

计算物理B第三次作业

PB20511896 王金鑫

使用说明

文件说明

- `main.py`: 主程序, 包括一个随机游走产生的结果的例子和 $\delta - RealWalk$ 关系演示。在这里默认取 $\mu = 0, \sigma = 1$

`RealWalk` 为一次随机游走的实际次数

- `RandomWalk.py`: 和随机游走有关的函数

第三方库说明

- `matplotlib.pyplot`: 用于绘制直方图
- `random.uniform()`: 用于产生均匀随机数。
- `random.seed()`: 更改随机数种子
- `math`: 调用相关数学常数 (例如: `math.pi` $\rightarrow \pi$) 和初等函数。
- `time()`: 调用当前时间作为随机数种子。

函数说明

源代码中均有注释, 在这里挑选部分进行展示

- `GaussFunc(x, mu, sigma)`: 计算Gauss分布密度函数的值。

Gauss分布密度函数:
$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

- `Gauss_Metro(nSample, mu=0, sigma=1, delta=1, SelfAdopt=0)`: 利用Metropolis随机游走方法进行Gauss分布采样

- 参数说明

`nSample`: 在 `SelfAdopt = 0` 时, 作为采样的次数;

在 `SelfAdopt \neq 0` 时, 作为采样次数的上限, 避免死循环或长时间无法跳出循环。

`delta`: 游走的步长

`SelfAdopt`: 等于0时, 采用规定次数的采样;

不等于0时, 采用“平衡条件” ($\langle (x - \mu)^2 \rangle \approx \sigma^2$) 作为停止游走的判据。同时为防止长时间无法跳出循环, 需要设置一个采样上限, 在这里将 `nSample` 作为上限的数值。

对于某些delta值, 即使误差放到 $abs(\langle (x - \mu)^2 \rangle - \sigma^2) \leq 0.5$, 在采样了 10^6 步后仍然没有达到平衡条件。

- 内部参数说明

`NSample`: 实际采样的次数。

`NWalk`: 随机游走的实际数目

`varX`: $(x - \mu)^2$ 的均值 $\langle (x - \mu)^2 \rangle$

`xList`: 产生的随机数列表

- 返回参数

`xList`, `Nwalk/NSample`, `varX`, `Nwalk`, `NSample`

其中 `Nwalk/NSample` 为接受度(Acceptance), 即 $\frac{\text{随机游走次数}}{\text{采样的次数}}$

运行说明

打开main.py,

- 事例部分: 可修改 `mu`, `sigma`, `delta` 的数值来得到不同的Gauss分布密度函数。采样的次数默认为 10^6 , 默认 `SelfAdopt` =0, 但都可自行修改。最终的结果会将理论曲线和产生的分布进行比较, 同时展示 `varX` 和 `Acceptance` 的数值。
- 探究最大试探步长 δ 和达到平衡分布的时间部分: 在这里用采样的次数来表示达到平衡分布的时间。取一系列 δ 进行随机游走, 得到采样的次数, 做出两者关系曲线。可以通过更改相关参数来实现不同程度的探究。这里的delta序列为一个等差数列。

`deltaMid`: 序列的中心值

`deltaNum`: 序列中元素的个数

`deltaStep`: 相邻元素的差值 (间隔)

注意事项

- 由于没有增加限制 δ 取值的部分, 因此需要人为地控制 δ 序列的最小值不能小于0。
- 经测试, 在 $\sigma = 1$ 的情况下, 若 δ 的值在2及以上, 随机游走达到“平衡条件”所需的步数最多要超过 1×10^7 , 因此不建议将游走次数的上限设的过高。
- 在第一次采样时可能没有接受该点, 使检验是否“平衡”时分母出现0。同时在游走次数不多时也可能达到“平衡条件”。但这些都不是我们想要的, 因此增加了一个采样步数下限, 在采样步数达到这个下限之后才开始检验是否达到“平衡条件”。
- 为防止样本方差偶然地达到平衡条件, 在游走过程中限制了只有连续10次的游走都满足“平衡条件”才能算满足平衡。

运行结果

$\delta = 2.08$ 时采样 10^6 次的结果如图1所示。

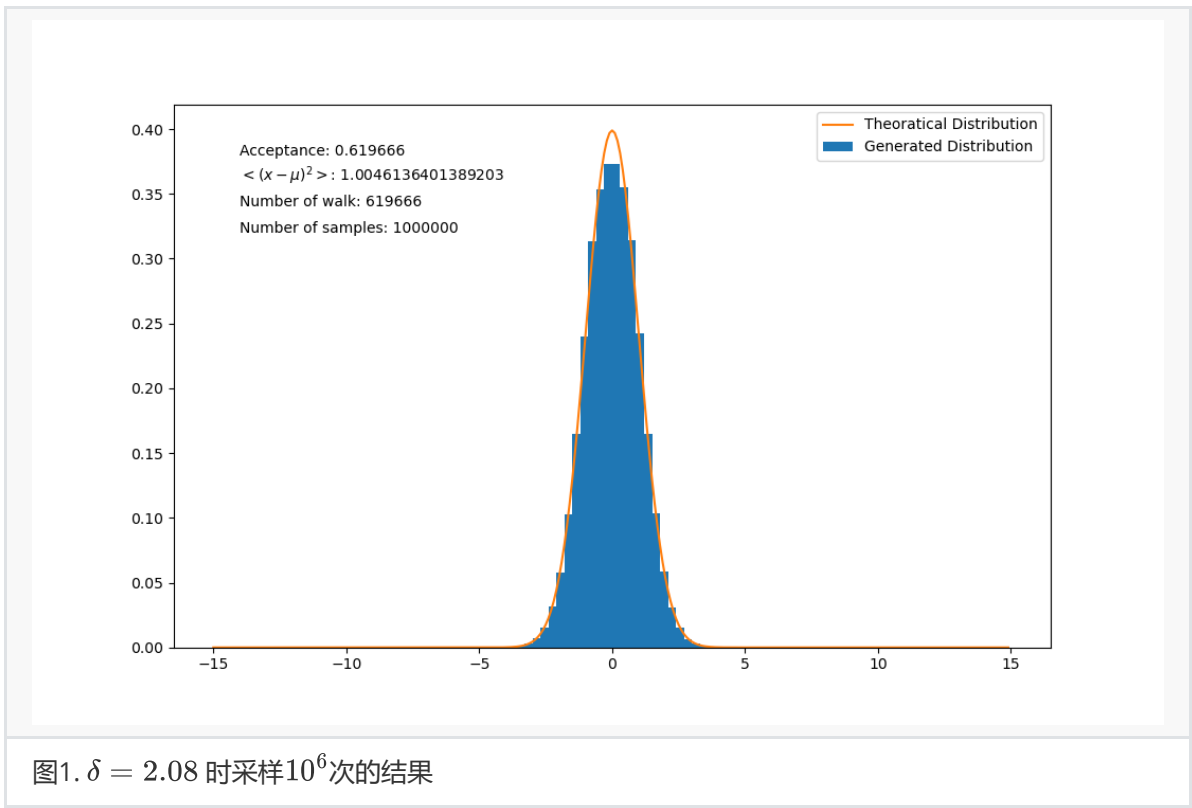
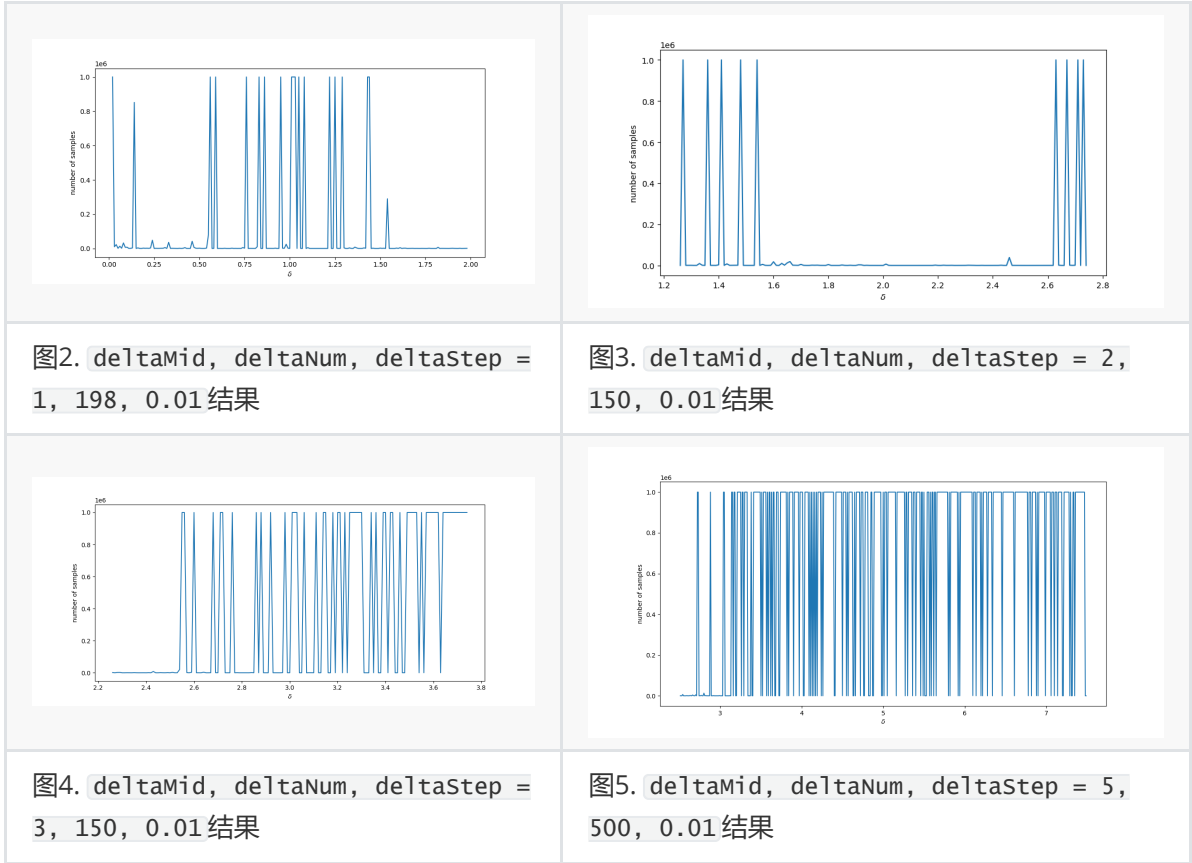


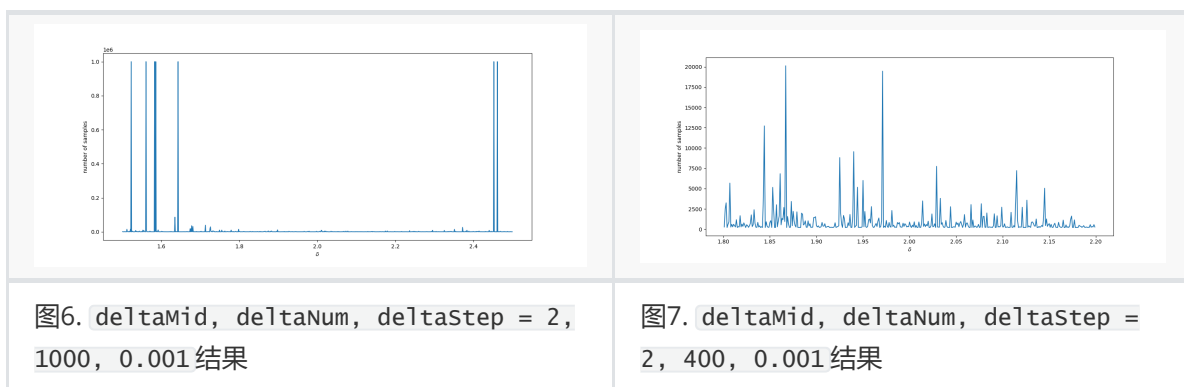
图1. $\delta = 2.08$ 时采样 10^6 次的结果

将误差放到 $abs(\langle (x - \mu)^2 \rangle - \sigma^2) \leq 0.05$, 采样下限为200次, 采样上限为 10^6 次, 运行结果如图2~5所示。

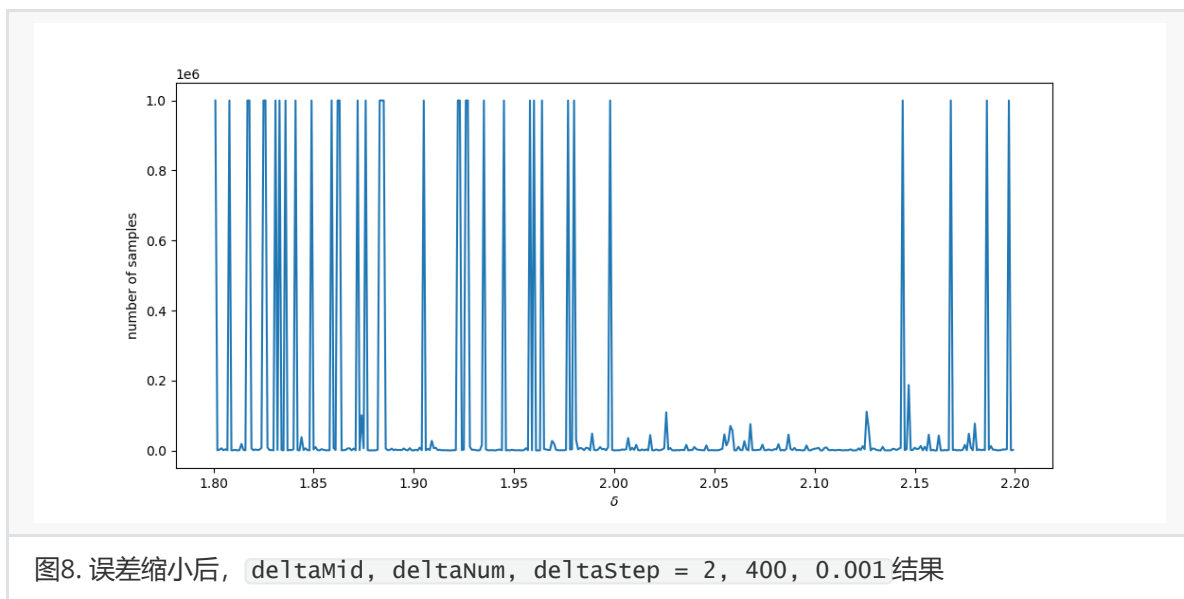
从图中来看, 当 δ 在0.1~0.5和1.6~2.4之间时会容易收敛, 其它情况下很难达到平衡, 尤其是当 $\delta > 3$ 时。



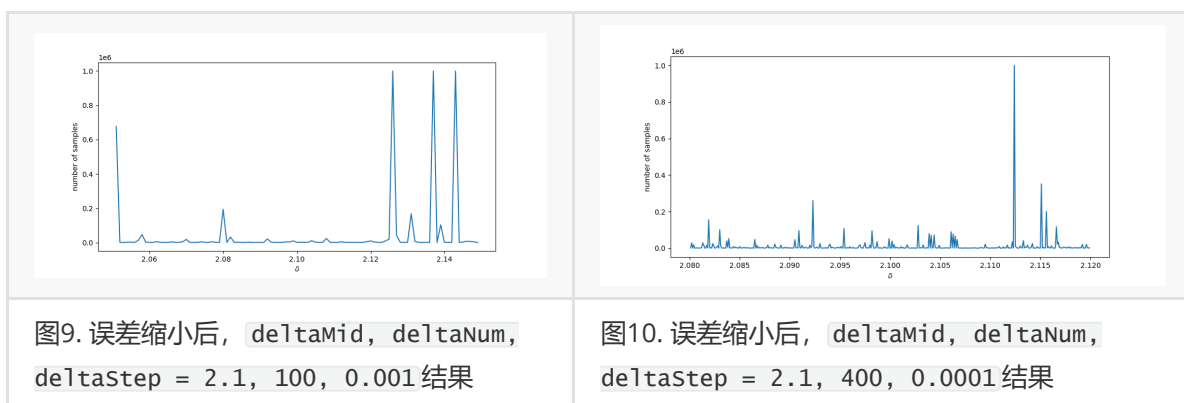
由于在2.0附近的收敛性都较好, 因此在2.0附近再作更细致的研究, 如图6、7所示



从图6和图7可看出 δ 在1.8~2.2的收敛性都较好。进一步探究，将误差放至 $abs(\langle (x - \mu)^2 \rangle - \sigma^2) \leq 0.005$ ，结果如图8所示。



从图中可看出只有在2.00~2.10附近的值收敛性较好。进一步考虑2.10附近，结果如图9、图10所示。



从图中可看出在2.08~2.10之间的 δ 对应的收敛性会较好，尤其是2.085和2.1058附近的值。

总的来看，随 δ 增大，达到平衡所需时间会不断地波动。由上述结果可知， δ 取值在2.08和2.1058附近时达到平衡所需时间较短，因此这些取值比较合理。