# 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 参数解释

我通过把模拟出来的积分值和理论值作差并处以理论值来算出相对误差值 error，用这个来衡量积分的精度；我又通过记录抽样被接受的次数，将其除以总次数来得到抽样效率。

### 2.3 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，得出积分值和效率，并保存到 "$Results.txt$"，并且把所用到的种子值 printf 到屏幕上. 每一次抽样都采取 N=100000 个值。值得注意的是，数据文件的第一列是 $\gamma$，第二列是积分结果，第三列是抽样的效率。

## 3. 实验结果

我选取了三组数据：$\{\alpha, \beta\} = \{1,1\}, \{1,2\}, \{2,1\}$ 进行了实验，每组数据的 $\gamma$ 从 $0.1 \sim 20$，实验的结果如下图1、2、3所示。每一张图都包含了相对误差 error（用来衡量精度）和抽样效率 efficiency，两者都是归一的，所以画在同一个纵坐标下。

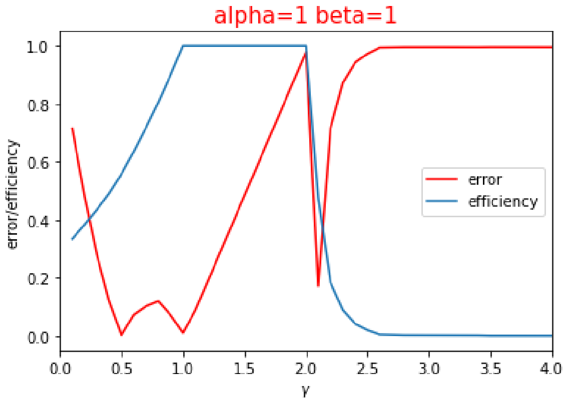


**图 1.** $\alpha = 1,\beta = 1$ 的时候的误差 error（用来衡量精度）和抽样效率 efficiency，注意，由于 $\gamma > 4$ 之后，抽样效率趋于 0 误差趋于 1，所以只画到 (0,4)

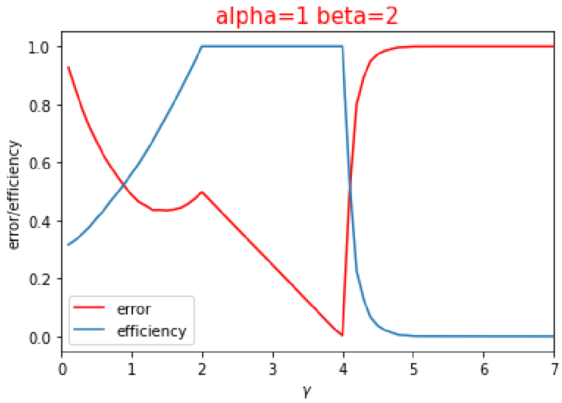


**图 2.** $\alpha = 1,\beta = 2$ 的时候的误差 error（用来衡量精度）和抽样效率 efficiency，注意，由于 $\gamma > 7$ 之后，抽样效率趋于 0 误差趋于 1，所以只画到 (0,7)

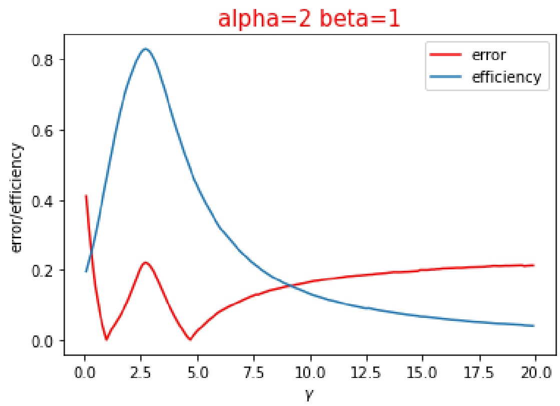


**图 3.** $\alpha = 2,\beta = 1$ 的时候的误差 error（用来衡量精度）和抽样效率 efficiency

## 4. 实验结果分析

首先我们可以看到，对于一个特定的 $\alpha, \beta$ 取值，在一些特定的 $\gamma$ 值时抽样效率最大，而在抽样效率最大值的附近，会有精度最高的点出现，从定性的角度，这说明抽样效率越大精度就越高。

其次，我们对比不同的 $\alpha, \beta$，会发现不同的条件下最后 $\gamma$ 的最佳值会有不同，而且其最佳值可能有多个（从图1和图3可以看出有多个极小值）。综合三个情况来看，抽样效率的最大值出现的位置和积分值有正相关，积分值越大，抽样效率最大值的点就越大。

最后，对于抽样最佳值有多个的情况，这可能是一个更为复杂的函数，但以当前水平，难以进行理论分析。

## 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，最后又定性总结了这些值之间的关系，实验圆满顺利完成。