有取向的布朗粒子的取向的自关联函数

[算法及公式]:

由于粒子受到的力矩是随机的，所以与一维随机行走相似，

设：在τ时间内，粒子平均顺时针或逆时针转过θ角，顺时针转和逆时针转的概率相等均为 0.5.

用 Monte Carlo 方法计算 cov(t)=<$u_x(t)u_x(0)$>

当 t=mτ时，

I:$\theta_0 = 360\xi$，ξ 是[0,1]的随机数。

$\xi_1, \xi_{2,\ldots\ldots}\xi_m$均为[0,1]的随机数，

dθ_i=$\begin{cases} -1\ ,\xi_i \le 0.5 \\ \ \ 1, \xi_i > 0.5 \end{cases}$

Δθ=$\sum_{i=1}^{m} d\theta_i$，θ_t=θ_0 +Δθ.

$u_x(t) = \cos\theta_t, u_x(0) = cos\theta_0$.

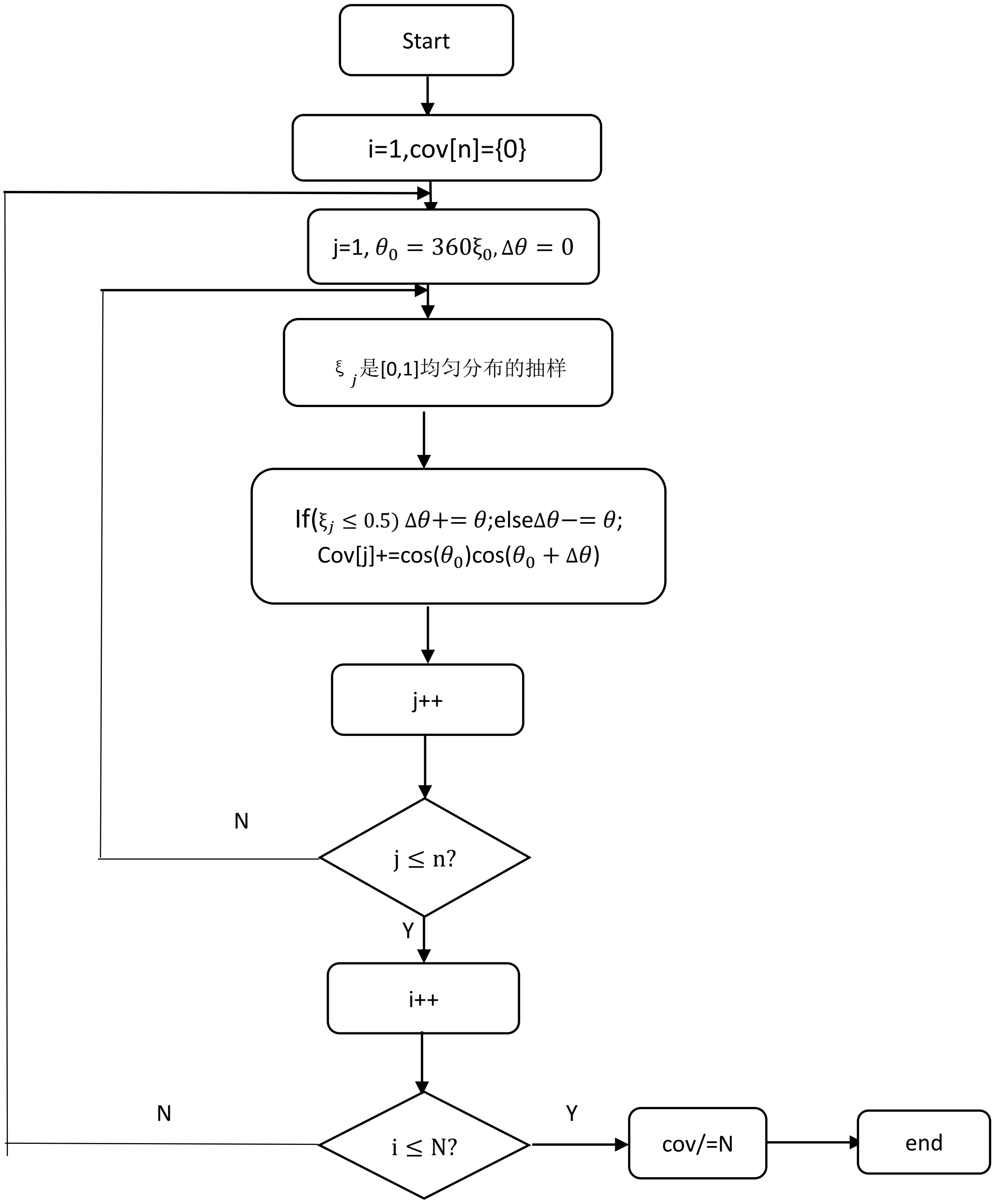
计算$u_x(t)u_x(0)$。

II：I 重复 N 次，对$u_x(t)u_x(0)$做系综平均，求得

cov(t)=<$u_x(t)u_x(0)$>。

III：画出 cov(t)的图像.

流程图如下:



[结果与讨论]:

理论结果：t=0 时，$<u_x(0)u_x(0)>=\int_0^{2\pi}\frac{\cos(x)\cos(x)}{2\pi}dx=\frac{1}{2}$.

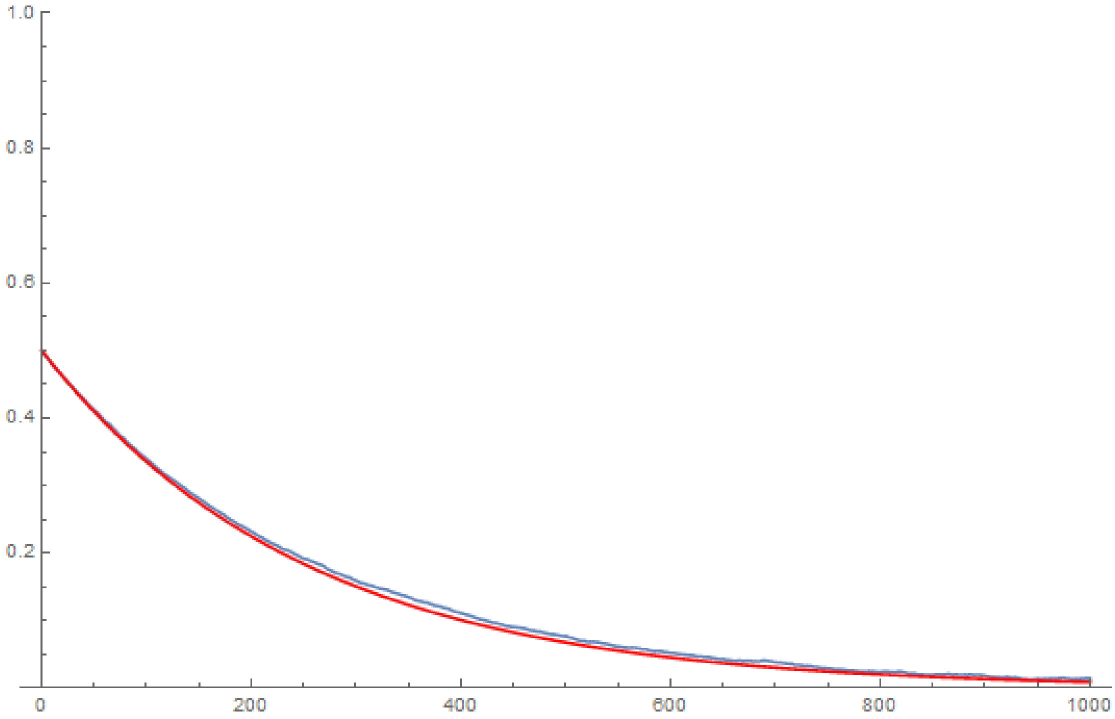
当 t=∞时， $u_x(t),u_x(0)$应无关联，

$<u_x(0)u_x(0)>=<u_x(t)><u_x(0)>=0$.

实验结果：

θ取不同的值，cov(t)的形状不变，而收敛于 0 的速度不同，但θ若太小，则计算量太大，所以θ要取适当的值。

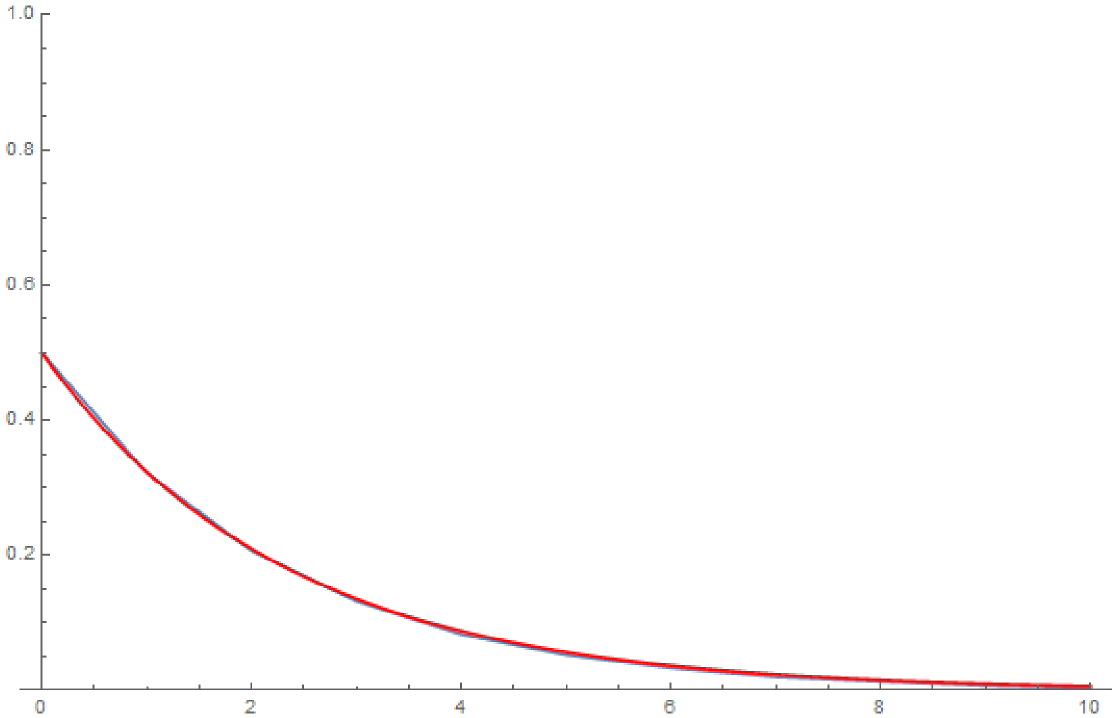
(1): $\theta = 5$



红色线为 f(x)=0.5Exp(-x/250)。

可见 cov(t)呈指数下降

(2)： $\theta = 50$



红色线为 f(x)=0.5Exp(-x/2.3)

所以对不同的θ，cov(t)只是收敛于 0 的速度不同，而图像均是呈指数下降。