

计算物理A第六次作业

王铠泽 PB18020766

1 作业题目

- 对两个函数线型(*Gauss*分布和类*Lorentz*型分布), 设其一为 $p(x)$, 另一为 $F(x)$, 用舍选法对 $p(x)$ 抽样。将计算得到的归一化频数分布直方图与理论曲线 $p(x)$ 进行比较, 讨论差异。讨论抽样效率。

本实验中, 取 $p(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-x^2}$, $F(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{x^4+1}$ 。理想效率 $\eta = 1/\text{Area}[F(x)] = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \approx 0.797885$

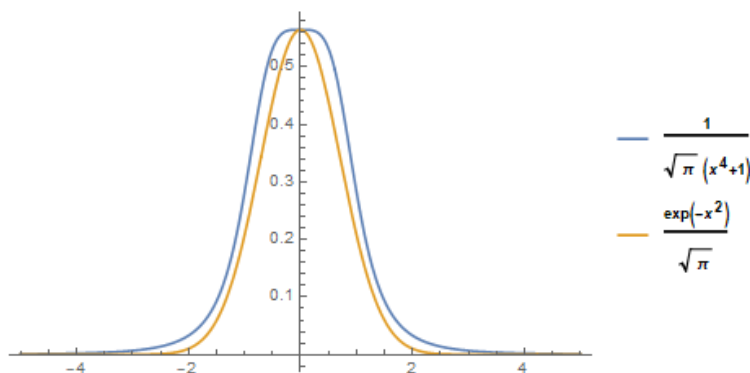


图 1: $p(x), F(x)$ 图例

2 实现方法

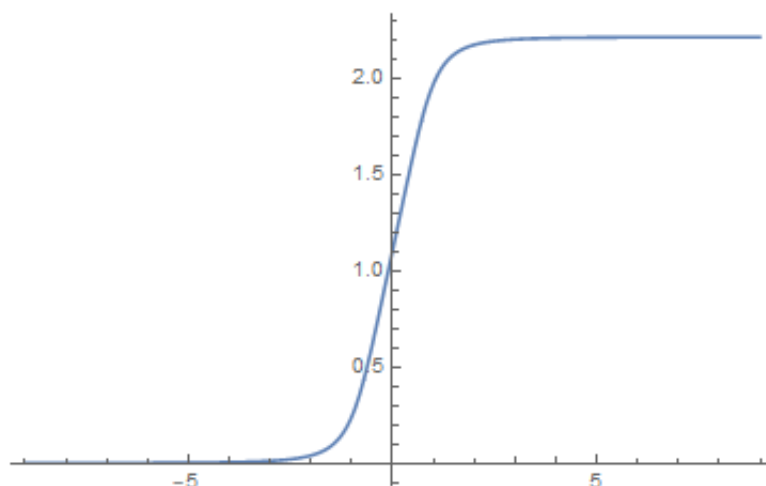
- 舍选法抽样

$F(x)$ 对应的归一化累计函数为:

$$H(x) = G(x) - G(-\infty)$$

其中 $G(x) = \frac{1}{4\pi} [2\tan^{-1}(1 + \sqrt{2}x) - 2\tan^{-1}(1 - \sqrt{2}x) + \ln(\frac{x^2 + \sqrt{2}x + 1}{x^2 - \sqrt{2}x + 1})]$, $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} G(x) = \pm\frac{1}{2}$ 。

这个函数不易求出反函数, 本次实验中采用二分法求得对应 ξ_x 。选定的二分初始区间为 $[-10, 10]$ 。这个区间对应 $H(-10) = 0.00015$, $H(10) = 0.99985$, 覆盖99.97% $[0, 1]$ 上随机数。

图 2: $H(x)$ 图例

抽样方法: 生成两个 $[0, 1]$ 上随机序列 ξ_1, ξ_2 。在 x 方向上, 按 $F(x)$ 分布抽样:

$$\xi_1 = H(\xi_x) \Rightarrow \xi_x = H^{-1}(\xi_1)$$

在 y 方向上, 按 $\frac{1}{F(\xi_x)}$ 的均匀分布抽样:

$$\xi_y = F(\xi_x)\xi_2$$

比较关系:

$$\begin{cases} \xi_y < p_2(\xi_x) & \Rightarrow \text{accept} \\ \xi_y \geq p_2(\xi_x) & \Rightarrow \text{reject} \end{cases}$$

3 程式说明

- Rejection.c

该程式使用舍选抽样方法抽取正态分布 $\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-x^2}$ 分布随机数。包含以下函数:

double p/F/H (double x)

这三个函数就是前述的 $p(x), F(x), H(x)$ 。

double root (double xi)

这个函数是通过二分法求解 $\xi = H(x)$ 对应的 x 。其中求解精度 ε 在函数中为 $erf = 10^{-4}$ 。

- 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。

- time_seed.txt

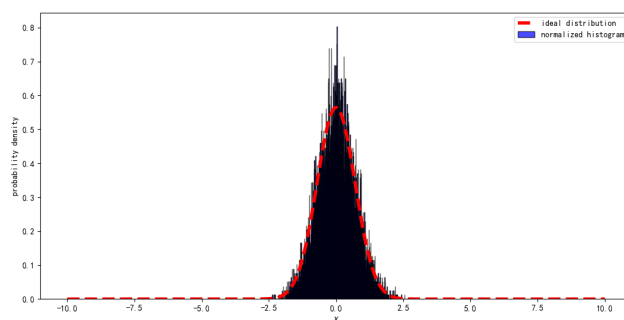
16807产生器抽样时对应的时间种子数据(1个种子)和最终舍选抽样效率(手动加的)。

- $N=10000/100000/1000000.txt$

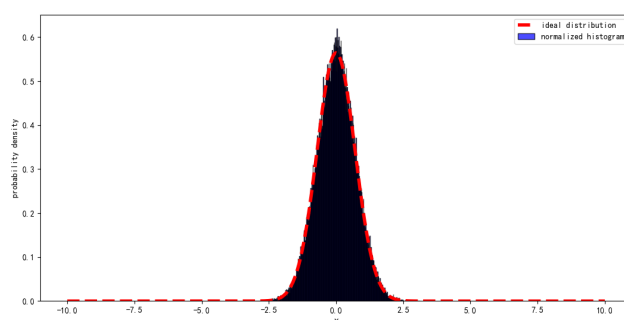
记录了生成的数据文件。

4 计算结果

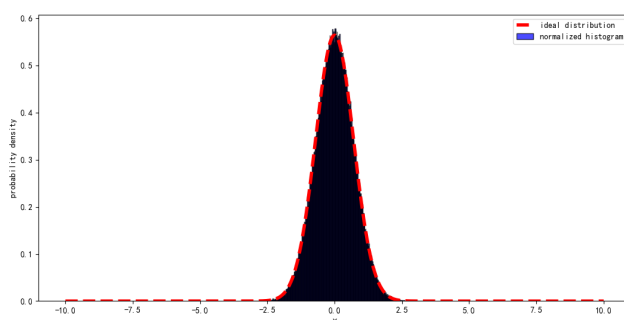
分别在总点数 $N = 10000, 100000, 1000000$ 下得到归一化直方图。默认参数 $bin = 500$ ，红色虚线为理想分布。



(a) $N = 10000$, $\eta = 0.793200$



(b) $N = 100000$, $\eta = 0.798740$



(c) $N = 1000000$, $\eta = 0.798477$

图 3: 归一化直方图

可见，随着 N 增大，频数分布逐渐趋于理想分布。

5 总结

- 本次实验采用舍选法，利用和 $Guass$ 函数形状类似的 $Lorentz$ 型函数作为比较函数抽样，提供了一种正态抽样的方法。
- 为了提高运算速度，应该考虑如何对 $F(x)$ 进行抽样，寻找比二分法求逆更有效率方式。