

# Metody Monte Carlo dla równań różniczkowych

Metody Monte Carlo – najogólniej te, które do rozwiązania zadania (obliczenia wyniku) wykorzystują próbkowanie losowe.

Stosowane nie tylko w modelowaniu procesów losowych, również do problemów nie mających nic wspólnego z rachunkiem prawdopodobieństwa (patrz – nasze doświadczenie z pierwszego semestru dla optymalizacji MC lub liczenia całek).

W tradycyjnej teorii MC problemy takie rozwiązuje się stawiając (nowe) zadanie z rachunku prawdopodobieństwa, które ma to samo rozwiązanie co zadanie pierwotne. Zadanie nowe rozwiązywane jest przez eksperyment statystyczny.

Znany przykład:  $I = \int_a^b f(x)g(x)dx$  przy czym  $\int_a^b f(x)dx = 1, f(x) \geq 0$

$I$  szacować można wtedy losując zmienną  $x$  z rozkładem pstwa  $f(x)$  i liczyć średnią wartość

$$I \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i)_{|f(x)} = \langle g(x) \rangle_{|f(x)}$$

Całkowania MC istotnie używa się, dla całek o większej liczbie wymiarów

Przykład: („mniej” użyteczny)

Sumę  $S=A+B$  można przedstawić jako

$$S = p \frac{A}{p} + (1 - p) \frac{B}{1 - p} \quad \text{gdzie } 0 < p < 1$$

i interpretować jako wartość oczekiwaną zmiennej losowej, która  
z prawdopodobieństwem  $p$  przyjmuje wartość  $A/p$ ,  
a z prawdopodobieństwem  $(1-p)$  wartość  $B/(1-p)$

Jeśli zbudujemy odpowiednią zmienną losową, i dokonamy  $N$  losowań,  
które dadzą wyniki  $w_1, w_2 \dots w_N$ ,

oszacowanie  $S$  znajdziemy jako

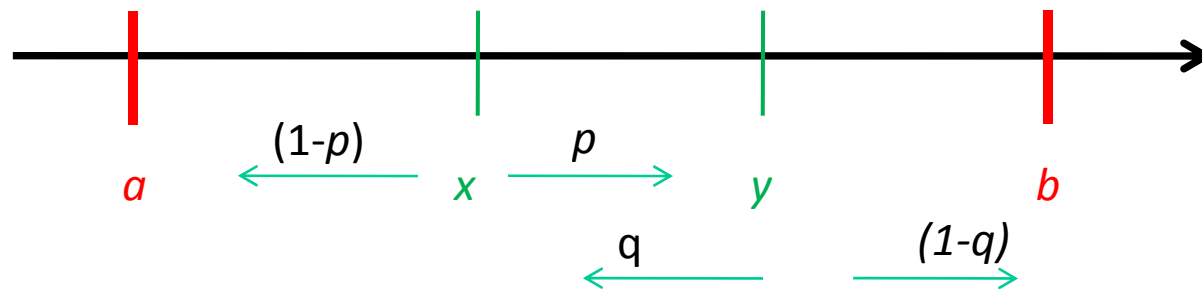
$$S \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i$$

Wyobraźmy sobie, że mamy układ równań liniowych

$$X = pY + (1-p)A$$

$Y = qX + (1-q)B$ , gdzie  $X, Y$  – niewiadome,  $A, B, p, q$  – dane, przy czym  $0 < p < 1$ ,  $0 < q < 1$ ,  
Interesuje nas  $X$

Problem można rozwiązać w następujący sposób (przez **błądzenie przypadkowe**):



Zasady błędzenia:

Startuję w  $x$ :

Jeśli jestem w  $x$ : z pstwem  $p$  przechodzę do  $y$ , a z pstwem  $(1-p)$  do  $a$

Jeśli jestem w  $y$ : z pstwem  $q$  przechodzę do  $x$ , a z pstwem  $(1-q)$  do  $b$

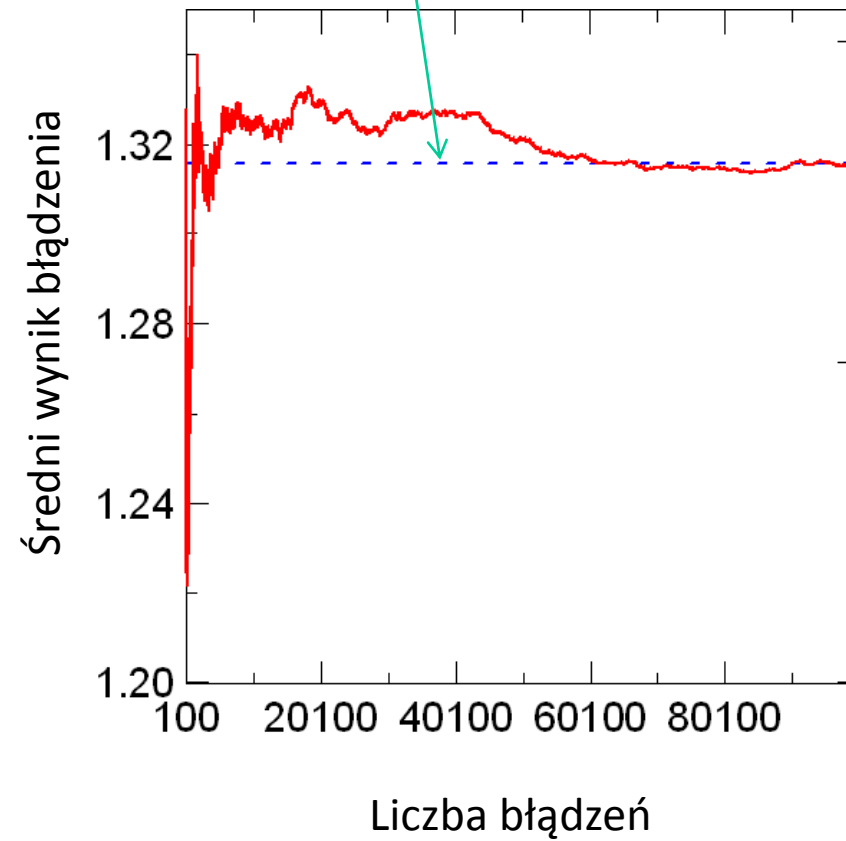
Błądzenie kończy się z wynikiem  $A$  gdy trafię do  $a$  i z wynikiem  $B$  gdy trafię do  $b$

$X$  jest oczekiwanym wynikiem błędzenia, które wystartujemy od  $x$

$$X = pY + (1-p)A$$
$$Y = qX + (1-q)B,$$

$$A=1, B=5, p=0.3, q=0.8$$
$$Y = 2.0526$$
$$X = 1.3158$$

Przykład:



Układ dowolnej liczby równań liniowych:  $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$

Przedstawiony w postaci iteracyjnej:  $\mathbf{x}=\mathbf{a}+\mathbf{Hx}$

Założmy, że macierz iteracji  $\mathbf{H}$  konstruujemy tak, że wszystkie jej elementy są nieujemne oraz mniejsze od 1

$$(\mathbf{I}-\mathbf{H})\mathbf{x}=\mathbf{a}$$

$$\mathbf{x}=(\mathbf{I}-\mathbf{H})^{-1}\mathbf{a}$$

$$\mathbf{x}=\mathbf{a}+\mathbf{Ha}+\mathbf{H}^2\mathbf{a}+\mathbf{H}^3\mathbf{a}+\dots$$

$$A:=\begin{bmatrix} -3 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 0 \\ 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \quad B:=\begin{bmatrix} -3 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \quad C:=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$(\mathbf{B}+\mathbf{C})\mathbf{x}=\mathbf{b}$$

$$\mathbf{Bx}=\mathbf{b}-\mathbf{Cx}$$

$$\mathbf{x}=\mathbf{B}^{-1}\mathbf{b}-\mathbf{B}^{-1}\mathbf{Cx}$$

$$\mathbf{H}=-\mathbf{B}^{-1}\mathbf{C}$$

Jak w met. Jakobiego

$$H:=\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

$$x_i = a_i + \sum_{j=1}^n H_{ij}a_j + \sum_{j_1=1}^n \sum_{j_2=1}^n H_{ij_1}H_{j_1j_2}a_{j_2} + \sum_{j_1=1}^n \sum_{j_2=1}^n \sum_{j_3=1}^n H_{ij_1}H_{j_1j_2}H_{j_2j_3}a_{j_3} + \dots$$

$$\mathbf{b}=(9,0,0)^T$$

$$\mathbf{x}=-(-4,2,1)^T$$

$$\mathbf{a}=-(-3,0,0)^T$$

Metoda von Neumanna-Ulama:  $\mathbf{x}=\mathbf{a}+\mathbf{H}\mathbf{x}$

Dla macierzy  $\mathbf{H}$ , która posiada tylko dodatnie elementy, takie, że suma wyrazów w wierszu  $< 1$

$$H := \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix}$$

Uzupełniamy macierz  $\mathbf{H}$  o kolumnę zerową

$$H_{i,0} = 1 - \sum_{j=1}^n H_{ij} \quad \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{a} = \begin{pmatrix} -3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Cel metody – wyznaczenie oszacowania składowej  $j$ -tej rozwiązania

Zbiór indeksów (stanów)  $\{0,1,2,\dots,n\}$

Punkt  $X$  (wędrowiec), startuje od wiersza  $i_0 = j$

W kroku  $t$  wędrowiec przechodzi z wiersza  $i_t$  do  $i_{t+1}$  z prawdopodobieństwem  $H(i_t, i_{t+1})$

Błądzenie zakończone, gdy  $X$  dotrze do stanu 0. Trajektoria  $\gamma = (i_0, i_1, i_2, \dots, i_{k-1}, i_k, 0)$ .

Wtedy wynik błędzenia:  $X(\gamma) = a(i_k) / H(i_k, 0)$

$X(\gamma)$  – zmienna losowa, która przyjmuje wartość  $= a(i_k) / H(i_k, 0)$  z pstwem równym wystąpieniu stanu  $i_k$  w przedostatnim kroku trajektorii.

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} -9 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$X(\gamma)$  – zmienna losowa, która przyjmuje wartość  $W(i_k)$  z pstwem równym wystąpieniu stanu  $i_k$  w przedostatnim kroku trajektorii.

$$\langle X | i_0 = s \rangle = \sum_{\gamma} X(\gamma) P(\gamma)$$

Wartość oczekiwana zmiennej  $X$ , pod warunkiem, że trajektoria startuje z punktu  $s$

Suma po wszystkich trajektoriach

Wynik błędzenia

pstwo wystąpienia konkretnej trajektorii

$$\langle X \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\gamma_k} X(\gamma_k) P(\gamma_k)$$

Suma po trajektoriach długości  $k$

Trajektoria długości 0 jest tylko jedna

:  $\gamma_0 = (s, 0)$

Trajektorii długości 1 jest  $n$  :

$\gamma_1 = (s, 1, 0); (s, 2, 0); \dots; (s, n, 0)$



Pstwo, że zaobserwowana zostanie trajektoria długości 0:  $H_{s,0}$ , jej wynik  $a_s / H_{s,0}$

Pstwo, że zaobserwowana zostanie trajektoria długości 1:  $(s, i_1, 0)$ :

$P(s, i_1, 0) = H_{s, i_1} * H_{i_1, 0}$ , a jej wynik  $X(s, i_1, 0) = a_{i_1} / H_{i_1, 0}$

itd

$$\begin{array}{c}
 -9 \\
 0 \\
 0 \\
 \uparrow \\
 x
 \end{array}
 \left[ \begin{array}{c}
 \frac{1}{3} \\
 \frac{1}{2} \\
 \frac{1}{2}
 \end{array} \right]
 \left[ \begin{array}{ccc}
 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\
 \frac{1}{2} & 0 & 0 \\
 0 & \frac{1}{2} & 0
 \end{array} \right]$$

$$\langle X \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\gamma_k} X(\gamma_k) P(\gamma_k)$$

Suma po trajektoriach długości  $k$

Trajektoria długości 0 jest tylko jedna

:  $\gamma_0 = (s, 0)$

Trajektorii długości 1 jest  $n$ :

$\gamma_1 = (s, 1, 0); (s, 2, 0); \dots; (s, n, 0)$

Pstwo, że zaobserwowana zostanie trajektoria długości 0:  $H_{s,0}$ , jej wynik  $a_s / H_{s,0}$

Pstwo, że zaobserwowana zostanie trajektoria długości 1:  $(s, i_1, 0)$ :

$P(s, i_1, 0) = H_{s, i_1} * H_{i_1, 0}$ , a jej wynik  $X(s, i_1, 0) = a_{i_1} / H_{i_1, 0}$

itd

$$\langle X \rangle = a_s + \sum_{i_1=1}^n H_{s, i_1} a_{i_1} + \sum_{i_1=1}^n \sum_{i_2=1}^n H_{s, i_1} H_{i_1, i_2} a_{i_2} + \dots$$

$$\langle X \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{\gamma_k} X(\gamma_k) P(\gamma_k)$$

Suma po trajektoriach długości  $k$

Trajektoria długości 0 jest tylko jedna

:  $\gamma_0 = (s, 0)$

Trajektorii długości 1 jest  $n$ :

$\gamma_1 = (s, 1, 0); (s, 2, 0); \dots; (s, n, 0)$

Pstwo, że zaobserwowana zostanie trajektoria długości 0:  $H_{s,0}$ , jej wynik  $a_s / H_{s,0}$

Pstwo, że zaobserwowana zostanie trajektoria długości 1:  $(s, i_1, 0)$ :

$P(s, i_1, 0) = H_{s, i_1} * H_{i_1, 0}$ , a jej wynik  $X(s, i_1, 0) = a_{i_1} / H_{i_1, 0}$

itd

$$\langle X \rangle = a_s + \sum_{i_1=1}^n H_{s, i_1} a_{i_1} + \sum_{i_1=1}^n \sum_{i_2=1}^n H_{s, i_1} H_{i_1, i_2} a_{i_2} + \dots$$

Rozpoznajemy wcześniejszy wzór:

$$\mathbf{x} = (\mathbf{I} - \mathbf{H})^{-1} \mathbf{a}$$

$$x_i = a_i + \sum_{j=1}^n H_{ij} a_j + \sum_{j_1=1}^n \sum_{j_2=1}^n H_{ij_1} H_{j_1 j_2} a_{j_2} + \sum_{j_1=1}^n \sum_{j_2=1}^n \sum_{j_3=1}^n H_{ij_1} H_{j_1 j_2} H_{j_2 j_3} a_{j_3} + \dots$$

Oszacowanie s-tej składowej rozwiązania dostaniemy jako średnią ważoną z wyników trajektorii błędzenia przypadkowego wg. podanego wyżej regulaminu

Przykład:

Startujemy od  $s=1$ :

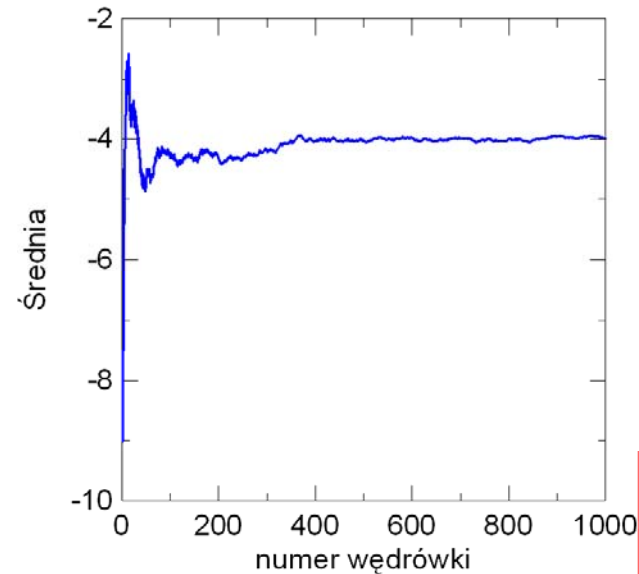
```
2.2477936E-05    0
*** -9.000000    -9.000000
8.5032448E-02    0
*** -9.000000    -9.000000
0.6013526        2
0.8916113        1
0.9679557        3
0.1896898        0
*** 0.0000000E+00 -6.000000
0.5149758        2
0.3980084        0
*** 0.0000000E+00 -4.500000
0.2629062        0
*** -9.000000    -5.400000
0.7435125        3
8.9547768E-02    0
*** 0.0000000E+00 -4.500000
0.5603899        2
0.5822297        1
0.8095667        3
0.5919188        2
0.5117126        1
0.8766339        3
0.9950845        2
0.7262117        1
0.9666114        3
0.2971023        0
*** 0.0000000E+00 -3.857143
0.4260508        2
0.8994977        1
0.6529987        2
0.9015343        1
0.9615331        3
0.1647129        0
```

Drukujemy liczbę losową i zaakceptowany stan

Trajektoria kończy się przez '\*\*\*', dwie liczby to „wynik” oraz

„średnia” z wyników

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{bmatrix} \quad X = \begin{pmatrix} -9 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$



$$b = (9, 0, 0)^T$$

$$x = -(4, 2, 1)^T$$

$$a = (-3, 0, 0)^T$$

Przykład:

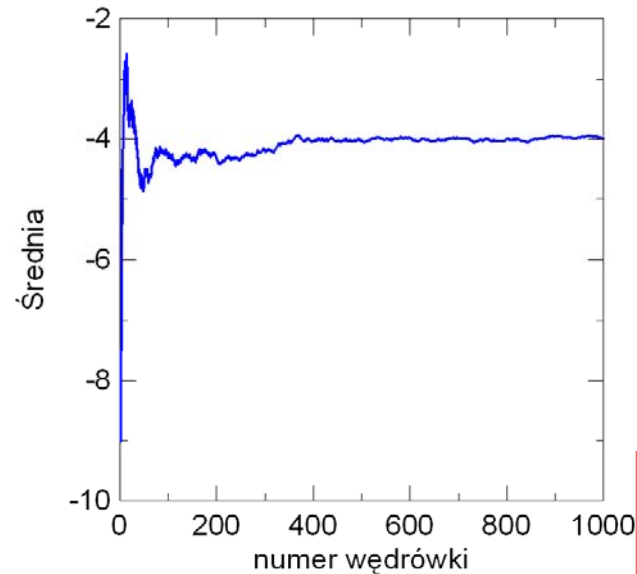
Startujemy od  $s=1$ :

$\sigma^2 = \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle$     Wariancja (miara zmienności rozkładu pstwa)

$\tilde{\sigma}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_i - \langle X \rangle)^2$     Oszacowanie wariancji (estymator nieobciążony)

W naszym przykładzie,  $X$  przyjmuje  
wartość  $-9$  z pstwem  $44.(44)\%$   
oraz  $0$  z pstwem  $[100-40.(44)]\%$   
Średnia  $-4$

Wariancja:  $44.(44)\% * (-9+4)^2 +$   
 $(100-44.(44)\%) * 4^2 = 20$

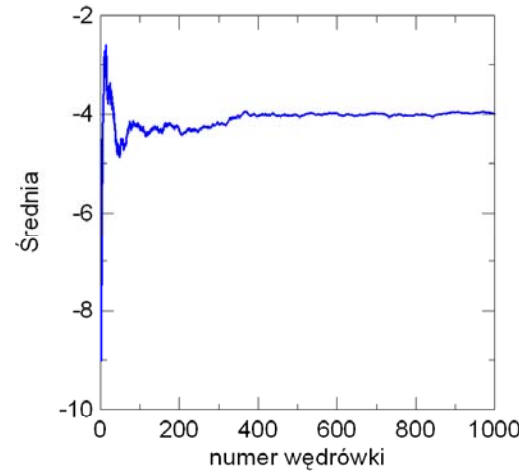
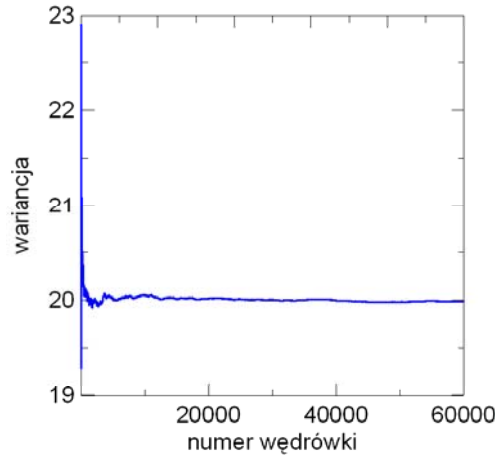


$b = (9, 0, 0)^T$   
 $x = -(4, 2, 1)^T$   
 $a = (-3, 0, 0)^T$

## Szacowanie błędu wyznaczenia średniej

$$\sigma^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_i - \langle X \rangle)^2$$

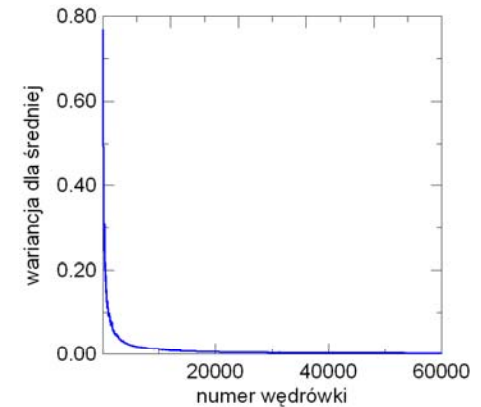
$\langle X \rangle$



$$\langle X_j \rangle = \frac{1}{j} \sum_{i=1}^j X_i$$

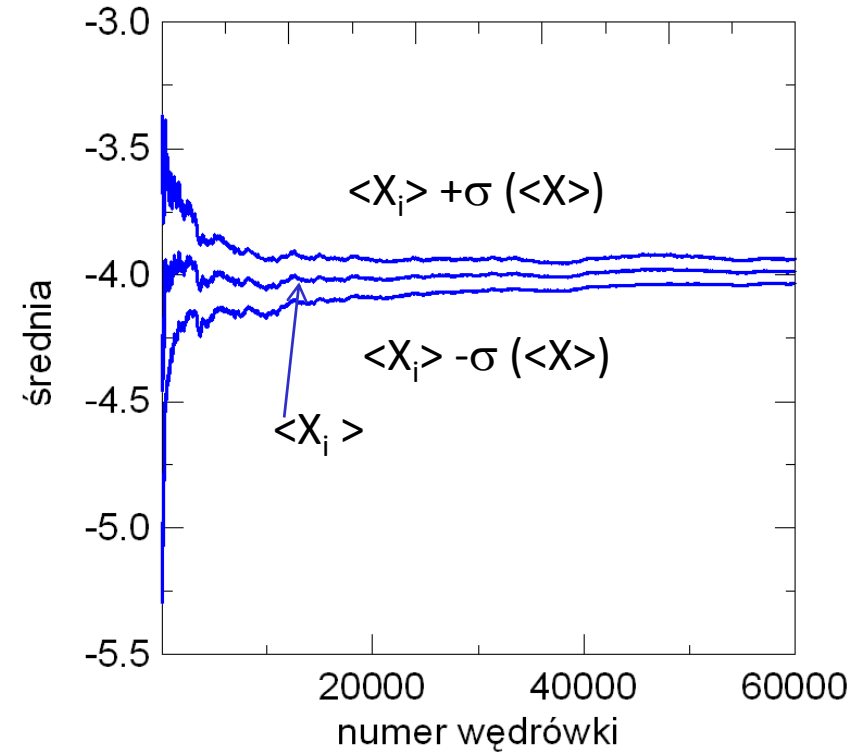
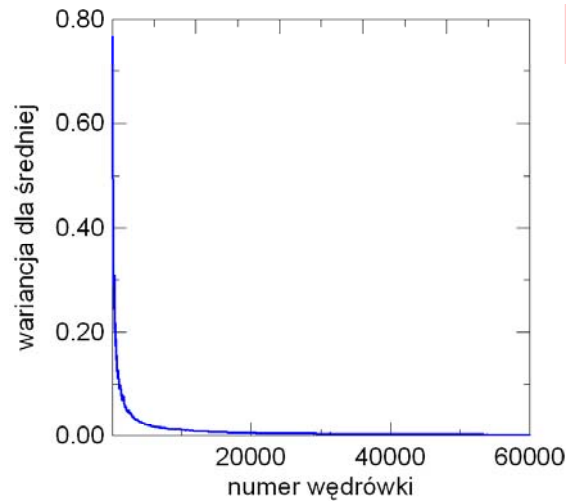
Średnia wyznaczona w  $j$  losowaniach

$$\sigma^2(\langle X \rangle) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\langle X_N \rangle - \langle X_i \rangle)^2 \longrightarrow$$

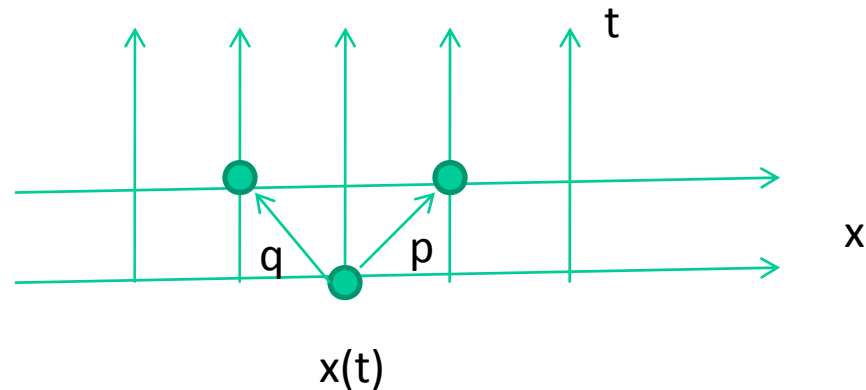


## Szacowanie błędu wyznaczenia średniej

$$\sigma^2(\langle X \rangle) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\langle X_N \rangle - \langle X_i \rangle)^2$$



## Metody MC dla równań cząstkowych



Czas: w jednym kroku zmienia się z  $t$  na  $t+1$

W czasie zmiany cząstka (wędrowiec) z pstwem  $p$  przechodzi do prawego oczka siatki przestrzennej  $x(t+1)=x(t)+1$

a z pstwem  $q=1-p$  przechodzi do oczka lewego  $x(t+1)=x(t)-1$

Ruch zaczyna się w chwili czasowej  $t=0$  i w punkcie  $x=0$ .

Prawdopodobieństwo tego, że w chwili czasowej  $t$  cząstka jest w punkcie  $x$ :  $v(x,t)$

$v(x=0,t=0)=1$ ,  $v(x,t=0)=0$  dla  $x \neq 0$

Zgodnie z regulaminem błędzenia:  $v(x,t+1)=p v(x-1,t)+q v(x+1,t)$



Zgodnie z regulaminem błędzenia:  $v(x, t+1) = p v(x-1, t) + q v(x+1, t)$

W powyższym wzorze  $t$  oraz  $x$  to indeksy punktów

Dla siatki o krokach  $\Delta x$  i  $\Delta t$  pstwo w funkcji położeń:

$$v(x, t + \Delta t) = p v(x - \Delta x, t) + q v(x + \Delta x, t)$$

Rozwijamy  $v$  z powyższego wzoru w szeregu Taylora.

Zachowujemy 2 pierwsze wyrazy dla lewej strony oraz 3 pierwsze dla strony prawej

$$v(x, t) + \frac{\partial v(x, t)}{\partial t} \Delta t = p v(x, t) - p \frac{\partial v(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} p \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2 + q v(x, t) + q \frac{\partial v(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} q \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2$$

$$\frac{\partial v(x, t)}{\partial t} \Delta t = (q - p) \frac{\partial v(x, t)}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2} \Delta x^2$$

$$\text{Równanie adwekcji dyfuzji} \quad u_t + V u_x = D u_{xx}$$

$$z \quad \left\{ \begin{array}{l} V = (p - q) \frac{\Delta x}{\Delta t} \\ D = \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \end{array} \right.$$

Błędzenia przypadkowego o ww. regulaminie można więc użyć do oszacowania rozwiązań równania adwekcji dyfuzji

Alternatywne wprowadzenie dla czystej dyfuzji:

$$D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{\partial v}{\partial t}$$

Wersja różnicowa (tzw. schemat Eulera)

$$D \frac{v(x + \Delta x, t) + v(x - \Delta x, t) - 2v(x, t)}{\Delta x^2} = \frac{v(x, t + \Delta t) - v(x, t)}{\Delta t}$$

$$v(x, t + \Delta t) = \left(1 - \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2}\right) v(x, t) + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (v(x - \Delta x, t) + v(x + \Delta x, t))$$

Dla danej stałej dyfuzji i kroku siatki przestrzennej dobierzemy krok czasowy tak, aby

$$\frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} = 1$$

Wtedy:

$$v(x, t + \Delta t) = \frac{1}{2} (v(x - \Delta x, t) + v(x + \Delta x, t))$$

co odpowiada błędzeniu  
przypadkowemu z  $p=q=1/2$

$$D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{\partial v}{\partial t}$$

$$v(x, t + \Delta t) = \frac{1}{2} (v(x - \Delta x, t) + v(x + \Delta x, t))$$

Warunki brzegowe:  $u(0,t)=f(t)$ ,  $u(a,t)=g(t)$

Warunek początkowy:  $u(x,t=0)=h(x)$

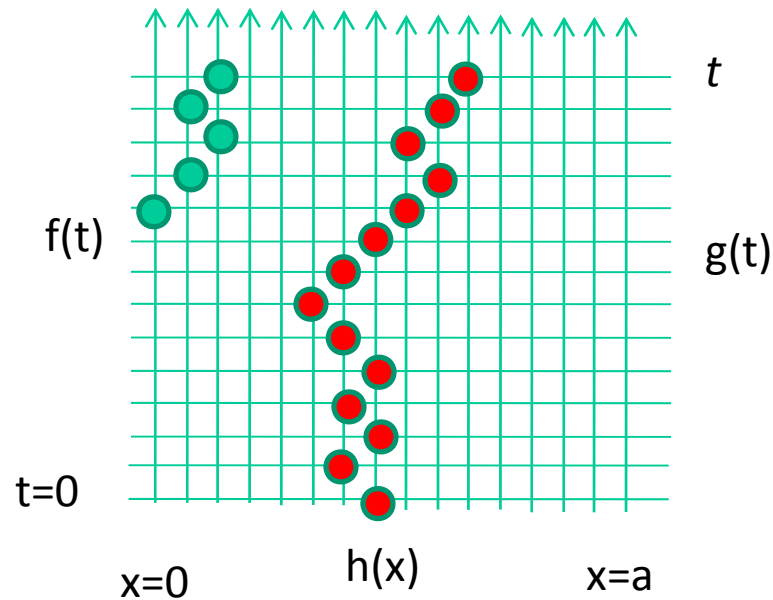
Regulamin:

Startujemy w chwili  $t$

Wędrowiec cofa się w czasie

W każdym kroku czasowym przechodzi do prawego lub lewego sąsiada z pstwem 50%

Wędrowka kończy się, gdy wędrowiec dojdzie do brzegu ( $x=0$  lub  $x=a$ ) z wynikiem  $f(\tau)$  lub  $g(\tau)$  lub gdy dojdzie do chwili początkowej, wtedy wynik wędrowki:  $h(\xi)$  gdzie  $\xi$  oraz  $\tau$  to współrzędne końca wędrowki

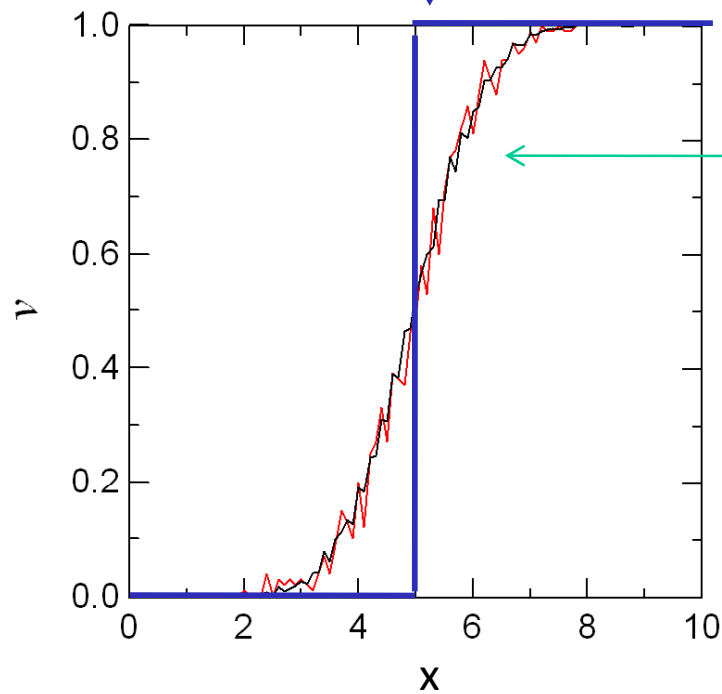


$$D \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = \frac{\partial v}{\partial t} \quad \left| \quad \frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} = 1$$

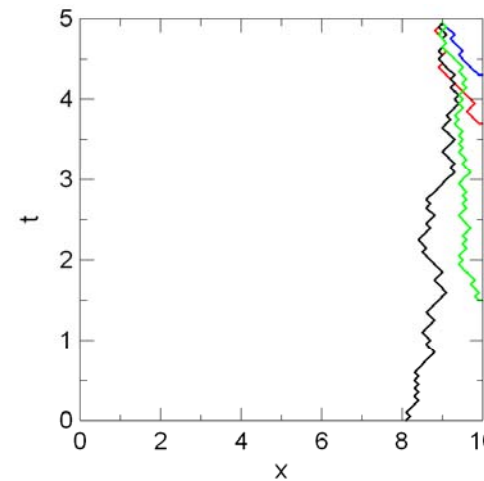
Wyniki:  $a=10$ ;  $\Delta x=0.1$ ,  $D=1 \rightarrow \Delta t=0.05$

$v(x=0,t)=0$ ,  $v(x=a,t)=1$ ,  $v(x,t=0)=1$  dla  $x>5$  oraz 0 dla  $x<5$

Warunek początkowy



Rozwiązania MC dla chwili czasowej  $t=5$   
Uzyskane dla 100 oraz 1000 błędzeń startowanych od każdego punktu



Cztery ścieżki startowane z  $x=8$

Podobnie można rozwiązywać problemy 2D,  
Zmienia się tylko interpretacja kroku czasowego:  $4D\Delta t/\Delta x^2 = 1$

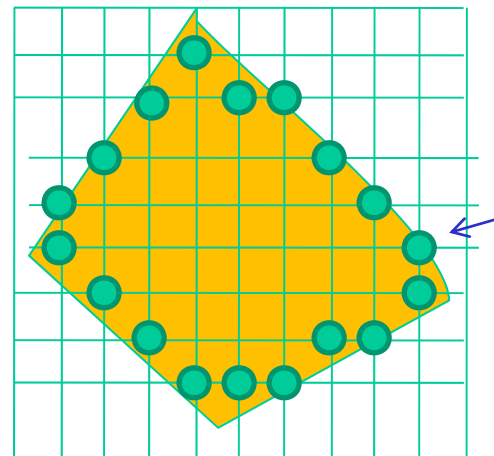
## Równanie Laplace'a: 2D

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

$$u(x, y) = \frac{1}{4} (u(x + \Delta, y) + u(x - \Delta, y) + u(x, y + \Delta) + u(x, y - \Delta))$$

Warunki Dirichleta na brzegu

$$u(x, y) = f(x, y)$$



Punkty należące do  
zdyskretyzowanego  
brzegu

## Równanie Laplace'a: 2D

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

$$u(x, y) = \frac{1}{4} (u(x + \Delta, y) + u(x - \Delta, y) + u(x, y + \Delta) + u(x, y - \Delta))$$

Warunki Dirichleta na brzegu

$$u(x, y) = f(x, y)$$

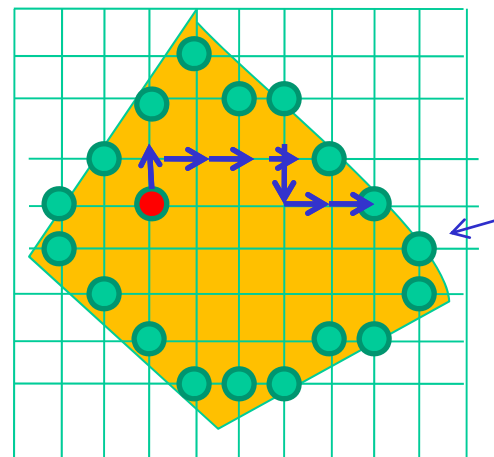
Startujemy od punktu  $(\alpha, \beta)$

Losowo wybieramy krawędź siatki

Idziemy aż do brzegu.

Wynikiem wędrówki jest warunek brzegowy w punkcie kończącym wędrówkę.

Zmienna losowa: wynik wędrówki dla startu w wybranym punkcie.



Punkty należące do zdyskretyzowanego brzegu

Równanie dyfuzji: wiemy jak je rozwiązywać cofając się w czasie  
 nauczmy się symulować jego rozwiązanie

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \text{z czasem płynącym do przodu}$$

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad (*) \quad \text{Jedno z rozwiązań}$$

Dla chwili początkowej  $t_0 = 0$

Rozwiązanie to przechodzi do delty Diraca,  
 Lub inaczej stanowi rozwiązanie dla warunku  
 początkowego w formie  $u(x, t) = \delta(x)$

ewolucja czasowa

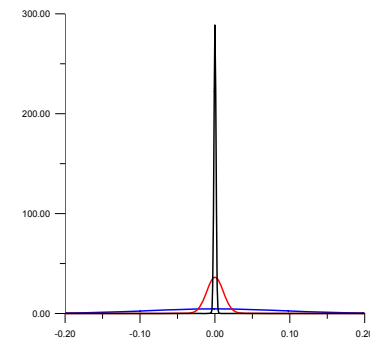
$$\delta(x) \longrightarrow u(x, t)$$

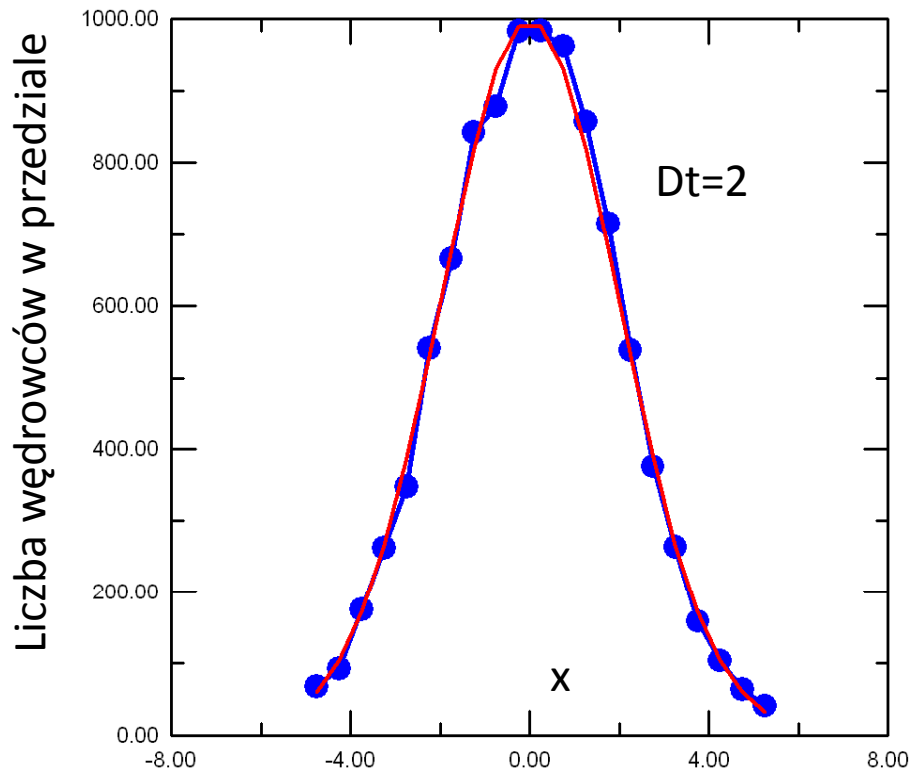
$$a\delta(x) + b\delta(x - x_0) \longrightarrow au(x, t) + bu(x - x_0, t)$$

$$f(x) = \int dx_0 f(x_0) \delta(x - x_0) \longrightarrow \int dx_0 f(x_0) u(x - x_0, t)$$

Jeśli będę wiedział jak zasymulować rozwiązanie startując od delty Diraca,  
 będę wiedział jak zasymulować rachunek dla dowolnego warunku początkowego

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow \infty} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \exp(-x^2/a^2)$$





$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

- 1) W punkcie  $x=0$   
wstawiam 10 000 wędrowców
- 2) Dla każdego wędrowca  
dokonuje przesunięcia  
 $x := x + \rho$ ,  
gdzie  $\rho$  jest zmienną losową  
o rozkładzie gaussowskim  
ze średnią  $\mu=0$  w zerze oraz  
wariancji  $\sigma^2 = 2Dt$

$$\frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

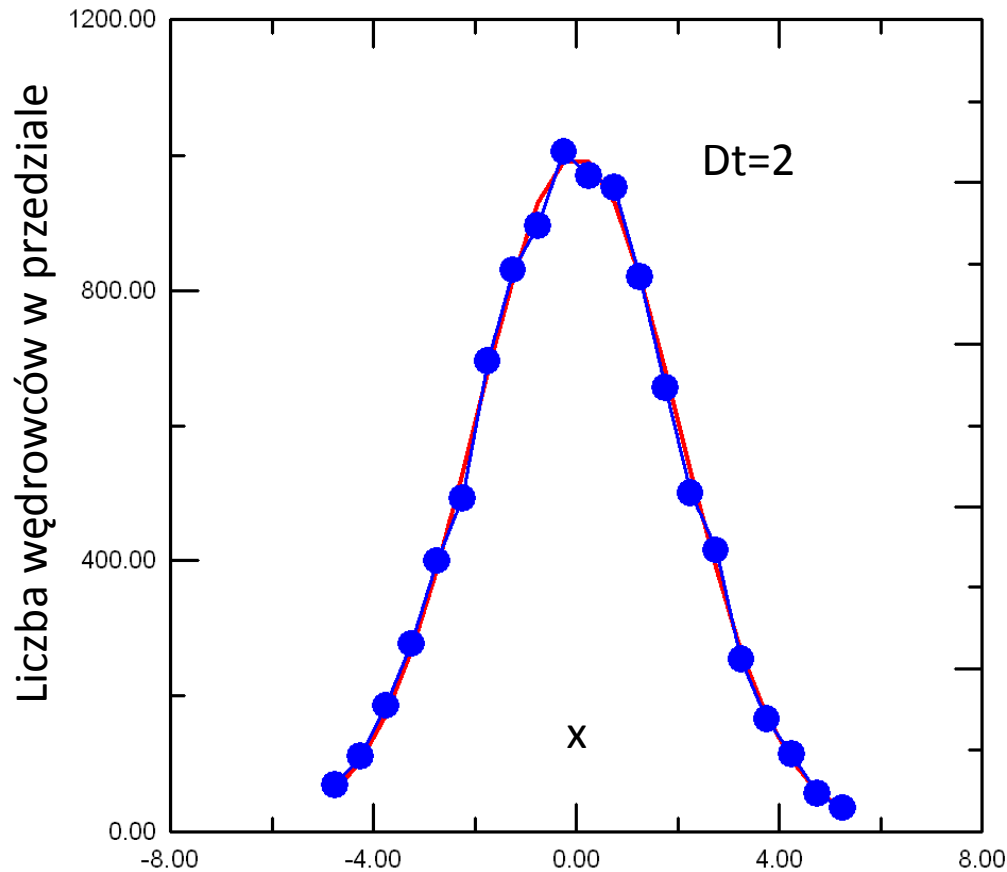
Wynik: wprowadzam przedziały o długości 0.5

Rysuję oczekiwaną liczbę wędrowców w każdym przedziale  
oraz wynik eksperymentu



Zamiast 1 kroku z wariancją  $\sigma^2$  :  
10 kroków z wariancją  $\sigma^2 / 10$ ,  
Wynik:

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$



- 1) W punkcie  $x=0$   
wstawiam 10 000 wędrowców
- 2) 10 razy powtarzam operację:  
Dla każdego wędrowca  
dokonuje przesunięcia  
 $x := x + \rho$ ,  
gdzie  $\rho$  jest zmienną losową  
o rozkładzie gaussowskim  
ze średnią  $\mu=0$  w zerze oraz  
wariancji  $\sigma^2 = 2Dt / 10$

Przesunięcie w jednym kroku  
czasowym: normalne ze średnią  
zero oraz wariancją daną  
przez  $\sigma^2 = 2D\Delta t$ .

Wniosek: Symulacja rozwiązania równania dyfuzji MC:

W chwili początkowej wędrowcy rozłożeni zgodnie z warunkiem początkowym  
każdy z nich wykonuje w każdym kroku czasowym losowe przesunięcie zgodne  
z rozkładem normalnym o średniej zero i wariancji  $\sigma^2 = 2D\Delta t$ .

Przesunięcie w jednym kroku czasowym: normalne ze średnią zero oraz wariancją  $\sigma^2 = 2D\Delta t$

$$N(\sigma, \mu) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$\rho$  – zmienna losowa o rozkładzie normalnym, średniej 0 i wariancji  $\sigma^2$

$\rho_1$  – zmienna losowa o rozkładzie normalnym i wariancji 1

$$x := x + \rho = x + \sigma \rho_1$$

```
function rho1 ()
x1=rand()
x2=rand()
pi=4*atan(1.0)
rho1 = sqrt( - 2.0*log(x1) ) *cos( 2 *pi* x2 )
end
```

Metody MC – stosowane do np. dyfuzji neutronów.

Jakość rozwiązania i czas rachunków nie zależy od liczby wymiarów, dla skomplikowanej geometrii w 3D rachunek może być konkurencyjny do metod tradycyjnych [MRS, MES].

W MC nie musimy budować żadnej siatki przestrzennej.

W rachunkach wielowymiarowych metody MC uważane są za niezastąpione.

Problemy wielowymiarowe, generowane w mechanice kwantowej.

Przykład: półprzewodnik, 3 nośniki dziura + 2 elektrony (trion ekscytonowy) układ 12 (!) wymiarowy.

Metody MC – jedyny sposób zbliżenia się do rozwiązania dokładnego.

## Równanie Schroedingera zależne od czasu

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

Operator Hamiltona w najprostszej wersji: 
$$H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\mathbf{r})\Psi$$

$$n(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$$
 Gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w chwili  $t$  i w punkcie  $\mathbf{r}$

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

BTW: rozwiązanie równania dyfuzji

dla warunku początkowego  $u(x, t) = \delta(x)$

rozwiązanie można interpretować, jako gęstość prawdopodobieństwa znalezienia w chwili  $t$  i w punkcie  $x$  cząstki, która w chwili  $t=0$  była w początku układu współrzędnych

## Równanie Schroedingera zależne od czasu

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

$$H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\mathbf{r})\Psi$$

$\tau = -it$       Wstawmy czas urojony (rotacja Wicka)

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \tau}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \tau}$$

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - \underline{V(x)\Psi(x)}$$

równanie dyfuzji

ze źródłami (odpływami) cząstek  
źródło nietypowe – bo zależne od rozwiązania  $\Psi$   
[dla dyfuzji ciepła, w najprostszej wersji wprowadza się źródła niezależne od rozwiązania – tj. temperatury]

## Równanie Schroedingera zależne od czasu

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

H jest liniowy, rozwiązanie można więc wskazać jako superpozycję stanów własnych

$$H\phi_n = E_n\phi_n$$

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \phi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar) \quad c_n \text{ nie zależy od czasu}$$

$$\tau = -it$$

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - V(x)\Psi(x)$$

$$\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \phi_n(x) \exp(-E_n \tau/\hbar) \leftarrow \begin{array}{l} \text{Składowe gasną tym szybciej im wyższa} \\ \text{jest ich energia, najwolniej gaśnie składowa } E_0 \end{array}$$

zmiana poziomu odniesienia dla energii  $V(x) := V(x) - E_R$ ,  $E_n := E_n - E_R$

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - (V(x) - E_R)\Psi(x)$$

$$\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \phi_n(x) \exp(-(E_n - E_R)\tau/\hbar) \leftarrow$$

Składowe gasną tym szybciej im wyższa jest ich energia, o losie symulacji decyduje ustawienie punktu odniesienia względem energii stanu podstawowego

- 1) Jeśli  $E_0 < E_R$  Funkcja falowa eksploduje w funkcji  $\tau$
- 2) Jeśli  $E_0 > E_R$  Funkcja falowa znika w funkcji  $\tau$
- 3) Jeśli  $E_0 = E_R$  Funkcja falowa dąży do  $c_0 \phi_0$  (funkcji falowej stanu podstawowego)

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - (V(x) - E_R) \Psi(x)$$

$$\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \phi_n(x) \exp(-(E_n - E_R)\tau/\hbar)$$

Składowe gasną tym szybciej im wyższa jest ich energia

- 1) Jeśli  $E_0 < E_R$  Funkcja falowa eksploduje w funkcji  $\tau$
- 2) Jeśli  $E_0 > E_R$  Funkcja falowa znika w funkcji  $\tau$
- 3) Jeśli  $E_0 = E_R$  Funkcja falowa dąży do  $c_0 \phi_0$  (funkcji falowej stanu podstawowego)

Wniosek: dla odpowiednio dobranego poziomu odniesienia funkcja falowa w czasie urojonym dąży do funkcji falowej stanu podstawowego niezależnie od warunku początkowego [o ile tylko całka przekrywania  $\langle \Psi(x,0) | f_0(x) \rangle = c_0$  nie znika].

Kwantowa dyfuzyjna metoda MC – do wyznaczenia funkcji falowej stanu podstawowego  
Kluczowy = dobór  $E_R$  oraz opis generacji / zaniku wędrowców

### Algorytm:

- 1) Umieścić  $N$  wędrowców gdziekolwiek, np. wszystkich w początku układu współrzędnych
- 2) Każdy z wędrowców jest przesuwany, o losową wartość zgodną z równaniem dyfuzji, to jest  $x := x + \sigma \rho_1$  gdzie wariancja

$$\sigma^2 = \frac{\hbar}{m} \Delta \tau$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

- 3) Replikacja wędrowców

$$\sigma^2 = 2D\Delta t$$

### 3) Replikacja wędrówców

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - (V(x) - E_R) \Psi(x)$$

Dla zaniedbanej części dyfuzyjnej mamy w każdym punkcie  $x$ :

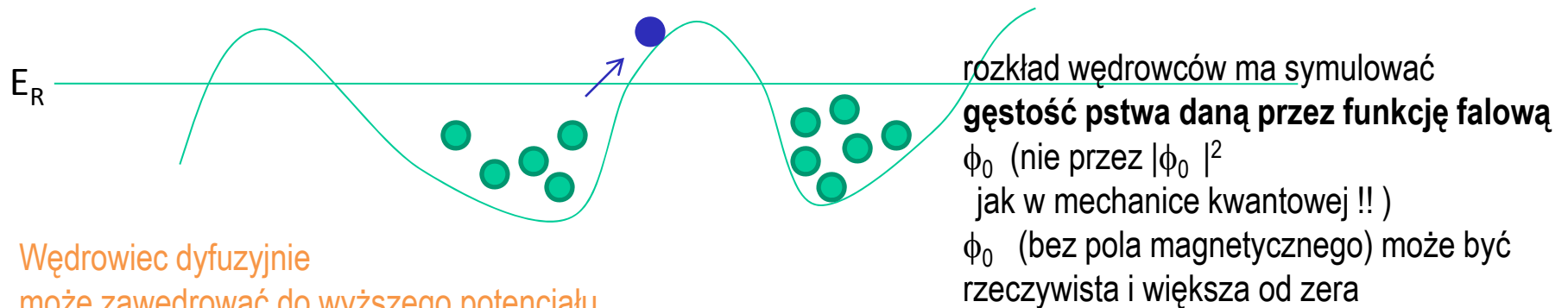
$$\Psi(x, \tau) = \Psi(x, \tau = 0) \exp [(E_R - V(x))\tau / \hbar]$$

$W(x)$

$$W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$$

W oryginalnej metodzie wędrowiec znajdujący się w punkcie  $x$  jest rozmnażany  $n$  razy, gdzie  $n$  jest liczbą całkowitą najbliższą  $W(x)$

Co się będzie działo: wędrowiec ginie na wierzchołkach potencjału wznoszących się ponad poziom odniesienia, a mnoży się w dolinach.



Wędrowiec dyfuzyjnie może zawędrować do wyższego potencjału, Lecz gdy wyjdzie zbyt wysoko - zginie

### 3) Replikacja wędrowców

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - (V(x) - E_R) \Psi(x)$$

Dla zaniedbanej części dyfuzyjnej mamy w każdym punkcie  $x$ :

$$\Psi(x, \tau) = \Psi(x, \tau = 0) \exp \left[ \frac{(E_R - V(x))\tau}{\hbar} \right]$$

$$W(x)$$

$$W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$$

W oryginalnej metodzie wędrowiec  $n$  znajdujący się w punkcie  $x$  jest rozmnażany  $m_n$  razy, gdzie  $m$  jest liczbą całkowitą najbliższą  $W(x_n)$

-Takie grozi nagłą eksplozją liczby wędrowców, gdy jeden z nich wdepnie w głęboki dołek. Na początku symulacji, gdy oszacowanie  $E_R$  jest zgrubne może to prowadzić do niestabilności symulacji,

dlatego lepiej:

$m_n = \min\{\text{int}(W(x_n) + \text{rand}()), 3\}$ , gdzie  $\text{rand}()$  – liczba losowa z przedziału  $[0, 1]$  (rozkład jednorodny)

gdy krok czasu urojonego  $d\tau$  jest mały: wtedy  $W$  oscyluje wokół 1 i rzadko przekracza 2, wtedy ograniczenie  $m_n$  przez 3 generuje mały błąd

Jeśli  $m_n$  wyjdzie zero – likwidujemy wędrowca, jeśli  $m_n$  wyjdzie 3 – startujemy dwie nowe ścieżki błędzenia dyfuzyjnego od punktu  $x$



### Algorytm:

- 1) Umieścić  $N$  wędrówców gdziekolwiek, np. wszystkich w początku układu współrzędnych
- 2) Każdy z wędrówców jest przesuwany, o losową wartość zgodną z równaniem dyfuzji, to jest  $x := x + \sigma \rho_1$  gdzie wariancja
- 3) Replikacja wędrówców  $W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$   $m_n = \min\{\text{int}(W(x_n) + \text{rand}()), 3\}$
- 4) Adaptacja poziomu odniesienia  $E_R$

Składowe gasną tym szybciej im wyższa jest ich energia

- 1) Jeśli  $E_0 < E_R$  Funkcja falowa eksploduje w funkcji  $t$
- 2) Jeśli  $E_0 > E_R$  Funkcja falowa znika w funkcji  $t$
- 3) Jeśli  $E_0 = E_R$  Funkcja falowa dąży do  $c_0 f_0$   
(funkcji falowej stanu podstawowego)

Dobre  $E_R$  będzie oszacowaniem energii stanu podstawowego, ma być takie aby funkcja falowa się nie zmieniała

...

Chcemy więc aby liczba wędrówców się nie zmieniała, więc

Średnie  $W$  powinno być jeden  $W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$

Czyli: 
$$E_R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i)$$

### Algorytm:

- 1) Umieścić  $N$  wędrówców gdziekolwiek, np. wszystkich w początku układu współrzędnych
- 2) Każdy z wędrówców jest przesuwany, o losową wartość zgodną z równaniem dyfuzji, to jest  $x := x + \sigma \rho_1$  gdzie wariancja
- 3) Replikacja wędrówców  $W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$   $m_n = \min\{\text{int}(W(x_n)) + \text{rand}(), 3\}$
- 4) Adaptacja poziomu odniesienia  $E_R$

$$E_R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i)$$

Chcielibyśmy utrzymać stałą liczbę wędrówców w czasie symulacji.

Po replikacji mamy  $N=N_i$  wędrówców, a chcemy ich liczbę utrzymać na poziomie  $N_0$  empiryczna i skuteczna w tym celu modyfikacja poziomu odniesienia:

$$E'_R = E_R + \frac{\hbar}{\Delta\tau} \left(1 - \frac{N_i}{N_0}\right)$$

Uwaga! Pojawiają się dwa progi  $E_R$

Energię stanu początkowego szacujemy na podstawie  $E_R$

$E'_R$  używane do wyliczenia  $W$

Uwaga:  $E_R$  warto uśredniać nie tylko po obecnej iteracji, ale również po krokach poprzednich (z pominięciem pewnej liczby kroków początkowych)

Przykład: atom wodoru (3D)

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}$$

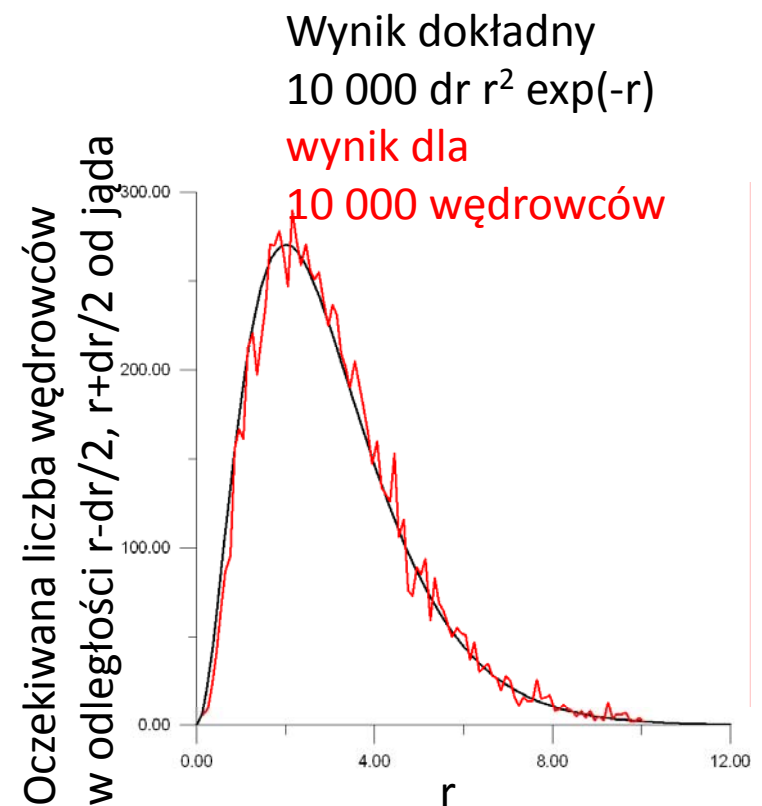
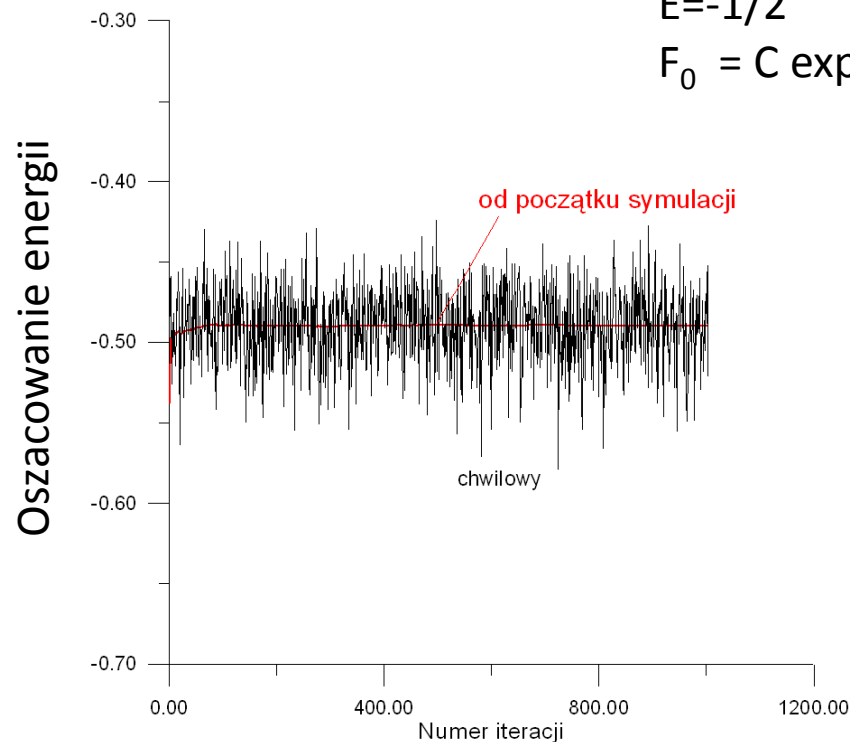
1000 wędrówców, ich położenia startują od  $r=(1,1,1)$

krok czasu urojonego  $d\tau=0.1$

$$\sigma^2 = d\tau$$

$$E = -1/2$$

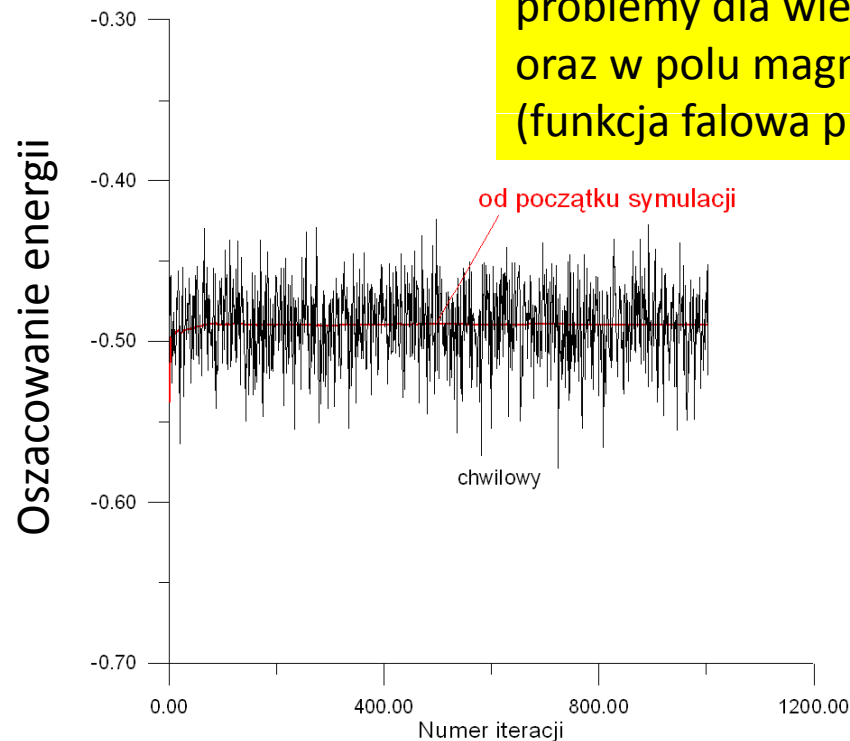
$$F_0 = C \exp(-r)$$



Przykład: atom wodo

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}$$

1000 wędrówców, ich p  
krok czasu urojonego  $d$   
 $\sigma^2 = d\tau$

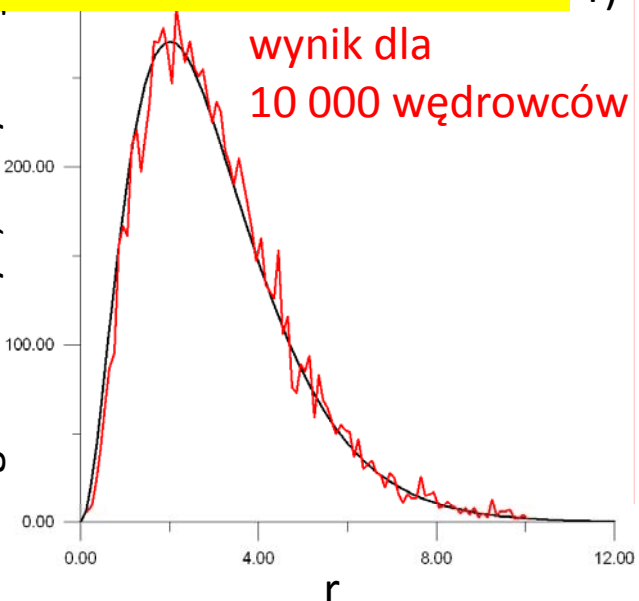


**Uwaga: gęstość wędrówców jest proporcjonalna do funkcji falowej (rzeczywistej, dodatniej), a nie do gęstości prawdopodobieństwa (f.falowa<sup>2</sup>)**

Kwantowa Metoda MC w tej formie: stosowana tylko dla stanu podstawowego nie więcej niż dwóch identycznych fermionów

Istnieją jednak warianty pozwalające rozwiązywać problemy dla wielu fermionów oraz w polu magnetycznym (funkcja falowa przestaje być rzeczywista)

Oczekiwana liczba wędrówców w odległości  $r-dr/2, r+dr/2$  od



-r)