

计算物理A作业10

吕邀 PB19030789

1.作业题目

Monte Carlo方法研究二维平面上电荷粒子在正弦外电场 ($\sim \sin \omega t$) 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.算法和主要公式

2.1 公式推导

我们先尝试考虑一维情况下粒子在正弦外场中的随机行走。

扩散方程

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - qE_0 \frac{\partial p}{\partial x} \sin \omega t$$

用Fourier变换法可以求出该方程的解为

$$p = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp \left(-\frac{(x - \frac{qE_0}{\omega}(1 - \cos \omega t))^2}{4Dt} \right)$$

可观测量位置的平均值 $\langle x \rangle = \frac{qE}{\omega}(1 - \cos \omega t)$ 。

如果没有正弦外场，则每一步向左和向右的概率均为 $p = q = 0.5$ 。加上外场后 p 不再是 0.5，而是外场的函数，可取

$$p = \frac{1}{2}(1 + A \sin \omega t)$$
$$q = 1 - p = \frac{1}{2}(1 - A \sin \omega t)$$

参数 $A \in [0, 1]$ 表示所加的正弦外场对随机行走的影响程度，由电场大小，粒子比荷等因素确定。

接下来回到本题中的二维平面。

根据题意我们考虑一个带电荷量为 q 的单位质量粒子在电场 $E_0 \sin \omega t$ 中的随机行走，为简单起见，我们让正弦电场始终加在 x 方向。Langevin 动力学方程为：

$$\begin{cases} \ddot{x} = -\frac{1}{B_1} \dot{x} + qE_0 \sin \omega t + F_x \\ \ddot{y} = -\frac{1}{B_2} \dot{y} + F_y \end{cases}$$

这种情况下， x 和 y 两个方向互不干扰， x 方向上就是我们刚才推导的正弦外场中的随机行走，而 y 方向则是正常的随机行走。

下面推导速度自相关函数，根据定义有

$$C(t) = \langle v_x(t) v_x(0) \rangle$$

由运动方程

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

可解得

$$v_x(t) = -\frac{1}{\omega^2 + \tau^{-2}}(\omega \cos \omega t - \frac{1}{\omega \tau} \sin \omega t) - \frac{C_1}{\tau} e^{-t/\tau}$$

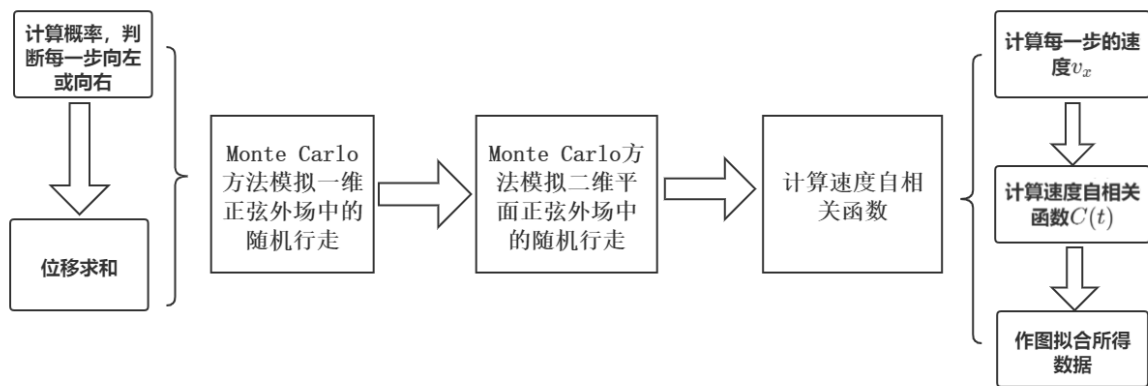
求系综平均后速度自相关函数仍然是呈指数衰减的形式

$$C(t) = C_2 \exp(-t/\tau)$$

选定一些参数后可以得到每个时间步数的自相关函数 $C(t)$ ，用Matlab拟合，与标准形式对比即可。

2.2 算法程序说明

我们整个实验的思路如下图所示：



其中一维情形我们在程序1Drandomwalk.c中实现。

二维情况我们在程序2Drandomwalk.c中实现。

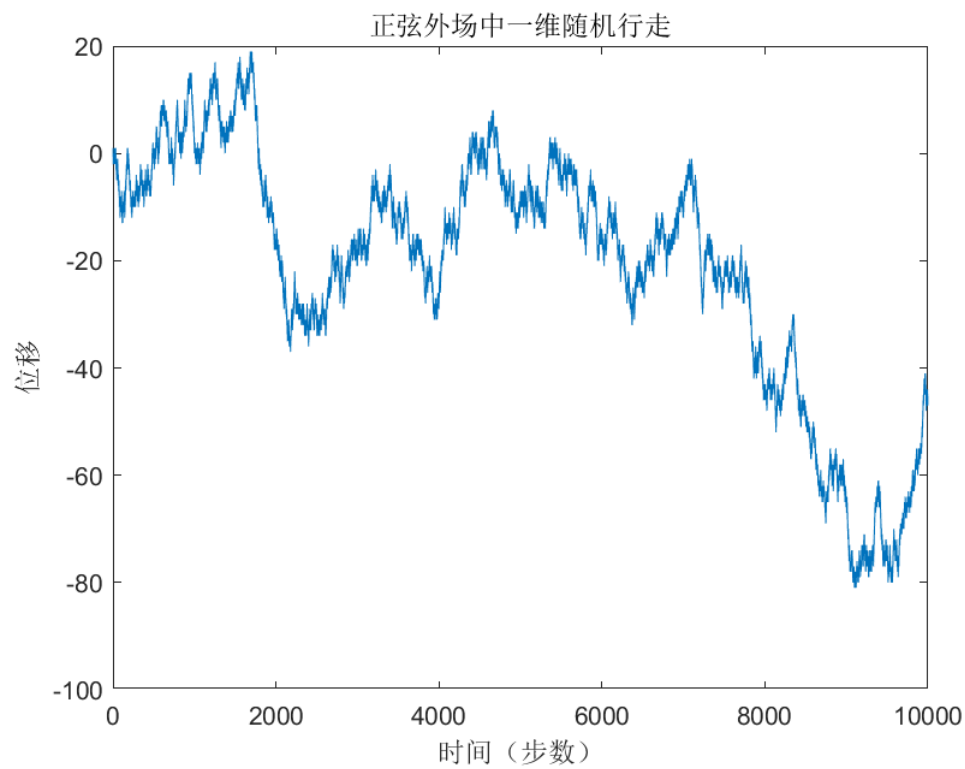
计算速度自相关函数我们在程序correlation.c中实现。

3. 计算结果及分析

3.1 正弦外场中一维随机行走

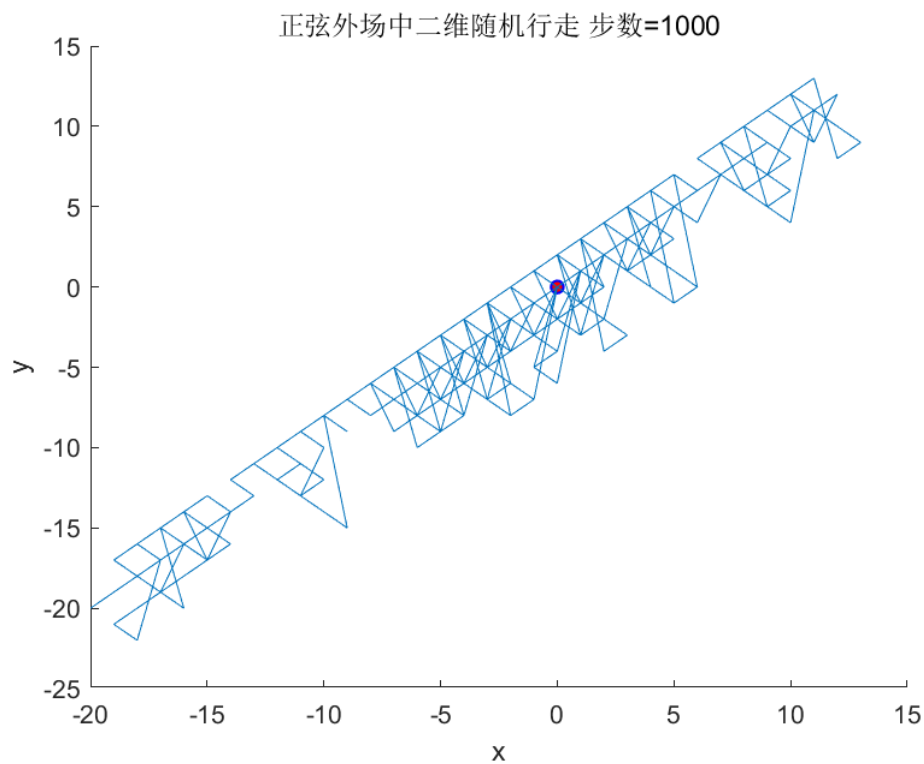
我们先模拟一下一维情形。相应参数取值为 $A = 1.0$ ， $\omega = \frac{\pi}{2}$ 。

下图为实验结果。可以看到位移随时间变化的曲线可以看作在周期性的受迫振动之上增加了涨落力的作用，这正是我们前面所推到的粒子随机行走的力学特征。



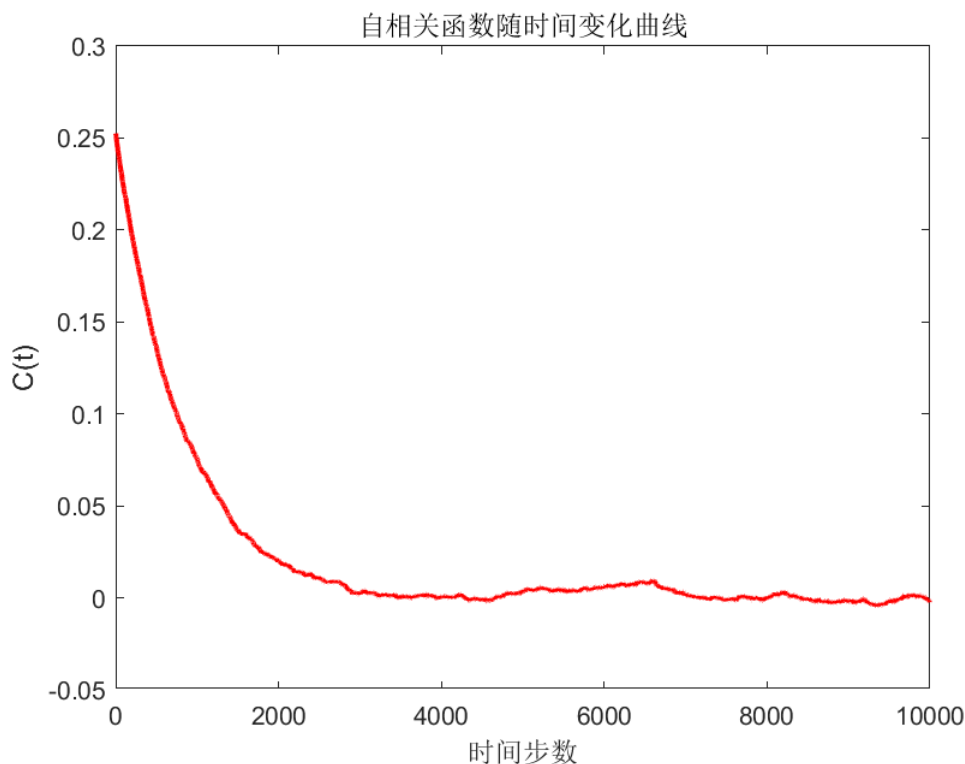
3.2 正弦外场中二维随机行走

实验中取步数=1000，相关参数 $A = 0.5$, $\omega = \frac{\pi}{2}$ 。



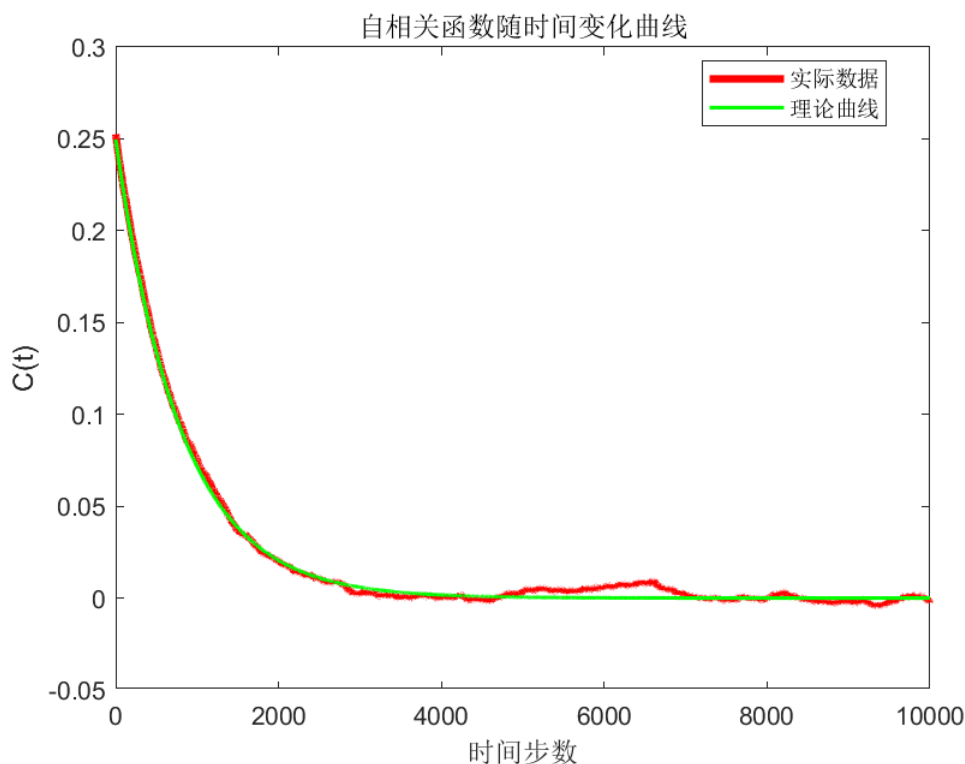
3.3 速度自相关函数

计算得到的自相关函数曲线如下图



可以看到自相关函数确实大致是呈一个指数衰减的趋势。

与理论曲线对比：



可见计算出的曲线与拟合所得曲线吻合的不错。

4.总结

- (1) 本题我们讨论了正弦外场作用下的随机行走，相当于正常的随机行走之上加了一个正弦震荡的趋势，有点类似于受迫振动。
- (2) 从概率角度考虑，正弦外场相当于在原有的概率之上加了一个影响因子 A ，使得不同方向的概率出现了差异，而且最后计算出的期望值也受正弦电场的影响。
- (3) 速度自相关函数反映了自发微观涨落的回归，一般当 $t \rightarrow \infty$ 时 $C(t) = 0$ 。