姓名	学号	班级	选题	论述	总结	总分
刘庆康	2015301020026	物基一班				

标题：Cream in Coffee:从随机行走到分数维度
Cream in Coffee: From Random Walks to Fractal Dimensionalities

刘庆康　　2015301020026　　武汉大学物理科学与技术学院

摘要：

本文首先研究随机游走问题。作为随机系统的基础，其无需使用物理法则计算，仅通过统计和随机原理，就能对系统给出相当好的描述。本报告使用 Python 模拟了一至三维的随机步长游走，对其均方位移做了线性拟合，并分析了其扩散系数 D。此后，依据牛奶在咖啡中的扩散过程，进一步研究随机游走与扩散的关系，并计算了该过程中熵的变化。最后对 Eden 和 DLA 两种聚类模型进行了简要介绍，模拟并展示了 DLA 聚类的生成过程，在对 DLA 聚类的进一步分析中，引出分数维度的概念并做了一些探索。

This paper first studies the random walk problem. As a basis for a stochastic system, it does not need to be accurately calculated using the laws of physics and can give a fairly good description of the system only through statistics and randomization. We used Python to simulate one-to-three-dimensional random walk, fitted their mean square displacements linearly, and analyzed their diffusion coefficients. Thereafter, based on the diffusion process of milk in coffee, the relationship between random walk and diffusion was further studied, and the change of entropy in the process was calculated. Finally, two kinds of clustering models of Eden and DLA are briefly introduced. The generation process of DLA clustering is simulated and demonstrated. In the further analysis of DLA clustering, the concept of fractional dimension is elicited and explored.

目录

序言

确定性系统通过诸如微分方程与边界条件之类的数学法则描述,这意味着系统随时间演化的状态是存在且唯一的。对于大多数问题，从卫星轨道的规划到电场电势的计算，这种形式的描述取得了极大成功。但对于诸多粒子构成的微观集合,确定性的描述有时会没有意义。试想一杯咖啡中有数百亿个粒子,虽然尽可以用简单的力学原理和强有力的计算设备给出任何一个粒子在任何时刻的位置和动量，但却无法回答“这杯咖啡多久会凉掉”这种问题。因此，对微观系统的研究需要使用新的手段，由此我们引入随机系统。接下来我们将讨论随机系统中的一些基本情形，并试着使用统计物理的手段阐释这些现象背后的规律。

正文

1 Random Walks

1.1 The Simulation of Random Walks

随机游走是最简单也最典型的随机过程。它的一个基本例子是某质点从原点开始，每次都以相同的概率向 x 轴正方向或负方向移动一个单位。在更高维的空间中，质点不仅仅在 x 轴上移动，也在 y 轴和 z 轴上随机移动。在许多现象和行为中存在类似随机行走模型的系统，比如液体中分子的移动、觅食动物的搜索路径和股票价格的波动。在这里模拟了从一维到三维的随机游走系统。接下来做一些展示。

首先模拟一维固定步长的随机游走。系统内含有 200 个粒子，时间步长为 100 步。

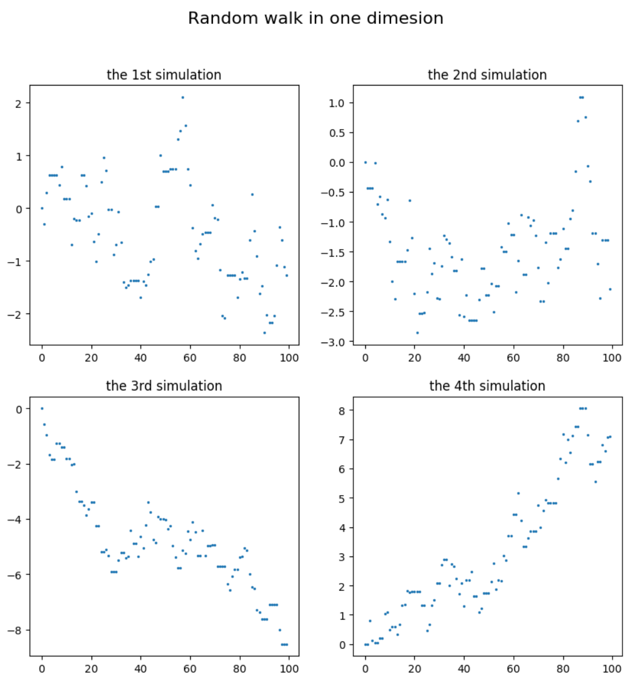


图 1.1

可以看到，几次模拟之间似乎没有任何相同之处。但如果考虑全部粒子在每一步长中位移平方的平均$< x^2 >$, 就能发现其中蕴含的规律。

在下图中，对$< x^2 >$和步长的关系绘制散点图，并进行拟合，可以看出它与正比例函数符合的很好。对于二维和三维情形，我也会进行这项工作，并在最后以数学推导的形式做出总结。

左图中蓝色实线为拟合线，散点为实际情形。拟合线公式为：$y = 0.1812x + 0.8608$

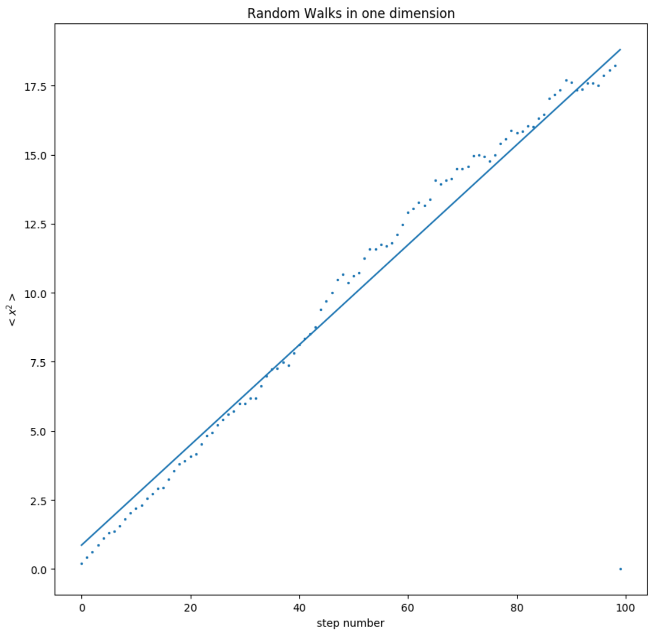


图 1.2

接下来模拟并展示二维和三维的随机游走：

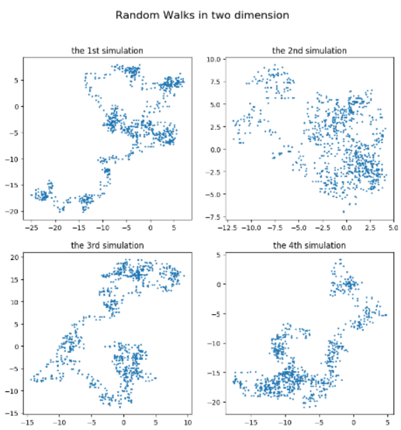


图 1.3

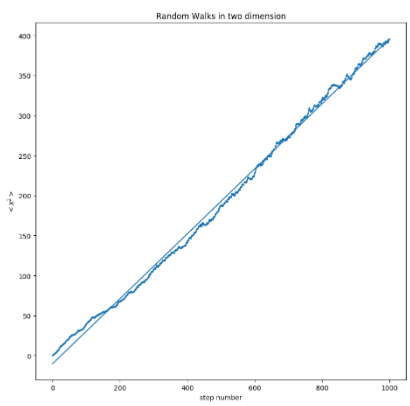


图 1.4

图 1.4 的线性拟合公式为 $y = 0.3730x + 4.287$。

1.2 关于随机游走的分析

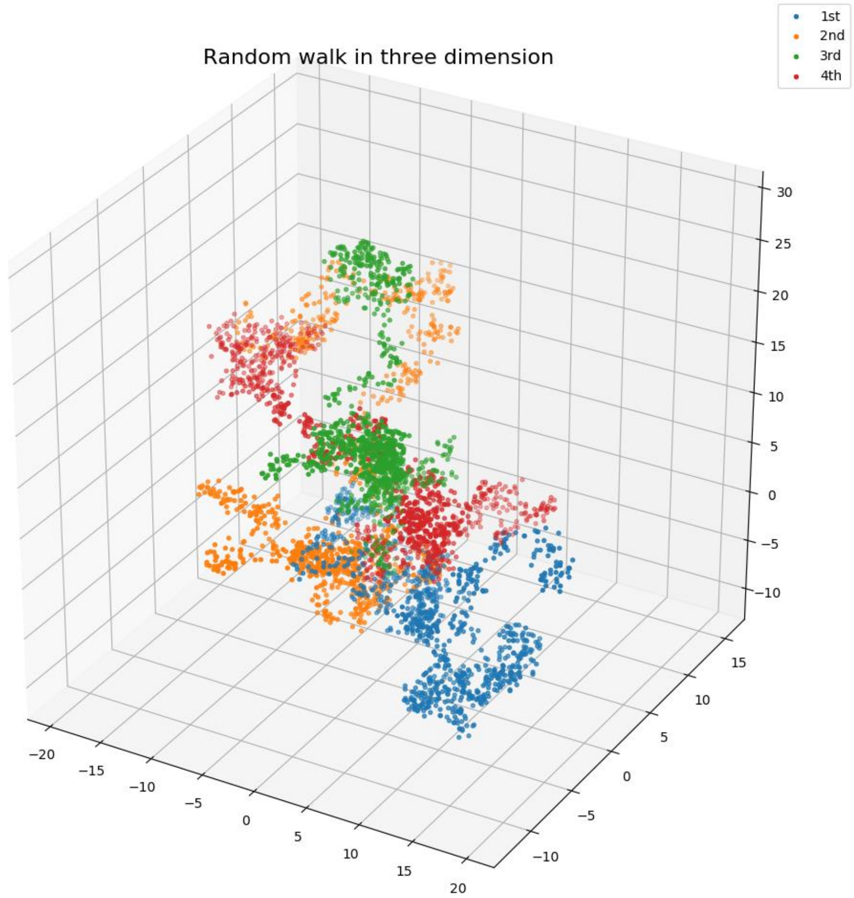


图 1.5

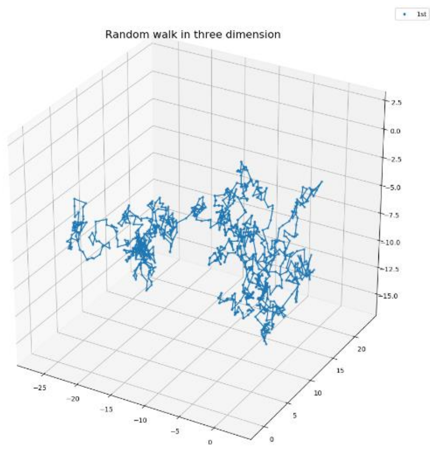


图 1.6

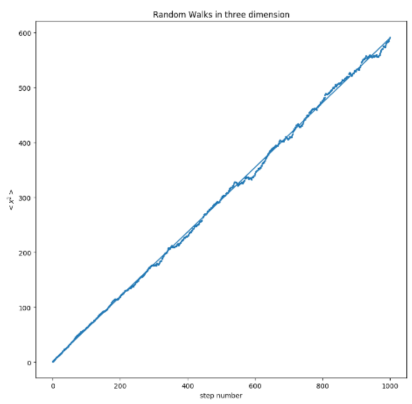


图 1.7

同样地，图 1.7 的线性拟合公式为$y = 0.5887x + 1.549$。

从上文的分析中可以得到初步结论，对任意维度的随机游走，其位移平方的平均$< x^2 >$与模拟步长（时间）成正相关，且其比例系数随维数的增长而增长。

以一维情形为例子，从数学角度出发，推导出$< x^2 >$与步长t的解析关系式：

首先，对于任一粒子，在经过n个步长后，其位移量

$$x_n = \sum_{i=1}^{n} s_i \tag{1.1}$$

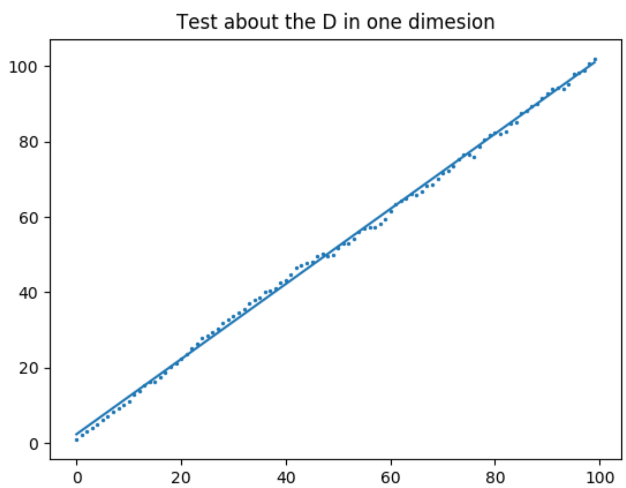
由于这是一个随机过程，我们可以把每步看作全同的，由此得到：

$$x_n^2 = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} s_i s_j \tag{1.2}$$

对于任意$i \neq j$，可知$s_i s_j = \pm 1$且其概率相等，故这部分相互抵消，有：

$$< x_n^2 \geq \sum_{i=1}^{n} s_i^2 = n \tag{1.3}$$

对于固定长度随机行走，$s_i^2 = 1$, 故比例系数$D \approx 1$，进行验证：



拟合显示其斜率为 0.9968，符合预期。

图 1.8

对于其他维度情形，不难推测有：

$$< r_n^2 > \mathrm{m} \sum_{i=1}^{n} s_i^2 = mn \tag{1.4}$$

其中m为维数。对照上文中一至三维的斜率情形，与推测相当吻合。

2 Diffusion and Entropy

2.1 Cream in coffee

让我们回到序章中的咖啡。如果将一滴奶油滴入咖啡中会发生什么？常识曰，奶油会慢慢“化开”，经过一段时间后，你可以在每一滴咖啡中找到奶油。接下来我将使用计算机模拟展示这一过程，并据此揭示扩散与随机游走的关系.

为了简化计算过程，将咖啡杯化简为一个 200×200 的平面，而奶油滴是一个 20×20 的方块，放置在咖啡杯的中间。下面展示经过不同时间步长后奶油的扩散情况：

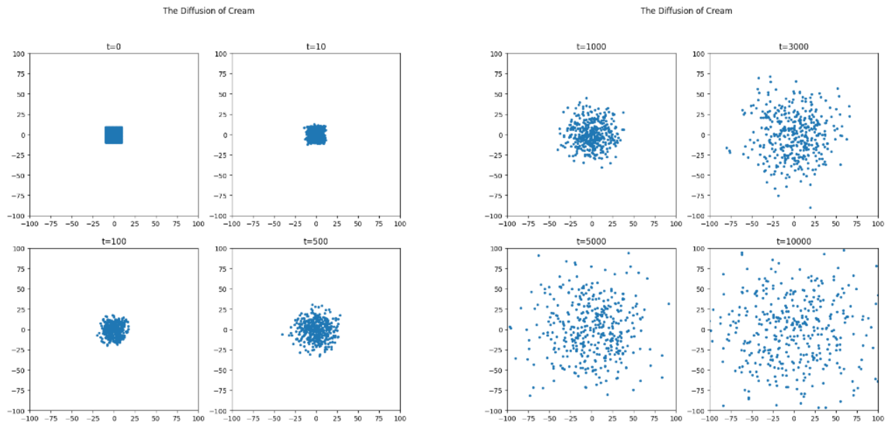


图 2.1

注意到当$t = 1000$时，奶油粒子已经扩散到了$x = 50$的位置。而在$t = 5000$左右，奶油粒子才到达$x = 100$的边界。我们可以通过数学推导验证这个结论：

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sigma} exp\left[-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right] \quad 2.1$$

式子中$\sigma = \sqrt{2Dt}$。这意味着粒子到达的最远位置$x_{max} \propto t^{1/2}$。同样由上文得到：

$$< x_n^2 > \sum_{i=1}^{n} s_i^2 = n \quad 2.2$$

变形即可得$|x_n| \propto n^{1/2}$, n 代表时间步长，和上面的结论等价。

2.2 扩散过程中熵的计算

统计物理学中对于熵的计算有如下法则：

$$S = -\sum_i P_i ln P_i \quad 2.3$$

这里的P_i指的是在系统所有可能的态中找到某一特定状态的可能性。而在咖啡杯问题中，我采用这样的方法：

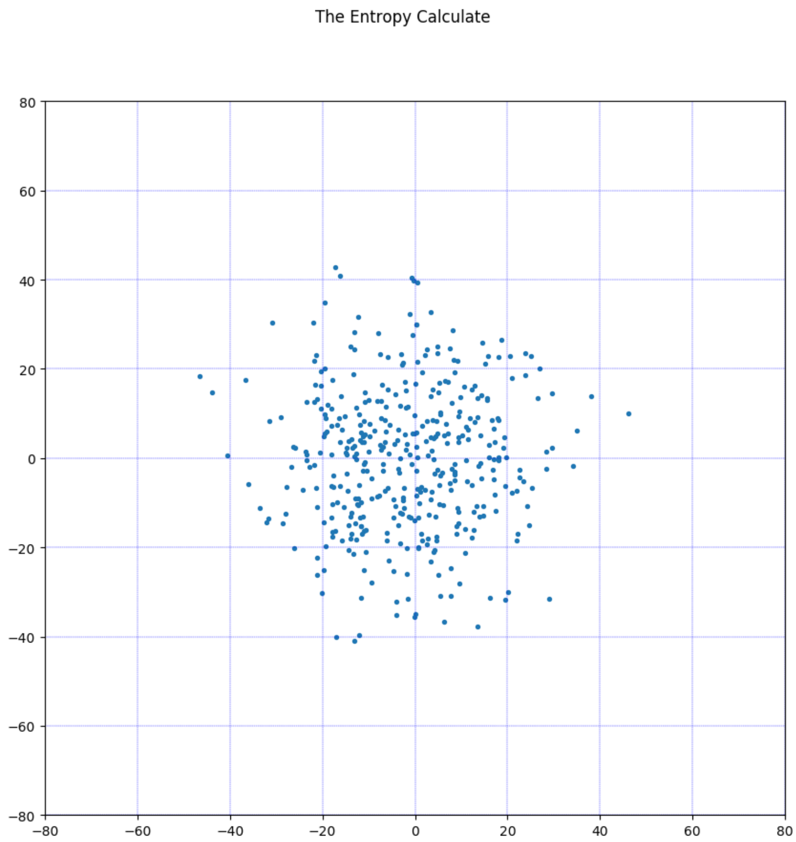


图 2.2

如上图所示，将咖啡杯均匀地划分成 8×8 的网格，可以看到不同的网格中落入了不同数目的奶油粒子。在这种情形下，P_i代表在某一特定方格中找到奶油粒子的可能性。通过这种方式，就可以计算系统中熵随时间的变化情况。

下图展示了熵随时间的变化，计算步长 10000 步。

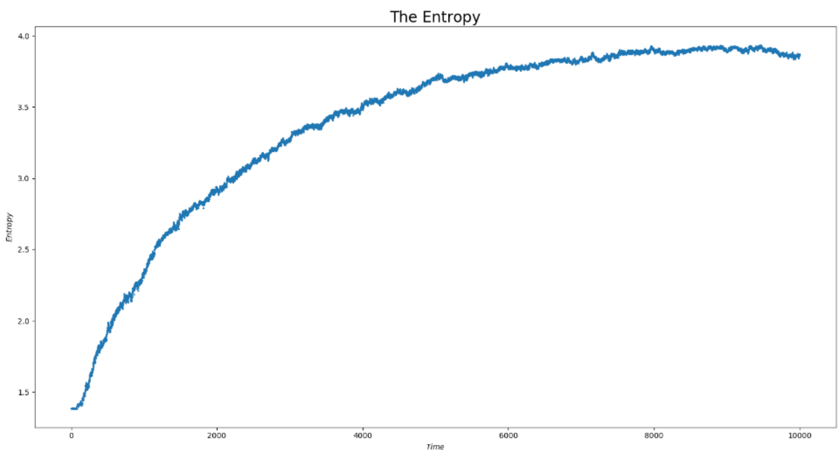


图 2.3

3 Cluster Growth Models

3.1 两种 Growth Models 简介

Cluster 是另一种有趣的随机过程,自然界中的许多过程都与 Cluster 的生长非常相似。比如雪花结晶，植物生长以及传染病扩散。首先对两种 Cluster 的生长模型做简要介绍，它们分别是 Eden Model 和 DLA Model。

Eden Model 的生长方式是这样的：选定一个二维平面，并规定平面上的点(x,y)坐标值只能取整数。首先我们在原点放置一个粒子来初始化这个 Cluster，这个 Cluster 通过在初始粒子周围增加其他粒子来增长。在初始情形下，Cluster 的可生长点为$(\pm1,0)$和$(0,\pm1)$,且下一个点放置在这四个位置的可能性是相同的。不断重复这个过程，就得到了 Eden Cluster。

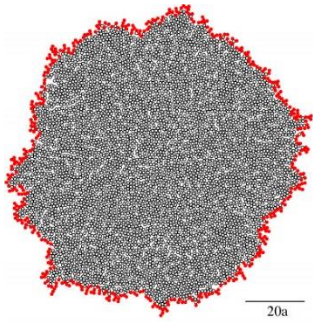


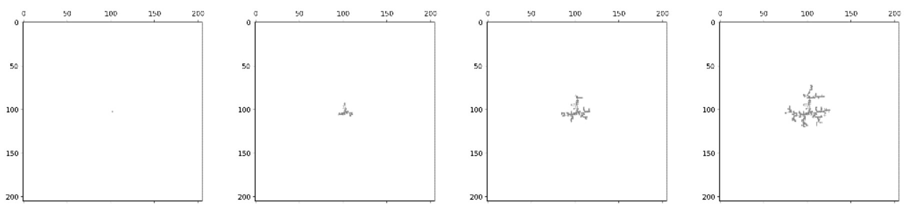
图 3.1

图 3.2

不同于 Eden，DLA Model 的生长方式更加奇特。其基本思想是：首先置一初始粒子作为种子，在远离种子的任意位置随机产生一个粒子使其做无规行走，直至与种子接触，成为集团的一部分；然后再随机产生一个粒子，重复上述过程，这样就可以得到足够大的 DLA Cluster。很明显，相当多的自然现象都以这种模式存在。一个鲜明的例子是金属结晶的过程。

3.2 DLA Cluster Model 的生成模拟

在下面的部分，用 python 生成 DLA Cluster,并通过一系列图片展示它的生成过程。



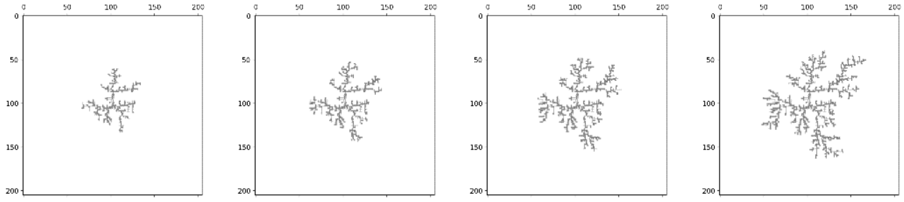


图 3.3

通过直观的观察，发现 Eden Model 表面较为平缓，且内部空洞较少。而 DLA Model 有大量的分支结构，且有很多开放空间。

3.3 DLA Cluster 与分数维度

对于一个平面，有：

$$m(r) = \sigma\pi r^2 \tag{3.1}$$

对于一个圆周，有：

$$m(r) = 2\lambda r \tag{3.2}$$

对此，可以总结出如下规律：

$$m(r) \sim r^{d_f} \tag{3.3}$$

把d_f称为物体的维度。

为了便于计算，对该等式稍做处理，两边取对数得到：

$$\log m \sim d_f \log r \tag{3.4}$$

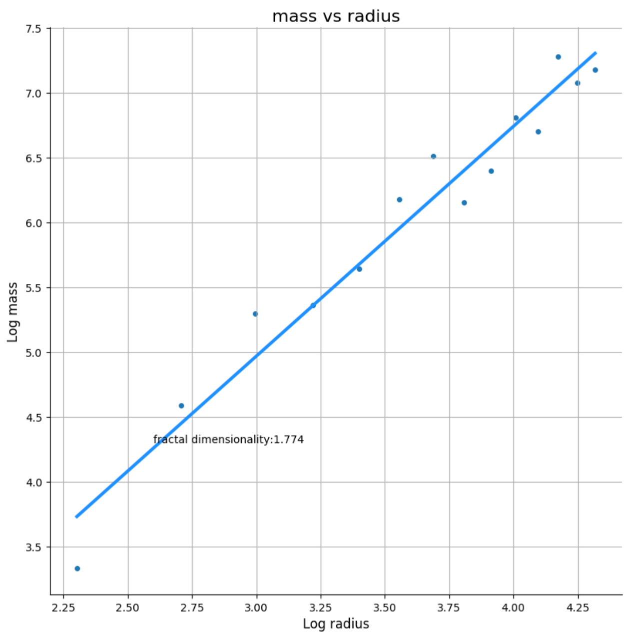


图 3.4

将点的数量作为 m，由上述公式，计算 DLA Cluster 的对应值并做拟合，结果如上图。

由此得出结论，DLA Cluster 的维度约为 1.77，也就是说，DLA Cluster 是一类介于一维与二维之间的对象。

结论

随机系统基于统计学和概率论，与确定性系统有诸多不同之处。对随机系统的分析既要运用传统的物理工具，又要考虑分析结果有无具体的物理意义。必要时忽略细节可以更好地从整体上把握系统的特性。随机系统表面上是“随机”，但其深层次蕴含着统计规律。我们在处理数据时，一方面应根据数值结果大胆猜测，另一方面要善于利用各种特征量进行拟合对照，寻找随机中的规律。

引用

[1] Nicholas J. Giordano *Computational Physics*
[2] ksenia007 *GitHub ksenia007/dlaCluster*
[3] Wikipedia *Diffusion-limited aggregation*
[4] Wikipedia *Random walk*