



UNIVERSIDAD TECNICA
FEDERICO SANTA MARIA



Random Walk

Tarea N°1

Termodinámica Estadística

IPM-417 - 2023

Martín Achondo Mercado

Rol: 201860005-9

Profesor: Christopher Cooper

18 de Abril de 2023

Resumen

En este trabajo se presentan los resultados de las simulaciones realizadas a un conjunto de partículas siguiendo un proceso de *Random Walk*. Lo anterior principalmente con el propósito de comparar los resultados obtenidos con la teoría física. Para las simulaciones se probó con conjuntos de 10^3 y 10^4 partículas en una cantidad de pasos no mayor a 20.000.

De los resultados obtenidos, se evidencia claramente que la posición de las partículas forma una distribución normal en todos los pasos de tiempo graficados. Además, la desviación estándar de esta distribución va aumentando con el tiempo, lo que coincide con la función de Green para la ecuación de difusión. De esta manera, se pudo vislumbrar el efecto macroscópico que genera el *Random Walk* en un conjunto de partículas. Junto a esto, se pudo calcular el error en la constante difusiva del problema, el cual tendió a estabilizarse para mayor cantidad de partículas.

Índice

1. Introducción	3
2. Metodología	3
3. Resultados	5
4. Análisis	8
5. Conclusiones	10
6. Referencias	10
7. Anexo	11

1. Introducción

En este trabajo se compararán los resultados experimentales y teóricos al modelar bajo el “random walk” un sistema de N partículas con igual probabilidad de tomar una dirección positiva o negativa en 1 dimensión. Con lo anterior se espera poder obtener una distribución normal que simule la concentración de estas partículas en el espacio y así obtener la constante de difusividad del problema.

2. Metodología

El random walk ilustra de buena manera los resultados fundamentales de la teoría de probabilidad en los que se basa la mecánica estadística. Un estudio de este experimento se detalla a continuación:

Considerar un sistema de N partículas que da M pasos de longitud ℓ . Cada partícula se mueve aleatoriamente en cada “paso temporal” n de la forma:

$$x_i(n+1) = x_i(n) + (2dX - 1)\ell \quad (1)$$

En donde dX sigue una distribución binomial de la forma: $dX \sim \text{Bin}(1, p)$ con p la probabilidad que la partícula i -ésima de un paso a la derecha y $q = 1 - p$ un paso hacia la izquierda.

Si se considera n_1 y n_2 como la cantidad de pasos que la partícula da a la derecha y a la izquierda respectivamente, se puede obtener que ambas siguen una distribución binomial de la forma: $n_1 \sim \text{Bin}(M, p)$ y $n_2 \sim \text{Bin}(M, q)$.

Sea m el desplazamiento neto (en pasos) que realiza una partícula, tal que $x = m\ell$. De esta forma $m = n_1 - n_2 = 2n_1 - M$ y $P_M(m) = P_M(n_1)$. Así, se puede calcular la probabilidad de que la partícula tenga un desplazamiento m a los M pasos como [1]:

$$P_M(m) = \frac{M!}{[(M+m)/2]![(M-m)/2]!} p^{(M+m)/2} q^{(M-m)/2} \quad (2)$$

Así, m sigue una distribución de media y varianza:

$$\begin{aligned} \bar{m} &= M(p - q) \\ \overline{\Delta m^2} &= 4Mpq \end{aligned} \quad (3)$$

Debido a lo anterior, la posición promedio que adoptarán las partículas será de: $\mu = M(p - q)\ell$, con desviación estándar de: $\sigma = 2\sqrt{Mpq\ell}$

Considerando ahora el sistema con N partículas, la posición de las partículas seguirá una distribución normal de la forma:

$$x \sim \mathcal{N}(M(p - q)\ell, 2\sqrt{Mpq\ell}) \quad (4)$$

En este trabajo se intentará probar que la distribución de las N partículas siguiendo el “random walk” sigue la distribución normal dada en (4). Para esto se tomarán los valores de $p = q = 0.5$ y $\ell = 1$ para comparar lo siguiente:

- Se realizará un “random walk” para distintos pasos $M \leq 2 \times 10^4$ con $N = 10^3$ y 10^4 partículas.
- Se compararán las distribuciones de densidad teóricas y experimentales obtenidas.
- Se calculará el error obtenido en la media y la desviación estándar respecto a la teoría.

Por otra parte, considerando las N partículas, se puede calcular la concentración C de estas a partir de la ecuación de difusión:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (5)$$

En donde D corresponde a la constante difusiva. Si se plantea la condición inicial:

$$C(x, t = 0) = \delta(x_0) \quad (6)$$

Se obtiene la siguiente función de Green que resuelve el problema [2]:

$$C(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{|x-x_0|^2}{4Dt}} \quad (7)$$

Notar que esta solución Gaussiana debe coincidir con la obtenida por el “random walk” (4), tomando $p = q = 0.5$ y $x_0 = 0$. Si se considera el tiempo $t = M\tau$ en donde τ corresponde al tiempo característico de vibración, se debería obtener que: $2DM\tau = \overline{\Delta x^2}$. Así, se puede calcular la constante de difusividad de manera teórica como $D = \frac{\ell^2}{2\tau}$ y de manera experimental según lo obtenido con $D = \frac{\overline{\Delta x^2}}{2M\tau}$.

El código para simular esta situación será adjuntado en el anexo del documento.

3. Resultados

Se presentan los valores para la media y desviación de las simulaciones realizadas. Además, se calculan los errores respecto al teórico como:

$$\begin{aligned} d\mu &= |\bar{x} - \mu| \\ d\sigma/\sigma &= \frac{|\sigma_x - \sigma|}{\sigma} \end{aligned} \tag{8}$$

En donde μ y σ corresponden a los valores teóricos de la media y la desviación respectivamente, y \bar{x} , σ_x a los experimentales.

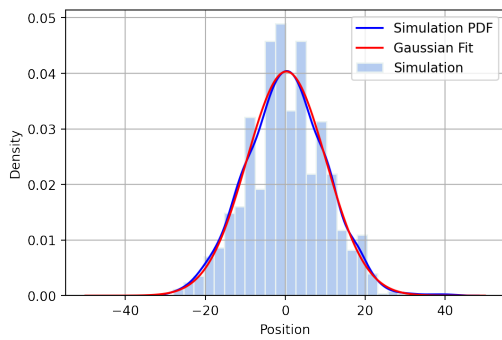
Tabla 1: Resultados obtenidos para $N = 10^3$

M	\bar{x}	σ_x	$d\mu$	$d\sigma/\sigma$
100	0.292	9.89	0.292	0.107
1000	0.766	31.53	0.766	0.0027
5000	0.102	73.48	0.102	0.039
10000	-1.45	98.7	1.45	0.125
20000	-6.98	141.24	6.978	0.0012

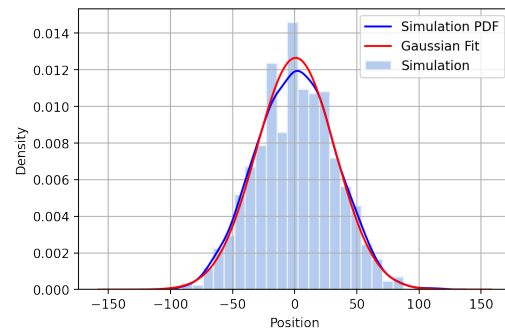
Tabla 2: Resultados obtenidos para $N = 10^4$

M	\bar{x}	σ_x	$d\mu$	$d\sigma/\sigma$
100	0.0468	10.0	0.0468	0.000696
1000	0.5574	31.5	0.5574	0.0038
5000	-0.0548	71.65	0.0548	0.0132
10000	-0.1092	99.95	0.1092	0.000487
20000	0.390	140.93	0.390	0.00347

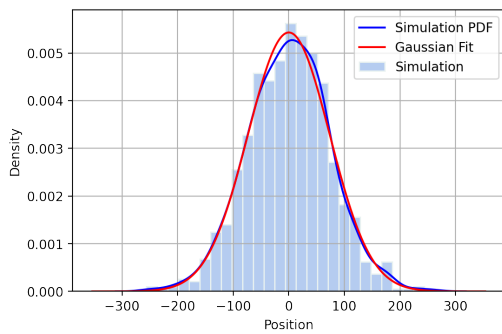
Distribuciones obtenidas para $N = 10^3$ partículas.



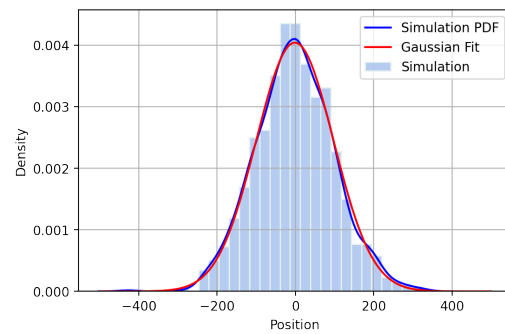
(a) $M = 100$



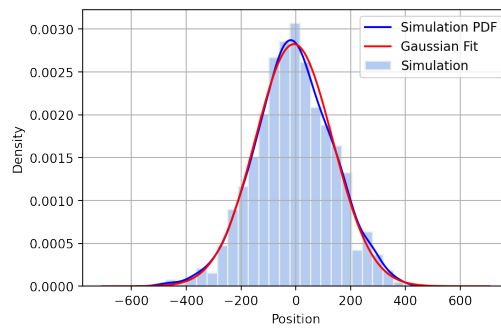
(b) $M = 1000$



(c) $M = 5000$



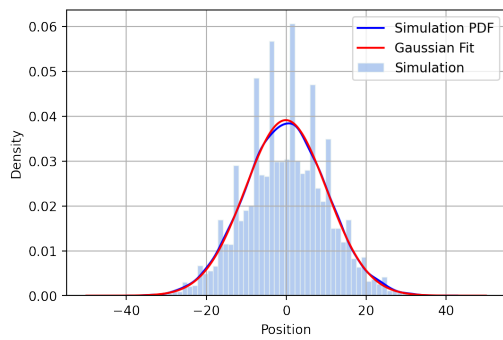
(d) $M = 10000$



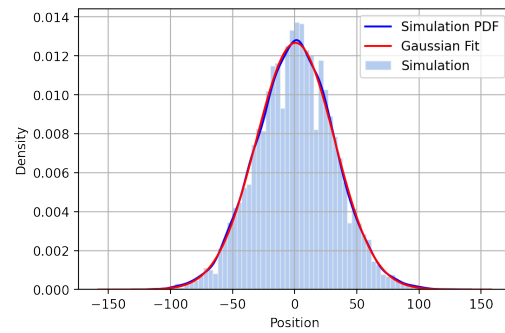
(e) $M = 20000$

Figura 1: Resultados para $N = 10^3$

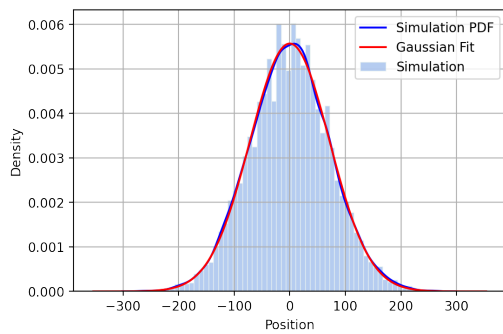
Distribuciones obtenidas para $N = 10^4$ partículas.



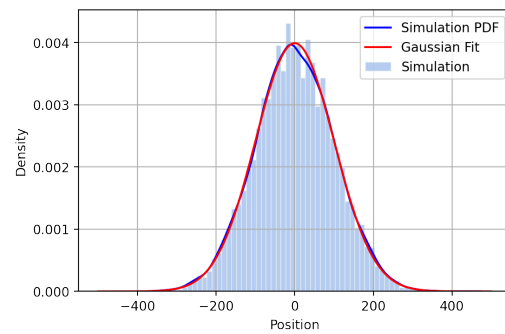
(a) $M = 100$



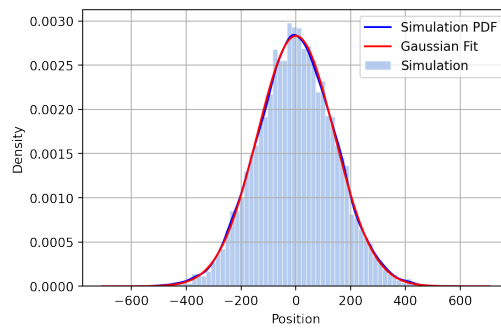
(b) $M = 1000$



(c) $M = 5000$



(d) $M = 10000$



(e) $M = 20000$

Figura 2: Resultados para $N = 10^4$

4. Análisis

Con los resultados obtenidos, se puede notar que en ambos casos la distribución de partículas a distintos pasos de tiempo se asemeja a una distribución normal. Esta distribución normal graficada (“Gaussian fit”), corresponde a la función densidad distribución con media $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum x_i$ y desviación estándar $\sigma_x = \sqrt{\frac{1}{N} \sum (x_i - \bar{x})^2}$, la cual corresponde a la media y desviación de las muestras obtenidas. Adicionalmente, se nota que la diferencia entre “Gaussian fit” y la PDF del experimento disminuye a medida que se aumenta el número de partículas. Este resultado tiene sentido ya que se está aumentando el tamaño de la muestra en este experimento probabilístico.

Por otra parte, se comparan los resultados obtenidos con los valores teóricos planteados en la metodología. Para $p = q = 0.5$ y $\ell = 1$, se debería obtener una distribución con media $\mu = 0$ y desviación estándar $\sigma = \sqrt{M}$. En primera instancia se nota que la curva gaussiana debería estar centrada en el origen, lo cual se cumple en todas las simulaciones. Además, a medida que aumentan los pasos de tiempo, la dispersión de los datos debería aumentar, lo cual también se cumple. En las siguientes figuras se muestra como varía el error en la media y la desviación respecto a los valores teóricos

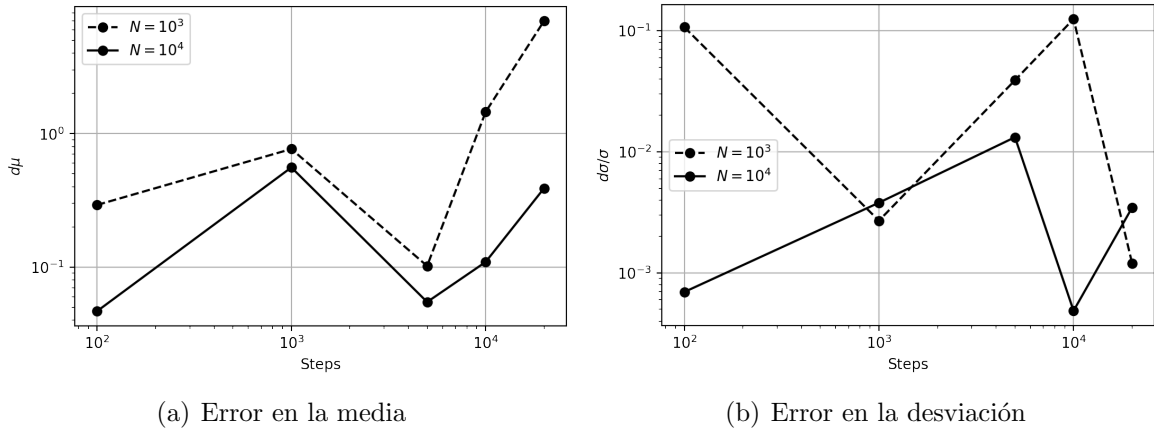


Figura 3: Error en la media y desviación estándar para distintos pasos n

De la figura anterior se nota que el error en la media es menor para el caso con mayor partículas. Esto se debe a que mientras más grande el N , más parecida debería ser la distribución. Sin embargo, pese a que la desviación estándar no exhibe exactamente el mismo comportamiento, existe la tendencia que su error disminuye mientras se aumenta el N . Por otra parte, para ambos parámetros no existen grandes diferencias en órdenes de magnitud a medida que aumentan los pasos.

Revisando el sentido físico de la solución, las soluciones obtenidas coinciden claramente con el movimiento Browniano. Cuando uno deposita una gota de tinta en un estanque de agua, todas las colisiones moleculares aleatorias que existen a nivel microscópico en el fluido provocará en las partículas de tinta un “random walk”. Esto es debido a que avanzará un paso en una dirección aleatoria en cada paso de tiempo característico de vibración. Si se asume que no existe interacción entre las partículas de tinta, la trayectoria que siga cada una será independiente de las otras. La concentración de estas partículas seguirá la función de Green (7). Esto coincide exactamente con la simulación realizada, solo que se trabajó en 1D en vez de 3D. La concentración de partículas formará la distribución Gaussiana que evoluciona con el tiempo, en donde su desviación aumenta con cada paso temporal, manteniendo la media fija. Es por esto que ambos escenarios pueden considerarse equivalentes.

Para darle un sentido físico a la solución, se obtuvo la constante de difusividad teórica del sistema, la cual se calcula como: $D = \frac{1}{2\tau}$. De esta manera, para $\tau = 1\mu s$, $D = 5e5$, y para $\tau = 1ps$, $D = 5e11$. Para τ más pequeño, la difusividad aumenta en el problema ya que pasó menos tiempo, lo que implica que el proceso de difusión ocurrió más rápido. Notar que esto está estrechamente relacionado con la desviación estándar de la simulación, ya que $D = \frac{\overline{\Delta x^2}}{2\tau M}$. Para hacer una comparación con ambos valores de τ , se calcula el error en la predicción de la difusividad como: $\Delta D/D = \frac{D_{\text{exp}} - D_{\text{teo}}}{D_{\text{teo}}} = \overline{\Delta x^2}/M - 1$. Notar que el error no depende de τ , lo que permite comparar las simulaciones de manera más eficiente.

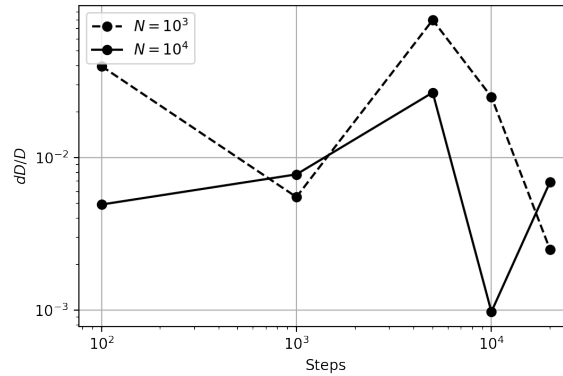


Figura 4: Error en la difusividad para distintos pasos n

En el gráfico anterior se nota como varía el error en la difusividad para los distintos N y pasos temporales. La gráfica toma una forma parecida al gráfico del error en la desviación. Esto se debe principalmente a que la difusividad tiene estricta relación con la dispersión obtenida en las simulaciones.

5. Conclusiones

Como se demostró en este trabajo, el experimento de “random walk” puede parecer bastante simple pero ilustra los fundamentos de la mecánica estadística. La ecuación de difusión intenta explicar este fenómeno en términos continuos en donde no es nada más que el reflejo de una cantidad grande de partículas moviéndose aleatoriamente generando una distribución con media y desviación definida.

Respecto a los resultados, se nota que las distribuciones obtenidas concuerdan con los planteamientos teóricos desarrollados en la metodología. Además al aumentar el número de partículas, se pudo ver como esta similitud a la teoría fue aumentando. Se estima que probando con una cantidad mayor de partículas estos errores deberían disminuir aún más.

6. Referencias

- [1] Reif, F. (1965). *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. McGraw-Hill.
- [2] Cooper, C. (2023). *Apuntes de Termodinámica Estadística*. UTFSM.

7. Anexo

En esta sección se incluye el código desarrollado. Es importante destacar que el código no se programó de la manera más eficiente, pero se prefirió esta forma dado que queda super simple la definición de la partícula como una instancia de la clase Partículas. De esta manera, se define su punto inicial y lo que significa dar un paso. Además, se puede modificar fácilmente la probabilidad p de dar un paso a la derecha o adicionar cualquier otro término que modifique lo que signifique dar un paso. Además, el programar la situación de esta forma no requiere definir un dominio.

Para evitar que los puntos dependan de la paridad de la cantidad de pasos, se inicializan $1/2$ del total de las partículas en $x = 0$ y el resto dividido en igual cantidad en $x = -1$ y $x = 1$.

Código 1: Código en Python para la simulación

```
1 import numpy as np
2 import seaborn as sns
3 import matplotlib.pyplot as plt
4
5
6 # Clase para las particulas
7
8 class Particles:
9
10     particle_list = list()
11     p = 0.5
12
13     def __init__(self, x_initial):
14         Particles.particle_list.append(self)
15         self.x = x_initial
16
17     def step(self):
18         d = np.random.binomial(1, self.p)
19         self.x += 2*d - 1
20
21     @classmethod
22     def positions(cls):
23         L = len(cls.particle_list)
24         Par_x = np.zeros(L)
25         for i, particle in zip(range(L), cls.particle_list):
26             Par_x[i] = particle.x
27         return Par_x
28
29 # Inicializacion de N particulas
30
31 N = 1000
```

```
32 for i in range(N):
33     pos = i%4
34     if pos==0 or pos==1:
35         Particles(x_initial=0)
36     elif pos==2:
37         Particles(x_initial=1)
38     elif pos==3:
39         Particles(x_initial=-1)
40
41 # Generar M pasos a las N particulas
42
43 M = 10000
44 for n in range(M):
45     for particle in Particles.particle_list:
46         particle.step()
47
48 positions = Particles.positions()
49
50
51 # Calculos para la media, desviacion y error en estos
52 mu = np.mean(positions)
53 sigma = np.std(positions)
54 mu_teo = (2*Particles.p-1)*M
55 sigma_teo = 2*np.sqrt(M*Particles.p*(1-Particles.p))
56 dmu = np.abs(mu-mu_teo)
57 dsigma = np.abs(sigma-sigma_teo)/sigma_teo
58
59
60 # Graficos
61 sns.histplot(positions, stat='density', label='Simulation', color='#9
    dbbeb', edgecolor='#e9f2f1')
62 sns.kdeplot(positions, c='b', label='Simulation PDF')
63 sns.lineplot(x=x,y=y, c='r', label='Gaussian Fit')
64
65 plt.grid()
66 plt.xlabel('Position')
```