

第二次作业

12307110227 文轩

一. Thermostat 方法

1. 热导率随温度的变化

在 10×10×20 的体系下，先画出在温度为 1.35（lj 制）时，温度沿 Z 轴的分布图：

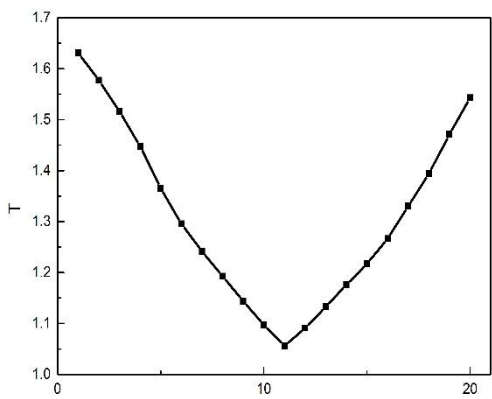


图 1. T=1.35 温度 profile

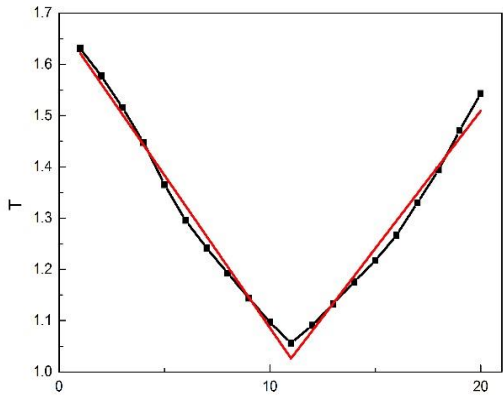


图 2. T=1.35 温度 profile 拟合

对图像进行拟合，得到温度梯度，再根据 log 文件里面的热源输入到系统的能量，求得热导率，并转化为 SI 制。

改变温度后，得到的不同温度的热导率如表 1 所示

表 1. Thermostat 方法热导率随温度变化表

| T (lj 制) | 1.35 | 1.50 | 1.65 | 1.80 | 1.95 |
|--------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Kappa (lj 制) | 7.418 | 7.054 | 7.412 | 7.072 | 7.379 |
| Kappa (SI 制) | 0.140 | 0.133 | 0.140 | 0.133 | 0.139 |

然后做出 Kappa 随温度 T 的变化图像，如图 3：

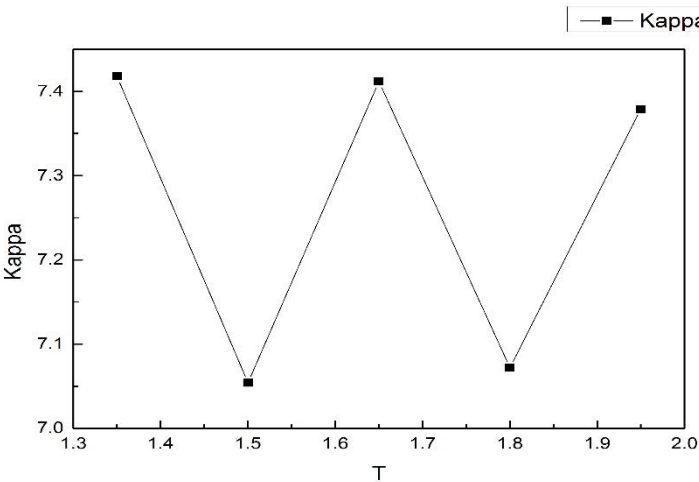


图 3. Thermostat 方法热导率随温度变化图

2. 热导率随长度的变化

固定温度为 1.35，改变 Z 方向上的长度，当长度变为 64 或以上时，温度分布的 profile 图像的线性变得不太好，如图 4 为长度为 64 时的温度分布图：

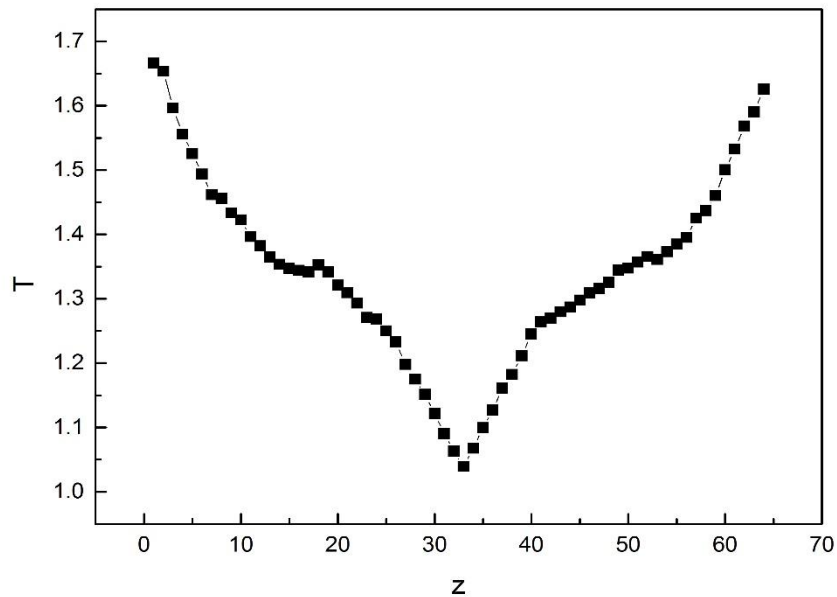


图 4. $L_z=64$ 温度 profile

此时在 log 文件里去找 T_{diff} 的累积平均 ave 随时间的变化，如图 5 所示：

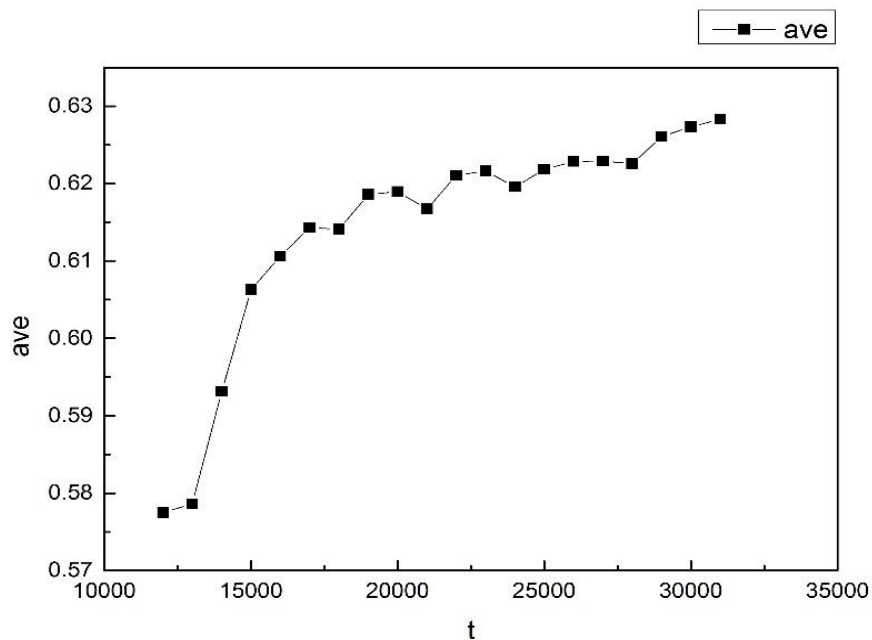


图 5. T_{diff} 的 ave 随时间的变化

由图 5 可知要模拟到 20000 步之后才能大致收敛，于是把模拟的步数变多，得到的 profile 图像如图 6 所示：

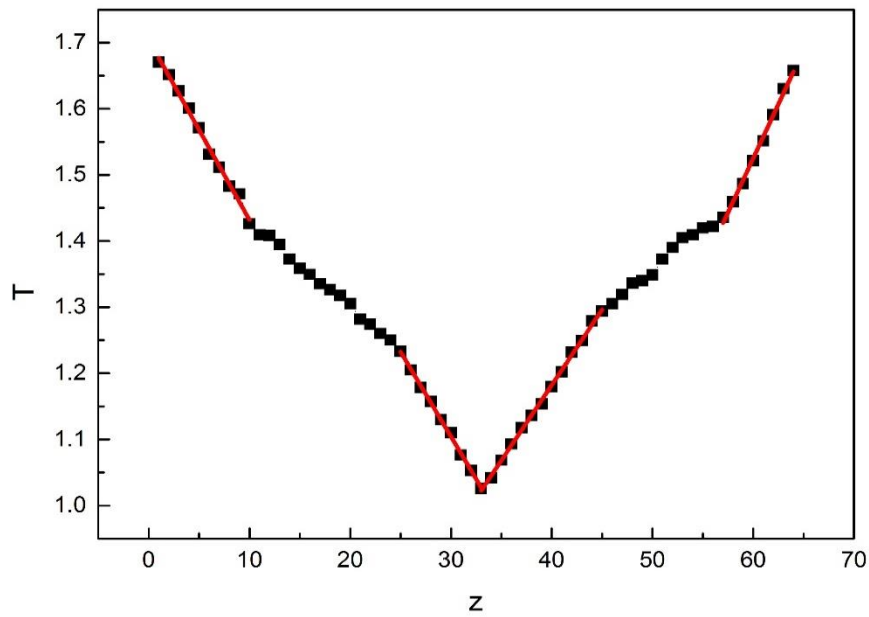


图 6. 增加步数后, $L_z=64$ 温度 profile

发现中间部分还是有线性不好的现象, 于是选取了线性较好的几段来求斜率的平均从而求出温度梯度, 进而求出热导率, 并转化为 SI 制。不同的长度下的热导率如表 2 所示:

表 2. Thermostat 方法热导率随 z 方向长度变化表

| Length_Z | 20 | 40 | 64 | 80 | 100 |
|--------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Kappa (Ij 制) | 7.418 | 8.114 | 6.529 | 6.514 | 8.234 |
| Kappa (SI 制) | 0.140 | 0.152 | 0.123 | 0.122 | 0.155 |

然后做出 Kappa 随 z 方向长度变化的图像:

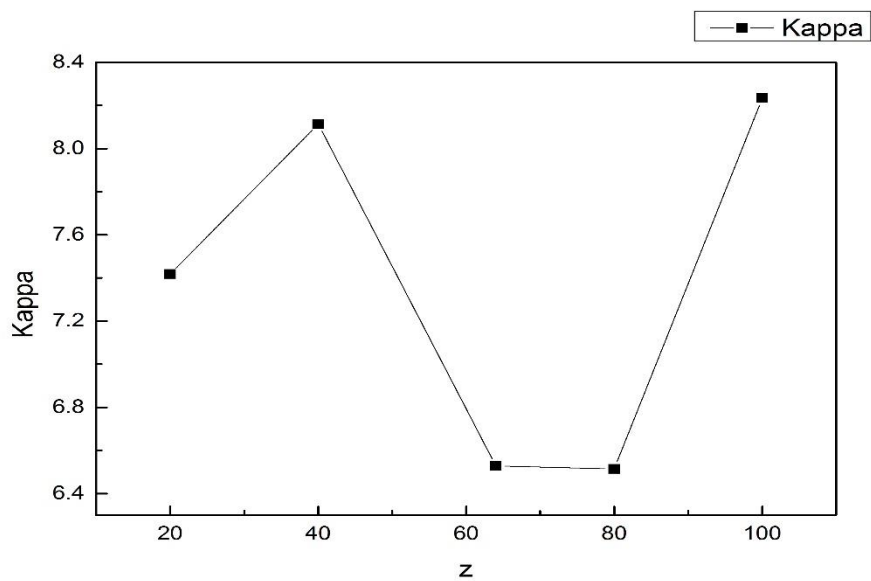


图 7. Thermostat 方法热导率随 z 方向长度变化图

二. Mullerplathe 方法

1. 热导率随温度的变化

在 $10 \times 10 \times 20$ 的体系下，先画出在温度为 1.35（Ij 制）时，温度沿 Z 轴的分布图：

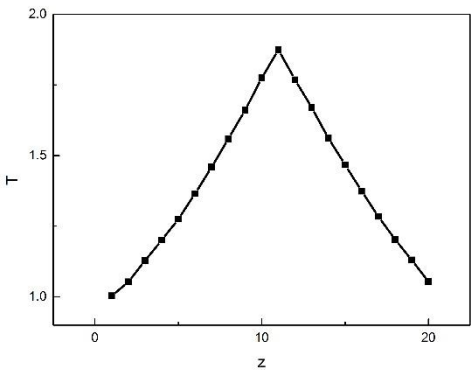


图 8. T=1.35 温度 profile

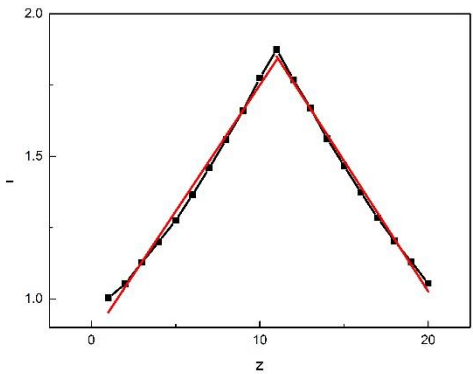


图 9. T=1.35 温度 profile 拟合

进行拟合之后得到温度梯度，再根据 log 文件中的能量可以求出热导率，并转化为 SI 制。不同温度下的热导率如表 3 所示：

表 3. Mullerplathe 方法热导率随温度变化表

| T (Ij 制) | 1.35 | 1.50 | 1.65 | 1.80 | 1.95 |
|--------------|-------|--------|-------|--------|--------|
| Kappa (Ij 制) | 4.488 | 4.6715 | 4.786 | 4.8565 | 5.1505 |
| Kappa (SI 制) | 0.084 | 0.088 | 0.090 | 0.091 | 0.097 |

然后做出 Kappa 随温度 T 变化的图像，得到图 10：

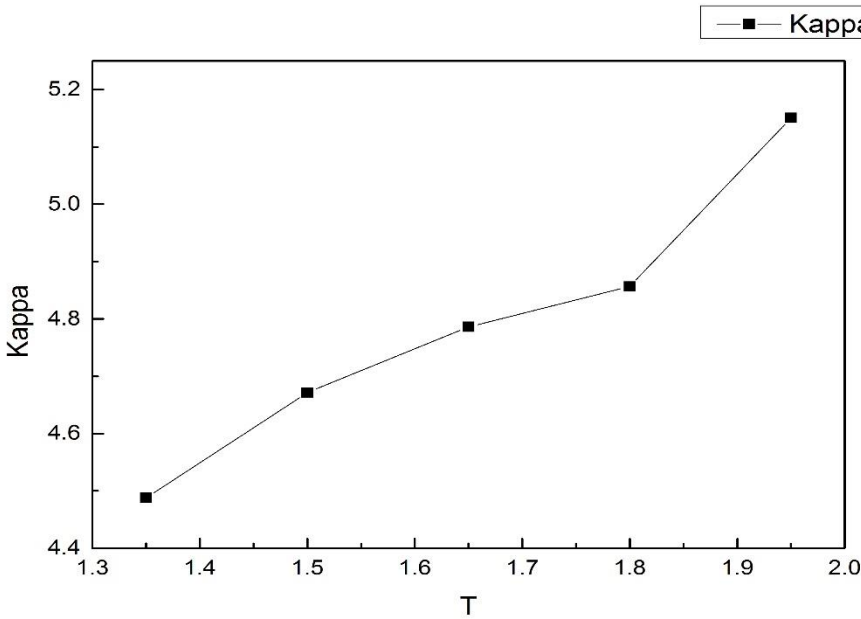


图 10. Mullerplathe 方法热导率随温度变化图

2. 热导率随长度的变化

再固定温度为 1.35，改变 Z 方向上的长度，在长度变长到 64 及以上时，也出现了 thermostat 方法里面出现的问题，温度 profile 图像的线性也开始变差，如图 11 所示。于是也将图像分为几段分别求斜率后再平均从而求得温度梯度，再求出热导率。热导率随 Z 方向长度的变化如表 4 所示：

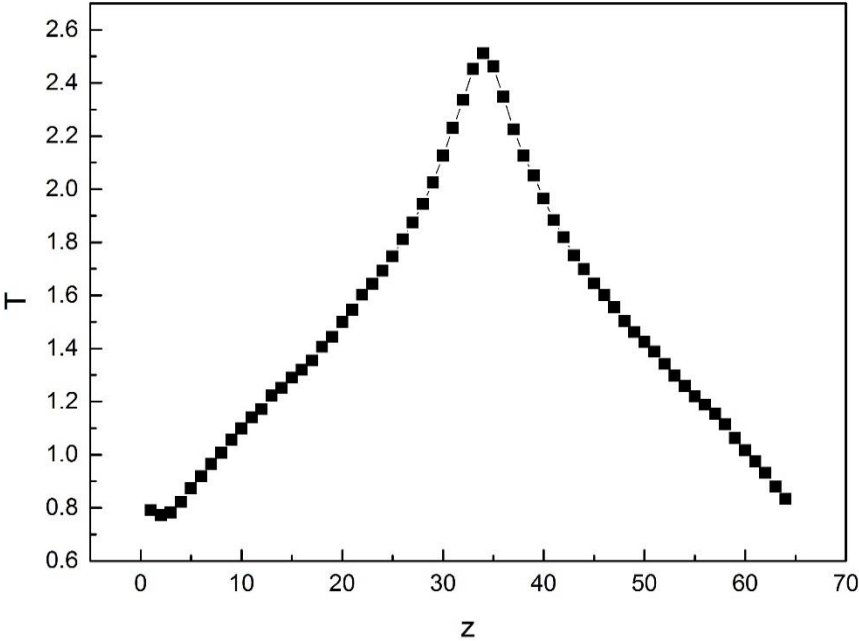


图 11. Lz=64 温度 profile

表 4. Mullerplathe 方法热导率随 Z 方向长度变化表

| Length_Z | 20 | 40 | 64 | 80 | 100 |
|-------------|-------|-------|--------|--------|-------|
| Kappa（Ij 制） | 4.488 | 5.074 | 7.3105 | 8.1385 | 6.68 |
| Kappa（SI 制） | 0.084 | 0.095 | 0.137 | 0.153 | 0.126 |

然后做出 Kappa 随 Z 方向长度变化的图像：

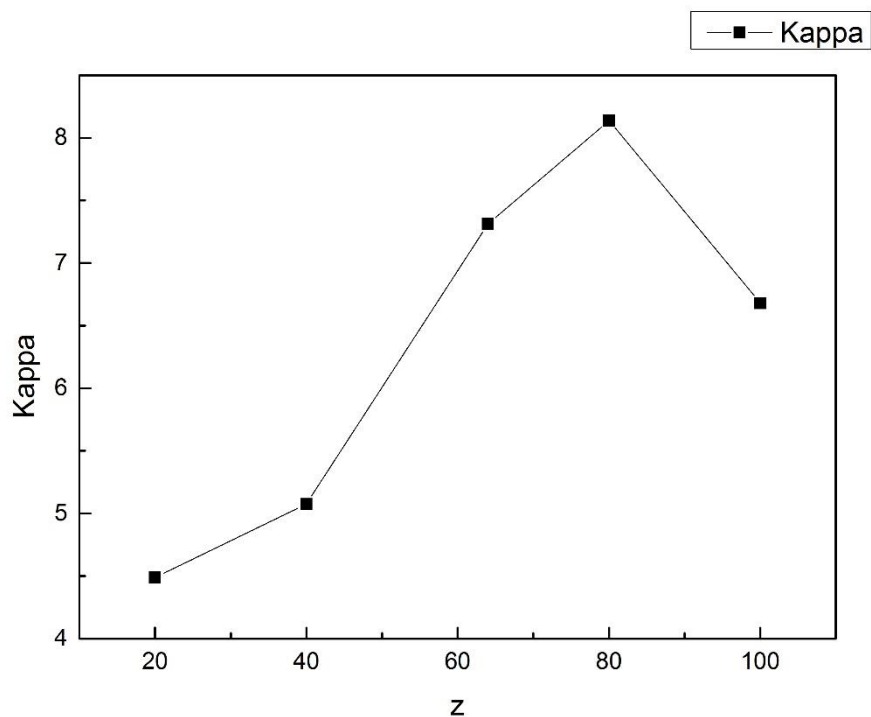


图 12. Mullerplathe 方法热导率随 Z 方向长度变化图

三. Greenkubo 方法：

由于 Greenkubo 方法是直接得到热导率的，因此直接做出了热导率随温度 T、Z 方向长度的变化的表格及图像：

表 5. Greenkubo 方法热导率随温度变化表

| T (Ij 制) | 1.35 | 1.50 | 1.65 | 1.80 | 1.95 |
|--------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Kappa (Ij 制) | 2.853 | 3.828 | 3.403 | 3.872 | 3.801 |
| Kappa (SI 制) | 0.054 | 0.072 | 0.064 | 0.073 | 0.071 |

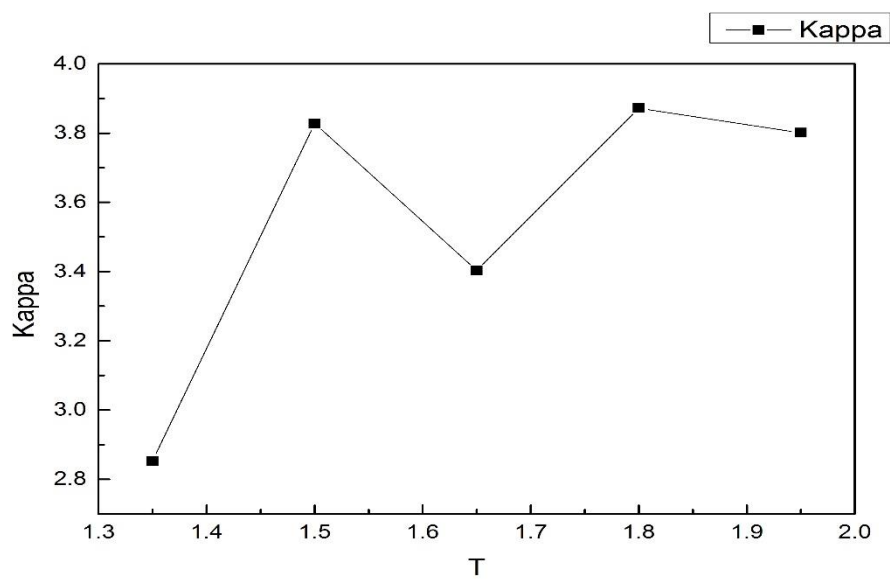


图 13. Greenkubo 方法热导率随温度变化图

表 4. Greenkubo 方法热导率随 z 方向长度变化表

| Length_Z | 10 | 20 | 32 | 40 | 50 |
|--------------|-------|-------|-------|-------|-------|
| Kappa (Ij 制) | 2.853 | 3.617 | 3.131 | 3.167 | 2.400 |
| Kappa (SI 制) | 0.054 | 0.068 | 0.059 | 0.060 | 0.045 |

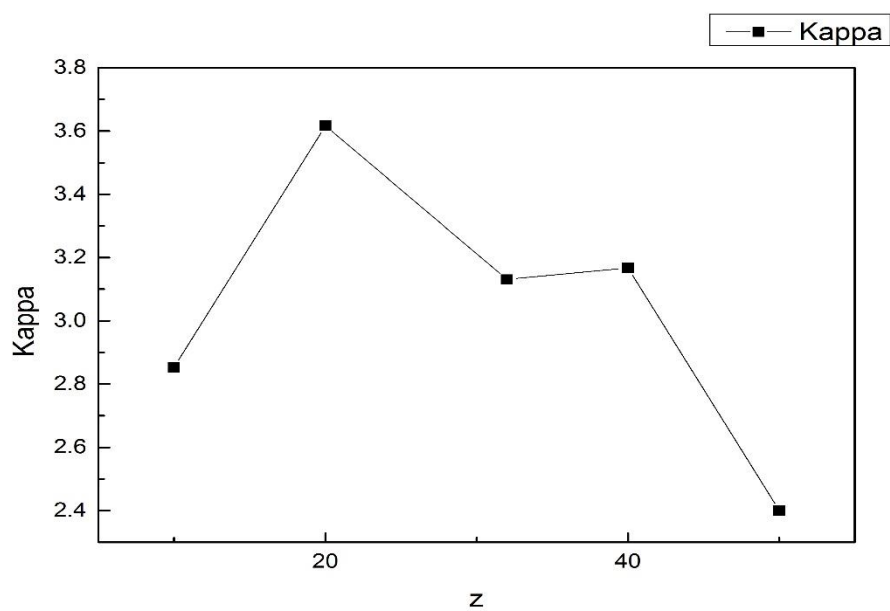


图 14. Greenkubo 方法热导率随 z 方向长度变化图

四. 比较

综合上面的计算，感觉距离能够算出比较好的数据还有好远，只能说再计算中得到了一些经验，可以总结为以下几点：

1. 只有 Mullerplathe 方法得到的热导率随温度、长度的变化有一些大致的线性的关系，而 Thermostat 方法和 Greenkubo 方法几乎完全没有什么规律。
2. Thermostat 方法的问题在于热流的数据是否准确以及温度梯度的求得是否准确。温度梯度的 profile 图像理论上是两条很直的直线，但是在我得到的图像中线性最好的也没有达到这个要求，其实在 Mullerplathe 方法中也有同样的问题。由于每次做一个 profile 用了 1000 个数据里面的 100 个作平均，这样在 20000 步中只有 20 个 profile 来作平均得到总的 profile，这是不够的，而如果要更多的，比如 200 次的 profile，这样在数据处理上又会遇到很大问题，一次因此必须得借助 python 来进行编程的处理，而这个 trick 暂时还没有 get，在之后的模拟中会努力学习。
3. Greenkubo 方法的问题在于数据很不稳定，每一个温度或者长度都需要至少 10 次模拟做平均，由于时间问题，这次还没有做很多次的模拟，因此数据很不好，之后会通过多次模拟来重新验证。