

REPORT 15

潘硕 PB24020526

2025 年 11 月 17 日

1 Question

设体系的能量为 $H(x, y) = -(x^2 + y^2) + \frac{1}{2}(x^4 + y^4) + \frac{1}{3}(x - y)^4$, 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, 从而形象理解 Markov 链.

2 method

2.1 理论值计算

分布函数 $p(x) \propto e^{-\beta H(x,y)}$, 考虑归一化系数, 有:

$$p(x, y) = \frac{e^{\beta[(x^2+y^2)-\frac{1}{2}(x^4+y^4)-\frac{1}{3}(x-y)^4]}}{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\beta[(x^2+y^2)-\frac{1}{2}(x^4+y^4)-\frac{1}{3}(x-y)^4]} dx dy} \quad (1)$$

理论计算式:

$$\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle x^2 + y^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 p(x, y) dx dy \quad (2)$$

使用 Matlab 的 integral2 函数数值计算 (Abstol = 1e-12), 结果如下:

$$\begin{aligned} \beta = 0.2 \quad & \langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = 1.1314, \quad \langle x^2 + y^2 \rangle = 2.2628 \\ \beta = 1 \quad & \langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = 0.7579, \quad \langle x^2 + y^2 \rangle = 1.5158 \\ \beta = 5 \quad & \langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = 0.86552, \quad \langle x^2 + y^2 \rangle = 1.7310 \end{aligned} \quad (3)$$

2.2 Metropolis 抽样法

使用 Metropolis 抽样法进行模拟, 具体步骤如下:

1. 初始化位置 $(x_0, y_0) = (0, 0)$

2. 设定步长 Δ 和总采样数 $N \cdot \Delta$ 的选择应使得接受率在 50% 左右.
3. 设粒子位于 (x_n, y_n) , 进行下一步采样:
 - (a) 生成两个 $[0, 1]$ 均匀分布随机数 (ξ_x, ξ_y) , 得到候选点坐标 $(x_{try}, y_{try}) = (x_n + (\xi_x - 0.5)\Delta, y_n + (\xi_y - 0.5)\Delta)$.
 - (b) 另外产生 $[0, 1]$ 均匀分布随机数 r . 若 $r < \min(1, \frac{p(x_{try}, y_{try})}{p(x, y)})$, 接受采样点, $(x_{n+1}, y_{n+1}) = (x_{try}, y_{try})$; 否则拒绝采样点, $(x_{n+1}, y_{n+1}) = (x_n, y_n)$.

4. 重复步骤 3 直到采样数达到 N

计算 $\langle x^2 \rangle, \langle y^2 \rangle, \langle x^2 + y^2 \rangle$ 时, 丢弃热化长度前 m 个样点以减小初始位置的影响. 本例中取 $N = 100000, m = 5000$.

3 Experiment

3.1 $\beta = 0.2$

$\beta = 0.2$ 对应于高温情况. 绘制此时的 $p(x, y)$ 图像如下:

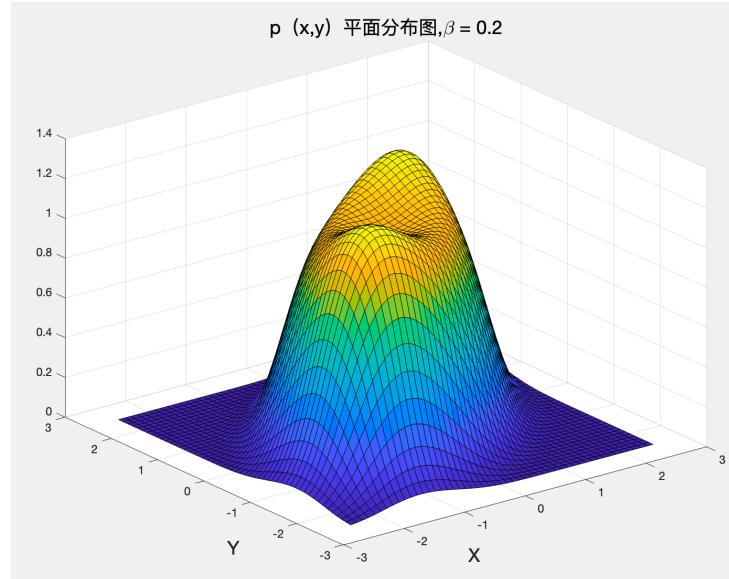


图 1: $p(x, y)$ 平面分布图 ($\beta = 0.2$)

在中央椭圆形区域的 $p(x, y)$ 值较大, 即中央区域采样概率较大.

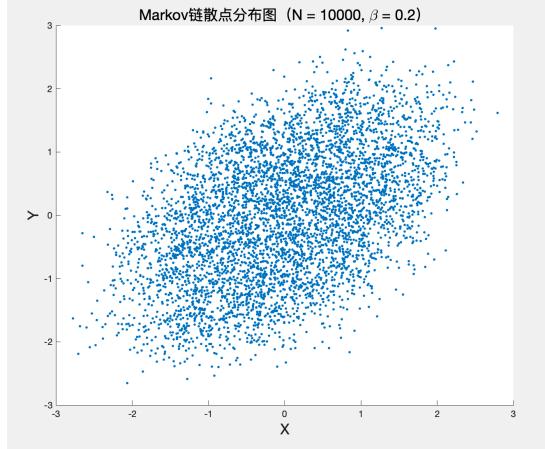
选择步长 Δ 为 3.7, 使得采样率约为 50%. Metropolis 抽样法计算结果如下:

```
<x^2> = 1.1304 <y^2> = 1.141 <x^2 + y^2> = 2.2715
exact = 1.1314 err<x^2> = 0.00083483 err<y^2> = 0.0085321 err<x^2+y^2> = 0.0038486
```

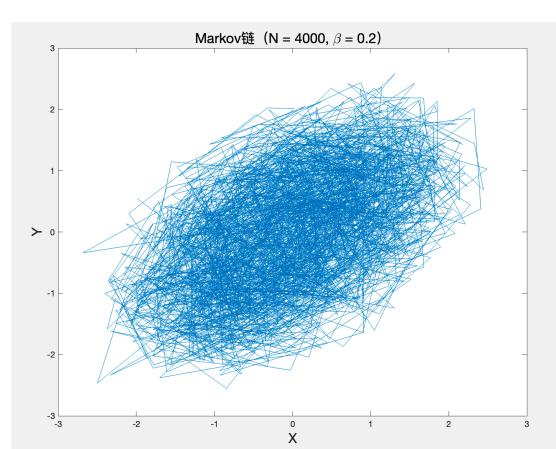
图 2: $\langle x^2 \rangle \langle y^2 \rangle \langle x^2 + y^2 \rangle$ 计算结果及其误差 $\beta = 0.2$

计算误差在 $1e - 3$ 量级, 精度较高.

绘制样本散点图及链分布如下.



(a) Markov 散点分布图 ($\beta = 0.2$)



(b) Markov 链 ($\beta = 0.2$)

由图像可知, 样本点主要分布于中央的椭圆形区域中, 这与 $p(x, y)$ 形状相符合.

3.2 $\beta = 1$

$\beta = 1$ 对应于中等温度, $p(x, y)$ 图像如下图所示:

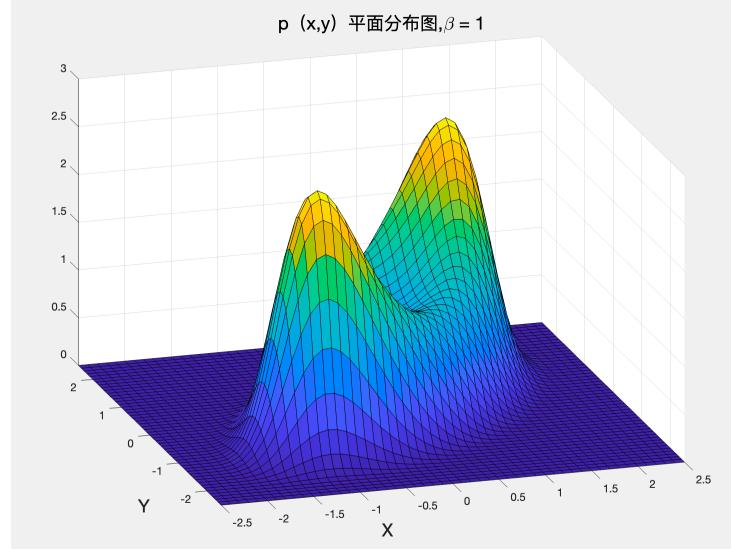


图 4: $p(x, y)$ 平面分布图 ($\beta = 1$)

中央区域 $p(x, y)$ 较大, 且 $p(x, y)$ 有两个相对原点对称的极大值峰, 即存在两个势阱.

选择步长 $\Delta = 2.4$ 进行计算, 误差 $err \sim 1e - 3$, 精度较高.

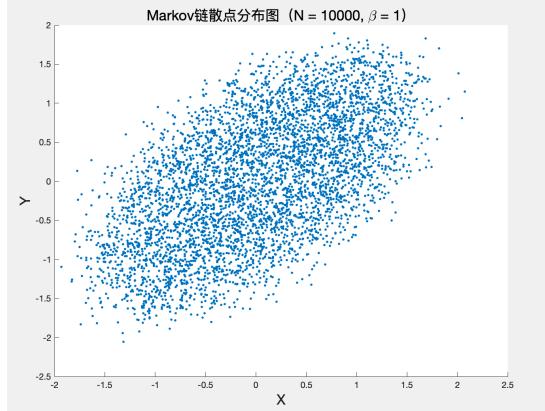
观察到散点分布图与 $\beta = 0.2$ 分布类似, 采样点可在两势阱之间穿梭.

```

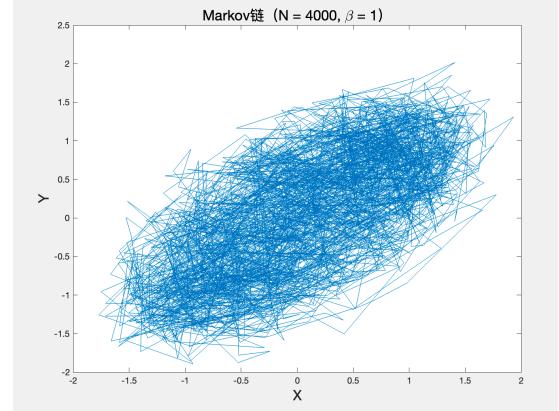
<x^2> = 0.75956 <y^2> = 0.75933 <x^2 + y^2> = 1.5189
exact = 0.7579 err<x^2> = 0.0021994 err<y^2> = 0.0018968 err<x^2+y^2> = 0.0020481

```

图 5: $\langle x^2 \rangle \langle y^2 \rangle \langle x^2 + y^2 \rangle$ 计算结果及其误差 ($\beta = 1$)



(a) Markov 散点分布图 ($\beta = 1$)



(b) Markov 链 ($\beta = 1$)

3.3 $\beta = 5$

$\beta = 5$ 对应于低温, 此时的 $p(x, y)$ 分布如下图所示:

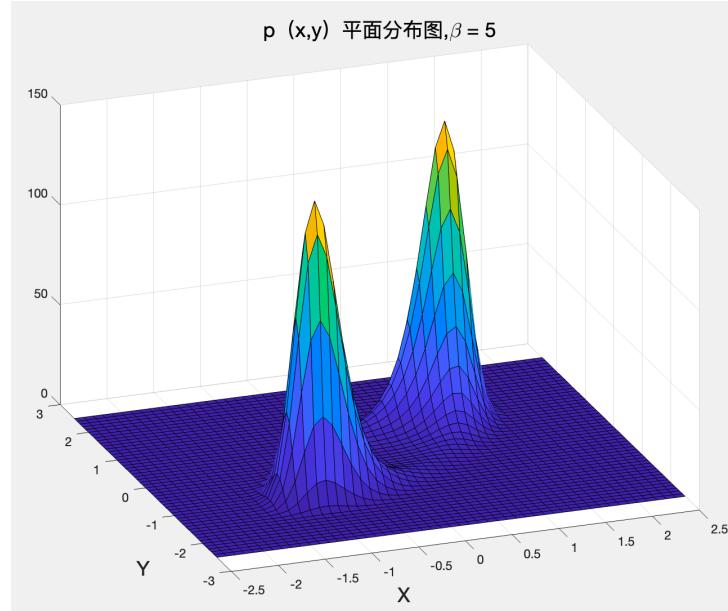


图 7: $p(x, y)$ 平面分布图 ($\beta = 5$)

$p(x, y)$ 有两处极大值, 即存在两处较深的势阱.

取 $\Delta = 0.9$ 进行采样计算. $err \sim 1e - 3$, 精度较高.

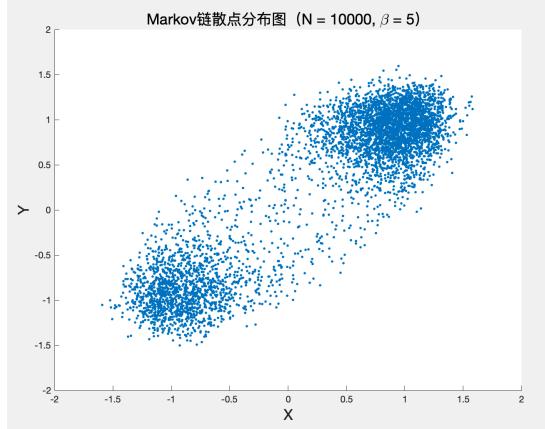
由散点图可知, 此时样本点主要分布于两处势阱内. 样本点在势垒内部游走, 只有较少的一部分可以越过中央势垒到达另一处势阱.

```

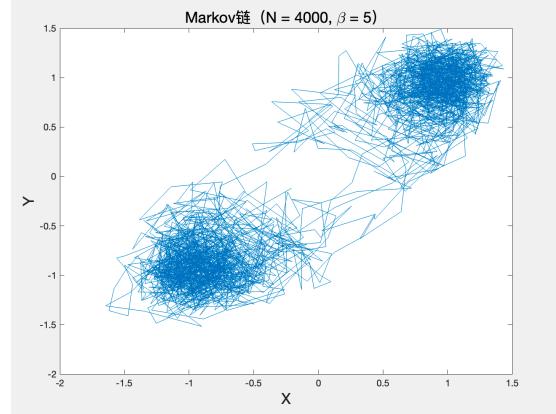
<x^2> = 0.86282 <y^2> = 0.86739 <x^2 + y^2> = 1.7302
exact = 0.86552 err<x^2> = 0.0031191 err<y^2> = 0.0021546 err<x^2+y^2> = 0.00048228

```

图 8: $\langle x^2 \rangle \langle y^2 \rangle \langle x^2 + y^2 \rangle$ 计算结果及其误差 ($\beta = 5$)



(a) Markov 散点分布图 ($\beta = 5$)



(b) Markov 链 ($\beta = 5$)

4 Summary

1. 本例中使用 Metropolis 方法对势能函数 $H(x, y) = -(x^2 + y^2) + \frac{1}{2}(x^4 + y^4) + \frac{1}{3}(x - y)^4$ 进行抽样, 并计算 $\langle x^2 \rangle, \langle y^2 \rangle, \langle x^2 + y^2 \rangle$ 的值, 与理论值进行对比. 在 $N_{sample} = 100000$ 的条件下, 误差 $err \sim 1e - 3$, 精度较高.
2. 研究了样本点分布并与实际 $p(x, y)$ 对比. 图像较为吻合.
3. 随着 β 的上升 (即温度下降), 体系的势阱逐渐变深, 样本点集中分布于势阱底部, 从一处势阱跨越到另一处势阱的难度增大.