УДК 515.2:517.2

Ю.І. НІКОЛАЄНКО
Херсонський фізико-технічний ліцей при ХНТУ і ДНУ
Р.О. ЄВДОКИМОВ
Херсонський фізико-технічний ліцей при ХНТУ і ДНУ
С.В. МОІСЕЄНКО
Херсонський національний технічний університет

РОЗВ'ЯЗОК ЗАДАЧІ ХРОНОМЕТРУВАННЯ В СЕРЕДНЬОМУ ВИПАДКОВИХ БЛУКАНЬ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

В роботі запропоновано ефективний метод розв'язання задачі хронометрування в середньому випадкових блукань – знаходження середньої кількості кроків (середнього часу) блукаючої частинки до поглинання у вузлі-пастці для сіткової області з довільним розташуванням вузлів-пасток методом Монте-Карло. При розв'язанні задачі використовується ітераційна процедура обчислення апріорних перехідних ймовірностей із звичайних вузлів області у вузли-пастки. Показано, що абсолютна похибка результату вище зазначеним методом при збільшені числа ітерацій зменшується за експоненціальним законом..

Ключові слова: задача хронометрування, метод Монте-Карло, випадкові блукання, вузли-пастки, ітераційна процедура.

Ю.И. НИКОЛАЕНКО
Херсонский физико-технический лицей при ХНТУ и ДНУ
Р.О. ЕВДОКИМОВ
Херсонский физико-технический лицей при ХНТУ и ДНУ
С.В. МОИСЕЕНКО
Херсонский национальный технический университет

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ХРОНОМЕТРИРОВАНИЯ В СРЕДНЕМ СЛУЧАЙНЫХ БЛУЖДАНИЙ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

В работе предложен эффективный метод решения задачи хронометрирования в среднем случайных блужданий – нахождение среднего количества шагов (среднее время) блуждающей частички до попадания в узел-ловушку для сеточной области с произвольным расположением узлов-ловушек методом Монте-Карло. При решении задачи используется итерационная процедура вычисления априорных переходных вероятностей из обычных узлов области в узлы-ловушки. Показано, что абсолютная погрешность результата полученного выше указанным методом при увеличении числа итераций уменьшается по экспоненциальному закону.

Ключевые слова: задача хронометрирования, метод Монте-Карло, случайные блуждания, узлы-ловушки, итерационная процедура.

Y.I. NIKOLAENKO
Kherson physico-technical liceum at KNTU and DNU
R.O. YAVDOKIMOV
Kherson physico-technical liceum at KNTU and DNU
S.V. MOISEENKO
Kherson National Technical University

SOLUTION OF THE CHRONOMETRIZATION PROBLEM IN THE MIDDLE OF RANDOM WALKS BY THE MONTE-CARLO METHOD

An effective method for solving the problem of timekeeping in the mean of random walks is to find the average number of steps (average time) of a wandering particle before it enters the trap node for a grid region with an arbitrary arrangement of trap nodes by the Monte Carlo method. When solving the problem, an iterative procedure is used to calculate the a priori transition probabilities from ordinary nodes in the region to trap nodes. It is shown that the absolute error of the result in calculating the above by the indicated method decreases exponentially with an increase in the number of iterations.

Key words: timekeeping problem, Monte Carlo method, random walks, trap nodes, iterative procedure.

Постановка проблеми

Моделі випадкових блукань при наявності пасток відіграють важливу роль у фізиці конденсованого стану [1]. Наприклад, за допомогою моделі випадкових блукань розглядається переміщення екситонів (електронних збуджень молекул) у кристалі напівпровідника або діелектрика, або переміщення вакансій у кристалі. Екситони закінчують блукання тоді, коли вони попадають в молекули домішок, в яких при цьому відбувається певний фізичний процес, наприклад, хімічна реакція. Вакансії закінчують блукання при потраплянні на поверхню кристалу. Таким чином для екситонів пастками є молекули домішок, а для вакансій – всі молекули поверхні кристалу.

Однією з важливих задач є задача хронометрування в середньому випадкових блукань [2], т.б. визначення середньої кількості кроків, які зробить частинка до потрапляння у вузол-пастку. Цю задачу було запропоновано розв'язати у посібнику [1] для одновимірного кристалу методом статистичних випробувань. Замість методу статистичних випробувань в [4-6] застосовувалася ітераційна процедура для розрахунку апріорних перехідних ймовірностей в схемах випадкових блукань, а також при розв'язанні задач відновлення функції.

Мета статті

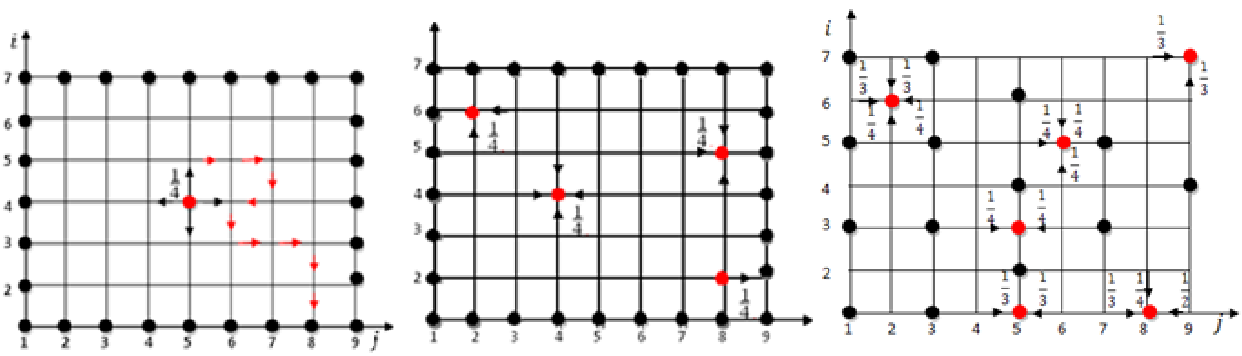
В даній роботі ставиться задача, використовуючи модель випадкових блукань частинки при наявності пасток, визначити середню кількість кроків (середній час), які зробить блукаюча частинка у двовимірній сітковій області до потрапляння у вузол-пастку, за допомогою ітераційної процедури обчислення апріорних перехідних ймовірностей з звичайних вузлів області у вузли-пастки.

Викладення основного матеріалу дослідження

Для подальшого аналізу результатів проведемо розрахунок середньої кількості кроків частинки до поглинання на межі області методом статистичних випробувань.

Вкриємо область сіткою розміром m х n з квадратними комірками розміром h х h, у якій усі вузли на межі є вузлами-пастками (рис. 1а). Розглянемо рівномірні випадкові блукання частинки на цій сітці.

Нехай, частинка починає свої блукання з вузла (i, j). Тоді з ймовірністю ¼ вона на першому кроці переходить у один з сусідніх вузлів. Цей процес повторюється до тих пір, доки частинка не поглинається у вузлу-пастці.



а) б) в)

Рис. 1. Схеми випадкових блукань з пастками: а) на межі області методом статистичних випробувань; б) на межі області для ітераційної процедури; в) довільно розподіленими по всій решітці для ітераційної процедури

Розрахуємо методом статистичних випробувань середнє число кроків, які виконає частинка до поглинання у вузлу-пастці. Для цього перед кожним кроком генеруємо випадкове число r , яке визначає напрям руху на кожному кроці. При цьому кількість кроків до поглинання для k-ого експерименту при старті частинки з вузла з координатами (i, j) позначаємо $S^k(i, j)$. Процедуру повторюємо при старті з того ж самого вузла N раз. Тоді середню кількість кроків розраховуємо за формулою:

$$\overline{S}(i,j) = \frac{s^1(i,j) + s^2(i,j) + \ldots + s^N(i,j)}{N} \quad (1)$$

Для прикладу розглядалась решітка розміром 7x9 (рис. 1а). Окремі результати іспитів представлені в табл. 1.

Результати експериментів для 10^3, 10^5 і 10^7 іспитів показують, що після 10^7 іспитів точність розрахунків підвищилась не більше, ніж до трьох точних значущих цифр.

Результати розрахунків добре узгоджуються з відомим теоретичним результатом: середньоквадратична похибка в N незалежних іспитах в $\sqrt{N}$ менше середньоквадратичної похибки окремого іспиту [3]:

$$\sigma_N = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}. \quad (2)$$

Таблиця 1

Середня кількість кроків частинки до поглинання у вузлу-пастці при старті з вузла (i, j) при 10^7 іспитах

i \ j	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	4,0814492	6,2476202	7,3158928	7,6326642	7,315579	6,246976	4,0870995	0
3	0	6,0954417	9,5884243	11,3821969	11,9162237	11,36907	9,588222	6,0971504	0
4	0	6,7060029	10,6375534	12,6690428	13,29752	12,66581	10,6395	6,7054932	0
5	0	6,1004948	9,5893314	11,3726463	11,9219602	11,37143	9,589563	6,0972213	0
6	0	4,0833972	6,2476296	7,309481	7,6321031	7,308473	6,24703	4,0895883	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Машинний час (с)						113,213			

Це означає, що для збільшення точності результату на одну точну значущу цифру методом статистичних випробувань треба збільшити кількість іспитів у 100 разів.

При використанні ітераційної процедури розраховується ймовірність $P_{k,l}^{m}(i, j)$ знаходження частинки у вузлу (k, l) сіткової області на кожному кроці m, якщо вона почала блукання з вузла з номером (i, j).

Якщо блукання частинки починається з вузла (i, j), ймовірність перебування частинки у вузлу (i, j) до початку блукань буде $P_{i,j}^{0}(i, j) = 1$. Тоді на m-му кроці ймовірність перебування частинки у вузлу (k, l), який не належить межі, можна розрахувати за формулою повної ймовірності :

$$P_{k,l}^{m}(i, j) = \frac{1}{4} \sum_{(s,t)} P_{s,t}^{m-1}(i, j), \tag{3}$$

де (s, t) – сусідні вузли для вузла (k, l), які не належать межі.

Це проілюстровано на рис.1б. Якщо вузол (i, j) не має сусідів-пасток, то в цей вузол частинка може потрапити по чотирьом маршрутам. Якщо вузол (i, j) знаходиться біля межі, то частинка може в нього потрапити по трьом або двом маршрутам. Потрапляння у вузол на межі області може відбуватися тільки по одному маршруту.

Якщо вузол (k, l) – це вузол-пастка, то ймовірність перебування у вузлі-пастці на m-му кроці треба розраховувати за формулою:

$$P_{k,l}^{m}(i, j) = P_{k,l}^{m-1}(i, j) + \frac{1}{4} \sum_{(s,t)} P_{s,t}^{m-1}(i, j), \tag{4}$$

де (s, t) – сусідні вузли для вузла (k, l), який не належить межі.

В формулі (4) враховано те, що у вузол-пастку частинка може потрапити тільки з одного сусіднього вузла, і ймовірність перебування частинки у вузлу-пастці на кожному кроці накопичується.

Доки ймовірність знаходження частинки у вузлах-пастках дорівнює нулю, частинка з ймовірністю 1 може зробити наступний крок. Але в подальшому сумарна ймовірність перебування частинки в звичайних вузлах стає менше 1 і перед кроком m буде дорівнювати

$$P_m(i, j) = 1 - \sum_{(k,l)} P_{k,l}^{m-1}(i, j), \tag{5}$$

де (k, l) – вузли-пастки. Саме з ймовірністю $P_m(i, j)$ частинка робить наступний крок.

Введемо випадкову величину $S_m(i, j)$, яка показує скільки кроків частинка зробить на m-му кроці. Ця величина приймає значення 0 або 1. Частинка робить крок з ймовірністю $P_m(i, j)$, і не робить крок з ймовірністю $1 - P_m(i, j)$. Математичне сподівання цієї випадкової величини розраховується за формулою:

$$M\left[S_m(i,j)\right] = 1 \cdot P_m(i,j) + 0 \cdot (1 - P_m(i,j)) = P_m(i,j). \tag{6}$$

Повна кількість кроків $S(i,j)$ – теж випадкова величина, і ця величина дорівнює сумі випадкових величин $S_m(i,j)$:

$$S(i,j) = \sum_m S_m(i,j). \tag{7}$$

Середня кількість кроків $\overline{S}(i,j)$, які робить частинка до потрапляння у пастку, дорівнює математичному сподіванню від повної кількості кроків $S(i,j)$, і за властивостю математичного сподівання дорівнює сумі математичних сподівань для кожного кроку :

$$\overline{S}(i,j) = M\left[S(i,j)\right] = \sum M\left[S(i,j)\right] = P_1(i,j) + P_2(i,j) + \ldots. \tag{8}$$

Процес розрахунків за формулою (8) завершуємо тоді, коли при заданій точності обчислення на кроці $m=N$ значеннями $P_{N+1}(i,j),\ P_{N+2}(i,j), \ldots$ можна знехтувати. Окремі результати експериментів представлені в табл. 2.

Таблиця 2

Середня кількість кроків частинки до поглинання у вузлу-пастці при старті з вузла (i, j) за 75 ітерацій

i \ j	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	4,085566	6,247007	7,314153	7,636859	7,314153	6,247007	4,085566	0
3	0	6,095273	9,588339	11,37278	11,91917	11,37278	9,588339	6,095273	0
4	0	6,707214	10,63834	12,66954	13,29433	12,66954	10,63834	6,707214	0
5	0	6,095273	9,588339	11,37278	11,91917	11,37278	9,588339	6,095273	0
6	0	4,085566	6,247007	7,314153	7,636859	7,314153	6,247007	4,085566	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Машинний час (с)						0,006			

Порівнюючи отримані результати з результатами статистичних випробувань робимо висновок, що для отримання результату з трьома точними значущими цифрами методом статистичних випробувань необхідно 10^7 іспитів та машинний час 113,213 секунд. Натомість за допомогою ітераційної процедури необхідно 75 ітерацій та машинний час 0,006 секунд при розрахунку на тому ж самому комп'ютері.

Порівнюючи результати при застосуванні ітераційної процедури для 25, 50, 75 і 225 ітерацій, встановлено, що після 25-ти ітерацій значення середньої кількості кроків отримані тільки з однією точною значущою цифрою. Після 50-ти ітерацій точними є вже дві значущі цифри, а після 75-ти ітерацій точними стали вже три значущі цифри. І далі ми спостерігаємо, що через кожні 25 ітерацій кількість вірних значущих цифр збільшується на одиницю. Після 225-ти ітерацій точних значущих цифр стає вже 10.

Для отримання того ж самого результату за допомогою методу статистичних випробувань необхідно було би виконати 10^{21} іспитів та витратити 10^{16} секунд машинного часу, або $317317 \cdot 10^6$ років.

Виконаємо оцінку абсолютної похибки для $\overline{S}(i,j)$. З формули (8) бачимо, що

$$\Delta\overline{S}(i,j) = P_{N+1}(i,j) + P_{N+2}(i,j) + \ldots. \tag{9}$$

Ймовірність $P_N(i,j)$ досить швидко зменшується при збільшенні N. Якщо в розрахунках ми встановили, що за N_0 кроків ймовірність перебування частинки в звичайних вузлах зменшилася в 10 разів, то слід чекати, що за наступні N_0 кроків вона зменшиться теж в 10 разів. Тому $P_N(i,j) \approx 10^{-\lambda N}$, де $\lambda = \dfrac{1}{N_0}$.

Тоді за формулою (7) отримаємо:

$$\Delta\overline{S}(i,j) \approx 10^{-\lambda(N+1)} + 10^{-\lambda(N+2)} + ... = 10^{-\lambda(N+1)}\left(1 + 10^{-\lambda} + 10^{-2\lambda} + ...\right) = 10^{-\lambda(N+1)}\frac{1}{1-10^{-\lambda}}.$$

Звідси маємо:

$$\Delta\overline{S}(i,j) \approx A \cdot 10^{-\lambda N}, \tag{10}$$

де $A = \dfrac{1}{10^{\lambda} - 1}$.

Ми отримали, що абсолютна похибка $\Delta\overline{S}(i,j)$ при збільшенні числа ітерацій зменьшується за експоненціальним законом.

У випадку, коли вузли-пастки розподілені по всій решітці, а не тільки на межі, алгоритм розв'язку майже не змінюється, за винятком значень перехідних ймовірностей із звичайних вузлів на межі області і граничних вузлів (рис. 1в). Така ситуація характерна у випадку досліджень випадкових блукань екситону у двовимірному кристалі.

До цих пір визначалась середня кількість кроків до поглинання частинок у вузлах-пастках. Для обчислення середнього часу блукання це число треба помножити на час одного кроку. В книзі [7] показано, що час одного кроку в двовимірному випадку обчислюється за формулою

$$\tau = \frac{h^2}{4d},$$

де h – крок сітки, d – коефіцієнт дифузії.

Висновки

Отже, за допомогою методу, заснованого на ітерційній процедурі, вдалося розрахувати середню кількість кроків частинки до поглинання у вузлі-пастці на порядки швидше, ніж за допомогою методу статистичних випробувань. В перспективі планується знаходження інших ефективних методів розв'язання розглянутої задачі.

Список використаної літератури

1. Гулд Х. Компьютерное моделирование в физике: часть 2 / Х. Гулд, Я. Тобочник – М.: Мир, 1990. – 399 с.
2. Хомченко А. Н. Явление "сверхсходимости" в задачах Прандтля для уравнение Пуассона / А.Н. Хомченко, Н.В. Колесникова // ААЭКС. – 2008. – №2. – С.15-18.
3. Сквайрс Дж. Практическая Физика / Дж. Сквайрс. – М.: Мир, 1971. – 246 с.
4. Когут І.М Розрахунок апріорних ймовірностей в схемах випадкових блукань / І.М. Когут, Ю.І. Ніколаєнко // Пошук молодих. Випуск 6. Збірник матеріалів Всеукраїнської студентської науково-практичної конференції "Проектування навчального середовища як методична проблема" / Укладач: В.Д. Шарко. – Херсон: Видавництво ХДУ. – 2007. – С. 208-211.
5. Николаенко Ю. И. Итерационная процедура вычисления переходных вероятностей случайных блужданий и её альтернативы / Ю.И. Николаенко, С.В. Моисеенко // Вестник Херсонского национального технического университета. – Херсон: ХНТУ. – Вып. 2 (35). – 2009. – С. 323-327.
6. Николаенко Ю.И. Расчет априорных вероятностей для решения задачи Дирихле для уравнения Пуассона методом Монте-Карло / Ю.И. Николаенко, С.В. Моисеенко, П.М. Зуб // Вестник Херсонского национального технического университета. – Херсон: ХНТУ. – 2010. – Вып. 3 (39). – С. 345-349.
7. Зельдович Я.Б. Элементы математической физики / Я.Б. Зельдович, А.Д. Мышкис. – М.: Наука, ГРФМЛ, 1973. – 352 с.