

# Potts 模型 实验报告

郑滕飞 2401110060

## 目录

<b>1</b>	<b>基本定义</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>相变温度</b>	<b>2</b>
2.1	问题描述 . . . . .	2
2.2	状态转移 . . . . .	2
2.3	$q = 3$ 结果展示 . . . . .	4
2.4	$q = 10$ 结果展示 . . . . .	6
<b>3</b>	<b>磁化强度</b>	<b>8</b>
3.1	问题描述 . . . . .	8
3.2	磁化强度的改变 . . . . .	8
3.3	$q = 3$ 结果展示 . . . . .	8
3.4	$q = 10$ 结果展示 . . . . .	10
<b>4</b>	<b>相干长度</b>	<b>11</b>
4.1	问题描述 . . . . .	11
4.2	平均协方差的估算 . . . . .	11
4.3	基本效果与改进 . . . . .	12
4.4	$q = 3$ 结果展示 . . . . .	17
4.5	$q = 10$ 结果展示 . . . . .	19
<b>5</b>	<b>极限性质</b>	<b>21</b>
5.1	问题描述 . . . . .	21
5.2	小网格分析 . . . . .	21
5.3	$q = 3$ 结果展示 . . . . .	22
5.4	$q = 10$ 结果展示 . . . . .	23
<b>6</b>	<b>三维情况</b>	<b>25</b>
6.1	相变温度 . . . . .	25
6.2	磁化强度 . . . . .	26
6.3	相干长度 . . . . .	27
6.4	极限性质 . . . . .	28
<b>A</b>	<b>附件列表</b>	<b>30</b>

## 1 基本定义

对于某  $N \times N$  的二维网格，其中的一个状态  $\sigma$  对应每个格点处给定整数  $\sigma_i = \{1, \dots, q\}$ ，称为此格点处的自旋。

定义一个状态的能量为

$$H(\sigma) = - \sum_{\langle i, j \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j} - h \sum_i \sigma_i$$

这里  $\langle i, j \rangle$  指在网格的意义下相邻，且采用循环边界条件（即首末行、首末列相邻）。

给定温度  $T$ ，状态的概率分布为

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H(\sigma)), \quad Z = \sum_{\sigma} \exp(-\beta H(\sigma)), \quad \beta = T^{-1}$$

下方的期望、方差均指在  $\sigma$  按  $P(\sigma)$  分布时的期望与方差。用  $\langle \cdot \rangle$  表示期望。为了方便构造，取定  $q$  为 3 或 10 分别讨论。

## 2 相变温度

### 2.1 问题描述

假设  $h = 0$ ，将平均内能

$$u = \frac{U}{N^2}, \quad U = \langle T \rangle$$

与比热

$$u = \frac{c}{N^2}, \quad C = \beta^2 \text{Var}(T) = \beta^2 (\langle T^2 \rangle - \langle T \rangle^2)$$

绘制为  $T$  的函数，并在  $N$  充分大时从图像观察发生相变的临界温度  $T^*$ 。

### 2.2 状态转移

采用 MCMC 方法进行模拟。定义只进行单次翻转的提议概率  $Q(\sigma \rightarrow \sigma')$ ：当  $\sigma$  与  $\sigma'$  只有一个分量不同时为  $\frac{1}{N^2(q-1)}$ ，否则为 0。这里分母上的  $q-1$  代表该分量的  $q$  种可能去掉与  $\sigma$  相同的情况。

对应的接受概率为

$$A(\sigma \rightarrow \sigma') = \min(1, \exp(-\beta(H(\sigma') - H(\sigma))))$$

由此可利用向量化构造计算哈密顿量的函数：

```
H = 0;
H = H - sum(sum(state(:, 1:end-1) == state(:, 2:end)));
H = H - sum(state(:, end) == state(:, 1));
H = H - sum(sum(state(1:end-1, :) == state(2:end, :)));
H = H - sum(state(end, :) == state(1, :));
if h ~= 0
    H = H - h * sum(sum(state));
end
```

并进行实际计算，在随机决定改变位置 (a,b) 与新的值 next 后，进行转移判定：

```
ori = state(a, b);
Hori = count_H(state, h);
state(a, b) = next;
```

```

H = count_H(state, h);
prob = exp(-(H - Hori) * beta);
u = rand();
if u > prob
    state(a, b) = ori;
    H = Hori;
end

```

由于  $\beta > 0$ , 当  $\Delta H < 0$  时转移不可能发生, 由此可直接合并两种情况, 无需再比较大小。

然而, 测试状态转移的时间可以得到 (这里的函数中只保留了状态转移部分, 四个参数为  $N$ 、 $q$ 、 $T$  与模拟次数):

```

>> tic;simulate_u_c(1000, 3, 10, 100);toc;
历时 1.296997 秒。
>> tic;simulate_u_c(10000, 3, 10, 10);toc;
历时 13.381002 秒。

```

这个时间成本是无法接受的, 必须选取更好的模拟方法。注意到, 每一次改变一个位置时,  $\Delta H$  只会受局部影响, 因此  $\Delta H$  无需计算完整的  $H$ , 由此可得到基本的迭代。

此外, 由于本题的过程中仍然需要计算  $H$ , 我们在第一次生成时进行完整计算, 之后每次将  $H$  传入, 同时迭代后若改变, 传出原来的  $H$  增添  $\Delta H$ , 即可实现迭代过程中对  $H$  的更新。之后对其他量的更新一般也遵循此过程。

具体来说, 我们假设改变的位置是  $(a, b)$ , 改变前为  $o$ , 改变后为  $n$ , 则

$$\Delta H = \delta_{oo(a-1,b)} + \delta_{oo(a+1,b)} + \delta_{oo(a,b-1)} + \delta_{oo(a,b+1)} - \delta_{no(a-1,b)} - \delta_{no(a+1,b)} - \delta_{no(a,b-1)} - \delta_{no(a,b+1)} + ho - hn$$

此时时间测试结果为:

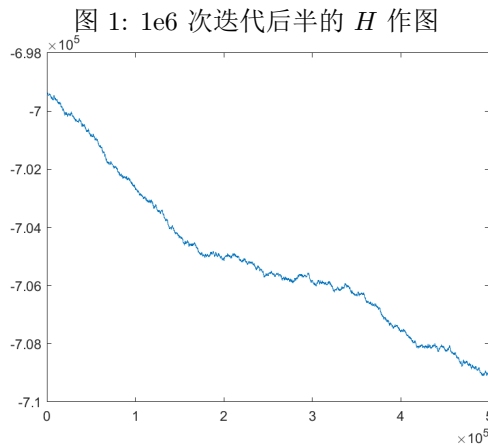
```

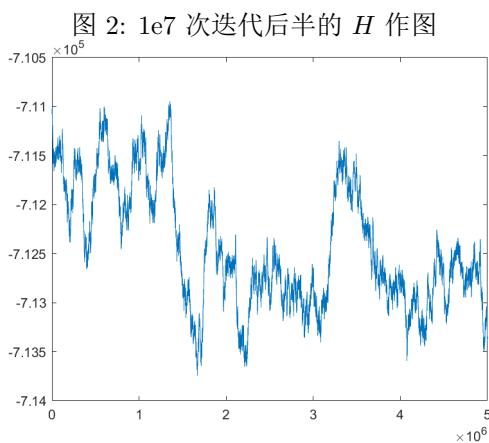
>> tic;simulate_u_c(1000, 3, 10, 100);toc;
历时 0.035547 秒。
>> tic;simulate_u_c(10000, 3, 10, 10);toc;
历时 1.572770 秒。

```

可以发现大大改进了运行时间, 且由于初次需要计算全部, 随着转移次数增多, 平均时间将更少。

我们进行随机初始化, 为了避免初始能量过高的问题, 可以将模拟次数的后半作为抽样结果进行估计。绘制发现, 取定  $N = 1000$ 、 $q = 3$ 、 $T = 10$ , 当抽样次数  $1e6$  时, 后半的哈密顿量  $H$  作图如图 1。





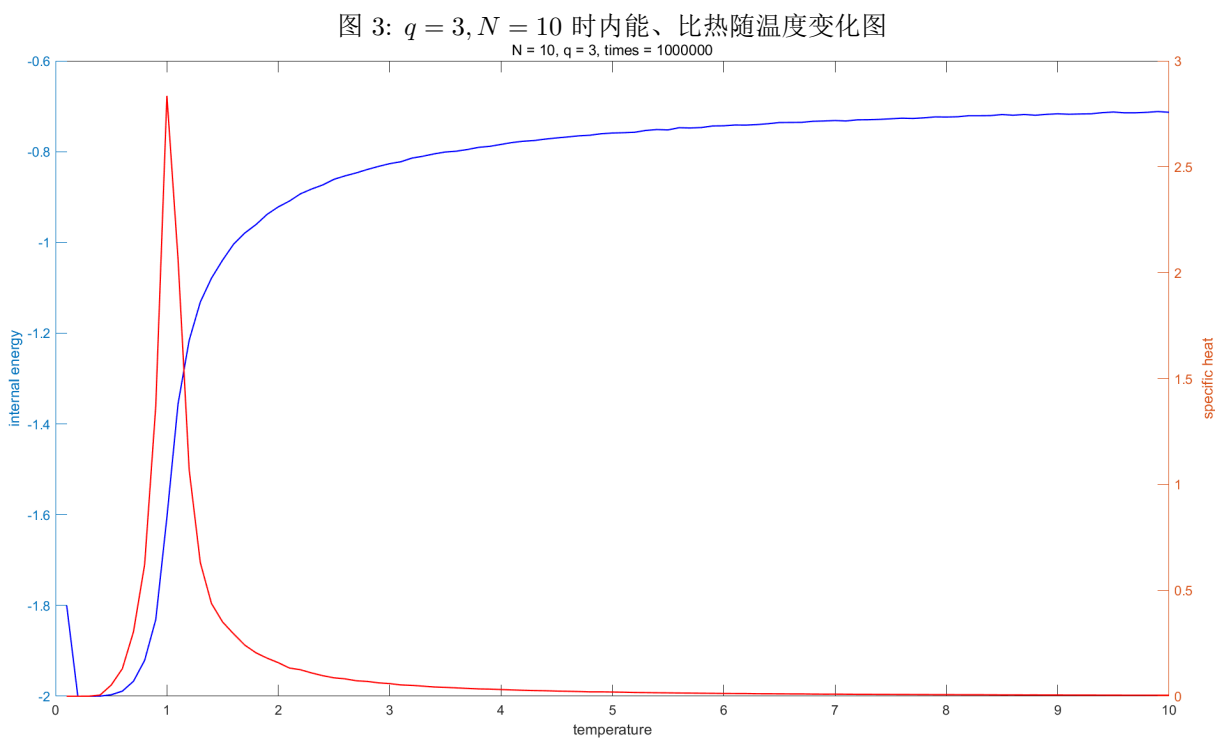
而当抽样次数  $1e7$  时, 后半的哈密顿量  $H$  作图如图 2。

可以发现,  $1e7$  次模拟时, 对  $N = 1000$ 、 $T = 10$ ,  $H$  可以基本稳定。不过, 由于温度越低时总能量倾向于越低, 下降次数即需要更久, 在温度较低时, 事实上可以通过从全部相等开始进行模拟, 以减少稳定需要的模拟次数。此外, 网格越小, 越容易收敛, 因此可从小网格开始估算相变温度, 再扩大网格以确认。

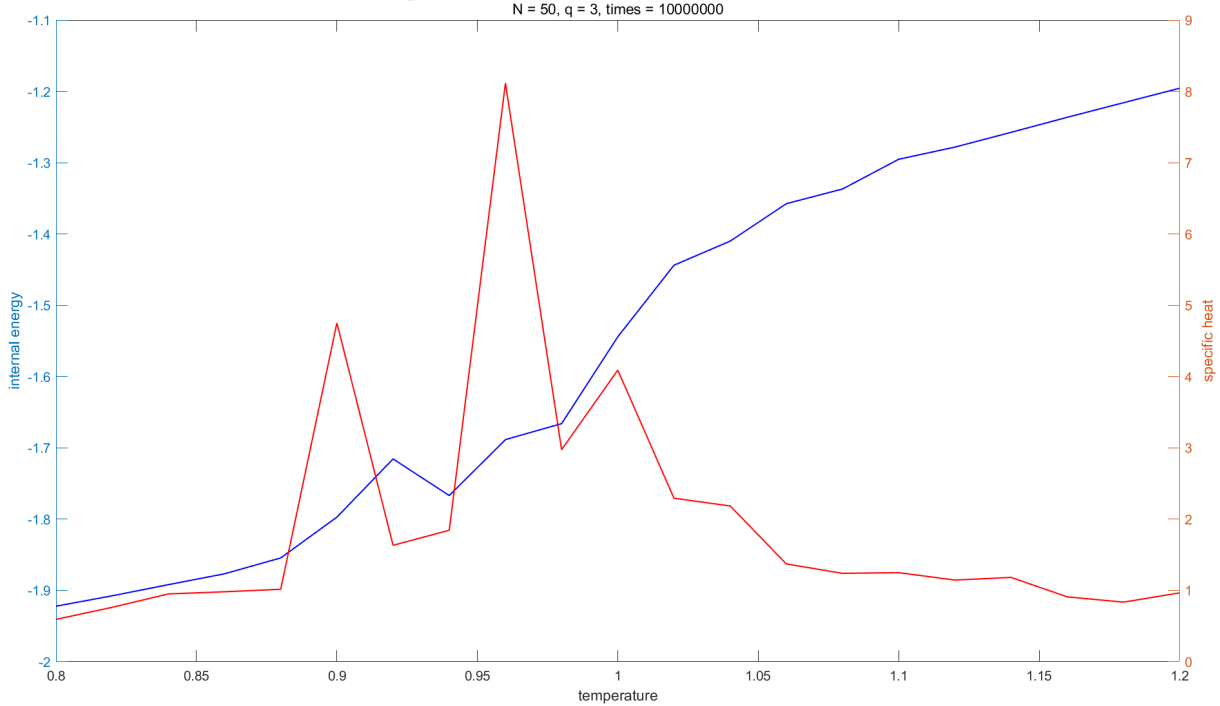
### 2.3 $q = 3$ 结果展示

我们将后半程的  $H$  存储下来, 即可在状态转移完成后得到  $u$  与  $c$  的估算。

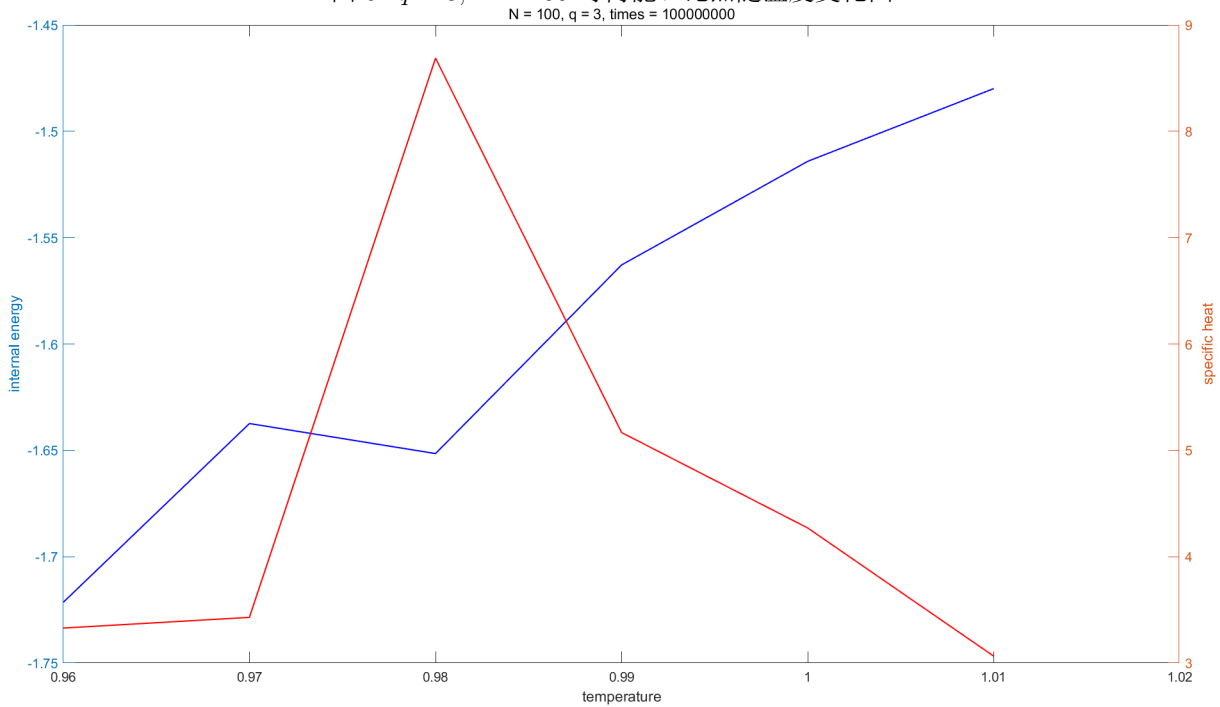
在  $N = 10$  时以  $0.1$  为温度步长在  $0.1$  到  $10$  间模拟  $1e6$  次, 结果如图 3。



可以发现, 红线表示的比热在  $1$  附近存在一个明显的导数不连续, 由此相变温度  $T_c$  在此附近。进一步放大网格并进行测试, 考虑  $N = 50$  时, 以  $0.02$  为温度步长在  $0.8$  到  $1.2$  间模拟  $1e7$  次, 得到的结果如图 4。

图 4:  $q = 3, N = 50$  时内能、比热随温度变化图

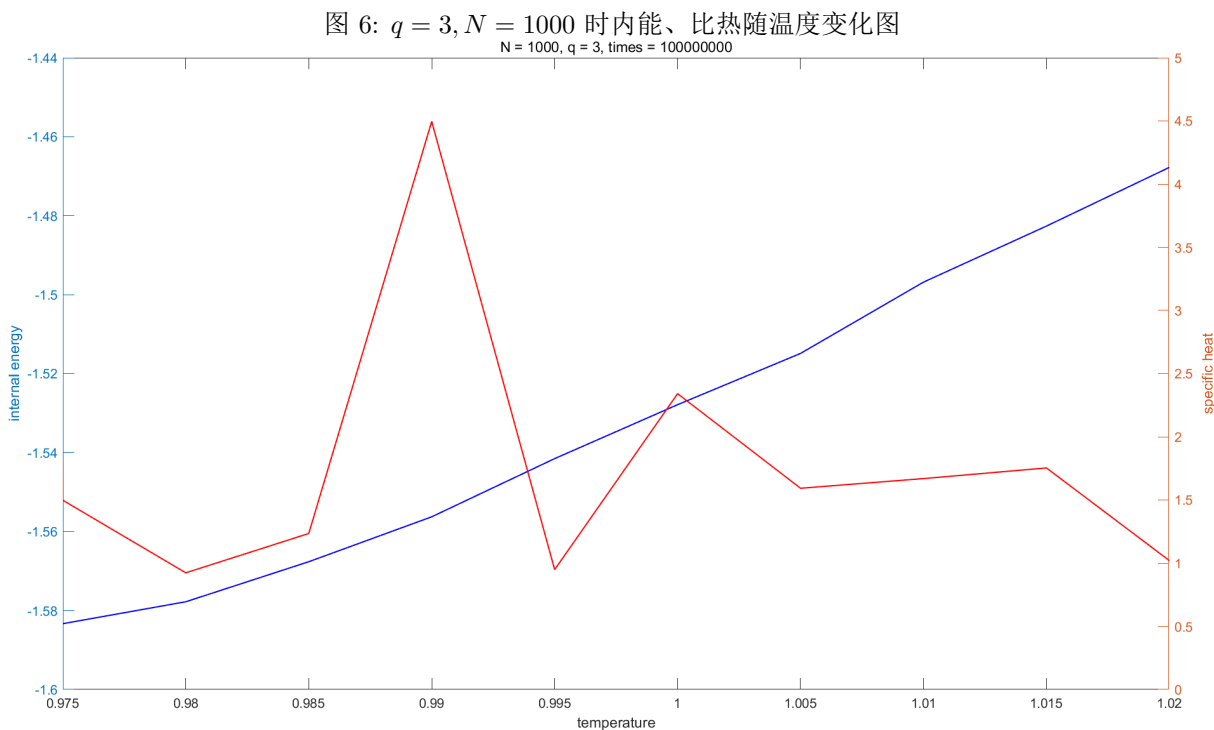
虽然此时收敛并不充分, 但已经足以看出所求的临界温度在 0.95 与 1 之间 (取到最大值为 0.96), 考虑  $N = 100$  时, 以 0.01 为温度步长在 0.96 到 1.01 间模拟  $1e8$  次, 得到的结果如图 5。

图 5:  $q = 3, N = 100$  时内能、比热随温度变化图

这时可以发现, 比热的峰值已经收敛到了 0.98 附近。结合  $N = 50$  时在 0.96 附近的峰值, 可以发现

随着网格增大，临界温度是不断增大的。在网格变得更大时，由于个人电脑算力有限，利用现有算法已经无法  $1e8$  次内有效收敛。不过，为了进行更精确的测定，我们考虑如下过程：

在  $T$  变化很小时， $H$  的变化理应相对小，因此状态变化不大。可以对第一个点进行较多迭代，之后的状态转移以前一次的结果作为初始情况，用较小的次数迭代得到结果。由此，取  $N = 1000$ ，首次迭代  $5e8$  次，之后迭代  $1e8$  次，以  $0.005$  为温度步长在  $0.97$  到  $1.02$  间模拟，舍弃首次迭代不稳定的  $0.97$  处数据，得到结果如图 6。



这时可以发现峰值出现在了  $0.99$  附近，与理论结果  $\frac{1}{\ln(1+\sqrt{3})} \approx 0.995$  非常接近。

## 2.4 $q = 10$ 结果展示

与  $q = 3$  时完全类似，采用  $N = 10$ 、单点  $1e6$  次迭代， $N = 50$ 、单点  $1e7$  次迭代， $N = 100$ 、单点  $1e8$  次迭代三次细分区间估算临界温度，效果如图 7、图 8 与图 9。三张图片的温度区间分别为  $0.1$  到  $10$ 、步长  $0.1$ ， $0.6$  到  $0.8$ 、步长  $0.01$ ， $0.65$  到  $0.71$ 、步长  $0.01$ 。可以发现，随着网格的增大，临界温度从  $0.6$  附近、 $0.66$  附近推移至了  $0.69$  附近。

图 7:  $q = 10, N = 10$  时网格内能、比热随温度变化图

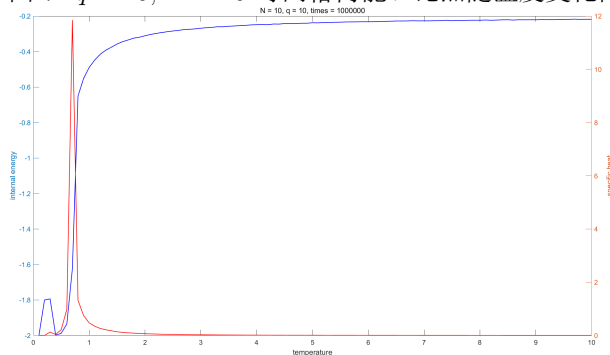
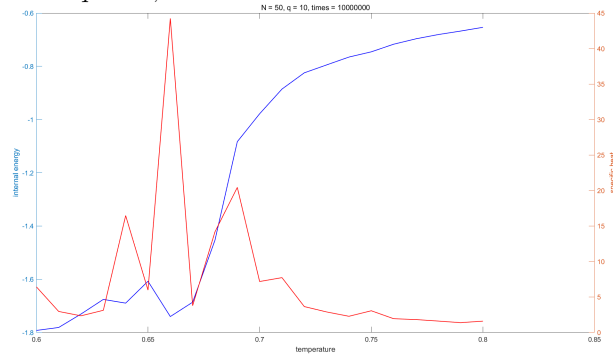
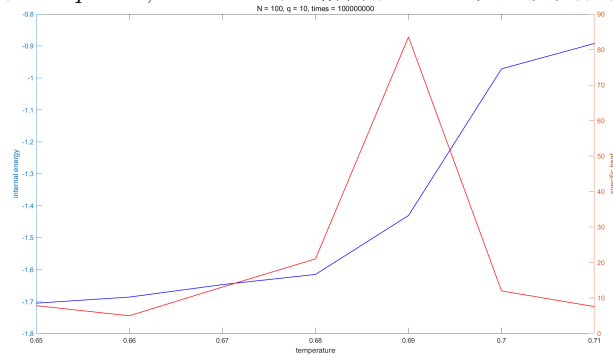
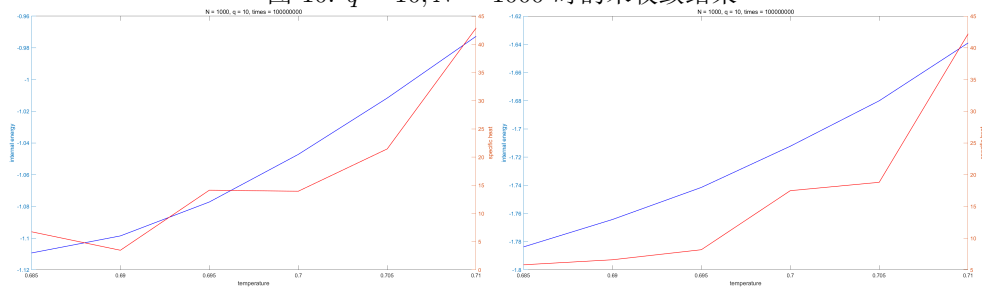
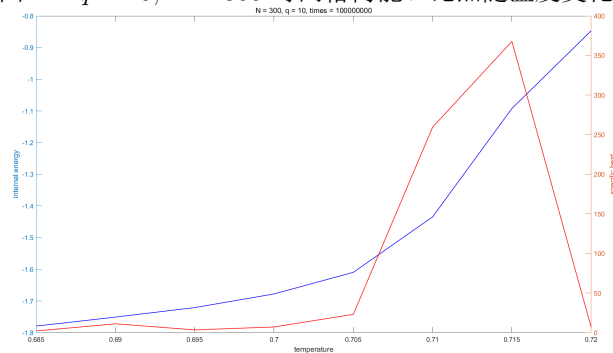


图 8:  $q = 10, N = 50$  时网格内能、比热随温度变化图图 9:  $q = 10, N = 100$  时网格内能、比热随温度变化图

最后，试着进行更精确的估计时，若以随机初始化，初始  $5e8$ 、此后  $1e8$  迭代次数的效果如图 10 左侧，说明  $q = 10, N = 1000$  时，这与温度越低时随机初始化想收敛所需的次数更多一致，但重新采用全相等初始化后，收敛效果如图 10 右侧，仍然可以发现未收敛。

图 10:  $q = 10, N = 1000$  时的未收敛结果图 11:  $q = 10, N = 300$  时网格内能、比热随温度变化图

进一步研究可发现，收敛不够充分时，以前一次结果作初始情况的迭代估算的临界温度会向右偏移，符合图 10，而考虑到算力因素，最终在  $N = 300$  时进行了数值估算，初始  $5e8$ 、此后  $1e8$  迭代次数时效果如图 11，临界温度在 0.71 到 0.715 之间，考虑到向右偏移，结合之前  $N = 100$  时得到的下界 0.69，符合理论结果  $\frac{1}{\ln(1+\sqrt{10})} \approx 0.701$ 。

此外，可以观察到，在  $q = 3$  时，内能在临界温度附近的导数接近连续，而  $q = 10$  时则呈现出导数间断的性态，这与理论结果中  $q = 3$  时为二级相变、 $q = 10$  时为一级相变相符合。

### 3 磁化强度

#### 3.1 问题描述

记磁化强度

$$m = \frac{M}{N^2}, \quad M = \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle$$

对不同的  $h$ ，估算  $M$  并将其绘制成  $T$  的函数。

#### 3.2 磁化强度的改变

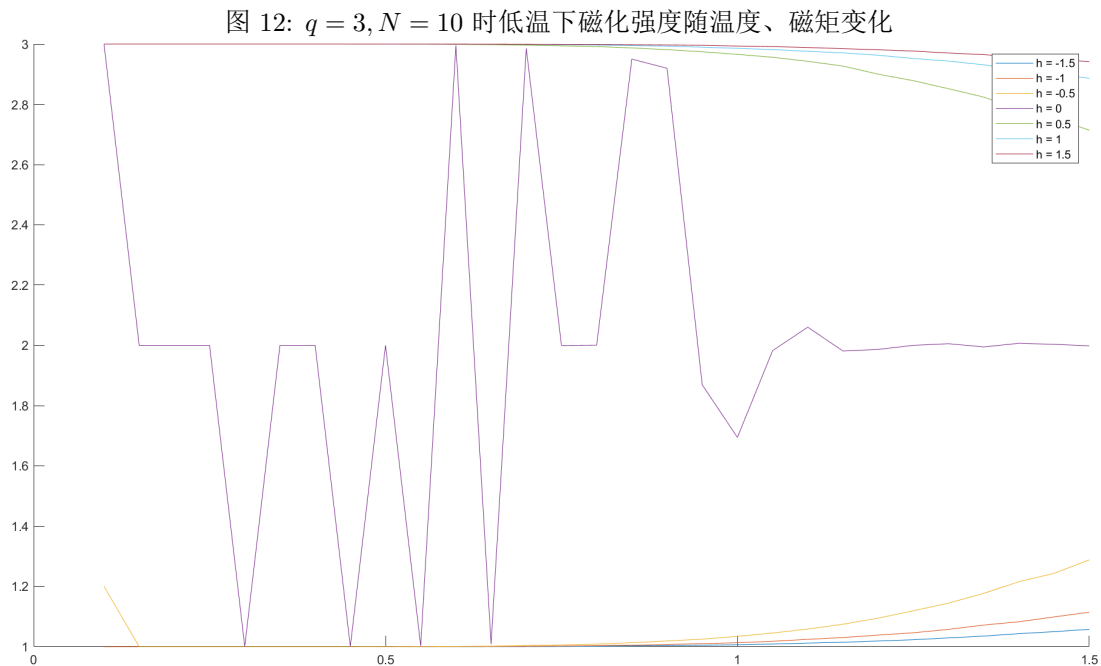
由于  $\Delta H$  的估算同样不依赖前一次的  $H$ ，在估算  $m$  时，进行状态转移无需再将哈密顿量传入传出，沿用 2.2 的记号，设改变前后  $M$  的差为  $\Delta M$ ，则

$$\Delta M = n - o$$

由此，同样只需计算开始的  $M$ ，即在迭代中以  $O(1)$  更新  $M$ 。

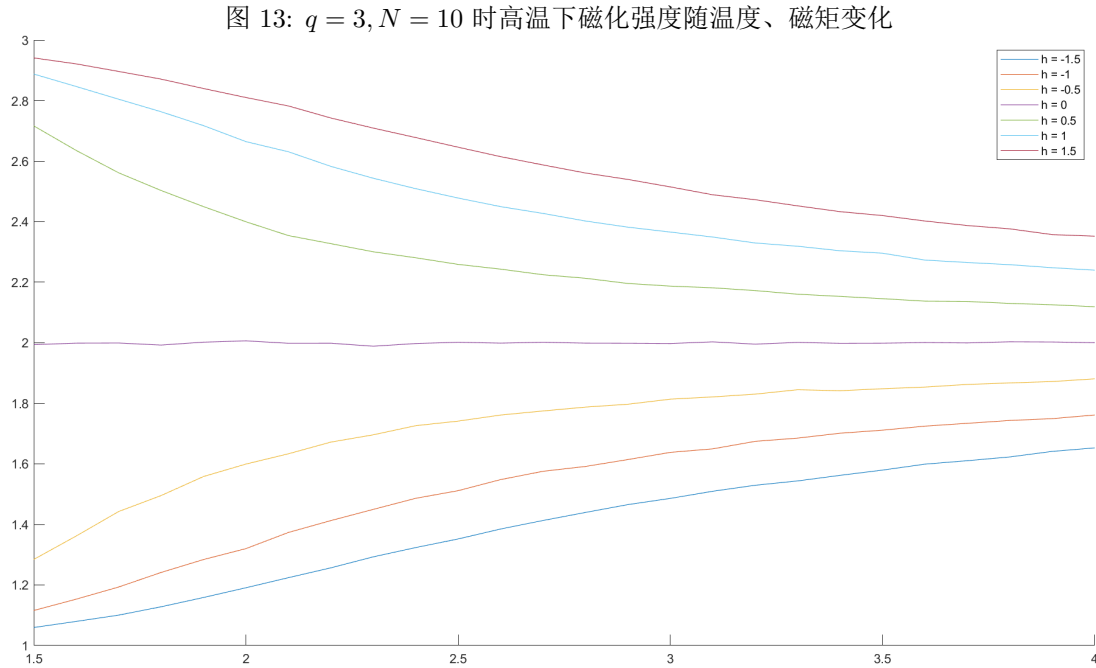
#### 3.3 $q = 3$ 结果展示

为了研究其性质，需要保证充分收敛，因此先考虑  $N = 10$  的情形，每个点迭代  $1e6$  次，对  $h$  取定  $-1.5$  到  $1.5$ 、 $T$  取定  $0.1$  到  $1.5$  模拟的效果如图 12。

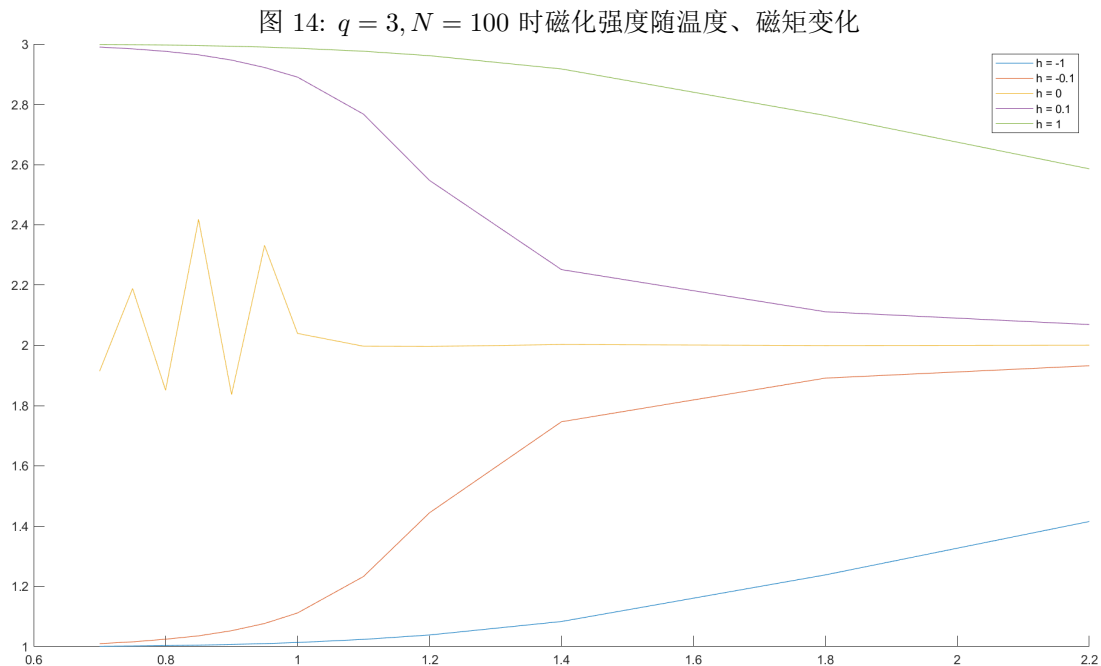




从中可以发现，在临界温度 ( $N = 10$  时根据之前结果为 0.9 附近) 以下时，当外磁场强度为负时几乎收敛到全部最低磁化态，而外磁场强度为正时几乎全部收敛到最高磁化态。外磁场强度为 0 时，其表现出了对称性自发破缺，既可能趋于全相同的稳定低能态 (事实上也可能在三种自旋数量接近时获得低能态——此时事实上形成了若干个磁畴，每个磁畴中具有同一类的自旋)。随着温度的升高，磁场对能量的贡献减弱，分子热运动对能量的贡献增强，最终趋于平均磁矩为 2 的无序状态。进一步对高温时进行观察，得到的结果如图 13。



可以看到，结果的确符合趋于混乱的预期，与之前理论分析的结果相同。当  $N$  增大时，结果在形式上并无区别，取  $N = 100$ ，每个点迭代  $2e7$  次，并考虑  $h$  为 0、 $\pm 0.1$ 、 $\pm 1$  的情况，结果如图 14。

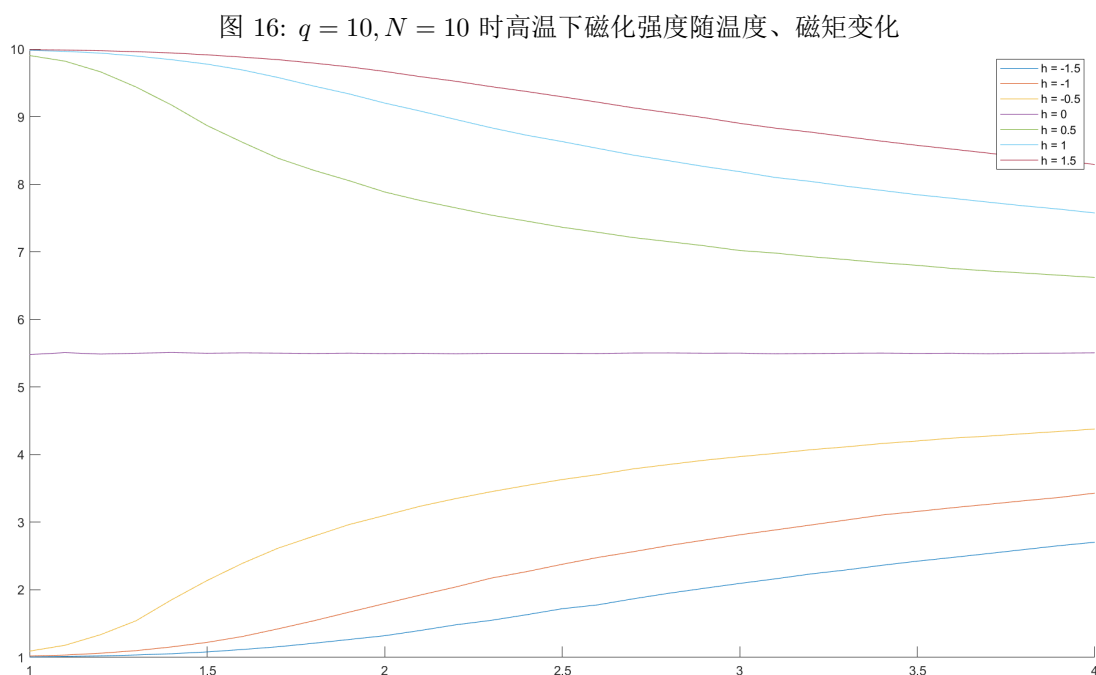
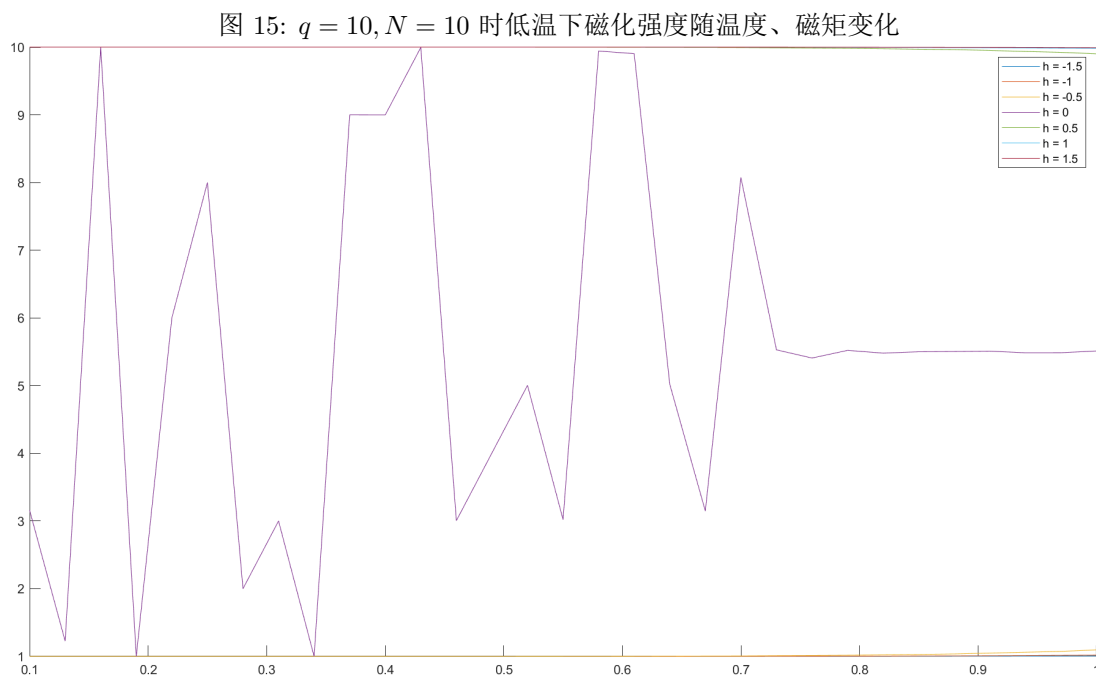


这里由于迭代次数没有保证充分收敛，对称性破缺的体现并不完全，进行更充分的迭代仍可以得到和

之前相似的结果，与下方  $q = 10, N = 100$  的情况类似。

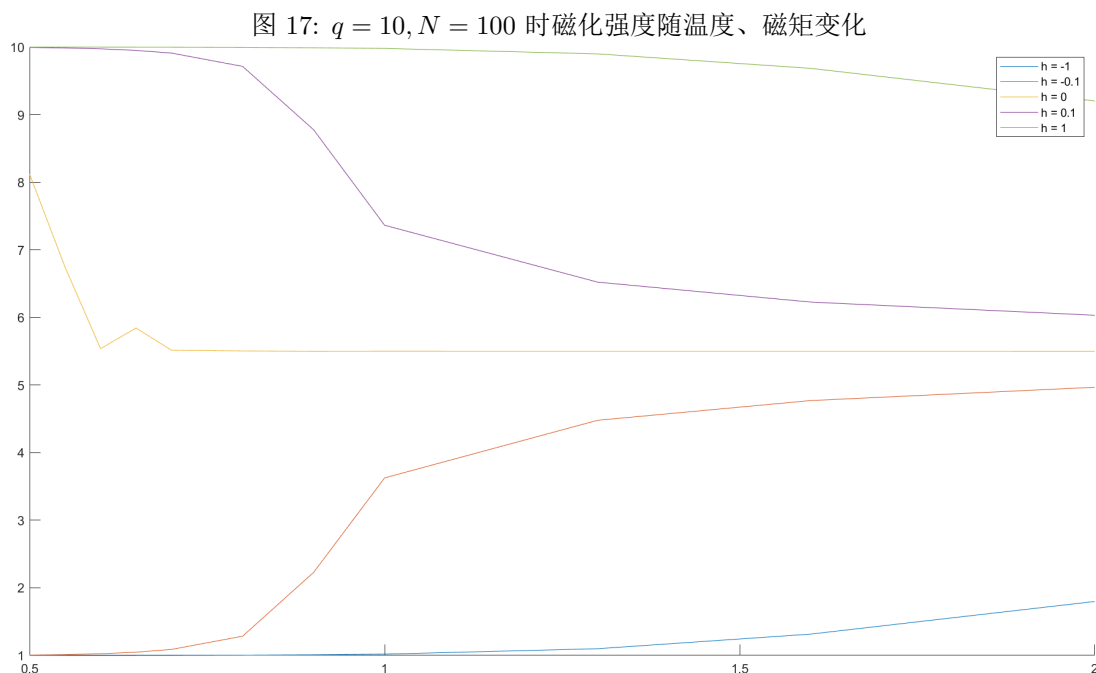
### 3.4 $q = 10$ 结果展示

同样先考虑  $N = 10$  的情形，每个点迭代  $3e6$  次，对  $h$  取定  $-1.5$  到  $1.5$ ，低温、高温时的模拟效果如图 15 与图 16。



考虑  $N = 100$  的情形，每个点迭代  $1e8$  次以保证充分，仍考虑  $h$  为  $0, \pm 0.1, \pm 1$  的情况，效果如图 17。

从图中可以看出，比临界温度低越多时，对称性自发破缺会变得越明显，也越有可能长期平均偏离期



望 5.5。而极限情况，当温度趋于 0 时，只有高能到低能的状态转移，理论上必然趋于全部同为某自旋的最低能态。

## 4 相干长度

### 4.1 问题描述

定义协方差  $C(i, j) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$ ，则相干长度为距离为  $k$  的两点的  $C(i, j)$  衰减至 0 的长度。具体来说，可估算

$$\Gamma(k) \approx \frac{1}{4N^2} \sum_i \sum_{j \in S_i} C(i, j), \quad S_i = \{i \pm (k, 0), i \pm (0, k)\}$$

则  $k \gg 1$  时应有

$$\Gamma(k) \approx \Gamma_0 \exp(-k/\xi)$$

设  $h = 0$ ，估算  $\xi$  并将其绘制为  $T$  的函数。

### 4.2 平均协方差的估算

首先，注意到  $\ln \Gamma(k) \approx \ln \Gamma_0 - \frac{1}{\xi} k$ ，只需要对  $\ln \Gamma(k)$  在  $k$  较大时进行线性拟合即可从斜率得到  $\xi$ ，因此问题转为对  $\Gamma(k)$  的估算。

将估算重新写为

$$\Gamma(k) = \frac{1}{4N^2} \sum_i \sum_{j \in S_i} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \frac{1}{4N^2} \sum_i \sum_{j \in S_i} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$$

第一项可以改写为  $\langle \langle i, j \rangle_k \rangle$  即为  $i \in S_j$

$$\frac{1}{2N^2} \left\langle \sum_{\langle i, j \rangle_k} \sigma_i \sigma_j \right\rangle$$

设平均中为  $P_k$ ，其有与  $H$  完全类似的更新过程

$$\Delta P_k = (n - o)(\sigma(a - k, b) + \sigma(a + k, b) + \sigma(a, b - k) + \sigma(a, b + k))$$

然而，第二项并没有好的处理手段，只能在迭代中估计每个  $\sigma_i$ ——这意味着每次迭代的时间复杂度从  $O(1)$  回到了  $O(N^2)$ ，并在迭代结束后计算均值以得到第二项。

此外，由于第二项也可改写为

$$\frac{1}{2N^2} \sum_{\langle i,j \rangle_k} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle$$

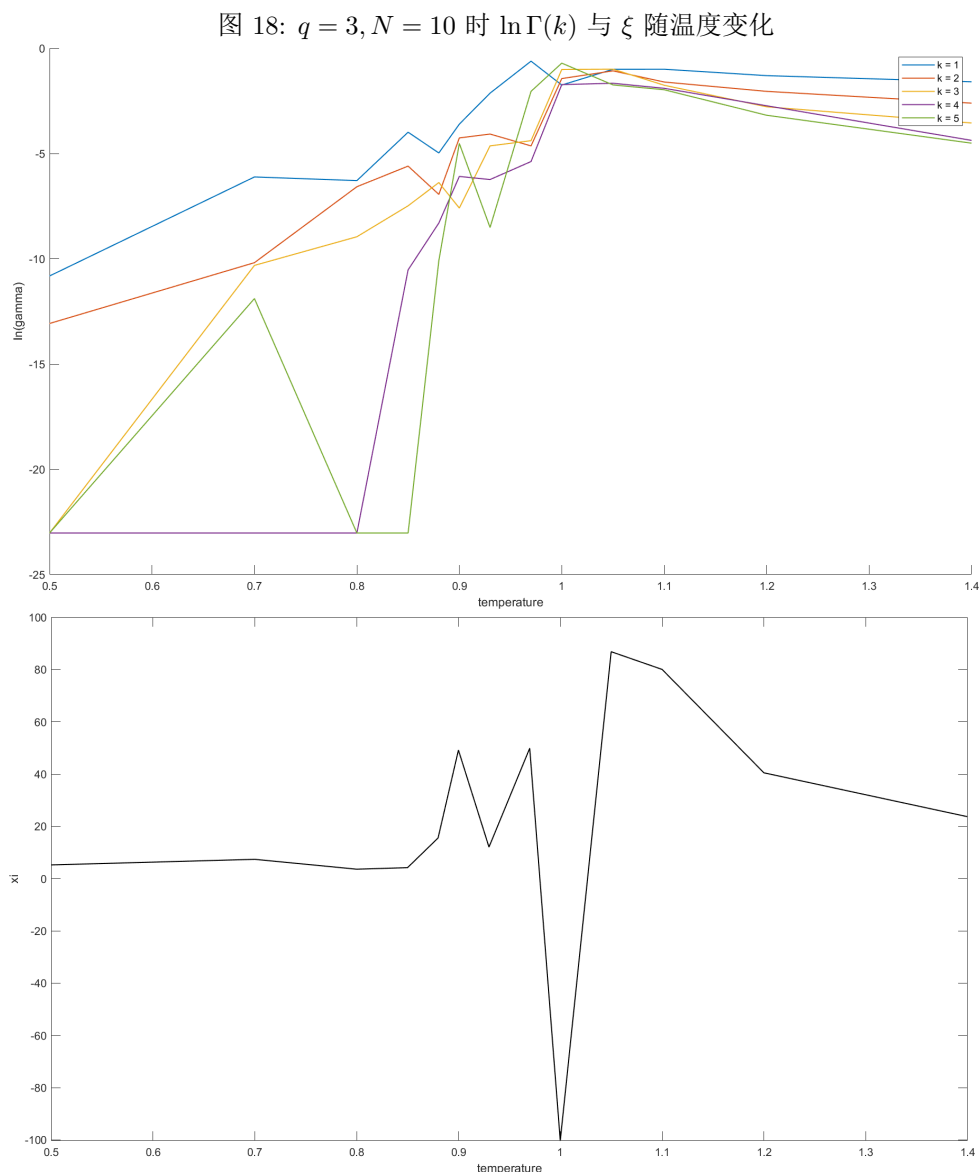
计算所有  $\langle i,j \rangle_k$  求和的函数可以重复使用。

由于实际计算中的随机性， $\Gamma(k)$  可能会出现负数，出于数值观察，正数的量级基本不会低于  $10^{-7}$ ，我们将负数视为  $10^{-10}$  以方便拟合。

### 4.3 基本效果与改进

先假设  $q = 3$ 。

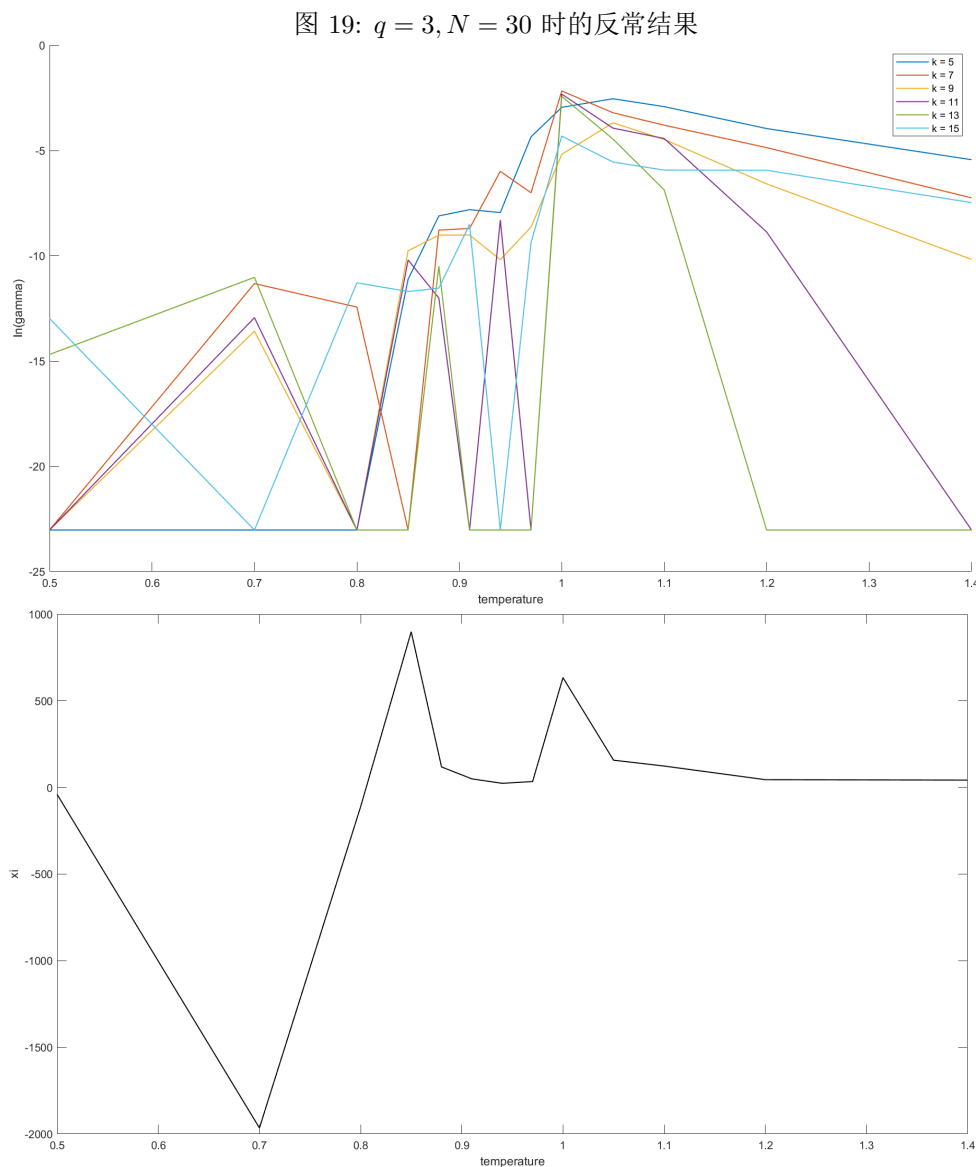
虽然要求  $k \gg 1$ ，但考虑到算力因素，我们仍然先从简单情况进行分析。对  $N = 10$  的情况在每个点进行  $1e6$  次模拟，考虑  $k = 1, 2, 3, 4, 5$ ，绘制出  $\Gamma(k)$  随  $T$  的变化与拟合的  $\xi$  随  $T$  的变化图，如图 18。



这里取  $k = 1, 2, 3, 4, 5$  是由于  $k$  与  $N - k$  对应的情况完全相同。从图中可以看出，虽然总体上同一

温度下  $\Gamma(k)$  随  $k$  增大而衰减，但会出现一些反常情况，尤其在**临界温度附近**，最终甚至可能出现估算出的  $\xi$  为负的情况。这是由于临界温度附近  $\xi$  接近 0，因此一旦反号就会导致巨大的负值出现。

再对  $N = 30$  的情况在每个点进行  $1e7$  次模拟进一步观察，考虑  $k = 5, 7, 9, 11, 13, 15$ ，绘制出  $\Gamma(k)$  随  $T$  的变化与拟合的  $\xi$  随  $T$  的变化图，如图 19。



因此，直接将所有的  $k$  用于斜率拟合效果并不好，此外，可以看出  $k = 15$  时有着非常明显的反常，而  $k = 5$  在低温时也存在一定的反常。

为了分析对于较小的  $N$  得到的结果，我们记网格大小为  $N$  时的结果为  $\Gamma_N(k)$ 。一个重要的观察是，由于循环边界条件，考虑将其无限重复放大后，原网格中距离为  $k$  的点实际也会对应真实网格距离  $N - k$  的点，因此存在估算

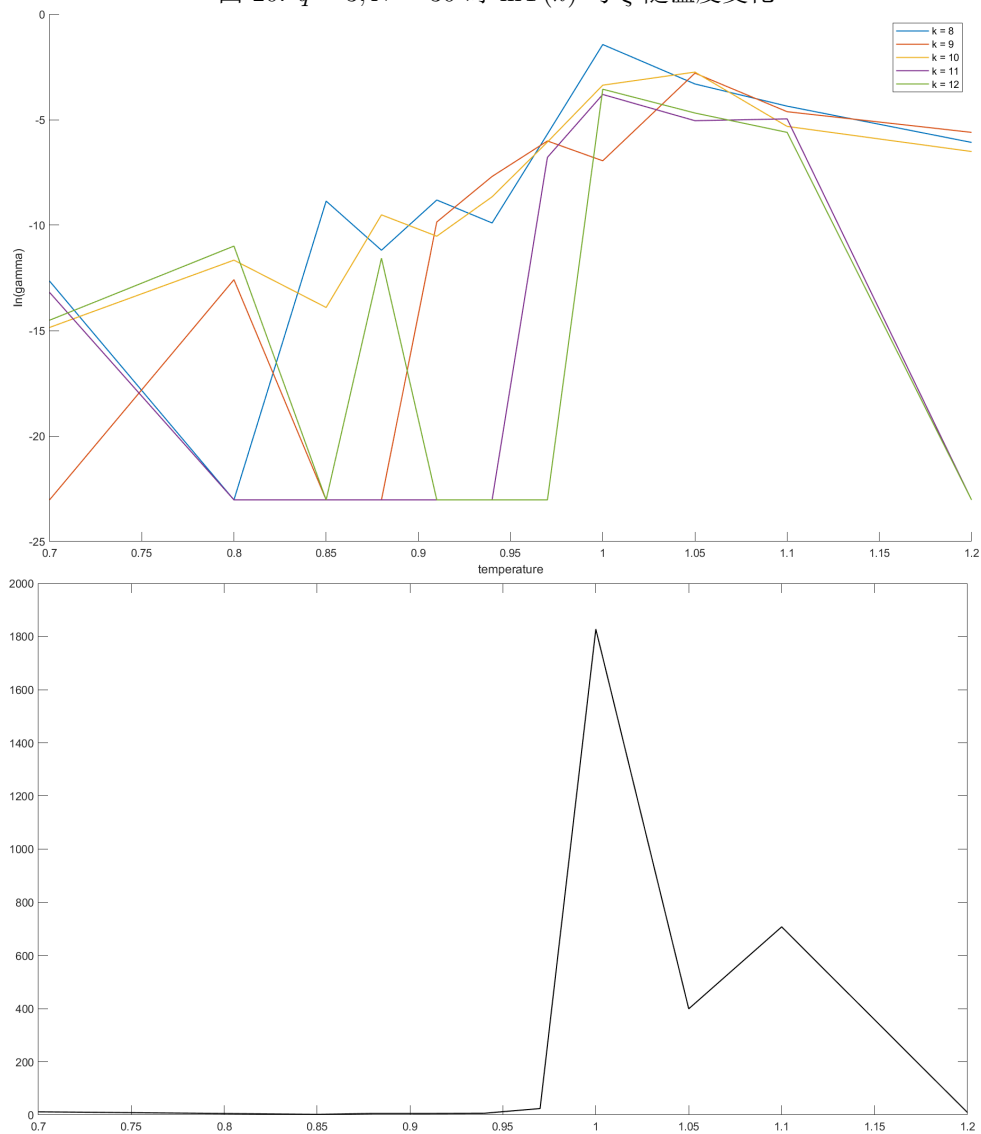
$$\Gamma_N(k) \propto \Gamma(k) + \Gamma(N - k)$$

当  $k$  与  $N - k$  相差较大时，最终结果几乎只有  $\Gamma(k)$  是重要的，由此可以作为估算，但相差较小时，后一项则可能会影响，尤其是  $k = N/2$  时，由于二者的累计，对应的偏差可能相当大，由此，我们希望  $\Gamma_N(k)$  能较好估计  $\Gamma(k)$ ，且拟合出正确的斜率，实际上需要

$$1 \ll 2k \ll N$$

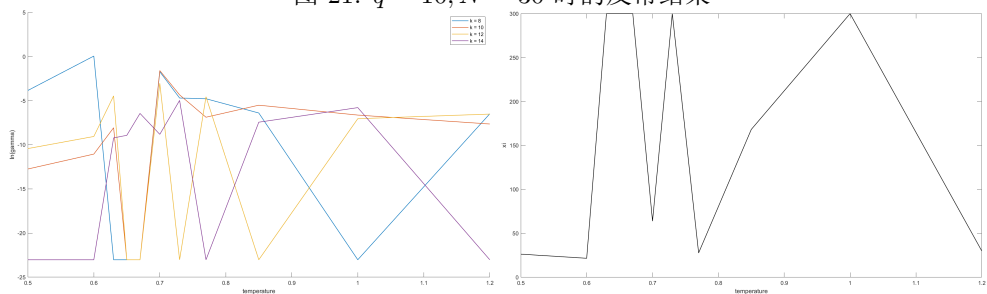
在此估算下，当  $N = 30$  时只能取出更少的  $k$  进行估算，我们尝试用  $k = 8, 9, 10, 11, 12$  估算斜率，此外，尝试直接去除  $\gamma$  为负的点 (若去除后过少则保留  $k$  最大的两个)，且之后的绘制中，若  $\xi$  出现正值，可令其斜率至多为  $-1/(10N)$ ，从而使  $\xi$  最大为  $10N$ 、最小为 0。进行上述处理后，实际效果如图 20。

图 20:  $q = 3, N = 30$  时  $\ln \Gamma(k)$  与  $\xi$  随温度变化

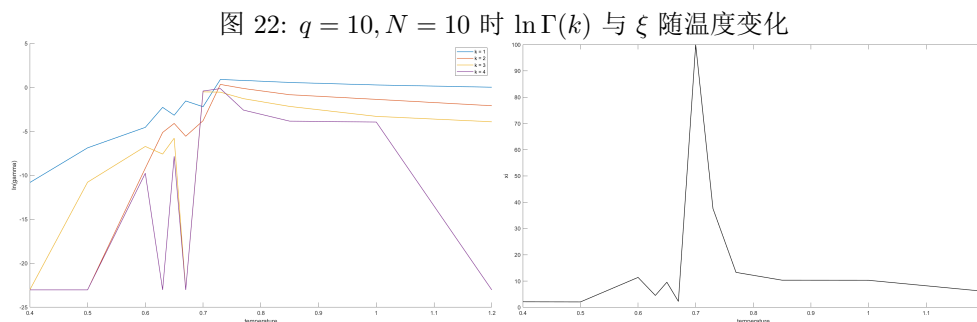


可以发现，这时已有较明显的在临界温度附近趋于无穷的效果。可是，这样的算法仍然无法从本质上避免奇异的出现，例如取  $N = 30, q = 10$ ，即使迭代次数充分多，仍然可能出现图 21 这样的奇异情况。

图 21:  $q = 10, N = 30$  时的反常结果

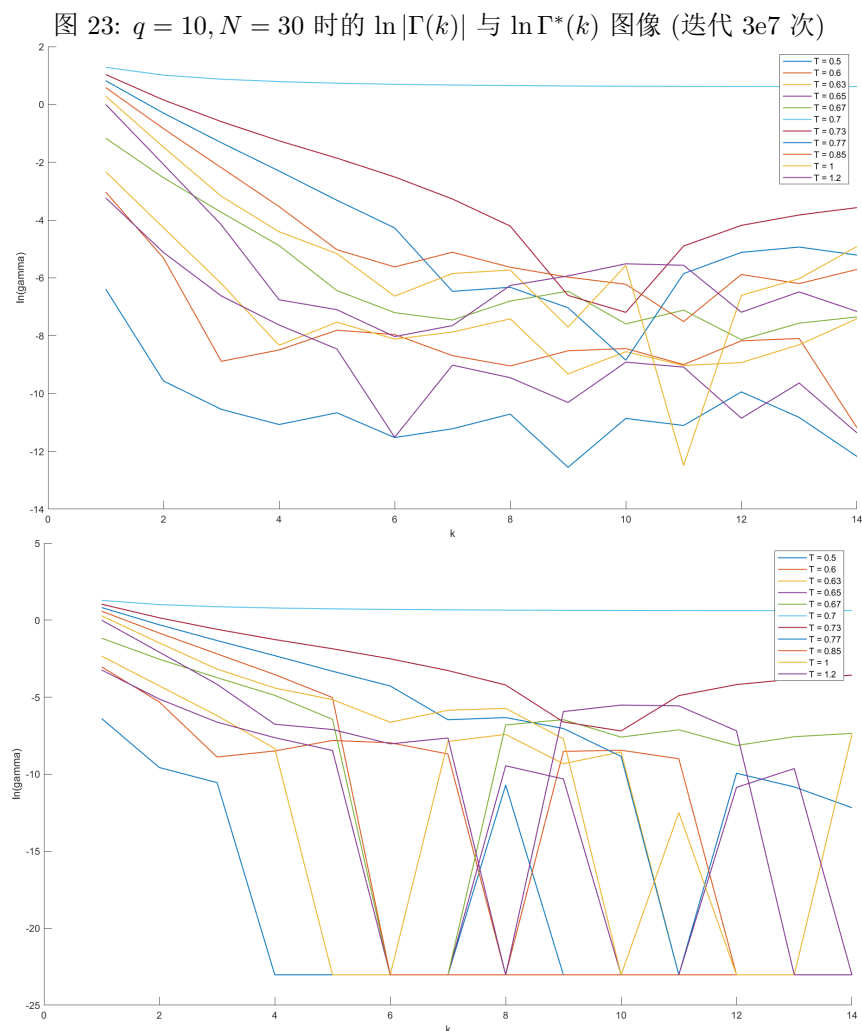


由于几乎每个点处都有变为负数的  $\Gamma(k)$ ，最终的结果也很难有效。不过，在网络取更小的  $N = 10$  时，算法却能得到较漂亮的收敛结果，如图 22，

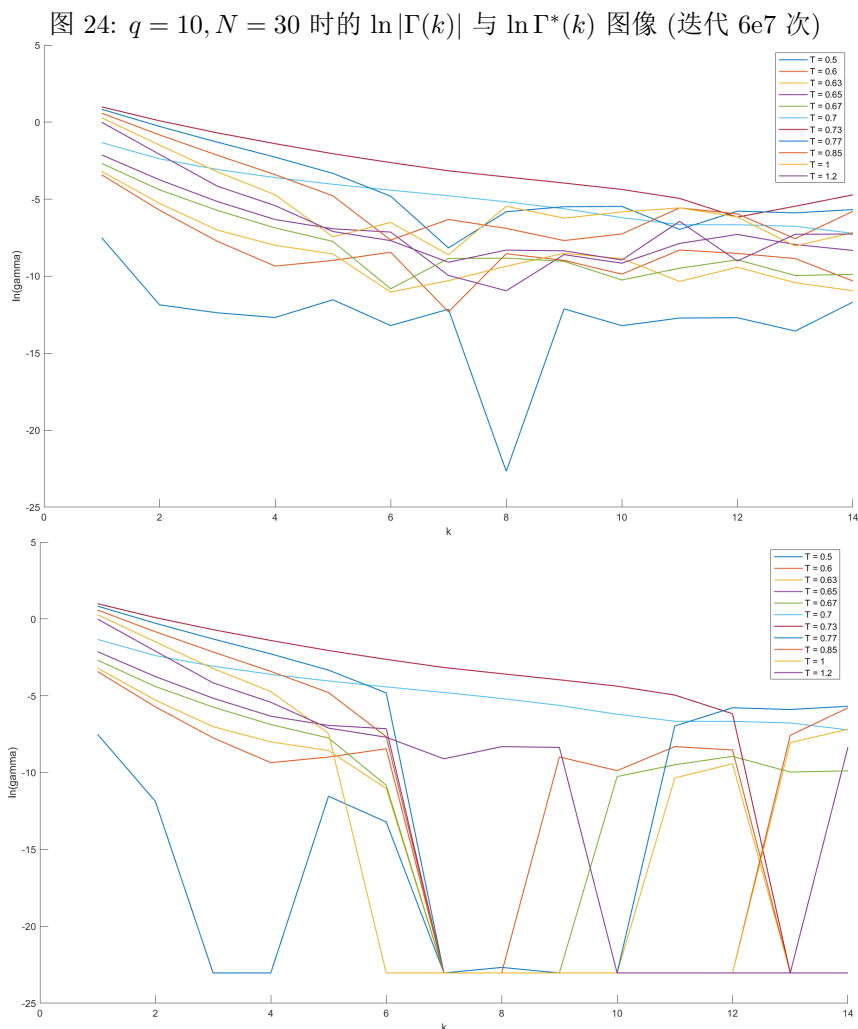


分析其原因，在网络变大时，会存在更多相对低能量的稳定态（互相之间到达概率较低，且每个态回到自己的概率相对高），但这些稳定态附近的方差数值可能不同。由此，我们尝试在一次迭代中同时估计所有需要的  $\Gamma(k)$  以获得更好的效果。

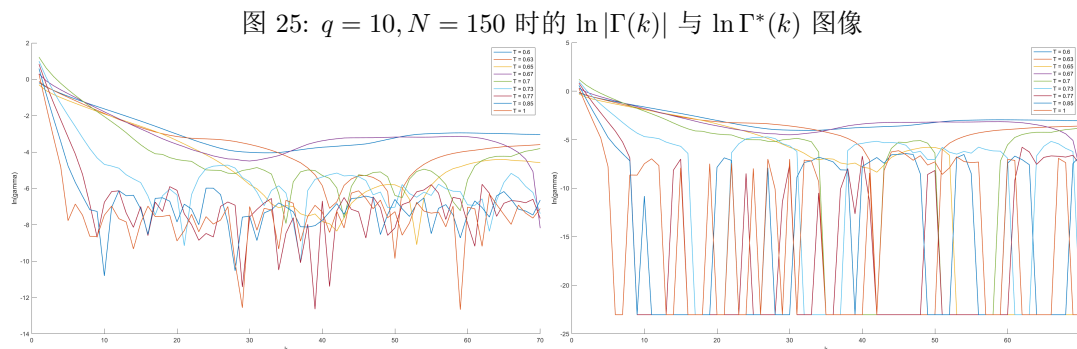
然而，实际实验可以发现，采用上述方法确实大大加快了迭代速度，但并未对结果的收敛性造成改进。为了研究为何会出现如此多负值，尝试以  $k$  为横坐标、 $\ln \Gamma$  为纵坐标在不同  $T$  下绘图，观察趋势。对一直无法得到好结果的  $N = 30, q = 10$  情况，作出的图如图 23，这里  $\Gamma^*(k) = \max(\Gamma(k), 10^{-10})$ 。



可以发现，取绝对值进行数据处理的效果会明显好于直接进行截断。然而，恰恰是  $k$  较大时，无法看出下降趋势，只在  $k$  取 6 时有较清晰的下降。考虑将迭代次数进一步增加，则效果如图 24。

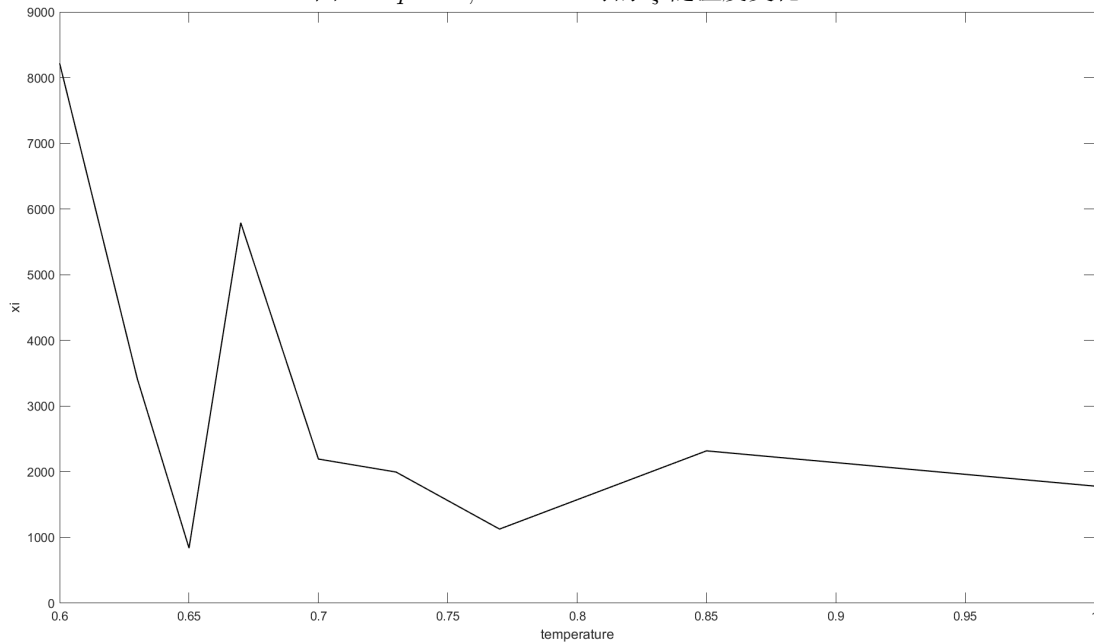


随着迭代次数的增大，计算结果的确更加符合了线性的性质，且在临界温度附近明显斜率偏低，然而，当  $k$  接近 14 时，所有的曲线仍然趋于平缓。进一步放大网格并充分迭代后，效果如图 25。



可以发现，在  $1 \ll 2k \ll N$  满足时，确实展现出了总体下降的性质，但由于振荡过多，这样的下降很难用数值刻画。由此，想到多次模拟进行平均以消除振荡。将上述结果去除负值后进行线性拟合，得到效果如图 26。除了  $T = 0.6$  时的反常外，图像的基本性质是得到了保证的。

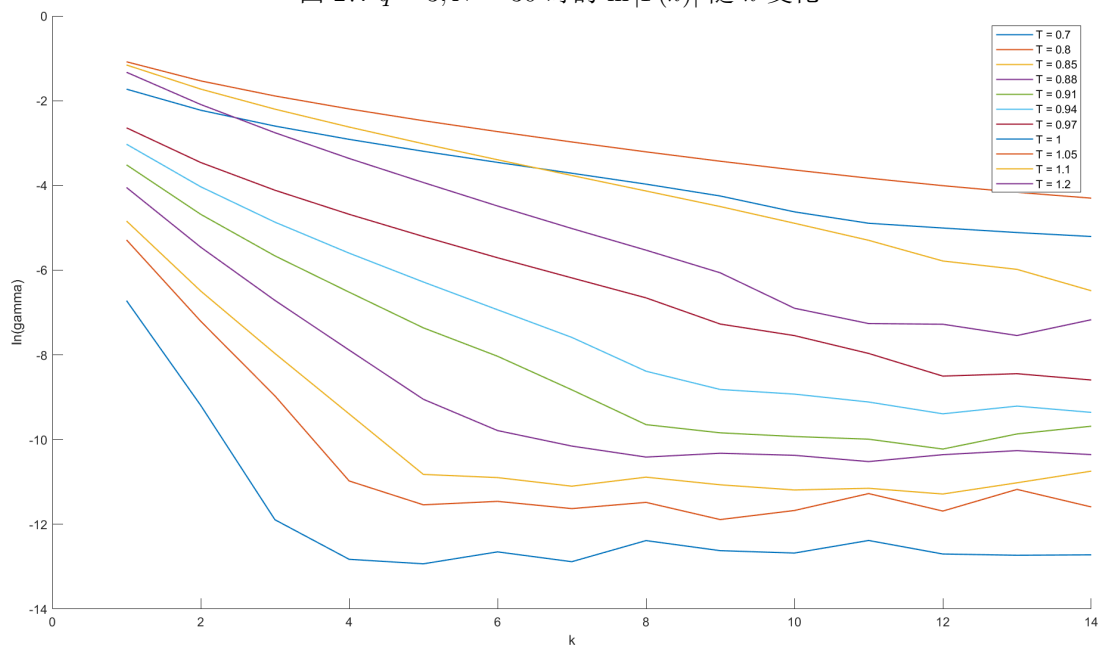


图 26:  $q = 10, N = 150$  时的  $\xi$  随温度变化

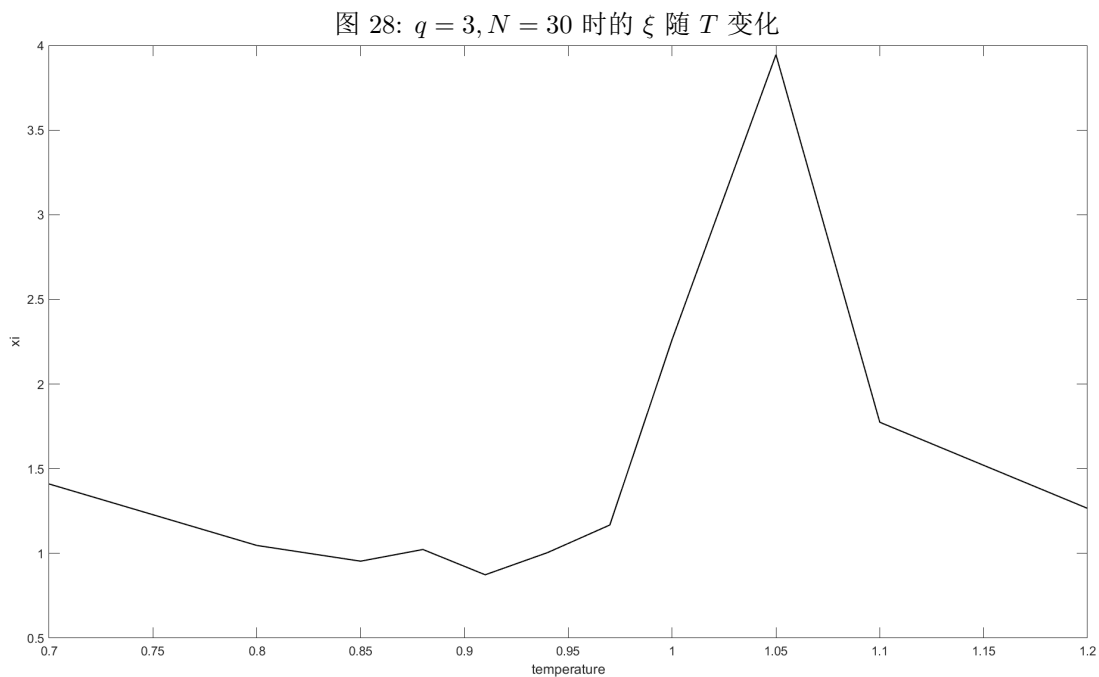
进一步观察,  $T = 0.6$  时的反常事实上源于这里将  $k$  从 1 到 70 都进行了拟合, 取定合适的范围后, 可以进行更好的拟合。出于上述结果, 最终在每个点处多次模拟以消除振荡, 并对模拟结果的负值进行不同的处理, 寻找效果较好的  $\xi$  的模拟。此外, 检查代码发现之前线性拟合处出现了倍数问题, 导致  $\xi$  的量级出现了误差, 这在下方的结果展示中已修复。

#### 4.4 $q = 3$ 结果展示

在  $N = 30$  时, 对  $k = 1, \dots, 14$ , 在每个温度处进行 20 次模拟。取每个点的  $\ln |\Gamma(k)|$  并平均后作图, 效果如图 27。

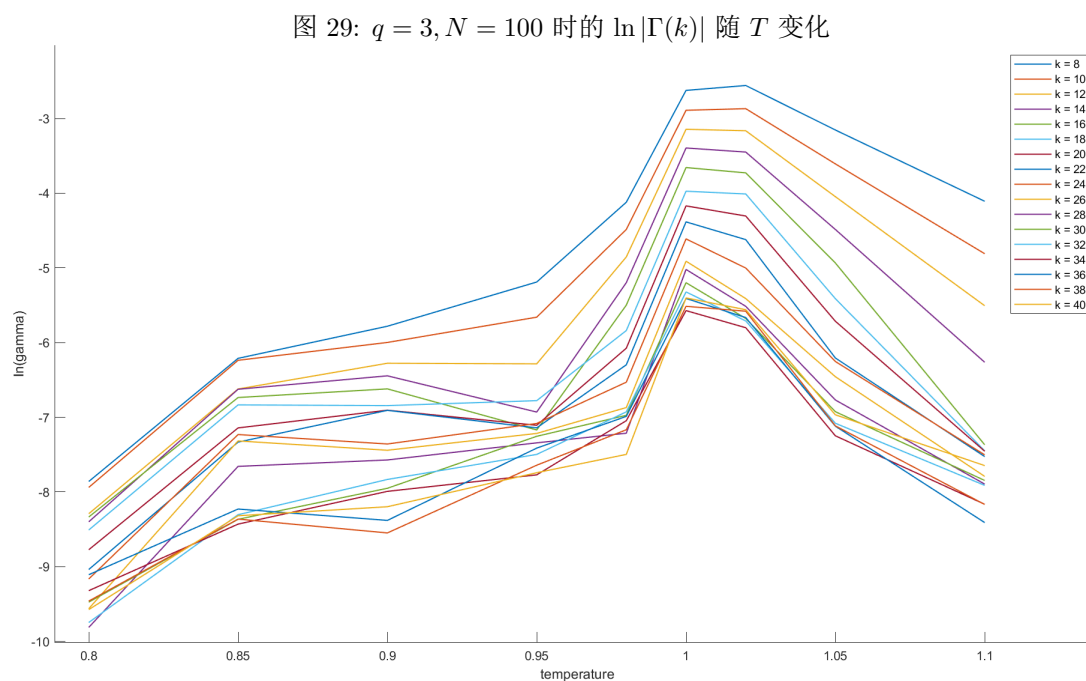
图 27:  $q = 3, N = 30$  时的  $\ln |\Gamma(k)|$  随  $k$  变化

观察不发生反常的部分，对  $k = 1, 4, 7, 10, 13$  进行线性拟合（拟合时利用  $\ln \Gamma^*(k)$ ），得到效果如图 28。



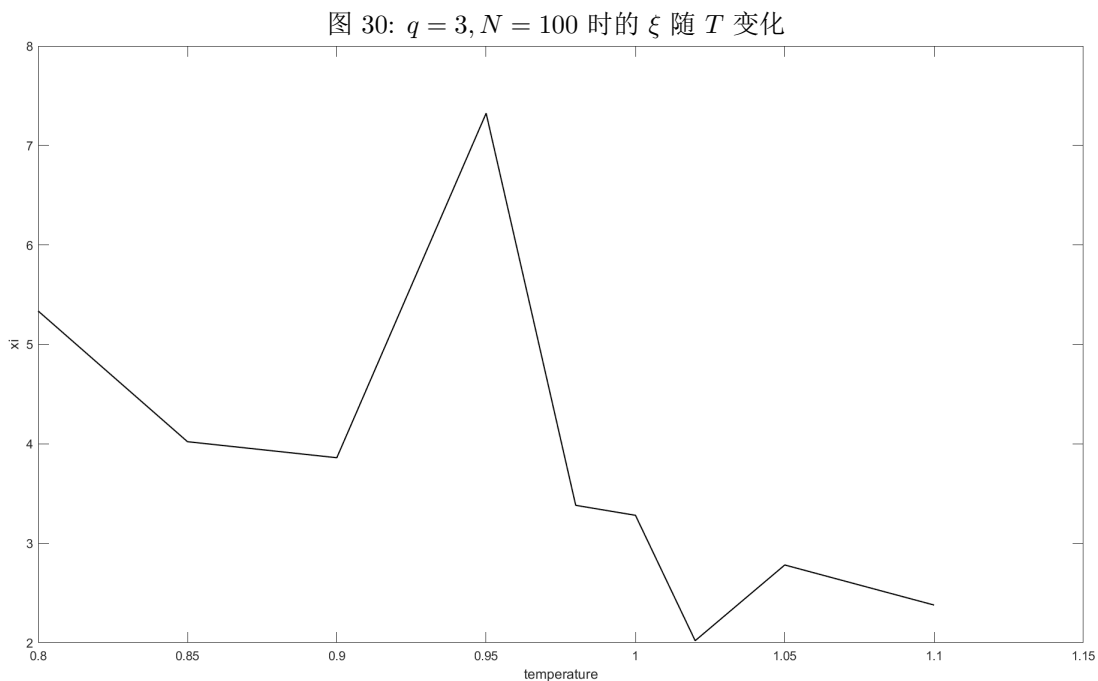
可以明显从图中看出 0.98 到 1.05 之间存在  $\xi$  的极大点，符合理论上的临界温度结果。

在更大的网格中， $N = 100$  时，对  $k$  为 8 到 40 中的偶数，在每个温度处进行 20 次充分模拟。取每个点的  $\ln |\Gamma(k)|$  并平均后作图，这次按  $T$  作图，效果如图 29。



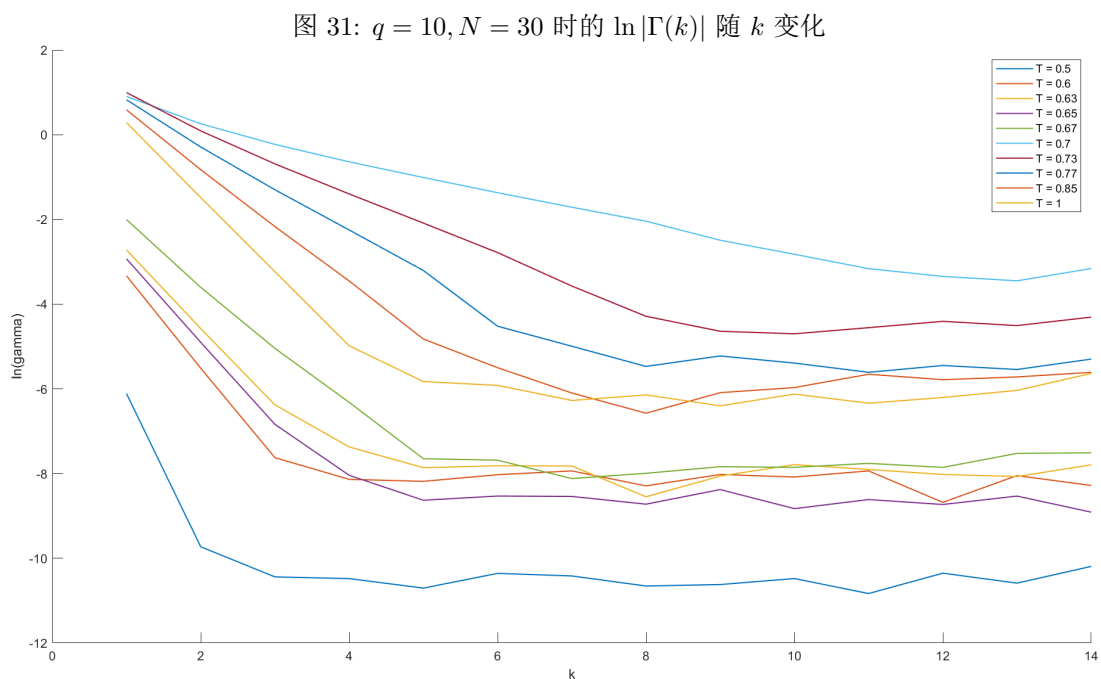
观察不反常的部分，对  $k = 16, 26, 32, 36$  进行线性拟合，得到效果如图 30。此时仍可发现临界温度附近的尖峰，符合理论结果。此外，在边界处估算的  $\xi$  会有一定幅度的上升，这在  $T = 3$  与  $T = 10$  时均可观察到，观察  $\ln |\Gamma(k)|$  随  $T$  变化的图片，可以猜测是由于离临界温度相对远，偏小偏大的  $k$  的反常都

更加明显。事实上，在较大处  $\ln \Gamma^*(k)$  的变化反而更加良好，这也是为什么拟合时采用  $\Gamma^*$  而非  $|\Gamma|$ 。



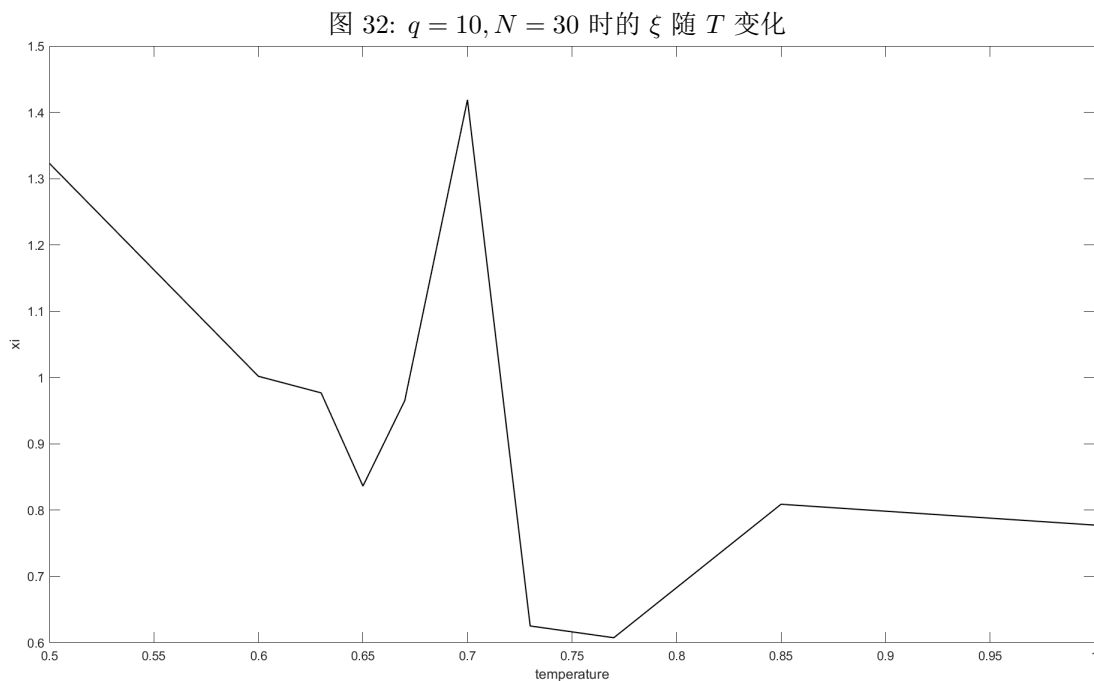
#### 4.5 $q = 10$ 结果展示

在  $N = 30$  时，对  $k = 1, \dots, 14$ ，在每个温度处进行 30 次模拟 ( $q = 10$  时反常情况更容易出现，需要更多模拟次数)。取每个点的  $\ln |\Gamma(k)|$  并平均后作图，效果如图 31。

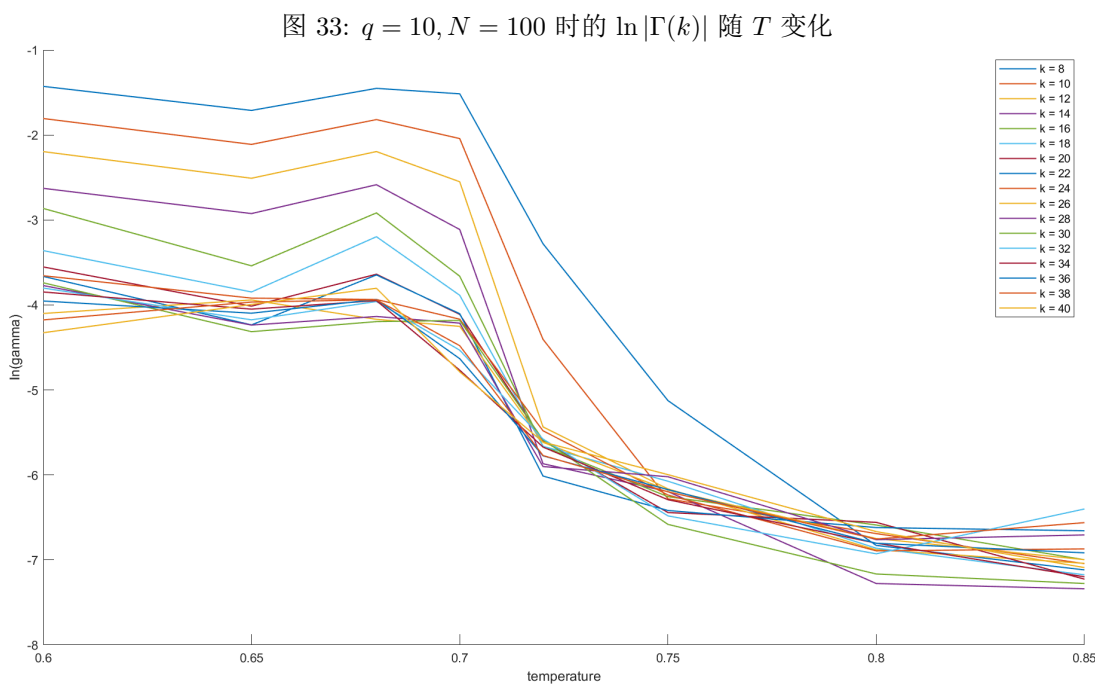


从图中可以更加明显地看出，当  $T$  偏低时，整体过低，导致难观察到随  $k$  增大的下降，而  $T$  偏高时整体则也在高位，只有  $T$  接近临界温度时才能看出直观的下陷关系。并且，总体来说从右侧接近临界温度时效果更好，这可能与之前观察到的自发对称性破缺导致的极端情况有关。

由此，取  $k = 2, 7, 10, 12$ ，拟合作图如图 32，即有奇异点 0.5 以外直观的尖峰。由于高低温时反常现象出现增多，下面去掉低于 0.6 或高于 0.9 的点，以精细进行最终拟合。

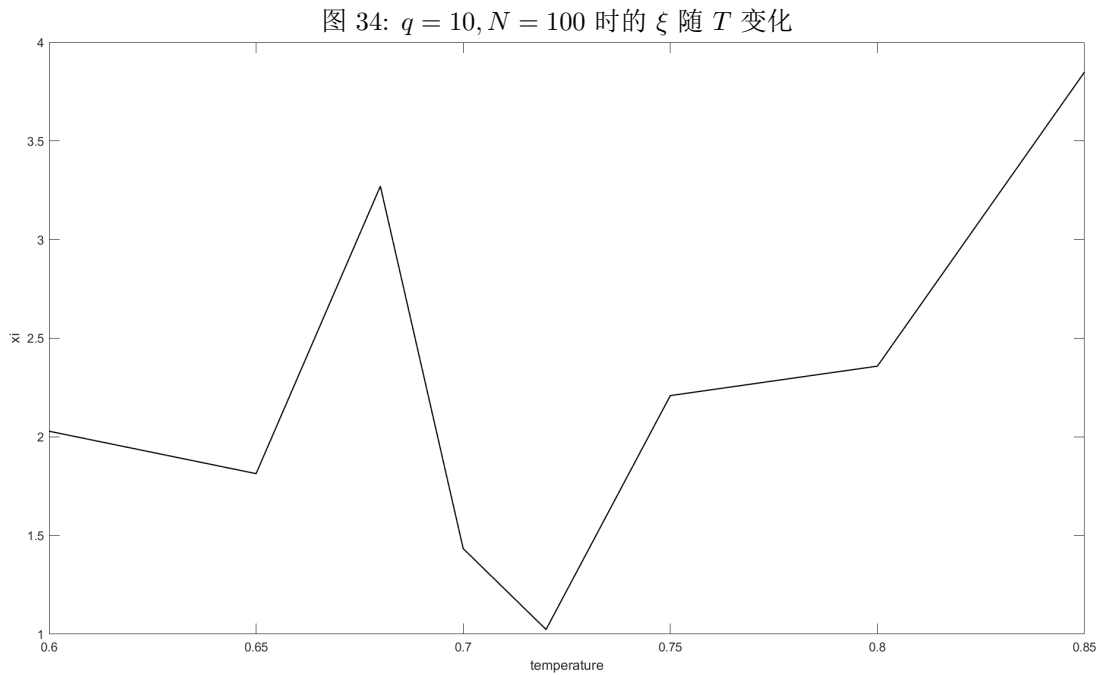


放大网格，在  $N = 100$  时，对  $k$  为 8 到 40 中的偶数，在每个温度处进行 30 次充分模拟。取每个点的  $\ln |\Gamma(k)|$  并平均后作图，并按  $T$  作图，效果如图 33。



注意到，在  $T = 0.85$  时情况过于反常，几乎已经无法正常拟合，于是还是采用  $\ln \Gamma^*(k)$  作为最终拟合。而由于其他点处有着相对更好的线性性，取  $k$  为 8 到 20 中的偶数 (测试可发现，当  $k$  取得更大时，高温处的反常更加明显)，拟合效果如图 34。

排除 0.85 处由于离临界温度较远而产生的异常，这的确展现出了临界温度附近趋于无穷的性态。



## 5 极限性质

### 5.1 问题描述

在临界温度  $T^*$  附近, 比热  $c$  与相干长度  $\xi$  变化为

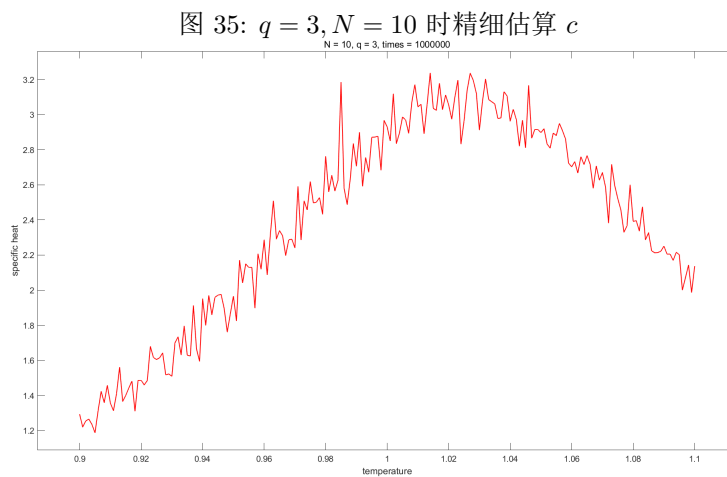
$$c \approx c_0 \epsilon^{-\gamma}, \quad \xi \approx \xi_0 \epsilon^{-\delta}, \quad \epsilon = \frac{|T - T^*|}{T^*}$$

拟合并估算临界指数  $\gamma$  与  $\delta$ 。

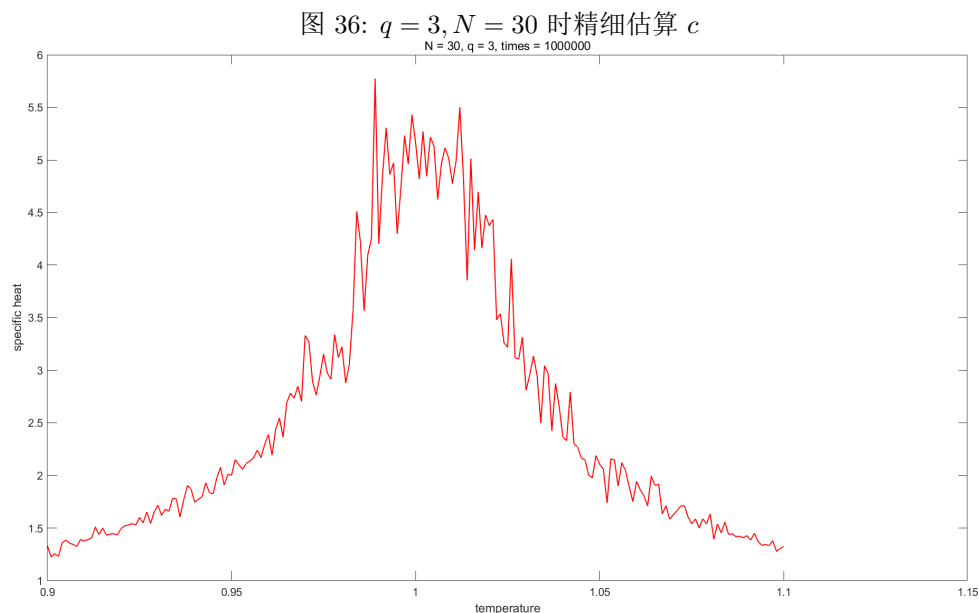
### 5.2 小网格分析

由于大网格需要的模拟时间非常久, 我们先对小网格的情况进行观察与拟合, 观察随网格增大时临界指数的变化, 再确定如何在大网格中进行拟合。先取定  $q = 3$ 。

$q = 3$  时, 采用  $N = 10$  的网格, 在 0.9 到 1.1 以 0.001 为步长, 每个点模拟 5 次并取平均, 得到的热容如图 35。



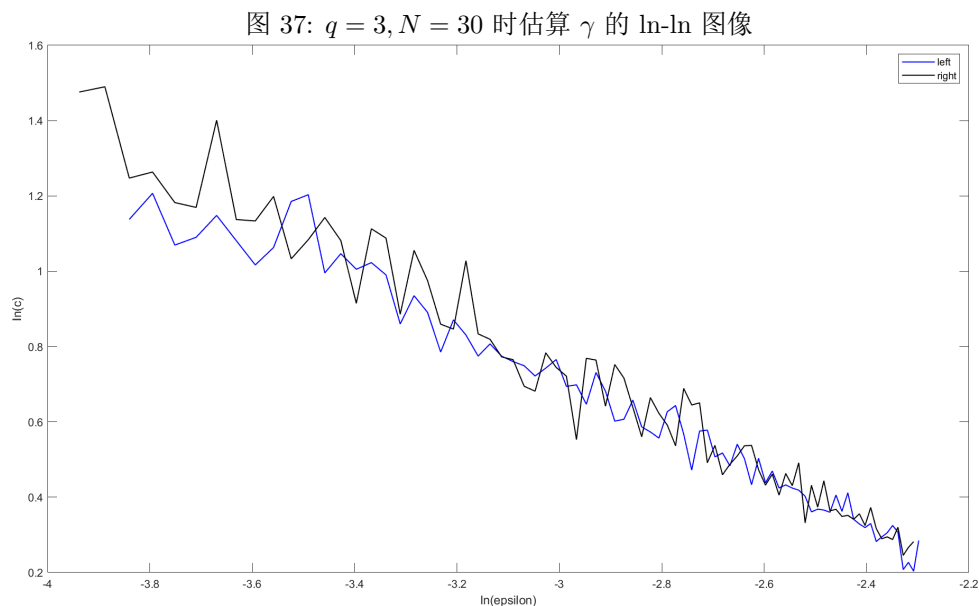
由此，在网格过小时几乎无法看出临界温度附近趋于无穷的性态。考虑将网格放大到  $N = 30$ ，同样进行上述步长与模拟次数的精细平均，得到的热容如图 36。



此时已经能观察到临界温度附近出现的指数爆炸 (过于靠近临界温度时则反而可能出现数值偏差大引起的不准确)，而由于实际测试中的振荡，在更大网格考虑时稳定收敛需要的运算时间过多，因此以  $N = 30$  的网格大小作为最终估算。

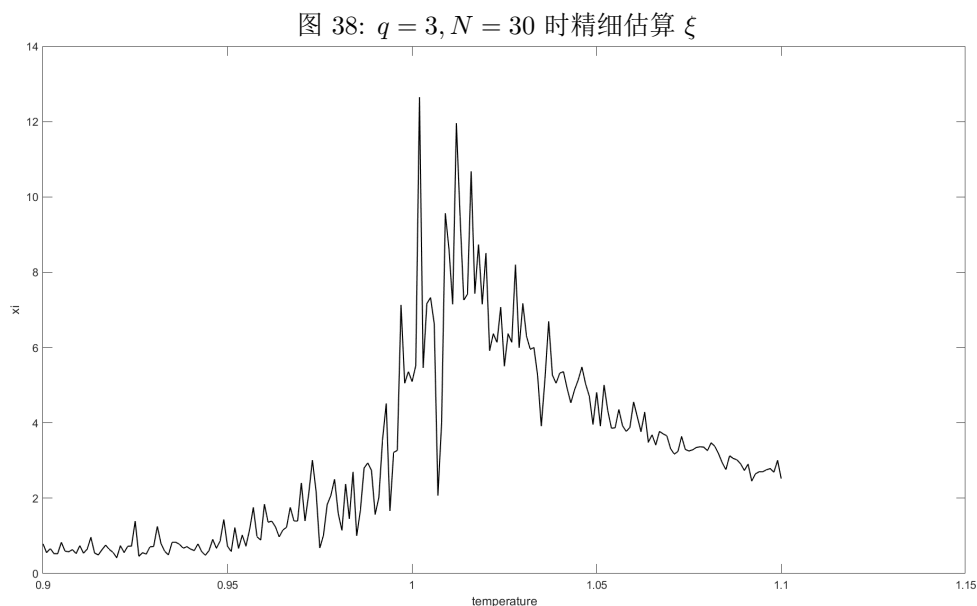
### 5.3 $q = 3$ 结果展示

在图 36 中，将 1 左右两侧的最大值平均值作为临界温度，在适当范围内计算  $\ln \varepsilon$  与  $\ln c$ ，作图效果如图 37。

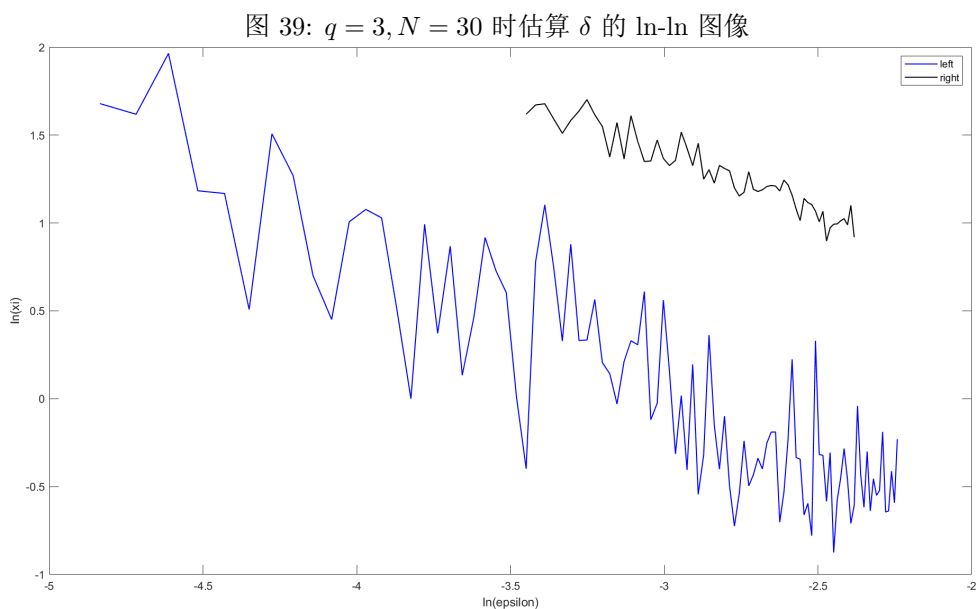


线性拟合可发现左侧、右侧对应的斜率分别为  $-0.6380$  与  $-0.7007$ ，取均值的相反数  $0.67$  作为  $\gamma$  的估算。

对  $\delta$ ，以  $k = 4, 6, 8, 10$  估算  $\xi$ ，作图如图 38。



将 1.01 左右两侧的最大值平均值作为临界温度，在适当范围内计算  $\ln \varepsilon$  与  $\ln \xi$ ，作图效果如图 39。

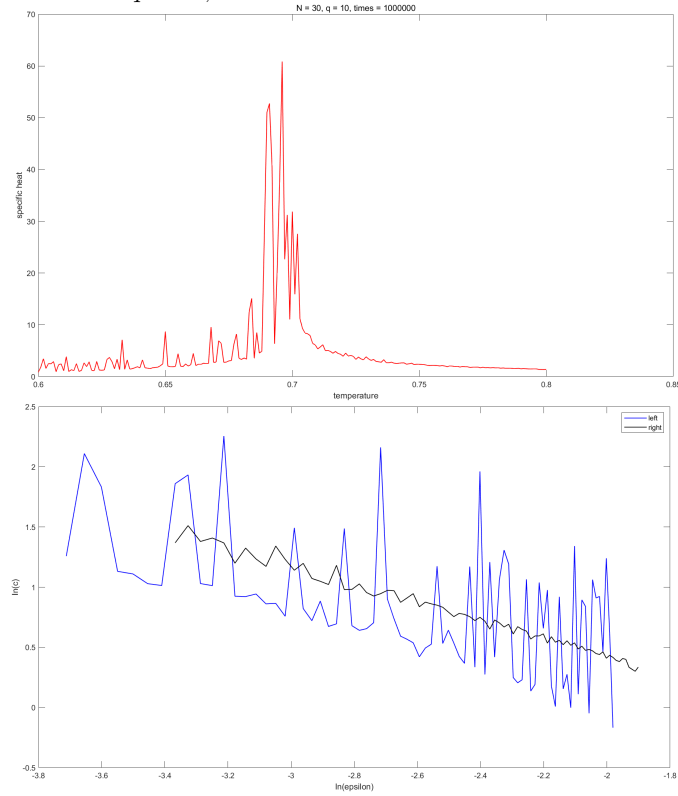


线性拟合可发现左侧、右侧对应的斜率分别为-0.7898 与-0.6630，由于右侧较稳定，取右侧的相反数 0.66 作为  $\delta$  的估算。

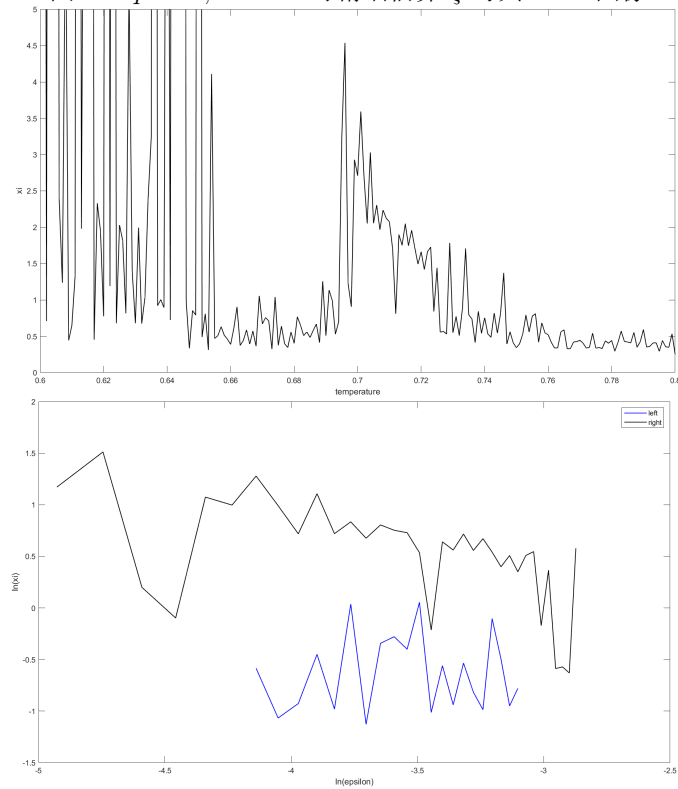
#### 5.4 $q = 10$ 结果展示

与  $q = 3$  时类似，在 0.6 到 0.8 之间进行 0.001 为步长的精细估算。在  $N = 30$  的网格上研究对应的量。此时热容作图如图 40 左。将 0.7 附近的两极大值平均值作为临界温度，在适当范围内计算  $\ln \varepsilon$  与  $\ln c$ ，作图效果如图 40 右。

由于  $q = 10$  时临界温度以下对称性自发破缺的状态可能更多，结果往往不稳定，因此左侧逼近的效果远没有右侧逼近好，因此接下来的估算一般都在临界温度右侧进行。

图 40:  $q = 10, N = 30$  时精细估算  $c$  与其  $\ln$ - $\ln$  图像

线性拟合可发现左侧、右侧对应的斜率分别为-0.5730 与-0.7486，由于右侧线性性态较好，以右侧的相反数 0.75 作为  $\gamma$  的估算。

图 41:  $q = 10, N = 30$  时精细估算  $\xi$  与其  $\ln$ - $\ln$  图像



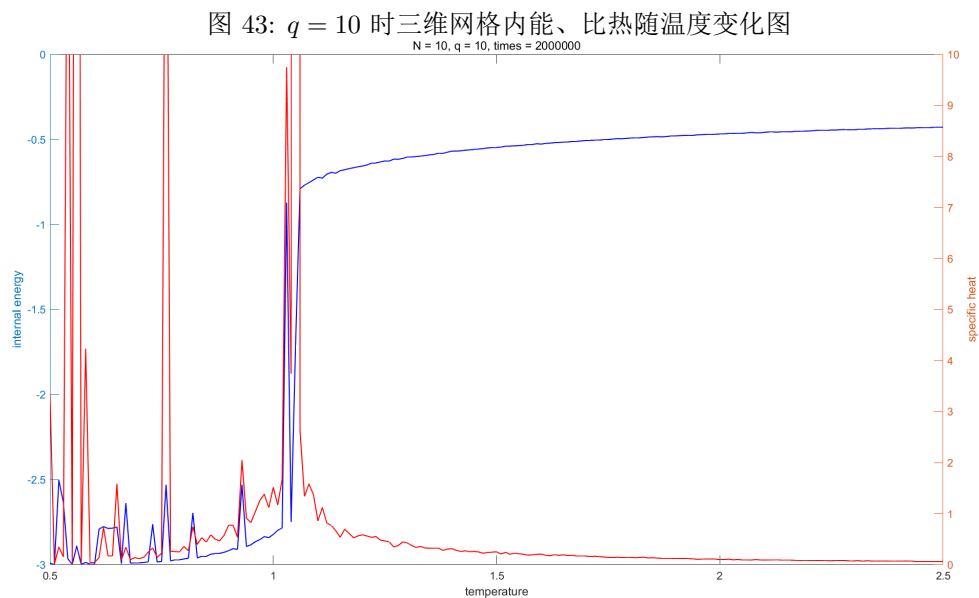
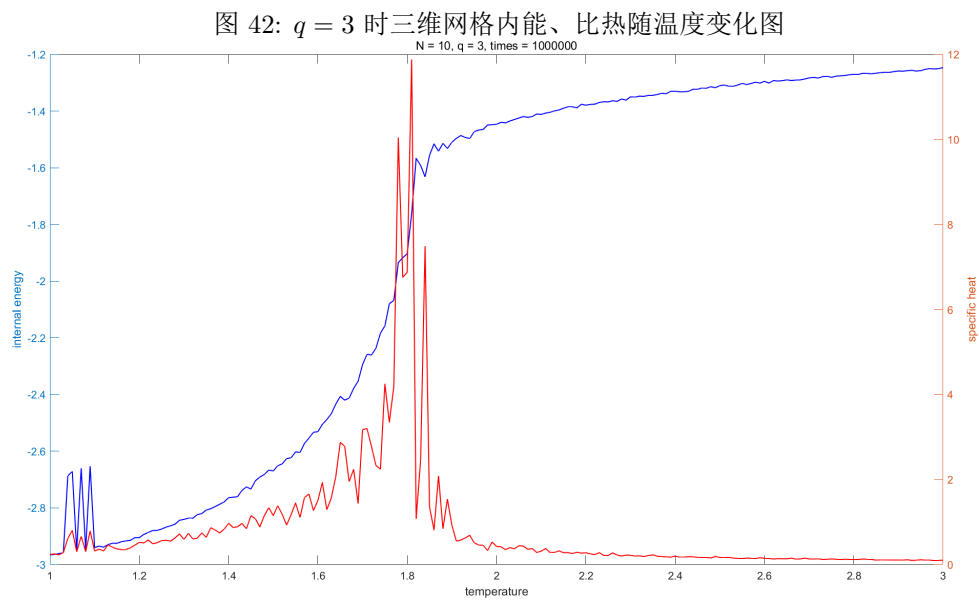
对  $\delta$ ，以  $k = 4, 6, 8$  估算  $\xi$ ，作图如图 41 左。由于临界温度以下过于奇异无法观察，将 0.69 作为临界温度，在适当范围内计算  $\ln \varepsilon$  与  $\ln \xi$ ，作图效果如图 41 右。此时左侧已经失去了线性的参考价值，线性拟合右侧可得对应的斜率为 -0.5142，取相反数 0.51 作为  $\delta$  的估算。

## 6 三维情况

出于算力原因，三维情况无法在大网格中进行实验，因此所有的模拟仅针对小网格时测试代码正确性。下方均取定  $N = 10$ ，不对  $N \rightarrow \infty$  的情况估算。

### 6.1 相变温度

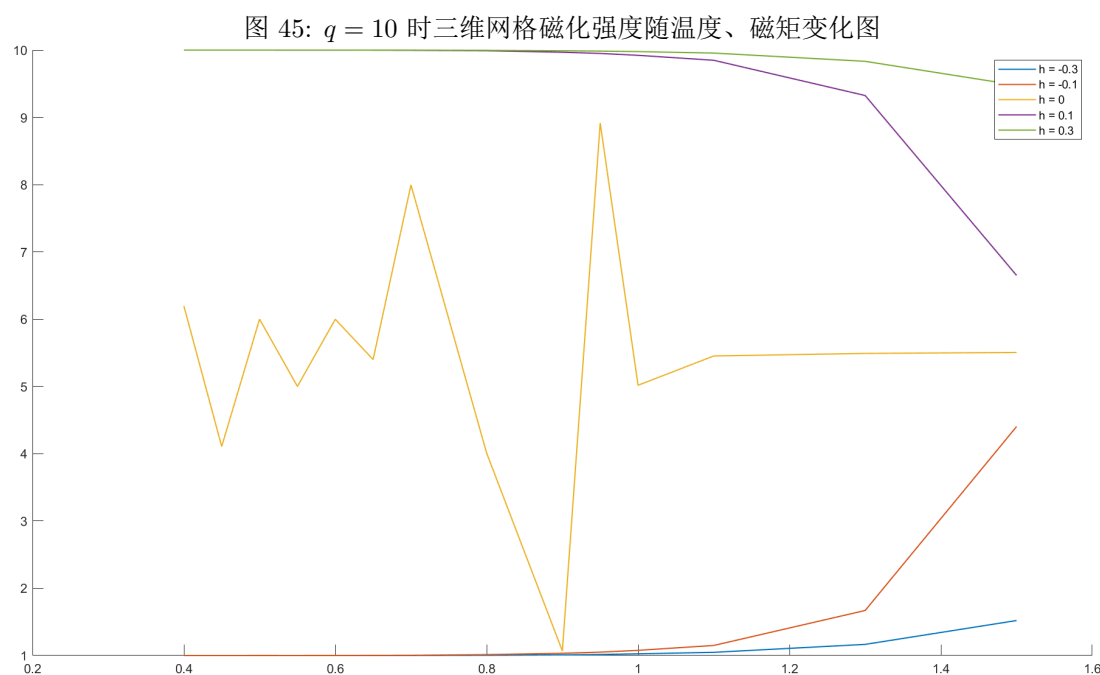
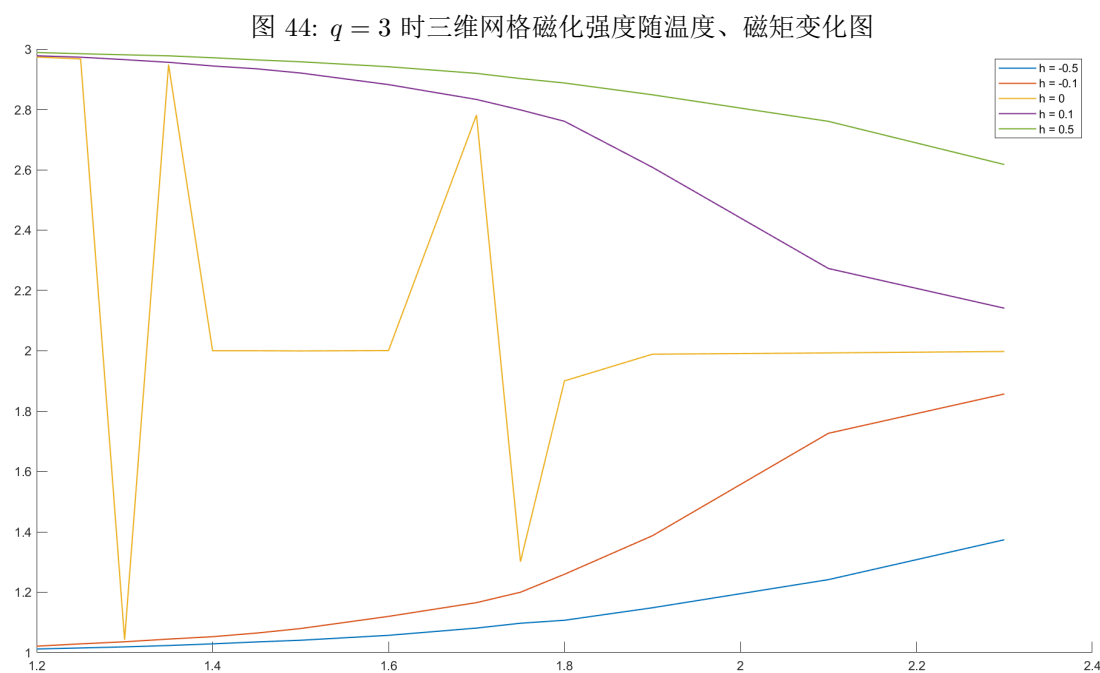
在  $q = 3$ 、 $q = 10$  时内能、比热作图效果如图 42 与图 43。



可以发现,  $q = 3$  时临界温度在 1.75 到 1.8 附近, 周围的比热 (尤其低温处) 呈现了较好的指数性态, 而  $q = 10$  时临界温度在 1.05 附近, 临界温度左侧有个别奇异点, 而右侧则呈现了较好的指数性态。

## 6.2 磁化强度

在  $q = 3$ 、 $q = 10$  时磁化强度随  $T$  与  $h$  变化作图效果如图 44 与图 45。

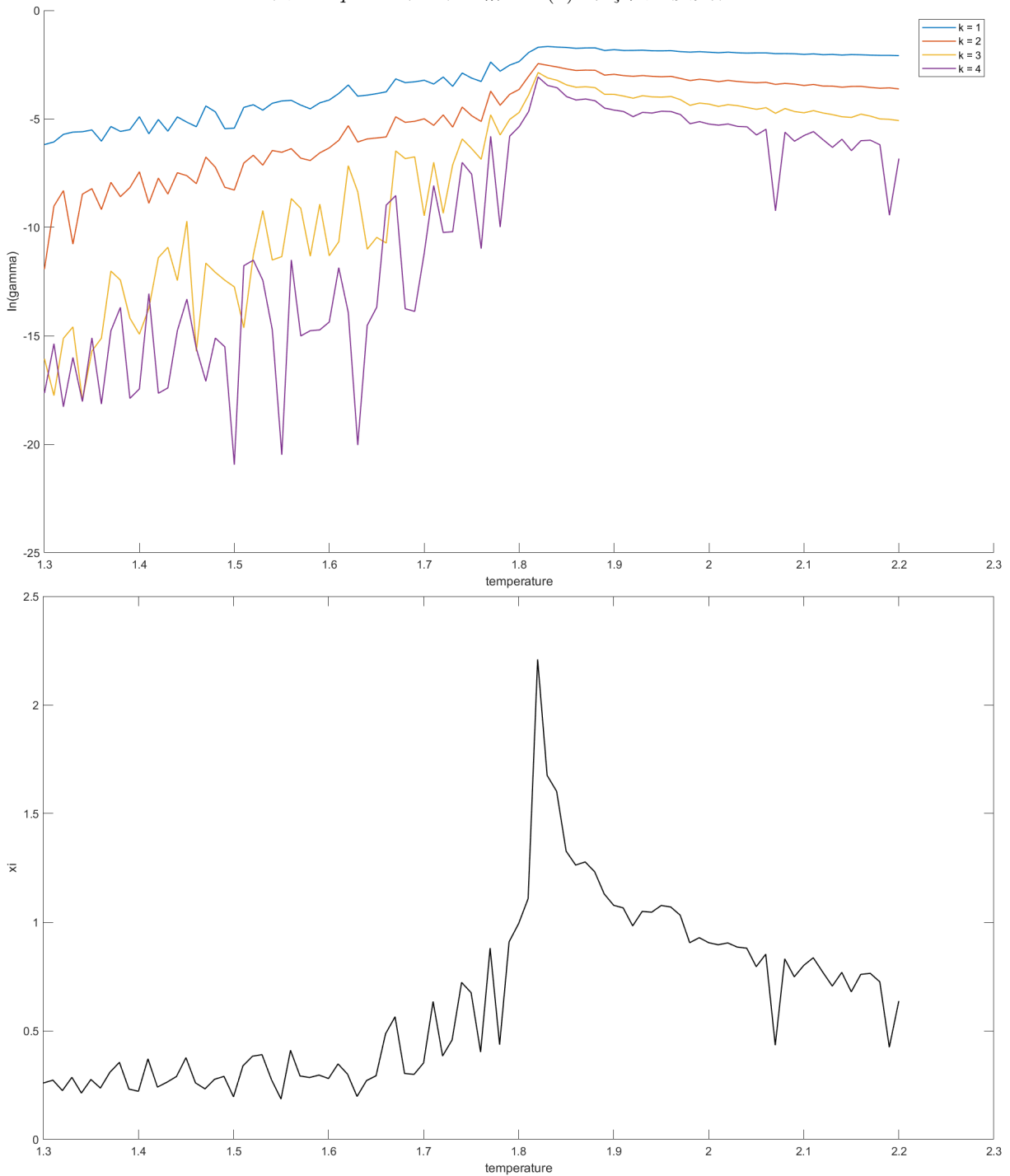


与二维时的观察完全相同, 低于临界温度时出现了对称性自发破缺, 而高于临界温度时分子热运动能量逐渐占据主要, 磁矩的影响降低。此外,  $q = 10$  时由于分子磁化强度的影响幅度更大, 需要更高的温度才能让相同磁矩下更接近混乱状态。

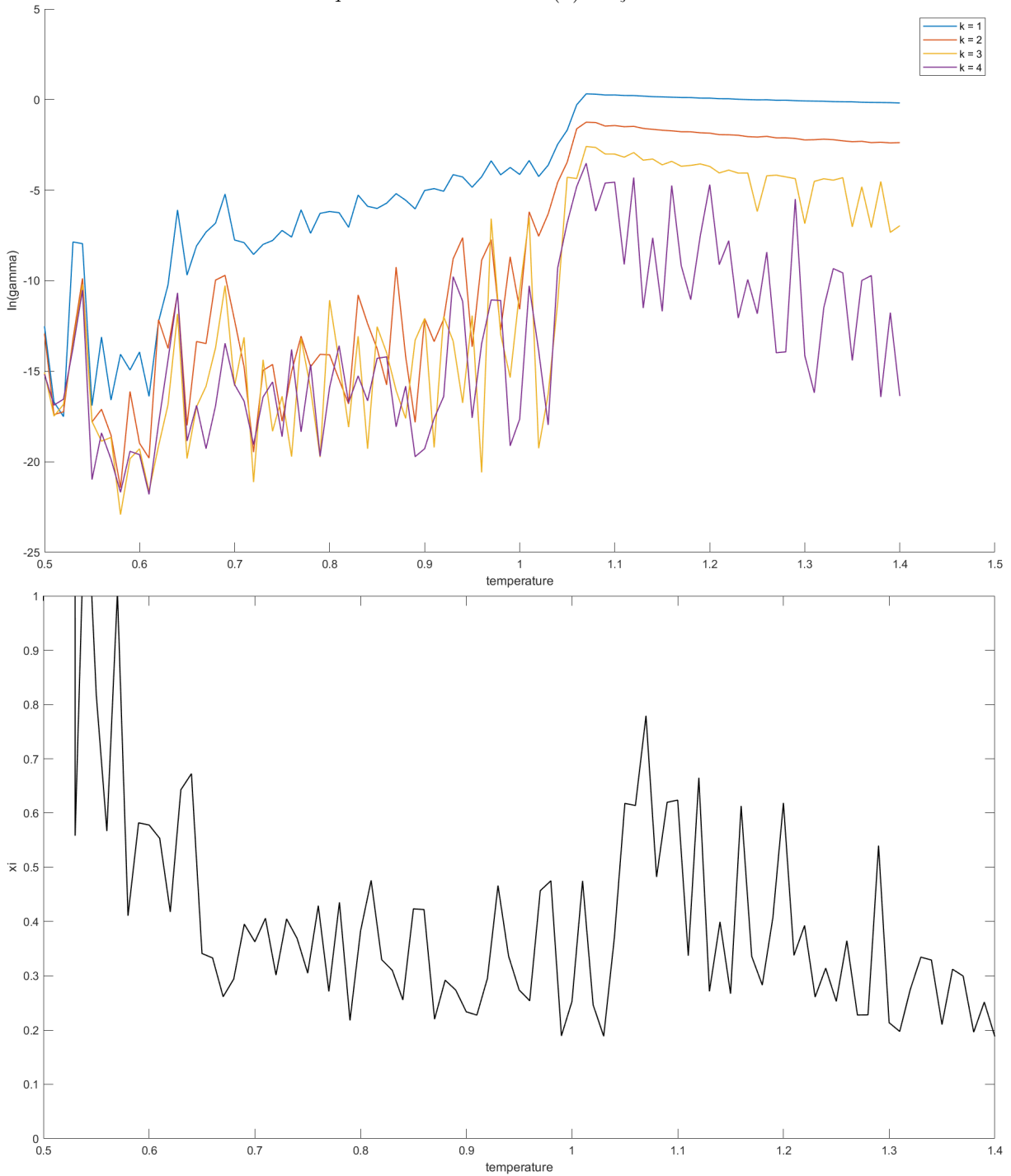
### 6.3 相干长度

在小网格时，相干长度的刻画较为困难，这里作出  $k = 1, 2, 3, 4$  时的情况，以此进行简单的估算。在  $q = 3$  时每个点迭代 5 次并平均，可发现此时  $\ln \Gamma(k)$  与  $\xi$  随温度的变化如图 46。

图 46:  $q = 3$  时三维网格  $\ln \Gamma(k)$  与  $\xi$  随温度变化



在临界温度的右侧，较之左侧表现出了更好的指数性态，这也与之前的观察结果完全相符。在  $q = 10$  时每个点迭代 8 次并平均，可发现此时  $\ln \Gamma(k)$  与  $\xi$  随温度的变化如图 47。由于此处  $\xi$  并不稳定，之后忽略  $k = 4$ ，以  $k = 1, 2, 3$  的数据作为最终估算。

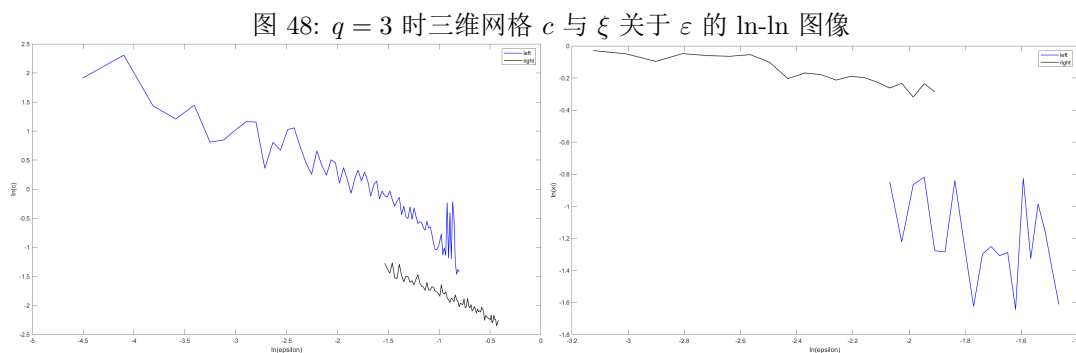
图 47:  $q = 10$  时三维网格  $\ln \Gamma(k)$  与  $\xi$  随温度变化

其效果与  $q = 3$  的情况基本一致，但在低于临界温度时可能反常，高温时也不如  $q = 3$  稳定，符合之前的分析。

#### 6.4 极限性质

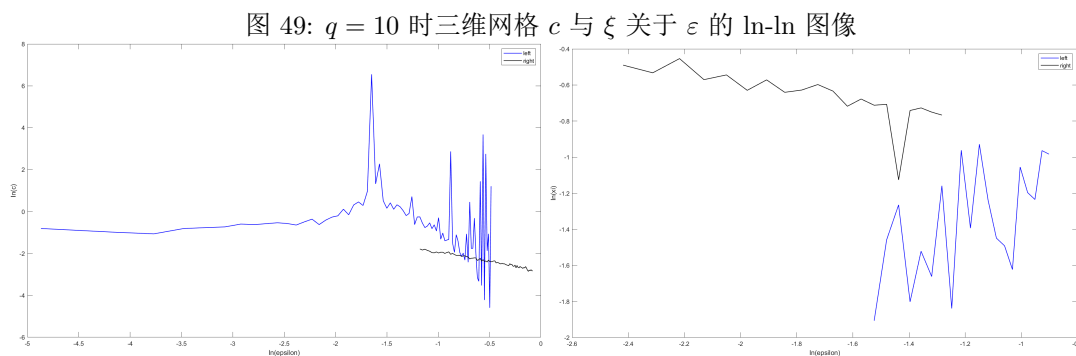
简便起见，我们在之前模拟热容与相干长度时都保存了数据，现在直接以对应的数据计算  $N = 10$  时的极限性态。

在  $q = 3$  时，热容、相干长度在估算临界温度后进行  $\ln\text{-}\ln$  作图效果如图 48。



可以发现，对于  $c$ ，两侧的逼近相对稳定，于是取拟合出的斜率  $-0.8954$ 、 $-0.8421$  均值的相反数作为  $\gamma$  的估算，即估算为  $0.87$ 。对于  $\xi$ ，从左侧拟合效果并不好，因此取右侧拟合出的斜率相反数作为  $\delta$  的估算，即估算为  $0.22$ 。

在  $q = 10$  时，热容、相干长度在估算临界温度后进行  $\ln\text{-}\ln$  作图效果如图 49。



无论是  $c$  还是  $\xi$ ，都只有在右侧逼近时效果尚可，因此均取右侧拟合出的斜率相反数作为估算，有  $\gamma \approx 0.92$ ， $\delta \approx 0.3$ 。

## A 附件列表

src_2d	二维情况
count_H.m	问题 1 中 计算初始的哈密顿量
c_10_10.mat	问题 1 中 $(N, q) = (10, 10)$ 的热容结果保存
c_10_3.mat	问题 1 中 $(N, q) = (10, 3)$ 的热容结果保存
c_30_10.mat	问题 1 中 $(N, q) = (30, 10)$ 的热容结果保存
c_30_3.mat	问题 1 中 $(N, q) = (10, 3)$ 的热容结果保存
draw_ln_ln_c.m	问题 4 中 绘制热容 $\ln\text{-}\ln$ 图并拟合斜率
draw_ln_ln_g.m	问题 4 中 $q = 3$ 时绘制相干长度 $\ln\text{-}\ln$ 图并拟合斜率
draw_ln_ln_g_10.m	问题 4 中 $q = 10$ 时绘制相干长度 $\ln\text{-}\ln$ 图并拟合斜率
draw_selected_k.m	问题 3 中对给定的 $k$ 拟合 $\xi$
g_30_10.mat	问题 4 中 $(N, q) = (30, 10)$ 的 $\Gamma$ 结果保存
g_30_3.mat	问题 4 中 $(N, q) = (30, 3)$ 的 $\Gamma$ 结果保存
problem1.m	问题 1 主要模拟程序
problem1_N.m	问题 1 $N$ 较大时的主要模拟程序
problem2.m	问题 2 主要模拟程序
problem3.m	问题 3 主要模拟程序
problem3_all.m	问题 3 对所有 $k$ 同时模拟的主要模拟程序
problem4.m	问题 4 主要模拟程序
simulate_gamma.m	问题 3 中 对单个 $k$ 模拟并估算 $\Gamma$
simulate_gamma_all.m	问题 3 中 对所有 $k$ 模拟并估算 $\Gamma$
simulate_m.m	问题 2 中 模拟并估算磁化强度
simulate_u_c.m	问题 1 中 模拟并估算内能与热容
simulate_u_c_N.m	问题 1 中 $N$ 较大时模拟并估算内能与热容
state_transform.m	问题 1 中 估算哈密顿量的状态转移
state_transform_m.m	问题 2 中 估算磁化强度的状态转移
state_transform_p.m	问题 3 中 对单个 $k$ 估算对应 $\Gamma$ 的状态转移
state_transform_p_all.m	问题 3 中 对所有 $k$ 估算对应 $\Gamma$ 的状态转移
xi_100_10.mat	问题 3 中 $(N, q) = (100, 10)$ 的 $\Gamma$ 结果保存
xi_100_3.mat	问题 3 中 $(N, q) = (100, 3)$ 的 $\Gamma$ 结果保存
xi_30_10.mat	问题 3 中 $(N, q) = (30, 10)$ 的 $\Gamma$ 结果保存
xi_30_3.mat	问题 3 中 $(N, q) = (30, 3)$ 的 $\Gamma$ 结果保存
src_3d	三维情况 $N = 10$
3d_10_c.mat	问题 1 中 $q = 10$ 的热容结果保存
3d_10_g.mat	问题 3 中 $q = 10$ 的 $\ln(\Gamma)$ 结果保存
3d_3_c.mat	问题 1 中 $q = 3$ 的热容结果保存
3d_3_g.mat	问题 3 中 $q = 3$ 的 $\ln(\Gamma)$ 结果保存
problem1.m	问题 1 主要模拟程序
problem2.m	问题 2 主要模拟程序
problem3.m	问题 3 主要模拟程序
problem4.m	问题 4 主要模拟程序
simulate_gamma.m	问题 3 中 对所有 $k$ 模拟并估算 $\Gamma$
simulate_m.m	问题 2 中 模拟并估算磁化强度
simulate_u_c.m	问题 1 中 模拟并估算内能与热容

<code>state_transform.m</code>	问题 1 中 估算哈密顿量的状态转移
<code>state_transform_m.m</code>	问题 2 中 估算磁化强度的状态转移
<code>state_transform_p.m</code>	问题 3 中 对所有 $k$ 估算对应 $\Gamma$ 的状态转移

# 随机微分方程 实验报告

郑滕飞 2401110060

## 目录

<b>1</b>	<b>准备工作</b>	<b>2</b>
1.1	问题定义 . . . . .	2
1.2	基本计算 . . . . .	2
<b>2</b>	<b>方法比较</b>	<b>2</b>
2.1	Euler-Maruyama 格式 . . . . .	3
2.2	高阶格式 . . . . .	3
2.3	隐式格式 . . . . .	5
<b>3</b>	<b>噪声强度影响</b>	<b>6</b>
3.1	多级蒙特卡洛 . . . . .	6
3.2	自适应方法 . . . . .	8
3.3	极限性质 . . . . .	8
<b>4</b>	<b>初值的影响</b>	<b>9</b>
4.1	数值稳定性 . . . . .	9
4.2	一般情况 . . . . .	10
<b>A</b>	<b>附件列表</b>	<b>13</b>



## 1 准备工作

### 1.1 问题定义

记高斯分布函数

$$p_+(x, y) = \mathcal{N}((1, 0), I_2), \quad p_-(x, y) = \mathcal{N}((-1, 0), I_2)$$

并定义势能

$$p(x, y) = \frac{1}{2}(p_+(x, y) + p_-(x, y)), \quad V(x, y) = -\ln p(x, y)$$

考虑随机微分方程

$$d\vec{X}_t = -\nabla V(\vec{X}_t)dt + \sqrt{2\epsilon}d\vec{W}_t$$

这里  $\vec{X}_t = (X_t, Y_t)$ ,  $\vec{W}_t$  表示  $\mathbb{R}^2$  上的基本布朗运动。

记

$$T(\epsilon, (x_0, y_0)) = \mathbb{E}^{(x_0, y_0)}(\tau_b^\epsilon), \quad \tau_b^\epsilon = \inf_{t \geq 0} \{X_t = 0\}$$

这里  $\mathbb{E}$  上标的  $(x_0, y_0)$  表示以初值  $(x_0, y_0)$  开始模拟的期望, 而  $\tau_b^\epsilon$  称为对应的**结束时间**, 也即首次击中  $y$  轴的时间。我们希望探究结束时间与  $\epsilon$ 、 $(x_0, y_0)$  的关系。

### 1.2 基本计算

直接计算并化简可知

$$p_+(x, y) = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2}((x-1)^2 + y^2)\right)$$

$$p_-(x, y) = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2}((x+1)^2 + y^2)\right)$$

$$V(x, y) = \ln(4\pi) + \frac{1}{2}(x+1)^2 + \frac{1}{2}y^2 - \ln(1 + e^{2x})$$

于是求导得方程可改写为 ( $W_t^1, W_t^2$  为独立的两个一维布朗运动)

$$dX_t = (-X_t + \tanh X_t)dt + \sqrt{2\epsilon}dW_t^1$$

$$dY_t = -Y_t dt + \sqrt{2\epsilon}dW_t^2$$

由于两个方向的分量完全独立发展, 关心结束时间时只需模拟 ( $W_t$  为一维布朗运动)

$$dX_t = (-X_t + \tanh X_t)dt + \sqrt{2\epsilon}dW_t$$

以下记  $b(x) = -x + \tanh x$ , 并将  $T(\epsilon, (x_0, y_0))$  记为  $T(\epsilon, x_0)$ 。

注意到, 当  $\epsilon = 0$  时, 其化为一维常微分方程  $X_t' = -X_t + \tanh X_t$ 。在  $X_t > 0$  处有  $\tanh X_t > 0$ , 从而  $X_t' > -X_t$ , 利用比较定理即得只要  $x_0 > 0$  就有

$$X_t > x_0 e^{-t} > 0$$

从而  $T(0, x_0) = \infty$ , 于是我们只对  $x_0 > 0$ 、 $\epsilon > 0$  的情况考虑。

## 2 方法比较

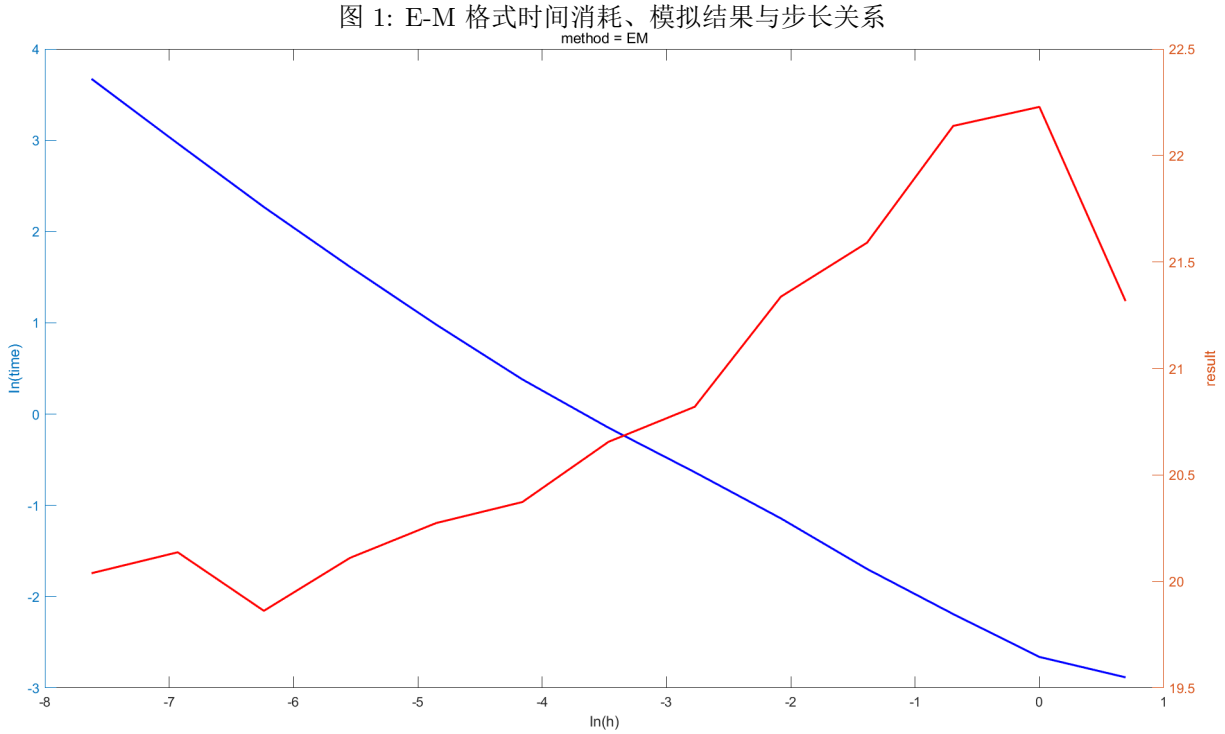
本节中, 我们取定  $x_0 = 1$ 、 $\epsilon = 0.01$ , 进行各个方法的比较, 以选取合适的方法。如无特殊说明, 单次模拟中结束时间的估算通过首次低于 0 的  $X_t$  值与前一个  $X_t$  进行插值得到, 而期望的估算则是由模拟 10000 次取平均实现的。记时间步长  $\delta t_n$  为  $h$ 。

## 2.1 Euler-Maruyama 格式

根据定义并合并常数可知 Euler-Maruyama 的迭代格式为

$$X_{n+1} = X_n + b(X_n)h + \sqrt{2\epsilon}e_n, \quad e_n \sim \mathcal{N}(0, 1)$$

$h$  取  $2^1, 2^0, \dots, 2^{-11}$  进行模拟, 并以  $\ln(h)$  为横坐标, 时间对数与模拟结果为纵坐标, 作图效果如图 1。



从图中可以看出, 在  $h = 0.004$  左右时, 迭代结果已经基本收敛, 不会随  $h$  降低, 通过后四次输出的数值平均可以将期望估算为 20.04。

此外, 当  $h = 2^{-10}$  与  $2^{-11}$  时, 迭代时间分别为 19.37 秒与 39.76 秒, 以此作为性能量度。

由于  $\sigma' = 0$ , 讲义上的 Milstein 格式与 Runge-Kutta 格式都会回到 Euler-Maruyama 格式, 因此下面直接对高阶格式进行测试。

## 2.2 高阶格式

高阶格式中, 由于  $\sigma(x) = \sqrt{2\epsilon}$ , 迭代过程可以化为

$$X_{n+1} = X_n + b(X_n)h + \sqrt{2\epsilon}r_{1,n} + \sqrt{2\epsilon}b'(X_n)r_{2,n} + \frac{1}{2}(b(X_n)b'(X_n) + \epsilon b''(X_n))h^2$$

这里

$$(r_{1,n}, r_{2,n}) \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \begin{pmatrix} h & h^2/2 \\ h^2/2 & h^3/3 \end{pmatrix}\right)$$

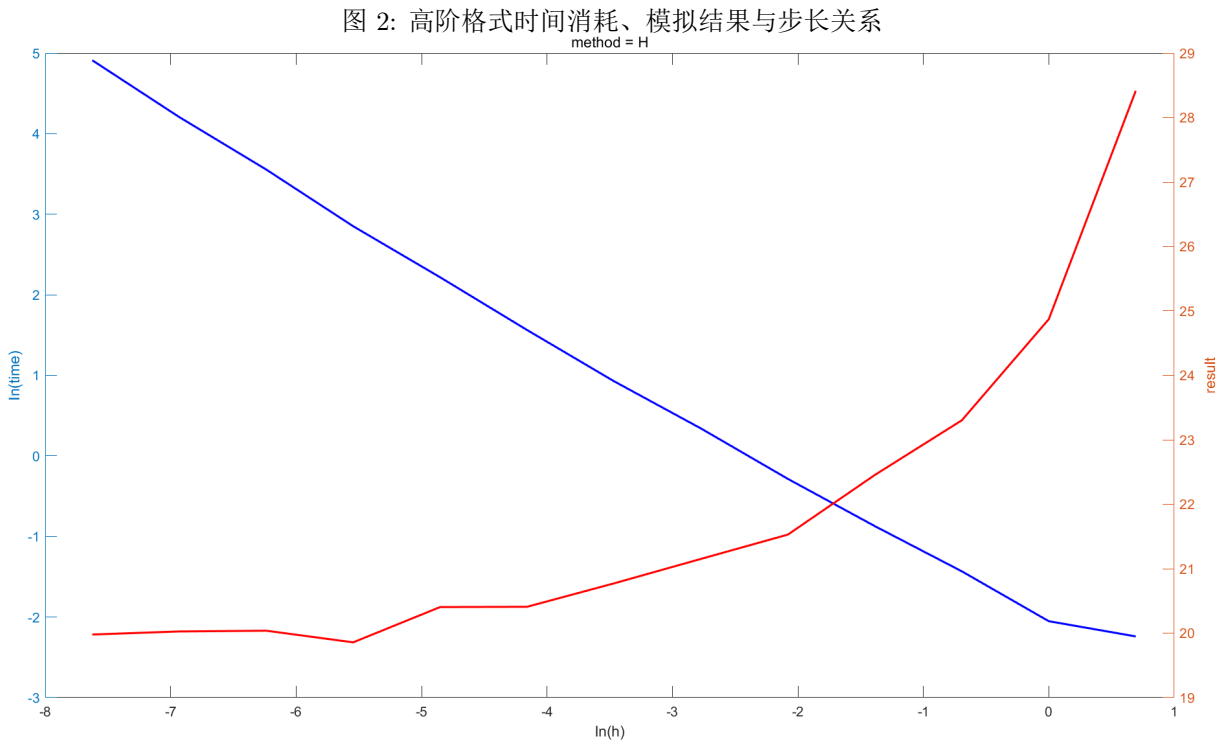
利用 Gauss 分布线性变换的结论, 可以先生成独立的标准 Gauss 分布变量  $e_{1,n}$ 、 $e_{2,n}$ , 再取

$$\begin{pmatrix} r_{1,n} \\ r_{2,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ h/2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{h}e_{1,n} \\ \sqrt{h^3/12}e_{2,n} \end{pmatrix}$$

结合

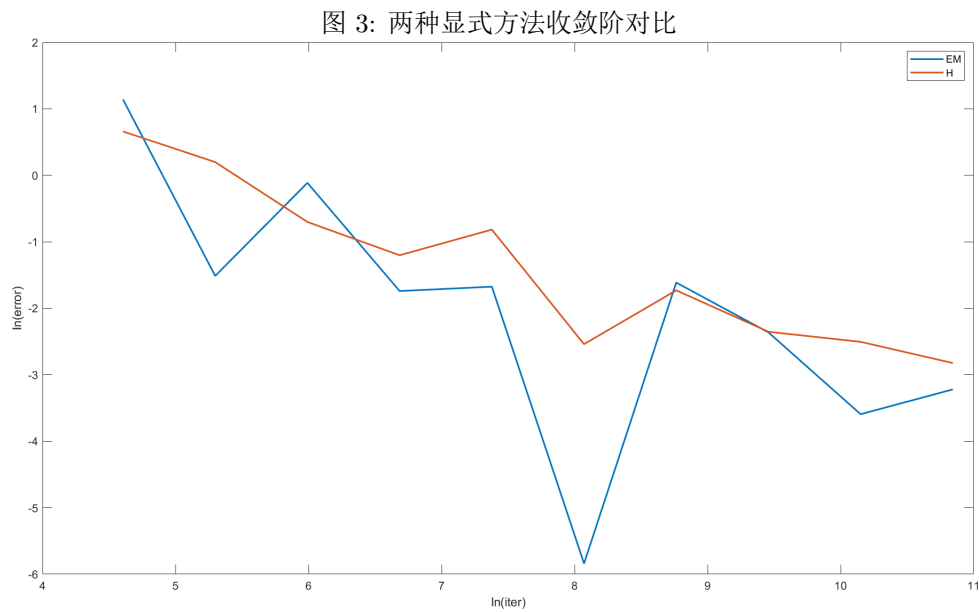
$$b'(x) = -\tanh^2 x, \quad b''(x) = -\frac{2 \tanh x}{\cosh^2 x}$$

即可得到迭代。与前一部分的测试采取相同的步长，效果如图 2。



仍然可发现  $h = 0.004$  左右时，迭代结果基本收敛，通过后四次输出的数值平均可以得到期望估算为 19.98，此结果与 E-M 方法得到的估算基本一致。

当  $h = 2^{-10}$  与  $2^{-11}$  时，迭代时间分别为 67.11 秒与 137.00 秒，单次迭代的时间是 E-M 格式的三倍余，然而，从图中似乎并无法直观高阶格式的更高阶收敛性。



为了验证是否高阶，我们固定  $h = 0.005$ ，以迭代次数 100, 200, 400, ..., 51200 进行估算，将真解设为两种方法在进行的所有迭代中的均值 (约为 20.19)，则作误差与迭代次数的对数图如图 3。从图中可以发现，两种方法在此例子中的数值收敛阶并没有出现明显的区别，但高阶格式的收敛显著更加稳定。直接拟合可以得到 E-M 格式的数值收敛阶为 0.60，高阶格式的数值收敛阶为 0.54。

### 2.3 隐式格式

利用欧拉方法的全隐格式可以写为

$$X_{n+1} = X_n + b(X_{n+1})h + \sqrt{2\epsilon}e_n, \quad e_n \sim \mathcal{N}(0,1)$$

不过，这会涉及到计算  $ax + b \tanh x$  的反函数，而这并没有简单的解析表达式，迭代计算没有优势，因此考虑部分隐式

$$X_{n+1} = X_n - X_{n+1}h + \tanh X_n h + \sqrt{2\epsilon}e_n$$

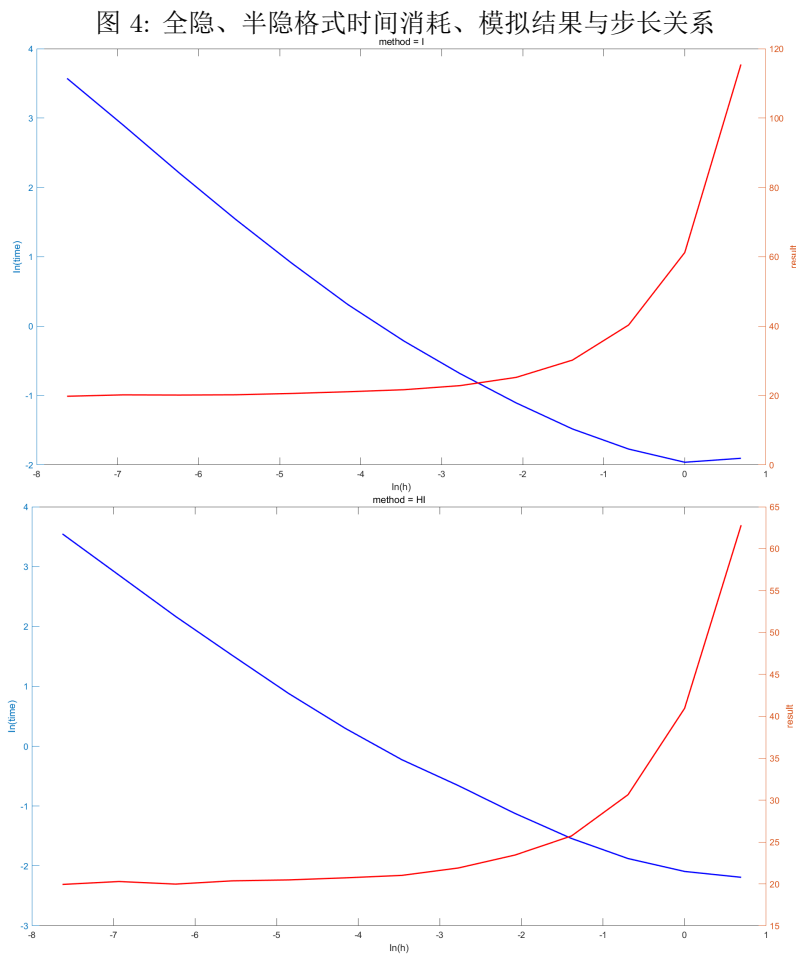
从而得到迭代

$$X_{n+1} = \frac{1}{1+h} (X_n + \tanh X_n h + \sqrt{2\epsilon}e_n)$$

利用介值定理，上述格式其实是某种半隐格式，类似可得到部分半隐格式 (取定  $\alpha = 1/2$ )

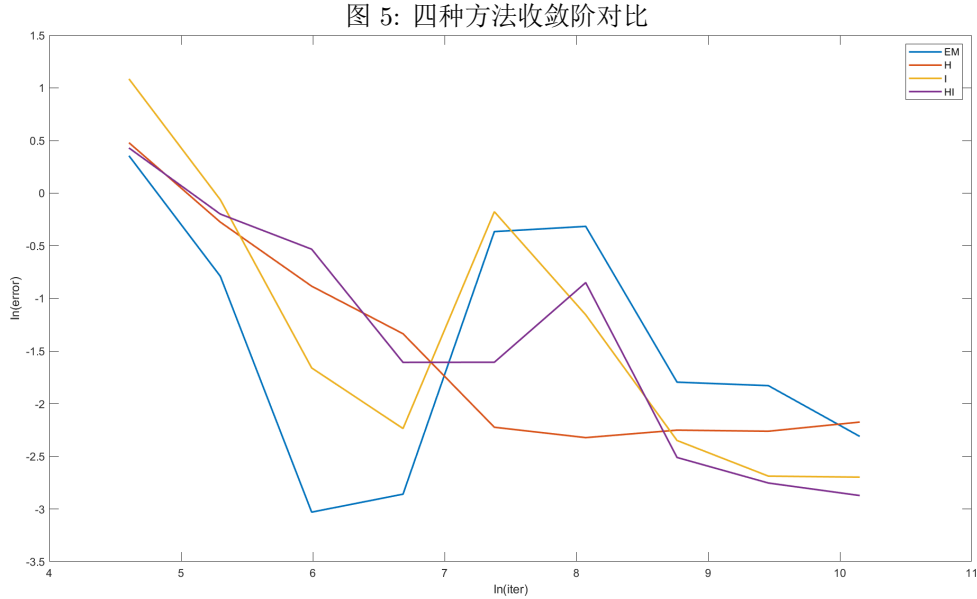
$$X_{n+1} = \frac{1}{1+h/2} (X_n - X_n h/2 + \tanh X_n h + \sqrt{2\epsilon}e_n)$$

与之前的测试采取相同的步长，效果如图 4。



从图中可以发现，隐式格式的迭代时间与 E-M 格式类似，但在  $h$  较大时，隐式格式的误差会非常明显。两种方法取收敛时的步长分别估算真解为 20.01、20.06，均在合理的误差范围内。

我们将两种隐式格式也加入误差阶的对比。取定  $h = 0.001$ ，与之前相同方式估算收敛阶，并假设真实结果是所有方法在所有迭代中的平均值，绘制误差与迭代次数的对数图如图 5。



四种方法的收敛阶分别为 0.21、0.49、0.56、0.58，进一步分析数据可知，半隐方法一般有着较好的收敛结果与稳定性，因此之后的迭代无特殊说明时以半隐方法为主。

### 3 噪声强度影响

由于之前已经论证了  $\epsilon \rightarrow 0$  时  $T(\epsilon, x_0)$  将趋于无穷，从而出于总时间考虑，迭代步长不能太小；反之， $\epsilon$  越大时  $T(\epsilon, x_0)$  理应越小，因此需要精度更高的迭代才能更好估算。出于这些原因，必须对迭代步长进行更好的处理。

#### 3.1 多级蒙特卡洛

一个有效的加速较小网格的收敛速度的方法是多级蒙特卡洛方法，其旨在通过小网格的少量迭代修正大网格下较快的迭代结果。

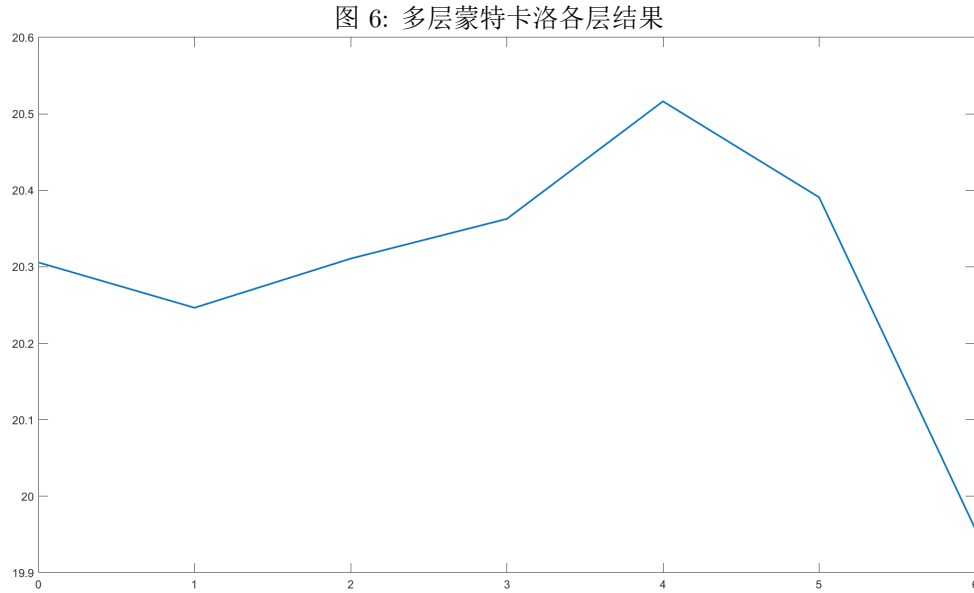
给定层次  $L$ 、估算时间目标  $T$ 、初始步长  $h_0$ 、步长衰减指数  $M$ 、估算精度  $p$ ，进行下述迭代 (若迭代时间点不包含  $T$ ， $X_T$  处的值以线性插值估算)：

1. 取定  $l = 0$ ，计算  $N_0 = \lceil p^{-2} L h_0 \rceil$ ，在步长  $h_0$  下对  $X_T$  进行  $N_0$  次迭代估算，均值为  $Y_0$ ；
2. 将  $l$  置为  $l + 1$ ，计算  $h_l = M^{-1} h_{l-1}$ 、 $N_l = \lceil p^{-2} L h_l \rceil$ ，在步长  $h_l$  与  $h_{l-1}$  下对  $X_T$  进行  $N_l$  次迭代，并将差的均值记为  $Y_l$ 。
3. 当  $l < L$  时回到上一步，否则结束迭代并将  $\sum_{l=0}^L Y_l$  作为最终估计值。

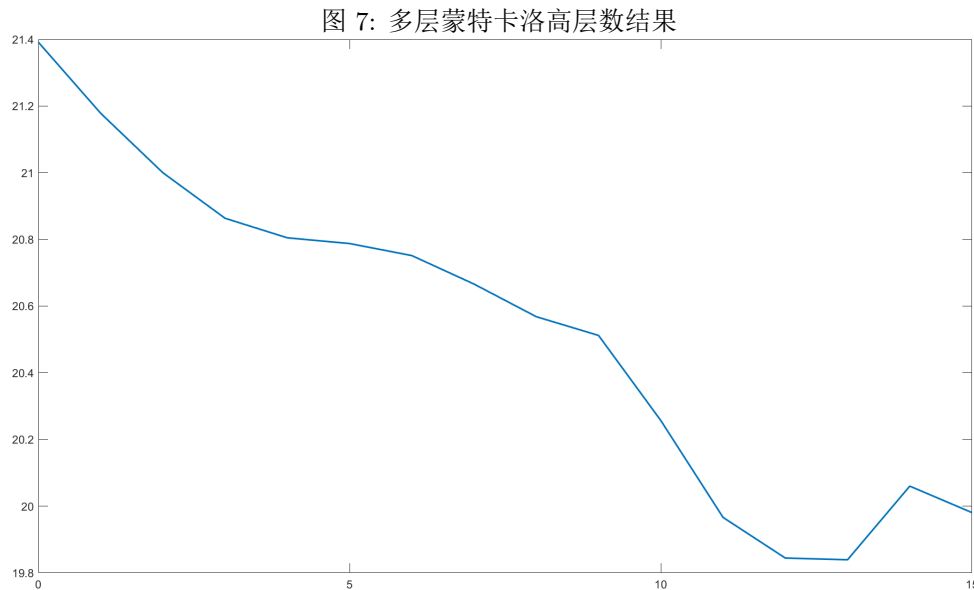
为了将此方法使用在结束时间问题中，一个非常简单的思路是将上述的对  $X_T$  的估算修改为对  $T(x, \epsilon)$  的估算。值得注意的是，首次击中 0 的期望为  $T$  并不代表着  $X_T$  的期望为 0，因此上方的估算  $X_T$  的方式对结束时间问题是完全无效的。

由于  $\epsilon$  越大时初始步长应越小，我们简单以噪声强度  $\sqrt{\epsilon}$  的反比作为初始步长，即给定  $s$  后选择初始步长  $s\epsilon^{-1/2}$ 。此外，出于之前的讨论，我们以半隐式方法作为主要模拟策略。

仍考虑  $x = 1$ 、 $\epsilon = 0.01$  时的估计，取  $p = 0.001$ 、 $L = 6$ 、 $s = 0.0005$ 、 $M = 1.3$  进行迭代，其在各层级估算结果如图 6。



可以发现，在上述定义下，并不能看出其收敛的优势。考虑  $s = 0.004$ ，并将层数改为 15 层，则效果为图 7。



按照此方法，最终的  $h$  约为 0.0008，而最后一步的迭代次数为 11722，估算结果 19.98。

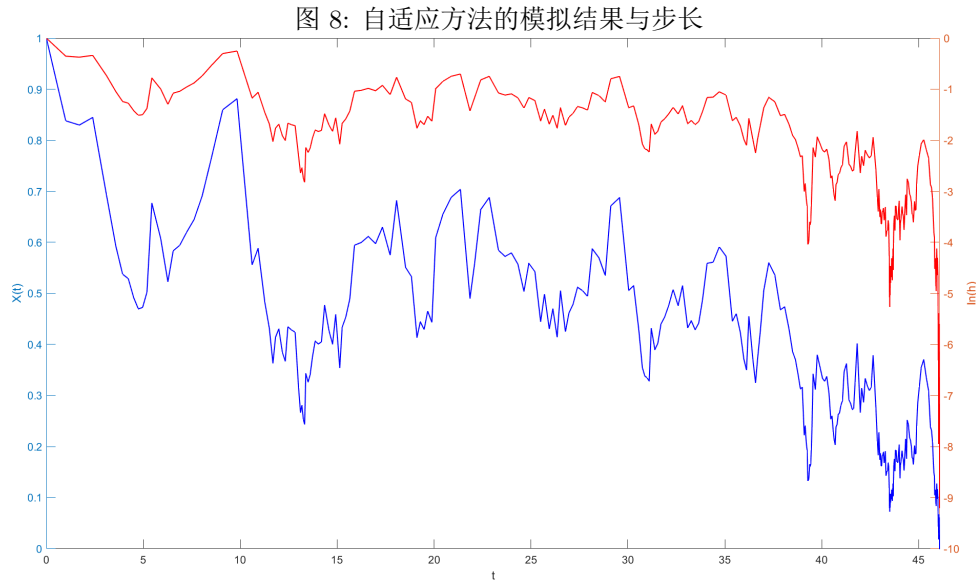
综合以上两种情况，可以发现多层蒙特卡洛方法在此问题中并不能显著改进收敛的速率，这是由于结束时间并不像单点的值一样具有明确的估算性质。

### 3.2 自适应方法

另一个可以考虑的方法是进行自适应的步长调整。具体来说，当前的  $x$  值越接近 0，步长就应调整得越低。由于每次迭代实际的行动最大量为步长的根号，考虑将步长与  $X_t^2$  成正比设置，并设定下界。

实际测试中，我们给定估算次数  $N$ 、步长参数  $s$  与下界参数  $m$ ，进行如下的自适应：设置初始步长为  $\sqrt{\epsilon x_0^2 s}$ ，迭代中不断将步长更新为  $\sqrt{\epsilon X_t^2 s}$ ，且将步长下界选择在初始步长的  $\frac{1}{m}$ 。

利用自适应方法进行一次迭代，取  $m = 2000$ 、 $s = 0.1$ ， $X_t$  与  $h$  的变化如图 8。



计算验证可发现，取  $m = 2000$ ， $s = 0.01$ ，其在  $x_0 = 1$ 、 $\epsilon = 0.01$  的例子中只需五秒即可得到 20 附近的收敛结果，效果远好于其他方法。为了更精确估计，我们实际将  $s$  取为 0.003，并迭代 20000 次。实验可以发现，对量级相似的  $x_0$  与  $\epsilon$ ，其万次迭代时间都在 10-30 秒，表现出了良好的自适应性。因此，最终以此方式进行估算。

### 3.3 极限性质

取定  $x_0 = 1, 2, 3$ ，并考虑  $\epsilon$  取  $e^{-9}, \dots, e^{-1}, 1$ ，将结果的对数按  $\ln \epsilon$  作图，效果如图 9。

从图中可以看出，无论对何种  $x_0$ ， $\ln T$  随  $\ln \epsilon$  的变化在  $\epsilon$  较小时具有一定的线性性，也即  $T$  近似为  $\epsilon$  的指数函数。直接进行线性拟合得到斜率：

$$x_0 = 1, k = -0.52634$$

$$x_0 = 2, k = -0.47921$$

$$x_0 = 3, k = -0.45831$$

这即是  $\epsilon \rightarrow 0$  时  $T(\epsilon, x_0)$  的极限性态。

下面，重新取定  $s = 0.00003$ ，考虑  $\epsilon = 1, e, \dots, e^9$ ，观察  $\epsilon \rightarrow \infty$  时  $T(\epsilon, x_0)$  的极限性态，作图得到图 10。这时线性拟合得到的斜率为：

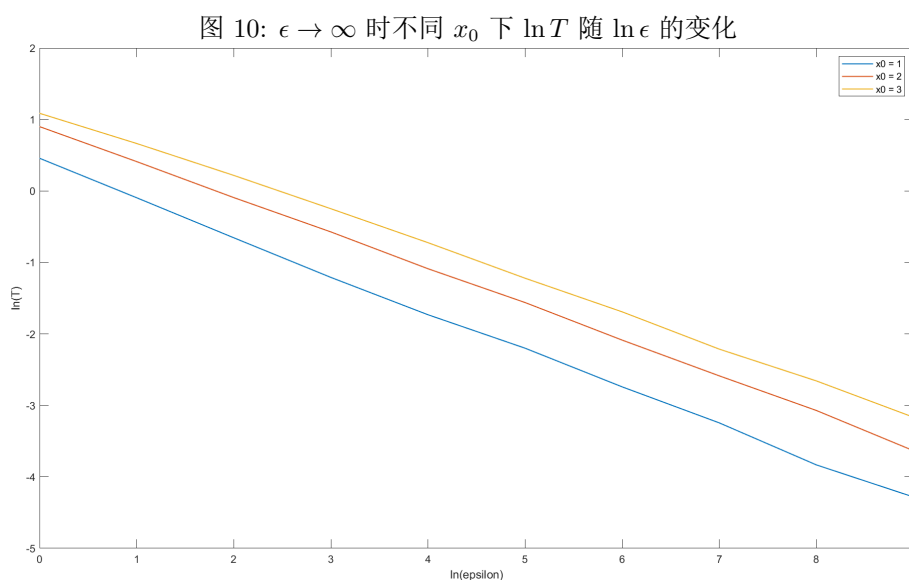
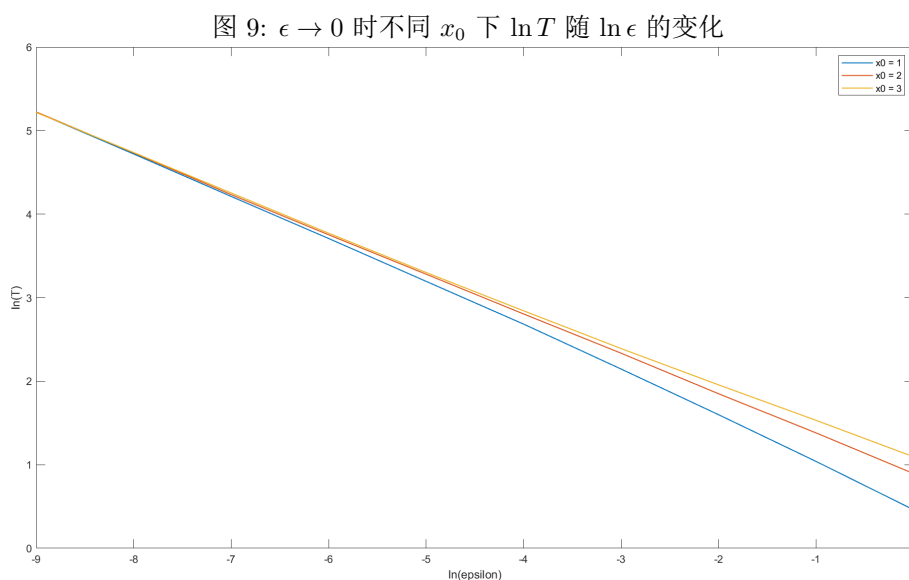
$$x_0 = 1, k = -0.52625$$

$$x_0 = 2, k = -0.50105$$

$$x_0 = 3, k = -0.47581$$

综合以上两种情况的精细拟合后，我们基本可以认为，在  $x_0$  取值较小时

$$T(\epsilon, x_0) \sim \epsilon^{-\delta}$$



也即可以设其写为

$$T(\epsilon, x_0) = c(x_0)\epsilon^{-\delta(x_0)}$$

## 4 初值的影响

### 4.1 数值稳定性

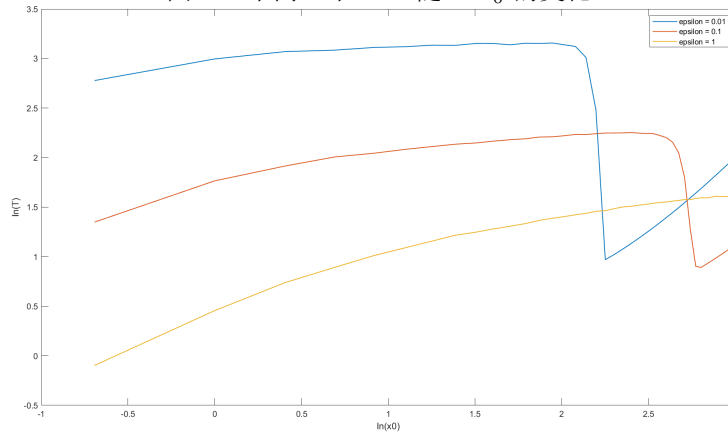
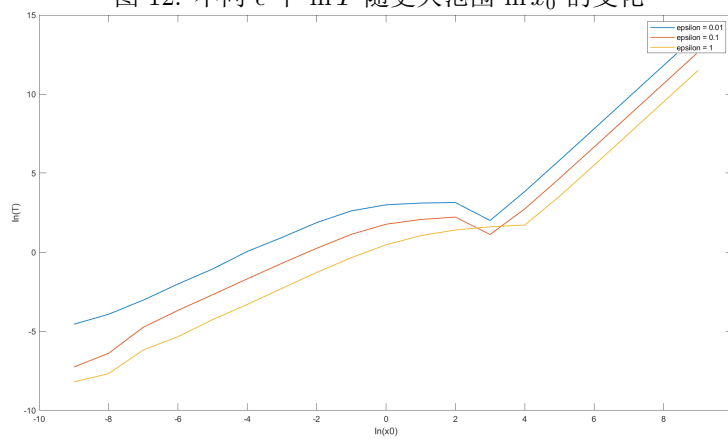
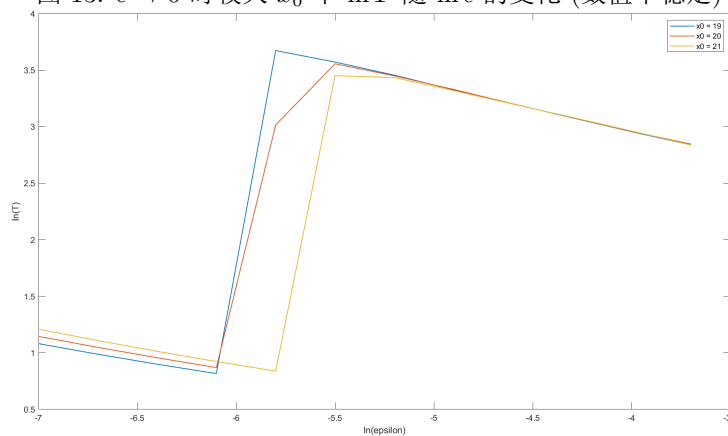
与之前类似，为了探究初值对  $T$  的影响，我们需要将噪声强度固定以观察性质。

取定  $\epsilon = 0.01, 0.1, 1$ ，将  $x_0$  在 0.5 到 20 均匀取点，作出图像如图 11。

可以发现，这次的图像结果相对复杂，在  $\ln(x_0) \in (2, 3)$  左右出现了某些反转，以至于  $T$  在  $x_0$  给定后不再随  $\epsilon$  而单调减小。为了探究这种情况是否是由于模拟不充分导致的，我们先扩大  $\ln(x_0)$  的范围进行模拟，效果如图 12。

这次可以明显看出，在 3 附近存在反转。我们重新取定  $x_0 = 19, 20, 21$ ，调整合适的  $s$  进行精细估算，并作出对应的  $\ln T - \ln \epsilon$  图像，效果如图 13。

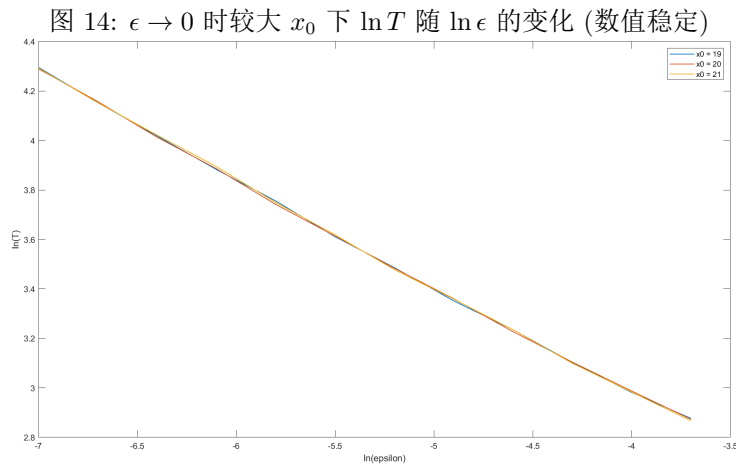


图 11: 不同  $\epsilon$  下  $\ln T$  随  $\ln x_0$  的变化图 12: 不同  $\epsilon$  下  $\ln T$  随更大范围  $\ln x_0$  的变化图 13:  $\epsilon \rightarrow 0$  时较大  $x_0$  下  $\ln T$  随  $\ln \epsilon$  的变化 (数值不稳定)

结合以上三张图的结果，我们事实上可以断言，这是迭代格式的数值稳定性问题，而非真实的反转。当  $x_0$  值偏大时，以  $x_0^2$  作为初始步长会过于不准确，必须给予步长一个上界。

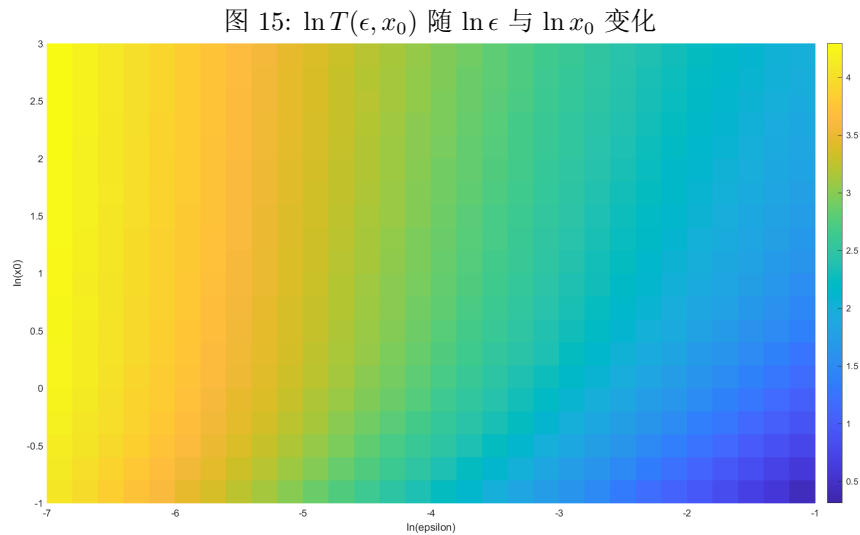
## 4.2 一般情况

解决了数值稳定性情况后，我们来进行最终的分析。首先，数值稳定的情况下，取定  $x_0 = 19, 20, 21$  的结果如图 14。

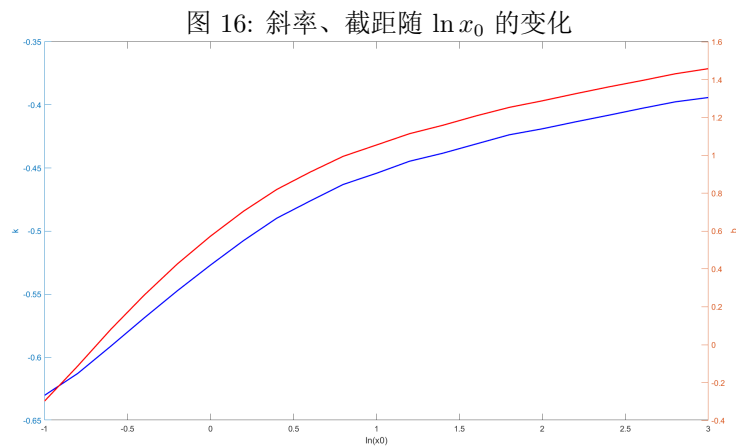


我们仍然得到了  $\ln \epsilon$  关于  $\ln T$  的线性关系, 符合之前的假设。为了最终进行拟合, 我们需要考虑一系列的  $x_0$  与  $\epsilon$ 。

取  $\ln x_0$  为  $-1, -0.8, \dots, 3$ ,  $\ln \epsilon$  为  $-7, -6.8, \dots, -1$ , 进行每个位置的估算, 最终的结果如图 15。



作图可以发现, 对于每个固定的  $x_0$ ,  $\ln T - \ln \epsilon$  图像仍然是呈现线性的, 由此可直接线性拟合, 得到斜率、截距与  $x_0$  的关系图 16。



从图中看出，随着  $x_0$  的增大，斜率、截距都是不断增大的，且直观来看具有凸性，即增长不断放缓（若不对  $x_0$  取  $\ln$ ，直接观察也可发现凸性存在）。

不过，对  $k$ 、 $b$  与  $x_0$  或  $\ln x_0$  进行不同函数拟合后发现，此函数并不存在过于初等的表达式，因此只有如上的数值拟合结果。斜率随着  $x_0$  增大而增大（也即绝对值减小）是符合理论的，因为当  $x$  更大时  $\epsilon$  的影响更小。

最后，当  $x_0$  很大时，原方程会在长时间内接近

$$dX_t = (-X_t + 1)dt + \sqrt{2\epsilon}dW_t$$

此化为了基本的 OU 过程，利用 OU 过程性质可知此方程在  $t$  时刻的  $X_t$  分布为

$$N(1 + e^{-t}(x_0 - 1), \epsilon(1 - e^{-2t}))$$

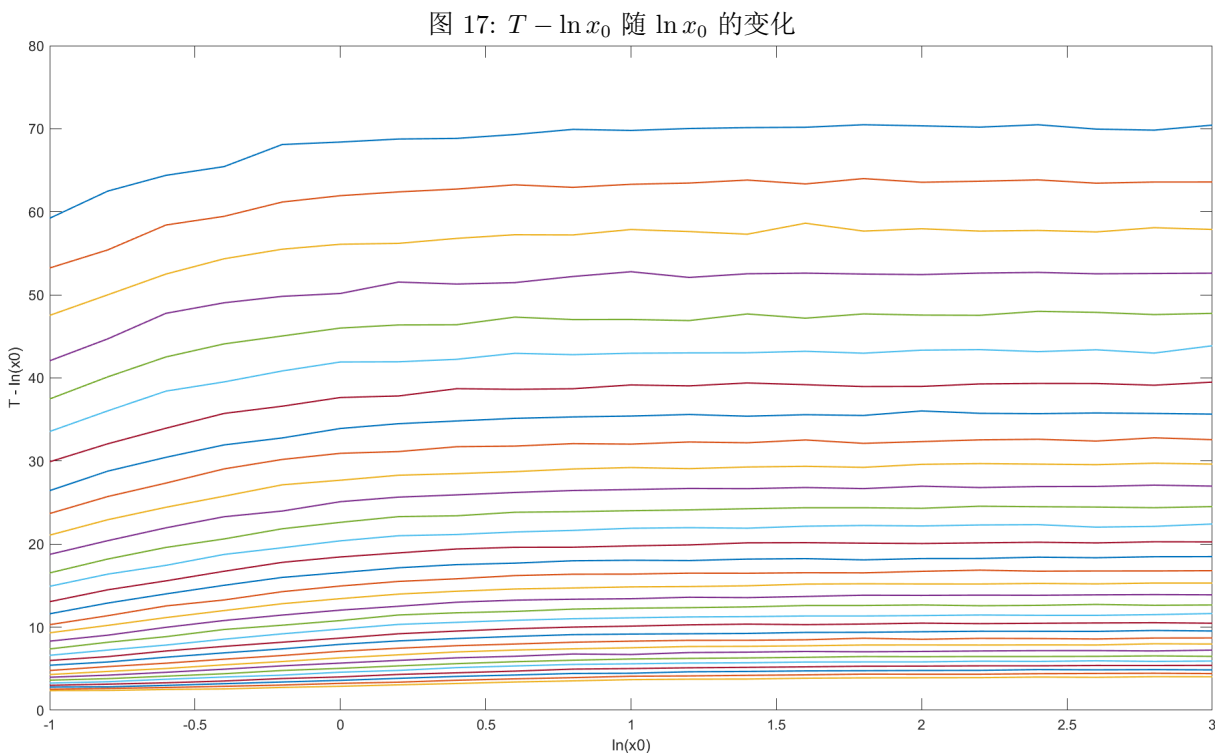
也即期望以  $e^{-t}$  衰减，并最终收敛于  $N(1, \epsilon)$ 。

由此， $x_0$  很大时应近似以负指数速度衰减到某个  $\tanh X_t - 1$  不可忽略的  $X_t$ （将此值记为  $x^*$ ），再由独立增量性质加上此  $X_t$  时的结果，也即当  $\epsilon$  变化不大时可以估算

$$T(\epsilon, x_0) \sim \ln \frac{x_0 - 1}{x^* - 1} + T(\epsilon, x^*) \sim \ln \frac{x_0 - 1}{x^* - 1} + c(x^*)\epsilon^{-\delta(x^*)}$$

这里  $c$  与  $\delta$  定义见第三节末尾。

作出  $T - \ln x_0$  关于  $\ln x_0$  的图像，如图 17，可以发现逐渐趋于常数，因此符合上述的推理。



## A 附件列表

src 源代码

<code>final_estimate.m</code>	最终估算、保存与作图
<code>mlmc.m</code>	多级蒙特卡洛方法
<code>order_estimate.m</code>	对比方法并估算收敛阶
<code>result.mat</code>	最终估算的结果保存
<code>sa_estimate.m</code>	自适应方法的多次模拟估算
<code>simulate.m</code>	给定步长的单次模拟
<code>simulate_sa.m</code>	自适应步长的单次模拟
<code>simulate_T.m</code>	给定步长的多次模拟估算
<code>test_method.m</code>	单个方法的时间与稳定性测试