

20：用demon方法抽取微正则系综

许传奇 PB16021546

1 题目

考虑一维经典粒子组成的理想气体，由于无相互作用，各粒子的能量不依赖于其位置，只考虑它的动能，因此体系的构型即是各粒子速度坐标值的集合。给定粒子的质量、初始速度、总粒子数、总能、demon能，模拟足够多步后达到平衡时的粒子速度分布。微正则系综中没有定义温度，其数值由 $\frac{1}{2}kT = \frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle$ 给出，求平衡时的温度值。

2 原理与算法

2.1 原理

2.1.1 Markov链

当满足条件：

$$p_n(x_1, \dots, x_n; t_1, \dots, t_n) = p_n(x_1, \dots, x_n; t_1 + t, \dots, t_n + t) \quad (1)$$

时，称随机过程是平稳的，这时的起点是无关紧要的。

我们称一个平稳的随机序列Markov的，如果某一时刻x取值的条件几率是独立于上一时刻之前的所有x值的话，即：

$$p(x_n | x_{n-1}, \dots, x_1) = p(x_n | x_{n-1}) \quad (2)$$

该式表示，某一步的结果仅仅依赖于上一步，与更前面的历史无关，对应的态序列 (x_1, \dots, x_n) 称为Markov链。

Markov链的极限分布是与初始分布的选择无关的，仅取决于转移概率。设达到平衡后各个状态的概率组成的向量为**p**，跃迁矩阵为**W**，则达到平衡后，应有：

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}\mathbf{W} \quad (3)$$

$$p_i = \sum_j p_j W_{ji} \quad (4)$$

2.1.2 Metropolis抽样法

Metropolis方法的实际做法有点像舍选法，设 $p(x)$ 为所考虑的几率密度分布，并且已经产生了 x_1, x_2, \dots, x_n 个抽样点，现在的问题是如何产生下一个抽样点 x_{n+1} ？

可以在上一个点附近构造一个试探解， $x_t = x_n + \delta$ ， δ 是试探步长（可正可负，例如可取 $\delta = (\xi - 0.5)\Delta x$ ， Δx 是固定步长， $\xi \in (0, 1)$ 是均匀分布的随机数），该点是否被选择取决于比值 $r = p(x_t)/p(x_n)$ ：

1. 如果 $r > 1$ 则选取，即 $x_{n+1} = x_t$ ($r > 1$)。
2. 否则，产生 $[0, 1]$ 区间内均匀分布的随机数 ξ ，如果 $\xi < r$ 则选取；也即，使得 $x_{n+1} = x_t$ ($r < 1$) 的选取概率为 r 。否则，放弃；即 $x_{n+1} = x_n$ 。

通过 Metropolis 算法可以产生大量离散的 x 值，构成 Markov 链。其中序列中热化过程的前 M 个构型被舍去。注意在计算体系系综统计平均时，需要将所有有效步数统计在内（不包括热化阶段）而不能只保留选取成功的步数和构型，如第 i 个构型计算出物理量的值为 A_i ，则系综平均为：

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N-M} \sum_{i=M+1}^N A_i \quad (5)$$

2.1.3 利用 Metropolis 算法抽取微正则系综

Creutz 等开发了一个效率较好的微正则系综 Monte Carlo 模拟方法，它不使用随机数来确定某步 Monte Carlo 移动是否接受，而是用以下方式来实现。

将所考虑的体系附加一个外部自由度，由于历史的原因该外部自由度被称为 demon，小鬼在力学体系中来回游荡，和体系交换能量从而改变体系的力学变量。如果体系的能量减小的话，小鬼拿走这部分能量；体系的能量要增加的话，如果小鬼手里握有足够的能量，它把这部分能量又交还给体系。唯一需要满足的条件是小鬼的能量不能为负。

对于经典粒子体系，其具体算法是：设体系的初始构型是 x_0 ，势能是 $U(x_0)$ ，把此体系的总能量固定在某个值 E 上，附加自由度是体系能量的剩余部分（小鬼的能量）， $E_d = E - U$ ，它应总是非负值，这时开始 Monte Carlo 步骤：

1. 随机选择一个粒子进行尝试，形成一个新构型 x_1 ，计算体系的能量变化， $\Delta U = U(x_1) - U(x_0)$ 。
2. 如果 $\Delta U < 0$ ，即体系的能量降低的话，接受该步移动，将 $|\Delta U|$ 交给 demon，即 $E_d \rightarrow E_d + |\Delta U| = E_d - \Delta U$ 。
3. 如果 $\Delta U > 0$ ，即体系的能量增加的话，检查 demon 是否能提供这部分能量（即 $E_d > \Delta U$ ？）：是，则接受该步移动，且 $E_d \rightarrow E_d - \Delta U$ ；否，则拒绝此尝试，系统保持原构型不变， E_d 值也不变。

在足够多的步数后，力学体系和 demon 各自达到平衡， E_d 的分布也服从 Boltzmann 几率分布，即：

$$p(E_d) \propto \exp(-\beta E_d) \quad (6)$$

而大体系的总能保持为 E 不变。由于力学体系是个多自由度的系统，相比而言 demon 只有一个自由度，因此力学体系能量的涨落非常小，为 $1/\sqrt{N}$ 量级，可认为是很好地代表了一个微正则系综。

2.1.4 题目的理论推导

题中给的微正则系综，在平衡状态下，可以认为系综中的粒子分布遵循一维 Maxwell 分布，即：

$$p(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) \quad (7)$$

因此系统的能量为：

$$E_T = N \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} mv^2 p(v) dv = \frac{NkT}{2} \quad (8)$$

定义该微正则系综的温度为:

$$\frac{1}{2}kT = \frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle \quad (9)$$

可以得到温度为:

$$T = \frac{2E_T}{kN} = \frac{m\langle v^2 \rangle}{k} \quad (10)$$

2.2 算法

根据原理部分所述的微正则系综Metropolis算法即可。

对于该系综，需要选择总次数N和热化阶段的次数M。不失一般性，可以设置粒子的质量 $m = 1$ ，所有粒子的速度都为 $v = 1$ ，初始时demon的能量设为 $E_d = 0$ 。

算法的过程如下：

1. 设当前系统的能量为 H_n ，随机生成 $[1, num]$ 中的一个整数*i*，表示选择第*i*个粒子进行改变。
2. 随机生成 $[-1, 1]$ 上的随机数 ξ ，对粒子的速度进行改变，即 $v_t = v_n + \xi\delta$ ，计算改变后的系统能量为 $H_t = H_n + \frac{1}{2}m(v_t^2 - v_n^2)$ 。
3. 判断 H_t 与 H_n 的关系：
 - (a) 如果 $H_t < H_n$ ，即系综能量下降，则接受此次尝试，即 $H_{n+1} = H_t$ 。同时，将减少的能量给demon，即 $E_d = E_d + H_n - H_{n+1}$ 。
 - (b) 如果 $H_t > H_n$ ，即系综能量上升，需要检查demon是否有足够的能量：
 - i. 如果 $E_d > H_t - H_n$ ，则demon有足够的能量给系综，接受此次尝试，即 $H_{n+1} = H_t$ 。同时，将demon能量减少，即 $E_d = E_d + H_n - H_{n+1}$ ；
 - ii. 如果 $E_d < H_t - H_n$ ，则demon没有足够的能量给系综，不接受此次尝试，即 $H_{n+1} = H_n$ 。
4. 若达到规定的迭代次数，则退出；否则返回第一步。

迭代完成后的速度输出并绘图，可以得到粒子速度分布。

同时，计算出速度平方的期望值，即：

$$\langle v^2 \rangle = \frac{1}{N-M} \sum_{i=M+1}^N v_i^2 \quad (11)$$

根据此系统的温度定义，可以求出温度为：

$$T = \frac{m\langle v^2 \rangle}{k} \quad (12)$$

3 源文件使用说明

编译并运行“20_Demon.cpp”，将弹出命令行，按要求输入总的粒子数和步长，程序将运行。

输入数据后，程序运行并将热化阶段后每步的demon的能量输入到“demon_energy.txt”中，或者将每步的温度输入到文件“T.txt”中，同时将每个粒子的速度和速度的期望、速度的平方的期望和速度的方差输入到文件“vs.txt”中。

4 计算结果及具体分析

4.1 平衡态时的粒子速度分布

粒子的质量设为1，初始速度全部设为1，总粒子数为10000，demon能初始设为0。总步数设为100000000，热化步数设为1000000。

理论上粒子平衡态的分布应该为高斯分布。对于给定的初始条件，有：

$$\frac{E_T}{N} = 0.5 \Rightarrow T = 1 \cdot \frac{1}{k} \quad (13)$$

这个条件下粒子速度在理论上的分布为标准正态分布，即：

$$f(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v^2}{2}} \quad (14)$$

100000000步后，粒子的速度分布如下图所示：

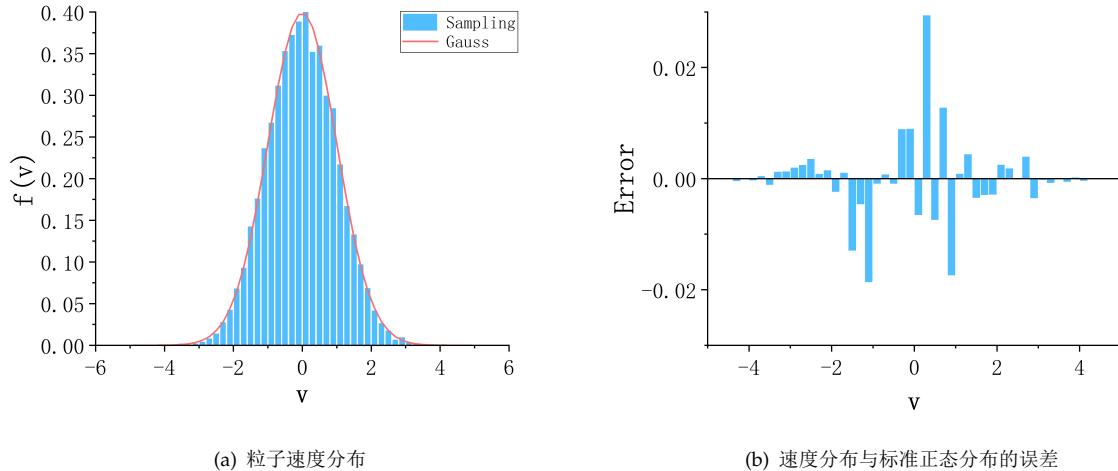


图 1: 100000000步后粒子的速度分布

可见与标准正态分布符合得较好。

4.2 平衡时的温度值

平衡时的温度值由 $\langle v^2 \rangle$ 给出：

$$T = \frac{m\langle v^2 \rangle}{k} = 0.999895 \cdot \frac{1}{k} \quad (15)$$

与理论值 $T = 1$ 的误差为：

$$\eta = 0.0105\% \quad (16)$$

可见误差非常小。

取前10000000次的温度值和与标准值的误差如下：

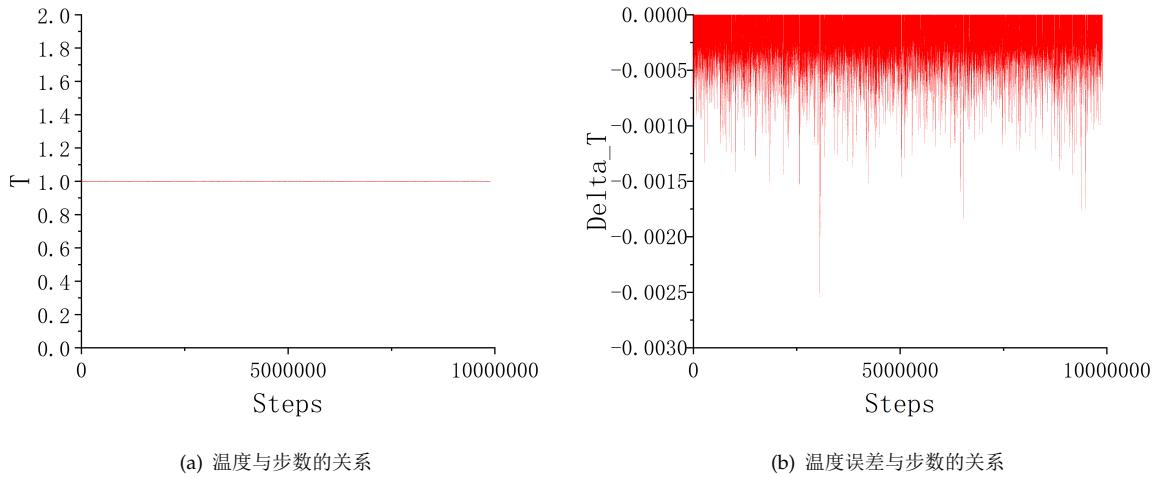


图 2: 温度与步数的关系

可以看到温度基本上不变，维持在1左右。误差最大不超过0.003，在 $1/\sqrt{N} = 0.01$ 量级内。

5 讨论

5.1 抽样值与理论值的偏差

由于Demon的能量非负，因此系综的能量要小于初始值，即温度要小于理论值。但这个误差极小，不会超过 $1/\sqrt{N}$ 的量级。

这个误差也可以消除：添加demon来抽取微正则系综后，若将demon和系综看做一个新的系统，则这个系统比原来的系综要多两个自由度。因此乘上修正因子就可以减小这部分误差，即：

$$T' = \frac{N+2}{N} \cdot T \quad (17)$$

对于本次模拟中的结果，有：

$$T' = \frac{N+2}{N} \cdot T = \frac{10002}{10000} \times 0.999895 \approx 1.000093 \quad (18)$$

5.2 迭代次数对模拟的影响

运行的迭代次数需要足够多，否则并不是平衡状态。如下图所示，是迭代次数不同时的图像，初始条件同样设置为：粒子的质量设为1，初始速度全部设为1，总粒子数为10000，demon能初始设为0。

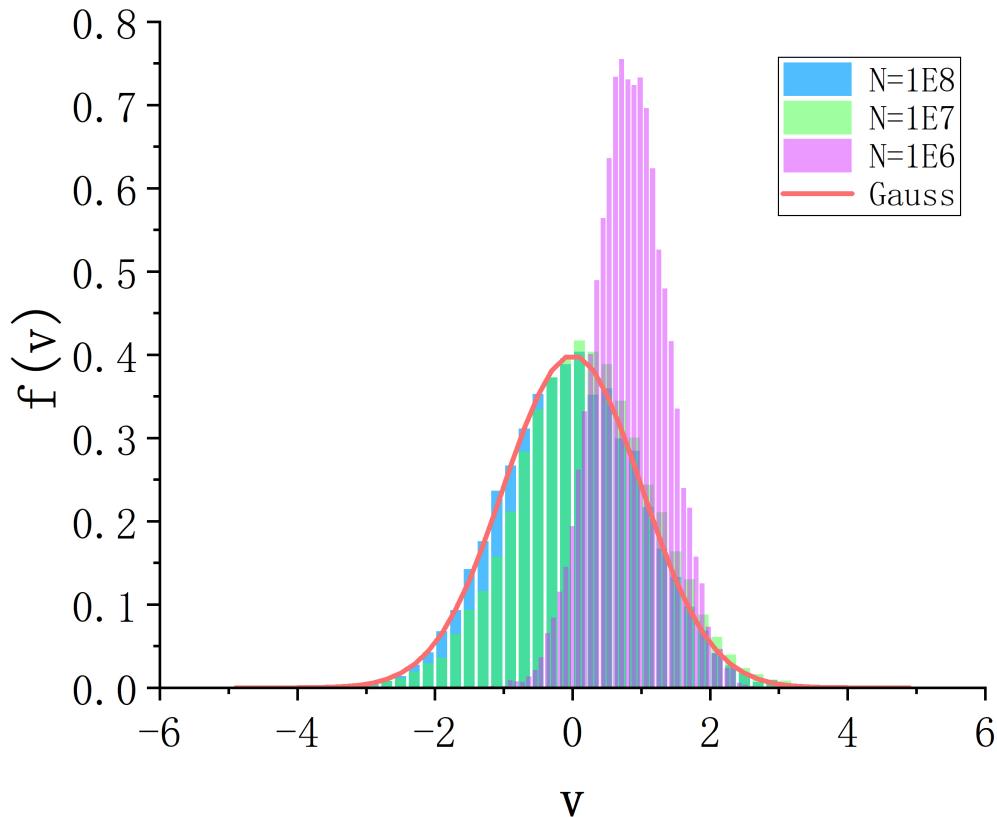


图 3: 不同步数下的速度分布

可见不同步数下的速度分布也不同，即便已经迭代1E6次，仍然与标准正态分布相差较大。

由于初始的速度全部设置为1，因此速度分布可以看成是 $\delta(v - 1)$ ，然后随着迭代次数的增加，函数中心逐渐向左移，同时逐渐散开。对应统计学上的描述就是速度的期望逐渐减小，方差逐渐变大，直到越来越接近标准正态分布的 $\mu = 0, \sigma = 1$ 。

当然，这里所说的标准正态分布是鉴于初始能量的均值 $\langle E_0 \rangle = 0.5$ 而言的，如果初始能量的均值不同，平衡态下的速度分布不是标准正态分布，但仍是期望为0的正态分布，对应的标准差为 $\sigma = \sqrt{kT}$ 。

5.3 Demon的能量

由图知，Demon的能量不会维持在一个稳定的值，但最大值也只有十几，与平衡时系统的总能量 $E \approx 5000$ 相比很小，不超过 $1/\sqrt{N} = 1/100$ 的量级。

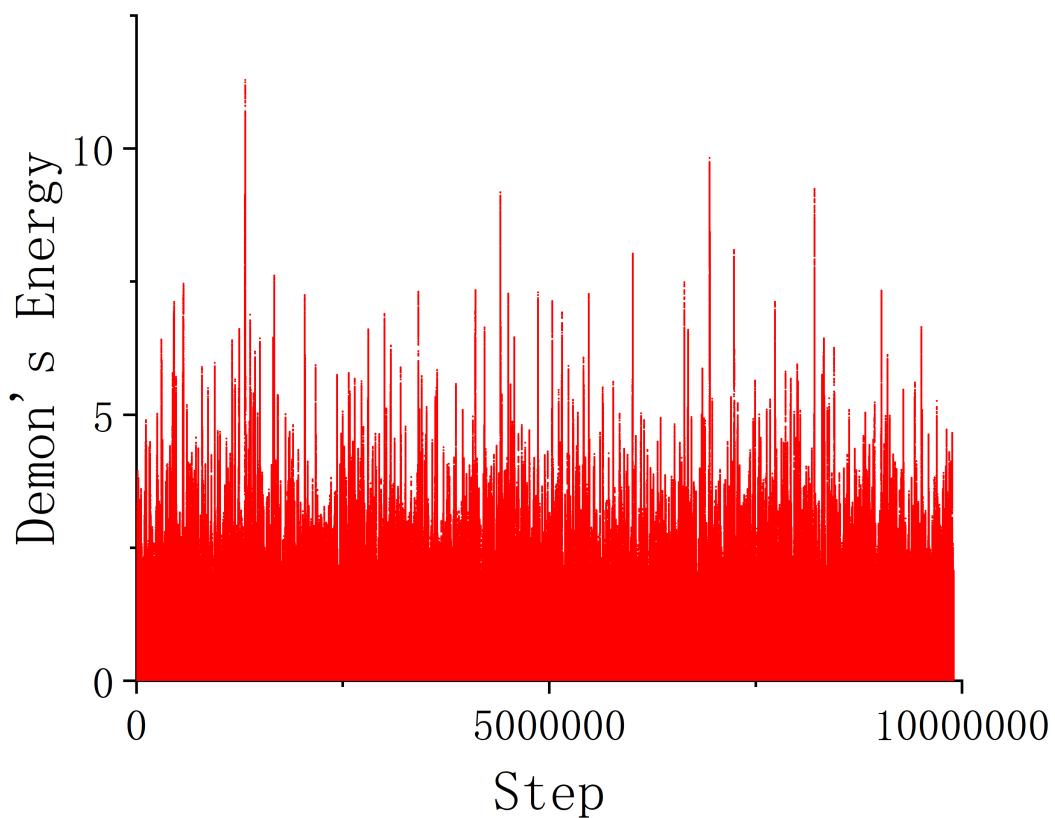


图 4: Demon的能量与步数的关系

5.4 初始能量的选择

不管怎么设置初始的demon能量和系综各个粒子的初速度，只要初始时给定系统的总能量（系综的能量加上demon的能量），系综中的粒子最后的分布和温度不会改变。

作为一个简单的验证的粒子，给出下面这种初始状态的选择。

若设置初始的速度都为0，但Demon的初始能量设置5000，即维持初始时系统的能量与之前的选取方法一样。得到的速度分布仍然是标准正态分布，得到的温度为0.99905，也基本与标准值一致。

对应的速度分布和demon的能量与步数的关系如下图所示：

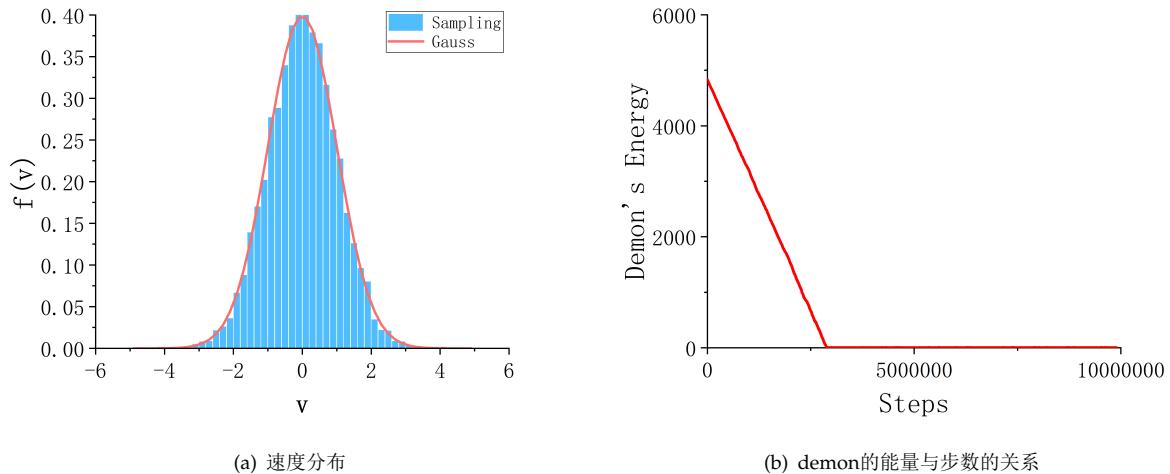


图 5: 不同抽样的图样

可以看到demon的能量基本上是以直线下降到0左右。

5.5 迭代步长的选择

迭代的步长也会影响程序运行的情况。

在理论上可知，如果迭代步长太小的话，系统变化得十分缓慢，会延长程序运行到平衡态的时间；而迭代步长太大的话，则系统运动过于剧烈，离散性更大，与真实情况相差较大。同时，系统接收的概率也会减小，这也增加了程序的运行时间和效率。

因此需要选择合适的步长，这是从选择上提高程序运行效率的方法。

6 总结

本次作业用demon方法抽取了微正则系综。

正则系综可以直接用Metropolis算法进行抽样，但对于微正则系综，现实生活中几乎不存在这样的体系，抽取也十分困难，因此用demon方法对Metropolis算法进行改造，抽取了微正则系综。

由实验的结果可知，最后抽样得到的速度分布符合正态分布，而温度与初始给定的状态有关。

由讨论知，由于demon能量的非负性，系统最后的温度会小于理论值；抽取时对热化过程的步数和总步数的选取对系综最后的抽样十分关键，否则很可能没有抽取想要的系综；只要初始时demon的能量和系综的能量的总和给定，最后的速度分布和温度与初始时两者的设置无关。