计算物理 homework11

李明达 PB18020616[1]*

摘要

这是计算物理第 11 次作业，作业题目是数值研究 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？

关键词

随机行走自回归

[1] 中国科学技术大学物理学院　　* 作者: dslmd@mail.ustc.edu.cn

1. 模型和算法

1.1 模型

在本实验中，我们考虑 d 维空间中的粒子在 N 次随机游走恰好能回到原点的几率。由讲义的知识，一维随机行走之后，其分布趋向于高斯分布，我们有

$$x^2(t) = 2Dt$$

$$f(x) \sim N(0, \sigma^2)$$

可以看到，随着时间（步数）的增加，回到原点的几率越来越小。我们可以将其扩展到二维网格、三维网格上，在不考虑自规避的前提下，可以看出，显然几率要更小一些。

理论上的分析告诉我们，$P_d(N)$ 应该可以定义一个指数值，定义如下：

$$P_d(N) = A \times N^{-\nu}$$

这个指数值可以通过如下变形看的更清楚：

$$lnP_d(N) = lnA - \nu lnN$$

对一维 d=1，理论值为 0.5；对二维 d=2，理论值为 1.0；对三维 d=3，理论值为 1.5。

下面是我的算法：

1.2 一维随机行走

单个粒子的位置用数组 $x[i]$ 来表述，我们采用一下 MC 模拟方法，先产生 $[0, 1]$ 随机数：

如果随机数 $\in [0, 0.5]$，粒子往 x 正方向走，x+1

如果随机数 $\in [0.5, 1]$，粒子往 x 正方向走，x-1

1.3 二维随机行走

单个粒子的位置用数组 $x[i], y[i]$ 来表述，我们采用一下 MC 模拟方法，先产生 $[0, 1]$ 随机数：

如果随机数 $\in [0, 0.25]$，粒子往 x 正方向走，x+1

如果随机数 $\in [0.25, 0.5]$，粒子往 x 正方向走，x-1

如果随机数 $\in [0.5, 0.75]$，粒子往 x 正方向走，y+1

如果随机数 $\in [0.75, 1]$，粒子往 x 正方向走，y-1

1.4 三维随机行走

单个粒子的位置用数组 $x[i], y[i], z[i]$ 来表述，我们采用一下 MC 模拟方法，先产生 $[0, 1]$ 随机数：

如果随机数 $\in [0, 1/6]$，粒子往 x 正方向走，x+1

如果随机数 $\in [1/6, 1/3]$，粒子往 x 正方向走，x-1

如果随机数 $\in [1/3, 1/2]$，粒子往 x 正方向走，y+1

如果随机数 $\in [1/2, 2/3]$，粒子往 x 正方向走，y-1

如果随机数 $\in [2/3, 5/6]$，粒子往 x 正方向走，z+1

如果随机数 $\in [5/6, 1]$，粒子往 x 正方向走，z-1

1.5 程序

在程序中，我通过 $d_i(intseed, intN)$ 函数来模拟 i 维的随机行走自回归概率，函数的参数 N 是指 N 次随机行走，每一个 N 次随机行走进行 n 次（n 是函数内的的变量，可以进行调节）的重复模拟来计算随机行走自回归概率。

2. 实验结果讨论

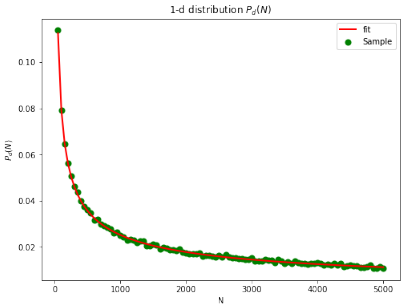

图 1. 一维随机行走的 $P_d(N) = A \times N^{-\nu}$ 图，此时 n=100000，并且拟合后的曲线为 $P_d(N) = 0.8045N^{-0.5016}$

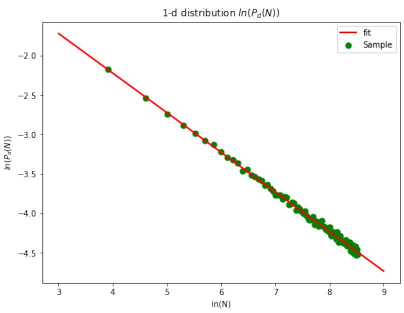

图 2. 一维随机行走的 $lnP_d(N) = lnA - \nu lnN$ 图，此时 n=100000，此时 lnA 为-0.2175，ν 为 0.5016

2.1 d=1 一维情况结果讨论

进行此次模拟的**种子值见附件**，这里，为了更高精度，模拟的时候我们取 n=100000，这个次数会保证结果的精确。

实验的模拟结果如图1和图2所示，可以看出，随机行走自回归的几率确实符合我们假设的减少趋势，并且通过最小二乘法的计算（采用 scipy 的包），拟合出的曲线为：$P_d(N) = 0.8045N^{-0.5016}$

可以看出，定义的指数值为 $\nu = 0.5016$，这与理论值 0.5 符合的相当好。

2.2 d=2 二维情况结果讨论

进行此次模拟的**种子值见附件**，这里，为了更高精度，模拟的时候我们取 n=100000，这个次数会保证结果的精确。

实验的模拟结果如图3和图4所示，可以看出，随机行走自回归的几率确实符合我们假设的减少趋势，并且通过最小二乘法的计算（采用 scipy 的包），拟合出的曲线为：$P_d(N) = 0.6003N^{-0.9923}$

可以看出，定义的指数值为 $\nu = 0.9923$，这与理论值 1.0 符合的相当好

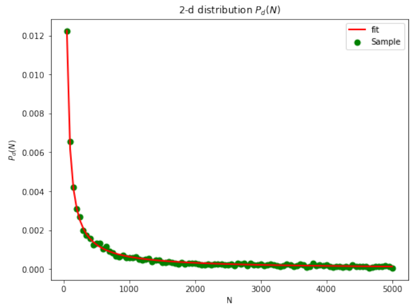

图 3. 二维随机行走的 $P_d(N) = A \times N^{-\nu}$ 图，此时 n=100000，并且拟合后的曲线为 $P_d(N) = 0.6003N^{-0.9923}$

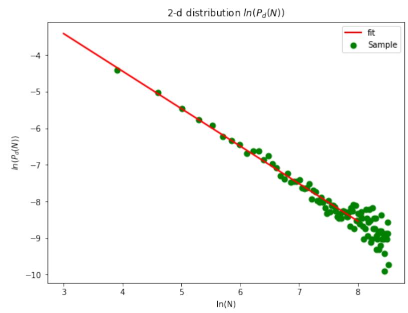

图 4. 二维随机行走的 $lnP_d(N) = lnA - \nu lnN$ 图，此时 n=100000，此时 lnA 为-0.5103，ν 为 0.9923

2.3 d=3 三维情况结果讨论

进行此次模拟的**种子值见附件**，这里，为了更高精度，模拟的时候我们取 n=100000，这个次数会保证结果的精确。

实验的模拟结果如图5和图6所示，可以看出，随机行走自回归的几率确实符合我们假设的减少趋势，并且通过最小二乘法的计算（采用 scipy 的包），拟合出的曲线为：$P_d(N) = 0.6306N^{-1.5106}$

可以看出，定义的指数值为 $\nu = 1.5106$，这与理论值 1.5 符合的相当好.

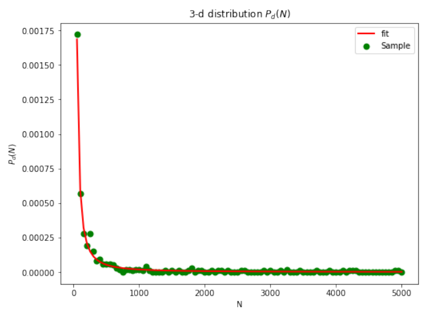

图 5. 三维随机行走的 $P_d(N) = A \times N^{-\nu}$ 图，此时 n=100000，并且拟合后的曲线为 $P_d(N) = 0.6306N^{-1.5106}$

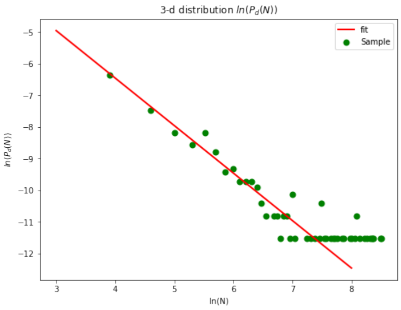

图 6. 三维随机行走的 $lnP_d(N) = lnA - \nu lnN$ 图，此时 n=100000，此时 lnA 为-0.4611，ν 为 1.5106，后面的点是因为三维情况下，这个 n 值不够大，模拟出来的概率是 0，而 lnP_d 在此时就会发散，所以会出问题，详细讨论见"3. 总结与思考"

3. 总结与思考

本次实验我们探究了在 d=1, 2, 3 的情况下，随机行走 N 步恰好回到原点的几率，并且我们定义并模拟了相关指数。可以看出实验的结果和理论完美吻合，这也体现了蒙卡方法在随机行走模型的合理性，不过我们发现在三维情况的时候，如果画 ln 图（如图6所示），会发现后面的点有较大的偏离，并且很稀疏。这是因为此时概率特别小导致我们的精度范围内模拟出来的 $P_d = 0$，所以 lnP_d 发散，画图软件是不能识别的。初步估计，如果取 $n = 10^8 \sim 10^10$，就可以比较好的把这些点复位。然而这会让程序模拟花费大量的时间，再加上目前的精度对于我们这个精度的需求这样已经够了，所以我就不再提高 n 了。不过虽然如此，我们的实验还是圆满完成！验证了 d=1,2,3 情况下给出的理论值 0.5,1.0,1.5！