1.2.2 变换抽样法

1.2.2.1 一般方法

变换抽样法的基本思想是将一个比较复杂的分布 $p(x)$ 的抽样，变换为已知的简单分布 $g(y)$ 的抽样（图 1.2.2.1-1）。例如，最简单情形是取 $g(y)$ 为 $[0,1]$ 区间中的均匀分布：

$$g(y)=\begin{cases}1, & if \quad 0\le y\le 1\\ 0, & \quad otherwise\end{cases}。\tag{1.2.2.1-1}$$

我们希望找到 $x\leftrightarrow y$ 之间的对应关系，使得几率密度守恒：

$$p(x)\,dx=g(y)\,dy,\quad\Rightarrow\quad p(x)=\left|\frac{dy}{dx}\right|g(y),\tag{1.2.2.1-2}$$

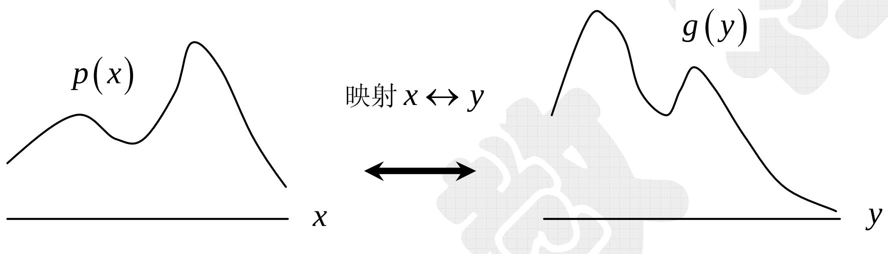

图 1.2.2.1-1 几率密度分布函数的变换。

上式不仅对于几率密度，而且对任意密度分布如质量密度或谱密度等均成立。例如：黑体辐射的谱密度按频率 ω 表示时为，

$$I(\omega)=\frac{\hbar\omega^3}{\pi c^3}\frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1},\tag{1.2.2.1-3}$$

当希望将谱密度用波长 $\lambda=2\pi c/\omega$ 表示时，按（1.2.2.1-2）式有

$$I(\lambda)=I\left[\omega(\lambda)\right]\left|\frac{d\omega}{d\lambda}\right|=\frac{\hbar}{\pi c^3}\left(\frac{2\pi c}{\lambda}\right)^3\frac{1}{e^{(hc/\lambda)/kT}-1}\left(\frac{2\pi c}{\lambda^2}\right),\tag{1.2.2.1-4}$$

显然，当（1.2.2.1-2）式中的 $g(y)$ 取（1.2.2.1-1）式时，问题即化为：寻找 $y(x)$，使其导数为 $p(x)$，然后在 $[0,1]$ 区间中对变量 y 抽样得到均匀分布的随机数，再由 $x(y)$ 关系得到对应几率密度函数 $p(x)$ 的随机抽样 x。

实际上，由（1.2.1.1-5）式给出的累积函数本身就是变换抽样的一特殊情形，$\xi(x)=y(x)$，因为累积函数的微商 $d\xi/dx=p(x)$。例如，对于 Lorentz 分布

$$p(x)=\frac{1}{\pi}\frac{1}{1+x^2},\tag{1.2.2.1-5}$$

x 取值范围为 $(-\infty,+\infty)$。由（1.2.1.1-5）式，它的累积函数是 $\xi=1/2+(1/\pi)\arctan x$，因此在 $[0,1]$ 区间中抽样得随机数 ξ 值后，作反变换得 $x=\tan\left[\pi(\xi-1/2)\right]$。

上述单变量情形可推广到多变量，如有两个变量 x 和 y 的联合分布密度函数

为 $p(x,y)$，欲变换至变量 u 和 v，它们的联合分布密度函数为 $g(u,v)$。则(1.2.2.1-2)式推广为

$$p(x,y)\,dxdy = g(u,v)\,dudv = g(u,v)\left|\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}\right| dxdy \\ p(x,y) = \left|\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}\right| g(u,v) \quad , \tag{1.2.2.1-6}$$

取联合分布密度函数 $g(u,v)$ 为均匀分布：

$$g(u,v) = \begin{cases} 1, & if \quad 0 \le u \le 1,\ 0 \le v \le 1 \\ 0, & otherwise \end{cases}, \tag{1.2.2.1-7}$$

则任务变为寻找变换式 $x = x(u,v),\ y = y(u,v)$，以使 $p(x,y) = \left|\partial(u,v)/\partial(x,y)\right|$，对均匀随机变量 (u,v) 进行抽样，代入变换式得 x 和 y 的抽样。

1.2.2.2 Box-Muller 法

Box-Muller 法是对于 Gauss 正态几率分布的抽样：

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-(x-\bar{x})^2/2\sigma^2}, \tag{1.2.2.2-1}$$

通过代换 $x \to \sigma x + \bar{x}$，我们可只考虑简单形式的分布

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}。 \tag{1.2.2.2-2}$$

现在我们试图通过一两维联合分布的抽样获得该一维分布的抽样。令极角坐标系下的角度为 $2\pi v$，半径为 $\sqrt{-2\ln u}$，u 和 v 都是 $[0,1]$ 区间中的均匀分布的随机抽样，则变换关系式为

$$x = \sqrt{-2\ln u}\cos 2\pi v, \quad y = \sqrt{-2\ln u}\sin 2\pi v, \tag{1.2.2.2-3}$$

可得反变换

$$u = \exp\left\{-\left(x^2+y^2\right)/2\right\}, \quad v = (2\pi)^{-1}\tan^{-1}(y/x), \tag{1.2.2.2-4}$$

和 Jacobi 行列式

$$\left|\frac{\partial(u,v)}{\partial(x,y)}\right| = \frac{1}{2\pi} e^{-\left(x^2+y^2\right)/2} = p(x)\,p(y) = p(x,y), \tag{1.2.2.2-5}$$

即两维分布正为两个独立分布之积。因为满足（1.2.2.1-6）式，所以由（1.2.2.2-3）式得到的抽样 x 或 y 都满足正态分布。可见，为了得到满足一个复杂分布的随机抽样，这里用了两个满足简单分布的随机数。

1.2.2.3 球面上的均匀分布

应用中经常遇到求在圆环（二维）或球面（高维）上均匀分布的抽样问题，当然最简单的是用极坐标或球坐标对角度进行抽样，然后再用坐标变换变到直角坐标下。例如，二维时首先取极角 $\phi\in(0,2\pi)$ 的均匀分布抽样，再计算 $x=r\cos\phi$ 和 $y=r\sin\phi$。但是，三角函数的计算耗时较多，一般不希望采用这样的抽样方式，因此，可用以下的代数方法：

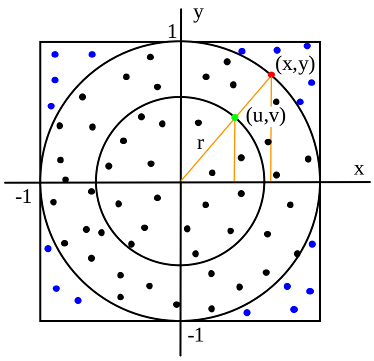

图 1.2.2.3-1 圆环上的均匀抽样，黑点是有效点，蓝点不符要求被舍去。对于一个有效点绿点(u,v)，内圆环半径为r，抽样得到圆环上的红点(x,y)。

圆环上的均匀抽样：（1）随机抽样一对均匀分布的随机数，$(u,v)\in[-1,1]$；（2）计算 $r^2=u^2+v^2$，如果 $r^2>1$ 则重新抽样直至 $r^2\le1$；（3）则

$$x=u/r,\ y=v/r。\tag{1.2.2.3-1}$$

该抽样方法由图 1.2.2.3-1 可以直观理解。按此方式需要 2 个均匀随机数抽样，而且在第二步中可能舍去不符要求的抽样，抽样效率为 $\pi/4$。即使这样，计算的效率仍较计算三角函数的为高。还可将该抽样步骤应用到 Gauss 分布抽样的 Box-Muller 法中以取代三角函数运算，则第三步将（1.2.2.2-3）式替换为：

$$x=(u/r)\sqrt{-2\ln r^2},\quad y=(v/r)\sqrt{-2\ln r^2}。\tag{1.2.2.3-2}$$

可将上述方法推广到高维情况下。如求三维球面上分布的 Marsaglia 方法为：（1）随机抽样一对均匀分布的随机数，$(u,v)\in[-1,1]$；（2）计算 $r^2=u^2+v^2$，如果 $r^2>1$ 则重新抽样直至 $r^2\le1$；（3）得

$$x=2u\sqrt{1-r^2},\ y=2v\sqrt{1-r^2},\ z=1-2r^2。\tag{1.2.2.3-3}$$

4 维超球面上分布的 Marsaglia 方法为：（1）随机抽样一对均匀分布的随机数 $(y_1,y_2)\in[-1,1]$，直至满足 $r_1^2=y_1^2+y_2^2\le1$；（2）随机抽样一对均匀分布的随机数 $(y_3,y_4)\in[-1,1]$，直至满足 $r_2^2=y_3^2+y_4^2\le1$；（3）得

$$x_1=y_1,\ x_2=y_2,\ x_3=(y_3/r_2)\sqrt{1-r_1^2},\ x_4=(y_4/r_2)\sqrt{1-r_1^2}。\tag{1.2.2.3-4}$$

1.2.3 舍选抽样法

1.2.3.1 一般形式

采用直接抽样法和变换抽样法经常遇到很大困难，主要是各种解析表达式不易给出，甚至密度分布函数本身就是以数值表的形式给出的，例如，如何用实验测出的微分散射截面对散射角进行抽样。这些问题正是 Monte Carlo 方法开创者在用 ENIAC 和 MANIAC 掷骰子时所考虑的，von Neumann 发展了一个简单而实用的方法，即舍选法，它不需要计算累积函数。

舍选法的一般数学形式是，设 $g(x,y)$ 为任意 2 维联合分布几率密度函数，$h(x)$ 是任意函数，则对于可以表示成如下积分形式的分布，

$$p(x)=\frac{\int_{-\infty}^{h(x)} g(x,y)\,dy}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx\int_{-\infty}^{h(x)} g(x,y)\,dy}, \tag{1.2.3.1-1}$$

它的舍选方法是:（1）由$g(x,y)$产生一对随机抽样值(ξ_x,ξ_y)，（如取$[0,1]$区间中的均匀分布的随机抽样(ξ_1,ξ_2)，由下式即直接抽样法规则进行抽样）:

$$\xi_1=\int_{-\infty}^{\xi_x} dx\int_{-\infty}^{+\infty} dy\, g(x,y),\quad \xi_2=\int_{-\infty}^{+\infty} dx\int_{-\infty}^{\xi_y} dy\, g(x,y); \tag{1.2.3.1-2}$$

（2）判断条件$\xi_y \le h(\xi_x)$是否成立。否，则返回（1）;（3）是，则取ξ_x为$p(x)$的随机抽样。

von Neumann 在建立舍选抽样法原理的同时，给出了一个著名的例子，即对（1.2.1.1-10）式中余弦分布$p(x)=\left(\pi\sqrt{1-x^2}\right)^{-1}$的抽样。作替换：$\xi=\xi_1\in[0,1]$，$\eta=2\xi_2-1\in[-1,1]$。由于$\eta$是在$[-1,1]$区间内均匀分布的，故$(\xi,\eta)$的联合分布几率密度函数为$p(\xi,\eta)=1/2$。定义

$$\begin{cases} x=\dfrac{\xi^2-\eta^2}{\xi^2+\eta^2}; \\ y=\xi^2+\eta^2, \end{cases} \tag{1.2.3.1-3}$$

$$\begin{cases} \xi=\sqrt{y(1+x)/2}; \\ \eta=\pm\sqrt{y(1-x)/2}, \end{cases} \tag{1.2.3.1-4}$$

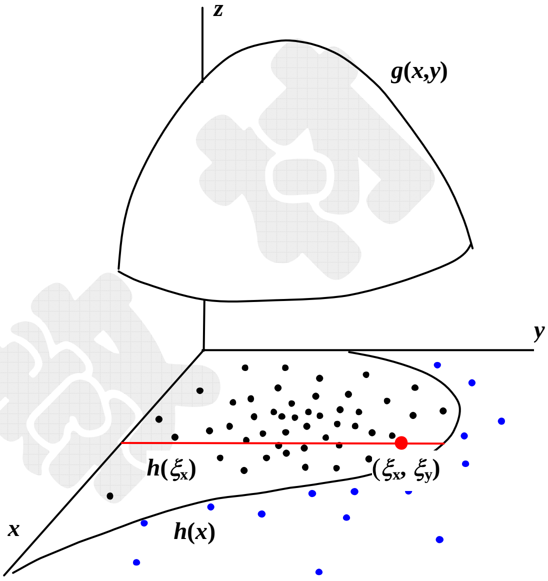

图 1.2.3.1-1 舍选抽样的几何表示。黑点是有效点，蓝点不符要求被舍去。红点(ξ_x,ξ_y)是一个待判断的点：当满足$\xi_y<h(\xi_x)$时，该点被选取，ξ_x成为$p(x)$的一个抽样。

则(x,y)的联合分布几率密度函数为，

$$g(x,y)=p(\xi,\eta)\left|\frac{\partial(\xi,\eta)}{\partial(x,y)}\right|=\frac{1}{2}\left|\frac{\partial(\xi,\eta)}{\partial(x,y)}\right|=\frac{1}{4\sqrt{1-x^2}}, \tag{1.2.3.1-5}$$

故（1.2.3.1-3）式得到的(x,y)是$g(x,y)$的随机抽样。与（1.2.1.1-10）式比较得，

$$p(x)=\frac{4}{\pi}\int_0^1 g(x,y)\,dy\,。 \tag{1.2.3.1-6}$$

它对应于（1.2.3.1-1）式中取$h(x)=1$，因此有舍选方法：由（1.2.3.1-3）式得到$g(x,y)$的随机抽样(x,y)，判断$y\le h(x)=1$是否成立，否则舍，是则取。x是$\cos\varphi$的抽样，同时可得，

$$\cos\varphi=\frac{\xi^2-\eta^2}{\xi^2+\eta^2},\quad \sin\varphi=\frac{2\xi\eta}{\xi^2+\eta^2}\,。 \tag{1.2.3.1-7}$$

1.2.3.2 简单分布

简单分布是指，密度分布函数$p(x)$定义在有限区域$[a,b]$内且是有界的，设

M 为上界，则（1.2.3.1-1）式中可取 $h(x)=p(x)$，以及：

$$g(x,y)=\begin{cases}1/(b-a)M, & if\ a\le x\le b,\ 0\le y\le M\\ 0, & otherwise\end{cases} \text{。} \tag{1.2.3.2-1}$$

按照舍选方法的一般形式得：（1）产生一对 $[0,1]$ 区间中均匀分布的随机抽样值 (ξ_1,ξ_2)，由 $g(x,y)$ 得抽样表示式 $\xi_1=(\xi_x-a)/(b-a)$，$\xi_2=\xi_y/M$；（2）判断条件 $M\xi_2\le p(a+(b-a)\xi_1)$ 是否成立，否，则舍；（3）是，则取 $x=a+(b-a)\xi_1$。

此时抽样的几何直观（图1.2.3.2-1）可视为，以曲线 $p(x)$ 的最大值作一直线 $y=M$，它和线段 $x=a$ 和 $x=b$ 以及 $y=0$ 构成一矩形面积，在此面积内产生一对随机抽样点 $(a+(b-a)\xi_1,\xi_2M)$ 作为点的 (x,y) 坐标，然后判断点是否落在曲线 $p(x)$ 下方围住的面积中，若是的话则取此 x 值。显然，$p(x)$ 越大，x 被选中的几率也越大，这是因为，x 的取值落在区间 $(x,x+dx)$ 内的概率等于面积比，$p(x)dx\Big/\int_a^b p(x)dx=p(x)dx$，故以此抽样步骤得到的随机数满足分布 $p(x)$。

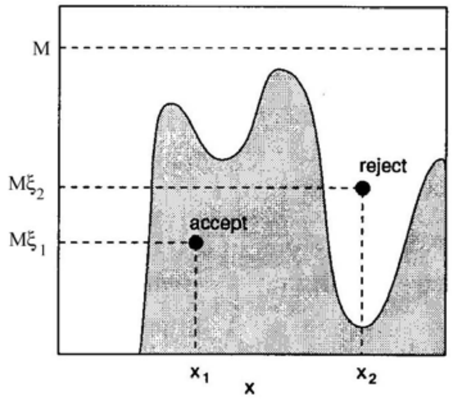

图 1.2.3.2-1 舍取法的示意图。

例如，β 分布是一连续型分布，其特殊情形为

$$p(x)=2x,\ 0\le x\le 1, \tag{1.2.3.2-2}$$

根据直接抽样得到 $x=\sqrt{\xi}$。根据舍选法，$M=2$，则有条件判断式，$\xi_2<\xi_1$，成立时取 $x=\xi_1$，抽样效率为 0.5，但由于 ξ_1 与 ξ_2 的等价性，可取 $x=\max(\xi_1,\xi_2)$，抽样效率为 1。

显然，当曲线 $p(x)$ 呈尖峰形状时，抽样效率很低。这时需要把变换抽样与舍选法结合起来，将上面的 $y=M$ 直线改为一个形状已知且是可积分的函数，曲线形状与 $p(x)$ 类似但处处比 $p(x)$ 大：$F(x)>p(x)$，$a\le x\le b$，$F(x)$ 称为比较函数（图1.2.3.2-2）。在比较函数的面积区内产生随机点 (x_0,y_0)，由反函数法推出 $\xi_x=\xi_x(\xi_1)$（此时 ξ_x 不是在 $[a,b]$ 区间内均匀分布的，而是按权重 $F(x)$ 的大小分布的），即

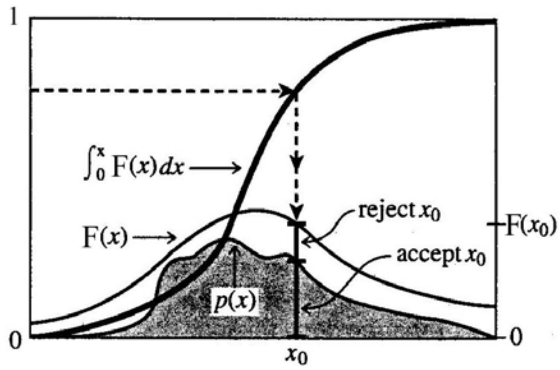

图 1.2.3.2-2 采用比较函数舍取法的示意图。

$$\xi_1=\int_a^{\xi_x}F(x)dx\Big/\int_a^b F(x)dx,\ \xi_y=\xi_2F(\xi_x), \tag{1.2.3.2-3}$$

对于较大的 $F(\xi_x)$，由此得到的 y 轴上的各个 ξ_y 点分布较稀疏，但 x 轴方向上 ξ_x 处附近点的分布较密，因此单位面积内 (ξ_x,ξ_y) 点的分布仍是均匀的，且全部落在 $F(x)$ 曲线下的面积内。如果该点在 $p(x)$ 的面积区内，即 $\xi_y<p(\xi_x)$，则取 ξ_x，

否则舍去该点。比较函数的具体形式不影响抽样的准确性，但抽样效率即有效选取的点数为 p 与 F 的面积比，与 $F(x)$ 的形状有关。实用上，为避免选用何种解析比较函数 $F(x)$ 的困难，可用分段阶梯函数（图1.2.3.2-3）:

$$F(x)=\begin{cases} M_1=\max f(x), & x\in[a,\ x_1] \\ M_2=\max f(x), & x\in[x_1,x_2] \\ \quad\cdots\cdots \end{cases}。\tag{1.2.3.2-4}$$

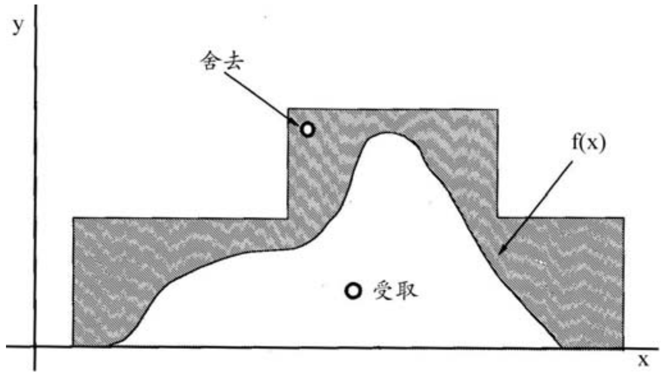

图 1.2.3.2-3 采用阶段函数舍取法的示意图。

[作业]：自设两个解析形式的函数 $p(x)$ 和 $F(x)$，取 x 是均匀分布的，即 $x=a+(b-a)\xi_1$，$y=\xi_2F(x)$。推导舍选抽样的判断条件，并与（1.2.3.2-3）式对照，数值验证两者是否等价，即离散取值 x_i 的归一化频数分布 n_i 直方图是否与曲线 $p(x)$ 相同。

1.2.3.3 乘分布

乘分布的一般形式是 $p(x)=h(x)q(x)$，其中：$\int_{-\infty}^{+\infty}q(x)\,dx=1$，$h(x)$ 的上界是 M，在（1.2.3.1-1）式中可取

$$g(x,y)=\begin{cases} q(x)/M, & if\ 0\le y\le M \\ 0, & otherwise \end{cases}。\tag{1.2.3.3-1}$$

按照舍选方法的一般形式有：（1）产生服从分布 $q(x)$ 的随机抽样 ξ_x（如由直接抽样法得到 $\int_{-\infty}^{\xi_x}q(x)\,dx=\xi_1$，$\xi_1$ 是 $[0,1]$ 区间中均匀分布的随机数）;（2）另外再产生一个 $[0,1]$ 区间中均匀分布的随机抽样值 ξ_2，判断条件 $M\xi_2\le h(\xi_x)$ 是否成立。否，则舍;（3）是，则取 $x=\xi_x$。

例如，统计物理中的 Maxwell 分布是一连续型分布，

$$p(x)=\frac{2\beta^{3/2}}{\sqrt{\pi}}\sqrt{x}\,e^{-\beta x},\ x\ge 0,\tag{1.2.3.3-2}$$

取 $q(x)=\alpha\exp(-\alpha x)$，$\alpha=2\beta/3$，则 $h(x)=p(x)/q(x)=3\sqrt{\beta x/\pi}\exp(-\beta x/3)$，可求得当 $x=\alpha^{-1}$ 时 $h(x)$ 有最大值，$M=h(\alpha^{-1})=3^{3/2}/\sqrt{2\pi e}$。因为 $q(x)$ 是指数分布（1.2.1.1-8）式，它的抽样值是 $\xi_x=-\alpha^{-1}\ln\xi_1$，代入到条件判断式 $M\xi_2\le h(\xi_x)$ 中后得，$\xi_2^2\le -e\xi_1\ln\xi_1$，该式成立时则取 $x=-\alpha^{-1}\ln\xi_1$。

参考文献

[1] 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 年)(第六章－第八章详细叙述各种抽样方法，并有实例说明)

[2] G. Marsaglia, Ann. Math. Stat. **43/2** (1972) 645.(球面上均匀分布的抽样)

§1.3 定积分的计算

1.3.1 简单抽样

1.3.1.1 掷石法

某一艺人为了复制《清明上河图》，首先要统计图里出现的众多人物和动物及物品数量，于是他采用了掷石法，在图中的每个人物头像上放一个石子，放完后将石子归拢数数。假设我们要计算地图上某个区域的面积，可以均匀的在包围此区域的一个方框里撒上小石子，待计算面积与正方形面积之比即为该区域中的石子数目与总数之比。显然，石子越小，撒的数目越多越均匀，则求得的面积越准确。这就是用 Monte Carlo 方法计算定积分的原理，因为 $f(x)$ 的定积分值即为曲线下的面积值，

$$S=\int_a^b f(x)\,dx \simeq S_0 (n/N)\text{，} \qquad (1.3.1.1\text{-}1)$$

这里的 S_0 为方形区域的面积，N 是总点数，n 是掷入 $f(x)$ 下面积区域中的点数，该方法从原理上与舍取抽样法是一致的。

例如，用 Monte Carlo 方法求 π 值。产生一对在 $[-1,1]$ 区间中均匀分布的随机数作为点的坐标 (x,y) 值，判断条件 $x^2+y^2\le 1$ 是否成立，成立则计数 n 值，当总点数 N 足够大时，$\pi/2^2=\lim\limits_{N\to\infty}(n/N)$。

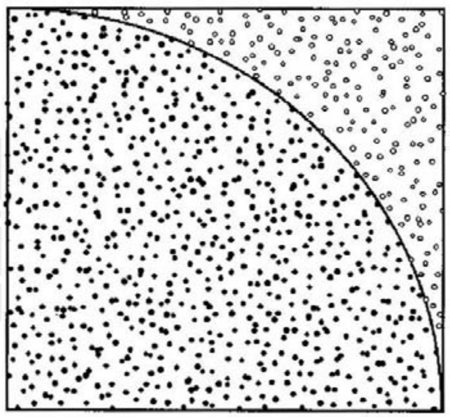

图 1.3.1.1-1 采用掷石法求 π 值。

1.3.1.2 平均值法

各种定积分的数值计算方法中，都要在按某种方式固定划分的网格上算出 $f(x_i)$ 值，而采用 Monte Carlo 方法计算时，x_i 可以是在 $[a,b]$ 区间中均匀随机选取的。根据积分的平均值定理（图1.3.1.2-1），

$$\int_a^b f(x)\,dx=(b-a)\langle f\rangle\text{，} \qquad (1.3.1.2\text{-}1)$$

而平均值又可从下式得到

$$\langle f\rangle \simeq \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)\text{，} \qquad (1.3.1.2\text{-}2)$$

故有

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{(b-a)}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)\text{，} \qquad (1.3.1.2\text{-}3)$$

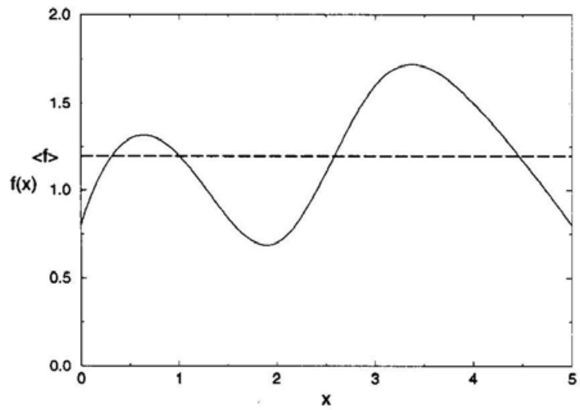

图 1.3.1.2-1 平均值法下，曲线 $f(x)$ 下的面积与直线 $\langle f\rangle$ 下的面积相同。

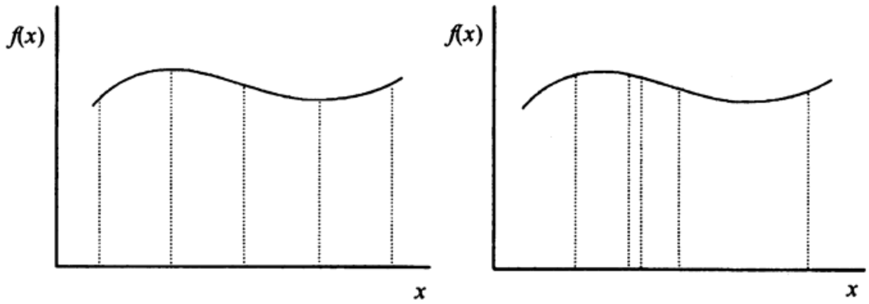

图 1.3.1.2-2 等间距数值积分（左）与 Monte Carlo 积分（右）的比较。

此式与矩形公式是一样的，不同的是，这里的$(b-a)/N$不是等间距网格宽度，而是对随机选取的x_i点所取的常数权重因子（图 1.3.1.2-2）。在简单抽样中，我们由均匀分布中选取随机数，并不考虑被积函数的具体情况。因此，被积函数的极大处和极小处有相同的抽样权重，而对积分贡献较大的更多在函数值较大处，故直观上就可以看出，非权重的简单抽样效率较低。即为了获得较高计算结果的精度，需要大量的抽样。

1.3.1.3 中心极限定理与误差

概率论中的大数法则和中心极限定理是 Monte Carlo 方法应用于统计计算的基础。大数法则说，如随机量序列$\{f_i\}$有期待值μ存在，则

$$\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}f_i\to\mu\,, \tag{1.3.1.3-1}$$

这里的期待值可视为：$\mu=(b-a)^{-1}\int_a^b f(x)\,dx$，则(1.3.1.3-1)式等同于(1.3.1.2-3)。

中心极限定理指出了当N有限时，平均值（1.3.1.2-2）式的误差分布。即

$$P\left\{\left|\frac{\langle f\rangle-\mu}{\sigma_f/\sqrt{N}}\right|<\beta\right\}\to\Phi(\beta)\,, \tag{1.3.1.3-2}$$

其中的$\Phi(\beta)$是 Gauss 正态分布。因此可得，

$$\sigma_S=\left|\langle f\rangle-\mu\right|\propto\frac{\sigma_f}{\sqrt{N}}=\frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\langle f^2\rangle-\langle f\rangle^2}\,, \tag{1.3.1.3-3}$$

式中，σ_f是函数$f(x)$的标准偏差，σ_S是积分值的标准偏差。

上式体现了 Monte Carlo 计算积分的两个重要方面：(1) σ_S随$1/\sqrt{N}$变化，即当样本点增加100倍时误差缩小10倍，反过来说，要达到一定的计算精度，必须以平方的方式增加总样本点数，这是 Monte Carlo 计算的一个固有弱点，即和其它积分数值计算方法相比收敛速度慢。但这只限于低维情形，在高维积分和奇异积分下，Monte Carlo 方法有巨大的优势。(2) 当σ_f小即函数平坦时，计算精度可以提高。极限情况下，对于常数$f(x)$，只取一点就可得到积分值。另一极限情况下，对于$\delta(x)$函数，只有很少的样本点能被选中，误差将非常大。这两点并不仅限于积分，对其他 Monte Carlo 应用也是如此，因为在中心极限定理中可取相应问题的期待值和标准偏差。

1.3.1.4 多重定积分

Monte Carlo 方法真正的威力在于应用于多重积分。设想一个物理系统由相互作用的多个粒子组成，如凝聚态物质中的原子、原子中的电子，而每个粒子都可以有几个自由度，要描述这个系统就要涉及高维的积分。如对 m 个原子组成的气体，经典配分函数是

$$Z=\int d\mathbf{r}_1\ldots d\mathbf{r}_m\ \exp\left\{-\beta\sum\nolimits_{i<j}U\left(r_{ij}\right)\right\}, \tag{1.3.1.4-1}$$

这里的 $\beta=\left(k_BT\right)^{-1}$ 代表温度，$U\left(r_{ij}\right)$ 是两体相互作用势。这个式子要用其他任意一种数值积分计算方法都是不可能算出的，除非 m 相当小时。假设每个坐标取10个点，总共将有 10^{3m} 个网格点，对于 $m=20$，如用万亿次计算机进行计算的话，需要 10^{48} 秒（约为宇宙年龄的 10^{29} 倍）。

因此，对于高维的多重积分不应采用固定网格法。现在用简单抽样的 Monte Carlo 方法，则（1.3.1.2-3）式推广成为

$$\int_{a_1}^{b_1}dx_1\int_{a_2}^{b_2}dx_2\cdots\int_{a_n}^{b_n}dx_n\ f\left(x_1,x_2,\ldots x_n\right)=\frac{1}{N}\left[\prod_{j=1}^{n}\left(b_j-a_j\right)\right]\sum_{i=1}^{N}f\left(x_{1_i},x_{2_i},\ldots x_{n_i}\right), \tag{1.3.1.4-2}$$

其中对每个坐标的抽样值是在相应的区间范围内均匀抽取的。

对于固定的样本数 N 值，Monte Carlo 方法给出的误差 $\sim 1/\sqrt{N}$，而对于固定网格点法，由于每一维上的平均点数为 $N^{1/d}$，因此误差 $\sim N^{-1/2d}>1/\sqrt{N}$，当多重积分的维数 $d>4$ 时，几乎没有其他数值计算方法可以超过 Monte Carlo 方法。

在实际计算时如何选取 N 值是根据被积函数的性质和要求的精度确定的，通常要比较不同 N 值下的结果，看它们的差异再确定需要增加的 N 值。

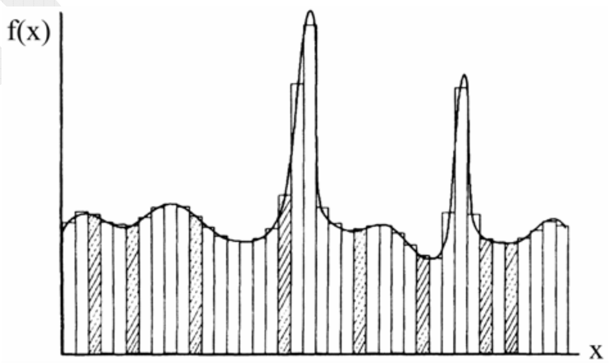

图 1.3.1.4-1 简单抽样求解积分时可能使得积分近似程度较差，图中的阴影区表示 Monte Carlo 随机抽样的取值。

如果积分中的被积函数不光滑时，如配分函数（1.3.1.4-1）式中的势能变化急剧时，则用目前的非权重简单抽样 Monte Carlo 方法得到的精度可能很差，如图 1.3.1.4-1 中有一些极大值区域没有被随机抽出。统计力学中 Boltzman 分布函数在相空间的大部分区域其值都是很小的，真正有贡献的区域范围很窄。简单抽样中如果要提高精度，必须增大抽样量。这种办法是不可取的，因为这样的计算效率很低。引入带权重的重要抽样法，将既可以保证计算精度又有很高的效率。

[作业]：用 Monte Carlo 方法计算任意 d 维空间中的单位超球体积。球面方程为 $\sum_{i=1}^{d}x_i^2=1$，要求精度为 1%。

1.3.1.5 提取法

由于 σ_S 正比于 σ_f，因此将被积函数变为平坦还可以有效地提高 Monte Carlo 方法的精度，因此发展了几种抽样技巧以减小方差，包括提取法和重要抽样法。对于一维积分，设我们能够构造一个与被积函数 $f(x)$ 形状相似的函数 $g(x)$，且它的积分值已知，

$$|f(x)-g(x)|<\varepsilon,\quad \int_a^b g(x)\,dx=J\text{。}\tag{1.3.1.5-1}$$

在提取法中，我们可以运用上面所述的 Monte Carlo 方法于一个较为平坦的被积函数 $f(x)-g(x)$，

$$\int_a^b f(x)\,dx=\int_a^b\{f(x)-g(x)\}\,dx+J\text{。}\tag{1.3.1.5-2}$$

1.3.1.6 奇异积分

奇异积分是指在积分限内被积函数有发散点的情形，尽管在奇点上被积函数是无穷大，但积分值可以是有限的，如 $\int_0^1 dx\big/\sqrt{1-x^2}=\pi/2$ 中的被积函数在上限处是发散的。在数值计算方法中，奇点必须避开，但因为奇点附近的贡献是相当大的，不可忽略，因此要尽可能的逼近奇点，这在固定网格划分形式下的其它数值方法中是很难做到的，但用 Monte Carlo 方法就比较容易，这是因为，随机选取的 x 恰为奇点的可能性不大，还可以在包含奇点的附近选择一非常小的排斥区域以避开奇点。不过，简单抽样的效率很低。

1.3.2 重要抽样

1.3.2.1 重要抽样方法

与提取法中的减法相比，实用中更为有效的重要抽样法中采用的是除法。设有一个几率分布 $g(x)$ 与 $f(x)$ 形状相似，

$$f(x)/g(x)\sim 1,\quad \int_a^b g(x)\,dx=1,\tag{1.3.2.1-1}$$

则积分可写成，

$$\int_a^b f(x)\,dx=\int_a^b\frac{f(x)}{g(x)}g(x)\,dx\text{，}\tag{1.3.2.1-2}$$

如果 x 在 $[a,b]$ 区间内的随机抽样不是均匀选取的，而是按照几率分布 $g(x)$ 选取的（图 1.3.2.1-1），则重要抽样法下的 Monte Carlo 积分为

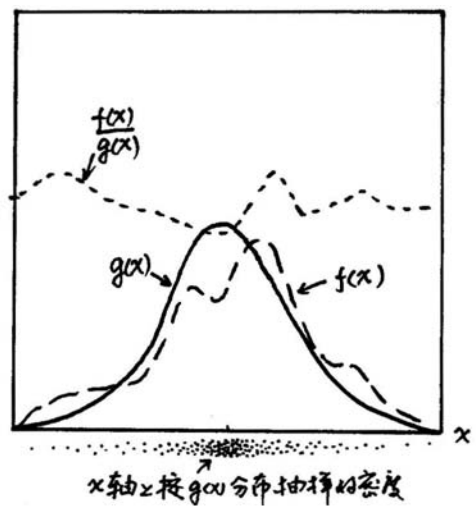

图 1.3.2.1-1 重要抽样法的示意图。

$$\int_a^b f(x)\,dx = \langle f/g \rangle \simeq \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{f(x_i)}{g(x_i)}。\tag{1.3.2.1-3}$$

注意几率分布 $g(x)$ 应该满足（1.2.1.1-6）式，即有：

$$\begin{aligned}&\int_a^b g(x)\,dx = 1,\ \ g(x) > 0,\\ &dP(x \to x+dx) = g(x)\,dx,\end{aligned}\tag{1.3.2.1-4}$$

对于 $[a,b]$ 区间内的均匀分布，显然应该有 $g(x)=1/(b-a)$，带入（1.3.2.1-3）后返回到（1.3.1.2-3）式。

例：我们可以用 $g(x)=\lambda^{-1}e^{-x/\lambda}$ 来消除积分中的指数因子，把它作为抽样的权重因子，因此被积函数变化放慢，计算误差将减小。由（1.2.1.1-7）－(1.2.1.1-9）式，可用重要抽样法计算下面的积分

$$\int_0^\infty e^{-x/\lambda} f(x)\,dx = \lambda\int_0^\infty f(x)g(x)\,dx \simeq \frac{\lambda}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i),\ (x_i = -\lambda\ln R_i)。\tag{1.3.2.1-5}$$

1.3.2.2 权重 Monte Carlo 积分

在（1.3.2.1-2）式中作变量代换，$x \leftrightarrow y$，其中选择 y 是在 $[0,1]$ 区间中的均匀分布的，满足（1.2.2.1-1）式，利用（1.2.2.1-2）式，即

$$dy = g(x)\,dx,\quad y = \int_a^x g(x')\,dx',\tag{1.3.2.2-1}$$

显见 $y(x)$ 即为累积函数（1.2.1.1-5）式，则得

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)}g(x)\,dx = \int_0^1 \frac{f(y)}{g(y)}\,dy,\tag{1.3.2.2-2}$$

上式对 y 的简单抽样即为（1.3.2.1-3）式。可见，重要抽样法的精神是：将随机变量 x 变换为另一随机变量 y，而变换关系 $y(x)$ 是表征被积函数 $f(x)$ 曲线变化特征的 $g(x)$ 的累积函数，对 y 的简单抽样就是对 x 带权重 $g(x)$ 的抽样。

更一般地，如选择的 $g(x)$ 本身不是归一化的，$c=\int_a^b g(x)\,dx$，则归一化步骤相当于将（1.3.2.2-2）式的上下限作一简单的替换：

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_0^c \frac{f(y)}{g(y)}\,dy,\tag{1.3.2.2-3}$$

其中对 y 的抽样是在 $[0,c]$ 区间。

例如，计算积分

$$I = \int_0^1 \exp(-x/2)\,dx,\tag{1.3.2.2-4}$$

该式当然可以解析算出，这里我们主要用该例说明重要抽样法的求解过程。式中的指数项随 x 增加而迅速减小，$g(x)$ 必须是另一有相同行为的函数，我们用指

数函数在 $x=0$ 附近的渐近展开来近似： $g(x)=1-x/2+x^2/8-x^3/48\cdots\simeq 1-x/2$，它在积分区间内是正的：

$$y(x)=\int_0^x (1-x'/2)\,dx'=x-x^2/4 \quad\Rightarrow\quad x=2\left(1\pm\sqrt{1-y}\right), \tag{1.3.2.2-5}$$

考虑到 $y(0)=0$，故上式中括号内应取负号，即 $x=2\left(1-\sqrt{1-y}\right)$，原积分写成：

$$I=\int_0^{3/4} dy\,\exp\left[-\left(1-\sqrt{1-y}\right)\right]\Big/\sqrt{1-y}, \tag{1.3.2.2-6}$$

[作业]：设权重因子 $g(x)=e^{ax}$，用重要抽样法计算积分 $\int_0^{\pi}\left(x^2+\cos^2 x\right)^{-1}dx$，并求使 σ_f 最小的 a 值。

参考文献

[1] 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 年）（第六章－第八章详细叙述各种抽样方法，并有实例说明）