

第 10-1 题作业报告

PB18000341 范玥瑶

A. 作业题目

Monte Carlo 方法研究正弦外力场 ($F \sim \sin \omega t$) 中的随机行走。

B. 算法及主要公式

B.1. 偏压扩散模型

牛顿力学体系中、笛卡尔坐标系下，各方向运动相互独立，只与该方向的受力有关。

考虑沿力场方向的运动，采用偏压扩散模型，向力场正方向行走的概率 $p_+ \sim 1 + E$ ，力场负方向行走的概率 $p_- \sim 1 - E$ ， E 正比于场强正比于力，即 E 正比于 $\sin \omega t$ 。以下比例系数用 e 表示（程序中用 E 表示）。由于 $p_+ + p_- = 1$, $p_+ = \frac{1+e\sin \omega t}{2}$, $p_- = \frac{1-e\sin \omega t}{2}$ 。移动距离和时间的步长分别设为 l 和 τ , 取为 1。

$$x = Nl(p_+ - p_-) = N(p_+ - p_-), t = N\tau = N$$

考虑 y 方向、 z 方向时由于 y, z 方向不受外力则为向两个方向行走等概率的随机行走。当然也可以考虑径向为 1（步长不变）、角向分别分布的情形。最准确考虑步长不变的情况是 $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ 的情形，但是 x 和 yz 之间的步长分配依赖于物理模型，所以此处分开计算。

一维情况下蒙特卡洛模拟的算法描述如下：

输入种子值， ω ，行走步数， e 的值。

使用 Schrage 方法生成随机数，对于第 N 个随机数 x_N ，当 $0 < x_N < (1 - e\sin \omega N)/2$ 时距离 x 自减，反之自增，输出此时的 x 到 data1D.txt 中。

二维情况下的算法是用相邻两随机数组成数对 (x_N, y_N) ，当 $0 < x_N < (1 - e\sin \omega N)/2$ 时距离 x 自减，反之自增；当 $0 < y_N < 1/2$ 时距离 y 自减反之自增。试验中该方法存在随机性不足的问题，此后优化为取不同的 $\text{seed}_x, \text{seed}_y$ 进行随机行走。原本的程序保留在附件中。

三维情况下采用三个直角坐标独立 RW 的情况和二维类似，以下讨论 yz 平面位移径向、角向分别均匀随机分布的情形。算法是用相邻两随机数组成数对 (x_N, y_N) ，当 $0 < x_N < (1 - \sin \omega N)/2$ 时距离 x 自减，反之自增； $y = y + \cos(2\pi * y_N)$, $z = z + \sin(2\pi * z_N)$ 。

B.2. Langevin 理论

在一维正弦外场中粒子运动的微分方程：

$$m \frac{dv}{dt} = -\frac{1}{B} v + F_0 \sin \omega t + F_{\text{random}}$$

将 v 分解为 v_1, v_2 , 分别满足

$$\begin{aligned} m \frac{dv_1}{dt} &= -\frac{1}{B} v_1 + F_0 \sin \omega t \\ m \frac{dv_2}{dt} &= -\frac{1}{B} v_2 + F_{\text{random}} \end{aligned}$$

解微分方程得

$$v_1(t) = v_1(0)e^{-\frac{t}{mB}} + \frac{F_0}{m} \frac{\frac{1}{\omega^2 m B} \sin \omega t - \frac{1}{\omega} \cos \omega t + \frac{1}{\omega} e^{-\frac{t}{mB}}}{1 + \frac{1}{\omega^2 m^2 B^2}}$$

不妨取 $v_1(0)=0, x(0)=0$ 。物理上 $\frac{1}{B} = 6\pi\eta a$ ，黏性越大 B 越小。

$$x_1(t) = \int_0^t v_1(t') dt$$

$$= \frac{F_0 \frac{1}{\omega^3 m B} (1 - \cos \omega t) - \frac{1}{\omega^2} \sin \omega t - \frac{1}{m \omega B} (e^{-\frac{t}{mB}} - 1)}{1 + \frac{1}{\omega^2 m^2 B^2}}$$

以下考虑 $v_2(t)$ 。 F_{random} 服从正态分布，设方差为 F_r 。由 Box-Muller 方法可以生成 F_{random} 。离散化分步处理 v_2 。取 $v_2(0)=0$ ，第 N 个周期中

$$x_2(N) = x_2(N-1) + v_2(N-1)\tau$$

$$v_2(N) = v_2(N-1) + \frac{\tau}{m} \left(-\frac{1}{B} v_2(N-1) + F_{random} \right)$$

时间间隔 τ 任选，不妨取为 $1/\tau$ 。在宏定义里，可以修改。

$t=N\tau=N$ 时粒子的位移为： $x(N) = x_1(N) + x_2(N)$ 。

算法：输入 ω, m, B, F_0, F_r 。将 $x_2(0), v_2(0)$ 预置为 0。取不同的种子值用 Schrage 方法生成一对随机数 (x, y) ，用 Box-Muller 方法生成一对独立同分布于 $N(0, 1)$ 的随机数 (xx, yy) ，抽样成功时 F_{random} 的值为 $xx * F_r$ ；反之使 N 自减，进入下一循环（ N 自减可以让随机点数即循环数为 N ；这在 N 具有物理意义，即 N 正比于随机行走时间时是有益的，但是在计算抽样效率的情形这会影响抽样总次数统计）。

第 N 个周期中 $x_2(N)=x_2(N-1)+v_2(N-1)\tau$ ， $v_2(N)=(1-\tau/(m*B))*v_2(N-1)+\tau/m*xx$ ，将 $x =$

$$x_2(N) + x_1(N) = x_2(N) + \frac{F_0 \frac{1}{\omega^3 m B} (1 - \cos \omega N \tau) - \frac{1}{\omega^2} \sin \omega N \tau - \frac{1}{m \omega B} (e^{-\frac{N \tau}{m B}} - 1)}{1 + \frac{1}{\omega^2 m^2 B^2}}$$
 写入文件 data.txt。

Box-Muller 方法生成正态分布随机数的算法是：

对于 $x, y \sim U[0, 1]$ ，取 $X=2*x-1, Y=2*y-1$ ，计算 $r^2 = \sqrt{X^2 + Y^2}$ ，若 $r > 1$ 则舍去， $r < 1$ 则取

$$xx = \frac{X}{r} \sqrt{-2 \ln r^2} = X \sqrt{-\frac{2 \ln (X^2 + Y^2)}{X^2 + Y^2}}$$

$$yy = \frac{Y}{r} \sqrt{-2 \ln r^2} = Y \sqrt{-\frac{2 \ln (X^2 + Y^2)}{X^2 + Y^2}}$$

用第三个算式的形式是避免开根号带来的舍入误差影响精度。

B.3.期望、方差分析

通过简单地改写此前的程序可以完成对 NN 个粒子行走 N 步的位移 x 进行统计，算法如下：

通过 Schrage 方法生成 N 个随机数，进而进行粒子的 N 步随机行走，将随机行走 N 步的结果返回到主函数，将线性同余法生成的整数随机数赋给全局变量 $seedx$ ，作为下一个粒子的 $seed$ 随机行走。

B.3.1. 偏压模型的期望、方差

以下利用偏压扩散模型求经过 N 步行走后 x, x^2 的期望值。

$$\begin{aligned}
E(x) &= E\left(\sum_{n=1}^N x_n\right) = \sum_{n=1}^N E(x_n) = \sum_{n=1}^N esin\omega n = \frac{\sum_{n=1}^N e\left(\cos\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega - \cos\left(n-\frac{1}{2}\right)\omega\right)}{-2\sin\frac{\omega}{2}} \\
&= e \frac{\cos\left(N+\frac{1}{2}\right)\omega - \cos\frac{\omega}{2}}{-2\sin\frac{\omega}{2}} = \frac{esin\frac{N+1}{2}\omega \sin\frac{N\omega}{2}}{\sin\frac{\omega}{2}} \\
E(x^2) &= E\left[\left(\sum_{n=1}^N x_n\right)^2\right] = E\left(\sum_{n=1}^N x_n^2\right) + E\left(\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N x_i x_j\right)
\end{aligned}$$

对 $i \neq j, x_i, x_j$ 相互独立

$$\begin{aligned}
E(x^2) &= \sum_{n=1}^N E(x_n^2) + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N E(x_i)E(x_j) \\
&= \sum_{n=1}^N (1 * p_+ + 1 * p_-) + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N 2esin\omega i * 2esin\omega j \\
&= N + \sum_{i,j=1}^N esin\omega i * esin\omega j - \sum_{k=1}^N e^2 \sin^2 \omega k \\
&= N + \left(\sum_{n=1}^N esin\omega n\right)^2 - e^2 \sum_{k=1}^N \sin^2 \omega k \\
&= N + \left(\frac{esin\frac{N+1}{2}\omega \sin\frac{N\omega}{2}}{\sin\frac{\omega}{2}}\right)^2 - e^2 \sum_{k=1}^N \frac{1 - \cos 2\omega k}{2} \\
&= N + \left(\frac{esin\frac{N+1}{2}\omega \sin\frac{N\omega}{2}}{\sin\frac{\omega}{2}}\right)^2 - \frac{e^2 N}{2} + \sum_{k=1}^N e^2 \frac{\sin(2k+1)\omega - \sin(2k-1)\omega}{2\sin\omega} \\
&= N \left(1 - \frac{e^2}{2}\right) + \frac{e^2 (\sin(2N+1)\omega - \sin\omega)}{2\sin\omega} + E(x)^2
\end{aligned}$$

第 N 步随机行走的位移方差

$$D(x) = E[x - E(x)] = E(x^2) - E(x)^2 = N \left(1 - \frac{e^2}{2}\right) + \frac{e^2 (\sin(2N+1)\omega - \sin\omega)}{2\sin\omega}$$

B.3.2.Langevin 模型期望、方差估计

$$\begin{aligned}
E(x) &= E\left(x_2(N) + \frac{F_0 \frac{1}{\omega^3 m B} (1 - \cos\omega N\tau) - \frac{1}{\omega^2} \sin N\omega\tau - \frac{1}{m\omega B} \left(e^{-\frac{N\tau}{mB}} - 1\right)}{1 + \frac{1}{\omega^2 m^2 B^2}}\right) \\
&= E\left(\sum_{k=0}^{N-1} v_2(k) + \frac{F_0 \frac{1}{\omega^3 m B} (1 - \cos\omega N) - \frac{1}{\omega^2} \sin N\omega - \frac{1}{m\omega B} \left(e^{-\frac{N}{mB}} - 1\right)}{1 + \frac{1}{\omega^2 m^2 B^2}}\right)
\end{aligned}$$

物理上 x_2 是无外场随机行走的距离所以期望 0, 方差 N ; 以下通过数学计算可以得到 Langevin 模型的一些矛盾。

$$\because v_2(k) = v_2(k-1) + \frac{1}{m} \left(-\frac{1}{B} v_2(k-1) + F_{random}(k) \right), v_2(0) = 0$$

$$\therefore v_2(k) = \left(1 - \frac{1}{Bm}\right)^k * \frac{1}{m} \sum_{n=1}^k \left(\frac{F_{random}(n)}{1 - \frac{1}{mB}} \right)^n$$

由于 $\frac{F_{random}}{F_r}$ 服从标准正态分布,

$$E \left(\left(\frac{F_{random}}{F_r} \right)^k \right) = \begin{cases} 0, (k \text{ 为奇数}) \\ \frac{\sqrt{2}^k}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{k+1}{2}\right) (k \text{ 为偶数}) \end{cases}$$

$$E(v_2(k)) = \begin{cases} \left(1 - \frac{1}{Bm}\right)^k * \frac{1}{m} \sum_{n=1}^{k-1} \left(\frac{F_r}{1 - \frac{1}{mB}} \right)^{2n} (2n-1)!!, (k \text{ 为奇数}) \\ \left(1 - \frac{1}{Bm}\right)^k * \frac{1}{m} \sum_{n=1}^k \left(\frac{F_r}{1 - \frac{1}{mB}} \right)^{2n} (2n-1)!! (k \text{ 为偶数}) \end{cases}$$

$$E \left(\sum_{k=0}^{N-1} v_2(k) \right) = E \left(\sum_{k=1}^{N-1} v_2(k) \right) = \sum_{k=1}^{N-1} E(v_2(k))$$

不一定取 0, 比如 $m=B=1$ 时有 $E(v_2(k)) > 0$ 恒成立, $E(x_2(N)) > 0$.

Langevin 模型与等可能随机行走不是完全一致, 说明粒子的布朗运动不是受服从正态分布的涨落力。

由于正态分布下的涨落力项难以计算, 此后的估计按照 $p=q=0.5$ 计算。

$$E(x) = \frac{F_0 \frac{1}{\omega^3 m B} (1 - \cos \omega N) - \frac{1}{\omega^2} \sin N \omega - \frac{1}{m \omega B} \left(e^{-\frac{N}{mB}} - 1 \right)}{1 + \frac{1}{\omega^2 m^2 B^2}}$$

$$D(x) = D(x_1) + D(x_2) + Cov(x_1, x_2) = D(x_2) = N$$

C. 计算结果及具体分析、讨论

C.1. 偏压扩散模型（单粒子随机行走）

取 $N=1E5$, 取 $e=0, 1, 10$, 对应于无外场、弱外场、强外场, $\omega=1, 100$ 即高低频进行计算。取 $seedx=1, seedy=5, N=1E5$, 旧算法 $seed=1$ 进行计算。

C.1.1. 无外场情形 $e=0$

当 $e=0$ 时频率的区别没有意义。取 $seed=1$, 无外场情形粒子的一维随机行走 x 随步数 N 变化如图 1, 二维随机行走用旧的算法得到的结果如图 2, 可以发现缺乏随机性, 新算法取 $seedx=1, seedy=5$, 得到的轨迹图如图 3, 三维随机行走的结果如图 4, 随机性还可以。

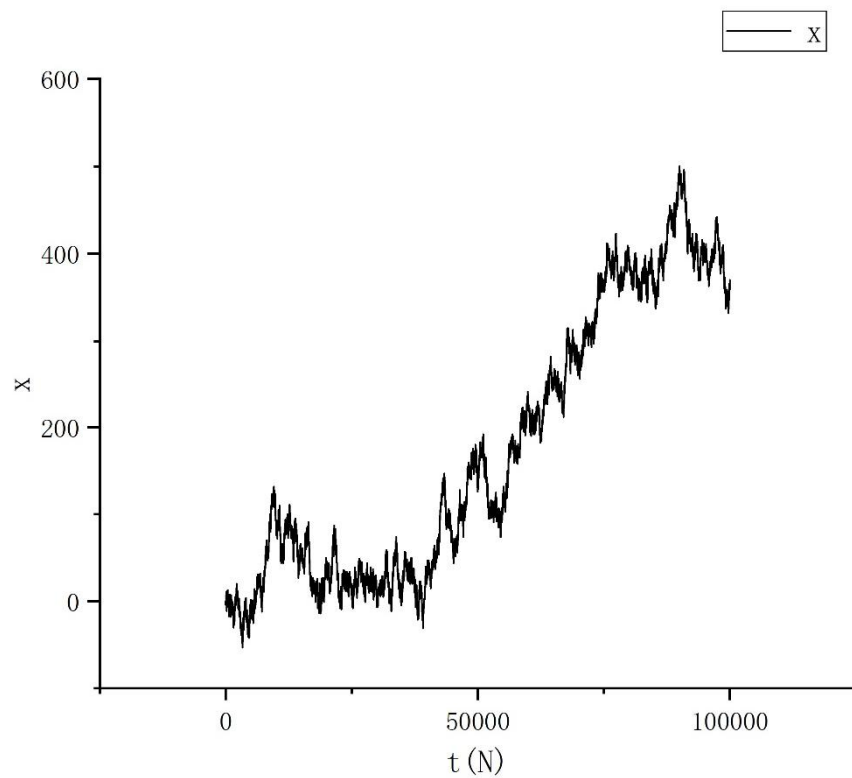


图1 (a) 无外场一维随机行走

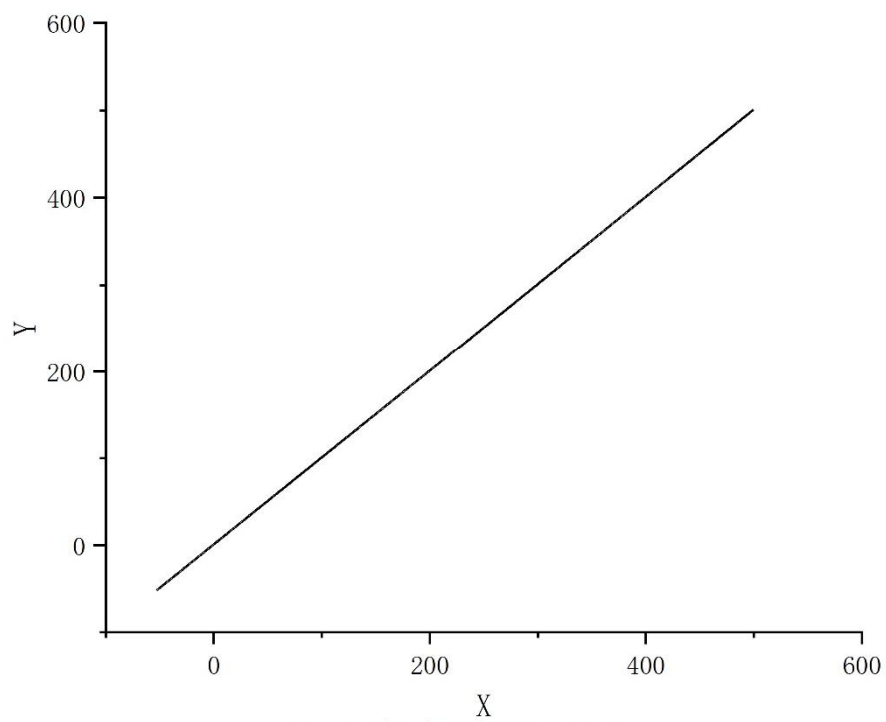


图2 旧算法随机行走轨迹

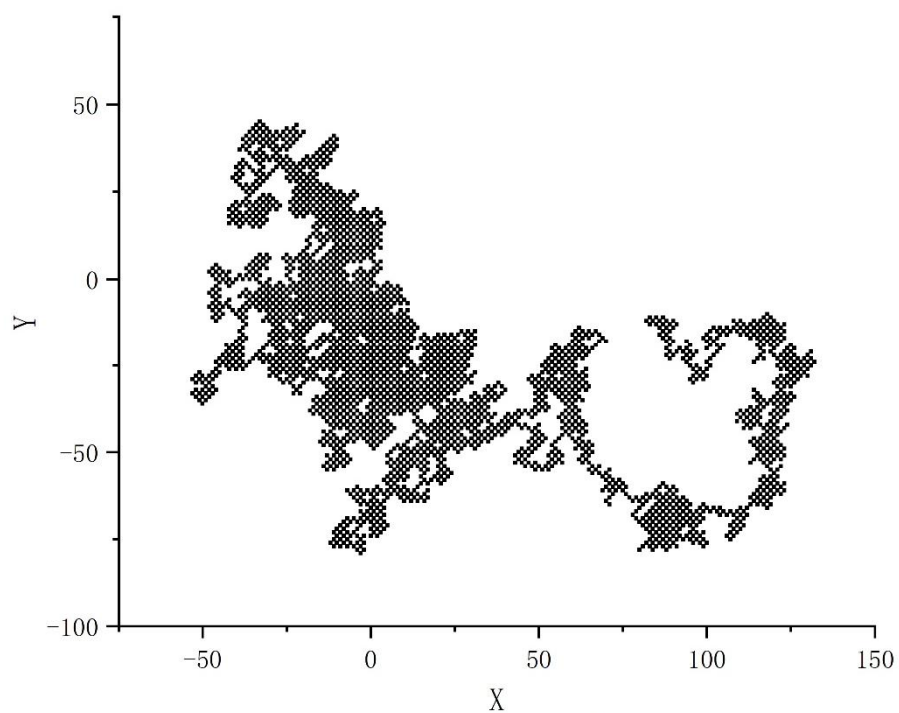


图3 新算法二维随机行走

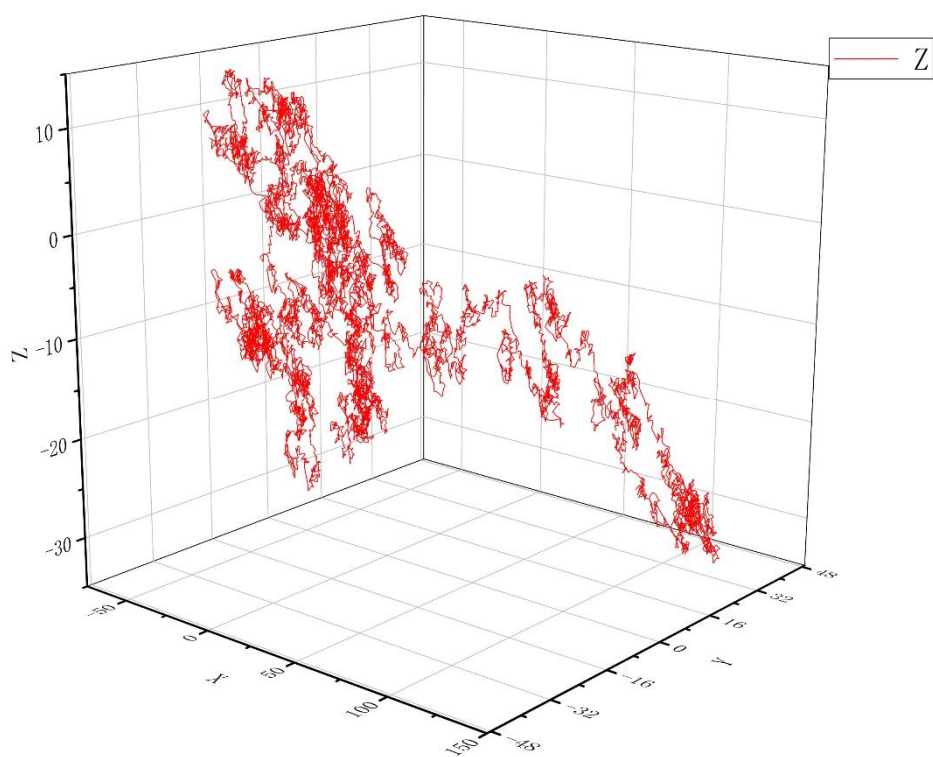


图4 三维随机行走轨迹

C.1.2.弱力场 $e=1$

取 $seedx=1, seedy=5, e=1, \omega=1$, 100 进行 1~3 维随机行走模拟。一维到三维条件下不

同频率弱力场的随机行走区别不大，径迹基本重合，如图 5-9。和无外场对照组进行对比，区别更明显，说明此处区别不大是频率变化不大的原因。

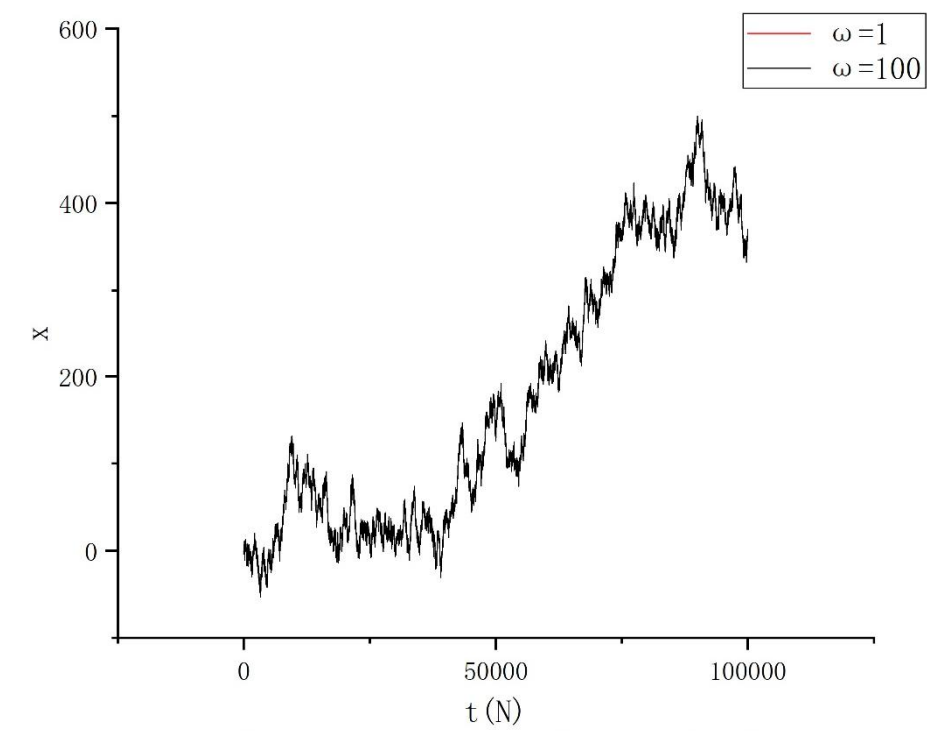


图5 $e=1$, $\omega=1, 100$ 的一维随机行走对比

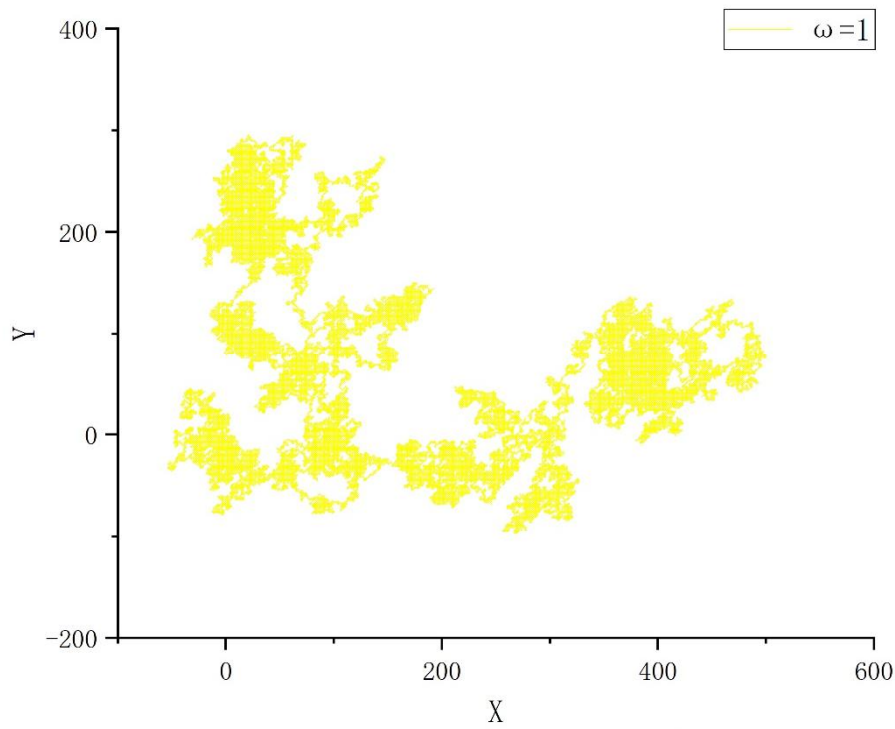


图6 $e=1$, $\omega=1$ 的二维随机行走轨迹

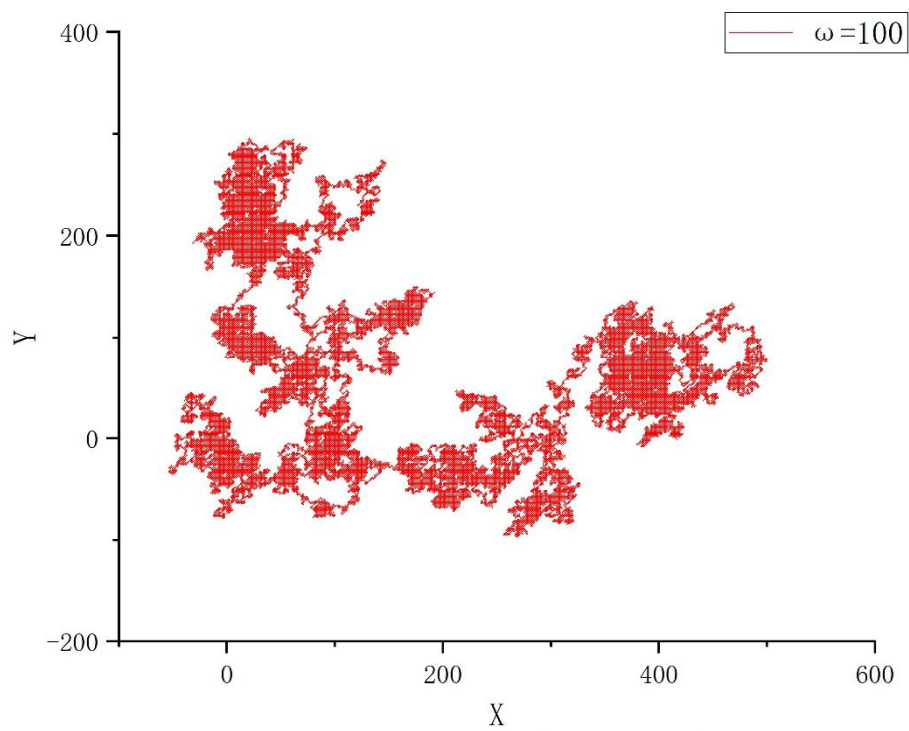


图7 $e=1$, $\omega=100$ 的二维随机行走轨迹

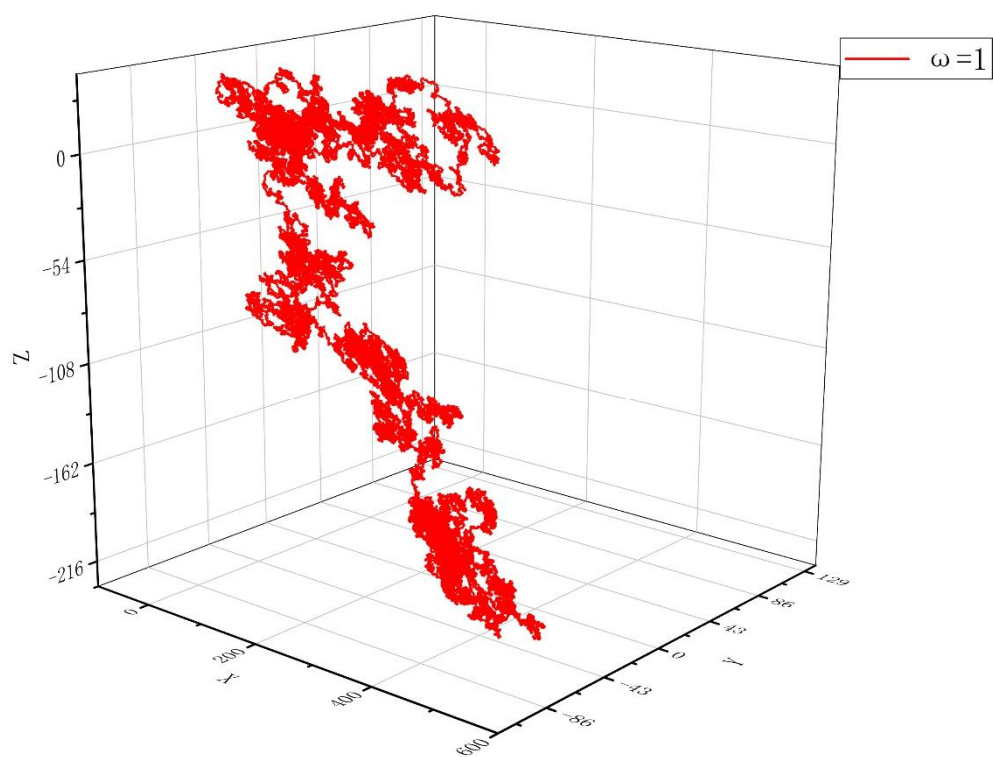


图8 $e=1$, $\omega=1$ 三维随机行走轨迹

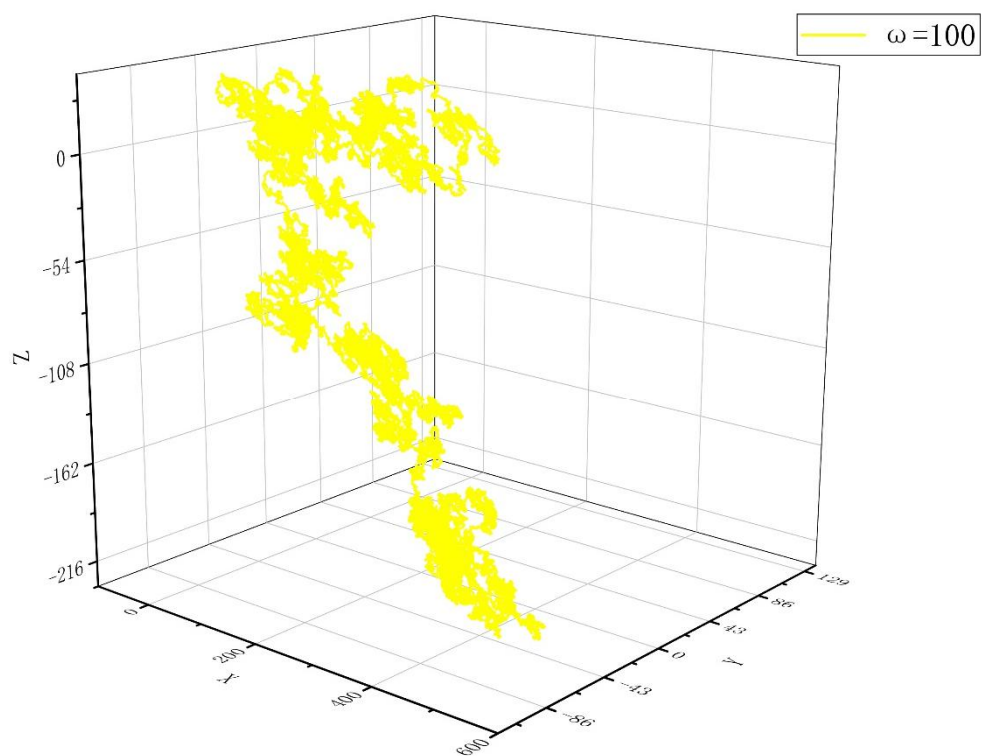


图9 $e=1$, $\omega=100$ 三维随机行走轨迹

C.1.3. 低频不同强度力场对比 $\omega=1$

取 $\text{seedx}=1, \text{seedy}=5, \omega=1, e=1, 10$ 进行一维随机行走, 得到轨迹如图 10. 区别不是非常明显, 可能是 e 差距比较小。

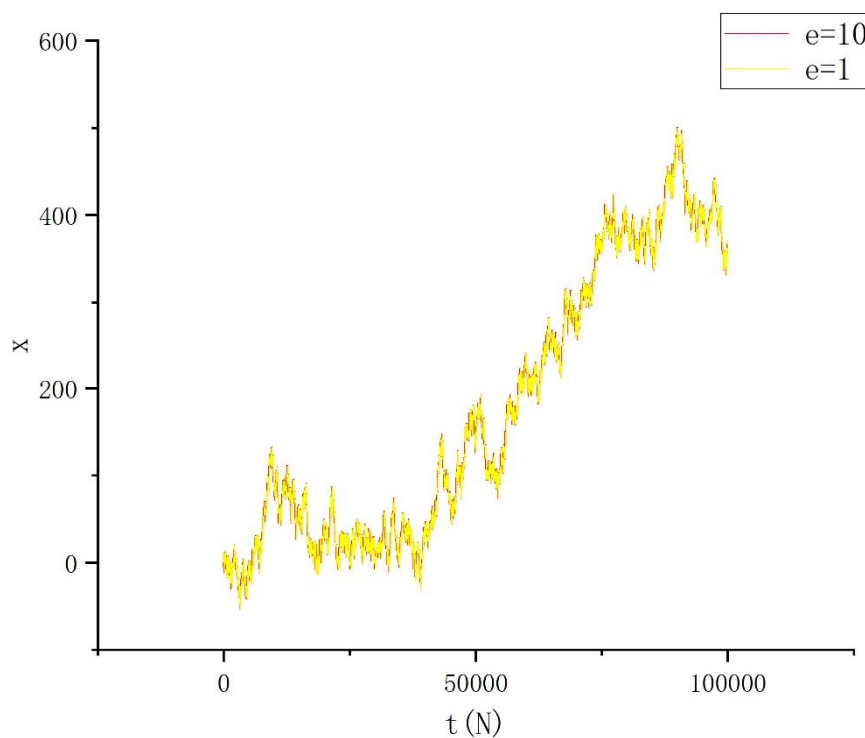


图10 低频1D随机行走对比

C.1.4.高频不同强度力场对比 $\omega=100$

取 $\text{seed}x=1, \text{seed}y=5, \omega=100, e=1, 10$ 进行一维随机行走，得到轨迹如图 11。区别不是非常明显，可能是 e 差距比较小。

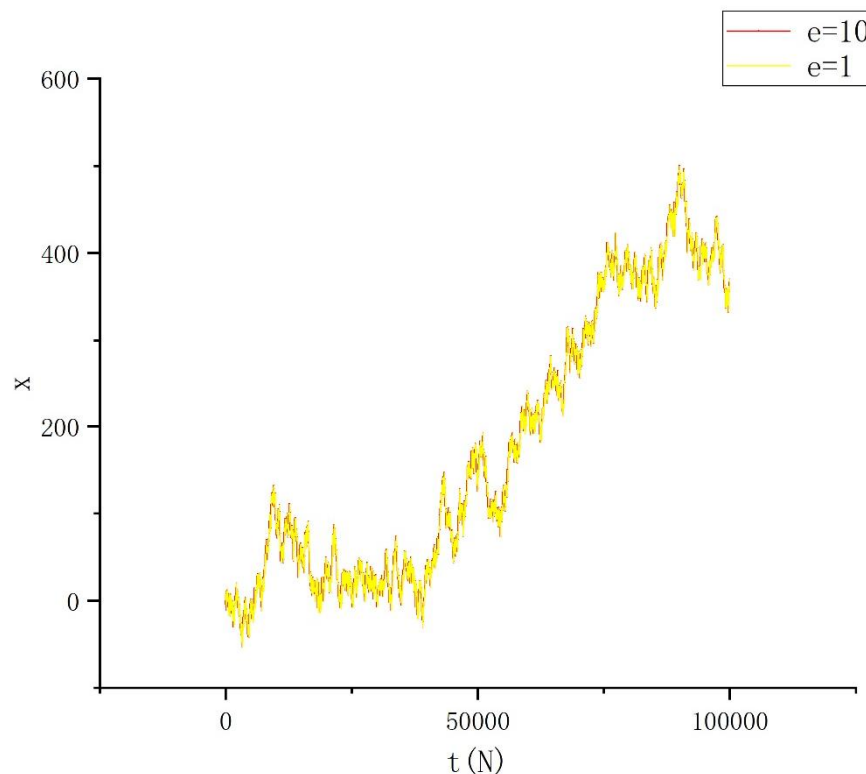


图11 高频1D随机行走对比

C.2.Langevin 理论（单粒子随机行走模拟）

只考虑一维随机行走，用于与偏压模型进行对比。如果两模型都正确则可以通过尝试不同的参数得到比例系数 e 的物理意义。

取 $\text{seed}x=1, \text{seed}y=5, N=100000, \omega=1, m=1, F_0=1, Fr=5$ （涨落力稍大于正弦力）， $B=1$ 或 10 ，得一维 Langevin 理论单粒子随机行走模拟的轨迹，对比得到图 12，对比得 B 较小即粘滞力较大时运动距离小。

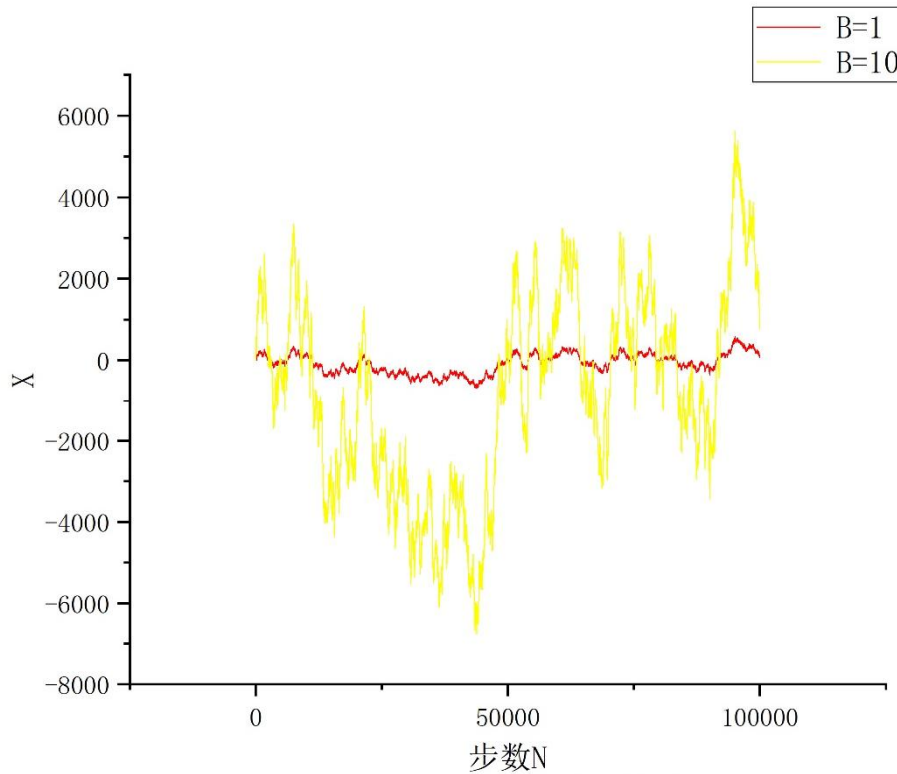


图12 Langevin一维随机行走

C.3.利用多粒子随机行走模拟进行 Langevin 理论和偏压扩散模型的对比

C.3.1. 偏压扩散模型

取 $e=1, \omega=1$ 计算 $1E3$ 个粒子进行 $1E5$ 步偏压扩散模型随机行走的位移和方差如下:

$$\langle x \rangle = 6.667000$$

$$\langle x^2 \rangle = 94632.064000$$

$$\langle \Delta x^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = 94587.615111$$

理论值

$$E(x) = \frac{\sin \frac{1E5+1}{2} \sin \frac{1E5}{2}}{\sin \frac{1}{2}} = 1.847777103630379$$

$$D(x) = 1E5 \left(1 - \frac{1}{2}\right) + \frac{\sin(2 * 1E5 + 1) - \sin 1}{2 \sin 1} = 49999.97578265628$$

相对误差

$$\eta_{\langle x \rangle} = \frac{E(x) - \langle x \rangle}{E(x)} = \frac{1.847777103630379 - 6.667000}{1.847777103630379} \times 100\% = -261\%$$

$$\eta_{\langle x^2 \rangle} = \frac{D(x) - \langle \Delta x^2 \rangle}{D(x)} = \frac{49999.97578265628 - 94587.615111}{49999.97578265628} \times 100\% = -89.175\%$$

数量级符合, 存在差距, 推测是取样量不够大。

C.3.2. 郎之万模型

取 $\text{seed } x=1, \text{seed } y=5, \omega=1, m=1, F_0=1, Fr=5$ (涨落力稍大于正弦力), $B=1$, 计算 $1E4$ 个粒子进行 $1E5$ 步随机行走的位移和方差如下:

$$\langle x \rangle = 82.120247$$

$$\langle x^2 \rangle = 6743.051758$$

$$\langle \Delta x^2 \rangle = -0.682676$$

理论值

$$E(x) = \frac{F_0 \frac{1}{\omega^3 m B} (1 - \cos \omega N) - \frac{1}{\omega^2} \sin N \omega - \frac{1}{m \omega B} \left(e^{-\frac{N}{mB}} - 1 \right)}{1 + \frac{1}{\omega^2 m^2 B^2}} = 1.481806004733098$$

$$D(x) = N = 1E5$$

相对误差

$$\eta_{\langle x \rangle} = \frac{E(x) - \langle x \rangle}{E(x)} = \frac{1.481806004733098 - 82.120247}{1.481806004733098} \times 100\% = -54.42\%$$

$$\eta_{\langle x^2 \rangle} = \frac{D(x) - \langle \Delta x^2 \rangle}{D(x)} = \frac{1E5 + 0.682676}{1E5} \times 100\% = 100.000682676\%$$

平均值的数量级符合，但是方差相差很大，和前文分析一致，郎之万模型与正弦力下的牛顿运动和随机行走不符。由于粘滞力和速度矢量成正比，因此问题在于用左右等可能的行走对无外场布朗运动进行描述。

C.3.3. 对比

偏压扩散模型对粒子运动的平均值和方差估计都偏小，郎之万偏大。

D. 总结

本次作业使用 2 种方法对粒子在正弦场中 1~3 维随机行走进行了模拟，对比不同参数和不同算法得到了粒子随机行走的特性随各参数变化情况：偏压扩散模型的粒子对力的振幅、频率变化不灵敏；郎之万模型的粒子在粘滞力小的液体中扩散速度更快，符合物理意义。通过数学知识得到郎之万模型的期望与方差估算存在不足。多粒子随机行走模拟得到粒子的数目和行走步数不大时，偏压扩散模型和郎之万模型都存在较大问题，偏压扩散模型的平均值和方差数量级合理但是数值差据较大，郎之万模型的步数平均值估计效果一般，但是方差估计非常不好。