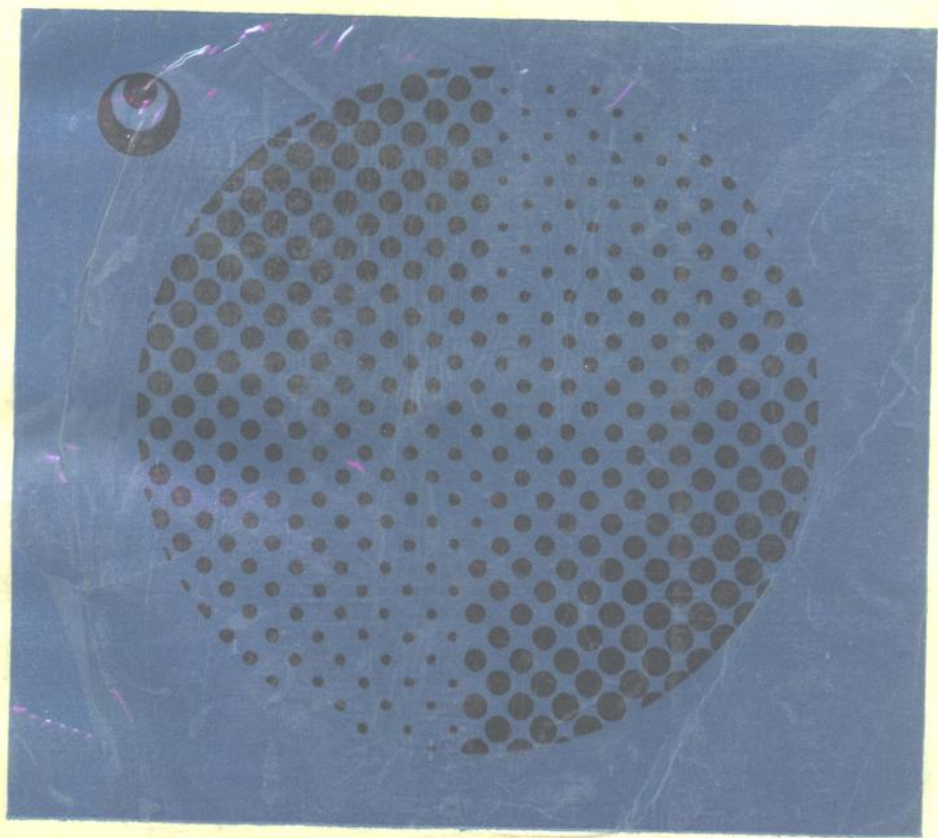


计算物理丛书

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

主 编：秦元勋

副 主 编：况蕙孙 符鸿源

编 委：(按姓氏笔划为序)

王宗皓	王贻仁	付德薰	乔登江	曲钦岳	杜书华
邱希春	况蕙孙	吴声昌	陈一心	孟昭利	胡海清
郝柏林	袁兆鼎	张开明	张锁春	谈庆明	秦元勋
常铁强	曾庆存	黄 敦	符鸿源	蒋伯诚	裴鹿成
虞福春					

名誉编委：(按姓氏笔划为序)

于 敏	王大珩	王淦昌	冯 康	庄逢甘	李德元
何祚庠	谷超豪	周光召	周毓麟	程开甲	彭桓武

编 辑 部：

蒋伯诚 张锁春 杜书华 陈一心 邵富球

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己研究的成果。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1章 绪论	(1)
§ 1.1 蒙特卡罗方法	(1)
§ 1.2 蒙特卡罗方法的收敛性、误差和费用	(4)
§ 1.3 蒙特卡罗方法的特点	(6)
§ 1.4 蒙特卡罗方法基础研究中的若干问题	(9)
§ 1.5 蒙特卡罗方法应用研究中的若干问题	(11)
第2章 蒙特卡罗方法的一般技巧	(17)
§ 2.1 期望估计技巧	(17)
§ 2.2 重要抽样技巧	(18)
§ 2.3 相关技巧	(20)
§ 2.4 对偶抽样技巧	(22)
§ 2.5 分裂与赌技巧	(23)
§ 2.6 系统抽样技巧	(26)
§ 2.7 分层抽样技巧	(27)
§ 2.8 条件蒙特卡罗技巧	(28)
§ 2.9 拟蒙特卡罗方法	(30)
第3章 蒙特卡罗方法中的子样	(33)
§ 3.1 简单子样	(33)
§ 3.2 带权子样	(34)
§ 3.3 蒙特卡罗方法中的一般技巧与子样	(35)
§ 3.4 集团子样	(36)
§ 3.5 集团子样与蒙特卡罗估计	(38)

§ 3.6	渐近子样	(39)
§ 3.7	渐近子样与蒙特卡罗估计	(42)
第4章	伪随机数	(44)
§ 4.1	随机数	(44)
§ 4.2	随机数的产生方法	(45)
§ 4.3	伪随机数	(46)
§ 4.4	伪随机数的均匀性	(48)
§ 4.5	伪随机数的独立性	(49)
§ 4.6	研究伪随机数序列独立性的主要方法	(50)
§ 4.7	用均匀偏度方法研究伪随机数序列独立性	(51)
§ 4.8	均匀偏度方法与其他方法的关系	(52)
§ 4.9	伪随机数的统计检验	(53)
§ 4.10	伪随机数的均匀性检验	(55)
§ 4.11	伪随机数的独立性检验	(57)
第5章	产生伪随机数的方法	(61)
§ 5.1	取中方法	(61)
§ 5.2	移位加方法	(64)
§ 5.3	加同余方法	(66)
§ 5.4	乘同余方法	(68)
§ 5.5	乘加同余方法	(71)
§ 5.6	代数方法	(73)
第6章	由已知分布的随机抽样	(76)
§ 6.1	由已知分布的随机抽样	(76)
§ 6.2	直接抽样方法	(77)
§ 6.3	舍选抽样方法	(80)
§ 6.4	复合抽样方法	(84)
§ 6.5	复合舍选抽样方法	(87)
§ 6.6	近似抽样方法	(93)
§ 6.7	对称抽样方法	(97)
§ 6.8	集团抽样方法	(100)

§ 6.9	变换抽样方法	(102)
§ 6.10	若干重要分布的随机抽样	(105)
第7章	非归一分布的随机抽样方法	(119)
§ 7.1	非归一分布的随机抽样问题	(119)
§ 7.2	离散型分布的Metropolis抽样方法	(123)
§ 7.3	连续型分布的Metropolis抽样方法	(124)
§ 7.4	Barker抽样方法	(126)
§ 7.5	Hastings抽样方法	(128)
§ 7.6	最佳迭代抽样方法	(130)
§ 7.7	热浴方法	(133)
§ 7.8	期望抽样方法	(136)
§ 7.9	排队抽样方法	(140)
§ 7.10	补偿抽样方法	(144)
§ 7.11	δ 累积抽样方法	(146)
第8章	多维分布和随机过程随机模拟	(151)
§ 8.1	多维分布的直接抽样方法	(151)
§ 8.2	多维分布的舍选抽样方法	(153)
§ 8.3	n 维正态分布的随机抽样	(155)
§ 8.4	Markov链的随机模拟	(156)
§ 8.5	Markov过程的随机模拟	(157)
§ 8.6	独立增量过程的随机模拟	(158)
§ 8.7	平稳过程的随机模拟	(159)
第9章	解线性代数方程组的蒙特卡罗方法	(162)
§ 9.1	极值方法	(162)
§ 9.2	均值方法	(163)
§ 9.3	加权方法	(166)
§ 9.4	期望估计方法	(167)
§ 9.5	伴方法	(169)
§ 9.6	重要抽样方法	(171)
§ 9.7	相关方法	(173)

§ 9.8 求逆矩阵	(175)
第10章 解积分方程的蒙特卡罗方法	(177)
§ 10.1 加权方法	(177)
§ 10.2 期望估计方法	(178)
§ 10.3 伴方法	(180)
§ 10.4 重要抽样方法	(183)
§ 10.5 相关方法	(184)
第11章 解齐次积分方程本征值问题的蒙特卡罗方法	(188)
§ 11.1 引言	(188)
§ 11.2 离散化方法	(191)
§ 11.3 函数展开方法	(193)
§ 11.4 分区迭代方法	(196)
§ 11.5 直接抽样方法	(199)
§ 11.6 合理迭代对策	(203)
§ 11.7 单历史迭代方法	(208)
§ 11.8 δ 累积抽样方法	(212)
§ 11.9 实现补偿抽样的伴方法	(214)
第12章 解粒子输运方程的蒙特卡罗方法	(219)
§ 12.1 粒子输运的 Boltzmann 方程	(219)
§ 12.2 粒子输运的积分方程	(221)
§ 12.3 解粒子输运问题的蒙特卡罗方法	(225)
§ 12.4 δ -散射方法	(228)
§ 12.5 迁移分布的随机抽样	(231)
§ 12.6 光子碰撞分布的随机抽样	(234)
§ 12.7 中子碰撞分布的随机抽样	(236)
§ 12.8 粒子输运的多群方程	(240)
§ 12.9 多群蒙特卡罗方法	(244)
第13章 伴蒙特卡罗方法	(247)
§ 13.1 Boltzmann 方程的伴方程	(247)
§ 13.2 倒易蒙特卡罗方法	(249)

§ 13.3	伴蒙特卡罗方法	(251)
§ 13.4	光子伴散射分布随机抽样	(256)
§ 13.5	中子伴散射分布随机抽样	(257)
§ 13.6	伴多群蒙特卡罗方法	(263)
第14章	贡献蒙特卡罗方法	(267)
§ 14.1	点贡献子	(267)
§ 14.2	点贡献蒙特卡罗方法	(269)
§ 14.3	源凸域正贡献方法	(272)
§ 14.4	简单域正贡献方法	(275)
§ 14.5	径迹贡献方法	(278)
§ 14.6	正贡献方法	(281)
第15章	解与时间有关粒子输运问题的蒙特卡罗方法	(287)
§ 15.1	与时间有关的粒子输运问题	(287)
§ 15.2	解与时间有关粒子输运问题的蒙特卡罗方法	(289)
§ 15.3	解与时间有关粒子输运问题的差分蒙特卡罗方法	(292)
§ 15.4	主方程	(294)
§ 15.5	解主方程的蒙特卡罗方法	(297)
§ 15.6	解主方程的差分蒙特卡罗方法	(300)
§ 15.7	与时间有关的增殖问题	(302)
第16章	解热传导问题的蒙特卡罗方法	(307)
§ 16.1	引言	(307)
§ 16.2	固定随机游动方法	(308)
§ 16.3	浮动随机游动方法	(313)
§ 16.4	Green函数方法	(316)
第17章	蒙特卡罗方法的并行计算	(321)
§ 17.1	向量化的蒙特卡罗方法	(321)
§ 17.2	多处理机上的蒙特卡罗方法	(327)
§ 17.3	有关伪随机数序列的一些问题	(331)

第二篇 蒙特卡罗方法应用

第18章 在通量计算中的应用	(337)
§ 18.1 通量计算	(337)
§ 18.2 碰撞估计方法	(339)
§ 18.3 期望估计方法	(340)
§ 18.4 权重估计方法	(343)
§ 18.5 径迹估计方法	(344)
§ 18.6 无偏转换定理	(345)
§ 18.7 局部通量计算	(348)
§ 18.8 计算局部通量的共域变换方法	(349)
第19章 在点通量计算中的应用	(352)
§ 19.1 引言	(352)
§ 19.2 指向概率方法	(354)
§ 19.3 统计量无界问题与有限方差方法	(357)
§ 19.4 碰撞概率方法	(359)
§ 19.5 有界估计方法	(362)
§ 19.6 再选择方法	(364)
§ 19.7 重要抽样方法	(367)
§ 19.8 二次碰撞概率方法	(369)
§ 19.9 计算点通量的其他方法	(371)
第20章 在实验核物理中的应用	(376)
§ 20.1 正比管反冲质子谱计算	(376)
§ 20.2 利用反冲质子谱解谱	(380)
§ 20.3 能量沉积计算	(384)
§ 20.4 多次散射与通量衰减修正	(388)
§ 20.5 几何影响计算	(392)
§ 20.6 人工阈探测器有效截面计算	(395)
第21章 在屏蔽计算中的应用	(399)
§ 21.1 引言	(399)

§ 21.2	直接模拟方法	(401)
§ 21.3	加权方法	(402)
§ 21.4	期望估计方法	(404)
§ 21.5	指数变换方法	(406)
§ 21.6	半解析方法	(407)
§ 21.7	相关方法	(410)
§ 21.8	分层抽样方法	(412)
§ 21.9	条件蒙特卡罗方法	(413)
§ 21.10	伴指数变换方法	(416)
§ 21.11	小区域方法	(418)
§ 21.12	偏倚抽样方法	(419)
第22章	在球几何深穿透问题中的应用	(423)
§ 22.1	引言	(423)
§ 22.2	加权方法与期望估计方法	(424)
§ 22.3	指数变换方法	(426)
§ 22.4	条件蒙特卡罗方法	(427)
§ 22.5	伴期望估计方法	(430)
§ 22.6	贡献蒙特卡罗方法	(432)
§ 22.7	小区域方法	(434)
第23章	在核临界安全计算中的应用	(440)
§ 23.1	核临界安全计算	(440)
§ 23.2	直接抽样方法	(443)
§ 23.3	估计方法	(447)
§ 23.4	最佳响应函数的计算	(450)
§ 23.5	最佳迭代策略	(453)
第24章	在解微扰问题中的应用	(456)
§ 24.1	引言	(456)
§ 24.2	解微扰问题的基本公式	(458)
§ 24.3	计算 $\delta k(p' \rightarrow p, x)$ 的基本公式	(461)
§ 24.4	计算迁移影响的变分蒙特卡罗方法	(465)

§ 24.5	计算散射影响的变分蒙特卡罗方法	(468)
§ 24.6	共域变换方法	(472)
§ 24.7	半伴蒙特卡罗方法	(478)
§ 24.8	相关蒙特卡罗方法	(481)
第25章	在反应堆计算中的应用	(484)
§ 25.1	活性区几何与等效边界	(484)
§ 25.2	逃脱共振吸收概率与热中子源强的计算	(487)
§ 25.3	快裂变因子的计算	(489)
§ 25.4	热利用因子和 η 值的计算	(491)
§ 25.5	中子照相束孔的蒙特卡罗计算	(492)
第26章	在系统可靠性分析中的应用	(496)
§ 26.1	概述	(496)
§ 26.2	系统可靠性分析有关概念	(497)
§ 26.3	直接蒙特卡罗方法	(498)
§ 26.4	改进蒙特卡罗方法	(499)
§ 26.5	例子	(505)
第27章	在高能物理中的应用	(508)
§ 27.1	高能物理	(508)
§ 27.2	蒙特卡罗方法在高能物理实验中的主要用途	(513)
§ 27.3	强子碎裂过程的模拟—费曼—费尔德模型介绍	(521)
第28章	在统计物理中的应用	(534)
§ 28.1	统计系综的平均观察量	(534)
§ 28.2	蒙特卡罗方法解Ising模型	(538)
§ 28.3	蒙特卡罗方法解量子多体问题	(542)
§ 28.4	蒙特卡罗方法研究格点规范场论	(550)
第29章	在电子束显微分析中的应用	(565)
§ 29.1	电子在固体中的散射	(565)
§ 29.2	一个简化的电子散射模型及蒙特卡罗模拟计算	

方法	(569)
§ 29.3 蒙特卡罗方法模拟电子散射模型的进展	(573)
§ 29.4 蒙特卡罗方法在本领域研究中的有关应用	(574)
第30章 在真空技术中的应用	(590)
§ 30.1 自由分子流传输概率的蒙特卡罗计算	(590)
§ 30.2 压强分布的蒙特卡罗计算	(597)
§ 30.3 电子发射的蒙特卡罗计算	(600)
§ 30.4 气体放电的蒙特卡罗计算	(605)
§ 30.5 离子溅射的蒙特卡罗计算	(611)
第31章 在激光技术中的应用	(618)
§ 31.1 紧耦合聚光腔聚光效率和晶体中抽运光能分布 的蒙特卡罗计算	(618)
§ 31.2 激光制导中光斑晃动的蒙特卡罗计算	(624)
第32章 蒙特卡罗方法与计算机	(628)
§ 32.1 各种坐标情况下的粒子随机游动	(628)
§ 32.2 点到给定几何表面的距离	(629)
§ 32.3 任意几何的处理	(631)
§ 32.4 对于对称几何的全反射处理	(633)
§ 32.5 概率表方法	(634)
§ 32.6 蒙特卡罗方法应用软件	(636)
§ 32.7 几个著名的蒙特卡罗方法软件	(637)
常用符号简表	(643)

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 $x_1, \dots, x_N$ ，则平均得分为

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

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

$$\sum_{j=1}^m a_{ij}x_j = b_i, \quad i = 1, \dots, m \quad (1.1.1)$$