计算物理学(A)第六次作业

物理学院　陈伟杰 1500011335

June 16, 2018

1　随机行走

1.1　理论分析

题目实际上是一个可数Markov链，转移概率如下($R+L=1$)：

$$p(x,x+1)=R \qquad p(x,x-1)=L \tag{1}$$

从$x=0$出发，则可以得到均值和方差的表达式：

$$\mu(t)=\langle x(T)\rangle=(R-L)t \qquad \sigma(t)^2=\langle x(t)^2\rangle-\langle x(t)\rangle^2=4LRt \tag{2}$$

另一方面,随机行走可以看成带对流的热扩散方程的差分形式(前述问题中时间步长$\epsilon=1$，空间步长$h=1$)：

$$\frac{\partial w}{\partial t}-2LR\frac{h^2}{\epsilon}\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}+\frac{h}{\epsilon}(R-L)\frac{\partial w}{\partial x}=\delta(x,0) \tag{3}$$

证明如下：

已知态转移方程$w(x,t+\epsilon)=Rw(x-h,t)+Lw(x+h,t)$，两侧同时减去$w(x,t)$，可以得到：

$$w(x,t+\epsilon)-w(x,t)=R[w(x-h,t)+w(x+h,t)-2w(x,t)]+(L-R)w(x+h,t)+(2R-1)w(x,t) \tag{4}$$

考虑到数值差分格式，可以改写为

$$\begin{aligned}&\frac{w(x,t+\epsilon)-w(x,t)}{\epsilon}=\frac{Rh^2}{\epsilon}\frac{[w(x-h,t)+w(x+h,t)-2w(x,t)]}{h^2}-(R-L)\frac{h}{\epsilon}\frac{w(x+h,t)-w(x,t)}{h}\\&\Rightarrow\frac{\partial w}{\partial t}=R\frac{h^2}{\epsilon}\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}-\frac{h}{\epsilon}(R-L)\frac{\partial w}{\partial x}\end{aligned} \tag{5}$$

但实际上，该推导过程对L与R是对称的，因此可以有：

$$\begin{aligned}&\frac{w(x,t+\epsilon)-w(x,t)}{\epsilon}=\frac{Lh^2}{\epsilon}\frac{[w(x-h,t)+w(x+h,t)-2w(x,t)]}{h^2}-(R-L)\frac{h}{\epsilon}\frac{w(x,t)-w(x-h,t)}{h}\\&\Rightarrow\frac{\partial w}{\partial t}=L\frac{h^2}{\epsilon}\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}-\frac{h}{\epsilon}(R-L)\frac{\partial w}{\partial x}\end{aligned} \tag{6}$$

将(5)式乘以R，(6)式乘以L，相加得到能体现扩散过程L与R地位相等的形式：

$$\frac{\partial w}{\partial t}=2LR\frac{h^2}{\epsilon}\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}-\frac{h}{\epsilon}(R-L)\frac{\partial w}{\partial x} \tag{7}$$

由于$t=0$时刻的初始分布均为$x=0$，因此可以看成一个点源$\delta(x,0)$，则得到

$$\frac{\partial w}{\partial t}-2LR\frac{h^2}{\epsilon}\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}+\frac{h}{\epsilon}(R-L)\frac{\partial w}{\partial x}=\delta(x,0) \tag{8}$$

注意到，该热扩散方程带有匀速对流项，考虑变量替换$y=x-(R-L)t\frac{h}{\epsilon}$，则化简为

$$\frac{\partial w}{\partial t}-2LR\frac{h^2}{\epsilon}\frac{\partial^2 w}{\partial y^2}=\delta(y,0) \tag{9}$$

记$k = 2LRh^2/\epsilon$，结合无穷远边界条件$w(\pm\infty, t) = 0$，得到w的解(即热核函数)：

$$w(y = x - (R-L)t\frac{h}{\epsilon}, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi kt}}exp(-\frac{y^2}{4kt}) \tag{10}$$

但是实际上，由于随机行走是一个离散过程，只能存在h的整数倍的态，因此若行走奇数倍的ϵ，则h的偶数倍的态的概率分布一定为0，所以得到随机行走的态的概率分布(非零部分)应为$2w(y,t)$。

若考虑$t = const$的情况下，这个解等效于每个时刻都是一个高斯分布，因此有

$$\mu(t) = \langle x(t) \rangle = (R-L)t\frac{h}{\epsilon} \qquad \sigma(t)^2 = \langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = 2kt = 4LR\frac{h^2}{\epsilon}t \tag{11}$$

显然，取本次随机行走问题中时间步长$\epsilon = 1$，空间步长$h = 1$，则随机行走的结果是这个结果的特例。

1.2 数值结果展示

首先对于$R = L = 0.5$的情况，显然有$\mu(t) = 0$，$\sigma(t)^2 = t$，$y = x$。在步数$T = 1e4$，粒子数$N = 1e5$情况下

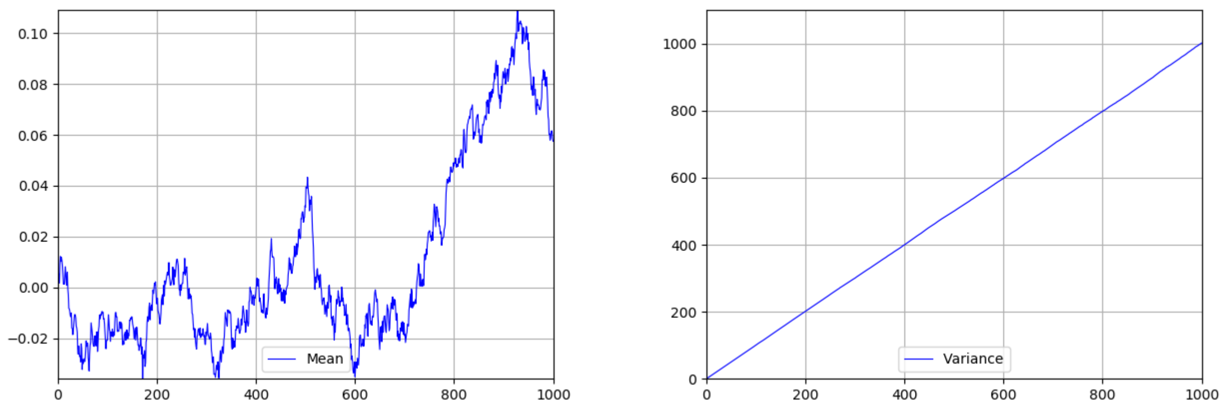

Figure 1: (左)均值；(右)方差

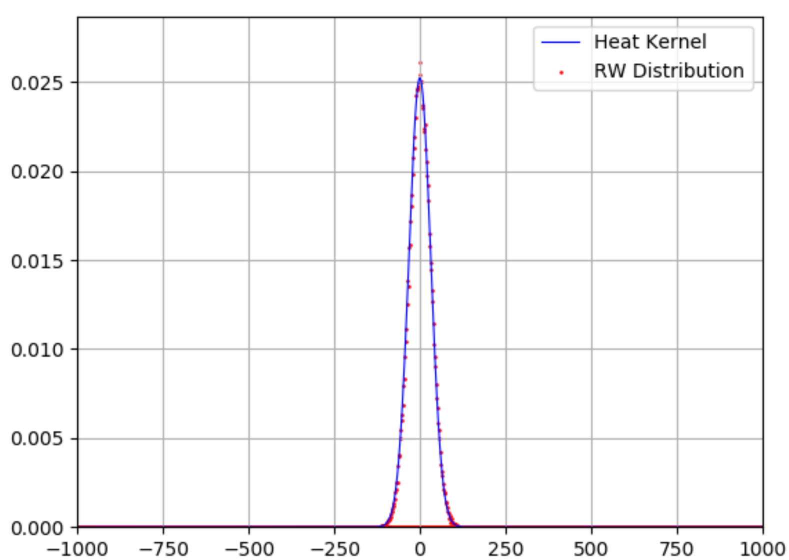

Figure 2: 步数$T = 1e4$，粒子数$N = 1e5$的状态分布图

从图像可以看出，均值基本在$x=0$附近波动，方差与$\sigma(t)^2=t$符合得很好，并且随机行走的状态分布与热核函数$2w(x,t)$的形状非常吻合。

对于$R=0.75$的情况，有$\mu(t)=0.5t$，$\sigma(t)^2=0.75t$，$y=x-0.5t$。在步数$T=1e4$，粒子数$N=1e5$情况下

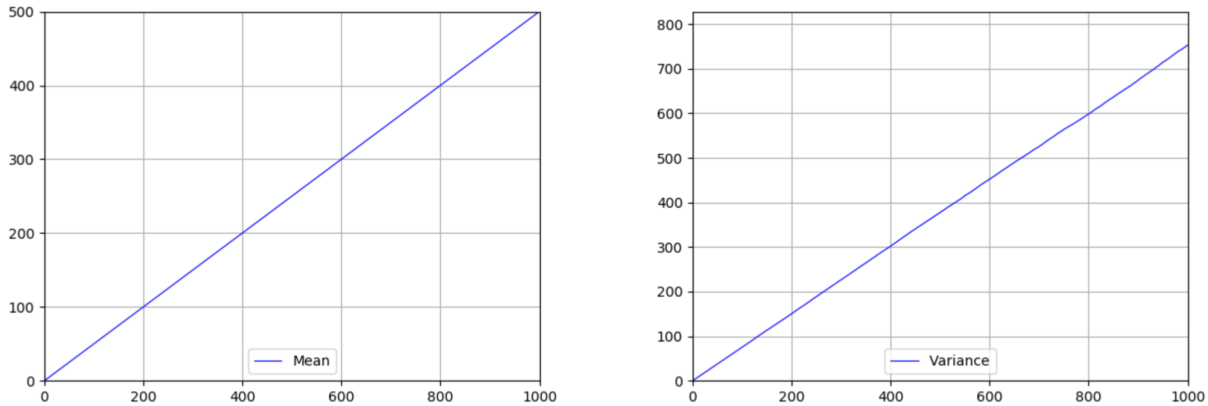

Figure 3: (左)均值；(右)方差

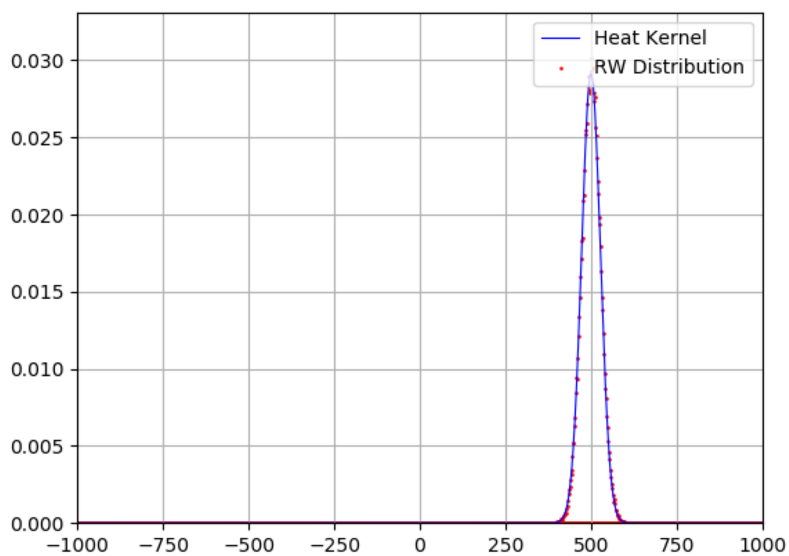

Figure 4: 步数$T=1e4$，粒子数$N=1e5$的状态分布图

从图像可以看出，均值与$\mu(t)=0.5t$符合得很好，方差与$\sigma(t)^2=0.75t$符合得很好，并且随机行走的状态分布与热核函数$2w(y=x-0.5t,t)$的形状非常吻合。