随机系统

2015301020096 15 级材料班唐哲

摘要：本文根据《计算物理》第七章的内容完成，对随机系统的性质进行研究。

1. 从典型的随机行走问题出发，对“一维---等概率---等步长”问题和“一维---非等概率---等步长”问题进行研究，然后增多维度，分析“三维---自由方向---等步长”问题。对上述三种过程，得到它们的位移平方系综平均与时间的关系，类比扩散方程，在线性条件下计算出扩散系数 D 值。
2. 对随机行走和扩散过程，书中以“咖啡中的奶油”为例，我们将以随机行走和计算两种方法得到一维扩散过程的分布曲线，并以三维图演示二维扩散过程，得到区域各点浓度随着时间的变化；最后以散点方法，直接演示例子中大量粒子的扩散方式。
3. 给出 Eden cluster 和 DLA cluster 的演化过程。
4. 探究分形，作出典型的分形图形 Mandelbrot 集。

关键字：随机行走 非等概率 自由方向 三维 扩散 正态分布 Eden cluster DLA cluster 曼德勃罗特集

1. 引言

不同于由精确的力学方程以及初始条件确定的决定性系统，假设在一维的坐标轴原点上有一个粒子，每隔相同的时间长度之后，它将会自由选择向左或向右跳一格（相同的步长），那么在一定的时间之后，我们无法具体说明这个粒子的坐标将会是多少，这样的系统称之为随机系统。

随机行走是典型的随机系统之一，在此上述例子的基础上，改变条件，还可以演化出（等概率/非等概率），（方向网格化/自由选择空间方向），（等步长/自由步长）等多种行走过程。用系综对系统的性质进行统计，我们将得到随机系统的平均性质，随着系综越来越大，系统的表现将越来越严格地遵守统计性质，在之后的正文中，我们将会通过计算得到随机行走的分布。

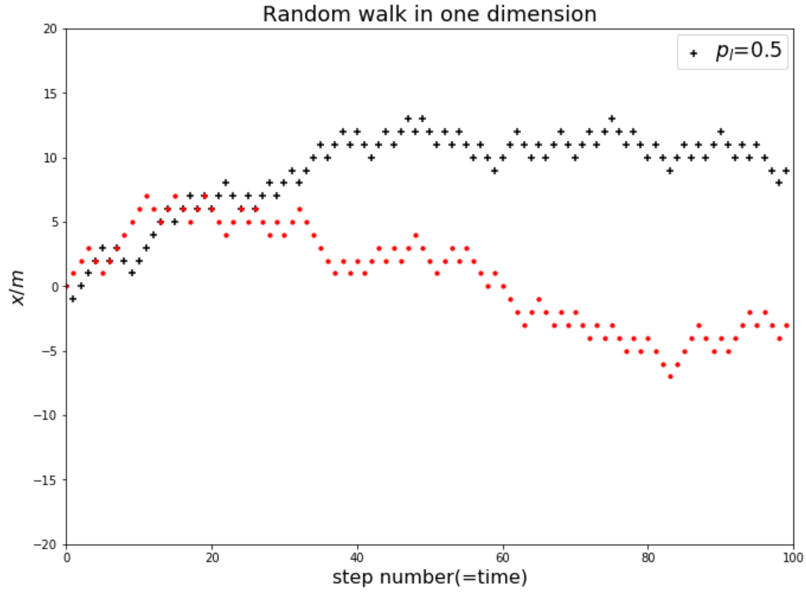
如果花粉在杯子中运动，不断受到其他粒子的撞击而改变方向，无规则的运行，这就是布朗运动，倘若大量粒子在一定条件下做随机行走过程，将演变成扩散。将一滴由大量奶油粒子构成的奶油滴入咖啡之中，随着时间推移，浓度将从初始的中心位置极大逐渐演变成整杯咖啡均匀，该过程也将在正文中加以模拟。

Mandelbrot 集由曼德勃罗特教授在二十世纪七十年代发现，是分形图形中的典型代表，点集由非线性迭代公式加以导出，将分形图形的局部放大可得到无穷的细节，具有自相似性。

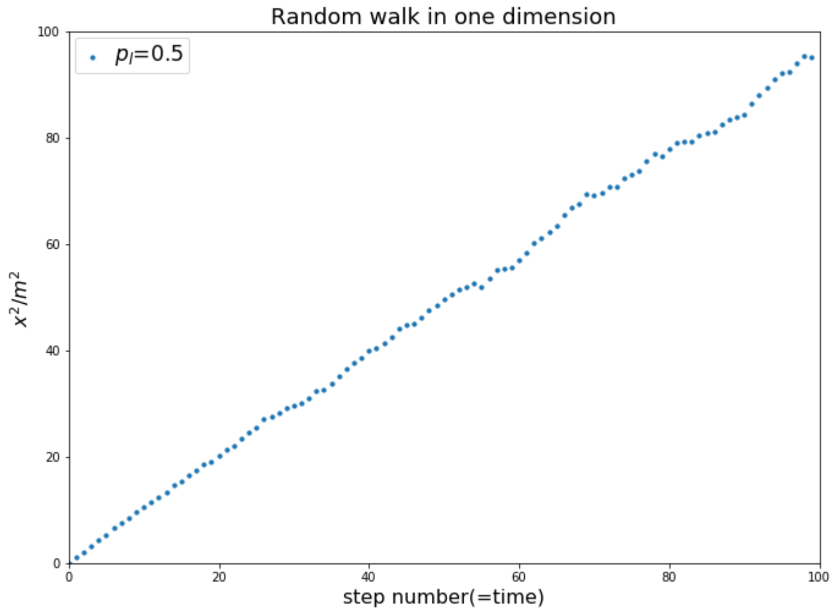
2 随机行走

2.1 一维随机行走

我们从一维的随机行走出发，这即是我们在引言中描述的例子：粒子自由地选择向左或者向右运动，每次保持相同步长。



当系综的数量越大，我们得到的结果将越接近严格的统计规律；取 900 系统的系综，统计他们的 r^2 与 t 的关系，如他们符合线性条件，如下图所示：



由图像进行拟合可知该图像斜率为 1.

类比公式：

$$<x^2>=2Dt$$

可知：

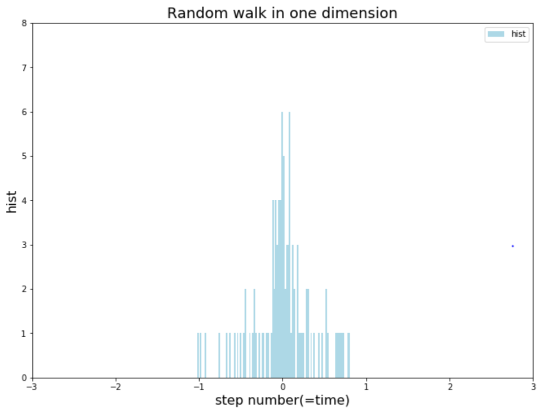
$$D=1/2$$

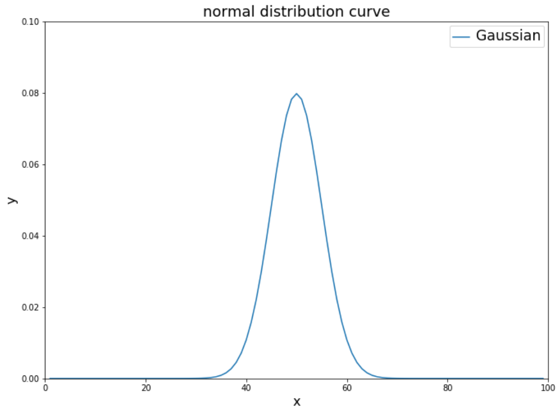
事实上，该条件下的 D 值亦可通过计算得到：

$$x_n^2 = \sum(\sum s_i s_j) = \sum s_i^2 = n$$

$$< x_n^2 >/t = 1 = 2Dt \rightarrow D = 1/2$$

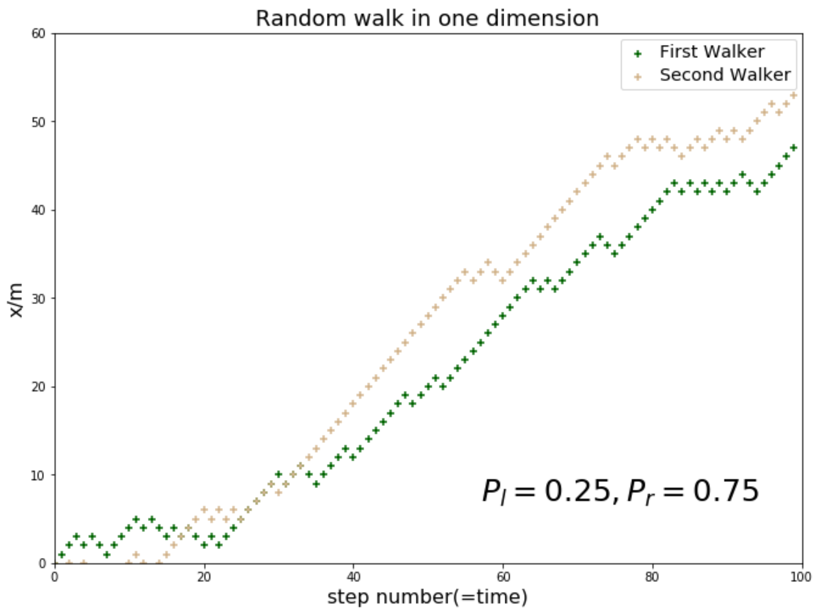
进一步的，研究实际 1 曲线上各点与理论曲线偏移，并用直方图统计该分布有：



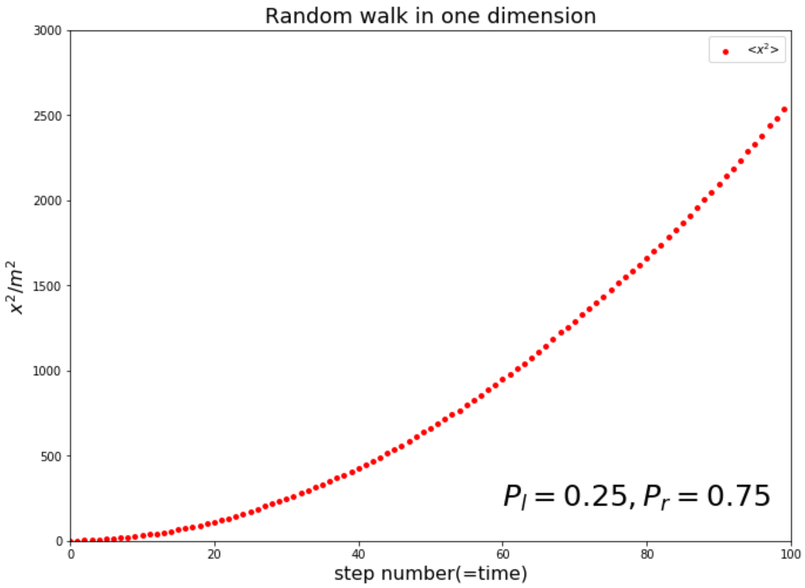


右图为正态分布，散点偏移接近于该分布。

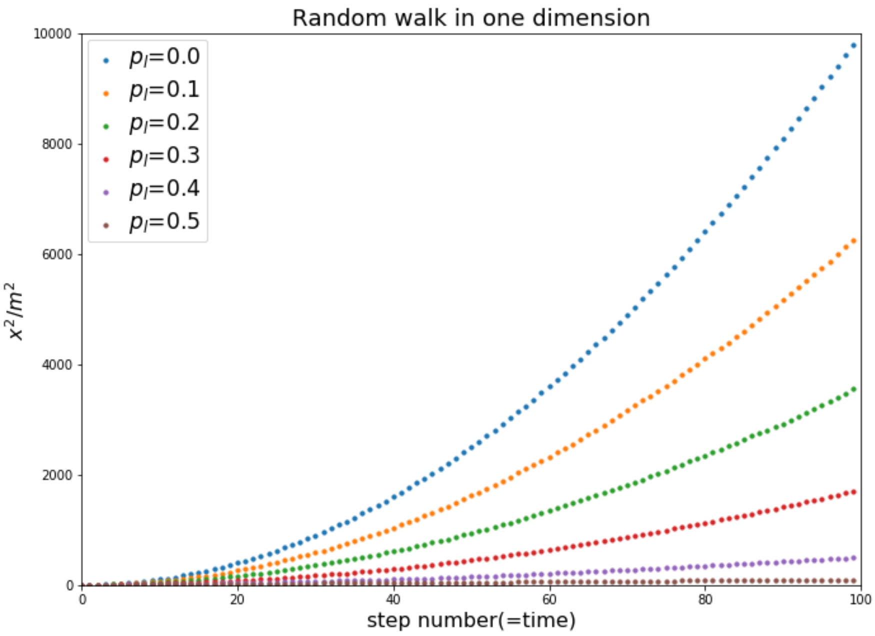
接下来我们改变条件，如果令向左概率为 0.25，向右概率为 0.75，则：



显然对于每个系统，位移出现了明显的偏移；同样对系综进行统计位移的平方：



此时已经明显不是一条直线



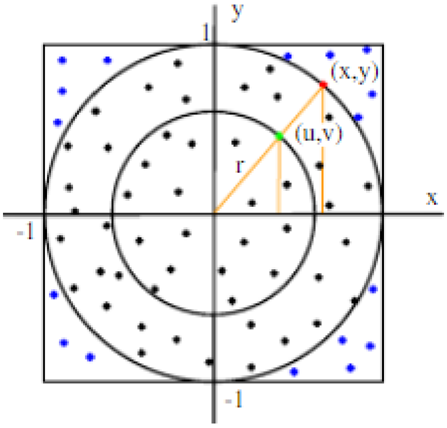
那么，对于一般的，在 0.1-0.5 之间的概率，都取其分布则如上图所示，显然：

1. 对于向左概率为 p 和 1-p 的曲线，应该重合。
2. 当极端条件 p=1 时，将变成二次曲线<x^2>=t^2；当极端条件 p=0.5 时，将变成之前计算的<x^2>=t

2.2 三维随机行走

对于三维随机行走，我们将研究这样一种情形：粒子可以在空间中自由选择自己的运动方向，但是保持步长始终一致。为了得到该计算结果，我们首先需得到一种办法实现三维空间中方向的自由取值，采用**三维球面上的 Marsaglia** 方法。

该方法基于抽样方法实现，在二维的平面上，它的原理图示如下：



其中黑色的即为有效抽样点，蓝色的是不符合要求的点，经过计算之后，我们最终得到圆环上对应的点（x，y）为了实现二维的随机抽样，我们需要两组均匀随机数抽样数；

$$(u,v) \in [-1,1]$$

$$r^2 = u^2 + v^2 \leq 1$$

$$x = u/r \quad y = v/r$$

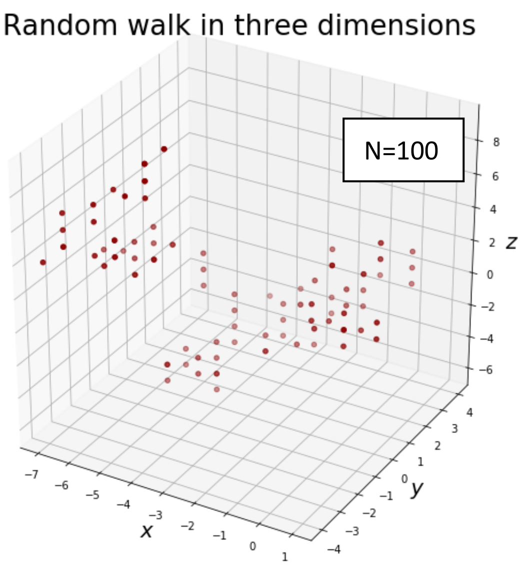
只要将该结论推广至高维空间即可，三维球面的表达式为：

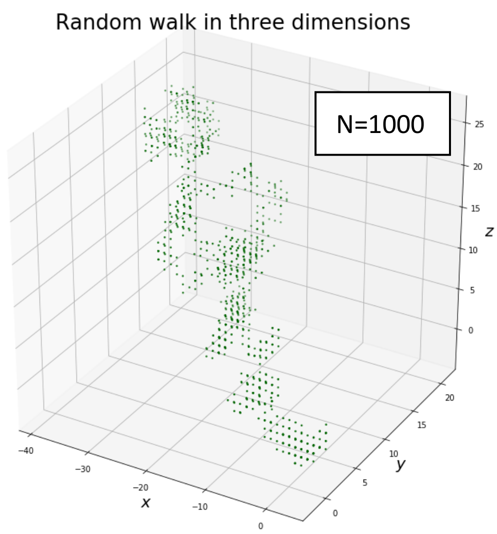
$$x = 2u\sqrt{1-r^2}$$

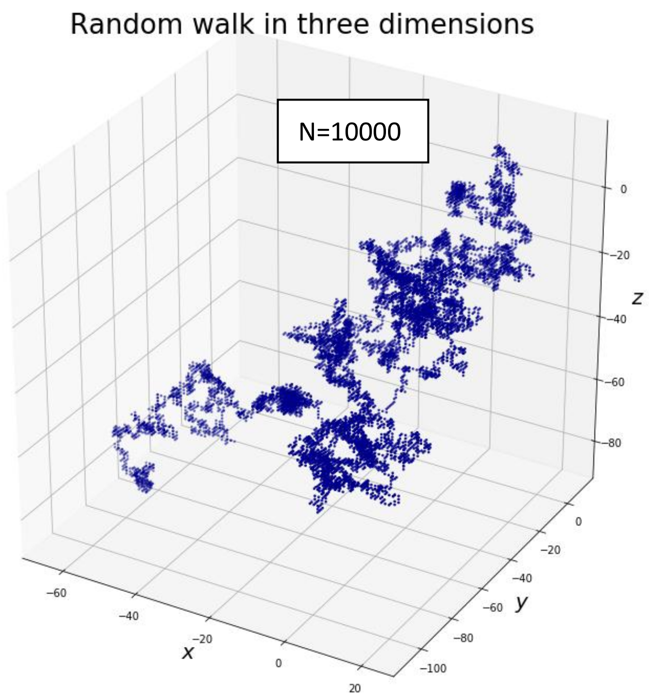
$$y = 2v\sqrt{1-r^2}$$

$$z = 1-2r^2$$

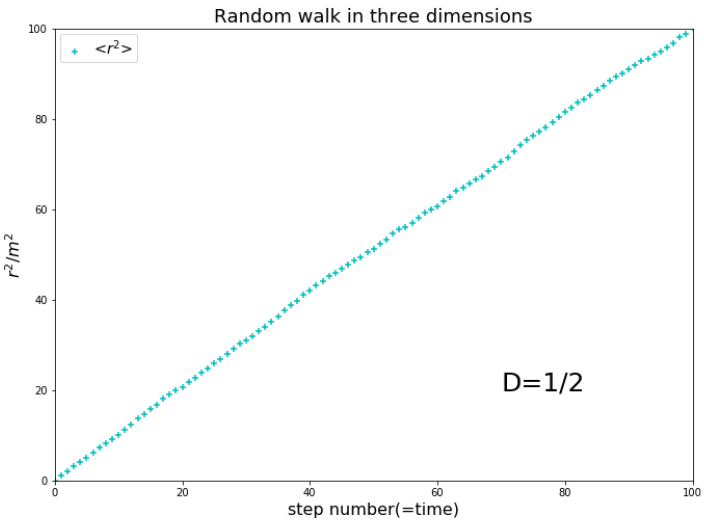
对于这样的行走，我们先给出它的空间图示：下方的二小图所示分别为走了 100 和 1000 步之后的空间图示，大图所示为行走 10000 步之后的空间图示：







可见行走者到达三个方向的范围基本相同：
同样，我们通过系纵计算它位移的平均值与步数的关系，对于 500 人系综，图示如下



表现为一直线，说明该方式下同样具有与扩散过程的联系，且 D=1/2：

2 随机行走与扩散过程

如果将一滴奶油滴入咖啡之中，奶油将会逐渐在咖啡中达到均匀状态，这就是扩散。如果将扩散视为大量粒子同时不断进行的随机行走过程，我们就可以模拟得到扩散的过程，进一步观察空间各点的密度，就会得到分布函数。

1855 年法国生理学家 Fick 提出了描述扩散规律的基本公式— 菲克定律，在一维（如 x 方向扩散的）粒子流密度（即单位时间内在单位截面上扩散的粒子流）与粒子数密度梯度成正比。

$$J=-D\frac{\partial C}{\partial x}$$

上式称为菲克定律又称扩散第一定律，该公式在计算杂质基质渗透深度和定杂质总量的薄膜解等材料学方法中具有广泛应用。

通过 Python 的 Tkinter 功能，我们可以直观地模拟出一个二维的动态扩散过程，在一个 tkinter 界面中显示：

随着时间增加，系统的混乱程度不断增加，粒子由集中趋向于均匀：

扩散过程的概率分布满足如下所示关系：

$$\frac{\partial P(x,y,z,t)}{\partial t}=D\nabla^2 P(x,y,z,t)$$

在一维条件下：其形式为

$$\frac{\partial P}{\partial t}=D\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$$

在程序的计算式中，我们将其改写为：

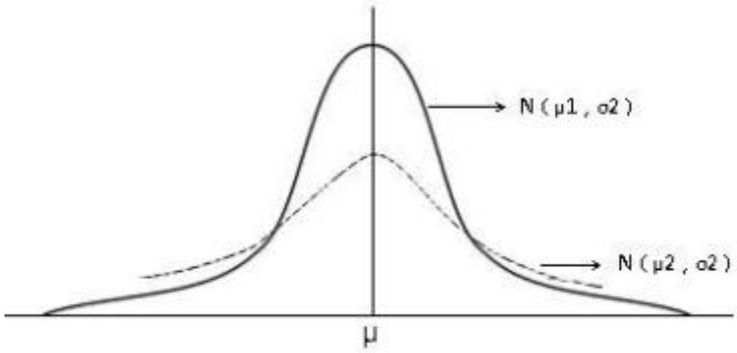
$$P(i,n+1)=P(i,n)+\frac{D\triangle t}{(\triangle x)^2}[P(i+1,n)+P(i-1.n)-2P(i,n)]$$

这里的 P 实际上是在空间各点之间出现的概率，正比于该点的实际密度（浓度），因此可以改写成：

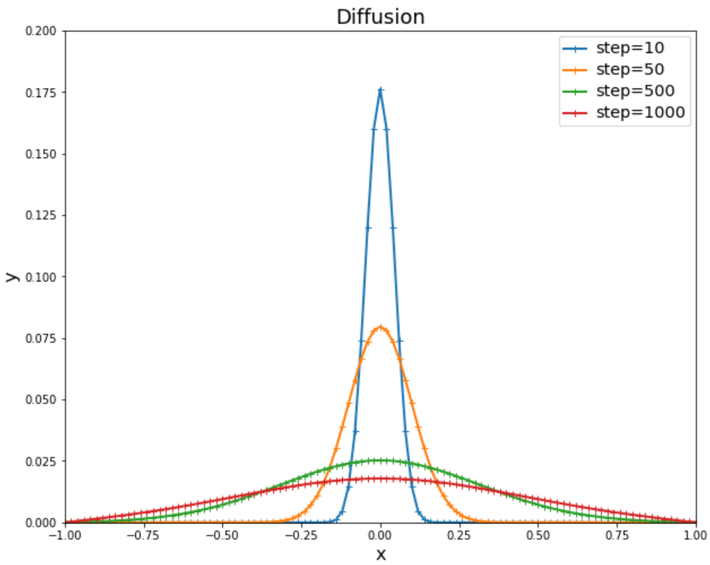
$$\rho(i,n+1)=\rho(i,n)+\frac{D\triangle t}{(\triangle x)^2}\rho(i+1,n)+\rho(i-1.n)-\rho(i,n)]$$

由该式的结果，可以试图类比正态分布：
对于这样所得到的分布结果，各点所在的位置符合正态分布曲线：

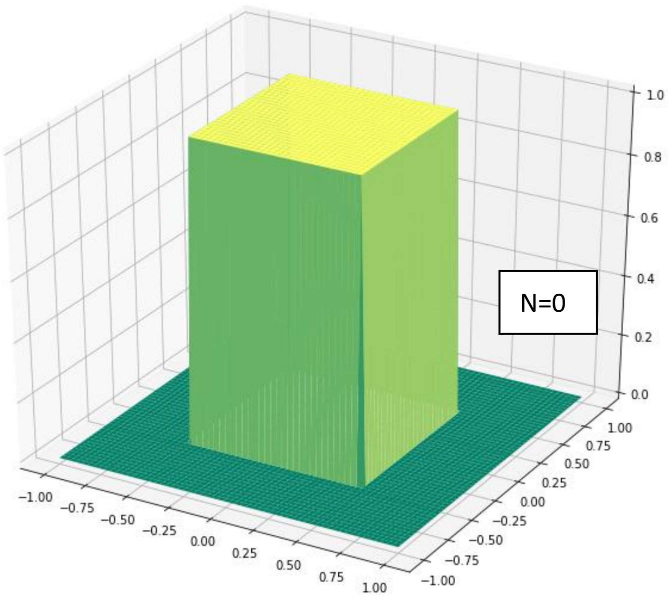
$$\rho(x,t)=\frac{1}{\sigma}exp[-\frac{x^2}{2\sigma^2}]$$

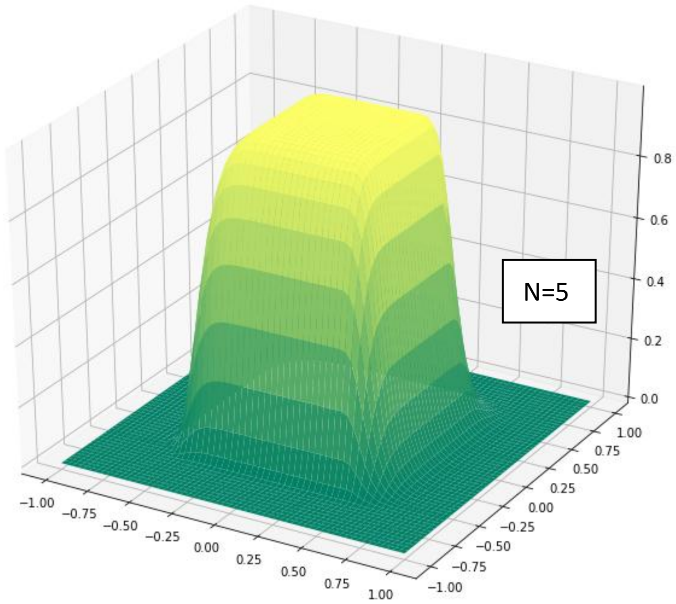


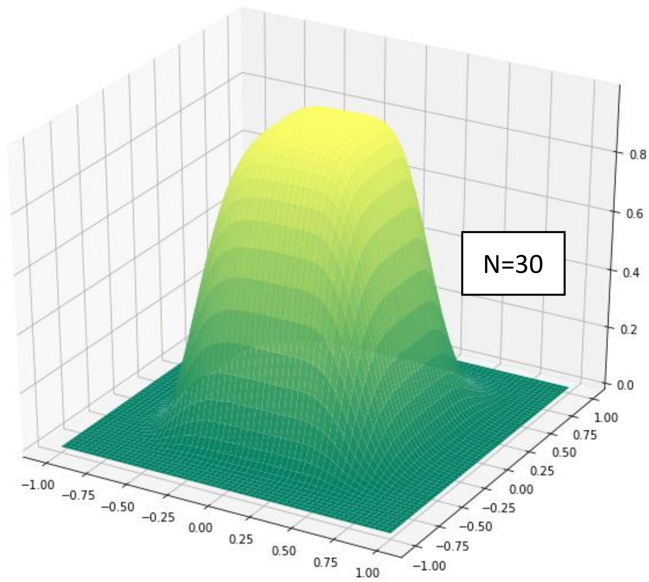
我们可以以此来模拟扩散过程，在一维条件下，计算结果为：



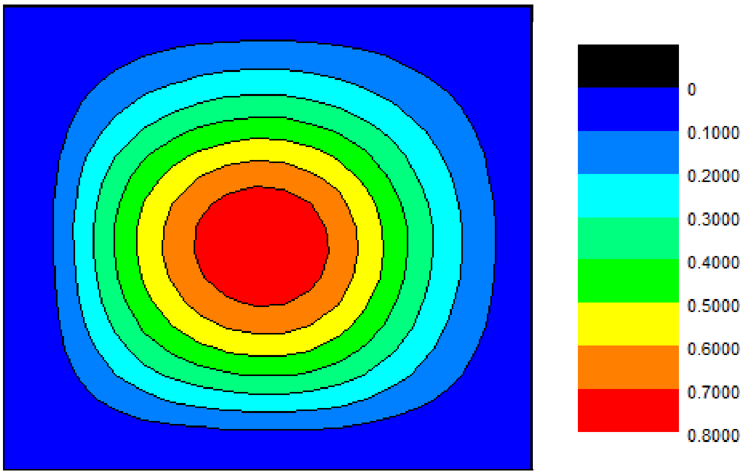
对于更高维的扩散过程，我们可以通过三维图来加以展示。
设定一块正方形区域，假设初始状态粒子集中于区域中间的一小块正方形区域，随着时间变化（位移步数），以 z 轴代表各个点的密度大小，密度随着步数的变化如以下三维图所示：


N=0
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
−1.00 −0.75 −0.50 −0.25 0.00 0.25 0.50 0.75 1.00
1.00 0.75 0.50 0.25 0.00 −0.25 −0.50 −0.75 −1.00

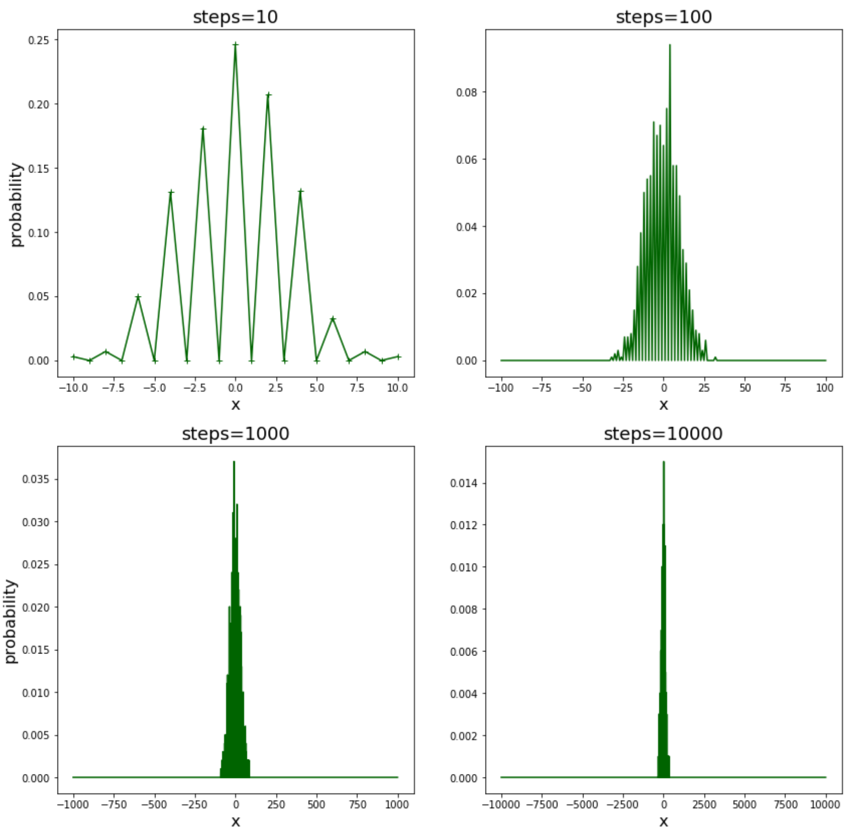

N=5
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
−1.00 −0.75 −0.50 −0.25 0.00 0.25 0.50 0.75 1.00
1.00 0.75 0.50 0.25 0.00 −0.25 −0.50 −0.75 −1.00


N=30
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
−1.00 −0.75 −0.50 −0.25 0.00 0.25 0.50 0.75 1.00
1.00 0.75 0.50 0.25 0.00 −0.25 −0.50 −0.75 −1.00

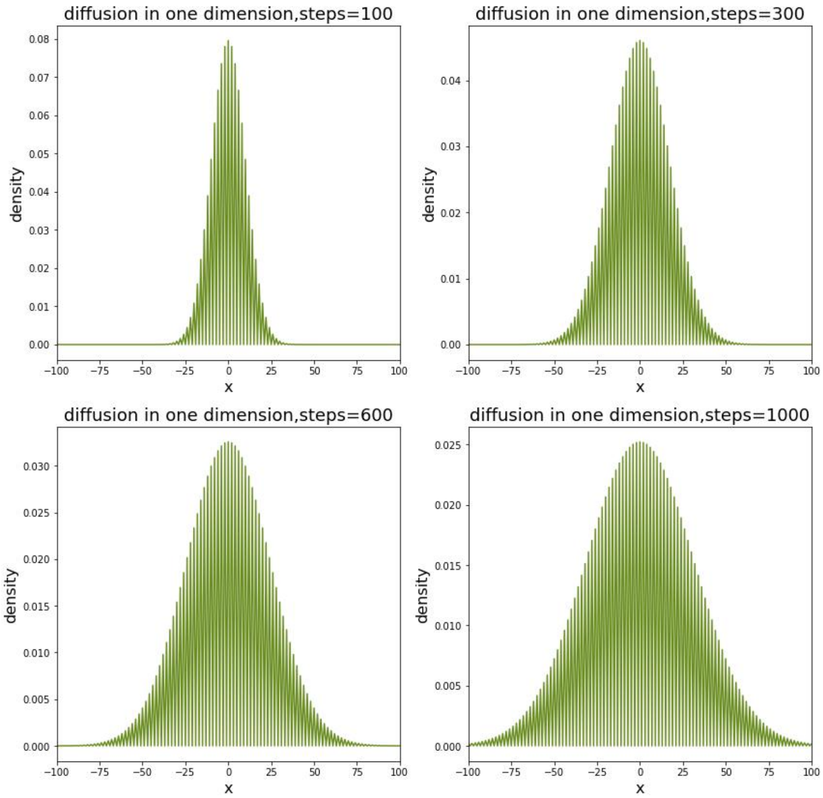
我们取一个中间过程，行走步数等于 10；对应于空间中的各点，可得到它的色彩等浓度图示



更进一步，对于一维随机行走过程（参考 Figure7.12），可得：

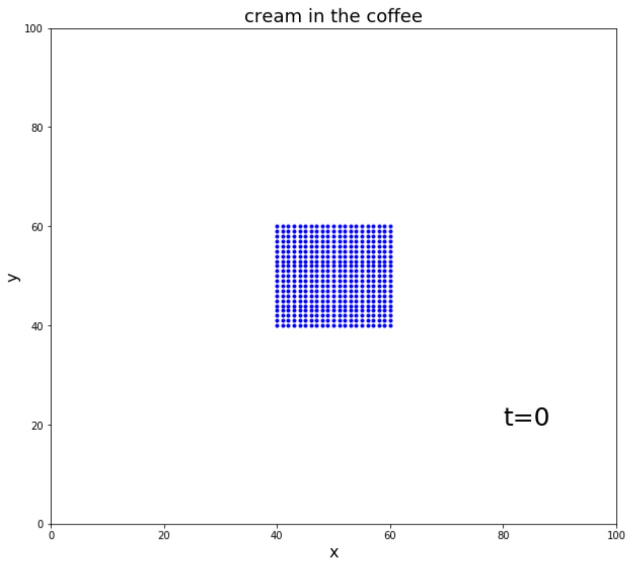


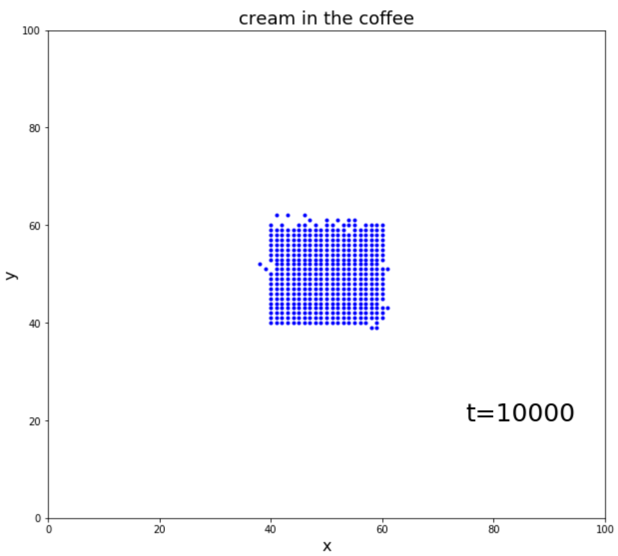
若直接采用计算方法，可得到更为平滑的曲线：

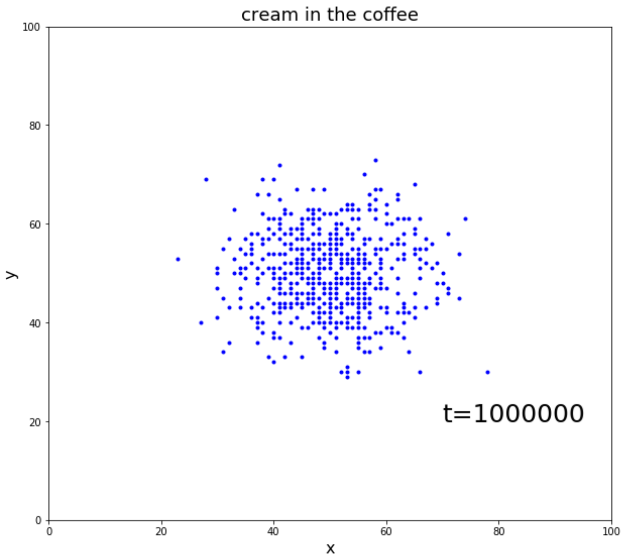


3　咖啡中的奶油

现在，我们可以用一个二维的散点图来模拟书中的例子，即将一滴奶油滴入咖啡之中，我们令系统的初始状态为一个方形的粒子集中区域，如图所示：







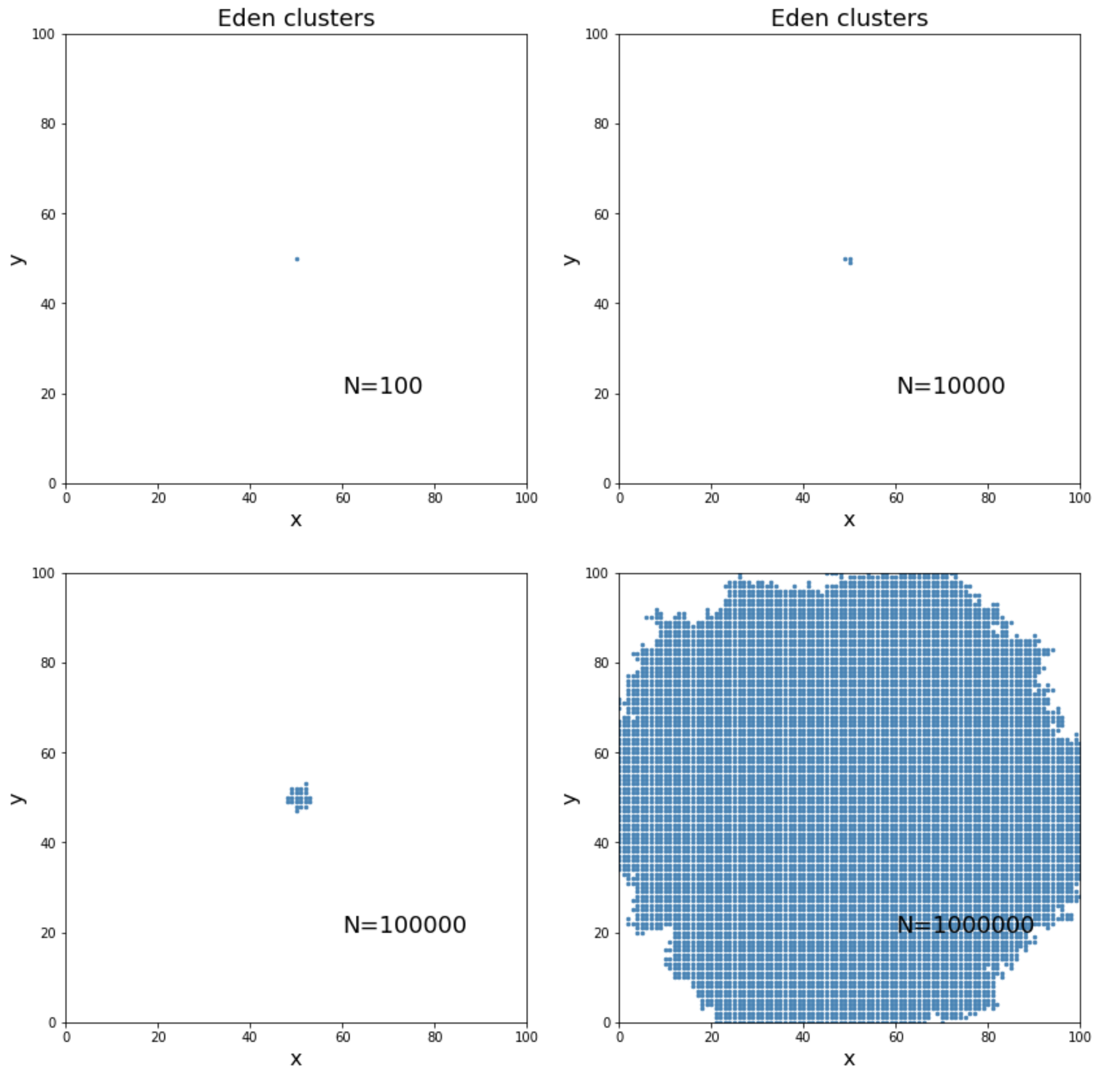
我们可以明显地看出，系统的混乱程度在不断地上升，随着时间的推移，粒子的无序度应符合教材 Figure 7.16 所示的图示，在初始高度有序的状态，熵增长的速度最快，随着无序程度增加，熵增长的速度也越来越慢，在经过足够长的时间之后，熵几乎保持不变。

$$S = -\sum P_i lnP_i$$

其中 P 代表各粒子出现在 i 点的概率大小：

4 Eden cluster

这种扩张方法基于在网格中（lattice）对随机的给定位置加上新的格点以拓展它的边界，由于该原理，这种群的生长方式也被称为“癌症”。当一个给定初始状态的 Eden cluster 生长时，它的边界接近于一个圆形，在中间状态可能会出现若干空点，然而随着进一步的生长，这样的格点总是接近于被填满，我们将在下图中演示 Eden cluster 的生长变化：



5　分形图形与 Mandelbrot 集：

分形，具有以非整数维形式充填空间的形态特征。通常被定义为“一个粗糙或零碎的几何形状，可以分成数个部分，且每一部分都（至少近似地）是整体缩小后的形状”，即具有自相似的性质。分形（Fractal）一词，是芒德勃罗创造出来的，其原意具有不规则、支离破碎等意义。1973 年，曼特勃罗夫（B.B.Mandelbrot）在法兰西学院讲课时，首次提出了分维和分形的设想。

现今人们熟悉的分形典型例子包括： 康托尔集、谢尔宾斯基三角形和门格海绵它们的非整数维数是渐增的，分别为 0.63、1.58、2.72，而它们长度、面积、体积令人吃惊的皆为 0。

分形图形还包括科赫曲线(H.von Koch,1870-1924，瑞典数学家)，其维数是 1.26，它的长度则是无限的，可它围住的面积却是有限的。

分形集由曼特勃罗夫定义如下，需满足条件：

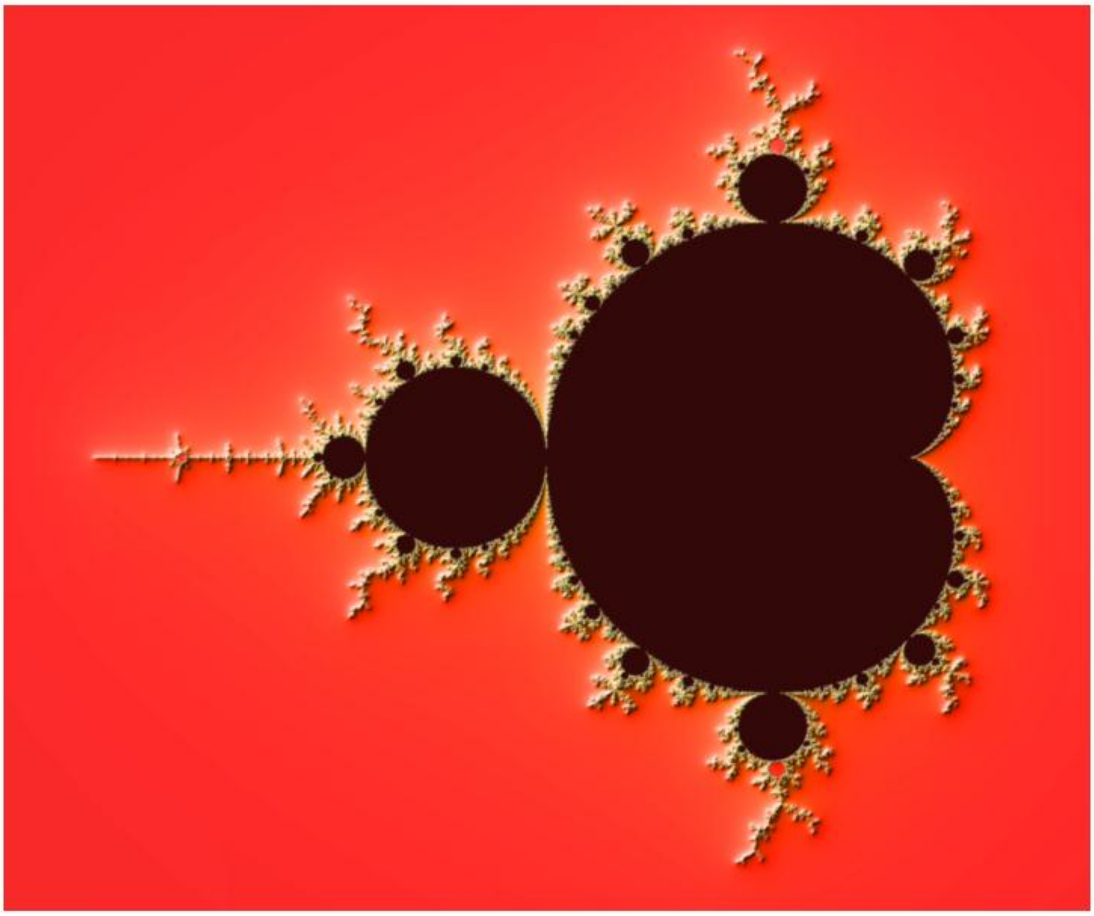
Dim(A)>dim(A)

的集合 A，称为分形集。其中，Dim(A)为集合 A 的 Hausdoff 维数（或分维数），dim(A)为其拓扑维数。一般说来，Dim(A)不是整数，而是分数。

对于通过该方式得到的点，他们构成 Mandelbrot **集：**

$$Z_{n+1} = Z_n^2 + C$$

在 Python 内，通过作图实现上述的曼特勃罗夫集：



6　结论：

随机行走现象符合着严格的统计规律，当系综的数量足够大时，其统计效果将高度服从统计曲线；

随机行走与扩散现象有着密不可分的关系，当该过程在不同的维度展开时，则可以加以模拟粒子的扩散过程；

对于一维行走的模拟，他们在各点出现的概率符合统计曲线，随着时间增长，分布曲线的中心变低，系统的熵增加，在经过足够长的时间后，熵趋于最大值。

引入新的增长模式 Eden cluster 后，系统在网格中表现出的新的扩展现象，该模式与 DLA cluster 也出现在现实生活中的诸多现象中。

分形和分形集由曼特勃罗夫所提出，典型的分形图形包括谢尔宾斯基三角形和 Koch 雪花，在 python 中我们作图实现 Mandelbrot 集。

7　参考文献与致谢

《Computational Physics》Nicholas ,Hisao Nakanishi

常用符号的 LaTeX 表示：http://www.mohu.org/info/symbols/symbols.htm

Matplotlib 的线条控制：https://www.cnblogs.com/darkknightzh/p/6117528.html

Matplotlib 官方网站：https://matplotlib.org/
并致谢 14 级陆文龙同学！

各源代码链接：
https://github.com/tzwhu/computational_physics_N2015301020096/tree/master

tkinter.txt	Create tkinter.txt
waves.md	Create waves.md
一维行走模拟扩散.txt	Create 一维行走模拟扩散.txt
一维非等概率等步长.txt	Create 一维非等概率等步长.txt
三维全方位行走三维图.txt	Create 三维全方位行走三维图.txt
咖啡里的奶油.txt	Create 咖啡里的奶油.txt
曼特勃洛夫集作图.txt	Create 曼特勃洛夫集作图.txt
计算+一维随机行走模拟扩散.txt	Create 计算+一维随机行走模拟扩散.txt