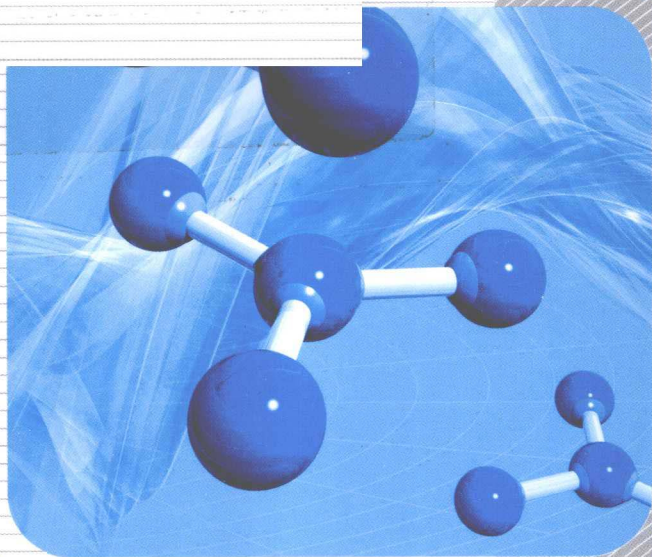


材料设计 理论及其应用

任庆利 编著



科学出版社
www.sciencep.com

材料设计理论及其应用

任庆利 编著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书从材料设计的基础出发,重点介绍了材料设计基本方法:蒙特卡罗法,有限元法,第一性原理法,人工神经网络的设计思想、步骤和方法,详细介绍了这些基本方法的相关数学内容,同时,从应用角度介绍了这些方法在材料设计中的设计实例。

本书适用于从事材料科学、化学、物理学、应用数学方面及其相关行业的科研人员,也可作为高等院校相关专业研究生及高年级本科生的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

材料设计理论及其应用/任庆利编著. —北京:科学出版社,2010
ISBN 978-7-03-026877-8

I. ①材… II. ①任… III. ①材料-设计 IV. ①TB3

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2010) 第 034173 号

责任编辑:王晶晶 / 责任校对:王万红

责任印制:吕春珉 / 封面设计:耕者工作设计室

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

*

2010年3月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2010年3月第一次印刷 印张:9 1/4

印数:1—2 000 字数:176 000

定价:28.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

销售部电话 010-62134988 编辑部电话 010-62137026(BA08)

版权所有,侵权必究

举报电话:010-64030229; 010-64034315; 13501151303

前 言

随着计算机技术的发展,计算材料学正成为材料研究领域的重要分支。除了日益增多的流程参数的计算机控制外,通过计算机模拟,深入研究材料的结构、组成及其在各物理、化学过程中微观变化机制以达到材料成分、结构及制备参数的最佳组合,即以材料设计为目的,已成为材料科学发展的热点。

材料计算与设计有两大特点:第一是具有“前瞻性”和“创新性”,能在更为广阔的范围内进行创新探索。例如,在诺贝尔物理学奖获得者江崎玲于奈(Leo Esaki)等提出设计半导体超晶格新概念之后,量子阱结构的半导体激光器及其他光电子器件取得惊人进展。第二是计算机可以模拟进行现实中不能或很难实现的实验,如材料在极端压力、温度条件下的相变,模拟原子及以下尺度的研究等,而且可以验证已有理论,也可以根据模拟结果修正或完善已有理论,并可以从模拟研究结果出发指导、改善实验室实验。因此,材料计算与设计已成为除实验和理论外解决材料科学中实际问题的第三个重要组成部分,使材料的研究跳出了传统的“炒菜法”(trial-error)而发展为基于原理的方法。

但是,我们发现目前存在这样一个问题,就是现有的理论研究往往与材料设计脱节。以大学为例,在“数学物理方程”、“量子力学”、“固体物理”等课程方面,人们给材料专业的本科同学打下了坚实的基础,但学生的感觉是,这些课程难度很大,进一步怎么用似乎没有体会到。另外,调剂到材料专业的计算机专业本科毕业的研究生进行材料计算与设计时,他们由于没有“晶体化学”、“材料学”等知识背景,拿着计算机这样一个强大的计算工具,面对材料的原子、分子等微观价键结构,感觉无从下手。大学是培养国家科学和工程技术人才的摇篮,为尽快使这些未来的科学家和工程师,在知识结构上,将理论研究和材料设计自然有机地联系起来,也是作者编写本书的出发点之一。

本书有如下特点:

- (1) 注重基本概念、基本原理的介绍。
- (2) 注重基本理论模型的数学推导。
- (3) 注重基本方法在材料计算与设计中的应用介绍。
- (4) 注重基本方法的特点及其仍存在的待解决问题的介绍。

本书的内容共分四大部分,各部分自成体系,但从其理论模型的数学推导上,我们能发现它们有共同的基础。

本书的出版得到全国博士后管理委员会及其具体设站单位的资助,在此表示

最为衷心的感谢;对协助本书公式录入工作的研究生郗国亮、拓勇、许焱、孙伯韬、赵婧同学,表示衷心的感谢;罗强博士后对本书的初稿,提出了许多宝贵意见和建议,编者在此表示衷心的感谢;最后,对本书取材论文和著作的作者表示衷心感谢。

由于编者水平的限制,加之时间仓促,本书难免存在一些不足之处,望读者批评指正。

目 录

前言

第一部分 蒙特卡罗方法

第 1 章 蒙特卡罗方法的数学基础	3
§ 1.1 蒙特卡罗方法的基本概念	3
§ 1.2 积分的蒙特卡罗方法计算	6
§ 1.3 数学物理方程的蒙特卡罗方法计算	10
第 2 章 蒙特卡罗方法模拟相变	16
§ 2.1 面心立方体系相图	16
§ 2.2 超晶格相变的模拟	19
第 3 章 蒙特卡罗方法模拟反应动力学	23
§ 3.1 解化学反应动力学问题的期望估计方法	23
§ 3.2 烧结反应过程	28
§ 3.3 多晶材料的晶粒生长	33
参考文献	37

第二部分 有限元法

第 4 章 有限元法	41
§ 4.1 有限元法简介	41
§ 4.2 扩展有限元法	43
§ 4.3 非线性有限元分析	53
第 5 章 有限元分析的数学基础	56
§ 5.1 变分及其特征	56
§ 5.2 变分法与欧拉方程	60
§ 5.3 变分问题的直接方法	63
第 6 章 有限元法在材料设计中的应用	72
§ 6.1 金属丝的扁平压制	72
§ 6.2 功能梯度材料	74
§ 6.3 烧结工艺过程	82
参考文献	87

第三部分 第一性原理法

第 7 章 第一性原理法的相关理论计算	93
§ 7.1 第一性原理法简介	93
§ 7.2 相关微分方程的求解	96
§ 7.3 用分离变量法解单电子薛定谔方程	101
§ 7.4 用变分法求解薛定谔方程	104
§ 7.5 多重散射 X_α 方法	105
第 8 章 第一性原理在材料设计中的应用	110
§ 8.1 在氧化环境中的 Ag-Cu 合金表面	110
§ 8.2 Cu/MgO(001)界面	114
§ 8.3 钛酸铅表面结构和稳定性	116
§ 8.4 立方钙钛矿结构的 SrMO_3 ($M = \text{Ti}, \text{V}, \text{Zr}, \text{Nb}$) 的弹性和电 性能	120
参考文献	123

第四部分 人工神经网络

第 9 章 人工神经网络发展概述	127
第 10 章 人工神经网络在材料科学中的应用	130
§ 10.1 BP 算法的分析与改进措施	130
§ 10.2 应用 BP 神经网络研究镁铝水滑石纳米晶制备工艺	132
§ 10.3 应用 BP 神经网络研究水滑石/聚合物纳米复合材料的制备 工艺	135
参考文献	139

第一部分 蒙特卡罗方法

在第二次世界大战期间, Von Neuman 和 Ulam 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。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。

蒙特卡罗方法也可称为随机模拟 (random simulation) 方法, 或称为随机抽样 (random sampling) 技术或统计试验。它是以概率论和数理统计为基础, 通过统计实验达到计算某个量的目的。蒙特卡罗方法不仅用于求解确定性的数学问题, 而且更适合求解随机性问题, 尤其是当问题来源于物理、化学以及包括材料科学在内的其他学科的实际问题时, 往往可以对所考虑的问题进行直接模拟, 即根据实际问题的概率法则, 用电子计算机进行抽样实验。

第 1 章 蒙特卡罗方法的数学基础

§ 1.1 蒙特卡罗方法的基本概念^[1~3]

1. 样本均值

令 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 为一组 n 个独立分布的随机变量, 令 $h(x_i)$ 为 x 的一个函数 ($i = 1, 2, \dots, n$), $h(x)$ 的样本均值定义为

$$\widetilde{h}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(x_i) \quad (1.1.1)$$

2. 抽样方法

(1) 合理抽样过程。对于一个给定的概率密度函数 $f(x)$ 和分布函数 $F(x)$, 如果一个数学算法或过程生成一个结果 x , 而且对于每一个给定的 x_0 都满足条件

$$P_r[x \leq x_0] = F(x_0) \quad (1.1.2)$$

则这个算法或过程就是一个合理的抽样过程。

考虑等式

$$\int_{-\infty}^x f(x') dx' = F(x) = \xi \quad (1.1.3)$$

并求解 x 。其中 ξ 是由定义在 $[0, 1]$ 区间上的均匀分布 $u(x)$ 所产生的一个随机数。

(2) 分布函数抽样方法。求解方程 (1.1.3) 就能得到一个随机变量的样本观察值 x , 这一过程就是分布函数 $F(x)$ 的一个抽样过程。

(3) 指数分布抽样。对于指数分布的概率密度函数, 式 (1.1.3) 的形式为 $1 - e^{-\lambda x} = \xi$, 抽样公式变为

$$t = -\frac{\ln(1-\xi)}{\lambda} \quad (1.1.4)$$

因此, 如果 ξ 是从 $[0, 1]$ 区间上的均匀分布产生的一个随机数, 那么 t 就是指数分布随机变量的一个样本观察值。因为 $(1-\xi)$ 也是 $[0, 1]$ 区间上的均匀分布的随机变量, 可以将表达式简化为 $t = -(\ln \xi)/\lambda$ 。

(4) 均匀分布。对于区间 $[a, b]$ 上的均匀分布, 有 $F(t) = (t-a)/(b-a)$, 代入式 (1.1.3) 可以得到均匀分布的一个抽样值

$$t = (b-a) \times \xi + a \quad (1.1.5)$$

(5) 韦伯分布。将分布函数 $F(t) = 1 - e^{-t^\beta}$ 代入式(1.1.3)中得

$$t = \left[-\frac{\ln(1-\xi)}{\lambda} \right]^{1/\beta} \quad (1.1.6)$$

(6) 矩型区域的均匀抽样。考虑平面上的一个矩形区域 $0 \leq x \leq a$ 和 $0 \leq y \leq b$, 为了对该区域内的点进行均匀抽样, 先对 x 坐标在 $[0, a]$ 区间内均匀抽样, 然后对 y 坐标在 $[0, b]$ 区域内均匀抽样, 最后利用式(1.1.5)得到 $x = a\xi$ 和 $y = b\xi$, $(a\xi, b\xi)$ 就是一个均匀的抽样点。

(7) 圆形区域上的均匀抽样。考虑一个半径为 R 的圆形区域, 用极坐标表示这个圆形区域上均匀分布的抽样点 (r, φ) 。由于圆的对称性, 方位角 φ 的抽样可以表示为 $\varphi = 2\pi\xi$ 。

3. 随机变量

经常碰到的随机变量有两类: 一类是离散型随机变量; 另一类是连续型随机变量。

(1) 离散型随机变量 (ξ) 只能取有限个数值, 能够一一列举出来, ξ 可用分布列

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1, x_2, \dots, x_n, \dots \\ p_1, p_2, \dots, p_n, \dots \end{array} \right\} \quad (1.1.7)$$

来描写, 它表示 ξ 取值 x_i 的概率为 p_i ($i=1, 2, \dots, n, \dots$)。

(2) 连续型随机变量的可能值布满某个区间, 不能一一列举而是连续的, 因此不能像离散型随机变量那样用分布列来描写它的概率分布, 而要用概率分布密度函数来描写。

考虑连续型随机变量 ξ 落在区间 $[x, x+\Delta x]$ 内的概率 $p(x \leq \xi < x+\Delta x)$, 如果极限

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{p(x \leq \xi < x+\Delta x)}{\Delta x} = f(x) \quad (1.1.8)$$

存在, 则函数 $f(x)$ 描写了 ξ 在点 x 的概率密度, 把 $f(x)$ 叫做随机变量 ξ 的概率分布密度, 简称分布密度或密度函数。于是, 随机变量 ξ 落在 $[a, b]$ 内的概率 $p(a \leq \xi < b)$ 可写为

$$p(a \leq \xi < b) = \int_a^b f(x) dx \quad (1.1.9)$$

显然, 式(1.1.9)只有当 $f(x)$ 可积时才有意义。由此可得连续型随机变量及其分布密度的定义: 若对随机变量 ξ , 存在区间 $[a, b]$ 内的非负可积函数 $f(x)$, 使式(1.1.9)成立, 则称 $f(x)$ 为连续随机变量 ξ 的分布密度。

4. 随机变量的分布函数

随机变量的分布函数描写随机变量的概率分布规律。分布函数 $F(x)$ 在 x 处的值等于随机变量 ξ 取值小于或等于 x 这样一个随机事件的概率。

对于离散型随机变量 ξ , 分布函数 $F(x)$ 为阶梯函数

$$F(x) = p(\xi \leq x) = \sum_{x_i \leq x} p_i \quad (1.1.10)$$

对于连续型随机变量, 分布函数 $F(x)$ 与分布密度 $f(x)$ 满足

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(x) dx \quad (1.1.11)$$

所以分布密度 $f(x)$ 即为分布函数 $F(x)$ 的导函数

$$f(x) = \frac{dF(x)}{dx} \quad (1.1.12)$$

5. 数学期望和方差

对于离散型随机变量 ξ , 若已知其取值 x_i 的概率为 p_i ($i=1, 2, \dots, n$), 则其数学期望定义为

$$E\xi = \sum_{i=1}^n x_i p_i \quad (1.1.13)$$

若记

$$D\xi = \sum_i p_i (x_i - E\xi)^2 \quad (1.1.14)$$

则 $D\xi$ 就称为方差。

对连续型随机变量 ξ , 若已知分布密度 $f(x)$, 则数学期望为

$$E\xi = \int_{-\infty}^{\infty} x f(x) dx \quad (1.1.15)$$

方差为

$$D\xi = \int_{-\infty}^{\infty} (x - E\xi)^2 f(x) dx \quad (1.1.16)$$

6. 大数定理和中心极限定理

1) 大数定理

设 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n, \dots$ 为一随机变量序列, 独立同分布, 数学期望值 $E\xi_i = a$ 存在, 则对任意 $\epsilon > 0$, 有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} p \left\{ \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - a \right| < \epsilon \right\} = 1 \quad (1.1.17)$$

大数定理指出, 当 $n \rightarrow \infty$ 时, 算术平均收敛到数学期望(或统计平均) a 。

2) 中心极限定理

设 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n, \dots$ 为一随机变量序列, 独立同分布, 数学期望为 $E\xi_i = a$, 方差 $D\xi_i = \sigma^2$, 则当 $n \rightarrow \infty$ 时

$$p\left\{\frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - a}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} < X_a\right\} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{X_a} e^{-\frac{x^2}{2}} dx \quad (1.1.18)$$

利用中心极限定理, 当 $n \rightarrow \infty$ 时, 还可得到

$$\begin{aligned} & p\left\{-X_a < \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - a}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} < X_a\right\} \\ &= p\left\{\frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - a}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} < X_a\right\} - p\left\{\frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - a}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} < -X_a\right\} \\ &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{X_a} e^{-\frac{x^2}{2}} dx - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{-X_a} e^{-\frac{x^2}{2}} dx = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{X_a} e^{-\frac{x^2}{2}} dx \end{aligned}$$

于是有

$$p\left\{\left|\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - a\right| < \frac{X_a \sigma}{\sqrt{n}}\right\} \rightarrow \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{X_a} e^{-\frac{x^2}{2}} dx \quad (1.1.19)$$

若

$$\frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{X_a} e^{-\frac{x^2}{2}} dx = 1 - \alpha \quad (1.1.20)$$

那就是说, 当 n 很大时, 不等式

$$\left|\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - a\right| < \frac{X_a \sigma}{\sqrt{n}} \quad (1.1.21)$$

成立的概率为 $1 - \alpha$ 。通常将 α 称为可信度, $1 - \alpha$ 就是可信水平。 α 和 X_a 的关系可以在正态分布的积分表中查到。

§ 1.2 积分的蒙特卡罗方法计算

1. 一重定积分的蒙特卡罗算法^[4]

假定函数 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 内有界连续且 $f(x) \geq 0$, 求定积分 $I = \int_a^b f(x) dx$ 。

为计算出定积分值,可构造一概率模型:取一个边长分别为 $(b-a)$ 和 M 的矩形 D ,使曲边梯形在矩形域之内(图 1.2.1),并在矩形内随机投点,假设随机点均匀地落在整个矩形之内,则落在图中灰色区域内的随机点数 k 与投点总数 N 之比 k/N ,就近似等于灰色区面积与矩形面积之比,从而得出定积分 $I = k/N(b-a)M$ 。

下面举例说明蒙特卡罗方法的应用,计算 $\int_{-1}^1 e^{-x^2} dx$ 。

对于上式,我们很难求出其原函数,用牛顿-莱布尼茨公式无法求解,这里用蒙特卡罗方法求解,如图 1.2.2 所示。

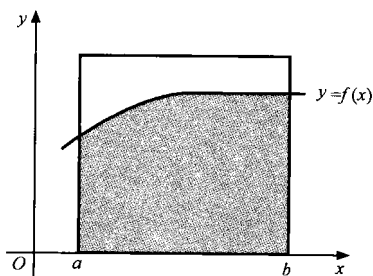


图 1.2.1 曲边梯形^[4]

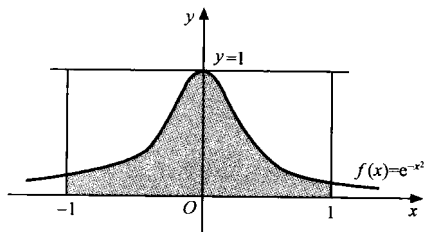


图 1.2.2 $f(x)=e^{-x^2}$ 的积分曲线图^[4]

步骤 1,产生矩形域 D 内的 N 个均匀随机点 $P_i(x_i, y_i)$ 。

步骤 2,统计满足条件 $y_i \leq f(x)$ 的落在曲边梯形内随机点 P_i 的数目 k 。

步骤 3,若取 $M=1, a=-1, b=1, N=100\,000$,则定积分的近似值 $I \approx \frac{k}{N}(b-a)M = \frac{k}{5000}$ 。

将以上步骤利用 Matlab 软件编程,并重复执行 6 次,所得计算结果如表 1.2.1 所示。

表 1.2.1 计算结果^[4]

第 i 次	1	2	3	4	5	6
积分近似值	1.4934	1.4928	1.4963	1.4936	1.4946	1.4941

由于随机误差的影响,每次计算机模拟的结果可能不一样,但是各次计算结果总是在准确值附近微小摆动。

2. 二重积分的蒙特卡罗算法^[4]

对二重积分 $I = \iint f(x, y) dx dy$, 设 $f(x, y)$ 为区域 A 上的有界函数且 $f(x, y) \geq 0$, 据其几何意义,它是以 $f(x, y)$ 为曲面顶, A 为底的曲顶柱体 C 的体积。据

此,用均匀随机数计算二重积分的蒙特卡罗方法的基本思路如下:

假设曲顶柱体 C 包含在已知体积为 V_D 的几何体 D 的内部,在 D 内产生 N 个均匀随机点,统计出在 C 内部的随机点数目 N_C ,则 $I \approx \frac{V_D}{N} N_C$ 。

3. 多重积分计算^[2,5~7]

1) 多重积分的蒙特卡罗方法^[2]

假设要求多重积分

$$J = \int_a \cdots \int_a f(x_1, x_2, \cdots, x_n) dx_1 dx_2 \cdots dx_n \quad (1.2.1)$$

的值。积分区域 A 是有界闭区域,被积函数 $f(x, y)$ 在区域 A 中是有界的。因此,总可以通过一些简单的变换,使 A 包含在 n 维单位立方体中,且被积函数 $f(x, y)$ 满足不等式

$$0 \leq f(x, y) \leq 1$$

于是我们可以将积分看成是 $n+1$ 维空间中立方体 V 的体积,而立方体 V 是由 n 维空间的区域 A 上的超曲面 $z = f(x, y)$ 所围成的。

现在进行随机试验,随机抽选区间 $(0, 1)$ 上均匀分布的 $n+1$ 个随机数,构成

$$R = (R_1, R_2, \cdots, R_n, U)$$

考虑 R 是否属于立方体 V 内。如果是,则记此次试验是成功的。 N 次试验后有 m 次试验成功,则积分 J 的近似值为

$$J \approx \frac{m}{N} \quad (1.2.2)$$

2) 多重积分的蒙特卡罗方法^[5~7]

任何一个积分都可看成某个随机变量的数学期望。因此,在利用蒙特卡罗法计算多重积分时,采用了这个随机变量的算术平均值来作为其近似值。

以一般的 S 重积分为例

$$\theta = \int_{V_s} G(P) dP \quad (1.2.3)$$

式中: $P = P(x_1, x_2, \cdots, x_s)$ 表示 S 维空间的点; V_s 表示积分区域。

在使用蒙特卡罗方法解算问题时,首先构造或描述概率过程。由于计算定积分本身不是随机性质的确定性问题,在使用蒙特卡罗法求解时,要将其由不具有随机性质的问题转化为随机性质的问题。因此,在求解时必须构造一个概率过程(分布密度函数),使其某些参量正好是所要求问题的解。

(1) 在所求积分区域上构造一个分布密度函数,取 V_s 上任一概率密度函数 $f(P)$,它满足条件 $f(P) \neq 0$ 。当 $P \in V_s$, $G(P) \neq 0$ 时,令

$$g(P) = \begin{cases} G(P)/f(P) & f(P) \neq 0 \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad (1.2.4)$$

则式(1.2.3)可改写为

$$\theta = \int_{V_s} g(P)f(P)dP = E[g(P)] \quad (1.2.5)$$

式中: θ 表示随机变量 $g(P)$ 的数学期望。

另外,建立各种估计量,使其期望值是所要求解问题的解。

(2) 用算术平均值来近似 $g(P)$ 的数学期望。现从 $f(P)$ 中抽取随机变量 P 的 N 个样本 $\{P_i\}_{i=1}^N$, 则算术平均值为

$$\tilde{g}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(P_i) \quad (1.2.6)$$

就是积分值 θ 的一个近似估计。

3) 采用均匀随机数的多重积分蒙特卡罗法^[8,9]

蒙特卡罗法计算多重积分时,采用均匀随机数法得到随机变量是常用方法之一。此时,选取 $f(P)$ 的方法是取 V_s 上的均匀分布,即

$$f(P) = \begin{cases} 1/V_s & P \in V_s \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad (1.2.7)$$

式中: V_s 表示积分区域的体积。此时 $g(P) = V_s G(P)$ 。

根据式(1.2.3)、式(1.2.5)、式(1.2.6)和式(1.2.7),采用均匀分布随机数计算多重积分时,有

$$\tilde{g}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [G(P_i)V_s] \quad (1.2.8)$$

设 $f(x, y)$ 为区域 D 上的有界函数,区域 $D: a \leq x \leq b, c \leq y \leq d$, 其面积 $A = (b-a)(d-c)$, 不妨设 (x_i, y_i) ($i = 1, \dots, N$) 为落在区域 D 上的均匀分布随机数列,根据式(1.2.8),则用均匀随机数计算二重积分 $\iint_D f(x, y) dx dy$ 时,当有 N 充分大时,有

$$\iint_D f(x, y) dx dy \approx \frac{A}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i, y_i) \quad (1.2.9)$$

将式(1.2.9)推广到多重积分,有

$$\int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \cdots \int_{a_S}^{b_S} f(x_0, x_1, \dots, x_S) dx_1 dx_2 \cdots dx_S \approx \frac{1}{N} \left[\sum_{i=1}^N f(x_1, x_2, \dots, x_i) \right] \prod_{j=1}^S (b_j - a_j) \quad (1.2.10)$$

式中: S 为积分变量的个数。 N 的取值要充分大。

采用式(1.2.10)进行积分计算时,首先需要获取随机数列, $(t_1, t_2, \dots, t_k)$ 代入被积函数,然后乘以对应积分变量上下限之差的累积,重复 N 次,并累加求和,当 N 充分大时,所得结果即为积分的近似结果。

使用式(1.2.10)编写程序计算积分时,其流程可分解为以下8个步骤^[8]。

(1) 设置变量 Sum, 并令其初值为 0, 设置变量 N 并对其赋初值, N 的取值要求充分大。

(2) 取 0 到 1 之间均匀分布的随机数列, $(t_1, t_2, \dots, t_S)$, 其中 S 为积分变量的个数。

(3) 计算积分变量 x_j 的取值 u_j , u_j 取值介于 a_j 和 b_j 之间, 由 $u_j = a_j + (b_j - a_j) \times t_j$ ($j = 0, 1, 2, \dots, k$, a_j 和 b_j 分别为积分变量 x_j 的积分上、下限) 计算可实现, 重复 S 次, 求得随机数列 $(u_1, u_2, \dots, u_S)$ 。

(4) 将第(3)步求得随机数列依次代入计算被积函数 $f(x_0, x_1, \dots, x_S)$, 求得被积函数的值 V。

(5) 计算积分变量上下限差值的累积, $Mul = \prod_{j=0}^S (b_j - a_j)$ 。

(6) 计算第(4)步所求得的 V 值与第(5)步所求得的 Mul 的乘积, 与 Sum 相加, 并赋值给 Sum。

(7) 重复第(2)~(6)步 N 次。

(8) Sum 除以 N, 所得结果就是积分 $\int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \dots \int_{a_S}^{b_S} f(x_0, x_1, \dots, x_S) dx_1 dx_2 \dots dx_S$ 的近似解。

§ 1.3 数学物理方程的蒙特卡罗方法计算

1. 蒙特卡罗方法在热传导方程中的应用^[10]

蒙特卡罗方法解题有 3 个主要步骤^[11]: ① 构造或描述概率过程; ② 从已知概率分布进行抽样; ③ 建立各种估计量。

1) 热传导方程边值问题的数值解

由于温度不均匀, 热量从温度高的地方向温度低的地方转移, 这种现象称为热传导。

一维热传导方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad 0 < x < l \quad 0 < t \leq T \quad (1.3.1)$$

初始条件

$$u(x, 0) = \phi(x) \quad 0 \leq x \leq l \quad (1.3.2)$$

边界条件

$$\begin{cases} u(0, t) = \mu_1(t) \\ u(l, t) = \mu_2(t) \end{cases} \quad 0 \leq t \leq T \quad (1.3.3)$$