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(nWalk, 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

    `nWalk`：在$SelfAdopt=0$时，作为游走的次数；

    在$SelfAdopt\neq 0$时，作为游走次数的上限，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，采用规定次数的游走；

    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，需要设置一个游走上限，在这里将`nWalk`作为上限的数值。

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

  - 内部参数说明

    `Acceptance`：接受度，即$\frac{\text{得到的随机数数目}}{\text{随机游走的总次数}}$。

    `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

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。游走的次数默认为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：在这里用随机游走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，得到随机游走的次数，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。
- 在第一次游走时可能没有接受，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，因此增加了一个游走步数下限，在游走步数达到这个下限之后才开始检验是否达到“平衡条件”。

运行结果

$\delta=2$ 时随机游走10^6步的结果如图1所示。

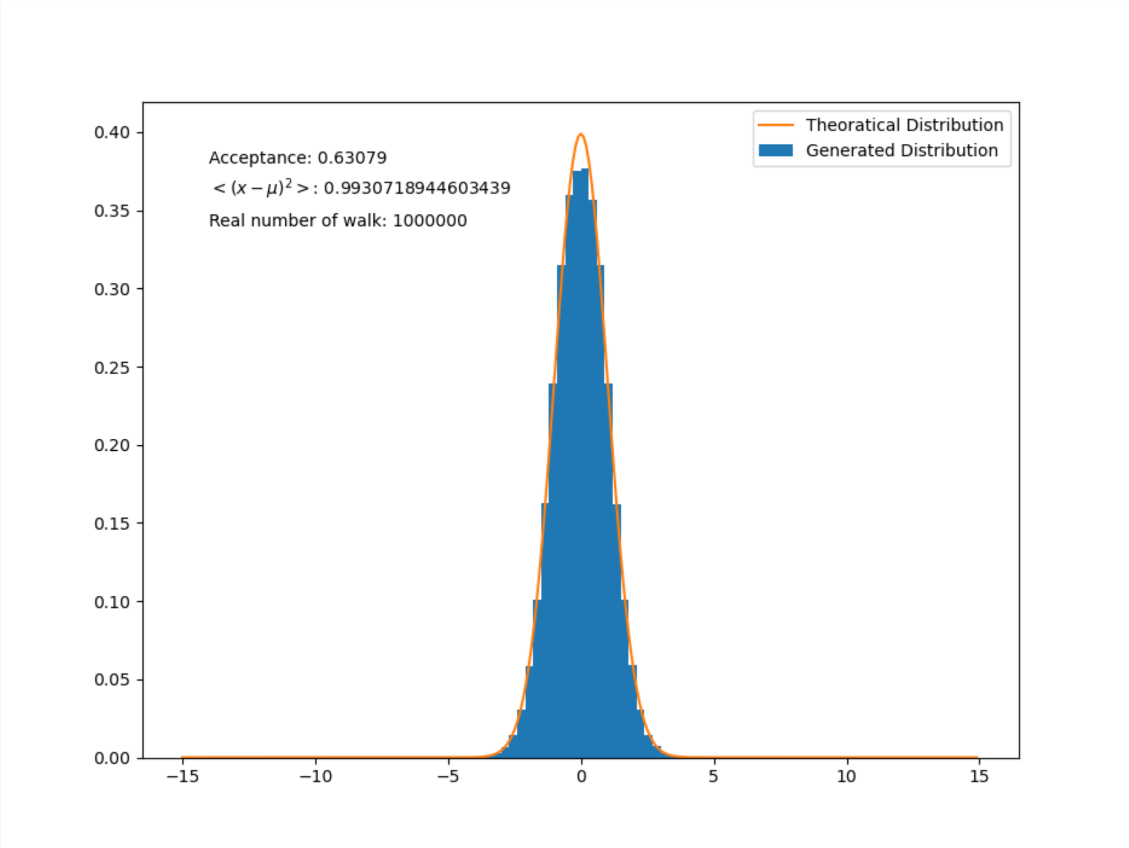


图1. $\delta = 2$ 时随机游走10^6步的结果

将误差放到 $abs(\langle(x-\mu)^2\rangle - \sigma^2) \leq 0.1$，运行结果如图2~9所示。其中为了检验结果的稳定性，对同一类参数进行了多次实验。

图3和图4是`deltaMid, deltaNum, deltaStep = 4, 200, 0.01`条件下的两次实验，图5~7是`deltaMid, deltaNum, deltaStep = 2, 200, 0.01`条件下的三次实验。从中可以看出同一条件下的结果比较相近，因此可认为实验的结果较为稳定。尽管图7中最大步数超过5×10^6而图5和图6都在14000左右，但是从分布形状上来看，三者还是差不多的。

从图2~4可看出当$\delta > 3$时达到平衡所需的步数十分不稳定，且游走的步数最高都超过了10^5甚至5×10^5。因此 **δ大于3的取值都不合理**。

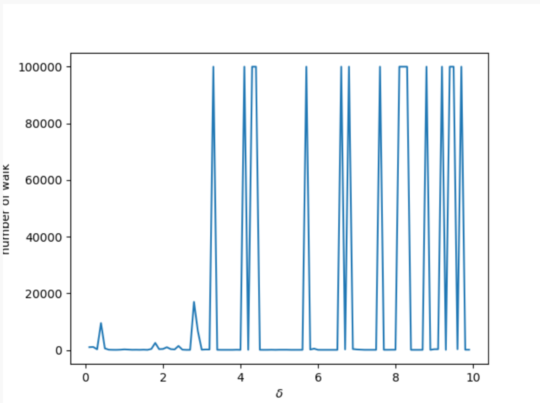


图2. `deltaMid, deltaNum, deltaStep = 5, 100, 0.1`结果

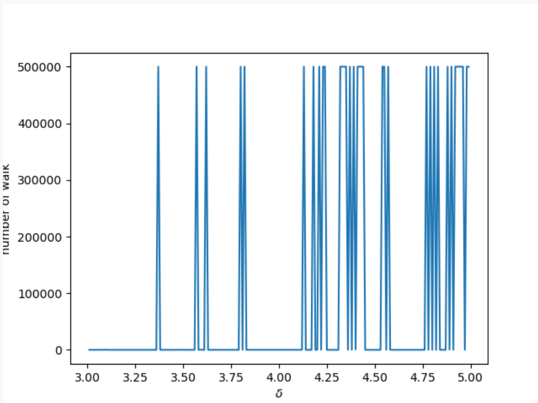
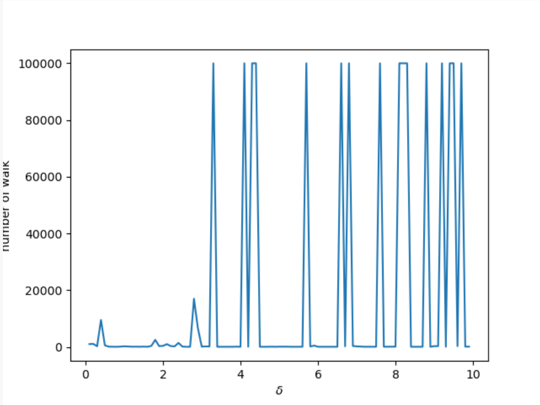
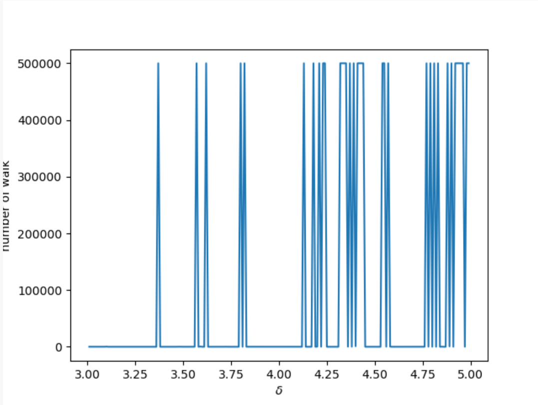


图3. `deltaMid, deltaNum, deltaStep = 4, 200, 0.01`第一次结果





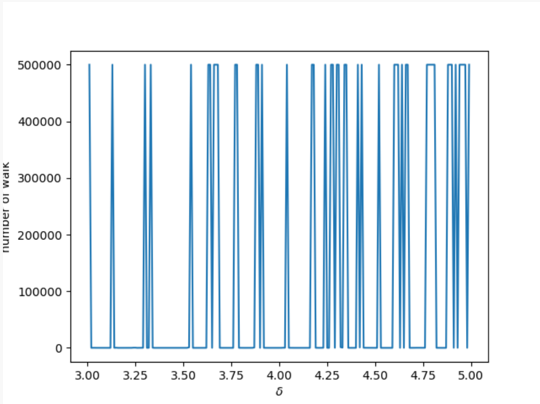


图4. `deltaMid, deltaNum, deltaStep = 4, 200, 0.01`第二次结果

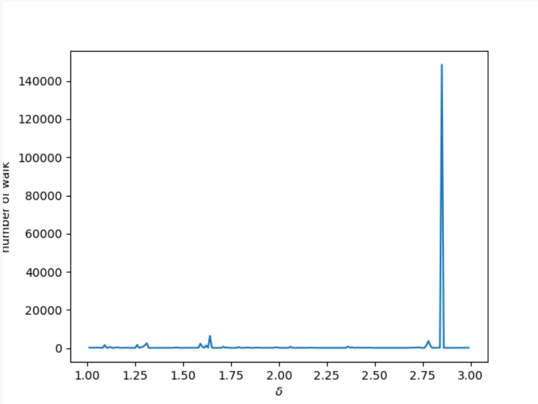


图5. `deltaMid, deltaNum, deltaStep = 2, 200, 0.01`第一次结果

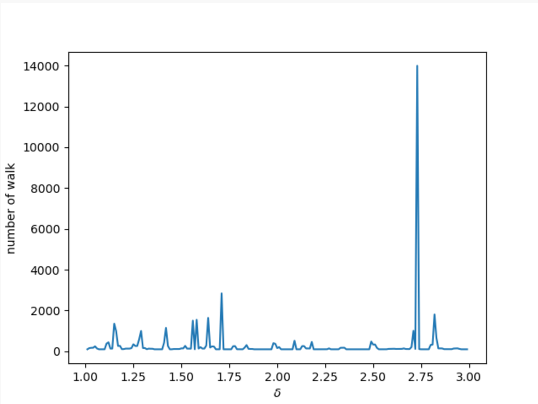


图6. `deltaMid, deltaNum, deltaStep = 2, 200, 0.01`第二次结果

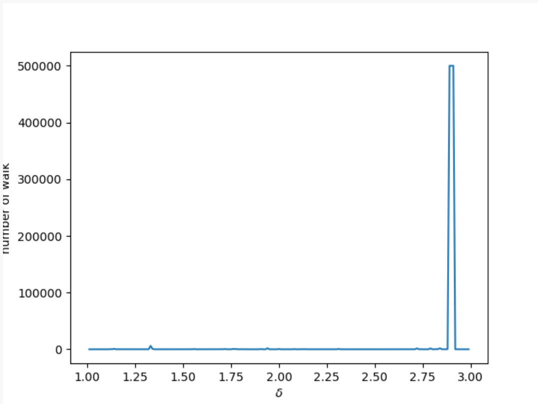


图7. `deltaMid, deltaNum, deltaStep = 2, 200, 0.01`第三次结果

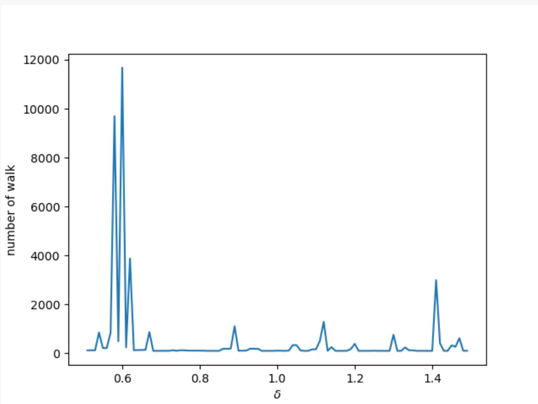


图8. `deltaMid, deltaNum, deltaStep = 1, 100, 0.01`第二次结果

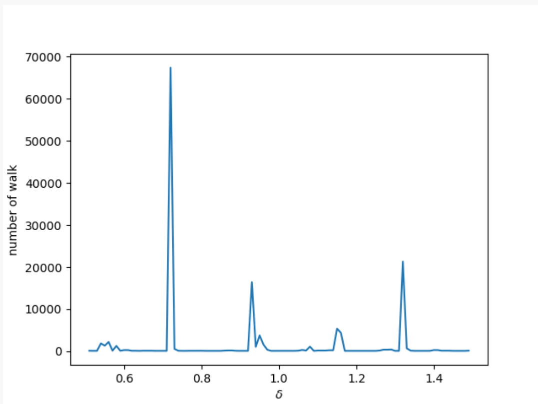


图9. `deltaMid, deltaNum, deltaStep = 1, 100, 0.01`第二次结果

图2~9的δ下限为100，因此图中较低的步数数量级过小，达到平衡应看作是一种偶然。因此对于图5~9，还需进一步研究。将下限设为1000，得到的结果如图10、11所示。再将下限设为10000，探究2.0附近的情况，如图12所示。

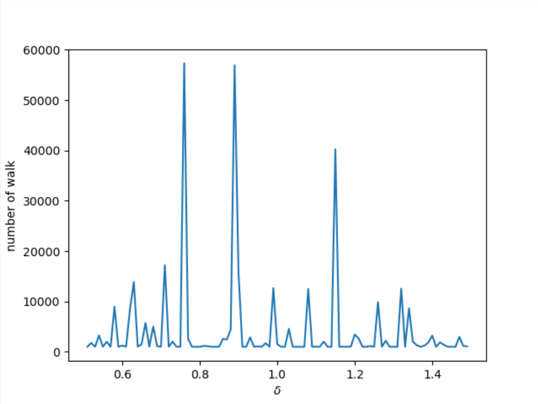


图10. 下限改为1000后原图8~9的结果

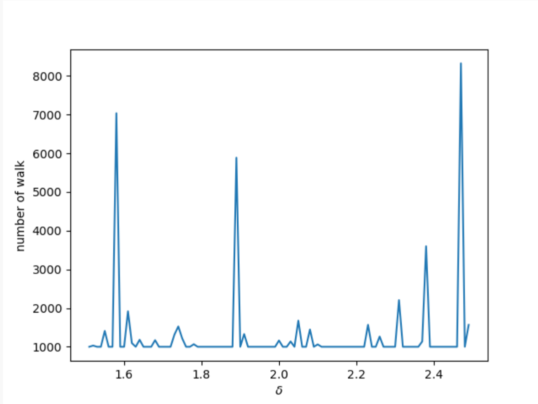


图11. 下限改为1000后原图5~7的结果

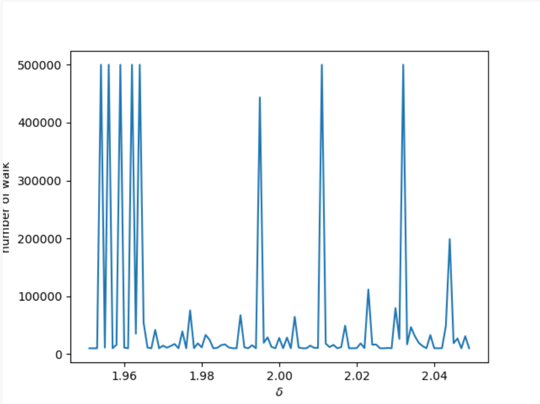


图12. 下限改为1000后在δ=2.0附近的结果

从图10~12中可以看出关系较为复杂，没有特点的规律。但是可以从中找到一些合适的δ取值，比如2.00和1.98等，即那些有波动但很小的部分。