

Rozwiązywanie równań różniczkowych cząstkowych metodą MC

Plan wykładu

- równania eliptyczne:
 - równanie Laplace'a
 - błądzenie przypadkowe ze stałą długością kroku
 - warunki brzegowe Dirichleta i von Neumanna
 - równanie Poissona
 - błądzenie przypadkowe ze stałą i zmienną długością kroku
- równania paraboliczne:
 - równanie przewodnictwa cieplnego w stanie
 - (a) ustalonym (bez czasu)
 - (b) nieustalonym (czas)
 - dyfuzja cząstek
 - przykład: wyznaczanie współczynnika dyfuzji

Literatura:

- W. Dunn, J. Shultis, „**Exploring MC methods**”, Elsevier
- M. Sadiku, „**MC methods for electromagnetics**”, CRC Press
- Ed. V. Chan, „**Theory and applications of MC simulations**”, free online
- W. Minkowycz, W. Sparrow, J. Murthy, „**Handbook of numerical heat transfer**”, Wiley

Równanie Laplace'a w 1D z warunkiem brzegowym Dirichleta

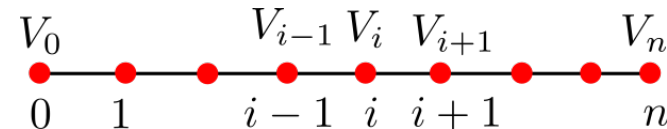
- równanie Laplace'a 1 D

$$\nabla^2 V = \frac{d^2 V}{dx^2} = 0, \quad V(x) = V_B(x)$$

- w obszarze, w którym szukamy rozwiązania wprowadzamy siatkę równoodległych węzłów, a operator różniczkowy zastępujemy ilorazem różnicowym

$$x = x_0 + \Delta \cdot i, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

$$V(x) = V(x_i) = V_i$$



$$\frac{d^2 V}{dx^2} \approx \frac{V_{i-1} - 2V_i + V_{i+1}}{\Delta^2} = 0$$

$$V_i = \frac{1}{2}V_{i-1} + \frac{1}{2}V_{i+1}$$

- V_i jest średnią ważoną dwóch wyrazów, wagi są dodatnie i sumują się do 1 – jak prawdopodobieństwa, wagi traktujemy jak dyskretny rozkład prawdopodobieństwa

$$V_i = p_- V_{i-1} + p_+ V_{i+1}, \quad p_- = p_+ = \frac{1}{2}$$

- obliczmy wartość oczekiwaną V_i

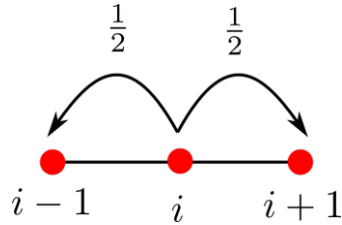
$$\langle V_i \rangle = p_- \langle V_{i-1} \rangle + p_+ \langle V_{i+1} \rangle$$

$$\langle V_{i-1} \rangle = p_- \langle V_{i-2} \rangle + p_+ \langle V_i \rangle$$

$$\langle V_{i+1} \rangle = p_- \langle V_i \rangle + p_+ \langle V_{i+2} \rangle$$

- to rozwinięcie zakończy się dopiero na brzegu tam potencjał jest ustalony

- rozwiązanie zakończy się na lewym lub prawym brzegu – to punkty absorpcyjne
- przejście do lewego lub prawego sąsiada możemy wykonać w sposób losowy, **metodą błędzenia przypadkowego**



$$j_0 = i \longrightarrow j_1 = ?$$

$$U_1 \sim U(0, 1) \rightarrow \begin{cases} U_1 \leq \frac{1}{2} & \implies j_1 = i - 1 \\ U_1 > \frac{1}{2} & \implies j_1 = i + 1 \end{cases}$$

- przemierzając się w ten sposób na siatce dotrzemy w k-tym kroku do lewego/prawego brzegu, gdzie kończymy ścieżkę tam wędrowiec jest absorbowany, wygenerowana ścieżka to **łańcuch Markowa**

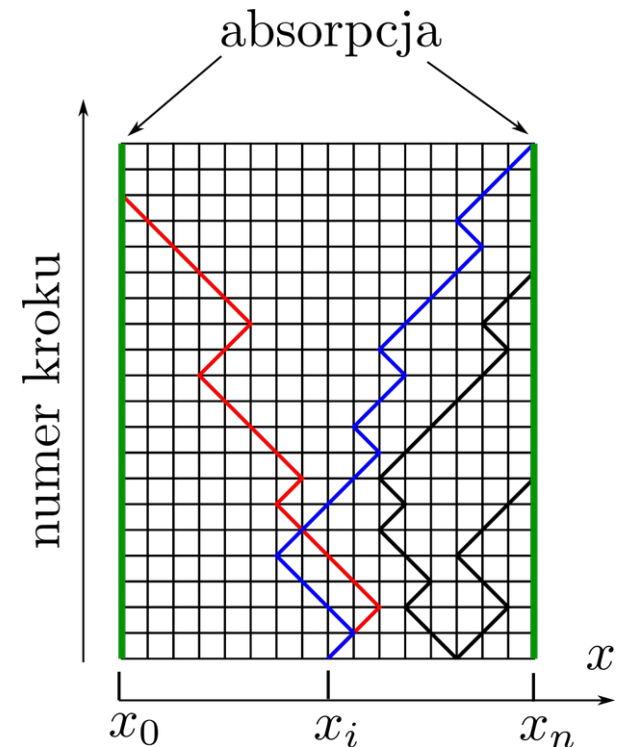
$$j_0 \rightarrow j_1 \rightarrow j_2 \rightarrow \dots \rightarrow j_k$$

- potencjał na brzegu daje przybliżoną wartość w startowym i-tym węźle, ale wynik jest obarczony dużym błędem (to tylko pojedynczy wynik), aby zmniejszyć błąd generujemy dużą liczbę łańcuchów, a wyniki uśredniamy

$$\langle V_i \rangle \approx \bar{V}_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V_{brzeg}^{(i)}$$

N – liczba łańcuchów Markowa

$V_B^{(i)}$ - potencjał na brzegu (lewym/prawym), gdzie zakończył się i-ty łańcuch



- długość łańcucha powinna być skończona (nie będziemy czekać w nieskończoność), ale łańcuch nie powinien być zbyt krótki – wędrowiec powinien mieć duże prawdopodobieństwo dotarcia do obu brzegów

$$k \leq k_{max}$$

jeśli dla k_{max} kroków nie dotrze do brzegu, to łańcuch kasujemy

Równanie Laplace'a 1D z warunkiem brzegowym Dirichleta i von Neumanna

- załóżmy, że na lewym brzegu mamy warunek Dirichleta, a na prawym von Neumanna

$$V_0 = V_B = const \quad \frac{dV}{d\vec{n}} = \frac{dV}{dx} = 0$$

Na lewym brzegu mamy warunek absorpcyjny – tam wędrówcy znikają.

Jak mają się zachować wędrówcy na prawym brzegu?
musimy WB wkomponować do równania Laplace'a

$$\left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x=x_n} \approx \frac{V_{n-1} - 2V_n + V_{n+1}}{\Delta^2} = 0$$

$$V_n = p_- V_{n-1} + p_+ V_{n+1}$$

V_{n+1} znajdziemy z WB

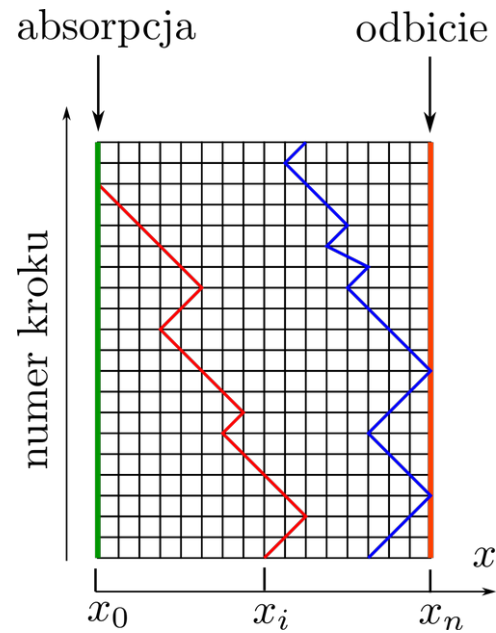
$$\left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=x_n} = \frac{V_{n+1} - V_{n-1}}{2\Delta} = 0$$

$$V_{n+1} = V_{n-1}$$

$$V_n = (p_- + p_+) V_{n-1} = V_{n-1}$$

- na brzegu z warunkiem von Neumanna cząstka odbija się z prawdopodobieństwem równym 1 - wraca do układu wkład do potencjału wnosi warunek na drugim brzegu

- przykładowe ścieżki (łańcuchy Markowa) dla równania Laplace'a z WB Dirichleta (lewy brzeg) i WB von Neumanna (prawy brzeg)



- w tym przypadku maksymalne długości łańcuchów Markowa powinny być większe, aby wędrowcy po odbiciu się od prawego brzegu mieli szansę dotarcia do lewego brzegu

- pseudokod błędzenia przypadkowego dla równania Laplace'a 1D z WB Dirichleta na obu końcach

```

inicjalizacja:  $N, n_x, i_0, \Delta, x_0 = \Delta \cdot i_0$ 
WB:  $i = 0 \rightarrow V_0 = V_{left}$  (absorption)
      $i = n_x \rightarrow V_{n_x} = V_{right}$  (absorption)

V = 0
for(k=1; k <= N; k++){
  i = i_0
  while(i > 0 && i < n_x){
     $U_1 \sim U(0,1)$ 
    if ( $U_1 \leq \frac{1}{2}$ ) i=i-1
    else i=i+1
    if (i == 0)  $V = V + V_{left}$  (absorption)
    if (i == n_x)  $V = V + V_{right}$  (absorption)
  }
}

V  $\leftarrow \frac{V}{N}$ 

```

- pseudokod błędzenia przypadkowego dla równania Laplace'a 1D z WB: Dirichlet + von Neumann

```

inicjalizacja:  $N, n_x, i_0, \Delta, x_0 = \Delta \cdot i_0$ 
WB:  $i = 0 \rightarrow V_0 = const$  (absorption)
      $i = n_x \rightarrow \frac{\partial V}{\partial x} = 0$  (reflection)

V = 0
for(k=1; k <= N; k++){
  i = i_0
  while(i > 0){
     $U_1 \sim U(0,1)$ 
    if ( $U_1 \leq \frac{1}{2}$ ) i=i-1
    else i=i+1
    if (i == n_x) i=i-1 (reflection)
    if (i == 0)  $V = V + V_0$  (absorption)
  }
}

V  $\leftarrow \frac{V}{N}$ 

```

Równanie Laplace'a w 2D

- wprowadzamy siatkę węzłów w 2D o identycznym oczku siatki w obu kierunkach

$$x = x_0 + \Delta \cdot i, \quad i = 0, 1, \dots, n_x$$

$$y = y_0 + \Delta \cdot j, \quad j = 0, 1, \dots, n_y$$

$$V(x, y) = V(x_i, y_j) = V_{i,j}$$

- dyskretyzujemy równanie Laplace'a

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

$$\frac{V_{i+1,j} - 2V_{i,j} + V_{i-1,j}}{\Delta^2} + \frac{V_{i,j+1} - 2V_{i,j} + V_{i,j-1}}{\Delta^2} = 0$$

$$V_{i,j} = p_{x+} V_{i+1,j} + p_{x-} V_{i-1,j} + p_{y+} V_{i,j+1} + p_{y-} V_{i,j-1}$$

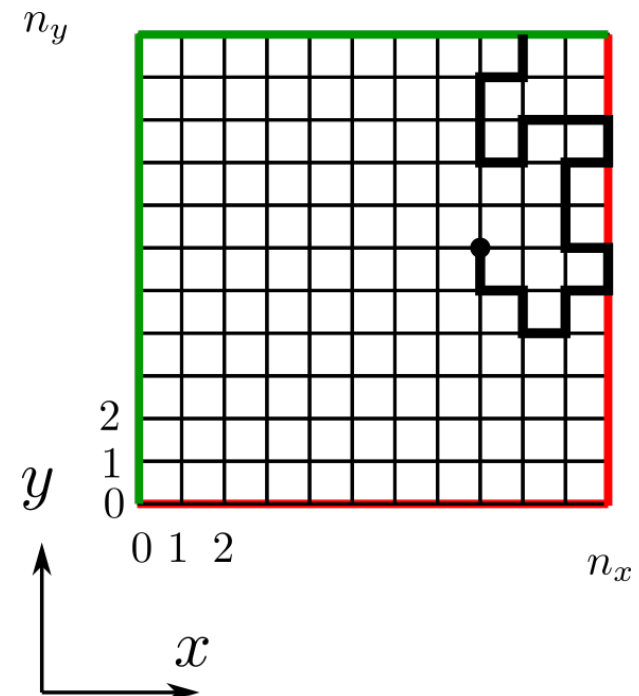
$$p_{x+} = p_{x-} = p_{y+} = p_{y-} = \frac{1}{4}$$

- bez uwzględnienia WB prawdopodobieństwo przejścia do każdego z 4 sąsiadów jest identyczne
- dla WB Dirichleta wędrowiec jest absorbowany na brzegu
- dla WB von Neumanna wędrowiec może się zarówno odbić od brzegu, jak również poruszać się wzdłuż niego

Przykładowa trajektoria:

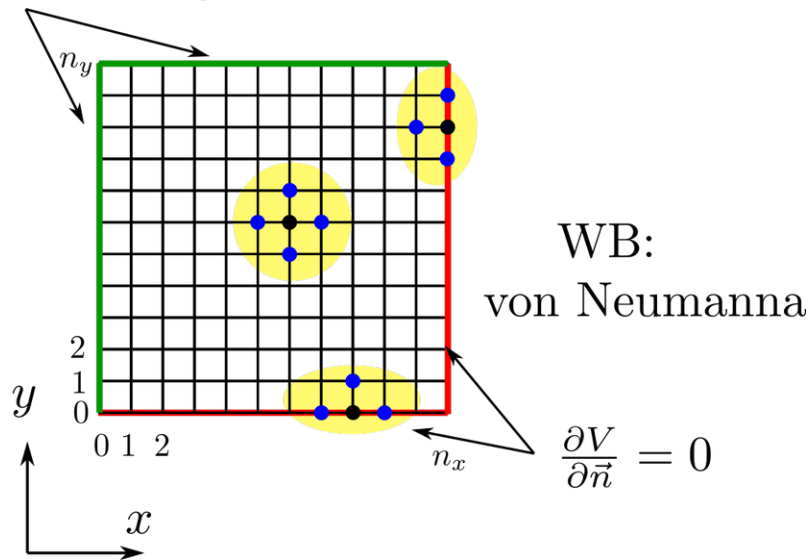
WB Dirichleta – kolor zielony

WB von Neumanna – kolor czerwony



Warunki brzegowe w 2D

WB:
Dirichleta
 $V = V_{brzeg}$



- w 2D dla warunku von Neumanna niekoniecznie musi dojść do odbicia na brzegu obszaru, wędrowiec może także poruszać się wzdłuż brzegu
- na brzegu z warunkiem Dirichleta, wędrowiec jest absorbowany

Mamy ogólny przepis na prawdopodobieństwa przejścia do węzłów sąsiednich

$$V_{i,j} = p_{x+}V_{i+1,j} + p_{x-}V_{i-1,j} + p_{y+}V_{i,j+1} + p_{y-}V_{i,j-1}$$

- środek obszaru** – każdy z 4 sąsiadów równouprawniony:

$$i = 1, 2, \dots, n_x - 1, \quad j = 1, 2, \dots, n_y - 1$$

$$p_{x+} = p_{x-} = p_{y+} = p_{y-} = \frac{1}{4}$$

- prawy brzeg** – WB: von Neumanna (brak prawego sąsiada)

$$i = n_x, \quad j = 1, 2, \dots, n_y - 1$$

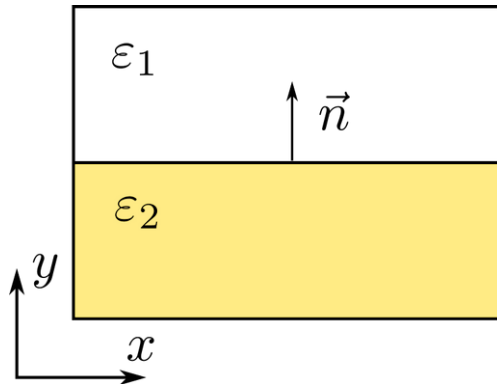
$$\frac{\partial V}{\partial \vec{n}} = \frac{\partial V}{\partial x} = \frac{V_{i+1,j} - V_{i-1,j}}{2\Delta} = 0 \quad \rightarrow \quad V_{i+1} = V_{i-1}$$

$$p_{x+} = 0, \quad p_{x-} = \frac{1}{2}, \quad p_{y+} = p_{y-} = \frac{1}{4}$$

- dolny brzeg** – WB: von Neumanna

$$p_{x+} = p_{x-} = \frac{1}{4}, \quad p_{y+} = \frac{1}{2}, \quad p_{y-} = 0$$

Równanie Laplace'a w 2D ze zmienną stałą dielektryczną



Na granicy dwóch dielektryków muszą być spełnione dwa warunki

$$\vec{D}_1 \cdot \vec{n} = \vec{D}_2 \cdot \vec{n} \quad \rightarrow \quad D_1^\perp = D_2^\perp \quad \bullet \quad \text{składowe prostopadłe do interfejsu}$$

$$E_1^\parallel = E_2^\parallel \quad \bullet \quad \text{składowe równoległe do interfejsu}$$

Równanie Laplace'a zapisujemy w postaci uwzględniającej zmianę przenikalności elektrycznej

$$\nabla \cdot \vec{D} = \nabla \cdot (\varepsilon \nabla V) = 0$$

- w obszarach (1) i (2) wartość ε jest ustalona i postępujemy jak poprzednio
- zmiana dotyczy jedynie interfejsu – węzły na interfejsie leżą zarówno w (1) jak i (2) obszarze

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial x} \right) = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \frac{V_{i-1,j} - 2V_{i,j} + V_{i+1,j}}{\Delta^2}$$

- nie ma zmiany przenikalności, ale ją uśredniamy

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial y} \right) = \frac{\varepsilon_1 \frac{V_{i,j+1} - V_{i,j}}{\Delta} - \varepsilon_2 \frac{V_{i,j} - V_{i,j-1}}{\Delta}}{\Delta} = \frac{\varepsilon_1 V_{i,j+1} - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) V_{i,j} + \varepsilon_2 V_{i,j-1}}{\Delta^2}$$

- w kierunku prostopadłym do interfejsu mamy skok przenikalności

$$V_{i,j} = p_{x+} V_{i+1,j} + p_{x-} V_{i-1,j} + p_{y+} V_{i,j+1} + p_{y-} V_{i,j-1}$$

$$p_{x+} = p_{x-} = \frac{1}{4}, \quad p_{y+} = \frac{\varepsilon_1}{2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}, \quad p_{y-} = \frac{\varepsilon_2}{2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}$$

- interfejs między dielektrykami może znacząco modyfikować prawdopodobieństwa przejścia

Równanie Poissona w 2D

- w równaniu Poissona występuje gęstość, której rozkład przestrzenny musimy uwzględnić w obliczeniach

$$\nabla^2 V = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} = -\frac{\rho}{\epsilon} \quad \rightarrow \quad \frac{V_{i-1,j} - 2V_{i,j} + V_{i+1,j}}{\Delta^2} + \frac{V_{i,j-1} - 2V_{i,j} + V_{i,j+1}}{\Delta^2} = \frac{\rho_{i,j}}{\epsilon}$$

$$V_{i,j} = p_{x-} V_{i-1,j} + p_{x+} V_{i+1,j} + p_{y-} V_{i,j-1} + p_{y+} V_{i,j+1} + \frac{\Delta^2}{4\epsilon} \rho_{i,j}$$

$$p_{x-} = p_{x+} = p_{y-} = p_{y+} = \frac{1}{4}$$

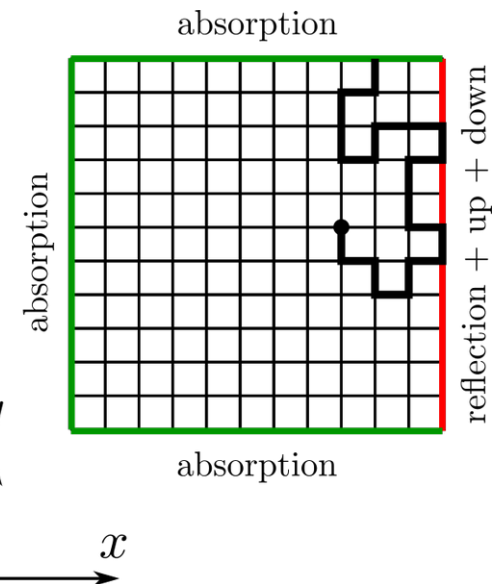
- tak jak poprzednio, potencjały sąsiadów określamy jako wartości oczekiwane
- ale wyraz z gęstością ładunku ma ustaloną wartość,
wniosek: sumujemy wkłady od gęstości podczas błędzenia przypadkowego na siatce

$$V(x_0, y_0) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V_{brzeg}^{(i)} + \frac{1}{N} \frac{\Delta^2}{4\epsilon} \sum_{i=1}^N \left[\sum_j^{m_i-1} \rho(x_j, y_j) \right]$$

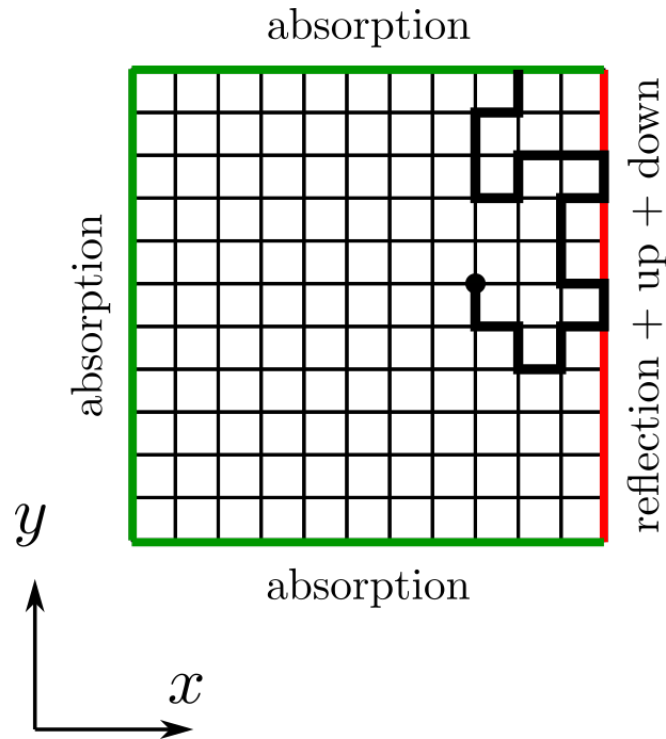
$V_{brzeg}^{(i)}$ - potencjał w punkcie brzegowym, gdzie kończymy i-tą ścieżkę

$(m_i - 1)$ - ostatni punkt przed brzegiem dla i-tej ścieżki

$\rho(x_j, y_j)$ - gęstości w odwiedzanych punktach



- pseudokod błędzenia przypadkowego dla równania Poissona z WB Dirichleta i von Neumanna



- jeśli wyznaczmy potencjał w węźle (i,j) to możemy go potraktować jako **punkt absorpcyjny** (**stretching boundary**) – to zwiększy wydajność metody

inicjalizacja: $N, n_x, n_y, i_0, j_0, \Delta, x_0 = \Delta \cdot i_0, y_0 = \Delta \cdot j_0, \varepsilon$
WB:

$$\begin{aligned} i = 0 &\rightarrow V_{left} = const \text{ (absorption)} \\ j = 0 &\rightarrow V_{bottom} = const \text{ (absorption)} \\ j = n_y &\rightarrow V_{top} = const \text{ (absorption)} \\ i = n_x &\rightarrow \frac{\partial V}{\partial x} = 0 \text{ (reflection + up + down)} \end{aligned}$$

$V = \frac{\Delta^2}{4\varepsilon} \rho_{i_0, j_0}$ (density contribution in starting point)
for (k=1; k <= N; k++){

$i = i_0$

$j = j_0$

while (i>0 && j>0 && j<n_y) { ($i == n_x$ dopuszczamy)

$U_1 \sim U(0,1)$

if ($U_1 \leq \frac{1}{4}$) $i = i - 1$

else if ($U_1 \leq \frac{1}{2}$) $i = i + 1$

else if ($U_1 \leq \frac{3}{4}$) $j = j - 1$

else $j = j + 1$

if ($i == n_x$)

$U_3 \sim (0,1)$

if ($U_3 \leq \frac{1}{2}$) $i = i - 1$ (reflection)

else if ($\frac{1}{2} < U_3 \leq \frac{3}{4}$) $j = j + 1$ (up)

else if ($\frac{3}{4} < U_3$) $j = j - 1$ (down)

end if

if ($i == 0$) $V = V + V_{left}$

if ($j == 0$) $V = V + V_{bottom}$

if ($j == n_y$) $V = V + V_{top}$

if ($i > 0$ && $i < n_x$ && $j > 0$ && $j < n_y$) $V = V + \frac{\Delta^2}{4\varepsilon} \rho_{i,j}$

}

}

$V \leftarrow \frac{V}{N}$

Metoda wyjścia (ang. Exodus method)

- potencjał w punkcie r_0 liczymy jako średnią z wartości brzegowych

$$V(\vec{r}_0) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V^{brzeg}(\underbrace{\vec{r}_i^{end}; \vec{r}_{i,m-1}, \vec{r}_{i,m-2}, \dots, \vec{r}_0}_{\text{łańcuch Markowa}})$$

- możemy go przedstawić w alternatywnej postaci, wykorzystując prawdopodobieństwo przejścia między punktem startowym a dowolnym punktem leżącym na brzegu

$$V(\vec{r}_0) = \int_{\Sigma} p(\vec{r}_0, \vec{r}) V(\vec{r}) d\Sigma \quad \bullet \quad p(r_0, r) \text{ pełni rolę fgp warunkowego}$$

i w wersji dyskretnej

$$V_{i,j} = \sum_{k,l} p(i, j; k, l) V_{k,l}^{brzeg}$$

Jak określić $p(i,j;k,l)$?

W punkcie (i,j) umieszczamy dużą liczbę wędrowców np. $N=10^6$, każdy z nich wędruje (błądzenie przypadkowe) aż dotrze do punktu leżącego na brzegu. Dla każdego punktu brzegowego określamy n_{kl} czyli liczbę wędrowców zaabsorbowanych w danym punkcie. Prawdopodobieństwo liczymy jako średnią

$$p(i, j; k, l) = \frac{n_{i,j \rightarrow k,l}}{N}$$

- start zawsze z punktu (i,j)

- metodę stosujemy w przypadku równania Laplace'a, gdy wielokrotnie zmieniamy warunki brzegowe, prawdopodobieństwa wyznaczamy tylko raz i używamy ich (ustalonych) dla innych WB

Rozwiązanie równania Poissona metodą błędzenia przypadkowego ze zmienną długością kroku

Metoda błędzenia przypadkowego na siatce jest skuteczna, ale ma wadę – dla dużej liczby węzłów siatki staje się mało wydajna.

przykład: $n_x=n_y=1000$ - startując w środku do brzegu dotrzemy po conajmniej 500 krokach (a średnio będzie ich kilka razy więcej)

wniosek: siatka powoduje ograniczenie wydajności

- pozbadźmy się siatki, wykonujmy większe kroki, przecież we wzorach końcowych występuje tylko potencjał brzegowy, pokonana ścieżka (poza wkładem od gęstości) nie jest ważna

Jak to zrobić?

Zastąpmy równanie Poissona postacią całkową – wiemy że całki dobrze się liczy, przy użyciu MC.

Rozważamy problem 3D (w 2D analogicznie, ale z inną funkcją Greena)

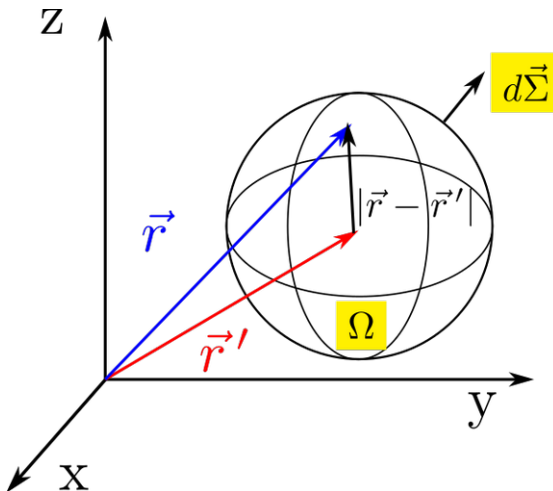
3D

$$\nabla^2 V(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\varepsilon}$$

$$\nabla^2 G(\vec{r}, \vec{r}') = -\delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

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

Równanie Poissona przemnażamy przez G, całkujemy dwukrotnie przez części i dostajemy



$$\int_{\Omega} G(\vec{r}, \vec{r}') \nabla^2 V(\vec{r}) d\Omega = - \int_{\Omega} G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\rho(\vec{r})}{\varepsilon} d\Omega$$

Uwaga: interesuje nas punkt r' stanowiący środek sfery, to punkt w którym chcemy wyznaczyć potencjał.

$$\int_{\Omega} G(\vec{r}, \vec{r}') \nabla^2 V(\vec{r}) d\Omega = \underbrace{\int_{\Omega} V(\vec{r}) \underbrace{\nabla^2 G(\vec{r}, \vec{r}')}_{=-\delta(\vec{r}-\vec{r}')} d^3r}_{=-V(\vec{r}')} + \int_{\Sigma} [G(\vec{r}, \vec{r}') \nabla V(\vec{r}) - V(\vec{r}) \nabla G(\vec{r}, \vec{r}')] \cdot d\vec{\Sigma}$$

- Σ to powierzchnia zamknięta otaczająca objętość Ω , po której całkujemy

- otrzymaliśmy wyrażenie zawierające 3 składniki

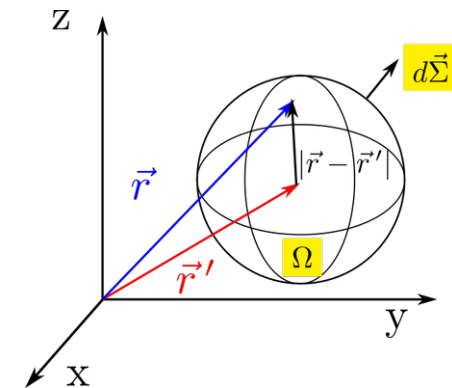
$$V(\vec{r}') = \underbrace{-\int_{\Sigma} V(\vec{r}) \nabla G(\vec{r}, \vec{r}') \cdot d\vec{\Sigma}}_{C_1} + \underbrace{\int_{\Sigma} G(\vec{r}, \vec{r}') \nabla V(\vec{r}) \cdot d\vec{\Sigma}}_{C_2} + \underbrace{\int_{\Omega} G(\vec{r}, \vec{r}') \frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon} d^3r}_{C_3}$$

- wyraz C_1 – funkcja Greena jest sferycznie symetryczna, gradient G w kierunku normalnym do powierzchni sfery to pochodna w kierunku radialnym. Odległość punktu na powierzchni sfery Σ (r) od jej środka (r') wynosi R

$$\vec{r} \in \Sigma \rightarrow R = |\vec{r} - \vec{r}'|$$

$$C_1 = -\int_{\Sigma} V(\vec{r}) \nabla G(\vec{r}, \vec{r}') \cdot d\vec{\Sigma} = -\int_{\Sigma} V(\vec{r}) \frac{1}{4\pi} \frac{-1}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} d\Sigma$$

$$C_1 = \frac{1}{4\pi R^2} \int_{\Sigma} V(\vec{r}) d\Sigma$$



Wartość tej całki to średnia z potencjału na powierzchni sfery o promieniu R – jej wartość szacujemy metodą MC.

- aby obliczyć wyraz C_2 zauważmy, że funkcja Greena jest liczona na powierzchni Σ , gdzie jej wartość jest ustalona

$$C_2 = \int_{\Sigma} G(\vec{r}, \vec{r}') \nabla V(\vec{r}) \cdot d\vec{\Sigma}$$

$$G(\vec{r}, \vec{r}')|_{\vec{r} \in \Sigma} = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{R}$$

przesuwamy G przed całkę a całkę powierzchniową zamieniamy na objętościową, drugą pochodną potencjału zastępujemy gęstością z równania Poissona

$$C_2 = \frac{1}{4\pi R} \int_{\Sigma} \nabla V(\vec{r}) \cdot d\vec{\Sigma} = \frac{1}{4\pi R} \int_{\Omega} \nabla^2 V(\vec{r}) d\Omega \quad \nabla^2 V(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon}$$

$$C_2 = - \int_{\Omega} G(R) \frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon} d\Omega$$

$$|\vec{r} - \vec{r}'| = |\vec{R}| = R$$

- teraz możemy uwzględnić 3 wkłady do potencjału

\vec{r}' - środek sfery

$$V(\vec{r}') = \underbrace{\frac{1}{4\pi R^2} \int_{\Sigma} V(\vec{r}) d\Sigma}_{\text{średnia z potencjału}} + \underbrace{\int_{\Omega} [G(\vec{r}, \vec{r}') - G(R)] \frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon} d^3r}_{\text{wkład od gęstości}}$$

$$G_{eff}(\vec{r}, \vec{r}'; R) = G(\vec{r}, \vec{r}') - G(R) = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} - \frac{1}{R} \right]$$

- potencjał w 3D

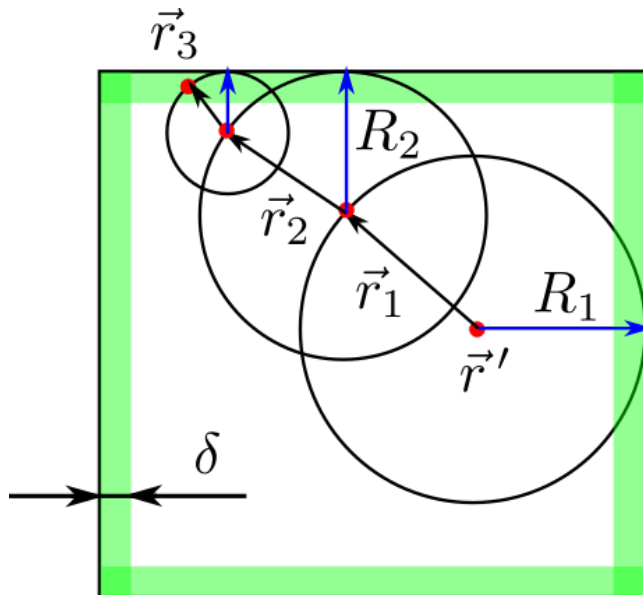
$$V(\vec{r}') = \frac{1}{4\pi R} \int_{\Sigma} V(\vec{r}) d\Sigma + \int_{\Omega} [G(\vec{r}, \vec{r}') - G(R)] \frac{\rho(\vec{r})}{\varepsilon} d^3r$$

- analogicznie możemy znaleźć wyrażenie dla równania Poissona w 2D

$$V(\vec{r}') = \frac{1}{2\pi R} \oint_{\Gamma} V(\vec{r}) d\Gamma + \int_{\Sigma} [G_{2D}(\vec{r}, \vec{r}') - G_{2D}(R)] \frac{\rho_{2D}(\vec{r})}{\varepsilon} d\Sigma$$

$$G_{2D}(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{2\pi} \ln |\vec{r} - \vec{r}'|$$

- musimy wykonać całkowanie, w tym celu używamy MC - generujemy łańcuchy Markowa, a wynik uśredniamy
- konstrukcja pojedynczego łańcucha Markowa w 2D (w 3D postępujemy identycznie – ale trudniej narysować)



- (1) określamy maksymalny promień koła (sfery) R_i
- (2) losujemy punkt wewnątrz koła i określamy w nim wartość gęstości
- (3) na okręgu losujemy punkt r_i

- (4) powtarzamy punkty 1-3 dopóki spełniony jest warunek

$$|\vec{r}_i - \vec{r}_{boundary}| > \delta, \quad (\delta > 0)$$

- (5) łańcuch kończymy, gdy warunek 3 nie jest spełniony (jesteśmy blisko brzegu – obszar zielony na rysunku)

Jako końcową wartość potencjału danego łańcucha bierzemy potencjał na brzegu leżący najbliżej końcowego położenia, do potencjału dodajemy sumę gęstości w wylosowanych punktach

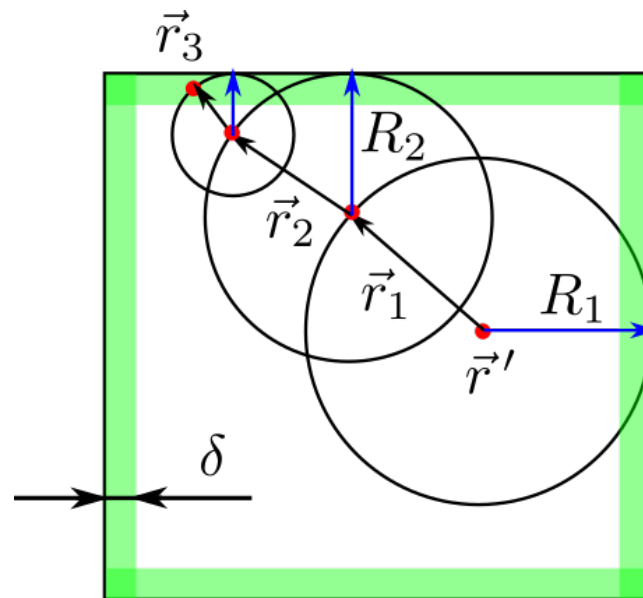
- dysponując oszacowaniem wyrazów dla gęstości oraz dla warunków brzegowych, konstruujemy wyrażenie będące oszacowaniem dla całego zestawu łańcuchów Markowa

$$V(\vec{r}') \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[V_{brzeg}(\vec{r}_i^{end}) + \sum_{m=1}^{M_i} \rho(\vec{r}_{m,1}^{(i)}) \frac{(R_m^{(i)})^2}{6} \right]$$

i - numer łańcucha

$\vec{r}_i^{(end)}$ - punkt końcowy i -tego łańcucha

M_i - długość i -tego łańcucha



- obliczmy wkład od gęstości

najpierw oszacujemy wkład od pojedynczego sfery/koła – obszaru Ω_m

$$V_{\rho}^m(\vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_m} \rho(\vec{r}) \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_{m,0}|} - \frac{1}{R_m} \right) d\Omega$$

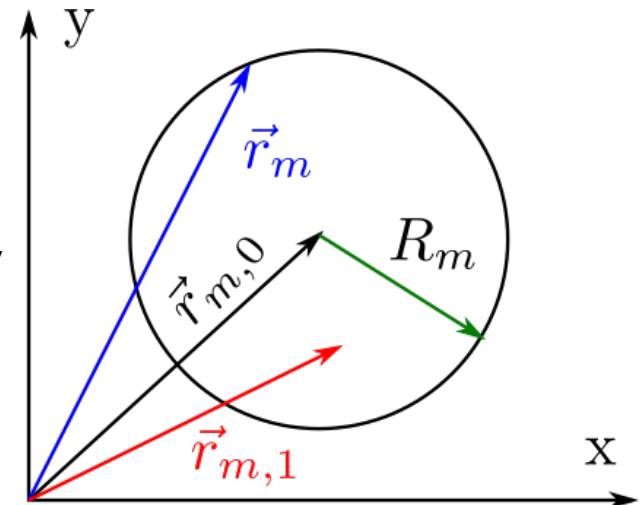
- szacowanie tej całki w każdym kroku byłoby mało efektywne, wobec czego jej wartość liczymy uśredniając wyniki z wielu łańcuchów Markowa (generowanych ścieżek)
- w danym kroku losujemy punkt $\vec{r}_{m,1}$ wewnątrz obszaru Ω_m dla którego określamy gęstość, którą w danym kroku traktujemy jako stałą – to pozwala wyznaczyć wartość całki półanalitycznie.
- wykonując wiele kroków, losujemy różne punkty – więc docelowo uśrednimy gęstość po całym obszarze
- całkowanie (uśrednianie) przeprowadzamy po objętości sfery

$\vec{r}_{m,0}$ - środek okręgu

$\vec{r}_{m,1}$ - losowy punkt wewnątrz koła

\vec{r}_m - losowy punkt na okręgu

R_m - promień okręgu



$$\vec{r}' = \vec{r}_{m,0} \quad V_{\rho}^m(\vec{r}') \approx \frac{\rho(\vec{r}_{m,1})}{4\pi} \int_{\Omega_m} \left(\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_{m,0}|} - \frac{1}{R_m} \right) d\Omega = \frac{\rho(\vec{r}_{m,1})}{4\pi} \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{R_m} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{R_m} \right) r^2 dr$$

$$V_{\rho}^m(\vec{r}') \approx \rho(\vec{r}_{m,1}) \frac{R_m^2}{6}$$

- wkład od gęstości dla pojedynczej wylosowanej sfery (w 2D będzie inny współczynnik)

Równanie przewodnictwa cieplnego

W ogólnym przypadku rozkład temperatury wewnątrz jakiegoś ośrodka jest funkcją położenia i czasu, równanie przewodnictwa cieplnego odzwierciedla tę zależność

$$\nabla [k(\vec{r}) \nabla T(\vec{r}, t)] + S(\vec{r}, t) = \rho c \frac{\partial T(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

Oznaczenia:

T - temperatura
 k – współczynnik przewodnictwa cieplnego
 S – źródło ciepła
 c – ciepło właściwe materiału
 ρ - gęstość ośrodka
 r – wektor położenia
 t - czas

- jeśli k nie zmienia się w przestrzeni wówczas równanie możemy przekształcić do innej, bardziej znanej postaci
 - **równania dyfuzji ciepła**

$$\frac{\partial T(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 T + \frac{D}{k} S(\vec{r}, t)$$

$$D = \frac{k}{\rho c} \quad - \text{współczynnik dyfuzji ciepła}$$

- do rozwiązania równania przewodnictwa cieplnego (z czasem lub bez czasu) konieczne jest wyspecyfikowanie warunków brzegowych

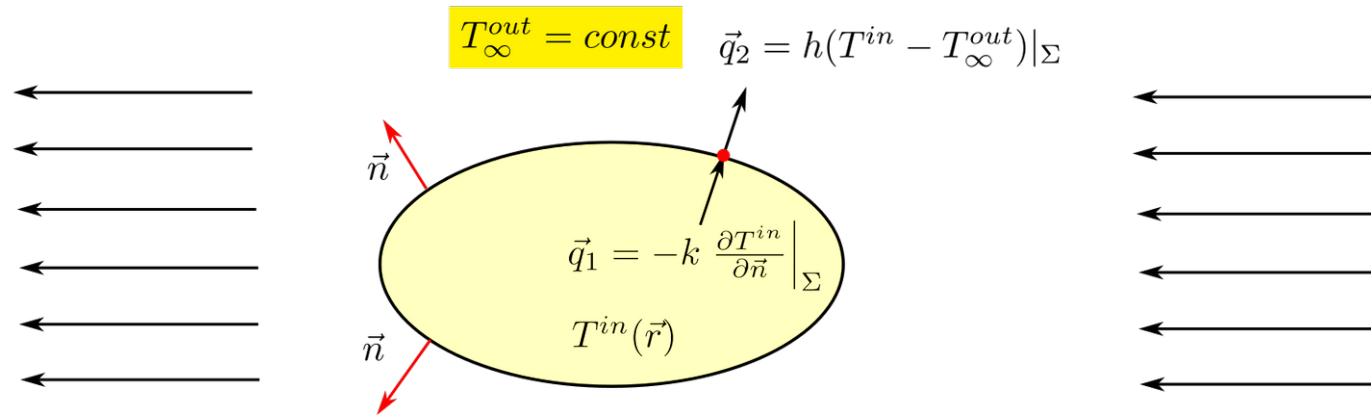
rodzaje warunków brzegowych

- WB Dirichleta (absorpcyjne) – ustalony rozkład temperatury na brzegu $T(\vec{r})|_{brzeg} = const$
- WB Neumanna (odbiciowe) – znika gradient temperatury na brzegu (brak strumienia ciepła) $\left. \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} \right|_{brzeg} = 0$
- WB Robina (konwekcyjne) – strumień ciepła przez brzeg jest proporcjonalny do gradientu temperatury i różnicy temperatur w układzie i na zewnątrz

WB absorpcyjne i odbiciowe już znamy i wiemy jak je implementować, zajmiemy się WB Robina.

Konwekcyjne WB

płyn w stałej temperaturze odbiera/dostarcza ciepło od/do układu ale nie zmienia temperatury



Z prawa zachowania energii – strumień q_1 , który dociera do brzegu układu (od wewnątrz) musi być równy strumieniowi q_2 unoszonemu na zewnątrz (prawo Fouriera)

$$\vec{q}_1 = -k \nabla T$$

- wewnątrz przepływ wywołany jest gradientem temperatury

$$\vec{q}_2 = h(T_{\infty} - T)$$

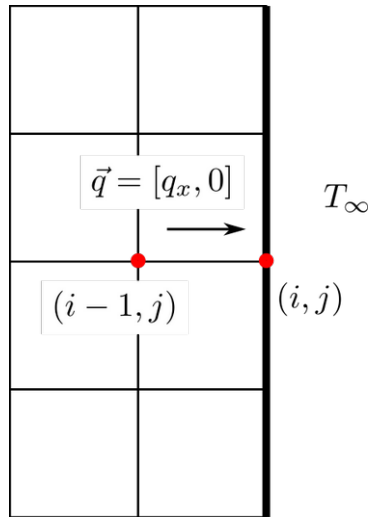
- strumień na zewnątrz jest proporcjonalny do różnicy temperatur rezerwuaru ciepła i temperatury na brzegu, współczynnik h charakteryzuje tempo wymiany ciepła z otoczeniem

$$\vec{q}_1 = \vec{q}_2$$

$$T = T_{\infty} - \frac{k}{h} \frac{\partial T}{\partial \vec{n}}$$

- zmieszane WB Dirichleta i von Neumanna (absorpcyjne + odbiciowe)

- uwzględnijmy konwekcyjne WB na siatce 2D



- równanie WB dla kierunku x

$$-k \frac{\partial T}{\partial x} = h(T - T_\infty)$$

- dyskretyzacja w 2D z identycznym krokiem Δ w obu kierunkach, pochodna wsteczna

$$-k \frac{T_{i,j} - T_{i-1,j}}{\Delta} = h(T_{i,j} - T_\infty)$$

$$T_{i,j} = \frac{k}{k + \Delta h} T_{i-1,j} + \frac{\Delta h}{\Delta h + k} T_\infty$$

$$T_{i,j} = p_{ref} T_{i-1,j} + p_{abs} T_\infty$$

$$p_{ref} = \frac{k}{k + \Delta h}, \quad p_{abs} = \frac{\Delta h}{\Delta h + k}, \quad p_{ref} + p_{abs} = 1$$

- otrzymaliśmy współczynniki odbicia (von Neuman) i absorpcji (Dirichlet)
- możliwe sytuacje

$$k > 0, \quad h > 0 \quad \implies \quad p_{ref}, p_{abs} \in (0, 1) \text{ - odbicie + absorpcja}$$

$$k > 0, \quad h = 0 \quad \implies \quad p_{ref} \in (0, 1), \quad p_{abs} = 0 \text{ - odbicie}$$

$$k = 0, \quad h > 0 \quad \implies \quad p_{abs} = 1, \quad p_{ref} = 0 \text{ - absorpcja}$$

- niezależne od czasu równanie przewodnictwa cieplnego ma postać równania Poissona

$$\nabla k \nabla T = -S(\vec{r}, t)$$

$$k = \text{const} \implies \nabla^2 T = -\frac{S(\vec{r}, t)}{k}$$

Na siatce rozwiązujemy je identycznie jak równanie Poissona dla potencjału elektrycznego, zastępując przenikalność dielektryczną ϵ współczynnikiem przewodnictwa cieplnego k , a gęstość ładunku ρ funkcją źródła ciepła S .

Równanie przewodnictwa cieplnego z konwekcją

Oprócz procesu dyfuzji ciepło może być przekazywane/przenoszone do innych części układu konwekcyjnie. Konwekcja jest wymuszona polem prędkości.

$$\underbrace{D \nabla^2 T}_{\text{dyfuzja}} + \underbrace{\vec{V} \cdot \nabla T}_{\text{konwekcja}} + \underbrace{\frac{D}{k} S(\vec{r}, t)}_{\text{źródło}} = 0$$

- całe równanie dyskretyzujemy na siatce 2D (lub 3D)

$$D \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{\Delta^2} + D \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{\Delta^2} + V_x \frac{T_{i+1,j} - T_{i-1,j}}{2\Delta} + V_y \frac{T_{i,j+1} - T_{i,j-1}}{2\Delta} + \frac{D}{l} S_{i,j} = 0$$

- wyznaczamy wyraz T_{ij}

$$T_{i,j} = p_{x+}T_{i+1,j} + p_{x-}T_{i-1,j} + p_{y+}T_{i,j+1} + p_{y-}T_{i,j-1} + \frac{\Delta^2}{4k}S_{i,j}$$

$$p_{x+} = \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\Delta v_x}{2D} \right) \qquad p_{x-} = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{\Delta v_x}{2D} \right)$$

$$p_{y+} = \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\Delta v_y}{2D} \right) \qquad p_{y-} = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{\Delta v_y}{2D} \right)$$

- wartości prawdopodobieństw są ograniczone z czego wynikają 4 relacje pomiędzy: Δ , V_x , V_y i D , w przeciwnym razie rozwiązanie nie będzie stabilne.

$$0 \leq \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\Delta v_x}{2D} \right) \leq 1 \qquad 0 \leq \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\Delta v_y}{2D} \right) \leq 1$$

$$0 \leq \frac{1}{4} \left(1 - \frac{\Delta v_x}{2D} \right) \leq 1 \qquad 0 \leq \frac{1}{4} \left(1 - \frac{\Delta v_y}{2D} \right) \leq 1$$

- temperaturę w wybranym węźle wyznaczamy jak dla potencjału elektrycznego: generujemy ciąg łańcuchów Markowa, łańcuchy kończą się w punktach brzegowych (absorpcja), dla każdego łańcucha zbieramy też informacje z obszarów, w których znajdują się źródła ciepła

$$T(x_0, y_0) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N T_{brzeg}^{(i)} + \frac{1}{N} \frac{\Delta^2}{4k} \sum_{i=1}^N \left[\sum_j^{m_i-1} S(x_j, y_j) \right]$$

Równanie dyfuzji ciepła zależne od czasu

- rozważamy problem przewodnictwa cieplnego bez źródeł ciepła

$$\frac{\partial T(\vec{r}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 T$$

- równanie dyskretyzujemy na siatce przestrzennej i czasowej i określamy wyraz w chwili n-tej

$$t = t_n = n \cdot \Delta t, \quad n = 0, 1, 2, \dots, n_t$$

$$x = x_i = i \cdot \Delta, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n_x$$

$$y = y_j = j \cdot \Delta, \quad j = 0, 1, 2, \dots, n_y$$

$$\frac{T_{i,j}^n - T_{i,j}^{n-1}}{\Delta t} = D \frac{T_{i+1,j}^{n-1} + T_{i-1,j}^{n-1} + T_{i,j+1}^{n-1} + T_{i,j-1}^{n-1} - 4T_{i,j}^{n-1}}{\Delta^2}$$

- górny indeks – chwila czasowa
- dolne indeksy – siatka przestrzenna

$$T_{i,j}^n = p_{x+} T_{i+1,j}^{n-1} + p_{x-} T_{i-1,j}^{n-1} + p_{y+} T_{i,j+1}^{n-1} + p_{y-} T_{i,j-1}^{n-1} + p_0 T_{i,j}^{n-1}$$

$$p_{x+} = p_{x-} = p_{y+} = p_{y-} = \frac{D \Delta t}{\Delta^2} \quad p_0 = 1 - \frac{4D \Delta t}{\Delta^2}$$

- warunek normalizacji spełniony jest zawsze

$$p_{x+} + p_{x-} + p_{y+} + p_{y-} + p_0 = 1$$

ale musimy zadbać aby $p_0 > 0$

$$p_0 \geq 0 \quad \rightarrow \quad 1 - \frac{4D \Delta t}{\Delta^2} \quad \rightarrow \quad \frac{\Delta t}{\Delta^2} \leq \frac{1}{4D}$$

- ta relacja musi być spełniona między krokiem czasowym i przestrzennym

wzór z poprzedniej strony:
$$T_{i,j}^n = p_{x+}T_{i+1,j}^{n-1} + p_{x-}T_{i-1,j}^{n-1} + p_{y+}T_{i,j+1}^{n-1} + p_{y-}T_{i,j-1}^{n-1} + p_0T_{i,j}^{n-1}$$

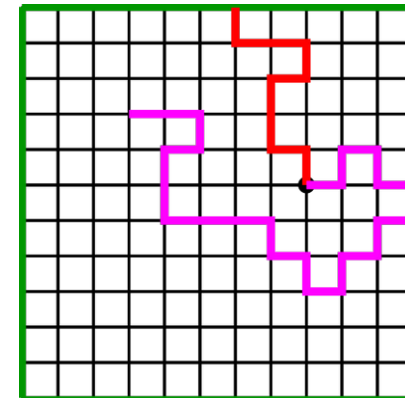
sposób postępowania:

- w każdym kroku cofamy się w czasie o Δt z określonymi prawdopodobieństwami p_a do punktów sąsiednich lub pozostajemy z prawdopodobieństwem p_0 w tym samym punkcie
- cofając się w czasie tworzymy łańcuch o maksymalnej długości

$$m \leq n_t$$

- jeśli generując łańcuch dotrzemy do brzegu (warunek Dirichleta) to zachowujemy wartość temperatury na brzegu w danej chwili i stanowi ona przyczynek do wartości końcowej
- może się zdarzyć że wykonując $m=n$ kroków czasowych, nie dotrzemy do brzegu (punktu absorpcji), wówczas zachowujemy informację o wartości temperatury w chwili $t=0$ w punkcie zatrzymania, stanowi ona wkład do wartości końcowej

$$T(x, y, t_n) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N T(\vec{r}^{end}, t_{m_k}^{end}), \quad t_{m_k} \leq t_n$$



- możliwe jest też symulowanie dyfuzji bez siatki ze zmienną długością kroku, wówczas oprócz losowej wartości promienia koła/sfery generowanej w każdym kroku konieczne jest także losowanie długości kroku czasowego o jaki cofamy się wstecz

Dyfuzja cząstek

Z dyfuzją zetknęliśmy się przy okazji omawiania procesów stochastycznych. Dowiedzieliśmy się, że proces Wienera i dyfuzja opisują to samo zjawisko, ale w różny sposób. Proces Wienera służy do symulacji ruchu pojedynczej cząstki w przestrzeni, natomiast równanie dyfuzji opisuje dynamikę zmian w czasie i przestrzeni funkcji rozkładu (gęstości, masy, stężenia, etc). Oba podejścia są równoważne w tym sensie, że po wygenerowaniu wielu łańcuchów Markowa i uśrednieniu położeń końcowych w określonych chwilach czasowych, ich rozkład przestrzenny powinien odpowiadać funkcji rozkładu (gęstości prawdopodobieństwa) ewoluującej zgodnie z równaniem dyfuzji.

Metodologię rozwiązywania problemu dyfuzji przy pomocy metody MC zaczniemy od analizy rozwiązań analitycznych.

Najpierw rozważmy problem 1D

$$f = f(x, t) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}, \quad x \in (-\infty, \infty)$$

z warunkiem początkowym w postaci delty Diraca

$$f(x, t = 0) = f_0(x) = \delta(x - x_0)$$

- rozwiązanie w chwilach późniejszych znajdziemy wykorzystując transformatę Fouriera (i transformatę odwrotną)

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

- policzmy transformatę równania dyfuzji

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial f}{\partial t} - D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right) e^{ikx} dx = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, t) e^{-ikx} dx - D \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} e^{-ikx} dx = \frac{\partial g(k, t)}{\partial t} + k^2 D g(k, t) = 0$$

- dostaliśmy RRZ1, które rozwiązujemy rozdzielając zmienne

$$\frac{\partial g(k, t)}{\partial t} + k^2 D g(k, t) = 0$$

$$g(k, t) = g_0(k) e^{-Dk^2 t}$$

warunek początkowy
 $g(k, t = 0) = g_0(k)$

- wykonujemy transformację odwrotną rozwiązania

$$\begin{aligned} f(x, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g(k, t) e^{ikx} dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g_0(k) e^{-Dk^2 t} e^{ikx} dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx - Dk^2 t} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dx' f_0(x') e^{-ikx'}}_{=g_0(k)} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' f_0(x') \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-Dk^2 t + ik(x-x')} \end{aligned}$$

$$f(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' f_0(x') \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{4Dt}\right)$$

- rozwiązanie ma postać równania całkowego

- otrzymaliśmy rozwiązanie w postaci całkowej

$$f(x, t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, t, x', t') f(x', t') dx'$$

- jądro całkujące to funkcja Greena (propagator)

$$G(x, t, x', t') = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t - t')}} \exp\left(-\frac{(x - x')^2}{4D(t - t')}\right)$$

- amplitudę skaluje czynnik (t-t')

- policzmy rozwiązanie dla warunku początkowego z deltą Diraca

$$f(x, t - t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x, t, x', t_0) \delta(x' - x_0) dx' = \frac{1}{\sqrt{4\pi D(t - t_0)}} \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2}{4D(t - t_0)}\right)$$

- podstawmy jeszcze

$$\Delta t = t - t_0$$

$$\Delta x = x - x_0$$

$$\sigma_t = \sqrt{2D(t - t_0)}$$

$$f(\Delta x, \Delta t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_t}} \exp\left(-\frac{\Delta x^2}{2\sigma_t^2}\right) = N(x_0, \sigma_t)$$

- rozwiązanie opisywane jest funkcją rozkładu normalnego, zatem generowanie łańcucha Markowa opisującego kolejne położenia wędrowców polega na sekwencyjnym losowaniu liczb z tego rozkładu i przesuwanie wędrowców o tę wartość

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \sigma_t N(0, 1)$$

- dyfuzja w 2D i 3D

Ze względu na liniowość operatora różniczkowego i transformacji Fouriera, rozwiązania dla każdego z kierunków (x,y,z) znajdujemy niezależnie, wobec czego natychmiast zapisz rozwiązanie

$$\frac{\partial f(\vec{r}, t)}{\partial t} = D\nabla^2 f(\vec{r}, t)$$

$$f(\vec{r}, t - t_0) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\vec{r}, t, \vec{r}', t_0) \delta(|\vec{r}' - \vec{r}_0|) dx' = \frac{1}{[4\pi D(t - t_0)]^{d/2}} \exp\left(-\frac{(\vec{r} - \vec{r}_0)^2}{4D(t - t_0)}\right)$$

- przemieszczenia wędrowców w każdym z d-kierunków wykonujemy niezależnie od pozostałych

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \sigma_t N_1, \quad N_1 \sim N(0, 1)$$

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \sigma_t N_2, \quad N_2 \sim N(0, 1)$$

$$z(t + \Delta t) = z(t) + \sigma_t N_3, \quad N_3 \sim N(0, 1)$$

- rozwiązanie w układzie nieograniczonym ze stałym współczynnikiem dyfuzji

- mamy dwa sposoby rozwiązywania równania dyfuzji:

1) rozwiązanie równania dyfuzji na siatce lub MES przy użyciu konwencjonalnych metod numerycznych

2) rozwiązanie problemu metodą Monte Carlo

Podejście (1) może być kłopotliwe ze względu na trudną (tzn. czasochłonną) implementację WB.

Ponadto wymagana jest siatka (regularna bądź nieregularna) co może (ale nie zawsze musi) ograniczać stosowalność metody.

Co daje nam podejście (2)? Siatka nie jest potrzebna oraz potencjalnie łatwiejsze uwzględnianie WB.

przykład: wyznaczanie współczynnika dyfuzji

Dyfuzja to proces rozpraszania cząstek w ośrodku, ale mechanizmów rozpraszania może być wiele. Przykładowo w półprzewodnikach wkład do dyfuzji wnoszą

- elastyczne i nieelastyczne (zakaz Pauliego) na innych elektronach/dziurach
- rozpraszanie na defektach sieci krystalicznej
- rozpraszanie na fononach (optycznych i akustycznych)

Intensywność oddziaływań dla poszczególnych kanałów rozpraszających może być silnie zależna od temperatury (fonony) a to powoduje, że nie możemy określić stałej dyfuzji analitycznie.

Współczynnik dyfuzji występuje we wzorze Einsteina określającym ruchliwość nośników ładunku.

Konieczne staje się zatem określenie współczynnika dyfuzji, a metoda MC dobrze się do tego nadaje.

- w celu określenia współczynnika dyfuzji posłużymy się relacją na wartość σ_t

$$\sigma_t = \sqrt{2Dt} \quad \rightarrow \quad D = \frac{\sigma_t^2}{2t} = \frac{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}{2t} = \frac{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}{2t}$$

lub w przypadku bardziej ogólnym

$$D_{\alpha,\beta}(t) = \frac{\langle (x_\alpha(t) - \langle x_\alpha(t) \rangle)(x_\beta(t) - \langle x_\beta(t) \rangle) \rangle}{2t} = \frac{\langle x_\alpha(t) x_\beta(t) \rangle - \langle x_\alpha(t) \rangle \langle x_\beta(t) \rangle}{2t}$$

uwaga: uśrednianie następuje w chwili t po wszystkich łańcuchach Markowa

- aby wyznaczyć D_{xx} , D_{yy} , D_{xy} wyznaczamy wartości średnie wielkości

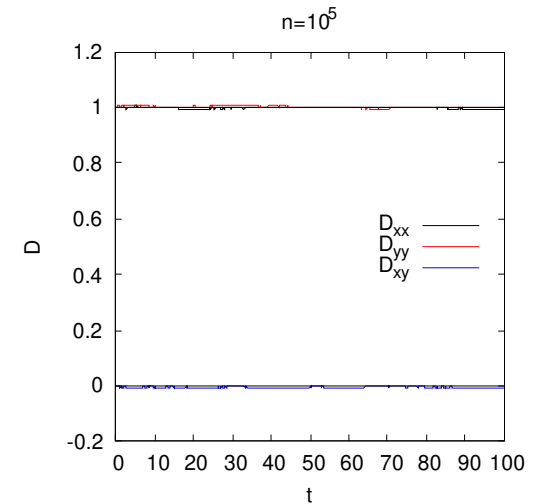
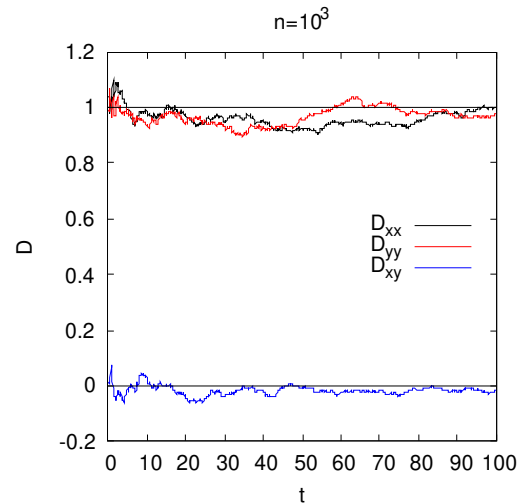
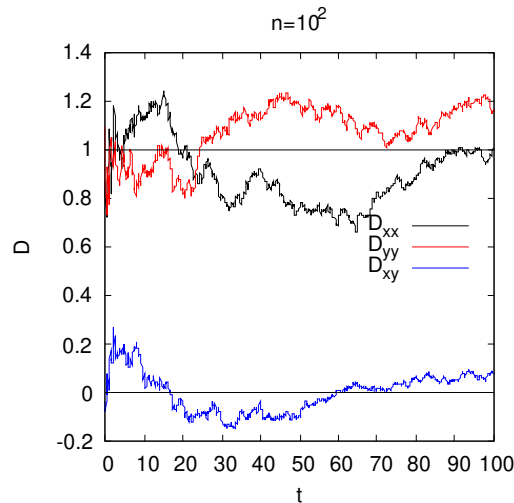
$$\langle x(t)y(t) \rangle = \overline{x(t)y(t)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i(t)Y_i(t)$$

$$\langle x^2(t) \rangle = \overline{x^2(t)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^2(t)$$

$$\langle x(t)y(t) \rangle = \overline{x(t)y(t)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i(t)Y_i(t)$$

$$\langle x^2(t) \rangle = \overline{x^2(t)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i^2(t)$$

Przykładowe wyniki dla $D=1$ oraz liczby wygenerowanych łańcuchów $n=10^2, 10^3, 10^5$



- zgodnie z oczekiwaniami, im więcej wygenerujemy łańcuchów tym wynik staje się dokładniejszy
 - rola fluktuacji statystycznych maleje
 - wielkość fluktuacji nie zależy od t