# 计算物理 homework13

李明达 PB18020616[1]*

**摘要**

这是计算物理第三次作业，作业题目是用 Metropolis-Hasting 抽样方法计算积分：

$$I=\int_0^{\infty}(x-\alpha\beta)^2 f(x)dx=\alpha\beta^2$$

其中

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

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 $\alpha,\beta$，并用不同的 $\gamma$ 值，分别计算积分，讨论计算精度和效率.

**关键词**

Metropolis-Hasting 抽样方法

[1] 中国科学技术大学物理学院　　* 作者：dslmd@mail.ustc.edu.cn

## 1. 前言和讨论

在周二下课后，我已经告诉丁泽军老师本题的第二个抽样函数 $p(x)=(x-\alpha\beta)^2 f(x)$ 实际上并不好操作，理由如下：

1. $p(x)=(x-\alpha\beta)^2 f(x)$ 并不是一个归一的函数

2. 如果想要归一，则必须知道最后的积分结果，所以此方法不行

**下面是正文：**

## 2. 算法和程序

### 2.1 算法

对于一个 $\gamma$，我们假设随机数 $R\in[0,1]$，此时猜测的 x 值为 $x'=-\gamma lnR$，我们设初始值 $x_0=1$，由此可以知道比较函数 $r$ 可以写作：

$$r=(\frac{x'}{x_i})^{\alpha-1}exp((x_i-x')/\beta)exp((x'-x_i)/\gamma)$$

这时候把 R 与 r 进行比较从而得出 $x_{i+1}$

$$x_{i+1}=\begin{cases}x' & if \quad R<min\{1,r\}\\ x_i & if \quad R>min\{1,r\}\end{cases}$$

从而我们可以得出一个 x 的数组，再进行求平均即可得到积分值。

### 2.2 程序

在程序中，前面 Seed 和 Schrage_int 是随机数产生器的两部分.

接下来是 Metropolis_Hasting_sampling(int seed,float alpha, float beta, float gamma) 这个函数，他的功能是进行 Metropolis Hasting 抽样，保存抽样结果到 "$Metropolis\_Hasting\_sampling.txt$"，并且把最后的积分结果 printf 到屏幕上. 每一次抽样都生成一个 N=100000 个 x 值的数组。

## 3. 实验结果

我选取了两个 $\{\alpha,\beta\}$ 进行了实验，分别是 $\alpha=1,\beta=1$、$\alpha=2,\beta=4$。

每次实验我采用 7 个 $\gamma$，从 1 到 7. 所得的实验结果如表 1 所示。

## 4. 实验结果分析

通过表 1 的结果，我们可以作如下分析：

对于不同的 $\gamma$ 值，计算精度和效率相差比较大，比如 $\alpha=1,\beta=1$ 的时候，可以看出 $\gamma=3,4,5$ 的时候计算的误差远远小于其他时候（当然效率也更高），并且当 $\gamma=2$ 的时候误差达到了惊人的 4.029184，这比实际积分值还大！（不仅如此，我重复了多次发现 $\gamma=2$ 的时候误差总是在 4 左右，这说明这一个点不是偶然的！）所以我推测如果想保证更小的误差和更高的效率，$\gamma$ 的取值范围应该有一

**表 1.** 模拟所得的实验结果

| **参数值** | $\gamma$ | **种子值** | **理论值** | **模拟值** | **误差值** |
|---|---|---|---|---|---|
| $\alpha = 1$ | 1 | 350807120 | 1 | 1.006297 | 0.006297 |
| $\beta = 1$ | 2 | 350807120 | 1 | 5.029184 | 4.029184 |
| | 3 | 350807120 | 1 | 0.999267 | -0.00073 |
| | 4 | 350807120 | 1 | 0.999176 | -0.00082 |
| | 5 | 350807120 | 1 | 0.999114 | -0.00089 |
| | 6 | 350807120 | 1 | 0.998958 | -0.00104 |
| | 7 | 350807120 | 1 | 0.998798 | -0.0012 |
| | | | | | |
| $\alpha = 2$ | 1 | 1765456300 | 32 | 25.82414 | -6.17586 |
| $\beta = 4$ | 2 | 1765456300 | 32 | 15.9436 | -16.0564 |
| | 3 | 1765456300 | 32 | 18.22591 | -13.7741 |
| | 4 | 1765456300 | 32 | 23.00902 | -8.99098 |
| | 5 | 1765456300 | 32 | 28.02898 | -3.97103 |
| | 6 | 1765456300 | 32 | 34.68905 | 2.689045 |
| | 7 | 1765456300 | 32 | 45.35759 | 13.35759 |

个区间：比如在这种情况，我们的选择首先要避开像 $\gamma = 2$ 这种点，其次应该靠近 3，4，5 这些点。

同理，我们还可以分析 $\alpha = 2, \beta = 4$ 的时候，可以看出在 $\gamma = 6$ 的时候，误差最小，效率也最高。但是在 $\gamma = 2, 3, 7$ 的时候，误差就会特别大，效率也特别小。如果想保证更小的误差和更高的效率，$\gamma$ 的取值范围应该有一个区间，如在这种情况，我们的选择首先要避开像 $\gamma = 2, 3, 7$ 这种点，其次应该靠近 $\gamma = 6$。

结合两者一起看，最佳的 $\gamma$ 应该和 $\alpha, \beta$ 具有正相关关系，过大过小都不好。

## 5. 总结

总的来说，本次实验中，我用 Metropolis Hasting 抽样方法求解了 $I = \int_0^\infty (x - \alpha\beta)^2 f(x)dx = \alpha\beta^2$ 积分，并且探究了计算精度和效率随 $\gamma$ 的变化关系，实验圆满顺利完成。