**شبیه سازی به روش مونت کارلو**

فهرست مطالب

[1- تاریخچه روش 2](#_Toc516262766)

[2- مبانی و مفاهیم اصلی روش 4](#_Toc516262767)

[3- اهداف روش 5](#_Toc516262768)

[4- موارد کاربرد روش 5](#_Toc516262769)

[5- ویژگی هاي روش 6](#_Toc516262770)

[5.1- انتگرال گیری 6](#_Toc516262771)

[5.2- محاسبه خطا 9](#_Toc516262772)

[5.3- نمونه برداری هوشمند 9](#_Toc516262773)

[5.4- انتگرال چندگانه 11](#_Toc516262774)

[5.5- استفاده در علم شیمی 11](#_Toc516262775)

[6- انواع و گونه شناسی روش 11](#_Toc516262776)

[6.1- شبیه سازی شبه مونت کارلو 11](#_Toc516262777)

[6.2- شبیه سازی مونت کارلو ادغامی 13](#_Toc516262778)

[7- فرآیند اجراي روش (مراحل و گام ها) 14](#_Toc516262779)

[8- نقاط قوت و نقاط ضعف روش 14](#_Toc516262780)

[9-مثال کاربردي در مدیریت از روش 15](#_Toc516262781)

[10- نتیجه گیری 15](#_Toc516262782)

[11- منابع 17](#_Toc516262783)

# 1- تاریخچه روش

روش مونت کارلو يکی از تکنيک­های بسيار کارآمد و مفيد برای شبيه سازی فرآيندهای آماری و شبه آماری است. اساس روش مونت کارلو مبتنی بر تولید اعداد تصادفی است. این روش در سال ١٩۴٨ توسط يولِم، و متروپوليس بر اساس بازی­های مبتنی بر شانس در قمارخانه­ های موناکو ابداع شد. این روش به سرعت توانست طرفداران بسیاری پیدا کند و در زمینه های مختلف علوم وارد شود. حوزه کاربرد این روش بسیار گسترده است. برخی از حوزه­ های کاربرد شبيه سازی مونت کارلو عبارتند از: فيزيک، پزشکی هسته­ ای، ترابرد ذرات، شيمی، زيست شناسی، رياضی و آمار، رشته­ های مهندسی، علوم کامپيوتر، علوم اجتماعی، اقتصاد، ترافيک و… . زمینه ­های مختلف استفاده از این روش با سرعت چشمگيری در حال افزایش است. در واقع روش مونت-کارلو یک الگوریتم محاسباتی است که از نمونه‌گیری تصادفی برای محاسبه نتایج استفاده می‌کند.

به دلیل گسترش روز افزون روشها و فناوریهای رایانه ای برای تشریح فرایندهای پیچیده، امروزه بسیاری از تجزیه و تحلیل های فرایند های مهندسی در زمینه مواد و فرایندها به روش تصادفی و به ویژه روش های مونت کارلو انجام می شود. این روش به جای نگاه جبر گرایانه و تکیه بر واقعیت ها، چگونگی فرایند طی زمان وقوع اتفاقات متحمل در زمان های آتی که بر مبنای توزیع احتمال هستند را بررسی میکند[1].

در مورد تاریخچه روش مونت کارلو در مراجع مختلف دو روایت وجود دارد:

روایت اول: متروپليس در سال ١٩١۵ در آمريکا متولد شد. او الگوريتم مشهور خود را به همراه دانشمندان دیگری از قبیل تیلر، روزنبلوث و ... در سال 1953 منتشر کرد. این الگوریتم جزء ١٠ الگوريتمی است که بيشترين تأثير را در توسعه و پيشرفت علوم و مهندسی در قرن بيستم داشته­ اند . متروپوليس، ون نيومان و يولِم برای روش محاسباتی ابداعی­ شان که مبتنی بر اعداد تصادفی است نام “مونت کارلو”  را انتخاب نمودند. در دوران جنگ جهانی دوم، گروهی از دانشمندان همچون وَن نيومان، فرمی، يولِم، متروپوليس و … در آزمایشگاه لوس آلاموس گرد هم آمدند و به کمک کامپيوترهای مدرن، جنبش عظيمی در پيشرفت روش مونت کارلو بوجود آوردند. آنها که خود از پيشگامان بزرگ اين روش بودند در توسعه و بسط آن با کامپيوترهای ديجيتال نیز نقش بسزايی داشتند[2].

روایت دوم: ریشه نام «مونت‌ کارلو» از زبان ایتالیایی است و به اصلیت اسم شاهزاده کارلو سوم از موناکو بر می‌گردد که زیر نفوذ و حمایت دربار ایتالیا قرار داشت. تا قبل از سال ۱۸۶۱ که موناکو به شکلی خودمختار درآمد، زبان رسمی ایتالیایی بود، اما در یکصد سال گذشته، زبان رسمی به فرانسوی تغییر داده شد.
مونت‌ کارلو نام منطقه‌ای است بسیار مشهور در کشور خودمختار موناکو واقع در اروپای غربی. جمعیت ساکن در مونت‌ کارلو در حدود ۳۰۰۰ نفر را شامل می‌شود. منطقه مونت‌ کارلو، ثروتمندترین منطقه از کشور خودمختار موناکو است.
نام روش مونت کارلو توسط تحقیقات فیزیکدانانی چون استنی‌سواف اولام، انریکو فرمی و جان فون نیومن شهرت فراوان یافت. این اسم مبدأیی به یک کازینو در موناکو است که عموی اولام برای قمار پول قرض می‌کرده‌ است. تصادفی بودن و تکرار طبیعی فرآیندها مشابه فعالیت‌های این کازینوها است[3].

شاید معروف‌ترین استفاده اخیر از این روش توسط انریکو فرمی در سال۱۹۳۰ باشد، هنگامیکه او از یک روش تصادفی برای دستیابی به خواص نوترون تازه کشف شده، استفاده کرد. همچنین روش‌های مونت کارلو مرکزیت شبیه سازی مورد نیاز در پروژه منهتن را داشتند اگرچه که در آن زمان در استفاده از ابزارهای محاسباتی در محدودیت جدی قرار داشتند؛ بنابراین مونت کارلو در زمانی مورد مطالعه و بررسی توسط دانشمندان قرار گرفت که رایانه‌های الکترونیکی برای اولین بار پا به عرصه گذاشتند. (از سال ۱۹۴۵ تا امروز)

روش‌های تصادفی برای محاسبه و آزمایش (که عموماً به عنوان شبیه سازی تصادفی شناخته می‌شوند) را بدون تردید می‌توان تا اولین پیشگامان نظریه احتمال دنبال کرد (سوزن بافون، کار جزیی روی نمونه‌ها توسط ویلیام گوست)، ولی به طور ویژه می‌توان آن را در دوران قبل از محاسبات الکترونیکی دنبال کرد. تفاوت اساسی که معمولاً درباره روش شبیه سازی مونت کارلو بیان می‌شود این است که به طور اصولی نوع روش شبیه سازی را وارون می‌کند و نظر مسایل را با یافتن مدل مشابه احتمالی به خود جلب می‌کند. روش‌های پیشین برای شبیه سازی و مدلسازی آماری عموماً عکس این کار را انجام می‌دادند: استفاده از شبیه سازی برای امتحان کردن مسایل مشخص قطعی. به هر حال همان‌طور که می‌دانیم مثال‌های دیدگاه «وارون» به صورت تاریخی نیز وجود دارند، آنها تا قبل از آمدن روش مونت کارلو به عنوان یک روش عمومی در نظر گرفته نمی‌شدند.

در ۱۹۵۰ در لوس آلاموس برای تحقیقات جدیدی که درباره بمب‌های هیدروژنی آغاز شده بود مورد استفاده قرار گرفت و در رشته‌های فیزیک و شیمی فیزیک و تحقیق در عملیات مشهور شد. شرکت رند(Rand) و نیروی هوایی ایالات متحده دو سازمان مرتبط برای جمع‌آوری و ارسال اطلاعات درباره روش‌های مونت کارلو در طول این زمان بوده ‌است، و کاربردهای گسترده این روش را یافته‌اند. استفاده از روش مونت کارلو نیاز به استفاده مقادیر زیادی اعداد تصادفی دارد و این استفاده باعث کنار رفتن و عدم گسترش زاینده‌های اعداد شبه تصادفی بود. روش مونت کارلو را می‌توان برای بسیاری از محاسبات مهندسی، مخصوصاً در بخش برق و تخمین‌های آن استفاده نمود[4].

# 2- مبانی و مفاهیم اصلی روش

هر فرآيندی که ماهيتی تصادفی داشته باشد، يک فرآيند آماری است. بسياری از فرآيندهای موجود در طبيعت نظير انداختن سکه، ريختن تاس، حرکت اتم های یک گاز، پراکندگی تابش ها از ماده، تونل زنی کوانتومی، واپاشی مواد راديواکتيو و برهم کنش تابش ها با ماده ماهيت آماری دارند.

شبيه سازی عددی فرآيندهای آماری يا شبه آماری تنها با روش های مبتنی بر اعداد تصادفی امکان پذير است. مهمترین روش شبیه سازی مبتنی بر اعداد تصادفی، روش مونت کارلو است. ساز و کار اصلی روش مونت کارلو به يکی از دو صورت زير است[5]:

* در صورت امکان خود مسئله شبيه سازی می شود.
* ابتدا يک مدل آماری متناسب با مسئله مورد نظر ساخته شده و سپس آن مدل شبيه سازی می شود.

در هر دو حالت، پارامترهای تصادفی مورد نياز بر اساس توزيع های آماری موجود در مسئله چندين بار نمونه برداری شده و سر انجام نتايج بدست آمده با روش های آماری تحليل می شوند. از آنجا که در شبيه سازی مونت کارلو، فرآيند مورد نظر همانند آنچه در واقعيت اتفاق می افتد شبيه سازی می شود، می توان آن را يک آزمايش نظری دانست.

این روش با انجام تکرار بسیار زیاد الگوریتم ها و محاسبات رایانه ای همراه است. در واقع جایی که انجام آزمایشات و محاسبات نظری بسیار پیچیده و پر هزینه هستند از این دست از روش های شبیه سازی استفاده می شود. این روش به یک الگوی ریاضی-آماری با دو جزء کلی تعیین پذیر تصادفی برای متغییر تحت بررسی نیاز دارد. این روش بر مبنای یک دنباله اعداد تصادفی در زمینه زمان یا فضا به همراه داده های ورودی و انجام پذیری رویدادهای محتمل می باشد.

به اين ترتيب می توان پنج گام ساده زير را برای شبيه سازی مونت کارلو در نظر گرفت[6]:

* ابداع يا پيشنهاد يک مدل پارامتری: y = f (x1,x2, … ,xq) .
* توليد مجموعه ای از ورودی های تصادفی : xi1, xi2, … , xiq .
* اعمال مدل پیشنهادی بر روی ورودی های تصادفی و محاسبه و ذخيره نتايج : yi .
* تکرار گام­ های دو و سه برای i = 1 , 2, 3, … , n .
* تحليل نتايج با استفاده از نمودارها و داده­ های آماری موجود و بررسی دقت و درستی آنها.

# 3- اهداف روش

شبیه سازی مونت کارلو به طور ویژهای در مطالعه سیستم ها با درجه آزادی زوج متعدد مورد استفاده قرار میگیرد، مثل مایعات، مواد متخلخل، مایعات شدیداً زوج و ساختارهای حفره دار (مانند ساختار حفره دار پات). روشهای مونت کارلو به صورت وسیعی در مدلسازی پدیده ها با مقادیر قابل توجهی عدم اطمینان در ورودی ها مورد استفاده قرار میگیرد، مثل: محاسبه ریسک در تجارت (مونه کاربرد آن در اقتصاد، مدلسازی تصادفی است) استفاده کلاسیک از این روشها برای ارزیابی و محاسبه انتگرال های معین، به طور خاص برای انتگرال های چند بعدی باشد با شرایط مرزی پیچیده، استفاده میشود[7].

روشهای مونت کارلو همچنین برای محاسبه ارزش سرمایه شرکتها، ارزیابی سرمایه پروژه ها نیز استفاده میشود. همچنین روشهای مونت کارلو در فیزیک محاسباتی، شیمی فیزیک و زمینه های مرتبط با این دو کاربرد فراوان دارد. مونت کارلو علاوه بر این، تأثیر بسزای خود را در حل معادله دیفرانسیل های زوج انتگرالی در زمینه تشعشع و انتقال انرژی ثابت کرده است، بنابراین این روش برای آشکارسازی جهانی محاسبات که مدلهای مجازی سه بعدی تصاویر فوتوریالیستیک را تولید میکند، مورد استفاده قرار میگیرد. روشهای مونت کارلو در زمینه های بسیاری نیز در ریاضیات محاسباتی مورد استفاده قرار میگیرد، که فقط یک خوش شانس میتواند نتیجه صحیح بگیرد. یک مثال کلاسیک، الگوریتم رابین است که برای آزمایش اول بودن اعداد مورد استفاده قرار میگیرد. [8]

# 4- موارد کاربرد روش

یکی از مهمترین کاربردهای روش مونت-کارلو، حل معادله موسوم به بلک-شولز در مورد مدلسازی بازار سهام دارای نرخهای تصادفی است. حل این معادله منجر به ساخت یک مدل شبیه سازی شده اقتصادی میگردد. این مدل اقتصادی برای پیشبینی تغییرات در یک بازار بورس مورد استفاده قرار میگیرد. از روش مونت کارلو در زمینه های زیر میتوان استفاده کرد[9]:

* گرافیک، به طور خاص خط اثر پرتو
* عدم قطعیت در سیستمهای قدرت
* مدلسازی جا به جایی نور در رشتههای زیستی
* مونت کارلو در اقتصاد
* مهندسی اطمینان
* در شبیه سازی پیچش برای پیشبینی ساختار پروتین
* در تحقیقات تجهیزات نیم رسانا، برای مدلسازی جا به جایی حامل های کنونی
* در محیط زیست، بررسی آلاینده ها
* کاربرد مونت کارلو در فیزیک استاتیک
* در طراحی احتمالاتی برای شبیه سازی و درک تغییرپذیری
* در شیمی فیزیک، به طور خاص برای شبیه سازی قالبهای اتم های درگیر
* کاربردهای گسترده در فیزیک هستهای

در علوم رایانه:

1. الگوریتم لاس وگاس
2. LURCH
3. Computer Go
4. بازیها

# 5- ویژگی هاي روش

 کاربرد روش مونت-کارلو در ریاضیات و آمار بسیار گسترده است. با استفاده از این روش، با انتخاب تصادفی یک یا تعداد محدودی پاسخ از میان پاسخهای موجود، تالش میشود تا به راه حل قابل قبولی دست یافت. این تکنیک زمانی ارزش پیدا میکند، که مجموعه آلترناتیوهای موجود برای پاسخ یک مسئله بسیار بزرگ باشد و عملاً امکان آزمودن تمامی آنها وجود نداشته باشد؛ یک نمونه کلاسیک در این زمینه، الگوریتم رابین برای تست اول بودن یک عدد است. الگوریتم رابین بیان میدارد که با داشتن یک عدد مانند n که غیر اول است، یک عدد تصادفی مانند x ،دارای احتمال ۷۵ درصد است تا ثابت کند عدد n عددی غیر اول است؛ بنابراین، با داشتن عدد غیر اولی مانند n اگر عددی تصادفی مانند x یافت شود، بطوری که ثابت کند n احتمالاً عددی اول است، ما موفق به آزمودن گزینه هایی شدهایم که احتمال رخداد آنها ۱ به ۴ است. حال با یافتن ۱۰ عدد دیگر مانند x که ثابت کند n احتمالاً عددی اول است، موفق به یافتن مجموعهای شدهایم که احتمال وقوع آنها ۱ به میلیون است. الگوریتم لاس وگاس نیز از روش مونت-کارلو بهره میبرد. یکی از رایجترین کاربرد مونت کارلو، انتگرال گیری مونت کارلو است[4].

## 5.1- انتگرال گیری

روشهای قطعی انتگرال گیری عددی به وسیله دریافت عدد نمونههای فاصلهدار یکنواخت از یک تابع است. به طور کلی، این روش برای توابع یک متغیری بسیار خوب جواب میدهد. در حالیکه برای تابعی از بردارها، روشهای تربیع قطعی بی تاثیراند. (مثلاً برای محاسبه انتگرال X2 اعداد تصادفی تولید شده توسط توابع گاوس را در صفحه ای مشخص میریزد و با استفاده از نسبت نقاط داخل و خارج تابع مساحت محاسبه میشود).

برای انتگرال گیری عددی از یک تابع دو متغیره از بردارها، نقاط فاصلهدار به صورت چهارخانه به طور مساوی روی صفحه دو بعدی مورد نیاز است. برای نمونه یک صفحه ۱۰×۱۰ نیاز به ۱۰۰ نقطه دارد. اگر بردار ما ۱۰۰ بعدی باشد، تقسیمبندی مورد نیاز روی صفحه، نیاز به 100 10(عدد گوگول) نقطه دارد که برای محاسبه بسیار بزرگ است. روش مونت کارلو روشی را برای خروج از این رشد نمایی پیشنهاد میکند. تا زمانی که تابع مورد سؤال یک تابع خوش رفتار است، به وسیله انتخاب تصادفی نقاط در فضای ۱۰۰ بعدی و گرفتن نوعی میانگین از مقادیر تابع در این نقاط، میتواند تخمین زده شود. با به کارگیری قانون اعداد بزرگ، این روش همگرایی به  را نشان میدهد[1].

یکی از مزایای محاسبه انتگرال گیری به روش مونت کارلو امکان محاسبه خطا به همراه انتگرال و کنترل توقف برنامه بعد از رسیدن به دقت مطلوب است. شما میتوانید همراه با متوسط تابع مقدار انحراف از معیار آن را نیز محاسبه کنید. با داشتن مقدار انحراف معیار شما میتوانید تخمین از تعداد نمونه ها برای اینکه دقت مورد نظر را بدست آورید تخمین بزنید. برای این کار کافی است که بعد از مثال چند هزار نمونه ای که میگیرید مقدار انحراف از معیار را بدست آورید. بدیهی است که در مقدار انحراف از معیار هم مانند متوسط خطا دارید، ولی این کمیت برای تخمین دقت بکار میرود و خطای آن اهمیت زیادی در این تخمین ندارد.

محاسبه ی انتگرال با روش کاملا تصادفی امکان پذیر است ولی مانند همیشه ساده ترین راه برای حل مسئله بهترین راه نیست[6].



که در اینجا داریم:



این تابع یکه نیست و



پس میتوانیم انتگرال مورد نظر را به صورت



نوشت. ولی عبارت کسری در سمت راست چیزی نیست به غیر از تعریف متوسط تابع (x)f در بازه a تا b. در نتیجه



این نتیجه را میتوان با توجه به تصویر هندسی انتگرال که در زیر داده میشود بهتر درک کرد.



از شکل در می یابیم که مساحت زیر تابع برابر است با مساحت مستطیلی با عرض برابر و ارتفاع متوسط تابع است.

در نتیجه برای محاسبه ی انتگرال کافی است که مقدار متوسط تابع در فاصله انتگرال گیری را داشته باشیم. این کار را میتوان به راحتی با استفاده از روش نمونه برداری آماری انجام داد. یعنی کافی است که مقادیر تابع را در نقاطی که کاملا به طور تصادفی انتخاب میکنیم بخوانیم و بعد با میانگین گرفتن از آنها مقدار متوسط تابع را تخمین بزنیم. اگر رشته اعداد کاتوره ای  را در اختیار داشته باشیم. مقدار متوسط تابع به راحتی قابل محاسبه است:



و با داشتن مقدار متوسط انتگرال را میتوانیم از رابطه فوق محاسبه کنیم. این روش از روش شلپ به دلیل اینکه برای نمونه برداری کافی است که بر روی یک محور نمونه برداری کنیم و نیازی به جستجو در فضای دو بعدی ندارد بسیار کارا تر است. این روش محاسبه انتگرال را مونت کارلو مینامند. به دلیل یکنواختی در نمونه برداری آنرا مونت کارلو با نمونه برداری ساده مینامند.

## 5.2- محاسبه خطا

حال وقت آن رسیده که به موضوع مهم دقت و خطای محاسبات بپردازیم. واضح است که دقت انتگرال به دقت در محاسبه ی متوسط تابع بر میگردد. دقت در محاسبه ی متوسط هم دو عامل مهم دارد. اول شکل خود تابع بشدت اهمیت دارد. متوسط یک تابع هموار و نسبتا افقی که افت و خیز کمی در بازه انتگرال گیری داشته باشد به راحتی و با نمونه برداری بسیار کم و محدود با دقت، خوبی قابل محاسبه است. پس خطای محاسبه به میزان افت و خیز تابع، بستگی دارد[3].

گر برای محاسبه ی متوسط تابع متوسط گیری را با مجموعه دیگری از اعداد تصادفی تکرار کنیم مقدار جدید با مقدار قدیم متفاوت خواهند بود و این معیاری از خطای محاسبه است . بنابراین  خود تابع توزیعی دارد که پهنای آن (انحراف معیار) معیاری از خطای محاسبه ی آن است. بر اساس قضیه حد مرکزی این تابع توزیع گوسی است و پهنای آن یا خطای محاسبه از رابطه ی زیر بدست می آید.



## 5.3- نمونه برداری هوشمند

روش مونت کارلو با نمونه برداری ساده، روشی بسیار کارا برای انتگرال گیری از توابع کم افت و خیز و نیز در بازه ی محدود است. ولی استفاده از این روش در دو حالت به مشکل برخورد میکند.

* انتگرال گیری با حدود بینهایت
* انتگرال گیری از توابعی که افت خیز زیادی دارند و به طور مثال انتگرال ده در بیشتر محدوده ی انتگرال گیری مقدار خیلی کوچکی دارد و فقط در یک ناحیه ی بسیار کوچک در مقایسه با حدود انتگرال غیر صفر است.

در هر دو حالت بالا اگر از روش نمونه برداری ساده استفاده کنیم در بیشتر زمان نمونه هایی را داریم که ارزشی در محاسبه ی ما ندارند. برای درک این مشکل به تصویر مساحت زیر انتگرال برگردید. فرض کنید که تابع فقط در حوالی یک ماکزیمم بسیار بلند دارد و در بقیه نقاط مقداری بسیار کوچک و نزدیک به صفر دارد. حال اگر در نمونه برداری ساده این ماکزیمم را از دست بدهیم مطمئنا مقدار مساحت زیر منحنی را بسیار کمتر از آنچه هست بدست میاوریم. برای رفع این مشکل باید مطمئن باشیم که نقاطی که تابع مقدار قابل توجهی دارند حتما در متوسط گیری لحاظ میشوند. این داستان را میتوان به شکل ریاضی تری نیز توضیح داد. به انتگرال



برمیگردیم. فرض کنید که تابع (x)g که در بازه انتگرال گیری به تابع (x)f شباهت دارد را بشناسیم. لازم است که انتگرال این تابع را در بازه فوق را نیز بدانیم. در این صورت انتگرال را میتوانیم به صورت



یا با کمی تغییرات به شکل



نوشت. کسر انتهایی در سمت چپ چیزی جز متوسط تابع (x)f با تابع توزیع احتمال



نیست. پس انتگرال را میتوانیم به صورت



است. در اینجا منظور از متوسط گیری بر روی اعداد کاتوره ای x است که از تابع توزیع (x)g تبعیت کند



توجه کنید که برای محاسبه متوسط این کسر با تابع توزیع (x)g فقط کافی است که اعداد کاتوره ای x با این تابع توزیع تولید شده باشند. مشابه الگوریتم قبل خطای محاسبه به افت و خیز تابع f(x)/g(x) بستگی دارد. اینجاست که اهمیت شباهت f و g مشخص میشود. اگر این دو تابع به یکدیگر شبیه باشند حاصل کسر تابعی هموار و کم افت و خیز است. در نتیجه با تعداد کمتری نمونه گیری در مقایسه با روش نمونه برداری ساده به دقت مطلوب میرسیم.

از شباهت f و g نکته ی دیگری نیز حاصل میشود. هرجا که f کوچک باشد g هم کوچک است و در نتیجه احتمال داشتن x در این ناحیه کم است. در مقابل در جاهایی که f و g بزرگ هستند، احتمال نمونه برداری بیشتر است. برای همین به این روش نمونه برداری هوشمند گفته میشود.

## 5.4- انتگرال چندگانه

یکی از مزایای خیلی مهم انتگرال گیری مونت کارلو سادگی تعمیم آن به ابعاد بالاتر و حل انتگرال های چند گانه است. فقط کافی است که متوسط تابع محاسبه شود. البته این بار این تابع بیش از یک متغیر دارد و برای نمونه برداری باید از مولد اعداد کتره ای برای تمام متغیرها استفاده کرد.[5]

## 5.5- استفاده در علم شیمی

همچنین از کاربردهای عملی این روش در دانش شیمی فیزیک، میتوان به ساخت و بررسی مدل مولکولی اشاره نمود که به عنوان جایگزینی برای روش محاسباتی دینامیک مولکولی و شیمی کوانتومی مطرح میشود. هدف اصلی روش مونت کارلو یا دینامیک مولکولی محاسبه خواص تعادلی یک سیستم است. در این روش پس از حصول اطمینان از بودن در حالت تعادل، با تغییر تصادفی موقعیت و جهت گیری ذرات موجود در سیستم، پیکربندی هایی از سیستم تولید میشود. منظور از پیکربندی مجموعهای از موقعیت و جهت گیری همه ذرات در یک حالت از تمام حالتهای ممکن سیستم است. پیکربندی تولید شده در هر مرحله با احتمالی که توسط قوانین ترمودینامیک آماری تعیین میگردد، رد یا تأیید میشود. این احتمال به انرژی پتانسیل بین دو ذره بستگی دارد. در هر پیکربندی خاصیت ترمودینامیکی مورد نظر اندازهگیری میشود. با نمونه برداری صحیح از این پیکربندی ها و میانگین گیری، میتوان مفدار آن خاصیت را در حال تعادل به دست آورد. مزیت این روش نسبت به دینامیک مولکولی، نیاز نداشتن به محاسبه اندازه حرکت برای هر ذره است که باعث کاهش زمان محاسبات رابان های میشود. از معایب این روش میتوان به دست نیاوردن اطلاعات راجع به دینامیک سیستم اشاره کرد.

# 6- انواع و گونه شناسی روش

## 6.1- شبیه سازی شبه مونت کارلو

این مسئله هم به صورت نظری و هم به صورت تجربی ثابت شده که در بیشتر مواقع خطاهای شبیه سازی با روش مونت کارلو سنتی بسیار بیشتر از روش شبه مونت کارلو است و از طرفی دیگر استفاده از اعداد پسدو نرخ تصحیح انحراف کمی را نیز برای این شبیه سازی به ارمغان می آورند. در بسیاری از مسائل تجربی نظیر موادی که در علوم مالی با آنها سر و کار داریم، محاسبه معیارهای مورد نظر، در واقع نوع تخمین انتگرال چندگانه یک تابع چند بعدی (چند متغییره) است، برای مثال تابع تسویه قراردادهای حق انتخاب با متغیرهایی که ارزش آنها از یک تابع چگالی فرضی تبعیت می کند). در این نوع از کاربرد ممکن است مهم نباشد که برخی از ویژگی های آماری مانند استقلال، به جای برخورداری از سرعت همگرایی بالاتر، فدا شوند. در این طبقه از مسائل، ایده بکارگیری سری های اغتشاش از درجه کم، مطرح شد. این ایده پایه اولیه ساخت سری اعداد شبه تصادفی را تشکیل می دهد. برای کاربردهایی که حضور ویژگی استقلال از ضروریات است، از یک بدیل دیگر به نام «سری های شبه تصادفی ادغامی» استفاده می شود. در بخش بعد به این مورد اشاره خواهد شد.

همانطور که اشاره شد اعداد شبه تصادفی دارای ویژگی های اغتشاش از درجه کم هستند. این خصوصیت معیاری برای اندازه گیری یکنواختی توزیع نقاط است. در واقع این شاخص نشان دهنده عدم وجود فضای خالی بزرگ یا خوشه شدگی داده ها در صفحه یا حجم های مختصات است. در حقیقت در این تعریف مفهوم اغتشاش به جای واریانس برای توضیح دادن میزان پراکندگی نقاط آمده است. خوشبختانه اگر کاربر دانش اولیه را داشته باشد و بداند چه وقت و چگونه از این سری ها استفاده کند، دانستن جزئیات فنی برای شبیه سازی خوب و مناسب لازم نیست.

مفهوم اغتشاش کم به این معنی است که اعداد متوالی به گونه ای دنبال هم قرار می گیرند که تا حد ممکن از اعداد دیگر دور باشند. یعنی تا جایی که امکان دارد از تجمع و خوشه شدگی نقاط جلوگیری می شود. خلاصه ای از ساده ترین روش های دستیابی به این اعداد توسط وان در کرپوت به صورت زیر ارائه شده است:

1. تمام اعداد لازم در سری در حال شبیه سازی تعیین می شوند (برای مثال T=100)
2. تمام اعضا عضو مجموعه  که در آن k عددی مثبت و انتخابی است در پایه b که یک عدد اول است نوشته می شوند (برای مثال 4 همان عدد 100 در پایه 2 است)
3. اعداد محاسبه شده در پایه b چپ و راست نوشته می شوند (برای مثال 001 → 100)
4. اعداد محاسبه شده در مرحله 3 یکبار دیگر بر پایه ده دهی محاسبه می شوند (برای مثال 125/0 →001)
5. بدین ترتیب سری از اعداد در فاصله (0.1) بدست می آید که گرچه تصادفی نیست، اما به صورت یکنواخت در طول این بازه توزیع شده اند.

همانطور که به وضوح مشخص است با تغییر دادن مقدار k , b می توان سری های شبه تصادفی دیگری ساخت که همگی دارای طول T بوده و در دامنه (0.1) به صورت یکنواخت توزیع شده باشند. این عمل در مسائل چند متغیری و برای تکرار شبیه سازی ضرورت دارد. علی رغم این توضیح، دانشمندان و محققان پیوسته به دنبال روش ها و متدهای جایگزین بودند. شیوه شبیه سازی (شبه) مونت کارلو ادغامی به این منظور برای اولین بار توسط کافلیش، موروکوف و اوون در سال 1997 معرفی شد[10]. در ادامه به صورت گذرا مطالبی در این خصوص ارائه شده است.

## 6.2- شبیه سازی مونت کارلو ادغامی

 در روش پیشنهادی کافلیش و دیگران، به طور ساده از سری های شبه تصادفی، برای ابعاد اصلی و از سری های تصادفی برای سایر ابعاد پسدو استفاده شده است. ایده اصلی این است که از دقت روش مونت کارلو برای آن گروه از متغییرها که از اهمیت بالاتری برخوردارند (در حالی که تعداد ابعاد زیاد است)، بدون اینکه تحت تاثیر افزایش ابعاد قرار گیرد، استفاده شود. اما در بسیاری از موارد، تفکیک متغیر پر اهمیت از کم اهمیت به این آسانی امکان پذیر نیست. از طرفی دیگر در برخی موارد در مباحث مالی نیز وجود استقلال بین سری اعداد شبیه سازی شده بسیار مهم است. در اینگونه حالات باید به دنبال روش دیگری بود[10].

ساده ترین راه برای دهم آمیختن ویژگی های بین زمانی سری های شبه تصادفی با الزامات استقلال، استفاده از انتقال تصادفی بردارهایی با درجه اغتشاش کم است. شکل زیر به درک بهتر موضوع کمک می کند. هر ستون بیانگر یک بردار شبه تصادفی معین است. تعداد این بردارها نشان دهنده بعد مسئله یا همان d می باشد. تعداد عناصر درون هر بردار یا سطرها، برابر تعداد شبیه سازی ها یا همان مسیرهای نمونه است. حال برای مثال می خواهیم سری از خصوصیت استقلال تبعیت کند.



در مونت کارلو، تمامی بردارهای موجود سری های شبه تصادفی شبیه سری وان در کرپورت هستند که به طور تصادفی بُر خورده اند و از نو به شکلی دیگر در توالی هم آورده شده اند. به طور خلاصه:

1. یک سری تصادفی با اغتشاش کم (نظیر سری وان در کرپوت در پایه 2 به عنوان ساده ترین آنها) با N عنصر ایجاد و از آن به شکل بردار پایه استفاده می شود.
2. d تبدیل تصادفی از بردار پایه ساخته و به کار گرفته می شود.

ایده اصلی در این روش شکستن همبستگی موجود بین عناصر سری های شبه تصادفی است. به این ترتیب بردار (سری) بدست آمده وِیژگی اغتشاش کم خود را حفظ می کند، همبستگی میان عناصر از بین می رود، اعداد کماکان در بازه (1 و 0) قرار می گیرند و ویژگی توزیع یکنواخت باقی می ماند. در حال حاضر، شیوه های دیگری نیز بدین منظور توسط محققان ارائه شده که به دلیل پیچیده بودن از ذکر آنها صرف نظر شده است[10].

# 7- فرآیند اجراي روش (مراحل و گام ها)

در شکل زیر نمودار فرایند کلی روش شبیه سازی مونت کارلو را مشاهده می کنید.



# 8- نقاط قوت و نقاط ضعف روش

* در روش مونت کارولو نرخ همگرایی به صورت کمی است، اما این نرخ با افزایش یا کاهش ابعاد مسئله (تعداد متغییرها که با d نشان داده می شود) تغییری نمی کند و فقط با افزایش تکرارها کاهش می یابد.
* نرخ همگرایی شبیه سازی مونت کارلو در دامنه (بدترین حالت، بهترین حالت) قرار دارد. بهترین حالت تابعی از تعداد ابعاد مسئله نیست. بدترین حالت با افزایش d، افزایش می یابد. به طوری که در نهایت فایده استفاده از این روش از بین می رود. این اتفاق در d=5 اتفاق می افتد. با اینحال در کاربردهای مالی به دلیل استفاده از توابع هموار برای تنزیل جریان عایدی ها، احتمال وقوع نتایج شبیه سازی مونت کارلو در نزدیکی بهترین حالت، بالاست.

# 9-مثال کاربردي در مدیریت از روش

برای مثال می‌توان مقدار عدد π (پی) را با استفاده از روش مونته کارلو محاسبه نمود. یک مربع روی صفحه ترسیم کنید، سپس یک دایره را درون آن محاط کنید. در ادامه چندین شکل با اندازه یکسان را روی آن به طور یکنواخت پخش کنید (برای مثال، دانه‌های شن یا برنج) در سرتاسر مربع. سپس تعداد اشیاء درون دایره را بشمارید، در چهار ضرب کنید و عدد به دست آمده را بر تعداد کل اشیاء درون مربع تقسیم نمایید. نسبت اشیاء درون دایره در مقابل اشیاء درون مربع تقریباً برابر خواهد بود با ۴/π، که همان نسبت سطح دایره ‌است به سطح مربع؛ بنابراین شما تخمینی از عدد π را به دست آورده‌اید. توجه داشته باشید که چگونه تخمین عدد π از یک الگوی مشخص شده در روش مونته کارلو پیروی می‌کند. ابتدا ما یک محدوده از متغیرها را تعریف کردیم که یک مربع بود که دایره ما را محاط کرده بود. سپس ورودی‌ها را به طور تصادفی تولید کردیم (پخش دانه‌ها به طور یکنواخت درون مربع)، سپس محاسبات را برای هر ورودی انجام دادیم (بررسی کردیم که آیا دانه درون دایره هست یا نه). در آخر، تمام جواب‌ها را در جواب نهایی ادغام نمودیم. همچنین به این نکته توجه داشته باشید که دو ویژگی مشترک دیگر روش‌های مونت کارلو این است: اتکای محاسبات بر اعداد تصادفی خوب همگرایی تدریجی به سمت تخمین‌های بهتر در زمانی که داده‌های بیشتری شبیه سازی می‌شوند [8].

# 10- نتیجه گیری

حدود پنجاه سال است که محققان و فعالان علوم و فنون مختلف به طور جدی بسته به نیازی که احساس می کنند سرگرم کار با روش های گوناگون شبیه سازی پدیده های دنیای حقیقی مورد توجه خود هستند. از انواع روش های شبیه سازی ، روش مونت کارلو جهت ایجاد داده هایی که هنوز اتفاق نیفتاده است و باید پیش بینی شود و به دلیلی ثبت نشده ، و دست یابی به آنها سخت و بسیار هزینه بر است به کار می آید.

از آنجا که این روش بر مبنای ساخت اعداد تصادفی با توزیع یکنواخت پایه گذاری شده است، الگوریتم های مختلفی که به این منظور طراحی شده است را به این منظور مورد استفاده قرار می دهد. اما هیچ یک از این الگوریتم ها به طور صد درصدی در ایجاد چنین سری از اعدادی موفق عمل نمی کنند. پرکاربردترین آنها یعنی محاسب اعداد تصادفی پسدو در برقراری یکنواختی در توزیع اعداد تصادفی ضعف دارند. همین امر باعث می شود دفعات محاسبه برای بالا رفتن درجه اطمینان و در نتیجه هزینه ها و زمان انجام آن به شدت افزایش یابد. به این دلیل شبیه سازی شبه مونت کارلو که از مولد اعداد با درجه اغتشاش کم بهره می برد، کاربرد پیدا کرد. اما این روش نیز کارایی خود را در مورد مسائلی با تعداد متغییر بالا و بررسی موضوعاتی که در آنها حفظ استقلال بین پیشامدها و متغیرها حیاطی است، از دست می دهد. از این رو، روش مونت کارلو ادغامی پیشنهاد شد.

به طور کلی کاربردهای متعددی برای این گروه از شبیه سازی در مباحث مالی وجود دارد و به کرات شاهد بهره گیری از آنها در موضوعاتی نظیر بودجه بندی سرمایه، قیمت گذاری دارایی های مشتقه، برآورد عدم اطمینان و ریسک های مالی، جریان های مالی و از این دست هستیم. اما باید توجه داشت که نباید در استفاده از این روش دچار افراط و تفریط یا سردرگمی و ساده انگاری شد. محققی که خواهان بهره گیری از توانایی های این روش است، باید به تمام نقاط ضعف آن نیز واقف باشد، موارد اثر گذار بر کارایی ان را بشناسد، و به روش های بدیل و جایگزین آن آشنا باشد، راه های تعدیل آن را بسته به شرایط مختلف و پیچیدگی های موجود مد نظر قرار دهد و بتواند نتایج حاصل از آن را تحلیل کند. لذا کار با این روش هیچگاه به سادگی آنچه ممکن است در ابتدا آشنایی با آن به نظر بیاید نیست.

اما از طرف دیگر پیشرفت های اتفاق افتاده در عرصه فناوری های محاسباتی باعث گشته تا ضمن لحاظ کردن یافته های جدید بتوان سرعت شبیه سازی را بالا برد. این پیشرفت ها از لحاظ دیگر، افزایش حجم مطالعات و بهبود کیفیت آنها را موجب خواهد شد. این واقعیت، مرزبندی، طبقه بندی، و رتبه بندی های دیگری را در بین روش های موجود باعث خواهد شد و به خلق روش ها، مدل ها و ابزار دقیق تر و کارآمد تر کمک خواهد کرد. همه این پیامدها به تثبیت هرچه بیشتر جایگاه روش های مختلف شبیه سازی خواهد انجامید.

# 11- منابع

[1] P. Saidi, M. Sadeghi, A. Shirazi, and C. Tenreiro, "Monte Carlo calculation of dosimetry parameters for the IR08‐P103d brachytherapy source," *Medical physics,* vol. 37, pp. 2509-2515, 2010.

[2] E. Vitali, H. Shi, M. Qin, and S. Zhang, "Computation of dynamical correlation functions for many-fermion systems with auxiliary-field quantum Monte Carlo," *Physical Review B,* vol. 94, p. 085140, 2016.

[3] J. M. Boone, J. A. Seibert, C.-M. Tang, and S. M. Lane, "Grid and slot scan scatter reduction in mammography: comparison by using Monte Carlo techniques," *Radiology,* vol. 222, pp. 519-527, 2002.

[4] J. Pengelly, "Monte carlo methods," *University of Otago,* 2002.

[5] J. M. Charnes, "Options pricing: using simulation for option pricing," in *Proceedings of the 32nd conference on Winter simulation*, 2000, pp. 151-157.

[6] M. G. Hilgers, "Quasi-Monte Carlo methods in cash flow testing simulations," in *Proceedings of the 32nd conference on Winter simulation*, 2000, pp. 517-526.

[7] B. W. Schmeiser, "Some myths and common errors in simulation experiments," in *Simulation Conference, 2001. Proceedings of the Winter*, 2001, pp. 39-46.

[8] D. B. Hertz, "Risk analysis in capital investment," *Harvard Business Review,* vol. 42, pp. 95-106, 1964.

[9] J. X. Li and P. Winker, "Time series simulation with quasi Monte Carlo methods," *Computational Economics,* vol. 21, pp. 23-43, 2003.

[10] R. E. Caflisch, W. J. Morokoff, and A. B. Owen, *Valuation of mortgage backed securities using Brownian bridges to reduce effective dimension*: Department of Mathematics, University of California, Los Angeles, 1997.