# 计算物理 homework10

李明达 PB18020616[1]*

**摘要**

这是计算物理第 10 次作业，作业题目是研究有取向的布朗粒子（如纳米棒）的随机性走，计算取向的自相关函数；$C(t) = \langle u_x(t)u_x(0)\rangle$，其中 $u_x$ 是单位矢量在 x 轴的投影。

**关键词**

布朗运动，旋转运动，自相关函数

[1] 中国科学技术大学物理学院 * 作者：dslmd@mail.ustc.edu.cn

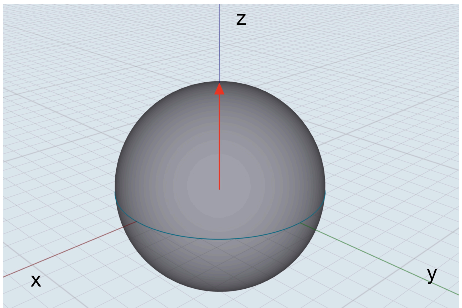


**图 1.** 初始布朗粒子的指向是红色箭头（注：箭头仅仅是指向，该布朗粒子可以是其他形状）

## 1. 原理和算法

### 1.1 对这个问题的假定

我们考虑一个有取向的布朗粒子，但为了方便讨论，我们假设布朗粒子的取向初始沿 z 轴，并且在我们讨论的时间尺度 (ms 量级) 里，这个粒子仅仅在球坐标方向 $\theta$ 转了小角度。如图 1 所示。

**注：我们这里的 $\theta$ 和 $\phi$ 都是指球坐标下的角度**

### 1.2 原理

由于涨落力是随机的，所以不论是对于平动还是对于转动，这个力的平均值都是 0.

我们不妨把平动和转动分开来看：

当有力 F 作用在粒子上的时候，对平动有

$$mx'' = F_x - \alpha x'$$

而在 $\theta$ 方向上对涨落力造成的力矩，我们同样可以做一个积分 $M = 2\int_0^{\frac{l}{2}} -\alpha r^2\theta'\frac{dr}{l}$ 可以得到

$$M = -\frac{\alpha l^2\theta'}{12}$$

所以对于我们讨论的问题，方程的形式应该是：

$$I\theta'' = M_\theta - \beta\theta'$$

但由于我们考虑 $\theta$ 小角度的近似，所以我们更关心的是 $\phi$ 方向粒子的运动。

上述的假设和论证，实际上是想说明由于我们假设布朗粒子在我们讨论的时间尺度 (ms 量级) 里，这个粒子仅仅转了小角度，所以实际上粒子的取向相当于一个二维平面的随机游走。所以相应的会有：$\sqrt{\langle\theta^2\rangle} \propto \sqrt{t}$ 我们会在后面的实验对这个进行检测。

所以我们接下来的重点是把这个假设下的结果论证模拟，为了保证小角度近似成立，我们取每次随机游走的步长是 $10^{-4}$，一共取 1000 次随机游走，每次随机游走假设为 1ms，我们考虑一共 1000ms 的结果。在求自相关函数的时候，我们一共进行 10 次这样的结果来取平均值。理论上如果该随机数是无记忆性的话，应该只有在 t=0 的时候是 1，之后都是 0.

### 1.3 算法

与前几次作业一样，我们仍然用 Schrage 随机数产生器，通过 Schrage_int(int seed) 输入一个种子值，即可输出一个对应整数，然后在后续的函数把这个整数变成 [0,1] 之间的随机数。然后我们通过 direction_sampling(int seed) 函数抽出小角度近似的取向随机行走，并记录 theta 和 phi 值，存储到"phi.txt" 和"theta.txt" 这两个文件里。

## 2. 实验结果和结果分析

**注意：我们这里的 $\theta$ 和 $\phi$ 都是指球坐标下的角度**

### 2.1 theta 的分布

我们测了 5 次 theta 的分布，每次 1000ms，每次共 1000 个数据（之所以比较小是因为保证小角度近似），把这个数据和 phi 的数据画在一起，如下

图 2-6 所示，可以看出 $\theta$ 的最大值不超过 0.005rad，并且通过观察这五幅图可以发现，$\theta$ 的分布普遍在 0.0015 左右，这说明小角度近似是成立的！所以我们的模拟是在符合我们假设的前提下进行的，是合理的！

### 2.2 phi 的分布

我们测了 5 次 theta 的分布，每次 1000ms，每次共 1000 个数据)，把这个数据和 phi 的数据画在一起，如下图 2-6 所示，可以看出 $\phi$ 的分布在 $[-\pi,\pi]$ 都有分布，并且在刚开始都波动比较厉害，最后会相对更稳定一些（当然也有不稳定的情况，比如第二次模拟的结果），这也符合随机游走的结果。

### 2.3 对 $\sqrt{\langle\theta^2\rangle} \propto \sqrt{t}$ 的检验

可以从图 7 看出，检验的结果告诉我们这个实验也是比较合理的。

### 2.4 取向的自相关函数

最后我们，模拟了 10 次取向随机行走，每次选取 1000ms，最后对这十次取平均来计算随机行走的自相关函数：$C(t) = \langle u_x(t)u_x(0)\rangle$，其中 $u_x$ 是单位矢量在 x 轴的投影。模拟的结果如下图 8 所示。可以看出，除了在 t=0 的时候关联度比较高，后面的关联度都在 0 左右比较小。

## 3. 总结

综上，在第一节我给出的假设下，这次的实验完美完成：我检测了 $\theta$ 和 $\phi$ 的分布，并且检验了 $\sqrt{\langle\theta^2\rangle} \propto \sqrt{t}$，这些模拟的实验结果都与假设吻合。最后，根据这个模拟，我给出取向自相关函数的数值结果，该结果反映自相关函数除了在 t=0 的时候关联度比较高，后面的关联度都在 0 左右比较小。

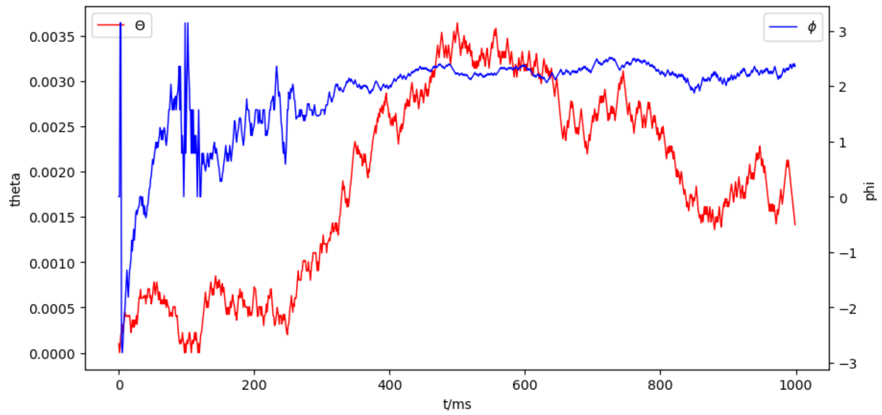


**图 2.** 第一次模拟的 theta 和 phi 的分布

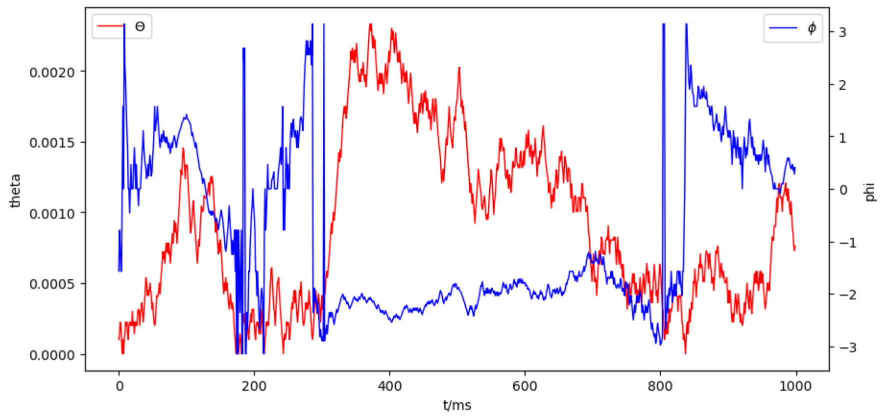


**图 3.** 第二次模拟的 theta 和 phi 的分布

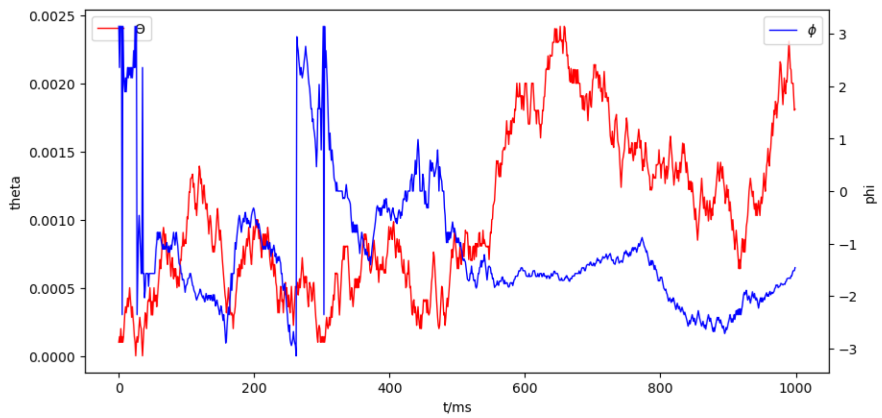


**图 4.** 第三次模拟的 theta 和 phi 的分布

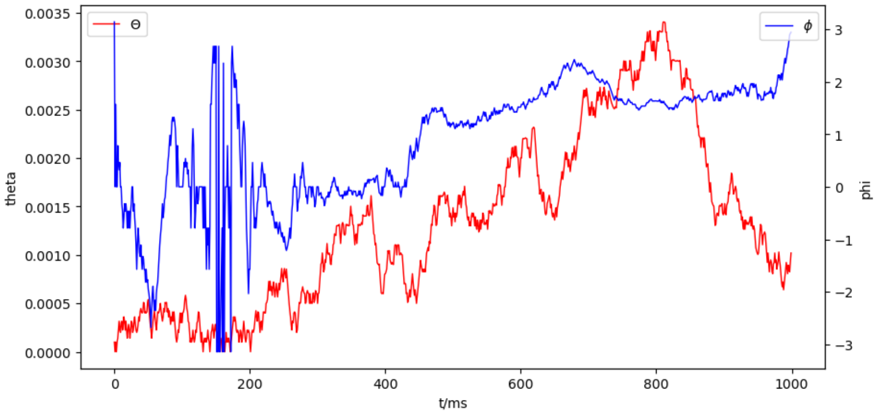


**图 5.** 第四次模拟的 theta 和 phi 的分布

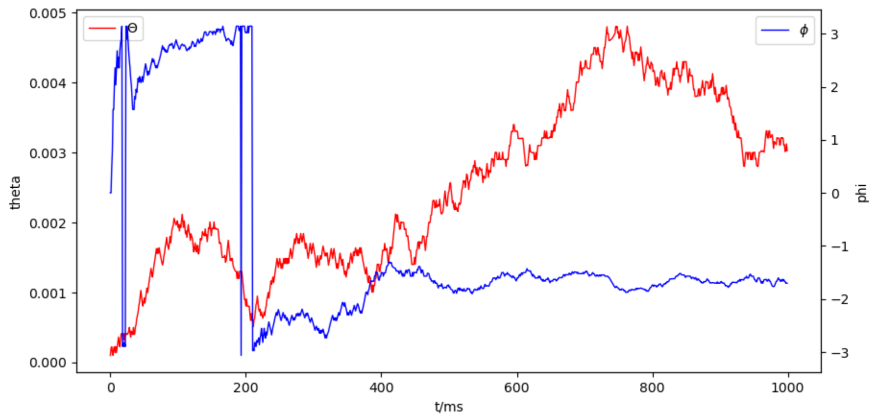


**图 6.** 第五次模拟的 theta 和 phi 的分布

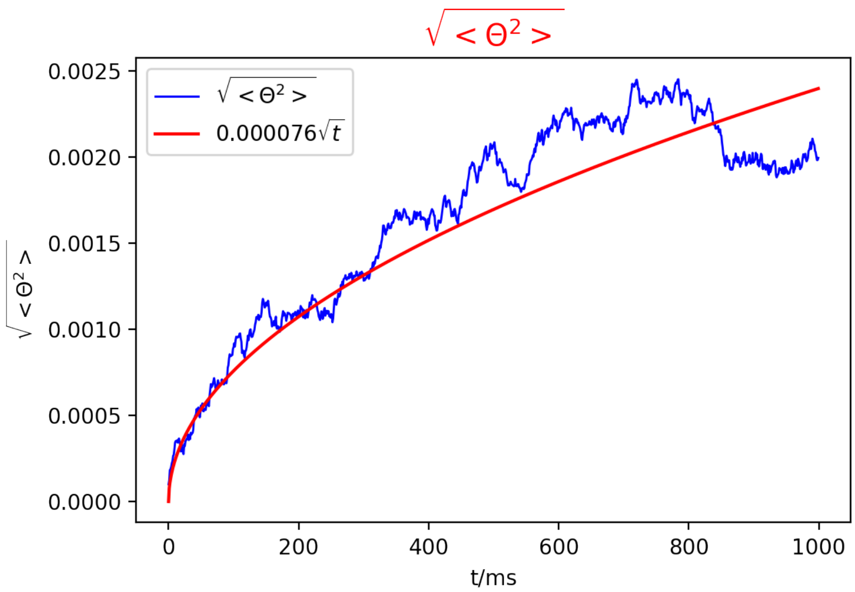


**图 7.** 对 $\sqrt{\langle\theta^2\rangle} \propto \sqrt{t}$ 的检验

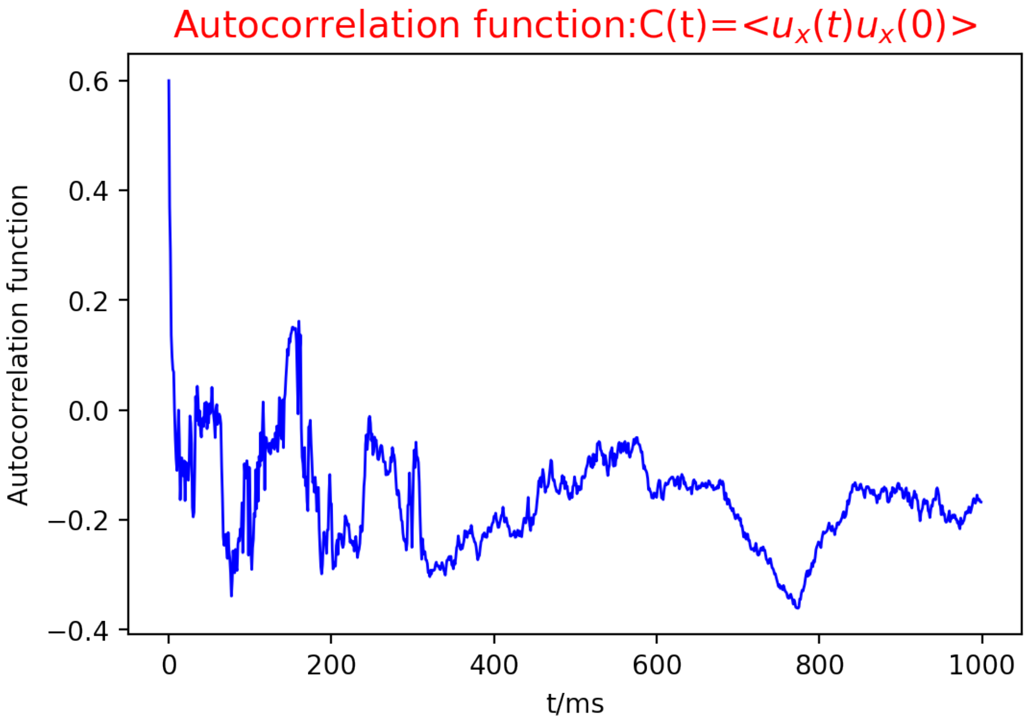


**图 8.** 取向的自相关函数 $C(t) = \langle u_x(t) u_x(0) \rangle$