作业第十五题报告

PB18020539 黄韫飞

1.作业题目：设体系的能量为$H = x^2/2\sigma_x^2 + y^2/2\sigma_y^2$（以$kT$为单位），采用Metropolis抽样法计算$\langle x^2\rangle, \langle y^2\rangle, \langle x^2+y^2\rangle$，并与解析的结果进行比较。抽样时依次在二维平面上标出Markov链点的分布从而形象地理解Markov链

2.算法与公式

首先从理论上推导出$\langle x^2\rangle, \langle y^2\rangle, \langle x^2+y^2\rangle$的解析结果：

粒子的能量：

$$H = k_B T(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2})$$

根据Boltzmann Distribution：

$$p(x,y) = A\exp(-(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2}))$$

$$\frac{1}{A} = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2}))\mathrm{d}x\mathrm{d}y = 2\pi\sigma_x\sigma_y$$

$$\Rightarrow p(x,y) = \frac{\exp\left(-(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2})\right)}{2\pi\sigma_x\sigma_y} = f(x)g(y)$$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x}\exp(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}), g(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_y}\exp(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2})$$

是一个二维正态分布，所以可以计算出：

$$\langle x^2\rangle = \sigma_x^2, \langle y^2\rangle = \sigma_y^2, \langle x^2+y^2\rangle = \sigma_x^2 + \sigma_y^2$$

Metropolis抽样算法描述

定义初始位置(x_n, y_n)，假设步长为δ，产生随机数$\xi, \eta \in [0,1]$，

则可以构造出下一步的试探解$x_t = x_n + \delta(\xi - 1/2), y_t = y_n + \delta(\eta - 1/2)$，

概率之比为$r = p(x_t, y_t)/p(x_n, y_n) = \exp\left(\frac{x_n^2 - x_t^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y_n^2 - y_t^2}{2\sigma_y^2}\right)$，然后产生另一个随机数$\zeta \in (0,1)$

若$\zeta < \min(1, r)$，则$x_{n+1} = x_t$，否则$x_{n+1} = x_n$

3.计算结果与讨论

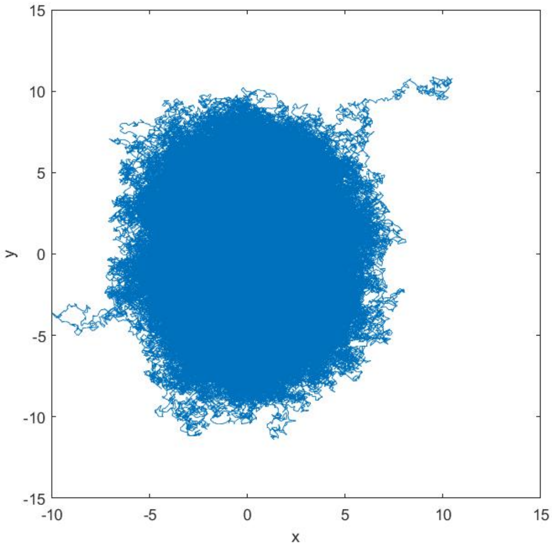
取参数为：$\delta = 0.5, \sigma_x = 2, \sigma_y = 3$，初始位置(10,10)，热化步数$M = 5E5$，平衡态步数$N = 1E6$，得到结果：

E:\2020秋计算物理\作业题15\题15.exe

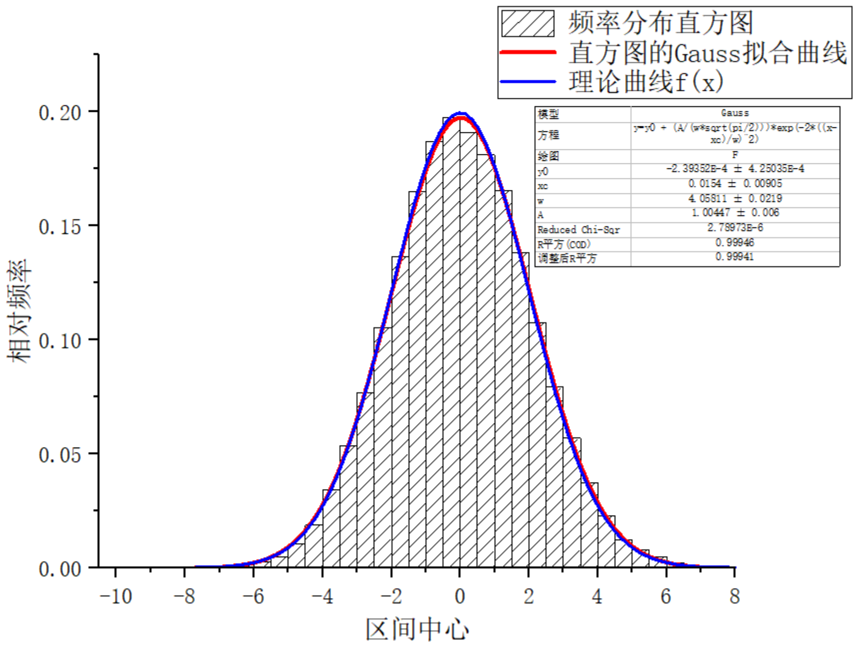
```
x^2=4.035600
y^2=8.971876
x^2+y^2=13.007476
```

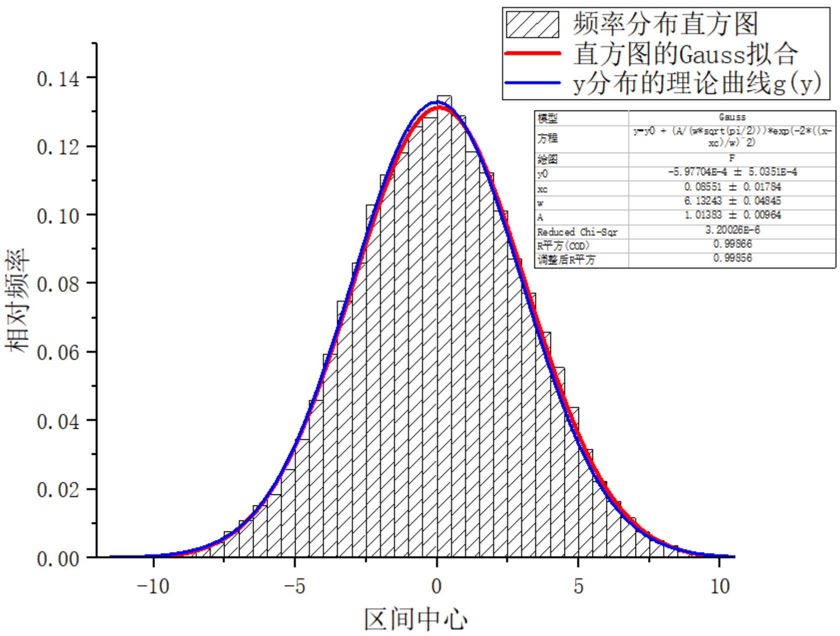
理论值为$\langle x^2\rangle = \sigma_x^2 = 4, \langle y^2\rangle = \sigma_y^2 = 9, \langle x^2+y^2\rangle = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 = 13$，较为接近，相对误差在$10^{-3}$量级

将数据导入MATLAB画图如下：



可以直观的看到Markov Chain的演化：从初始位置(10,10)逐渐向平衡位置靠拢。在平衡态时，由于满足正态分布，粒子的位置几乎完全被限制在$[-3\sigma, 3\sigma]$之间，分别画出平衡态x和y的分布直方图





拟合得到的结果与解析结果$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x}\exp(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}), g(y)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_y}\exp(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2})$很接近

4.结论

本题利用Metropolis抽样计算了粒子在二维正态分布情形下的$\langle x^2\rangle, \langle y^2\rangle, \langle x^2+y^2\rangle$，取步长$\delta=0.5$，方差$\sigma_x=2, \sigma_y=3$，得到$\langle x^2\rangle=4.035600, \langle y^2\rangle=8.971876, \langle x^2+y^2\rangle=13.007476$，与理论值的偏差在$10^{-3}$量级，同时，画出的Markov链点也有正态分布的特征（如3σ原则），x，y方向的分布满足正态分布。