

# 实验模拟与数据分析工具

平荣刚

中国科学院高能物理研究所  
([pingrg@ihep.ac.cn](mailto:pingrg@ihep.ac.cn))

中国科学院大学，2024-4，课程编号：070200M02020H

# 目 录

## 第四章 蒙特卡罗模拟

4.1: 蒙特卡罗方法简史

4.2: 随机数产生和检验

4.3: 概率分布抽样方法

4.4: 蒙特卡罗模拟在物理中的应用

## 第五章 物理事例产生器

5.1: 事例产生器的作用和原理

5.2: 物理事例的运动学描述

5.3: PYTHIA产生子

5.4: 高能物理实验中常用的产生子

## 教材/参考资料

- **实验物理数据分析（下册）**  
朱永生 著 科学出版社(2012)
- **蒙特卡罗方法在实验核物理中的应用**  
许淑艳 编著 原子能出版社
- **A Primer for the Monte-Carlo Method**  
Iiya M. Sobol, CRC press, Inc. (1994)
- **Exploring Monte Carlo Methods**  
William L. Dunn and J. Kenneth Shultis, Elsevier, 2012
- **Introduction to Monte Carlo methods**  
Stefan Weinzierl, arXiv:hep-ph/0006269

## 4.3 概率分布抽样方法

4.3.1 随机抽样及其特点

4.3.2. 离散型分布随机变量的直接抽样

4.3.3. 连续分布的随机变量抽样

A: 直接抽样方法

B. 变换抽样方法

C. 舍选抽样方法

4.3.4. 复合抽样方法

4.3.5. 特殊抽样方法

4.3.6 多维向量抽样方法

➤ 作业



## 4.3.1 随机抽样及其特点

随机变量的随机抽样指的是由该变量的总体分布产生简单随机子样。在用蒙特卡罗法解题时,经常会遇到具有不同分布的各种随机变量,要求产生对应于该随机变量的随机子样,也即随机数列。这一步骤称为对该随机变量的随机模拟或随机抽样。

为方便起见,用 $X_F$ 表示由已知分布 $F(x)$ 中产生的简单子样的个体。对于连续型分布,常用分布密度函数 $f(x)$ 表示总体的已知分布,用 $X_f$ 表示由已知分布密度函数 $f(x)$ 产生的简单子样的个体。另外,在抽样过程中用到的伪随机数均称随机数。

## 4.3.2.离散型分布随机变量的直接抽样

对于任意离散型分布:

$$F(x) = \sum_{x_i < x} P_i$$

其中 $x_1, x_2, \dots$ 为离散型分布函数的跳跃点,  $P_1, P_2, \dots$ 为相应的概率, 根据前述直接抽样法, 有离散型分布的直接抽样方法如下:

$$X_F = x_I, \quad \text{当} \sum_{i=1}^{I-1} P_i < \xi \leq \sum_{i=1}^I P_i, \xi \sim U(0,1)$$

该结果表明, 为了实现由任意离散型分布的随机抽样, 直接抽样方法是非常理想的。

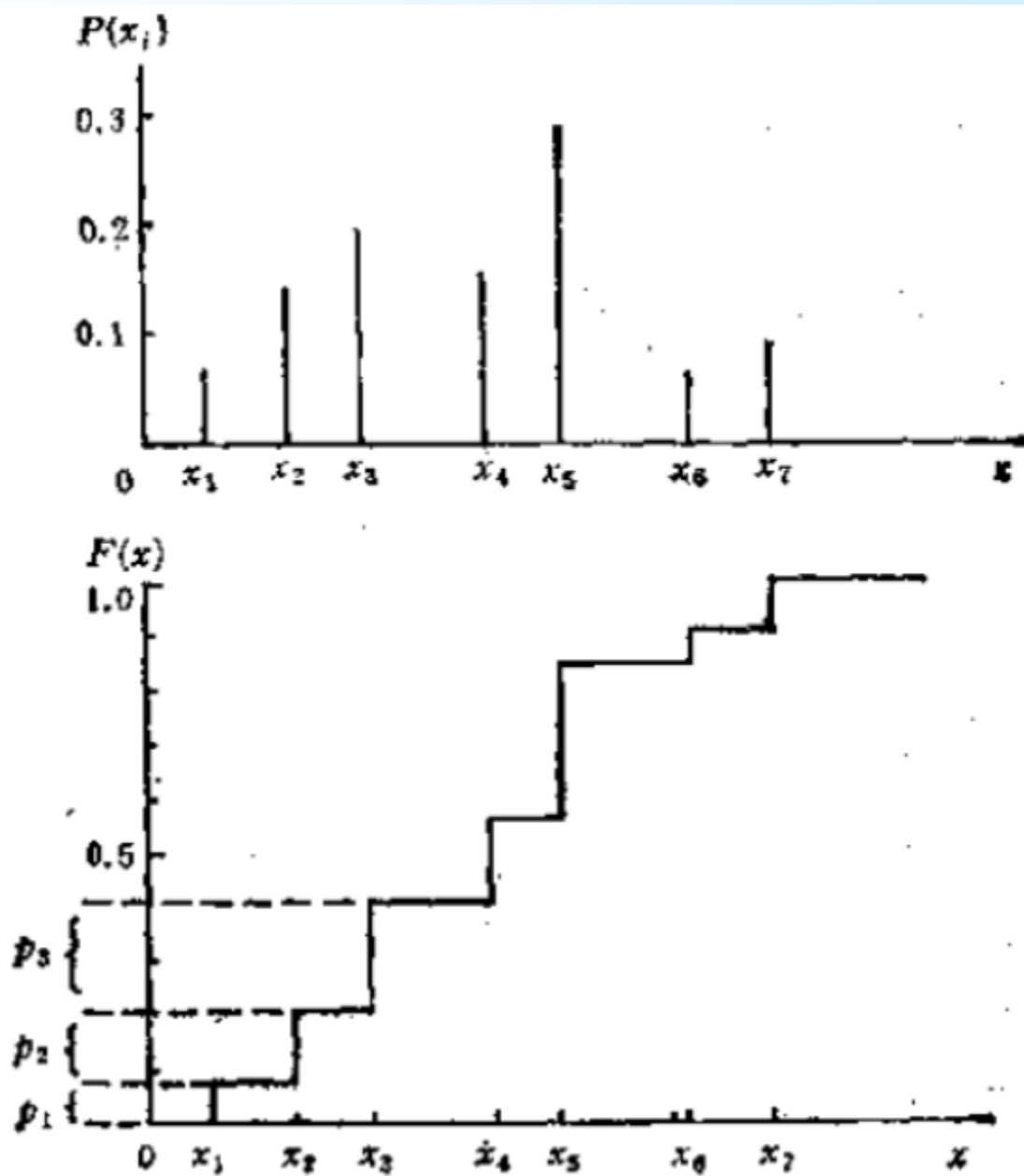


图 13.2 离散随机变量的概率分布和累积分布

# 例1. 伯努利试验抽样

抽样方法：设成功的概率为 $p$

1. 产生一个随机数 $r \sim U(0,1)$

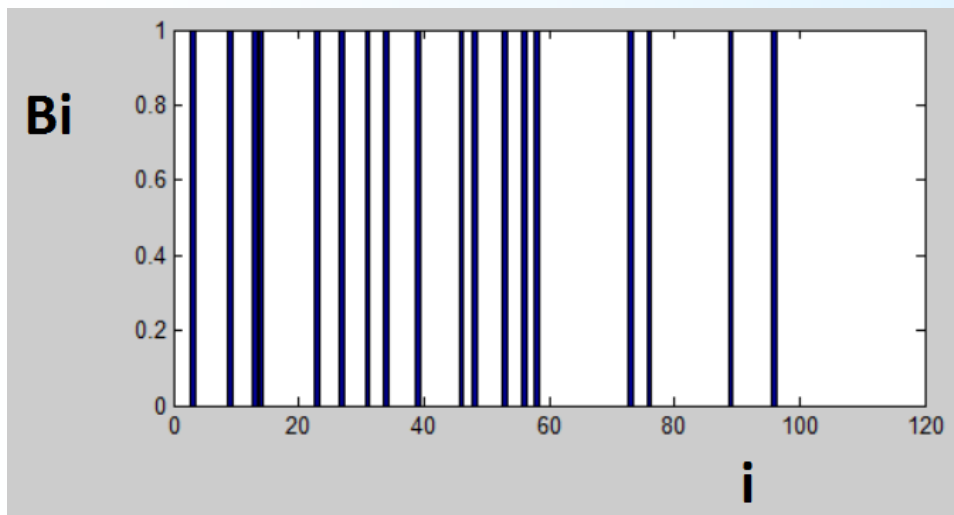
2. 若 $r < p$ ,  $\xi=1$ ; 若 $r \geq p$ ,  $\xi=0$

则 $\xi$ 服从伯努利分布 $\text{Ber}(p)$ 的抽样值。

伯努利试验 $x$	取值
成功	$x=1$
失败	$x=0$

Matlab 代码：  $\text{Ber}(0.25)$ : 用竖条 表示100个随机二进制的变量 $B_i(i=1,2,\dots,1000)$  的值

$x = (\text{rand}(1,100) \leq 0.25) ; \text{bar}(x)$



## 例2. 二项分布的抽样

二项分布为离散型分布，其概率函数为：

$$P(x = n) = P_n = C_N^n p^n (1 - p)^{N-n}$$

其中， $p$ 为概率。对该分布的直接抽样方法如下：

$$X_F = n, \text{ 当 } \sum_{i=0}^{n-1} p_i < \xi \leq \sum_{i=0}^n p_i$$

---

或者：通过伯努利分布的变量来产生

1. 产生 $n$ 个具有伯努利分布的随机变量 $X_1, X_2, \dots, X_n$

2. 返回  $X = \sum_{i=1}^n X_i$

### 例3. 泊松(Possion)分布的抽样

泊松(Possion)分布为离散型分布，其概率函数为：

$$P(x = n) = P_n = e^{-\lambda} \frac{\lambda^n}{n!}$$

其中， $\lambda > 0$ 。对该分布的直接抽样方法如下：

$$X_F = n, \text{ 当 } \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\lambda^i}{i!} < \xi \cdot e^\lambda \leq \sum_{i=0}^n \frac{\lambda^i}{i!}, \quad \text{其中, } \xi \sim U(0,1)$$

---

或者通过这个算法产生泊松分布 $Poi(l)$ 抽样：

1. 置 $n = 1$ ,  $a = 1$
2. 产生 $U_n \sim U(0,1)$ , 并置  $a = a * U_n$
3. 如果  $a \geq e^{-\lambda}$ , 置 $n = n + 1$ , 回到2
4. 否则 返回 $X = n - 1$ 作为 $Poi(l)$ 的抽样

## 例4. 掷骰子点数的抽样

掷骰子点数 $X=n$ 的概率为：

$$P(X = n) = \frac{1}{6}$$

选取随机数 $\xi \sim U(0,1)$ ，如

$$\frac{n-1}{6} < \xi \leq \frac{n}{6}$$

则

$$X_F = n$$

在等概率的情况下，可使用如下更简单的方法：

$$X_F = [6 \cdot \xi] + 1$$

其中  $[]$  表示取整数。

## 例5. 碰撞核种类的确定

中子或光子在介质中发生碰撞时，如介质是由多种元素组成，需要确定碰撞核的种类。假定介质中每种核的宏观总截面分别为 $\Sigma_1, \Sigma_2, \dots, \Sigma_n$ ，则中子或光子与每种核碰撞的概率分别为：

$$P_i = \frac{\Sigma_i}{\Sigma_t}, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

其中 $\Sigma_t = \Sigma_1 + \Sigma_2 + \dots + \Sigma_n$ 。碰撞核种类的确定方法为：产生一个随机数 $\xi \sim U(0, 1)$ ，如果

$$\sum_{i=1}^{I-1} P_i < \xi \leq \sum_{i=1}^I P_i$$

则中子或光子与第 $I$ 种核发生碰撞。



## 例6. 中子与核的反应类型的确定

假设中子与核的反应类型有如下几种:弹性散射, 非弹性散射, 裂变, 吸收, 相应的反应截面分别为 $\Sigma_{el}$ ,  $\Sigma_{in}$ ,  $\Sigma_f$ ,  $\Sigma_a$ 。则发生每一种反应类型的概率依次为:

$$P_1 = \frac{\Sigma_{el}}{\Sigma_t}, P_2 = \frac{\Sigma_{in}}{\Sigma_t}, \quad P_3 = \frac{\Sigma_f}{\Sigma_t}, \quad P_4 = \frac{\Sigma_a}{\Sigma_t}$$

其中反应总截面 $\Sigma_t = \Sigma_{el} + \Sigma_{in} + \Sigma_f + \Sigma_a$ 。抽样方法类似例5。

产生一个随机数 $\xi \sim U(0,1)$ , 如果

$$\sum_{i=1}^{I-1} P_i < \xi \leq \sum_{i=1}^I P_i$$

则中子与核发生第 $I$ 种反应。

### 4.3.3.连续分布的随机变量抽样

- A: 直接抽样方法(反函数法)

任意连续随机变量 $Y$ 的概率密度为 $g(y)$ , 累积分布函数为  
 $G(y)$

$$x = G(y) = \int_{-\infty}^y g(t) dt$$

为(0,1)区间中均匀分布的随机变量。

若 $G(y)$ 的反函数存在.

上式可写成

$$y = G^{-1}(x)$$

所以若令 $\xi_i$ 为随机变量 $Y$ 的随机子样(随机数列),  $r_i$ 为(0,1)区间均匀分布的随机子样(随机数列), 则应在

$$r_i = G(\xi_i) = \int_{-\infty}^{\xi_i} g(y) dy$$

写成反函数形式

$$\xi_i = G^{-1}(r_i)$$

利用这个公式可从 $r_i$ 求出任意连续随机变量的随机 $\xi_i$ 系列。

## 例1：对指数分布的直接抽样

满足指数分布  $f(x) = \lambda e^{-\lambda x} (x \geq 0)$  的随机数  $\xi_i$

$$r_i = \int_0^{\xi_i} \lambda e^{-\lambda x} dx = 1 - e^{-\lambda \xi_i}$$

求得：  $\xi_i = -\frac{1}{\lambda} \ln(1 - r_i)$  .

注意到  $r_i$  与  $1 - r_i$  都是  $[0,1]$  区间均匀分布的随机数，故上式可以写成：

$$\xi_i = -\frac{1}{\lambda} \ln r_i$$

例2.对如下的分布函数进行抽样

$$f(x) = \left( \frac{\gamma-1}{x_0^{1-\gamma}} \right) x^{-\gamma} \quad (x_0 \leq x, \gamma > 1)$$

在(0,1)区间上随机抽取均匀分布的随机数 $r_i$ ,令

$$r_i = F(\xi) = \int_{x_0}^{\xi} f(x) dx = 1 - \left( \frac{x_0}{\xi} \right)^{\gamma-1}$$

解此方程，并考虑到到 $1 - \xi$ 和 $\xi$ 都是(0,1)区间的均匀分布的伪随机数，得到

$$\xi = x_0 r_i^{-\frac{1}{\gamma-1}}$$

# 小结：直接抽样方法

1. 检查密度函数 $f(x)$ 是否归一，若不归一，要做归一化处理。

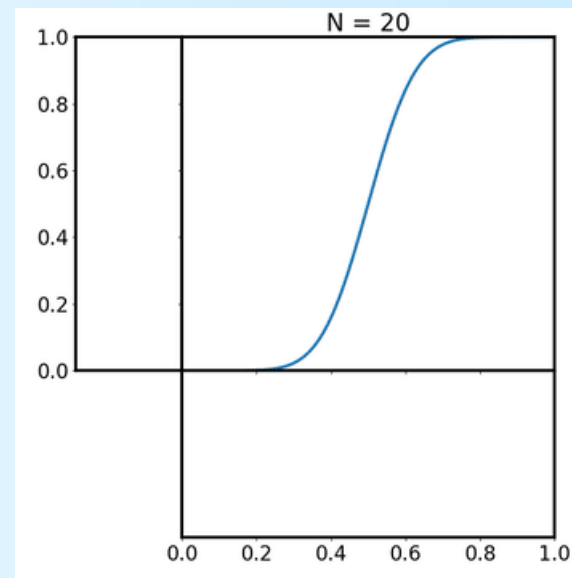
2. 计算

$$r_i = G(\xi_i) = \int_{-\infty}^{\xi_i} g(y) dy$$

3. 反解出 $\xi_i$ ，即得到满足分布密度函数 $g(y)$ 的抽样

$$\xi_i = G^{-1}(r_i)$$

图：高斯分布的反函数抽样动画



## B. 变换抽样方法

已知某个随机变量 $X$ 的概率密度 $f(x)$ 且其随机数 $\eta_i$ ，则任意随机变量的随机数 $\xi_i$ 可通过对 $\eta_i$ 的某种变换求得. 设随机变量  $Y=Y(x)$ 是 $X$ 的一一对应变换。则 $Y$ 的概率密度为

$$g(y) = f(x(y)) \left| \frac{dx(y)}{dy} \right|$$

随机变量 $Y$ (或概率分布 $g(y)$ )的随机数 $\xi_i$  可由下式求得:

$$\xi_i = y(\eta_i)$$

特例： $X$ 是 $(0,1)$ 区间均匀分布的随机变量,  $f(x) = 1$ ; 任意随机变量 $Y$  的概率密度令为 $g(y)$ ， 则有

$$g(y) = \left| \frac{dx(y)}{dy} \right|, dx = g(y)dy = dG$$

两边求积分, 得  $x = G(y) = \int_{-\infty}^y g(y)dy$ , 于是又  $y = G^{-1}(x)$ .

- 多维随机变量

多维随机变量  $X = \{x_1, x_2, x_3, \dots, x_n\}$  的概率密度函数为

$$f(x) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

随机变量  $Y = \{Y_1, Y_2, \dots, Y_n\}$  是  $X$  的函数  $Y_i = Y_i(X), i = 1, 2, \dots, n$ .  
则随机变量  $Y$  的概率密度可表示为

$$g(y) = f(x) \left| J \left( \frac{x}{y} \right) \right| \quad J \text{ 是雅可比行列式}$$

若  $X$  的随机数向量用  $\eta = \{\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n\}$  表示. 则  $Y$  的随机数向量  $\xi = \{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n\}$  由下式求出:

$$\xi_i = y_i(\eta_i), i = 1, 2, 3, \dots, n$$

例如，两个相互独立的正态 $N(0,1)$ 的随机数 $\xi_1, \xi_2$ 可按下式求得：

$r_1, r_2$  是 $(0,1)$ 均匀分布的随机数

$$\begin{aligned}\xi_1 &= (-2\ln r_1)^{1/2} \cos(2\pi r_2) \\ \xi_2 &= (-2\ln r_1)^{1/2} \sin(2\pi r_2)\end{aligned}$$

由随机变量和反解得：

$$r_1 = e^{-\frac{\xi_1^2 + \xi_2^2}{2}}, r_2 = \frac{1}{2\pi} \arctan \frac{\xi_2}{\xi_1}$$

变换的雅可比行列式是：

$$J\left(\frac{r_1, r_2}{\xi_1, \xi_2}\right) = \begin{vmatrix} \partial r_1 / \partial \xi_1 & \partial r_1 / \partial \xi_2 \\ \partial r_2 / \partial \xi_1 & \partial r_2 / \partial \xi_2 \end{vmatrix} = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{\xi_1^2 + \xi_2^2}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi_1^2}{2}} * \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi_2^2}{2}}$$

又 $\{r_1, r_2\}$ 的联合概率密度为 $\phi(r_1, r_2) = 1$ , 因此， $\xi$ 的联合概率密度为：

$$g(\xi) = f(r) \left| J\left(\frac{r}{\xi}\right) \right| = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi_1^2}{2}} * \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\xi_2^2}{2}}$$



# 逆问题：已知随机变量的抽样形式，试求它们的密度分布函数

相互独立的随机变量 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ 满足的联合密度分布函数为 $f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ ，另一随机变量 $\eta$ 的函数关系为 $\eta = u(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ 。试求随机变量 $\eta$ 满足的密度分布函数 $f_\eta(x)$ 。

$\eta$ 的分布函数为

$$\begin{aligned} F_\eta(x) &= P(\eta < x) = P(u(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) < x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) \theta(x - u(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)) d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_n \end{aligned}$$

$$\text{阶跃函数 } \theta(x) = \begin{cases} 1 & (x > 0) \\ 0 & (\text{其他}) \end{cases} \quad \frac{d\theta(x)}{dx} = \delta(x)$$

所以,  $\eta$  的密度分布函数为

$$\begin{aligned} f_{\eta}(x) &= \frac{dF_{\eta}(x)}{dx} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) \delta(x - u(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)) d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_n \end{aligned}$$

利用 [δ函数的性质](#), 可以简化以上计算

比如, 一维变换抽样的密度分布函数, 随机变量  $Y$  与  $X$  具有一一对应关系  $y = f(x)$ 。  $Y$  和  $X$  的密度函数分别为  $g(y)$  和  $f(x)$ 。

$$\begin{aligned} P_Y(b) &= P_Y(Y < b) = \int_{-\infty}^b g(y) dy \\ &= \int_{-\infty}^{x(y=b)} f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \theta[b - y(x)] dx \\ \therefore f_Y(b) &= \frac{dP_Y(b)}{db} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta[b - y(x)] dx \end{aligned}$$

例：  $Z$  是密度分布函数  $f(x)$  的随机子样， 证明随机变量  $\eta = \int_{-\infty}^Z f(x)dx = F(z)$  是  $(0, 1)$  之间的一个均匀分布随机数

证明：  $\eta$  的密度函数为

$$\begin{aligned} g(\eta) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(z) \delta(\eta - F(z)) dz \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(z) \frac{\delta(z - F^{-1}(\eta))}{\left| \frac{dF(z)}{dz} \right|} dz \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(z) \frac{\delta(z - F^{-1}(\eta))}{f(z)} dz = 1 \end{aligned}$$

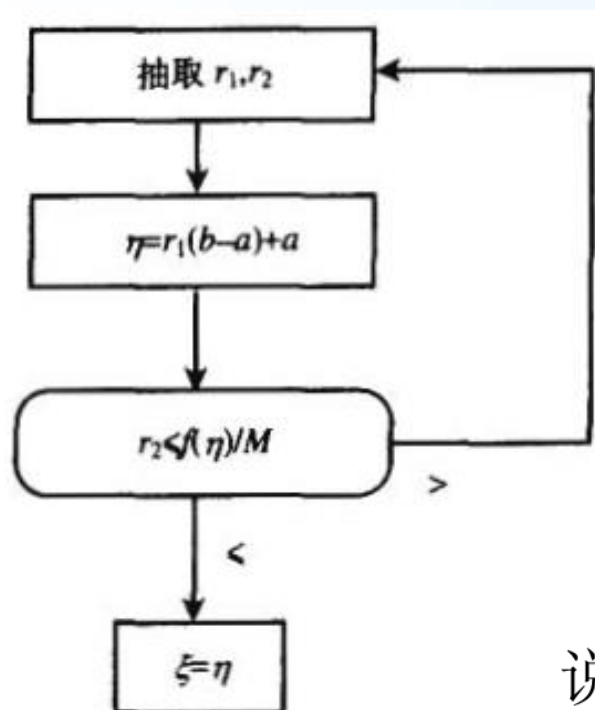
所以，  $\eta$  是  $(0,1)$  之间的均匀分布随机数

## C.舍选抽样方法

舍选法是冯·诺伊曼（Von Neumann）为克服直接抽样和变换抽样方法的困难最早提出来的。它抽样的基本思想是按照给定的分布密度函数 $\phi(\xi)$ 对均匀分布的随机数系列 $\{\xi_i\}$ 进行舍选，舍选的原则是：在 $\phi(\xi)$ 大的地方保留较多的随机数，在 $\phi(\xi)$ 小的地方保留较少的随机数，使得到的子样中的 $\xi$ 的分布满足密度函数 $\phi(\xi)$ 的要求，这种方法对分布密度函数 $\phi(\xi)$ 在抽样范围内有界，且其上界是容易得到的情况，总是可以采用的。它使用起来十分灵活，计算也较简单，因而使用也比较广泛，但是这种方法对 $\phi(\xi)$ 在抽样范围内函数值变化很大的时候效率是很低的，因为大量的均匀分布的抽样点被舍去了，由于这个原因，有时我们选择另外一些更有效的方法。

## • 第一类舍选法

设随机置量 $X$ 的取值域为 $[a, b]$ , 概率密度 $f(x)$ 为有界函数, 其极大值用 $M$ 表示 $f(x) \leq M$ , 舍选抽样的流程图:



框图的含义如下:

$\eta$ 是 $[a, b]$ 间内均匀分布随机数, 考察 $r_2 \leq \phi(\eta)/M$  是否成立. 若成立, 则 $\eta$ 取为随机变量 $X$ 的随机数 $\xi_i$ ; 否则,  $\eta$ 被舍弃。重复以上过程可求得 $X$ 的随机数列 $\{\xi_i\}$ .

说明:  $M$ 可以比最大值大, 但不能比最大值小。在实际工作中,  $M$ 通过有限次计算得到时, 为安全起见, 可以把 $M$ 适当放大, 如10%或更高。

## 讨论:

- 对于无限区间的情形, 可进行截尾处理. 即选择有限区间 $[a,b]$ 时, 满足

$$\int_a^b f(x)dx > 1 - \varepsilon.$$

只要 $\varepsilon$ 且够小. 就可以应用上述方法而使计算误差满足要求。

- 舍选抽样的效率

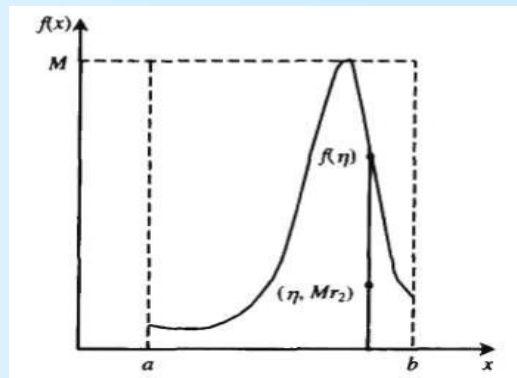
在舍选法中, 假定产生 $n$ 对 $r_1, r_2$  (共 $2n$ 个随机数). 其中满足不等式 $r_2 \leq f(\eta)/M$  的 $\eta$ 的个数 $m$ 与 $n$ 之比. 等于曲线 $f(x)$ 下的面积与总面积 $(b-a)M$ 之比.

$$\frac{m}{n} = \frac{\int_a^b f(x)dx}{(b-a)M} = \frac{1}{(b-a)M}$$

因此, 舍选法的抽样效率为

$$E = \frac{m}{2n} = \frac{1}{2M(b-a)}.$$

$f(x)$ 可以是不归一的



例：对随机变量 $\eta$ 抽样，使它满足分布函数

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

解：在 $x \in [0, 1]$ , 分布函数的最大值 $M = 2$ . 产生两个随机数 $\xi_1, \xi_2 \in [0, 1]$ , 判断

$$\xi_2 \leq f(\xi_1)/2, \text{ 或者 } \xi_2 \leq \xi_1$$

是否成立，若成立，取 $\xi = \xi_1$ , 若不成立，再取两组随机数，重复以上操作。实际上，由于随机数的独立性， $\xi_1, \xi_2$ 的值可以互换，使它们满足舍选要求，所以可以取

$\xi = \max(\xi_1, \xi_2)$ . (思考题：用反函数法怎么抽样？)

类似地，可以推广到高幂次情况：

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

提示：反函数法和  
第二类舍选法



## • 第二类舍选法

假如 $h(x)$ 和 $f(x)$ 同是在 $x \in (0,1)$ 区域上的分布密度函数，并且 $f(x)$ 可以写为：

**应用：TOY MC**

$$f(x) = L * \left( \frac{f(x)}{Lh(x)} \right) h(x) \equiv Lg(x)h(x)$$

**注意：这不是条件概率分布抽样**

式中取 $L = \max \frac{f(x)}{h(x)} > 1$ ，它保证 $|g(x)| \leq 1$ 对满足分布函数 $f(x)$ 的随机变量的抽样步骤

(a) 在 $(0,1)$ 区间上抽取均匀分布随机数 $\xi_1$ 。并由 $h(x)$ 分布密度函数抽样得到 $\eta_h$ 。

(b) 判别 $\xi_2 \leq g(\eta_h)$ 不等式是否成立。如果不成立，则回到步骤(a)。

(c) 选取 $\eta = \eta_k$ 作为服从分布密度函数 $f(x)$ 的一个抽样值。



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：

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

解：选择：

$$L = \sqrt{\frac{e}{2\pi}}, h(x) = e^{-x}, g(x) = e^{-(x-1)^2/2}, 0 < x < \infty$$

由于 $f(x)$ 是偶函数，在 $(-\infty, 0]$ 上的抽样可以由 $[0, \infty)$ 的抽样反射得到。抽样过程：

- (a)由 $h(x)$ 的直接抽样得到随机变量 $\eta_h = -\ln\xi_1$ ;
- (b)产生随机数 $\xi_2$ ,判别 $\xi_2 \leq g(\eta_h)$ 是否成立，也即判断不等式 $(\eta_h - 1)^2 \leq -2\ln\xi_2$ ;
- (c)若成立，取 $x = -\ln\xi_1$ ;若不成立，返回(a).

- 第三类舍选法

如果分布密度函数可以表示成积分形式

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

其中 $g(x, y)$  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, 常数 $L$ 定义为

$$L = 1 / \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{h(x)} g(x, y) dx dy$$

舍取抽样步骤:

- (a) 由联合分布密度函数 $g(x, y)$  抽取 $(\eta_x, \eta_y)$  随机向量值。
- (b) 判别 $\eta_y \leq h(\eta_x)$  是否成立。若不成立, 返回(a).
- (c) 取分布密度函数 $f(x)$  的抽样值 $\eta = \eta_x$  .

证明：用第三类舍选法产生的样本满足 $f(x)$ 分布

利用贝叶斯定律： 注： 贝叶斯定律  $P(B|A)=P(A,B)/P(A)$

$$\begin{aligned} p(\eta \leq x) &= p(\eta_x \leq x | \eta_y \leq h(\eta_x)) = \frac{p(\eta_x \leq x, \eta_y \leq h(\eta_x))}{p(\eta_y \leq h(\eta_x))} \\ &= \frac{\int_{-\infty}^x dt_1 \int_{-\infty}^{h(t_1)} g(t_1, t_2) dt_2}{\int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{h(t_1)} g(t_1, t_2) dt_2} = \int_{-\infty}^x \left[ L \int_{-\infty}^{h(t_1)} g(t_1, t_2) dt_2 \right] dt_1 \end{aligned}$$

特例： 如果 $x, y$ 相互独立，  $g(x, y) = g_1(x)g_2(y)$ , 则

$$f(x) = Lg_1(x) \int_{-\infty}^{h(x)} g_2(y) dy, \text{ 进一步假定:}$$

$$g_2(x) = \begin{cases} 1, x \in (0, 1) \\ 0, \text{其他.} \end{cases}$$

则回到第二类舍选抽样  $f(x) = Lh(x)g_1(x)$ .

## 一些说明

例：方位角余弦的分布密度函数为 ([试证明](#))

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, & |x| < 1 \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

用第三类舍选抽样法抽取它的随机变量。

(不采用：  $\eta = \cos(2\pi\xi)$ ,  $\xi \in (0, 1)$  均匀分布的随机数)

解：取  $L = 4/\pi$ ,  $h(x) = 1$ , 联合分布密度函数  $g(x, y)$  取为  
：

$$g(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{4} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, & |x| < 1, 0 < y < 1, \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

思考：  $g(x, y)$  为什么要这么取？

$f(x)$  改写为：

$$f(x) = \frac{4}{\pi} \int_0^1 g(x, y) dy$$

首先，用变换抽样法抽取满足 $g(x, y)$ 的随机变量。在 $(0, 1)$ 期间上产生独立的两个随机数 $\xi_1, \xi_2$ , 定义：

$$x = \frac{\xi_1^2 - \xi_2^2}{\xi_1^2 + \xi_2^2}, y = \xi_1^2 + \xi_2^2,$$

反解可以得到：

$$\begin{aligned}\xi_1 &= \sqrt{y(1+x)/2} \equiv h_1(x, y), \\ \xi_2 &= \sqrt{y(1-x)/2} \equiv h_2(x, y),\end{aligned} \quad |J| = \begin{bmatrix} \partial \xi_1 / \partial x & \partial \xi_1 / \partial y \\ \partial \xi_2 / \partial x & \partial \xi_2 / \partial y \end{bmatrix}$$

可以证明, $x, y$  分布函数就是： $g(x, y) = \phi(h_1(x, y), h_2(x, y)) |J|$ ,

式中，由于 $\xi_1, \xi_2$ 是独立的随机数，所以 $\phi(h_1(x, y), h_2(x, y)) = 1$ .

抽样步骤如下：

(a)产生(0,1)区间上的均匀分布的独立随机数 $\xi_1, \xi_2$ ，计算

$$x = \frac{\xi_1^2 - \xi_2^2}{\xi_1^2 + \xi_2^2}, y = \xi_1^2 + \xi_2^2.$$

(b)判断 $y \leq h(x) = 1$ 是否成立。如不成立返回(a)。

(c) 方位角余弦 $\cos \phi$ 的抽样值

$$\eta = \frac{\xi_1^2 - \xi_2^2}{\xi_1^2 + \xi_2^2}, \sin(\phi) \text{的抽样值为 } \eta' = \frac{2\xi_1 \xi_2}{\xi_1^2 + \xi_2^2}.$$

## 4.3.4. 复合抽样方法

所谓复合分布是指随机变量 $X$ ，它服从的分布与另一个随机变量 $y$ 有关。一般复合分布密度函数可以表示为

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

其中， $g(x|y)$ 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。抽样步骤：

- (a)由分布密度函数 $h(y)$ 抽取 $y_h$ ;
- (b)由 $g(x|y_h)$ 抽取 $x_g$ 的值  $\xi_f = x_{g(x|y_h)}$ .

证明：  $p(x \leq \xi_f < x + dx) = p(x \leq x_{g(x|y_\eta)} < x + dx)$

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

## (1)加分布抽样

作为复合抽样的特殊情况，首先介绍如分布抽样。数学上加分布的一般形式为

$$f(x) = \sum_n p_n h_n(x), \quad 0 < p_n < 1, \sum p_n = 1$$

抽样步骤：

(a) 用分离抽样确定 $n$ ，取 $(0,1)$ 区间上均匀分布随机数 $\xi$ ，解下面的不等式求得 $n$

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

(b) 找到对应的 $h_n(x)$ 并对其抽样，得到最后的抽样值 $\eta = \eta_{hn}$ 。



例：球壳均匀分布的抽样。设球壳内外半径分别为 $R_0$ 和 $R_1$ ，球壳内一点到球心距离为 $r$ 。则 $r$ 的分布密度函数为

$$f(r) = \frac{3r^2}{R_1^3 - R_0^3}, R_0 \leq r \leq R_1,$$

解：令  $r = (R_1 - R_0)x + R_0$ ,  $\lambda = R_1^2 + R_1 R_0 + R_0^2$ , 分布函数化为：

$$f(x) = \frac{(R_1 - R_0)^2}{\lambda} 3x^2 + \frac{3R_0(R_1 - R_0)}{\lambda} 2x + \frac{3R_0^2}{\lambda} * 1,$$

$$\text{取： } p_1 = \frac{3R_0^2}{\lambda}, p_2 = \frac{3R_0(R_1 - R_0)}{\lambda}, p_3 = \frac{(R_1 - R_0)^2}{\lambda},$$

$$p_1 + p_2 = \frac{3R_0 R_1}{\lambda},$$

$$p_1 + p_2 + p_3 = 1.$$

## 抽样方框图

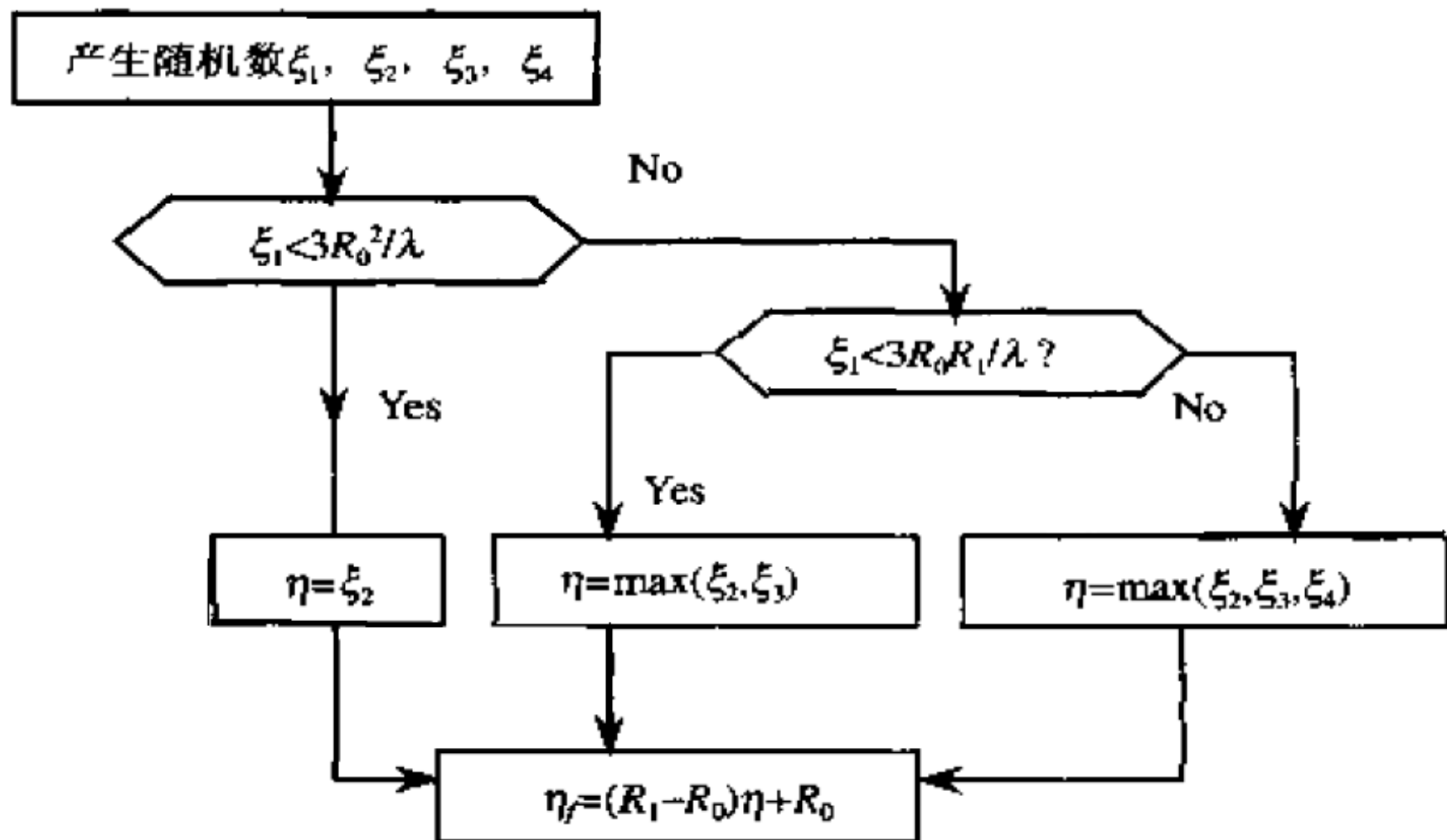


图 球壳均匀分布的抽样图

## (2) 减分布抽样

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:

$$m = \min_{x \in [a, b]} \frac{g_2(x)}{g_1(x)},$$

$$\text{则有: } 0 < f(x) = g_1(x) \left[ A_1 - A_2 \frac{g_2(x)}{g_1(x)} \right] \leq g_1(x) (A_1 - A_2 m)$$

因为  $A_1 - A_2 m > 0$ , 所以

$$0 < \frac{f(x)}{(A_1 - A_2 m) g_1(x)} \leq 1$$

令

$$h_1(x) = \frac{f(x)}{(A_1 - A_2 m) g_1(x)} = \frac{A_1}{A_1 - A_2 m} - \frac{A_2}{A_1 - A_2 m} \frac{g_2(x)}{g_1(x)}$$

则 $f(x)$ 可以写为:

$$f(x) = (A_1 - A_2 m) h_1(x) g_1(x), \text{ 且 } 0 < h(x) \leq 1.$$

因而按第二类舍选法抽样, 抽样效率为 $E_1 = 1/(A_1 - A_2 m)$ 。

类似上述方法, 我们可以将 $f(x)$ 写为

$$f(x) = \frac{(A_1 - A_2 m)}{m} h_2(x) g_2(x), \text{ 其中}$$
$$h_2(x) = \frac{A_1 m}{A_1 - A_2 m} \frac{g_1(x)}{g_2(x)} - \frac{A_2 m}{A_1 - A_2 m}, \text{ 且 } 0 < h(x) \leq 1.$$

同样按第二类舍选抽样法, 其效率为 $E = m/(A_1 - A_2 m) = mE_1$ 。  
选用哪种抽样函数, 取决于它具有较高的抽样效率。

**思考题:** 满足分布函数为 $f(x) = 3 * (1 - x^2)/4$  ( $|x| < 1$ ) 的变量 $X$ , 怎么抽样? (当 $g_1(x)=1$ 时, 回到第一类舍选抽样)

### (3)乘加分布抽样

此类分布密度函数形式为

$$f(x) = \sum_n H_n(x)g_n(x), \quad x \in [a, b], \text{ 且 } H_n(x) \geq 0.$$

为简单计, 下面我们只考虑两项( $n = 2$ )的情况. 对更多项( $n > 2$ )情况的一般表示可以以此作推广。设 $\eta$  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  $p_1 = \int_a^b H_1(x)g_1(x)dx$ ,  $p_2 = \int_a^b H_2(x)g_2(x)dx$ , 必有  $p_1 + p_2 = 1$ .

$f(x)$ 可改写为:

$$f(x) = p_1 \frac{H_1(x)}{p_1} g_1(x) + p_2 \frac{H_2(x)}{p_2} g_2(x) \equiv p_1 G_1(x) + p_2 G_2(x),$$

这个分布密度函数形式就可以采用加分布抽样法。

## (4)乘减分布抽样

设分布密度函数 $f(x)$ 的形式为:

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

令:

$$m = \min_{x \in [a, b]} \frac{H_2(x)g_2(x)}{H_1(x)g_1(x)}, \quad M_1 = \max_{x \in [a, b]} H_1(x)$$

则有如下关系:

$$\begin{aligned} 0 < f(x) &= H_1(x)g_1(x) \left[ 1 - \frac{H_2(x)g_2(x)}{H_1(x)g_1(x)} \right] \leq H_1(x)g_1(x)(1-m) \\ &\leq M_1(1-m)g_1(x) \end{aligned}$$

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

上式中,  $0 < h_1(x) \leq 1$ 。类似地,  $f(x)$ 也可以写成:

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

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

$M_2$  为  $f(x)$  在  $[a, b]$  区间的上界,  $h_2(x)$  在  $[a, b]$  区间满足  $0 < h_2(x) \leq 1$ 。

以上两种形式的  $f(x)$  都可以采用第二类舍选抽样。

## 4.3.5. 特殊抽样方法

### (1) 对由直方图给出的分布抽样

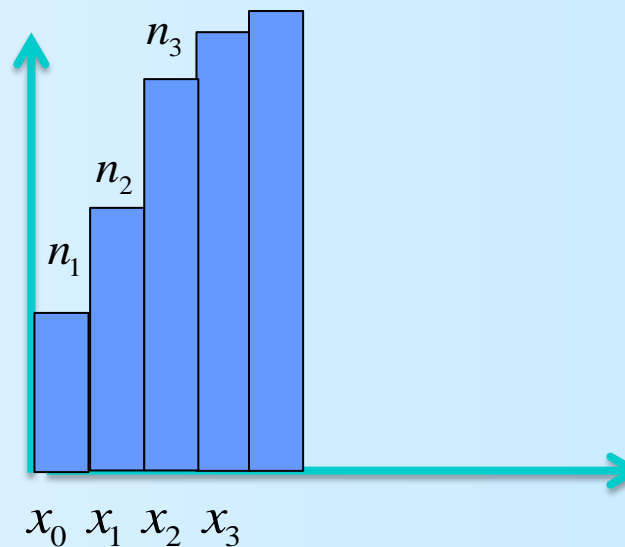
设一维直方图是对观测变量  $x$  的分布, 第  $j$  个 bin 中值代表观测值为  $x_j$  的事例数(频度), 总的 bin 数为  $N$ , 则对应第  $j$  个 bin 的分布函数为:

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

它的抽样可以采用阶梯近似法, 即抽取均匀分布随机数  $\xi$ , 找出满足不等式

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

的  $i$  值, 把对应的  $x_i$  值作为抽样值. 即取  $\eta = x_i$ .





进一步作细致的考虑时，我们可以用线性插值法求出抽样值

$$x_i' = x_{i-1} + \xi_2(x_i - x_{i-1}),$$

$\xi_2$ 是第2个随机数

最后，取作 $\eta = x_i'$ 为抽样值

(2)对由经验公式/实验测量给出的分布抽样

当随机变量样本的一维分布密度函数是由平滑的经验公式/实验测量 $f(x)$ 给出时，常用的技巧是采用如下得方法。首先将抽样区间分为若干等份的子区；然后在各个子

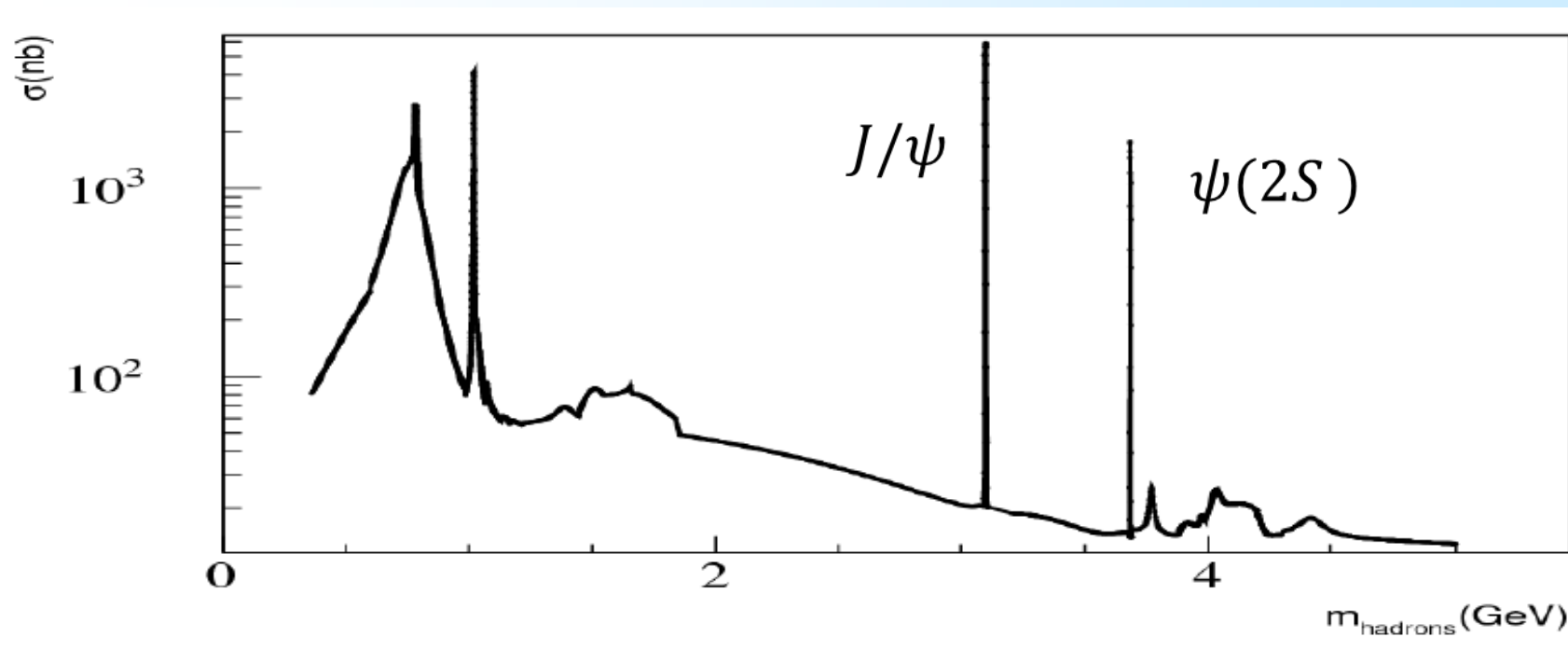
区间内对分布密度函数积分；再计算出对于各个区间的分布函数值，即

$$F(j) = \sum_{i=1}^j \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx,$$

最后，再采用由于直方图分布抽样中使用的相同办法来求出抽样值。种方在求对应于各子区间的一组分布函数值时比较耗时，但依在据这些数产生随机数时却相当快。

**技巧：**为了细致地刻画分布函数中的某些细节，比如，质量谱上较窄的共振态，我们可以采用宽带不同的分bin，最窄共振态采用较窄的bin来刻画。

例如，在5GeV以下，由实验测量得的强子截面分布



在抽样中，为了更好的描述 $J/\psi$ ,  $\psi(2S)$ 等较窄的共振态，我们可以再3.097 GeV，3.686 GeV附件采用较窄的分bin。

### (3)反函数近似

设随机变量 $\eta$ 以分布函数 $F(x)$ 分布。采用直接抽样法，取 $\eta = F^{-1}(\xi)$ ，则可以从均匀分布的随机变量抽样值 $\xi$ 得到随机变量 $\eta$ 的抽样值。当反函数 $F^{-1}(\xi)$ 的解析形式求不出来时，可以采用近似计算方法求得 $F^{-1}(y) = Q(y)$ ，以 $Q(y)$ 作为 $\eta$ 的抽样近似值，这就是反函数近似。

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

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

其中， $a, b, c, \alpha, \beta$ 为待定常数。

## (4)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的抽样。它利用任意分布的随机数的和来产生正态分布的抽样。假如 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$ 是(0,1)区间 $n$ 个均匀分布的独立随机变量的抽样样本。它的平均值为1/2, 方差为1/12。

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

$$V\{\xi\} = E\{\xi^2\} - [E\{\xi\}]^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 f(x)dx - \left(\frac{1}{2}\right)^2 = \frac{1}{12},$$

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

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

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

根据中心极限定理，引入新的随机变量 $\delta_n$

$$\delta_n = \frac{R_n - n/2}{\sqrt{n/12}}, \text{ 则: } \lim_{n \rightarrow \infty} p(\delta_n \leq x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-t^2/2} dt = N(0,1).$$

通常取 $n=12$ ，就认为 $n$ 趋于无穷大了。因此，我们可以直接用 $\delta_n$  ( $n \gg 1$ 时)作为标准正态分布的抽样值。此时随机变量 $\delta_{12} = R_{12} - 6$ ，这种抽样的方法称为极限近似法。但是要注意：如果取 $n = 12$ ， $-6 \leq \delta_{12} \leq 6$ 。所以采用这种方法抽样时， $|x| > 6$ 的情况已经完全忽略。若要考虑 $|x| < 6$ 处的情况，必须取 $n > 12$ 或改用其他的抽样办法。

## 4.3.6 多维向量抽样方法

### (1) 舍选法

设随机向量变量 $\boldsymbol{\eta}$ 的各分量为 $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n$ , 它的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  $\{a_1 \leq x_1 \leq b_1, a_2 \leq x_2 \leq b_2, \dots, a_n \leq x_n \leq b_n\}$

内。令在该范围内,

$$L = \max f(x_1, x_2, \dots, x_n) < +\infty.$$

舍选抽样步骤:

(a) 产生 $n+1$ 个 $(0,1)$  上的均匀分布随机数 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{n+1}$ , 然后判断如下不等式 $\xi_{n+1} < f[(b_1 - a_1)\xi_1 + a_1, \dots, (b_n - a_n)\xi_n + a_n]/L$ 是否成立。若成立, 则得到 $\boldsymbol{\eta}$  的一个抽样值, 该向量的各个分量值 $\eta_i = (b_i - a_i)\xi_i + a_i, (i = 1, 2, \dots, n)$ .

(b) 若不等式不成立, 返回(a).

## (2)条件密度

条件概率：设 $A, B$ 为一随机试验的两个事件，事件 $A$ 的概率为 $P(A)$ ，则在事件 $A$ 发生的条件下事件 $B$ 发生的概率为：

$$P(B | A) = \frac{P(A, B)}{P(A)}.$$

类似地，我们以二维随机向量为例，介绍一下条件密度函数的概念。设 $\eta = (\eta_1, \eta_2)^T$ 的联合密度函数为 $f(x_1, x_2)$ ，在某个特定的点 $x_1$ 处

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x_1, x_2) dx_2 > 0,$$

则定义：

联系加分布抽样的思想

$$f(x_2 | x_1) = f(x_1, x_2) / \int_{-\infty}^{+\infty} f(x_1, x_2) dx_2,$$

其中 $f(x_2 | x_1)$  称为在 $\eta_1 = x_1$ 条件下， $\eta_2$ 的条件分布密度函数. 有

$$f(x_1, x_2) = f(x_2 | x_1) \int_{-\infty}^{+\infty} f(x_1, x_2) dx_2.$$



用类似的方法可以将三维随机向量的联合分布密度函数写为:

$$f(x_1, x_2, x_3) = f_1(x_1)g f_2(x_2 | x_1)g f_2(x_3 | x_2, x_1),$$

上面公式中,

证明?

$$f_1(x_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x_1, x_2, x_3) dx_2 dx_3$$

$$f_2(x_2 | x_1) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x_1, x_2, x_3) dx_3 / f_1(x_1)$$

$$f_3(x_3 | x_1, x_2) = f(x_1, x_2, x_3) / [f_1(x_1) f_2(x_2 | x_1)]$$

进一步推广到 $n$ 维随机向量:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = f_1(x_1)g f_2(x_2 | x_1)g f_2(x_3 | x_2, x_1) \dots g f_n(x_n | x_1 x_2 \dots x_{n-1}),$$

## 抽样步骤:

- (1)由 $f_1(x_1)$  为分布密度函数产生 $\eta_1$ 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 $\eta_2 = x_2$ .
- (3)在 $\eta_1 = x_1, \eta_2 = x_2$ 的条件下, 由分布密度函数 $f_3(x_3|x_1, x_2)$ 抽取 $\eta_3 = x_3$ .
- ....
- (n)在 $\eta_1 = x_1, \eta_2 = x_2, \dots, \eta_{n-1} = x_{n-1}$ 的条件下, 由分布密度函数 $f_n(x_n|x_1, x_2, \dots, x_{n-1})$ 抽取 $\eta_n = x_n$ .

例：  $f(x, y) = \frac{e^{-xy}}{x} (1 < x < \infty, 0 < y < \infty)$  的抽样。

解： 将  $f(x, y)$  写为：

$$f(x, y) = f_1(x)f_2(y | x),$$

其中：  $f_1(x) = \frac{1}{x^2}, f_2(y | x) = xe^{-xy}$ 。

由直接抽样法得到：

$$x_{f_1} = \frac{1}{\xi_1}, y_{f_2} = -\ln \xi_2 / x_{f_1} = -\xi_1 \ln \xi_2.$$

### (3)N维正态分布抽样

当 $n$ 维随机向量 $\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n)^T$ 服从标准正态分布时:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x_1^2}{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x_2^2}{2}} \dots \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x_n^2}{2}},$$

各分量是相独立的。我们可以用一维标准正态分布的抽样法，对各分量分别抽取 $\eta_{x_i}$ ，构成总体抽样值 $\eta = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n)^T$ 。如果 $n$ 维随机向量 $\eta$ 服从的联合分布密度函数可以表示为如下的正态分布形式:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = (2\pi)^{-n/2} \cdot |M|^{-1/2} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{\mu})^T M^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{\mu})\right],$$

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T, \mathbf{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n)^T.$$

$\mu = E\{\eta\}$ , 即  $\eta$  的期望值,  $M$  称为  $\eta$  的协方差矩阵, 它是正定对称的  $n$  阶方阵, 其矩阵元  $\sigma_{ij}$  为:

$$\sigma_{ij} = E\{(\eta_i - \mu_i)(\eta_j - \mu_j)\} = \sigma_{ji},$$

因为  $M$  是正定对称的, 所以总可以找到一个非奇异的下三角矩阵  $A$ 。将  $M$  分解为  $M = AA^T$ 。可以证明, 一般  $n$  维正态分布的抽样值  $\mu_x$ , 可以通过  $n$  维标准正态分布抽样值  $\mu_y$ , 经过变换

$$\mathbf{\eta}_x = \mathbf{\mu} + A\mathbf{\mu}_y$$

来得到。

## 应用：TOY MC

### 例：二维正态分布抽样

解：设 $\eta = (\eta_1, \eta_2)$ 服从二维正态分布，对其协方差矩阵

$$M = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{bmatrix},$$

进行分解，以得到 $M = AA^T$ 的形式。我们可以得到下三角矩阵 $A$ 为

$$A = \begin{bmatrix} \sqrt{\sigma_{11}} & 0 \\ \frac{\sigma_{12}}{\sqrt{\sigma_{11}}} & \frac{\sqrt{\sigma_{11}\sigma_{22} - \sigma_{12}^2}}{\sigma_{11}} \end{bmatrix}$$

设 $\eta$ 的期望值为 $\mu = (\mu_1, \mu_2)^T$ ，若相应的二维标准正态分布已抽得 $\eta = (\eta_{y1}, \eta_{y2})^T$ ，则得到最后的抽样结果 $\eta_x = (\eta_{x1}, \eta_{x2})^T$  为

$$\eta_{x_1} = \mu_1 + \sqrt{\sigma_{11}} \eta_{y_1}, \quad \eta_{x_2} = \mu_2 + \frac{1}{\sqrt{\sigma_{11}}} [\sigma_{12} \eta_{y_1} + (\sigma_{11}\sigma_{22} - \sigma_{12}^2)^{1/2} \eta_{y_2}].$$

## 4.4: 蒙特卡罗模拟在物理中的应用

- 4.4.1 蒙特卡罗方法概述
- 4.4.2. 蒙特卡罗方法在积分计算中的应用
- 4.4.3 随机游走
- 4.4.4 高能实验物理中的蒙特卡罗方法
- 4.4.5 量子力学中的蒙特卡罗方法
- 4.4.6 统计力学中的蒙特卡罗方法
- 4.4.7 粒子输运过程的蒙特卡罗模拟

## 4.4.1 蒙特卡罗方法概述

**蒙特卡罗方法**是利用随机变量的一个数值序列来得到特定问题的近似解的数值计算方法。蒙特卡罗方法的应用可以大致分为两类:**第一类**是所求问题具有严格确定的数学形式,例如求定积分、解微分方程的某些边值问题、解线性代数方程组等。对这类问题通常要将其转化为求概率或其他统计量的计算问题,然后才能采用蒙特卡罗方法求解。**另一类**是本身就是具有统计性质的问题,如粒子输运过程中的问题、粒子反应过程及探测过程等等。这类问题可以直接采用蒙特卡罗方法进行计算机"实验",以求出某些物理量。



## 4.4.2. 蒙特卡罗方法在积分计算中的应用

(1)一维定积分计算的平均值法(期望值估计法)

$f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上的积分，根据根据积分的平均值定理：

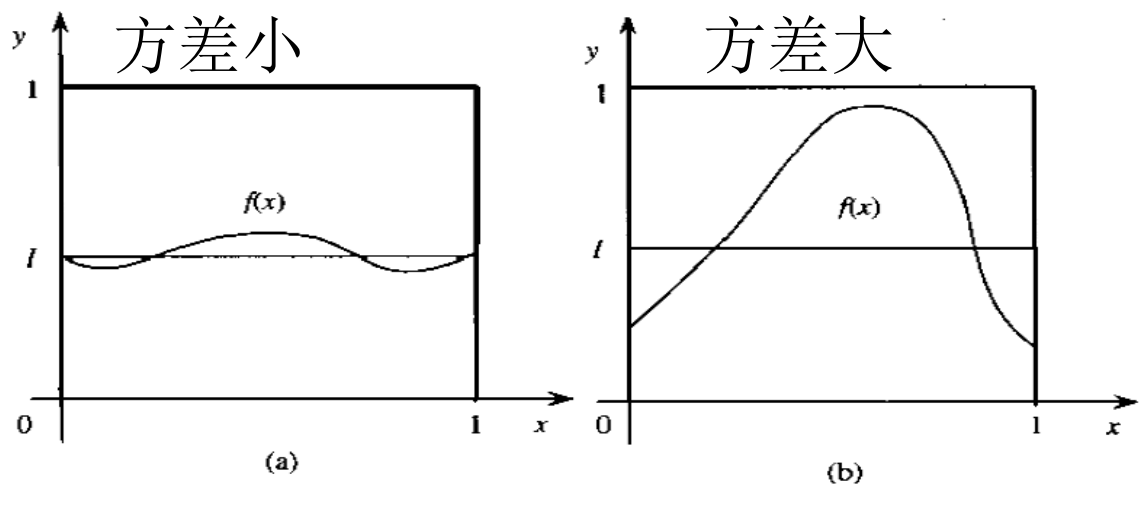
$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)\langle f \rangle,$$

而平均值又可从下式得到：

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i), \text{ 所以有: } \int_a^b f(x)dx = \frac{(b-a)}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i).$$

它的方差为：

$$V = \int_a^b [f(x) - \langle f \rangle]^2 dx,$$



减小方差的重要抽样方法：

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)} g(x)dx \equiv \int_a^b f^*(x)g(x)dx,$$

偏倚函数 $g(x)$ 的选择十分关键，它应当满足如下条件：

- $g(x)$  应当是个分布密度函数。
- $f(x)/g(x)$  不应在积分域内起伏太大，使之尽量等于常数，以保证方差 $V\{f/g\}$ 比 $V\{f\}$ 小。

- 分布密度函数 $g(x)$ 所对应的分布函数 $G(x)$ 能够比较方便地解析求出。
- 能方便地产生在积分域内满足分布函数 $G(x)$ 分布的随机点。

如能按上述条件找到函数 $g(x)$ ，我们就可以依下列步骤求积分值：

- 1)根据分布密度函数 $g(x)$ 产生随机点 $x$ ，例如采用反函数法。
- 2)求出各抽样点 $x$ 的函数值 $f(x)/g(x)$ ，并将所有点上的该函数值叠加起来，再除以抽样点数 $N$ 就得到期望值 $\langle f \rangle$ 。

**Why?**

$$\langle f \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f^*(x_i), \quad \text{比较 } I = \int_a^b f(x) dx = \frac{a-b}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i), \text{ 为什么没有 } b-a \text{ 因子?}$$

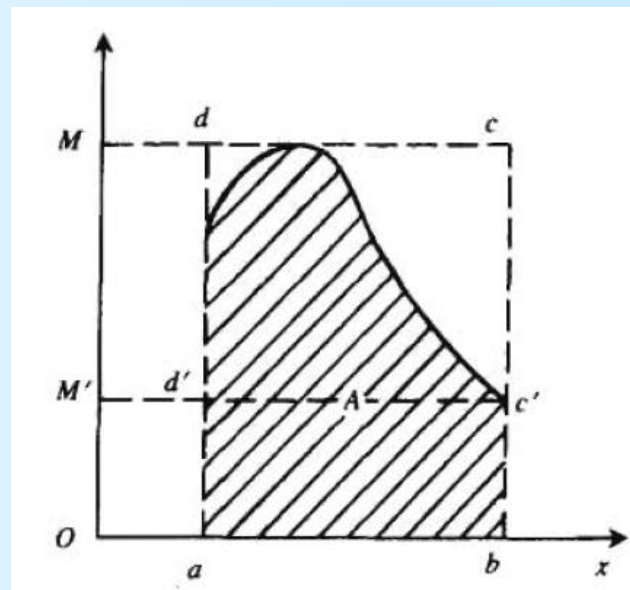
$$\text{方差 } V = \int_a^b [f^*(x) - I]^2 g(x) dx = \int_a^b \frac{f^2(x)}{g(x)} dx - I^2.$$

如果取 $f(x) = g(x)$ ，那么积分值永远为1，为什么？

## (2) 一维定积分的掷点法

在矩形  $a \leq x \leq b$ ,  $0 \leq y \leq M$  中均匀、独立地投点, 假定投点落在面积  $A$  中为成功. 则每次投点成功的概率  $p$  等于面积  $A$  与矩形  $abcd$  面积之比:

$$p = \frac{A}{(b-a)M},$$



在总投点为  $n$  次试验中, 有  $m$  次落在面积  $A$  中, 由大数定律知

$$p = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{m}{n}, \quad \text{所以有:}$$

$$\int_a^b f(x) dx = A = pM(b-a) \approx \frac{m}{n} M(b-a) \equiv I_n.$$

$n$  次投点可看成  $n$  次伯努利试验。成功的概率为  $p$ ，所以成功的次数  $m$  服从参数  $n, p$  的二项分布，其均值和方差分别为

$$E(m) = np, \quad \sigma^2(m) = np(1-p).$$

从而有：

$$E(I_n) = E\left[m \frac{M(b-a)}{n}\right] = \frac{M(b-a)}{n} E(m) = M(b-a)p = A.$$

可见  $I_n$  是积分值的无偏估计量。方差为：

$$\sigma^2(I_n) = \sigma^2\left[m \frac{M(b-a)}{n}\right] = \frac{M^2(b-a)^2 p(1-p)}{n}.$$

积分估计的误差为：

$$\sigma(I_n) = M(b-a) \sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}.$$

思考题：

用第一类舍选抽样原理怎么求面积积分？

### (3) 多重定积分的计算

对于 $s$ 维多重积分, 可以用“归一化”方法, 使得积分变量 $x_i \in [0, 1], (i = 1, 2, \dots, s)$ , 被积函数在积分范围内满足 $0 \leq f(x_1, x_2, \dots, x_s) \leq 1$ 。考虑积分

$$I = \int_0^1 \int_0^1 \dots \int_0^1 f(x_1, x_2, \dots, x_s) dx_1 dx_2, \dots, dx_s,$$

为了减小积分的估算误差, 可抽样重要抽样:

$$f^*(x_1, x_2, \dots, x_s) = \begin{cases} \frac{f(x_1, x_2, \dots, x_s)}{g(x_1, x_2, \dots, x_s)}, & g(x_1, x_2, \dots, x_s) \neq 0 \\ 0, & g(x_1, x_2, \dots, x_s) = 0 \end{cases}$$

使得 $f^*(x_1, x_2, \dots, x_s)$ 在积分区域内的方差较小。

$$I = E\{f^*(x_1, x_2, \dots, x_s)\}$$

$$= \int_0^1 \int_0^1 \dots \int_0^1 f^*(x_1, x_2, \dots, x_s) g(x_1, x_2, \dots, x_s) dx_1 dx_2, \dots, dx_s,$$

按照偏倚密度函数 $g(x_1, x_2, \dots, x_s)$  在 $0 \leq x_i \leq 1 (i=1, 2, \dots, s)$ 空间抽取N个子样，则记录函数 $f^*(x_1, x_2, \dots, x_s)$ 的平均值为：

$$I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f^*(x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,s}).$$

## 蒙特卡罗积分的特点：

- 蒙卡积分方法计算定积分的收敛速度与积分的重数无关。
- 蒙卡积分方法计算定积分问题时受积分区域限制小。
- CERNLIB提供了自适应蒙卡积分程序包(D114, RIWIAD)

# 例. 多重积分在振幅分析中的应用

在振幅分析（分波分析）中，一个 $n$ 体衰变振幅表达为： $\mathcal{M} = M(p_1, p_2, \dots, p_n)$ ，我们需要计算振幅的归一化条件是一个多重积分（ $3n - 4$ 维）：

$$I = \int \int \dots \int |M(p_1, p_2, \dots, p_n)|^2 d\Phi_n$$

$d\Phi_n$ 是 $n$ 体衰变的相空间。多重积分 $I$ 的值可以表达为 $n$ 体衰变相空间的平均值，即：

$$I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |M(p_1, p_2, \dots, p_n)_i|^2$$

$N$ 代表相空间模型（PHSP）产生的 $N$ 个相空间的一个事例。 68



### 4.4.3 随机游走

早在在1906年Pearson就提了“随机游动”问题。以后随着其理论的逐步完善，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，先看几个例子：

**例1.** 一醉汉在一条直道上行走，他从 $x = 0$ 的点出发，步长为 $l$ ，假定醉汉的每一步行走的取向是随机的，与前一步的方向无关，向右行一步的概率为 $p$ ，则向左的概率为 $q = 1 - p$ 。在他向右行走了 $n_R$ 步，向左行走了 $n_L$ 步，问在他一共行走了 $N = n_R + n_L$ 步后，他的位移和方差的平均值是多少？

## 查点法

我们用查点法, 讨论 $N = 3, l = 1$ 的情况。由概率理论得到:  $P_3(x = -3) = q^3, P_3(x = -1) = 3pq^2,$   
 $P_3(x = 1) = 3qp^2, P_3(x = 3) = p^3$

为什么会有因子3?

$$\langle x_3 \rangle = \sum_{x=-3}^3 xP_3(x) = -3q^3 - 3pq^2 + 3p^3q + 3p^3 = 3(p - q),$$

$$\langle x_3^2 \rangle = \sum_{x=-3}^3 x^2 P_3(x) = 9q^3 + 3pq^2 + 3p^3q + 9p^3 = 12pq + [3(p - q)]^2,$$

$$\langle \Delta x_3^2 \rangle = \langle x_3^2 \rangle - \langle x_3 \rangle^2 = 12pq.$$

查点法只有在总步数 $N$ 较小时才可以使用. $N$ 比较大时, 用起来就比较困难了。蒙特卡洛方法就可以克服在游动中的这个困难, 具有更广泛的可操作性。

## 醉汉行走问题的蒙特卡罗方法:

(i)初始化: 位移 $x = 0$ , 步数计数器 $n = 0$ .

(ii)产生随机数 $x_1$ , 如果 $x_1 < p$ , 则位移 $x += l$ , 否则 $x += -l$ , 步数 $n += 1$ 。

(ii)总步数 $n = N$ 吗? 如果不是, 回到(ii); 如果是, 记录位移系列 $x_N^{(1)}$ , 回到(i).

得到足够多的位移系列 $\{x_N^{(1)}, x_N^{(2)}, \dots, x_N^{(J)}\}$ 后, 可以做统计:

$$\langle x_N \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_N^i, \langle x_N^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_N^i)^2,$$

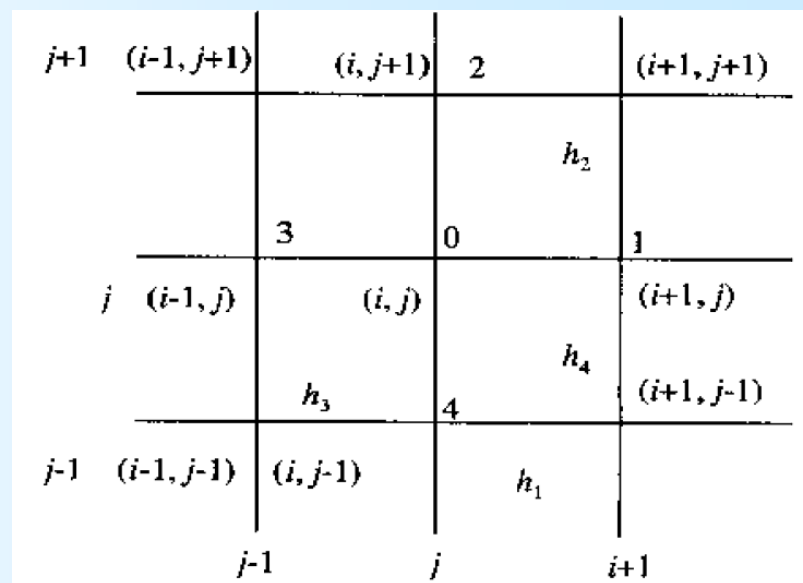
$$\langle \Delta x_3^2 \rangle = \langle x_3^2 \rangle - \langle x_3 \rangle^2.$$

思考题: 根据随机游走的概率模型。应该怎么做模拟?

## 例2.求解泊松微分方程

若泊松方程及其边界条件为

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



$\Gamma$ 为求解区域D的边界.  $s$ 为边界 $\Gamma$ 上的点。采用等步长为 $h$ 的正方形格点划分的差分法，即：

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial^2 x} \right|_{(x_i, y_j)} \approx \frac{f(x_i + h, y_j) - 2f(x_i, y_j) + f(x_i - h, y_j)}{h^2},$$

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial^2 y} \right|_{(x_i, y_j)} \approx \frac{f(x_i, y_j + h) - 2f(x_i, y_j) + f(x_i, y_j - h)}{h^2},$$

差分法

差分方程:

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

$$\phi_0 = \sum_{j=1}^4 W_{0,j} \phi_j - \frac{h^2}{4} q_0, \text{ and } \sum_{j=1}^4 W_{0,j} = 1, W_{0,j} = \frac{1}{4},$$

$q_0$ 是区域D内0点的函数值 $q(x, y)$ .

随机游走方法:

(1)从0点随机游走到最邻近的4个点中之一的 $m$ 点。

方法是产生随机数 $\xi$ , 若满足条件 $\xi \leq 1/4$ , 游动到达点为第1点, 若满足条件 $1/4 < \xi \leq 1/2$ , 游动到点2点, 若 $1/2 < \xi \leq 3/4$ , 游动到点3, 其他的情况下, 游动到第4点。则0点的函数 $f_0$ 的估计值为 $\eta_0 = \phi_m - q_0 h^2 / 4$ ; 而从 $m$ 点又用同样的随机选择方法选择 $m$ 周围四个点中的 $n$ 点时,  $m$ 点函数的估计值为 $\eta_m = \phi_n - q_m h^2 / 4$ ; 此时,  $\eta_0 = \phi_n - h^2(q_0 + q_m) / 4 \dots\dots\dots$ , 游走 $J^{(1)}$ 步时,

到达边界，得到0点上的函数的一个估计值

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

(2)反复从0点开始进行N随机游动，我们得到一个函数 $\phi_0$ 的估计值序列

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

则0点的函数 $\phi_0$ 的期望值为  $\bar{\phi}_0 = E\{\eta_0\}$ ，方差为：

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

这实际上是具有吸收壁的随机游走。对边界条件适应性强！

## 随机游走特征:

- 它在游走中的任一阶段的行为都不被先前游动过程的历史所限制, 即区域内的点可以被多次访问, 这种随机游动过程叫做马尔科夫(Markov)过程。又因为游动最终会终止在边界上, 故而这类游动也称为马尔科夫链。
- 马尔科夫链的相继各状态正是这样生成的: 它使得后一个状态在前一个状态的邻近。由此可以知道相继各状态之间的确存在着关联。系列 $x_0, x_1, \dots, x_k, x_{k+1}$ 发生的概率:

$$P(x_0, x_1, \dots, x_k, x_{k+1}) = P(x_0)P(x_1|x_0) \dots P(x_{k+1}|x_k)$$

- 一种非马尔科夫过程: 自规避随机游动过程。在这个过程中任何一步的游动概率都要考虑前面游动的历史, 因而游动将有可能在碰到边界前就被强行终止掉

# 随机游走的Metropolis方法

## Equation of State Calculations by Fast Computing Machines

Nicholas Metropolis, Arianna W. Rosenbluth, Marshall N. Rosenbluth, Augusta H. Teller, and Edward Teller

Citation: [The Journal of Chemical Physics](#) **21**, 1087 (1953); doi: 10.1063/1.1699114

View online: <https://doi.org/10.1063/1.1699114>

View Table of Contents: <http://aip.scitation.org/toc/jcp/21/6>

Published by the [American Institute of Physics](#)

## 2. Equation of state calculations by fast computing machines

N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller (Los Alamos), E. Teller (Chicago U.). Jun 1953. 6 pp.

Published in **J.Chem.Phys.** **21** (1953) 1087-1092

DOI: [10.1063/1.1699114](https://doi.org/10.1063/1.1699114)

[References](#) | [BibTeX](#) | [LaTeX\(US\)](#) | [LaTeX\(EU\)](#) | [Harvmac](#) | [EndNote](#)

[ADS Abstract Service](#)

详细记录 - [Cited by 1681 records](#) 1000+

20世纪最伟大的10大算法



### 例3.随机游走的Metropolis方法

- **Metropolis**方法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。
- **Metropolis**方法是通过某种方式的“随机游动”来实现的。
- 细致平衡条件：游走要经过一系列的点 $x_0, x_1, \dots, x_k, x_{k+1}$ ，由 $x$ 点游走到 $x'$ 点的**过度概率** $\omega(x \rightarrow x')$ ，如果满足
$$f(x) \omega(x \rightarrow x') = f(x') \omega(x' \rightarrow x),$$
游走就可以得到平衡时的分布 $f(x)$ 。
- 细致平衡只是随机游走达到平衡的充分条件，而非必要条件，所以，选择过渡概率有很大的自由度。一个简单的选择过渡概率的方法是：

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

## 一维问题的Metropolis随机游走步骤

- (1) 选取一个试探位置，假定该点位置为 $x_{try} = x_n + \eta_n$ ，其中 $\eta_n$ 为在间隔 $[-\delta, \delta]$ 内均匀分布的随机数。
- (2) 计算 $r = f(x_{try})/f(x_n)$ 的数值。
- (3) 如果不等式 $r \geq 1$  满足，那就接受这一步游动，并取 $x_{n+1} = x_{try}$ ，然后返回(1)开始对游动到 $x_{n+2}$ 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 $\xi$ 。
- (5) 如果此时 $\xi \leq r$ ，那么也还接受这步游动，并取这步游动所到达的点为 $x_{n+1} = x_{try}$ ，然后返回(1)开始对游动到 $x_{n+2}$ 点的试探。
- (6) 如果此时 $\xi > r$ ，就拒绝游动到 $x_{try}$ 这一点，仍留在 $x_n$ 点的位置不变。
- (7) 返回到步骤(1)，重新开始对游动到 $x_{n+1}$ 点的具体位置的又一次试探。

## 几点说明

- (1)采用这样的游动过程时，只有在产生了大量的点  $x_0, x_1, \dots, x_k$  后，才能得到收敛到满足分布  $f(x)$  的点集。
- (2)选择  $\delta$  的标准：选择适当  $\delta$  大小的原则是要在游动的试探过程中，有  $1/3$  到  $1/2$  的试探步子将被接受。按照这样的标准选择得到的  $\delta$ ，就可以大大提高游动的效率。
- (3)进行这样的随机游动，从哪一点出发才可以比较快地达到平衡分布呢？

原则上讲，从任何一个初始位置出发均可达到平衡分布，但是为了尽快地达到平衡分布，我们最好是要选择一个合适的初始位置，这个初始位置应当是在游动范围内所要求的几率分布密度  $f(x)$  最大的区域。

## 4.4.4 高能实验物理中的蒙特卡罗方法

### 1). 实验设计中的蒙特卡罗方法的应用

在提出一个完整的高能物理实验建议书，设计一个实验装置的时候，应当采用蒙特卡罗方法对待研究的物理过程、本底、判选条件、探测器性能、装置中各个探测器的设计安排等进行研究。

#### ◆ 实验装置性能的研究

高能粒子反应的终态，在探测器中的输运是个很复杂的过程，探测器是通过终态粒子在其中穿行过程中，留下的时间信息和(或)能量沉积信息来决定终态粒子的物理参数，如能量、动量、运动方向和粒子种类等。这些效应具有随机性，涉及到带电粒子与探测器物质的核力强相互作用，电磁相互作用等过程。

## • 实验方案的可行性研究

高能物理实验的**目的**之一是要检验某种理论或假说的正确性，并排除一切可能的理论和假说。因而在对实验装置进行评估时，判断它能有实现对理论战假说的检验是很必要的。

实验的**精度**依赖于蒙特卡罗方法做评估。比如理论预言了某种粒子的衰变截面或者分支比，一种方案是在该粒子统计量一定的情况下，探测到这种粒子的精度估计，另一种方案是先预设一个精度，需要用蒙特卡罗方法估计需要采集的数据统计量或者积分亮度。

本底的**污染**情况和控制方案需要用蒙特卡罗方法来研究。信号的探测和本底控制是实验过程中的一对矛盾，严格的事例挑选条件可以降低本底，但要损失效率，通过蒙特卡罗方法，可以优化事例挑选条件，提高信噪比。

## 2)实验数据分析中的蒙特卡洛模拟方法的应用

高能物理实验可以看做两个系统，硬件装置和软件系统。硬件系统是获取数据统计量或者积分亮度的系统，软件系统是对硬件系统获取物理事例的模拟和重现。

事例源的模拟，也称为事例产生器，它是根据物理过程的理论截面进行随机抽样产生事例，提供末态粒子的四动量，随后模拟粒子在各个子探测器中的输送和与探测器的相互作用。

在探测器中记录下来的粒子信息，通常是一些带点径迹或者电磁信号的簇射，通过这些信息我们可以重建事例。这些被探测到的事例是与这类事例在事例源点的总数比值，即探测效率，需要用蒙特卡罗模拟的方法来确定。



探测器对带电径迹的动量测量，量能器对电磁能量的测量，有探测精度和误差，粒子种类的鉴别也会有误判。利用这些信息重建出来的事例有可能是假信号。它对信号的污染水平，需要用蒙特卡罗方法产生本底事例，研究本底的污染水平。

由于高能物理实验对蒙特卡罗的依赖性，软件系统对物理过程的模拟，粒子的输运等与硬件系统的差别，造成测量结果的系统性偏差，它是系统误差的一个重要来源。

蒙特卡罗方法在事例产生器，探测器中粒子的输运过程的模拟，留在以后的章节中做专门讲述。

# 例：对MC事例效率的修正

$D^+ \rightarrow K_S^0 \pi^+$  探测器效率的修正(BESIII, Phys.Rev. D89, 052001)。

定义  $r_\epsilon(p_{K_S^0}, p_{\pi^+}, p_{\pi^0}) = \prod_c \frac{\epsilon_{c,\text{data}}(p_c)}{\epsilon_{c,\text{MC}}(p_c)}$ ，通过对蒙特卡罗事例的舍选抽样，实现蒙特卡罗的效率与数据匹配，步骤为

1. 对某一事例迹  $E_v$ ，如果  $r_\epsilon < 1$ ，则产生于随机数  $\xi \in (0,1)$ ，如果满足  $\xi < r_\epsilon$ ，接受这个蒙特卡罗事例，否则，转到下一个事例。
2. 如果  $r_\epsilon > 1$ ，则接受这个蒙特卡罗事例。然后产生另一随机数  $\xi_2 \in (0,1)$ ，如果满足  $\xi_2 < r_\epsilon - 1$ ，要再一次接受这个事例，否则，转到下一个事例

思考题：试证明，按照这种舍选抽样得到的蒙特卡罗事例，它的效率分布与数据是一致的。



## 4.4.5 量子力学中的蒙特卡罗方法

量子蒙特卡罗方法是指用于求解量子系统的薛定谔方程的蒙特卡罗模拟方法。首先要将薛定谔方程的波函数解转化为路径积分形式，它具有统计力学中的波尔茨曼分布形式，因此可以借助**Metropolis**抽样方法计算波函数。

在薛定谔方程中，如果哈密顿算符与时间无关，可以写成：

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x),$$

$E_n$ 是能量本征值。在欧氏空间将 $t-t_0$ 分成 $N+1$ 个等时间间隔为 $\varepsilon$ 的小区间，波函数的路径积分形式为

$$|\psi(x)|^2 = \int dx_0 \int \prod_{j=1}^N d\mathbf{x}_j \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) Z^{-1} [\exp(-\frac{\varepsilon}{\hbar} E(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N))],$$

其中,  $Z$ 为配分函数

$$Z = \int \prod_{j=1}^n d\mathbf{x}_j \left[ \exp \left( -\frac{\epsilon}{\hbar} E(x_0, x_1, \dots, x_N) \right) \right], \text{其中}$$

$$\frac{\epsilon}{\hbar} E(x_0, x_1, \dots, x_N) = \frac{\epsilon}{\hbar} \sum_{k=0}^N \left[ \frac{m}{2} \times \left( \frac{x_k - x_{k+1}}{\epsilon} \right)^2 \right] + V(\vec{x}_k)$$

因此,  $|\psi_0(\mathbf{x})|^2$  可以看成是函数  $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$  在位形  $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$  分布下得平均值。分布函数取为:

$$p(\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \prod_{j=1}^N d\vec{x}_i = \exp \left[ \frac{\epsilon}{\hbar} E(\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \right] Z^{-1} \prod_{j=1}^N d\vec{x}_i$$

利用Metropolis 方法, 按照上式中类似玻尔兹曼分布的分布函数来抽取若干位形  $\{\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ , 便可以计算出公式基态波函数  $|\psi_0(\mathbf{x})|^2$  的估计值, 然后对该估计值求平均便得到  $|\psi_0(\mathbf{x})|^2$  的值。

例：用Metropolis方法计算一维谐振子的基态能级。假定有一个质量为 $m$ 的粒子，一维简单简谐势为

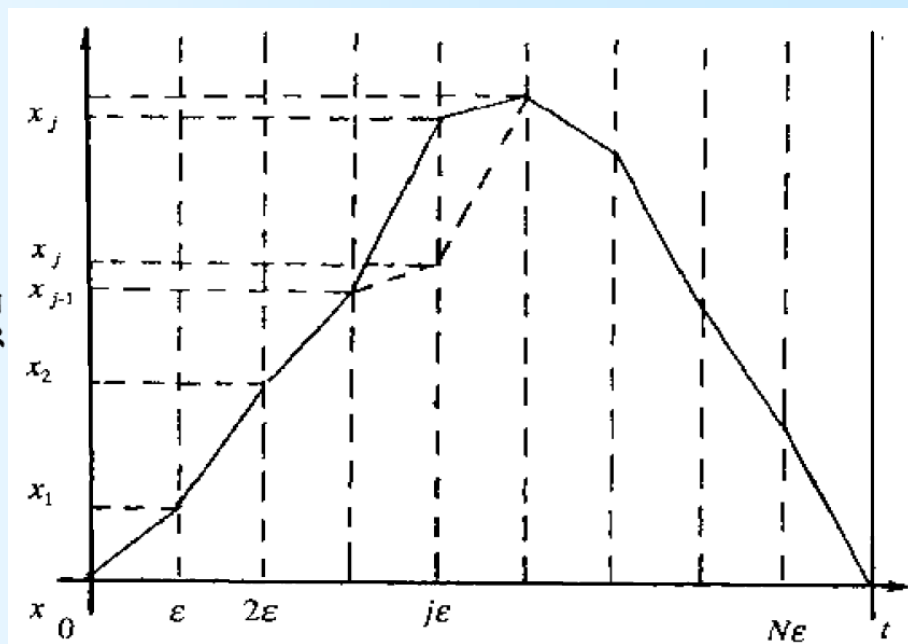
$$V(x) = m\omega^2 x^2 / 2$$

取为 $\sqrt{\hbar/m\omega}$  长度单位， $1/\omega$ 为时间 $t = -i\tau$ 中 $\tau$ 的单位。

$$\varepsilon E(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \frac{\varepsilon}{2} \sum_{k=0}^N \left[ \left( \frac{x_k - x_{k+1}}{\varepsilon} \right)^2 + x_k^2 \right].$$

首先，选择任意的、连接 $N + 1$ 个时间间隔、且 $x_{N+1} = x_0$ 的一条路径，按照上式计算能量值。然后，再选择一系列路径，每条路径与前一条路径最多只有在一个时刻有不同的空间点。采用Metropolis方法来确定满足上面要求的新路径。其中，将随机定下的坐标 $x_j$ 改变到 $x_j'$ 的过渡概率为 $\omega_{jj}' = \min[1, \exp(-\varepsilon \Delta E)]$ ，其中， $\Delta E$ 为两条分别包括在 $t_j$ 时刻坐标为 $x_j$ 和 $x_j'$ 的两条径迹

的能量差。这样的随机游动抽样得到的径迹也许会与前一个径迹相同。每当新径迹选出后，就利用波函数的路径积分形式计算被积函数 $\delta(x - x_0)$ 的估计值，并累加到求和之中。最终该求和所得的值与抽样路径的总数相除得到平均值，就得到 $|\psi_0(x)|^2$ 的数值结果。按上述方法，游动足够多的步数后，我们就可以得到 $x$ 点的 $|\psi_0(x)|^2$ 值。



波函数决定下来后，基态能量可以用哈密顿算符作用于波函数来得到。

$$\frac{E_0}{\hbar\omega} = \frac{1}{2} \int \psi_0^* \left( -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2 \right) \psi_0 dx.$$

## 4.4.6 统计力学中的蒙特卡罗方法

统计物理学研究的经典系统称为热力学系综，它的特征是用微观的方法处理宏观现象。使用蒙特卡罗方法处理热力学系综，正是利用这个特性。热力学系综的内能，比热，自由能和熵等重要的物理量用 $A(x')$ 表示，它的平均值是指系综平均：

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \int_{\Omega} A(x') f(H(x')) dx',$$

其中， $Z$ 是配分函数，

$$Z = \int_{\Omega} f(H(x')) dx'.$$

系统处在 $x'$ 状态的概率分布为：

$$f(x') = Z^{-1} f(H(x')).$$

系综的蒙特卡罗模拟主要是解决随机抽样问题。由于配分函数的积分是高维积分，给不出来，概率分布 $f(x)$ 是不完全已知的概率分布，需要用马尔可夫链蒙特卡罗方法抽样，得到样本值 $X$ ，物理量 $A$ 的估计值为：

$$\langle A \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A(X_i).$$

热力学处理的系综有：微正则系综、正则系综、等温等压系综、巨正则系综等。

作为例子，假定相应的系综是正则系综，系统对应于粒子的位形空间参数矢量 $x'$ 的哈密顿量为 $H(x') = \sum p_i^2 / 2m_i + \Phi(x')$ 。如果粒子间的作用力与速度无关，则可以将动能项去掉。这是由于在这时动能项的贡献时以积分积掉。则在平衡态时其几率分布为Boltzmann分布：

$$p(x, T) dx = \exp\{-\Phi(x)/(k_B T)\} Z^{-1} dx,$$



满足上式分布的 $\mathbf{X}$ 的抽样，可以采用Metropolis方法，步骤为

始于1946年@曼哈顿计划

1. 在相空间中确定一个起始状态 $\mathbf{X}_0$ 。
2. 如果已经游动到第 $n$ 步，现在要游动到第 $n + 1$ 步。产生一个试探状态或位形 $x_{try}$ ，使 $x_{try} = x_n + \eta_n$ ，其中， $\eta_n$ 是在间隔 $(-\delta, \delta)$ 内均匀分布的随机数。
3. 计算过波概率 $\omega(x_n, x_{try}) = \min[1, p(x_{try})/p(x_n)]$ 。
4. 产生一个 $(0,1)$ 区间的均匀分布随机数 $r$ 。
5. 如果 $r < \omega(x_n, x_{try})$ ，那么接受这一步游走，取 $x_{n+1} = x_{try}$ 。
6. 如果 $r > \omega(x_n, x_{try})$ ，则把老状态当作新状态。取 $x_{n+1} = x_n$ ，重新回到第(2)步。

当所有的粒子的位形都访问过，形成一个新的态。我们蒙特卡罗模拟流逝一个“单位时间”。重复以上抽样过程，一段时间后，当系综弛豫到平衡状态，就可以开始对时间求平均了。可以指明，在蒙特卡罗模拟中对时间的平均，等于热力学中的对系综平均。

## 4.4.7 粒子输运过程的蒙特卡罗模拟

当粒子进入到介质时，粒子的运动要经过一系列的碰撞和相互作用，其中的每一次碰撞和相互作用都是随机过程，而且下一次碰撞与前一次碰撞是完全独立的。这一连串的过程过程马尔可夫过程。蒙特卡罗方法对解决这类问题非常有效。我们以反应堆中子辐射屏蔽的问题来介绍[直接模拟法、权重法和统计估计法](#)。

### I. 直接模拟法

考虑一个简化的物理模型，平行入射的中子束从O点，垂直入射到一个厚度为 $a$ 的物质层，中子与物质相互作用后，一部分被吸收，另一部分经过多次散射后会穿透物质透射出去。计算中子的透射率。

我们跟踪一个中子，假定在初始时刻，中子的位形为  $S_0 = (x_0 = 0, E_0, \cos\theta_0 = 1)$ ，第一次碰撞后的位形为  $S_1 = (x_1, E_1, \cos\theta_1)$ ，...，我们假定由位形  $S_{i-1}$  开始，确定下一个  $S_i$  位形



采用如下的步骤来实现：

- 确定坐标参数 $x_i$   
 $S_{i-1} \rightarrow S_i$ , 经过第 $i-1$ 次碰撞后  
 做匀速直线运动。中子的自由程 $y$   
 的分布密度函数：

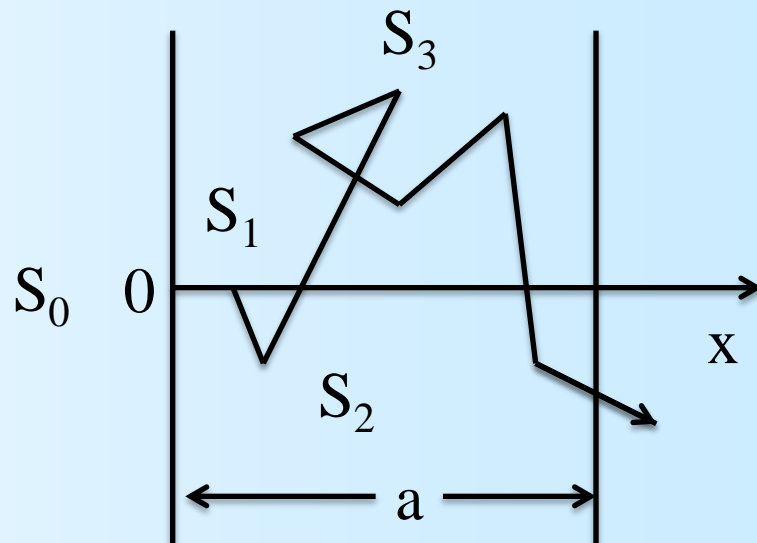
$$f(y) = \sigma_T(E_{i-1}) \exp[-y\sigma_T(E_{i-1})].$$

$\sigma_T$  是总的中子与材料作用的总截面, 包括散射截面和吸收截面。  
 自由程的抽样为：

$$y = -\frac{1}{\sigma_T(E_{i-1})} \ln \xi.$$

则 $x_i$ 由下式给出：

$$x_i = x_{i-1} + y \cos \theta_{i-1} = x_{i-1} - \frac{\ln \xi}{\sigma_T(E_{i-1})} \cos \theta_{i-1}.$$



- 确定碰撞的原子类型

中子与第 $m$ 种原子的碰撞概率为：

$$p_m^{(i-1)} = \sigma_T^m(E_{i-1}) / \sigma_T(E_{i-1}),$$

$\sigma_T^m$ 是中子与第 $m$ 种物质作用的总截面。

- 确定碰撞的性质是吸收还是散射

$$p_{m,s}^{(i-1)} = \sigma_s^m(E_{i-1}) / \sigma_t^m(E_{i-1}),$$

其中， $\sigma_s^m$ ， $\sigma_t^m$ 分别是中子与第 $m$ 中物质的散射截面和总截面。

- 确定中子的散射角 $\theta$ 和能量 $E_i$ 。

在质心系中，抽取散射角，满足：

$$f(\cos \theta_c) = \frac{d\sigma_s^m(E_{i-1})}{d \cos \theta_c}.$$

在理论上，散射中子的能量为：

$$E_i = \frac{1}{2} E_{i-1} [(1+r) + (1-r) \cos \theta_c], \text{ 其中, } r = \left( \frac{A-1}{A+1} \right)^2,$$

$A$ 是原子核质量与中子质量之比。

实验室系的散射角 $\theta_L$ 为：

$$\cos \theta_L = (1 + A \cos \theta_c) / \sqrt{1 + A^2 + 2A \cos \theta_c}.$$

- 中子透射率的估算

设第 $n$ 个中子对透射率的贡献为 $\eta_n$

$$\eta_n = \begin{cases} 1, & x_M > a \\ 0, & x_M \leq a \text{或被吸收。} \end{cases}$$

在跟踪 $N$ 个中子的模拟中，透射的中子数为 $N_1 = \sum_{i=1}^N \eta_i$ ,

透射率的估计值为：

$$\bar{P} = \frac{N_1}{N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \eta_i.$$

在 $1-\alpha$ 置信水平下， $\bar{P}$ 的误差估计为：

$$|\bar{P} - P| < t_{\alpha} \sigma_{\eta} / N.$$

$\sigma_{\eta}$ 是 $\eta$ 的方差，它满足二项式分布，即

$$\sigma_{\eta}^2 = P(1-P) \approx \bar{P}(1-\bar{P}).$$

## II:权重法

模拟法重复了物理机制，模拟思想朴素、简单。但当物质比较厚时，透过率低，导致误差很大。采用权重法时，可以把每一次的散射权重概率 $\omega$ 加到位形参数中,此时，中子的状态描写为：

$$s = (x, E, \cos \theta, \omega)$$

由 $S_{i-1}$ 到 $S_i$ ， $x_i, E_i, \theta_i$ 的抽样与直接法相同。 $\omega_i$ 由下式确定：

$$\omega_i = \omega_{i-1} \frac{\sigma_{T,s}^m(E_{i-1})}{\sigma_T^m(E_{i-1})},$$

$m$ 是第 $m$ 种原子核。第 $n$ 个中子对透射率的贡献为

$$\delta = \begin{cases} \omega_{i-1}, & x > a \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

在跟踪了N个中子后，透射率 $\bar{P}'$ 的估计值为

$$\bar{P}' = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta_n,$$

方差为：

$$\sigma_{\delta}^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta_n^2 - (\bar{P}')^2.$$

### III. 统计估计法

在权重法中，中子直接贯穿物质层的概率为

$$\bar{P}_n^i = \begin{cases} \omega_i \exp\left(-\sigma_T(E_i) \frac{a - x_i}{\cos \theta_i}\right), \cos \theta_i > 0 \\ 0, \text{其他} \end{cases}$$

跟踪第n个中子，在M次碰撞后，这个中子对透射率的贡献为

$$\bar{P}_n = \sum_{i=0}^{M-1} \bar{P}_n^i,$$

跟踪N个中子后，透过率为：

$$\bar{P}'' \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \bar{P}_n = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{i=0}^{M-1} \bar{P}_n^i,$$

方差为：

$$\sigma_{\omega}^2 \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\bar{P}_n^2) - (\bar{P}'')^2.$$

为了降低方差和节约计算时间，还发展起来的算法有碰撞点积分，半解析方法等。

# 作业

1. 若 $\xi$ 是 $(0,1)$ 之间的均匀分布随机数, 证明:  $1 - \xi$ 也是 $(0,1)$ 之间的均匀分布的随机数。
2. 证明: 若 $\xi, \xi_i$ 是 $(0,1)$ 之间的均匀分布随机数
  - (a)  $\max(\xi_1, \xi_2)$ 与 $\xi^{1/2}$ 同分布,  $\min(\xi_1, \xi_2)$ 与 $1 - \xi^{1/2}$ 同分布。
  - (b)  $\max(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ 与 $\xi^{1/n}$ 同分布。
3. 任意随机变量 $Z$ 的分布函数 $F(Z)$ 都是 $(0,1)$ 上均匀分布的随机变量。
4.  $\psi(2S)$ 的三个强子跃迁过程的分支比分别为:
$$Br(\psi(2S) \rightarrow \pi^+ \pi^- J/\psi) = 34.45\%$$
$$Br(\psi(2S) \rightarrow \pi^0 \pi^0 J/\psi) = 18.13\%$$
$$Br(\psi(2S) \rightarrow \eta J/\psi) = 3.36\%$$



试写出 $\psi(2S) \rightarrow \pi^+\pi^-J/\psi, \pi^0\pi^0J/\psi, \eta J/\psi$ 衰变的抽样程序框图。

5. 编写一个程序,用(0,1)之间的均匀分布随机数 $\xi$ ,按照 $\eta = -\lambda^{-1} \ln \xi$ 产生随机数列 $\{\eta_i\}$ ,并绘图表明其分布满足密度分布函数

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

6.  $\tau$ 轻子的平均寿命为 $3.4 \times 10^{-13}$ ,试写出 $N$ 个 $\tau$ 轻子在实验室系中运动的飞行距离的抽样程序框图和程序(不考虑相对论效应)。

7. 试写出方位角 $\phi$ 和极角 $\theta$ 的抽样程序( $d\Omega = d(\cos \theta)d\phi$ )。

8. 分布密度函数为 $f(x, y) = ne^{-xy}x^{-n}$ (其中,  $x \geq 1, y \geq 0, n$ 为整数), 试抽样程序框图和程序。

## 9. 证明Breit-Wigner分布

$$f(x) = \frac{\Gamma}{\pi} \frac{1}{(x - x_0)^2 + \Gamma^2}$$

可以通过抽样 $x_i = x_0 - \Gamma \cot(\pi \xi_i)$ 抽样得到,其中,  $\xi_i$ 是在(0,1)区间的随机数。

## 10. 归一化的黑体辐射频谱为

$$f(x)dx = \frac{15}{\pi^4} \frac{x^3}{e^x - 1} dx, \text{其中, } x = \frac{h\nu}{kT}$$

证明如下抽样步骤得到的抽样分布满足上面的分布, 求出它的抽样效率。

抽样步骤: 让 $L$ 等于满足下面不等式的整数 $l$ 的最小值

$$\sum_{j=1}^l \frac{1}{j^4} \geq \frac{\xi_1 \pi^4}{90}$$

然后置  $x = -1/L * \ln(\xi_2 \xi_3 \xi_4 \xi_5)$ , 其中,  $\xi_i$  为 (0,1) 区间的随机数。

11. 对正则高斯分布抽样

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2} \right]$$

12. Gamma函数的一般形式为

$$f(x)dx = \frac{a^n}{(n-1)!} x^{n-1} e^{-ax} dx, x \geq 0$$

证明抽样方法为

$$\eta = -\frac{1}{a} \ln(\xi_1 \xi_2 \dots \xi_{n-1} \xi_n).$$

13.  $\chi^2$ 分布的一般形式为

$$f(x)dx = \frac{1}{2^{n/2} \Gamma(n/2)} x^{n/2-1} e^{-x/2} dx, x > 0,$$

证明其抽样方法为：

$$\eta = \sum_{i=1}^n x_i^2$$

其中， $x_1, x_2, \dots, x_n$  为标准正态分布的  $n$  个抽样值。

14. 用分布密度函数 $f(x) = \exp(-x)$ 做重要抽样积分，并分析误差与投点的关系。

$$I = \int_0^{\infty} x^{5/2} \exp(-x) dx.$$

15. 编写Metropolis 算法的一维积分程序：

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-x^2 / 2) x^2 dx.$$

16. 采用路径积分量子力学蒙特卡洛方法，求液态He<sup>4</sup>的基态能量。

17.如果 $\cos \theta$ 的分布密度函数满足,

$f(\cos \theta) \propto 1 + \alpha \cos^2 \theta$ , 其中 $\alpha = -0.358 \pm 0.042$   
有一个函数

$$C(\cos \theta) = - \frac{\sin^2 \theta}{1 + \alpha \cos^2 \theta}$$

试求

(1)  $C$ 的分布密度函数 $g(c)$ ?

(2) 如果在 $-1 \leq \cos \theta \leq 1$ 中观测到1000个事例,  $\cos \theta$ 直方图分布为20个bin, 用蒙特卡洛方法给出 $f(\cos \theta)$ 和  $C(\cos \theta)$ 的分布。

(3).在  $C(\cos \theta)$  分布中, 给每个bin的期望值和统计误差的表达式, 并用toy MC的方法证明它的合理性 (需要同时考虑 $\alpha$ 的不确定性)。

# 离散随机变量分布

离散型随机变量分布函数的表示

$$\begin{pmatrix} x_1, x_2 & \dots & x_n \\ p_1, p_2 & \dots & p_n \end{pmatrix}$$

性质：

- 非负性：  $p_i > 0$
- 归一化：  $\sum p_i = 1$
- $x_i$  的期望值：  $\bar{x} = \sum x_i p_i$

[返回](#)

# 伯努利试验

设随机试验的结果只有两种：A表示成功， $\bar{A}$ 表示失败。成功和失败的概率分别为  $P(A) = p$ ,  $P(\bar{A}) = 1 - p \equiv q$ , 这样一次随机试验称为伯努利试验(Bernoulli experiment)。

- 用X表示伯努利试验结果，X的概率分布函数为  $P(X = r) = p^r (1 - p)^{1-r}$ ,  $0 < p < 1$ ,  $r = 0$ (失败),  $1$ (成功)
- 均值为 $p$
- 方差为 $p(1 - p)$ .
- N次伯努利试验, 结果成功 $r$ 次的分布函数，也称为二项式分布

$$B(N, r, p) = \binom{N}{r} p^r (1 - p)^{N-r}$$

[返回](#)



# 二项式分布

做一次实验，有两种结果，成功和失败，成功的概率为 $p$ ，共做 $N$ 次实验中，有 $k$ 次成功的概率

$$P(x = k) = \binom{N}{k} p^k (1 - p)^{N-k}.$$

(说明：如果只做一次实验，二项式分布退化为Bernoulli分布)

性质：

[返回](#)

1. 期望值：  $np$
2. 方差：  $np(1 - p)$
3. 当 $N$ 充分大时，二项分布可用正态分布来近似
4. 在二项分布中，当 $N$ 较大， $p$ 较小时，可以用泊松分布近似代替二项分布，从而降低计算量.

# 泊松分布

泊松分布的密度函数为

$$f(x, \lambda) = \frac{\lambda^x}{x!} e^{-\lambda}, x = 0, 1, 2, \dots$$

性质：

- 期望值为 $\lambda$
- 方差为 $\lambda$

泊松分布可用于描述时间或空间尺度上的数据事件出现的随机过程，具有以下性质：

- 在一定时间或空间内出现的事件与此时间间隔外出现的事件数无关，即不相重叠的间隔内的事件相互独立的
- 在非常小的间隔内，出现一个事例的概率正比于间隔宽度 $\Delta t$ ，即  $P(\Delta t) = \lambda \Delta t$ ,  $\lambda$ 是一个常数.

## 泊松分布(续) [返回](#)

- 在间隔 $\Delta t$ 内，出现多于一个事件的概率小到可以忽略不计。

以上这三个条件称为泊松假设。满足泊松假设的随机过程称为泊松过程。在泊松过程中，一定时间或空间间隔中出现的事件数是一个随机变量，称为泊松变量，它服从泊松分布。

- 泊松分布与指数函数的关系

如果 $Y_i$ 满足指数分布 $e^\lambda$ 分布，则

$$X = \max\{n: \sum Y_i \leq 1\} \sim Poi(\lambda)$$

# 累积分布函数

累积分布函数(Cumulative Distribution Function), 又叫**分布函数**(  $F_X(x)$  ), 是**概率密度函数**(  $f_X(x)$  )的积分, 能完整描述一个实随机变量 $X$ 的概率分布。

$$\text{定义: } F_X(x) = P(X \leq x) = \int_{-\infty}^x f_X(t) dt$$

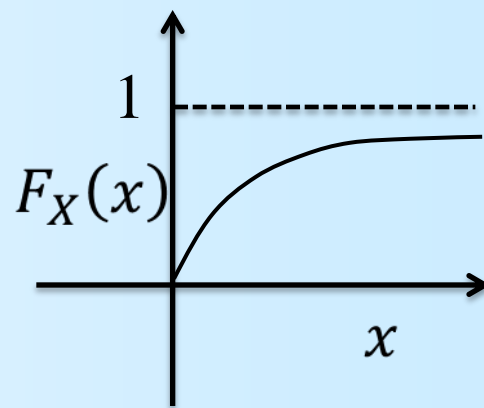
性质:

1. 有界性

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} F_X(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} F_X(x) = 1$$

2. 单调性

如果  $x_1 < x_2$ , 那么  $F_X(x_1) < F_X(x_2)$



# 累积分布函数(续)

## 3. 右连续性

$$\lim_{x \rightarrow x_0^+} F_X(x) = F_X(x_0)$$

之值落在区间 $(a, b]$ 之内的机率为

$$P(a < x \leq b) = F_X(b) - F_X(a)$$

其中

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^x f_X(t) dt$$

[返回](#)

证明：对任意随机变量 $Z$ , 密度函数为 $f(x)$ , 分布函数 $F_Z(x)$ 是 $(0, 1)$ 之间的均匀随机数。

证明：令 $\eta = F_Z(z) = \int_0^z f_Z(t)dt$ , 反函数存在，可反解出 $z = F_Z^{-1}(\eta)$ . 由变量变换法得到 $z$ 的密度函数为

$$f_Z(\eta) = f_Z(z) \left| \frac{dz}{d\eta} \right| = f_Z(z) \left| \frac{1}{\frac{dF_Z(z)}{dz}} \right| = f_Z(z) \frac{1}{f_Z(z)} = 1.$$

利用了反函数求导定律：反函数的导数，等于原函数的导数的倒数。

另外一种证明方法:

$$\begin{aligned}
 F_{\eta}(x) &= P(\eta < x) = P(F_Z(z) < x) = P\left(Z < F_Z^{-1}(x)\right) \\
 &= \int_0^{F_Z^{-1}(x)} f_Z(t) dt \\
 \therefore f_{\eta}(x) &= \frac{dF_{\eta}(x)}{dx} = \frac{d}{dx} \int_0^{F_Z^{-1}(x)} f_Z(t) dt \\
 &= \frac{d}{dx} \int_0^{\infty} f_Z(t) \theta(F_Z^{-1}(x) - t) dt \\
 &= \int_0^{\infty} f_Z(t) \delta(F_Z^{-1}(x) - t) \frac{dF_Z^{-1}(x)}{dx} dt \\
 &= 1
 \end{aligned}$$

Using  $f_Z(F_Z^{-1}(x)) = f(x)$   
 也可以这样直接计算:  $\frac{d}{dx} \int_0^{F_Z^{-1}(x)} f_Z(t) dt = f_Z(t) \frac{dF_Z^{-1}(x)}{dx}$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial \lambda} \int_0^{\phi(\lambda)} f(x, \lambda) dx = \int_0^{\phi(\lambda)} \frac{\partial}{\partial \lambda} f(x, \lambda) dx + f(\phi(\lambda), \lambda) \frac{d\phi(\lambda)}{d\lambda}$$

结论：对任意随机变量 $Z$ , 密度函数为 $f(x)$ , 分布函数 $F_Z(x)$ 是 $(0, 1)$ 之间的均匀随机数。

## 几点说明：

- 这条重要的结论是分离抽样的基础
- 这个结论也为随机数产生提供了一种新的方案。 尽管实际上并不可行。
- 推论：

对任意随机变量 $Z$ , 密度函数为 $f(x)$ , 它对阶跃函数的积分变换结果是 $(0, 1)$ 之间均匀分布的随机数 $r_i$ 。

$$r_i = \int_{-\infty}^x f(t) dt = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \theta(x - t) dt$$

[返回](#)



# 随机变量函数的分布

例如：有随机变量 $X, Y$ ，已知 $X$ 的密度函数为 $f(x)$ ，随机变量满足 $Y = X^2$ ，求随机变量 $Y$ 的密度函数 $g(y)$ ？

更一般的情形，随机变量满足一一对应关系 $y = y(x)$ 。

a. 考虑离散随机变量的情况

	$x_1$	$x_2$	...	$x_n$
$y = y(x)$	$y_1$	$y_2$	...	$y_n$
$P(x)$	$P(x_1)$	$P(x_2)$	...	$P(x_n)$
$P(y)$	$P(x(y_1))$	$P(x(y_2))$	...	$P(x(y_n))$

注意：由于一一对应的关系， $Y$ 取 $y_i = y(x_i)$ 的概率与 $X$ 取值 $x_i$ 的概率相等，即

$$p(y_i) = p(x_i) = p(x(y_i))$$

# 随机变量函数的分布

b. 对于连续随机变量,  $Y$ 在 $a, b$ 之间的概率为  
 $P(a < Y < b)$

$$= \int_a^b g(y) dy \xrightarrow{x \text{与} y \text{的一一对应关系}} \left| \int_{x(y=a)}^{x(y=b)} f(x) dx \right|,$$

利用 $dx \rightarrow \frac{dx(y)}{dy} dy$ 得到

$$\int_a^b g(y) dy = \int_a^b f(x(y)) \left| \frac{dx(y)}{dy} \right| dy$$

得到:

$$g(y) = f(x(y)) \left| \frac{dx(y)}{dy} \right|.$$

如果 $X, Y$ 不是一一对应函数,  $X$ 的值域有 $k$ 个不相重叠的值域

$$g(y) = \sum_{i=1}^k f(x_i(y)) \left| \frac{dx(y)}{dy} \right|.$$

[返回](#)

# $\delta$ 函数的性质

1. 对称性:  $\delta$ 函数是偶函数, 其导数是奇函数

$$\delta(-x) = \delta(x), \quad \frac{d\delta(-x)}{dx} = -\frac{d\delta(x)}{dx}$$

2. 缩放性

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$$

3. 挑选性

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - t_0) dx = f(t_0)$$
$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \frac{d^n}{d^n x} \delta(x - t_0) dx = (-1)^n \left[ \frac{d^n}{d^n x} f(x) \right]_{x=t_0}$$

4. 方程的解

如果方程  $\varphi(x) = 0$  的实根  $x_k$  全是单根, 则

$$\delta(\varphi(x)) = \sum_k \frac{x - x_i}{|\varphi'(x)|}$$

## $\delta$ 函数的性质(续)

例如: 
$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|} [\delta(x - a) + \delta(x + a)]$$

5. 与 $x$ 乘积

$$x \delta(x) = 0$$

[返回](#)

# 舍选抽样方法的证明

设 $f(x)$ 和 $g(x)$ 为密度函数，它们满足：

存在 $C > 0$ , 对所有的 $x$ ,  $Cg(x) \geq f(x)$ , 令 $X \sim g(x)$ ,  $U \sim U(0,1)$ 是两个相互独立的随机变量. 那么,  $f(x)$ 可以取为 $X$ 满足条件 $U \leq \frac{f(X)}{Cg(x)}$ 的条件密度分布函数。

证明考虑 $X, U$  联合分布的密度函数为

$$\begin{aligned} f_{X,U}(x, u) &= \frac{g(x)I_{u \leq \frac{f(x)}{Cg(x)}}}{\int \int_0^1 g(x)I_{u \leq \frac{f(x)}{Cg(x)}} du dx} = \frac{g(x)I_{u \leq \frac{f(x)}{Cg(x)}}}{\int g(x) \int_0^{\frac{f(x)}{Cg(x)}} 1 du dx} \\ &= Cg(x)I_{u \leq \frac{f(x)}{Cg(x)}} \end{aligned}$$

所以 $X$ 密度函数为

$$f_X(x) = \int_0^1 f_{X,U}(x,u) du = C g(x) \frac{f(x)}{C g(x)} = f(x)$$

$g(x)$ 称为建议的密度分布函数。

[返回](#)

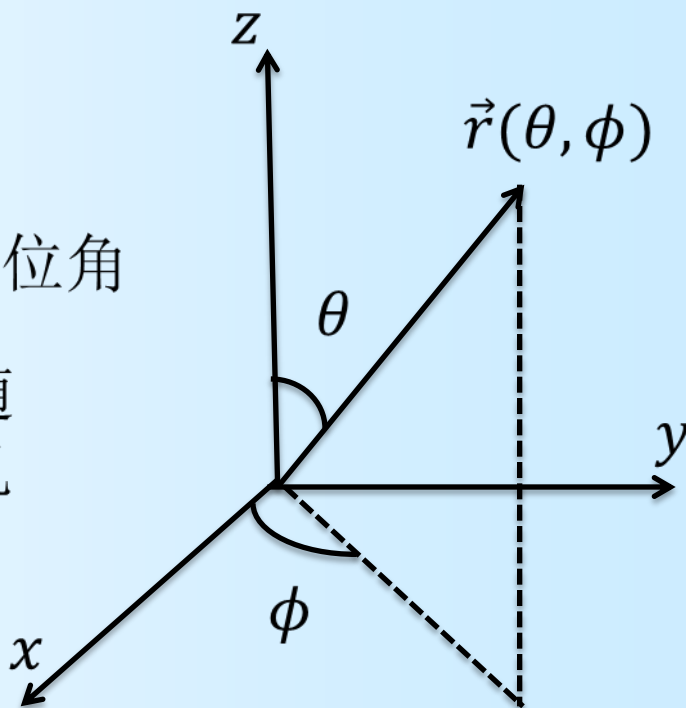
# 球坐标中极角和方位角的抽样

体积微元:

$$dV = r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$$

$\theta \in (0, \pi)$ : 极角,  $\phi \in (0, 2\pi)$ : 方位角

注意:  $\cos \theta \in (-1, 1)$  中均匀分布的随机数, 而  $\theta$  不是  $(0, \pi)$  均匀分布的随机数。但极角  $\phi$  是  $(0, 2\pi)$  中均匀分布的随机数



一个简单的抽样方法:

$$\begin{aligned}\phi &= 2\pi\xi_1, \\ \theta &= \arccos \xi_2\end{aligned}$$

[返回](#)

$\xi_1, \xi_2$  是  $(0, 1)$  之间的均匀分布随机数。这种极角的抽样运算量很大, 不是一个好的抽样方法。

# 方位角的余弦分布密度函数

$\xi \in (0,1)$ 中均匀分布的随机数，证明：随机变量 $\eta = \cos(2\pi\xi)$ 的分布密度函数为

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, & |x| < 1 \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

证明： $\eta$ 的分布密度函数为

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_{-1}^1 g(\xi) \delta(x - \cos(2\pi\xi)) d\xi \\ &= 2 \int_0^1 1 * \frac{\delta\left(\xi - \frac{1}{2\pi} \arccos x\right)}{2\pi \sin 2\pi\xi} d\xi \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sin(\arccos x)} = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \end{aligned}$$

[返回](#)



# 中心极限定理

[返回](#)

独立同分布的中心极限定理:

设随机变量 $X_1, X_2, \dots, X_n, \dots$ 独立同分布, 并且具有有限的数学期望和方差:  $E(X_i) = \mu, D(X_i) = \sigma^2, (k = 1, 2, \dots)$ , 则对任意 $x$ , 分布函数

$$F_n(x) = P \left\{ \frac{\sum_{i=1}^n X_i - n\mu}{\sigma\sqrt{n}} \leq x \right\}$$

满足

$$\lim_{n \rightarrow \infty} F_n(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} P \left\{ \frac{\sum_{i=1}^n X_i - n\mu}{\sigma\sqrt{n}} \leq x \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{t^2}{2}} dt$$

该定理说明, 当 $n$ 很大时, 随机变量 $Y_n = \frac{\sum_{i=1}^n X_i - n\mu}{\sigma\sqrt{n}}$ 近似地服从标准正态分布 $N(0, 1)$ 。因此, 当 $n$ 很大时,  $\sum_{i=1}^n X_i = \sigma\sqrt{n}Y_n + n\mu$ 近似地服从正态分布 $N(n\mu, n\sigma^2)$ 。该定理是中心极限定理最简单又最常用的一种形式, 在实际工作中, 只要 $n$ 足够大, 便可以把独立同分布的随机变量之和当作正态变量。这种方法在数理统计中用得很普遍, 当处理大样本时, 它是重要工具。

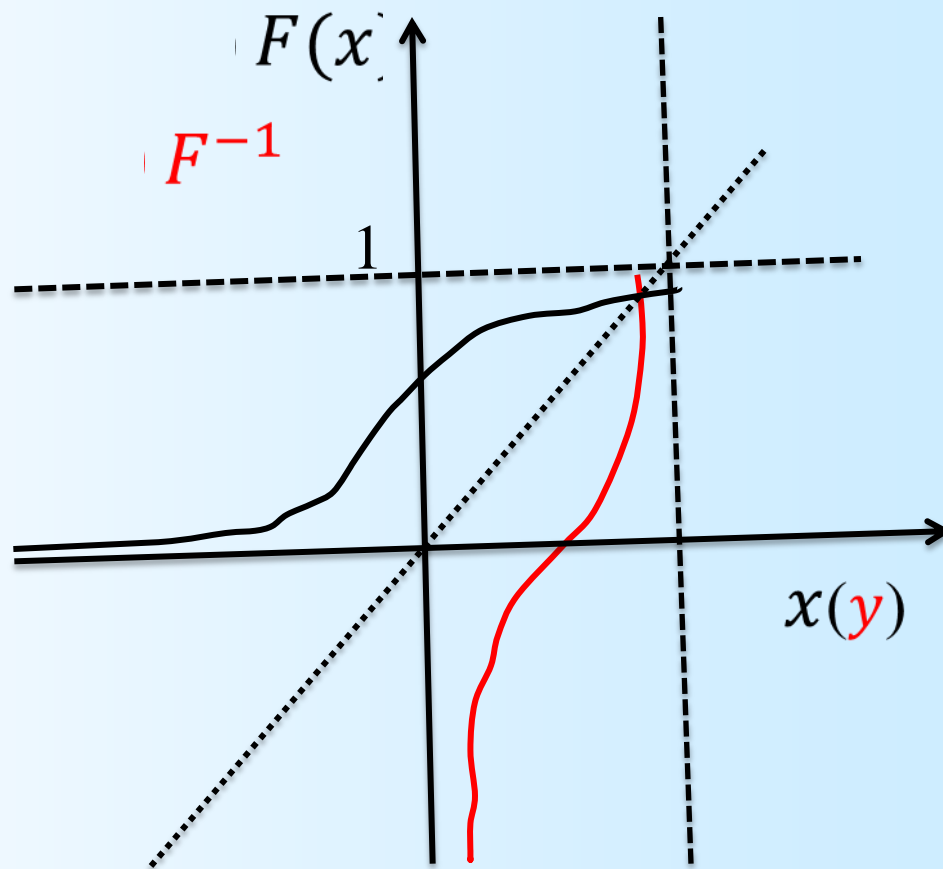
# 分布函数和它的反函数的对称关系

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} F(x) = 0,$$
$$\lim_{x \rightarrow +\infty} F(x) = 1,$$

所以

$$\lim_{y \rightarrow 0} F^{-1}(y) = -\infty,$$

$$\lim_{y \rightarrow 1} F^{-1}(y) = +\infty,$$



[返回](#)

$$E[f^*(x)] = \text{积分值}$$

把 $f^*(x) = f(x)/g(x)$ 代入到期望值的定义得到

$$E[f^*(x)] = \int_0^1 f^*(x)g(x) dx = \int_0^1 f(x)dx$$

[返回](#)

# 偏倚抽样和一维积分公式得比较

一维积分公式:

$$I = \int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

偏倚抽样积分公式

$$I = \int_a^b f(x) dx = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)} g(x) dx$$

$$= \int_a^b f^*(x) g(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f^*(x_i)$$

按照偏倚抽样的思想，把一维积分写为

$$I = \int_a^b f(x) dx = \int_a^b \frac{b-a}{b-a} f(x) = \int_a^b \frac{1}{b-a} [(b-a)f(x)] dx$$

令  $g(x) = \frac{1}{b-a}$ ,  $f^*(x) = (b-a)f(x)$ , 得到

$$I = \int_a^b f^*(x)g(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f^*(x) = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x)$$

抽样函数  $g(x)$  必须是归一化的!

[返回](#)

$$I = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)} g(x) dx \equiv \int_a^b f^*(x) g(x) dx$$

如果取 $f(x) = g(x)$ , 则 $f^*(x) = 1$ , 有

$$I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N 1 = 1.$$

这个道理很简单, 意味着 $g(x)$ 是归一的抽样密度函数, 所以它的积分值应该是1。

返回

# 随机行走的查点法公式

[返回](#)

假设:  $N = n_R + n_L = 3, l = 1$

$n_L$	$n_R$	位置 $x$	概率 $P_N(x)$
3	0	-3	$q^3$
2	1	-1	$3pq^2$
1	2	1	$3p^2q$
0	3	3	$p^3$

注意位置 $\pm 1$ 的实现有三种方式, 比如位置1。

(a)  $L \rightarrow R \rightarrow R$ , (b)  $R \rightarrow L \rightarrow R$ , (c)  $R \rightarrow R \rightarrow L$

走 $N$ 步以后, 右概率论理论公式可以得到:

$$\langle x_N \rangle = \sum_{x=-Nl}^{Nl} x P_N(x) = (p - q)Nl,$$

$$\langle x_N^2 \rangle = \sum_{x=-Nl}^{Nl} x^2 P_N(x) = 4pqNl + \langle x_N \rangle^2$$

$$\langle \Delta x_N^2 \rangle = 4pqNl$$

# 微分方程的差分形式

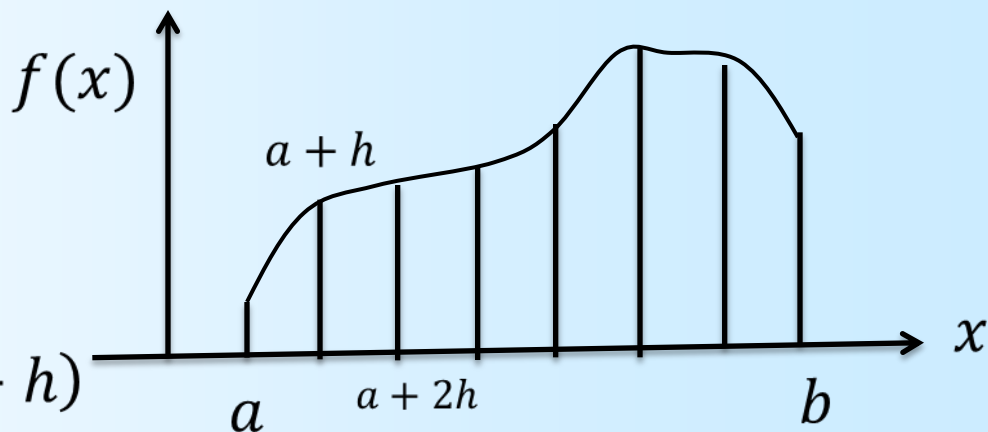
- 一维情况：设 $f(x)$ 在区间 $[a, b]$ 上连续可导，以步长 $h = \Delta x$ 将区间离散化

向前差分： $f(x_i + h) - f(x_i)$

向后差分： $f(x_i) - f(x_i - h)$

中心差分： $f(x_i + h) - f(x_i - h)$

泰勒展开：



$$f(x_i - h) = f(x_i) - hf'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots$$

$$f(x_i + h) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \dots$$



# 微分方程的差分形式(续)

所以，导数用差分形式写为

向前差分形式:  $f'(x_i) \approx \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h}$

向后差分形式:  $f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_i - h)}{h}$

中心差分形式:  $f'(x_i) \approx \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h}$

二阶导数:

$$f''(x_i) \approx \frac{f(x_i + h) - 2f(x_i) + f(x_i - h)}{h^2}$$

[返回](#)

# 20世纪最伟大的10大算法

[返回](#)

1. 1946 年, Metropolis 蒙特卡洛方法
2. 1947 单纯形法: 一种非常实用的寻找最优基本可行解的方法
3. 1950 Krylov子空间迭代法:在提高大型科学和工程计算效率上起着重要作用
4. 1951 矩阵计算的分解方法:该算法的意义使得开发灵活的矩阵计算软件包成为可能
5. 1957 优化的Fortran编译器:它是世界上第一个被正式采用并流传至今的高级编程语言。
6. 1959-61 计算矩阵特征值的QR算法: 找到了一种稳定的特征值的计算方法
7. 1962 快速排序算法: 排序算法中的经典算法
8. 1965 快速傅立叶变换: 是离散傅立叶算法的一种快速算法
9. 1977 整数关系探测算法: 该算法还可简化量子场论中的Feynman图的计算
10. 1987 快速多极算法

# 量子蒙特卡罗求解波函数

由薛定谔方程:

$$\hat{H}\psi(\vec{x}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} \quad (1)$$

引入传播子:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} D_F(\vec{x}t; x_0 t_0) \psi(\vec{x}_0, t_0) d\mathbf{x}_0 \quad (2)$$

(1) 式的解:

$$\psi(\vec{x}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \psi(\vec{x}, t_0) \quad (3)$$

在上式右端插入完备集  $\int |\psi(\vec{x}_0, t_0)\rangle \langle \psi(\vec{x}_0, t_0)| d\vec{x}_0$  得到:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int \langle \psi(\vec{x}_0, t_0) | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | \psi(\vec{x}, t_0) \rangle |\psi(\vec{x}, t_0)\rangle d\vec{x}_0 \quad (4)$$

# 量子蒙特卡罗求解波函数

比较(2),(4)式, 得到传播子的表达式:

$$D_F(\vec{x}, t; \vec{x}_0, t_0) = \langle \vec{x} | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | x_0 \rangle \quad (5)$$

如果考虑基态的情况, 取  $|\vec{x}\rangle = \psi_0(x), t - t_0 = -i\tau, t_0 = 0$

$$D_F(\vec{x}, -i\tau; x_0 t_0) \approx |\psi_0(x)|^2 \times e^{-E_0\tau/\hbar}$$

利用归一化条件  $\int |\psi_0(x)|^2 dx = 1$ , 得到:

# 量子蒙特卡罗求解波函数

$$|\psi_0(x)|^2 = e^{E_0\tau/\hbar} D_F(\vec{x} - it; \vec{x}_0, 0)$$

$$|\psi_0(x)|^2 = \lim_{\tau \rightarrow 0} \left[ D_F(\vec{x}, -i\tau; \vec{x}_0) \times \left( \int_{-\infty}^{+\infty} D_F(\dots) d\mathbf{x} \right)^{-1} \right]$$

在 (5) 中插入完备集

$$\int \int \int \prod_{i=1}^N |\vec{x}_n\rangle \langle \vec{x}_n| d\vec{x}_n = 1$$

得到:

$$D_F(\vec{x}, t; \vec{x}_0, 0) = Z^{-1} \int \prod_{i=1}^N d\vec{x}_j e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^t E d\tau}$$

$$\text{其中配分函数: } z = \int d\vec{x} \int \prod_{j=1}^N d\vec{x}_j e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^t E d\tau}$$

其中：

$$\begin{aligned}\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau E d\tau &= \frac{\epsilon}{\hbar} \sum_{k=0}^N \left[ \frac{m}{2} \times \left( \frac{x_k - x_{k+1}}{\epsilon} \right)^2 \right] + V(\vec{x}_k) \\ &= \frac{\epsilon}{\hbar} E(\vec{x}_1 \vec{x}_2 \dots \vec{x}_n)\end{aligned}$$

最后得到：

$$|\psi(\vec{x}_0)|^2 = \frac{1}{Z} \int d\vec{x}_0 \int \prod_{j=1}^N d\vec{x}_j \delta(\vec{x} - \vec{x}_0) e^{-\frac{\epsilon}{\hbar} E(\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n)}$$

# Feynman的物理学思想

[返回](#)

科学是一种方法，它教导人们一切事物是如何被了解的，不了解的还有什么，现在又了解到什么程度（因为任何事物都没有被绝对了解）。如何对待疑问和不确定性？依据的法则是什麼？如何思考问题并作出判断？如何区别真理与欺骗？养成一种独创精神和探索精神，在对科学的学习过程中，你学会通过实验和误差分析来处理问题，养成一种**独创精神**和**自由探索精神**，这比科学本身的价值更巨大，还要学会问自己有没有更好的办法来做。