Report10

> PB20020480 王润泽

1. Question

Monte Carlo 方法研究二维平面上荷电粒子在正弦外电场(~ sinωt)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

2. Algorithm

2.1 速度自相关函数

由于题目未给定电场方向，不妨假设电场沿着x方向，那么可以类比**Langevin方程**得到

$$\frac{dv_x}{dt} = -\frac{1}{\tau}v_x + A_x(t) + B\sin(\omega t) \tag{1}$$

$$\frac{dv_y}{dy} = -\frac{1}{\tau}v_y + A_y(t) \tag{2}$$

与讲义一致$\tau = \frac{m}{6\pi\eta a}$ ，$\mathbf{A}$代表了一种涨落力，满足

$$\langle \mathbf{A}(t) \rangle = 0$$
$$\langle \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{A}(0) \rangle = D\delta(t)$$

由（1）（2）式，解出微分方程

$$v_x(t) = v_x(0)e^{-t/\tau} + e^{-t/\tau}\int_0^t e^{t'/\tau}\left[A_x(t') + B\sin\left(\omega t'\right)\right]dt'$$

$$v_y(t) = v_y(0)e^{-t/\tau} + e^{-t/\tau}\int_0^t e^{t'/\tau}A_y(t')dt'$$

以下公式默认 $\langle \mathbf{r} \rangle = \langle \mathbf{v} \rangle = 0$

由于是二维平面，所以距离平方的期望是

$$\left\langle \mathbf{r}^2(t) \right\rangle = 4Dt$$

这样根据定义，二维速度自相关函数为

$$C(t) = \frac{1}{2}\langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle = \frac{1}{2}\langle v_x(t)v_x(0) \rangle + \frac{1}{2}\langle v_y(t)v_y(0) \rangle$$

$$\langle v_x(t)v_x(0) \rangle = \left\langle v_x^2(0) \right\rangle e^{-t/\tau} + e^{-t/\tau}\int_0^t e^{t'/\tau}\left[\left\langle v_x(0)A_x(t') \right\rangle + \left\langle v_x(0)B\sin\left(\omega t'\right) \right\rangle\right]dt'$$

$$\langle v_y(t)v_y(0) \rangle = \left\langle v_y^2(0) \right\rangle e^{-t/\tau} + e^{-t/\tau}\int_0^t \left[e^{t'/\tau}\left\langle v_y(0)A_y(t') \right\rangle\right]dt'$$

很显然，$\mathbf{A}$作为随机力，与速度 $\mathbf{v}$无关，同时 $\langle A \rangle = 0$

所以可以推导出二维速度自相关函数的表达式为：

$$
\begin{aligned}
C(t) &= \frac{1}{2}\langle v_x(t)v_x(0)\rangle + \frac{1}{2}\langle v_y(t)v_y(0)\rangle \\
&= \frac{1}{2}(\left\langle v_x^2(0)\right\rangle + \left\langle v_y^2(0)\right\rangle)e^{-t/\tau} \\
&= \frac{\left\langle \mathbf{v}^2(0)\right\rangle}{2}e^{-t/\tau}
\end{aligned} \tag{3}
$$

注：$v_x(0)$与$v_y(0)$在初态应该属于相同的均匀分布

速度自相关系数的变化符合e指数衰减，与外界作用力本身无关。

2.2 模拟验证的算法

2.2.1数值公式

为了验证理论的可靠性，得用数值计算模拟出粒子速度随时间的方程 $\mathbf{v}(t)$

仍然根据（1）（2）所得的**Langevin方程**

$$
\frac{dv_x}{dt} = -\frac{1}{\tau}v_x + A_x(t) + B\sin(\omega t)
$$

$$
\frac{dv_y}{dy} = -\frac{1}{\tau}v_y + A_y(t)
$$

为了计算微分方程，采取**微分近似为差分**的思想，采用 **Euler-梯形公式** 得，其中时间间隔 $h = t_{n+1} - t_n$

$$
v_{x,n+1} = v_{x,n} + h\left[-\frac{1}{\tau}v_{x,n} + A_x(t_n) + B\sin(\omega t_n)\right] \tag{4}
$$

$$
v_{y,n+1} = v_{y,n} + h\left[-\frac{1}{\tau}v_{y,n} + A_x(t_n)\right] \tag{5}
$$

得到 数值方程解：

$$
v_{x,n+1} = (-\frac{h}{\tau} + 1)v_{x,n} + h\left[A_x(t_n) + B\sin(\omega t_n)\right] \tag{6}
$$

$$
v_{y,n+1} = (-\frac{h}{\tau} + 1)v_{y,n} + h\left[A_y(t_n)\right] \tag{7}
$$

2.2.2 参数选择

1. 对于$\tau = \frac{m}{6\pi\eta a} = \frac{mD}{kT}$，由于不知道粘滞阻力等具体数值，编程中设置为5，保证粒子的一定随机性，而不至于导致速度快速减小到0附近，只有电场的周期震荡。

$$
\tau = 5
$$

2. 对于指数衰减来说，总时间取$T = 10\tau$较为合适，此时指数已衰减到很小
3. 对于布朗运动来说，无论时间间隔h取的多么小，都不会影响整体运动轨迹，不妨为了方便采样取

$$
h = \tau/1000
$$

4. 对于电磁场周期频率，为了让实验符合正常观察情况，至少应该确保在**总时间T**内有多个个周期的电磁场作用力被观测到，取

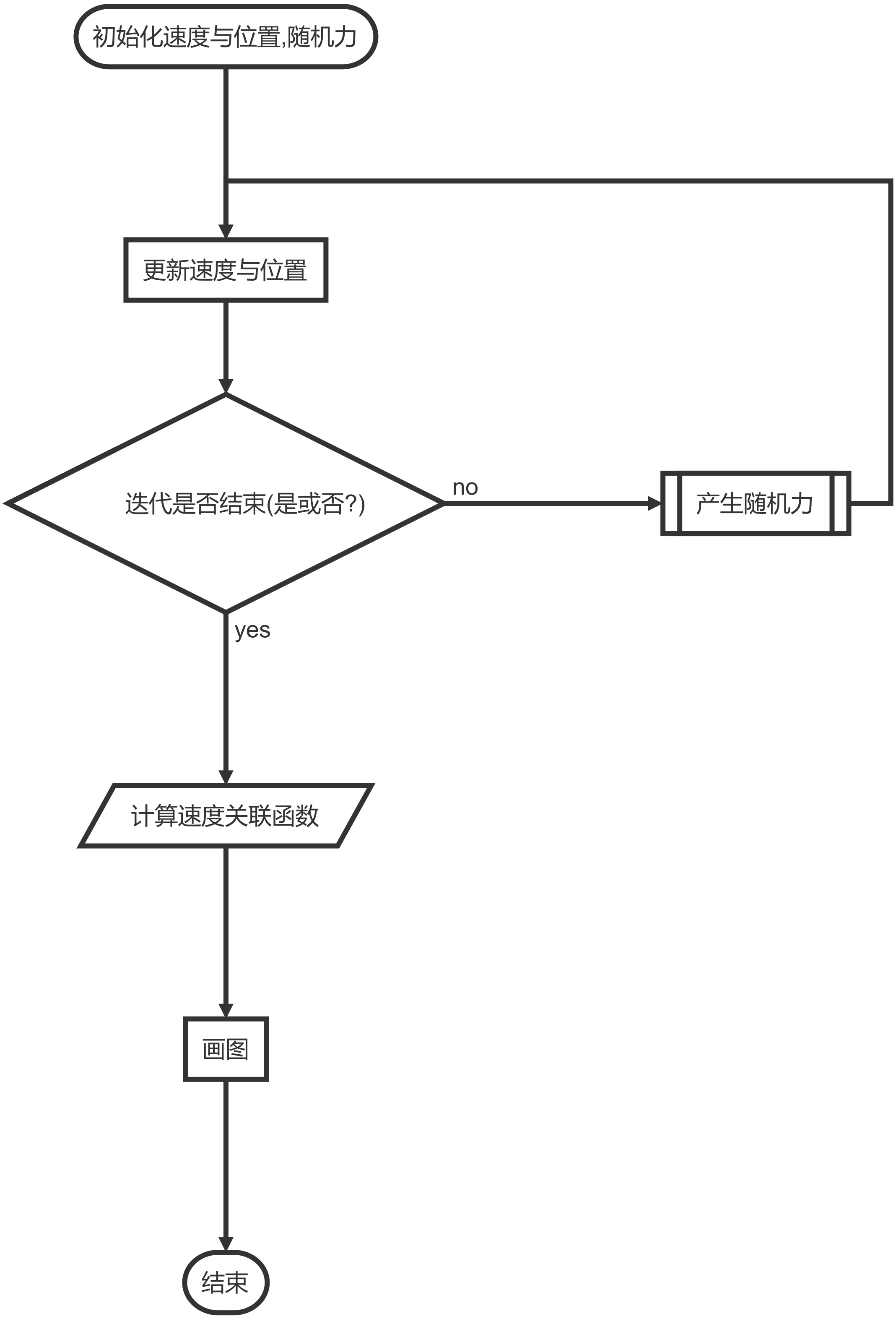
$$
\omega = 2\pi
$$

5. 为了保证结果的准确性，在数值计算平均值式，应当取以在相同时刻t取100次，以平均作为检验统计量来表示 $\langle \mathbf{v}(t)\cdot\mathbf{v}(0)\rangle$

6. 在实际情况中，一般**随机力应该小于电磁作用力**，故我选择以下表达式 $B = 20A$，然而由于统计检验精度有限，对于 $\mathbf{v}(0) \in [-1,1]$内，$< \mathbf{v}(0) > \approx 0.01$，故选择作用力时大小范围应当合适，所以有

$$A_{max} = 0.05$$
$$B\sin(wt) = \sin(2\pi t)$$

2.2.3 流程图



3. Experiment

3.1粒子随机游走图像

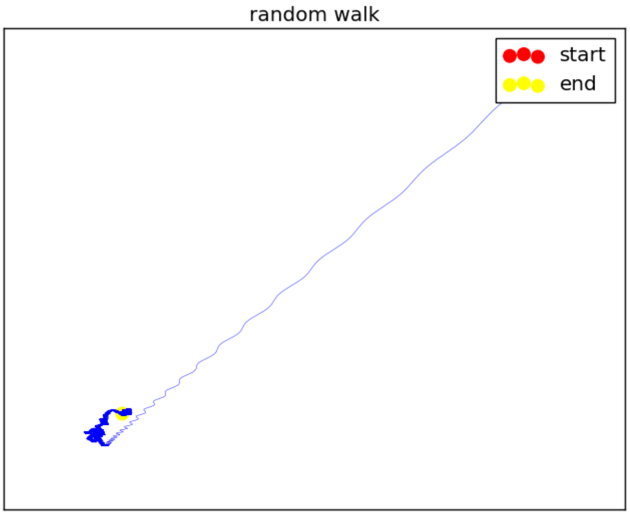


图1：在强电场中粒子随机游走

得到如上图像

解释：一开始速度比较大，而随机力比较小，所以随机游走不明显，呈直线行走状态，但是随着时间增长，由于阻力的效果导致粒子做衰减的简谐振动，同时Y方向仍然有一定的随机性。

3.2 速度相关函数

按照之前的推导得到的(3)式，为理论的速度相关系数

$$C_1(t) = \frac{\left\langle \mathbf{v}^2(0) \right\rangle}{2} e^{-t/\tau} \tag{8}$$

实验模拟所得速度相关函数，采用速度相关系数的定义式

$$C_2(t) = \frac{1}{2}\langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle = \frac{1}{2}\langle v_x(t) v_x(0) \rangle + \frac{1}{2}\langle v_y(t) v_y(0) \rangle \tag{9}$$

实验与理论比较得下图

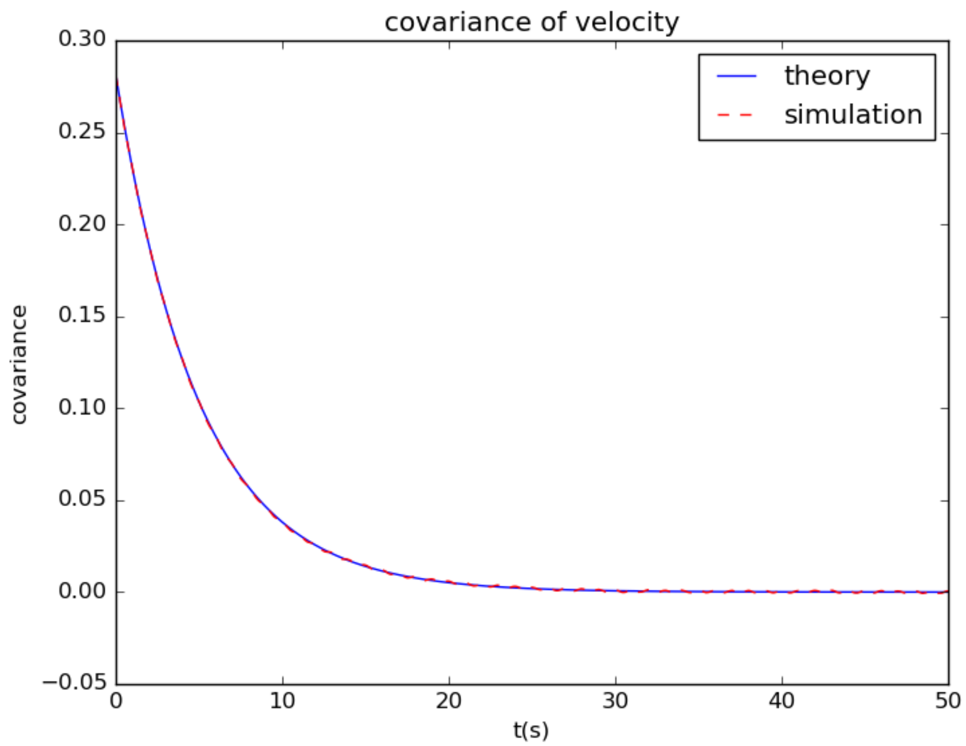


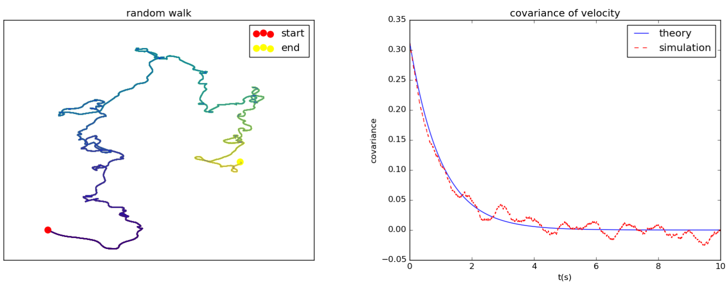
图2：在强电场中，速度相关系数理论与模拟图像

图中尾处有一定的波动情况，这是由于初始速度平均值$<\mathbf{v}(0)>$并不精准为0导致的。但在误差涨落允许范围内可以看到，图像的整体趋势实验模拟与理论吻合较好，即速度自相关函数确实为

3.3 调整随机力大小和粘滞阻力

加大粘滞阻力与随机力

$$\tau = 1$$
$$A_{max} = 10$$
$$B\sin(wt) = \sin(2\pi t)$$



由图像可见，当加大随机力后，图像更加接近随机游走，局部有微笑的振动；而由于粘滞阻力的作用，粒子相关系数仍然会逐渐收敛到0，但由于实验模拟精度有限，右图像末端会有一些涨落，但整体趋势仍然符合理论。

4. Summary

实验模拟外加周期力的情况下粒子的随机行走现象。

实验可见当外加电场相对大小较大的时候，并且粒子有向着初始方向漂移的趋势。直到因为粘滞阻力效果，粒子最终在某处沿x方向来回周期运动，但在y方向，仍然保持一定的随机性。

在外加电场相对大小较小的情况下粒子主要体现随机运动，在局部有微小的振动。

无论是较小的电场还是较大的电场，随机运动模型下粒子的自相关函数和粒子所受的外力无关，粒子的自相关函数只取决于粒子所受的衰减力的大小。