蒙特卡罗方法及其在水力学中的应用

吉庆丰　编著

东南大学出版社

本书由国家自然科学基金项目(50279044)、
扬州大学水利水电工程省级重点学科资助出版

蒙特卡罗方法及其在水力学中的应用

吉庆丰　编著

东南大学出版社

内 容 提 要

本书在介绍蒙特卡罗方法基础知识和基本方法的基础上，重点介绍蒙特卡罗方法在复杂边界渗流计算、堰闸流动计算、供水管网分析、河网非恒定流计算、泥沙运动模拟和水环境预报中的应用。

本书可供从事教学、科学研究、工程设计的水利水电工作者参考，也可作为有关专业研究生的学习参考书。

图书在版编目(CIP)数据

蒙特卡罗方法及其在水力学中的应用/吉庆丰编著.—南京:东南大学出版社，2004.12

ISBN 7-81089-861-2

Ⅰ.蒙... Ⅱ.吉... Ⅲ.蒙特卡罗法-应用-水力计算 Ⅳ.TV131.3

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 140494 号

东南大学出版社出版发行

(南京四牌楼 2 号 邮编 210096)

出版人:宋增民

江苏省新华书店经销 南京京新印刷厂印刷

开本: 850mm×1168mm 印张: 7.125 字数: 180 千字

2004 年 12 月第 1 版 2004 年 12 月第 1 次印刷

定价: 18.00 元

前　　言

蒙特卡罗方法是 20 世纪 40 年代美国科学家 Von Neumann 首先应用于原子弹的研制并以摩纳哥国的世界闻名赌城 Monte Carlo 命名的一种数值计算方法。它的基本思想是：为了求解数学、物理、工程技术以及生产管理等方面的问题，首先建立一个概率模型或随机过程，使它的参数等于问题的解，然后通过对模型或过程的观察或抽样试验来计算所求参数的统计特征，最后给出所求解的近似值。它既能求解确定性的数学问题，也能求解随机性的问题。随着电子计算机的发展，该方法得到了迅速发展和应用，目前已经应用到物理学、医学、材料科学、农业、交通、管理科学和社会科学等许多领域。本书重点阐述蒙特卡罗方法在水力学各种研究问题中的应用。

本书内容由 11 章构成。前 5 章讲述蒙特卡罗方法的基础知识和求解各种随机性、确定性问题的基本方法，包括蒙特卡罗方法基础知识及蒙特卡罗方法求解随机性问题、确定性问题、椭圆型偏微分方程和抛物型偏微分方程。后 6 章分别讲述蒙特卡罗方法在复杂边界渗流计算、堰闸流动计算、供水管网分析、河网非恒定流计算、泥沙运动模拟和水环境预报中的应用。每一章都有计算实例，努力将理论与实际应用相结合，使内容具有实用性，也便于读者加深对本书内容的理解。本书主要内容是作者近十多年来的研究工作总结，但为兼顾全书的系统性和铺垫必要的基础知识，反映蒙特卡罗方法在水力学热点领域的最新研究成果，如海洋溢油扩展预测等水环境问题研究，也加进了一些必要的补充内容。

本书可供从事教学、科学研究、工程设计的水利水电工作者参考，也可作为有关专业研究生的学习参考书，如能对他们的学习和工作有所帮助，我将不胜欣慰。

由于作者本人水平所限，本书在选择内容的合理性、叙述的科学性方面可能还有值得斟酌的地方，不足之处，欢迎读者批评指正。

在本书撰写、出版及相关内容的研究过程中，武汉大学郑邦民教授和扬州大学刘超教授、程吉林教授曾给予作者许多指教与热心帮助，在此谨表示衷心的感谢。

吉庆丰

2004 年 11 月于扬州大学

目　　录

1 蒙特卡罗方法基础

蒙特卡罗方法思想的提出可以追溯到18世纪末期，但实际上直到20世纪40年代以后，随着电子计算机的发展，该方法才得到迅速的发展和应用。在第二次世界大战中，蒙特卡罗方法首先被美国科学家应用于原子弹的研制中。目前这一方法已经应用到物理学、医学、材料科学、农业、交通和管理、社会科学等许多领域。这些都充分表现出这种方法完全区别于其他的方法，具有独特功能和优越性。

本章主要介绍蒙特卡罗方法的基本思想、伪随机数的产生方法、任意分布的伪随机变量的抽样以及蒙特卡罗计算中减少方差的技巧等内容[1~3]。

1.1 蒙特卡罗方法的基础知识

1.1.1 基本思想

所谓蒙特卡罗方法，就是根据待求随机问题的变化规律，根据物理现象本身的统计规律，或者人为地构造一个合适的概率模型，依照该模型进行大量的统计试验，使它的某些统计参量正好是待求问题的解。下面我们举两个最简单的例子来说明上面解释的内涵。

蒙特卡罗方法就其数学特性而言，蒙特卡罗方法的发展可以追溯到 18 世纪著名的蒲丰问题。1777 年，法国科学家蒲丰(Buffon) 提出用投针试验计算圆周率 π 值的问题。这里我们用蒲丰问题来初步说明蒙特卡罗方法的基本原理和解决问题的基本过程[6]。

蒲丰问题是这样一个古典概率问题：在平面上有彼此相距为 $2a$ 的平行线，向此平面任意投一长度为 $2l$ 的针，假定 $l < a$，显然，所投的针至多可与一条直线相交，那么，此针与任意条平行线相交的概率可以求出。由下面的分析可知，此概率与所取针长 $2l$、平行线间距 $2a$ 有关，并且包含有 π 值。在这里，任投一针的概率含义有以下三点：(1) 针的中点 M_l 在平行线之间等概率落入，即 M_l 距平行线的距离 x 均匀分布在区间 $[0, a]$ 之内；(2) 针与线的夹角 θ 均匀分布在区间 $\left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$ 之内；(3) x 与 θ 互相独立。

如图 1.1 所示，建立与平行线垂直且原点在某一条平行线上的 x 轴，不失一般性，假定针的中心处于图示中的 x 轴上。由于对称性，我们只需分析针中心处在 $x \in (0, a)$ 范围的情况即可。令探针中心的坐标值为 x，显然，只有 $x \leqslant l$ 时才可能发生相交的事

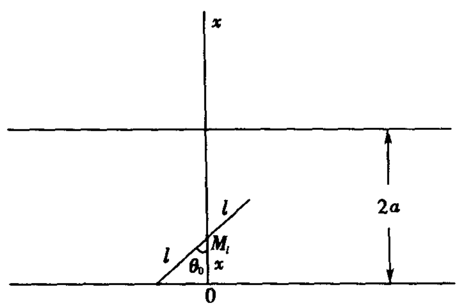

图 1.1 蒲丰问题的概率分析

件。我们来分析在条件 $x \leqslant l$ 满足时，针与线相交的概率：只有当 $\theta \leqslant \theta_0 = \arccos \frac{x}{l}$ 时才能相交，且相交的概率为

$$P_1 = \frac{2}{\pi} \arccos \frac{x}{l}。 \tag{1.1}$$

下面再来分析针中心位置在轴上的分布。显然，这是一个均匀分布，即针中心处于区间内的概率为

$$\mathrm{d}P_2 = \frac{\mathrm{d}x}{a}, \tag{1.2}$$

这样，一次投掷，针中心落入$(x, x + \mathrm{d}x)$且与线相交的概率为

$$\mathrm{d}P = P_1 \mathrm{d}P_2 = \frac{2}{\pi a} \arccos \frac{x}{l} \mathrm{d}x, \tag{1.3}$$

则一次投掷，针与线相交的总概率为

$$P = \int \mathrm{d}P = \int_0^l \frac{2}{\pi a} \arccos \frac{x}{l} \mathrm{d}x = \frac{2l}{\pi a}, \tag{1.4}$$

即

$$\pi = \frac{2l}{Pa}。 \tag{1.5}$$

从 (1.5) 式可见，可利用投针试验计算 π 值：设投针 N 次，其中 n 次针与线相交，则可用频率值 n/N 作为概率 P 的估计值，从而求得 π 的估计值为

$$\pi \approx \frac{2l}{a} \frac{N}{n}。 \tag{1.6}$$

这就是早期的用频率值作为概率近似值的方法的应用实例，表 1.1 是在历史上一些有名的用投针试验计算 π 值的结果，其中针长以 a 为单位。

表 1.1　投针试验计算 π 值的结果

试验者	时间(年份)	针长	投针次数	相交次数	π 的估计值
Wolf	1850	0.8	5000	2532	3.1596
Smith	1855	0.6	3204	1218.5	3.1554
Morgan	1860	1.0	600	382.5	3.137
Fox	1884	0.75	1030	489	3.1595
Lezzerini	1901	0.83	3408	1808	3.1415929
Reina	1925	0.5419	2520	859	3.1795

需要指出的是，上述由投针试验求得 π 近似值的方法，是进行真正的试验，并统计试验结果，要使获得的频率值与概率值偏差小，就要进行大量的试验，这在实际中，往往难以做到。可以设想，对蒲丰问题这样一个简单的概率问题，若要进行 10 万次投针试验，以每次投针、作出是否相交判断并累加相交次数用时 5 s 计算，则需用时 50 万 s，即大约 139 h。那么，可以设想，对于像核裂变、直流气体放电中粒子的输运过程及粒子输运的总效应，若要用多次掷骰子的方法近似求出就不可能了。所以，在现代计算机技术出现之前，用频率近似概率的方法 —— 抑或称为雏形时代的蒙特卡罗方法 —— 并没有得到实质上的应用。若用数值模拟方法代替上述的真正的投针试验，是利用均匀分布于[0, 1]之间的随机数序列，构造出随机投针的数学模型，然后进行大量的随机统计并求得 π 的近似值。

如图 1.2 建立坐标系，平面上一根针的位置可以用针中心 M_l 的坐标 x 和针与平行线的夹角 θ 来决定，在 y 方向上的位置不影响相交性质。任意投针，意味着 x 与 θ 都是任意取的。但 θ 的范围可限于$[0, \pi]$，x 的范围可限于$[0, a]$。在这种情况下，针与平行线相交的数学条件是

$$x \leqslant l\sin\theta,\ 0 \leqslant x \leqslant a。 \tag{1.7}$$

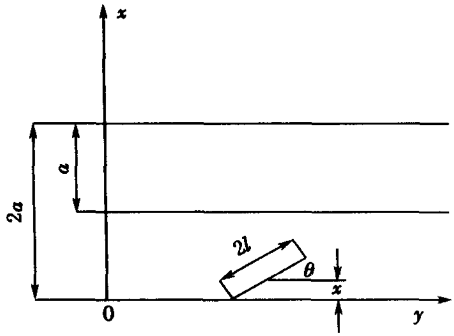

图 1.2　用数值模拟方法计算蒲丰问题

其次，怎样模拟投针呢？亦即如何产生任意的$[x,\ \theta]$。x 在$[0,\ a]$任意取值，意味着 x 在$[0,\ a]$上取哪一点的概率都一样，即 x 的概率密度函数为

$$f_1(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{a}, & \text{当 } 0\leqslant x\leqslant a \text{ 时；}\\ 0, & \text{当 } x \text{ 为其他值时。}\end{cases} \tag{1.8}$$

类似的，θ 的概率密度函数为

$$f_2(\theta)=\begin{cases}\dfrac{1}{\pi}, & \text{当 } 0\leqslant \theta\leqslant \pi \text{ 时；}\\ 0, & \text{当 } \theta \text{ 为其他值时。}\end{cases} \tag{1.9}$$

由此，产生任意$(x,\ \theta)$的过程就变为由 $f_1(x)$ 抽样 x，由 $f_2(x)$ 抽样 θ 的过程。容易得到

$$\begin{cases}x=a\xi_1,\\ \theta=\pi\xi_2,\end{cases} \tag{1.10}$$

式中，ξ_1，ξ_2 均为$[0,\ 1]$上均匀分布的随机数。只要随机数的均匀性和独立性良好，如此构造的数值模型就很好地模拟了实际试验

中的一次投针，并用下式判断是否相交且记录统计结果：

$$S(x_i, \theta_i) = \begin{cases} 1, & \text{当 } x_i \leqslant l\sin\theta_i \text{ 时；} \\ 0, & \text{当为其他值时。} \end{cases}$$

如果投针 N 次，那么

$$S_N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S(x_i, \theta_i) \tag{1.11}$$

是相交概率 P 的估计值。这样就实现了用数值方法模拟真正的投针试验。用此方法计算的 π 近似值的情况如表 1.2 所示。

表 1.2　用蒙特卡罗方法计算的 π 近似值

投针次数	10 000	20 000	100 000	200 000
π 的近似值	3.162 233	3.137 993	3.141 179	3.141 354

表 1.2 中的计算结果表明，随着模拟投针次数的增大，所计算的 π 近似值越来越接近于其真值。而要进行这样的数值模拟，就需要很大的计算量，只有利用计算机才能实现。

从蒲丰问题可以看出，用蒙特卡罗方法求解问题时，应建立一个概率模型，使待解问题与此概率模型相联系，然后通过随机试验求得某些统计特征值作为待解问题的近似解。随着现代计算机技术的出现和飞速发展，用计算机模拟概率过程，实现多次模拟试验并统计计算结果，进而可获得所求问题的近似结果。计算机的大存储量、高运算速度使得在短时间内获得精度极高且内容丰富的模拟结果。在历史上，也正是原子弹工程研究初期阶段的工作，为模拟裂变物质的中子随机扩散，提出了运用大存储量、高运算速度计算机的要求，这也成为当时推动计算机技术发展的重要动力。也就是在第二次世界大战期间，冯·诺依曼和乌拉姆两人把他们所从事的与研制原子弹有关的秘密工作——对裂变物质的中子

随机扩散进行直接模拟——以摩纳哥国的世界闻名赌城蒙特卡罗（Monte Carlo）作为秘密代号来称呼。用赌城名比喻随机模拟，风趣又贴切，很快得到广泛接受。此后，人们便把这种计算机随机模拟方法称为蒙特卡罗方法。

需要指出的是，蒙特卡罗方法不仅在处理具有概率性质的问题方面获得广泛的应用，对于具有确定性问题的计算也因其程序简单等优点获得了广泛的应用。这里以定积分的计算简要说明其处理确定性问题的过程。

对于定积分

$$s=\int_0^1 f(x)\mathrm{d}x,$$

通过变量替换，可以转换为下面的形式：

$$s=k\int_0^1 g(x)\mathrm{d}x。$$

其中 $g(x)\in[0,1]$。当 $x\in[0,1]$ 时，即转换为求积分 $\int_0^1 g(x)\mathrm{d}x$ 亦即求边长为 1 的正方形中一个曲边梯形的面积问题，如图 1.3 所示。

我们可以设想这样一种随机投点求定积分 $\int_0^1 g(x)\mathrm{d}x$ 的方法：在一个边长为 1 的正方形上并以其两边分别为坐标轴画出曲线 $g(x)$，实际上就是图 1.3，然后随机地向正方形投掷小球，那么，小球击中 $g(x)$ 曲线下部分的概率就等于所要求的积分 $\int_0^1 g(x)\mathrm{d}x$，这样就将确定性的定积分问题转化为一个概率问题，同样可以通过数值模拟方法——蒙特卡罗方法求得其近似解。用此方法，我们计算了积分 $\int_0^1 x^2\mathrm{d}x$，当投球数为 1 万次时，得到的积分近似值为 0.332 800，与其真值 $\frac{1}{3}$ 极为接近。

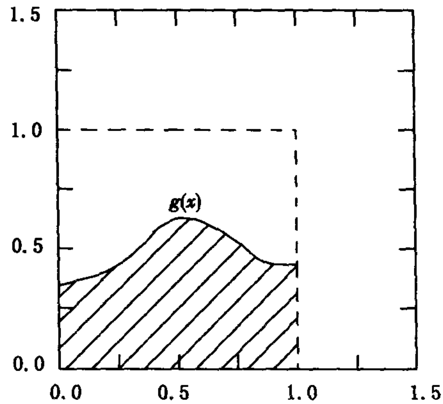

图 1.3　用蒙特卡罗方法求定积分

在用蒙特卡罗方法解算问题时，一般需要这样几个过程：构造或描述概率过程，对于本身就具有随机性质的问题，如粒子输运问题，主要是正确地描述和模拟这个概率过程。对于本来不是随机性质的确定性问题，比如计算定积分、解线性方程组、偏微分方程边值问题等，要用蒙特卡罗方法求解，就必须事先构造一个人为的概率过程，它的某些参量正好是所要求问题的解，即要将不具有随机性质的问题，转化为随机性质的问题，这构成了蒙特卡罗方法研究与应用上的重要问题之一。然后建立各种估计量，使其期望值是所要求解问题的解。最后根据所构造的概率模型编制计算程序并进行计算，获得计算结果。

与其他的数值计算方法相比，蒙特卡罗方法有这样几个优点：(1) 收敛速度与问题维数无关，换句话说，要达到同一精度，用蒙特卡罗方法选取的点数与维数无关；计算时间仅与维数成比例。但一般数值方法，比如在计算多重积分时，达到同样的误差，点数与维数的幂次成比例，即计算量要随维数的幂次方而增加。这一特性，决定了对多维问题的适用性。(2) 受问题的条件限制影响

小。(3) 程序结构简单,在电子计算机上实现蒙特卡罗计算时,程序结构清晰简单,便于编制和调试。(4) 对于模拟像粒子输运等物理问题具有其他数值计算方法不能替代的作用。蒙特卡罗方法的弱点是收敛速度慢,误差具有概率性质。这一情况在解粒子输运问题中仍然存在。除此之外,经验证明,只有当系统的大小与粒子的平均自由程可以相比较时,一般在 10 个平均自由程左右,此方法算出的结果较为满意。而对于大系统深穿透问题,算出的结果往往偏低。对于大系统,其他数值方法往往很适应,能算出较好的结果。因此,已有人将数值方法与蒙特卡罗方法联合起来使用,克服了这种局限性,取得了一定的效果。

1.1.2 随机变量和随机变量的分布

随机变量是一个可以取不止一个值的变量(通常在连续区间取值),并且人们可能无法事先预知它取的某一特定值。虽然这种变量的值无法预知,但其分布是可能了解的。假定我们研究连续的随机变量,由随机变量的分布可以得到它取某给定值的概率,即

$$g(u)\mathrm{d}u = P(u < u' < u + \mathrm{d}u), \tag{1.12}$$

$g(u)$ 为 u 的概率分布密度函数,它表示随机变量 u' 取 u 到 $u+\mathrm{d}u$ 之间的概率。物理学家常常用概率密度函数来表达 u' 的分布。但是,数学上有时采用分布函数更为方便。分布函数定义为

$$G(u) = \int_{-\infty}^{u} g(x)\mathrm{d}x, \tag{1.13}$$

则

$$g(u) = \mathrm{d}G(u)/\mathrm{d}u。 \tag{1.14}$$

注意:$G(u)$ 是一个在[0, 1]区间取值的单调递增函数。通常 $g(u)$ 是归一化的分布密度函数,因而该函数对所有的 u 值范围的