计算物理第十四题

PB16000702 韦璐

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Pd，讨论它随步数N的变化关系Pd(N)，能否定义相关的指数值？

编程思路：

粒子在d维无限大的空间中的正方形格点上随机行走，边长只有1，两个距离是单位长度的格点称为相邻格点，粒子跳到相邻每个格点的概率相同。

一维随机行走返回原点的概率：假如行走了n步以后，粒子向右边行走了n1步，向左边行走了n2步，，这两个步数相加得到n，两个方向行走的概率都是0.5，那么粒子的位置就是x=n1-n2，粒子的概率分布是：$\mathrm{P(x,n)}=\frac{n!}{n1!(n-n1)!}p^{n1}q^{n2}, n1=\frac{n+x}{2}$，那么返回原点的时候，n=2n1.那么一维随机行走返回原点的概率是P(0,n)=$\frac{n!}{\left(\frac{n}{2}\right)!\left(\frac{n}{2}\right)!}(\frac{1}{2})$^$n$

二维随机行走返回原点的概率：$\mathrm{P(0,n)}=\sum_{i=0}^{n/2}\frac{n!}{\left[i!\left(\frac{n}{2}-i\right)!\right]^2}(\frac{1}{4})$^$n$

三维随机行走返回原点的概率：$\mathrm{P(0,n)}=\sum_{i=0}^{n/2}\sum_{j=0}^{\frac{n}{2}-i}\frac{n!}{\left[i!j!\left(\frac{n}{2}-i-j\right)!\right]^2}(1/6)$^$n$

定义的相关指数值：

我们设置n很大的时候，概率和n满足指数关系，那么有$\mathrm{logp}=\mathrm{blogn}+\mathrm{b}$。

随机行走的编程思路：

我们用 c 语言自带的 rand 函数，来生成随机数决定粒子的下一刻的随机行走，一维的时候加入生成的随机数是偶数，那么就退后，如果生成的是奇数，那就向前走，二维的时候假如生成的随机数除以 4……，三维的时候有六个方向的随机行走方法，那就除以 6，用蒙特卡洛方法模拟计算这么多个粒子，随机行走 n 步以后，将粒子随机行走的返回原点的粒子数除以总共的粒子的个数，就是特定的 n 得到返回原点的几率，这样改变不同的 n 就可以拟合上面的直线了。可以预测的是，粒子数目越大，涨落的情况就越小，几率就更加接近理论值。

计算结果和分析：

***在模拟计算的时候为了更加精确并考虑计算时间，由于维数越大粒子越难回到原点，所以我们在一维的时候计算 10000 个粒子，后面维数变大，粒子数目变多，粒子行走的次数也变多。

一、模拟结果

1. 一维的粒子的行走步数和概率：（前十步）

1 0.000000000000000

2 0.504000000000000

3 0.000000000000000

4 0.359900000000000

5 0.000000000000000

6 0.300000000000000

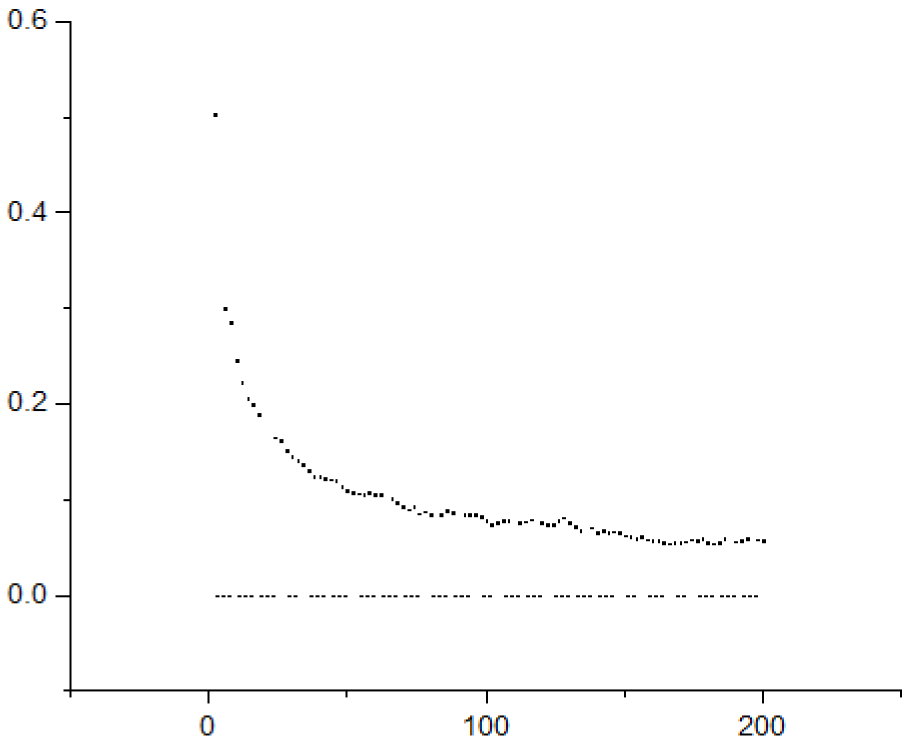
7 0.000000000000000

8 0.285700000000000

9 0.000000000000000

10 0.246400000000000

一维粒子行走步数和概率作图：



2. 二维的粒子的行走步数和概率：（前十步）

1 0.000000000000000

2 0.250400000000000

3 0.000000000000000

4 0.152510000000000

5 0.000000000000000

6 0.099170000000000

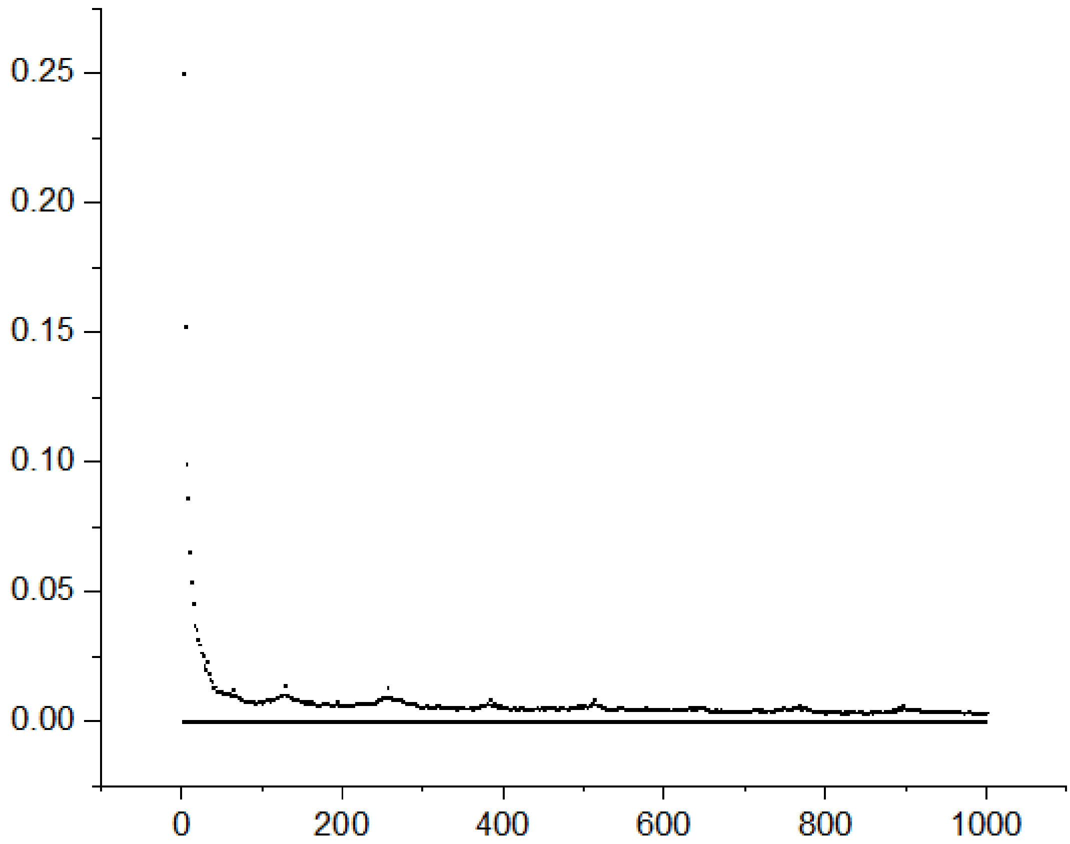
7 0.000000000000000

8 0.086280000000000

9 0.000000000000000

10 0.065580000000000

二维粒子行走步数和概率作图：



3. 三维的粒子的行走步数和概率：（前十步）

1 0.000000000000000

2 0.167049000000000

3 0.000000000000000

4 0.075484000000000

5 0.000000000000000

6 0.039202000000000

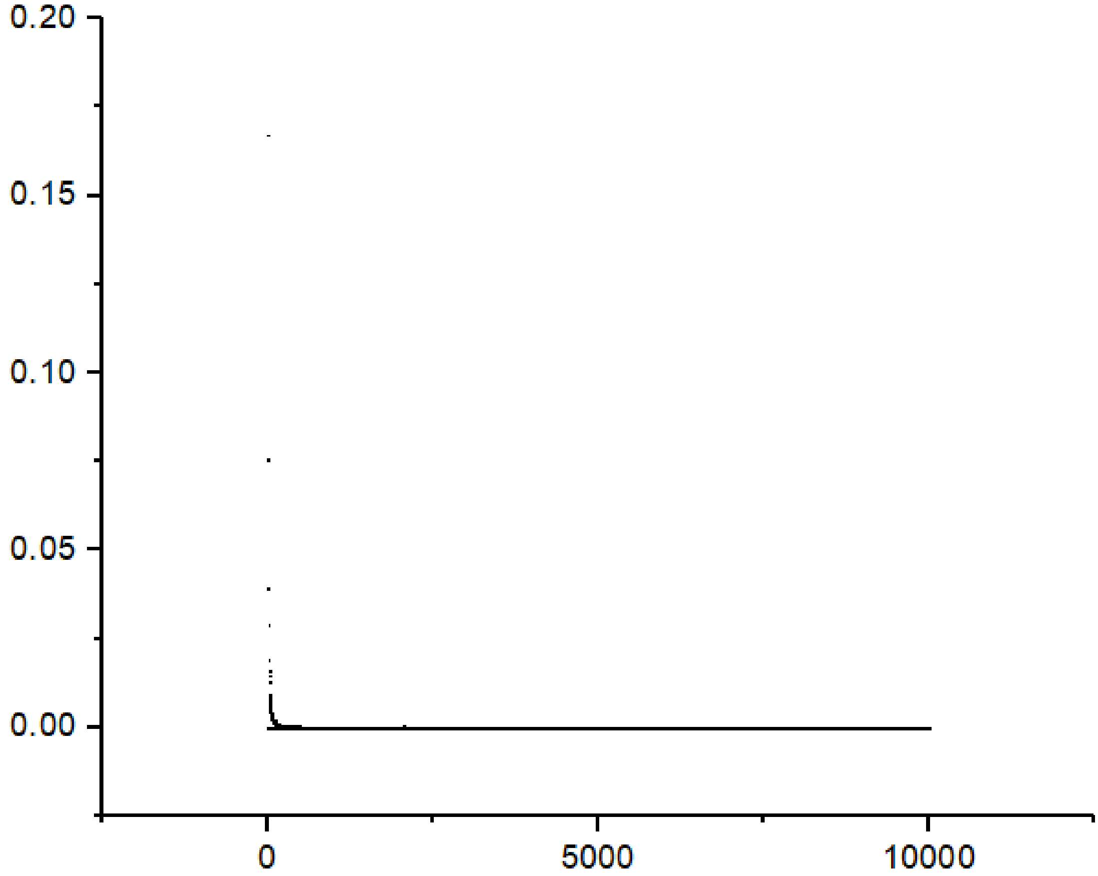
7 0.000000000000000

8 0.029147000000000

9 0.000000000000000

10 0.019041000000000

三维粒子行走步数和概率作图：



总结：

（1） 随着 n 增大，每个维度返回原点的概率都在减小。

（2） 相同步数的情况下，维度变大的话返回原点的概率也在减小。

（3） 当 n 是奇数的时候，不论是什么维度，返回原点的概率都是零。

二．计算结果和理论的比较（一维为例）

d=1 的时候计算的理论的概率是:

2 0.500000000000000

4 0.375000000000000

6 0.312500000000000

8 0.273437500000000

10 0.246093750000000

12 0.225585937500000

14 0.003073059374213

16 0.000018811253523

18 -0.000000026026737

20 -0.000000000152242

22 -0.000000000000078

24 -0.000000000000000

26 -0.000000000000000

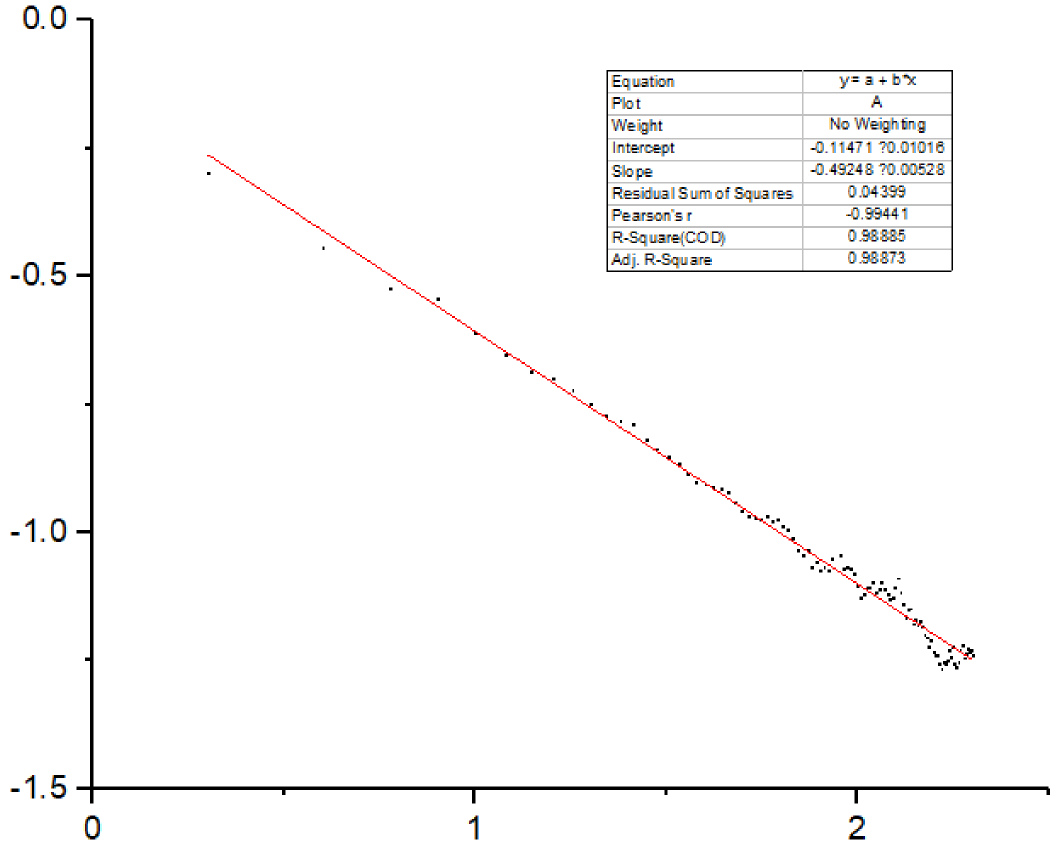
28 -0.000000000000000

30 0.000000000000000

总结:可以看到,开始时候和上面 d=1 的结果符合的还是不错的,但是行走的步数变大以后就开始产生比较大的偏离了。

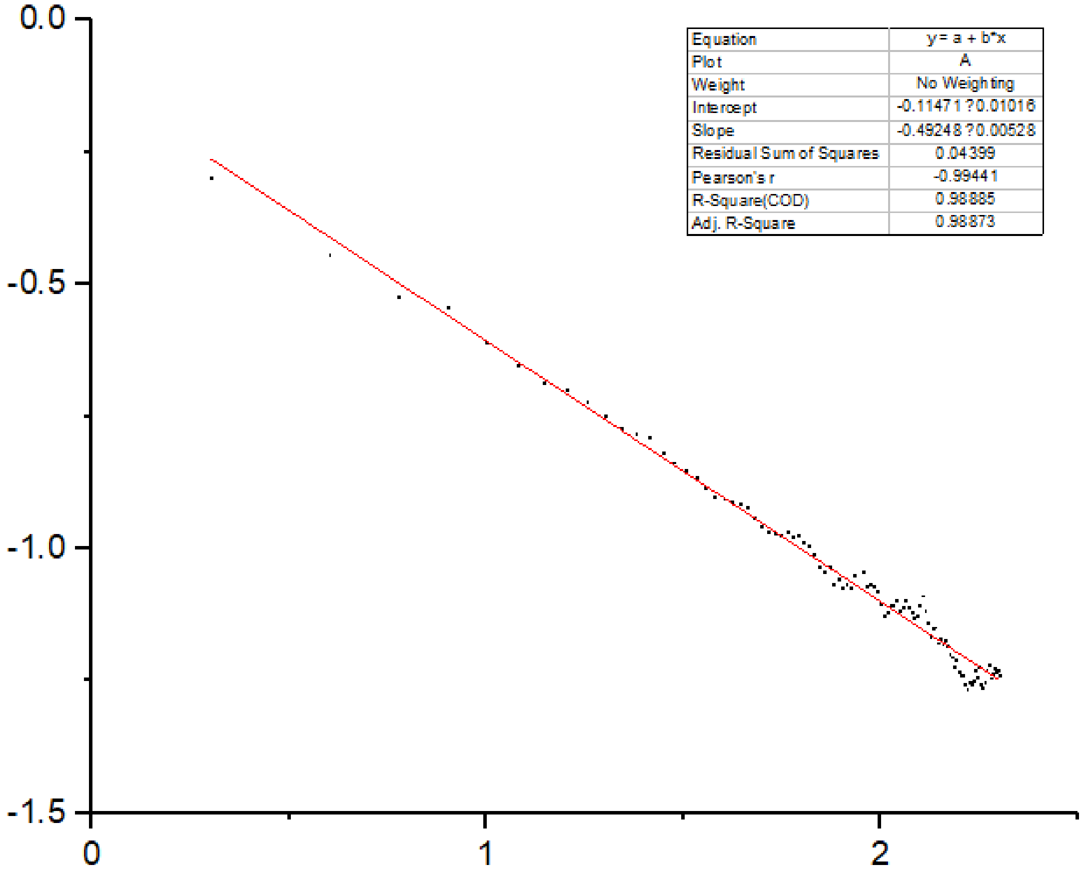
三. 拟合公式

一维:



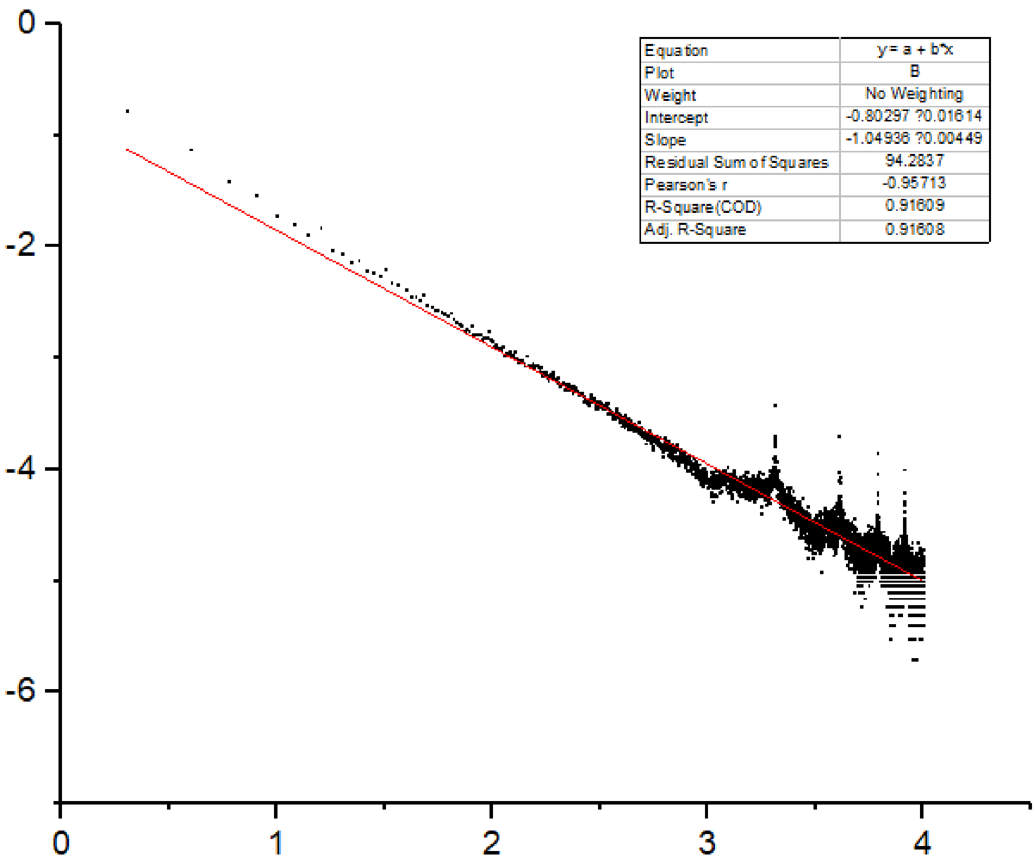
0.0
-0.5
-1.0
-1.5
0
1
2
Equation
y = a + b*x
Plot
A
Weight
No Weighting
Intercept
-0.11471 ?0.01016
Slope
-0.49248 ?0.00528
Residual Sum of Squares
0.04399
Pearson's r
-0.99441
R-Square(COD)
0.98885
Adj. R-Square
0.98873

二维：



0.0
-0.5
-1.0
-1.5
0
1
2
Equation | y = a + b*x
Plot | A
Weight | No Weighting
Intercept | -0.11471 ?0.01016
Slope | -0.49248 ?0.00528
Residual Sum of Squares | 0.04399
Pearson's r | -0.99441
R-Square(COD) | 0.98885
Adj. R-Square | 0.98873

三维：



总结：使用计算器计算以上的拟合结果，可以发现返回原点的概率 p 与维数 d，步数 n 的关系为

$$P_d(N) \propto \frac{1}{N^{\frac{d}{2}}}$$

程序说明：

未命名 1：一维

未命名 2：二维

未命名 3：三维

未命名 4：理论