

## ЛЕКЦІЯ 6. МОДЕЛЮВАННЯ ВИПАДКОВИХ СИСТЕМ

Моделі, розглянуті дотепер, були, в основному, *детермінованими*. Як відомо, особливість таких систем полягає в тому, що їх еволюція визначається набором ЗДР з визначеними початковими умовами. Розв'язання цих рівнянь дає нам опис фізичної системи для будь-якого моменту часу і, в цьому сенсі, є цілком передбачуваним, випадковість практично не має значення. Далі розглянемо саме випадкові або *стохастичні процеси* в системах, в яких випадковість тої чи іншої події відіграє визначальну роль. Випадковість може виникнути з цілого ряду причин. Наприклад, може виявитися, що ми не знаємо (або не можемо знати) початкові умови (позиції координат та початкові швидкості) для всіх частинок у системі. Або ж наша система взаємодіє з термодинамічним резервуаром за якимось складним законом, і все, що ми знаємо, – це лише імовірність тої чи іншої події. Найчастіше мова йде про системи з великою кількістю степенів свободи, які виникають при описі якогось макроскопічного об'єкту, наприклад, газу, рідини або ансамблю спінів у магнетику.

Одною з таких типових проблем є *дифузія або броунівський рух*. Прикладом може бути розповсюдження краплини молока у чашці з кавою. Питання, яке ми ставимо, є досить простим: якщо у звичайній чашці поширення молока від центру чашки до стінок триває, скажімо, 20 с, то скільки часу триватиме такий рух для чашки з радіусом, удвічі більшим? Розв'язок ЗДР для всіх «молекул» (частинок) молока з початковими умовами дасть нам положення кожної частинки у будь-який момент часу та її швидкість, але не допоможе відповісти на поставлене питання. Тому звернімося до *статистичного опису*, яке замінює детермінований опис стохастичним.

### 6.1 Випадкові кроки та блукання

**Випадкові блукання** це математична формалізація шляху, що складається з послідовності випадкових кроків. Випадкове блукання може бути ланцюгом Маркова або процесом. Випадкові блукання можуть моделювати рандомізовані процеси в таких галузях, як фізика, хімія, біологія, інформатика, екологія, економіка, психологія, тощо.

Змоделюємо процес випадкової поведінки як випадковий вибір кроку (random walk). В даному випадку процес зіткнення молекули молока з іншою частинкою

моделюється, як покроковий рух, де кожний новий крок обирається випадковим чином. У найпростішому випадку одновимірного руху кожний крок має одиничну довжину, і рух відбувається уздовж однієї лінії. Стартуючи з  $x=0$ , ми обираємо крок з імовірністю 0.5 ліворуч або праворуч. Число (кількість) кроків  $n$  пропорційне часу  $t$ . Таким чином, ми отримаємо положення частинки як функцію часу (число кроків). При моделюванні ми генеруємо випадкове число від 0 до 1 і, залежно від того, більшим або меншим є це число від 0.5, наш рух відбувається ліворуч або праворуч. Процес повторюється  $n$  разів для отримання  $x(n)$ .

Найпростіша програма випадкових кроків для одновимірного випадку наведена нижче, а на рис.6.1 наведений відповідний графік для 1000 кроків. Для онлайн-спостереження за випадковими блуканнями можна використати функцію `comet`.

```

:
% задання кількості випадкових кроків step
:
t = 1:step;
y = cumsum(rand(step,1) - 0.5);
figure;
grid on;
plot(t,y);
title('1-вимірний процес випадкових блукань для 1000 кроків');
grid on

```

У випадку, наприклад, 7 одновимірних випадкових блукань по 1000 кроків отримаємо графіки, подібні до наведених на рис.6.2.

Важливо також слідкувати за поведінкою середнього квадрату зміщення  $\langle x^2 \rangle$  для великого числа реалізацій цієї випадкової процедури. Відомо, що середнє значення квадрату зміщення змінюється лінійно з числом кроків:  $\langle x^2 \rangle = 2Dn = 2Dt$ .

Поведінка частинки з випадковим вибором кроку дуже відрізняється від поведінки частинки, що рухається вільно. Якщо для частинки, що рухається вільно, її характерне положення у будь-який момент часу визначається як  $x = vt$ , де  $v$  – швидкість розповсюдження, то для дифундуючої частинки  $\sqrt{\langle x^2 \rangle} \sim \sqrt{t}$ , тобто частинка, що рухається стохастично, розповсюджується значно повільніше вільної частинки. Крім того, саме середнє відхилення дорівнює нулю для стохастичного руху.

З наведеного вище виходить відповідь на запитання, поставлене раніше: при збільшенні радіусу чашки вдвічі молекулам молока знадобиться в 4 рази більше часу для досягнення стінок чашки.

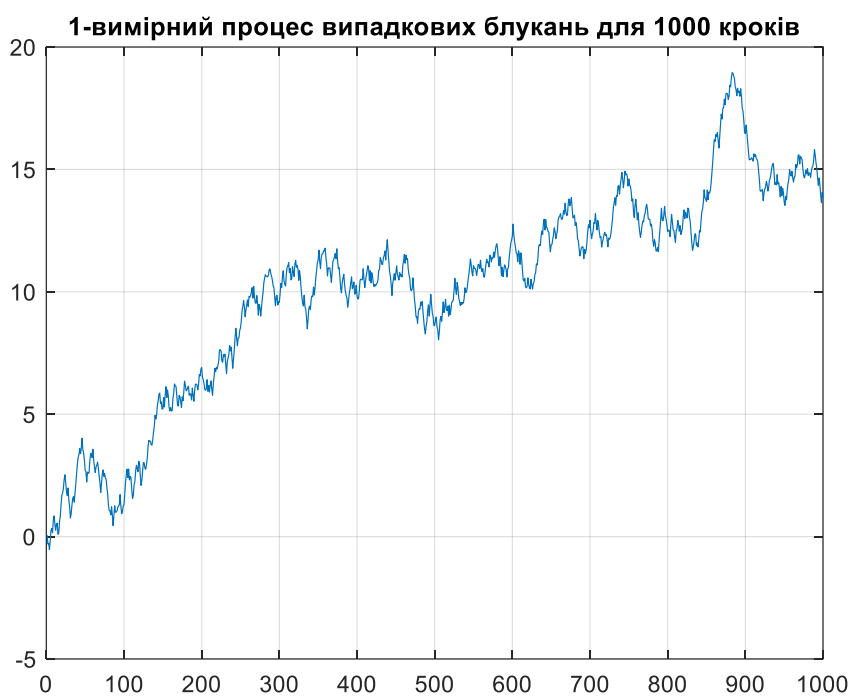


Рисунок 6.1 – Випадкові блукання (одновимірний випадок)

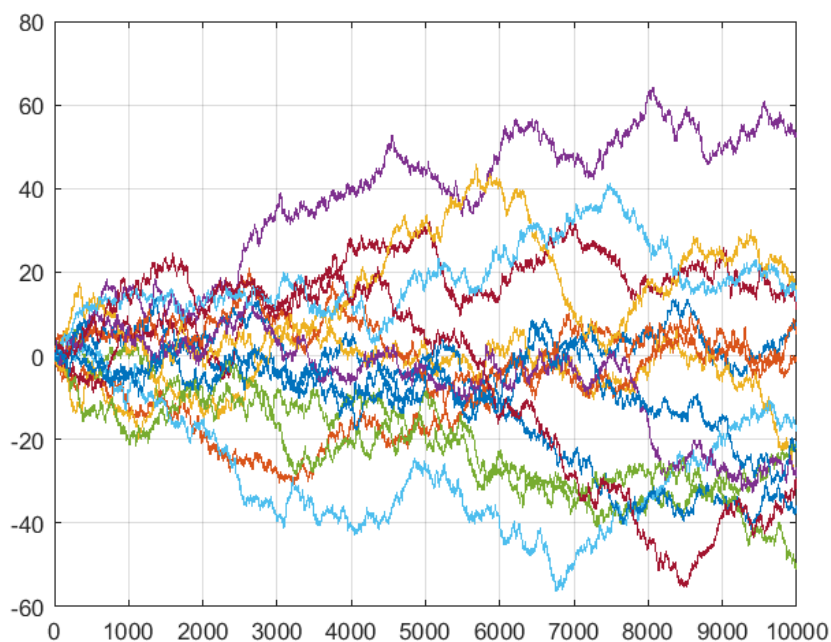


Рисунок 6.2 – 7 одновимірних випадкових блукань

Константу пропорційності  $D$  легко обчислити аналітично. Для одновимірного стохастичного руху вона дорівнює  $1/2$ . Крім того, розраховуючи флуктуації від середнього квадрата зміщення за стандартною формулою  $\sqrt{\langle x_n^4 \rangle - \langle x_n^2 \rangle^2}$  (для одновимірного випадку це можна зробити аналітично, а у випадку систем з більшими розмірностями – розрахувати чисельно), ми отримаємо, що ці флуктуації  $\sqrt{\langle x_n^4 \rangle - \langle x_n^2 \rangle^2} \sim \sqrt{2n}$ . Це надає додаткову інформацію про стохастичний рух: відстань між двома окремими частинками при дифузії також збільшується з часом.

## 6.2 Випадкові блукання без самоперетинів

У випадку дифузного руху на кожному новому етапі вибір наступного кроку цілком випадковий і не залежить від попереднього кроку. Така поведінка не підходить для опису поведінки зростання полімерних молекул, наприклад, таких, які наведені на рис.6.3.

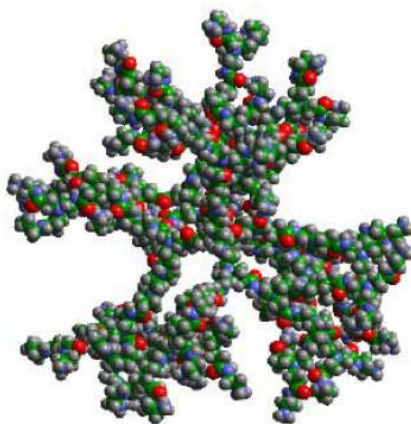


Рисунок 6.3 – Типова структура полімерної молекули, що складається з простіших сполучних ланок, мономерів

Припустимо, що ми прагнемо описати структуру зростання такої молекули та її статистичні властивості. Схема простого випадкового вибору кроку (random walk), розглянута вище, в принципі підходить і для цього випадку, але з важливою зміною. Вважатимемо кожний мономер за один крок в такому русі, при цьому в разі полімеру його складові-мономери не можуть перетинатися один з одним. Кожний сегмент полімеру займає свою область в просторі. Таке обмеження дифузного руху призводить

нас до поняття *випадкових блукань без самоперетинів* – self-avoided random walk (SAW). Моделювання такої поведінки є досить простим, і безліч згенерованих кроків без перетинів дасть нам можливість досліджувати їх ансамбль статистично.

Однак важливо пам'ятати, що кожна реалізація такої поведінки повинна бути статистично рівноймовірною, порівняно з іншою реалізацією. Однак легко бачити, що у випадку, наведеному на рис.6.4, після 3-го кроку виникає проблема. Якщо у випадку (а) є три можливі реалізації 4-го кроку, то у випадку (б) їх всього дві (ліворуч і вгору). Це означає, що якщо ми на кожному новому кроці SAW вибиратимемо кроки лише з можливо доступних, то імовірність 4-го кроку у випадку (а) буде  $2/3$  від імовірності кроку у випадку (б). Тобто ці дві конфігурації не будуть статистично рівноймовірними в такому випадку. Для виправлення ситуації краще зберігати рівноймовірність кожного нового кроку ( $1/4$  у двовимірному варіанті) і припиняти реалізацію SAW в тому випадку, якщо новий крок призведе до самоперетину. Тільки в цьому випадку отриманий статистичний ансамбль з множини SAW буде правильним. При порівнянні властивостей SAW у дво- та тривимірному варіантах особливість SAW полягає в тому, що поширення частинок відбувається швидше, ніж при дифузному русі. У двовимірному випадку корінь із середнього квадратичного відхилення  $\sqrt{\langle r^2 \rangle} \sim t^{1.5}$ , тобто щось середнє між частинкою, що вільно рухається, і дифундуючою частинкою.

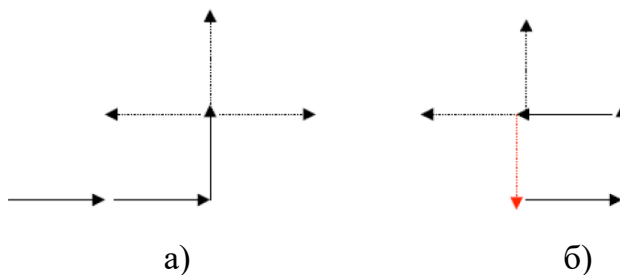


Рисунок 6.4 – Два варіанти розвитку руху без самоперетину (SAW) у двовимірному випадку

Одним з фізичних процесів, який можна описати за допомогою процедури випадкових кроків, є це *зростання кластерів*. Розглянемо два приклади: кластер Едена (рис.6.5,а) та кластер, отриманий методом обмеженої дифузії (рис.6.5,б).

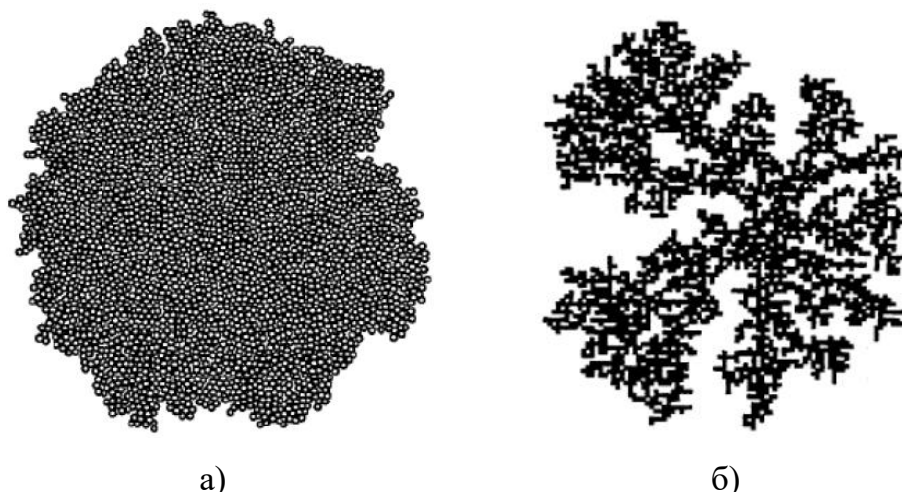


Рисунок 6.5: а) Кластер Едена; б) DLA-кластер

У випадку *двовимірного кластера Едена* розташуємо зерно кластера на початку системи координат ( $x=0$ ,  $y=0$ ). Кожна нова частинка додається рівноймовірно по периметру границі вже існуючого кластера. Таким чином, вже на першому кроці в нас є 4 можливі варіанти  $(0, \pm 1)$  та  $(\pm 1, 0)$ , і, обираючи один з них рівноймовірно, ми приєднуємо його до кластера. Новий кластер містить 2 частинки і більший периметр. Відповідно, процес повторюється: по периметру з рівною імовірністю обирається новий незайнятий вузол з усіх можливих і приєднується до кластера. Дана процедура повторюється доти, поки кластер не набуде необхідного розміру. Відповідна програма `eden.m` наведена нижче.

```
function eden(L, STEPS) % Зростання кластерів за методом Едена
% L - параметр сітки, STEPS - число кроків
S=[1 0; 0 1; -1 0; 0 -1]; % вектор, в який додається частинка
X=zeros(2*L+1,2*L+1); % визначення сітки
X(L,L)=1; % визначення вузла на сітці
NEXT=S; % крок
for i=1:STEPS
    % визначення випадковим чином незайнятого вузла по периметру кластера
    R=ceil(length(NEXT)*rand(1));
    CURRENT=NEXT(R,:);
    NEXT(R,:)=[]; % займання позиції поза периметром кластеру
    X(L+CURRENT(1),L+CURRENT(2))=1;
    h=pcolor(X);
    colormap(cool);
    set(h,'LineStyle','none');
    pause(0.1)
```

```

for j=1:4
    % визначення нового периметру кластера
    NEXT_T=CURRENT+S(j,:);
    if(X(L+NEXT_T(1),L+NEXT_T(2))==0)
        NEXT(length(NEXT)+1,:)=NEXT_T;
    end
end
end
h=pcolor(X);      colormap(cool);    set(h,'LineStyle','none');    title('Кластер Едена');
end

```

Результат роботи команди `eden(40,1000)` (рис.6.6) подібний до кластеру, наведеного на рис.6.5,а. Як бачимо, кластер Едена має не дуже рівні границі, але в цілому нагадує диск. Це стає ще помітнішим, якщо збільшити число частинок.

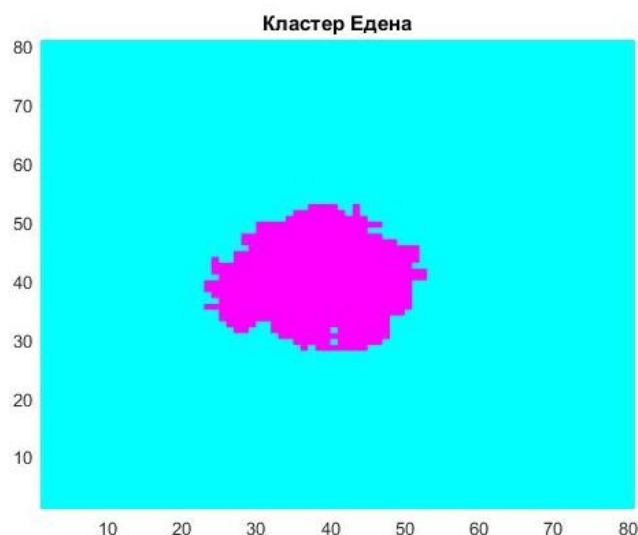


Рисунок 6.6 – Результат роботи процедури отримання кластера Едена

Однак не всі кластери зростають (утворюються) подібно до кластеру Едена. Наприклад, сніжинки або кристали зростають *методом обмеженої дифузії (DLA – diffusion limited aggregation)*. Він описується наступним алгоритмом.

Обирається початок координат в точці  $(0,0)$ , де розміщується зерно кластера. Після цього випадковим чином обирається вузол  $(x,y)$ , розташований далеко від початку координат. З розташування  $(x,y)$  починаються випадкові кроки (random walk), які в якийсь момент перетинаються з периметром зерна. Після цього вся ця «траєкторія» стає частиною кластеру. Процедура випадкових кроків повторюється доти, поки не створиться необхідний кластер. *Даний процес моделює не клітинне зростання, як модель кластера Едена, а зростання великих молекул або інших об'єктів*

з менших, які перебувають у рідкому розчині. Результат моделювання такого кластера наведений на рисунку 6.5,б. Потрібно зазначити, що при виборі точки для початку руху за допомогою процедури випадкових кроків (random walk) потрібно відступити на деякий радіус  $r$  від початку границь кластера. Крім того, якщо в процесі випадкового руху рухатись занадто далеко від вже існуючого кластера, скажімо, на відстань, більшу, ніж  $1.5r$  від початку координат, то варто припинити дану реалізацію випадкових кроків. І почати нову, оскільки імовірність того, що ця реалізація дійде до вже існуючого кластера, є досить малою.

*Порівнюючи два кластери, отриманих двома різними методами, бачимо суттєву різницю. Кластер Едена має досить регулярну структуру. У разі ж DLA-кластера, незважаючи на великий розмір, є величезна кількість порожнин, і границя такого кластера є вкрай нерегулярною. Кількісно це можна описати за допомогою поняття розмірності об'єкту.*

Розглянемо диск, що лежить в  $x$ - $y$ -площині. Його маса, обмежена колом радіуса  $r$ , визначається як  $m(r) = \sigma \pi r^2$ , де  $\sigma$  – це маса на одиницю поверхні, і  $r$  обраний таким чином, що все коло розміщується всередині диска. При збільшенні  $r$  можна побачити, що маса збільшуватиметься як  $r^2$ , де 2 – це і є розмірність об'єкта. Для лінійного об'єкта маса визначиться як  $m(r) = 2\lambda r$ , де  $\lambda$  – це маса на одиницю довжини. Тепер маса при збільшенні довжини  $r$  змінюватиметься також лінійно, тобто таким же чином, як і розмірність об'єкта. Тому введемо розмірність нашого кластера як  $m(r) \sim r^{d_f}$ , де  $d_f$  – це ефективна або так звана **фрактальна розмірність об'єкта**.

Тепер можна визначити розмірності кластерів Едена та DLA. Припускаючи, що всі частинки мають одну й ту ж масу, можна знайти фрактальну масу кластера як функцію відстані від початку координат. Рекомендується використовувати логарифмічну шкалу  $\log m \sim d_f \log r$ , тоді нахил отриманої прямої в подвійному логарифмічному масштабі ( $\log$ - $\log$ ) і дасть шукану розмірність.

### Контрольні питання

1. Випадкові блукання без перетинів.
2. Моделювання зростання кластерів.
3. Фрактальна розмірність об'єкту.