Random Walk & Physics

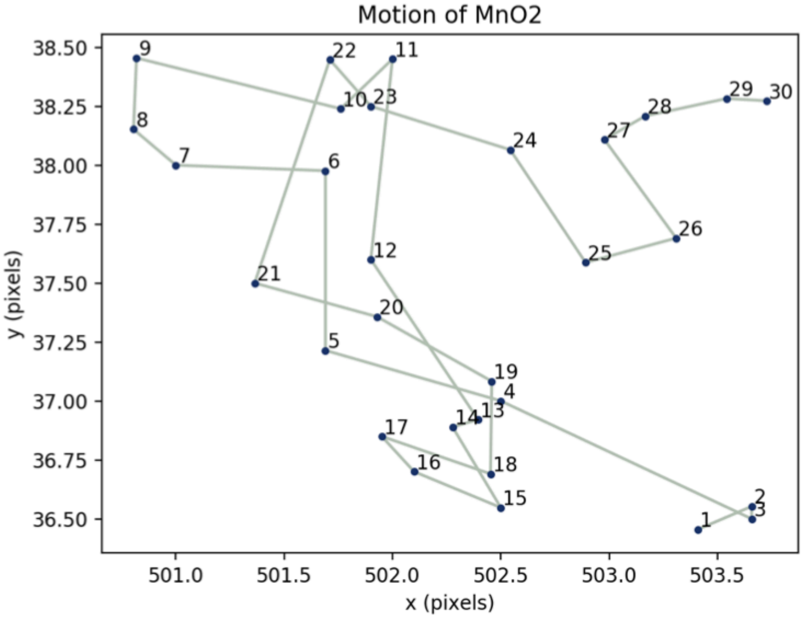
Final Project of Probability
06/15/2017
B03202017 物理三 李漪莛
B03202047 物理三 王昱翔

Introduction

- 希望找出幾個特定的 random walk 模型，對應到實際的物理系統。
  - Brownian motion 布朗效應
  - Precipitation 沈澱現象
  - Mean collision frequency 碰撞頻率
- 若 model 有對應到實際系統，則機率分佈要相同。

Random Walk

- 數學統計模型，由一連串的軌跡組成，其中每一次都是隨機的，如：醉漢走路。
- Random walk 的位移分佈是 normal distrib.。



Model

	Model 1
邊界	沒有
維度	1D
粒子數	1
方向	P(+1) = P(-1) = 1/2
模擬	布朗運動

- 每個時間點只能走一步

因為布朗運動
是空間對稱的

Brownian Motion

- 花粉粒子在水中受水分子碰撞，形成不規則運動。
- 實際上，布朗運動就是對稱的 random walk 在「連續」形式的對應。

	Random Walk (Model 1)	Brownian Motion
相同點	• 每一個時間點，粒子隨機行動 • 往各方向的機率都均勻	
方向、步伐大小	• dx = +1 or -1 → 離散	• 可朝任何一個角度移動 • 每次的步伐大小不固定 → 連續

Equation of Brownian Motion

- 愛因斯坦~~利用理想氣體方程式、滲透壓、質量連續性方程式等等~~（計算過程和機率無關）推導出布朗運動滿足：

$$\boxed{\begin{aligned} &\frac{\partial P}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} && (eq1) \\ &P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\,e^{\frac{-x^2}{4Dt}} && (eq2) \end{aligned}}$$

- 分佈同樣是 normal distrib.。
- P(x, t) = Prob(粒子從 x = 0 出發，經過時間 t 在位置 x)
- 問題：D 在物理中和粒子半徑、溫度等物理參數有關，但在 random walk 中沒有這些特性，要怎麼求 D？

Define D

- In model 1：P(dx = +1) = P(dx = -1) = ½, dt = 1
- P(t+1時物體在 x) =

  加總[P(物體可能的位置) x P(可能的位子移動到 x)] =

$$\boxed{f(x,t+1) = \sum_{dx} f(x-dx,t)P(dx)}, \text{ and } f(x,t) \equiv f,$$

$$f + \frac{\partial f}{\partial t} = f\overbrace{\sum P(dx)}^{1} - \frac{\partial f}{\partial x}\overbrace{\sum (dx)P(dx)}^{0} + \frac{\partial^2 f}{2\partial x^2}\sum (dx)^2\, P(dx)$$

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t}} = 0 + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \times \left[(1)^2 \times \frac{1}{2} + (-1)^2 \times \frac{1}{2}\right] = \boxed{\frac{1}{2}\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}}$$

- 透過和（eq1）比較可得：D = 1/2

Define D

- 代入 D = ½，eq2 → $\boxed{P(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{\frac{-x^2}{2t}}}$

  $$\sigma^2 = t = E(x^2) - E(x)^2 = < x^2 > - 0$$

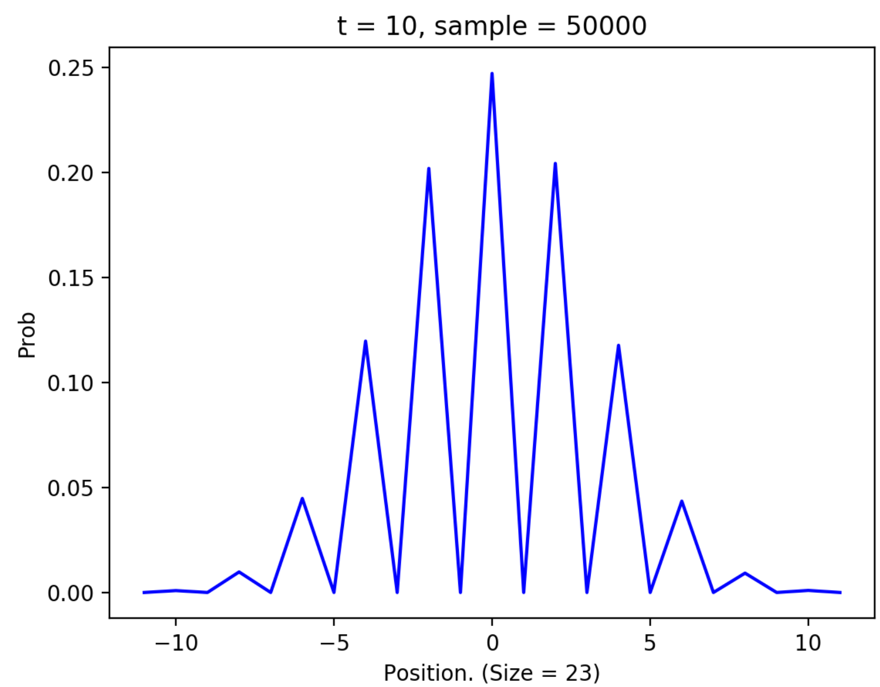
- Model 1 的機率分佈就是平均 = 0、變異數 = t 的 normal distrib.。
- 計算出的方程式和模擬結果相符，但因為離散、連續的特性不同，需要再做一些調整。（P9~12）

Random walk & Normal Distrib. Simulation: Disc & Cont

- 設 t = 10，可知 ： $P(x, t=10) = \binom{10}{5+x}\left(\frac{1}{2}\right)^{10}$

- 隨機漫步因為離散的特性，當 t 是偶數時，只能停在 x 屬於偶數的點

→ 需多考慮相鄰的點
（如下頁）

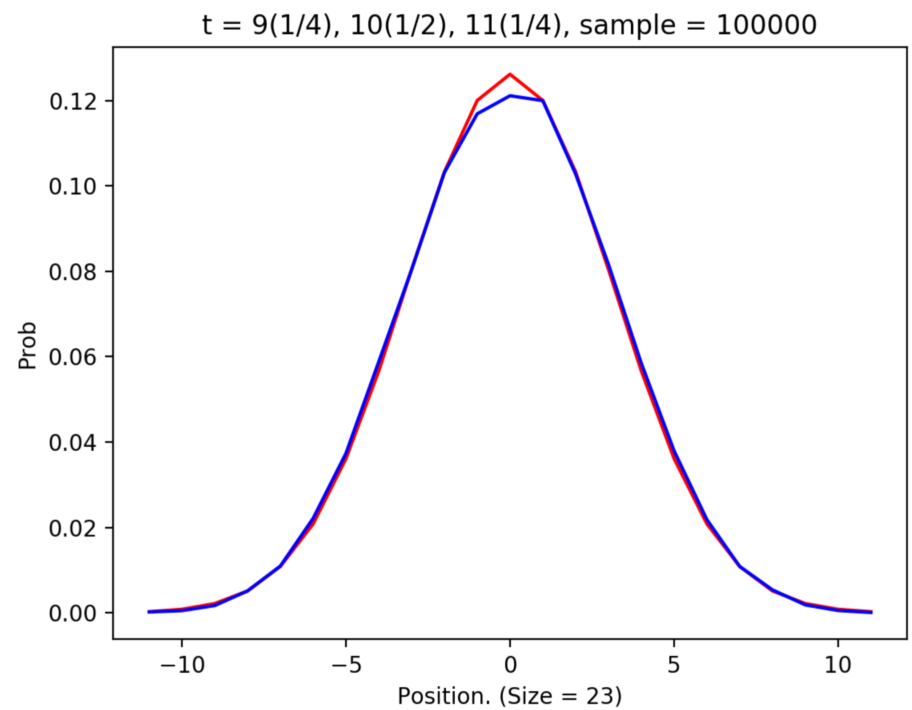


Random walk & Normal Distrib. Simulation: Disc & Cont

- 改成模擬 t = 9, 10, 11 時機率的 weighted sum，則可擬和連續的 normal distrib.：

$$P_{cont}(x, t = 10) \approx \frac{1}{2} P_{disc}(x, 10) + \frac{1}{4}[P_{disc}(x, 9) + P_{disc}(x, 11)]$$

- 藍：Model 1 模擬結果
- 紅：將 x 代入 eq2 （理論值）



Random walk & Normal Distrib. Theoretical Approximation

- 想用除了 MGF 的方法驗證時間 t 的 random walk（Bernoulli）等效於 normal distrib.（下式）：

$$\boxed{\binom{t}{\frac{t}{2}+x}\left(\frac{1}{2}\right)^{t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}}e^{\frac{-x^2}{2t}}, -\frac{t}{2} \leq x \leq \frac{t}{2}}$$

- 需利用 Stirling’s approximation：

$$k! \approx k^{k+1/2}e^{-k}\sqrt{2\pi}$$

  – 此式適用在 k 很大的時候，但實際上 k = 2 時就有不錯近似效果。
  – 2! = 2 → 1.92
  – 5! = 120 → 118
  – 10! = 3.63M → 3.59M

Random walk & Normal Distirb. Theoretical Approximation

$$P(x,t) = \binom{t}{\frac{t}{2}+x}\left(\frac{1}{2}\right)^t = \frac{t!}{(\frac{t}{2}+x)!\left(\frac{t}{2}-x\right)!}\left(\frac{1}{2}\right)^t$$

- 目前我們只證得出 x = 0（可使上頁右式 exp(0) = 1）：

$$P(x=0,t) = \frac{t!}{\frac{t}{2}!\,\frac{t}{2}!}\left(\frac{1}{2}\right)^t = \frac{t^{t+\frac{1}{2}}e^{-t}\sqrt{2\pi}}{[\frac{t}{2}^{\left(\frac{t+1}{2}\right)}e^{-\frac{t}{2}}\sqrt{2\pi}]^2}\times\left(\frac{1}{2}\right)^t$$

$$= \frac{t^t\times\sqrt{t}}{(\frac{t}{2})^t\times 2^t\times\frac{t}{2}\times\sqrt{2\pi}} = \frac{2}{\sqrt{2\pi t}} \neq \frac{e^0}{\sqrt{2\pi\times t}}$$

- 同樣考慮離散、連續性質，則上式不等號的左邊多乘上 ½，則左右兩式相等。

Random walk & Brownian motion Differential Approach

可從另一個角度看出兩者等價性：

- From eq1： $$\frac{\partial P}{\partial t} = D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$$
- 考慮隨機漫步的特性：

$$P(x,t+1) = \frac{P(x+1,t)}{2} + \frac{P(x-1,t)}{2}$$

$$P(x,t+1) - P(x,t) = \frac{1}{2}[P(x+1,t) - 2P(x,t) + P(x-1,t)]$$

- 連續後就是 eq1，且同樣 D = ½
- From Ref [2]

Model

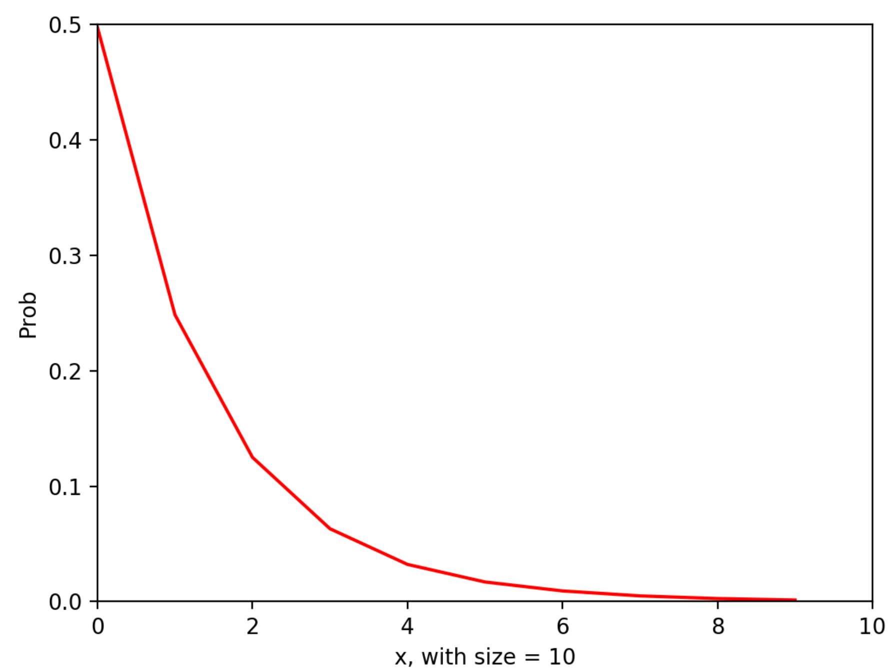
	Model 1	Model 2
邊界	沒有	有
維度	1D	1D
粒子數	1	1
方向	P(+1) = P(-1) = 1/2	P(+1) != P(-1)
模擬	布朗運動	沈澱現象

- 若從邊界往外走（站在牆邊往牆撞），則當作不動，留在原地。

Precipitation 沈澱現象
Brownian Motion with Gravity

- 粒子受重力影響，向下機率較大，經長時間後底部密度較高。
- 重力只有一個方向→只需考慮一維。
- Model 2 假設左邊機率大，P(-1) > P(+1)，好像有力把粒子往左推，類似沈澱現象。

等效受力方向



Precipitation 沈澱現象
Brownian Motion with Gravity

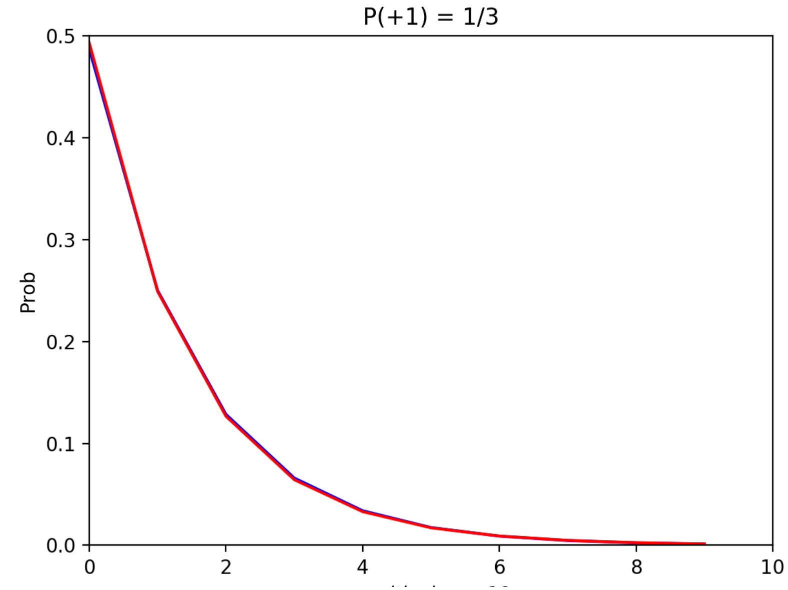
- 沈澱現象的方程式可簡化為：$\boxed{P(x) \propto e^{cgx}}$
  - c：跟物理係數有關的常數（粒子體積、溫度…）
  - g：重力
  - x：沿重力方向的座標
- 如果我們假設 model 2 跟沈澱現象有關，則 model 2 的機率分佈必須要符合上式的形式。
- 那對應到的指數項的係數（cg）要是多少？

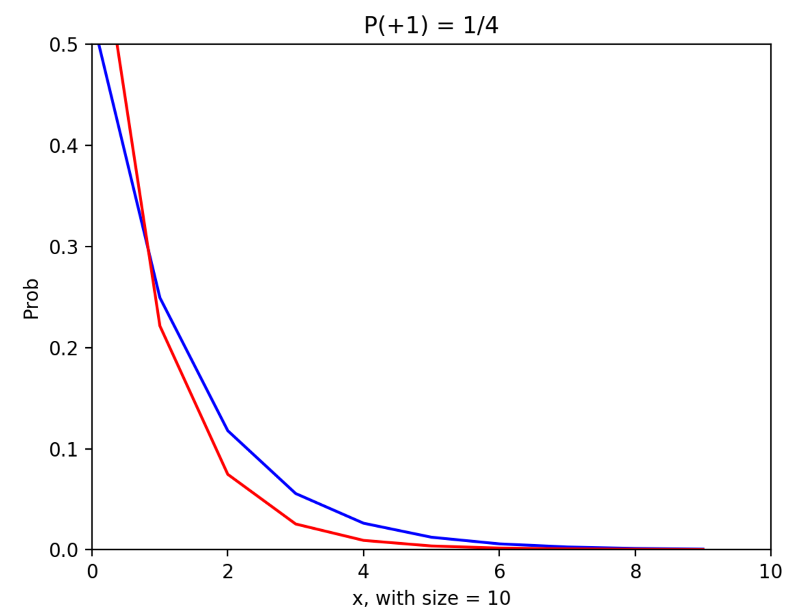
Precipitation

$$P(x) \propto e^{cgx}$$

猜測 1： cg = - P(-1)

- 只有在 P(-1) = 2/3 符合
- 在其他情況擬和效果差





紅：Random walk 模擬結果
藍：猜測 1 曲線

Precipitation

$$P(x) \propto e^{cgx}$$

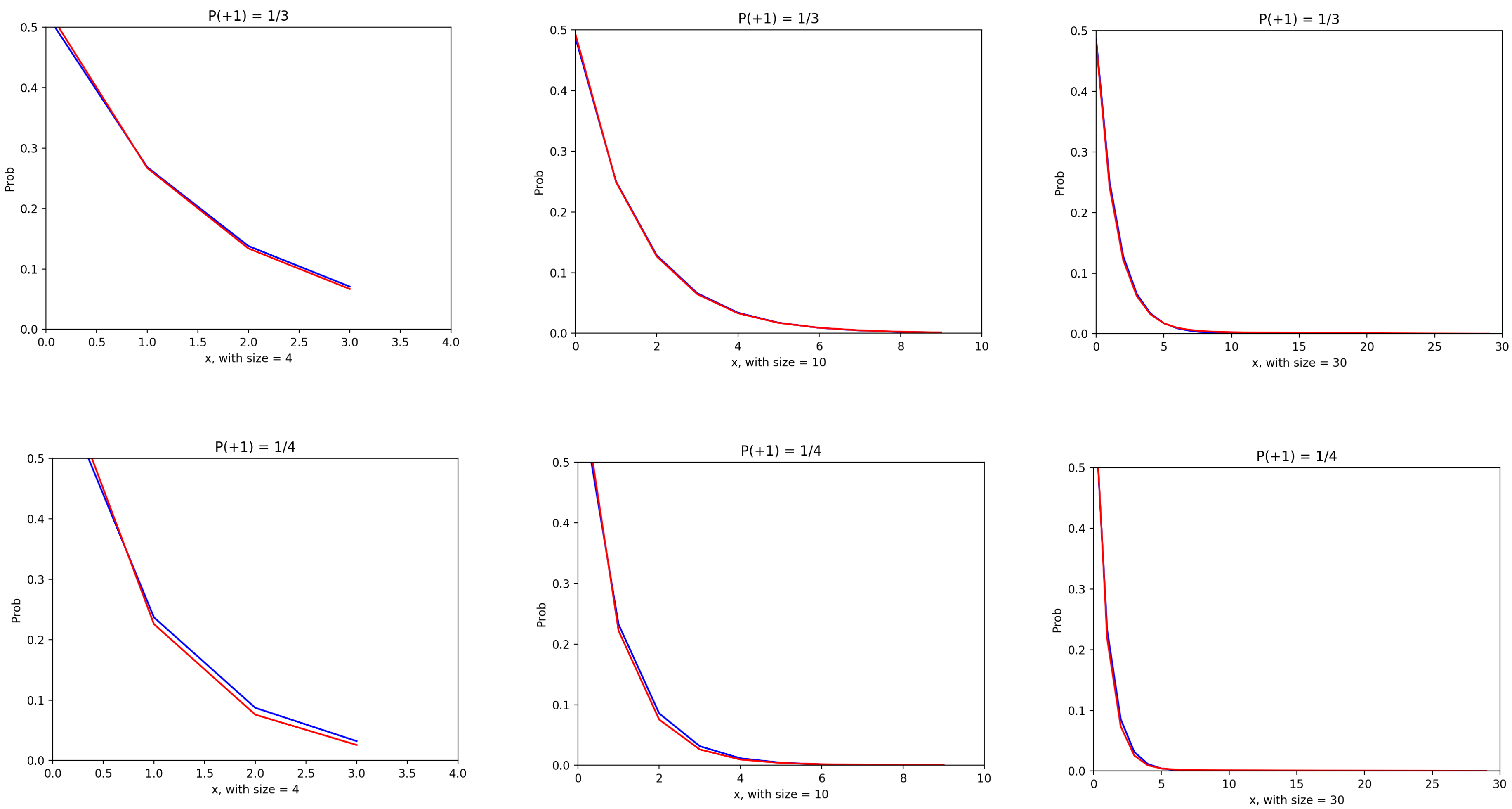
- 考慮在 P(+1) = P(-1) = 1/2 時， cg 應該要是 0
  - 因為當 P(+1) = P(-1)、有邊界、長時間的隨機漫步，其機率分佈是完全均勻，跟 x 無關（page 25）

猜測 2：g = P(-1)-P(+1), c = -2

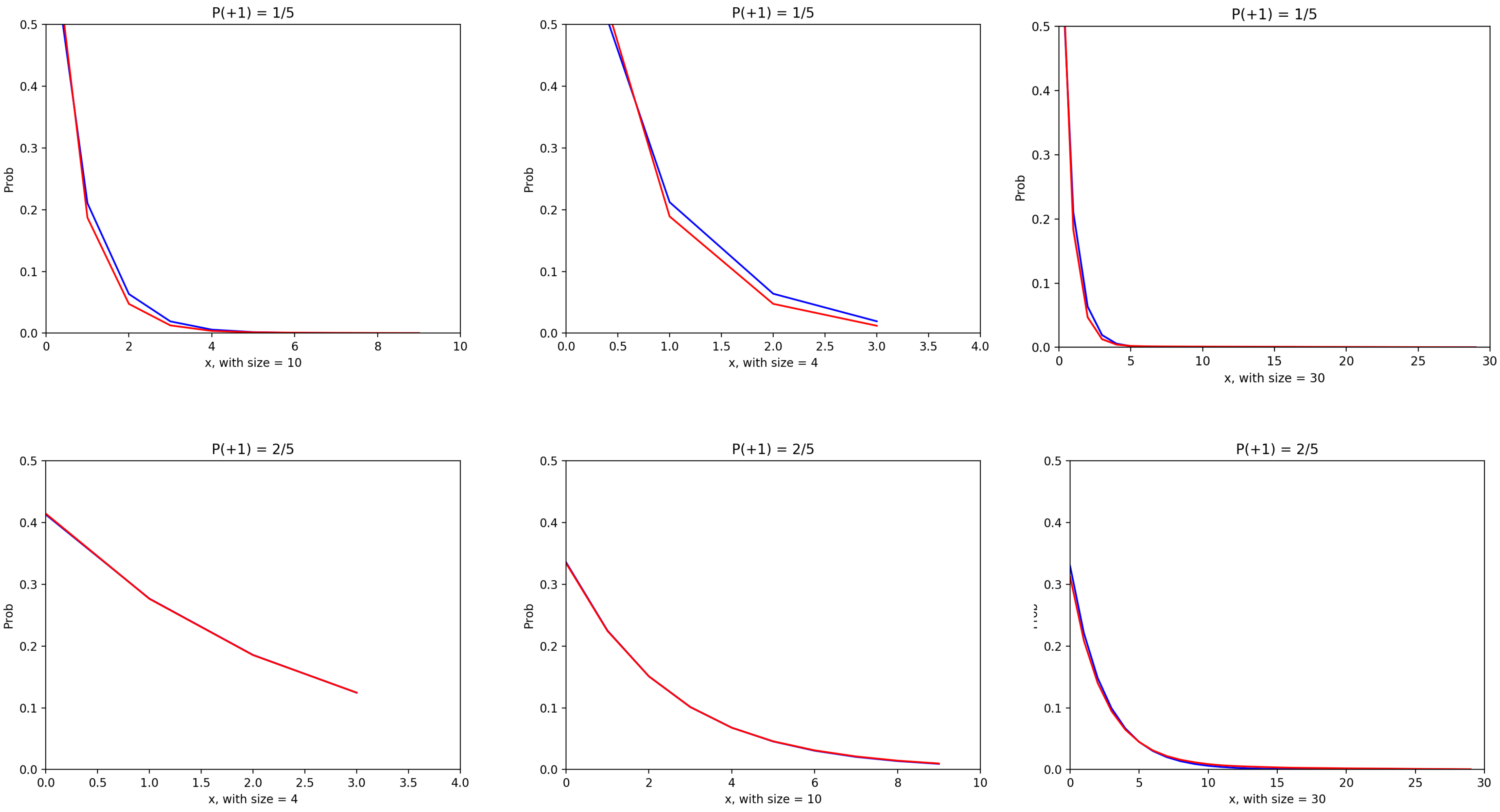
- 在 P(+1), P(-1) 差異不大時擬和效果佳
- 如 P(+1) = 1/3, 1/4, 2/5

Precipitation

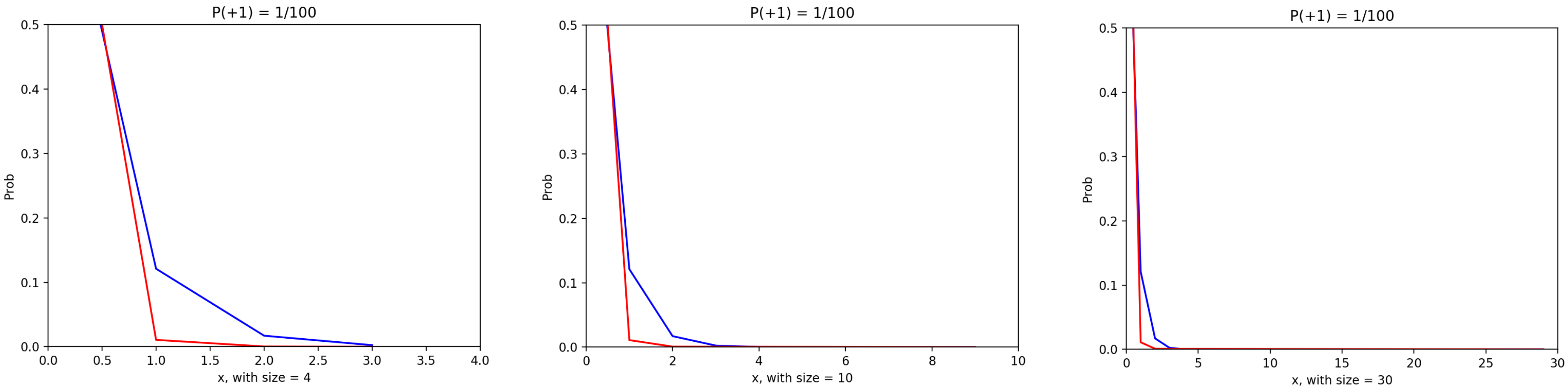
紅：model 2 模擬結果
藍：根據沈澱現象方程式猜測的機率函數



Precipitation



Precipitation



- Model 2 左右機率差異越大，猜測 2 的擬和越差。
  - 如上圖 P(-1) – P(+1) = 0.98
- 目前 model 2 在機率差較小時，才符合實際沈澱現象。
- 由於左右機率差異放在猜測 2 的 exp 指數項，推測也許函數跟 exp 無關，只是當指數項小時 exp(x) 可近似成 1+x 才會恰巧看起來一樣。

Precipitation - Markov Matrix

沈澱和 model 2 都是長時間穩定後的現象。

Model 2（不含沈澱） 可用 Markov 矩陣運算：

Pi = P(x = i). Assume size = 4, P(+1) = 2/3, then:

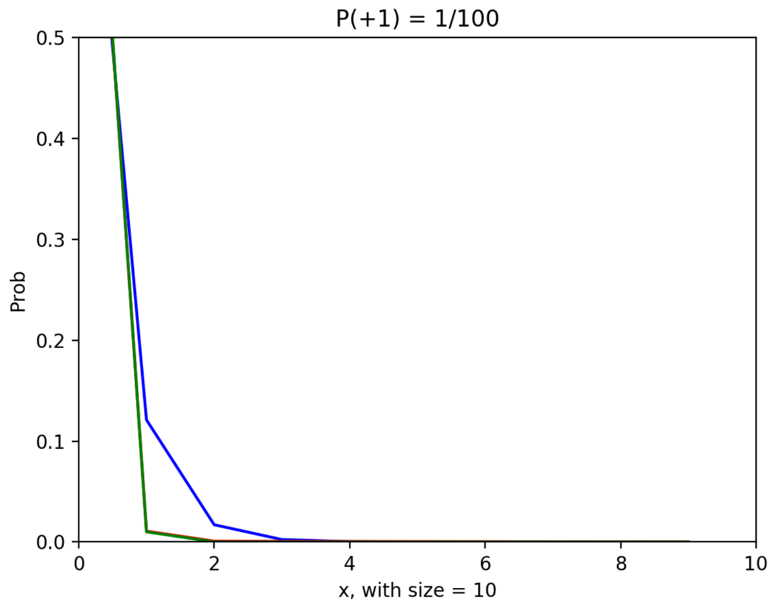
紅：Model 2 模擬
綠：Matrix 算法
藍：猜測 2
綠線幾乎和紅線重合

$$\rightarrow \begin{bmatrix} P0 \\ P1 \\ P2 \\ P3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2/3 & 2/3 & 0 & 0 \\ 1/3 & 0 & 2/3 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 & 2/3 \\ 0 & 0 & 1/3 & 1/3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} P0 \\ P1 \\ P2 \\ P3 \end{bmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{cases} P0 = 2 \cdot P1 \\ P1 = 2 \cdot P2 \\ P2 = 2 \cdot P3 \\ P0 + P1 + P2 + P3 = 0 \end{cases}$$

→ 通式：

$$\boxed{P(x) \propto [\frac{P(+1)}{P(-1)}]^x}$$

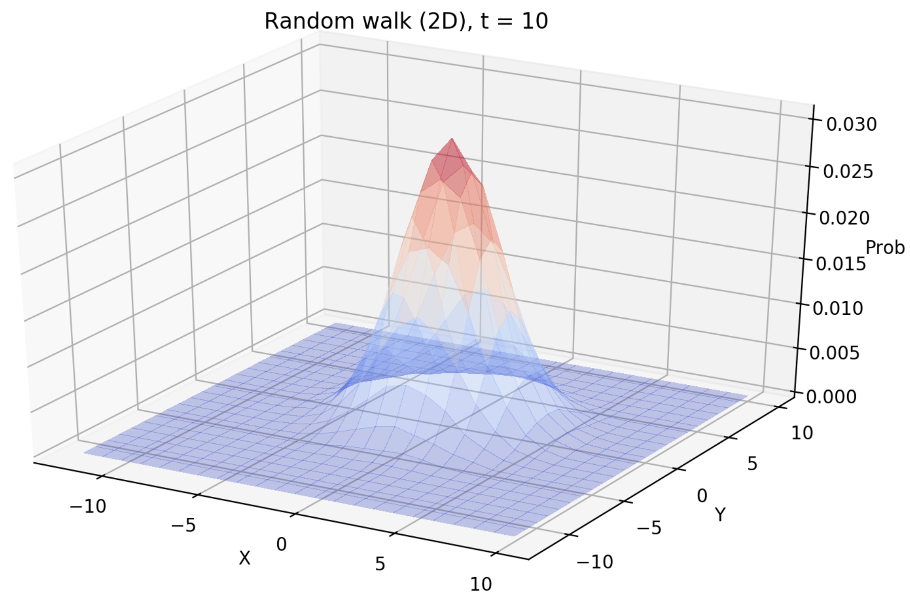


Model

	Model 1	Model 2	Model 3
邊界	沒有	有	有
維度	1D	1D	2D （正方形）
粒子數	1	1	2 ~ n
方向	P(+1) = P(-1) = 1/2	P(+1) != P(-1)	向上下左右的機率都是 1/4
模擬	布朗運動	沈澱現象	碰撞頻率

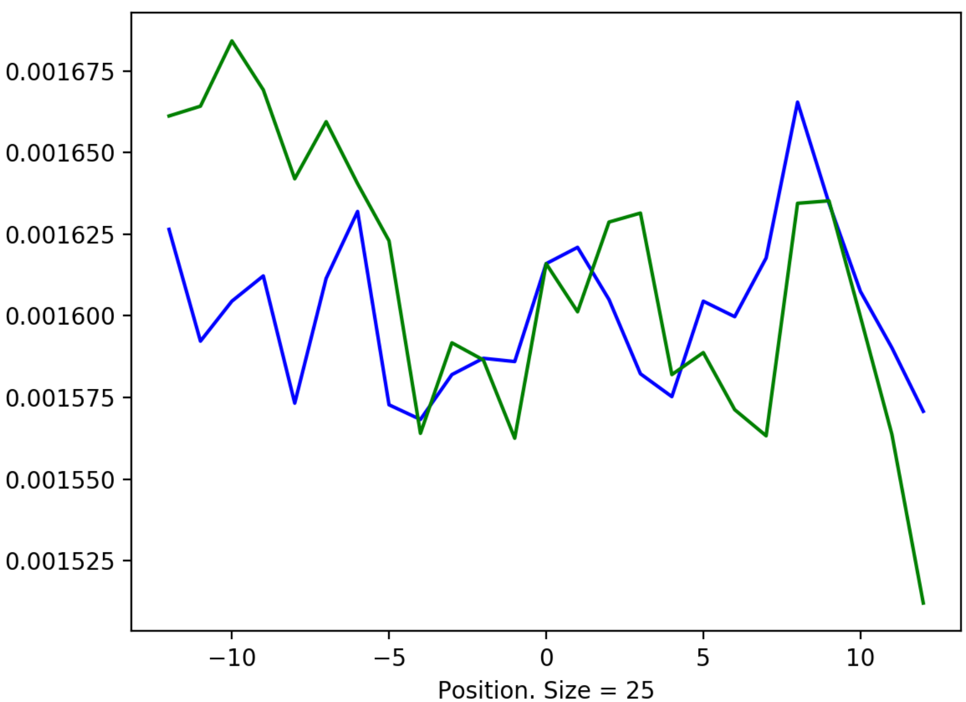
Random Walk in 2D

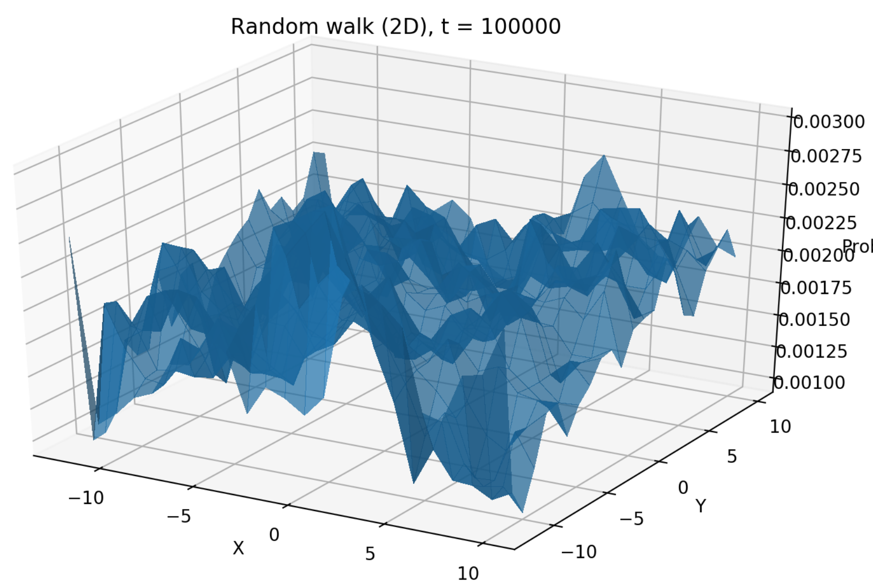
- Simulate random walk in 2D, at t = 10.
- 同樣符合 2D normal distrib.



Random walk for a long time in a limited space

- 常態分佈被邊界折回去 → 不管尺寸多大，邊界機率不會特別高或低。
- 圖上座標間隔很小，看起來不平滑，實際上每個位置的機率接近 uniform。





Mean Collision Frequency 碰撞頻率

Random walk of 2 people

- 理想氣體分子的碰撞頻率和分子相對速率成正比
  - 別的粒子會不會動，對於某顆特定粒子（會動）的碰撞頻率會有影響。
- 那隨機漫步的碰撞頻率受什麼因素影響？
- 設定 model 3 中有兩人 A 和 B：

$$N \equiv \frac{A\text{、}B\text{ 都會動，兩者相撞前平均移動步數}}{\text{只有 }A\text{ 動，兩者相撞前平均移動步數}}$$

Result of N

B_move & B_fixed
指在 B 會不會動時平均走幾步會相遇
跑 20 萬次，取到小數點後五位，
表格只放到整數位的數據

		邊界	起始位置	B move	B fixed	N
1	B 從正中心出發	Size = 5 x 5 |x| = |y| <= 2	A = (1, 1), B = (0, 0)	35	30	1.153
2			A = (2, 2), B = (0, 0)	42	36	1.181
3		Size = 15 x 15 |x| = |y| <= 7	A = (4, 3), B = (0, 0)	563	441	1.279
4			A = (7, 7), B = (0, 0)	550	482	1.141
5	B 從邊界出發	Size = 5 x 5 |x| = |y| <= 2	A = (1, 1), B = (-2, -2)	49	102	0.444
6			A = (2, 2), B = (-2, -2)	51	107	0.478
7		Size = 15 x 15 |x| = |y| <= 7	A = (4, 3), B = (-7, -7)	606	1551	0.391
8			A = (7, 7), B = (-7, -7)	624	1586	0.393
9	A, B 初始距離相同 = 5, 5	Size = 10 x 10 0 <= |x| = |y| <= 9	A = (2, 2), B = (7, 7)	235	289	0.813
10		Size = 20 x 20 0 <= |x| = |y| <= 19	A = (7, 7), B = (12, 12)	974	971	1.003

Random walk for n people

- 假定有 1 A + n B，A 和 {B} 都是隨機初始化位置，討論所有 {B} 有動跟沒動的差別。
- 各跑 800 次，每次 10000 步

size	Number of {B}	B move 碰撞次數	B fixed 碰撞次數	N
15 x 15	3	132.7025	130.3525	1.018
	4	176.7775	176.9175	0.999
	5	221.6650	223.0325	0.994
	10	443.5950	444.4150	0.998

- N 都很接近 1，表示碰撞頻率和粒子相對速率無關
- 平均差不多，但 B move 的標準差都會比較小！

Collision frequency of different density

- 驗證隨機漫步的碰撞頻率和粒子密度（幾乎）成正比
- 跑 800 次 10000 的平均碰撞次數（取到整數位）
  - 指 A 和 {B} 相撞次數，不考慮 {B} 彼此相撞

尺寸/面積	B 的個數	密度	平均碰撞次數
15 x 15 225	1	0.0044	45
	3	0.0133	135
	5	0.0222	222
	10	0.0444	444
9 x 9 81	1	0.0123	125
	2	0.0247	249
	3	0.0370	370
	10	0.1234	1240

Discussion of Model 3

- 經過思考和模擬可得知隨機漫步的碰撞頻率只和粒子密度成正比。
- 若隨機漫步的起始位置完全隨機，則不論其他粒子有沒有動，某顆粒子（會動）的碰撞頻率都相同。
- 隨機漫步和氣體分子運動的結果不同。

	隨機漫步	理想氣體分子運動
相似點	有一大堆粒子、可探討平均碰撞頻率	
方向、速度	每一時間點都隨機	再下一次碰撞前， 方向和速度都是固定的
平均碰撞頻率	只和粒子密度有關	和粒子相對速率成正比

Model (Review)

	Model 1	Model 2	Model 3
邊界	沒有	有	有
維度	1D	1D	2D （正方形）
粒子數	1	1	2 ~ n
方向	P(+1) = P(-1) = 1/2	P(+1) != P(-1)	向上下左右的機率都是 1/4
模擬	布朗運動	沈澱現象	碰撞頻率

Conclusion
(What we have learned)

- Model 1 可看作是布朗運動在離散的對應
  - 布朗運動的方程式（物理學家在這方面研究甚多）可提供隨機漫步、normal distrib 的其他理論想法（another approach）。
  - 兩者在對應時，要對連續或離散不同造成的影響做修正。
- Model 2 在 P(+1), P(-1) 差異不大時，機率分佈可由沈澱現象方程式（猜測 2）擬和。
  - Model 2 還需要修正，才能完整模擬出沈澱現象。
  - Markov matrix 可計算出 case 2 長時間後（穩定）的粒子機率分佈。
- 影響 model 3 和氣體分子的碰撞頻率的因素不同。
- 雖然這次的題目跟物理相關，但這份投影片 80% 的內容是經過模擬、數學計算和查資料等方法新學到（得知）的。

Other (future) works

隨機漫步的模型有許多變因可以調整（如下表），可找出哪些排列組合較符合、可解釋現實生活的現象。

空間	1D/2D正方形邊界/2D球型邊界/ 球面/立方體/球體 （球型和球體較符合自然界的邊界）
個數	1 ~ n
機率	各方向機率是否均勻
邊界	若有邊界，可設定不同的邊界機制

Reference

[1] https://en.wikipedia.org/wiki/Brownian_motion

[2] https://www.mpp.mpg.de/~caldwell/ss05/Lecture7.pdf