第 11 题作业报告

PB18000341 范玥瑶

A. 作业题目

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?

B. 算法及主要公式

B.1. 理论分析

在 d 维空间中随机行走一步有 2d 种可能性，行走 N 步时返回原点等价于每个维度 n+=n-。

d=1 时，$p_+ = p_- = \frac{1}{2}$，设右行步数 n+，左行步数 n-，第 N 步返回原点时$n+= n-= \frac{N}{2}$.

因此

$$P_1（N） = \frac{N!}{n_+!\,n_-!}\left(\frac{1}{2}\right)^N = \frac{N!}{\left(\frac{N}{2}!\right)^2}\left(\frac{1}{2}\right)^N$$

d=2 时，$p = \frac{1}{4}$.设 4 个方向正负方向移动步数为 x+，x-，y+，y-，第 N 步返回原点时

$$x_+ = x_-$$
$$y_+ = y_-$$
$$x_+ + y_+ = \frac{N}{2}$$

因此

$$P_2(N) = \sum_{x_+=0}^{\frac{N}{2}} C_N^{x_+} C_{N-x_+}^{x_-} C_{N-x_+-x_-}^{y_+} C_{N-x_+-x_--y_+}^{y_-} \left(\frac{1}{4}\right)^N = \sum_{j=0}^{\frac{N}{2}} \frac{N!}{(j!)^2[\left(\frac{N}{2}-j\right)!]^2}\left(\frac{1}{4}\right)^N$$

d=3 时，$p = \frac{1}{6}$.设 6 个方向正负方向移动步数为 x+，x-，y+，y-，z+，z-，第 N 步返回原点时

$$x_+ = x_-$$
$$y_+ = y_-$$
$$z_+ = z_-$$
$$x_+ + y_+ + z_+ = \frac{N}{2}$$

$$P_3（N） = \sum_{\substack{i，j=0 \\ i+j\le\frac{N}{2}}}^{\frac{N}{2}} \frac{N!}{(i!)^2(j!)^2[\left(\frac{N}{2}-i-j\right)!]^2}\left(\frac{1}{6}\right)^N$$

数值模拟时 N>>1，由 Stirling 公式$n! \approx \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n \quad (n \gg 1)$

d=1 时理论值为

$$P_1(N) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi N}}$$

d=2 时，考虑坐标变换$e_u = \frac{e_x+e_y}{2}$，$e_v = \frac{e_x-e_y}{2}$，其中e_x，e_y是基矢量。粒子进行一步二维随机行走等价于在 u 和 v 方向独立地各进行一步一维随机行走，而且粒子回到原点和在 u，v 方向同时回到出发点等价，因此

$$P_2(N) = [P_1(N)]^2 \approx \frac{2}{\pi N}$$

d=3 时不可类似 d=2 进行坐标变换，因为完成 d=2 的坐标变换等价于取三个变量使得每个变量中 x，y，z 系数绝对值相等，且三个轴是正交的，但是 d 是奇数，0 是偶数，d 个是±1 的值求和不为 0。N 为奇数时随机行走不返回原点，以下取 N=2n 进行估计

$$P_3(2n) = 2^{-2n} \sum_{\substack{i,\ j=0 \\ i+j\le n}}^{n} \frac{N!}{(i!)^2(j!)^2[(n-i-j)!]^2}\left(\frac{1}{3}\right)^N$$

$$= 2^{-2n}\frac{N!}{(n!)^2} \sum_{\substack{i,\ j=0 \\ i+j\le n}}^{n} \left(\frac{n!}{i!\,j!\,(n-i-j)!}\left(\frac{1}{3}\right)^n\right)^2$$

注意到$\sum_{\substack{i,\ j=0 \\ i+j\le n}}^{n} \frac{n!}{i!j!(n-i-j)!}\left(\frac{1}{3}\right)^n = \sum_{\substack{i,\ j=0 \\ i+j\le n}}^{n} \frac{n!}{i!j!(n-i-j)!}\left(\frac{1}{3}\right)^n 1^i 1^j 1^{n-i-j} = (1+1+1)^n\left(\frac{1}{3}\right)^n = 1$

且$\frac{n!}{i!j!(n-i-j)!}\left(\frac{1}{3}\right)^n > 0$

$$\therefore \sum_{\substack{i,\ j=0 \\ i+j\le n}}^{n} \left(\frac{n!}{i!\,j!\,(n-i-j)!}\left(\frac{1}{3}\right)^n\right)^2$$

$$\le \sum_{\substack{i,\ j=0 \\ i+j\le n}}^{n} \frac{n!}{i!\,j!\,(n-i-j)!}\left(\frac{1}{3}\right)^n * \max_{\substack{0\le i,\ j\le n \\ i+j\le n}} \frac{n!}{i!\,j!\,(n-i-j)!}\left(\frac{1}{3}\right)^n \quad (1)$$

$$= \max_{\substack{0\le i,\ j\le n \\ i+j\le n}} \frac{n!}{i!\,j!\,(n-i-j)!}\left(\frac{1}{3}\right)^n$$

$$= \max_{\substack{0\le i,\ j\le n \\ i+j\le n}} \frac{n!}{i!\,j!\,(n-i-j)!}\left(\frac{1}{3}\right)^n$$

$\frac{n!}{i!j!(n-i-j)!}\left(\frac{1}{3}\right)^n$可以依照这样的热力学情形理解：有 n 个粒子可能处于 3 种状态，每个粒子的状态相互独立，处于 3 种状态的粒子数分别为 i，j，n-i-j 的概率，由热力学知识，$i \approx j \approx \frac{n}{3}$时熵最大，概率最大，考虑 n>>1 时有 Stirling 公式，因此

$$\max_{\substack{0\le i,\ \ j\le n \\ i+j\le n}} \frac{n!}{i!\,j!\,(n-i-j)!}\left(\frac{1}{3}\right)^n \approx \frac{\sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n}{\left(\sqrt{\frac{2\pi n}{3}}\left(\frac{n}{3e}\right)^{\frac{n}{3}}\right)^3}\frac{1}{3^n}\sim\frac{1}{N}$$

由斯特林公式，

$$2^{-2n}\frac{N!}{(n!)^2}\sim N^{-\frac{1}{2}}$$

所以P_3（N）的指数值最大为$P_3(N)\sim\frac{1}{\sqrt{N^3}}$.

综上所述，推断$P_d(N)\sim N^{-\frac{d}{2}}$.

B.2. 算法

当粒子数很大时可以用频率作为概率的近似值。

算法：输入种子值 seed，粒子数 NN，粒子步数 N，创建长度为 NN 的动态数组，用于存储某时刻粒子步数。利用循环语句，每个周期内调用子函数 RWd（d=1，2，3）依次完成 NN 个粒子的一步行走，完成行走的同时会进行返回原点粒子数目的计数，结果为子函数返回值，因此周期编号具有行走步数（n=step-1）的意义。

子函数 RWd 的算法为：将（0，1）区间 2d 等分，用 Schrage 方法生成的随机数 x 落在一个区间代表一种行走方向。如一维情形，0<x<0.5 时粒子向正方向移动一步，0.5<x<1 时则向负方向移动一步；d=2 时，0<x<0.25 时粒子向 x 的正方向移动一步，0.25<x<0.5 时粒子向 x 的负方向移动一步，0.5<x<0.75 时粒子向 y 的正方向移动一步，0.75<x<1 时向 y 的负方向移动一步；d=3 时，0<x<1/6 时粒子向 x 的正方向移动一步，1/6<x<1/3 时粒子向 x 的负方向移动一步，2/6<x<1/2 时粒子向 y 的正方向移动一步，1/2<x<2/3 时向 y 的负方向移动一步；2/3<x<5/6 时粒子向 z 的正方向移动一步，5/6<x<1 时粒子向 z 的负方向移动一步。由于 I 是全局变量可以连续取若干随机数不需要重新输入种子值。在更新完位移后如果粒子的位置处于原点（x=y=z=0）则更新返回原点粒子数的计数。行走结束后返回 NN 个粒子中返回原点的粒子数。

在主函数的循环语句中利用返回值除以粒子数目 NN 得到频率作为 Pd（N）的近似值输出，随后导入 Origin 拟合。从理论分析可以得到 N 为奇数时 P_d（N）=0，初步计算结果与之符合，则仅输出步数为偶数即周期为奇数的点。

C. 计算结果及具体分析、讨论

取 seed=1，进行 1E5 个粒子 1E5 步中偶数步的 1~3 维随机行走模拟，作 log-log 图如图 1。观察到 d=2，3 时大概 N~100 开始，N 较大的地方出现 logN 比较接近的地方 logPd（N）区别很大，作折线图放大，得到是 N 比较大时 Pd（N）会随 N 震荡，从而给拟合带

来不便。因此除对所有 N 进行拟合之外截取 N 较小的部分另外拟合。拟合 log-log 直线得到拟合直线图如图 2，3，4，读出的斜率如表 1.

维度 d	全部 N 拟合	较小 N 拟合	理论值
1	-0.5047		-0.5
2	-0.83647	-0.99465	-1
3	-0.54946	-1.48357	-1.5

表 1 log-log 直线拟合斜率

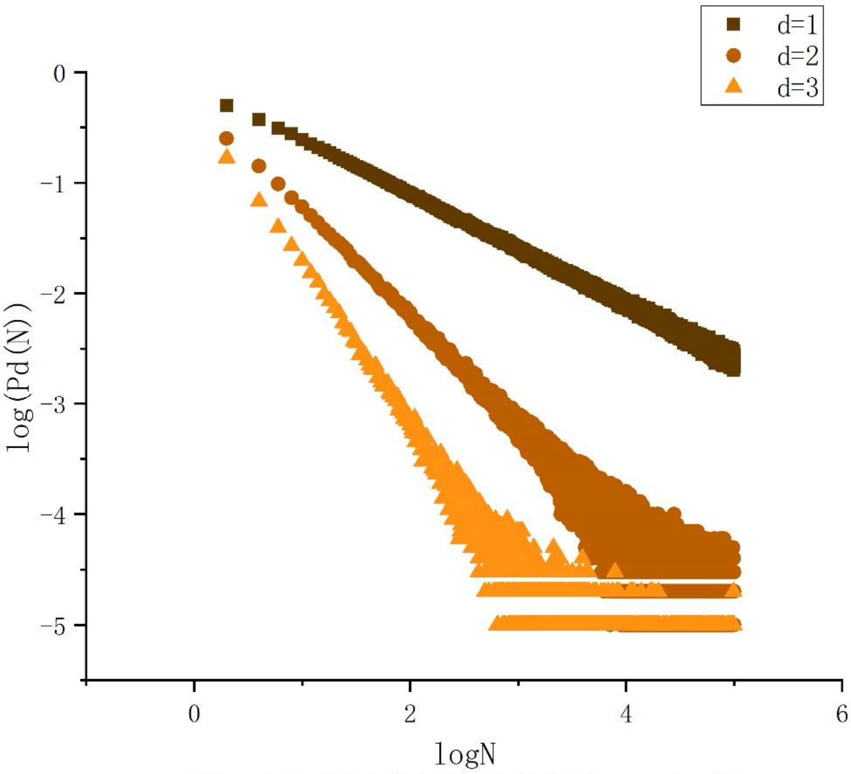

图1 1到3维概率和粒子步数的log-log图

由图 1，相同维度 d 的随机行走 P_d 关于步数 N 二者对数基本呈线性递减关系，N 较大时出现小幅度震荡，可以定义指数值；相同步数 N，P_d（N）随维度 d 递减，N 较大时 d=2，3 出现交错，N 更大时 d=1 或者更高维度是否发生交错暂时不知道。$\log P_d$ 随 logN 递减的速度随 d 的增大而呈现增大趋势，即斜率随 d 递减，绝对值增大。

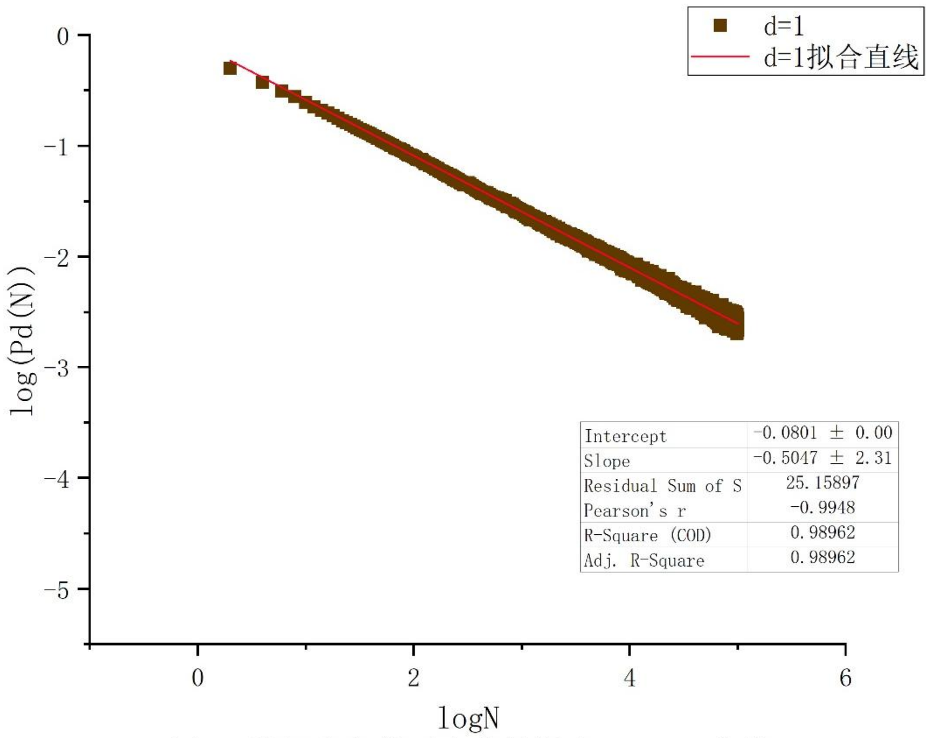

图2 1维概率和粒子步数的拟合log-log直线

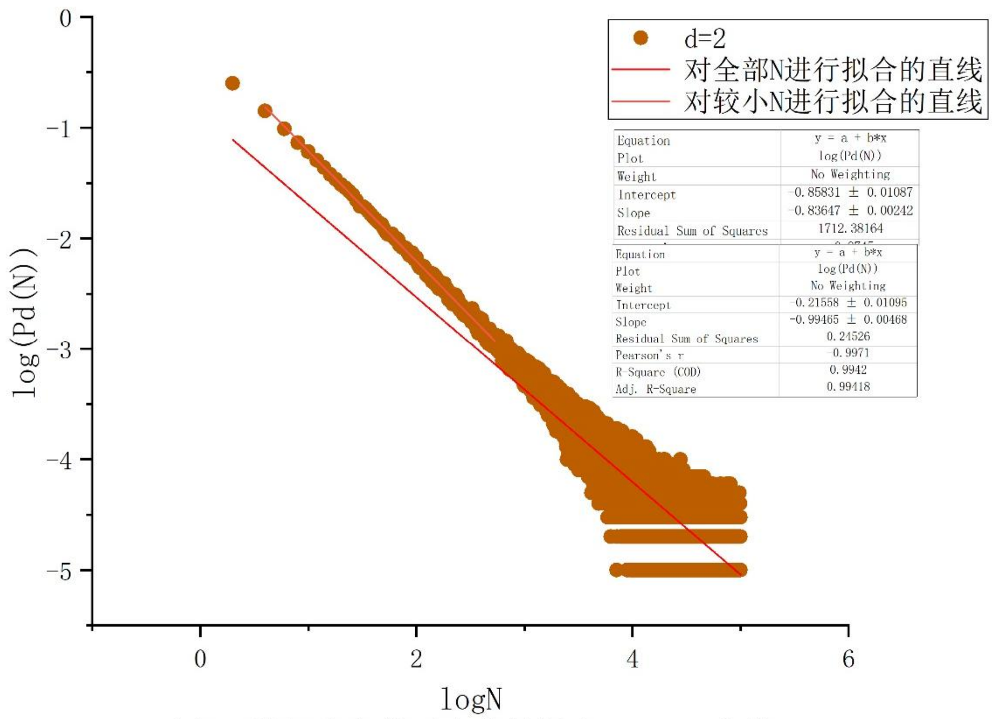

图3 2维概率和粒子步数的拟合log-log直线

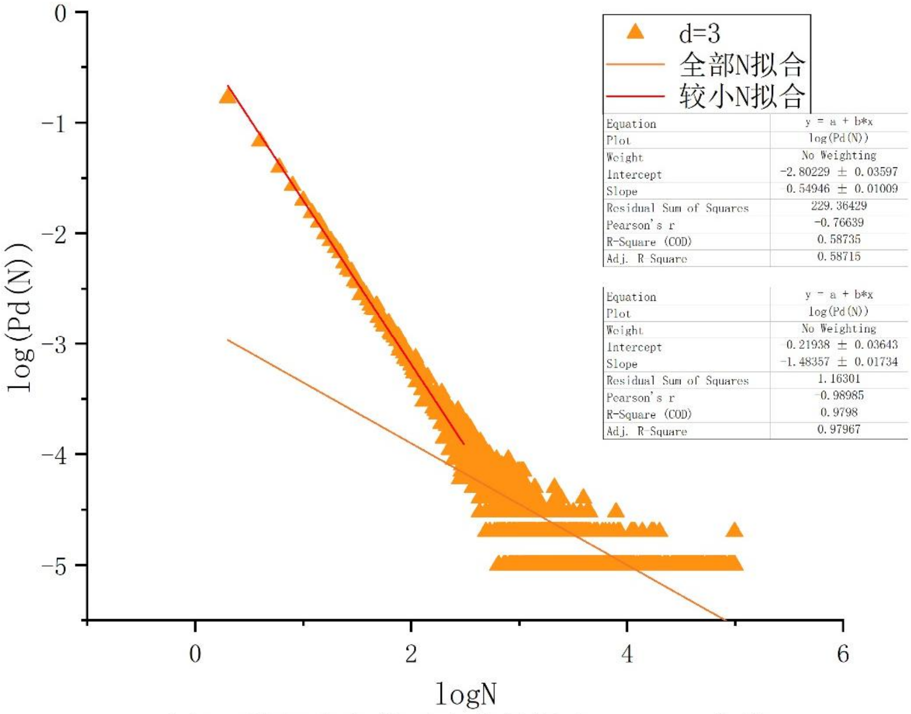

图4 3维概率和粒子步数的拟合log-log直线

根据图定性分析或根据表 1 定量分析可以得到 N 较小时的拟合非常接近理论值，N 较大时 d=2，3 出现了向绝对值比理论值小，也就是 Pd 偏大方向的误差。理论分析中应用斯特林公式产生的误差应当在 N 较小时更明显，而且不应该仅仅在 d=2，3 出现。d=2 时其余推导是严格的，对 Const^N 的忽略产生的误差应当偏大而且随 N 的增大相对误差减小，因此误差来自随机数生成器的随机性不足。d=3 时剩余推导中可能的误差来源为式（1），理论分析中可得理论值是偏大的，实际值会比理论值小，和模拟结果不符。推测误差来自随机数生成器的随机性不足。

D. 总结

d 维空间中随机行走返回原点的几率 Pd（N）在 N 为奇数时随机行走返回原点为 0。N 为偶数时满足关系 Pd(N)∝N-0.5d，可以定义指数值。误差分析中可以得到，N 较小（~1E0，1E1）时可以用含阶乘的公式对 Pd 进行计算；N 稍大（~1E2）时可以用 Stirling 公式、坐标轴变换和放缩法进行进一步化简，和模拟结果相比比较准确；N 很大时因为随机数生成器的随机性不足出现向 Pd 偏大的波动，但是理论分析中的近似没有带来更明显的问题。综合理论和模拟结果，用 1E5 个粒子进行 1E5 步的模拟，产生 Pd（N）的理论和实际值误差基本合理。