数值分析上机习题报告 (17)

张宏毅 1500017736

June 6, 2017

1 Problem

考虑 $M \times M$ 格点二维 Ising 模型中 U_M, C_M 随温度变化的相变现象，并数值确定相变的临界温度 β_c，这里

$$U_M = \frac{1}{M^2}\langle H(\sigma)\rangle,\ C_M = \frac{\beta^2}{M^2}[\langle H^2(\sigma)\rangle - \langle H(\sigma)\rangle^2],$$

J 取为 1，边界条件取为周期。

2 Solution

为生成服从概率分布为 $p(x)$ 的随机变量，将其按各状态排成一个行向量 π，我们希望构造一个以 π 为不变分布的本原马氏链，这样根据时齐马氏链的遍历定理，从某一初始状态 $\sigma^{(0)}$ 出发（即初始概率分布为 $\pi_0 = (0, \cdots, 1, \cdots, 0)$），经过 n 次取样后得到的状态作为一个随机变量，其概率分布 $\pi_0 P^n$ 满足

$$\lim_{n\to\infty} \|\pi_0 P^n - \pi\| = 0,$$

其中 P 为马氏链的转移概率矩阵。因此当 n 充分大时，可认为所取样本服从我们期望的概率分布。

为构造一个以给定分布 π 为不变分布的马氏链转移概率矩阵 P，进一步考虑更强的细致平衡条件

$$\pi(i)P(i,j) = \pi(j)P(j,i),$$

假设我们已有一个转移概率矩阵 G（例如等概率转移），则 G 一般不满足细致平衡条件，考虑引入 $\alpha(i,j)$ 使得

$$\pi(i)G(i,j)\alpha(i,j) = \pi(j)G(j,i)\alpha(j,i), \tag{*}$$

则能让 (*) 式成立的一种简单的 $\alpha(i,j)$ 的选取方法为

$$\alpha(i,j) = \pi(j)G(j,i),\ \alpha(j,i) = \pi(i)G(i,j).$$

所以如果令 $P(i,j) = G(i,j)\alpha(i,j) = \pi(j)G(i,j)G(j,i)$，则 P 就满足了细致平衡条件，进而若选取 G 使得 P 不可约，则 π 便成为了 P 唯一的不变分布。这里的 $\alpha(i,j)$ 可看作状态转移 $i \to j$ 的接受率，但注意到 $\alpha(i,j)$ 可能会很小，从而导致状态转移的接受概率过低，收敛到不变分布的时间过长，因而可以将

(*) 式两边的接受率等比放大，使得较大的接受率达到 1，即取

$$\alpha(i,j) = \min\left\{1, \frac{\pi(j)G(j,i)}{\pi(i)G(i,j)}\right\}, \tag{**}$$

这样既保证了细致平衡条件不被破坏，又提高了取样分布的收敛速度。于是我们可以总结出 Metropolis-Hastings 取样算法的基本步骤：

Step 1. 选取初始状态 $\sigma^{(0)}$ 和一个转移概率矩阵 G（例如等概率转移）；

Step 2. 对当前状态 $\sigma^{(n)}$ 利用转移概率矩阵 G 产生预选状态 $\tilde{\sigma}^{(n)}$，由 (**) 式计算其接受率 α；

Step 3. 依 $[0,1]$ 均匀分布产生一个随机数 r，当 $r \le \alpha$ 时令 $\sigma^{(n+1)} = \tilde{\sigma}^{(n)}$，即接受预选状态，否则令 $\sigma^{(n+1)} = \sigma^{(n)}$，即拒绝预选状态。返回第二步。

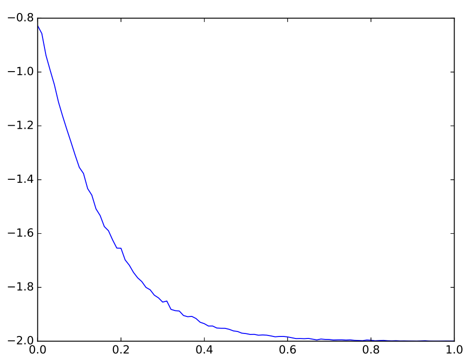
在 Ising 模型中，我们需要产生一系列服从 Gibbs 分布，即

$$p(\sigma) = \frac{1}{Z}\mathrm{e}^{-\beta H(\sigma)}, \quad Z = \sum_{\sigma}\mathrm{e}^{-\beta H(\sigma)},$$

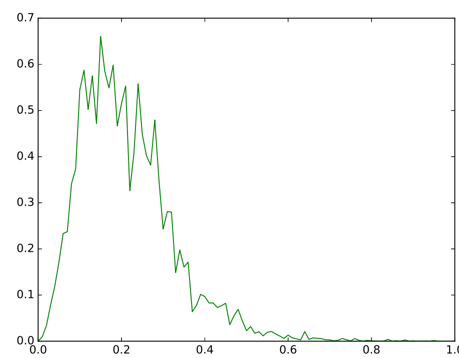
的随机变量，因而我们可以选取 G 为向所有与当前状态仅有一个格点不同的状态的等概率转移（显然是对称的），则每一步的接受率

$$\alpha(i,j) = \min\left\{1, \frac{\pi(j)}{\pi(i)}\right\} = \min\left\{1, \mathrm{e}^{-\beta\Delta H}\right\},$$

其中 $\Delta H = H(\sigma_j) - H(\sigma_i)$ 为状态的能量差。实际计算中，我们选取了 $M = 200$，对每个参数 β 进行了 10000 次抽样，并取后 2000 次作为不变分布的样本，相应计算得到平均内能 U_M 和比热容 C_M。计算结果如图 1 所示，可以看出，当 β 较大（即温度较低）时，材料的铁磁性基本能够稳定保持，电子的自旋方向保持一致，平均内能保持在 -0.5 左右，而比热趋近于 0。但当 β 不断减小（即温度升高）时，材料的铁磁性被破坏，尤其是图 (b) 中出现了非常剧烈的震荡，发生了显著的铁磁相变现象。临界温度 β_c 可以采用多次计算比热最大时对应的参数值并取平均来做估计，数值近似约为 0.162。



(a) $U_M - \beta$ 关系图



(b) $C_M - \beta$ 关系图

图 1: 二维 Ising 模型下物理指标随参数 β 的变化 ($M = 200$)