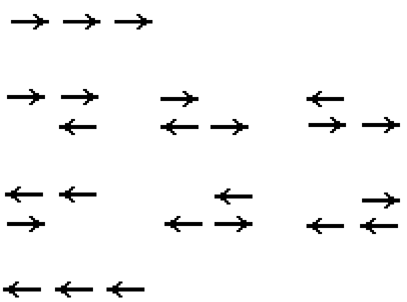
**Випадкові блукання (стохастичний метод Монте-Карло)**

## 1. Задача про випадкове блукання

Нехай матрос може рухатися вправо з імовірністю $p$, вліво з імовірністю $q = 1 - p$ з однаковим кроком $l$. Необхідно визначити з якою імовірністю $P_N(x)$ через $N$ випробувань частинка буде знаходитись на відстані $x$ від початкової точки $x_0 = 0$.

Звичайно, цю задачу можна розв’язати аналітично або використати комп'ютер як генератор всіх можливих перестановок блукань. Наприклад, якщо розглянути три кроки випадкового блукання, то можливі два варіанти зміщення на три кроки (вправо з імовірністю $p^3$ або вліво з імовірністю $q^3$) та шість варіантів зміщення на один крок (три вправо з імовірністю $p^2 q$ або три вліво з імовірністю $pq^2$ ). Тоді середнє зміщення

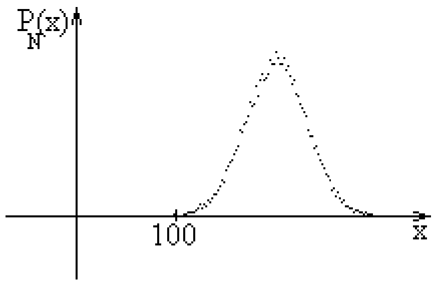
$$\langle x_3 \rangle = -3l \cdot q^3 - l \cdot 3pq^2 + l \cdot 3p^2 q + 3l \cdot p^3 .$$



Оскільки кількість можливих траєкторій блукань $2^N$ (для розглянутого прикладу вісім траєкторій, рис.) для одновимірного простору, то для *d*-вимірного простору кількість блукань обмежена через громіздкість операцій.

Альтернативним варіантом може бути вибірка, статистичний характер якої дасть інформацію про процес в цілому. Наприклад, якщо розглядати команду (ансамбль) матросів, кожен з яких незалежно від інших проходить випадковий шлях довжиною $N$ кроків з однієї початкової точки, то більшість матросів після однакової кількості кроків матимуть однакову координату $x_N$, а кількість матросів з іншою координатою тим менша, чим далі вони від $x_N$. Тобто для визначення імовірності знаходження матроса в певній точці $x$ моделюється багато запусків $M$, за якими робиться усереднення для визначення середнього зміщення за $N$ кроків, і визначається імовірність появи частинки в заданій точці $x$ як

$$P_N(x) = \frac{m}{M} ,$$




де $m$ - кількість запусків зі зміщенням $x$. На рисунку показано розподіл імовірностей $P_{1000}(x)$ для $M = 30000$ запусків, кожен з яких містив $N = 1000$ кроків. Імовірність кроку вправо $p = 0.6$, тому пік зміщений вправо.

Статистичний характер задачі випадкового блукання означає, що ми розглядаємо або велику кількість послідовних блукань, або велику кількість однакових частинок, що рухаються одночасно.

Отже, для реалізації запропонованого методу необхідні випадкові числа. Способи розв'язування задач, що використовують випадкові величини, отримали загальну назву ***стохастичних методів*** або методів Монте-Карло (МК-методів). Як правило, ці методи передбачають багаторазове відтворення імовірносного алгоритму. Чим більше повторень, тим точніший результат.

## 2. Моделювання одновимірних блукань

Для моделювання одновимірних випадкових блукань задається ансамбль $M$ частинок, кожна з яких незалежно від інших робить $N$ кроків (довжина кроку $h$) вліво або вправо з однаковою імовірністю.

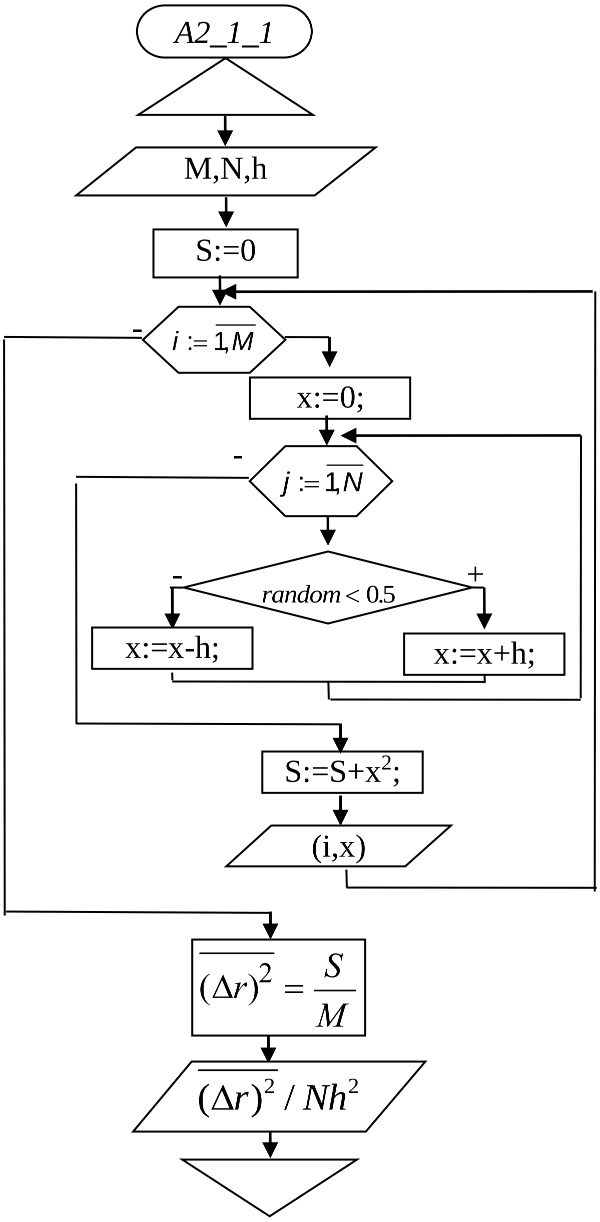
Для кожної частинки визначається квадрат зміщення $(\Delta r)^2$ за $N$ кроків. Далі проводиться усереднення по ансамблю $\overline{(\Delta r)^2}$ . Величина $\dfrac{\overline{(\Delta r)^2}}{Nh^2} \to 1$, якщо $M \to \infty$, тобто середній квадрат зміщення пропорційний часу випадкових блукань $t = N\tau$ ( $\tau$ - середній час одного кроку) – параболічний закон дифузії.

**Алгоритм 1**

0. Ініціалізувати генератор випадкових чисел.
1. Обнулити суматор $S$ середнього квадрату зміщення.
2. Лічильнику частинок $i$ присвоїти 1.
3. Поки $i \le M$ виконувати:
   а) задати початкове значення координати частинки $x = 0$;
   б) лічильнику кроків $i$-ої частинки $j$ присвоїти 1;
   в) поки $j \le N$ виконувати
   і) якщо $random < 0.5$, то координату частинки зменшити на $h$ (крок вліво), інакше збільшити на $h$ (крок вправо);
   іі) лічильник кроків частинки $j$ збільшити на одиницю;
   г) $S = S + x^2$;
   д) лічильник частинок $i$ збільшити на одиницю.
4. Знайти середній квадрат зміщення $\overline{(\Delta r)^2} = \dfrac{S}{M}$, усереднений по ансамблю.
5. Визначити значення $\dfrac{\overline{(\Delta r)^2}}{Nh^2}$.
6. Кінець алгоритму.

***Тестовий приклад.*** $M = 1000$, $N = 100$, $h = 2$.

***Завдання.*** 1. Виконати алгоритм для випадкових блукань з вітром (імовірність кроків вправо і вліво різна) та перевірити чи виконується параболічний закон дифузії.
2. Модифікувати алгоритм для двовимірних випадкових блукань. Для цього врахувати кроки вліво, вправо, вгору, вниз (алгоритм 2, пункт 6) і визначити середній квадрат зміщення як $x^2 + y^2$.




## 3. Випадкові блукання та розподіл імовірностей

Для визначення імовірносного розподілу частинок при одновимірних випадкових блуканнях (алгоритм 2) використаємо гістограму $P_k(m)$ з шириною стовпчика $\Delta x$, де $m$ - кількість матросів, положення яких після $N$ кроків відповідає умові $k \cdot \Delta x - \dfrac{\Delta x}{2} < x \le k \cdot \Delta x + \dfrac{\Delta x}{2}$.

Для побудови гістограми необхідно описати масив $p$ з індексами від $-K$ до $K$, де $K = round\left(\dfrac{Nh}{\Delta x}\right)$ ($Nh$ - максимально можливе зміщення, коли всі кроки однонаправлені), елементи якого будуть відповідати кількості матросів, що попали в даний інтервал $\Delta x$.

**Алгоритм 2**

0. Ініціалізувати генератор випадкових чисел.
1. Обнулити значення масиву $p$.
2. Лічильнику частинок присвоїти одиницю.
3. Поки $i \le M$ виконувати:
   а) задати початкове значення координати частинки $x = 0$;

б) лічильнику кроків $i$ -ої частинки $j$ присвоїти 1;

в) поки $j \le N$ виконувати:

і) якщо $random < 0.5$, то координату частинки зменшити на $h$ (крок вліво), інакше збільшити на $h$ (крок вправо);

іі) лічильник кроків частинки $j$ збільшити на одиницю;

г) визначити номер стовпчика діаграми $k = round\left(\dfrac{x}{\Delta x}\right)$;

д) збільшити кількість матросів в $k$ -му інтервалі $p[k] = p[k] + 1$;

е) вивести нове значення $k$ -ого стовпчика.

є) лічильник частинок $i$ збільшити на одиницю.

4. Кінець алгоритму.

***Тестовий приклад.*** $M = 1000$, $N = 100$, $h = 2$, $\Delta x = 5$.

***Завдання.*** Для перевірки того, що отриманий розподіл є розподілом Гауса, слід використати метод найменших квадратів (підпрограма MMS) для значень $((k \cdot \Delta x)^2, \ln(p[k]))$ для ненульових значень масиву $p$, оскільки для розподілу Гауса $p \sim e^{-cx^2} \Rightarrow \ln p = const - cx^2$.

***Зауваження.*** Елементи масиву $p$ з індексами, близькими до $K$ та $-K$, (хвости функції розподілу) матимуть ненульові значення (імовірність, що всі кроки буде зроблено в один бік) лише для нескінченно великого ансамблю частинок. Оскільки при обробці методом найменших квадратів розглядається логарифм імовірностей, то нульові значення не можна використовувати, тому слід визначити межі крайніх ненульових елементів масиву $p$.