计算物理第11-1题

PB18000039 徐祺云

一 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?

二 算法及主要公式

模型

在d维空间内，粒子作等概率随机行走：$d=1$时粒子在一条直线上随机行走，每次移动固定步长定作单位长度，向左或向右跨一步长的概率相等为1/2；$d=2$时粒子在二维平面正方形网格上作随机行走，每次移动固定步长定作单位长度，向上下左右跨一步长的概率相等为1/4；$d=3$时粒子在三维空间方网格中作随机行走，每次移动固定步长定作单位长度，向上下前后左右跨一步长的概率相等为1/6。

算法实现

运行$main.c$：以一维为例($d=1$)，对每一个粒子的每一步，使用16807随机产生器产生$[0,1]$中的随机数ξ，若$\xi<1/2$则粒子向左走一步，否则向右走一步；选取足够多的粒子(num个)做上述过程，对于第n步，统计返回原点的粒子数(res)，可以得到第n步返回原点的几率$P_d(n)=\dfrac{res}{num}$。

对二维三维($d=2,d=3$)同理，多做一个($d=2$)或两个($d=3$)随机数判断y/z方向的行走，具体行走规则如下：

$$d=1:\begin{cases} x+=1 & \xi_1\in[0,0.5) \\ x-=1 & \xi_1\in[0.5,1] \end{cases}$$

$$d=2:\begin{cases} x+=1 & \xi_1\in[0,0.5) \\ x-=1 & \xi_1\in[0.5,1] \\ y+=1 & \xi_2\in[0,0.5) \\ y-=1 & \xi_2\in[0.5,1] \end{cases}$$

$$d=3:\begin{cases} x+=1 & \xi_1\in[0,0.5) \\ x-=1 & \xi_1\in[0.5,1] \\ y+=1 & \xi_2\in[0,0.5) \\ y-=1 & \xi_2\in[0.5,1] \\ z+=1 & \xi_3\in[0,0.5) \\ z-=1 & \xi_3\in[0.5,1] \end{cases}$$

$$\xi_1,\xi_2,\xi_3\ are\ the\ random\ numbers\ in[0,1]$$

理论分析

显然，粒子若能返回原点，其步数必定为偶数(以一维为例反证，若返回到原点步数为奇数，则向左和向右的步数必然不可能相等，矛盾)。

先考虑一维情况下一个一般性的问题：一维随机行走向右概率p，从a出发第n步到达b的概率为多少？

考虑初态和末态，n步从a到达b，其中向右走了$r=(n+b-a)/2$步，向左走了$l=(n-b+a)/2$步，那么概率

$$\mathbb{P}\left(S_n=b\right)=\begin{pmatrix} n \\ \frac{1}{2}(n+b-a) \end{pmatrix} p^{\frac{1}{2}(n+b-a)}q^{\frac{1}{2}(n-b+a)}$$

对于本题，一维情况下等概率随机行走n步返回原点的概率为

$$P_1(n)=\begin{pmatrix} n \\ \frac{n}{2} \end{pmatrix}\frac{1}{2^n}=\frac{1}{2^n}\frac{n!}{(\frac{n}{2})!(\frac{n}{2})!}$$

对于高维情况，以二维为例，设n步中$2k$步上下行走，$n-2k$步左右行走，其中向上/向下k步，向左/向右$(n-2k)/2$步，则等概率随机行走n步返回原点的概率为

$$
\begin{aligned}
P_2(n) &= \sum_{k=0}^{n/2} \begin{pmatrix} n \\ 2k \end{pmatrix} \frac{1}{2^n} \begin{pmatrix} 2k \\ k \end{pmatrix} \frac{1}{2^{2k}} \begin{pmatrix} n-2k \\ \frac{n-2k}{2} \end{pmatrix} \frac{1}{2^{n-2k}} \\
&= \sum_{k=0}^{n/2} \frac{1}{4^n} \frac{n!}{(k!)^2[(\frac{n}{2}-k)!]^2}
\end{aligned}
$$

同理，三维随机行走：

$$
P_3(n) = \sum_{k=0}^{n/2} \sum_{l=0}^{(n-2k)/2} \frac{1}{6^n} \frac{n!}{(k!)^2(l!)^2[(\frac{n}{2}-k-l)!]^2}
$$

定义相关指数值：

$$
P_d(N) = AN^B
$$

先从理论上定性分析一下指数值的大小。当n足够大时，由斯特林公式知

$$
n! \sim \sqrt{n} n^n
$$

例如对$d=1$，$n \to \infty$，$P_1(n) = \frac{1}{2^n} \frac{n!}{(\frac{n}{2})!(\frac{n}{2})!} \sim \frac{\sqrt{n} n^n}{2^n \cdot (\frac{n}{2})^{n+1}} \sim \frac{1}{n^{0.5}}$

同理知$n \to \infty$，$P_2(n) \sim \frac{1}{n}$，$P_3(n) \sim \frac{1}{n^{1.5}}$

对数据的处理：在下式两边取对数，

$$
P_d(N) = AN^B
$$

$$
\log P_d(N) = \log A + B \log N
$$

最小二乘法做线性拟合即可得到指数值B。

三　计算结果与分析

对于$d=1,2,3$，分别取步数$N=800,200,100$，总模拟粒子个数为100000个。由(二)中理论分析，步数为奇数时概率为零，所以作图时只取步数为偶数的点$(2,4...)$，结果如下：

$d = 1$:取步数$N = 800$，总模拟粒子个数10^5个：

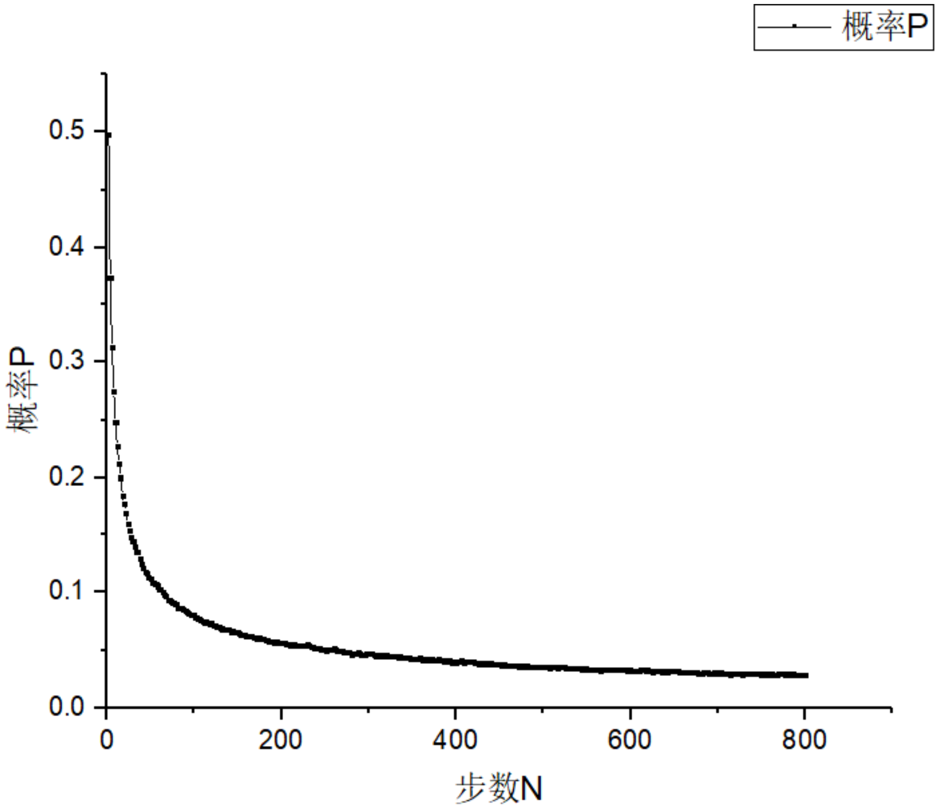

图 1: d=1时返回几率$P_d(N) - N$图，种子 565499710

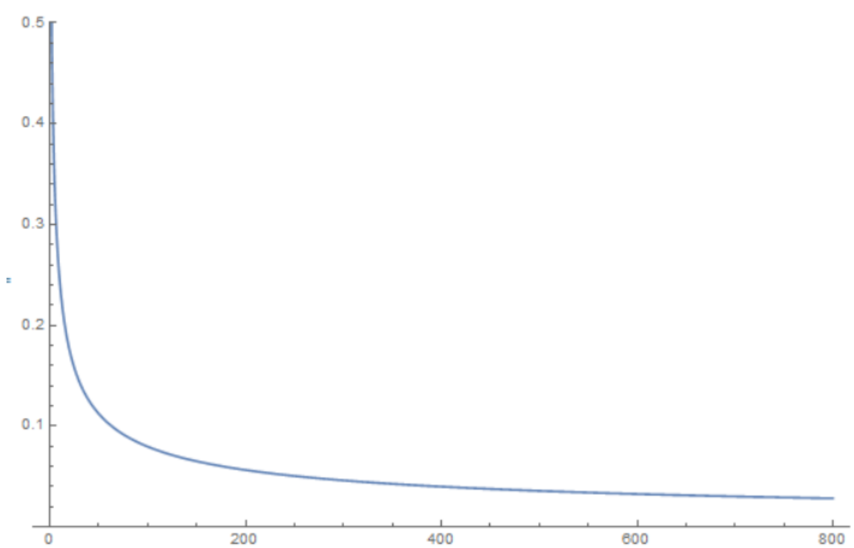

图 2: d=1时$P_d(N) - N$理论图像

$d = 2$:取步数$N = 200$，总模拟粒子个数10^5个：

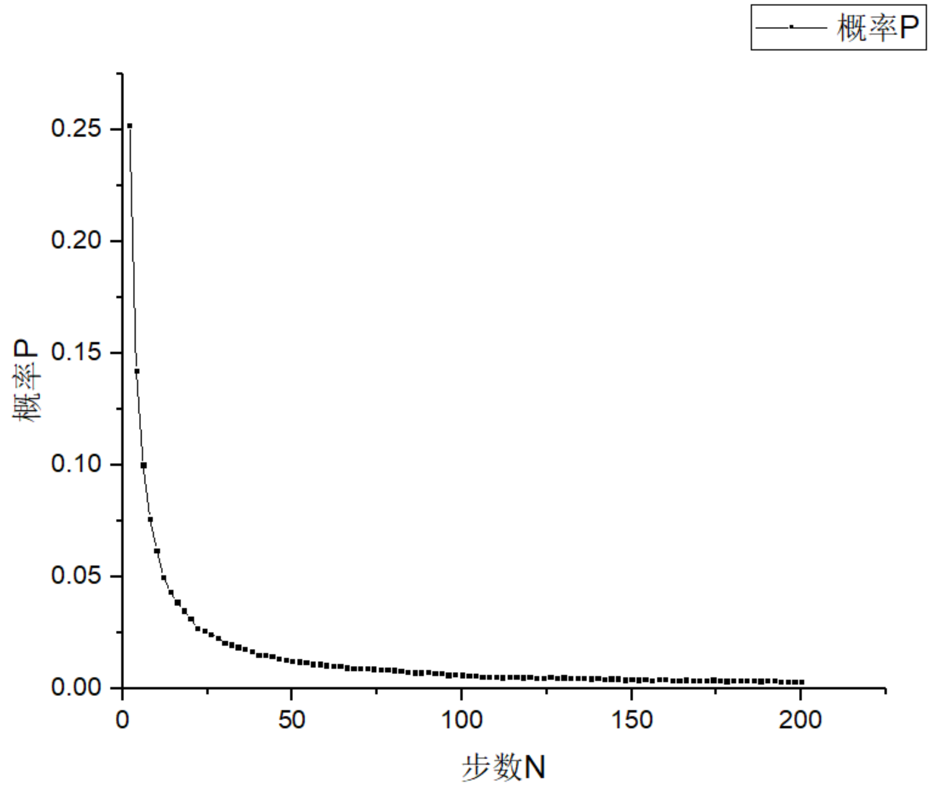

图 3: d=2时返回几率$P_d(N) - N$图，种子 614663230

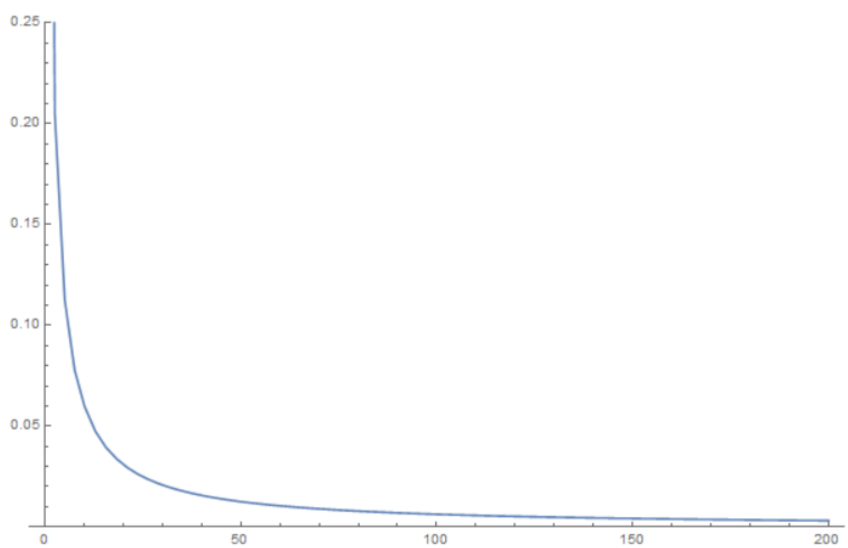

图 4: d=2时$P_d(N) - N$理论图像

$d = 3$:取步数$N = 100$，总模拟粒子个数10^5个：

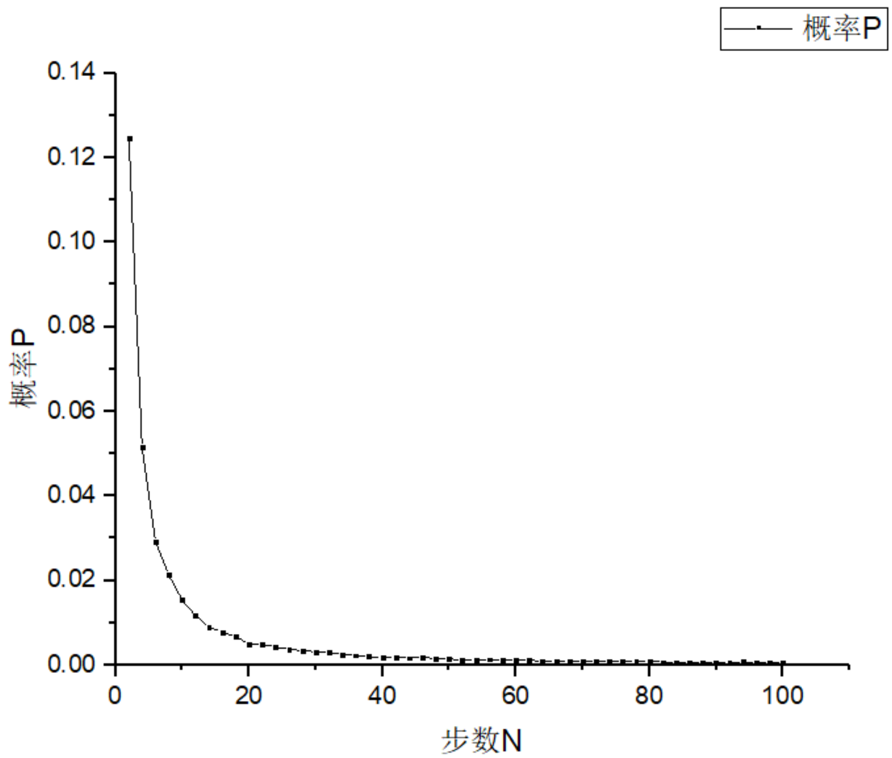

图 5: d=3时返回几率$P_d(N)-N$图，种子 685335790

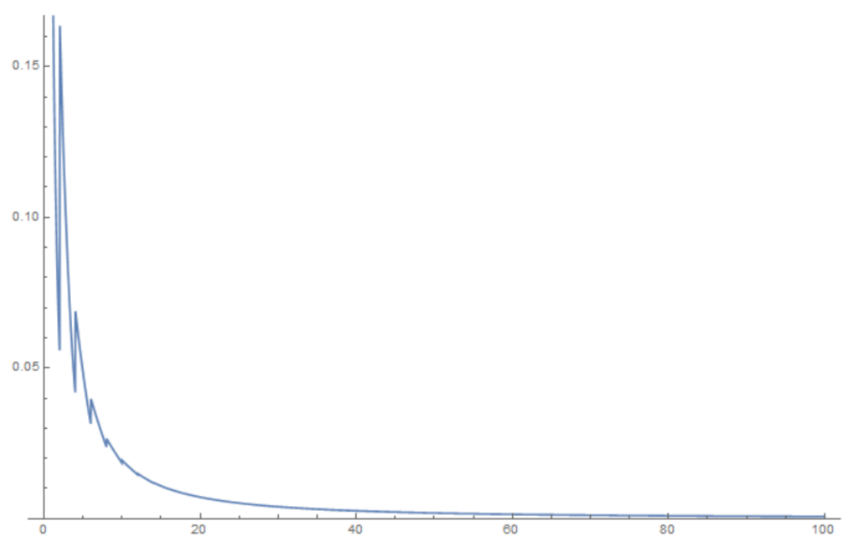

图 6: d=3时$P_d(N)-N$理论图像

观察看出，$d=1,2,3$维时理论图像与模拟得到的图像趋势相像(由于计算精度的原因，这里在Mathematica里画的理论图像，发现$d=3$N较小时出现因插值算法引起的抖动，不过不妨碍与计算图像的比较)。定性地，我们发现，随着步数N的增大，返回几率$P_d(N)$趋于0;

维度越高时，$P_d(N)$随步数N衰减得越快.

下面作对数处理来计算指数值：

把(P,N)导入EXCEL中，计算 $(log10P, log10N)$，最小二乘法作拟合直线图，斜率k即为指数B:

$d=1$时:

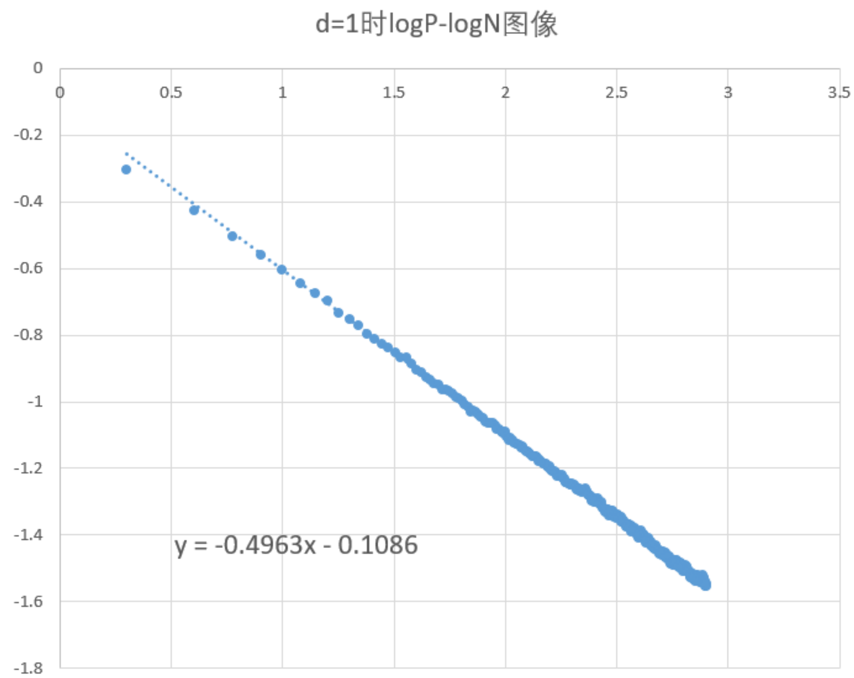

图 7: d=1时$logP_d(N)-logN$拟合图像

$d=2$时:

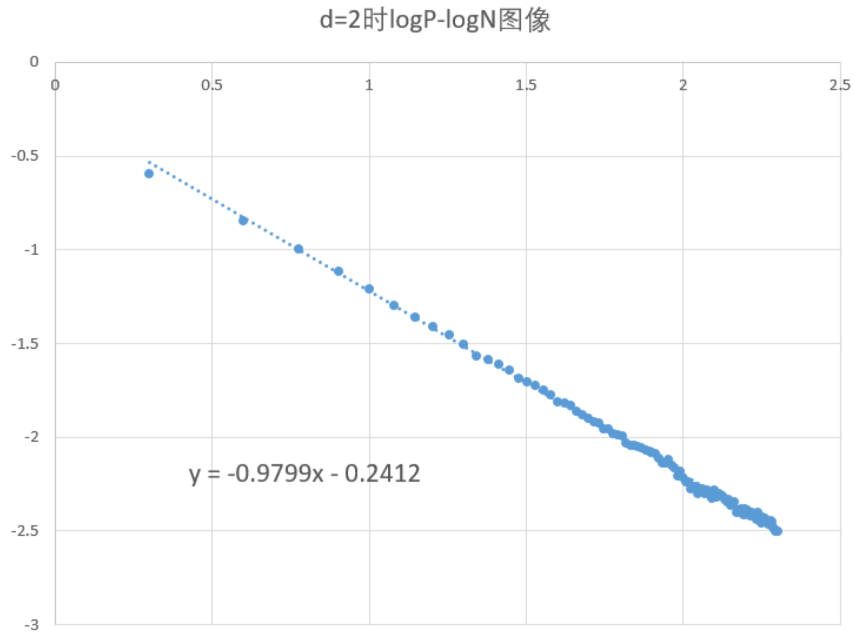

图 8: d=2时$logP_d(N) - logN$拟合图像

$d = 3$时:

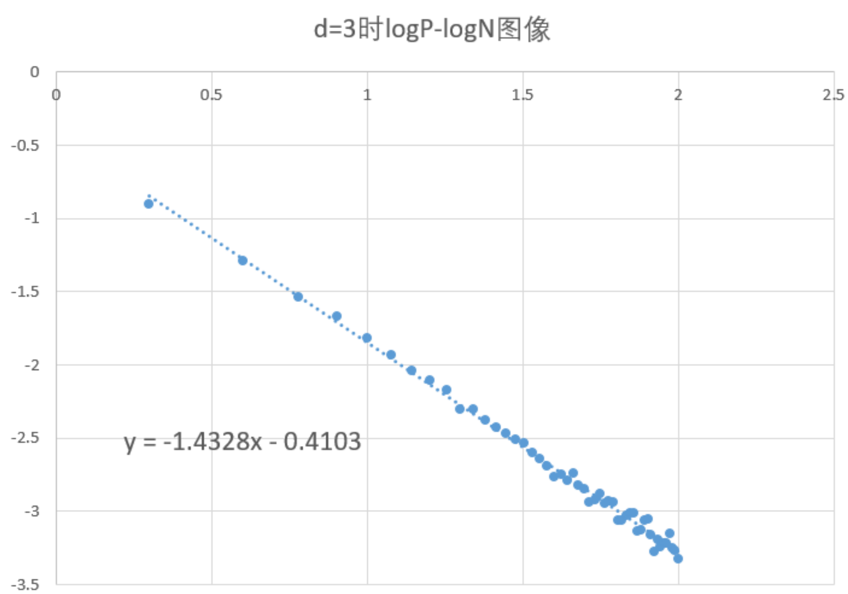

图 9: d=3时$logP_d(N) - logN$拟合图像

得到指数值：

d	1	2	3
B	-0.4963	-0.9799	-1.4328

这和理论分析中的估计相近，即约为$-0.5, -1, -1.5$，出现偏差的原因可能是取步数N不够多。可以猜测，对于d维随机行走，返回原点的几率P_d和步数N的关系：$P_d \propto N^{-d/2}$

四　结论

本题模拟了d维($d = 1, 2, 3$)随机行走过程，分别计算得到了$N = 800, 200, 100$步下返回原点的几率P_d，并与理论得到的几率作比较，发现曲线吻合性良好。定性地，随着步数N的增大，返回几率$P_d(N)$趋于0；维度越高时，$P_d(N)$随步数N衰减得越快。此外，假设几率与步数有指数关系，发现返回原点的几率P_d和步数N近似满足：$P_d \propto N^{-d/2}$，可以定义相关指数值。