

# 蒙特卡罗方法及其应用 (一)

裴鹿成 主编

国防科技大学出版社

# 蒙特卡罗方法及其应用

(一)

裴鹿成 主编

国防科技大学出版社

[湘] 新登字 009 号

**蒙特卡罗方法及其应用**

(一)

主 编 裴鹿成

责任编辑 张树发 胡见堂

\*

国防科技大学出版社出版发行

湖南省新华书店经销

国防科技大学印刷厂印装

\*

开本：787×1092 1/16 印张：17.25 字数：398千

1993年10月第1版 第1次印刷 印数：1—1000册

ISBN 7-81024-269-5

O·27 定价：15元

## 前 言

全国蒙特卡罗方法学术交流会迄今已召开了四届。第一届于1980年在杭州召开，第二届于1983年在厦门召开，第三届于1986年在苏州召开，第四届于1989年在大连召开。每届交流会都差不多有50篇左右的论文在会上交流，基本上反映了我国在蒙特卡罗方法研究和应用方面的水平。遗憾的是，这些论文虽有不少已先后正式发表，但多数仍滞留在作者手中，既不便于查找，又难引用，更不利于在更广泛的范围内交流。

第五届全国蒙特卡罗方法学术交流会将于1993年10月在西安召开。为了便于在更广泛的范围内交流，也为了有利于推动蒙特卡罗方法研究与应用的进一步发展，拟从本届交流会起，均将参加交流的论文汇集成书，分别在交流会召开之前正式出版，书名均为《蒙特卡罗方法及其应用》。本书作为《蒙特卡罗方法及其应用》丛书的第一本，主要内容有，蒙特卡罗方法基础、伪随机数的产生、已知分布抽样、蒙特卡罗方法通用软件及其应用、蒙特卡罗方法在粒子输运问题中的应用、在统计物理中的应用、在可靠性分析中的应用、在军事上的应用、在化学中的应用、在传染病流行问题中的应用等等。愿本书能成为蒙特卡罗方法研究与应用的最重要参考书之一。

受承办第五届全国蒙特卡罗方法学术交流会的第二炮兵工程学院的委托，本次论文集的稿件全部是由中国原子能科学研究所的有关专家编审的。参加编审工作的有裴鹿成、张孝泽、董秀芳、凌玉德、许淑艳、金文绵、李素梅、朱秀芝、高彦锋和李卫平等。由于我们的水平有限，论文所涉及的面又很宽，时间也很紧迫，错误和不当之处在所难免，恳请广大读者和同行批评指正。

国防科技大学的蒋伯诚和张树发二位教授一直关心和支持本书的出版，国防科技大学出版社对本书的出版给予了大力支持，借此机会谨向他们的关心和支持表示最诚挚的感谢。

裴鹿成

1993年6月1日

# 目 录

蒙特卡罗方法发展的回顾与展望 .....	裴鹿成	(1)
十个蒙特卡罗方法问题 .....	裴鹿成	(8)
在统计物理中使用的新蒙特卡罗方法 .....	张孝泽	(16)
量子蒙特卡罗方法进展 .....	王忆平 王玉清	(26)
解非线性辐射传输问题的 Monte Carlo 方法 .....	冯庭桂	(30)
电子在固体中散射理论及 Monte Carlo 计算方法		
..... 何延才 陈家光 王心磊 马业明 杨进 杨祖宝 谭震宇		(38)
伪随机数产生的方法 .....	李卫平 张孝泽	(45)
关于产生随机变量方法的综述 .....	李卫平 张孝泽 许淑艳	(50)
指数分布几种抽样方法的比较 .....	张树发	(58)
CHMCK 和 KENO 程序性能比较 .....	刘凤兰 肖永泉	(61)
MCNP 和 MORSE—CGT 程序中的旋转椭圆环及其处理 .....	邓力	(68)
临界安全计算程序——KENO Va .....	金文绵 李素梅	(72)
MARS 几何系统的 MORSE——SGC/S 程序 .....	李素梅 金文绵	(78)
CHMCK 的实验验证 .....	肖永泉 赵志祥 刘凤兰	(83)
AMPX—CHMCK 程序系统 .....	肖永泉 刘凤兰	(90)
KENO—N 可视化研究 .....	高彦铎	(95)
微型计算机蒙特卡罗模拟工具述评 .....	方再根	(102)
以蒙特卡罗模拟为背景的知识获取与求精系统设计 .....	刘爱民 余权	(105)
用 GEANT 模拟低能核物理过程 .....	张子平 叶竟波 许咨宗 张桂根	(111)
后处理厂钷线若干设备 $\gamma$ 源项的 Monte Carlo 模拟 .....	王瑞宏 凌玉德	(120)
高纯 Ge 探测器的全能峰探测效率及沉积谱的蒙特卡罗计算 ...	许淑艳 肖雪夫	(128)
C/O 比能谱测井仪 NaI 探测器对 $\gamma$ 射线响应函数的计算		
..... 蔡少辉 邓力 李一彤		(133)
蒙特卡罗方法在核辐射针孔照相技术中的应用 .....	牛胜利 李原春	(139)
二维几何下计算轴向中子注入量的随机模拟方法 .....	张本爱 姜元龙 刘恭梁	(144)
用蒙特卡罗方法计算热中子在铝空心圆柱的分布 .....	王世明 徐海珊	(148)
中子探测靶室灵敏度计算 .....	赵毓武 马驰 范彩君	(151)
核部件库存模型的临界安全计算 .....	张全虎 罗吉庭	(156)
期望抽样方法在三光子模拟实验中的应用		
..... 程锦荣 刘红 高永椿 杨德田 周勤		(160)
高能光子探测系统蒙特卡罗模拟 .....	陈敬平 赵毓武	(164)

HpGe 就地 $\gamma$ 谱仪探测效率因子的蒙特卡罗方法计算及实验验证.....	肖雪夫	(169)
Monte Carlo 方法计算 f. c. c. 体系相图.....	杨进 杨祖宝	何延才 (176)
Cu 中背散射电子发射的 Monte Carlo 直接模拟 .....	谭震宇 蒋定举	何延才 (179)
氮气直流辉光放电阴极区电子行为的模拟分析 .....	孙继忠 宫野	王德真 (184)
等离子体源离子注入球形靶的蒙特卡罗模拟 .....	王德真 马腾才	宫野 (187)
自由电子激光物理单粒子三维模型模拟计算 .....	朱秀芝	许淑艳 (193)
超晶格相变的模拟 .....	刘云鹏 郑茂盛	罗恩泽 (202)
量子 Monte Carlo 模拟的簇团迭代方法及其关于二维 AFMH 模型的研究 .....	应和平	季达人 (206)
用集团蒙特卡罗重整化群方法对二维 Ising 模型的研究 .....	季达人 张剑波 潘勤	应和平 (216)
二维无网格结构上 DLA 生长模型的 Monte Carlo 模拟 .....	张建华 屈世显	刘振华 (222)
串并联系统可靠性置信下限的随机模拟方法 .....	罗吉庭	夏勇其 (227)
电子产品容差分析中的随机模拟 .....	罗强	罗吉庭 (233)
固体推进剂燃料产物平衡组分 Monte Carlo 方法求解 .....	艾春安	罗吉庭 (236)
利用等效数据法评估网络系统可靠性的 M—C 方法 .....	罗吉庭	熊志昂 (242)
液体火箭发动机性能参数的 Monte—Carlo 随机模拟 .....	罗吉庭 肖刚	郑敦兵 (247)
串联系统 Non-Markov 可修系统几种常用分布的 Monte Carlo 模拟 .....	何斌	罗吉庭 (253)
蒙特卡罗方法在军事上的应用 .....	李长生	(258)
解传染病流行问题的期望估计方法 .....	裴鹿成	(261)
解化学反应动力学问题的期望估计方法 .....	裴鹿成	(266)

# 蒙特卡罗方法发展的回顾与展望

裴鹿成

(中国原子能科学研究院)

蒙特卡罗 (Monte Carlo) 是摩纳哥公国的一个著名城市, 地处地中海北岸, 风景秀丽, 尤以赌博业发达闻名于全世界。蒙特卡罗方法借用这一城市的名称, 既想表明该方法是对随机性问题进行模拟为其基本特征 (赌博都带有一定的随机性质, 赌博的过程实际上是按赌博规则进行‘模拟’), 又可使他人对方法的内容琢磨不清, 达到保密之目的 (蒙特卡罗方法是美国于第二次世界大战期间秘密研制核武器时, 为解决其中某些计算问题而提出来的)。

## 一 直接仿真方法——蒙特卡罗方法的雏形

蒙特卡罗方法虽然是在 20 世纪 40 年代提出来的, 可是, 作为该方法的基本思想和原理, 早在 17 世纪时就已经出现了, 所不同的只是, 那时所采用的办法是对具有随机性质的问题进行直接仿真, 还不可能成为一种比较普遍地和有效地解决实际问题的方法, 或者说, 还只是蒙特卡罗方法的雏形。

考虑  $n$  个相互独立的服从同一正态分布的随机变量  $x_1, x_2, \dots, x_n$ 。确定统计量

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 \quad (1)$$

所服从的分布, 使其成为已知的, 在统计学的发展史中曾起到过非常大的推动作用。

统计量  $\chi^2$  所服从的分布称为  $\chi^2$ ——分布。早在 1908 年, 著名统计学家 Gossett 曾经猜到了, 其形式如下:

$$\frac{1}{2^{n/2} \Gamma(n/2)} y^{n/2-1} \exp\left(-\frac{y}{2}\right), \quad y > 0 \quad (2)$$

为了证实自己的猜想是正确的, Gossett 曾经以 3000 个接近正态分布的人体测量数据作为总体, 用有放回抽样方法, 每次抽取 4 个样本 ( $n=4$ ), 总共进行了 5000 次抽样, 试验值与猜想值符合得比较好。

总结 Gossett 所提出来的问题和为解决问题所采用的方法。很明显, 他所提出来的问题是, 确定  $\chi^2$  是否服从分布 (2)。所采用的方法是, 对统计量  $\chi^2$  进行直接仿真, 利用仿真过程中所得到的  $x_1^2, x_2^2, \dots, x_{3000}^2$ , 确定  $\chi^2$  的试验分布, 然后与猜想分布 (2) 进行比较。由此可见, 他所采用的方法实际上正是我们这里所讲的直接仿真方法, 是蒙特卡罗方法的雏形。



## 二 数学仿真方法——蒙特卡罗方法的诞生

蒙特卡罗方法的诞生是以如下转变为其根本标志：为了得到某一具有随机性质问题的解答，对随机现象进行直接仿真改为用数学方法进行仿真。对蒙特卡罗方法的诞生做出重要贡献的代表人物有 Von Neumann, E. Fermi, S. Ulam 和 N. Metropolis 等<sup>[1]</sup>。

同样以 Gossett 猜想为例，看一看是如何用数学方法实现仿真的。不难证明，如下随机变量服从正态分布：

$$x = \sqrt{-2 \ln \xi_1} \cos 2\pi \xi_2 \quad (3)$$

其中  $\xi_1$  和  $\xi_2$  均为服从 (0, 1) 上均匀分布的随机数。根据这一事实，有产生容量为  $M$ ，由式(2)的确定的  $\chi^2$  的简单子样的 FORTRAN 程序如下：

```
SUBROUTINE GOSSETT (N, M, CHI2)
  DIMENSION CHI2 (M)
  DO 2 MM=1, M
    CHI2 (MM) =0.
  DO 1 NN=1, N
    CHI2 (MM) =CHI2 (MM) -2. * LOG (RANF ())
  $ * COS (6. 283185 * RANF ()) * * 2
1  CONTINUE
2  CONTINUE
  END
```

其中  $N$  为自由度， $RANF ()$  为产生 (0, 1) 上均匀分布的随机数发生器。

用上述解 Gossett 猜想问题的数学仿真方法，经实际计算的结果表明，完成 Gossett 在 1908 年完成的试验，在普通的 386 微机上完成仅需要 1.38 秒的时间。

对于本来就具有随机性质的问题，实现数学仿真已无本质上的困难，可是，对于确定性问题，人为地将其转化成具有随机性质的问题，然后用数学仿真方法解决，常常会遇到许多本质上的困难。当然，这种转化的必要性常常是不存在的，但是，对于同时具有确定性与随机性的交叉性质的问题，如随机方程中的多数问题，用确定性方法解决又遇到本质性的困难时，这种转化工作就显得十分必要了<sup>[2-4]</sup>，仍将是蒙特卡罗方法发展中长期会遇到的问题。

## 三 拟仿真方法——蒙特卡罗方法的迅速发展

为了对问题的解决更有效，可以人为地改变原随机现象为另一种与原问题答案有一定关系的‘随机现象’。拟仿真方法就是，确定人为随机现象并按此人为随机现象进行仿‘真’（像似仿真又不全是仿真），利用人为随机现象与原问题答案间的关系，得到原问题的解答。拟仿真方法的掘起，使蒙特卡罗方法进入了迅速发展的阶段。对拟仿真方法做出杰出贡献的主要代表人物有 Von Neumann, S. Ulam 和 H. Kahn<sup>[5]</sup>。

甲乙二人进行博弈，博弈的方法和计分规则是，甲乙二人依次各随机地抽取 4 张扑克牌，各自可以随意地将 4 张牌两两配对，每对牌点数的总和被 10 除的余数规定为此对



牌的点数。二人间的小点数与大点数分别相比，点数大者得正 1 分，点数小者得负 1 分，相等时不得分。依照如此规则，很明显，博弈者都希望自己配对后的小点数和大点数的总和尽量大。由于在尽量大的前提下仍然可能有几种不同的配对方案，至少存在有如下 4 种相异的策略：

(1) 小点数与大点数的差尽量拉大。

(2) 小点数与大点数的差尽量缩小。

(3) 小点数与大点数的差既不尽量拉大，也不尽量缩小，而是居中。无中间情况时，采用第一种策略。

(4) 小点数与大点数的差既不尽量拉大，也不尽量缩小，而是居中。无中间情况时，采用第二种策略。

试问甲持哪一种策略为最优？亦即需要计算，甲持策略  $j$ ，乙持策略  $k$ ，甲的平均得分。对于所有的  $k$ ，甲都得正分时，相应的策略  $j$  为最优。

对于这样一个所谓最优对策问题，很明显，用数学仿真方法解决是不存在什么困难的，但是，也可以采用更好的拟仿真方法如下：

将每局博弈中持策略  $j$  的甲相对持策略  $k$  的乙的得分，人为地改变成，在同一局中同时考虑乙改持策略  $j$ ，甲改持策略  $k$ ，乙相对甲的得分，并用二者得分和的一半作为持策略  $j$  的甲相对持策略  $k$  的乙在这一局中的得分。

按上述考虑，在概率误差同样等于 5% 的情况下，解最优对策问题的数学仿真方法与拟仿真方法所需要的计算机时间比，列入在表 1 中。从表 1 中所列数据看出，当甲乙持不同策略时，拟仿真方法比数学仿真方法效率提高均在 10 倍至 46 倍之间。当甲乙持相同策略时，由于拟仿真方法只要一次抽样便可得到精确结果，因此，表中有关这方面的数据实际上都是数学仿真方法所需要的抽样数，拟仿真方法比数学仿真方法效率提高数万倍。提出拟仿真方法的必要性被明显地表露了出来。

表 1 数学仿真方法与拟仿真方法所需机时比

机时比 甲持策略 \ 乙持策略	1	2	3	4
1	37524	10.353	33.185	10.477
2	10.384	47806	12.709	45.250
3	33.246	12.680	41691	16.896
4	10.477	45.250	16.896	45367

可以毫不夸张地讲，没有拟仿真方法的出现和发展，就没有蒙特卡罗方法的应用和发展。由于拟仿真方法的出现往往都和应用联系在一起，因此，也可以反过来这样讲，没有蒙特卡罗方法的广泛应用就没有拟仿真方法的进一步发展。展望未来，最为紧迫的是给出适合蒙特卡罗方法通用软件使用的拟仿真方法<sup>[6]</sup>，取代目前所普遍采用的一种可望而不可及的似很好但却无法实施的‘赌与分裂’方法<sup>[5]</sup>。

## 四 高维问题的解——蒙特卡罗方法的广泛应用

一般数值方法的误差不仅受问题的维数影响,而且,随问题维数的增大按指数增加。与此情况截然不同,蒙特卡罗方法的误差则与问题的维数无关。

考虑如下多重积分的计算问题<sup>[7]</sup>:

$$\Theta = \int_0^1 \cdots \int_0^1 \exp\left(-\prod_{i=1}^S x_i\right) dx_1 \cdots dx_S \quad (4)$$

计算此多重积分的蒙特卡罗方法是,当  $N$  足够大时,用

$$\hat{\Theta}_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \exp\left(-\prod_{i=1}^S \xi_{i..}\right) \quad (5)$$

作为  $\Theta$  的近似估计,其中  $\xi_{i..}$ ,  $i=1, 2, \dots, S$ ,  $n=1, 2, \dots, N$  为在  $(0, 1)$  上均匀分布的随机数。

利用简单的换元法和分部积分法,可以将多重积分(4)转化为单积分形式如下:

$$\Theta = \frac{1}{(S-1)!} \int_0^1 \exp(-x_1) |\ln x_1|^{S-1} dx_1 \quad (6)$$

于是,为了用蒙特卡罗方法计算积分(4),也可以用

$$\hat{\Theta}_N = \frac{1}{(S-1)!} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \exp(-\xi_{1..}) |\ln \xi_{1..}|^{S-1} \quad (7)$$

作为  $\Theta$  的近似估计。

比较计算多重积分(4)的两种不同方法(5)和(7),由于前者实际上是用蒙特卡罗方法计算  $S$  重积分,而后者用蒙特卡罗方法计算单积分,因此,按惯例,后者应比前者好,而且,重数越多越是如此。可是,实际情况如何呢?取  $S=2, 4, 8, 16$ ;  $N=100000$ ,两种方法的计算结果及其相应的误差列入在表2中。从表2中所列计算结果看出,方法(5)的误差普遍比方法(7)的误差小,而且小很多,积分重数越多越是如此。

粒子输运所要解决的问题,其表现形式常常是多次散射的结果,因此,解粒子输运问题属于解高维问题。解粒子输运问题是蒙特卡罗方法最早的和至今不衰的应用领域之一<sup>[8-10]</sup>,其原因也正在于此。展望未来,深穿透问题蒙特卡罗计算结果偏低等问题<sup>[3]</sup>,将长期困惑蒙特卡罗方法在这一领域中的进一步发展。

表2 两种方法的计算结果及其误差

计算结果与误差 S	计算 S 重积分		计算单积分	
	$\hat{\Theta}_N$	$\epsilon$	$\hat{\Theta}_N$	$\epsilon'$
2	0.7967	9.81-4	0.7952	6.12-3
4	0.9430	4.79-4	0.9338	2.60-2
8	0.9962	6.85-5	0.9068	2.70-1
16	0.9999	9.19-7	0.7950	1.05

在现代科学技术中,不少问题最终常归结为需要计算如下平均值:

$$\bar{\Theta} = \frac{\sum_{i=1}^I \Theta(i) \pi(i)}{\sum_{i=1}^I \pi(i)} \quad (8)$$

其中  $\pi(i) = \{\pi_i\}_{i=1}^I$  为系统的分布;  $\Theta(i)$  为处在状态  $i$  时, 系统的观察量。如系统可靠性分析和格点规范理论等, 都常归结为计算平均值(8)。

在实际问题中, 由于状态数  $I$  是一个相当相当大的数, 要想通过式(8)直接计算  $\bar{\Theta}$  实际上是不可能的。例如, 为了直接计算具有 100 个底事件系统的不可用度, 只计其中的求和数就多达  $1.27 \times 10^{30}$  次之巨, 按每秒可完成千亿次加法运算的计算机计算, 需要约 4 千亿年。用蒙特卡罗方法计算是不是可能呢? 根据蒙特卡罗方法的一般原理, 按置信水平为 0.95 和相对误差为 0.01 考虑, 如果不可用度属于 1/10000 量级, 则抽样数大约为 3 亿 8 千万次, 这是现代计算机上很容易办到的事。由于上述原因, 蒙特卡罗方法在有关领域中的应用势头强劲, 方兴未艾<sup>[10-13]</sup>。

用蒙特卡罗方法计算平均值(8), 既存在收敛性问题, 又存在收敛速度问题。前者属于理论性问题, 没有太大的实际意义, 后者则属于实际问题, 即存在大量的这样情况: 理论上虽然收敛, 但实际上仍然无法给出好的结果, 甚至根本给不出正确的结果<sup>[2-4]</sup>。

## 五 蒙特卡罗方法通用软件 ——在粒子输运问题中的应用趋于成熟

蒙特卡罗方法不受问题的维数和几何复杂的限制, 而且不需要对问题进行离散化处理, 从而使得蒙特卡罗方法通用软件具有惊人的解题能力。由于蒙特卡罗方法在粒子输运问题中的应用已趋于成熟, 因此, 到目前为止, 比较成熟的蒙特卡罗方法通用软件还主要围绕在粒子输运方面的应用, 如 MORSE 程序<sup>[14]</sup>、KENO 程序<sup>[15]</sup>、MCNP 程序<sup>[16]</sup>、CHMCK 程序<sup>[17]</sup>、EGS 程序<sup>[18]</sup>和 SAND 程序<sup>[19]</sup>等等。

同其他科学计算通用软件的发展一样, 蒙特卡罗方法通用软件的发展是以如下两个原因为其动力的:

(1) 对于某一类问题, 许许多多的人都需要计算, 其基本步骤都不外乎是, 确定计算方法、写出相应程序、输入方案参数和上机计算。是不是可以写出这样一个程序, 计算者只须根据自己问题中的具体情况, 输入方案参数和上机计算便可以了。

(2) 为完成某一科学计算问题, 计算者必须掌握有关的计算方法和具有一定的写程序的能力。是不是可以写出这样一个程序, 科技工作者除具有本专业的基础知识外, 只需具有一定的上机能力便可以了。

很明显, 科学计算通用软件的出现很好地解决了这样两个问题。

作为科学计算通用软件的进一步发展, 很自然, 应该是使其具有较强的专家能力<sup>[6]</sup>, 即用该软件所完成的计算应达到专家不用该软件而直接完成这一题目计算的水平。可是, 到目前为止, 至少是蒙特卡罗方法通用软件, 虽然从某些局部问题方面看具有了一定的专家能力, 但是, 从全局看, 都不能讲它们具有了专家能力。

## 六 向量蒙特卡罗方法<sup>[6]</sup>

### ——迎接现代计算机对蒙特卡罗方法的挑战

考虑如下数值分布的抽样问题

$$\mathcal{P}(x = a(i)) = P(i), \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (9)$$

其中  $\mathcal{P}(\ast)$  表示事件  $\ast$  发生的概率。对此分布的常规抽样方法如下：

```
S=RANF ( )
DO 1 I=1, M-1
S=S-P (I)
IF (S) 2, 2, 1
1 CONTINUE
I=M
2 X=A (I)
```

不妨一般性，假设  $P(i) \neq 0, i=1, 2, \dots, m$ 。用  $n$  表示满足如下条件的整数：

$$n \geq \frac{1}{\min(P(1), P(2), \dots, P(m))} \quad (10)$$

令

$$\begin{aligned} b(0) &= a(1), \\ b(k) &= a(j), \quad \text{当 } \sum_{i=1}^{j-1} P(i) < k/n \leq \sum_{i=1}^j P(i) \text{ 时}, \\ c(k) &= \begin{cases} k - n \sum_{i=1}^j P(i), & \text{当 } (k-1)/n < \sum_{i=1}^j P(i) \leq k/n \text{ 时} \\ 0, & \text{其他情况,} \end{cases} \\ & \quad j = 1, 2, \dots, m, k = 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (11)$$

于是，有数值分布的另一种抽样方法如下<sup>[4]</sup>：

```
X=N * RANF ( )
K=X+1.
K=C (K) +X
X=B (K)
```

比较数值分布的上述两种不同的抽样方法，很明显，由于前者含 *IF* 语句，后者不含，因此，前者不适合向量化运算，而后者适合。

向量蒙特卡罗方法指的是，适合在 SIMD（单指令多数据流）计算机上使用的蒙特卡罗方法，如上述数值分布抽样的第二种方法。由于向量蒙特卡罗方法对于提高 SIMD 计算机的使用率十分重要，因此，已开始受到了重视<sup>[21,22]</sup>，但离真正解决问题还有较大的距离。

## 参 考 文 献

- [1] N. Metropolis and S. Ulam, *J. Amer. stat. Assoc.*, 44, 335, 1949.
- [2] 裴鹿成, *计算物理*, 4, 563, 1992.
- [3] 裴鹿成, 十个蒙特卡罗方法问题, 蒙特卡罗方法及其应用 (一), 国防科技大学出版社, 1993.
- [4] 裴鹿成, *蒙特卡罗方法基础*, 原子能出版社, 1995.
- [5] H. Kahn, AECU-3259, 1954.
- [6] 裴鹿成, *计算物理*, 4, 560, 1992.
- [7] 裴鹿成, *蒙特卡罗方法与问题的维数*, 即将发表.
- [8] J. Spanier and E. M. Gelbard, *Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems*, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1969.
- [9] 裴鹿成 张孝泽, *蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用*, 科学出版社, 1980.
- [10] 裴鹿成等, *计算机随机模拟*, 湖南科学技术出版社, 1989.
- [11] K. Binder (ed), *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Springer-Verlag, 1979.
- [12] K. Binder (ed), *Applications of the Monte Carlo method in statistical Physics*, Springer-Verlag, 1984.
- [13] 张孝泽, *蒙特卡罗方法在统计物理中的应用*, 河南科学技术出版社, 1991.
- [14] E. A. Straker et al., ORNL-4585, 1970.
- [15] G. E. Whiteskles and N. F. Cross, CTC-5, 1969.
- [16] LANL Group X-6, LA-7396-M, 1979.
- [17] 董秀芳, *计算物理*, 3, 340, 1987.
- [18] H. M. Colbert, SLL-74-0012, 1974.
- [19] S. A. Harblerb and T. A. Mehlhorn, SAND 84-0573, 1984.

---

(接 29 页) 罗模拟。由于难用其它方法探讨高温超导的机理, 原以为较有希望的“任意子”模型和理论不成功, 所以这几年出现了这方面的许多工作, 取得了初步进展。他们在 Hubbard 模型<sup>[74]</sup>的基础上, 采用三能带 Hubbard 模型 (或 Enery 模型<sup>[77-78]</sup>), 讨论最近邻 Cu 或 O 及其之间的各种作用<sup>[79-88, 98, 99]</sup>。采用 Anderson 杂质模型的工作<sup>[72, 89-97]</sup>也引人注目。用的方法, 多数为 GCQMC (或 PIMC) 方法和 PQMC 方法。1992 年, 用 PQMC 方法对“顶氧”模型的研究认为<sup>[100]</sup>, “顶氧”的非线性振动与 Cu-O 平面的电子自由度耦合, 可以获得出现高 Tc 超导的迹象, 并且显示短的相干长度和同位素效应。

高临界温度氧化物超导这种电子、声子强关联作用, 只能用非微扰的方法讨论, 已有研究表明, 用 QMC 方法有可能对这种超导机理提供较明确的启示, 如果更多地参照至今已不算少的各种实验结果, 包括巴基球等新材料, 建立更多更好的模型, 同时与分子动力学等其它方法的研究相互促进, 那末在这么多人的努力下, 若干年内, 可能会基本解决一些问题。

# 十个蒙特卡罗方法问题

裴鹿成

(中国原子能科学研究院)

任何一门科学,在其应用与发展过程中总会遇到这样或那样问题,有的可能容易解决,有的解决起来可能很困难。发现难题是件大好事,理由是,一旦攻克了这些难题,不仅自然地扩大了应用领域,而且还可以推动本学科的进一步发展,甚至可能孕育着某一新的学科的诞生。

蒙特卡罗方法已经走过了近 50 年的历史,在其应用与发展过程中,曾遇到过哪些至今还没有很好地解决的难题呢?

## 一 深穿透概率计算结果偏低问题

10Mer 光子垂直入射到铅平板上。用  $P$  表示其穿透概率,  $P_0$  表示光子进入铅平板后不经过散射而直接穿透的概率。理论上的结果是,  $P/P_0$  随着铅平板的变厚而不断变大。

蒙特卡罗方法的计算结果如何呢?为了回答这一问题,按入射光子飞行平均自由程度量,用常规的统计估计方法<sup>[1]</sup>分别计算了铅平板厚度为 1 个自由程, 2 个自由程, ..., 30 个自由程时的  $P/P_0$ 。计算结果参看图 1。从图 1 中的曲线看出,当平板厚度从 1 个自由程到 12 个自由程时,计算结果与理论分析结果符合得比较好,可是,当平板厚度超过 15 个自由程时,  $P/P_0$  却急剧地下降。这一现象即为深穿透概率蒙特卡罗计算结果偏低问题。

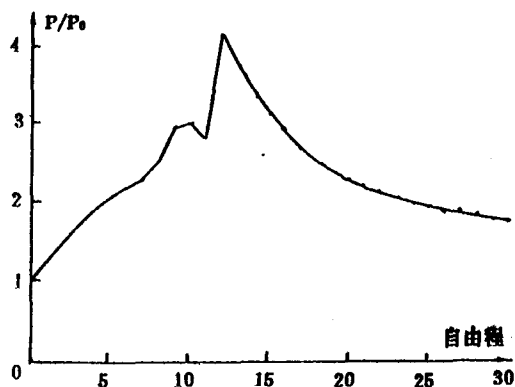


图 1 深穿透概率计算结果

深穿透概率计算结果偏低问题是于 1950 年,由著名学者 H. Kahn 首先发现的<sup>[1]</sup>,至今虽然已有 40 余年的历史,但仍然没有突破性的成果,有些比较成功的解决方法也只限于平板几何情况<sup>[2,3]</sup>。

与深穿透概率计算结果偏低问题属于同类的其他问题有,蒙特卡罗方法计算小概率结果偏低和蒙特卡罗方法不适于解决大系统问题等。由于这些问题都十分重要,因此,解决深穿透计算结果偏低问题一直是蒙特卡罗方法最关注的问题之一。

## 二 通量的蒙特卡罗估计无界问题

均匀介质、单能和各向同性散射假设下,于点 $\vec{r}$ 发生碰撞的粒子对点 $\vec{r}^0$ 的通量贡献为

$$\Phi(\vec{r}^0) = \frac{W}{4\pi|\vec{r} - \vec{r}^0|^2} \exp(-\sum_i |\vec{r} - \vec{r}^0|) \quad (1)$$

其中 $W$ 为粒子的权重; $\sum_i$ 为粒子飞行平均自由程的倒数。由于可能发生 $\vec{r} = \vec{r}^0$ ,因此,作为计算点通量的蒙特卡罗估计(1)是无界的。蒙特卡罗估计无界不仅可使其统计涨落明显变大,而且还会使蒙特卡罗方法的收敛速度变慢<sup>[4]</sup>。

注意并研究计算点通量的蒙特卡罗估计无界问题的最早工作是在1963年,不过,在当时还仅限于研究使蒙特卡罗估计的方差有界问题<sup>[5]</sup>。直到1971年,才真正出现了解决蒙特卡罗估计无界的方法<sup>[6]</sup>。随后,虽然先后又出现了一些解决方法<sup>[7]</sup>,但与实际使用这些方法还有一段距离。

在同样的假设下,于点 $X$ 发生碰撞的粒子对平面 $X=A$ 的通量贡献为

$$\Phi(A) = \frac{W}{|U|} \exp\left(-\sum_i \frac{A-X}{U}\right), \quad \text{当} \frac{A-X}{U} \geq 0 \text{时} \quad (2)$$

其中 $U$ 为粒子运动方向与 $X$ 轴的夹角余弦。由于可能会出现 $X=A, U=0$ 的情况,因此,作为计算面通量的蒙特卡罗估计(2)也是无界的。对于其他曲面的面通量,情况也常常如此。

粗看上去,解决面通量的蒙特卡罗估计无界问题似乎比解决点通量无界问题容易,可是,实际上并非完全如此,加之面通量计算中所指的面千差万别,使得对它的解决更为困难。

## 三 解齐次方程的零方差技巧

蒙特卡罗方法中的零方差技巧大体上可分为两类,一类基于重要抽样方法,另一类则基于相关抽样方法<sup>[3]</sup>。

考虑如下线代数方程组:

$$X = AX + B \quad (3)$$

满足条件 $\|A\| < 1$ 。假若我们已经知道了此方程的一个近似解 $\bar{X}$ 。令 $\Delta = X - \bar{X}$ 。由于 $X = AX + \bar{X}$ ,  $\bar{X}$ 已知,因此,可以将解方程(3)的问题转化为解如下线代数方程组:

$$\Delta X = A\Delta X + \Delta B \quad (4)$$

其中 $\Delta B = B + A\bar{X} - \bar{X}$ 。众所周知,用蒙特卡罗方法解方程(4),其中的每一项都以 $\Delta B$ 的某分量为其因子,因此,如果 $\bar{X}$ 为方程(3)的解,则用蒙特卡罗方法解方程(4)具有零方差<sup>[3]</sup>。这种用蒙特卡罗方法解线代数方程组的零方差技巧即属于基于相关抽样方法那一类。

基于相关抽样方法的零方差技巧,对方程(3)的解不附加任何条件,原蒙特卡罗方法中的抽样过程不变。基于重要抽样方法的零方差技巧则不然,只有方程(3)的解全都非负的情况下才可实现,原蒙特卡罗方法中的抽样过程需要改变。因此,前者比后者有非常



明显的优点。

对于非齐次的线代数方程组和线性积分方程，基于重要抽样方法和基于相关抽样方法的零方差技巧均已建立<sup>[8]</sup>。基于重要抽样方法的解齐次线性积分方程的零方差技巧也已建立<sup>[8]</sup>，但基于相关抽样方法的零方差技巧尚未实现。由于基于相关抽样方法的零方差技巧常优于基于重要抽样方法的零方差技巧，因此，实现基于相关抽样方法的解齐次方程的零方差技巧有十分重要的意义。

#### 四 解连续型问题的自改善方法

方程(3)为待解方程，它的近似解往往并不知道，即使知道也会同其精确解相差较大。可是，我们在用蒙特卡罗方法解此方程时，可以得到它的近似解，而且，随着计算的不断进行，其近似解将不断地靠近其精确解。利用不断得到的近似解  $\bar{X}$ ，不断改善  $\Delta B = B + A\bar{X} - \bar{X}$ ，可逐步向具有零方差估计的最佳情况靠近，这种方法即为自改善方法<sup>[9]</sup>。

考虑线代数方程组的如下实例：

$$a_{ij} = \frac{144}{155} (\sqrt{2} - 1) 2^{-(5((i+j-2)/10)+1/2)} \quad i, j = 1, 2, \dots, 10, \quad (5)$$

$$b_i = i - \sum_{j=1}^{10} j a_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, 10,$$

其中  $\{ * \}$  表示取数 \* 的小数部分。对此实例，在每步抽样数均为 2000 的情况下，用自改善方法进行了计算，计算到第 50 步的结果列入在表 1 中。从表 1 中所列结果看出，自改善方法的方差几乎变成了零，近似估计实际上已变成了精确解，而一般蒙特卡罗方法的方差还相当大，近似估计与精确解相差仍然比较明显。每完成一次抽样计算所需要的计算机时间，二者相差无几，致使从方法的有效性看，前者比后者平均约高  $10^{27}$  倍，是个相当惊人的数字。

表 1 自改善方法与一般方法比较

结 果 i	类 别	自改善方法				一般方法			
		$x_i$	$\sigma^2(x_i)$	$t(\text{秒})$	$\sigma^2(x_i)t$	$x_i$	$\sigma^2(x_i)$	$t(\text{秒})$	$\sigma^2(x_i)t$
1		1.0000	1.05-29	2.040-3	2.15-32	0.9753	8.82-3	2.039-3	1.80-5
2		2.0000	6.27-29	2.040-3	1.28-31	1.9045	8.44-2	2.039-3	1.72-4
3		3.0000	1.04-29	2.040-3	2.12-31	3.0716	9.05-2	2.039-3	1.84-4
4		4.0000	8.58-29	2.040-3	1.75-31	4.4974	7.51-2	2.039-3	1.53-4
5		5.0000	6.44-29	2.040-3	1.31-31	5.3012	5.51-2	2.039-3	1.12-4
6		6.0000	4.97-29	2.040-3	1.01-31	6.1049	3.99-2	2.039-3	8.14-5
7		7.0000	3.76-29	2.040-3	7.67-32	7.1905	2.94-2	2.039-3	6.00-5
8		8.0000	2.87-29	2.040-3	5.86-32	8.0767	2.24-2	2.039-3	4.58-5
9		9.0000	2.60-29	2.040-3	5.31-32	9.0768	1.81-2	2.039-3	3.69-5
10		10.0000	1.55-29	2.040-3	3.15-32	10.002	1.54-2	2.039-3	3.13-5

对于离散型问题的自改善方法的巨大成功，很自然地促使我们去关心解连续型问题

的自改善方法。由于连续型问题的近似解常需要进行离散化处理，而实际问题中的维数又甚多，因此，要比较好地解决连续型问题的自改善方法还是相当相当困难的。可是，由于连续型问题是实际问题中的绝大多数，因此，解决连续型问题的自改善方法的实现问题，格外显得必要。

## 五 集团抽样方法的最佳情况

考虑如下二重积分的计算问题

$$\Theta = \iint \Theta(x, y) f(x, y) dx dy \quad (6)$$

其中  $f(x, y)$  为分布密度函数。对于所有  $x$ ，引入正定函数  $I(x)$ 。由于对于任意的  $I(x)$  可以将积分(6)写成如下形式：

$$\Theta = \int f(x) dx \frac{1}{I(x)} \left( \int_0^1 d\xi \int \sum_{n=1}^{[I(x)+\xi]} \Theta(x, y_n) f(y_n | x) dy_n \right) \quad (7)$$

其中  $f(x)$  和  $f(y|x)$  分别为  $f(x, y)$  的边缘分布密度和条件分布密度； $[*]$  表示取数  $*$  的整数部分，因此，下式

$$\frac{1}{I(x)} \sum_{n=1}^{[I(x)+\xi]} \Theta(x, y_n) \quad (8)$$

为积分(6)的无偏估计，其中  $\xi$ ， $x$  和  $y_n$  分别为服从  $(0, 1)$  上均匀分布， $f(x)$  分布和  $f(y|x)$  分布的随机数。计算积分(6)的集团抽样方法就是用式(8)作为其无偏估计<sup>[3]</sup>。

同著名的赌与分裂方法比较，集团抽样方法不仅包括了它，而且，由于集团抽样方法只要求  $I(x)$  是正定的，而赌与分裂方法必须将  $x$  的区域划分为非重要区域和重要区域，在非重要区域上一定有  $I(x) = P(x) < 1$ ；在重要区域上， $I(x) = M(x)$  一定取正整数，因此，集团抽样方法比赌与分裂方法运用起来既方便灵活，而且通用性强。存在的问题是，如何确定其中的  $I(x)$ ，使集团抽样方法达到最佳。

## 六 Metropolis 方法的收敛性问题

对于任意分布  $\pi(x)$ ，抽样产生  $\pi(x)$  的渐近子样  $x_1, x_2, \dots, x_N$  的 Metropolis 方法如下<sup>[10]</sup>：

(1) 由任意初始分布  $\pi_0(x)$  中抽样产生  $x'_0$ ，令  $x_0 = x'_0$ ， $m = 0$ 。

(2) 对于确定的  $x_m$ ，由任意遍历的对称分布  $P^*(x_m, x)$  中抽样确定  $x'_{m+1}$ ，并用下式确定下一个样本  $x_{m+1}$ ：

$$x_{m+1} = \begin{cases} x'_{m+1}, & \text{当 } \xi \leq \frac{\pi(x'_{m+1})}{\pi(x_m)} \text{ 时,} \\ x_m, & \text{其他情况下.} \end{cases} \quad (9)$$

(3) 令  $m = m + 1$ ，当  $m < N$  时重复步骤(2)；否则，抽样终止。

Metropolis 方法的收敛性问题就是要证明，当  $m \rightarrow \infty$  时， $\pi_m(x) \rightarrow \pi(x)$ ，其中  $\pi_m(x)$  为  $x_m$  所服从的分布。

当  $\pi(x)$  为具有有限状态的离散型分布时，Metropolis 方法的收敛性问题已经得到了解决。可是，对于可数状态的离散型分布和连续型分布，Metropolis 方法的收敛性问题尚