

计算物理第16题

PB18000039 徐祺云

一 作业题目

考虑一维经典粒子组成的，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。

二 推导及主要公式

题中给定的是NVE系综，Creutz 等开发了一个效率较好的微正则系综 Monte Carlo 模拟方法：引入一个外部自由度 *demon*，和体系交换能量从而改变体系的力学变量。具体算法如下：

因为各粒子能量不依赖于位置坐标，只依赖于各粒子的速度坐标，设体系的初始构型是 p_0 ，给定粒子数目 N ，粒子质量 m 和速度上限 v_0 ，可以产生在 $[-v_0, v_0]$ 上均匀分布的初始速度分布，此体系的总能量固定在某个值 E 上，初始附加自由度 *demon* 能能为零，且它应总是非负值。这时开始 Monte Carlo 步骤：

- 1、随机选择一个粒子进行尝试移动，形成一个新构型 p_1 (设随机数 $\xi \in [-1, 1]$, $v' = v + \xi h$, h 是速度改变的步长)，计算体系的能量变化 $\Delta E = E(p_1) - U(p_0)$ 。

- 2、如果 $\Delta E < 0$ ，即体系的能量降低的话，接受该步移动，将 ΔE 交给 *demon*。

- 3、如果 $\Delta E > 0$ ，即体系的能量增加的话，检查 *demon* 是否能提

供这部分能量($E_d > \Delta E$): 是, 则接受该步移动; 否, 则拒受此尝试, 系统保持原构型不变。

可见, 除了试探移动是随机的以外, 上述接受步骤没有使用随机数。在足够多的步数之后, 力学体系和 *demon* 各自达到平衡, E_d 的分布也是服从 *Boltzmann* 几率分布的($p(E_d) \propto \exp(-\beta E_d)$), 而大体系的总能保持为 E 不变。

三 计算结果与分析

假设粒子为简单氢原子, 质量 $m = 1.67 * 10^{-27} kg$; 初始速度上限 $v_0 = 500 m/s$, 速度改变步长 $h = 200 m/s$; 总粒子数 N 为 10^4 个; 总能为粒子初始动能和; 初始 *demon* 能为零; 模拟的步数取 10^6 步; 用于16807产生器的初始种子值为 1950975620。绘图如下:

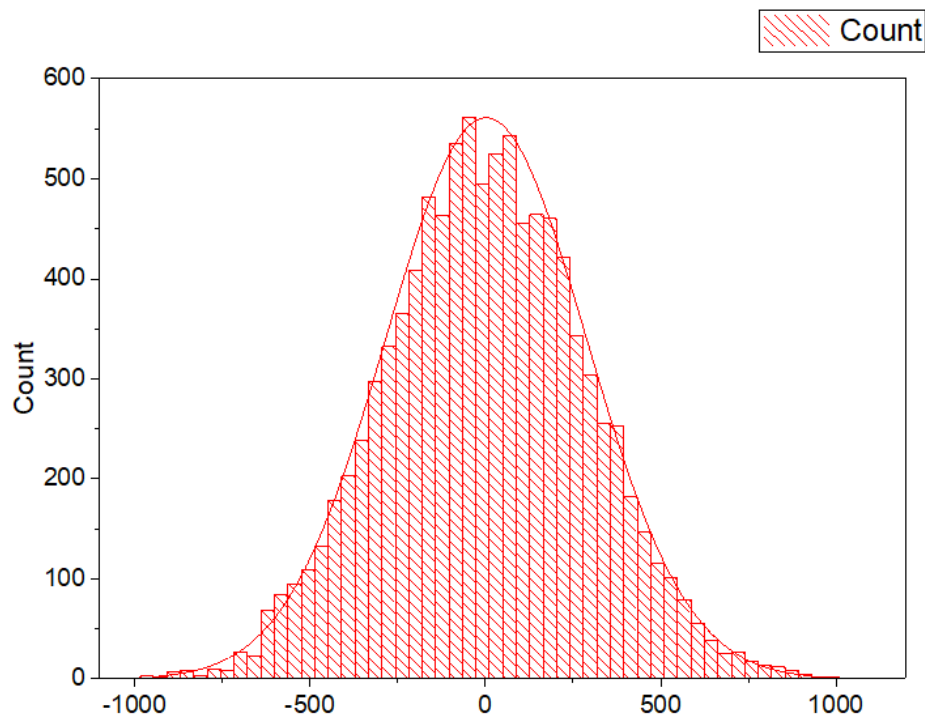


图 1: 步长 $h = 200$ 下的速度分布图

可见, 速度分布与我们预期的理论玻尔兹曼分布趋势一致。

系统的温度 T 、总能量、*demon* 能随步数变化如下(为了使绘制的图片便于观察, 其中每1000个点选取一次数据点):

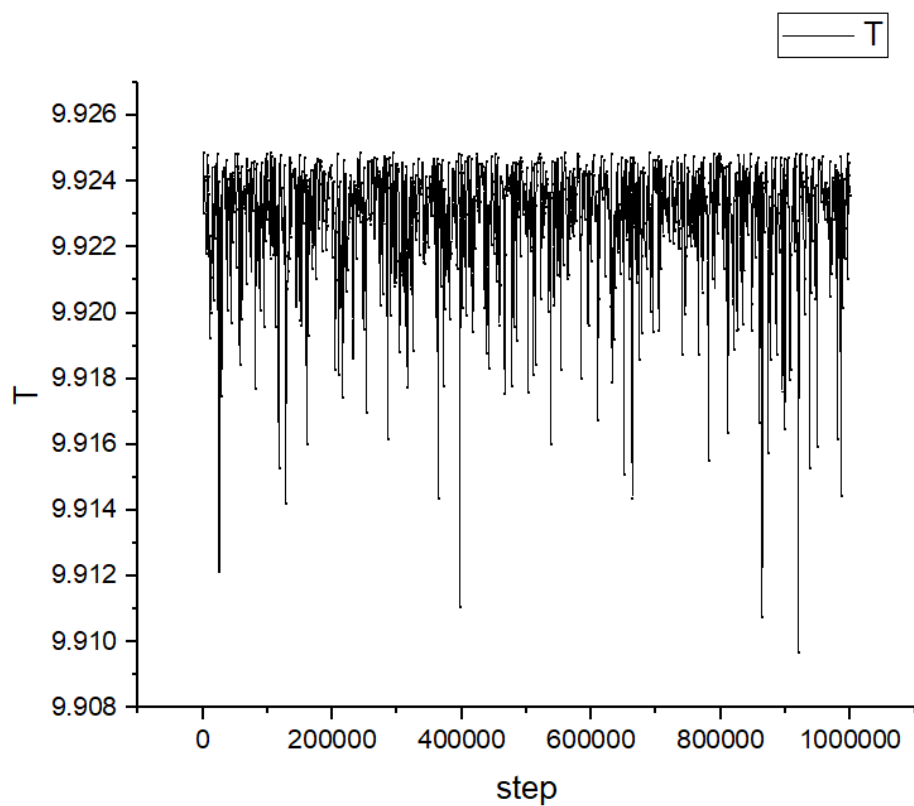


图 2: 步长 $h = 200$ 下的温度随步数变化图

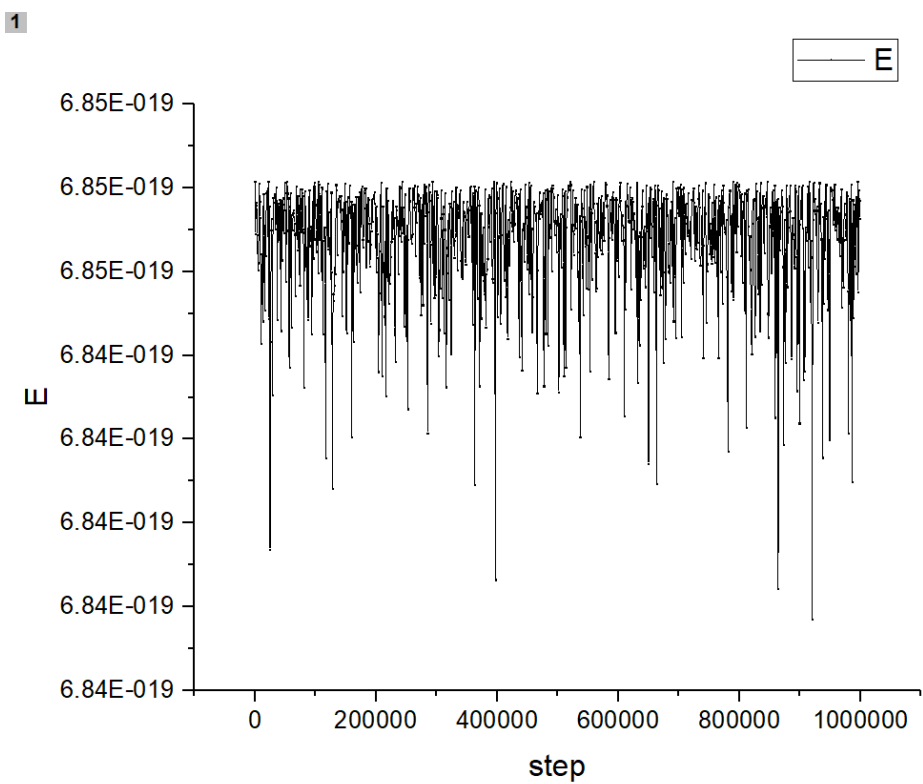


图 3: 步长 $h = 200$ 下的总能量随步数变化图

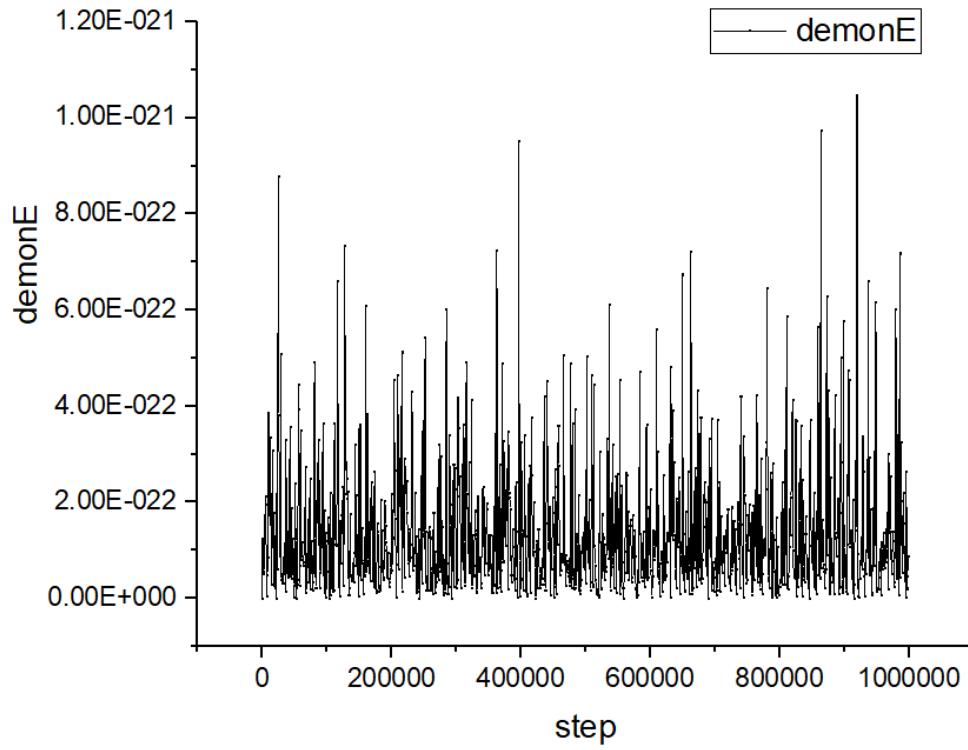


图 4: 步长 $h = 200$ 下的demon能随步数变化图

结算结果如下:

$$v_{avg} = 228.43m/s$$

$$accept\ rate = 0.863$$

$$E = 6.8454 \times 10^{-19}$$

$$Ed = 2.7699 \times 10^{-22}$$

$$T = 9.920863K$$

可见总能量远大于demon能, 且由图可知, 只在少数时间点处demon获得较大的能量用于存储, 而温度随着时间(步长)变化而波动; 近似地, 总能涨落约为总值的 $\frac{1}{100}$, 近似满足涨落量级 $\frac{1}{\sqrt{N}}$

此外, 初始速度是 $[-500, 500]$ 上的均匀分布, 最终平均速度(大小)约为 $228.43m/s$; 根据温度定义得到平衡时的温度 $9.920863K$.

E_d 分布如下:

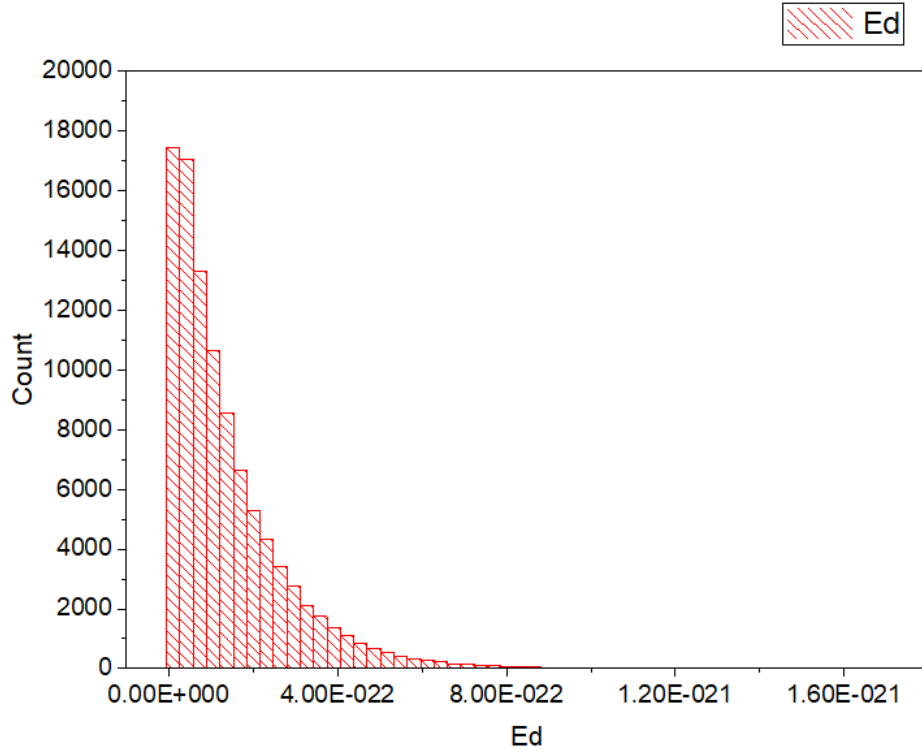


图 5: 步长 $h = 200$ 下的 demom 能分布图

在理论分析部分我们认为 E_d 的分布是服从 *Boltzmann* 几率分布的 ($p(E_d) \propto \exp(-\beta E_d)$), 由上图可见的确如此。

下面考虑速度步长的意义: 步长 h 代表每次速度变化范围的大小, 表征了粒子被激发而变化的程度。这里取 $h = 20m/s$ 绘制速度分布图如下:

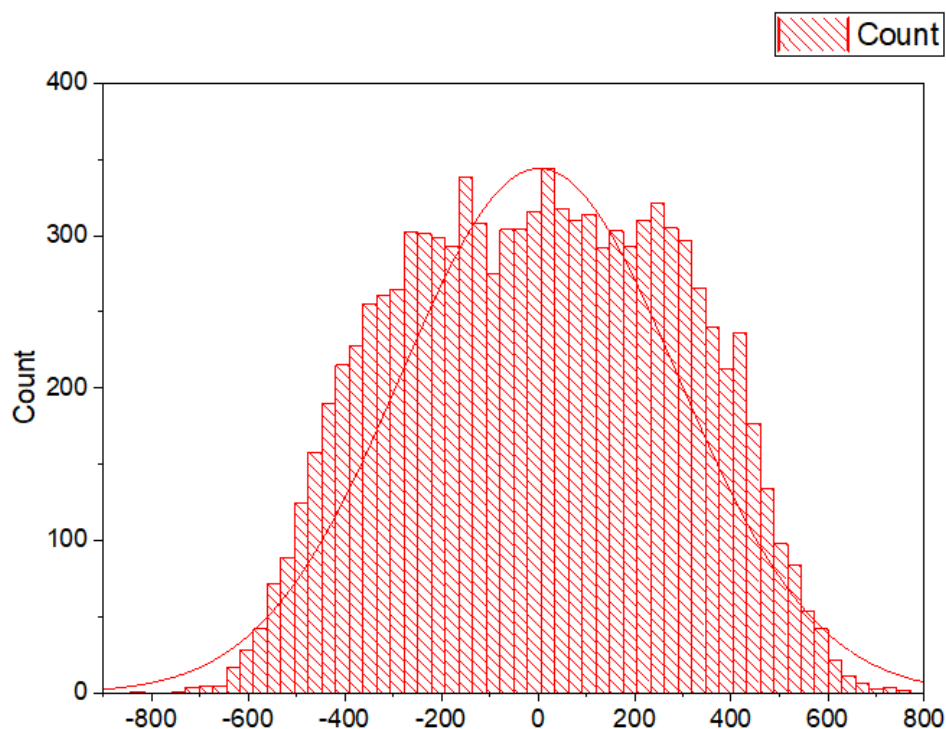


图 6: 步长 $h = 20$ 下的速度分布图

可见与前面的平衡态差距较大，这是因为步长较小，速度改变小的缘故。如若增大模拟的步数 M ，可以预见最终应该也能达到平衡态。

四 结论

本次作业模拟了一维微正则系综下粒子的分布情况，使用demon能的思路进行MC模拟，选取了合适的参数(如氢原子质量 m_p ，初始随机速度上限 500m/s 等)，绘制了平衡态下粒子速度分布，以及温度、总能、demon能随步数增加的变化图，计算得到了该模型下平衡态温度 $T \approx 9.92\text{K}$ 。此外还绘制了 $demonE$ 的概率密度分布；由 $h = 20$ 时的速度分布图可知，当速度改变步长选取不合适时，需要更大的模拟步数才能到达平衡态。