计算物理A第十五次作业

王铠泽　　PB18020766

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$\langle x^2\rangle$，$\langle y^2\rangle$，$\langle x^2+y^2\rangle$ ，并与解析结果进行比较。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　实现方法和原理

- $Metropolis$抽样方法

  本次实验中，设$\sigma_x = \sigma_y = 1$

  理论上解析计算得到:

$$\langle x^2\rangle = \frac{1}{Z}\int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dx\, exp\left(-\frac{x^2}{2}-\frac{y^2}{2}\right)x^2$$

其中Z为配分函数，其数值为：

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dx\, exp\left(-\frac{x^2}{2}-\frac{y^2}{2}\right) = 2\pi$$

$$\Rightarrow \langle x^2\rangle = 1$$

同理得到：

$$\langle y^2\rangle = 1, \langle x^2+y^2\rangle = 2$$

采用正则系统的$Boltzmann$分布作为平衡构型时的分布。所以从(x,y)过渡到(x',y')的概率为:

$$p(\vec{x}\rightarrow\vec{x'}) = min\{1, exp(\frac{x^2/2\sigma_x^2 + y^2/2\sigma_y^2}{x'^2/2\sigma_x^2 + y'^2/2\sigma_y^2})\}$$

算法基本描述：

本次实验采用每次在原来位置上随机抽取$[-A,A]$上的随机数作为dx、dy，进行概率判断。若能量降低，则前进概率等于1，直接进入下一个状态。若概率小于1，则再次生成$[0,1]$中的随机数r，若$r < exp(\frac{\Delta E}{kT})$，则刷新状态，进行下一步，否则就维持原样。

最后注意：采用$Metropolis$抽样计算系综平均时要去掉热化阶段：

$$\langle X\rangle = \frac{1}{N-M}\sum_{i=M+1}^{N} X_i$$

3 程式说明

- metropolis.c

  这是一个对于用于生成对于$N = 10^6$步数的$Metropolis$抽样计算积分的误差评估的程序。

- rdm.h

  这是一个包含了使用16807产生器生成指定长度的$[0, 1]$上均匀分布随机数函数的头文件。

  void rdm(int N,double *x,int method)

  该函数将输入的指针x对应的长度为N的数组用$[0, 1]$上的随机数填满。method是关于初始种子的选择。method=0:默认种子;method=1,时间种子。

- time_seed(gamma range).txt

  对于括号内标识的γ取值范围对应使用的时间种子文件。注意在程式中生成随机数时，一组随机数使用时间种子，另一组采用默认种子值(I=1)。16807产生器抽样时对应的时间种子数据(每次1个种子)。调用多少次16807生成器就生成多少个数据记录。每一个分布对应的种子已经手动加上对应的实验了。种子产生公式如下:

  年: $0 \le i_y \le 99$， 月: $1 \le i_m \le 12$， 日: $1 \le i_d \le 31$

  时: $0 \le i_h \le 23$， 分: $0 \le i_n \le 59$， 秒: $0 \le i_s \le 59$

  则可设种子值为: $I_0 = i_y + 70\left(i_m + 12\left\{i_d + 31\left[i_h + 23\left(i_n + 59 i_s\right)\right]\right\}\right)$，它的值约在区间$\left[0, 2^{31}-1\right]$内，第二部分的括号在100年内不会重复。

4 计算结果

4.1 不同步长下的平均值计算

本次实验中，采取总步长$N = 10^6$，热化步长$M = 10^4$。为了探究不同行走步长A对结果的影响，对其取值如下：

$$A = 0.001, 0.002, 0.005, 0.01, 0.04, 0.08, 0.1, 0.5, 1, 2, 4, 10, 100$$

由此得到的$\langle x^2\rangle, \langle y^2\rangle, \langle x^2 + y^2\rangle$列表如下：

系综平均N	$A = 0.001$	$A = 0.002$	$A = 0.005$	$A = 0.01$	$A = 0.04$	$A = 0.08$
$\langle x^2\rangle$	59.965622	42.503714	9.911649	3.336977	0.916165	0.983122
$\langle y^2\rangle$	31.747700	21.228011	4.922366	1.654147	0.899795	0.930838
$\langle x^2 + y^2\rangle$	91.713322	63.731725	14.834015	4.991124	1.815960	1.913960

表 1: $A = 0.01 \sim 0.08$系综平均计算表格

系综平均N	$A=0.1$	$A=0.5$	$A=1$	$A=2$	$A=4$	$A=10$	$A=100$
$\langle x^2 \rangle$	0.999358	1.002436	1.000011	0.998231	1.000731	1.005191	1.049830
$\langle y^2 \rangle$	0.950428	1.010010	1.000383	0.995312	1.001040	1.001623	1.045211
$\langle x^2+y^2 \rangle$	1.949786	2.012446	2.000394	1.993542	2.001770	2.006814	2.095041

表 2: $A=0.1\sim100$系综平均计算表格

从上面的表格可以看出，系综平均的计算值误差随步长并不是单调的关系。步长过小/过大都不能得到很好的结果，这将在稍后继续讨论。我们的模拟方法存在一个“最佳步长”，不至于太小，走不到理想分布；也不至于太大，每一步的涨落太大，这13个值中最佳的是$A=0.04$。下面给出$\langle x^2+y^2 \rangle$的误差表格以更加直观地表述上面的观点。

步长	误差ϵ
$A=0.001$	89.713322
$A=0.002$	61.731725
$A=0.005$	12.834015
$A=0.01$	2.991124
$A=0.04$	0.184040
$A=0.08$	0.086040
$A=0.1$	0.050214
$A=0.5$	0.012446
$A=1$	0.000394
$A=2$	0.006458
$A=4$	0.001770
$A=10$	0.006814
$A=100$	0.095041

表 3: $A=0.01\sim100$系综平均误差表格

将误差-步长曲线绘制如下(由于取值范围跨度较大，取用对数坐标)：

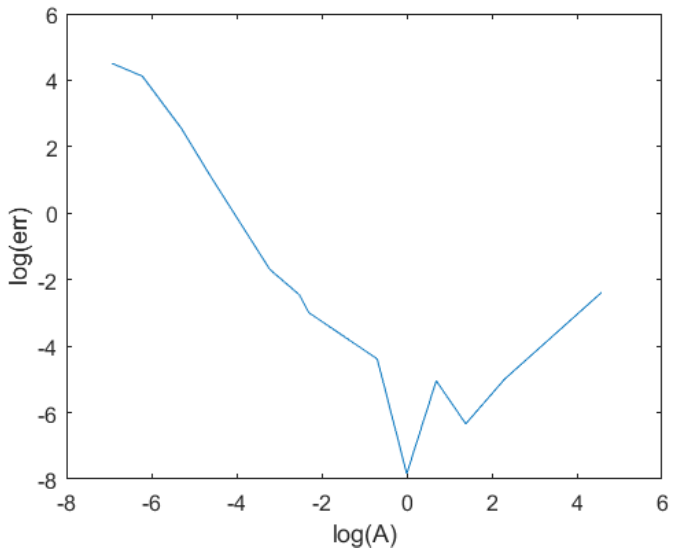


图 1: 误差曲线

显然在$A=1$附近会存在极小值，过大或过小步长误差会增大，特别是小步长。还可以从$Markov$链抽样出来的x最终分布的形态来观察是否达到良好的平衡构型，得到准确的结果。理论上，平衡态时，x,y的边缘分布都是$\sigma=1$的高斯分布。下面分别给出$A=0.001$(小步长),$A=1$(恰当步长),$A=10$(大步长)，$A=100$(巨大步长)的x直方图统计情况。我们在下一小节中集中讨论这些问题。

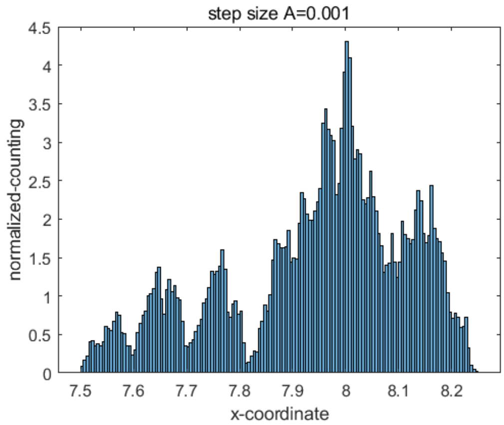
5 $Markov$链的进一步讨论

首先给出热化之后的x分布直方图：

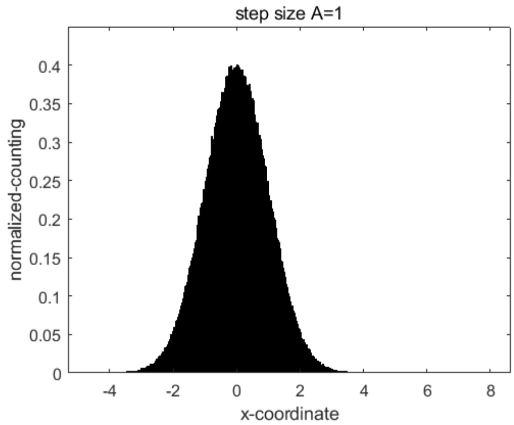
从图上可以看出，当步长过小或者过大时分布都不是那么理想，特别是步长小的时候，就算用尽了$N=10^6$步，看起来似乎离平衡位置还很远。并且可以看到小步长的概率密度图上有很多个小峰状结构，这是由于步长太小，倾向于在一个地方“打转”的可能性变大了，所以出现一系列峰。

至于在步长很大($A=100$)的时候，分布倒是已经体现出正态分布的雏形了，对称性也基本具备，但是由于步数不够多，还不够得到平衡时的理想构型。从$(b),(c),(d)$三图能明显看出分布被步长变大破坏的过程。

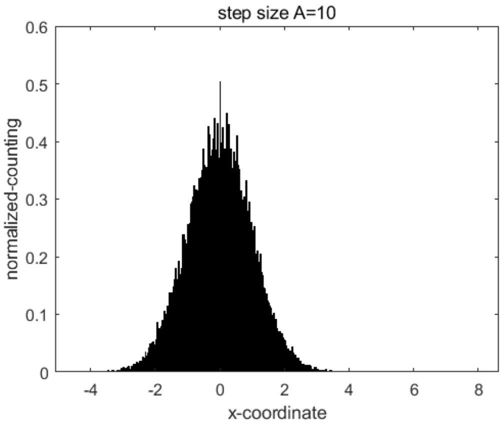
总的来说，步数越大越能得到理想效果；步长要选取合适的，一般判据是选取步长和数据方差在一个数量级，这样得到的收敛速度快，精度高。对于$Markov$链直观的可视化抽样图如下给出：



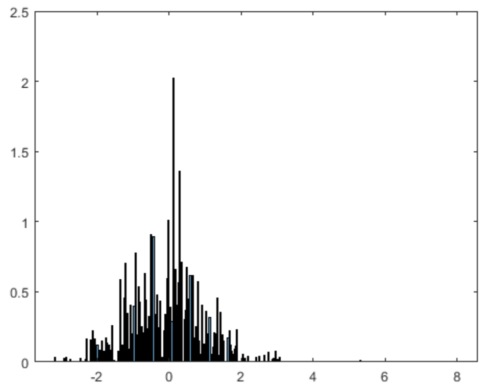
(a) $A = 0.001$



(b) $A = 1$

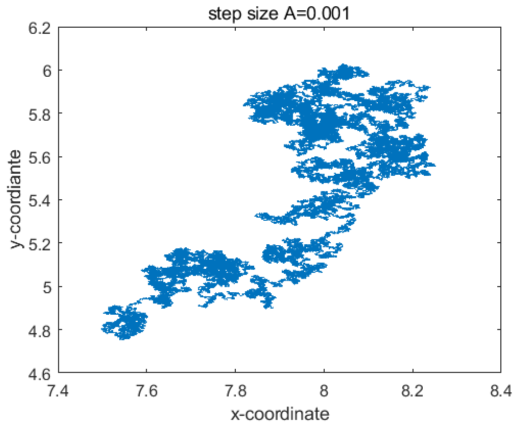


(c) $A = 10$

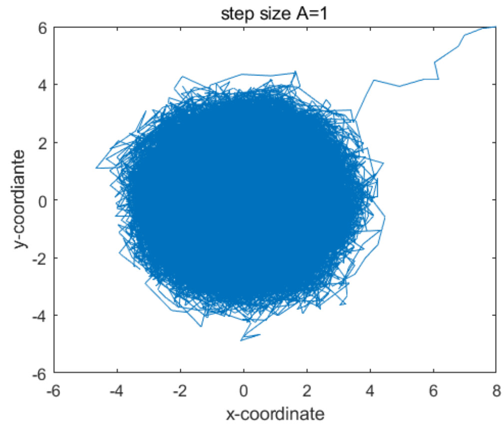


(d) $A = 100$

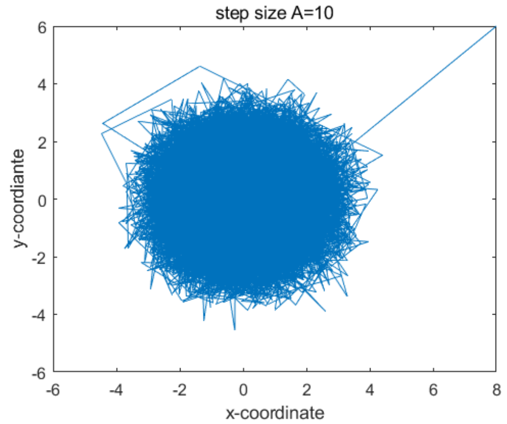
图 2: 不同A情况的x分布概率密度



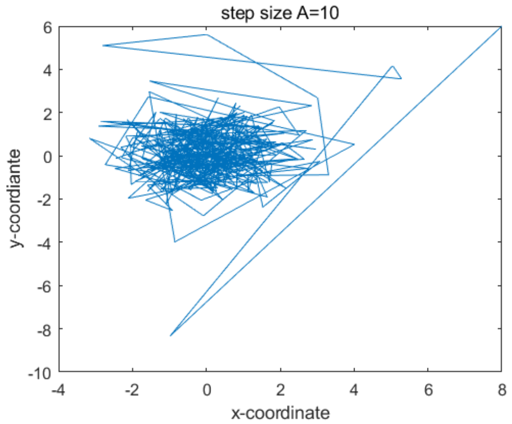
(a) $A = 0.001$



(b) $A = 1$



(c) $A = 10$



(d) $A = 10$

图 3: 不同A情况$Markov$链抽样情况

三个$Markov$链都是从(x_0, y_0)=(8,6)开始摸拟。在小步长$A = 0.001$情况下，至循环结束时才行走到大约(7.4,4.4)处，不能有效进入理想构型附近。**此时的运动更加接近的是$Brown$运动，带有随机游走的特征**。我们可以粗略地估计一下，如果是理想的布朗运动，$\Delta x \approx \sqrt{N}A \approx 1$，这和(a)图吻合得很好。而大步长下的轨迹显然比“最佳步长”的要粗糙很多，毛刺更明显，在平衡位置附近涨落更大，也不能得到理想的结果。

6 总结

- $Metropolis$抽样是摸拟各种系综的一个简单直观的抽样方法，有很大的实用性。
- $Metropolis$抽样的缺点也很明显，非常依赖于步长（步进频率分布）的选取，有一定的预实验或者计算前的估计非常重要。