计算物理A第十三次作业

王铠泽 PB18020766

1 实现目标

用$Metropolis-Hasting$抽样方法计算积分：

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

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

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。

2 实现方法

按 $p(x)$ 为平稳分布来实现$Metropolis-Hasting$抽样。
设T与初态无关（即非对称的）：$T_{ij}=T(x\to x')=T(x')=0.5\,exp\frac{-x'}{\gamma}$
设$x_0=1$, 抽样$x'=-\gamma lnR$, R 为[0,1]上均匀分布的随机数，由此抽取在(0,∞)上分布的x'。

$$\frac{p_jT_{ji}}{p_iT_{ij}}\equiv r=\left(\frac{x'}{x_i}\right)^{\alpha-1}exp[-(x'-x_i)/\beta]exp[(x'-x_i)/\gamma]$$

最后按照r的大小来决定接受概率，得到下一步的x_{i+1}

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

其中R'为[0,1]上均匀分布的随机数
最后只需要用求和近似积分：

$$I=\frac{1}{N-m}\sum_{i=m+1}^{N}(x_i-\alpha\beta)^2$$

其中m是为了去除前面热化阶段引入的参数，本次实验中，取$m=\frac{N}{10}$。
本实验中,取 $\alpha=2,\beta=1$，调整不同γ来讨论精度和效率。

3 程式说明

- metropolis_1.c

  这是一个对于用于生成对于$N=10^6$步数的$Metropolis$抽样计算积分的误差评估的程序。其输出为不同γ值下面的积分误差，并且输入到文件中。注意到，循环中的γ范围根据需要可以修改。

- metropolis_2.c

  这是一个对于用于生成对于不同步数$N=10^1\sim10^7$步数的$Metropolis$抽样计算积分的误差评估的程序。其输出为不同γ值下面的积分误差，并且输入到文件中。注意到，循环中的γ范围根据需要可以修改。本次实验中取γ值为0.2,1.4,4.0。

- 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(gamma range).txt

  对于括号内标识的γ取值范围对应使用的时间种子文件。注意在程式中生成随机数时，一组随机数使用时间种子，另一组采用默认种子值(I=1)。16807产生器抽样时对应的时间种子数据(每次1个种子)。调用多少次16807生成器就生成多少个数据记录。每一个分布对应的种子已经手动加上对应的实验了。种子产生公式如下:

年: $0\le i_y\le 99$， 月: $1\le i_m\le 12$， 日: $1\le i_d\le 31$

时: $0\le i_h\le 23$， 分: $0\le i_n\le 59$， 秒: $0\le i_s\le 59$

则可设种子值为: $I_0=i_y+70\left(i_m+12\left\{i_d+31\left[i_h+23\left(i_n+59i_s\right)\right]\right\}\right)$，它的值约在区间$\left[0,2^{31}-1\right]$内，第二部分的括号在100年内不会重复。

4 计算结果

4.1 不同γ参数值对于积分的影响

取$N=10^6$，调节γ的取值，使得其取值落在$0\sim10^4$范围，然后做出误差-$log(\gamma)$图像如下:

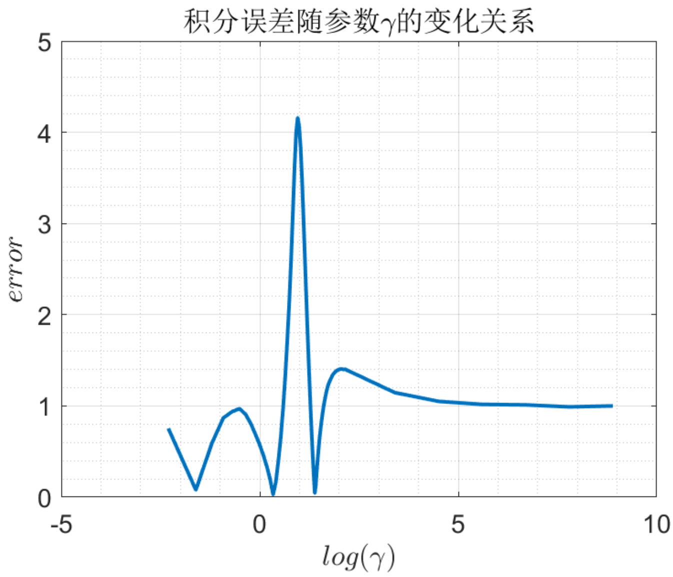
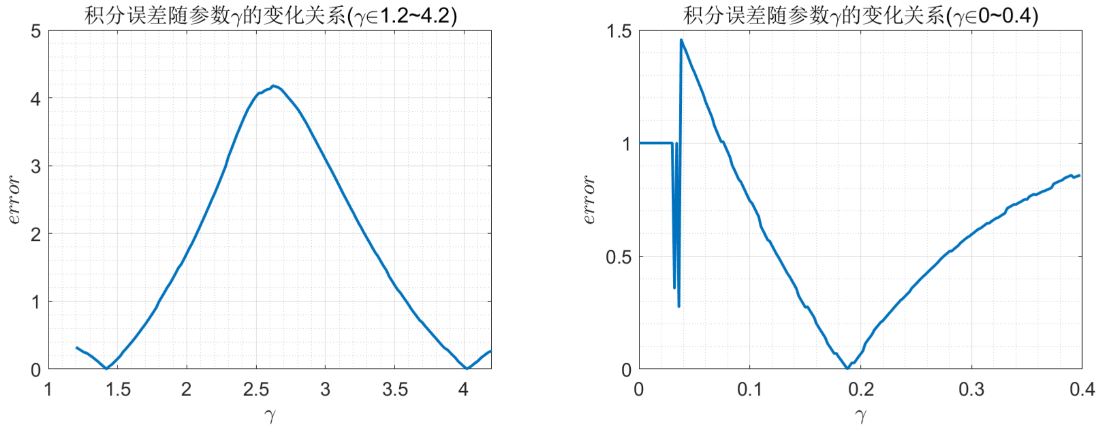


图 1: error-log(γ)图线

可以观察到基本可以认为在$\gamma > 0$的范围内，积分误差会出现三个极小值，分别是$0.2, 1.4, 4.0$。在其附近更加精确的采点绘出的图像如下：



(a) $\gamma \in (1.2, 4.2)$ (b) [$\gamma \in (0, 0.4)$

图 2: 误差随步数N变化曲线

可以非常明确的确定这就是三个极小值点，能够得到最理想的积分误差。从图线中可以看出，**积分误差对于γ的依赖性非常明显**，选择不合适的γ很可能会导致积分误差非常大(即使已经走了很大的步数)。有趣的是在很大的γ下，误差基本稳定在1左右。不过这也是可以理解的:γ是T_{ij}抽样时对应的指数分布的参数，**当γ大到一定程度时，指数分布下降得非常快，基本只剩下0附近的点被抽到，这等价于很小的步进距离，这当然是不合适的**，要经过相当长的步长才能达到平稳分布。同理，**太小的γ 也是不合适的，因为这样每一步都走的很大，很难以到达合适的平衡位置**，这在图上也有所体现。

4.2 不同步数N对积分误差的影响

取在上述分析中误差的极小值点来进行步数依赖的分析。

积分步数N	绝对误差ϵ
10	1.000000
100	0.192531
1000	0.137306
10000	0.028388
100000	0.099934
1000000	0.099932
10000000	0.087569

表 1: $\gamma = 0.2$时的积分误差表

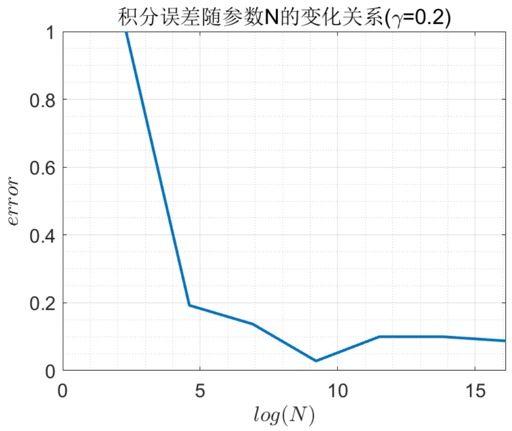
积分步数N	绝对误差ϵ
10	0.585176
100	0.269133
1000	0.203556
10000	0.043600
100000	0.024212
1000000	0.040619
10000000	0.032623

表 2: $\gamma = 1.4$时的积分误差表

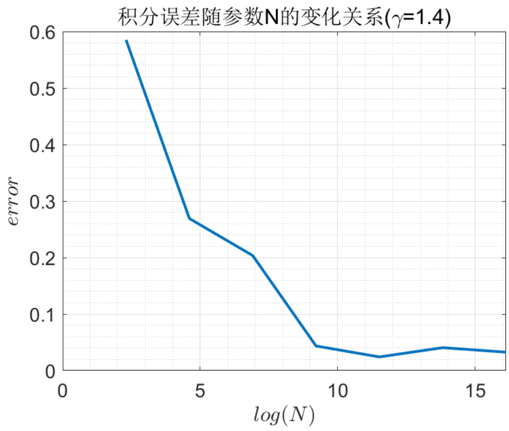
积分步数N	绝对误差ϵ
10	1.482793
100	0.905431
1000	0.469053
10000	0.001988
100000	0.067546
1000000	0.030883
10000000	0.040191

表 3: $\gamma = 4.0$时的积分误差表

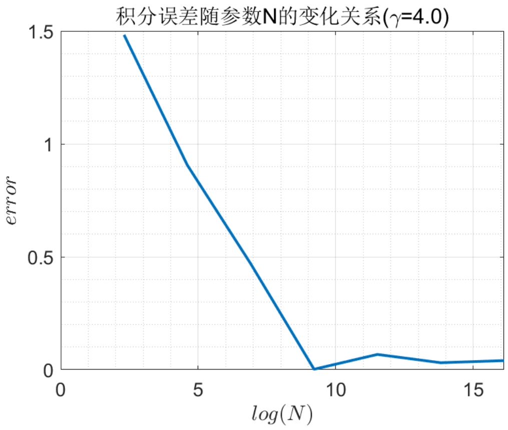
可以看出，当N较小的时候，误差很大，随着N增大，误差减小，并且后面误差随着N的增大几乎不会出现量级上的变化，比较稳定，这时候想要加大精度，可能要再走很多步，说明增大步数并不能非常有效地提高精度。以步数的对数作为横坐标，误差作为纵坐标，做出的曲线图如下：



(a) $\gamma = 0.2$



(b) $\gamma = 1.4$



(c) $\gamma = 4.0$

图 3: 误差随步数N变化曲线

从曲线上更加直观地看出，最后随着步数增加误差和步数之间并没有很明显的单调递减关系，而是变得逐渐平缓，控制在0.1的量级。

5 总结

- 本次实验通过$Metropolis$抽样实现积分的计算，选择合适的参数值，能够得到较为理想的模拟结果
- 可以发现$Metropolis$抽样对于步进矩阵T的选择有很高的要求，一个合适的T矩阵应该使得每一步的步长不能太长也不能太短，这样才能在尽可能少的步数到达热平衡态，得到我们所要的重要抽样分布。