

计算物理第六次作业

2023/1/10

1.蒙特卡洛积分

利用蒙特卡洛法求积分,

$$I = \int_D f(\vec{x}) d^n \vec{x}$$

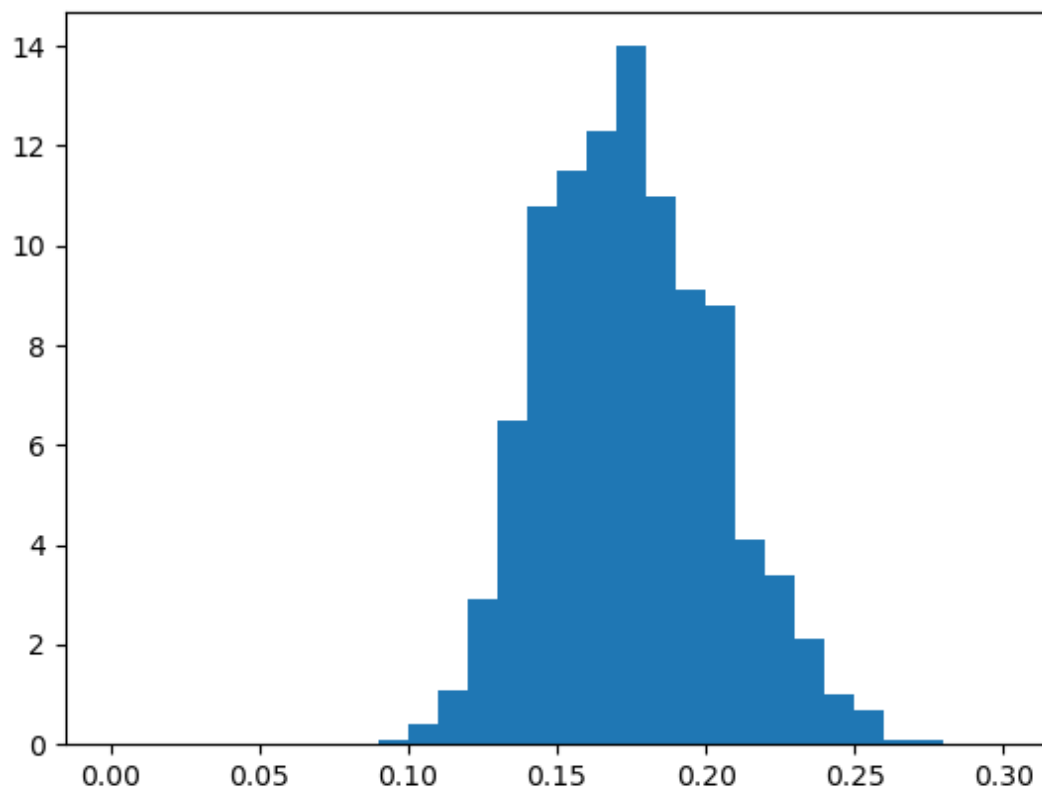
可在积分区域 D 内随机选取 N 个点 $\vec{x}_1, \vec{x}_2 \cdots \vec{x}_n$, $\vec{x}_i \in D$.若选取得各个点概率是均匀的,则积分近似值为:

$$I \approx \frac{V(D)}{N} \sum_{i=1}^n f(\vec{x}_i)$$

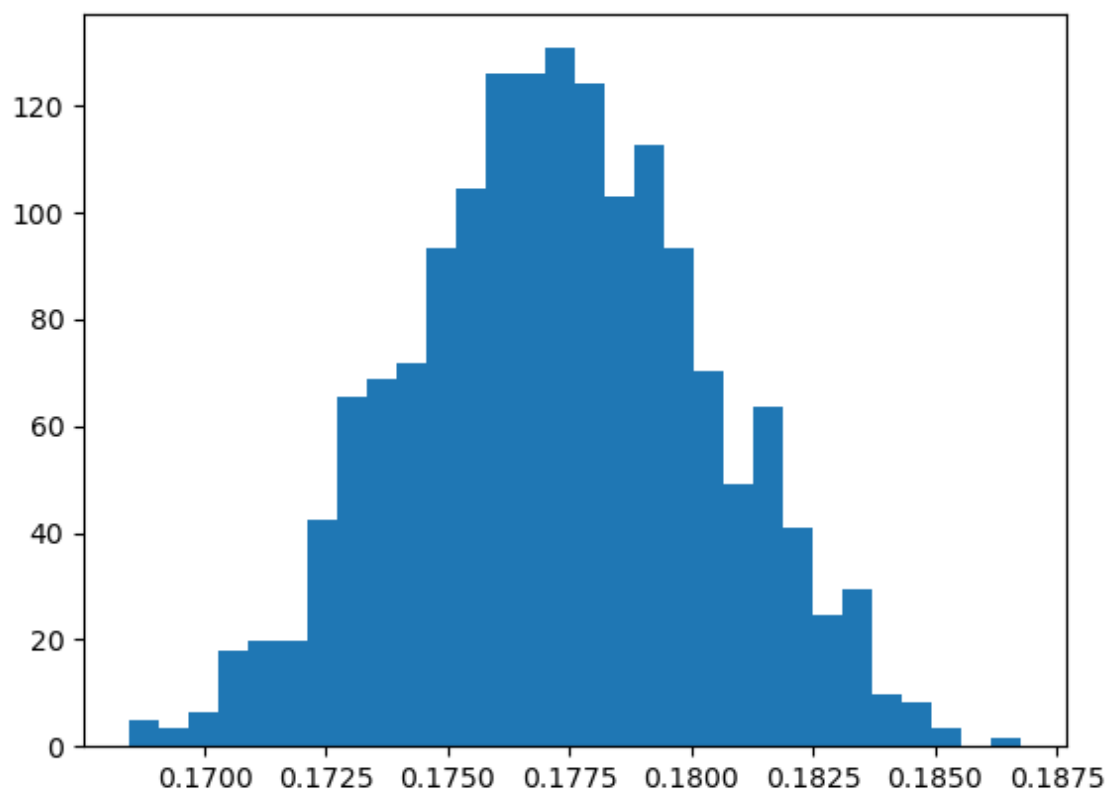
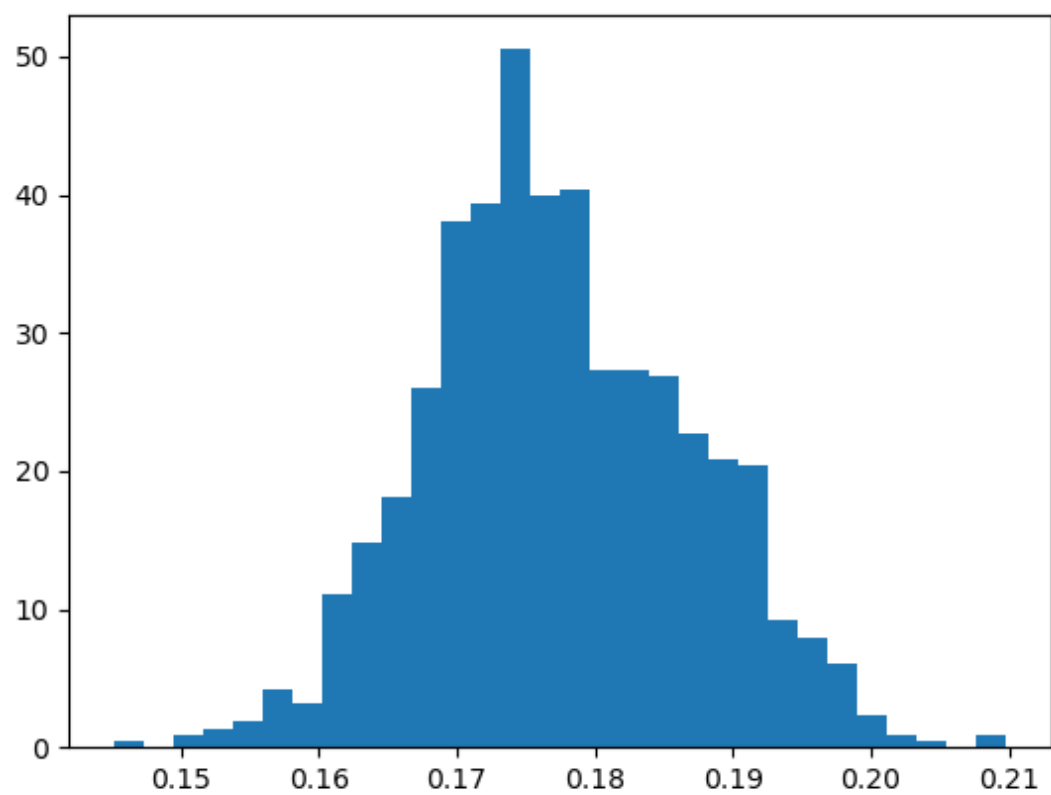
$V(D)$ 为区域 D 的体积.

1.1

每次取100个点,重复1000次,得到结果的频数分布直方图如下:



增加取点数到1000和10000,得到相应的频数分布直方图如下.可以看到,随着点数 N 增加,方差呈 $\frac{1}{N}$ 的趋势减小,平均值也更加精确.



1.2

取 10^7 个随机点,计算积分结果(见T1_2.py),得出结果为: 1.317×10^{-7}
真实值约为: $0.17724^9 \approx 1.73 \times 10^{-7}$

2. Potts Model

(1)

利用Metropolis算法,过程如下:设系统处于各个态的概率分布为 $w_i(t)$,转移矩阵设为两个因子之积:

$$W(j \rightarrow i) = T(j \rightarrow i)A(j \rightarrow i)$$

根据转移矩阵性质, $\sum_i W(j \rightarrow i) = 1$.

其中 $T(j \rightarrow i)$ 为 j 态向 i 态转移的概率,满足 $\sum_i T_{ji} = 1$; $A(j \rightarrow i)$ 为接受 $j \rightarrow i$ 的概率

于是态的演化为(为方便起见,下面记 $X(i \rightarrow j) = X_{ij}$):

$$\begin{aligned} w_i(t+1) &= \sum_j [w_j(t)T_{ji}A_{ji} + w_i(t)T_{ij}(1 - A_{ij})] \\ w_i(t+1) - w_i(t) &= \sum_j (W_{ji}w_j - W_{ij}w_i) \end{aligned}$$

平衡态要求 $\Delta w_i(t) = 0$,即 $\sum_j w_j W_{ji} = \sum_j w_i W_{ij} = w_i$

为避免Markov过程中出现循环解,引入细致平衡: $w_j W_{ji} = w_i W_{ij}$

$$\frac{w_i}{w_j} = \frac{W_{ji}}{W_{ij}} = e^{-\beta(E_i - E_j)}$$

其中用到了玻尔兹曼分布 $w_i \propto e^{-\beta E_i}$,也是我们的目标分布.

从任意态 $A = \{s_1 s_2 \cdots s_n\}$ 开始,随机选取一个分子 k ,改变它的状态从而使系统态为 $B = \{s'_1 \cdots s'_n\}$.

定义态之间的距离为1-norm: $\|A - B\| = \sum_k |s_k - s'_k|$

计算能量 $\Delta E = E_A - E_B$,令接受概率为 A_{AB} (当 $\|A - B\| = 1$ 时)为:

$$A_{AB} = \begin{cases} 1, & E_A \leq E_B \\ e^{-(E_B - E_A)/T}, & E_A > E_B \end{cases}$$

转移概率 T_{AB} 可写为:

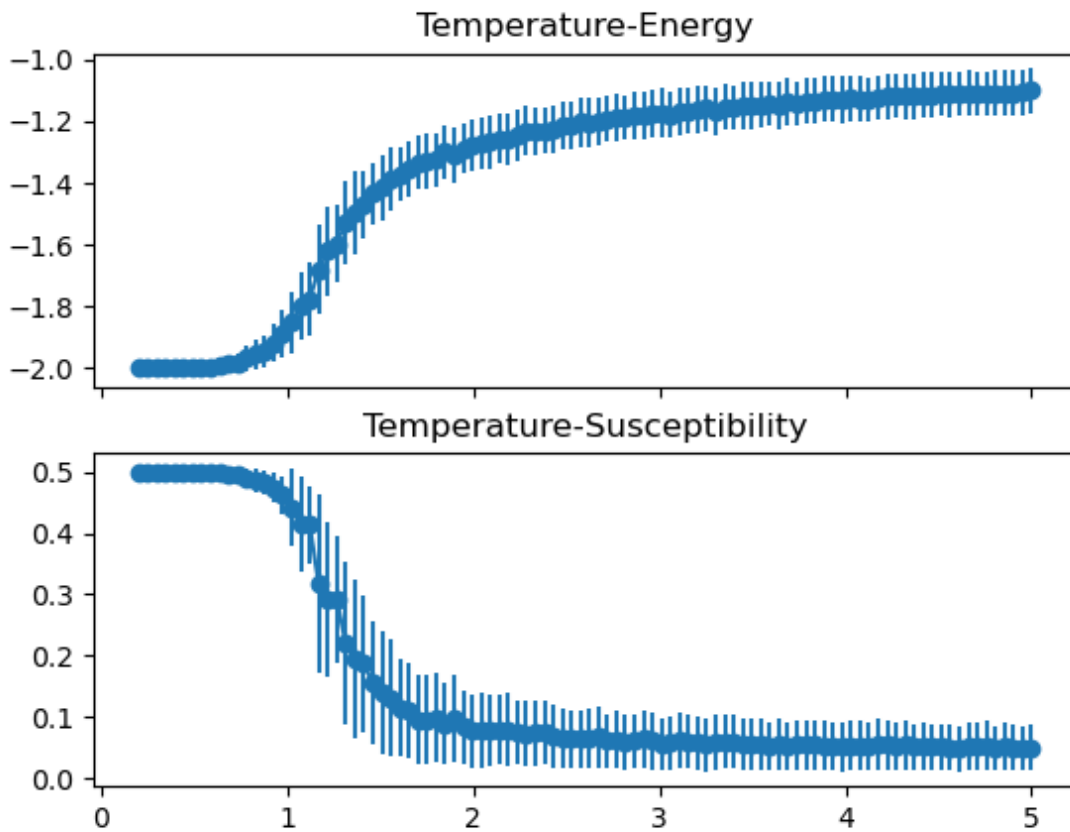
$$T_{AB} = \begin{cases} 0, & A = B \text{ or } \|A - B\| \geq 2 \\ \frac{1}{\#\{B \mid \|A - B\| = 1\}}, & \|A - B\| = 1 \end{cases}$$

其中 $\#\{B \mid \|A - B\| = 1\}$ 表示与态 A 距离为1的态个数

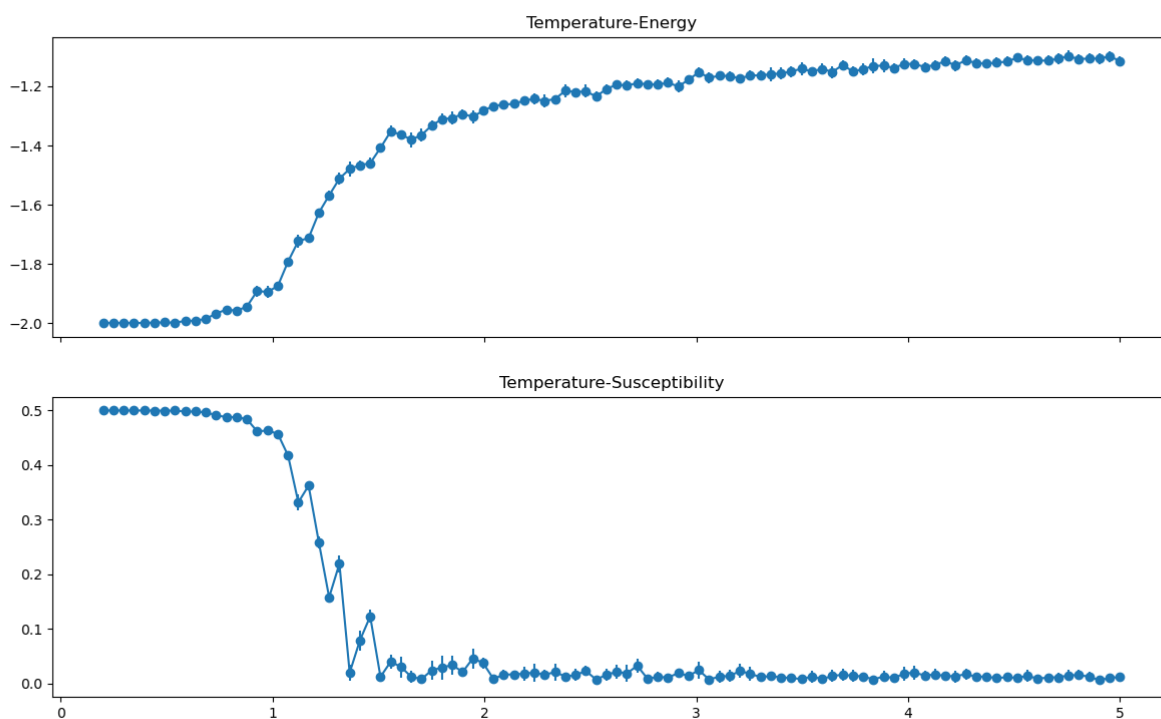
于是总的概率转移矩阵写为:

$$W_{AB} = \begin{cases} \frac{1}{\#\{B \mid \|A - B\| = 1\}}, & E_B \leq E_A, \|A - B\| = 1 \\ \frac{1}{\#\{B \mid \|A - B\| = 1\}} e^{-(E_B - E_A)/T}, & E_B > E_A, \|A - B\| = 1 \\ 0, & \|A - B\| \geq 2, \\ 1 - \sum_{B' \neq A} W_{AB'}, & B = A \end{cases}$$

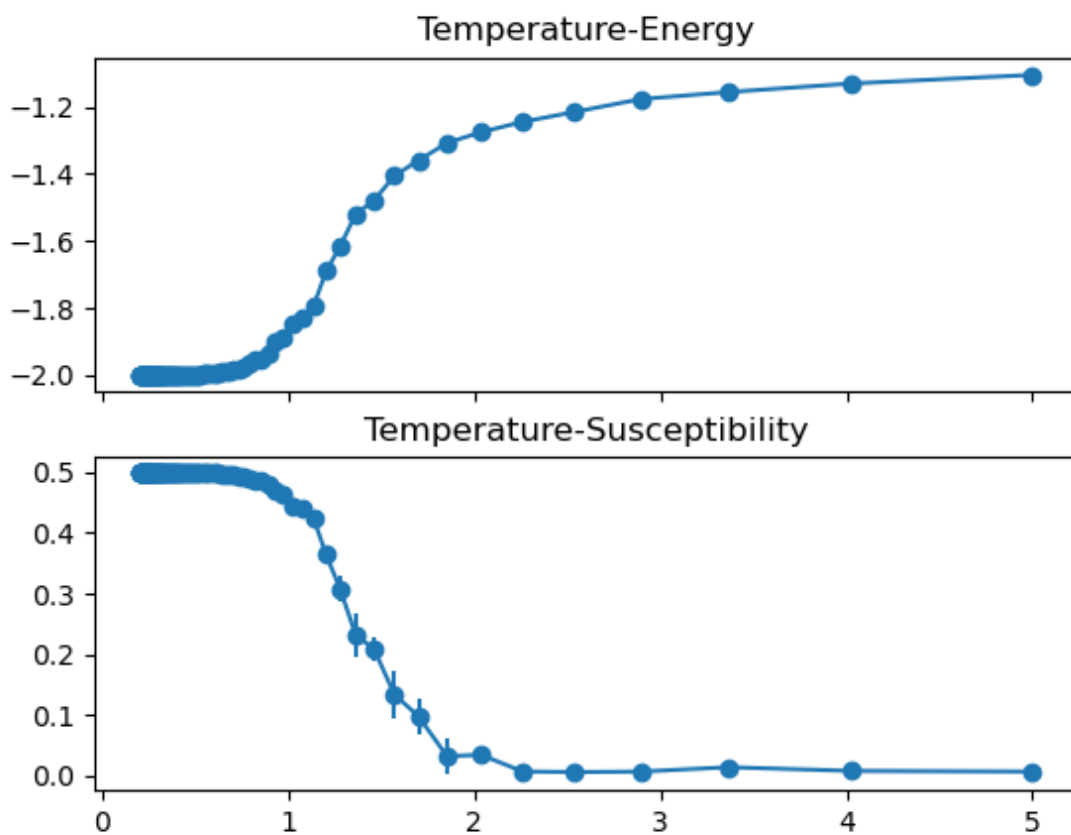
该模型的模拟程序见[T2_.py](#)。分别对 $10 \times 10, 40 \times 40, 80 \times 80$ 的格子进行模拟，得到的结果如下图所示：



40x40:



80x80:



热容作为内能对温度的导数，可以在图中看出在曲线转折点附近 $T \approx 1.2$ 附近最大，这个转折点也对应了相变点。

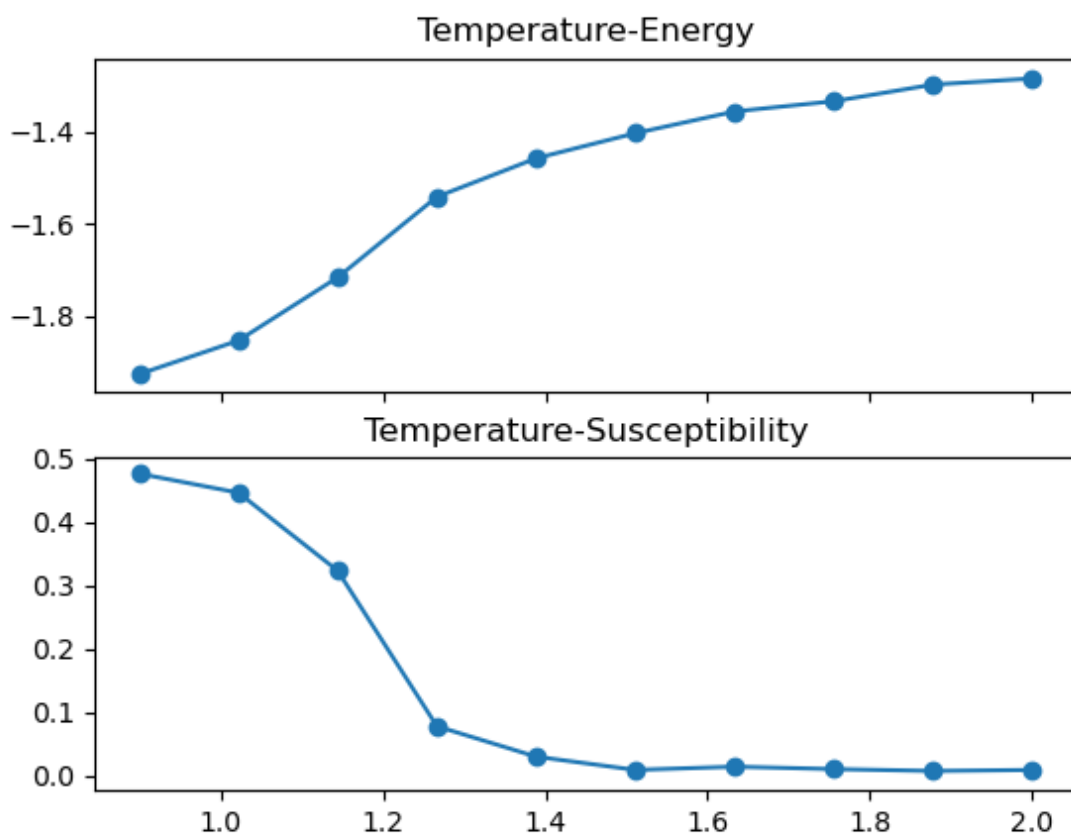
(2)

Potts模型的哈密顿量可以写成：

$$E = \frac{-J}{2} \sum_{\langle kl \rangle}^N 2 \left(\delta_{s_l, s_k} - \frac{1}{2} \right) - \sum_{\langle kl \rangle}^N \frac{J}{2}$$

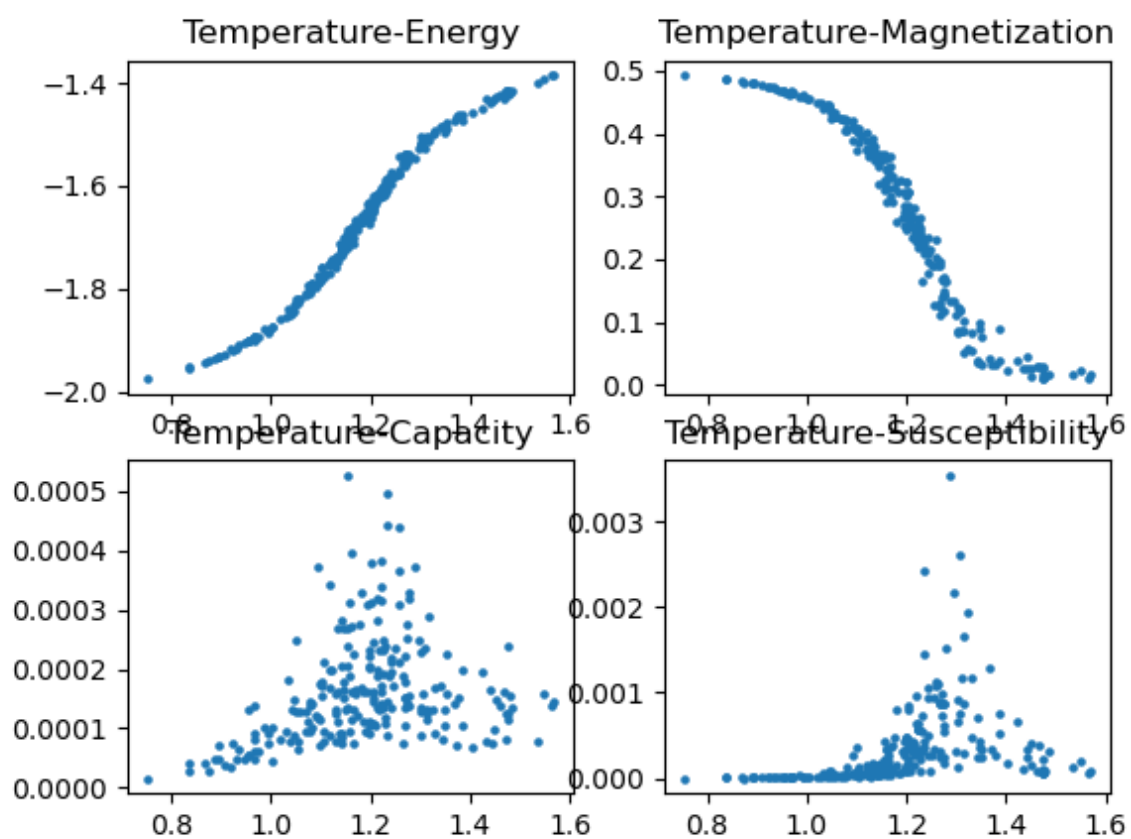
因此相变温度在 $J/k_B = 1$ 的条件下为 $\frac{T_c}{2} = 1.135$

为了得到更精确的相变温度，对相变温度临近区间精密取点，由于在临界点附近达到热平衡速度很慢，因此增大统计步数到150万步，得到：



相变温度估计为 $T_c \approx 1.2$ 左右，和实际相符

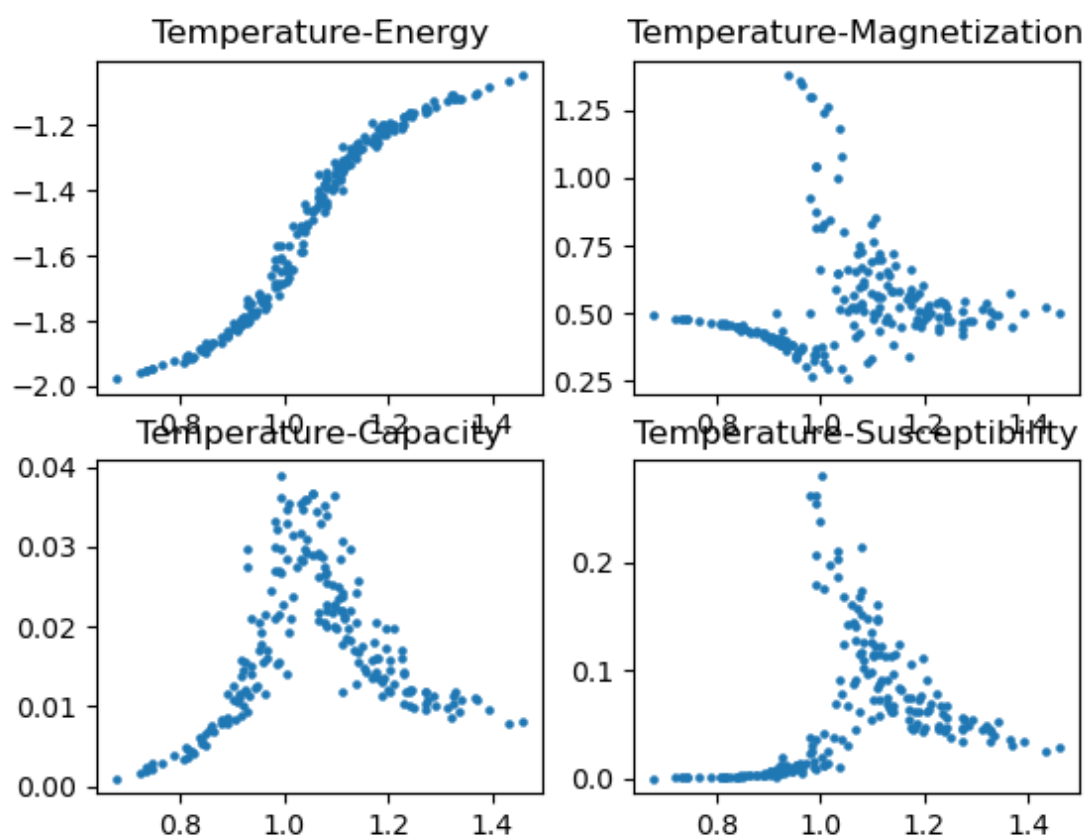
自变量温度改用高斯分布生成，得到散点图如下：



(3)

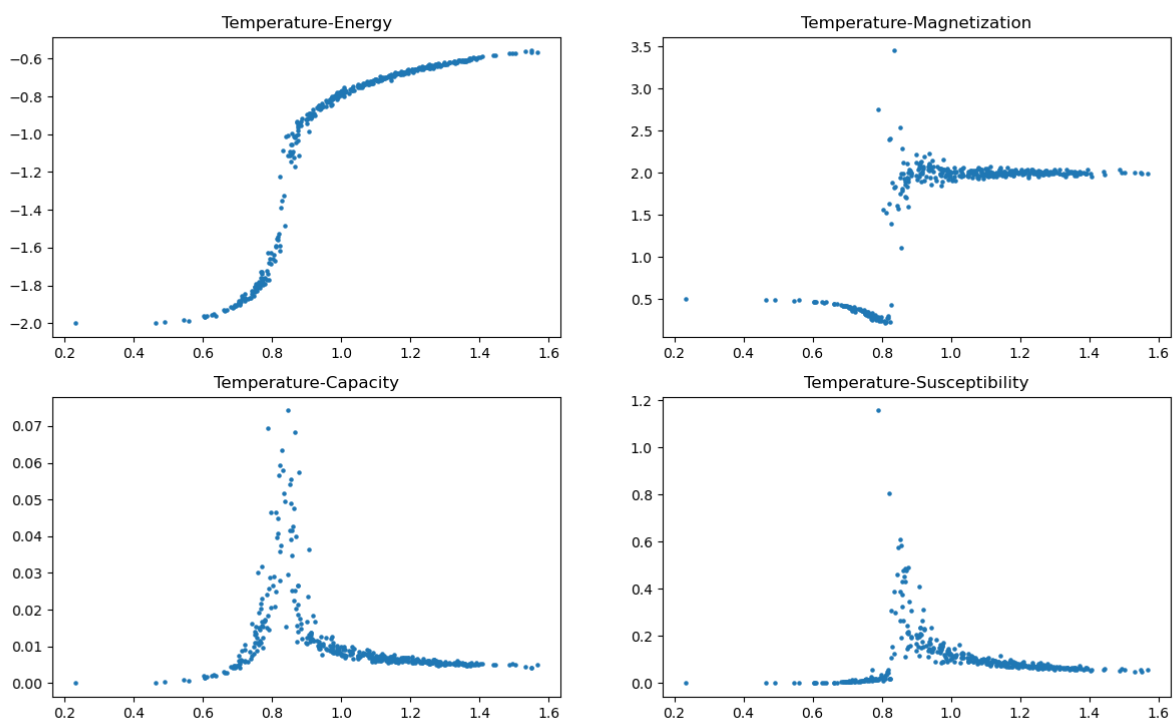
改变q的值为3,6,10, 可能的能量差依然为: $\Delta E = 4, 2, 0, -2, -4$ 。分别模拟得到:

q=3:



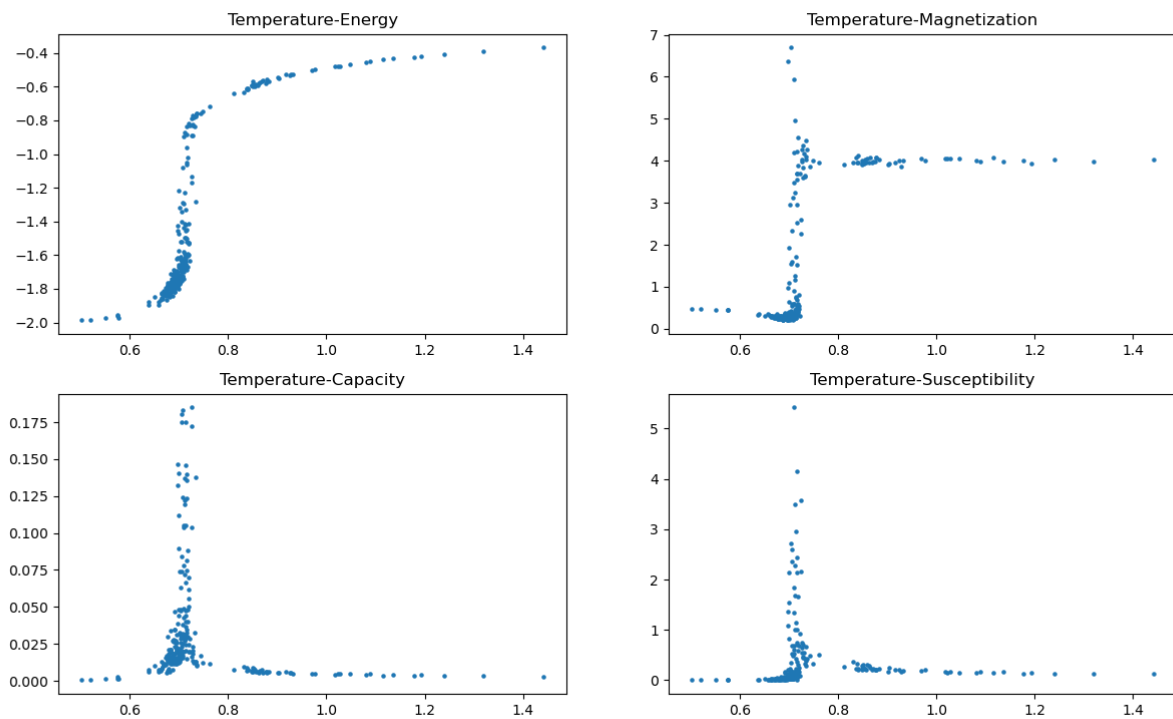
此时估计相变在 $T_c = 1.0 \sim 1.1$ 之间发生。

q=6:



相变温度 T_c 约为 0.84

$q=10$:



相变温度 T_c 进一步降低, 达到 0.72

通过归纳可以得出，q值越大相变温度越低。