fizikai szemle

AZ EÖTVÖS LORÁND FIZIKAI TÁRSULAT LAPJA

Alapította Eötvös Loránd 1891-ben Mathematikai és Physikai Lapok néven

XXXVIII. évfolyam | 7. szám | 1988. július

A BROWN-MOZGÁS SZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓJA

HORVÁTH GÁBOR
ELTE, Alacsony Hőmérsékleti Fizikai Tanszék

különlenyomat

271–275

HU ISSN 0015–3257

SZÁMÍTÓGÉP AZ OKTATÁSBAN

A BROWN-MOZGÁS SZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓJA

Horváth Gábor
ELTE, Alacsony Hőmérséklet Fizikai Tanszék

Bevezetés

A természetben nagyon sok jelenség vezethető vissza a véletlenszerű bolyongásra, a Brown-mozgásra. Az illat, a füst terjedése, a diffúziós jelenségek, a perkolációval kapcsolatos transzportfolyamatok, a koaguláció, szedimentáció, gélképződés, a "random walking"-folyamatok, a diffúziólimitált aggregációs (DLA) folyamatok... stb. mind szoros kapcsolatban vannak a Brown-mozgással. Egy Brown-mozgó részecske pályája jellegzetes fraktálszerkezetet mutat [6].

Manapság igen felkapott és rendkívül gyorsan fejlődő kutatási irányzat a fraktálszerkezetű jelenségek

kutatása. Hasonlóan érdekes a DLA-ra visszavezethető kolloidfizikai, kolloidkémiai s egyéb leválási, lecsapódási effektusok problémája. Mindezek közös alapja részben vagy egészben a Brown-mozgás [1,6,7].

A Brown-mozgás aktuális tehát napjaink fizikájában is, s mivel az oktatásnak most már viszonylag széles személyi számítógéppark áll rendelkezésére, ezért semmi akadálya annak, hogy akár Monte Carlo szimulációval a számítógépen tanulmányozhassa a diákság ezt a fundamentális bolyongási jelenséget.

Jelen cikkben a Brown-mozgással kapcsolatban azt a problémát tárgyaljuk, hogy egy véletlenszerűen bolyongó részecske adott idő elteltével várhatólag mekkora távolságra található kiindulási pontjától. Megmutatjuk, hogy a kapott Einstein-Smoluchowski-féle összefüggést miként lehet egy, a számítógépes szimulációra alkalmasabb formára hozni, majd egy könnyen elvégezhető szimulációs algoritmusról szólunk, mellyel a számítógépen lehet igazolni a szóban forgó összefüggést. Ezzel az egyszerű szimulációval felszabadulhat a diákság az alól a fáradságos, sok türelmet, kitartást igénylő mikroszkopizáló kísérleti munka alól, amivel annak idején Perrin igazolta az Einstein-Smoluchowski-féle összefüggés helyességét. Így a klasszikus Perrin-kísérlet egy modernebb, számítógépre ültetett szimulációs (könnyen elvégezhető) formában akármelyik fizikai laboratóriumi kurzusba bevonulhat, s ott fontos didaktikai szerepet tölthet be.

1. Az Einstein-Smoluchowski-féle összefüggés

A Brown-mozgást 1827-ben Robert Brown angol botanikus fedezte föl. Parányi élőlényeket tanulmányozott mikroszkóppal, s a vizsgált folyadékban lévő pollenek rendszertelen mozgását figyelte meg. Mivel nem élőlényekről volt szó, ezért sajátmozgásról szó sem lehetett. Az élőlények mozgásától származó esetleges zavaró hatás kiküszöbölése végett egy kvarcdarabkában lévő vízzárványban található élettelen részecskéket vizsgált, s ott is hasonló statisztikus mozgást tapasztalt [2,3,4].

Einstein és Smoluchowski nevéhez fűződik a Brown-mozgás első elméleti vizsgálata. Ők adták meg először, hogy adott idő alatt milyen mértékben távolodik el a vizsgált részecske a kiindulási helyétől. Az ezen témában folyó kutatásaik 1904–1906-ban folytak. A jelenséget Langevin is behatóan tanulmányozta elméletileg, míg Perrin kísérletileg igazolta az elméleti eredmények helyességét [4].

Vizsgáljunk mi is egy r sugarú, gömb alakú részecskét, mely a környező specieszek között végez bolyongást, Brown-mozgást. A bolyongás átlagsebességét az ekvipartíció tételének felhasználásával kaphatjuk:

$$\frac{1}{2}m\bar{v}^2=\frac{3}{2}kT \text{ ,innen } \bar{v}=\sqrt{\frac{3kT}{m}}, \qquad (1)$$

ahol m a bolyongó részecske tömege, k a Boltzmann-állandó, T a hőmérséklet. A Brown-mozgó részecske mozgásegyenletét a következő formában írhatjuk fel:

$$m\frac{d^2r}{dt^2}=F-h\frac{dr}{dt}. \qquad (2)$$

(2)-ben F szimbolizálja a bolyongást okozó véletlenszerű lökdösődést a közeg specieszei által, a jobboldal második tagja pedig a közegbeli súrlódási erőt, mely nem túl nagy sebességekre és nem túl nagy bolyongó részecskeméretre a sebességgel arányos, s vele ellentétes irányú. Ha (2)-t megszorozzuk r-al, s felhasználjuk a

$$\frac{d^2r^2}{dt^2}=2\left(\frac{dr}{dt}\right)^2+2r\frac{d^2r}{dt^2} \qquad (3)$$

kifejezést, majd átlagot képezünk (viriál-tétel), akkor a következőt kapjuk:

$$\frac{1}{2}m\frac{d^2\langle r^2\rangle}{dt^2}-m\left\langle\left(\frac{dr}{dt}\right)^2\right\rangle=\langle Fr\rangle-\frac{h}{2}\frac{d\langle r^2\rangle}{dt} \qquad (4)$$

Bevezetve a $\xi(t)=d\langle r^2\rangle/dt$ jelölést, (4)-ből kapjuk:

$$\frac{d\xi}{dt}+\frac{h}{m}\xi=\frac{6kT}{m}. \qquad (5)$$

Közben felhasználtuk (1)-et, valamint azt, hogy $\langle Fr\rangle=\langle Fr\cdot\cos\phi\rangle=0$, mert egyforma valószínűséggel fordul elő ϕ és $\pi-\phi$, márpedig $\cos(\pi-\phi)=-\cos\phi$, így az átlagoláskor az ellentétes előjelű, összetartozó tagok kiejtik egymást. Integrálva (5)-öt kétszer, kapjuk az $\langle r^2\rangle$ időfüggésére:

$$\langle r^2\rangle=r_0^2+\frac{6kT}{m}-C\cdot\exp(-t/\tau),\ \tau=\frac{m}{h}. \qquad (6)$$

Ha kellően nagy méretű a bolyongó részecske a közeg specieszeihez képest, akkor alkalmazható rá a Stokes-törvény, mely szerint:

$$h=6\pi\eta r, \qquad (7)$$

ahol r a Brown-mozgó részecske sugara, η a közeg viszkozitása. Ha a τ relaxációs időnél jóval hosszabb idő telik el attól a pillanattól, mikor a bolyongó részecskét elindítottuk, akkor (6)-ban az exponenciális tag eltűnik; ha pedig a Brown-mozgó részecskét az origóból indítottuk, akkor $r_0=0$, így (6), (7)-ből kapjuk az Einstein-Smoluchowski-féle összefüggést:

$$\langle r^2\rangle=\frac{kT}{\pi r\eta}t. \qquad (8)$$

(8) tehát megadja a Brown-mozgó részecske eltávolodásának négyzetes átlagát az idő, a hőmérséklet, a viszkozitás és a bolyongó részecske méretének függvényében. Enskog törvénye szerint a viszkozitási együttható gázban:

$$\eta = \frac{1}{2} \cdot \bar{v}_k \cdot \rho_k \cdot \lambda_k \,, \qquad (9)$$

ahol ρ_k a közeg sűrűsége, λ_k a közeg specieszeinek közepes szabad úthossza, az átlagsebességük pedig (1) alapján:

$$\bar{v}_k = \sqrt{\frac{3kT}{m_k}} \,. \qquad (10)$$

A közeg specieszeinek átlagos szabad úthossza:

$$\lambda_k = \frac{m_k}{4\sqrt{2}\pi r_k^2 \cdot \rho_k} \,. \qquad (11)$$

(8), (9), (10) és (11) felhasználásával végül is kapjuk:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{8r_k^2}{r} \cdot \sqrt{\frac{2RT}{3M_k}} \cdot t, \qquad (12)$$

ahol R a gázállandó, M_k a közeg móltömege.

2. *A bolyongó részecske közepes szabad úthossza*

A számítógépes szimuláció szempontjából megfelelőbb, ha $\langle r^2 \rangle$-ot nem az idővel, hanem az ütközési számmal fejezzük ki. Ehhez meg kell határozni a bolyongó részecske közepes szabad úthosszát. A Brown-mozgó részecske két ütközés között tegyen meg átlagosan $\bar{l}$ utat. Ekkor az ütközési idő: $\Delta t = \bar{l}/\bar{v}$ Ha t idő alatt n ütközés zajlik le, akkor $t = n \cdot \Delta t$, azaz (1) felhasználásával

$$t = n\bar{l}/v = n\bar{l} \sqrt{\frac{M}{3RT}} \,. \qquad (13)$$

Legyen a Brown-mozgó részecske helyvektora az $(n-1)$-ik ütközés után r_{n-1}, az n-ik ütközés után pedig r_n. Nyilván

$$r_n = \bar{l} + r_{n-1} \,. \qquad (14)$$

(14)-et négyzetre emelve, s átlagot képezve

$$\langle r_n^2 \rangle = \bar{l}^2 + \langle r_{n-1}^2 \rangle + 2\bar{l} \langle r_{n-1} \cdot \cos\alpha \rangle \,. \qquad (15)$$

(15)-ben a jobboldal harmadik tagja zérus, mert egyforma valószínűséggel fordulnak elő az α és $\pi - \alpha$ értékpárok. Így tehát

$$\langle r_n^2 \rangle = \bar{l}^2 + \langle r_{n-1}^2 \rangle \,. \qquad (16)$$

A (16) rekurziós egyenlet megoldása:

$$\langle r_n^2 \rangle = r_0^2 + n\bar{l}^2 \,. \qquad (17)$$

De korábban már megállapodtunk abban, hogy a bolyongó részecskét az origóból indítjuk, azaz $r_0 = 0$. (12), (13) és (17) felhasználásával a bolyongó részecske közepes szabad úthossza:

$$\bar{l} = \frac{8r_k^2}{3r} \sqrt{\frac{2M}{M_k}} \,. \qquad (18)$$

(17), (18)-ból végül is megkapjuk a Brown-mozgó részecske origótól való eltávolodásának négyzetes átlagát az n ütközési szám függvényében:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{128 r_k^4 M}{9r^2 M_k} n, \qquad (19)$$

ahol tehát r_k a közeg specieszeinek a sugara, r a bolyongó részecske sugara, M_k a közeg móltömege, M pedig a Brown-mozgó részecskéé.

Ha képezzük a τ relaxációs idő és a Δt ütközési idő hányadosát, akkor azt kapjuk, hogy $\tau = \Delta t/2$. Az eddigiek akkor érvényesek, ha teljesül az $n \gg \tau/\Delta t = 1/2$ feltétel. Ez azonban már néhány ütközésre teljesül, így jogosan tekintettünk el (6)-ban az exponenciális tagtól.

3. *Számítógépes szimuláció*

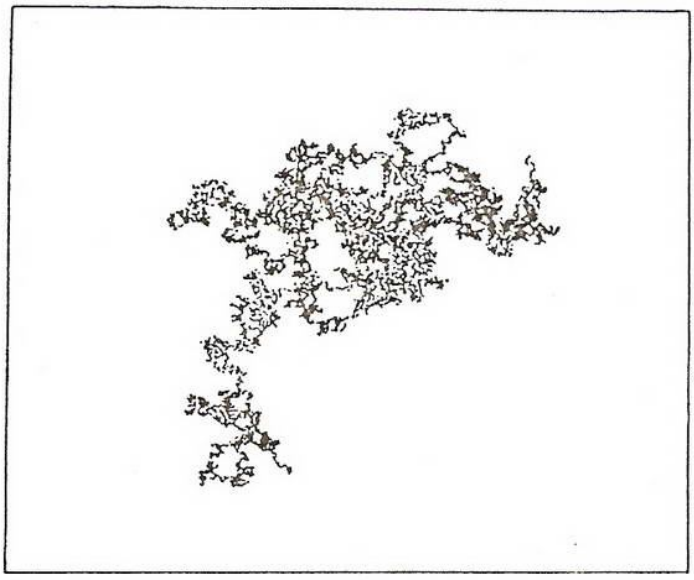
Demonstrációul nagyon egyszerű programot írhatunk a Brown-mozgás szimulációjára. Egy képzeletbeli részecskét megjelenítünk valahol a képernyőn, s 1-től 4-ig egy egész véletlenszámot generálunk. A négy szám mindegyikéhez az É, D, K, NY irányok valamelyikét rendeljük, s egy ciklus végeztével a részecskét a generált irányba mozdítjuk el egy egységnyi szakasszal, majd újabb véletlenszámot generálunk, s ezt ismételtetjük a számítógéppel. Ahol a bolyongó részecske már járt, ott besötétítjük a képernyőt (egy pontot teszünk ki). Így kirajzolódik a Brown-mozgó részecske pályája. Mivel a bolyongó részecske kiszaladhat a képernyőről, ezért érdemes periodikus határfeltételt alkalmazni, azaz ha K-re kifut a részecske a képernyőről, akkor NY-on újra belépve, folytathatja bolyongását (és fordítva), s hasonló érvényes az É-D irányra is.

1. ábrákon egy ilyen szimuláció eredménye látható. Érdemes a szimulációs programot gépi kódban megírni, mert így roppant gyorssá tehető a bolyongtatás. Megfigyelhető az 1. ábrán a Brown-mozgó részecske pályájának jellegzetes fraktálszerkezete.

Ha a valóságot akarjuk szimulálni, akkor már nem elegendő az előbb említett egyszerű bolyongtatási program. Egy háromdimenziós bolyongást a következőképpen lehet szimulálni: Véletlenszámgenerátorral két szögértéket generálunk, melyek a bolyongó részecske gömbi szögei lesznek (Θ, ϕ). A részecskét minden egyes ciklusban a (Θ, ϕ) irányba léptetjük a (18) szerinti átlagos lépéshosszal. Az új koordináták ekkor a következők lesznek:

$$x_{i+1} = x_i + \bar{l} \sin\Theta \cdot \cos\phi, \; y_{i+1} = y_i + \bar{l} \sin\Theta \cdot \sin\phi,$$

$$z_{i+1} = z_i + \bar{l} \cos\Theta. \qquad (20)$$



1. ábra Számítógépen szimulált kétdimenziós Brown-mozgás fraktálszerkezetű képe

(20) alapján meghatározzuk a részecske origótól való távolságának négyzetét, s ábrázoljuk az n lépésszám (ütközési szám) függvényében. Ha egy n=N lépésszámú bolyongást K-szor elvégeztetünk, akkor képezhetjük az eltávolodás négyzetes átlagát:

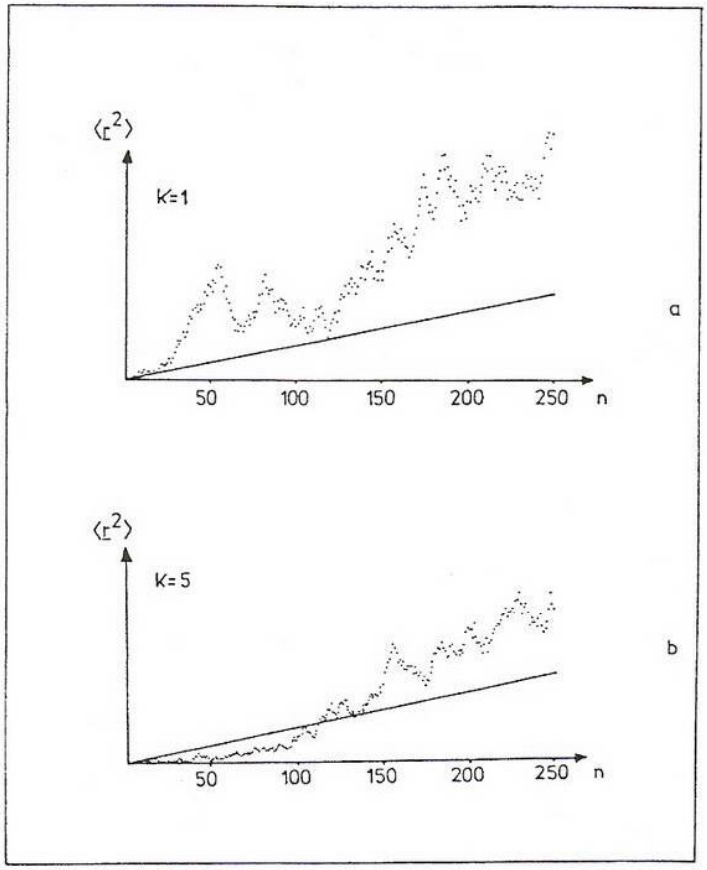
$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^{K} r_j^2 . \qquad (21)$$

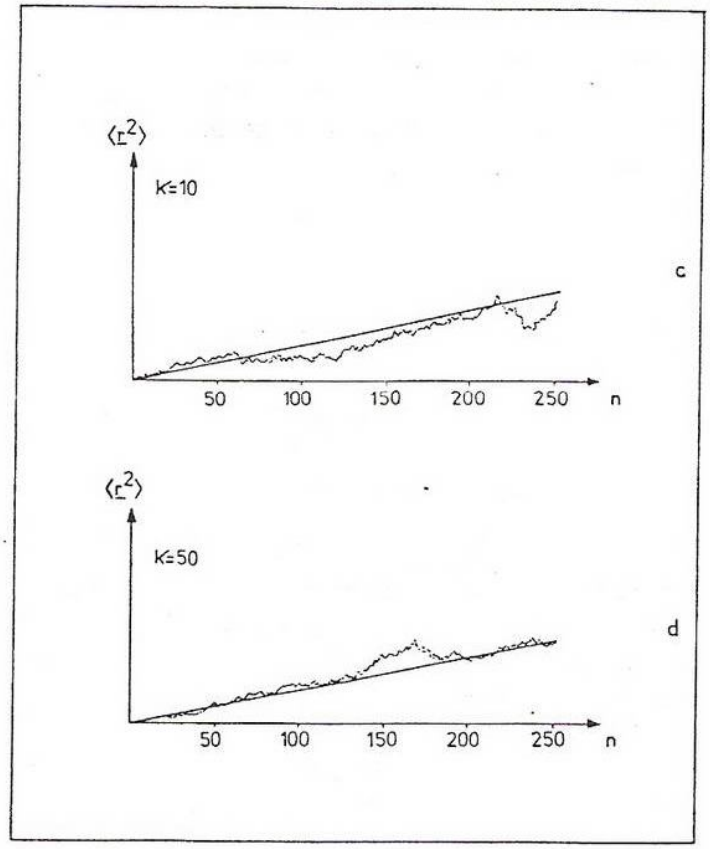
A 2. árbrán látható K néhány értékére a futtatási eredmény. Az origón átmenő egyenes a (19) szerinti elméleti $\langle r^2 \rangle$-n-függést mutatja. Ha a valóságnak megfelelő r_k, r, M_k, M értékeket használunk a futtatás során, akkor a természetet szimuláljuk a számítógépen.

A 2/a. ábrán nem átlagoltunk, egyetlen részecske Brown-mozgását figyelhetjük meg (K=1). Jól látható a bolyongás véletlenszerű jellege; a részecske eltávolodásának négyzete meglehetősen eltér az elméleti átlagtól. A 2/b. ábrán már 5 részecskére átlagoltunk, s jól látható, hogy az elméleti átlagtól való eltérés már jóval kisebb, mint az a. esetben. Még több részecskére átlagolva K=10, ill. K=50-re a 2/c., ill. 2/d. ábrán látható az eredmény. Megfigyelhető, hogy minél több részecskére átlagolunk, a szimuláció eredménye annál jobban megközelíti az elméleti átlagot, azaz ha a futtatás eredményeként kapott $\langle r^2 \rangle$-n görbére a legkisebb négyzetek módszerével egyenest illesztünk, akkor az illesztett egyenes K növekedésével egyre inkább az origón megy át és meredeksége is egyre jobban megközelíti a

$$\frac{128 r_k^4 M}{9 r^2 M_k}$$

elméleti értéket. 3. ábrákon egyszerű Basic (ZX-Spektrum) program látható, mellyel a 2. ábra eredményei megvalósíthatók.





2. ábra Számítógépes szimulációval nyert $\langle r^2 \rangle$ függése az n lépésszámtól különböző fokú átlagolásokra. Az átlagolás száma: K.

A folytonos vonal az elméleti függést mutatja

```
1  INPUT rk,r,mk,m,n,k
2  LET l=8*rk+r*SQR(2*m/mk)
3  LET a=120*rk*r*mk*rk*m/(9*r*r*mk)
4  DIM x(k):DIM y(k):DIM z(k)
5  FOR j=1 TO n
6  FOR i=1 TO k
7  LET x(i)=x(i)+l*SIN(PI*RND)*COS(2*PI*RND)
8  LET y(i)=y(i)+l*SIN(PI*RND)*SIN(2*PI*RND)
9  LET z(i)=z(i)+l*COS(PI*RND)
10 NEXT i
11 LET s=0
12 FOR s=1 TO k
13 LET s=s+x(i)*x(i)+y(i)*y(i)+z(i)*z(i)
14 PLOT j,1e23*s/k
15 NEXT j
```

3. ábra

4. Az Avogadro-szám meghatározása a Brown-mozgás alapján

Az Avogadro-számnak számos meghatározási módja létezik [5]. (12) is lehetőséget ad az Avogadro-szám meghatározására, hiszen $M_k = Am_k$. Ha tehát kísérletileg meghatározzuk, hogy a Brown-mozgó részecske origótól való eltávolodásának négyzetes átlaga hányszorosa az eltelt időnek, akkor az arányossági tényezőből, a T hőmérséklet és a közeg specieszei tömegének ismeretében meghatározhatjuk az A Avogadro-számot. Sajnos az is látható, hogy a számítógépes szimuláció során használt (19) kifejezés alapján nem lehet meghatározni az Avogadro-számot, mert az arányossági tényezőből kiesik az A, ha $M = Am$, $M_k = Am_k$ helyettesítéssel élünk. A számítógépes szimulációnk legföljebb csak igazolni tudja azt, hogy az Avogadro-szám tényleg annyi, mint amit mi betáplálunk M-mel vagy M_k-val. Tehát legföljebb azt tehetjük meg, hogy M vagy M_k értékét valahonnan, más kísérleti eredményből vesszük s felbontva M-et vagy M_k-t Am, ill. Am_k-ra, a futtatási görbére illesztett egyenes meredekségéből meghatározhatjuk az A-t. A valóságot akkor szimuláltuk jól, ha visszakapjuk az Avogadro-szám helyes, valódi értékét. Így, ha kissé mesterkélt és burkolt formában is, de számítógépes szimulációnk alapján is meghatározható az Avogadro-szám. A számítógépes szimuláció valósághűségének csak a használt véletlenszámgenerátor azon tulajdonsága szab korlátot, hogy mennyire kvázivéletlen számokat generál.

Ezúttal szeretnék köszönetet mondani Megyeri László fizikusnak (KFKI), aki az 1. ábra gyors generálásához szükséges gépi kódú programot írta, s bocsátotta rendelkezésemre.

IRODALOM

[1] Vicsek Tamás: Kritikus jelenségek perkolációs rendszerekben. A szilárdtestkutatás újabb eredményei *14*. Akadémiai K., Bp., 1985. p. 197–279.

[2] Kastler Alfred: Az a különös anyag. Gondolat K., Bp., 1980. p. 15–41.

[3] Kiss Dezső: Atomfizika. Tankönyvkiadó, Bp., 1983. p. 21–23.

[4] Feynman, R. P.; Leighton, R. B.; Sands, M.: Mai fizika 4., Műszaki K., Bp., 1985. p. 31–42.

[5] Horváth Gábor: Az Avogadro-szám meghatározása az égbolt kék színéből. A fény szóródása. Fizikai Szemle, *36*. (1986) p. 214

[6] Mandelbrot, B. B.: The Fractal Geometry of Nature. Brownian Motion and Brown Fractals. Freeman, San Francisco, 1983. p. 233–243.

[7] Rundick, J.; Gaspari, G.: The Shapes of Random Walks. Science, *237*. (1987) p. 384