计算物理 作业报告11

PB14203209 张静宁 2017.11.1 4

第十一题

用Monte Carlo方法计算如下定积分，并讨论有效数字位数.

$\int_0^1 dx\sqrt{x+\sqrt{x}}$,

$\int_0^{7/10} dx \int_0^{4/5} dy \int_0^{9/10} dz \int_0^1 du \int_0^{11/10} dv (6-x^2-y^2-z^2-u^2-v^2)$

算法公式

Monte Carlo简单抽样平均值法

计算单变量积分时，根据平均值定理 $\int_a^b f(x)dx=(b-a)<f>$,

$<f>=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N f(x_i)$，即$<f>$表示$f(x)$在$[a,b]$上的均值，$x_i$在$[a,b]$区间中均匀随机选取.

故有 $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{N}\sum_{i=1}^N f(x_i)$

计算多重积分时，上式推广为

$\int_{a_1}^{b_1} dx_1 \int_{a_2}^{b_2} dx_2 \ldots \int_{a_n}^{b_n} dx_n f(x_1,x_2,\ldots,x_n)=\frac{1}{N}[\prod_{j=1}^n (b_j-a_j)]\sum_{i=1}^N f(x_{1_i},x_{2_i},\ldots,x_{n_i})$

中心极限定理与误差

中心极限定理指出，当N有限时，$P((\frac{<f>-\mu}{\sigma_f/\sqrt{N}})<\beta)\rightarrow\phi(\beta)$，其中$\phi(\beta)$是标准正态分布.

其中 μ为随机序列$\{f_i\}$的期望值，σ_f为函数标准差.

积分值 $s=\int_a^b f(x)dx=(b-a)<f>$，定义$<f>=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N f(x_i)$

积分值方差 $\sigma_s^2=var(s)=var((b-a)<f>)=(b-a)^2 var(<f>)$

积分值标准差 $\sigma_s=(b-a)\sqrt{E(<f>-\mu)^2}=(b-a)\frac{\sigma_f}{\sqrt{N}}$

上式说明，σ_s随着$1/\sqrt{N}$变化，即当样本点增加100倍时误差缩小十倍. 反过来说，要达到一定的计算精度，必须以平方的方式增加样本点数. 这是Monte Carlo计算的一个固有弱点.

随机数发生器

这次的程序，直接调用了C语言rand()函数，作为随机数发生器，并根据需要取了不同的随机数种子.

程序说明

- integral1.c 计算单变量积分，输出样本点、积分值、误差大小
- integral2.c 计算多变量积分，输出样本点、积分值、误差大小

计算结果与分析

用 Mathematica 计算所给积分（保留15位有效数字）

$\int_0^1 dx \sqrt{x+\sqrt{x}} = 1.04530130813919$

$\int_0^{7/10} dx \int_0^{4/5} dy \int_0^{9/10} dz \int_0^1 du \int_0^{11/10} dv (6-x^2-y^2-z^2-u^2-v^2) = 2.55948000000000$

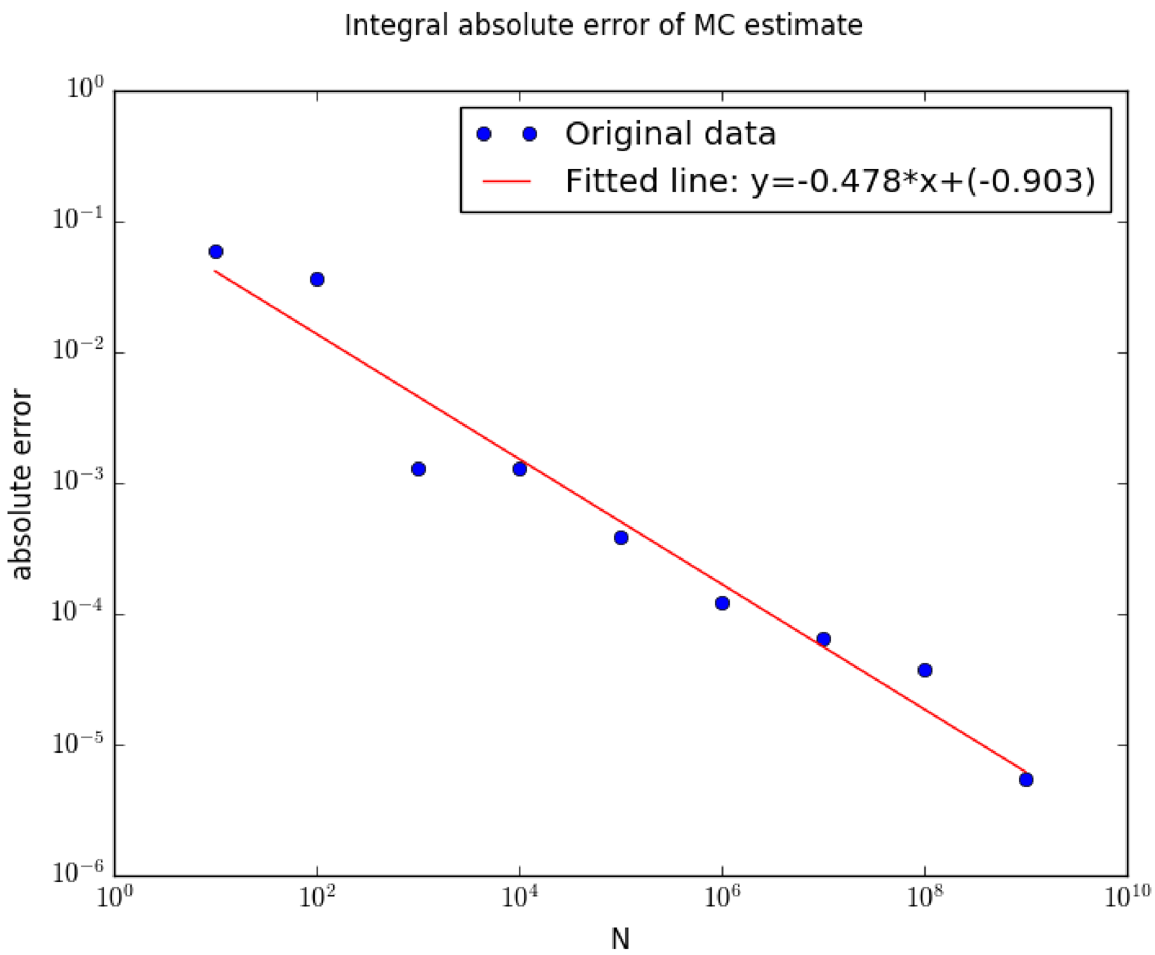
误差定义为：积分计算值与理论值的差的绝对值.

单变量积分

随机抽样样本点为N，积分值为Integral，误差为Error，计算了结果表示：随着样本点增多，误差减小. 做出N-Error双对数图，并对数据点线性拟合，得到直线斜率为-0.478，验证了误差随$1/\sqrt{N}$变化. 即样本点增加100倍，误差缩小10倍.

随机数种子 srand(1)，$N=10^9$时，误差为$5*10^{-6}$，有效数字为小数点后五位.

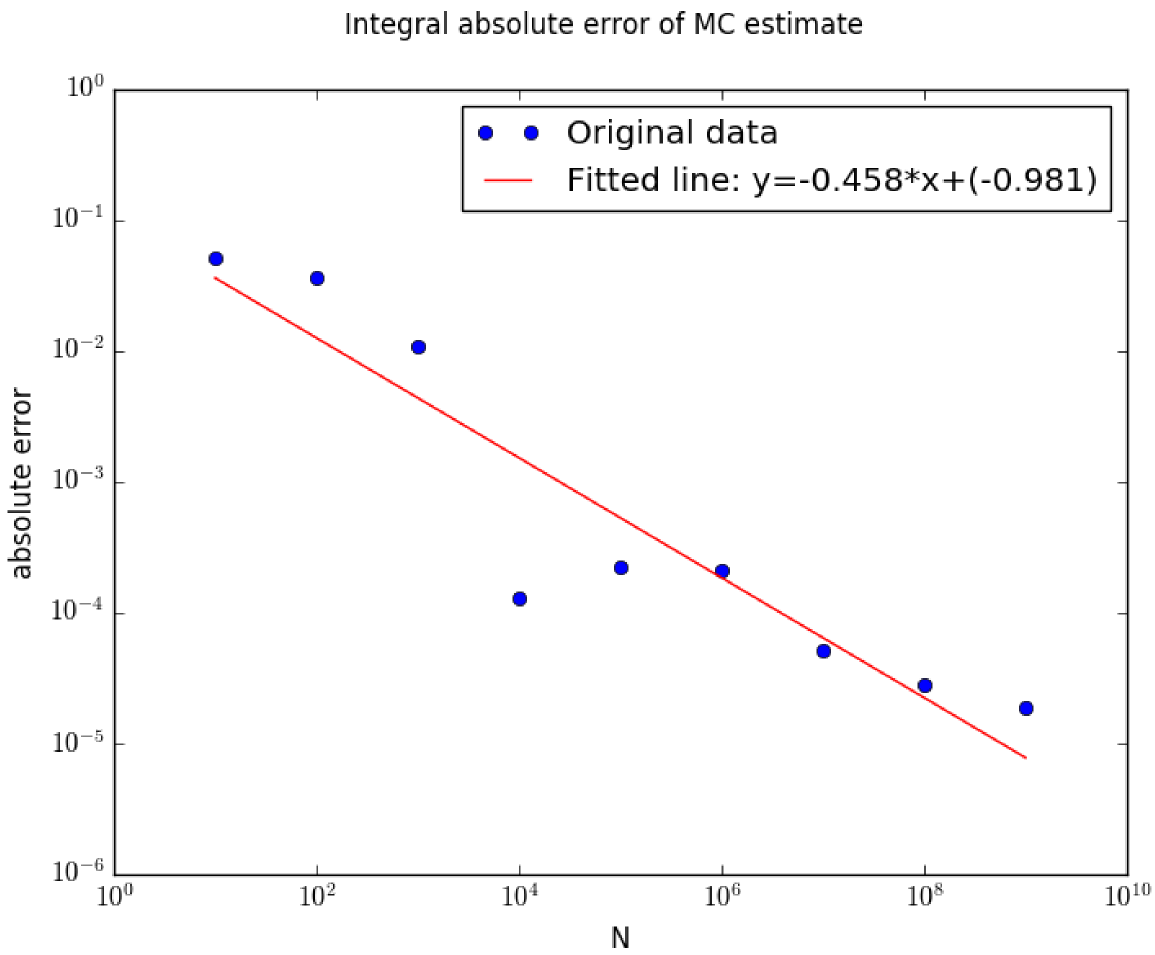
```
         N,                Integral,             Error
        10,              0.98657257,          5.87287411e-02
       100,              1.00907477,          3.62265414e-02
      1000,              1.04660385,          1.30253750e-03
     10000,              1.04401941,          1.28189481e-03
    100000,              1.04568437,          3.83056956e-04
   1000000,              1.04542423,          1.22922394e-04
  10000000,              1.04523602,          6.52838077e-05
 100000000,              1.04526370,          3.76047207e-05
1000000000,              1.04529584,          5.47170710e-06
```



多重积分

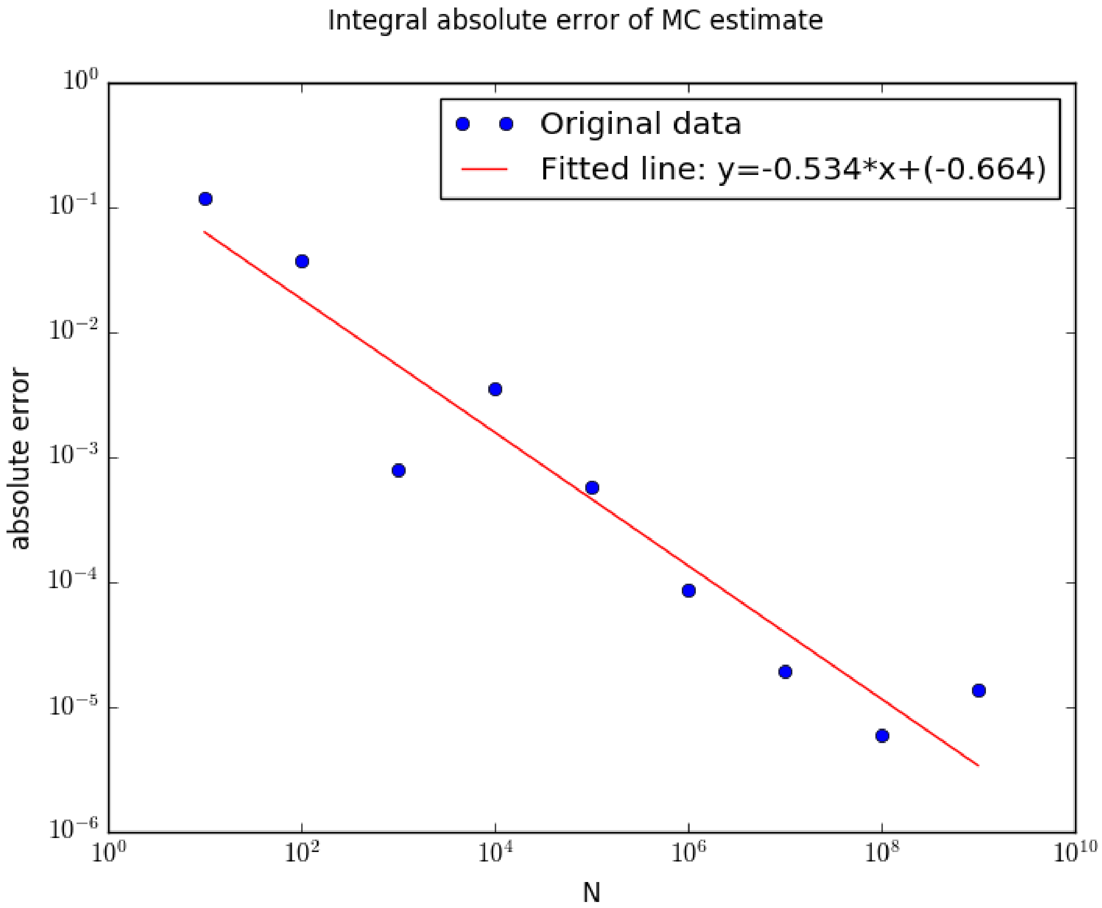
1. 随机数种子 srand(12)，双对数图拟合斜率 -0.458 . $N=10^9$时，误差为$2*10^{-5}$，有效数字为小数点后四位.

```
         N,           Integral,                Error
        10,     2.507602429329813,    5.187757067018683e-02
       100,     2.595694440214977,    3.621444021497666e-02
      1000,     2.548582948841808,    1.089705115819228e-02
     10000,     2.559609230311399,    1.292303113986648e-04
    100000,     2.559705647489841,    2.256474898403305e-04
   1000000,     2.559689045911346,    2.090459113461840e-04
  10000000,     2.559531088919472,    5.108891947225302e-05
 100000000,     2.559508269810699,    2.826981069858903e-05
1000000000,     2.559460914245181,    1.908575481968100e-05
```



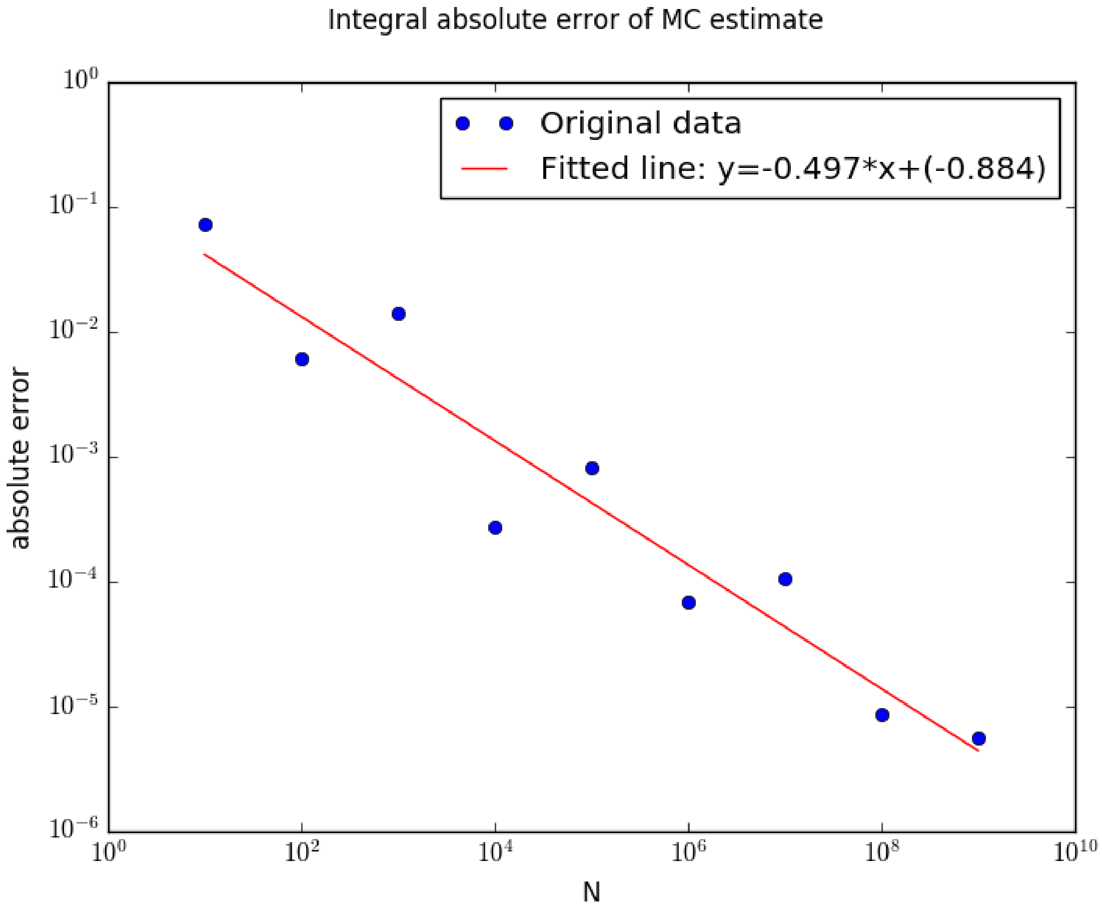
2. 随机数种子 srand(1)，双对数图拟合斜率 -0.534 . 且$N=10^8$时，误差为$6*10^{-6}$，有效数字为小数点后五位.

```
         N,          Integral,              Error
        10,      2.439722211934796,    1.197577880652041e-01
       100,      2.521629490936233,    3.785050906376730e-02
      1000,      2.558676622083478,    8.033779165224075e-04
     10000,      2.562985711306419,    3.505711306418746e-03
    100000,      2.558901267598593,    5.787324014074890e-04
   1000000,      2.559394428555048,    8.557144495213720e-05
  10000000,      2.55946046864356 5,   1.953135643484316e-05
 100000000,      2.559474081116166,    5.918883833722077e-06
1000000000,      2.559466379688593,    1.362031140761388e-05
```



3. 随机数种子 srand(100)，双对数图拟合斜率 -0.497 . 且$N=10^9$时，误差为$6*10^{-6}$，有效数字为小数点后五位.

```
         N,          Integral,              Error
        10,      2.631379452379285,    7.189945237928486e-02
       100,      2.553436711990599,    6.043288009401238e-03
      1000,      2.545179684162530,    1.430031583746993e-02
     10000,      2.559204505038392,    2.754949616083913e-04
    100000,      2.558666930773520,    8.130692264800565e-04
   1000000,      2.559548031775482,    6.803177548153627e-05
  10000000,      2.559585048904444,    1.050489044440717e-04
 100000000,      2.559488742355630,    8.742355629642873e-06
1000000000,      2.559474315303494,    5.684696506413900e-06
```



以上三种随机数种子的结果，双对数图斜率都接近-0.5，取它们三个斜率的均值为-0.496 .

总结

1. 误差位即为计算值的无效位数，误差越小，有效位数越大.
2. 随着样本点增多，误差减小. 由N-Error双对数图，拟合直线斜率接近-0.5，验证了误差随$1/\sqrt{N}$变化. 即样本点增加100倍，误差缩小10倍.
3. Monte Carlo计算积分的结果，受选取的随机数序列的影响. 用不同的随机数发生器，甚至是不同的种子，都会影响到积分结果. 因此误差随样本数量选取的变化，会有一些波动，不会严格满足中心极限定理的误差理论，但整体趋势是相符的.