

随机行走以及溶解过程的计算机模拟

黄梓宸 2015301020149

(武汉大学 物理科学与技术学院 物基二班)

摘要: 基于随机性原理, 本文使用 Python 语言对一维的等概率和不等概率的随机性行走进行了模拟, 并对随机行走的位置概率分布、平均距离、方均距离与时间的关系进行了计算, 得到了和理论相符的结果。同时本文还得出基于随机行走原理的扩散方程, 并使用扩散方程对一维、二维下的扩散问题进行了计算机模拟。

关键词: 随机行走; 扩散过程; 计算机模拟;

Computer simulations of random walks and Diffusion process

HuangZichen 2015301020149

(School of Physics and Technology, Wuhan University)

Abstract: Based on the principle of randomness, the simulations of one-dimensional equal and unequal random walks are conducted using Python. The probability distribution of random walks, the average distance, and the average square distance are also calculated and yield same results with the theory. We derive the diffusion equation basing on the random walks process and use it to simulate the diffusion process in one-dimension and two-dimension.

Key words: random walks; diffusion process; computer simulation;

1. 引言

本次实验我们探讨的主题是随机过程, 它相较于我们在之前章节学习的内容有着本质的不同。回顾本学期在计算物理课上我们遇到的问题, 无论是人口模型、炮弹轨迹、行星运动, 亦或是静电场的描绘, 我们所探讨的问题都是“确定”的, 所谓“确定”可以理解为: 我们所讨论的问题都服从着确定的数学关系或者说微分方程。比如对于一个炮弹, 在给定了初始位置和速度后, 结合由牛顿第二定律我们可以获得炮弹轨迹从的微分方程并由此得到任意时刻炮弹的位置和速度; 同样, 如果给定了电势的边值条件, 我们可以由拉普拉斯方程唯一的确定出电势的分布和电场的分布。以上问题的“确定”性在计算机上也得到了体现, 当我们将系统服从的微分方程输入程序后, 无论运行多少次都能得到一样的轨迹或相同的电势。

随机过程与确定过程是截然相反的。人类观察到的一个典型的随机过程便是显微镜下花粉的运动。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，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。从原则上讲，花粉的运动遵从牛顿第二定律，如果我们知道了花粉间的相互作用力我们是可以解微分方程的方式计算出所有粒子的运动轨迹的，但所有花粉的运动自由度是巨大的，无论是解析的方法还是数值计算都是及其艰难甚至无法完成的，所以虽然花粉的运动原则上是确定的，我们还是假设所有花粉的运动都是随机的。更进一步，对于微观尺度下的粒子，根据量子力学的哥本哈根解释，它们从原理上就是不可能的预测的。

由以上的两个例子我们可以看出，在物理学中有些问题我们无法得到确定的结果，对于这些随机过程我们可以通过计算机模拟并结合概率论的相关知识，得出统计性的结果。

2. 随机行走

2.1 等概率下的随机行走

无论是花粉的运动还是我们之后要讨论的方糖扩散问题，它们最核心的本质就是组成它们的单个粒子的随机行走。在这里我们模拟粒子在一维条件下的随机行走，假设初始时刻粒子处在 $x = 0$ 的位置，每一步运动都有两种可能：向左($x - 1$)和向右($x + 1$)，粒子向左和向右的概率是相等的。通过Python内置的random模块可以轻松的实现此功能，我们模拟了两个粒子的运动，并进行了四次模拟，如图 1所示：

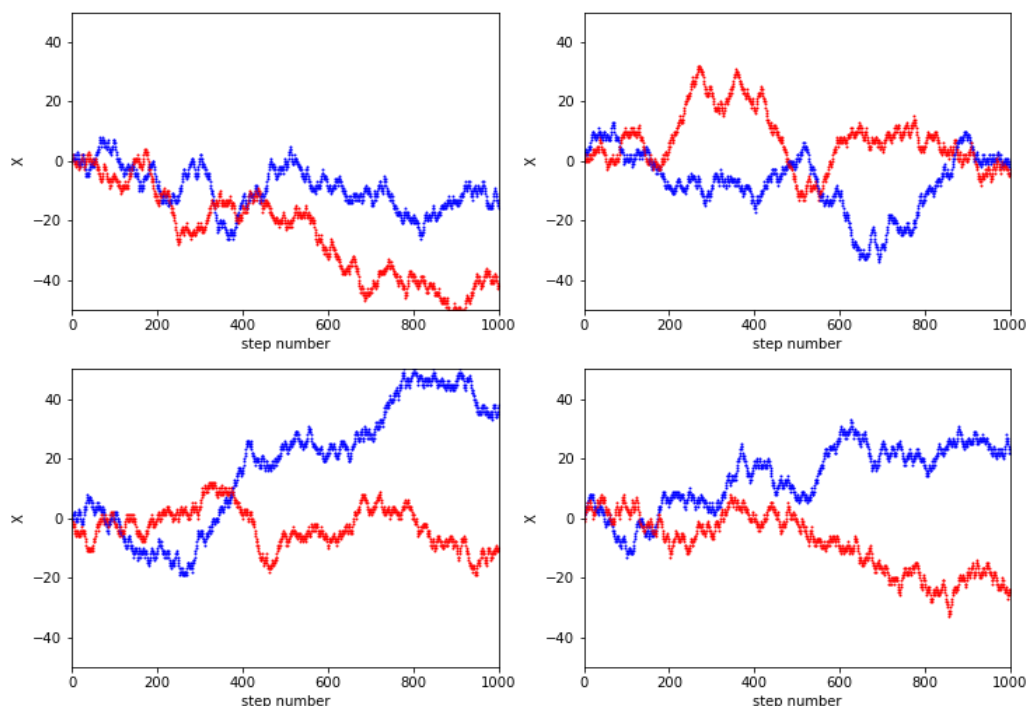


图 1：两个粒子的一维随机行走，共行走 1000 步

我们可以看到，每次模拟粒子的轨迹都不一样，它们大部分在原点附近徘徊，但偏离原点的距离有的大的有的小的，似乎缺少规律性。事实上，我们可以根据概率论的知识对粒子的随机行走做出解释和预言。

设粒子（或者说行走者）在走了 S 步后的位置为 X ，我们有：

$$X = \sum_{i=1}^S k_i$$

其中：

$$\begin{cases} k_i = +1 & \text{如果第} i \text{步向右} \\ k_i = -1 & \text{如果第} i \text{步向左} \end{cases}$$

由于每步向左向右的概率相等，因此 k_i 的平均值和方差为：

$$E(k_i) = 0$$

$$D(k_i) = 1$$

显然 k_i 之间是相互独立的，根据概率论中的知识，我们有：

$$\bar{X} = \sum_{i=1}^S E(k_i) = 0 \quad (2.1)$$

$$D(X) = \sum_{i=1}^S D(k_i) = S \quad (2.2)$$

同时注意到，由于 $D(X) = \overline{X^2} - \bar{X}^2$ ，我们有：

$$\overline{X^2} = D(X) + \bar{X}^2 = S \quad (2.3)$$

注意到式(2.1)和(2.3)给出了随机行走中行走距离的平均值和平方平均值与步数的关系，这些是可以通过计算机模拟验证的。首先我们验证式(2.1)，我们分别模拟了500个、1000个、3000个粒子随机行走的平均值，并做出了平均值与所走步数的关系，如图 2所示。



图 2 :粒子一维随机行走的距离平均值

可以看到,随着所取粒子数量的增加, \bar{X} 的取值更加趋近于0.

接下来我们验证式(2.3)，即 $\overline{X^2} = S$ ，我们取粒子数（或者叫walkers）为1000，计算不同步数 S 下的 $\overline{X^2}$ ，如图 3所示：

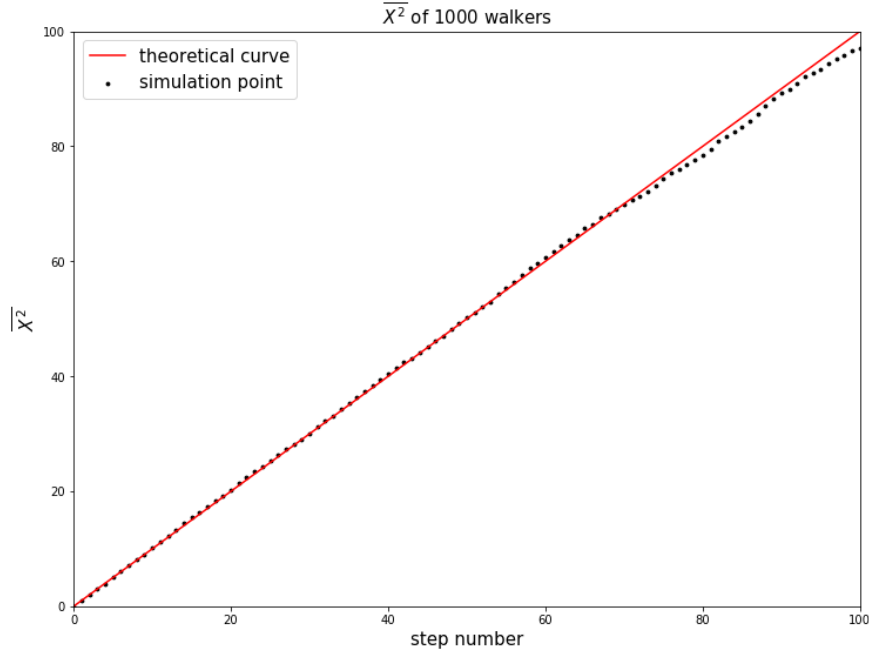


图 3：粒子一维随机行走的距离平方平均值

可以看到，模拟的数据点很好的符合了理论曲线，说明了计算机在处理随机行走问题时的有效性。

2.2 不等概率下的随机行走

上文我们讨论的都是粒子向左向右概率相等的情况，但有些情况下向左向右并非平权，粒子有可能更偏向于往某一个方向前进。（比如带电的花粉在电场下的随机行走）这时我们的处理方式和刚才相似，不过我们在计算机模拟时需要对随机数的判定做出修正，比如生成一个范围是 $[0, 1]$ 的随机数 A ，我们可以通过判定 A 如果在 $[0, 0.75]$ 上则 $X + 1$ ，如果在 $[0.75, 1]$ 上则 $X - 1$ 来实现不等概率的随机行走。

此时我们仍能用概率论的知识做出 \bar{X} 和 $\overline{X^2}$ 的理论预言，假设粒子向右的概率为 P ，有：

$$k_i = \begin{cases} +1 & P \\ -1 & 1 - P \end{cases}$$

此时对于 k_i 有：

$$E(k_i) = 2P - 1$$

$$D(k_i) = -4P^2 + 4P$$

同样根据上文的讨论，我们得到：

$$\bar{X} = SP \tag{2.4}$$

$$\overline{X^2} = (2P - 1)^2 S^2 + 4P(1 - P)S \tag{2.5}$$

注意到式(2.1)和(2.3)是上式在 $P = 0.5$ 时的特殊形式

同样，我们通过计算200个粒子的运动平均值来模拟 \bar{X} 和 \bar{X}^2 ，结果如图 4所示：

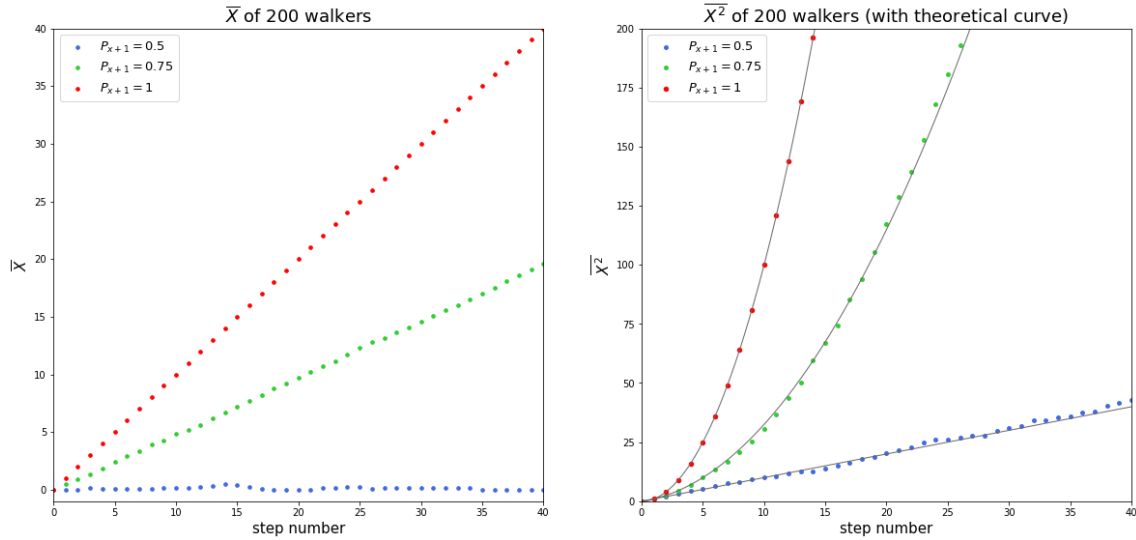


图 4 :不等概率下的粒子随机行走的 \bar{X} 和 \bar{X}^2

我们分别模拟了 $P = 0.5, 0.75, 1$ 的三种情况，可以看到，理论曲线和计算机模拟的结果吻合的很好，再次说明了计算机模拟的有效性。

2.3 随机行走的概率分布

在等概率的随机行走中，我们根据概率论中平均值和方差的有关知识算出了 \bar{X} 和 \bar{X}^2 ，事实上，根据中心极限定理，我们还可以算出 X 的具体分布形式：

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi S}} e^{-x^2/2S} \quad (2.6)$$

(2.6)式中为典型的正态分布， S 为粒子行进的步数，可见随着粒子步数的增加,粒子的概率分布越来越广，而根据分布(2,6)我们始终有：

$$E(X) = 0 \quad D(X) = S$$

我们重复单个粒子的随机行走 N 次，假设每次走 S 步，模拟完成后统计坐标轴上每个点上的粒子数并除以 N 以得到该点的频率大小。注意到坐标轴上的点是离散的，而且粒子最终到达的点的坐标奇偶性与步数 S 相同，我们得到的频率是一个离散的分布而不是密度，我们假设为 $F(n)$ 。

那么如何将 $f(x)$ 和 $F(n)$ 联系起来呢？注意到 $f(x)$ 和 $F(n)$ 都描述了粒子的位置分布，则粒子出现在 $[n, n+2]$ 的概率为：

$$P = F(n) = \int_n^{n+2} f(x) dx \approx f(n) \times 2$$

所以我们有：

$$F(n) = f(n) \times 2$$

因此我们的理论概率函数为：

$$f_0(x) = 2 \times f(x) = \frac{2}{\sqrt{2\pi S}} e^{-x^2/2S} \quad (2.7)$$

理论上, 单个粒子重复行走的次数越多, 我们得到的频率分布越接近理论的正态分布, 我们取粒子移动步数 S 为1000, 分别重复500、1000、5000、10000次随机行走, 并由式(2.7)给出理论分布, 如图 5所示:

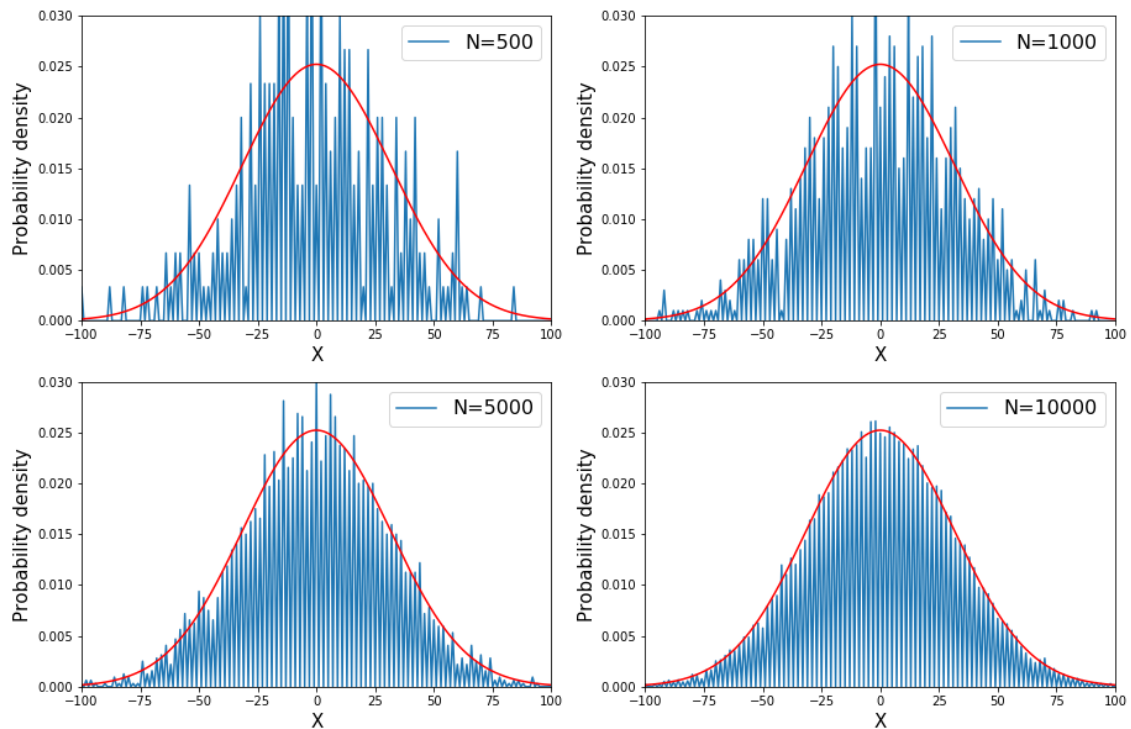


图 5 : 固定 $S=1000$, 改变模拟次数 N 的概率分布

从图中可见, 随着模拟次数 N 的增大, 频率分布逐渐趋近于理论计算出的概率分布。反过来, 为了模拟出粒子分布密度的扩散, 我们固定 N 为5000次模拟, 改变粒子行进的步数 S , 得到的分布如图 6所示:

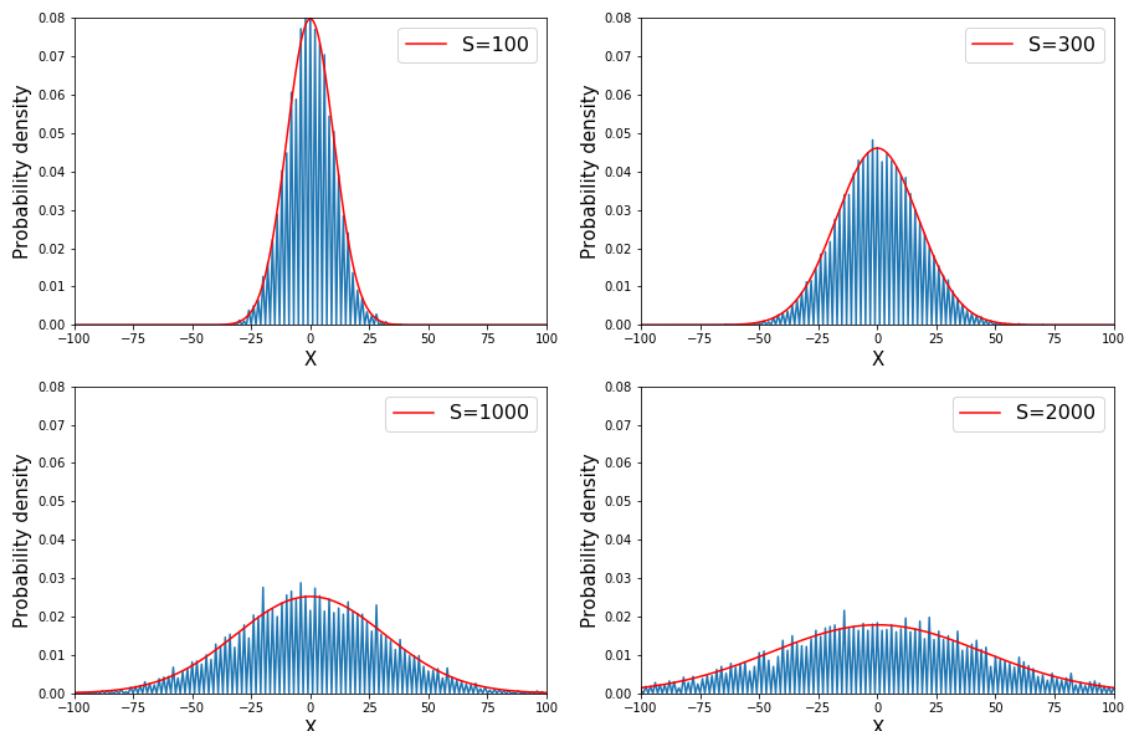


图 6 : 固定 $N=5000$, 改变行进步数 S 的概率分布

从上图中可以看到，随着粒子随机行走的步数增多，粒子的概率分布越来越散，并始终保持着两个关系：

$$\bar{X} = 0$$

$$\overline{X^2} = S$$

在上述的模拟中我们并没有提到时间 T ，而是使用步数 S 来代替，我们可以推测在实际发生的随机过程中，步数 S 正比于时间 T ，因此对实际的随机行走：

$$\overline{X^2} \propto T \quad (2.8)$$

如果我们将随机行走从一维拓展到三维，很容易联想（事实上可以根据概率论去证明），粒子离原点的距离 r 有：

$$\overline{r^2} \propto T \quad (2.9)$$

3. 扩散过程

3.1 从随机行走到扩散方程

在三维的随机行走模型中，我们将空间分成一个一个单位体积的小空间，粒子每次等可能的朝着 X, Y, Z 轴的六个方向移动一格。若我们假设第 n 步时粒子处在第 (i, j, k) 处的概率为 P ，有：

$$P(i, j, k, n) = \frac{1}{6} [P(i+1, j, k, n-1) + P(i-1, j, k, n-1) + P(i, j+1, k, n-1) + P(i, j-1, k, n-1) + P(i, j, k+1, n-1) + P(i, j, k-1, n-1)]$$

将两个格子间的距离理解为 $\Delta X, \Delta Y, \Delta Z$ ，设两次行走间的时间差为 Δt ，我们可以由上式导出粒子随机行走的概率服从方程：

$$\frac{\partial P(x, y, z, t)}{\partial t} = D \nabla^2 P(x, y, z, t) \quad (3.1)$$

由单个粒子的概率密度我们可以直接类推得到多个粒子的密度 ρ 服从扩散方程：

$$\frac{\partial \rho(x, y, z, t)}{\partial t} = D \nabla^2 \rho(x, y, z, t) \quad (3.2)$$

$$D = \frac{1}{6} \frac{\Delta X^2}{\Delta t}$$

3.2 一维扩散过程

将三维形式的扩散方程简化为一维形式，我们得到：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (3.3)$$

在这里我们模拟一粒白砂糖在洪都拉斯卡图艾咖啡中的扩散过程，方法与处理弦振动类似，（教材上模拟的是奶油在咖啡中的扩散，但我认为砂糖更贴切）我们假设初始时的浓度在 $x = 0$ 处为1，其余地方为0， D 取为0.5，模拟得到的图像如图 7所示：

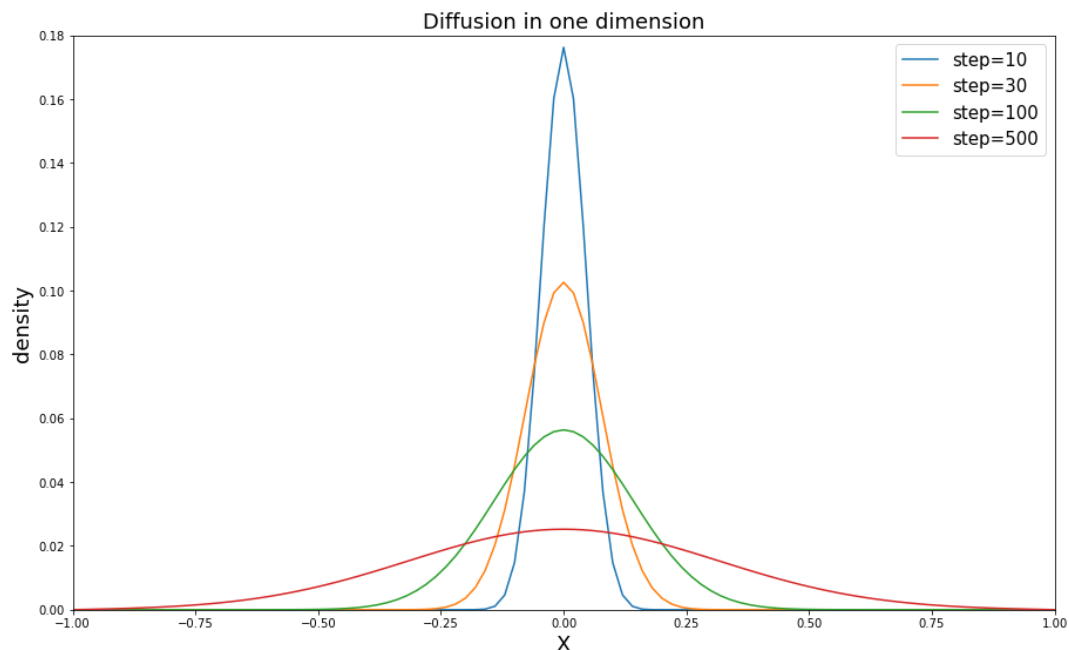


图 7：砂糖在咖啡中的扩散与扩散步数的关系

可以看到，随着溶解过程的进行砂糖的密度逐渐呈正态分布的扩散，正如同我们在图 6 中看到的，这也再一次说明扩散过程可以看作很多个粒子的随机行走过程。

3.3 二维扩散过程

考虑在二维情形下的扩散问题，此时的扩散方程为：

$$\frac{\partial \rho(x, y, t)}{\partial t} = D \nabla^2 \rho(x, y, t) \quad (3.4)$$

我们考虑将两颗方糖放在咖啡中的情形，D取0.25， $t = 1$ 的情形如图 8所示：

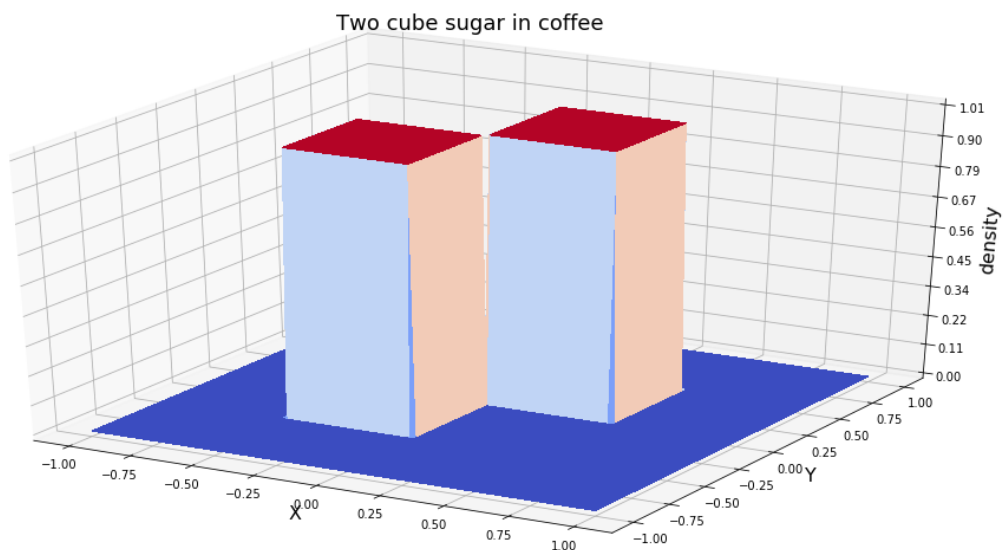


图 8：两颗方糖在咖啡中

运行程序，注意到此时的程序算法与计算电势时类似，我们分别得到在不同时间下的咖啡中的各点密度如图 9所示：

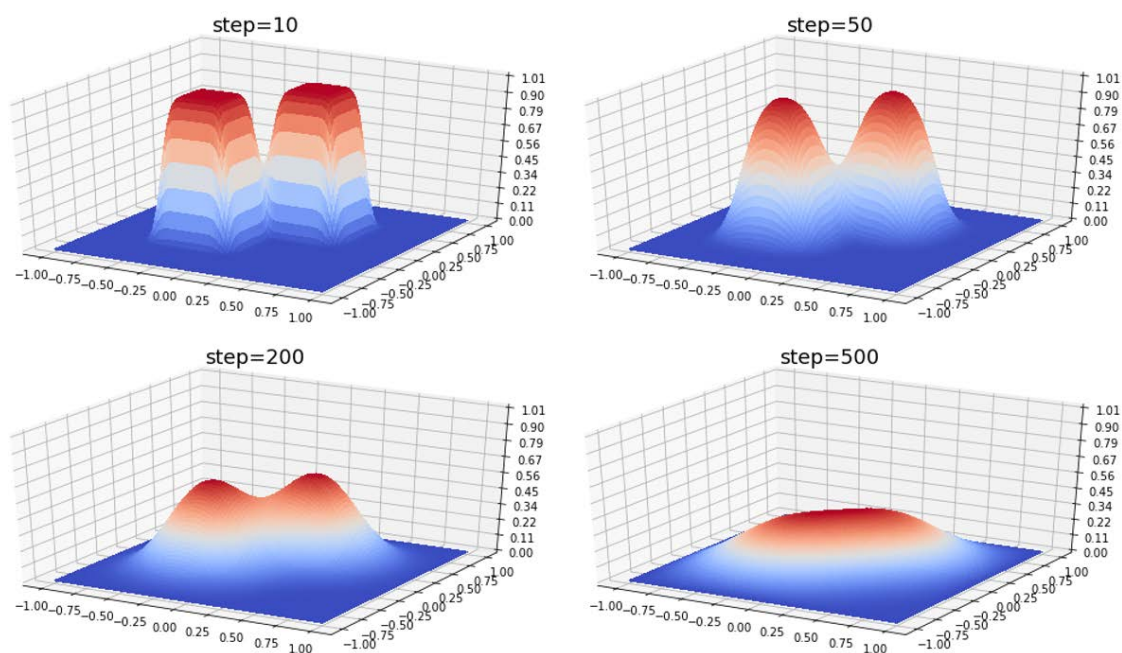


图 9：两颗方糖在咖啡中的溶解过程

如同一维情形，两颗方糖逐渐溶解，我们可以看到浓度的变化的计算与之前的电势计算十分相似，只不过在电势计算中我们只需要看达到平衡后的分布，而这里我们需要考虑达到平衡过程中的分布。

4. 总结

随机行走是简单而又最基本的随机过程，它能清晰的反映出随机过程的不确定性。同时从随机行走中我们可以得到扩散过程的微观模型并导出扩散方程。

借助计算机的强大运算能力，我们能从一次次的模拟中挖掘出在随机过程的不确定性背后所蕴含的统计规律，而借助Python与Matplotlib强大的可视化功能，我们又能清楚地看到统计规律一次次的与概率论中的理论相吻合。如此一来，既加深了我们对随机过程的理解，也让我们看到了计算机模拟在物理过程中的广泛的运用空间。

通过本学期《计算物理》课程的学习，我们见证了计算机在物理学中的广泛应用，也对计算物理这样一个未来的研究方向有了大致的了解。相信随着经济和硬件的发展，计算机在物理、化学、生物、工程的运用将会越来越广泛，对我们的生活将产生更为深远的影响。

参考文献

- [1] Nicholas J. Giordano, Hisao Nakanishi. *Computational Physics*, 北京：清华大学出版社，2007.12
- [2] 齐民友，刘祿勤. *概率论与数理统计*, 北京：高等教育出版社，2011.8