

linux/unix 下的 C++中的编译器用法

`g++ -o 执行文件名 C语言源文件名` : 这样得到一个可执行的文件
`./执行文件名` : 执行文件,

例如: `g++ -o lj_mc -O3 lj_mc.C`

其中 `-O3` 指对生成可执行代码进行执行速度优化。然后运行 `./lj_mc` 运行程序。

Monte Carlo 模拟作业

程序 `lj_mc` 对 3 维 Lennard-Jones (LJ) 体系进行 *NVT* 系综下的 Monte Carlo (MC) 模拟。

理解 MC 程序的参数文件 `mc_para.dat` 中参数的含义。了解 Reduced unit 与国际单位制的相互转化关系。

理解 MC 程序中判断是否接受构型变化(trial move)的实现。

1. MC 程序中判断是否接受构型变化的过程是怎么实现的? 为什么要求达到细致平衡?什么是细致平衡? 为什么 MC 程序里没有包含粒子的速度?

2. MC 程序中的势能是怎么求得的, 其中的 `Ecut` 是什么含义? 为什么总势能要减去 `Ecut`?

3. MC 程序中构型变化的具体实现过程是什么? 怎样才能调节一个 MC 程序的接受率? 一个 MC 程序在多大的接受率才能达到比较好的模拟效率?

4. 利用 VMD 软件来查看 `mc_out.xyz` 文件, 并比较初态与末态。

5. 在 `mc_out.dat` 文件中包含了哪些信息? 从中提取数据利用 Excel 画出相应的物理量随时间的变化图。

6. 参考书中求解径向分布函数 $g(r)$ 的公式是什么? 编一个自己的程序来实现针对采样下来的构型计算 $g(r)$, 并利用 Excel 画出 $g(r)$ 。

附加题: 有兴趣的同学可以利用 MC 程序中的随机数生成程序, 并利用 MC 模拟的思想来完成圆周率 π 的计算。