

Úloha III.S ... na procházce s integrály 10 bodů; průměr 4,95; řešilo 19 studentů

- a) Vymyslete tři odlišné příklady markovovského procesu, z toho alespoň jeden fyzikální. Je procházka bez návratu markovovská? A co procházka bez křížení?
- b) Mějme 2D náhodnou procházku bez návratu na čtvercové síti s počátkem v bodě $(x, y) = (0, 0)$, která je omezena absorpčními bariérami $b_1: y = -5$, $b_2: y = 10$. Nalezněte pravděpodobnost, že v bariéře b_1 skončíme dříve než v b_2 .
- c) Proveďte simulaci pohybu brownovské částice ve 2D a vykreslete graf závislosti střední vzdálenosti od počátku na čase. Uvažujeme diskrétní čas a konstantní délku kroku (jeden krok simulace trvá $\Delta t = \text{konst}$, délka kroku je $\Delta l = \text{konst}$) a umožňujeme pohyb do libovolného směru, tj. každý krok je specifikován délkou a úhlem $\vartheta \in (0, 2\pi)$, přičemž všechny směry jsou stejně pravděpodobné. Zajímá nás především asymptotické chování, tedy vývoj střední vzdálenosti pro $t \gg \Delta t$.
- d) Chybová funkce je definována vztahem

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt.$$

Tabelujte tuto funkci, tedy vypočtete integrál pro mnoho různých x . Do řešení nevkládějte tabulku hodnot, ale graf funkce. Zkuste tuto funkci opět numericky zderivovat. Co dostanete?

- e) Najděte si definici hustoty pravděpodobnosti Maxwellova-Boltzmannova rozdělení $f(v)$, tedy rozdělení rychlostí molekul ideálního plynu. Spočítejte pak pomocí MC integrace střední hodnotu rychlosti definovanou

$$\langle v \rangle = \int_0^\infty v f(v) dv,$$

přičemž pro vzorkování použijte náhodná čísla dle Maxwellova-Boltzmannova rozdělení získaná Metropolisovým-Hastingsovým algoritmem. Hodnotu pro konkrétní zvolené parametry srovnajte s hodnotou z literatury.

Mirek a Lukáš se náhodně procházejí do školy.

- a) Připomeňme, že Markovův proces jsme definovali jako náhodný proces, který nám umožňuje určit pravděpodobnost realizace určitého stavu systému (stav je dán hodnotou náhodné veličiny) v čase t_{i+1} zcela na základě znalosti stavu v čase t_i . Uvedme tři příklady Markovova procesu: matematický, fyzikální a „z běžného života“.
- (a) Mějme klobouk A obsahující 10 černých koulí a klobouk B , v němž je 10 bílých koulí. V každém kroku náhodně vybereme jednu kouli z klobouku A a jednu z klobouku B a vyměníme je. Sekvence náhodných proměnných představujících poměr černých ku bílým koulím v klobouku A je náhodný proces. Zároveň se jedná i o Markovův proces/řetězec, neboť znalost aktuálního (v čase t_i) poměru koulí v klobouku A jednoznačně udává i poměr koulí v klobouku B a na základě těchto znalostí dokážeme určit pravděpodobnost, s jako v klobouku A vzroste v dalším časovém kroku počet koulí jedné barvy o jedna, klesne o jedna, nebo se nezmění.
- (b) Fyzika je aplikací matematických modelů na dění kolem nás. Proto potřebujeme najít přírodní děj, pro jehož popis se používají náhodné procesy. Příkladem může být například vývoj počtu částic radionuklidu. Pokud známe počet částic v čase t , dokážeme určit pravděpodobnostní rozdělení v čase $t + dt$ (zde bychom správně měli rozšířit naši

definici na spojitě plynutí času, můžeme ale uvažovat i model s konečnými časovými kroky Δt a konečnou pravděpodobností rozpadu každé částice v jednom kroku).

- (c) Označíme-li každý den jako slunečný, nebo deštivý, a víme, s jakou pravděpodobností přejde slunečný den v deštivý a naopak (a nebo nedojde ke změně), pak na základě dnešního stavu počasí dokážeme říct, s jakou pravděpodobností bude zítra slunečno či deštivo.

Třetí příklad je dobrou ukázkou toho, že každý jev lze modelovat jako markovovský. Totiž, abychom získali pravděpodobnost přechodu slunečného dne v deštivý, museli jsme provést statistiku na velkém počtu předchozích dní. Lze tedy namítnout, že na určení pravděpodobnosti realizace určitého stavu v příštím časovém kroku jsme potřebovali znát všechny předchozí. Podobně lze argumentovat, že téměř žádný fyzikální proces není markovovský, protože pro výpočet zrychlení z pohybové rovnice potřebujeme znát nejen polohy, ale i rychlosti, a ty získáme měřením polohy ve více časových bodech. Proto, když se mluví o (ne)markovosti určitého fyzikálního jevu, je vždy potřeba zmínit model, kterým jev popisujeme.

Co se týče zbylých dvou otázek na markovovskost náhodných procházek, ani jedna z uvedených nemá Markovovu vlastnost. Náhodná procházka bez návratu si kromě aktuální pozice vždy musí pamatovat i tu předešlou a náhodná procházka bez křížení musí mít v paměti celou trajektorie, tj. všechny pozice za celou dobu vývoje. Za markovovské bychom mohli tyto procházky považovat použitím „podvodu“ popsaného výše, kdy bychom za aktuální stav procházky prohlásili např. celou její trajektorii.

- b) K nalezení pravděpodobnosti, že procházka skončí dříve v dolní než horní bariéře, použijeme kód z textu seriálu. Do něj přidáme podmínky zastavení výpočtu a proměnnou, která obsahuje počet procházek L , které skončily v dolní bariéře. Také musíme přidat identifikátor, který si zapamatuje, jakým směrem byl proveden poslední krok, a nepovolí krok opačným směrem jako následující – tak zajistíme, že půjde skutečně o procházku bez okamžitého návratu. Hledaným řešením je poměr L/N , kde N je celkový počet procházek. Délku procházky přitom neomezujeme, protože bariéry jsou poměrně blízko počátku, a tedy procházky skončí po rozumném počtu kroků.

Na souboru $N = 10^7$ procházek jsme dostali pravděpodobnost 0.6562 skončení procházky v bariéře b_1 , tedy o něco méně než $2/3$, přičemž první tři platné číslice jsou s vysokou pravděpodobností přesné. Pro obyčejnou 2D procházku bychom dostali pravděpodobnost přesně $2/3$ (ne simulací, výpočtem), protože pohyb ve směru osy x můžeme zcela vypustit a jedná se pak o 1D problém, který jsme již prozkoumali v prvním dílu seriálu. V případě procházky bez návratu neexistuje dobrá 1D analogie, taková procházka vždy probíhá jedním směrem a pravděpodobnost nárazu do jedné bariéry je stejná jako do druhé. Pokud bychom krom zadané úlohy chtěli také nalézt průměrnou délku procházky, která se zastaví na nějaké bariéře, dostali bychom výsledek 57.27. U jednoduché procházky bychom dostali výrazně větší hodnotu než u procházky bez návratu, ta totiž zamezuje stavům, kdy se trajektorie „točí“ kolem jednoho místa a délka narůstá, aniž bychom se přiblížili k bariéře.

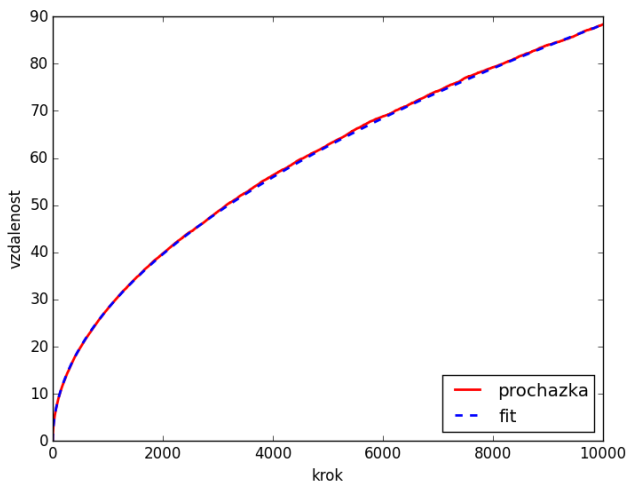
- c) K simulaci opět využijeme kód ze seriálu, nyní však budeme generovat náhodné reálné číslo ϑ v rozsahu od 0 do 2π a polohu v čase $t + \Delta t$ určíme podle vztahů

$$\begin{aligned}x(t + \Delta t) &= x(t) + \Delta l \cos \vartheta, \\y(t + \Delta t) &= y(t) + \Delta l \sin \vartheta.\end{aligned}$$

Pro jednoduchost volíme¹ $\Delta t = 1$, $\Delta l = 1$. Pro srovnání s pravoúhloú procházkou uvedenou

¹I kdybychom měli zadánú např. střední rychlost částice, stále bychom volili tyto kroky, protože simulace

v seriálu budeme generovat 10 000 procházek o délce 10 000. Graf střední vzdálenosti v závislosti na čase (na počtu kroků) je na obrázku 1. Zlogaritmujeme data a fitováním posledních 1 000 bodů lineární funkcí $f(x) = ax + b$ dostaneme hodnotu směrnice $a = 0,498 \pm 0,001$. Vzdálenost procházky od počátku je tedy opět úměrná druhé odmocnině počtu kroků. Stejný výsledek dostaneme pro každou 2D procházku, která má umožněn pohyb symetricky ve všech osách.



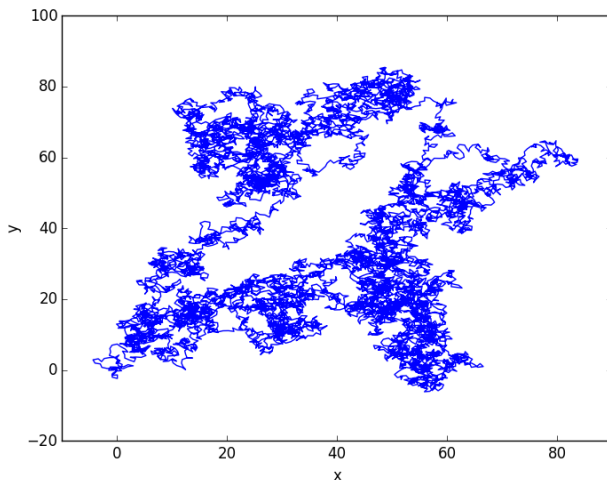
Obr. 1: Vzdálenost 2D procházky od počátku v závislosti na počtu kroků (čase). Graf vznikl průměrováním 10 000 procházek o délce 10 000 kroků. Mocnný fit byl proveden na posledních 1 000 bodech. Fit obecně nemusí dobře sedět i na prvních 9 000 bodech, ale může, jak je vidět a tomto příkladu.

Pro srovnání uvádíme i trajektorie procházek o délce 10 000 kroků a 200 000 kroků, obrázky 2 a 3. Zatímco v prvním případě odpovídá „všesměrová“ procházka lépe naší představě o pohybu Brownovy částice než pravoúhlá procházka, při velkém počtu kroků už se rozdíly mezi diskrétní a spojitou volbou směru stírají.

- d) Pro výpočet hodnot chybové funkce použijeme složené Simpsonovo pravidlo, neboť jde o nejefektivnější nám známou² metodu výpočtu jednorozměrných integrálů. Funkci přitom budeme tabelovat pro hodnoty $x \in \langle -5, 5 \rangle$, protože chybová funkce se chová zajímavě v okolí nuly, jinde je skoro konstantní. Integrál byl samplován $N = 1\,000$ body. Při této volbě je chyba řádu 10^{-15} , což je skoro strojová přesnost. Tato hodnota N je tedy rozumným kompromisem mezi dobou výpočtu a přesností. Samotnou funkci jsme tabelovali v $k = 10\,000$ bodech, důvodem je vhodný krok při opětovné derivaci. Tabelovaná chybová funkce je vynesena v grafu 4.

je vhodné provádět v normalizovaných jednotkách. Obzvláště v kvantové fyzice by volba $\hbar \doteq 1,05 \cdot 10^{-34}$ J·s namísto $\hbar = 1$ způsobila spoustu zbytečných numerických problémů.

²Samozřejmě existují daleko efektivnější metody, jejich implementace v Pythonu najdete např. v balíku `scipy.integrate`.



Obr. 2: Trajektorie 2D procházky o délce 10 000 kroků. V tomto měřítku je stále vidět, že se nejedná o spojitý proces, jednotlivé diskrétní kroky jsou ještě patrné.

Pokud chybovou funkci zderivujeme, analyticky dostaneme

$$(\operatorname{erf}(x))' = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{d \left(\int_0^x e^{-t^2} dt \right)}{dx} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2}.$$

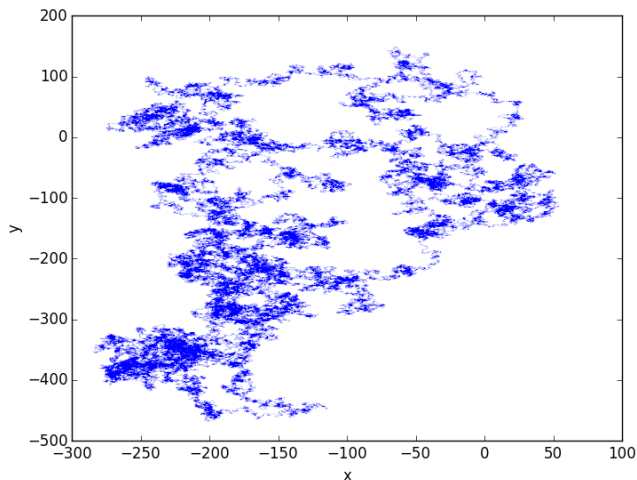
Pro numerickou derivaci použijeme metodu 4. řádu, která byla odvozena v minulém díle seriálu. Optimální krok této metody je řádu 10^{-4} , což skoro odpovídá rozestupu dvou hodnot naší tabelované funkce. Provedením derivace skutečně dostaneme kýžený výsledek, jak je vidět v grafu 5.

- e) Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení, popisující rozdělení rychlostí částic ideálního plynu, má tvar³

$$f(v) = \begin{cases} \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} 4\pi v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}}, & v \geq 0 \\ 0, & v < 0 \end{cases},$$

kde v je velikost rychlosti částice, m její hmotnost, k Boltzmannova konstanta a T termo-

³https://en.wikipedia.org/wiki/Maxwell-Boltzmann_distribution



Obr. 3: Trajektorie 2D procházky o délce 200 000 kroků. V tomto měřítku již není poznat, zda byl proces v čase a prostoru diskrétní či spojitý.

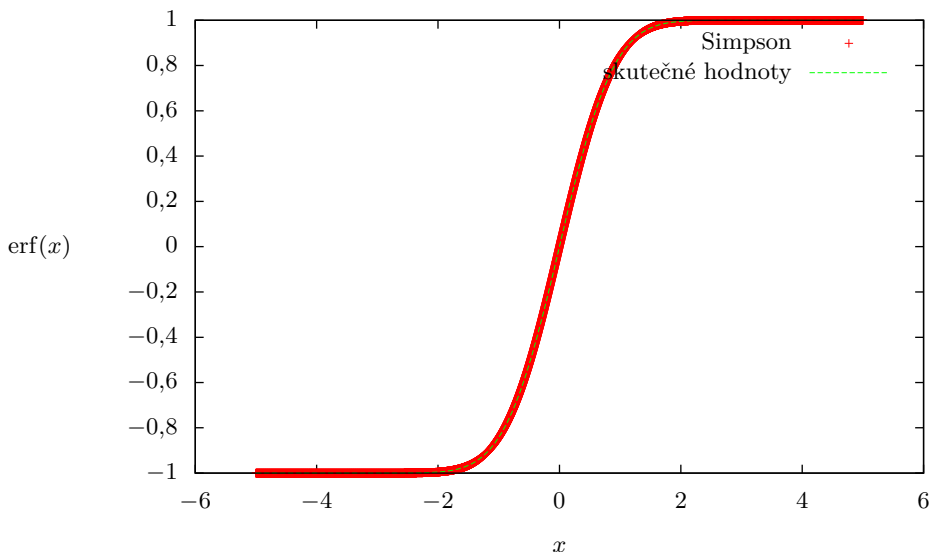
dynamická teplota. Střední hodnota rychlosti je pak z definice rovna

$$\begin{aligned}
 \langle v \rangle &= \int_0^\infty v f(v) dv = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{\frac{3}{2}} 4\pi \int_0^\infty v^3 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv & / t = \frac{mv^2}{2kT}, dt = \frac{mv}{kT} dv \\
 &= \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \int_0^\infty te^{-t} dt & / \text{per partes} \\
 &= \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \left([-te^{-t}]_0^\infty + \int_0^\infty e^{-t} dt \right) = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}.
 \end{aligned}$$

Ti z vás, kteří neumějí integrovat, mohou použít program Wolfram Alpha⁴, najít výsledný vzorec v literatuře, či v tabulkách rovnou najít číselnou střední hodnotu rychlosti pro zvolené parametry.

Nyní, když máme připraveny podklady pro ověření výsledku, se zabýváme samotným numerickým výpočtem. Střední hodnotu rychlosti budeme určovat pro dvouatomový plynný vodík ($m = 2m_p$, kde $m_p \doteq 1,67 \cdot 10^{-27}$ kg je hmotnost protonu) při teplotě $T = 280$ K, což je rozumná fyzikální volba. Samozřejmě ideálním plynem lze modelovat mnoho jiných plynů za různých teplot, nejde tedy o jedinou možnou volbu. Pokud si vykreslíme Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení pro tyto hodnoty parametrů, zjistíme, že jej tvoří převážně jeden „kopeček“ s maximem kolem hodnoty $v \approx 1500$ m·s⁻¹ a šířkou řádově 2000 m·s⁻¹ (bráno v polovině výšky „kopečku“, tedy jako tzv. FWHM). Tyto informace nám poslouží pro správné nastavení Metropolisova-Hastingsova algoritmu. Počáteční hodnotu procházky zvolíme do

⁴<http://www.wolframalpha.com>



Obr. 4: Porovnání námi vypočtené a skutečné chybové funkce.

okolí maxima,⁵ jako generátor návrhu přeskočení (v textu seriálu označen jako funkce g ; můžete si ověřit, že skutečně má všechny požadované vlastnosti) si zvolíme rovnoměrné rozdělení se středem v aktuální hodnotě a šířkou $1000 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, tedy polovinou šířky „kopečku“.

Získali jsme posloupnost N náhodných čísel v_i , s kterou nyní již můžeme přímočaře použít Monte Carlo integraci. Nesmíme ale zapomenout na to, že generujeme náhodná čísla ne dle rovnoměrného, ale dle Maxwellova-Boltzmannova rozdělení, musíme tedy použít variantu MC integrace s vahami $w_i = 1/f(v_i)$, jak bylo uvedeno v textu seriálu. Protože integrujeme funkci $vf(v)$, můžeme ukázat, že pro hodnotu integrálu bude platit vztah

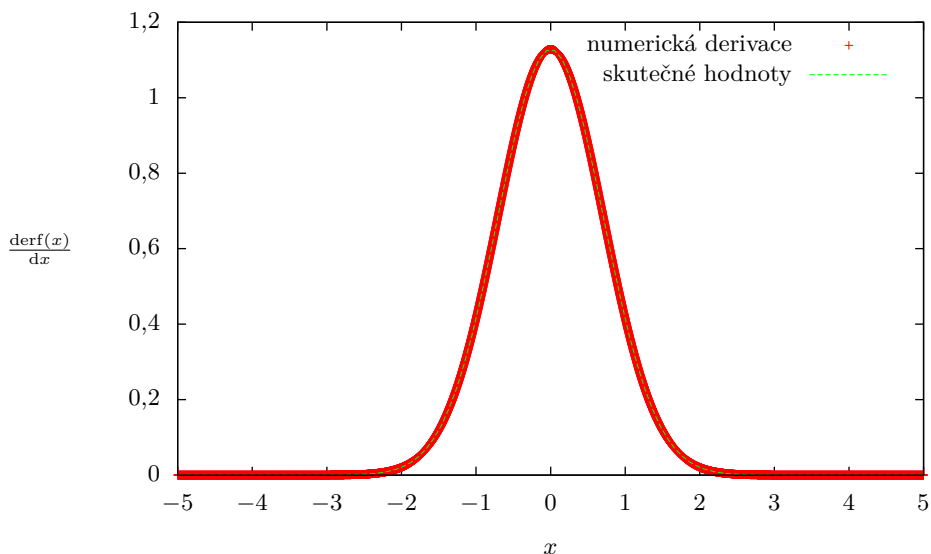
$$I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N w_i v_i f(v_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{v_i f(v_i)}{f(v_i)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_i,$$

kde v_i jsou náhodná čísla generovaná Maxwellovým-Boltzmannovým rozdělením $f(v)$. Na tento finální vztah vlastně můžeme nahlédnout i tak, že sčítáme N náhodných proměnných se střední hodnotou $\langle v \rangle$.

Pozastavme se ještě nad jednou věcí. Počítáme určitý integrál v mezích 0 a $+\infty$, tyto meze ale v MC integraci nikde nespécifikujeme. Kde tedy dáme programu najevo, že chceme použít právě tyto meze? Vzpomeňme si na MC integraci s rovnoměrným rozdělením náhodných čísel. Tam jsme meze specifikovali šířkou rovnoměrného rozdělení. Zde je to stejné, meze, resp. oblast integrace je určena nosičem⁶ hustoty pravděpodobnosti, kterou používáme pro

⁵Není nutno zcela přesně, hodnota by ale měla ležet v blízkém okolí „kopečku“.

⁶Nosičem funkce f tady myslíme množinu x takových, že $f(x) \neq 0$. Přesněji je definován jako tzv. uzávěr této množiny.



Obr. 5: Porovnání námi vypočtené a skutečné derivace chybové funkce.

generování náhodných čísel. V našem případě je Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení nenulové v intervalu $(0, +\infty)$, vše je tedy v pořádku.

Integraci pro námi zvolené parametry získáme hodnotu střední rychlosti $\langle v \rangle \doteq (1714 \pm 1) \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, což odpovídá teoretické hodnotě $\langle v \rangle \doteq 1715 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. Integraci jsme opakovali stokrát, z těchto hodnot jsme pak vypočetli průměr a směrodatnou odchylku, což bylo použito jako zmíněná výsledná hodnota a její chyba. V každém běhu byla integrovaná funkce samplována ve 100 000 bodech. Zdrojový kód použitého programu naleznete jako přílohu řešení na našich webových stránkách.

Komentáře k došlým řešením

Ve vašich řešeních problémů zaměřených na markovovské procesy a náhodné procházky (NP) se objevilo několik chyb, které stojí za to si zde rozebrat. Často docházelo k nepochopení pojmu bezpaměťovost. Jestliže každý prvek náhodného řetězce/procesu závisí nejvýše na předchozím prvku, pak je řetězec bezpaměťový neboli Markovův. Pokud při konstrukci trajektorie NP rozhodneme v čase t_i o následující poloze (čas t_{i+1}) na základě předchozí polohy (čas t_{i-1}), nejedná se bezpaměťový proces, protože stav v t_{i+1} je dán stavem v t_{i-1} , o dva kroky zpět. To se přesně děje u NP bez návratu, proto není markovovská. Někteří z vás ve svém řešení definovali jako stav NP bez návratu směr kroku, pak ji lze považovat za markovovskou, ale z matematického hlediska už jde o jiný proces, při kterém neumíme bezpaměťově určit aktuální polohu. Dále mnoho z vás předpokládalo, že když v případě obyčejné NP pro výpočet nárazu do bariéry můžeme zanedbat pohyb v ose x , lze to udělat i v případě NP bez návratu. To nelze, jednak musíme pohyb v x alespoň povolit, byť ho nebudeme zaznamenávat, a navíc se i ve 2D

projeví tendence NP bez návratu „pokračovat ve směru, kterým vyrazila“.

Dále je při studiu vzdálenosti Brownovy částice od počátečního bodu potřeba zprůměrovat velké množství NP, abychom zjistili, jak se typicky (statisticky) vzdálenost vyvíjí po delším čase. Z jedné realizace procházky žádnou statistiku nevyčteme. Několik řešitelů se také dopustilo chyby, kdy místo počítání aktuální vzdálenosti sčítalo vzdálenosti ze všech předchozích kroků, což je samozřejmě jiná veličina, než nás zajímá. Nakonec je potřeba uvědomit si, že předpokládaná odmocninná závislost vzdálenosti na čase je asymptotická, chování okolo počátku je jiné. Po delším čase se vzdálenost každé realizace od počátku mezi sebou výrazně liší a je potřeba velký statistický soubor, jinak bude každý bod na průměrovaném grafu zatížen velkou chybou a i směrnice fitu bude nepřesná. (Použité funkce pro fitování v Pythonu neuvažují chyby jednotlivých bodů, proto vám přesná hodnota 0,5 nemusela padnout ani do několikerého násobku směrodatné odchylky fitu.)

Miroslav Hanzelka
mirek@fykos.cz

Lukáš Timko
lukast@fykos.cz

Fyzikální korespondenční seminář je organizován studenty MFF UK. Je zastřešen Oddělením pro vnější vztahy a propagaci MFF UK a podporován Ústavem teoretické fyziky MFF UK, jeho zaměstnanci a Jednotou českých matematiků a fyziků.

Toto dílo je šířeno pod licencí Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported. Pro zobrazení kopie této licence navštivte <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>.