

# 计算物理导论 - Homework 6

## A. Langevin方程

一个有限温度  $T$  下一维粒子的Langevin方程是：

$$m\ddot{q} + \lambda\dot{q} + \frac{\partial V}{\partial q} = \xi(t).$$

其中噪声项  $\xi(t)$  是一白噪声，其关联函数是

$$\langle \xi(t')\xi(t) \rangle = \mathcal{D}^2 \cdot \delta(t - t').$$

- 取势能项  $V = 0$ ，从能均分定理的角度，热平衡态的粒子具有平均动能  $\langle E_k \rangle = k_B T/2$ . 利用这一关系导出  $\mathcal{D}^2$  和  $m, \lambda, k_B, T$  的关系。思考这一关系的物理意义。(1分)
- 为了数值上求解这个问题，你需要数值求解上述SDE问题。请你写出一个离散化的格式。(1分)
- 取势能项  $V = \frac{1}{2}x^2$  且其余参数  $k_B = m = \lambda = 1$ . 使用SDE的相关算法数值求解下列问题：
  - 首先取  $T = 1$ ，计算两个初态下的时间演化结果：A.  $q(0) = 0, \dot{q}(0) = 1$  B.  $q(0) = 4, \dot{q}(0) = 0$ . 对于每个初态，计算大量粒子的演化轨迹，并对物理量作系综平均，在同一张图画出  $t \in [0, 10]$  区间上的系综平均动能  $\langle E_k \rangle(t)$  和平均势能  $\langle V \rangle(t)$ 。(2分)
  - 自己选择区间，改变温度，画出充分弛豫后系统的平均动能  $\langle E_k \rangle(\infty)$  平均势能  $\langle V \rangle(\infty)$ . 你从这个结果中发现了什么？(1分) hint: 物理量的系综平均和时间平均有什么关系？
  - 将势能改为  $V = \frac{1}{2}x^4$  并重复(b)的计算。你发现了什么差异？怎么理解这一差异？(1分)

## B. 梳子上的随机行走

考虑在一个梳子状的晶格上的随机行走：

- 粒子  $t = 0$  时刻位于原点  $(x, y) = (0, 0)$ .
- 粒子每步进行随机行走，**等可能**选取所有可以前进的方向，并前进一步。
- 晶格是梳子形的，粒子在x轴上时，可以自由选择四个前进的方向。如果不在x轴上，则只能上下移动。

你要求解：

- 该随机运动过程中，平均水平位移  $\langle |x| \rangle$  和时间  $t$  的关系。(1.5分)
- 对比一维随机行走，它们有什么差异？(1.5分)
- 尝试解释你发现的规律。(1分)

