计算物理作业六

于浩然 PB19020634 2021.10.20

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 $a \neq b \neq 1$，用舍选法对 $p(x)$ 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。

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

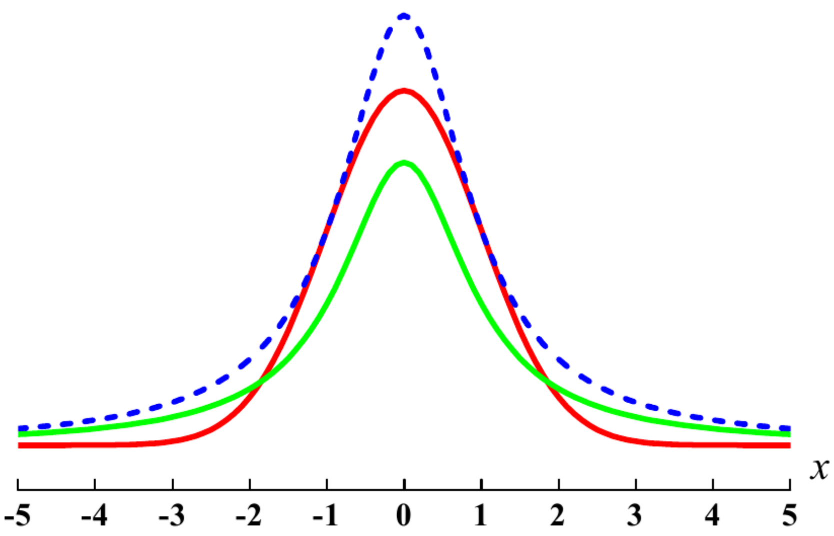

图 1: Gauss 分布和类 Lorentz 型分布示意图

2 算法简介

2.1 Gauss 分布/正态分布

若随机变量 X 服从位置参数为 μ、尺度参数为 σ 的正态分布，记为 $X \sim N(\mu, \sigma^2)$，则其概率密度函数为

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \tag{2}$$

题干 (1) 所给 Gaussian 分布 $f(x) = \exp(-ax^2)$，即平均值 $\mu = 0$，$\sigma = 1/\sqrt{2a}$，忽略了前面的归一化常系数.

2.2 类 Lorentz 分布

有一种物理学中十分重要的分布称为柯西-洛伦兹分布，它是描述受迫共振的微分方程的解：

$$f(x;x_0,\gamma)=\frac{1}{\pi}\left[\frac{\gamma}{(x-x_0)^2+\gamma^2}\right] \tag{3}$$

$x_0=0$ 且 $\gamma=1$ 的特例称为柯西分布，概率密度函数为：

$$f(x;0,1)=\frac{1}{\pi(1+x^2)} \tag{4}$$

题目中所给“类 Lorentz 分布”便为将上式中 x^2 替换为 x^4，稍微复杂一些.

具体到图 1 中的各条曲线，推测 红色为 Gaussian 分布，另两条可能是 类 Lorentz 分布.

2.3 舍选抽样法

首先我们将作为概率密度函数的 $p(x)$ 归一化，得到：

$$p(x)=\sqrt{\frac{a}{\pi}}e^{-ax^2} \tag{5}$$

在本题中，$F(x)$ 并没有概率密度函数的物理含义，而仅仅作为舍选法中的比较函数，故不需要归一化. 只需恰当选取 b 的值，使得在某一确定范围内 $F(x)\geq p(x)$，满足作为比较函数的要求. 不妨设

$$F(x)=\frac{k}{1+bx^4},\qquad k=const. \tag{6}$$

按照舍选法的一般步骤：

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

$$\xi_1=\frac{\int_{-\infty}^{\xi_x}F(x)\mathrm{d}x}{\int_{-\infty}^{\infty}F(x)\mathrm{d}x},\qquad \xi_y=\xi_2F(\xi_x) \tag{7}$$

(2) 判断如下条件是否成立：

$$\xi_y\leq p(\xi_x) \tag{8}$$

若否，则舍，再次抽样；若是，则取 $x=\xi_x$ 作为抽样结果. 上面式中 $F(x)$ 的积分形式复杂，难以用 ξ_1 解析表示出 ξ_x，考虑逐次求数值解，在下一部分中我们将进一步讨论.

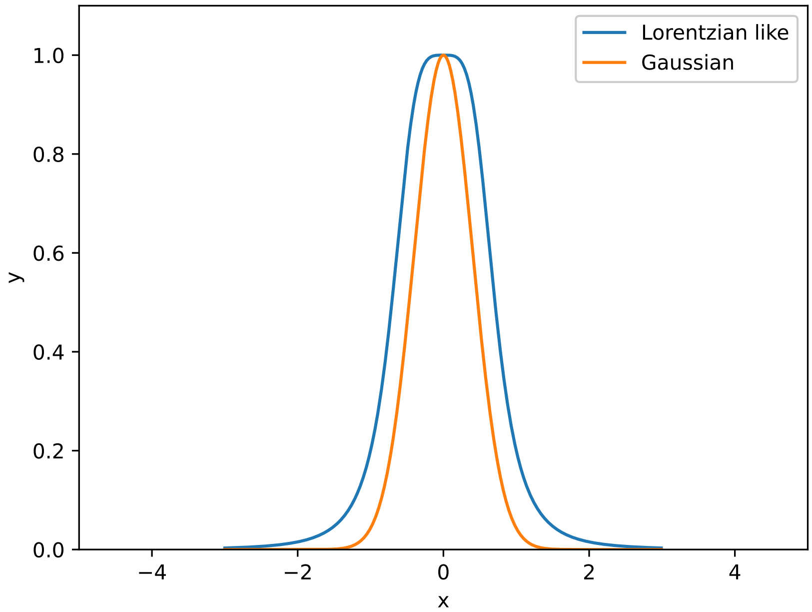

图 2: 两种函数线型示意图，取归一化的 $a=\pi$,$F(x)=\frac{1}{1+4x^4}$

2.4 抽样变换式的进一步讨论

$p(x)$ 和 $F(x)$ 式中，x 均取遍 $(-\infty,\infty)$. 但在我们的实际抽样中只能考虑有限区间的抽样；而且结合了分布函数的特点 (类似正态分布的 3σ 原则)，我们知道距离中心点一定距离以外概率密度函数已经变得相当小，即使包含了这些区域抽样也未必能抽到这些点，如图 2 展示.

可以非常明显地看出，当 $|x|>3$ 时两曲线都明显趋近于零. 于是有

$$\int_{-3}^{3}F(x)\mathrm{d}x\approxeq\int_{-\infty}^{\infty}F(x)\mathrm{d}x,\quad\int_{-3}^{3}p(x)\mathrm{d}x\approxeq\int_{-\infty}^{\infty}p(x)\mathrm{d}x,\tag{9}$$

为了后续编写程序，我们不妨设

$$p(x)=e^{-\pi x^2},\qquad F(x)=\frac{1}{1+4x^4}\tag{10}$$

用 Wolfram Alpha 计算不定积分：

$$\int\frac{\mathrm{d}x}{1+4x^4}=\frac{1}{8}\log\frac{2x^2+2x+1}{2x^2-2x+1}-\frac{1}{4}\arctan(1-2x)+\frac{1}{4}\arctan(2x+1)\equiv g(x)\tag{11}$$

则

$$\int_{-\infty}^{\infty}F(x)\mathrm{d}x\approxeq\int_{-3}^{3}F(x)\mathrm{d}x\approx 1.56463163641954\equiv S\tag{12}$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\xi_x}F(x)\mathrm{d}x &\approxeq \int_{-3}^{\xi_x}F(x)\mathrm{d}x\\ &= g(\xi_x)-g(-3)\end{aligned}\tag{13}$$

由 (7) 式，

$$S\xi_1 = g(\xi_x) - g(-3) \tag{14}$$

对于每个给定 ξ_1，可由上面方程解出 ξ_x 数值解，我们考虑使用 **弦截法**.

2.5 弦截法求方程数值解

弦截法是求非线性方程近似根的一种线性近似方法，是牛顿迭代法的一种变形算法. 对于非线性方程：

$$f(x) = 0 \tag{15}$$

其迭代公式为：

$$x_{k+1} = x_k - \frac{(x_k - x_{k-1})f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})} \tag{16}$$

计算步骤为：

(1) 选择迭代初值 x_0、x_1 以及误差精度 ε

(2) 按照迭代公式 (15) 计算 x_2

(3) 若 $|x_1 - x_0| < \varepsilon$，转向 (4)，否则 $x_0 = x_1, x_1 = x_2$，返回 (2)

(4) 输出满足精度的根 x_2，结束.

这种做法通过几次迭代就可以达到较好的精度，可以尝试在程序中使用.

3 编程实现

很遗憾，数值计算过于复杂, 也可能是前面的推导有误，程序不能输出正确的抽样结果.Anyway，还是把程序代码贴在下面：

```fortran
MODULE Sam !抽样程序模块
    IMPLICIT NONE
    REAL(KIND=8) ,PARAMETER :: S = 1.56463163641954 !为了定义S这一全局变量使用模块
    REAL(KIND=8) ,PARAMETER :: PI = 3.1415926

    CONTAINS
    FUNCTION F(x)
        REAL(KIND=8) :: F, x
        F = 1 / (1 + 4 * x**4)
```

```fortran
    END FUNCTION F
    FUNCTION P(x)
        REAL(KIND=8) :: P, x
        P = exp(-PI * x**2)
    END FUNCTION P
    FUNCTION G(x) !用函数定义g(x)表达式
        REAL(KIND=8) :: G, x
        G = log((2 * x**2 + 2 * x + 1)/(2 * x**2 - 2 * x + 1)) / 8 + atan(1 - 2 * x) / 4 + atan(1 + 2 * x) / 4
    END FUNCTION G
    FUNCTION H(x, xi_1) !定义要求解的方程左端h(x)
        REAL(KIND=8) :: xi_1, H, x
        H = G(x) - G(-3.0_8) - S * xi_1
    END FUNCTION H

    FUNCTION Sec(x0, x1, err, xi_1) !弦截法(Secant Method)求方程数值解
        REAL(KIND=8) ,INTENT(IN) :: err, x0, x1, xi_1
        REAL(KIND=8) :: Sec, tmp, tmpx0, tmpx1, diff
        INTEGER(KIND=8) :: i
        tmpx0 = x0
        tmpx1 = x1
        diff = x1 - x0
        DO WHILE (diff > err)
            tmp = tmpx1
            tmpx1 = tmpx1 - (tmpx1 - tmpx0) * H(tmpx1, xi_1) / (H(tmpx1, xi_1) - H(tmpx0, xi_1))
            tmpx0 = tmp
            diff = tmpx1 - tmpx0
        END DO
        Sec = tmpx1
    END FUNCTION Sec

    SUBROUTINE Sample(n) !进行舍选法抽样
        REAL(KIND=8) ,DIMENSION(10**n) :: x, y, xi_x, xi_y
        INTEGER(KIND=4) :: n, i
        REAL(KIND=8), DIMENSION(10**n) :: z !数组用于存放抽样结果
        OPEN (1, file='x.dat')
```

```
        READ (1, *) x
        CLOSE (1)
        OPEN (1, file='y.dat')
        READ (1, *) y
        CLOSE (1)
        DO i = 1, 10**n
            xi_x(i) = Sec(-3.0_8, 3.0_8, 0.00001_8, x(i)) !全部按照种别值为8传入参数
            print *, xi_x(i)
            IF (y(i) * F(xi_x(i)) < P(xi_x(i))) THEN
                z(i) = xi_x(i)
            END IF
        END DO
    END SUBROUTINE Sample
END MODULE Sam

SUBROUTINE Schrage(P, z0, filename) !Schrage随机数生成器子程序
    IMPLICIT NONE
    INTEGER :: N = 1, P
    INTEGER :: m = 2147483647, a = 16807, q = 127773, r = 2836, In(10**P), z0
    REAL(KIND=8) :: z(10**P)
    CHARACTER(LEN=5) :: filename
    In(1) = z0 !将传入值z0作为种子
    z(1) = REAL(In(1))/m
    DO N = 1, 10**P - 1
        In(N + 1) = a*MOD(In(N), q) - r*INT(In(N)/q)
        IF (In(N + 1) < 0) THEN !若值小于零，按Schrage方法加m
            In(N + 1) = In(N + 1) + m
        END IF
        z(N + 1) = REAL(In(N + 1))/m !得到第N+1个随机数
    END DO
    OPEN (1, file=filename) !每次运行子程序按照传入参数filename生成数据文件
    DO N = 1, 10**P !将随机数按行存入文件
        WRITE (1, *) z(N)
        END DO
    CLOSE (1)
END SUBROUTINE Schrage
```

```fortran

PROGRAM MAIN

    USE Sam
    INTEGER(KIND=4) :: intI = 4
    CALL Schrage(intI, 84651212, 'x.dat') !产生一对[0,1]之间均匀分布的随机数
    CALL Schrage(intI, 16545214, 'y.dat')
    CALL Sample(intI)
END PROGRAM MAIN
```

4 结论

本题中虽然未求出抽样结果，但由于要使用全局常量的缘故了解了 FORTRAN90 中函数、模块的结构与使用，有助于后面其他程序的设计. 对于如同本题中 $F(x)$ 这样比较复杂的函数难以求解积分，故以其作为比较函数会造成极大的麻烦. 当使用舍选抽样法时，还应选择形式尽量简单的比较函数.