

О всех опечатках и неясностях в условиях и текстах сообщайте, пожалуйста!

ПРОЕКТ 1

Рассмотрим систему **1D** связанных ангармонических осцилляторов:

$$U_1(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{N-1} \left[\frac{k}{2} (x_{i+1} - x_i - L_0)^2 - \frac{\beta}{3} (x_{i+1} - x_i - L_0)^3 \right].$$

Выберем $k = 10$, $\beta = 1$, $L_0 = 1$. Масса частицы $m = 1$.

1. Предварительный (но важный!) шаг. Пусть $N = 3$ и зафиксируем (в смысле координат и нулевых скоростей) частицы 1 и 3. Поставьте $x_i = (i - 1) \cdot L_0$ и сгенерируйте какую-нибудь небольшую скорость для частицы 2. Теперь напишите «ядро» кода, связанного с мол. динамикой: инициализация системы, ф-ция расчета ускорений, шаг интегрирования Velocity Verlet, измерение энергии. Убедитесь, что $x_2(t)$ является гармонической ф-цией, а

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{mv_i^2}{2} + U_1(\vec{x})$$

в среднем сохраняется. Шаг интегрирования в авторском исполнении 10^{-3} , возможно, может потребоваться несколько изменить это значение.

2. Пусть далее $N = 100$. Добавьте расчет ускорений всех частиц (включая крайние слева и справа), так чтобы они все могли двигаться. При генерации начальных скоростей обеспечивайте неподвижность центра масс частиц. В условиях МКРГ убедитесь, что E сохраняется.
3. Теперь переходим в КРГ: добавьте, согласно рецепту на Лекции, термостат Nosé-Hoover и путем подбора параметра Q добейтесь моделирования при примерно постоянной «статистической» температуре

$$\theta_{\text{стат}} = \frac{1}{(N-1)d} \sum_{i=1}^N v_i^2, \quad d = 1.$$

Введем, далее, наблюдаемую

$$\bar{x} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} (x_{i+1} - x_i)$$

– среднее расстояние между частицами. Оценим ее следующим образом:

- а. термализуйте систему; **проверьте примерное сохранение температуры!**
- б. вычислите \bar{x} для 1 конфигурации (расположения частиц) и добавьте в массив/список;
- в. выполните еще 20-50 шагов интегрирования (эволюции) системы;
- г. повторите вычисление, добавив новое значение в коллекцию;
- д. повторяйте шаги в.-г. до получения *достаточно* большого числа измерений (автору потребовалось 10^4);
- е. оцените среднее и погрешность:

$$\tilde{x} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \bar{x}_m, \quad \sigma^2 = \frac{1}{M(M-1)} \sum_{m=1}^M (\bar{x}_m - \tilde{x})^2.$$

Проделайте вычисление для температур $0.1 \dots 1.0$ с шагом 0.1 . Перед каждым новым «измерением» сбрасывайте систему в случайное начальное состояние и приступайте к шагу а. Постройте график $\tilde{x}(\theta)$. Оцените его вид. На какую функцию похожа получающаяся зависимость? (Прим. задача №86 осеннего курса статфизики относится к случаю $\beta \ll k$.)

- Получим распределение Максвелла для данной системы. Вспомним, оно справедливо не только для идеальных систем, поэтому его можно попробовать увидеть и для системы осцилляторов. Для этого задайте $N = 1000$, $\theta = 0.05$ (подберите Q заново, поскольку изменили параметры). Убедитесь, что термостат сумел установить нужную температуру, иначе подкорректируйте Q . Затем для **какой-нибудь одной конфигурации** сохраните скорости v_x всех 10^3 частиц в отдельный файл. Затем постройте гистограмму, она должна быть симметрична относительно 0. Постройте график, соответствующий *выборочным частотам*: частоты в зависимости от v_x – и путем фиттирования на $Ae^{-v^2/(2\theta)}$ определите (таким косвенным путем) температуру θ . Сравните ее с задаваемой для термостата Nosé-Hoover при моделировании.

ПРОЕКТ 2

Рассмотрим **регулярный язык** L над алфавитом $\{0,1\}$, содержащий ненулевые цепочки с количеством «0», кратным 5, и произвольным количеством «1» (включая их полное отсутствие). Примерами являются цепочки «00000», «0000000000», «010000», «01001100», «001000000111100».

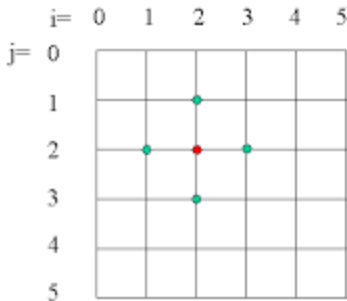
- Постройте регулярное выражение, языком которого является L . Запишите его в качестве ответа и напишите программу, которая тестирует предлагаемое выражение при помощи библиотеки используемого Вами языка. Самостоятельно разбор regex писать не нужно.
- Постройте КА (ДКА или (ϵ -)НКА), распознающий цепочки языка L . Нарисуйте схему (**на бумаге/как фото**) этого КА. Реализуйте работу КА при помощи используемого Вами языка программирования. Алгоритм нужно полностью реализовать самостоятельно, и средств языка можно применять лишь класс/тип «множество». Проверьте функцию на нескольких примерах.
- Задайте контекстно-свободную грамматику, задающую язык L . Запишите (**на бумаге/как фото**) продукции этой грамматики. Согласно материалу Лекции 13 *Некоторые свойства КС-грамматик* преобразуйте построенную грамматику в нормальную форму Хомского, полученный набор продукций также запишите (**на бумаге/как фото**).
- Используя полученную в п. 3 нормальную форму Хомского, запрограммируйте алгоритм Кока-Янгера-Касами (см. Лекцию 13) проверки принадлежности цепочки языку L . Проверьте функцию на нескольких примерах.
- Постройте МП-КА, допускающий цепочки языка L . Нарисуйте схему (**на бумаге/как фото**) этого КА. Реализуйте работу КА при помощи используемого Вами языка программирования. Алгоритм нужно полностью реализовать самостоятельно, и средств языка можно применять лишь класс/тип «множество». Проверьте функцию на нескольких примерах. (Указание. В данном случае достаточно МП-ДКА.)

ПРОЕКТ 3

Рассмотрим **XУ-модель** на двумерной решетке:

$$E = - \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j),$$

где в каждом узле квадратной решетки $N \times N$ атомов задан угол θ «спина», а сумма берется по всем ближайшим соседям по окрестности фон Неймана (см. Рис.).



Пусть заданы периодические граничные условия, т.е. сосед спина с номером N вдоль какой-либо оси совпадает со спином с номером 0 вдоль этой же оси.

Моделирование производится методом Монте-Карло при помощи алгоритма Метрополиса с точечными (узловыми) обновлениями. Начальное состояние решетки: все углы нулевые. Предложение Метрополиса:

$$\theta_i \rightarrow \theta_i + \text{no} \cdot \pi \cdot \text{red},$$

где no – стандартно нормально распределенное ПСЧ $\text{no} \in \mathcal{N}(0; 1)$, red – «редуцирующий» фактор, настройка которого улучшает качество моделирования. Используем $N \geq 40$.

1. Реализуйте ядро алгоритма: функцию смены конфигураций, функцию вычисления энергии и функцию управления моделированием.
2. Подберите red из соображения, чтобы acceptance rate для $T = 1.0$ был в диапазоне 80-90%.
3. Для какой-нибудь одной температуры (напр, той же $T = 1.0$) постройте график зависимости удельной энергии от номера шага и убедитесь, что система «термализуется» (т.е. приходит в окрестность наиболее выгодных при данных условиях моделирования состояний). Все последующие вычисления выполняются только после достижения термализации.
4. Для $T \in [0.1; 4)$ постройте график зависимости удельной энергии от температуры.
5. Для $T \in [0.1; 2]$ постройте график зависимости от температуры величины

$$\frac{\langle M^2 \rangle}{N^2} = \frac{1}{N^2} \frac{1}{N^2} \left(\left(\sum_{i=1}^{N^2} \cos \theta_i \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^{N^2} \sin \theta_i \right)^2 \right).$$

6. Для $T \in [0.1; 4)$ постройте график зависимости от температуры удельной теплоемкости C/N^2 . Для этого вспомним, что

$$C = \frac{\mathcal{D}[E]}{\theta^2},$$

где E есть полная (не удельная!) энергия системы. Дисперсию энергии оцените по ряду последовательно вычисленных в ходе эволюции системы значений E_j как

$$\frac{1}{m} \sum_{j=1}^m (E_j - \bar{E})^2,$$

причем m далеко не 10 ☺, а настолько велико, чтобы *результатирующий* график уд. теплоемкости выглядел бы достаточно гладко. Кроме того, учтите, что последовательно вычисленные значения E_j в ряду, по которому находится дисперсия, могут быть коррелированы. Чтобы

достоверно истолковать справедливость наших действий, следует вычислить хотя бы τ_{int} (см. осень) и убедиться, что оно не превышает 1-1.5 (около 2.0 уже плохо!).

Замечание. В пп. 4-6 шаг по температуре выберите достаточно подробный, напр, 0.1.

7. Прodelайте п. 6 для $N = 20, 30, 50$ и, если получится, $N = 100$. Постройте три-четыре графика в одних осях. Что Вы наблюдаете? Как это можно было бы объяснить?
8. Определим коррелятор спинов на расстоянии $d = \overline{0, N/2}$ как

$$C(d) = \langle |\cos(\theta_i - \theta_{i+d})| \rangle,$$

где среднее взято одновременно по цепочке конфигураций (т.е. по р/в распределению Гиббса) и по пространству (в силу однородности системы). Оценку среднего можно выполнить так:

- а. Походят всю решетку, для каждого узла вычисляют все значения $|\cos(\theta_i - \theta_{i+d})|$ для всех d и усредняют. В 2D следует рассмотреть соседей d -ого порядка вправо и вниз. Общее число слагаемых получится $2N^2$. При усреднении на него нужно разделить сумму.
- б. Меняют конфигурации несколько раз (пропуск вычислений служит для ослабления автокорреляций) и повторяют процедуру п. а. Полученные значения при каждом d суммируют независимо.
- в. После выполнения m -кратного вычисления следует разделить сумму при каждом d на m и сохранить результат как оценку $C(d)$.

Замечание. В этом численном эксперименте нужно особое внимание обратить на достаточность предварительной стадии «термализации», т.е. установления средних значений разных наблюдаемых (напр, энергии) и взять много последовательных значений m (автор брал 100 при выбрасывании 4 промежуточных конфигураций).

Постройте три графика $C(d)$ в диапазоне $d = \overline{0, N/2}$ в одних осях: для $T = 0.5; 1.0; 2.0$. Проинтерпретируйте наблюдаемые отличия с физической точки зрения.

ПРОЕКТ 4

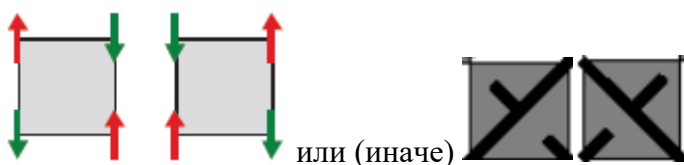
Рассмотрим **квантовую 1D модель Изинга**

$$\hat{H} = - \sum_{i=0}^{N-1} \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z, \quad \hat{S}_N^z \equiv \hat{S}_0^z.$$

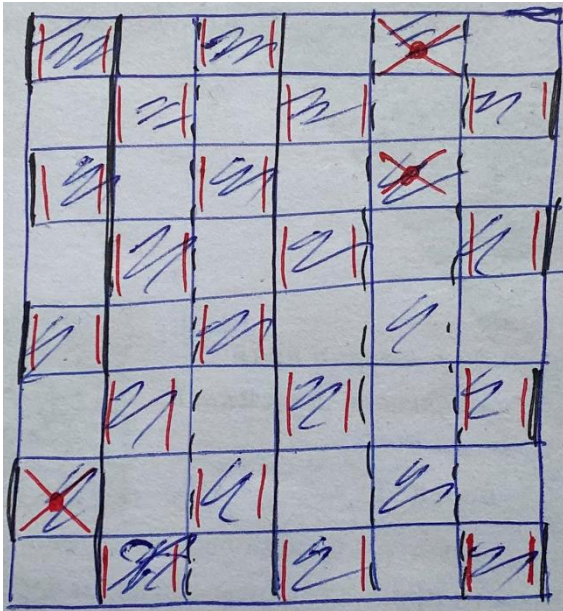
Заданы периодические граничные условия. Будем использовать **Loop update**-алгоритм кластерного обновления конфигураций «мировые линии на шахматном поле».

• Типы плакетов и свойства переходов в конфигурационном пр-ве модели Изинга ($J_{xy} = 0, J_z < 0$) см. на Лекции 20 *Обновления мировых линий*.

Важно! Задача облегчается тем, что квантовая 1D модель Изинга не обладает конфигурацией с переставленными спинами, т.е. возможность возникновения



можно исключить. Таким образом, линии спинов +1 и -1 проходят *вертикально* через все «шахматное поле», и в качестве конфигурации достаточно хранить набор спинов на 0 уровне по τ . Конфигурация же состоит из N вертикальных столбцов с M копиями одного и того же плакета в каждом. Наличие



строк по мнимому времени τ следует учитывать при покрытии конфигурации графами G , поскольку существует вероятность выбора каждого из двух типов графов (G_1 и G_4) для плакета с линиями из сонаправленных спинов (плакет C_2) на любом из временных слоев, а выбор каждого из этих типов влияет на формирование кластера. Пример конфигурации и покрытия графами приведен на Рис. ■

Перед началом работы рассчитайте

$$P(G_1|C_2) = \frac{\Delta(C_2, G_1)V(G_1)}{W(C_2)}; P(G_4|C_2).$$

1. Запрограммируйте «ядро» алгоритма: функцию генерации решетки в состоянии со всеми спинами \uparrow , функцию шага обновления, функцию отображения конфигурации системы. Аккуратно реализуйте алгоритм разбиения мировых линий на кластеры и их последующее обновление. Периодические гр. условия создают существенные проблемы в этой связи. Обратите внимание: на каждом временном слое лишь половина клеток «шахматного поля» активны!

Для $N = 20, M = \beta/\tau = 10$ проверьте (визуально, интуитивно), насколько активно меняются конфигурации при $T = 0.1, 1, 5$.

Ниже по заданию $N = 100$.

2. Подберем M , достаточное для моделирования. Для холодной системы (в фазе когда коллективные эффекты сильны), например, при $T = 0.1$, для ряда значений M в диапазоне от 4 до 100 при фиксированном $\beta = 1/T$ вычислите

$$P = \left| \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} S_i^z \right|, \quad S_i^z = \pm \frac{1}{2}.$$

Замечание. Вспомним, что перед началом снятия данных следует дождаться термализации, т.е. прихода системы в ту область конф. пр-ва, точки которой соответствуют наиболее вероятным при фиксированных внешних условиях микросостояниям.

Сохраняя каждый раз получаемый ряд значений $P(C_\alpha)$, рассчитайте среднее \bar{P} , интегральное время АК

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \sum_{s=1}^{s_{\text{max}}} A(s), \quad A(s) = \frac{1}{N_{\text{mea}} - s} \sum_{k=0}^{N_{\text{mea}} - s - 1} (P_k - \bar{P})(P_{k+s} - \bar{P}),$$

где s_{max} – значение s , предшествующее первому появлению $A(s) < 0$ и погрешность среднего

$$\sigma = \sqrt{\frac{A(0)}{N_{\text{mea}} - 1} \cdot 2\tau_{\text{int}}}.$$

N_{mea} для данного эксперимента должно быть достаточно большим, например, у автора 10000.

Постройте график зависимости \bar{E} с «усами» погрешности в зависимости от M . Должна наблюдаться стабилизация среднего, начиная с некоторого M . Выбрав в качестве значения параметра чуть большие значения, мы достигаем результата.

3. Выведем рабочее выражение для вычисления средней энергии. На лекции 19 Монте-Карло моделирование квантовых спиновых систем доказано, что энергия конфигурации \mathcal{C} составляет

$$E(\mathcal{C}) = -\frac{1}{M} \frac{\partial}{\partial \tau} \ln W(\mathcal{C}),$$

где $W(\mathcal{C}) = \prod_p W(C_p)$, а $W(C_1) = 1 - \tau/4$, $W(C_2) = 1 + \tau/4$. Всего плакетов M шт (одинаковы, как сказано выше) в каждом столбце. Тогда

$$E(\mathcal{C}) = -\frac{1}{M} \frac{\partial}{\partial \tau} \sum_{i=0}^{N-1} M \ln W(C_i),$$

где C_i – плакет, заполняющий столбец между частицами i и $i + 1$. Вычисляя производные,

$$E(\mathcal{C}) = -\sum_{i=0}^{N-1} \left\{ \begin{array}{ll} \frac{-1/4}{1 - \tau/4}, & C_i = C_1, \\ \frac{1/4}{1 + \tau/4}, & C_i = C_2 \end{array} \right\}, \quad \tau = \frac{\beta}{M}.$$

Для среднего значения энергии в той же Лекции было получено

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mathcal{C}} E(\mathcal{C}) W(\mathcal{C}), \quad Z = \sum_{\mathcal{C}} W(\mathcal{C}).$$

Поскольку в ряду $E(C_1), E(C_2), \dots$ наблюдений Монте-Карло конфигурация \mathcal{C} встречается с частотой, пропорциональной $W(\mathcal{C})$, при использовании выборки по значимости среднее можно оценить

$$\langle \hat{H} \rangle \approx \bar{E} = \frac{1}{N_{\text{mea}}} \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{mea}}} E(\mathcal{C}_\alpha).$$

Руководствуясь полученным рецептом и значением M , определенным в п. 2, вычислите ряд значений \bar{E} в зависимости от номера шага Монте-Карло. Следует пронаблюдать термализацию и последующее установление «равновесного» значения энергии. Постройте два графика для $T = 1$ и $T = 0.5$. Прокомментируйте результаты с физической точки зрения.

4. Согласно рецепту, освоенному по п. 3, определите зависимость \bar{E} от T в интервале от 0.1 до 2. В каждом отдельном запуске снова вычислите интегральное время автокорреляции для наблюдаемой (аналогично п. 2). N_{mea} для энергии обычно меньше, чем для спина, напр, автору хватило 1000. Для уменьшения АК времени (напр, от 1.5 до 0.6) пропускайте несколько промежуточных конфигураций между последовательными вычислениями. Если точки по температуре поставить достаточно густо, путем конечно-разностной производной можно оценить (изохорическую) теплоемкость в зависимости от температуры:

$$C \approx \frac{\Delta \bar{E}}{\Delta T}; \quad \sigma_C = \frac{\sqrt{\sigma_{E_2}^2 + \sigma_{E_1}^2}}{\Delta T}.$$

Замечание. Для расчета C нельзя вычислить дисперсию посл-ти \bar{E}_α , потому что это не соответствует вычислению по формуле с квантово-механическим распределением Гиббса:

$$\mathcal{D}[\hat{H}] = \langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2 = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{H}^2) - (\text{Tr}(\hat{\rho} \hat{H}))^2.$$

5. Рассмотрим проявление эффекта конечного объема. Для $N = 25, 50, 100, 200$ (M можно не менять, т.к. разделение $e^{-\beta(H_1+H_2)} = e^{-\beta H_1} e^{-\beta H_2}$ *точное*) согласно методике п. 4. получите график $\bar{E}(T)$ для T в интервале от 0.1 до 0.4 с шагом не более 0.01. Постройте 4 графика в одних осях, изучите совместное расположение кривых. Выделите 2 области, где графики расходятся. Прокомментируйте, почему эти области расположены именно при таких значениях T (результаты п. 4 могут помочь с одной областью).