计算物理A第八次作业

王铠泽 PB18020766

1 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。

$$I_1 = \int_0^2 dx\sqrt{x+\sqrt{x}}$$

$$I_2 = \int_0^{\frac{9}{10}} dx \int_0^{\frac{4}{5}} dy \int_0^{\frac{9}{10}} dz \int_0^{2} du \int_0^{\frac{13}{10}} dv(6-x^2-y^2-u^2-v^2)$$

2 实现方法和原理

- $Monte\ Carlo$简单抽样求积分

  单变量的情况下求$\int_a^b f(x)dx$，可以按照以下方法: 设ξ为$[0,1]$上均匀随机数。则$\tilde{\xi}=(b-a)\xi+b$为$[a,b]$上的均匀随机数。抽取$\tilde{\xi}$序列(总点数为N)，则$\langle f\rangle = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^N f(\tilde{\xi})$。

$$\Rightarrow \int_a^b f(x)dx = (b-a)\langle f\rangle = \frac{b-a}{N}\sum_{k=1}^N f(\tilde{\xi})$$

  这个结论可以推广到多变量情形:

$$\int_R f(\vec{r})d\vec{r} = \langle f\rangle \cdot V(R)$$

  其中R代表任意维度的矩形区域$[a_1,b_1]\times[a_2,b_2]\times...$，$V(R)$表示矩形区域的体积，
  $\langle f\rangle = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^N f(\tilde{\xi})$,$\tilde{\xi}$为$R$上均匀分布的随机变量。

- 大数定律和中心极限定理

  假设$X_1,...,X_N$为服从同一分布的随机变量序列。设其期望为μ，标准差为σ,$\langle X\rangle = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^N X_k$。大数定律指出:

$$\frac{1}{N}(X_1+...+X_N) \stackrel{N\to\infty}{\longrightarrow} \mu$$

  中心极限定理：

$$P(\frac{\langle X\rangle-\mu}{\sigma/\sqrt{N}} < x) \stackrel{N\to\infty}{\longrightarrow} \Phi(x)$$

  其中$\Phi(x)$为标准正态分布$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{x^2}{2}}$。

$$积分结果I = V(R)\langle f\rangle$$

$$积分结果方差var(I) = V^2(R)var(\langle f\rangle)$$

$$积分结果标准差\sigma(I) = V(R)\sqrt{\langle f\rangle} = V(R)\frac{\sigma(f)}{\sqrt{N}}$$

  当N充分大时，结果的误差是正比于$\sqrt{N}$的。

3 程式说明

- single.c

  该程式计算第一个单变量积分。

- multi.c

  该程式计算第二个多变量积分。

- rdm.h

  这是一个包含了使用16807产生器生成指定长度的$[0,1]$上均匀分布随机数函数的头文件。

  void rdm(int N,double *x,int method)

  该函数将输入的指针x对应的长度为N的数组用$[0,1]$上的随机数填满。method是关于初始种子的选择。method=0:默认种子;method=1,时间种子。程式中故意采用$sleep$函数就是为了得到不同的时间种子。

- time_seed_single/multi.txt

  16807产生器抽样时对应的时间种子数据(1个种子)。调用多少次16807生成器就生成多少个数据记录。

- single_variable/multi_variable.txt

  详细记录了不同N下的积分值I以及其和准确值之间的误差Err。

4 计算结果

4.1 单变量积分

对于积分:

$$I_1 = \int_0^2 dx\sqrt{x+\sqrt{x}}$$

使用$Mathematica$得到其准确值约为$I \approx 2.689521304816752$。不同$N$下对应的情况如下表所示。

N	$Integral$	$Error$	$\frac{1}{\sqrt{N}}$
10	2.29035867e+000	3.99162639e-001	3.16227766e-001
10^2	2.64702903e+000	4.24922760e-002	1.00000000e-001
10^3	2.71176247e+000	2.22411622e-002	3.16227766e-002
10^4	2.67987859e+000	9.64271888e-003	1.00000000e-002
10^5	2.68859115e+000	9.30158296e-004	3.16227766e-003
10^6	2.68942442e+000	**9.68839664e-005**	**1.00000000e-003**
10^7	2.68944262e+000	7.86839022e-005	3.16227766e-004
10^8	2.68942564e+000	9.56666747e-005	1.00000000e-004

表 1: 不同N下单变量积分的情况(采用科学计数法)

可见，当N越来越大时，标准差和$\frac{1}{\sqrt{N}}$逐渐接近。

4.2 多变量积分

对于积分:

$$I_2 = \int_0^{\frac{9}{10}} dx \int_0^{\frac{4}{5}} dy \int_0^{\frac{9}{10}} dz \int_0^{2} du \int_0^{\frac{13}{10}} dv (6 - x^2 - y^2 - u^2 - v^2)$$

使用$Mathematica$得到其准确值约为$I \approx 5.644079999999997$。不同$N$下对应的情况如下表所示。

N	$Integral$	$Error$	$\frac{1}{\sqrt{N}}$
10	6.17363991e+000	5.29559909e-001	3.16227766e-001
10^2	5.14681851e+000	4.97261489e-001	1.00000000e-001
10^3	5.69498165e+000	5.09016489e-002	3.16227766e-002
10^4	5.67040355e+000	2.63235535e-002	1.00000000e-002
10^5	5.64101095e+000	3.06904571e-003	3.16227766e-003
10^6	5.64586026e+000	1.78026028e-003	1.00000000e-003
10^7	5.64415403e+000	7.40250527e-005	3.16227766e-004

表 2: 不同N下多变量积分的情况(采用科学计数法)

可见，当N越来越大时，标准差和$\frac{1}{\sqrt{N}}$逐渐接近。

4.3 误差分析

对单变量情况，做出对数$Error - 1/\sqrt{N}$拟合曲线如下:

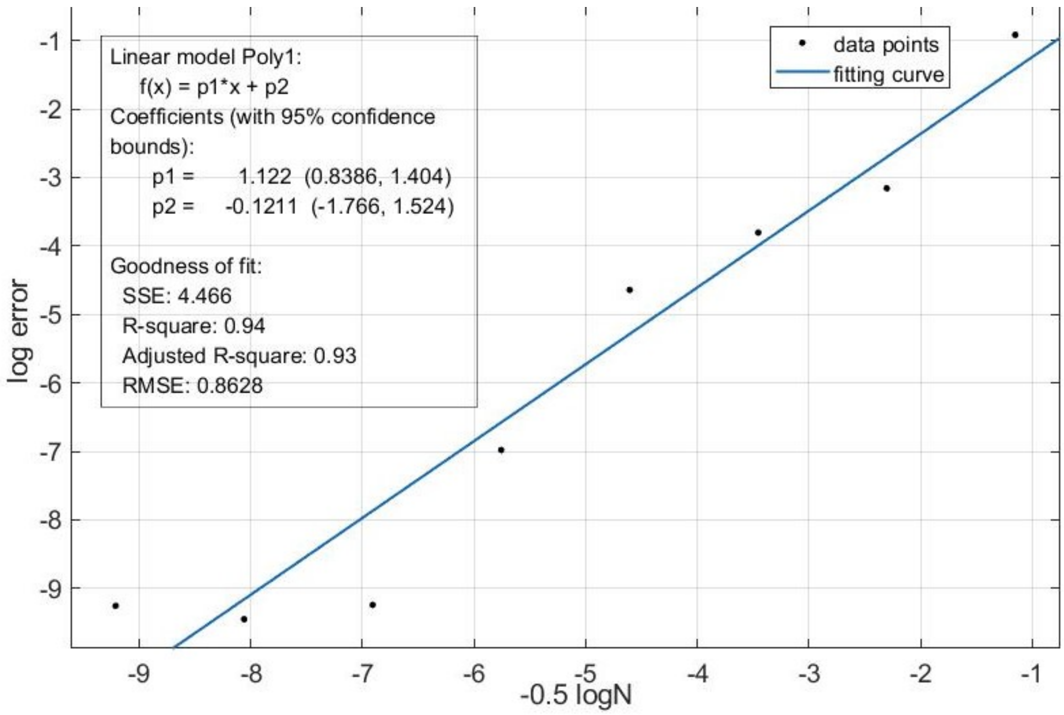

图 1: 单变量积分$log(\epsilon) - log(\frac{1}{\sqrt{N}})$

对多变量情况，做出对数$Error-1/\sqrt{N}$拟合曲线如下:

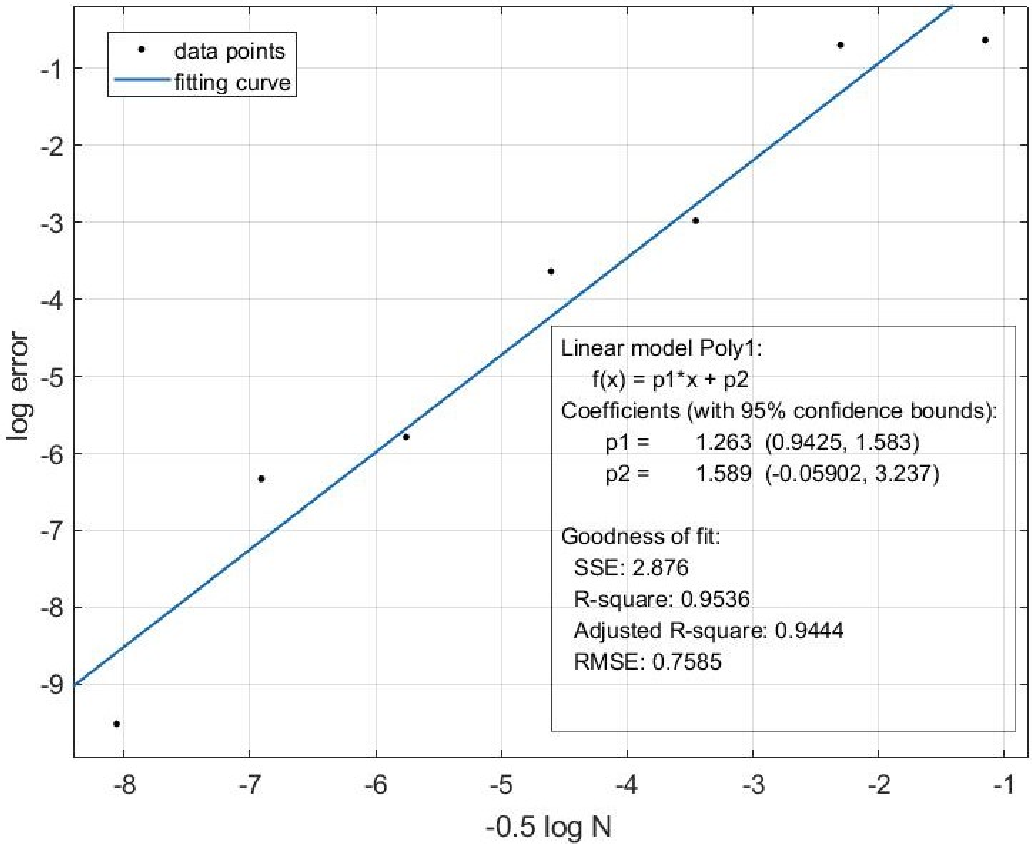

图 2: 多变量积分$log(\epsilon)-log(\frac{1}{\sqrt{N}})$

拟合结果可以看出误差$\epsilon\sim 1/\sqrt{N}$

5 总结

- 本次实验使用$Monte\ Carlo$方法求简单区间上的积分值，在N较大的时候很接近准确值。
- 随着对精确度ϵ要求提高，对抽样点数N的增长大约是是小数点后每精确一位就需要增长100倍，高精度计算只用简单抽样的$Mone\ Carlo$方法显然是不实际的，需要其他的优化。
- 由于点数有限和生成随机数的初始种子，生成方式等影响，误差并不严格满足中心极限定理预言的$\frac{1}{\sqrt{N}}$，有时甚至会略小(见前述的单变量实验表格)。