计算物理A作业13

吕遨 PB19030789

1.作业题目

用Metropolis-Hasting抽样方法计算积分：$I=\int_0^\infty (x-\alpha\beta)^2 f(x)\mathrm{d}\,x=\alpha\beta^2$

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

设积分权重函数为：$p(x)=f(x)$和$p(x)=(x-\alpha\beta)^2 f(x)$

给定参数α,β，并用不同的γ值，分别计算积分，讨论计算精度和效率。

2.算法和主要公式

2.1 公式推导

抽样x满足分布为$p(x)$作为积分的权重函数：

设T与初态无关（即非对称的）:$T_{ij}=T(x\rightarrow x')=0.5\exp\{-x'/\gamma\}$

设$x_0=1$，抽样$x'=-\gamma\ln R$，其中R为区间$[0,1]$上的随机数

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

按照r的大小来决定下一步的x_i取值

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

最终积分的近似值为

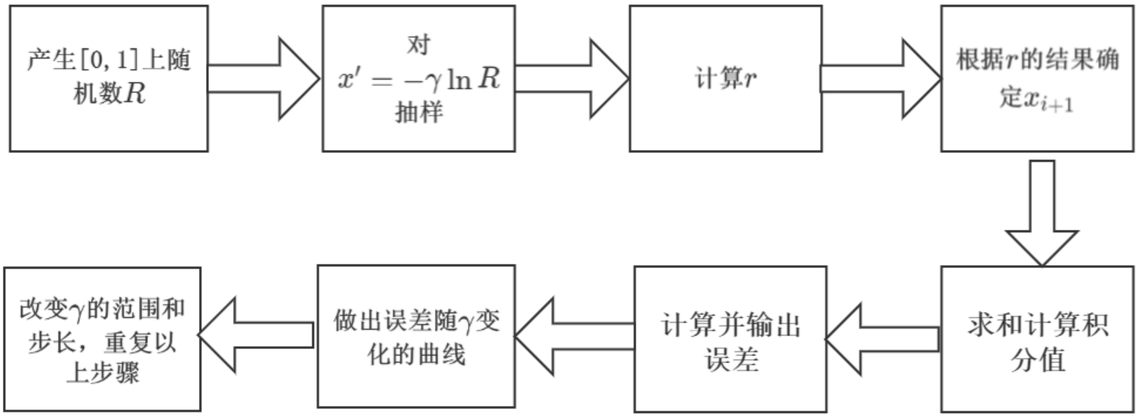
$$I=\frac{1}{N-m}\sum_{m+1}^{N}(x_i-\alpha\beta)^2$$

其中m为热化长度，可取$m=\frac{N}{10}$。

本题中取参数$\alpha=2,\beta=1$，取不同的γ值讨论该积分的精度和效率。

2.2 程序设计

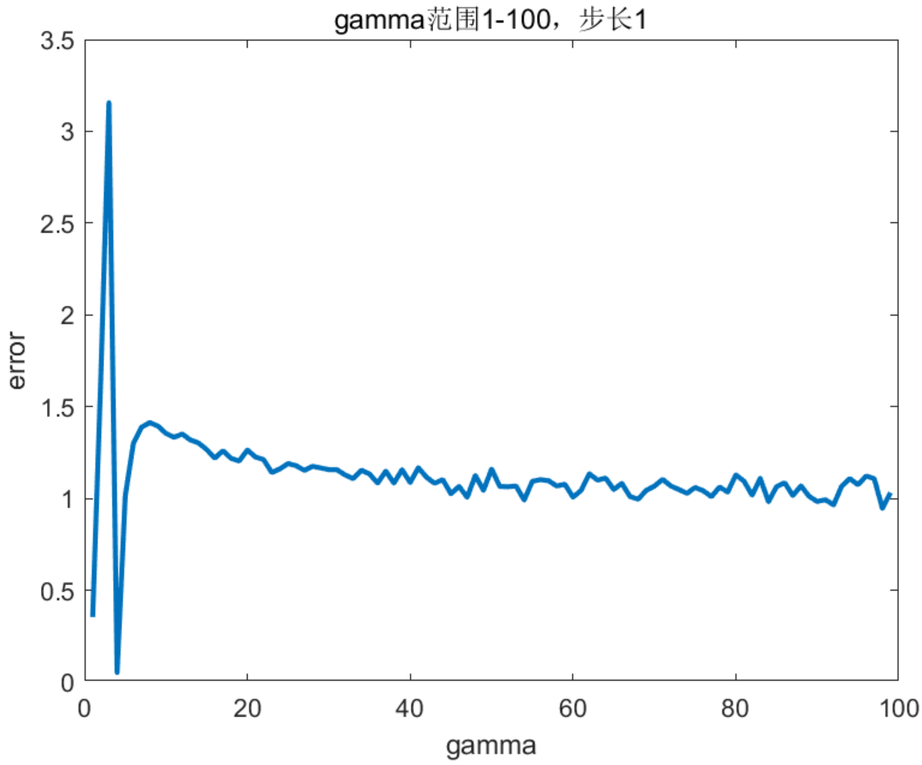
本实验程序的基本思路如下图所示：



3.计算结果及分析

3.1 误差与γ的关系

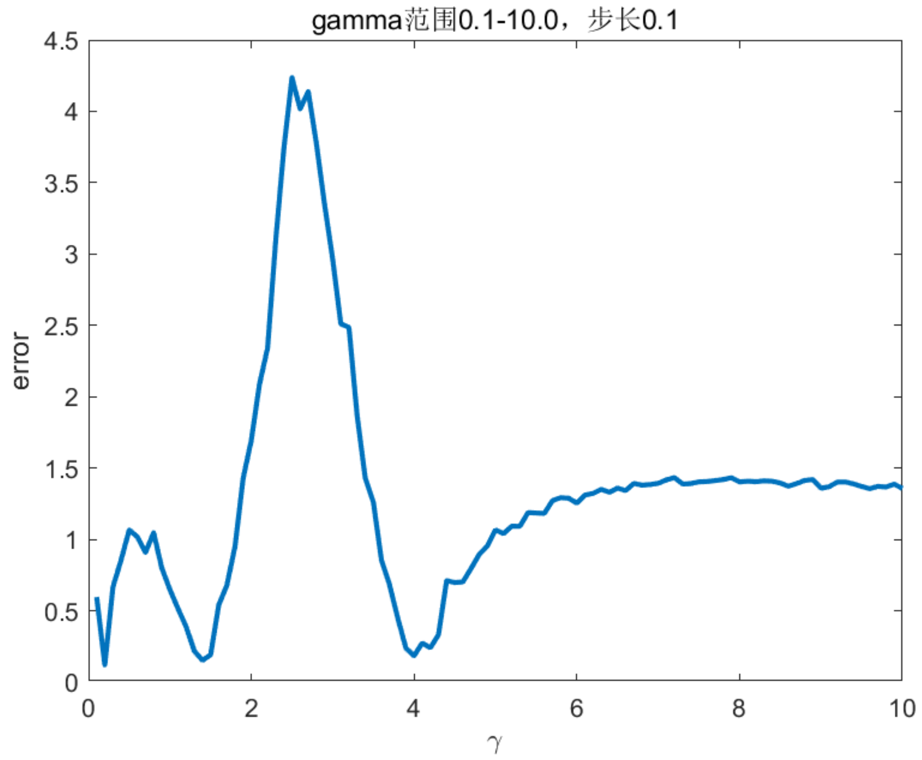
根据所得数据可以作出误差随γ变化的曲线，**γ范围1~100，步长为1**



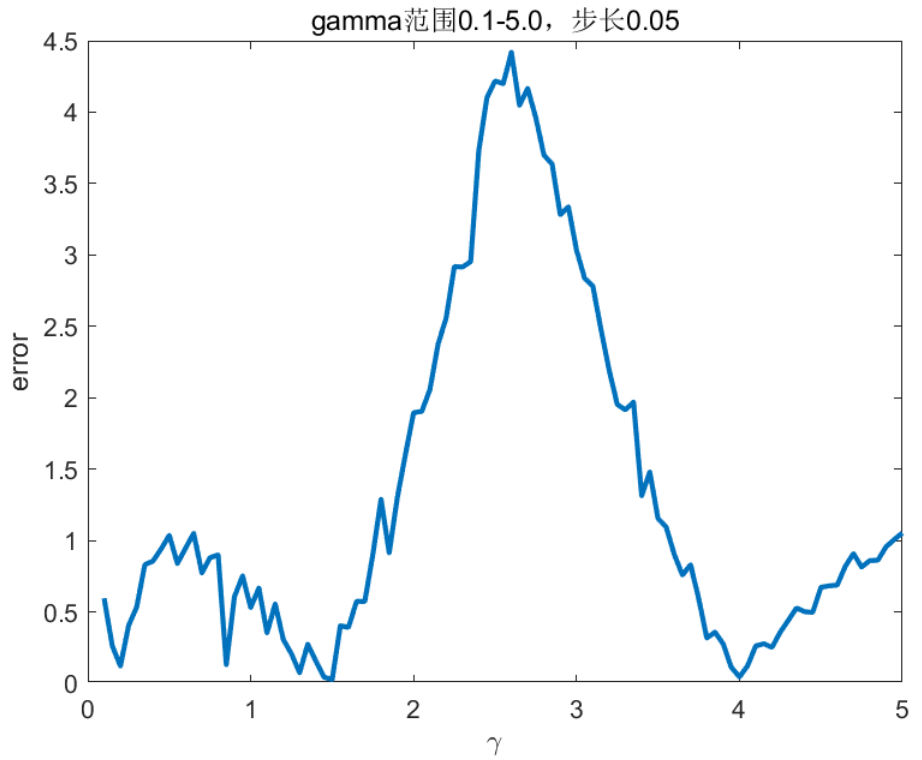
可以看到在γ比较大的情况下，积分误差基本上集中在1~1.5之间。但当γ较小时，误差值会有很大的波动，这值得我们进一步研究。

现在我们缩小γ的范围和步长再次计算：

γ范围0.1~10.0，步长为0.1



γ范围0.1~5.0，步长为0.05

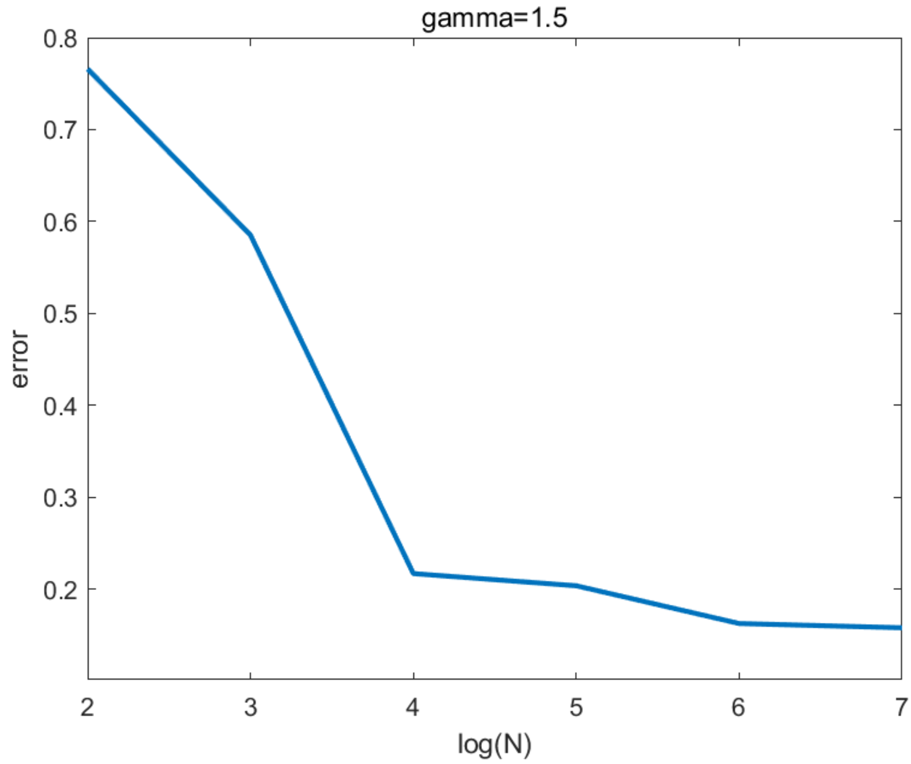


由以上两图可以看出，当γ比较小时，误差有两个很接近于0的极小值，对于γ值大约为**1.5**和**4.0**。

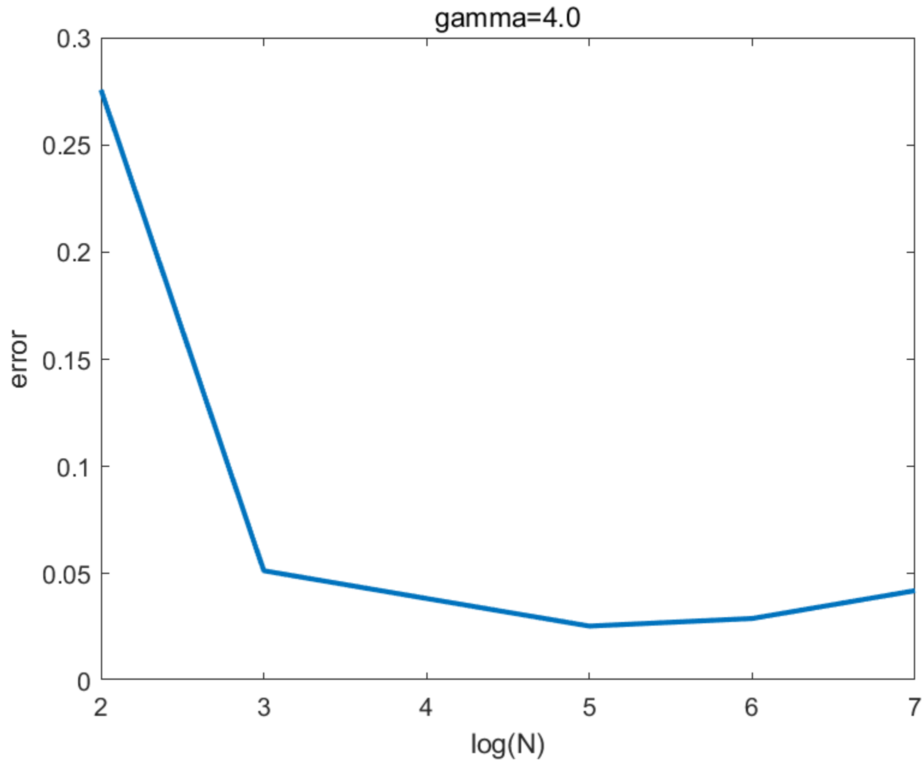
3.2 计算效率

下面我们讨论计算效率问题，主要研究计算误差与总步数N的关系。γ则取上述的两个极小值点。

固定$\gamma = 1.5$,计算不同的步数N下积分误差值，作图如下：



固定$\gamma = 4.0$,计算不同的步数N下积分误差值，作图如下：



可以看到，当N较小时，误差值会随着N的增加而快速减小，但当N比较大(大于等于10^4数量级)时，误差值基本不随N的增大而减小，甚至还可能增大。这说明单纯增大步数并不能有效地提高计算的效率。

4.总结

（1）本次作业我们使用Metropolis抽样计算积分。通过改变参数γ的值计算积分，我们发现不同γ对积分的误差值影响很大，只有选取合适的γ值才能控制误差在一个比较小的范围内。

（2）总步数N较大时，误差基本会趋于稳定，而不是持续减小。所以单纯增大计算步数并不能有效提高计算效率。