

计算方法

黄佳城 20420201151673

2021 年 04 月 13 日

Code:

https://github.com/Acpnohc/computational_method_in_theory_physics/tree/main/hw6

问题 1:

利用 Verlet 积分法模拟一维 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 $N=10$ ，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。只需将所有粒子的位置、总能量和总动量随时间的变化画成图即可。积分步长选为 $h=0.01$ ，积分步数 1000 步。

研究系统长度分别为 $L=9$ ， $L=10$ ， $L=11$ 时系统内部的压力。压力为第 i 个粒子对第 $i+1$ 个粒子的作用力的平均值。

解:

分析:

由动量的变化率就是外力 F 很容易可以由上周的内容进行系统的模拟。第 i 个粒子对第 $i+1$ 个粒子的作用力在 FPU 模型中，可以视为以下公式:

$$f_i = (r_{i+1} - r_i - 1) + (r_{i+1} - r_i - 1)^3$$

在周期边界条件下: 对于第 10 个粒子作用力表达式应为:

$$f_1 = (r_1 + L - r_{10} - 1) + (r_1 + L - r_{10} - 1)^3$$

其它粒子则为

$$f_i = (r_{i+1} - r_i - 1) + (r_{i+1} - r_i - 1)^3$$

结果:

Verlet 积分法模拟一维 FPU 模型的演化:

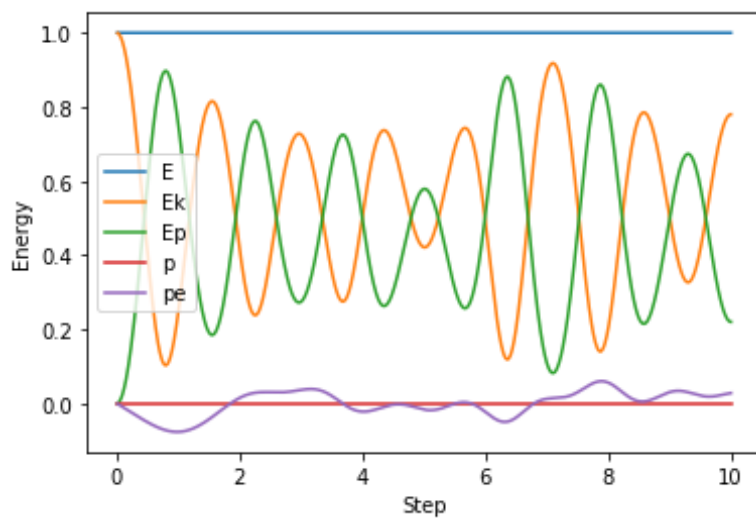


图 1 模拟过程中，总能量（E）、势能（Ep）、动能（Ek）、动量（p）的变化（L=10）

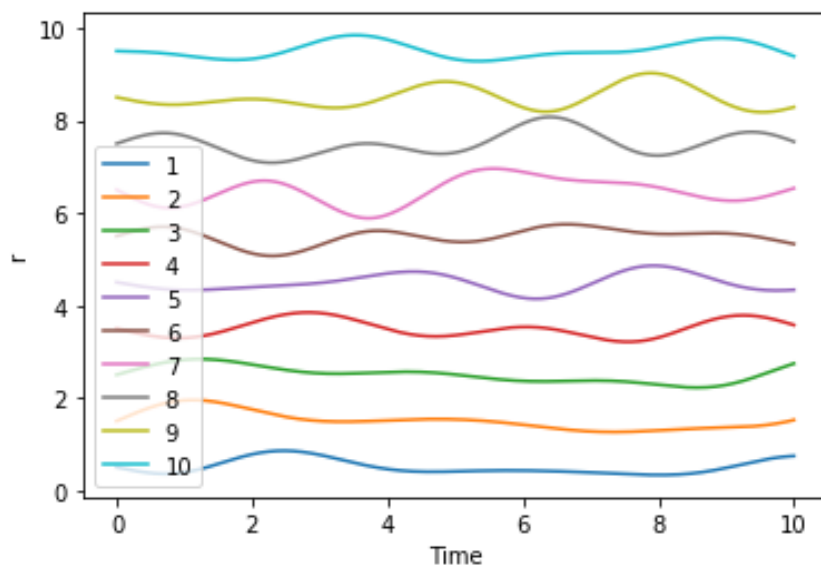


图 2 模拟过程中，粒子位置随时间的变化（L=10）

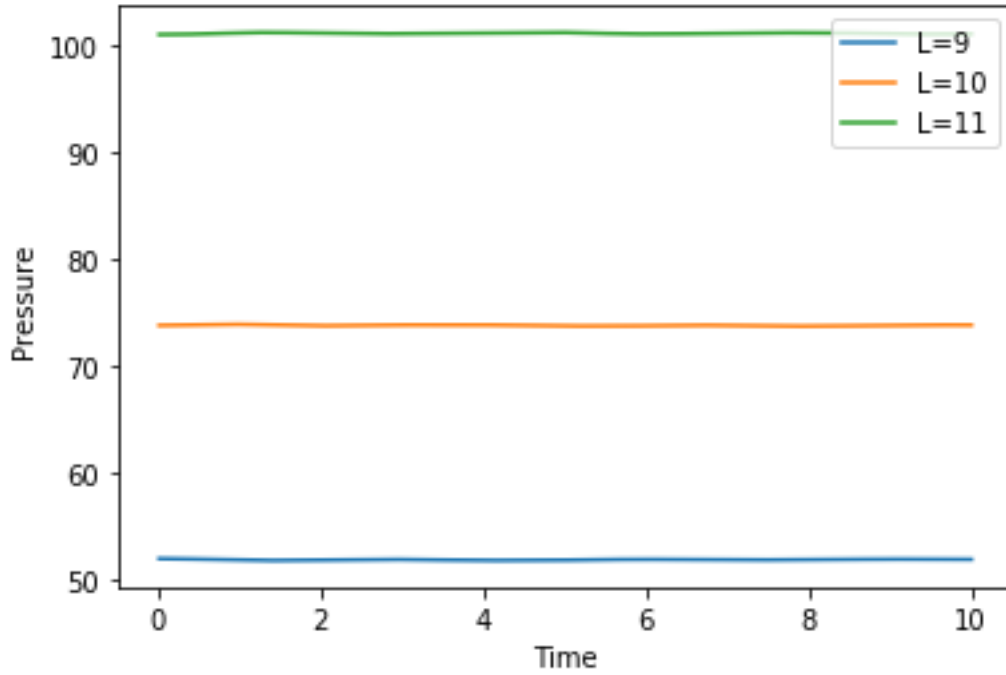


图 3 压强随系统长度变化

问题 2:

利用 Verlet 积分法模拟一维 FPU 模型的演化:

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

将编号为偶数的粒子的质量改为 $\sqrt{2}$ 。计算编号为 1、2 的两个粒子的

1. 速度分布是否为玻尔兹曼分布?
2. 两种粒子的平均动能是否相等?
3. 速度关联和动能关联

解:

Verlet 积分法模拟一维 FPU 模型的演化:

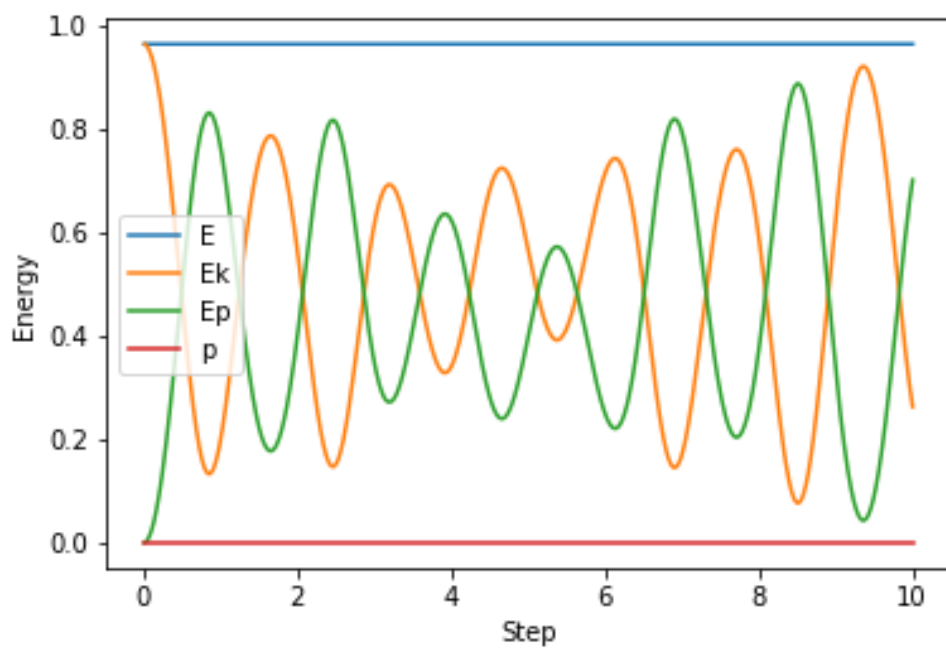


图 4 模拟过程中，总能量（E）、势能（Ep）、动能（Ek）、动量（p）的变化（1000 步）

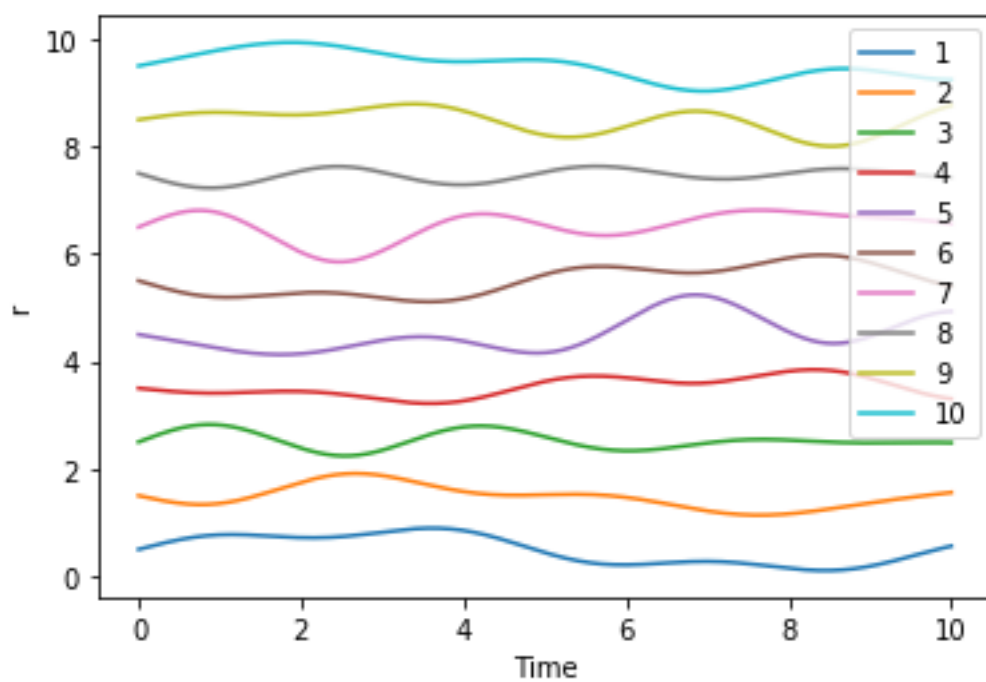


图 5 模拟过程中，粒子位置随时间的变化（L=10）（1000 步）

1. 速度分布是否为玻尔兹曼分布？

应为高斯分布，图 6-9 为步长 100000 的模拟结果。

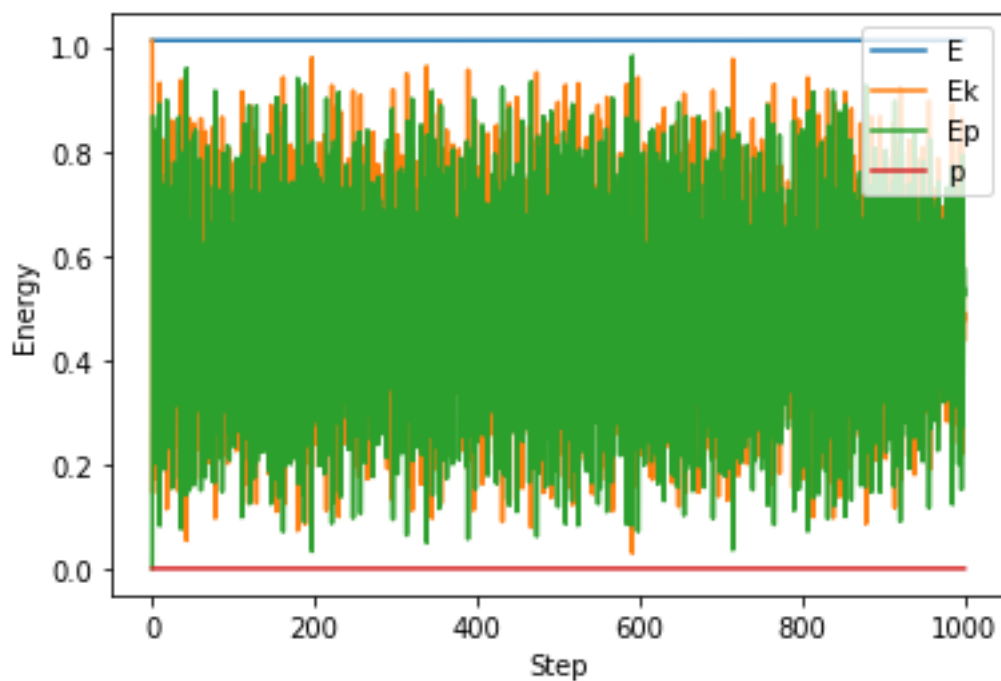


图 6 模拟过程中，总能量（E）、势能（Ep）、动能（Ek）、动量（p）的变化（100000 步）

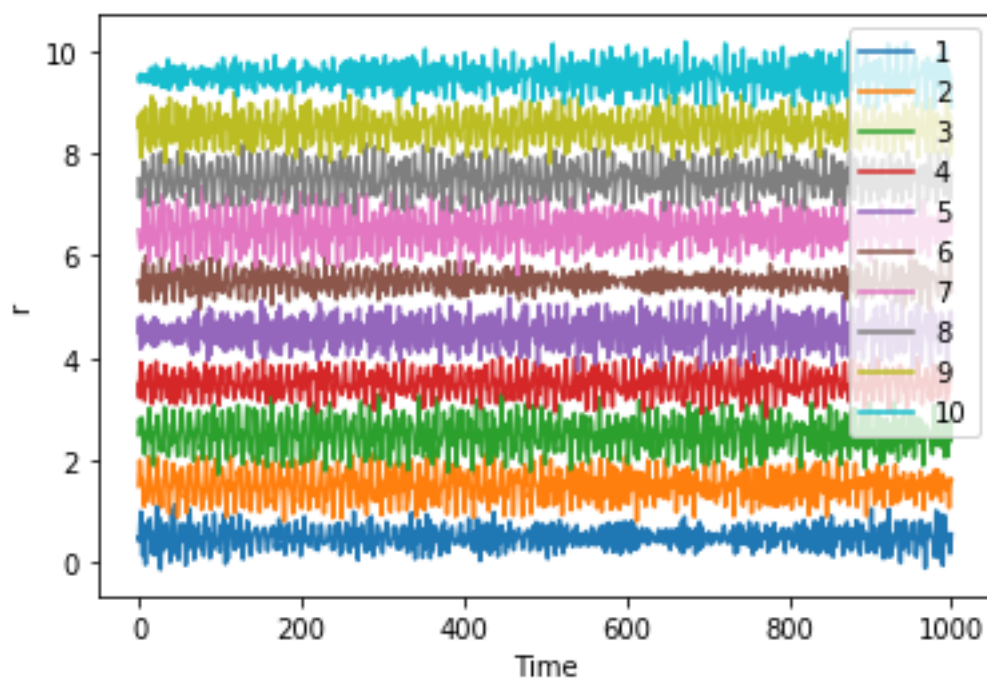


图 7 模拟过程中，粒子位置随时间的变化（L=10）（1000 步）

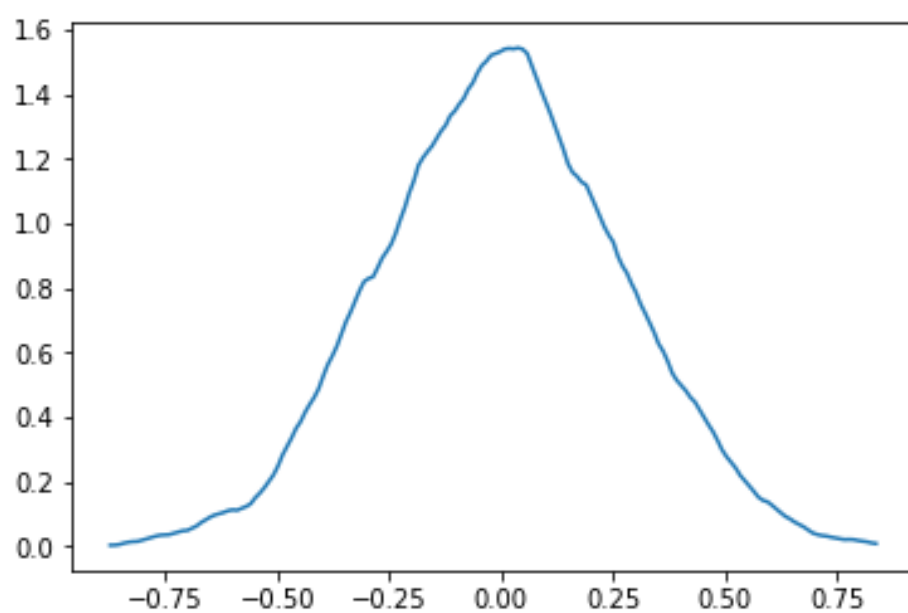


图 8 编号为 1 的粒子的速度分布（100000 步）

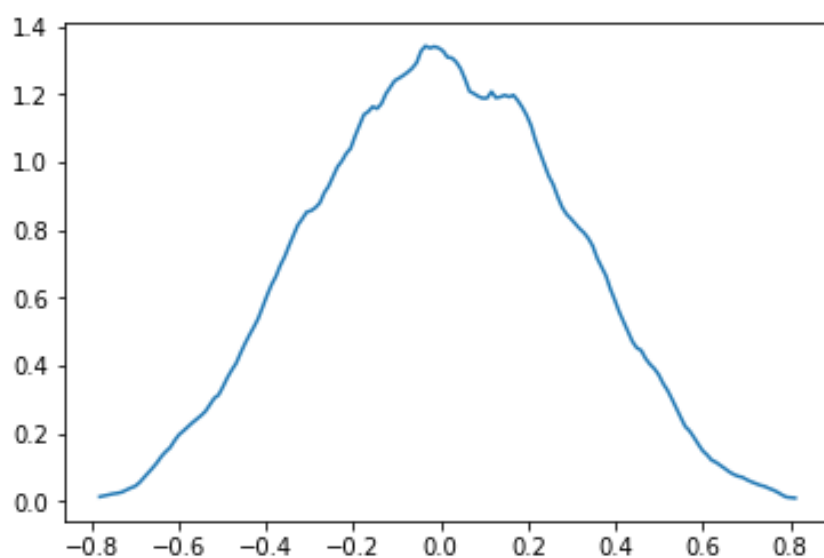


图 9 编号为 2 的粒子的速度分布（100000 步）

从这里往后就使用 100000 步的结果。

2. 两种粒子的平均动能是否相等？

以模拟 100000 步的结果为例，我们计算两种粒子的平均动能，如下表所示。

不同粒子	平均动能
编号为 1	0.047627452837959446
编号为 2	0.05574814362580864

在一定范围内可以认为是相等的（从分布函数上看亦可知）。

3. 速度关联和动能关联

速度关联和动能关联如下图所示。

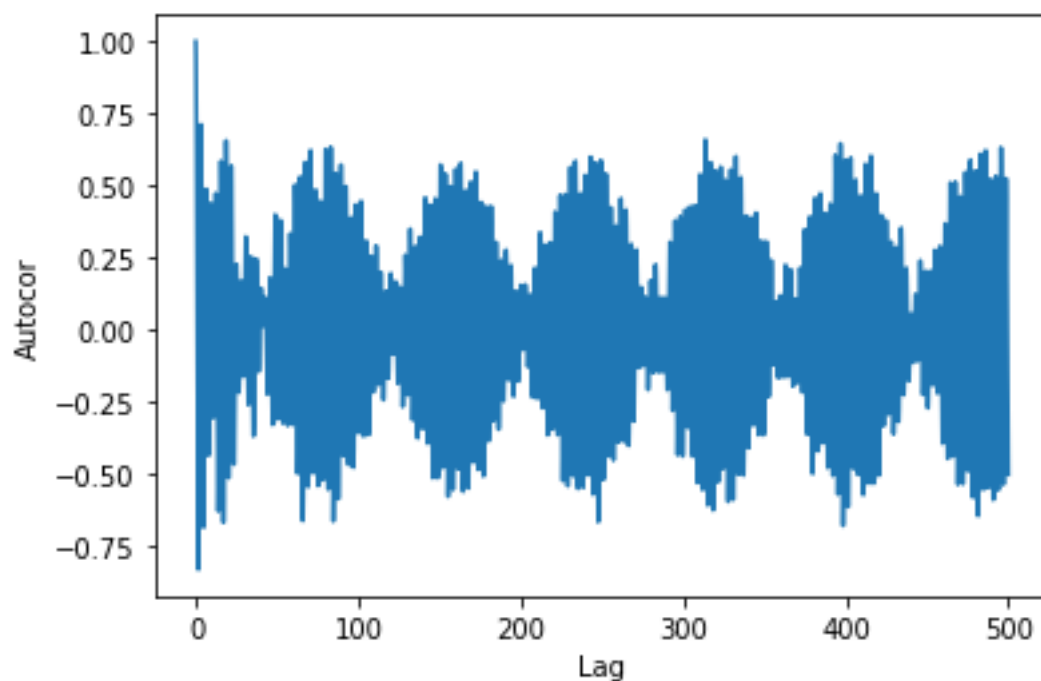


图 12 编号为 1 的粒子的速度关联（100000 步）

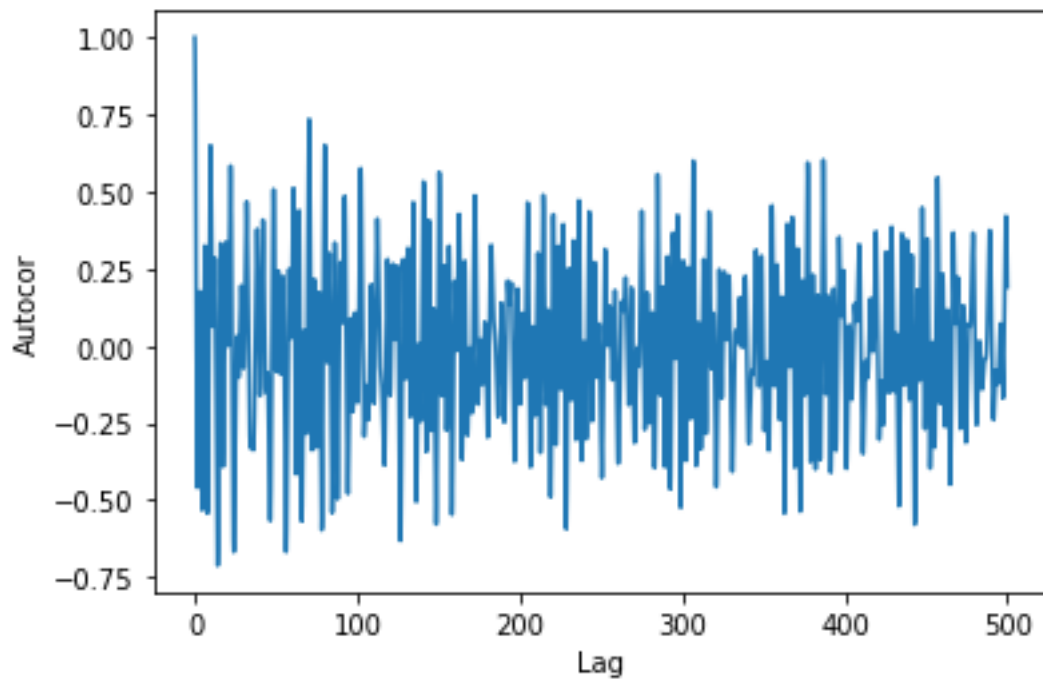


图 13 编号为 1 的粒子的速度关联（100000 步）

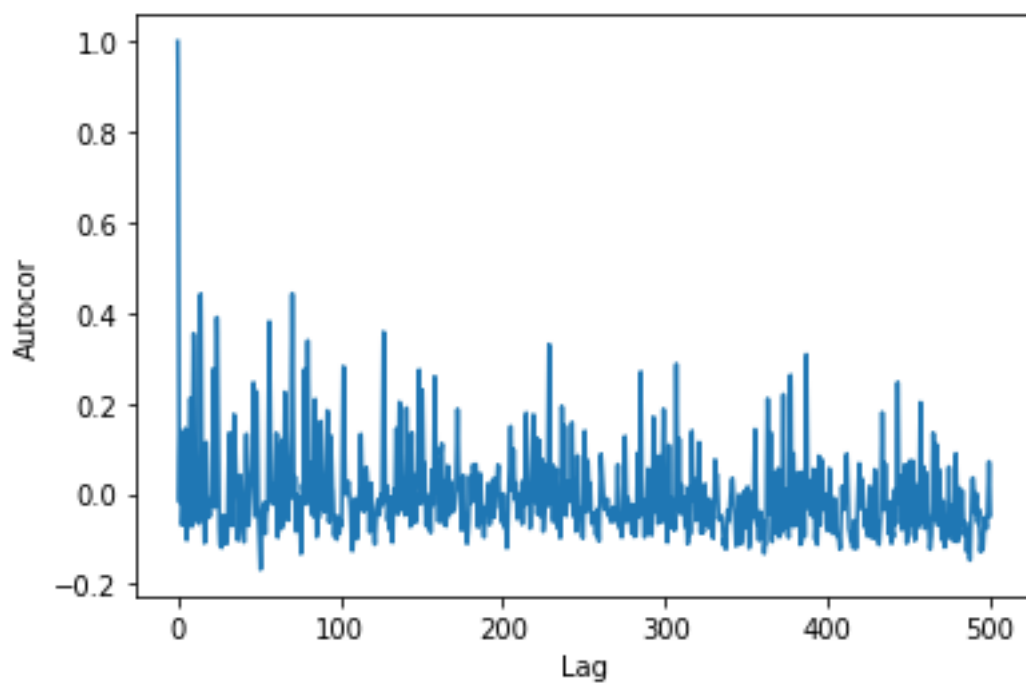


图 14 编号为 2 的粒子的动能关联（100000 步）

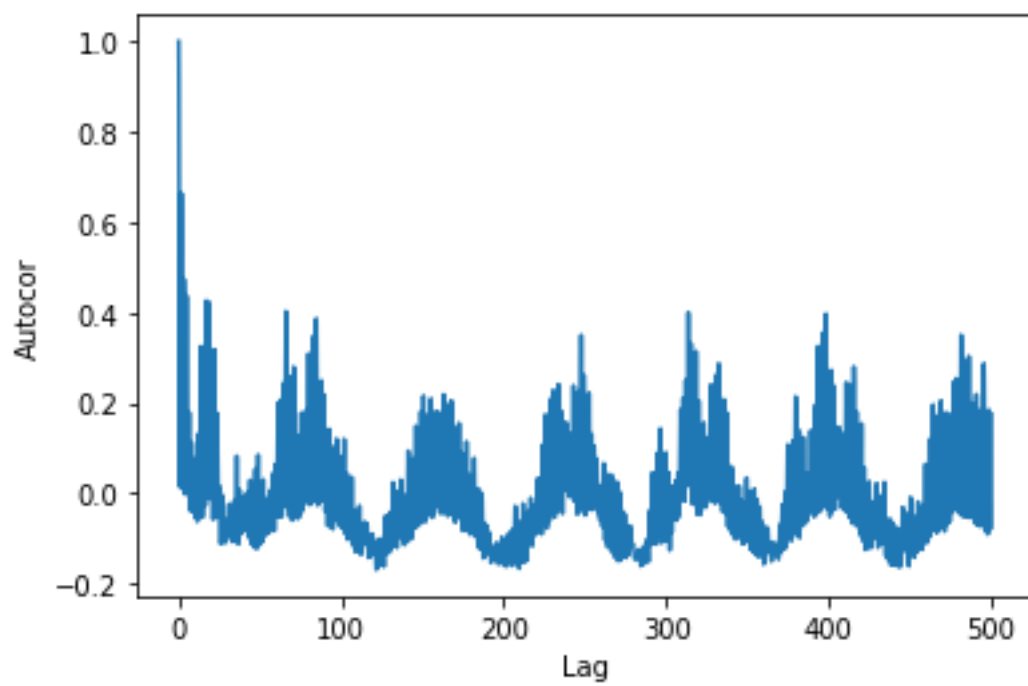


图 15 编号为 2 的粒子的动能关联（100000 步）