

随机模拟方法 第一次大作业

李佳 2100010793

1 问题描述

使用 Monte Carlo 方法, 研究 $N \times N$ 带周期边界条件的二维 Potts 模型的相变现象. q 个状态的 Potts 模型的 Hamiltonian 定义为

$$H(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j} - h \sum_i \sigma_i, \quad i = 1, 2, \dots, N^2$$

其中 $\sigma_i = 1, 2, \dots, q$. 本报告取 $q = 3$ 作为具体算例研究下列问题:

(a) 取 $J = 1, k_B = 1, h = 0$. 作出内能 u

$$u = \frac{U}{N^2} \quad \text{其中 } U = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} H(\sigma) \exp(-\beta H(\sigma))$$

以及比热 c

$$u = \frac{C}{N^2} \quad \text{其中 } C = k_B \beta^2 \text{Var}(H)$$

关于温度 T 的函数图像, 其中 $\beta = (k_B T)^{-1}$, 配分函数 $Z = \sum_{\sigma} \exp(-\beta H(\sigma))$. 在 N 充分大时, 确定相变的临界温度 (critical temperature) T_* .

(b) 对不同的温度 T , 作出磁化强度

$$m = \frac{M}{N^2} \quad \text{其中 } M = \langle \sum_i \sigma_i \rangle$$

关于 h 的函数图像. 对这些图像作出一些说明.

(c) 定义空间关联函数

$$C(i, j) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$$

及关联长度 (Correlation Length) ξ , 作为函数 $\Gamma(k) = C(i, j) \Big|_{|i-j|=k}$ 衰减至 0 的特征长度. 可以通过计算平均以近似得到 $\Gamma(k)$

$$\Gamma(k) = \frac{1}{4N^2} \sum_i \sum_{j \in S_i} C(i, j),$$

其中 $S_i = \{j | i - j = \pm(k, 0) \text{ or } \pm(0, k)\}$. 关联长度可通过以下式子定义:

$$\Gamma(k) \propto \Gamma_0 \exp(-k/\xi), \quad k \gg 1.$$

在 $h = 0$ 时, 研究 ξ 作为 T 的函数.

(d) 在 $h = 0$ 时, 考察 c, ξ 在临界温度 T_* 附近的行为. 假设有

$$c \sim c_0 \epsilon^{-\gamma} \text{ and } \xi \sim \xi_0 \epsilon^{-\delta},$$

其中 $\epsilon = |1 - \frac{T}{T_*}|$. 数值地求出指数 γ, δ .

(e) 考察 3 维情形下的上述问题.

2 思路及计算步骤

计算上述问题的思路是:

1. 预运行. 固定参数, 使用 MCMC 方法将初始样本迭代充分多次, 使之尽可能达到不变分布.
2. 采样. 固定参数, 使用 MCMC 方法生成充分多的样本用于计算.
3. 计算物理量. 对每次采样的样本计算相关的物理量, 并在采样结束后作平均, 得到宏观量.
4. 数据处理. 根据想要得到的物理规律, 对数据进行变换, 用最小二乘的方法数值确定相关参数.

3 数值方法、分析及遇到的困难

3.1 Metropolis 算法

Metropolis 算法是经典的 MCMC 算法, 将目标分布作为一个 Markov 链的不变分布, 利用 Markov 链趋向于不变分布及遍历性的特点, 在运行较长时间、近似为不变分布的 Markov 链上采样, 即可近似得到目标分布.

对于 Potts 模型, Proposal $Q(\sigma \rightarrow \sigma')$ 可采用 Metropolis 的 "Single Flip" (Gibbs Sampling), 即每一次采样均匀地随机选取 σ 一个位点 (site), 再均匀地随机选取 $1, 2, \dots, q$ 中的一个状态 (state) 作为 σ' 在该位点的状态. 其接受 (Decision) 概率为

$$A(\sigma \rightarrow \sigma') = \min(1, \exp(-\beta \Delta H)), \quad \Delta H = H(\sigma') - H(\sigma).$$

此时满足细致平衡条件.

这一算法的好处是每次仅改变一个位点的状态, 因此在已知上一个样本的物理量时, 可以有效率地更新得到新样本的物理量, 如 Hamiltonian, 磁化强度 (Magnetization) 等.

然而, 在临界温度附近, 在笔者尝试多次后, 遇到的困难是: 传统的 Metropolis 方法即使进行大量采样, 依然容易出现较大的统计噪声. 这是因为, 在临界温度附近发生相变, 大量的位点的关联增强, 使用 Metropolis 每次只翻转一个位点, 每次的 Proposal 极易失败. 但此时的整体状态又与低温情形不同, 依然有许多种整体状态未被采样, 导

致采样不充分. 文献大多将其称为”critical slow down”. 巨大的采样时间开销不利于我们提高 N 的大小及推广到 3 维情形, 因此对临界温度及低温情形, 需要特别地处理.

3.2 Wolff 算法

Wolff 算法是 Swendsen-Wang 算法的改进, 它们都是聚类型的算法. 其想法是, 在临界温度附近, 位点相关性强, 呈团簇状, 因此可以考虑将一整片相同状态的位点一起改变, 以加快采样效率. 对于本报告考虑的 Potts 模型对应的 Wolff 算法, 每次的 Proposal 均匀地随机选择一个位点 i , 在其周围递归地生成一个聚类 C (cluster):

- 选取与现有 $C^{(old)}$ 中某位点 j 相邻的未检查过的位点 k , 若 j, k 相同状态, 则以 $1 - \exp(\beta J)$ 的概率连接 j, k , 即将 k 加入 $C^{(old)}$ 中得到 $C^{(new)}$. (若状态相同但连接失败, 则不算在被检查过的里面)
- 若与 $C^{(old)}$ 相邻的位点均被检查过, 则停止递归.

之后, 设得到的聚类 C 共 m 个元素, 且状态均为 s_1 , 则以如下的概率选择新的状态 s_2 ($s_2 = 1, 2, \dots, q$), 并以概率 1 接受 (Decision):

$$p_{s_2} \propto \exp(\beta h m s_2)$$

容易验证, 假设聚类 C 附近共 n_1 个位点状态 s_1 , n_2 位点状态 s_2 , 则由

$$A(\sigma \rightarrow \sigma') = \min(1, \frac{\pi(\sigma')Q(\sigma' \rightarrow \sigma)}{\pi(\sigma)Q(\sigma \rightarrow \sigma')}),$$

$$\frac{\pi(\sigma')}{\pi(\sigma)} = \frac{\exp(\beta J n_2 + \beta h m s_2)}{\exp(\beta J n_1 + \beta h m s_1)}, \quad \frac{Q(\sigma' \rightarrow \sigma)}{Q(\sigma \rightarrow \sigma')} = \frac{\exp(-\beta J n_2 + \beta h m s_1)}{\exp(-\beta J n_1 + \beta h m s_2)},$$

可知 $A(\sigma \rightarrow \sigma') = 1$ 是满足细致平衡条件的.

这一算法的优点是, 在低温及临界温度时可以更有效率地进行采样. 缺点是, 由于每次的更新位点数量较多, 因此更新物理量的效率会降低. 以及在高温情形, 由于各位点的弱相关性, 聚类每次可能只更新一个点.

综上, 本报告的采样策略是: 对临界温度以上的温度使用传统的 Metropolis 算法, 以提高更新物理量的效率; 对低温及临界温度附近, 采用 Wolff 算法, 以提高采样的效率.

4 具体实现细节

4.1 Metropolis 算法的初值

一般有两种初始的选择: 一种是完全确定的初值 (例如设置初值为全为 1 的方阵), 另一种是完全随机的初值 (方阵每个元素均服从 $1 - q$ 均匀分布). 这两种初值分别对应于 Metropolis 算法中温度为 0 和 $+\infty$ 的分布. 因此, 取对应的初值时, 应考虑采样的样本设置的温度大小, 越接近初值分布所对应的温度, 就需要越少的预运行次数, 也有利于

减少采样过程中因不充分接近不变分布而引起的的噪声. 本报告在计算数据时, 若采样样本温度较高, 则考虑完全随机的初值; 若温度较低, 则考虑完全确定的初值.

另外, 本报告在计算关于温度变化的数据时, 一般会将全体温度从高到底排序, 依次对每个温度进行计算. 我们考虑以完全随机的初值出发, 最开始计算最高温度的情形, 计算完毕后的样本作为次高温度的初值, 依次类推. 这样的想法类似模拟退火, 每一次采样的初值都比较接近所需要的不变分布, 有利于减少预运行次数与误差.

4.2 MCMC 方法的预运行及采样次数

对传统的 Metropolis 方法, 对 $N \times N$ 的规模, 取预运行次数为 $10 \times N^2$, 取采样次数为 $50 \times N^2$; 对 Wolff 算法, 对 $N \times N$ 的规模, 取预运行次数为 $10 \times N$, 取采样次数为 $50 \times N$ 次.

4.3 物理量的计算

为利用 Metropolis Single Flip Proposal 的好处, 每次采样后, 不必重新计算物理量, 而是将上一步的物理量进行更新即可. 例如对哈密顿量 H , 只需考虑一个位点的改变导致的能量变化.

4.4 关联长度的计算

关联长度需要计算的量包括 $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$, $\langle \sigma_i \rangle$, $i, j = 1, 2, \dots, N^2$, 但 $i - j = (\pm k, 0), (0, \pm k)$, 因此不必将全部的 $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ 算出, 只需计算其中的 $2 \times N^3$ 个.

5 计算结果及分析

5.1 2 维情形

(a) 内能与比热: 确定相变的临界温度

通过程序采样计算物理量 u, c , 可得内能、比热随温度的变化图如下所示:

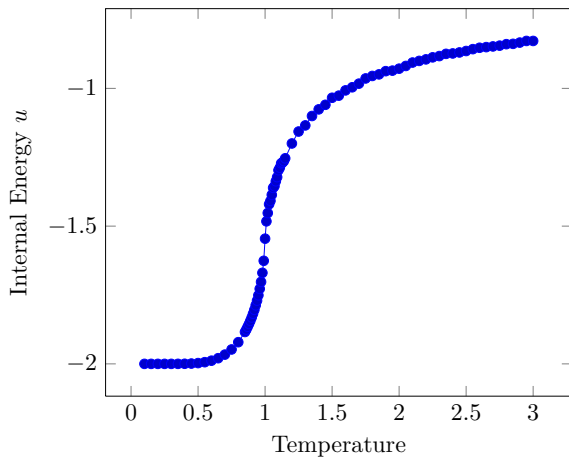


Figure 1: $N = 80$ 时内能随温度变化图

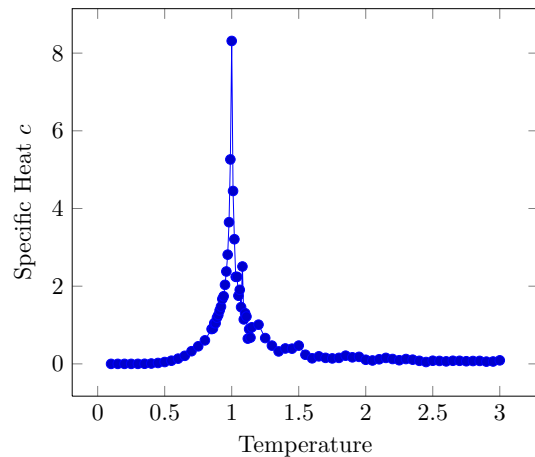
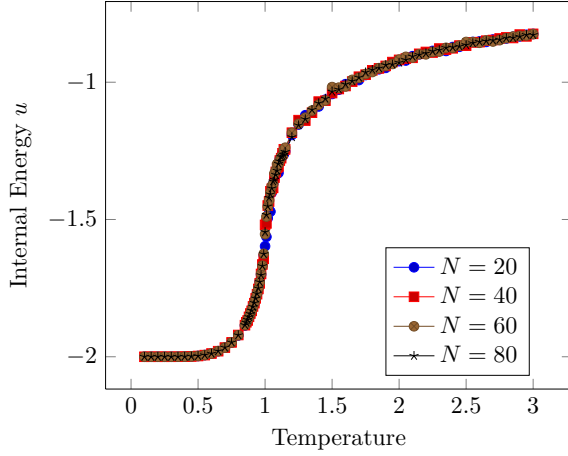
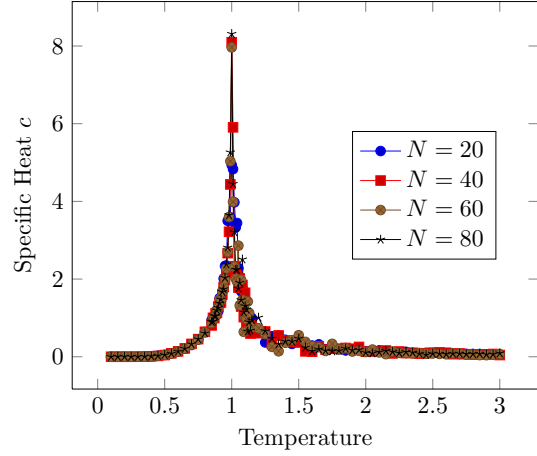


Figure 2: $N = 80$ 时比热随温度变化

Figure 3: N 取不同值时内能随温度变化图Figure 4: N 取不同值时比热随温度变化

由上图可知,

- 由内能 - 温度曲线可看出: $q = 3$ 时, 相变温度大约在 $T = 1$ 附近, 在这一温度段内, 内能迅速变化, 随温度增高而迅速增大. 但对较大的 N 与较小的 N 比较, 可以看到内能关于温度的曲线并没有发生间断, 内能在相变过程中依然是连续变化.
- 由比热 - 温度曲线也可看出 $q = 3$ 时, 相变温度大约在 $T = 1$ 附近, 这一温度附近, 比热迅速增大, 而在该温度之外, 比热迅速减小. 由不同的 N 对应的曲线可看出, 随着 N 增大, 其最大值也增大, 因此有可能比热 c 在该温度处有间断现象, 可能趋于无穷大.

下面确定临界温度: 可以用以下的特征量来反映相变过程的发生:

- 对内能 u , 其相变过程中关于温度的变化率非常大. 可以考虑将温度网格上各点处的 du/dT 近似为:

$$\frac{du}{dT}(T_i) \approx \frac{u(T_{i+1}) - u(T_{i-1}))}{T_{i+1} - T_{i-1}}$$

取离散温度序列中的最大值点作为临界温度.

- 对比热 c , 其相变过程中的值非常大. 为避免数据单点误差的污染, 考虑取平均

$$\bar{c}(T_i) = \frac{1}{3}(c(T_{i-1}) + c(T_i) + c(T_{i+1}))$$

取离散温度序列中的最大值点作为临界温度.

由以上的两个判别法可分别得到不同 N 时对应的临界温度 T_*

criterion	$n = 20$	$n = 40$	$n = 60$	$n = 80$
u	1.01	0.99	1.00	1.00
c	0.99	1.00	1.00	1.00

Table 1: 依据不同判别标准得到的临界温度值

注意到 N 较大时, 数值确定的临界温度均为 1.00, 因此对 $q = 3$, 取临界温度为 1.00. 理论上, Potts 模型的临界温度满足 $\beta = \log(1 + \sqrt{q})$, 对 $k_B = 1, q = 3$ 的情形可得

临界温度约 0.995, 误差与之相差不到一个网格尺度. 这说明我们得到的临界温度是符合理论的.

(b) 磁化强度: 随温度与系数 h 的变化

通过采样计算物理量磁化强度 (Magnetization), 我们发现其关于系数 h 的变化可根据温度分为三个阶段: $T > T_*$, $T \approx T_*$, $T < T_*$. 分别取 $T = 0.50, 1.00, 2.00$, 得到磁化强度 m 关于 h 的变化如图所示:

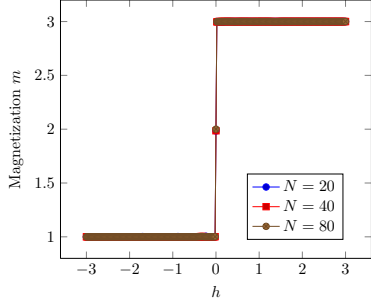


Figure 5: $T = 0.5$, N 取不同值时 m 随 h 变化图

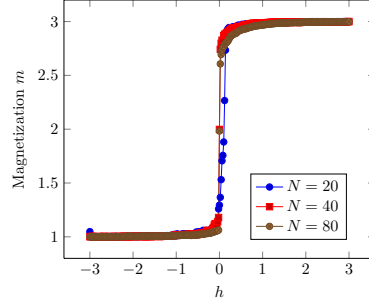


Figure 6: $T = 1$, N 取不同值时 m 随 h 变化图

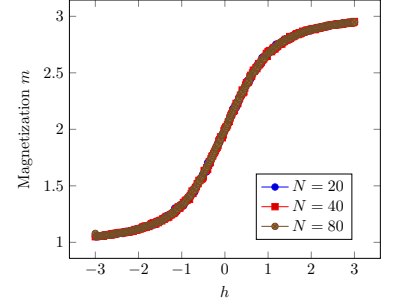


Figure 7: $T = 2$, N 取不同值时 m 随 h 变化图

由图可知,

- $T < T_*$ 阶段, 在 $h = 0$ 处磁化强度发生间断. 这是由于低温时, 为达到最低能量, 各个位点将倾向于有相同的状态, 而 h 的正负决定位点共同取哪一个状态. $h > 0$ 时, 最低能量时各位点均取值 q , 反之则取 1.
- $T > T_*$ 阶段, 处于相对混沌无序的状态, 温度较高, 导致各位点不会被强有力地束缚在一起, 因此各个位点的状态不会被 h 的符号几乎完全决定, 从而磁化强度没有发生间断. h 增大时, 能量低处倾向于更大的状态数, 从而磁化强度关于 h 单调增加.
- $T \approx T_*$ 阶段, 处于相变临界温度阶段, 由图可看出, 磁化强度的间断正在形成但还未完全形成. 此时相同状态的位点呈片状, 但不是几乎所有位点都在相同状态, 因而保留了上面两种阶段各自的部分特征.

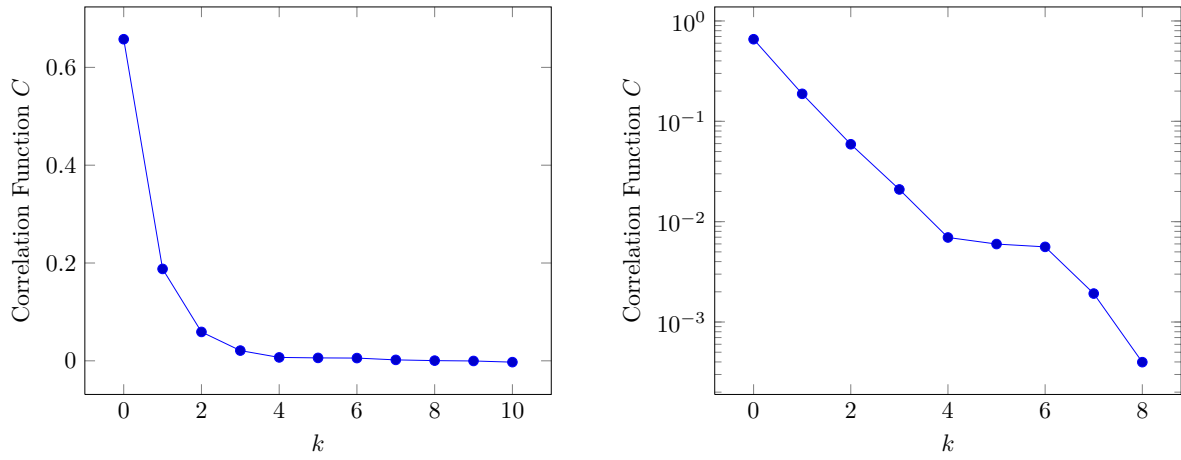
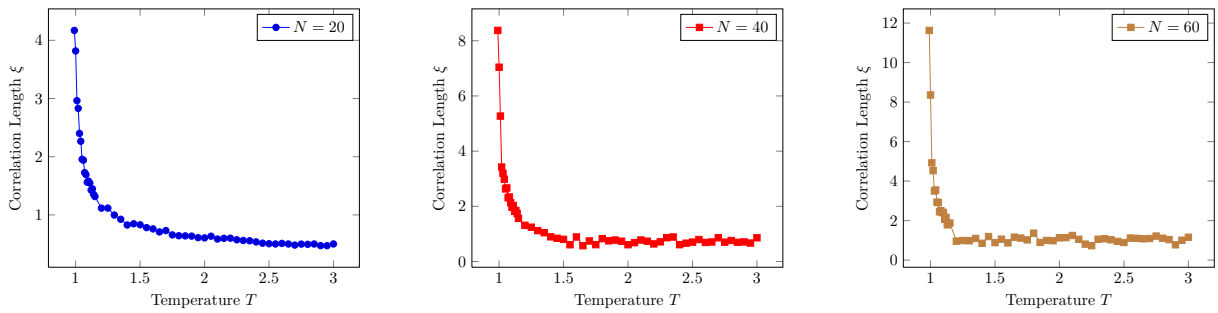
(c) 关联长度: 关于距离的衰减率

通过采样可计算出各温度下的 $\Gamma(k)$. 为确定 $\Gamma(k) = \Gamma_0 \exp(-k/\xi)$ 中的特征长度 ξ , 考虑对 $k \in [N/8, N/4]$ 对应的 $\log(\Gamma(k))$ 作最小二乘的线性拟合, 关联长度 ξ 被数值地确定为拟合直线的斜率的负倒数. 以 $N = 20, T = 1.5$ 为例, 可得 Figure 8.

在对数坐标图中作最小二乘可确定该温度对应的关联长度 $\xi(T)$. 依此方法可作出相关长度 ξ 关于温度 T 的变化图. 为便于展示结果, 当 $T \geq T_*$ 时如 Figure 9 所示, $T < T_*$ 时如 Table 2 所示:

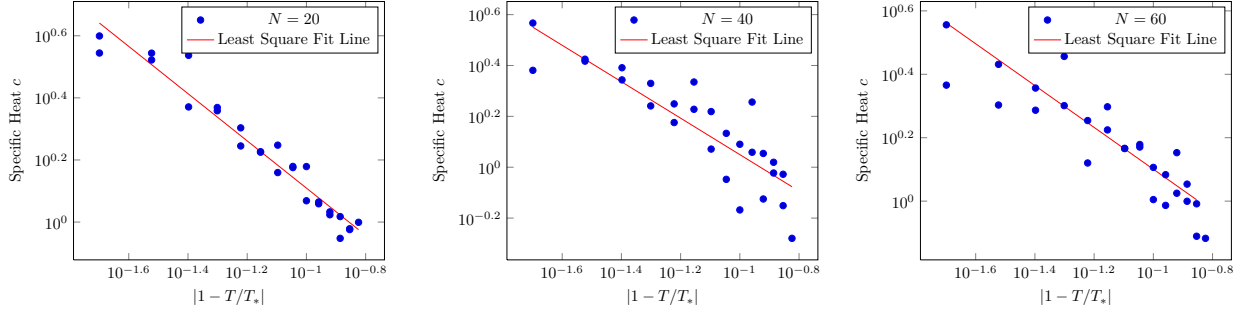
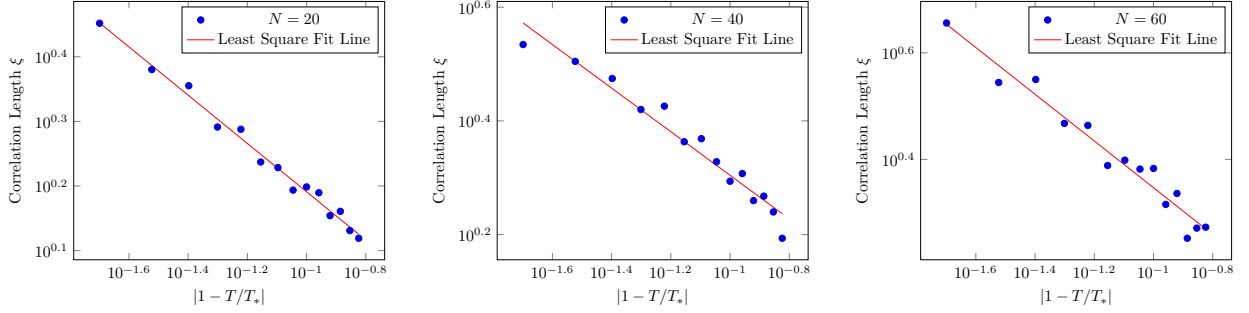
由图表可知:

- 当 $T > T_*$ 时, 相关长度相对较小; 这是由于 T 较大时, 系统整体相对无序, 单个位点的变化是多见的, 两两之间的相关性较低, 因此相关长度较小;

Figure 8: $N = 20, T = 1.5$ 时关联函数随距离 k 变化图Figure 9: N 取不同值时, 关联长度随温度变化图

ξ	$T = 0.40$	$T = 0.60$	$T = 0.80$
$N = 20$	7.019 e+03	2.256 e+02	2.905 e+01
$N = 40$	2.552 e+04	7.400 e+02	8.913 e+01
$N = 60$	4.332 e+04	1.278 e+03	1.516 e+02

Table 2: N 取不同值, $T < T_*$ 关联长度随温度变化表

Figure 10: N 取不同值时, 比热随温度变化图Figure 11: N 取不同值时, 关联长度随温度变化图

- 当 $T \approx T_*$ 时, 温度越靠近临界温度 T_* , 相关长度越大, 且在 T_* 附近快速增大; 这是因为趋近于临界温度时, 相同状态的位点呈片状出现, 两两之间的相关性增强;
- 当 $T < T_*$ 时, 温度较低, 为达到较低的能量, 各位点趋向于取值相同, 两两相关性均很强, 因此相关长度远大于前面的情形。

(d) 比热与关联长度服从的规律

由于假设比热与相关长度在临界温度附近服从幂律, 因此作双对数坐标图, 得到结果如图 Figure 10,11 所示: 用最小二乘的方法数值确定双对数图中线性拟合的斜率, 可数值确定参数 γ, δ , 并得到线性拟合的相关系数平方 r^2 如表 Table 3,4 所示:

	$N = 20$	$N = 40$	$N = 60$
γ	0.7604	0.7166	0.6595
r^2	0.9479	0.7877	0.8090

Table 3: N 取不同值时, 比热的幂律参数 γ 及线性拟合的 r^2

	$n = 20$	$n = 40$	$n = 60$
δ	0.3738	0.3833	0.4388
r^2	0.9884	0.9537	0.9588

Table 4: N 取不同值时, 关联长度的幂律参数 δ 及线性拟合的 r^2

由图 Figure 10,11, 表 Table 3,4 可知:

- 能明显地观察到, 在双对数图中, 比热和关联长度在临界温度附近均有线性变化的性质, 且由线性拟合的 r^2 值可看出, 线性性质是相对良好的. 这意味着数值上, 它们均在临界温度附近服从幂律。

- 对不同的 N 得到的幂律参数 γ, δ , 我们可以数值地确定 $\gamma \approx 0.7121$, $\delta \approx 0.3986$.
- 由计算结果可以看出, 不同的 N 得到的参数依然有一定差别. 说明临界温度附近的计算容易带来误差污染, 要么需要大量的采样, 要么需要更好的算法生成样本.

5.2 3 维情形

(a) 内能与比热: 确定相变的临界温度

对 $N = 10, 20$ 的情形计算内能与比热, 用类似的判定方法判别临界温度, 得到结果如图所示:

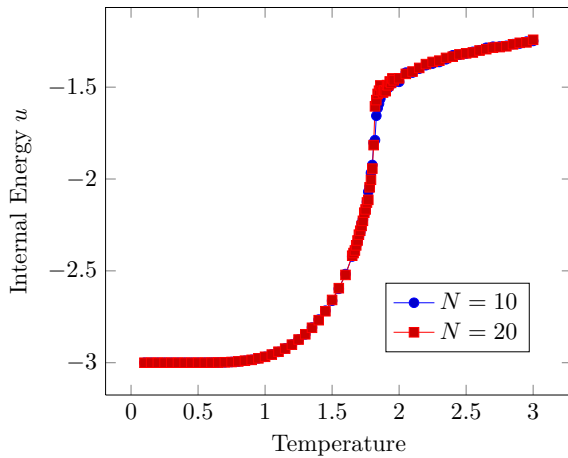


Figure 12: $N = 10, 20$ 时内能随温度变化图

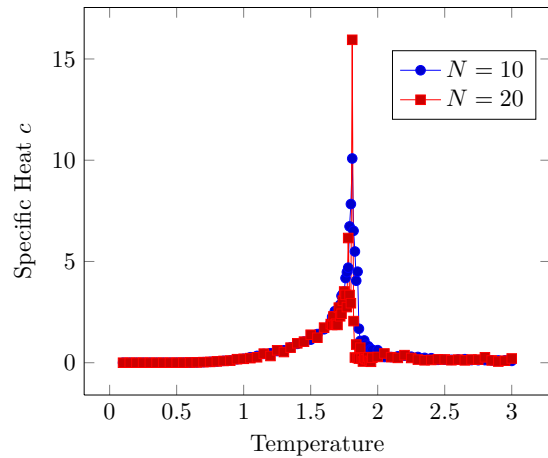


Figure 13: $N = 10, 20$ 时比热随温度变化

criterion	$n = 10$	$n = 20$
u	1.83	1.81
c	1.80	1.80

Table 5: 依据不同判别标准得到的临界温度值

由表可知, 此时可取临界温度为均值 1.81.

直观上可观察到:

- 3 维情形的内能曲线在临界温度变化很快, 依然关于温度单调增加, 但直观上观察可能出现间断点;
- 比热在临界温度附近发生了明显的间断, 左侧极限大于右侧极限.

但由于未能计算更大规模的情形, 这些观察未能佐证.

(b) 磁化强度: 随温度与系数 h 的变化

由图 Figure 14,15,16 可知, 3 维情形磁化强度随 h 的变化与二维类似, 均在 $T < T_*$, $T \approx T_*$, $T > T_*$ 三个阶段有较分明的差异.

(c) 关联长度

对 $N = 10$ 的情形计算. 与二维情形类似, 对 $k \in [1, 4]$ 作最小二乘的线性拟合得到各温度对应的关联长度, $T \geq T_*$ 如图 Figure 17 所示, $T < T_*$ 如表 Table 6 所示:

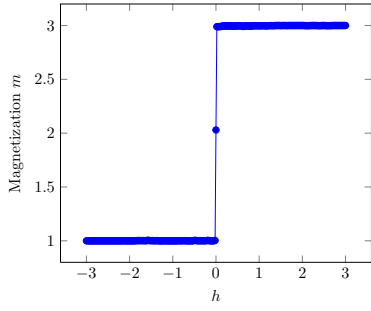


Figure 14: $T = 1 < T_*$, $N = 10$ 时 m 随 h 变化图

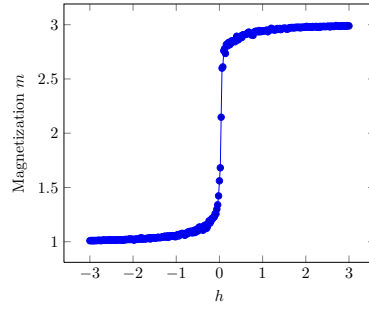


Figure 15: $T = 1.8 \approx T_*$, $N = 10$ 时 m 随 h 变化图

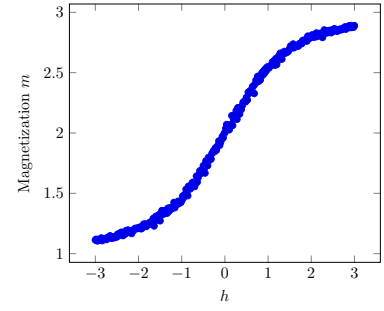


Figure 16: $T = 3 > T_*$, $N = 10$ 时 m 随 h 变化图

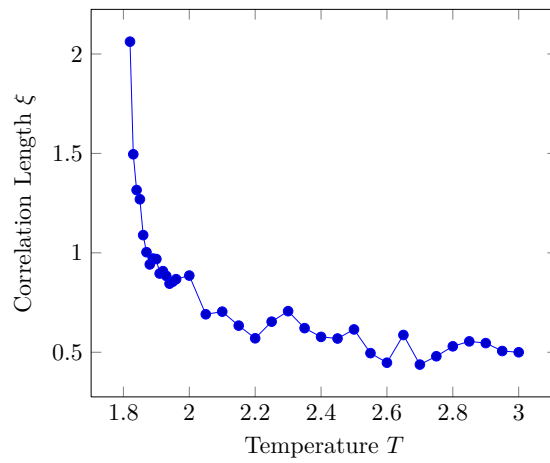


Figure 17: $N = 10$ 时, 关联长度随温度变化图

	$T = 0.50$	$T = 0.75$	$T = 1.00$	$T = 1.25$	$T = 1.50$	$T = 1.75$
ξ	7.576 e+4	1.631 e+3	2.010 e+2	4.760 e+1	1.580 e+1	4.610

Table 6: $N = 10$ 时, 关联长度随温度变化表

由图表可知, 关联长度关于温度的变化与二维情形类似, 依然当 $T > T_*$ 时, 关联长度相对较小; 当 $T \approx T_*$ 时, 温度越靠近临界温度 T_* , 关联长度越大. 并且当 $T < T_*$ 时, 温度较低, 为达到较低的能量, 各位点趋向于取值相同, 两两相关性均很强, 关联长度远大于较高温度的情形.

(d) 比热与关联长度服从的规律

对 $N = 10$ 情形的比热与关联长度进行数据处理, 在双对数图中观察其特征, 如下图所示:

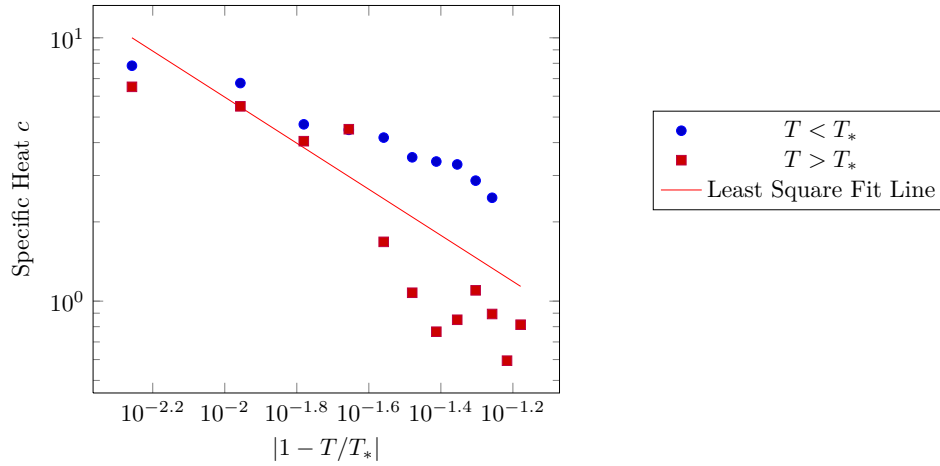


Figure 18: $N = 10$ 时比热随温度变化图

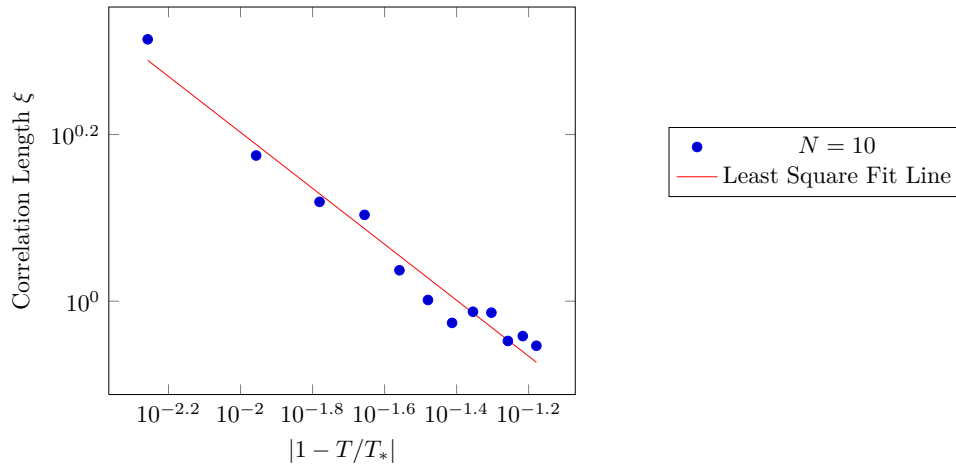


Figure 19: $N = 10$ 时, 关联长度随温度变化图

最小二乘得到的结果为:

- 比热: $\gamma = 0.8748$, $r^2 = 0.6066$.
- 关联长度: $\delta = 0.3359$, $r^2 = 0.9695$.

由图及数据可看出:

- 3 维情形的比热在临界温度处可能发生间断, 导致临界温度左右两侧的比热变化不统一. 在图中可看出, 两侧比热差异较大, 这导致双对数图中的线性拟合结果较差. 比热在其附近可能不服从幂律, 或在两侧分别服从不同的幂律.

- 关联长度在临界温度附近, 在双对数图中有着明显的线性变化, 线性拟合的效果较好, 因此关联长度在临界温度附近可能仍服从幂律. 由 $N = 10$ 得到的幂律参数为 $\delta = 0.3359$, 但由于仅有一组数据, 这一参数可能不准确.

6 总结

本报告使用 MCMC 方法对 2 维及 3 维 $q = 3$ 的 Potts 模型进行数值计算, 观察到了模型中产生的相变, 得到了一些宏观量随温度或随其它参数变化的特征. 主要遇到的困难, 在于临界温度附近的采样难以充分, 容易引入统计误差, 通过使用聚类型的 Wolff 算法部分克服了这一困难. 计算得到的结果中, 部分物理量例如比热在 2 维与 3 维的情形有不同的变化情况, 需要进一步对更大规模的 3 维模型计算以证实. 这其中依然面临统计误差的问题, 临界温度附近要么需要更大的采样数量, 要么需要更加高效的采样算法, 才能更精确地得到模型中物理量的相应规律.