

# 计算物理 homework10

李明达 PB18020616<sup>1</sup>\*

## 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

<sup>1</sup> 中国科学技术大学物理学院 \* 作者: dslmd@mail.ustc.edu.cn

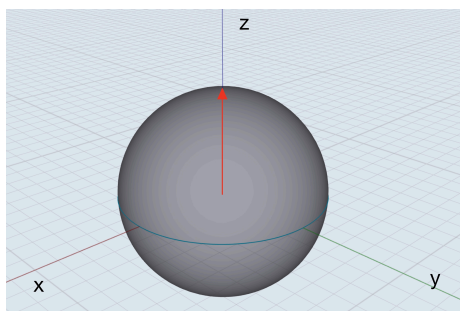


图 1. 初始布朗粒子的指向是红色箭头（注：箭头仅仅是指向，该布朗粒子可以是其他形状）

## 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，并且每步随机行走发生的时间约  $1\text{ms}$ ，所以在我们讨论的时间尺度 ( $1000\text{ms}$  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，所以不论是由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  $F$  作用在粒子上时，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  $M = 2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} -\alpha r^2 \theta' \frac{dr}{l}$  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  $1\text{ms}$ ，我们考虑一共  $1000\text{ms}$  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  $1000\text{ms}$ ，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。

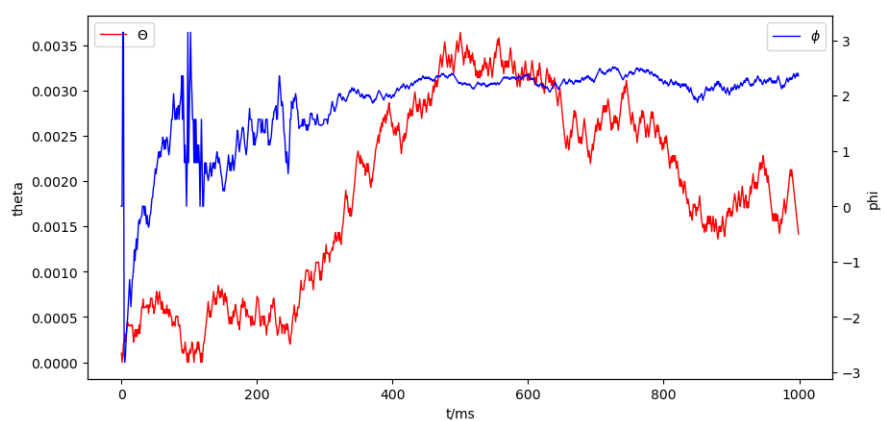


图 2. 第一次模拟的 theta 和 phi 的分布

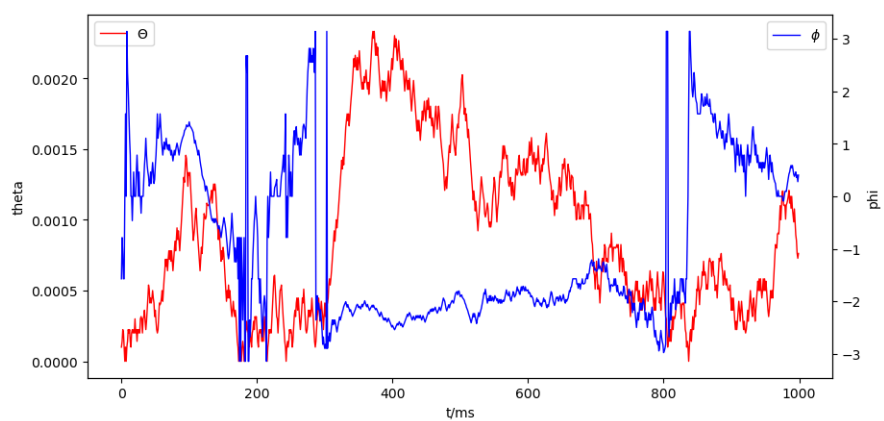


图 3. 第二次模拟的 theta 和 phi 的分布

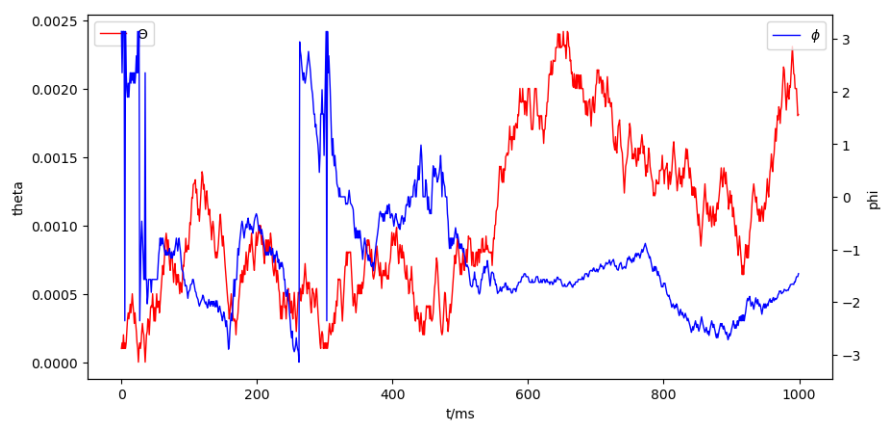


图 4. 第三次模拟的 theta 和 phi 的分布

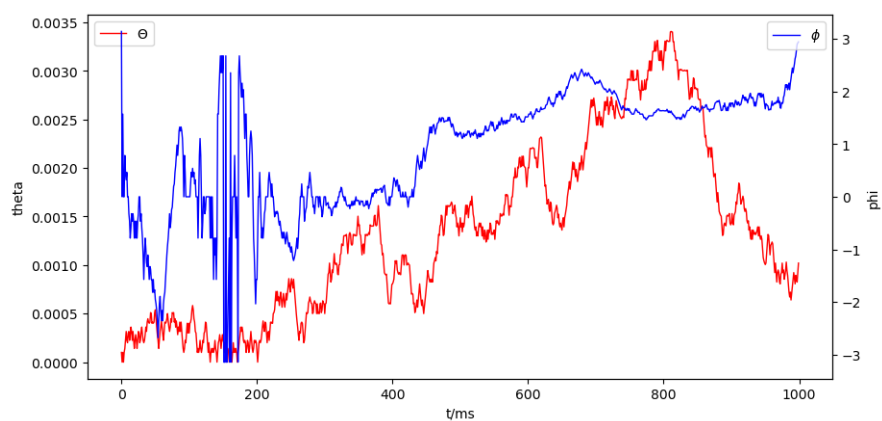


图 5. 第四次模拟的 theta 和 phi 的分布

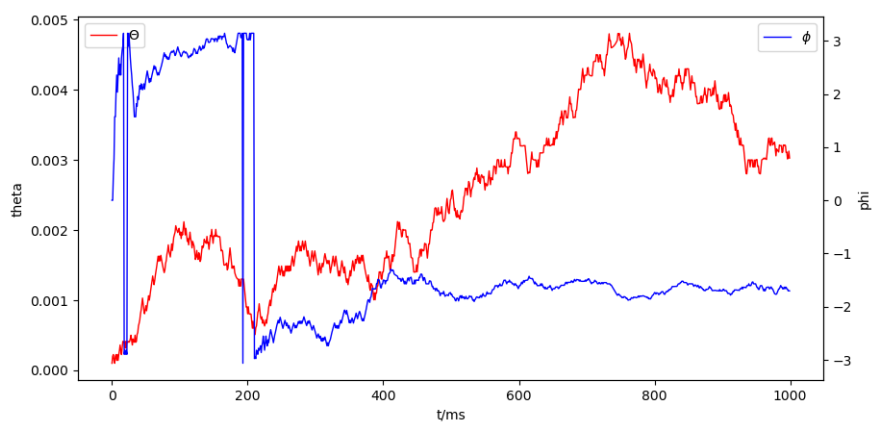


图 6. 第五次模拟的 theta 和 phi 的分布

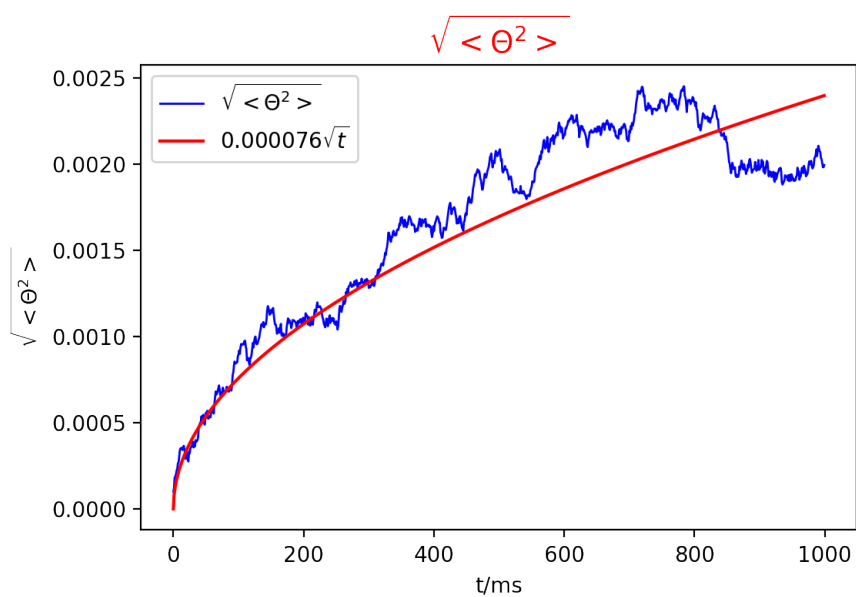


图 7. 对  $\sqrt{\langle \theta^2 \rangle} \propto \sqrt{t}$  的检验

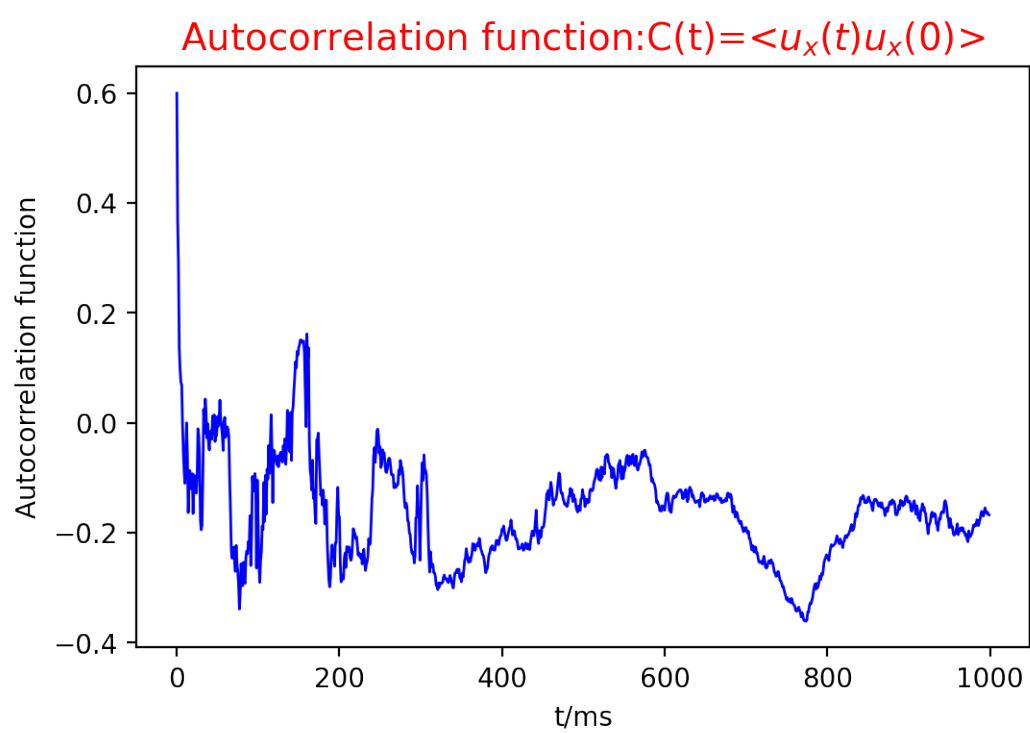


图 8. 取向的自相关函数  $C(t) = \langle u_x(t)u_x(0) \rangle$