



# 2. naloga: Naključni sprehodi

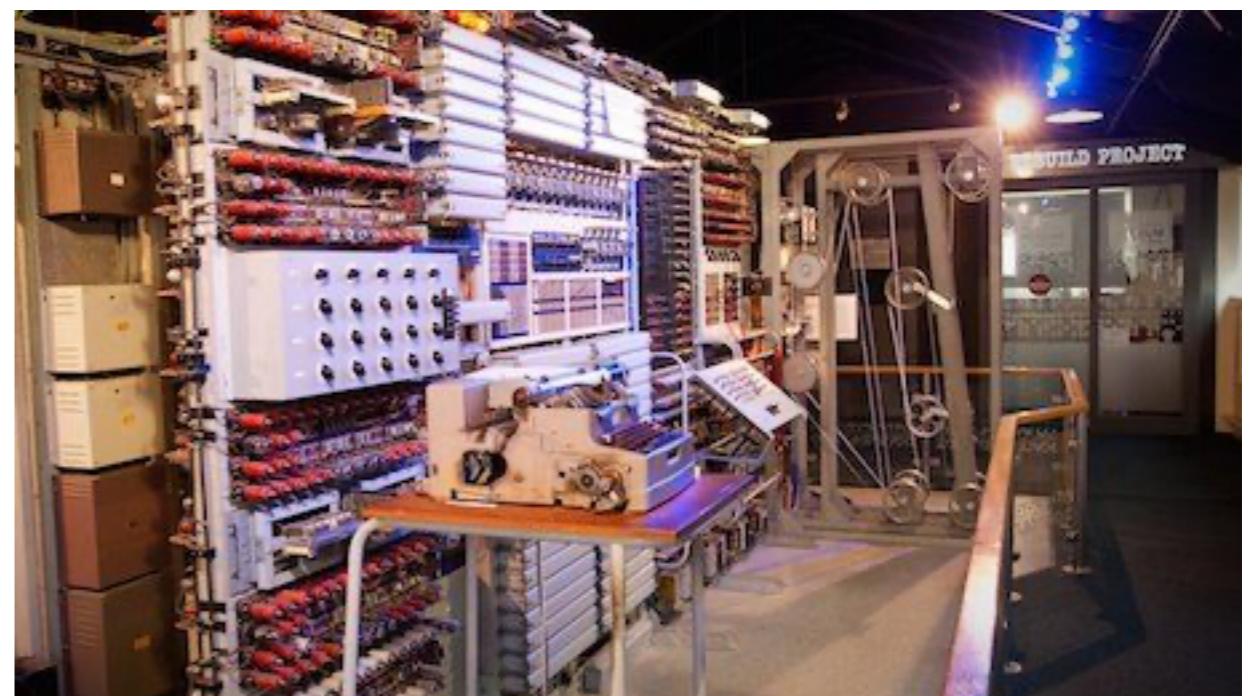
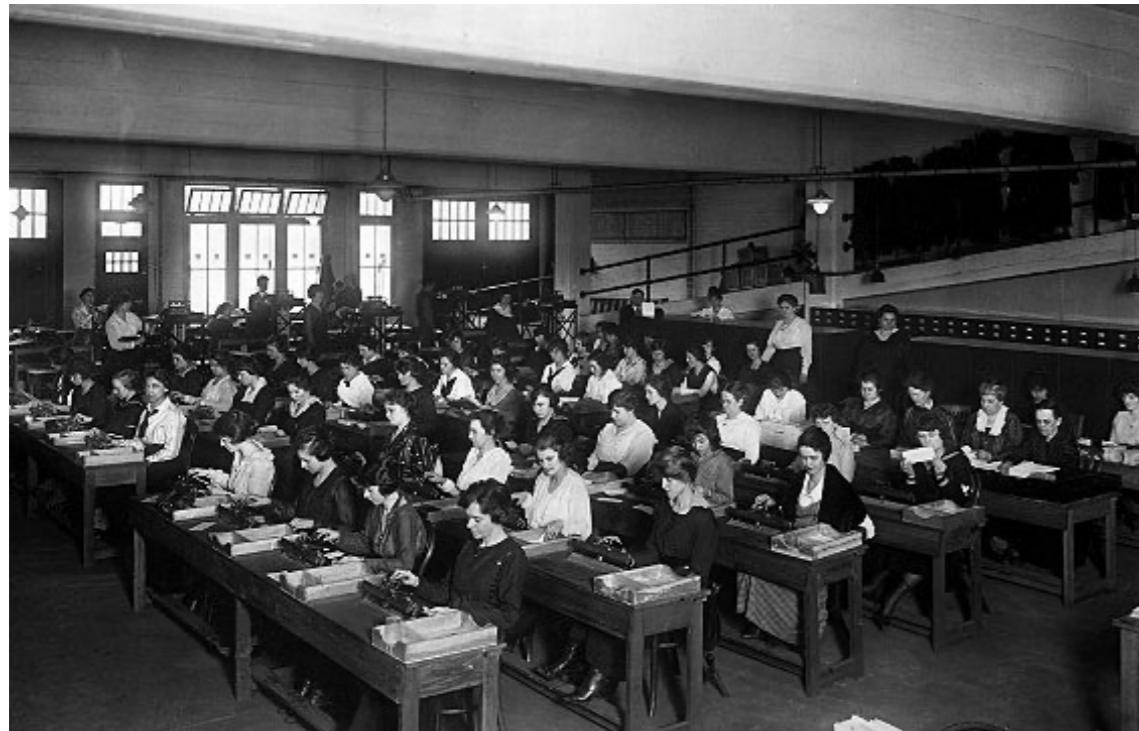
---

Ma-Fi Praktikum 21/22



# Monte Carlo metode

- **Monte Carlo (MC) metode:** osnovni cilj naloge vas je naučiti **simulacijo** procesov in stvari, ki jih lahko s pomočjo tega izračunamo.
- Osnove teh metod so nastale že pred razvojem računalnikov:
  - ‘Computer’ je v originalu **oseba!**
  - ‘**Digital** computer’ je računalnik....
    - ...pomisli na dekripcijo v 2. svetovni vojni... Bletchley Park, Alan Turing ...

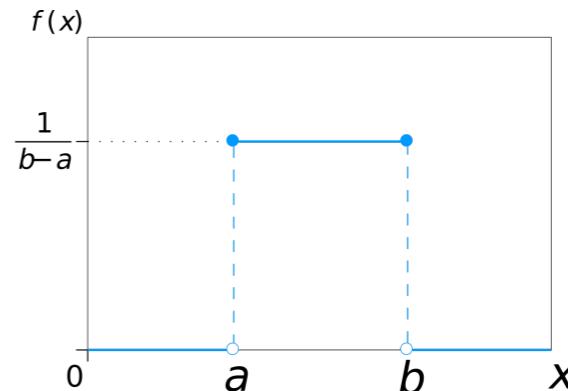




# Naključna števila

- Osnovno izhodišče za tvorbo MC metod je (računalniška) generacija naključnih števil.
  - Osnovna lekcija je, da **prava naključna števila v programiranju ne obstajajo!**
  - Nadomestijo jih **pseudo-naključna (pseudo-random) števila**:
    - Algoritmi, ki generirajo števila, ki zgledajo naključna, tipično kot realna števila v intervalu  $[0,1]$ :  $\rho \in [0,1]$ .

$$w(\rho) = \begin{cases} 1 & \rho \in [0, 1] \\ 0 & \text{drugače} \end{cases}$$



- Vsi te algoritmi so **deterministični (funkcije)** in po naravi **periodični**:
  - pomembna je **hitrost izvajanja** in
  - **dolžina periode!**
- Vsi te algoritmi tudi začnejo pri začetni vrednosti, določeni z enim ali več t.i. **random seed**:
  - **Za enak random seed je zaporedje vrednosti enako!!**
    - Generiranje enakih primerov, vdori ipd...



# Naključna števila

- Pomembno pa je, da so tako generirana števila **statistično neodvisna!**
  - torej jih lahko obravnavamo kot naključni proces!
    - ... z vsemi statističnimi orodji, ki sodijo zraven...
- Eden najboljših ta hip je pseudo-random algoritem **Mersenne Twister**
  - perioda  $2^{19937} - 1 = 10^{6002}$  (!)
  - Če ne spremeniš random seeda, dobiš seveda vedno 10 istih začetnih števil !



WIKIPEDIA  
The Free Encyclopedia

Main page  
Contents  
Current events  
Random article  
About Wikipedia  
Contact us  
Donate  
Contribute

A screenshot of a Wikipedia article page for "Mersenne Twister". The top navigation bar includes links for "Not logged in", "Talk", "Contributions", "Create account", and "Log in". Below the bar, there are tabs for "Article" (selected), "Talk", "Read", "Edit", "View history", and a search bar with the placeholder "Search Wikipedia".

## Mersenne Twister

From Wikipedia, the free encyclopedia

The **Mersenne Twister** is a [pseudorandom number generator](#) (PRNG). It is by far the most widely used general-purpose PRNG.<sup>[1]</sup> Its name derives from the fact that its period length is chosen to be a [Mersenne prime](#).

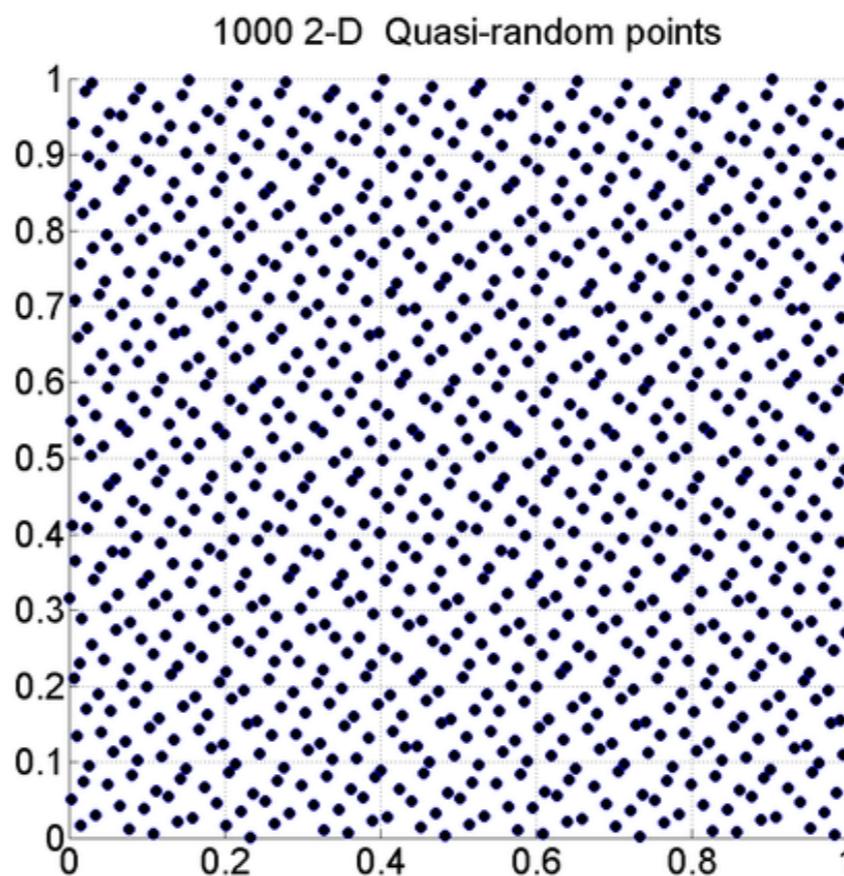
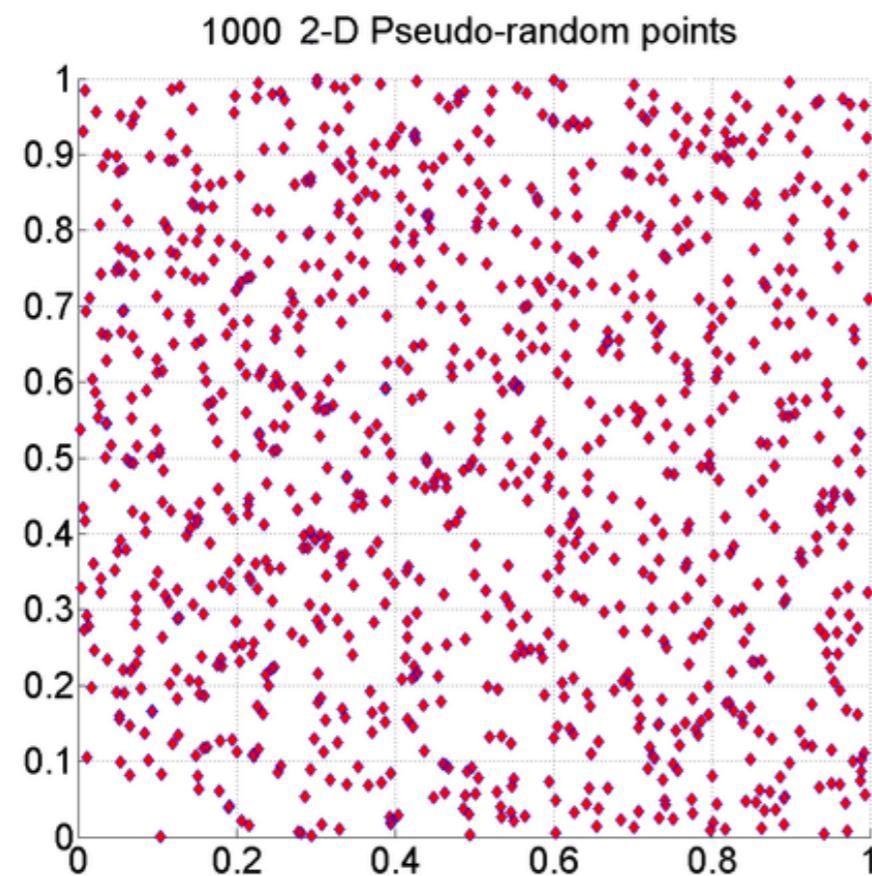
The Mersenne Twister was developed in 1997 by [Makoto Matsumoto](#) [ja] (松本 真) and [Takuji Nishimura](#) (西村 拓士).<sup>[2]</sup> It was designed specifically to rectify most of the flaws found in older PRNGs.

The most commonly used version of the Mersenne Twister algorithm is based on the Mersenne prime  $2^{19937}-1$ . The standard implementation of that, MT19937, uses a [32-bit](#) word length. There is another implementation (with five variants<sup>[3]</sup>) that uses a 64-bit word length, MT19937-64; it generates a different sequence.



# Quasi-random numbers

- Poleg pseudo- obstajajo tudi kvazi-naključna (quasi random) števila. Ki pa so nekaj drugega!
  - Cilj quasi-random števil je enakomerno pokriti prostor, torej števila **niso neodvisna!**
    - **Kar je bistveno za naše simulacije v smislu statistične obravnave, in jih zato ne uporabljam prav pogosto...**
    - V uporabi v industriji, sploh v filmskih CGI efektih....





# MC integracija

- Prva izvedba MC metod, ki jo bomo spoznali, je uporaba MC metod za integracijo.
- Najpreprostejši zgled je kar izračun ploščine lika na papirju.
  - Vzemimo enotski krog na kvadratu  $[-1,1] \times [-1,1]$  za računski zgled.
  - Narišimo krog na papir in naključno ‘streljajmo’ nanj.

$$x = \rho_1 * 2 - 1$$

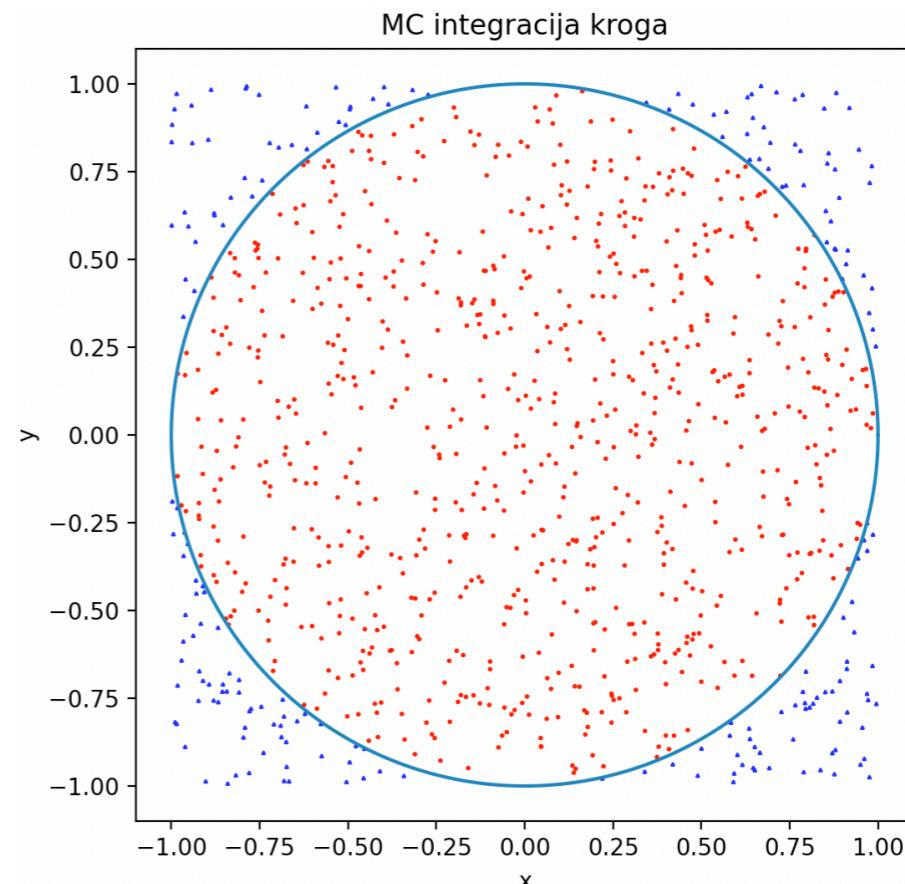
$$y = \rho_2 * 2 - 1$$

- Verjetnost, da zadanemo v krog je kar razmerje ploščin:

$$P_{in} = \frac{S_k}{S_0} = \frac{\pi * r^2}{(2r)^2} = \frac{\pi}{4}$$

$$\hat{P}_{in} = \frac{N_{in}}{N_{in} + N_{out}}$$

Ocena za vrednost





# MC integracija

- Iz tega lahko določimo ploščino kroga, tudi če ne poznamo vrednosti števila  $\pi$ !

$$S_k = S_0 \cdot \hat{P}_{in}$$

$$\sigma_{S_k} = S_0 \cdot \sigma_{\hat{P}_{in}} = S_0 \cdot \sqrt{\frac{\hat{P}_{in} \cdot (1 - \hat{P}_{in})}{N}}, \quad N = N_{in} + N_{out}$$

- Vidimo, da je napaka **binomska** in pada enostavno s korenom števila poskusov  $N$ !
  - Ta koren je tudi ‘boleče dejstvo’...
- To je mnogo enostavnejše, kot kak drug postopek! **Omejen si s časom za poskuse...**
- Postopek lahko uporabimo za lik **poljubne oblike**!
  - Potrebujemo le kriterij zunaj/znotraj...
- ... Prav tako ga lahko **uporabimo v poljubno dimenzijah** (volumen...)!
  - Potrebujemo le **smiseln** volumen, ki objame to telo...



# Met šivanke na pod...

- Lahko tudi obrnemo, pa iz danega primera izračunamo oceno za  $\pi$ ! Enako enostaven (robusten) postopek ...

$$\hat{\pi} = 4 \cdot \hat{P}_{in}$$

$$\sigma_{\pi} = 4 \cdot \sigma_{\hat{P}_{in}} = 4 \cdot \sqrt{\frac{\hat{P}_{in} \cdot (1 - \hat{P}_{in})}{N}}, \quad N = N_{in} + N_{out}$$

- To je spet mnogo enostavnejše, kot kak drug postopek za račun števila  $\pi$ !

- **Poznano kot Buffonov problem šivanke...**
- Menda analogen poskus popularen v angleški mornarici: metanje šivance na ladijski pod. Verjetnost, da šivanka prekrije špranjo je tudi sorazmerna s  $\pi$ ...
- **Omejen si s časom za poskuse... kar na Atlantiku ni problem...**

## Buffon's needle problem

From Wikipedia, the free encyclopedia

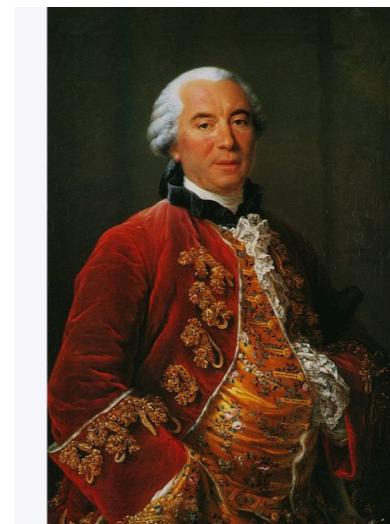
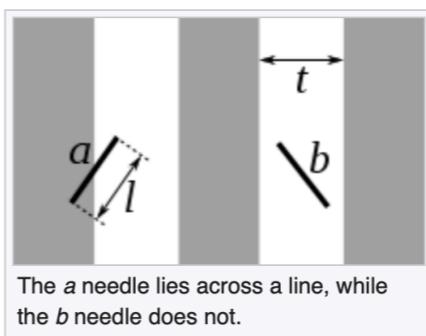
In mathematics, **Buffon's needle problem** is a question first posed in the 18th century by Georges-Louis Leclerc, Comte de Buffon.<sup>[1]</sup>

Suppose we have a floor made of parallel strips of wood, each the same width, and we drop a needle onto the floor. What is the probability that the needle will lie across a line between two strips?

Buffon's needle was the earliest problem in geometric probability to be solved<sup>[according to whom?]</sup>; it can be solved using integral geometry. The solution for the sought probability  $p$ , in the case where the needle length  $l$  is not greater than the width  $t$  of the strips, is

$$p = \frac{2l}{\pi t}.$$

This can be used to design a Monte Carlo method for approximating the number  $\pi$ , although that was not the original motivation for de Buffon's question.<sup>[2]</sup>



Georges-Louis Leclerc, Comte de Buffon, by François-Hubert Drouais

**Born** 7 September 1707  
**Montbard, Burgundy, France**



# MC integracija funkcij

- Analogno lahko definiramo tudi MC integral funkcije. Recimo 1D integral:
  - ‘List’ je območje  $[a,b] \times [0,h]$ , kjer je  $h$  povsod višji od funkcije:  $f(x) < h$ .
  - Neznana ‘ploskev’ je (dobesedno) integral funkcije.

$$S = I = \int_a^b f(x) dx$$

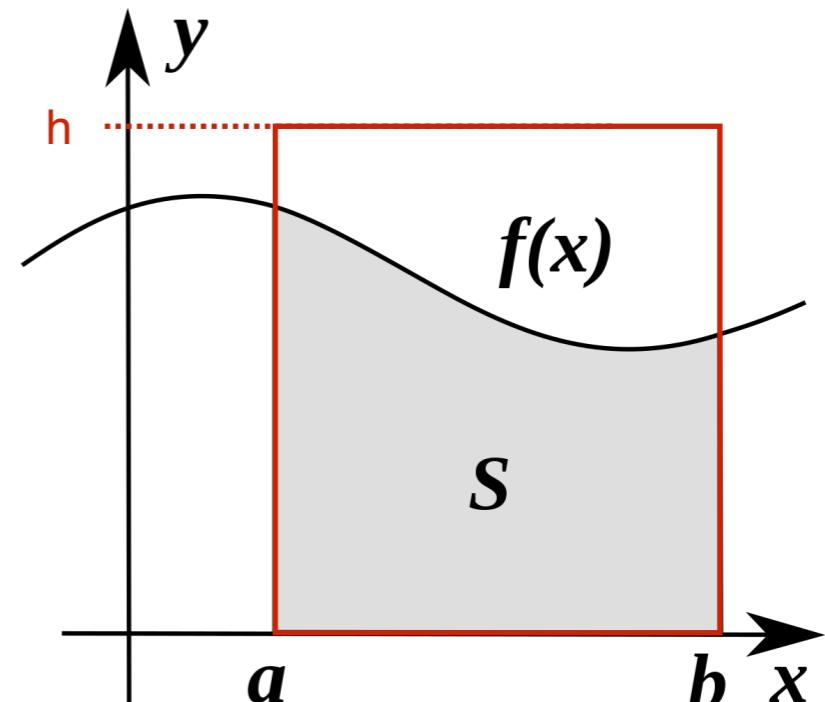
$$S_0 = (b - a) \cdot h$$

$$\hat{P} = \frac{S}{S_0} = \frac{I}{(b - a)h} \int_a^b f(x) dx$$

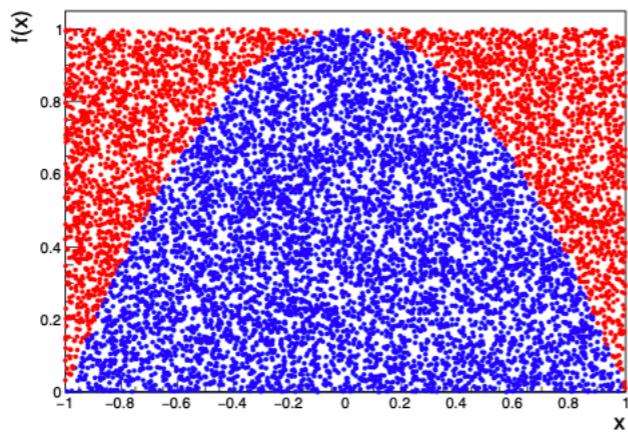
- Če malo poračunamo problem hitro vidimo, da je lažje nadomestiti vzorčenje po smeri  $y$  kar z razmerjem med  $f(x)$  in  $h$ .



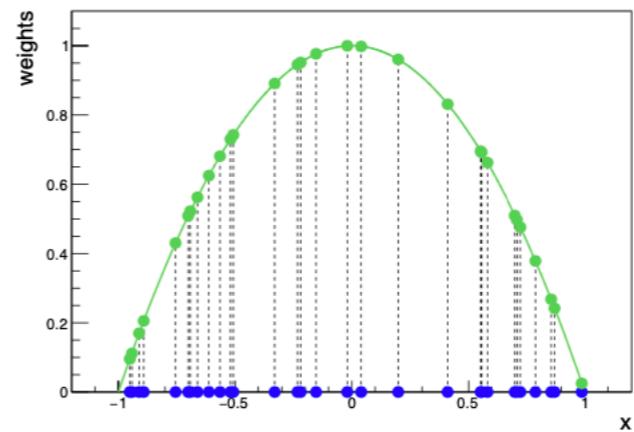
$$I = (b - a) \cdot h \cdot \frac{N_{hit}}{N_{hit} + N_{miss}}$$



$$I = (b - a) \cdot h \cdot \frac{\sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{h}}{N}$$



dogodki: uteži 0 ali 1  
( pod/nad f(x) )



dogodki: uteži  $f(x_i)/h$ ,  
kar je verjetnost za  
uspeh pri nekem  $x_i$ !



# MC integracija funkcij

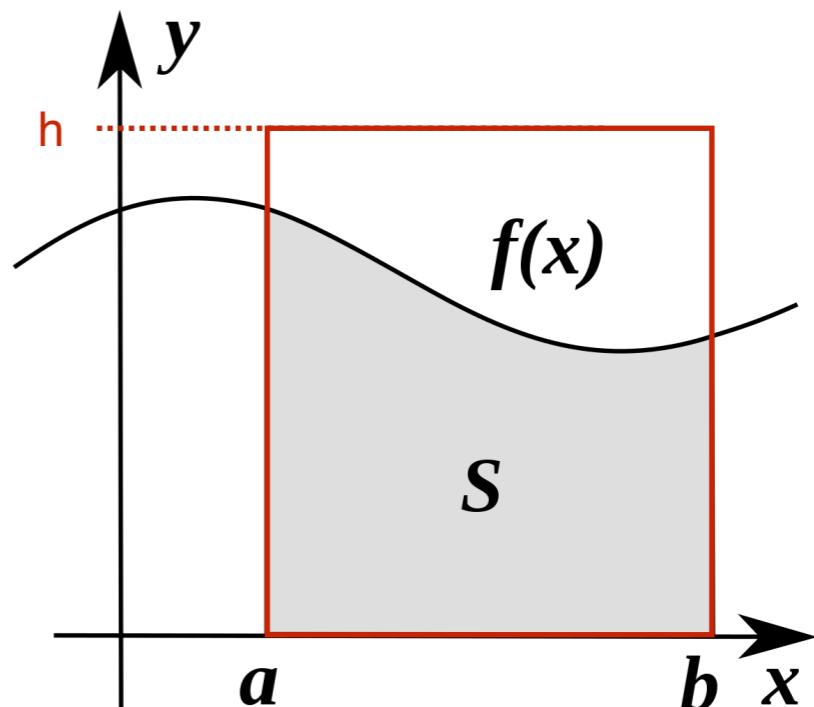
- Analogno lahko definiramo tudi MC integral funkcije. Recimo 1D integral:
  - ‘List’ je območje  $[a,b] \times [0,h]$ , kjer je  $h$  povsod višji od funkcije:  $f(x) < h$ .
  - Neznana ‘ploskev’ je (dovesedno) integral funkcije.

$$S = I = \int_a^b f(x) dx$$

$$S_0 = (b - a) \cdot h$$

$$\hat{P} = \frac{S}{S_0} = \frac{I}{(b - a)h} \int_a^b f(x) dx$$

- Če malo poračunamo problem hitro vidimo, da je lažje nadomestiti vzorčenje po smeri  $y$  kar z razmerjem med  $f(x)$  in  $h$ .
  - Ostane nam torej le vzorčenje po  $x$ . Dobimo **izrek o povprečni vrednosti**:



$$x_i = (b - a) \cdot p_i + a$$

$$\frac{I}{(b - a)} \int_a^b f(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{(b - a)}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

$h$  se pokrajsa na obeh straneh imenovalca...



# MC integracija funkcij

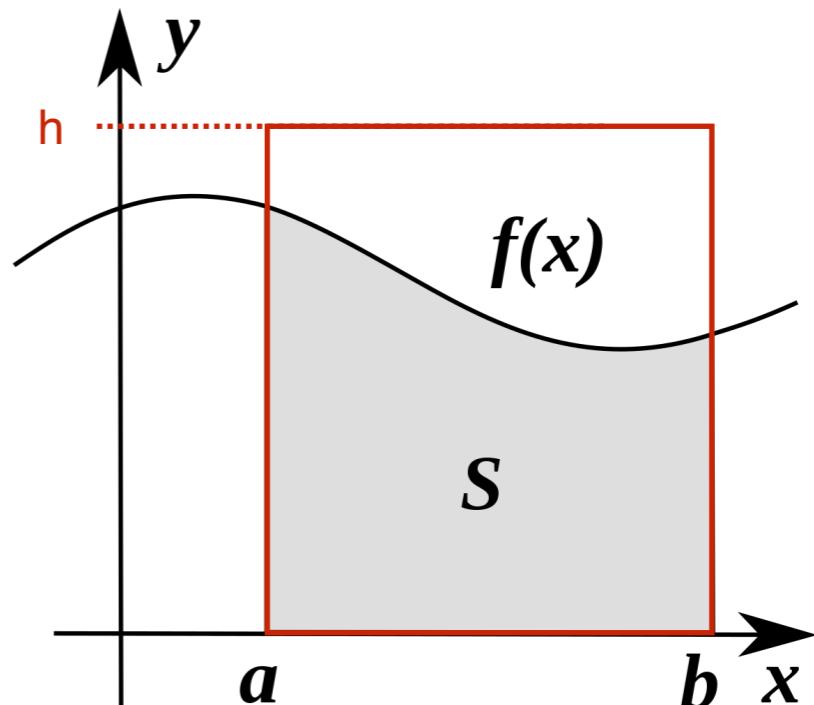
- Analogno lahko definiramo tudi MC integral funkcije. Recimo 1D integral:
  - ‘List’ je območje  $[a,b] \times [0,h]$ , kjer je  $h$  povsod višji od funkcije:  $f(x) < h$ .
  - Neznana ‘ploskev’ je (dobesedno) integral funkcije.

$$S = I = \int_a^b f(x) dx$$

$$S_0 = (b - a) \cdot h$$

$$\hat{P} = \frac{S}{S_0} = \frac{I}{(b - a)h} \int_a^b f(x) dx$$

- Če malo poračunamo problem hitro vidimo, da je lažje nadomestiti vzorčenje po smeri  $y$  kar z razmerjem med  $f(x)$  in  $h$ .
  - Ostane nam torej le vzorčenje po  $x$ . Dobimo **izrek o povprečni vrednosti**:



$$x_i = (b - a) \cdot p_i + a$$

$$x_i \sim w(x)$$

$$\frac{I}{(b - a)} \int_a^b f(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

$$\frac{1}{a} \int_a^b f(x) w(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = \mathbb{E}_{x \sim w}[f(x)]$$

$h$  se pokrajša na obeh straneh imenovalca...



# MC integracija funkcij

- Napaka je torej koren variance pričakovane vrednosti, kot jo poznamo iz verjetnosti, kvantne mehanike ipd... ( $\sigma_{int} \sim 1/\sqrt{N}$ ).

$$\sigma_{int} = \frac{(b-a)}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left( f(x_i) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \right)^2}$$

↗ varianca funkcije

- Seveda se da to proceduro spet **prevesti na poljubno dimenzij.**
- Obstajajo naprednejši algoritmi, ki prilagajajo integracijski volumen (adaptivni algoritmi). Eden najbolj znanih je VEGAS (pa MISER, Metropolis-Hastings ...)

SLAC-PUB-1839 (Revised)  
November 1976  
Revised April 1977  
(T/E)

A NEW ALGORITHM FOR ADAPTIVE MULTIDIMENSIONAL INTEGRATION\*

G. Peter Lepage  
Stanford Linear Accelerator Center  
Stanford University, Stanford, California 94305

## ABSTRACT

A new general purpose algorithm for multidimensional integration is described. It is an iterative and adaptive Monte Carlo scheme. The new algorithm is compared with several others currently in use, and shown to be considerably more efficient than all of these for a number of sample integrals of high dimension ( $n \geq 4$ ).

## Adaptive Multidimensional Integration: VEGAS Enhanced

G. Peter Lepage\*  
Department of Physics, Cornell University, Ithaca, NY, 14853  
(Dated: September 22, 2020)

We describe a new algorithm, VEGAS+, for adaptive multidimensional Monte Carlo integration. The new algorithm adds a second adaptive strategy, adaptive stratified sampling, to the adaptive importance sampling that is the basis for its widely used predecessor VEGAS. Both VEGAS and VEGAS+ are effective for integrands with large peaks, but VEGAS+ can be much more effective for integrands with multiple peaks or other significant structures aligned with diagonals of the integration volume. We give examples where VEGAS+ is 2–17× more accurate than VEGAS. We also show how to combine VEGAS+ with other integrators, such as the widely available MISER algorithm, to make new hybrid integrators. For a different kind of hybrid, we show how to use integrand samples, generated using MCMC or other methods, to optimize VEGAS+ before integrating. We give an example where preconditioned VEGAS+ is more than 100× as efficient as VEGAS+ without preconditioning. Finally, we give examples where VEGAS+ is more than 10× as efficient as MCMC for Bayesian integrals with  $D = 3$  and 21 parameters. We explain why VEGAS+ will often outperform MCMC for small and moderate sized problems.



# MC simulacija v 1D

- Pri MC simulaciji bi radi pridobili (statistično neodvisne) **dogodke**, ki so porazdeljeni v prostoru spremenljivk po določeni porazdelitvi.
- Najpreprostejši pristop za 1D primer lahko pridobimo kar iz MC integracije.
  - Privzamemo, da je  $f(x) > 0$  na intervalu  $[a,b]$ .
    - Vzorčimo  $x$  enakomerno po  $[a,b]$ , kot prej:  $x_i = (b - a) \cdot p_i + a$
    - Izračunamo  $f(x_i)$ .
    - Vzamemo še eno naključno število  $\rho$ . Dogodek obdržimo samo, če:

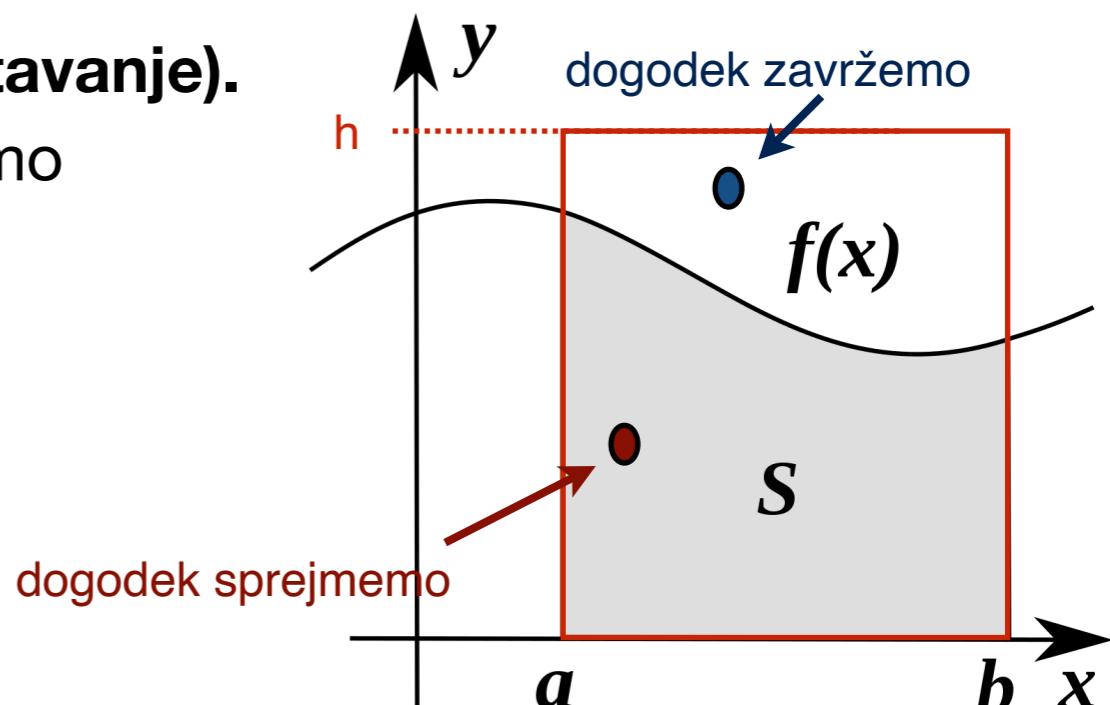
$$p \leq \frac{f(x_i)}{h}$$

$$y = \rho \cdot h \leq f(x_i) \quad (\text{ekvivalentno})$$

- Metoda se imenuje '**hit & miss**' (**odmetavanje**).
  - Očitno je potratna, saj lahko zavržemo veliko poskusov... Vendar dobimo porazdelitev:

$$w(x) = \frac{f(x)}{\int_a^b f(x) dx}$$

normalizacija





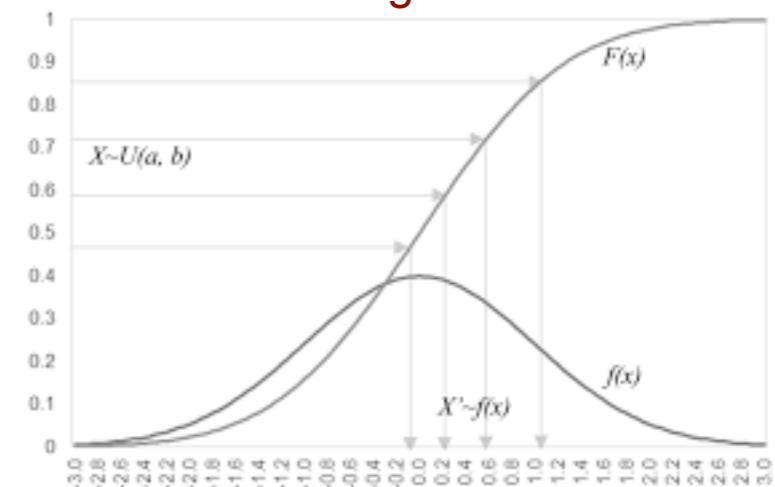
# MC simulacija v 1D

- Obstajajo boljše, **unitarne** metode, ki za vsak poskus dajo rezultat...
- Zelo pogost pristop je **vzorčenje iz kumulante (inverse CDF sampling)**.  
Rešujemo (integralski) sistem enačb:

$$\int_a^x f(z) dz = p \int_a^b f(z) dz$$

*kumulanta*                    *normalizacija*

normirani zgled...



- Če obstaja integralska funkcija  $F(x)$ , ki ima tudi inverz  $F^{-1}(x)$ , je postopek analitičen (drugače pa numeričen):

$$F(x) - F(a) = \int_a^x f(z) dz$$

$$F(x) - F(a) = p \int_a^b f(z) dz = p [F(b) - F(a)]$$

$$x = F^{-1} (p [F(b) - F(a)] + F(a))$$



# MC simulacija v 1D

- Za zgled: Eksponentna porazdelitev:

$$w(t) = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}}$$

$$t = -\tau \cdot \ln(1 - \rho)$$

- Normalna (Gauss) porazdelitev

$$w(x) = (G)(x \mid \mu = 0, \sigma = 1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

$$x = \sin(2\pi\rho_1)\sqrt{-2 \ln(\rho_2)}$$

dve naključni števili ....

- Potenčna (Pareto) porazdelitev

- Obstajajo velikanske zbirke receptov!

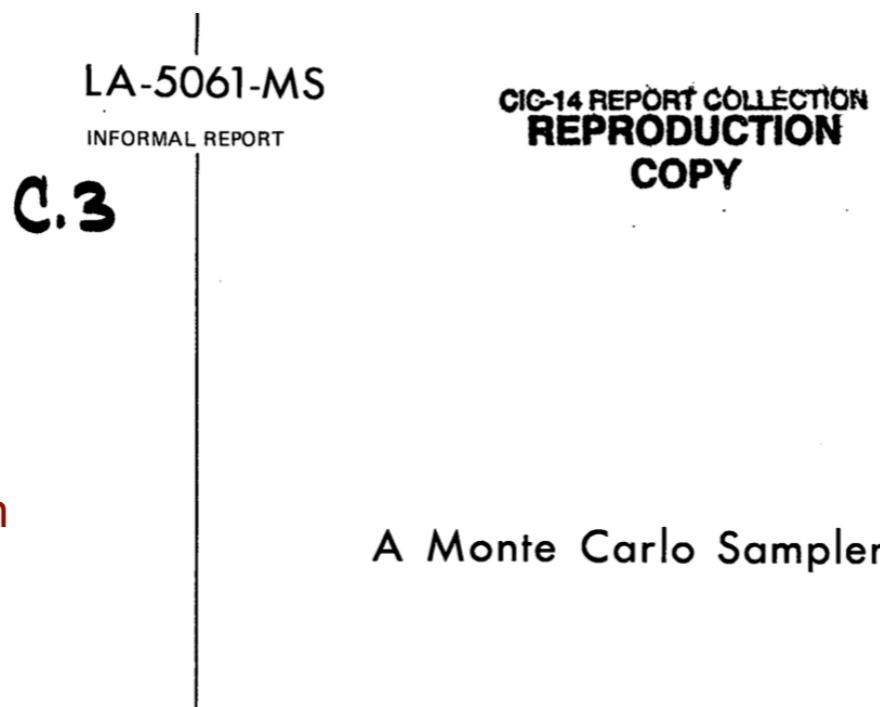
$$w(x) = \begin{cases} \frac{\alpha x_m^\alpha}{x^{\alpha+1}} & x > x_m \\ 0 & x < x_m \end{cases}$$

Pazi na izbiro  
min. vrednosti!

$$x = x_m \cdot (1 - \rho)^{-\frac{1}{\alpha}}$$

Previdno pri implementacijah: v Numpy premakni za 1 in reskaliraj! ....kot imate v zgledu na učinici! )

```
#pareto distribution, pazi na (a+1) potenco!
a, m = 3., 2. # shape and mode
s = (np.random.pareto(a, 1000) + 1) * m
```



A Monte Carlo Sampler



# MC simulacija v M-dim

- V več dimenzijah kombiniramo recepte tako, kot verjetnostne porazdelitve. Za neodvisne kar produkt

$$w(x, y, z, \dots) = w(x) \cdot w(y) \cdot w(z) \cdot \dots$$

- Za odvisne spremenljivke je stvar bolj komplikirana, ker moramo poznati pogojne verjetnosti in vrstni red vzorčenja ni poljuben, na primer:

$$w(x, y, z) = w(x \mid y, z) \cdot w(y \mid z) \cdot w(z)$$

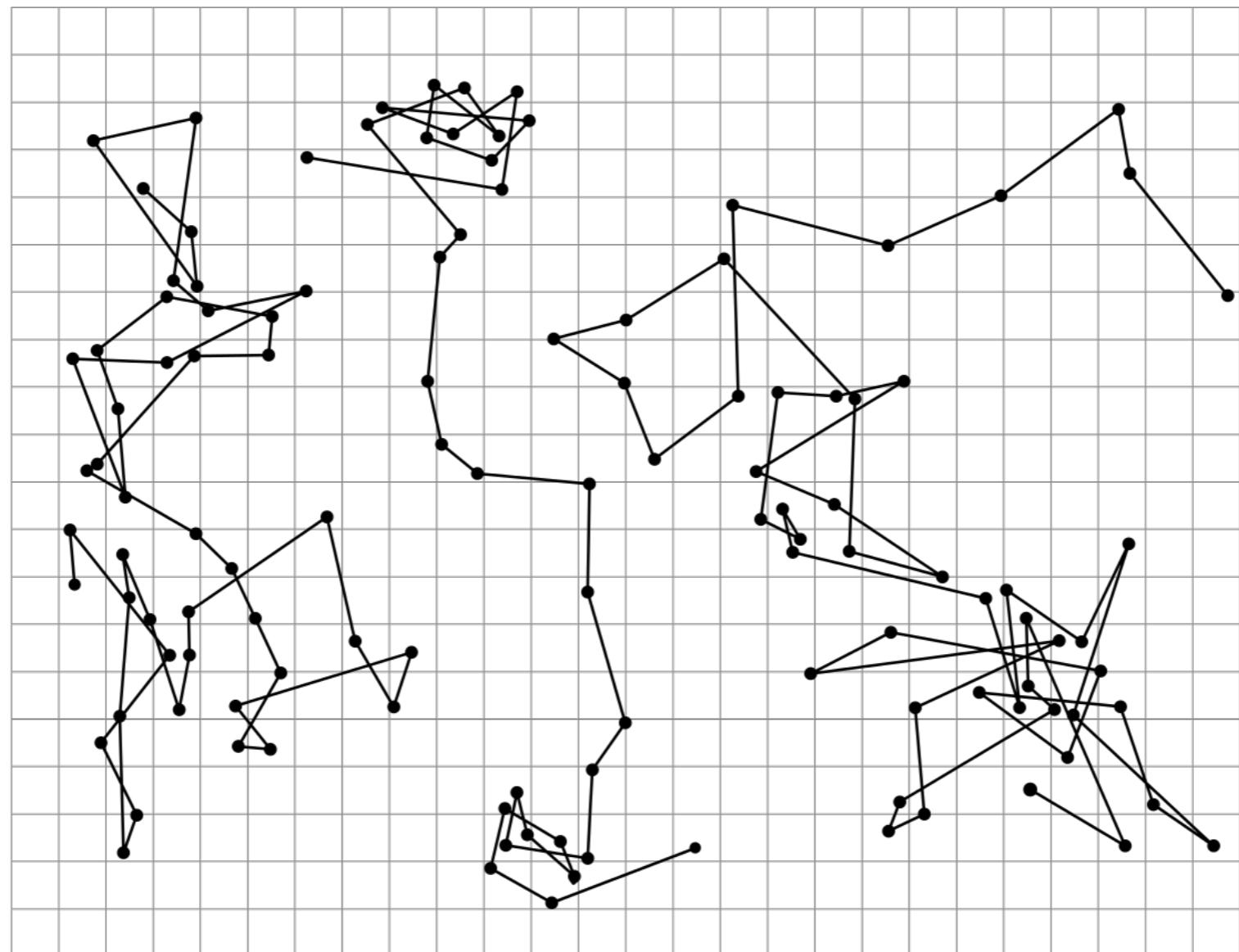
↑                   ↑                   ↑  
najprej izberemo z, potem y, potem x ...

- Za naš problem v DN, ki je 2D korakanje lahko neodvisno izberemo dolžino koraka ( $l$ ) po Pareto distribuciji in poljubno smer ( $\varphi$ ) ...



# Random Walk

- Tema naše naloge so naključni sprehodi (random walk) v 2D.
  - Srečamo marsikje, tipičen zgled je **difuzija** (od Brownovega gibanja dalje...).





# Random Walk

- Najlažje se naučimo bistvenih lastnosti, če se omejimo kar na 1-dim gibanje:

- Difuzijska DE je podana z:

$$\frac{\partial w(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 w(x, t)}{\partial x^2}$$

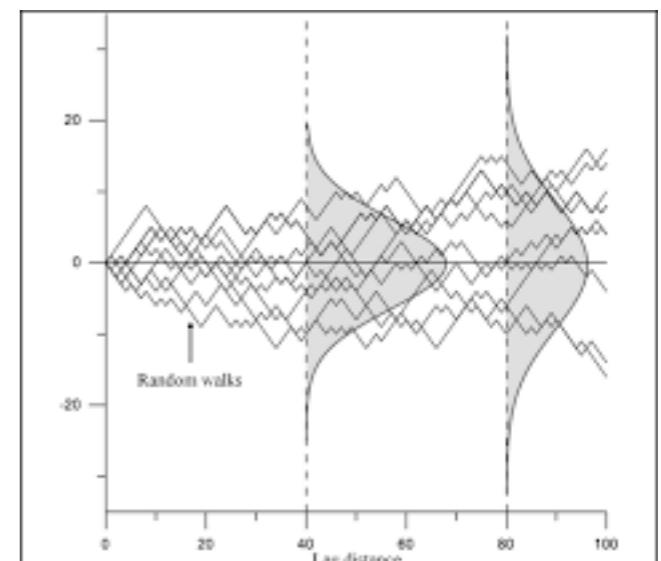
- Začetna situacija naj bo ‘barvilo’ le v izhodišču:  $w(x, t) = \delta(x)$ .
- Rešitev je potem kar Gaussova funkcija:

$$G(x | \mu = 0, \sigma = \sqrt{2Dt}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

- Kjer je varianca  $\sigma^2$  linearno sorazmerna s časom:

$$\sigma^2(t) = \langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = 2Dt$$

- To se imenuje **normalna difuzija**.





# Normalna difuzija

- Rezultat normalne difuzije temelji na nekaj predpostavkah.
  - Predstavljajmo si ta proces kot zaporedje diskretnih korakov (dogodkov)  $x_i \in \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  v enakomernih časovnih intervalih  $\Delta t$ . Vsak korak naj izhaja iz neke porazdelitve  $w(x)$ , simetrične okrog izhodišča.
  - Skupna dolžina n korakov (z) je potem porazdeljena po konvoluciji posameznih porazdelitev  $w(x_i)$ :

$$z = \sum_{i=1}^n x_i$$

$$w(z) = \underbrace{w(x_1) * w(x_2) * \dots * w(x_n)}_n$$

- **Ob predpostavki**, da ima porazdelitev  $w(x)$  končno varianco, velja Centralni limitni izrek:

$$\langle z \rangle = \sum_{i=1}^n \langle x_i \rangle = 0$$

$$\langle z^2 \rangle = \sum_{i=1}^n \langle x_i^2 \rangle = n \sigma_x^2$$

Reproducira naš rezultat!  
( $\sigma^2 \sim t$ )

$$w(z) \longrightarrow G(z | \mu = 0, \sigma_z = \sqrt{n} \sigma_x)$$



# Anomalna difuzija

- **Anomalno difuzijo** pa dobimo, če so variance posameznih korakov neskončne, z ‘debelimi repi’, (Cauchy/Breit-Wigner/Lorentz) in centralni limitni izrek ne velja! **Ekvivalentno lahko postavimo, da gre  $D \rightarrow \infty$ !**
  - Difuzijska konstanta  $D$  je ( ne glede na dimenzije ) sorazmerna z:

$$D \propto \frac{\langle L^2 \rangle}{\tau}$$

pričakovana vrednost kvadrata dolžine koraka

pričakovana vrednost časa med koraki

- Obe količini imata lahko konstantno vrednost ali pa izhajata iz verjetnostne porazdelitve. Tipično:

$$\left. \begin{array}{l} w(L) \propto L^{-\mu} \\ w(\tau) \propto \tau^{-\nu} \end{array} \right\} \text{določata vedenje } D \text{ in } \sigma^2(t)$$



# Intermezzo: sprehodi in poleti

- Sliko naključnega gibanja, povezanega s korakanjem, lahko interpretiramo na dva načina:
  - **Lévyjev pobeg oz. polet (flight):** implicira, da vsak korak iz porazdelitve  $w(L)$  traja enako dolgo (v originalu celo nič časa), medtem ko se hitrost gibanja med koraki in s tem dolžina poti (divje) spreminja.
    - **Čas je sorazmeren s številom korakov.**
  - **Lévyjev sprehod (walk):** interpretira korak iz porazdelitve  $w(L)$  kot gibanje s konstantno hitrostjo in tako koraki trajajo različno dolgo časa.
    - **Čas je sorazmeren s celotno potjo.**
- Slednja interpretacija bolj ustreza fizikalni sliki naključnega gibanja delca skozi snov, medtem ko se prva interpretacija uporablja v posebnih aplikacijah.
  - **V nalogi obravnavaj obe možnosti, da se naučiš razlik!**

VOLUME 71, NUMBER 24

PHYSICAL REVIEW LETTERS

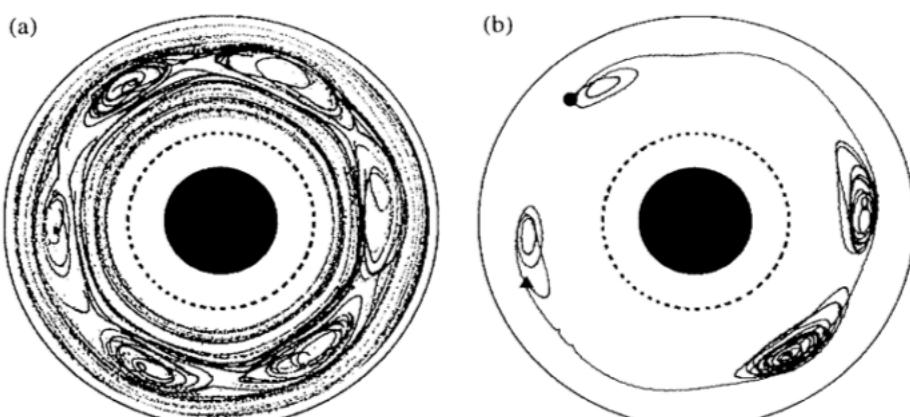
13 DECEMBER 1993

## Observation of Anomalous Diffusion and Lévy Flights in a Two-Dimensional Rotating Flow

T. H. Solomon,\* Eric R. Weeks, and Harry L. Swinney†

Center for Nonlinear Dynamics and Department of Physics, University of Texas at Austin, Austin, Texas 78712  
(Received 17 September 1993)

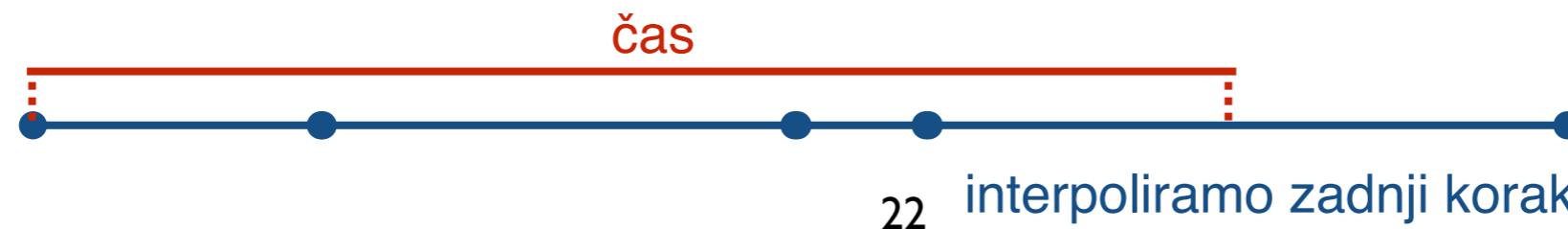
Chaotic transport in a laminar fluid flow in a rotating annulus is studied experimentally by tracking large numbers of tracer particles for long times. Sticking and unsticking of particles to remnants of invariant surfaces (Cantori) around vortices results in superdiffusion: The variance of the displacement grows with time as  $t^\gamma$  with  $\gamma = 1.65 \pm 0.15$ . Sticking and flight time probability distribution functions exhibit power-law decays with exponents  $1.6 \pm 0.3$  and  $2.3 \pm 0.2$ , respectively. The exponents are consistent with theoretical predictions relating Lévy flights and anomalous diffusion.





# Intermezzo: sprehodi in poleti

- Sliko naključnega gibanja, povezanega s korakanjem, lahko interpretiramo na dva načina:
  - **Lévyjev pobeg oz. polet (flight):** implicira, da vsak korak iz porazdelitve  $w(L)$  traja enako dolgo (v originalu celo nič časa), medtem ko se hitrost gibanja med koraki in s tem dolžina poti (divje) spreminja.
    - **Čas je sorazmeren s številom korakov.**
  - **Lévyjev sprehod (walk):** interpretira korak iz porazdelitve  $w(L)$  kot gibanje s konstantno hitrostjo in tako koraki trajajo različno dolgo časa.
    - **Čas je sorazmeren s celotno potjo.**
- Slednja interpretacija bolj ustreza fizikalni sliki naključnega gibanja delca skozi snov, medtem ko se prva interpretacija uporablja v posebnih aplikacijah.
  - **V nalogi obravnavaj obe možnosti, da se naučiš razlik!**
- **Merjenje časa:**
  - **Poleti:** štej število korakov in iz tega naravnost lego za vsak poskus.
  - **Sprehodi:** čas sorazmeren s potjo, za različne poskuse različno dolga in različno število korakov. Lego za vsak poskus ob določenem času določiš po potrebi z **linearno interpolacijo med koraki!**





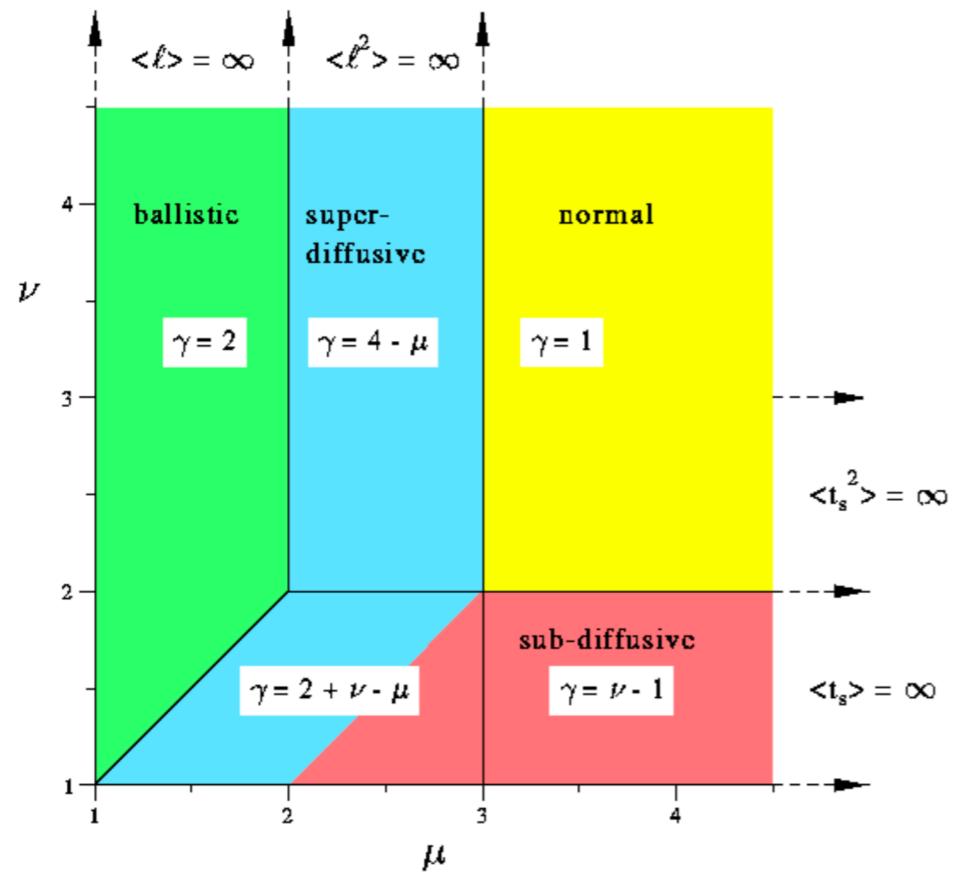
# Anomalna difuzija (sprehodi)

- Odvisno od obeh potenc  $\mu$  in  $\nu$ , so pričakovane vrednosti bolj ali manj ‘pohlevne’. Dobimo različne oblike anomalne difuzije:

$$\left. \begin{array}{l} w(L) \propto L^{-\mu} \\ w(\tau) \propto \tau^{-\nu} \end{array} \right\} \text{določata vedenje } D \text{ in } \sigma^2(t) \quad D \propto \frac{\langle L^2 \rangle}{\tau}$$

- Splošna časovna odvisnost variance anomalne difuzije je definirana s potenco  $\gamma$ :

$$\sigma^2(t) \propto t^\gamma$$



- Za končen (fiksen)  $\tau$ :
  - $1 < \mu < 2$ :  $\gamma = 2$  (balistično :  $\sigma \sim t$ , eksplozija),
  - $2 < \mu < 3$ :  $\gamma = 4 - \mu$  (super-difuzivna)
  - $3 < \mu$ :  $\gamma = 1$  (normalna difuzija)
- Posebej:
  - $\mu = 2$ :  $\sigma^2(t) \sim t^2/\ln(t)$ ,
  - $\mu = 3$ :  $\sigma^2(t) \sim t \ln(t)$ ,



# Anomalna difuzija (poleti)

- Odvisno od obeh potenc  $\mu$  in  $\nu$ , so pričakovane vrednosti bolj ali manj ‘pohlevne’. Dobimo različne oblike anomalne difuzije:

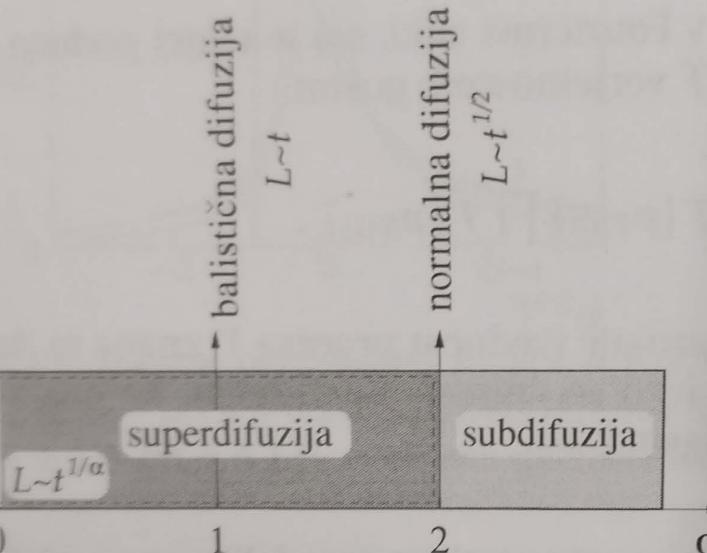
$$\left. \begin{array}{l} w(L) \propto L^{-\mu} \\ w(\tau) \propto \tau^{-\nu} \end{array} \right\}$$

določata vedenje  $D$  in  $\sigma^2(t)$

$$D \propto \frac{\langle L^2 \rangle}{\tau}$$

- Splošna časovna odvisnost variance anomalne difuzije je definirana s potenco  $\gamma$ :

$$\sigma^2(t) \propto t^\gamma$$



Slika 6.4 – Odvisnost karakteristične prostorske skale  $L$  od časa  $t$  – Iakovl Češnjan

- Za končen (fiksen)  $\tau$ :
  - $1 < \mu < 3$ :  $\gamma = 2/(\mu-1)$
  - $3 < \mu$ :  $\gamma = 1$  (normalna difuzija)
- Na sliki (Širca et al):
  - $\mu = \alpha + 1$
  - $\nu = \beta + 1$



# Anomalna difuzija - dodatno

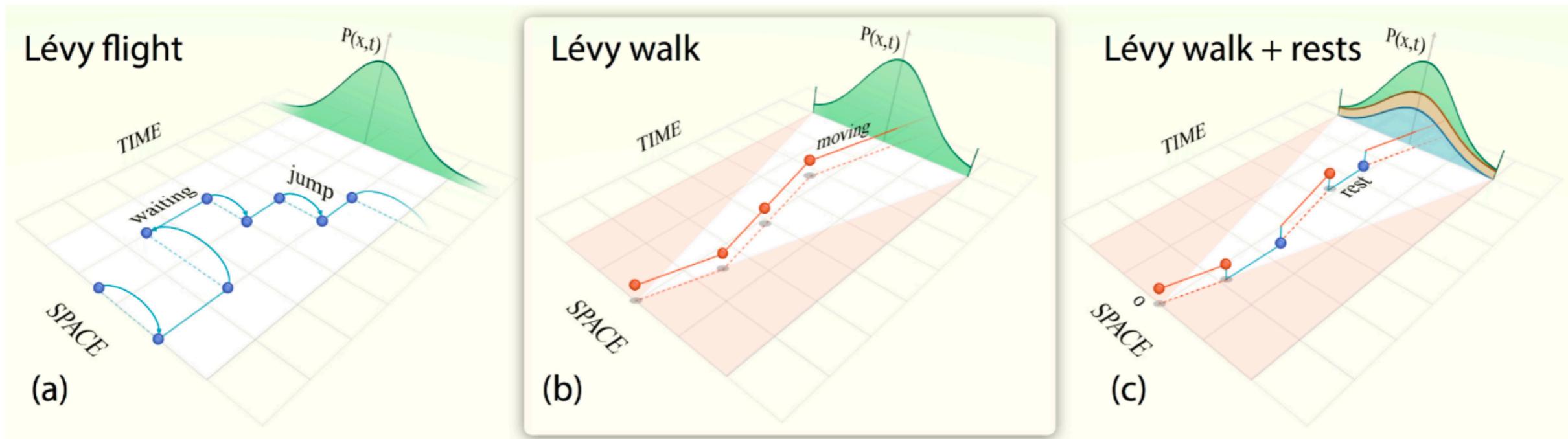
- Natančneje obravnavajmo še časovno porazdelitev  $\tau$  (čas med koraki).

$$\left. \begin{array}{l} w(L) \propto L^{-\mu} \\ w(\tau) \propto \tau^{-\nu} \end{array} \right\}$$

določata vedenje  $D$  in  $\sigma^2(t)$

$$D \propto \frac{\langle L^2 \rangle}{\tau}$$

- Natančneje obravnavajmo še časovno porazdelitev  $\tau$  (čas med koraki). Formalizem je podan s pristopom Montroll-Weiss (Continuous time random walk).



CTRW čas pri poletih postavi kar na nič, šteje samo čas čakanja! (Upoštevaj pri DN!)



# Cilj naloge

- Cilj naloge je določiti vrednosti parametra  $\gamma$  za različne scenarije (poleti, sprehodi, različne porazdelitve poti in (dodatno) časa med koraki) ter primerjati s teorijo.
- Ker gre za statističen proces:
  - Morate **nareediti M korakov** ( $n=10, 100, 1000, 10000\dots$ ) v 2D
  - To **N krat ponoviti**.
- Iz obojega lahko računate statistična povprečja (povprečna lega ob času t, varianca ipd..).
  - Za anomalno difuzijo, kjer varianca koraka divergira, ima cenilka močno raztresene vrednosti (poglej!), zato **ni dobra za določitev  $\sigma^2(t)$** !

$$\hat{\sigma}^2(t) = \frac{1}{N-1} \sum_{n=1}^N (x_n(t) - \langle x(t) \rangle)^2$$

- bolje je vzeti kot cenilko bolj robustno **Median Absolute Deviation (MAD)**, ki je sorazmerna z varianco:

$$MAD(t) = \text{median}_{k=1,\dots,N} \left( |x_k(t) - \text{median}_{j=1,\dots,N}(x_j(t))| \right)$$

$$\hat{\sigma}^2(t) = \frac{MAD(t)^2}{0.45494}$$

Python: `scipy.stats.median_abs_deviation`



# Cilj naloge

- Za določitev parametra  $\gamma$  je seveda najbolj smiselno operirati z logaritmi:

$$\ln \text{MAD}(t)^2 \propto \ln \hat{\sigma}^2(t) \propto \gamma \ln(t)$$

- ...in uporabiti enostavno linearno regresijo (oz. fit, npr. Python curve\_fit, metode tipa least squares ipd...) za določitev 'naklona'  $\gamma$ .
  - Vsaka dostojno implementirana metoda fita da **tudi oceno napake na ocenjenem parametru!** (pričlenek kovariančne matrike...).
  - Za pravilno regresijo je seveda pomembno oceniti tudi napake na vaših podatkih! (Kako je prepuščeno bralcu ... in DN ... )

