

## 第 15 题作业报告

PB18000341 范玥瑶

### A. 作业题目

设体系的能量为  $H = \frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2}$  (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。

### B. 算法及主要公式

#### B.1. 理论值估计

正则系综中

$$p(x) = \frac{1}{Z_{NVT}} \exp[-\beta H(x)] = \frac{1}{Z_{NVT}} e^{-\frac{H}{kT}}$$

由题,  $H = \left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) kT$ , 因此

$$p(x, y) = \frac{1}{Z_{NVT}} \exp\left[-\left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)\right]$$

正则配分函数

$$Z_{NVT} = \int dx dy \exp\left[-\left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)\right] = \int dx \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right) \int dy \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) = 2\pi\sigma_x\sigma_y$$

因此

$$p(x, y) = \frac{1}{2\pi\sigma_x\sigma_y} \exp\left[-\left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)\right]$$

理论值:

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle &= \int dx dy x^2 p(x, y) = \sigma_x^2 \\ \langle y^2 \rangle &= \int dx dy y^2 p(x, y) = \sigma_y^2 \\ \langle x^2 + y^2 \rangle &= \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle = \sigma_x^2 + \sigma_y^2\end{aligned}$$

#### B.2. 算法

Metropolis 方法进行抽样的方法如下: 抽样开始前取步长  $\Delta$ , 从  $(x_0, y_0) = (10, 10)$  出发进行随机行走, 进行第  $i$  步时生成两个  $(0, 1)$  上均匀分布的随机数  $\xi_1, \xi_2$ , 得到  $x, y$  方向的试探位移

$$dx = \Delta(\xi_1 - 0.5)$$

$$dy = \Delta(\xi_2 - 0.5)$$

得到一个新的位置

$$x_t = x_{i-1} + dx$$

$$y_t = y_{i-1} + dy$$

构型  $r(t_{i-1}) = (x_{i-1}, y_{i-1})$  和试探步  $r = (x_t, y_t)$  对应能量  $H_{i-1} = \left(\frac{x_{i-1}^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y_{i-1}^2}{2\sigma_y^2}\right) kT$  和  $H_t =$

$\left(\frac{x_t^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y_t^2}{2\sigma_y^2}\right) kT$ , 求能量变化量  $dH = H_t - H_{i-1}$ , 如果  $dH < 0$  接受试探步,  $r(t_i) = (x_i, y_i)$  否则

生成一个随机数  $\xi \sim U(0, 1)$ , 当  $0 < \xi < \exp(-\beta dH) = \exp\left(-\left(\frac{x_t^2 - x_{i-1}^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y_t^2 - y_{i-1}^2}{2\sigma_y^2}\right)\right)$  时接受, 否

则放弃,  $r(t_i) = (x_{i-1}, y_{i-1})$ 。当热化步骤结束,  $x^2$ ,  $y^2$ ,  $x^2 + y^2$  的值将被求和, 抽样完成后将和除以抽样步数  $N$  得到平均值。

### C. 计算结果及具体分析、讨论

取不同的  $\Delta$ ,  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\text{seed} = 1$ ,  $n = 1000$ ,  $N = 1E5$  进行模拟。得到的 Marcov 链点分布如图 1 到图 9,  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle y^2 \rangle$ ,  $\langle x^2 + y^2 \rangle$  及其误差列表如表 1. 图中有保留热化步骤的点, 可以看出不同的条件中合适的热化步骤数目大概是多少。先分析图片以定性判断是否每一次抽样均充分热化, 进而保证后续分析的准确性。

在上述条件下用 (0,0) 作为初始点进行  $N=1E7$  次抽样得到数据如表 2. 因为初始位置处于期望位置  $(E(x), E(y))$ , 因此排除热化不充分的可能性, 可以得到数值模拟相对理论推导误差随各条件变化的趋势。

在上述条件下用 (1,1) 作为初始点进行  $N=1E5$  次抽样得到数据如表 3. 因为热化步骤不明显所以不作图。相应地因为初始位置偏离平衡位置不远热化比较充分, 所以计算误差较小。

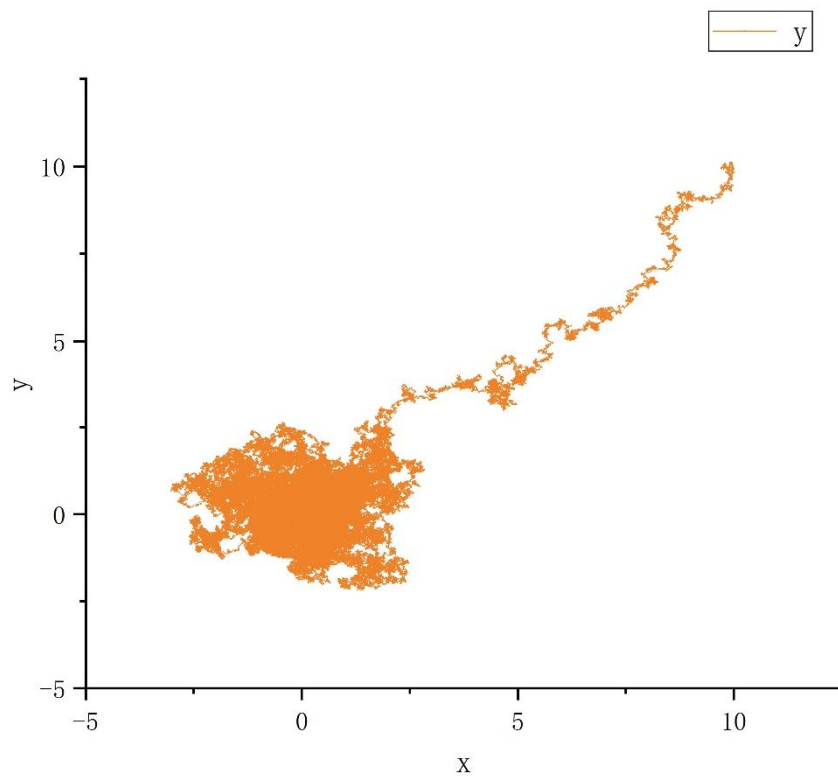


图 1  $\Delta=0.1$ ,  $\sigma_x=1$ ,  $\sigma_y=1$  的 Marcov 链点分布图

由图 1, 在  $\Delta=0.1$ ,  $\sigma_x=1$ ,  $\sigma_y=1$  时热化步骤大概在 4700 步时才算热化充分。

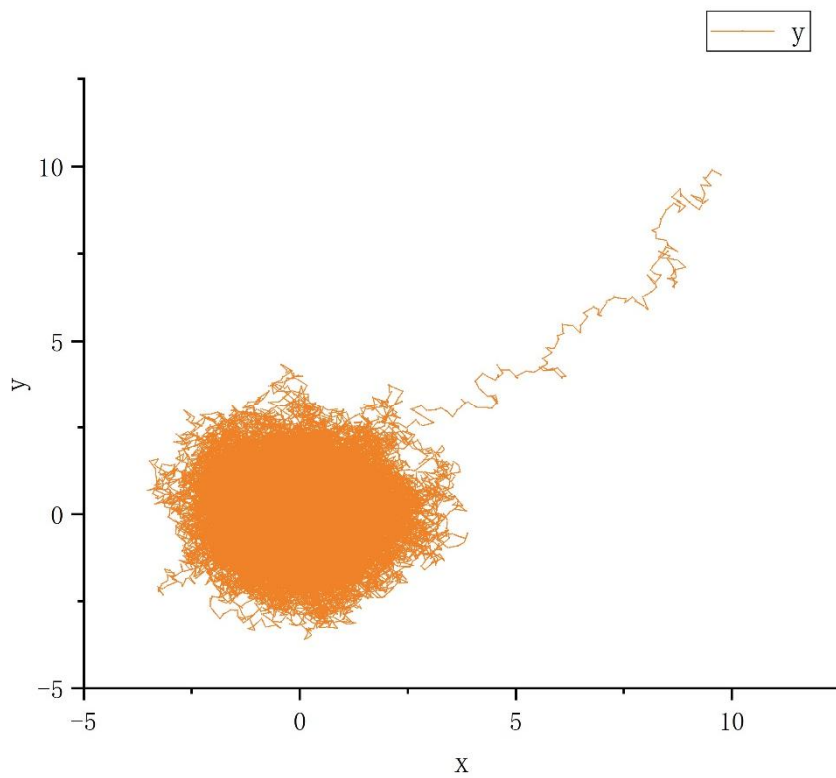


图 2  $\Delta=0.5$ ,  $\sigma_x=1$ ,  $\sigma_y=1$  的 Markov 链点分布图

由图 2, 在  $\Delta=0.5$ ,  $\sigma_x=1$ ,  $\sigma_y=1$  时热化步骤大概在 230 步时算热化充分。

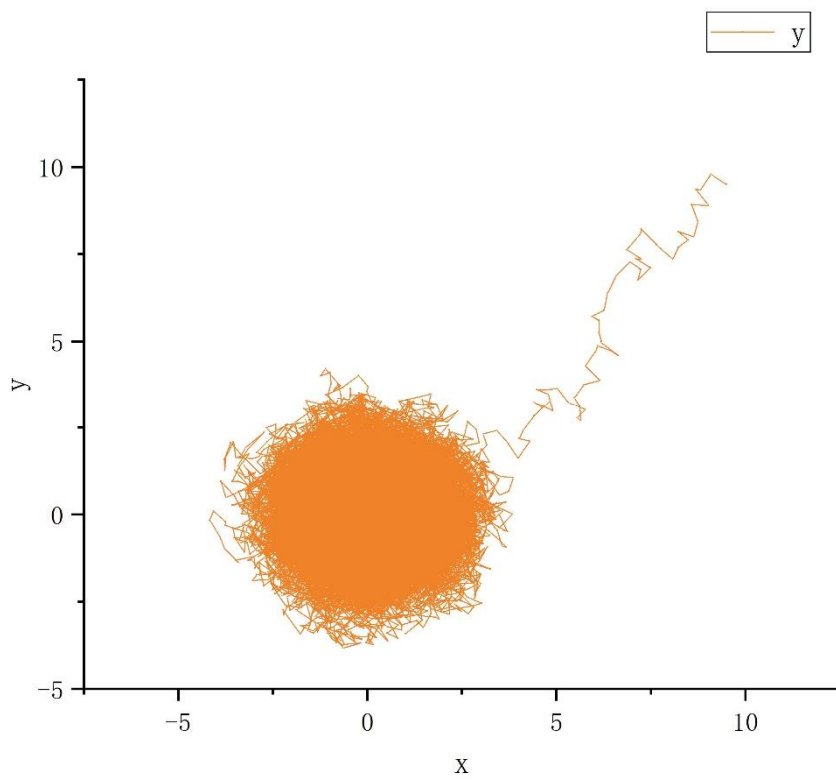


图 3  $\Delta=1$ ,  $\sigma_x=1$ ,  $\sigma_y=1$  的 Markov 链点分布图

由图 3, 在 $\Delta=1$ ,  $\sigma_x=1$ ,  $\sigma_y=1$  时热化步骤大概在 110 步时算热化充分。

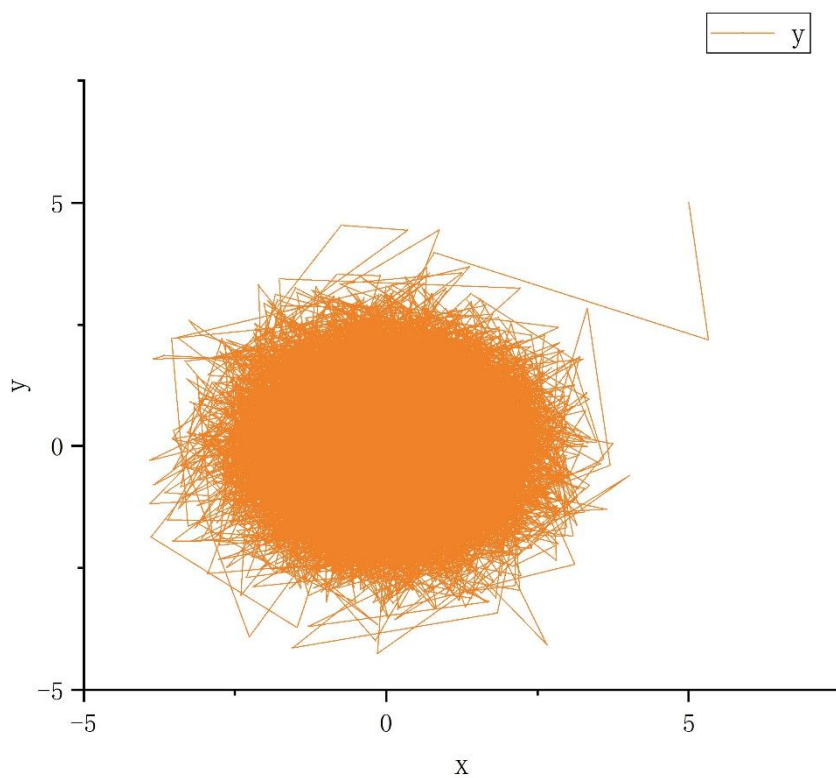


图 4  $\Delta=10$ ,  $\sigma_x=1$ ,  $\sigma_y=1$  的 Markov 链点分布图

由图 4, 在 $\Delta=10$ ,  $\sigma_x=1$ ,  $\sigma_y=1$  时热化步骤大概在 12 步时算热化充分。.

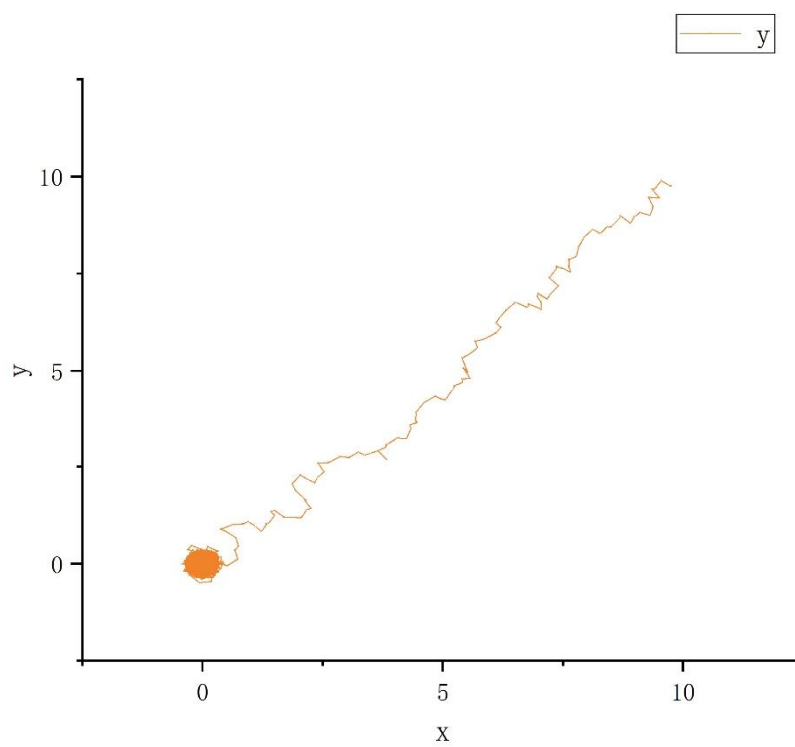


图 5  $\Delta=0.5$ ,  $\sigma_x=0.1$ ,  $\sigma_y=0.1$  的 Markov 链点分布图

由图 5, 在 $\Delta=0.5$ ,  $\sigma_x=0.1$ ,  $\sigma_y=0.1$  时热化步骤大概在 240 步时算热化充分。

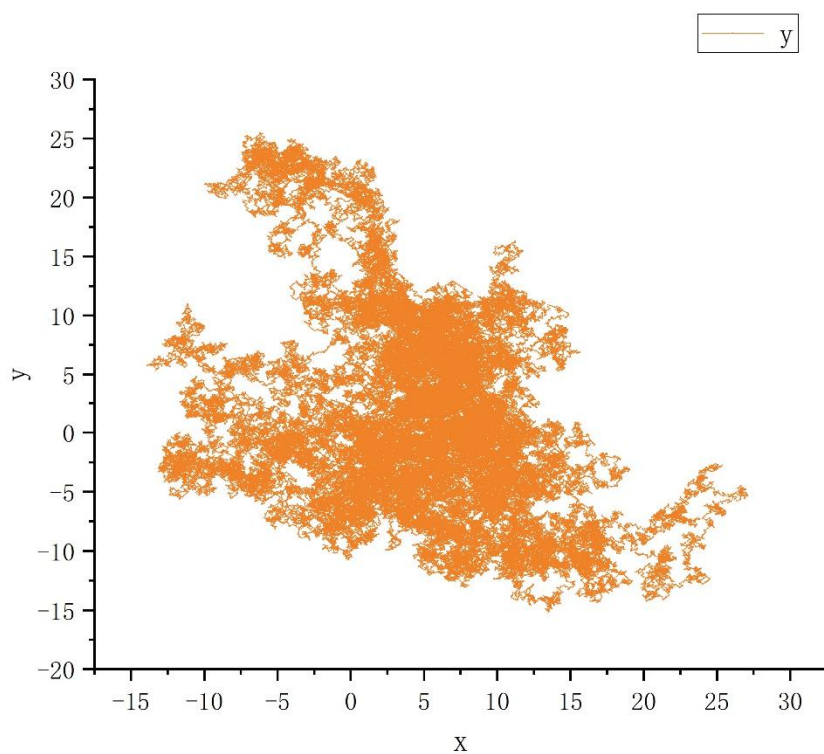


图 6  $\Delta=0.5$ ,  $\sigma_x=10$ ,  $\sigma_y=10$  的 Markov 链点分布图

由图 6, 在 $\Delta=0.5$ ,  $\sigma_x=10$ ,  $\sigma_y=10$  时由于步长较大, 行走范围宽广, 平衡态在初态的一步距离内, 热化步骤作用不明显, 基本无需热化。

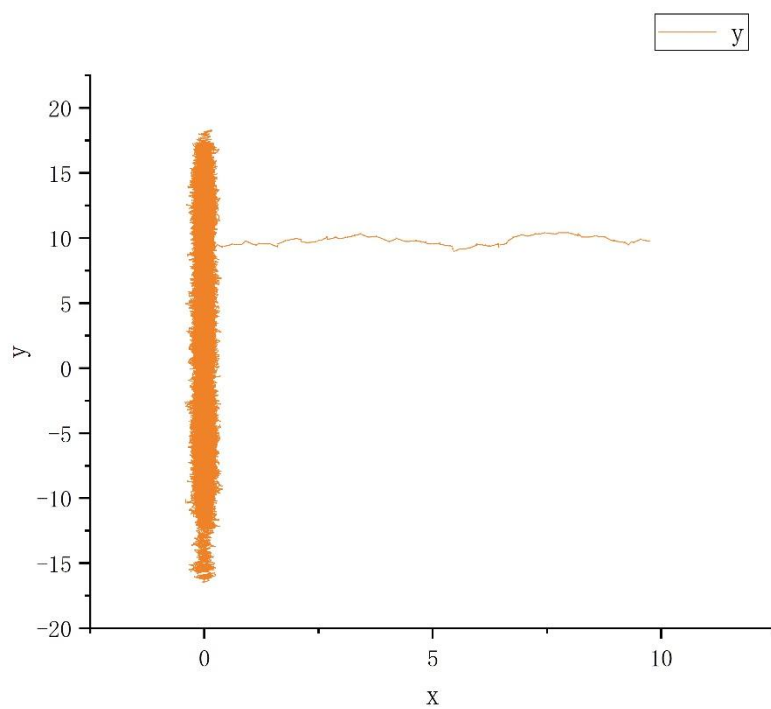


图 7  $\Delta=0.5$ ,  $\sigma_x=0.1$ ,  $\sigma_y=10$  的 Markov 链点分布图

由图 7, 在 $\Delta=0.5$ ,  $\sigma_x=0.1$ ,  $\sigma_y=10$  时热化步骤大概在 170 步时算热化充分。

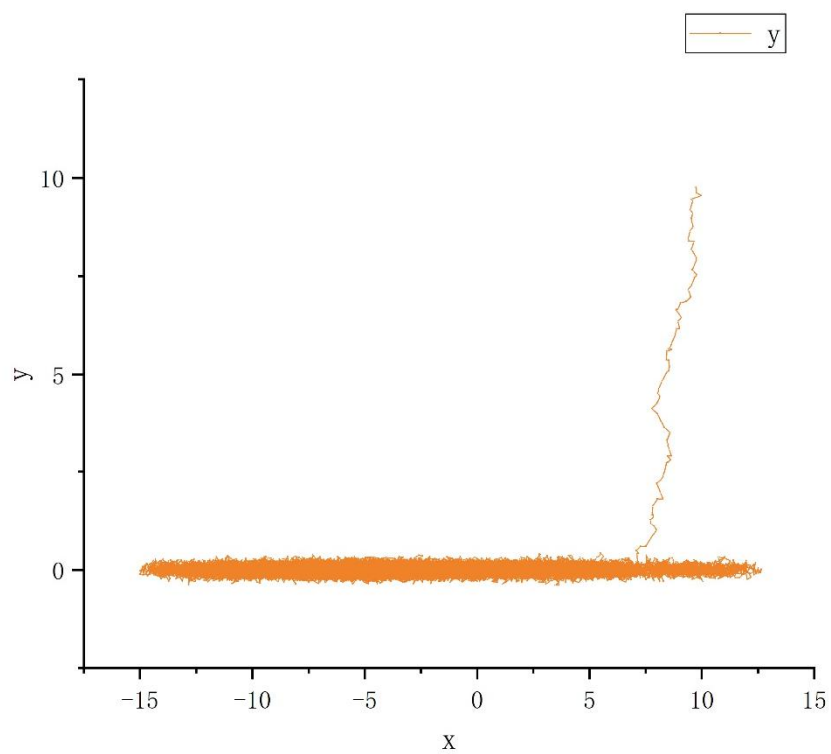


图 8  $\Delta=0.5$ ,  $\sigma_x=10$ ,  $\sigma_y=0.1$  的 Markov 链点分布图

由图 8, 在 $\Delta=0.5$ ,  $\sigma_x=10$ ,  $\sigma_y=0.1$  时热化步骤大概在 170 步时算热化充分。

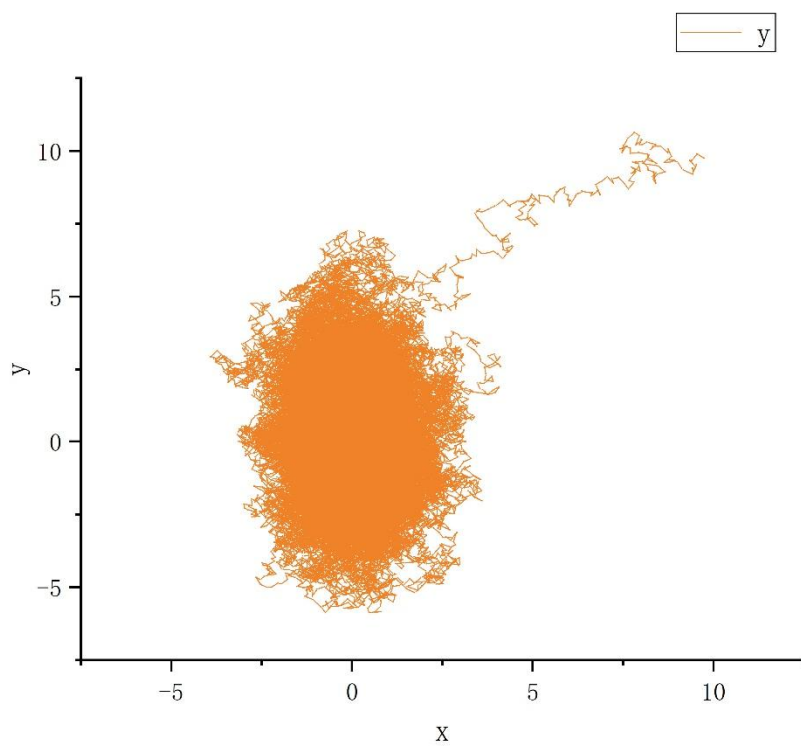


图 9  $\Delta=0.5$ ,  $\sigma_x=1$ ,  $\sigma_y=2$  的 Markov 链点分布图

由图 9, 在 $\Delta=0.5$ ,  $\sigma_x=0.1$ ,  $\sigma_y=2$  时热化步骤大概在 270 步时算热化充分。

对比图 1 到图 4 可得, 对相同的  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\Delta$  越大所需热化步骤越少, 充分热化后粒子的运动范围也越大, 符合直观。对比图 2, 图 5 到图 9 可得, 对于相同  $\Delta$ , 某一方向的  $\sigma$  越大充分热化后其位置波动越大, 无论是对于不同的模拟还是同一个模拟中不同的方向。合理的热化步骤数目下界由  $\sigma_x$  和  $\sigma_y$  共同决定, 两者作用相同 (从抽样中  $x,y$  地位对等可以很容易地解释),  $\sigma$  比较大的情况下所需热化步骤比较少, 可能是因为充分热化后粒子所处位置的范围比较大, 所以达到充分热化后所在的区域比较容易。这一效应需要在  $\sigma$  的差别达到约 2 个数量级才有所体现。

条件			均值			误差		
$\Delta$	$\sigma_x$	$\sigma_y$	$\langle x^2 \rangle$	$\langle y^2 \rangle$	$\langle x^2+y^2 \rangle$	$\langle x^2 \rangle$	$\langle y^2 \rangle$	$\langle x^2+y^2 \rangle$
0.1	1	1	1.949822	1.444668	3.39449	94.98%	44.47%	69.72%
0.5	1	1	1.01769	0.964438	1.982128	1.77%	3.56%	0.89%
1	1	1	1.051787	0.968038	2.019825	5.18%	3.20%	0.99%
10	1	1	0.994318	0.997102	1.991419	0.57%	0.29%	0.43%
0.5	0.1	0.1	0.010285	0.009994	0.020278	2.85%	0.06%	1.39%
0.5	10	10	66.44732	67.35659	133.803909	33.55%	32.64%	33.10%
0.5	0.1	10	0.009983	65.5893	65.599281	0.17%	34.41%	34.41%
0.5	10	0.1	37.8018	0.015597	37.817395	62.20%	55.97%	62.19%
0.5	1	2	0.985757	3.898392	4.88415	1.42%	2.54%	2.32%

表 1 起始位置 (10, 10),  $N=1E5$  抽样参数和结果表

条件			均值			误差		
$\Delta$	$\sigma_x$	$\sigma_y$	$\langle x^2 \rangle$	$\langle y^2 \rangle$	$\langle x^2+y^2 \rangle$	$\langle x^2 \rangle$	$\langle y^2 \rangle$	$\langle x^2+y^2 \rangle$
0.1	1	1	0.976321	1.006881	1.983202	2.3679%	0.6881%	0.8399%
0.5	1	1	0.996105	1.001008	1.997113	0.3895%	0.1008%	0.1444%
1	1	1	0.996121	1.001186	1.997308	0.3879%	0.1186%	0.1346%
10	1	1	0.998294	1.002566	2.00086	0.1706%	0.2566%	0.0430%
0.5	0.1	0.1	0.009988	0.010005	0.019993	0.1200%	0.0500%	0.0350%
0.5	10	10	100.6528	98.17369	198.826496	0.6528%	1.8263%	0.5868%
0.5	0.1	10	0.009995	97.16199	97.171983	0.0500%	2.8380%	2.8377%
0.5	10	0.1	93.17949	0.010023	93.189517	6.8205%	0.2300%	6.8198%
0.5	1	2	1.002136	4.006351	5.008488	0.2136%	0.1588%	0.1698%

表 2 起始位置 (0, 0),  $N=1E7$  抽样参数和结果表

条件			均值			误差		
$\Delta$	$\sigma_x$	$\sigma_y$	$\langle x^2 \rangle$	$\langle y^2 \rangle$	$\langle x^2+y^2 \rangle$	$\langle x^2 \rangle$	$\langle y^2 \rangle$	$\langle x^2+y^2 \rangle$
0.1	1	1	0.854447	0.85529	1.709737	14.56%	14.47%	14.51%
0.5	1	1	0.992858	0.932992	1.92585	0.71%	6.70%	3.71%
1	1	1	0.985705	0.936184	1.92189	1.43%	6.38%	3.91%
10	1	1	0.977877	0.949775	1.927651	2.21%	5.02%	3.62%
0.5	0.1	0.1	0.01018	0.010091	0.020271	1.80%	0.91%	1.35%
0.5	10	10	99.361	56.3152	155.6762	0.64%	43.68%	22.16%
0.5	0.1	10	0.009907	90.80778	90.81768	0.93%	9.19%	9.19%
0.5	10	0.1	91.23773	0.009881	91.24761	8.76%	1.19%	8.76%

0.5	1	2	1.043294	3.522046	4.565339	4.33%	11.95%	8.69%
-----	---	---	----------	----------	----------	-------	--------	-------

表 3 起始位置 (1, 1),  $N=1E5$  抽样参数和结果表

由表 1,  $N=1E7$  时,  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle y^2 \rangle$ ,  $\langle x^2 + y^2 \rangle$  和理论值基本相同。对同样的  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ , 当  $\Delta$  增大时误差会下降,  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle y^2 \rangle$ ,  $\langle x^2 + y^2 \rangle$  三个量的误差在同一数量级。对相同的  $\Delta$ , 某一分量对应  $\sigma$  增大时, 误差相应增大, 增速是  $\sigma$  增大两个数量级误差增大一个数量级。对于数量级差别在 10 倍以内基本上误差相当。和统计学意义相符,  $\sigma$  和  $x, y$  的波动性成正相关。

由表 2,  $N=1E5$  时,  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle y^2 \rangle$ ,  $\langle x^2 + y^2 \rangle$  和理论值基本相同。对同样的  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ , 当  $\Delta$  增大时误差基本上呈下降趋势 (因为数值模拟的随机性, 点数比较少的时候有个别点会在标准差比较大的时候误差反而比较大),  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle y^2 \rangle$ ,  $\langle x^2 + y^2 \rangle$  三个量的误差一般在同一数量级。 $\Delta=0.5$ ,  $\sigma_x=10$ ,  $\sigma_y=10$  的情况不是很正常, 经过取不同的种子值或者取  $N=1E7$ , 从 (1,1) 出发的试验发现是偶然现象。对相同的  $\Delta$ , 某一分量对应  $\sigma$  增大时, 误差相应增大, 增速是  $\sigma$  增大两个数量级误差增大一个数量级。对于数量级差别在 10 倍以内基本上误差相当。和统计学意义相符,  $\sigma$  和  $x, y$  的波动性成正相关。

用误差率衡量热化充分度, 误差大说明热化不充分。从表 1 可以得到, 除上述规律之外, 步长越小相同热化步骤数目  $n$  下误差越大, 说明所需热化步骤更多, 这符合直观判断。

对比表 2, 3 取样点数增大 100 倍, 误差显著减小。 $\sigma$  差异造成的误差的变化,  $N=1E5$  时比  $N=1E7$  时更明显。

对比表 1, 2, 初态偏离越远, 相同热化步骤数目  $n$  下误差越大, 说明所需热化步骤越多。

## D. 总结

本次实验中学生利用 Metropolis 抽样法计算了特定能量正则系综的  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle y^2 \rangle$ ,  $\langle x^2 + y^2 \rangle$  并与基于概率论分析所得理论结果进行比较, 求出误差进行分析。模拟结果和理论值基本相同。对同样的  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ , 当  $\Delta$  增大时误差会下降, 三个量的误差在同一数量级。对相同的  $\Delta$ , 某一分量对应  $\sigma$  增大时, 误差相应增大, 增速是  $\sigma$  增大两个数量级误差增大一个数量级。对于数量级差别在 10 倍以内基本上误差相当。符合  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  在统计学中随机变量方差的意义。取样点数多的时候误差减小;  $\sigma$  差异造成的误差的变化,  $N=1E5$  时比  $N=1E7$  时更明显。初态偏离越远, 步长越小相同热化步骤数目  $n$  下误差越大, 说明热化越不充分, 所需热化步骤更多。

抽样时, 学生在 2 维平面上依次标出 Markov 链点分布, 从而形象地理解了 Markov 链。学生借助图像判断了每次模拟中热化是否充分以及不同条件下比较合理的热化步数下限, 并得到, 对相同的  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\Delta$  越大所需热化步骤越少, 充分热化后粒子的运动范围也越大, 符合直观。对于相同  $\Delta$ , 某一方向的  $\sigma$  越大充分热化后其位置波动越大, 无论是对于不同的模拟还是同一个模拟中不同的方向。合理的热化步骤数目下界由  $\sigma_x$  和  $\sigma_y$  共同决定, 两者作用相同 (从抽样中  $x, y$  地位对等可以很容易地解释),  $\sigma$  比较大的情况下所需热化步骤比较少, 可能是因为充分热化后粒子所处位置的范围比较大, 所以达到充分热化后所在的区域比较容易。这一效应需要在  $\sigma$  的差别达到约 2 个数量级才有所体现。