

Schemat Metropolis'a i całkowanie Monte Carlo

B. Szafran, lab. MOFiT 1 2019/2020

9 czerwca 2022

Zad. 1 Postaramy się wygenerować ścieżkę wędrowca, którego lokalizacja będzie zmienną losową o rozkładzie $\rho(x) = \pi^{-1/2} \exp(-x^2)$.

Schemat Metropolis'a: Umieszczamy wędrowca np. w początku układu współrzędnych. Nazywamy jego położenie przez x_w .

W schemacie Metropolis'a generujemy ścieżkę lokalizacji w następujący sposób:

(1) Losujemy przesunięcie wędrowca x_w o losowy krok Δx wybrany wg rozkładu jednorodnego z przedziału $[-1/4, 1/4]$.

(2) Próbne położenie wędrowca $x'_w = x_w + \Delta x$.

(3) Generujemy liczbę losową y z przedziału $[0, 1]$ wg rozkładu jednorodnego.

(4) Jeśli $y < \frac{\rho(x'_w)}{\rho(x_w)}$ to próbne położenie akceptujemy, tj. przyjmujemy $x_w := x'_w$.

(5) Wracamy do (1).

do wykonania

Generujemy ścieżkę wg powyższego przepisu. W czasie wędrówki liczymy przybliżenie momentów rozkładu

$$I_n = \langle x^n \rangle = \int x^n \rho(x) dx, \quad (1)$$

dla $n = 1, 2, 3$ i 4 . Dla wyliczenia tych całek liczymy sumując x_w^n dla x_w jakie jest na ścieżce tuż przed wykonaniem punktu (5). Do średniej bierzemy aktualną wartość x_w , niezależnie od tego czy wartość została zmieniona czy nie

$$I_n(l) \simeq \frac{1}{l} \sum_{k=1}^l x_w^n, \quad (2)$$

gdzie k to suma po krokach od początku symulacji, a l to liczba kroków

Narysować $I_n(l)$ dla $n = 1, 2, 3, 4$ oraz $l \in [1, 10^7]$ (70 pkt). Dokładne wartości: $I_2 = 0.5$, $I_4 = 0.75$, $I_1 = I_3 = 0$.

Zad. 2 Dwuwymiarowy kwantowy oscylator harmoniczny o częstości ω opisuje Hamiltonian

$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 + \frac{1}{2} \omega^2 y^2, \quad (3)$$

Dla $\omega = 1$ funkcja falowa stanu podstawowego ma postać $\psi(x, y) = \pi^{-1/2} \exp(-\frac{1}{2}(x^2 + y^2))$, a odpowiadająca jej energia to $E = 1$.

do wykonania Wygenerować ścieżkę wg przepisu Metropolis dla rozkładu pstwa $\rho(x, y) = |\psi(x, y)|^2$. **Narysować średnią wartość energii potencjalnej $\langle (x^2 + y^2)/2 \rangle$ w funkcji liczby kroków. 30 pkt.**

Dokładna wartość to $1/2$.