计算物理——Homework Week 14

白博臣、何骐多、夏营

(四川大学　物理学拔尖计划)

Figure 1: 白博臣

Figure 2: 何骐多

Figure 3: 夏营

1 Problem 1

1.1 理论分析

自由程满足一定范围内的均匀分布，$\lambda \in \left(\bar{\lambda} - \delta, \bar{\lambda} + \delta\right)$

以平均自由程为单位长度，取 $la\bar{m}bda = 1$，则有：$\lambda(1-b, 1+b)$，λ 在区间 (1-b,1+b) 上服从均匀分布，其数字特征为：

$$E(\lambda) = 1$$

$$D(\lambda) = \frac{b^2}{3}$$

由方差计算公式可得：

$$E(\lambda^2) = 1 + \frac{b^2}{3}$$

代入化简可得自由程服从一定范围的均匀分布时，方均根距离与平均自由程的比值满足：

$$\frac{d(n)_{rms}}{\bar{\lambda}} = \sqrt{n} \cdot \sqrt{1 + \frac{b^2}{3}}$$

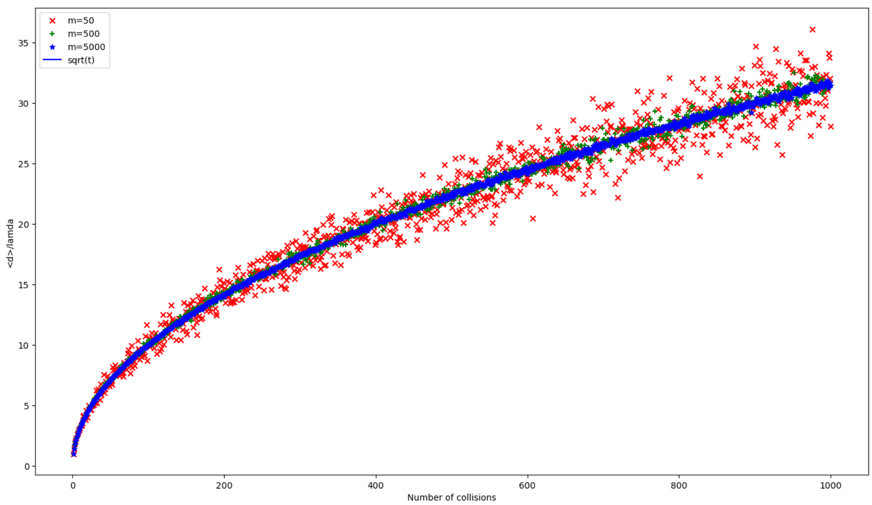

Figure 4: 固定 λ 的 3D random walk

代入不同的 b 值，有对应的理论曲线：

我们可以发现点聚集整体可以有微小差异随着方差变大，整体有略微抬升，差异很明显，引入 λ 方差引起的预测偏差越大越明显将大部分点抬升至 $\sqrt(N)$ 上面，原因就是方差引入一定程度的偏差。结果表明，拟合曲线和理论曲线几乎完全重合，进一步验证了理论推导的正确性！也可以观察到，参数 的值越大，均方根距离的值相对会增大。

$$
\begin{cases}
\text{while } b = 0.1, & d(n) = \sqrt{n} \cdot \sqrt{1 + \frac{0.1^2}{3}} = 1.00167 \cdot \sqrt{n} \\
\text{while } b = 0.3, & d(n) = \sqrt{n} \cdot \sqrt{1 + \frac{0.3^2}{3}} = 1.01489 \cdot \sqrt{n} \\
\text{while } b = 0.5, & d(n) = \sqrt{n} \cdot \sqrt{1 + \frac{0.5^2}{3}} = 1.04083 \cdot \sqrt{n} \\
\text{while } b = 0.7, & d(n) = \sqrt{n} \cdot \sqrt{1 + \frac{0.7^2}{3}} = 1.07858 \cdot \sqrt{n} \\
\text{while } b = 0.9, & d(n) = \sqrt{n} \cdot \sqrt{1 + \frac{0.9^2}{3}} = 1.12694 \cdot \sqrt{n}
\end{cases}
$$

Figure 5: 理论曲线

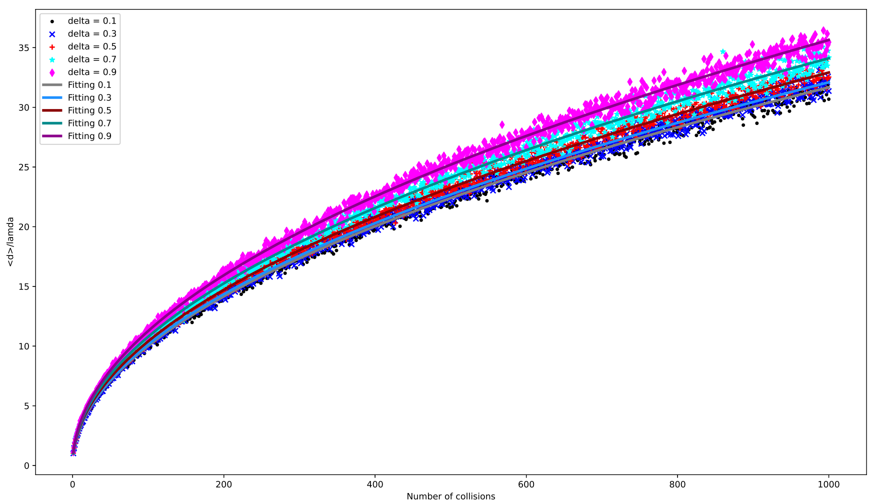

Figure 6: 不固定 λ 的 3D random walk 及其

2 Problem 2

2.1 题目回顾

溶液中聚合物的一个简单模型将其视为一系列随机取向的片段：也就是说，一个片段的取向与任何其他片段的取向之间没有相关性。这就是所谓的随机飞行模型，或自由连接随机行走链模型。

2.2 问题解答

首先我们定义了一个名为 Polymer 的类，表示在溶液中的随机飞行聚合物。在类的初始化方法 init 中，传入 N 和 a 两个参数，分别表示聚合物的段数和每段的长度。之后，将 N 和 a 保存在 self.N 和 self.a 中，并创建一个长度为 N 的空列表 self.xyz 来保存聚合物的段位置向量。还定义了一个变量 self.R 来保存聚合物的端到端向量。make_polymer 方法用来计算随机飞行聚合物的段位置、质心和端到端距离。首先，将第一个段的位置设为原点 (0,0,0)。然后，使用循环从第二个段开始逐个计算段的位置。每个段的位置由随机选择的角度 theta 和 phi 决定，通过计算对应的位移向量来更新当前位置。每次计算得到一个段的位置后，将其存储在 self.xyz 中，并更新质心的坐标。最后，计算质心的位置，并将最后一个段的位置作为端到端向量 self.R。最后，calc_Rg 方法用来计算并返回聚合物的旋转半径 Rg。该方法首先初始化 self.Rg 为 0，然后遍历所有段的位置，计算每个段的坐标的平方和，并累加到 self.Rg 中。最后，将 self.Rg 除以 N 并取平方根，得到 Rg 的值，并返回它。

接着导入了一个名为 Polymer 的模块，并从该模块中导入了 Polymer 类。接下来，创建了一个名为 polymer1 的 Polymer 对象，传入了参数 1000 和 0.5，表示创建一个由 1000 个长度为 0.5 的段组成的聚合物。然后，通过 polymer1.R 可以获取聚合物的端到端向量。最后，通过 polymer1.calc_Rg() 可以计算聚合物的旋转半径 Rg，并返回它的值:

$$R_g = 6.276669088499813$$

定义了一个变量 Np，表示要计算的聚合物数量，为 3000。然后，通过循环计算了 Np 个聚合物的端到端距离 R。每个聚合物由 N 个长度为 a 的段组成，并使用 Polymer 类创建了一个 polymer 对象。接着，计算并保存聚合物的端到端距离 Rx、Ry、Rz，并将其存储在 R 列表中。使用 plt.hist 函数绘制了 R 的分布情况，使用 50 个 bin 来绘制，density=True 来进行归一化。绘制了 r 和 Pr 的曲线见下图：

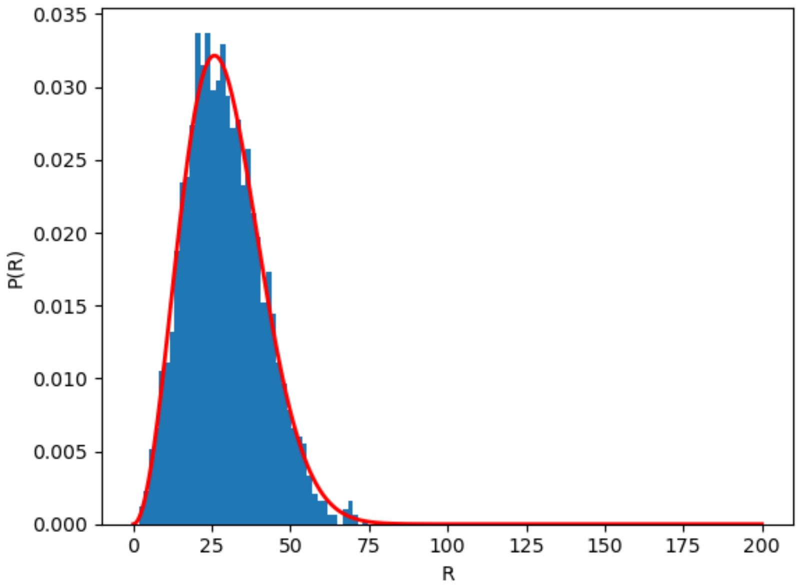

Figure 7: P(R) 与 R 关系图

3 Problem 3

3.1 问题解答

3.1.1 问题 a 解答

模拟一维轴上行走，每步决定一次向左/向右，各有一次 0.5 概率选择-1，+1。

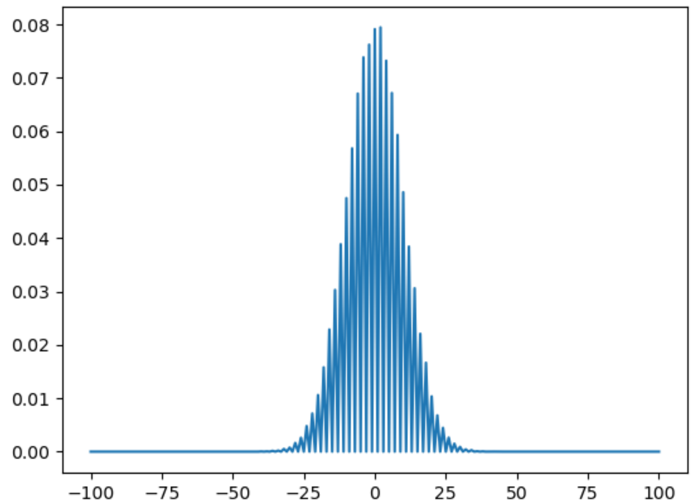

Figure 8: P(R) 与 R 关系图

通过改变 N 值，得到不同 N 值下的随机行走：

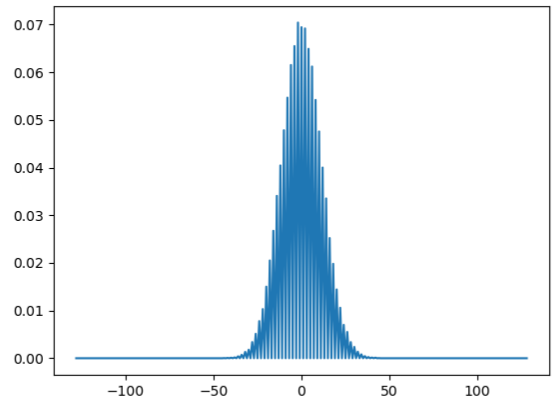

Figure 9: N=128

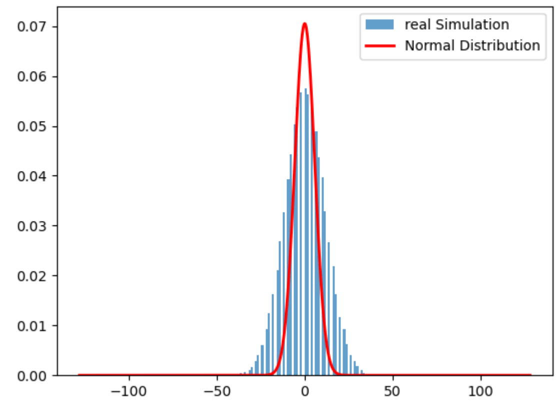

Figure 10: N=128

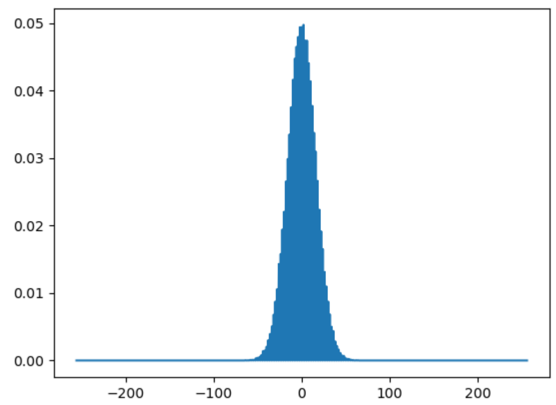

Figure 11: N=256

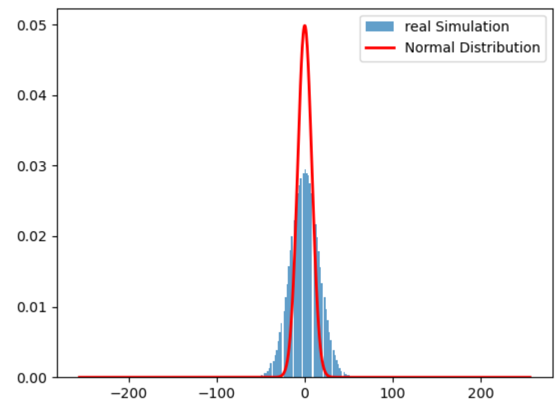

Figure 12: N=256

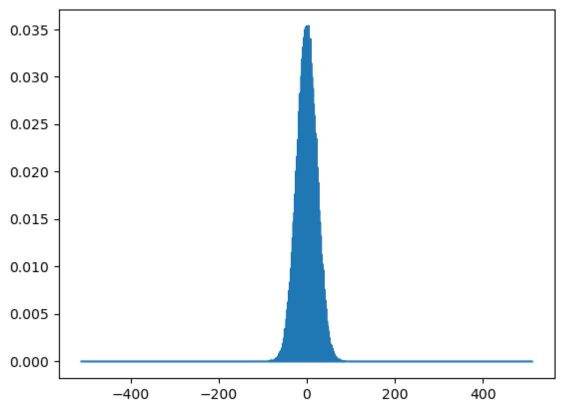

Figure 13: N=512

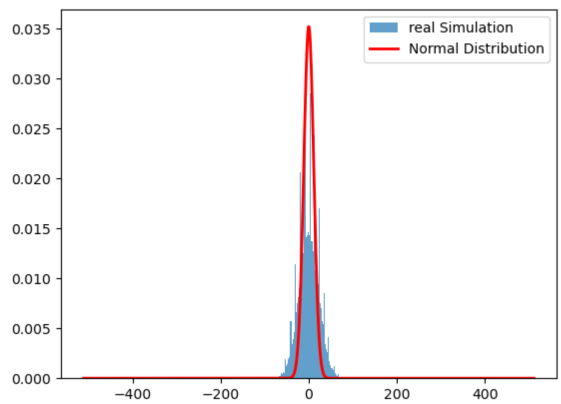

Figure 14: N=512

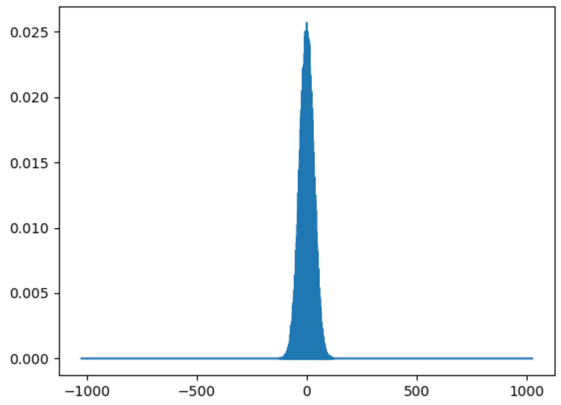

Figure 15: N=1024

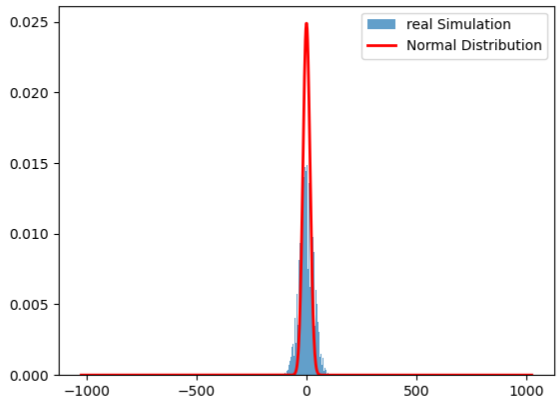

Figure 16: N=1024

能够观察到拟合效果较好，可以近似认为符合正太分布。

我们发现，在 N 值改变的过程中，P 的最大值式中在 $X = 0$ 处取得，在 $X = 25 and X = -25$ 附近 P 值会逐渐趋向于 0.

当改为向左频率为 0.7 的时候，我们可以得到如下分布：

N	16	32	64	128	256	512	1024
$<X_N>$	-41.395	-40.123	-41.371	-41.482	-39.739	-40.102	-40.234
$<\Delta X_N^2>$^0.5	41.979	41.234	41.645	41.986	40.145	41.428	41.728

Figure 17: 向左频率为 0.7 时的分布

观察以向左的概率为 0.7 得到的分布，可以看出平均位置是在-40 左右，均方差是在 40 左右。

4 Problem 4

4.1 问题回顾

二维随机行走：聚合物是由几个重复亚基（单体）组成的大分子。它们在我们的日常生活中发挥着重要作用，从生物过程到合成材料。在这里，我们模拟了线性和无支链的聚合物，它们浸泡在良好的溶剂中。

4.2 问题解答

分别采用 2D Sample Random Walk，2D Traditional Random Walk，2D Self-Avoiding Random Walk 来计算双端距离 $< R_e^2 >$ 和回旋半径 $< R_g^2$，并且绘制其对数值与步数的值的关系图，并对其进行线性拟合。

对于 2D Sample Random Walk：

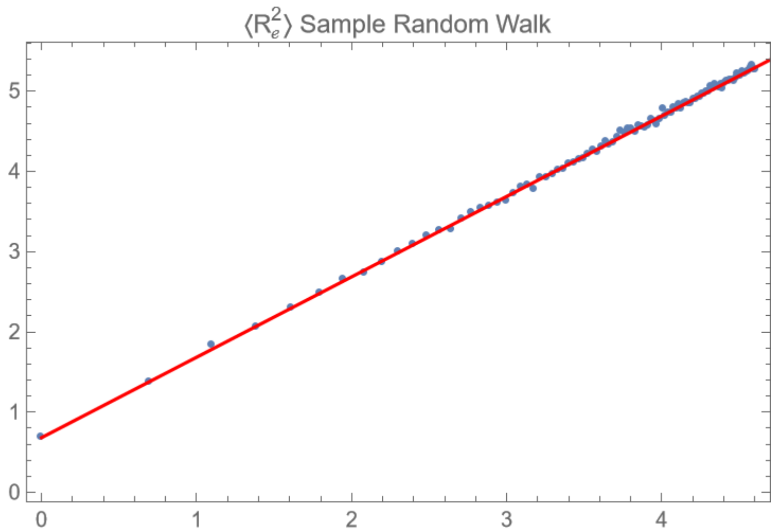

Figure 18: $< R_e^2 >$ 对数关系图

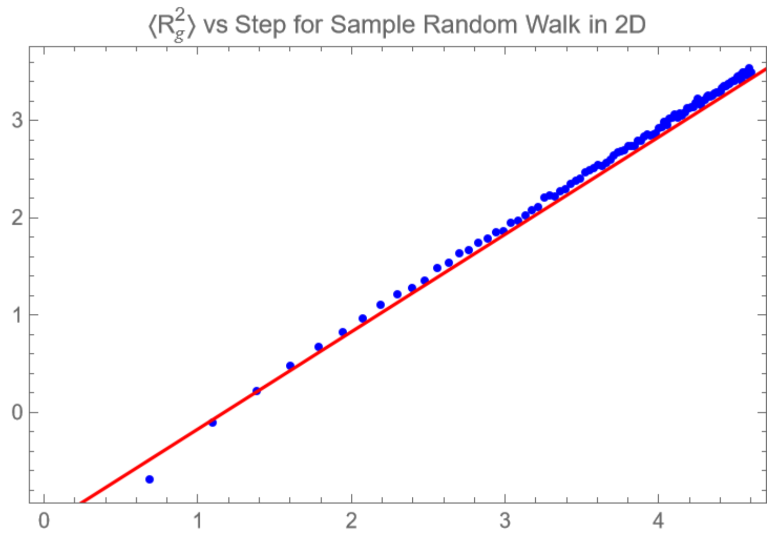

Figure 19: $< R_g^2 >$ 对数关系图

2D Traditional Random Walk：

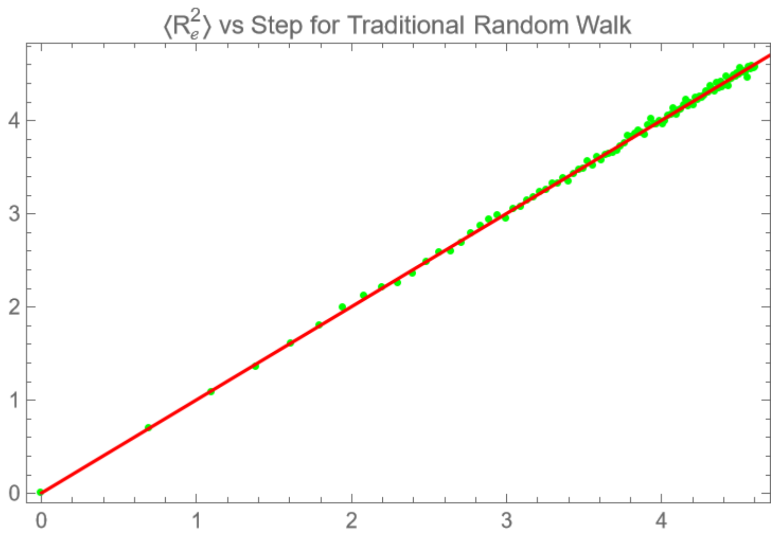

Figure 20: $< R_e^2 >$ 对数关系图

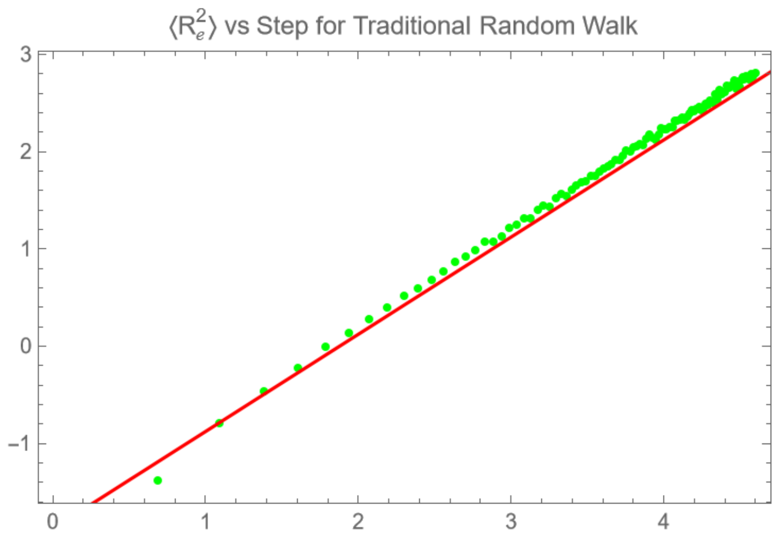

Figure 21: $< R_g^2 >$ 对数关系图

2D Self-Avoiding Random Walk：

Figure 22: $< R_e^2 >$ 对数关系图

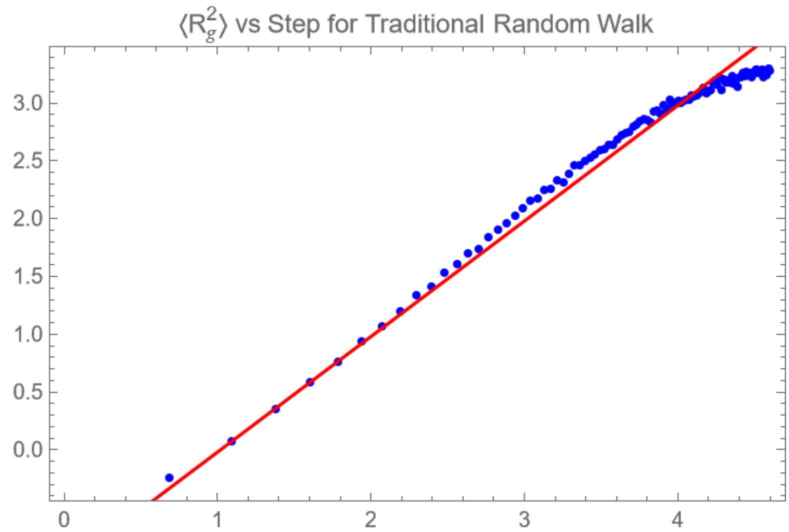

Figure 23: $< R_g^2 >$ 对数关系图

通过绘图与拟合我们发现自回避随机行走的线性拟合为：$y = 1.32x + 0.05$，对应得到 $\nu = 0.66$，与理论值 3/4 较为接近。

5 Problem 5

3D Random Walk 中的 Traditional 方法与 Problem 1 过程思路一致，此处不再冗余阐述。

对于 3D Self-Avoiding Random Walk ，同 Problem 4 处理，得到以下图像：

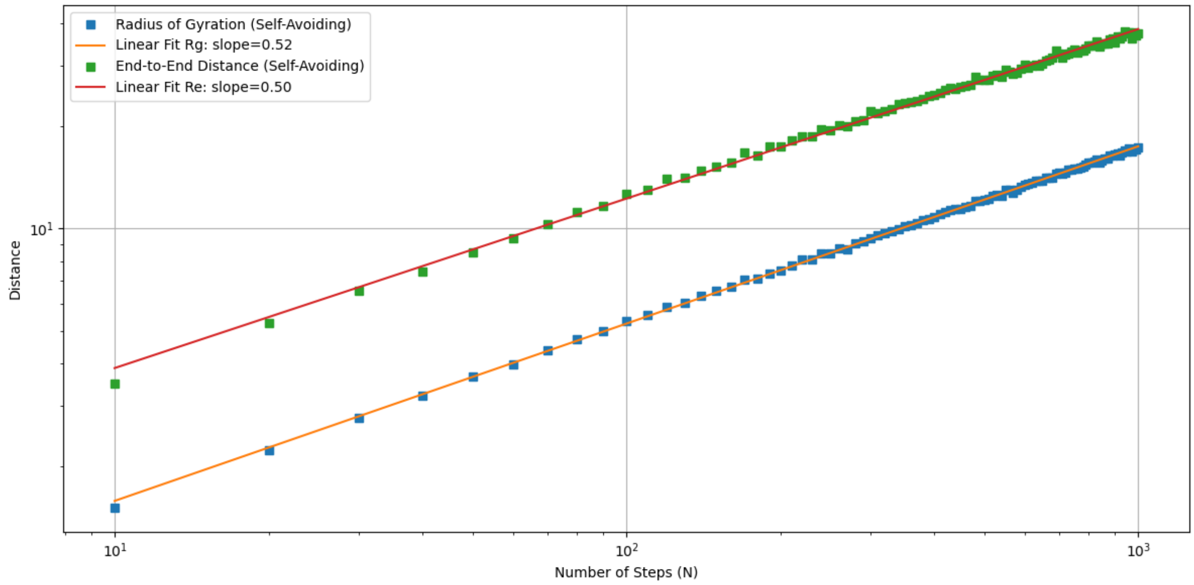

Figure 24: $< R_g^2 >$ 对数关系图

得到的斜率为 $\nu = 0.52$ 与理论值 0.6 较为接近！