第五章 数值积分

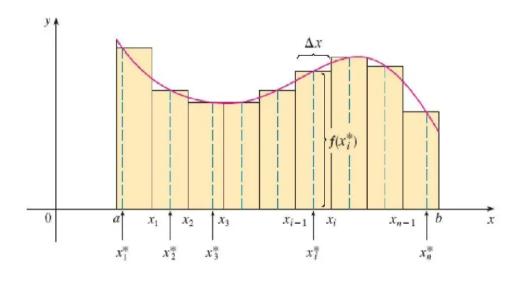
六、例

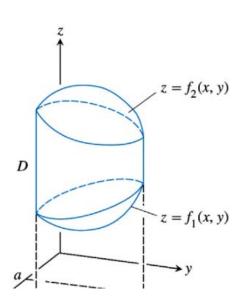
用蒙特卡洛法计算三重积分

$$S = \int_{1}^{2} \int_{1}^{2} \int_{1}^{2} (x_{1}^{2} + x_{2}^{2} + x_{3}^{2}) dx_{1} dx_{2} dx_{3}$$

主程序及计算被积函数值的子程序(文件名:

• 定积分 $\int_a^b f(x) dx - \lim_{n \to \infty} \sum_{i=1}^n f(x_i^n) \Delta x$





计算多重积分的蒙特卡洛法

一、功能

用蒙特卡洛(Monte Carlo)法计算多重积分

$$S = \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \cdots \int_{a_n}^{b_n} f(x_1, x_2, \dots, x_n) \, dx_1 dx_2 \cdots dx_n$$

二、方法说明

取0到1之间均匀分布的随机数点列

$$(t_1^{(i)}, t_2^{(i)}, \dots, t_n^{(i)}), i = 1, 2, \dots, m$$

并令

$$x_j^{(i)} = a_j + (b_j - a_j)t_j^{(i)}, j = 1, 2, \dots, n$$

只要 m 足够大,则有

$$S \approx \frac{1}{m} \left[\sum_{i=1}^{m} f(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_n^{(i)}) \right] \cdot \prod_{j=1}^{n} (b_j - a_j)$$

在本子程序中,取 m=10000。

三、子程序语句

SUBROUTINE FMTML (N,A,B,F,X,S)

四、形参说明

- N 整型变量,输入参数。积分的重数。
- A——双精度实型一维数组,长度为 N,输入参数。积分的下限值 a_1, a_2, \dots, a_n 。
- B——双精度实型一维数组,长度为 N,输入参数。积分的上限值 b_1,b_2,\dots,b_n 。
- F——双精度实型函数子程序名,输入参数。用于计算被积函数值 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 。在主程序中必须用外部语句及类型说明语句对相应的实参进行说明。该子程序由用户自编,其语句形式为

DOUBLE PRECISION FUNCTION F (N,X)

其中:N 为整型变量,被积函数中自变量个数,也是积分的重数;X 为双精度实型一维数组,长度为 N,存放自变量值 x_1,x_2,\cdots,x_n ;函数名 F 返回双精度实型函数值 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 。

- X——双精度实型一维数组,长度为 N。本子程序的工作数组,用于存放 N 个自变量值 x_1, x_2, \cdots, x_n 。
 - S——双精度实型变量,输出参数。返回积分值。

PROGRAM EXAMPLES06

```
EXTERNAL F
   DIMENSION X(3),A(3),B(3)
   DOUBLE PRECISION X,F,S,A,B
   DATA A,B/3*1.0D0,3*2.0D0/
   N=3
   CALL FMTML(A,B,N,F,X,S)
   WRITE(*,*)
   WRITE(*,10) S
10 FORMAT(1X,'S=',D13.6)
   WRITE(*,*)
   END
   FUNCTION F(N,X)
   DIMENSION X(N)
   DOUBLE PRECISION X,F
   F=0.0D0
   DO 10 I=1,N
10 F=F+X(I)*X(I)
   END
```

运行结果为

S = .697043D + 01

七、附注

本子程序需要调用产生 0 到 1 之间均匀分布的一个随机数子程序 NRND1,

SUBROUTINE FMTML(A,B,N,F,X,S)

DOUBLE PRECISION A(N),B(N),F,S,R,X(N),K

REAL M,NRND1

R=1.0D0

M=10000.0

K=10000.0D0

S=0.0D0

10 IF (M+1.0.NE.1.0) THEN

M=M-1.0

DO 20 I=1,N

X(I)=A(I)+(B(I)-A(I))*NRND1(R)

20 CONTINUE

S=S+F(N,X)/K

GOTO 10

END IF

DO 30 I=1,N

30 S=S*(B(I)-A(I))

END

REAL FUNCTION NRND1(R)

DOUBLE PRECISION S,U,V,R

S=65536.0

U=2053.0

V=13849.0

M=R/S

R=R-M*S

R=U*R+V

M=R/S

R=R-M*S

NRND1=R/S

RETURN

END

第七章 二阶微分方程边值问题的数值解法

设二阶微分方程边值问题为

$$\begin{cases} -y'' + \frac{2}{x^2}y = \frac{1}{x} \\ y(2) = 0, \ y(3) = 0 \end{cases}$$

求解区间为[2,3],等分数为 n=11(即步长 h=0.1)。其中 u(x)=-1,v(x)=0,w(x)

$$=\frac{2}{x^2}, f(x) = \frac{1}{x}$$

一、功能

用有限差分法求二阶线性微分方程边值问题的数值解。

二、方法说明

设二阶线性微分方程的边值问题为

$$\begin{cases} u(x)y'' + v(x)y' + w(x)y = f(x) \\ y(a) = \alpha \\ y(b) = \beta \end{cases}$$

现要求未知函数 y(x) 在区间[a,b]上的n个等距离散点上的近似解。其中n个等距离散点为

$$x_i = a + (i - 1)h, i = 1, 2, \dots, n$$

 $h = (b - a)/(n - 1)$

显然, $y(x_1) = y(a) = \alpha, y(x_n) = y(b) = \beta$ 。

用中心差分近似代替 y"(x) 与 y'(x),即

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$$

$$y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$$

$$y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$$
其中 $y_i = y(x_i)$ 。将它们代入原微分方程得
$$\frac{u(x_i)}{h^2}(y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}) + \frac{v(x_i)}{2h}(y_{i+1} - y_{i-1}) + w(x_i)y_i = f(x_i)$$

$$i = 2, 3, \dots, n-1$$

经整理后可得到如下关于 $y_i(i = 1, 2, \dots, n)$ 的方程组:

$$\begin{cases} y_1 = \alpha \\ A_i y_{i-1} + B_i y_i + C_i y_{i+1} = D_i, i = 2, 3, \dots, n-1 \\ y_n = \beta \end{cases}$$

其中

$$\begin{cases} A_i = u(x_i) - \frac{h}{2}v(x_i) \\ B_i = h^2w(x_i) - 2u(x_i) \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_i = u(x_i) + \frac{h}{2}v(x_i) \\ D_i = h^2f(x_i) \end{cases}$$

用矩阵表示为

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 \\ A_2 & B_2 & C_2 \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & A_{n-1} & B_{n-1} & C_{n-1} \\ & & A_n & B_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ \vdots \\ D_{n-1} \\ D_n \end{bmatrix}$$

其中 $B_1 = 1$, $C_1 = 0$, $D_1 = \alpha$; $A_n = 0$, $B_n = 1$, $D_n = \beta$.

此为三对角线方程组,可用追赶法求解。

在实际计算时,为了提高精度,采用如下方法:

用步长
$$h = (b-a)/(n-1)$$
 计算得到 $n-2$ 个等距离散点上的一组近似解 $y_i^{(h)} = y_i(a+(i-1)h), i=2,3,\cdots,n-1$

再用步长 $\frac{h}{2} = (b-a)/(2(n-1))$ 计算得到 n-2 个等距 离散点上的另一组近似

解

$$y_i^{(h/2)} = y_i(a + (i-1)h), i = 2,3,\dots,n-1$$

最后令

$$y_i = \frac{4y_i^{(h/2)} - y_i^{(h)}}{3}, i = 2, 3, \dots, n-1$$

程序代码:

RD

SUBROUTINE GDFTE(A,B,Y0,YN,N,Y,FS,N2,N6,G,D)

A,B——均为双精度实型变量,输入参数。求解区间的左端点与右端点值。

YO,YN—均为双精度实型变量,输入参数。未知函数在求解区间左、右端点处的in 数值 y(A)与 y(B)。

N---整型变量,输入参数。求解区间[A,B]上的等分点数,即各等分点为

$$h = (B - A)/(N - 1)$$

$$x_i = A + (i-1)h, i = 1, 2, \dots, N$$

一双精度实型一维数组,长度为N,输出参数。存放N个等分点上的未知函数值,

$$y_i = y(x_i), i = 1, 2, \dots, N$$

FS——子程序名,输入参数。用于计算微分方程

$$u(x)y'' + v(x)y' + w(x)y = f(x)$$

中的函数 u(x),v(x),w(x),f(x) 的值。在主程序中必须用外部语句对相应的实参进行 说明。该子程序由用户自编,其语句形式为

SUBROUTINE FS(X,U,V,W,F)

其中:X,U,V,W,F均为双精度实型变量,X为自变量值,U,V,W,F分别返回 u(x), v(x), w(x), f(x)的值。

N2-整型变量,输入参数。要求 N2=2*N。

N6 — 整型变量,输入参数。要求 N6=6*N。

G - 双精度实型一维数组,长度为 N6。本子程序的工作数组。

D——双精度实型一维数组,长度为 N2。本子程序的工作数组。

PROGRAM GDFTE0

EXTERNAL FS DIMENSION Y(11),G(66),D(22) DOUBLE PRECISION Y,A,B,Y0,YN,G,D A=2.0B = 3.0N=11N2 = 22N6=66 Y0 = 0.0YN = 0.0CALL GDFTE(A,B,Y0,YN,N,Y,FS,N2,N6,G,D) WRITE(*,*) WRITE(*,10) (I,Y(I),I=1,N)

10 FORMAT(1X,'Y(',I2,')=',D15.6)

WRITE(*,*)

END PROGRAM

SUBROUTINE FS(X,U,V,W,F)

DOUBLE PRECISION X,U,V,W,F

U = -1.0

V=0.0

W=2.0/(X*X)

F=1.0/X

RETURN

END SUBROUTINE

运行结果为:

$$y(0) = 0.00000e + 00$$

$$y(1) = 1.86090e - 02$$

$$y(2) = 3.25359e - 02$$

$$y(3) = 4.20480e - 02$$

 $y(4) = 4.73684e - 02$
 $y(5) = 4.86842e - 02$
 $y(6) = 4.61538e - 02$
 $y(7) = 3.99123e - 02$
 $y(8) = 3.00752e - 02$
 $y(9) = 1.67423e - 02$
 $y(10) = 0.00000e + 00$
本问题的解析解为

$$y(x) = \left(19x - 5x^2 - \frac{36}{x}\right)/38$$

SUBROUTINE GDFTE(A,B,Y0,YN,N,Y,FS,N2,N6,G,D)

DIMENSION Y(N),G(N6),D(N2)

DOUBLE PRECISION Y,G,D,A,B,Y0,YN,H,X,U,V,W,F

H=(B-A)/(N-1.0)

NN=2*N-1

G(1)=1.0

G(2)=0.0

Y(1)=Y0

Y(N)=YN

G(3*N-2)=1.0

G(3*N-3)=0.0

DO 10 I=2,N-1

X=A+(I-1)*H

 $CALL \ FS(X,U,V,W,F)$

K=3*(I-1)-1

$$G(K+1)=U-H*V/2.0$$

$$G(K+2)=H*H*W-2.0*U$$

$$G(K+3)=U+H*V/2.0$$

$$Y(I)=H*H*F$$

10 CONTINUE

M1=3*N-2

CALL ATRDE(G,N,M1,Y,L)

H=H/2.0

G(1)=1.0

G(2)=0.0

D(1)=Y0

D(NN)=YN

G(3*NN-2)=1.0

G(3*NN-3)=0.0

DO 20 I=2,NN-1

$$X=A+(I-1)*H$$

CALL FS(X,U,V,W,F)

$$K=3*(I-1)-1$$

$$G(K+1)=U-H*V/2.0$$

$$G(K+2)=H*H*W-2.0*U$$

$$G(K+3)=U+H*V/2.0$$

$$D(I)=H*H*F$$

20 CONTINUE

$$M1=3*NN-2$$

CALL ATRDE(G,NN,M1,D,L)

DO 30 I=2,N-1

$$K=2*I-1$$

$$Y(I)=(4.0*D(K)-Y(I))/3.0$$

30 CONTINUE

RETURN

END

三对角线方程组的追赶法求解AX=D

追赶法本质上是没有选主元的高斯消去法,只是在计算过程中考虑到了三对角矩阵的特点,对于绝大部分的零元素不再作处理。

三、子程序语句

SUBROUTINE ATRDE(B,N,M,D,L)

四、形参说明

B——双精度实型一维数组,长度为 M=3*N-2,输入参数。以行为主存放三对角矩阵 A 中三条对角线上的元素,即在 B 中依次存放元素:

 $a_{11}, a_{12}, a_{21}, a_{22}, a_{23}, a_{32}, a_{33}, a_{34}, \cdots, a_{n,n-1}, a_{nn}$

返回时该数组将被破坏。

N-整型变量,输入参数。方程组阶数。

M 整型变量,输入参数。M=3*N-2为三对角矩阵三条对角线上的元素个数。

D——双精度实型一维数组,长度为 N,输入兼输出参数。调用时存放方程组右端的常数向量;返回方程组的解向量。

L 一整型变量,输出参数。若返回 L < 0,说明 M 的值不正确(应为 M = 3 * N - 2),若 L = 0,说明程序工作失败;若 L > 0,表示正常返回。

```
SUBROUTINE ATRDE(B,N,M,D,L)
  DIMENSION B(M),D(N)
  DOUBLE PRECISION B,D
  L=1
  IF (M.NE.(3*N-2)) THEN
    L=-1
    WRITE(*,10)
    RETURN
  END IF
10 FORMAT(1X,' ERR ')
  DO 20 K=1,N-1
    J=3*K-2
    IF (ABS(B(J))+1.0.EQ.1.0) THEN
      L=0
      WRITE(*,10)
```

RETURN

END IF

$$B(J+1)=B(J+1)/B(J)$$

$$D(K)=D(K)/B(J)$$

$$B(J+3)=B(J+3)-B(J+2)*B(J+1)$$

$$D(K+1)=D(K+1)-B(J+2)*D(K)$$

20 CONTINUE

L=0

WRITE(*,10)

RETURN

END IF

$$D(N)=D(N)/B(3*N-2)$$

$$D(K)=D(K)-B(3*K-1)*D(K+1)$$

30 CONTINUE

RETURN

END