计算物理作业四

于浩然 PB19020634 2021.10.17

1 作业题目

设 pdf 函数满足关系式：

$$p'(x) = a\delta(x) + b\exp(-cx), \qquad x \in [-1, 1] \tag{1}$$

讨论该函数性质并给出抽样方法.

2 函数性质讨论

2.1 函数形式的确定

pdf 函数的导数中含有 $\delta(x)$，故 pdf 函数在 $x = 0$ 处有阶跃. 我们引进 Heaviside 阶梯函数：

$$\Theta(s) = \begin{cases} 1, & s > 0 \\ 0, & s < 0 \end{cases} \tag{2}$$

此函数具有如下性质：

$$\frac{\mathrm{d}\Theta(s)}{\mathrm{d}s} = \delta(s) \tag{3}$$

于是，我们不妨设 $p'(x)$ 原函数的第一项为

$$p_1(x) = a\Theta(x) \tag{4}$$

对 $p'(x)$ 的第二项求不定积分：

$$\int b\exp(-cx)\mathrm{d}x = -\frac{b}{c}e^{-cx} + C \tag{5}$$

为了讨论方便，我们尽可能使 $p(x)$ 的形式简单. 不妨取 $C = 0$，得到 pdf 函数的第二项：

$$p_2(x) = -\frac{b}{c}e^{-cx} \tag{6}$$

至此我们已经得到了 pdf 函数的一个简单形式：

$$\begin{aligned} p(x) &= p_1(x) + p_2(x) \\ &= a\Theta(x) - \frac{b}{c}e^{-cx} \\ &= \begin{cases} a - \frac{b}{c}e^{-cx}, & x \in [0, 1] \\ -\frac{b}{c}e^{-cx}, & x \in [-1, 0] \end{cases} \end{aligned} \tag{7}$$

2.2 函数最大值的讨论

由于后面可能需要用到舍选抽样法，考虑其抽样效率，需要对 pdf 函数的最大值进行讨论. 由于 pdf 函数不能为负，a, b, c 参数将受到一定限制：

$$\begin{cases} a - \frac{b}{c}e^{-cx} > 0, & x \in [0,1] \\ -\frac{b}{c}e^{-cx} > 0, & x \in [-1,0] \end{cases} \tag{8}$$

易得 $-b/c > 0$. 下面分类讨论：

- $c > 0 \Rightarrow b < 0$

  这时 e^{-cx} 为递减函数，在 -1 处取最大值 e^c. 这时函数的最大值仍决定于 a 的大小，为了进行讨论，我们将函数分为两段分别求最大值：

$$\begin{cases} \max_{x\in[0,1]} p(x) = a - b/c \\ \max_{x\in[-1,0]} p(x) = -(b/c)e^c \end{cases} \tag{9}$$

- $c < 0 \Rightarrow b > 0$

  这时 e^{-cx} 为递增函数，在 1 处取最大值 e^{-c}. 有

$$a > \frac{b}{c}e^{-c} \tag{10}$$

  a 仍可能为负值，故我们考虑最大值时仍分段考虑：

$$\begin{cases} \max_{x\in[0,1]} p(x) = a - (b/c)e^{-c} \\ \max_{x\in[-1,0]} p(x) = -b/c \end{cases} \tag{11}$$

2.3 求反函数的可能性

若要使用直接抽样法，则须考虑 pdf 函数的累积函数是否容易求反函数. 对我们给出的 pdf 函数形式 (7)，求其累积函数：

$$\begin{aligned} \eta(x) &= \int_{-1}^{x} p(\tau)\mathrm{d}\tau \\ &= \begin{cases} (b/c^2)(e^{-cx} - e^c), & x \in [-1,0] \\ (b/c^2)(e^{-cx} - e^c) + ax, & x \in [0,1] \end{cases} \\ &= (b/c^2)(e^{-cx} - e^c) + ax\Theta(x) \end{aligned} \tag{12}$$

对于这样的累积函数，求反函数十分困难，即使分段后 $[0,1]$ 上也不能解析求出 $x(\eta)$，故我们在后面不考虑直接抽样法.

3 抽样方法

3.1 抽样公式推导

在这里我们直接考虑 **阶段函数舍选法**. 分别取 $[0,1]$ 和 $[-1,0]$ 上的最大值

$$M_1 = a - \frac{b}{c}e^{|c|}, \qquad M_2 = -\frac{b}{c}e^{|c|} \tag{13}$$

设分段阶梯比较函数

$$F(x) = \begin{cases} M_1, & x \in [0,1] \\ M_2, & x \in [-1,0] \end{cases} \tag{14}$$

根据舍选法的一般形式:

(1) 产生一对 $[0,1]$ 区间中均匀分布的随机抽样值 (ξ_1, ξ_2)，可得抽样表示式:

$$\xi_1 = \int_a^{\xi_x} F(x)\mathrm{d}x / \int_{-1}^{1} F(x)\mathrm{d}x, \qquad \xi_y = \xi_2 F(\xi_x) \tag{15}$$

分段表示如下:

$$\xi_1 = \begin{cases} \dfrac{(\xi_x+1)M_2}{M_1+M_2}, & \xi_x \in [-1,0] \\ \dfrac{M_2+\xi_x M_1}{M_1+M_2}, & \xi_x \in [0,1] \end{cases} \tag{16}$$

$$\xi_2 = \begin{cases} \xi_y/M_2, & \xi_x \in [-1,0] \\ \xi_y/M_1, & \xi_x \in [0,1] \end{cases} \tag{17}$$

(2) 判断条件 $\xi_y \le p(\xi_x)$ 是否成立:

- $\xi_x \in [-1,0]$ 时

  $$\xi_x = (1+\frac{M_1}{M_2})\xi_1 - 1 < 0 \Rightarrow \xi_1 < \frac{M_2}{M_1+M_2} \tag{18}$$

  判断条件为

  $$M_2\xi_2 < p((1+\frac{M_1}{M_2})\xi_1 - 1) \tag{19}$$

  时，取 ξ_x.

- $\xi_x \in [0,1]$ 时

  $$\xi_x = \frac{(M_1+M_2)\xi_1 - M_2}{M_1} > 0 \Rightarrow \xi_1 > \frac{M_2}{M_1+M_2} \tag{20}$$

  判断条件为

  $$M_1\xi_2 < p\left((1+\frac{M_2}{M_1})\xi_1 - \frac{M_2}{M_1}\right) \tag{21}$$

  时，取 ξ_x.

若判断条件不成立，则舍.

3.2 抽样效率讨论

对于舍选法抽样，其抽样效率 (即有效选取的点数占比) 即为 p 与 F 的面积比. 代入本题目中参数可得抽样效率:

$$\frac{\int_{-1}^{1} p(x)\mathrm{d}x}{\int_{-1}^{1} F(x)\mathrm{d}x} = \frac{a+\int_{-1}^{1}(-\frac{b}{c})e^{-cx}}{M_1+M_2} = \frac{a+b/c^2(e^c-e^{-c})}{a-2(b/c)e^{|c|}} \tag{22}$$

4 结论

本题中我们讨论了带有阶跃的 pdf 函数的性质与抽样方法. 对于比较复杂的情况，直接抽样法中的反函数通常很难求解，这更体现了舍选抽样法 “万金油” 的优越性. 对于简单分布 (密度分布函数 $p(x)$ 定义在有限区域且有界)，可通过直接采取分段式常数函数作为比较函数的方式，便捷地得到抽样效率可观的抽样方法.

本题中变参数过多，可以说是 a,b,c 的取值决定了我们的抽样方法好坏，为防止得到片面性结论. 决定不自行确定数值来进行实验. 注意归一性没有讨论到.