

计算物理 作业报告19

PB14203209 张静宁 2017.12.29

第十九题

设体系的能量为 $H = x^2/2\sigma_x^2 + y^2/2\sigma_y^2$ (以 kT 为单位), 采用 Metropolis 抽样法计算 $\langle x^2 \rangle, \langle y^2 \rangle, \langle x^2 + y^2 \rangle$, 并与解析结果进行比较。抽样时在 2 维平面上依次标出 Markov 链点分布, 从而形象地理解 Markov 链。

理论和算法

理论推导

体系的能量 $H = (\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2})KT$, 满足玻尔兹曼分布 $P_i = \frac{1}{Z}e^{-E_i/k_bT}$,

归一化常数 Z , 即配分函数为

$$Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2})} dx dy = 2\pi\sigma_x\sigma_y$$

故空间概率分布为

$$P(x, y) = \frac{e^{-(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2})}}{2\pi\sigma_x\sigma_y}$$

故理论上

$$\langle x^2 \rangle = \sigma_x^2, \langle y^2 \rangle = \sigma_y^2, \langle x^2 + y^2 \rangle = \sigma_x^2 + \sigma_y^2$$

若取 $\sigma_x = \sigma_y = 1$, 则 $\langle x^2 \rangle = 1, \langle y^2 \rangle = 1, \langle x^2 + y^2 \rangle = 2$

Metropolis 算法

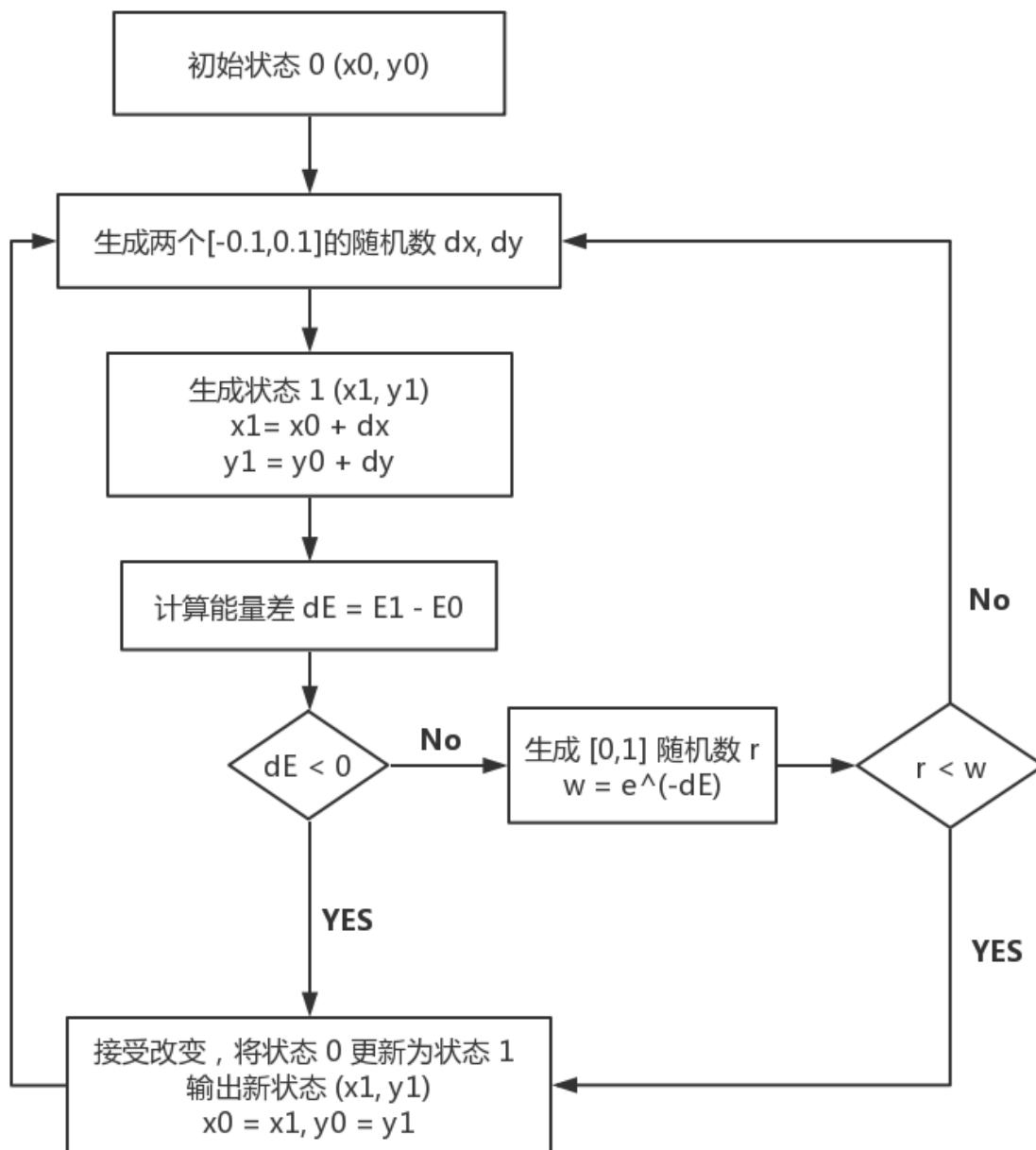
设定Markov链走N步, 其中热化阶段为M步, 计算系综统计平均时, 需要将所有有效步数统计在内(不包括热化阶段)。物理量 A 的系综平均为

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N - M} \sum_{i=M+1}^N A_i$$

计算中将初始值设定如下

$$(x_0, y_0) = (10, 10), N = 500,000, M = 50,000$$

采用 C 自带函数 rand() 生成随机数, 种子是默认值。



文件说明

- metro.c 源程序，执行可输出三个期望值和 Markov 链点坐标
- metro 可执行文件，建议将数据导入文档
- data.txt 数据文件

计算结果与分析

计算结果输出：

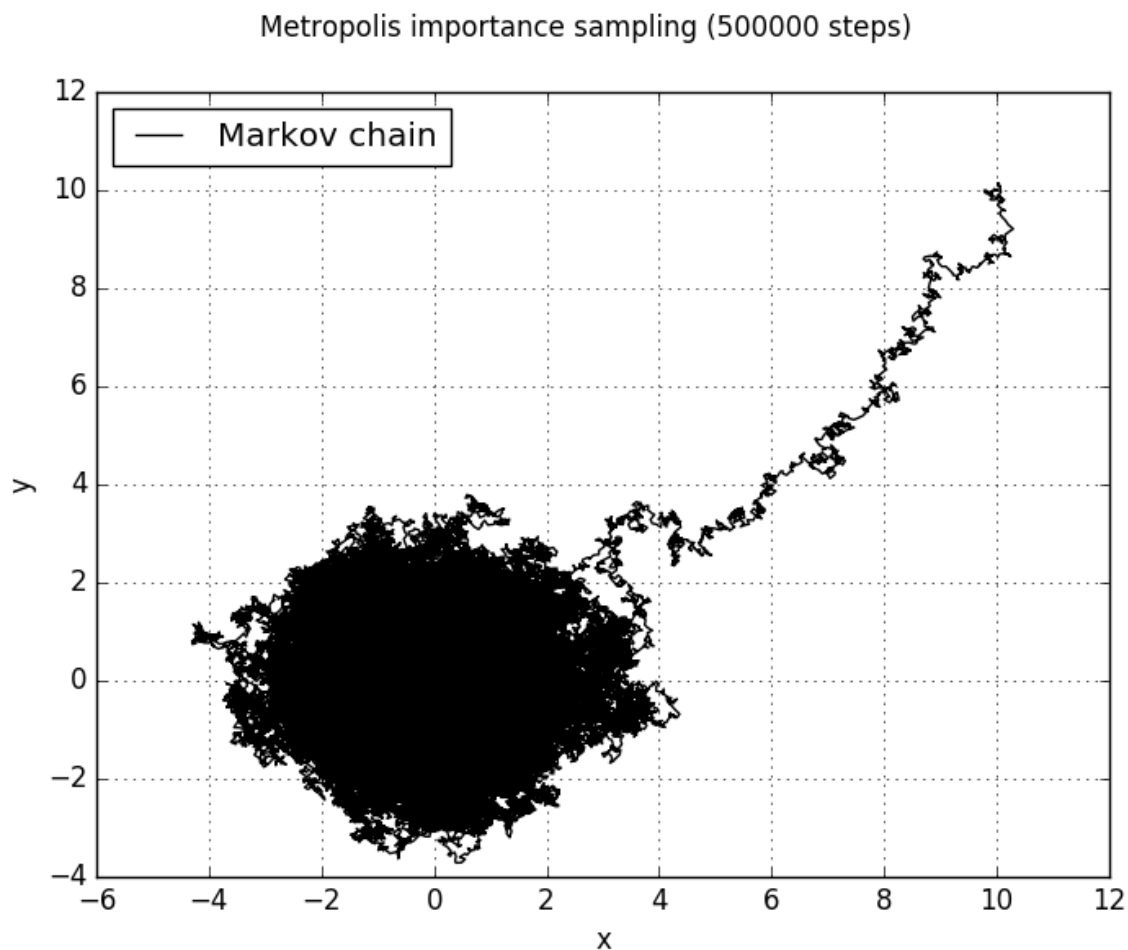
$$\langle x^2 \rangle = 1.040565,$$

$$\langle y^2 \rangle = 0.943181,$$

$$\langle x^2 + y^2 \rangle = 1.983746,$$

与理论值 $\langle x^2 \rangle = 1$, $\langle y^2 \rangle = 1$, $\langle x^2 + y^2 \rangle = 2$ 非常接近, 误差小于 5.7%.

做出二维 Markov 链点图：



总结

本次作业用Metropolis重要抽样算法, 实现了玻尔兹曼分布的抽样。绘制出二维Markov链图像, 明显可见热化过程为一条从初始点(10, 10)向原点接近的不规则曲线, 故需要在算平均值时将热化阶段剔除。

计算了 $\langle x^2 \rangle$, $\langle y^2 \rangle$, $\langle x^2 + y^2 \rangle$ 的期望值, 均和理论值比较接近。

参考资料

[1] 丁泽军《计算物理讲义》2.2.2 Metropolis 方法

[2] LECTURE 10: Monte Carlo Methods II [PDF](#)

[3] Metropolis 抽样算法 何博 [PDF](#)