计算物理 作业报告14

PB14203209　张静宁　　2017.11.28

第十四题

[作业14-1] 数值研究 $d\ (d=1,2,3)$ 维空间中随机行走返回原点的几率 P_d，讨论它随步数 N 的变化关系 $P_d(N)$，能否定义相关的指数值？

理论和算法

简单对称随机行走

粒子在 d 维无限大空间中的正方形格点上随机行走，正方形边长为单位长度. 两个距离为单位长度的格点称为相邻格点，粒子跳到相邻每个格点的概率相同.

一维

先讨论一维随机行走返回原点的概率。

若行走了 N 步以后，粒子向$x+$走了n_+步，向$x-$走了$n_-=n-n_+$步，且向两个方向行走的概率分别为 $p=1/2,\ q=1/2$，则此刻粒子的位置$x=n_+-n_-$，粒子概率分布为

$$P(x,N)=\frac{N!}{n_+!(N-n+)!}p^{n_+}q^{N-n_+}，\quad n+=\frac{N+x}{2}$$

由上式可知，$N+x$为偶数，故返回原点时 $x=0$, n 为偶数.

一维随机行走返回原点的概率与步数n关系

$$P(0,n)=\frac{n!}{(n/2)!(n/2)!}(\frac{1}{2})^n \qquad (1)$$

二维

类似的，可以得到二维随机行走时返回原点的概率

$$P(0,n)=\sum_{i=0}^{n/2}\frac{n!}{[(i)!(n/2-i)!]^2}(\frac{1}{4})^n \qquad (2)$$

三维

类似的，得到三维随机行走返回原点的概率

$$P(0,n)=\sum_{i=0}^{n/2}\sum_{j=0}^{n/2-i}\frac{n!}{[(i)!(j)!(n/2-i-j)!]^2}(\frac{1}{6})^n \qquad (3)$$

定义相关指数值

当 n 很大时，以上公式（1）、（2）、（3）由于涉及到阶乘和求和，使得计算理论概率值变得很困难. 理论公式不具有实际操作意义. 因此我们需要根据计算结果，拟合出 n 很大时返回原点概率满足的近似公式，从而预测 n 很大时的结果.

设 n 很大时，概率与 n 满足指数关系

$$P_d(N) = aN^b$$

两边取对数得到

$$\log P_d = b \log N + \log a$$

对 $\log N$，$\log P_d$ 做线性拟合，斜率即为指数 b.

随机行走算法实现

设走了 k 步以后粒子的坐标为 $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$，用C语言自带的 rand() 函数（种子为默认值）生成随机数 m，来决定粒子此刻行走行为.

一维空间坐标为 x，行走规则如下

$$m \; mod \; 2 = \begin{cases} 0, & \Delta x = -1, \\ 1, & \Delta x = +1, \end{cases}$$

二维空间坐标为 $(x,\ y)$，行走规则如下

$$m \; mod \; 4 = \begin{cases} 0, & \Delta x = -1, \\ 1, & \Delta x = +1, \\ 2, & \Delta y = -1, \\ 3, & \Delta y = +1, \end{cases}$$

三维空间坐标为 $(x,\ y,\ z)$，行走规则如下

$$m \; mod \; 6 = \begin{cases} 0, & \Delta x = -1, \\ 1, & \Delta x = +1, \\ 2, & \Delta y = -1, \\ 3, & \Delta y = +1, \\ 4, & \Delta z = -1, \\ 5, & \Delta z = +1, \end{cases}$$

用Monte Carlo方法模拟计算M个粒子，在随机行走N步以后，若有K个粒子返回了原点，则返回原点的几率P_d

$$P_d(N) = \frac{K}{M}$$

因为每个粒子位置x是独立同分布的随机变量

可以预测，粒子数M越大，涨落的影响越小，几率越接近理论值.

程序说明

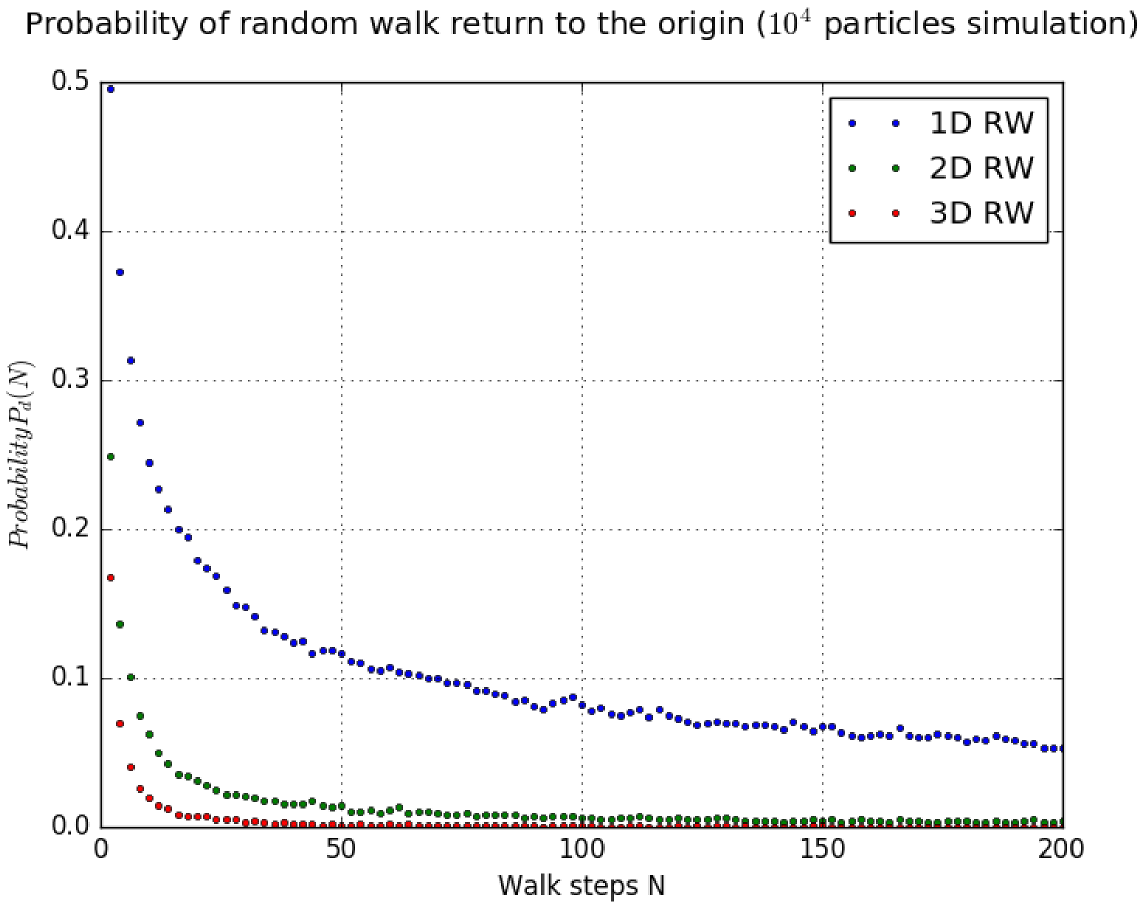
- random1D.c 实现一维简单对称随机行走，并输出步数和返回原点的点数、几率
- random2D.c 实现二维随机行走，同上
- random3D.c 实现三维随机行走，同上

计算结果与分析

1. 模拟计算概率数值

模拟10^4个粒子随机行走返回原点的概率，节选前10步的结果如下（更多步的结果看数据文件）

行走步数 N	一维 $P_1(N)$	二维 $P_2(N)$	三维 $P_3(N)$
1	0.000	0.000	0.000
2	0.496	0.249	0.168
3	0.000	0.000	0.000
4	0.373	0.137	0.069
5	0.000	0.000	0.000
6	0.313	0.101	0.041
7	0.000	0.000	0.000
8	0.272	0.075	0.026
9	0.000	0.0000	0.000
10	0.245	0.062	0.020



结论：

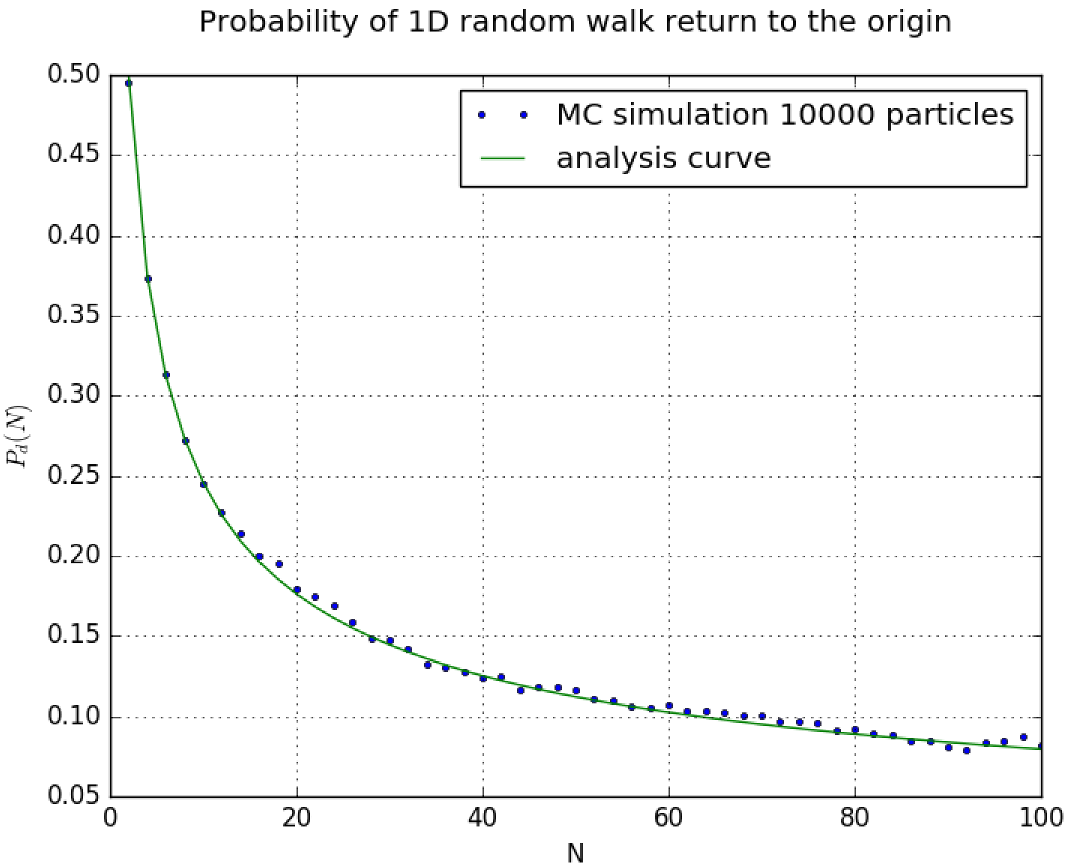
（1）验证了N为奇数时，1维、2维、3维返回原点概率都为0.

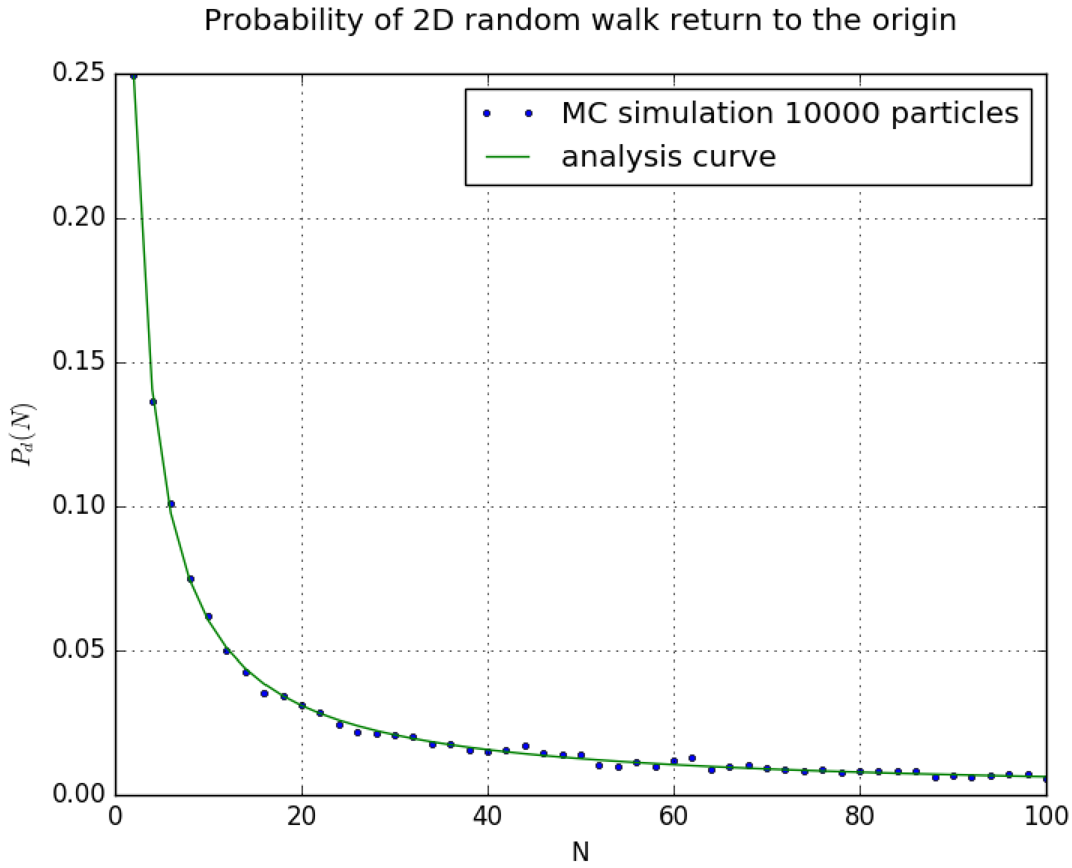
（2）随着N增大，1维、2维、3维返回原点概率P_d都减小

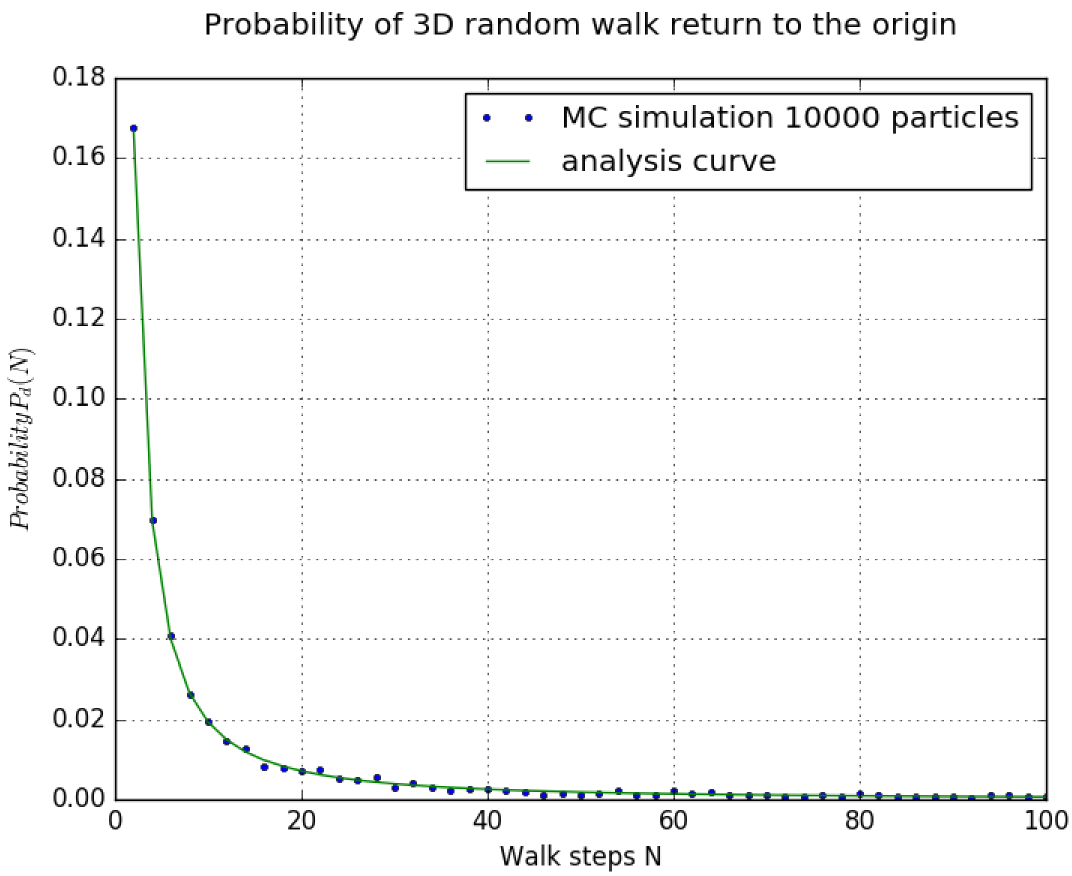
（3）相同步数N的情况下，维数d越大，返回原点的概率越小，趋于0速度越快.

2. 计算和理论曲线比较

画出100步以内的随机行走，返回原点的概率与步数的关系的计算结果和理论曲线。理论曲线套用的是算法部分的公式（1）（2）（3）





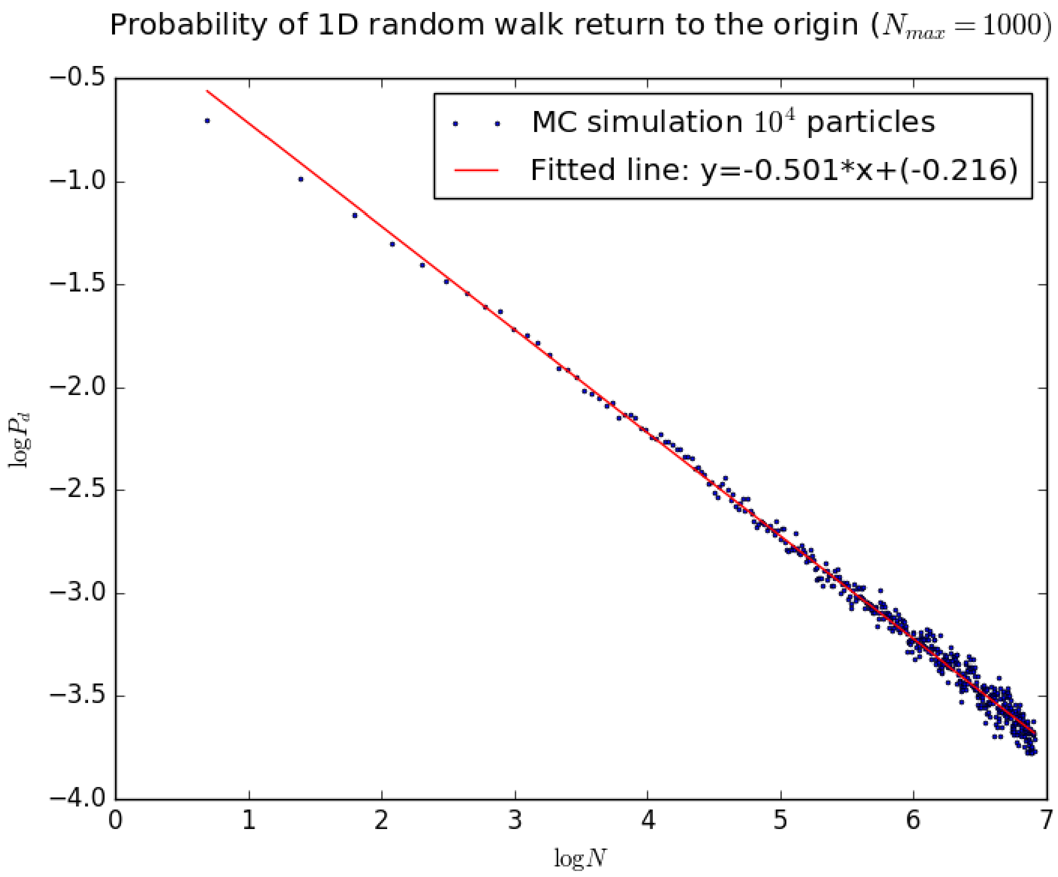


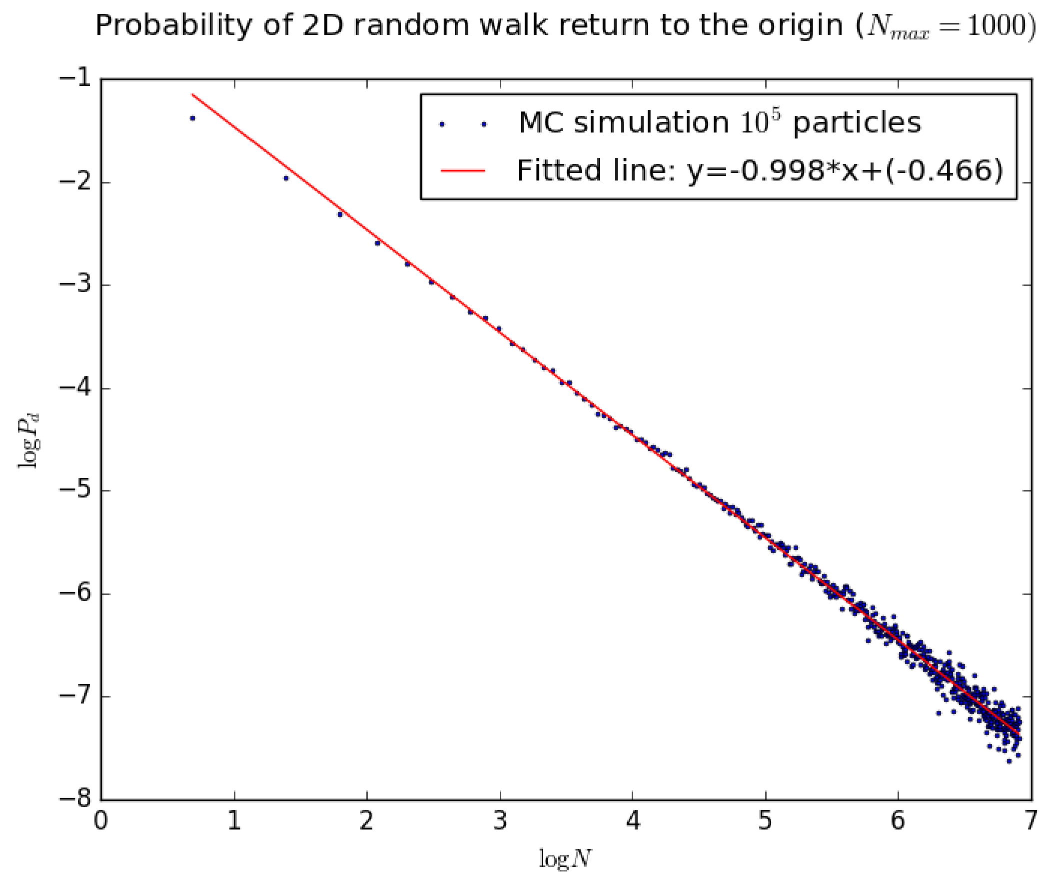
结论：步数 n 不太大时，此时仍可以套用公式（1）（2）（3），模拟计算的结果和公式计算的结果吻合得很好.

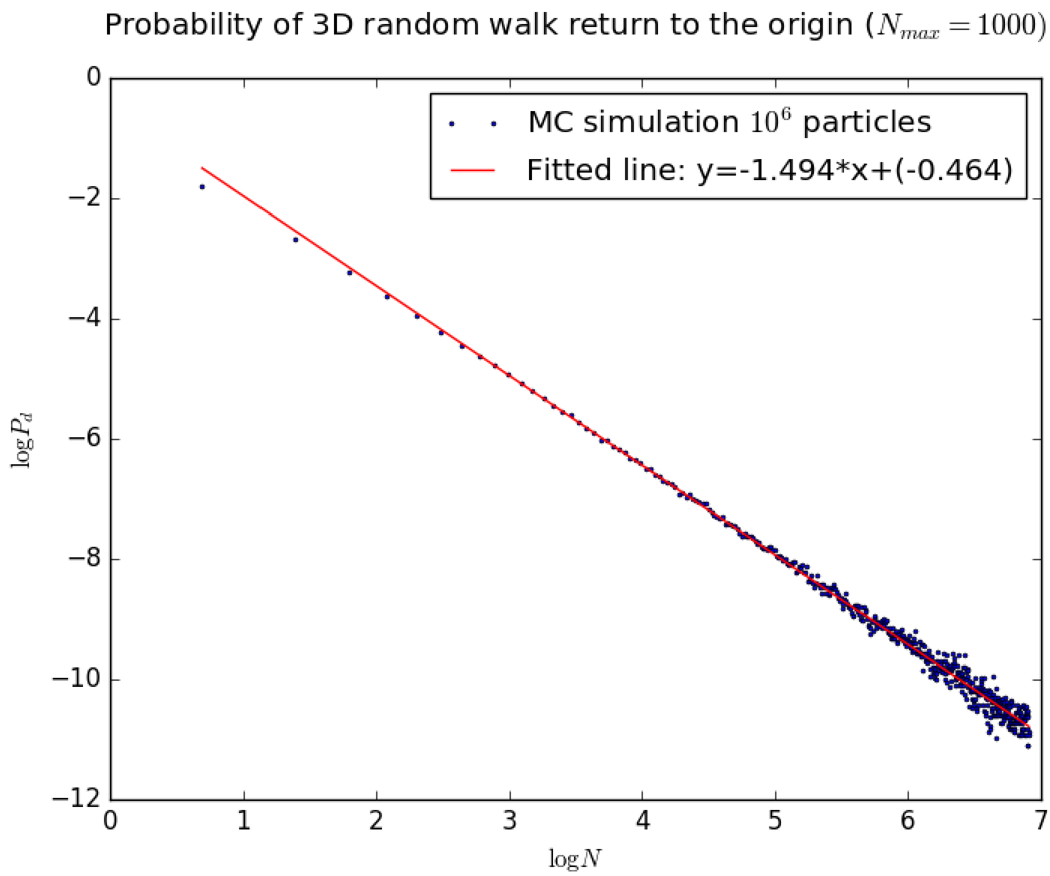
3.拟合近似公式

计算 $N_{max} = 1000$ 步1维、3维、3维随机行走返回原点的概率，由于维数越高返回原点的概率越低，故1维时模拟计算了10^4个粒子，2维时模拟计算了10^5个粒子，1维时模拟计算了10^6个粒子. 以此来避免某时刻没有任何一个粒子返回原点，频率$P_d = 0$，导致 $\log P_d$ 出错.

拟合结果如下




Probability of 2D random walk return to the origin ($N_{max}=1000$)
MC simulation 10^5 particles
Fitted line: y=-0.998*x+(-0.466)
$\log P_d$
$\log N$


Probability of 3D random walk return to the origin ($N_{max}=1000$)
MC simulation 10^6 particles
Fitted line: y=-1.494*x+(-0.464)
$\log P_d$
$\log N$

结果用表格表示

维数	指数 b	系数 a	近似公式 $P_d(N)$	猜测 $(N \to \infty)$
d = 1	-0.501	-0.216	$-0.216N^{-0.501}$	$P_1(N) \propto \frac{1}{\sqrt{N}}$
d = 2	-0.998	-0.466	$-0.466N^{-0.998}$	$P_2(N) \propto \frac{1}{N}$
d = 3	-1.494	-0.464	$-0.464N^{-1.494}$	$P_3(N) \propto \frac{1}{N^{3/2}}$

结论：由以上图表可知，拟合曲线和计算结果十分吻合，说明假设的近似关系式形式恰当. 根据得到的指数结果，猜测$N \to \infty$ 返回原点的概率P与维数d、步数N的关系为

$$P_d(N) \propto \frac{1}{N^{d/2}}$$

总结

考虑 d $(d = 1, 2, 3)$ 维空间中简单对称随机行走返回原点的几率$P_d(N)$

（1）N为奇数时，1维、2维、3维返回原点概率都为0.

（2）随着N增大，1维、2维、3维返回原点概率P_d都减小

（3）相同步数N的情况下，维数d越大，返回原点的概率越小，趋于0速度越快.

（4）N 不太大时，可以套用公式理论（1）（2）（3）来计算返回原点的概率

（5）N很大时，返回原点的概率P与维数d、步数N的近似公式为 $P_d(N) \propto \frac{1}{N^{d/2}}$，即可以定义相关指数