

计算物理第六次作业 作业解答

隋源 2000011379

Jan 10th 2023

1. Monte Carlo Integration

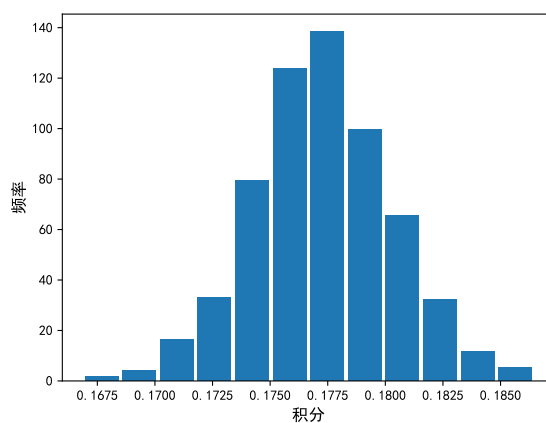
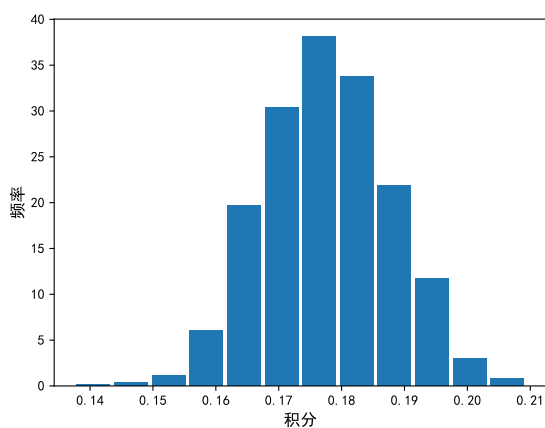
代码原理不详细阐述，见源码 MonteCarlo.py

(1)

积分的准确结果

$$\int_0^1 dx \exp[-100 \times (x - 0.5)^2] = 0.1772453851$$

利用随机数均匀性设计 MC 积分算法，1000 次 1000 点，10000 点 MC 积分的分布情况如下



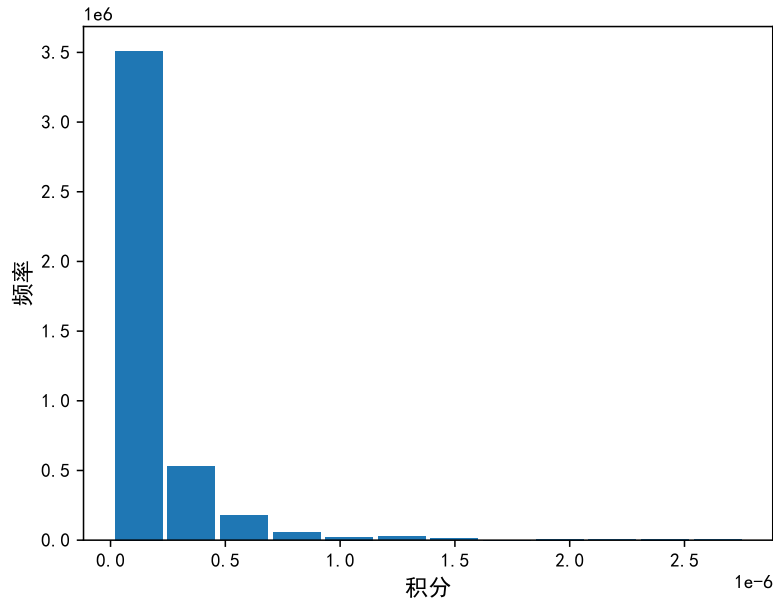
可以发现二者分布形状相似，总体平均值也较为准确 (0.17730)，显然随着点数的增加 MC 积分的最大偏差也下降了，即越多次越多点的 MC 积分结果越好。

(2)

积分的准确结果

$$\int_0^1 \cdots \int_0^1 dx_1 \cdots dx_9 \exp \left[-100 \times \sum_{i=1}^9 (x_i - 0.5)^2 \right] = 1.726531185 \times 10^{-7}$$

同样的原理设计算法，1000 次 100000 点的分布情况如下



右侧有大量留白是因为在对应的地方有个别的样本，即此算法的最大偏差相当之大，并且此时平均结果为 1.42×10^{-7} ，与准确结果偏差相当高。一方面原因是维数变高，需求投点数增加，100000 点不足以覆盖空间；另一方原因是此随机数的独立性比均匀性更差（见第五次作业），使得高维空间取随机点的随机性进一步变差，导致计算结果有很多偏离。诚然如果继续增加点数量级会让结果更好，但高维积分对随机数独立性要求很高，导致最终结果无法很好地逼近准确解，并且意味着计算时间的几何倍数增加，此时再使用 MC 模拟已不合适。

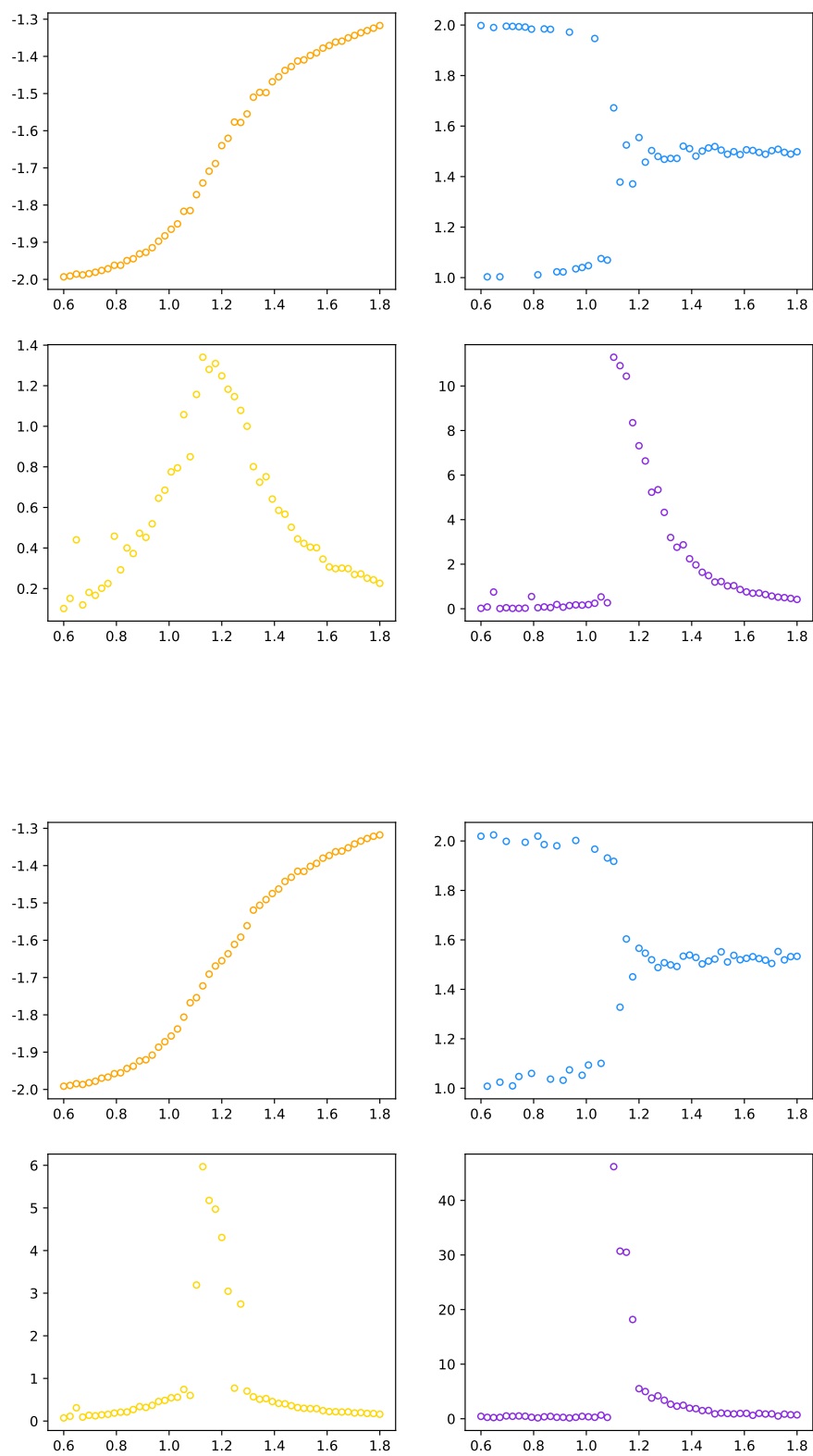
2.Potts Model

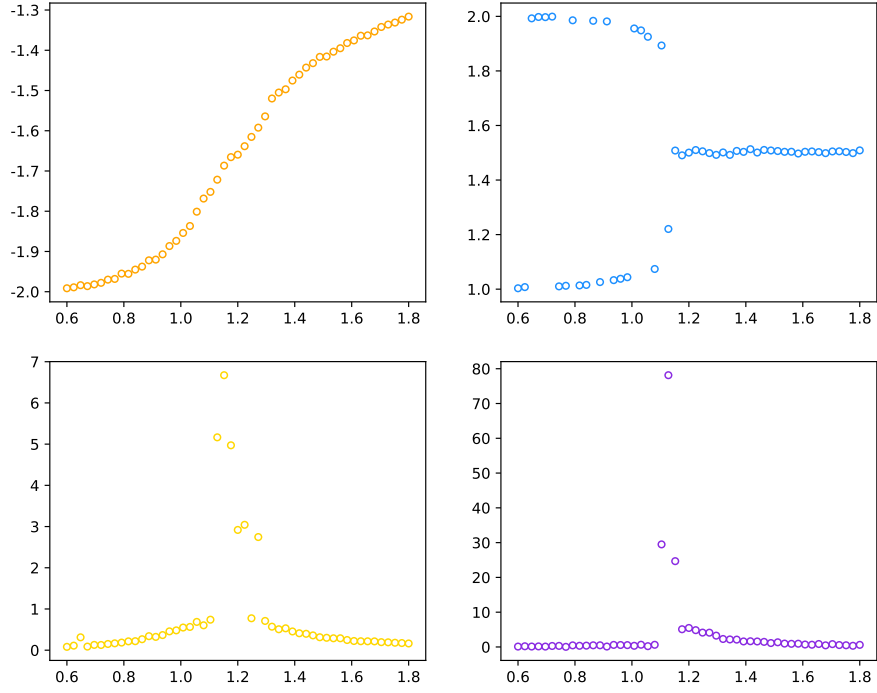
代码原理不详细阐述，见源码 PottsModel.py

(1)

对 $q = 2$ 情形，首先进行粗略搜索观察到范围在 0.6-1.8 之间，之后分别对 $10 \times 10, 40 \times 40, 80 \times 80$ 样品进行能量、磁矩、热容、磁化率的温度曲线计算。比对可以明显发现，随着样品增大，样品在温度临界点附近的行为逐渐从二阶相变向一阶相变转化，温度临界点越发明显。

图如后所示。依次是 $10 \times 10, 40 \times 40, 80 \times 80$ 样品，橙、蓝、黄、紫分别为能量、磁矩、热容、磁化率。MC 循环数为 5×10^5 。热容和磁化率是用统计结论 $\frac{\sigma_E^2}{T^2}, \frac{\sigma_M^2}{T^2}$ 求出的， σ_E, σ_M 为能量和磁矩数据的标准差。需要注意的是磁矩并非实际意义上的，无论是 2 还是 1 都是磁矩最大值，沿 1.5 对折才是真正的物理结果，其导数也对应磁化率图中的行为。





(2)

Potts 模型的等效能量宽度是 Ising 模型的一半，这影响了 MC 模拟时配分系数的计算。由于二者结果等价，在计算配分比时 $e^{-E/kT}$ 是不变的，也即意味着 Potts 模型的温度临界点时 Ising 模型的一半

$$Tc = 1.1345$$

图中看到的温度临界点（热容和磁化率最高点）为 1.104，可以说符合的较好。

(3)

最近邻近下，不同 q 的能量改变量易于给出

$$q = 2, \quad \Delta E = 0, \pm 2J, \pm 4J$$

$$q \geq 3, \quad \Delta E = 0, \pm 2J, \pm 2J, \pm 3J, \pm 4J$$

用同样的方法做出 $q = 3, 6, 10$ 的数据。首先粗略搜索到临界点都在 $0.6 - 1.2$ 范围内，接下来对该区域进行细致搜索，发现随 q 增大临界点逐渐减小，分别在 $1.0, 0.8, 0.7$ 左右。并且 $q = 6, 10$ 时体系基本出现一阶相变现象。三种情况的图表如后所示。

