

计算物理 作业报告20

PB14203209 张静宁 2017.12.30

第二十题

考虑一维经典粒子组成的理想气体，由于无相互作用，各粒子的能量不依赖于其位置，只需考虑它的动能，因此体系的构型即是各粒子速度坐标值的集合。给定粒子的质量、初始速度、总粒子数、总能、demon能，模拟足够多步后达到平衡时的粒子速度分布。微正则系综中没有定义温度，其数值由 $\frac{1}{2}kT = \frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle$ 给出，求平衡时的温度值。

文件说明

- demon.c 主要程序，实现MC模拟，输出粒子速度分布，或者体系温度与demon能，取决于注释哪一部分代码

算法

设一个粒子的质量为 $m = 1$ ，总粒子数为 $N = 10000$ ，初始速度为 $[-1, 1]$ 的均匀分布（由直接抽样实现），玻尔兹曼常数 $K = 1$ 。设初始 demon 能为 $E_d = 0$ 。体系模拟 $M = 100000$ 步。

Demon Algorithm

- 初始时刻，粒子速度为 $[-1, 1]$ 均匀分布，demon能 $E_d = 0$
- 粒子的速度记为 $ve[i], i = 1, 2, \dots, N$ ，计算此时所有粒子的动能之和为 $E_k = \sum_i 0.5 * ve[i]^2$
- 随机生成一个 $[1, N]$ 之间整数 i ，即选中第 i 个粒子与demon交换能量
- 随机生成 $[-1, 1]$ 中的随机数 r ，设定 $\delta = 0.5$
- i 粒子速度改变大小为 $\Delta v = \delta * r$ ，交换前 i 粒子速度 $v_0 = ve[i]$ ，交换后 $v_1 = ve[i] + \Delta v$
- 计算 i 粒子动能改变量 $\Delta E_k = \frac{1}{2}(v_1^2 - v_0^2)$
- 若 $\Delta E_k \leq 0$ 或 $0 < \Delta E_k < E_d$ ，则接受这个改变 $ve[i] = v_1, E_k = E_k + \Delta E_k, E_d = E_k - \Delta E_k$ ，否则不接受这个改变，保持原样
- 回到 3，继续进行

计算结果与分析

1、平衡态粒子速度分布

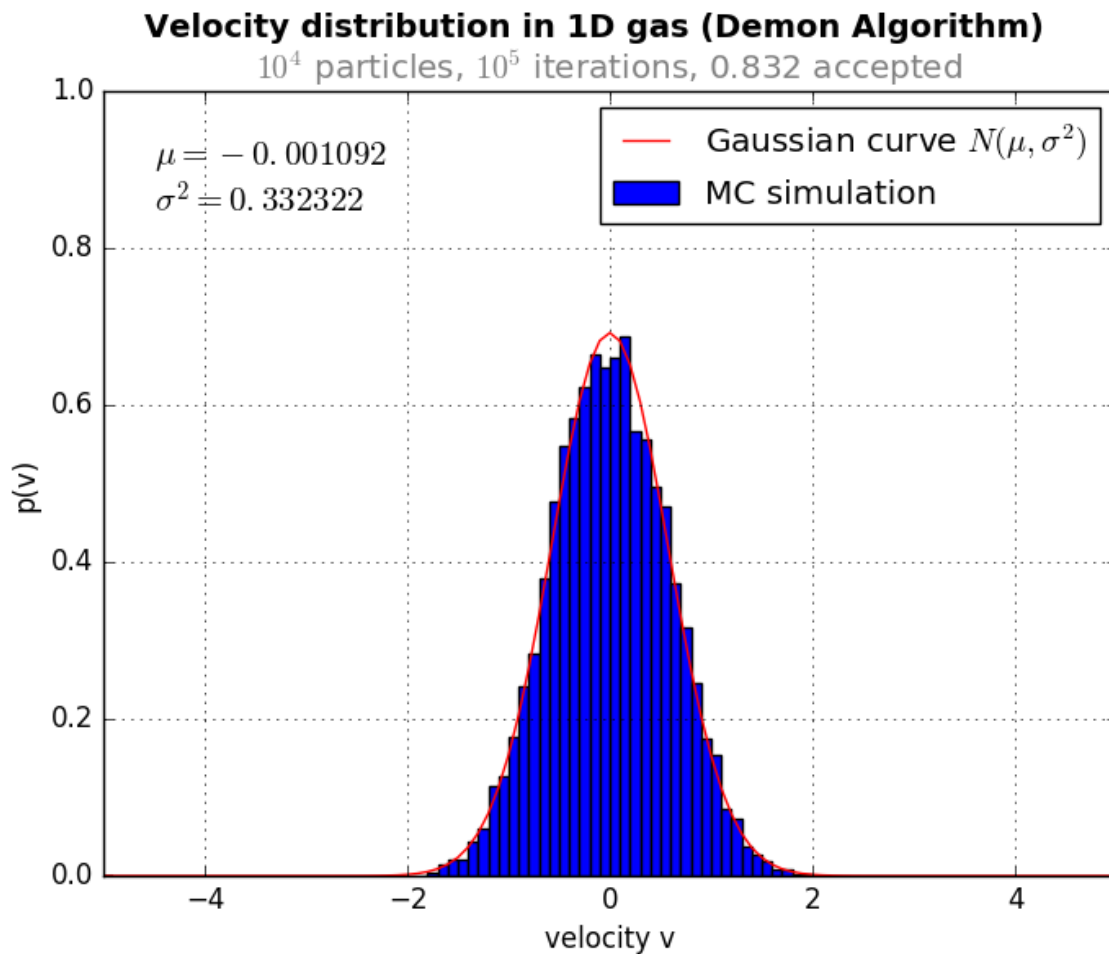
计算得到模拟 $M = 10^5$ 步后，认为体系达到了平衡态，一共接受了 83249 步，接受率为 83.25%。

高斯曲线

$$f(x | \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

平衡状态时，粒子速度的平均值为 $\mu = -0.001092$ ，速度的方差为 $\sigma^2 = 0.332322$

画出此时粒子速度分布直方图和对应的高斯曲线



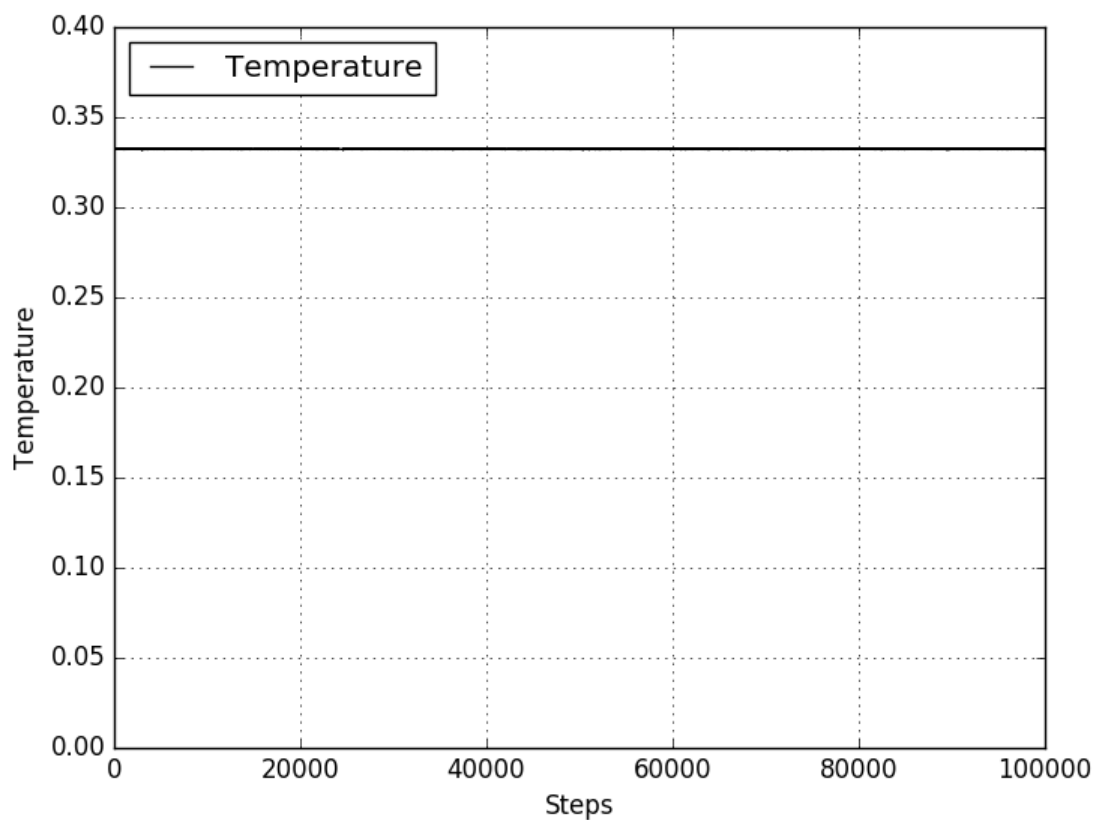
可见平衡态粒子的分布的确符合正态分布.

2、温度、demon能随步数变化

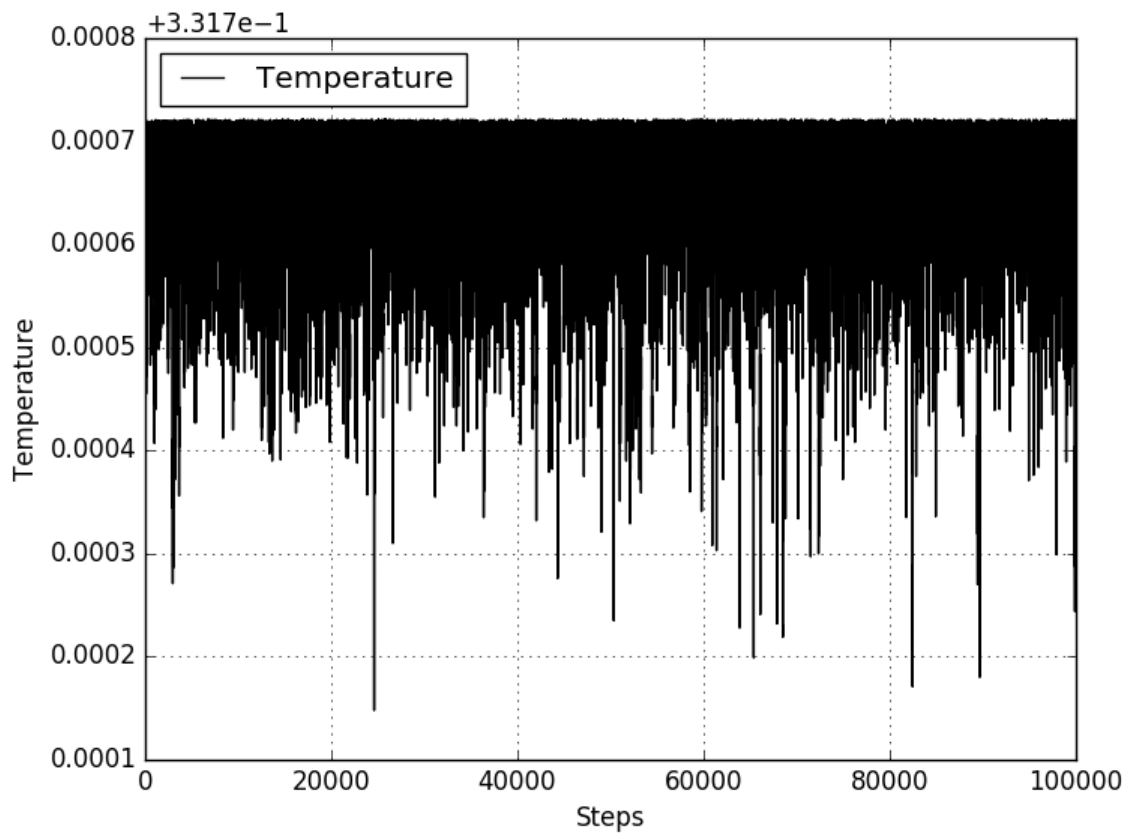
计算得平衡态气体温度为 $T = 0.3323$

由下图可见，温度随步数的变化微乎其微，去掉基底 **0.3317** 后才可以看到温度的变化，变化幅度在 $\Delta T = 0.001$ 以内. 由于力学体系是个多自由度的系统，相比而言 demon 只有一个自由度，因此力学体系温度的涨落非常小，满足 $\frac{1}{\sqrt{N}}$ 量级

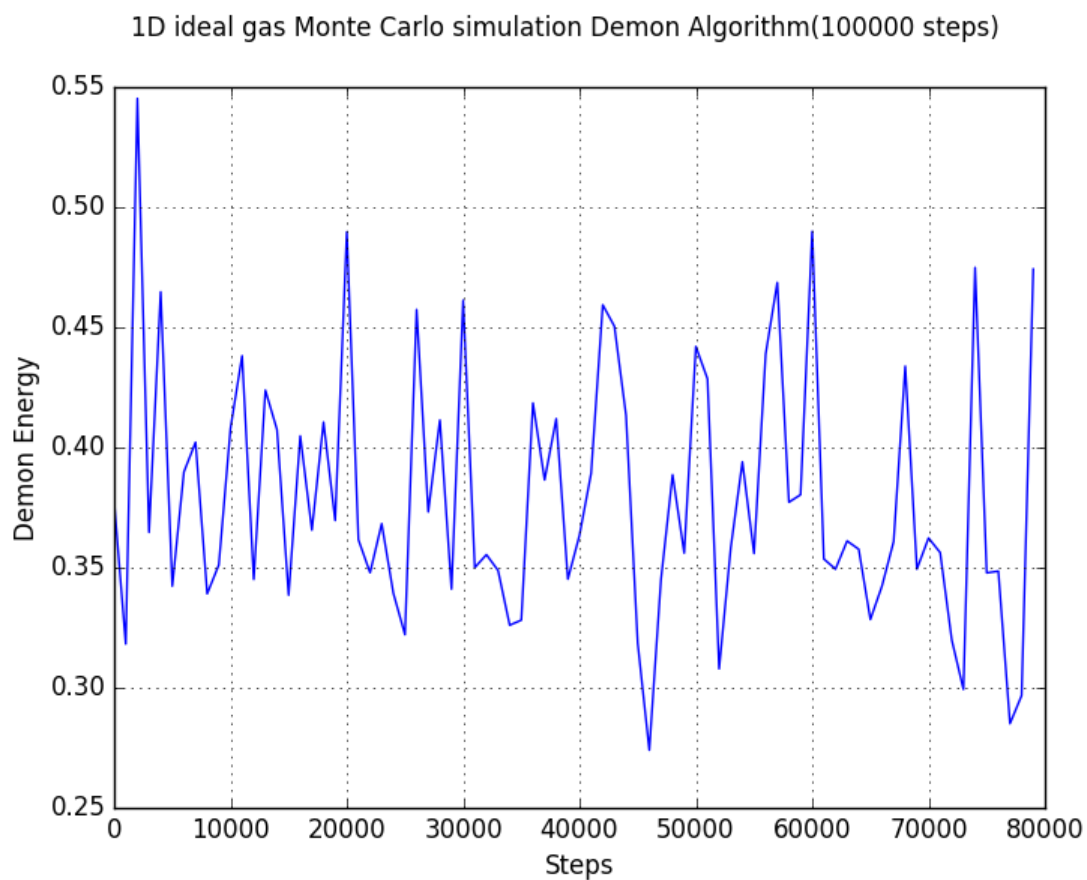
1D ideal gas Monte Carlo simulation Demon Algorithm (100000 steps)



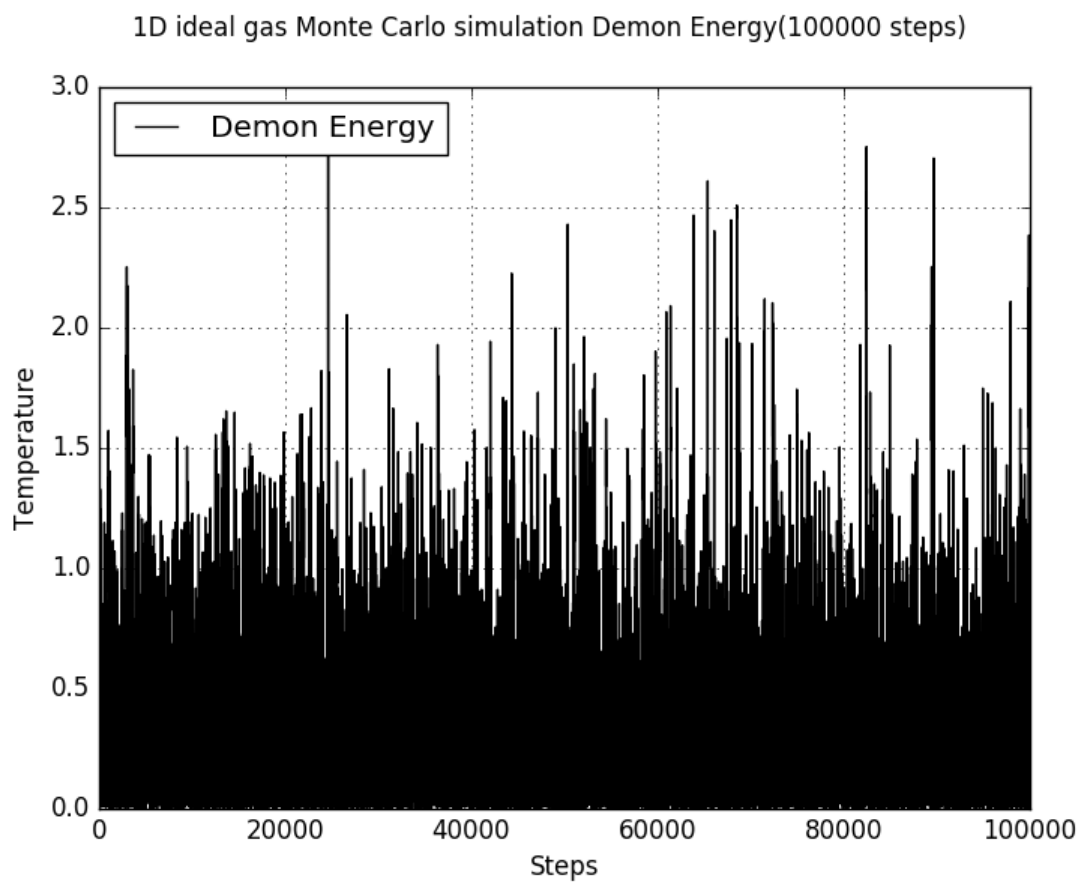
1D ideal gas Monte Carlo simulation Demon Algorithm (100000 steps)



将1000步的数据取平均处理后得到下图，可见demon能一直在波动



不取平均是下图的效果，图中纵坐标 Temperature 应该为 demon E



总结

本次作业实现了 demon 算法，一维粒子速度分布初始状态为均匀分布，经过 10^5 次和demon交换能量以后，粒子速度分布为正态分布。并且这个过程中系统的温度都近似不变，变化幅度小于 $\frac{1}{\sqrt{N}}$ 量级，较好得模拟了微正则系综。

参考资料

[1] 丁泽军《计算物理讲义》 2.2.3.2 微正则系综

[2] Monte Carlo: Demon Algorithm [Youtube](#)

[3] MC simulation of “thermodynamic” ensembles [PDF](#)