

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ

Ακαδημαϊκό έτος 2008-2009

Μεταπτυχιακό Φυσικού Τμήματος, Πανεπιστήμιο Αθηνών

Θέματα που θα μελετηθούν

Πρώτη ενότητα:

- Στοχαστικές διαδικασίες - γενικές έννοιες
- Διαδικασίες Markov
- Εξίσωση Master

Δεύτερη ενότητα:

- Η διαδικασία RTP (τυχαίος τηλεγράφος)
- Προσομοίωση της εξίσωσης Master
- Παραδείγματα μαρκοβιανών διαδικασιών

Τρίτη ενότητα:

- Διαδικασίες Markov με αλλαγή φάσης
- Το πρόβλημα χρόνου πρώτης διέλευσης
- Διάχυση

Τέταρτη ενότητα:

- Εξίσωση Fokker-Planck
- Τυχαίος περίπατος και εφαρμογή του στη προσομοίωση Monte-Carlo
- Κβαντική προσομοίωση Monte-Carlo

1. Στοχαστικές διαδικασίες - Γενικές έννοιες

Στοχαστική μεταβλητή $X \Rightarrow$ Τυχαία συνάρτηση $Y_X(t) = f(X, t)$

Αν $t =$ χρόνος τότε: **στοχαστική διαδικασία**

Τοποθετώντας για X μιά από τις δυνατές τιμές της $x \Rightarrow$ υλοποίηση της διαδικασίας $Y_x(t) = f(x, t)$

Συλλογή από υλοποιήσεις \equiv στοχαστική διαδικασία

Αν $P_X(x)$ η πυκνότητα πιθανότητας της X τότε:

$$\langle Y(t) \rangle = \int Y_x(t) P_X(x) dx$$

η μέση τιμή του μεγέθους Y

Ομοίως και για τις ανώτερης τάξης ροπές:

$$\langle Y(t_1)Y(t_2)\dots Y(t_n) \rangle = \int Y_x(t_1)Y_x(t_2)\dots Y_x(t_n)P_X(x) dx$$

Συνάρτηση αυτοσυσχέτισης:

$$\kappa(t_1, t_2) = \langle\langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle\rangle$$

με:

$$\langle\langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle\rangle = \langle (Y(t_1) - \langle Y(t_1) \rangle)(Y(t_2) - \langle Y(t_2) \rangle) \rangle$$

Στάσιμη στοχαστική διαδικασία:

$$\langle Y(t_1 + \tau)Y(t_2 + \tau)\dots Y(t_n + \tau) \rangle = \langle Y(t_1)Y(t_2)\dots Y(t_n) \rangle$$

τότε: $\langle Y \rangle$ ανεξάρτητη του χρόνου t !!!

Η Ιεραρχία των Πυκνοτήτων Πιθανότητας

Η **πυκνότητα πιθανότητας** για την $Y_X(t)$ να πάρει τη τιμή y τη χρονική στιγμή t δίνεται από τη σχέση:

$$\rho_1(y, t) = \int \delta(y - Y_x(t)) P_X(x) dx$$

Η **συνδυασμένη πυκνότητα πιθανότητας** το Y να πάρει τη τιμή y_1 τη χρονική στιγμή t_1 , y_2 τη χρονική στιγμή t_2, \dots, y_n τη t_n θα είναι:

$$\rho_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) = \int \delta(y_1 - Y_x(t_1)) \dots \delta(y_n - Y_x(t_n)) P_X(x) dx$$

Χρησιμοποιώντας αυτές τις συναρτήσεις μπορούμε να βρούμε μέσες τιμές:

$$\langle Y(t_1) \dots Y(t_n) \rangle = \int y_1 y_2 \dots y_n \rho_n(y_1, t_1; \dots; y_n, t_n) dy_1 dy_2 \dots dy_n$$

Άπειρη ακολουθία από πυκνότητες πιθανότητας με τις ιδιότητες:

- $\rho_n \geq 0$
- ρ_n συμμετρική σε ανταλλαγή ζευγών y_k, t_k με y_l, t_l
- $\int \rho_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n) dy_n = \rho_{n-1}(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_{n-1}, t_{n-1})$
- $\int \rho_1(y_1, t_1) dy_1 = 1$

Οι συναρτήσεις ρ_n μας επιτρέπουν να υπολογίσουμε **όλες** τις δυνατές αναμενόμενες τιμές του $Y \implies$ **καθορίζουν πλήρως** τη στοχαστική διαδικασία $Y_X(t)$ (Kolmogorov).

Η στασιμότητα μιας στοχαστικής διαδικασίας έχει συνέπειες:

- Οι συναρτήσεις πυκνότητας πιθανότητας έχουν την ιδιότητα:

$$\rho_n(y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_n, t_n) = \rho_n(y_1, t_1 + \tau; y_2, t_2 + \tau; \dots; y_n, t_n + \tau)$$

- Η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης:

$$\kappa(t_1, t_2) = \langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle - \langle Y(t_1) \rangle \langle Y(t_2) \rangle$$

είναι συνάρτηση **μόνο του σχετικού χρόνου** $t_2 - t_1$ διότι:

$$\langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle = \int y_1 y_2 \rho_2(y_1, t_1; y_2, t_2) dy_1 dy_2$$

Όμως

$$\int y_1 y_2 \rho_2(y_1, t_1; y_2, t_2) dy_1 dy_2 = \int y_1 y_2 \rho_2(y_1, t_1 + \tau; y_2, t_2 + \tau) dy_1 dy_2$$

και επιλέγοντας $\tau = -t_1$ παίρνουμε:

$$\langle Y(t_1)Y(t_2) \rangle = \int y_1 y_2 \rho_2(y_1, 0; y_2, t_2 - t_1) dy_1 dy_2$$

άρα $\kappa(t_1, t_2) = \kappa(t_2 - t_1)$.

- Έτσι μπορούμε να ορίσουμε το **χρόνο αποσυσχέτισης**:

$$t_{\kappa} = \frac{1}{\kappa(0)} \int_0^{\infty} dt |\kappa(t)|$$

- Οι στάσιμες στοχαστικές διαδικασίες παρουσιάζουν **εργοδικότητα !!!**:

Μέση τιμή σε διαφορετικές υλοποιήσεις της διαδικασίας (συλλογή) \equiv Μέση τιμή στο χρόνο για μια υλοποίηση σε άπειρο χρόνο

$$\langle F(Y(t)) \rangle = \int F(y) \rho_1(y) dy = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T F(Y_x(t)) dt$$

- Ισχύει ότι αν t_{κ} **πεπερασμένο** η διαδικασία είναι **εργοδική**

Υπό συνθήκη πυκνότητες πιθανότητας

Η πυκνότητα πιθανότητας $\rho_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1)$ είναι η **υπό συνθήκη πυκνότητα πιθανότητας** το Y να πάρει τη τιμή y_2 τη στιγμή t_2 αν είχε τη τιμή y_1 τη χρονική στιγμή t_1

↓

Από όλες τις υλοποιήσεις $Y_x(t)$ επιλέγουμε αυτές που περνάνε από τη τιμή y_1 τη χρονική στιγμή t_1 . Από αυτές η υποσυλλογή που χαρακτηρίζεται από υλοποιήσεις που περνάνε από τη **πύλη** $y_2, y_2 + dy_2$ τη χρονική στιγμή t_2 δίνονται ως:

$$\rho_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_2$$

Προφανώς ισχύει:

$$\int \rho_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_2 = 1$$

Γενίκευση:

$$\rho_{l|k}(y_{k+1}, t_{k+1}; \dots; y_{k+l}, t_{k+l} | y_1, t_1; \dots; y_k, t_k) = \frac{\rho_{k+l}(y_1, t_1; \dots; y_{k+l}, t_{k+l})}{\rho_k(y_1, t_1; \dots; y_k, t_k)}$$

2. Διαδικασίες Markov

Η στοχαστική διαδικασία για την οποία οι υπό συνθήκη πυκνότητες πιθανότητας για κάθε σύνολο n διαδοχικών χρονικών στιγμών $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ έχουν την ιδιότητα:

$$\rho_{1|n-1}(y_n, t_n | y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1}) = \rho_{1|1}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1})$$

λέγεται **διαδικασία Markov**.

Οι μαρκοβιανές διαδικασίες περιγράφονται πλήρως από τις δύο συναρτήσεις: $\rho_1(y_1, t_1)$ και $\rho_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1)$

Πράγματι:

$$\rho_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) = \rho_2(y_1, t_1; y_2, t_2) \rho_{1|2}(y_3, t_3 | y_1, t_1; y_2, t_2)$$

οπότε

$$\rho_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) = \rho_1(y_1, t_1) \rho_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) \rho_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2)$$

Βασική ιδιότητα: $\rho_{1|1}(y_2, t | y_1, t) = \delta(y_1 - y_2)$

Παράδειγμα διαδικασίας Markov: κίνηση Brown

Ενδιαφέρουσα περίπτωση \rightarrow συνήθης διαφορική εξίσωση:

$$\dot{x} = f(x)$$

Έστω $x(t_0) = x_0$. Τότε $x(t) = \phi(x_0, t - t_0)$. Μπορείτε να δείξετε ότι η $x(t)$ ικανοποιεί τον ορισμό διαδικασίας Markov με

$$\rho_{1|1}(x, t | x_0, t_0) = \delta(x - \phi(x_0, t - t_0))$$

Η παρατήρηση αυτή γενικεύεται και για διανυσματικό μέγεθος \vec{x} .

Συμπέρασμα: **Κάθε ντετερμινιστική διαδικασία είναι και διαδικασί-
α Markov !!!** (λίγο ιδιαίτερης μορφής)

Σχέση Chapman-Kolmogorov

Αναφέραμε την ιδιότητα:

$$\rho_3(y_1, t_1; y_2, t_2; y_3, t_3) = \rho_1(y_1, t_1) \rho_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) \rho_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2)$$

Ολοκληρώνοντας ως προς y_2 παίρνουμε:

$$\rho_2(y_1, t_1; y_3, t_3) = \rho_1(y_1, t_1) \int \rho_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) \rho_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) dy_2$$

Διαιρώντας με $\rho_1(y_1, t_1)$ καταλήγουμε στη:

$$\rho_{1|1}(y_3, t_3 | y_1, t_1) = \int \rho_{1|1}(y_3, t_3 | y_2, t_2) \rho_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) dy_2$$

Γνωστή ως **σχέση Chapman-Kolmogorov (CK)**.

Η CK ικανοποιείται από τη $\rho_{1|1}$ κάθε διαδικασίας Markov.

Έτσι κάθε μαρκοβιανή διαδικασία $y_1, t_1; y_2, t_2; \dots; y_{n-1}, t_{n-1} \longrightarrow y_n, t_n$ σπάει σε απλά βήματα:

$$y_1, t_1 \longrightarrow y_2, t_2 \longrightarrow \dots \longrightarrow y_n, t_n$$

Στατιστική ανεξαρτησία διαδοχικών βημάτων

Αν μια μαρκοβιανή διαδικασία είναι στάσιμη τότε ισχύει:

$$\rho_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = \rho_{1|1}(y_2, t_2 + \tau | y_1, t_1 + \tau)$$

Επομένως επιλέγοντας $\tau = -t_1$:

$$\rho_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = \rho_{1|1}(y_2, t_2 - t_1 | y_1, 0)$$

Δηλαδή η **πυκνότητα πιθανότητας μετάβασης** $\rho_{1|1}$ εξαρτάται μόνο από τη διαφορά χρόνου $t_2 - t_1$.

Στη συνέχεια θα χρησιμοποιούμε συχνά το συμβολισμό:

$$\rho_{1|1}(y_2, \Delta t | y_1)$$

Αλυσίδες Markov

Θεωρούμε ότι η διαδικασία περιέχει μεταβάσεις σε διάκριτες χρονικές στιγμές: $t_k = k\tau$ με $k = 0, 1, 2, \dots, \infty$

Επίσης θεωρούμε ότι κάθε χρονική στιγμή t_i η στοχαστική μεταβλητή μπορεί να πάρει ένα διάκριτο σύνολο τιμών: $y_1, y_2, \dots, y_M, \dots$

Τότε $P_1(n, k) \equiv$ η πιθανότητα η στοχαστική μεταβλητή Y να πάρει τη τιμή y_n ($n = 1, 2, \dots, M$) τη χρονική στιγμή t_k

Η αντίστοιχη υπό συνθήκη πιθανότητα θα είναι: $P_{1|1}(n_2, k_2 | n_1, k_1)$

Αν η διαδικασία είναι **στάσιμη** \Rightarrow **αλυσίδα Markov**. Αν M πεπερασμένο \Rightarrow **πεπερασμένη** αλυσίδα Markov.

Σε αναλογία με τις συνεχείς διαδικασίες θα ισχύει:

$$P_1(n, k + 1) = \sum_{m=1}^M P_1(m, k) P_{1|1}(n, k + 1 | m, k)$$

Η πιθανότητα μετάβασης: $P_{1|1}(n, k + 1 | m, k)$ ορίζει το πίνακα μετάβασης $\hat{Q}(k)$:

$$Q_{n,m}(k) = P_{1|1}(n, k + 1 | m, k)$$

Για στάσιμη διαδικασία:

$$P_{1|1}(n, k + k_0 + 1 | m, k + k_0) = P_{1|1}(n, k + 1 | m, k)$$

και επιλέγοντας $k_0 = -k$:

$$P_{1|1}(n, k + 1 | m, k) = P_{1|1}(n, 1 | m, 0)$$

Ο πίνακας μετάβασης δεν εξαρτάται από τη χρονική στιγμή k

Ο πίνακας Q είναι παράδειγμα **στοχαστικού πίνακα** με τις ιδιότητες:

- τα στοιχεία του πίνακα είναι μη αρνητικά
- κάθε στήλη δίνει άθροισμα 1

Λόγω της δεύτερης ιδιότητας προφανώς ο \hat{Q} έχει ένα αριστερό ιδιοδιάνυσμα:

$$(1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1)\hat{Q} = (1 \ 1 \ 1 \ \dots \ 1)$$

με ιδιοτιμή 1. Η γραμμική άλγεβρα τότε μας λέει ότι υπάρχει και δεξί ιδιοδιάνυσμα (αντίστοιχο της $\rho_1(y)$):

$$\hat{Q} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ q_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ q_M \end{pmatrix}$$

Ένα αρχικό διάνυσμα πιθανότητας:

$$\vec{P}_1(0) = \begin{pmatrix} p_1(0) \\ p_2(0) \\ \cdot \\ \cdot \\ p_M(0) \end{pmatrix}$$

εξελίσσεται χρονικά με το νόμο:

$$\vec{P}_1(k) = \hat{Q}^k \vec{P}_1(0)$$

Το ζητούμενο στις μαρκοβιανές αλυσίδες είναι ο προσδιορισμός της κατάστασης:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \hat{Q}^k \vec{P}_1(0)$$

και ειδικώτερα ποιές αρχικές συνθήκες οδηγούν σε:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \vec{P}_1(k) = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ q_M \end{pmatrix}$$

Άσκηση 1: Μελετήστε τη δυναμική της $N = 2$ μαρκοβιανής αλυσίδας ! (Πίνακας)

Άσκηση 2: Δείξτε ότι η εξίσωση Chapman-Kolmogorov ικανοποιείται από τη:

$$\rho_{1|1}(y_2, t_2 | y_1, t_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_2 - t_1)}} \exp \left[-\frac{(y_2 - y_1)^2}{2(t_2 - t_1)} \right]$$

με $t_2 > t_1$ και $y \in (-\infty, \infty)$.

Αν $\rho_1(y_1, 0) = \delta(y_1)$ τότε η προκύπτουσα διαδικασία είναι μεν μαρκοβιανή αλλά μη στάσιμη! Είναι η γνωστή **διαδικασία Wiener**.

Άσκηση 3: Βεβαιωθείτε ότι η στοχαστική διαδικασία με:

$$\rho_1(y_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{y_1^2}{2}}$$

και:

$$\rho_{1|1}(y_2, \tau | y_1, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(1 - e^{-2\tau})}} \exp \left[-\frac{(y_2 - y_1 e^{-\tau})^2}{2(1 - e^{-2\tau})} \right]$$

είναι και μαρκοβιανή και στάσιμη. Είναι η γνωστή **διαδικασία Ornstein-Uhlenbeck**.

Προτεινόμενες εργασίες-μελέτες: (i) Κίνηση Brown, (ii) Διαδικασία διάσπασης

Γενικές παρατηρήσεις για μαρκοβιανές διαδικασίες

- Ο χαρακτηρισμός 'μαρκοβιανή' για μια διαδικασία χρειάζεται προσεκτική χρήση. Προυποθέτει ότι η βασική ιδιότητα:

$$\rho_{1|n-1}(y_n, t_n | y_1, t_1; \dots; y_{n-1}, t_{n-1}) = \rho_{1|1}(y_n, t_n | y_{n-1}, t_{n-1})$$

ισχύει για κάθε n .

- Για κάποια διανυσματική στοχαστική διαδικασία οποιαδήποτε προβολή της είναι και αυτή στοχαστική διαδικασία. Αν όμως η διαδικασία είναι και μαρκοβιανή τότε η ιδιότητα αυτή **δεν** μεταφέρεται στις προβολές.
- Ισχύει όμως και το ανάποδο: μια μη μαρκοβιανή στοχαστική διαδικασία μπορεί να ενταχθεί σε μια μαρκοβιανή υψηλότερης διάστασης

3. Εξίσωση Master

Ας θεωρήσουμε τώρα τη περίπτωση που η στοχαστική μεταβλητή Y παίρνει τιμές από πεπερασμένο και διακριτό σύνολο $\{y_1, y_2, \dots, y_M\}$ αλλά ο χρόνος εξέλιξης της διαδικασίας παίρνει συνεχείς τιμές. Τότε θα ισχύει:

$$P_1(n, t + \Delta t) = \sum_{m=1}^M P_1(m, t) P_{1|1}(n, t + \Delta t | m, t)$$

Ορίζεται ο ρυθμός μεταβολής του $P_1(n, t)$:

$$\frac{\partial P_1(n, t)}{\partial t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{P_1(n, t + \Delta t) - P_1(n, t)}{\Delta t}$$

Χρησιμοποιώντας τη προηγούμενη σχέση παίρνουμε:

$$\frac{\partial P_1(n, t)}{\partial t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left[\sum_{m=1}^M P_1(m, t) P_{1|1}(n, t + \Delta t | m, t) - P_1(n, t) \right]$$

$$\frac{\partial P_1(n, t)}{\partial t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \sum_{m=1}^M P_1(m, t) [P_{1|1}(n, t + \Delta t | m, t) - \delta_{n,m}]$$

Ο χειρισμός της πιθανότητας $P_{1|1}(n, t + \Delta t | m, t)$ θέλει ιδιαίτερη προσοχή διότι:

- για $m \neq n$ έχουμε μετάβαση
- για $m = n$ δεν έχουμε μετάβαση

Αν $w_{n,m}(t)$ είναι ο ρυθμός μετάβασης $m \rightarrow n$ τη χρονική στιγμή t τότε σε τάξη Δt παίρνουμε:

$$P_{1|1}(n, t + \Delta t | m, t) = \delta_{n,m} (1 - \Delta t \sum_{l=1}^M w_{l,m}(t)) + w_{n,m}(t) \Delta t$$

ΟΠΟΤΕ ΓΙΑ $m = n$:

$$P_{1|1}(n, t + \Delta t | m, t) = 1 - \Delta t \sum_{l, l \neq m} w_{l,m}(t) = 1 - \Delta t \sum_{l, l \neq n} w_{l,n}(t)$$

ΠΟΥ ΕΙΝΑΙ Η ΠΙΘΑΝΟΤΗΤΑ ΝΑ ΜΗΝ ΕΧΟΥΜΕ ΜΕΤΑΒΑΣΗ ΤΗ ΣΤΙΓΜΗ t . Έτσι η αρχική εξίσωση γράφεται:

$$\begin{aligned} \frac{\partial P_1(n, t)}{\partial t} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \sum_{m=1}^M P_1(m, t) [\delta_{n,m} (1 - \Delta t \sum_{l=1}^M w_{l,n}(t)) \\ + w_{n,m}(t) \Delta t - \delta_{n,m}] \end{aligned}$$

ΚΑΤΑΛΗΓΟΝΤΑΣ ΣΤΗΝ **εξίσωση Master**:

$$\frac{\partial P_1(n, t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^M [P_1(m, t) w_{n,m}(t) - P_1(n, t) w_{m,n}(t)]$$

Με παρόμοιο τρόπο βρίσκουμε ότι και η πιθανότητα $P_{1|1}$, υποθέτοντας χρονική ομοιογένεια, ακολουθεί αντίστοιχη εξίσωση Master:

$$\frac{\partial P_{1|1}(n, t|m)}{\partial t} = \sum_{l=1}^M \left[P_{1|1}(l, t|m)w_{n,l}(t) - P_{1|1}(n, t|m)w_{l,n}(t) \right]$$

που ουσιαστικά αποτελεί τη **διαφορική διατύπωση της CK σχέσης**

Αθροίζοντας την εξίσωση ως προς n βρίσκουμε:

$$\frac{\partial \sum_n P_{1|1}(n, t|m)}{\partial t} = 0$$

Η κανονικοποίηση $\sum_n P_{1|1}(n, t|m) = 1$ διατηρείται στην εξίσωση Master

4. Η διαδικασία τυχαίου τηλεγράφου RTP

Θα μελετήσουμε την πιο απλή διαδικασία Markov με δύο δυνατές καταστάσεις $n = 0$ και $n = 1$ (Random-Telegraph-Process).

Θεωρούμε γνωστό ότι: $w_{1,0} = a$ και $w_{0,1} = b$ (σταθερές που μετρώνται σε $[\text{χρόνος}]^{(-1)}$)

Παραδείγματα τέτοιων συστημάτων:

- Ανεξάρτητα σπιν $\frac{1}{2}$ σε θερμικό περιβάλλον
- Άτομα που διακυμαίνονται θερμικά μεταξύ θεμελιώδους και πρώτης διεγερμένης στάθμης
- Ένζυμα σε χημικό περιβάλλον που παλινδρομούν μεταξύ ενεργής και ανενεργής κατάστασης

Οι εξισώσεις Master για το σύστημα αυτό είναι:

$$\dot{P}_{1|1}(0, t|m) = bP_{1|1}(1, t|m) - aP_{1|1}(0, t|m)$$

$$\dot{P}_{1|1}(1, t|m) = aP_{1|1}(0, t|m) - bP_{1|1}(1, t|m)$$

Χρησιμοποιώντας τη κανονικοποίηση:

$$P_{1|1}(0, t|m) + P_{1|1}(1, t|m) = 1$$

καταλήγουμε στην απλή εξίσωση:

$$\dot{P}_{1|1}(0, t|m) = -(a + b) \left(P_{1|1}(0, t|m) - \frac{b}{a + b} \right)$$

με λύση (χωριζόμενες μεταβλητές):

$$P_{1|1}(0, t|m) = \frac{b}{a + b} + C_m e^{-(a+b)t}$$

Η σταθερά C_m προσδιορίζεται από τις αρχικές συνθήκες:

$$P_{1|1}(0, 0|0) = 1 \text{ και } P_{1|1}(0, 0|1) = 0$$

Με παρόμοιο τρόπο χειριζόμαστε την εξίσωση για τη $P_{1|1}(1, t|m)$.

Η πλήρης λύση γράφεται:

$$P_{1|1}(0, t|0) = \frac{1}{a+b} (b + ae^{-(a+b)t})$$

$$P_{1|1}(1, t|1) = \frac{1}{a+b} (a + be^{-(a+b)t})$$

$$P_{1|1}(0, t|1) = \frac{b}{a+b} (1 - e^{-(a+b)t})$$

$$P_{1|1}(1, t|0) = \frac{a}{a+b} (1 - e^{-(a+b)t})$$

Λόγω της στασιμότητας της διαδικασίας υπάρχει το όριο:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p(0) = \frac{b}{a+b} \quad ; \quad \lim_{t \rightarrow \infty} p(1) = \frac{a}{a+b}$$

Αντίστοιχα η στάσιμη μέση τιμή είναι:

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^1 np(n) = p(1) = \frac{a}{a+b}$$

Η στάσιμη τιμή για τη συνάρτηση αυτοσυσχέτισης προσδιορίζεται από:

$$\langle n(t)n(t') \rangle = \sum_{n,n'} nn' P_2(n, t; n', t')$$

και:

$$\langle n(t) \rangle = \langle n(t') \rangle = \frac{a}{a+b}$$

Ισχύει όμως:

$$\sum_{n,n'} nn' P_2(n, t; n', t') = P_2(1, t; 1, t') = P_{1|1}(1, t - t' | 1) P_1(1)$$

Οπότε:

$$\kappa(t - t') = \frac{ab}{(a+b)^2} e^{-(a+b)(t-t')}$$

Με χρόνο αποσυσχέτισης:

$$t_{\kappa} = \frac{1}{a + b}$$



Η διαδικασία RTP είναι εργοδική

Η προσομοίωση της διαδικασίας μπορεί να γίνει χρησιμοποιώντας πλήθος υλοποιήσεων ή παρακολουθώντας μια υλοποίηση για μεγάλο χρονικό διάστημα.

Συνήθως τα ζητούμενα μεγέθη είναι η μέση τιμή, η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης και ο χρόνος αποσυσχέτισης.

Προσομοίωση της διαδικασίας RTP

Σκοπός: Εύρεση της ακολουθίας χρόνων t_1, t_2, \dots, t_N στους οποίους μια υλοποίηση της διαδικασίας παρουσιάζει μεταβάσεις μεταξύ $n = 0$ και $n = 1$.

Έστω ότι η διαδικασία ξεκινάει με $n = 1$ για $t = 0$.

Αν για $0 \leq t < t_1$ η υλοποίηση της διαδικασίας παραμένει στο $n = 1$ τότε:

$$P_{1|1}(0, t|1) = 0$$

Η εξίσωση Master για αυτό το διάστημα είναι:

$$\dot{P}_{1|1}(1, t|1) = -bP_{1|1}(1, t|1)$$

Με αρχική συνθήκη $P_{1|1}(1, 0|1) = 1$ η λύση είναι:

$$P_{1|1}(1, t|1) = e^{-bt}$$

Η πιο πάνω λύση εκφράζει τη πιθανότητα σε χρόνο t να μη πραγματοποιηθεί μετάβαση στο $n = 0$.

Η πιθανότητα αυτή η μετάβαση να γίνει στο διάστημα $t_1 \leq t \leq t_1 + dt_1$ είναι:

$$\rho(t_1)dt_1 = P_{1|1}(1, t_1|1) - P_{1|1}(1, t_1 + dt_1|1)$$

Δηλαδή η κατανομή του χρόνου πρώτης μετάβασης t_1 δίνεται ως:

$$\rho(t_1) = - \left(\frac{d}{dt} e^{-bt} \right)_{t=t_1} = b e^{-bt_1}$$

Άσκηση Δείξτε ότι η σχέση:

$$t_1 = -\frac{1}{b} \ln(1 - r_1)$$

όπου r_1 τυχαίος αριθμός ομοιόμορφα κατανεμημένος στο $[0, 1)$ παράγει χρόνους t_1 κατανεμημένους σύμφωνα με τη $\rho(t_1)$

Με παρόμοιο συλλογισμό υπολογίζουμε το χρόνο δεύτερης μετάβασης t_2 (αντικατάσταση του b με a):

$$t_2 = t_1 - \frac{1}{a} \ln(1 - r_2)$$

Σύνοψη αλγόριθμου προσομοίωσης της διαδικασίας RTP:

- Επιλογή αρχικής κατάστασης $t_0 = 0$, $n = 1$ και δείκτης αλγοριθμικού βήματος $m = 0$

- Επιλογή r_1 , r_2 και υπολογισμός χρόνων μετάβασης:

$$t_{2m+1} = t_{2m} - \frac{1}{b} \ln(1 - r_1)$$

$$t_{2m+2} = t_{2m+1} - \frac{1}{a} \ln(1 - r_2)$$

- Μεταβολή του δείκτη $m \rightarrow m + 1$ και επιστροφή στο δεύτερο βήμα αν $t_{2m+2} < t_N$ (αλλιώς διακοπή).

Καταλήγουμε στην ακόλουθη υλοποίηση της διαδικασίας:

$$n(t) = \begin{cases} 1 & ; \quad t \in [t_{2m}, t_{2m+1}) \\ 0 & ; \quad t \in [t_{2m+1}, t_{2m}) \end{cases} \quad m = 0, 1, \dots, \frac{N}{2}$$

Από την οποία υπολογίζουμε τη μέση τιμή και τη συνάρτηση αυτοσυσχέτισης ως:

$$\langle n \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T n(t) dt$$

και:

$$\kappa(\tau) = \langle n(t)n(t+\tau) \rangle - \langle n \rangle^2 = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^{T-\tau} n(t)n(t+\tau) dt - \langle n \rangle^2$$

Άσκηση Επιλέγοντας $a = b = 1$ και $N = 10000$ γράψτε πρόγραμμα υλοποίησης του ανωτέρω αλγορίθμου. Συγκρίνατε τα αποτελέσματά σας με την αναλυτική λύση.

Προσομοίωση της διακριτής εξίσωσης Master

Έστω ότι γνωρίζουμε τα $w_{n,m}$ στην εξίσωση:

$$\frac{\partial P_{1|1}(n, t|m)}{\partial t} = \sum_{l=1}^M \left[P_{1|1}(l, t|m) w_{n,l}(t) - P_{1|1}(n, t|m) w_{l,n}(t) \right]$$

και είναι ανεξάρτητα του χρόνου t .

Ορίζουμε τότε:

$$W_n = \sum_m w_{m,n}$$

σαν τη πιθανότητα εγκατάλειψης της κατάστασης n ανά μονάδα χρόνου.

Σύμφωνα με τα όσα είπαμε πιο πάνω ο χρόνος παραμονής στη κατάσταση n θα είναι:

$$\Delta t = -\frac{1}{W_n} \ln(1 - r)$$

Μετά από χρόνο Δt θα πραγματοποιηθεί μετάβαση $n \rightarrow m$. Ο τρέχων χρόνος είναι τότε:

$$t \rightarrow t + \Delta t \quad ; \quad t_n = t_n + \Delta t$$

όπου t_n είναι ο συνολικός χρόνος παραμονής στη κατάσταση n .

Επειδή υπάρχουν πολλοί δυνατοί προορισμοί επιλέγουμε την κατάσταση k ανάλογα με τη συμμετοχή της ($w_{k,n}$) στο άθροισμα W_n . Στη πράξη βρίσκουμε:

$$R_n = W_n r$$

με r ομοιόμορφα κατανεμημένο στο $[0, 1)$.

Κατόπιν αφαιρούμε διαδοχικά από το R_n τα διάφορα $w_{m,n}$:

$$R_n \rightarrow R_n - w_{m,n}$$

Αν για κάποιο $m = j$ το προκύπτον R_n γίνει αρνητικό τότε θεωρούμε ότι υλοποιήθηκε η μετάβαση $n \rightarrow j$ και η νέα κατάσταση είναι η j .

Επαναλαμβάνουμε την όλη διαδικασία μέχρι ο τρέχων χρόνος να πάρει τη τιμή T_{sim} .

Κάθε παρατηρήσιμο μέγεθος θα δίνεται από σχέση του τύπου:

$$\langle f(n) \rangle = \frac{1}{T_{sim}} \sum_n f_n t_n$$

όπου

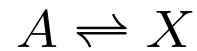
$$T_{sim} = \sum_n t_n$$

Το σχήμα αυτό ονομάζεται αλγόριθμος Gillespie

Άσκηση Γράψτε πρόγραμμα υλοποίησης του αλγορίθμου Gillespie θεωρώντας σαν μεταβλητές εισόδου τα $w_{m,n}$. Για οικονομία μνήμης αποφύγετε την αποθήκευση των t_n υπολογίζοντας μετά το δεύτερο βήμα $\langle f \rangle \rightarrow \langle f \rangle + f_n \Delta t$ και κανονικοποιώντας στο τέλος: $\langle f \rangle \rightarrow \frac{\langle f \rangle}{T_{sim}}$!

6. Άλλα παραδείγματα μαρκοβιανών διαδικασιών

A, X δυνατές καταστάσεις ενός ατόμου ή μορίου μεταξύ των οποίων επιτρέπονται μεταβάσεις:



Υποθέσεις

- Ομοιογενής κατανομή των ατόμων στο χώρο
- Το συντριπτικό ποσοστό των ατόμων βρίσκεται στη κατάσταση A (A -δεξαμενή)
- Ο αριθμός ατόμων στη κατάσταση X μπορεί να πάρει τις τιμές $N = 0, 1, 2, \dots$ με στοχαστικό τρόπο

- Θεωρούμε ότι η πιθανότητα μετάβασης είναι ανάλογη του αριθμού των ατόμων στην αντίστοιχη αρχική κατάσταση και οι επιτρεπτές μεταβάσεις είναι: $N \leftrightarrow N \pm 1$

Έτσι έχουμε:

$$W_{N+1,N} = k_1 A \quad ; \quad W_{N-1,N} = k_2 N$$

Για απλότητα θα θεωρήσουμε στη συνέχεια: $k_1 = k_2 = k$

Η εξίσωση Master σε αυτή τη περίπτωση είναι (πίνακας):

$$\frac{\partial p(N, t)}{\partial t} = k A p(N-1, t) + k(N+1)p(N+1, t) - k(A+N)p(N, t)$$

Τεχνικό τρικ: Ισοδύναμα μπορούμε να υποθέσουμε ότι η μεταβλητή N παίρνει τιμές στο $(-\infty, \infty)$ αλλά $P(N, t) = 0$ για $N < 0$.

Προφανώς θα ισχύει:

$$\frac{d}{dt} \sum_N P(N, t) = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_N p(N, t) = 1$$

Με παρόμοιο τρόπο μπορούμε να υπολογίσουμε και την $\langle N \rangle = \sum_N N p(N, t)$ καταλήγοντας στη σχέση:

$$\frac{d}{dt} \langle N \rangle = k(A - \langle N \rangle)$$

με λύση την:

$$\langle N \rangle (t) = A + (\langle N \rangle (0) - A)e^{-kt}$$

και ασυμπτωτική (στάσιμη) τιμή: $\langle N \rangle_s = A$.

Για την επίλυση της εξίσωσης Master παίρνουμε:

$$\frac{\partial p(N, t)}{\partial t} = J(N - 1, t) - J(N, t)$$

όπου:

$$J(N, t) = kAp(N, t) - k(N + 1)P(N + 1, t)$$

Στη στάσιμη περίπτωση:

$$\frac{\partial p(N, t)}{\partial t} = 0 \quad \Rightarrow \quad J(N - 1, t) = J(N, t) = J$$

Για $N = 0$ παίρνουμε:

$$\frac{\partial p(0)}{\partial t} = J(-1) - J(0) = -J(0)$$

αφού $J(-1) = 0$. Στη στατική περίπτωση:

$$J(0) = J(N) = 0 \quad \forall N$$

Η προηγούμενη ιδιότητα μας οδηγεί στο αποτέλεσμα:

$$p(N + 1) = \frac{A}{N + 1} p(N)$$

οπότε:

$$p(N) = \frac{A^N}{N!} p(0)$$

και επομένως Poisson κατανομή για το N στη στάσιμη φάση:

$$p(N) = \frac{\langle N \rangle^N}{N!} e^{-\langle N \rangle} \quad ; \quad \langle N \rangle = A$$

Αλγόριθμος προσομοίωσης της διαδικασίας:

- Αρχικά: $t = 0$, $N = A$. Ο ρυθμός εγκατάλειψης αυτής της κατάστασης θα είναι $W_N = k(A + N)$

- Υπολογισμός του αντίστοιχου χρόνου:

$$\Delta t = \frac{-\ln(1 - r)}{W_N}$$

- Χρονική εξέλιξη: $t \rightarrow t + \Delta t$ και αποθήκευση του χρόνου παραμονής στη κατάσταση N : $t_N = t_N + \Delta t$

- Επιλογή r και εύρεση του $R_N = W_N r$

$$R_N < A \quad ; \quad N \rightarrow N + 1, \quad W_N \rightarrow W_N + k$$

$$R_N \geq A \quad ; \quad N \rightarrow N - 1, \quad W_N \rightarrow W_N - k$$

- Αν $t < T_{sim}$ τότε επιστροφή στο δεύτερο βήμα (T_{sim} = προεπιλεγμένος χρόνος προσομοίωσης). Αλλιώς,
- Υπολογισμός των πιθανοτήτων:

$$p(N) = \frac{t_N}{t}$$

Άσκηση: Εφαρμογή του αλγορίθμου για $A = 20$ και $T_{sim} = 10000$.

Άσκηση: Εξετάστε τη περίπτωση $X \rightleftharpoons Y$ με X και Y μεταβλητά. Ισχύει προφανώς: $N_X + N_Y = A$. Δείξτε ότι σε αυτή τη περίπτωση η στάσιμη κατανομή είναι η δυωνυμική !!

Τα πράγματα δεν είναι πάντα όμως τόσο απλά!!

Ένα παράδειγμα από τη βιοχημεία: **Συζευγμένες αντιδράσεις**

Ένα ένζυμο μπορεί να βρεθεί σε δύο καταστάσεις:

$$s = 0 \text{ (ανενεργό) και } s = 1 \text{ (ενεργό)}$$

Στην **ενεργό** κατάσταση **καταλύει** την αντίδραση: $A \rightarrow X$ όπου A είναι το **υπόστρωμα** και X είναι το **προϊόν**.

Το προϊόν X **ανεξάρτητα** από τη κατάσταση του ενζύμου **διασπάται** **αυθόρμητα** $A \leftarrow X$.

Αντίδραση Michaelis-Menten

Η στοχαστική διαδικασία αφορά την εξέλιξη του πληθυσμού του προϊόντος X και την κατάσταση του καταλύτη s . Η βασική ποσότητα είναι η πιθανότητα $p_s(N, t)$ ο καταλύτης να είναι στη κατάσταση s και ο πληθυσμός του προϊόντος N την χρονική στιγμή t .

Ο ρυθμός μετάβασης $s = 0$ σε $s = 1$ είναι a . Ενώ η αντίστροφη μετάβαση έχει ρυθμό b .

Η εξίσωση Master για τη πιθανότητα $p_0(N, t)$ είναι:

$$\frac{\partial p_0(N, t)}{\partial t} = bp_1(N, t) - ap_0(N, t) + k [(N + 1)p_0(N + 1, t) - Np_0(N, t)]$$

Ενώ για τη $p_1(N, t)$ είναι:

$$\frac{\partial p_1(N, t)}{\partial t} = ap_0(N, t) - bp_1(N, t) + k [(N + 1)p_1(N + 1, t) - Np_1(N, t)] + A [p_1(N - 1, t) - p_1(N, t)]$$

Οι εξισώσεις για τις καταστάσεις του καταλύτη

Αθροίζοντας τις ανωτέρω εξισώσεις ως προς N παίρνουμε:

$$\frac{\partial P_0(t)}{\partial t} = bP_1(t) - aP_0(t)$$

$$\frac{\partial P_1(t)}{\partial t} = aP_0(t) - bP_1(t)$$

με:

$$P_s(t) = \sum_N p_s(N, t)$$

Δηλαδή ο καταλύτης ακολουθεί μια **RTP** διαδικασία

Οι εξισώσεις για τη κατάσταση του προϊόντος

Αθροίζοντας τις αρχικές εξισώσεις μεταξύ τους παίρνουμε:

$$\frac{\partial p(N, t)}{\partial t} = k [(N + 1)p(N + 1, t) - Np(N, t)] + kA [p_1(N - 1, t) - p_1(N, t)]$$

όπου:

$$p(N, t) = p_0(N, t) + p_1(N, t)$$

Πρόβλημα Για το προϊόν δεν παίρνουμε κλειστή εξίσωση !!!

Όπως στο προηγούμενο παράδειγμα βρίσκουμε τη $\langle N \rangle$:

$$\frac{d \langle N \rangle}{dt} = -k \langle N \rangle + kAP_1(t)$$

Η $P_1(t)$ είναι γνωστή από την επίλυση των RTP εξισώσεων.

⇓

Επιλύσιμο το πρόβλημα χρονικής εξέλιξης της μέσης τιμής $\langle N(t) \rangle$

Για τη στάσιμη κατάσταση βρίσκουμε:

$$P_1 = \frac{a}{a+b} \quad ; \quad \langle N \rangle = AP_1 = \frac{Aa}{a+b}$$

Όμως για τη $p(N)$ σε αυτό το όριο δεν υπάρχει κλειστή μορφή.



Πρέπει να λυθεί η ακριβής εξίσωση Master

Σε αυτή τη περίπτωση η προσομοίωση είναι η μόνη διαθέσιμη μέθοδος επίλυσης

Πριν περάσουμε στον αλγόριθμο προσομοίωσης ας δούμε μιιά προσεγγιστική αντιμετώπιση

Παραδοχή αποσύζευξης

$$p_s(N, t) = P_s(t)p(N, t)$$

Με αντικατάσταση στην εξίσωση για το $p(N, t)$ προκύπτει:

$$\frac{\partial p(N, t)}{\partial t} = k [(N + 1)p(N + 1, t) - Np(N, t)] + kAP_1(t) [p(N - 1, t) - p(N, t)]$$

Το $P_1(t)$ μπορεί να υπολογιστεί από τη αντίστοιχη εξίσωση της RTP διαδικασίας.

Στη στάσιμη κατάσταση ισχύει:

$$P_1 = \frac{a}{a + b} \quad ; \quad \frac{\partial p(N, t)}{\partial t} = 0 \quad \Rightarrow \quad p(N) = \frac{\langle N \rangle^N}{N!} e^{-\langle N \rangle}$$

Αλγόριθμος προσομοίωσης

1. Για $t = 0$ επιλογή π.χ. $s = 1$ και $N = \lfloor N \rfloor$. Επίσης θα είναι $W(s = 1, N) = b + k(A + N)$.

2. Χρονικό βήμα:

$$\Delta t = -\frac{\ln(1 - r)}{W(s = 1, N)}$$

Χρονική εξέλιξη: $t \rightarrow t + \Delta t$. Καταγραφή του χρόνου παραμονής στη κατάσταση N : $t_N \rightarrow t_N + \Delta t$

3. Προσδιορισμός του: $R(s, N) = rW(s, N)$

4. $R(s, N) \rightarrow R(s, N) - kN$. Αν $R(s, N) < 0$ τότε:

$$N \rightarrow N - 1, \quad W(s, N) \rightarrow W(s, N - 1) = W(s, N) - 1$$

και συνέχεια στο βήμα 6.

5. (a) Για $s = 0$ μετάβαση $s = 0 \rightarrow s = 1$ με:

$$W(s = 0, N) \rightarrow W(s = 1, N) = W(s = 0, N) + kA + b - a$$

και συνέχεια στο βήμα 6.

5. (b) Για $s = 1$: $R(s, N) \rightarrow R(s, N) - kA$. Αν $R(s, N) < 0$ τότε:

$$N \rightarrow N + 1, \quad W(s, N) \rightarrow W(s, N + 1) = W(s, N) + 1$$

αλλιώς:

$s = 1 \rightarrow s = 0$ και

$$W(s = 1, N) \rightarrow W(s = 0, N) = W(s = 1, N) - kA + a - b$$

6. Αν $t < T_{sim}$ επιστροφή στο βήμα 2 αλλιώς υπολογισμός του $p(N) = \frac{t_N}{t}$

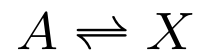
Άσκηση:

Προσπαθείστε να υπολογίσετε τη κατανομή $p(N)$ χρησιμοποιώντας πρόγραμμα που υλοποιεί τον πιο πάνω αλγόριθμο. Μελετήστε τη συμπεριφορά για διάφορες τιμές των παραμέτρων a , b και k !

Παρατηρήσεις: Θα παρατηρήσετε ότι για $a, b \gg k$ τα αριθμητικά αποτελέσματα πλησιάζουν τα αναλυτικά που προκύπτουν από τη παραδοχή αποσύζευξης. Πράγματι σε αυτή τη περίπτωση οι μεταβάσεις:

$$s = 0 \leftrightarrow s = 1$$

γίνονται πολύ πιο γρήγορα από ότι η αντίδραση:



↓

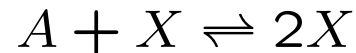
Χωρισμός κλιμάκων χρόνου \Rightarrow Ισχύει η αποσύζευξη

7. Μαρκοβιανές διαδικασίες με αλλαγή φάσης

Θα παραμείνουμε θεματικά στις διαδικασίες του τύπου που εξετάσαμε στην ενότητα 6.

Νέο στοιχείο: Μη γραμμικότητα!

Αντιπροσωπευτικό σύστημα:



Παραδείγματα: αυτοκαταλυτικές χημικές αντιδράσεις, δυναμική πληθυσμών, ενεργειακές μεταβάσεις σε μη γραμμικά υλικά.

Έστω N ο πληθυσμός στη κατάσταση X . Οι ρυθμοί μετάβασης $N \rightarrow N \pm 1$ θα είναι:

$$W_{N,N+1} = k_1 \frac{AN}{V} \quad ; \quad W_{N,N-1} = k_2 \frac{N(N-1)}{V}$$

όπου V είναι μιά **εκτατική** παράμετρος έτσι ώστε τα $W_{N,N \pm 1}$ να είναι **εκτατικά μεγέθη!**

Για παράδειγμα V θα μπορούσε να είναι ο **όγκος** του συστήματος.

Προφανώς η $W_{N,N-1}$ είναι ανάλογη των τρόπων επιλογής δύο σωμάτων από τα N στη κατάσταση X . Ένας παράγοντας 2 έχει απορροφηθεί στο k_2 .

Η εξίσωση Master του συστήματος θα είναι:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(N, t)}{\partial t} = & k_1 \frac{A}{V} (N-1) p(N-1, t) - k_1 \frac{A}{V} N p(N, t) + \\ & + k_2 \frac{N(N+1)}{V} p(N+1, t) - k_2 \frac{(N-1)N}{V} p(N, t) \end{aligned}$$

Ορίζουμε τη **ροή πιθανότητας** $J(N, t)$:

$$J(N, t) = k_1 \frac{A}{V} N p(N, t) - k_2 \frac{N(N+1)}{V} p(N+1, t)$$

οπότε η εξίσωση Master γράφεται:

$$\frac{\partial p(N, t)}{\partial t} = J(N-1, t) - J(N, t)$$

Για να έχουμε στασιμότητα:

$$J(N, t) = J(N) = J \quad ; \quad J(0) = 0 \Rightarrow J(N) = 0 \quad \forall N$$

Επομένως για τη στάσιμη κατάσταση θα ισχύει:

$$p(N+1) = \frac{k_1 A}{k_2 (N+1)} p(N)$$

Με λύση:

$$p(N) = \frac{1}{N!} \left(\frac{k_1 A}{k_2} \right)^{N-1} p(1) \quad ; \quad N \geq 1$$

Χρησιμοποιώντας τη κανονικοποίηση $\sum_{N=1}^{\infty} p(N) = 1$ καθώς και ότι

$A \gg \frac{k_2}{k_1}$ παίρνουμε:

$$p(1) \approx \frac{k_1 A}{k_2} e^{-\frac{k_1 A}{k_2}} \quad ; \quad p(N) = \frac{\langle N \rangle^N}{N!} e^{-\langle N \rangle} \quad ; \quad \langle N \rangle = \frac{k_1 A}{k_2}$$

Όμως στη στάσιμη φάση υπάρχει μιά ακόμη λύση:

$$p(N) = \delta_{N,0}$$

η οποία θα αποδειχθεί σημαντική στη συνέχεια.

Πολλαπλασιάζοντας την εξίσωση Master με N και αθροίζοντας στα N παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \frac{d \langle N \rangle}{dt} &= \frac{k_1 A}{V} \sum_N N [(N-1)p(N-1, t) - Np(N, t)] + \\ &+ \frac{k_2}{V} \sum_N N^2 [(N+1)p(N+1, t) - (N-1)p(N, t)] \end{aligned}$$

Με κατάλληλο χειρισμό παίρνουμε:

$$\begin{aligned}\frac{d \langle N \rangle}{dt} &= \frac{k_1 A}{V} \sum_N N p(N, t) - \frac{k_2}{V} \sum_N (N - 1) N p(N, t) = \\ &= k_1 \frac{A \langle N \rangle}{V} - k_2 \frac{\langle (N - 1) N \rangle}{V}\end{aligned}$$

Η ανωτέρω εξίσωση **δεν κλείνει** \Rightarrow εμφανίζεται το $\langle N^2 \rangle$!

\Downarrow

Ιεραρχία εξισώσεων εξέλιξης μέσω τιμών

Όμως το ίδιο συμβαίνει και για $\frac{d \langle N^2 \rangle}{dt} \Rightarrow$ εμφανίζεται το $\langle N^3 \rangle$
κ.ο.κ.

Το πρόβλημα είναι μη επιλύσιμο!

Η μέση τιμή $\langle N^2 \rangle$ γράφεται:

$$\langle N^2 \rangle = \langle N \rangle^2 + \langle (\delta N)^2 \rangle$$

Αν αγνοήσουμε τις διακυμάνσεις θεωρώντας $\langle N^2 \rangle \approx \langle N \rangle^2$ κάνοντας επί πλέον τη παραδοχή $\langle N \rangle \gg 1$ καταλήγουμε στην εξίσωση:

$$\frac{d \langle N \rangle}{dt} = \frac{k_1 A}{V} \langle N \rangle - \frac{k_2}{V} \langle N \rangle^2$$

Ορίζοντας τώρα: $x = \frac{\langle N \rangle}{V}$ και $\lambda = \frac{k_1 A}{V}$ απλοποιούμε σε:

$$\frac{dx}{dt} = \lambda x - k_2 x^2$$

Με αρχική συνθήκη: $x_0 = x(0)$ η λύση είναι:

$$x(t) = \frac{\lambda x_0 e^{\lambda t}}{\lambda + k_2 x_0 (e^{\lambda t} - 1)} \Rightarrow \frac{\lambda}{k_2} \quad (t \rightarrow \infty)$$

Στάσιμες λύσεις:

$$p(N) = \frac{\langle N \rangle^N}{N!} e^{-\langle N \rangle} \quad ; \quad \langle N \rangle = \frac{k_1 A}{k_2}$$

ή:

$$p(N) = \delta_{N,0} \quad ; \quad \langle N \rangle = 0$$

Η μη γραμμικότητα οδηγεί σε κορεσμό του $\langle N \rangle$. Πράγματι αν:

$$\frac{dx}{dt} = \lambda x$$

τότε για $t \rightarrow \infty$ **απειρίζεται** το $\langle N \rangle$!!

Το μοντέλο Schlögl

Ας θεωρήσουμε τη διαδικασία:



Οι αντίστοιχοι ρυθμοί μετάβασης θα είναι:

$$W_{N,N+1} = k_1 \frac{AN}{V} \quad ; \quad W_{N,N-1} = k_2 \frac{(N-1)N}{V} + k_3 N$$

με κατάλληλες βαθμίσεις αποροφούμε όλες τις παραμέτρους πλην της $a = \frac{A}{V}$.

Η εξίσωση Master σε αυτή τη περίπτωση γράφεται:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p(N, t)}{\partial t} = & a(N-1)p(N-1, t) - aNp(N, t) + \\ & + \left[\frac{N(N+1)}{V} + N + 1 \right] p(N+1, t) - \left[\frac{(N-1)N}{V} + N \right] p(N, t) \end{aligned}$$

Δηλαδή:

$$\frac{\partial p(N, t)}{\partial t} = J(N - 1, t) - J(N, t)$$

όπου

$$J(N, t) = aNp(N, t) - \left[\frac{N(N + 1)}{V} + N + 1 \right] p(N + 1, t)$$

Και στη στάσιμη περίπτωση:

$$p(N + 1) = \frac{aN}{(N + 1)(1 + \frac{N}{V})} p(N)$$

Από αυτή τη σχέση συμπεραίνουμε για $N = 0$ ότι $p(1) = 0$ και επομένως $p(N) = 0$ για $N \geq 1$.

Η κατανομή $p(N) = \delta_{N,0}$ είναι ελκυστής για όλες τις αρχικές κατανομές $p(N, t = 0)$ καθώς αυτές εξελίσσονται για $t \rightarrow \infty$.

⇓

Η κατάσταση $N = 0$ λέγεται **αποροφητική (absorbing state)**.

Εργαζόμενοι όπως και στις προηγούμενες περιπτώσεις μπορούμε να κατασκευάσουμε την ιεραρχία των διαφορικών εξισώσεων για τις μέσες τιμές.

Και στη τρέχουσα περίπτωση το σύνολο των εξισώσεων αυτών δεν κλείνει.

Αγνοώντας τις διακυμάνσεις, θεωρώντας $\langle N \rangle \gg 1$ και θέτοντας $x = \frac{\langle N \rangle}{V}$ βρίσκουμε:

$$\frac{dx}{dt} = (a - 1)x - x^2$$

Εδώ ο συντελεστής $a - 1$ μπορεί να γίνει και αρνητικός!

Η εξίσωση έχει δύο σταθερά σημεία: $x_s = 0$ και $x_s = a - 1$.

Από μελέτη ευστάθειας βρίσκουμε:

- Για $a < 1$ το ευσταθές σημείο είναι το $x_s = 0$ (στοχαστική λύση $p(N) = \delta_{N,0}$)
- Για $a > 1$ το ευσταθές σημείο είναι το $x_s = 1 - a$ (μετασταθής $p(N)$) με μέγιστο για $N \approx V(a - 1)$)

Το μέγεθος a λέγεται **παράμετρος ελέγχου**.

Η μεταβλητή x λέγεται **παράμετρος τάξης**.

Για $a_c = 1$ εμφανίζεται **κρίσιμο σημείο** αλλαγής φάσης **δεύτερης τάξης**

Μοναδικός τρόπος εύρεσης της μετασταθούς $p(N) \rightarrow$ προσομοίωση

Αλγόριθμος προσομοίωσης

1. Για $t = 0$ επιλέγουμε $N_s = [V(a - 1)]$ ($a > 1$) και $p(N_s) = 1$, $S_2 = 0$, $S_0 = 1$.
2. Αρχίζοντας με $N = N_s$ εφαρμόζουμε τη διαδικασία $N \rightarrow N + 1$. Το $p(N)$ υπολογίζεται από την αντίστοιχη αναγωγική σχέση. Επίσης έχουμε:

$$S_2 \rightarrow S_2 + (N - N_s)^2 p(N)$$

$$S_0 \rightarrow S_0 + p(N)$$

Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία έως ότου συγκλίνει σε επιθυμητή ακρίβεια το S_2 .

3. Αρχίζοντας με $N = N_s$ εφαρμόζουμε τη διαδικασία $N \rightarrow N - 1$ με ανάλογο τρόπο όπως στο βήμα 2. Επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία έως ότου συγκλίνει σε επιθυμητή ακρίβεια το S_2 ή $N = 1$.

4. Υπολογίζουμε τη διασπορά: $\langle (\delta N)^2 \rangle = \frac{S_2}{S_0}$.

Το αποτέλεσμα της προσομοίωσης για τη διασπορά μπορεί να εκτιμηθεί αναλυτικά:

$$\begin{aligned} \frac{p(N)}{p(1)} &= \frac{a^{N-1}}{N \prod_{K=1}^{N-1} \left(1 + \frac{K}{V}\right)} = \\ &= \exp \left[(N-1) \ln a - \sum_{K=1}^{N-1} \ln \left(1 + \frac{K}{V}\right) - \ln N \right] \end{aligned}$$

Προσεγγίσεις:

Για μεγάλα N το άθροισμα γράφεται σαν ολοκλήρωμα.

$N - 1 \approx N$ καθώς και $\ln N \ll N$.

Θέτοντας $\xi = \frac{N}{V}$ παίρνουμε:

$$p(\xi) \approx \exp(V\Phi(\xi)) \quad ; \quad \Phi(\xi) = \xi \ln a - \int_0^\xi dy \ln(1+y)$$

Η $\Phi(\xi)$ παρουσιάζει μέγιστο στο $\xi = x_s = a - 1$. Αναπτύσσοντας μέχρι τετραγωνικής τάξης βρίσκουμε:

$$\Phi(\xi) = \Phi(x_s) - \frac{(\xi - x_s)^2}{2a}$$

Η κατανομή $p(\xi)$ είναι Gauss για ξ κοντά στο x_s :

$$p(\xi) \sim \exp \left[-\frac{V}{2a} (\xi - x_s)^2 \right]$$

με διασπορά:

$$\sigma = \langle (\delta\xi)^2 \rangle = \frac{a}{V}$$

Για $a \gg 1$ η προσέγγιση είναι καλή. Για $a \rightarrow 1$ οι **διακυμάνσεις είναι κρίσιμες** και η διασπορά απέχει πολύ από αυτή της κατανομής Gauss ενώ για $a = 1$ η διασπορά μηδενίζεται απότομα λόγω του φαινόμενου **πεπερασμένου μεγέθους**.

8. Η έννοια της συνέχειας στις στοχαστικές διαδικασίες

Θα μελετήσουμε διαδικασίες για τις οποίες η στοχαστική μεταβλητή $Y(t)$ παίρνει συνεχείς τιμές.

Ερώτηση: Πότε η υλοποίηση (= ενδεικτική τροχιά) $Y_x(t)$ είναι συνεχής ;

Σκεφτείτε το παράδειγμα των μορίων ενός αερίου. Αν θεωρήσουμε ότι μπορούμε με ικανοποιητικό τρόπο να τα προσεγγίσουμε με σκληρές σφαίρες τότε:

- Η ταχύτητα κάθε μορίου παίρνει τιμές από ένα συνεχές σύνολο
- Σε κάθε κρούση η ταχύτητα των συγκρουόμενων μορίων αλλάζει ασυνεχώς
- Μια **ενδεικτική τροχιά** $\vec{V}_i(t)$ θα είναι ασυνεχής

Αντίθετα περιμένουμε η θέση κάθε μορίου $\vec{X}_i(t)$ να είναι συνεχής.

Βασικό ερώτημα: Υπάρχουν στη φύση **διαδικασίες Markov** με **συνεχείς** ενδεικτικές τροχιές ;

Τουλάχιστον **κλασικά** περιμένουμε κάθε φυσική διαδικασία που περιγράφει εξέλιξη συνεχών μεταβλητών να χαρακτηρίζεται από συνεχείς ενδεικτικές τροχιές !

Όμως παρατηρώντας οποιαδήποτε φυσική διαδικασία σε **πολύ μικρές χρονικές κλίμακες** ο μαρκοβιανός χαρακτήρας **χάνεται**.



Τα φυσικά συστήματα παρουσιάζουν εν γένει **μνήμη !!!**

Μαρκοβιανή προσέγγιση:

χαρακτηριστικός χρόνος μνήμης \ll χρόνος παρατήρησης

Τότε όμως η **συνέχεια** της ενδεικτικής τροχιάς **δεν είναι απαραίτητη**.

Κίνηση Brown αλά Einstein: $\vec{X}(t)$ και $\vec{V}(t)$ ασυνεχείς!!

- Όμως για το $\vec{X}(t)$ η ασυνέχεια στη θέση σε σχέση με τη συνολική απόσταση που διανύει το σωματίο είναι πολύ μικρή \Rightarrow η ενδεικτική τροχιά είναι πρακτικά συνεχής!
- Αντίθετα η $\vec{V}(t)$ είναι ασυνεχής



Υπό κατάλληλες συνθήκες οι φυσικές διαδικασίες προσεγγίζονται από μαρκοβιανές διαδικασίες με συνεχείς ενδεικτικές τροχιές

Ορισμός της συνεχούς διαδικασίας Markov

Οι ενδεικτικές τροχιές μιας μαρκοβιανής διαδικασίας είναι συνεχείς συναρτήσεις του χρόνου t με πιθανότητα 1 εάν $\forall \epsilon > 0$:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\vec{z} - \vec{y}| > \epsilon} d\vec{z} \rho_{1|1}(\vec{z}, t + \Delta t | \vec{y}, t) = 0$$

συνθήκη Lindeberg

Δηλ. η πιθανότητα η τελική κατάσταση \vec{z} να έχει πεπερασμένη διαφορά από την αρχική κατάσταση \vec{y} τείνει στο μηδέν πιο γρήγορα από το Δt για $\Delta t \rightarrow 0$.

Παραδείγματα

1) Η λύση Einstein για τη κίνηση Brown

$$\rho_{1|1}(z, t + \Delta t | y, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D \Delta t}} e^{-\frac{(z-y)^2}{4D\Delta t}}$$

ικανοποιεί το πιο πάνω κριτήριο \Rightarrow συνεχείς ενδεικτικές τροχιές

2) Η διαδικασία Cauchy

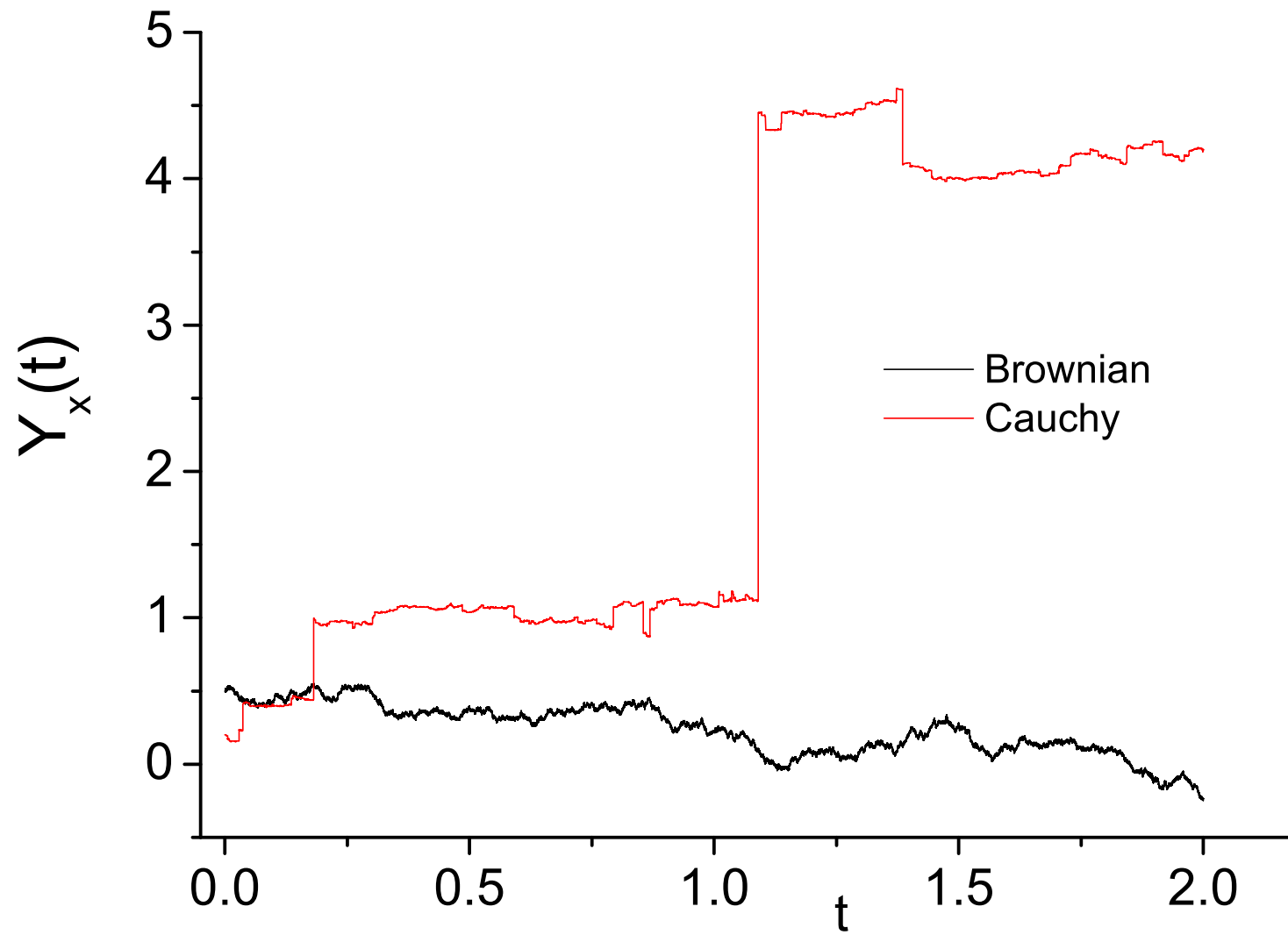
$$\rho_{1|1}(z, t + \Delta t | y, t) = \frac{\Delta t}{\pi} \frac{1}{[(z-y)^2 + \Delta t^2]}$$

δεν ικανοποιεί το κριτήριο Lindeberg και έχει ασυνεχείς ενδεικτικές τροχιές.

Προφανώς και στις δύο περιπτώσεις ισχύει η συνθήκη συνέπειας:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \rho_{1|1}(z, t + \Delta t | y, t) = \delta(z - y)$$

καθώς και η σχέση Chapman-Kolmogorov.



Η διαφορική εξίσωση Chapman-Kolmogorov

Θα ξαναμελετήσουμε τη διαφορική εκδοχή της εξίσωσης Chapman-Kolmogorov χρησιμοποιώντας την έννοια της συνέχειας των ενδεικτικών τροχιών μιας στοχαστικής διαδικασίας.

Η βασική ιδέα είναι να χωρίσουμε τις συνθήκες διαφορισιμότητας σε δύο μέρη:

- χρονική εξέλιξη αντίστοιχη σε **συνεχείς** ενδεικτικές τροχιές
- αντίστοιχη σε **ασυνεχείς** ενδεικτικές τροχιές

Απαιτούμε τις εξής συνθήκες $\forall \epsilon > 0$:

1.

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\rho_{1|1}(\vec{z}, t + \Delta t | \vec{y}, t)}{\Delta t} = W(\vec{z} | \vec{y}, t)$$

ομοιόμορφα για \vec{z} , \vec{y} , t και $|\vec{z} - \vec{y}| \geq \epsilon$

2.

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\vec{z} - \vec{y}| < \epsilon} d\vec{z} (z_i - y_i) \rho_{1|1}(\vec{z}, t + \Delta t | \vec{y}, t) = A_i(\vec{y}, t) + O(\epsilon)$$

3.

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\vec{z} - \vec{y}| < \epsilon} d\vec{z} (z_i - y_i)(z_j - y_j) \rho_{1|1}(\vec{z}, t + \Delta t | \vec{y}, t) = B_{ij}(\vec{y}, t) + O(\epsilon)$$

Οι (2) και (3) ισχύουν ομοιόμορφα για \vec{y} , ϵ και t .

Μπορεί κανείς να δείξει ότι οι ανώτερης τάξης ποσότητες του τύπου (2), (3) είναι μηδέν.

Για παράδειγμα έστω:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\vec{z}-\vec{y}| < \epsilon} d\vec{z} (z_i - y_i)(z_j - y_j)(z_k - y_k) \rho_{1|1}(\vec{z}, t + \Delta t | \vec{y}, t) \\ \equiv C_{ijk}(\vec{y}, t) + O(\epsilon)$$

Το C_{ijk} είναι συμμετρικό ως προς τα i, j, k . Ορίζουμε:

$$\sum_{i,j,k} \alpha_i \alpha_j \alpha_k C_{ijk}(\vec{y}, t) \equiv \bar{C}(\vec{\alpha}, \vec{y}, t)$$

έτσι ώστε:

$$C_{ijk}(\vec{y}, t) = \frac{1}{3!} \frac{\partial^2}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j \partial \alpha_k} \bar{C}(\vec{\alpha}, \vec{y}, t)$$

Τότε:

$$\begin{aligned} |\bar{C}(\vec{a}, \vec{y}, t)| &\leq \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\vec{z} - \vec{y}| < \epsilon} d\vec{z} |\vec{a} \cdot (\vec{z} - \vec{y})| [\vec{a} \cdot (\vec{z} - \vec{y})]^2 \rho_{1|1}(\vec{z}, t + \Delta t | \vec{y}, t) \\ &\quad + O(\epsilon) \\ &\leq |\vec{a}| \epsilon \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_{|\vec{z} - \vec{y}| < \epsilon} d\vec{z} [\vec{a} \cdot (\vec{z} - \vec{y})]^2 \rho_{1|1}(\vec{z}, t + \Delta t | \vec{y}, t) + O(\epsilon) \\ &= |\vec{a}| \epsilon [\alpha_i \alpha_j B_{ij}(\vec{y}, t) + O(\epsilon)] + O(\epsilon) = O(\epsilon) \end{aligned}$$

Δηλαδή το C **μηδενίζεται!** και παρόμοια αποδεικνύεται ότι **μηδενίζονται όλες οι ανώτερης τάξης ποσότητες.**

Για να έχουμε **συνεχείς ενδεικτικές τροχιές** θα πρέπει $W(\vec{z} | \vec{y}, t) = 0$ για $\vec{z} \neq \vec{y}$.

Το $W(\vec{z} | \vec{y}, t)$ περιγράφει την ασυνεχή συνιστώσα της διαδικασίας ενώ τα $A_i(\vec{y}, t)$ και $B_{ij}(\vec{y}, t)$ τη συνεχή.

Ας εξετάσουμε τώρα την χρονική εξέλιξη της μέσης τιμής:

$$\begin{aligned}
 & \partial_t \int d\vec{u} f(\vec{u}) \rho_{1|1}(\vec{u}, t | \vec{y}, t') \\
 = & \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\{ \int d\vec{u} f(\vec{u}) [\rho_{1|1}(\vec{u}, t + \Delta t | \vec{y}, t') - \rho_{1|1}(\vec{u}, t | \vec{y}, t')] \}}{\Delta t} \\
 = & \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\{ \int d\vec{z} \int d\vec{u} f(\vec{u}) \rho_{1|1}(\vec{u}, t + \Delta t | \vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \\
 & - \int d\vec{z} f(\vec{z}) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \}}{\Delta t}
 \end{aligned}$$

στον πρώτο όρο χωρίζουμε το χώρο καταστάσεων σε δύο περιοχές:

$$|\vec{u} - \vec{z}| \geq \epsilon \quad ; \quad |\vec{u} - \vec{z}| < \epsilon$$

Για την f υποθέτουμε ότι είναι **διπλά συνεχώς διαφορίσιμη**

Θα ισχύει επομένως το ανάπτυγμα:

$$f(\vec{u}) = f(\vec{z}) + \sum_i \frac{\partial f(\vec{z})}{\partial z_i} (u_i - z_i) + \sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f(\vec{z})}{\partial z_i \partial z_j} (u_i - z_i)(u_j - z_j) \\ + |\vec{u} - \vec{z}|^2 R(\vec{u}, \vec{z})$$

όπου: $|R(\vec{u}, \vec{z})| \rightarrow 0$ για $|\vec{u} - \vec{z}| \rightarrow 0$.

$$\begin{aligned}
&= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \left(\int \int_{|\vec{u}-\vec{z}| < \epsilon} d\vec{u} d\vec{z} \left[\sum_i (u_i - z_i) \frac{\partial f}{\partial z_i} + \sum_{i,j} \frac{1}{2} (u_i - z_i)(u_j - z_j) \frac{\partial^2 f}{\partial z_i \partial z_j} \right] \right. \\
&\quad \times \rho_{1|1}(\vec{u}, t + \Delta t | \vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \\
&\quad + \int \int_{|\vec{u}-\vec{z}| < \epsilon} d\vec{u} d\vec{z} |\vec{u} - \vec{z}|^2 R(\vec{u}, \vec{z}) \rho_{1|1}(\vec{u}, t + \Delta t | \vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \\
&\quad + \int \int_{|\vec{u}-\vec{z}| < \epsilon} d\vec{u} d\vec{z} f(\vec{z}) \rho_{1|1}(\vec{u}, t + \Delta t | \vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \\
&\quad + \int \int_{|\vec{u}-\vec{z}| \geq \epsilon} d\vec{u} d\vec{z} f(\vec{u}) \rho_{1|1}(\vec{u}, t + \Delta t | \vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \\
&\quad \left. - \int \int d\vec{u} d\vec{z} f(\vec{z}) \rho_{1|1}(\vec{u}, t + \Delta t | \vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \right)
\end{aligned}$$

Όπου στη τελευταία γραμμή χρησιμοποιούμε:

$$\int d\vec{u} \rho_{1|1}(\vec{u}, t + \Delta t | \vec{z}, t) = 1$$

Ας δούμε τη προηγούμενη σχέση γραμμή προς γραμμή:

Γραμμές 1,2: Χρησιμοποιώντας τις **συνθήκες 2) και 3)** παίρνουμε:

$$\int d\vec{z} \left[\sum_i A_i(\vec{z}, t) \frac{\partial f}{\partial z_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{i,j}(\vec{z}, t) \frac{\partial^2 f}{\partial z_i \partial z_j} \right] \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') + O(\epsilon)$$

Γραμμή 3: Όρος υπολοίπου, **μηδενίζεται** για $\epsilon \rightarrow 0$ (απόδειξη στο πίνακα).

Γραμμή 4-6: Μαζεύοντας όλους τους όρους παίρνουμε:

$$\int \int_{|\vec{u}-\vec{z}| \geq \epsilon} d\vec{u} d\vec{z} f(\vec{z}) \left[W(\vec{z} | \vec{u}, t) \rho_{1|1}(\vec{u}, t | \vec{y}, t') - W(\vec{u} | \vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \right]$$

(απόδειξη στο πίνακα).

$$\begin{aligned} & \partial_t \int d\vec{z} f(\vec{z}) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') = \\ & \int d\vec{z} \left[\sum_i A_i(\vec{z}, t) \frac{\partial f(\vec{z})}{\partial z_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{i,j}(\vec{z}, t) \frac{\partial^2 f(\vec{z})}{\partial z_i \partial z_j} \right] \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \\ & + \int d\vec{z} f(\vec{z}) \left(\int d\vec{u} \left[W(\vec{z} | \vec{u}, t) \rho_{1|1}(\vec{u}, t | \vec{y}, t') - W(\vec{u} | \vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \right] \right) \end{aligned}$$

Το ολοκλήρωμα $\int_{|\vec{u}-\vec{z}| \geq \epsilon} d\vec{u} W(\vec{u} | \vec{z}, t) f(\vec{u}, \vec{z})$ υπάρχει μόνο αν $W(\vec{u} | \vec{z}, t)$ είναι **πεπερασμένο** για $\vec{u} = \vec{z}$. Αλλιώς πρέπει να ερμηνευθεί σαν **ολοκλήρωμα πρωτεύουσας τιμής** (π.χ. διαδικασία Cauchy).

Το ολοκλήρωμα πρωτεύουσας τιμής υπάρχει αν $\rho_{1|1}(\vec{u}, t | \vec{y}, t')$ είναι συνεχής και απλά παραγωγίσιμη!

$$\begin{aligned}
\int d\vec{z} f(\vec{z}) \partial_t \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') &= \int d\vec{z} f(\vec{z}) \left(- \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} A_i(\vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \right. \\
&\quad \left. + \sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} B_{i,j}(\vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \right. \\
&\quad \left. + \int d\vec{u} \left[W(\vec{z} | \vec{u}, t) \rho_{1|1}(\vec{u}, t | \vec{y}, t') - W(\vec{u} | \vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \right] \right) \\
&\quad + \text{ επιφανειακοί όροι.}
\end{aligned}$$

Αν η διαδικασία περιορίζεται σε περιοχή R με επιφάνεια S τότε:

- $\rho_{1|1}(\vec{u}, t | \vec{z}, t') = 0$ εκτός αν $\vec{u}, \vec{z} \in R$
- $W(\vec{u} | \vec{z}, t) = 0$ εκτός αν $\vec{u}, \vec{z} \in R$

Για να αποφύγουμε τους ανεπιθύμητους επιφανειακούς όρους θεωρούμε ότι $f(\vec{z}) = 0$ στο σύνορο S οπότε παίρνουμε τελικά:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} \left[A_i(\vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \right] \\ &+ \sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} \left[B_{i,j}(\vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \right] \\ &+ \int d\vec{u} \left[W(\vec{z} | \vec{u}, t) \rho_{1|1}(\vec{u}, t | \vec{y}, t') - W(\vec{u} | \vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \right] \end{aligned}$$

Διαφορική Εξίσωση Chapman-Kolmogorov

Ζητάμε λύσεις **θετικές** που υπακούουν στην αρχική συνθήκη:

$$\rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t) = \delta(\vec{y} - \vec{z})$$

Ερμηνεία της Δ.Ε. Chapman-Kolmogorov

- Στην περίπτωση $A_i(\vec{z}, t) = B_{i,j}(\vec{z}, t) = 0$ προκύπτει η εξίσωση **Master**:

$$\partial_t \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') = \int d\vec{u} \left[W(\vec{z} | \vec{u}, t) \rho_{1|1}(\vec{u}, t | \vec{y}, t') - W(\vec{u} | \vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \right]$$

που περιγράφει διαδικασίες με ενδεικτικές τροχιές **κατά διαστήματα σταθερές και ασυνεχή άλματα** σε χρονικές στιγμές που η κατανομή τους ορίζεται από το $W(\vec{z} | \vec{y}, t)$.

- Για να έχουμε συνεχείς ενδεικτικές τροχιές θα πρέπει $W(\vec{z} | \vec{y}, t) = 0$ οπότε καταλήγουμε στην **εξίσωση Fokker-Planck**:

$$\begin{aligned} \partial_t \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') &= - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} \left[A_i(\vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \right] \\ &+ \sum_{i,j} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} \left[B_{i,j}(\vec{z}, t) \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t') \right] \end{aligned}$$

Η εξίσωση **Fokker-Planck** περιγράφει διαδικασίες **διάχυσης**.

Ο συντελεστής $A_i(\vec{z}, t)$ λέγεται **διάνυσμα κύλησης**

Ο συντελεστής $B_{i,j}(\vec{z}, t)$ λέγεται **πίνακας διάχυσης**

Οι ενδεικτικές τροχιές, λύσεις της Fokker-Planck, είναι συνεχείς.

Άσκηση 1 Μελετήστε την εξίσωση Fokker-Planck στην περίπτωση $B_{i,j} = 0$. Δείξτε ότι τότε προκύπτει η εξίσωση Liouville της κλασικής μηχανικής!

Άσκηση 2 Δείξτε ότι με ανάλογο τρόπο μπορεί κανείς να βρεί την αντεστραμμένη στο χρόνο εξίσωση Fokker-Planck:

$$\frac{\partial \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t')}{\partial t'} = - \sum_i A(\vec{y}, t') \frac{\partial \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t')}{\partial y_i} - \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{i,j}(\vec{y}, t') \frac{\partial^2 \rho_{1|1}(\vec{z}, t | \vec{y}, t')}{\partial y_i \partial y_j}$$

9. Εφαρμογές της εξίσωσης Fokker-Planck

Η διαδικασία Wiener

Έστω διαδικασία μιάς στοχαστικής μεταβλητής $W(t)$ με $A_i(w, t) = 0$ και $B_{i,j}(w, t) = B(w, t) = 1$. Ικανοποιεί την εξίσωση:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{1|1}(w, t|w_0, t_0) = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial w^2} \rho_{1|1}(w, t|w_0, t_0)$$

Αρχική συνθήκη:

$$\rho_{1|1}(w, t_0|w_0, t_0) = \delta(w - w_0)$$

Για την επίλυση της ανωτέρω Fokker-Planck εξισώσεως εισάγουμε τη χαρακτηριστική συνάρτηση:

$$\phi(s, t) = \int dw \rho_{1|1}(w, t|w_0, t_0) e^{isw}$$

Η $\phi(s, t)$ ικανοποιεί την εξίσωση:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{1}{2}s^2\phi$$

με λύση:

$$\phi(s, t) = e^{-\frac{1}{2}s^2(t-t_0)}\phi(s, t_0)$$

Η αρχική συνθήκη είναι:

$$\phi(s, t_0) = e^{isw_0}$$

οπότε:

$$\phi(s, t) = e^{isw_0 - \frac{1}{2}s^2(t-t_0)}$$

Υπολογίζοντας τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier παίρνουμε τελικά:

$$\rho_{1|1}(w, t|w_0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t-t_0)}} e^{-\frac{(w-w_0)^2}{2(t-t_0)}}$$

Δηλ. η διαδικασία Wiener αναπαριστά Gaussian με:

$$\langle W(t) \rangle = w_0$$

και:

$$\langle (W(t) - w_0)^2 \rangle = t - t_0$$

Μια αρχικά οξεία κατανομή απλώνει καθώς εξελίσσεται στο χρόνο!

Η διαδικασία Wiener είναι μιά διαδικασία **διάχυσης**



Οι ενδεικτικές τροχιές $W(t)$ είναι **συνεχείς** αλλά **μη διαφορίσιμες**

Απόδειξη μη διαφορισιμότητας → δείξτε ότι:

$$Prob\left\{\left|\frac{W(t+h) - W(t)}{h}\right| > k\right\} = 1$$

ανεξάρτητα του k .

Η διαδικασία Ornstein-Uhlenbeck

Η διαδικασία Wiener δεν είναι στάσιμη (βλέπε προηγούμενα μαθήματα).

Μπορούμε να επιτύχουμε στασιμότητα αν προσθέσουμε όρο κύλισης στην εξίσωση Fokker-Planck της διαδικασίας Wiener.

Για την ακρίβεια θέτουμε:

$$A(x, t) = -kx \quad ; \quad B(x, t) = D$$

Αν θέσουμε $\rho(x, t) \equiv \rho_{1|1}(x, t|x_0, 0)$ τότε η εξίσωση FokkerPlanck γράφεται:

$$\partial_t \rho = \partial_x (kx\rho) + \frac{1}{2} D \partial_x^2 \rho$$

↓

Διαδικασία Ornstein-Uhlenbeck

Με τη βοήθεια της χαρακτηριστικής συνάρτησης:

$$\phi(s) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{isx} \rho(x, t) dx$$

παίρνουμε την εξίσωση:

$$\partial_t \phi + ks \partial_s \phi = -\frac{1}{2} Ds^2 \phi$$

Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο των χαρακτηριστικών για $u(s, t, \phi) = a$ και $v(s, t, \phi) = b$ παίρνουμε:

$$\frac{dt}{1} = \frac{ds}{ks} = \frac{-d\phi}{\frac{1}{2} Ds^2 \phi}$$

Οπότε η γενική λύση γράφεται:

$$f(u, v) = 0$$

Και ολοκληρώνοντας:

$$u(s, t, \phi) = se^{-kt} \quad ; \quad v(s, t, \phi) = \phi e^{\frac{Ds^2}{4k}}$$

με γενική λύση:

$$\phi(s, t) = e^{-\frac{Ds^2}{4k}} g(se^{-kt})$$

Χρησιμοποιώντας την αρχική συνθήκη:

$$\rho(x, 0) = \delta(x - x_0)$$

παίρνουμε: $\phi(s, 0) = e^{ix_0s}$ οπότε:

$$g(s) = e^{\frac{Ds^2}{4k} + ix_0s}$$

και τελικά:

$$\phi(s, t) = \exp \left[\frac{-Ds^2}{4k} (1 - e^{-2kt}) + ix_0e^{-kt} \right]$$

Που αντιστοιχεί σε Gaussian με:

$$\langle X(t) \rangle = x_0 e^{-kt} \quad ; \quad \langle (X(t) - \langle X(t) \rangle)^2 \rangle = \frac{D}{2k} [1 - e^{-2kt}]$$

Στο στάσιμο όριο η εξίσωση Fokker-Planck γράφεται:

$$\partial_x \left[kx\rho + \frac{1}{2} D \partial_x \rho \right] = 0$$

Δηλαδή:

$$\frac{1}{\rho} \partial_x \rho = -\frac{2kx}{D}$$

Με λύση τη στάσιμη πυκνότητα πιθανότητας:

$$\rho_s(x) = \sqrt{\frac{k}{\pi D}} e^{-\frac{kx^2}{D}}$$

Άσκηση: Βρείτε τις συναρτήσεις αυτοσυσχέτισης για τις διαδικασίες Wiener και Ornstein-Uhlenbeck

10. Η εφαρμογή των στοχαστικών διαδικασιών στη τεχνική της προσομοίωσης

Ας θεωρήσουμε τη περίπτωση στοχαστικής διαδικασίας με διάκριτο σύνολο τιμών.

Έχουμε αντιμετωπίσει το πρόβλημα της επίλυσης της εξίσωσης **Master:**

$$\frac{\partial P_1(n, t)}{\partial t} = \sum_{m=1}^M [P_1(m, t)w_{m,n}(t) - P_1(n, t)w_{n,m}(t)]$$

Αυτό που μας ενδιαφέρει είναι η εύρεση της στάσιμης τιμής της πιθανότητας $P_s(n)$ για την οποία:

$$\frac{\partial P_s(n)}{\partial t} = 0$$

θεωρώντας γνωστές τις πιθανότητες μετάβασης: $w_{m,n}(t)$.

Σε πολλά φυσικά συστήματα η πιθανότητα $P_s(n)$ είναι γνωστή.

Τυπικό παράδειγμα \Rightarrow συστήματα σε **θερμική ισορροπία**.

Αποτελούνται από **τεράστιο πλήθος** $O(10^{23})$ **αλληλεπιδρώντων βαθμών ελευθερίας**.



Πολύπλοκα συστήματα

Ο αριθμός των δυνατών καταστάσεων n του συστήματος είναι συνήθως αστρονομικά μεγάλος!!!

Ακόμη και για ένα σύστημα όπου κάθε βαθμός ελευθερίας παίρνει μόνο τις τιμές 0 και 1 ο αριθμός καταστάσεων M είναι:

$$M \sim e^{N \ln 2}$$

όπου N ο αριθμός των μικροσκοπικών βαθμών ελευθερίας.

Η υλοποίηση της $P(n)$ σε ένα τόσο **υψηλοδιάστατο χώρο** είναι εν γένει πολύ δύσκολη!

Η εξίσωση Master μας υποδεικνύει μία δυνατή λύση. Θεωρούμε το **αντίστροφο πρόβλημα**:

- Έστω $P_s(n)$ γνωστή.
- Ζητάμε τα $w_{n,m}$ έτσι ώστε

$$\sum_{m=1}^M [P_s(m)w_{m,n} - P_s(n)w_{n,m}] = 0$$

Η εξίσωση αυτή έχει πολλές λύσεις. Μιά προφανής παρέχεται από τη συνθήκη **λεπτομερούς ισοζυγίου**:

$$P_s(m)w_{m,n} = P_s(n)w_{n,m}$$

Ικανή αλλά όχι αναγκαία συνθήκη για τη υλοποίηση στοχαστικής διαδικασίας με στάσιμο όριο τη $P_s(n)$!

Για συστήματα σε θερμική ισορροπία:

$$P_s(n) \sim e^{-\frac{E_n}{kT}}$$

Ο **αλγόριθμος Metropolis** προτείνει:

$$w_{m,n} = \begin{cases} e^{-\frac{E_n - E_m}{kT}} & ; \quad E_n > E_m \\ 1 & ; \quad E_n \leq E_m \end{cases}$$

Είναι η **βάση** για τη **Monte-Carlo προσομοίωση**!
(Ικανοποιεί το λεπτομερές ισοζύγιο \Rightarrow απόδειξη)

Η ιδέα αυτή μας επιτρέπει τη υλοποίηση στοχαστικής διαδικασίας:

$$n_0 \rightarrow n_1 \rightarrow n_2 \rightarrow \dots \rightarrow n_k \rightarrow \dots$$

η οποία δειγματοληπτεί το χώρο καταστάσεων (φασικό χώρο) με πιθανότητα $P_s(n)$.

Αν υποθέσουμε και την ύπαρξη **εργοδικότητας** τότε:

$$\langle Q \rangle = \sum_i Q(i) = \sum_i Q(s_1^{(i)}, s_2^{(i)}, \dots, s_N^{(i)})$$

Όπου Q είναι ένα φυσικό μέγεθος, η μέτρηση του οποίου μας ενδιαφέρει, οριζόμενο στο φασικό χώρο του συστήματος.

Οι βαθμοί ελευθερίας αναπαρίστανται με s_k .

Οι καταστάσεις i στο άθροισμα είναι αυτές που δειγματοληπτεί η στοχαστική διαδικασία καθορισμένη από την $P(n,0)$ και τους ρυθμούς μετάβασης $w_{m,n}$.

Στη πράξη

1. Επιλέγουμε: $P(n, 0) = \delta_{n, n_0}$
2. Αλλάζουμε τυχαία τους βαθμούς ελευθερίας έτσι ώστε (με ερ-γοδικό τρόπο) να πάμε σε νέα κατάσταση n_1
3. Υπολογίζουμε τη διαφορά ενέργειας: $\Delta E = E_{n_1} - E_{n_0}$
4. (a) Αν $\Delta E \leq 0$ υλοποιούμε τη μετάβαση
4. (b) Αν $\Delta E > 0$ επιλέγουμε r ομοιόμορφο στο $[0, 1]$ και αν $r < e^{-\frac{\Delta E}{kT}}$ υλοποιούμε τη μετάβαση, αλλιώς μένουμε στη n_0
5. Επιστροφή στο βήμα 2

Η εφαρμογή της εξίσωσης διάχυσης σε κβαντικά συστήματα

Σκοπός: Εύρεση της θεμελιώδους κατάστασης κβαντικού συστήματος χρησιμοποιώντας προσομοίωση της διαδικασίας διάχυσης.

Διάχυση και τυχαίοι περίπατοι

Έστω μονοδιάστατο πλέγμα με πλεγματική σταθερά a . Ορίζουμε σωματίο (περιπατητής) το οποίο μπορεί σε διάκριτα χρονικά βήματα nh να μετατοπίζεται στο πλέγμα.

Ο νόμος μετατόπισης ορίζεται με στοχαστικό τρόπο.

Στην απλούστερη περίπτωση:

- Αν ο περιπατητής βρίσκεται στη θέση x τη χρονική στιγμή t τότε η πιθανότητα μετάβασης στις θέσεις $x \pm a$ τη χρονική στιγμή $t + h$ είναι p .

Ας θεωρήσουμε συλλογή από περιπατητές χαρακτηριζόμενη από τη πυκνότητα $\rho(x, t)$.

Η εξίσωση Master για τη διαδικασία αυτή είναι:

$$\rho(x, t + h) - \rho(x, t) = p\rho(x + a, t) + p\rho(x - a, t) - 2p\rho(x, t)$$

Για πολύ μικρά h, a μπορούμε να αναπτύξουμε:

$$\rho(x, t + h) \approx \rho(x, t) + h \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad ; \quad \rho(x \pm a, t) = \rho(x, t) \pm a \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{1}{2} a^2 \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$$

Στο συνεχές όριο: $h \rightarrow 0$ και $a \rightarrow 0$ με $\frac{a^2}{h}$ σταθερό παίρνουμε την εξίσωση διάχυσης:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}$$

όπου:

$$\gamma = \lim_{h, a \rightarrow 0} \frac{\rho a^2}{h}$$

είναι η **σταθερά διάχυσης** για τη συλλογή των περιπατητών.

Η πυκνότητα περιπατητών τη χρονική στιγμή t θα δίνεται από τη σχέση:

$$\rho(y, t) = \int dx G(x, y; t) \rho(x, 0) \quad ; \quad G(x, y; t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\gamma t}} e^{-\frac{(x-y)^2}{4\gamma t}}$$

όπου η $G(x, y, ; t)$ είναι η συνάρτηση Green:

$$G(x, y; 0) = \delta(x - y) \quad ; \quad \int dx G(x, y; t) = 1$$

Συγκρίνοντας με τη στοχαστική διαδικασία Wiener βλέπουμε ότι η $G(x, y; t)$ παίζει το ρόλο της υπό συνθήκη πυκνότητας πιθανότητας $\rho_{1|1}(y, t|x, 0)$.

Αυτή η αναλογία μας επιτρέπει να διατυπώσουμε αλγόριθμο υλοποίησης του τυχαίου περιπάτου:

- Επιλογή χρονικού βήματος Δt
- Μετακίνηση του περιπατητή στη θέση $x(t)$ σύμφωνα με το νόμο:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \eta\sqrt{\Delta t}$$

όπου η τυχαίος αριθμός με Gaussian κατανομή και $\sigma^2 = 2\gamma$

Εφαρμόζοντας τον αλγόριθμο οδηγούμε το σύστημα των περιπατητών σε ισορροπία $\Rightarrow \rho_s(x) = \text{σταθερό}$

Με την εξίσωση διάχυσης δεν μπορούμε να πάρουμε στάσιμη κατάσταση με $\rho_s(x) \neq \text{const}$. Αν θελήσουμε να ορίσουμε διαδικασία με:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \rho(x, t) = \rho_s(x) = |\Psi(x)|^2$$

θα πρέπει να γενικεύσουμε την εξίσωση διάχυσης \Rightarrow **εξίσωση Fokker-Planck**

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial}{\partial x} - F(x) \right] \rho(x, t)$$

όπου:

$$F(x) = \frac{1}{\rho_s(x)} \frac{d\rho_s(x)}{dx}$$

οπότε η εξίσωση Fokker-Planck γράφεται:

$$\frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 \rho(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\rho(x, t)}{\rho_s(x)} \frac{d^2 \rho_s(x)}{dx^2} + \frac{\rho(x, t)}{\rho_s^2(x)} \left(\frac{d\rho_s(x)}{dx} \right)^2 - \frac{1}{\rho_s(x)} \frac{d\rho_s(x)}{dx} \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial x} \right]$$

Με στάσιμη λύση: $\rho(x, t) = \rho_s(x)$!

Δυστυχώς στη περίπτωση αυτή δεν υπάρχει ακριβής λύση της συνάρτησης Green για οποιοδήποτε $F(x)$

↓

Προσεγγιστική λύση σε τάξη Δt (σφάλμα τάξης $(\Delta t)^2$):

$$G(x, y; \Delta t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta t}} e^{-\frac{(y-x-\frac{F(x)\Delta t}{2})^2}{2\Delta t}}$$

με:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} G(x, y; \Delta t) = \delta(x - y) \quad ; \quad \int dx G(x, y; \Delta t) = 1$$

Η μετακίνηση των περπατητών σε αυτή τη περίπτωση ακολουθεί το νόμο:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{1}{2}F(x)\Delta t + \eta\sqrt{\Delta t}$$

όπου η ακολουθεί Gaussian κατανομή με διασπορά 1.

Κβαντικό Monte-Carlo διάχυσης

Βασισμένοι στην εξίσωση διάχυσης και την εξίσωση Fokker-Planck μπορούμε να παράγουμε οποιαδήποτε κατανομή $|\Psi(x)|^2$ χρησιμοποιώντας τυχαίους περιπάτους.

Το ζητούμενο είναι να βρούμε μέθοδο - βασισμένη στην εξίσωση διάχυσης - ώστε να πηγαίνουμε στην επιθυμητή κβαντική κατάσταση ξεκινώντας από τυχαία αρχική κατανομή.

Ας δούμε την εξίσωση Schrödinger ελευθέρου σωματιδίου σε μια διάσταση:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$

Η εξίσωση γράφεται:

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = \gamma_{im} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$

σαν εξίσωση διάχυσης όπου γ_{im} είναι **φανταστική σταθερά διάχυσης!**

Ένας άλλος τρόπος γραφής της εξίσωσης είναι χρησιμοποιώντας **αναλυτική συνέχεια** $t \rightarrow -i\tau$:

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

Τώρα η σταθερά διάχυσης είναι **πραγματική**

Η χρονική εξέλιξη κβαντικής κατάστασης ισοδυναμεί
διάχυση συλλογής σωματιδίων σε φανταστικό χρόνο!

Η διάχυση οδηγεί το σύστημα στη θεμελιώδη κατάσταση

Η κυματοσυνάρτηση τη χρονική στιγμή $t = 0$ γράφεται:

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

Σε πραγματικό χρόνο η χρονική εξέλιξη δίνεται ως:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \psi_n(x)$$

Με αναλυτική επέκταση παίρνουμε:

$$\Psi(x, \tau) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-\frac{\tau E_n}{\hbar}} \psi_n(x)$$

↓

Για $\tau \rightarrow \infty$ κάθε συνεισφορά πηγαίνει εκθετικά στο μηδέν. Η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους κατάστασης προκύπτει στο όριο:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{\frac{E_0 \tau}{\hbar}} \Psi(x, \tau) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-\frac{(E_n - E_0) \tau}{\hbar}} \psi_n(x) = c_0 \psi_0(x)$$

Σε αυτή τη παρατήρηση στηρίζεται το Monte-Carlo διάχυσης.

Αν υπάρχει και δυναμικό η εξίσωση γίνεται ($\hbar = 1, m = 1$):

$$\frac{\partial \Psi(x, \tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi(x, \tau)}{\partial x^2} - V(x) \Psi(x, \tau)$$

Όπως δείξαμε πιο πάνω όταν $V = 0$ η εξίσωση λύνεται με τη βοήθεια της συνάρτησης Green:

$$\Psi(y, \tau) = \int dx G(x, y; \tau) \Psi(x, 0) \quad ; \quad G(x, y; \tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau}} e^{-\frac{(x-y)^2}{2\tau}}$$

Η λύση διατηρεί την συνολική πιθανότητα \Rightarrow **δεν αλλάζει ο αριθμός περιπατητών** καθώς το σύστημα εξελίσσεται χρονικά

Η παρουσία του δυναμικού $V(x)$ **καταστρέφει** αυτή την ιδιότητα!

Για να το δούμε αυτό ας αγνοήσουμε το κινητικό όρο:

$$\frac{\partial \Psi(x, \tau)}{\partial \tau} = -V(x) \Psi(x, \tau) \quad ; \quad \Psi(x, \tau) = e^{-V(x)\tau} \Psi(x, 0)$$

Οπότε:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \Psi(x, \tau) \begin{cases} 0 & ; & V(x) > 0 \\ \Psi(x, 0) & ; & V(x) = 0 \\ \infty & ; & V(x) < 0 \end{cases}$$

Ανάλογα με τη μορφή του δυναμικού η συνολική πιθανότητα μπορεί να μηδενισθεί, απειρισθεί ή να πάρει οποιαδήποτε τιμή.

Η διέξοδος στο πρόβλημα αυτό δίνεται αλλάζοντας την εξίσωση σε:

$$\frac{\partial \Psi(x, \tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \Psi(x, \tau)}{\partial x^2} - (V(x) - E_T(\tau)) \Psi(x, \tau)$$

Η ενέργεια $E_T(\tau)$ είναι συνάρτηση του χρόνου που ρυθμίζεται έτσι ώστε ο αριθμός των περιπατητών να παραμένει σταθερός συναρτήσει του τ .

Στο όριο $\tau \rightarrow \infty$ η λύση $\Psi(x, \tau) \rightarrow \Psi_o(x)$ γίνεται ανεξάρτητη του τ οπότε:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \Psi_o(x)}{dx^2} + V(x) \Psi_o(x) = E_T(\infty) \Psi_o(x)$$

με $E_T(\tau)$ την **ιδιοτιμή της ενέργειας!**

Ο αλγόριθμος του Monte-Carlo διάχυσης στηρίζεται στην ιδέα ότι:

- Ο **κινητικός όρος** στην εξίσωση Schrödinger μετά την αναλυτική επέκταση περιγράφει **διάχυση τυχαίων περιπατητών**
- Η **δυναμική ενέργεια** προκαλεί τοπικά **αυξομείωση του αριθμού περιπατητών**

Περιγραφή της υλοποίησης του αλγορίθμου

- **Έναρξη:** Επιλογή χρονικού βήματος Δt και αριθμού περιπατητών N_T κατανεμημένων σε περιοχή που η κυματοσυνάρτηση παίρνει μεγάλες τιμές. Επιλογή του $E_T(0)$.
- **Χρονικό βήμα:** Σε καθένα από τους περιπατητές εφορμόζουμε τις εξής δύο διαδικασίες:
 - **Βήμα Διάχυσης:** Η κινητική ενέργεια μετατοπίζει το παρατηρητή σε νέα θέση με βήμα επιλεγμένο από Gaussian κατανομή με διασπορά Δt
 - **Βήμα Αυξομείωσης:** Η δυναμική ενέργεια, αφού αφαιρεθεί η E_T , προκαλεί αύξηση ή μείωση του αριθμού των παρατηρητών τοπικά. Για αυτό το λόγο υπολογίζουμε:

$$q = e^{-\Delta\tau[V(x)-E_T]}$$

και η τιμή του q καθορίζει αν ο περιπατητής στη θέση x θα πεθάνει, πολλαπλασιαστεί ή επιζήσει.

- **Διόρθωση της τιμής της ενέργειας E_T :** Η αλλαγή του αριθμού των περιπατητών στο προηγούμενο βήμα πρέπει να αντισταθμιστεί με κατάλληλη μεταβολή του E_T :

$$E_T \longrightarrow E_T + \alpha \ln \left(\frac{N_T}{N} \right)$$

όπου α είναι παράμετρος με μικρή θετική τιμή

Παρατήρηση

Στο βήμα αυξομείωσης ο παρατηρητής αντικαθίσταται από $[q]$ αντίγραφα με πιθανότητα $1 - (q - [q])$ και $[q] + 1$ αντίγραφα με πιθανότητα $q - [q]$.