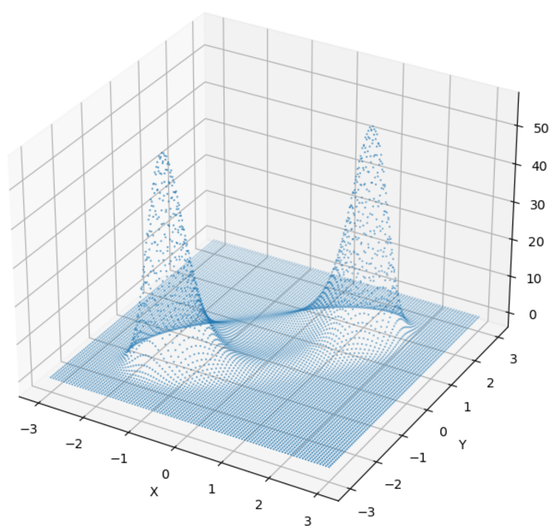
Report 15

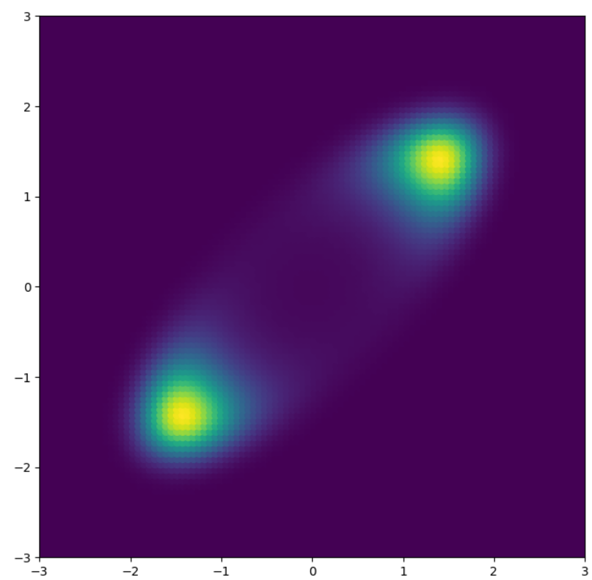
题目

[作业15]：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，从而形象地理解Markov链。

算法及公式

根据boltzman分布，画出exp(-beta*H)的几率分布。





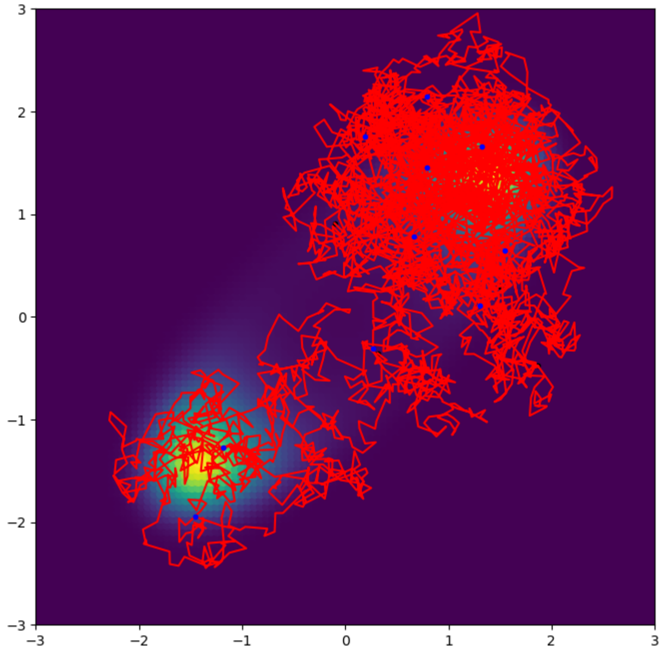
可以看出，有两个能量最低点，有着最大概率分布。

本实验采用MetropolisMonteCarlo抽样方法，通过随机行走进行随机抽样，根据boltzman分布，决定是否取样。

结果及讨论

beta=0.2

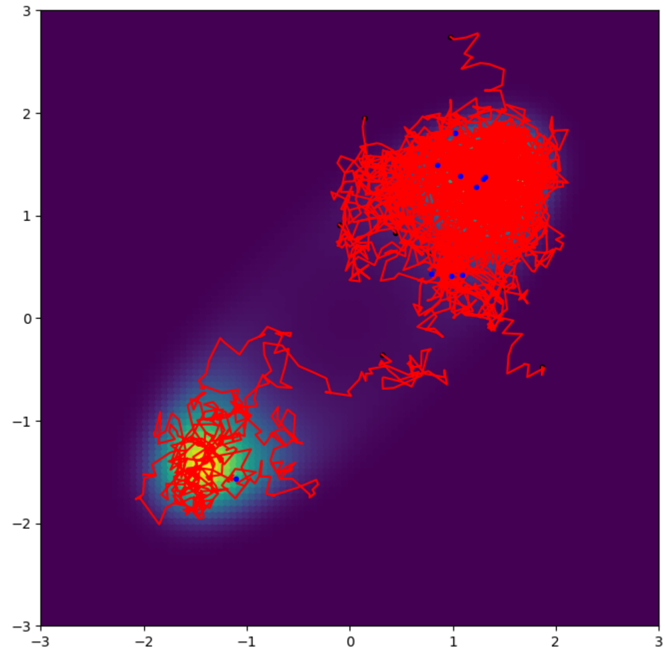
<x**2>=1.455290475653293, <y**2>=1.8098633369635564,
<x**2+y**2>=3.265153812616849



beta=1

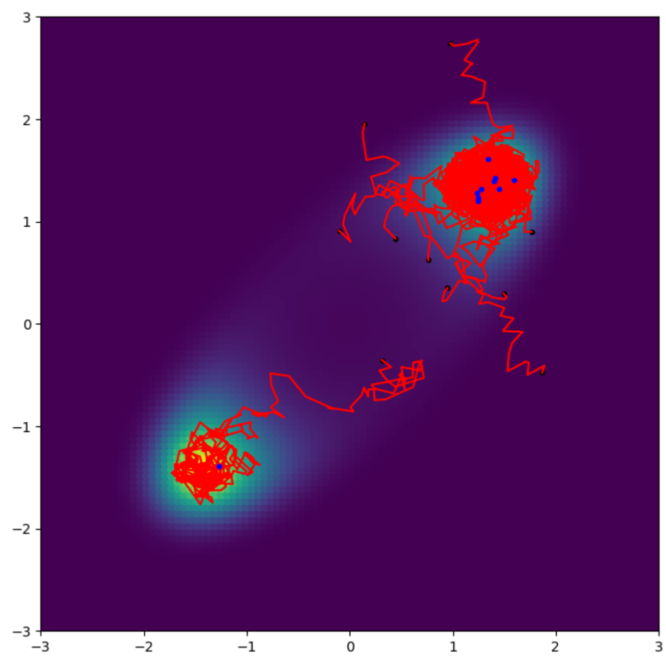
<x**2>=1.605393309205096, <y**2>=1.658350968802688, <x**2+y**2>=3.263744278007784

分析：总体而言，三种β下，取样都聚集在能量最低值附近。当β比较低，即温度较高时，取样 更具随机性一些，并存在一些翻过势垒，从一个最低值到另一个最低值的点。



beta=5

<x**2>=1.8629292944861748, <y**2>=1.905720076485794,
<x**2+y**2>=3.7686493709719695



分析：总体而言，三种β下，取样都聚集在能量最低值附近。当β比较低，即温度较高时，取样 更具随机性一些，并存在一些翻过势垒，从一个最低值到另一个最低值的点。

但当温度较低时，取样较稳定，都很靠近极值点。但缺点是没有足够的随机性使点跨越势垒，达到其他最低值。可能存在困在局域极小值的情况。

总结

本实验采用Metropolis抽样方法，在二维能量分布下，研究了Markov链的行走。