Matematično-fizikalni praktikum

2. naloga: Naključni sprehodi

Tadej Tomažič

16. oktober 2024

Kazalo

Slike

1 Uvod

Naključni sprehodi so vrsta gibanja, pri katerem v velikem številu korakov napredujemo iz izhodišča v neko končno lego, tako da se parametri vsakega naslednjega koraka sproti naključno določajo. Običajni zgled je Brownovo gibanje (difuzija) drobnih delcev barvila po mirujoči homogeni tekočini, kjer je spočetka barvilo zbrano v izhodišču. "Težišče" barvila $\langle x(t)\rangle$ v povprečju ostane v izhodišču, razen če v tekočini vzpostavimo kako anizotropijo (na primer v dveh razsežnostih z vsiljeno rotacijo). "Razmazanost" po dolgem času je sorazmerna s časom,

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

Sorazmernostni koeficient je običajna difuzijska konstanta, priča smo normalni difuziji. Ta rezultat izhaja iz centralnega limitnega teorema (CLT), ki izraža, da je rezultantna porazdelitev končnih leg pri difuziji porazdeljena normalno (Gauss), če so le povprečni časi med koraki in povprečni kvadrati dolžin korakov končni.

Zanimiveje je opazovati naključne sprehode, pri katerih dovolimo nadpovprečno dolge korake. Verjetnostno gostoto porazdelitve po dolžinah posameznih korakov parametrizirajmo v potenčni obliki

$$p(l) \propto l^{-\mu}\,, \tag{1}$$

kjer naj bo $1 < \mu < 3$. Tedaj postane drugi moment porazdelitve

$$\langle l^2\rangle = \int l^2 p(l)\,\mathrm{d}l$$

neskončen. Govorimo o anomalni difuziji, prisotni pri celi družini kinematičnih distribucij dolžin poti z "debelimi repi".

Ustrezno sliko naključnega gibanja, povezanega s temi dolgimi koraki, lahko interpretiramo na dva načina:

- Lévyjev pobeg oz. polet (*flight*), implicira, da vsak korak iz porazdelitve (1) traja enako dolgo, medtem ko se hitrost gibanja med koraki (divje) spreminja.
- Lévyjev sprehod (*walk*), ki interpretira korak iz porazdelitve (1) kot gibanje s konstantno hitrostjo in tako koraki trajajo različno dolgo časa (dolžina koraka je sorazmerna s časom).

Slednja intepretacija bolj ustreza fizikalni sliki naključnega gibanja delca skozi snov, medtem ko se prva interpretacija uporablja v drugačnih aplikacijah.

Vse naloge lahko obravnavaš za obe interpretaciji, pobegov in sprehodov. V prvem primeru (pobeg, flight) je pretečeni čas direktno sorazmeren s številom korakov, v drugem primeru (sprehod, walk) pa je pretečeni čas sorazmeren z vsoto dolžine korakov.

Pri anomalni difuziji razmazanost (varianca) velike množice končnih leg naključnih Lévyjevih **sprehodov (walks)** narašča z drugačno potenco časa. Velja $\sigma^2(t) \sim t^\gamma$, kjer je

$$\begin{aligned}
1 < \mu < 2\,, &\qquad \gamma = 2 &&\qquad \text{(balistični režim)}\,,\\
2 < \mu < 3\,, &\qquad \gamma = 4 - \mu &&\qquad \text{(super-difuzivni režim)}\,,\\
\mu > 3\,, &\qquad \gamma = 1 &&\qquad \text{(normalna difuzija)}\,.
\end{aligned}$$

Za $\mu = 2$ pričakujemo $\sigma^2(t) \sim t^2/\ln t$, za $\mu = 3$ pa $\sigma^2(t) \sim t \ln t$ (glej na primer [1] in druge reference prav tam).

Slika je nekoliko drugačna pri opazovanju naključnih Lévyjevih **poletov (flights)**. Spet vzamemo zvezo $\sigma^2(t) \sim t^\gamma$ in dobimo odvisnosti

$$\begin{aligned} 1 < \mu < 3\,, \qquad & \gamma = \frac{2}{\mu - 1} \qquad && \text{(super-difuzivni režim)}\,, \\ \mu > 3\,, \qquad & \gamma = 1 && \text{(normalna difuzija)}\,. \end{aligned}$$

Pri $\mu = 2$ očitno pričakujemo $\sigma^2(t) \sim t^2$, torej balistični režim.

Statistični komentar: v primerih, ko je drugi moment porazdelitve neskončen, bo tudi račun razmazanosti končnih leg x_n v obliki

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

divergiral oziroma bo imel ob ponovnih zagonih naključnega sprehoda močno raztresene vrednosti. Pomagaš si lahko na več načinov. širino porazdelitve končnih leg lahko oceniš tako, da prilagajaš Gaussovo krivuljo zgolj centralnega dela porazdelitve, tako da s prilagajanjem ne zajameš štrlečih (ne-Gaussovskih) repov. Lahko tudi neposredno računaš vsoto (2), a vanjo vključiš samo "razumne" člene (izpusti na primer nekaj odstotkov najmanjših in nekaj odstotkov največjih). Tretja možnost je, da definiramo novo vrsto variance

$$\sigma / N^p$$

in poiščemo tako potenco p, da ta spremenljivka konvergira za velike N (oz. velike t). še ena možnost je, da vzameš kako robustno mero za množico vrednosti X_i, na primer MAD, "median absolute deviation"

$$\mathrm{MAD} \equiv \mathrm{median}_i \left(|X_i - \mathrm{median}_j X_j| \right)\;.$$

Z njo merimo povprečje absolutne vrednosti deviacije na način, ki je zelo malo občutljiv na oddaljene vrednosti v repih porazdelitve, saj te vrednosti na račun mediane bistveno manj vplivajo kot na račun običajne povprečne vrednosti.

Naloga: Napravi računalniško simulacijo dvorazsežne naključne hoje za **polete in sprehode**. Začni vedno v izhodišču ($x = y = 0$), nato pa določi naslednjo lego tako, da naključno izbereš smer koraka in statistično neodvisno od te izbire še njegovo dolžino, torej

$$\begin{aligned} x &\leftarrow x + l \cos\varphi\,, \\ y &\leftarrow y + l \sin\varphi\,, \end{aligned}$$

kjer je φ enakomerno naključno porazdeljen po intervalu $[0, 2\pi]$, dolžina koraka l pa naj bo porazdeljena v skladu s potenčno obliko (Enačba 1). Dolžine l_i je v tem primeru potrebno generirati po verjetnostni porazdelitvi w(l)$\sim$ p(l) (Enačba 1). Za izračun algoritma je osnova naslednja formula:

$$\int_a^l w(t)\,dt = \rho \cdot \int_a^b w(t)\,dt, \tag{3}$$

ki jo je potrebno rešiti in iz nje izraziti spremenljivko l. Tu je ρ (psevdo-)naključno število na intervalu $[0, 1]$ ter je $[a, b]$ relevantni interval vzorčenja. Za nekatere porazdelitve je izračun preprost, npr $w(t) = \frac{1}{\tau}e^{-\frac{t}{\tau}}$ nam da kar:

$$l = -\tau \ln(1 - \rho). \tag{4}$$

Dodatno pomoč za pretvorbo med verjetnostnimi porazdelitvami najdeš v gradivu v spletni učilnici ter na spletu.

Opomba: Korakaš lahko tudi v kartezičnem sistemu,

$$\begin{aligned} x &\leftarrow x + f_x(\rho_1) \,, \\ y &\leftarrow y + f_y(\rho_2) \,, \end{aligned}$$

kjer sta ρ_1 in ρ_2 naključni števili na intervalu $[0, 1]$ ali $[-1/2, 1/2]$, funkciji $f_{x,y}$ pa morata na koncu podati ustrezno porazdelitev po dolžinah poti glede na potenčno obliko (1), kjer lahko določiš zvezo med porazdelitvami po končnih legah x ali y ter po $l = \sqrt{x^2 + y^2}$ z uporabo ustreznega Jacobijevega faktorja.

V vsakem primeru nariši nekaj značilnih slik sprehodov za 10, 100, 1000 in 10000 korakov. Iz velikega števila sprehodov z velikim številom korakov nato poskusi določiti eksponent γ za nekaj izbranih parametrov μ oziroma funkcij $f(x)$ v posameznih primerih ter presodi, za kakšno vrsto difuzije gre.

Dodatna naloga: Naključno spreminjaj še čas, ko delec pred naslednjim korakom miruje (s tako dodatno prostostno stopnjo poskušamo modelirati tako imenovani “sticking time” ali “trapping time” pri anomalni difuziji elektronov v amorfnih snoveh). Ustrezna verjetnostna gostota naj ima potenčno odvisnost

$$p(t) \propto t^{-\nu} \,,$$

kjer $1 < \nu < 2$. Je ta odvisnost razklopljena od porazdelitve osnovnega naključnega sprehoda po dolžinah (oziroma časih) posameznih korakov?

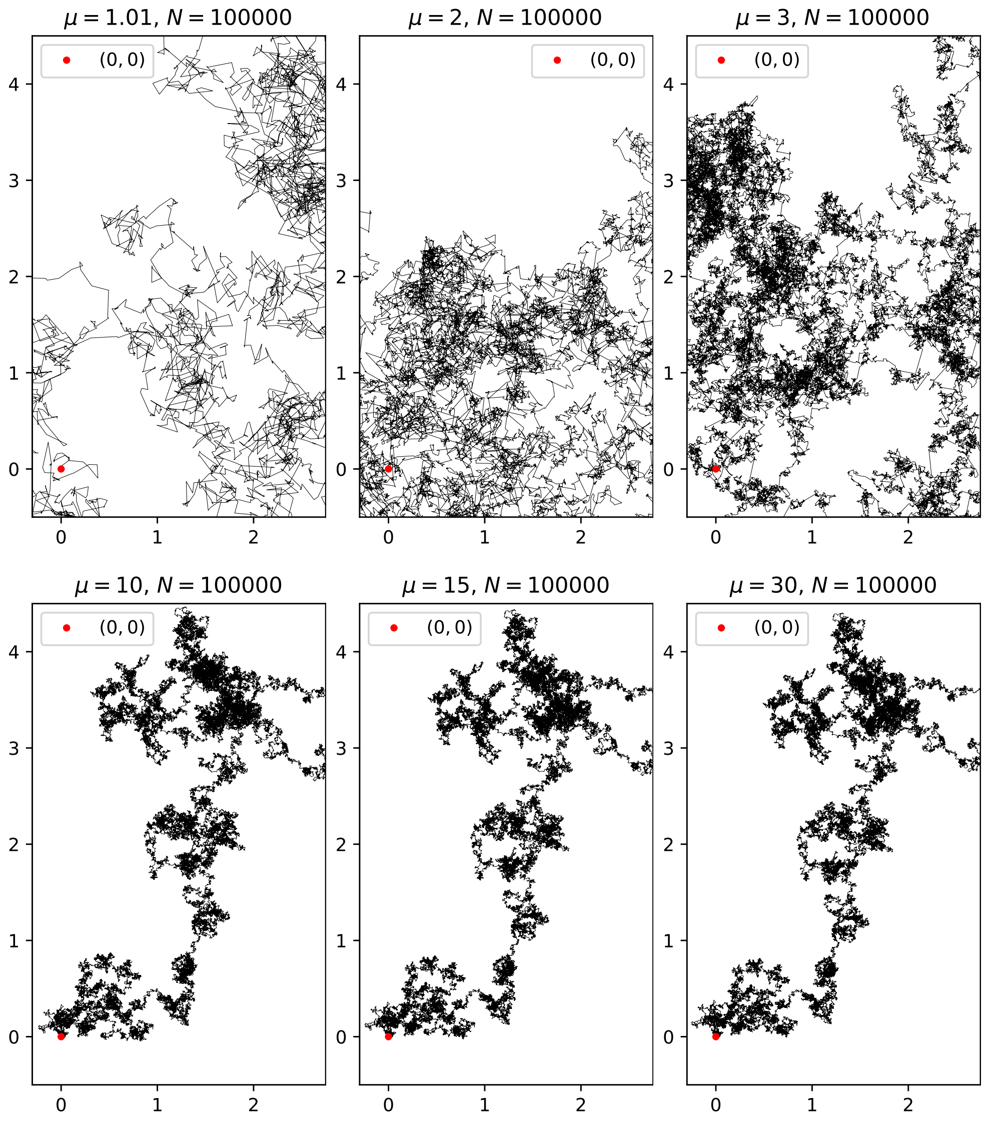
Literatura

[1] E. R. Weeks, J. S. Urbach, H. L. Swinney, Physica D **97** (1996) 291.

2 Rešitev

2.1 Naključni sprehod

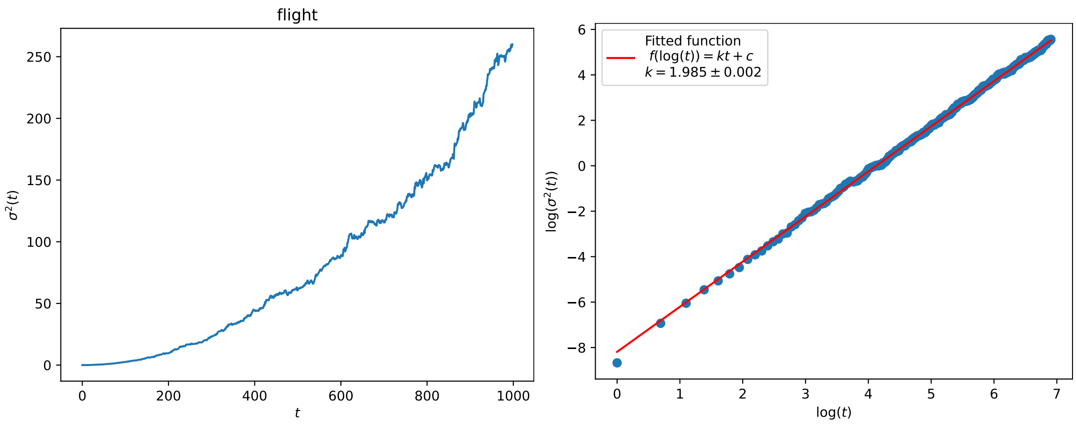
Za izbiranje naključnega števila sem uporabil psevdo naključen generator `random.radnom()`, ki ga ima `python` že vgrajenega. Če je ρ naključno izbrana vrednost za naključni kot potem zadostuje $\varphi = 2\pi\rho$. Za naključno dolžino l pa moramo poiskati po formuli (3). Če vemo, da je porazdelitev $p(l) \propto l^{-\mu}$, za $\mu > 1$. Po krajšem računu izrazimo $l = (\rho\,(1-\mu))^{\frac{1}{1-\mu}}$. Zdaj imamo vsa orodja za izračun naključne poti.



Slika 1: Naključni sprehodi, z danim μ in številom korakov sto tisoč

2.2 Difuzisko obnašanje naključnih pobegov

Zanima nas kako se obnaša s časom varainca σ^2 vseh različnih pobegov. Definiramo eno časovno dolžino kot en korak. Ker smo v dveh dimenzijah si želimo, brez škode splošnosti preiti na eno dimenzijo, tako da v vsakem koraku razdaljo od izhodišča $r = \sqrt{x^2+y^2}$. Za izračun variance bom uporabil metodo MAD, ki povezuje spremenljivki $\sigma^2 = \frac{MAD^2}{0.45494}$.

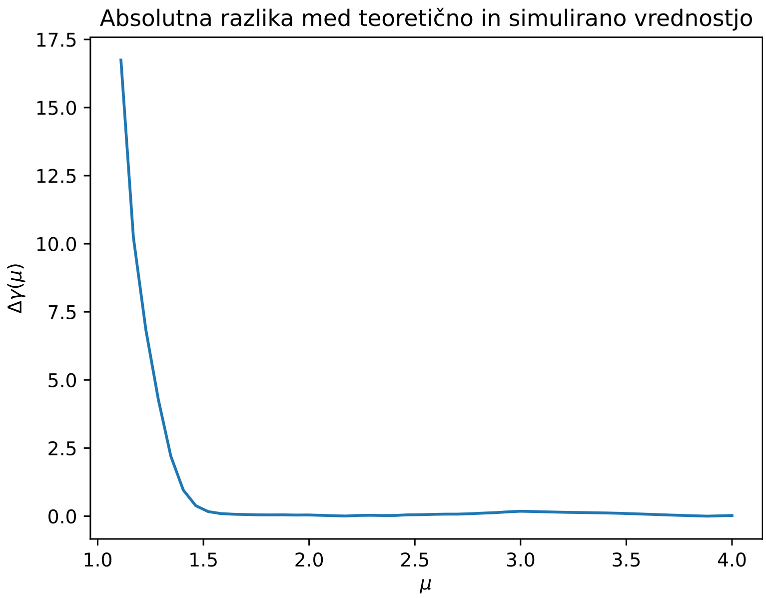


Slika 2: Pobegi pri $\mu = 2$

Iz teorije vemo $\sigma^2 \approx t^\nu$. Logaritmiramo to zvezo in dobimo

$$\ln \sigma^2 \approx \nu \ln t \tag{5}$$

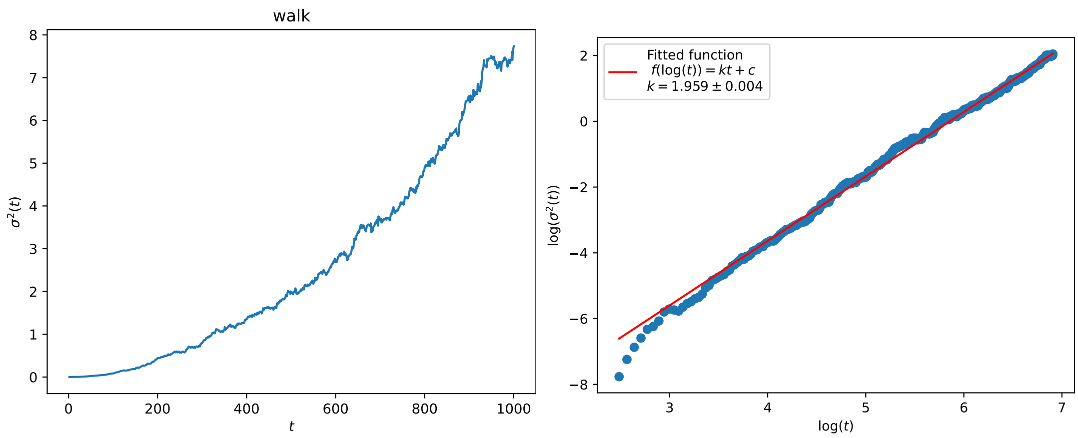
Teorija pravi, da imamo dva režima; super difuzivni in normalno difuzivni režim. Poglejmo si še primerjavo med teoretično in generirano vrednostjo, v smislu $\gamma(\mu)$. Vemo po teoriji, da $\sigma^2 = t^\gamma$, kjer je $\gamma = \frac{2}{\mu - 1}$ za $1 < \mu < 3$ ali $\gamma = 1$ za $3 < \mu$. Poglejmo si torej absolutno napako med teorijo in prakso.



Slika 3: Absolutna razlika med simulirano vrednostjo in teoretično vrednostjo

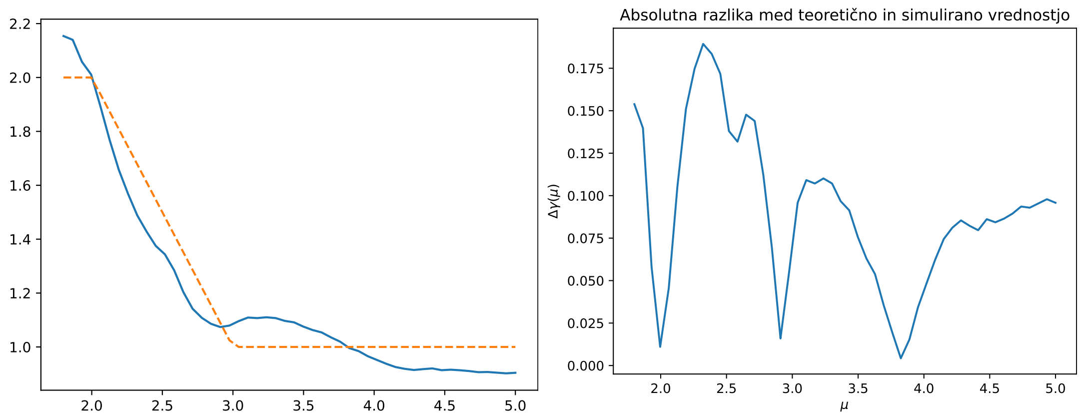
2.3 Difuzisko obnašanje naključnih sprehodov

Namesto pobega uporabimo hojo.



Slika 4: Sprehodi pri $\mu = 2$

Poglejmo še napako med teorijo in simulacijo.



Slika 5: Sprehodi pri poljubnem μ in napaka med simulirano in teoretično vrednostjo