

2. naloga: Naključni sprehodi

Rok Mlinar Vahtar - 28211126

November 2023

1 Navodilo

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 rezultatna 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

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

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

$$\langle l^2 \rangle = \int l^2 p(l) dl$$

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

Vse naloge lahko obravnavаш 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

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

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 [?] 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

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

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

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

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”

$$\text{MAD} \equiv \text{median}_i (|X_i - \text{median}_j X_j|) .$$

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:

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

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:

$$l = -\tau \ln(1 - \rho). \quad (4)$$

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?

2 Rešitev

2.1 Izbiranje naključnih števil

Preden se sploh lotimo analize razpršenosti naših naključnih sprehodov v odvisnosti od časa, moramo razčistiti, kako deluje naključni del teh naključnih sprehodov. Iz navodil vidimo, da moramo v vsakem koraku naključno izbrati dolžino naslednjega koraka in kot, ki predstavlja smer. Ker smer izbiramo enakomerno, je naključne kote zelo lahko izbirati. Če vzamemo naključno število ρ iz intervala $[0, 1)$, ki ga generiramo recimo z metodo `random.random()` v Python, naključen φ dobimo kar preko raztega $\varphi = 2\pi\rho$. Za naključno dolžino koraka L , pa ne bo tako enostavno.

Za L želimo da je porazdeljen po porazdelitvi sorazmerni z $L^{-\mu}$. Takšne porazdelitve ne moremo normirati okrog divergence pri $L = 0$, zato si moramo izbrati nek L_{min} . Od sedaj naprej izberemo $L_{min} = 1$. Normirana porazdelitev za L se tako glasi:

$$P(L) = (\mu - 1)L_{min}^{\mu-1}L^{-\mu} \quad (5)$$

Če sedaj rešimo enačbo:

$$\int_{L_{min}}^L P(L)dL = \rho \int_{L_{min}}^{\infty} P(L)dL \quad (6)$$

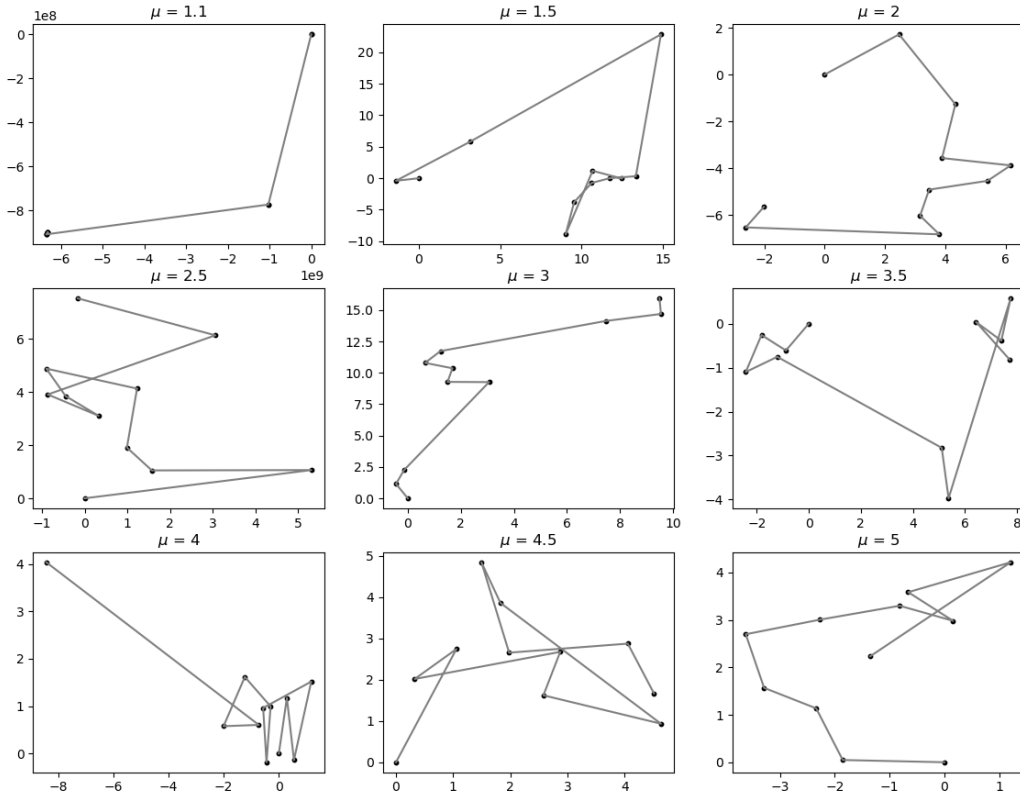
dobimo transformacijo:

$$L = (1 - \rho)^{\frac{1}{1-\mu}} \quad (7)$$

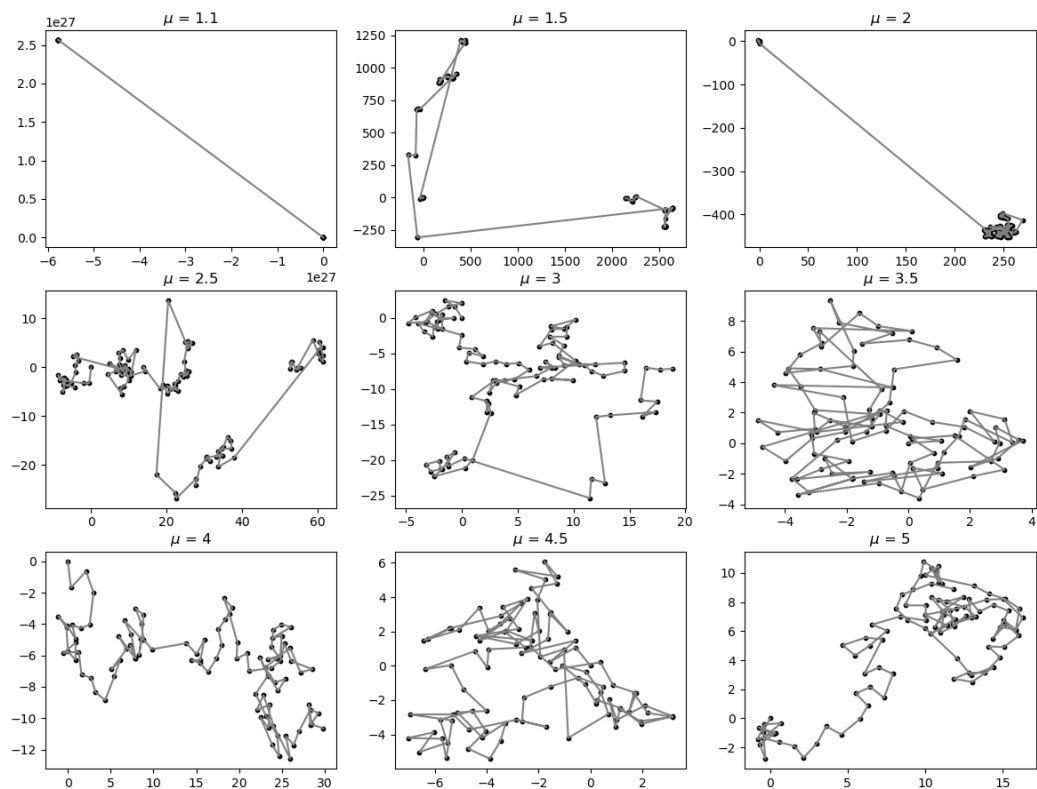
ki pretvori naključni ρ iz $[0, 1)$, v L , porazdeljen po $P(L)$.

2.2 Naključni sprehodi v 2D

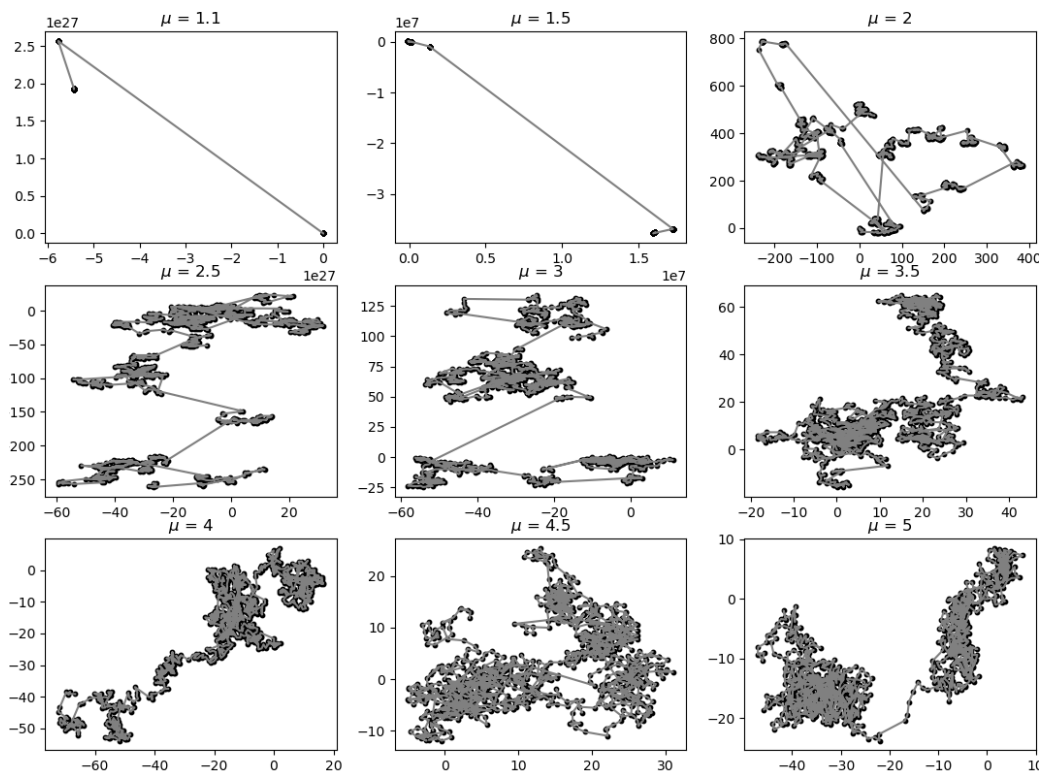
Kot bi lahko pričakovali, ima izbira μ velik vpliv na naravo naših naravnih sprehodov. Bližje kot je μ vrednosti 1, bolj izrazit je neskončni rep, kar pomeni, da je verjetnost tudi orjaških korakov večja.



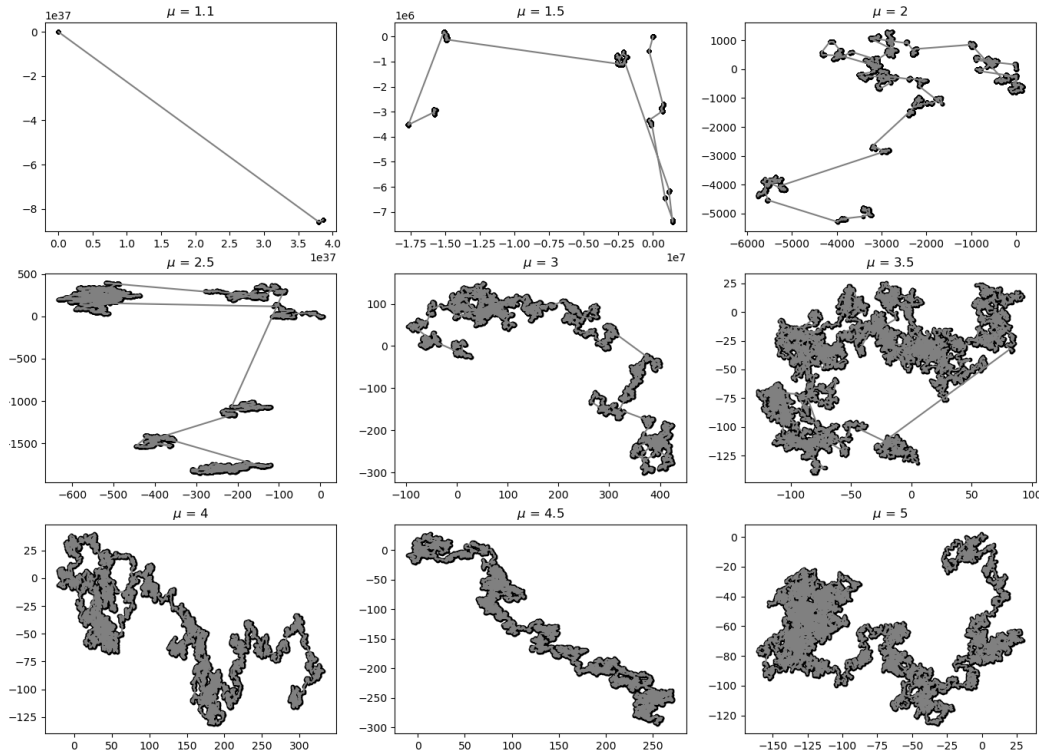
Slika 1: Primeri sprehodov z 10 koraki



Slika 2: Primeri sprehodov z 100 koraki



Slika 3: Primeri sprehodov z 1000 koraki

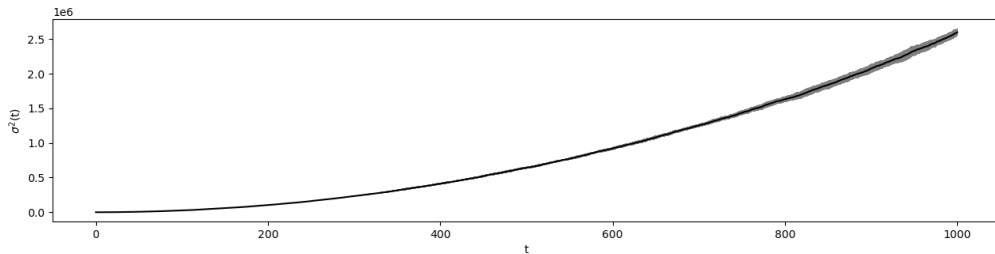


Slika 4: Primeri sprehodov z 10000 koraki

Prej omenjeno višjo verjetnost ogromnih korakov, lahko na grafih vidimo kot to, da je grafih z majhnim μ vidnih le nekaj korakov, dolžine mnogo večje od 1, medtem ko je na npr. $\mu = 5$ cela slika omejena na območje z radijem nekaj deset enot.

2.3 Difuzijsko obnašanje naključnih pobegov

Naključni pobegi, so definirani kot naključne poti iz prejšnjega poglavja 2.2, kjer privzamemo, da vsak korak traja isto časa, torej se hitrost divje spreminja. Zanima nas, kako se, če vzamemo mnogo pobegov, s časom spreminja varianca σ^2 vseh točk. To bomo računali preko mere MAD iz navodil, za katero velja $\sigma^2 = \frac{\text{MAD}^2}{0.45494}$. Napako na MAD bomo določili tako, da bomo na 10 različnih setih pobegov izračunali $\text{MAD}(t)$ in iz teh meritev pridobili varianco za $\text{MAD}(t)$, samo meritev $\text{MAD}(t)$, pa bomo vzeli kot povprečje MAD teh 10 setov ob vsakem času. MAD bi lahko računali za x in y posebej, ampak zaradi rotacijske simetrije našega problema zadošča, če operiramo le z $r = \sqrt{x^2 + y^2}$.

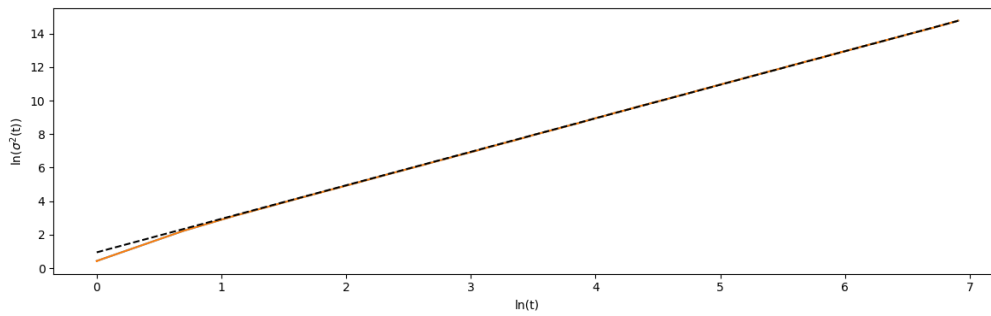


Slika 5: $\text{MAD}(t)$ za $\mu = 2$ iz 10 setov po 10000 pobegov dolžine 1000 korakov

Teorija nam pravi, da velja $\sigma^2(t) \approx t^\nu$. Če to zvezo logaritmujemo dobimo:

$$\ln \sigma^2(t) \approx \nu \cdot \ln t \quad (8)$$

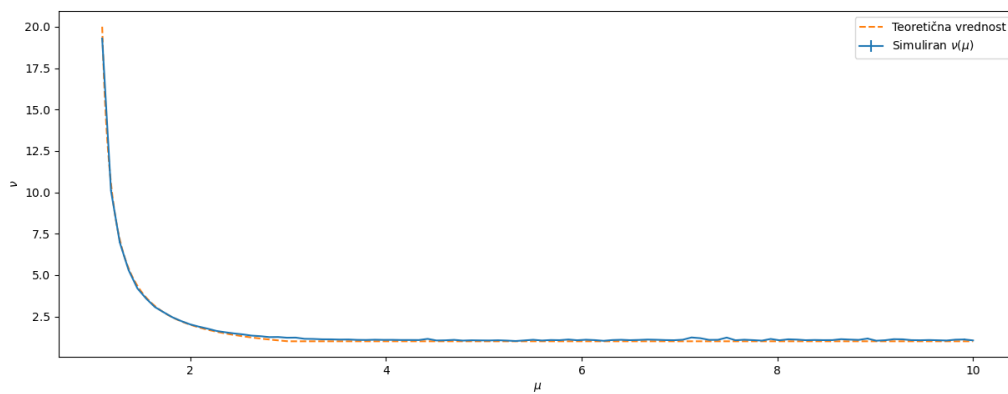
ν lahko tako dobimo z linearno regresijo, obteženo z prej izračunanimi napakami na točkah tako, da na podatke fitamo premico $y(\ln t) = k \cdot \ln t + c$.



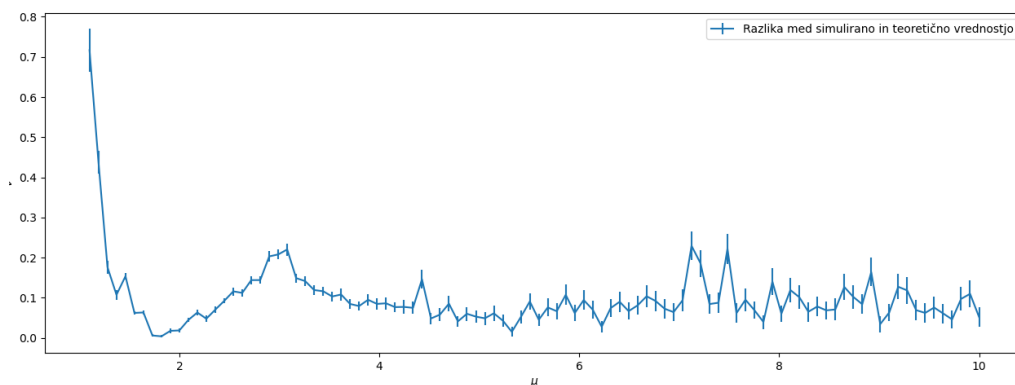
Slika 6: Fitana premica za isti $MAD(t)$

Tako dobimo $\nu = 1.9994 \pm 0.00038$ za $\mu = 2$.

Če to storimo za več različnih μ in primerjamo z teoretičnimi vrednostmi, dobimo naslednja grafa. Slednja sta posledica 10000 različnih 100 korakov dolgih poletov za vsakega iz 100 različnih μ , računanje katerih je trajalo 1h:26min:34s.



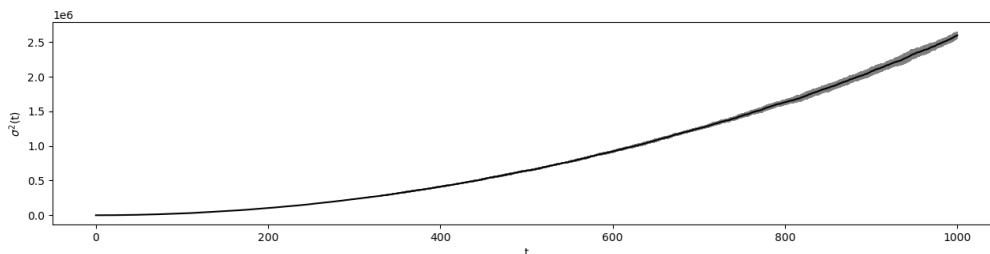
Slika 7: $\nu(\mu)$ za naključne pobege



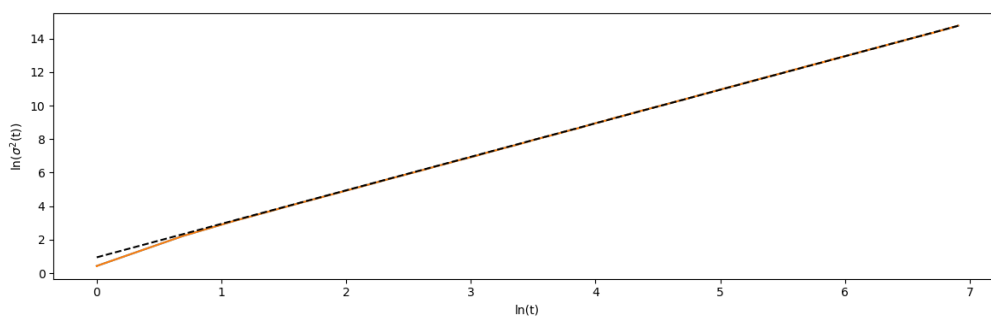
Slika 8: Razlika med simulirano in teoretično vrednostjo

2.4 Difuzijsko obnašanje naključnih sprehodov

Edina razlika med naključnimi pobegi in sprehodi, je ta, da pri sprehodih definiramo, da ima potovanje konstantno hitrost v , za katero bomo privzeli, da je $v = 1$. To seveda pomeni, da različno dolgi koraki trajajo različno dolgo. To pomeni, da moramo, če želimo dobiti $MAD(t)$, točke $x(t)$ in $y(t)$ interpolirati, kar pa ni težko, saj se sprehod dogaja v ravnih črtah. Ko enkrat imamo $MAD(t)$ pa vse storimo natanko tako kot pri poletih.



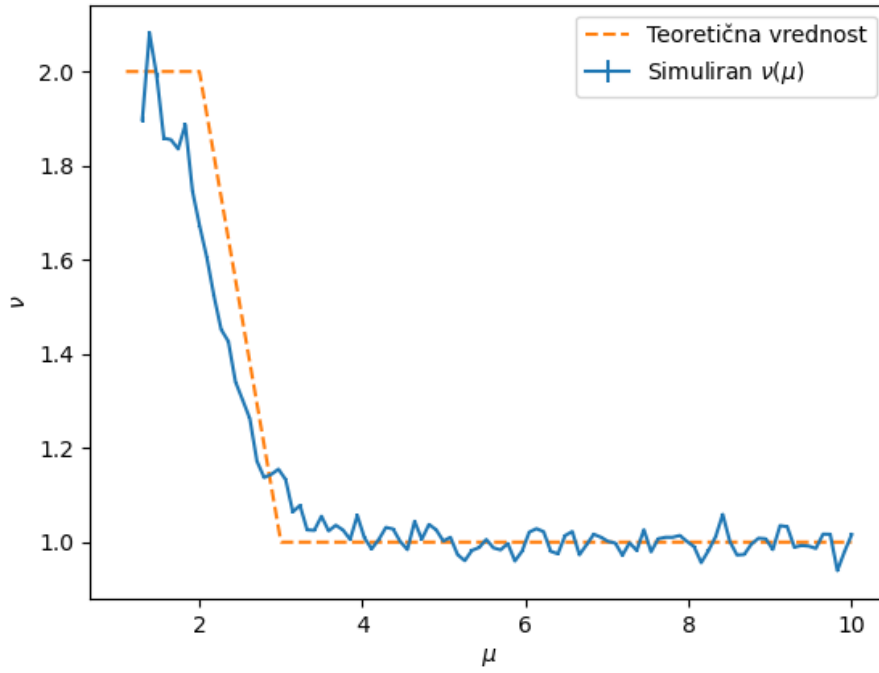
Slika 9: $MAD(t)$ za $\mu = 2$ iz 10 setov po 10000 sprehodov dolžine do 1000 korakov



Slika 10: Fitana premica za isti $MAD(t)$

Tako dobimo $\nu = 1.669 \pm 0.00083$ za $\mu = 2$.

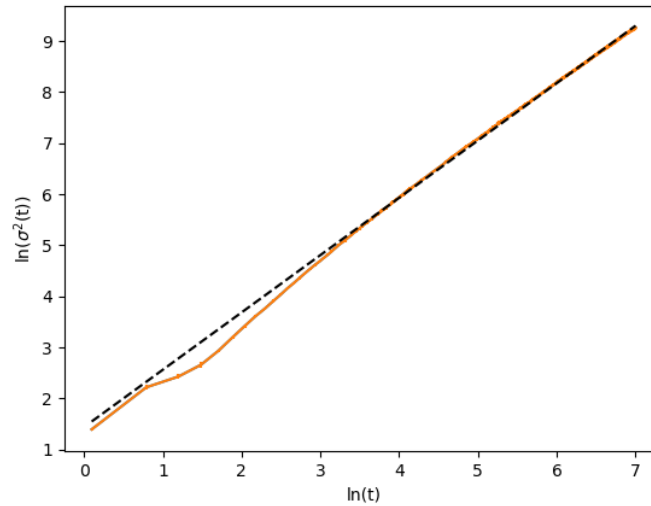
Naslednji graf je posledica 1000 različnih do 1000 korakov dolgih sprehodov za vsakega iz 100 različnih μ , računanje katerih je trajalo 2h:47min:02s.



Slika 11: $\nu(\mu)$ za naključne pobege

3 Dodatna naloga

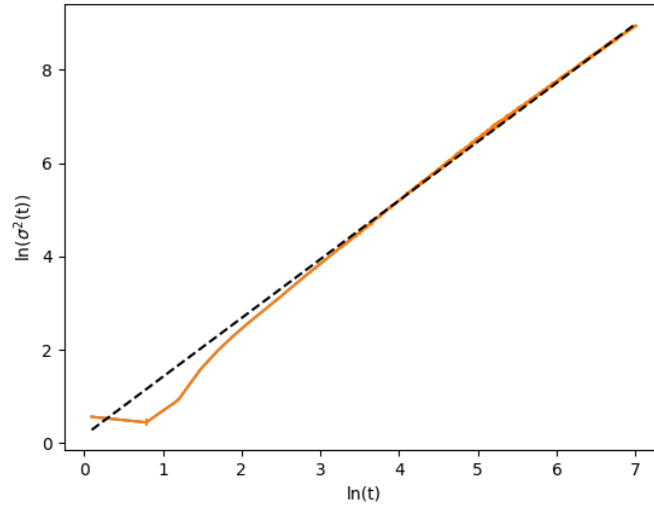
Pri dodatni nalogi moramo v model dodati še čas čakanja po vsakem koraku. Ta je tako kot dolžina koraka porazdeljen z verjetnostno gostoto $p(t) = (\nu - 1)t_{min}^{\nu-1}t^{-\nu}$. Tako dobimo odvisnosti MAD, ki izgledata tako:



Slika 12: $MAD(t)$ za $\mu = 2$, $T_{min} = 0.1$ in $\nu = 1.5$ iz 10 setov po 10000 pobegov dolžine do 1000 korakov

Celokupna odvisnost od časa je tako $t^{-\alpha}$, $\alpha = 1.122 \pm 0.0013$, kar predstavlja padec od prejšnje

vrednosti 1.99, ko ni bilo čakanja. To je seveda tudi nekaj kar bi lahko pričakovali, saj smo upočasnili cel postopek.



Slika 13: $MAD(t)$ za $\mu = 2$, $T_{min} = 0.1$ in $\nu = 1.5$ iz 10 setov po 10000 sprehodov dolžine do 1000 korakov

Podobno velja tudi za sprehode.

Zadnje vprašanje, ki ga poda dodatna naloga je to, ali je odvisnost porazdelitve čakalnih časov razklopljena od porazdelitve po dolžinah korakov pri sprehodih. Kot prvo si oglejmo kako so porazdeljeni časi potovanja za en korak pri sprehodih. Vemo da velja:

$$p(L) = (\mu - 1)L_{min}^{\mu-1}L^{-\mu} \quad \text{in} \quad T = \frac{L}{v} \quad (9)$$

kjer so L dolžina koraka, T čas koraka in v konstantna hitrost. Z p bom označil verjetnostno gostoto in z P kumulativno verjetnostno gostoto.

$$P(t < T) = P\left(\frac{L}{v} < T\right) = P(L < Tv) = \int_{L_{min}}^{Tv} p(L)dL \quad (10)$$

Če kumulativno porazdelitev P odvajamo dobimo p . Tako velja:

$$p(T) = (\mu - 1)(L_{min}/v)^{\mu-1}T^{-\mu} \quad (11)$$

Za sprehode imata tako porazdelitve čakalnih in potovalnih časov zelo podobno obliko. V primeru, da vzamemo $t_{min} = T_{min} = \frac{L_{min}}{v}$ in $\mu = \nu$, pa sta porazdeljena popolnoma enako.

4 Zaključek

V tej nalogi smo se spoznali z tako imenovanimi Monte Carlo metodami. Bolj specifično smo jih uporabili za simulacijo različnih režimov difuzije. Videli smo kako se takšni sistemi obnašajo v balističnem, superdifuzijskem, difuzijskem in subdifuzijskem režimu in pokazali, da se formule, ki opisujejo prehod med temi fazami, precej dobro prilagajajo rezultatom simulacije.