

蒙特卡罗方法理论 和应用

康崇禄 著



科学出版社

蒙特卡罗方法理论和应用

康崇禄 著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书比较全面系统地介绍蒙特卡罗方法的理论和应用. 全书 15 章, 前 8 章是蒙特卡罗方法的理论部分, 包括蒙特卡罗方法简史、随机数产生和检验、概率分布抽样方法、马尔可夫链蒙特卡罗方法、基本蒙特卡罗方法、降低方差基本方法、拟蒙特卡罗方法和序贯蒙特卡罗方法. 后 7 章是蒙特卡罗方法的应用部分, 包括确定性问题、粒子输运、稀薄气体动力学、自然科学基础、数理统计学和可靠性、金融经济学及科学实验模拟.

本书内容丰富, 给出许多算法和算例, 可供从事科学技术、工程、统计和金融经济等领域的研究人员以及高等院校研究生和本科生参考.

图书在版编目(CIP)数据

蒙特卡罗方法理论和应用/康崇禄著. —北京: 科学出版社, 2014
ISBN 978-7-03-041895-1

I. ①蒙… II. ①康… III. ①蒙特卡罗法—研究 IV. ①O242.28

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2014) 第 215342 号

责任编辑: 李 欣 / 责任校对: 胡小洁
责任印制: 赵德静 / 封面设计: 陈 敬

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>

北京佳信达欣艺术印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015 年 1 月第 一 版 开本: 720 × 1000 1/16

2015 年 1 月第一次印刷 印张: 29 1/4

字数: 566 000

定价: 148.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

序

蒙特卡罗方法引入国内,是在 20 世纪 50 年代末.从美国回来的徐钟济教授,在安徽大学和中国科学院计算技术研究所讲授研究蒙特卡罗方法.与此同时,裴鹿成研究员在中国科学院原子能研究所开展蒙特卡罗方法研究,在粒子输运领域做了许多实际应用工作.1964 年到 1966 年,原子能所理论室成立裴鹿成领导的 5 人专门研究小组,本书作者是其中成员,他们完成核爆炸中子和伽马射线输运蒙特卡罗模拟,为核试验提供可靠的理论数据,作出了贡献.

最近 30 年,国外蒙特卡罗方法发展很快.随机数产生方法和检验方法面目一新,各种类型概率分布的随机抽样方法更加完善更为有效,出现许多高效的蒙特卡罗方法.蒙特卡罗方法应用领域扩展得很宽,涵盖了科学技术、工程、统计和金融经济.国外出版了许多关于蒙特卡罗方法的专著.20 世纪 80 年代国内出版了裴鹿成和徐钟济的书,对我国蒙特卡罗方法发展起了很大的促进作用.此后,偶尔有蒙特卡罗应用专题著作出版,但是全面介绍蒙特卡罗方法理论和应用的著作很少,满足不了广大读者的需要,这可能是人才断层的影响.

本书作者早年跟随裴鹿成学习蒙特卡罗方法,在利用蒙特卡罗方法解决核辐射输运、热辐射输运、稀薄气体动力学、系统分析和科学试验模拟等方面,曾经取得过很好的成果.由于有长期技术积累,加上近年广泛深入地跟踪研究,写成《蒙特卡罗方法理论和应用》一书.本书比较全面系统地介绍蒙特卡罗方法的理论发展,基本上反映应用发展情况.本书的理论部分包括三种类型随机数产生和检验方法、三种类型概率分布的抽样方法和各种高效蒙特卡罗方法.应用部分包括确定性问题、粒子输运、稀薄气体动力学、物理学化学生物学、滤波问题、数理统计学、可靠性问题、金融经济学和科学实验模拟等应用领域.

本书内容丰富,比较系统全面,具有较高实用价值.本书的出版将填补国内最近 30 年蒙特卡罗方法理论方面出版物的空缺,推动国内蒙特卡罗方法的发展.人们面临的科学技术问题越来越复杂,维数越来越高,难度越来越大.蒙特卡罗方法是解决高维复杂问题的有效方法,是很有特色的计算模拟方法.由于蒙特卡罗方法

应用领域的扩展, 从事蒙特卡罗方法的科学工作者很多, 该书出版将对他们有所帮助.



2013 年 7 月 15 日于上海

前 言

人们将蒙特卡罗方法比喻为“最后的方法”，是因为它可以解决其他数值方法不能解决的问题。没有计算机就没有蒙特卡罗模拟，现在除非大规模并行蒙特卡罗模拟要用巨型机，目前每秒运算 10 亿次的微机，就可以做相当规模的蒙特卡罗模拟，本书的算例都是用微机完成的。随着微机的普及和蒙特卡罗方法应用的不断扩展，蒙特卡罗模拟将进入家庭，在家里就能做蒙特卡罗模拟。之所以写此书，除了乔登江院士在序中说的原因，再就是希望更多的人，特别是年轻同志，学习蒙特卡罗方法，更为广泛地利用蒙特卡罗模拟，解决更多的科学技术问题。

本书第 1 章是蒙特卡罗方法简史，由于历史资料的公开，现在已经可以比较真实地介绍蒙特卡罗方法的开创历史。第 2~8 章是蒙特卡罗方法的理论部分，包括如下内容：真随机数、伪随机数和拟随机数的产生方法；随机数检验方法只是介绍严格的统计检验方法。随机抽样方法有直接抽样方法、马尔可夫链蒙特卡罗方法和未知概率分布抽样方法。除了降低方差基本技巧以外，还有许多高效蒙特卡罗方法，例如，互熵方法、稀有事件模拟方法、最优化蒙特卡罗方法、马尔可夫链蒙特卡罗模拟方法、拟蒙特卡罗方法、序贯蒙特卡罗方法和并行蒙特卡罗方法等。并行蒙特卡罗方法只是给出并行随机数产生方法和并行抽样方法。

第 9~15 章是蒙特卡罗方法的应用部分，包括确定性问题、粒子输运、稀薄气体动力学、物理学化学生物学、数理统计学、可靠性问题、金融经济学和科学实验模拟。粒子滤波和粒子分裂放在序贯蒙特卡罗方法叙述，还有许多应用领域没有包括在本书中。蒙特卡罗方法的理论与具体实际应用之间有一座联系桥梁，就是基础应用方法。掌握了基础应用方法，具体应用就比较容易些。作者介绍蒙特卡罗方法的应用，不是着眼于应用领域的某个具体应用，而是着重于应用原理、基本概念和基本算法，不涉及那些繁杂的专业性很强的具体应用。

本书给出的算例，大多数经过作者在计算机上编程计算。关于伪随机数产生和检验程序，只在附录给出 MT19937 伪随机数的程序。拟随机数产生程序和算例程序，特别是拟随机数序列产生需要很多基础数据，由于篇幅限制，本书无法给出，需要的读者可以通过电子邮箱获取，作者的电子邮箱是 kangchonglu@sina.com。

裴鹿成先生是作者学习蒙特卡罗方法的启蒙老师，感谢裴先生的教诲。张孝泽

同志是作者的良师益友, 可惜他英年早逝. 感谢乔登江院士对本书写作和出版给予的关心和支持. 书中难免有不足之处, 敬请读者批评指正.

康崇禄

2014 年 4 月于北京

目 录

序

前言

第 1 章 蒙特卡罗方法简史	1
1.1 蒙特卡罗方法产生历史	1
1.1.1 启蒙时期历史	1
1.1.2 开创时期历史	2
1.2 蒙特卡罗方法发展简况	7
1.2.1 蒙特卡罗方法发展概要	7
1.2.2 蒙特卡罗方法发展动力	9
1.2.3 蒙特卡罗方法存在问题	10
参考文献	12
第 2 章 随机数产生和检验	13
2.1 真随机数产生器	13
2.1.1 噪声真随机数产生器	13
2.1.2 量子真随机数产生器	13
2.2 早期伪随机数产生器	14
2.2.1 伪随机数产生方法	14
2.2.2 早期伪随机数产生方法	15
2.2.3 线性同余产生器问题	18
2.3 伪随机数产生器的发展	20
2.3.1 非线性同余产生器	20
2.3.2 多步线性递推产生器	21
2.3.3 进位借位运算产生器	22
2.3.4 迟延斐波那契产生器	24
2.3.5 线性同余组合产生器	24
2.3.6 通用组合产生器	26
2.3.7 麦森变型产生器	28
2.3.8 多维随机数产生方法	31
2.4 随机数理论检验和统计检验	32
2.4.1 伪随机数理论检验	32

2.4.2	随机数统计检验原理	33
2.4.3	随机数统计检验程序	34
2.4.4	严格的统计检验方法	34
2.4.5	随机数统计检验结果	41
	参考文献	42
第 3 章	概率分布抽样方法	46
3.1	随机抽样方法概述	46
3.1.1	概率分布抽样	46
3.1.2	直接抽样方法原理	47
3.2	随机变量基本抽样方法	48
3.2.1	逆变换算法	48
3.2.2	取舍算法	50
3.2.3	复合算法	53
3.2.4	复合取舍算法	53
3.3	离散随机变量高效抽样方法	55
3.3.1	高效抽样方法	55
3.3.2	别名算法	56
3.3.3	布朗算法	57
3.3.4	直接查找算法	58
3.3.5	马萨格利亚算法	58
3.3.6	加权算法	59
3.4	连续随机变量高效抽样方法	62
3.4.1	变换算法	62
3.4.2	均匀比值算法	65
3.4.3	高效抽样方法	66
3.4.4	自动抽样方法	69
3.5	随机向量抽样方法	71
3.5.1	条件概率密度算法	71
3.5.2	取舍算法	72
3.5.3	仿射变换算法	73
3.5.4	相关随机向量抽样的困难	74
3.6	随机过程抽样方法	75
3.6.1	随机过程抽样算法	75
3.6.2	布朗运动抽样方法	76
3.7	未知概率分布抽样方法	79

3.7.1	系词抽样方法	79
3.7.2	统计参数抽样方法	81
	参考文献	83
第 4 章	马尔可夫链蒙特卡罗方法	86
4.1	马尔可夫链性质和抽样原理	86
4.1.1	直接抽样方法的困难	86
4.1.2	马尔可夫链性质	87
4.1.3	抽样方法原理	90
4.2	通用梅特罗波利斯算法	91
4.2.1	梅特罗波利斯算法	91
4.2.2	黑斯廷斯算法	92
4.2.3	算法收敛性证明	95
4.2.4	算法诊断监视	97
4.2.5	抽样方法改进和发展	100
4.3	建议概率分布改进方法	101
4.3.1	随机行走算法	101
4.3.2	独立抽样算法	102
4.3.3	关联性多点建议算法	105
4.4	条件概率分布抽样方法	106
4.4.1	吉布斯算法	106
4.4.2	完备化吉布斯算法	109
4.4.3	混合吉布斯算法	110
4.4.4	聚类算法	111
4.5	特殊抽样方法	112
4.5.1	打了就跑算法	112
4.5.2	辅助变量算法	113
4.5.3	杂交蒙特卡罗算法	115
4.6	改进方法共同框架	116
4.6.1	广义马尔可夫链算法	116
4.6.2	切片算法	117
4.6.3	可逆跳跃算法	118
4.7	精确抽样方法	119
4.7.1	耦合过去算法	119
4.7.2	向前耦合算法	121
4.8	马尔可夫链蒙特卡罗模拟	122

4.8.1	马尔可夫链的预热期	122
4.8.2	马尔可夫链蒙特卡罗模拟方法	123
4.8.3	提高模拟效率	123
	参考文献	124
第 5 章	基本蒙特卡罗方法	127
5.1	估计值蒙特卡罗方法	127
5.1.1	蒙特卡罗方法基本框架	127
5.1.2	蒙特卡罗方法数学性质	128
5.1.3	蒙特卡罗方法误差	129
5.1.4	蒙特卡罗方法效率	131
5.2	直接模拟方法	132
5.2.1	直接模拟方法描述	132
5.2.2	蒲丰投针直接模拟	133
5.2.3	射击打靶直接模拟	134
5.3	降低方差提高模拟效率方法	136
5.3.1	降低方差技巧	136
5.3.2	提高模拟效率方法	136
5.3.3	互熵方法概述	137
5.4	最优化蒙特卡罗方法	138
5.4.1	最优化问题	138
5.4.2	随机搜索算法	140
5.4.3	随机近似算法	144
5.4.4	样本平均近似算法	144
5.4.5	调优最优化算法	145
5.4.6	互熵最优化算法	147
	参考文献	148
第 6 章	降低方差基本方法	150
6.1	降低方差原理和技巧	150
6.1.1	降低方差原理	150
6.1.2	降低方差技巧	150
6.2	降低方差基本技巧	151
6.2.1	重要抽样	151
6.2.2	分层抽样	155
6.2.3	控制变量	159
6.2.4	对偶随机变量	161

6.2.5	公共随机数	163
6.2.6	条件期望	164
6.2.7	样本分裂	165
6.3	降低方差技巧事例	166
6.3.1	桥网最短路径模拟	166
6.3.2	圆周率随机投点模拟	169
6.4	稀有事件模拟方法	172
6.4.1	稀有事件概率估计	172
6.4.2	矩生成函数方法	173
6.4.3	条件估计方法	174
6.4.4	互熵方法	176
6.4.5	分裂方法	177
	参考文献	180
第 7 章	拟蒙特卡罗方法	183
7.1	拟随机数产生方法	183
7.1.1	拟蒙特卡罗方法概述	183
7.1.2	数字网格方法	184
7.1.3	格点规则方法	185
7.2	拟随机数序列产生	186
7.2.1	一维拟随机数序列	186
7.2.2	霍尔顿序列	187
7.2.3	福尔序列	188
7.2.4	索波尔序列	191
7.2.5	尼德雷特序列	196
7.2.6	柯罗波夫序列	200
7.2.7	斐波那契序列	202
7.3	拟随机数均匀性	204
7.3.1	拟随机数丛聚现象	204
7.3.2	改善均匀性方法	205
7.4	拟蒙特卡罗方法有关问题	207
7.4.1	拟蒙特卡罗方法的偏差	207
7.4.2	拟蒙特卡罗收敛加速方法	210
7.4.3	随机化拟蒙特卡罗方法	211
	参考文献	211
第 8 章	序贯蒙特卡罗方法	214
8.1	序贯蒙特卡罗方法原理	214

8.1.1	序贯抽样方法	214
8.1.2	序贯重要抽样方法	216
8.1.3	样本退化问题	217
8.2	序贯重要重抽样方法	218
8.2.1	样本分裂和重抽样	218
8.2.2	序贯重要重抽样方法描述	219
8.2.3	样本贫化问题	221
8.3	序贯蒙特卡罗方法发展	222
8.3.1	重要概率分布选取	222
8.3.2	改进重抽样算法	222
8.3.3	应用问题	224
8.4	粒子滤波方法	224
8.4.1	状态估计问题	224
8.4.2	贝叶斯递推滤波	226
8.4.3	标准粒子滤波	227
8.4.4	广义粒子滤波	231
8.4.5	粒子滤波模拟事例	233
8.4.6	粒子滤波发展和应用	235
8.5	粒子分裂方法	236
8.5.1	粒子分裂方法原理	236
8.5.2	广义分裂算法	237
8.5.3	自适应分裂算法	239
8.5.4	多维积分模拟	240
8.5.5	组合计数问题模拟	243
8.5.6	组合优化问题模拟	244
	参考文献	245
第 9 章	确定性问题模拟	248
9.1	线性代数方程模拟	248
9.1.1	构造概率模型	248
9.1.2	随机游动概率模型	248
9.1.3	线性代数方程模拟方法	250
9.2	椭圆型偏微分方程模拟	251
9.2.1	随机游动概率模型	251
9.2.2	椭圆型偏微分方程模拟方法	254
9.3	抛物型偏微分方程模拟	256

9.3.1 随机游动概率模型	256
9.3.2 抛物型偏微分方程模拟方法	258
9.4 积分方程模拟	258
9.4.1 随机游动概率模型	258
9.4.2 积分方程模拟方法	260
9.5 积分模拟	261
9.5.1 直接模拟方法	261
9.5.2 降低方差技巧	264
9.5.3 拟蒙特卡罗方法	265
参考文献	267
第 10 章 粒子输运模拟	269
10.1 粒子输运玻尔兹曼方程	269
10.1.1 粒子输运基本假设	269
10.1.2 线性玻尔兹曼方程	269
10.2 粒子输运蒙特卡罗方法	270
10.2.1 玻尔兹曼方程变换	270
10.2.2 直接模拟方法导出	272
10.2.3 粒子通量模拟方法	276
10.2.4 粒子状态概率分布	278
10.2.5 粒子穿透平板概率	281
10.3 降低方差提高效率方法	282
10.3.1 降低方差技巧	282
10.3.2 深穿透问题解决方法	286
10.3.3 拟蒙特卡罗方法	290
10.3.4 倒易模拟和伴随模拟	290
10.3.5 通用计算机程序	294
10.4 各种粒子输运蒙特卡罗模拟	295
10.4.1 多种粒子联合输运模拟	295
10.4.2 电子输运模拟	296
10.4.3 热辐射输运模拟	300
10.4.4 自由分子输运模拟	302
参考文献	302
第 11 章 稀薄气体动力学模拟	304
11.1 非线性输运问题	304
11.1.1 稀薄气体动力学	304

11.1.2	非线性玻尔兹曼方程	304
11.2	分子碰撞抽样方法	305
11.2.1	初始状态抽样	305
11.2.2	弹性碰撞抽样	306
11.2.3	非弹性碰撞抽样	309
11.2.4	界面壁面反射抽样	310
11.2.5	奇异概率分布抽样	311
11.3	直接模拟蒙特卡罗方法	312
11.3.1	直接模拟方法原理	312
11.3.2	分子运动解耦方法	314
11.3.3	化学反应模拟	315
11.3.4	降低误差方法	317
11.3.5	计算机模拟流程	319
11.4	直接模拟蒙特卡罗方法应用	321
11.4.1	通用计算机程序开发	321
11.4.2	大尺度高速流动领域应用	323
11.4.3	微尺度低速流动领域应用	326
	参考文献	328
第 12 章	自然科学基础模拟	331
12.1	基本方程蒙特卡罗方法	331
12.1.1	自然科学基础模拟概述	331
12.1.2	朗之万方程模拟	331
12.1.3	主方程模拟	334
12.2	经典系统蒙特卡罗方法	336
12.2.1	系综蒙特卡罗模拟	336
12.2.2	微正则系综模拟	337
12.2.3	正则系综模拟	338
12.2.4	等温等压系综模拟	339
12.2.5	巨正则系综模拟	340
12.2.6	随机行走模拟	342
12.3	量子系统蒙特卡罗方法	343
12.3.1	量子蒙特卡罗模拟	343
12.3.2	变分子量子蒙特卡罗方法	344
12.3.3	格林函数量子蒙特卡罗方法	346
12.3.4	扩散量子蒙特卡罗方法	348

12.3.5 路径积分量子蒙特卡罗方法	350
12.4 物理学蒙特卡罗模拟	352
12.4.1 自然科学模拟	352
12.4.2 状态方程模拟	353
12.4.3 伊辛模型模拟	354
12.4.4 规范场论模拟	357
12.4.5 量子系统模拟	357
12.4.6 高分子科学模拟	358
12.5 化学和生物学蒙特卡罗模拟	359
12.5.1 化学蒙特卡罗模拟	359
12.5.2 分子水平化学模拟	360
12.5.3 生物分子结构模拟	361
12.5.4 生物信息学模拟	362
12.5.5 分子马达模拟	363
参考文献	363
第 13 章 数理统计学和可靠性模拟	366
13.1 数理统计学的困难	366
13.1.1 统计模型的困难	366
13.1.2 统计推断的困难	367
13.2 蒙特卡罗统计学方法	368
13.2.1 蒙特卡罗统计学方法概述	368
13.2.2 似然估计模拟	369
13.2.3 贝叶斯估计模拟	373
13.3 可靠性结构函数计算	378
13.3.1 可靠性问题特点	378
13.3.2 最小路集和割集	379
13.3.3 结构函数计算	381
13.4 可靠性蒙特卡罗方法	384
13.4.1 直接模拟方法	384
13.4.2 条件期望技巧	387
13.4.3 重要抽样技巧	389
参考文献	392
第 14 章 金融经济学模拟	394
14.1 金融经济问题模拟	394
14.1.1 挑战性的金融难题	394

14.1.2 蒙特卡罗模拟方法	396
14.2 期权定价蒙特卡罗模拟	398
14.2.1 常规期权定价模拟	398
14.2.2 奇异期权定价模拟	402
14.2.3 多资产期权定价模拟	404
14.3 减小蒙特卡罗模拟误差方法	406
14.3.1 减小离散化误差方法	406
14.3.2 降低方差技巧	408
14.4 高效蒙特卡罗方法	413
14.4.1 拟蒙特卡罗方法	413
14.4.2 马尔可夫链蒙特卡罗方法	416
参考文献	420
第 15 章 科学实验模拟	421
15.1 科学实验模拟方法	421
15.1.1 理论实验与模拟	421
15.1.2 物理实验模拟	422
15.1.3 化学实验模拟	425
15.1.4 武器试验模拟	427
15.2 中段反导系统模拟	429
15.2.1 中段反导系统	429
15.2.2 导引方程和制导方案	430
15.2.3 发射和导引弹道参数	433
15.2.4 反导制导精度模拟	435
15.2.5 模拟可视化	437
参考文献	439
附录 MT19937 伪随机数程序	440
附录 1 C 语言程序	440
附录 2 Fortran 语言程序	442
附录 3 Matlab 语言程序	444
索引	446