

计算物理作业-12

Spring 2026

课程内容: 蒙特卡洛方法

上交方式: 上传至“学在浙大”

开始时间: 2026/04/10

截止时间: 2026/04/17, 24:00

1. 模拟退火算法求二维带电粒子体系的低能构型

在许多物理问题中, 体系的稳定结构对应于总能量的极小值。然而, 对于具有多个自由度的复杂体系, 其能量函数往往存在大量局域极小点, 常规的梯度下降或局部搜索方法容易陷入局部最优解。模拟退火算法借鉴统计物理中热退火过程的思想, 通过在高温下允许体系以一定概率接受“变差”的状态, 从而有机会跳出局部极小, 逐步逼近全局最优解。

考虑一个由 N 个相同带电粒子组成的二维体系。粒子被限制在平面内运动, 并同时受到粒子间的库仑斥力以及一个将粒子束缚在中心附近的外加抛物势作用。体系总势能取为

$$E = \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} + \alpha \sum_{i=1}^N (x_i^2 + y_i^2),$$

其中

$$r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2},$$

(x_i, y_i) 为第 i 个粒子的坐标, $\alpha > 0$ 为束缚势强度。

上式第一项表示粒子之间的两两库仑斥力, 倾向于使粒子彼此远离; 第二项表示外加束缚势, 阻止粒子无限远离中心。两种效应相互竞争, 使得体系形成若干可能的低能排布。该问题具有典型的多极值结构, 是模拟退火算法的一个代表性应用。

作业要求 编写 Python 程序, 利用模拟退火算法寻找该体系的低能量构型, 并完成以下内容。

(a) 取粒子数 $N = 12$, 束缚势参数取 $\alpha = 1$ 。在给定半径 $R = 2.5$ 的圆盘区域

$$x^2 + y^2 \leq R^2$$

内随机生成初始粒子坐标, 作为初始构型。

(b) 设计单粒子随机扰动方案。每一步随机选取一个粒子, 并对其坐标施加小扰动

$$x_i \rightarrow x_i + \delta_x, \quad y_i \rightarrow y_i + \delta_y,$$

其中 δ_x, δ_y 可在区间 $[-\Delta, \Delta]$ 内均匀随机取样。若新位置超出允许区域, 则可重新采样或拒绝该步移动。

(c) 对每次扰动计算能量变化

$$\Delta E = E_{\text{new}} - E_{\text{old}},$$

并采用 Metropolis 准则决定是否接受该新状态:

- 若 $\Delta E < 0$, 则无条件接受;
- 若 $\Delta E > 0$, 则以概率

$$p = \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right)$$

接受新状态, 其中 T 为当前“温度”。

(d) 设定退火过程。可采用几何降温方式:

$$T_{k+1} = qT_k, \quad 0 < q < 1,$$

其中 $T_0 = 1.0$ 为初始温度, $q = 0.98$ 为降温因子。每个温度下进行若干次 (比如 $N_T = 300$ 次) 随机扰动, 再降低温度, 直至达到终止温度 $T_{\text{min}} = 0.001$ 。

(e) 输出并展示以下结果:

- i. 总能量随迭代步数变化的曲线;
- ii. 初始构型与最终构型的二维分布图;
- iii. 对结果进行简要分析, 讨论这些参数对算法收敛速度、结果稳定性以及是否容易陷入局域极小的影响。

提示

- 为避免数值发散, 当两个粒子距离极小时应注意程序中的数值稳定性;
- 对同一参数重复运行多次, 可比较最终能量是否稳定, 以判断算法的可靠性。

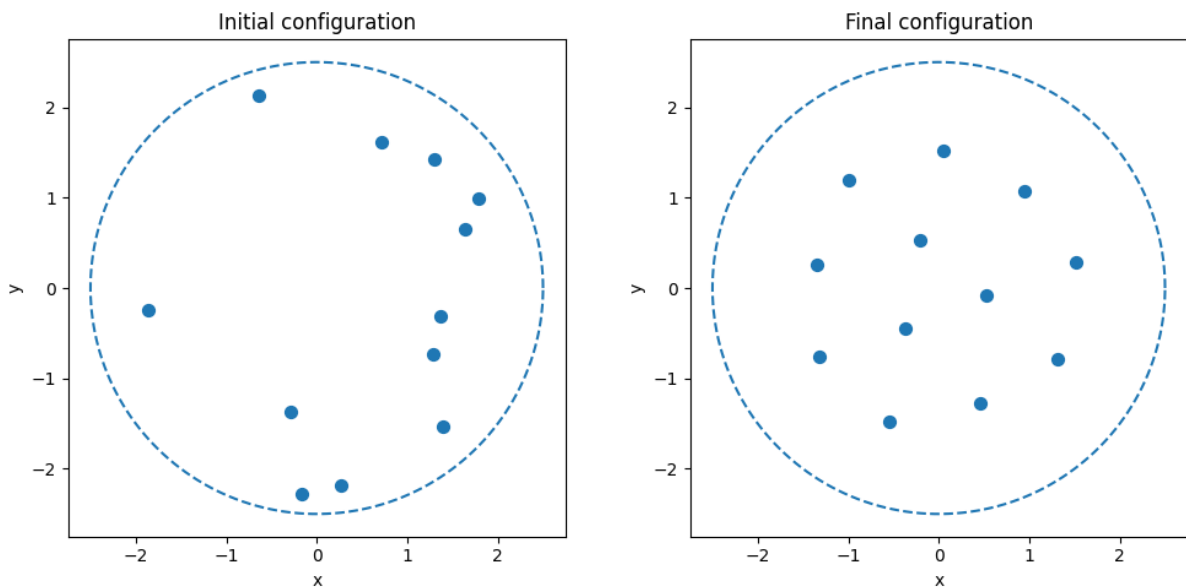


图 1: 最初随机构型 (左) 和模拟退火之后的稳定构型 (右)