《非平衡统计物理》第二次作业

（作业提交截止时间：4 月 12 日 21:00）

说明：

1）文件名格式范例："第二次作业_19720182203306_程##.docx"

1. 有粒子处在非简谐势阱中,其哈密顿表示如下：

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{4}x^4$$

现放置该粒子于温度为 T 的热浴中作布朗运动。

1）写出刻画该粒子运动的郎之万方程；

2）写出对应的福克-普朗克方程，并推导出它的定态分布表达式；（推导过程可手写，再拍照贴到 word 文档中）。

3）利用自适应声子理论解析计算该系统的平均能量，并与精确解比较（可用 Mathematica 计算）。

4）采用分子动力学模拟（随机 RK2 算法）验算（3）的结果（可令耗散系数 $\gamma = 0.4$）。

解：

1）该粒子运动的郎之万方程应为：

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = v \\ m\dfrac{dv}{dt} = -\gamma v - x - x^3 + 2\gamma k_B T \xi(t) \end{cases} \tag{1}$$

其中郎之万力 $\xi(t)$ 为高斯噪声，满足以下条件：

$$\begin{cases} <\xi(t)>= 0 \\ <\xi(t_1)\xi(t_2)>= \delta(t_1 - t_2) \end{cases}$$

其中，γ 为粘滞力系数，k_B 为玻尔兹曼常数，T 为温度。

2）该粒子运动的福克-普朗克方程应为：

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt}=v \\ \dfrac{\partial P(x,v,t)}{\partial t}=-\dfrac{\partial}{\partial v}[(\dfrac{-\gamma v-x-x^3}{m})\cdot P(v,t)]+\dfrac{\partial^2}{\partial v^2}[\dfrac{2\gamma^2 {k_B}^2 T^2}{m^2}\cdot P(v,t)] \end{cases} \tag{2}$$

欲求定态分布解，则令 $\dfrac{\partial P(v,t)}{\partial t}=0$ 有：

$$\frac{\partial}{\partial v}\{[(\frac{-\gamma v-x-x^3}{m})\cdot P_s(v)]+\frac{\partial}{\partial v}[\frac{2\gamma^2 {k_B}^2 T^2}{m^2}\cdot P_s(v)]\}=\frac{\partial}{\partial v}J(v)=0$$

$P_s(v)$ 为定态分布，与时间 t 无关。

$J(v)$ 指系统的“概率流”，显然他应该是一个常数，由于其导数为 0。

又因为 $P_s(v)$ 是一个概率分布函数，所以当 $v\to\infty$，$P_s(v)$=0 。

故，$J(v)$=0 。定态求解变成求解以下方程：

$$(\frac{-\gamma v-x-x^3}{m})\cdot P_s(v)+\frac{\partial}{\partial v}[\frac{2\gamma^2 {k_B}^2 T^2}{m^2}\cdot P_s(v)]=0$$

令 $k_B=m=\gamma=1$，上式改写为：

$$\frac{\partial}{\partial v}P_s(v)+(\frac{-v-x-x^3}{2T^2\cdot})\cdot P_s(v)=0$$

为一阶线性齐次微分方程，其解为：

$$\begin{aligned} P_s(v) &= \mathrm{C}\cdot \mathrm{e}^{-\int(\frac{-v-x-x^3}{2T^2\cdot})dv} \\ &= \mathrm{C}\cdot \mathrm{e}^{(\frac{-\frac{v^2}{2}-x-x^3}{2T^2\cdot})} \end{aligned}$$

3）

没做出来这个小题。

4）

由“时间平均等于系综平均”出发，对（1）式利用欧拉法和 SRK2 算法结合进行模拟：微分方程使用龙格库塔算法，随机微分方程部分使用随机龙格库塔算法。

在松弛一段时间后，取模拟的时间平均作为估计值。欧拉法和 SRK2 算法与 PPT 给出的流程基本一致，这里不再赘述。

假定 $k_B = m = \gamma = 1$，模拟的时间为 100s，松弛时间为 20s。模拟的粒子能量平均值随温度 T 的变化规律如图 1 所示。

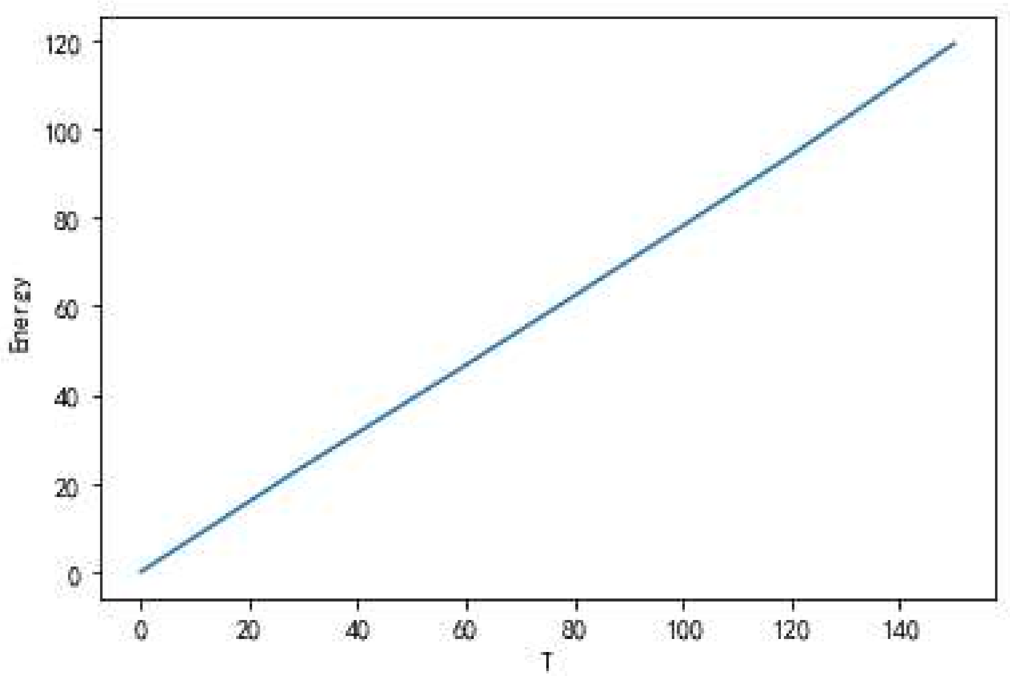

图 1 粒子能量平均值随温度 T 的变化规律

Code: https://github.com/Acpnohc/conputational_method_in_theory_physics/tree/main/hw7