Schemat Metropolisa i całkowanie Monte Carlo

B. Szafran

10 maja 2023

Zad. 1 Postaramy się wygenerować ścieżkę wędrowca, którego położenie uśrednione po ścieżce opisywać będzie zmienna losowa o rozkładzie $\rho(x) = \pi^{-1/2}\exp(-x^2)$.

Schemat Metropolisa: Umieszczamy wędrowca np. w początku układu współrzędnych. Nazywamy jego położenie przez x_w.

W schemacie Metropolisa generujemy ścieżkę lokalizacji w następujący sposób:

(1) Losujemy przesunięcie x_w z rozkładu jednorodnego i przedziału $[-\frac{1}{4}, \frac{1}{4}]$, nazywamy go Δx.

(2) Przesunięcie daje nam próbne położenie wędrowca $x'_w = x_w + \Delta x$.

(3) Generujemy liczbę losową y z rozkładem jednorodnym z przedziału $[0, 1]$.

(4) Jeśli $y < \frac{\rho(x'_w)}{\rho(x_w)}$ to próbne położenie akceptujemy, tj. przyjmujemy $x_w := x'_w$.

(5) Wracamy do (1).

do wykonania Generujemy ścieżkę wg powyższego przepisu. W czasie wędrówki szacujemy momenty rozkładu prawdopodobieństwa

$$I_n = \langle x^n \rangle = \int x^n \rho(x) dx, \tag{1}$$

dla $n = 1, 2, 3$ i 4. Do wyliczenia całek sumujemy x_w^n dla x_w na ścieżce tuż przed wykonaniem punktu (5) [bierzemy aktualną wartość x_w, niezależnie od tego czy w punkcie (4) wartość została zmieniona czy nie i dzielimy wynik przez liczbę kroków

$$I_n(l) \simeq \frac{1}{l} \sum_{k=1}^{l} x_w^n, \tag{2}$$

gdzie k to suma po krokach od początku symulacji, a l to liczba kroków

Narysować $I_n(l)$ dla $n = 1, 2, 3, 4$ oraz $l \in [1, 10^7]$ (70 pkt). Dokładne wartości: $I_2 = 0.5$, $I_4 = 0.75$, $I_1 = I_3 = 0$.

Zad. 2 Dwuwymiarowy kwantowy oscylator harmoniczny opisany jest Hamiltonianem

$$H = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}y^2, \tag{3}$$

Funkcja falowa stanu podstawowego ma postać $\psi(x, y) = \pi^{-1/2}\exp(-(x^2 + y^2)/2)$.

do wykonania Wygenerować ścieżkę wg przepisu Metropolisa dla rozkładu pstwa $\rho(x, y) = |\psi(x, y)^2|$. **Narysować próbkę ścieżki (tyle kroków ile będzie czytelne). Narysować średnią wartość energii potencjalnej $\langle (x^2 + y^2)/2 \rangle$ w funkcji liczby kroków. 30 pkt.** Dokładna wartość średniej energii potencjalnej wynosi $1/2$.