

计算物理B

第二章 蒙特卡罗方法

主讲：张志勇

zzyzhang@ustc.edu.cn

自然界的变化的过程

第一类：具有确定形式的变化的过程，或者说其变化规律具有必然性。用数学语言来说：变化的过程可以用一个时间 t 的确定函数来描述，比如抛射体的速度随时间的变化。

第二类：没有确定的变化形式，也就是说，每次对它的测量结果没有一个确定的变化规律。

用数学语言来说：这类事物的变化的过程不能用一个时间 t 的确定性函数来描述。

如：布朗运动

随机过程

如果对某事物变化的全过程进行一次观察，可得到一个时间 t 的函数，若对该事物的变化过程重复、且独立地进行多次观察，则每次所得到的结果不相同。

从另一个角度看，如果固定某一观察时刻 t ，事物在该时刻出现的状态不能预先知道，因而是随机的。这类过程称为**随机过程**。

随机过程举例

(1) 玻耳氢原子模型中电子的轨道运动

用 $\xi(t)=i$ 表示“在 t 时刻、电子在第 i 条轨道上运动”的事件。电子可以从一条轨道跃迁到另一条轨道上（即从第 i 轨道跃迁到第 j 轨），但跃迁到哪一条轨道上是随机的，事先不可预知，跃迁时刻 t_1 、 t_2 、... 也是随机的。因此，经过时间 t 后，电子所处的轨道 $\xi(t)$ 是随机的。

(2) 液面上质点的运动

观察液面上作布朗运动的质点A。用 $\{\xi(t), \eta(t)\}$ 表示该质点在时刻 t 在液面上的坐标位置，显然，当固定 t 时，它们是一对二维随机坐标。

t 是一个连续变量，因此 $\{\xi(t), \eta(t)\}$ 又是一个过程。

随机过程有规律

以上两个例子说明，需要在事物的随机变化过程中研究它的状态。为此，用“**随机过程**”一词来表示依赖于一个变动参量的一组随机变量。

随机过程不能用一个确定的函数来描述，但是，**随机过程也是有规律的**。

蒙特卡罗方法

蒙特卡罗方法（Monte Carlo method，简称MC），是20世纪40年代中期由于科学技术的发展和电子计算机的发明，而被提出的一种以概率统计理论为指导的一类非常重要的数值计算方法。它是针对随机过程而提出的一种计算机模拟方法

随机模拟方法（Random Simulation Method）

统计试验方法（Statistical Test Method）

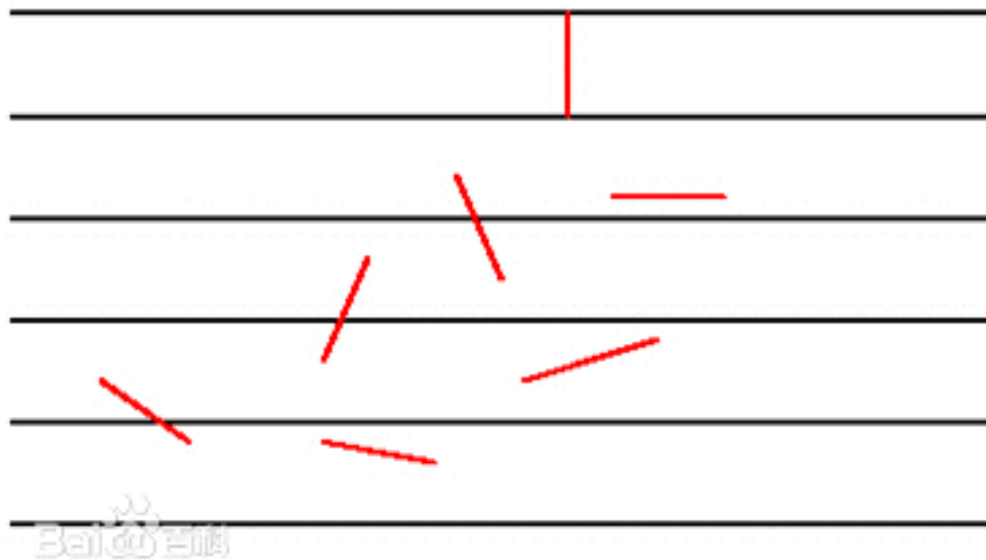
随机抽样技术（Random Sampling Technique）

MC方法的发明

20世纪40年代，John von Neumann（冯.诺依曼），Stanislaw Ulam（乌拉姆）和Nicholas Metropolis在洛斯阿拉莫斯国家实验室为核武器计划工作时，发明了蒙特卡洛方法。因为Ulam的叔叔经常在蒙特卡洛赌场输钱得名，而蒙特卡洛方法正是以概率为基础的。

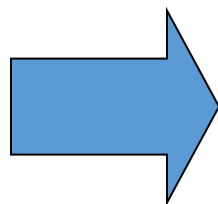
1946年，von Neumann和Ulam首先用这种方法在数字电子计算机上模拟中子链式反应。

MC方法的起源：布丰投针实验



18世纪，布丰提出以下问题：设我们有一个以平行且等距木纹铺成的地板，现在随意抛一支长度小于或等于木纹之间距离的针，求针和其中一条木纹相交的概率。计算公式 $p=2L/\pi s$ ，其中 L 是针的长度， s 是平行线间的距离， π 是圆周率。当 $L=s$ 时， $p=2/\pi$ 。

如果在 N 次投针实验中，有 M 次和平行线相交。当 N 足够大时，则可用 M/N 近似表示细针和平行线相交的概率 p ，于是



$$\pi \approx \frac{2M}{N}$$

所以从针和平行线相交的概率就可以求 π 值。

用这种方法计算 p 值的效率和精度都很差， N 次投针的标准误差为 $2.37/\sqrt{N}$ 。

MC方法的应用

蒙特卡罗方法的应用范围日趋广阔。它已被广泛应用到许多科学研究与工程设计领域，成为计算科学的一个重要分支。

在纯数学方面，可用来计算多维积分，解线性方程组和线性积分方程，计算齐次线性积分方程的本征值，求解微分方程等。

在应用科学方面，它可用来解决核物理、中子物理、高能物理、辐射输运、统计物理、真空物理、激光技术、电子学、信息论、高分子科学、凝聚态物理、流体力学、生物学、医学、运筹学、军事学、人口学等学科中的某些问题。

模拟微观粒子在宏观介质中输运的各类问题，至今依旧是主要的应用领域。

MC方法的三种应用形式

MC方法可以解决各种类型的问题。根据问题是否涉及随机过程以及抽样方法，通常将处理的问题分为三类：

直接蒙特卡罗模拟：采用随机数序列来模拟复杂随机过程的效应。

蒙特卡罗积分：利用随机数序列计算积分的方法，且积分维数越高，该方法的积分效率就越高。

Metropolis模拟：是指在MC模拟中采用Metropolis抽样方法。

直接MC模拟

中子、电子等微观粒子在介质中的扩散等问题就属于随机性问题，因为粒子在介质内部的运动不仅受到某些确定性的影响，而且更多的是受到随机性的影响。

这类问题采用直接模拟方法，即根据实际物理情况的概率法则用计算机进行抽样试验，然后计算其统计参数。

原子核物理问题、运筹学中的库存问题、随机服务系统中的排队问题、动物的生态竞争问题、传染病的蔓延问题等

MC方法计算定积分

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 处相应的得分数（环数），分布密度函数 $f(r)$ 表示该运动员的弹着点分布，它反映运动员的射击水平。运动员的成绩可表示为

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

用概率语言： $\langle I \rangle$ 就是随机变量 $g(r)$ 的数学期望值。

现在假设这个运动员共射击 N 次，弹着点依次为 $\{r_1, r_2, \dots, r_N\}$ ， N 次射击的平均得分相当好地代表了这个运动员的成绩：

$$\bar{g}_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g(r_n)$$

因此， \bar{g}_N 是积分的一个估计值（或近似值）。

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

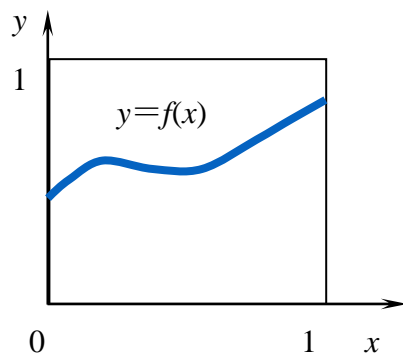
这个例子直观说明了蒙特卡罗方法计算定积分的思想。

$$\bar{g}_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g(r_n) \quad \longleftrightarrow \quad \langle I \rangle = \int_0^\infty g(r) f(r) dr$$

为进一步了解蒙特卡罗方法计算定积分的思想，再考虑如下最简单的定积分计算

$$I = \int_0^1 f(x)dx$$

假定 $y=f(x)$ 定义在区间 $0 \leq y \leq 1$ ，如下图：



任意积分 $\int_a^b g(z)dz$

可通过变量代换 $x=(z-a)/(b-a)$ 变为

$$\frac{1}{b-a} \int_0^1 g(x)dx$$

若 $0 < L \leq g(z) \leq M$ 可作变换使 $g^*(x)$ 在区间 $[0,1]$

$$g^*(x) = \frac{1}{M-L} [g(x) - L]$$

平均值法（期望值估计法）

掷点法

例：求解 $\int_0^1 (x^2 + x)dx$

其解析解为 $5/6 = 0.83333333$

MC求解确定性的问题

用蒙卡方法求解这类问题的方法是，首先建立一个与求解相关的概率模型，使解就是所建立的模型的概率分布或数学期望。

然后对这个模型进行随机抽样试验，即产生随机数；最后用随机数的算术平均值作为解的近似估计值。

计算多重积分、解某些偏微分方程边值问题、解积分方程等属于这一类。

Metropolis模拟

以马尔可夫链的形式产生系统的分布序列，能够研究经典和量子多粒子系统的问题，主要要用于统计物理研究。

MC方法的基本思想

对于一个具体的问题：（**1**）建立一个概率模型或随机过程，使它的参数等于问题的解；（**2**）对模型或过程的观察或抽样试验来计算所求参数的统计特征，给出解的近似值；（**3**）解的精度可用估计值的标准误差来表示。

假设所要求的量 x 是随机变量 ξ 的数学期望值 $E(\xi)$ ，用蒙卡方法确定 x 需要对 ξ 进行 N 次重复抽样，从而产生一个相互独立的 ξ 值的序列 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ ，它们的算术平均值就是待求量的近似值，即

$$x = E(\xi) \quad \Leftrightarrow \quad x \approx \bar{\xi}_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \xi_n$$

随机变量和随机变量的分布

随机变量是一个可以取不止一个值的变量（通常在连续区间取值），并且人们无法事先预言它取的某一特定值。

这种变量的值无法预言，但其分布是可能知道的。

对于连续的随机变量，由随机变量的分布可以得到它取某给定值的概率：

$$f(u)du = P(u < u' < u + du)$$

$f(u)$ 称为 u 的**概率分布密度函数**， $f(u)du$ 表示随机变量 u' 取 u 到 $u+du$ 之间值的概率。 $f(u)$ 通常是归一化的，因而函数 $f(u)$ 对所有的 u 值范围内的积分值为1，即

$$\int f(u)du = 1$$

MC方法的核心问题

以概率统计理论为其主要理论基础（对大量的随机事件进行统计，概率论中的大数法则和中心极限定理是MC方法的基础）；

以随机抽样为主要手段（按要求产生随机数）。

大数定理

大数定理反映了大量随机数之和的性质。

如果函数 g 在 $[a,b]$ 区域上可积，在区间 $[a,b]$ 以均匀的概率密度随机地取 N 个数 u_n ，对每个 u_n 计算出函数值 $g(u_n)$ （记为 g_n ）。

大数法则指出，这些函数值之和除以 N 的值将收敛于函数 g 的期望值，即

$$\bar{g}_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g_n \rightarrow I = \frac{1}{b-a} \int_a^b g(u) du$$

蒙特卡罗估计值  定积分

根据这个定理，在抽取足够多的随机样本后，计算得到的积分的蒙特卡罗估计值将收敛于该积分的正确结果。

当 $N \rightarrow \infty$ 时，平均值收敛到定积分值 I 的概率为1，即

$$P(\lim_{N \rightarrow \infty} \bar{g}_N = I) = 1$$

$$\bar{g}_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g_n \rightarrow I = \frac{1}{b-a} \int_a^b g(u) du$$

蒙特卡罗方法的误差正比于： $\frac{1}{\sqrt{N}}$

中心极限定理

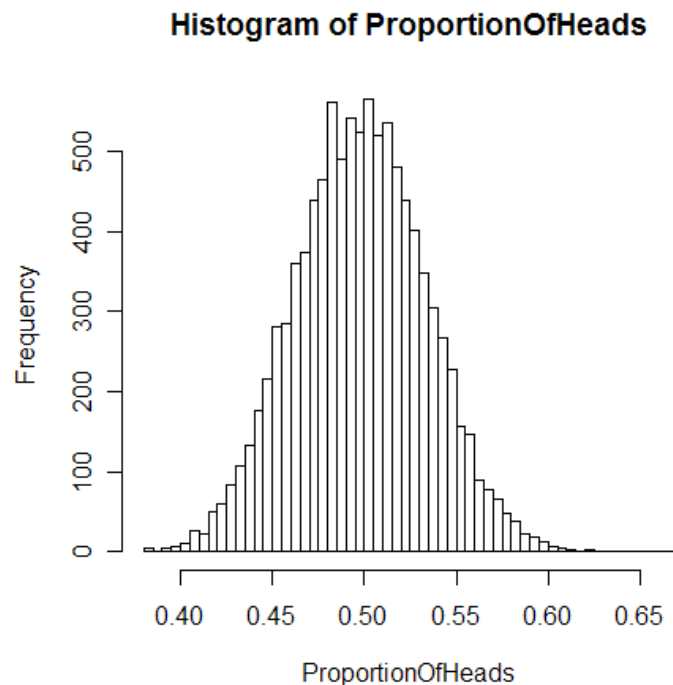
事实上， N 不可能取无穷大，所以需要对收敛的程度进行研究，作出各种误差估计。这个工作可利用中心极限定理来完成。

中心极限定理近似地告诉我们，对于足够大、但有限的 N ，蒙特卡罗估计值是如何分布的。

该定理指出：无论单个随机变量的分布如何，它的若干独立随机变量之和总是满足正态分布（即高斯分布）。

中心极限定理是概率论中最著名的结果之一。它指出，大量的独立随机变量之和具有近似于正态的分布。因此，它不仅提供了计算独立随机变量之和的近似概率的简单方法，而且有助于解释为什么有很多自然群体的经验频率呈现出正态曲线这一事实。因此中心极限定理这个结论使正态分布在数理统计中具有重要的地位。

右图描绘了多次抛掷硬币实验中
出现正面的平均比率，每次实验
均抛掷了大量硬币。



MC方法的步骤

MC方法解题可归结为三个主要步骤：

(1) 建立一个与问题相关的随机模型（对于本身就具有随机性质的问题，主要是正确地描述这个概率过程），并形成某个随机变量，使它的某个数字特征（如概率、期望值、二次矩等）正好是问题的解。

例如把求圆周率 π 的问题构造为投针问题，并且使
随机变量

$$z = \begin{cases} 1, & \text{当针命中圆内时} \\ 0, & \text{否则} \end{cases}$$

的期望值，正好是问题的解。

在解决实际问题时，还要根据概率统计模型的特点
和计算成本的限制，尽量改进模型，以提高效率，
降低计算费用。

(2)按概率模型进行大量的随机模拟试验，从而获得随机变量的大量试验值(即抽样值)。

通过模拟试验，可得到总体的一个简单子样，每个抽样值就是子样中的一个元素。这里还要解决如何从已知概率分布实现抽样这一问题，或者说如何产生具有已知概率分布的随机变量。这是实现蒙特卡罗模拟试验的基本手段。

(3)统计处理模拟结果，给出问题的解及解的精度
的估计。

用MC方法解题的步骤可归结为三句话：

构造或描述概率过程；

实现从已知概率分布抽样；

建立各种估计量。

MC方法的特点

(1) MC方法的误差与问题的维数无关，特别适应于求解高维问题

维数的增加，除了引起抽样时间及计算估计量的时间有所增加外，不影响解的误差，**计算时间仅与维数成正比**。

一般的数值方法，计算量要随维数**幂次方**而增加。

(2) 蒙特卡罗方法受问题条件限制的影响小

例如，计算 s 维空间任一区域 Ω (其“体积”为 V)的积分

$$I = \int_{\Omega} g(x_1, \dots, x_s) dx_1 \cdots dx_s$$

无论 Ω 的形状如何特殊，被积函数如何不光滑，由于

$$I = V \int_{\Omega} g(x_1, \dots, x_s) \frac{1}{V} dx_1 \cdots dx_s$$

所以总可以给出积分值的估计：

$$\bar{I} = \frac{V}{N} \sum_{i=1}^N g(x_1^{(i)}, \dots, x_s^{(i)})$$

其中 $1/V$ 是区域 Ω 上的均匀分布密度， $(x_1^{(i)}, \dots, x_s^{(i)})$ 是 Ω 中的第 i 个均匀点。

不管 g 和 Ω 的形式如何，这种算法不会有什么原则上的困难，而其它数值方法受问题条件限制的影响比较大。

在粒子输运问题中，对于截面与能量相关、散射各向异性、介质非均匀、复杂几何、时间相关等问题，其它方法处理起来相当困难，而对MC方法来说，这些情况只不过维数增多了，分布密度变化了，几何条件复杂了，不会产生本质性的困难。

(3) 用MC方法解题时方法灵活，一个问题可通过不同的随机模型来实现

(4) MC方法的弱点是收敛速度慢和误差的概率性质不宜用来求解小概率问题

随机数

简单地说，随机数就是不可预计的数字。

例如，基本数字包括0到9共十个数，如果随机地取一个数，则每个数字出现的概率相同，都是 $1/10$ ，而且每个数字的出现，与相邻其它数字的出现都是独立的（相互没有关联的），满足这样的条件的数字就是随机数。

这个简单例子中的随机数称为离散随机数。

如果将任意四个随机数字合并为一个数，并用 10^4 除，这样的随机数可看成是从0.0000到0.9999之间均匀分布的随机数。

随机数的特点

随机数在MC方法中占有极其重要的位置，**独立性**和**均匀性**是随机数必备的两个特点。

➤最简单、最基本，也是最重要的随机数是在单一区间[0,1]上的均匀分布的随机数，其分布密度函数为

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

分布函数为：

$$F(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ x, & 0 \leq x \leq 1 \\ 1, & x > 1 \end{cases}$$

随机数的分类

随机数是实现由已知分布抽样的基本量，在由已知分布的抽样过程中，将随机数作为已知量，用适当的数学方法可以由它产生具有任意已知分布的简单子样。

真随机数：不可重复，物理方法产生

如放射性衰变，电子设备的热噪音，宇宙射线的触发时间等

准随机数：不具随机性质，只要处理问题能得到正确结果

伪随机数：可重复，数学方法产生，必须通过统计检验

良好统计分布，容易实现，效率高，周期长，可移植性好等

真随机数

真随机数列是不可预计的，不可能重复产生。这种随机数列只能通过某些物理过程来产生，如放射性衰变，电子设备的热噪音等。

通过随机物理过程产生蒙特卡罗需要的随机数序列在理论上不存在什么问题，但在实际应用时确非常困难。

真随机数的产生

如：掷骰子游戏，投掷硬币



在计算机上用物理方法产生随机数的基本原理是：利用某些物理现象，在计算机上增加某些特殊设备，可以在计算机上直接产生随机数。这些特殊设备称为随机数发生器。

用来作为随机数发生器的物理源主要有两种：一种是**根据放射性物质的放射性**，另一种是**利用计算机的固有噪声**。

物理方法产生的随机数无法重复实现，不能进行程序复算，给验证结果带来很大困难。而且，需要增加随机数发生器和电路联系等附加设备，费用昂贵。因此，该方法也不适合在计算机上使用。

准随机数

原则上，一个随机数仅仅是指随机变量所取的某一特定值。

通常采用已经确定好的数列作为蒙特卡罗计算中所需要的随机数序列，但这些数列从统计意义上讲并不是随机的，只不过与真正的随机序列具有相似的某些特征而已，用它来处理问题时能得到正确的结果。

伪随机数

实际应用中的随机数一般通过数学方法借助计算机产生，这样的随机数从数学上讲并不是随机的，但只要满足一定的条件，仍可当作随机数应用，并在蒙特卡罗计算中得到正确的结果。

这种随机数就是**伪随机数**。

用MC方法解题，需要产生各种随机变量。在理论上，只要有了一种连续分布的随机变量，通过变换就可以得到任意分布的随机变量。

在连续分布中，区间 $[0,1]$ 上的均匀分布（也称单位矩形分布）最简单，并且将其变换为其它各种分布时较为简便。

伪随机数的产生

用数学方法产生伪随机数的优点是：速度快、费用低、可以复算、适合于在计算机上实现。

产生伪随机数的方法很多，在选择时需要注意以下几点：**随机性好；省时；周期长；容易在计算机上实现。**

在产生伪随机数的数学方法中，有取中法、移位法和同余法等，取中法产生的数列均匀性差一些，加同余法则相互独立性较差。乘加同余法统计性质较优、使用较广。

冯·诺伊曼平方取中法

平方取中法是把一个 $2S$ 位的十进制自平方后，去头截尾只保留中间 $2S$ 个数字，然后用 10^{2S} 来除，这样就可以得到在 $[0,1]$ 上均匀分布的伪随机数序列。

递推公式：
$$x_{n+1} = [x_n^2 / 10^S](\text{mod } 10^{2S}) \quad \xi = x_n / 10^{2S}$$

►例如，设十进制数的 $2S=4$ ，并取 $x_1=6406$ ，则有：

$$\begin{array}{llll} x_1 = 6406 & x_1^2 = 41036836 & x_2 = 0368 & x_2^2 = 00135424 \\ x_3 = 1354 & x_3^2 = 01833316 & x_4 = 8333 & x_4^2 = 69438889 \end{array}$$

►相应的伪随机数序列是**0.6406**， **0.3680**， **0.1354**， **0.8333**， **0.4388**

不足：具有周期性，有些数甚至会紧接着重复出现，很少使用

Lehmer 线性同余法

➤由Lehmer在1951年提出来的，它的一般形式是：对于任一初始值 x_0 ，伪随机数序列由下面递推公式确定：

$$x_{n+1} = (ax_n + c)(\text{mod } M) \quad \xi_n = \frac{x_n}{M}$$

➤ x_0 称为种子，改变它的值就得到基本序列的不同区段随机数

➤ a - 乘子， c - 增量， m - 模

例如 $x_0 = \text{Seed} \quad 0 \leq \text{Seed} \leq 199617$

$$c = 99991 \quad a = 24298 \quad M = 199617$$

乘同余法 $x_{n+1} = ax_n (\text{mod } M) \quad \xi_n = \frac{x_n}{M}$

乘同余法具有在计算机上容易实现、快速等特点，已被广泛采用

伪随机数的统计检验

➤判断伪随机数是否满足均匀和相互独立的要求，要靠统计检验的方法实现。一般包括两大类：均匀性检验和独立性检验

➤ 伪随机数的均匀性

➤均匀性是指在 $[0,1]$ 区间内等长度子区间中随机数的数量是一样的。

➤ 伪随机数的独立性

➤按先后顺序出现的随机数中，每个随机数的取值与其相距一定间隔的随机数取值之间无关。

伪随机数的均匀性

➤将区间 $[0,1]$ 分为 K 个子区间，统计随机数落在第 k 个子区间的实际频数 n_k ，它应当趋近于理论频数 m_k

$$m_k = \frac{N}{K}$$

限制条件 $\sum_{k=1}^K m_k = N$

计算统计量 $\chi^2 = \sum_{k=1}^K \frac{(n_k - m_k)^2}{m_k}$

➤如果 χ^2 值很大，表示远远偏离理想值，因此要求 χ^2 值尽可能小

➤ K 的取值不能太大也不能太小，太大反映不出“小区间”的均匀性，太小反映不出“大区间”的均匀性。

“均匀性”经平移与压缩后不变：

$$\eta = a + \xi(b - a) \quad \text{为}(a, b)\text{上的均匀分布随机变量}$$

伪随机数的独立性

顺序相关法

➤用相邻两个随机数的自相关函数（或相关系数）来标识伪随机数的独立性情况，间距为 l 的自相关函数是

$$C(l) = \frac{\langle x_n x_{n+1} \rangle - \langle x_n \rangle^2}{\langle x_n^2 \rangle - \langle x_n \rangle^2}$$

➤相关系数越小，独立性越好

伪随机数的独立性

多维频率检验

➤ (1) 将伪随机数用任意一种办法进行组合，每 S 个随机数作为 S 维空间中的一个点的坐标值，于是可以构成一个点序列；

➤ (2) 把 S 维空间中的单位方体分成为 K 个子方体；

方体边长： $K_0 = K^{-1/S}$

➤ (3) 统计落在第 k 个子方体中的实际频数 n_k ，应趋近于理论频数：

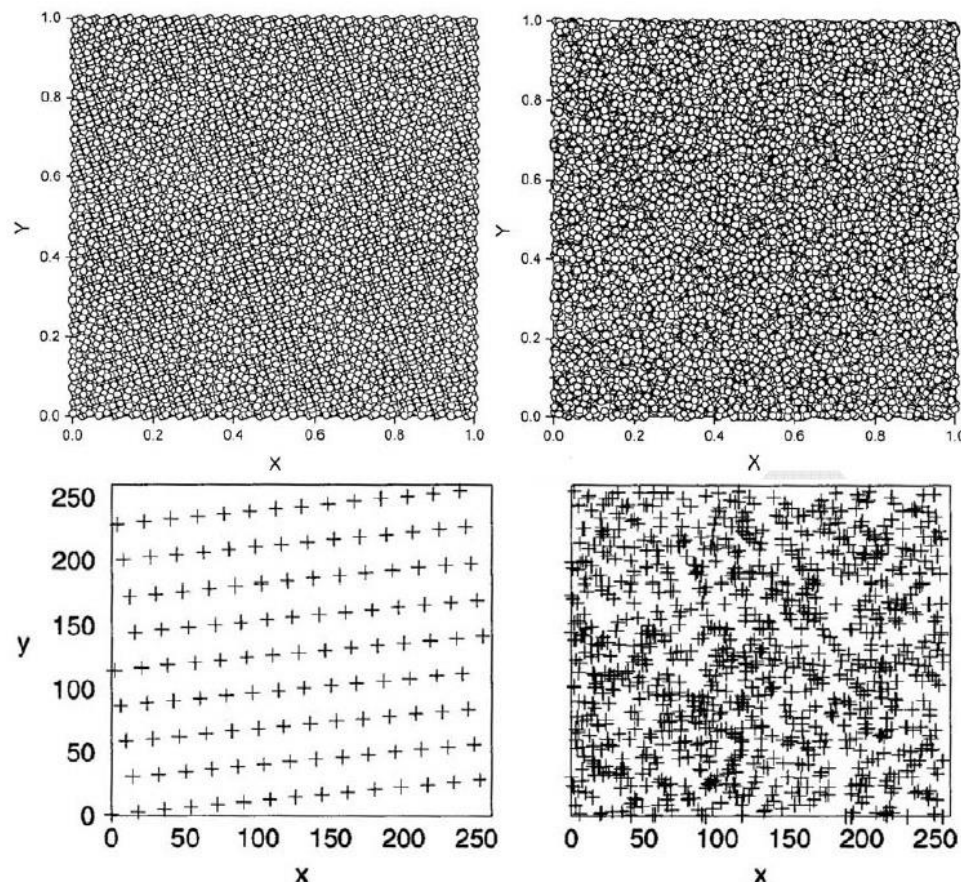
$$m_k = NK_0^S = \frac{N}{K}$$

多维频率检验：例子

➤例如将 $2N$ 个随机数序列分为两组： $\{\xi_1, \xi_3, \dots\}$ 和 $\{\xi_2, \xi_4, \dots\}$ ，分别作为平面中 N 个点的 x 和 y 坐标值。在 xy 平面中作 $K_0 \times K_0$ 个小正方形网格区域，落在第 (i, j) 个网格区域中的实际频数为 n_{ij} ，则

$$\chi^2 = \sum_{ij=1}^{K_0} \frac{(n_{ij} - N/K_0^2)^2}{N/K_0^2}$$

➤用连续的两个随机数作为点 (x, y) 的坐标作图可以直观看出随机数之间的关联性。显然左边是不好的随机数：左上显示出条带结构，左下则是规则网格结构。



用物理方法得到的真随机数，是永远不会重复的，周期为无穷大。

通过计算机得到的随机数是有确定周期的，如果伪随机数的周期足够大，则用于计算机模拟是完全符合使用要求的。

伪随机变量的抽样

对一个具有分布密度函数 $f(x)$ 的伪随机变量抽样，有如下步骤：

1. 在 $[0, 1]$ 区间抽取均匀分布的伪随机序列；
2. 从中抽取一个简单子样，使其分布满足 $f(x)$ ，且各个伪随机数相互独立。

对不均匀的伪随机变量抽样的关键问题：如何从均匀分布的伪随机变量样本中，抽取符合分布密度函数的简单子样。

叠加原则

如果要产生分布密度函数为 $f(x)$ 的随机变量样本数列，我们可以把 $f(x)$ 变成分布概率密度函数 $h_i(x)$ 的和的形式：

$$f(x) = \sum_i h_i(x)$$

我们可以按 $h_i(x)$ 进行抽样作为 $f(x)$ 的抽样值，选择哪一个 $h_i(x)$ 进行抽样是根据 $\int h_i(x)dx$ 的积分值作为权重随机选择的。

在对复杂的分布密度函数抽样时，叠加原则是十分有用的。

抽样方法

A. 离散型分布随机变量的直接抽样

B. 连续分布的随机变量抽样

1. 直接抽样方法

2. 变换抽样法

3. 舍选抽样法（1-3类）

4. 复合抽样法（加分布、减分布、乘加分布和乘减分布）

5. 特殊抽样方法（直方图、经验公式、反函数近似、近似修正、极限近似）

6. 多维随机向量的抽样方法（舍选法、条件密度法、 n 维正态分布随机向量）

离散型分布随机变量的直接抽样

如果离散型随机变量 x 以概率 p_i 取值 x_i ，则其分布函数为：

$$F(x) = \sum_{x_i \leq x} p_i$$

其中 p_i 满足归一化条件： $\sum_i p_i = 1$ 。该随机变量的直接抽样方法如下：选取在 $[0,1]$ 区间上均匀分布的随机数 ξ ，判断满足不等式

$$F(x_{j-1}) < \xi < F(x_j)$$

的 j 值，与之对应的 x_j 就是所抽子样的一个抽样值，即 $\eta = x_j$ 。该子样具有分布函数 $F(x_j)$ 。

连续分布的随机变量抽样

直接抽样方法

又称为反函数法。设连续型随机变量 η 的分布密度函数为 $f(x)$ ，其分布函数为：

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

如 $F(x)$ 的反函数 $F^{-1}(x)$ 存在，且 ζ 为在 $[0,1]$ 区间上均匀分布的随机数，令 $\xi=F(\eta)$ ，则求解变量 η ，得到的解 $\eta=F^{-1}(\xi)$ 即为满足分布密度函数 $f(x)$ 的一个抽样值。

该方法的优点是使用简单，应用范围广；不足时当 $F(x)$ 不能从 $f(x)$ 解析求出，或求出的函数形式抽样太复杂的情况下，不能采样这种方法。

指数分布的直接抽样

解 指数分布的问题可用于描述粒子运动的自由程，粒子衰变寿命或射线与物质作用长度等许多物理问题。它的分布密度函数为

$$f(x) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda x}, & x > 0, \lambda > 0 \\ 0, & \text{其它.} \end{cases}$$

它的分布函数为

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(t) dt = \int_0^x \lambda e^{-\lambda t} dt = 1 - e^{-\lambda x} .$$

设 ξ 是 $[0, 1]$ 区间上的均匀分布的随机数，令 $\xi = F(\eta) = 1 - e^{-\lambda \eta}$ ，

解此方程得到

$$\eta = -\frac{1}{\lambda} \ln(1 - \xi) .$$

注意到 $1 - \xi$ 和 ξ 同样服从 $[0, 1]$ 区间的均匀分布，故有

$$\eta = -\frac{1}{\lambda} \ln \xi .$$

直接抽样方法python例子

例 对随机变量 η 抽样。它的分布密度函数为

$$f(x) = \begin{cases} 2x, 0 \leq x \leq 1, \\ 0, \text{其它}. \end{cases}$$

解 如果用直接抽样法, 首先求出分布函数

$$F(x) = x^2 \quad .$$

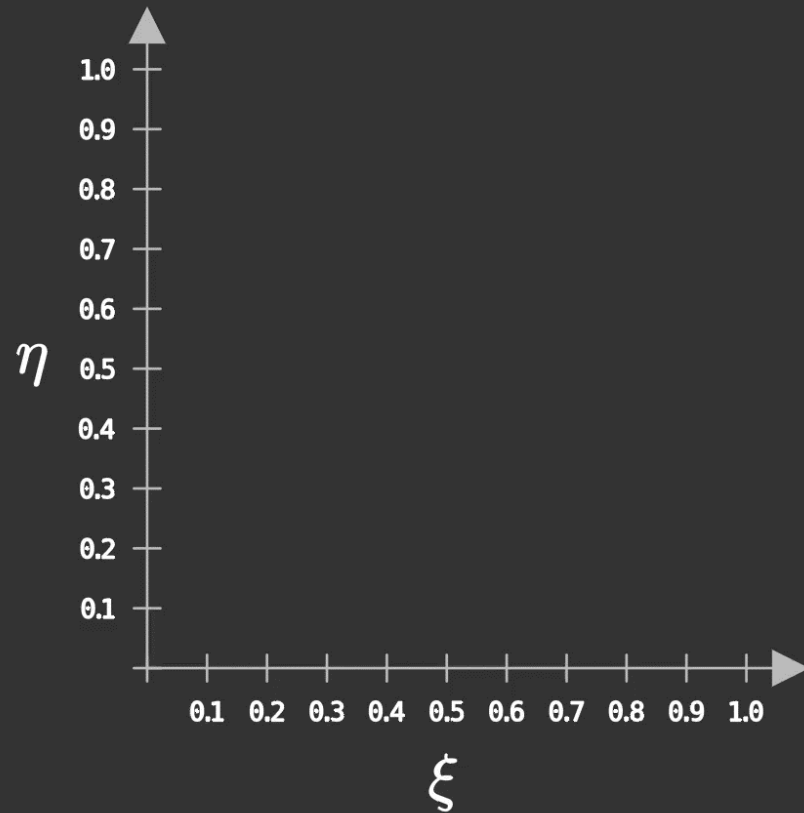
抽取在 $[0, 1]$ 区间上的均匀分布的随机数 ξ 。令

$$\xi = x^2 \quad .$$

则有

$$x = \sqrt{\xi} \quad .$$

直接抽样方法python例子



连续分布的随机变量抽样

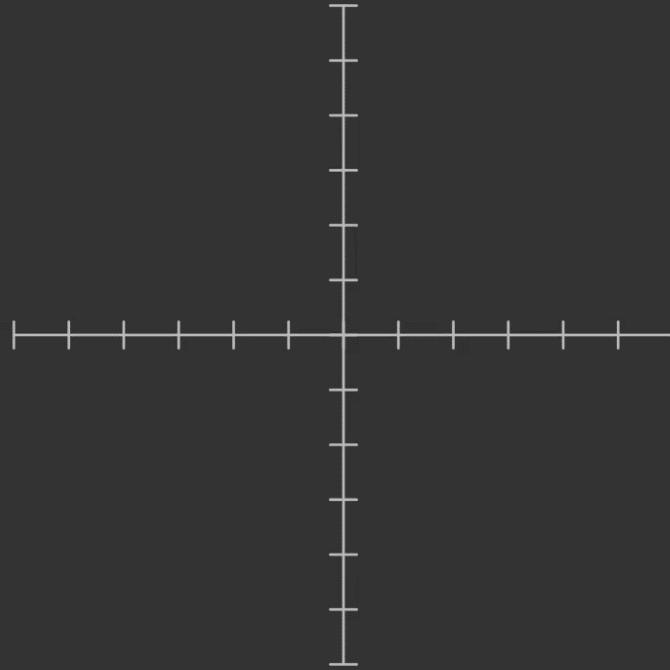
变换抽样法

将一个比较复杂的分布的抽样，变换为已知的比较简单的分布的抽样。

对满足分布密度函数 $f(x)$ 的随机变量 η 抽样，直接抽样时比较困难的。如果存在另外一个随机变量 δ ，它的分布密度函数为 $\varphi(y)$ ，其抽样方法已经掌握且比较简单，那么可以寻找一个适当的变换关系 $x=g(y)$ 。先对 $\varphi(y)$ 抽样得到 δ ，通过变换 $\eta=g(\delta)$ 得到满足 $f(x)$ 的抽样值。直接抽样是变换抽样的特殊情况。

缺点：具体问题找到合适的变换关系比较困难。

变换抽样法python例子



连续分布的随机变量抽样

舍选抽样法

按照给定的分布密度函数 $f(x)$ ，对均匀分布的随机数序列 $\{\xi_n\}$ 进行舍选。 $f(x)$ 大的地方，保留较多的随机数，而 $f(x)$ 小的地方，保留较少的随机数，使得子样中 ξ_i 的分布满足 $f(x)$ 的要求。

对 $f(x)$ 在抽样范围内有界，且上界容易得到的情况，总是可以采用的，使用灵活，计算较简单。

缺点： $f(x)$ 在抽样范围内函数值变化很大的时候，效率较低，因为大量的均匀分布抽样点被舍弃了。

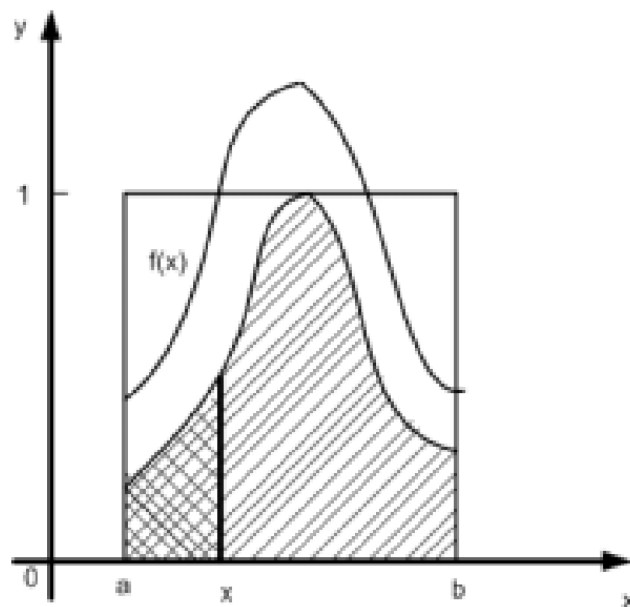
第一类舍选法

设随机变量 η 在 $[a,b]$ 上的分布密度函数为 $f(x)$ ，在区间 $[a,b]$ 上 $f(x)$ 的最大值存在，等于 $1/\lambda$ ，所以 $\lambda f(x)$ 的取值在 $[0,1]$ 区间上。

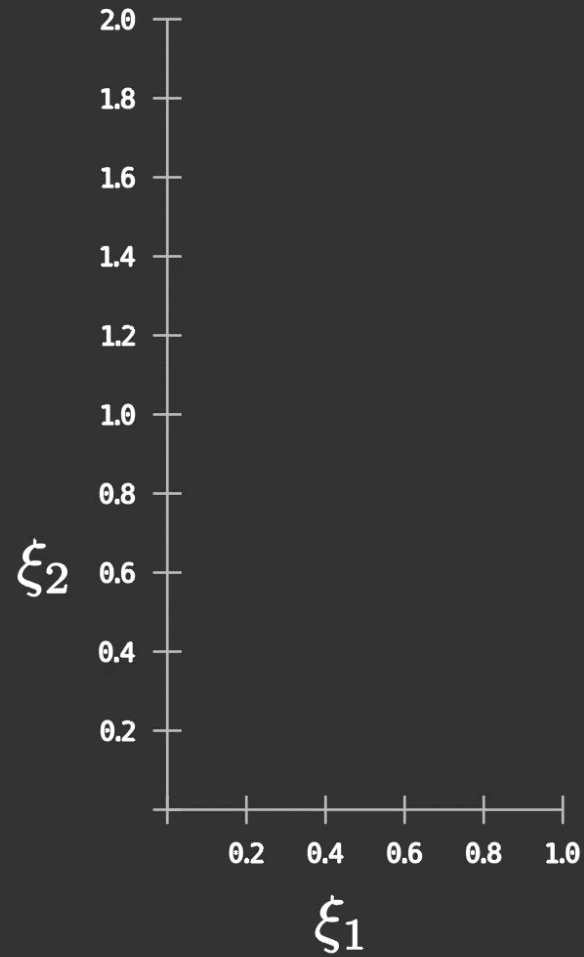
(a) 用均匀的 $[0,1]$ 区间的随机数 ξ_1 ，构造出 $[a,b]$ 区间上均匀分布的随机数 $\delta=a+(b-a)\xi_1$ ；

(b) 再选取独立的均匀分布于 $[0,1]$ 区间上的随机数 ξ_2 ，判断 $\xi_2 \leq \lambda f(\delta)$ 是否满足？如满足则执行(c)，不满足则返回(a)；

(c) 选取 $\eta=\delta$ 作为一个抽样值。



第一类舍选法python例子



第二类舍选法

$h(x)$ 和 $f(x)$ 同是在 x 属于 $[0,1]$ 区域上的分布密度函数:

$$f(x) = L \cdot \frac{f(x)}{Lh(x)} h(x) \equiv Lg(x)h(x)$$

$g(x)$ 可视为另一个随机变量的分布密度函数。对满足 $f(x)$ 的随机变量的抽样,可以由 $h(x)$ 抽样得到:

- (a) 在 $[0,1]$ 区间均匀抽取随机数 ξ , 并由 $h(x)$ 抽样得到 η_h ;
- (b) 判断 $\xi \leq g(\eta_h)$ 是否满足? 不满足返回(a);
- (c) 选取 $\eta = \eta_h$ 作为一个抽样值。

当 $h(x)=1$ 时, 转化为第一类舍选法。

只有当 $h(x)$ 的抽样比从 $f(x)$ 的抽样简单得多时, 才能体现出第二类舍选法的优越性。

例 采用第二类舍选抽样法来产生标准正态分布的随机抽样值。标准正态分布密度函数可以写为

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2}\right\} \quad (-\infty < x < +\infty)$$

解 由于相应的分布密度函数不存在反函数，故可以采用舍选法。令

$$L \equiv \sqrt{\frac{2e}{\pi}},$$

$$h(x) \equiv e^{-x}, \quad (0 < x < +\infty),$$

$$g(x) \equiv \exp\{-(x-1)^2/2\}, \quad (0 < x < +\infty).$$

由于 $f(x)$ 是 x 的偶函数，因而可以在 $(0, +\infty)$ 区域上抽样后反射到 $(-\infty, 0)$ 区间上的抽样值。这样我们可以只考虑 $(0, +\infty)$ 区域的抽样。此时在对 $f(x) = Lg(x)h(x)$ 的抽样中，

- (1) 对 $h(x)$ 的抽样可以用直接抽样法。由 $\eta_h = -\ln \xi_1$ 算出 η_h 的值，
- (2) 然后产生随机数 ξ_2 ，判别 $\xi_2 \leq g(\eta_h)$ 是否成立，也即判断不等式 $(\eta_h - 1)^2 \leq -2 \ln \xi_2$ 是否成立。
- (3) 如不成立，则舍弃，再重新由 $h(x)$ 直接抽样；
- (4) 如成立，则抽样值为 η_h 。该抽样的效率为 $E = \sqrt{\frac{\pi}{2e}}$ 。

第二类舍选法 python样例

第三类舍选法

如果分布密度函数可以表示成积分形式:

$$f(x) = L \int_{-\infty}^{h(x)} g(x, y) dy$$

$g(x, y)$ 是二维随机向量 (x, y) 的联合分布密度函数, $h(x)$ 取值在 y 的定义域上。

- (a) 由联合分布密度函数 $g(x, y)$ 抽取 (η_x, η_y) 随机向量值;
- (b) 判断 $\eta_y \leq h(\eta_x)$ 是否满足? 不满足返回(a);
- (c) 选取 $\eta = \eta_x$ 作为一个抽样值。

当 x, y 相互独立时, 有 $g(x, y) = g_1(x)g_2(y)$, 再做进一步假定, 转化为第二类舍选法处理的分布密度函数类型。

第三类舍选法

当 x , y 相互独立时, 则有 $g(x,y) = g_1(x)g_2(y)$ 。 则

$$f(x) = Lg_1(x) \int_{-\infty}^{h(x)} g_2(y) dy \quad .$$

若进一步假定 $0 \leq h(x) \leq 1$, 并且

$$g_2(y) = \begin{cases} 1, y \in [0,1] \\ 0, \text{其它} \end{cases}$$

则有 $f(x) = Lh(x)g_1(x)$, 这正好属于第二类舍选法处理的分布密度函数类型。

连续分布的随机变量抽样

复合抽样法

复合分布是指随机变量 x 服从的分布与另外一个随机变量 y 有关：

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x|y)h(y)dy$$

$g(x|y)$ 表示与参数 y 有关的 x 的条件分布密度函数，而 $h(y)$ 是 y 的分布密度函数。首先由 $h(y)$ 抽取 y_h ，然后由 $g(x|y_h)$ 抽取 x_g 的值： $\xi_f = x_{g(x|y_h)}$ ， ξ_f 服从分布 $f(x)$ 。

加分布抽样

复合抽样的特殊情况，加分布的一般形式为：

$$f(x) = \sum_n p_n h_n(x)$$

总体分布以概率 p_n 取分布 $h_n(x)$ 。抽样方法如下：

(a) 取 $[0,1]$ 区间上均匀分布的随机数 ξ ，解不等式求得 n

$$\sum_{i=1}^{n-1} p_i < \xi \leq \sum_{i=1}^n p_i$$

(b) 找到对应的 $h_n(x)$ ，并对其抽样，得到最后的抽样值 $\eta = \eta_{h_k}$ 。这实际上是叠加原理的应用。

减分布抽样

此类抽样的分布密度函数为：

$$f(x) = A_1 g_1(x) - A_2 g_2(x)$$

x 定义在区域 $[a,b]$ 上， A_1 和 A_2 为非负实数。令 m 为 $g_2(x)/g_1(x)$ 的下界，通过变换 $f(x)$ 可以写为：

$$f(x) = (A_1 - A_2 m) h_1(x) g_1(x)$$

或者：

$$f(x) = \frac{A_1 - A_2 m}{m} h_2(x) g_2(x)$$

都可以按照第二类舍选法抽样，看那个抽样效率高。

乘加分布抽样

乘加分布密度函数形式为：

$$f(x) = \sum_n H_n(x) g_n(x), \quad x \in [a, b]$$

其中 $H_n(x) \geq 0$ 。变换成加分布抽样或者加分布抽样/第二类舍选法抽样。

乘加分布抽样

设 η 的分布密度函数为：

$$f(x) = H_1(x)g_1(x) + H_2(x)g_2(x)$$

如果令

$$p_1 = \int_a^b H_1(x)g_1(x)dx \quad , \quad p_2 = \int_a^b H_2(x)g_2(x)dx \quad .$$

则必有 $p_1 + p_2 = 1$ 。这样我们可以改写 $f(x)$ 为：

$$f(x) = p_1 \frac{H_1(x)}{p_1} g_1(x) + p_2 \frac{H_2(x)}{p_2} g_2(x) = p_1 g'_1(x) + p_2 g'_2(x) \quad .$$

上式所表示的分布密度函数形式就可以采用加分布抽样法。

乘加分布抽样

我们也可以采用另一种方式，将公式改写为

$$f(x) = (M_1 + M_2) \left\{ \frac{M_1}{M_1 + M_2} \frac{H_1(x)}{M_1} g_1(x) + \frac{M_2}{M_1 + M_2} \frac{H_2(x)}{M_2} g_2(x) \right\} .$$

其中 M_1 和 M_2 分别是 $H_1(x)$ 和 $H_2(x)$ 在区域 $[a, b]$ 上的上界。令

$$p_1 = \frac{M_1}{M_1 + M_2} , \quad p_2 = \frac{M_2}{M_1 + M_2} .$$

$$L_1 = L_2 = M_1 + M_2 , \quad H_1(x) = M_1 h_1(x) , \quad H_2(x) = M_2 h_2(x) .$$

则

$$f(x) = p_1 [L_1 h_1(x) g_1(x)] + p_2 [L_2 h_2(x) g_2(x)] .$$

这样的分布密度函数形式就可以采用加分布抽样和第二类舍选法抽样。这种处理方法的效率不如前一种方法高，但省掉了

乘减分布抽样

乘减分布密度函数形式为：

$$f(x) = H_1(x)g_1(x) - H_2(x)g_2(x), \quad x \in [a, b]$$

类似于减分布抽样，可以采用第二类舍选法。

令

$$m = \min_{x \in [a, b]} \frac{H_2(x)g_2(x)}{H_1(x)g_1(x)}, \quad M = \max_{x \in [a, b]} H_1(x),$$

则有如下的关系：

$$0 < f(x) = H_1(x)g_1(x) \left[1 - \frac{H_2(x)g_2(x)}{H_1(x)g_1(x)} \right] \leq H_1(x)g_1(x)(1-m) \leq M(1-m)g_1(x).$$

再令

$$h_1(x) = \frac{1}{M_1(1-m)} \left[H_1(x) - \frac{H_2(x)g_2(x)}{g_1(x)} \right],$$

则

$$f(x) = M_1(1-m)h_1(x)g_1(x).$$

可知 $0 < h_1(x) \leq 1$ ，因而实际上抽样可以采用第二类舍选抽样法。采用如上类似的方法，不难也将分布密度函数 $f(x)$ 改写为

$$f(x) = M_2 \frac{1-m}{m} h_2(x)g_2(x).$$

其中 M_2 为 $H_2(x)$ 在 $[a, b]$ 区间的上界。且

$$h_2(x) = \frac{m}{M_2(1-m)} \left[\frac{H_1(x)g_1(x)}{g_2(x)} - H_2(x) \right],$$

乘减分布抽样

连续分布的随机变量抽样

特殊的抽样方法

- (1) 有些分布从实验测量得到，无法用数学公式解析表示；
- (2) 即使能解析地给出分布函数，用上述方法可能也很难实现抽样，计算量大或效率低；
- (3) 针对具体问题，采用一些近似抽样方法；
- (4) 如果近似分布密度函数在抽样范围内是有界的，可以采用舍选法。但当分布密度函数在抽样范围内起伏比较大时，该方法抽样效率很低。

由直方图给出的分布的抽样

一维直方图给出的分布反映了某一随机变量出现的频数，它以图形给出随机变量在各道上的分布密度函数 $f(x)$ 和分布函数 $F(x)$ 的值。如果随机变量在第 j 道的频数为 n_j ，则到该道的累积分布数为 $\sum_{i=1}^j n_i$ ，假定抽样范围从1到 N ，则在第 j 道的分布函数值为：

$$F(x_j) = \sum_{i=1}^j n_i / \sum_{i=1}^N n_i$$

抽样可以采用阶梯近似法，即取均匀分布的随机数 ξ ，解不等式求得 i

$$F(x_{i-1}) \leq \xi < F(x_i)$$

把对应的 x_i 作为抽样值，即 $\eta = x_i$ 。可以用线性插值法求出抽样值。

$$x'_i = x_{i-1} + \frac{\xi - F(x_{i-1})}{F(x_i) - F(x_{i-1})}(x_i - x_{i-1})$$

上述方法效率很低，折半查找法可以提高效率。

由经验公式给出的分布的抽样

当随机变量的一维分布密度函数是由平滑的经验公式 $f(x)$ 给出时，采用如下方法：

- (a) 将抽样区间划分为若干等份的子区间；
- (b) 在各个子区间内对分布密度函数积分，计算出对应的分布函数值，即 $F(j) = \sum_{i=1}^j \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx$ ；
- (c) 直方图分布抽样。

该方法在求对应于各子区间的一组分布函数值时比较耗时，但依据这些数产生随机数时却相当快。

反函数近似

设随机变量 η 以分布函数 $F(x)$ 分布，可以用直接抽样法，即反函数法，进行抽样。但在实际中，反函数 $F^{-1}(y)$ 的解析形式求不出来，需要用近似方法求得，这就是反函数近似。

可以利用最小二乘法拟合曲线 $F^{-1}(y)$ 的函数，这对相当广泛的分布函数抽样是可行的。

假如 $F^{-1}(y)$ 具有如下性质： $y \in [0,1]$ ， $\lim_{y \rightarrow 0} F^{-1}(y) = -\infty$ 和 $\lim_{y \rightarrow 1} F^{-1}(y) \approx +\infty$ ，

此时，可以利用最小二乘法拟合曲线 $F^{-1}(y)$ 的函数。例如我们取

$$F^{-1}(y) \approx Q(y) = a + by + cy^2 + \alpha(1-y)^2 \ln y + \beta y^2 \ln(1-y).$$

这样的近似取法对相当广泛的分布函数抽样是可行的。其中系数 α, β, a, b, c 是待定参数。当然 $Q(y)$ 也可以取其它数学表示形式，如帕迪(Pade)近似。

近似修正抽样

若 $f_1(x)$ 是 $f(x)$ 的一个近似密度分布函数，并且以分布的抽样简单，运算量小，则可以令

$$m = \min_{f_1(x) \neq 0} f(x) / f_1(x)$$

使分布密度函数可以表示成乘加分布抽样的形式

$$f(x) = mf_1(x) + H_2(x)f_2(x)$$

其中， $H_2(x)f_2(x)$ 是对 $f(x) \approx mf_1(x)$ 的一个修正。

如果 $f_1(x)$ 取得好， m 接近1，则大部分抽样值可能直接用 $f_1(x)$ 的抽样来代替，而只有少量的取 $f_2(x)$ 的抽样值。

该方法在 $f(x)$ 的函数形式比较复杂时，使用方便。

极限近似法

中心极限定理可以用来产生具有正态分布的随机变量抽样，它利用任意分布的随机数的和来产生正态分布的抽样值。

值。假如 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ 是在 $[0, 1]$ 区间上 n 个均匀分

机变量的抽样样本。它的平均值为 $1/2$ ，方差为 $1/12$ 。

我们有

$$E\{\xi\} = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot f(x) dx = \int_0^1 x \cdot 1 dx = \frac{1}{2} \quad .$$

$$V\{\xi\} = E\{\xi^2\} - [E\{\xi\}]^2 = \int_0^1 x^2 \cdot f(x) dx - \left(\frac{1}{2}\right)^2 = \frac{1}{12} \quad .$$

设 $R_n = \xi_1 + \xi_2 + \dots + \xi_n$ ，则

$$E\{R_n\} = \int_{-\infty}^{+\infty} nx \cdot f(x) dx = \int_0^1 nx \cdot 1 dx = \frac{n}{2} \quad .$$

$$V\{R_n\} = E\{R_n^2\} - [E\{R_n\}]^2 = \frac{n^2}{12} \quad .$$

根据中心极限定理，引入新的随机变量 δ_n ，

$$\delta_n = \frac{R_n - \frac{n}{2}}{\sqrt{\frac{n}{12}}} ,$$

则

$$\lim_{n \rightarrow \infty} p(\delta_n \leq x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-t^2/2} dt = N(0,1) .$$

通常取 $n=12$ ，此时随机变量 δ_{12} 为

$$\delta_{12} = R_{12} - 6 .$$

这种抽样的方法称为极限近似法。但是要注意：如果

连续分布的随机变量抽样

多维随机变量的抽样方法

如果随机向量各分量是相互独立的，问题可以转化为对各个分量分别进行独立抽样，可以使用前面讲述过的各种方法。但是在一般情况下，各个分量是相互关联的，使问题变得很复杂。

舍选法

随机向量 $\boldsymbol{\eta}$ 的各分量为:

$$\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2, \eta_3, \dots, \eta_n)^T$$

其联合分布密度函数为 $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, 抽样范围在平行多面体内, 有最大值 L 。

$$\{a_1 \ll x_1 \ll b_1, \dots, a_n \ll x_n \ll b_n\}$$

n 维舍选法如下: 首先产生 $n+1$ 个 $[0,1]$ 上均匀分布随机数 $\zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_{n+1}$, 然后判断不等式:

$$\zeta_{n+1} < \frac{1}{L} f[(b_1 - a_1)\zeta_1 + a_1, \dots, (b_n - a_n)\zeta_n + a_n]$$

若成立, 则得到 $\boldsymbol{\eta}$ 的一个抽样值, 各个分量为:

$$\eta_i = (b_i - a_i)\zeta_i + a_i$$

该方法抽样效率较低, L 的计算比较困难。

条件密度法

n 维随机向量 $\boldsymbol{\eta}$:

$$\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2, \eta_3, \dots, \eta_n)^T$$

的联合分布密度函数 $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 可以表示为:

$$f_1(x_1) \cdot f_2(x_2|x_1) \cdot \dots \cdot f_n(x_n|x_1, x_2, \dots, x_{n-1})$$

可以用如下步骤实现抽样:

- (1) 由 $f_1(x_1)$ 为分布密度函数产生 η_1 的抽样值 $\eta_1 = x_1$;
 - (2) 在 $\eta_1 = x_1$ 的条件下, 由分布密度函数 $f_2(x_2|x_1)$ 抽取 $\eta_2 = x_2$;
- 依此类推。

n维正态分布随机变量的抽样

n 维随机向量 $\boldsymbol{\eta}$:

$$\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2, \eta_3, \dots, \eta_n)^T$$

服从标准正态分布时，各分量是相互独立的。我们可以用一维变量正态分布的抽样法，对各分量分别抽样，构成总体抽样值。

MC中减少方差的技巧

MC求积分的方差为： $\sigma^2 = V\{f\}/n$ （ $V\{f\}$ 为方差）

除了增加随机点数 n ，另外一个减少计算结果误差的途径是减少方差。

1. 分层抽样
2. 重要抽样法
3. 控制变量法（相关抽样法）
4. 对偶变量法

分层抽样

MC的分层抽样技巧包括以下步骤：

- (1) 将积分区间划分为不相交的子区间；
- (2) 在第 i 个子区间内抽取 n_i 个点，如果将子区间长度记为 $\{i\}$ ，将子区间内所有点上的函数值乘上权重因子 $\{i\}/n_i$ 后叠加起来，就得到该积分在这个子区间的积分估计值；
- (3) 将所有子区间的积分值叠加起来，就得到在整个区间的积分估计值，其方差为

$$V\{\bar{I}\} = \sum_j \frac{\{j\}^2}{n_j} \sigma_j^2$$

如果适当选择子区间的大小和随机点数，就可以减小方差，关键是要了解被积函数在子区间的特性。

均匀分层抽样法：子区间相等，且抽取相同数量的随机点数。

重要抽样法

重要抽样法的原理来自于变量代换方法的思想：

$$\int_0^1 f(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)}{g(x)} g(x)dx = \int_0^1 \frac{f(x)}{g(x)} dG(x)$$

随机点的选择不再是均匀的，而是以 $G(x)$ 分布。新的被积函数为 $f(x)$ 乘以权重 $1/g(x)$ ，其中 $g(x)$ 称为偏倚密度分布函数。该方法使原本对 $f(x)$ 的抽样，变成由 $f(x)/g(x)$ 产生简单子样，并附带权重 $g(x)$ ，故这种方法又称为偏倚抽样法。

如果 $g(x)$ 选择恰当，使它在积分域的函数曲线形状与 f 接近，则方差可以变得很小。

- (1) 根据 $g(x)$ 产生随机点 X ，如利用反函数法；
- (2) 求出各抽样点 X 的函数值 $f(x)/g(x)$ ，并将所以点上的该函数值迭加，再除以抽样点数 n 得到积分结果。

也可以采用 $f(x)/g(x)$ 作为分布密度函数，然后用舍选法抽样。应事先判断出 $f(x)/g(x)$ 的最大值。

重要抽样法是MC计算中最基本和常用的技巧之一，它无论在提高计算速度和增加数值结果的稳定性方面都有很大的潜力。

局限性：

- (1) 能找出 $g(x)$ ，并解析求出其对应的 $G(x)$ ，情况并不多；
- (2) 当 $g(x)$ 在某点函数值为0或很快趋于0时（如高斯分布），在该点的数值计算其方差可能很大，导致计算结果不稳定。

控制变量法（相关抽样法）

利用数学上积分运算的线性特性：

$$\int f(x)dx = \int [f(x) - g(x)]dx + \int g(x)dx$$

对 $g(x)$ 的要求：(1) 在整个积分区域都容易精确算出；(2) 对 $f(x)-g(x)$ 积分的方差应该比对 $f(x)$ 积分的方差小。

优势：

- (1) 重要抽样法中遇到的困难不再存在，结果稳定性较好；
- (2) 不需要从 $g(x)$ 解析求出分布函数 $G(x)$ ，所受限制比较小。

对偶变量法

使用相关联的点（正关联或者负关联）进行计算。两个函数值 f_1 和 f_2 之和的方差为：

$$V\{f_1 + f_2\} = V\{f_1\} + V\{f_2\} + 2E\{(f_1 - E\{f_1\})(f_2 - E\{f_2\})\}$$

如果选择一些点，使 f_1 和 f_2 负关联，就可以使上式的方差减小。不过实践中不存在寻找负关联点的通用办法。

例题：

已知 $f(x)$ 为单调递增的函数，求积分：

$$I = \int_0^1 f(x) dx$$

- (1) 在 $[0,1]$ 区间产生均匀分布的随机数点集 $\{x_i\}$;
- (2) 计算 $[f(x_i)+f(1-x_i)]/2$ 的值, 将所有点的函数值迭加, 除以总的随机点数, 得到积分值:

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [f(x_i) + f(1-x_i)]/2$$

由于采用相同的随机数列 $\{x_i\}$, 使 $f(x)$ 和 $f(1-x)$ 高度负关联, $[f(x_i)+f(1-x_i)]/2$ 的值应该比单个点的函数值 $f(x_i)$ 更接近常数, 因而方差也小些。这实际上是采用了 $f(x)$ 和 $f(1-x)$ 的积分期望值的平均值作为结果。

实用MC计算复合技术

单独使用这四种方法减小方差的技巧仍有局限性：

1. 需要预先了解被积函数的变化特性，但对于大多数的实际问题，无法事先获得；
2. 如果被积函数在积分区间具有多个尖峰，四个方法效果有限。

发展了一些复合MC计算技术，如**适应性MC方法**和**多道MC抽样方法**等，特别具有实用价值。

适应性MC方法

该方法是一种在执行过程中通过试探，了解被积函数习性，然后有针对性地采用MC技巧来减少方差的算法。

采用此方法的子程序有VEGAS，它用于计算多重积分，广泛应用在高能物理领域。其基本思想是将重要抽样法和分层抽样法结合到迭代算法中，能够做自动调整，将对被积函数的计算集中到被积函数值最大的区间。

- 1 试探阶段：将 $[0,1]$ 区间划分为正交子区间，分别进行积分；
- 2 按照各个子区间的积分结果调整子区间大小，用于下一次迭代计算。调整子区间大小的原则是按照该子区间对总积分贡献的大小来确定。

多道MC抽样方法

如果 $f(\mathbf{x})$ 在被积区间有多个不同的尖峰，往往不可能找到一个变量代换，既能吸收 $f(\mathbf{x})$ 的所有峰值特性，又比较容易按特定分布进行随机数抽样。多道MC方法就是针对这种类型 $f(\mathbf{x})$ 的计算方法，基本思想是叠加原则加上重要抽样法。

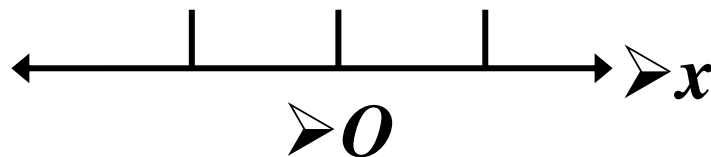
随机游走

1906年由Pearson提出，随机游走是一种基于运用 $[0,1]$ 区间的均匀分布随机数序列来进行的计算。

随机游走模型在物理学、生物学和社会科学中都得到广泛的应用：

1. 气体分子扩散
2. 液体中悬浮物的布朗运动
3. 量子力学中薛定谔方程的求解
4. 高分子长链的特性研究
5. 偏微分方程和数学积分的近似计算

醉汉行走问题



醉汉从 $x=0$ 的位置出发（向右为正，向左为负），假定他的步长为 l ，每一步的取向是随机的，和前一步的方向无关。如果醉汉在每个时间间隔内向右行走一步的概率为 p ，则向左走一步的概率为 $q=1-p$ ，那么他在行走 N 步之后，离起点距离为 x 的概率为 $P_N(x)$ 。

N 步后，位移和方差的平均值（ N 步中所有可能的行走过程的平均）：

$$\langle x_N \rangle = \sum_{x=-Nl}^{Nl} x P_N(x), \quad \langle \Delta x_N^2 \rangle = \langle x_N^2 \rangle - \langle x_N \rangle^2$$

通过概率理论，得到解析式：

$$\langle x_N \rangle = (p - q)Nl, \quad \langle \Delta x_N^2 \rangle = 4pqN^2l^2$$

在左右对称的情况下， $p=q=1/2$ ， $\langle x_N \rangle=0$ 。

一般情况下，能精确求解游走问题的技术不简单。有两种重要的方法：查点法和MC方法。

查点法只有在 N 比较小时才可以使用，而MC具有更广泛的可操作性，可以对 N 较大的游走过程进行抽样。

MC方法求解泊松方程

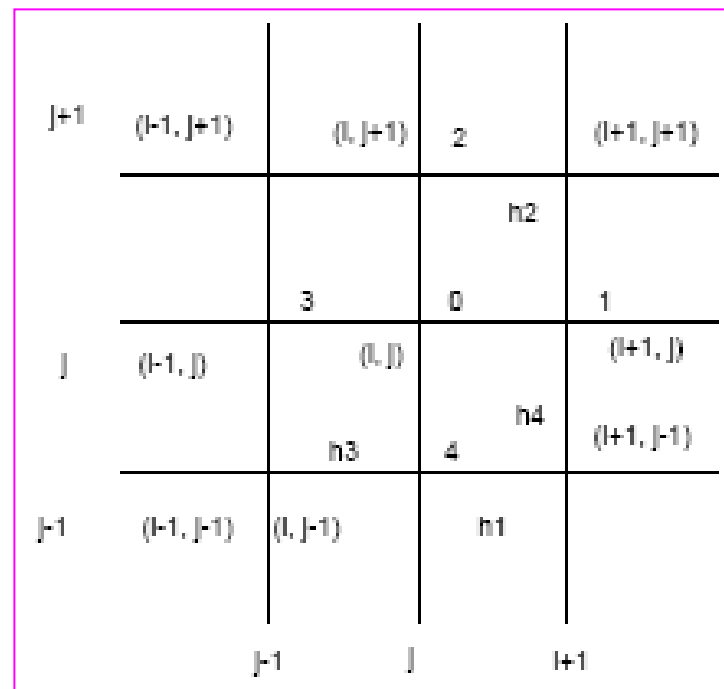
➤若泊松方程及其边界条件为

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = q(x, y) \\ \varphi|_{\Gamma} = F(s) \end{cases}$$

➤ Γ 为求解区域D的边界,
➤ s 为边界 Γ 上的点。

$$\phi_0 = \frac{1}{4}(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \phi_4 - h^2 q_0)$$

➤其中, q_0 是在区域D的正则内点0上的函数 $q(x,y)$ 的值。



➤正方形格点划分

➤等步长 h

➤ **1/4可以解释为概率。** 即有：

$$\varphi_0 = \sum_{j=1}^4 W_{0,j} \varphi_j - \frac{h^2}{4} q_0 \quad \sum_{j=1}^4 W_{0,j} = 1, \quad W_{0,j} = \frac{1}{4}, \quad j = 1, 2, 3, 4$$

➤ **随机游走的判据：**

- (1) 选定一个 $[0,1]$ 区间的均匀分布的随机数 ξ ;
- (2) 若 ξ 满足条件 $\xi \leq 1/4$ ，则选定下一个游走到达点为第1点;
- (3) 若满足条件 $1/4 < \xi \leq 1/2$ ，选游走到的下一个点为2点;
- (4) 若满足条件 $1/2 < \xi \leq 3/4$ ，选定游走到下一个点为3点;
- (5) 在其他的的情况下，则选游走到第4点。

➤如果按上面的判据选择了0点周围四个点中之一 m 点，则0点函数的估计值为：

$$\eta_0 = \phi_m - \frac{h^2}{4} q_0$$

➤从 m 点上又按判据选择周围四个点中的 n 点时， m 点函数的估计值为：

$$\eta_m = \phi_n - \frac{h^2}{4} q_m$$

➤此时0点函数的估计值也可以写为：

$$\begin{aligned}\eta_0 &= \phi_m - \frac{h^2}{4} q_0 = (\phi_n - \frac{h^2}{4} q_m) - \frac{h^2}{4} q_0 \\ &= \phi_n - \frac{h^2}{4} (q_0 + q_m)\end{aligned}$$

➤若按照以上随机游走的步骤，有：

$$\phi_0 = \frac{1}{4}(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \phi_4 - h^2 q_0) = \phi_n - \frac{h^2}{4}(q_0 + q_1 + \cdots + q_j)$$

➤当第 J 步到达边界，边界上的函数值记为 $F(s^{(1)})$

➤得到0点上的函数 ϕ_0 的一个估计值：

$$\eta_0^{(1)} = F(s^{(1)}) - \frac{h^2}{4} \sum_{j=0}^{J^{(1)}} q_j^{(1)}$$

➤上标(1)表示第一次从0点出发游走时经历 J 步到达边界 S 点时对应函数 ϕ_0 的一个估计值。

➤如此反复从0点开始进行 N 次上述的随机游走，我们得到一个函数的估计值序列：

$$\{\eta_0^{(1)}, \eta_0^{(2)}, \dots, \eta_0^{(n)}, \dots, \eta_0^{(N)}\}$$

➤其中， $\eta_0^{(n)} = F(s^{(n)}) - \frac{h^2}{4} \sum_{j=0}^{J^{(n)}} q_j^{(n)} \quad n = 1, 2, \dots, N$

➤则0点的函数 ϕ_0 的期望值为

$$\bar{\phi}_0 = E(\eta_0) \approx \frac{\sum_{n=1}^N \eta_0^{(n)}}{N} = \frac{\sum_{n=1}^N \left[F(s^{(n)}) - \frac{h^2}{4} \sum_{j=0}^{J^{(n)}} q_j^{(n)} \right]}{N}$$

➤ ϕ_0 估计值序列的方差为：

$$\sigma^2 = \frac{N}{N-1} \left[\langle \eta_0^2 \rangle - E\{\eta_0^2\} \right]$$

➤以上随机游走的做法，是个人为的概率过程，是一个具有吸收壁的随机游走。

➤ 上述类型的随机游走或链(chain)具有如下特征：

1. **马尔可夫(Markov)过程**：它在游走中任一阶段的行为都不被先前游走的历史所限制，即区域内的点可以被多次访问。
2. 游走最终会终止在边界上，故而该类随机游走又被称为**马尔可夫链**。

➤ 马尔可夫链正是这样生成相继各个状态的，使得后一个状态是由前一个状态和确定的分布所决定，由此可知相继的各状态之间的确存在着关联。

➤ **自规避随机游走**：非马尔可夫过程，在随机游走的过程中，任何一个的游走概率都要考虑前面游走的历史，因而游走有可能碰到边界前就被强行终止掉。

Metropolis方法

- 在随机游走的MC方法中，有一种最常用方法称为**Metropolis方法**，它是**重要抽样法**的一个特殊情况。采用此方法可以产生任意分布的随机数，包括无法归一化的分布密度函数。
- 基本思想**：通过某种方式的“随机游走”来实现。只是该随机游走过程按照**一定规则**来进行，那么在进行大量的游走，并达到平衡后，所产生点的分布就满足所要求的分布。
- 以一维**Metropolis方法**为例，其游走规则是选择一个从 x 点游走到 x' 点的“**过渡概率**” $w(x \rightarrow x')$ ，使得它在游走中所走过的点 x_0, x_1, x_2, \dots 的分布**收敛到**系统达到平衡时的分布 $f(x)$ 。要达到这样分布的重要抽样，就需要对**过渡概率** $w(x, x')$ 的选择加上适当的限制。

➤可以**证明**：只要游走所选的“过渡几率”满足如下的细致平衡条件：

$$f(x)w(x \rightarrow x') = f(x')w(x' \rightarrow x)$$

➤就可以达到平衡时的分布为 $f(x)$ 的目的。

➤实际上满足细致平衡条件只是一个**充分条件**，并不是一个必要条件。该条件并不能唯一地确定过渡几率 $w(x \rightarrow x')$ 。所以，过渡几率 $w(x \rightarrow x')$ 的选择具有很大的自由度。选取不同的过渡几率就是不同的游走方法。

➤Metropolis方法采用一个**简单的**选择过渡几率的方法，即

$$w(x \rightarrow x') = \min \left[1, \frac{f(x')}{f(x)} \right]$$

➤ 操作步骤:

- (1) 首先选取一个试探位置, 假定该点位置为 $x_{\text{try}} = x_n + \eta_n$, 其中 η_n 为在间隔 $[-\delta, \delta]$ 内均匀分布的随机数;
- (2) 计算 $r = f(x_{\text{try}})/f(x_n)$ 的数值;
- (3) 如果不等式 $r \geq 1$ 满足, 那就接受这一步游走, 并取 $x_{n+1} = x_{\text{try}}$ 。然后返回(1)开始对游走到 x_{n+2} 点的试探;
- (4) 如果 $r < 1$, 那么就再另产生一个 $[0, 1]$ 区间均匀分布的随机数 ξ ;
- (5) 如果 $\xi < r$, 那么也还接受这步游走, 并取这步游走所到达的点为 $x_{n+1} = x_{\text{try}}$ 。然后返回到步骤(1), 开始下一步到达点的游走;
- (6) 如果 $\xi > r$, 就拒绝游走到这一点, 即仍留在点 x_n 的位置不变;
- (7) 返回步骤(1), 重新开始对游走到点的具体位置的又一次试探。

➤ 采用这样的游走过程时, 只有在产生了大量的点 x_0, x_1, x_2, \dots 的分布后, 才能得到收敛到满足分布 $f(x)$ 的点集。

两个问题

如何选择 δ 的大小，才能提高游走的效率？

➤ **步长选取原则**：在游走的过程中，有1/3到1/2的试探步子被接受。

进行这样的游走，从哪一点出发可以比较快的达到平衡？

➤ **初态选取原则**：初始位置应当是在游走范围内所要求的概率分布密度 $f(x)$ 最大的区域。

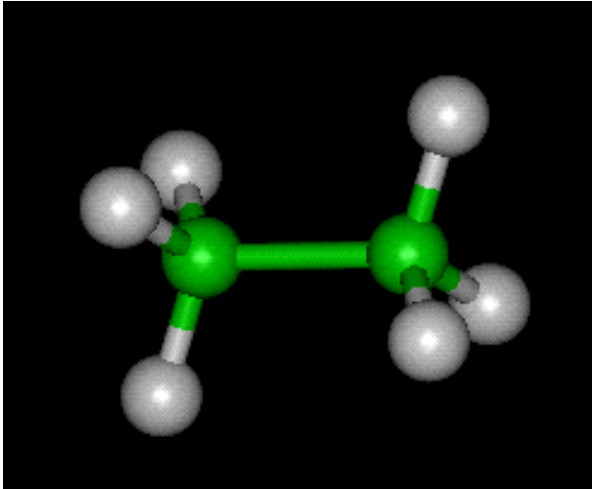
统计力学中的MC方法

统计物理学的主要任务是从物质的微观结构和微观运动出发来说明物质的宏观性质，所采用的方法是计算相应微观量的统计平均（即系综平均）。

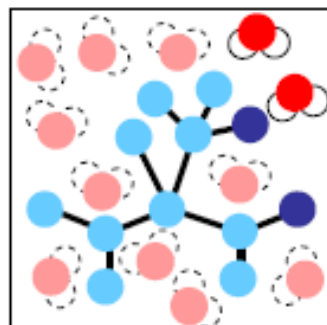
具体说，首先用一个哈密顿量来描述系统，并选择一个对问题合适的系综；然后用和这个系综相联系的分布函数和配分函数来计算所有的可观测量。

计算各类平均值、特别是高维分布上的平均值是蒙特卡罗方法的特长之一，因此，将蒙特卡罗方法用于统计物理学研究是很自然的。但是，要计算统计物理中的系综平均，关键是要选择合适的抽样技术，Metropolis抽样方法巧妙地解决了系综分布的抽样问题，在统计物理中得到广泛应用。

例子：分子构象变化

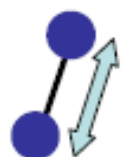


分子力场



*bonded
interactions*

*non-bonded
interactions*



Bond stretching



Angle bending



Allow rotation
around bonds



Maintain atom
groups planar



Electrostatic
interactions



van der Waals
interactions

势能函数

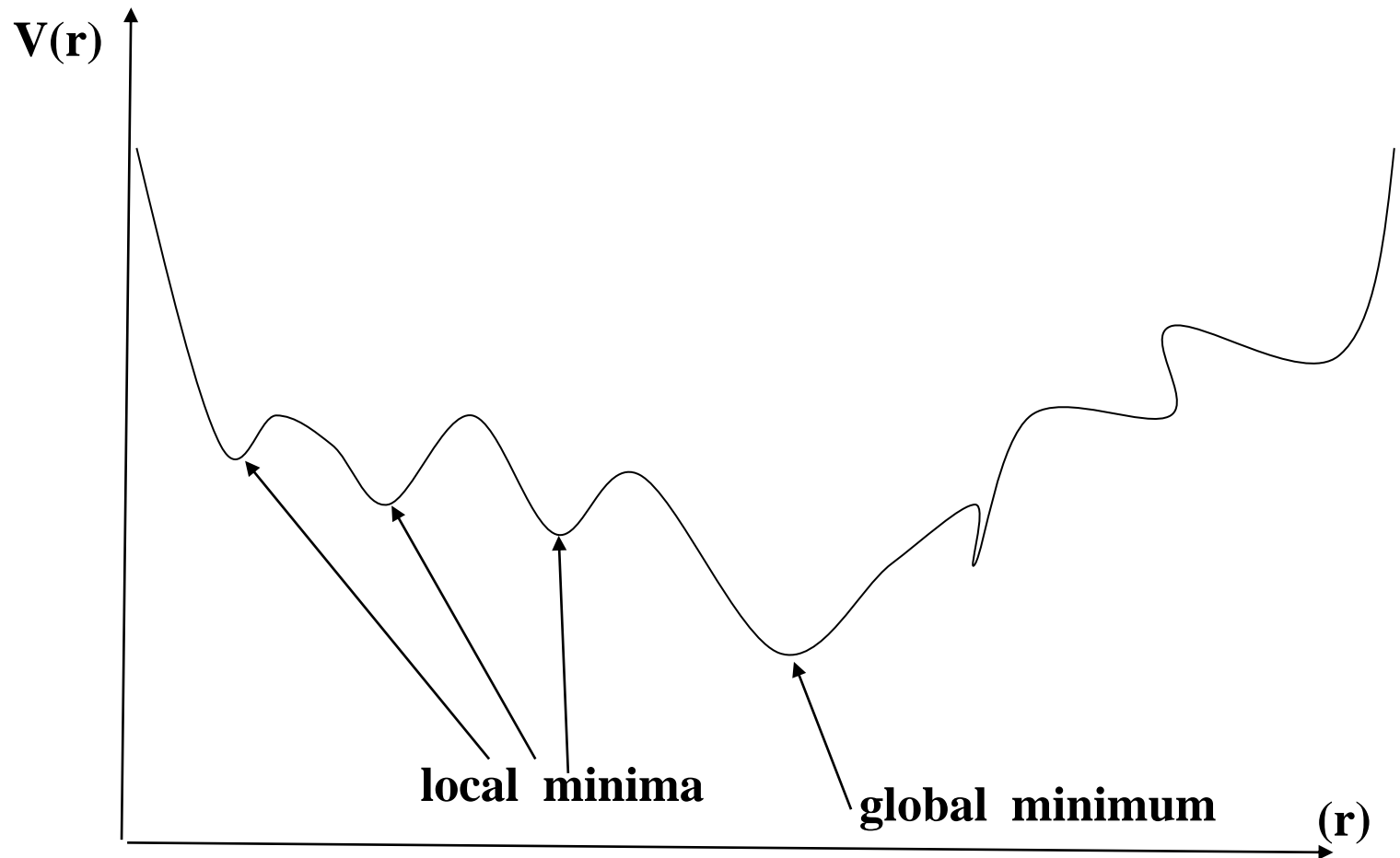
一般将分子的PEF分解成五部分：

$$V(r^N) = \sum_{bonds} \frac{k_i}{2} (l_i - l_{i,0})^2 + \sum_{angles} \frac{k_i}{2} (\theta_i - \theta_{i,0})^2 + \sum_{torsions} \frac{V_n}{2} (1 + \cos(n\omega - \gamma))$$
$$+ \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \left(4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right)$$

$$E_{bonded} = \underbrace{E_{bond-stretch}}_{\text{键伸缩能}} + \underbrace{E_{angle-bend}}_{\text{键弯曲能}} + \underbrace{E_{rotate-along-bond}}_{\text{二面角扭转能}}$$

$$E_{non-bonded} = \underbrace{E_{van-der-Waals}}_{\text{范德华作用能}} + \underbrace{E_{electrostatic}}_{\text{静电作用能}}$$

势能面 (Potential Energy Surface)



相空间和哈密顿量

For a system containing N atoms, $6N$ values are required to define the state of the system (three coordinates per atom and three components of the momentum). Each combination of $3N$ positions and $3N$ momentum defines a point in the $6N$ -dimensional phase space, thus an ensemble can be considered to be a collection of points in phase space. The way in which the system moves through phase space is governed by Hamiltonian's equations.

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}_i}$$
$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{r}_i}$$

Thermodynamic Properties by Integration

We can explore configurational phase space and derive useful thermodynamic properties. For example, the average potential energy can, in principle, be determined by evaluating the integral:

$$\langle \mathcal{V}(\mathbf{r}^N) \rangle = \int d\mathbf{r}^N \mathcal{V}(\mathbf{r}^N) \rho(\mathbf{r}^N)$$

Note: the energy function is dependent only upon the positions of the atoms and not their momenta.

$\rho(\mathbf{r}^N)$ is the probability of obtaining the configuration \mathbf{r}^N and is given by

$$\rho(\mathbf{r}^N) = \frac{\exp[-\mathcal{V}(\mathbf{r}^N)/k_B T]}{Z}$$

简单MC方法

1. Obtain a configuration of the system by randomly generating $3N$ Cartesian coordinates, which are assigned to the particles;
2. Calculate the potential energy of the configuration, $V(\mathbf{r}^N)$;
3. From the potential energy, calculate the Boltzmann factor, $\exp(-V(\mathbf{r}^N)/k_B T)$;
4. Add the Boltzmann factor to the accumulated sum of Boltzmann factors and the potential energy contribution to its accumulated sum and return to step 1;
5. After a number, N_{trial} , of iterations, the mean value of the potential energy would be calculated using:

$$\langle \psi(\mathbf{r}^N) \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N_{\text{trial}}} \psi_i(\mathbf{r}^N) \exp[-\psi_i(\mathbf{r}^N)/k_B T]}{\sum_{i=1}^{N_{\text{trial}}} \exp[-\psi_i(\mathbf{r}^N)/k_B T]}$$

This is not a feasible approach for calculating thermodynamic properties due to the large number of configurations that have extremely small Boltzmann factors caused by high-energy. This reflects the nature of the phase space, **most of which corresponds to non-physical configurations with very high energies. Only a small proportion of the phase space corresponds to low-energy configurations, which coincide with the physically observed phases.**

Metropolis抽样

Important Sampling

The Metropolis approach biases the generation of configurations towards those that make the most significant contribution to the integral. Specifically, it generates states with a probability $\exp(-V(r^N)/k_B T)$ and then counts each of them equally. By contrast, the simple MC integration method generates states with equal probability (both high- and low-energy) and then assigns them a weight.

Equation of State Calculations by Fast Computing Machines

NICHOLAS METROPOLIS, ARIANNA W. ROSENBLUTH, MARSHALL N. ROSENBLUTH, AND AUGUSTA H. TELLER,
Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico

AND

EDWARD TELLER,* *Department of Physics, University of Chicago, Chicago, Illinois*

(Received March 6, 1953)

A general method, suitable for fast computing machines, for investigating such properties as equations of state for substances consisting of interacting individual molecules is described. The method consists of a modified Monte Carlo integration over configuration space. Results for the two-dimensional rigid-sphere system have been obtained on the Los Alamos MANIAC and are presented here. These results are compared to the free volume equation of state and to a four-term virial coefficient expansion.

I. INTRODUCTION

THE purpose of this paper is to describe a general method, suitable for fast electronic computing machines, of calculating the properties of any substance which may be considered as composed of interacting individual molecules. Classical statistics is assumed, only two-body forces are considered, and the potential field of a molecule is assumed spherically symmetric. These are the usual assumptions made in theories of liquids. Subject to the above assumptions, the method

II. THE GENERAL METHOD FOR AN ARBITRARY POTENTIAL BETWEEN THE PARTICLES

In order to reduce the problem to a feasible size for numerical work, we can, of course, consider only a finite number of particles. This number N may be as high as several hundred. Our system consists of a square† containing N particles. In order to minimize the surface effects we suppose the complete substance to be periodic, consisting of many such squares, each square containing N particles in the same configuration. Thus we define d_{AB} , the minimum distance between particles A

Metropolis Monte Carlo method

Algorithm:

DO large number of steps.

1. Make a step $\Delta\vec{r}$ in configuration space: $\vec{r}_{n+1}^N = \vec{r}_n^N + \Delta\vec{r}$

2. Calculate the change in energy ΔE : $E_n = V(\{\vec{r}_n^N\})$
 $\Delta E = E_{n+1} - E_n$

3. IF ($\Delta E \leq 0$) THEN

Accept new configuration \vec{r}_{n+1}^N

ELSE IF ($e^{-\Delta E/k_B T} >$ random number $\epsilon(0,1)$) THEN

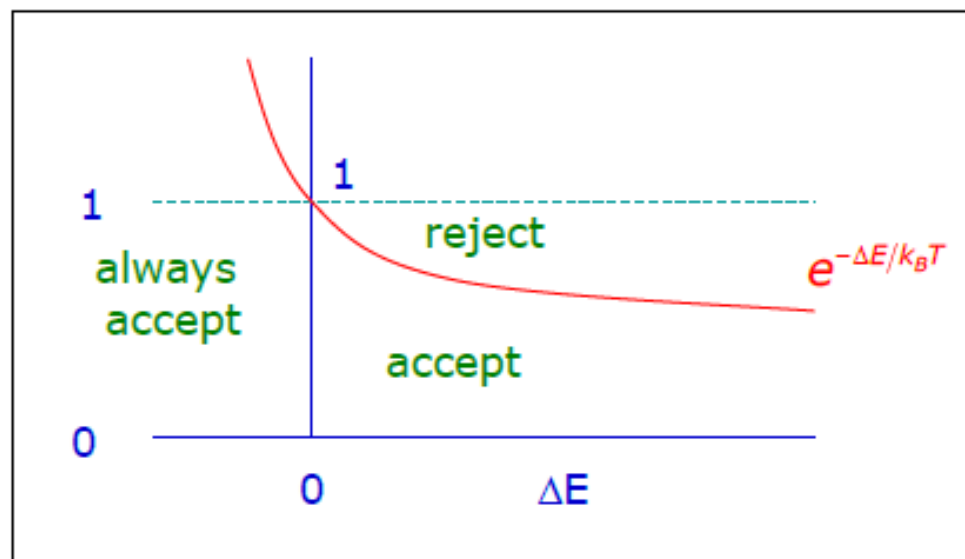
Accept \vec{r}_{n+1}^N

ELSE

Take \vec{r}_n^N again.

END IF

END DO



A Markov process

The Metropolis algorithm generates a Markov chain of states, that is, the outcome of each trial depends only upon the preceding trial and not upon any previous trials.

Detailed-balance principle (细致平衡原理) :

$$\sum_{new} \{P(new)\pi(new \rightarrow old) - P(old)\pi(old \rightarrow new)\} = 0$$

Choice of MC Moves

1. Make a random change to the Cartesian coordinates of a single randomly chosen particle using a random number generator.

$$x_{\text{new}} = x_{\text{old}} + (2\xi - 1)\delta r_{\text{max}}$$

$$y_{\text{new}} = y_{\text{old}} + (2\xi - 1)\delta r_{\text{max}}$$

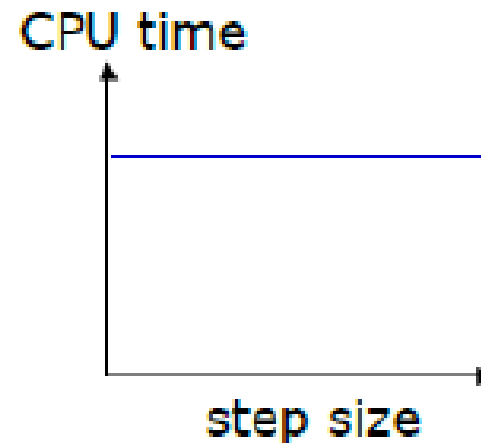
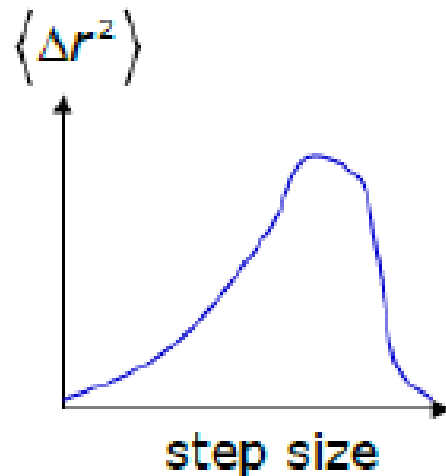
$$z_{\text{new}} = z_{\text{old}} + (2\xi - 1)\delta r_{\text{max}}$$

2. Move the atoms sequentially (this requires one fewer call to the random number generator per iteration).

3. Several atoms can be moved at once. If an appropriate value for the maximum displacement is chosen then this may enable phase space to be covered more efficiently.

In practice: Efficiency depends on
balance between $\left\{ \begin{array}{l} \text{step-size} \\ \text{acceptance/rejection ratio} \end{array} \right.$

1. Step size: too large $\Rightarrow \Delta E$ big $\Rightarrow e^{-\Delta E/k_B T} \approx 0 \Rightarrow$ no acceptance
too small \Rightarrow no motion \Rightarrow limited sampling



2. One-particle versus many-particle moves:

$\left. \begin{array}{l} N \text{ 1-particle moves} \\ \text{or} \\ 1 \text{ N-particle move} \end{array} \right\}$	<ul style="list-style-type: none">- Energy calculation requires same CPU time- Sum of mean square displacement N times larger in first case
---	--

遍历性假设 (Ergodic Hypothesis)

For macroscopic numbers of atoms or molecules (*of the order of 10^{23} , Avogadro's number is $6.02214199 \times 10^{23}$*) it is not feasible to determine an initial configuration of the system, and to later integrate equation of the motion which describe its temporal evolution.

Boltzmann and Gibbs developed statistical mechanics。

$$\langle A \rangle = \int \int dp^N dr^N A(p^N, r^N) \rho(p^N, r^N)$$

遍历性假设：一个分子系统的足够长时间的演化（保持能量守恒）可遍历（或无限接近）任何微观状态。

A system of molecules will assume, in the long run, all conceivable micro-states that are compatible with the conservation of energy.

时间平均

- Values such as pressure or heat capacity generally depend upon the positions and momenta of the N particles that comprise the system. The instantaneous value of the property A can thus be written as :

$$A(p^N(t), r^N(t))$$

- Average value of the property A can be calculated using integral approach:

$$A_{ave} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{t=0}^{\tau} A(p^N(t), r^N(t)) dt$$

时间平均和系综平均

A single system evolving in time is replaced by a large number of replications of the same system that are considered simultaneously.

An average quantity measured over long enough time will approach the ensemble average:

$$\bar{A} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_{t_0}^{t_0+t} A(t) dt = \frac{1}{M} \sum_M A_i = \langle A \rangle$$

这一是遍历性假设的另一种表达。