코딩으로 공부하는 과학이야기
3차시: 몬테카를로 방법

서지범 (서울대학교 과학교육과 물리전공)
*jabam1264@snu.ac.kr

SEOUL NATIONAL UNIVERSITY

1. 몬테카를로 방법

1. 몬테카를로 방법

몬테카를로 방법(Monte Carlo method) 또는 몬테카를로 실험은 반복된 무작위 추출(repeated random sampling)을 이용하여 함수의 값을 수리적으로 근사하는 알고리즘을 부르는 용어이다.

수학이나 물리학 등에 자주 사용되며, 계산하려는 값이 닫힌 형식으로 표현되지 않거나 복잡한 경우에 근사적으로 계산할 때 사용된다.

넓은 의미의 몬테카를로 방법이란?
매번 다른 결과가 얻어지도록 random number를 이용해 결과를 얻는 것!

1. 몬테카를로 방법

2. 넓이 구하기

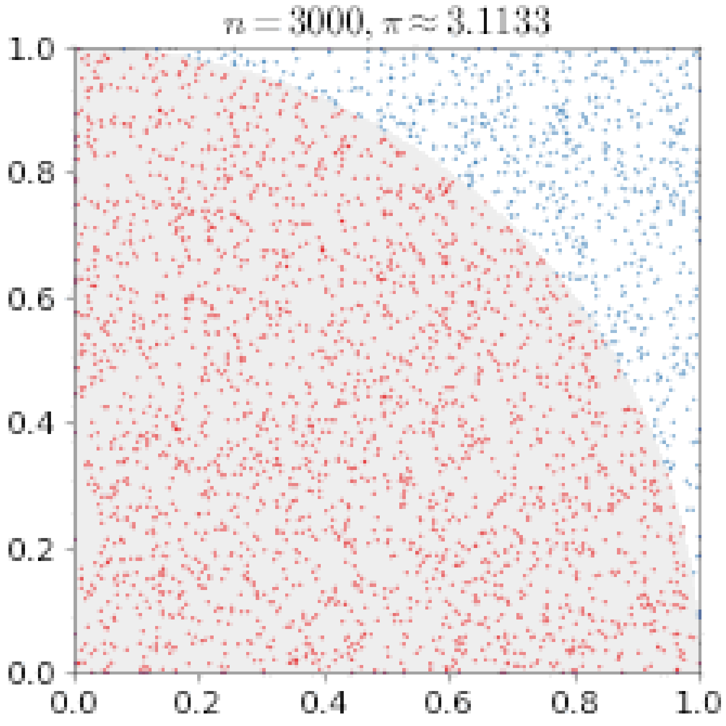
2. 넓이 구하기

몬테카를로 방법은 다양하지만, 특정한 패턴을 따르는 경향이 있다.

1. 표본 공간의 값으로 가능한 범위를 정의한다.
2. 표본 공간의 확률 분포에서 임의로 표본을 뽑는다. (표집한다.)
3. 표본에 대한 결정론적인 계산을 수행한다.
4. 결과를 집계한다.

예를 들어 단위 정사각형에 새겨진 사분원(원형 부분)을 생각해 보자. 몬테카를로 방법을 사용해서 π의 값을 근사치로 추정할 수 있다.[13]

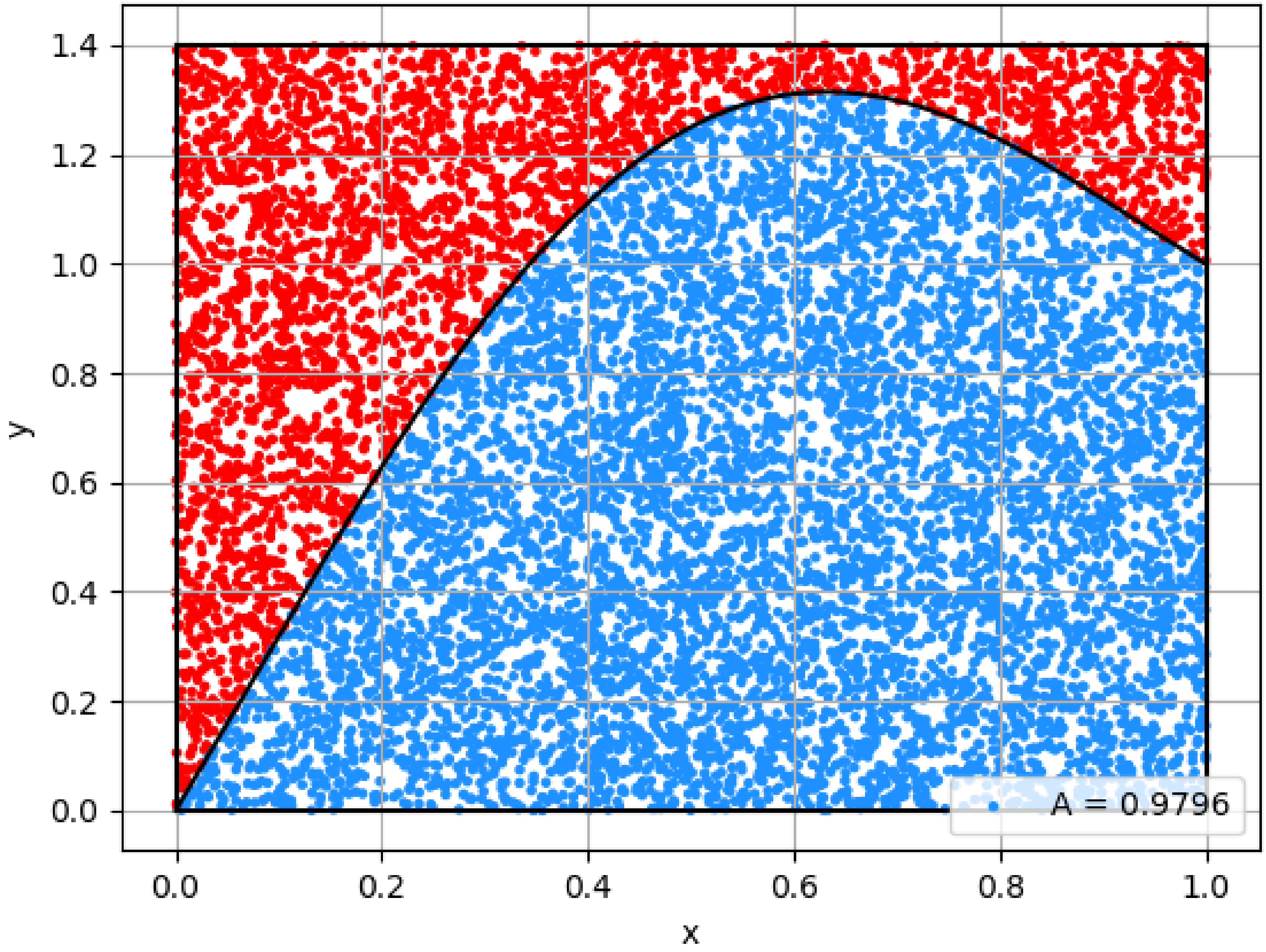
1. 정사각형을 그린 다음, 그 안에 사분원을 삽입한다.
2. 정사각형 위에 일정한 개수의 점을 균일하게 분포한다.
3. 사분원 내부의 점(즉, 원점으로부터 1 미만)의 개수를 센다.
4. 내부의 개수와 전체 개수의 비율은 두 영역의 비율을 나타낸다. 그 값에 4를 곱하여 π를 만든다.



여기서 두 가지의 중요한 점이 있다.

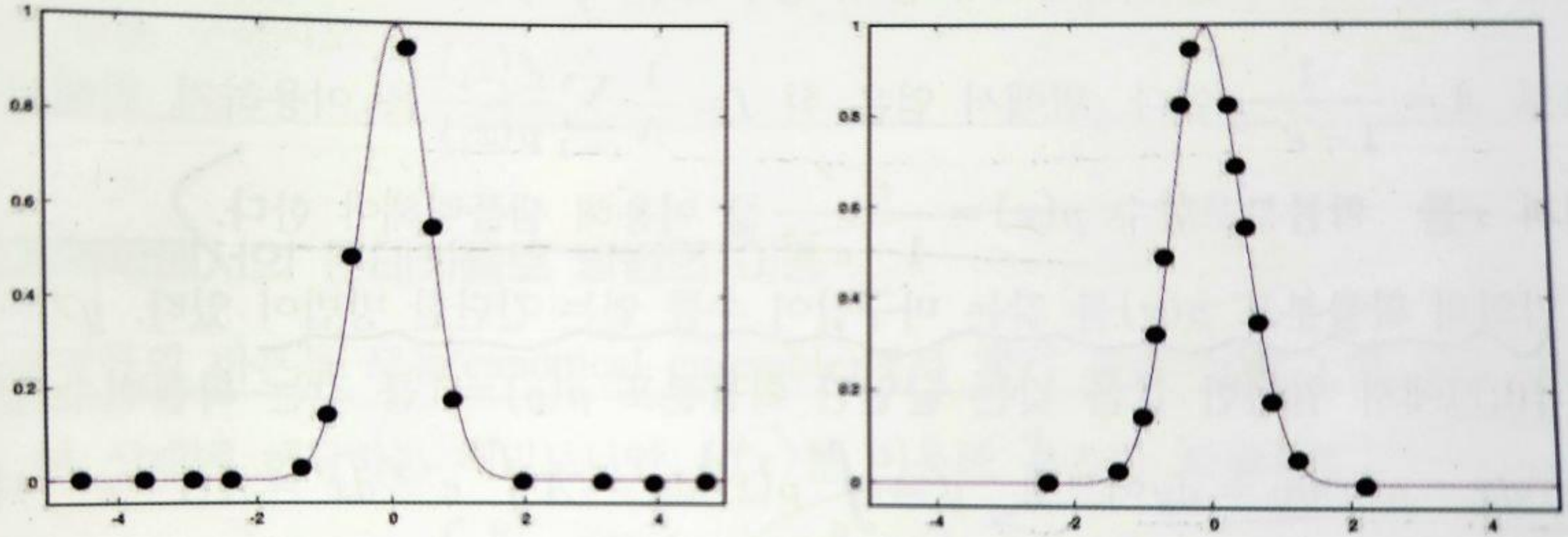
1. 점이 균일하게 분포되지 않으면 근사치가 떨어진다.
2. 평균적으로 더 많은 점을 배치할수록 근사치가 개선된다.

2. 넓이 구하기



https://studyingrabbit.tistory.com/33

2. 넓이 구하기



중요성 샘플링은 중요한 부분에서 더 촘촘하게 샘플링을 하는 방법이다. 중요성 샘플링(오른쪽)을 하면 균일한 샘플링(왼쪽)보다 더 정확한 적분값을 얻게 된다.

3. 물리 문제에 적용

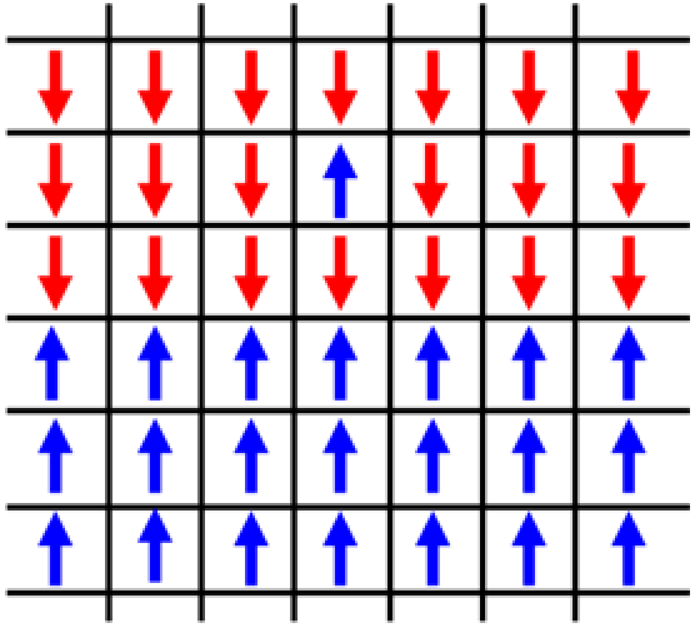
3. 이징 모델

통계역학에서 이징 모형(Ising model)은 자석의 간단한 격자 모형이다. 이징 모형은 강자성체를 위치가 고정되어 있는 자기 쌍극자의 격자로 나타낸다.

각 쌍극자는 +1 또는 −1 두 개의 상태를 가질 수 있고, 격자 위에서 바로 옆에 있는 쌍극자와 상호 작용한다.

$$H(\sigma) = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \mu\sum_j h_j\sigma_j$$

$$M = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sigma_i$$



3. 이징 모델

1. 전체 N개의 스핀 중 임의로 하나를 골라(k번째 스핀이라 하자),
   S_k를 $-S_k$로 바꾸자. 이렇게 만들어진 스핀 상태를 $\overrightarrow{S'}$라 하자.
2. 에너지 차이 $\Delta \mathrm{E} = H(\overrightarrow{S'}) - H(\vec{S})$를 계산한다.
3. 만약 $\Delta E \leq 0$이면,
   $\vec{S}$에서 k번째 스핀을 뒤집는다. 즉 $S_k \rightarrow - S_k$.
   만약 $\Delta E > 0$이면,
   $e^{-\beta \Delta \mathrm{E}}$의 확률로 $\vec{S}$에서 k번째 스핀을 뒤집는다. 즉 $S_k \rightarrow - S_k$.
4. 질서도 $m = \frac{1}{N} |\sum_i S_i|$를 계산해 저장한다.
5. 다시 과정1 $-$ 과정4를 여러 번 반복한다.
6. 모든 단계가 끝난 후 질서도의 평균값 $< m >$ 을 출력한다.
7. 위 전 과정을 온도 T를 바꿔가면서 반복한다.

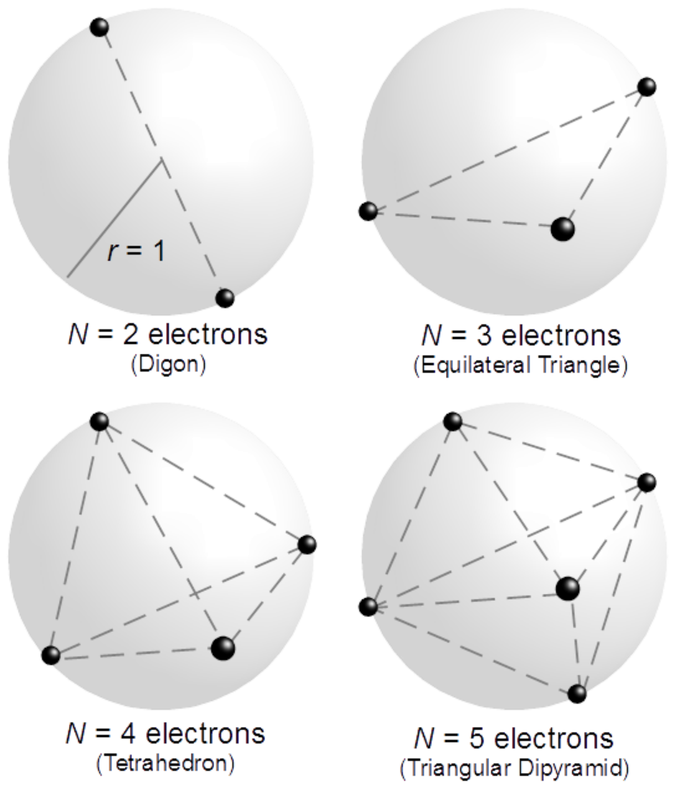
3. 톰슨 문제

톰슨 문제(Thomson problem)의 목적은 쿨롱 법칙에 의해 주어진 힘으로 서로 밀어내는 단위구의 표면에 구속된 N 전자의 최소 정전기 위치 에너지 구성을 결정하는 것이다.

$$U_{ij}(N) = \frac{1}{r_{ij}}$$

$$U(N) = \sum_{i<j} \frac{1}{r_{ij}}$$

Solutions of the Thomson Problem



https://en.wikipedia.org/wiki/Thomson_problem

Thank you