HW9 第 15 题 Markov 链 2 维模拟

王启骅 PB20020580

2022 年 11 月 26 日

1 题目

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 $\beta=0.2,\ 1, 15$ ，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 算法原理

对于正则系统，有分布

$$p(x,y)=\frac{1}{Z}\exp[-\beta H(x,y)] \tag{1}$$

其中配分函数

$$Z=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-\beta H)dxdy \tag{2}$$

对于求解平均值

$$\langle x^2\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2\ p(x,y)\ dxdy \tag{3}$$

$$\langle y^2\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}y^2\ p(x,y)\ dxdy \tag{4}$$

$$\langle x^2+y^2\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}(x^2+y^2)\ p(x,y)\ dxdy \tag{5}$$

进行 metropolis 方法抽样模拟 Markov 链，首先选取初始坐标 (x_0,y_0), 从此开始游走。抽取 [0,1] 均匀分布的随机数 ξ, 则每次随机行走的位移 $\delta=(\xi-0.5)\Delta$, 接受该移动的几率为

$$p_\alpha=\min\{1,\exp[-\beta(H_1-H_0)]\} \tag{6}$$

领取一个新的随机数 $\xi>p_\alpha$ 时，拒受该构型，保持原构型不变，否则接受。每次记录新随机游走点的坐标，进行平均值求解。

$$\langle A\rangle=\frac{1}{n-m}\sum_{m+1}^{n}A \tag{7}$$

其中前 m 为热化过程舍去。

3 结果

这里取用 n=10^6 个点进行模拟，取前 $m = 10^5$ 作为热化过程。并取每次位移距离 $\Delta = 2$。

3.1 $\beta = 0.2$

计算得到结果

$$\langle x^2 \rangle = 1.5732543080442860 \tag{8}$$

$$\langle x^2 \rangle = 1.5621809210996516 \tag{9}$$

$$\langle x^2 + y^2 \rangle = 3.1354352291439378 \tag{10}$$

对比计算得到标准结果为

$$\langle x^2 \rangle_{standard} = \langle y^2 \rangle_{standard} = 1.561886003600077 \tag{11}$$

$$\langle x^2 + y^2 \rangle_{standard} = 3.123771904782158 \tag{12}$$

二维 Markov 链如图1

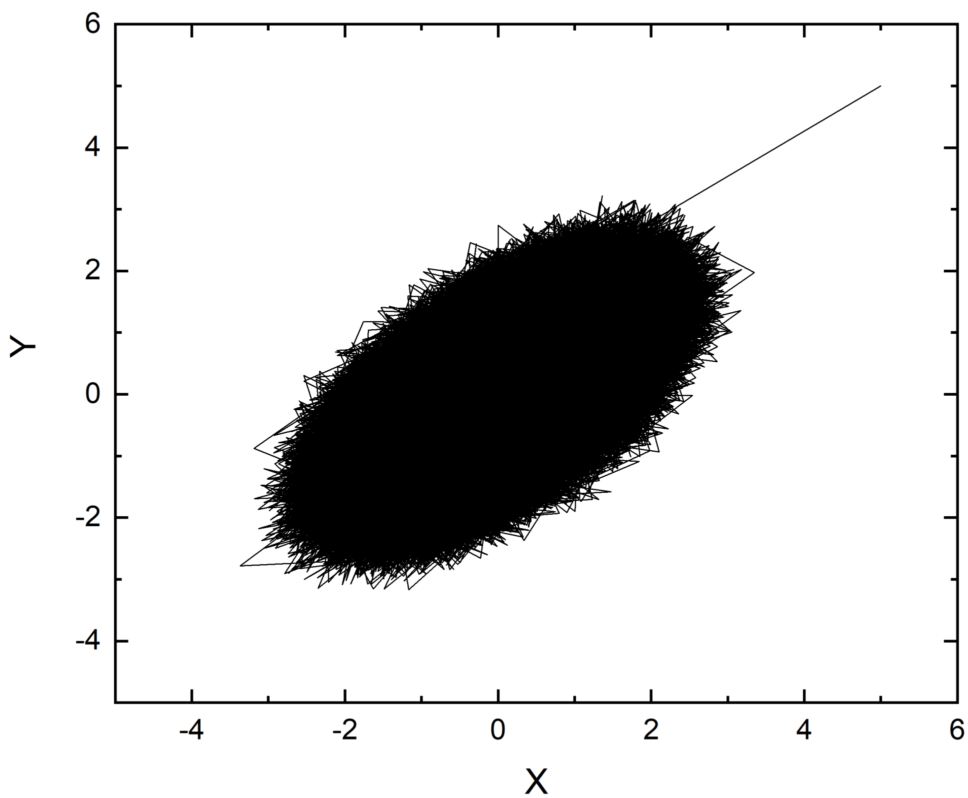

图 1: $\beta = 0.2$ **下** Markov **链**

3.2 $\beta = 1$

计算得到结果

$$\langle x^2 \rangle = 1.6802036533334823 \tag{13}$$

$$\langle x^2 \rangle = 1.6872743155871015 \tag{14}$$

$$\langle x^2 + y^2 \rangle = 3.3674779689205838 \tag{15}$$

对比计算得到标准结果为

$$\langle x^2 \rangle_{standard} = \langle y^2 \rangle_{standard} = 1.682470341271205 \tag{16}$$

$$\langle x^2 + y^2 \rangle_{standard} = 3.364940624409566 \tag{17}$$

二维 Markov 链如图2

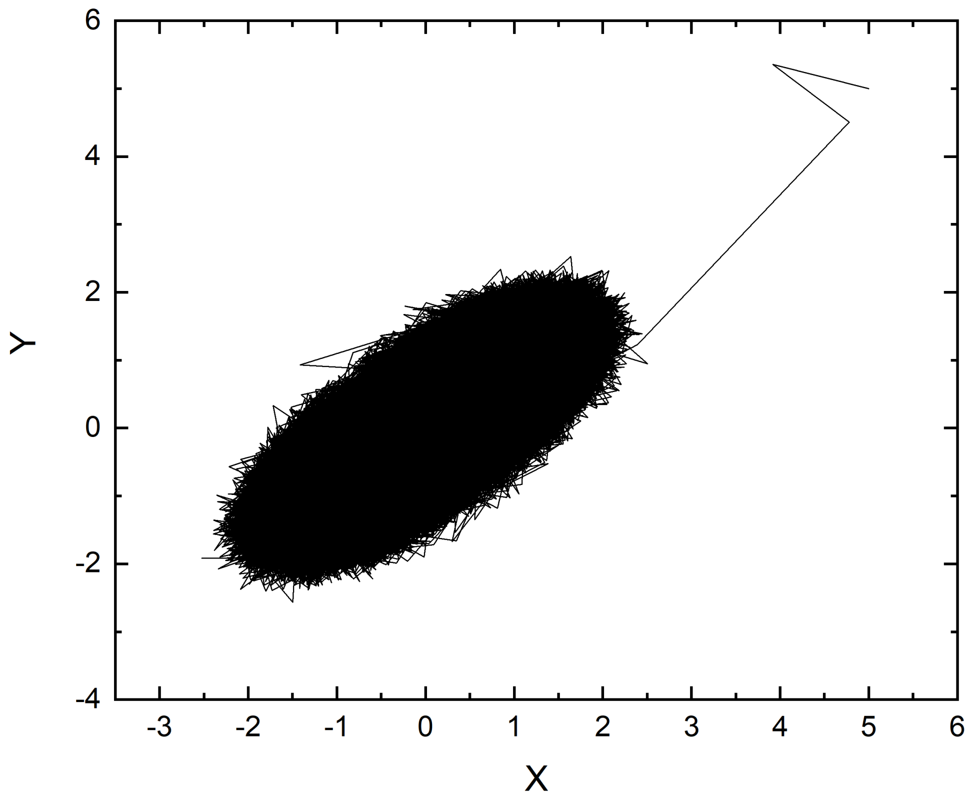

图 2: $\beta = 1$ 下 Markov 链

3.3 $\beta = 5$

计算得到结果

$$\langle x^2 \rangle = 1.9495791449383584 \tag{18}$$

$$\langle x^2 \rangle = 1.9467188325009992 \tag{19}$$

$$\langle x^2 + y^2 \rangle = 3.8962979774393576 \tag{20}$$

对比计算得到标准结果为

$$\langle x^2 \rangle_{standard} = \langle y^2 \rangle_{standard} = 1.947830003176043 \tag{21}$$

$$\langle x^2 + y^2 \rangle_{standard} = 3.895659879435674 \tag{22}$$

二维 Markov 链如图3

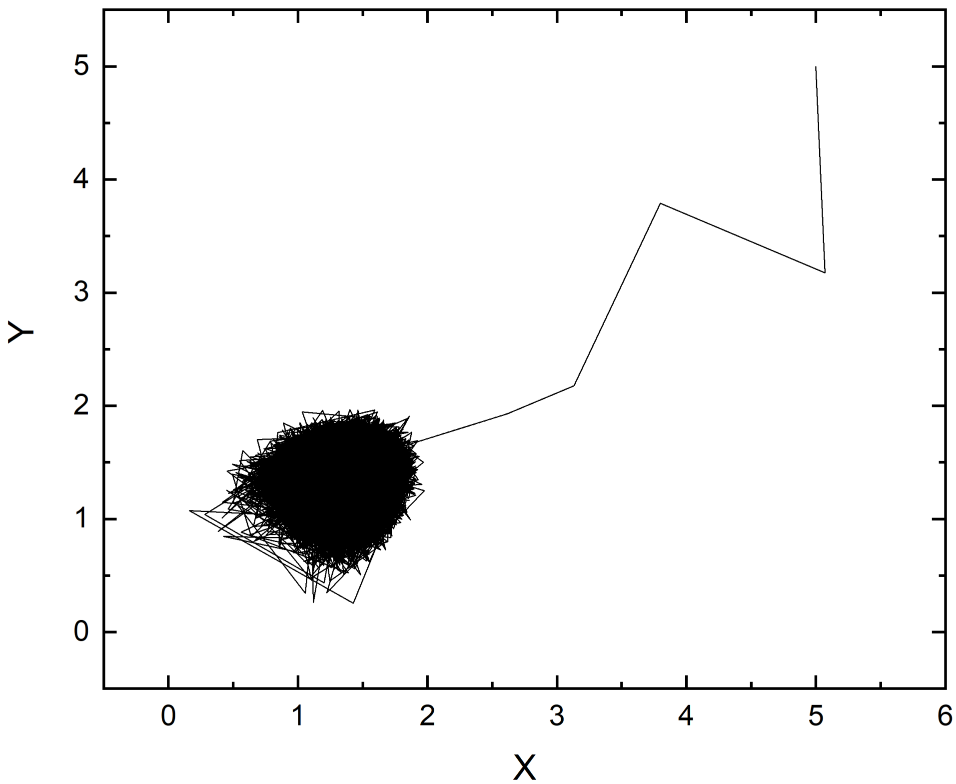

图 3: $\beta = 5$ **下 Markov 链**

3.4 误差分析

这里计算的平均值于标准期望值对比，具有 2-3 位有效数字的精度，考虑到程序运行时间问题只取了 $n = 10^6$ 个点，如果进一步增大取点数量级，可以达到更高精确度。

接下来进行通过改变模拟的步数得到计算结果于真实值的绝对误差。模拟计算值的绝对误差为 $|\langle A \rangle - \langle A \rangle_{standard}|$。

取 $\beta = 0.2$ 情况下。得到结果如图4

取 $\beta = 1$ 情况下。得到结果如图5 取 $\beta = 5$ 情况下。得到结果如图6 由图可见，在 $n = 10 - 10^3$ 误差迅速下降，从当 n>10^4 后绝对误差趋近于 0，基本没有太大变化。

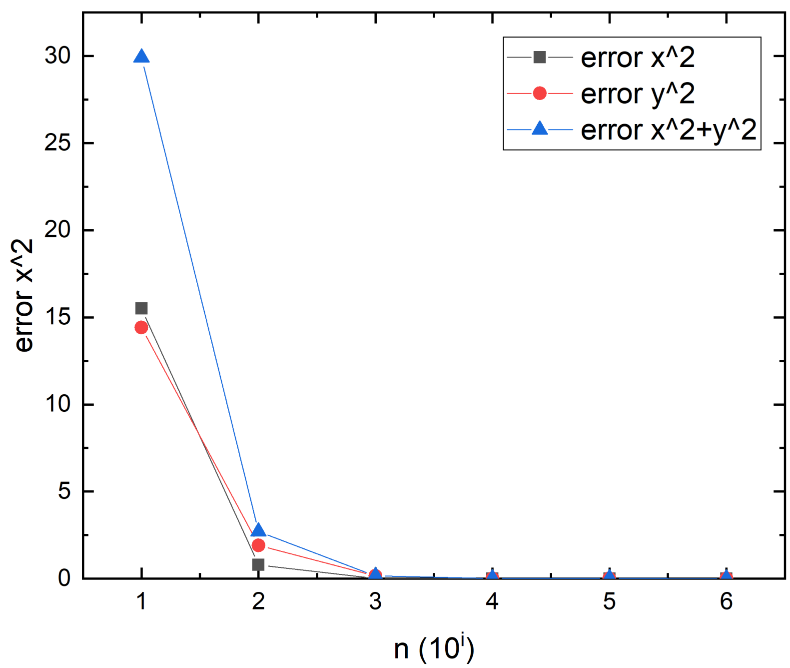

图 4: $\beta = 0.2$ 下平均值绝对误差随模拟步数变化

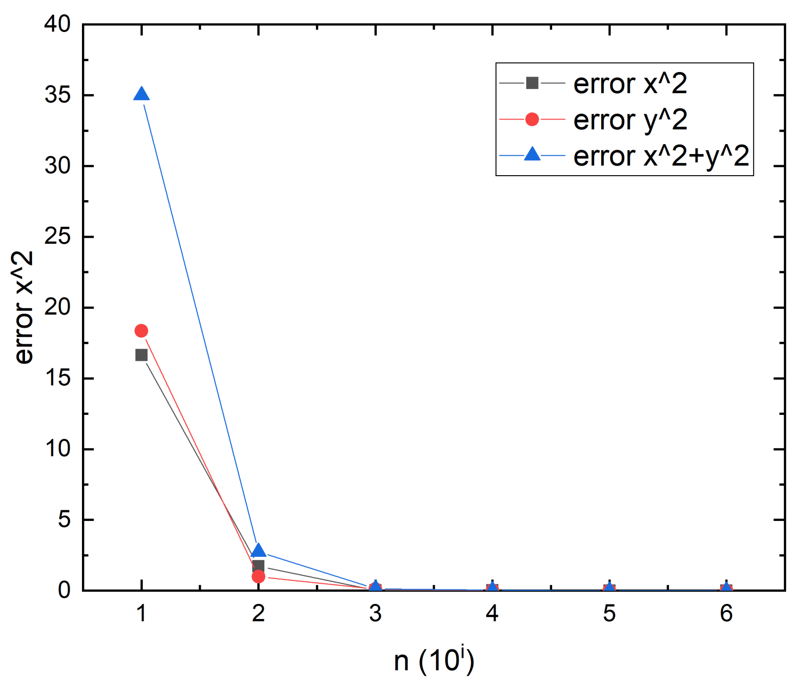

图 5: $\beta = 1$ 下平均值绝对误差随模拟步数变化

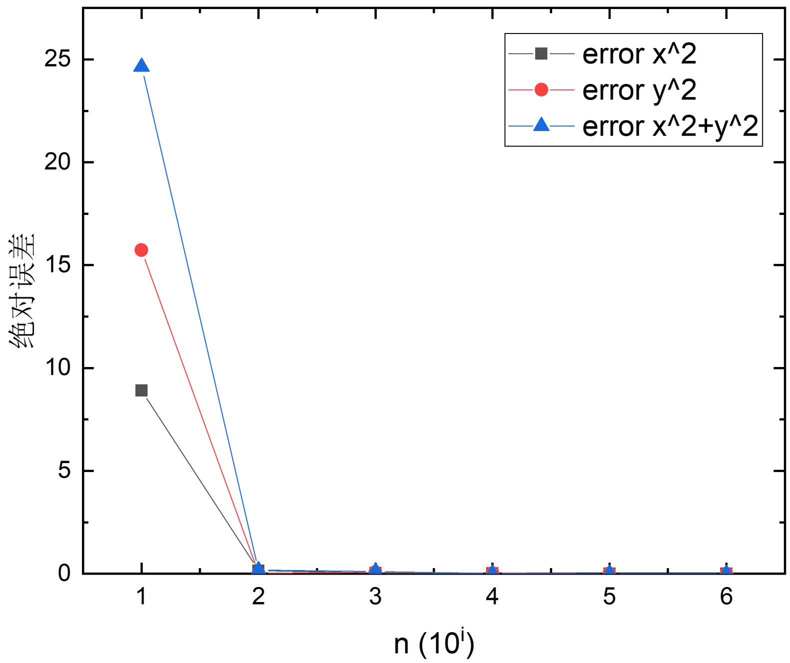

图 6: $\beta = 5$ **下平均值绝对误差随模拟步数变化**

4 结论

根据模拟结果与误差分析结果可以看出，随着 β 逐渐增大，明显 Markov 链收敛于能量最低点的速率加快，而且在最低点附近游走的范围较小。这是由于 β 增大导致游走到新的能量更高的点的概率明显减小，导致每次游走基本只向能量趋于更低的方向前进或者停留不动，导致 Markov 链有较快的收敛。