

计算方法

黄佳城 20420201151673

2021 年 04 月 20 日

Code:

https://github.com/Acpnohc/computational_method_in_theory_physics/tree/main/hw8

课堂例题（用于验证算法）：

模拟一维 FPU 模型的演化：

$$H = \sum_{i=1} \left[\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2}(r_{i+1} - r_i - 1)^2 + \frac{1}{4}(r_{i+1} - r_i - 1)^4 \right]$$

设定粒子数 $N = 1000$ ，所有粒子的质量都为 1，且考虑周期边界条件。初始系统的总动量为 0，总能量为 1。积分步长选为 $h = 0.01$ 。

解：

（1）方法一：

使用 Verlet 积分算法，利用速度重新标度进行 NVT 模拟，结果如图 1 所示，与课上结果一致。

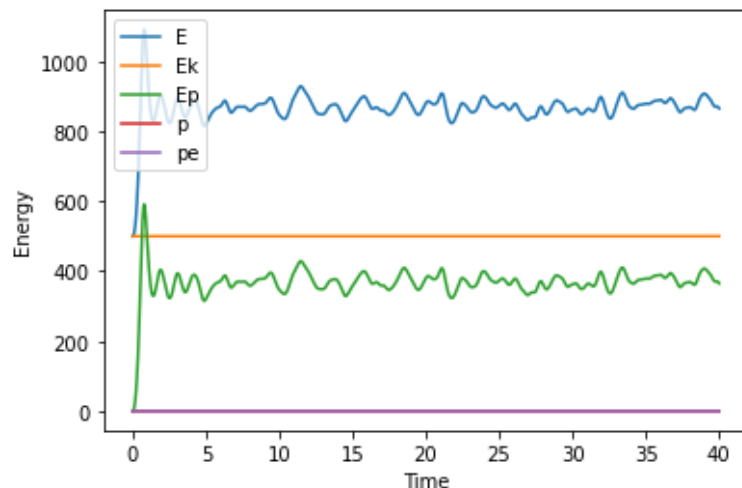


图 1 速度重新标度法进行 NVT 模拟，总能量（E）、势能（Ep）、动能（Ek）、动量（p）、体系压强（pe）的变化，步长 0.01，积分步数 4000

(2) 方法二:

使用 Verlet 积分算法，利用 Nose-Hoover 热浴法进行 NVT 模拟，结果如图 2 ($c=0.1$)，图 3 ($c=1$)，图 4 ($c=10$) 所示。图 2-4 的对比验证了耦合常数 c 对系统热化速度的影响。同时结果也与课上展示的一致。

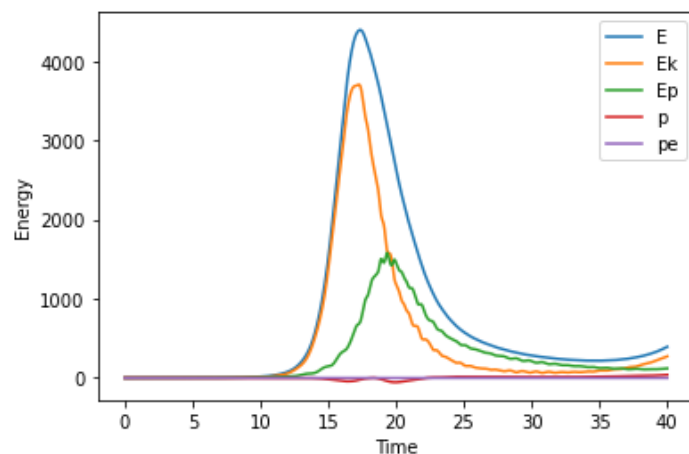


图 2 Nose-Hoover 热浴法进行 NVT 模拟，总能量 (E)、势能 (E_p)、动能 (E_k)、动量 (p)、体系压强 (p_e) 的变化， $c=0.1$ ，步长 0.01，积分步数 4000

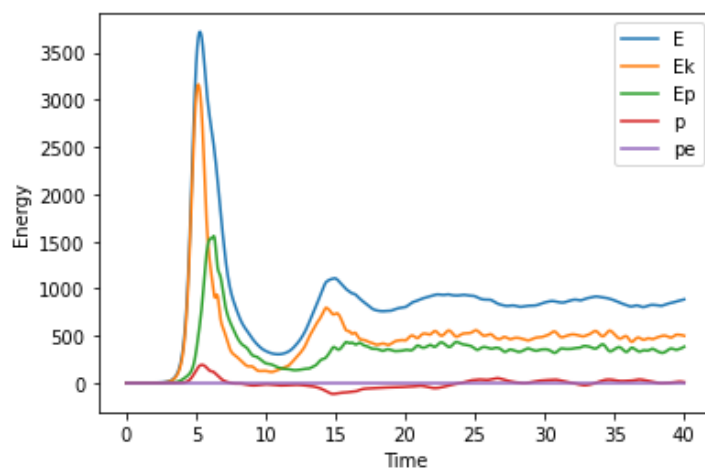


图 3 Nose-Hoover 热浴法进行 NVT 模拟，总能量 (E)、势能 (E_p)、动能 (E_k)、动量 (p)、体系压强 (p_e) 的变化， $c=1$ ，步长 0.01，积分步数 4000

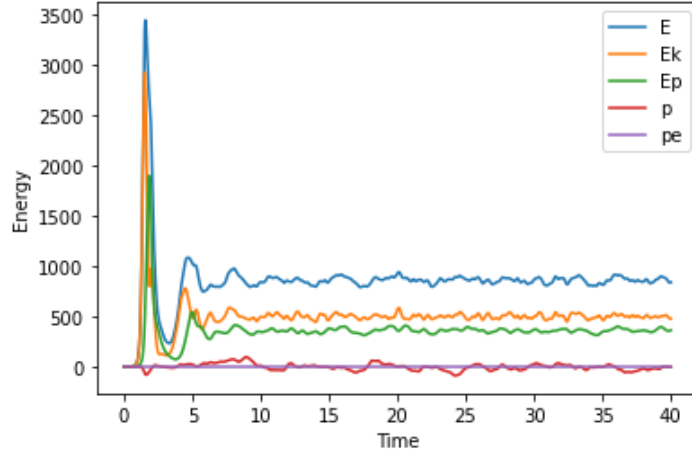


图 4 Nose-Hoover 热浴法进行 NVT 模拟，总能量 (E)、势能 (Ep)、动能 (Ek)、动量 (p)、体系压强 (pe) 的变化， $c=10$ ，步长 0.01，积分步数 4000

问题 1:

利用 Verlet 积分法模拟一维 FPU 模型的演化：

$$H = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2}(r_{i+1} - r_i - 1)^2 + \frac{1}{4}(r_{i+1} - r_i - 1)^4 \right]$$

设定粒子数 $N=10$ ，所有粒子的质量都为 1，且考虑周期边界条件。初始系统的总动量为 0，总能量为 1。积分步长选为 $h = 0.01$ 。

研究系统温度在 $T=0.5$ ， $T=1.0$ ， $T=1.5$ 时，系统的定容热容量。

解：

系统的定容热容量的表示如下：

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V$$

数值离散处理方式如下：在 T 的周围取值 $T + \Delta t$ ，计算 E_T 和 $E_{T+\Delta t}$ ，系统的定容热容量可以被近似表示为：

$$C_v = \frac{E_{T+\Delta t} - E_T}{\Delta t}$$

本次模拟使用的 $\Delta t = 0.05$ 。

分别用速度重新标度法和 Nose-Hoover 热浴法对系统进行 NVT 模拟，根据图 1-4 的经验，我们可以取步长 0.01，积分步数 4000，最终进行时间平均选择最后 2000 步。结果如下所示：

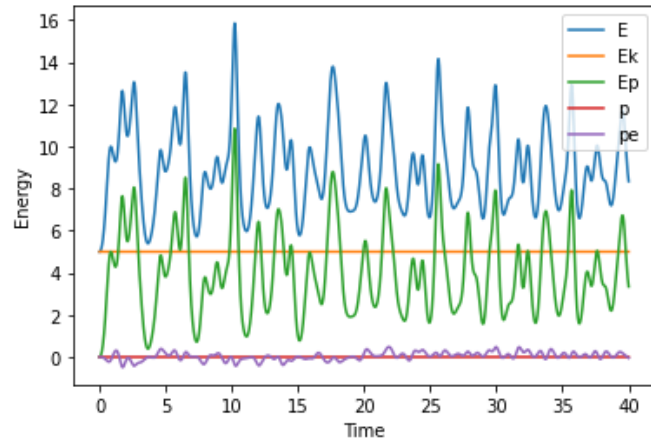


图 5 速度重新标度法进行 NVT 模拟，总能量 (E)、势能 (Ep)、动能 (Ek)、动量 (p)、体系压强 (pe) 的变化，步长 0.01，积分步数 4000

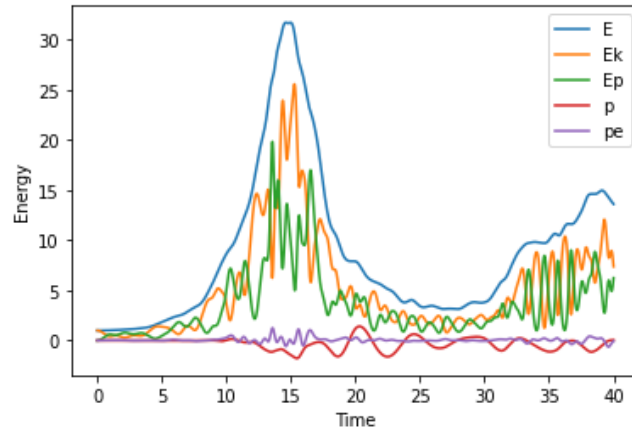


图 6 Nose-Hoover 热浴法进行 NVT 模拟，总能量 (E)、势能 (Ep)、动能 (Ek)、动量 (p)、体系压强 (pe) 的变化， $c=0.1$ ，步长 0.01，积分步数 4000

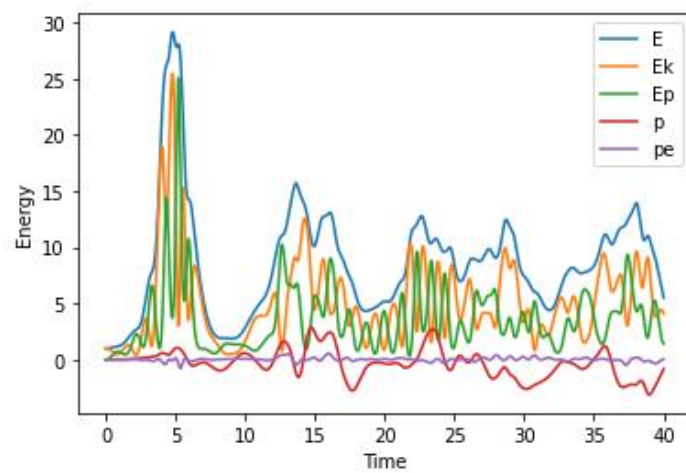


图 7 Nose-Hoover 热浴法进行 NVT 模拟，总能量 (E)、势能 (Ep)、动能 (Ek)、动量 (p)、体系压强 (pe) 的变化， $c=1$ ，步长 0.01，积分步数 4000

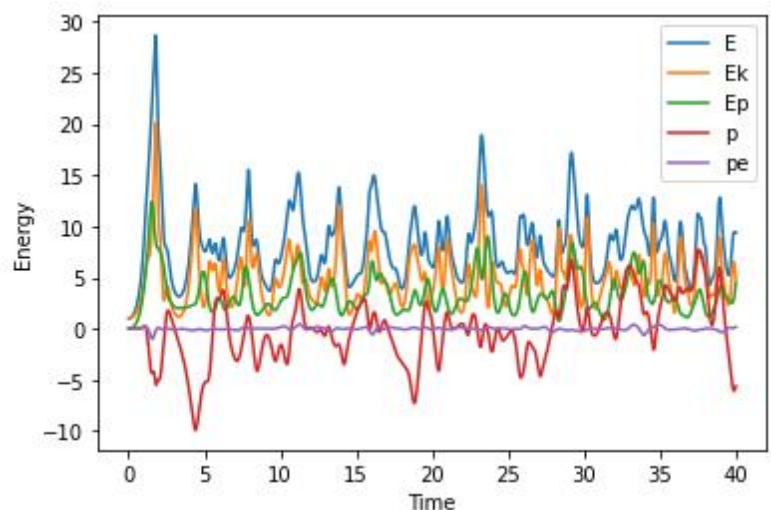


图 8 Nose-Hoover 热浴法进行 NVT 模拟，总能量 (E)、势能 (Ep)、动能 (Ek)、动量 (p)、体系压强 (pe) 的变化， $c=10$ ，步长 0.01，积分步数 4000

个人认为，系统涨落似乎过大，并未达到所谓的平衡，于是使用 Nose-Hoover 热浴法进行了一次积分步数为 100000 的模拟，结果如下图所示：

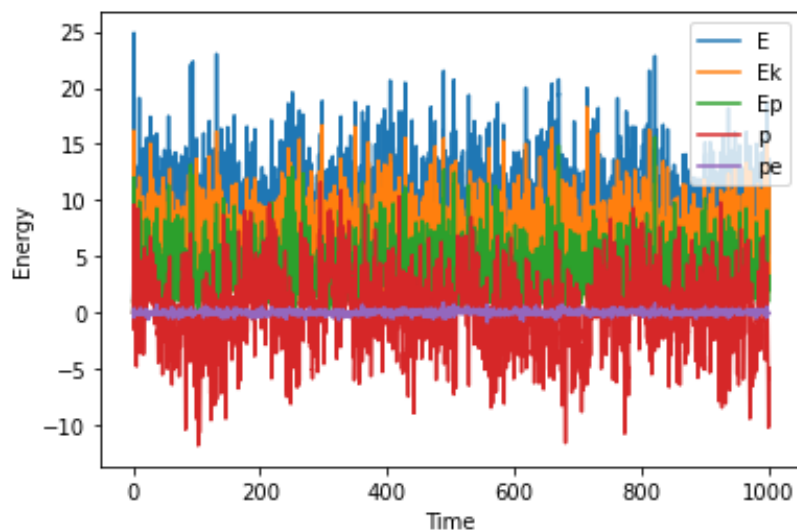


图 8 Nose-Hoover 热浴法进行 NVT 模拟，总能量 (E)、势能 (Ep)、动能 (Ek)、动量 (p)、体系压强 (pe) 的变化， $c=10$ ，步长 0.01，积分步数 100000

结果并未得到较好的改善，根据查阅文献，我认为问题可能出现在这里：Unfortunately, the Nosé-Hoover dynamics is not ergodic for small or stiff systems^[1]. Nose-Hoover 热浴法对少体系统（10 个粒子）不太友好，遍历性不能得到保证，用 Nose-Hoover Chain 可能更加合适（该方法还在编写代码）。

系统的定容热容量结果如下表所示，

	速度重新标度法 (4000 步)	Nose-Hoover 热浴法 (100000 步)
T=0.5	8.679732698011833	7.832289497328535
T=1	8.584670642002834	9.391035510738739
T=1.5	8.11353695553052	4.571199088886537

参考文献：

[1] Martyna G J , Klein M L , Tuckerman M . Nosé - Hoover chains: The canonical ensemble via continuous dynamics[J]. Journal of Chemical Physics, 1992, 97(4):2635-2643.