

Schemat Metropolisa i całkowanie Monte Carlo

lab. MOFiT 1 2019/2020

Aleksandra Pestka

29.04.2020

1 Cel projektu

Projekt miał na celu wykorzystanie schematu Metropolisa i całkowania Monte Carlo do znalezienia ścieżki wędrowca oraz do symulacji kwantowego oscylatora harmonicznego.

2 Wędrowiec

Pierwszy etap projektu polegał na wygenerowaniu ścieżki wędrowca według algorytmu Metropolisa i liczeniu momentów rozkładu.

Rozkład prawdopodobieństwa zmiennej losowej przedstawia się następująco: $\rho(x) = \pi^{-1/2} \exp(-x^2)$.

Symulację przeprowadzono dla 100 różnych kroków czasowych wybranych równomiernie ze skali logarytmicznej w przedziale $l \in [1, 10^7]$.

Poniżej zamieszczono wykresy zależności czterech pierwszych momentów rozkładu od liczby kroków.

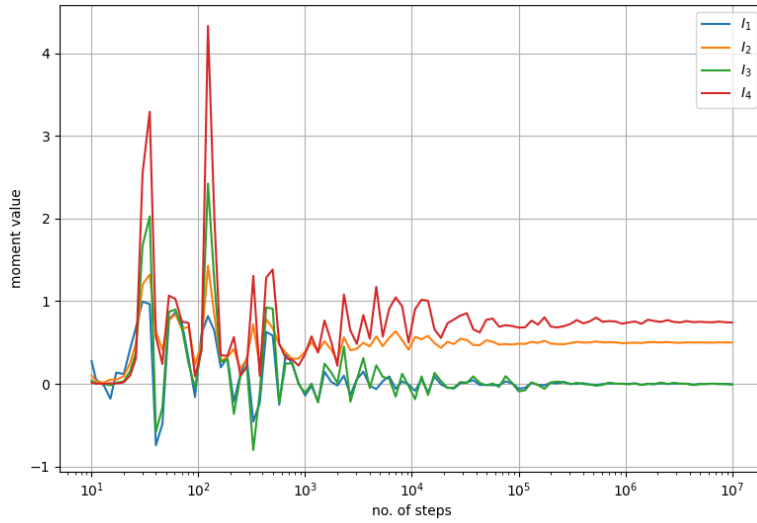


Figure 1: Momenty rozkładu I_n w funkcji liczby kroków l .

Od liczby kroków równej 10^5 wartości momentów zaczynają zbiegać do przewidywanych wartości teoretycznych, tj. $I_1 = 0$, $I_2 = 0.5$, $I_3 = 0$, $I_4 = 0.75$.

3 Dwuwymiarowy kwantowy oscylator harmoniczny

W kolejnym zadaniu należało wygenerować ścieżkę według przepisu Metropolis dla rozkładu prawdopodobieństwa $\rho(x, y) = |\psi(x, y)|^2$, gdzie funkcja falowa stanu podstawowego ma postać: $\psi(x, y) = \pi^{-1/2} \exp(-\frac{1}{2}(x^2 + y^2))$.

3.1 Ścieżka

Poniżej zamieszczono wykres próbki ścieżki (liczba kroków $l = 4 * 10^3$).

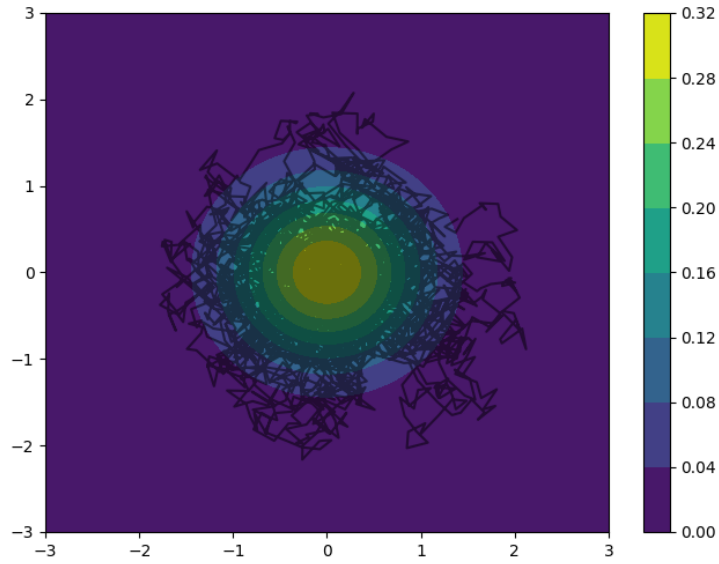


Figure 2: Próbką ścieżki dla $l = 4 * 10^3$ wraz z funkcją prawdopodobieństwa $\rho(x, y)$

Wraz ze wzrostem liczby kroków ścieżka zagęszcza się w kierunku maksimum funkcji prawdopodobieństwa, co jest zgodne z oczekiwaniami.

3.2 Energia potencjalna

Następnie narysowano średnią wartość energii potencjalnej $\langle (x^2 + y^2) / 2 \rangle$ w funkcji liczby kroków.

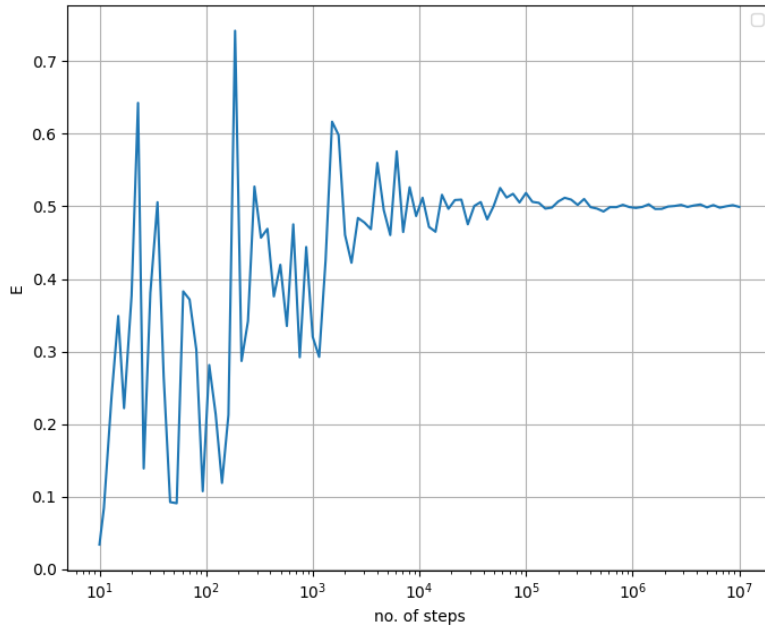


Figure 3: Energia potencjalna kwantowego oscylatora harmonicznego w funkcji liczby kroków.

Od liczby kroków równej 10^5 energia potencjalna zaczyna zbiegać do przewidywanej wartości teoretycznej, tj. $E = 0.5$.

4 Wnioski

Zarówno w przypadku problemu wędrowca, jak i kwantowego oscylatora harmonicznego należy użyć co najmniej 10^5 kroków w algorytmie Metropolis, aby otrzymać wiarygodne rezultaty, które są zgodne z teoretycznymi przewidywaniami.