随机游走过程的计算机模拟

武汉大学　　李弘禹　　2015301020100

摘要：随机游走（random walk）也称随机漫步，是统计力学中的一个常见应用。随机游走指基于过去的表现，无法预测将来的发展步骤和方向。核心概念是指任何无规则行走者所带的守恒量都各自对应着一个扩散运输定律，接近于布朗运动，是布朗运动理想的数学状态。本文采用计算机程序模拟了随机游走的过程，清晰而明了。

关键词： 随机游走 计算机模拟

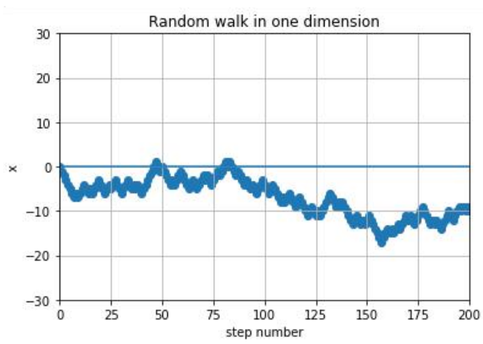
一、一维随机游走过程的模拟

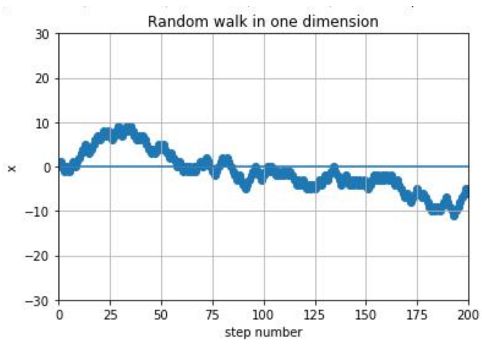
我们考虑一类系统，其中随机性起关键作用，这些被称为随机系统。这些系统内包含着大量的“自由度”，通常，这类系统可能与大量粒子有关。

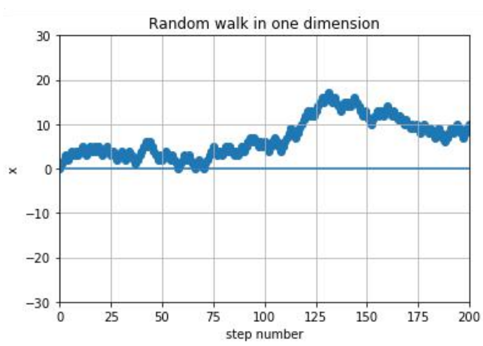
一个典型的随机问题是扩散。一个经典的扩散的例子就是在咖啡中撒一滴奶油的过程，如果你把奶油放在中间，最终咖啡会呈现出均匀的褐色。在微观层面上，一种物质会在短时间内直线运动，与其他的奶油颗粒碰撞，并与咖啡颗粒发生碰撞。每次碰撞都会引起粒子速度的突然变化。

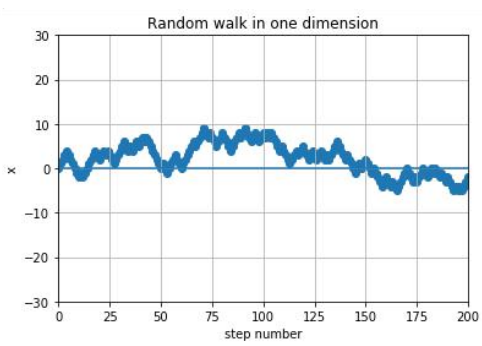
我们认为，溶液中的一个粒子或分子的运动类似于一个随机过程。本文给出了在一维中实现随机游动的例子。我们首在 0 和 1 之间的范围内生成一个随机数，并将其值与 1 / 2 进行比较，如果小于 1 / 2，我们的步行者就会向右移动，坐标值+1，否则就会向左移动，坐标值-1。然后重复这个过程以产生一个位置函数。

当只有一个人在一条直线上随机行走时，我们进行了几次模拟，他的行走过程如下图所示（总共 200 步）：



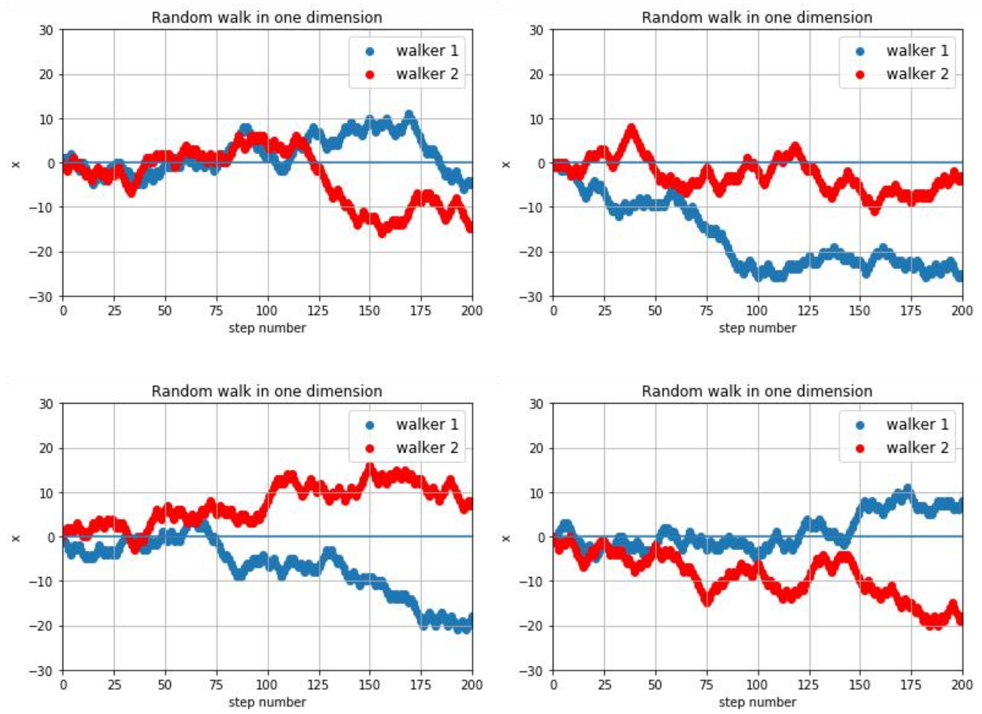




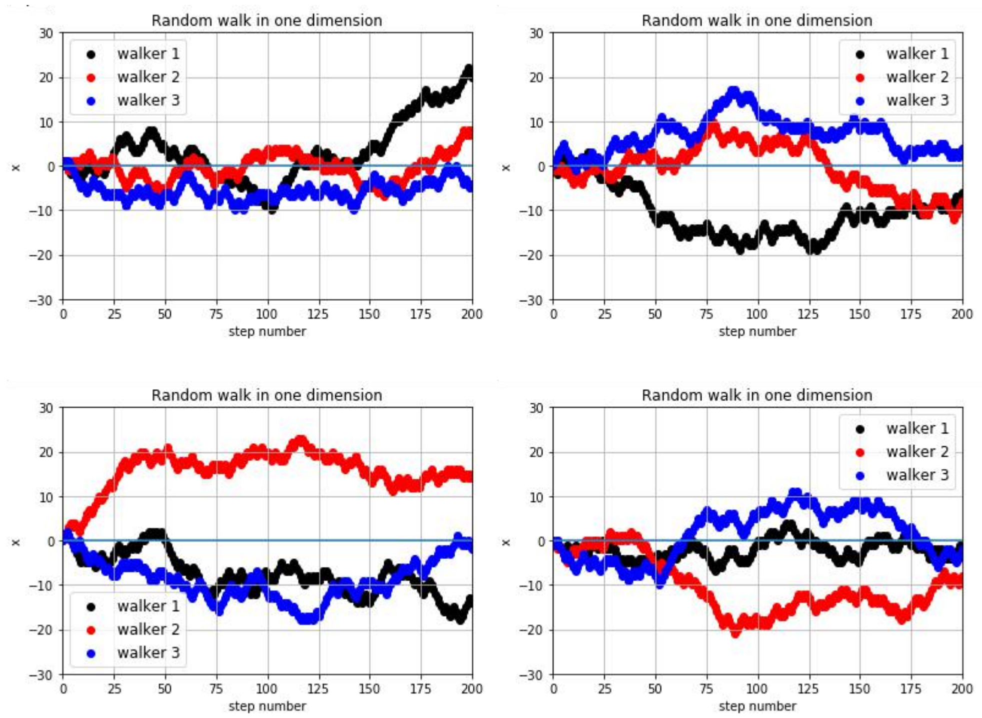


发现，在随机行走过程中，随着总步数的逐渐增加，对原点的偏离也逐渐减少，整体向原点靠拢，行走曲线也一直在 x=0 附近，同统计理论非常符合。

下面，我们模拟了两个人的随机行走过程，同样，是在一条直线上：



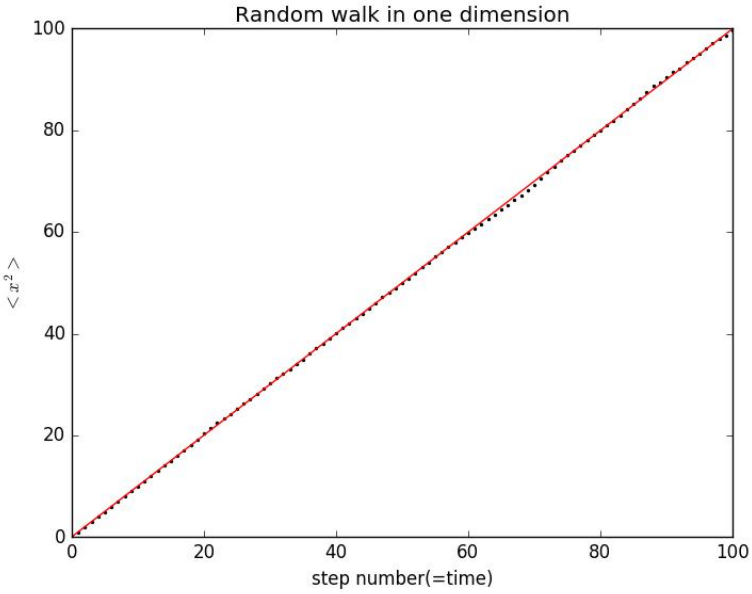
同理，我们可以模拟三个人的情况：



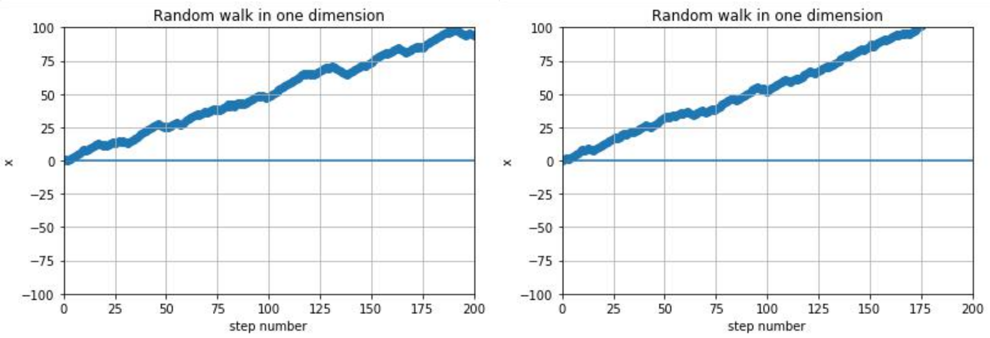
发现，无论是两个人同时行走或是三个人同时行走，其每个人的坐标分布同一个人行走具有相同的规律。且多个人之间不互相干扰，可以完全分离开来，使得随机行走过程有了更加广泛的应用。

在上文中，我们发现，坐标 x 分布在 x=0 周围，但是，当我们用程序模拟 x^2 的分布之

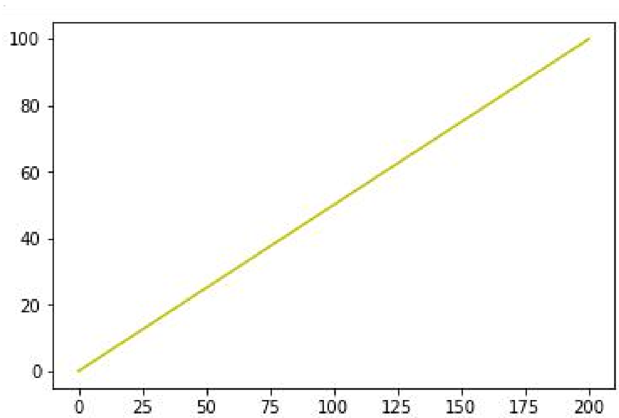
时，按一单位时间走一步，发现其分布与时间成正比例关系，与统计力学中布朗运动的性质 $<x^2>=2Dt$ 不谋而合，显然在本试验中，D 为 1/2.



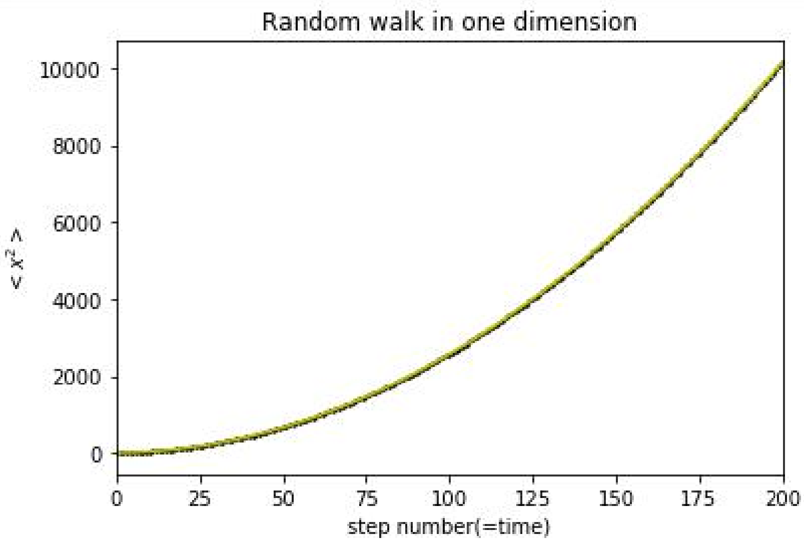
之后，为了深入研究一维随机游走的平均值，我们又改变了几率分布，即产生 0 到 1 的一个随机数，如果随机数小于 3/4 则向右移动，即+1；如果随机数大于 3/4 则向左移动，即-1.模拟了两次具体运动状态，发现其向 $x=\frac{1}{2}t$ 靠拢。



后面，利用程序计算了 x 分布的平均值，发现确实如上所述。



同之前一样，我们也计算了 x^2 的平均值，如下图所示，模拟出来为一个二次函数。



综上，我们模拟了一维随机游走的两种情况，等概率和不等概率时的分布状况和分布的平均值，但是我们并没有求出每一种分布的概率，下面，我们将更深刻的理解一维随机游走的概率分布问题。

二、一维随机游走概率分布

我们知道，在随机过程中如果随机次数趋于无穷，一般会得到一个固定的分布，而以为随机游走也不例外，在统计力学中可以给出，当等概率一维随机行走步数趋于无穷时，在各位置的分布将趋近于一个高斯分布。下面给出统计力学的证明。

假设只有一个人在进行随机行走，共走了 N 步。设 N 步中有 N1 步向东，N2 步向西，则走法的数量为

$$\frac{N!}{N_1!N_2!}$$

考虑总走法为 2N，则 N1 步向东的概率为：

$$P_N(N_1)=\frac{N!}{N_1!N_2!}2^{-N}$$

利用斯特林公式，得到

$$\ln P_N(N_1)=(N+\frac{1}{2})\ln N-N+\frac{1}{2}\ln(2\pi)-(N_1+\frac{1}{2})\ln N_1+N_1-\frac{1}{2}\ln(2\pi)$$
$$-(N_2+\frac{1}{2})\ln N_2+N_2-\frac{1}{2}\ln(2\pi)-N\ln 2$$

做变换：$N_1-N_2=\frac{x}{l}$

当 N 很大时，就有 $$\ln P_N(N_1)=-\frac{1}{2N}(\frac{x}{l})^2+\frac{1}{2}\ln\frac{N}{2\pi N_1N_2}$$

$$P_N(N_1)=\sqrt{\frac{2}{\pi N}}e^{-\frac{(N_1-N_2)^2}{2N}}$$

发现，统计力学告诉我们为一个高斯分布，下面，我们就用计算机来进行计算，并将之与统计力学的结果进行对比，观察一下二者是否相同。

随机游动和扩散类似，我们可以计算出这些粒子在空间上是如何随时间而分布的。一种描述相同物理的方法涉及到粒子的密度 $\rho(x,y,z,t)$ 。密度与单位时间粒子出现在单位体积单位体积的概率 $P(x,y,z,t)$ 成正比，表示为在时间内发现一个粒子。由于我们是在一个简单的立方晶格中，有 6 个不同的最近点。到达 (i,j,k) 的总概率是

$$\begin{aligned}P(i,j,k,n)=\frac{1}{6}[&P(i+1,j,k,n-1)+P(i-1,j,k,n-1)+P(i,j+1,k,n-1)\\&+P(i,j-1,k,n-1)+P(i,j,k+1,n-1)+P(i,j,k-1,n-1)]\end{aligned}$$

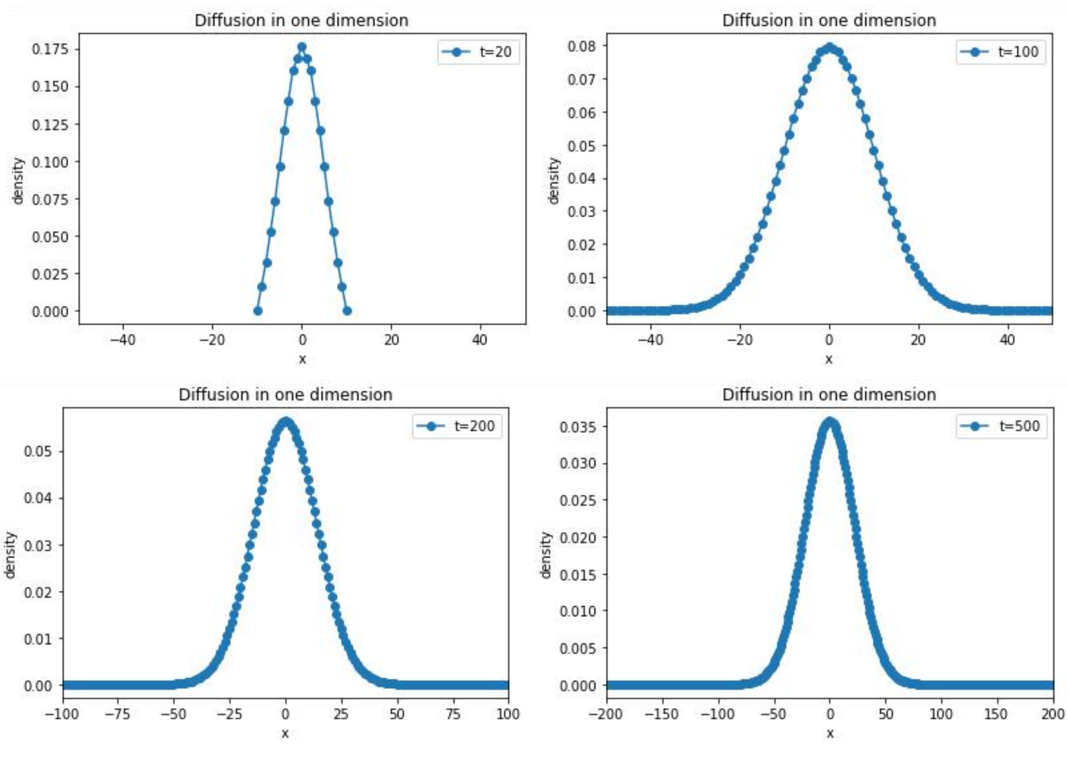
还有

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

得到

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

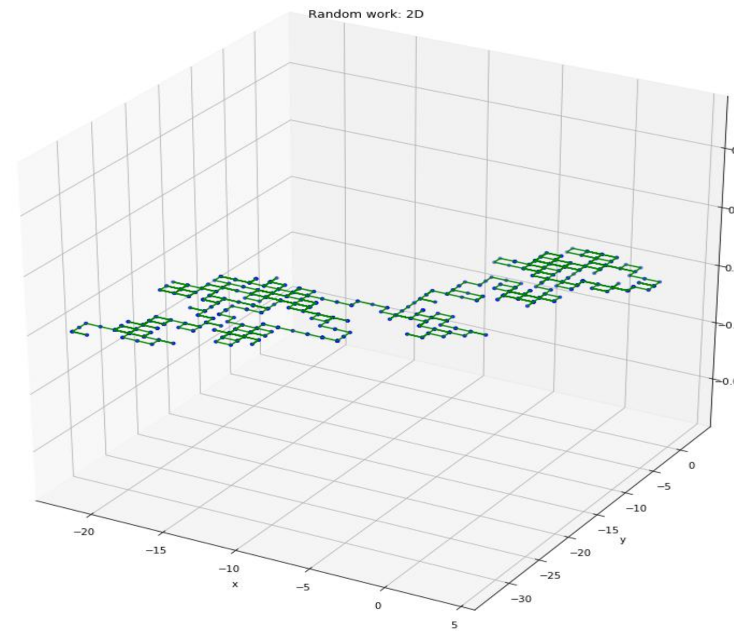
利用上式使用 Euler 法便可以解出扩散过程的概率分布，即一维随机行走问题的概率分布，为了使结果更为直观，我们取了四个时间：t=20，t=100，t=200，t=500：

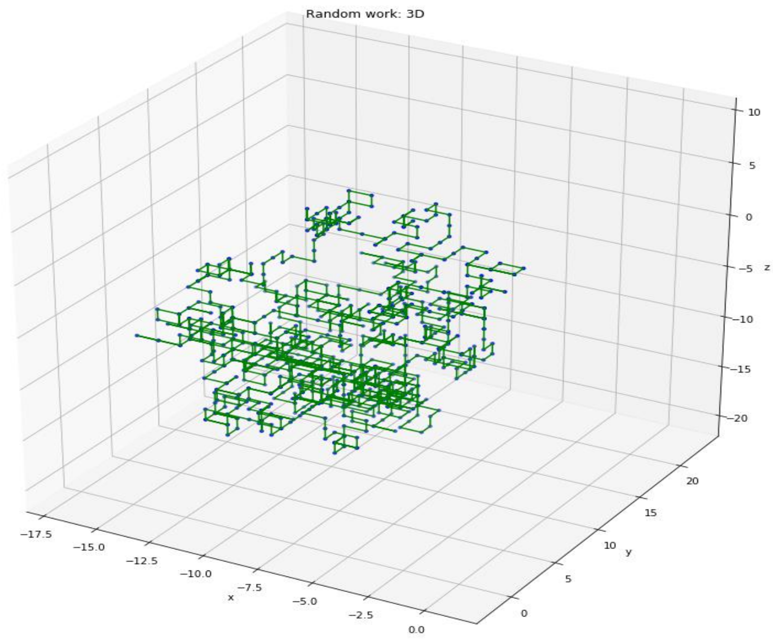


发现，一维随机行走确实是一个高斯分布，而且，与统计力学规律相一致，高斯分布的峰值与$\sqrt{\frac{1}{t}}$成正比。

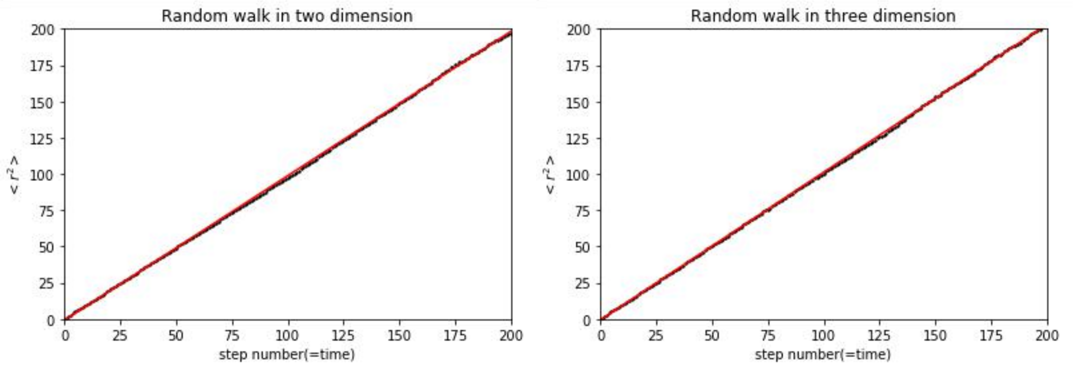
三、高维随机游走的进一步研究

在研究完一维的随机游走之后，我们又进一步研究了二维和三维的随机游走，方法与一维随机游走类似，就是在模拟时让 x，y，z 三个方向互不干涉的运动。我们先模拟了二维和三维随机游走的运动情况：

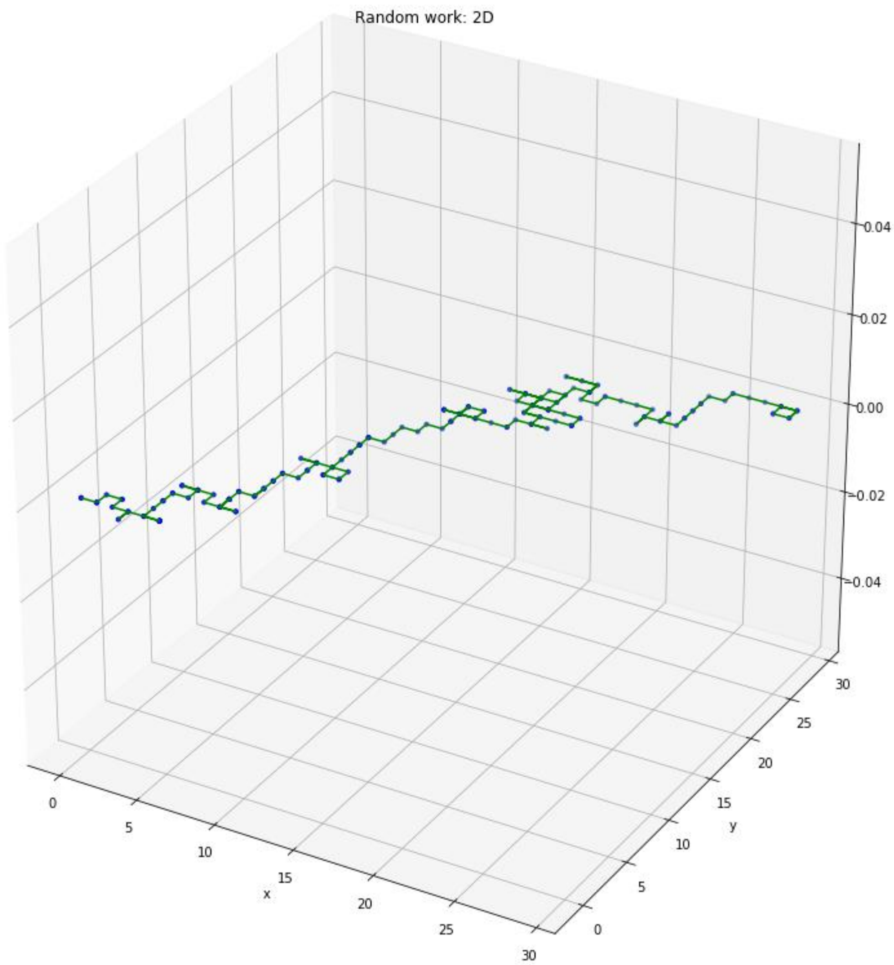




同一维随机游走类似，我们可以求出$\left\langle r^2 \right\rangle$与 t 的关系图，并可以与一维情况进行对比，看看有什么异同。

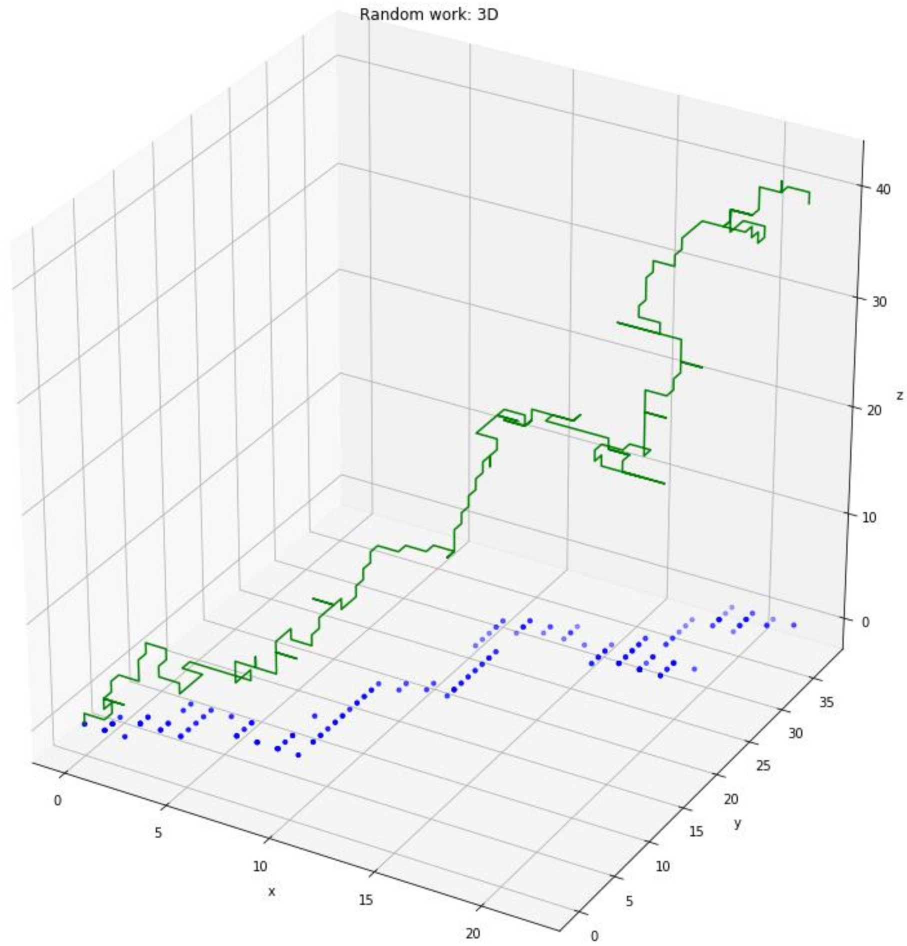


发现同一维情况类似，二维和三维情况下等概率随机游走情况下$\left\langle r^2 \right\rangle$分布也为一条直线，与布朗运动公式相吻合。同样，我们改变一下概率，同之前一样，在各方向上 3/4 概率加 1，1/4 概率减 1，先模拟一下运动状态：



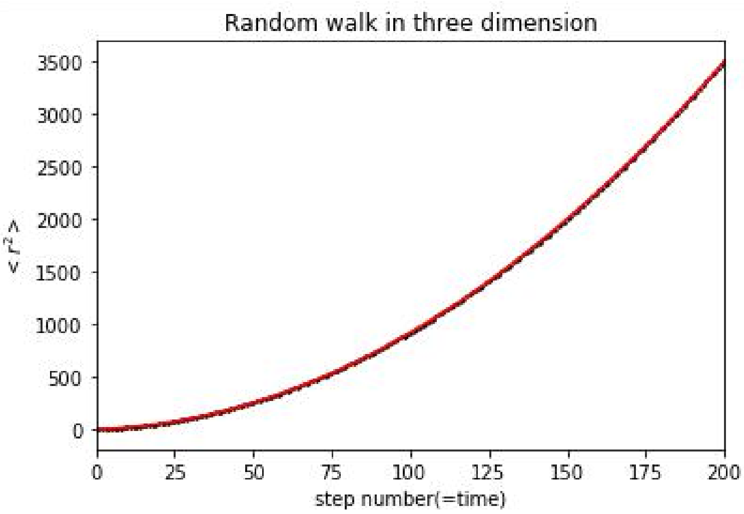
发现，在模拟二维运动时，曲线整体向 y=x 靠拢。

发现同一维情况类似，模拟出来是一个二次函数。



同之前结果类似，曲线整体向 x=y=z 靠拢。

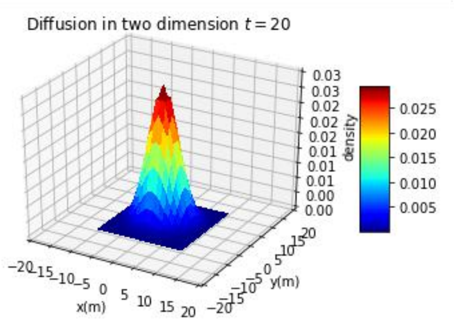
下面计算三维情况下的$\left\langle r^2 \right\rangle$的平均值：

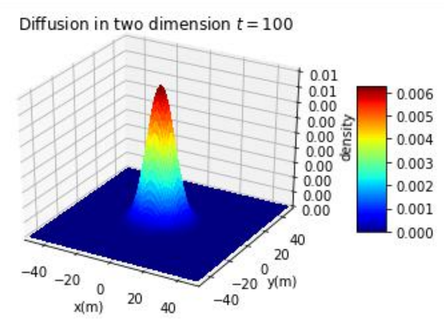


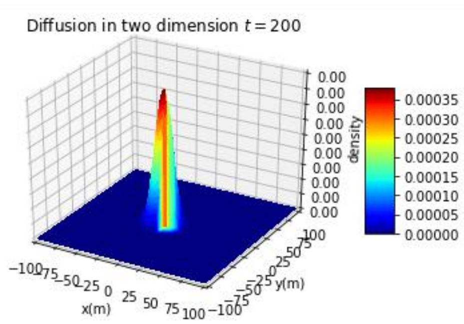
发现同一维情况类似，模拟出来是一个二次函数。

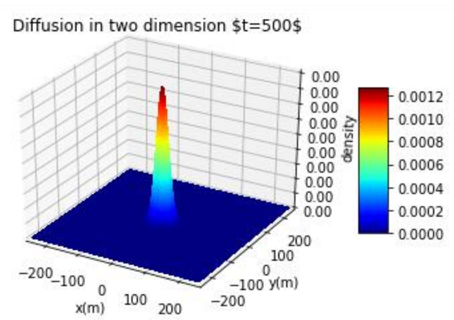
下面，我们模拟了二维随机游走过程中的概率分布图。

先是等概率时，同样，我们模拟了 t=10，t=100，t=200，t=500 时的情况：





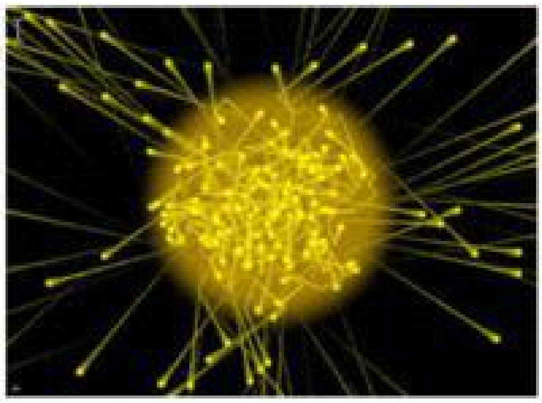




发现，同一维情况类似，依旧为一个高斯分布，其中大部分概率都集中在很小的范围内，且随着实验次数的增加，峰值也在非线性变小。我们并没有模拟三维随机游走的概率分布，因为需要四维的图像，看起来不那么直观，实际上，三维和之前的一维二维具有相同的规律。

四、小结

对随机行走这个过程来说，如果粒子有相同概率对任意方向运动，与布朗运动类似，无论是一维，二维或是更高维度，$< r^2 >$与 t 成正比例关系。如果粒子有向某个方向运动的倾向，且概率固定，那么$< r^2 >$就会与 t 成二次关系。



在随机行走过程中，如果粒子有相同概率对任意方向运动，无论是一维、二维或是更高维度，概率分布就是高斯分布。

通过这次使用计算机技术的模拟，我对随机游走这个过程有了更为深刻的认识，也对 Python 语言有了更高的了解。

参考文献：

1. Computational Physics Nicholas J. Giordano, Hisao Nakanishi

2. 复杂网络上的随机行走 胡耀光 陕西师范大学

3. 平面上的一种随机行走模型及其计算机模拟 张国春 河北大学