikeyhtälöiden numeerista ratkaisemista. Tähän perussysteemiin voidaan sitten lisätä "kitkatermejä" tai muita häviötermejä kuvaamaan energian poistumista esimerkiksi kvantti-virityksiksi, "lähdetermejä" kuvaamaan energian saantia ulkoisesta säteilystä tai viritysten purkautumisista ja lämpökylpy vakioimaan lämpötilaa tai vakio-painedynamiikkaa.

Tasapainotilojen MC-simuloinnin perussysteemiä taas kutsutaan kanoniseksi eli NVT-joukoksi (engl. canonical ensemble), jossa lämpötila on annettu ja säilyvä suure. Kanonisen joukon simulointiin käytetään täsmälleen 50 vuotta sitten keksittyä tehokasta Metropolis-MC-algoritmia (MMC). Se kuuluu viime vuosisadan viiden merkittävimmän algoritmin joukkoon. MMC-algoritmia varten ei tarvita hiukkasten välisten voimien laskentaa, vaan vuorovaikutusenergiat riittävät. Toisaalta tämän vuoksi simulointi ei myöskään kuvaa ajasta riippuvaa dynamiikkaa, joten ajasta riippuvia ilmiöitä tai epätasapainodynamiikkaa ei voida tarkastella tällä menetelmällä.

Monte Carlon monet kasvat

MMC-algoritmiin perustuu optimointimenetelmä, joka on saanut nimekseen simuloitu jäähditys (engl. simulated annealing,

SA). Nimi perustuu analogiaan sulan metallin jäähtymisen ja kiteytymisen kanssa, jossa metallin atomaarinen (kide)rakenne muodostuu energian minimoitumisen seurauksena. Avaintekijä tässä on lämpötila MMC-algoritmin muuttujana, jota kohti nollaa pienentämällä optimirakenne löytyy.

MC-menetelmänä SA "pu-ree" myös huonosti-käyttäytyviin optimointiongelmien eikä oikeastaan aseta minkäänlaisia rajoituksia optimoitavalle funktiolle eikä edellytä siltä minkäänlaista säännönmukaisuutta. Siten se on suoraviivainen menetelmä, jota voidaan käyttää aina, esimerkiksi silloin kun ratkaisuna voi olla useita samanarvoisia minimejä. Toisaalta kuitenkin hyvin käyttäytyvissä tapauksissa SA on merkittävästi tehottomampi ja hitaampi menetelmä kuin optimoitavan funktion säännönmukaista muotoa turkivat ja hyväksikäyttävät algoritmit.

MC-algoritmeja voidaan käyttää myös ajasta riippuvien ilmiöiden mallintamiseen. Ehkäpä tavallisin näistä menetelmistä on kineettinen MC (engl. kinetic MC, kMC), jossa lähtökohtana ovat joukko alkeistapahtumia ja niille määritellyt tapahtumatoennäköisyydet. Kun määritellystä lähtötilanteesta alkaen edetään ajassa lyhyin askelin kullakin askeleella arpoen sille sattuvat alkeistapahtumat, saadaan mallin ja sen parametrien hyvyyden puitteissa sekä havainnollinen kuva prosessista että lopputila, joka voi olla esimerkiksi tarkasteltavan systeemin etsitty tasapainotila.

Yksi tyypillinen esimerkki on pintareaktio, jossa alkeistapahtumina ovat kaasufaasista pintaan törmäävät ja siihen mahdollisesti tarttuvat molekyylit tai atomit, niiden diffuusioiden pinnalla, mahdolliset kemialliset reaktiot ja lopuksi reaktiotuotteiden desorptio pois pinnalta takaisin kaasufaasiin.

Kvantti-MC (engl. quantum MC, QMC) otsikon alle listataan tavallisesti menetelmiä, joissa tarkasteltava kohde on kvanttisysteemi. Tällöin yksinkertaisimmillaan kyse voi olla vain moniulotteisten tai muuten huonosti-käyttäytyvien integraalien numeerisesta laskemisesta MC-menetelmällä.

"Numeerisina integrointimenetelminä MC-algoritmit taas osoittavat käyttökelpoisuutensa silloin, kun perinteiset menetelmät joutuvat vaikeuksiin."

Kaikkein eksoottisin QMC-menetelmistä lienee polkuintegraali-MC (engl. path integral MC, PIMC), jonka lähtökohtana on äärellisen lämpötilan kvanttistatistiikan esittäminen Feynmanin polkuintegraalien avulla. Tämä sinänsä on jo poikkeuksellista, sillä kvanttiteoriaan perustuvat tarkastelut tehdään tavallisimmin välittämättä lämpötilasta eli olettamalla se nolllaksi. Ympäristönsä kanssa lämpötasapainossa olevaa systeemiä tarkasteltaessa lämpötilan huomioiminen on kuitenkin oleellista, ja avaa aivan uusia mahdollisuuksia kvantti-ilmiöiden tutkimiseen esimerkiksi nanofysiikassa.

Osoittautuu, että kvanttihiukkasten äärellisen lämpötilan statistiikkaa voidaan simuloida klassillisella MMC-algoritmillä. Tämä tapahtuu korvaamalla kvanttihiukkaset klassisten hiukasten muodostamilla "helminauhoilla". Helmien lukumäärää sanotaan Trotterin luvuksi. Helmet on kytketty toisiinsa harmonisilla voimilla, joiden potentiaalienergia vastaa kvanttimekaanista pysyvän tilan kineettistä energiaa. Helminauhan helmet tuntevat ulkoisen voiman heikennettynä, eli jaettuna Trotterin luvulla. Toistensa vuorovaikutuksen hiukkaset tuntevat ainoastaan vastinohelminparien välisinä voimina. Kasvattamalla Trotterin lukua siirrytään klassisesta yhden helmen hiukkaskuvauksesta kvanttihiukkaseen pitkän helminauhan muodossa.

Monte Carlo -menetelmillä on oma paikkansa numeeristen menetelmien ja simulointialgoritmien joukossa. Eräissä tapauksissa niiden käyttö muiden menetelmien sijaan on perusteltavissa useastakin eri syystä. Parhaimmillaan ne ovat simuloitavien suurten joukkojen statistiikkaa tai tarkasteltaessa satunnaisil-

miöiden jakautumia. Juuri 50 vuotta täyttänyt Metropolis-Monte Carlo -algoritmi on mainitsemisen arvoinen tässä yhteydessä.

Numeerisina integrointimenetelminä MC-algoritmit taas osoittavat käyttökelpoisuutensa silloin, kun perinteiset menetelmät joutuvat vaikeuksiin, syystä tai toisesta. Lisäksi, kuten edellä on lyhyesti kuvattu, mitä erilaisimpia sovellutuksia voidaan keksiä optimointialgoritmeista aina kvanttitiilojen tarkasteluun. Toisaalta MC-menetel-

mät tarvitsevat numeronmurskaustehoa merkittävästi enemmän kuin vastaaviin tarkoituksiin soveltuvat deterministiset algoritmit, jos sellaisia kulloinkin löytyy. Mutta juuri tästä syystä voidaan MC-menetelmien odottaa säilyttävän merkityksensä tai jopa kasvattavan sitä tietokoneiden laskentakapasiteetin jatkuvasti kasvaessa.

Monte Carloa ilman tietokoneita

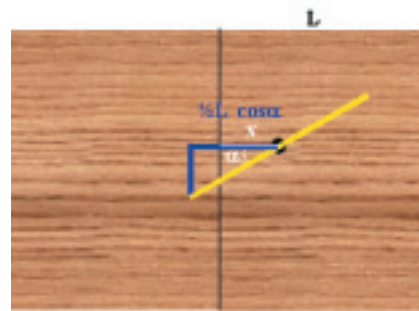
Tapio Rantala
Tampereen teknillinen
yliopisto
tapio.rantala@tut.fi

Sirotellaan tasaiselle lankkuallattialle sattumanvaraisesti N kappaletta neuvoja (keltaisen), tai vaihtoehtoisesti sama neuja N kertaa. Neulan pituus L on sama kuin lattialankkujen leveys. Osa neuvoista (n kappaletta) asettuu molempien vierekkäisten lankkujen päälle.

Koska neuja on keskipiteen suhteen symmetrinen, voidaan seuraava tarkastelu suorittaa vain neulan puolikkaan suhteen. Tällöin nähdään, että muodostuvan sinisen suorakulmaisen kolmion yksi sivu voidaan esittää kosinilausekkeena. Tämän sivun pituus lattialankkujen saumaan kohtaan saakka on x . Nyt x voi saada minkä tahansa arvon nollan ja $L/2$:n välillä, ja kulma α vastaa vastavasti nollan ja $\pi/2$:n välillä. x ja α ovat systeemin vapausasteita.

Lasketaan osu-maksi n jokainen tapaus, jossa x on pienempi kuin kosinilauseke. Integroidaan kosinilau-

seke yli vapausasteiden (x ja α), jolloin tulokseksi saadaan $L/2$. Kun tämä normitetaan kaikkia tapauksia N kuvaavalla vastaavalla integraalilla, joka antaa tulokseksi $\pi/2 \cdot L/2$, saadaan integraalien suhteeksi $n/N = 2/\pi$. Niinpä tästä Monte Carlo -kokeesta saadaan likiarvo luvulle π , sillä $2N/n$ lähestyy piitä, kun N kasvaa rajatta. Tyypillisesti Monte Carlo -kokeille suppeneminen on varsin hidasta ja ensimmäisenkin desimaalin laskeminen vaatii jo kohtuuttomasti kärsivällisyyttä.



Jari Koponen, CSC