Python 在随机过程中的应用

赵宇飞 2015301020041

（武汉大学 物理科学与技术学院 物理学基地班）

摘要：本报告主要研究随机行走与扩散的相关问题。先从二维单粒子系统入手，模拟单粒子的随机行走，进而模拟多粒子系统，得到与二维扩散现象相对应的结果。接着考虑各向异性的扩散，模拟多粒子系统在外场中的行为。

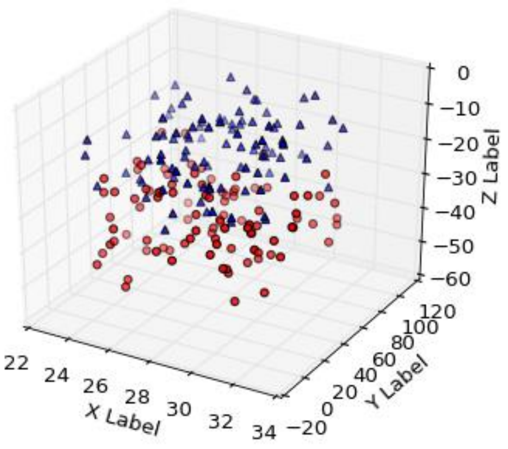
关键词：随机行走 布朗运动 扩散

引言

物理学中有一些系统，是确定性的系统，它们由某些准确的数学模型加上边界条件所描述，比如谐振子，它们有唯一确定解，而有另一些物理系统，它们不能用准确的表达式描述，其中，随机性扮演着非常重要的角色，这类系统一般成为**随机系统**。这类系统，一个明显的特征就是拥有非常多的自由度，或者与粒子数相关，或者与自旋相关。

随机系统的随机性来自很多方面，有可能因为无法同时确定所有粒子的位置和速度,有可能因为外部作用力非常复杂，而只能用概率来描述，等等。因而，尽管这些系统背后的物理是确定的，但由于对系统无法完全掌握，我们只能得出一个统计性或者随机的描述。

一个代表性的随机问题是扩散问题，扩散是一种常见的随机过程。在扩散现象中，每个粒子的运动都可看作独立的随机行走。因此，随机行走与布朗运动类似，是布朗运动的理想数学状态。尽管在模拟随机行走的过程中，不考虑粒子服从的真实动力学规律，但当模拟的时间足够长、模拟粒子数足够多后，就可以准确的描述真实系统的统计学规律。

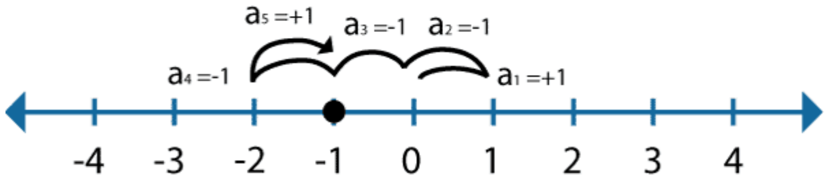


三维中的随机性

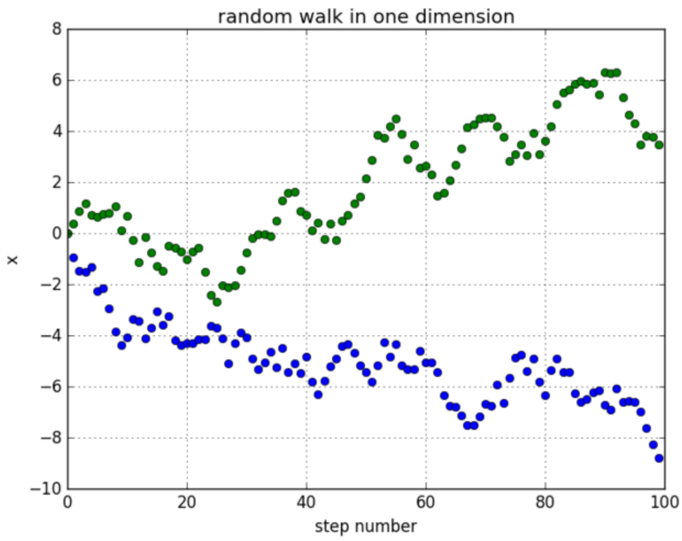
正文

随机性是缺乏模式或事件的可预测性。一个随机的事件序列，符号或步骤没有秩序，不遵循一个可理解的模式或组合 。

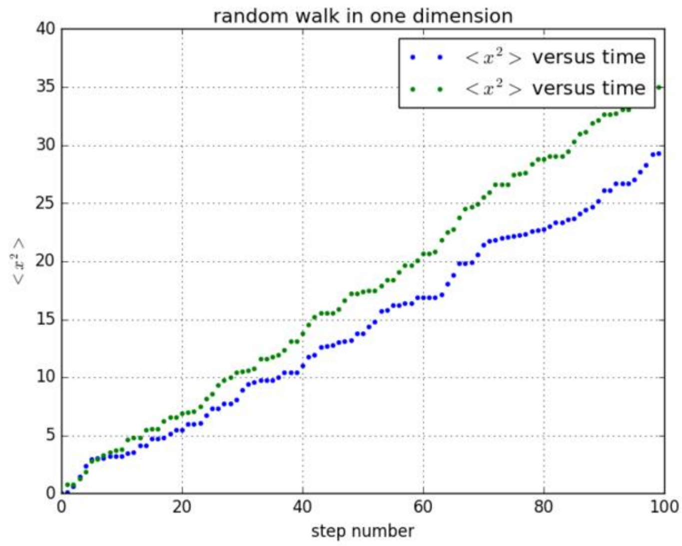
最简单的理解是一个一维随机行走行走。假设下面的黑点位于一条数字线上。黑点开始在中心。然后，它向前或向后迈出一步，等概率。它每次都采取向前或向后的步骤。我们称之为第一步 A1，第二步 A2，第三步 A3 等。每个 A 都等于+1（如果步骤是向前的）或-1（如果步骤是向后的）。



下面是 python 下的模拟结果：

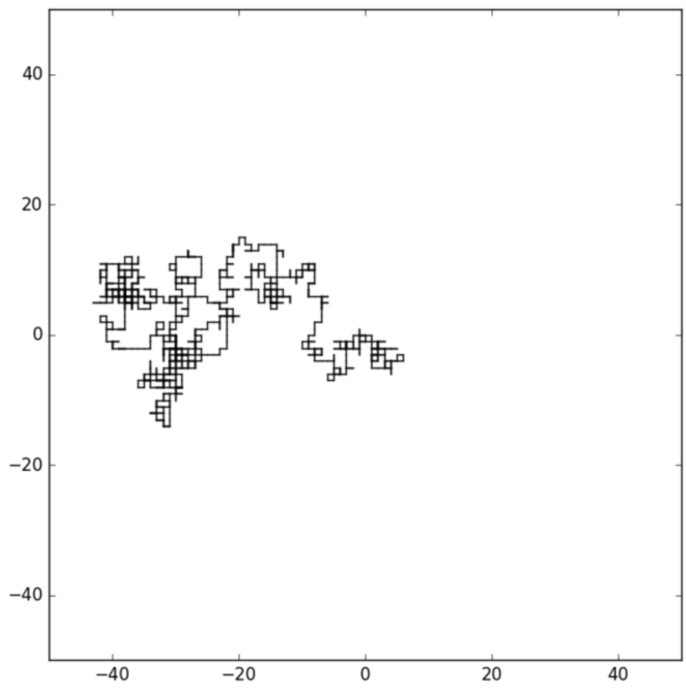


$x-t$

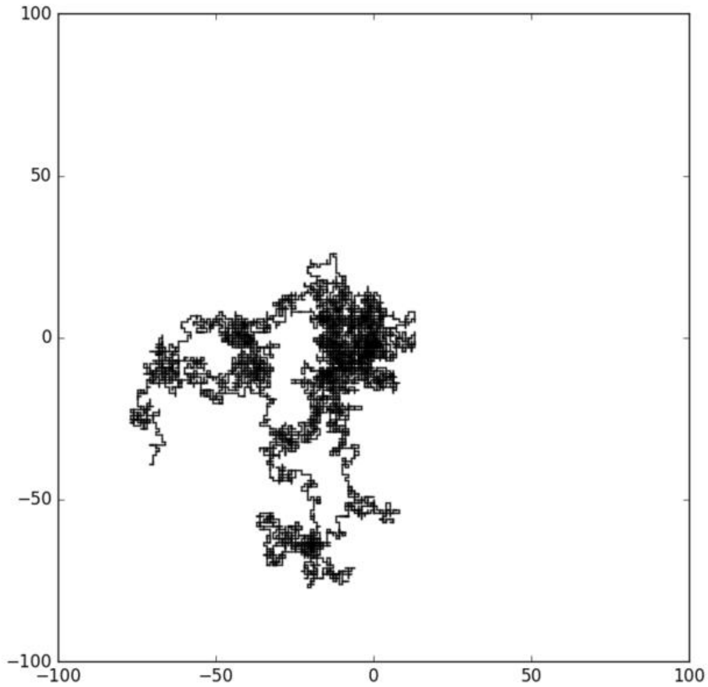


x^2-t

接着考虑单个粒子的二维随机行走。粒子进行分步的运动，每次可朝着上下左右四个方向移动，并且每个方向的几率和移动距离都一样。假设粒子初始时刻位于原点，下图画出了两次独立运动的轨迹，分别为 1000 和 10000 步。

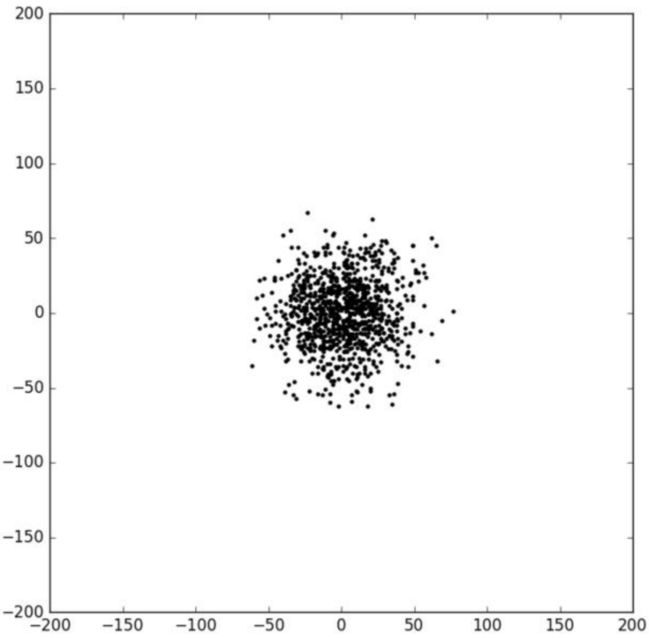


t=1000

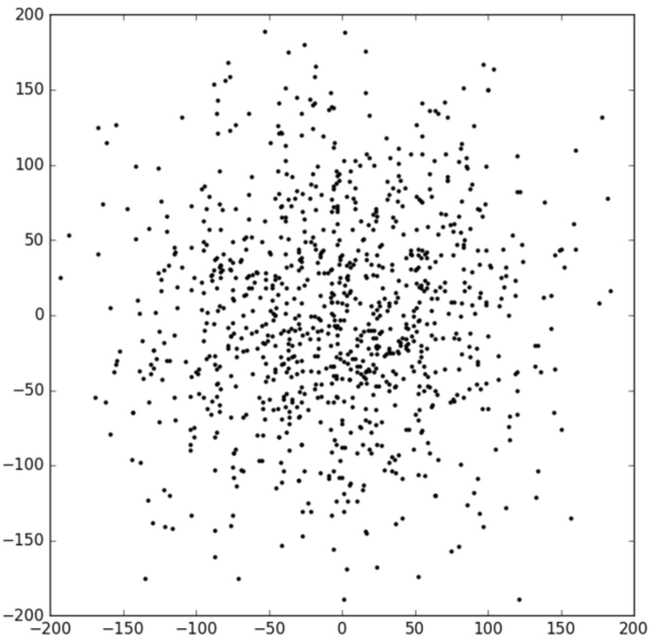


t=10000

现在同时考虑多次随机行走，可看做一个多粒子体系，且粒子之间的随机行走是独立的。下图模拟了包含 1000 个粒子的体系，在运行了一定时间 t=1000 和 t=10000 后的粒子分布。为了叙述方便，将模拟的步数等同为时间 t。

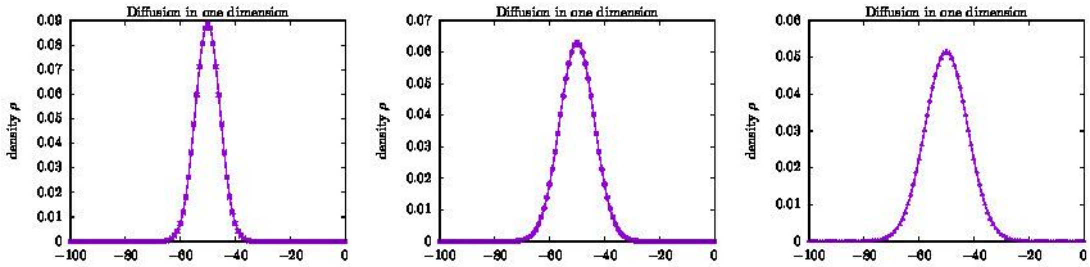


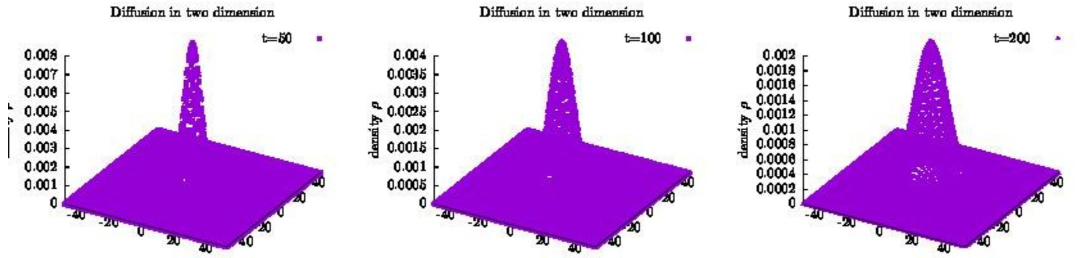
t=1000

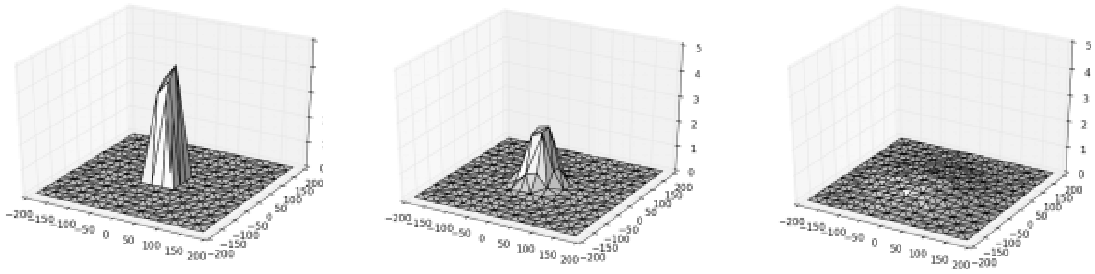


t=10000

从上图中可以清晰而直观地看出，粒子有远离原点的倾向。随着模拟时间增加，粒子的分布范围增大，这正是扩散现象的表现。但是无论时间有多长，越靠近原点的地方，粒子数密度越高。为了直观考察这一数密度的分布特点，将平面划分成 25×25 的格子，计算每格内的平均数密度，以此作为该格中心的数密度，画出三维的密度分布图。为了使图像更平滑，考虑 10000 个粒子进行一定时间的随机行走后分布图。







t=100 t=1000 t=10000

概率密度分布是高斯型的，而且宽度是与时间相关的，扩散时间越长，波形越扁，这与我们通常的认知是符合的。在左图中，数密度平面在中心处只有一点隆起，这也说明在 t=10000 时，粒子扩散已经非常充分，中心处的数密度已远小于初始时刻。

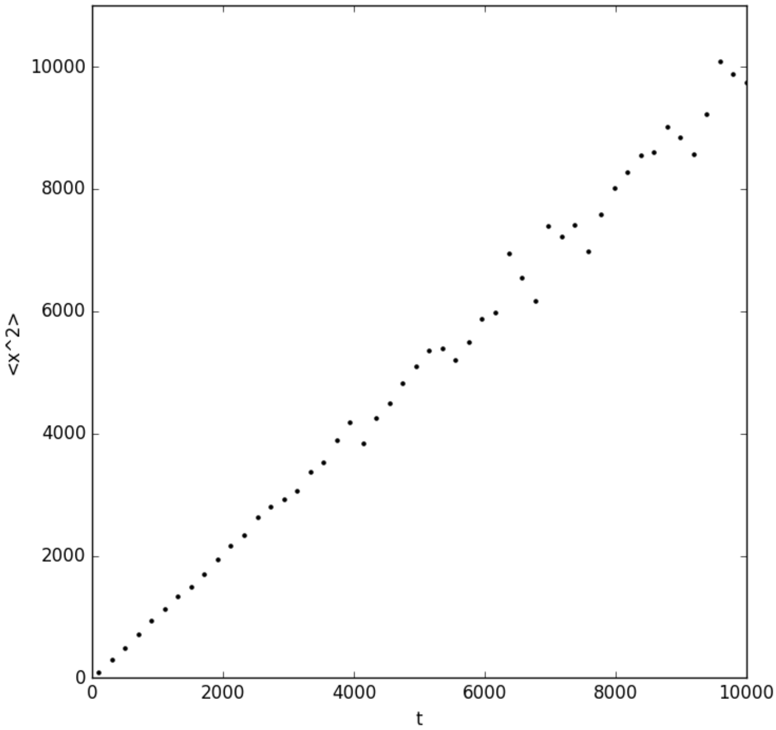
为了进一步说明粒子与原点偏离程度随时间的变化，计算粒子与原点距离的平方平均，即

$$\overline{x^2}(t) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}[r_i(t)]^2$$

其中

$$r_i^2 = x_i^2 + y_i^2$$

需要指出的是，对于每一个时间 t 的结果，程序都是重新从 t=0 开始模拟的，但在粒子数足够多的情况下，并不影响问题的实质。下图画出了 1000 个粒子的体系中，粒子位移平方平均与时间的关系。



从图中可以看出，x^2 平均值的与 t 呈正比关系，且直线斜率为 1，这与课本的结论一致。并且由扩散系数 D 与 x^2 均值的关系可知，扩散系数：

$$\mathrm{D} = \frac{\overline{x^2}}{2t} = \frac{1}{2}$$

结语

随机行走（random walk）又名随机游走，它是布朗运动的理想数学状态。事实上，任何无规则行走者所带的守恒量都各自对应着一个扩散运输定律。尽管任何单次步骤不会遵从扩散定律，但只要等待足够长的时间和步骤，便可精确预测无规则行走。布朗运动就是无规则行走这一现象的宏观观察。通过程序实现模拟大量粒子的随机行走行为，可以让我们直观地了解扩散现象的特点，并认识到扩散现象拥有局部运动的随机性与宏观量的确定性。

参考文献

Nicholas J. Giordano, Hisao Nakanishi, Computational Physics(Second Edition).