计算物理A第十一次作业

王铠泽 PB18020766

1 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？

2 实现方法和原理

- d 维随机游走的实现

  本次实验采用离散化模型，即一维链，二维正方形网格，三维正方体网络来摸拟d维的随机游走。具体到算法上，采用16807产生器每一次产生一个$[0,1]$之间的随机数ξ，若$\xi>0.5$，则朝正方向前进一步；若$\xi<0.5$，则朝负方向前进一步。使用计数器cnt来计数在第N步返回原点的次数，除以总系统数量M，就可以得到第N步返回原点的概率$p(N)$。

- d 随机游走理论和常返性

  对于网格模型，显然只有在偶数步N时才能返回原点(奇数步必然在正负两个方向中有一个是多出一部分步长的)。

  一维情形

$$p(N)=\frac{N!}{(\frac{N}{2}!)^2}\left(\frac{1}{2}\right)^N$$

  二维情形

$$p(N)=\sum_{k=0}^{\frac{N}{2}}\frac{N!}{[k!\cdot(\frac{N}{2}-k)!]^2}\left(\frac{1}{4}\right)^N$$

  三维情形

$$p(N)=\sum_{k=0}^{\frac{N}{2}}\sum_{j=0}^{\frac{N}{2}-k}\frac{N!}{[k!\cdot j!\cdot(\frac{N}{2}-k-j)!]^2}\left(\frac{1}{6}\right)^N$$

  当步数N足够大的时候，做$Stirling$近似展开得到d维随机游走标度律为[1]:

$$p^{2N}(0,0)=C_dN^{-\frac{d}{2}}$$

  对三维情况简单的证明如下:

  每一步要决定是走南北、东西、上下哪一个方向，那么总共有C_{2N}^N种组合方式取安排总共N步走南东上，N步走北西下。那么必然也有i步走南/北，j步走东/西，$N-i-j$步走上/下。从而：

$$p^{2N}(0,0)=\frac{1}{6^{2N}}C_{2N}^N\left(\sum_{i+j\leq N}\frac{N!}{i!j!(N-i-j)!}\right)^2$$

  可以验证，在$x+y+z=N$，N充分大，当$x=y=z=\frac{N}{3}$时，$x!y!z!$取得最小值。

所以

$$p^{2N}(0,0)\leq\frac{1}{6^{2N}}C_{2N}^{N}\frac{N!}{\frac{N}{3}!^2}\left(\sum_{i+j\leq N}\frac{N!}{i!j!(N-i-j)!}\right)=\frac{1}{6^{2N}}C_{2N}^{N}\frac{N!}{(\frac{N}{3}!)^2 3^N}\sim C_3N^{-3/2}$$

常返性可以通过$\sum_{N=0}^{\infty}p^{2N}(0,0)$的收敛性来判断，这是由过程的马尔可夫性决定的。一，二维上该级数发散，所以是常返的。三维以上发散，不再常返[1]。

3 程式说明

- random_walk.c

  该程式输出在 $d=1,2,3$维情况下的$P_1(N),P_2(N),P_3(N)$。

- ideal.c

  该程式输出在 $d=1,2,3$维情况下的理论$P_1(N),P_2(N),P_3(N)$。

- rdm.h

  这是一个包含了使用16807产生器生成指定长度的$[0,1]$上均匀分布随机数函数的头文件。

  void rdm(int N,double *x,int method)

  该函数将输入的指针x对应的长度为N的数组用$[0,1]$上的随机数填满。method是关于初始种子的选择。method=0:默认种子;method=1,时间种子。程式中故意采用$sleep$函数就是为了得到不同的时间种子。

- time_seed.txt

  16807产生器抽样时对应的时间种子数据(每次1个种子)。调用多少次16807生成器就生成多少个数据记录。每一个分布对应的种子已经手动加上对应的实验了。种子产生公式如下:

  年: $0\leq i_y\leq 99$， 月: $1\leq i_m\leq 12$， 日: $1\leq i_d\leq 31$

  时: $0\leq i_h\leq 23$， 分: $0\leq i_n\leq 59$， 秒: $0\leq i_s\leq 59$

  则可设种子值为: $I_0=i_y+70\left(i_m+12\left\{i_d+31\left[i_h+23\left(i_n+59i_s\right)\right]\right\}\right)$，它的值约在区间$\left[0,2^{31}-1\right]$内，第二部分的括号在100年内不会重复。

  Tip:程序中多处使用了$sleep$函数是为了换时间种子，因而可能运行时间较久一点。

- 1/2/3d_random_walk.txt

  记录了$p(N)$的txt文件

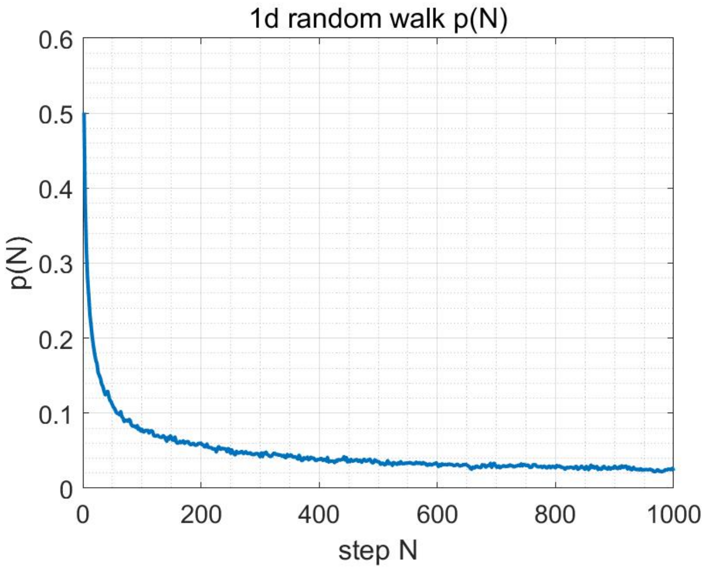
- 1/2/3d_ideal.txt

  记录了理论上从$N=1\sim 200$的$p(N)$数值，后续作图和实验值作比较。

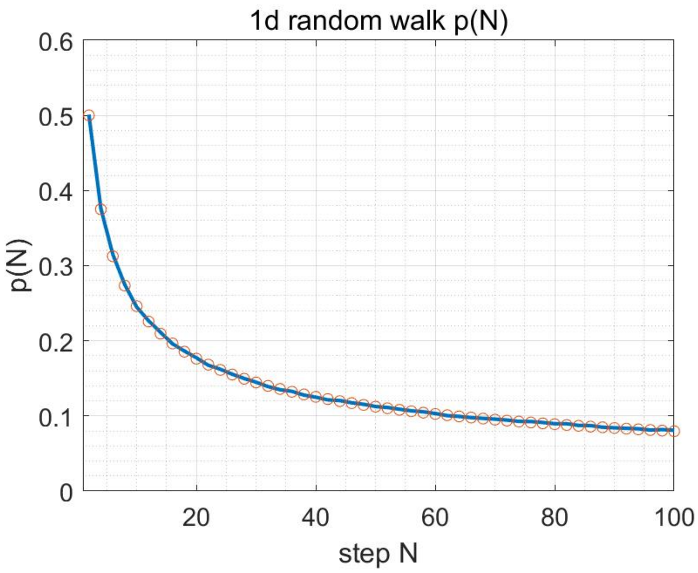
4 计算结果

选择总步数为$N=1000$，系综包含的系统数为$M=200000$个。以网格模型摸拟随机游走，得到的结果如下：

4.1 不同维度下$p(N)$和理想结果的对比

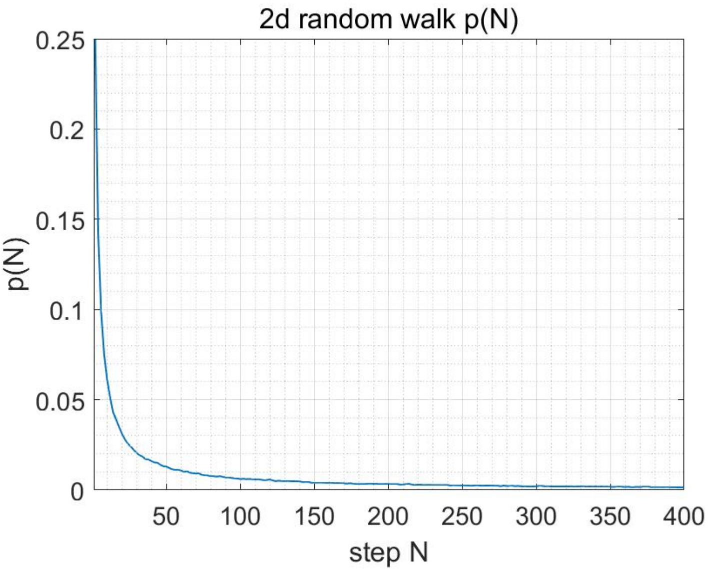


(a) $p_{1d}(N)$

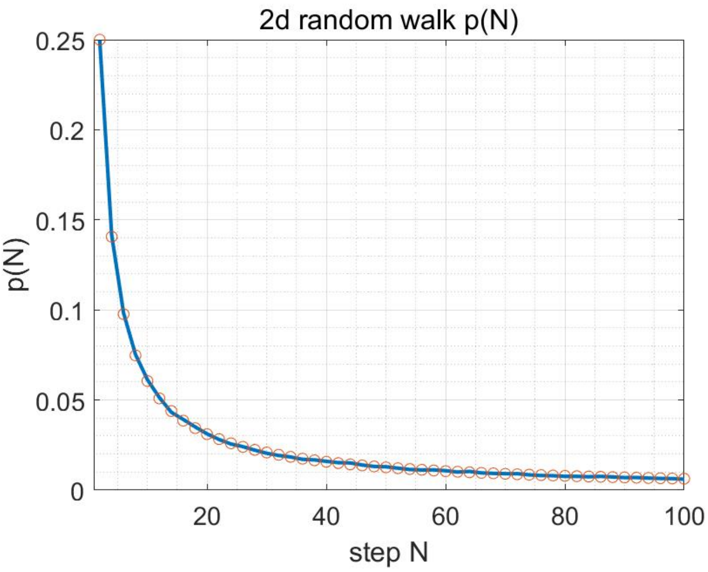


(b) 与理想值的比较(圆圈为理想值)

图 1: 一维情形

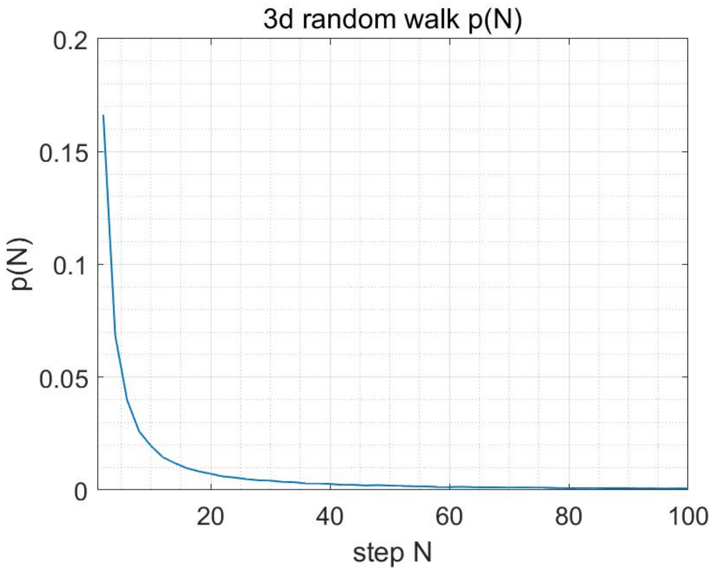


(a) $p_{2d}(N)$

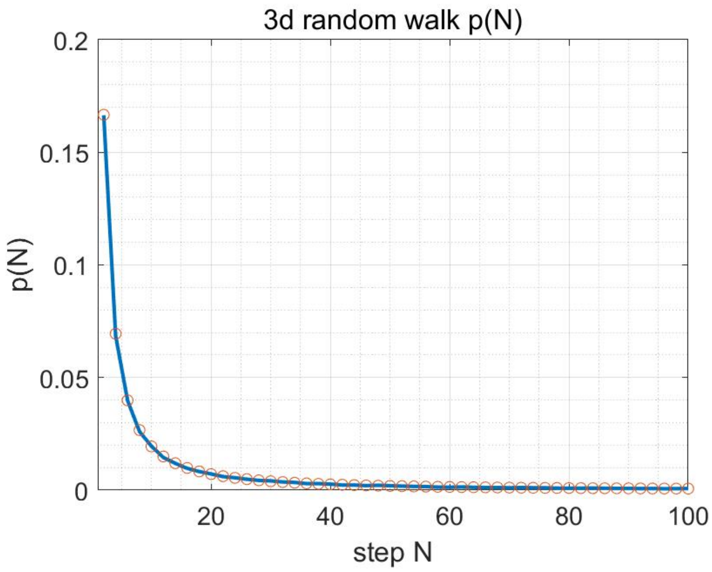


(b) 与理想值的比较(圆圈为理想值)

图 2: 二维情形



(a) $p_{3d}(N)$



(b) 与理想值的比较(圆圈为理想值)

图 3: 三维情形

从上面的计算结果可以看出，我们的计算模拟和理论计算值非常吻合。除了少许的涨落，得到的曲线基本满足前面的理论推导。

4.2 标度律指数的计算

对$d = 1, 2, 3$维分别做出双对数图，计算指数标度律如下

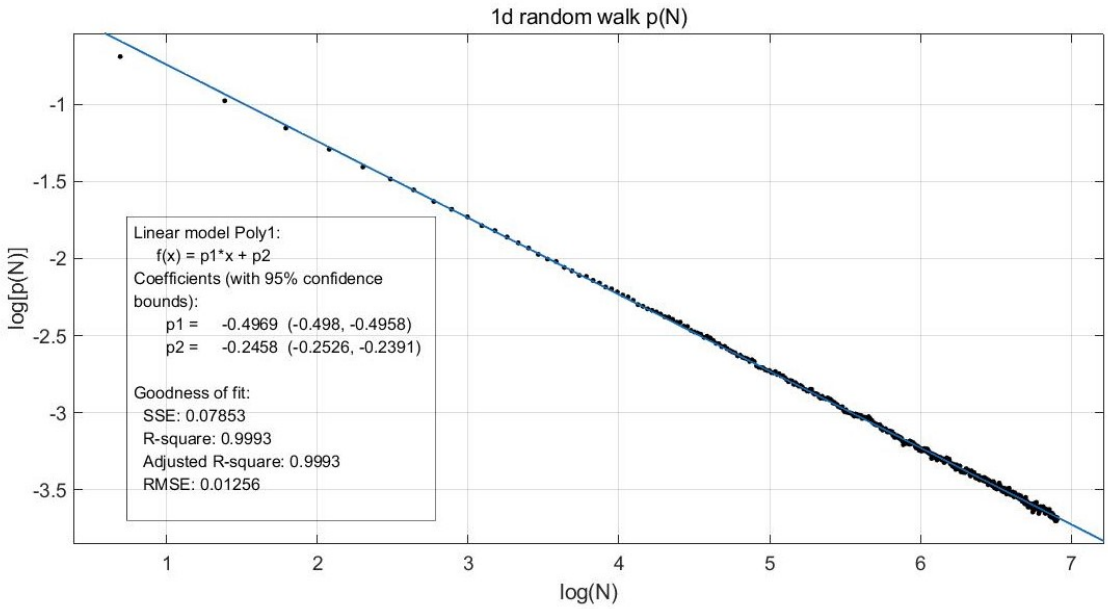


图 4: 1d随机游走

从拟合结果来看，一维的指数大约为$\nu = \mathbf{-0.4969}$。这和理论近似的**-0.5**非常接近，且随着N的增大，吻合程度增大，这也符合对大N值近似展开的前提。

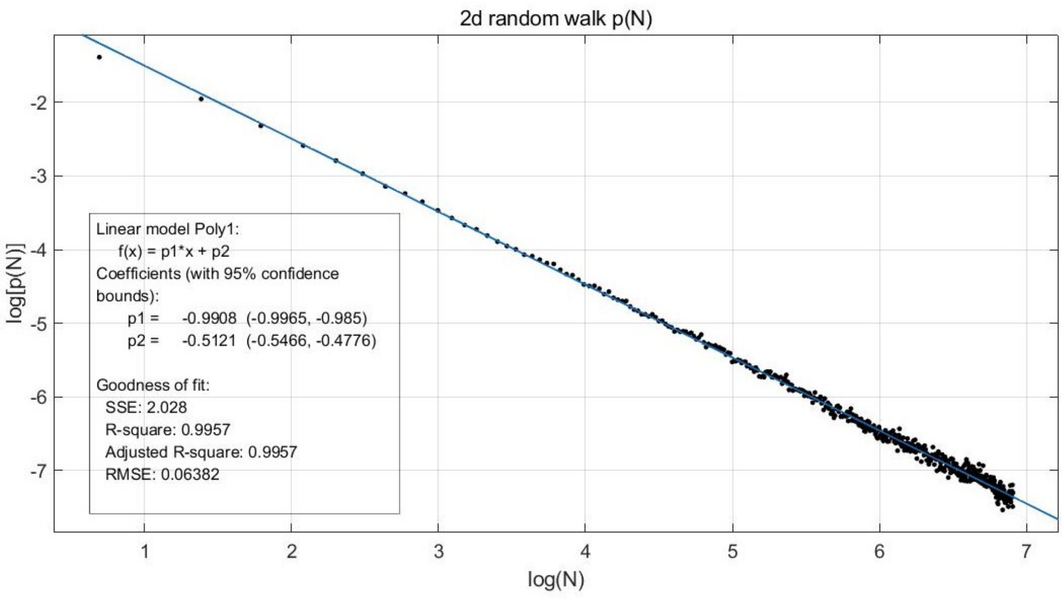


图 5: 2d随机游走

从拟合结果来看，一维的指数大约为$\nu = \mathbf{-0.9908}$。这和理论近似的**-1.0**非常接近，且随着N的增大，吻合程度增大，这也符合对大N值近似展开的前提。

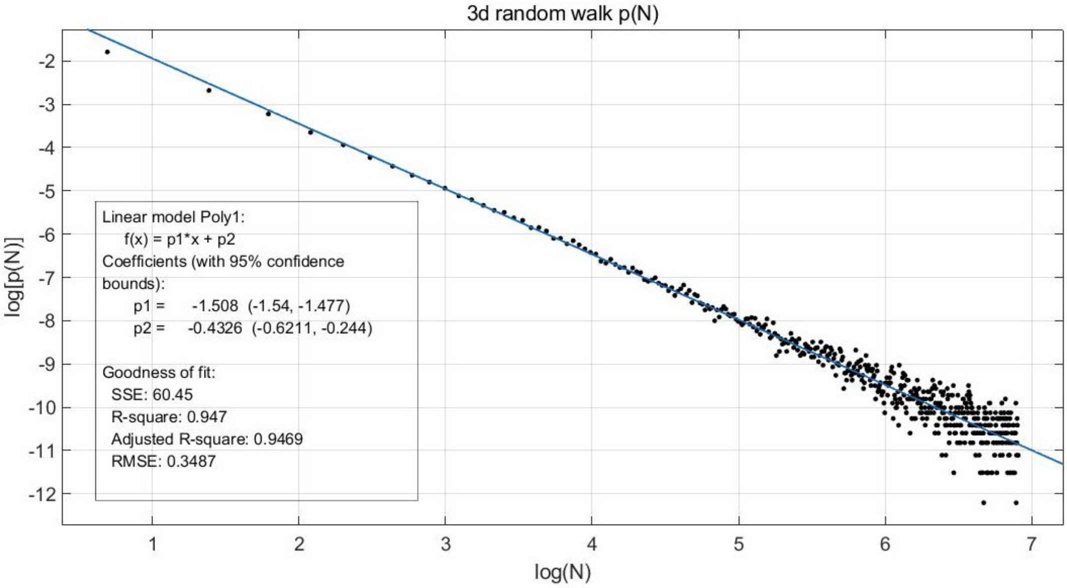


图 6: 3d随机游走

从拟合结果来看，一维的指数大约为$\nu =$ **-1.508**。这和理论近似的**-1.5**非常接近，且一开始随着N的增大，吻合程度增大，这也符合对大N值近似展开的前提。并且由上面的理论推导可以指导，p确实也会略小于标度的-1.5次方关系，从而实际实验标度要略小于-1.5。但是需要注意的是，当N继续增大时，可能是由于笔者选取的系综数量还不够多，在大步长的时候会出现$log(p)$无穷大的点，因为没有粒子经过原点。另一个值得注意的是，由于系综取得不够大，在后面很大的N时出现的统计涨落会变大，体现在图上就是最后模糊的一片点集，这是由系综中系统数M不够大引起的，而非步长N的原因。

4.3 三维和二维的随机游走比较

做出系综中一个粒子的随机游走轨迹。在二，三维的轨迹如下：

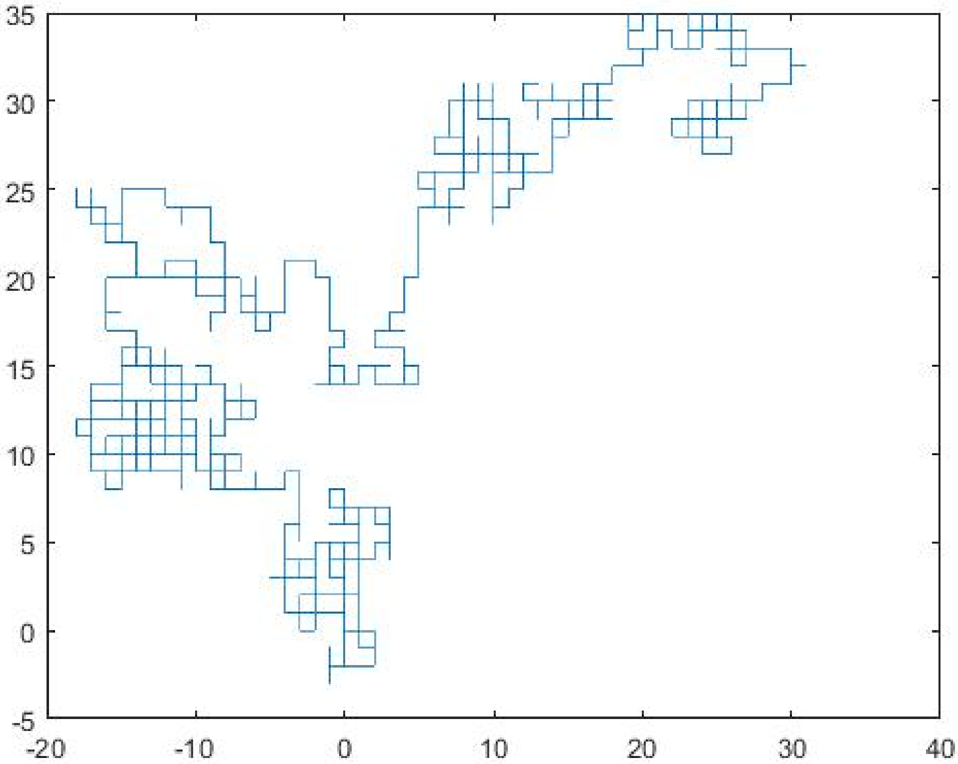
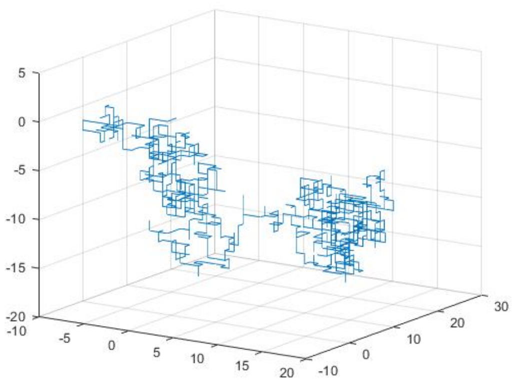
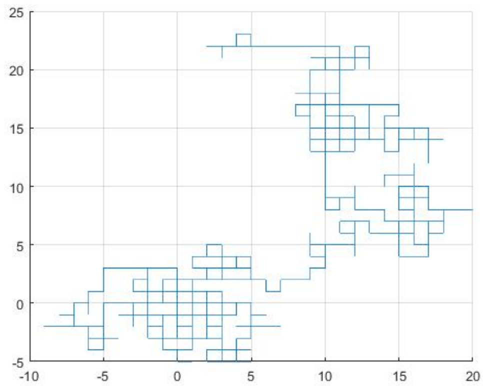


图 7: 二维随机游走



(a) 三维视图



(b) xy平面投影

图 8: 三维随机游走

5 总结

- 本实验数值模拟了$d = 1, 2, 3$维随机游走的标度律，得到了和理论自洽的结果。
- 程序还需改进。有的地方动态分配多个大数组，明显减慢了运行速度。并且为了换不同的时间种子，用了几处$sleep$函数，也降低了运行速度。

参考文献

[1] Woess, Wolfgang. Random walks on infinite graphs and groups. Vol. 138. Cambridge university press, 2000.