计算物理 A——Homework 8

何金铭 PB21020660

1 题目描述

用 Monte Carlo 方法计算如下定积分，并讨论有效数字位数。

$$I_1 = \int_0^5 dx\sqrt{x^2 + 2\sqrt{x}} \tag{1}$$

$$I_2 = \int_0^{\frac{7}{10}} \int_0^{\frac{4}{7}} \int_0^{\frac{9}{10}} \int_0^{2} \int_0^{\frac{13}{11}} dx\,dy\,dz\,du\,dv(5 + x^2 - y^2 + 3xy - z^2 + u^3 - v^3) \tag{2}$$

1.1 大致思路

1. 对不同的积分考虑不同的方法，比如比较容易的积分可以采用掷石法和均值法，对于那些比较陡峭的积分可以采取重要抽样法。
2. 讨论有效数字位数，主要考虑中心极限定理对 Monte Carlo 算法误差的影响。

2 理论分析与算法实现

2.1 对于第一个积分

其理论值为 $I_1 = 15.4390107356$

观察积分的图像：

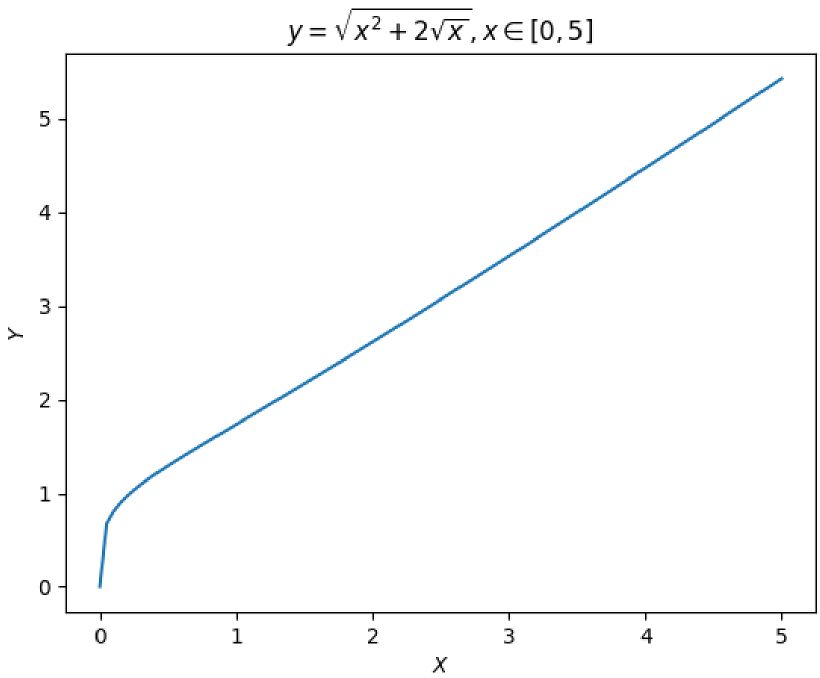

图 1: 函数图像

发现函数在 0 附近比较陡峭，故比较适合用重要抽样法。

2.1.1 平均值法

1. 生成随机数 $\xi \in [0,1]$
2. 相应的 $x_i = a_i + (b_i - a_i)\xi$
3. 重复上述操作 N 次，计算得 N 个函数值，最终求得平均值。

当 $N = 10^6$ 时，计算得的积分值为 6.254。发现偏差十分大，选取新的方法。

2.1.2 提取法

取 $I_1 = \int_0^5 (f(x) - x)\, dx + \int_0^5 x\, dx$
得变换后的函数图像如图：

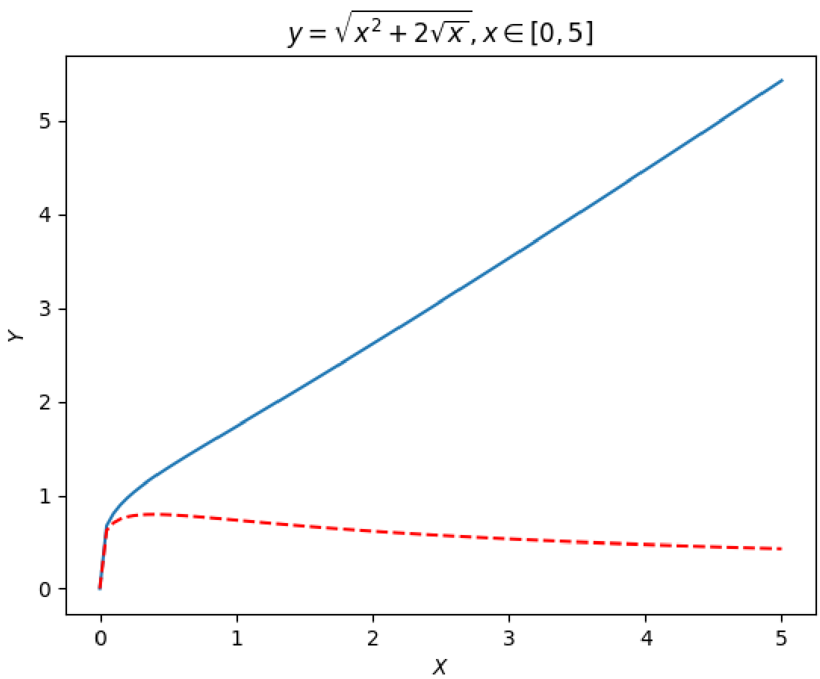

图 2: 提取法

其算法与平均值法一致，可参考 (2.1.1) 法

2.1.3 权重 Monte Carlo 法

若取 $g(x) = x + \sqrt[4]{x}$，则 $\dfrac{f(x)}{g(x)} = \dfrac{\sqrt{x^2 + 2\sqrt{x}}}{x + \sqrt[4]{x}}$

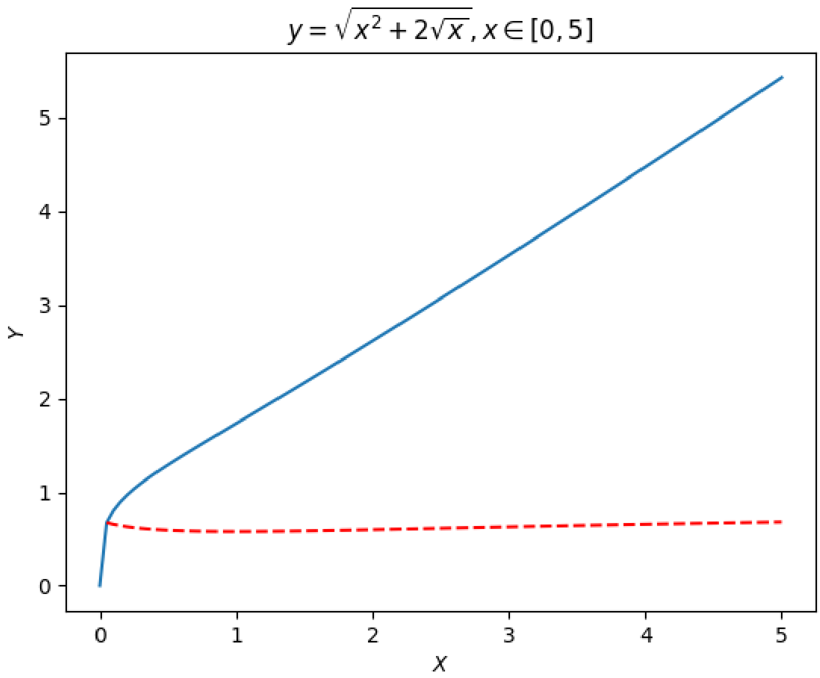

图 3: 原函数图像与变换后的函数图像

可以发现函数图像变得平缓了不少

$$c=\int_0^5 g(x)\,dx=12.5+0.8\cdot 5^{\frac{5}{4}}=18.4814 \tag{3}$$

$$I\cong(c-0)\cdot\left\langle\frac{f(y)}{g(y)}\right\rangle=(c-0)\cdot\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{i=N}\frac{f(y_i)}{g(y_i)} \tag{4}$$

其中 $x=c\xi$，ξ 为 $[0,1]$ 间的随机数

其算法与平均值法一致，可参考 (2.1.1) 法其算法与平均值法一致，可参考 (2.1.1) 法

有效数字位数由抽样次数 N 决定。

2.2 对于第二个积分

其理论值为 $I_2=\dfrac{5091022053}{896761250}=5.677120920$

2.2.1 平均值法

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_0^{\frac{7}{10}}\int_0^{\frac{4}{7}}\int_0^{\frac{9}{10}}\int_0^{2}\int_0^{\frac{13}{11}} dx\,dy\,dz\,du\,dv(5+x^2-y^2+3xy-z^2+u^3-v^3)\\ &= \int_0^{\frac{7}{10}}\int_0^{\frac{4}{7}}\int_0^{\frac{9}{10}}\int_0^{2}\int_0^{\frac{13}{11}} dx\,dy\,dz\,du\,dv f(x,y,z,u,v)\\ &\cong \frac{\prod_i^5(b_i-a_i)}{N}\sum_{i=1}^{i=N} f(x_i,y_i,z_i,u_i,v_i) \end{aligned} \tag{5}$$

其算法为:

1. 生成随机数 $\xi_1, \xi_2, ..., \xi_5 \in [0,1]$
2. 相应的 $x_i = a_i + (b_i - a_i)\xi_i$
3. 重复上述操作 N 次，计算得 N 个函数值，最终求得平均值。

2.2.2 分成多个一维积分

$$
\begin{aligned}
I_2 = &\frac{7}{10}\cdot\frac{4}{7}\cdot\frac{9}{10}\cdot 2\cdot\frac{13}{11}\cdot 5 + \int_0^{\frac{7}{10}} x^2\,dx\cdot\frac{4}{7}\cdot\frac{9}{10}\cdot 2\cdot\frac{13}{11} - \int_0^{\frac{4}{7}} y^2\,dy\cdot\frac{7}{10}\cdot\frac{9}{10}\cdot 2\cdot\frac{13}{11} \\
&+ 3\int_0^{\frac{7}{10}} x\,dx\int_0^{\frac{4}{7}} y\,dy\cdot\frac{9}{10}\cdot 2\cdot\frac{13}{11} - \int_0^{\frac{9}{10}} z^2\,dz\cdot\frac{7}{10}\cdot\frac{4}{7}\cdot 2\cdot\frac{13}{11} + \int_0^{2} u^3\,du\cdot\frac{7}{10}\cdot\frac{4}{7}\cdot\frac{9}{10}\cdot\frac{13}{11} \\
&- \int_0^{\frac{13}{11}} v^3\,dv\cdot\frac{7}{10}\cdot\frac{4}{7}\cdot\frac{9}{10}\cdot 2
\end{aligned} \tag{6}
$$

分析函数的表达式可得:

- 函数有多个自变量
- x^3 类型的函数于 0 附近的函数值变化十分陡峭

将多重积分拆分成一重积分将会削弱 Monte Carlo 的优势，故在此不演示，以方法 (2.2.1) 为主。

3 程序说明

3.1 主要程序

schrage.c 16807 随机数生成器 (*Schrage* 法) 的代码

int1.py 积分第一个式子的程序，其中有平均值法、提取法、权重 Monte Carlo 法的代码

int2.py 积分第二个式子的程序，其中有多重积分的平均值法。

3.2 程序结果

schrage.exe 16807 PRNG

16807.csv 一个种子数为”23942907” 的样本随机数文件

3.3 其他说明

1. 数据都写于 CSV 文件中
2. 其中 Python 程序用到的库有:

- matplotlib.pyplot：用于作图
- numpy：用于数据处理
- csv：用于读写 CSV 文件

4 结果分析

4.1 第一个积分

4.1.1 提取法

N	10^2	10^3	10^4	10^5
$\|\Delta I\|$	0.7748	0.8222	0.8164	0.8169
有效位数	1	1	2	2

发现结果与精确值有一个约 0.8 的偏差，可知此方法精度不够，效率不高。

4.1.2 权重 Monte Carlo 法

N	10^2	10^3	10^4	10^5
$\|\Delta I\|$	0.855313	0.740149	0.749371	0.749778
有效位数	1	1	2	3

4.2 第二个积分

N	10^2	10^3	10^4	10^5	10^6	10^7
$\|\Delta I\|$	0.248512	0.146947	0.017949	0.005355	0.000565	0.000123
有效位数	1	1	2	3	4	4

5 总结

1. 计算比较陡峭的函数时，需要注意使用提取法、重要抽样法或权重 Monte Carlo 法
2. 权重法需要找到一个合适的 $g(x)$，否则整体效果也不佳
3. 积分 1 的有效数字如上图所示，但是积分 1 的结果有待提高
4. 积分 2 的有效数字如上图所示
5. Monte Carlo 在高维多重积分下更加有优势