

计算方法

黄佳城 20420201151673

2021 年 04 月 06 日

问题 1:

利用二步法模拟一维 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 $N=10$ ，系统长度 $L=10$ ，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。

代码

(https://github.com/Acpnohc/computational_method_in_theory_physics/tree/main/hw5)

解:

从一维 FPU 模型的哈密顿量可知势能函数:

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

对势能函数求导则有

$$F = ma = a = -\nabla U = \sum_{i=1} (2r_{i+1} - 2r_i - 2) \quad (2)$$

结合牛顿运动方程即可进行分子动力学模拟。

几个问题:

1. 初始化粒子的影响

方法一: 在系统长度 $L=10$ 中随机生成位置，结果: 不能满足总能量为 1 的要求，势能函数 (1) 总是大于 1. 结果如图 1 所示。

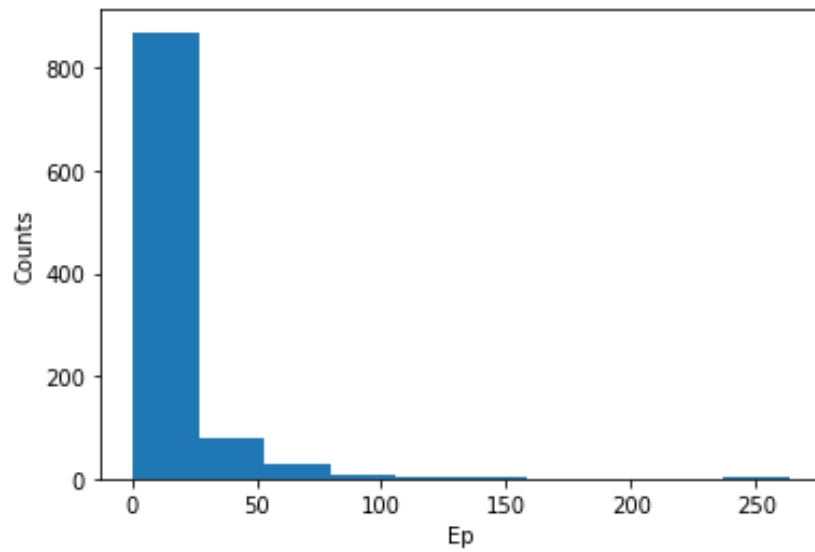


图 1 随机生成 1000 个位置，初始势能的直方图，横轴为势能值，纵轴为计数

方法二：在系统长度 $L=10$ 中均匀生成位置，结果：粒子可以满足总能量为 1 的要求，但是整个系统处于完全的平衡态：势能全为 0，并且外力 $F(2)$ 均为 0，不对系统的演化产生任何作用。

方法三：在系统长度 $L=10$ 中均匀生成位置后，加入高斯噪音。结果是可以的，最终我初始化选择的是这种方式。由方法一和方法二和方法三对照显然知：高斯分布的方差对此应该有正线性影响，如图 2 所示。

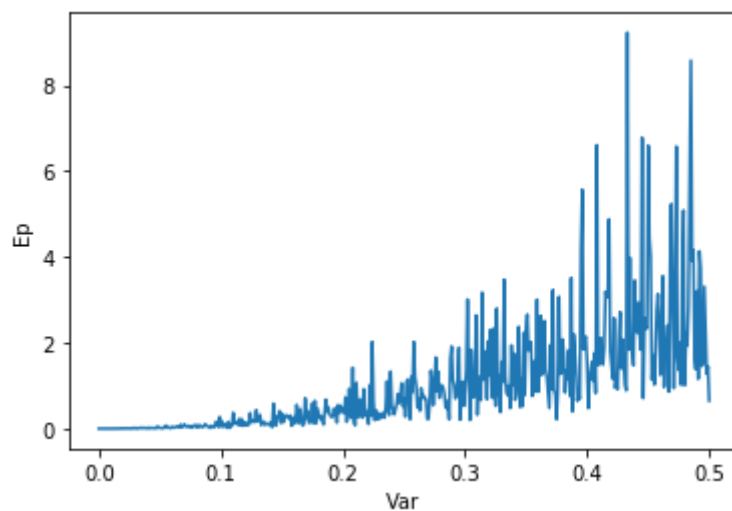


图 2 高斯噪音的方差对初始化势能的影响

图 2 系综平均取得不多，所以波动较大。

2. 分子模拟过程中的温度标度因子的选择

第一次模拟时，我选择没有使用温度标度因子，结果如图 3 所示，整个系统的能量会下降。

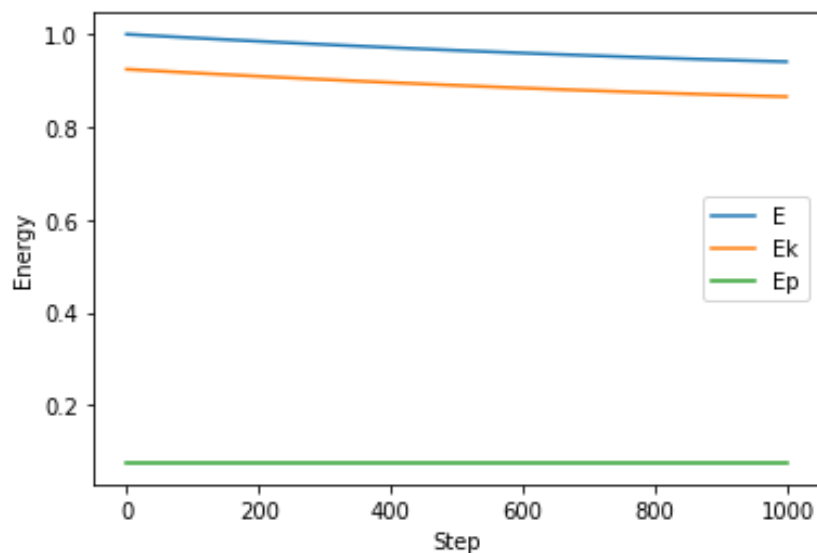


图 3 无温度标度因子时，系统的总能量（E）下降

教材 P37 的标度因子应该是为 L-J 势能函数特制的，我没有使用，我采取以下标度因子：

$$\beta = \sqrt{\frac{1 - E_p}{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m v_i^2}}$$

该标度因子无参考文献，但是能够通过标度将系统能量保持在 $E=1$ 的情况下，如图 4 所示。

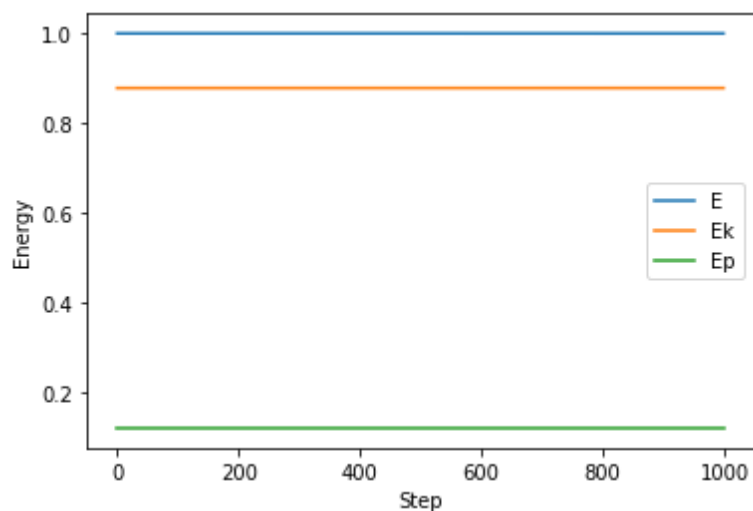


图 4 有温度标度因子时，系统的总能量（E）下降

显然这个标度因子不太对，由于这个标度因子的使用，整体的结果都不太对，回到了初始化粒子影响中方法二的问题（图 5）。

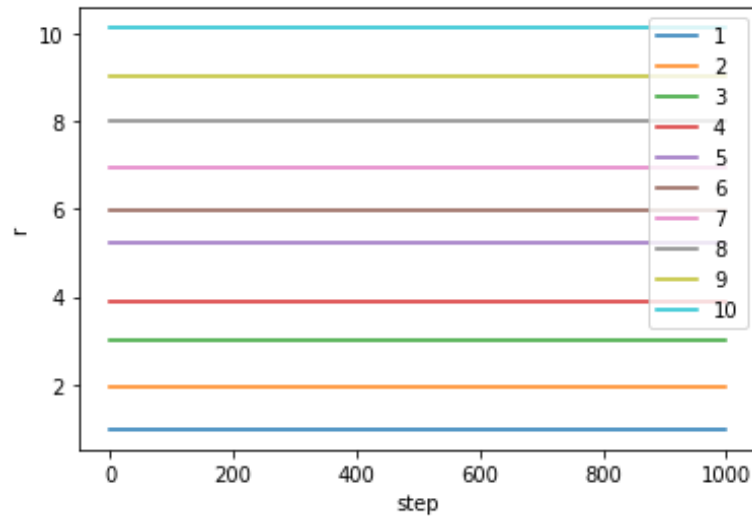


图 5 有温度标度因子时，系统中粒子的位置改变