Report15

1 Question

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

2 Analysis

2.1 概率密度分布

根据玻尔兹曼分布可知，体系的概率分布函数正比于

$$F(x,y)=\exp\left(-\frac{H}{kT}\right)=\exp\{-\beta\times[-2(x^2+y^2)+\frac{1}{2}(x^4+y^4)+\frac{1}{2}(x-y)^4]\} \tag{1}$$

其中 $\beta=\frac{1}{KT}$。

对 $F(x,y)$求偏导，求出其极值点，得到以下几组解

$$\{x\to 0,y\to 0\},\left\{x\to -\sqrt{2},y\to -\sqrt{2}\right\},\left\{x\to \frac{\sqrt{2}}{3},y\to -\frac{\sqrt{2}}{3}\right\},\left\{x\to -\frac{\sqrt{2}}{3},y\to \frac{\sqrt{2}}{3}\right\},\left\{x\to \sqrt{2},y\to \sqrt{2}\right\}$$

从解的结果来看，与 β 的取值无关，在固定的点处取到极值，为了使得结果更加形象，不妨取 $\beta=1$，得到

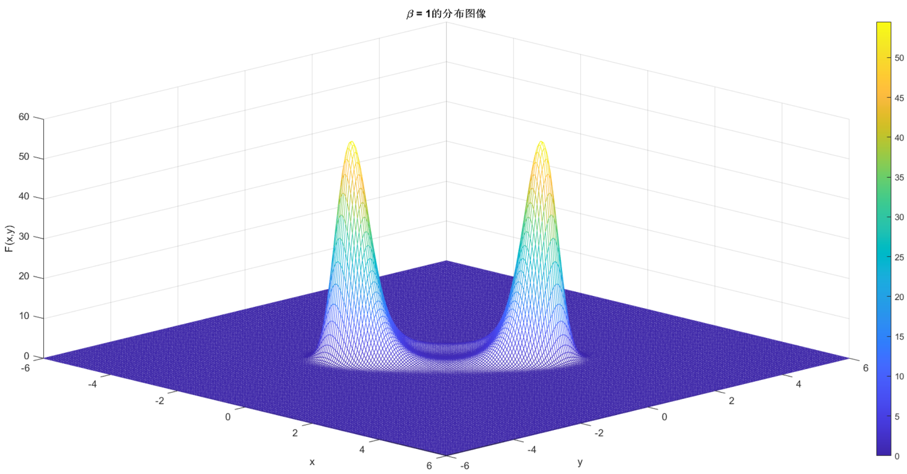

图1：F(x,y)图像

2.2 建议分布 $T(x',y')$

如**图1**所示的图像，可以明显的看到 $(-\sqrt{2},-\sqrt{2})(\sqrt{2},\sqrt{2})$处有两组极大峰值，故选择下列**正态分布作为建议分布**来抽样，其中

$$G_1(x,y)=\frac{1}{2\pi\sigma^2}\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2+(y-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$
$$G_2(x,y)=\frac{1}{2\pi\sigma^2}\exp\left(-\frac{(x+\mu)^2+(y+\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

上式中取 $\mu=\sqrt{2},\sigma=\frac{1}{2\sqrt{\beta}}$

μ是固定在极大值处的，而σ 与 β相关的。这是由于随着 β增大，极值点不改变，而待抽样的分布会逐渐收敛到极值点附近，相应**图1**中极值点附近的弥散度下降，峰变得尖锐，这可以在后续报告中的 **图3，图5，图7**中可以看出，故**随着 β增大，标准差σ要逐渐减小**

设建议分布 T 为

$$T(x \to x', y \to y') = T(x', y') = \frac{1}{2}(G_1(x', y') + G_2(x', y'))$$

则建议分布的图像如下所示

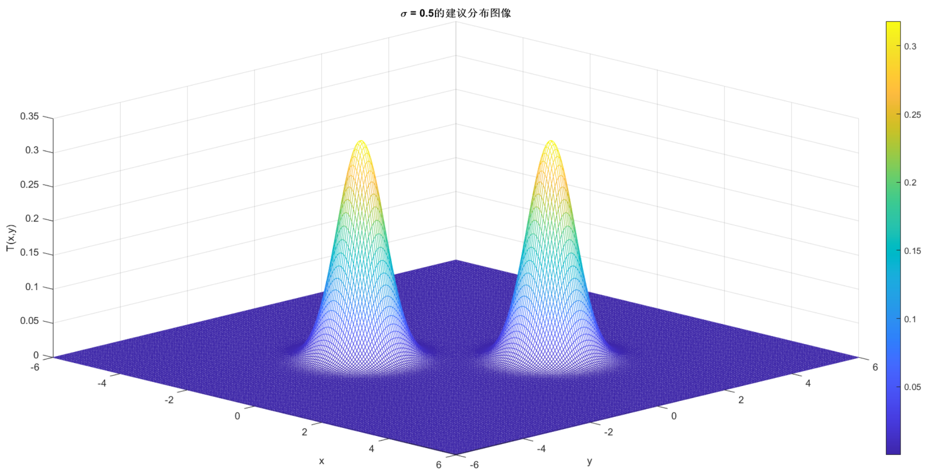

图2：T(x,y)图像

2.3 抽样算法

那么根据 **Metropolis-Hasting 抽样方法**可以得到以下算法：

设初始点为 $(x_0, y_0) = (0, 0)$

1. 设 M 为Markov链集合 $\{(x_k, y_k)\}$，取最后一个点为 (x_n, y_n)
2. 在二维正态分布 $T(x', y')$ 下抽样得到试探点 (x', y')
3. 根据Metropolis-Hasting方法，令

$$r_1 = \frac{p_j T_{ji}}{p_i T_{ij}} = \frac{F(x', y')T(x_n, y_n)}{F(x_n, y_n)T(x', y')}$$

4. 在[0,1]均匀分布中抽样出随机点 ξ，若 $\xi < \min(1, r)$，取 $(x_{n+1}, y_{n+1}) = (x', y')$；若 $\xi > \min(1, r)$，取 $(x_{n+1}, y_{n+1}) = (x_n, y_n)$
5. 将 x_{n+1} 加入到 M 集合，循环到步骤1，直到集合总数大于 N

当得到有N个点的Markov链集合后，将序列中热化过程的前M个构型舍去，那么对应的平均值如下所示

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{N-M} \sum_{i=M+1}^{N} x_i^2$$

$$\langle y^2 \rangle = \frac{1}{N-M} \sum_{i=M+1}^{N} y_i^2$$

$$\langle x^2 + y^2 \rangle = \frac{1}{N-M} \sum_{i=M+1}^{N} x_i^2 + y_i^2$$

2.4 Markov Chain 形象化展示算法

为了绘制出 Markov Chain 的轨迹，上述建议分布 $T(x, y)$ 会在两个高斯分布间来回跳转，规避了粒子落入势阱中，无法逃离的情况，但是，无法展示出 Markov Chain 形象的过程，故**在热化过程中，采取了另一种采样的方式**，算法如下：

设初始点为 $(x_0, y_0) = (5, 5)$

1. 设 B 为Markov链热化点集合 $\{(x_k, y_k)\}$，取最后一个点为 (x_n, y_n)
2. 随机向前试探一步：

$$(x_t, y_t) = (x_n + \xi_x * s, y_n + \xi_y * s)$$

其中 ξ_x, ξ_y 是[-1,1]上均匀分布分布的随机数，s=0.1为固定步长

3. 根据Metropolis抽样规则，设 能量改变为 ΔH，选择概率为 r_1

$$\Delta H = H(x_t, y_t) - H(x_n, y_n)$$
$$r_1 = \exp(-\beta\Delta H)$$

4. 在[0,1]均匀分布中抽样出随机点ξ，若 $\xi < \min(1, r)$，取 $(x_{n+1}, y_{n+1}) = (x_t, y_t)$；若$\xi > \min(1, r)$，取 $(x_{n+1}, y_{n+1}) = (x_n, y_n)$
5. 将 x_{n+1}加入到 B集合，循环到步骤1，直到集合总数大于 M

3 Experiment

3.1 $\beta = 0.2$

此时对应的是高温下的情况。

数值计算可得以下结果

$$\langle x^2 \rangle = 1.556912649927367, \quad \langle y^2 \rangle = 1.559989388948787,$$
$$\langle x^2 + y^2 \rangle = 3.116902038876154$$

理论值计算是：$< x^2 >= 1.56189$， $< y^2 >= 1.56189$，结果比较准确

由**图 3** 可见，分布的极大值处于原点附近，但是原点和离原点较远的地方分布都比较小，抽样结果来看，基本与原分布吻合

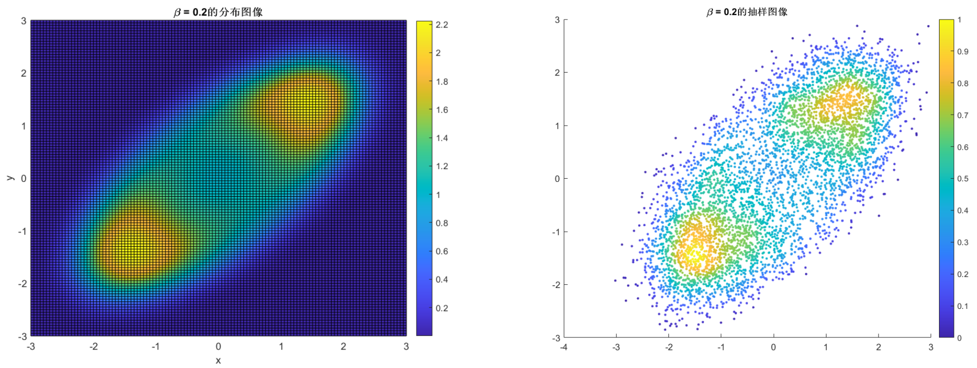

图3：高温分布与抽样图像比较

根据2.4 其热化得到的 Markov Chain如**图4**所示，粒子较为均匀在两个势阱间穿梭

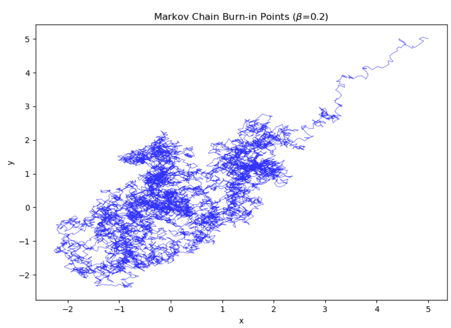

图4：高温热化时的Markov Chain

3.2 $\beta = 1$

此时对应的是中等温度下的情况。当β较大时马尔科夫链开始向分布极值靠近。

数值计算可得以下结果

$$\langle x^2 \rangle = 1.6822846190170353, \quad \langle y^2 \rangle = 1.679052276012874,$$
$$\langle x^2 + y^2 \rangle = 3.36133689502991$$

理论计算值是：$< x^2 >= 1.68247$， $< y^2 >= 1.68247$，结果比较准确

对应的图像对比与Markov Chain如**图5**，**6**所示

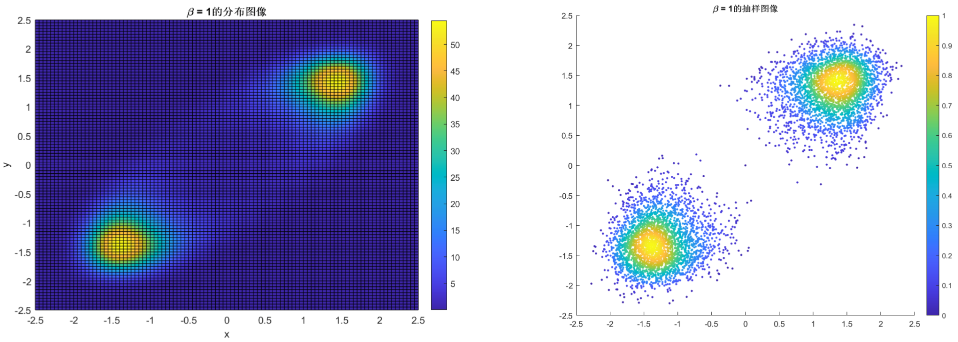

图5：中等温度分布与抽样图像比较

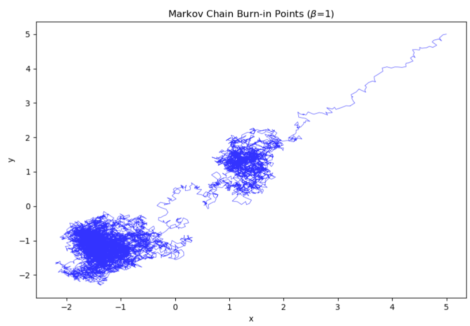

图6：中等温度热化时的Markov Chain

3.3 $\beta = 5$

此时对应的是低温的情况。

数值计算可得以下结果

$$\langle x^2 \rangle = 1.9464660730764258, \quad \langle y^2 \rangle = 1.950173563246566,$$
$$\langle x^2 + y^2 \rangle = 3.896639636322991$$

理论计算值是：$< x^2 >= 1.94783$， $< y^2 >= 1.94783$，结果比较准确

对应的分布与抽样图像对比如**图7**所示

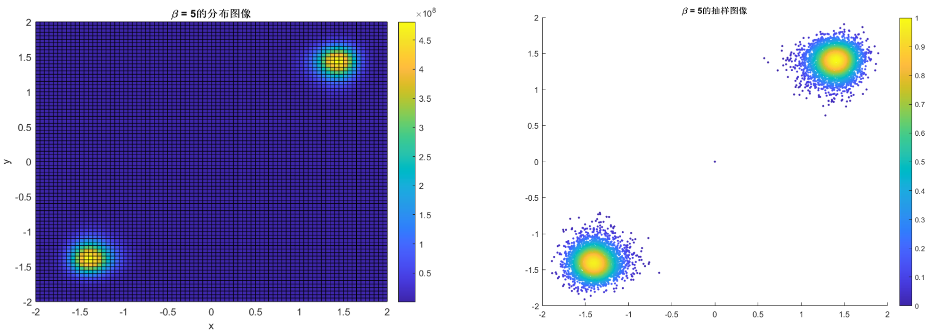

图7：低温分布与抽样图像比较

为比较2.3与2.4提出的算法，取在 $\beta = 5$时比较更为形象，因为此时在极值点处是势阱很深，如**图7**所示，粒子基本只在极值点附近，而极少的有“隧穿”过程，比较结果如下所示

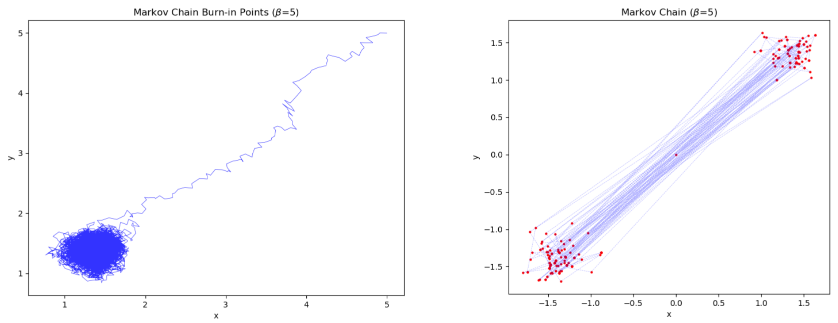

图8：低温热化与抽样时的Markov Chain 对比

当采取2.4中的算法，如**图8左**所示，在从（5，5）出发的点，当靠近极值点后，基本活动范围只在第一象限内的势阱中，几乎不可能到另一边的势阱，这与图4展现的 β 较小（高温）时热化的Markov Chain很不一样。

而抽样采取 2.3 中提出的两个高斯分布作为建议抽样分布，可以规避这类情况的发生，如**图8右**所示，粒子在两个势阱间来回穿梭，不会只局限在一个势阱中，可以遍历全局，抽样出完整的分布。

4 Summary

- 利用 Metropolis 方法对玻尔兹曼分布积分。当温度较高的时候马克科夫链会同时 往远离原点和靠近原点的方向扩散，但是由于离原点较远的点对$< x^2 >$贡献远大于靠近 原点的点，所以积分值会偏高，随着温度降低，马尔科夫链将收拢与分布极值点，使得积分收 敛于一个稳定值。
- 比较了两种 Metropolis 抽样方法，对于普通的Metropolis 方法，粒子在遇到较大势阱时，很容易在一个势阱中无法逃脱。根据Metropolis-Hasting 方法，应当采取与待抽样分布近似的建议分布，使得让粒子有机会挣脱势阱束缚，在全局进行遍历，这样才能采样出完整的分布。
- 在待抽样的Boltzmann分布的参数 β 在变化时，相应的建议分布 $T(x, y)$也要随之改变，在实验中发现，在调整标准差 $\sigma = \frac{1}{2\sqrt{\beta}}$ 时，建议分布于待抽样分布比较接近，抽样的结果较好。