

计算物理 A——Homework 10

何金铭 PB21020660

1 题目描述

Monte Carlo 方法研究二维平面上荷电粒子在正弦外电场 ($\sim \sin \omega t$) 中的随机行走。推导速度自相关函数的表达式, 它随时间的变化是怎样的行为? 能否模拟得到该自相关函数的曲线? 是的话与理论曲线进行比较, 否的话讨论理由。

1.1 模型假设

1. 考虑一个正电荷粒子 (电荷质量分别为 q_0, m_0) 于一群理想分子 (不带电且质量为 m_1) 中运动
2. 考虑粘滞力 $f = -\eta v$
3. 外电场的总场强为 $E_0 = E_x \cdot \hat{i} + E_y \cdot \hat{j}$, 其 x 分量为 E_x , y 分量为 E_y

1.2 大致思路

1. 先理论推导出其随机游走的方程
2. 推导其速度的自相关函数
3. 模拟其曲线并与理论曲线进行比较

2 理论分析

2.1 坐标简化

可以做一个线性变换 $\mathcal{L}(V)$ 使得电场仅作用于 x 方向, 所以不妨假设:

$$E = E_0 \sin \omega t \hat{i} \quad (1)$$

之后可以再相应的逆变换 $\mathcal{L}^{-1}(V)$ 使得结果变换为原坐标

2.2 动力学方程

因为研究的是随机游走的速度自相关表达式, 所以列出的牛顿方程可以写成以下的形式:

$$m \dot{v}_x = E_0 \sin \omega t - F_x - \alpha v_x \quad (2)$$

$$m \dot{v}_y = -F_y - \alpha v_y \quad (3)$$

这里只解方程 (2), 代入 $E_0 = 0$ 即可得方程 (3) 的结果。

2.3 速度关联函数

由于我们需求解的是速度关联函数 $C(t) = \langle v(t)v(0) \rangle$ 或 $C(t) = \langle v(t)v(0) \rangle - \langle v(0) \rangle^2$ 。两种形式只相差的常数 $\langle v(0) \rangle^2$ 故这里讨论 $C(t) = \langle v(t)v(0) \rangle$

2.4 方程求解

$$m\dot{v}_x = E_0q - F_x - \alpha v_x$$

$$m \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{v(t+\tau) - v(t)}{\tau} = E_0q \sin \omega t - F_x - \alpha v_x$$

$$m \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{v_x(t+\tau)v(0) - v_x(t)v(0)}{\tau} = v(0)E_0q \sin \omega t - v(0)F_x - \alpha v_x(t)v(0)$$

$$m \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\langle v_x(t+\tau)v(0) - v_x(t)v(0) \rangle}{\tau} = \langle v(0)E_0q \sin \omega t \rangle - \langle v(0)F_x \rangle - \langle \alpha v_x(t)v(0) \rangle$$

$$m \frac{d \langle v_x(t)v_x(0) \rangle}{dt} = \langle v_x(0)E_0q \sin \omega t \rangle - \langle \alpha v_x(t)v(0) \rangle$$

$$\frac{dC_x(t)}{dt} + \frac{\alpha}{m}C_x(t) = \frac{\langle v_x(0) \rangle E_0q}{m} \sin \omega t \quad (4)$$

于是解得：

$$C_x(t) = \left[C_x(0) + \frac{\langle v_x(0) \rangle E_0q\omega}{m(\omega^2 + \beta^2)} \right] e^{-\beta t} + \frac{\langle v_x(0) \rangle E_0q}{m\sqrt{\omega^2 + \beta^2}} \sin(\omega t + \varphi) \quad (5)$$

上式中 $C_x(0) = \langle v_x^2(0) \rangle$, $\beta = \frac{\alpha}{m}$, $\varphi = \arctan(-\frac{\omega}{\beta})$

同理可得：

$$\frac{dC_y(t)}{dt} + \frac{\alpha}{m}C_y(t) = 0 \quad (6)$$

于是解得：

$$C_y(t) = C_y(0)e^{-\beta t} \quad (7)$$

上式中 $C_y(0) = \langle v_y^2(0) \rangle$, $\beta = \frac{\alpha}{m}$

3 算法模拟

此模型可以等价为周期性偏压的随机游走模型。

3.1 随机游走的算法

利用两个数组 $x[], y[]$ 分别储存随机游走 n 步后 x, y 方向的移动步数。

定义走 1 步，运动 $1m$ ，用时 k 秒，外电场角频率为 ω 。

并设 λ 为属于 $\left[0, \frac{1}{4}\right]$ 的一个常数。

1. 定义 $p_l(n)$ 为走了 n 步之后向左的概率，其表达式为 $p_l(n) = \frac{1}{4} + \lambda \sin \omega \frac{n}{k}$ ；则 $p_r(n)$ 为走了 n 步之后向右的概率，其表达式为 $p_r(n) = \frac{1}{4} - \lambda \sin \omega \frac{n}{k}$ ；向上向下的概率均为 $\frac{1}{4}$
2. 生成一个随机数 $\xi \in [0, 1]$ 。

3. 走了 n 步之后，有表达式如下：

$$\begin{cases} x[] = x[] + 1 & \xi \in [0, p_l(n)] \\ x[] = x[] - 1 & \xi \in [p_l(n), \frac{1}{2}] \\ y[] = y[] + 1 & \xi \in [\frac{1}{2}, \frac{3}{4}] \\ y[] = y[] - 1 & \xi \in [\frac{3}{4}, 1] \end{cases}$$

3.2 自相关函数的计算

模拟 N 次上述随机游走的过程，利用下式计算即可：

$$C(t) = \langle v(t)v(0) \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{v_i(t)v_i(0)}{N} \quad (8)$$

上式亦可写成：

$$C(\frac{n}{k}) = \langle v(t)v(0) \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{v_i(0)v_i(\frac{n}{k})}{N} \quad (9)$$

故有：

$$C_x(\frac{n}{k}) = \langle v_x(t)v(0) \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{v_{xi}(0)v_{xi}(\frac{n}{k})}{N} \quad (10)$$

$$C_y(\frac{n}{k}) = \langle v_y(t)v(0) \rangle = \sum_{i=1}^N \frac{v_{yi}(0)v_{yi}(\frac{n}{k})}{N} \quad (11)$$

其中 $v_i(t), v_{xi}(t), v_{yi}(t)$ 有两种计算方法：

1. 直接将其下一步的速度视为其值
2. 将接下来前 k 步的速度视为其值 ($k \ll n$) (n 为每次随机游走的步数)

4 程序说明

4.1 主要程序

schrage.c 16807 随机数生成器 (*Schrage* 法) 的代码

RW.py 周期性偏压随机游走的模拟和作图代码

c_calculate.py 两种速度自相关函数的模拟代码

4.2 程序结果

schrage.exe 16807 PRNG

16807.csv 一个种子数为"23942907" 的样本随机数文件

c_calculate_10000_1.csv 第一种抽样方法的结果, 10000 代表重复独立随机游走的次数, 1 代表震荡角频率

c_calculate_10000_0_1.csv 第一种抽样方法的结果, 10000 代表重复独立随机游走的次数, 0.1 代表震荡角频率

c_calculate_10000_100.csv 第一种抽样方法的结果, 10000 代表重复独立随机游走的次数, 100 代表震荡角频率, 下同

c_calculate_10000_10000.csv

c_calculate_10000_0_0001.csv

c_a_calculate_10000_1.csv 第一种抽样方法的结果, 10000 代表重复独立随机游走的次数, 1 代表震荡角频率

c_a_calculate_10000_0_1.csv 第一种抽样方法的结果, 10000 代表重复独立随机游走的次数, 0.1 代表震荡角频率

c_a_calculate_10000_10.csv 第一种抽样方法的结果, 10000 代表重复独立随机游走的次数, 10 代表震荡角频率, 下同

c_a_calculate_10000_10000.csv

c_a_calculate_10000_0_01.csv

c_a_calculate_10000_0_0001.csv

./pic 文件夹路径, 里面存放了各种图片, 命名方式与上面一致。

4.3 其他说明

1. 数据都写于 CSV 文件中
2. 其中 Python 程序用到的库有:

- matplotlib.pyplot : 用于作图
- numpy : 用于数据处理
- csv : 用于读写 CSV 文件

5 结果分析

5.1 正弦外电场中随机行走的 Monte Carlo 模拟结果

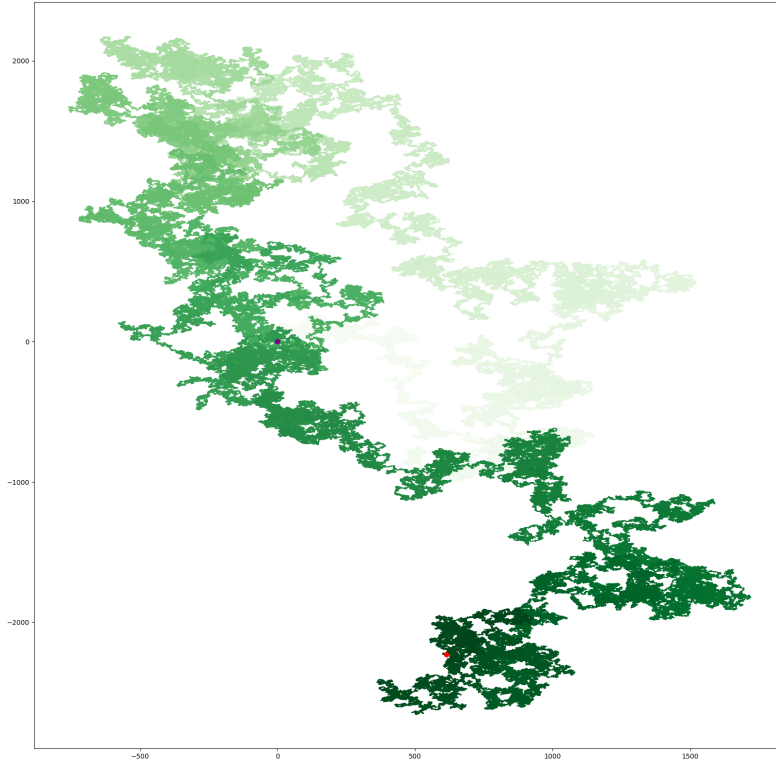


图 1: 10000000 步结果

5.2 自相关函数随时间的变化

$C_x(t), C_y(t)$ 的结果如下:

$$C_x(t) = \left[C_x(0) + \frac{\langle v_x(0) \rangle E_0 q \omega}{m(\omega^2 + \beta^2)} \right] e^{-\beta t} + \frac{\langle v_x(0) \rangle E_0 q}{m \sqrt{\omega^2 + \beta^2}} \sin(\omega t + \varphi) \quad (12)$$

上式中 $C_x(0) = \langle v_x^2(0) \rangle, \beta = \frac{\alpha}{m}, \varphi = \arctan(-\frac{\omega}{\beta})$

$$C_y(t) = C_y(0) e^{-\beta t} \quad (13)$$

上式中 $C_y(0) = \langle v_y^2(0) \rangle, \beta = \frac{\alpha}{m}$

5.2.1 对 ω 的讨论

设时间于 $t \in [0, t_1]$ 内变化。则于系统时间演化范围内, 进行讨论:

1. $\omega \gg \frac{2\pi}{t_1}$ 时, 有 $C_x(t) \cong C_x(0)e^{-\beta t}$ 。此时 x, y 方向的运动可近似认为一致
2. $\omega \ll \frac{2\pi}{t_1}$ 时, 有 $C_x(t) \cong C_x(0)e^{-\beta t} + \text{const}$ 。此时 x 方向的 $C(t)$ 仅比 y 方向多一个常数, 且在这种初值下为 0。
3. $\omega \sim \frac{2\pi}{t_1}$ 时, 需要进一步讨论其值。

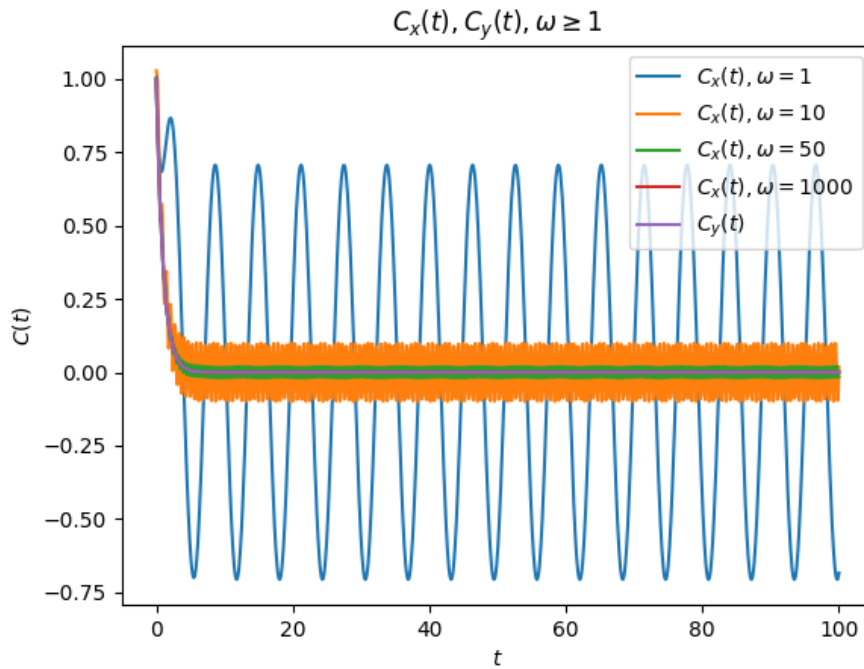


图 2: 研究 $\omega \geq 1$ 时的 $C_x(t)$ 与 $C_y(t)$

通过观察 $\omega \geq 1$ 时的 $C_x(t)$ 与 $C_y(t)$ 图可以发现:

1. 由于周期性作用的存在, 当 $\omega \geq 1$ 时, $C_x(t)$ 一开始呈现指数衰减, 之后就做周期性的震荡。
2. 当 ω 越来越大的时候, 其震荡的频率会越来越大。当 $\omega \gg 1$ 时, 于某些情况下 $C_x(t)$ 与 $C_y(t)$ 会变得无法区分。就比如图的情况中的红线 ($C_x(t), \omega = 1000$) 与紫线 ($C_y(t)$) 就无法区分。

但需要注意的是这不是决定的, 因为在作图的过程中, $\langle v_x(0) \rangle$ 可能随着的 ω 的变化而变化, 所以以上的分析只做波形上的参考。

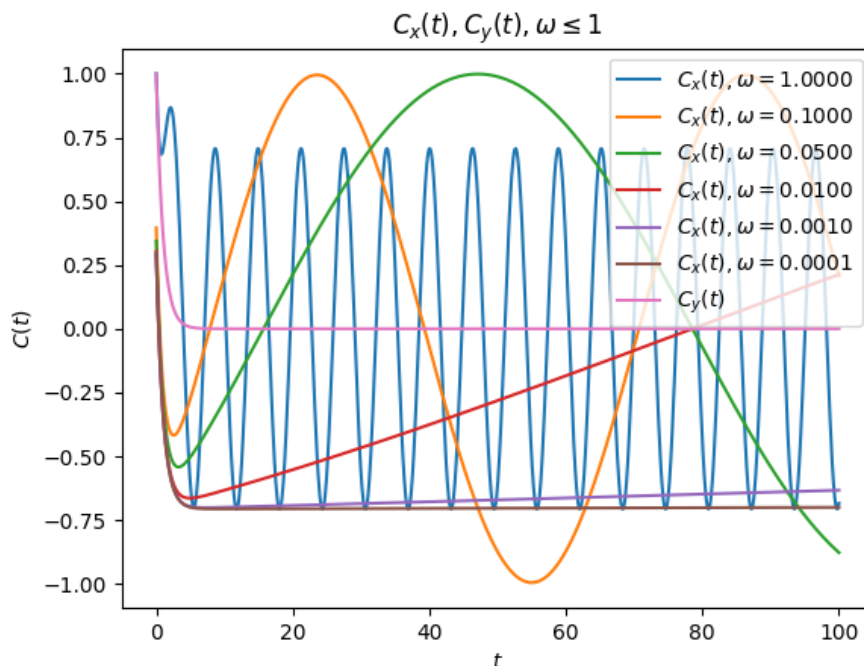


图 3: 研究 $\omega \leq 1$ 时的 $C_x(t)$ 与 $C_y(t)$

通过观察 $\omega \geq 1$ 时的 $C_x(t)$ 与 $C_y(t)$ 图可以发现：

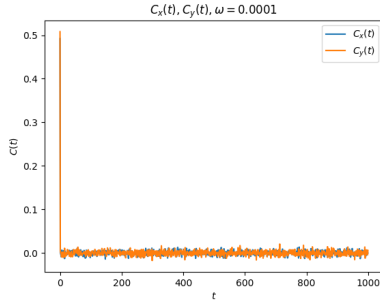
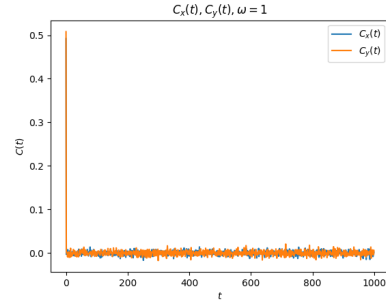
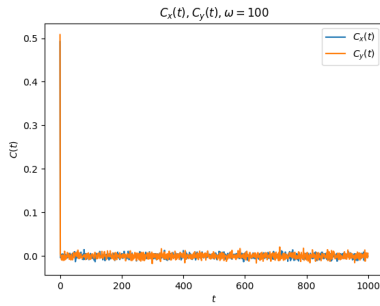
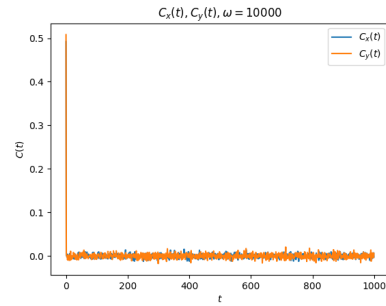
1. 当 $\omega \leq 1$ 时， $C_x(t)$ 一开始呈现指数衰减，之后就做周期性震荡。
2. 当 $\omega \leq 1$ 时，随着 ω 的减小，其震荡的周期也变得越来越大
3. 当 $\omega \ll 1$ 时，于一定范围内，正弦震荡的周期变得极大，可以认为其几乎不变，如图中棕线 ($C_x(t), \omega = 0.0001$) 与粉线 ($C_y(t)$) 在时间范围内相互平行，只相差一个尝试，与分析结果一致。

但需要注意的是这不是决定的，因为在作图的过程中， $\langle v_x(0) \rangle$ 可能随着 ω 的变化而变化，所以以上的分析只做波形上的参考。而且作图的时候，由于取 $\beta = 1$ ，所以于此看不出振幅的变化。

5.3 模拟的自相关函数曲线

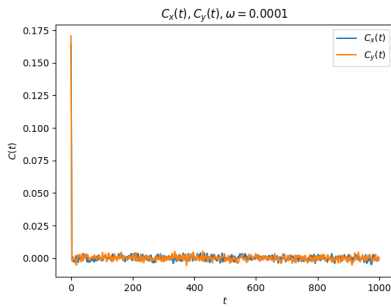
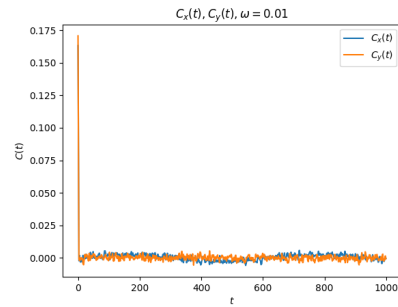
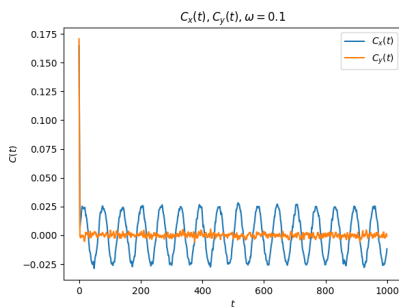
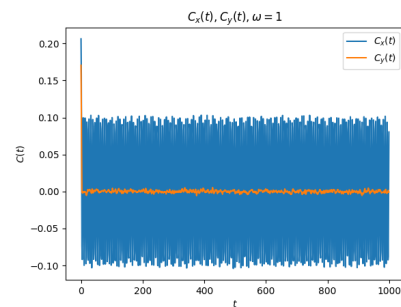
5.3.1 $v(0)$ 计算方法 1

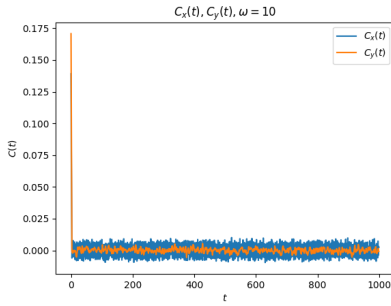
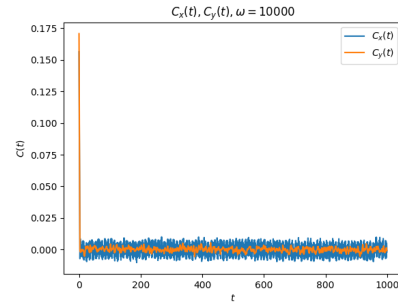
理论上来分析，由于再次每一次变化是离散的，也就是说速度的变化是跳跃式的，然而实际的运动中速度是连续变化的，所以得出效果不是很好，但还是可以看出指数函数的衰减，但正弦的变化则体现的不明显。从下方的曲线即可看出，橙色的曲线与蓝色的曲线几乎完成重合，而且可以看出这个一个近似的指数函数。

图 4: $N = 10000, \omega = 0.0001$ 图 5: $N = 10000, \omega = 1$ 图 6: $N = 10000, \omega = 100$ 图 7: $N = 10000, \omega = 10000$

5.3.2 $v(0)$ 计算方法 2

在前一种方法的基础上，我们可以考虑在几个步长范围内的平均速度取为此点的瞬时速度，这样会削弱速度的非连续变化。以下的结果取在 3 个步长范围内的平均速度。

图 8: $N = 10000, \omega = 0.0001$ 图 9: $N = 10000, \omega = 0.01$ 图 10: $N = 10000, \omega = 0.1$ 图 11: $N = 10000, \omega = 1$

图 12: $N = 10000, \omega = 10$ 图 13: $N = 10000, \omega = 10000$

发现结果与上面的理论预期一致：

1. $\omega = 1$ 时，发现正弦震荡十分的明显
2. $\omega = 10, 10000$ 时，震荡更加密集，而且振幅也变小，虽然这个也是有条件的，比较 $\omega = 100$ 时，就不满足。
3. $\omega = 0.1$ 时，发现频率变小，且振幅变小
4. $\omega = 0.01$ 时，依稀可以分辨出正弦波的图像，且发现振幅与频率都变得更小了。
5. $\omega = 0.0001$ 时，发现图像已经无法区分了，与上面的理论推导一致。

但是由于我们的 n 是离散的，也就是说 t 是离散的，当 ω 很大的时候，我们得到的结果也是离散的，因为我们的时间没有足够的精度来体现 $\sin \omega t$ 的变化细节，因此上方的 $\omega = 100, 10000$ 得到的结果会有一些出入。

6 总结

1. 可以用一个偏压随机游走来模拟这个过程。
2. 速度自相关函数的具体表达式可于上文中找到，在垂直于电场方向的 $C_y(t)$ 与一般的随机游走一致。在电场方向的 $C_x(t)$ 一开始呈指数衰减，后来就以正弦的形式震荡。
3. 可以模拟得到该自相关函数的曲线。利用了时间尺度大的前提下，将粒子在一个小的时间范围内的平均速度来近似粒子在一点的瞬时速度。这里只讨论了 3 个步长范围内的情况，已经得到了与理论近似的结果，还可以进一步处理步长。