计算方法

黄佳城 20420201151673

2021 年 05 月 05 日

Code:

https://github.com/Acpnohc/conputational_method_in_theory_physics/tree/main/hw10

问题 1：

数值模拟一个一维单位质量的布朗粒子的运动，设其初始位置为 $x_0 = 0$，初始速度为 $v^0 = 1$，其余参数 $\beta = k_B = T = 1$，积分步长 $h = 0.01$ 。画出其中一次模拟的 $x(t)$ ，$v(t)$ ；共进行 10^5 次模拟，画出 $< x(t) >$，$< v(t) >$，$\sigma_v^2(t)$ ，$\sigma_x^2(t)$ 及 $t = 100$ 时的速度概率分布函数。

解：

系统分析：

布朗粒子的郎之万方程应为：

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = v \\ m\dfrac{dv}{dt} = -\beta v + \xi(t) \end{cases} \tag{1}$$

其中随机力力 $\xi(t)$ 为满足以下条件的高斯分布：

$$\begin{cases} < \xi(t) >= 0 \\ < \xi(t_1)\xi(t_2) >= \dfrac{2\beta k_B T}{h} \end{cases}$$

也即随机力均值为 0，且前后不相关。

其中，β 为粘滞力系数，k_B 为玻尔兹曼常数，T 为温度，m 为布朗粒子的质量，根据题目要求均取 1。

数值离散：

（欧拉法）离散化后的离散方程应为：

$$\begin{cases}\Delta x = v \cdot \Delta t \\ \Delta v = [-\beta v + \xi(t)] \cdot \Delta t\end{cases} \tag{2}$$

（二阶随机龙格库塔算法）离散化后的离散方程应为：

$$\begin{cases}F^{x}{}_{1} = v_{t-1} \\ F^{x}{}_{2} = v_{t-1} + (F^{v}{}_{1} + \xi(t)) \cdot \Delta t \\ F^{v}{}_{1} = -\beta v_{t-1} \\ F^{v}{}_{2} = -\beta [v_{t-1} + (F^{v}{}_{1} + \xi(t)) \cdot \Delta t] \\ x_{t+1} = x_{t-1} + \dfrac{(F^{x}{}_{1} + F^{x}{}_{2})}{2} \Delta t \\ v_{t+1} = x_{t-1} + [\dfrac{(F^{v}{}_{1} + F^{v}{}_{2})}{2} + \xi(t)] \cdot \Delta t\end{cases} \tag{3}$$

数值模拟结果：

欧拉法模拟 100s，结果如图 1-2：

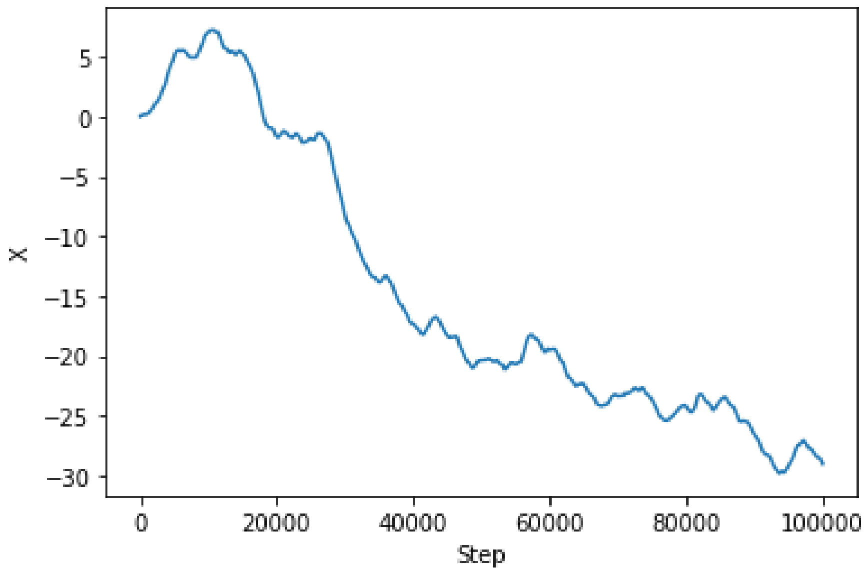

图 1 欧拉法模拟 100s，布朗粒子位置的变化

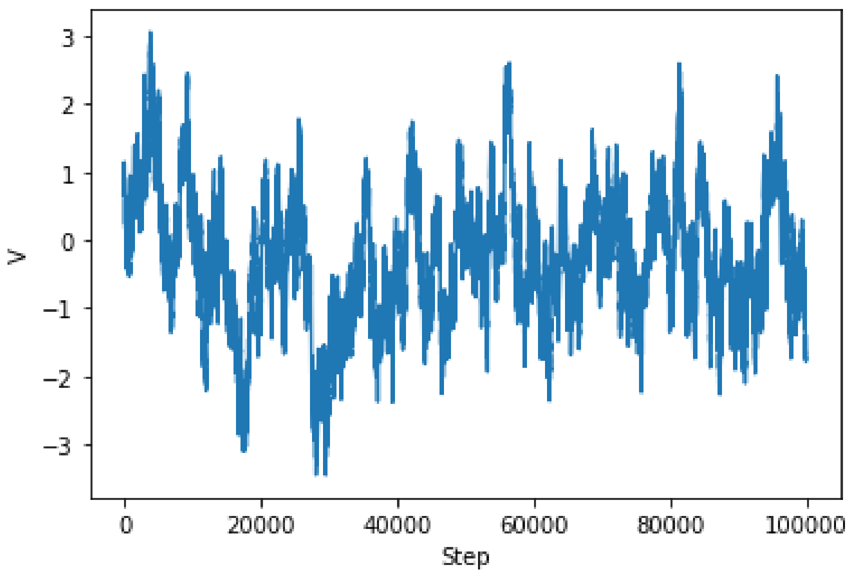

图 2 欧拉法模拟 100s，布朗粒子速度的变化

二阶随机龙格库塔算法模拟 100 秒，结果如图 3-4：

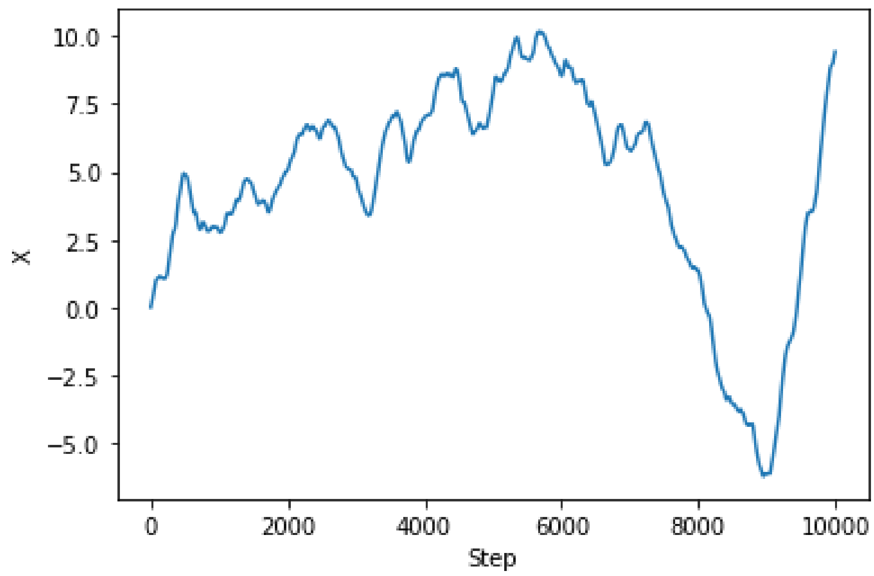

图 3 SRK2 模拟 100s，布朗粒子位置的变化

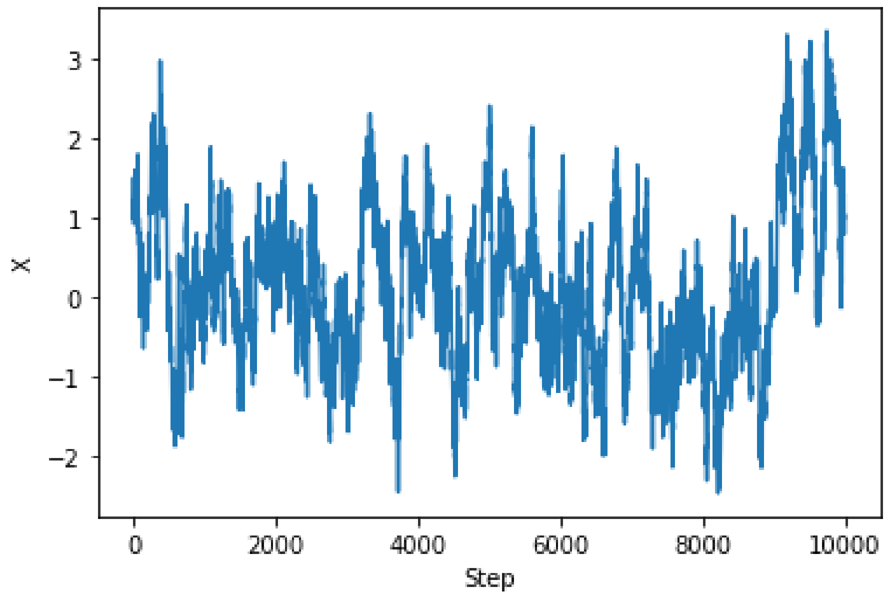

图 4 SRK2 模拟 100s，布朗粒子速度的变化

$<x(t)>$, $<v(t)>$, $\sigma_v^2(t)$ ， $\sigma_x^2(t)$ 及 $t=100$ 时的速度概率分布函数采用二阶随机龙格库算法的结果计算，结果如图 5-9 所示：

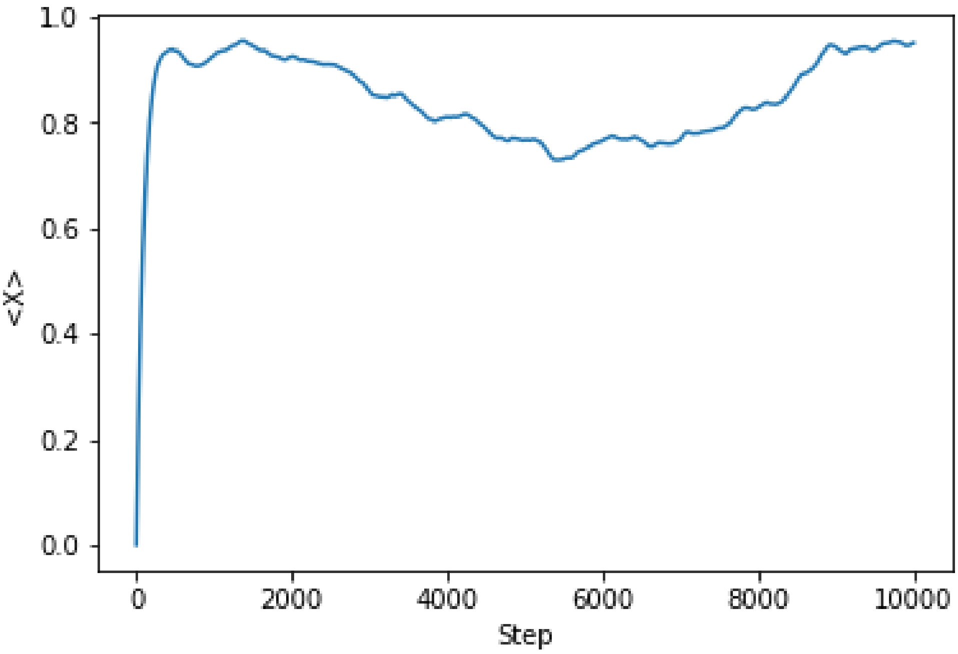

图 5 SRK2 模拟 100s，布朗粒子位置平均值的变化

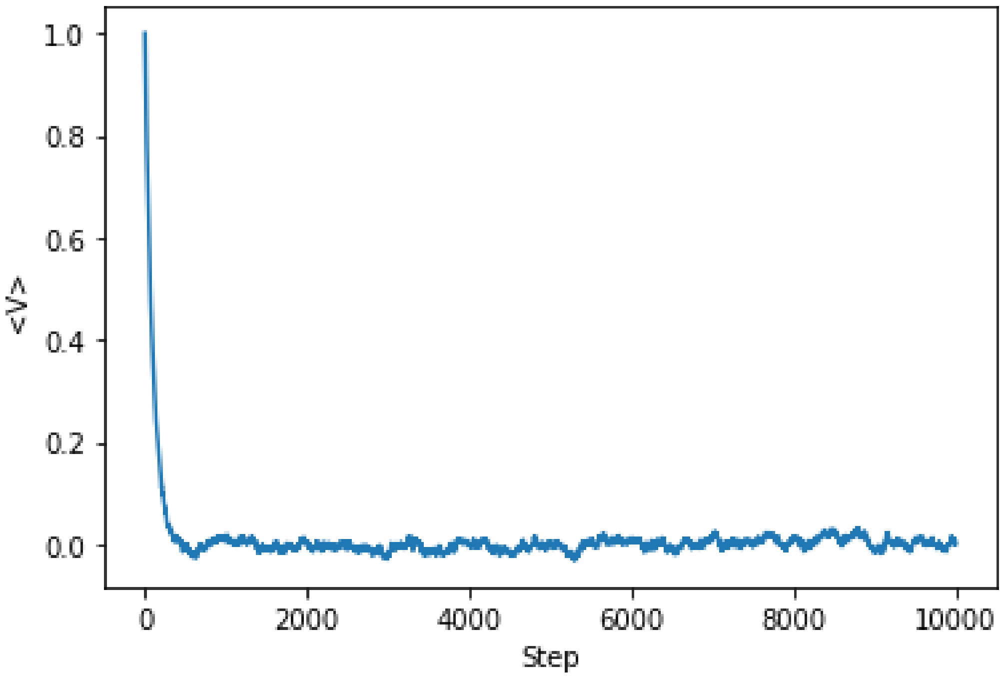

图 6 SRK2 模拟 100s，布朗粒子速度平均值的变化

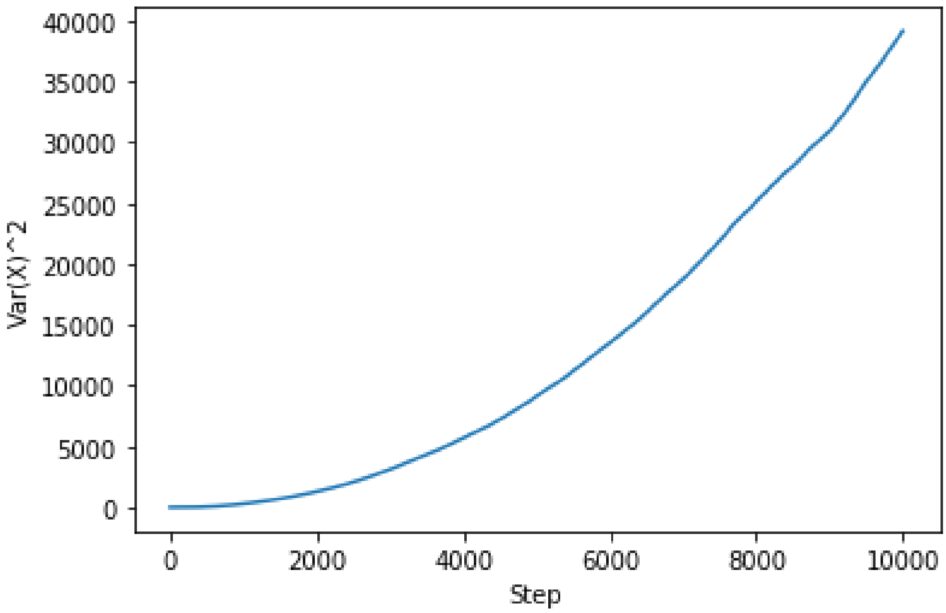

图 7 SRK2 模拟 100s，布朗粒子位置标准差的变化

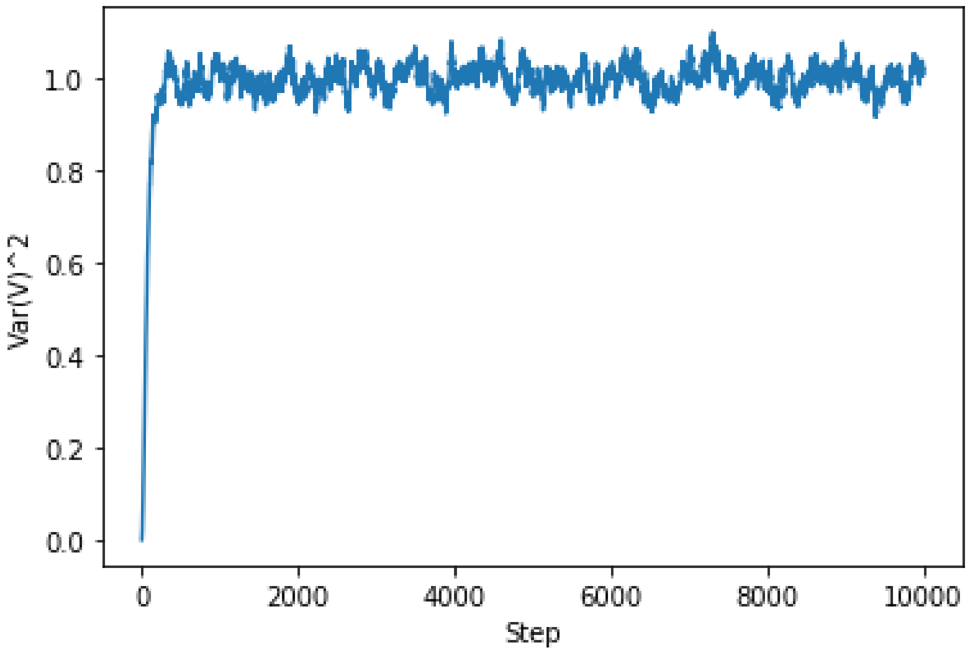

图 8 SRK2 模拟 100s，布朗粒子速度标准差的变化

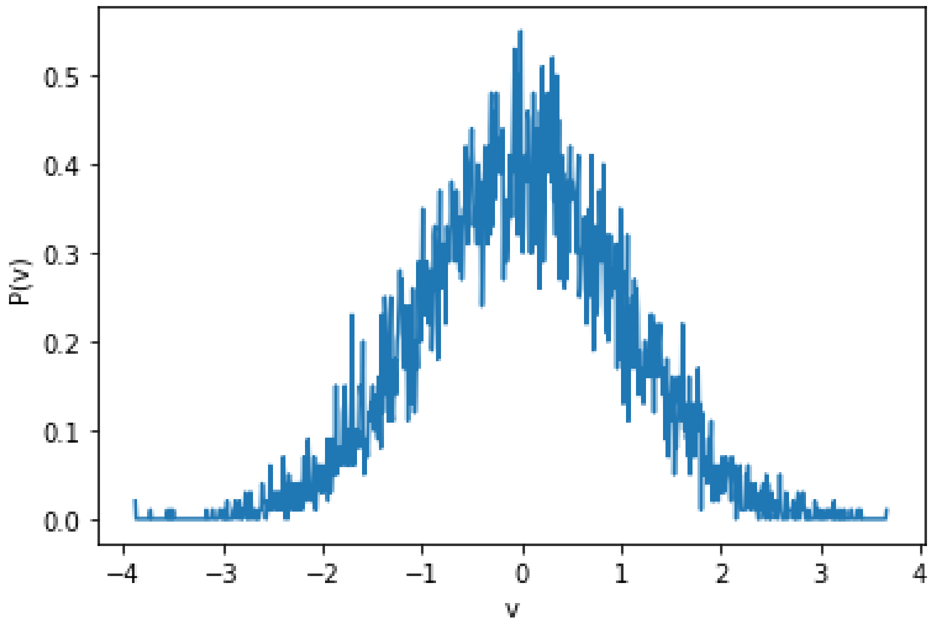

图 9 SRK2 模拟 100s，布朗粒子 $t=100$ 时的速度概率分布

与理论值符合，波动来源于模拟次数的不足（由于 Python 较慢，实际只模拟了 10000 次）。