13-1 正弦外力场中的随机行走

许传奇 PB16021546

1 题目

13-1：Monte Carlo方法研究正弦外力场（$\sim sin\omega t$）中的随机行走。

2 原理与算法

2.1 原理

2.1.1 一维随机行走

考虑一个粒子以几率p往左以几率q=1-p往右跨一步长l，其运动为概率论的二项分布，因此由：

$$\langle x(N) \rangle = (q-p)Nl \tag{1}$$

$$\langle x^2(N) \rangle = 4pqNl^2 + N^2l^2(q-p)^2 \tag{2}$$

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = 4pqN^2 \tag{3}$$

这些统计量用来描述一维随机行走的特征。

2.1.2 随机行走模型的变形

对于上面简单的RW模型，可以加以各种变形。

对于本题中的情况，可以选择正弦外力场的方向为x轴方向，一开始正弦外力场朝x正方向增大。

即使是三维的随机行走问题，因为仅在正弦外力场的方向上是有额外作用的，其他两个方向上没有额外的作用。因此仅需考虑x轴方向上的随机行走模型的变形即可，其余两个方向上是之前讨论的普通的随机行走问题。

可以设在该正弦力外场下，粒子向x轴正方形和负方向运动的概率分别为：

$$p_{x+} = \frac{1}{2}(1 + c \cdot \sin \omega t) \tag{4}$$

$$p_{x-} = \frac{1}{2}(1 - c \cdot \sin \omega t) \tag{5}$$

其中的c为coefficient，用来表征正弦力场对粒子的影响作用的大小。考虑到概率的非负性，对c的大小有要求，即：

$$c \in [0,1] \tag{6}$$

不失一般性，可以设粒子每步在x轴上行走1个单位长度，随机行走一步的时间是1个单位时间。在这种取值下，第k步的期望和位移平方的期望分别为：

$$\langle \Delta x_k \rangle = p - q = c \cdot \sin \omega k \tag{7}$$

$$\langle \Delta x_k^2 \rangle = p + q = 1 \tag{8}$$

对应的行走N步时，粒子离原点距离的期望为：

$$\begin{aligned}\langle x(N) \rangle &= \sum_{k=0}^{N} \langle \Delta x_k \rangle \\ &= c \cdot \sum_{k=0}^{N} \sin \omega k \\ &= c \cdot \frac{\sin \frac{\omega N}{2} \sin \frac{\omega (N+1)}{2}}{\sin \frac{\omega}{2}}\end{aligned} \tag{9}$$

离远点距离平方的期望为：

$$\begin{aligned}\langle x^2(N) \rangle &= \langle (\sum_{k=0}^{N} \Delta x_k)^2 \rangle \\ &= \sum_{k=0}^{N} \langle \Delta x_k^2 \rangle + \sum_{k=0,m=0,k\neq m}^{N} \langle \Delta x_k \Delta x_m \rangle \\ &= N + \sum_{k=0,m=0,k\neq m}^{N} \langle \Delta x_k \rangle \langle \Delta x_m \rangle \\ &= N + c^2 \cdot \sum_{k=0,m=0,k\neq m}^{N} \sin(\omega k) \sin(\omega m) \\ &= N + c^2 \cdot \left[(\sum_{k=0}^{N} \sin \omega k)^2 - \sum_{k=0}^{N} \sin^2 \omega k \right] \\ &= (1 - \frac{1}{2} c^2) N + c \cdot \left\{ \frac{\sin \omega N \cos \omega (N+1)}{2 \sin \omega} + \left[\frac{\sin \frac{\omega N}{2} \sin \frac{\omega (N+1)}{2}}{\sin \frac{\omega}{2}} \right]^2 \right\}\end{aligned} \tag{10}$$

其中用到三角函数的求和公式：

$$\sum_{k=0}^{N} \sin \omega k = \frac{\sin \frac{\omega N}{2} \sin \frac{\omega (N+1)}{2}}{\sin \frac{\omega}{2}} \tag{11}$$

$$\sum_{k=0}^{N} \cos \omega k = \frac{\sin \frac{\omega N}{2} \cos \frac{\omega (N+1)}{2}}{\sin \frac{\omega}{2}} \tag{12}$$

2.1.3 随机行走的分布

在讲义中说到，随机行走与扩散的方程解得到的形式一致，而扩散方程的解为正态分布，即：

$$\rho(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \tag{13}$$

随机行走第N步满足的分布也应该是正态分布，其中的μ即为之前求的第N步离远点距离的期望，而σ为标准差，即：

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= Var(x(N)) \\ &= \langle x^2(N) \rangle - (\langle x(N) \rangle)^2 \\ &= (1-\frac{1}{2}c^2)N + c \cdot \frac{\sin\omega N \cos\omega(N+1)}{2\sin\omega} \end{aligned} \tag{14}$$

2.2 算法

2.2.1 随机行走示意图

生成[0,1]内的随机数，当随机数小于p_{x+}时，让点的坐标加一；否则点的坐标减一。记为随机行走一次。

将每次随机行走后的点的坐标输出到文件中，画出对应的步数与坐标的对应关系，就是随机行走的示意图。

2.2.2 计算随机行走的1阶距与2阶距

在上述过程中，添加两个变量x_1, x_2，代表1阶距和2阶距。

选取大量的粒子，第一个循环设置不同的最大随机行走步数，第二个循环遍历不同的粒子，第三个循环遍历不同的随机行走步数。

每个随机行走步数中遍历不同的粒子的循环中，先输出当前随机行走步数，并设置$x_1, x_2 = 0$。

随后每遍历一个粒子，就让x_1, x_2分别加上该粒子的坐标和该粒子坐标的平方。

遍历完该步下所有的粒子后，输出$x_1/num_particles, x_2/num_particles$到文件中，就是该随机行走步数对应的1阶距和2阶距。

遍历完随机行走步数，即得到不同步数下的1阶距和2阶距。

绘制出对应步数与1阶距和2阶距的图片，得到随机行走对应的图。

2.2.3 验证分布为正态分布

在随机行走的程序中，将每个粒子结束时的位置输出到文件中。

然后绘制出对应坐标和频率的直方图，观察是否符合正态分布。

3 源文件使用说明

编译并运行“13RandomWalk.cpp”，将弹出命令行，要求输入总的粒子个数num_particles、正弦外力场的影响效果coefficient和正弦外力场中的ω。

输入数据后，程序运行并将数据输出到三个文件，分别为：

1. Random_Walk,c=coefficient,omega=omega.txt：

   保存5个粒子每次随机行走后的坐标，用来绘制随机行走示意图。

2. particles=num_particles,c=coefficient,omega=omega.txt：

   保存最大步数为1000，步长为10，粒子数为num_particles的不同步长的1阶距和2阶距，用来绘制1阶距和2阶距与步数的关系图。

3. end_x,c=coefficient,omega=omega.txt：
   保存不同粒子进行1000步随机行走后的中止坐标，用来绘制直方图，验证是否是正态分布。

编译并运行以下三个文件，设置其中的参数，即可得到不同的图片：

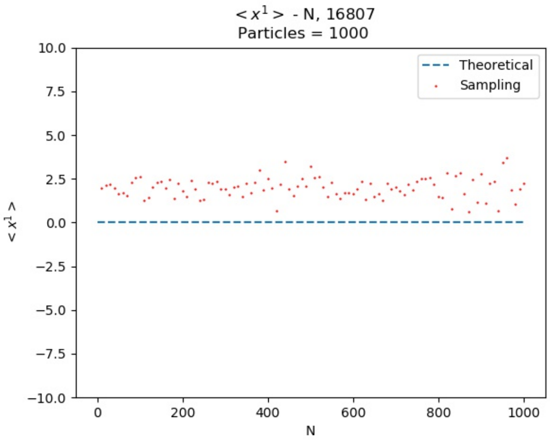
1. plot_random_walk.py：
   用来绘制随机行走示意图。
2. plot_x_k.py：
   用来绘制1阶距和2阶距与步数的关系图。
3. plot_nd.py：
   用来绘制直方图，验证是否是正态分布。

4 计算结果

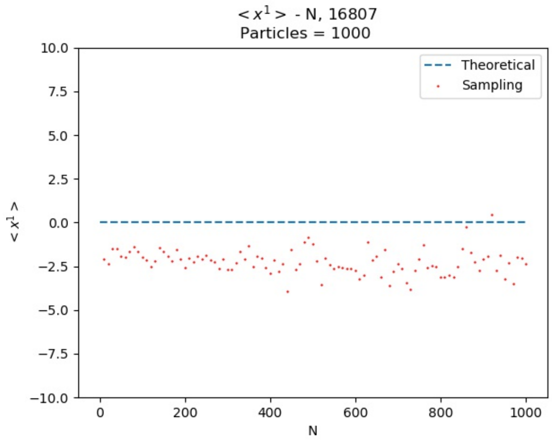
4.1 随机数生成器的选取

取coefficient=0，即无正弦外力场的影响。

先使用16807随机数生成器，结果如下所示：



(a) 起始值为rand()



(b) 起始值为m-rand()

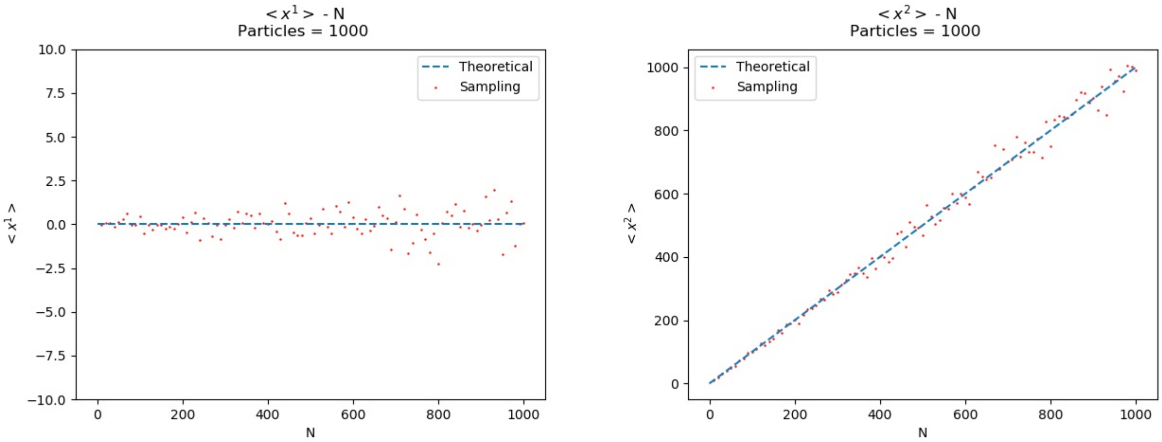
图 1: 16807随机数产生器求得的1阶距

可以看到，当16807种子值为随机数rand()时，对应的1阶距不为0。主要是因为rand()产生的16807随机数肯定要小于0.5，因此第一步必向正方向走，这就没有了随机性了。

为了验证上面的猜测是否正确，在第二章子图中，设置种子值为m-rand()，m是16807最大数。根据上面分析，得到的随机数肯定大于0.5，因此第一次必向左走，因此1阶距基本上是负的。符合我们的推断。

此外，16807之间也存在自相关的关系，因此本题中不适用16807作为随机数生成器，而直接使用C语言自带的rand()函数来生成随机数。

如下图所示，使用C语言自带的rand()函数来生成随机数：

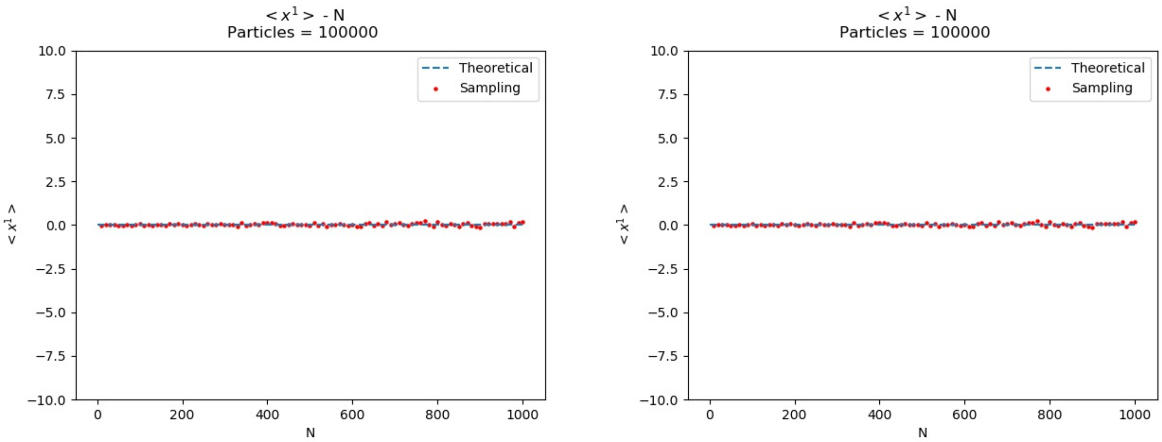


(a) 1阶距 (b) 2阶距

图 2: C语言自带的随机数产生器求得的1阶距

可见1阶距基本上在0附近，2阶距也符合理论的结果。但随着步数的增加，偏离理论值逐渐增大。这主要是因为点的个数选择较少，只有1000个粒子。

把粒子数增加到100000，如下图所示：



(a) 1阶距 (b) 2阶距

图 3: C语言自带的随机数产生器求得的1阶距

可见偏离理论值过大确实是因为点的个数选择得太少。

以后若无明确说明，点的个数都是100000个。

4.2 随机行走示意图

4.2.1 无正弦外力场影响下的随机行走

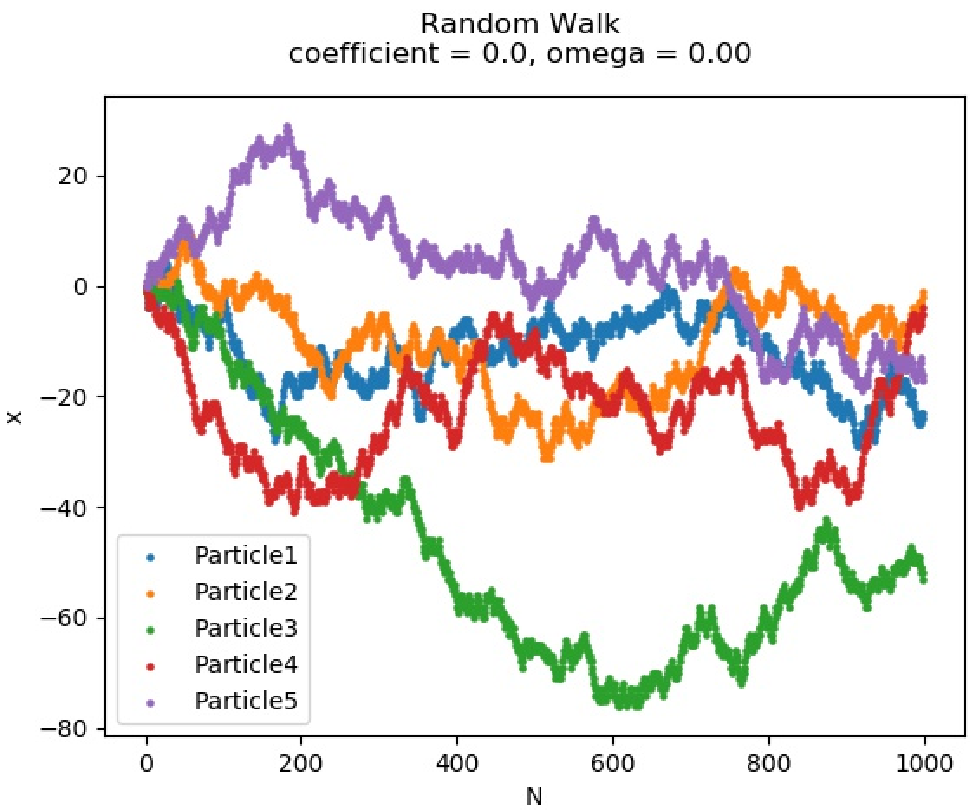


图 4: 无正弦外力场下的随机行走示意图

4.2.2 研究不同coefficient下的随机行走

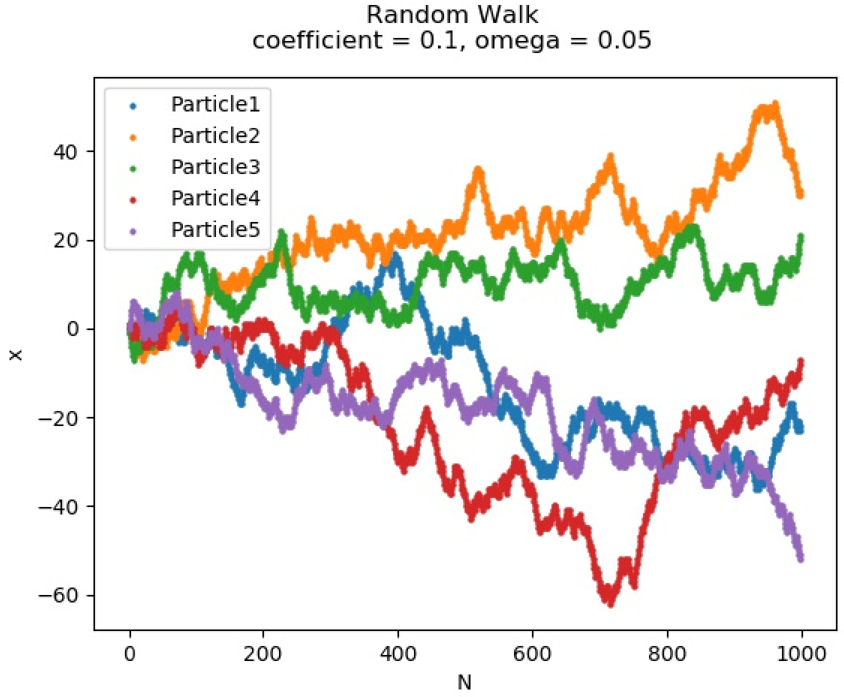


图 5: 随机行走示意图：c=0.1,ω=0.05

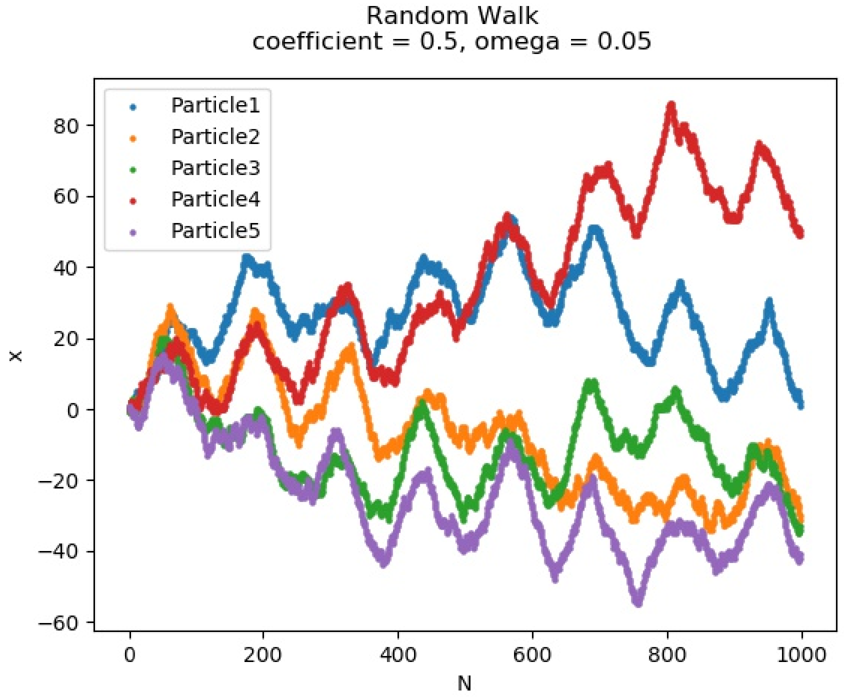


图 6: 随机行走示意图：c=0.5,ω=0.05

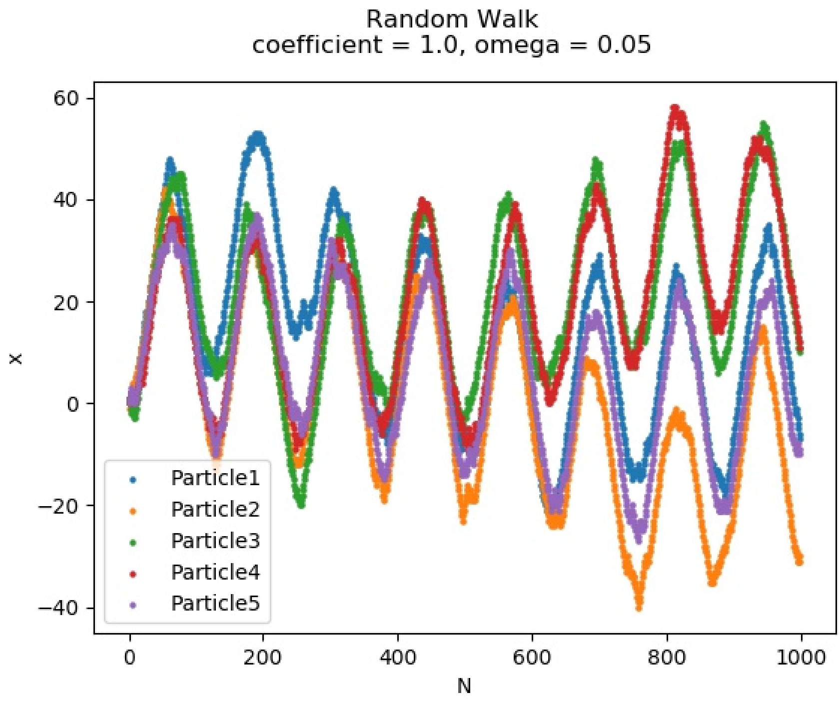


图 7: 随机行走示意图：c=1.0,ω=0.05

4.2.3 研究不同ω下的随机行走

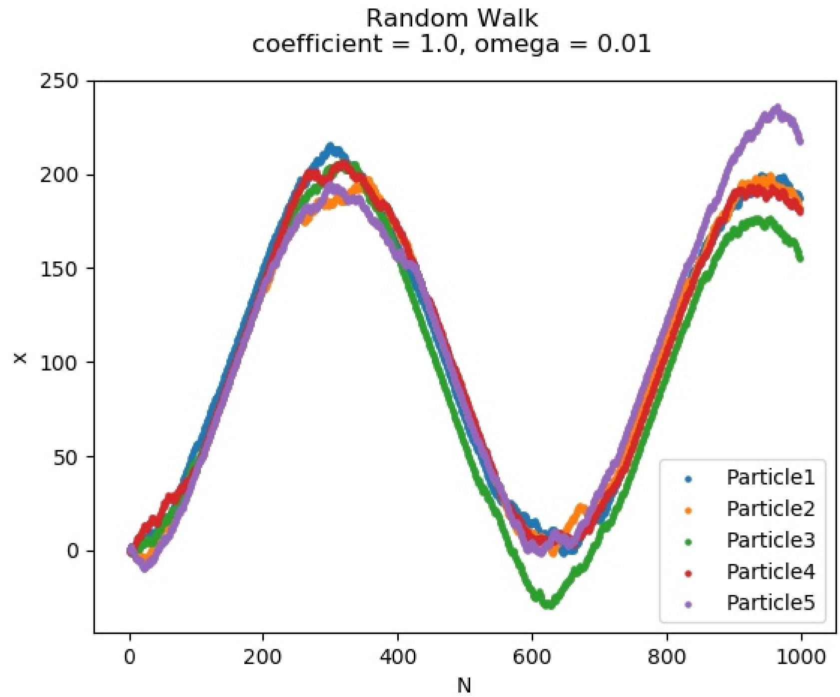


图 8: 随机行走示意图：c=1.0,ω=0.01

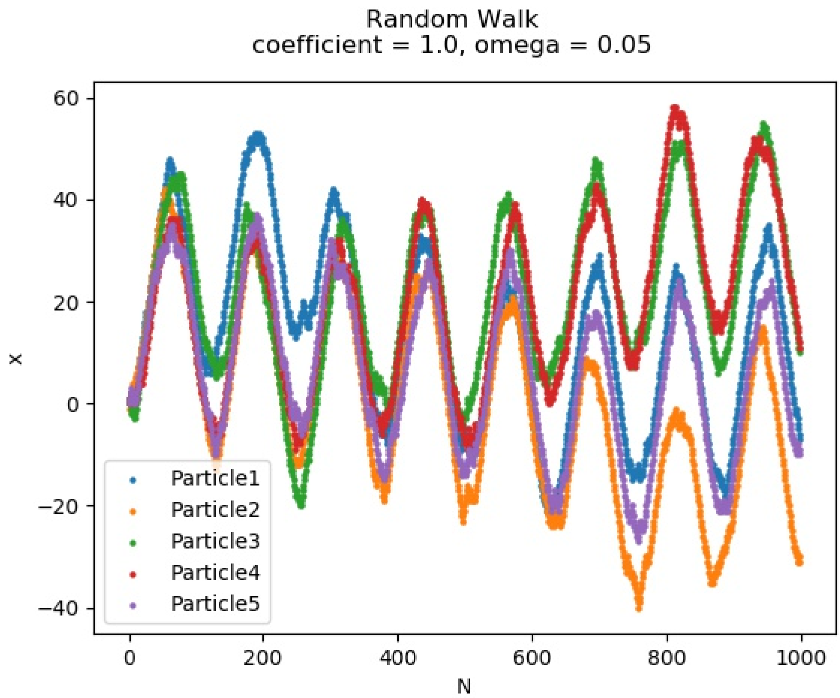


图 9: 随机行走示意图：c=1.0,ω=0.05

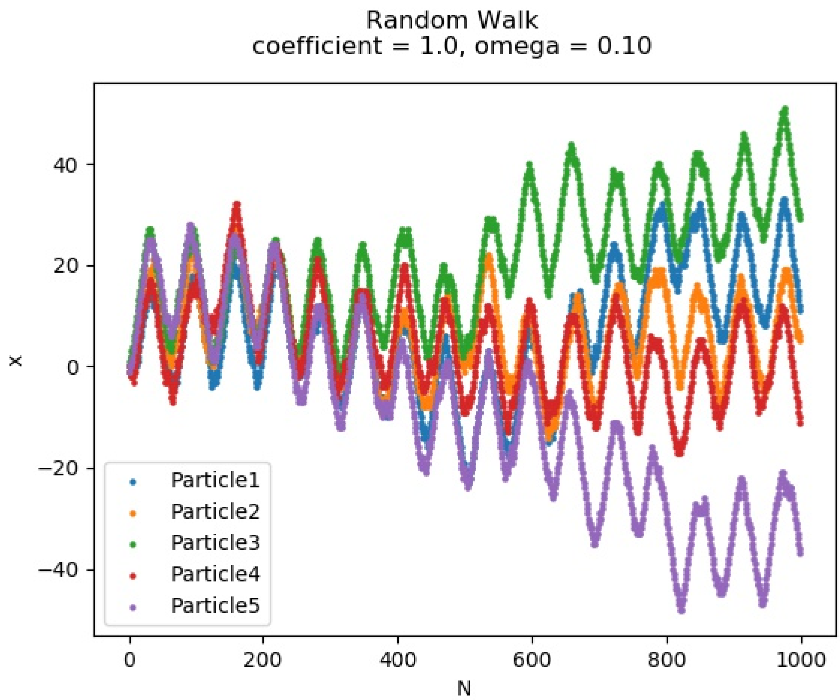
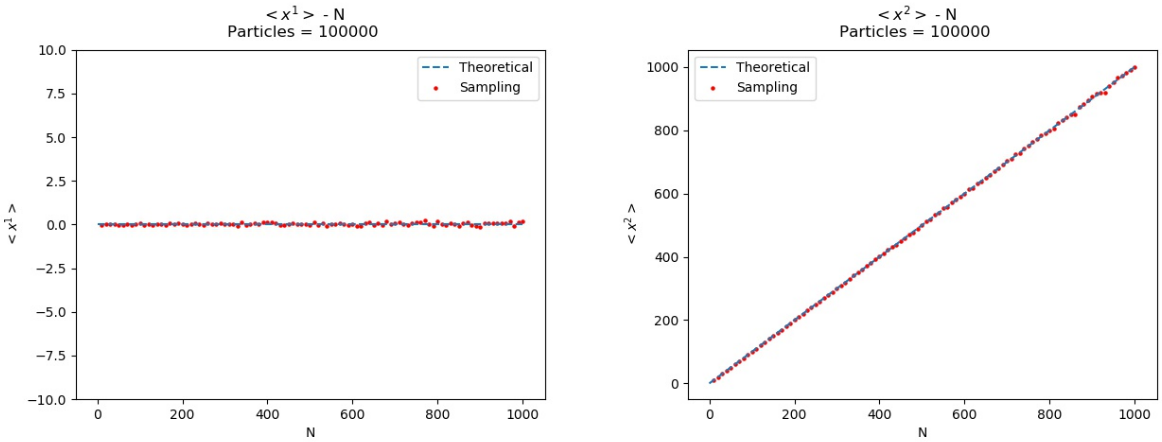


图 10: 随机行走示意图：c=1.0,ω=0.10

4.3 1阶距与2阶距

4.3.1 无正弦外力场影响下的1阶距与2阶距

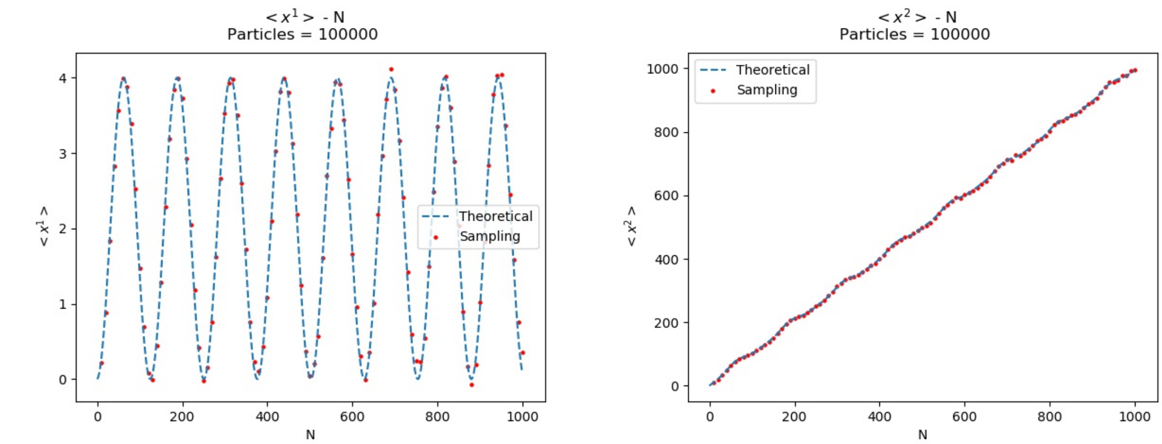
因为步长取的是10，因此并不是连续的点，可以在图中看到理论的曲线会有多的地方没有点。



(a) 1阶距 (b) 2阶距

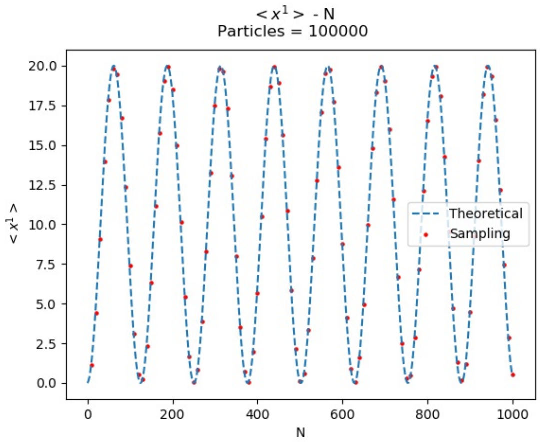
图 11: C语言自带的随机数产生器求得的1阶距

4.3.2 研究不同coefficient下的1阶距与2阶距

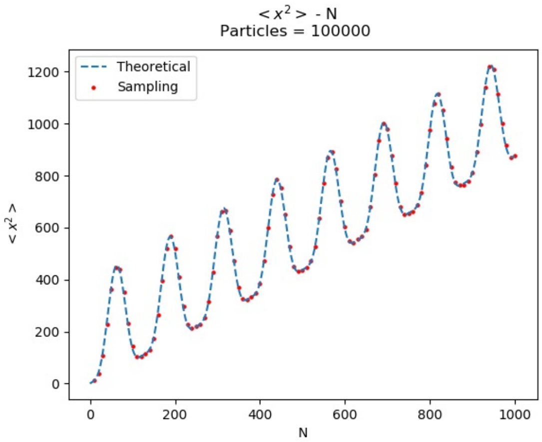


(a) 1阶距 (b) 2阶距

图 12: c=0.1,ω=0.05时的1阶距与2阶距

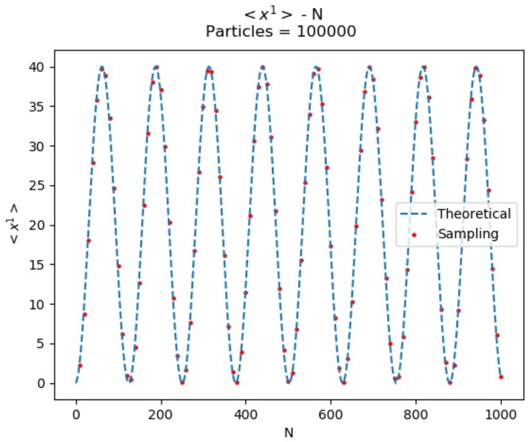


(a) 1阶距

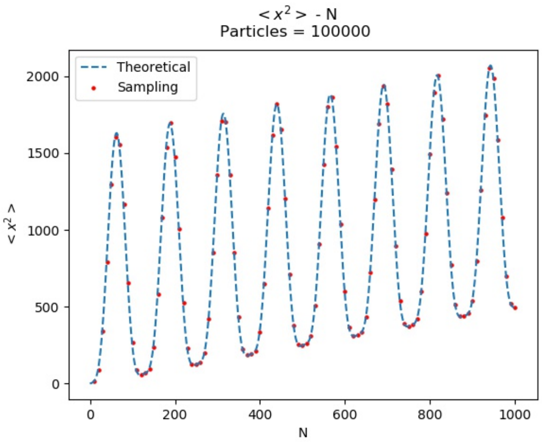


(b) 2阶距

图 13: c=0.5,ω=0.05时的1阶距与2阶距



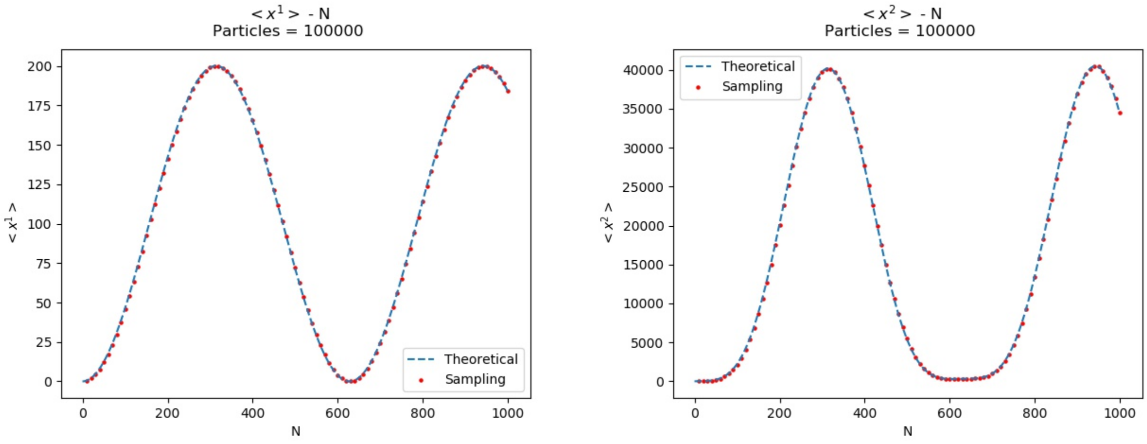
(a) 1阶距



(b) 2阶距

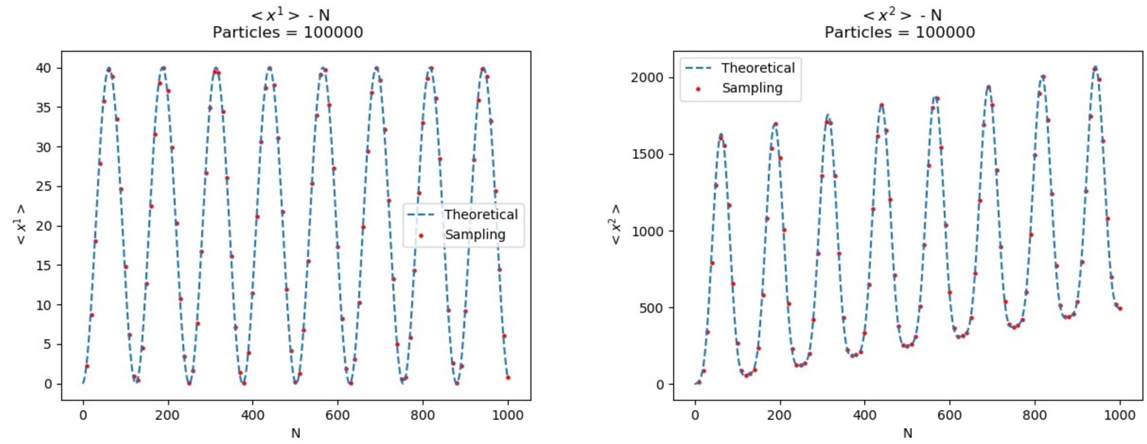
图 14: c=1.0,ω=0.05时的1阶距与2阶距

4.3.3 研究不同ω下的1阶距与2阶距



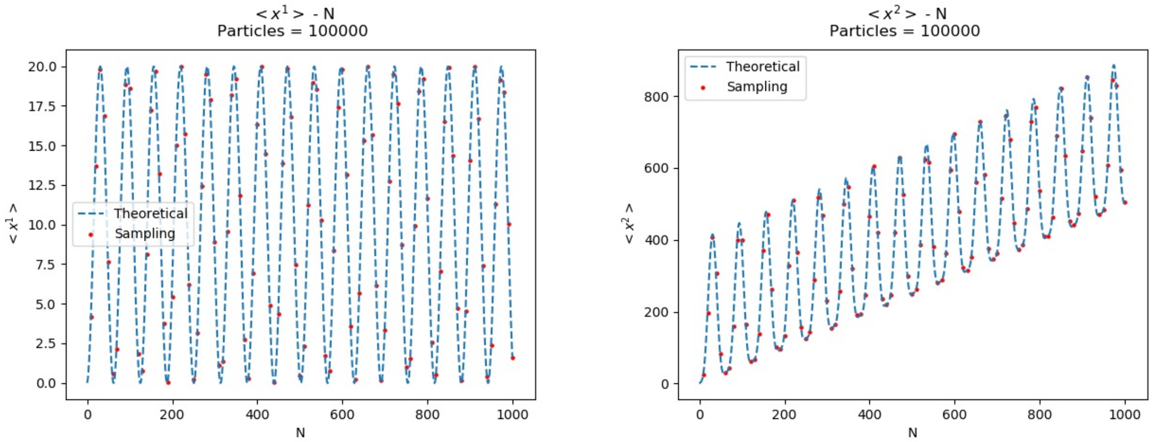
(a) 1阶距 (b) 2阶距

图 15: c=1.0,ω=0.01时的1阶距与2阶距



(a) 1阶距 (b) 2阶距

图 16: c=1.0,ω=0.05时的1阶距与2阶距



(a) 1阶距

(b) 2阶距

图 17: c=1.0,ω=0.10时的1阶距与2阶距

4.4 验证随机行走下的分布为正态分布

以下数据中，粒子总数为100000，每个粒子行走步数为1000。

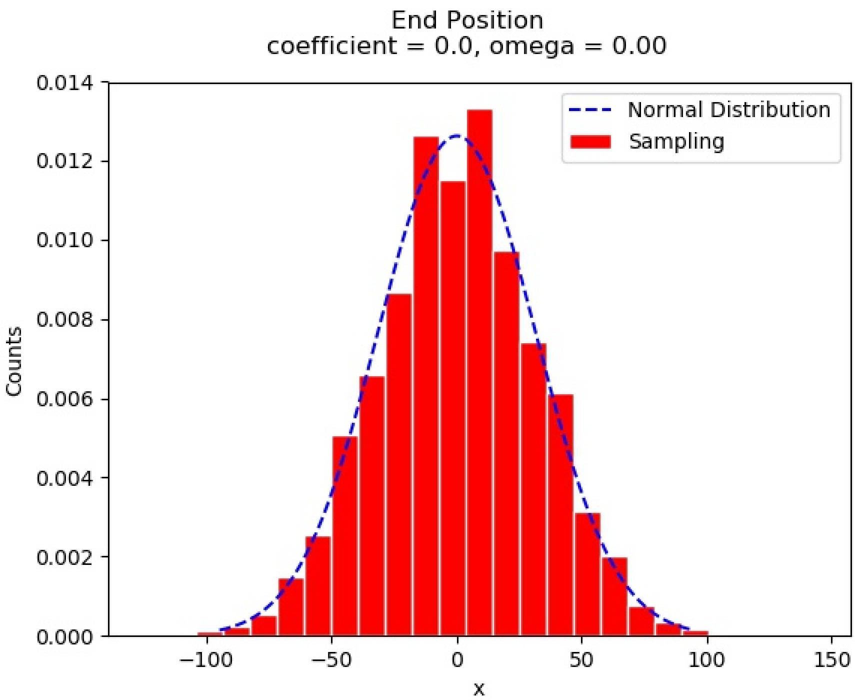


图 18: 无正弦外力场影响下的分布

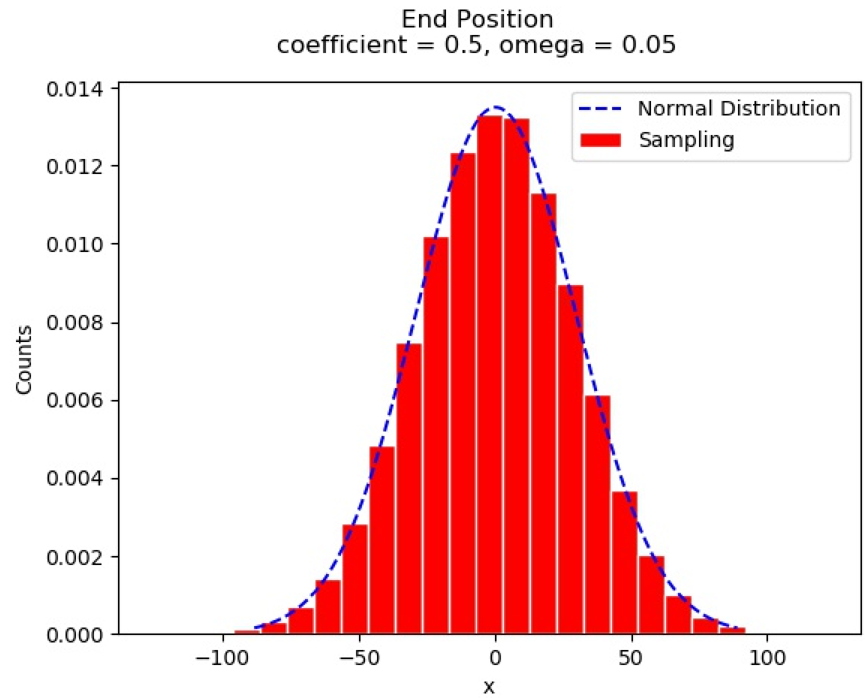


图 19: c=0.5,ω=0.05时的分布

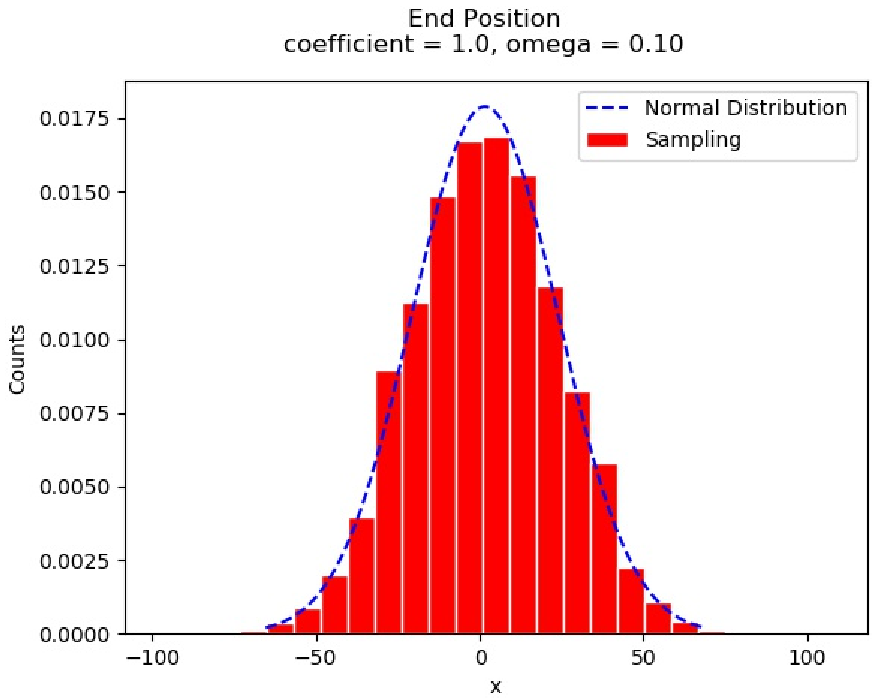


图 20: c=1.0,ω=0.10时的分布

5 讨论

5.1 原理的讨论

本次直接研究的是一维随机行走问题。

对于粒子来说，并不是在一维方向上随机行走，而是三维空间的随机行走。不过总可以选定正弦外力场的方向为x轴，则粒子只在该方向上不是等概率的随机行走，而在y和z方向上都是等概率的随机行走。因此直接研究x方向上即可，对于y方向和z方向直接套用等概率的随机行走的结论即可。

5.2 结果的讨论

5.2.1 随机数生成器的选取

在计算结果中的第一个部分（即第4面4.1：随机数生成器的选取）中可以看到，由16807随机数生成器产生的随机数进行随机行走的模拟的结果并不好。原因在4.1中已经分析，主要是因为16807随机数之间存在一定的相关关系，导致某些步骤是必然的而不是随机的。而C语言自带的rand()函数来生成随机数的结果更好。

因此在作业中选择的随机数生成器采用的是C语言自带的rand()函数。

此外，计算中也分析了随机数个数对结果的影响。由概率的知识可知，可以假设不同的粒子的距离和距离的平方都是独立同分布的，这样1阶距和2阶距的分布的标准差为相应粒子分布的标准差除以$\sqrt{N}$，N是粒子的个数。因此，粒子个数越多，拟合出来的结果越好。模拟的结果也证明了这点。

5.2.2 随机行走示意图

在计算结果的第二部分（即第6面4.2：随机行走示意图）中可以看到，正弦外力场对粒子影响的各种参数会对随机行走产生较大的影响。这参数也是之前提到的衡量正弦外力场的影响的参数coefficient和正弦外力场形式中自带的参数ω。

从结果中可以看出：

1. 当无正弦外力场影响时，粒子的随机行走基本上没有明确的规律。
2. coefficient的影响主要是随机行走路径与正弦形式的相似程度。coefficient越大，随机行走路径与正弦函数越相似，且“振幅”越大。
3. ω的影响主要是随机行走路径类似正弦形式的这种形式的“频率”。ω越大，随机行走路径的“频率”越大，且“振幅”越小。

以上的结果与直接分析在有正弦外力场的影响下的随机行走一样。

5.2.3 1阶距与2阶距

在计算结果的第三部分（即第10面4.3：1阶距与2阶距）中可以看到，拟合的结果与理论值基本一

样。理论值在原理部分在写到，即：

$$\langle x(N)\rangle = c\cdot\frac{\sin\frac{\omega N}{2}\sin\frac{\omega(N+1)}{2}}{\sin\frac{\omega}{2}} \tag{15}$$

$$\langle x^2(N)\rangle = (1-\frac{1}{2}c^2)N + c\cdot\left\{\frac{\sin\omega N\cos\omega(N+1)}{2\sin\omega}+\left[\frac{\sin\frac{\omega N}{2}\sin\frac{\omega(N+1)}{2}}{\sin\frac{\omega}{2}}\right]^2\right\} \tag{16}$$

结果中的步长选取的是10，因此并不是拟合出一条与理论曲线类似的曲线，但所有的点基本上都在理论曲线附近，因此拟合结果较好，理论值也算的是正确的。

此外，从结果中可以看出：

1. 当无正弦外力场影响时，粒子的1阶距为0，2阶距为线性的，即$\langle x^2(N)\rangle = N$。
2. coefficient的影响主要是1阶距和2阶距与正弦形式的相似程度与“振幅”。coefficient越大，1阶距和2阶距与正弦函数越相似，且“振幅”越大。
3. ω的影响主要是1阶距和2阶距类似正弦形式的这种形式的“频率”与“振幅”。ω越大，1阶距和2阶距“频率”越大，且“振幅”越小。

不过，以上所说的2阶距的正弦形式还有整体上的纵轴上的一种线性偏移，而不是中心一直在横轴上。偏移的量就是上述计算结果中的线性项，即$(1-\frac{1}{2}c^2)N$。且上述分析与随机行走路径中的分析一致，也从侧面证明自洽性。

5.2.4 验证随机行走下的分布为正态分布

在计算结果的第四部分（即第13面4.4：验证随机行走下的分布为正态分布）中可以看到，对于题目中的随机行走问题，不管coefficient和ω为多少，随机行走完粒子的分布皆为正态分布。coefficient和ω影响的只是正态分布的期望和方差而已，而不影响分布是不是正态的。

期望和方差在原理部分中推导过，即：

$$\mu = c\cdot\frac{\sin\frac{\omega N}{2}\sin\frac{\omega(N+1)}{2}}{\sin\frac{\omega}{2}} \tag{17}$$

$$\sigma^2 = (1-\frac{1}{2}c^2)N + c\cdot\frac{\sin\omega N\cos\omega(N+1)}{2\sin\omega} \tag{18}$$