

Metoda Monte Carlo a ruchy Browna

Dr hab. Ryszard KUTNER

W ostatnich kilkunastu latach, wraz z prawdziwą inwazją nie tylko w wielu gałęziach nauki różnego typu komputerów najnowszych generacji, nastąpił szybki rozwój m.in. numerycznych metod symulacji komputerowej. Znalazły one zastosowanie głównie w dziedzinie fizyki materii skondensowanej, w teorii pola, w fizyce stosowanej czy też w dziedzinie chemii fizycznej, przyczyniając się w istotny sposób do ich rozwoju. Do perfekcji doprowadzono metody: deterministyczną dynamiki molekularnej, deterministyczno-stochastyczną dynamiki Langevina, a przede wszystkim, szybszą od innych stochastyczną metodę Monte Carlo. Szczególnie spektakularnym, a zarazem poglądowym przykładem zastosowania tej ostatniej metody może być symulowanie komputerowe ruchów Browna.

Pogłębioną fizyczną analizę ruchów Browna Czytelnik może znaleźć np. w dwuczęściowym artykule B. Cichockiego pt. „Ruchy Browna”, *Delta* nr 4 i 5 (1983).

Zrozumienie istoty zjawiska ruchów Browna nastąpiło na początku bieżącego stulecia i związane jest z nazwiskiem Alberta Einsteina, Paula Langevina, a przede wszystkim Mariana Smoluchowskiego, któremu zawdzięczamy wyjaśnienie mechanizmu tego zjawiska. Porównanie przewidywań teorii z doświadczeniem pozwoliło Jeanowi Perrin na wyznaczenie m.in. liczby Avogadra, a zatem bezwzględnych mas atomowych i stanowiło przekonujący dowód realności tzw. hipotezy atomistycznej.

Charakterystyczna własność ruchów Browna to występująca nieustannie nieregularna zmiana położenia cząsteczki o rozmiarach rzędu 10^{-4} cm, zawieszona w cieczy lub w gazie, wywołana przypadkowymi potrąceniami ze strony otaczających ją znacznie mniejszych cząsteczek ośrodka. Inaczej mówiąc — na cząsteczkę zawieszony działa fluktuująca siła spowodowana chaotycznymi, nieskompensowanymi uderzeniami cząsteczek ośrodka. Wynik pojedynczego, całkowicie przypadkowego zderzenia jest bardzo mały (w skali makroskopowej), jednak sumarycznym efektem dużej liczby tych zderzeń może być, obserwowane przez mikroskop nawet o niewielkim powiększeniu, znaczne wypadkowe przesunięcie przypadkowe cząstki zawiesiny. Przejawiająca się w postaci zygzakowatej trajektorii błędzącej cząstki zawiesiny, leży u podstaw symulacji ruchów Browna metodą Monte Carlo.

Metoda Monte Carlo została omówiona np. w sześcioczęściowym artykule R. Zielińskiego pod wspólnym tytułem: „Metody Monte Carlo”, *Delta* nr 9—11 (1975) oraz *Delta* nr 1—3 (1976).

Metoda ta pozwala na zbudowanie modelu numerycznego — jest on zrealizowany w postaci (odtworzonego na drodze numerycznej) procesu stochastycznego Markowa, zwanego w tej sytuacji dokładniej błędzeniem przypadkowym. Najistotniejszym elementem tego, w istocie rzeczy uproszczonego modelu, jest przypadkowe wybieranie przez komputer kierunku każdego, kolejnego elementarnego przesunięcia Δr_j cząstki ($j = 1, \dots, N$, gdzie N jest całkowitą liczbą elementarnych przemieszczeń).

Liczby generowane przez funkcję RND mikrokomputera nie są przypadkowe „sensu stricto” — są to liczby pseudolosowe, chyba że komputer korzysta z tzw. generatora szumowego, czyli, najogólniej mówiąc, przetwornika fluktuacji prądowych na sygnały binarne, rozumiane przez komputer właśnie jako liczby przypadkowe.

```

10 REM Ruch Browna pojedynczo
20 REM atomu w zawieszynie.
30 REM Program wyznacza m.in. <math>r^2(t)</math>
40 REM w eksperymentach komputerowych.
50 REM
60 REM Macierze i dane
70 DIM u(50): DIM v(50): DIM d(50): DIM r(50)
80 READ tk,a,s,p
90 DATA 40,6,100,50
100 REM
110 REM Tabela
120 PRINT "Czas eksperymentu=";tk;" [kMCI]"
130 PRINT "-----"
140 PRINT "PRINT"
150 PRINT "<Dalej dowolny klawisz>"
160 PAUSE 0:CLS
170 REM
180 REM Punkt startu oznaczono przez "0"
190 LET a0=120:LET b0=76
200 REM
210 REM Segment dyfuzyjny
220 FOR j=1 TO s
230 PRINT "nr exper.=",j;" "; "liczba exper.=",s
240 REM
250 REM Rysuje pojemnik i punkt startowy
260 PLOT 0,0: DRAW 0,151
270 PLOT 0,151: DRAW 255,0
280 PLOT 255,151: DRAW 0,-151
290 PLOT 255,0: DRAW -255,0
300 CIRCLE a0,b0,4
310 REM *****
320 REM
330 REM Pojedynczy eksperyment statystyczny
340 LET x0=a0:LET y0=b0
350 FOR t=1 TO tk
360 LET f=2*PI*RND
370 LET dx=a*COS(f):LET x1=x0+dx
380 LET dy=a*SIN(f):LET y1=y0+dy
390 IF x1>=255 THEN GO TO 410
400 GO TO 420
410 LET x1=2*255-x1:LET dx=x1-x0
420 IF y1>=151 THEN GO TO 440
430 GO TO 450
440 LET y1=2*151-y1:LET dy=y1-y0
450 IF x1<=0 THEN GO TO 470
460 GO TO 480
470 LET x1=-x1:LET dx=x1-x0
480 IF y1<=0 THEN GO TO 500
490 GO TO 530
500 LET y1=-y1
510 LET dy=y1-y0
520 REM *****
530 REM
540 REM Rysuje kolejne pozycje atomu
550 PLOT x0,y0: DRAW dx,dy
560 REM
570 REM Oblicza <math>r^2(t)</math>
580 LET u(t)=x1:LET v(t)=y1
590 LET d(t)=(u(t)-a0)*(u(t)-a0)+(v(t)-b0)*(v(t)-b0)
600 LET x0=x1:LET y0=y1
610 NEXT t
620 FOR t=1 TO tk
630 LET r(t)=r(t)+d(t)/s
640 NEXT t
650 REM
660 IF j=2 THEN GO TO 690
670 PRINT "<Dalej dowolny klawisz>"
680 PAUSE 0:CLS
690 PAUSE 0
700 IF j=s THEN GO TO 720
710 CLS
720 NEXT j
730 PRINT "<Dalej dowolny klawisz>"
740 PAUSE 0:CLS
750 REM
760 REM Tabela
770 PRINT "t"; " "; "<math>r^2(t)</math>"
780 PRINT "-----"
790 PRINT
800 FOR t=1 TO tk
810 PRINT t;" ";r(t)
820 NEXT t
830 PRINT
840 PRINT "Teoretyczny wsp. dyfuzji D=";a*a/4;"
      "Ejednostki eksp. komputerowe, tzn. 1kMCI="
850 PRINT
860 PRINT "<Dalej dowolny klawisz>"
870 PAUSE 0:CLS
880 REM
890 REM Konstrukcja wyskalowanych osi x-y
900 PRINT "2^ 3"
910 PRINT "r x10"; PRINT "PRINT"; PRINT "2"; PRINT "1";
      PRINT "PRINT"; PRINT "PRINT"; PRINT "PRINT"; PRINT "1";
      PRINT "PRINT"; PRINT "PRINT"; PRINT "PRINT"; PRINT "PRINT"
920 PRINT TAB 29;"2"
930 PRINT TAB 7;"2";TAB 12;"4";TAB 17;"6";TAB 22;"8";
      TAB 26;"10";TAB 28;"tx5"
940 PRINT TAB 27;"[kMCI]"
950 PLOT 0,19: DRAW 235,0
960 PLOT 19,0: DRAW 0,170
970 FOR i=4 TO 23 STEP 2
980 PLOT 10*i-1,19: DRAW 0,3
990 NEXT i
1000 FOR j=4 TO 16 STEP 2
1010 PLOT 19,10*j-1: DRAW 3,0
1020 NEXT j
1030 REM
1040 REM Dane do skalowania osi x-y
1050 READ k1,k2,k3,k4,k5,k6,k7,k8,k9
1060 DATA 1,40,1,1,0,4,19,,06,19
1070 FOR k=k1 TO k2 STEP k3
1080 LET g=k*k4+k5
1090 LET g1=g*k6+k7
1100 LET k00=k/2
1110 LET k0=INT(k00)
1120 LET k0=2*k0
1130 IF k0<k THEN GO TO 1160
1140 LET r2=<math>(g**k0+k) </math>
1150 CIRCLE g1,r2,2
1160 LET dt=a*a*g
1170 LET d2=dt*k0+k9
1180 PLOT g1,d2
1190 NEXT k
1200 STOP

```

W załączonym obok programie na popularny komputer ZX Spectrum 48K firmy Sinclair ma to miejsce w pętli wewnętrznej rozpoczynającej się w linii 350, a kończącej w linii 610. Mianowicie w pojedynczym kroku, w linii 360, losowany jest kąt biegunowy f z przedziału $[0, 2\pi)$. Ten krok to właśnie pojedynczy krok Monte Carlo (kMC), który traktuje się tutaj jako umowną jednostkę czasu. Kolejne jednostki indeksowane są zmienną sterującą t przyjmującą wartość początkową $t = 1$ i końcową $t = tk$; tk wprowadzono z zewnątrz w linii 90 w postaci danej liczbowej.

Obsługa programu jest łatwa, a mianowicie: po bezbłędnym wpisaniu programu do mikrokomputera i uruchomieniu go klawiszem RUN należy po prostu stosować się do wyświetlanych na ekranie poleceń umieszczonych w nawiasach.

Uruchomienie programu na innym mikrokomputerze wymaga, niestety, modyfikacji. Na przykład mogą ulec zmianie instrukcje graficzne PLOT i DRAW lub funkcja RND, a także może ulec zmianie rola znaków interpunkcyjnych.

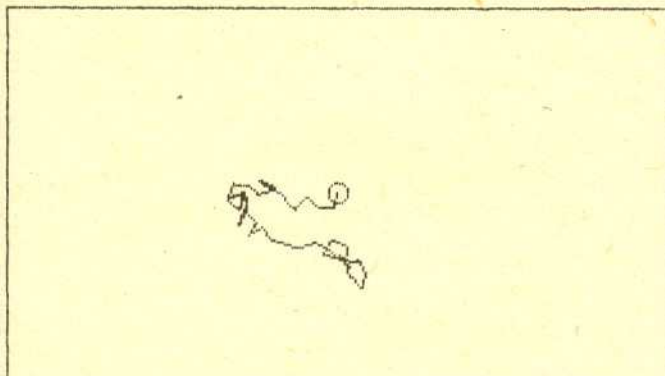
Następnie, w linii 370 obliczana jest x -owa składowa elementarnego przemieszczenia cząstki, oznaczona tutaj przez dx , oraz x -owa składowa nowego, aktualnego wektora położenia cząstki, oznaczona przez $x1$. Analogicznie obliczane są w linii 380 odpowiednie składowe y -owe (zauważmy, że wektor poprzedniego położenia cząstki oznaczono przez $(x0, y0)$). W ten sposób błądząca cząsteczka przemieszcza się z danego położenia $(x0, y0)$ w sąsiednie położenie $(x1, y1)$, przy czym prawdopodobieństwo tego przemieszczenia na jednostkę czasu (v), zwane także częstością przemieszczeń, przyjęto równe 1 kMC. (Fakt, że czas komputerowy t ma charakter dyskretny, nie ma w tym jednocząstkowym przypadku większego znaczenia.)

W wewnętrznej pętli konstruowane jest więc indywidualne „doświadczenie” komputerowe polegające na generowaniu dwuwymiarowego błędzenia przypadkowego pojedynczego punktu, który kreśli trajektorię swego ruchu na ekranie monitora.

Rysunki 1a i 1b stanowią kopię ekranu odpowiednio po pierwszym i czterdziestym kMC. Trajektoria tego ruchu jest, jak należało oczekiwać, linią łamaną złożoną z chaotycznie ukierunkowanych prostych odcinków. W każdym indywidualnym „doświadczeniu” komputer oblicza (linie 580 i 590) zależny od czasu kwadrat przesunięcia $[\Delta R(t)]^2 = \left(\sum_{j=1}^N \Delta r_j\right)^2$.

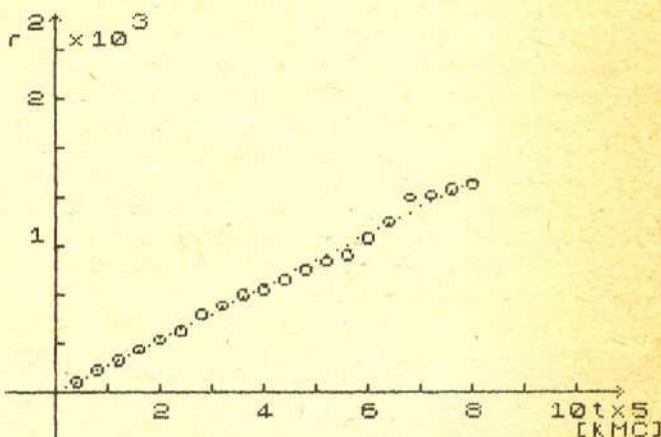
Następnie, między linią 620 a 640, uśrednia tę wielkość po utworzonym zespole statystycznym niezależnych „doświadczeń” (tzn. oblicza średnią arytmetyczną tej wielkości po liczbie „doświadczeń”), dając w efekcie zależne od czasu średnie przesunięcie kwadratowe $\langle [\Delta R(t)]^2 \rangle$. Wyniki otrzymane

```
nr exper.=2;liczba exper.=100
```



Rys. 1a. Kopia ekranu monitora po wykonaniu przez komputer drugiego „eksperymentu” należącego do zespołu statystycznego. Linia łamana pokazuje trajektorię cząstki Browna do chwili $t = 40$ kMC (kółko na środku rysunku oznacza miejsce startu w chwili $t = 0$).

z symulacji dla każdej chwili czasu t zestawiono w tabelce, którą komputer wyświetla na ekranie po zakończeniu „eksperymentu” (zależnie od czasu średnie przesunięcie kwadratowe oznaczono przez $\langle r^2(t) \rangle$). Ponadto wyniki te prezentuje w postaci wykresu (kółka na rys. 2) porównując je z przewidywaniami teoretycznymi (kropki na tym samym rysunku).



Rys. 2. Średnie przesunięcie kwadratowe $\langle [\Delta R(t)]^2 \rangle$ (oznaczone skróto przez r^2) jako funkcja czasu t . Kółkami zaznaczono wynik „doświadczenia” komputerowego, a kropkami dla porównania rezultat teoretyczny.

Można wykazać, że na mocy statystycznej niezależności elementarnych przemieszczeń zachodzi następująca zasadnicza relacja:

$$\langle [\Delta R(t)]^2 \rangle = \nu a^2 t,$$

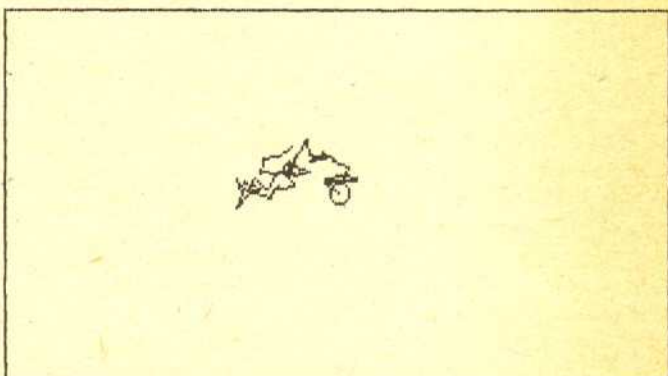
gdzie $\nu = N/t$. Wielkość tę można interpretować, dla dużych czasów t , jako średnią liczbę elementarnych przemieszczeń w jednostce czasu (czyli częstość przemieszczeń). W powyższym wzorze występuje charakterystyczna własność problemu: średnia z kwadratu N elementarnych przypadkowych niezależnych przemieszczeń jest proporcjonalna do N , a nie do N^2 . Stąd współczynnik dyfuzji D swobodnej cząsteczki Browna dany jest wzorem

$$D = \nu a^2 / 2d,$$

gdzie d jest wymiarem przestrzeni (w naszym przypadku, oczywiście, $d = 2$). Właśnie powyższe dwie relacje są sprawdzane w omawianym „doświadczeniu” statystycznym.

Wykres skonstruowano dla zespołu statystycznego składającego się z $s = 100$ indywidualnych „doświadczeń”, co, jak widać, zapewnia zadowalającą zgodność rezultatów „doświadczalnych” z przewidywaniami teoretycznymi. Liczba s jest daną wprowadzoną w linii 90 i w istocie rzeczy odpowiedzialną za rozrzut statystyczny punktów „doświadczalnych”. Przyjęcie np. $s = 400$ znakomicie zmniejsza rozrzut wyników, wydłuża jednak znacznie czas „eksperymentu” komputerowego. Wydaje się więc,

```
nr exper.=100;liczba exper.=100
(Datej dowolny klawisz)
```



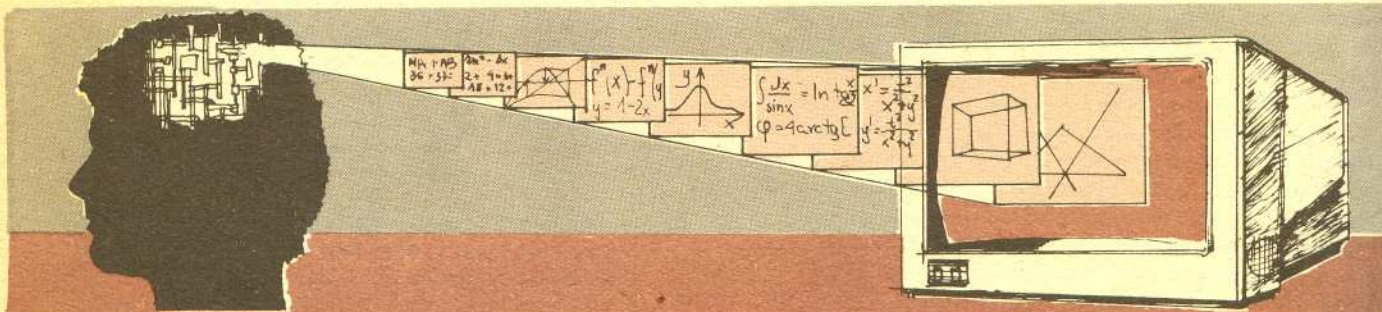
Rys. 1b. Analogiczna kopia ekranu po wykonaniu przez komputer ostatniego, setnego „eksperymentu”.

że $s \approx 100$ jest rozsądnym kompromisem — czas „eksperymentu” nie przekracza bowiem w takim przypadku 25 minut. Oczywiście komputer mógłby obliczać także i inne, niemniej ważne, charakterystyki ruchów Browna i porównywać je z teorią, ale tutaj chodziło jedynie o naszkicowanie idei, a nie o wyczerpującą analizę.

Jeżeli niektórzy Czytelnicy chcieliby we własnym zakresie dokonać modyfikacji zamieszczonego programu, to warto dodatkowo uwzględnić np. stochastyczny charakter długości elementarnego przemieszczenia. W tym celu należy wprowadzić linię przykładowo o numerze 365, w postaci: $LET I = -a * LN (RND)$ oraz w linii 370 i 380 dokonać zamiany zmiennej a na wyznaczoną powyżej długość elementarnego przemieszczenia l . Myślę, że Czytelnicy rozumieją, jakiemu (unormowanemu) rozkładowi prawdopodobieństwa podlega zmienna l . Należy zaznaczyć, że

przy takim podejściu wpływ warunków brzegowych (odbicie cząstki), przyjętych w programie, może być już istotny. Wymaga to więc ich zamiany na tzw. periodyczne warunki brzegowe.

Innym, ambitnym zagadnieniem, które mógłbym Ci zaproponować, Szanowny Czytelniku, do rozwiązania, może być np. wyznaczenie prawdopodobieństwa powrotu cząsteczki po czasie t do punktu startowego. Prawdopodobieństwo to jest jedną z głównych charakterystyk błędzenia przypadkowego. Warto dodać ponadto, że o ile ruchy Browna pojedynczej cząsteczki są wystarczająco przebadane, o tyle zagadnienie ruchów Browna wielu oddziałujących wzajemnie ze sobą cząsteczek w skondensowanej zawieszinie jest obecnie przedmiotem intensywnych badań i wydaje się, że właśnie symulacje komputerowe (zwłaszcza metodą Monte Carlo) mogą przyczynić się do ich głębszego zrozumienia.



Zadania

Redaguje dr Rafał SZTENCEL

M 445. Czy szachownicę o wymiarach 10×10 można pokryć kostkami domina o wymiarach 2×1 w taki sposób, by dokładnie połowa z nich była ustawiona poziomo?

Rozwiązanie na str. 14

M 446. Wykazać, że czworokąty wypukłe o tych samych środkach boków mają równe pola.

Rozwiązanie na str. 2

M 447. Startująca z zera cząstka błądzi losowo po prostej w taki sposób, że z prawdopodobieństwem p wykonuje krok o jednostkę w prawo, z prawdopodobieństwem $q = 1 - p$ w lewo; kolejne kroki są niezależne. Niech S_n oznacza położenie cząstki po n krokach.

Obliczyć $E \left(\frac{q}{p} \right)^{S_n}$.

Rozwiązanie na str. 7

Redaguje mgr Rafał STAROŃSKI

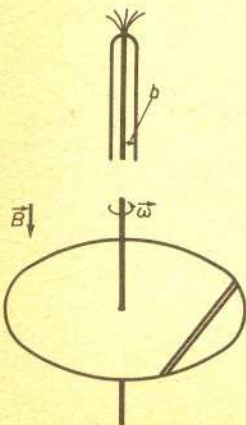
F 204. Piorunochron składa się ze sztywnego prostoliniowego przewodnika i otaczającej go metalowej rurki o promieniu $b = 1$ cm (rys. 1). W wyniku przepływu prądu wyładowania atmosferycznego rurka uległa zgnieceniu. Wyjaśnij dlaczego? Oszacuj wielkość ładunku elektrycznego, jaki przepłynął przez piorunochron, jeśli wiadomo, że rurka może wytrzymać ciśnienie nie większe niż 30 kPa, a czas przepływu prądu wynosi 10^{-3} s.

Rozwiązanie na str. 6

F 205. Płaska tarcza o promieniu R , wykonana z dielektryka, wiruje ze stałą prędkością kątową ω w stałym polu magnetycznym B skierowanym prostopadle do tarczy. Na powierzchni tarczy przymocowano wzdłuż cięciwy przewodnik o długości l (rys. 2). Obliczyć różnicę potencjałów między końcem przewodnika i jego środkiem.

Rozwiązanie na str. 3

Rys. 1



Rys. 2