计算物理 A——Homework 15

何金铭 PB21020660

1 题目描述

设体系的能量为 $H(x,y)=-2(x^2+y^2)+\frac{1}{2}(x^4+y^4)+\frac{1}{2}(x-y)^4$, 取 $\beta=0.2,1,5$, 采用 Metropolis 抽样法计算 $\langle x^2\rangle$, $\langle y^2\rangle$, $\langle x^2+y^2\rangle$。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。

1.1 大致思路

1. 先于二维平面上随机生成一个起始点 (x_0,y_0)
2. 再令点于二维平面上随机运动 $(x_t,y_t)=(x+\delta\cos\theta, y+\delta\sin\theta)$
3. 若其交换后能量 E_t 小于前一点的能量 E_0，则选 (x_t,y_t) 做为链的下一点；若其交换后能量 E_t 大于前一点，则依据概率选择 (x_t,y_t) 或 (x_0,y_0) 做为链的下一点。
4. 重复 n 次，获得一个链长为 n 的 Markov Chain，并将其标于二维平面上。

2 理论分析

2.1 H 分析与系综的选择

2.1.1 H 分析

由 Mathematica 计算得：$H(x,y)$ 有极大值点 $(0,0)$，有极小值点 $(-1.414,-1.414)$,$(1.414,1.414)$, $(0.471,-0.471)$,$(-0.471,0.471)$

其大致的模样如图所示：

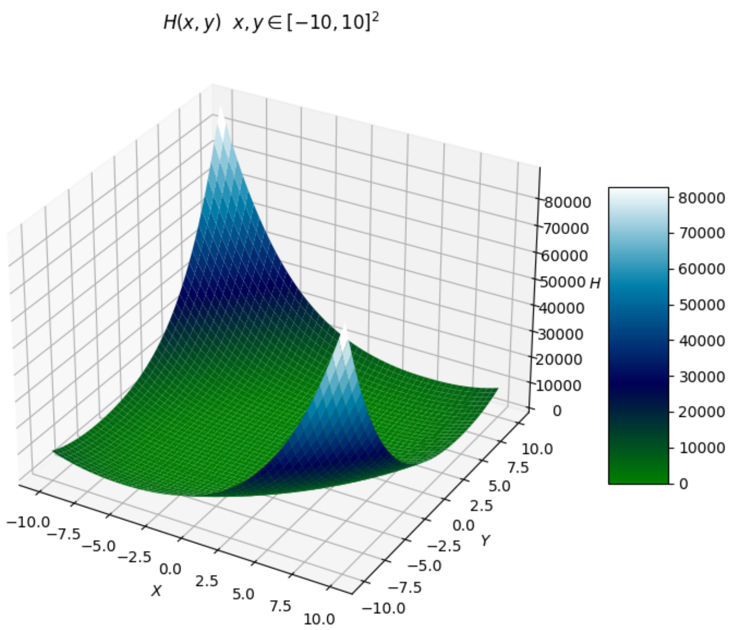


图 1: $H(x,y),(x,y)\in[-10,10]^2$ 图像

可以发现，函数在 $y=-x$ 方向函数值变化非常明显，而在 $y=x$ 方向函数值变化相对缓慢。整体呈现一个山谷的形状，预期 Markov Chain 最终会位于山谷的位置。

2.1.2 系综的选择

对于一个给定的 Hamilton 量 $H(x,y)$，其对应的体系可能有多种不同的概率分布，这里我们选择一种来讨论，所以在以下的讨论中，我们选择最常见的正则系综来讨论，即满足 Boltzmann 分布。

系综平均值为：

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

式中 β 为一个表征系统温度的常数，Z_{NVF} 为正则配分函数

$$Z_{NVT} = \int \exp\{-\beta H(q,p)\}\,d\Omega \tag{2}$$

2.2 Metropolis-Rosenbluth 抽样方法

采用对称的分布矩阵 T 和接受矩阵 A

设 $T((x,y)\to(x',y')) = T(x',y') = N((x'-x,y'-y)|0,0,\sigma^2,\sigma^2,0)$ 为点 (x,y) 运动到 (x',y') 的概率

取 $A_{ij} = \min\left\{1,\dfrac{p_j}{p_i}\right\}$

根据细致平衡条件：$\dfrac{p_j}{p_i} = \dfrac{W_{ij}}{W_{ji}}$，有

$$W_{ij} = \begin{cases} T_{ij} & ,if\ p_jT_{ji} > p_iT_{ij} \\ \dfrac{p_j}{p_i}T_{ji} & ,if\ p_jT_{ji} < p_iT_{ij} \end{cases} \tag{3}$$

$$W_{ii} = 1-\sum_{j\neq i}W_{ij} \tag{4}$$

记：

$$R = \frac{p_j}{p_i} = \exp\{-\beta(H'-H)\} \tag{5}$$

2.3 Metropolis-Hasting 抽样方法

采用不对称的分布矩阵 T 和接受矩阵 A

其中 T 为一个任意形状的方阵(最好与分布有着类似的形式)$T_{ij} = T(x\to x'), A_{ij} = \min\left\{1,\dfrac{p_jT_{ji}}{p_iTij}\right\}$

根据细致平衡条件：$\dfrac{p_j}{p_i} = \dfrac{W_{ij}}{W_{ji}}$，有

$$W_{ij} = \begin{cases} T_{ij} & ,if\ p_jT_{ji} > p_iT_{ij} \\ \dfrac{p_j}{p_i}T_{ji} & ,if\ p_jT_{ji} < p_iT_{ij} \end{cases} \tag{6}$$

$$W_{ii} = 1-\sum_{j\neq i}W_{ij} \tag{7}$$

这里取 $T((x,y)\to(x',y'))=T(x',y')=\exp\{-\gamma H\}$ 为点 (x,y) 运动到 (x',y') 的概率，并取一个合适的 γ

记：

$$R=\frac{p_jT_{ji}}{p_iT_{ij}}=\exp\{-\beta(H'-H)\}\exp\{\gamma(H'-H)\} \tag{8}$$

2.4 结果的计算

于 Monte Carlo 模拟的过程中记录总步数 N 与热化步数 m，对于力学量 A 的平均值 $\langle A\rangle=\frac{1}{N-m}\sum_{i=m}^{N}A_i$

只需代入表达式 $A=x^2,y^2,x^2+y^2$ 即可。

3 算法过程

3.1 一些说明

在以下讨论的情况中，取 $(x,y)\in[-10,10]^2$，且取 Markov Chain 的长度为 $N=10^5$

3.2 Metropolis-Rosenbluth 抽样方法

记 $r=\exp\{-\beta(H'-H)\}$，随机生成一个初始点 (x_0,y_0)

1. 生成均匀分布的随机数 $\xi\in[0,1]$
2. 定义 $\eta=10-20\xi,\theta=2\pi\xi$，于是生成了一个新随机数 $\eta\in[-10,10]$，可得初始点 (x_0,y_0)
3. 从前一点 (x,y) 开始,每次运动的步长记为 $\delta=(\xi-0.5)\Delta r,(\Delta r=0.2)$,可得试探位置 $(x_t,y_t)=(x+\delta\cos\theta,y+\delta\sin\theta)$
4. 定义 r 如上式，若 $r>1$，则 $(x_{n+1},y_{n+1})=(x_t,y_t)$；否则，生成均匀随机数 $\xi\in[0,1]$，若 $r>\xi$，则 $(x_{n+1},y_{n+1})=(x_t,y_t)$，否则 $(x_{n+1},y_{n+1})=(x,y)$
5. 记录下所有的点 (x,y), 并计数，其总数为 N，则其积分值 $I\cong\sum_{i=m}^{N}\frac{1}{N-m}(x_i-\alpha\beta)^2$。其中 m 代表热化所需要的步数。这里取 $m=k\times N$，也可设置一个阈值 λ，令 $\frac{|H'-H|}{H}<\lambda$ 时，记此处的步数为 m。

3.3 Metropolis-Hasting 抽样方法

记 $r=\exp\{-(\beta-\gamma)(H'-H)\}$

其他的步骤与上一种方法一致。

由于之前的一次作业中已经尝试过了 Metropolis-Hasting 方法，两种方法的本质差不多，并且此次作业讨论的是形象的画出 Markov Chain，所以在之后的讨论中不采用此种方法。

4 程序说明

4.1 主要程序

MCMC.c Markov Chain 主程序。把所有功能写进了一个文件中的多个函数内

- **rn()** 一个产生随机数的函数，每次调用一次即可获得一个随机数。
- **hamilton(double x,double y)** 系统哈密顿量的表达式
- **R_rosenbluth(double x_1,double y_1,double x_2,double y_2,double beta)** 判别式 r 的表达式。
- **abs_d(double a)** 一个 double 型绝对值函数
- **m_rosenbluth()** 一个用于 Metropolis-Rosenbluth 抽样的函数，$\beta = 0.2, 1, 5$，链长 $N = 10^5$，把每一条链的结果储存于文件中。

markov_visual.py 对结果进行可视化操作，该文件为纯作图文件，助教可以不用检查，故此文件不加注释。

4.2 程序结果

MCMC.exe Metropolis-Hasting 方法主程序。把所有功能写进了一个文件中的多个函数内，**编译时需要手动修改！**

./data 文件夹路径，里面存放了各种导出的数据（**下面文件中：后缀只为数字的为起始点随机点情况，后缀为 temp 的为另一个不同点的情况，后缀为 lambda 的为 $\lambda = 0.01$ 的情况，后缀为 delta_r 的为固定步长 $\Delta r = 1$ 的情况**）

- **out.txt** 初始点随机的答案**注：由于 txt 文件是"a" 格式写入的，助教在检查时可以先删去其中的内容**
- **out_temp.txt** 指定初始点的测试结果**同**
- **out_lambda.txt** $\lambda = 0.01$ 时的测试结果**同**
- **out_delta_r.txt** 固定步长 $\Delta r = 1$ 时测试结果**同**
- **m_rosenbluth_1.csv** $\beta = 0.2, \lambda = 0.001, \Delta r = 0.2$ random fist point 原始数据
- **m_rosenbluth_2.csv** $\beta = 1, \lambda = 0.001, \Delta r = 0.2$ random fist point 原始数据
- **m_rosenbluth_1.csv** $\beta = 5, \lambda = 0.001, \Delta r = 0.2$ random fist point 原始数据
- **m_rosenbluth_1_temp.csv** $\beta = 0.2, \lambda = 0.001, \Delta r = 0.2$ fist point $= (8, -8)$ 原始数据
- **m_rosenbluth_2_temp.csv** $\beta = 1, \lambda = 0.001, \Delta r = 0.2$ fist point $= (8, -8)$ 原始数据
- **m_rosenbluth_3_temp.csv** $\beta = 5, \lambda = 0.001, \Delta r = 0.2$ fist point $= (8, -8)$ 原始数据
- **m_rosenbluth_1_lambda.csv** $\beta = 0.2, \lambda = 0.01, \Delta r = 0.2$ random fist point 原始数据
- **m_rosenbluth_2_lambda.csv** $\beta = 1, \lambda = 0.01, \Delta r = 0.2$ random fist point 原始数据
- **m_rosenbluth_3_lambda.csv** $\beta = 5, \lambda = 0.01, \Delta r = 0.2$ random fist point 原始数据
- **m_rosenbluth_1_delta_r.csv** $\beta = 0.2, \lambda = 0.001, \Delta r = 1$ random fist point 原始数据
- **m_rosenbluth_2_delta_r.csv** $\beta = 1, \lambda = 0.001, \Delta r = 1$ random fist point 原始数据
- **m_rosenbluth_3_delta_r.csv** $\beta = 5, \lambda = 0.001, \Delta r = 1$ random fist point 原始数据

./pic 文件夹路径，里面存放了各种由数据转来的图片，其具体含义请参见报告中的内容。

4.3 其他说明

1. 数据都写于 CSV 文件中
2. 其中 Python 程序用到的库有:

- matplotlib.pyplot：用于作图
- numpy：用于数据处理
- csv：用于读写 CSV 文件

5 结果分析

注：于以下的结果展示中，紫色点代表初始位置，红色点代表最终位置。

5.1 不同的 β 时的结果

以下的结果给出时的条件为阈值 $\lambda = 0.001$，固定步长 $\Delta r = 0.2$

5.1.1 $\beta = 0.2$

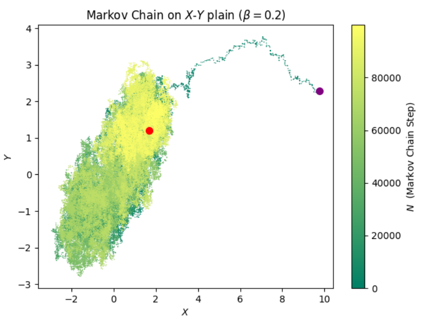


图 2: $\beta = 0.2$ 时 Markov Chain 的 2D 展示

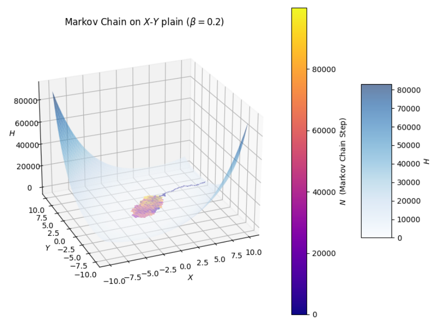


图 3: $\beta = 0.2$ 时 Markov Chain 的 3D 展示

5.1.2 $\beta = 1$

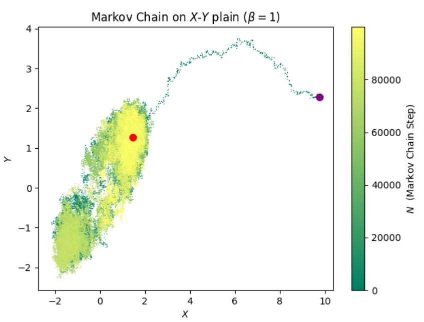


图 4: $\beta = 1$ 时 Markov Chain 的 2D 展示

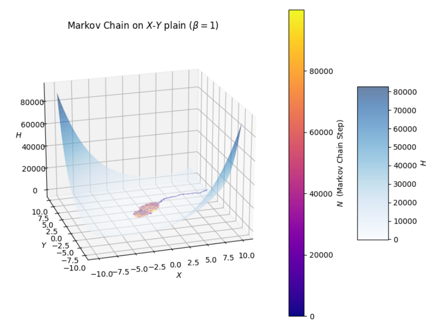


图 5: $\beta = 1$ 时 Markov Chain 的 3D 展示

5.1.3 $\beta = 5$

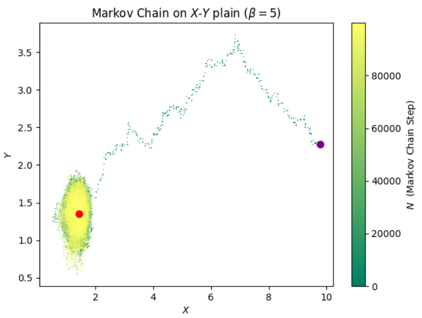


图 6: $\beta = 5$ 时 Markov Chain 的 2D 展示

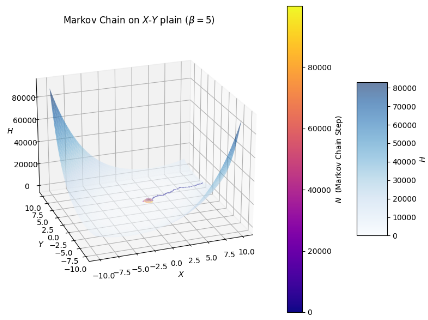


图 7: $\beta = 5$ 时 Markov Chain 的 3D 展示

5.1.4 分析

β	$\langle x^2 \rangle$	$\langle y^2 \rangle$	$\langle x^2 + y^2 \rangle$
0.2	1.9521	1.6397	3.5918
1	1.9357	1.6494	3.5851
5	2.1533	1.9742	4.1275

表 1: 各种均值与 β 的关系表

1. 可以十分形象的观察到 Markov Chain 的过程，链起始时颜色为绿色，终结时颜色为黄色，发现最终大量的黄色聚集在山谷的位置。
2. 另外从 3D 图可以更加容易理解这个过程，一开始链长位于小山坡上，最终运动到了谷的位置。
3. 于图中发现到 β 上升的时候，Markov Chain 表现的更为密集；于表中发现，当 β 上升时，$\langle x^2 \rangle, \langle y^2 \rangle, \langle x^2 + y^2 \rangle$ 的值均在变大。从物理的角度分析，当 β 越大的时候，系统的温度越低，系统就自然更加稳定，其能量的取值更可能取到能量更低的位置。在这里结果呈现这样的原因可能是：体系于原点附近具有 4 个低谷，温度较高的时候比较容易遍历所有的低谷，故 $\langle x^2 + y^2 \rangle$ 更加接近原点，而温度较低的时候，更加容易局限于一个低谷中，则导致 $\langle x^2 + y^2 \rangle$ 较大。

5.2 不同的阈值 λ 时的结果

不同的阈值可能会带来不一样的均值计算的结果，以下再讨论阈值为 0.01 时的情况。

β	$\langle x^2 \rangle$	$\langle y^2 \rangle$	$\langle x^2 + y^2 \rangle$
0.2	1.9521	1.6397	3.5918
1	1.9357	1.6494	3.5851
5	2.1533	1.9742	4.1275

表 2: 各种均值与 β 的关系表 ($\lambda = 0.01$)

发现结果和 $\lambda = 0.001$ 时一模一样，得出的结论是，在这种情况下，Markov Chain 可能在一步之内就完成了剧烈的热化过程。

5.3 不同的初始位置 (x_0, y_0) 时的结果

根据理论，Markov Chain 的计算结果与起始点 (x_0, y_0) 的位置无关，下面来加以验证。

不妨设起始点为 $(8, -8)$

5.3.1 $\beta = 0.2$

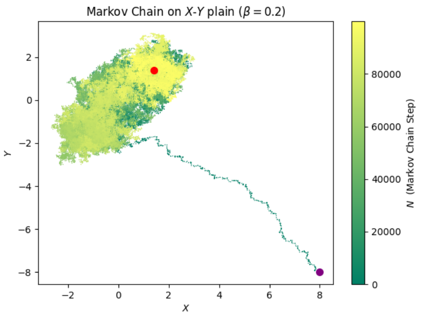


图 8: $\beta = 0.2$ 时 Markov Chain 的 2D 展示

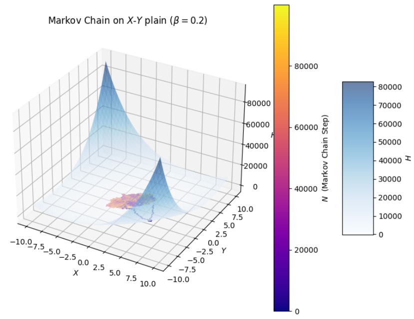


图 9: $\beta = 0.2$ 时 Markov Chain 的 3D 展示

5.3.2 $\beta = 1$

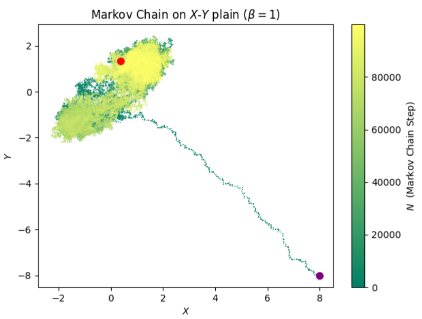


图 10: $\beta = 1$ 时 Markov Chain 的 2D 展示

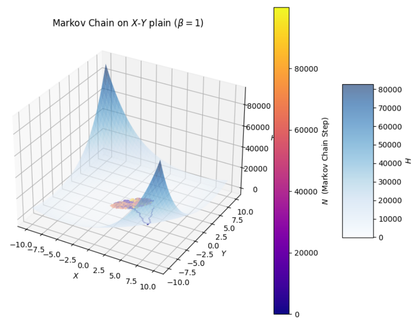


图 11: $\beta = 1$ 时 Markov Chain 的 3D 展示

5.3.3 $\beta = 5$

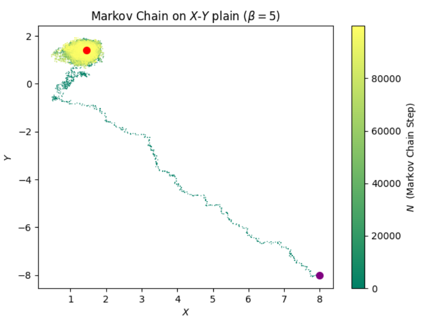


图 12: $\beta = 5$ 时 Markov Chain 的 2D 展示

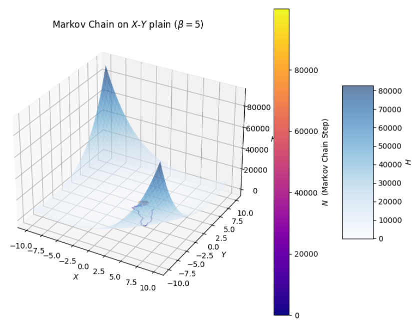


图 13: $\beta = 5$ 时 Markov Chain 的 3D 展示

5.3.4 分析

β	$\langle x^2\rangle$	$\langle y^2\rangle$	$\langle x^2+y^2\rangle$
0.2	1.8042	1.8827	3.6869
1	1.7898	1.7361	3.5259
5	2.0747	2.0707	4.1454

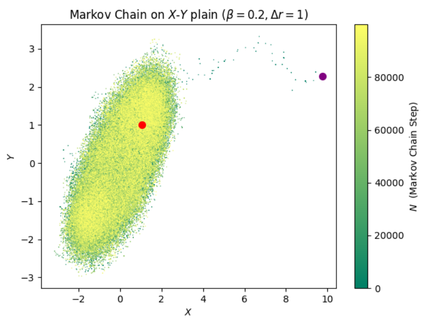
表 3: 各种均值与 β 的关系表（不同的起始点）

1. 发现虽然于不同起始点的数据 $\langle x^2\rangle,\langle y^2\rangle$ 有大约 5% 左右的误差，但 $\langle x^2+y^2\rangle$，只有差不多 1.5% 的误差。
2. 上一条中的出入可能是由于 Markov Chain 的链长不够长导致的。

5.4 不同的固定步长 Δr 对结果的影响

以下再讨论步长为 $\Delta r = 1$ 的情况。

5.4.1 $\beta = 0.2$



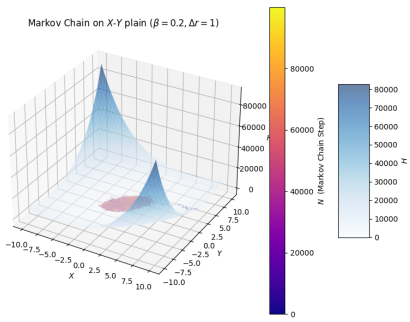
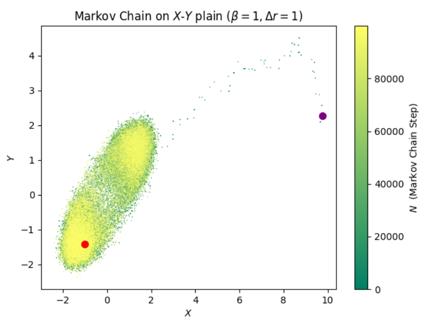


图 14: $\beta = 0.2$ 时 Markov Chain 的 2D 展示 图 15: $\beta = 0.2$ 时 Markov Chain 的 3D 展示

5.4.2 $\beta = 1$



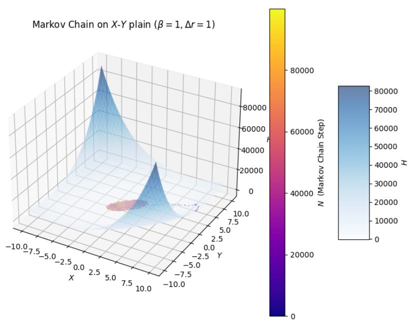


图 16: $\beta = 1$ 时 Markov Chain 的 2D 展示 图 17: $\beta = 1$ 时 Markov Chain 的 3D 展示

5.4.3 $\beta = 5$

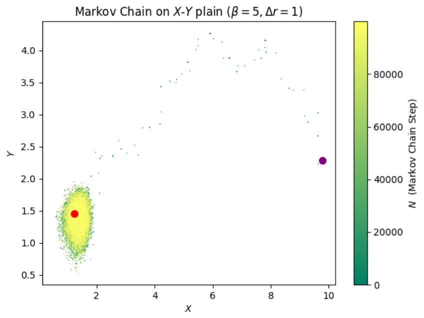


图 18: $\beta = 5$ 时 Markov Chain 的 2D 展示

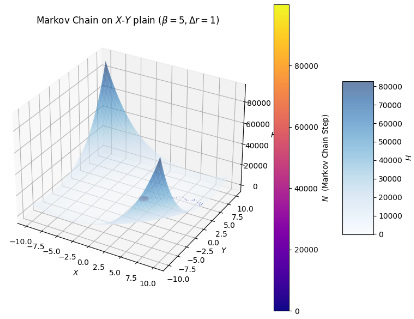


图 19: $\beta = 5$ 时 Markov Chain 的 3D 展示

5.4.4 分析

β	$\langle x^2 \rangle$	$\langle y^2 \rangle$	$\langle x^2 + y^2 \rangle$
0.2	1.6390	1.6007	3.2396
1	1.7308	1.6914	3.4223
5	1.9898	1.9583	3.9481

表 4: 各种均值与 β 的关系表（$\Delta r = 1$）

1. 发现其均值与之前的计算都相差较大，特别是温度较高 (β 较小) 的时候。
2. 产生的原因是不同的步长会导致 Markov Chain 可能会越过势垒达到别的小谷值中。
3. 得出的结论是：每次的步长不能选的太小，否则长时间可能会陷入小低谷中；也不能太大，否则长时间可能会在一个大范围内运动。

6 总结

1. 通过本次的作业对 Markov Chain 有了更深的认识，以及不同条件下对应了 Markov Chain 不同的结果。
2. Markov Chain 热化的阈值有时候可能会不敏感，换一句话说，就是 Markov Chain 的热化过程可能会仅仅在一步完成，即整个系统瞬间达到平衡态。
3. 于不同的温度下 (不同的 β 下)，结果会不同，这是由体系的 Hamilton 函数决定的。对于有很多极小值的 $H(x, y)$ 来说，当温度越低的时候，Markov Chain 更加容易陷入一个低谷当中；当温度较高的时候，平衡态时能遍历的状态可以更多。
4. 不同的起始位置对 Markov Chain 的结果对但极值函数影响不大，只要运动时间足够长就可以得到相同的结果；而对于多极值的函数来说，则结果还会受温度，步长等其他值选取的影响。
5. Markov Chain 每次的固定步长不能选的太小，否则长时间可能会陷入小低谷中；也不能太大，否则长时间可能会在一个大范围内运动。