

# 计算物理第六次作业

2000012425 张弛

2023 年 1 月 10 日

1. 选取某种程序自带的随机数产生方法，产生一组  $[0 - 1]$  之间均匀分布的随机数.

1.1

利用随机数，编写程序对下列积分进行蒙特卡洛计算。重复上述步骤多次（如：1000次），给出积分值的分布曲线，讨论该分布与撒点数的关系。

$$\int_0^1 dx \exp[-100 \times (x - 0.5)^2].$$

解. 分别设撒点数为  $10^2, 10^3, 10^4$ 。分别计算积分1000次，并画出积分值的分布曲线。

借助程序“HW6计物第一题撒点法.py”得到下图

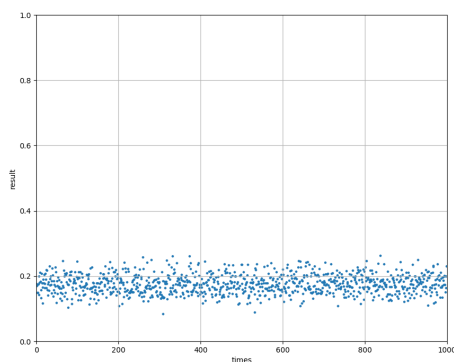


图 1:  $10^2$ 次撒点

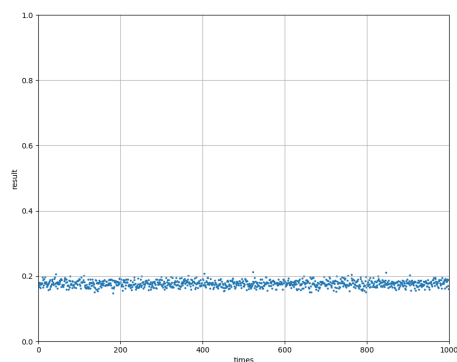


图 2:  $10^3$ 次撒点

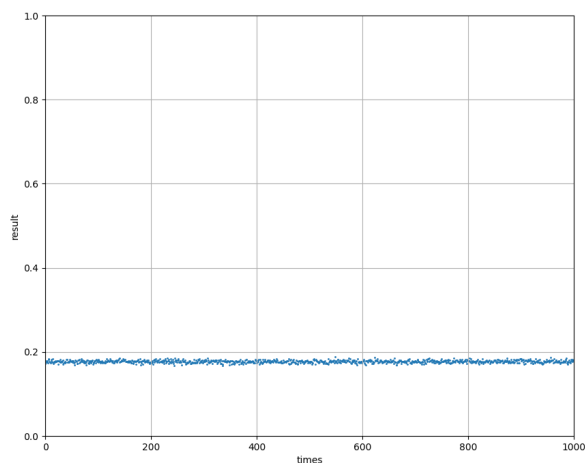


图 3:  $10^4$ 次撒点

可以看出计算结果集中在精确值 $0.177$ 附近，且撒点数越多，方差越小。

## 1.2

利用随机数，编写程序对下列多维积分进行蒙特卡洛估算：

$$\int_0^1 \cdots \int_0^1 dx_1 \cdots dx_9 \exp \left[ -100 \times \sum_{i=1}^9 (x_i - 0.5)^2 \right].$$

解. 依然使用撒点法。在九维空间中撒点 $10^7$ 次，取函数值的平均值。借助程序“HW6计物第一题多维积分.py”得到 $10000$ 次计算结果分布如下

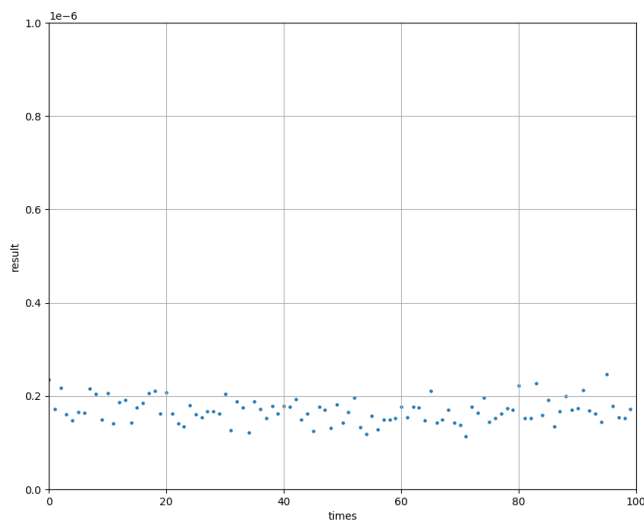


图 4:  $10^7$ 次撒点

结果基本集中在精确值 $1.7 \times 10^{-7}$ 附近。结果可信。

## 2.1

题目不抄了。

解. 蒙卡的基本思路是，对于一个给定的态，按顺序随机改变自旋的值，计算改变前后的能量差值 $\Delta E$ ，这样考虑可以提高计算效率。若

$$\Delta E < 0,$$

则接受这个改变。若

$$\Delta E > 0,$$

则按照概率

$$e^{-\Delta E/kT}$$

接受改变。每一次概率选择结束计算能量（加上 $\Delta E$ ），所有的结果求和取平均得到平均能量 $E$ 。画出不同温度 $T$ 下的能量 $E$ ，用差分来近似温度 $T$ 下的热容 $C$ 。

若要计算磁化率，则在计算 $\Delta E$ 时，加入外场与自旋磁矩的相互作用项 $CS$ ，在多轮次蒙卡循环中计算磁化强度 $M$ 平均值即可。

晶格结构是循环周期的。

不妨 $J = 1, C = -1, k = 1$ 。

先进行一些粗略计算，仅看热容 $C$ 的温度 $T$ 依赖。蒙卡循环 $10^3$ 次。温度 $T$ 范围 $0.5 - 9.5K$ 。借助程序“HW6计物第二题热容试探.py”，对于 $10 \times 10$ 格子有

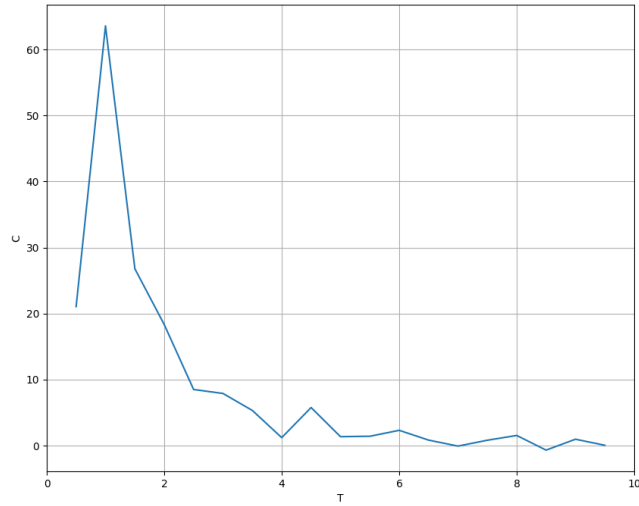


图 5:  $10 \times 10$  热容  $C$  的温度  $T$  依赖粗略计算

以及对  $40 \times 40$  和  $80 \times 80$  格子有

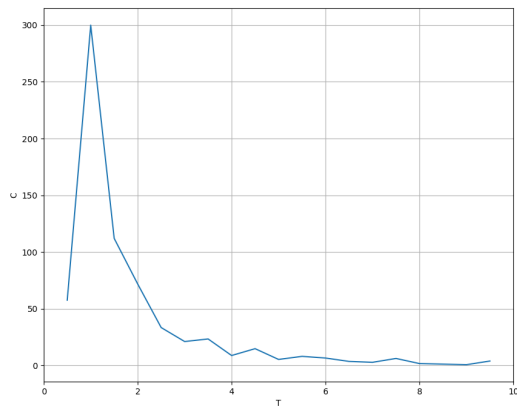


图 6:  $40 \times 40$  热容  $C$  的温度  $T$  依赖粗略计算

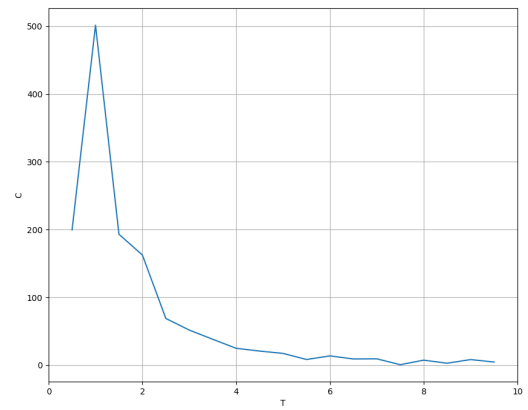


图 7:  $80 \times 80$  热容  $C$  的温度  $T$  依赖粗略计算

看到相变在  $0.5 - 1.5K$  之间。下面正式计算能量  $E$ ，热容  $C$  与磁化率  $\chi$  的在相变温度附近的温度  $T$  依赖。蒙特卡罗循环  $10^5$  次。温度  $T$  范围  $0.6 - 1.5K$ 。借助程序“HW6计物第二题能量.py”“HW6计物第二题热容.py”和“HW6计物第二题磁化率.py”得到下面结果。对于  $10 \times 10$  格子，能量有

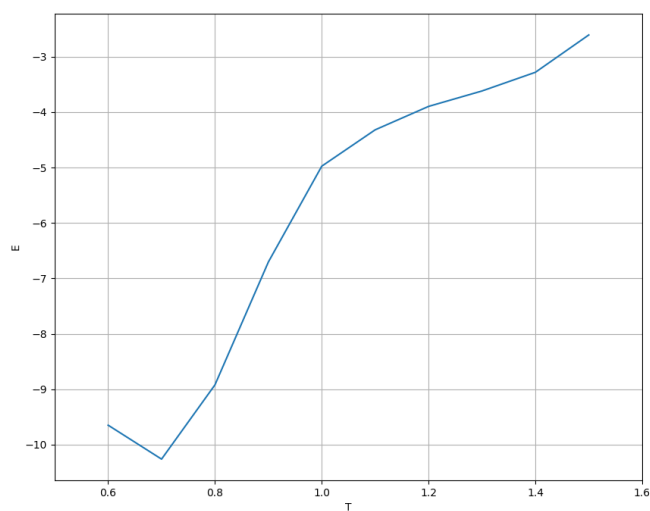


图 8:  $10 \times 10$  能量  $E$  的温度  $T$  依赖

热容和磁化率有

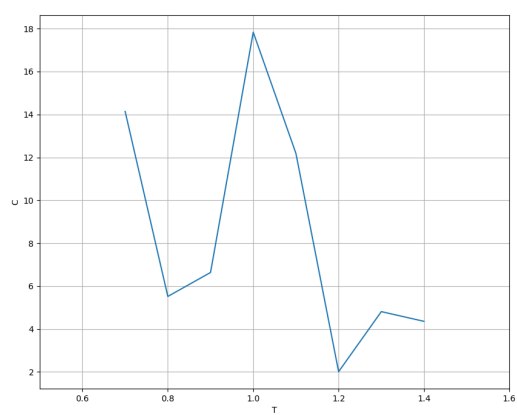


图 9:  $10 \times 10$  热容  $C$  的温度  $T$  依赖

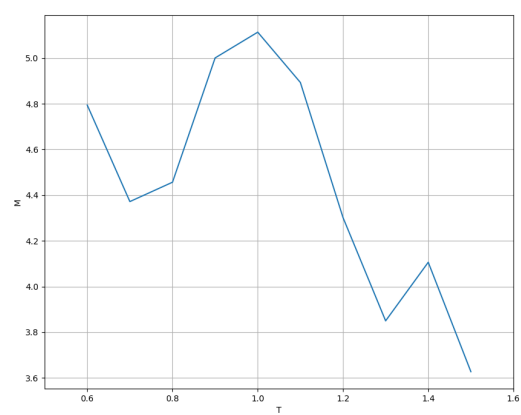


图 10:  $10 \times 10$  磁化强度  $M$  的温度  $T$  依赖

对于  $40 \times 40$  格子, 能量有

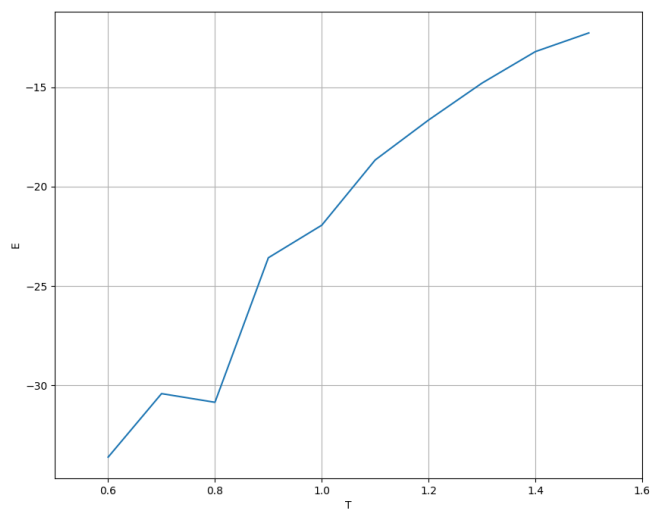


图 11:  $40 \times 40$  能量  $E$  的温度  $T$  依赖

热容和磁化率有

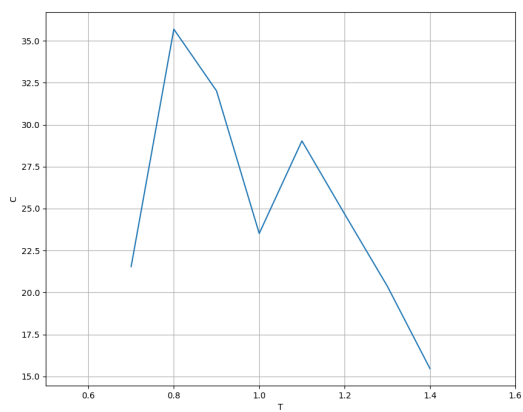


图 12:  $40 \times 40$  热容  $C$  的温度  $T$  依赖

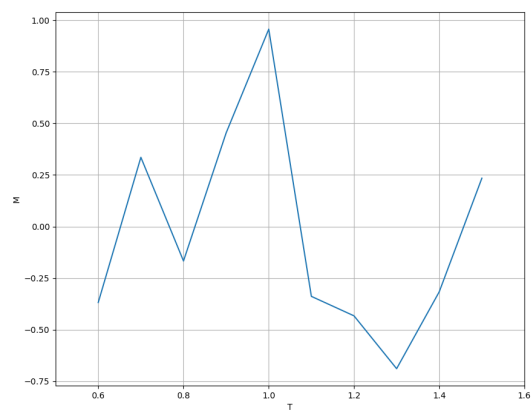


图 13:  $40 \times 40$  磁化强度  $M$  的温度  $T$  依赖

对于  $80 \times 80$  格子，能量有

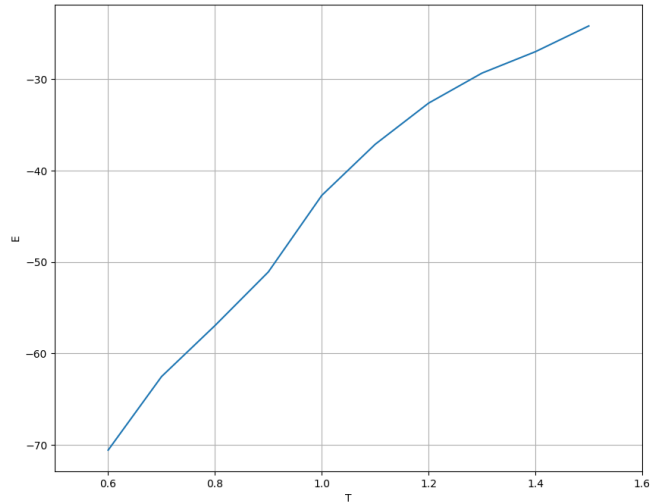


图 14:  $80 \times 80$  能量  $E$  的温度  $T$  依赖

热容和磁化率有

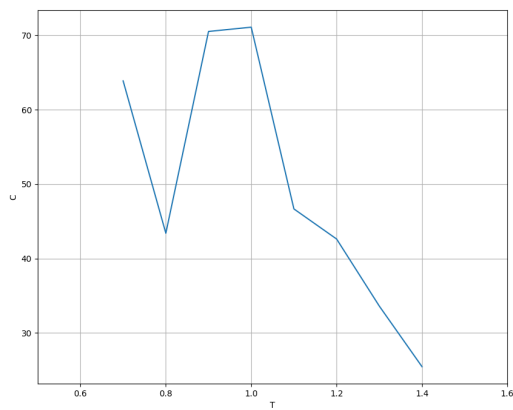


图 15:  $80 \times 80$  热容  $C$  的温度  $T$  依赖

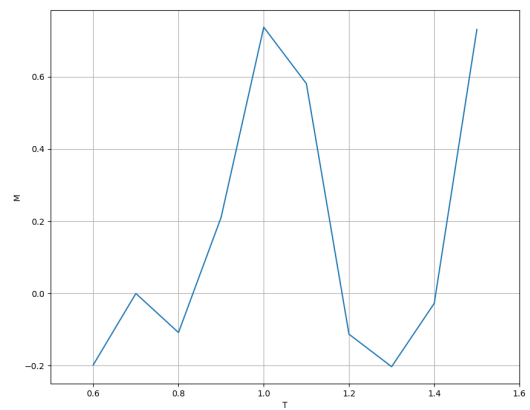


图 16:  $80 \times 80$  磁化强度  $M$  的温度  $T$  依赖

仅有二级相变。热容  $C$  和磁化率  $\chi$  的相变在  $0.8 - 1.4K$  范围。总的来说，算法的稳定性不是很好，非常有可能是循环次数不够，时间有限，不再多算。

## 2.2

**解.** 对于  $J = 1$  情形的 *Ising* 模型，相当于在 *Potts* 模型上加上一个常数项，以及把 *Potts* 模型改为  $J = 2$ 。一样先粗略查看热容。蒙特卡罗循环  $10^3$  次，格子大小  $80 \times 80$ ，温度范围  $0.25 - 5K$ 。借助程序“HW6计物第二题*Ising*热容试探.py”得到下图

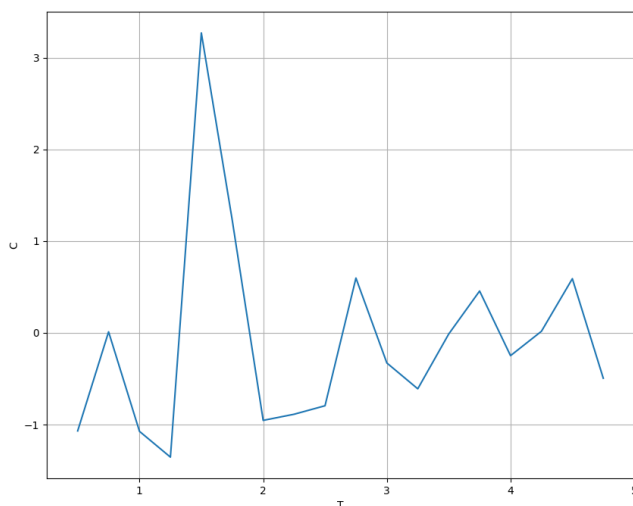


图 17: Ising模型热容粗略计算

可以看到温度 $1 - 3K$ 范围内有相变。下面仅验证 $80 \times 80$ 格子情形, *Ising*模型与*Potts*模型结论的相符程度。温度范围 $1.25 - 3.0K$ , 蒙特卡罗循环 $10^5$ 次。借助程序“HW6计物第二题*Ising*热容.py”与“HW6计物第二题*Ising*磁化率.py”得到

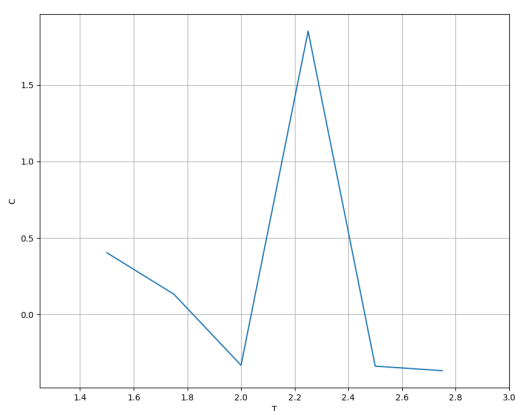


图 18: Ising模型 $80 \times 80$ 热容 $C$ 的温度 $T$ 依赖

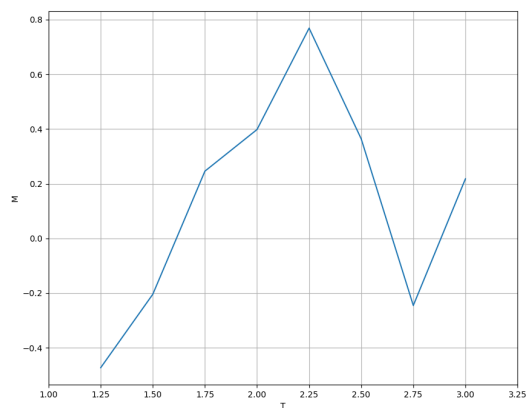


图 19: Ising模型 $80 \times 80$ 磁化强度 $M$ 的温度 $T$ 依赖

可以看到热容 $C$ 相变出现在 $2 - 2.4K$ 附近, 和理论精确值很像。再由程序“HW6计物第二题*Ising*能量.py”得到

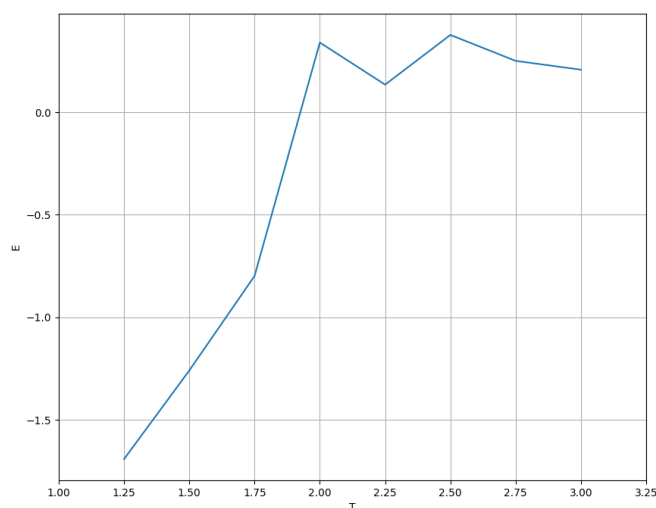


图 20: Ising模型 $80 \times 80$ 能量 $E$ 的温度 $T$ 依赖

故为二级相变。和 $Potts$ 模型的结论相符合。

总的来讲计算稳定性很有问题，估计是一些参数设置和循环次数的缘故。

### 2.3

解. 我的算法并不需要关于 $\Delta E$ 与 $q$ 的表格。

参数设置同前。对于 $q = 3$ 情形，先用热容 $C$ 试探，借助程序“HW6计物第二题推广 $q3$ 热容试探.py”得到

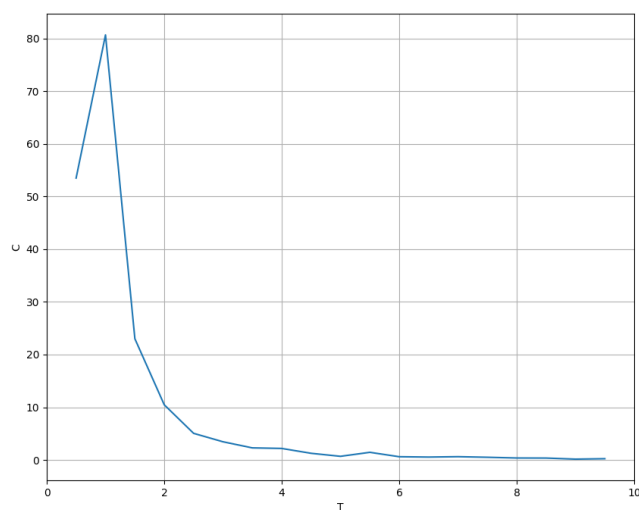


图 21:  $q = 3$ 热容 $C$ 粗略计算

相变范围在 $0.5-1.5K$ 之间。借助程序“HW6计物第二题推广 $q3$ 能量.py”、“HW6计物第二题推广 $q3$ 热容.py”和“HW6计物第二题推广 $q3$ 磁化率.py”得到



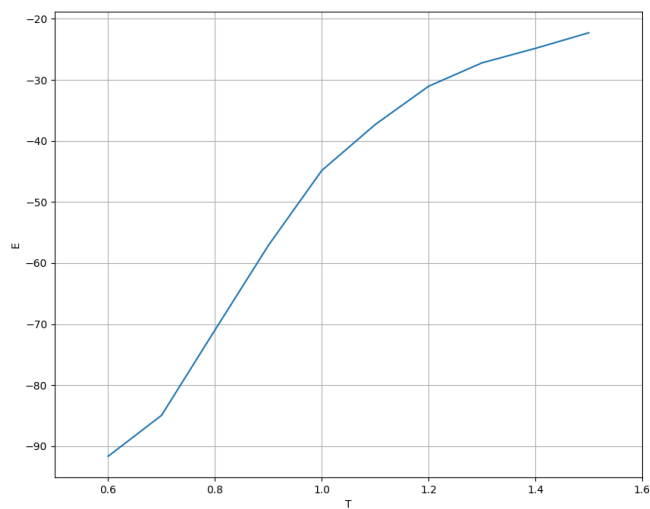


图 22:  $q = 3$  能量  $E$  的温度  $T$  依赖

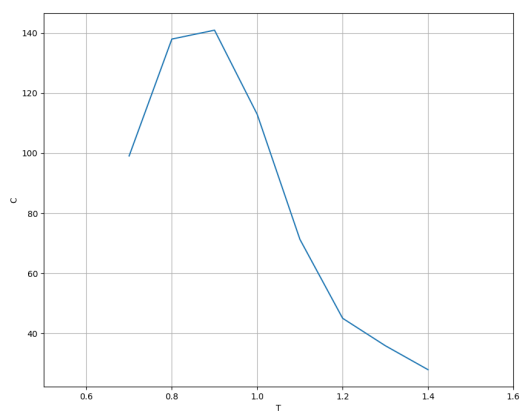


图 23:  $q = 3$  热容  $C$  的温度  $T$  依赖

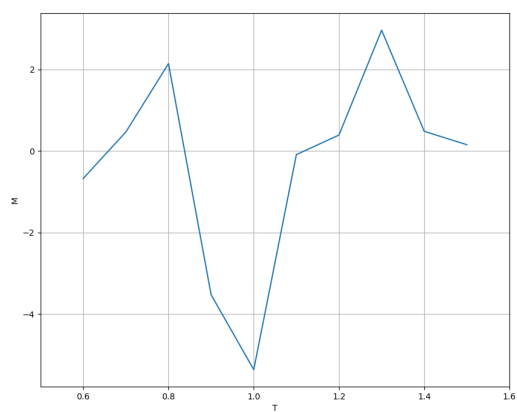


图 24:  $q = 3$  磁化强度  $M$  的温度  $T$  依赖

磁化率计算的稳定性依旧不是很好。和  $q = 2$  情形的差别不是很明显。主要关心能量  $E$ ，再细致地计算一下

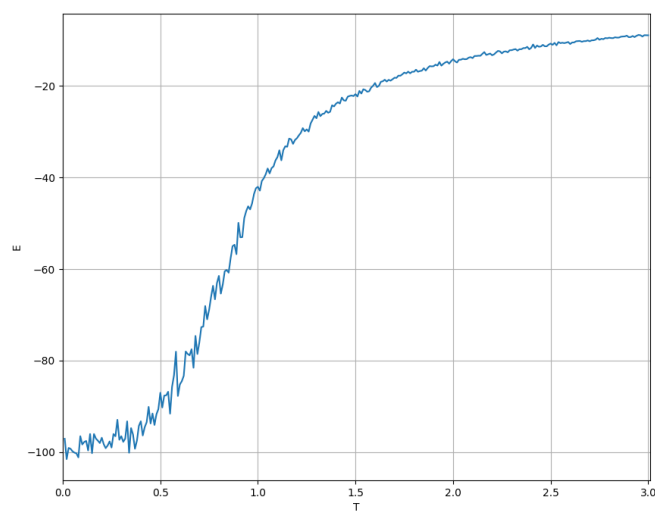


图 25:  $q = 3$  能量  $E$  的温度  $T$  依赖

倾斜程度相比  $q = 2$  情形有一些增大。

对于  $q = 6$  情形

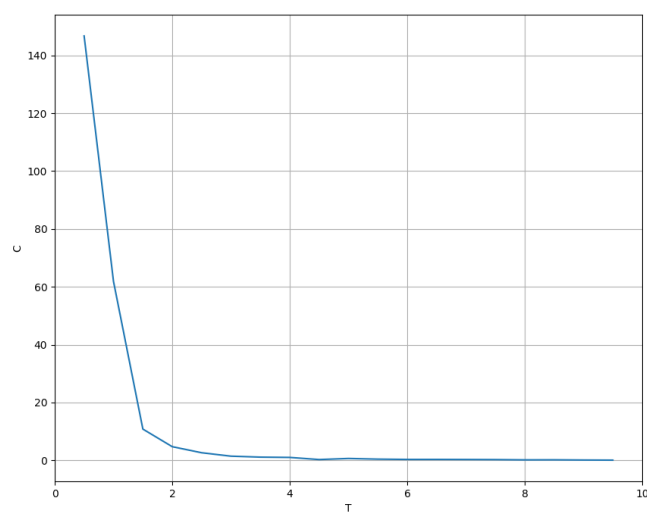


图 26:  $q = 6$  热容  $C$  粗略计算

热容的峰值温度变得很低。能量似乎在低温有点不测。进行一些细致计算

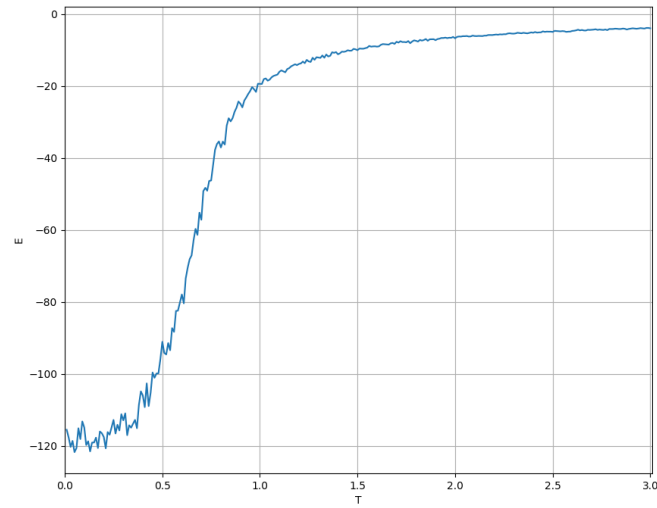


图 27:  $q = 6$  能量  $E$  的温度  $T$  依赖

在温度范围  $0.5 - 1K$  之间有能量的跃变，似乎出现了一级相变。

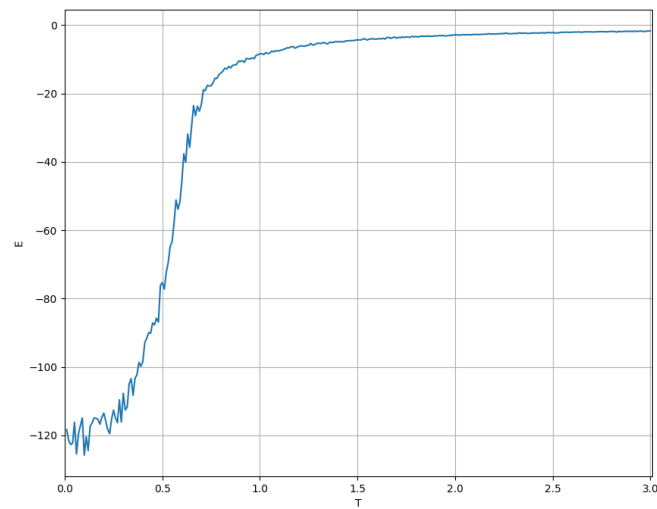


图 28:  $q = 10$  能量  $E$  的温度  $T$  依赖

能量跃变更明显了，是一级相变。此时热容  $C$  和磁导率  $\chi$  的计算稳定性极差，不予展示了。