计算物理第8题

PB18000039 徐祺云

一　作业题目

用Monte Carlo方法计算如下定积分，并讨论有效数字位数。

$$\int_0^2 dx\sqrt{x+\sqrt{x}}$$

$$\int_0^{9/10} dx \int_0^{4/5} dy \int_0^{9/10} dz \int_0^{2} du \int_0^{13/10} dv \left(6-x^2-y^2-z^2-u^2-v^2\right)$$

二　算法及主要公式

对于第一个积分，采用Monte Carlo平均值法，x_i在区间$[0,2]$上随机选取，根据积分的平均值定理：

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)\langle f\rangle$$

而平均值可从下式得到：

$$\langle f\rangle \approx \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$

故有

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

即对随机数x_i求$f(x_i)$并累加，乘上2除以N得到积分结果。程序中采用16807随机数生成器，取不同量级的N计算结果。

另外，积分值的标准误差也可以由

$$\sigma_S = |\langle f\rangle - \mu|$$

计算得出。

对于第二个积分，高维多重积分的简单抽样的Monte Carlo方法可将前式推广为：

$$\int_{a_1}^{b_1} dx_1 \cdots \int_{a_n}^{b_n} dx_n f(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \frac{\left[\prod_{j=1}^{n}(b_j - a_j)\right]}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$$

其中对每个坐标的抽样值是在相应的区间范围内均匀抽取的。

同理，先生成相应范围内的随机数x, y, z, u, v，计算函数值累加，乘上前置系数即可得到结果。取不同量级的N计算结果。

三　计算结果与分析

第一题

使用Mathematica计算数值解为：2.689521304816739

运行程序得到结果如下：

$N = 100 : ans1 = 2.629104\ DS1 = 0.030209$

$N = 1000 : ans1 = 2.699758\ DS1 = 0.005118$

$N = 10000 : ans1 = 2.684234\ DS1 = 0.002643$

$N = 100000 : ans1 = 2.688916\ DS1 = 0.000302$

$N = 1000000 : ans1 = 2.690482\ DS1 = 0.000480$

$N = 10000000 : ans1 = 2.689020\ DS1 = 0.000251$

关于有效数字位数：可以看出，随着取点数量的增加，计算值与确切数值解的误差越来越小。N取$10^2, 10^3$时为两位有效数字；N取10^4 ,$10^5, 10^6$时为三位有效数字；N取10^7时为四位有效数字。可见随着抽样点数的增加，有效数字位数增加，但其缺点也明显：要达到一定精度需要以平方量级方式增加总样本点数。

关于标准偏差：当N在$10^2 \sim 10^5$范围内时，积分值的标准偏差σ_S随$1/\sqrt{N}$变化，即样本点增加100倍时误差缩小10倍，这一点是符合我们的理论预期的；当N取$10^6, 10^7$量级时，其标准偏差在10^{-4}数量级左右波动，这是受我们随机数产生器的算法精度所限制的。总的来说，

在N取值够大时，Monte Carlo 方法计算的积分值接近于真实值，偏差在10^{-4}数量级。

第二题

使用Mathematica计算数值解为：5.644080000000002

运行程序得到结果如下：

$N = 100 : ans2 = 5.912685\ DS2 = 0.159428$

$N = 1000 : ans2 = 5.524711\ DS2 = 0.070851$

$N = 10000 : ans2 = 5.647808\ DS2 = 0.002213$

$N = 100000 : ans2 = 5.637754\ DS2 = 0.003755$

$N = 1000000 : ans2 = 5.644443\ DS2 = 0.000216$

$N = 10000000 : ans2 = 5.644152\ DS2 = 0.000043$

关于有效数字位数：同第一题，计算值与确切数值解的误差随N的增大而减小，有效数字位数增加。 N取$10^2, 10^3$时为一位有效数字；N取$10^4, 10^5$时为三位有效数字；N取10^6时为四位有效数字；N取10^7时为五位有效数字。

关于标准偏差：随着N的增大标准偏差减小，其收敛速度较快，且量级有继续缩小的趋势。在$N \sim 10^7$时标准误差已达到10^{-5}量级，一般情况下，该 Monte Carlo 方法计算的积分值可以满足需求，结果良好。

四 结论

利用Monte Carlo平均值法求解了两个定积分，并与Mathematica精确数值解进行了比较，发现随着样本取点数的增多，有效数字位数变多，在N取10^7时精度可达四/五位有效数字。第一个一维定积分偏差σ_S约正比于$1/\sqrt{N}$的速度收敛；第二个多维超球体积积分偏差收敛速度较快。总之，通过本次作业，熟悉了Monte Carlo求解定积分问题的方法，更深层次理解了求解精度与效率的估计。