UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO

Matematično-fizikalni praktikum

2. naloga: Naključni sprehodi

Žiga Šinigoj, 28191058

Ljubljana, oktober 2021

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. 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).

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

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

Za $\mu = 2$ pričakujemo $\sigma^2(t) \sim t^2/\ln t$, za $\mu = 3$ pa $\sigma^2(t) \sim t \ln t$. Slika je nekoliko drugačna pri opazovanju naključnih Lévyjevih **poletov (flights)**. Spet vzamemo zvezo $\sigma^2(t) \sim t^\gamma$ in dobimo odvisnosti

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

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. Ena izmed možnosti je 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.

2 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:

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

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

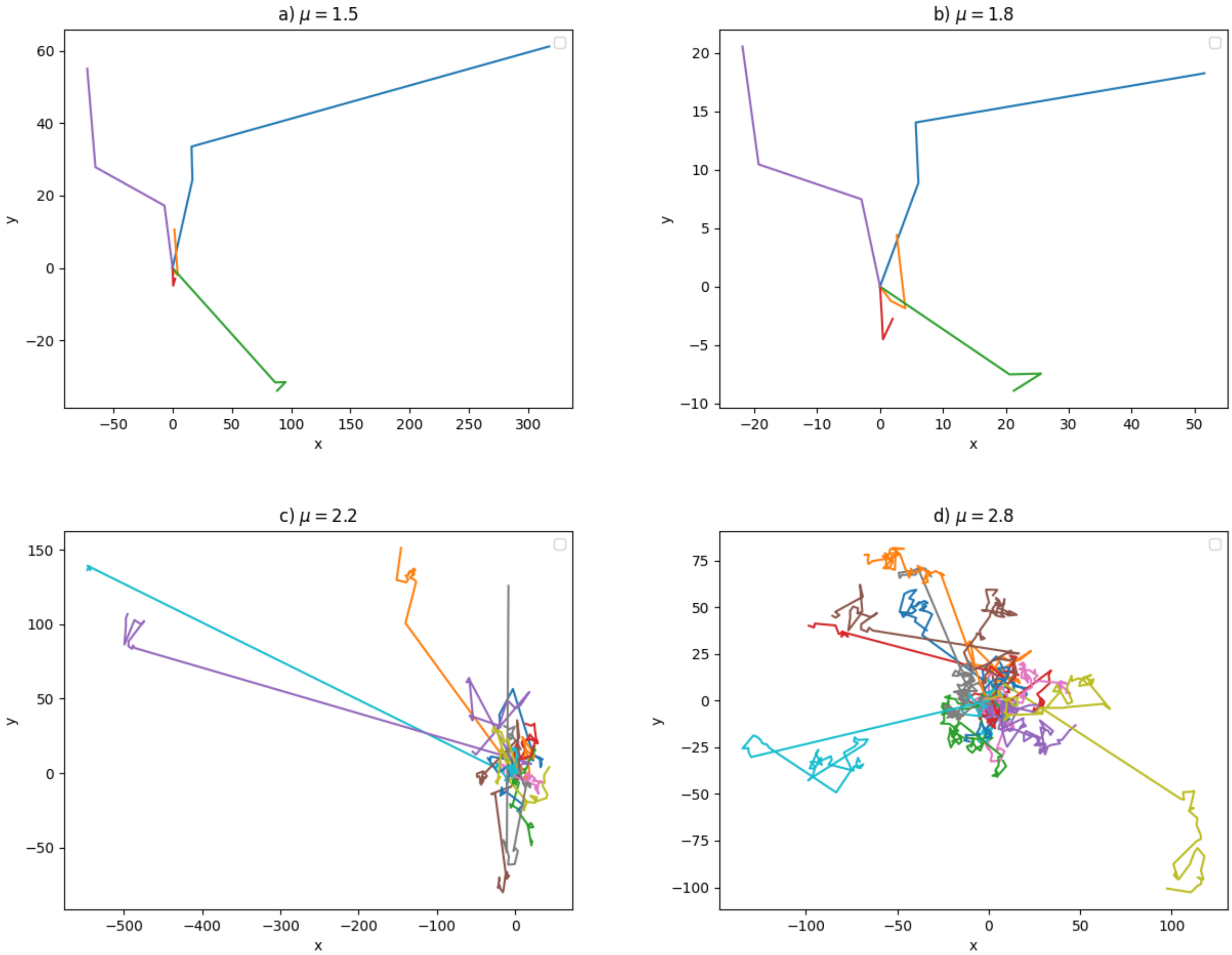
$$p(t) \propto t^{-\nu}\,,$$

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

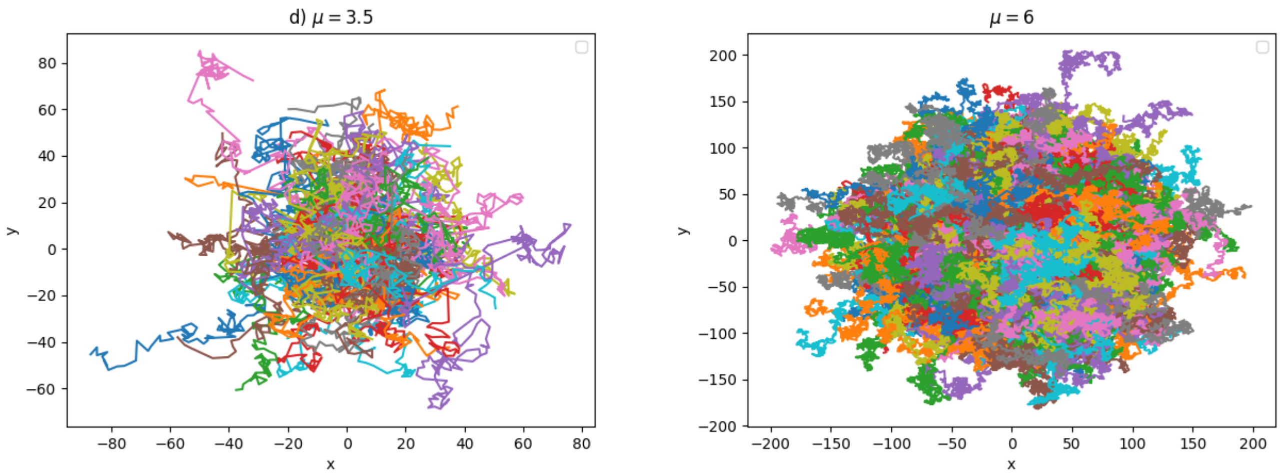
3 Rezultati

3.1 Sprehodi

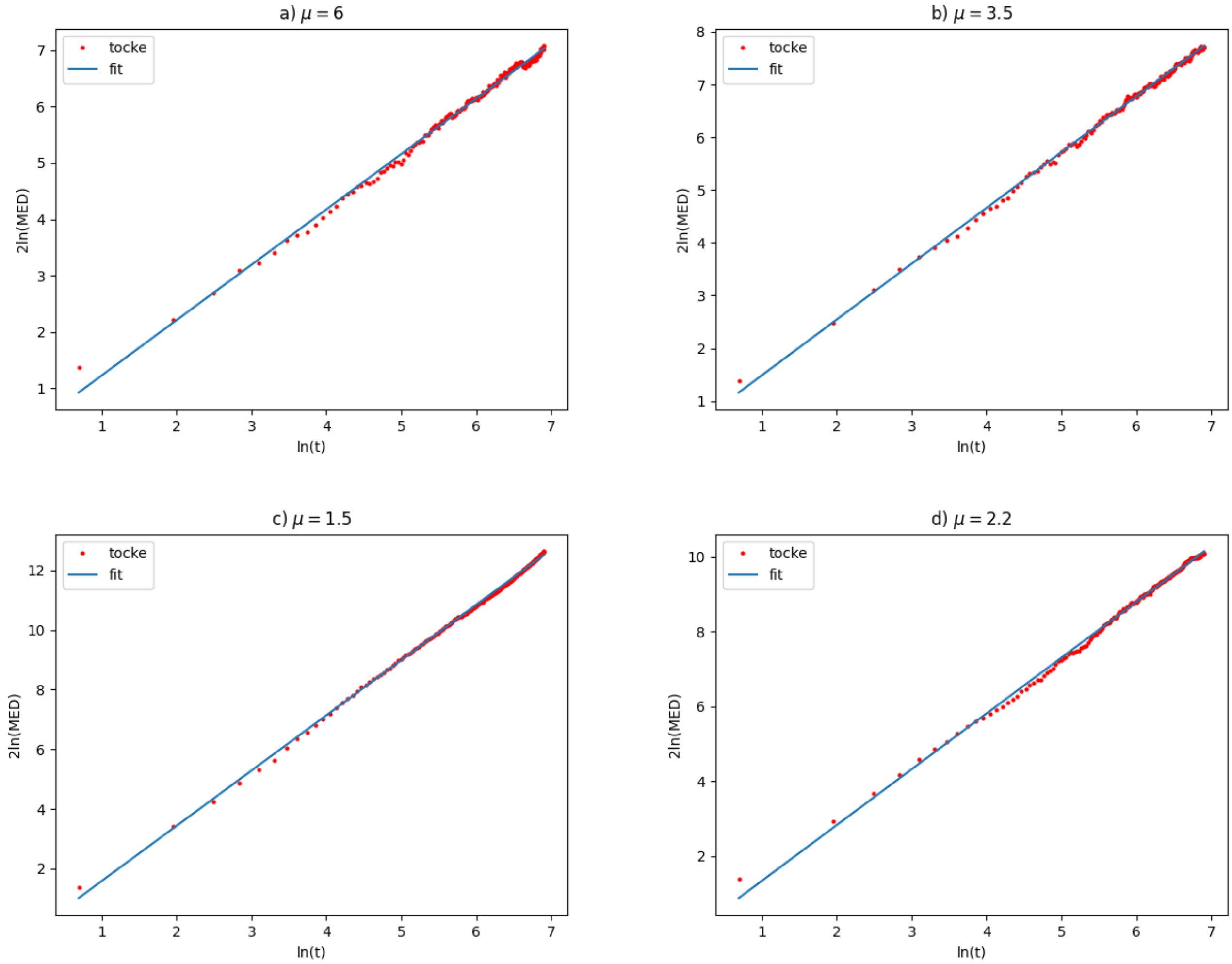
Pri sprehodih sem štel čas kar kot $t_{korak} = l_{korak}$ oz. $t_{cel} = l_{cel}$, kjer je l_{cel} celotna pot delca in t_{cel} celotni čas, ki ga potrebuje za dano pot. Vrednosti kota φ sem generiral iz enakomerne porazdelitve, dolžino koraka l pa s Paretovo porazdelitvijo *pareto.random* s parametrom $m = 2$ iz knjižnice NumPy. Nekaj primerov sprehodov prikazuje slika 1 in 2. Potrebno je določiti tudi γ faktor, ki pove kako se gibljejo delci. Zanima nas naklon premice v logaritemski skali. Točke ob izbranih časih, ki jih mogoče nisem imel, sem interpoliral z linearno interpolacijo. Za izračun MED sem uporabil funkcijo *stats.median_abs_deviation* iz paketa SciPy. Za izračun paramtera γ sem uporabil 500 delcev s 500 koraki. Napako parametra γ sem ocenil iz diagonalnih elementov kovariančne matrike, ki jo da metoda *optimize_curve_fit* iz paketa SciPy. Vrednosti paramtera γ določene iz naklonov premic se precej dobro ujemajo z napovedanimi vrednostimi in režimi iz teorije.



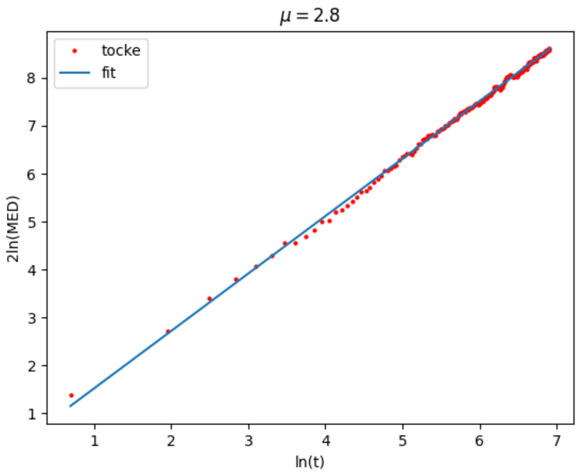
Slika 1: a) 5 delcev, 4 koraki, pri vrednosti $\mu = 1.5$ smo v balističnem režimu in delci hitro podivjajo. b) 5 delcev, 4 koraki, delci ne tako hitro pobegnejo kot pri $\mu = 1.5$, ampak smo še vedno v balističnem režimu. c) 20 delcev, 20 korakov v super-difuzivnem režimu, delci difundirajo počasneje kot v balističnem režimu in hitreje kot pri normalni difuziji. d) 20 delcev, 50 korakov, delci so bližje režimu normalne difuzije.



Slika 2: d) 100 delcev, 100 korakov, pri vrednosti $\mu = 3.5$ se nahajamo v režimu normalne difuzije in delci se počasi premikajo radialno navzven. Desna slika: 1000 delcev, 1000 korakov, pri vrednosti $\mu = 6$, povprečna dolžina koraka je najmanjša in povprečna lega delca se premika še počasneje kot na levi sliki.



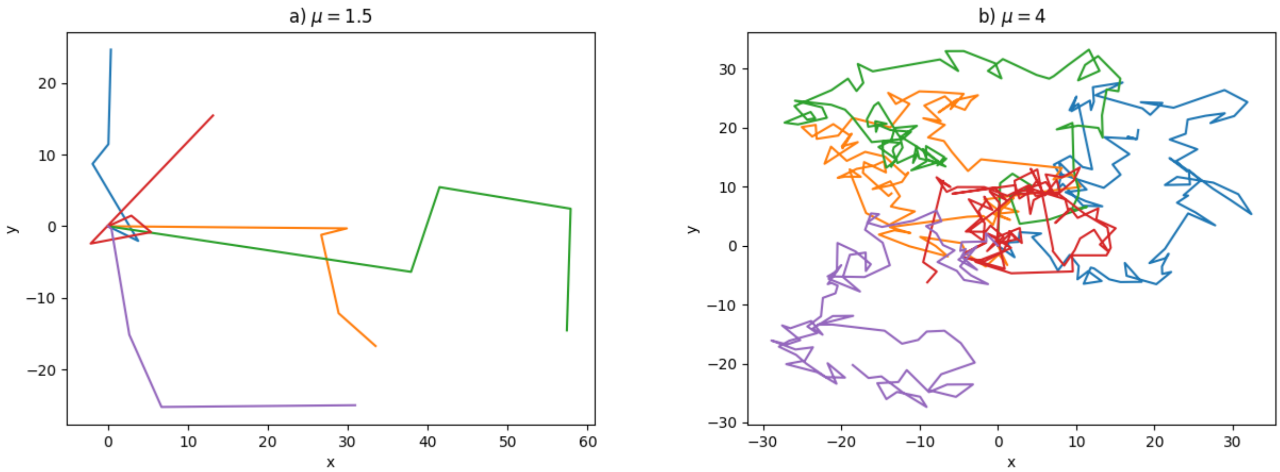
Slika 3: Logaritem cenilke Median Absolute Deviation v odvisnosti od logaritma časa. Iz naklona premice dobim vrednosti iskanega parametra γ. a) $\gamma = 0.982 \pm 0.005$, b) $\gamma = 1.0578 \pm 0.003$, c)$\gamma = 1.851 \pm 0.004$, d) $\gamma = 1.492 \pm 0.005$.



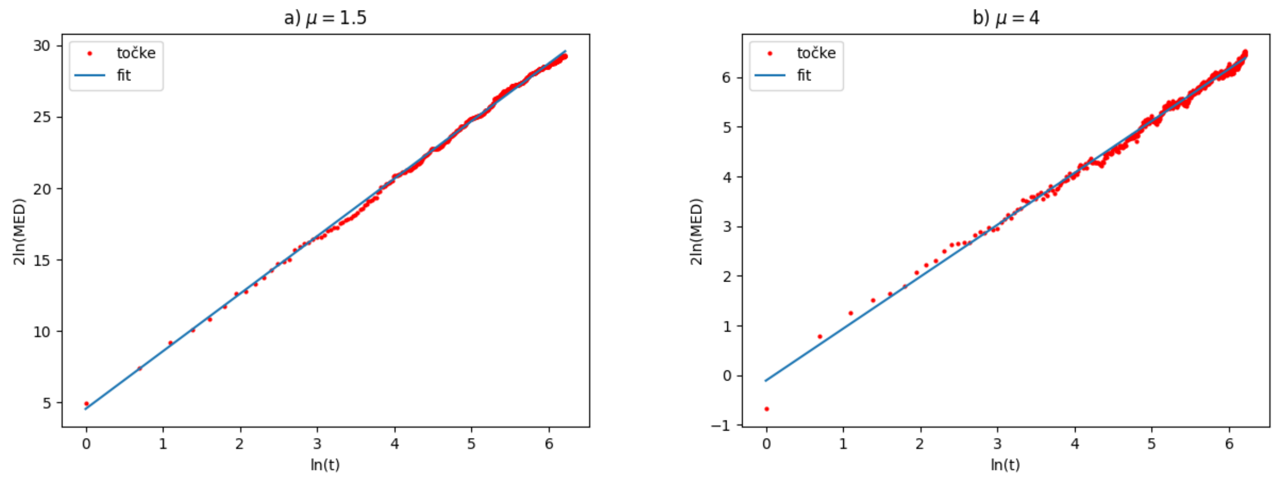
Slika 4: Logaritem cenilke Median Absolute Deviation v odvisnosti od logaritma časa. $\gamma = 1.198 \pm 0.003$.

3.2 Poleti

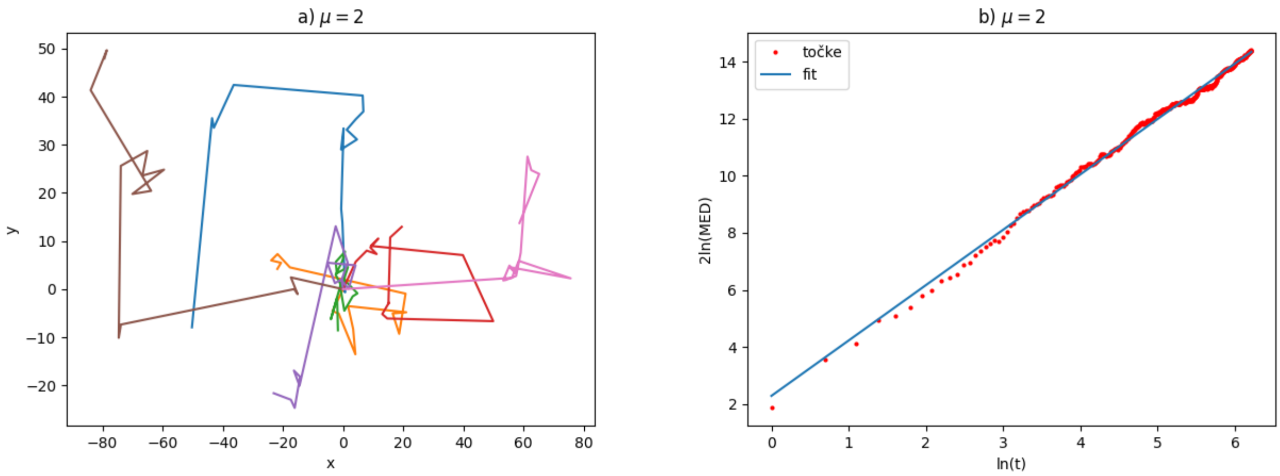
Pri poletih sem štel čas kot dolžino korakov, zaradi tega ni bilo potebno interpolirati točk, saj sem imel koordinate vseh točk ob enakih časih. Dinamika premikanja je enaka kot pri sprehodih, le štetje časa je drugačno. Za izračun parametra γ sem prav tako uporabil 500 delcev s 500 koraki. Ocenjene napake in fiti so določeni po enakem postopku kot pri sprehodi. Vrednosti paramtera γ določene iz naklonov premic se precej dobro ujemajo z napovedanimi vrednostimi in režimi iz teorije.



Slika 5: a) 5 delcev, 5 korakov v super-difuzivnem režimu. Povprečna lega delcev se hitro spreminja. b) 5 delcev, 100 korakov v režimu normalne difuzije. Povprečna lega delcev se počasneje spreminja kot v super-difuzivnem režimu.



Slika 6: Logaritem cenilke Median Absolute Deviation v odvisnosti od logaritma časa. Iz naklona premice dobim vrednosti iskanega parametra γ. a) $\gamma = 4.03 \pm 0.01$, b) $\gamma = 1.046 \pm 0.004$.



Slika 7: a) 7 delcev, 15 sprehodov v balističnem režimu. b) Logaritem cenilke Median Absolute Deviation v odvisnosti od logaritma časa.$\gamma = 1.942 \pm 0.006$. Vrednost fita t^γ se ujema z napovedjo t^2.

4 Zaključek

Z naključnimi sprehodi lahko napovemo gibanje delcev v raznih snoveh in s tem lahko boljše razumemo fizikalne pojave. Vrednosti iskanega eksponenta se ujemajo z teorijo precej natančno. Če bi vzel več delcev pri fitanju premice, bi lahko dobil še natančnejšo vrednost γ. Za simulacijo delcev je potrebno veliko operacij in če bi hotel simulirati pravo število delcev v neki snovi bi potreboval boljši računalnik in optimizirano kodo.