计算物理 A——Homework 4

何金铭 PB21020660

1 题目描述

设 pdf 函数满足关系式

$$p'(x) = a\delta(x) + b\exp(-cx), x \in [-1, 1], a \neq 0$$

讨论该函数性质并给出抽样方法。

1.1 大致思路

1. 对方程积分，得出 $p(x)$ 的表达式，然后对其进行分析

2. 选取一种合适的抽样方式对其进行抽样，并且讨论参数 a, b, c 对抽样方法选取的影响，并且得出各种情况下效率最高的抽样方法.

2 具体过程

对 $p'(x)$ 积分可得:

$$p(x) = \begin{cases} \frac{b}{c}(e^c - e^{-cx}) & x \in [-1, 0] \\ a + \frac{b}{c}(e^c - e^{-cx}) & x \in [0, 1] \end{cases} \tag{1}$$

可以得到 $p(x)$ 的大致图像 $(a, b, c > 0)$:

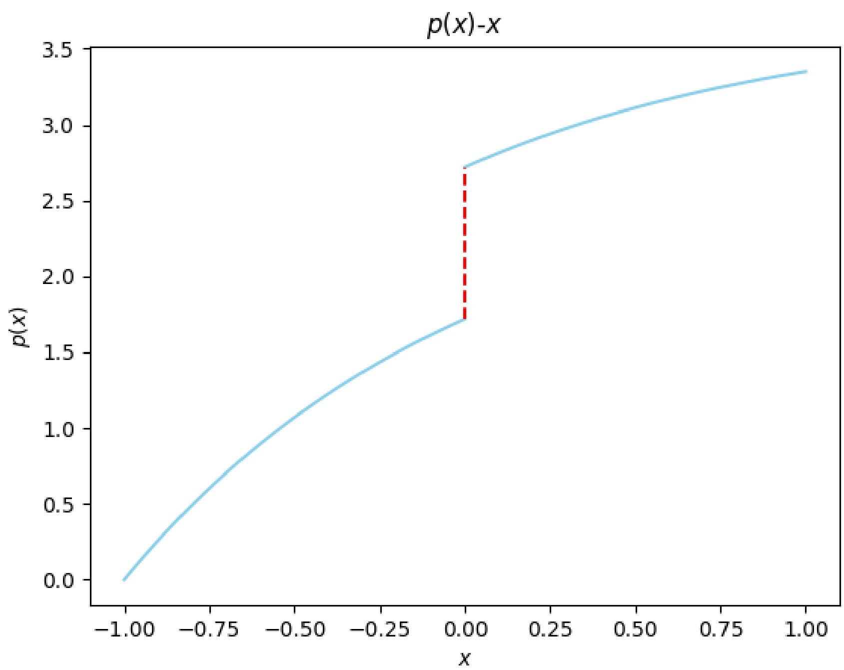

图 1: 未归一化的 $p(x)$

另外有 pdf 需要满足归一化条件, 有 $\int_{-1}^{1} p(x)\,dx = 1$

$$F(x) = \int_{-1}^{x} p(x)\,dx = \begin{cases} \frac{b}{c}e^{c}(x+1) + \frac{b}{c^2}(e^{c} - e^{-cx}) & x \in [-1,0] \\ ax + \frac{b}{c}e^{c}(x+1) + \frac{b}{c^2}(e^{c} - e^{-cx}) & x \in [0,1] \end{cases} \tag{2}$$

带入 $x = 1$ 得:

$$a + 2\frac{b}{c}e^{c} + \frac{b}{c^2}(e^{c} - e^{-c}) = 1 \tag{3}$$

由于未知参数过多, 这里就不给出具体的数值讨论, 只给出大致的思路.

2.1 分类讨论

1. $b = 0$ 时是一个平凡的情况,$p(x)$ 是一个阶梯函数, 讨论的意义不大, 这里舍去.
2. $c = 0$ 时也是一个平凡的情况,$p(x)$ 是一个阶梯函数在 y 轴上的平移, 讨论的意义不大, 这里舍去.
3. 由数学上分析可得:$b > 0$ 恒成立,$c < 0, c > 0$ 均有可能出现,$a > 1, a < 1$ 的情况也均可能出现

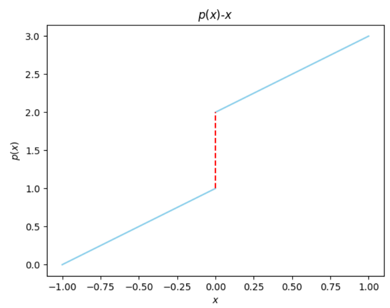

图 2: $c \to 0$ 时

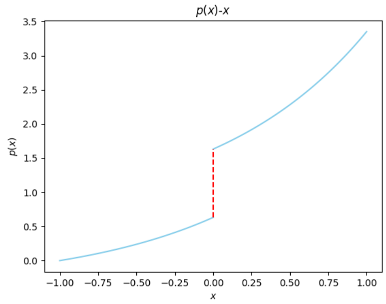

图 3: c 取负值时

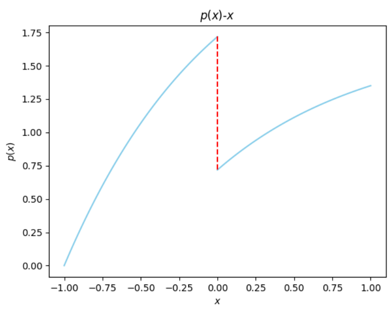

图 4: $a < 0$ 时

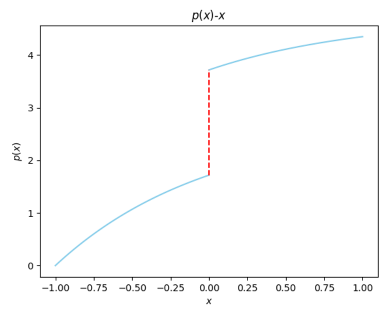

图 5: $a > 1$ 时

2.2 抽样方法

2.2.1 舍选抽样法 (简单分布)

对于某些特定的 b, c, 当其使得指数图像稍为平衡的时候, 可以选择简单分布抽样法, 其操作简单且计算效率也尚可接受.

对于区间 $x_1 \in [-1, 0]$:

1. 生成随机数 $\xi_1, \xi_2 \in [0,1]$
2. x-$Axis$ 上的随机点的坐标 $\xi_x = -\xi_1$
3. 区间内最大值 $M = \frac{b}{c}(e^c - 1)$, 若 $\xi_2 M < p(\xi_x)$, 则取抽样点 $\eta = \xi_x = -\xi_1$; 若不成立, 则重新开始操作 1.

同理可得, 对于区间 $x_2 \in [0,1]$:

1. 生成随机数 $\xi_1, \xi_2 \in [0,1]$
2. x-$Axis$ 上的随机点的坐标 $\xi_x = \xi_1$
3. 当 $\frac{b}{c}(1 - e^{-c}) > 0$ 时区间内最大值 $M_1 = \frac{b}{c}(e^c - 1) + a + \frac{b}{c}(1 - e^{-c})$, 当 $\frac{b}{c}(1 - e^{-c}) < 0$ 时区间内最大值 $M = \frac{b}{c}(e^c - 1) + a$. 若 $\xi_2 M < p(\xi_x)$, 则取抽样点 $\eta = \xi_x = \xi_1$; 若不成立, 则重新开始操作 1.

抽样方法如图所示:

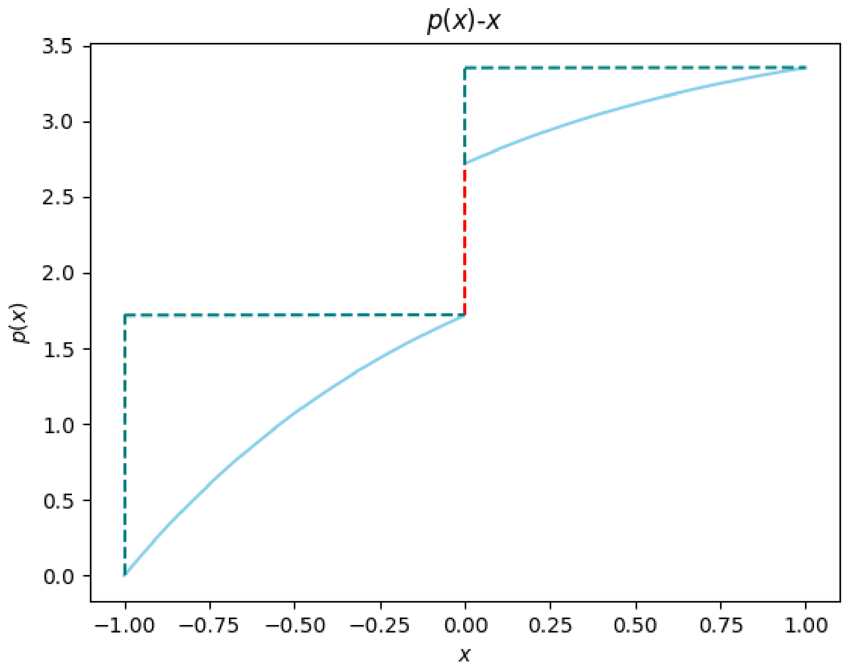

图 6: 简单分布示意图

2.2.2 舍选抽样法 (第二类舍选法)

当 b, c 的取值一般化时, 指数图像可能会比较陡峭, 其中一个区间可以使用简单分布的舍选法, 而另一个区间就需使用第二类舍选法以提高抽样的效率.

由于要构造一个新的函数也比较困难, 所以可以采取阶梯函数的形式, 来提高效率.

具体用数学的语言来说, 就是对于指数函数陡峭的区间 $[x_1, x_2]$. 将其切分成若干的小区间 $[x_{a0}, x_{a1}], [x_{a1}, x_{a2}] \ldots [x_{a(n-1)}, x_{an}]$. 然后进行操作如下:

1. 生成随机数 $\xi_1, \xi_2 \in [0,1]$

2. x-$Axis$ 上的随机点的坐标 $\xi_x = (x_{a(j+1)} - x_{aj})\xi_1 + x_{aj}$
3. 区间内最大值 $M = \max\{p(x_{aj}), p(x_{a(j+1)})\}$, 若 $\xi_2 M < p(\xi_x)$, 则取抽样点 $\eta = \xi_x$; 若不成立, 则重新开始操作 1.

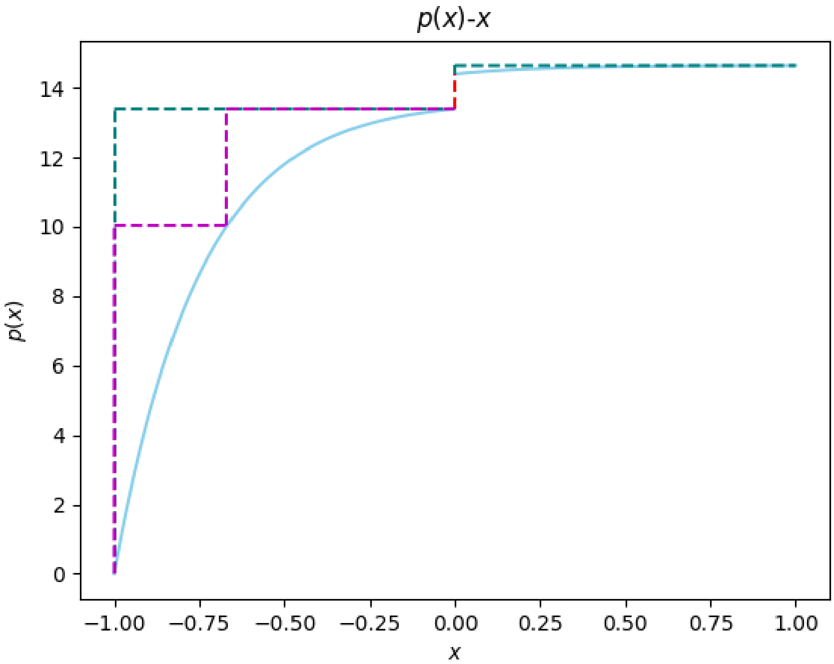

图 7: 第二类舍选法大致思路示意图

2.2.3 变换抽样法

这里讨论 $c > 0$ 的情况,$c < 0$ 的情况也可以类似得出:

$$p(x) = \begin{cases} \frac{b}{c}(e^c - e^{-cx}) & x \in [-1, 0] \\ a + \frac{b}{c}(e^c - e^{-cx}) & x \in [0, 1] \end{cases} \tag{4}$$

令 $y = e^{-cx}$, 有:

$$g(y) = C_0 \cdot \begin{cases} \frac{b}{c}(e^c - y) & y \in [1, e^c] \\ a + \frac{b}{c}(e^c - y) & y \in [e^{-c}, 1] \end{cases} \tag{5}$$

其中 C_0 为归一化常数, 积分可得:

$$C_0 = \frac{1}{a(1 - e^{-c}) + \frac{b}{2c}(e^c - e^{-c})^2} \tag{6}$$

$$G(y) = \int_{e^{-c}}^{e^c} g(y)\, dy = \begin{cases} \frac{b}{c}e^c(y-1) - \frac{b}{2c}(y^2 - 1) & y \in [1, e^c] \\ a(y - e^{-c}) + \frac{b}{c}e^c(y - e^{-c}) - \frac{b}{2c}(y^2 - e^{-2c}) & y \in [e^{-c}, 1] \end{cases} \tag{7}$$

具体算法为:

1. 生成随机数 $\xi \in [0, 1]$

2. 代入式 (7), 解得关系式 $y = f(\xi)$
3. 解得 x 关于 y 的反函数 $x = -\frac{1}{c}\log y$, 可得到表达式:

$$x = -\frac{1}{c}\log y = x = -\frac{1}{c}\log f(\xi) \tag{8}$$

由于缺少具体的参数 a, b, c, 这里只给出一般的算法, 而不会给出通解.

3 程序说明

由于缺少具体的参数 a, b, c, 就不代入数值进行运算

3.1 文件说明

./pic 文件夹路径, 里面存放了一些 $p(x)$ 可能的图像

./report4.pdf 作业报告

4 结果分析

由于缺少具体的参数 a, b, c, 就不代入数值进行运算

5 总结

1. 函数的大致性质是一个错位的指数函数, 其陡峭程度由参数 c 决定
2. 抽样方法需要依据具体的参数而定
3. 对于比较平稳的图像, 可以采用舍选法简单分布
4. 对于比较陡峭的图像, 可以采用第二类舍选法, 对陡峭的区间进行不断的切分, 以以提高抽样效率
5. 还有一种普适的变换抽样法