



北京市高等教育精品教材立项项目

经典和量子耗散系统的 随机模拟方法

■ 包景东 著



科学出版社

www.sciencep.com

北京市高等教育精品教材立项项目

经典和量子耗散系统的 随机模拟方法

包景东 著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书系统深入地介绍了如何用随机模拟方法求解经典和量子耗散系统的问题及其策略,全书分两大部分.第一部分为经典随机系统,包含第1~9章.内容包括蒙特卡罗方法与技巧、米特罗波利斯抽样和动力学方法、噪声与涨落耗散、朗之万方程的数值模拟及其策略、主方程的蒙特卡罗模拟、反常扩散的数值模拟方法、相变模型的随机模拟.第二部分为量子耗散系统,包含第10~15章.内容包括路径积分的基本特性、传播子精确可解的例子、密度矩阵和影响泛函、量子耗散系统、变分路径积分和量子蒙特卡罗方法等.

本书从基础到前沿阐明了处理随机问题的行之有效的方案,也包含了作者多年科研与教学的体会.可供从事和研究随机过程的科技人员参考,也可作为高等院校理科有关专业的研究生学习科学计算方法的教学用书.

图书在版编目(CIP)数据

经典和量子耗散系统的随机模拟方法/包景东著. —北京:科学出版社,2009
(北京市高等教育精品教材立项项目)

ISBN 978-7-03-024280-8

I. 经… II. 包… III. 蒙特卡罗法—高等学校—教材 IV. O242.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2009) 第 038991 号

责任编辑:胡云志 杨 然 / 责任校对:包志虹

责任印制:张克忠 / 封面设计:耕者设计工作室

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

双 青 印 刷 厂 印 刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2009年1月第 一 版 开本: B5 (720×1000)

2009年1月第一次印刷 印张: 18 1/4

印数: 1—3 500 字数: 368 000

定价: 38.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换(环伟))

前 言

人们所面临和研究的问题原则上可以分为两大类：确定性和随机问题。前者可用熟知的数值差分或积分解决；后者只能用模拟方法解决。即便对确定性问题，也能够设计一个随机过程，它的某个特征量的统计平均等价于问题的解。而随机问题又可归结为两个方面：① 过程方程具有随机因素；② 初始或边界条件是随机分布的。可以说：“随机的是确定的”。这句话的含义是指，孤立的系统，仅受牛顿力学支配的模型只是理想化的，而系统往往要受到环境及其他不确定因素的影响，却是可以肯定的。

随机与涨落现象是众多学科领域广泛遇到的。解决这一问题最为方便的方法是蒙特卡罗方法 (Monte Carlo method, MC 方法)。该方法是以世界上最著名的赌城——摩纳哥的蒙特卡罗市的名字来命名的，颇具象征意义，现在也多被称为计算机随机模拟方法。一个最早包含了蒙特卡罗方法思想雏形的实验，是著名的蒲丰 (Comte de Buffon) “投针求 π ”。而系统地用蒙特卡罗方法解决科学问题，出现在利用早期的电子计算机模拟中子在裂变物质中的输运现象。

随机模拟方法在许多文献中介绍过，但是很零散。研究者使用这一方法，大多是通过跟踪文献或从有经验的学者那里学到的。因此，将随机模拟方法系统地介绍并加以讨论是一件有意义的事情。由于蒙特卡罗方法的巨大功效，不同的研究者在他们的工作领域内对蒙特卡罗方法 (参见文献 [1~12]) 以及随机过程理论和应用 (参见文献 [13~18]) 的发展都做出了贡献。人们将蒙特卡罗模拟比喻为“最后的方法”，这有两个含义：一是说当其他方法不能解决所研究的问题时，可采用蒙特卡罗方法；二是说当能用解析或数值方法时，不要使用这一方法，因为蒙特卡罗模拟结果具有较慢的随机收敛性。不少研究者由于对此方法缺乏体会，不敢或者不放心使用蒙特卡罗方法，主要担心精度不高，以为其相对误差会高达百分之几。然而情况并非如此，首先，大数定理和中心极限定理在理论上保证了这种算法的正确性；其次，结果收敛于真值具有概率性，因此进行多次统计实验是必要的。很有可能用较少的实验粒子数目就获得较好的结果，这里面有一些技巧和策略可供选择。

众所周知，统计物理的基本原理是“宏观量是相应的微观量的统计平均值”。所以擅长于计算各类平均、特别是高维分布上的平均值的蒙特卡罗方法自然能在统计物理和凝聚态物理中发挥很大的作用。这方面将是本书主要涉及的课题。

描写经典动力学框架下的阻尼运动的最简单的方式是在牛顿运动方程中添加一个阻力，其一般与速度有关。原则上，将一个系统耦合到一个热库或其他粒子 (或者是一个场) 而建立阻尼运动，通过消去其他粒子或场的自由度，获得想要研究的

系统的运动方程. 对于非保守系统, 一般情况下, 哈密顿 (Hamilton) 量并不是一个运动积分, 即并不代表系统的能量.

在量子理论中, 单个微观粒子的状态可用一波函数 ϕ 来描述, 其遵守薛定谔 (Schrödinger) 方程. 1942 年, 费恩曼 (Feynman) 因受到狄拉克 (Dirac) 在 1933 年关于量子力学的拉格朗日 (Lagrange) 表述的启发, 在他的博士论文 (发表在《近代物理评论》上^[19], 后又总结成书^[20]) 中提出了波函数的一种“按路径求和”表达方式

$$\phi(x, t) = \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_t(\gamma) \right] \phi(0) D[\gamma] \quad (1)$$

其中

$$S_t(\gamma) = \frac{m}{2} \int_0^t |\dot{\gamma}(s)|^2 ds - \int_0^t V(\gamma(s)) ds \quad (2)$$

为作用量泛函, $D[\gamma]$ 为路径空间上“平坦测度”, 也就是无穷维积分元. 费恩曼尽管认识到他的形式积分在数学上的定义是不严格的, 但还是以极大的热情将它应用到量子力学、统计力学以及具有相对论协变性的量子电动力学中去, 取得了意想不到的成功.

在路径积分表示中, 量子系统的状态由位形空间的波函数表示, 但系统的运动不再用微分方程 (薛定谔方程) 描述, 而是用积分变换 (传播子) 给出波函数在有限时间内的演化. 费恩曼把波函数的传播子表示成经典路径的作用量泛函的积分, 从而得到了量子力学的路径积分表示.

值得提出的是, 诺贝尔物理学奖获得者杨振宁教授在庆祝中国科学院院庆五十周年的学术报告会上, 作了题为“量子化、对称性和相位因子——20 世纪物理学的主旋律”的演讲. 其中, 他将路径积分提升到了一个包含了 20 世纪物理学精髓的高度.

他谈到的第一个主旋律为“量子化”, 是普朗克 (Planck) 在 1900 年、爱因斯坦 (Einstein) 在 1905 年以及玻尔 (Bohr) 在 1913 年所建立的. 第二个主旋律是“对称性”, 其实这个概念很早就有了, 而真正引到物理上来乃归于爱因斯坦在 1905 年所写的关于狭义相对论的重要文章. 虽然当时他并没有提到“对称”这个概念, 但两年以后, 闵可夫斯基 (Minkowski) 指出时间与空间可以等同地处理, 后来物理学家渐渐认识到“对称”跟“不变”是极为密切联系在一起的概念. 第三个主旋律是“相位因子”, 首先是从赫曼·韦尔 (H. Weyl) 1918 年的一篇文章引出来的. 意思是说: 一个向量在时空之间平行走动了一周, 回到原来的地方, 由于时空不是平坦的, 而是弯曲的, 那么这个向量的方向可以跟原来的方向不一样; 同样, 它的长度也发生了改变, 后者的量度被称作“拉长因子”. 接下来的一个发展是在 1922 年, 薛定谔发表了一篇题为“量子轨道的一个引人注意的性质”的文章. 他写道: “如果你把韦尔的拉长因子绕着玻尔轨道来算一下的话, 那你就会发现拉长因子 $\exp \left[-\frac{e}{\gamma} \int A_\mu dx^\mu \right]$

里的量等于 $-n$, 这个 n 就是玻尔所引进的一个整数”。现在看来, 若将常数 γ 换成 $\hbar$, 并将 $i = \sqrt{-1}$ 放进去, 则“拉长因子”也就变成了“相位因子”。

20 世纪 40 年代末, 费恩曼所发展的路径积分将上述三个主旋律联系起来, 即

$$\text{Propagator} = \int \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\text{action}) \right] d(\text{path})$$

- (1) $\hbar$ 与相位因子有关系;
- (2) 规范不变性使规范变化不影响传播子 (propagator);
- (3) 量子力学与经典力学中作用量 (action) 原理有关系。

在以上传播子的表达式里, 出现了虚数单位, 这当然是一个“相位因子”, 而这个相位因子的单位是 $\hbar$, 所以跟量子化发生了关系。这个相位因子之所以对物理学的最近 50 年发生重大影响, 是因为有所谓的“规范不变”。在路径积分中, 作用量通过一个规范变化, 却引起一个使得整个“传播子”基本上没有变的变化, 此即把相位因子和传播子间的关系写得很清楚。而且, 费恩曼的这个公式把量子力学与经典力学的作用量原理的关系也描写得非常直接, 如果有一个作用量, 它是稳定的, 那么这个积分就变得非常重要。

无独有偶, 《21 世纪 100 个科学难题》一书甚至将路径积分列为 21 世纪一个待解决的难题 [21]。其主要来自于数学上的两个不严格性: 一是积分中出现的“平坦测度”在路径空间上根本不存在; 二是如果用有穷维逼近来计算这种积分, 则积分中出现的“振荡因子” $\exp \left[\frac{i}{\hbar} S_i(\gamma) \right]$ 将变得无法控制。另外, 长期困扰费恩曼的一个问题是连最简单的氢原子模型的波函数用他的路径积分都算不出来, 而这一个问题早已被薛定谔方程方法解决了。因此, 从数学上研究费恩曼路径积分也十分必要。从目前来看, 比较有成效的几种方法是无穷维振荡 [菲涅耳 (Fresnel)] 积分、序列逼近方法和解析延拓方法。

路径积分是研究量子物理的一种途径 [22~25], 即量子过程的随机化处理技术, 由于其在数学上的简捷和物理图像上的清晰, 近年来它受到许多领域的物理科学工作者的青睐。可以发现, 通过维克 (Wick) 旋转, 将时间换成虚时间, 薛定谔方程就变成了扩散方程, 而路径积分中的量子力学传播子可以对平均轨道积分而变成统计物理中的配分函数; 另一方面, 费恩曼积分可以做渐近展开而得到积分的近似值, 也就是量子物理学的半经典逼近。这些也许是费恩曼当初引进路径积分的两个主要目的。自从泡利 (Pauli) 在 1928 年的关于量子系统的阻尼描述的开创性工作之后, 大量的有关耗散的合适量子力学描述的方法被发展了, 其中最为普遍的方法是量子朗之万方程 (Langevin equation) 和对应的主方程, 例如, 量子光学和自旋弛豫理论。然而不幸的是, 虽然量子朗之万方程和量子主方程形式上简单, 但仅适合于微扰处理以及系统弱耦合到一个环境热浴之上。原则上, 这种局限使得系统的弛豫时间必

须大于非阻尼运动的最长的时间尺度,也大于“热时间”尺度 $h/k_B T$. 这些条件对低温系统很容易被违背,尤其是穿透过程. 部分原因是为了避免以上困难,本书采用路径积分技术处理量子耗散系统,也就是量子布朗运动. 这能适用于任意低的温度和任意强的阻尼. 用实时间路径积分处理量子系统运动,用虚时间路径积分考虑平衡态附近的量子统计涨落效应.

本书通过大量的实例来理解方法,通过结果来感悟数值策略. 力求将蒙特卡罗方法与路径积分结合起来,概率分布中心的移动,即平均轨道仍然由经典动力学方程所控制;而用随机轨道来刻画热和量子涨落. 写作上力求层次分明:①在每章节开始用概括性的语言将问题点明;②尽量给出方法的严格数学证明;③通过具体算例来理解随机模拟方法的意义;④最后对方法的使用注意事项作一讨论. 本书中所有的数值例子均是通过数值实现了的,是可信和可靠的.

面对有物理学和计算方法背景的学生,如何将理论与模型变成现实?遇到具体问题如何探寻解决方案?怎样对模型进行预期与结果分析?或者说,怎样为研究生在课程学习与学位论文之间搭起一座桥梁,甚至增强他们今后自主创新意识?作为这方面的探索,作者从2000年起在北京师范大学为物理系、核科学与技术学院、化学学院等院系硕士、博士研究生开设了“蒙特卡罗方法”和“量子路径积分”两门课程;还分别于2006年在中国科学院应用物理研究所为研究生讲授蒙特卡罗方法,2007年在上海交通大学全国核物理暑期学校主讲蒙特卡罗方法基础,2008年在华中师范大学复杂系统研究生研讨班上报告了著此书的主要想法. 在教学过程中,研究生们提出的问题使得作者不断地修改和完善两部课程讲义.

开设这两门课程和编写此教材都是带有探索性的,由于作者的水平有限与经验不足,在取材和安排方面很可能不够恰当,挂一漏万,不妥之处也在所难免,希望读者批评指正.

作者在此首先要感谢导师中国原子能科学研究院的卓益忠先生,在硕士和博士论文中,作者用朗之万方程的蒙特卡罗模拟研究受激重核裂变碎片动能分布,开始接触随机问题,并一直从事这个方向的研究;作者向中国原子能科学研究院的裴鹿成先生和张孝泽研究员学习了蒙特卡罗方法理论及其应用;也衷心感谢北京师范大学物理系的许多同事对作者开设上述两门课程的鼓励.

本书得到北京市教育委员会共建项目专项和国家自然科学基金的资助.

包景东

2008年11月

于北京师范大学

目 录

前言

第一章 随机方法概述	1
1.1 预备知识	1
1.2 蒙特卡罗方法的发展	2
1.3 蒙特卡罗求积分思想	5
1.4 蒙特卡罗方法的特点	8
1.5 计算的若干细节	9
1.6 小结	10
第二章 由已知分布随机抽样	12
2.1 基本特性	12
2.2 直接抽样方法	13
2.3 舍选抽样方法	16
2.3.1 简单分布的舍选法	16
2.3.2 乘分布的舍选法	18
2.4 复合抽样方法	21
2.4.1 加分布	21
2.4.2 随机变量的合成	23
2.4.3 复合抽样方法的一般形式	23
2.5 变换抽样方法	25
2.6 近似抽样方法	31
2.7 随机向量的抽样方法	33
2.8 注释	39
第三章 降方差技巧	44
3.1 降低实验方差的特性	44
3.2 重要抽样技巧	44
3.3 期望估计技巧	50
3.4 相关技巧	53
3.5 分层抽样技巧	55
3.6 分裂与赌技巧	57
3.7 评注	58

第四章 米特罗波利斯抽样和动力学方法	60
4.1 马尔可夫过程	60
4.2 正则系综平均量的计算	61
4.3 米特罗波利斯抽样方法	63
4.4 热浴法	65
4.5 广义米特罗波利斯抽样方法	69
4.6 动力学方法产生平衡态与已知分布	70
4.6.1 平衡态分布	70
4.6.2 应用算例	70
4.6.3 已知分布	71
4.6.4 动力学重要抽样求定积分	71
4.7 评注	77
第五章 噪声与涨落耗散	79
5.1 概述	79
5.2 噪声与布朗运动	80
5.3 系统加热浴模型	81
5.3.1 广义朗之万方程	82
5.3.2 涨落耗散定理	83
5.3.3 谱函数	84
5.4 噪声的功率谱	85
5.4.1 色噪声	86
5.4.2 噪声的带宽	86
5.5 简谐噪声和简谐速度噪声	88
5.6 简谐噪声	89
5.6.1 简谐噪声的关联函数	89
5.6.2 极限情况分析	90
5.6.3 简谐噪声的频谱关系	91
5.6.4 简谐噪声的频域带宽	92
5.7 简谐速度噪声	94
5.7.1 简谐速度噪声的关联函数	94
5.7.2 极限情况和频谱关系	95
5.7.3 简谐速度噪声的频域带宽	96
5.8 福克-普朗克方程	96
5.8.1 福克-普朗克方程的推导	96

5.8.2 伊藤 斯特拉托诺维奇困境的讨论	98
5.9 小结	100
第六章 朗之万方程的数值模拟及其策略	102
6.1 分子动力学与布朗动力学的比较	103
6.2 欧拉方法	103
6.3 随机泰勒展开	105
6.3.1 乘性噪声	107
6.3.2 一般阻尼情况	108
6.3.3 奥恩斯坦-乌伦贝克噪声	109
6.4 随机龙格-库塔算法	113
6.5 随机积分方法	116
6.5.1 非线性力展开的积分算法	116
6.5.2 应用算例: 倾斜周期势中的定向流	118
6.6 广义朗之万方程的积分算法	119
6.7 拟局部振荡算法	122
6.7.1 模型和算法	122
6.7.2 应用算例	126
6.7.3 小结	128
6.8 乘性白噪声驱动的周期运动	128
6.9 半隐式算法	132
6.10 阻尼积分算法	133
6.11 评注	135
第七章 主方程的蒙特卡罗模拟	138
7.1 主方程及其差分解	138
7.2 时间相关平均量和相关系数的蒙特卡罗计算	142
7.3 主方程的直接蒙特卡罗模拟	143
7.4 主方程与朗之万方程的关系	144
7.5 实例	145
第八章 反常扩散的数值模拟方法	147
8.1 离散傅里叶变换产生任意色噪声	147
8.1.1 时间关联噪声的模拟	147
8.1.2 二维空间关联噪声的模拟	149
8.2 非欧姆阻尼	151
8.3 利用傅里叶变换产生任意关联色噪声的数值算法	152
8.4 粒子在非欧姆阻尼环境中的扩散	154

8.5 连续时间无规行走	156
8.5.1 CTRW 模型及其数值实现	157
8.5.2 有势情况下的 CTRW	159
8.5.3 小结	165
第九章 相变模型的随机模拟	166
9.1 伊辛模型	166
9.1.1 伊辛模型	166
9.1.2 主要物理量和方法	167
9.1.3 米特罗波利斯方法	168
9.1.4 弛豫效应	168
9.1.5 周期边界条件	169
9.1.6 有限尺度效应	169
9.1.7 最近邻相互作用	170
9.2 伊辛模型的蒙特卡罗模拟	171
9.3 二元合金系统	172
9.4 XY 模型	173
第十章 路径积分的基本特性	175
10.1 传播子	175
10.1.1 定义和性质	175
10.1.2 薛定谔方程的路径积分表示	177
10.2 有限维位形空间中的路径积分	179
10.2.1 由拉格朗日函数描述波函数的时间演化	179
10.2.2 $K(x, t_f; x_0, t_0)$ 的路径积分公式	181
10.3 路径积分的优缺点	182
第十一章 传播子精确可解的例子	184
11.1 一维自由运动	184
11.2 一维谐振子的传播子	186
11.2.1 借助经典路径求传播子	186
11.2.2 直接计算 $N-1$ 维路径积分求传播子	188
11.2.3 与量子力学结果的比较	191
11.3 强迫谐振子的传播子	193
第十二章 密度矩阵和影响泛函	196
12.1 系统环境相互作用模型	196
12.2 实时间路径积分	199

12.2.1 欧几里得泛函积分	199
12.2.2 用跃迁矩阵元求影响泛函	202
12.2.3 应用算例:鞍点通过概率	205
第十三章 量子耗散系统	209
13.1 虚时间和傅里叶级数	209
13.2 傅里叶空间的泛函测量	210
13.3 量子耗散系统	213
第十四章 变分路径积分	217
14.1 半经典近似	217
14.2 有效经典势和配分函数	218
14.2.1 思路	218
14.2.2 谐振子的有效经典势	218
14.3 变分路径积分	219
14.3.1 费恩曼-克莱默特有效经典势	220
14.3.2 应用算例	225
14.4 非线性耗散系统的有效经典势	226
14.4.1 双变分	226
14.4.2 应用算例	229
14.5 评注	229
第十五章 量子蒙特卡罗方法	232
15.1 变分蒙特卡罗方法	232
15.1.1 量子多体系统的最低能量	232
15.1.2 麦克米伦-米特罗波利斯 (McMillan-Metropolis) 方法	233
15.1.3 偏倚抽样法求极小能量	234
15.1.4 应用算例	235
15.1.5 扩散方程、格林函数和朗之万方程	237
15.2 变分蒙特卡罗方法的改进:福克-普朗克方程导引	241
15.3 格林函数蒙特卡罗方法	241
15.3.1 薛定谔方程的积分形式	242
15.3.2 无规行走法求格林函数	243
15.4 扩散蒙特卡罗方法	246
15.5 路径积分蒙特卡罗方法	247
15.5.1 轨道递推方法	247
15.5.2 快速傅里叶变换方法	252
15.6 非线性量子耗散系统	254

15.6.1 重要高斯测量	255
15.6.2 有效耗散经典势	256
15.6.3 应用算例	258
15.7 量子亚稳系统的衰变速率	260
15.7.1 路径积分蒙特卡罗方法	261
15.7.2 结果和讨论	265
参考文献	268
索引	275
中英文人名对照表	280

第一章 随机方法概述

随机模拟方法是利用计算机进行数值计算的一类方法, 又称计算机模拟方法. 该方法是对构造的模型作统计实验, 故也称统计实验法或统计模拟法. 这个名字表明, 这些模拟方法要使用计算机内的“随机数发生器”所产生的“伪随机数”.

这种方法同确定性方法并不是截然相反的, 布朗 (Brown) 动力学就是把两种方法结合起来形成一种混合方法的例子, 其中系统的漂移 (平均) 由牛顿 (Newton) 方程来控制, 而它的扩散行为取决于涨落以及噪声.

随机模拟方法的应用广泛, 可以用来研究各种类型的问题, 既能解决随机问题, 也可求解确定性问题. 若问题中不包含时间因素, 称为静态模型, 研究此类问题的模拟方法习惯上称为蒙特卡罗方法; 而将求解随机性的动态模型的模拟方法称为随机模拟方法. 但现在人们已不再将两者严格地区分开来. 本书使用随机方法的名称, 表明涉及的问题更广泛.

1.1 预备知识

定义 1.1 分子动力学

分子动力学方法是计算一组分子的相空间轨道, 其中每个分子各自服从经典牛顿定律.

定义 1.2 布朗动力学

布朗动力学方法是模拟构成一个统计系统的 N 个粒子的轨道, 其中每一个粒子都遵守朗之万方程.

定义 1.3 蒙特卡罗方法

该方法使问题的解等于一个假设的统计模型的参数, 用随机数序列建立这个统计模型的一个样本, 从它可以算出这个参数的估计值.

定义 1.4 马尔可夫 (Markov) 链

序列 $x_0, \cdots, x_n, \cdots$, 如果对任何的 n , 条件概率具有如下的性质:

$$P(x_n | x_{n-1}, \cdots, x_0) = P(x_n | x_{n-1}) \quad (1.1)$$

则称此序列是一个马尔可夫链.

定义 1.5 弱平稳过程

设 $\{x_t, 0 \leq t\}$ 是一个随机过程, 如果对于任意的 t 和 τ ,

$$B(\tau) = E(x_{t+\tau}x_t) \quad (1.2)$$

不依赖于 t , 则 $\{x_t, 0 \leq t\}$ 是一个弱平稳过程.

定理 1.1 大数定理

若 $x_1, \dots, x_n$ 是按照分布密度函数 $f(x)$ 抽取的随机变量, 设 $I = \int_a^b g(x)f(x)dx$ 存在, 有

$$P\left(\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g(x_n) = I\right) = 1 \quad (1.3)$$

这个定理表明, 只要样本足够大, 求和平均将趋近想要计算的积分值. 即使随机变量是相关的, 上面的结论也仍然成立.

定理 1.2 中心极限定理

$$P\left(\left|\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g(x_n) - I\right| \leq \frac{\lambda\sigma}{\sqrt{N}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\lambda}^{\lambda} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt = \Phi(\lambda) \quad (1.4)$$

其中, σ^2 是统计量 $g(x)$ 在分布密度函数 $f(x)$ 下的方均差, 定义为

$$\sigma^2(g|f) = \int_a^b g^2(x)f(x)dx - I^2 \quad (1.5)$$

$\Phi(\lambda)$ 称为置信水平. 这个定理告诉人们, 如果样本为有限个, 蒙特卡罗计算所引起的估计误差为

$$\boxed{\varepsilon = \frac{\lambda\sigma}{\sqrt{N}}}$$

并且, 统计量的估计值偏离真值的程度不大于 ε 的事件发生的概率为 $\Phi(\lambda)$.

1.2 蒙特卡罗方法的发展

1946 年, 物理学家冯·诺伊曼 (Von Neumann) 等在电子计算机上用随机抽样方法模拟了裂变物质的中子链式反应, 因为此项研究是与研制原子弹有关的秘密工作, 他们把此方法称为蒙特卡罗方法. 以赌城的名字作为随机模拟方法的代号, 既风趣又贴切, 是具有象征意义的. 虽然随机模拟方法始于 20 世纪 40 年代, 即系统地用蒙特卡罗方法解决科学问题, 利用早期的电子计算机模拟中子在裂变物质中的输运. 但一个最早包含了随机模拟方法思想雏形的实验, 可追溯到著名的蒲丰“投针求 π ”.

1777 年, 法国学者蒲丰用随机投针方法求 π . 在地面上画一些间距为 $2a$ 的平行线束, 向此地面随机投长为 $2l$ 的针, $l < a$ 保证针不同时与两线相交. 针的位置

由其中点与最近一平行线的距离 x 和针与平行线的夹角 θ 来确定 (图 1.1). 显然, 针与平行线相交的条件是

$$x \leq l \sin \theta \quad (1.6)$$

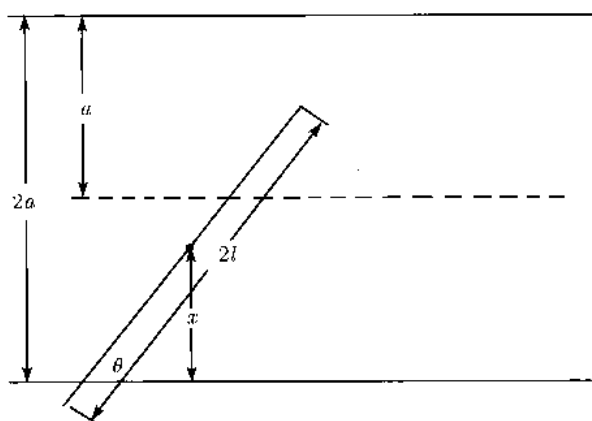


图 1.1 投针求 π 的示意图

其中, x 和 θ 分别在 $[0, a]$ 和 $[0, \pi]$ 两区间上均匀独立地取值. 针与线相交概率为

$$p = P(x \leq l \sin \theta) = \frac{\int_0^\pi d\theta \int_0^{l \sin \theta} dx}{\pi a} = \frac{2l}{\pi a} \quad (1.7)$$

其中, $P(\cdot)$ 表示事件 $\cdot$ 发生的概率. 从图 1.2 也可看出, 针与平行线束的相交概率就是曲线 $x = l \sin \theta$ 下方面积与矩形面积之比.

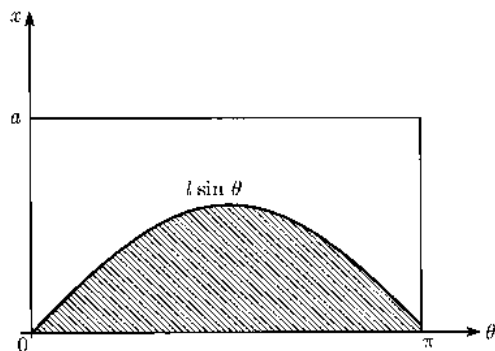


图 1.2 曲线下方面积表相交频率

设随机投针 N 次, 其中 n 次针与线束相交, 当 N 足够大, 可用频率 n/N 作为

概率 p 的估计值, 从而算得 π 的值

$$\pi \approx \frac{2l}{a} \left(\frac{N}{n} \right) \quad (1.8)$$

历史上, 曾有一些学者作了随机投针的实验, 得到了 π 的近似估计值. 表 1.1 列出了部分实验结果.

表 1.1 圆周率 π 的实验值

实验值	年份	投针次数	π 的估计值
沃尔弗 (Wolf)	1850	5000	3.1596
史密斯 (Smith)	1855	3204	3.1553
福克斯 (Fox)	1894	1120	3.1419
拉查里尼 (Lazzarini)	1901	3408	3.1415929

我们亦用随机投针实验计算了 π 值, 在图 1.3 中画出了数值结果与真值误差的绝对值随投针次数的变化规律, 进而检验了蒙特卡罗方法误差公式.

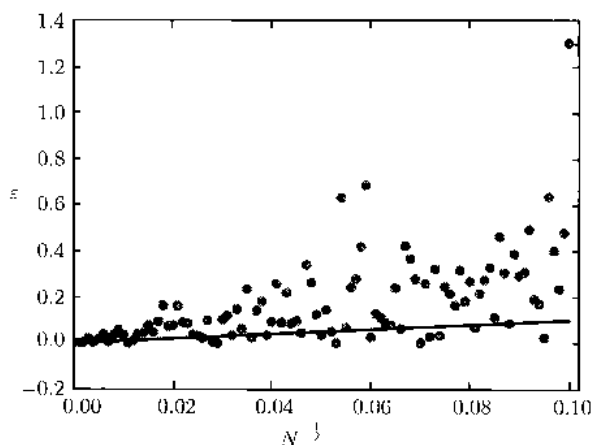


图 1.3 投针求 π 的误差随 $N^{-\frac{1}{2}}$ 的变化关系. 其中点为模拟结果, 实线是误差公式

$$\varepsilon = \lambda\sigma/\sqrt{N}$$

概率论和随机行走理论的许多进展, 可以看做是蒙特卡罗方法的基础. 例如, 开尔文 (Lord Kelvin) 已经用到随机抽样去帮助求气体动能理论中的一些时间积分, 他的随机抽样包含了关联系数分布. 柯朗 (Courant)、弗里德里希斯 (Friedrichs) 和卢伊 (Lewy) 认为一定的随机行走与某个偏微分方程的解相等价. 20 世纪 30 年代, 费米 (Enrico Fermi) 作了一些数值实验, 后来被称为蒙特卡罗计算. 他在研究当时最新发现的中子的行为时, 设计了一个中子可能与凝聚态物质相互作用的抽样实验, 这导致了后来更多的中子扩散和输运理论.