REPORT 13

潘硕 PB24020526

2025 年 11 月 12 日

1 Question

用 Metropolis-Hasting 抽样方法计算积分:$I = \int_0^\infty (x-\alpha\beta)^2 f(x)dx = \alpha\beta^2$

$$f(x) = \frac{1}{\beta\Gamma(\alpha)}(\frac{x}{\beta})^{\alpha-1}exp(-x/\beta)$$

设积分的权重函数为:$p(x) = f(x)$ 和 $p(x) = (x-\alpha\beta)^2 f(x)$
给定参数 α, β, 并用不同的 γ 值, 分别计算积分, 讨论计算精度和效率.

2 method

2.1 随机过程

用矢量 $\mathbf{p} = (p(x_1), \cdots, p(x_M))$ 表示系统处于状态 x_i 的概率分布. 设每一步的条件几率仅仅依赖于上一步的值, 定义 $W_{i\to j} = p(x_j|x_i)$, 即从状态 x_i 跃迁到状态 x_j 的几率.$W_{i\to j}$ 应满足:

$$W_{i\to j} \geq 0, \quad \sum_j W_{i\to j} = 1 \tag{1}$$

设系统可能的状态总数为 M, 定义 $M \times M$ 转移矩阵 $\mathbf{W} = \{W_{ij}\}$, 由某时刻系统状态 $\mathbf{p}(N)$ 可得下一时刻状态:

$$\mathbf{p}(N+1) = \mathbf{p}(N)\mathbf{W} \tag{2}$$

此时系统的态序列 $(x_1, \cdots, x_i)$ 称为 Markov 链.Markov 链的极限分布与初始分布的选择无关, 平衡态的概率分布 $\mathbf{p}$ 满足:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}\mathbf{W}, p_i = \sum_j p_j W_{ji} \tag{3}$$

考虑到体系为平衡态分布, 达到平衡后与时间无关, 故有:

$$p_i W_{ij} = p_j W_{ji} \tag{4}$$

为细致平衡条件.

2.2 Metropolis 方法

考虑转移矩阵自由度 N^2, 由 (2)(3) 只给出 $2N$ 个约束方程, 故 W 不可唯一确定. Metropolis 方法可提供其中一解.

设 $W_{ij} = T_{ij}A_{ij}$,T_{ij} 是由 x_i 选择步进到 x_j 的几率, A_{ij} 是接受该步的几率. 取:

$$W_{ij} = \begin{cases} T_{ij}, & p_j > p_i \\ T_{ij}(p_j/p_i), & \text{otherwise} \end{cases} \tag{5}$$

$$W_{ii} = 1 - \sum_{j \neq i} W_{ij} \tag{6}$$

抽样规则:

1. 选择系统初始位形 $\mathbf{x}(0)$.
2. 从当前位形 $\mathbf{x}_n$ 出发, 根据提议分布 T_{ij} 随机选取下一时刻位形 $\mathbf{x}_t$.
3. 计算 $r = \dfrac{p_t T_{t\to n}}{p_n T_{n\to t}}$. 若 $r > 1$, 接受试探解; 否则, 产生均匀分布随机数 $\xi \in [0, 1]$, 若 $\xi < r$, 接受试探解; 否则, 放弃,$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n$.
4. 重复步骤 2-3, 直到达到预设的采样次数 N.

根据此算法可构成 Markov 链 $\{\mathbf{x}_i | i = 1, \cdots, m, \cdots, n\}$. 可舍弃序列热化过程前 m 个样本, 将剩余的样本用于计算.

2.3 算法

2.3.1 权重函数 $p(x) = f(x)$

提议分布选为 $T(x \to x') = \dfrac{1}{\gamma} exp(-\dfrac{x'}{\gamma})$, 系统初始状态为 $x_0 = 0$.

根据 Metropolis 算法, 抽取 $\{\mathbf{x}_i | i = 1, \cdots, N + N_{heat}\}$ 满足分布 $p(x) = f(x)$, 舍弃前 N_{heat} 个样本 (热化长度), 剩余样本用于计算积分:

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1+N_{heat}}^{N+N_{heat}} (x_i - \alpha\beta)^2 \tag{7}$$

2.3.2 权重函数 $p(x) = (x - \alpha\beta)^2 f(x)$

提议分布与系统初始状态同上. 用 Metropolis 算法抽取 $\{\mathbf{x}_i | i = 1, \cdots, N + N_{heat}\}$ 满足分布 $p(x)$, 舍弃前 N_{heat} 个样本.

下面计算积分. 选取区间 $x \in [0, X_{Max}]$, 将该区间均匀分割成 Ns 段, 设样本中 $x \in [x_i, x_{i+1}]$ 的概率密度为 $\int_{x_i}^{x_{i+1}} P_i dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \dfrac{(x-\alpha\beta)^2 f(x)}{I} dx$, 现取 $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i \to 0$, 则有:

$$I \approx \frac{(x_i - \alpha\beta)^2 f(x_i)}{P_i} = \frac{p(x)}{P_i} \tag{8}$$

考虑到不同 x_i 处计算结果的方差不同, 用加权平均法计算最终结果:

$$I \approx \frac{\sum_{i=1}^{Ns} \frac{(x_i - \alpha\beta)^2 f(x_i)}{P_i} / \sigma_i^2}{\sum_{i=1}^{Ns} 1/\sigma_i^2} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \frac{p(x)^2}{P_i}}{\sum_{i=1}^{N} p(x)} \tag{9}$$

3 Experiment

3.1 $\alpha, \beta = (1, 1)$ 抽样结果

先考虑最简单的情形 $(\alpha, \beta) = (1, 1)$, 样本有效数目 $N = 500000, N_{heat} = 2000$. 选取不同的 γ 值进行抽样, 计算积分结果, 绘制相对误差 $err = \dfrac{|I - I_0|}{I_0}$ 及舍选效率随 γ 变化的曲线, 如下图所示. ($\gamma = [0.5 : 0.5 : 5, 6 : 1 : 15, 20 : 5 : 100]$, 数据见 tesdata.xlsx)

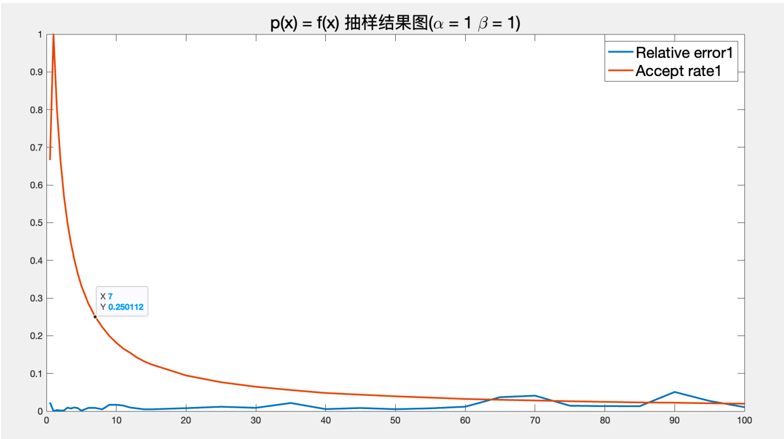

图 1: $p(x) = f(x)$ 抽样结果相对误差

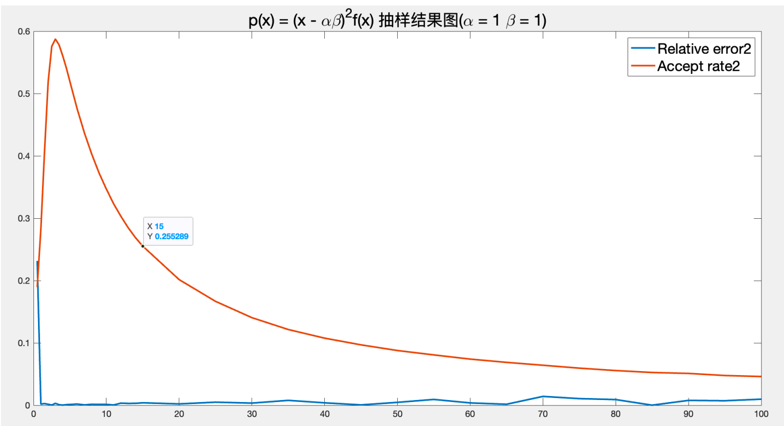

图 2: $p(x) = f(x)(x - \alpha\beta)^2$ 抽样结果相对误差

在两种抽样方法中, 舍选效率随着 γ 的增大, 先迅速上升再逐渐减小. 在 γ 值较小时, 相对误差波动较大, 此后下降趋于稳定.

Metropolis 抽样的理想舍选效率约为 0.25. 由上图可得两种抽样方法的理想 γ 值:

$$\gamma_1 \approx 7, \quad \gamma_2 \approx 15 \tag{10}$$

此时结果的相对误差 $err_1 \approx 0.009, err_2 \approx 0.004$, 积分结果 I 至少能达到 3 位有效数字.

3.2 最优参数 γ 选取

根据上节结果,$(\alpha, \beta) = (1, 1)$ 时, 两种方法的理想 γ 值分别为 7 和 15. 现对任意情况的 (α, β) 选取合适的 γ 应用于计算.$(\alpha \geqslant 1, \beta > 0)$

对任意 $\beta \neq 1$, 可做变量代换 $t = \dfrac{x}{\beta}$, 将 (α, β) 转化为 $(\alpha, 1)$, 对应有 $\gamma_{(\alpha,\beta)} = \beta\gamma_{(\alpha,1)}$

对 $\alpha \neq 1, \beta = 1$, 考虑到 $f(x)$ 先递增再递减, 在 $x = \alpha - 1$ 处达到极值点, 可由极值点的位置偏移估计 γ 的偏移, 取 $\gamma_{(\alpha,1)} = \alpha + \gamma_{(1,1)} - 1$

综上, 对任意 (α, β), 取:

$$\gamma_1 = \beta(\alpha + 6), \quad \gamma_2 = \beta(\alpha + 14) \tag{11}$$

对不同的 (α, β) 进行计算, 结果如下:

Relative Error_1	beta	2	4	6	8	10
alpha						
2		0.003365899	0.002778615	0.002481832	0.005570834	0.009383278
4		0.001944716	0.00476337	0.00258792	4.35945E-05	0.011768746
6		0.003754766	0.006032433	0.00541925	0.004902508	0.008330464
8		0.004794571	0.004972964	0.003520638	0.00269909	0.003952608
10		0.003976177	0.00455	0.002001504	0.001801982	0.00543623

Relative Error_2	beta	2	4	6	8	10
alpha						
2		0.002236539	0.001388391	0.002500717	0.000294246	0.001957546
4		0.000915008	0.000797021	0.000917601	0.000750297	0.000458987
6		0.000608659	0.00049804	0.000891501	0.000928697	0.000698695
8		0.000633226	0.000476735	0.000654528	0.000685827	0.000634746
10		0.000560212	0.000522317	0.000759657	0.000632735	0.000549172

图 3: 理想 γ 值计算相对误差

计算结果表明, 在不同的 (α, β) 下, 两种方法均能达到较高的计算精度. 相对而言,$p(x) = (x - \alpha\beta)^2 f(x)$ 的抽样方法精度更高.

4 Summary

本例应用 Metropolis 抽样方法, 使用两种不同的权重函数计算积分, 并讨论了不同参数下的计算精度和效率, 结论如下:

1. 固定 $(\alpha,\beta)=(1,1)$, 改变 γ 进行抽样时, 舍选效率先随着 γ 增大而增大, 再逐渐下降. 在 γ 较小时, 抽样的相对误差有较大波动, 随着 γ 增大, 相对误差逐渐下降并趋于稳定.

2. $(\alpha,\beta)=(1,1)$, 对 $p(x)=f(x)$ 和 $p(x)=f(x)(x-\alpha\beta)^2$, 分别选择 $\gamma=7,15$ 进行积分计算. 取 $N=500000$ 时, 两种方法均能达到 3 位有效数字的精度.

3. 对任意 (α,β), 可取 $\gamma_1=\beta(\alpha+6),\gamma_2=\beta(\alpha+14)$ 进行计算. 结果精度较高, 且 $p(x)=(x-\alpha\beta)^2f(x)$ 的抽样方法精度高于 $p(x)=f(x)$.