计算物理作业三

于浩然 PB19020634 2021.10.16

1 作业题目

在球坐标系 (ρ, θ, φ) 下，产生上半球面上均匀分布的随机坐标点，给出其直接抽样方法.

2 算法简介

2.1 直接抽样方法

对于连续型变量的直接抽样方法，我们考虑如下量，将其称为累积函数：

$$\xi(x) = \int_a^x p(x')\mathrm{d}x' \tag{1}$$

其中 $p(x)$ 是已经归一化的几率密度分布函数，定义为：

$$\int_a^b p(x) = 1, \quad p(x) \geq 0 \tag{2}$$

$$\mathrm{d}P(x \to x + \mathrm{d}x) = p(x)\mathrm{d}x \tag{3}$$

上式中 P 为无量纲几率，几率密度函数 $p(x)$ 的量纲为自变量量纲的倒数.

我们只需由累积函数 $\xi(x)$ 的表达式反解出 $x(\xi)$ 的函数表达式，即求反函数，这样就得到了几率密度分布 $p(x)$ 的直接抽样方法.

2.2 本题具体解法

我们首先需要定义球坐标系 (ρ, θ, φ) 中单位球面上的“均匀分布”，可理解为在相同面积元 $\mathrm{d}S = \sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$ 上取点的概率 $\mathrm{d}P$ 均相同，可表达如下式：

$$\mathrm{d}P = p(\theta, \varphi)\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi = p(\theta, \varphi)\mathrm{d}S/\sin\theta \tag{4}$$

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}S} = \frac{p(\theta, \varphi)}{\sin\theta} = const. \tag{5}$$

为满足上述关系，我们不妨设 $p(\theta, \varphi) = k\sin\theta$ (k 为常数)

上半球面有 $0 \leq \theta \leq \pi/2$，$0 \leq \varphi \leq 2\pi$ 由归一化关系：

$$\iint p(\theta, \varphi)\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi/2} k\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi = 2\pi k = 1 \tag{6}$$

因此我们得到 $k = 1/2\pi$，

$$p(\theta, \varphi) = \sin\theta/2\pi \tag{7}$$

由于均匀分布的独立性，θ 和 φ 应相互独立，我们不妨设 $p(\theta,\varphi)=p(\theta)p(\varphi)$. 除了 (θ,φ) 的联合密度归一化外，$p(\theta)$ 和 $p(\varphi)$ 必须分别满足几率密度函数归一化：

$$\int_0^{\pi/2} p(\theta)\mathrm{d}\theta = 1, \qquad \int_0^{2\pi} p(\varphi)\mathrm{d}\varphi = 1 \tag{8}$$

容易得到：

$$p(\theta)=\sin\theta, \qquad p(\varphi)=1/2\pi \tag{9}$$

分别求累积函数 $\xi(\theta)$ 和 $\eta(\varphi)$：

$$\xi(\theta) = \int_0^{\theta} \sin\tau \mathrm{d}\tau = 1-\cos\theta \tag{10}$$

$$\eta(\varphi) = \int_0^{\varphi} 1/2\pi \mathrm{d}\tau = \frac{\varphi}{2\pi} \tag{11}$$

求解反函数：

$$\theta(\xi) = \arccos(1-\xi) \to \arccos\xi \tag{12}$$

$$\varphi(\eta) = 2\pi\eta \tag{13}$$

其中由于 $1-\xi$ 也服从均匀分布，故直接将其替换为 ξ. 这样，我们便可以通过 $[0,1]$ 上均匀分布的两个随机数序列 ξ 和 η 利用上式产生上半球面上均匀分布的随机数点.

3 编程实现

本题中我们需要使用随机数产生器，为方便起见考虑使用以前编程实现过的 16807 生成器，使用两个不同的种子生成两组一定数目的随机数，再使用 (12)(13) 式生成单位上球面 $\rho=1, z>0$ 上的均匀随机数点.

使用 Fortran90 进行编程，程序各部分及其功能介绍如下：

- `PROGRAM MAIN`
  在主程序中，使用 `DO` 循环结构考察随机数数目分别为 $10^3, 10^4, 10^5$ 时的情况，让整型变量 `intI` 分别为 3、4 和 5. 这里使用了一个小技巧，用 `WRITE` 语句把整型量 `intI` 转变为字符型量 `charI`，以便写入文件名便于后续区分和使用. 对于每个 `intI` 值，(手滚键盘) 输入两个随机数种子来生成两组随机数序列，再调用 `Spdererd` 子程序进行直接抽样，得到不同数目的 (θ,φ) 均匀分布序列，最后储存在文件中.

```fortran
PROGRAM MAIN
    INTEGER(KIND=4) :: intI
    CHARACTER(LEN=1) :: charI
    DO intI = 3, 5
        WRITE (charI,"(I1)") intI !此语句将10以内的整型数据
            intI变为字符类型charI
        CALL Schrage(intI, 1651661, 'x'//charI//'.dat')
        CALL Schrage(intI, 7459556, 'y'//charI//'.dat')
        CALL Sphererd(intI) !使用前面生成的随机数进行抽样
    END DO
END PROGRAM MAIN
```

- SUBROUTINE Schrage(P, z0, filename)
  此子程序对前面作业使用的子程序进行了一定改进，可以指定种子 z0，并指定写入的文件名 filename，通过 16807 生成器原理生成随机数并存入文件以备后续取用.

```fortran
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=40) :: 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=trim(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
```

- SUBROUTINE Sphererd(intP)

  在此子程序中，我们读取前面生成的不同数目的两组随机数序列，利用 (12)(13) 式计算出每个 ξ, φ 对应的 θ, φ 值，并依次存放于 'theta/phi'+charP+'.dat' 文件中.

```
SUBROUTINE Sphererd(intP)
    INTEGER(KIND=4) intP, i
    CHARACTER(LEN=1) charP
    REAL(KIND=8), DIMENSION(10**intP) :: theta, phi, xi, eta
    REAL(KIND=8), PARAMETER :: PI = 3.1415926
    WRITE (charP,"(I1)") intP !将整型数据intP转为字符型数据
       charP
    OPEN (1, file='x'//charP//'.dat') !打开相应文件传入两组随
       机数序列
    READ (1, *) xi
    CLOSE (1)
    OPEN (1, file='y'//charP//'.dat')
    READ (1, *) eta
    CLOSE (1)
    DO i = 1, 10**intP
        theta(i) = ACOS(xi(i)) !按照公式进行直接抽样
        phi(i) = 2*PI*eta(i)
    END DO
    OPEN (1, file='theta'//charP//'.dat') !将不同大小的球上随
       机数存入相应文件
    WRITE (1, *) theta
    CLOSE (1)
    OPEN (1, file='phi'//charP//'.dat')
    WRITE (1, *) phi
    CLOSE (1)
END SUBROUTINE Sphererd
```

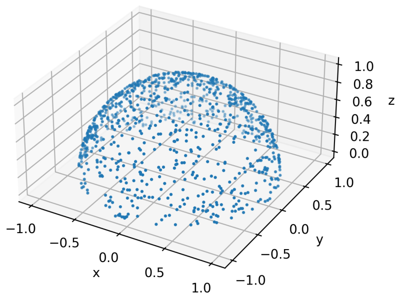
- python 绘图程序

  将 theta、phi 值传入数组，转化为直角坐标 x,y,z，再通过 ax1.scatter3D() 绘制 3D 散点图，保存为 png 文件.

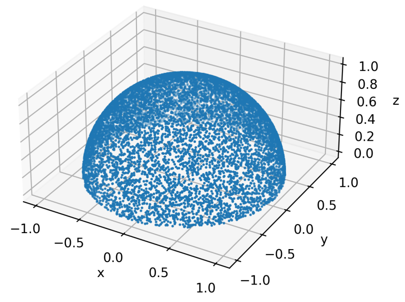
```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np

plt.rcParams['savefig.dpi'] = 300
plt.rcParams['figure.dpi'] = 300

fig = plt.figure()
ax1 = plt.axes(projection='3d')

theta = np.loadtxt("theta4.dat")
phi = np.loadtxt("phi4.dat")
x = np.sin(theta) * np.cos(phi)  # 换算为直角座标绘图
y = np.sin(theta) * np.sin(phi)
z = np.cos(theta)

ax1.scatter3D(x, y, z, s=1)
plt.gca().set_box_aspect(aspect=(1, 1, 0.5))  # 调整xyz轴比例尺相同
ax1.set_xlabel('x')
ax1.set_ylabel('y')
ax1.set_zlabel('z')
plt.savefig("fig4.png")
```

4 计算结果

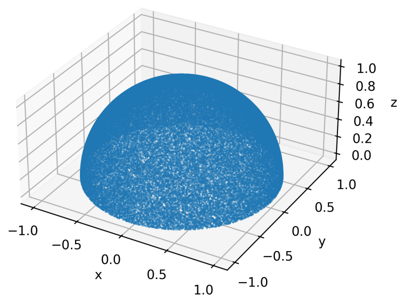
随机数点分别为 $10^3, 10^4, 10^5$ 时，绘制散点图如下：



(a) 10^3 个随机数点



(b) 10^4 个随机数点



(c) 10^5 个随机数点

图 1: 上半球面上均匀分布点散点图

容易看出，随机数点在球面上有较好的均匀性.

5 结论

本题利用直接抽样法，对两组 $[0,1]$ 的随机数序列进行抽样分别得到球面上均匀分布的 θ, φ 序列，并绘图进行展示，可以看出直接抽样法的优点：只要均匀分布的序列 ξ, η 性质优秀，就可以保证抽样得到的结果 $\theta(\xi), \varphi(\eta)$ 性质一样好. 但是当不能解析求反函数时这种方法不能使用，还应寻求其他的抽样方法. 应有定性误差分析.