

# Report15

胡琦浩 PB21000235

## 一、问题

设体系能量为  $H(x, y) = -(x^2 + y^2) + \frac{1}{2}(x^4 + y^4) + \frac{1}{3}(x - y)^4$ , 取  $\beta = 0.2, 1, 5$ , 采用 Metropolis抽样方法计算  $\langle x^2 \rangle, \langle y^2 \rangle, \langle x^2 + y^2 \rangle$ 。抽样时在二维平面上依次标出Markov链点分布, 从而形象地理解Markov链。

## 二、方法

### 2.1 理论计算

该热力学系统满足Boltzmann分布:

$$p(x, y) = \frac{1}{A} \exp(-\beta H(x, y))$$

式中:  $A = \int \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\beta H(x, y)) dx dy$

则应该有:

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

由Mathematica计算结果如下:

$\beta$	$\langle x^2 \rangle$	$\langle y^2 \rangle$	$\langle x^2 + y^2 \rangle$
0.2	1.13138	1.13138	2.26277
1	0.75789	0.75789	1.51579
5	0.86552	0.86552	1.73105

### 2.2 抽样方法

由Metropolis方法:

$$\begin{aligned} p_i W_{ij} &= p_j W_{ji} \\ W_{ij} &= \begin{cases} T_{ij} & \text{if } p_j > p_i \\ T_{ij}(p_j/p_i) & \text{if } p_j < p_i \end{cases} \end{aligned}$$

下标*i*和*j*是不同的, 当两者相同时, 满足转移概率的归一化:

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

根据上述方法即可抽样出满足 $p(x, y)$ 的样本

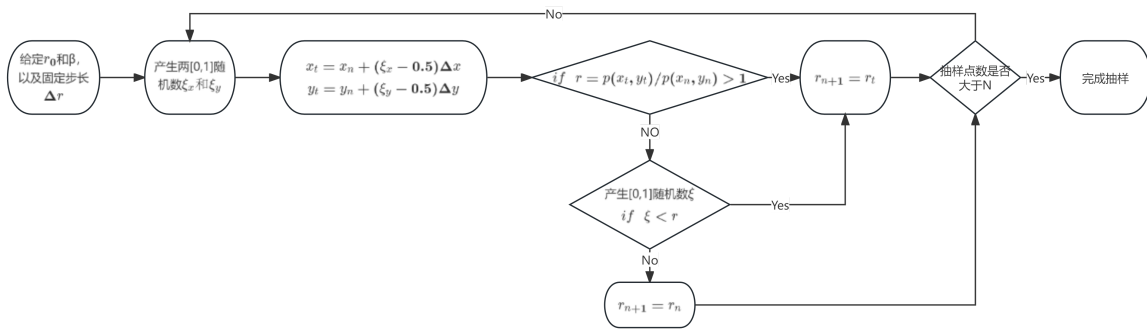


图1：抽样流程图

在本题中，不妨取 $r_0 = (-5, -5)$ ， $\Delta r = (0.5, 0.5)$ ， $N = 10^6$

则根据得到的样本值： $\langle x^2 \rangle = \frac{1}{N-m} \sum_{i=m+1}^N x_i^2$ ，舍去前 $m$ 个热化的构型，在本题中取 $m = 1000$

### 三、实验结果

由Metropolis抽样法得到结果如下：

$\beta$	$\langle x^2 \rangle$	$\langle y^2 \rangle$	$\langle x^2 + y^2 \rangle$
0.2	1.13002	1.13862	2.26864
1	0.75627	0.76115	1.51742
5	0.86251	0.86682	1.72933

可以看出，与Mathematica得到结果相差很小，精度很高

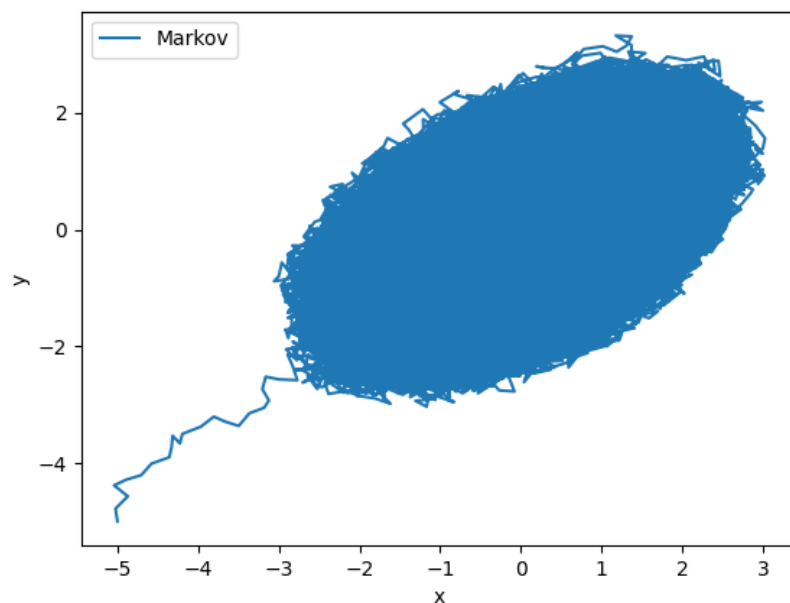


图2:  $\beta = 0.2$ 时的Markov链

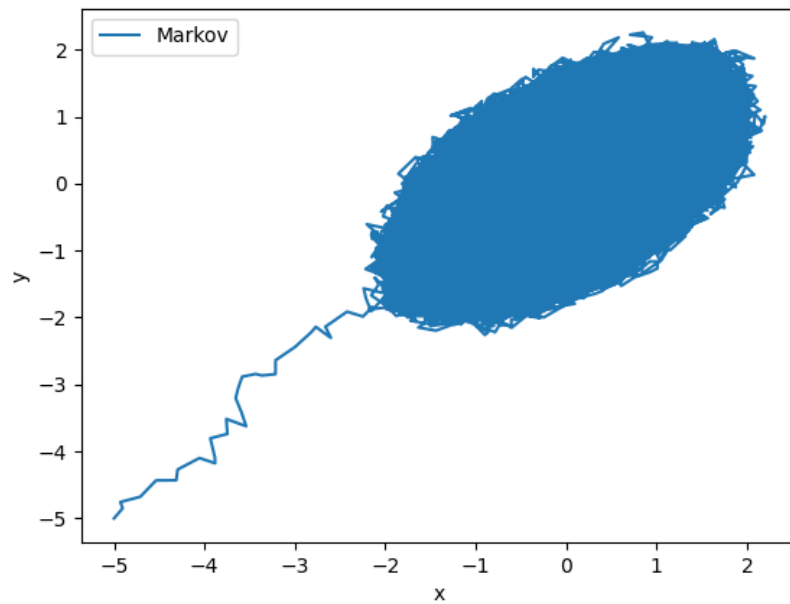


图3:  $\beta = 1$ 时的Markov链

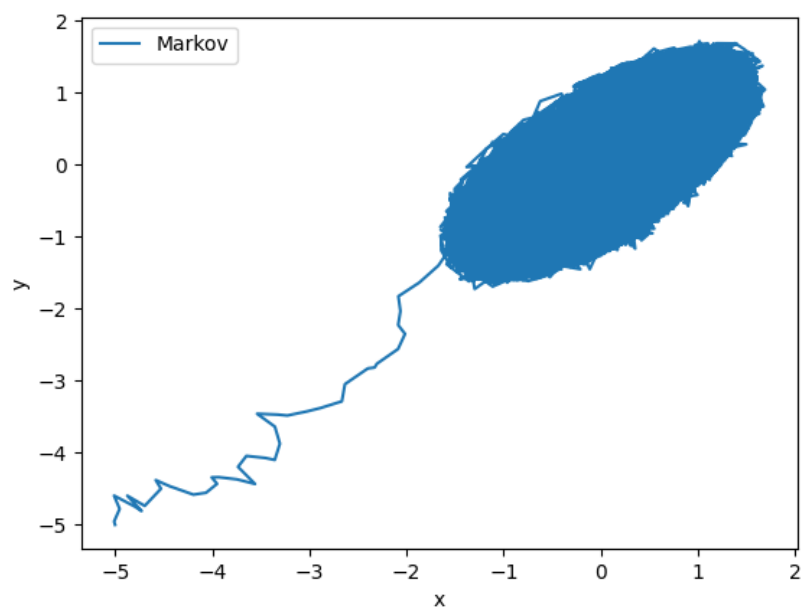


图4:  $\beta = 5$ 时的Markov链

由图可以看出，经过一段时间的热化过程，Markov链最后会交织在一起，达到平衡状态

## 四、总结

本题中再次运用了Metropolis抽样方法，更加深刻地认识了解了Markov链，以及运用Metropolis方法更加熟练

