计算物理第 8 次作业第 15 题

姓名：姚星宇　　学号：PB21000188　　班级：2021 级少年班学院四班

2022 年 11 月 24 日

1　题目重述

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 $\beta = 0.2, 1, 5$，采用 Metropolis 抽样法计算 $\langle x^2 \rangle, \langle y^2 \rangle, \langle x^2+y^2 \rangle$。抽样时在平面上标出 Markov 链点分布，从而形象地理解 Markov 链。"依次标出 Markov 链点分布" 理解不能，我的处理是标出所有抽样点

2　题目分析

本作业采用 Python 3 作为编程语言。本题是较为简单的 Metropolis 抽样的实现 [1]。对于平面上已经存在的一点 $r_n = (x_n, y_n)$, 进行两次均匀抽样获得试探位移 $\Delta = (\delta(\xi_1 - 0.5), \delta(\xi_2 - 0.5)), \xi_{1,2} \in [0,1]$。若 $H(r_n) > H(r_n + \Delta)$，则试探位移使之能量减小，故应接受此次位移，$r_{n+1} = r_n + Delta$；反之，则再取 $\xi_3 \in [0,1]$, 若 $\xi_3 < \exp(\beta(H(r_n+\Delta) - H(r_n)))$, 则接受位移，$r_{n+1} = r_n + Delta$，反之则重新选取试探位移。

显然的，该过程中可控制的参量有两个：控制概率对于势能敏感程度的 β 和控制抽样范围的 δ。进行分析可得：β 一定时，δ 过小会导致抽样点集中在一个极值附近，即抽样点的行走步长过小导致被极值点附近的"势阱"所捕获，难以行走至其他的极值点；δ 较大时虽然可以较为全面地反映平面上各点的概率分布，但由于每一步行走较远，势能变化太大导致试探位移被接受的概率较小，即抽样效率低下。针对一定的 β 选择合适的 δ 是获得较为准确与稳定的平均值的前提。

需要注意的是，这里对于 $\xi_{1,2}$ 的抽样使用了 16807 生成器生成的两个相邻的随机数，由于两数并非完全不相关故这种做法可能造成未知错误，但对这种做法进行分析已经超出笔者能力范围，故在这里不展开。

3　结果

图一是各类参数组合下的抽样图像与计算结果。观察结果可得，δ 过小时，抽样的结果基本不能代表真实的概率分布（事实上，如果此处的 H 不关于 y = x 对称，则计算出的各类平均值会与真实值完全不同），只能代表某一个极值点附近的情况。δ 较大时，抽样的结果较好，例如文中的类椭圆的分布图像，但抽样效率的下降却令人难以忍受如 $\delta = 5, \beta = 5$ 时，抽样效率仅为万分之六，即每个点会需要数百次次抽样才能产生。

参考文献

[1] 丁泽军. 计算物理讲义 [M]

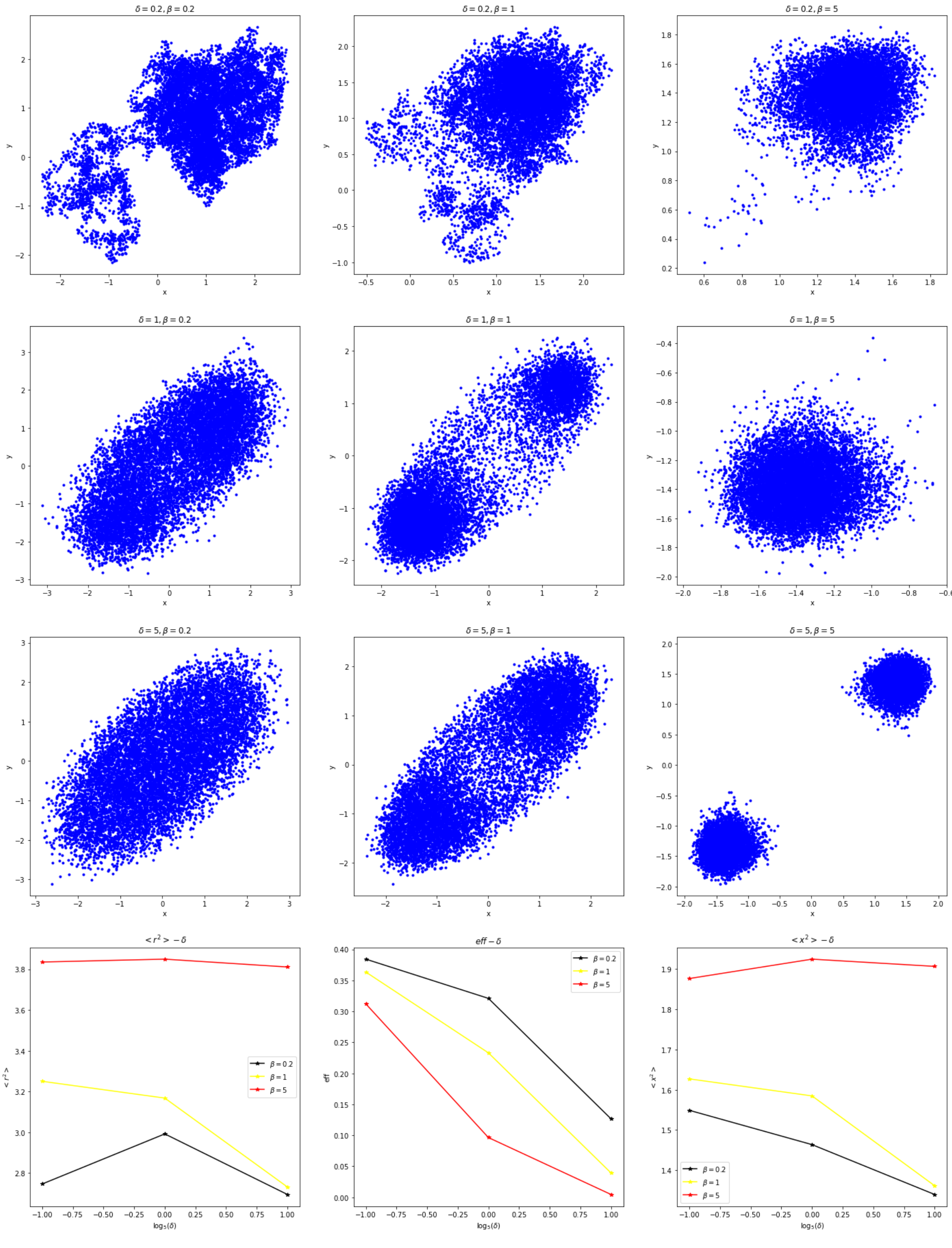
$\delta = 0.2, \beta = 0.2$
$\delta = 0.2, \beta = 1$
$\delta = 0.2, \beta = 5$
$\delta = 1, \beta = 0.2$
$\delta = 1, \beta = 1$
$\delta = 1, \beta = 5$
$\delta = 5, \beta = 0.2$
$\delta = 5, \beta = 1$
$\delta = 5, \beta = 5$
x
y
$< r^2 > -\delta$
$< r^2 >$
$eff - \delta$
eff
$< x^2 > -\delta$
$< x^2 >$
$\log_5(\delta)$
$\beta = 0.2$
$\beta = 1$
$\beta = 5$

图 1: 程序运行结果