

## 计算物理第十九次作业

韦璐 PB16000702

题目：

[作业19]：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。

编程思路：

$$\text{体系的能量 } H = \left( \frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2} \right) KT$$

$$\text{满足玻尔兹曼分布 } P_i = \frac{e^{-\frac{E_i}{k_b T}}}{Z}$$

$$\text{其中 } Z = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{H}{KT} dx dy = 2\pi\sigma_x\sigma_y$$

$$\text{空间概率分布为 } P(x, y) = \frac{\frac{H}{KT}}{2\pi\sigma_x\sigma_y}$$

我们得到

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

如果  $\sigma_x = \sigma_y = 1$ ，则前两式结果为一，最后一个式子的结果是二。

假设马尔科夫链走  $N$  步，热化  $M$  步，物理量  $A$  的系综平均是

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

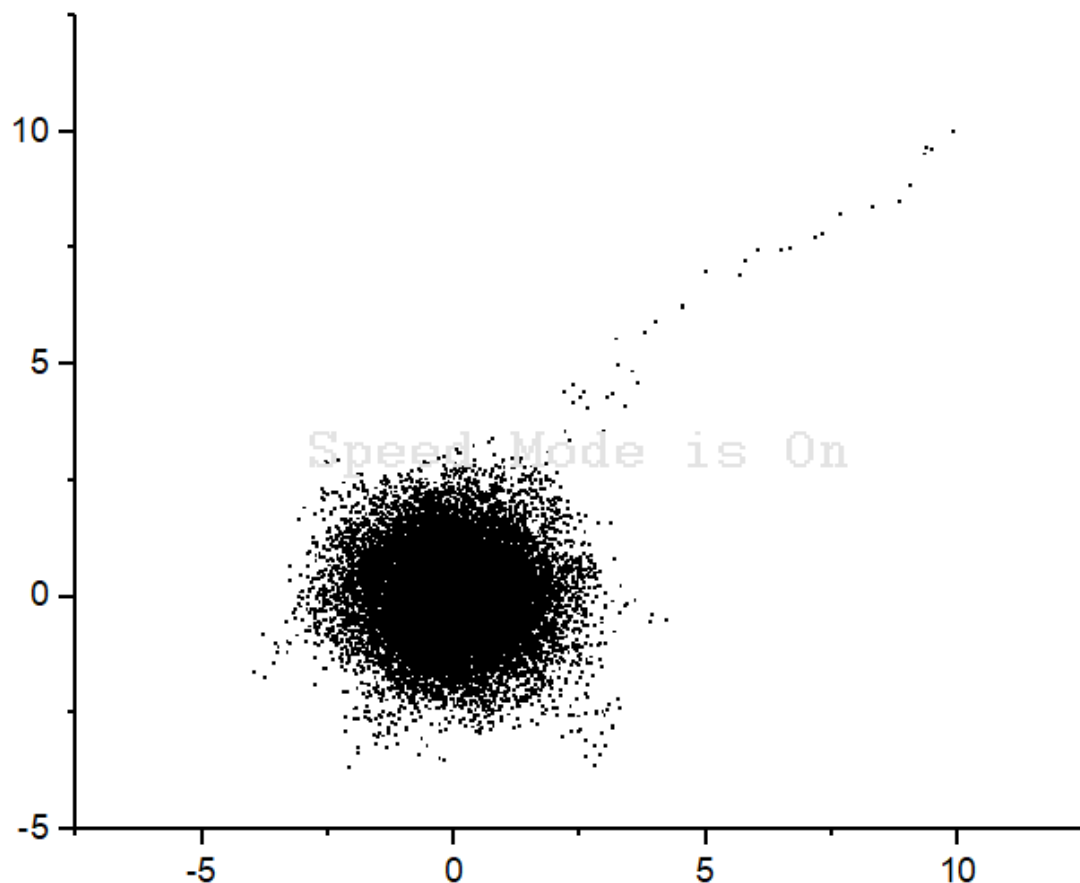
我们设初始位置坐标为  $(10, 10)$ ，行走五十万步，热化阶段为五万步：

1. 我们从初始状态生成两个在很小的范围内的随机数
2. 生成新的状态
3. 计算能量差

4. 能量差小于零就接受这个新的状态，然后输出新的状态，然后就重复之前的过程
5. 能量差大于零就生成零到一之间的随机数  $r$ ，如果这个数小于所计算的数，就同样更新状态并且让之前的过程继续，如果大于所计算出的数，就不更新状态，这个数就是能量差的负数的  $e$  的指数次方。

### 计算结果与分析：

马尔科夫链点图：



计算结果：

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle &= 1.018290, \\ \langle y^2 \rangle &= 0.972450, \\ \langle x^2 + y^2 \rangle &= 1.990740\end{aligned}$$

可以看到和理论值非常接近。

### 实验总结：

我们可以看到马尔科夫的链点图从我们设定的原点开始，就一步步的向原点靠近，最后在原点的附近徘徊，在徘徊之前的那条线非常的迅速，那个就是热化阶段，在我们计算平均值的时候要剔除。