第15题作业报告

by Bo Zhnag

PB18020635

2020.12.01

1 题目

设体系的哈密顿量为

$$H = \frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2}$$

采用 Metropolis抽样法，计算$<x^2>$,$<y^2>$,$<x^2+y^2>$,并与解析结果比较，并在二维平面上标出Markov链点分布。

2 算法与主要公式

根据正则系综，体系的某一构型出现的概率为 $p = e^{-\beta H}$。

2.1 理论分析

配分函数即归一化常数Z:

$$Z = \iint \exp\beta\left(\frac{x^2}{2\sigma_x^2} + \frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) dx\,dy = \frac{2\pi}{\sqrt{\beta}}\sigma_x\sigma_y$$

理论上三个统计量的结果为：

$$<x^2>=\frac{\iint x^2 e^{-\beta H}}{\iint e^{-\beta H}}=\frac{\sigma_x^2}{\beta}$$

$$<y^2>=\frac{\iint y^2 e^{-\beta H}}{\iint e^{-\beta H}}=\frac{\sigma_y^2}{\beta}$$

$$<x^2+y^2>=<x^2>+<y^2>=\frac{\sigma_x^2+\sigma_y^2}{\beta}$$

2.2 算法

按照讲义上的抽样规则进行抽样：

初始化：

1.随机选取系统的初始构型(x,y);

更新：

2.设已有抽样点(x_n,y_n),构造下一抽样点。提出一个试探更新(x_t,y_t)

$x_t=(\xi 1-0.5)\times\Delta x+x_n$,其中$\xi 1$为$[0,1]$内均匀分布的随机数;

$y_t=(\xi 2-0.5)\times\Delta y+y_n$,其中$\xi 2$为$[0,1]$内均匀分布的随机数;

3.细致平衡要求：

$$A_{i\to j}p(i)p^{\mathrm{ac}}(i\to j)=A_{j\to i}p(j)p^{\mathrm{ac}}(j\to i)$$

先验概率取对称分布时，即$A_{i\to j}=A_{j\to i}$时

Metropolis算法的接受率：

$p^{\mathrm{ac}}(x_n\to x_t)=\min\left(1,\frac{p(x_t)}{p(x_n)}\right)=\min\left(1,e^{-\beta(E_t-E_n)}\right)$,

其中

$$E_t=\frac{x_t^2}{2\sigma_x^2}+\frac{y_t^2}{2\sigma_y^2}$$

$$E_n=\frac{x_n^2}{2\sigma_x^2}+\frac{y_n^2}{2\sigma_y^2}$$

即更新规则为：

产生一个新的ζ为$[0,1]$内均匀分布的随机数,新的抽样点：

$$(x_{n+1},y_{n+1})=\begin{cases}(x_t,y_t),\zeta<\min\left(1,e^{-\beta(E_t-E_n)}\right)\\(x_n,y_n),\zeta>\min\left(1,e^{-\beta(E_t-E_n)}\right)\end{cases}$$

热化：
4.重复更新（2，3）共$N_{\rm warm}$次，确保Markov链达到平稳分布;
统计：
5.热化完成后，重复更新（2，3）得到$N_{\rm samp}$个抽样点，并计算统计量$<x^2>, <y^2>, <x^2+y^2>$。

进一步分析这一道题目我们可以发现，这一题目实际涉及到三类物理量（参数）：

分别是表征体系温度的 $\boldsymbol{\beta}$，表征试探步长大小的$\boldsymbol{\Delta x(\Delta y)}$和表征体系哈密顿量大小的 $\boldsymbol{\sigma_x(\sigma_y)}$。

很明显，这三类物理量不是彼此独立的，它们的比值关系才会最终影响系统的特征。

所以为了研究物理系统随这些物理量的变化关系，我们实际上固定一类物理量而去改变另外两类就可以了。同时，我们注意到系统在 x，y 方向的运动是彼此无关的，所以，x 方向的物理量和 y 方向物理量的比值并不是我们感兴趣的研究内容，从而在模拟中我们也不会去 刻意改变 x 方向和 y 方向物理量的比值关系。

有鉴于此，我们固定 $\boldsymbol{\sigma_x = 3, \sigma_y = 5}$ 不变，研究物理量 $\boldsymbol{\beta}$ 及 $\boldsymbol{\Delta x(\Delta y)}$ 的变化对系统模拟情况的影响。

同时在模拟中，我们也始终保持$\boldsymbol{\frac{\Delta x}{\sigma_x} = \frac{\Delta y}{\sigma_y}}$成立,并令上式为$\boldsymbol{\lambda}$, 即

$$\lambda := \frac{\Delta x}{\sigma_x} = \frac{\Delta y}{\sigma_y}$$

3 计算结果及分析讨论

3.1 $\Delta x(\Delta y)$的变换对系统模拟情况的影响

在本小节中，我们固定 $\beta = 4$，改变 λ，研究系统的模拟精度对 λ 的依赖关系。

取λ从0.1变换到4（取λ从0.1变化到4），进行Metropolis 抽样方法模拟。

并将最后结果和理论值比较,得到 $<x^2>$，$<y^2>$，$<x^2+y^2>$ 的计算误差。

模拟中取总步数为 550000 步，热化处理 525000 步，即只取最后的 25000 计算统计量的平均值。模拟中取 $\beta = 4$，算出理论值

$$<x^2+y^2>=8.5$$

$$<x^2>=2.25$$

$$<y^2>=6.25$$

作出的误差值相对于步长变化的曲线见 fig.1，fig.2。

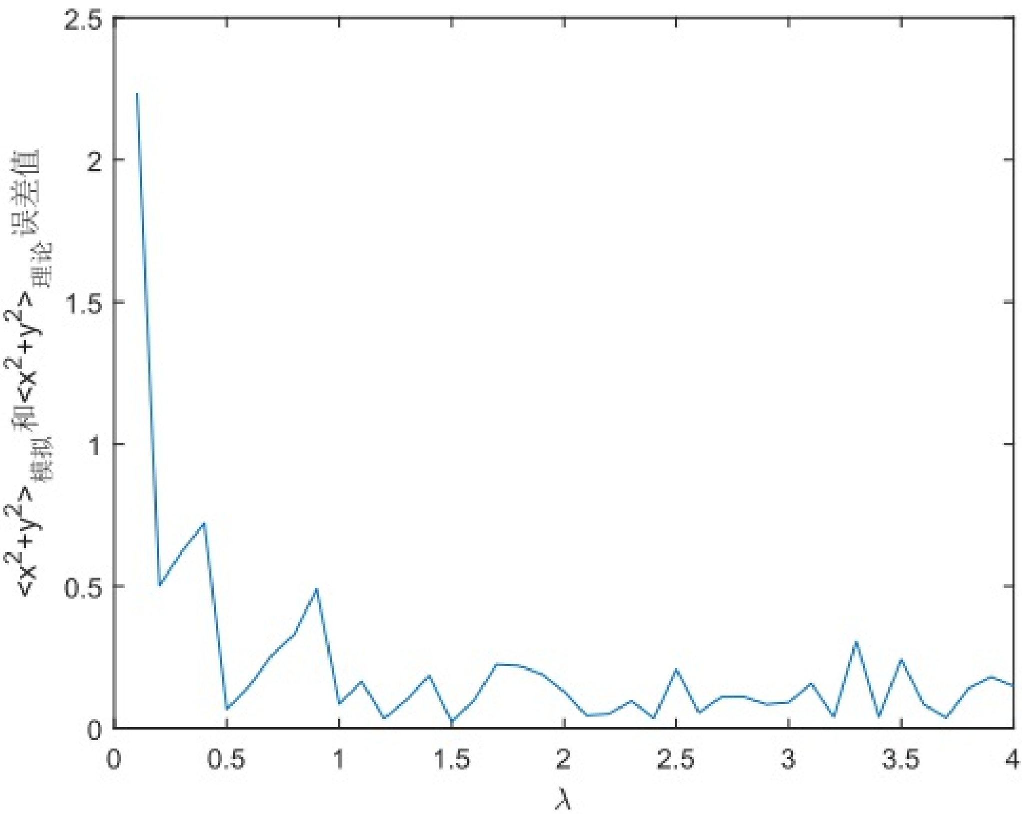


fig.1.$\lambda-$error , λ决定步长

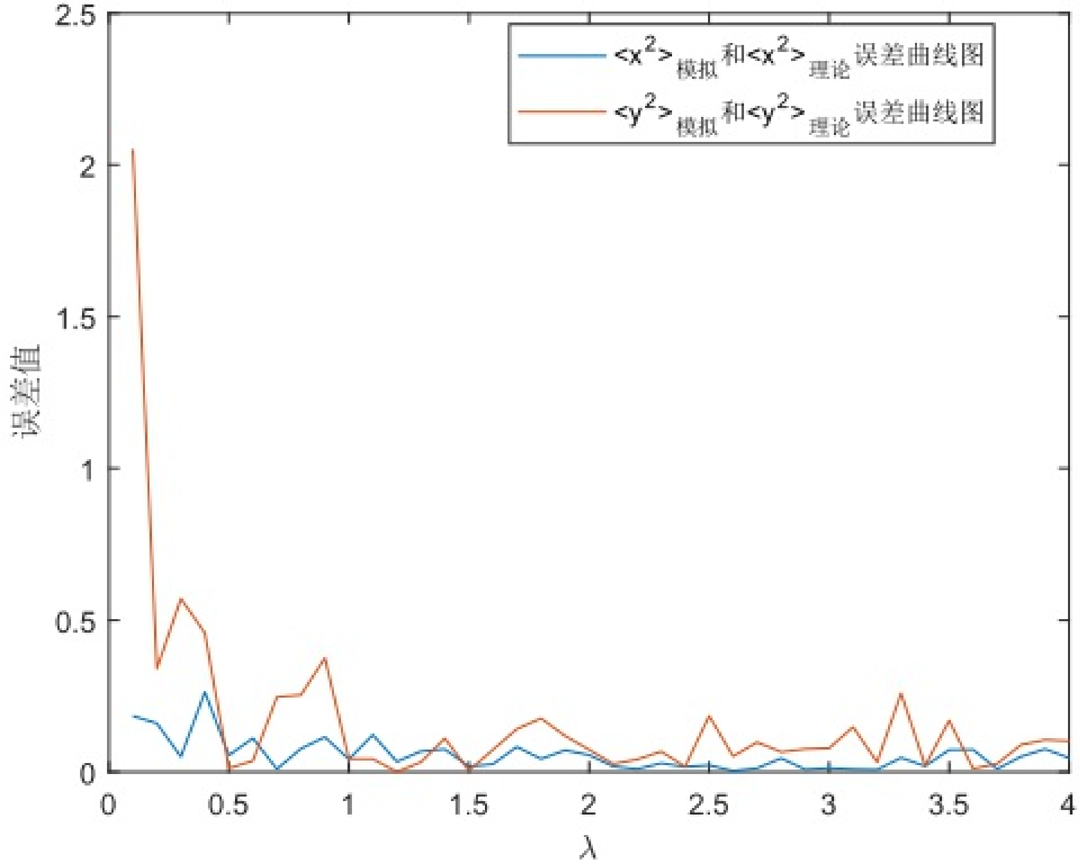


fig.2.$\lambda-\mathrm{error}$, λ决定步长

由这两幅图我们可以明显看到，当 λ较大时，模拟值与理论值符合得较好，但 λ较小时，理论值和模拟值有非常显著的误差，尤其是当 λ

$= 0.1$ 时，相对误差已经接近 30% 了！对于这么大的误差，首先猜想是由于热化 处理步数不够，系统尚未达到平衡态所致。为了检验该猜想，我们又在保持$\lambda = 0.1, \beta = 4$ 的条件下，多次改变模拟总步数和热化处理步数，计算$<x^2+y^2>$,并求出误差error。

模拟中保持每次热化处理阶段的步数和总模拟步数的差都为 15000 步，即每次模拟都利用最后 15000 步的构型计算统计量的平均值。得到的结果由fig.3.给出。

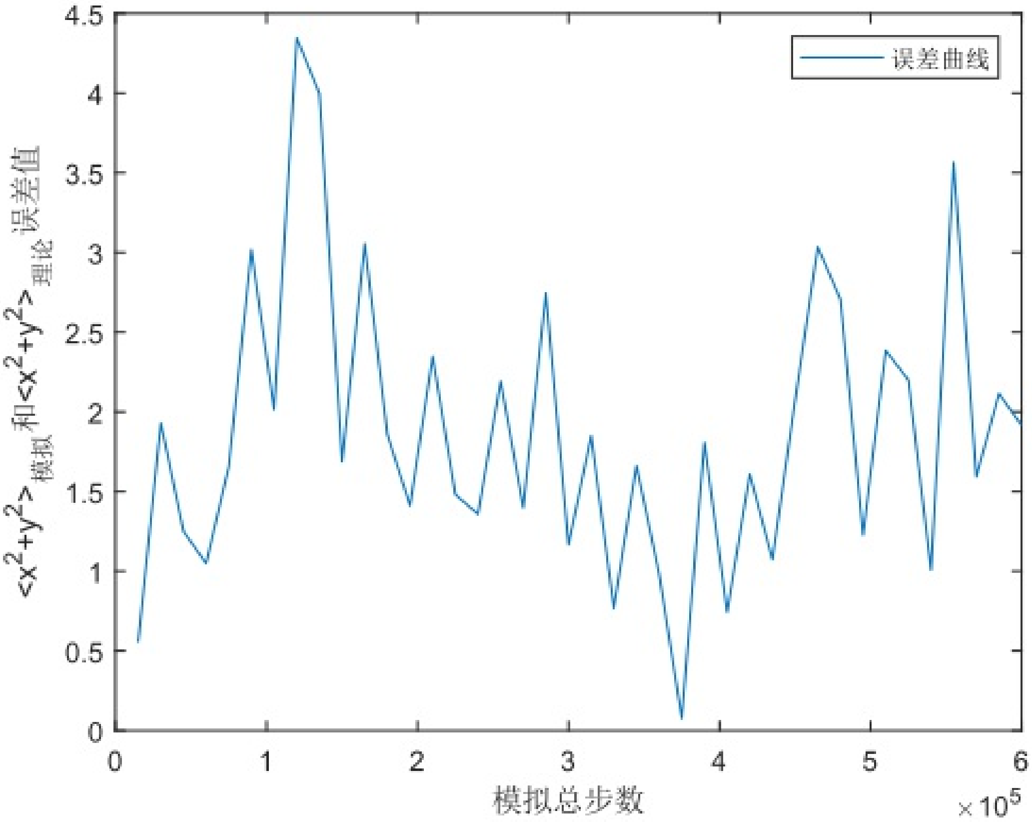
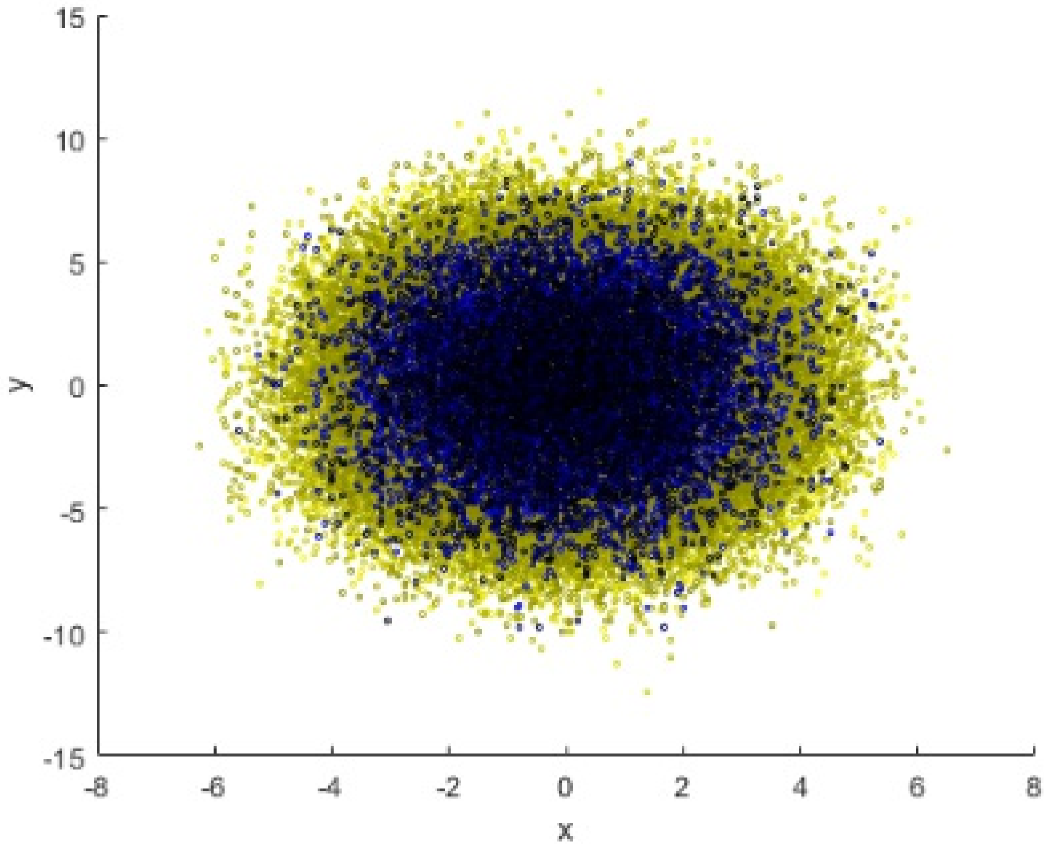


Fig.3.N_{warm}对error的影响$(\lambda = 0.1, \beta = 4)$

我们可以看到，即使我们改变模拟的总步数和热化处理阶段的步数，依旧没办法降低模拟与理论值的误差！无论模拟步数如何增大，误差值却始终关于步数在波动。这说明 $\lambda = 0.1$ 时理论和模拟结果的巨大误差并非来源 于系统没有达到平衡态，而是体系本身的性质决定的。为了更深入的研究，我们在二维平面上画出了 Markov 链点分布。

为了对比，我们同时画出了 $\lambda = 4$ 的情况下 Markov 链点分布，见Fig.4.


15
10
5
0
-5
-10
-15
y
-8
-6
-4
-2
0
2
4
6
8
x

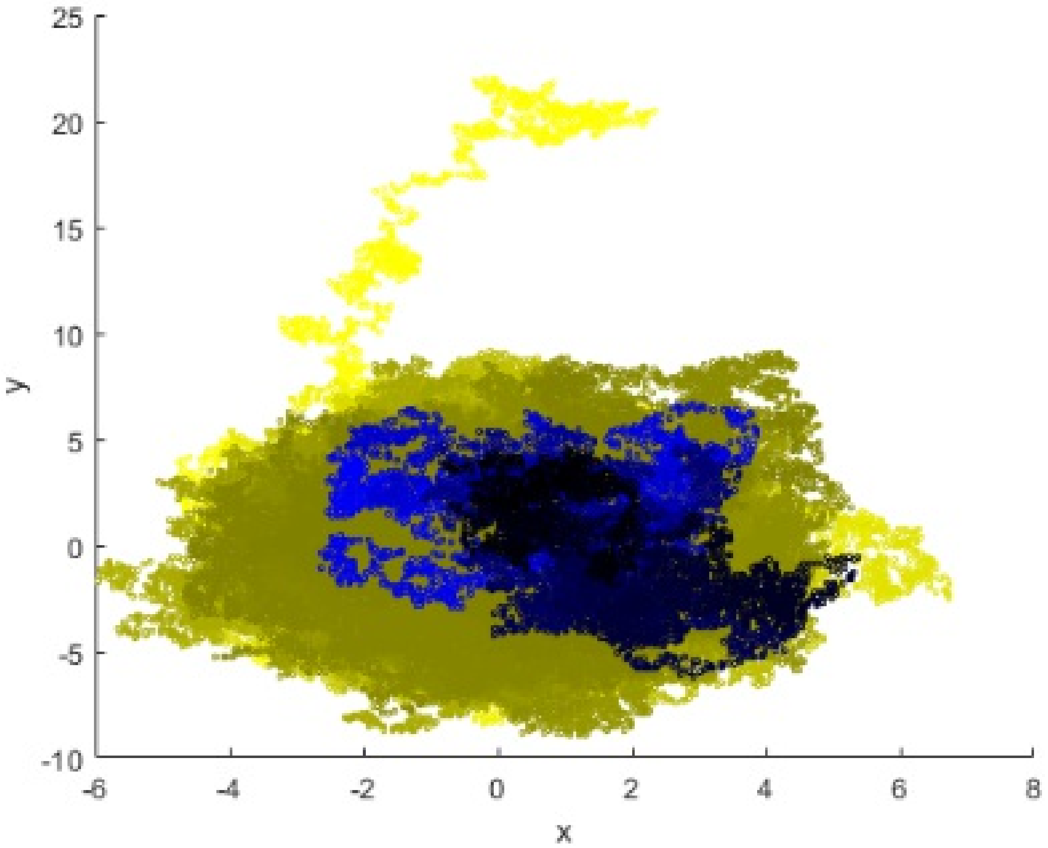

25
20
15
10
5
0
-5
-10
y
-6
-4
-2
0
2
4
6
8
x

fig.4.上图是 $\lambda = 4$，模拟 550000 步的 Markov 链点分布图，下图是 $\lambda = 0.1$，模拟 1200000 步的 Markov 链点分布图，其中颜色由浅到深代表模拟点生成的先后顺序，即颜色越浅的点是越开始生成的点。黄色-深黄色的点是热化处理过程生成的点链，而蓝色-黑色的点是用于统计计算的点链。

由这两幅图的对比我们可以看出，$\lambda = 4$ 生成的点链基本上是按照等势线分布的，代表了在模拟过程中点链逐渐由初始位置向势能较低的位置的过渡，当然也夹杂着一些向势能较高的位置跃迁的试探点，但这些点的数目非常少。这符合理论图像，得到的模拟结果也与理论结果符合得较完美。但反观 $\lambda = 0.1$ 对应的点链，我们发现，点链的生成顺序基本上不是按照等势线生成的。同时在点链生成的初中期点链就已经达到了势能最小值，但这之后却有大量的点会跃迁到势能较高的位置。在 $\lambda = 0.1$ 的情况下，点链感觉到的势阱束缚仿佛被大大削弱，相较与 $\lambda = 4$ 的情况，点链的运动更为自由。因为点链无法被势阱束缚住，这也导致了模拟计算的结果与理论结果有非 常大的误差。至于为什么当 λ 过小，即每次的试探步长过小时，将导致势阱 对点链的束缚大大下降，个人猜想是因为由于在 $\lambda = 0.1$ 时，每一步模拟点 链的试探步长都很小，导致点链感觉到的两步之间的势能差异非常小，点链 更容易向高势能处跃迁。这样，不断积累的效果使点链有更大的概率移动到 势能相对高的构型上。换一句话说，$\lambda = 0.1$ 的点链感觉到的势能比 $\lambda = 4$的点链要更平滑些，所以两者在相空间中的行走呈现完全不同的情况。

由此我们可以得到结论，在进行 Metropolis 重要抽样时如何选取步长的值非常关键，这将直接影响实验的精度。

步长的选取不能过大也不能过小，需要和模拟的其它参数（主要是β）相匹配。

很明显，在β值一定的情况下，当Δx, Δy过大时，接受率很小，Markov 点链将很难离开势能极小处，相当于体系将被束缚在相空间一个很小的区域内，无法做到各态历经，这很明显会影响模拟的精度。

但从本次实验的结果中我们也同时看到，在β值一定的条件下，如果 $\Delta x, \Delta y$ 选取过小，Markov 点链则会有更大的概率向高能量处跃迁，使得点链实际感受到的势能束缚被缩减，导致体系的模拟精度出现很大的误差。在实验中为了得到较好的模拟效果，我们需要合理地选取 $\Delta x, \Delta y$ 的值，使生成的 Markov 点链既可以做到相空间中的各态历经，又不会使得点链感受到的势能束缚被缩减。

3.2 β的变换对系统模拟情况的影响

这一节研究研究物理量 β 及 $\Delta x(\Delta y)$ 的变化对系统模拟情况的影响。

在本小节的实验中，我们固定 λ = 2，总模拟步数 550000 步，热化处理步数 525000 步，用最后 25000 步进行相应统计量的计算，以此来研究极 端的 β 值对实验结果的影响。

β 值实际上对应于实验温度。β过大意味着实验温度过低，系统基本上被冻结在基态，而 β过小则意味着体系温度很高，体系的涨落将会变得比较大。 我们选取了两个极端条件下的 β值，研究模拟的误差和 Markov 点链分布。

3.3 $\beta = 0.01$

我们首先选取 β值为 0.01，模拟得到的 $<x^2>, <y^2>, <x^2+y^2>$ 的值分别是 1327.05，2036.05，3363.12；理论计算得到的 $<x^2>, <y^2>$, $<x^2+y^2>$ 分别是 900，2500，3400。 其中 x 方向的误差 达到了将近 50%。相空间中的 Markov 点链分布见所示。

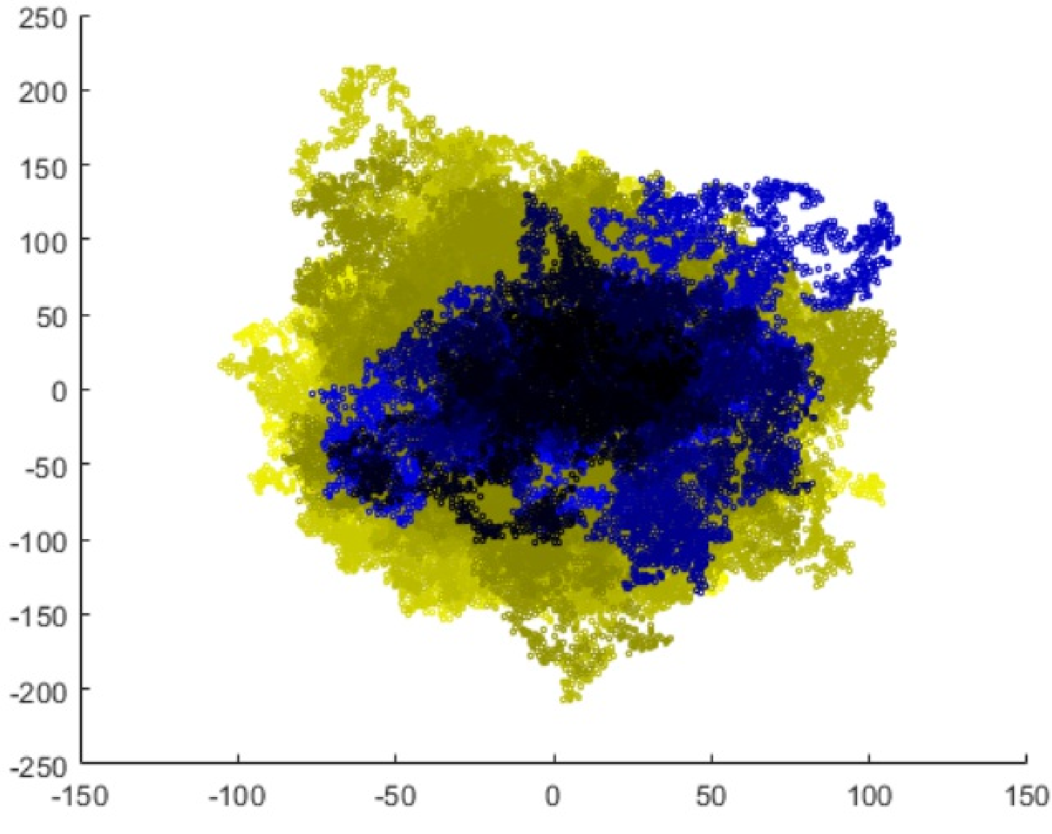


fig.5.$\beta = 0.01$条件下的 Markov 点链图

其中颜色由浅到深代表模拟点生成的先后顺序，即颜色越浅的点是越开始生成的点。黄色-深黄色的点是热化处理过程生成的点链，而蓝色-黑色的点是用于统计计算的点链。

3.4 $\beta = 1000$

接下来，我们选取 β 值为 1000，模拟得到的 $<x^2>, <y^2>, <x^2+y^2>$ 的值分别是 9.733×10^{-3}，2.738×10^{-2}，3.712×10^{-2}。

理论计算得到的 $<x^2>, <y^2>, <x^2+y^2>$ 分别是 9×10^{-3}，2.5×10^{-2}，3.4×10^{-2}，相对误差总体较小。相空间的 Markov 点链分布如 fig.6.

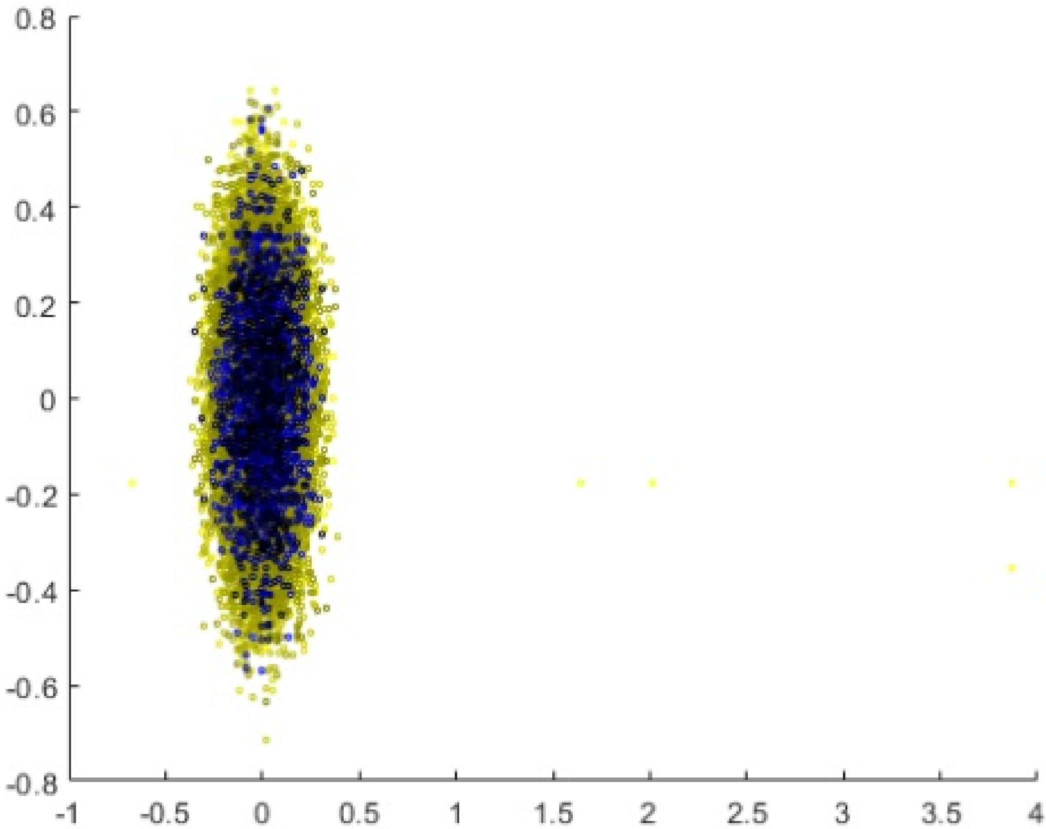


Fig.6.$\beta = 1000$条件下的 Markov 点链图

其中颜色由浅到深代表模拟点生成的先后顺序，即颜色越浅的点是越开始生成的点。黄色-深黄色的点是热化处理过程生成的点链，而蓝色-黑色的点是用于统计计算的点链。

Markov 点链的生成分布也基本上围绕着系统的等势线进行。这说明相比于极端高温条件下，Metropolis 重要抽样方法对低温系统的模拟更精确一些。

由本节的讨论可以，在固定$\Delta x, \Delta y$ 的情况下对正则系综进行模拟时，需要考虑到 β值的选取对模拟结果的影响。

如果β值的选取过小，则系统会产生较大的误差，通过errorbar的计算和观测可知 体系的涨落较大。

β值过大时模拟结果的平均值与理论值相差较小， 但模拟结果的errorbar较大，即说明体系的涨落较大。

4 总结

在本次实验中，我们针对给定的哈密顿量，成功进行了 Metropolis 重要抽样方法模拟， 并探讨了模拟准确度和模拟参数 Δx,Δy即λ以及β的关系。

我们得出结论:

在β值一定的情况下,Δx,Δy过小会使模拟结果产生非常大的偏差,

在$\Delta x, \Delta y$一定的情况下,β值过小也会对模拟结果产生很大偏差。

我们进一步说明产生这两种误差的机制实际上是相同的。

另一方面，当β值过大时,系统受到的影响却相对较小。

这里也有一些更有趣的问题,我们提到过$\Delta x, \Delta y$过小以及β过小对系统造成误差的机制是相同的，这似乎暗示着$\Delta x, \Delta y$有某种类似于温度的性质，影响了Markov Chain的涨落和更新的接受率。