计算物理作业 9

刘畅, PB09203226

2012 年 11 月 3 日

[作业 9]: Monte Carlo 方法研究正弦外力场 ($\sim \sin\omega t$) 中的随机行走.

1 理论

经典的 (最原始的) 随机游走是一个典型的 Markov 过程. 假设初始时刻, 粒子处在原点 $\mathbf{R}_0 = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^d$ 处, 其中 d 是粒子所处空间的维数. 行走发生在离散的时间点上, 即发生在 $t = 0, \Delta t, 2\Delta t, \ldots, n\Delta t$. 每一次随机行走都使得粒子的位置改变 $\Delta\mathbf{r}_n$. 这样, 如果我们记 t 时刻, 也就是行走了 $n = \frac{t}{\Delta t}$ 次后粒子处于位置 $\mathbf{R}_n$ 处, 那么 $\mathbf{R}_n$ 满足关系

$$\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_{n-1} + \Delta\mathbf{r}_n \tag{1}$$

每个 $\Delta\mathbf{r}_n$ 都是从独立的随机分布中抽样的, 因此每一个 $\mathbf{R}_n$ 都只与 $\mathbf{R}_{n-1}$ 和 $\Delta\mathbf{r}_n$ 有关, 与所有满足 $i < n-1$ 的 $\mathbf{R}_i$ 都是无关的 (是独立的随机变量). 这样的随机变量叫做一个 Markov 链.

从 (1), 我们可以导出每个 $\mathbf{R}_n$ 的概率分布. 假设 $\Delta\mathbf{r}_n$ 的概率分布已经给定了, 那么由于假设每个 $\Delta\mathbf{r}_n$ 都是从独立的分布中抽取的, 有: (为了简化记号, 我们记 $P_n(\mathbf{r}) = p(\mathbf{R}_n = \mathbf{r})$, $p_n(\delta\mathbf{r}) = p(\Delta\mathbf{R}_n = \delta\mathbf{r})$.)

$$P_n(\mathbf{r}) = \int P_{n-1}(\mathbf{r} - \delta\mathbf{r}) p_n(\delta\mathbf{r})\, \mathrm{d}^d\delta\mathbf{r} \tag{2}$$

换句话说, 每个 P_n 是 P_{n-1} 和 p 的卷积. 这个 $p(\Delta\mathbf{r}_n)$ 叫做转移概率.

为了考虑 $n \to \infty$ 时的极限分布, 首先注意到 $n \to \infty$ 等价于说 $\Delta t \to 0$.

这样可以记 $\rho(t,\mathbf{r}) = P_{t/\Delta t}(\mathbf{r})$. 从 (2), 可以导出 $\rho(t,\mathbf{r})$ 满足的微分方程:

$$\begin{aligned}
\rho(t,\mathbf{r}) &= \int \rho(t-\Delta t, \mathbf{r}-\delta\mathbf{r}) p(\delta\mathbf{r}) \,\mathrm{d}^d\delta\mathbf{r} \\
&\approx \int \big(\rho(t-\Delta t,\mathbf{r}) - \sum_i \partial_i \rho(t-\Delta t,\mathbf{r})\delta r_i \\
&\qquad\qquad + \frac{1}{2}\sum_{i,j}\partial_i\partial_j\rho(t-\Delta t,\mathbf{r})\delta r_i \delta r_j\big)\, p(\delta\mathbf{r}) \,\mathrm{d}^d\delta\mathbf{r} \\
&= \rho(t-\Delta t,\mathbf{r}) - \sum_i \partial_i\rho(t-\Delta t,\mathbf{r})\langle\delta r_i\rangle \\
&\qquad\qquad + \frac{1}{2}\sum_{i,j}\partial_i\partial_j\rho(t-\Delta t,\mathbf{r})\langle\delta r_i\delta r_j\rangle
\end{aligned}$$

移项两边除以 Δt, 令 $\Delta t \to 0$ 得到

$$\partial_t\rho(t,\mathbf{r}) = -\nabla\rho(t,\mathbf{r})\cdot\mathbf{f}(t) + D(t)\nabla^2\rho(t,\mathbf{r}) \tag{3}$$

其中

$$\mathbf{f}(t) = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{\langle\delta\mathbf{r}\rangle}{\Delta t}$$
$$D(t) = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{\langle\delta\mathbf{r}\cdot\delta\mathbf{r}\rangle}{\Delta t}$$

如果 $p(\delta\mathbf{r})$ 和时间有关, 那么上面两个量就与时间有关. 在随机游走问题中上面两个量都收敛 (即每一步行走的距离不太长).

为了简单起见, 我们假设这个问题中随机行走发生在一维的格点上. 因此 $d=1$, 前面的微分方程 (3) 变成:

$$\partial_t\rho(t,x) = -f(t)\partial_x\rho(t,x) + \frac{D(t)}{2}\partial_x^2\rho(t,x)$$

我们考虑粒子的平均位置 $\langle x\rangle$ 随时间的变化:

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\langle x(t)\rangle}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int x\rho(t,x)\,\mathrm{d}x \\
&= \int x\partial_t\rho(t,x)\,\mathrm{d}x \\
&= \int x(-f(t)\partial_x\rho(t,x) + \frac{1}{2}D(t)\partial_x^2\rho(t,x))\,\mathrm{d}x \\
&= -f(t)\int x\partial_x\rho(t,x)\,\mathrm{d}x + \frac{D(t)}{2}\int\partial_x^2\rho(t,x)\,\mathrm{d}x \\
&\qquad \text{(由于 } f(t) \text{ 和 } D(t) \text{ 与 } x \text{ 无关, 可以提出积分号)} \\
&= f(t) \qquad \text{(分部积分, 利用 } \rho \text{ 是速降的)}
\end{aligned}$$

这表明 $f(t)$ 其实是粒子的平均速度.

同理, 还可以计算 $\langle x^2\rangle$ 随时间的变化:

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle x^2\rangle &= -f(t)\int x^2\partial_x\rho\,\mathrm{d}x + D(t)\int x^2\partial_x^2\rho\,\mathrm{d}x\\ &= 2f(t)\langle x\rangle + D(t) \qquad (\text{分部积分})\end{aligned}$$

由上面的结果可以计算:

$$\langle x\rangle = \int_0^t f(\tau)\,\mathrm{d}\tau \tag{4}$$

这样

$$\langle x^2\rangle = 2\int_0^t f(t_1)\int_0^{t_1} f(\tau)\,\mathrm{d}\tau\,\mathrm{d}t_1 + \int_0^t D(\tau)\,\mathrm{d}\tau$$

通过变量代换可以证明

$$\int_0^t f(t_1)\int_0^{t_1} f(\tau)\,\mathrm{d}\tau\,\mathrm{d}t_1 = \frac{1}{2}\int_0^t f(t_1)\int_0^t f(t_2)\,\mathrm{d}t_1\,\mathrm{d}t_2 = \frac{\langle x\rangle^2}{2}$$

因此

$$\sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = \sqrt{\int_0^t D(\tau)\,\mathrm{d}\tau} \tag{5}$$

这个问题要求外力场 $\sim \sin(\omega t)$, 按照 Newton 定律, 应当有

$$m\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = F(t) \sim \sin(\omega t)$$

这样解出来应该有

$$v = \frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} \sim -\frac{\cos(\omega t)}{\omega} = f(t) \tag{6}$$

经典的随机游走是 $\frac{1}{2}$ 的概率向前走 1 步, $\frac{1}{2}$ 的概率向后走 1 步. 容易看出, 为了满足 (6), 只要修改为 $\frac{1}{2} - a\sin(\omega t)$ 的概率向前走一步, $\frac{1}{2} + a\sin(\omega t)$ 的概率向后走一步就可以了. (其实应该是 $\cos(\omega t)$, 但 cos 和 sin 只差一个相位.) 这 a 是常数, 要取得 $|a| < \frac{1}{2}$.

我们的程序的目的就是按照这个算法编程, 验证 (4) 和 (5).

2 程序, 结果和分析

为了便于比较, 也由于和我们的问题很接近, 我们先编写了经典的等概率的随机游走, 即 δr 满足 Bernoulli 分布的随机游走. 程序在 `unbiased.c`. 首先需要 $[0, 1]$ 区间上的均匀分布:

```
/* uniform distribution over [0,1] */
double rand_norm(void)
{
    return (double) rand() / (double) RAND_MAX;
}
```

然后, 需要从 Bernoulli 分布抽样的例程:

```
/* sample from uniform distribution over {1,-1},
 * i.e. the Bernoulli distribution
 */
int sample_delta_r(void)
{
    return (rand_norm() > 0.5) ? 1 : -1;
}
```

从函数名也可以看出, 这是 δr 满足的分布.

最后, 需要把上面的函数求和, 得出对 $R = \sum_i \delta r_i$ 抽样的函数:

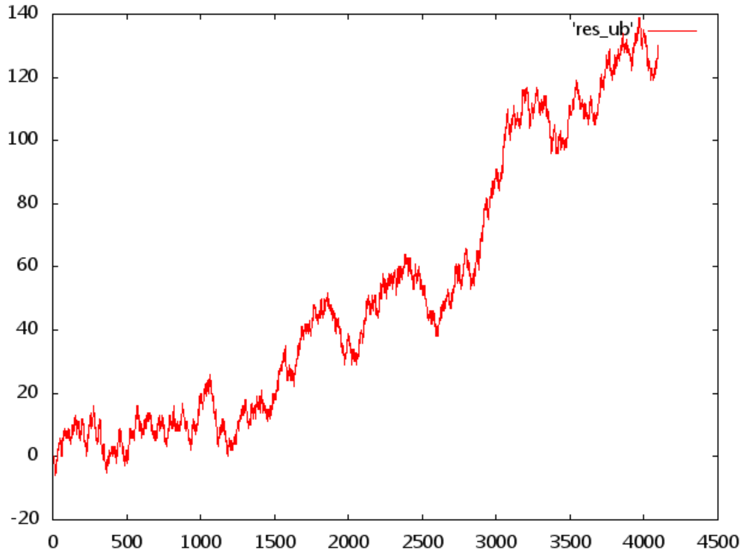
```
/* sample from R = \sum_i r_i,
   where r_i ~ Bernoulli dist. */
int sample_r(int nsteps)
{
    int i, dist;

    dist = 0;
    for (i = 0; i < nsteps; i++)
        dist += sample_delta_r();
    return dist;
}
```

接下来的步骤是作出各种图形来验证 (4) 和 (5). 首先我们作出一次随机游走的 R 关于 t 的图: (在 `main.c`)

```
    /* plot r-t diagram of one random walk with NSTEPS */
    fout = fopen("res_ub", "w");
    srand(time(NULL));
```

```
dist = 0;
for (i = 0; i < NSTEPS; i++) {
    fprintf(fout, "%d %d\n", i, dist);
    dist += sample_delta_r();
}
fclose(fout);
```

这段程序运行的结果是

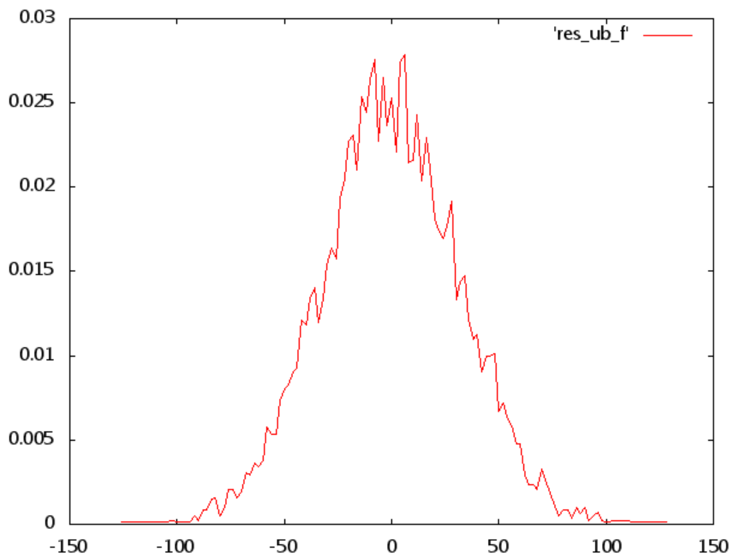


可以看出, 走了 4000 多步, 粒子离开原点的距离仅有 $140 \approx 2\sqrt{4000}$.

然后我们需要看一下在某个固定的时间 t 抽样的 $R(t)$ 满足什么样的分布. 为此需要前面写过的 `count_freq` 例程, 前面解释过了. 这里只要直接调用就可以了:

```
/* plot the frequency histogram of many random walks */
fout = fopen("res_ub_f", "w");
count_freq(fout, sample_r, -150.0, 150.0);
fclose(fout);
```

结果如下:



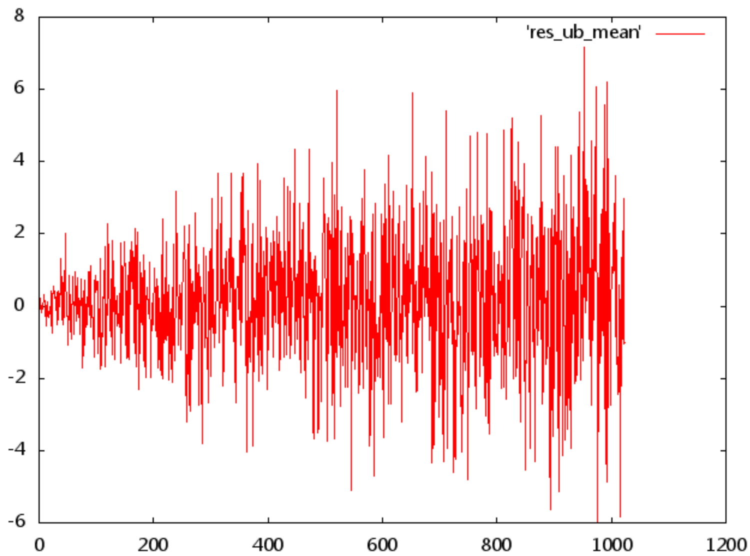
可以看出这分布非常接近正态分布, 这与中心极限定理的结果非常一致.

然后我们作出 $R(t)$ 的期望值 $\langle x \rangle$ 和方均根 $\sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ 随时间的关系:

```
    /* plot mean = \langle x\rangle and
       rms = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}
       versus time */
    fout = fopen("res_ub_mean", "w");
    fout_rms = fopen("res_ub_rms", "w");
    if (fout == NULL) {
        perror("fopen() res_ub_mean");
        abort();
    }
    if (fout_rms == NULL) {
        perror("fopen() res_ub_rms");
        abort();
    }
#define NSTEPS_PER_WALK     (1<<7)
    for (i = 0; i < (1<<10); i++) {
        sum = 0.0;
```

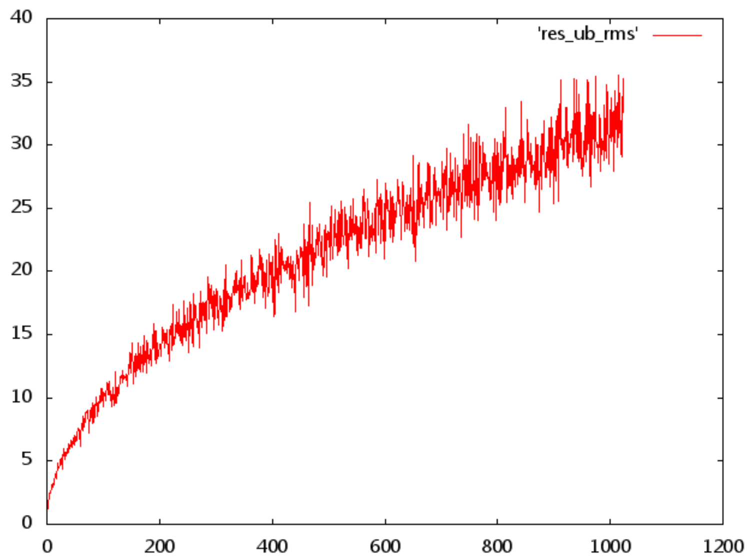
```
        sum_x2 = 0.0;
        for (j = 0; j < NSTEPS_PER_WALK; j++) {
            dist = sample_r(i);
            sum += dist;
            sum_x2 += dist * dist;
        }
        mean = sum / NSTEPS_PER_WALK;
        rms = sqrt(sum_x2 / NSTEPS_PER_WALK - mean * mean);
        fprintf(fout, "%d %.12f\n", i, mean);
        fprintf(fout_rms, "%d %.12f\n", i, rms);
    }
    fclose(fout);
    fclose(fout_rms);
```

代码是非常直接的, 结果如下: 首先是 $\langle x \rangle$



可以看出 $\langle x \rangle$ 一直保持在 $y = 0$ 的直线上. 注意纵坐标的刻度, 最大值在 8 远小于前面的 140.

然后是方均根:



前面的理论给出 (式 (5))

$$\mathrm{RMS} = \sqrt{\int_0^t D(\tau)\,\mathrm{d}\tau} = \sqrt{t}$$

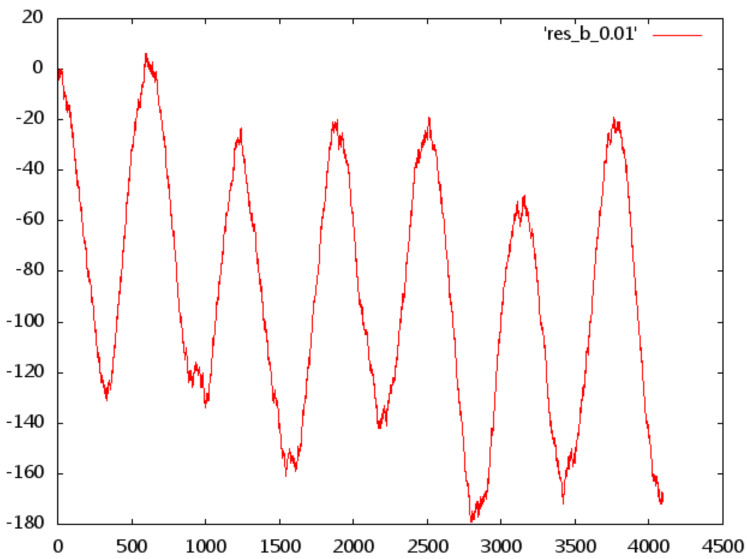
(因为 $D = \langle \delta r^2 \rangle = 1$.) 因此理论的曲线应该是抛物线 $y = \sqrt{t}$. 这和上面的结果非常一致. (最高点 $\sqrt{1024} = 32$.)

在正弦外力场中的随机游走和上面的唯一不同就是 `sample_delta_r` 要改成:

```
int sample_biased_delta_r(int t)
{
    return (rand_norm() > (0.5 +
        Param_a * sin(Param_omega*t) ) ) ? 1 : -1;
}
```

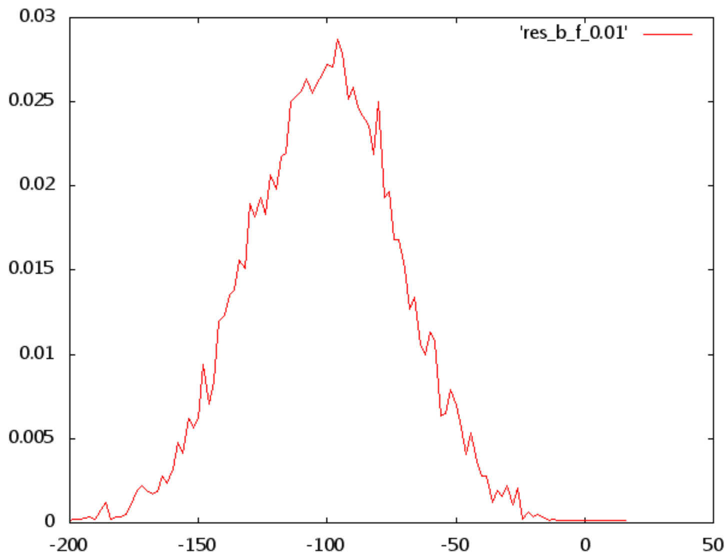
其余完全一样. 代码见 `biased.c`.

不同的是在这个问题中 a 和 ω 都是可以任意取的 (只要 $a < 0.5$). 我取了 $a = 0.3$. ω 取了两个值: 0.1 和 0.01. 先来看 $\omega = 0.01$ 的结果, 这个 ω 对应的周期为 $T = \frac{2\pi}{\omega} \approx 628$. 下面是一次随机游走的图:



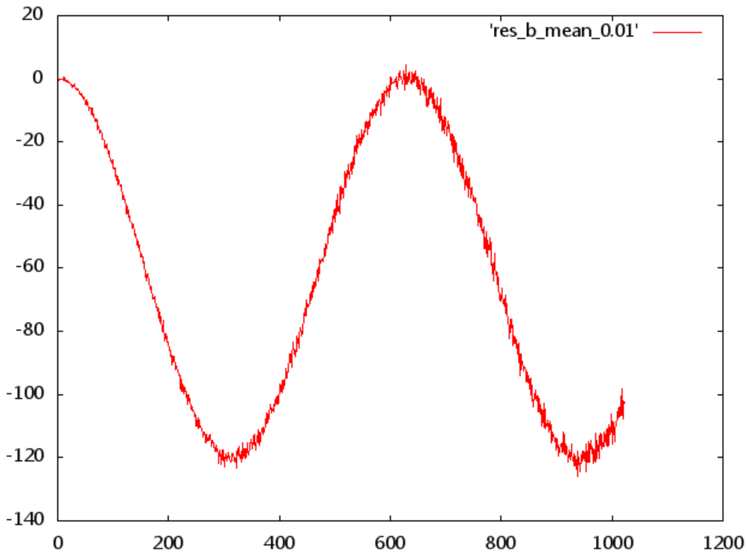
可以看到振荡的效应是主导的, 带有一定随机性. 周期大概在 628 左右.

然后是固定 t 时刻的 $R(t)$ 分布:



可以看到仍然是近似的正态分布.

然后是 $\langle x\rangle(t)$:

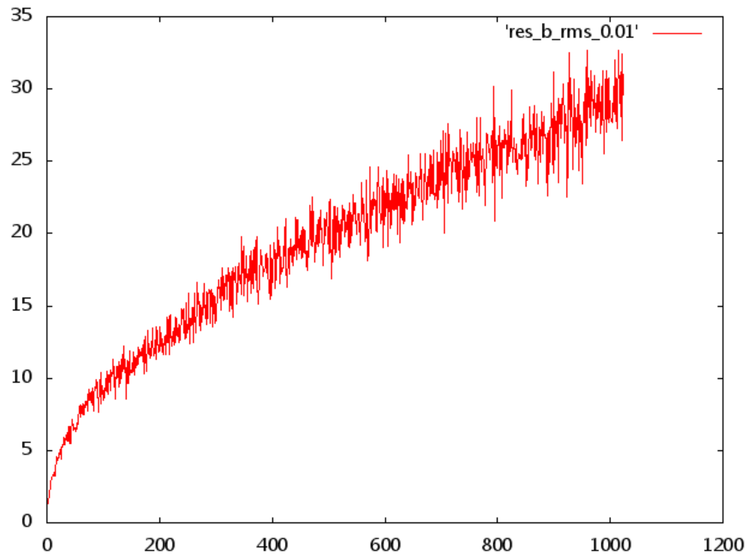


按照前面的理论 (4):

$$\langle x\rangle = \int_0^t \langle \delta r\rangle(\tau)\,\mathrm{d}\tau = \int_0^t -2a\sin\omega\tau\,\mathrm{d}\tau = \frac{2a}{\omega}(\cos\omega t - 1)$$

注意到理论给出的振幅为 $\frac{2a}{\omega} = 60$ 和图上的结果非常一致. 周期为 628 和图上的也非常一致.

最后是方均根

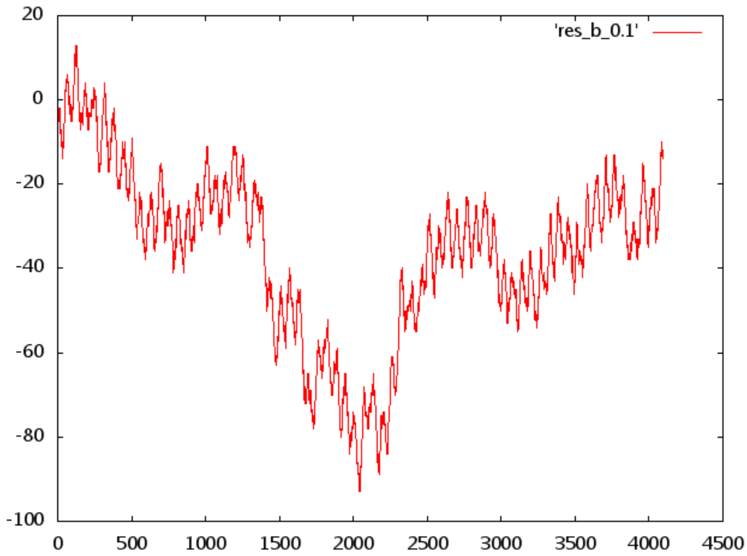


理论 (5) 给出

$$\mathrm{RMS} = \sqrt{\int_0^t \langle \delta r^2 \rangle(\tau)\, \mathrm{d}\tau} = \sqrt{t}$$

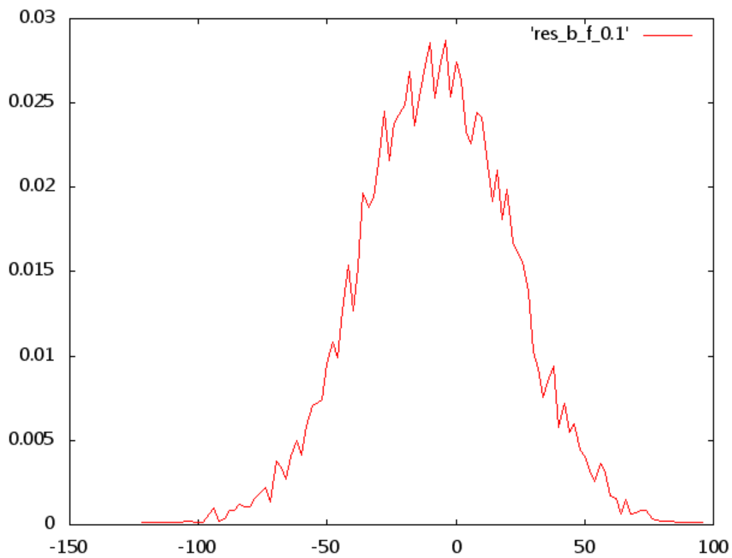
和前面经典的服从 Bernoulli 分布的随机游走的结果是一样的. 当然这里的涨落略大.

然后是 $\omega = 0.1$ 的结果, 首先是一次随机游走的 R-t 图:



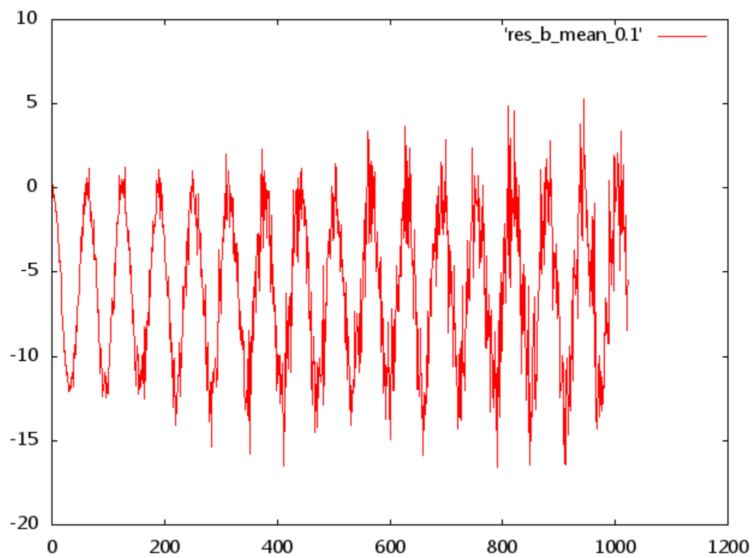
这个 ω 对应的周期为 $T = \frac{2\pi}{\omega} = 63$. 和前面不同的是上面的图中随机性占了比较大的比重, 周期性较少.

然后是固定 t 的 $R(t)$ 分布:



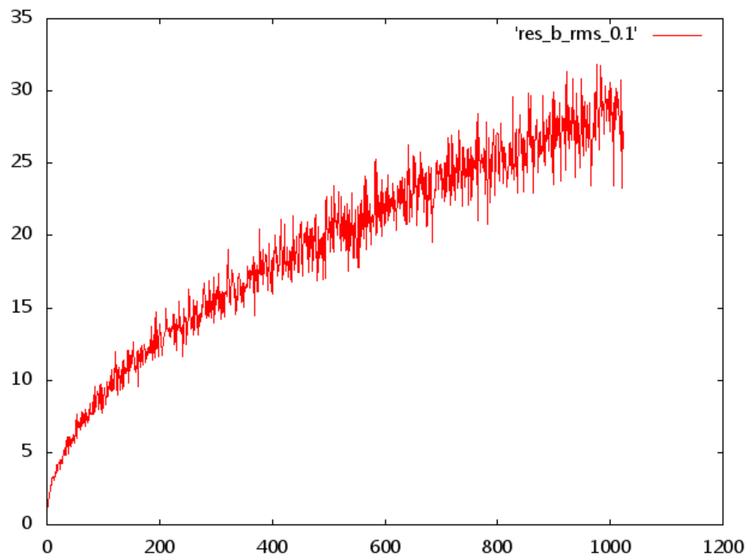
还是正态分布.

然后是 $\langle x \rangle$:



和前面的理论分析一致，只不过这里涨落要比前面大.

最后是方均根:



和前面的一样.