计算物理第10-2题

PB18000039 徐祺云

一　作业题目

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

二　算法及主要公式

模型分析

在二维平面内考虑上述问题。首先建立合适的物理模型：近似认为有取向的布朗粒子在二维平面上是一个长宽为(l_x,l_y)的矩形，其中由等大小的均匀像素点填充。在二维平面建立极坐标系(r,θ)，其中r表征质心到原点的距离，θ表征此时该纳米棒的取向在x轴上的投影，假设初始时纳米棒在原点处，取向与x轴正方向平行。

对于一个粒子的Brown运动，我们可以列出运动方程：

$$m\ddot{x}=F_x-\alpha\dot{x}$$

对于上述模型，可以看作是一个矩形排布的(l_x,l_y)的像素点集合，对于边界上的每一个像素点，受到一个正态分布$N(0,\sigma^2)$的涨落力F；由是，对于其中的一条边界（有N个像素点），可以将每个点的涨落力叠加，合力的分布依然是服从正态分布$N(0,N\sigma^2)$，根据中心极限定理，其标准差与$\sqrt{N}$呈正比。因为$EX^2=\mu^2+\sigma^2$，故可以利用标准差估计力的大小，所以可以近似认为长宽边受到的力的大小之比与边长的平方根呈正比。

为了简化模型，这里做出几点假设：首先，在时间间隔足够短时，认为纳米棒处于准静态；当模拟取样点足够多时，可以用固定大小的力来代替正态分布的涨落力。

基于以上假设，下面推导(r,θ)的递推变化：

(1)设当前质心位置为(x,y)，在$t=\tau$时刻，纳米棒受到一个随机位置的、等效后的平均力F，大小正比于边界长l的平方根，准静态假设下，纳米棒在液体中受到的阻力$f=kvl=F$，因此可以简略得到$v=\dfrac{A}{k\sqrt{l}}$，l是受力的边界的长度，v与受力方向一致，不妨统一一个步长$\lambda=A\cdot\triangle t$，则在$\triangle t$时间内，质心平动距离$\triangle x(\triangle y)=\dfrac{\lambda}{k\sqrt{l}}$

(2)设当前角度为θ，考虑在$t=\tau$时刻后的$\triangle t$时间内的角位移$\triangle\theta$，在质心系中，纳米棒受涨落力力矩与阻力力矩，设转动角速度为w，则$M_F=FL$(L是力臂)，$M_f=\sum\limits_{l=l_x,l_y}\int_{-l/2}^{l/2}k\cdot wx\cdot xdx=\dfrac{kw}{6}(l_x^3+l_y^3)$，矩形刚体的转动惯量$I=\dfrac{1}{3}mw(l_x^2+l_y^2)$，小纳米棒认为质量很小，则由$M=Iw$得到$w=\dfrac{6FL}{k(l_x^3+l_y^3)}=\dfrac{6AL\sqrt{l}}{k(l_x^3+l_y^3)}$，所以$\triangle\theta=\dfrac{6\lambda\sqrt{l}}{k(l_x^3+l_y^3)}L$

计算方法

初始化纳米棒位置$(r,\theta)=(0,0)$，取一系列时间点，随机生成一系列表征涨落力特征的随机数序列：(ξ_1,ξ_2,ξ_3)：

ξ_1在$[0,1]$中随机生成，表示力作用在长边还是短边上，若$\xi_1\in[0,l_x/(l_x+l_y)]$则为$l_x$边，否则作用在$l_y$边；$\xi_2$在$[0,1]$中随机生成，表示力的方向，规定$\xi_2\in[0,1/2]$表示负方向，即力向左(x负半轴)/下(y负半轴)，否则力向右/上；ξ_3在$[-l_x/2,l_x/2]$或$[-l_y/2,l_y/2]$中取，表示力作用的位置来计算力矩。

注：上述所说方向“上下左右”是指开始时纳米棒l_x取向与x轴平行时，“上下左右”的四条边界，此后纳米棒有旋转，但此时这里讲的“上下左右”依然指初始时刻“上下左右”各自对应的边。防止引起误会特此说明。

假设$t = \tau$时刻，纳米棒状态为(x, y, θ)，此时随机得到的涨落力参数为(ξ_1, ξ_2, ξ_3)，根据假设可以计算出质心移动的距离$\triangle r$，通过ξ_1, ξ_2的取值可以判断质心平动的方向，例如当力作用于“左”面时，纳米棒向着其“右”正方向前进，则

$$x+ = \triangle r \cos\theta$$

$$y+ = \triangle r \sin\theta$$

当力作用于“下”面时，纳米棒向着其“上”正方向前进，则

$$x+ = \triangle r(-\sin\theta)$$

$$y+ = \triangle r \cos\theta$$

三　计算结果与分析

(1)先研究各个参数对随机行走结果的影响，取N=10000：

取纳米棒尺寸为(3×2)，步长$\lambda = 0.1$，粘滞系数$k = 1$(种子值为21025990)，绘制质心坐标变化图、角度取向图如下(注意到图2有断点，是因为θ转角超过了$[-\pi, \pi]$时应当使其回到范围内)：

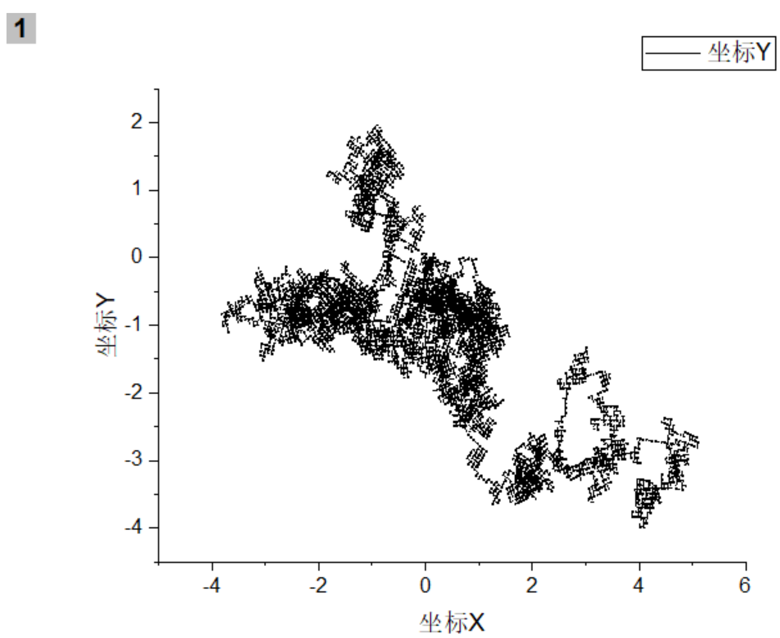

图 1: 质心位置变化图

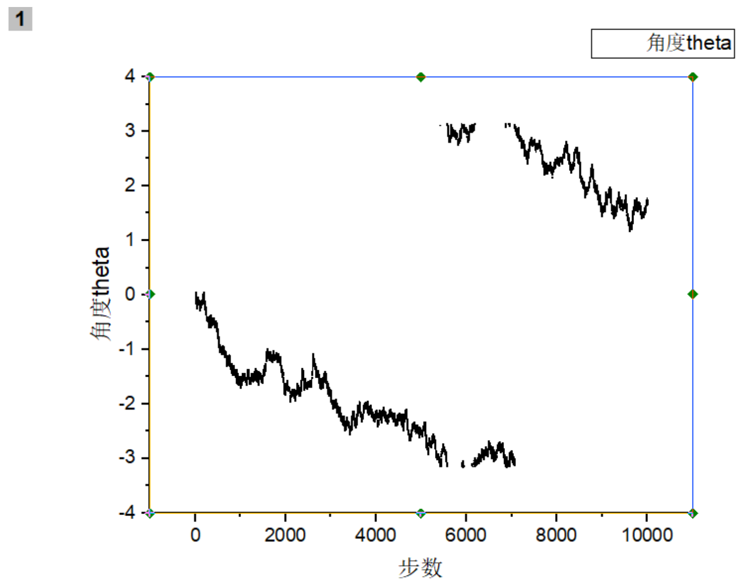

图 2: 角度变化图

可见取步长0.1时，纳米棒随机行走的范围在10×6的矩阵内，其长宽比与纳米棒的长宽比近似相等；对于纳米棒取向角度，波动范围在一个周期2π内，说明粘滞力对其阻力比较可观。

下面研究粘滞系数对结果的影响：

改变粘滞系数为$k = 0.1$，其他取值不变，得到质心坐标变化图、角度取向图如下(种子值为1884891070)：

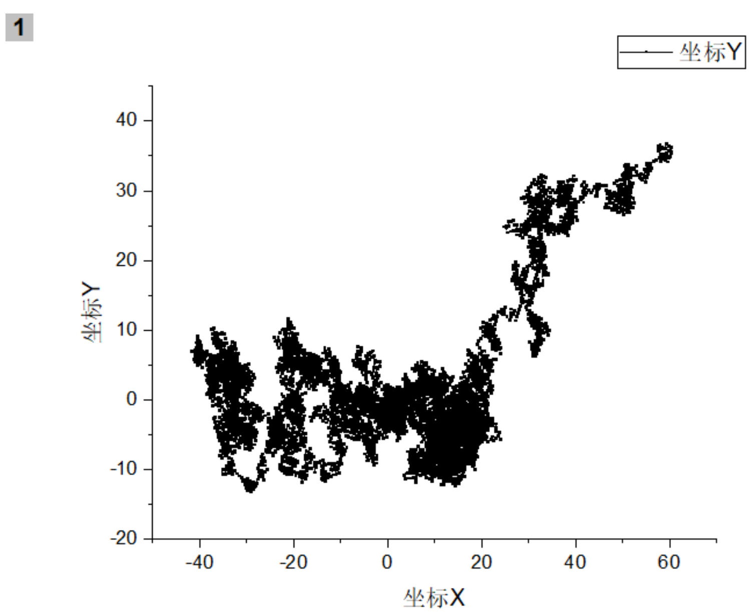

图 3: 质心位置变化图

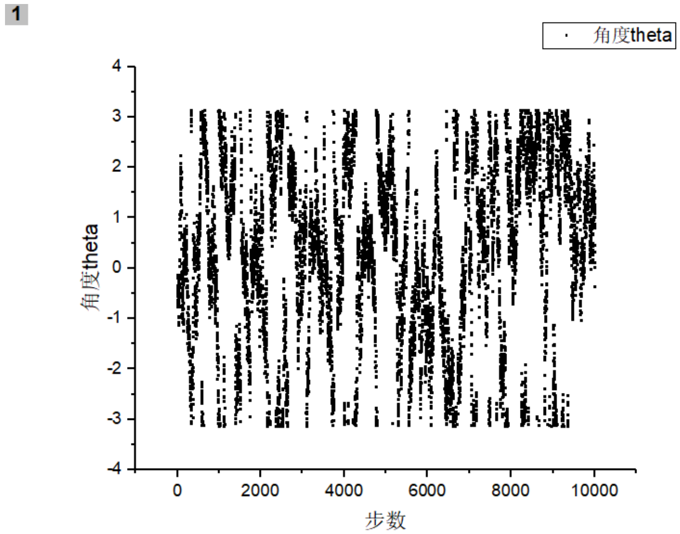

图 4: 角度变化图

我们发现，粘滞系数越小，纳米棒随机行走的范围越大，角度的变化也越快，这是符合预期的：粘滞系数的大小反映了液体对纳米棒的阻力大小，粘滞系数越小，粘滞阻力越小，纳米棒的随机行走收到的束缚就越小，表现出来的坐标移动范围大，转角变化快。

下面再研究纳米棒大小对结果的影响：

改变纳米棒的大小，如取纳米棒尺寸为(16×9)，步长$\lambda = 0.1$，粘滞系数$k = 1$(种子值为1838175310)，绘制质心坐标变化图、角度取向图如下：

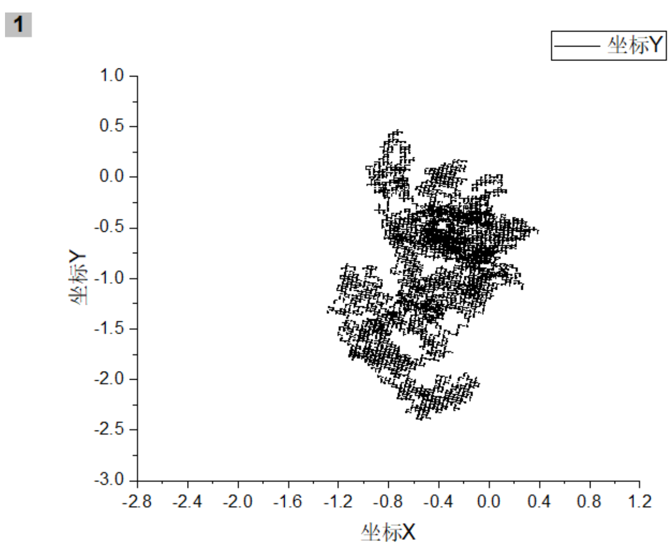

图 5: 质心位置变化图

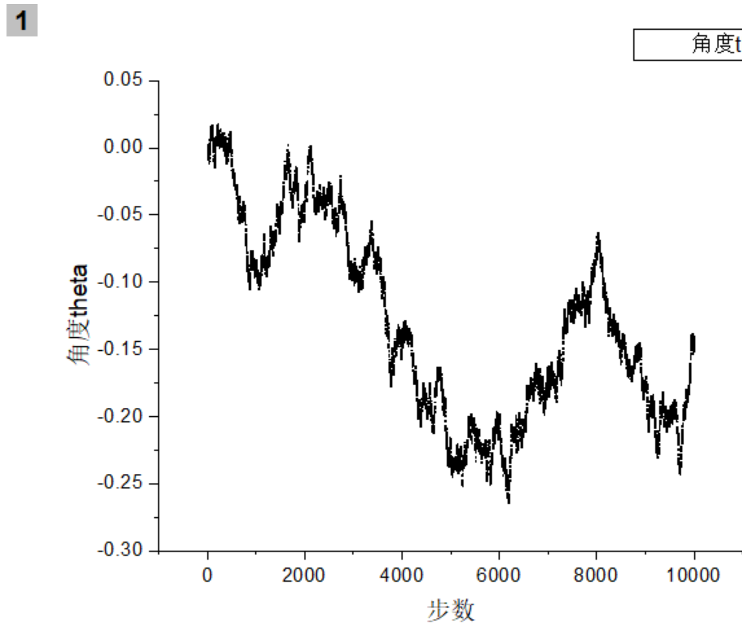

图 6: 角度变化图

可明显看出，控制其他变量不变的情况下，改变纳米棒的大小，纳米棒尺寸越大，其质心坐标变化越小，角度变化越小、稳定性提高，这是符合预期的：纳米棒尺寸大小反映了其惯性大小，我们在原理部分定义了步长$\lambda = A\triangle t$，A是涨落力平均值的一个度量，故纳米棒越大，惯性越大，步长不变的情况下越难改变纳米棒的位矢、角度，表现在图上即为分布更加稳定。

(2)计算取向的自关联函数：$C(t) = \langle u_x(t)u_x(0)\rangle$.

注意到，其中初始时纳米棒取向为x轴正方向，故取向的自关联系数等于当前取向角度的余弦值的平均值。

取N=500000，纳米棒的参数3×2，步长$\lambda = 0.1$，粘滞系数$k = 1$，运行$main.c$产生数据，然后运行$calcu.c$计算取向的自关联函数，得到如下图像(种子值为141434950)：

.

.

.

.

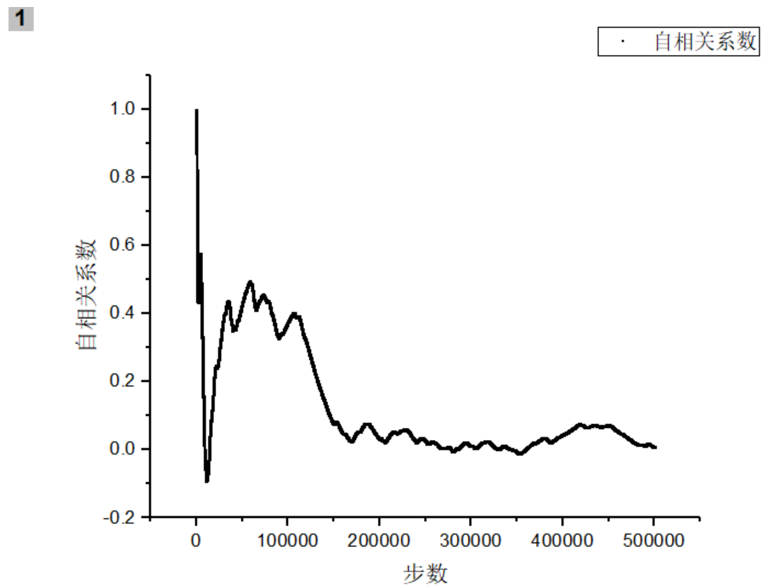

图 7: 自相关系数与步数关系

可见，随着步数的增大，自相关函数由1衰减到0，虽然一开始波动较大，有明显的大幅度震荡，但最后趋于0处，关于0作小幅度上下震荡。

下面探究纳米棒大小对自相关函数的影响，这里取纳米棒尺寸参数分别为：$2\times1, 8\times4, 32\times20$，粘滞系数$k=0.5$，其他参数同上，可以得到图像如下：

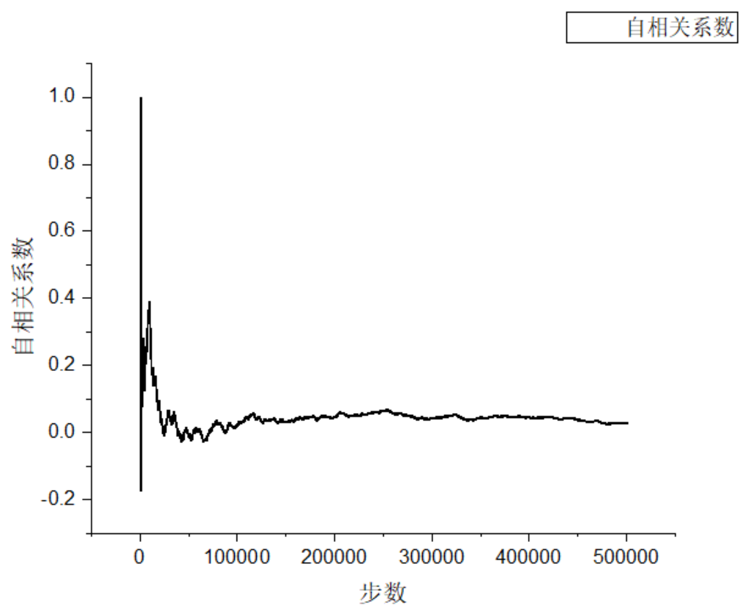

图 8: 自相关函数与步数关系(2×1),种子1191966670

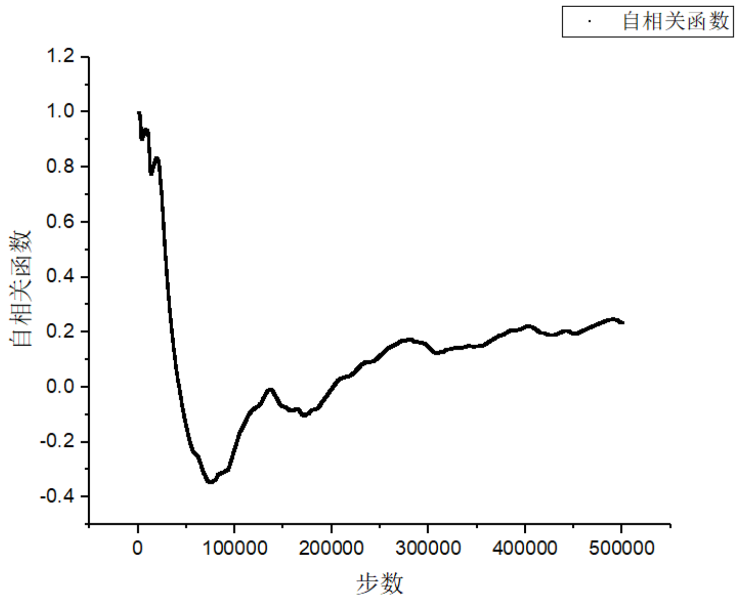

图 9: 自相关函数与步数关系(8×4),种子1699277950

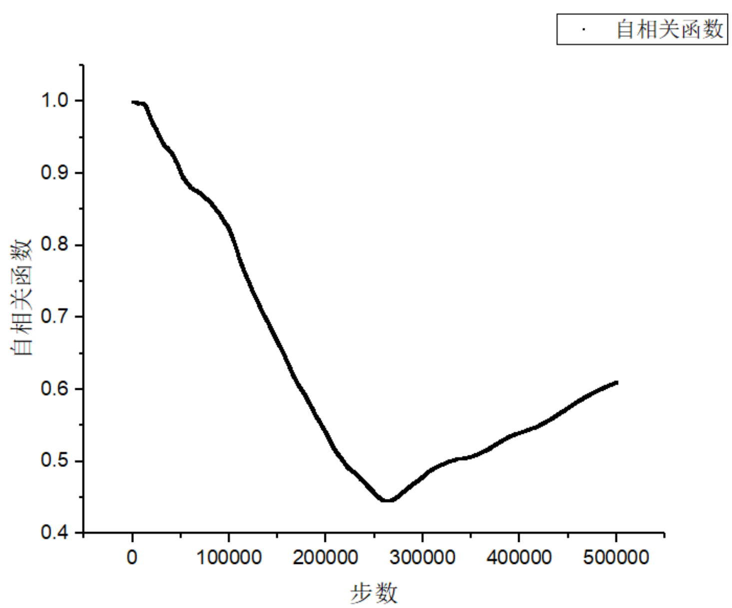

图 10: 自相关函数与步数关系(32×20),种子 500839030

可见，纳米棒越大，自相关函数衰减速度越慢，在500000步范围内，2×1迅速衰减到0，围绕0作小幅度波动；8×4的纳米棒的自相关函数图像有一个较大的起伏，在500000步时自相关函数在0.2左右；而32×20的自相关系数衰减很慢，在500000步时才有第一个低峰回涨，约在0.6左右，可以预测的是，当N充分大时，后两种情况应和第一种情况一样，衰减到0作小幅度波动。

另外，从纳米棒尺度考虑，物体尺寸越大，自相关函数衰减越慢，即布朗运动对纳米棒取向改变的影响就越小，这是在预期之内的：尺寸越大的物体惯性越大，保持现有取向状态的能力越强。

四　结论

本次实验模拟了二位平面上纳米棒的随机游走，建立了矩形化的物理模型，并做了一系列的简化假设，模拟了不同参数下质心平动轨迹、纳米棒取向角的变化图。

模拟发现，液体粘滞系数越大，阻力越大，纳米棒的随机行走收到的束缚就越大，平动坐标范围、取向角度范围也就越小；而纳米棒越大，纳米棒的惯性也越大，平动坐标范围、取向角度范围也就越小、稳定性提高。

最后模拟了不同尺寸纳米棒的自相关函数，发现该函数总体趋势是由1衰减到0，对应物理意义是取向由给定的初值衰减到失去取向；而纳米棒越大，保持初始取向的能力越大，衰减就越慢。

另外，为了方便计算，本模型采取了很多粗糙的近似，例如用固定大小的平均力代替随机涨落力，每个时刻的小时间段内近似平衡态来列受力方程等。可以做出的改进：用正态分布的涨落力而非平均力参与模拟。