计算物理 作业报告13

PB14203209　张静宁　　2017.11.21

第十三题

[作业13-1] Monte Carlo方法研究正弦外力场$F \propto \sin wt$中的随机行走。

算法公式

理论公式推导

考虑一个粒子在一维格点上的随机行走问题，粒子受到正弦外力场 $F \propto \sin wt$ 的影响.

设粒子从原点出发，每走一步移动一个单位长度，并耗时单位时间.

且第 k 步时$(t=k)$，粒子向右走一步$\Delta x_k = +1$ 概率为

$$p = \frac{1}{2}(1+\alpha \sin wt)$$

向左走一步$\Delta x_k = -1$ 概率为

$$q = 1 - p = \frac{1}{2}(1-\alpha \sin wt)$$

影响因子 $\alpha \in [0,1]$ 决定了随机行走受外力场的影响程度.

$t=i$ 时刻，这一步的期望

$$<\Delta x_i> = (+1)p + (-1)q = \alpha \sin(wi)$$

$t=N$ 时刻粒子总位移 $x(N) = \sum_{i=1}^{N} \Delta x_i$ 的期望为

$$\begin{aligned} < x(N) > &= < \sum_{i=1}^{N} \Delta x_i > = \sum_{i=1}^{N} < \Delta x_i > \\ &= \sum_{i=1}^{N} \alpha \sin(iw) = \alpha \frac{\sin(\frac{Nw}{2}) \sin(\frac{N+1}{2})w}{\sin(\frac{w}{2})} \end{aligned}$$

这里用到了

$$\sin x + \sin 2x + \ldots + \sin(nx) = \frac{\sin(\frac{nx}{2}) \sin(\frac{n+1}{2})x}{\sin(\frac{x}{2})}$$

则位移平方的期望为

$$
\begin{aligned}
<x^2(N)> =&< [\sum_{i=1}^{N}\Delta x_i]^2 > \\
&=< \sum_{i=1}^{N}\Delta x_i^2 + \sum_{i\neq j}^{N}\Delta x_i\Delta_j > \\
&= \sum_{i=1}^{N} < \Delta x_i^2 > + \sum_{i\neq j}^{N} < \Delta x_i \Delta x_j >
\end{aligned}
$$

其中 $< \Delta x_i^2 >= (+1)^2 p + (-1)^2 q = 1$，

由于 Δx_i与Δx_j相互独立，故 $< \Delta x_i \Delta x_j >=< \Delta x_i >< \Delta x_j >= \alpha^2 \sin(wi)\sin(wj)$

$$
\begin{aligned}
< x^2(N) > &= N + \sum_{i\neq j}^{N} \alpha^2 \sin(wi)\sin(wj) \\
&= N + \alpha^2[(\sum_{i=1}^{N}\sin iw)(\sum_{j=1}^{N}\sin jw) - \sum_{i=1}^{N}(\sin iw)^2] \\
&= N + \alpha^2(\sum_{i=1}^{N}\sin iw)^2 - \alpha^2\sum_{i=1}^{N}(\sin iw)^2 \\
&= N + \alpha^2(\frac{\sin(\frac{Nw}{2})\sin(\frac{N+1}{2})w}{\sin(\frac{w}{2})})^2 - \frac{\alpha^2}{2}(N - \frac{\sin(Nw)\cos(N+1)w}{\sin w}) \\
&= N(1-\frac{\alpha^2}{2}) + \alpha^2\frac{\sin(Nw)\cos(N+1)w}{2\sin w} + \alpha^2(\frac{\sin(\frac{Nw}{2})\sin(\frac{N+1}{2})w}{\sin(\frac{w}{2})})^2
\end{aligned}
$$

$t = N$ 时刻位移的方差

$$
\begin{aligned}
Var(x(N)) =&< x^2(N) > - < x(N) >^2 \\
&= N - \alpha^2\sum_{i=1}^{N}(\sin iw)^2 \\
&= N - \alpha^2\sum_{i=1}^{N}\frac{1-\cos 2iw}{2} \\
&= N - \frac{\alpha^2}{2}(N - \frac{\sin(Nw)\cos(N+1)w}{\sin w}) \\
&= N(1-\frac{\alpha^2}{2}) + \alpha^2\frac{\sin(Nw)\cos(N+1)w}{2\sin w}
\end{aligned}
$$

其中用到了

$$
\cos x + \cos 2x + \ldots + \cos(nx) = \frac{\sin(\frac{nx}{2})\cos\frac{(n+1)x}{2}}{\sin(\frac{x}{2})}
$$

程序算法

程序中随机行走函数，用 y = rand()/RAND_MAX 生成 $[0, 1]$ 均匀随机变量，

若 $y < \frac{1}{2}(1 + \alpha\sin wt)$ 则向右走一步，若 $y > \frac{1}{2}(1 + \alpha\sin wt)$ 则向左走一步.

程序说明

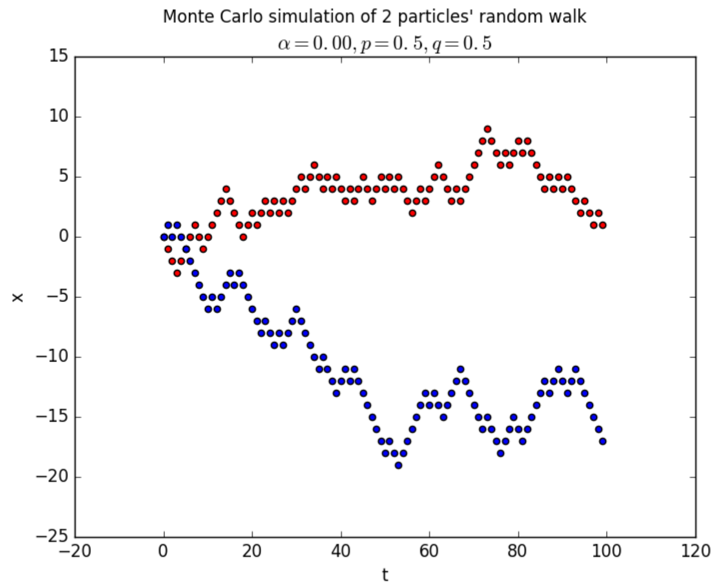
- randomwalk.c　蒙特卡罗方面模拟一维随机行走程序，并输出绘图所需的数据点
- a.out　可执行程序

计算结果与分析

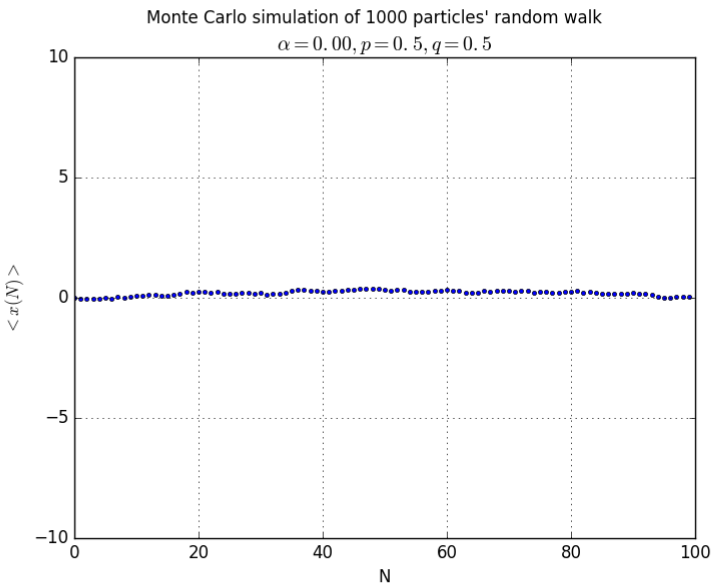
1. $\alpha = 0$ 等几率

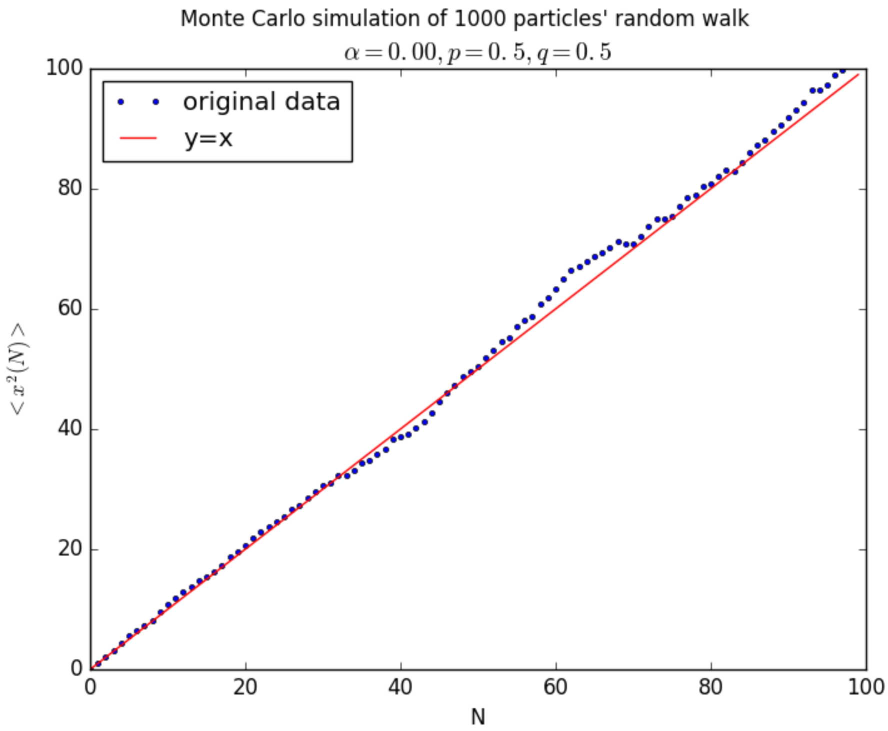
$\alpha = 0$ 即向左向右等几率的情况，有 $p = 0.5,\ q = 0.5,\ <x(N)>= 0,\ <x^2(N)>= N$

以下是两个粒子的一维随机行走模拟，显示了行走距离与步数（即时间）的关系：



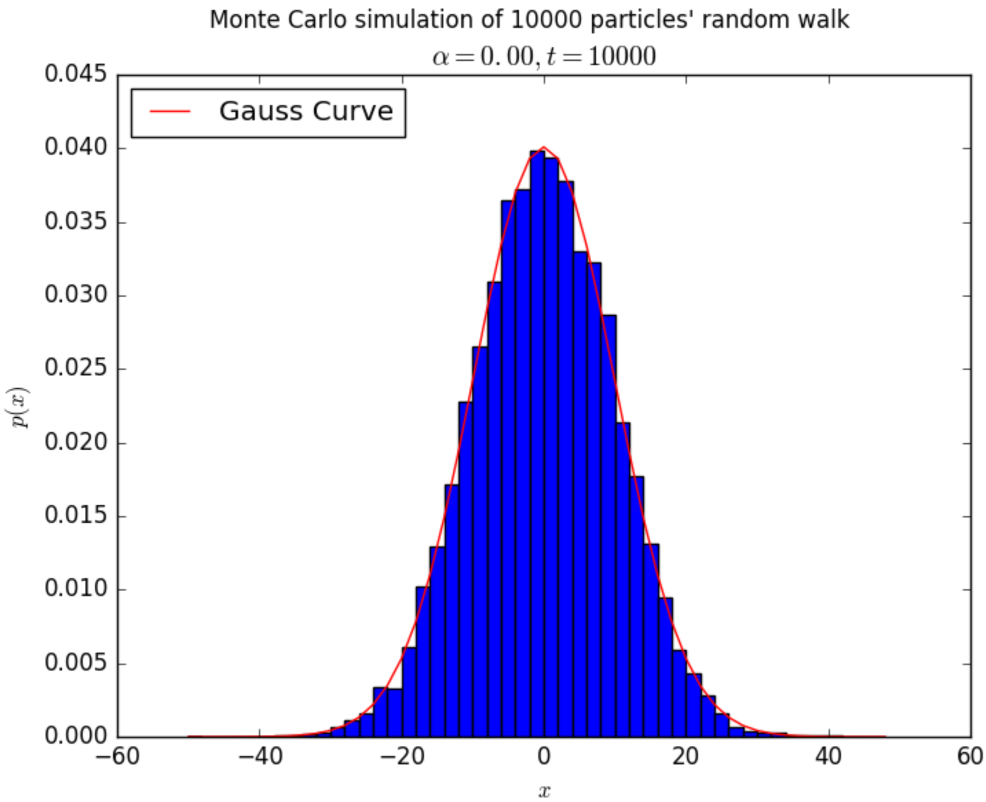
下图显示了，1000个粒子随机行走离原点距离的平均值基本为0. 离原点距离平方的平均值，与时间（步数）成线性关系：





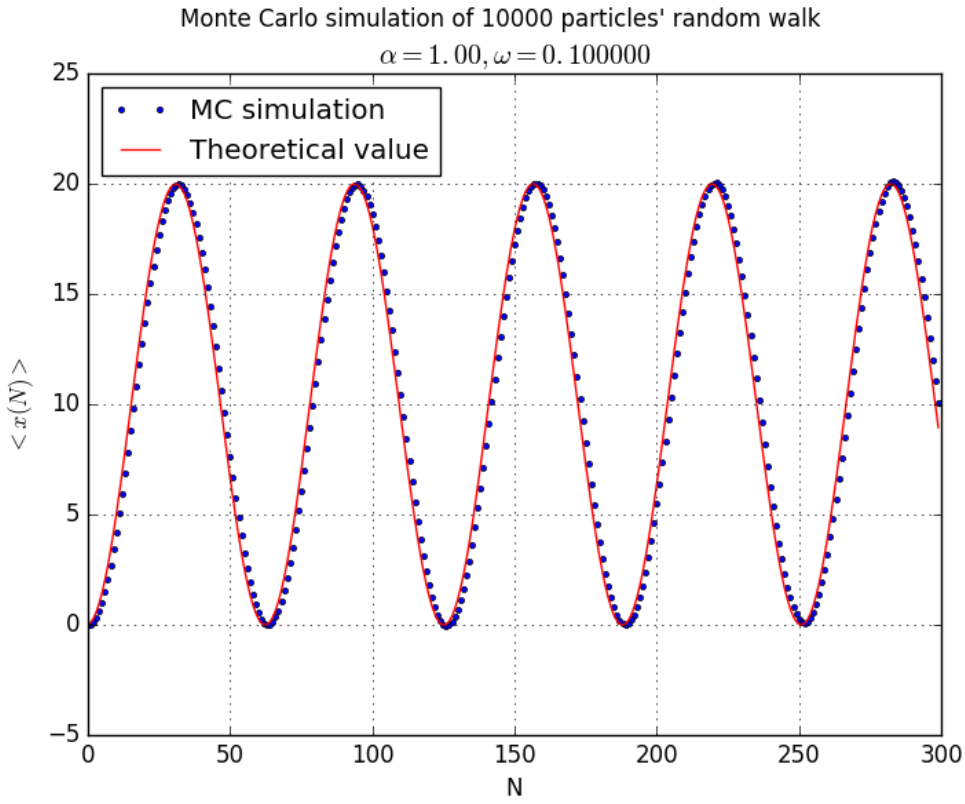
下图显示了，$t=100$ 时，10000个粒子随机行走离原点距离的分布，与高斯曲线十分接近（图中的t写错了）：

$$p(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-(x-<x>)^2/(2\sigma^2)}=\frac{1}{\sqrt{2\pi*100}}e^{-(x-<x>)^2/(2*100)}$$

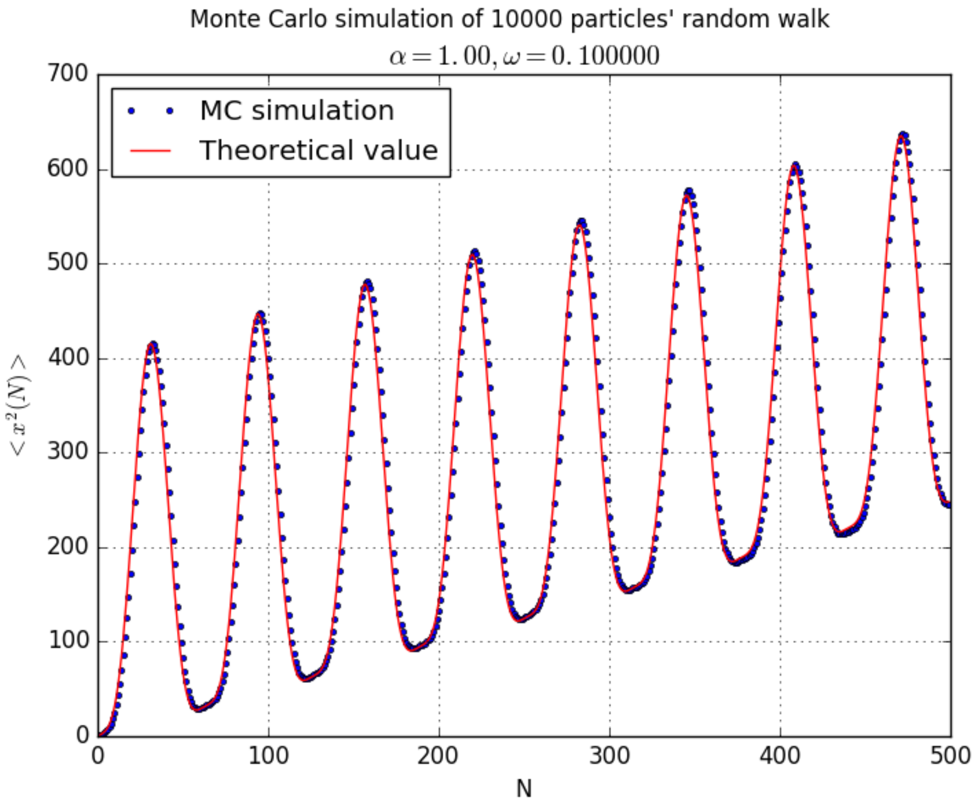


2. $\alpha=1,\ \omega=0.1$

模拟10000个粒子一维随机行走，以下画了$<x(N)>$随步数N（时间）的变化，可见模拟结果和理论分析的非常接近：

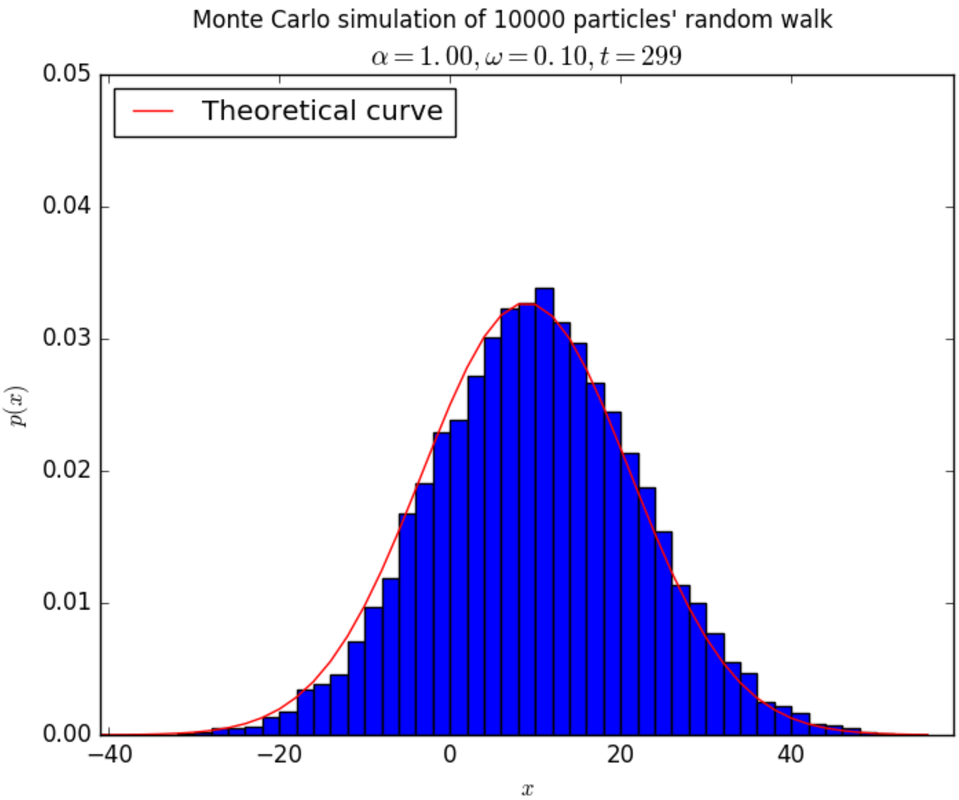


下图显示$<x^2(N)>$随步数的变化，计算结果和理论推导也符合的很好（之前不符合，是因为把理论值公式代错了，代成了方差的公式）



$t=299$ 时，$<x(N)>=8.94445$，$<x^2(N)>=228.73184$，$\sigma^2=148.729$，代入如下公式，即为理论分布情况

$$p(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-(x-<x>)^2/(2\sigma^2)}$$



总结

本次作业，研究了粒子正弦外力场$F\propto\sin wt$中的一维随机行走.

1. t 时刻粒子，向右行走一步的概率为

$$p=\frac{1}{2}(1+\alpha\sin wt)$$

可见粒子行走的行为，与正弦力场的频率 w 、影响因子 α 有关.

2. 当 $\alpha=0$ 时，粒子做左右等概率的随机行走，满足 $<x(N)>=0$，$<x^2(N)>=N$.
3. α 越大，粒子受正弦力场的影响越大，$<x(N)>$ 随 N 增加成正弦变化，而 $<x^2(N)>$ 随 N 增加，边振荡边增加
4. α越大，$<x^2(N)>$振荡振幅越大
5. 振荡的平衡位置是以 $N(1-\frac{\alpha^2}{2})$ 增加的，故α越大，增加越慢
6. w 越大，振荡越快