



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

**Un método numérico mediante integrales de camino
para una ecuación con exponente crítico de Sobolev**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

FÍSICO

PRESENTA:

CARLOS ALBERTO BRACAMONTES PALMA

DIRECTOR DE TESIS:

DR. PABLO PADILLA LONGORIA



México, D. F.

2014



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

1. Datos de Alumno
Apellido paterno
Apellido materno
Nombre(s)
Teléfono
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Carrera
Número de cuenta

2. Datos del tutor
Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

3. Datos del sinodal 1
Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

4. Datos del sinodal 2
Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

5. Datos del sinodal 3
Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

6. Datos del sinodal 4
Grado
Nombre(s)
Apellido paterno
Apellido materno

7. Datos del trabajo escrito
Título
Subtítulo
Número de páginas
Año

1. Datos del Alumno
Bracamontes
Palma
Carlos Alberto
5525585273
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Física
408005496

2. Datos del tutor
Dr
Pablo
Padilla
Longoria

3. Datos del sinodal 1
Dr
Fernando
Baltazar
Larios

4. Datos del sinodal 2
Dr
Hernando
Quevedo
Cubillos

5. Datos del sinodal 3
Dr
David Philip
Sanders

6. Datos del sinodal 4
Dr
Gerónimo
Uribe
Bravo

7. Datos del trabajo escrito
Un método numérico mediante integrales de camino para una ecuación con exponente crítico de Sobolev
48 p
2014

Índice general

Resumen	1
1. Introducción	2
2. Integrales de camino en mecánica cuántica	5
2.1. Integrales de camino en física.	5
2.2. Integrales de camino partiendo de la ecuación de Schrödinger	7
2.3. Ecuación de Schrödinger a partir de la formulación de Feynman	9
2.4. Aplicación de la integral de camino al caso de una partícula libre	10
3. Fórmula de Feynman–Kac	12
3.1. Fórmulas de Feynman–Kac	12
3.2. Deducción heurística de la fórmula (3.8)	14
3.3. Integral de camino de Feynman-Kac en dominios <i>cúbicos</i>	15
4. Soluciones obtenidas con otros métodos	21
4.1. Método de disparo	21
4.2. Método de diferencias finitas	25
5. Soluciones usando la fórmula de Feynman–Kac	27
5.1. Método mediante integrales de camino	27
5.2. Iteraciones para soluciones radiales en la esfera.	29
5.3. Iteraciones para dominios con simetría cilíndrica en tres dimensiones	30
6. Conclusiones	38
A. Elementos de CUDA	39
B. Código para realizar una iteración en tres dimensiones.	40

Resumen

En este trabajo se presenta la implementación de un método numérico para resolver la ecuación diferencial parcial conocida como ecuación con exponente crítico de Sobolev. El método numérico empleado hace uso de la fórmula de Feynman–Kac para construir un algoritmo de tipo Monte Carlo que, al iterarlo, puede aproximar la solución en ciertos casos.

El contexto de la ecuación con exponente crítico de Sobolev, sobre la cual trata este trabajo, se expone en el capítulo 1. En él se hace un breve recuento de resultados relacionados con la solubilidad de esta ecuación y el estado actual de algunos problemas que se asocian con ella.

El capítulo 2 describe el papel que tienen las integrales de camino en la física, especialmente en la mecánica cuántica. Este uso de las integrales de camino fue el que dio lugar a la fórmula de Feynman–Kac, de la cual trata el capítulo 3 y en el cual se provee una deducción heurística de una versión de esta ecuación, de hecho, la que será más útil en este trabajo. Además, se detalla cómo usar esta fórmula para hallar directamente la solución en dominios *cúbicos*.

El capítulo 4 muestra las aproximaciones a ciertas soluciones del problema de este trabajo usando el método del disparo y el método de diferencias finitas. Las aproximaciones obtenidas mediante estos métodos servirán para compararlos con los resultados del método que se intenta utilizar en este trabajo.

Las aproximaciones resultantes del método mediante integrales de camino se ilustran en el capítulo 5. Algunas de las aproximaciones se comparan con las obtenidas en el capítulo 4.

Las conclusiones obtenidas se hallan en el capítulo 6.

Finalmente, el apéndice A da una breve explicación de CUDA, el lenguaje de programación empleado en este trabajo, mientras que el apéndice B contiene el código utilizado para implementar el método mediante integrales de camino.

Capítulo 1

Introducción

Este trabajo es motivado por la idea de estudiar la ecuación conocida como ecuación con exponente crítico de Sobolev

$$\begin{cases} \Delta u = -u^p, & p > 1 \\ u(x) > 0 & \forall x \in \Omega \\ u(x) = 0 & \forall x \in \partial\Omega, \end{cases} \quad (1.1)$$

donde Ω es un dominio abierto y acotado en \mathbb{R}^N ($N \geq 3$), desde un punto de vista estocástico a través de la fórmula de Feynman-Kac.

El interés en esta ecuación creció debido a su relación al problema de Yamabe en geometría diferencial (véase [3] para la solución original de Hidehiko Yamabe a este problema), el cual puede formularse de la siguiente manera: dada una variedad compacta y suave M de dimensión $N \geq 3$ con una métrica riemanniana g , ¿existe una métrica g' conforme a g tal que la curvatura escalar de g' sea constante? Este problema se reduce a hallar una función $u > 0$ que satisfaga la ecuación

$$-\Delta u = u^{p^*} - \frac{N-2}{4(N-1)}R(x)u \quad \text{en } M, \quad (1.2)$$

donde $R(x)$ es la curvatura escalar y $p^* \equiv \frac{N+2}{N-2}$ (p^* se conoce como exponente crítico de Sobolev). La solución completa al problema de Yamabe fue dada por el trabajo conjunto de Neil Trudinger, Thierry Aubin y Richard Schoen ([22], [23], [24]) en 1984 al demostrar que siempre puede hallarse dicha métrica g' con curvatura constante.

En astrofísica, el problema (1.1) es conocido como la ecuación de Lane-Emden en honor a John H. Lane y Robert Emden, quienes la propusieron para modelar el interior de estrellas (véase [20] [21] para mayor discusión sobre su aplicación en astrofísica). En este contexto, u^p es proporcional a la densidad de una estrella gaseosa y el exponente p es llamado índice politrópico. El valor de este

índice caracteriza el proceso termodinámico en cuestión. En general, p puede tomar cualquier valor mayor que 1.

La manera más común en la que se han estudiado las propiedades del problema (1.1) es por medio de su formulación variacional. En una de estas formulaciones, las soluciones son puntos críticos de la funcional

$$f(u) = \int_{\Omega} |Du|^2 dx \quad (1.3)$$

restringida a la variedad $M_p(\Omega) = \{u \in H_0^{1,2}(\Omega) : \int_{\Omega} |u|^p dx = 1\}$ (véase el capítulo 1 de [29]). La restricción de (1.1) a $M_p(\Omega)$ puede cambiarse por la introducción de un multiplicador de Lagrange en esta funcional. Con este término, las soluciones corresponden a puntos críticos de la funcional

$$h(u) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |Du|^2 dx - \frac{1}{p+1} \int_{\Omega} |u|^{p+1} dx \quad (1.4)$$

definida en el dominio $H_0^1(\Omega)$ (véase ecuación (1) en [15]).

La solubilidad de (1.1) depende de modo importante del valor del exponente p . Cuando $p < p^*$, el problema siempre tiene solución no trivial en cualquier dominio acotado Ω . Esto puede mostrarse usando métodos del cálculo de variaciones aplicados a las funcionales (1.3) y (1.4) (véase [29]). En cambio, cuando $p \geq p^*$, la existencia de una solución no trivial sí depende del dominio Ω . En realidad, el primer indicio de esto fue que los métodos variacionales no podían aplicarse como en el caso $p < p^*$ pues la condición de Palais-Smale para compacidad no se satisfacía en este caso.

Un primer resultado relacionado con la solubilidad en el caso $p \geq p^*$ fue obtenido por Pohozaev [10] al probar que no existe solución si $p \geq \frac{N+2}{N-2}$ y Ω es un conjunto estrella¹. Para probar este resultado utilizó la siguiente identidad

$$\frac{2-N}{2} \int_{\Omega} g(u) u dx + N \int_{\Omega} G(u) dx = \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega} (x \cdot \nu) \left(\frac{\partial u}{\partial \nu} \right)^2 d\sigma, \quad (1.5)$$

válida para cualquier solución de $-\Delta u = g(u)$ con condición de frontera $\partial\Omega = 0$. En (1.5), $G(u) = \int_0^u g(s) ds$ y ν es la normal exterior a $\partial\Omega$. Utilizando $g(u) = u^p$, el lado izquierdo de esta ecuación es $\frac{N-2}{2(p+1)} \left(\frac{N+2}{N-2} - p \right) \int_{\Omega} u^{p+1} dx$. Por lo tanto, este lado de la ecuación es positivo sólo si $p < p^* = \frac{N+2}{N-2}$. Por otra parte, el miembro derecho es positivo siempre que el dominio sea estrella ($x \cdot \nu > 0$ para este tipo de conjuntos) y $u \neq 0$. De este modo se concluye que si el dominio tiene forma estrella entonces sólo existe solución no trivial si $p < p^*$.

Sin embargo, la condición del dominio de ser estrella no es necesaria para garantizar la no existencia de una solución pues se han hallado conjuntos sin forma estrella que no tienen solución

¹Un conjunto S es conjunto estrella si existe un punto x_0 en S tal que para todo x en S el segmento de recta con extremos x y x_0 está íntegramente en S .

diferente a la trivial si $p \geq p^*$ (ver [17]). Después, Kazdan y Warner [12] probaron que (1.1) sí posee solución para valores de p mayores a p^* si Ω es una corona circular (anillo). Este último resultado motivó el uso de la topología de Ω para establecer la existencia de soluciones de (1.1) para $p \geq p^*$. Siguiendo esta idea, Bahri y Coron [16] probaron que (1.1) tiene solución si Ω tiene una topología no trivial. Con mayor precisión, ellos probaron que si el dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ es tal que $H_d(\Omega, \mathbb{Z}_2) \neq 0$ para alguna $d > 0$ (i.e. el grupo de homología de Ω con coeficientes \mathbb{Z}_2 no es trivial), entonces el problema tiene solución. Por lo tanto, se pensó que la condición para establecer la existencia de una solución podía ser puramente topológica. Sin embargo, Dancer [13] y Ding [9] dieron ejemplos de conjuntos contraíbles (i. e., topología trivial) en el que se tiene una solución distinta a la trivial, mostrando que tanto la topología como la geometría del dominio juegan un papel importante. Asimismo, se han dado ejemplos de dominios acotados y contraíbles en los que, para un natural $k \geq 1$ cualquiera, existen k soluciones no triviales incluso si $p > p^*$ (uno de estos ejemplos se halla en [25]).

Hasta ahora no resulta claro cuál es la condición necesaria y suficiente sobre el dominio en este problema para que exista una solución no trivial. En este contexto es interesante intentar obtener condiciones necesarias o suficientes en términos distintos a los topológicos o geométricos.

Capítulo 2

Integrales de camino en mecánica cuántica

En este capítulo se hace un repaso de las aplicaciones del concepto de integral de camino en física. Se hace énfasis en su papel en la mecánica cuántica, repasando cómo la formulación mediante integrales de camino es equivalente a la representación de Schrödinger. También se ilustra cómo usar integrales de camino para calcular el propagador de una partícula libre.

2.1 Integrales de camino en física.

La mecánica cuántica describe fenómenos en los que la acción es del orden de la constante de Planck, $\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$. De acuerdo con esta teoría, los resultados de experimentos son impredecibles y lo único que puede calcularse es la distribución de probabilidad de esos resultados. En la mecánica cuántica, la cantidad que se emplea para describir el comportamiento de los sistemas es la amplitud de probabilidad.

En el formalismo de Schrödinger de la mecánica cuántica, la amplitud de probabilidad se calcula al resolver una ecuación diferencial conocida como ecuación de Schrödinger.

Una formulación alternativa de la mecánica cuántica es mediante las integrales de camino, cuyo método fue desarrollado por Richard Feynman (véase [4]). En esta formulación, la amplitud de probabilidad de un evento es una suma sobre todas las posibles trayectorias entre el estado inicial y el final. La contribución de cada trayectoria a la suma es proporcional a $e^{iS/\hbar}$ donde S es la acción¹ asociada a dicha trayectoria. Al igual que en el formalismo de Schrödinger, la probabilidad del evento es igual al cuadrado de la amplitud.

La idea de integral sobre trayectorias, también conocida como integral funcional porque el dominio de integración es un espacio de funciones, fue introducida por primera vez en la década de 1920 por Norbert Wiener [18] como un método para resolver problemas en la teoría de difusión y

¹La acción se define como la integral del lagrangiano L con respecto al tiempo t , a lo largo de la trayectoria del sistema, i. e., $S = \int_{t_1}^{t_2} L dt$. Los límites de integración son los tiempos inicial y final en la evolución del sistema.

movimiento browniano. Esta integral, conocida ahora como integral de Wiener, marcó el inicio de integrales de trayectoria.

La integral sobre trayectorias fue retomada por Richard Feynman en 1942 (véase [5]) para una reformulación de la mecánica cuántica, alternativa a las formulaciones de Schrödinger y de Heisenberg. Esta formulación fue inspirada por un artículo de Dirac [11] en 1933 en el que se discutía el papel del Lagrangiano y del principio de mínima acción en la mecánica cuántica.

Posteriormente, la integral sobre trayectorias se aplicó al estudio del movimiento browniano en un medio absorbente y al desarrollo de la teoría de la superfluidez [1]. A partir de estos trabajos, se hallaron diversas aplicaciones en física estadística, como la teoría de transiciones de fase, superfluidez, superconductividad, modelo de Ising y plasmas (en [2] se discute las aplicaciones al modelo de Ising, a la superfluidez y a la superconductividad). Feynman también empleó la técnica de integral de camino para investigar el problema del polarón en la física de estado sólido.

Fue el mismo Feynman quien proporcionó una receta para calcular la suma sobre trayectorias. Esta receta consiste en discretizar el tiempo de las trayectorias del sistema y sumar sobre todas las posibles configuraciones en cada tiempo a considerar. La discretización en el tiempo consiste en considerar n instantes (t_1, \dots, t_n) con la misma separaciones entre dos tiempos consecutivos. La suma sobre las trayectorias está expresada por integrales con respecto a las posiciones x_1, \dots, x_n en los respectivos tiempos t_1, \dots, t_n (figura (2.1)). De esta forma, la suma sobre trayectorias se ve como la siguiente integral

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L(x(t), v(t)) dt\right) dx_1 \cdots dx_n, \quad (2.1)$$

donde L es el lagrangiano del sistema y x_i es la posición al tiempo t_i . Nótese que cada trayectoria es *pesada* por el factor $\exp(iS/\hbar)$.

Cuando $n \rightarrow \infty$, la expresión anterior se convierte en una integral funcional que es directamente proporcional a la amplitud $\langle x_a, t_a | x_b, t_b \rangle$.

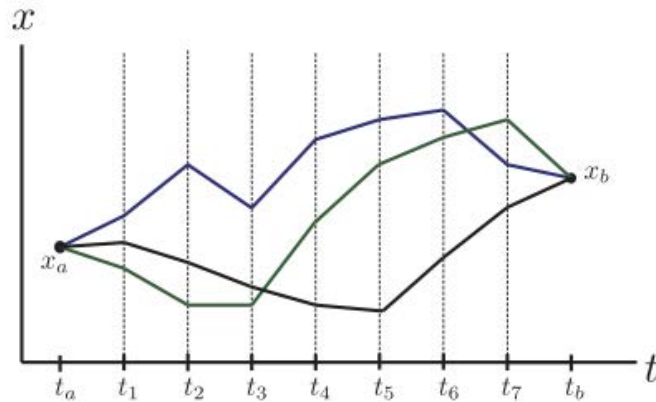


Figura 2.1: Ilustración de diferentes trayectorias para distintos valores de las coordenadas x_i .

2.2 Integrales de camino partiendo de la ecuación de Schrödinger

A continuación se da una demostración de cómo puede obtenerse una expresión para el propagador en términos de una integral sobre trayectorias partiendo de la ecuación de Schrödinger para la función de onda $|\psi\rangle$ de una partícula de masa m en un potencial V . La ecuación de Schrödinger es

$$H|\psi\rangle = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t},$$

donde

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V.$$

es el hamiltoniano del sistema.

El propagador es un operador que permite obtener la solución a la ecuación de Schrödinger $|\psi(t)\rangle$ a un tiempo t en función del estado $|\psi(t_0)\rangle$ a un tiempo t_0 ($t_0 < t$) por medio de la expresión $|\psi(t)\rangle = G(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$. Esta última expresión junto con la ecuación de Schrödinger da como resultado la siguiente ecuación para el propagador

$$\left(H + \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \right) G(t, t_0) = \frac{\hbar}{i} \mathbb{1} \delta(t - t_0).$$

Si el operador H es independiente del tiempo, la solución a la ecuación anterior es $G(t, t_0) = \theta(t - t_0) \exp\left[-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\right]$. Sin pérdida de generalidad, podemos suponer que $t_0 = 0$. Entonces la representación del propagador $G(t)$ con respecto al conjunto de estados $\{|x\rangle\}$ es

$$G(x, t; y) = \langle x | e^{-iHt/\hbar} | y \rangle.$$

El operador $e^{-iHt/\hbar}$ en la ecuación anterior puede separarse en n factores iguales $e^{-\lambda(T+V)/n}$ con $\lambda = it/\hbar$, con lo cual se obtiene la siguiente expresión para el propagador

$$G(x, t; y) = \langle x | e^{-\lambda(T+V)/n} \dots e^{-\lambda(T+V)/n} | y \rangle. \quad (2.2)$$

Usando las identidades

$$\exp[-\alpha(T + V)] = \mathbb{1} - \alpha(T + V) + (1/2)\alpha^2(T^2 + V^2 + TV + VT)$$

y

$$\exp[-\alpha T] \exp[-\alpha V] = \mathbb{1} - \alpha(T + V) + \alpha^2 TV + O(\alpha^3),$$

que resultan de la expansión en series de los miembros izquierdos, puede obtenerse que

$$e^{-\lambda(T+V)/n} = e^{-\lambda T/n} e^{-\lambda V/n} + O\left(\frac{\lambda^2}{n^2}\right),$$

con lo que puede justificarse el siguiente límite

$$G(x, t; y) = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle x | (e^{-\lambda T/n} e^{-\lambda V/n})^n | y \rangle. \quad (2.3)$$

Ahora se introduce el operador identidad $\mathbb{1}$ con la forma $\int dx_j |x_j\rangle \langle x_j|$ entre cada factor del producto en la ecuación (2.3). Con este paso se transforma la ecuación (2.3) en una integral sobre $n-1$ coordenadas, x_1, \dots, x_{n-1} ($n \rightarrow \infty$), lo cual llevará a su representación en términos de integrales de camino. Se tiene entonces que

$$G(x, t; y) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int dx_1 \cdots dx_{n-1} \prod_{j=0}^{n-1} \langle x_{j+1} | e^{-\lambda T/n} e^{-\lambda V/n} | x_j \rangle, \quad (2.4)$$

donde por convención se ha tomado $x_0 = y$ y $x_n = x$.

El operador V es diagonal en el espacio $\{|x\rangle\}$ por lo que $\exp\left(-\frac{\lambda V}{n}\right) |x_j\rangle = \left[\exp\left(-\frac{\lambda V(x_j)}{n}\right)\right] |x_j\rangle$ y la expresión (2.4) toma la forma

$$G(x, t; y) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int dx_1 \cdots dx_{n-1} \prod_{j=0}^{n-1} \langle x_{j+1} | e^{-\lambda T/n} | x_j \rangle e^{-\lambda V(x_j)/n}. \quad (2.5)$$

Los términos $\langle x_{j+1} | e^{-\lambda T/n} | x_j \rangle$ pueden reescribirse cada uno con forma de una integral gaussiana introduciendo el operador identidad $\mathbb{1} = \int dp |p\rangle \langle p|$ entre el operador $e^{-\lambda T/n}$ y el estado $|x_j\rangle$. El conjunto $\{|p\rangle\}$ está compuesto por los eigenestados del operador de momento, los cuales satisfacen $\langle p|x\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} \exp(-ipx/\hbar)$. Se tiene entonces

$$\langle x_{j+1} | e^{-\lambda T/n} | x_j \rangle = \int dp \langle x_{j+1} | e^{-\lambda T/n} | p \rangle \langle p | x_j \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{-\lambda p^2/2mn} e^{ip(x_{j+1}-x_j)/\hbar}. \quad (2.6)$$

donde se ha usado que $\exp(-\lambda T/n) |p\rangle = \exp(-\lambda p^2/n) |p\rangle$. La cuadratura de la última integral en (2.6) puede obtenerse a partir de la fórmula general $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-az^2+bz} dz = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{b^2/4a}$. Entonces

$$\langle x_{j+1} | e^{-\lambda T/n} | x_j \rangle = \sqrt{\frac{mn}{2\pi\lambda\hbar^2}} e^{-mn(x_{j+1}-x_j)^2/2\lambda\hbar^2}. \quad (2.7)$$

Al sustituir (2.7) en (2.5) y tomar las definiciones $\epsilon = t/n = \hbar\lambda/in$, se llega a la siguiente fórmula

$$G(x, t; y) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int dx_1 \cdots dx_{n-1} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon}\right)^{n/2} \exp \left[\frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^{n-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{j+1} - x_j}{\epsilon}\right)^2 - V(x_j) \right] \right]. \quad (2.8)$$

Esta última ecuación es la expresión del propagador G en términos de una integral sobre trayectorias.

La suma que aparece en la exponencial de (2.8) puede interpretarse como una suma de Riemann de la acción

$$S = \int_0^t d\tau \left[\frac{1}{2}m \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 - V(x) \right].$$

Así, el argumento de dicha exponencial se aproxima a iS/\hbar , donde S es la acción de la trayectoria que pasa por los puntos $y, x_1, \dots, x_{n-1}, x$ en los respectivos tiempos $t_0, t_1, \dots, t_{n-1}, t_n$ ($t_k = t_0 + k(t - t_0)/n$).

Además, las $n - 1$ integrales sobre las coordenadas x_1, \dots, x_{n-1} pueden tomarse, en el límite $n \rightarrow \infty$, como una suma sobre todas las posibles trayectorias que unen a y con x .

Las consideraciones anteriores permiten entender el miembro derecho en (2.8) como una suma sobre caminos $x(\cdot)$, i. e.,

$$G(x, t; y) = C \sum_{x(\cdot)} e^{iS[x(\cdot)]/\hbar}, \quad (2.9)$$

con la condición $x(0) = y$ y $x(t) = x$.

2.3 Ecuación de Schrödinger a partir de la formulación de Feynman

En esta sección se muestra una derivación de la ecuación de Schrödinger a partir de la formulación de Feynman de la mecánica cuántica mediante integrales de camino. Esta derivación está basada en la presentada por Feynman en el libro que escribió sobre integrales de camino en mecánica cuántica [6].

Primero se toma la ecuación que expresa la función de onda $\psi(x, t_2)$ de la partícula a un tiempo t_2 en términos de su función de onda a un tiempo t_1 ($t_1 < t_2$). Esta ecuación es $\psi(x, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x, t_2; y, t_1) \psi(y, t_1) dy$, donde $K(x, t_2; y, t_1)$ es la amplitud de que la partícula se encuentre en x al tiempo t_2 si se encontraba en el punto y al tiempo t_1 . Si t_2 difiere de t_1 por un valor ϵ ($\epsilon \equiv t_2 - t_1$) pequeño, $K(b, a)$ es proporcional a $e^{\frac{i}{\hbar}S[t_2, t_1]}$ donde $S[t_2, t_1]$ es la acción en el intervalo $[t_1, t_2]$. Como $t_2 - t_1$ es pequeño, dicha acción puede aproximarse como el producto de ϵ y el lagrangiano en este intervalo, $L(\frac{x-y}{\epsilon}, \frac{x+y}{2})$. Por lo tanto,

$$\psi(x, t + \epsilon) \approx \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon L \left(\frac{x-y}{\epsilon}, \frac{x+y}{2} \right) \right\} \psi(y, t) dy.$$

Para una partícula moviéndose en una dimensión sujeta al potencial $V(x, t)$, el lagrangiano es $L = (m/2)\dot{x}^2 - V(x, t)$ y la ecuación anterior toma la siguiente forma

$$\psi(x, t + \epsilon) \approx \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m(x-y)^2}{2\epsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \epsilon V \left(\frac{x+y}{2}, t \right) \right\} \psi(y, t) dy.$$

Realizando la sustitución $y = x + \eta$

$$\psi(x, t + \epsilon) \approx \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right\} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \epsilon V \left(x + \frac{\eta}{2}, t \right) \right\} \psi(x + \eta, t) d\eta.$$

Ahora, usando series de Taylor, se expanden ψ y V en la ecuación anterior alrededor del punto (x, t) , conservando sólo términos de orden ϵ o menor a este:

$$\psi(x, t) + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right\} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon V(x, t) \right] \left[\psi(x, t) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] d\eta. \quad (2.10)$$

Del lado derecho, el término con menor orden en ϵ es

$$\left[\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right\} d\eta \right] \psi(x, t) = \frac{1}{A} \left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{1/2} \psi(x, t),$$

mientras que en el lado izquierdo el término respectivo es $\psi(x, t)$. En el límite $\epsilon \rightarrow 0$ ambos lados deben coincidir por lo que es necesario que $A = \left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{1/2}$.

Usando las integrales $\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \eta \exp \left\{ \frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right\} d\eta = 0$ y $\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \eta^2 \exp \left\{ \frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right\} d\eta = \frac{i\hbar\epsilon}{m}$ la ecuación (2.10) toma la forma

$$\psi + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi - \frac{i}{\hbar} \epsilon V \psi + \frac{i\hbar\epsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}.$$

Esta última expresión debe ser cierta para cualquier ϵ , por lo cual $\psi(x, t)$ debe satisfacer la ecuación diferencial

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x, t) \psi \right],$$

la cual es la ecuación de Schrödinger para una partícula moviéndose en una dimensión.

2.4 Aplicación de la integral de camino al caso de una partícula libre

En el caso en que una partícula se mueve libremente ($V = 0$), el lagrangiano es

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2.$$

De acuerdo con (2.1), el propagador es

$$G(x, t; y) = \langle x, t | y, 0 \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{N/2} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[\frac{im}{2\hbar\epsilon} \sum (x_i - x_{i-1})^2 \right] dx_1 \dots dx_{N-1}, \quad (2.11)$$

donde $\epsilon = t_j - t_{j-1}$.

2.4. APLICACIÓN DE LA INTEGRAL DE CAMINO AL CASO DE UNA PARTÍCULA LIBRE 11

Usando que la integral de gaussianas es de nuevo una gaussiana o, con mayor precisión, usando

$$\left(\frac{1}{\epsilon}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{im}{2\hbar\epsilon} [(x_{j+1} - x_j)^2 + (x_j - x_{j-1})^2]\right] dx_j = \left(\frac{1}{2\epsilon}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{im}{2\hbar 2\epsilon} (x_2 - x_0)^2\right]$$

de manera sucesiva en la ecuación (2.11), se obtiene que el propagador para una partícula libre es

$$G(x, t; y) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{im(x - y)^2}{2\hbar t}\right].$$

Capítulo 3

Fórmula de Feynman–Kac

Este capítulo tiene el objetivo de mostrar diferentes versiones de la fórmula de Feynman-Kac. Entre estas versiones hay una que es útil para el diseño de algoritmos de tipo Monte Carlo que aproximan la solución al problema que nos interesa, (problema (1.1)). Posteriormente se da una deducción heurística de dicha versión y se muestra cómo utilizar directamente esta expresión para obtener la solución en dominios *cúbicos*.

3.1 Fórmulas de Feynman–Kac

Después de haber sido presentada la formulación de la mecánica cuántica por medio de integrales de camino, Mark Kac se dio cuenta de que una fórmula similar a la fórmula de Feynman, pero con un exponente real, podía presentarse de manera matemáticamente rigurosa utilizando la medida de Wiener. Esta fórmula expresa la solución $W(x, t)$ a la ecuación de Bloch,

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{1}{4} \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} - V(x)W, \quad (3.1)$$

con condición inicial $W(x, 0) = \delta(x - x_0)$, en términos de una integral sobre trayectorias

$$W(x, t) = \int_{C\{x_0, 0; x, t\}} d_W X_s \exp \left\{ - \int_0^t ds V(X_s) \right\}, \quad (3.2)$$

donde el símbolo $\int_{C\{x_0, 0; x, t\}}$ indica una integral sobre todas las posibles trayectorias X_s de movimiento browniano que pasan por los puntos x_0 y x en los tiempos $s = 0$ y $s = t$, respectivamente (véase [1] para la definición de la medida de Wiener $d_W X_s$ y una demostración de la fórmula (3.2)). La integral sobre trayectorias en (3.2), pesadas de acuerdo a la medida de Wiener, puede considerarse un valor esperado de la cantidad $\exp \left\{ - \int_0^t ds V(X_s) \right\}$. Por lo tanto, (3.2) puede reescribirse como

$$W(x, t) = E \left[\exp \left\{ - \int_0^t ds V(X_s) \right\} \right], \quad (3.3)$$

donde E denota un valor esperado (promedio pesado sobre trayectorias).

Una fórmula similar tiene lugar para ecuaciones diferenciales parciales más generales del tipo parabólico. En este caso, el movimiento browniano se sustituye por un proceso estocástico más general. Supongamos que $u(x, t)$ es solución a la ecuación

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mu(x) \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{2} \sigma^2(x) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - V(x)u, \quad (3.4)$$

con condición inicial $u(x, 0) = f(x)$. Entonces $u(x, t)$ puede expresarse de la siguiente forma [7]

$$u(x, t) = E \left[f(x + X_t) \exp \left\{ - \int_0^t ds V(x + X_s) \right\} \right], \quad (3.5)$$

donde X_t es un movimiento browniano con deriva μ , coeficiente de difusión σ y que inicia en el punto $X_0 = 0$, i.e., X_t es el proceso estocástico que satisface la solución a

$$dX_t = \mu(X_t)dt + \sigma(X_t)dB_t$$

con condición inicial $X_0 = 0$.

Nótese que en el caso $f(x) = \delta(x - x_0)$, $\mu = 0$ y $\sigma = 1$, la ecuación (3.4) se reduce a (3.1). Por otra parte, en (3.5) solo se consideran movimientos brownianos para los que $x + X_t = x_0$ ya que de no ser así se tendría $f(x + X_t) = 0$. Entonces (3.5) se convierte en un promedio de $\exp \left\{ - \int_0^t ds V(x + X_s) \right\}$ sobre aquellas trayectorias que pasan por los puntos x y x_0 en los tiempos 0 y t , respectivamente. De este modo, (3.5) toma la forma de (3.3).

También se tienen expresiones de este estilo para ecuaciones elípticas. Un ejemplo es el siguiente: para toda x en un dominio Ω , la solución al siguiente problema con condiciones homogéneas a la frontera

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\Delta u + cu = f & \text{en } \Omega \\ u(x) = 0 & \forall x \in \partial\Omega \end{cases} \quad (3.6)$$

puede darse en la siguiente forma

$$u(x) = E_x \left(\int_0^\tau f(\mathbf{X}(t)) e^{-\int_0^t c(\mathbf{X}) ds} dt \right), \quad (3.7)$$

donde $X(s) = W(s) + x$ es un movimiento browniano que comienza en x y τ es el tiempo en el que el movimiento browniano toca por primera vez la frontera de Ω (véase [30] para una demostración de (3.7)).

En el caso en que $c = 0$, la solución al problema es

$$u(x) = E_x \left(\int_0^\tau f(\mathbf{X}(t)) dt \right). \quad (3.8)$$

También existe una fórmula de este tipo para funciones armónicas. Si $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $g : \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}$ y u es solución de

$$\begin{cases} \Delta u = 0 & \text{en } \Omega \\ u = g & \text{en } \partial\Omega, \end{cases} \quad (3.9)$$

entonces para todo punto $x \in \Omega$

$$u(x) = E_x (g(X(\tau_x))), \quad (3.10)$$

donde $X(s) = W(s) + x$ es un movimiento browniano que comienza en x . Este último resultado fue probado por Shizuo Kakutani en 1944 [32] y es uno de los primeros en los que se da un enfoque estocástico a la solución de ecuaciones diferenciales con valores a la frontera. Después se descubrió que este caso era sólo un ejemplo de un conjunto más grande de problemas con valores a la frontera asociados a ecuaciones diferenciales parciales semielípticas de segundo orden en los que la solución puede expresarse mediante procesos estocásticos que resultan de resolver ecuaciones diferenciales estocásticas [31].

3.2 Deducción heurística de la fórmula (3.8)

Una forma no muy rigurosa de verificar que la fórmula de Feynman-Kac (3.8) es en efecto solución al problema (3.6) con $c = 0$ consiste en lo siguiente: imaginemos que el movimiento browniano en el dominio Ω es en realidad un caminante aleatorio moviéndose en un retículo *cúbico* con lados de longitud ℓ . Además, sobre cada eje coordenado la posición del caminante puede cambiar por ℓ o $-\ell$ con la misma probabilidad, i. e., es simétrico. Entonces, los pasos del caminante tienen longitud $s = \sqrt{d}\ell$, donde d es la dimensión del dominio. Luego, tomemos un punto cualquiera x_0 de ese retículo al interior de Ω (véase figura 3.1).

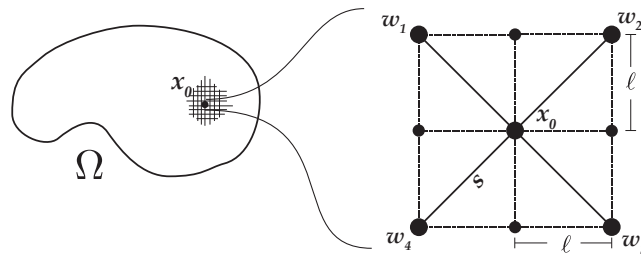


Figura 3.1: Dominio Ω con un retículo *cúbico*.

No es complicado ver con este esquema que la fórmula (3.8) implica que

$$u(x_0) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N u(w_j) + f(x_0)\Delta t, \quad (3.11)$$

donde j es un índice asignado a cada uno de los N sitios del retículo adyacentes a x_0 , y Δt es el tiempo asociado a cada paso del caminante aleatorio. El número N está relacionado con la dimensión d del dominio por la fórmula $N = 2d$. El límite necesario para que este caminante se convierta en un movimiento browniano es $\Delta t \rightarrow \ell^2$ cuando $\ell \rightarrow 0$. Tomando este límite en (3.11),

$$\frac{\sum_j u(w_j) - Nu(x_0)}{\ell^2} = -Nf(x_0). \quad (3.12)$$

El numerador en el miembro derecho de (3.12) puede desarrollarse en potencias de s , la distancia entre puntos adyacentes,

$$\left[\sum_{j=1}^N u(w_j) \right] - Nu(x_0) = \left[Nu(x_0) + \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x_j^2} \Big|_{x_0} s^2 + O(s^3) \right] - Nu(x_0). \quad (3.13)$$

Nótese que en la última ecuación, los términos de primer orden se anulan. Sustituyendo la expansión (3.13) en (3.12) se obtiene

$$\frac{\sum_{j=1}^d \frac{\partial^2 u}{\partial x_j^2} \Big|_{x_0} s^2 + O(s^3)}{\ell^2} = -Nf(x_0).$$

Despreciando los términos de orden s^3 o mayor, y tomando en cuenta que $s^2 = d\ell^2$ y $d/N = 1/2$, se obtiene

$$\frac{1}{2} \sum_{j=1}^d \frac{\partial^2 u}{\partial x_j^2} \Big|_{x_0} = -f(x_0),$$

lo cual muestra que u , tal como se define en (3.8), satisface la ecuación $-\frac{1}{2}\Delta u = f$ en cualquier punto al interior de Ω . Además, $u(x) = 0$ en $\partial\Omega$ por la propia definición de u .

3.3 Integral de camino de Feynman-Kac en dominios cúbicos.

En esta sección se presenta una forma de obtener una expresión analítica de la solución a (3.6) (con $c = 0$) partiendo directamente de la fórmula de Feynman-Kac (3.8) en el caso en que el dominio es cúbico en \mathbb{R}^n . Primero se toma el caso más sencillo, el de un intervalo. Después se muestra cómo se generaliza a más dimensiones.

El primer paso para llegar a la forma analítica es obtener, para todo tiempo t , la distribución $\bar{w}_x(s, t)$ de movimientos brownianos que han iniciado en x y que aún no “tocan” la frontera del intervalo $[x_1, x_2]$. Esta distribución debe satisfacer localmente la ecuación de difusión

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \bar{w}_x}{\partial s^2} = \frac{\partial \bar{w}_x}{\partial t}$$

con la condición $\bar{w}_x(x_1, t) = \bar{w}_x(x_2, t) = 0$ para todo tiempo t y para todo valor de x . Esta condición expresa que en \bar{w}_x sólo se consideran movimientos brownianos que no han tocado la frontera.

Una manera de expresar \bar{w}_x es a través del método de las imágenes. De acuerdo con este método,

$$\tilde{w}_x(s, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left[-\frac{(s-x)^2}{2t}\right] + \sum_{j=1} \sum_{\alpha=1,2} \frac{(-1)^j}{\sqrt{2\pi t}} \exp\left[-\frac{(s-x_{j,\alpha})^2}{2t}\right], \quad x_1 \leq s \leq x_2 \quad (3.14)$$

donde

$$x_{j,\alpha} = (-1)^j x + j(x_\alpha - x_\beta) + \text{mod}(j, 2)(x_\alpha + x_\beta)$$

$\beta = 2$ si $\alpha = 1$ y viceversa.

Los puntos $x_{j,\alpha}$ ($\alpha = 1, 2$) son aquellos que se obtienen de x a partir de sucesivas reflexiones con respecto a los extremos x_1 y x_2 ; además, los puntos $x_{j,1}$ se hallan a la izquierda de x_1 mientras que los puntos $x_{j,2}$ lo están a la derecha de x_2 . En otras palabras, los puntos $x_{j,\alpha}$ indican las posiciones de las imágenes de x si hubiera un espejo en x_1 y otro en x_2 , véase figura (3.2)

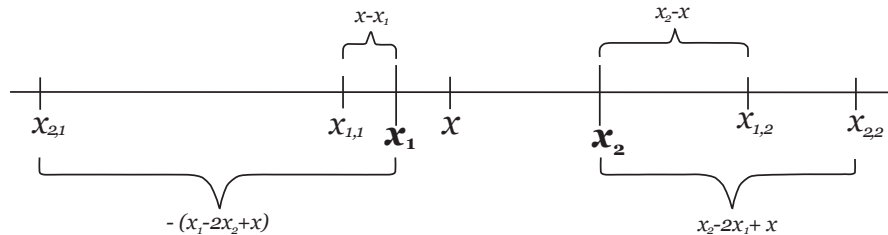


Figura 3.2: Puntos $x_{j,\alpha}$. Estos puntos indican las posiciones de las imágenes de x si hubiera un espejo en x_1 y otro en x_2 .

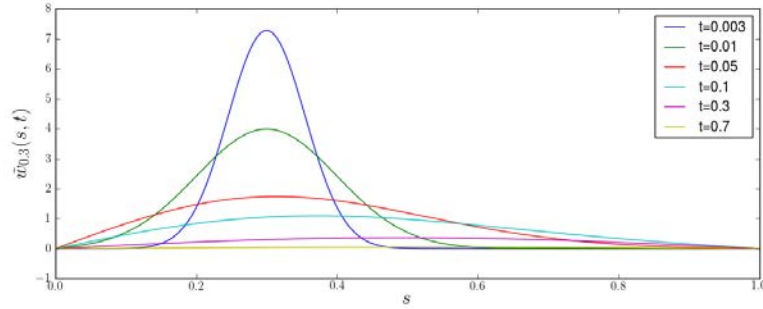


Figura 3.3: Ejemplos de la distribución $\tilde{w}_x(s, t)$ para $x_1 = 0.0$, $x_2 = 1.0$, $x = 0.3$ y $t = 0.003, 0.01, 0.05, 0.1, 0.3, 0.7$.

No es difícil verificar que la distribución (3.14), además de satisfacer la ecuación de difusión, también cumple con las siguientes condiciones:

- (a) $\lim_{t \rightarrow 0} \tilde{w}_x(s, t) = \delta(s - x)$,
- (b) $\tilde{w}_x(x_1, t) = \tilde{w}_x(x_2, t) = 0$ para todo tiempo t y para cualquier x ,

las cuales son condiciones suficientes para que (3.14) represente la distribución buscada de movimientos brownianos. Nótese que (3.14) no es una distribución con normalización constante; de hecho se cumple que

$$\frac{d}{dt} \int_{x_1}^{x_2} ds \tilde{w}_x(s, t) < 0$$

para $t > 0$. Como la cantidad $\int_{x_1}^{x_2} ds \tilde{w}_x(s, t)$ es la probabilidad de que un movimiento browniano no haya tocado la frontera, esta última desigualdad expresa que dicha probabilidad decrece con el tiempo.

Con ayuda de la distribución \tilde{w}_x puede calcularse explícitamente el valor esperado en la fórmula de Feynman-Kac (3.8). Dicho valor esperado debería ser, según al teorema de Feynman-Kac, la solución u de la ecuación $-\frac{1}{2}\Delta u = f$, con condiciones de frontera $u(x_1) = u(x_2) = 0$. En términos de \tilde{w}_x , (3.8) puede escribirse como

$$u(x) = \int_{x_1}^{x_2} ds \int_0^\infty dt \tilde{w}_x(s, t) f(s). \quad (3.15)$$

Para calcular (3.15), definamos a partir de f una nueva función $\tilde{f} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por

$$\tilde{f}(s) = \begin{cases} f(x_1 + \text{mod}(s - x_1, x_2 - x_1)) & \text{si } \text{mod}\left(\frac{s - x_1}{x_2 - x_1}, 2\right) < 1, \\ -f(x_2 - \text{mod}(s - x_1, x_2 - x_1)) & \text{si } \text{mod}\left(\frac{s - x_1}{x_2 - x_1}, 2\right) > 1, \end{cases} \quad (3.16)$$

que es una función periódica con período $2(x_2 - x_1)$. En la figura (3.4) se muestra un ejemplo de la

construcción de \tilde{f} a partir de f .

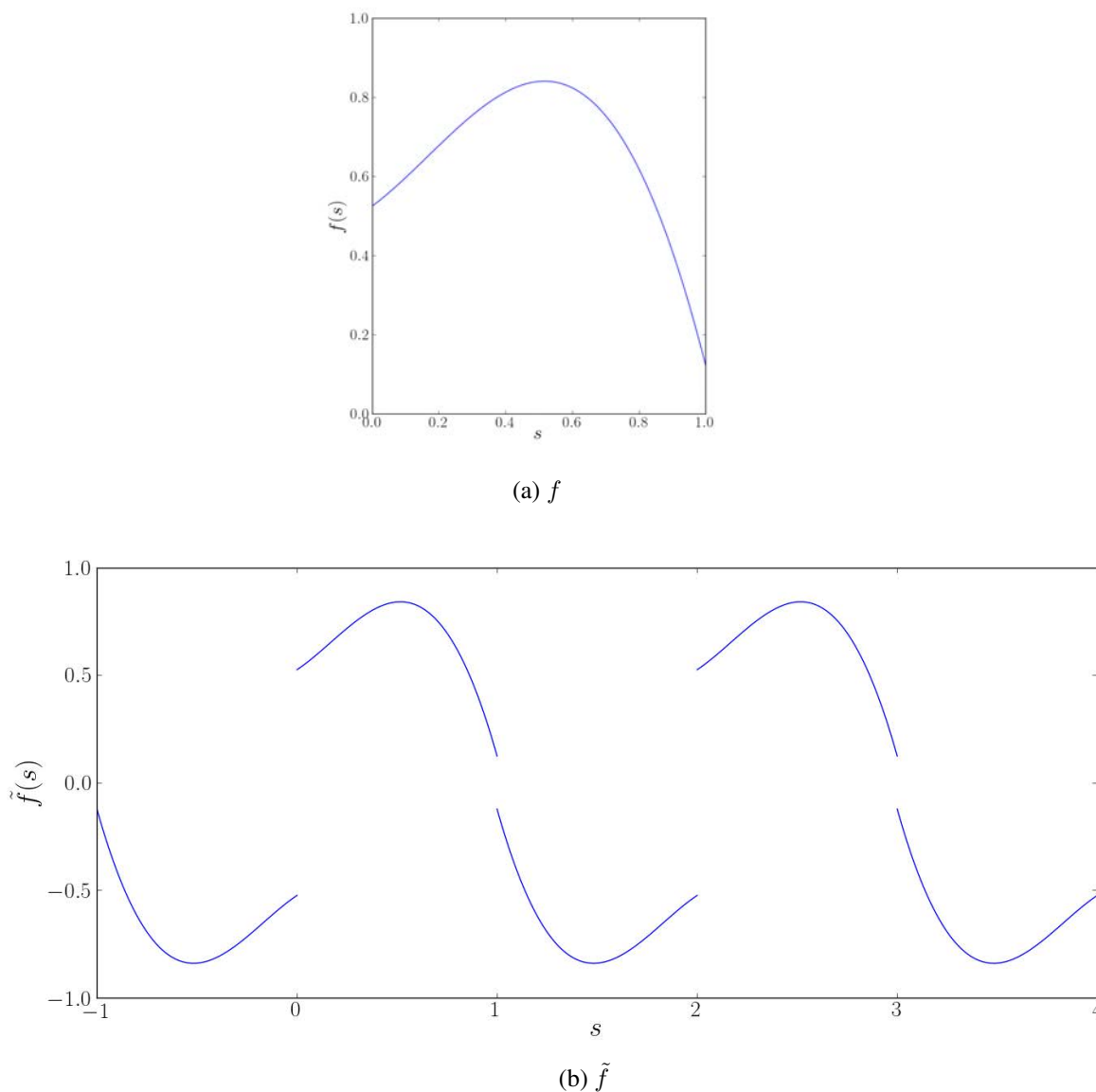


Figura 3.4: Ejemplo de \tilde{f} cuando el intervalo es $[0, 1]$.

Con esta nueva función, (3.15) puede escribirse como

$$u(x) = \int_{-\infty}^{\infty} ds \int_0^{\infty} dt w_x(s, t) \tilde{f}(s), \quad (3.17)$$

donde $w_x(s, t)$ es la distribución de posiciones, sobre todo \mathbb{R} , de movimientos brownianos en una dimensión con posición inicial x , ahora sin la condición de que se anule en los extremos del intervalo. Ahora, la expansión en series de Fourier de \tilde{f} debe ser de la forma

$$\tilde{f}(s) = \sum_{r=1}^{\infty} a_r \operatorname{sen} \left[\frac{r\pi}{x_2 - x_1} (s - x_1) \right] \quad (3.18)$$

La figura (3.5) muestra la aproximación por medio de series de Fourier a la función \tilde{f} mostrada en (3.4b).

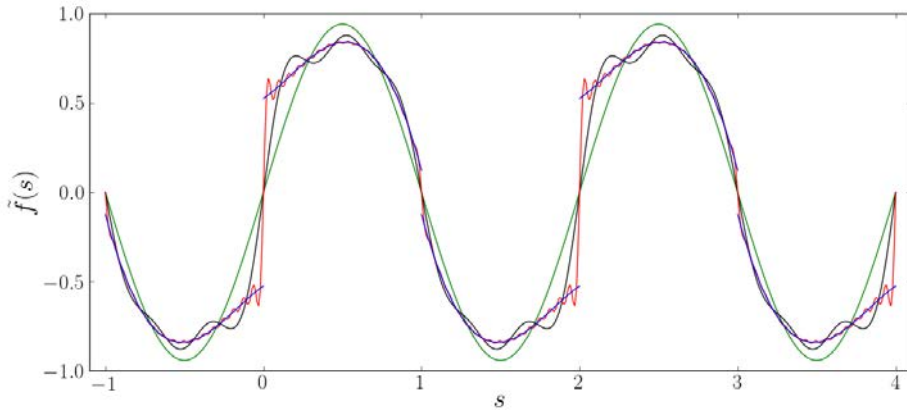


Figura 3.5: Aproximación a \tilde{f} usando series de Fourier.

Por consiguiente,

$$u(x) = \sum_{r=1}^{\infty} a_r \int_0^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} ds \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp \left[-\frac{(s-x)^2}{2t} \right] \operatorname{sen} \left[\frac{r\pi}{x_2 - x_1} (s - x_1) \right]$$

Usando el siguiente resultado

$$\int_{-\infty}^{\infty} ds \exp [-k(s-x)^2] \operatorname{sen} [c(s-w)] = \sqrt{\frac{\pi}{k}} \exp \left(-\frac{c^2}{4k} \right) \operatorname{sen} [c(x-w)], \quad (3.19)$$

se obtiene

$$u(x) = \sum_{r=1}^{\infty} a_r \int_0^{\infty} dt \exp \left[-\left(\frac{r\pi}{x_2 - x_1} \right)^2 \frac{t}{2} \right] \operatorname{sen} \left[\frac{r\pi}{x_2 - x_1} (x - x_1) \right]$$

$$u(x) = \sum_{r=1}^{\infty} 2a_r \left(\frac{x_2 - x_1}{r\pi} \right)^2 \operatorname{sen} \left[\frac{r\pi}{x_2 - x_1} (x - x_1) \right],$$

lo cual demuestra que (3.8) es efectivamente solución de la ecuación $-\frac{1}{2}\Delta u = f$, con condiciones de frontera $u(x_1) = u(x_2) = 0$.

La generalización del procedimiento anterior a un dominio cúbico en \mathbb{R}^n , $\Omega = \prod_{k=1}^n [x_{k,1}, x_{k,2}]$, no presenta muchas dificultades. Análogamente a la ecuación (3.17), $u(\bar{x}) = E_{\bar{x}} \left[\int_0^T dt f(X(t)) \right]$,

$\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, puede escribirse como

$$u(\bar{x}) = \int_{\mathbb{R}^n} d\bar{s} \int_0^\infty dt w_{\bar{x}}(\bar{s}, t) \tilde{f}(\bar{s}) \quad (3.20)$$

donde $\bar{s} = (s_1, s_2, \dots, s_n)$, $w_{\bar{x}}(\bar{s}, t)$ es la distribución de posiciones, sobre todo \mathbb{R}^n , de movimientos brownianos en n dimensiones con posición inicial \bar{x} , y $\tilde{f}(\bar{s})$ admite una representación en serie de Fourier de la siguiente forma

$$\tilde{f}(\bar{s}) = \sum_{m_1, m_2, \dots, m_n=1}^{\infty} a_{m_1, m_2, \dots, m_n} \prod_{k=1}^n \text{sen} \left[\frac{m_k \pi}{x_{k,2} - x_{k,1}} (s_k - x_{k,1}) \right] \quad (3.21)$$

Poniendo (3.21) en (3.20)

$$u(\bar{x}) = \sum_{m_1, \dots, m_n=1}^{\infty} a_{m_1, \dots, m_n} \int_0^\infty dt \int_{\mathbb{R}^n} d\bar{s} \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} \exp \left[-\frac{(\bar{s} - \bar{x})^2}{2t} \right] \prod_{k=1}^n \text{sen} [c_k (s_k - x_{k,1})]$$

donde $c_k = (m_k \pi)/(x_{k,2} - x_{k,1})$. Usando de nuevo el resultado (3.19) se concluye que

$$u(\bar{x}) = \sum_{m_1, \dots, m_n=1}^{\infty} a_{m_1, \dots, m_n} \int_0^\infty dt \exp \left[-\sum_{k=1}^n \frac{c_k^2 t}{2} \right] \prod_{k=1}^n \text{sen} [c_k (x_k - x_{k,1})]$$

$$u(\bar{x}) = \sum_{m_1, \dots, m_n=1}^{\infty} 2 \left(\frac{x_{k,2} - x_{k,1}}{m_k \pi} \right)^2 a_{m_1, \dots, m_n} \prod_{k=1}^n \text{sen} \left[\frac{m_k \pi}{x_{k,2} - x_{k,1}} (x_k - x_{k,1}) \right]$$

Esta es la expresión analítica a la que quería llegarse. Es fácil verificar que dicha expresión es solución a $-\frac{1}{2}\Delta u = f$, con condiciones de frontera $u(\bar{x})|_{\bar{x} \in \partial\Omega} = 0$.

Capítulo 4

Soluciones obtenidas con otros métodos

El presente capítulo contiene aproximaciones a soluciones del problema (1.1) utilizando el método de disparo y el de diferencias finitas, dos métodos en los que no están involucrada la integral sobre caminos. Estos métodos son más sencillos de implementar que el que se describirá en el capítulo siguiente, pero dicha facilidad sólo es aplicable en casos especiales. Las aproximaciones incluidas en este capítulo servirán como referencia para aquellas que se resultan del método mediante integrales de camino que se quiere implementar.

4.1 Método de disparo

En esta sección se implementa el método del disparo para obtener soluciones al problema (1.1) cuando el dominio es una bola en \mathbb{R}^n , $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n : r < R\}$ ($r := \|x\|_2 = (\sum x_i^2)^{1/2}$). En esta situación, puede esperarse que la solución al problema sea una función con simetría radial, i. e., $u(x) = u(r)$, con lo que el problema se transforma en la siguiente ecuación diferencial

$$u''(r) + \frac{n-1}{r}u'(r) = -u^p(r), \quad (4.1)$$

con condiciones de frontera $u(R) = 0$ y $u'(0) = 0$.

Definiendo $v = u'(r)$, esto puede escribirse como

$$\begin{cases} u' = v, \\ v' = -u^p(r) - \frac{n-1}{r}v(r) \\ u(R) = 0, v(0) = 0. \end{cases} \quad (4.2)$$

Esta ecuación puede resolverse usando el método de Euler, el cual fue el que se usó en este trabajo.

Estas últimas condiciones de frontera pueden cambiarse por las condiciones $u(R) = 0$ y $v(R) =$

α donde α es aquel valor que debe tener u' en $r = R$ de modo que $v(0) = 0$. En general, cualquier valor de α dará una solución a (4.2) que no necesariamente satisface $v(0) = 0$; sin embargo, para algún conjunto de valores de α dicha condición sí se satisfará y al hallar dicho conjunto se habrá obtenido una solución a (1.1). Ambas expresiones de la condiciones de frontera son equivalentes pero la última es apropiada para la aplicación del método de disparo. A continuación se muestran las aproximaciones numéricas obtenidas mediante este método. En el caso de una dimensión se muestran las funciones sobre el intervalo $[0, 1]$. En dimensiones 2 y 3 se presentan los valores de las aproximaciones a lo largo del radio. En cada caso se discretizó el radio en 150000 partes.

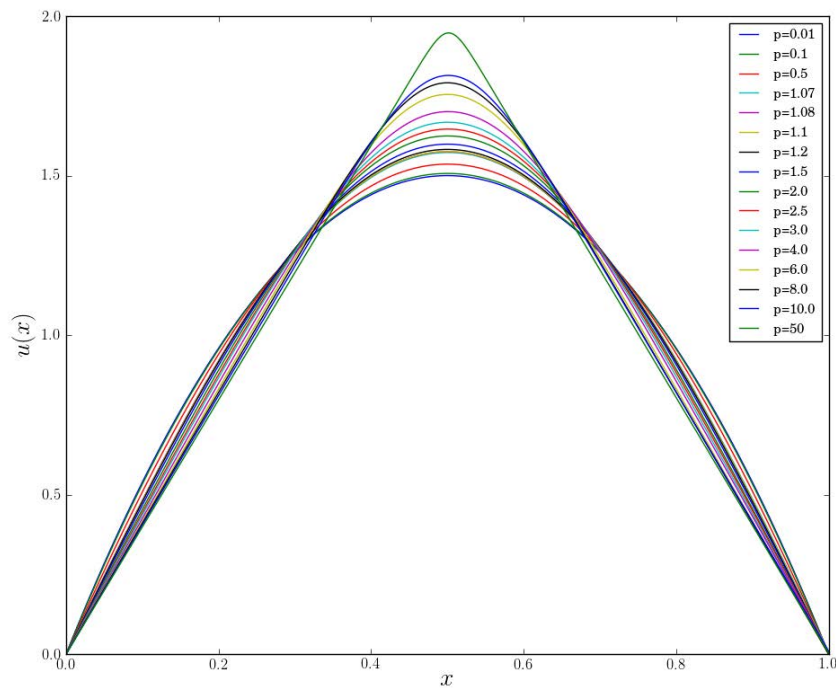


Figura 4.1: Soluciones $u(x)$ del problema en dimensión $d = 1$.

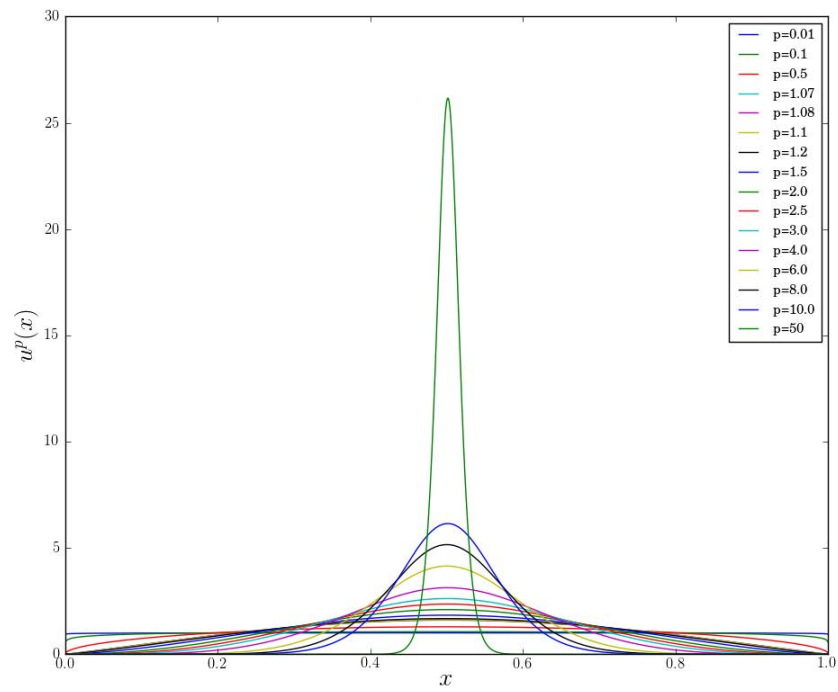


Figura 4.2: $u^p(x)$ en una dimensión.

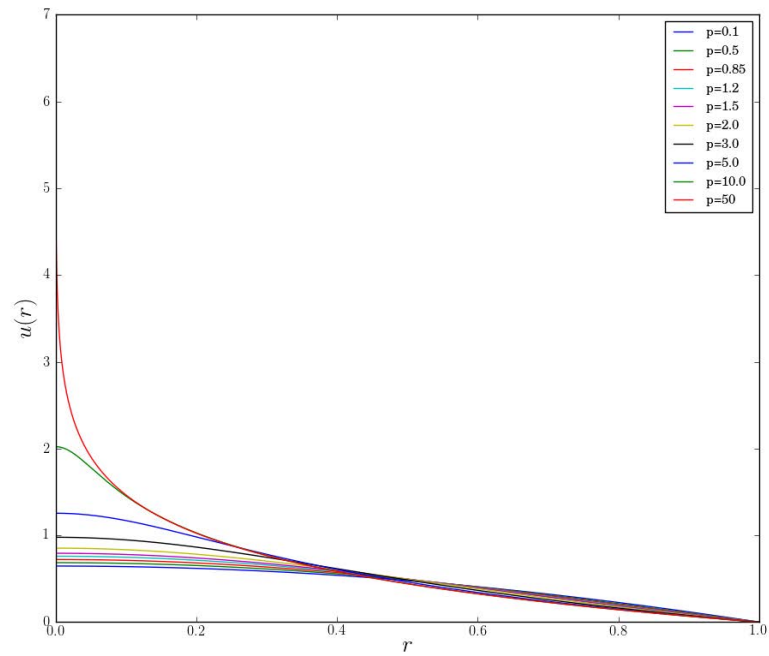
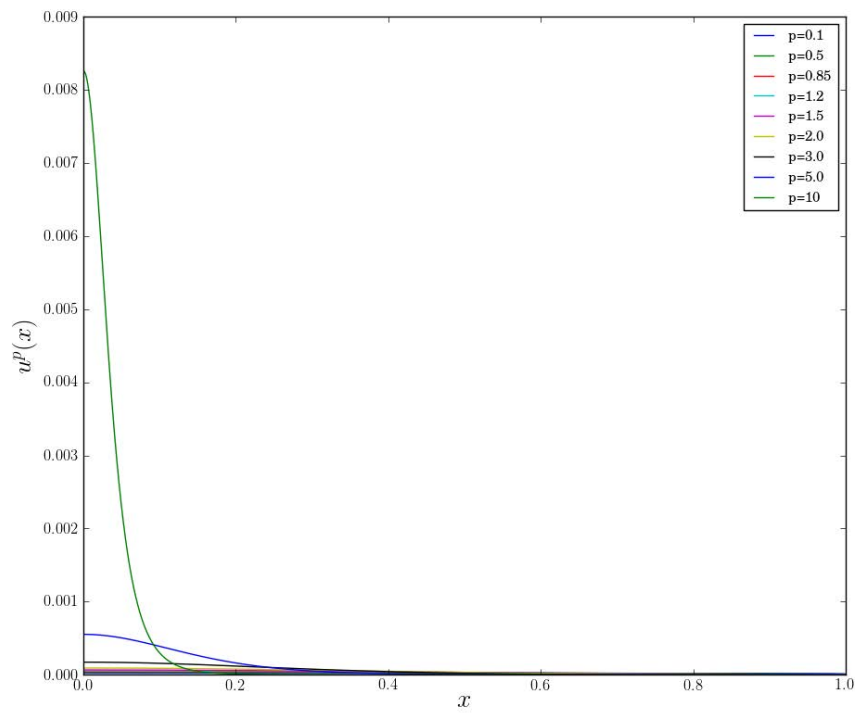
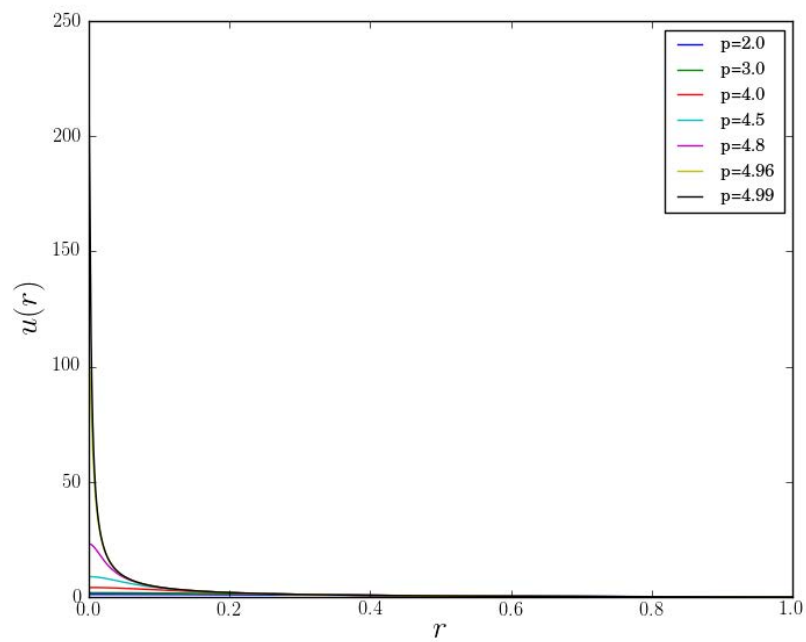


Figura 4.3: Soluciones $u(x)$ del problema en dos dimensiones.

Figura 4.4: $u^p(x)$ en dos dimensiones.Figura 4.5: Soluciones $u(x)$ del problema en tres dimensiones. Sólo se muestra la parte radial.

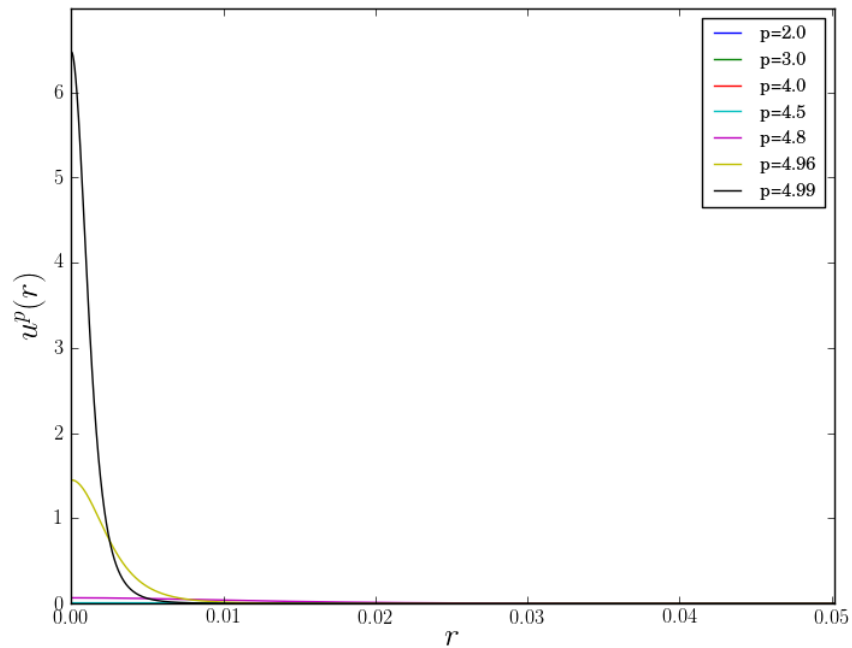


Figura 4.6: $u^p(x)$ en tres dimensiones. Sólo se muestra la parte radial.

4.2 Método de diferencias finitas

Otra manera de hallar numéricamente las soluciones a (4.1) consiste en representar las derivadas involucradas en diferencias finitas,

$$u''(r)|_{r=b} \approx \frac{u(b+h) - 2u(b) + u(b-h)}{h^2}.$$

Con este tipo de expresiones se obtiene un sistema de ecuaciones (no lineales en este caso), cuya solución puede obtenerse mediante métodos iterativos, como el método de Newton.

Las siguientes son gráficas de aproximaciones numéricas a (4.1) usando el método de diferencias finitas

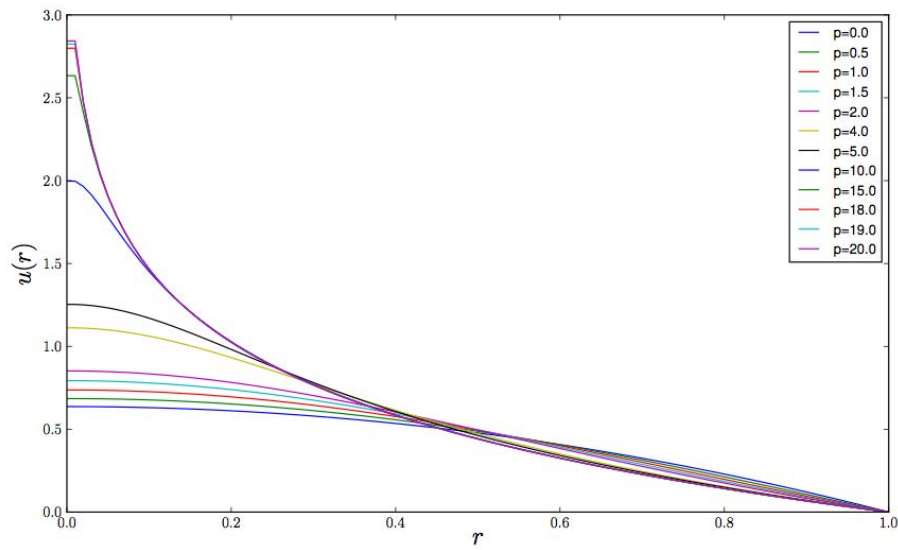


Figura 4.7: Soluciones $u(r)$ del problema en dos dimensiones. Las gráficas están normalizadas para que su integral sobre un disco sea igual a la unidad.

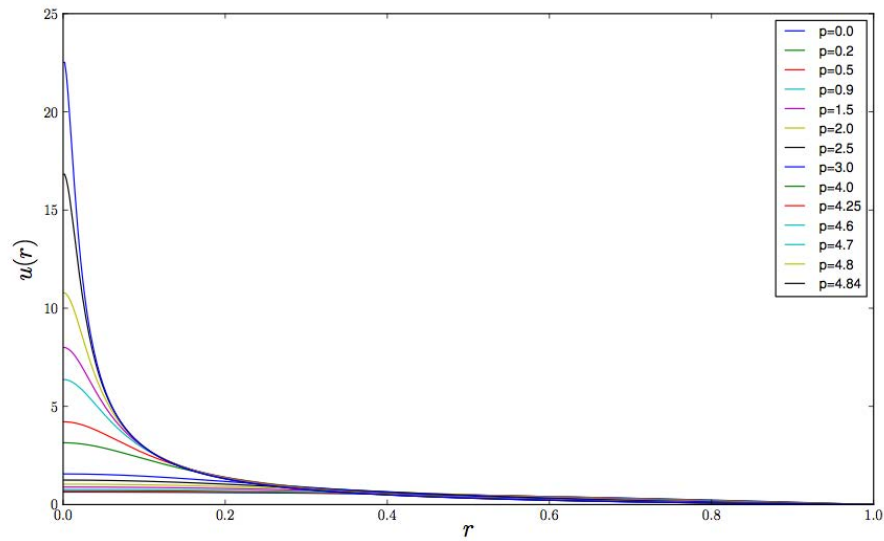


Figura 4.8: Soluciones $u(r)$ del problema en tres dimensiones.

Capítulo 5

Soluciones usando la fórmula de Feynman–Kac

Este capítulo describe el método mediante integrales de camino que se propone para resolver el problema (1.1). Más adelante se muestran los resultados obtenidos con él. En algunos casos se compara con lo obtenido en el capítulo anterior. Para dominios con simetría cilíndrica, la aproximación obtenida se ilustra con su sección transversal pues la solución se asume con la misma simetría.

5.1 Método mediante integrales de camino

La fórmula de Feynman–Kac (3.8) nos dice que la solución del problema $\Delta u = -2f$, $u(x) = 0$ $\forall x \in \partial\Omega$ está dada por

$$u(x) = E_x \left(\int_0^\tau f(X(t)) dt \right), \quad (5.1)$$

donde τ es el primer tiempo de encuentro de un movimiento browniano con la frontera y E_x indica que se toma el valor esperado de la integral $\int_0^\tau f(X(t)) dt$ con respecto a movimientos brownianos cuyo origen se encuentra en x .

Por lo tanto, si quiere encontrarse una solución al problema (1.1) entonces debe hallarse $u(x)$ ($u(x) > 0 \forall x \in \Omega \setminus \partial\Omega$) tal que

$$u(x) = E_x \left(\int_0^\tau \frac{1}{2} u^p(X(t)) dt \right). \quad (5.2)$$

Nótese que si se tiene la solución de (1.1) entonces también se tiene la solución de ese mismo problema con $\Delta u = -\alpha u^p$ ($\alpha > 0$) en lugar de la ecuación $\Delta u = -u^p$ ya que $u_\alpha = k u_1$ (donde $k^{p-1} = \alpha$ y u_1 es la solución de (1.1)) es una solución. Por consiguiente, en (1.1) podría cambiarse $\Delta u = -\alpha u^p$ por cualquiera de las ecuaciones $\Delta u = -\alpha u^p$ con $\alpha > 0$ y el análisis sería equivalente.

La ecuación (5.2) sugiere que la solución u puede encontrarse como un punto fijo de la iteración $u_n(x) \mapsto u_{n+1}(x) = E_x \left(\int_0^\tau \frac{1}{2} u_n^p(X(t)) dt \right)$. Esta iteración puede realizarse de manera aproximada utilizando métodos de Monte-Carlo. Esto puede proveer una conexión entre la solubilidad de (1.1) y los tiempos de salida de los movimientos brownianos que ocurren en el interior del dominio.

Este método utiliza las iteraciones descritas anteriormente para aproximar la solución al problema con exponente crítico de Sobolev.

En el apéndice B se incluye y comenta el código utilizado para implementar el método de Monte Carlo en la fórmula de Feynman-Kac. Lo que se hace en este código es discretizar el dominio del problema utilizando un retículo y en cada punto de este dominio se utiliza la fórmula de Feynman-Kac para aproximar el valor de la nueva función en ese punto. Para ello se efectúan varias repeticiones de trayectorias de caminantes aleatorios que se mueven sobre el retículo y que terminan cuando el caminante toca por primera vez la frontera. A cada una de estas trayectorias le es asociado un valor de acuerdo con la fórmula de Feynman-Kac. Al final suman estos valores, el cual corresponde al valor de la nueva aproximación.

El lenguaje de programación utilizado para escribir este código es CUDA-C, el cual está diseñado para realizar cómputo en paralelo. Esto es apropiado para este método porque en cada iteración se realizan las mismas operaciones de modo independiente para diferentes puntos del dominio.

Las imágenes en las figuras (5.1) y (5.2) muestran las iteraciones que se realizaron para obtener la solución al problema en dimensión 1 sobre el intervalo $[0, 1]$ para los casos $p = 3$ y $p = 6$. La línea sólida roja que se muestra en las figuras es la aproximación obtenida mediante el método del disparo correspondiente a cada caso. En estos dos ejemplos, el tamaño de paso del caminante fue $h = 0.0005$ mientras que los puntos del intervalo en los que se evaluó la función en cada iteración están separados por 0.005, de manera que en el intervalo hay 200 puntos considerados. El número de caminantes que comenzaron en cada uno de estos puntos fue 9000. El tiempo que tomaba cada iteración era del orden de 1 hora.

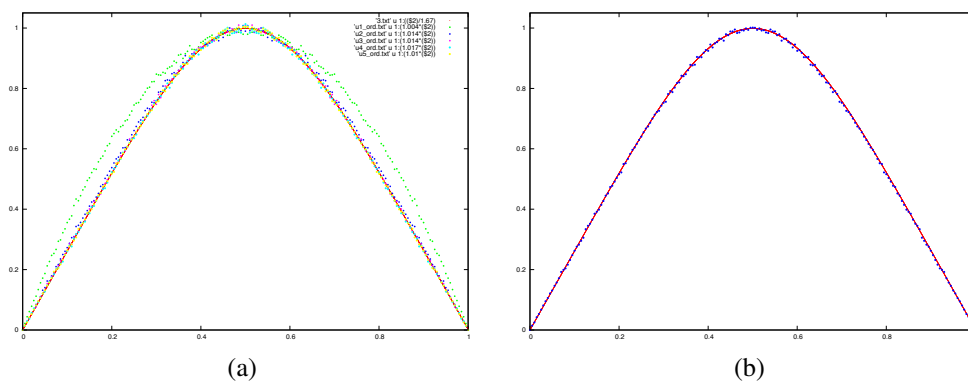


Figura 5.1: Aproximación de $u(x)$ en una dimensión cuando $p = 3$, usando el método de Monte-Carlo. En (5.1a) se muestran cinco iteraciones partiendo de la función uniforme. En (5.1b) se compara únicamente la función resultante de la última iteración con la obtenida por el método de disparo.

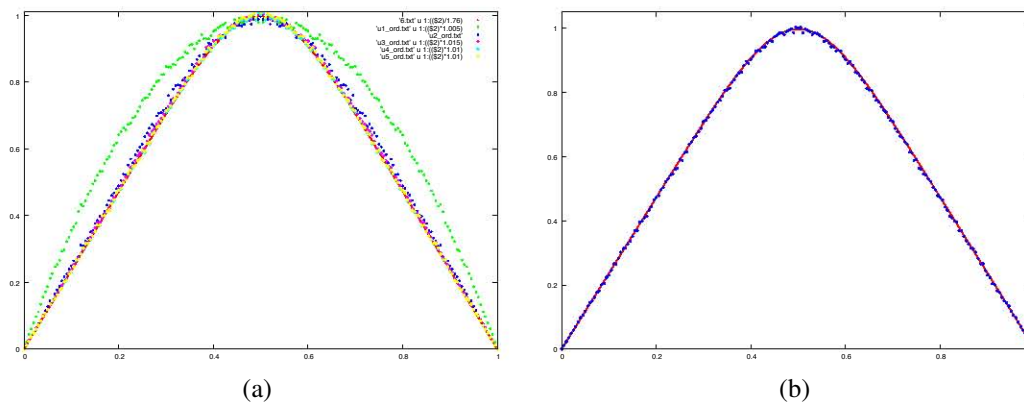


Figura 5.2: Aproximación de $u(x)$ en una dimensión cuando $p = 6$, usando el método de Monte-Carlo. En la figura (5.2a) se muestran cinco iteraciones partiendo de la función uniforme. En (5.2b) se compara la función resultante de la última iteración con la obtenida por el método de disparo.

5.2 Iteraciones para soluciones radiales en la esfera.

Ahora se muestran las aproximaciones a las soluciones radiales en una esfera (tres dimensiones) en los casos $p = 0$, $p = 2$ y $p = 3$, y obtenidas con el método mediante integrales de camino que se describió en la sección anterior.

La figura (5.3) muestra la aproximación a la solución radial del problema cuando $p = 0$. En este caso no es necesario hacer más de una iteración ya que elevar a la 0 resulta siempre en una distribución uniforme. La solución analítica del problema es la función $u(r) = \frac{1}{4}(1 - r^2)$.

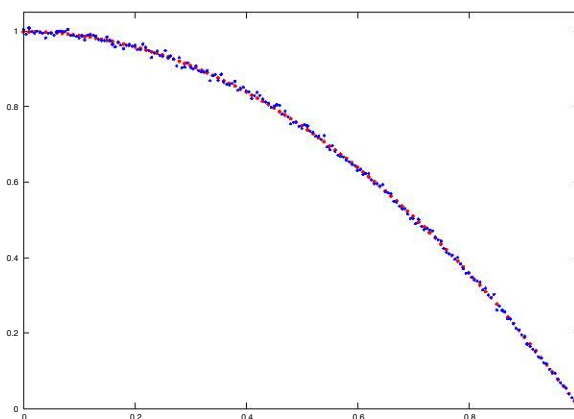


Figura 5.3: Aproximación a la solución usando la fórmula de Feynman-Kac mediante el método Monte-Carlo cuando $p = 0$. La línea roja sólida es la función $1 - r^2$.

Las figuras (5.4) y (5.5) presentan las iteraciones para los casos $p = 2$ y $p = 3$. En el primer caso se realizaron ocho iteraciones y en el segundo, diez iteraciones. En ambos casos se inició con una función uniforme como aproximación inicial. La línea sólida roja es la función obtenida mediante el

método del disparo.

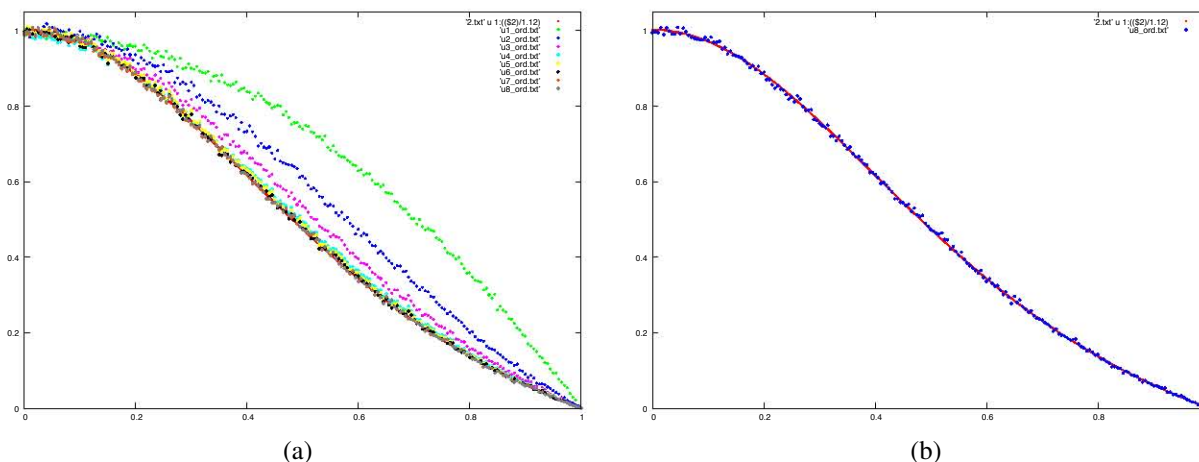


Figura 5.4: Aproximación de la solución radial $u(r)$ en tres dimensiones cuando $p = 2$ y el dominio es una esfera, usando el método de Monte-Carlo. En la figura (5.4a) se muestran ocho iteraciones partiendo de la función uniforme. En (5.4b) se compara la función resultante de la última iteración con la obtenido por el método de disparo.

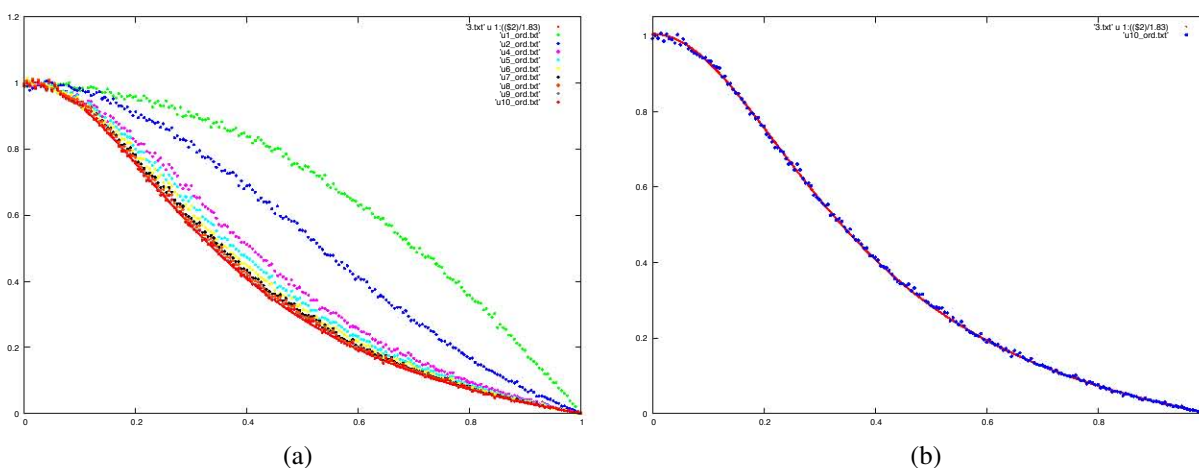


Figura 5.5: Aproximación de $u(x)$ en tres dimensiones cuando $p = 3$ y el dominio es una esfera, usando el método de Monte-Carlo. En la figura (5.5a) se muestran ocho iteraciones partiendo de la función uniforme. En (5.5b) se compara la función resultante de la última iteración con la obtenido por el método de disparo.

5.3 Iteraciones para dominios con simetría cilíndrica en tres dimensiones

Los dominios que se consideran a continuación tienen dimensión tres y poseen una simetría cilíndrica. A las funciones resultantes de las iteraciones se les impone una simetría igual a la del dominio. Por este motivo, en las figuras que incluyen las iteraciones se muestra sólo una sección

transversal que incluye al eje de simetría. Los colores en las figuras corresponden a la escala de valores de la función. Todas las iteraciones corresponden a un valor del exponente p igual a 5 (el valor del exponente crítico).

A modo de ilustración, la figura siguiente (5.6) contiene algunos ejemplos de dominios utilizados en esta sección.

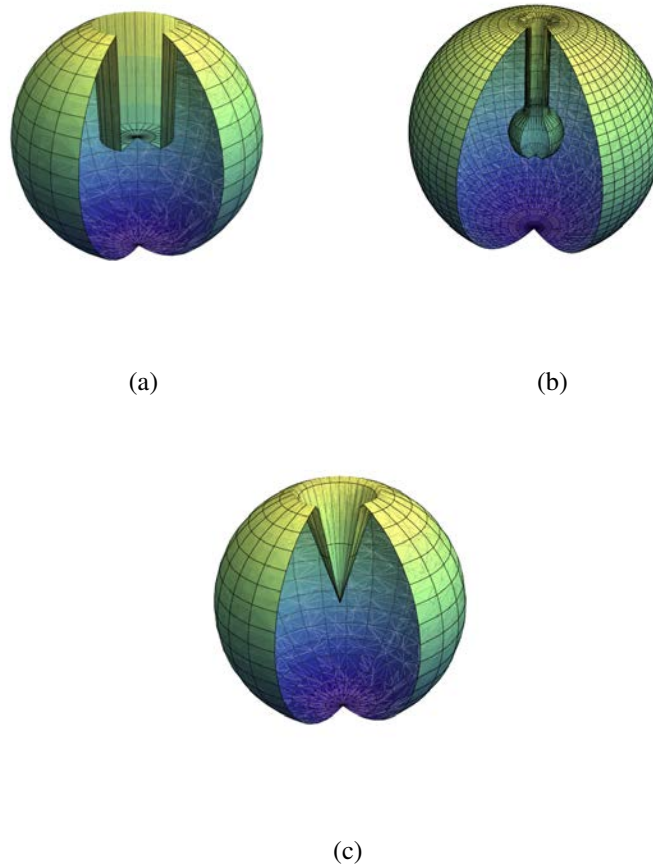


Figura 5.6: Fronteras de algunos dominios considerados. (a) corresponde a una esfera a la que se le ha removido una sección de un cilindro. (b) es una esfera a la que se le ha quitado una sección cilíndrica así como una esfera más pequeña en el centro. (c) es una esfera a la cual se le ha removido una sección de un cono circular.

El dominio considerado en la figura (5.7) es el de una esfera unitaria a la que se le ha quitado una sección cilíndrica, similar al dominio que se ve en (5.6a). El cilindro removido tiene un radio de 0.1. Se muestran los resultados de las primeras cinco iteraciones. En esta secuencia, la aproximación inicial u_0 es una función uniforme, i. e., con el mismo valor en todos los puntos del dominio. Aunque no se incluyen más de estas iteraciones, la tendencia es a concentrarse (explotar) en un punto del dominio que se halla sobre el eje de simetría.

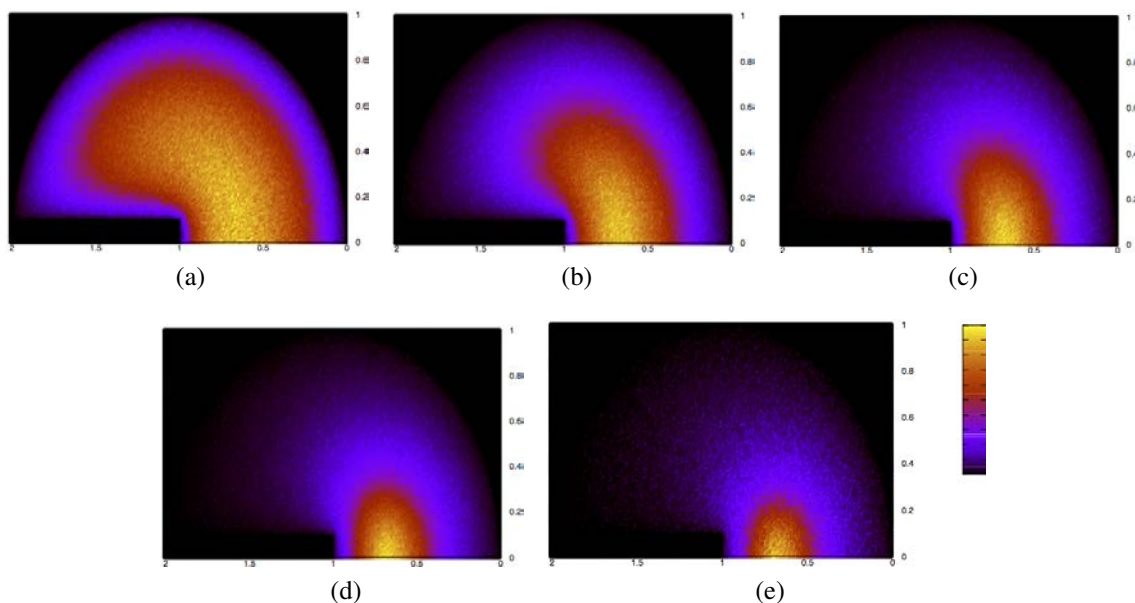


Figura 5.7: Iteraciones en el caso en que el dominio es una esfera unitaria a la cual se le ha removido una sección cilíndrica que inicia en el centro. La aproximación inicial es una función uniforme.

La figura (5.8) muestra las iteraciones obtenidas para un dominio parecido al de la figura (5.7). El cambio con respecto al caso anterior es que ahora la sección cilíndrica removida es más larga (1.45 en lugar de 1). Aquí la aproximación inicial fue también uniforme. A diferencia del caso anterior, las iteraciones no tienden a concentrarse en un solo punto del dominio. En este caso, el valor máximo de la aproximación parece localizarse sobre un aro.

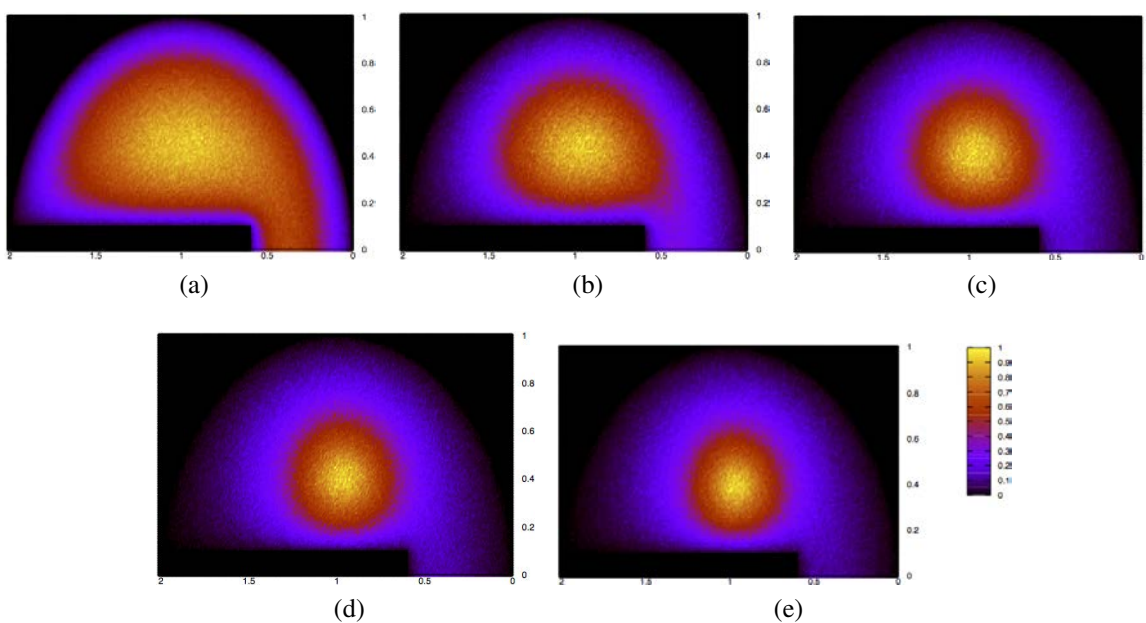


Figura 5.8: Iteraciones para un dominio similar al de la figura anterior. La sección cilíndrica removida es más larga.

5.3. ITERACIONES PARA DOMINIOS CON SIMETRÍA CILÍNDRICA EN TRES DIMENSIONES33

Los dominios en las siguientes dos figuras, (5.9) y (5.10), tienen la particularidad de que se les ha removido una esfera centrada en el origen además de la sección cilíndrica. Los dos dominios tienen la forma que se observa en (5.6b). La esfera removida en ambos casos tiene un radio de 0.21. La diferencia se encuentra en el radio de la sección del cilindro circular que se ha quitado. En la figura (5.9) el radio de esta sección es 0.06 mientras que en (5.10) el radio es 0.027. La aproximación inicial es de nuevo uniforme. Aquí, las figuras indican que las iteraciones tienden a concentrarse en un punto del dominio. Estos dominios se escogieron porque en estos casos existe una solución no trivial. Sin embargo, una condición inicial uniforme parece no ser apropiada para llegar a esa solución.

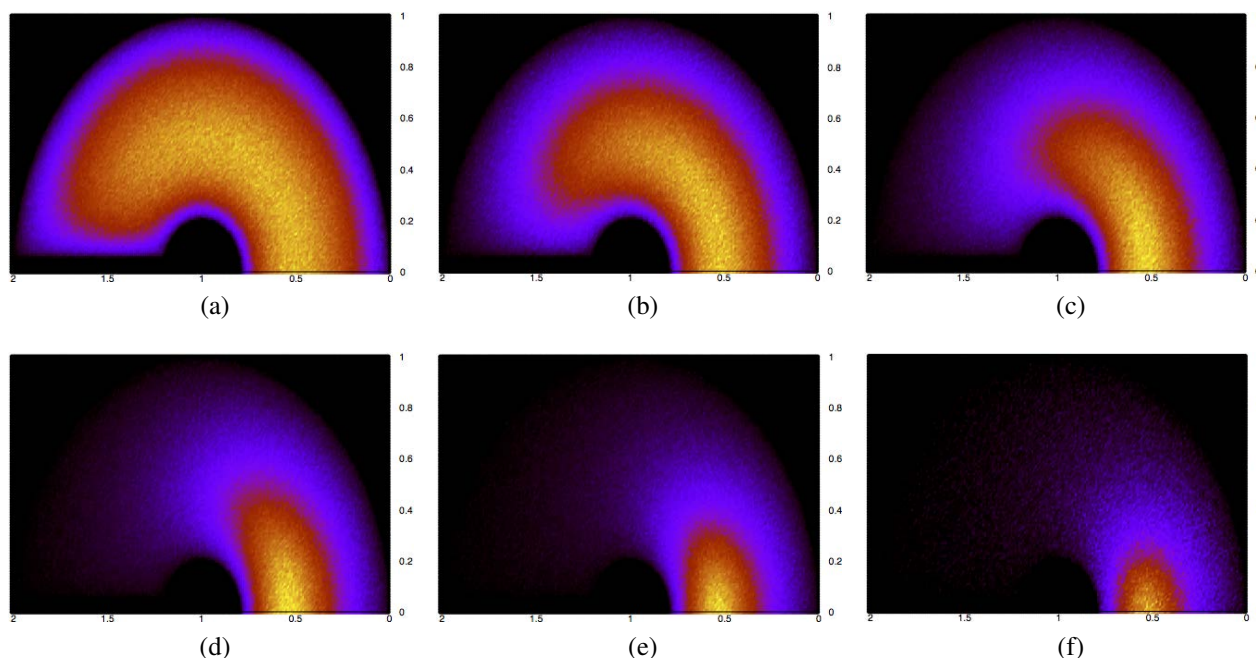


Figura 5.9: Iteraciones correspondientes a un dominio que consiste en una esfera unitaria a la que se le ha quitado una sección cilíndrica de radio 0.06 y una esfera centrada en el origen con radio 0.21. La aproximación inicial es uniforme.

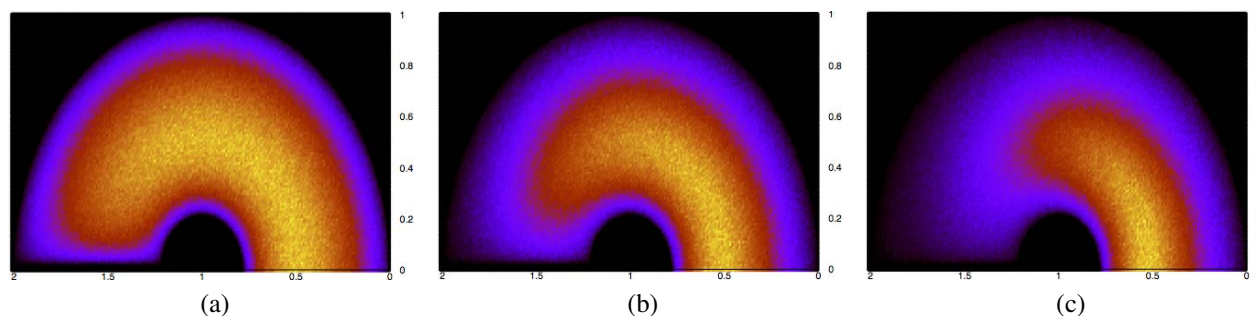


Figura 5.10: Iteraciones para un dominio similar al anterior. Ahora el radio de la sección cilíndrica es 0.027. Las iteraciones parten de una función uniforme.

La figura (5.11) muestra las iteraciones para el mismo dominio de la figura (5.10) pero ahora la función inicial no es uniforme. Como primera aproximación se tomó la función que vale 1 para aquellos puntos del dominio donde $z \leq -0.45$ (z es el eje de simetría del dominio) y 0 para los demás puntos. Las últimas tres iteraciones (figuras (5.11d), (5.11e), (5.11f)) son muy similares entre sí, lo cual indica que se ha llegado a un punto fijo de la iteración. Este punto fijo de las iteraciones es la aproximación a la solución no trivial que debe existir en este caso. Como se ve de la figura, esta serie de iteraciones no tiene una tendencia a explotar como en los casos anteriores.

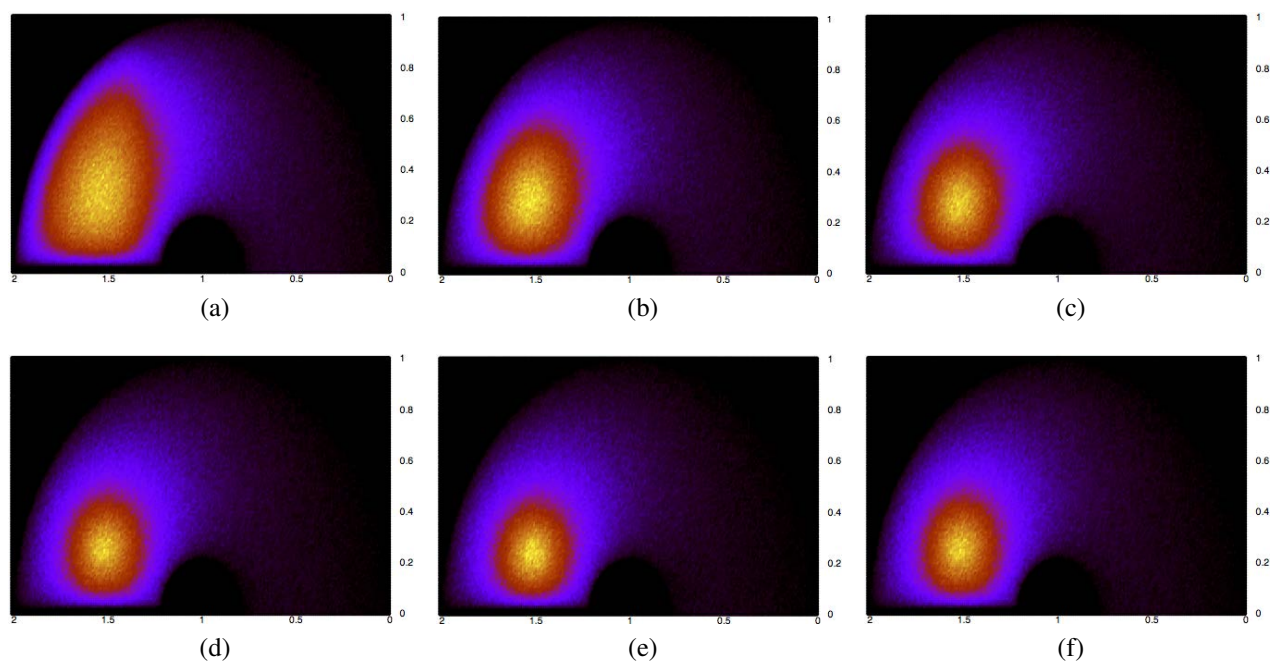


Figura 5.11: Iteraciones para un dominio idéntico al de la figura (5.10) pero con una aproximación inicial no uniforme.

El dominio en la figura (5.12) es una esfera unitaria a la cual se le ha quitado una parte de un cono con vértice a una distancia 0.4 del origen de la esfera. El cono tiene una pendiente de 0.3. Este dominio tiene la forma del que aparece en (5.6c). La función inicial es uniforme. Como era de esperarse, no hay convergencia en las iteraciones (porque el dominio tiene forma estrella), las cuales tienden a concentrarse en un punto del dominio. Con este ejemplo se ve que las iteraciones no se concentran en el punto más alejado de la frontera, como podría sugerirse por los casos anteriores.

La figura (5.13) muestra el caso en que a la esfera unitaria sólo se le ha quitado otra esfera más pequeña de radio 0.07 y centrada a 0.2 del centro. En este ejemplo, la condición inicial es 0 para todos los puntos excepto para aquellos cuya proyección sobre el eje de simetría se encuentra a una distancia 0.2 del origen, i. e., ‘sobre’ el centro de la esfera removida; en estos últimos puntos el valor de la aproximación inicial es 1.

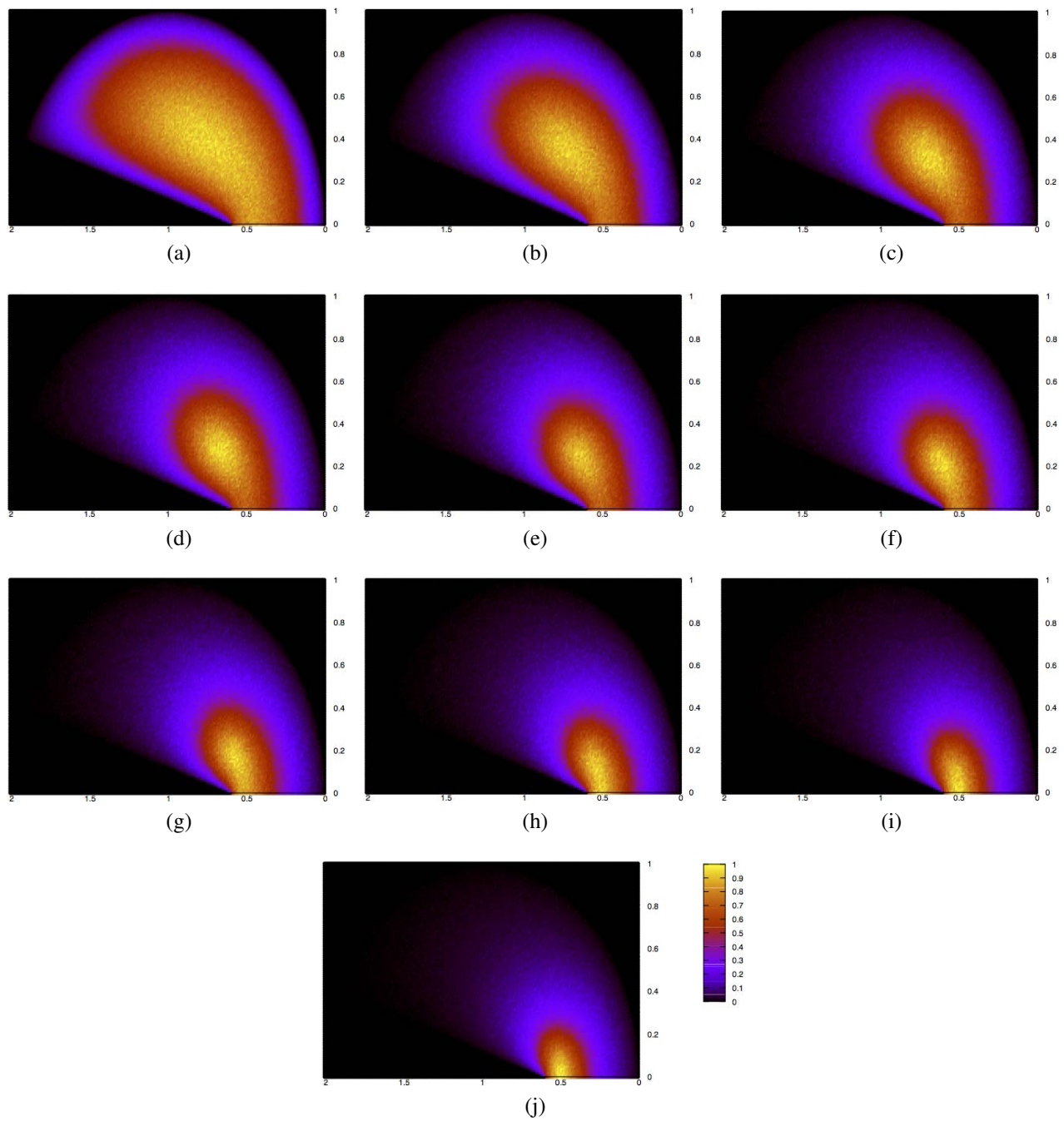


Figura 5.12: El dominio en estas iteraciones es una esfera unitaria a la que se le ha quitado un cono centrado a una distancia 0.4 del origen.

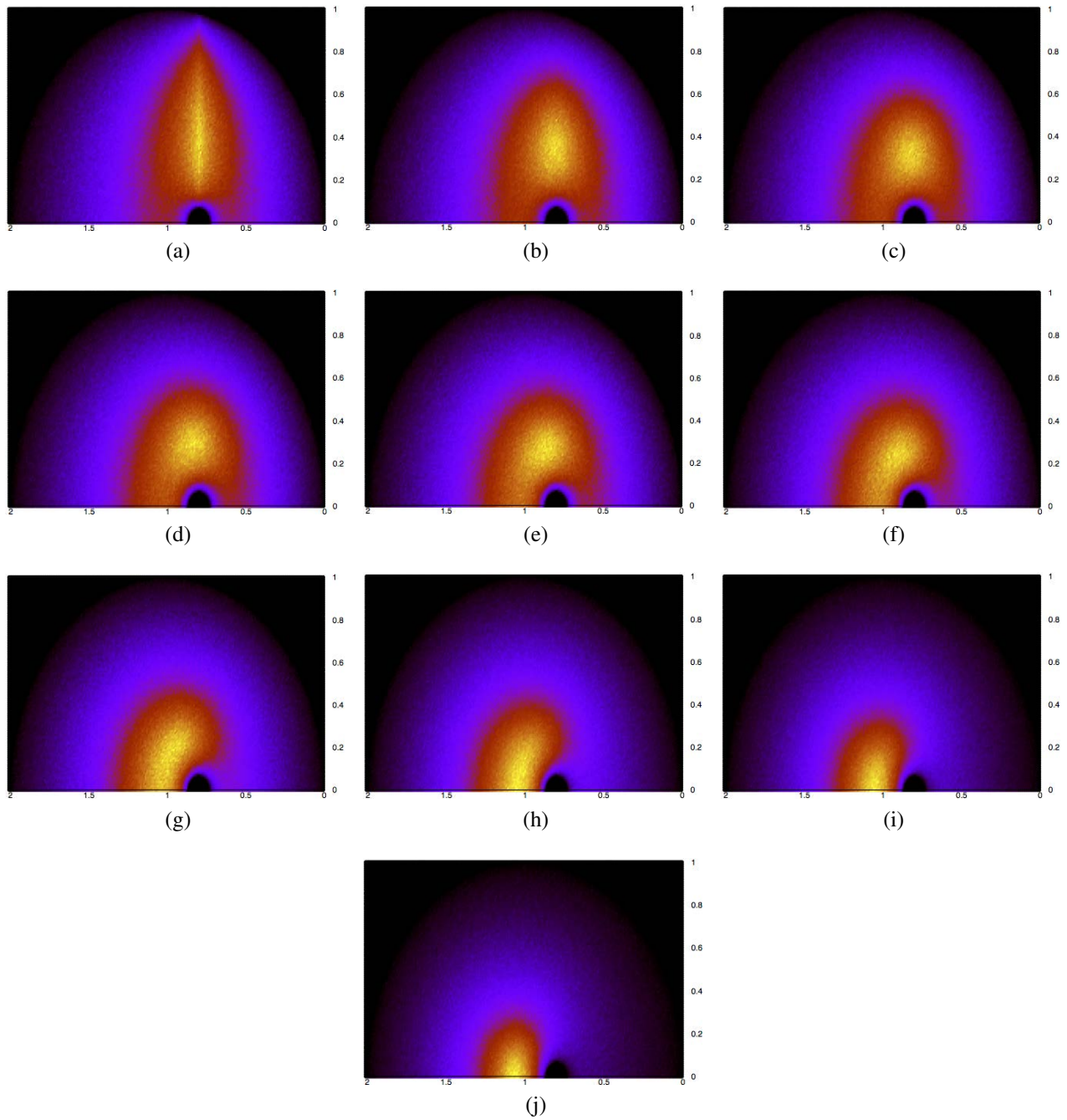


Figura 5.13: Iteraciones en una esfera unitaria a la que le fue removida otra de radio 0.07 con un centro a 0.2 del origen.

5.3. ITERACIONES PARA DOMINIOS CON SIMETRÍA CILÍNDRICA EN TRES DIMENSIONES 37

La figura (5.14) ilustra el caso en que el dominio es contraíble y existe más de una solución no trivial para $p = 5.0$. En este ejemplo, el dominio es una esfera menos una sección cilíndrica y dos esferas disjuntas centradas en puntos del eje de simetría.

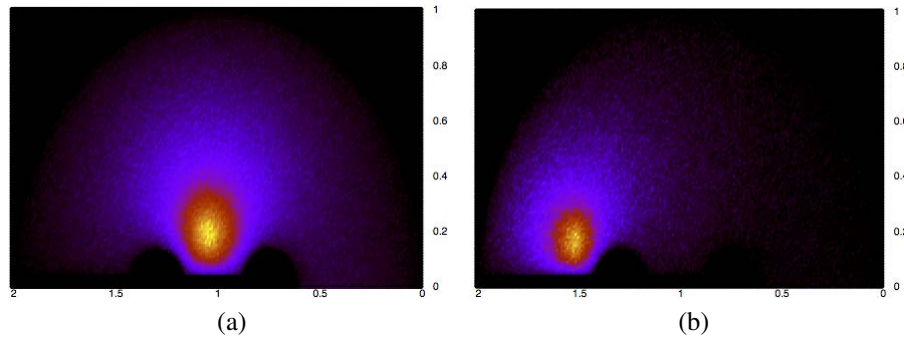


Figura 5.14: Aproximaciones de soluciones para un dominio con topología trivial en el que existen al menos dos soluciones no triviales cuando $p = 5.0$. Las figuras muestran aproximaciones a soluciones distintas.

En todos los ejemplos mostrados en esta subsección, el tamaño de paso del caminante aleatorio fue $h = 0.001$. Las funciones resultantes de cada iteración se evaluaban en los puntos de un retículo con 0.01 de separación, i. e., en una malla 10 veces menos fina que aquella en la que se movían los caminantes. El número de caminantes que se consideró en cada punto del dominio fue 1400. La forma de determinar si se había llegado a un punto fijo de la iteración era la siguiente: en cada punto del dominio se tomaba el valor absoluto de la diferencia entre dos iteraciones consecutivas y se integraban estos valores sobre todo el dominio. Si esta integral era menor a 0.04 veces el volumen de la última iteración entonces se consideraba que se había llegado a un punto fijo.

Capítulo 6

Conclusiones

En este trabajo se ha presentado cómo implementar un método de iteraciones a partir de la fórmula de Feynman–Kac para aproximar la solución a la ecuación con exponente crítico de Sobolev. Los ejemplos en los que se ha aplicado tienen un dominio con dimensión 3 o menor.

El uso de plataformas para cómputo en paralelo, como CUDA, es apto para este tipo de implementaciones. El tiempo de ejecución del programa no depende de qué tan refinada se quiera la malla para aproximar la solución. Lo único que ha limitado la precisión espacial en estas iteraciones fue el máximo número de tareas (hilos) que el GPU puede procesar de manera simultánea.

El método presentado en este trabajo puede usarse para estudiar cuándo una iteración converge a partir de las propiedades del dominio expresadas en términos de los tiempos de salida de los movimientos brownianos. Sin embargo, este método, del modo presentado en este trabajo, no siempre converge a una solución aún cuando ésta existe. Por lo tanto, sería interesante encontrar una forma similar de resolver este problema que permita transformar todas las soluciones en puntos de convergencia (estabilidad). De otro modo, sólo podrían proporcionarse condiciones suficientes para la existencia de soluciones a dicho problema.

Los ejemplos anteriores sugieren que dichas iteraciones no son útiles cuando el dominio está perforado por hoyos pequeños (véase figura (5.13)), por lo que quizás no sea posible dar condiciones en estos casos. Por otra parte, en los casos en que la geometría del dominio determina fuertemente la existencia de la solución, sí se han hallado puntos fijos. Bajo esta perspectiva, el método parece más apropiado para estudiar la influencia de la geometría del dominio en la existencia de soluciones y no tanto la de su topología.

El método iterativo presentado en esta tesis podría mejorarse empleando métodos de optimización para simulaciones tipo Monte Carlo, como el método de reducción de varianza. También podría buscarse una manera más precisa de realizar la integral sobre la trayectoria de cada caminante.

Apéndice A

Elementos de CUDA

CUDA-C es un lenguaje de programación creado por NVIDIA que permite manejar fácilmente los elementos de un procesador gráfico (GPU) para realizar programación en paralelo.

En este lenguaje, se diferencia al GPU y a su memoria (llamándolos *receptor*¹) del GPU y su memoria (denominándolos por *dispositivo*²). La palabra `__global__` es usada para definir un *kernel*. El *kernel* es una función o tarea que se ejecuta de modo paralelo en los diferentes hilos de la tarjeta y es llamada desde el receptor (CPU). Esta tarea es compilada por la tarjeta gráfica. Cuando un kernel es llamado desde el receptor, se incluyen unos parámetros dentro de unos paréntesis angulares (`<<<<, >>>>`). Con estos parámetros se indican el número de bloques y el de hilos en cada bloque con los que se ejecutarán las instrucciones en el kernel.

El lenguaje de CUDA-C tiene variables intrínsecas que se refieren a los bloques e hilos en lo que se ejecutan las tareas en paralelo. Una de estas variables es `blockIdx.x` la cual se refiere al índice del bloque que realiza la operación. De manera similar, `threadIdx.x` alude al índice del hilo.

El *dispositivo* y el *receptor* tienen memorias diferentes. Entre las instrucciones más comunes para administrar la memoria del dispositivo están `cudaMalloc()`, `cudaFree()` y `cudaMemcpy()`, cuyas equivalentes en C son `malloc()`, `free()` y `memcpy()`. Las primeras dos sirven para asignar y liberar espacio en la memoria de la tarjeta, respectivamente. La última instrucción (`cudaMemcpy()`) se usa para copiar valores de una variable a otra cuando una de dichas variables está definida en la memoria de la tarjeta.

¹*host* en inglés.

²*device* en inglés.

Apéndice B

Código para realizar una iteración en tres dimensiones.

Con el código siguiente se llevaron a cabo las iteraciones para aproximar la solución al problema (1.1) cuando el dominio es de dimensión tres. Este mismo código con algunas modificaciones menores puede utilizarse en un dominio de diferente dimensión.

Para realizar la iteración se requiere, además de este código, un archivo que posea información de la función obtenida en la iteración anterior o de aquella que se toma como aproximación inicial si se va a realizar la primera iteración. En este código, por ejemplo, se requiere de un archivo que tenga 20301 ($=201 \times 101$) números correspondientes a los distintos puntos del dominio en los que la función se evalúa.

Listing B.1: Código para las iteraciones

```
1  #include <stdio.h>
2  #include <stdlib.h>
3  #include <math.h>
4  #include <cuda.h>
5  #include <curand_kernel.h>
6  // NB es el número de bloques y NT el número de hilos en cada bloque.
7  #define NB 201
8  #define NT 101
9  // h es el tamaño de paso a lo largo de cada coordenada del caminante.
10 #define h 0.001f
11
12 // curandState es un tipo de variable similar a la semilla de rand()
    para C. Las tres funciones 'setup_kernel' sirven para definir esta
    semilla. Con estas semillas se obtienen los números aleatorios que
    se usan para los pasos en las tres coordenadas del caminante.
```

```

13 __global__ void setup_kernel1(curandState *state1)
14 {
15     int id = threadIdx.x + blockIdx.x * NT;
16     curand_init(1233, id, 0, &state1[id]);
17 }
18
19 __global__ void setup_kernel2(curandState *state2)
20 {
21     int id = threadIdx.x + blockIdx.x * NT;
22     curand_init(1234, id, 0, &state2[id]);
23 }
24
25 __global__ void setup_kernel3(curandState *state3)
26 {
27     int id = threadIdx.x + blockIdx.x * NT;
28     curand_init(1235, id, 0, &state3[id]);
29 }
30
31 // La función siguiente, TrW, es aquella que utiliza los datos de la
    iteración anterior (archivo 'devu') y las semillas (state1, state2,
    state3) para generar una trayectoria de caminante aleatorio. Los
    puntos iniciales de la trayectoria dependen del hilo con el que se
    ejecuta la tarea. Además, la función elabora la integral en la
    fórmula de Feynman-Kac sobre esa trayectoria.
32 __global__ void TrW(float *devu, curandState *state1, curandState *state2, curandState *
    state3, float *result, float* RevT)
33 {
34     // ipx, ipy, ipz son las posiciones iniciales del caminante.
35     //px, py, pz son las coordenadas de la trayectoria del caminante.
36     float ipx, ipy, ipz, px, py, pz;
37     // stx, sty, stz determinan la dirección de los pasos del caminante
        en las direcciones x, y y z. Este signo dependerá de una variable
        aleatoria.
38     float stx, sty, stz;
39     // lp es la distancia del caminante al origen, rho es la distancia
        al eje de simetría del dominio.
40     float lp, rho, trm, psum;
41
42     int id = threadIdx.x + blockIdx.x * NT;

```

42 APÉNDICE B. CÓDIGO PARA REALIZAR UNA ITERACIÓN EN TRES DIMENSIONES.

```
43     int i;
44
45     if (id < NB*NT)
46     {
47         curandState localState1 = state1[id]; curandState localState2 = state2[id]; curandState
            localState3 = state3[id];
48
49         // A cada hilo se le asigna una posición inicial.
50         ipx = threadIdx.x * 0.01f; ipy = 0.5f + blockIdx.x * 0.01f; ipz = 0.0f;
51         px = ipx; py = ipy; pz = ipz;
52         // psum es una suma parcial proporcional a la integral sobre
            trayectoria que aparece en la fórmula de Feynman-Kac.
53         psum = 0;
54         // En esta parte, la función TrW genera una trayectoria para
            cada caminante en cada hilo. La trayectoria no puede tener
            más de 2200000 pasos. En cada paso se suma un término a psum.
55         for(i = 0; i < 2200000; i++)
56         {
57             lp = sqrt(pow(px,2) + pow(py,2) + pow(pz,2));
58             rho = sqrt(pow(px,2)+pow(pz,2));
59             // trm es el valor de la iteración anterior (cuyos datos
                están en 'devu') en el punto donde se halla el caminante.
60             trm = devu[ 101 * (int)(( py + 1.0049f)/0.01f ) + (int)(( sqrt(pow(px,2) + pow(pz
                ,2) + 0.0049f ) / 0.01f )];
61             psum += trm;
62             // Las siguientes sentencias del tipo 'if' indican cuándo se
                termina la trayectoria, i. e., cuándo la trayectoria
                toca la frontera del dominio.
63             if (lp >= 1.0f)
64             {
65                 break;
66             }
67
68             if ( sqrt( pow(px,2) + pow(pz,2) + pow((py + 0.25f), 2) ) <= 0.14f )
69             {
70                 break;
71             }
72
73             stx = 2.0f*round(curand_uniform(&localState1)) - 1.0f; sty = 2.0f*round(
```

```

    curand_uniform(&localState2)) - 1.0f; stz = 2.0f*round(curand_uniform(&
    localState3)) - 1.0f;
74     px += h*stx; py += h*sty; pz += h*stz;
75
76     __syncthreads();
77
78     }
79
80     result[id] += psum;
81
82     if(blockIdx.x == 0)
83     {
84         RevT[id] = psum;
85     }
86
87     state1[id] = localState1; state2[id] = localState2; state3[id] = localState3;
88
89     __syncthreads();
90 }
91 }
92
93 // Las instrucciones siguientes se ejecutan en el CPU.
94 int main(void)
95 {
96     int i, j, NW;
97     FILE * fu0;
98     curandState *devStates1, *devStates2, *devStates3;
99     float *devu, *devResults, *hostResults, *RevT, *Rev;
100    float u[201*101];
101
102    // devu es un arreglo donde se guardan los valores de la función
103    // resultante de la iteración anterior o la función que desea tomarse
104    // como aproximación inicial. Los valores se toman del archivo fu0.
105    cudaMalloc( (void **)&devu, 201 * 101 * sizeof(float) );
106    fu0 = fopen("u0.txt", "r");
107    // Se leen los valores de fu0 y se guardan en u.
108    i = 0;
109    while(!feof(fu0))
110    {

```

44 APÉNDICE B. CÓDIGO PARA REALIZAR UNA ITERACIÓN EN TRES DIMENSIONES.

```
109     fscanf(fu0, "%f \n", &u[i]);
110     i++;
111 }
112 // cudaMemcpy copia los valores de u en devu.
113 cudaMemcpy(devu, u, 201*101*sizeof(float), cudaMemcpyHostToDevice);
114 // Las variables siguientes guardarán la aproximación resultante de la
115     iteración. Una es para el GPU y otra es para el CPU.
116 hostResults = (float *)calloc( NT * NB, sizeof(float) );
117 cudaMemcpy( (void **)&devResults, NT * NB * sizeof(float) );
118 Rev = (float *)calloc( NT, sizeof(float) );
119 cudaMemcpy( (void **)&RevT, NT * sizeof(float) );
120 cudaMemcpy((void **)&devStates1, NT*NB * sizeof(curandState)); cudaMemcpy((void **)&
121     devStates2, NT*NB * sizeof(curandState)); cudaMemcpy((void **)&devStates3, NT*NB
122     * sizeof(curandState));
123 // NW es el número de caminatas aleatorias que se realizarán para de
124     cada uno de los puntos del dominio.
125 NW = 1000;
126 // Se obtienen los estados (semillas) para los diferentes hilos.
127 setup_kernel1<<<NB, NT>>>(devStates1);
128 setup_kernel2<<<NB, NT>>>(devStates2);
129 setup_kernel3<<<NB, NT>>>(devStates3);
130
131 for(i = 0; i < NB*NT; i++){
132     hostResults[i] = 0.0f;
133 }
134 cudaMemcpy(devResults, hostResults, NB*NT*sizeof(float), cudaMemcpyHostToDevice);
135
136 // La función TrW se ejecuta NW veces consecutivas en cada hilo del
137     dispositivo (GPU).
138 for(j = 0; j < NW; j++)
139 {
140     TrW<<<NB, NT>>>(devu, devStates1, devStates2, devStates3, devResults, RevT);
141     if(j%1 == 0 )
142     {
143         printf("%d \n", j);
144         cudaMemcpy(Rev, RevT, NT*sizeof(float), cudaMemcpyDeviceToHost);
145         for(i = 0; i < (NT-1)/5; i++)
146         {
```



```
143         printf(" %f \n", Rev[i]);
144     }
145     printf("\n");
146 }
147 }
148
149 // Los resultado guardados en la memoria del dispositivo (devResults)
150 // se copian a hostResults.
151 cudaMemcpy(hostResults, devResults, NB * NT * sizeof(float),
152     cudaMemcpyDeviceToHost);
153 // Los resultados se guardan en un archivo con nombre "datos.txt".
154 fp = fopen ("datos.txt", "w+");
155 for(i = 0; i < NB * NT; i++){
156     fprintf(fp, " %f \n", hostResults[i]);
157 }
158 fclose(fp);
159
160 // Se libera la memoria del CPU (receptor) y del GPU (dispositivo).
161 cudaFree(devResults);
162 cudaFree(devStates1);
163 cudaFree(devStates2);
164 cudaFree(devStates3);
165 cudaFree(RevT);
166 cudaFree(devu);
167 free(hostResults);
168 free(Rev);
169
170 return 0;
171 }
```

Bibliografía

- [1] Chaichian, M; Demichev, A. *Path Integrals in Physics. Volume I: Stochastic Processes and Quantum Mechanics*. Institute of Physics Publishing. 2001.
- [2] Chaichian, M; Demichev, A. *Path Integrals in Physics. Volume II: Quantum Field Theory, Statistical Physics and other Modern Applications*. Institute of Physics Publishing. 2001.
- [3] Yamabe, Hidehiko. "On a deformation of Riemannian structures on compact manifolds". *Osaka Journal of Mathematics*. **12**, 21-37 (1960).
- [4] Feynman, R. P. "Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics". *Reviews of Modern Physics* **20** (2): 367-387. (1948).
- [5] Feynman, R. P. *The principle of least action in quantum mechanics*. PhD Thesis. Princeton, NJ: Princeton University. Unpublished. (1942).
- [6] Feynman, R.; Hibbs, A.; Styer, D. *Quantum Mechanics and Path Integrals: Emended Edition*. Editorial Dover.
- [7] Steele, Michael. *Stochastic Calculus and Financial Applications*. Editorial Springer. 2001.
- [8] Schulman, L. S. *Techniques and Applications of Path Integration*. John Wiley & Sons. 1981
- [9] Ding, W.Y. Positive solutions of $\Delta u + u^{\frac{N+2}{N-2}} = 0$ on contractible domains. *J. Partial Differential Equations*. (1989) 83-88.
- [10] Pohožaev, S. I. On the eigenfunctions of the equation $\Delta u + \lambda f(u) = 0$. *Soviet Math. Dokl.* **6** (1965) 1408-1411.
- [11] Dirac, P. A. M. "The Lagrangian in Quantum Mechanics." *Phys. Z. Sowjetunion* **3**: 64.
- [12] Kazdan, J.; Warner, F. W. Remarks on some quasilinear elliptic equations. *Comm. Pure Appl. Math* **28**, 567-597 (1975).

- [13] Dancer, E.N. A note on an equation with critical exponent. *Bull. London Math. Soc.* 20 (1988) 600-602.
- [14] Rey, O. A multiplicity result for a variational problem with lack of compactness. *Nonlinear Anal.* 13(10). pp 1241-1249.
- [15] Bahri, Abbas; Li, Yanyan; Rey, Olivier. On a variational problem with lack of compactness: the topological effect of the critical points at infinity. *Calc. Var.* 3, 67-93 (1995).
- [16] Bahri, A; Coron, J. M. On a nonlinear elliptic equation involving the Sobolev exponent: the effect of the topology of the domain. *Comm. Pure Appl. Math.* Vol. 41, (1988), 253-294.
- [17] Carpio-Rodriguez, A., et al. A nonexistence result for a nonlinear equation involving critical Sobolev exponent. *Annales de l'Institut Henri Poincaré - Analyse non linéaire.* Vol. 9, no. 3 (1992) p. 243-261.
- [18] N. Wiener. Differential space, *J. Math. and Physics* 2 (1923) 131-174.
- [19] Sanders, J.; Kandrot, Edward. *CUDA by Example*. Addison-Wesley. EUA. (2010)
- [20] Chandrasekhar, S. *An Introduction to the Study of Stellar Structure*. University of Chicago Press. (1939)
- [21] Fowler, R. H. "Further studies on Emden's and similar differential equations", *Quarterly J. Math.* 2 (1931), 259-288.
- [22] Trudinger, Neil S. (1968), "Remarks concerning the conformal deformation of Riemannian structures on compact manifolds", *Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa* (3) 22: 265-274, MR 0240748
- [23] Aubin, Thierry (1976), "Équations différentielles non linéaires et problème de Yamabe concernant la courbure scalaire", *J. Math. Pures Appl.*, (9) 55: 269-296.
- [24] Schoen, Richard (1984), "Conformal deformation of a Riemannian metric to constant scalar curvature", *J. Differential Geom.* 20: 479-495.
- [25] Passaseo, Donato. "Multiplicity of positive solutions of nonlinear elliptic equations with critical Sobolev exponent in some contractible domains", *Manuscripta Math.*, 65 (1989), 147-166.
- [26] Kac, M. "On distributions of certain Wiener functionals", *Trans. Amer. Math. Soc.* 65, (1949) pp. 1-13.
- [27] Kac, M. "On some connections between probability theory and differential and integral equations", *Proc. Second Berkeley Symp.* Univ. California Press, Berkeley. (1951), pp. 189-215.

- [28] Freidlin, Mark. *Functional Integration and Partial Differential Equations*. Princeton University Press. Princeton, New Jersey. 1985.
- [29] Struwe, Michael. *Variational Methods. Applications to Nonlinear Partial Differential Equations and Hamiltonian Systems*. Cuarta Edición. Editorial Springer.
- [30] Evans, Lawrence C. *An Introduction to Stochastic Differential Equations*. American Mathematical Society. Providence, Rhode Island. 2013.
- [31] Øksendal, B. K. *Stochastic Differential Equations: An Introduction with Applications*. Springer-Verlag. Berlin, Heidelberg. 1995.
- [32] Kakutani, Shizuo (1944). “Two-dimensional Brownian motion and harmonic functions”. *Proc. Imp. Acad. Tokyo* **20** (10): 706-714.