

## Metoda Monte Carlo

Zastosowania:

1. Całkowanie (wykład z Metod Numerycznych)
2. Układy równań liniowych
3. Równania całkowe
4. Równania różniczkowe – Laplace'a, Poissona
5. Równanie dyfuzji
6. Optymalizacja -> minimalizacja wartości funkcji celu:
  - symulowane wyżarzanie (MOF)
  - algorytmy genetyczne (wykład z AG)
  - kwantowa wariacyjna i dyfuzyjna metoda Monte Carlo (MOF)

Literatura:

„Exploring Monte Carlo Methods” , W.L. Dunn, J.K. Shultis, Academic Press  
„Explorations in Monte Carlo Methods”, R.W. Shonkwiler, F. Mendivil, Springer

## Łańcuch Markova

Jeśli w zbiorze dostępnych stanów układu

$$X_1, X_2, X_3, \dots$$

przejście od stanu  $X_i$  do dowolnego innego stanu  $X_j$  może nastąpić z pewnym niezerowym prawdopodobieństwem  $p_{ij}$ , to wygenerowany w ten sposób pojedynczy ciąg stanów układu

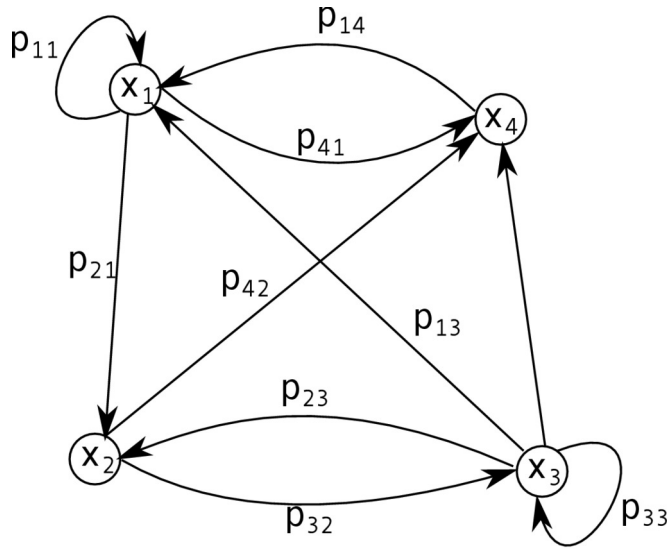
$$\{X_{\alpha_1}, X_{\alpha_2}, X_{\alpha_3}, X_{\alpha_4}, X_{\alpha_5}, \dots\}$$

nazywamy **łańcuchem Markova**.

W łańcuchu Markova aktualna realizacja stanu  $X_i$  zależy wyłącznie od poprzedniej realizacji  $X_{i-1}$ , nie zależy natomiast od jego wcześniejszych realizacji  $X_{i-2}$ ,  $X_{i-3}$  itd..

Inaczej: zacierana jest historia – sposób dotarcia do  $X_{i-1}$  może być różny tj. stochastyczny.

## Błądzenie przypadkowe na grafie (random walk)



Reprezentacja macierzowa przejść pomiędzy wierzchołkami

$$P = \begin{bmatrix} p_{11} & 0 & p_{13} & p_{14} \\ p_{21} & 0 & p_{23} & 0 \\ 0 & p_{32} & p_{33} & 0 \\ p_{41} & p_{42} & p_{43} & 0 \end{bmatrix}$$

Z warunkiem

$$\sum_{j=1}^N p_{i,j} = 1$$

Przejście ze stanu  $k$  do  $k+1$

$$p_{k+1} = P \cdot p_k$$

Wektor  $p_k$  opisuje rozkład obsadzeń wierzchołków w kroku  $k$

Uwaga: prawdopodobieństwo znalezienia się w wierzchołku  $j$ -tym po  $k$  krokach można uzyskać na dwa sposoby

1) Startując od wybranego wierzchołka, przechodzimy w kolejnych krokach do wierzchołka  $m$  z prawdopodobieństwem  $p_{mi}$ . Ciąg, **pojedynczy łańcuch Markowa**, urywamy po wygenerowaniu  $k$  przejść. Generujemy  $N$  takich łańcuchów, jeśli  $n$ -razy doatrzliśmy do  $j$ -tego wierzchołka to prawdopodobieństwo to wynosi  $n/N$

$$p_k = P \cdot p_{k-1} = \underbrace{P \cdot P \dots P}_k \cdot p_0$$

2) wyznaczamy po prostu  $j$ -tą składową wektora  $p_k$

## Własności łańcucha Markova

1. Dla danej macierzy przejść istnieje **wektor niezmienniczy** względem danego rozkładu

$$P \cdot q = q$$

Inaczej: startując od dowolnego wektora  $p_0$ , w wyniku wielu przejść będzie on dążył do  $q$ .

2. **Łańcuch jest nieredukowalny** tj. istnieje niezerowe prawdopodobieństwo przejścia pomiędzy dwoma dowolnymi wierzchołkami.

Jeśli graf jest redukowalny to można go przedstawić w postaci dwóch lub więcej rozłącznych grafów.

3. Łańcuch jest aperiodyczny – nie istnieje taka liczba  $K$ , że po  $K$  przejściach pomiędzy wierzchołkami następowałby powrót do wierzchołka startowego (proces stochastyczny).

Najczęściej stosowaną metodą generowania łańcuchów Markova jest **algorytm Metropolisa**.

W algorytmie tym generujemy łańcuch, który będzie niezmiennikiem danego rozkładu (tj. określonej gęstości prawdopodobieństwa).

Elementy łańcucha generujemy tak aby spełniony był warunek

$$p_{i,j} = p_{j,i}$$

## Generowanie ciągu liczb pseudolosowych o zadanym rozkładzie algorytmem Metropolisa

Modyfikujemy metodę eliminacji. W standardowej postaci jest ona mało wydajna – bo nierzadko odrzucamy większość wyników. Dzięki algorytmowi Metropolisa nie odrzucamy żadnego.

Akceptację nowego położenia (nowej liczby w ciągu) dokonujemy zgodnie z formułą

$$h(x_{i-1}, x_i) = \min\left(1, \frac{f(x_i)}{f(x_{i-1})}\right)$$

czyli:

1) Jeśli  $f(x_i) > f(x_{i-1})$  to nowe położenie akceptujemy zawsze.

2) W przeciwnym wypadku akceptacja następuje z prawdopodobieństwem  $f(x_i)/f(x_{i-1})$ .

Jeśli nie akceptujemy nowego punktu to zatwierdzamy stary

(każdy krok generuje nowy element ciągu).

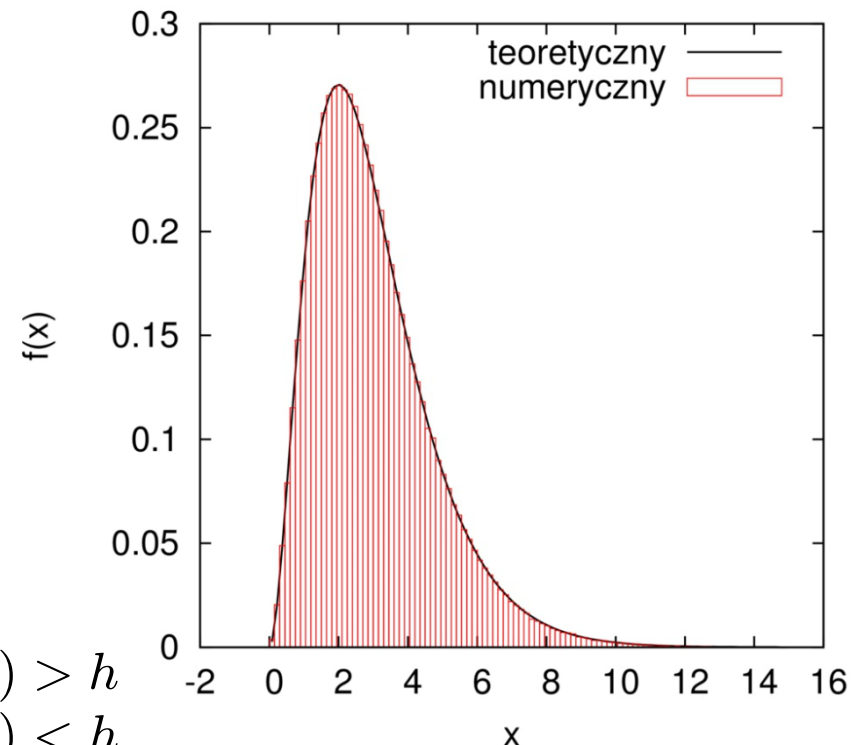
Uwaga: w naszym przykładzie

$$x_{new} = x_i + (2 \cdot U(0, 1) - 1)$$

aby zachodził warunek  $p_{ij} = p_{ji}$

$$x_{i+1} = \begin{cases} x_i & \iff x_{new} < 0 \\ x_i & \iff x_{new} > 0 \quad u \in U(0, 1) > h \\ x_{new} & \iff x_{new} > 0 \quad u \in U(0, 1) < h \end{cases}$$

histogram generatora (Metropolis)  
dla  $f(x) = x^2 \cdot \exp(-x)/2$



## Układ algebraicznych równań liniowych rozwiązywany metodą MC

$$Ax = f$$

Dokonajmy rozkładu macierzy A

$$B = I - A$$

I zastosujmy schemat iteracyjny

$$x^{k+1} = f + Bx^k$$

$$k = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad x^0 = f$$

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= f + Bx^k \\ &= (I + B + B^2 + \dots + B^k)f \end{aligned}$$

Warunkiem zbieżności szeregu jest

$$Sp\{B\} = \max |\lambda_i| < 1$$

Jeśli interesuje nas

$$(h, x) = \sum_{i=1}^n h_i x_i$$

Gdzie

$$h_i = \delta_{ij}$$

to można poszukiwać jedynie i-tej składowej wektora

$$\begin{aligned} x_i^{k+1} &= f_i + \sum_{j_1} b_{i,j_1} f_{j_1} \\ &+ \sum_{j_1, j_2} b_{i,j_1} b_{j_1, j_2} f_{j_2} \\ &+ \sum_{j_1, j_2, j_3} b_{i,j_1} b_{j_1, j_2} b_{j_2, j_3} f_{j_3} + \dots \\ &= \sum_{m=0}^k \sum_{j_1=0}^n \dots \sum_{j_m=0}^n b_{i,j_1} \dots b_{j_{m-1}, j_m} f_{j_m} \end{aligned}$$

## Włączamy błędzenie przypadkowe

Najpierw definiujemy macierz określającą prawdopodobieństwa przejść  $i \rightarrow j$

$$P = \begin{bmatrix} p_{1,1} & p_{1,2} & \dots & p_{1,n} \\ p_{2,1} & p_{2,2} & \dots & p_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n,1} & p_{n,2} & \dots & p_{n,n} \end{bmatrix}_{n \times n}$$

Z warunkiem

$$\sum_{j=1}^n p_{i,j} = 1 \quad \begin{cases} p_{i,j} > 0 \iff b_{ij} \neq 0 \\ p_{i,j} = 0 \iff b_{ij} = 0 \end{cases}$$

Oraz wektor startowy  $q$  z warunkiem

$$\sum_{i=1}^n q_i = 1 \quad \begin{cases} q_i > 0 \iff f_i \neq 0 \\ q_i = 0 \iff f_i = 0 \end{cases}$$

Wartości  $p_{i,j}$  oraz  $q_i$  można powiązać z  $b_{ij}$  oraz  $f_i$ .

Następnie tworzymy łańcuch Markova o długości  $k$

- 1) losujemy z prawdopodobieństwem  $p_i$  numer wiersza
- 2) z prawdopodobieństwem  $p_j$  przesuujemy się do wiersza  $j$ -tego
- 3) powtarzamy pkt 2 aż osiągniemy ciąg  $k$  przejść tj. pojedynczy łańcuch

$$i_0 \rightarrow i_1 \rightarrow \dots \rightarrow i_k$$

- 4) w ten sposób tworzymy  $N$  łańcuchów Markova

- 5) w każdym kroku wyznaczamy wielkość

$$\begin{aligned} U_m &= \frac{b_{i_0,i_1} b_{i_1,i_2} \dots b_{i_{m-1},i_m}}{p_{i_0,i_1} p_{i_1,i_2} \dots p_{i_{m-1},i_m}} \\ &= U_{m-1} \frac{b_{i_{m-1},i_m}}{p_{i_{m-1},i_m}} \end{aligned}$$

Sumujemy je

$$Z_k(h) = \frac{h_{i_0}}{q_{i_0}} \sum_{m=0}^k U_m f_{i_m}$$

i uśredniamy po wszystkich łańcuchach (s)

$$(h, x^{k+1}) \approx \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N Z_k^s(h)$$

**Modyfikacja** – rozwiązanie układu z macierzą sprzężoną ( $B^\dagger = (B^*)^\top$ )

$$x \cdot / \quad x^\dagger = h + B^\dagger x^\dagger$$

$$(x, x^\dagger) = (x, h) + (x, B^\dagger x^\dagger)$$

Jeśli to samo zrobimy z poprzednim równaniem ale mnożąc przez  $x^\dagger$  to dostaniemy

$$(x^\dagger, x) = (x^\dagger, f) + (x^\dagger, Bx)$$

A ich różnica wynosi

$$(h, x) = (x^\dagger, f)$$

Teraz zamiast  $Z_k(h)$  wyznaczamy

$$Z_k^\dagger(f) = \frac{f_{i_0}}{p_{i_0}^\dagger} \sum_{m=1}^k U_m^\dagger h_{i_m} \frac{b_{i_m i_{m-1}}}{p_{i_{m-1} i_m}^\dagger}$$

$$U_0^\dagger = 1 \quad U_m^\dagger = U_{m-1}^\dagger \frac{b_{i_m i_{m-1}}}{p_{i_{m-1} i_m}^\dagger}$$

którego wartość w granicy wynosi

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \langle Z_k^\dagger(f) \rangle &= \lim_{k \rightarrow \infty} (f, x^\dagger(k+1)) \\ &= (f, x^\dagger) = (h, x) \end{aligned}$$

Podstawiając

$$h_i = \delta_{i,j}$$

dostajemy przybliżenie

$$x_j^{k+1} = \langle Z_k^\dagger(f) \rangle = \left\langle \frac{f_{i_0}}{p_{i_0}^\dagger} \sum_{m=1}^k U_m^\dagger \delta_{i_m, j} \right\rangle$$

Dzięki czemu możemy jednocześnie wyznaczać wszystkie elementy wektora  $x$ .



Algorytm w tej postaci wymaga empirycznego ustawienia długości łańcucha Markova.

Można tego uniknąć zakładając że dla niektórych wierszy macierzy P spełniony jest warunek

$$\sum_{j=1}^n p_{i,j} < 1$$

Definiujemy wtedy wektor g o elementach

$$g_i = 1 - \sum_{j=1}^n p_{i,j}$$

Teraz skok pomiędzy wierszami i oraz j dokonuje się z prawdopodobieństwem  $p_{ij}$ , ale może też zakończyć łańcuch z prawdopodobieństwem  $g_i$ .

Łańcuchy będą miały różne długości (k) a oszacowanie składowej wektora x przyjmuje postać

$$(h, x) = \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N Z_k^s(h) = \sum_{s=1}^N \frac{h_{i_0}}{p_{i_0}} \sum_{m=1}^k U_m \frac{f_{i_k}}{g_{i_k}}$$

Uwagi:

- 1) rozwiązywanie układu równań tą metodą daje rozwiązanie przybliżone – zależy od ilości wygenerowanych łańcuchów Markova
- 2) zastosowanie mało praktyczne, tylko dla dużych  $n \sim 10^5$ , gdy nie było jeszcze wydajnych metod iteracyjnych
- 3) w ten sposób można rozwiązywać np. równanie Poissona na siatce, po wcześniejszej jego dyskretyzacji (metoda różnic skończonych) czyli po sprowadzeniu problemu różniczkowego do problemu algebraicznego

## Zastosowanie metody MC do rozwiązania równania całkowego

Przykładowo chcemy rozwiązać równanie Fredholma 2 rzędu

$$y(x) = f(x) + \int_a^b K(x', x)y(x')dx'$$

Całkę zastępujemy kwadraturą

$$y(x_i) = f(x_i) + \sum_{j=1}^M w_j K(x_j, x_i)y(x_j)$$

( $w_j$  – wagi,  $x_j$  – węzły kwadratury)

otrzymujemy układ równań

$$(I - A)y = f$$

który rozwiązujemy.

Problem pojawia się w dwóch przypadkach:

- 1) duża liczba węzłów  $n$  generuje duże macierze  $A^{n \times n}$  (gęste  $\rightarrow$  pełne)
- 2) w przypadku nawet małej liczby węzłów, dla 2 lub 3 wymiarów wygenerowane macierze znowu staną się duże (gęste)

Zastosujemy metodę MC

**Przypadek 1** – szczególny, mający ograniczone zastosowanie

Założenia:

- 1)  $f(x)$  i  $K(x', x)$  pełnią rolę **funkcji gęstości prawdopodobieństwa (fgp)**

$$f(x) \geq 0$$

$$K(x', x) \geq 0$$

- 2) są więc unormowane

$$\int f(x)dx = 1$$

$$\int K(x', x)dx = 1, \quad x' = const$$

W celu znalezienia  $y(x)$  stosujemy rozwinięcie Neumanna

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} y_n(x)$$

w którym elementy szeregu mają postać

$$y_0 = f(x)$$

$$y_n(x) = \int K(x', x) y_{n-1}(x') dx'$$

Jeśli skonstruujemy teraz następujący funkcjonal  $H$

$$H = \int dx h(x) \sum_{n=0}^{\infty} y_n(x)$$

to jego wartość możemy oszacować jako wartość średnią

$$H = \sum_{n=0}^{\infty} \int dx h(x) y_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle h(x) \rangle_n$$

Algorytm wyznaczania  $H$  metodą MC

- 1) tworzymy  $N$  próbek
- 2) każda próbka składa się z ciągu

$$\mathbf{x}_0 \rightarrow \mathbf{x}_1 \rightarrow \mathbf{x}_2 \rightarrow \dots$$

- 3) wektor  $x_0$  generujemy z fgp  $f(x)$
- 4) kolejne wektory  $x_j$  generujemy z fgp  $K(x_{j-1}, x)$
- 5) wkłady od wszystkich próbek uśredniamy

$$H \approx \sum_{n=0}^{M_s} \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N h(x_n^s)$$

$M_s$  – to maksymalna ilość elementów w pojedynczym szeregu (dalsze wyrazy dają niewielki wkład)

## Przypadek 2 – ogólny

Równanie całkowe zapisujemy w postaci operatorowej

$$y(x) = f(x) + \kappa y(x)$$

$$\kappa y(x) = \int dx' K(x', x) y(x')$$

i korzystamy z iteracyjnego przybliżenia rozwiązania układu algebraicznych równań liniowych

$$y^{k+1}(x) = f(x) + \kappa y^k(x) = \sum_{m=0}^k \kappa^m f(x)$$

$$\kappa^0 = 1, \quad y^0 = 0$$

z warunkiem zbieżności aby  $f(x)$  i  $K(x', x)$  były klasy  $L_2$  (całka z  $f^2$  i  $K^2$  skończona)

Algorytm

1) wprowadzamy macierz  $P(x', x)$  oraz wektor  $q(x)$  takie, że

$$\int P(x', x) dx = 1$$

$$P(x', x) \geq 0 \iff K(x', x) \neq 0$$

$$\int p(x) dx = 1 \quad p(x) = \alpha |f(x)|, \quad \alpha > 0$$

**Uwaga:**  $P(x', x)$  oraz  $p(x)$  mogą mieć inny rozkład np. jednorodny

2) wybieramy wektor startowy  $x_0$  z fgp  $p(x)$

3) generujemy ciąg

$$\mathbf{x}_0 \rightarrow \mathbf{x}_1 \rightarrow \mathbf{x}_2 \rightarrow \dots$$

z prawdopodobieństwami przejścia

$$\mathbf{x}_j \rightarrow \mathbf{x}_{j+1}$$

określonymi przez

$$P(x_j, x_{j+1})$$

4) dla każdej próbki  $s=1,2,\dots,N$  określamy wartość zmiennej losowej

$$Z_k^s(h) = \frac{h(x_0)}{p(x_0)} \sum_{m=0}^k U_m f(x_m)$$

gdzie  $U_0 = 1$

$$U_m = \frac{K(x_0, x_1)}{P(x_0, x_1)} \frac{K(x_1, x_2)}{P(x_1, x_2)} \cdots \frac{K(x_{m-1}, x_m)}{P(x_{m-1}, x_m)}$$

5) wartość funkcjonału  $H$  liczymy jako estymator średniej arytmetycznej

$$H = (h, y) = \frac{1}{N} \sum_{s=1}^N Z_k^s(h)$$

6) jeśli interesuje nas rozwiązanie w konkretnym punkcie  $x_0$  to stosujemy podstawienie

$$h(x) = p(x) = \delta(x - x_0)$$

Wtedy

$$\frac{h(x_0)}{p(x_0)} = 1$$

i każdy ciąg startuje z punktu  $x_0$ .

**Przykład.** Dane jest równanie

$$y(x) = x + \lambda \int_0^1 e^{x-x'} y(x') dx'$$

Rozwiązanie:

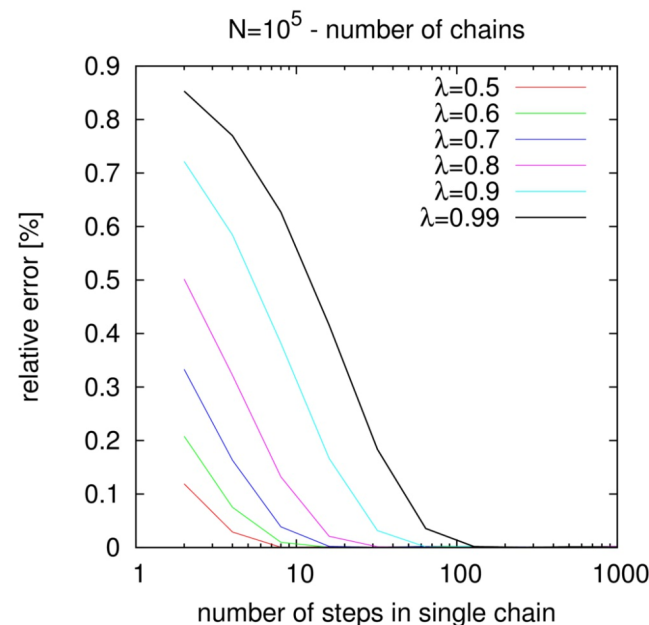
$$y(x) = x + \frac{\lambda}{1-\lambda} (1 - 2e^{-1}) e^x$$

Zakładamy:

$$h = p(x) = P(x', x) = 1$$

Iloczyn:

$$(h, y) = \frac{1}{2} + \frac{\lambda}{1-\lambda} (e + 2e^{-1} - 3)$$



## Równanie Laplace'a

Weźmy np. równanie przewodnictwa cieplnego bez źródeł

$$\nabla^2 u(x, y) = 0, \quad u|_{\Gamma} = f(x, y)$$

I zapiszmy je we współrzędnych cylindrycznych

$$(x, y) \rightarrow (r, \theta)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2} = 0$$

Dokonujemy standardowej separacji zmiennych

$$u(r, \theta) = R(r)\Theta(\theta)$$

$$\frac{r^2}{R} \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{r}{R} \frac{dR}{dr} = -\frac{1}{\Theta} \frac{d^2 \Theta}{d\theta^2} = -l^2 = \text{const}$$

$$\frac{d^2 \Theta}{d\theta^2} + l^2 \Theta = 0$$

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l^2}{r^2} R = 0$$

Rozwiązania:

$$\Theta = A \sin(l\theta) + B \cos(l\theta)$$

$$R = \begin{cases} C \ln(r) + D, & l = 0 \\ C r^{-l} + D r^l, & l > 0 \end{cases}$$

Ustalamy że  $C=0$  bo potencjał musi być skończony. Ogólne rozwiązanie ma postać

$$\begin{aligned} u(r, \theta) &= R \cdot \Theta \\ &= u_0 + \sum_{l=1}^{\infty} r^l [a_l \sin(l\theta) + b_l \cos(l\theta)] \end{aligned}$$

Ponieważ całka

$$\int_0^{2\pi} u(r, \theta) d\theta = 2\pi u_0$$

jest skończona, możemy ją wykorzystać do znalezienia rozwiązania w dowolnym punkcie  $r_0$

$$u(\mathbf{r}_0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(r, \theta) d\theta$$

Taką całkę możemy wyznaczyć przy użyciu metody MC. 14

Algorytm generowania pojedynczego łańcucha:

- 1) wybieramy punkt  $r_0$
- 2) punkt ten otaczamy go okręgiem o maksymalnym promieniu nie wykraczającym poza brzeg obszaru
- 3) losujemy punkt  $r_i$  na obwodzie tego okręgu
- 4) punkty 2 i 3 powtarzamy aż do momentu

$$|\mathbf{r}_{nj} - \mathbf{r}_\Gamma| < \varepsilon$$

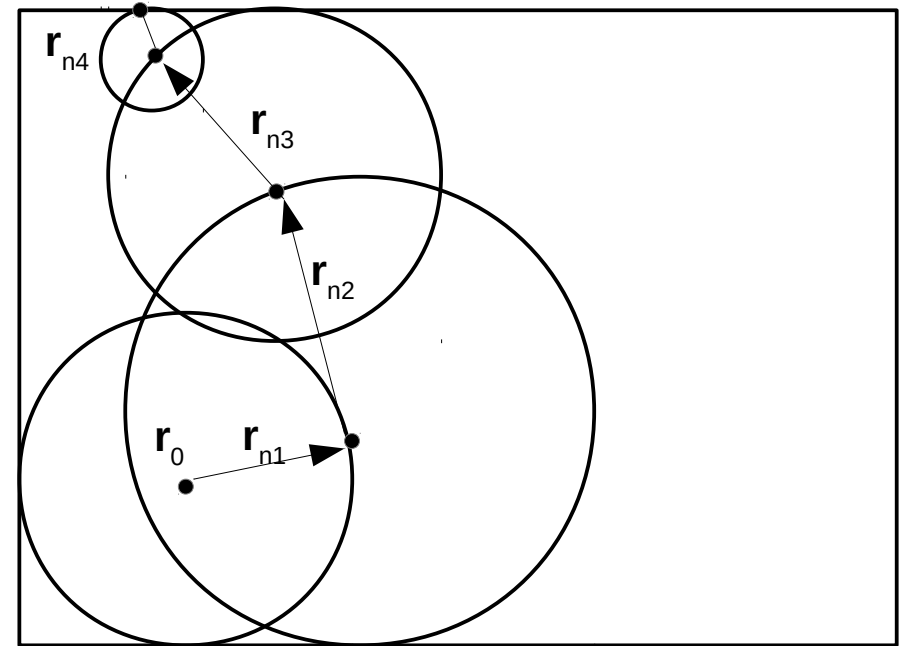
Wówczas zachowujemy wartość  $u_n(\mathbf{r}_\Gamma)$

Proces generowania pojedynczego łańcucha powtarzamy  $N$  razy a wyniki uśredniamy

$$u(\mathbf{r}_0) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N u(\mathbf{r}_{n,\Gamma})$$

Algorytm ten nosi nazwę **WOS** (walking on sphere).

**Uwaga:** jest on mało wydajny o ile nie interesują nas rozwiązania w tylko w wybranych punktach lub gdy obszar ma nieregularny kształt.



## Równanie Poissona dla stałej gęstości

$$\nabla^2 u = -\rho_0, \quad u_\Gamma = f(\mathbf{r})$$

Równanie zapisujemy we współrzędnych sferycznych

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u}{\partial \phi^2} = -\rho_0$$

Rozwiązanie równania jednorodnego

$$u_{jedn} = a_0 + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=1}^l r^l P_l^m(\cos \theta) [a_l \sin(l\phi) + b_l \cos(l\phi)]$$

Rozwiązanie szczególne dla równania niejednorodnego przy założeniu (przypadek 1)

$$\rho_0 = const$$

Znajdujemy poprzez rozdzielanie zmiennych i dwukrotne całkowanie po zmiennej r

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial u}{\partial r} = -\rho_0 \quad / \cdot r^2 \rightarrow / \int dr$$

$$r^2 \frac{\partial u}{\partial r} = -\frac{r^3}{3} \rho_0 + A, \quad / : r^2 \rightarrow / \int dr$$

$$u(r) = -\frac{r^3}{6} \rho_0 - \frac{A}{r^2} + B$$



Suma obu rozwiązań daje całkę ogólną równania niejednorodnego

1) stałą A odrzucamy ze względu na osobliwość

2) stałą B odrzucamy bo ją wyznaczają warunki brzegowe dla całki ogólnej

$$u(r, \theta, \phi) = a_0 + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=1}^l r^l P_l^m(\cos\theta) [a_l \sin(l\phi) + b_l \cos(l\phi)] - \rho_0 \frac{r^2}{6}$$

$P_l^m(\cos\theta)$  - harmoniki sferyczne

Tak jak dla równania Laplace'a w 2D wartość potencjału w  $r_0$  otrzymamy **uśredniając** potencjał na sferze o promieniu  $r$  (3D) – tj. **dzielimy przez pełny kąt bryłowy**.

$$u(\mathbf{r}_0) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi u(\mathbf{r}) + \rho_0 \frac{r^2}{6}$$

Angażujemy algorytm dla równania Laplace'a (generujemy  $N$  łańcuchów) co daje nam oszacowanie potencjału w wybranym punkcie w postaci

$$u(\mathbf{r}_0) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left( \sum_{j=1}^{k_n} \rho_0 \frac{r_j^2}{6} + u(\mathbf{r}_\Gamma) \right)$$

**Uwaga: otrzymaliśmy rozwiązanie dla jednorodnego rozkładu gęstości, ale widać że w każdym kroku musimy uwzględnić dodatkowy przyczynik od gęstości**

## Równanie Poissona z niejednorodnym rozkładem gęstości

Rozwiązania nadal poszukujemy generując łańcuch (ciąg) sfer z jednoczesnym szacowaniem wartości potencjału w środku każdej sfery, czyli:

$$u(\mathbf{r}_j) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} d\Omega u(r_j, \phi, \theta) + \tilde{u}(r), \quad d\Omega = d\phi d\theta$$

Zauważmy, że potencjał w środku sfery można wyznaczyć wykorzystując funkcję Greena

$$\tilde{u} = \int_0^{\pi} d\theta' \int_0^{2\pi} d\phi' \int_0^r dr' G(0, \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}')$$

Postać swobodnej funkcji Greena jest znana, ale .....

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

.... my narzucamy warunek brzegowy na powierzchni sfery (wymuszone współczynnikami równania jednorodnego).

To oznacza że całka z iloczynu gęstości i  $G(r,r')$  nie powinna dawać wkładu na powierzchni sfery – sfera uziemiona, a  $G(r,r')$  dla uziemionej sfery otrzymamy z metody obrazów (wykład: Podstawy fizyki teoretycznej -> Elektrodynamika)

$$G_S(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi} \left( \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{1}{r} \right)$$

Wkład niejednorodnej gęstości do potencjału w środku sfery

$$\tilde{u}(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{|\mathbf{r}'| < r_j} dV' \rho(\mathbf{r}') \left( \frac{1}{|\mathbf{r}'|} - \frac{1}{r} \right)$$

powyższą całkę możemy policzyć przy użyciu kwadratury MC z fgp w postaci  $G_s(0, \mathbf{r}')$ .

Losujemy więc punkt w sferze ( $\mathbf{r}_{j,\alpha}$ ) o fgp  $G_s$  i liczymy

$$\tilde{u}(r) = \rho(\mathbf{r}_{j,\alpha}) \int_{|\mathbf{r}'| < r_j} G_S(0, \mathbf{r}') dV' = \rho(\mathbf{r}_{j,\alpha}) \frac{r_j^2}{6}$$

Wartość tej całki będzie dobrze przybliżona gdy uwzględnimy przyczynki od wielu wygenerowanych łańcuchów.

Ostatecznie potencjał w punkcie  $\mathbf{r}_0$  otrzymujemy uśredniając wkłady od wszystkich wygenerowanych łańcuchów

$$u(\mathbf{r}_0) \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left( \sum_{j=1}^{k_n} \rho(\mathbf{r}_j + \mathbf{r}_{j,\alpha}) \frac{r_j}{6} + u(\mathbf{r}_\Gamma) \right)$$

$r_j$  – promień sfery w j-tym kroku

$\mathbf{r}_j + \mathbf{r}_{j,\alpha}$  – punkt wylosowany w j-tej sferze

$k_n$  – długości poszczególnych łańcuchów (mogą być różne)

## Równanie dyfuzji

Problem 1D

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad x \in (-\infty, \infty), \quad t > 0$$

Warunek początkowy

$$u(x, t = 0) = u_0(x)$$

Wykorzystamy transformację Fouriera

$$g(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx u(x) e^{-ikx}$$

i transformację odwrotną

$$u(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk g(k) e^{ikx}$$

oraz własności transformacji Fouriera

$$F \left\{ \frac{d^n f}{dx^n} \right\} = (ik)^n g(k)$$

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ikx} \left( \frac{\partial u}{\partial t} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) = \frac{\partial g}{\partial t} + Dk^2 g = 0$$

$$\frac{\partial g}{\partial t} = -Dk^2 g \quad \rightarrow \quad g(k, t) = g_0(k) e^{-k^2 Dt}$$

Stosujemy transformację odwrotną

$$\begin{aligned}u(x, t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx} g_0(k) e^{-k^2 Dt} \\&= \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx - k^2 Dt} \left( \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx' u_0(x') e^{-ikx'} \right) \\&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx' u_0(x') \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-k^2 Dt - ik(x' - x)}\end{aligned}$$

Druga całka to transformata gaussianu więc od razu można zapisać rozwiązanie

$$u(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' u_0(x') \underbrace{\frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x - x')^2}{4Dt}\right)}_{\text{Green function} = G(x, x', t=t')}$$

Jeśli jako warunek początkowy zadamy deltę Diraca

$$u_0(x, t = 0) = \delta(x - x_0)$$

to dalszą ewolucję  $u(x,t)$  opisuje formuła

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{4Dt}\right)$$

Założmy teraz że  $u(x,t)$  ma opisywać zbiór  $N$  cząstek, które dla  $t=0$  były skupione w niewielkim obszarze, a dla  $t>0$  dyfundują w prawo i w lewo.

Rozkład gęstości w chwili  $t=\Delta t$

$$u(\Delta x, \Delta t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D\Delta t}} \exp\left(-\frac{\Delta x^2}{4D\Delta t}\right), \quad \Delta x = x - x_0$$

można wygenerować stochastycznie **przesuwając każdą cząstkę** o  $\Delta x$ , przy czym  $\Delta x$  otrzymujemy z rozkładu normalnego (np. generator Boxa-Mullera):

$$\Delta x = N(0, 1)\sqrt{2D\Delta t}$$

W kolejnych chwilach czasowych  $t_i = i \Delta t$  operację powtarzamy dla każdej cząstki.

## Dyfuzja w trzech wymiarach

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)$$

Dzięki liniowości operatora różniczkowego:

$$u(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' u_0(\mathbf{r}', t) \underbrace{\frac{1}{C} \cdot e\left(-\frac{(x-x')^2}{4Dt}\right)}_{\delta(x-x')} \underbrace{\frac{1}{C} \cdot e\left(-\frac{(y-y')^2}{4Dt}\right)}_{\delta(y-y')} \underbrace{\frac{1}{C} \cdot e\left(-\frac{(z-z')^2}{4Dt}\right)}_{\delta(z-z')}$$

przesunięcia w każdym z trzech kierunków są niezależne

$$\Delta x = N_x(0, 1) \sqrt{2D\Delta t}$$

$$\Delta y = N_y(0, 1) \sqrt{2D\Delta t}$$

$$\Delta z = N_z(0, 1) \sqrt{2D\Delta t}$$

## Problem pochodnych mieszanych w równaniu dyfuzji

Jeśli w równaniu dyfuzji mamy pochodne mieszane  $\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}$

wówczas dokonujemy transformacji zmiennych

$$p = \frac{1}{2} \left( \frac{x}{a} - \frac{y}{b} \right) \qquad q = \frac{1}{2} \left( \frac{x}{a} + \frac{y}{b} \right)$$
$$x = a(q + p) \qquad y = b(q - p)$$

i liczymy drugą pochodną u

$$\frac{\partial^2 u}{\partial q^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2ab \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + b^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

Stałe a oraz b dobieramy tak aby czynnik 2ab był taki jak w równaniu wyjściowym.

Zamiast równania z pochodnymi mieszany rozwiążemy „standardowe” równanie dyfuzji

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

Z krokami w q i p:

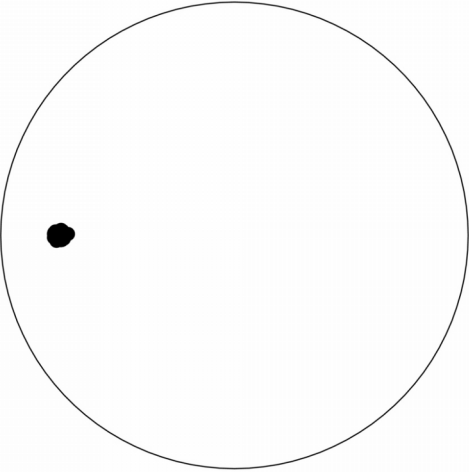
co odpowiada **korelacji** zmiennych x i y:

$$\Delta q = N(0, 1) \sqrt{2D\Delta t}$$
$$\Delta p = 0$$

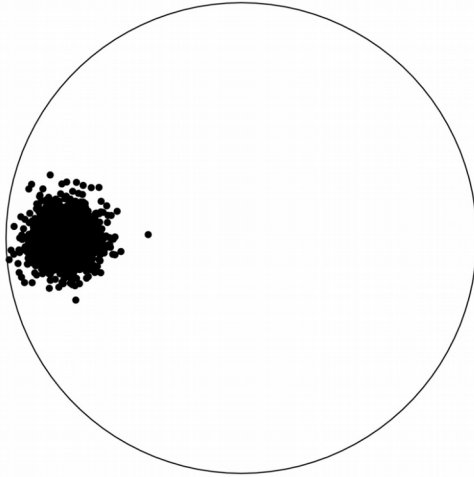
$$\Delta x = a N_x(0, 1) \sqrt{2D\Delta t}$$
$$\Delta y = b N_x(0, 1) \sqrt{2D\Delta t}$$



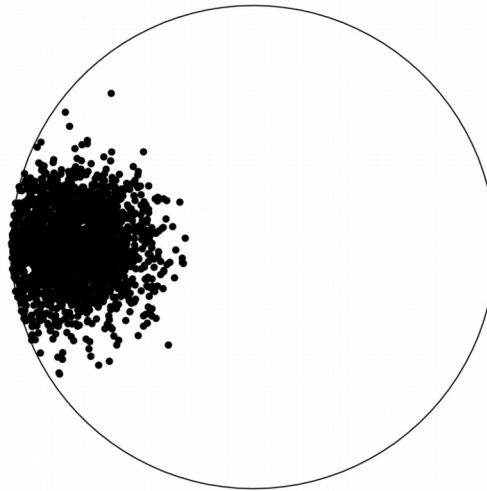
$t = \Delta t$



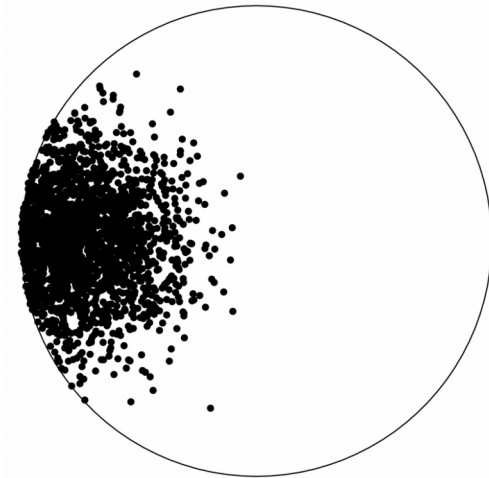
$t = 100 \Delta t$



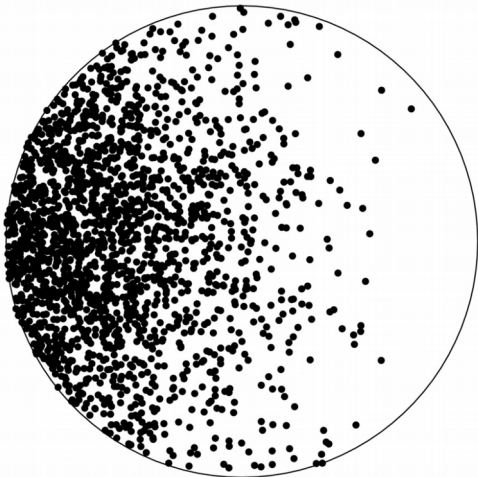
$t = 500 \Delta t$



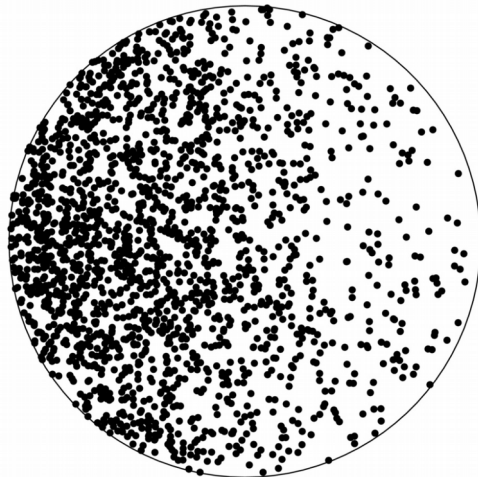
$t = 1000 \Delta t$



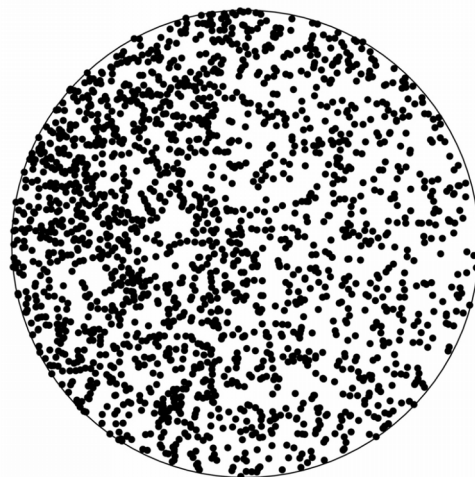
$t = 5000 \Delta t$



$t = 10000 \Delta t$



$t = 20000 \Delta t$



$t = 40000 \Delta t$

