计算物理 A 第十七题

杨旭鹏 PB17000234

2019 年秋季

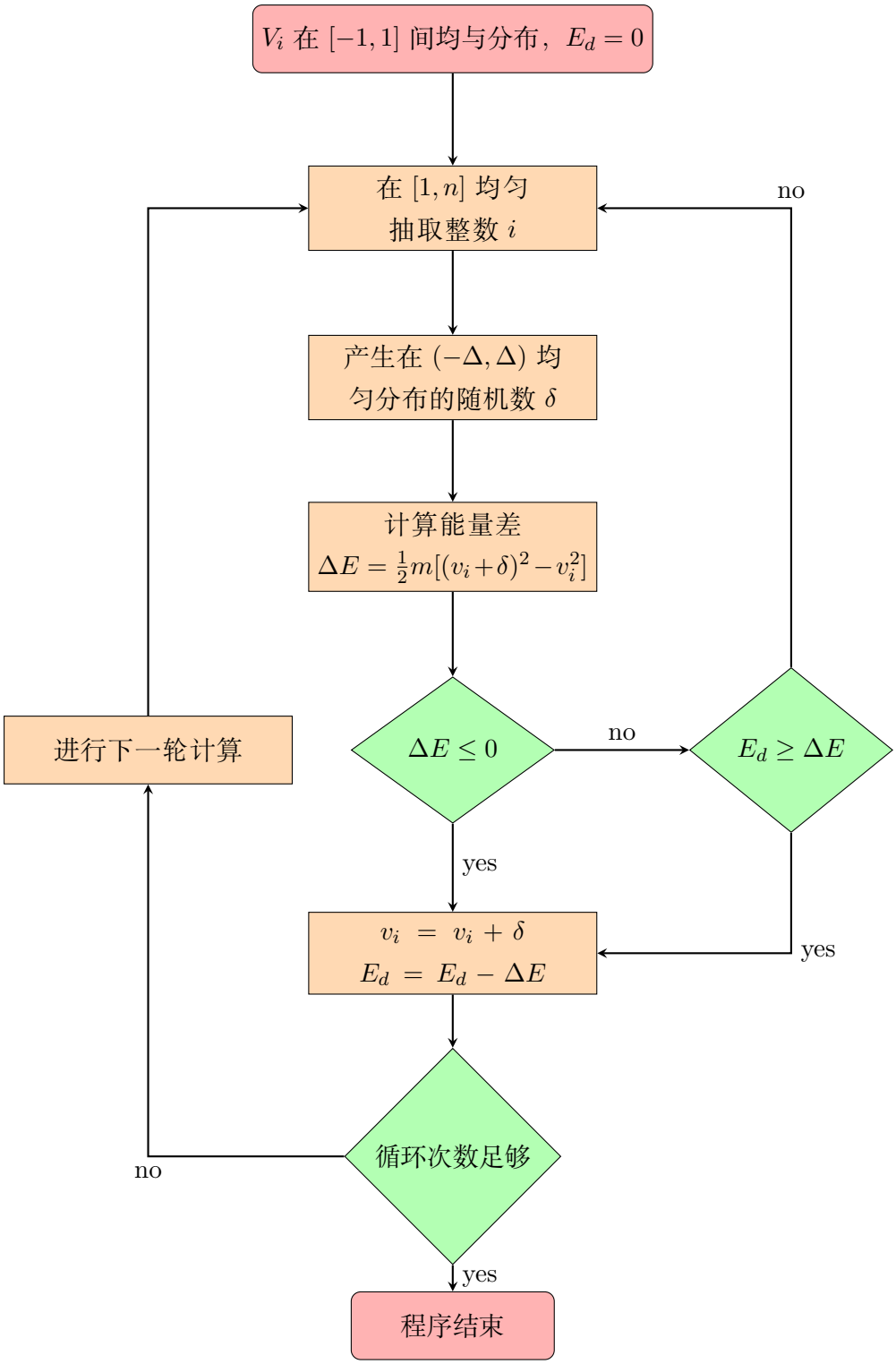
目录

1 题目描述

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 $\frac{1}{2}kT = \frac{1}{2}m\left\langle v^2\right\rangle$ 给出，求平衡时的温度值。

2 微正则系综 Monte Carlo 模拟方法

设初始情况一维粒子速度 V_i 在 $[-1, 1]$ 间均与分布，质量 $m = 1$，Demon 能 $E_d = 0$。设粒子总数为 n，能量每步改变范围为 $(-\Delta, \Delta)$。



算法流程图如上所示。

3 理论推导

为简化计算，规定 $T = m\langle v^2 \rangle$，则可推知：

$$T = \frac{\int_{-1}^{1} v^2 dv}{2} = \frac{1}{3} \approx 0.33333 \tag{1}$$

而平衡态理想气体速度分布满足高斯分布：

$$p(v) = \sqrt{\frac{1}{2\pi T}} e^{-\frac{v^2}{2T}} = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} e^{-\frac{3}{2}v^2} \tag{2}$$

而对于 E_d，根据计算物理讲义上的内容，其满足 Bolzman 分布：

$$p(E_d) = \frac{1}{T} e^{-\frac{E_d}{T}} = 3e^{-3E_d} \tag{3}$$

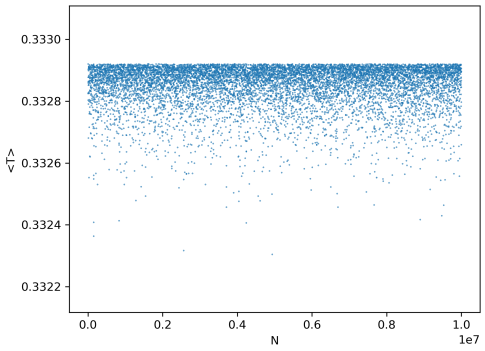
4 程序使用方法

此程序设计为参数在程序代码中直接赋值形式，每次需在程序源码中进行参数调整，进而编译运行，以简化每次输入的过程（重复运行时不用在此输入）。需要调整的参数包括 main 函数中的粒子总个数 n，进行模拟总步数 N，计算粒子温度 T 及 demon 能 E_d 的步数间隔，每一个粒子每一次速度该变量参数 Δ。调整完参数后，编译运行，程序会自动输出不同步数对应的 T, E_d，模拟最后一步时粒子的速度分布至不同文件。

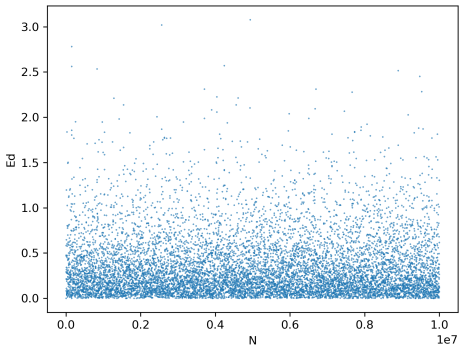
5 程序结果与讨论

5.1 粒子平衡时的温度

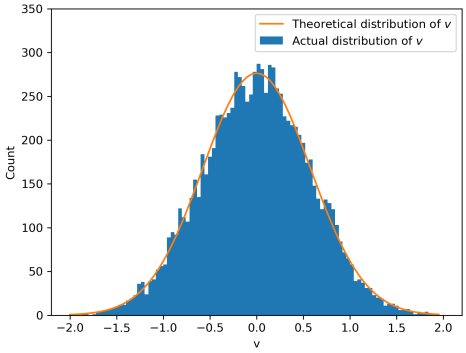
当设定粒子总数 $n = 10^4$，模拟总步数 $N = 10^7$，每计算 1000 步统计粒子的温度 T 和 E_d 时，得到结果：



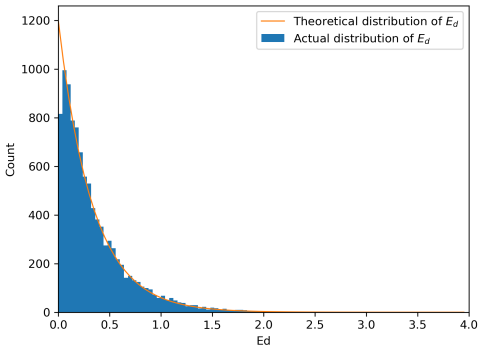
(a) 粒子温度统计结果



(b) E_d 统计结果



(c) 粒子速度 v 的最终分布



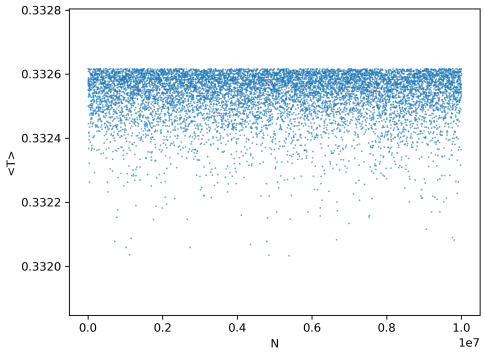
(d) E_d 的分布

图 1: $\Delta = 0.1$，$n = 10^4$，$N = 10^7$，每计算 1000 步统计 T, E_d 的结果

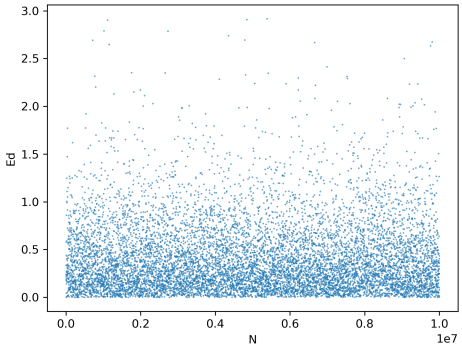
其中的理论概率分布均为归一化概率密度函数 p 乘以统计区间长度和总统计个数得到的理论频率曲线。可以看出，粒子的温度基本稳定在 0.332921，与理论值 $\frac{1}{3}$ 基本一致，差别在于一开始初始化速度时存在统计涨落。而粒子的温度随步数变化幅度较小，基本满足微正则系综的要求。从粒子模拟最后的速度分布看出与理论高斯分布比较接近，若提高粒子总数，猜测能够与理论分布更加接近，但这样会增大计算量。而 E_d 的统计分布与理论的 Bolzman 分布除了在 0 附近也拟合的比较好，这样的结果可能来自于 Bolzman0 附近导数较大，变化比较剧烈，猜测若减小速度改变的步长范围会使 E_d 的统计分布更加接近理论分布，但是同样的必须提高计算总步数，才可能使系统达到平衡态，而这样会增加计算量。则可以近似认为模拟步数 $N = 10^7$ 时系统达到平衡态。达到题目要求。

5.2 参数对于结果的影响

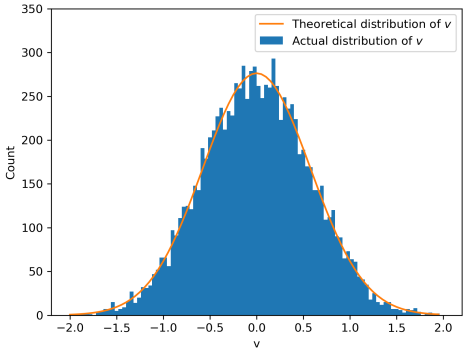
若调整速度改变步长参数 $\Delta = 1$，得到：



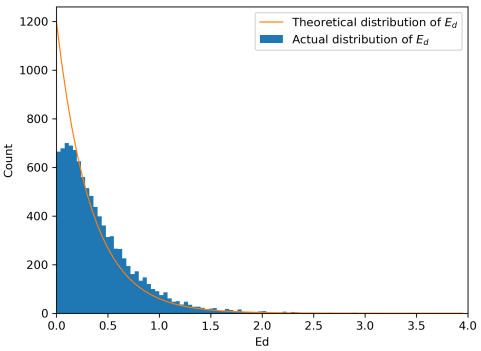
(a) 粒子温度统计结果



(b) E_d 统计结果



(c) 粒子速度 v 的最终分布

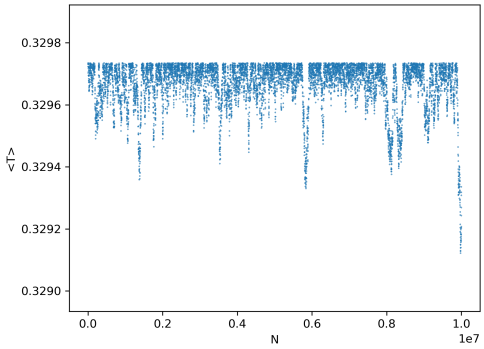


(d) E_d 的分布

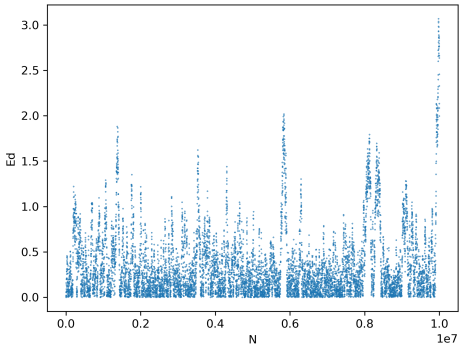
图 2: $\Delta = 1$, $n = 10^4$, $N = 10^7$, 每计算 1000 步统计 T, E_d 的结果

可以看出步长的变化会导致 E_d 的统计分布变化。猜测速度变化步长约小，E_d 更加接近理论分布。因为速度变化步长越大，会迫使本来在 0 附近的 Ed 下一步变化到离 0 距离更远的地方，偏离理论分布。

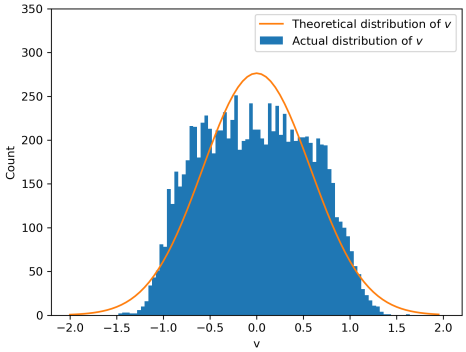
为此，继续调整参数 $\Delta = 0.01$，得到：



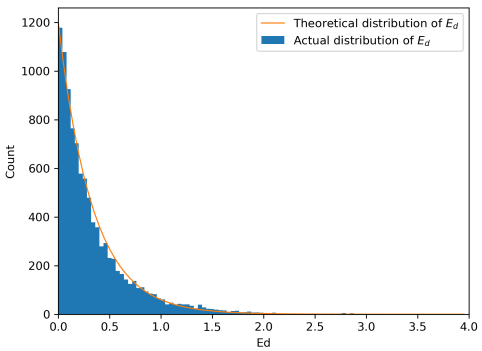
(a) 粒子温度统计结果



(b) E_d 统计结果



(c) 粒子速度 v 的最终分布



(d) E_d 的分布

图 3: $\Delta = 0.01$，$n = 10^4$，$N = 10^7$，每计算 1000 步统计 T, E_d 的结果

可以看出，当 Δ 减小时，确实使 E_d 更加接近理论分布，但是与此同时，在相同总模拟步数下，由于步数的减小，导致在此步数下系统并未达到平衡态，导致 v 的分布偏离平衡时的理论分布。

所以为了模拟的更加真实性，速度改变步长的设定既不能太小，也不能太大。

值得注意的是，从 E_d 的统计结果来看，发现此时每一步间的关联性比较大，出现多出类似尖峰状的形状，表明在某一步数区间内，E_d 随步数增加而增加，某一区间内随步数增加而减小。这也就意味着在某些步数区间内，系统能量的该变量 ΔE 都为负值而在另外一些区间内，都为正值。对于这样的现象，本人没有想到合理的令人满意的解释，可能由于随机数的产生存在某种关联性导致。

6 附录

A Metropois 算法抽样 C 语言源程序

```c
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <time.h>
#include <math.h>
#define a 16807
#define b 0
#define m 2147483647
#define r (m%a)
#define q (m/a)


//写文件子程序，输入写成文件名称字符串str，数据来源于数组num，数据总数n
int my_filewriter(char str[],double num[],int n){
    FILE * fp;
    fp = fopen(str,"w+");

    for(int i=0;i<(n-1);i++)
    {
        fprintf(fp,"%lf,",num[i]);

    }
    fprintf(fp,"%lf",num[n-1]); //最后一个数据后不加 ","
    fclose(fp);
    return 0;
}



int main(int argc, const char * argv[]) {
    time_t t;
    srand((unsigned) time(&t)); //给随机函数赋种子值
    int n = 10000; //一维粒子的总个数
    double *v = malloc(sizeof(double)*n); //一维粒子的速度数组
    double dE; //能量差
    double dv; //某一步对某一粒子速度的改变量
    double delta = 0.1; //每一步每一粒子速度的改变范围在[-delta,delat]之间
    int N = 10000000; //总步数
    int i;  //粒子的标号
    int flag = 0;
    int flag2 = 0;
```

```
41    int step = 1000; //计算粒子平均温度与Ed的步数间隔
42
43    double *T = malloc(sizeof(double)*N/step + 1); //不同步数的一维粒子温度
44    double *Td = malloc(sizeof(double)*N/step + 1); //不同步数的demon能
45    double Ed = 0; //demon能初值为0
46
47    for(int j =0;j<N/step;j++){
48        T[j] = 0;
49    }
50
51    for(int j = 0;j<n;j++){
52        v[j] = 2*(double)rand()/RAND_MAX - 1; //粒子速度初始化
53    }
54
55
56    for(int k = 0;k<n;k++){ //计算模拟后的系统平均温度
57        T[0] += pow( v[k],2 )/n;
58    }
59    Td[0] = 0;
60    flag++;
61
62
63    for(int j = 0;j<N;){
64        i = rand() % n;
65        dv = 2*delta*rand()/(double)RAND_MAX-delta;
66
67        dE = 0.5*( pow(v[i]+dv,2)-pow(v[i],2) );
68        if(dE<0){
69            v[i] += dv;
70            Ed -= dE;
71            j++;
72        }
73        else{
74            if(Ed >= dE){
75                v[i] += dv;
76                Ed -= dE;
77                j++;
78            }
79        }
80        if(j % step == 0 && j != 0 && j!= flag2){
              //当步数差了step步时计算T,flag2为判断是否与上步相同的标志
81            flag2 = j;
82            for(int k = 0;k<n;k++){ //计算模拟后的系统平均温度
83                T[flag] += pow( v[k],2 )/n;
84            }
```

```
            Td[flag] = Ed;
            flag++;
        }
    }

    my_filewriter("v.dat", v, n);
    my_filewriter("T.dat", T, N/step + 1);
    my_filewriter("Ed.dat", Td, N/step + 1);

    return 0;
}
```

B 可视化绘图及数据处理 Python 程序源码

```python
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import math

plt.rcParams['savefig.dpi'] = 300 #图片像素
plt.rcParams['figure.dpi'] = 300 #分辨率
# 默认的像素：[6.0,4.0]，分辨率为100，图片尺寸为 600&400
fig1 = plt.figure()
fig2 = plt.figure()
fig3 = plt.figure()
fig4 = plt.figure()

ax1 = fig1.add_subplot(111)
ax2 = fig2.add_subplot(111)
ax3 = fig3.add_subplot(111)
ax4 = fig4.add_subplot(111)

v = []
T = []
vcul = []
Ed = []
Edcul = []
XT = []
delta = 0.1
n = 4
N = 7
step = 1000

XT = np.arange(0, 10**N + step/2, step)

with open('problem 17/v.dat', 'r') as f:
    while True:
        lines = f.readline() # 整行读取数据
        if not lines:
            break
        v = [float(i) for i in lines.split(',')] # 将整行数据分割处理
    v = np.array(v) # 将数据从list类型转换为array类型。


with open('problem 17/T.dat', 'r') as f:
    while True:
        lines = f.readline() # 整行读取数据
        if not lines:
```

```
            break
        T = [float(i) for i in lines.split(',')] # 将整行数据分割处理
    T = np.array(T) # 将数据从list类型转换为array类型。

with open('problem 17/Ed.dat', 'r') as f:
    while True:
        lines = f.readline() # 整行读取数据
        if not lines:
            break
        Ed = [float(i) for i in lines.split(',')] # 将整行数据分割处理
    Ed = np.array(Ed) # 将数据从list类型转换为array类型。


vcul = (10**n)*0.04*math.sqrt(3/(2*math.pi))*np.exp(-3*np.power(np.arange(-2, 2,
    0.05), 2)/2)
Edcul = (10**N/step)*0.04*np.exp(-3*np.arange(0, 4, 0.05))*3


ax1.hist(v, np.arange(-2, 2 + 0.04/2, 0.04), label=r'Actual distribution of
    $v$') # DLA模拟结果散点图
ax1.plot(np.arange(-2, 2, 0.05), vcul, label=r'Theoretical distribution of $v$')
ax1.set_xlabel('v')
ax1.set_ylabel('Count')
ax1.legend(loc=1)
ax1.set_ylim(0, 350)
#ax1.set_aspect('equal')
fig1.savefig(str(delta)+'-10'+str(n)+'-10'+str(N)+'-v.png')

ax2.scatter(XT, T, s=0.1)
ax2.set_xlabel('N')
ax2.set_ylabel('<T>')
#ax2.set_aspect('equal')
fig2.savefig(str(delta)+'-10'+str(n)+'-10'+str(N)+'-T.png')


ax3.scatter(XT, Ed, s=0.1, label=r'$Ed$')
ax3.set_xlabel('N')
ax3.set_ylabel('Ed')
#ax3.set_aspect('equal')
fig3.savefig(str(delta)+'-10'+str(n)+'-10'+str(N)+'-Ed.png')

ax4.hist(Ed, np.arange(0, 4 + 0.04/2, 0.04), label=r'Actual distribution of
    $E_{d}$') # DLA模拟结果散点图
ax4.plot(np.arange(0, 4, 0.05), Edcul, lw=1, label=r'Theoretical distribution of
    $E_{d}$')
```

```
ax4.set_xlabel('Ed')
ax4.set_ylabel('Count')
ax4.set_xlim(0, 4)
ax4.legend(loc = 1)
fig4.savefig(str(delta)+'-10'+str(n)+'-10'+str(N)+'-Ed-2.png')
```