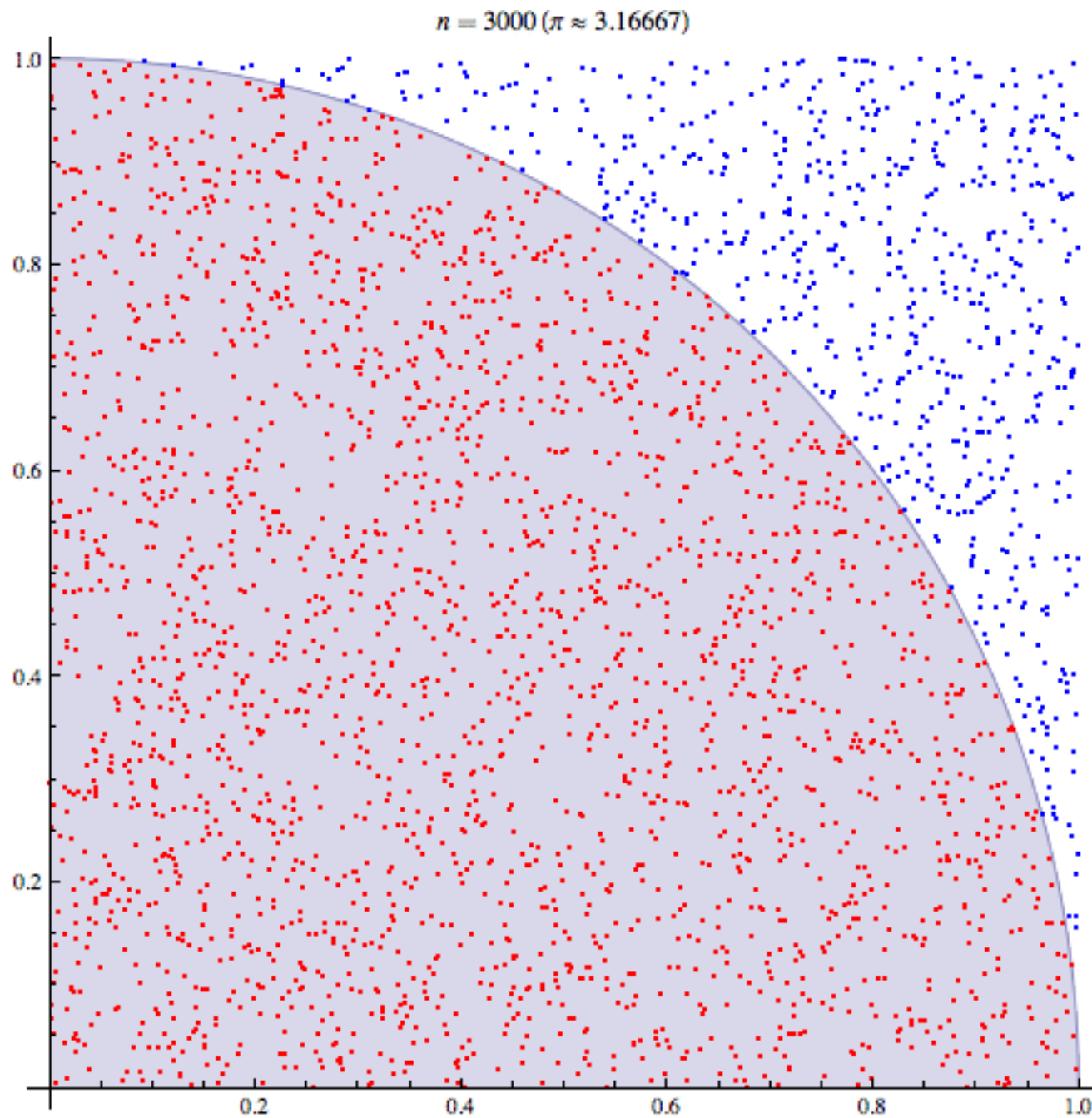


# Динамические системы и методы математического моделирования

Алгоритм Метрополиса. Модель Поттса.

# Метод Монте-Карло



+ Подходит для  
многомерных задач

Но...

# Не подходит для измерения глубины Нила

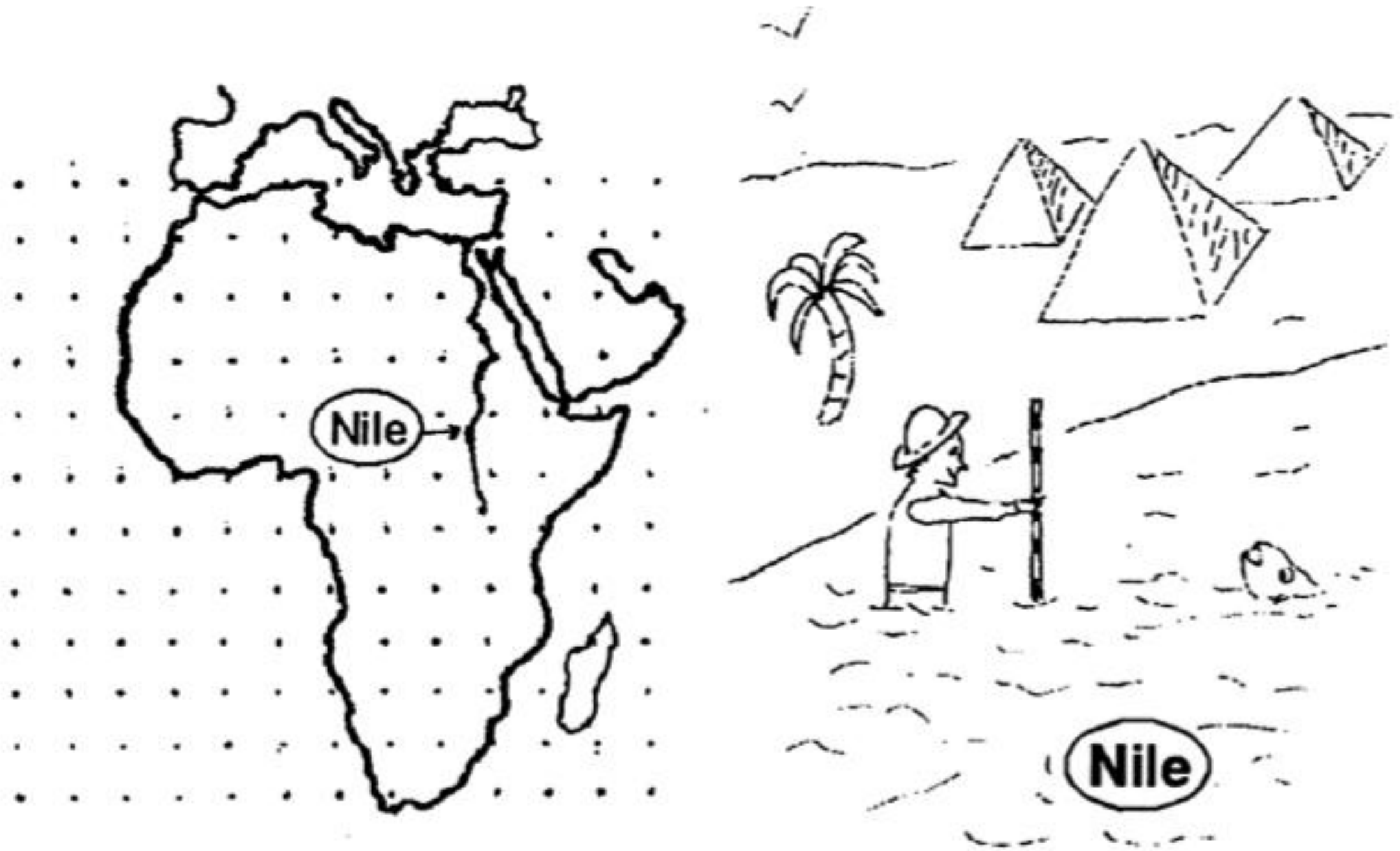


Figure 3.1: Measuring the depth of the Nile: a comparison of conventional quadrature (left), with the Metropolis scheme (right).

## Аналогично в термодинамических задачах

Мы можем взять интеграл (статсумму  $Z$ ) с помощью Монте-Карло

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \frac{\int d\mathbf{R} A \exp^{-E/kT}}{\int d\mathbf{R} \exp^{-E/kT}} = \frac{\int d\mathbf{R} A \exp^{-E/kT}}{Z} = \\ &= \frac{\sum_{\Gamma} A(\Gamma) \rho(\Gamma)}{\sum_{\Gamma} \rho(\Gamma)}\end{aligned}$$

что мы сделаем плохо, потому что будем интегрировать хвост экспоненты.  
А можем создать такую выборку  $\mathbf{X}$ , соответствующую распределению  $\rho(\Gamma)$   
Тогда

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_X A(X)}{N_{MCsteps}}$$

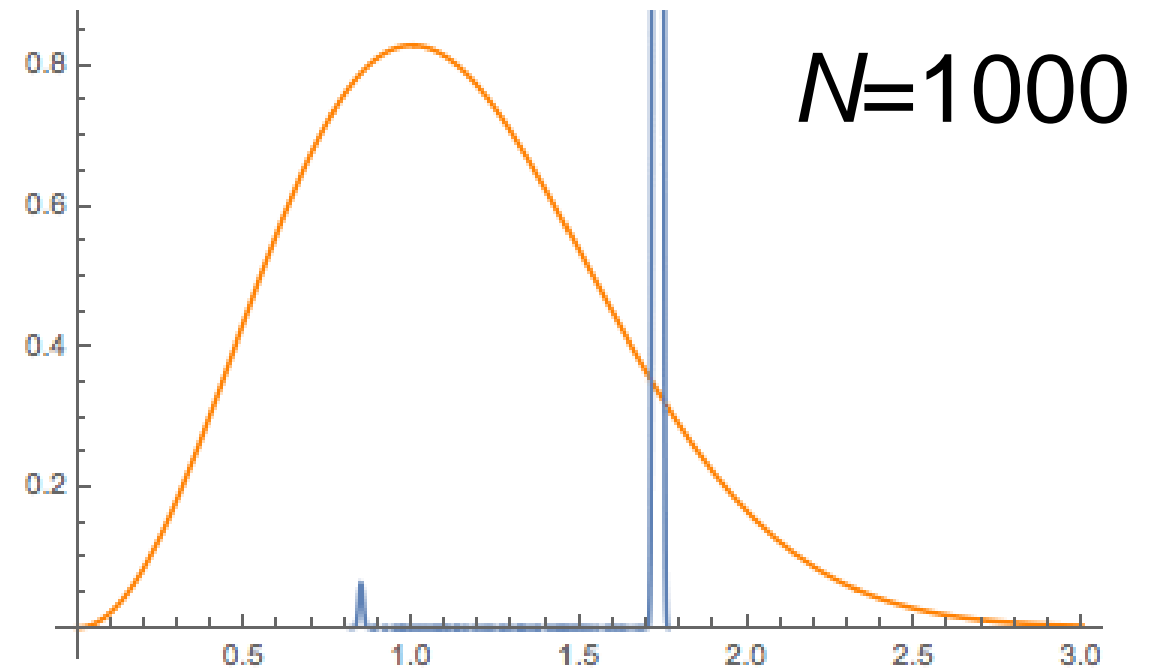
# Алгоритм Метрополиса

## Нулевой шаг

1. Выбрать произвольные начальные значения  $\mathbf{v}$  для  $N$  точек
2. Выбрать максимальное смещение  $dV$

## Последующие шаги

1. Выбрать случайную частицу номер  $i$
2. Посчитать текущую энергию, связанную с данной частицей. Для идеального газа  $E_b = \mathbf{v}_i^2$
3. Сгенерировать смещение  $d\mathbf{v} = \text{RandomReal}[-1, 1, \text{dimensions}] dV$
4. Сместить частицу и вычислить новую энергию  $E_a = (\mathbf{v}_i + d\mathbf{v})^2$
5. Вычислить изменение энергии  $dE = E_a - E_b$
6. Если:
  1.  $dE \leq 0$  — оставить частицу в новом состоянии
  2.  $dE > 0$ 
    1. Сгенерировать случайное число  $p$  от 0 до 1
    2. Если  $p < e^{-dE/kT}$ , то оставить в новом состоянии, иначе вернуть в старое
7. Повторить с пункта 1



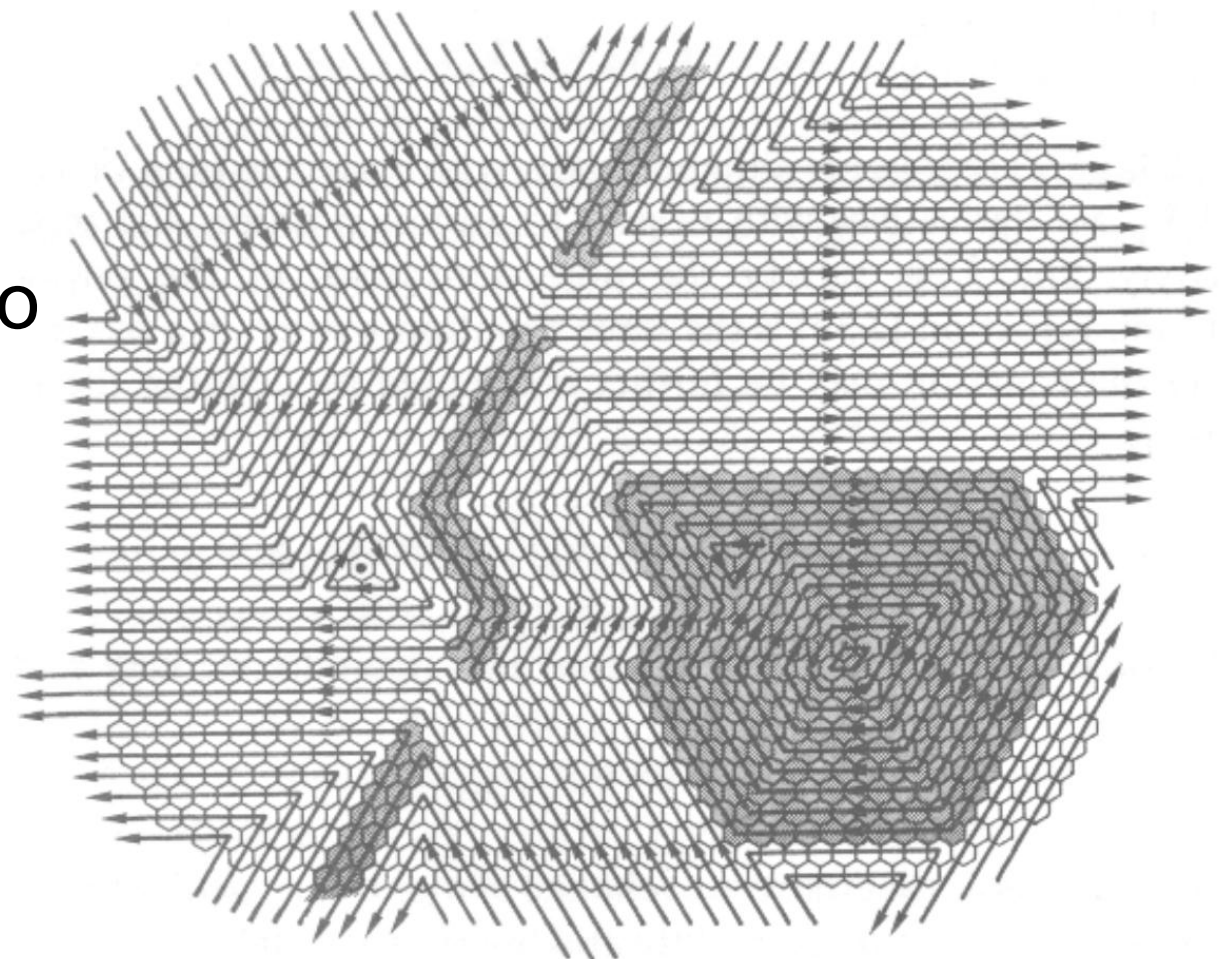
# Чтобы алгоритм Метрополиса работал

1. Должно существовать стационарное распределение  $\pi(x)$
2. Оно должно быть уникально. Система должна быть **эргодична**, т.е. в фазовом пространстве не должно возникать замкнутых циклов

При достижении стационарного распределения будет соблюдаться принцип детального равновесия

$$\pi(x)P(x \rightarrow x') = \pi(x')P(x' \rightarrow x)$$

где  $P(x \rightarrow x')$  — вероятность перехода из  $x$  в  $x'$



# Процент принятия новых состояний

Вероятность перехода из состояния  $x$  в  $x'$  складывается из вероятности **предложить**  $x'$  для перехода (**proposal distribution**  $g(x \rightarrow x')$ ) и вероятности **принять** это состояние (**acceptance distribution**  $A(x \rightarrow x')$ )

$$P(x \rightarrow x') = g(x \rightarrow x') A(x \rightarrow x')$$

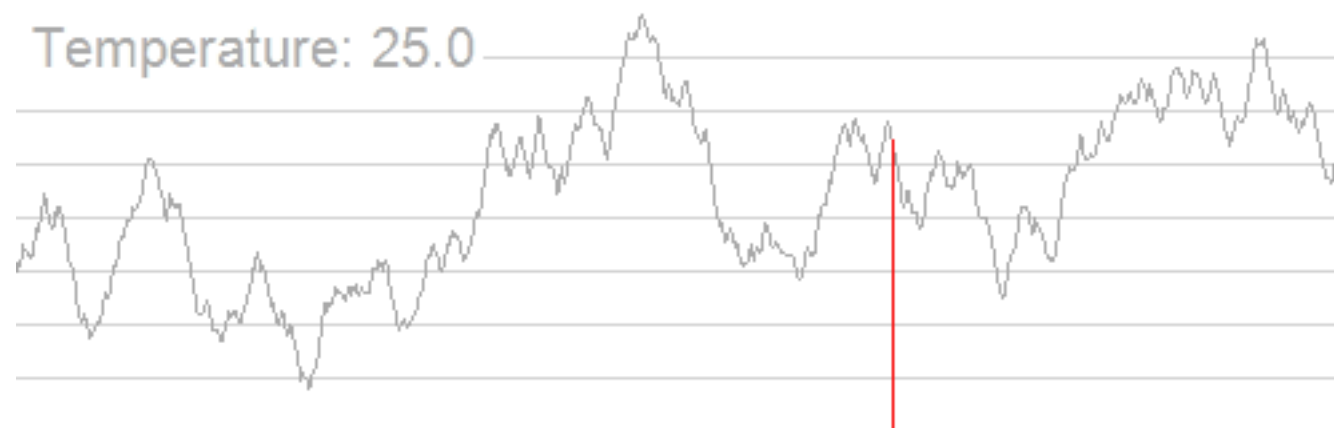
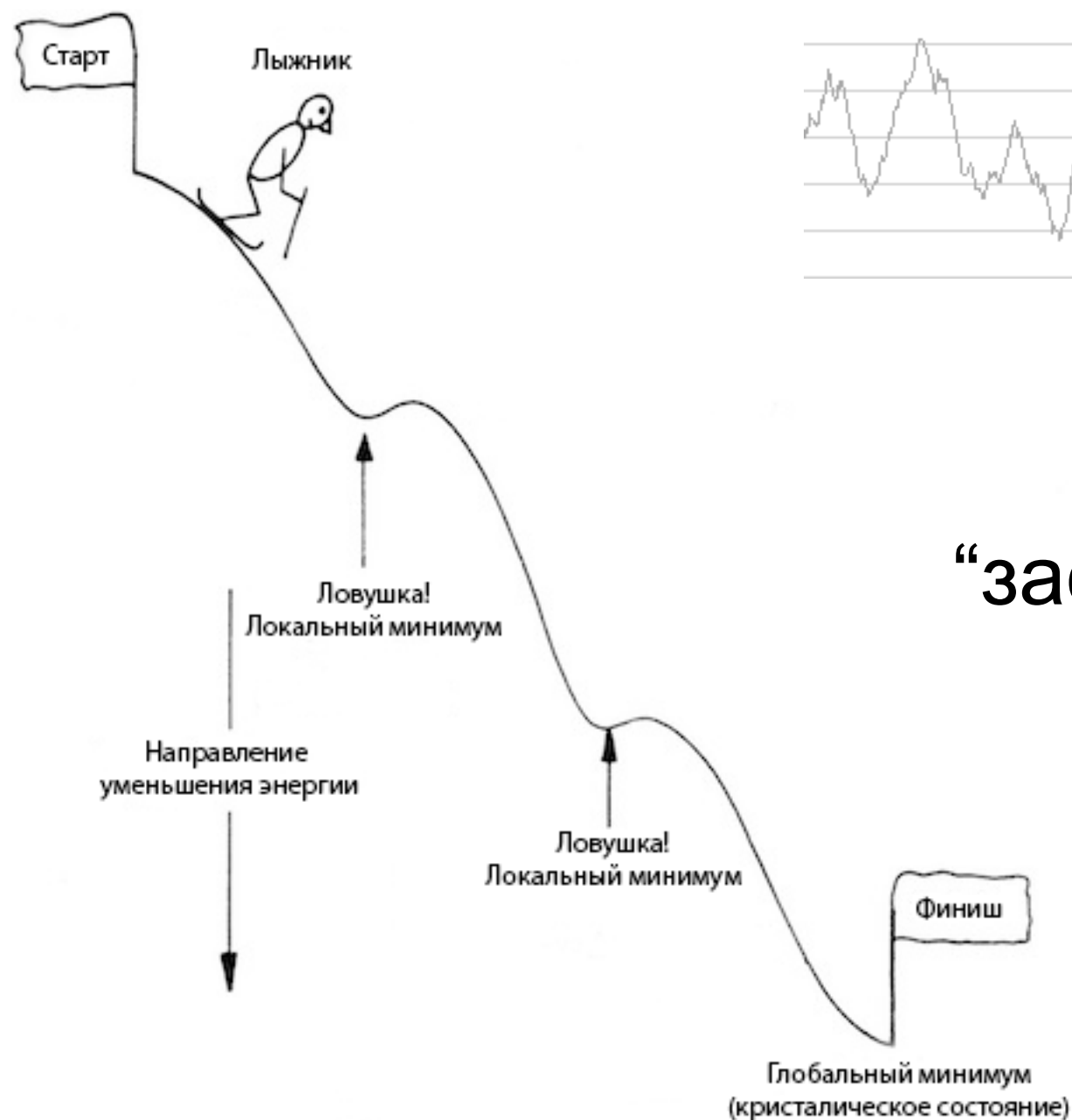
согласно принципу детального равновесия

$$P(x) P(x \rightarrow x') = P(x') P(x' \rightarrow x)$$

отсюда *ожидаемая* вероятность принятия состояния  $x'$

$$\frac{A(x \rightarrow x')}{A(x' \rightarrow x)} = \frac{P(x') g(x' \rightarrow x)}{P(x) g(x \rightarrow x')} \quad \begin{array}{l} \geq 1 \text{ — принять} \\ < 1 \text{ — отвергнуть} \end{array}$$

# Имитация отжига (simulated annealing)

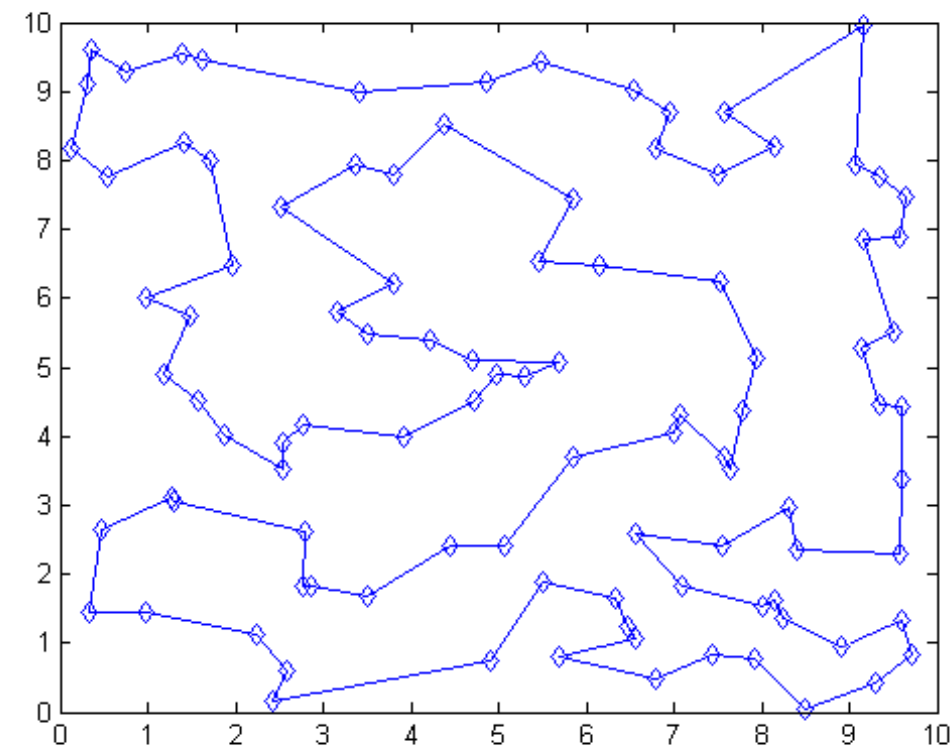
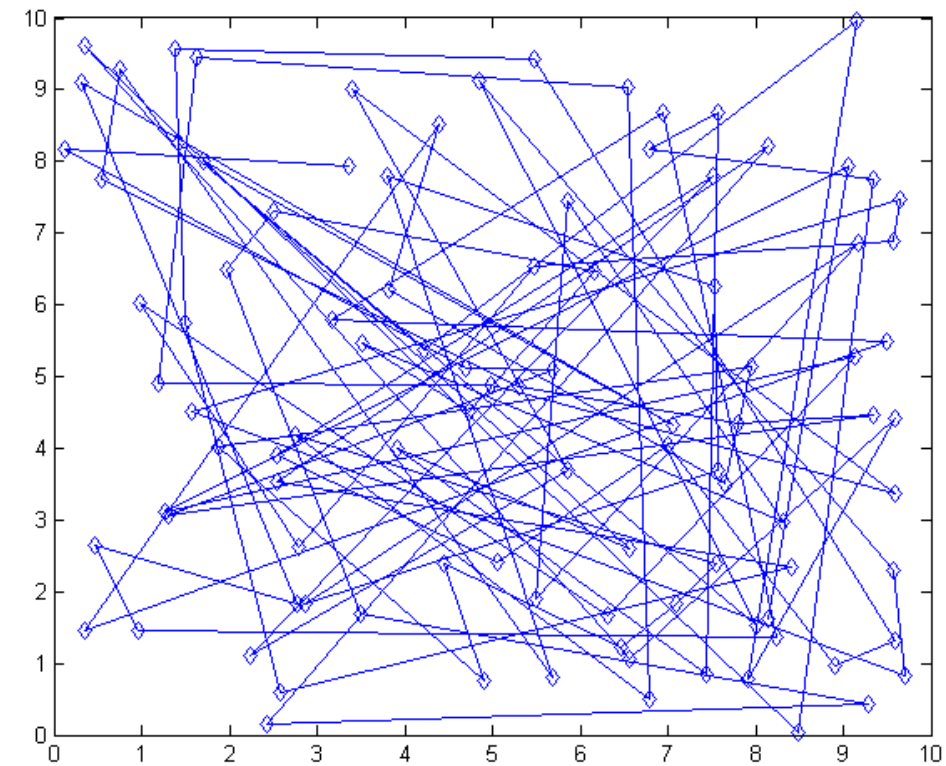


Позволяет избежать  
“застревания” в локальном  
минимуме



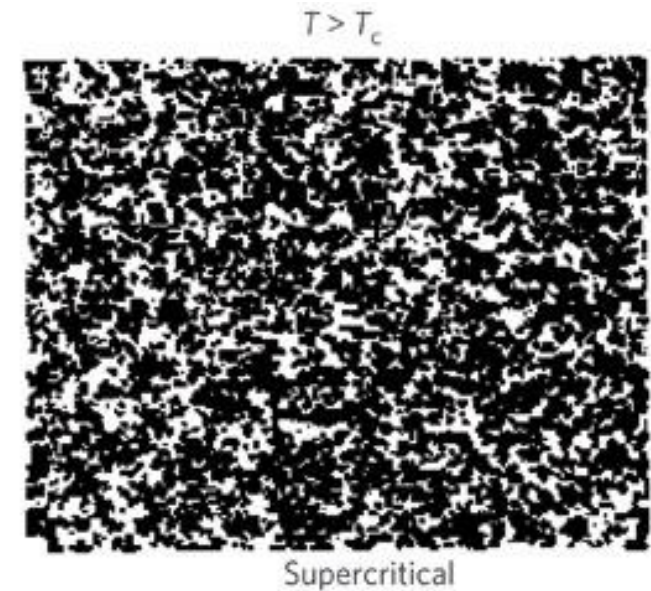
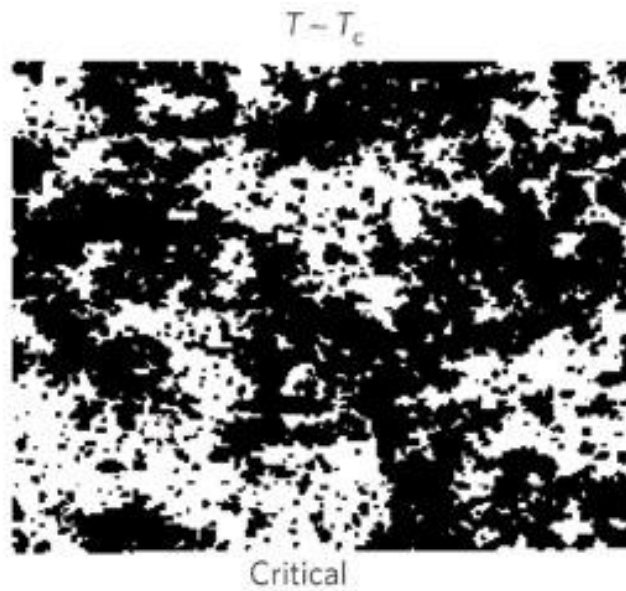
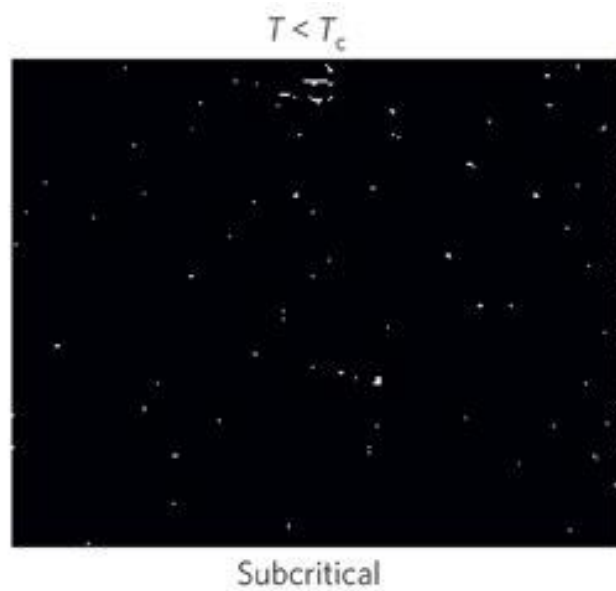
# Имитация отжига в задаче коммивояжера

0. Соединить все города по порядку  
—1—2—3—...—N-1—N—1—
1. Случайно выбрать  $i$  и  $j$  от 1 до  $N$ ,  
 $i \neq j$
2. Инвертировать путь из  $i$  в  $j$ ,  
например:  $i=2, j=7$   
 $(1, 2, 3, 4, 5, 6, 7) \rightarrow (1, 7, 6, 5, 4, 3, 2)$
3. Посчитать энергию нового  
состояния (длину пути)
4. Принять или отбросить  
состояние, согласно алгоритму  
Метрополиса
5. Повторять с пункта 1, медленно  
понижая температуру

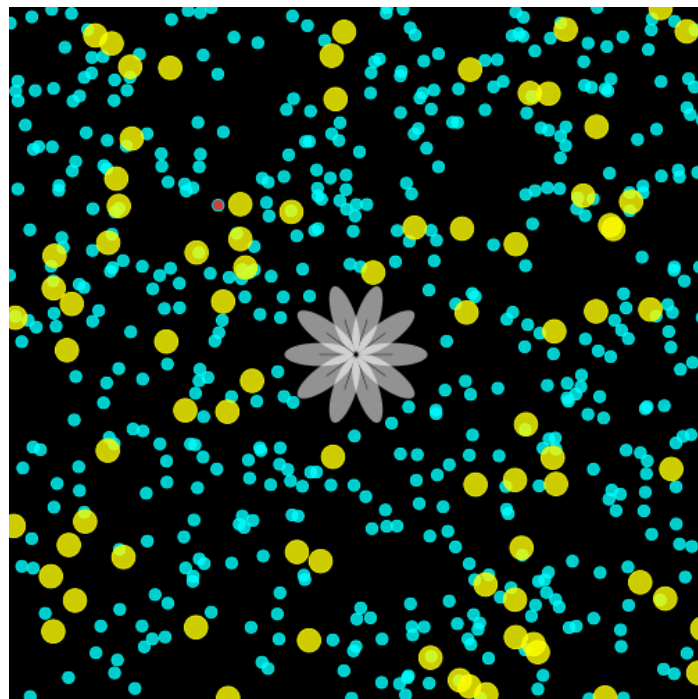


<http://habrahabr.ru/post/209610/>

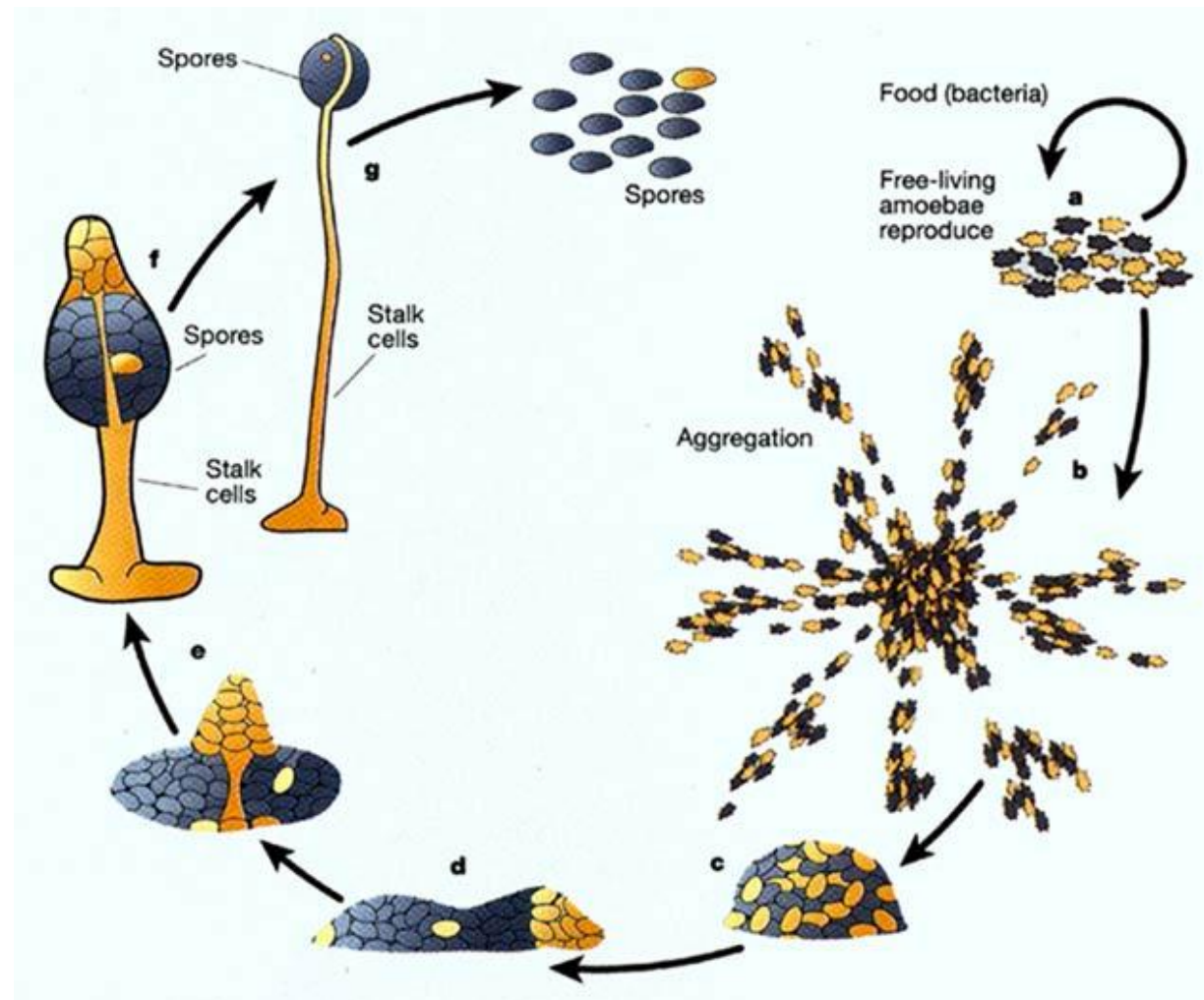
# Ферромагнетик (модель Изинга)



# Что можно моделировать?

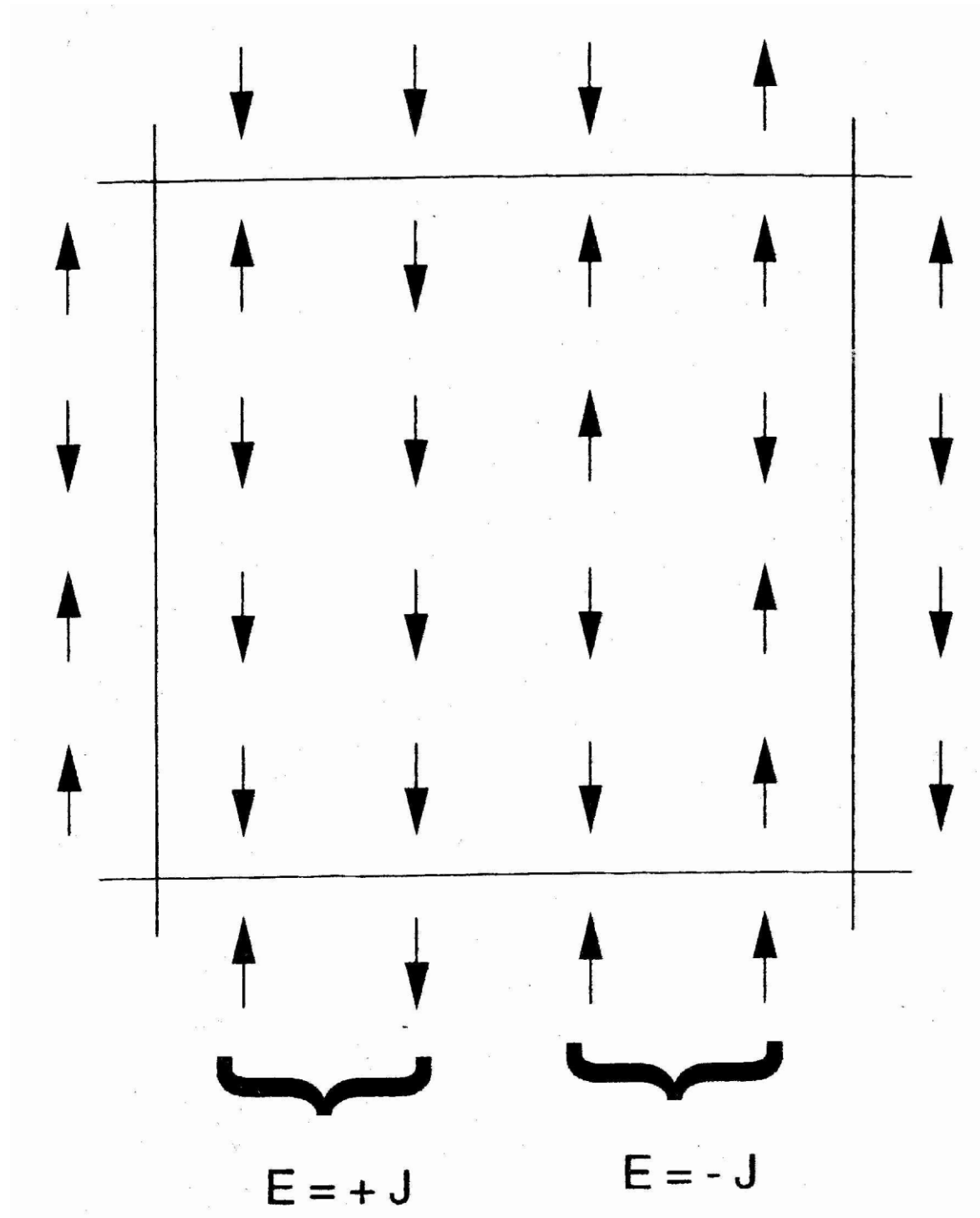


# Жидкие кристаллы



# Целые организмы\*

# Модель Изинга



$$E(S) = -J \sum_{i \sim j} S_i S_j - h \sum_i S_i.$$

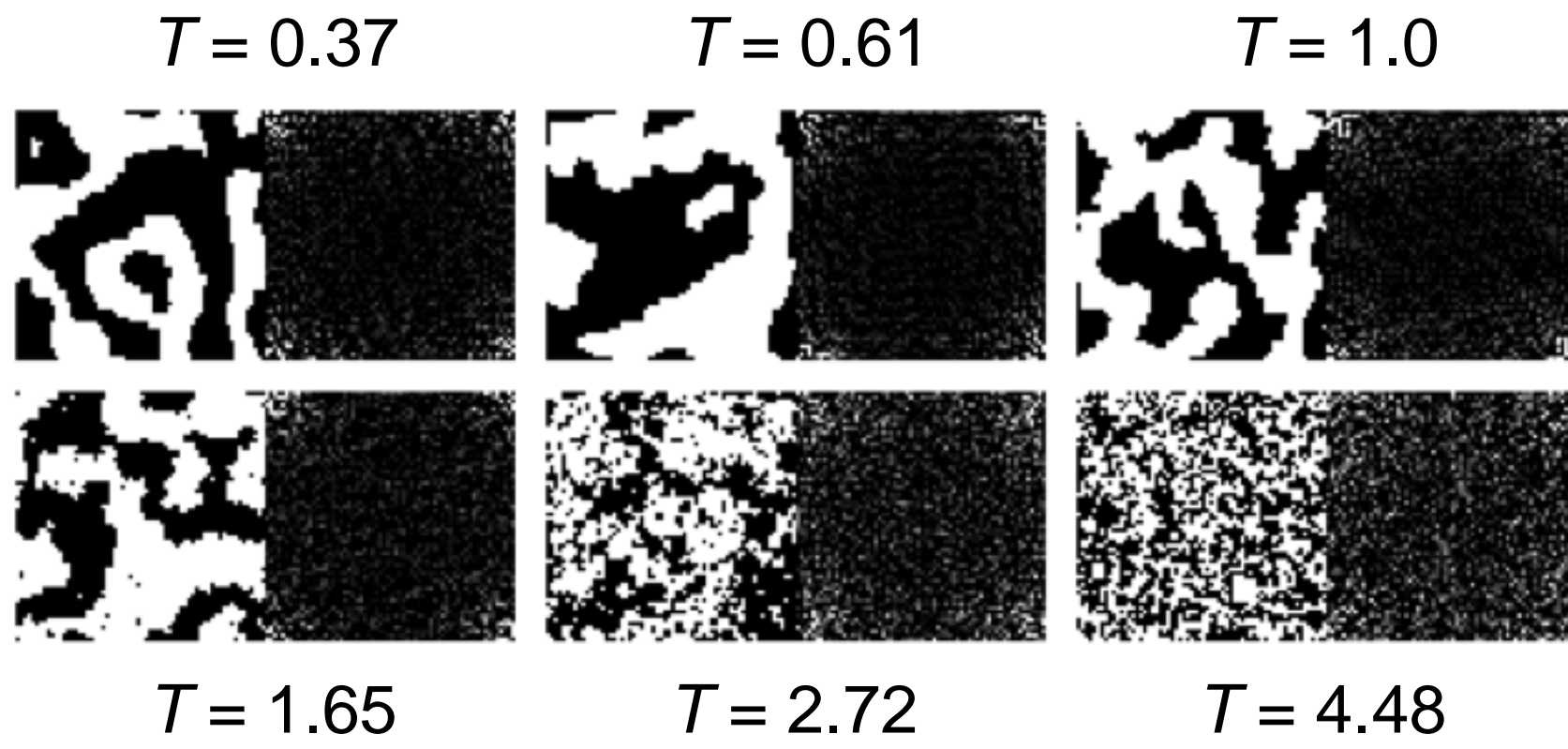
$h$  — магнитное поле

$J > 0$  — ферромагнетик

$J < 0$  — антиферромагнетик

$J = 0$  — нет взаимодействия

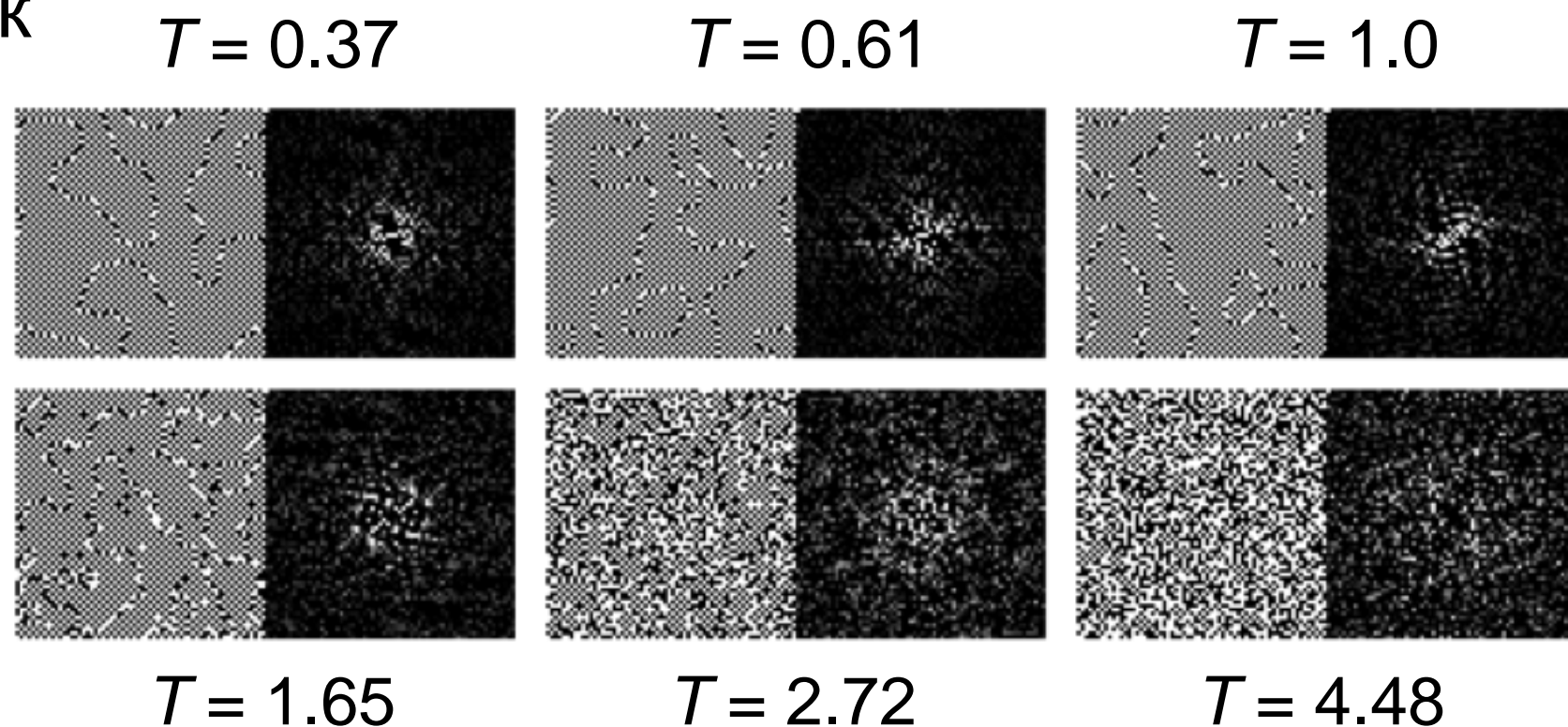
# Модель Изинга ( $h=0$ )




---

## Антиферромагнетик

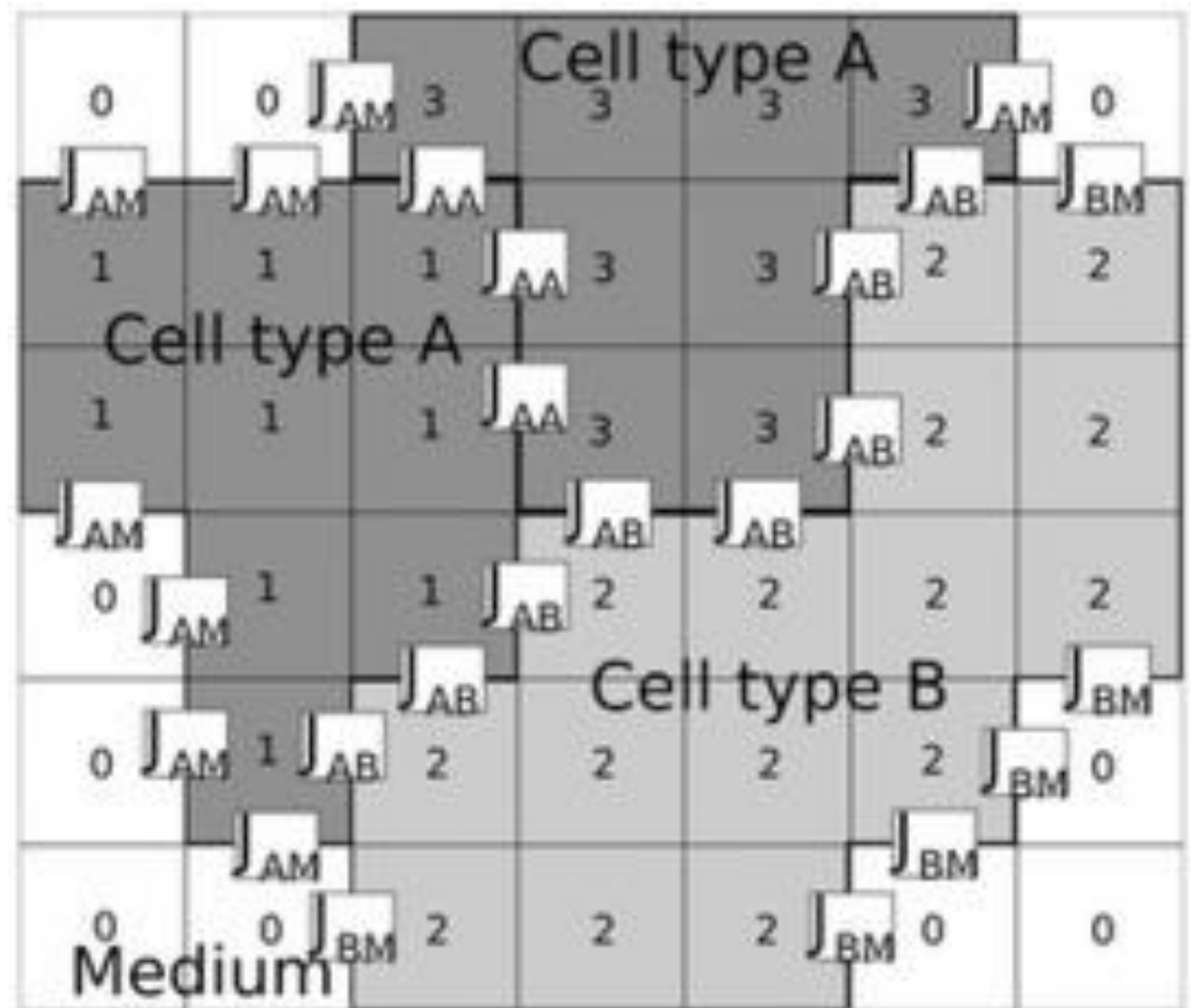
$$T_c^* = k_B T_c / J = 2.269...$$





# Модель Поттса — обобщение модели Изинга

1. “Спин” — индекс
2. Для клеток “спин” — натуральное число
3. Нулевой спин — среда
4. Энергия взаимодействия зависит от **типа** взаимодействующих клеток, а не от “спина”



# Гамильтониан в модели Поттса

$$H = \sum_{\substack{\vec{i}, \vec{j} \\ \text{neighbours}}} J(\tau(\sigma_{\vec{i}}), \tau(\sigma_{\vec{j}})) (1 - \delta(\sigma_{\vec{i}}, \sigma_{\vec{j}})) + \sum_{\sigma} \lambda_{\text{vol}}(\sigma) (v(\sigma) - V_t(\sigma))^2$$

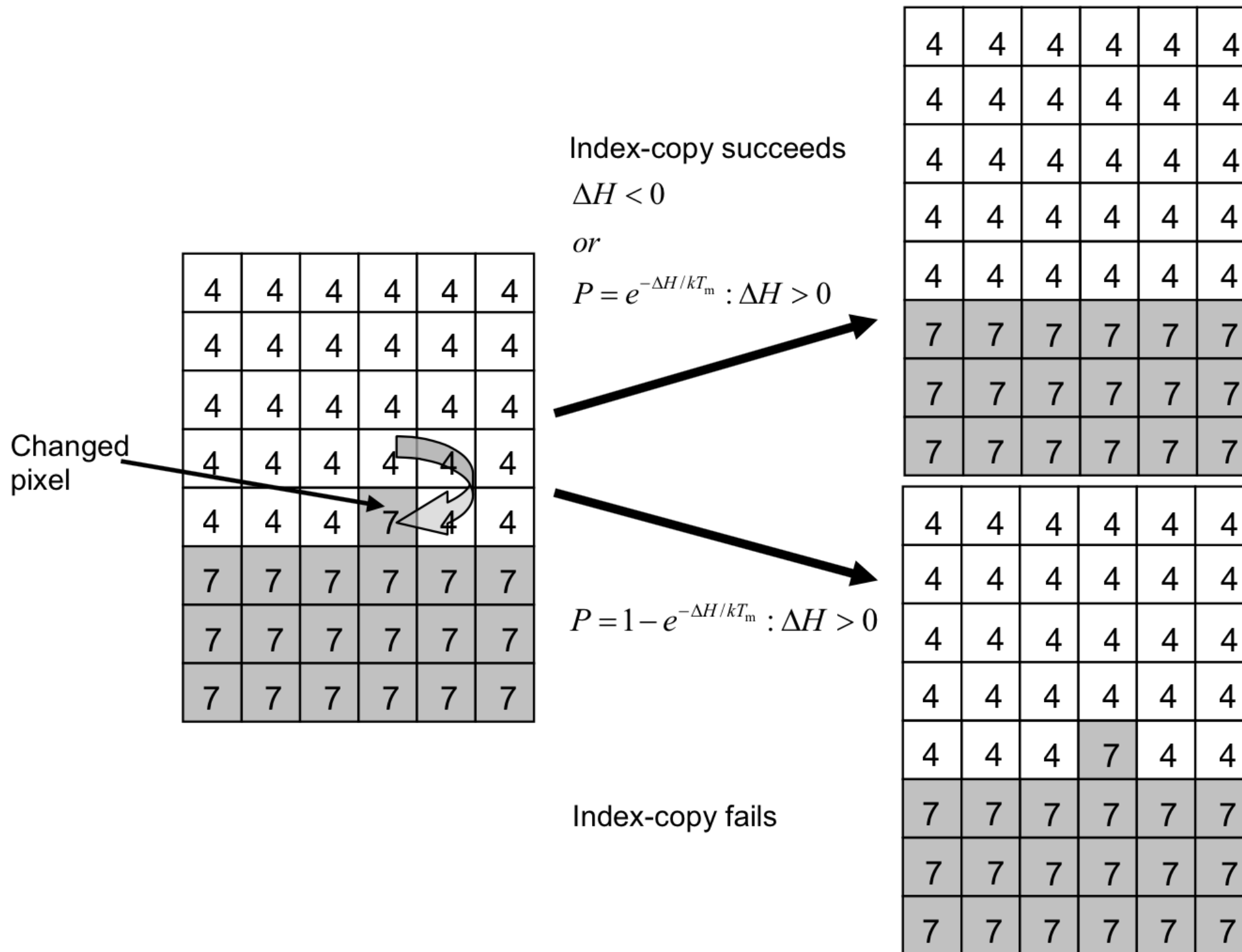
стремление к  
заданному объёму  
 $V_t$

$\sigma_i$  — спин ячейки  $i$ ,  $\tau(\sigma_i)$  — тип клетки для спина  $\sigma_i$

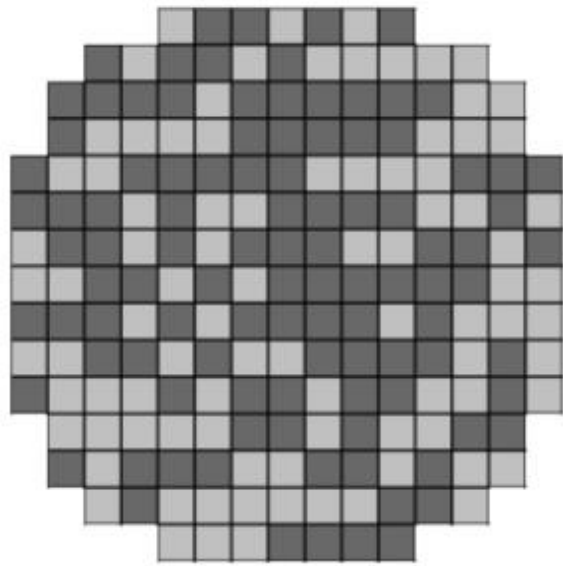
Чем меньше  $J(\tau(\sigma_i), \tau(\sigma_j))$  — тем лучше адгезия между клетками.

Элемент первой суммы, ответственной за взаимодействие, обращается в 0, если спины соседних ячеек совпадают.

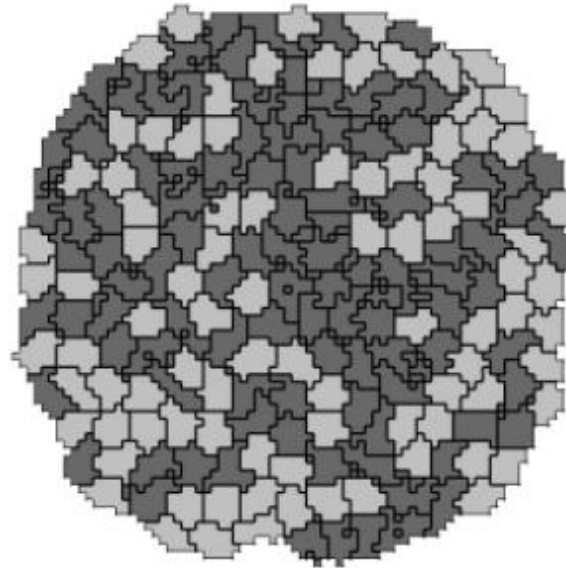
# Применим алгоритм Метрополиса



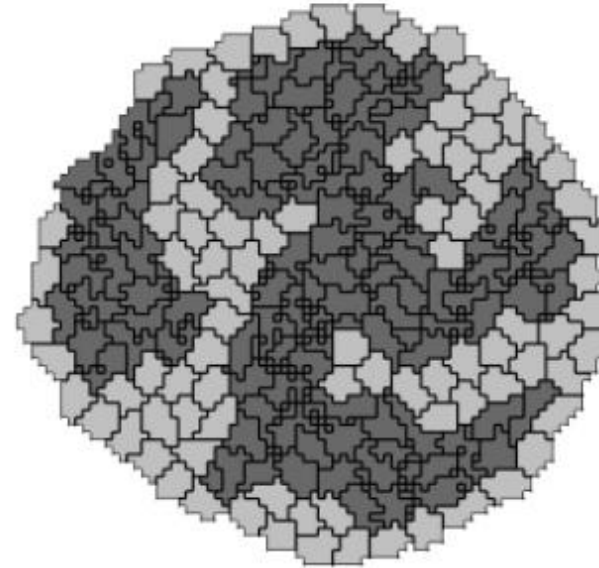
# Сортировка клеток



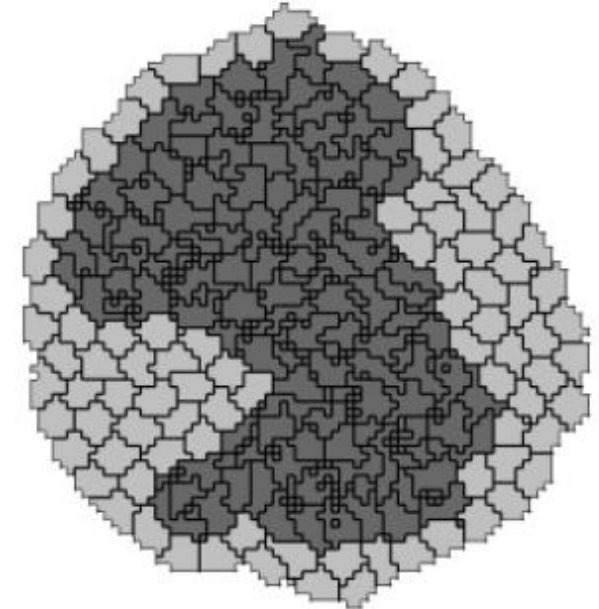
$t=0$  MCS



$t=20$  MCS



$t=880$  MCS



$t=10000$  MCS

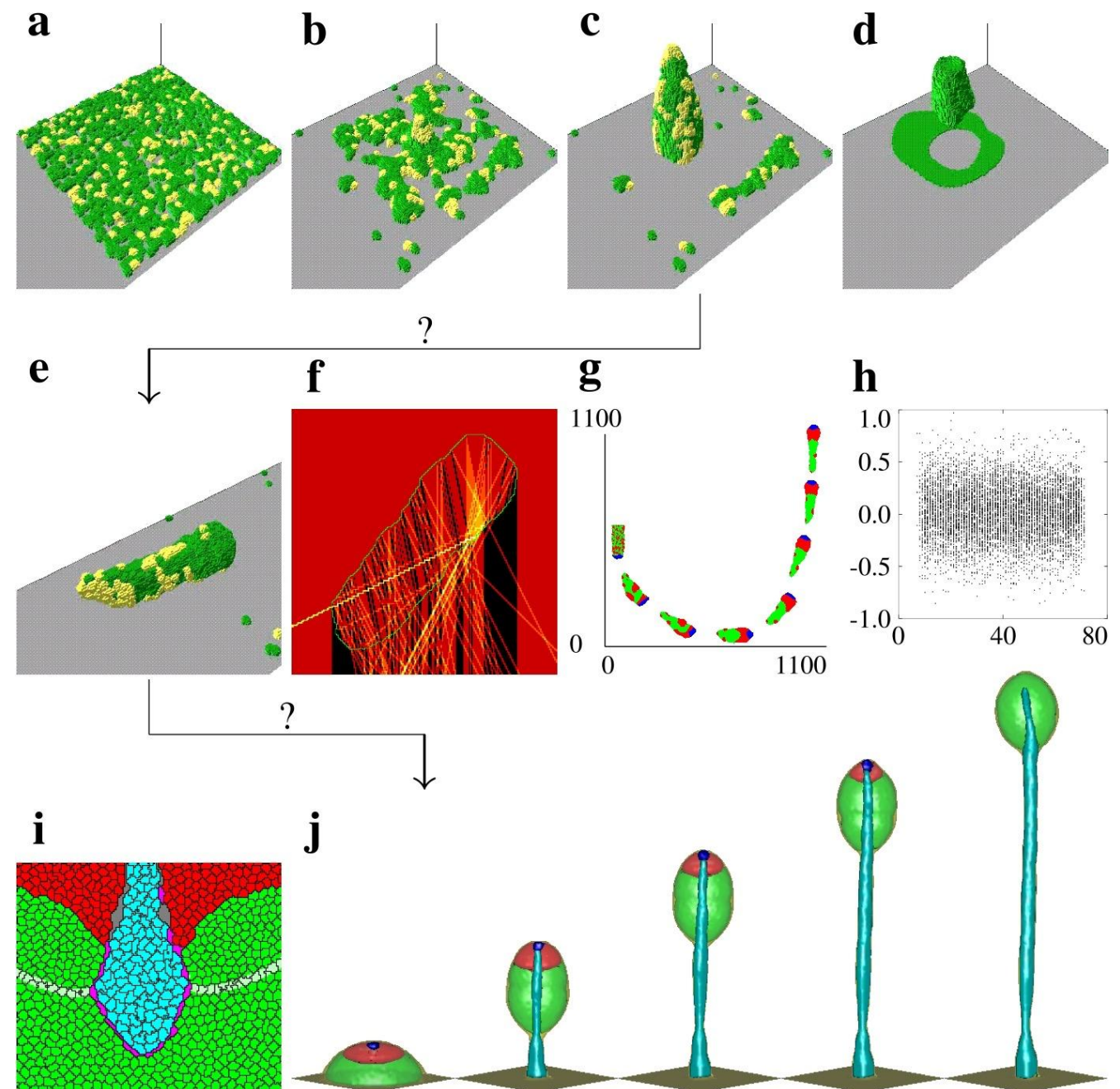
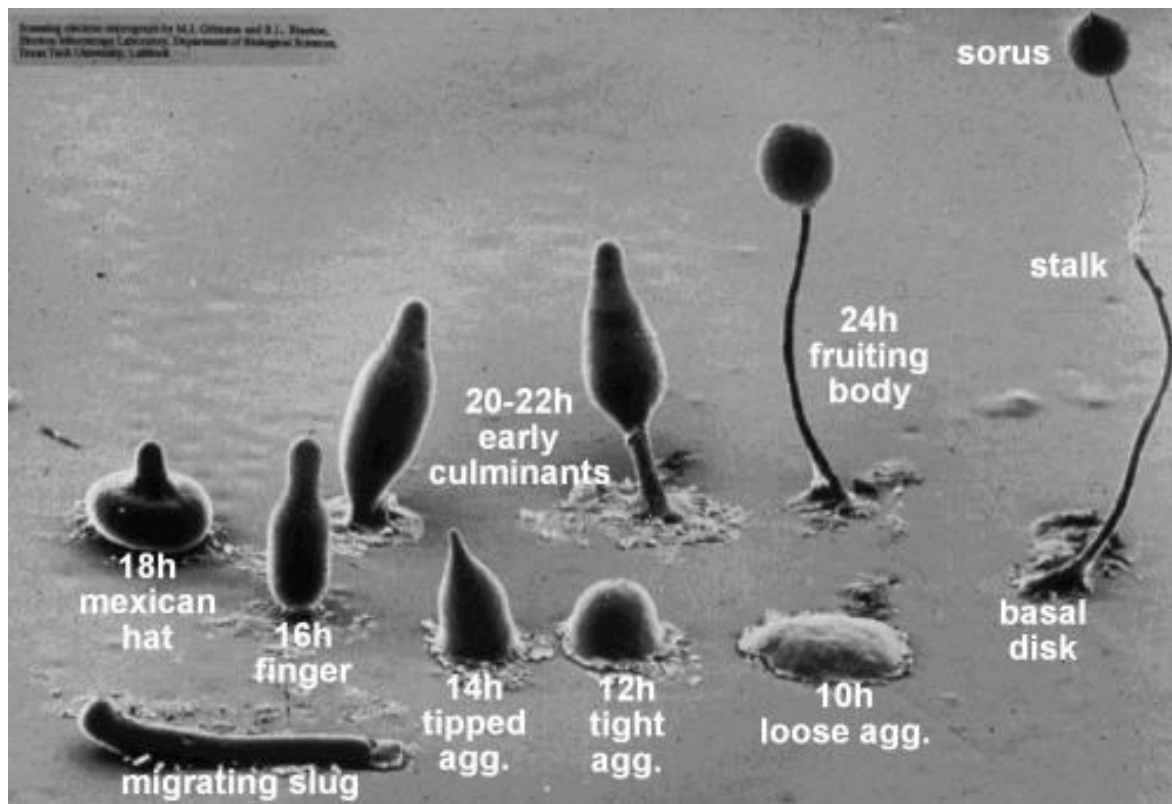
$$J = \begin{pmatrix} & \text{M} & \text{C} & \text{N} \\ \text{M} & 0 & 16 & 16 \\ \text{C} & 16 & 2 & 11 \\ \text{N} & 16 & 11 & 16 \end{pmatrix}$$

M — medium  
C — condensing  
N — noncondensing

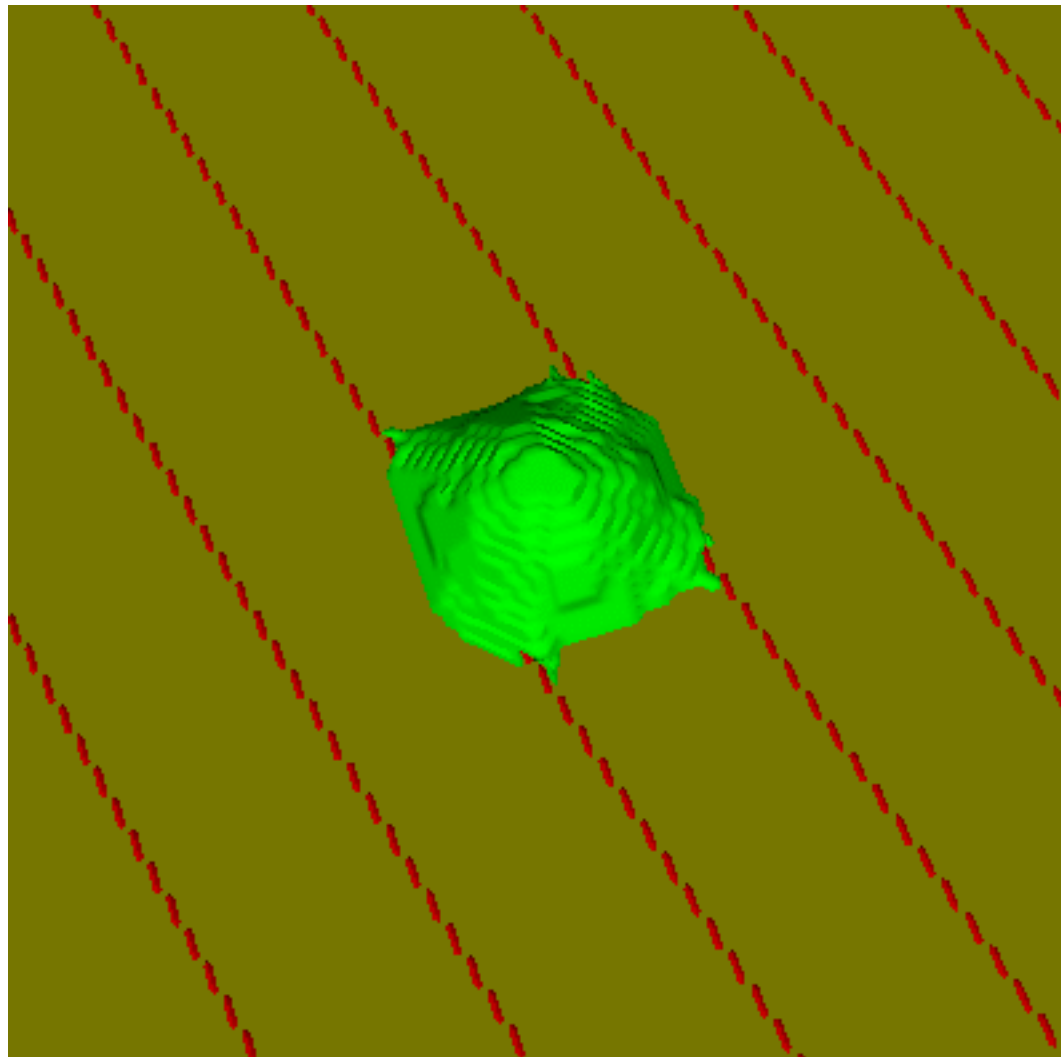


# Весь “жизненный цикл” слизевика (*Dictyostelium discoideum*) в многоклеточном виде описан моделью Поттса

К энергии добавляются члены, зависящие от концентрации различных веществ (напр. cAMP), для которых отдельно на той же вычислительной сетке решается уравнение реакции-диффузии



# На этом всё



Вытягивание клетки вдоль адгезивных волокон