

计算物理homework6

李明达 PB18020616^{1*}

摘要

这是计算物理第6题作业，作业题目是对两个函数线型（Gauss 分布和类Lorentz 型分布），设其一为 $p(x)$ ，另一为 $F(x)$ ，用舍选法对 $p(x)$ 抽样。将计算得到的归一化频数分布直方图与理论曲线 $p(x)$ 进行比较，讨论差异。讨论抽样效率。

关键词

舍选抽样法, lineshape

¹中国科学技术大学物理学院

*作者: dslmd@mail.ustc.edu.cn

1. 数学基础和算法

1.1 数学基础

我在本次实验中取Guassian为

$$G = \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right)$$

为了方便，我取Lorentzian为

$$L = \frac{2}{\sqrt{e}} \frac{1}{1+x^4}$$

之所以这么选，是因为这两个函数的交点在 $x=1$ 处，方便我们舍选抽样的进行，并且在 $[-1, 1]$ 的区域内，Lorentzian函数始终大于Guassian函数。所以我们要做的事情就是在Lorentzian函数中把Guassian函数抽出来。

两函数的大小分布如图1所示：

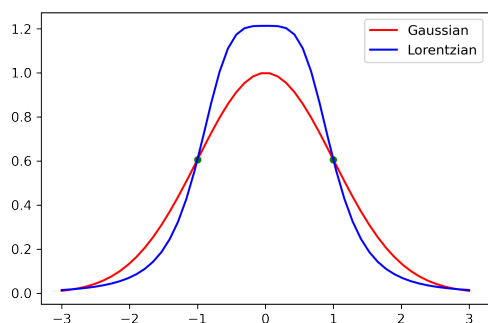


图 1. 在 $[-3, 3]$ 上两函数的相对位置

综上，我在本次作业选择Lorentz型作为 $F(x)$ ，用Guass型作为 $p(x)$ 进行舍选抽样

1.2 舍选抽样效率

通过上述两个公式，我们可以计算抽样效率

$$\eta = \frac{\int_{-1}^1 \exp(-x^2/2) dx}{\int_{-1}^1 \frac{2}{\sqrt{e}} \frac{1}{1+x^4} dx} = \frac{1.7112487}{2.1033828}$$

通过这种取法，最终效率可以达到81.36%

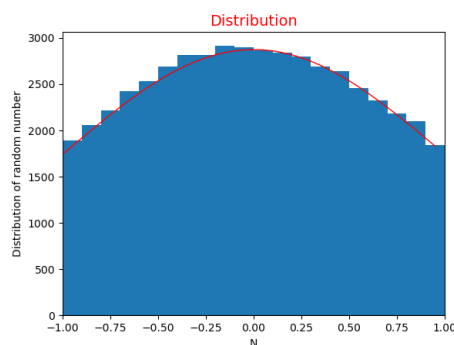


图 2. 实验模拟出来的抽样分布（蓝色）与理论值（红线）对比，第一次

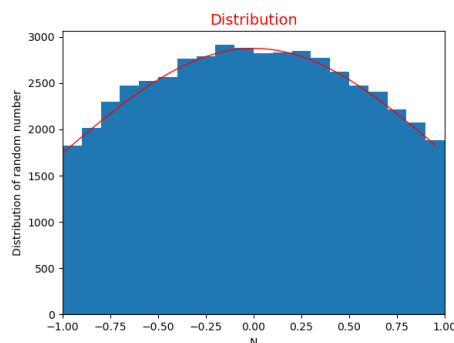


图 3. 实验模拟出来的抽样分布（蓝色）与理论值（红线）对比，第二次

1.3 算法

我写了Lorentzian_selected.Gaussian_RandN(int seed, int N) 函数，该函数通过Schrage随机数产生器，先从均匀分布里用舍选法选出Lorentzian型的函数，再从Lorentzian型舍选出N个Gaussian型的随

机数,并写入文件“lorentzian.txt”中保存。

2. 实验情况

2.1 计算频数分布直方图并与理论比较

为了得到比较好的效果,我取 $N=50000$,即每次程序运行产生50000个随机数。如图2, 3所示

2.2 抽样效率

这里我取 $N=10000$,即每次程序运行产生10000个随机数。如图4, 5, 6所示。

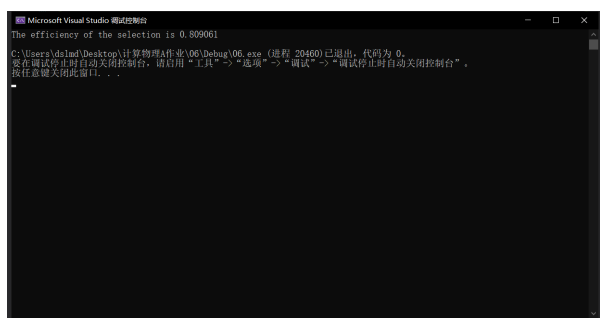


图 4. 实验模拟出来的抽样效率, 第一次

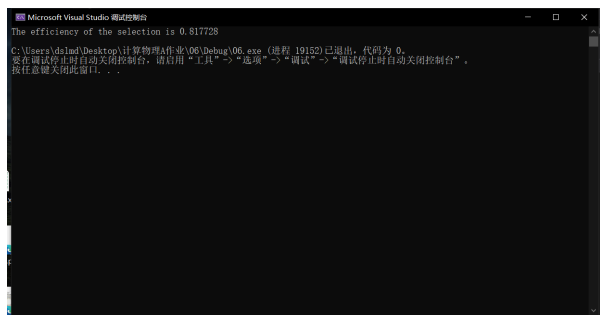


图 5. 实验模拟出来的抽样效率, 第二次

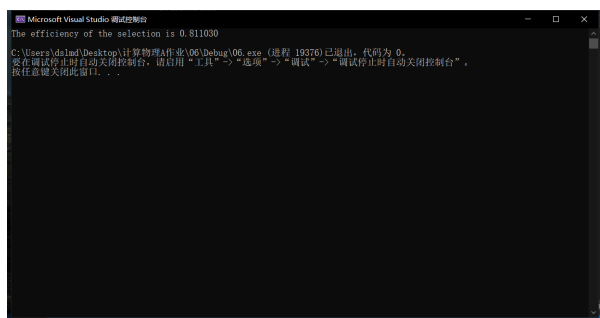


图 6. 实验模拟出来的抽样效率, 第三次

我们取三次平均的结果可以得到实验效率为81.26%, 这与理论值81.36%非常接近, 说明这次实验是很成功的!

2.3 抽样效率的讨论

从图1可以看出来, 如果我们想让抽样效率更高, 可以让Gaussian占更多的Lorentzian的面积, 比如把Lorentzian函数前面的系数减小, 并缩小舍选范围; 或者我们还可以把Guassian型的函数沿y轴向上平移并缩小舍选范围。

在本题中, 我为了计算方便选择Lorentzian前面 $\frac{2}{\sqrt{e}}$ 的系数, 使得效率达到了八成, 理论上可以更加优化甚至到九成的效率。

3. 结论

本题我写了Lorentzian_selected_Guassian_RandN函数, 该函数通过Schrage随机数产生器, 先从均匀分布里用舍选法选出Lorentzian型的函数, 再从Lorentzian型舍选出N个Gaussian型的随机数, 并通过Python画出最终的实验结果图。通过实验模拟出来的抽样分布(蓝色)与理论值(红线)对比, 我们发现符合结果良好。其次, 我们取三次平均的结果可以得到实验效率为81.26%, 这与理论值81.36%非常接近, 这也说明了实验是非常成功的。最后我们又讨论了提高抽样效率的方法, 为以后的优化指明了方向。