

جب ۲۵، ۱۴۰۰

سید الدار محمد الرحمن

$$\lim_{dx \rightarrow 0} \frac{dP}{dx} = p(x)$$

حصہ لڈتہ

پکھانے کے ذریعے

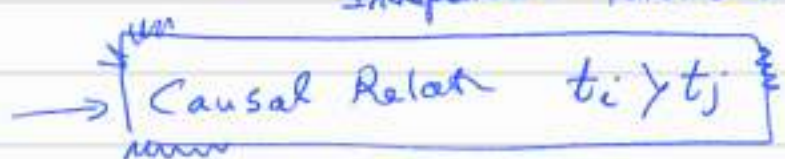
Joint PDF

Suppose (1+1) Dimension $\{x_1, t_1, x_2, t_2, \dots, x_n, t_n\}$

$$p(x, t) = \checkmark$$

↑ Independent Parameter

بہار x_i t_i x_j t_j x_n t_n x_{n-1} t_{n-1} x_{n-2} t_{n-2} \dots x_1 t_1



$$P(x_i, t_i \text{ و } x_j, t_j) = ? \rightarrow \text{Two-Point PDF (Joint PDF)}$$

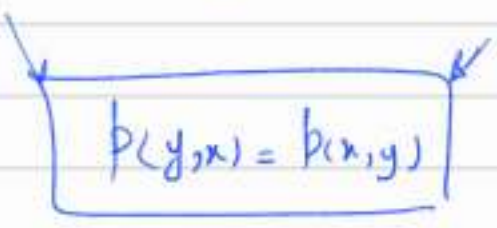
$$P(x_n, t_n \text{ و } x_{n-1}, t_{n-1}, x_{n-2}, t_{n-2}, \dots \text{ و } x_1, t_1) = ?$$

نقطہ کے ذریعے \rightarrow n-Point PDF (Joint PDF)

Bayse theorem

$$p(x, y) = p(x|y) p(y)$$

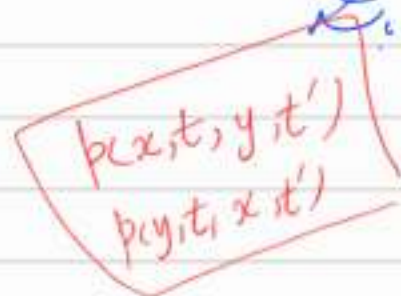
$$p(x|y) = \frac{p(x, y)}{p(y)}$$



Stationary

$$p(y, x) = p(y|x) p(x)$$

$$p(y|x) = \frac{p(y, x)}{p(x)}$$



Stationary

Weak Definition of Stationary
 $\sigma^2 = \langle x^2(t) \rangle \rightarrow \sigma_w^2 = \langle x(t) \rangle_w$

$p(x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1}; x_{n-2}, t_{n-2}; \dots; x_1, t_1)$

$= p(x_n, t_n + \tau; x_{n-1}, t_{n-1} + \tau; x_{n-2}, t_{n-2} + \tau; \dots; x_1, t_1 + \tau)$

نویسند τ - Translate خواص آماري وقت

[n-order stationary Regime]

$\xi(t) = \dots$

steady state

$\neq \text{state}$

وجود دارد و استیبل

$p(x)$

خواص آماري مستقل زمان یا انتقال در زمان

Static \rightarrow ثابت

حکم کرد و استیبل زمان در تغییر $\{ \xi \}$ در خواص آمده وجود ندارد

چگونه $p(x_i, t_i; x_j, t_j)$ حاصل کنیم

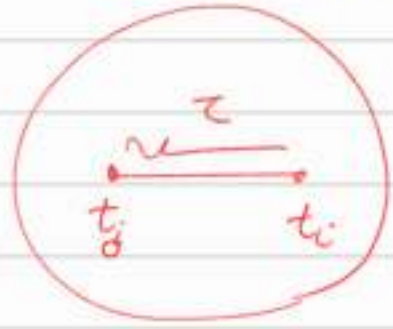
$\tau = |t_i - t_j| \leftarrow$ Stationary

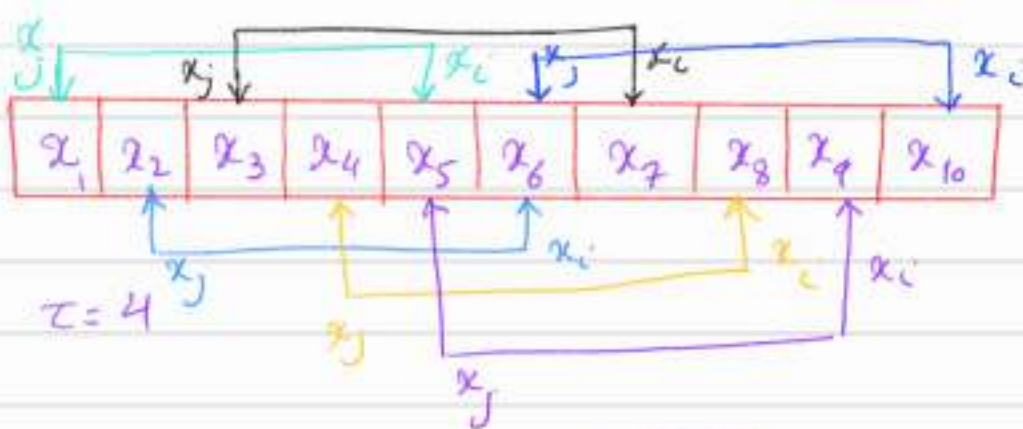
فرض $t_i > t_j$

$p(x_i, t_i; x_j, t_i - \tau) = p(x_i, t_i + \tau; x_j, t_i)$

چون ما t_i همین حالت داریم

قطر نامده زمان رخداد x_i در زمان t_j





0.0
~~~~~

for "z" →  $N - \tau$  ← عضو دایم

اگر  $\tau = 0$  برز را خواهیم داشت

محاسبه  $Q(\frac{1}{\sqrt{N}})$  ← خطای  $\tau$  ←

برای  $\tau$  بزرگ که برز را بینیم استوار داریم خطای  $\tau$  را به نفع  $\tau$  بزرگ برداشته ایم

Simple algorithm for Joint PDF  $P(x, y, z)$

Import Data Set  $\{S\}$ ,

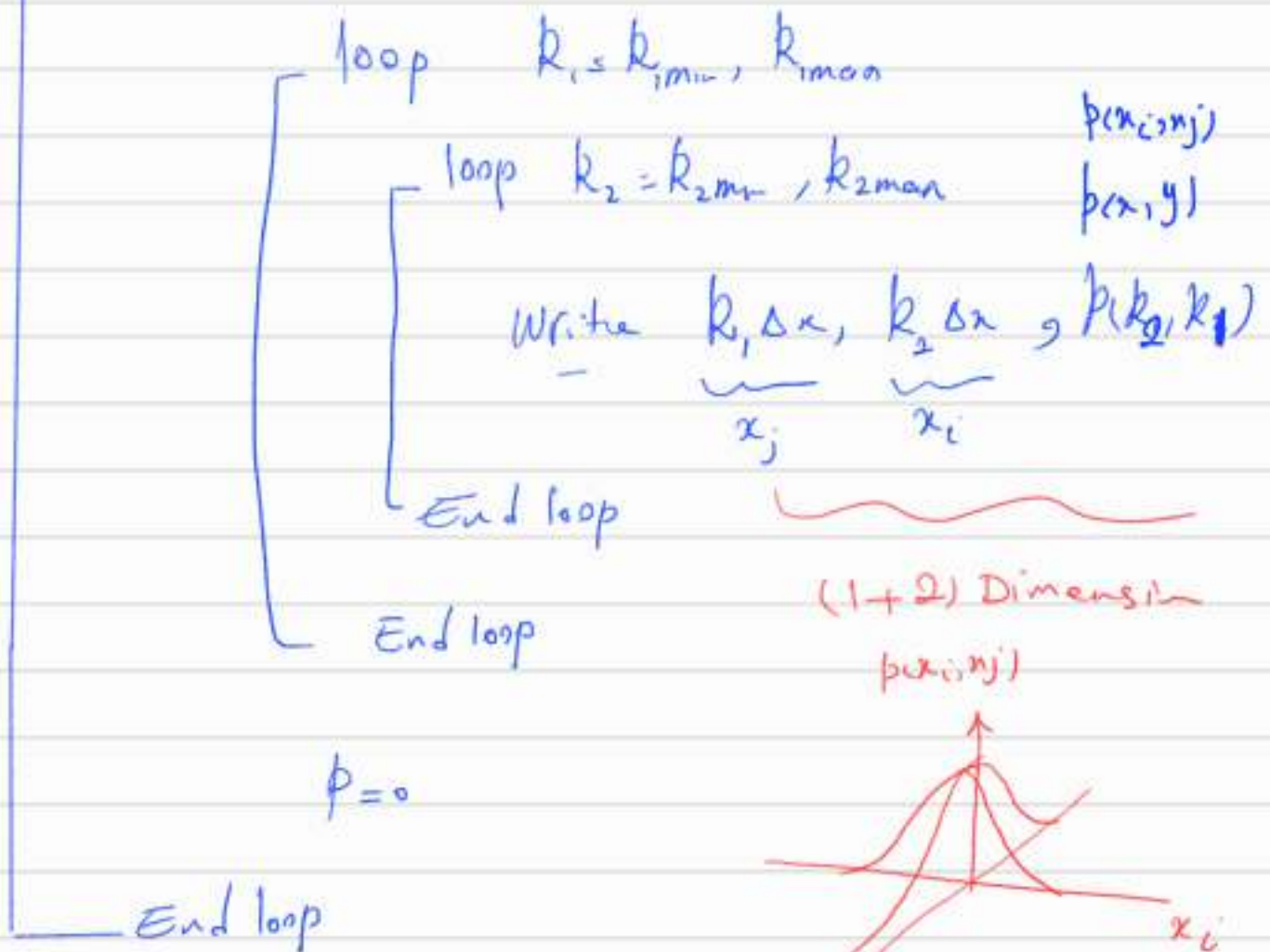
$\Delta x = \frac{\text{Max}\{S\} - \text{min}\{S\}}{M}$  → Input

```

loop z
  loop i = 1, N - z
     $k_1 = \text{float}(\frac{S_i}{\Delta x})$  →  $x_j$ 
     $k_2 = \text{float}(\frac{S_{i+z}}{\Delta x})$  →  $x_{i+z}$ 
     $P(k_2, k_1) = P(k_2, k_1) + 1$  → Simple algorithm →  $W()$ 
  End loop

```

Normalizati-



پارہ ہوتے ہیں اور ان کے درمیان تعلق ہے

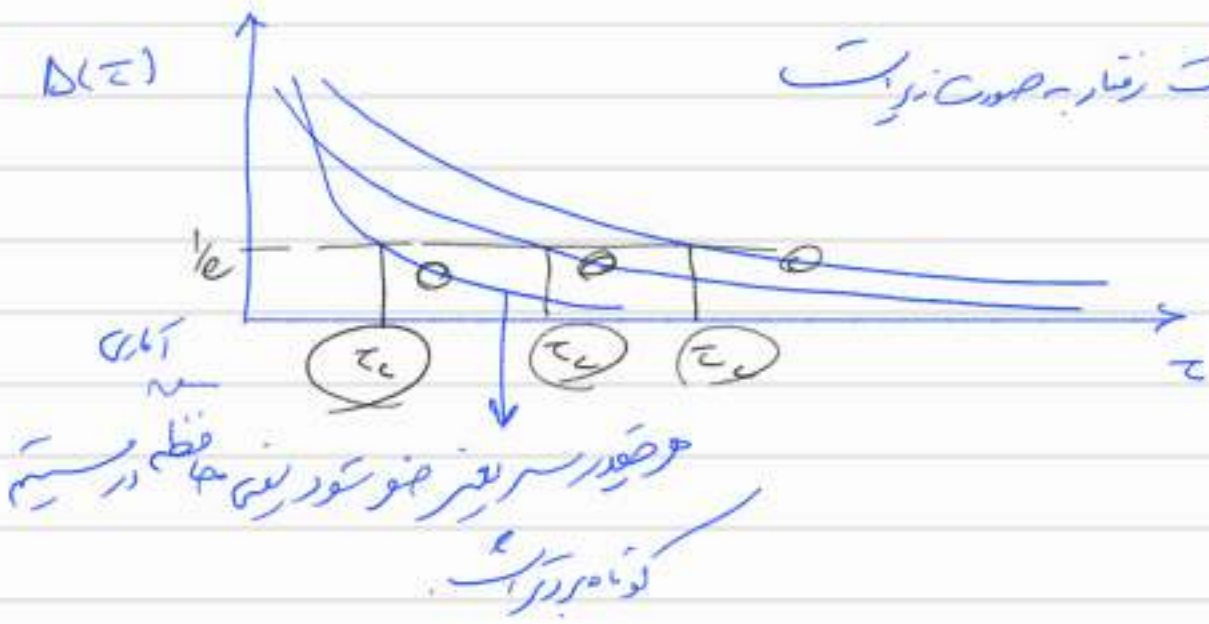
(1+3)-Dimension

پارہ ہوتے ہیں اور ان کے درمیان تعلق ہے

$$\Delta(\tau) = \int dx_i \int dx_j | p(x_i, x_j) - p(x_i) p(x_j) |$$

$$p(x_i, x_j) = p(x_i) p(x_j) \leftarrow \text{دو متغیرات کے درمیان تعلق ہے}$$

طیارات رفتار به صورت زیر است



Characteristic Time-Scale معیار زمان مشخص

$\Delta(\tau = \tau_c) = 0$   
 همیشه ممکن است اتفاق نیفتد

توزیع  $\rightarrow \frac{1}{e} (\text{Max}(\Delta(\tau=0))) = \Delta(\tau = \tau_c)$

اغلب مشاهده شده که توزیع همگسترده است

$\sim e^{-\frac{\tau}{\tau_c}}$   
 زمان مشخص رفتار سیستم

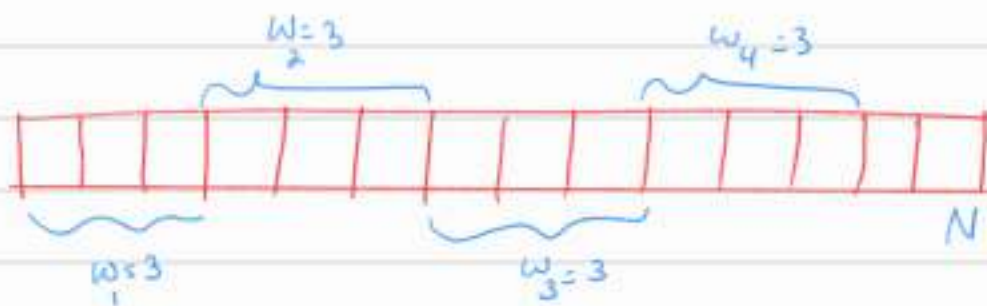
$\tau = \tau_c \rightarrow e^{-1} = \frac{1}{e}$

Conditional PDF  $p(x|y) = ?$  Joint

نیاز داریم که بدانیم  $\rightarrow p(x|y)$

Bayesian Analysis

$\frac{p(x, y)}{p(y)} = \checkmark$   
 $p(y) = \checkmark$



$$\sigma_{w_1}^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$$

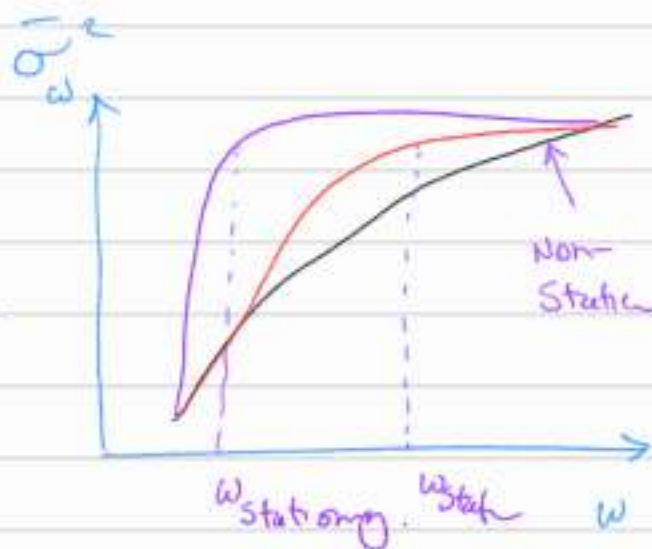
$$\sigma_{w_2}^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$$

$$\vdots$$

$$\sigma_{w_n}^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$$

$$\sigma_w^2 = \frac{1}{\text{Int}[\frac{N}{W}]} \sum_{i=1}^{\text{Int}[\frac{N}{W}]} \sigma_{w_i}^2$$

توفيق ضعیف با نوبت ۱



**N-Joint PDF**

$$p(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) \rightarrow \langle x_1, x_2, x_3, \dots, x_n \rangle$$

$$\langle f \rangle = \int d\Gamma P(\Gamma) f(\Gamma)$$

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

$$\langle x_1, x_2, \dots, x_n \rangle = \int dx_1 dx_2 dx_3 \dots dx_n x_1 x_2 \dots x_n p(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$$

if completely independent

متوالت مستقلة

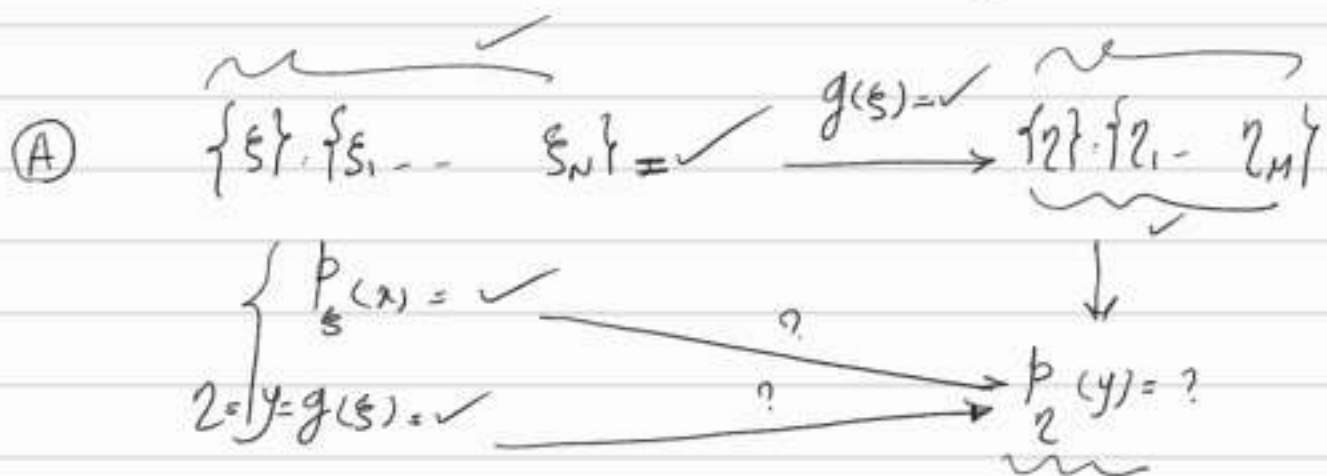
$$\langle x_1, x_2, \dots, x_n \rangle = \langle x_1 \rangle \langle x_2 \rangle \langle x_3 \rangle \dots \langle x_n \rangle = 0$$

$$= \int dx_1 x_1 p(x_1) \int dx_2 x_2 p(x_2) \dots \int dx_n x_n p(x_n)$$

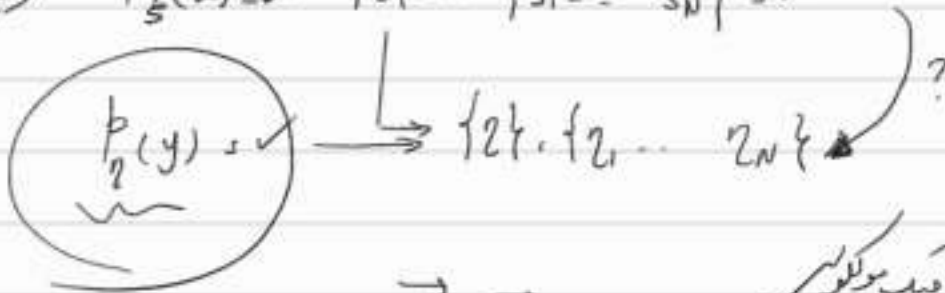
$$p(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) = p(x_1) p(x_2) \dots p(x_n)$$

PDF - Transformation

تحويل توزيع



(B)  $p_x(x) = \checkmark \quad \{x\} = \checkmark \quad \{x_1, \dots, x_N\} = \checkmark$



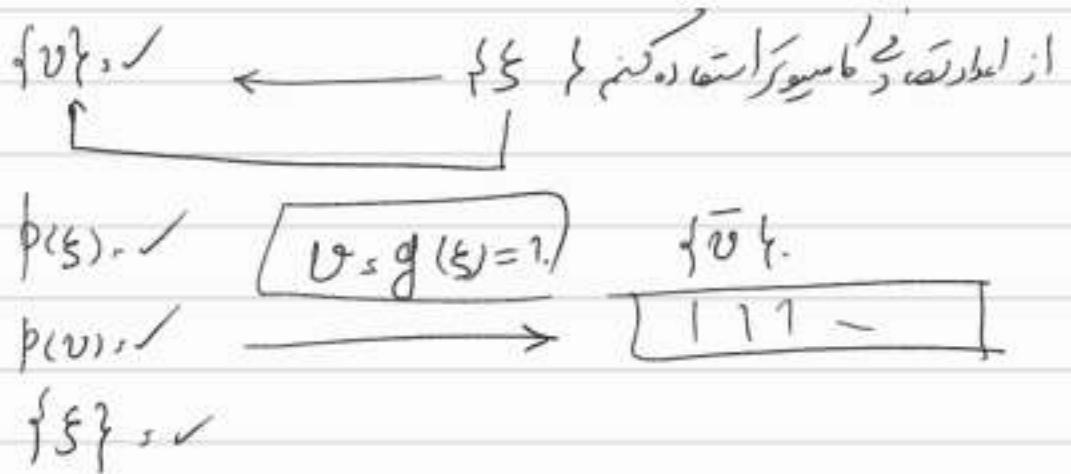
شبه سازگی دینامیک مولکولی  
 N ذره در آن شبه سازگی کنیم  
 موقعیت (در حالت تصادفی در حالت)  $\rightarrow \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$   
 از تابع توزیع MB بیاید  $\rightarrow \vec{v}_1, \dots, \vec{v}_N$   
 کامل تصادفی یا نسبت به هم تصادفی است

$(v_x, v_y, v_z)$

|             |             |             |  |  |  |  |  |             |
|-------------|-------------|-------------|--|--|--|--|--|-------------|
| $\vec{v}_1$ | $\vec{v}_2$ | $\vec{v}_3$ |  |  |  |  |  | $\vec{v}_N$ |
|-------------|-------------|-------------|--|--|--|--|--|-------------|

$\Omega, \Omega \gg N$

$$p(\vec{v}) \sim e^{-\frac{mv^2}{2kT}}$$



(A)  $p_y(y) = ?$   
 $y = g(x) = \checkmark$



$$p_2(y) = \langle \delta_D(y-\eta) \rangle_\eta = \langle \delta_D(y-g(\xi)) \rangle_\xi$$

$$= \int d\eta \delta_D(y-\eta) p_2(\eta) = \int d\xi \delta_D(y-g(\xi)) p_\xi(\xi)$$

انحصار سے رابطہ برقرار رکھیں

نئی شکل میں

$$\delta_D(y-g(\xi)) \rightarrow \delta_D(x-\xi)$$

ہر اکوئی تبدیل لازم نہیں

$$g(\xi) = \overbrace{g(\xi_0)}^y + (\xi - \xi_0) \left. \frac{dg(\xi)}{d\xi} \right|_{\xi=\xi_0} + \mathcal{O}(\Delta\xi^2)$$

$$g(\xi) - g(\xi_0) \approx (\xi - \xi_0) \left. \frac{dg(\xi)}{d\xi} \right|_{\xi=\xi_0}$$

$$\delta_D(g(\xi) - g(\xi_0)) \approx \delta_D\left((\xi - \xi_0) \left. \frac{dg(\xi)}{d\xi} \right|_{\xi=\xi_0}\right)$$

$$\delta_D(y - g(\xi)) \approx \delta_D(\xi - \xi_0) \left. \frac{dg}{d\xi} \right|_{\xi=\xi_0}^{-1}$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$$

$$p_2(y) = \langle \delta_D(y-\eta) \rangle_\eta = \int d\xi \delta_D(\xi - \xi_0) \left. \frac{dg}{d\xi} \right|_{\xi=\xi_0}^{-1} p_\xi(\xi)$$

$$= \sum_{s=1}^n p_s \left( g_n^{-1}(y) \right) \left| \frac{dg}{ds} \right|^{-1}$$

تعداد  $s$  مقدار  $y$  منحصر به فرد  $\rightarrow$   $n$

$\xi = \xi_n = g_n^{-1}(y)$

$$y = g(x) = x^2$$

$$\begin{matrix} x=+1 \\ x=-1 \end{matrix} \rightarrow y=1$$

Ex

$$p(v) = \checkmark$$

$$g(v) = E = \frac{1}{2}mv^2 \Rightarrow p(E) = ?$$

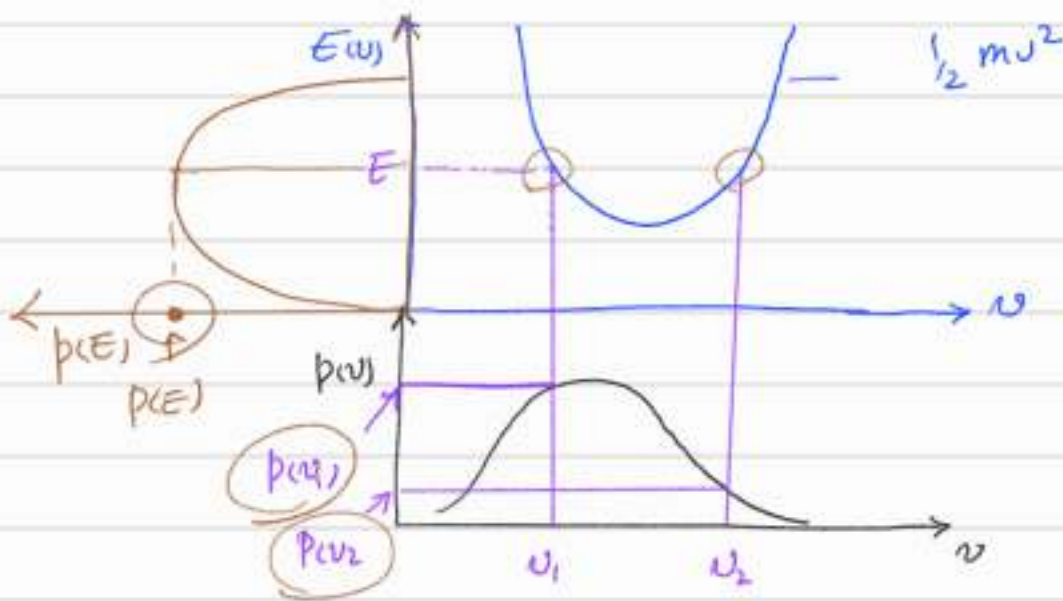
$$v_{1,2} = \pm \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

$$\frac{dg}{dv} = mv$$

$$p(E) = p_v(v_1) \left| \frac{dg}{dv} \right|_{v=v_1}^{-1} + p_v(v_2) \left| \frac{dg}{dv} \right|_{v=v_2}^{-1}$$

$g^{-1}(E)$

$$= p_v\left(+\sqrt{\frac{2E}{m}}\right) \frac{1}{m\sqrt{\frac{2E}{m}}} + p_v\left(-\sqrt{\frac{2E}{m}}\right) \frac{1}{m\sqrt{\frac{2E}{m}}}$$



(B)  $f\{x\} = \checkmark$   
 $p(x) = \checkmark$   
 $p_{\eta}(y) = \checkmark$

$\Rightarrow f\{z\} = ?$

در اغلب سیستم‌های ای  
 صورت کارلو  
 مورد استفاده قرار می‌دهیم  
 صورت نواری

Ex 1. در فرایع اعداد تصادفی تولید کننده که دارای تابع توزیع پواسون هستند

Poissonian  
 Distribution

Random  
 ↓  
 (1)  $\langle z_i z_j \rangle = \delta_{ij}$  \*

(2)  $p_{\eta}(y) = \begin{cases} \frac{1}{\eta} e^{-y/\eta} & y \geq 0 \\ 0 & y < 0 \end{cases}$

$f(z_1, z_2, \dots)$   
 $\eta_N \{ = ?$

غایت سے ایک در کامپیور توابع داخلی وجود رکھنے کی لئے اعداد تصادفی تولید کنندہ بنائیں خاصیت ①

ادخلہ کامپیور تکسٹ گریم

Random Number =  $\{\xi_1, \dots, \xi_N\}$   
 Generated by computer  
 $\eta_i = g(\xi_i) = ?$   
 $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_N$

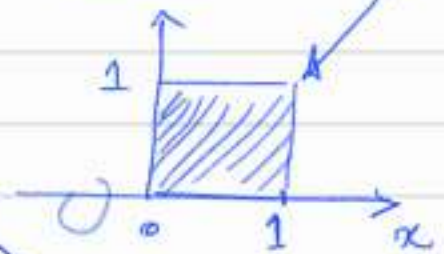
$$\langle \xi_i, \xi_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\langle \eta_i, \eta_j \rangle = \delta_{ij} = \checkmark$$

الگورتھم برسم تولید تصادفی کامپیور را مورد نظر قرار داج

$$y = g(\xi) = ?$$

$p_{\text{Random}}$



مردم زفص زرم

$$\int_0^1 p_{\text{Random}}(x) dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy p_{\eta}(y) = 1 = \int_0^1 dx p_{\xi}(x) = 1$$

$$\int_0^1 p_{\text{Random}}(x) dx = \int_0^1 p_{\eta}(y) dy$$

$$R = \int_0^y dy' \frac{e^{-y'/\lambda}}{\lambda}$$

$$R = -e^{-y'/\lambda} \Big|_0^y = 1 - e^{-y/\lambda} \Rightarrow e^{-y/\lambda} = 1 - R$$

$$y_{\lambda} = \ln(1-R)$$

$$y = -\lambda \ln(1-R)$$

$R = \text{Random Number}$

حکلی

$$y = -\lambda \ln(1-R)$$

$$p_{\eta}(y) = \frac{e^{-y/\lambda}}{\lambda}$$

میان چیت کرد

① سبب انحراف (حکلی)

ردا مرحله وجود دارد

② که معکوس کردن منبع (حکلی)

Ex2: تولید اعداد تصادفی گوسی (وارینانس و میانگین مشخصه)

$$p(y) = \frac{e^{-y^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \quad \{\mu_1, \dots, \mu_n\} = ?$$

$\langle \mu_1, \mu_2 \rangle = \delta_{12}$

$$\int_0^1 dR \frac{1}{p_{\text{Random}}(R)} = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \frac{e^{-y^2/2}}{\sqrt{2\pi}} = 1$$

طول قضایا باز در تکمیل برقرار شده است

$$\int_0^R dR' 1 = \int_{-\infty}^y dy' \frac{e^{-y'^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \rightarrow \text{مستطیل}$$

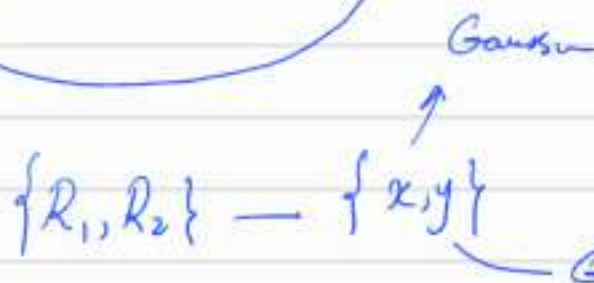
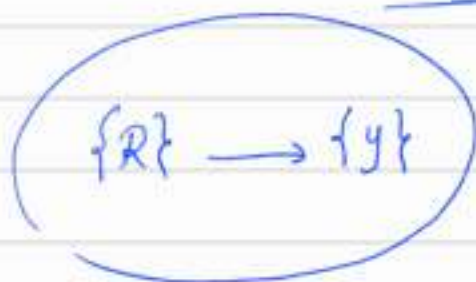
$R = ?$  حکلی طریقی باشد

① = ?  
② = ?

# Box-Muller to generate

## Gaussian Random Number

$\delta_{ij}$



$$P(R_1, R_2) = P(R_1) P(R_2)$$

$$P(x, y) = P(x) P(y)$$

$$\int_0^1 dR_1 \int_0^1 dR_2 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{-\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \frac{e^{-\frac{y^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}}$$

$$1 = 1$$

$\int_0^{R_1} dR_1' \int_0^{R_2} dR_2' = \int_{-\infty}^x dx' \frac{e^{-\frac{x'^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^y dy' \frac{e^{-\frac{y'^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}}$

$$(R_1, R_2) \rightarrow (r, \theta) \rightarrow (x, y)$$

$$\underline{dx dy, r d\theta}$$

$$\begin{matrix} x = r \cos \theta \\ y = r \sin \theta \end{matrix}$$

$$r^2 = x^2 + y^2$$

$$\int_0^{R_1} dR'_1 \int_0^{R_2} dR'_2 = \int_0^r \int_0^{2\pi} \frac{r' d\theta' dr'}{2\pi} e^{-\frac{r'^2}{2}}$$

$$\int_0^{R_1} dR'_1 \int_0^1 dR'_2 = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta'}{2\pi} \int_0^r r' dr' e^{-\frac{r'^2}{2}}$$

$$\int_0^{R_1} dR'_1 = \int_0^r dr' r' e^{-\frac{r'^2}{2}}$$

$$R_1 = -e^{-\frac{r^2}{2}} \Big|_0^r = 1 - e^{-\frac{r^2}{2}}$$

$$1 - R_1 = e^{-\frac{r^2}{2}}$$

$$-\frac{r^2}{2} = \ln(1 - R_1)$$

$$r^2 = -2 \ln(1 - R_1)$$

$$r = \pm \sqrt{-2 \ln(1 - R_1)}$$

$$\rightarrow \textcircled{x} r \cos \theta = + \sqrt{-2 \ln(1 - R_1)} \cos(2\pi R_2)$$

$$\rightarrow \textcircled{y} r \sin \theta = + \sqrt{-2 \ln(1 - R_1)} \sin(2\pi R_2)$$

(0,1)

(0,1)

Box  
Muller





① ماکنون مدام گفتیم که تولیداره تصادف  $\langle z, \eta \rangle = \delta_{z, \eta}$  ←  $\frac{p(x, y)}{\eta}$

② تولیداره اس کور  $p_\eta(y)$  بست در همسایگی دگواه داشته بست  
 دگواه  $\langle z, \eta \rangle \neq \delta_{z, \eta} = f(z, \eta)$

Correlation

③ تولیداره ک بابع توزیع دگواه و بابع همسایگی دگواه  
 Random ✓