Random Walk

Pablo Torrón Pérez
Judith Satorra Cortasa

17 de novembre de 2019

En aquest treball, compararem els resultats teòrics que hem vist a la teoria relatius a l'estudi d'un *random walk* unidimensional amb l'anàlisi de *random walk*s simulats.

1 Introducció teòrica

Diem que una partícula es fa un *random walk* o que una trajectòria correspon a un *random walk* quan l'evolució de la posició té una component estocàstica.

En aquest treball, considerem el *random walk* més senzill: a cada interval de temps τ, un punt es pot desplaçar ℓ unitats cap a dreta o esquerra amb probabilitats θ i $1-\theta$, respectivament. Prenem com a origen la seva posició inicial.

Ens preguntem primer quant s'haurà desplaçat en mitjana després de $t = n\tau$.

$$\langle x \rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle x_i \rangle = n\langle x_i \rangle = n[\theta\ell + (1-\theta)(-\ell)] = n\ell(2\theta - 1). \tag{1}$$

Ens preguntem també quina serà la desviació estàndard respecte d'aquesta mitjana a $t = n\tau$. Això será l'arrel quadrada positiva de la variància σ^2.

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i^2 = n[\langle x_i^2 \rangle - \langle x_i \rangle^2] = n\ell^2 \left[1 - (2\theta - 1)^2\right] = 4n\ell^2\, \theta(1-\theta). \tag{2}$$

Notem que

$$n = \left\lfloor \frac{t}{\tau} \right\rfloor \implies \langle x \rangle = \frac{\ell}{\tau} t\,(2\theta - 1),\, \sigma^2 = \frac{4\ell^2}{\tau} t\,\theta(1-\theta); \tag{3}$$

o sigui: tenim una deriva rectilínea uniforme (la mitjana és lineal amb t) i un comportament difusiu (la desviació quadràtica de la mitjana és lineal amb t).

Podem trobar la velocitat de deriva v_d i el coeficient de difusió D comparant la gaussiana que obtenim per a la posició a temps t en aplicar el teorema del límit central amb la solució de l'equació de difusió (homogènia, isòtropa, unidimensional).

Igualant la gaussiana que tenim del límit central a la solució de l'equació de difusió,

$$P(x,t) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left\{-\frac{x - \langle x \rangle}{2\sigma^2}\right\} = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} \exp\left\{-\frac{x - vt}{4Dt}\right\} \tag{4}$$

veiem que $\langle x \rangle = v_d t$ i que $\sigma^2 = 2Dt$. Així doncs, tenim

$$v_d = \frac{\langle x \rangle}{t} = \frac{\ell}{\tau}(2\theta - 1), \qquad D = \frac{\sigma^2}{2t} = \frac{2\ell^2}{\tau}\theta(1-\theta); \tag{5}$$

que ens relacionen l'estadística del *random walk* amb la física de les partícules que en descriuen un.

Segons el valor de θ, podem diferenciar tres casos:

- quan $\theta = 0.5$, tenim $v_d = 0$ (no hi ha deriva) i $D = \ell/2\tau$ (màxima difusió).
- quan $\theta = 0.5 \pm 0.5$, tenim $v_d = \pm\ell/\tau$ (màxima velocitat de deriva) i $D = 0$ (no hi ha difusió, el moviment és completament determinista).
- a tots els valors de θ diferents de 0, 0.5, 1 tenim tant deriva com difusió, amb els valors per a v_d i D que hem calculat al paràgraf anterior.

Hem escrit un programa a Pyhton que permet simular un *random walk* unidimensional i discret com el que acabem de descriure, al qual podem controlar tots aquests paràmetres (el número de passos n, la probabilitat d'anar cap a x positives θ...). Als dos apartats següents mirem de verificar els valors de $\langle x \rangle$ i σ^2 (a partir del seu significat estadístic) i el teorema del límit central.

2 Trajectòries individuals per a diferents θ

El primer cas que analitzarem és el de $\theta = 0.5$. A la Figura 1 hi ha dibuixades 20 trajectòries simulades amb aquest valor de θ.

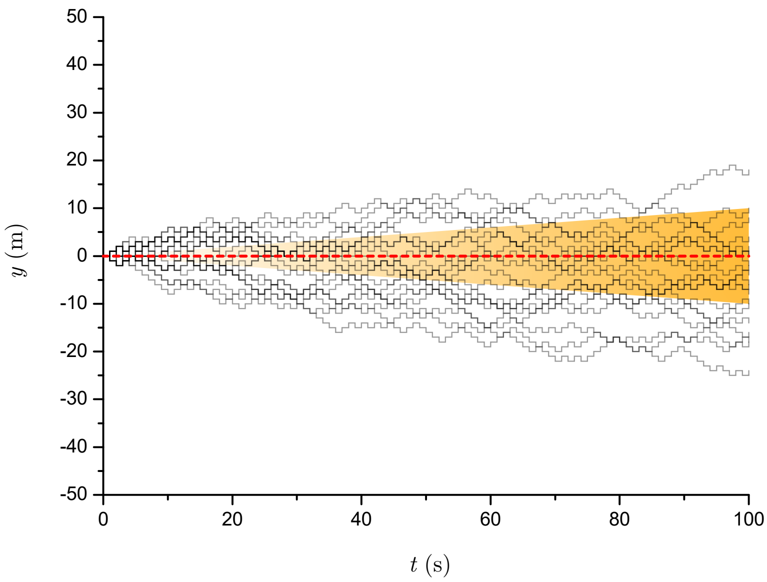

Figura 1: 20 trajectòries amb $n = 100$, $\ell = 1$m, $\tau = 1$s i $\theta = 0.5$.

S'hi ha dibuixat l'evolució de la mitjana i ombrejat l'interval $\langle x \rangle \pm \sigma$ d'acord amb els valors teòrics. S'observa, en efecte, que les trajectòries acaben al voltant de la mitjana i, només amb $n = 100$, tenim una mitjana de -3.75m entre les 20 trajectòries i tenim que 14 d'aquestes 20 (el 70%, força proper a 1σ) es troben dins l'interval ombrejat

Tot i que la mitjana estadística coincideix o s'apropa molt a la teòrica a cada instant, la σ^2 estadística no s'assembla massa a la teòrica per a temps petits. No obstant, a $t \gg \tau$ tendeix també al valor teòric.

Així doncs, si dibuixéssim la mitjana estadística d'aquestes dades a cada t i ombrejéssim l'interval més petit que conté el 65$\sim$70% de les trajectòries, esperaríem —pel que veiem— que coincidissin amb les teòriques quan $t \to \infty$.

Estudiem ara els casos $\theta = 0.35$ i 0.75. Hi tenim dibuixades 20 trajectòries per a cada cas als dos gràfics de la Figura 2.

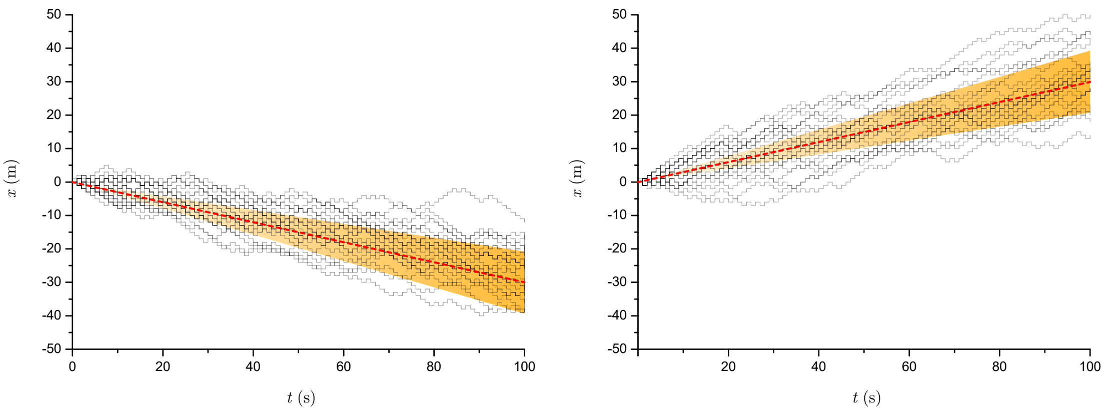

Figura 2: 20 trajectòries amb $n = 100$, $\ell = 1$m, $\tau = 1$s; amb $\theta = 0.35$ a l'esquerra i 0.65 a la dreta.

La primera observació és que els gràfics són —a grans trets, com a mínim— un la reflexió de l'altra respecte de la recta $x = 0$, tal i com esperem si calculem el signe de v_d en cada cas. Efectivament, ara tenim deriva i tenim menys difusió. Les mitjanes de la posició a cada instant segueixen essent properes a la mitjana teòrica i, per a $t = 100\tau$ ($n = 100$), tenim una $\langle x \rangle$ molt propera a ± 30m als dos casos i 13 de les 20 trajectòries (el 65%, força proper a 1σ) dins l'interval $\langle x \rangle \pm \sigma$.

Recordem que la σ teòrica és més petita en aquests casos que a l'anterior, de manera que queda en evidència que hi ha menys difusió ara.

No cal córrer cap codi per a saber que la simulació amb $\theta = 0.5 \pm 0.5$ donaria com a trajectòria $x = \pm\lfloor t \rfloor$ (la funció *floor*, que arrodoneix a la baixa, i faltaria un factor m/s que corregeixi les unitats). En aquests casos, es verifica $v_d = \pm\ell/\tau$ i $\sigma = 0$ ($\Leftrightarrow D = 0$).

3 Teorema del límit central

Per tal de comprovar que la distribució de probabilitat de la posició final és de la forma d'una gaussiana (equació (4)), fem l'histograma del punt en què arriben les diferents partícules d'un milió de *random walks* (figures 3 i 4).

Notem que en cap cas les partícules poden acabar en posicions parelles si n és senar o en posicions senars si n és parell. En efecte, a la figura 4 ($n = 100$) només s'ocupen les posicions parelles, i a la figura 5 ($n = 101$) només s'ocupen les senars.

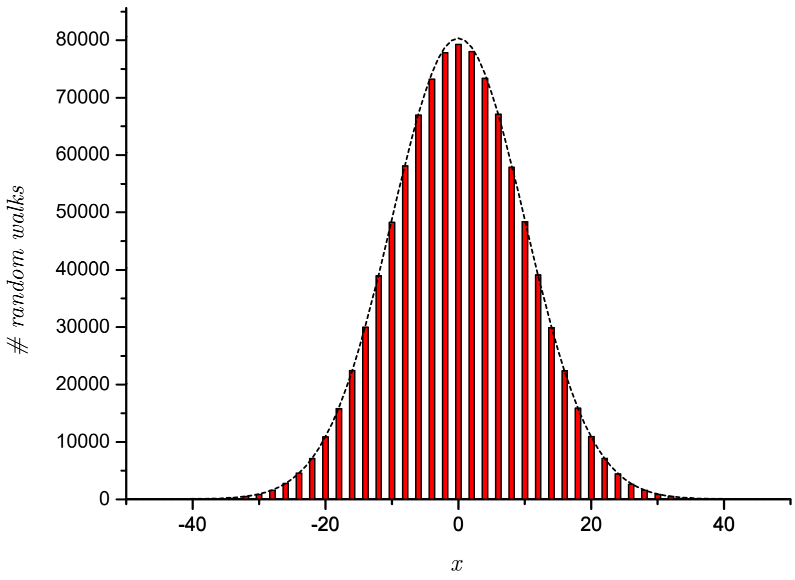

Figura 3: Histograma de les posicions finals d'un milió de partícules amb $n = 100$, $\ell = 1$m, $\tau = 1$s i $\theta = 0.5$; i corba gaussiana predita pel TCL (multiplicada per 2).

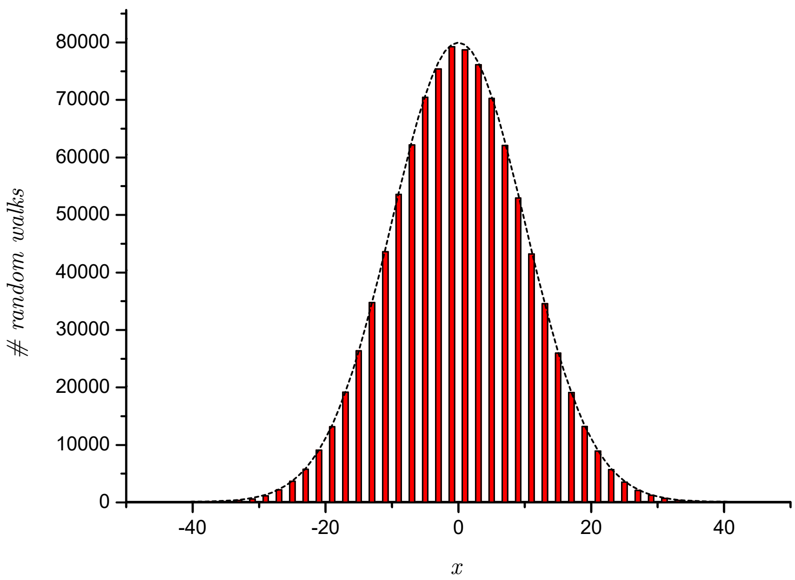

Figura 4: Histograma de les posicions finals d'un milió de partícules amb $n = 101$, $\ell = 1$m, $\tau = 1$s i $\theta = 0.5$; i gaussiana predita pel TCL (multiplicada per 2).

En representar gràficament la corba de la gaussiana teòrica sobre l'histograma, trobavem que, tot i estar centrada a $x = 0$m i tenir l'amplada corresponent a la σ de l'histograma, la gaussiana prediu la meitat de partícules situades en cada posició.

Així doncs, multipliquem la corba per 2 i la nova corba que obtenim s'ajusta molt bé als resultats. Segurament això es deu a que la normalització ha de tenir en compte que, a $n \neq \infty$, només la meitat de posicions són accessibles (les parelles o les senars) segons el va- lor de n, com ja s'ha comentat.

Tot i així, és remarcable com el teorema central del límit és capaç de donar-nos amb molta precisió la distribució de posicions quan el número de *random walk*s que es fan es prou gran.

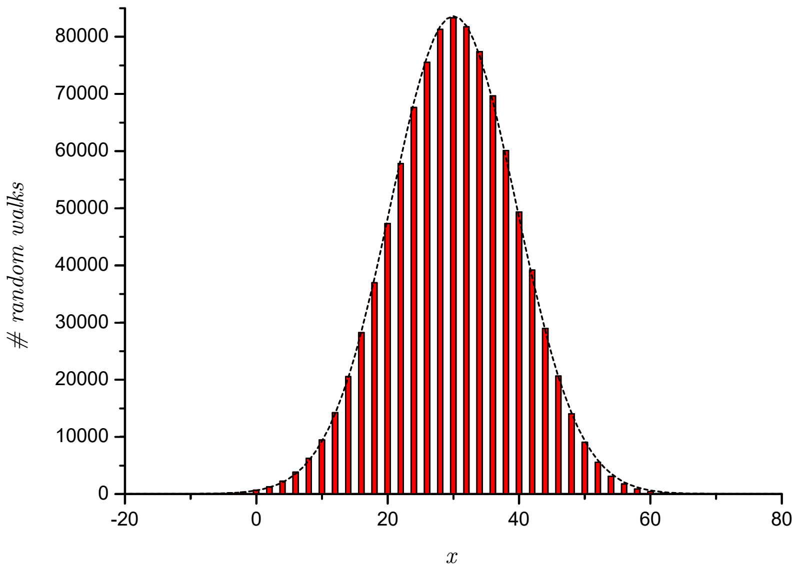

Figura 5: Histograma de les posicions finals d'un milió de partícules amb $n = 100$, $\ell = 1$ m, $\tau = 1$ s i $\theta = 0.65$.

Fem córrer el programa fixant, en aquest cas, $n = 100$ i $\theta = 0.65$. Ens trobem altra vegada amb el problema anterior que tornem a solucionar multiplicant per 2 la gaussiana. De nou, les dades s'ajusten de forma perfecta a una gaussiana amb mitjana i σ iguals a la del *random walk* —en aquest cas, $\langle x \rangle = 30$m i $\sigma = 91$m^2—.

El cas $\theta = 0.35$ dóna la mateixa gaussiana, centrada a -30m.

Codi de la simulació

La simulació s'ha programat a Python v3. Les dades s'han exportat al programa Origin, amb el qual s'han fet els *plots*. A continuació es mostra el codi de Python que s'ha fet servir per a obtenir les dades als dos apartats anteriors.

```python
import numpy as np
import random

p = 0.5
q = 1 - p

L = 1
N = 100
R = 20

# p és la probabilitat d'anar cap a dalt,
# q és la d'anar cap avall.
# N és el número total de passos.
# L és la longitud dels passos.
# R és el número de walks.

B = np.zeros((R))

######################################################
######################################################

for i in range(R):
    A = np.zeros((N+1))
    y = 0
    m = 0
    s2 = 0

    # Bucle del RW
    for n in range(N):
        if random.uniform(0,1) >= p:
            y += L
        else:
            y += -L
        A[n+1] = y

    # print(A)

    j = i
    B[j] = A[N-1]

# print(B)
```