# 2. naloga: Naključni sprehodi

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 (gaussovsko), 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, ustrezni sliki naključnega gibanja pa zaradi posameznih silno dolgih korakov, od katerih vsak traja enak čas, pravimo Lévyjevi pobegi. Pobege (*flights*) tako ločimo od sprehodov (*walks*), ki označujejo gibanje, pri katerem je dolžina koraka sorazmerna s časom.

Porazdelitev (1) implicira, da vsak korak traja enako dolgo, medtem kot se hitrost potovanja delca spreminja od koraka do koraka. Nekoliko drugačno sliko dobimo, če je hitrost delca vselej konstantna, le čas potovanja do naslednjega trka se spreminja. To bolj ustreza pravi, fizikalni sliki naključnega gibanja delca skozi snov. Naloge v nadaljevanju lahko obravnavaš za obe predstavitvi sprehodov. (V drugem primeru lahko z enim časom merimo čas trajanja koraka, z drugim časom pa samo štejemo trke.)

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

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

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). Opomba: v primerih, ko je drugi moment porazdelitve neskončen, bo tudi račun razmazanosti končnih leg $x_n$ v obliki

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

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 (negaussovskih) 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. 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

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

kjer je $\phi$ enakomerno naključno porazdeljen po intervalu $[0, 2\pi]$, dolžina koraka $l$ pa naj bo porazdeljena v skladu s potenčno obliko (1): pomoč za pretvorbo med verjetnostnimi porazdelitvami najdeš npr. v Numerical Recipes (poglavje 7.2). Korakaš lahko tudi v kartezičnem sistemu,

$$\begin{aligned} x &\leftarrow x + f(R_1) \,, \\ y &\leftarrow y + f(R_2) \,, \end{aligned}$$

kjer sta $R_1$ in $R_2$ naključni števili na intervalu $[0, 1]$ ali $[-1/2, 1/2]$, funkcija $f(x)$ pa naj bo $f(x) = x$, $|x|$, $1/x$, $1/|x|$, itd. Opazuješ lahko porazdelitev po končnih legah $x$ ali $y$, z ustreznim Jacobijevim faktorjem tudi po $r = \sqrt{x^2 + y^2}$.

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 $\gamma$ za nekaj izbranih parametrov $\mu$ 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?

## Dodatno čtivo

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