计算物理A作业14

吕遨 PB19030789

1.作业题目

设体系能量为$H(x,y)=-2(x^2+y^2)+\frac{1}{2}(x^4+y^4)+\frac{1}{2}(x-y)^4$，取$\beta=0.2,1,5$，利用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.算法和主要公式

2.1 公式推导

正则系综的玻尔兹曼分布：

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

配分函数Z为

$$Z=\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\{\beta[2(x^2+y^2)-\frac{1}{2}(x^4+y^4)-\frac{1}{2}(x-y)^4]\}\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

x^2的平均值$\langle x^2\rangle$理论计算公式为

$$\langle x^2\rangle=\frac{1}{Z}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2\exp\{\beta[2(x^2+y^2)-\frac{1}{2}(x^4+y^4)-\frac{1}{2}(x-y)^4]\}\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

同理

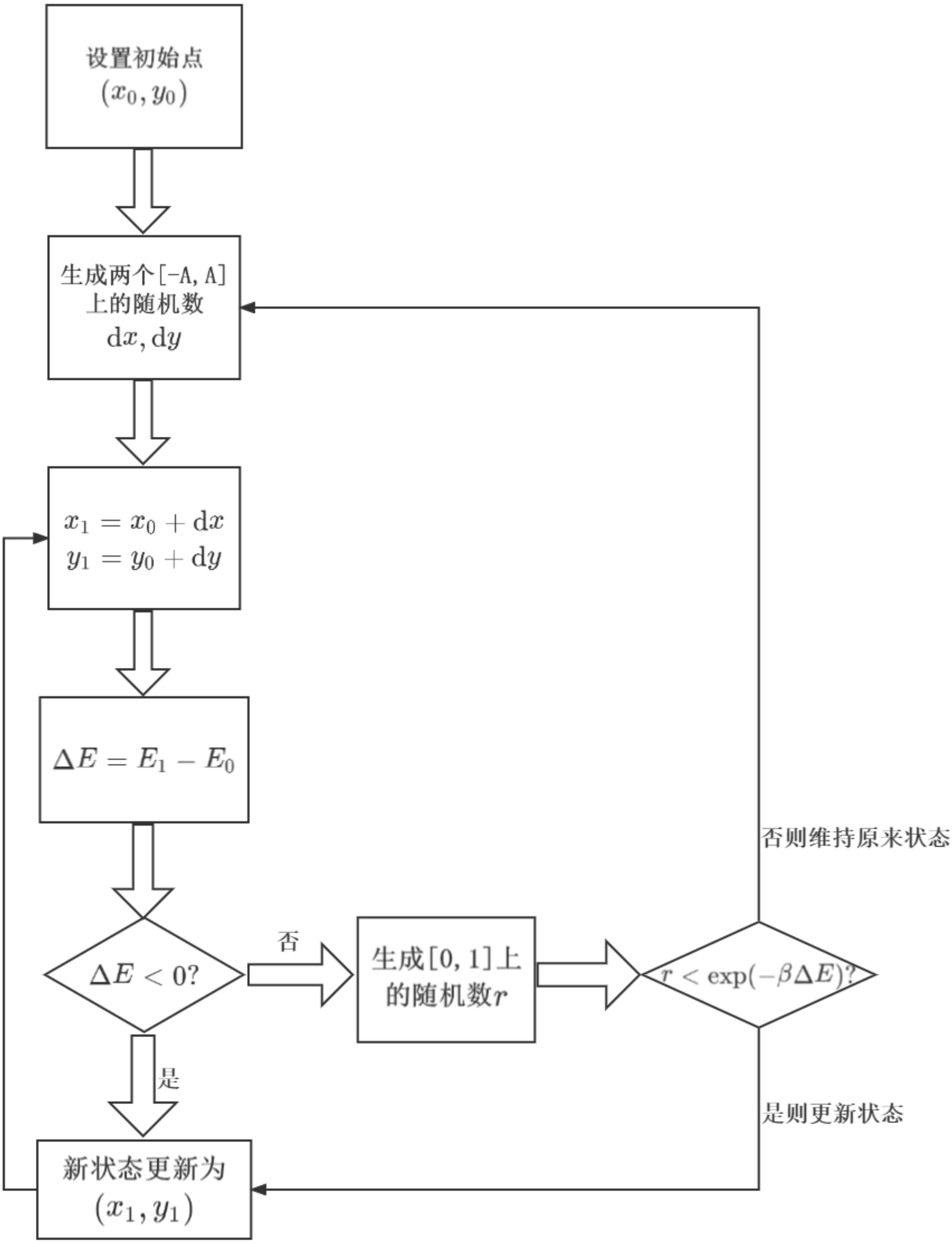
$$\langle y^2\rangle=\frac{1}{Z}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}y^2\exp\{\beta[2(x^2+y^2)-\frac{1}{2}(x^4+y^4)-\frac{1}{2}(x-y)^4]\}\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$\langle x^2+y^2\rangle=\frac{1}{Z}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}(x^2+y^2)\exp\{\beta[2(x^2+y^2)-\frac{1}{2}(x^4+y^4)-\frac{1}{2}(x-y)^4]\}\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

从(x,y)过渡到(x',y')的转移概率为

$$p=\min\{1,\exp\left(\frac{\beta[-2(x^2+y^2)+\frac{1}{2}(x^4+y^4)+\frac{1}{2}(x-y)^4]}{\beta[-2(x'^2+y'^2)+\frac{1}{2}(x'^4+y'^4)+\frac{1}{2}(x'-y')^4]}\right)\}$$

2.2 Metropolis算法描述



求系综平均时要去除热化阶段

$$\langle X \rangle = \frac{1}{N - n_0} \sum_{n_0+1}^{N} X_i$$

本实验中我们取初始点$(x_0, y_0) = (8, 8)$，步长$A = 0.1$，$N = 1000000$，$n_0 = 100000$。

3.计算结果及分析

3.1 $\beta = 0.2$时的结果

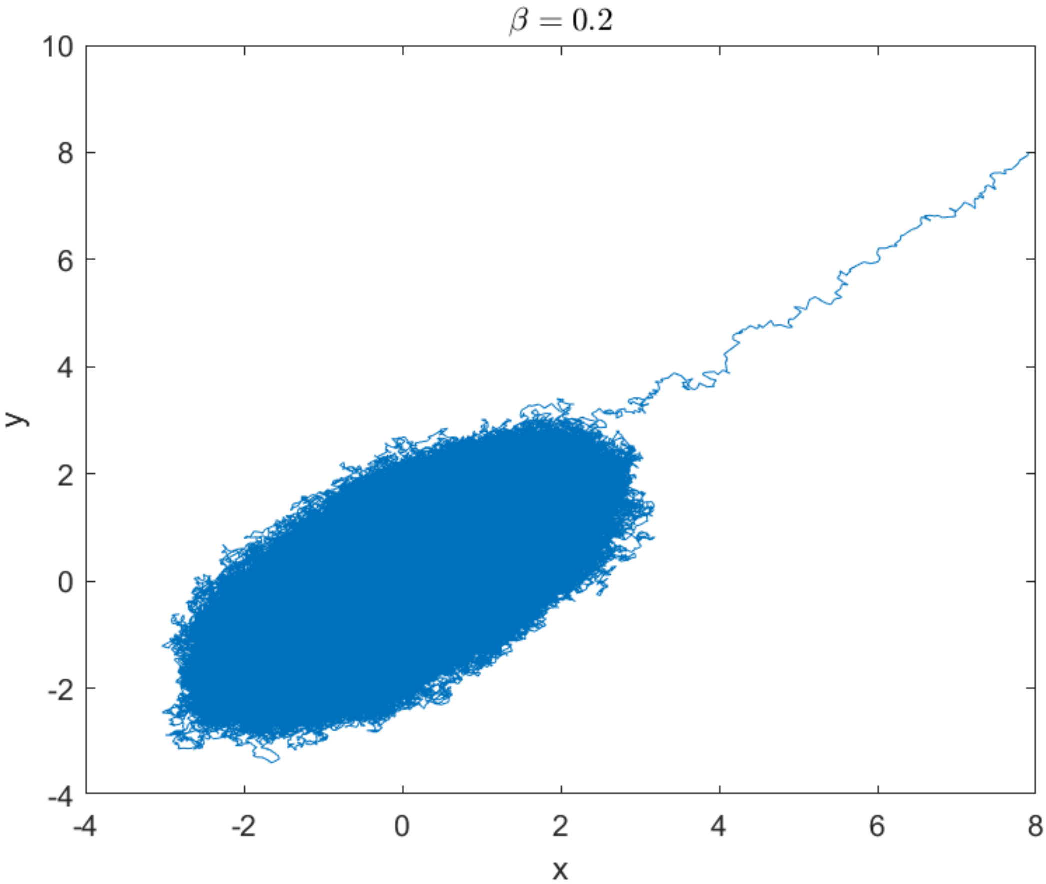
用Metropolis抽样计算得到的$\langle x^2 \rangle, \langle y^2 \rangle, \langle x^2 + y^2 \rangle$结果如下：

$$\langle x^2 \rangle = 1.680343$$

$$\langle y^2 \rangle = 1.694046$$

$$\langle x^2 + y^2 \rangle = 3.374389$$

二维平面上Markov链点的分布如下图所示



3.2 $\beta = 1.0$时的结果

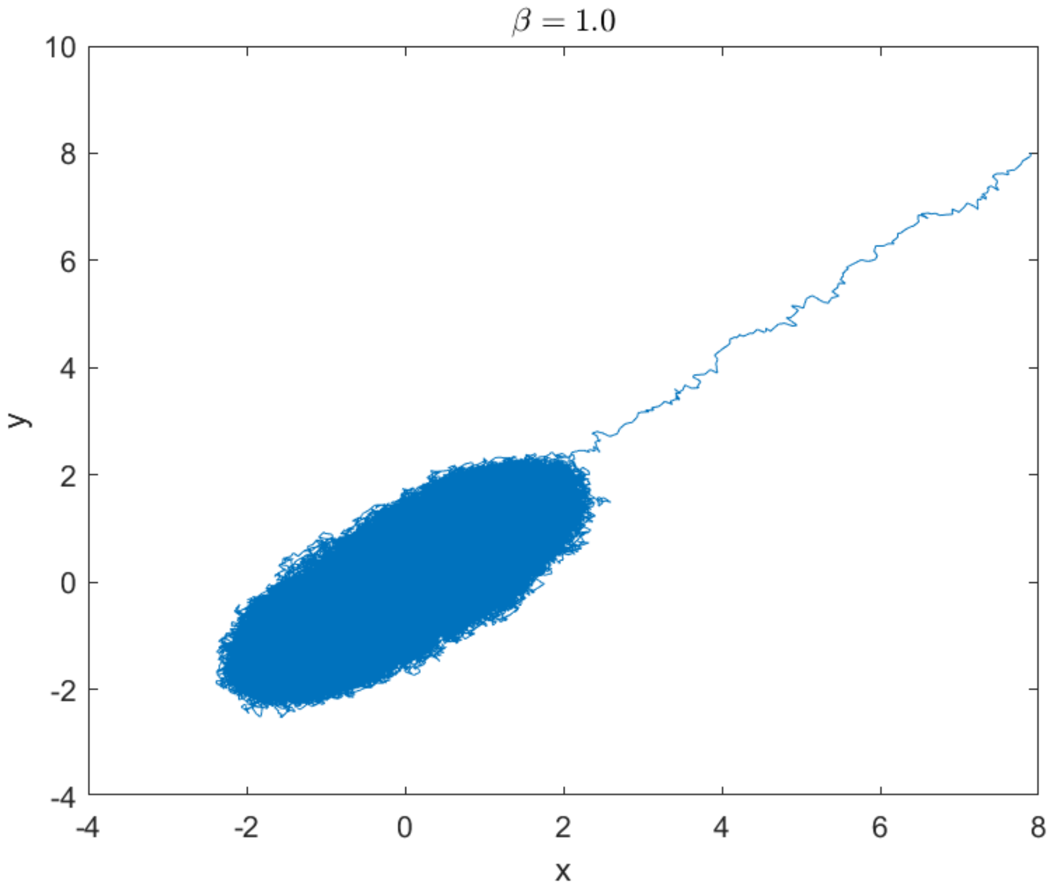
用Metropolis抽样计算得到的$\langle x^2 \rangle, \langle y^2 \rangle, \langle x^2 + y^2 \rangle$结果如下：

$$\langle x^2 \rangle = 1.524680$$

$$\langle y^2 \rangle = 1.517520$$

$$\langle x^2 + y^2 \rangle = 3.042200$$

二维平面上Markov链点的分布如下图所示

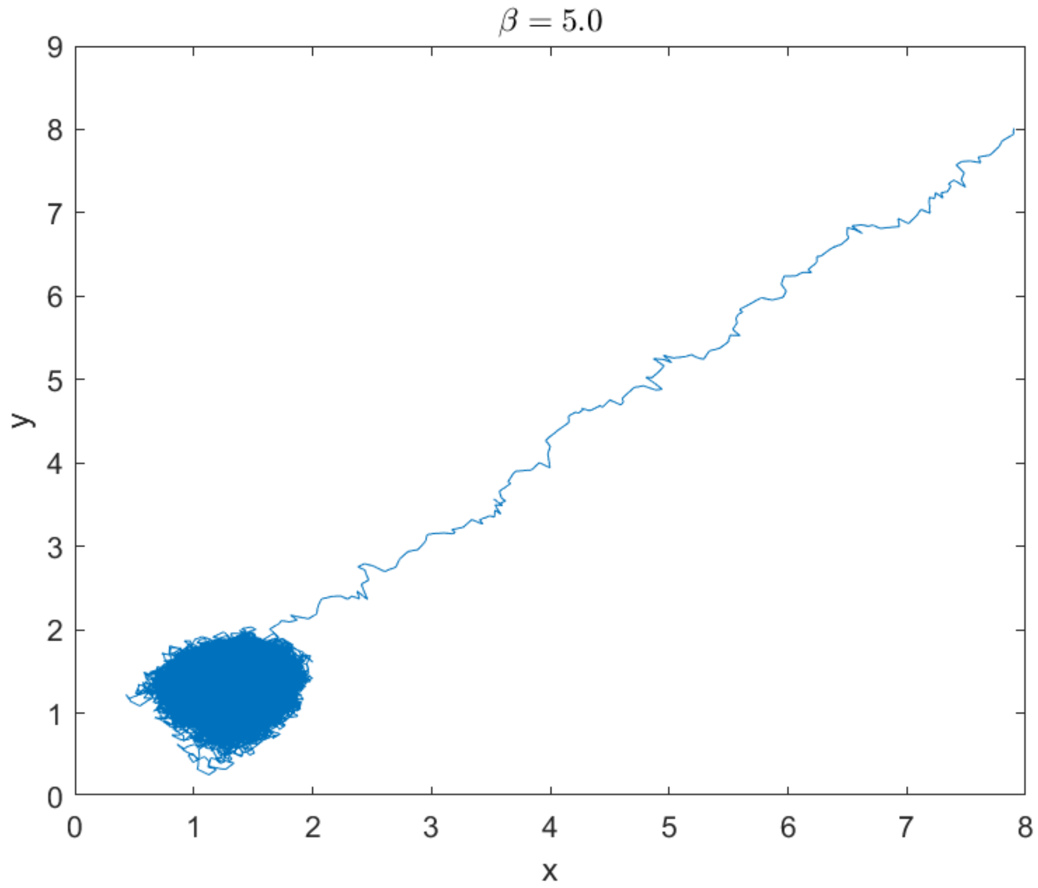


3.3 $\beta = 5.0$时的结果

用Metropolis抽样计算得到的$\langle x^2\rangle, \langle y^2\rangle, \langle x^2+y^2\rangle$结果如下:

$$\langle x^2\rangle = 1.953429$$
$$\langle y^2\rangle = 1.952420$$
$$\langle x^2+y^2\rangle = 3.905849$$

二维平面上Markov链点的分布如下图所示



3.3 结果分析

从以上三幅图我们可以看到，初始时链点从我们选定的起点出发，随着步数的增加，会快速趋于平衡位置。

热化过程是一条从起点出发向平衡位置靠近的一条不规则曲线，所以我们在计算系综平均时必须要去掉热化过程。

随着β的增大，热化过程将变长，同时最后平衡分布的涨落会缩小。这在物理上很好理解，因为$\beta = \frac{1}{kT}$，温度越低则需要更长时间的热化过程，最终平衡位置的涨落也相对小一些。

4.总结

（1）本次作业中我们使用Metropolis重要抽样方法，完成了玻尔兹曼分布的抽样。可以看到Metropolis是一种简单直观且实用的抽样方法。

（2）Metropolis抽样需要一个热化过程，在计算系综平均时要注意将其剔除。同时Metropolis抽样效果也与抽样步长有关，当步长选择合适时才能获得比较理想的效果。