

# 第一章 蒙特卡罗方法概述

1. 蒙特卡罗方法的基本思想
2. 蒙特卡罗方法的收敛性，误差
3. 蒙特卡罗方法的特点
4. 蒙特卡罗方法的主要应用范围

➤ 作业



# 第一章 蒙特卡罗方法概述

蒙特卡罗方法又称随机抽样技巧或统计试验方法。半个多世纪以来，由于科学技术的发展和电子计算机的发明，这种方法作为一种独立的方法被提出来，并首先在核武器的试验与研制中得到了应用。蒙特卡罗方法是一种计算方法，但与一般数值计算方法有很大区别。它是以概率统计理论为基础的一种方法。由于蒙特卡罗方法能够比较逼真地描述事物的特点及物理实验过程，解决一些数值方法难以解决的问题，因而该方法的应用领域日趋广泛。



# 1. 蒙特卡罗方法的基本思想

二十世纪四十年代中期，由于科学技术的发展和电子计算机的发明，蒙特卡罗方法作为一种独立的方法被提出来，并首先在核武器的试验与研制中得到了应用。但其基本思想并非新颖，人们在生产实践和科学试验中就已发现，并加以利用。

- 两个例子

- [例1. 蒲丰氏问题](#)

- [例2. 射击问题（打靶游戏）](#)

- [基本思想](#)

- [计算机模拟试验过程](#)



# 例 1. 蒲丰氏问题

为了求得圆周率  $\pi$  值，在十九世纪后期，有很多人作了这样的试验：将长为  $2l$  的一根针任意投到地面上，用针与一组相间距离为  $2a$  ( $l < a$ ) 的平行线相交的频率代替概率  $P$ ，再利用准确的关系式：

$$P = \frac{2l}{\pi a}$$

求出  $\pi$  值

$$\pi = \frac{2l}{aP} \approx \frac{2l}{a} \left( \frac{N}{n} \right)$$

其中  $N$  为投计次数， $n$  为针与平行线相交次数。这就是古典概率论中著名的蒲丰氏问题。



一些人进行了实验，其结果列于下表：

实验者	年份	投计次数	$\pi$ 的实验值
沃尔弗 (Wolf)	1850	5000	3.1596
斯密思 (Smith)	1855	3204	3.1553
福克斯 (Fox)	1894	1120	3.1419
拉查里尼 (Lazzarini)	1901	3408	3.1415929



## 例 2. 射击问题（打靶游戏）

设  $r$  表示射击运动员的弹着点到靶心的距离， $g(r)$  表示击中  $r$  处相应的得分（环数）， $f(r)$  为该运动员的弹着点的分布密度函数，它反映运动员的射击水平。该运动员的射击成绩为

$$\langle g \rangle = \int_0^{\infty} g(r) f(r) dr$$

用概率语言来说， $\langle g \rangle$  是随机变量  $g(r)$  的数学期望，即

$$\langle g \rangle = E[g(r)]$$



现假设该运动员进行了  $N$  次射击，每次射击的弹着点依次为  $r_1, r_2, \dots, r_N$ ，则  $N$  次得分  $g(r_1), g(r_2), \dots, g(r_N)$  的算术平均值

$$\bar{g}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(r_i)$$

代表了该运动员的成绩。换言之，为积分  $\langle g \rangle$  的估计值，或近似值。

在该例中，用  $N$  次试验所得成绩的算术平均值作为数学期望  $\langle g \rangle$  的估计值（积分近似值）。



## ➤ 基本思想

由以上两个例子可以看出，当所求问题的解是某个事件的概率，或者是某个随机变量的数学期望，或者是与概率、数学期望有关的量时，通过某种试验的方法，得出该事件发生的频率，或者该随机变量若干个具体观察值的算术平均值，通过它得到问题的解。这就是蒙特卡罗方法的基本思想。

当随机变量的取值仅为 1 或 0 时，它的数学期望就是某个事件的概率。或者说，某种事件的概率也是随机变量（仅取值为 1 或 0）的数学期望。





因此，可以通俗地说，蒙特卡罗方法是用随机试验的方法计算积分，即将所要计算的积分看作服从某种分布密度函数  $f(r)$  的随机变量  $g(r)$  的数学期望

$$\langle g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} g(r) f(r) dr$$

通过某种试验，得到  $N$  个观察值  $r_1, r_2, \dots, r_N$ （用概率语言来说，从分布密度函数  $f(r)$  中抽取  $N$  个子样  $r_1, r_2, \dots, r_N$ ），将相应的  $N$  个随机变量的值  $g(r_1), g(r_2), \dots, g(r_N)$  的算术平均值

$$\bar{g}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(r_i)$$

作为积分的估计值（近似值）。



为了得到具有一定精确度的近似解，所需试验的次数是很多的，通过人工方法作大量的试验相当困难，甚至是不可能的。因此，蒙特卡罗方法的基本思想虽然早已被人们提出，却很少被使用。本世纪四十年代以来，由于电子计算机的出现，使得人们可以通过电子计算机来模拟随机试验过程，把巨大数目的随机试验交由计算机完成，使得蒙特卡罗方法得以广泛地应用，在现代化的科学技术中发挥应有的作用。



## ➤ 计算机模拟试验过程

计算机模拟试验过程，就是将试验过程（如投针，射击）化为数学问题，在计算机上实现。以上述两个问题为例，分别加以说明。

例 1. [蒲丰氏问题](#)

例 2. [射击问题（打靶游戏）](#)

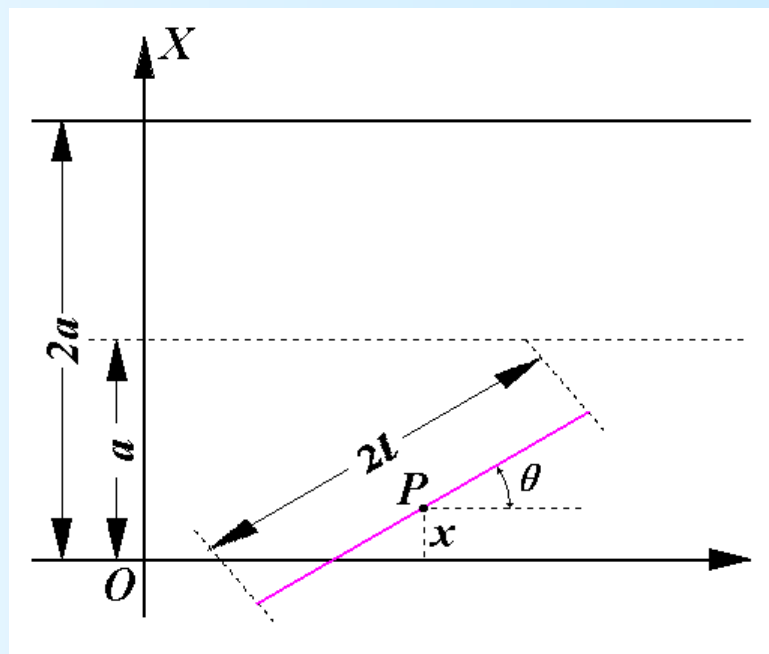
由上面两个例题看出，蒙特卡罗方法常以一个“概率模型”为基础，按照它所描述的过程，使用由已知分布抽样的方法，得到部分试验结果的观察值，求得问题的近似解。



# 例 1．蒲丰氏问题

设针投到地面上的位置可以用一组参数  $(x, \theta)$  来描述， $x$  为针中心的坐标， $\theta$  为针与平行线的夹角，如图所示。

任意投针，就意味着  $x$  与  $\theta$  都是任意取的，但  $x$  的范围限于  $[0, a]$ ，夹角  $\theta$  的范围限于  $[0, \pi]$ 。在此情况下，针与平行线相交的数学条件是

$$x \leq l \cdot \sin \theta$$


如何产生任意的  $(x, \theta)$  ?  
 $x$  在  $[0, a]$  上任意取值, 表示  $x$  在  $[0, a]$  上是均匀分布的, 其分布密度函数为:

$$f_1(x) = \begin{cases} 1/a, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

类似地,  $\theta$  的分布密度函数为:

$$f_2(\theta) = \begin{cases} 1/\pi, & 0 \leq \theta \leq \pi \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

因此, 产生任意的  $(x, \theta)$  的过程就变成了由  $f_1(x)$  抽样  $x$  及由  $f_2(\theta)$  抽样  $\theta$  的过程了。由此得到:

$$x = a\xi_1$$

$$\theta = \pi\xi_2$$

其中  $\xi_1, \xi_2$  均为  $(0, 1)$  上均匀分布的随机变量。



每次投针试验，实际上变成在计算机上从两个均匀分布的随机变量中抽样得到  $(x, \theta)$ ，然后定义描述针与平行线相交状况的随机变量  $s(x, \theta)$ ，为

$$s(x, \theta) = \begin{cases} 1, & \text{当 } x \leq l \cdot \sin \theta \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

如果投针  $N$  次，则

$$\bar{s}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s(x_i, \theta_i)$$

是针与平行线相交概率  $P$  的估计值。事实上，

$$P = \int \int s(x, \theta) f_1(x) f_2(\theta) dx d\theta$$

$$= \int_0^{\pi} \frac{d\theta}{\pi} \int_0^{\sin \theta} \frac{dx}{a} = \frac{2l}{\pi a}$$

于是有

$$\pi = \frac{2l}{aP} \approx \frac{2l}{a\bar{s}_N}$$



## 例 2 . 射击问题

设射击运动员的弹着点分布为

环数	7	8	9	10
概率	0.1	0.1	0.3	0.5

用计算机作随机试验（射击）的方法为，选取一个随机数  $\xi$ ，按右边所列方法判断得到成绩。

这样，就进行了一次随机试验（射击），得到了一次成绩  $g(r)$ ，作  $N$  次试验后，得到该运动员射击成绩的近似值

$\xi \leq 0.1 \xrightarrow{\leq} \text{命中7环}$

$\downarrow >$

$\leq 0.2 \xrightarrow{\leq} \text{命中8环}$

$\downarrow >$

$\leq 0.5 \xrightarrow{\leq} \text{命中9环}$

$\downarrow >$

命中10环

$$\bar{g}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(r_i)$$



## 2. 蒙特卡罗方法的收敛性，误差

蒙特卡罗方法作为一种计算方法，其收敛性与误差是普遍关心的一个重要问题。

- [收敛性](#)
- [误差](#)
- [减小方差的各种技巧](#)
- [效率](#)





## ➤ 收敛性

由前面介绍可知，蒙特卡罗方法是由随机变量  $X$  的简单子样  $X_1, X_2, \dots, X_N$  的算术平均值：

$$\bar{X}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i$$

作为所求解的近似值。由大数定律可知，如  $X_1, X_2, \dots, X_N$  独立同分布，且具有有限期望值 ( $E(X) < \infty$ )，则

$$P\left(\lim_{N \rightarrow \infty} \bar{X}_N = E(X)\right) = 1$$

即随机变量  $X$  的简单子样的算术平均值  $\bar{X}_N$ ，当子样数  $N$  充分大时，以概率 1 收敛于它的期望值  $E(X)$ 。



## ➤ 误差

蒙特卡罗方法的近似值与真值的误差问题，概率论的中心极限定理给出了答案。该定理指出，如果随机变量序列  $X_1, X_2, \dots, X_N$  独立同分布，且具有有限非零的方差  $\sigma^2$ ，即

$$0 \neq \sigma^2 = \int (x - E(X))^2 f(x) dx < \infty$$

$f(X)$  是  $X$  的分布密度函数。则

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P\left(\frac{\sqrt{N}}{\sigma} |\bar{X}_N - E(X)| < x\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2/2} dt$$



当  $N$  充分大时，有如下的近似式

$$P\left(\left|\bar{X}_N - E(X)\right| < \frac{\lambda_\alpha \sigma}{\sqrt{N}}\right) \approx \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\lambda_\alpha} e^{-t^2/2} dt = 1 - \alpha$$

其中  $\alpha$  称为置信度， $1 - \alpha$  称为置信水平。

这表明，不等式  $\left|\bar{X}_N - E(X)\right| < \frac{\lambda_\alpha \sigma}{\sqrt{N}}$  近似地以概率  $1 - \alpha$  成立，且误差收敛速度的阶为  $O(N^{-1/2})$ 。

通常，蒙特卡罗方法的误差  $\varepsilon$  定义为

$$\varepsilon = \frac{\lambda_\alpha \sigma}{\sqrt{N}}$$

上式中  $\lambda_\alpha$  与置信度  $\alpha$  是一一对应的，根据问题的要求确定出置信水平后，查标准正态分布表，就可以确定出  $\lambda_\alpha$ 。



下面给出几个常用的  $\alpha$  与的数值：

$\alpha$	0.5	0.05	0.003
$\lambda_{\alpha}$	0.6745	1.96	3

关于蒙特卡罗方法的误差需说明两点：第一，蒙特卡罗方法的误差为概率误差，这与其他数值计算方法是有区别的。第二，误差中的均方差  $\sigma$  是未知的，必须使用其估计值

$$\hat{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i^2 - \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \right)^2}$$

来代替，在计算所求量的同时，可计算出  $\hat{\sigma}$  。



## ➤ 减小方差的各种技巧

显然，当给定置信度  $\alpha$  后，误差  $\varepsilon$  由  $\sigma$  和  $N$  决定。要减小  $\varepsilon$ ，或者是增大  $N$ ，或者是减小方差  $\sigma^2$ 。在  $\sigma$  固定的情况下，要把精度提高一个数量级，试验次数  $N$  需增加两个数量级。因此，单纯增大  $N$  不是一个有效的办法。

另一方面，如能减小估计的均方差  $\sigma$ ，比如降低一半，那误差就减小一半，这相当于  $N$  增大四倍的效果。因此降低方差的各种技巧，引起了人们的普遍注意。后面课程将会介绍一些降低方差的技巧。



## ➤ 效率

一般来说，降低方差的技巧，往往会使观察一个子样的时间增加。在固定时间内，使观察的样本数减少。所以，一种方法的优劣，需要由方差和观察一个子样的费用（使用计算机的时间）两者来衡量。这就是蒙特卡罗方法中效率的概念。它定义为  $\sigma^2 \cdot c$ ，其中

$c$  是观察一个子样的平均费用。显然  $\sigma^2 \cdot c$  越小，方法越有效。



### 3. 蒙特卡罗方法的特点

#### ➤ 优点

- 1) 能够比较逼真地描述具有随机性质的事物的特点及物理实验过程。
- 2) 受几何条件限制小。
- 3) 收敛速度与问题的维数无关。
- 4) 具有同时计算多个方案与多个未知量的能力。
- 5) 误差容易确定。
- 6) 程序结构简单，易于实现。



#### ➤ 缺点

- 1) 收敛速度慢。
- 2) 误差具有概率性。
- 3) 在粒子输运问题中，计算结果与系统大小有关。



# 1) 能够比较逼真地描述具有随机性质的事物的特点及物理实验过程

从这个意义上讲，蒙特卡罗方法可以部分代替物理实验，甚至可以得到物理实验难以得到的结果。用蒙特卡罗方法解决实际问题，可以直接从实际问题本身出发，而不从方程或数学表达式出发。它有直观、形象的特点。





## 2) 受几何条件限制小

在计算  $s$  维空间中的任一区域  $D_s$  上的积分

$$g = \int_{D_s} \cdots \int g(x_1, x_2, \cdots, x_s) dx_1 dx_2 \cdots dx_s$$

时, 无论区域  $D_s$  的形状多么特殊, 只要能给出描述  $D_s$  的几何特征的条件, 就可以从  $D_s$  中均匀产生  $N$  个点  $(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \cdots, x_s^{(i)})$ , 得到积分的近似值。

$$\bar{g}_N = \frac{D_s}{N} \sum_{i=1}^N g(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \cdots, x_s^{(i)})$$

其中  $D_s$  为区域  $D_s$  的体积。这是数值方法难以作到的。

另外, 在具有随机性质的问题中, 如考虑的系统形状很复杂, 难以用一般数值方法求解, 而使用蒙特卡罗方法, 不会有原则上的困难。



### 3) 收敛速度与问题的维数无关

由误差定义可知，在给定置信水平情况下，蒙特卡罗方法的收敛速度为  $O(N^{-1/2})$ ，与问题本身的维数无关。维数的变化，只引起抽样时间及估计量计算时间的变化，不影响误差。也就是说，使用蒙特卡罗方法时，抽取的子样总数  $N$  与维数  $s$  无关。维数的增加，除了增加相应的计算量外，不影响问题的误差。这一特点，决定了蒙特卡罗方法对多维问题的适应性。而一般数值方法，比如计算定积分时，计算时间随维数的幂次方而增加，而且，由于分点数与维数的幂次方成正比，需占用相当数量的计算机内存，这些都是一般数值方法计算高维积分时难以克服的问题。



## 4) 具有同时计算多个方案与多个未知量的能力

对于那些需要计算多个方案的问题，使用蒙特卡罗方法有时不需要像常规方法那样逐个计算，而可以同时计算所有的方案，其全部计算量几乎与计算一个方案的计算量相当。例如，对于屏蔽层为均匀介质的平板几何，要计算若干种厚度的穿透概率时，只需计算最厚的一种情况，其他厚度的穿透概率在计算最厚一种情况时稍加处理便可同时得到。

另外，使用蒙特卡罗方法还可以同时得到若干个所求量。例如，在模拟粒子过程中，可以同时得到不同区域的通量、能谱、角分布等，而不像常规方法那样，需要逐一计算所求量。



## 5) 误差容易确定

对于一般计算方法，要给出计算结果与真值的误差并不是一件容易的事情，而蒙特卡罗方法则不然。根据蒙特卡罗方法的误差公式，可以在计算所求量的同时计算出误差。对于很复杂的蒙特卡罗方法计算问题，也是容易确定的。

一般计算方法常存在着有效位数损失问题，而要解决这一问题有时相当困难，蒙特卡罗方法则不存在这一问题。



## 6) 程序结构简单，易于实现

在计算机上进行蒙特卡罗方法计算时，程序结构简单，分块性强，易于实现。



# 1) 收敛速度慢

如前所述，蒙特卡罗方法的收敛速度为 $O(N^{-1/2})$ ，一般不容易得到精确度较高的近似结果。对于维数少（三维以下）的问题，不如其他方法好。



## 2) 误差具有概率性

由于蒙特卡罗方法的误差是在一定置信水平下估计的，所以它的误差具有概率性，而不是一般意义下的误差。



### 3) 在粒子输运问题中，计算结果与系统大小有关

经验表明，只有当系统的大小与粒子的平均自由程可以相比较时（一般在十个平均自由程左右），蒙特卡罗方法计算的结果较为满意。但对于大系统或小概率事件的计算问题，计算结果往往比真值偏低。而对于大系统，数值方法则是适用的。

因此，在使用蒙特卡罗方法时，可以考虑把蒙特卡罗方法与解析（或数值）方法相结合，取长补短，既能解决解析（或数值）方法难以解决的问题，也可以解决单纯使用蒙特卡罗方法难以解决的问题。这样，可以发挥蒙特卡罗方法的特长，使其应用范围更加广泛。





## 4. 蒙特卡罗方法的主要应用范围

蒙特卡罗方法所特有的优点，使得它的应用范围越来越广。它的主要应用范围包括：粒子输运问题，统计物理，典型数学问题，真空技术，激光技术以及医学，生物，探矿等方面。随着科学技术的发展，其应用范围将更加广泛。

蒙特卡罗方法在粒子输运问题中的应用范围主要包括：实验核物理，反应堆物理，高能物理等方面。

蒙特卡罗方法在实验核物理中的应用范围主要包括：通量及反应率，中子探测效率，光子探测效率，光子能量沉积谱及响应函数，气体正比计数管反冲质子谱，多次散射与通量衰减修正等方面。

