计算物理 A 第八题

杨旭鹏 PB17000234

2019 年秋季

1 题目描述

用 Monte Carlo 方法计算如下定积分，并讨论有效数字位数。

$$\int_0^2 dx\sqrt{x+\sqrt{x}} \tag{1}$$

$$\int_0^{0.9} dx \int_0^{0.8} dy \int_0^{0.9} dz \int_0^2 du \int_0^{1.3} dv(6-x^2-y^2-z^2-u^2-v^2) \tag{2}$$

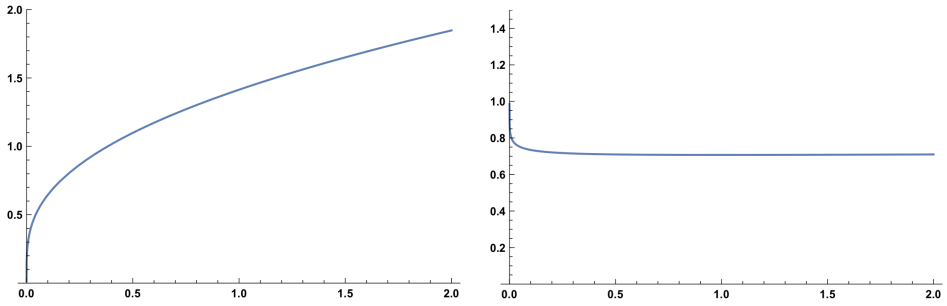
2 算法

2.1 第一个积分

对于第一个积分，我们可以直接利用 Monte Carlo 方法进行计算，即：

$$\int_0^2 \sqrt{x+\sqrt{x}}dx = 2\left\langle\sqrt{x+\sqrt{x}}\right\rangle \doteq \frac{2}{N}\sum_{i=1}^{N}\sqrt{x_i+\sqrt{x_i}} \tag{3}$$

其中 x_i 为在 $[0,2]$ 中均匀抽样得到的数据点。但由于第一个积分式的积分函数并不是很平滑，故可能积分精确度不高，我们可取 $g(x)=\sqrt{x}+\sqrt[4]{x}$ 将积分转化为 $\int_0^2 \frac{f(x)}{g(x)}g(x)dx$。(其中 $f(x)=\sqrt{x+\sqrt{x}}$) 则对于 $\frac{f(x)}{g(x)}$ 部分来说，其在 $[0,2]$ 之间比较平缓，且接近于 1：



(a) 不平滑的 $\sqrt{x+\sqrt{x}}$ (b) 相对平滑的 $\frac{f(x)}{g(x)}$

图 1: 函数示意图

而对于 $g(x)$ 来说，我们很容易能计算出其在 $[0,2]$ 上的积分为 $\frac{4}{15}\times 2^{\frac{1}{4}}(6+5\times 2^{\frac{1}{4}}) \doteq 3.788349467$。则利用权重 Monte Carlo 积分，我们有：

$$\begin{cases} \int_0^2 \frac{f(x)}{g(x)}g(x)dx = \int_0^c \frac{f(y)}{g(y)}dy \\ y = \int_0^x g(t)dt \\ c = \int_0^2 g(x)dx = \frac{4}{15}\times 2^{\frac{1}{4}}(6+5\times 2^{\frac{1}{4}}) \doteq 3.788349467 \end{cases} \tag{4}$$

其中选择 y 在 $[0,c]$ 中均匀分布。则其数值近似解为：

$$\int_0^2 f(x)dx = \int_0^c \frac{f(y)}{g(y)}dy = c\left\langle \frac{f(y)}{g(y)} \right\rangle \doteq \frac{c}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{f(y_i)}{g(y_i)} \tag{5}$$

2.2 第二个积分

我们可直接利用 Monte Carlo 方法进行计算，即:

$$\begin{aligned} &\int_0^{0.9}dx\int_0^{0.8}dy\int_0^{0.9}dz\int_0^{2}du\int_0^{1.3}dv(6-x^2-y^2-z^2-u^2-v^2) \\ &= 0.9\times 0.8\times 0.9\times 2\times 1.3\left\langle 6-x^2-y^2-z^2-u^2-v^2\right\rangle \\ &\doteq \frac{0.9\times 0.8\times 0.9\times 2\times 1.3}{N}\sum_{i=1}^{N}(6-x_i^2-y_i^2-z_i^2-u_i^2-v_i^2) \end{aligned} \tag{6}$$

其中 x_i, y_i, z_i, u_i, v_i 分别为在区间 $[0,0.9],[0,0.8],[0,0.9],[0,2],[0,1.3]$ 间均匀抽样得到的数据点。即可计算出第二个积分式得结果。

2.3 16807 产生器

16807 产生器属于线性同余法产生器的特例。而线性同余法方法为：

$$\begin{aligned} I_{n+1} &= (aI_n + b)\ mod\ m \\ x_n &= I_n/m \end{aligned} \tag{7}$$

其中整数 $I_i \in [0, m-1]$，a, b, m 为算法中的可调参数，其选取直接影响产生器的质量。选取参数：

$$\begin{cases} a = 7^5 = 16807 \\ b = 0 \\ m = 2^{31} - 1 = 2147483647 \end{cases} \tag{8}$$

即为所谓的 16807 产生器。由于直接利用7编写程序时计算 $(aI_n\ mod\ m)$ 时很容易造成数据溢出，故采取 Schrage 方法进行具体编程的实现：

$$aI_n\ mod\ m = \begin{cases} a(I_n\ mod\ q) - r[I_n/q], & if \geq 0 \\ a(I_n\ mod\ q) - r[I_n/q] + m, & otherwise \end{cases} \tag{9}$$

其中 $m = aq + r$，即 $q = m/a = 127773$，$r = m\ mod\ a = 2836$。即可利用此方法产生伪随机数序列。

3 程序使用方法

在运行程序后，会看到请求输入积分所需总随机点数的提示，按照提示在后面输入所需要的总随机点数，摁回车继续。然后经过计算在屏幕上给出 2 个积分的结果。程序输出完这些后会自动退出。

```
请输入您计算积分所需要的总点数：10000000
您输入的参数已接受，正在计算请稍等片刻~
the integation1-1(with transformation) is 2.700381,the difference is 0.010860
the integation1-2 is 2.689367,the difference is 0.000154
the integation2-1 is 5.643886,the difference is 0.000194
Program ended with exit code: 0
```

图 2: 一个典型程序的运行示例

4 程序结果与讨论

当输入一些不同的点数时，得到如下结果：

	$N = 10^3$	$N = 10^4$	$N = 10^5$	$N = 10^6$	$N = 10^7$	$N = 10^8$	理论值
积分 1 结果 (变换)	2.698789	2.700485	2.700437	2.700343	2.700364	2.700387	2.689521
积分 1 结果 (变换) 与精确值差值	0.009268	0.010964	0.010916	0.010822	0.010843	0.010866	
积分 1 结果 (直接抽样)	2.679132	2.686411	2.685039	2.687622	2.689306	2.689497	2.689521
积分 1 结果 (直接抽样) 与精确值差值	0.010389	0.003110	0.004482	0.001899	0.000215	0.000024	
积分 2 结果	5.654970	5.663653	5.648212	5.644032	5.645314	5.643928	5.64408
积分 2 结果与精确值差值	0.010890	0.019573	0.004132	0.000048	0.000215	0.000152	

表 1: 积分结果一览表

可以看出积分 1 利用变换抽样得到的结果并不收敛于准确值。这可能是由于虽然变换将大部分积分区间内的函数变得比较平缓，但由于靠近积分左端的导数很大，故此变换方法很难收敛。

其与精确值的差别与 $\frac{1}{\sqrt{N}}$ 的比较为 (不讨论变换法得到的积分 1，下同)：

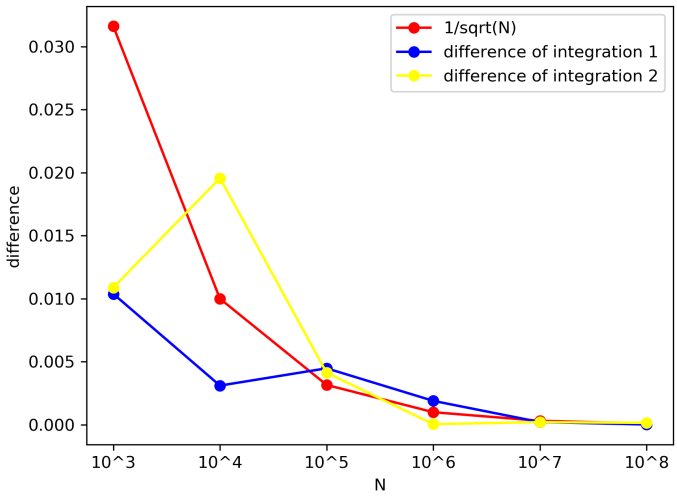


图 3: 数值积分结果与精确值的差值与 $\frac{1}{\sqrt{N}}$ 的比较

可以看出其数值积分误差与 $\frac{1}{\sqrt{N}}$ 相关。使用不同的种子值得到如下结果：

	$N=10^3$	$N=10^4$	$N=10^5$	$N=10^6$	$N=10^7$	$N=10^8$
积分 1 结果与精确值差别 1	0.009551	0.002047	0.000933	0.000084	0.000036	0.000039
积分 1 结果与精确值差别 2	0.025366	0.002164	0.003410	0.000575	0.000224	0.000033
积分 1 结果与精确值差别 3	0.000016	0.003167	0.001923	0.000487	0.000130	0.000055
积分 1 结果与精确值差别 4	0.020162	0.005893	0.002752	0.001050	0.000066	0.000085
积分 1 结果与精确值差别 5	0.008691	0.018182	0.002630	0.001048	0.000143	0.000032
积分 2 结果与精确值差别 1	0.035440	0.021787	0.000213	0.000625	0.000146	0.000205
积分 2 结果与精确值差别 2	0.054598	0.012395	0.003819	0.001073	0.000821	0.000162
积分 2 结果与精确值差别 3	0.096984	0.022211	0.008630	0.002231	0.000570	0.000120
积分 2 结果与精确值差别 4	0.060068	0.006463	0.000507	0.000968	0.000629	0.000098
积分 2 结果与精确值差别 5	0.003673	0.011706	0.017530	0.003387	0.001163	0.000100

表 2: 积分结果误差

则可推知其积分有效位数分别为:

	$N=10^3$	$N=10^4$	$N=10^5$	$N=10^6$	$N=10^7$	$N=10^8$
积分 1 有效位数	2	2	3	3	4	4
积分 2 有效位数	1	2	2	3	3	4

表 3: 积分结果一览表

5 心得与体会

通过此次作业，对 Monte Carlo 法积分更加熟悉，也对其结果的有效位数有了更深的理解。发现变换法对于有些函数来说即使让其在积分区间内比较平缓，但若出现导数在某点很大时，数值积分结果会相当不好，甚至不收敛。

通过编程作业，也更加熟悉了一些 C 语言和 LaTeX。

6 附录

A C 语言源程序

```c
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <time.h>
#include <math.h>
#define a 16807
#define b 0
#define m 2147483647
#define r (m%a)
#define q (m/a)
#define Pi 3.1415926



//利用/dev/random 产生"真"随机数
int my_realrandom(int ran[],int n){
    FILE * fp1 = fopen("/dev/random","r");
    for(int i=0;i<n;i++){
        fread(&ran[i], 1, 4, fp1);
    }
    fclose(fp1);
    return 0;
}


// Schrage 方法产生随机数
int my_schrage(double ran[],int seed,int n){
    for (int i = 0; i < n - 1; i++) {
        if (seed >= 0) {
            ran[i] = (seed / (double) m);
        } else {
            ran[i] = ((seed + m) / (double) m);
        }
```

```
33          if(seed == m-1){
34              if(a >= b){   //由于Schrage方法只对z in
                    (0,m-1)成立，故这里要讨论z == m-1的情况
35                  seed = m + (b-a) % m;
36              }
37              else  seed = (b-a) % m;
38
39          }
40          else seed = ((a * (seed % q) - r * (seed / q)) + b % m ) %
                m; //递推式
41      }
42      if (seed >= 0) {
43          ran[n-1] = (seed / (double) m);
44      } else {
45          ran[n-1] = ((seed + m) / (double) m);
46      }
47      return 0;
48  }
49
50
51
52
53
54  int main(int argc, const char * argv[]) {
55      int N;   //总随机数个数
56      double x1,x2,x3,x4,x5,x6,x7;
57      double result1 = 0;
58      double result2 = 0;
59      double result3 = 0;
60      char str[50];
61      printf("请输入您计算积分所需要的总点数: ");
62      while (!scanf("%d",&N)){ //简单的输入检查
63          gets(str);
64          printf("\nInput error,please try again\n");
65          printf("请输入您计算积分所需要的总点数: ");
66      }
67      if(N >1000000)
            printf("您输入的参数已接受，正在计算请稍等片刻~\n");
```

```
68      int seed[5];
69      my_realrandom(seed,5); //读取"/dev/random"产生随机种子方便多次调用
70
71      double *ran1 = malloc(sizeof(double) * N); //用来存放随机数
72      double *ran2 = malloc(sizeof(double) * N); //用来存放随机数
73      double *ran3 = malloc(sizeof(double) * N); //用来存放随机数
74      double *ran4 = malloc(sizeof(double) * N); //用来存放随机数
75      double *ran5 = malloc(sizeof(double) * N); //用来存放随机数
76
77      my_schrage(ran1,seed[0],N);
78      my_schrage(ran2,seed[1],N);
79      my_schrage(ran3,seed[2],N);
80      my_schrage(ran4,seed[3],N);
81      my_schrage(ran5,seed[4],N);
82
83
84      for(int i = 0;i < N;i++){
85          x1 = 3.78834946716848*ran1[i];
86          x2 = 2*ran1[i];
87          x3 = 0.9*ran1[i];
88          x4 = 0.8*ran2[i];
89          x5 = 0.9*ran3[i];
90          x6 = 2*ran4[i];
91          x7 = 1.3*ran5[i];
92          result1 += 3.78834946716848*sqrt(x1+sqrt(x1))/(sqrt(x1) +
                sqrt(sqrt(x1)))/N; //第一个积分变换方法
93          result2 += 2*sqrt(x2+sqrt(x2))/N; //第一个积分直接抽样计算法
94          result3 +=
                1.6848*(6-pow(x3,2)-pow(x4,2)-pow(x5,2)-pow(x6,2)-pow(x7,2))/N;
                //第二个积分直接抽样计算法
95      }
96
97      printf("the integation1-1(with transformation) is %lf,the
            difference is %lf\n",result1,fabs(result1-2.689521));
            //第一个积分变换方法
98      printf("the integation1-2 is %lf,the difference is
            %lf\n",result2,fabs(result2-2.689521));
            //第一个积分直接抽样计算法
```

```
99      printf("the integation2-1 is %lf,the difference is
            %lf\n",result3,fabs(result3-5.64408));
            //第二个积分直接抽样计算法
100     return 0;
101 }
```

B 可视化绘图 python 程序源码

```

import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
import numpy as np
#from IPython.core.pylabtools import figsize # import figsize
#figsize(12.5, 4) # 设置 figsize
plt.rcParams['savefig.dpi'] = 300 #图片像素
plt.rcParams['figure.dpi'] = 300 #分辨率
# 默认的像素：[6.0,4.0]，分辨率为100，图片尺寸为 600&400
fig = plt.figure()
ax1 = fig.add_subplot(111)
X = []
Y = []

with open('problem 6/p_108.txt', 'r') as f:
    while True:
        lines = f.readline() # 整行读取数据
        if not lines:
            break
        Y = [float(i) for i in lines.split(',')] # 将整行数据分割处理
    Y = np.array(Y) # 将数据从list类型转换为array类型。


X = np.arange(-2.995, 3.005, 0.01)

plt.bar(x=X, height=Y, width=0.01, label='actual probability')
ax1.legend(loc=1)
ax1.set_ylabel('probability')


X = np.arange(-2.995, 3.005, 0.01)
oY = 0.01/(1+X**4)/2.196879736
ax1.plot(X, oY, 'r', label='original probability')
ax1.legend(loc=2)
plt.ylim([0,0.0055])
```

```
plt.xlabel('X')


plt.savefig("2.png")
```