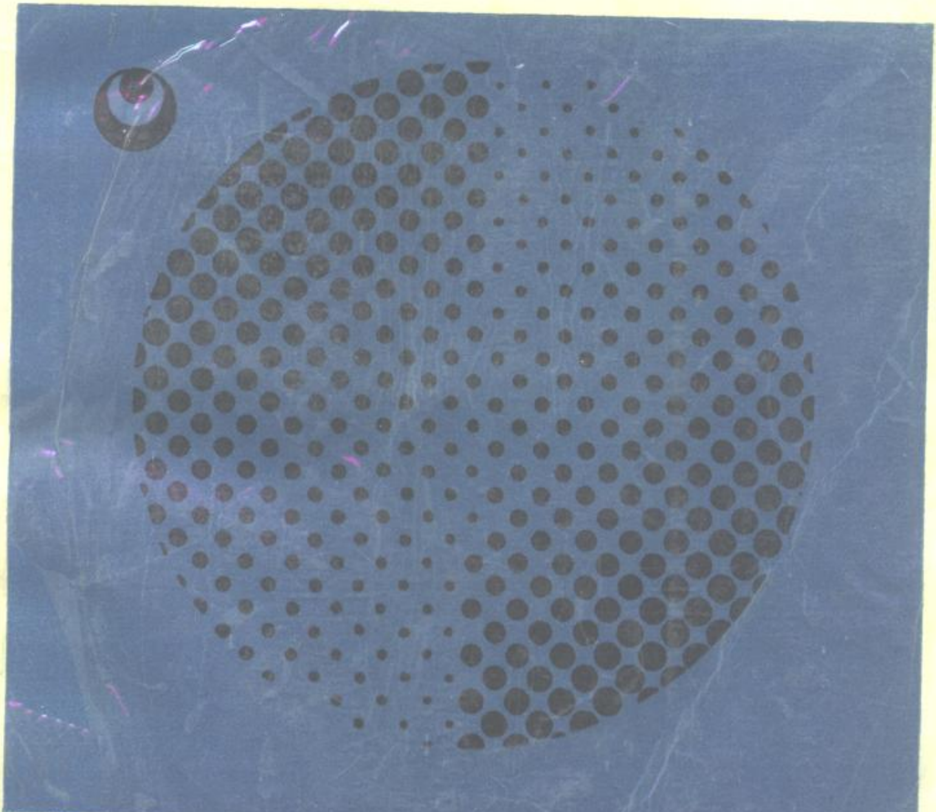
计算物理丛书

计算机随机模拟

裴鹿成等著



湖南科学技术出版社

计 算 机 随 机 模 拟

裴鹿成　等著

责任编辑：陈一心

*

湖南科学技术出版社出版发行

(长沙市展览馆路8号)

湖南省新华书店经销　湖南省新华印刷二厂印刷

*

1989年12月第1版第1次印刷

开本：850×1168毫米　1/32　印张：20.625　字数：540,000

印数：1—1,100

ISBN 7--5357--0551—0

TP·21　　**定价：9.85元**

地科89—27

《计算物理丛书》编辑委员会

总 序 言

计算物理学在中国的发展已有30年的历史。这门学科首先为国防科研作出了重大贡献，现已广泛应用于国民经济建设和基础科学研究。我国的一大批计算物理科学家积累了丰富的实际经验，急需及时地总结、提高、推广和交流。

继1982年成立中国核学会计算物理学会和1984年出版计算物理学报以来，现在开始出版的计算物理学丛书是计算物理学界的又一重大里程碑。

这套丛书的对象是高年级大学生、研究生和广大的科技工作者。内容首先反映中国人自己的成就，并吸收国外的有用经验。有理论，有方法，有算例。既保证高水平的科学体系，又注重解决实际问题，以普及的形式表达专著的内容。

这套丛书的出版得到湖南科技出版社的大力支持。对湖南科技出版社这种着眼于中华民族科技自立的崇高行为，计算物理学工作者都高度赞赏，并表示衷心的感谢。

对于参加这套丛书撰写的科学家、丛书编委会的编委、德高望重的名誉编委和编辑部的工作者所付出的辛勤劳动，我代表中国核学会计算物理学会表示衷心的感谢。

祝计算物理学在为祖国的现代化作出贡献中茁壮成长！

秦元勋

1988年8月8日

前　言

计算机随机模拟是在电子计算机上对随机现象进行模拟并进而得到问题解答的方法的简称，其中所说的随机现象可以是原问题本身所固有的，也可以是人为建立起来的与原问题答案有一定关系的某随机现象。计算机随机模拟方法亦称蒙特卡罗方法（Monte Carlo method），后一名称已被国内外广大学者所普遍采用。

本书共32章，包括两大部分内容。第一部分是蒙特卡罗方法基础，共17章，内容是相当完整的。第二部分是蒙特卡罗方法在计算物理中的应用，共15章，包括了在计算物理中最重要的和比较有代表性的应用。

蒙特卡罗方法与被模拟问题的关系十分密切，在计算物理中的应用又涉及到物理学的多个领域，因此，要想使本书能包括尽量多的应用内容，没有多方面的大力支持是不可能的。张孝泽（第16章、§28.1、§28.2和§28.3）、钟友琴（第17章）、董秀芳（§20.1和§32.3）、凌玉德（第25章）、李中强（第26章）、童国梁（第27章）、萨本豪（§28.4）、何延才（第29章）、徐廷伟（第30章和第31章）和刘恭樑（§32.6和§32.7）为本书撰写了共9章零4节的内容。赵纾、徐闻、丛树铮和徐映波也分别为本书撰写了部分内容，只因全书篇幅需要压缩，最后未被列入到本书之中。蒋伯诚一直关心本书的撰写工作。张树发全面地审阅了全书，并提出了许多宝贵的意见。谨借此机会向上述同行和

朋友表示最诚挚的感谢．坦白地讲，没有他们的大力支持和鼓励，要想写成这本书是不可能的．

要想读懂本书第1章至第8章的内容，只要求读者具备一定的高等数学和概率统计的基础知识．要想读懂第9章及其以后任意一章的内容，完全可以进行跳跃式的选读，而只要求读者读懂本书第1章至第8章中的有关内容，知道与其应用领域有关的相适应的物理知识．

作为蒙特卡罗方法及其在计算物理中应用的专著，本书几乎包括了蒙特卡罗方法基础知识的全部内容．就蒙特卡罗方法在计算物理中的应用而言，也是目前所见到的国内外专著中最全的一本．本书的另一个特点是，它包括了不少最新的和作者们多年来自已研究的成果．本书不仅适于作为大学高年级学生、研究生、教师和计算物理工作者掌握蒙特卡罗方法基础知识和应用蒙特卡罗方法开展实际计算工作的参考书，而且还可以在本书的基础上直接开展蒙特卡罗方法基础的研究和新应用领域的开拓工作．

由于我本人水平有限，多年来又主要是从事蒙特卡罗方法基础研究和在原子能事业中应用等方面的工作，对其他同行所提供的材料，又没有进行消化后再按全书统一的思想成文，而只是通观全书，按统一的格局进行了必要的规范，因此，书中一定存在许多不妥之处，由衷地欢迎同行和广大读者批评指正．

裴鹿成

于中国原子能科学研究院

1986年国庆

目　录

第一篇　蒙特卡罗方法基础

第二篇　蒙特卡罗方法应用

第一篇 蒙特卡罗方法基础

第1章 绪 论

§1.1 蒙特卡罗方法[1—6]

1. 蒙特卡罗方法的名称

蒙特卡罗方法为计算数学中的一种计算方法，它的基本特点是，以概率与统计中的理论与方法为基础，以是否适于在计算机上使用为重要标志。因此，它虽属计算方法但又与一般计算方法有很大区别。蒙特卡罗是摩纳哥的一个著名城市，以赌博闻名于世。蒙特卡罗方法借用这一城市的名称，属于象征性的，是为了表明该方法的上述基本特点的。蒙特卡罗方法也称统计试验方法或计算机随机模拟方法，这些名称同样是为表明该方法的上述基本特点的。

2. 蒙特卡罗方法的产生历史

蒙特卡罗方法作为一种可行的计算方法，是由 Ulam 和 Von Neumann在20世纪40年代中叶为解决研制核武器中的计算问题而首先提出并加以运用的。在此之前，作为该方法的基本思想，实

际上早已被统计学家所发现和利用了。

例如，早在17世纪的时候，人们就知道了依频数来决定概率的方法。又如，在19世纪末，曾有很多人进行随机投针试验，根据针与地面上平行线束（距离均为二倍针长）相交的概率P等于π的倒数，用频数n/N替代概率P，并进而得到$\pi \cong \hat{\pi} = N/n$。

为了使π的有效数字达到4位，置信水平为0.95，所需投针次数要在40万以上。因此，在还不具备实现这样大量试验的条件之前，除非为其他目的，如上例求π是为了验证大数定律，不会有人用进行实际试验的办法来计算所要计算的值。

进入20世纪40年代中叶，出现了电子计算机，使得用数学方法在电子计算机上模拟这样大量的试验成为可能。另外，科学技术的不断发展，出现了越来越多的复杂而困难的问题，用通常的解析方法或数值方法都很难得到解决。蒙特卡罗方法就是在这些情况下，作为一种可行的而且是不可缺少的计算方法被提出和迅速发展起来的。

3. 蒙特卡罗方法的两个简单例子

考虑一个射击运动员的射击成绩G。令x表示弹着点到靶心的距离，$g(x)$表示得分，$f(x)$表示该运动员的弹着点分布的密度函数，则

$$G=\int g(x)f(x)dx.$$

另一方面，如果该运动员进行了实弹射击，弹着点依次为$x_1, \cdots, x_N$，则平均得分为

$$\hat{G}_N=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}g(x_n).$$

很明显，$\hat{G}_N$是G的一个近似估计。蒙特卡罗方法计算积分G，正是用$\hat{G}_N$作为G的近似估计。

另一个例子是如下线性代数方程组

$$\sum_{j=1}^{m}a_{ij}x_j=b_i,\quad i=1,\cdots,m \tag{1.1.1}$$