学校编码：10384　　　　　　　　分类号 ______ 密级 ______

学号：19820071152322　　　　　　　　UDC ______

厦门大学

硕 士 学 位 论 文

Langevin方程数值算法和低维系统声子输运过程

The Algorithm for Langevin Equation and Phonon Transport in Low Dimensional Systems

游 佳 斌

指导教师姓名：　赵 鸿　教授

专 业 名 称：　理 论 物 理

论文提交日期：　2010 年 5 月

论文答辩日期：　2010 年 6 月

学位授予日期：　2010 年 6 月

答辩委员会主席：__________

评　　阅　　人：__________

2010 年 5 月

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下，独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果，均在文中以适当方式明确标明，并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范（试行）》。

另外，该学位论文为（　　　　　　　　　　　　）课题（组）的研究成果，获得（　　　　　　　　　　　　）课题（组）经费或实验室的资助，在（　　　　　　　　　　　　）实验室完成。（请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称，未有此项声明内容的，可以不作特别声明。）

声明人（签名）：

年　　月　　日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

（　　）1.经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，于　　年　　月　　日解密，解密后适用上述授权。

（　　）2.不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年　　月　　日

摘　要

本文第一章介绍了用双色根树图数值求解随机微分方程的方法，并将该方法应用到Langevin方程的情形下，提出了精度为o(7,4.5)的Langevin方程数值算法，从而提高了数值积分求解Langevin方程的精度。为了验证我们这套算法的可行性和普适性，我们给出了四个实例。第一、二个例子使用我们的算法计算了双势阱中的能量驰豫和倾斜Smoluchowski-Feynman棘轮中的粒子流和外力的关系，第三、四个例子我们数值积分了含时Langevin方程和多维Langevin方程。我们将我们的算法与Euler算法、Heun算法分别进行了比较，发现在保证计算精度的前提下，这两套算法的最大积分步幅分别为0.001、0.1，而我们算法的最大积分步幅可以达到0.5。

本文第二章详细研究了Tersoff势下石墨烯的声子谱，并讨论了其与声子输运之间的联系。我们先通过动力学矩阵法求得了石墨烯的声子谱，并计算了Γ点处声学支LA、TA的群速度。随后我们简单介绍了分子动力学软件LAMMPS的使用方法，然后使用LAMMPS讨论了石墨烯中的能量输运过程，发现石墨烯中能量输运主要由声子来完成。同时我们还研究了石墨烯的尺寸对声子输运的影响，通过数值模拟我们发现，尺寸越大、激发越大，长波声子所携带的能量就越多。

本文第三章采用微扰论的方法初步探讨了量子FPU-β链中单声子态在一级修正下的能量和波函数，并讨论了晶格系统中倒逆过程产生的原因。然后我们数值模拟了高斯声子波包和KdV孤子，我们采用平面波叠加法模拟了高斯声子波包，采用pseudospectral法模拟了KdV孤子。

关键词： Langevin方程；石墨烯；FPU-β链；数值算法；声子输运

Abstract

Chapter 1 of this thesis introduces the numerical algorithm for stochastic differential equation by Bicolour Rooted Tree method, and then applies this method to Langevin equation. We propose an algorithm for Langevin equation and improve the accuracy to order $o(7,4.5)$. To demonstrate the validity and universality of our algorithm, we give four examples. In the first and second examples, we calculate the energy relaxation in the double well and the external force dependence of particle current in the tilted Smoluchowski-Feynman ratchet. In the third and fourth examples, we apply our method to the cases of time-dependent Langevin equation and multidimensional Langevin equation. We also compare our algorithm with Euler and Heun algorithm. We find that the maximal available integral step of Euler and Heun algorithm are 0.001 and 0.1 respectively, while the maximal available integral step of our algorithm is 0.5.

Chapter 2 elaborates the phonon spectrum of Tersoff potential of graphene and its relation to the phonon transport. We use the Dynamic Matrix method to get the phonon spectrum of graphene and calculate the group velocities of LA and TA acoustic branches at Γ point. Then we briefly introduce the usage of the software of LAMMPS and use it to study the energy transport in graphene. We conclude that the energy transport of graphene is mainly carried by phonon. Furthermore, we study the influence of the size of graphene on the energy transport and the simulations show that the bigger the size and the stronger the excitation, the more energy carried by long wavelength phonon.

Chapter 3 preliminarily investigates the first order approximation of energy and wavefunction of 1-phonon state in the quantum FPU-β chain by perturbation theory and discusses the Umklapp process in the lattice systems. Then we introduce the numerical method for simulating Gaussian phonon packet and KdV soliton. We simulate the Gaussian phonon packet by the method of superposition of planar waves and simulate the KdV soliton by pseudospectral method.

Keywords: Langevin equation; graphene; FPU-β chain; numerical algorithm; phonon transport

目　录

Contents

第一章　Langevin方程的数值算法

1.1　引言

自然界充满了随机性。从微观世界到宏观世界，从无机物到生命体，从自然科学到社会科学，我们都可以观察到许多随机现象[1–8]。在这些随机现象中，尽管它们背后的机制各不相同，但是描述它们的方式却是相似的。一般说来，我们可以通过随机微分方程来描述这些随机现象。这方面的工作最早可以追溯到Einstein和Smoluchowski关于布朗运动的定量描述，随后Itô和Stratonovich创立了随机微积分，将随机微分方程理论建立在一个稳固的数学基石上。在这些随机微分方程中，Langevin方程与物理现象结合得特别紧密，提出这个方程的主要动机是想通过把随机力引入牛顿方程，构造一个简化的模型，用来描述产生这种随机性的背后的复杂的物理机制。至今，这类方程已经在科学的很多分支得到广泛应用，比如，化学中的反应动力学[9]，生物中的分子马达和蛋白质折叠[10, 11]，物理中的量子布朗运动，随机量子化和细胞内的钙离子信号[12–14]，甚至是金融市场中的证券价格的涨落[8]，都可以用Langevin方程来描述。但是，只有少数类型的Langevin方程具有解析解，因此，我们有必要发展一套数值解法来求解大多数的Langevin方程。

随机微分方程的一般形式是

$$\dot{x}_i = f_i(X(t)) + g_i(X(t))\xi_i(t) \quad (i = 1, 2, ..., d) \tag{1.1}$$

其中$X(t) = \{x_1, x_2, ..., x_d\}$，$f_i(X(t))$是方程的确定性部分，$g_i(X(t))$是扩散系数，$\xi_i(t)$是一组独立的高斯随机变量，它们之间的关联为：

$$< \xi_i(t)\xi_j(t^{'}) >= \delta_{ij}\delta(t - t^{'}) \tag{1.2}$$

为了从方程（1.1）中获得某一精度的数值算法，我们可以直接对其进行随机泰勒展开，然后取到所需要的精度即可[15, 16]。这种方法的优点是直观，并且适合绝大多数的随机微分方程，但是缺点是当我们需要高阶的算法时，展开式将会变得非常繁杂。因此，如果我们打算用此法获得高阶数值算法的话，必然寻找一种系统的方案用来处理繁杂的随机泰勒展开式。在本论文中，我们采用了双色根树图的方法来获得随机微分方程的高阶算法。

我们先简单回顾下常微分方程的数值解法。在这个领域里，J. C. Butcher采用了根树图的方法数值求解常微分方程，这种方法的核心思想是将常微分方程的泰勒展开式中每一项都用一棵根树来对应[17]，这样做的好处是可以系统的表示泰勒展开式中的每一项从而为获取常微分方程的高阶算法提供了可能。而后K. Burrage和P. M. Burrage将这种根树图的方法拓展到了随机微分方程这个领域里，他们采用双色根树图来表示随机泰勒展开中的每一项[16]，并且用这种方法得到了2.5阶的随机龙格库塔算法。在本论文中，我们将发展他们的工作，提出一个新的双色根树图方法，并把它应用到Langevin方程中去。由于随机微分方程高阶数值解法的复杂性，像Euler和Heun算法这些常用的算法的阶数都没有超过2.5阶[16, 18, 19]。但是对于Langevin方程，我们可以得到高阶的数值算法。例如，Hershkovitz已经有发表过一个基于随机泰勒展开的四阶算法[15]。在这篇论文中，我们将基于双色根树图的方法，把Langevin方程的数值算法精度提高到确定部分7阶和随机部分4.5阶（$o(7,4.5)$）。

1.2 双色根树图

首先我们先将方程（1.1）转化成如下形式：

$$dx_i = f_i(X(t))dt + g_i(X(t)) \circ dW_i(t) \quad (i = 1, 2, ..., d) \tag{1.3}$$

其中，$W_i(t)$表示Wiener过程，符号$\circ$表示该微分是Stratonovich微分[19]（本文里的随机微积分都是Stratonovich意义下的，因为Stratonovich意义下的微积分