Simulation of Random Walk and Self Avoiding Walk

丁冬冬 [1)]

1)（武汉大学物理科学与技术学院，材料班，武汉 430072

学号：2013301020059）

摘 要

本实验主要研究了无限制随机行走和自我回避随机行走，模拟了无限制随机行走在一维、二维、三维情况下等概率随机行走和不等概率随机行走问题；并计算了其位移和位移均值随着时间变化的解析解和数值解的关系。在自回避行走中，模拟了运动的轨迹曲线，并且通过外推法求得不同维度下自回避运动下的 Flory exponent。

关键词：随机运动，自回避运动，等概率，Flory 系数

† 通讯作者.E-mail: 1510854409@qq.com

1 引 言

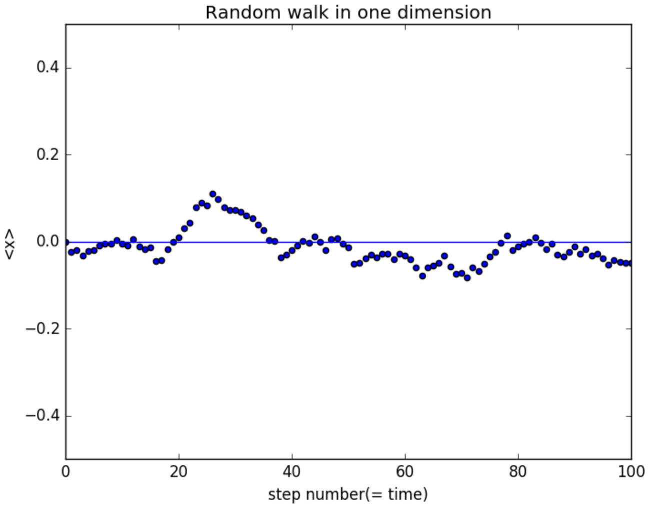
1827 年英国植物学家 Robert Brown 发现了悬浮于水中的花粉颗粒会做连续快速的不规则运动，称为布朗运动。后来物理学家将这种形式的运动称为随机行走（Random walk），这种运动就像醉汉一样，每一步方向飘忽不定，并且往任何方向的可能性都是一样的。现在随机行走模型的普适性已经在很多领域得到认可，如生态学，经济学，心理学，计算机科学，物理学，化学，生物学等；在生态学模拟个体移动和种群数量；化学中模拟高分子链的聚合、断裂和反应等性质；计算机科学中模拟互联网大小；物理学中模拟扩散现象；生物学模拟蛋白质等结构特性……所以对随机行走的研究很有必要性。

自回避行走（Random avoiding walks 简称 RAWs）可以模拟高分子聚合物链，在高分子聚合物链中一个结构单元只能占据一个位置，不可能有两个或者两个以上单元占据同一位置。RAWs 是在随机行走的基础上加上限制条件，如果假设每次行走一个单位，每一次方向都随机，但是在每次运动时都不能运动到前次运动经过的节点上，即满足不能有两个两个或者两个以上节点占据同一位置的属性。美国化学家 Paul John Flory 在化学分子高聚物方面做出了重大贡献并且建立了数学理论，其中我们本次用到的主要是位移方均根和时间关系即：$\sqrt{\langle r^2\rangle} \sim At^{\nu}$，变形得到：$\sqrt{\frac{\langle r_{n+1}^2\rangle}{\langle r_n^2\rangle}} \sim 1+\frac{2\nu}{n}$，并通过外推法求出 flory exponent。

2 Random walk

1.1、一维情况等概率时

假设行走方向随机并且等概率，步数相当于时间，所以我们只需要做出目标量和步数的关系曲线即可；做出 $x-n, \langle x\rangle - n, \langle x\wedge 2\rangle - n$ 关系曲线如下：



〈x〉 -n

〈x^2〉 -n

行走方向概率见下表：

方向	**左**	**右**
概率	0.5	0.5
单次步长	1	1

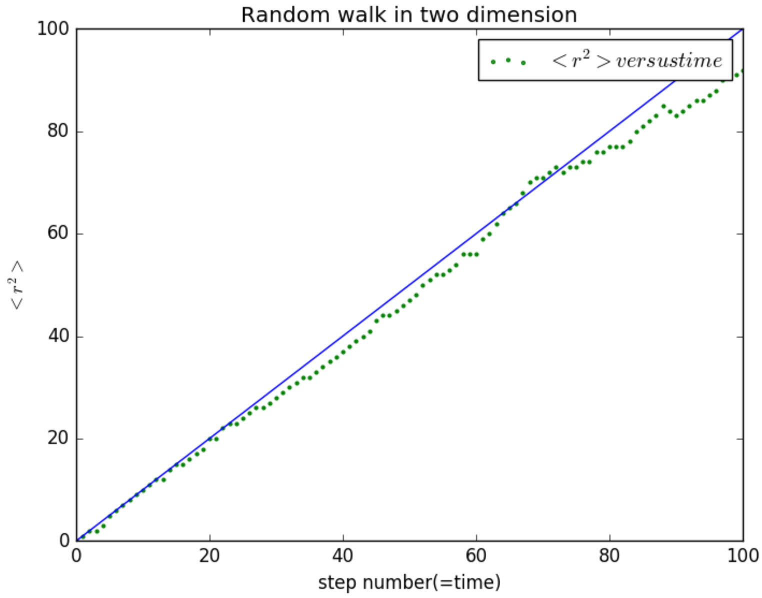
我们在此只考虑有限步长问题，n 步之后的均值由二项式定理：$\langle x\rangle = n(2p-1)$,带入 $p=0.5$ 有：$\langle x\rangle = 0$；因为均值为 0，所以方差 $Var = 4np(1-p)$,带入 $p=0.5$ 有：$Var = n \sim t$ 位移均方 $\langle x^2\rangle = n \sim t$ 。

对比真实值和计算机模拟值，虽然步数不多，但是 仍然发现 $\langle x\rangle - n$ 基本上是在 0 附近波动；$\langle x^2\rangle - n$ 随着步数变化与 $y = x$ 曲线拟合的很好；

1.2、二维运动

假设四个方向随机运动，做出轨迹运动$\langle r\rangle - n$ ，$\langle r^2\rangle - n$曲线如下：

$\langle r\rangle - n$



$\langle r^2\rangle - n$

假设往 x 正向概率为 0.5，负向概率为 0.5，往 y 正向概率为 0.5，y 负向概率为 0.5，

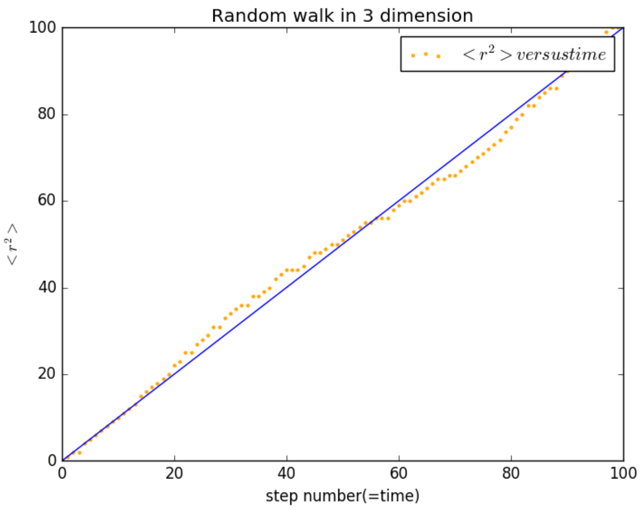
方向	x	-x	y	-y
概率	0.5	0.5	0.5	0.5
单次步长	1	1	1	1

同理可求得$\langle r\rangle = 0,\quad \langle r^2\rangle = n \sim t$。对比计算值和有限步下的模拟值可以发现，曲线基本吻合；

1.3、三维运动

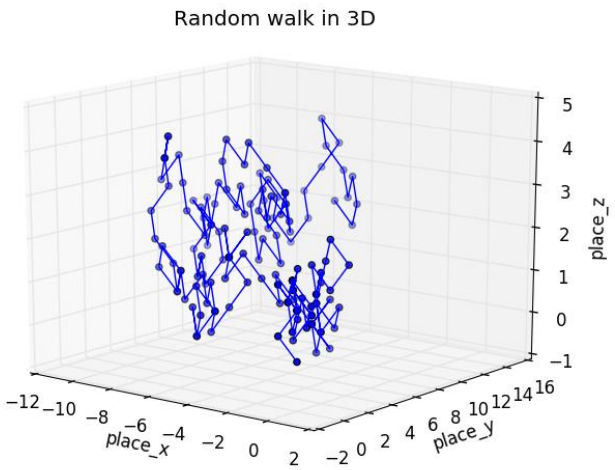
假设六个方向随机运动，做出轨迹运动$\langle r\rangle - n,\langle r^2\rangle - n$ 曲线如下：

$\langle r\rangle - n$



$\langle r^2\rangle - n$

三维情况下随机行走的三维轨迹如下：



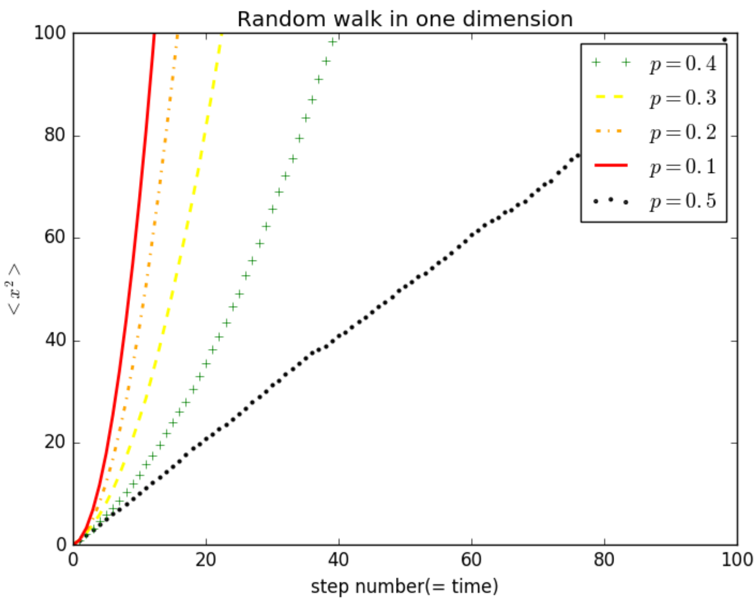
假设往 x 正向概率为 0.5，负向概率为 0.5，往 y 正向概率为 0.5，y 负向概率为 0.5，往 x 正向概率为 0.5，负向概率为 0.5，不同方向概率见下表

方向	x	-x	y	-y	z	-z
概率	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
单次步长	1	1	1	1	1	1

同理可求得 $\langle r\rangle = 0,\quad \langle r^{\wedge}2\rangle = n \sim t$，对比计算值和有限步下的模拟值可以发现，基本吻合；

2、左右运动概率不等一维情况：

假设向左运动概率是 p ,向另一个方向运动是 $(1-p)$ ， $p \neq 0.5$ 改变 p ,得到均方位移和时间关系曲线：



不同概率位移均方和时间关系曲线

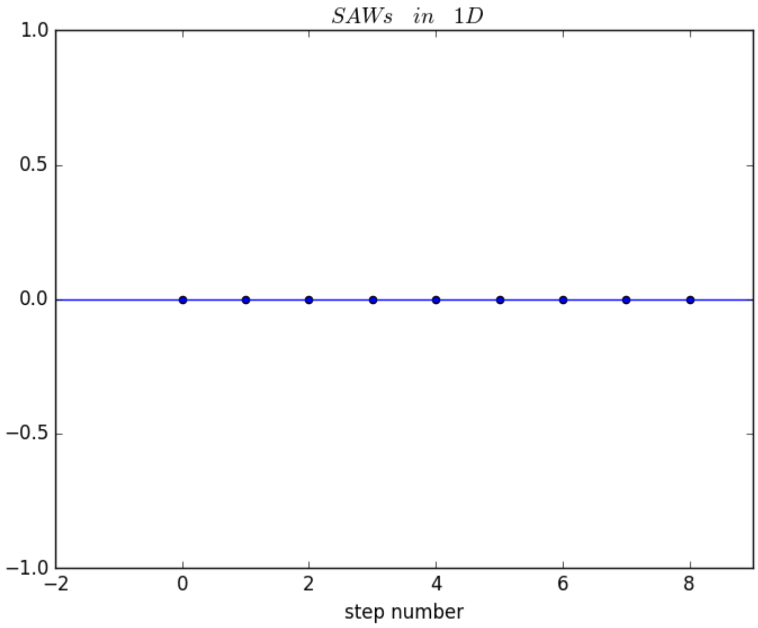
由上述求得：$\langle x\rangle = n(2p-1)$，方差 $Var = 4np(1-p)$ ， $p \neq 0.5$ 时：位移均方 $\langle x^{\wedge}2\rangle \sim n^{\wedge}2 \sim t^{\wedge}2$，对比解析解和模拟数值曲线，其趋势基本吻合；除了 $p = 0.5$ 外，其余概率其位移均方和时间关系均是二次函数，并且曲线主要是二次函数系数变化。

3 Self Avoiding Walks(RAWs)

1、一维自回避行走

一维情况下由于 RAWs 不能经过以前经过的位置，所以一维只能往一个方向一直运

动，轨迹如下：



一维位置和时间关系图

感觉并没有什么可以参考的的价值,其方均根明显为：$\sqrt{\langle r^2\rangle} \sim At^{\nu}$，即与时间 t 或者步数 n 的一次方成正比,并且其 Flory 指数明显是 1，为确定值。

2、二维自回避行走

二维情况下就比一维情况值得研究，就像是小时候玩的简单的平面贪吃蛇游戏，只要自身发生交叠就意味着游戏失败，和二维自回避运动结构相似；

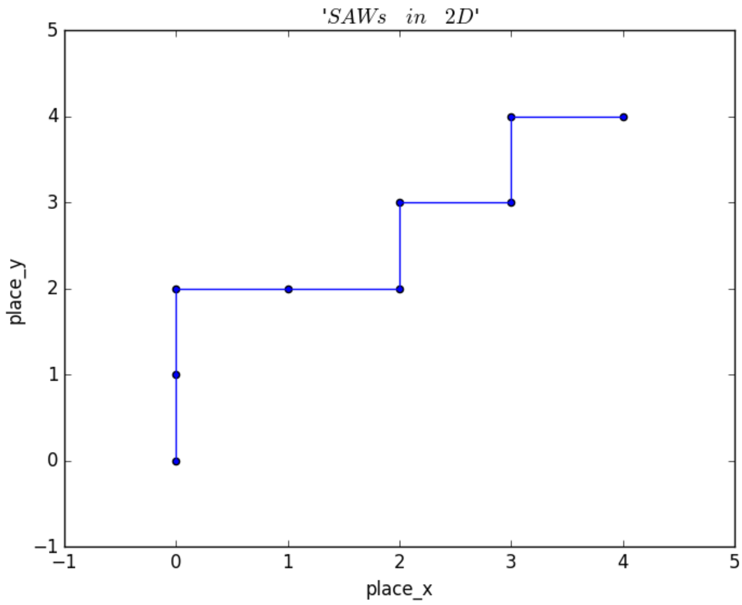
假设只能沿着直角转弯，即如果没有限制条件和二维随机行走相似，往每个方向的概率相同，下面分析出步数和 SAWs 数目的关系：第一步可以随意选四个方向，第二步为了满足不经过前面走过的路径，就只有三个选择，第三部为了满足限制也只有三个选择……

步数	1	2	3	4	……
the number of RAWs	4	12	35	100	……

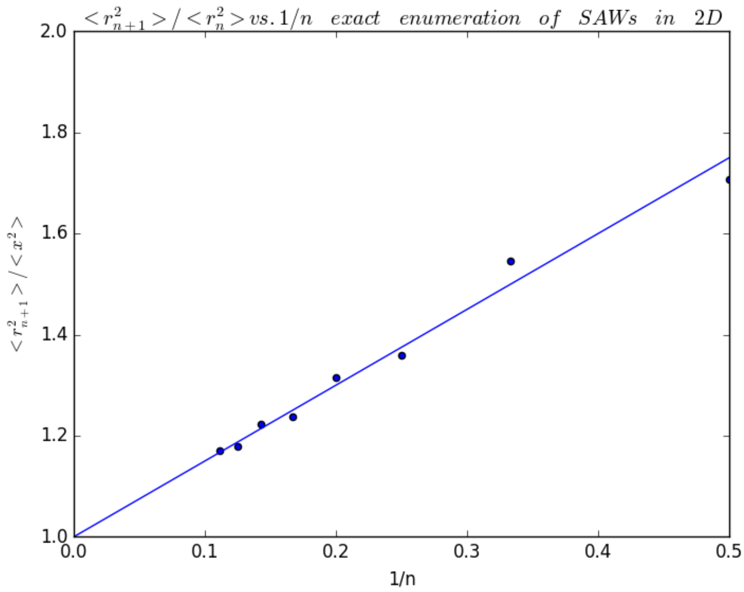
Flory 公式 $\sqrt{\langle r^2\rangle} \sim At^{\nu}$ 中，由此公式导出：$\sqrt{\dfrac{\langle r_{n+1}^2\rangle}{\langle r_n^2\rangle}} \sim \left(1+\dfrac{1}{n}\right)^{2\nu} \sim 1+\dfrac{2\nu}{n}$ 所以只要我们求出各步长 n 对应的均方 $\langle r_n^2\rangle$，然后求出 $\dfrac{\langle r_{n+1}^2\rangle}{\langle r_n^2\rangle}$ 和 $\dfrac{1}{n}$ 关系曲线用外推法，当 n→∞,就可以准确求出 flory exponent υ。

用程序模拟模拟求出轨迹运动和各步长 n 对应的均方 $\langle r_n^2\rangle$，然后绘制 $\dfrac{\langle r_{n+1}^2\rangle}{\langle r_n^2\rangle}$ 和 $\dfrac{1}{n}$ 关系

曲线：



二维位置和时间关系图



$$\frac{\left\langle r_{n+1}^2 \right\rangle}{\left\langle r_n^2 \right\rangle}\text{和}\frac{1}{n}\text{关系曲线}$$

从图中看出几乎所有的点都在 $y = 1.5x + 1$ 直线上，或者在直线附近，用最小二乘法得到这些点模拟直线斜率为 1.48，所以对应的 Flory 指数：υ =0.73，理论值为 0.75，相对误差为 2.7%，误差原因分析，因为步数增大，RAWs 的数目太大 ，电脑运行时间 会变长还可能会卡，所以只模拟了几个点作为代表，再通过外推求出斜率。

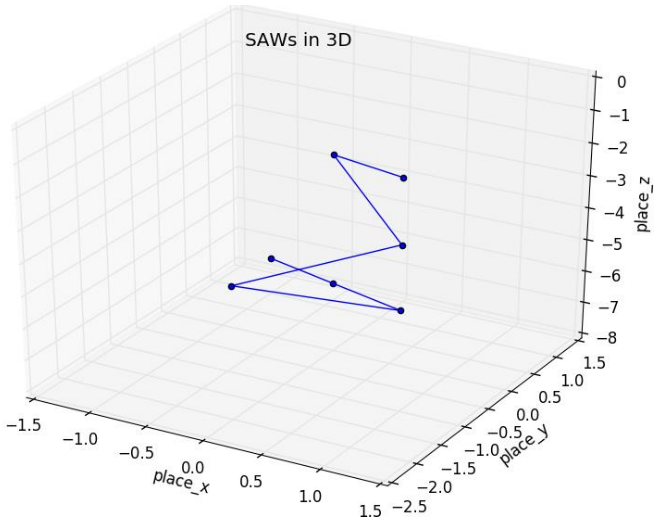
3、三维自回避行走

三维 RAWs 和高聚物链十分相似，可用来模拟化学反应中聚合物链的断裂和合成等；

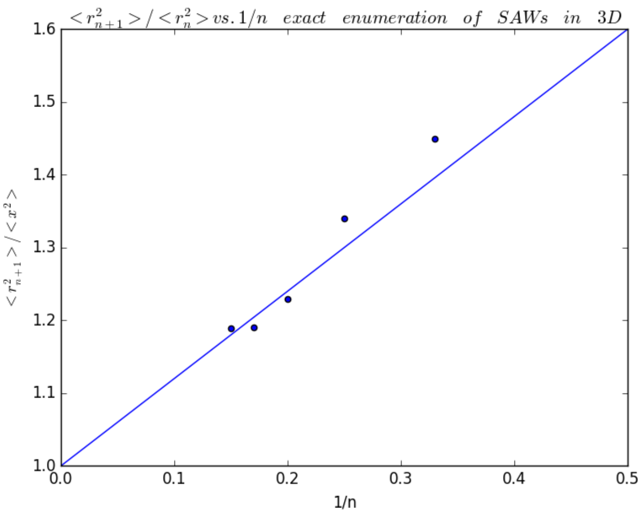
分析出步数和 SAWs 数目的关系：第一步可以随意选六个方向，第二步为了满足不经过前面走过的路径，就只有五个选择，第三部为了满足限制也只有五个选择……

步数	1	2	3	4	……
the number of RAWs	6	30	150	720	……

用程序模拟轨迹运动和求出各步长 n 对应的均方 $\langle r_n^2 \rangle$，然后绘制 $\frac{\langle r_{n+1}^2 \rangle}{\langle r_n^2 \rangle}$ 和 $\frac{1}{n}$ 关系曲线：



三维位置和时间关系图



$$\frac{\langle r_{n+1}^2 \rangle}{\langle r_n^2 \rangle} \text{和} \frac{1}{n} \text{关系曲线}$$

从图中看出几乎所有的点都在 $y=1.2x+1$ 直线上，或者在直线附近，用最小二乘法得到其斜率为 1.28，所以求出的 Flory 指数为 0.64，理论值 为 0.6，则相对误差为 6.7%,误差分析原因：因为三维的，当步数增大后，电脑运行太卡，运行不动，只能找几个代表点模拟直线，再通过外推求出斜率，得到 Flory 系数，所以误差会有点大；

5 总结

本次实验主要是模拟了随机行走和 RAWs 行走在一维、二维、三维情况下的模型，用外推法求出在 RAWs 中，不同维数下的 Flory 指数，并在极少步数下模拟了用 RAWs 轨迹；由于随机行走模型在很多领域均有重要的应用，所以对其研究具有很重要的意义。

致谢：

[1]Nicholas J.Giordano,Hisao Nakanishi 计算物理（第二版），清华大学出版社 p182-197

[2]Wikipedia contributors."Random walk" Wikipedia, The Free Encyclopedia. Wikipedia, The Free Encyclopedia on 5 June 2016

[3]Wikipedia contributors"self avioding walk"Wikipedia, The Free Encyclopedia. Wikipedia, The Free Encyclopedia on 5 June 2016

[4]齐民友，刘禄勤等概率论与数理统计（第二版）高等教育出版社

[5]刘润树，金梓阳，谢张天，一维随机游动的研究

[6]感谢强雨同学在二维 SAWs 运动中避开以前的路径给出的逻辑思维方法

Simulation of Random Walk and Self Avoiding Walk Zhang San[1) 2)]

Ding Dong-Dong [1) †] student number：2013301020059

1) (School of Thysics and Technology,WuHan Universy Wuhan 430072)

Abstract：This experiment focuses on the random walk and self avoiding random walks and simulates the random walk in different dimension under equal and unequal probability. calculate means and the mean-square value of displacement and consider the relationship between numerical solution and analytical solution of the variance over time. In Self Avoiding walks, movement trajectory curve are simulated, and the Flory exponent of the movement. are obtained by extrapolation under different dimensions

Keywords: Random walk, self avoiding walk, probability, Flory exponent