

§1.4 随机行走与生长问题

1.4.1 随机行走

将随机性引入到物理实在的模型中的想法可以追溯到古希腊时代, Epicurean (伊壁鸠鲁) 就认为原子的无规运动源于单独的原子没有什么理由就可以偏离直线而游荡, 这种观点理所当然地受到其他持有决定论或因果性观念的学者的反对。按现代的观点, 我们对物理世界随机性的认识是这样的: 在建立物理实在的模型时, 可以暂时只考虑一个小的物理子系统, 但这个子系统的边界可以受系统外部的力、场和碰撞的影响。为了避免在描述中包含大的物理系统和多自由度, 我们用一个适当选择的“偶然”力、场和碰撞等物理量来代替外部自由度对子系统施加的影响, 这就是物理中引入随机性思想的基础。

谈到随机 (stochastic) 人们经常想到统计 (statistical), 但这是两个不同的概念。古罗马的地区行政长官称为 stisticus, 他的职责就是日常的无序状态中析取规律性, 如麦子的产量等, 这类的工作正是统计学家所做的事情, 即从一大堆杂乱的数据中提取关键参数, 如平均值、标准偏差等。然而, 随机意味无规或任意, 在随机方法中我们是利用无规性来做事情, 如试验系统的所有可能状态, 这和统计学做的是相反的两样事情。

1.4.1.1 Brown 运动

1827年植物学家 Brown 观察到水中的花粉等颗粒可以不停的作无规则运动, 1905年 Einstein 发表了 Brown 运动的统计理论, 推导了运动位置方差与运动时间的关系, 并且将扩散系数用粒子半径、温度、粘滞性等物理量表示。这些启发了 Perrin 在1916年进行了实验观测研究 (他于1926年由于对物质的非连续结构研究和 Avogadro 常数的计算获得了 Nobel 物理奖)。当时他是用显微镜直接观察胶粒, 并每隔30秒记录一次位置 (图 1.4.1.1-1), 图中的直线段是用于将这些位置相连接的, 并不表示在30秒中它们是按直线段行走的。

由于 Brown 颗粒的质量远较液体的分子大, 我们将颗粒看成是一个巨分子, 它不停地受到周围环境中液体分子的碰撞, 这种碰撞的频率为每秒 10^{19} 次量级, 因此我们观察到的 Brown 颗粒的运动是大量碰撞的涨落的结果, 它是一种完全无规则的随机运动 (图 1.4.1.1-2)。在描述 Brown 运动时, 我们将影响系统在相空间中轨迹的随机力应用于决定性运动方程, 也就是把液体分子的自由度凝缩为仅用随机力代表。

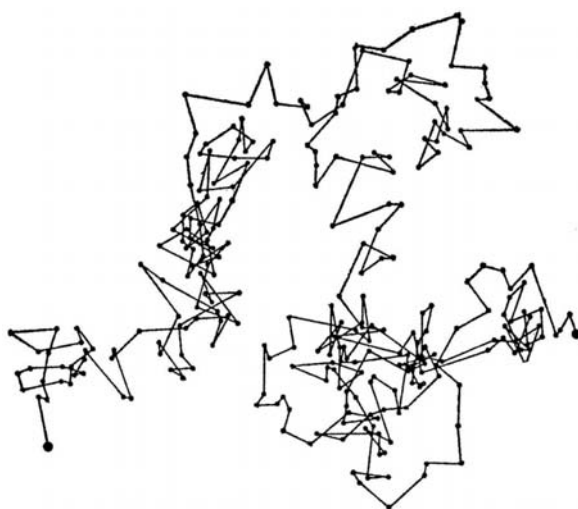


图 1.4.1.1-1 Perrin 记录的 Brown 运动轨迹。

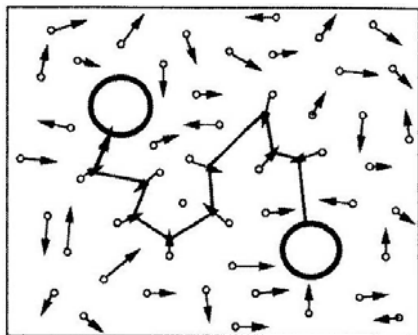


图 1.1.4.1-2 Brown 运动是大颗粒受周围小分子碰撞的涨落引起的。

设颗粒所受的阻力为 $-\alpha \mathbf{v}$ ，所受的涨落力为 \mathbf{F} ，则颗粒在水平面内 x 方向上的运动方程为

$$m\ddot{x} = F_x - \alpha \dot{x}, \quad (1.4.1.1-1)$$

这是 1907 年由 Langevin 提出的 Brown 运动方程。由

$$x\ddot{x} = \frac{d}{dt}(x\dot{x}) - \dot{x}^2 = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} x^2 - \dot{x}^2, \quad (1.4.1.1-2)$$

(1.4.1.1-1) 式两边乘以 x 后得到 Virial (维里: 含意为力) 定理:

$$\frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} (mx^2) - m\dot{x}^2 = xF_x - \frac{1}{2} \alpha \frac{d}{dt} x^2, \quad (1.4.1.1-3)$$

将上式对颗粒总数进行平均, 得

$$\frac{1}{2} \frac{d^2}{dt^2} \langle mx^2 \rangle - \langle m\dot{x}^2 \rangle = \langle xF_x \rangle - \frac{1}{2} \alpha \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle. \quad (1.4.1.1-4)$$

由于涨落力项是无规的, 其平均值为 0。对于速度项, 应用能量均分定理后得,

$\langle m\dot{x}^2 \rangle = k_B T$, (1.4.1.1-4) 式变为

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x^2 \rangle + \frac{\alpha}{m} \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle = \frac{2k_B T}{m}, \quad (1.4.1.1-5)$$

方程的一般解为

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2k_B T}{\alpha} t + c_1 e^{-\alpha t/m} + c_2, \quad (1.4.1.1-6)$$

由于指数项的幂系数非常大, $\alpha/m \approx 10^7 \text{ 秒}^{-1}$, 当时间 $t > 10^{-6}$ 秒时指数项可以忽略不计, 起始点在原点时, 常数项为 0, 因此有,

$$\langle x^2(t) \rangle = 2Dt, \quad (1.4.1.1-7)$$

其中的 $D = k_B T / \alpha$ 为扩散系数。设以 τ 秒间隔测粒子的移动量, 在 t 时间内测 N 次, $t = N\tau$, 每次的位移为 Δx_i , 则总位移的平方为

$$x^2 = \left(\sum_{i=1}^N \Delta x_i \right)^2 = \sum_{i=1}^N \Delta x_i^2 + \sum_{i \neq j}^N \Delta x_i \Delta x_j, \quad (1.4.1.1-8)$$

由于 Δx_i 可正可负, 交叉项在对大量粒子取平均后为 0, 故有

$$\langle \Delta x^2 \rangle = 2D\tau, \quad (1.4.1.1-9)$$

Brown 运动的实验观测验证了这个结果。由于对于 y 方向有类似的结果, 故 (1.4.1.1-5) 式可按径向位移写成

$$\langle r^2(t) \rangle = 2Dt. \quad (1.4.1.1-10)$$

这个结果是 Brown 运动的一个重要结论：在随机运动中，每步的位移可正可负，其平均值为 0，因此对大量粒子平均后的运动首尾总位移量 $\langle x \rangle = 0$ ，但恒为正值的平方位移平均值是与时间成正比的。

1.4.1.2 一维 RW 模型

作为 Monte Carlo 模拟的初级应用，我们以随机行走问题来考察 Brown 运动。随机行走的问题最初是由 Person 在 1905 年发表于《Nature》的论文中提出的：

“一个人从 θ 点出发，沿直线走了 l 码，然后他转了一个角度后由沿第二条直线走了 l 码，他重复了 n 次这样的过程。我想求出 n 次过程后此人位于离开起始点 r 到 $r+dr$ 距离内的概率”。显见，这就是 Brown 运动问题的数学表达。

为简便起见，我们先只考虑一个粒子或醉鬼在一维格点上的行走。设从原点出发，醉鬼以几率 p 往左或以几率 $q=1-p$ 往右跨一步长 l 。我们要统计对于醉鬼系综， N 步后的总位移平均和方差。根据概率论的 Bernoulli 二项式分布可得

$$\langle x(N) \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N \Delta x_i \right\rangle = \sum_{i=1}^N \Delta x_i P_i = (q-p)Nl, \quad (1.4.1.2-1)$$

$$\begin{aligned} \langle x^2(N) \rangle &= \left\langle \left(\sum_{i=1}^N \Delta x_i \right)^2 \right\rangle = \left\langle \left(\sum_{i=1}^N \Delta x_i^2 \right) \right\rangle + \left\langle \sum_{i \neq j}^N \Delta x_i \Delta x_j \right\rangle, \\ &= 4pqNl^2 + N^2l^2(q-p)^2 \end{aligned} \quad (1.4.1.2-2)$$

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \left\langle \{x(N) - \langle x(N) \rangle\}^2 \right\rangle = \langle x^2(N) \rangle - \langle x(N) \rangle^2 = 4pqNl^2. \quad (1.4.1.2-3)$$

方差表示了均值附近的散布程度。模拟时，可先只考虑 $p=q=1/2$ 的等几率和单位步长 $l=1$ 的情形，把对大量醉鬼模拟后的计算结果与理论值

$$\langle x(N) \rangle = 0, \quad \langle x^2 \rangle = \langle (\Delta x)^2 \rangle = N, \quad (1.4.1.2-4)$$

比较，结果是完全吻合的（图 1.4.1.2-1）。计算时，要注意单个醉鬼的行为是很难

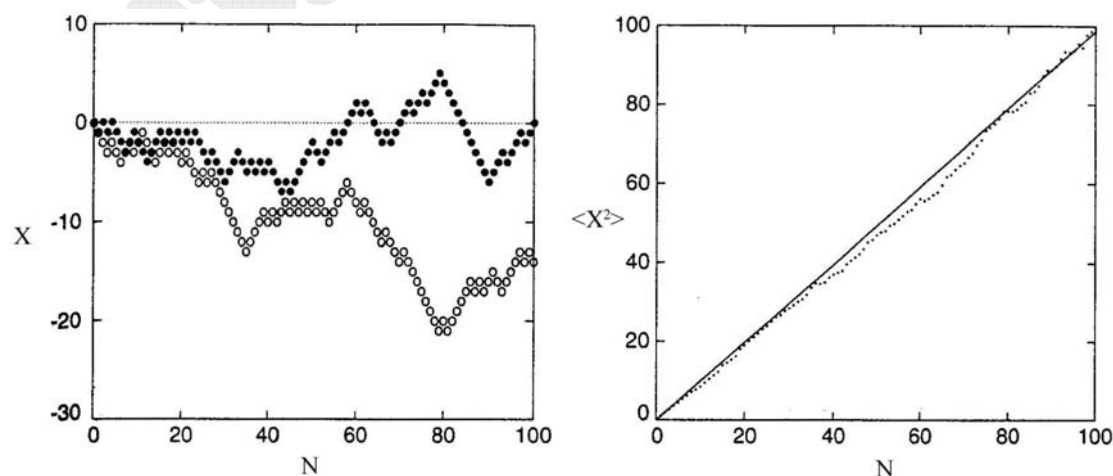


图 1.4.1.2-1 一维随机行走的模拟结果。左图显示两次不同的行走时，离原点的距离与行走步数即时间的关系。右图显示，对大量行走取平均后离原点的距离平方与行走步数成线性关系。

预测的，应该统计平均大量个数。

在这个随机行走的例子中，进行第 i 步的几率与之前的任何一步无关，因此它是 Markov 过程（其定义留待 §2.2 节详述）。特别是，由于时间 t 正比于步数 N ，方程 (1.4.1.2-4) 式正是 Brown 运动的 (1.4.1.1-7) 和 (1.4.1.1-9) 式。这个式子说明了酒鬼在喝酒前后不同的运动本质：当他以常速度奔着酒馆而去时， $x = vt$ ，离原点的距离是与时间成正比的，而当他酩酊大醉后从酒馆里出来后， $\sqrt{\langle x^2 \rangle} \propto t^{1/2}$ ，因此他离开原点的距离要比喝酒前要慢得多。

1.4.1.3 标度指数

一般情况下，随机行走前后距离的方均值为

$$\langle r^2(N) \rangle = aN^{2\nu} (1 + bN^{-\Delta} + \dots), \quad (1.4.1.3-1)$$

标度指数 ν 说明了方均根值是如何随 N 趋于无穷大的， ν 可视为相变标度律下的临界指数， Δ 是修正标度的指数（见 (1.4.1.1-6) 式）。这样，与相互作用多粒子体系中的相变情形类似，我们可定义与相变问题中的配分函数等价的物理量，

$$Z_N \propto N^{\gamma-1} q_{\text{eff}}^N, \quad (1.4.1.3-2)$$

它描述格点上不同的随机行走数目随行走步数的变化关系， q_{eff} 是有效坐标数。对不同的随机行走方式（维度和规则）有不同的指标 ν 和 γ ，因此可以把随机行走模型按照标度律进行分类。可见，纯几何的描述与相变之间有唯象的联系。

对于上面的随机行走问题来说，醉鬼可以任意走而没有限制。对于这个 RW（Random Walk）模型，在 d 维空间中，有 $\nu = 1/2$ ， $\gamma = 1$ 。

[作业]: 模拟二维上的随机行走运动，推导 (1.4.1.3-1) 式中的临界指数 ν ：（1）设极角 θ 是在 $[0, 2\pi]$ 内均匀分布的， $\Delta x = \cos \theta$ ， $\Delta y = \sin \theta$ ；（2） Δx 和 Δy 是在 $[-\sqrt{2}, \sqrt{2}]$ 内均匀分布的；（3）随机选择（N,E,S,W）方向；（4）随机选择（N,NE,E,SE,S,SW,W,NW）方向；（5）三角网格。问 ν 与格点的对称性有无关系？

1.4.1.4 扩散的物理

(1.4.1.1-7) 式实际上描述了热扩散的运动，因此随机行走和扩散之间有着必然的联系。扩散是由于粒子浓度梯度的存在 $\nabla \rho$ 形成粒子往低密度区域迁移的趋势，单位时间内通过某一方向垂直截面的粒子数即为粒子流密度， $\mathbf{J} = -D \nabla \rho$ ，由粒子数守恒的 Liouville 连续性方程 $\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$ 可得扩散方程， $\partial p / \partial t = D \nabla^2 p$ 。其中 $p(x, t) dx$ 是粒子在 t 时刻存在于 x 至 $x + dx$ 之间的概率， $\rho(x, t) = \rho_0 p(x, t)$ ， ρ_0 是单位体积内的平均密度。在一维情况下扩散方程为

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p(x, t)}{\partial x^2}. \quad (1.4.1.4-1)$$

任意函数的平均值（等价于（1.4.1.1-4）中对粒子数的平均）是

$$\langle f(x,t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x,t) p(x,t) dx. \quad (1.4.1.4-2)$$

方程（1.4.1.4-1）两边乘以 x 并积分，左边为

$$\int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial p(x,t)}{\partial t} dx = \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{\infty} xp(x,t) dx = \frac{\partial}{\partial t} \langle x \rangle, \quad (1.4.1.4-3)$$

右边分部积分后代入边界条件 $p(\pm\infty, t) = 0$ 得

$$D \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial^2 p(x,t)}{\partial x^2} dx = D \left. x \frac{\partial p(x,t)}{\partial x} \right|_{-\infty}^{\infty} - D \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial p(x,t)}{\partial x} dx = 0. \quad (1.4.1.4-4)$$

故 $\partial \langle x \rangle / \partial t = 0$ 。由于在 $t=0$ 时粒子均是在原点的，从而粒子位置的平均值是不随时间变化的， $\langle x(t) \rangle = \langle x(0) \rangle = 0$ 。

方程（1.4.1.4-1）两边乘以 x^2 并积分后可得，

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle x^2(t) \rangle = 2D, \Rightarrow \langle x^2(t) \rangle = 2Dt, \quad (1.4.1.4-5)$$

该结果与 Brown 运动的（1.4.1.1-1）式完全一致，说明 Brown 运动或 RW 模型的随机行走就是描述了扩散的物理过程。通过简单的微分运算可以验证，扩散方程的解为 Gauss 正态分布（图 1.4.1.4-1），

$$p(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x-\langle x \rangle)^2 / 2\sigma^2}, \quad (1.4.1.4-6)$$

式中的方差表示峰宽，

$$\sigma = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \sqrt{2Dt}. \quad (1.4.1.4-7)$$

考虑单位体积的系综中有 N 个粒子，则粒子的密度分布是 $\rho(x,t) = Np(x,t)$ 。 $t=0$ 时，这些粒子均是集中在原点的，此时的密度分布是 δ 函数， $\rho(x,0) = N\delta(0)$ 。随着时间的发展，粒子开始做随机行走离开原点，产生扩散，在 t 时刻的密度分布由（1.4.1.4-6）式描述，即以坐标原点为中心的钟型 Gauss 曲线，极大值在原点处，粒子的弥散程度为峰的半宽 $\sim \sigma \propto t^{1/2}$ （图 1.4.1.4-2）。Rayleigh（他于 1904 年因气体物质的密度研究获 Nobel 物理学奖）首

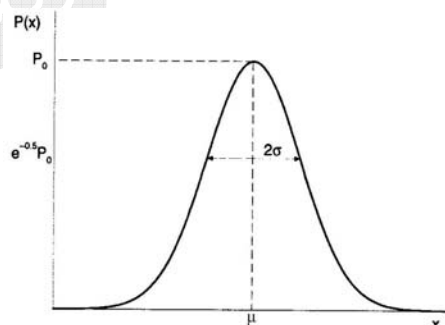


图 1.4.1.4-1 Gauss 分布曲线。

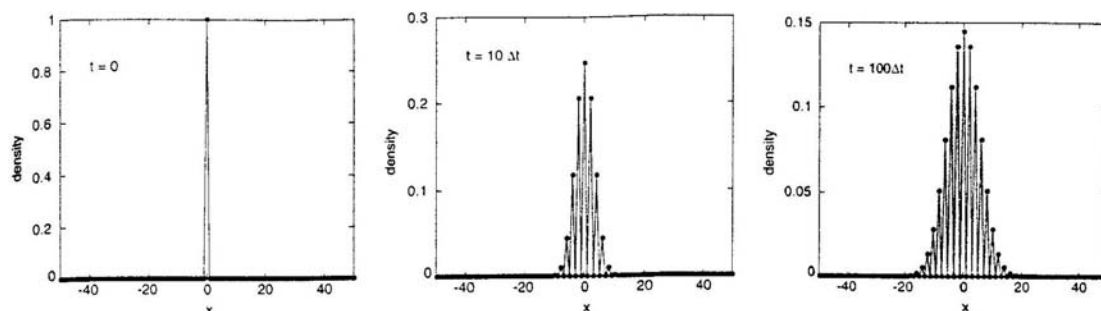


图 1.4.1.4-2 一维扩散时，粒子的数密度分布峰随行走时间的展宽，注意纵轴的尺度是不一样的。

先从定步长的离散随机行走中获得 Gauss 分布, Einstein 由概率密度分布推导出扩散方程, 并求解得到 Gauss 分布。因为 Brown 运动与随机行走问题和扩散问题是相互关联的, 它在凝聚态物理、化学和材料科学的研究中起着重要的作用。如材料中离子电导和空位(缺陷)的移动等问题都可以用随机行走模型来处理, 不过在具体问题中要将物理参数和实验条件代入, 如扩散系数的温度依赖性等等。

1.4.1.5 熵

现在我们以非平衡态的统计物理的观点来讨论扩散的 RW 模型, 以说明系统是如何趋于平衡的。我们从日常生活经验可知, 当一滴蓝墨水滴入一杯自来水中时, 可见到墨水是逐步扩散开来的。现在以二维扩散为例, 我们用 RW 模型进行模拟。首先采用粗粒平均 (coarse graining), 即假设每个扩散的粒子实际上代表了一大群分子的集合, 在 $t=0$ 时在原点放置 N 个粒子, 让它们开始做随机行走, 随着时间 t (正比于步数) 的演化, 粒子逐步扩散开来, 从起始的有序状态发展成为一个无序并达到平衡的分布 (图 1.4.1.5-1)。

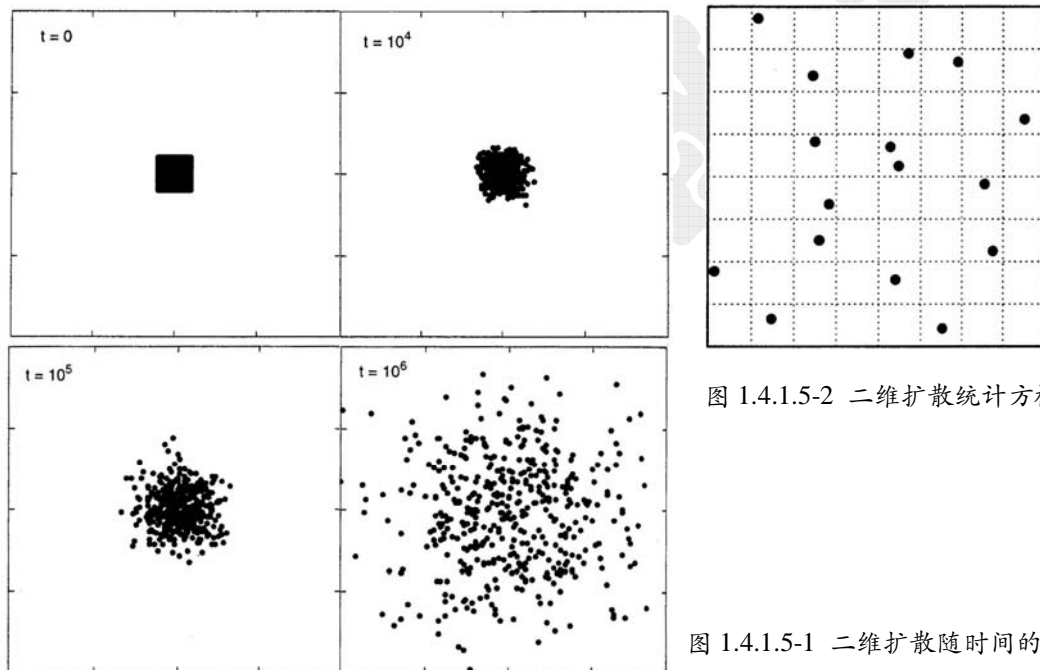


图 1.4.1.5-2 二维扩散统计方格。

图 1.4.1.5-1 二维扩散随时间的演变。

统计物理中用熵来描述系统的有序度, 它的定义是

$$S = -\sum_i p_i \ln p_i, \quad (1.4.1.5-1)$$

式中的求和为所有可能的占据态, p_i 为系统处于 i 态的几率。为了计算 p_i , 我们将平面分划成正方网格, 则态 i 表示第 i 个方格, p_i 为在此方格中的粒子数除以粒子总数 (图 1.4.1.5-2)。因为 $t=0$ 时, 原点格子中的几率为 1, 其它格子为 0, $S(t=0)=0$ 。模拟计算可以显示, $S(t)$ 随 t 增加, 最后趋于常数 (图 1.4.1.5-3), 即 $t \rightarrow \infty$ 时粒子仍然在作扩散, 但当粒子之间距离 $\sqrt{\Delta x^2} = \sigma$ 已增加到了足够大的程度时, 分布达到了平衡, 即在每个格子中找到粒子的几率是一样的。

1.4.1.6 RW 模型的变形

对于上面的简单 RW 模型，可以加以各种变形。例如，设有离地面高度为 h 的粒子进行竖直面上的二维运动。在竖直方向上，向下走的几率比向上走的几率大，这样粒子最终会落到地面上。这个随机行走模拟了龙卷风中雨滴的落下过程（图 1.4.1.6-1），可以计算它们落下的平均时间。设行进的几率在水平和垂直 4 个方向上有不同的值，可以得到落到地面后的 x 方向上的分布。

此例属于偏压扩散的一种情况，偏压扩散中，可将运动粒子看成是带电子子，外界施加给粒子系统一个偏电压，于是粒子沿着电场方向行进的几率 p_+ 要大于反电场方向行进的几率 p_- 。于是有 $p_{\pm} \sim 1 \pm E$ ， E 正比于场强。场可以是空间均匀的，也可以是局域有方向的。

上面的雨滴模型还是受限模型的一种。我们可以设计出不同边界条件限制下的其他各种受限模型。如反射壁模型，在 $x = \pm a$ 处有无穷大势垒，当粒子到达 a 格点，下一步被反射到 $a-1$ 格点，可以计算几率分布 $p(x, N)$ 并比较如无边界情形下的差别。

作为物理中激子在原子晶格中的输运的理想化模型，可以采用随机行走来模拟。当光子入射到固体中时，某个格点上的原子态或分子态被激发，这个激发能可以转移到邻近的格点上使该分子激发，而原来的格点上的分子返回基态，该激子沿晶格传输，直至被某一特殊的格点俘获，在此引起化学反应或发光。可将一维无限长格点设为周期性的圆环，上面 N 个格点中有一个是俘获格点，在任何一个随机选取的格点上放一粒子，可以计算粒子的平均寿命。

在持续性随机行走模型中，某一步的行进几率与之前的一步有关，如果是同方向则设为 a ，反方向为 $1-a$ 。持续性随机行走模型最初的应用例子是化学中的层析分离柱中的分子扩散，设分子在运动状态下速度为 v ，在停止状态下为 0，可把随机行走每一步长 ± 1 改为 v 和 0。

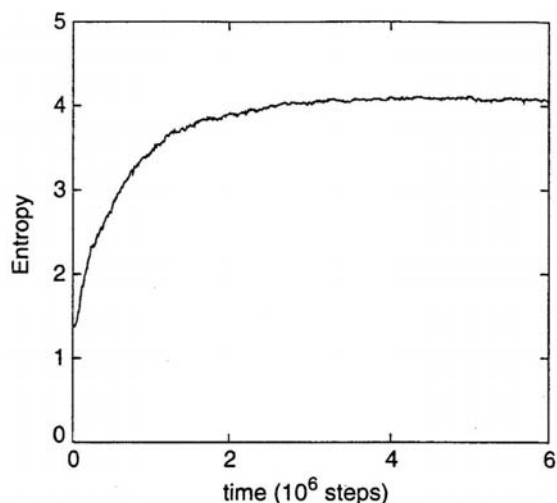


图 1.4.1.5-3 二维扩散时熵随时间的增加，最后趋于平衡态熵饱和。

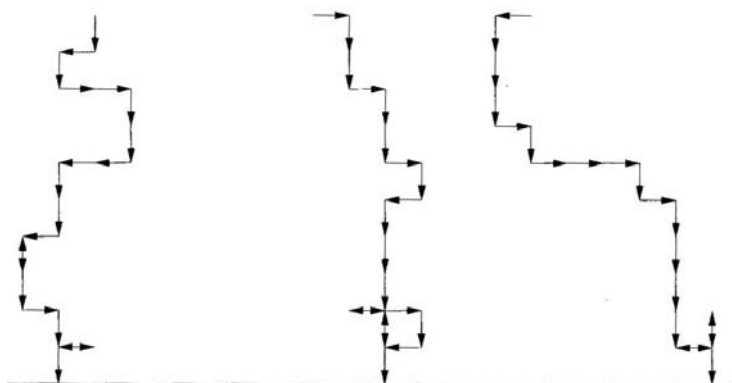


图 1.4.1.6-1 模拟雨滴落下的偏压随机行走中 3 个粒子的轨迹。

[作业]: 对于上面的变形 RW 模型之一进行计算模拟, 计算与(1.4.1.4-6)式对应的几率分布 $p(x, N)$ 以及 $\langle x(N) \rangle$, $\langle x^2(N) \rangle$, $\langle \Delta x^2(N) \rangle$ 。其中的参数可自设。求扩散系数 D 用双对数曲线求临界指数 ν , 它们是否依赖参数, 为什么?

[作业]: 设计一种三维空间中电磁场偏压下的随机行走模型, 详细叙述模型和计算条件, 给出计算结果。

1.4.2 自规避随机行走

1.4.2.1 SAW 模型

Brown 运动的粒子在作随机行走时, 粒子先前在空间中漫游时任何位置的记忆对当前的运动没有任何限制, 可以与自己的历史路径相交, 而一条柔性高分子链是一个占据有限空间的物理实体, 它不可能自相交。链结构的空间轨迹与漫游的粒子不同, 它不能叠加在相同的空间位置上。有一种蛇形生长游戏, 蛇的长度在不断动态地生长, 由玩家通过键盘的上下左右四个键决定在蛇头有限空间内的生长方向, 当蛇头与自身相交时游戏结束。与此游戏极为相似的是, 在粒子的自规避行走 SAW (self-avoiding walks) 模型中, 粒子要记住以往走过的格点位置, 在禁止返回上一位置的同时, 当它与历史位置相交时粒子将死亡从而终止行走。与历史有关的自规避行走是非 Markov 过程, 人们已经对于 SAW 模型作了大量的研究。SAW 模型在模拟柔软巨分子在溶剂中空间构型的大尺度统计性质以及小分子的结构势能方面有着重要的应用。在随机行走应用于高分子结构时, 由行走产生的路径被认为是柔性长链分子的物理位形, 而非扩散粒子的瞬时路径。

SAW 中的禁止性记忆的作用迫使路径范围扩大, 在一维时效果特别明显, 这时行走必须沿着第一步的方向持续下去而不能转向, 行走在出发后再也不能回到原点, 走了 N 步后的长度等于 N , 这个结果与 RW 模型有着显著的差别。自规避效应或称为自排斥效应同样也会在高维空间中发生, 但其严重程度会降低, 因为自规避限制随着对路径延续的可挑选性增长而迅速失去它的重要性。

由于 SAW 模型中随机行走粒子由于与自身交叉容易死去, 因此损耗较大, 不易生长, 人们设计了另外一种聪明的自规避随机行走以避免死亡, 它称为生长自规避随机行走 (GSAW)。在这个模型中, 粒子会记住以前走过的位置, 并避免落入这些历史的陷阱而选择其它安全的路径 (图 1.4.2.1-1)。但有可能粒子走入一条死胡同, 在某一步必将死亡 (图 1.4.2.2-1b)。

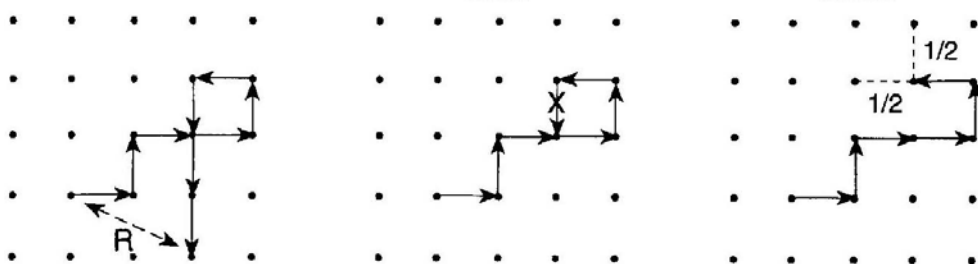


图 1.4.2.1-1 正方格子上的不同随机行走类型。RW (左) 中以等几率沿 4 个方向中的任意一个方向行走; SAW (中) 中如果与自己交叉则路径中止; GASW (右) 中行走粒子是聪明的粒子, 它将避免与自己交叉。

1.4.2.2 指数的计算

由于自规避的排斥效应, 尽管 SAW 行走结果造成的路径范围要较理想的 RW 行走要大, 但是大 N 的路径数目较少, 因此在由指数律 (1.4.1.3-1) 式求指数 ν 时, 要通过双对数曲线 $\log \langle r^2(N) \rangle - \log N$ 求斜率。通常是由比值法求斜率,

$$\nu(N) = \frac{1}{2} \frac{\ln \left[\frac{\langle r^2(N+i) \rangle}{\langle r^2(N-i) \rangle} \right]}{\ln \left[\frac{(N+i)}{(N-i)} \right]}, \quad (1.4.2.2-1)$$

式中的 $i \ll N$, 选取 i 时要使它大到可以忽略附近的涨落, 但又要比 N 小很多以使修正项对指数的计算影响很小。类似地, 对于指数 γ 的计算有:

$$\begin{aligned} & \ln [Z(N)/Z(N-i)] - \ln [Z(N+i)/Z(N)] \\ &= (\gamma-1) \ln [N^2/(N-i)(N+i)] \approx (1-\gamma)(i/N)^2, \end{aligned} \quad (1.4.2.2-2)$$

另外一种方法是权重法, 可以提高计算的效率, 也就是将一次行走中遇到的可能性路径方向数作为权重进行加和, 以较少的行走数目模拟大量行走 (图 1.4.2.2-1)。以二维正方网格上的自规避行走为例, 取任意点作为起点, 取 4 个方向之一开始走一步, 下一步只能选择 3 个方向中的一个, 记录每一次走过的格点, 为了规避历史上的格点, 后面的步行时可能选择的方向数可能小于 3。加权的步骤是: (1) 起始一步时的权重 $w(1)=1$; (2) 自相交时 $w(N)=0$, 重新开始另外一条行走; (3) 如果可以选择 3 个方向, 则 $w(N)=w(N-1)$; (4) 如果可以选择的方向数 m 为 $1 \leq m < 3$, 则 $w(N)=(m/3)w(N-1)$ 。最后, 对行走数 i 以权重加和求方均根值:

$$\langle r^2(N) \rangle = \frac{\sum_i w_i(N) r_i^2(N)}{\sum_i w_i(N)}. \quad (1.4.2.2-3)$$

对于 SAW, 目前用重正化群方法和 Monte Carlo 方法计算出的指数值是:

$$\begin{aligned} \nu &= 3/4, & d &= 2 \\ \nu &\approx 0.588 \pm 0.001, & d &= 3. \\ \nu &= 1/2, & d &\geq 4 \end{aligned} \quad (1.4.2.2-4)$$

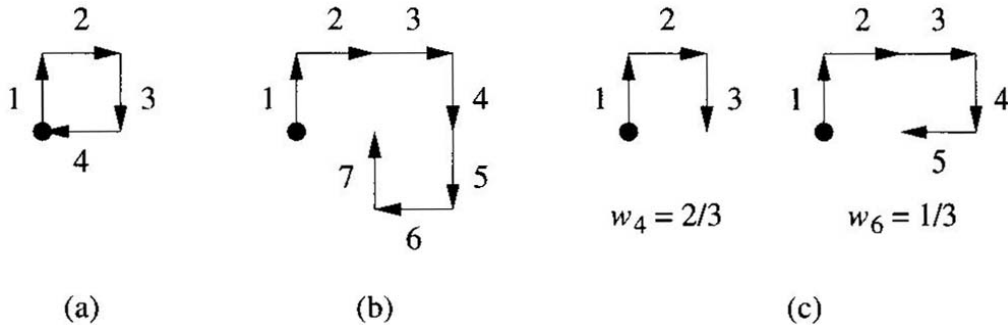


图 1.4.2.2-1 正方格子上的 SAW, (a) 中第 4 步与自己交叉, 路径中止; (b) 中第 8 步必然走向死亡; (c) 中给出了加权算法中的权重因子。