

计算物理第二十题

韦璐 PB16000702

题目：

[作业20]：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。

编程思路：

给定的参数为：单个粒子的质量是 1，并且这个气体不是混合的，总粒子数为一万，我们假设初始时刻粒子的速度分布是在负一到一之间的均匀分布，再假设波尔兹曼常数 $K=1$ ，并且假设初始的 demon 能量是 0，只要求和就可以得到总能量 $E_k = \sum_i^N 0.5 * v_i^2$ ，我们会将这个体系模拟 10 万步：

1. 随机生成一个不超过粒子总数的整数，也就是选中第 i 个粒子与 demon 交换能量
2. 随机生成一个负一到一之间的随机数，设定 delta 为 0.5，得到 $\Delta v_i = \delta * r$ 和粒子动能改

$$\text{变量} \Delta E_k = \frac{1}{2}(v_1^2 - v_2^0)$$

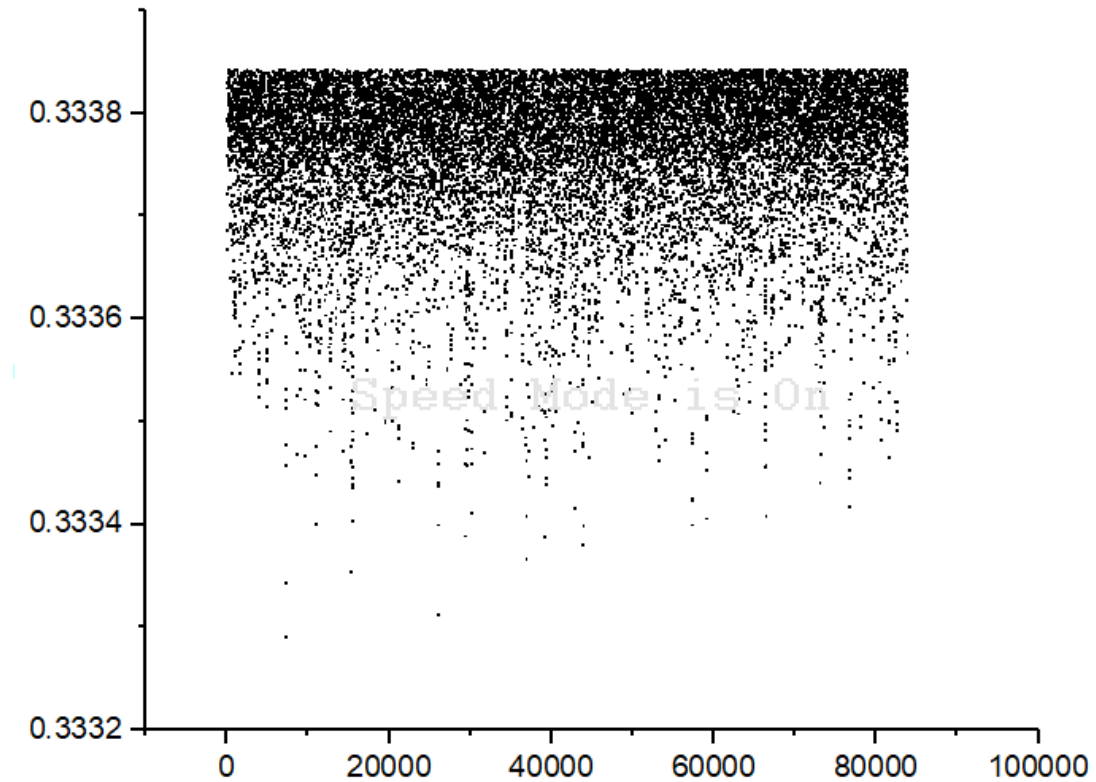
3. 如果动能的该变量小于零或者在零和 demon 之间，我们就接受这个改变，然后返回继续执行。

计算结果与分析：

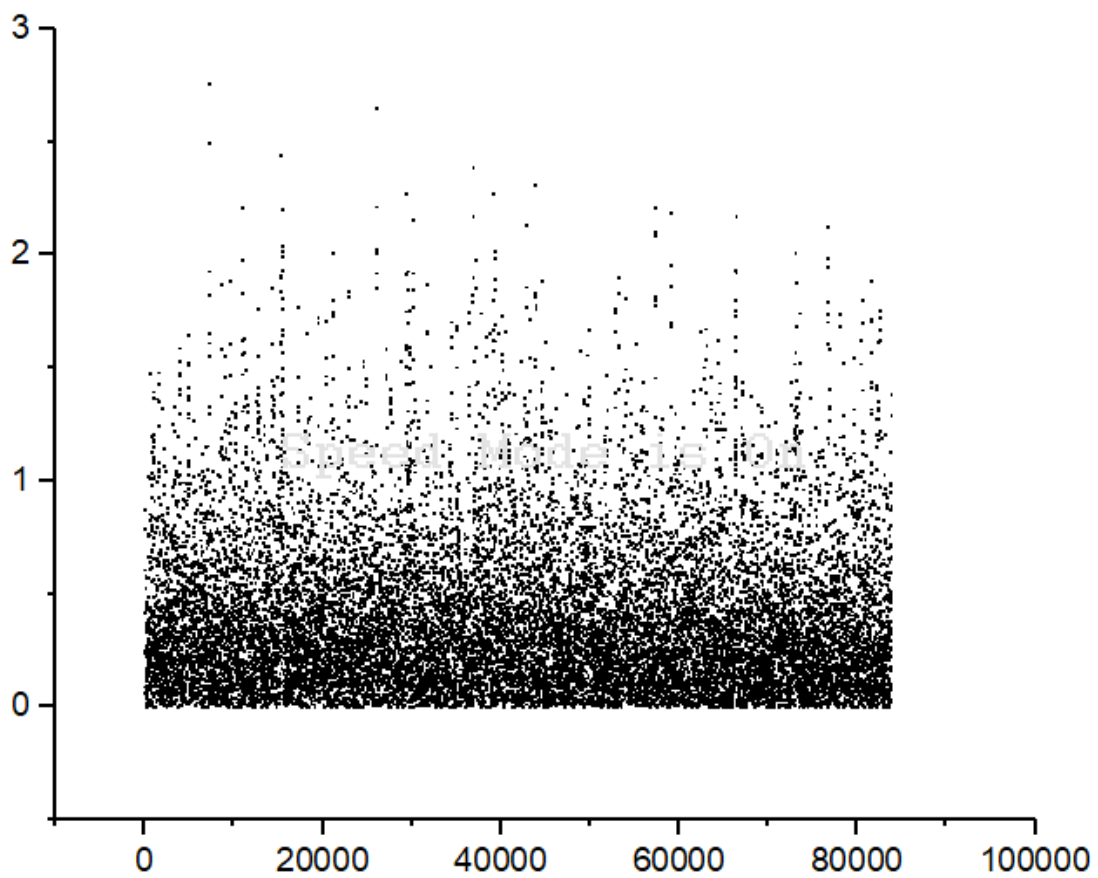
```
0.333765
N 10000, M 100000, delta 0.500000
accept 83791, rate 0.837910
av -0.001101, var 0.333566
```

1. 温度和 demon 能

如上，可以看见温度的平均值是 0.333765



从上图可以看到，温度的变化区间非常小，在 0.001 左右的量级上

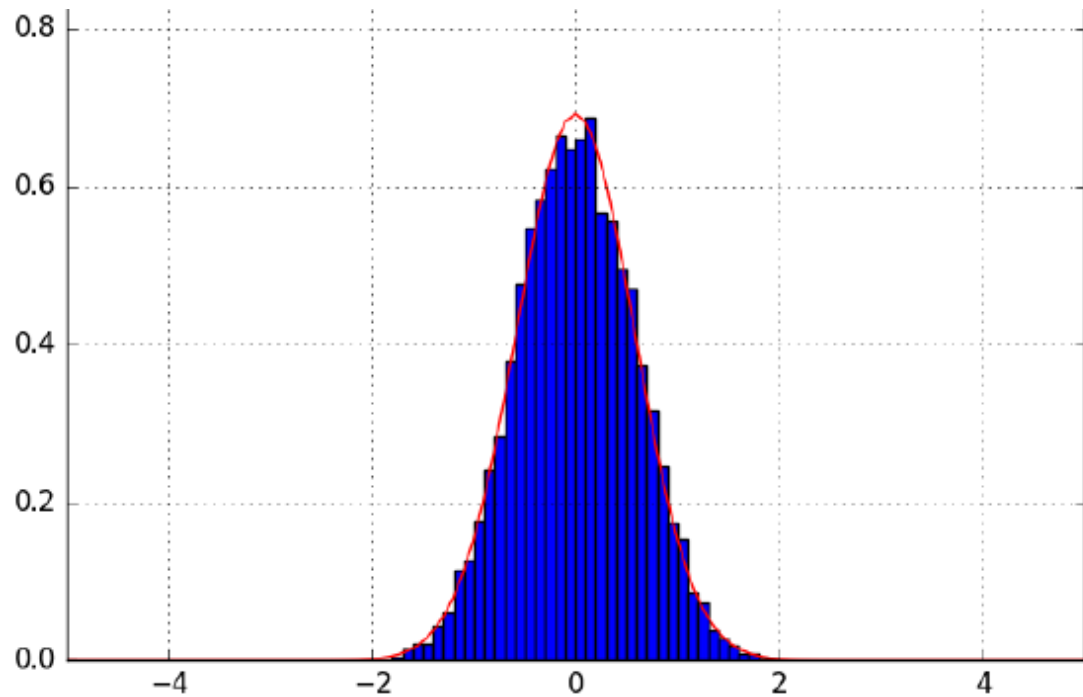


可以看见 demon 能一直在波动，而且波动的相对幅度还很大。

力学是一个多自由度的，而 demon 能只有一个自由度，所以温度的涨落很小，而 demon 能的涨落很大。

2. 平衡态粒子速度分布

从开始的图我们可以看到，一共接收了 83791 个粒子，接受率是 0.83791，而且平衡时候粒子速度的平均值接近零，并且方差接近三分之一。粒子的速度分布直方图和以上两个参数的高斯曲线合并以后：



可以看见符合的非常好。

实验总结：

我们这次模拟在设定初始值的时候都选取了非常特殊的情况，温度变化幅度比较小，对微正则系综的模拟效果比较好。