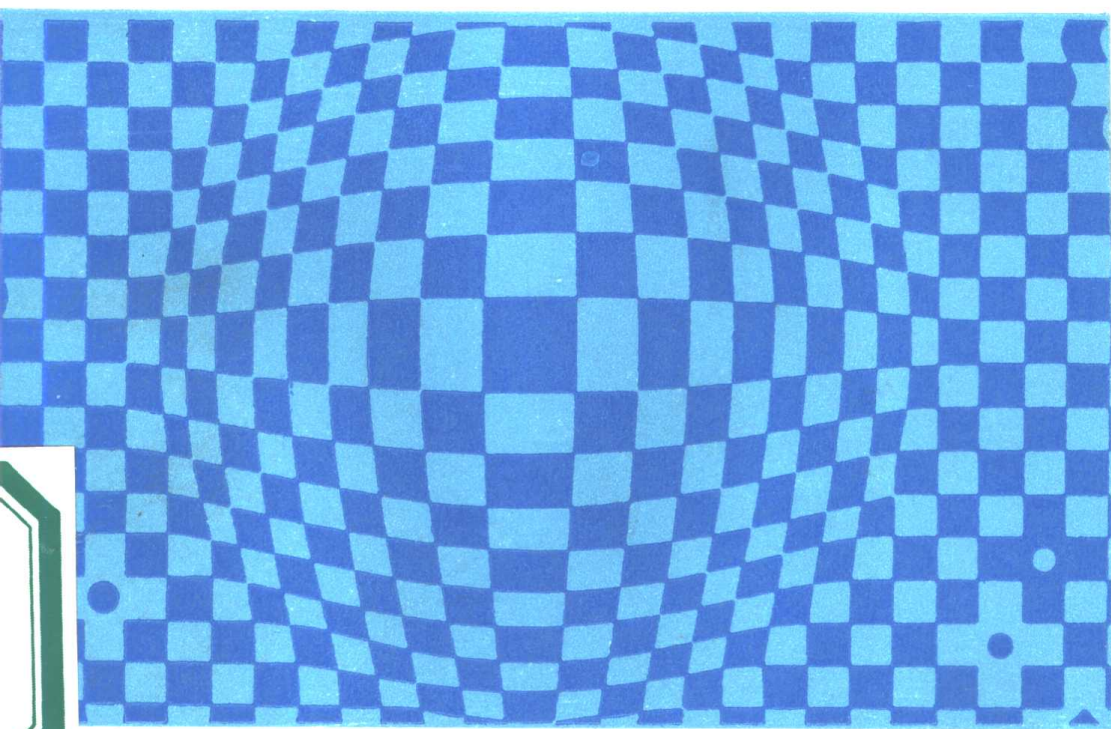


MENGTEKALUO
FANGFA YINLUN

蒙特卡罗方法引论

● 朱本仁 编



山东大学出版社

蒙特卡罗方法引论

朱本仁 编

山东大学出版社

蒙特卡罗方法引论

朱本仁 编

山东大学出版社出版

山东省新华书店发行

山东大学印刷厂印刷

787×1092毫米 5.75 印张 129 千字

1987年8月第1版 1987年8月第1次印刷

印数 1,500册

ISBN 7-5607-0024-1/N·2

书号: 13338·22 定价 0.98元

序 言

蒙特卡罗 (Monte Carlo) 方法又名随机模拟法或统计试验法。它是在第二次世界大战期间兴起和发展起来的。它的奠基人是冯·诺伊曼 (J. Von Neumann)。其主要思想是在计算机上模拟实际概率过程, 然后加以统计处理。这种方法与传统数学方法相比, 具有思想新颖, 直观性强、简便易行的优点, 它能处理一些其他方法所不能的复杂问题, 并且容易在计算机上实现。从目前有关文献看, 蒙特卡罗方法已经在应用物理, 原子能, 固体物理, 化学, 生物, 生态学, 社会学以及经济行为等领域中得到广泛的应用。特别是在计算机上用蒙特卡罗方法解很多理论和应用科学问题, 在很大程度上可以代替许多大型的、难以实现的复杂实验或社会行为过程。所以, 可以毫不夸张地说, 由于有了蒙特卡罗方法, 计算机已经不仅仅是数学家和理论科学家的重要工具, 也已经成为许多实验物理家、应用科学家、社会学家的第二实验场所。

本书的对象主要是物理、化学和其他有关应用科学专业的研究生或高年级学生、专业科学工作者。他们希望通过短期的学习, 能学会使用此方法来解决本专业中提出的许多实际问题。因此, 本书内容的编排是根据在一学期时间内 (大约50学时左右), 使学生基本掌握蒙特卡罗方法的基本概念和方法这一指导思想进行的。这样的教材在国内尚难找到, 所以根据我们手头的资料决定主要取材于参考书目[2]

中第一至五章，以及〔4〕、〔3〕中的若干内容，还有编者个人的若干想法及推算。考虑到本书的读者一般不具备概率论的完备知识，本书根据内容的需要在第一章编写了有关概率、统计方面的最低限度的基本知识。这样使本书自成体系，读者不需要在学习中查阅其他书目和文献，就能学懂所有内容。从第二章开始，在每章末按排了少量能在小型计算机上完成的实验题。这些题目的选择既利于巩固已学的知识，也为后续章节作了准备。通过实验还能提高读者的学习兴趣。因而自然要求读者能会运用一、两种算法语言（例如 *Basic*，*Fortran*语言）和具备使用计算机的能力。为了顺利阅读本书，要求读者具备理科高等数学知识。

本书内容曾给山东大学物理系84—85学年，85—86学年的研究生以及部分教师讲授过，现经修改作为正式教材出版。在讲课和本书编写过程中承蒙物理系梅良模教授以及其他有关教师热情鼓励 and 大力支持，在此仅表真挚的谢意。

由于编者水平有限，错误在所难免，恳切希望读者批评指正。

朱本仁 于山东大学

1986年1月7日

目 录

第一章 概率论基本知识

- § 1 事件和概率····· (1)
- § 2 概率场····· (5)
- § 3 独立试验序列概型····· (12)
- § 4 随机变量及分布函数····· (18)
- § 5 多元随机变量及其分布函数····· (23)
- § 6 随机变量的数字特征····· (29)
- § 7 极限定理····· (43)

第二章 蒙特卡罗方法概述

- § 1 蒙特卡罗方法的基本思想和一般过程····· (49)
- § 2 蒙特卡罗方法的收敛性和误差估计····· (55)
- § 3 随机数和伪随机数····· (60)
- § 4 产生伪随机数的方法····· (66)
- § 5 若干应用举例····· (81)

第三章 从已知分布实现随机抽样

- § 1 从已知分布的随机抽样····· (92)
- § 2 随机抽样的一般方法····· (97)
- § 3 进一步推广····· (103)
- § 4 某些常用分布的随机抽样····· (108)

第四章 蒙特卡罗方法的应用

- § 1 计算多重积分····· (142)
- § 2 解辐射屏蔽问题····· (151)
- § 3 输运方程的蒙特卡罗解法····· (161)
- § 4 特征值问题的蒙特卡罗解法····· (172)

参考书目····· (175)

第一章 概率论基本知识

§1 事件和概率

在我们观察客观现象时，可能有三种情况发生：

(1) 在一定条件下必然会发生的某种“事件”(现象)，称为必然事件。如在标准大气压下，水加热到 100°C 时必然会沸腾，在地球表面附近重物必然会下落；太阳必然从东边升起；……

(2) 在一定条件下必然不会发生的“事件”，称为不可能事件。如在标准大气压下，低于 100°C 的水不会沸腾；在地球表面附近重物无外因不会自己上升；太阳从西边升起；……

(3) 在一定条件下可能发生也可能不发生的事件，称为随机事件。如打靶中环数；中彩票的事件；赌博的输赢；还有下列实例：

例1 “在一分钟内，一个电话交换台至少接到15次呼唤”或“少于15次呼唤”这类事件。

例2 “在抽查某工厂生产的10件产品时，发现有一件次品”、“发现有两件次品”、“至少发现一件次品”和“不发现次品”的事件。

例3 “从一个袋中摸黑、白球的试验中，摸出黑球”、“连续两次摸出黑球”的事件。

为了详细说明问题，我们举一个产品检查的具体实例来讨论。

例 4 在一大批产品中分别抽 5 件、10 件、60 件、150 件、600 件、900 件、1200 件、1800 件产品来检查，结果记录如下：

表 1—1

抽 取 件 数	5	10	60	150	600	900	1200	1800
合 格 品 数	5	7	53	131	548	820	1091	1631
合 格 品 频 率	1	0.7	0.883	0.873	0.913	0.911	0.909	0.906

$$\text{合格品频率} = \frac{\text{合格数}}{\text{抽取件数}}$$

虽然抽出的产品中，次品数目是随机的，然而随着抽查件数的增加，合格品频率愈来愈趋于一个稳定值 0.9。

现在引进概率的定义。设 U 为必然事件， V 为不可能事件， A 为一般的随机事件，它们的概率是一非负实数，分别记之为 $P(U)$ ， $P(V)$ 和 $P(A)$ ，且满足：

$$P(U) = 1, P(V) = 0, \text{通常 } P(A) \text{ 满足}$$

$$0 \leq P(A) \leq 1$$

$P(A)$ 表示出现事件 A 的可能性的 size，将其称为事件 A 的概率。

事件 A 的概率 $P(A)$ 可理解为事件 A 的函数。今后，我们用大写字母 $A, B, C, \dots$ 表示事件，而用 $P(A), P(B), P(C), \dots$ 表示相应事件的概率。事件间主要有以下几种关系：

(1) 如果事件 A 发生，必然导致事件 B 发生，则称：

事件 A 是事件 B 的**特款**，记作 $A \subset B$ 或 $B \supset A$ 。

若 $B \supset A$ 且 $A \supset B$ ，则称 A 与 B **等价**，记作 $A = B$ 。

(2) 事件 A 或 B 发生所构成的事件，称为事件 A 与 B 的**和**。记作 $A \cup B$ 。其推广为事件 A_1 或 A_2 或 $\cdots$ 或 A_N 发生所构成的事件，称为事件 $A_1, A_2, \cdots, A_N$ 的**和**，记作

$$\bigcup_{n=1}^N A_n。$$

(3) 事件 A 或 B 同时发生所构成的事件，称为事件 A 与 B 的**交**，记作 $A \cap B$ (简记为 AB)。其推广为事件 $A_1,$

$A_2, \cdots, A_N$ 同时发生所构成的事件，记为 $\bigcap_{n=1}^N A_n$ 。

(4) 若事件 A 发生，必然导致 B 不发生 (反之亦然)，则称 A 与 B 是**互不相容**的事件。即有 $AB = V$ 。

若记 $\bar{A}$ 表示事件 A 不发生的事件，称 A 与 $\bar{A}$ 为**互逆**事件。于是，显然有

$$A \cup \bar{A} = U, \quad A \cap \bar{A} = V。$$

事件 A 的概率 $P(A)$ 的基本性质 (见图1—1, a、b、c、d)：

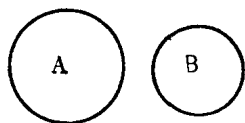


图1—1, a

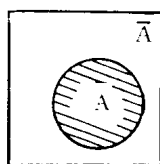


图1—1, b

(1) 若 $A \cap B = V$ ，则 $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$ 。

(2) 若 $\bar{A}$ 为 A 的逆事件，则

$$P(\bar{A}) = 1 - P(A)$$

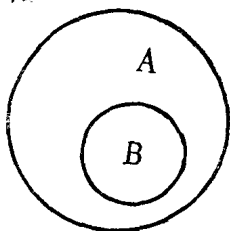


图1—1, c

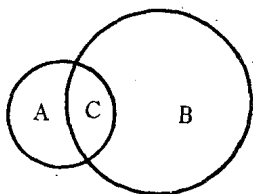


图1—1, d

(3) 若 $A \supset B$, 则 $P(A) \geq P(B)$

(4) 若 $A \cap B = C \neq \emptyset$, 则

$$A = A \cap (B \cup \bar{B}) = \underline{A \cap B} \cup \underline{A \cap \bar{B}},$$

$$B = B \cap (A \cup \bar{A}) = \underline{B \cap A} \cup \underline{B \cap \bar{A}},$$

$$A \cup B = \underline{A \cap \bar{B}} \cup \underline{A \cap B} \cup \underline{B \cap \bar{A}},$$

$$P(A \cup B) \leq P(A) + P(B).$$

现在引进**条件概率**: $P(A|B)$ 表示在“事件 B 发生的条件下”事件 A 发生的概率。考虑事件集合 B 和 A (见图1—1, e)

$$P(A|B) = \frac{P(AB)}{P(B)}$$

由此可知**乘法定理**:

$$\begin{aligned} P(AB) &= P(A|B)P(B) \\ &= P(B|A)P(A). \end{aligned}$$

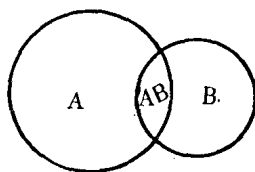


图1—1, e

例5 设96件产品中有5件次品, 任意抽查两件, 求两件都合格的概率

解: 以 A 代表第一次抽得合格品的事件, 以 B 代表第二次抽得合格品的事件。由乘法定理

$$P(AB) = P(A) \cdot P(B|A)$$

而 $P(A) = 91/96, P(B|A) = 90/95$

所以 $P(AB) = \frac{91 \times 90}{96 \times 95}$

$P(AB)$ 就是所抽的两件都是合格品的概率。由于

$$B = B(A \cup \bar{A}) = BA \cup B\bar{A}$$

$$P(B) = P(BA) + P(B\bar{A})$$

$$P(B\bar{A}) = P(\bar{A})P(B|\bar{A})$$

$$P(\bar{A}) = 5/96, \quad P(B|\bar{A}) = 91/95$$

所以

$$P(B) = \frac{90 \times 91}{96 \times 95} + \frac{5 \times 91}{96 \times 95} = \frac{91}{96} = P(B|A)$$

这说明了由于事件 A 的出现影响了事件 B 的概率,表明 $P(B|A)$ 与 A 有关。但有时若事件 A 不影响事件 B 的概率,即

$$P(B|A) = P(B) \text{ 或 } P(AB) = P(A)P(B)$$

则称事件 A 与 B 是**独立的**。

例6 由两道工序加工圆柱体,直径不合格率为 p ,长度不合格率为 q 。 A 表示直径不合格的事件, B 表示长度不合格的事件。若该两道加工工序完全无关,那末应有

$$P(A) = p, P(B) = q, P(AB) = P(A)P(B) = pq$$

这表明事件 A 和 B 是独立的。

§2 概 率 场

在考察任一随机现象时,每次的试验或观察总可得一结果,称此结果为**基本事件**,基本事件的全体为**基本空间**,记为 U 。若把基本空间视为一个集合,其元素为基本事件,

在问题的研究中还要涉及 U 中的某些子集合 $A, B, \dots$ 这些子集合的全体记为 $\mathcal{F}$, 要求 $\mathcal{F}$ 满足:

- (1) $U \in \mathcal{F}$;
- (2) 若 $A_n \in \mathcal{F}, n=1, 2, \dots$, 则 $\bigcup_n A_n \in \mathcal{F}$;
- (3) 若 $A \in \mathcal{F}$, 则 $\bar{A} \in \mathcal{F}$.

由上面 (1), (3) 立即知 $V \in \mathcal{F}$.

在 $\mathcal{F}$ 上定义概率 P : 任取 $A \in \mathcal{F}$, $P(A)$ 应满足:

- (1) $0 \leq P(A) \leq 1, A \in \mathcal{F}$;
- (2) $P(U) = 1$;
- (3) 若 $A_n \in \mathcal{F}, A_i \cap A_j = V, i \neq j$, 则:

$P(\bigcup_n A_n) = \sum_n P(A_n)$, 称为概率的完全可加性。

这样的 $U, \mathcal{F}, P$ 称之为一个**概率场**, 记作 $(U, \mathcal{F}, P)$, 有时也称它为一个**概率空间**。

根据上述公理, 我们立即可以推出一些重要的结论:

- (1) 不可能事件的概率为零, 即 $P(V) = 0$ 。
- (2) 若 $A_i \cap A_j = V (i \neq j)$, 则

$$P\left(\bigcup_{i=1}^n A_i\right) = \sum_{i=1}^n P(A_i)$$

(见图 1—2, a)

(3) 任取 $A \in \mathcal{F}$, 有 $P(\bar{A}) = 1 - P(A)$.

(4) 若 $A \supset B$ (见图 1—2, b), 则

$$P(A - B) = P(A) - P(B)$$

(5) 若 $A \supset B$, 则 $P(A) \geq P(B)$.

(6) 一般情况 (见图 1—2, c) 我们有

$$P(A \cup B) \leq P(A) + P(B),$$

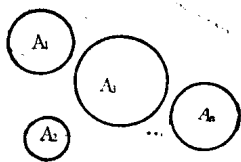


图1—2, a

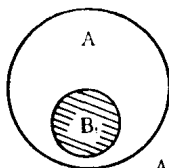


图1—2, b

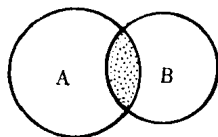


图1—2, c

$$A - B = A\bar{B} \quad A = A(B \cup \bar{B}) = AB \cup A\bar{B}$$

$$P(\cup_i A_i) \leq \sum_i P(A_i).$$

在概率场 $(U, \mathcal{F}, P)$ 中定义条件概率 $P(A|B)$ 如下:

$$P(A|B) = P(AB)/P(B) \quad (P(B) \neq 0).$$

若“已知事件 B 发生”的条件对事件 A 的概率不发生影响, 即有 $P(A|B) = P(A)$, 此时有

$$P(AB) = P(A)P(B)$$

称**事件 A 对于事件 B 独立**。

由条件概率及事件独立性的定义, 可以推出下列结果。

(1) 若事件 A 对于事件 B 独立, $P(A) \neq 0$, $P(B) \neq 0$, 则事件 B 对于事件 A 也独立, 即两个事件的独立性是对称的。因为

$$\begin{aligned} P(AB) &= P(A|B)P(B) = P(B|A)P(A) \\ &= P(A)P(B). \end{aligned}$$

我们称为 $\{A, B\}$ 独立。

(2) 若 $\{A, B\}$ 独立, 则 $\{\bar{A}, B\}, \{A, \bar{B}\}, \{\bar{A}, \bar{B}\}$ 亦都独立。因为

$$\begin{aligned} \bar{A}B &= B - AB, \\ P(\bar{A}B) &= P(B) - P(AB) = P(B) - P(A)P(B) \\ &= P(B)(1 - P(A)) = P(B)P(\bar{A}). \end{aligned}$$

独立性的概念可以推广至多个事件的情况：一组事件 $A_1, A_2, \dots, A_s$ 称为**相互独立的**，那么对任何 $r (1 \leq r \leq s)$ 及 $1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_r \leq s$ 有

$$P(A_{i_1} A_{i_2} \dots A_{i_r}) = P(A_{i_1})P(A_{i_2}) \dots P(A_{i_r}).$$

应当注意，两两独立的一组事件不一定是相互独立的。例如一个均匀的四面体，第一面染红色记为 A ，第二面是绿色记为 B ，第三面是蓝色记为 C ，第四面同时染有红、绿、蓝色记为 (ABC) 。投掷四面体时出现 A, B, C 的概率均为 $1/2$ (见图 1—2, d)

$$P(A) = P(B) = P(C) = \frac{1}{2}, \text{ 而}$$

$$P(AB) = P(BC) = P(CA)$$

$$= \frac{1}{4},$$

$$\text{然而 } P(ABC) = \frac{1}{4} \neq P(A)$$

$$P(B)P(C).$$

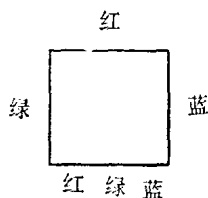


图1—2, d

(3) **全概率公式** 设事件 B 能而且只能与互不相容的事件 $A_1, A_2, \dots, A_n, \dots$ 之一同时发生，即

$$B = \bigcup_{i=1}^{\infty} BA_i$$

这里当 $i \neq j$ 时由于 $A_i A_j = \emptyset$ ，因而 $(BA_i)(BA_j) = \emptyset$ ，表明 BA_i 与 BA_j 是互不相容的，由概率的完全可加性有

$$P(B) = \sum_{i=1}^{\infty} P(BA_i)$$

$$\text{利用 } P(B|A_i) = P(BA_i)/P(A_i)$$

$$\text{就可推得 } P(B) = \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i)P(B|A_i)$$

这就是全概率公式。

全概率公式的几何意义见图 1—2, e : B 的面积为 $P(B)$, A_i 的面积为 $P(A_i)$, B 在 A_i 中所占有的面积与 A_i 的面积比值为 $P(B|A_i)$ 。

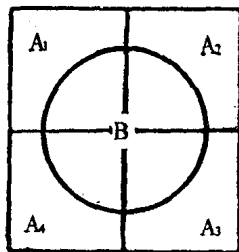


图1—2, e

(4) 贝叶斯(Bayes)公式

设事件 B 能而且只能与互不相容的事件 $A_1, A_2, \dots, A_n, \dots$ 之一同时发生, 即

$$B = \bigcup_{i=1}^{\infty} BA_i$$

于是从 $P(A_i B) = P(B)P(A_i|B) = P(A_i)P(B|A_i)$

得 $P(A_i|B) = P(A_i)P(B|A_i)/P(B)$

利用全概率公式

$$P(A_i|B) = P(A_i)P(B|A_i) / \sum_{j=1}^{\infty} P(A_j)P(B|A_j)$$

这就是贝叶斯公式。

例 1 在一段时间 t 内某电话站得到 K 次呼唤的事件 A_i^K 的概率为 $P_K(t)$, 假设在同一时间长度内得到 K 次呼唤的概率相同, 且两段时间内各自得到呼唤的事件是相互独立的, 求在 $2t$ 时间内得到 S 次呼唤的概率。

$$\text{解: } A_{2t}^S = A_t^0 A_t^S \cup A_t^1 A_t^{S-1} \cup \dots \cup A_t^{S-1} A_t^0$$

$$P(A_{2t}^S) = P_S(2t) = \sum_{i=0}^S P(A_t^i A_t^{S-i})$$

$$= \sum_{i=0}^S P(A_t^i)P(A_t^{S-i}) = \sum_{i=0}^S P_i(t)P_{S-i}(t)$$

已知 $P_K(t) = \frac{(at)^K}{K!} e^{-at}$, 这里 $a = \text{const.}$

于是

$$\begin{aligned} P(A_{2t}^s) &= P_s(2t) = \sum_{i=0}^s \frac{1}{i!} \frac{(at)^s}{(s-i)!} e^{-2at} \\ &= \frac{(at)^s}{s!} \cdot e^{-2at} \sum_{i=0}^s \frac{s!}{i!(s-i)!} \end{aligned}$$

但
$$\sum_{i=0}^s \frac{s!}{i!(s-i)!} = (1+1)^s = 2^s$$

所以
$$P_s(2t) = \frac{(2at)^s}{s!} e^{-2at}.$$

例2 带有吸收壁的随机游动。一个质点从 x 轴的某一点 K 出发 ($0 < K < N$, 且 K, N 均为整数), 随机地在直线上游动。每次向右移动一个单位的概率为 p , 向左移动一个单位的概率为 $q = 1 - p$ 。当质点游动到位置 0 和 N 时游动就停止, 即质点被吸收。 0 和 N 称为吸收壁。

设 P_K^0 和 P_K^N 分别表示质点从 K 点出发而被吸收壁 0 和 N 吸收的概率。求 P_K^0 和 P_K^N 。

解: 设 B_0 表示从 K 点出发被 0 吸收的事件, B_+ 表示从 $K+1$ 点出发被 0 吸收的事件, B_- 表示从 $K-1$ 点出发被 0 吸收的事件, 则有

$$\begin{aligned} B &= B_0 \cap \{K \rightarrow K+1\} \cup B_+ \cap \{K \rightarrow K-1\} \\ &= B_+ \cap \{K \rightarrow K+1\} \cup B_- \cap \{K \rightarrow K-1\} \end{aligned}$$

其中 $\{K \rightarrow K+1\}$ 表示质点从 K 点游动到 $K+1$ 点的事件,

因而

$$P_K^0 = pP_{K+1}^0 + qP_{K-1}^0 \quad K \neq 0, N$$

$$P_0^0 = 1, \quad P_N^0 = 0, \quad p = P(K+1|K), q = P(K-1|K)$$

上述方程的特征方程为

$$p\lambda^2 - \lambda + q = 0$$

有两根 $\lambda = 1, q/p$

其通解为 $P_K^0 = C_0 + C_1(q/p)^K$

选择 C_0, C_1 使之满足端点条件后解得

$$P_K^0 = \frac{q^N - q^K p^{N-K}}{q^N - p^N} \quad K = 0, 1, 2, \dots, N$$

而 $P_K^N = 1 - P_K^0$

例3 在炮战中, 分别在距目标250米, 200米, 150米处射击的概率为0.1, 0.7, 0.2, 而在各处命中的概率分别为0.05, 0.1, 0.2。现在已知目标被击毁, 求击毁目标的炮弹是由距目标200米射出的概率。

解: 设 A_1 为距目标250米时射击的事件,

A_2 为距目标200米时射击的事件,

A_3 为距目标150米时射击的事件,

B 为命中目标这一事件

因为 $A_1 \cup A_2 \cup A_3 = U$, 因而

$$P(A_2|B) = \frac{P(A_2)P(B|A_2)}{P(A_1)P(B|A_1) + P(A_2)P(B|A_2) + P(A_3)P(B|A_3)}$$

$$= \frac{0.7 \times 0.1}{0.05 \times 0.1 + 0.1 \times 0.7 + 0.2 \times 0.2} = 0.6087.$$