HW10-1

古宜民

2019.10.17

题目

Monte Carlo 方法研究正弦外力场(~ $sin\omega t$)中的随机行走。

分析&算法

理论分析

为了对系统进行模拟，我们首先要从理论上推导粒子在正弦外力场中的运动。

首先考虑没有涨落力，只有周期性外力F和阻力$-\alpha v$的情况。

粒子的运动方程为：

$m\frac{d^2x}{dt^2}=F_0sin\omega t-\alpha\frac{dx}{dt}$

这个二阶方程可以直接求解（使用通解+特解的方法，特解可猜测为$Asin\omega t+Bcos\omega t$），得到粒子运动位置随时间变化：

$x_a(t)=-\frac{F_0}{m}\frac{1}{\omega^2+(\frac{\alpha}{m})^2}(sin\omega t+\frac{\alpha}{m\omega}cos\omega t)+x_1+x_2e^{-\frac{\alpha}{m}t}$

求导可得速度：

$v_a(t)=-\frac{F_0}{m}\frac{1}{\omega^2+(\frac{\alpha}{m})^2}(\omega cos\omega t-\frac{\alpha}{m\omega}sin\omega t)-\frac{\alpha}{m}x_2e^{-\frac{\alpha}{m}t}$

其中x_1,x_2为取决于初始条件的任意常数。如果给定的初始条件是初始位置x_0和速度v_0，那么有：

$x_2=-\frac{m}{\alpha}(v_0+\frac{F0}{m}\frac{1}{\omega^2+(\frac{\alpha}{m})^2}\omega)$

$x_1=\frac{F0}{m}\frac{1}{\omega^2+(\frac{\alpha}{m})^2}\frac{a}{m\omega}+x_0-x_2$

于是，在考虑涨落力求解Brown运动方程时，可以进行变量代换：

$x=x_a+z$

代入Brown方程

$m\frac{d^2x}{dt^2}=F_0sin\omega t-\alpha\frac{dx}{dt}+F$，F为涨落力

可得：

$m\frac{d^2z}{dt^2}=F-\alpha\frac{dz}{dt}$

可见通过变量代换，我们把外力场中粒子的Brown方程化为了与自由粒子相同的方程。这样，按照讲义上的推导，我们可以得到$<z^2(t)>=2Dt,D=\frac{k_BT}{\alpha}$。通过计算这个平方平均值，我们可以检查模拟结果与理论结果是否符合。

模拟实现

对于变量z，模拟如同常规自由粒子的布朗运动，每一步有1/2的概率往左走一步或往右走一步。但如果这样，对z进行模拟，加上x_a得到原本x的运动，然后又减去x_a得到z求平方平均来表征模拟结果未免太无聊了。

所以，可以较为底层地，使用原始的运动方程，使用随机分布的涨落力，直接对运动方程进行模拟，然后检查结果。

因为涉及到对微分方程的模拟，可以使用经典四阶Runge-Kutta方法。取时间步长为h，速度v为因变量，则

$$v' = \frac{F_0}{m} sin\omega t - \frac{\alpha}{m} v + \frac{F}{m} = f(t, v)$$
$$v_{n+1} = v_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$
$$k_1 = f(t_n, v_n)$$
$$k_2 = f(t_n + \frac{h}{2}, v_n + \frac{h}{2} k_1)$$
$$k_3 = f(t_n + \frac{h}{2}, v_n + \frac{h}{2} k_2)$$
$$k_4 = f(t_n + h, v_n + hk_3)$$

F的随机性体现在对于每一部计算，f中的F是随机的，在[-Fm,Fm]中随机取值。

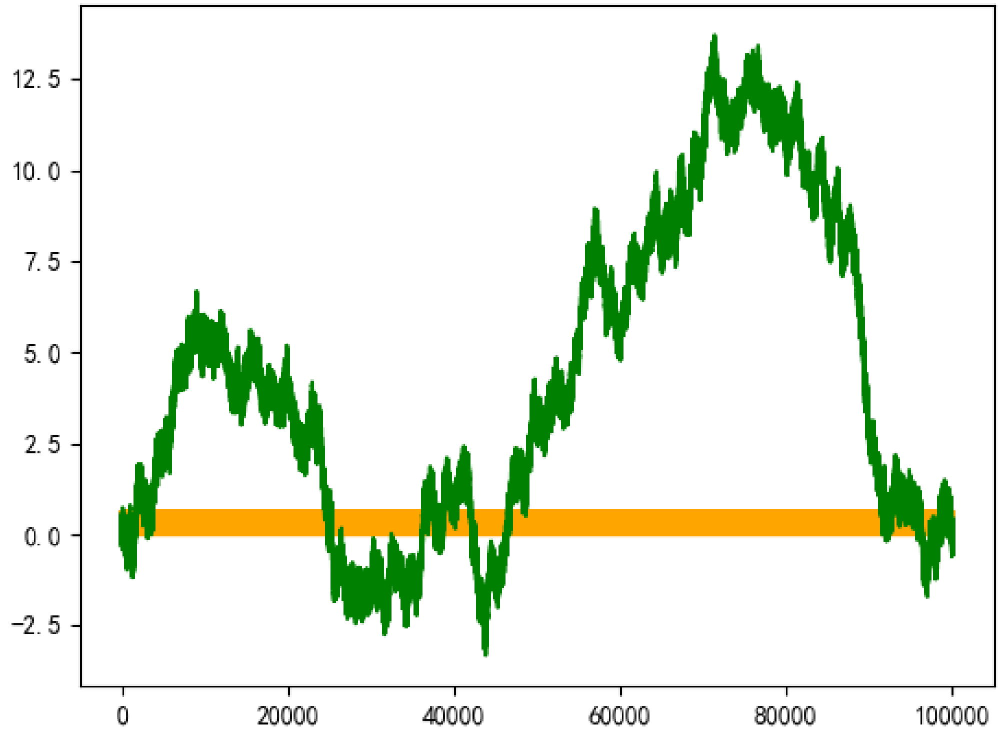
于是求得了计算机模拟的速度。至于位置，可以直接对速度积分求得，使用一个梯形公式即可很好的完成积分。在其他方面，程序实现并无困难。

使用Monte-Carlo得到了大量次数的模拟结果之后，即可计算出布朗运动与理论运动的偏差z，进而计算出$< \Delta z^2 >$，将计算结果与理论值$2Dt$比较，可以表征模拟的结果。

计算结果

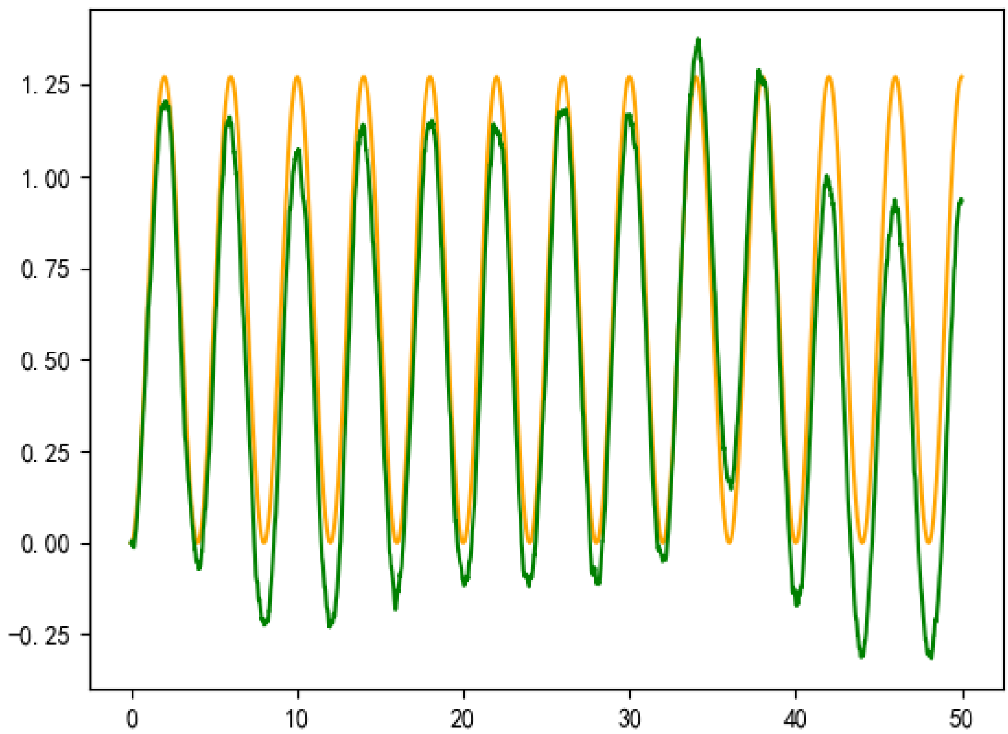
粒子位置随时间变化

一个典型的长时间结果（迭代10^7步，用时30秒左右，横轴为时间秒，纵轴为位移）：



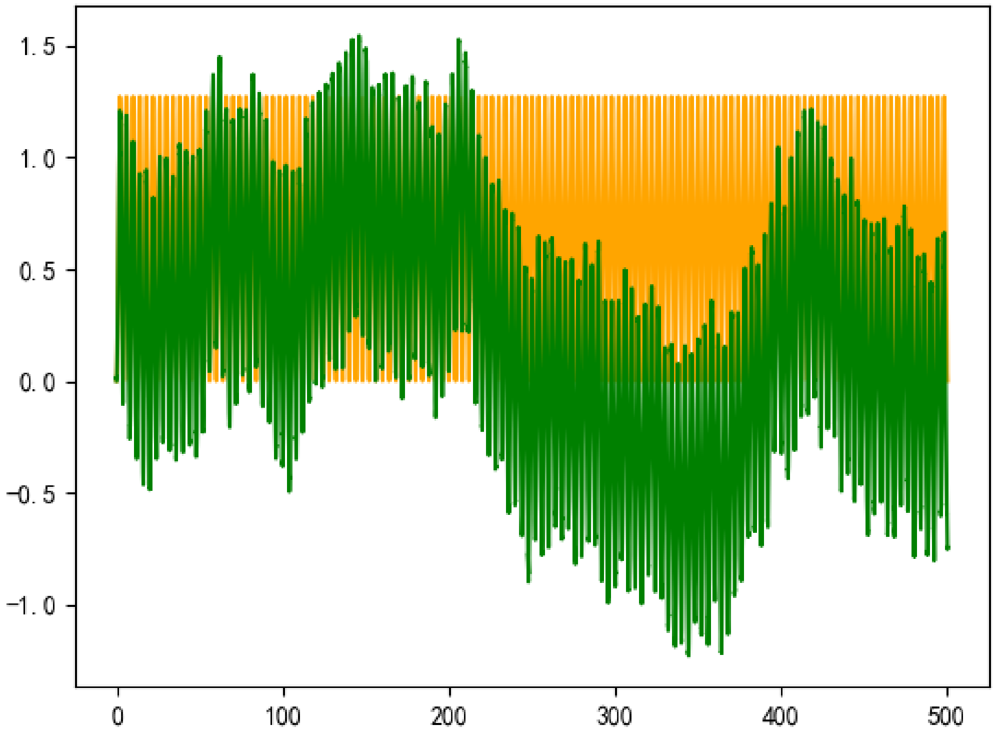
橙色为没有涨落力的情况，呈周期运动，因为周期相对模拟时间很短，所以只看到一条粗线，绿色为涨落力作用下的运动。因为随机性的原因，每次模拟的具体结果不相同。

短时间的图：



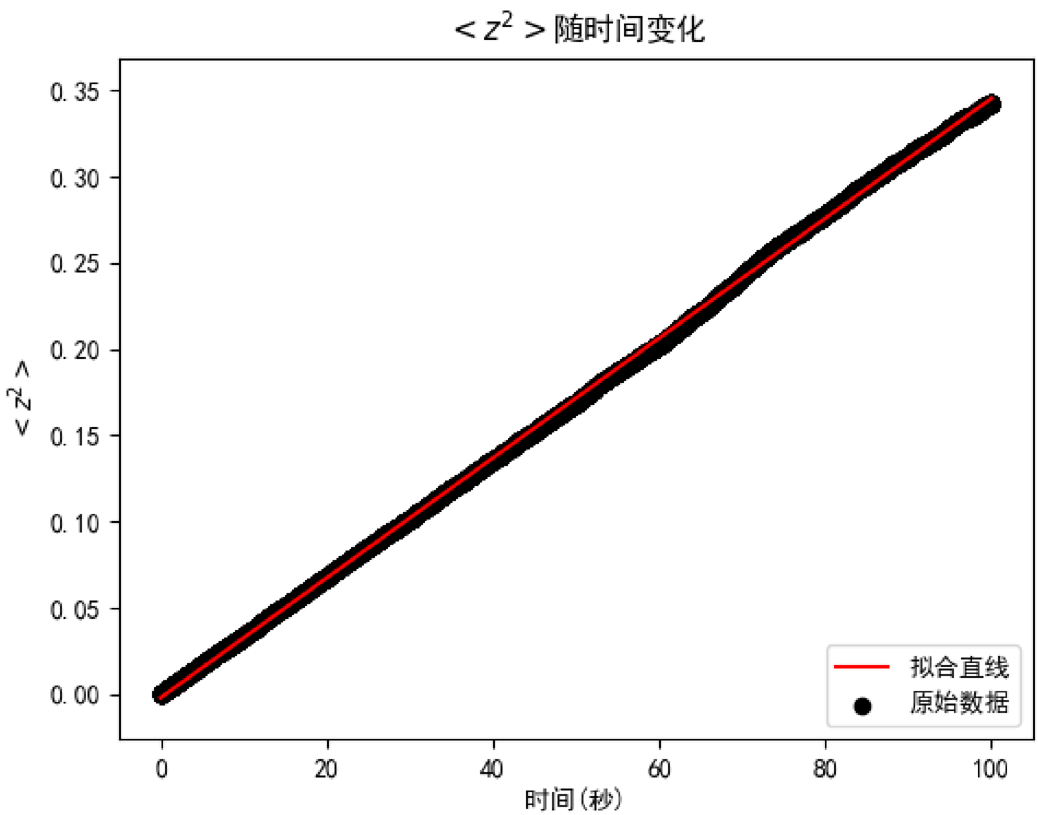
从短时图像看，可见涨落力在理论运动上叠加了一个随机运动。这与我们的期望是相同的。

中等时间的图：

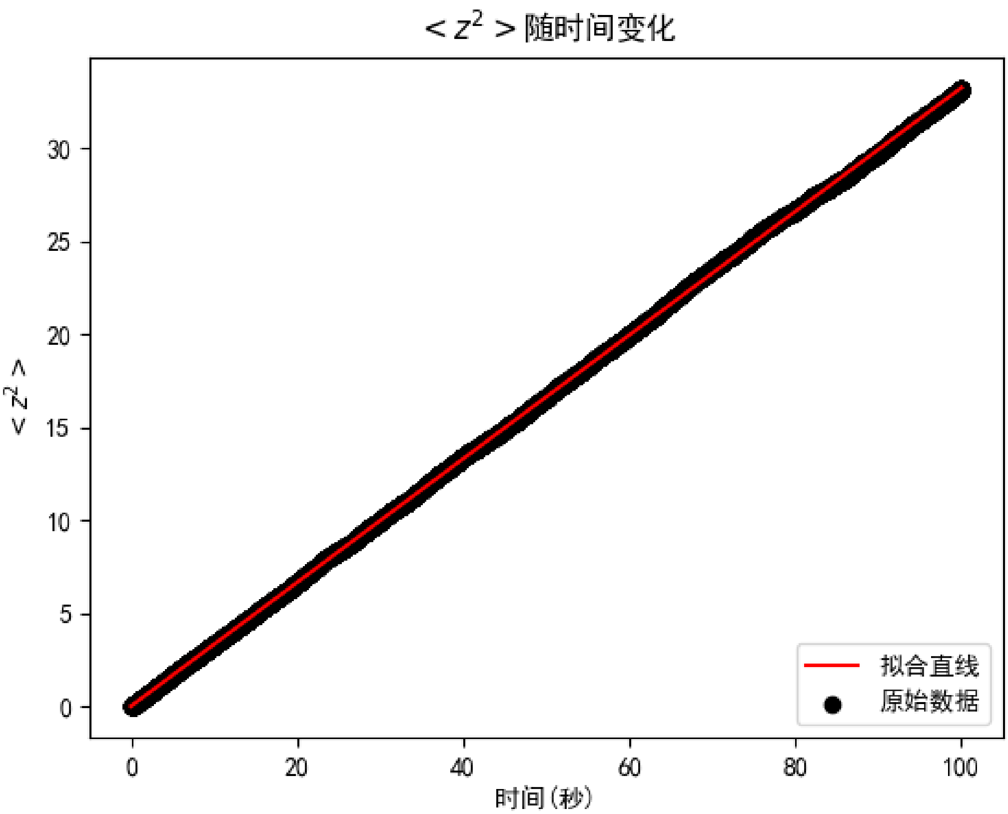


$<z^2>$随时间变化

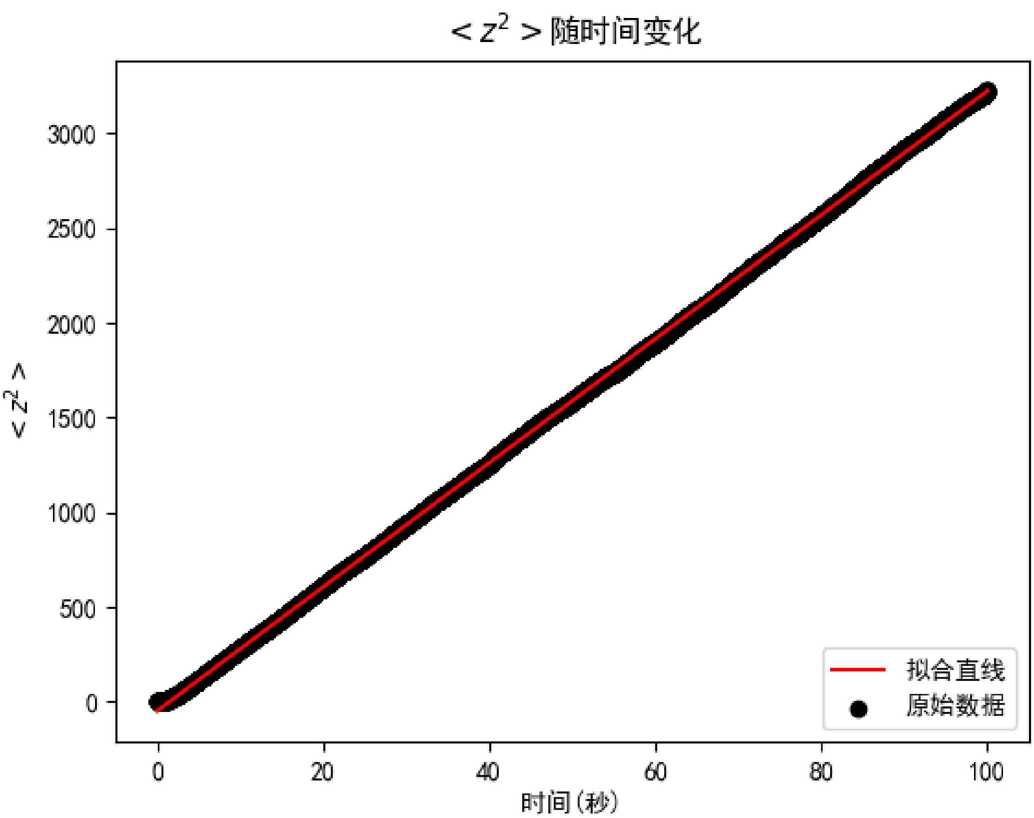
将布朗运动结果与理论无干扰结果相减并平方得到z^2随时间变化，进行Monte-Calro计算得到z^2的平均值，作图观察。



$F_m = 1, F_0 = 1, w = \frac{\pi}{2}, a = 1, h = 0.01, v_0 = 0; k = 0.00347$



$F_m = 1, F_0 = 1, w = \frac{\pi}{2}, a = 0.1, h = 0.01, v_0 = 0; k = 0.332$



$F_m = 1, F_0 = 1, w = \frac{\pi}{2}, a = 0.01, h = 0.01, v_0 = 0; k = 32.7$

从图中可见，$< z^2 >$与t成正比，这与理论相符。

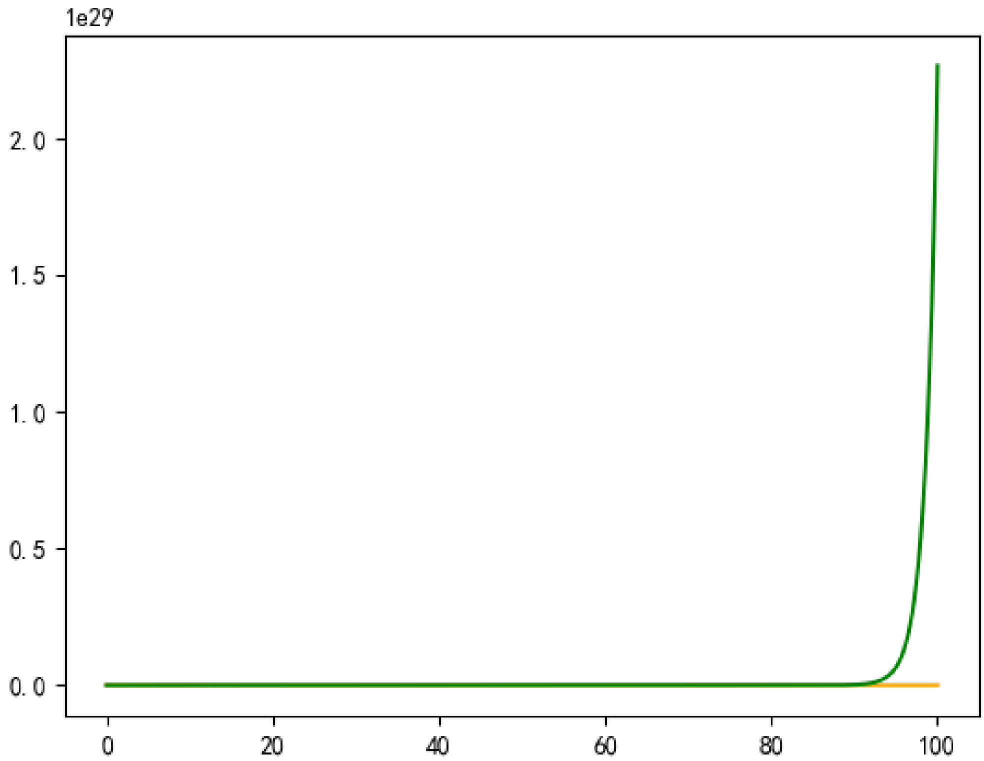
但同时发现，正比的比例系数2D随着阻力系数α以二次方减小：α减小一个量级，斜率增大二个量级。这与理论值D与α成一次方反比有不同。产生这种不同的原因并不清楚，一个猜想是可能RK模拟的随机力实现方式与真实情况有所差别。

同理改变其他变量，可以得出$< z^2 >$与F_m二次方成正比、与质量m无关。这些趋势也是与直观预期相符的。

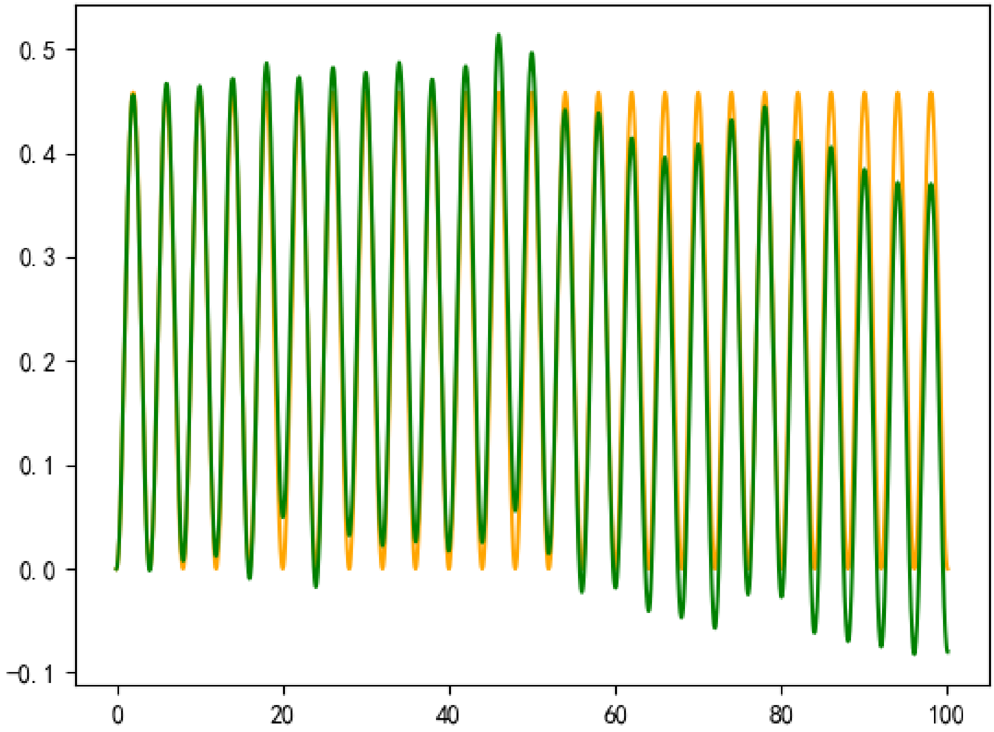
一个问题

在计算中发现，当阻力系数α大于某特定值而理论的周期性震荡消失，物体位置随时间趋近于0，这时在RK方法模拟微分方程时，会发生发散。猜测的原因是在物体位置以及速度极小时，计算精度会因浮点误差急剧增大，引起结果指数发散。

$\alpha = 2.79$的图



$\alpha = 2.78$的图



结论&其他

本实验中使用了RK方法模拟了正弦外力场中粒子的布朗运动，并计算相关物理量与理论值进行对比。整体结果是与理论符合的，但也存在着与理论不相符的地方，还需进一步深入研究。

其他

关于程序效率：这个程序写得比较中规中矩，结构很清晰，但因此几乎没有做任何优化，作为一个计算程序，个别地方已经低效到了让我不想看的程度。很多重复计算，内存没有优化，函数调用过多，内存可以节省到O(1)量级但这里直接开了O(N)。这种Monte-Calro程序对并行和SIMD也是及其友好的，预计全套优化下来速度有10-20倍的提升空间。目前情况，RK迭代10^4次，MC重复10^4次，用时30秒，开O3用时20秒，现在算是可以接受。

程序使用和作图方法：

```
pip3 install physicsexp
gcc hw10.c -lm -O3
./a.out single | ./plot2.py
./a.out z2avg | ./plot.py
```