

# 13-2 有取向的布朗粒子的随机行走

许传奇 PB16021546

## 1 题目

13-2: 研究有取向的布朗粒子（如纳米棒）的随机行走，计算取向的自相关函数： $C(t) = \langle u_x(t)u_x(0) \rangle$ ，其中 $u_x$ 为取向单位矢量在x轴上的投影。

## 2 原理与算法

### 2.1 原理

#### 2.1.1 一维随机行走

考虑一个粒子以几率 $p$ 往左以几率 $q=1-p$ 往右跨一步长 $l$ ，其运动为概率论的二项分布，因此由：

$$\langle x(N) \rangle = (q - p)Nl \quad (1)$$

$$\langle x^2(N) \rangle = 4pqNl^2 + N^2l^2(q - p)^2 \quad (2)$$

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = 4pqN^2 \quad (3)$$

这些统计量用来描述一维随机行走的特征。

#### 2.1.2 有取向的布朗粒子的随机行走模型的简化

简化模型主要参考自文献[1]。

首先，三维空间中的有取向的布朗粒子的随机行走模型与二维空间中的类似，因此为了简便，首先讨论二维空间中的有取向的布朗粒子的运动。

对于有取向的布朗粒子的随机行走，并不能认为其朝各个方向等概率等距离地行走。对于不均匀的布朗粒子，其随机行走受形状的影响。无法讨论一般的形状，因为实在太复杂。考虑一个非常简单的模型，粒子为二维空间上长为 $a$ ，宽为 $b$ 的矩形。

##### 1. 粒子受随机力的研究：

对于矩形的受力，不考虑沿边方向的剪切力，只考虑沿边法向的力，则力可以合成为作用于长边和作用于短边的两个力。

假设将长分为 $N_a$ 份，每份为 $\Delta a$ ，当 $N_a$ 较大时，作用在其上的力的分布是期望为0，标准差为 $\sigma$ 的正态分布。考虑作用在两条长边上的合力，因为在一个方向上，可以直接进行代数相加运算。由于正态分布的和的分布仍然是正态分布，由统计学的只是，作用在长边上的力的合力的分布为期望为0，标准差为 $\sqrt{2N_a}\sigma$ 的正态分布。

同理，作用在短边上的力的合力的分布也为期望为0，标准差为 $\sqrt{2N_b}\sigma$ 的正态分布（假定各向同性，两边上的力的标准差相等），但要保证分的每一块都相等，即 $a/N_a = b/N_b$ 。

标准差之间的关系可以代表力的大小之间的关系，因此作用在长边和作用在短边上的力的比为：

$$F_a : F_b = \sqrt{a} : \sqrt{b} \quad (4)$$

## 2. 粒子受流体阻力的研究：

粒子除了受涨落引起的随机力外，流体的阻力等平均里力不可忽略的，流体力学中的基本方程是斯托克斯方程：

$$\rho \frac{dv}{dt} = -\nabla p + pF + \mu \Delta v \quad (5)$$

用此方程来解析求解平面平行运动的矩形所受的阻力和阻力距，将会十分困难。目前主要的计算方法除了直接数值求解动力学方程外还有格子玻尔兹曼方法等。

采用一种简化假设，来考虑流体对粒子的整体作用：当固体边界各处存在一定法向速度分布时，统计上看前进方向前端的边界将会受到更多流体分子的碰撞。

假设流体分子的速度分布服从气体的麦克斯韦分布律，与边界法向发生一维碰撞而改变动量，只需考虑这一方向上的速度的分布律：

$$f(v) = Ae^{-\lambda v^2} \quad (6)$$

其中 $\lambda = \frac{m}{2kT}$ ，归一化常数A由概率积分给出。

在单位时间内 $\Delta t$ 内，对长 $\Delta L$ 的一小段固体壁，如果以向内的法向速度 $u$ 前进，则对于法向速度为 $v$ 的粒子群，只有面积为 $\Delta S = \Delta L(v - u)\Delta t$ 的流体分子会与其发生碰撞，流体分子面密度为 $\sigma$ 。将速度分布带入，动量的改变量为：

$$\Delta p = \int_0^{+\infty} 2Ae^{-\lambda v^2} \sigma \Delta L \Delta t (v - u)^2 dv \quad (7)$$

对于线压强 $P(u) = \frac{\Delta p}{\Delta L \Delta t}$ 在做变量代换 $x = v - u$ 后正比于以下形式的含参变量积分：

$$P(u) \propto \int_0^{\infty} e^{-\lambda(x+u)^2} x^2 dx \quad (8)$$

而这个积分本质上是不完全的伽马函数，由于布朗运动的速度在数量级上远远小于分子热运动速度，故可以用泰勒展开进行近似，有：

$$\int_0^{\infty} e^{-\lambda(x+u)^2} x^2 dx \approx \int_0^{\infty} e^{-\lambda x^2} (1 - 2\lambda x u) x^2 dx = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}} - \frac{u}{\lambda} \quad (9)$$

其中，第一项是边界静止时的平均压强，它是一个定值。对任意简单闭曲线，它本身和它的一次距的积分都为0，这意味着它不提供合力和合力距。

第二项则是边界有法向速度时对压强的线性影响，运动方向前端的边界所受压强更大，后端的边界所受压强更小，呈现出阻力的特征。

为了方便计算，忽略切向的粘滞力，假定流体对颗粒的整体阻力为正比于边界法向速度的压强。

## 3. 粒子平动步长的研究:

对于平动步长的取值, 可以认为其跟速度成正比。

根据前面的研究, 设作用在长 $L$ 边上的力为 $F$ , 阻力为 $f$ , 法向速度为 $v$ , 则在纳米棒足够小的准静态假设下, 当粘滞阻力与布朗力平衡时, 有以下关系:

$$\begin{cases} F = f \\ F \propto \sqrt{L} \\ f \propto L \\ f \propto v \end{cases} \Rightarrow v \propto \frac{1}{\sqrt{L}} \quad (10)$$

设一个基准值步长, 例如 $S$ , 则有:

$$\Delta S = \frac{S}{\sqrt{L}} \quad (11)$$

## 4. 粒子转动步长的研究:

假设随机力的效果相当于作用在长为 $L$ 的边上, 力臂为 $R$  (最大为 $\frac{L}{2}$ ) 的力, 当前的平动速度为 $v$ , 转动角速度为 $\omega$ 。

计算此时粘滞阻力所产生的力矩。当纳米棒绕中心转动时, 边界承担阻力, 对于其中一条承担阻力的边界, 有:

$$v(x) = \omega x \quad (12)$$

$$df = \alpha v(x) dx = \alpha \omega x dx \quad (13)$$

$$dM = x df = \alpha \omega x^2 dx \quad M = \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dM = \frac{\alpha \omega L^3}{12} \quad (14)$$

则四条边界所受合力矩为:

$$M = \frac{\alpha \omega}{6} (a^3 + b^3) \quad (15)$$

为了达到力矩平衡, 有:

$$M = RF = R\sqrt{L}F_0 = R\sqrt{L}\alpha v_0 = \frac{\alpha \omega}{6} (a^3 + b^3) \quad (16)$$

则可以求出:

$$\omega = \frac{6R\sqrt{L}}{a^3 + b^3} v_0 \quad (17)$$

$$\Delta \theta = \frac{6R\sqrt{L}}{a^3 + b^3} S \quad (18)$$

## 2.2 算法

根据原理部分的讨论, 将任意布朗粒子进行简化处理, 即可写出便于计算的程序。

首先将粒子的形状简化成长为 $a$ , 宽为 $b$ 的矩形。对于粒子的平动, 认为随机力每次仅作用于四条边中的一条, 且为法向作用, 不存在切向的力。则力的作用概率与对应的截面积成正比。

因此，先抽取 $[0,1]$ 上的随机数 $\xi$ ，用来选择作用于哪一条边。按照以下规则选择边（假设初始状态矩形长和宽分别沿x轴和y轴，其中一个顶点在原点，且位于第一象限）。

$$\begin{cases} 0 \leq \xi < \frac{0.5a}{a+b} & \text{bottom} \\ \frac{0.5a}{a+b} \leq \xi < \frac{a}{a+b} & \text{top} \\ \frac{a}{a+b} \leq \xi < \frac{a+0.5b}{a+b} & \text{left} \\ \frac{a+0.5b}{a+b} \leq \xi < 1 & \text{right} \end{cases} \quad (19)$$

如此便能选择出力作用于哪一条边。

每次作用的步长，为式（11）：

$$\Delta S = \frac{S}{\sqrt{L}} \quad (20)$$

因此，随机数 $\xi$ 对应的横坐标x、纵坐标y的变化为（当前转动的角度为 $\theta$ ）：

$$\begin{cases} \Delta x = -\frac{S}{\sqrt{L}} \sin \theta, \Delta y = \frac{S}{\sqrt{L}} \cos \theta & 0 \leq \xi < \frac{0.5a}{a+b} \\ \Delta x = \frac{S}{\sqrt{L}} \sin \theta, \Delta y = -\frac{S}{\sqrt{L}} \cos \theta & \frac{0.5a}{a+b} \leq \xi < \frac{a}{a+b} \\ \Delta x = \frac{S}{\sqrt{L}} \cos \theta, \Delta y = \frac{S}{\sqrt{L}} \sin \theta & \frac{a}{a+b} \leq \xi < \frac{a+0.5b}{a+b} \\ \Delta x = -\frac{S}{\sqrt{L}} \cos \theta, \Delta y = -\frac{S}{\sqrt{L}} \sin \theta & \frac{a+0.5b}{a+b} \leq \xi < 1 \end{cases} \quad (21)$$

在选择一个 $[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$ 中的随机数 $\eta$ ，随机力的作用点可以认为是在边上的任意一处均匀分布，因此对于长为L的边，作用的力臂R为：

$$R = \eta L \quad (22)$$

而此次随机行走的角度变化为式（18）：

$$\begin{cases} \Delta \theta = \frac{6\eta a \sqrt{a}}{a^3+b^3} S & 0 \leq \xi < \frac{0.5a}{a+b} \\ \Delta \theta = -\frac{6\eta a \sqrt{a}}{a^3+b^3} S & \frac{0.5a}{a+b} \leq \xi < \frac{a}{a+b} \\ \Delta \theta = -\frac{6\eta b \sqrt{b}}{a^3+b^3} S & \frac{a}{a+b} \leq \xi < \frac{a+0.5b}{a+b} \\ \Delta \theta = \frac{6\eta b \sqrt{b}}{a^3+b^3} S & \frac{a+0.5b}{a+b} \leq \xi < 1 \end{cases} \quad (23)$$

至此，简化模型下的粒子每次随机行走后的坐标和角度变化已经求解完毕。代码中按照以上法则进行随机行走的模拟即可。

对于自相关函数的计算，根据公式：

$$C(t) = \langle u_x(t) u_x(0) \rangle \quad (24)$$

设置n粒子，第i个粒子运动N步的角度为 $\theta_i$ ，则自相关函数为：

$$C(N) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \cos \theta_i \quad (25)$$

只需要遍历不同的粒子，同时根据上面角度的变化求出N次随机行走后的角度的累计变化值，就可以求出自相关函数。

### 3 源文件使用说明

编译并运行“13.2OrientationRW.cpp”，将弹出命令行，按要求输入矩形的长length、宽width、基准值步长step、粒子总数num\_particles、随机行走次数num\_steps，程序将运行。

输入数据后，程序运行并将数据输出到两个文件，分别为：

1. RW,length=length,width=width,num=num\_steps.txt:

保存该参数下的每步随机行走后的横坐标、纵坐标和角度。

2. RC.txt:

保存不同步数下的2阶距和自相关函数。

编译并运行以下五个文件，设置其中的参数，即可得到不同的图片：

1. plot\_2D.py:

用来绘制2D随机行走示意图。

2. plot\_3D.py:

用来绘制3D随机行走示意图。其中Z方向为角度。

3. plot\_radius.py:

用来绘制单个粒子随机行走时距离原点距离的平方随步数变换的关系。

4. plot\_R.py:

用来绘制2阶距随步数变换的关系。

5. plot\_C.py:

用来绘制自相关函数随步数变换的关系。

## 4 计算结果

### 4.1 随机行走示意图

设置不同的长与宽，得到的随机行走图如下所示。

第一幅是粒子的横、纵坐标的示意图，子图的左侧是纵坐标为角度的示意图，右侧是 $R^2$ 与N的关系图。

如果没有明确说明，一下的基准步长值S都设置为0.5。

为了节省空间，将其压缩，可以“放大PDF”观看

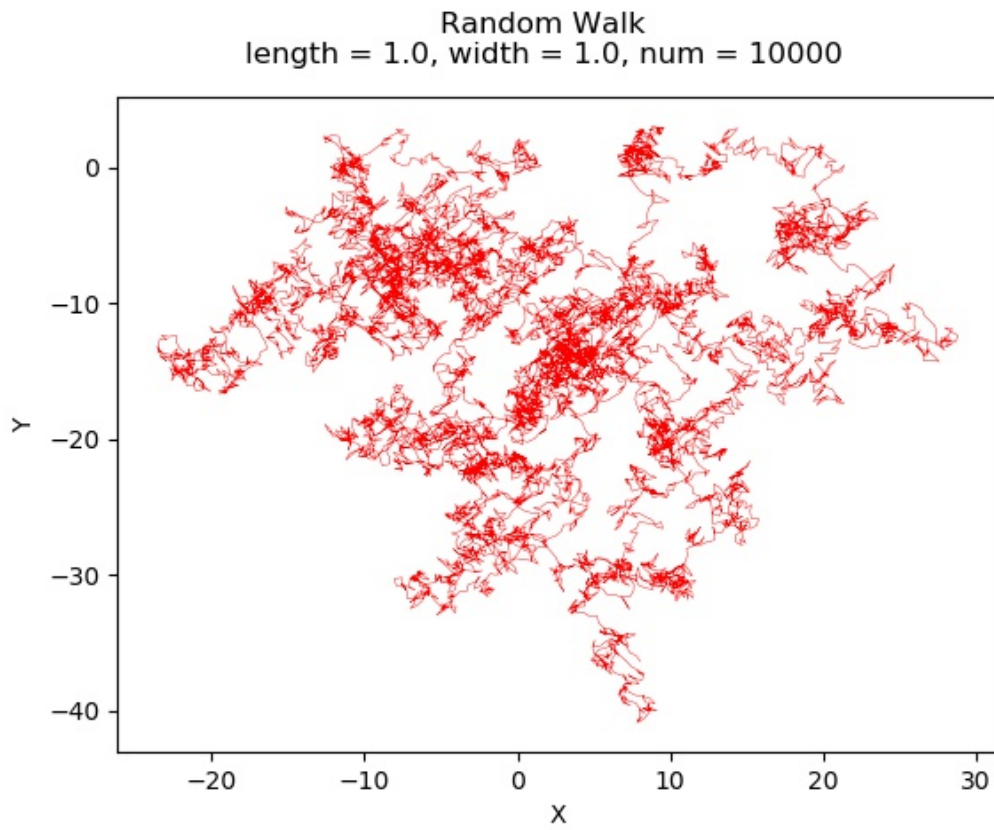
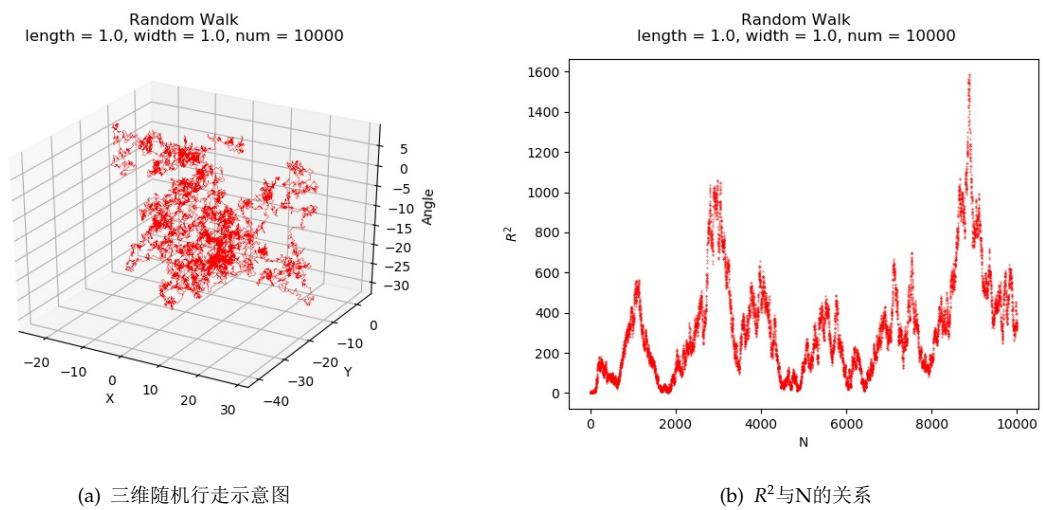


图 1: 二维随机行走示意图 (长为1, 宽为1)

图 2: 三维随机行走示意图与 $R^2$ 与N的关系 (长为1, 宽为1)

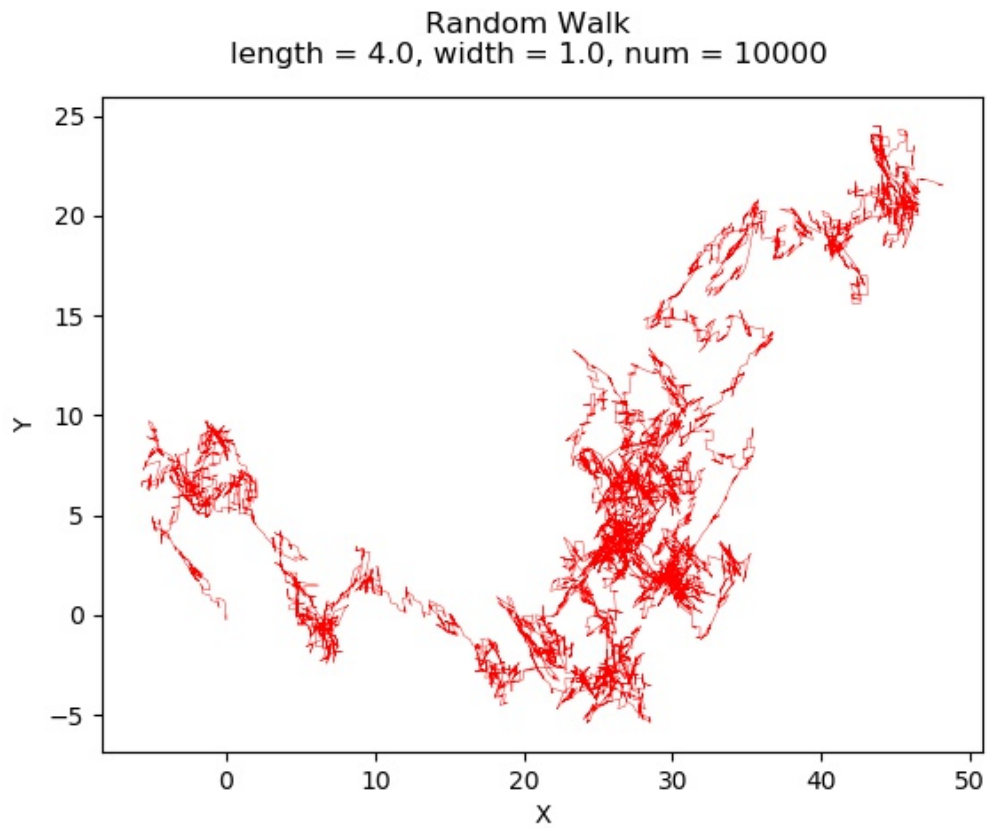
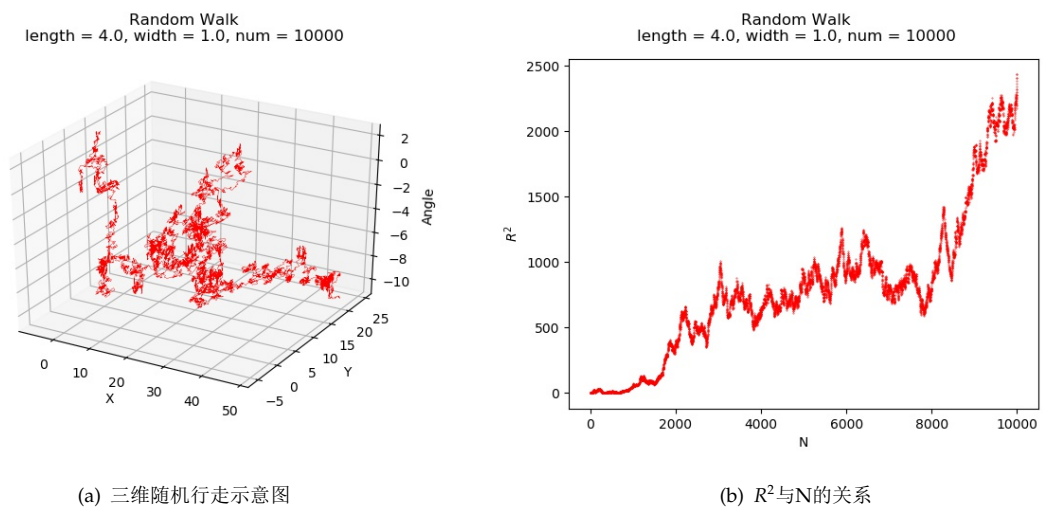


图 3: 二维随机行走示意图 (长为4, 宽为1)

图 4: 三维随机行走示意图与 $R^2$ 与N的关系 (长为4, 宽为1)

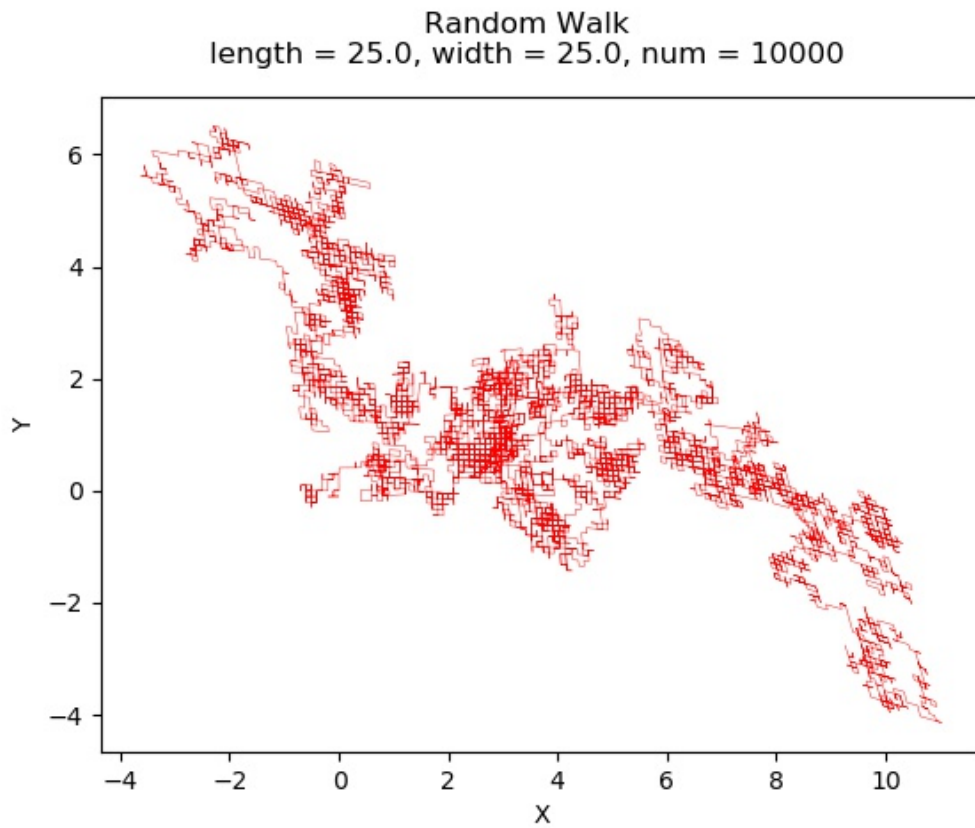
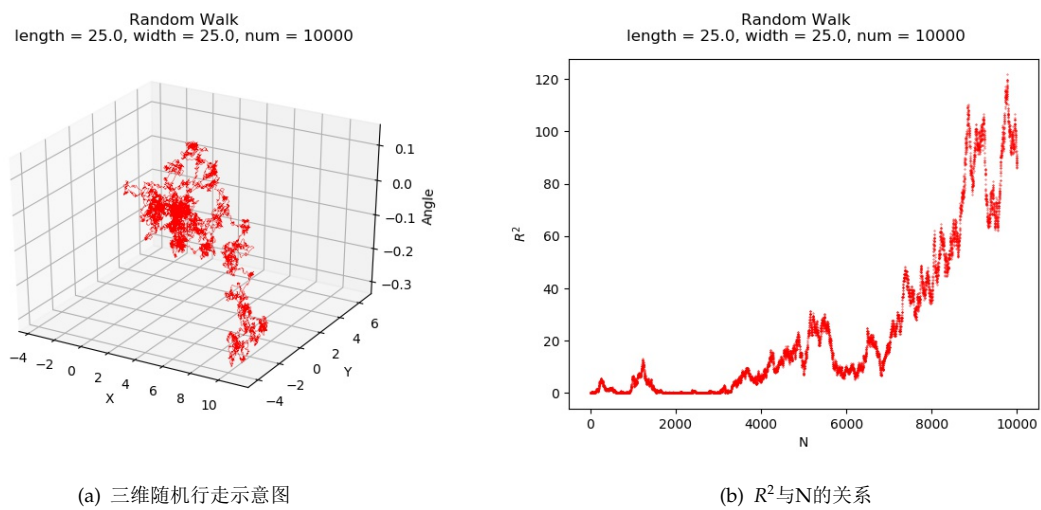


图 5: 二维随机行走示意图 (长为25, 宽为25)

图 6: 三维随机行走示意图与 $R^2$ 与N的关系 (长为25, 宽为25)



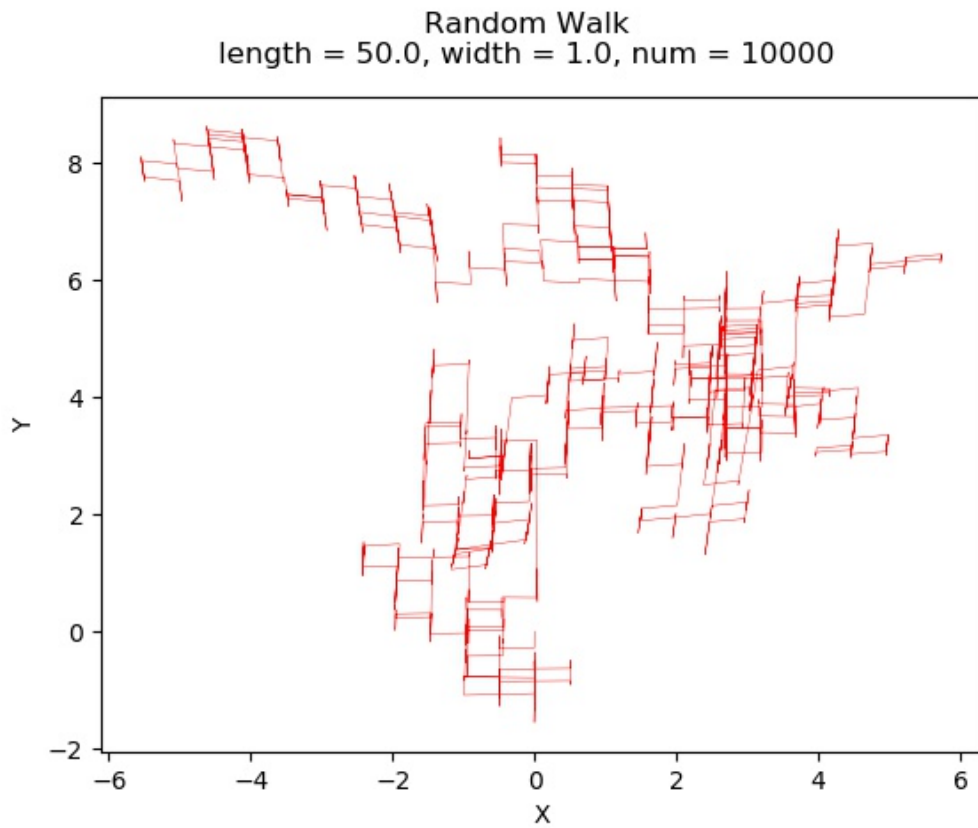
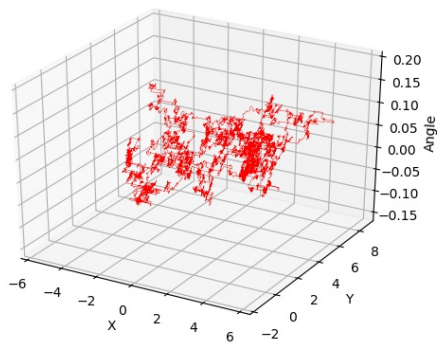


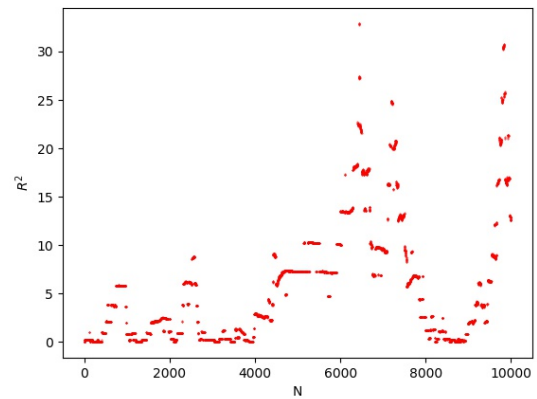
图 7: 二维随机行走示意图 (长为50, 宽为1)

Random Walk  
length = 50.0, width = 1.0, num = 10000



(a) 三维随机行走示意图

Random Walk  
length = 50.0, width = 1.0, num = 10000

(b)  $R^2$ 与N的关系图 8: 三维随机行走示意图与 $R^2$ 与N的关系 (长为50, 宽为1)

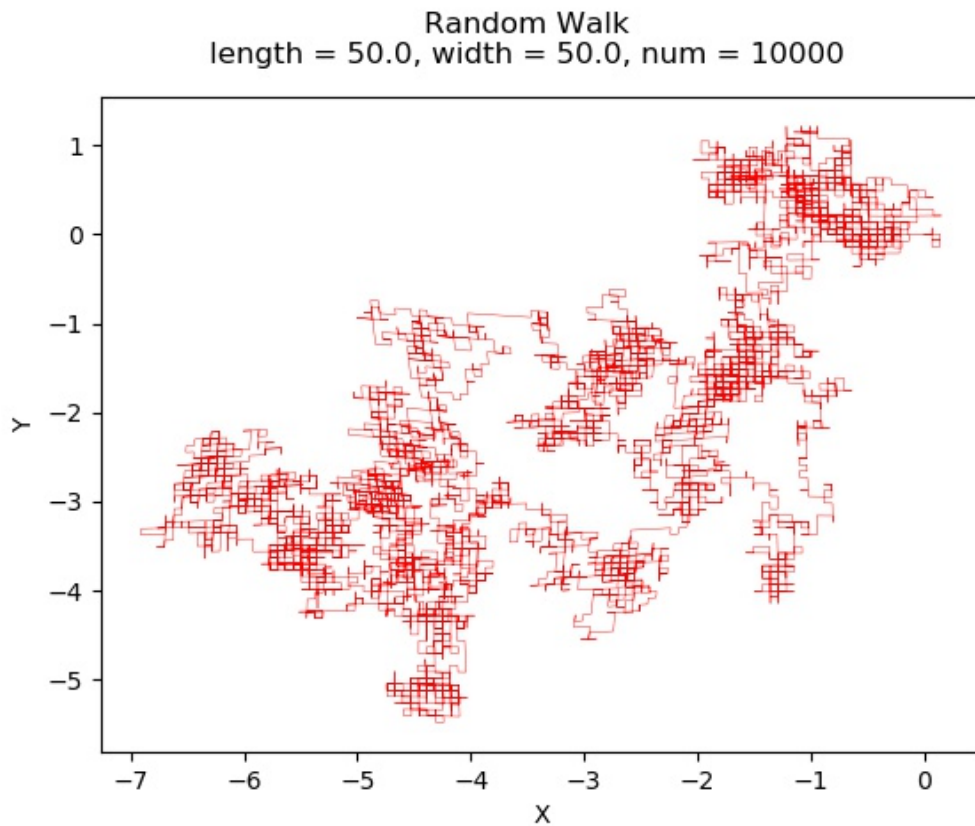
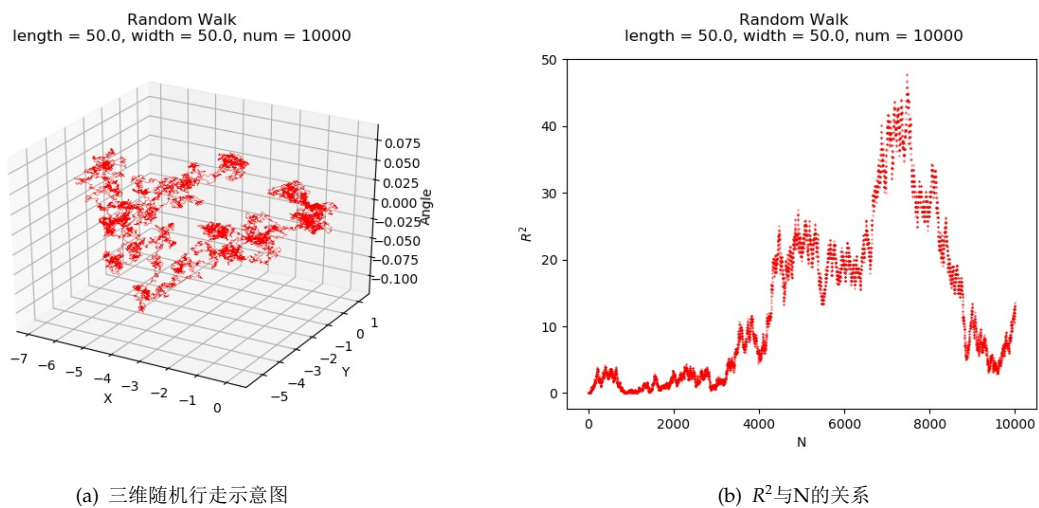
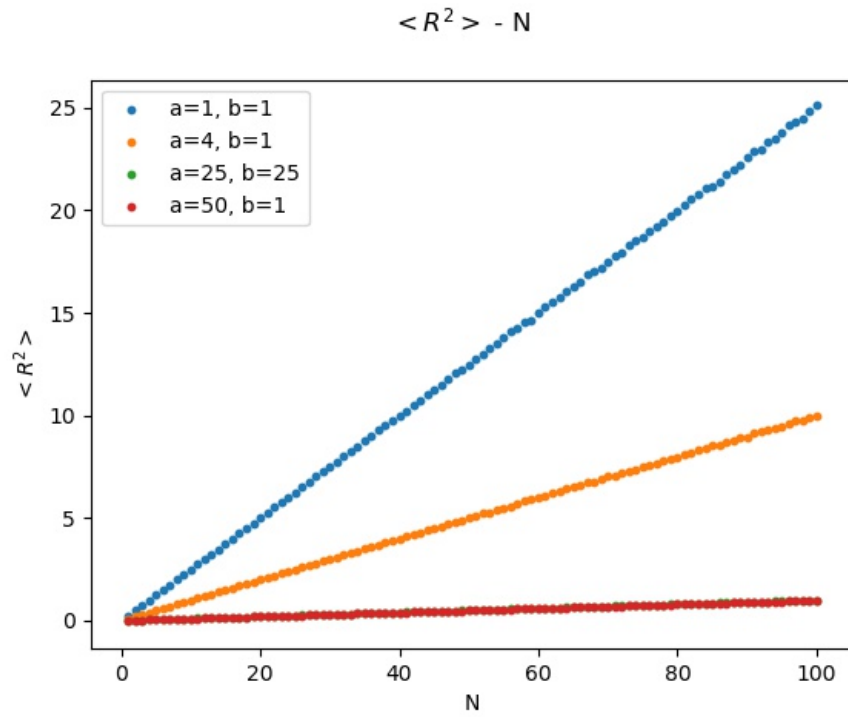
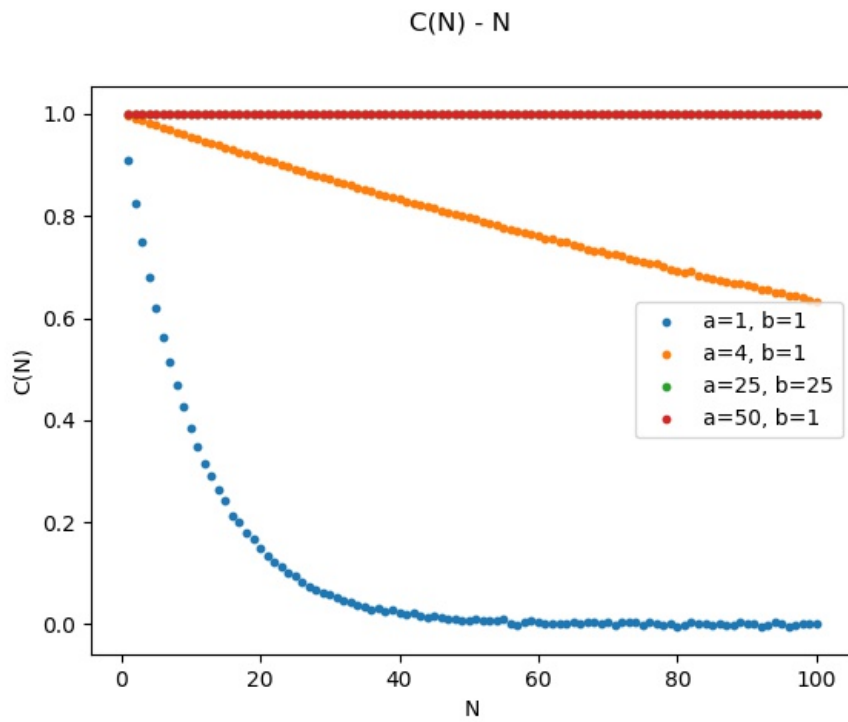


图 9: 二维随机行走示意图 (长为50, 宽为50)

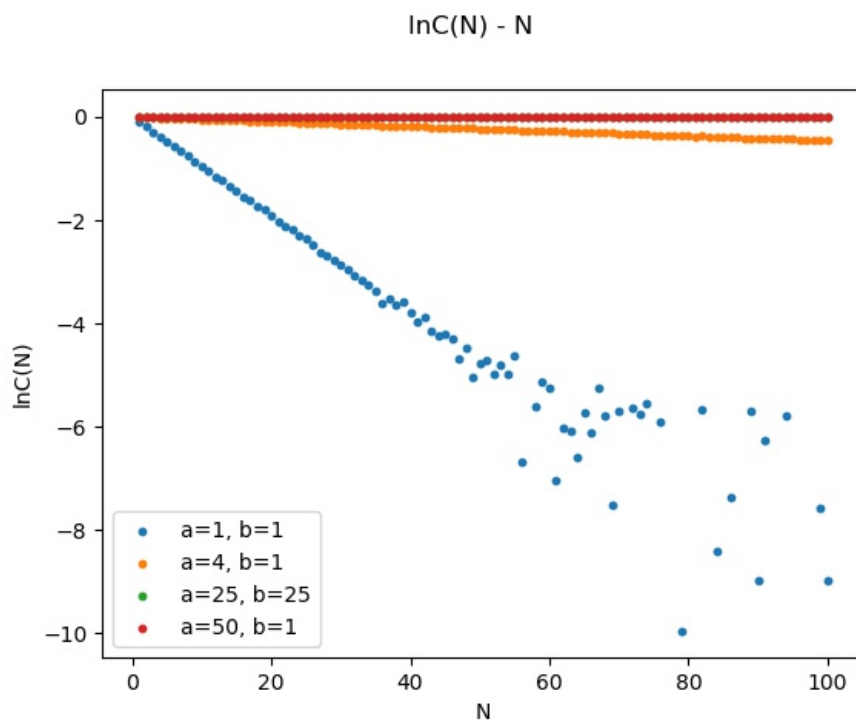
图 10: 三维随机行走示意图与 $R^2$ 与N的关系 (长为50, 宽为50)

## 4.2 $R^2$ 的期望和 $C(N)$ 与步数N的关系

如下图所示, 是长、宽分别为(1,4,25,50)和(1,1,25,1)的 $R^2$ 的期望和 $C(t)$ 与N的关系:

图 11:  $R^2$  的期望与  $N$  的关系图 12:  $C(N)$  与  $N$  的关系

可见  $R^2$  与  $N$  的关系几乎是线性的，而  $C(N)$  与  $N$  的关系则有点像指数型。  
作出  $\ln C(N)$  与  $N$  的关系，如下图所示：

图 13:  $\ln C(N)$ 与 $N$ 的关系

## 5 讨论

### 5.1 原理的讨论

本次作业选择的是十分简化的模型，实际中粒子的轮廓肯定不是矩形的，因此分析起来十分复杂。

在模拟的过程中，只能选择简化的模型。不过，除了矩形的简化外，还有其他的模型简化，例如圆或者椭圆[2]。

对于模型的改进，主要集中在增加其与现实的相似度。比如上面说的将矩形化为椭圆。

另外，在本次作业中的模型中的可以改进的地方还有这些：

1. 平动的方向不只是某一条边的法向，还可以增加切向力；
2. 平动的步长和转动的步长不是一个固定值。根据前面的分析，可以假设作用力遵从某种分布，比如正态分布。这样平动的步长和转动的步长也遵从正态分布；
3. 本题只研究了二维平面的随机行走，还可以扩展到三维平面。不过三维情况只是多了一个自由度而已，原理部分可以直接拓展，不需要进行大的修改。

### 5.2 结果的讨论

#### 5.2.1 随机行走示意图

在计算结果的第一部分（即第5面4.1：随机行走示意图）中可以看到，设置不同的长与宽会对粒子

的随机行走产生影响。根据原理部分的分析，设置的平动步长和转动步长分别为：

$$\Delta S = \frac{S}{\sqrt{L}} \quad (26)$$

$$\Delta\theta = \frac{6R\sqrt{L}}{a^3 + b^3} S \quad (27)$$

长度增加，步长将会减小（第二个分母上的长度指数比分子上的大），在这种看法下，其实是因为原理部分的推导中长度与质量联系在一起的，因此长度越长，质量越大，惯性越大，受随机力的影响将会更小，因此步长更小。

平动的步长随着边长增大而减小反映在横纵坐标随着边长的增加减小，而转动的步长随着边长增大而减小反映在图中随着边长的增大轨迹逐渐向矩形靠拢（是矩形的原因是因为模型简化为只在边的法向发生平动）。

模拟的这种随机行走的效果随边长增大而减弱，也与实际符合。实际中，物体的尺寸变大，分子撞击的统计性涨落的影响将会越来越小，因此导致随机行走的效果减弱。

### 5.2.2 $R^2$ 的期望与步数N的关系

在计算结果的第二部分的第一张图（即第11面图11）中可以看到， $R^2$ 的期望与步数N几乎是线性的，这也是数学中随机行走理论的一个重要结论。

在丁老师的讲义中也写到，一个醉汉做类似随机行走的运动时，其距离原点的距离与时间的二分之一次方满足反比关系，即：

$$\sqrt{\langle x^2 \rangle} \propto t^{1/2} \quad (28)$$

这也就是这里的， $R^2$ 的期望与步数N的线性关系。

另外，从图中也可以看出， $R^2$ 的期望与周长成反比，而与具体形状无关，即：

$$\langle R^2 \rangle \propto \frac{N}{C} \quad (29)$$

### 5.2.3 $C(N)$ 与步数N的关系

在计算结果的第二部分的第二张图和第三张图（即第11面图12和第12面图13）中可以看到，自相关函数与步数N几乎满足指数关系，即：

$$C(N) \propto e^{-kN} \quad (30)$$

其中k是比例系数，与边长有关。

此外，当边长为1，1时，步数较小时与N呈上述关系，但随着N逐渐变大，最后几乎变得无规律。

原因可以这样解释：当步数较小时，还有规律可循，即随机行走在步数小的时候对粒子角度的累计影响还没有达到一定程度。但随着步数的增加，随机行走对粒子角度的累计的影响越来越大。因为随机行走本身就是无规律的，因此累积起来就没有什么规律，求得的相关系数几乎是0，也就是说步数大的时候角度与初始角度没有什么关系了，这就是随机性的一种体现。

而当长度很大时，比如图中的25，25和50，1，自相关函数几乎是1，也就是说几乎没有角度变化，这也是之前分析到的随着尺度的增加，随机行走的随机力的涨落效果的影响越来越小，也就逐渐对物体的角度没有影响。

## 参考文献

- [1] 邹全胜. 有取向颗粒的布朗运动模拟研究. 滁州学院学报, 2018.
- [2] Yilong Han, Ahmed M Alsayed, Maurizio Nobili, Jian Zhang, Tom C Lubensky, and Arjun G Yodh. Brownian motion of an ellipsoid. *Science*, 2006.