

PhD-prosjekt

Torquil Macdonald Sørensen

Veiledere: Fred Espen Benth og Morten Hjort-Jensen

Torquil Macdonald Sørensen sitt doktorgradsprosjekt dreier seg om studier og utvikling av numeriske metoder og algoritmer for stokastiske partielle differensiallikninger, samt videreutvikling og studier av algoritmer for Monte Carlo metoder. Anvendelsene er tenkt innenfor utvalgte fysiske systemer og numerisk finans.

Monte Carlo simuleringer av fysiske systemer og numerisk finans

Sentralt her er studier av forbedrete teknikker for kvante Monte Carlo metoder, både variasjonell og diffusjons- Monte Carlo teknikker som anvendes på kvantemekaniske systemer. Kvant Monte Carlo metoder, diffusjons-Monte Carlo især, tillater en eksakt numerisk løsning for systemer med mange vekselvirkende partikler og framstår som en av de mest farbare veier for 'ab initio' beregninger av kvantemekaniske systemer. Med 'ab initio' menes en reduksjonistisk tilnærming til et fysisk system, hvor en studerer et systems utvikling utifra vekselvirkningene mellom dets elementære bestanddeler, for eksempler partikler som elektroner i atomer.

Det er to sentrale numeriske temaer i kvante Monte Carlo teknikker: en god sampling av punkter i tilstandsrommet og utvikling av bedre metoder for variansestimering.

Hva sampling av punkter i koordinatrommet angår, så er standardalgoritmen basert på en kombinasjon av viktighetssampling og Metropolisalgoritmen. Førstnevnte del approksimeres oftest ved å introdusere Langevinlikningen, hvis løsning gir et drifteledd i tillegg til et vanlig diffusjonsledd for å bestemme neste skritt i tilstandsrommet. Her ønsker vi spesielt å teste den såkalte eksakt-diffusjons-algoritmen for sample punkter i tilstandsrommet. Dette er en algoritme som har sitt opphav fra stokastisk analyse og har ikke vært nevneverdig brukt i kvantemekaniske studier.

Når et nytt skritt har blitt valgt utifra en gitt sannsynlighetsfordeling (her er den proporsjonal med en prøvebølgefunksjon) ønsker vi å teste Metropolis algoritmen mot MPMC og Metropolis-Hastings algortitmene. Systemet vi i frste omgang er interessert er såkalte kvantepunkter, eller quantum dots. Dette er tredimensjonale systemer av elektroner som er avgrensete i små områder mellom lag i halvledere. Elektronene beveger seg i to dimensjoner pga et ytre

på satt magnetfelt ortogonalt på xy-planet. En er i dag i stand til å avgrense bevegelsene til få elektroner, fra 1 til flere hundre i områder på noen få nanometre, som er størrelsen på kvantepunktet. Sammenliknet med størrelsen på ordinære atom, er kvantepunkter fra noen få ganger større til ca 2 størrelsesordener større enn et vanlig atom. I tillegg kan flere slike kvantepunkter lages industrielt, med ett eller flere elektroner i hvert kvantepunkt. I dag utgjør kvantepunkter ett av de mest lovende fysiske systemer for å manipulere kvantetilstander, med blant det mål å lage kvantekretser. Både såkalte CNOT og NOT kretser har blitt framstilt nylig, se f.eks Nature Physics, bind 1, desember 2005, side 176.

Det første systemet vi ser for oss er to elektroner som kan være i to kvantepunkter, enten ett elektron i hvert sitt kvantepunkt eller begge i samme kvantepunkt. Her ønsker vi å studere effektiviteten til MPMC og Metropolis-Hastings algoritimene kontra standard Metropolis. Grunnen til dette er at MPMC algoritmen har mye lettere for å hoppe fram og tilbake mellom områder med stor sannsynlighet (som er adskilt av områder med lav sannsynlighet) enn hva Metropolis-Hastings og Metropolis algoritmene har. Deretter er planen å utvide systemet med to kvantepunkter til å inneholde flere elektroner.

For to elektroner kan systemet også studeres via av standard partielle differensiallikninger (et annet prosjekt på CMA). Vi kan dermed sammenlikne resultatene herfra med disse metodene når kodene har blitt utviklet. For flere elektroner er Monte Carlo teknikker eneste farbare veg for ab initio beregninger.

Det er for tiden stor eksperimentell interesse i nanoteknologi for egenskapene til kvantepunkter med flere elektroner. Monte Carlo beregninger, som i prinsippet gir numerisk eksakt svar, kan være avgjørende for oppsett av eksperiment og vår grunnleggende forståelse av dynamikken til mange-elektron systemer.

Vi har for tiden utviklet variasjonelle Monte Carlo koder for både Bose og Fermi systemer, og for Bosoner har vi også diffusjons Monte Carlo koder. Dette er koder det er naturlig å gripe fatt i i starten av prosjektet.

Monte Carlo simuleringer i numerisk finans

Innen numerisk finans er Monte Carlo metoder helt sentralt for å være istand til å prise kompliserte derivater, dvs finansielle kontrakter som avhenger av verdien til andre kontrakter. Teorien sier at derivater har en pris gitt som en forventet utbetaling fra kontrakten. Har man en sannsynlighetsfordeling som beskriver utbetalingen, lar forventingen seg beregne via, for eksempel, Monte Carlo simuleringer.

I numerisk finans har man tradisjonelt brukt vanlig Monte Carlo for å simulere priser. Metoden er som regel ineffektiv, og gir høy feil hvis man ikke simulerer lenge nok. Mange derivater involverer også baneavhengigheter, som for eksempel knock-out opsjoner som nulles ut hvis aksjekursen bryter en barriere. For å beregne prisen på slike opsjoner trenger man gode simuleringsalgoritmer for å finne ut mest mulig nøyaktig når aksjekursen faktisk bryter barrieren. Vi vil teste ut exact-diffusjon algoritmen, og sammenligne med andre mer etablerte Monte Carlo metoder for slike problemer.

Kvasi-Monte Carlo er en teknikk som virker meget godt p finansproblemer, og vi ønsker å gå videre med disse teknikkene på fysiske problemstillinger slik som beskrevet i seksjonen over. Kvasi-Monte Carlo konvergerer mye hurtigere enn Monte Carlo og har en elegant etablert teoretisk basis.

Mange numeriske teknikker benyttet i finans har sitt opphav i fysikk. Vi ønsker å se nærmere på sammenhengen mellom Monte Carlo i finans og Monte Carlo i de fysiske anvendelsene nevnt over. Mange problemer i finans kan omskrives som Feynman-Kac løsninger av partielle differensiallikninger, i mange tilfeller analoge til de man treffer på i kvantefysikk. Vi vil analysere sammenhenger og muligheter for utvikling av metoder basert på kunnskap i hvert av fagfeltene.

Stokastiske partielle differensiallikninger

Teorien for stokastiske partielle differensiallikninger (SPDL) er veldig umoden i forhold til PDL teori. Når PDL'er blir påvirket av stokastiske krefter, vil løsningen i mange tilfeller være singular (og må forstås som en generalisert løsning). Gruppen i stokastisk analyse ved MI har jobbet mye med forskjellige typer SPDL'er både fra et teoretisk ståsted, men også med utviklingen av numeriske metoder for å løse disse.

I dette prosjektet skal vi se på ulike teknikker for å løse SPDL'er numerisk som har fysiske anvendelser (der for eksempel fraksjonell støy inngår). Metodene vil enten være basert på en kombinasjon av klassiske numeriske løsningsteknikker for PDL med Monte Carlo simuleringer, eller en ren Monte Carlo simulering basert på Feynman-Kac formulering av løsningen. Sistnevnte har blitt utviklet for mange typer SPDL'er, og er i virkeligheten en stokastisk variant av Feynman-Kac.

For de teknikkene som baserer seg på klassiske numeriske skjemaer for PDL'er, vil vi fokusere på Galerkin og endelig elementmetoder. I mange tilfeller er det utviklet kriterier for konvergens av disse metodene. Det vil bli aktuelt å videreutvikle slike konvergensresultater.

Basert på løsningsmetoden på Feynman-Kac, må vi benytte Monte Carlo metoder. Det finnes lite kjent teori for konvergens av denne type numeriske skjemaer, og det vil være interessant å studere slike spørsmål mer inngående.