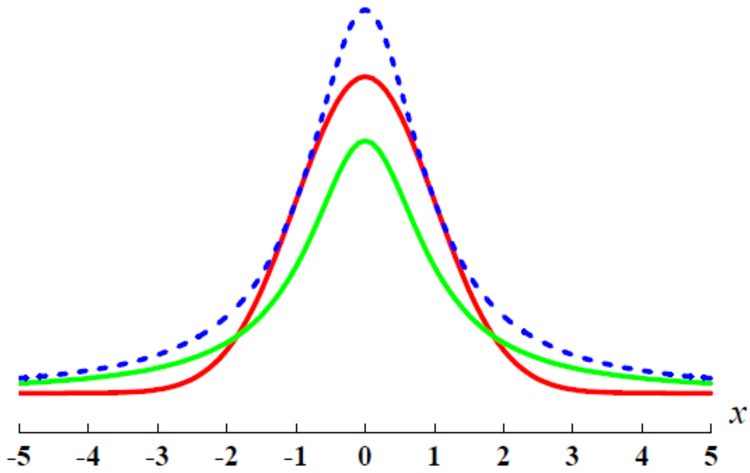
计算物理A作业6

吕遨 PB19030789

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$F(x)$，其中常数$a \neq b \neq 1$，用舍选抽样对$p(x)$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。

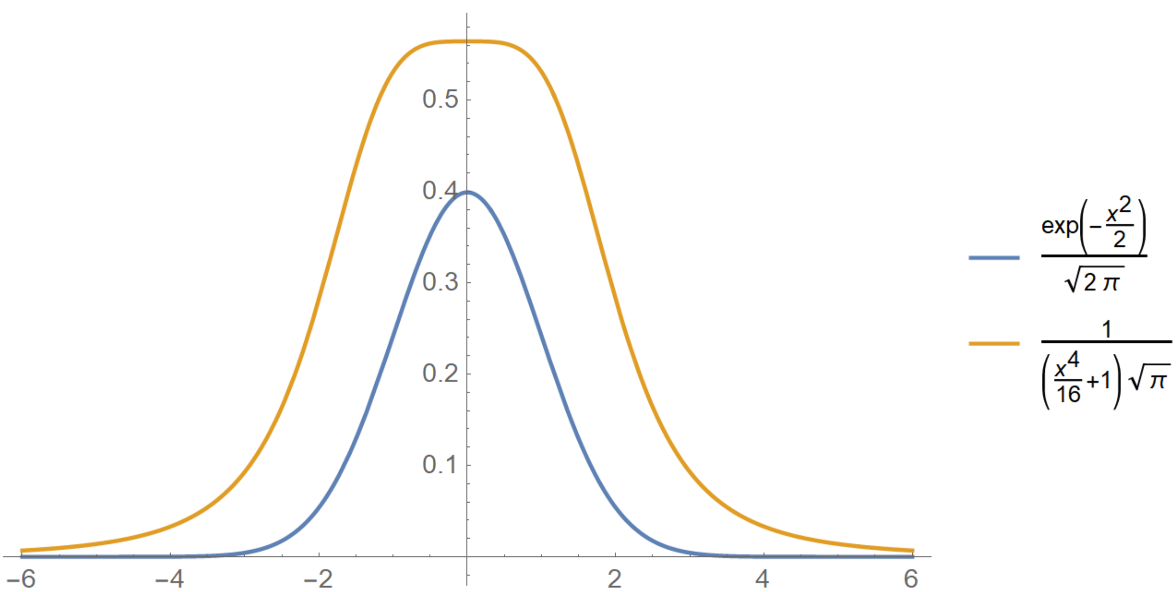
$$Gaussian :\sim exp(-ax^2) \qquad Lorentzian\ Like :\sim \frac{1}{1+bx^4}$$



2.算法和主要公式

本题中我们采用标准Gauss分布，即取$p(x) = \frac{\exp\left(\frac{-x^2}{2}\right)}{\sqrt{2\pi}}$。Lorentz类分布（比较函数）可取$F(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}(1+\frac{x^4}{16})}$

两个函数的图像如下图所示：

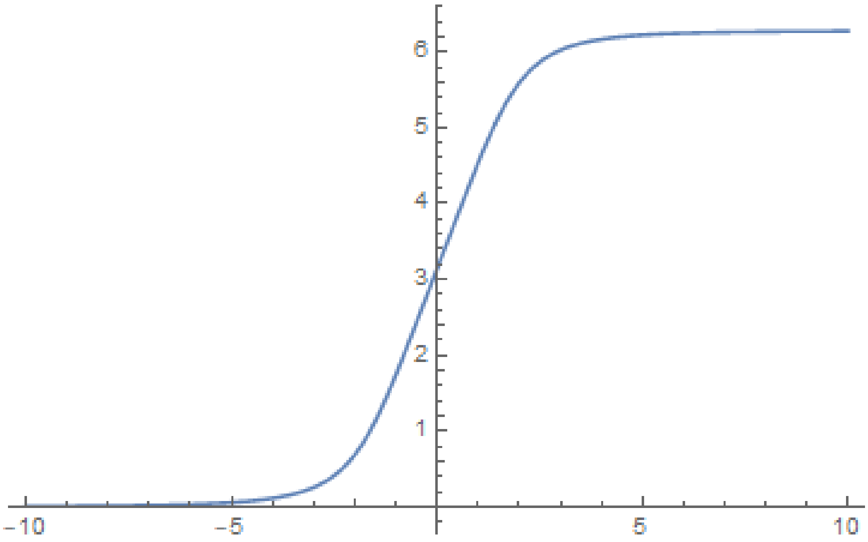


理论抽样效率应该为$1/\int_{-\infty}^{+\infty}F(x)\,\mathrm{d}x=1/\sqrt{2\pi}=0.398942$

$F(x)$的归一化的累积函数为

$$G(x)=\frac{1}{2}\left(2\arctan\left(1+\frac{x}{\sqrt{2}}\right)-2\arctan\left(1-\frac{x}{\sqrt{2}}\right)+\ln\left(\frac{x^2+2\sqrt{2}x+4}{x^2-2\sqrt{2}x+4}\right)\right)+\pi$$

$G(x)$的大致图像如下



这个函数不易求反函数，因此我们考虑用二分法求出数值解。

考虑到$G(-10)=0.00753731, G(10)=6.27565$，可将初始区间取为$[-10,10]$。

抽样的具体方法是：先生成两个$[0,1]$上的随机数序列ξ_1,ξ_2。

在x方向上，按照$F(x)$的分布抽样。首先要将ξ_1乘以一个系数6.28，使其变换为区间$[0,6.28]$上的随机数，之后用二分法解方程

$$\xi_1=G(\xi_x)$$

即可得到x方向上抽样点$\xi_x=G^{-1}(\xi_1)$。

在y方向上，按照$\frac{1}{F(\xi_x)}$的均匀分布抽样，即

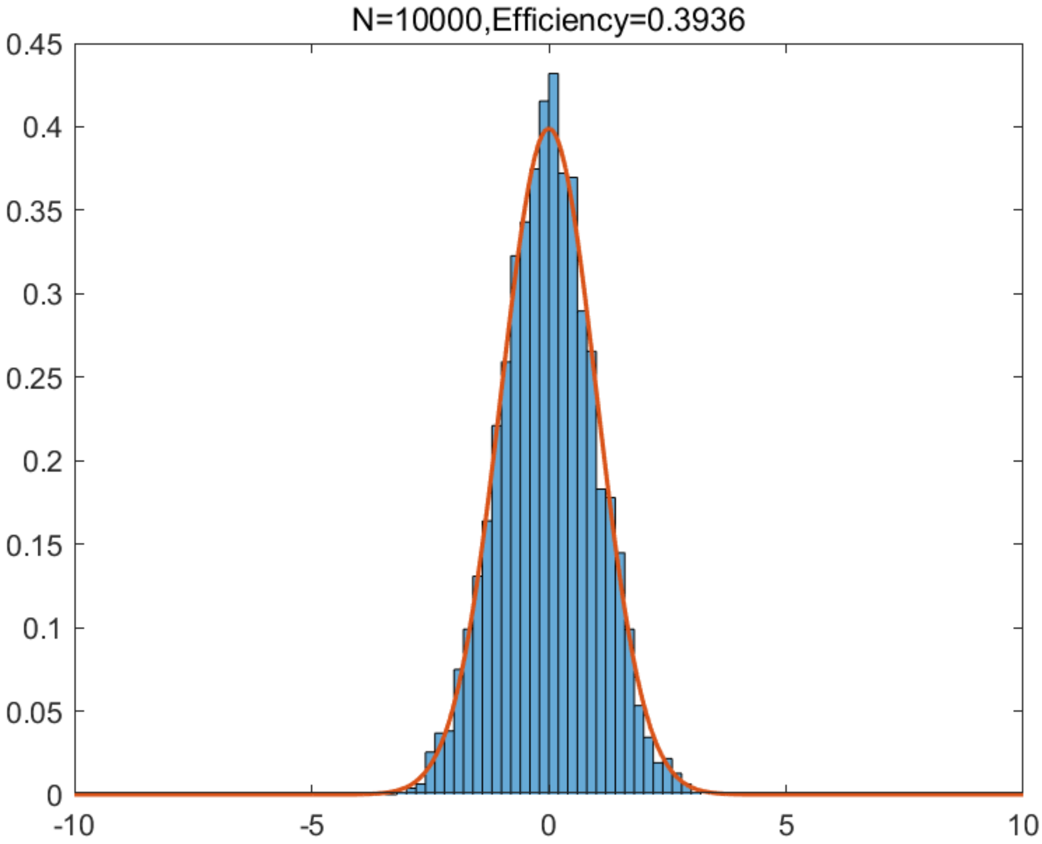
$$\xi_y=F(\xi_x)\xi_2$$

最后需要比较大小关系$\xi_y\leq p_2(\xi_x)$，是则取，否则舍。

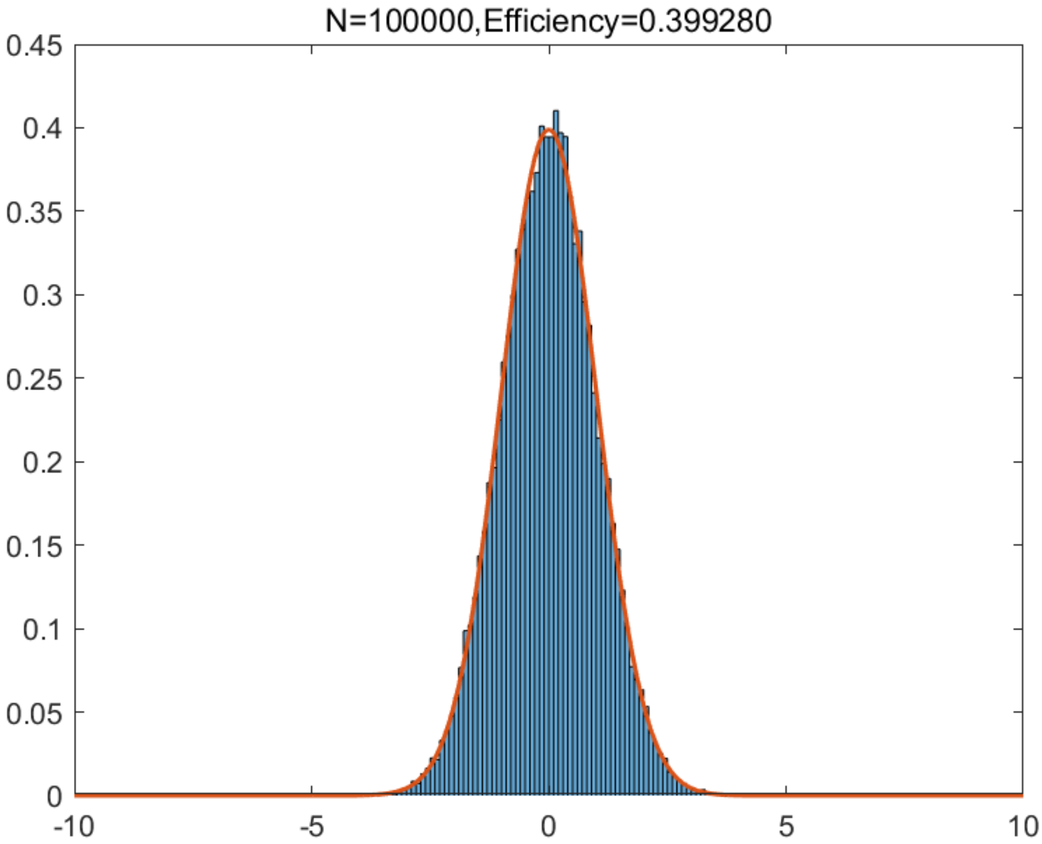
3.计算结果及分析

我们分别取总的抽样点数$N=10000,100000,1000000$，分别作出频率分布直方图并计算抽样的效率。图中红色的曲线标准正态分布曲线。

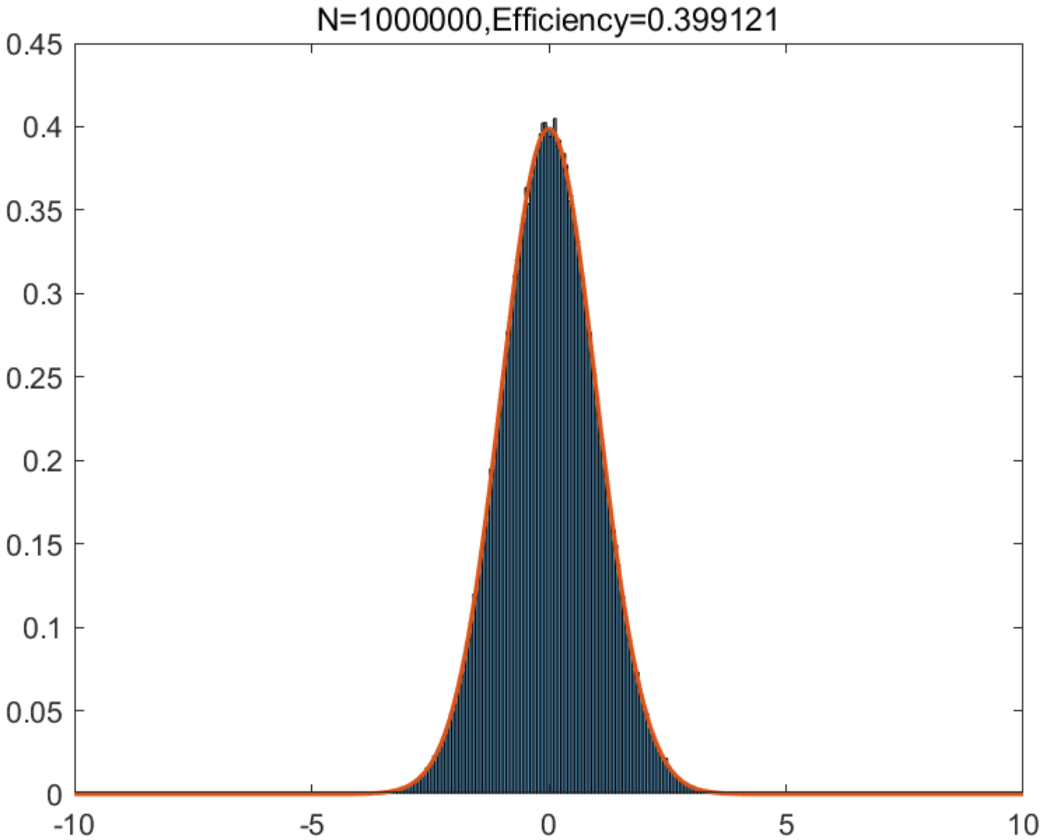
$N=10000$，**效率为0.3936**



$N = 100000$，**效率为0.399280**



$N = 1000000$，**效率为0.399121**



可见随着N增大，频数分布逐渐趋于理想分布。而抽样效率也比较接近理论值0.398942.

4.总结

（1）我们采用舍选抽样得到的归一化的频率分布直方图与理论分布$p(x)$吻合的很好。当N增大时，二者越来越接近。

（2）实际的抽样效率与理论值非常接近。

（3）舍选抽样的效率取决于比较函数$F(x)$的选取。本题选取中类Lorentz函数$F(x)$作为比较函数，为了使反函数便于计算，故意将 $F(x)$取得比较"大"，这样相当于浪费了更多面积，减低了抽样效率。应该有另外的参数取法可以使$F(x)$更贴近$p(x)$，这样的话抽样效率会变高。

（4）当比较函数的反函数很难求时，可以考虑用二分法进行数值求解，但这样带来的问题是程序的效率会比较低。