选做一题:

[作业15]: 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。

[作业16]: 考虑一维经典粒子组成的,由于无相互作用,各粒子的能量不依赖于其位置,只需考虑它的动能,因此体系的构型即是各粒子速度坐标值的集合。给定粒子的质量、初始速度、总粒子数、总能、demon能,模拟足够多步后达到平衡时的粒子速度分布。微正则系综中没有定义温度,其数值由 $\frac{1}{2}kT = \frac{1}{2}m\left\langle v^2\right\rangle$ 给出,求平衡时的温度值。