计算方法

黄佳城 20420201151673

2021年03月23日

代码可以在（https://github.com/Acpnohc/conputational_method_in_theory_physics/tree/main/hw3）被查阅。

问题一：

设随机变量r均匀分布在区间$(0,1)$上。若要求通过变换$v=f(r)$，使得新的随机变量v的分布满足：

$$P(v)=\frac{Mv}{k_BT}e^{\left(-\frac{Mv^2}{2k_bT}\right)} \quad (v>0)$$

请给出变换$v=f(r)$的具体形式，并将用数值方法给出的v的分布与上式比较。取$M=1$,$k_B=1$,$T=1$.

解：

设$v=f(r)$是单调递增函数，则有：

$$\int_{-\infty}^{x} v(x)\,\mathrm{d}x=\begin{cases}0 & x\le 0\\ 1-e^{-\frac{Mv^2}{2k_BT}} & x>0\\ 1 & x\to\infty\end{cases}=\begin{cases}0 & r\le 0\\ r & 0<x<1\\ 1 & r\geqslant 1\end{cases}$$

可由之得 $v=\sqrt{-\frac{2k_BT}{M}\left[\ln(1-r)\right]}$。

取$M=1$,$k_B=1$,$T=1$，验算结果如图1所示（抽样10000个点，概率密度绘图中：$\delta x=0.01$, $\Delta=0.1$）。

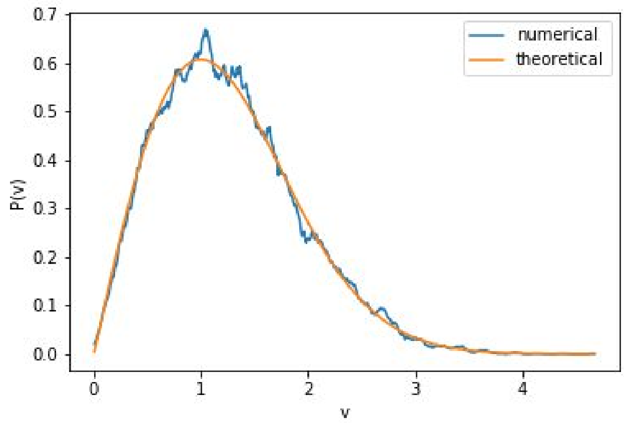

图1 逆函数法生成满足题中分布的随机数的概率密度函数（蓝线为数值解，黄线为理论值）

问题二：

利用舍选法产生满足分布$P(x)=Ae^{-|x|^{\frac{5}{3}}}$**，分布在区间**$|x|<1$**上的随机数。其中**$A$**是未知的归一化因子。**

解：

算法设计等与PPT基本一致，这里不再赘述。计算结果如图2所示（抽样10000个点,概率密度绘图中：$\delta x=0.01$, $\Delta=0.1$）。

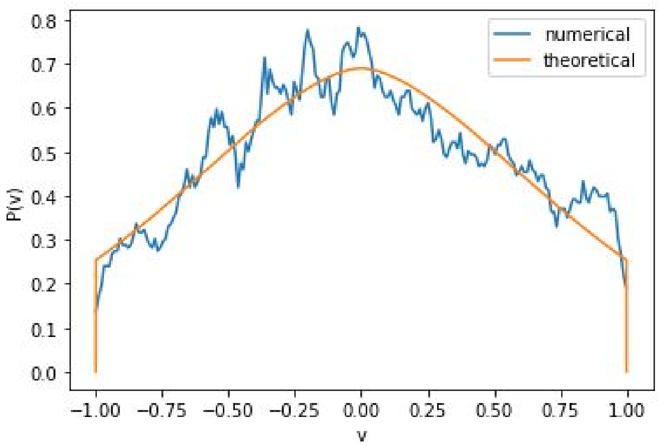

图2 舍选法生成满足题中分布的随机数的概率密度函数（蓝线为数值解，黄线为理论值，以下均同不再重复）

接下来我另外尝试了讨论了以下两个问题：

（1）利用蒙特卡洛法求取符合题目中的抽样分布，并探究跃迁矩阵的影响。

（2）对比蒙特卡洛法和舍选法的分布的生成效率。

解：

（1）

蒙特卡洛法过程与PPT中描述一致，采样1000步。

跃迁矩阵（1-1）：在（-1，1）中随机生成。

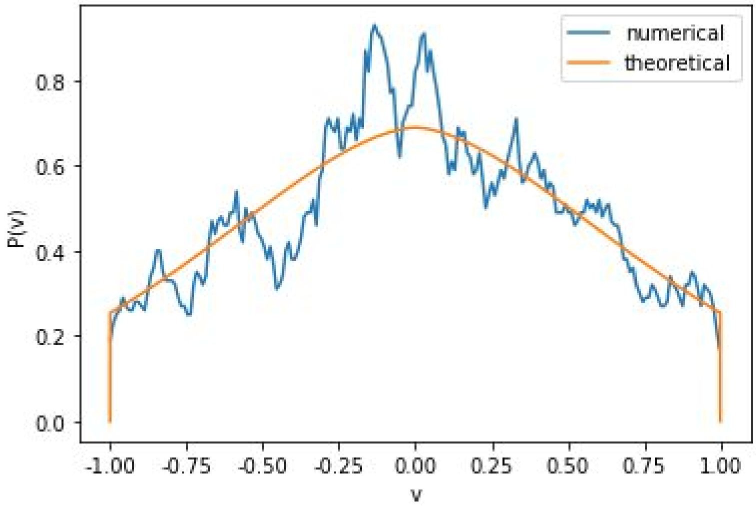

图3 采用跃迁矩阵（1-1）的蒙特卡洛法结果

跃迁矩阵（1-2）：在上一个数上随机游走（-1，1）个单位。

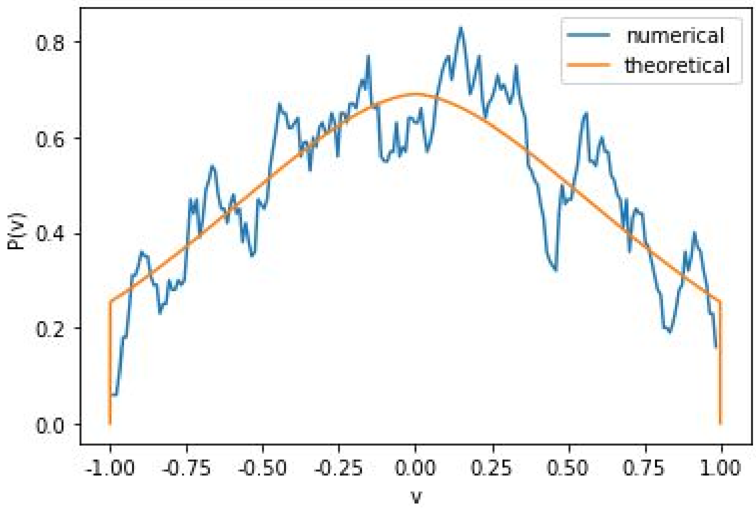

图4 采用跃迁矩阵（1-2）的蒙特卡洛法结果

跃迁矩阵（1-3）：在上一个数上随机游走（0，1）个单位。

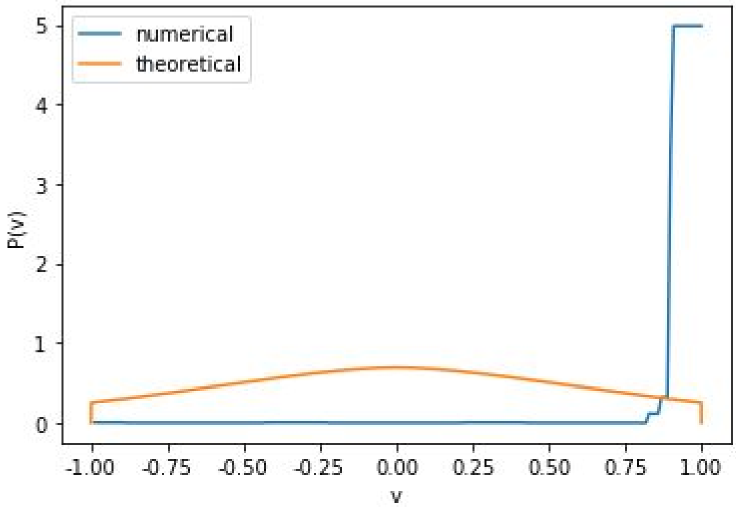

图5 采用跃迁矩阵（1-3）的蒙特卡洛法结果

跃迁矩阵（1-4）：在（0，1）中随机生成。

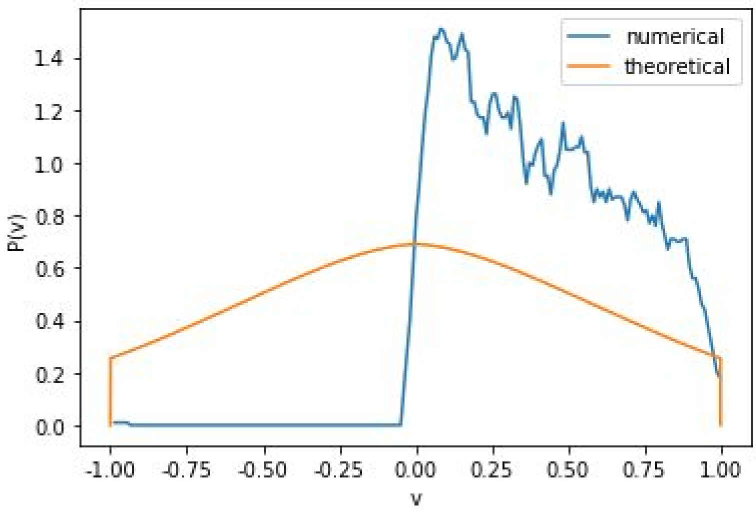

图6 采用跃迁矩阵（1-4）的蒙特卡洛法结果

结论：跃迁函数的目的应是使得获得的马尔可夫链能够遍历该概率密度函数的可行域。跃迁矩阵（1-1）和跃迁矩阵（1-2）显然具备有遍历的能力；而跃迁矩阵（1-3）和跃迁矩阵（1-4）：一个只能取（0，1），一个只能在坐标轴上向右遍历。

（2）蒙特卡洛法的跃迁函数取（1-1），采用以下指标衡量分布的生成效率：概率密度函数理论值和模拟值的差平方和（从数值意义上来说），与随机数生成次数的关系。

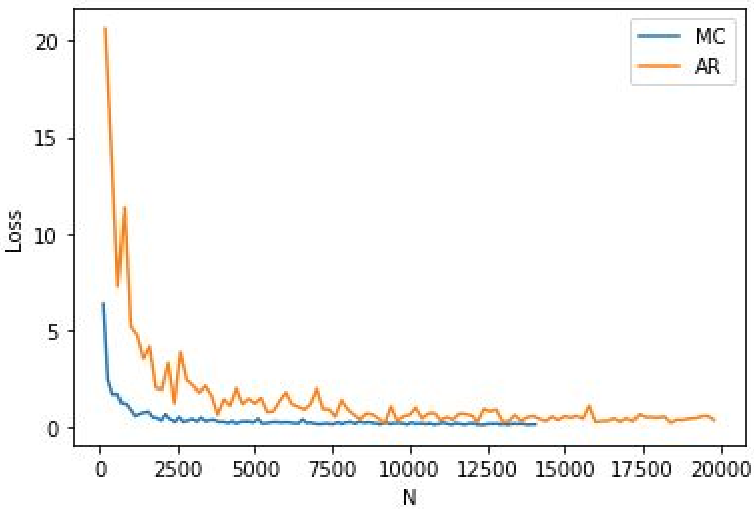

图7 舍选法（黄线）与蒙特卡洛法（蓝线）效率对比

结论：蒙特卡洛法在随机数生产次数较少时，具有优势。后期两者持平：但不排除是由于上节课由计算机浮点数精度改变造成的。

问题三：

设随机变量r均匀分布在区间$(0,1)$上，$x=(r+1)^2$。产生十万个x的值，将其概率密度画出来，并与理论值比较。

解：

理论值应为

$$\begin{cases} \dfrac{1}{2\sqrt{x}} & 1 \le x \le 4 \\ 0 & \text{其他} \end{cases}$$

模拟结果如图8所示：

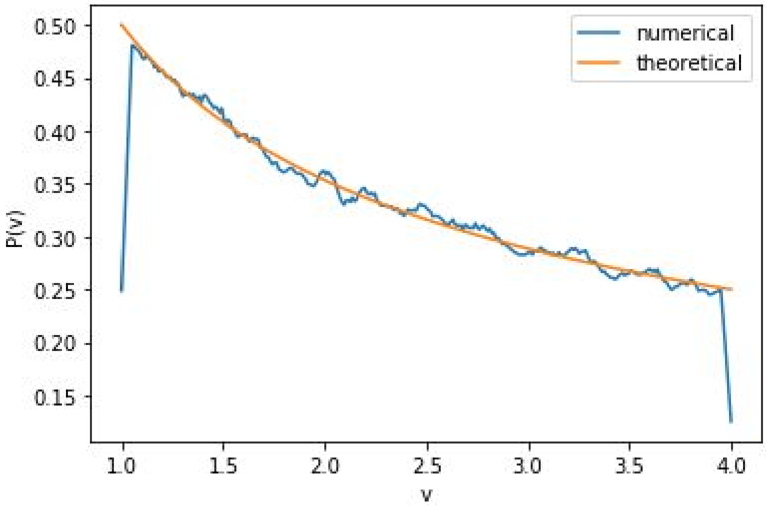

图8 $x=(r+1)^2$的概率分布函数

问题四：

设随机变量r均匀分布在区间$(0,1)$上，x是10个这样的随机数的和。产生十万个x值，将其概率密度函数画出来。

解：

结果如图9所示：

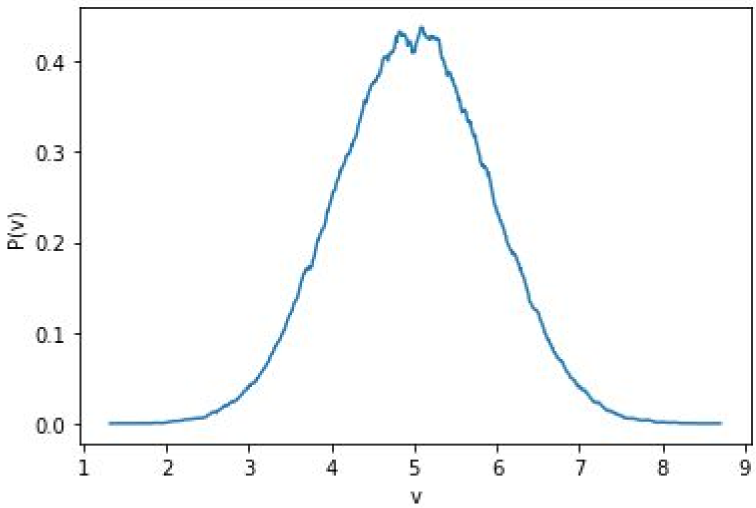

图9 10个随机数和的分布