HW16

古宜民

2019.12.11

题目

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。

分析&算法

理论分析

理论计算$\langle x^2\rangle$,$\langle y^2\rangle$,$\langle x^2+y^2\rangle$的解析结果。

体系的能量分布满足Boltzmann分布，概率密度为$P_i=\frac{1}{Z}e^{-H_i/k_0T}$，其中配分函数Z为：

$$Z=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2}+\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)}dxdy=2\pi\sigma_x\sigma_y$$

所以空间概率分布为：

$$P(x,y)=\frac{e^{-\left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2}+\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)}}{2\pi\sigma_x\sigma_y}$$

对于力学量A，其系综平均值为：

$$\langle A\rangle=Z^{-1}\int A(\mathbf{q},\mathbf{p})e^{-\beta H(\mathbf{q},\mathbf{p})}d\Omega,$$

在本二维情况下即为：

$$\langle x^2\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-\left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2}+\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)}dxdy=\sigma_x^2$$

$$\langle y^2\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}y^2e^{-\left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2}+\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)}dxdy=\sigma_y^2$$

$$\langle x^2+y^2\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}(x^2+y^2)e^{-\left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2}+\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)}dxdy=\sigma_x^2+\sigma_y^2$$

具体的数值要取定σ_x和σ_y才能确定。

程序实现

使用Metropolis方法进行模拟。对于一个状态，每次迭代（Markov链向前走一步）从该状态生成一个新状态（对其x与y座标加上一个在[-a, a]中均匀分布的随机值，这里取a=0.1），计算能量，如果新状态的能量高于旧状态，则以$w=e^{-\Delta E}$的概率接受新状态，$1-w$的概率拒绝。如果新状态能量低于旧状态，则100%接受新状态。

模拟中，选取总步数N=5000000，预热步数（初始化用，在最后计算时舍去）Nskip=100000，随程序运行在线计算待求量的平均值，用后的状态不保留。

同时使用OpenCV进行二维平面上的Markov链点分布。

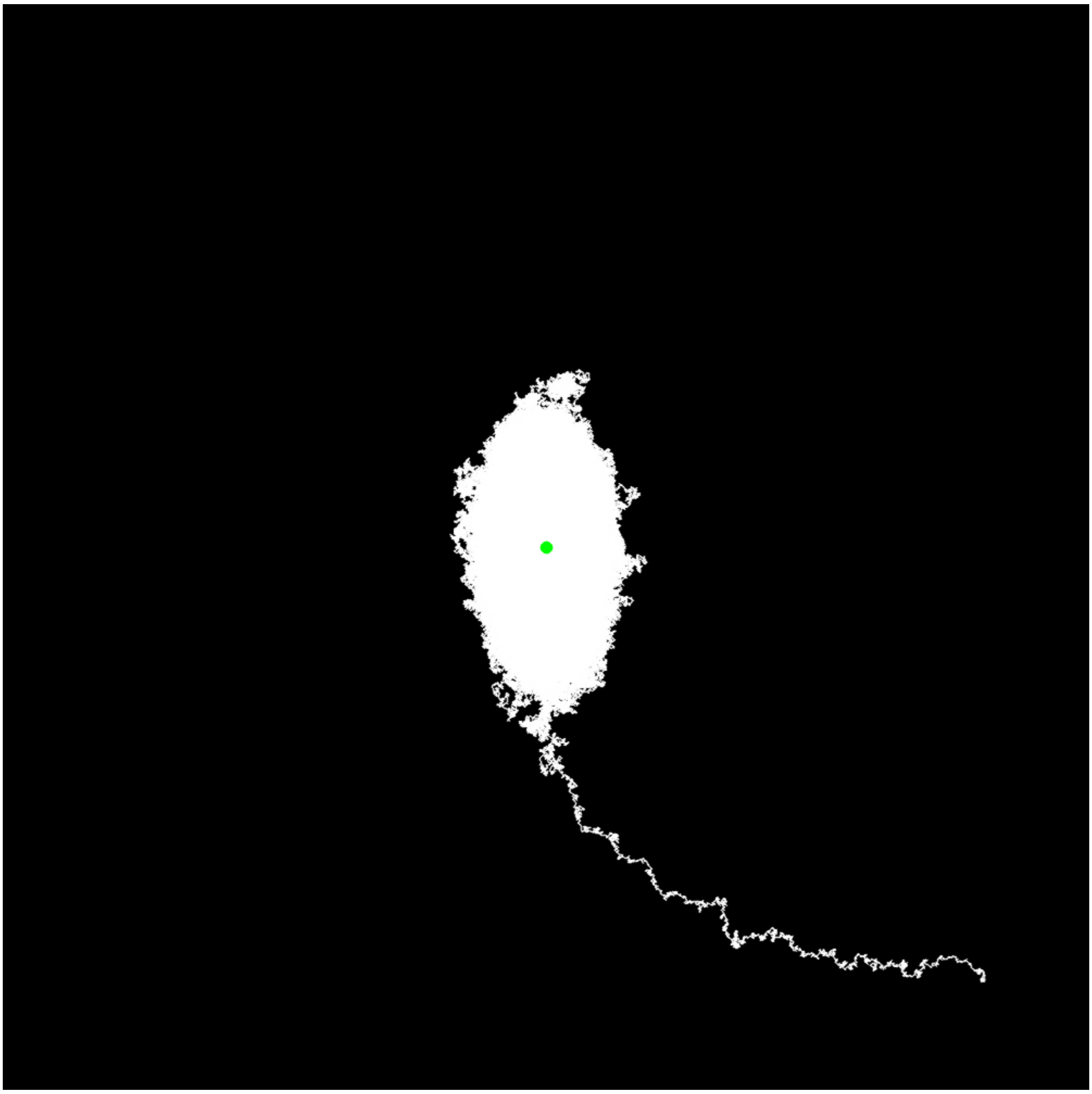
模拟结果

结果概览

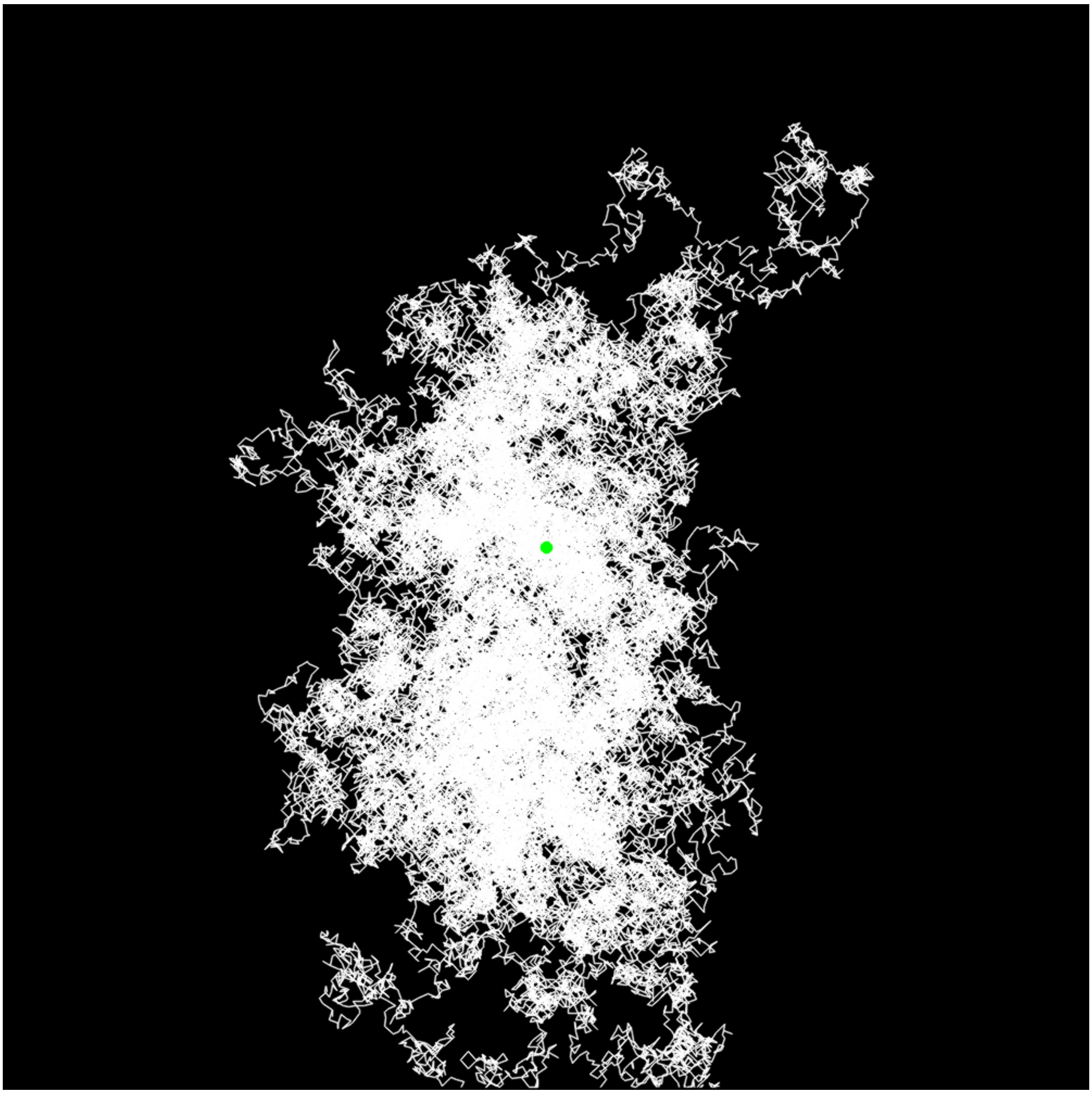
$\sigma_x = 1, \sigma_y = 2$的三次模拟结果，从上到下是$\langle x^2 \rangle, \langle y^2 \rangle, \langle x^2 + y^2 \rangle$

```
x2avg: 0.98373（理论值1）
y2avg: 4.11766（理论值4）
x2py2avg: 5.10139（理论值5）

x2avg: 0.967797
y2avg: 3.93284
x2py2avg: 4.90064

x2avg: 1.00191
y2avg: 3.89229
x2py2avg: 4.8942
```

一次模拟的图像：



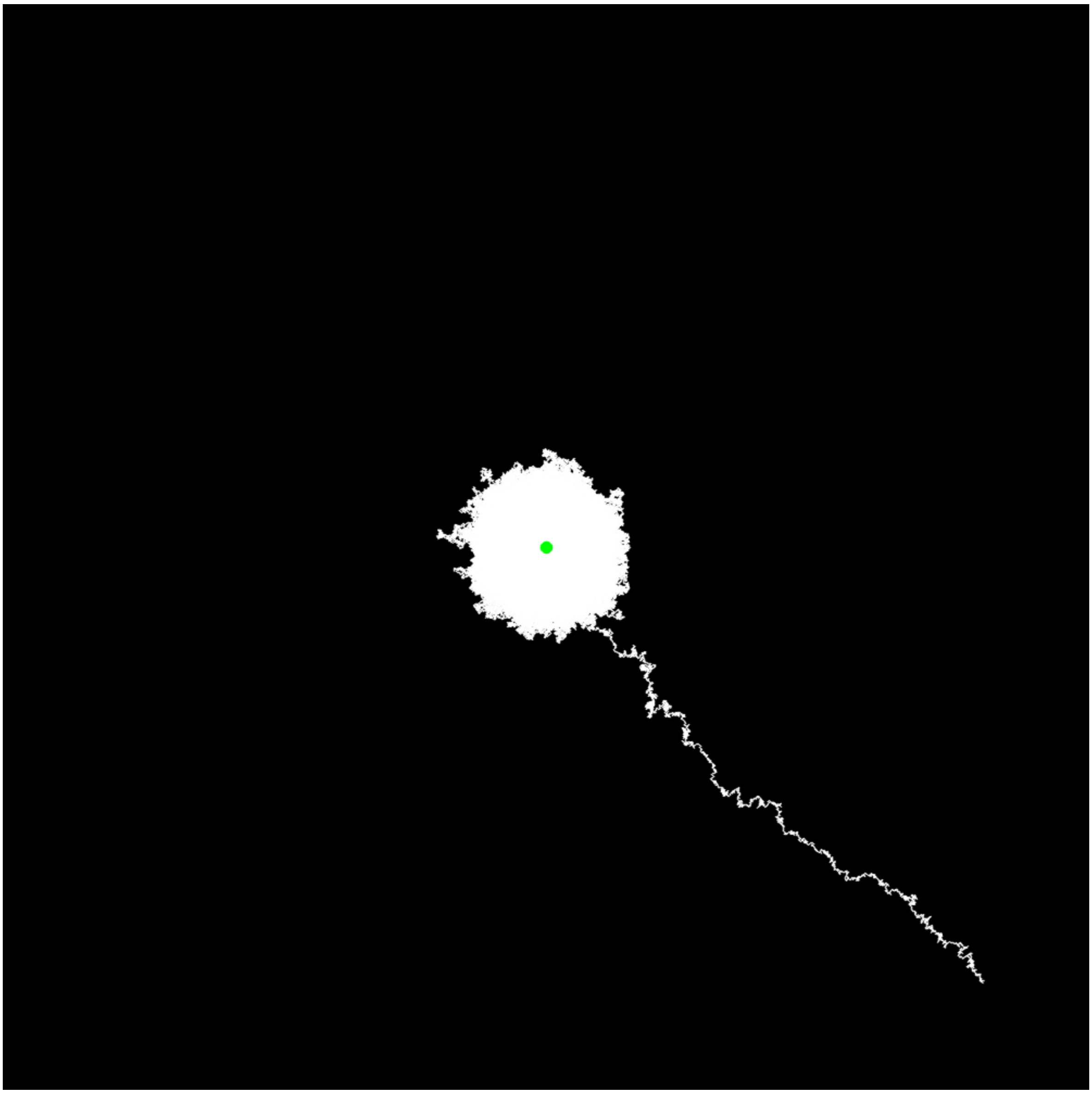
点数较少时放大图像：



$\sigma_x = 1, \sigma_y = 1$的三次模拟结果，从上到下是$\langle x^2 \rangle, \langle y^2 \rangle, \langle x^2 + y^2 \rangle$

```
x2avg: 1.01931（理论值1）
y2avg: 0.9763（理论值1）
x2py2avg: 1.99561（理论值2）

x2avg: 0.997186
y2avg: 0.964969
x2py2avg: 1.96216

x2avg: 0.976273
y2avg: 0.996528
x2py2avg: 1.9728
```

一次模拟的图像：



结果分析

从图像上看，开始时粒子的状态远离平衡位置，随着模拟步数增加，粒子迅速趋于平衡位置，并在之后一直在平衡位置附近的区域内运动。只要我们选取的预热时间保证了粒子走到平衡位置附近，就可以满足要求。如果预热结束后粒子还离平衡位置较远，则需要增加预热时间。从数据看，我们选取的预热时间已经足够长。

对于$\sigma_x = 1, \sigma_y = 2$的情况，理论值为$\langle x^2 \rangle = 1, \langle y^2 \rangle = 4, \langle x^2 + y^2 \rangle = 5$，有约2%-4%的误差。并且因为$\sigma_x$和$\sigma_y$不等，可以清楚的在图像上看到游走轨迹上y方向展宽较大，x方向展宽较小，总体轨迹历史成椭圆型。

对于$\sigma_x = 1, \sigma_y = 1$，理论值$\langle x^2 \rangle = 1, \langle y^2 \rangle = 1, \langle x^2 + y^2 \rangle = 1$，x与y对称，轨迹成圆形。误差为1%-3%左右。

如果减小模拟点数，减小至500000点，则$\sigma_x = 1, \sigma_y = 1$的误差约为2%-5%，而$\sigma_x = 1, \sigma_y = 2$中$\langle y^2 \rangle$的误差上升至了约10%-15%。可见当$\sigma_x$和$\sigma_y$增大时，在模拟点数较少是误差会增大很快，需要更多的模拟步数才能得到可以接受的结果。

三次运行的结果：

```
1,1
x2avg: 1.04688
y2avg: 1.02083
x2py2avg: 2.06771
```

```
x2avg: 0.997932
y2avg: 0.980587
x2py2avg: 1.97852

x2avg: 0.953336
y2avg: 1.05201
x2py2avg: 2.00535

1,2
x2avg: 0.992074
y2avg: 4.39254
x2py2avg: 5.38461

x2avg: 1.00193
y2avg: 3.23476
x2py2avg: 4.23668

x2avg: 0.948397
y2avg: 4.44338
x2py2avg: 5.39178
```

结论&其他

本次实验中成功地使用Metropolis重要抽样算法模拟了Boltzmann分布的粒子位置分布，结果与理论计算的预期相符。同时可视化地描述了二维Markov链的图像，形象地看到了Metropolis抽样的过程和粒子的位置分布。