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

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

1. 导出D^2和m, λ, k_B, T的关系

取势能项V=0，从动能均分定理的角度，热平衡态的粒子具有平均动能$\langle E_k \rangle = \frac{k_B T}{2}$. 利用这一关系导出$D^2$和$m, \lambda, k_B, T$的关系。思考这一关系的物理意义。(1分)

我们从给定的 Langevin 方程出发，在势能项 $V = 0$ 的情况下，简化为：

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

令 $\dot{q} = v$，上式变成速度形式的随机微分方程：

$$m\dot{v} + \lambda v = \xi(t),$$

由于 $v(t)$ 服从 Ornstein-Uhlenbeck 过程，其稳态解的方差 $\langle v^2 \rangle$ 满足以下关系：

$$\frac{d\langle v^2 \rangle}{dt} = -2\frac{\lambda}{m}\langle v^2 \rangle + \frac{D^2}{m^2}$$

稳态时左边为零，得：

$$0 = -2\frac{\lambda}{m}\langle v^2 \rangle + \frac{D^2}{m^2}$$

则

$$\langle v^2 \rangle = \frac{D^2}{2\lambda m}$$

又：

$$\langle v^2 \rangle = \frac{k_B T}{m}$$

则

$$D^2 = 2\lambda k_B T$$

2.数值求解的离散化格式

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)

给出的方程：

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

我们将该二阶方程拆成两个一阶方程，引入速度$v = \dot{q}$,得到

$$\begin{cases} \dot{q} = v \\ \dot{v} = -\frac{\lambda}{m}v - \frac{1}{m}\frac{\partial V}{\partial q} + \frac{1}{m}\xi(t) \end{cases}$$

引入时间步长Δt,离散化形式如下：

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + v_n \Delta t \\ v_{n+1} = v_n + \left(-\frac{\lambda}{m}v_n - \frac{1}{m}\frac{\partial V}{\partial q_n}\right)\Delta t + \frac{1}{m}D \cdot \sqrt{\Delta t} \cdot \mathcal{N}(0,1) \end{cases}$$

其中：

- $\mathcal{N}(0,1)$表示标准正态分布的高斯白噪声；
- $D = \sqrt{2\lambda k_B T}$,是我们在第1问中推导出的噪声强度；

由此得到离散化的格式：

$$q_{n+1} = q_n + v_n \Delta t$$
$$v_{n+1} = v_n + \left(-\frac{\lambda}{m}v_n - \frac{1}{m}\frac{\partial V}{\partial q_n}\right)\Delta t + \frac{1}{m}D \cdot \sqrt{\Delta t} \cdot \mathcal{N}(0,1)$$

但是这个方法的精度不够高；采用henu算法改进：

$$
\begin{aligned}
\tilde{q}_{n+1} &= q_n + v_n \Delta t \\
\tilde{v}_{n+1} &= v_n + \left(-\frac{\lambda}{m} v_n - \frac{1}{m}\frac{\partial V}{\partial q_n}\right)\Delta t + \frac{1}{m} D \cdot \Delta W \\
q_{n+1} &= q_n + \frac{1}{2}(v_n + \tilde{v}_{n+1})\Delta t \\
v_{n+1} &= v_n + \frac{1}{2}\left[\left(-\frac{\lambda}{m} v_n - \frac{1}{m}\frac{\partial V}{\partial q_n}\right) + \left(-\frac{\lambda}{m}\tilde{v}_{n+1} - \frac{1}{m}\frac{\partial V}{\partial \tilde{q}_{n+1}}\right)\right]\Delta t + \frac{1}{m} D \cdot \Delta W
\end{aligned}
$$

3. 求解问题

取势能项$V = \frac{1}{2}x^2$且其余参数$k_B T = m = \lambda = 1$. 使用SDE的相关算法数值求解下列问题：

(a).系统平均动能$\langle E_k(t) \rangle$ 和平均势能$\langle V(t) \rangle$的演化

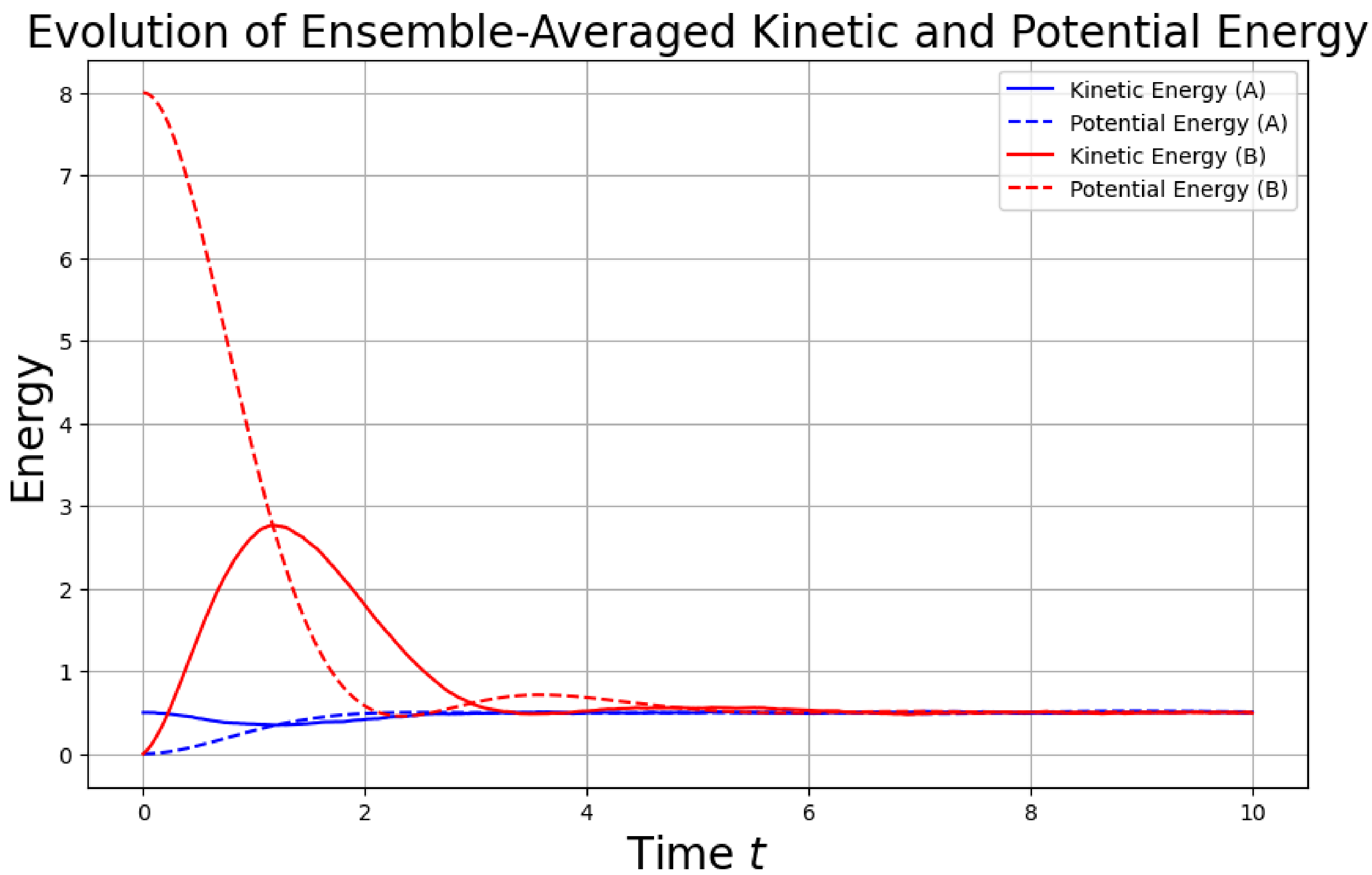
首先取T=1，计算两个初态下的时间演化结果：A.q(0)=0,$\dot{q}(0) = 1$ B.q(0)=4,$\dot{q}(0) = 0$. 对于每个初态，计算大量粒子的演化轨迹，并对物理量作系综平均，在同一张图画出t∈[0,10]区间上的系统平均动能$\langle E_k(t) \rangle$ 和平均势能$\langle V(t) \rangle$(2分)

在这样的系数下离散化的方程更新为：

$$
\begin{aligned}
\tilde{q}_{n+1} &= q_n + v_n \Delta t \\
\tilde{v}_{n+1} &= v_n + (-v_n - q_n)\Delta t + \sqrt{2}\Delta W \\
q_{n+1} &= q_n + \frac{1}{2}(v_n + \tilde{v}_{n+1})\Delta t \\
v_{n+1} &= v_n + \frac{1}{2}\left[(-v_n - q_n) + (-\tilde{v}_{n+1} - \tilde{q}_{n+1})\right]\Delta t + \sqrt{2}\Delta W
\end{aligned}
$$

$\text{其中}\Delta W = \sqrt{\Delta t} \cdot \mathcal{N}(0,1)$在前后保持一致

得到结果：



(b). 自己选择区间，改变温度，画出充分弛豫后系统的平均动能 $\langle E_k(\infty)\rangle$ 平均势能 $\langle V(\infty)\rangle$. 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?

(c). 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

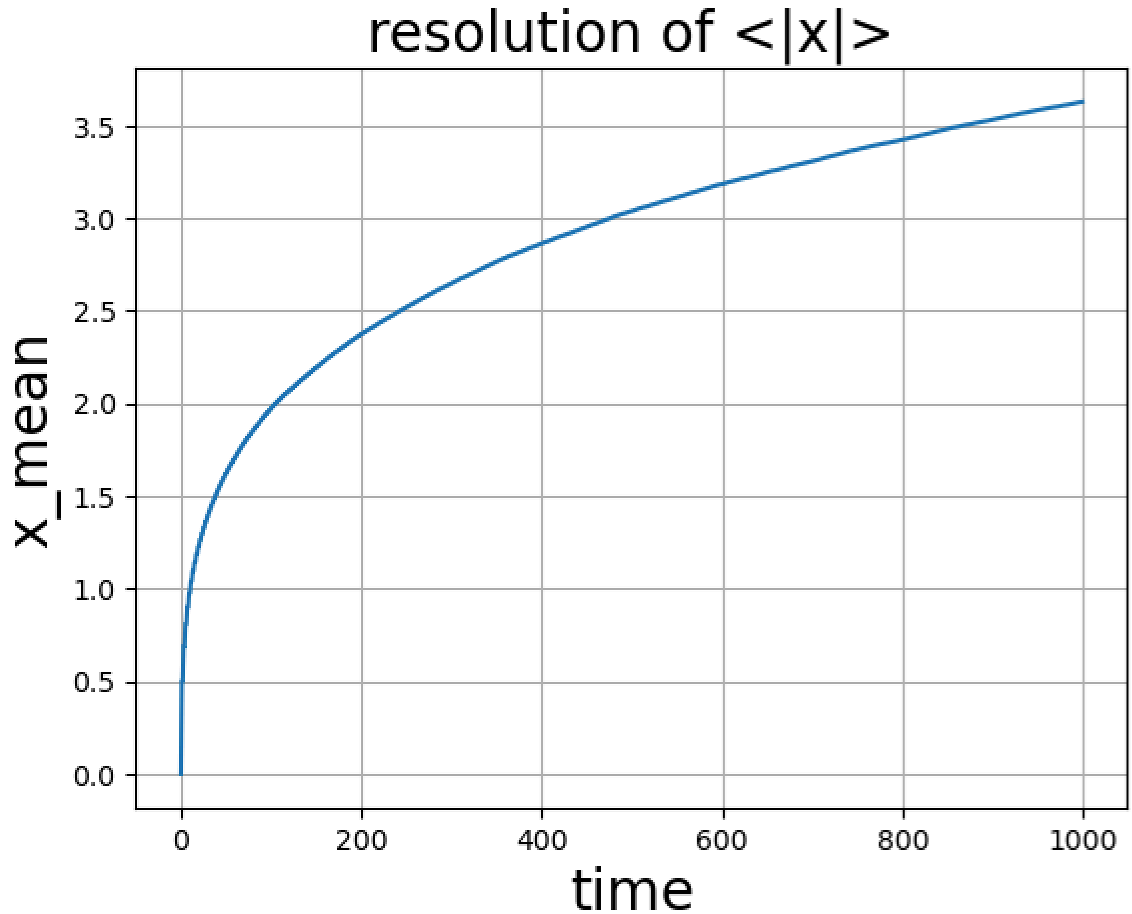
考虑在一个梳子状的晶格上的随机行走：

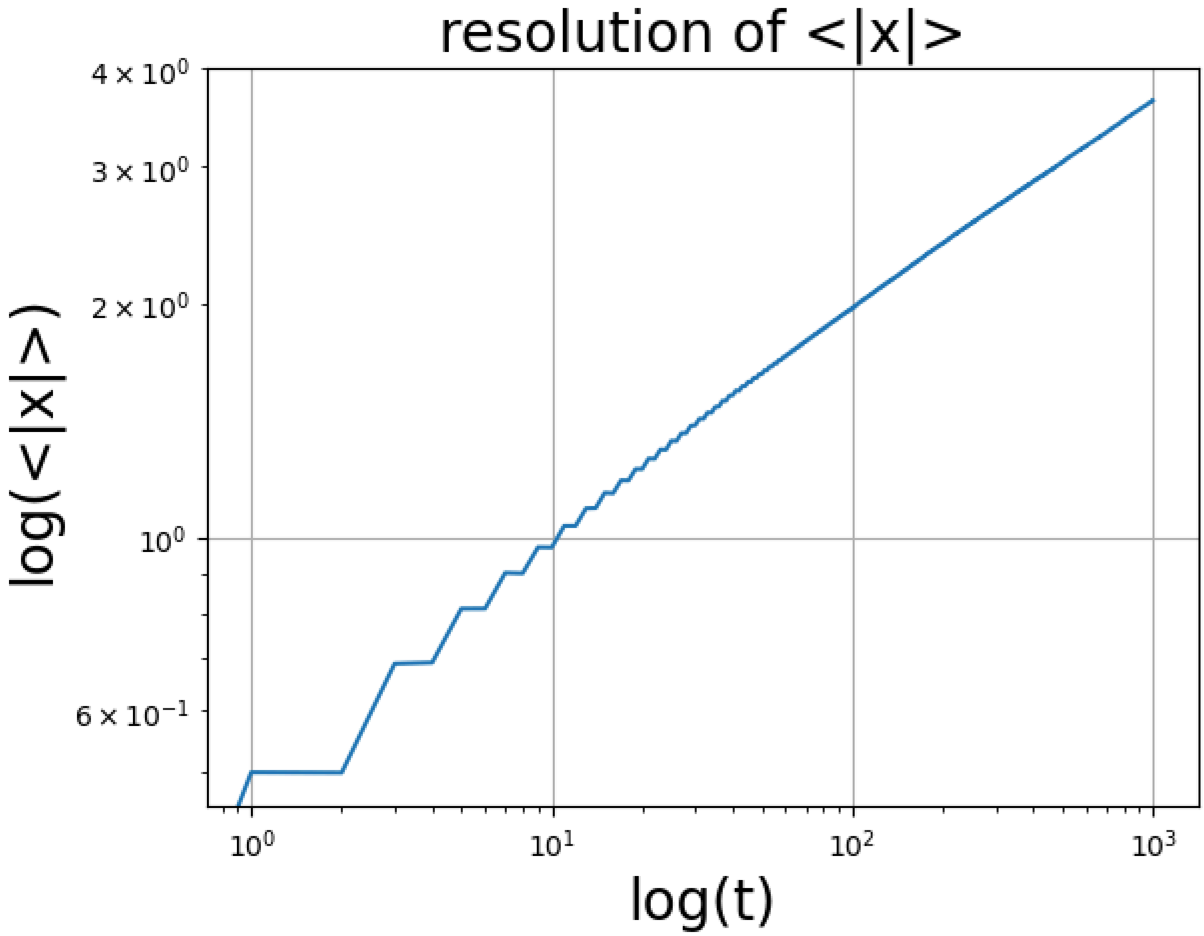
1. 粒子 $t=0$ 时刻位于原点 $(x,y)=(0,0)$.
2. 粒子每步进行随机行走，等可能选取所有可以前进的方向，并前进一步。
3. 晶格是梳子形的，粒子在x轴上时，可以自由选择四个前进的方向。如果不在x轴上，则只能上下移动。

   你需要求解：

1.平均水平位移的演化

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)





因为该题背景下没有限制格点的大小，因此采用记录各地位置的方案。

2.对比一维随机行走

对比一维随机行走，它们有什么差异？(1.5分)

3.解释规律

尝试解释你发现的规律。(1分)