

前 言

计算物理学是物理学、数学在过去百余年来取得巨大成就的基础上,伴随着计算机科学近几十年来突飞猛进的发展而逐步发展起来的新兴学科分支。计算物理早已与实验物理和理论物理形成三足鼎立之势,甚至可以说它已成为现代物理大厦的“栋梁”。今天的年轻一代物理工作者,无论是从事基础理论或实验研究,应用基础或工程研究,都必须学习和掌握计算物理的概念和方法。

从20世纪80年代中期开始,笔者就在中国科学技术大学近代物理系为本科生和研究生开设了“计算物理学”必修课程。本书的大部分内容就是取自过去在该系给高年级学生和研究生编写的“计算物理学”教材。该课程虽然主要针对粒子物理和原子核物理、等离子体物理等专业的学生,但对诸如物理化学、材料科学、工程物理等专业的本科学生和研究生也有很大的用处。计算物理学是一门交叉学科,它涉及物理学、数学和计算机科学的知识。因此,本书是针对已经具备物理学基础知识、并具有一定数学水平和一般的计算机编程能力的读者而编写的。

计算物理学所包含的内容是相当广泛的。本书的内容力求较为全面,但由于讲授课程的对象、时间和本人实践经验的限制,本书中仅特别选择了近代物理学中应用比较广泛,但又不是本科学生很容易掌握的一部分方法和技术作为教材内容。书中介绍了计算物理学的两大类计算。一类可以称作是计算机数值计算方法(第二、三、四、五、六、九章),另一类则可以称为计算机符号计算(第七、八章)。在计算机数值计算方法中介绍了偏微分方程的数值求解方法(第四章的有限差分法和第五章的有限元素法)和计算机模拟方法。在计算机模拟的内容中又包含了蒙特卡罗模拟方法及其应用(第二、三章)和确定性模拟方法(第六章的分子动力学方法)。在第九章中介绍的神经网络方法实际上还是一种数值计算方法,它是近年来在粒子物理研究中用得较为成功的方法。第十章介绍了近年来发展起来的并行计算机及并行算法的基本知识,使读者对高性能计算有一个基本的了解。

由于作者本人水平所限,本书在选择内容的合理性,叙述的科学性方面仍然存在不少问题,错漏之处也在所难免。希望读者们批评指正。

作者在编写本书的过程中得到过舒伯尔(F. Schoeberl)教授、韩良教授的帮助,在此表示深切的谢意。

马文淦

2004年夏于中国科大

目 录

第一章 引言	1
1.1 计算物理学的起源和发展	1
1.2 计算物理学在物理学研究中的应用	2
第二章 蒙特卡罗方法	6
2.1 蒙特卡罗方法的基础知识	6
2.2 随机数与伪随机数	11
2.3 任意分布的伪随机变量的抽样	17
2.4 蒙特卡罗计算中减少方差的技巧	40
2.5 实用蒙特卡罗计算复合技术	46
2.6 随机游走	49
习题	54
参考文献	55
第三章 蒙特卡罗方法的若干应用	56
3.1 蒙特卡罗方法在积分计算中的应用	56
3.2 事例产生器	62
3.3 粒子碰撞过程的相空间产生	65
3.4 高能物理实验中蒙特卡罗方法的应用	70
3.5 在量子力学中的蒙特卡罗方法	75
3.6 在统计力学中的蒙特卡罗方法	89
3.7 粒子输运问题的蒙特卡罗模拟	93
习题	98
参考文献	99
第四章 有限差分方法	100
4.1 引言	100
4.2 有限差分法和偏微分方程	102
4.3 有限差分方程组的迭代解法	108

4.4 求解泊松方程的直接法	114
习题	117
参考文献	117
第五章 有限元素方法	119
5.1 有限元素方法的基本思想	119
5.2 二维场的有限元素法	123
5.3 有限元素法与有限差分法的比较	130
习题	132
第六章 分子动力学方法	133
6.1 引言	133
6.2 分子动力学基础知识	134
6.3 分子动力学模拟的基本步骤	139
6.4 平衡态分子动力学模拟	143
习题	149
参考文献	149
第七章 计算机代数	150
7.1 引言	150
7.2 粒子物理中的计算机代数	153
7.3 Mathematica 语言编程	159
习题	163
参考文献	164
第八章 Mathematica 在量子力学中的应用举例	165
8.1 粒子在中心力场中的运动问题	165
8.2 求非相对论性薛定谔方程本征能量限	172
8.3 求解薛定谔方程束缚态问题	193
习题	198
参考文献	198
第九章 神经网络方法及其应用举例	199
9.1 神经网络法	199
9.2 高能物理中的神经网络应用举例	204

参考文献	206
第十章 高性能计算和并行算法	207
10.1 引言	207
10.2 并行计算机和并行算法	208
10.3 并行编程	211
参考文献	212
附录	213
附录 A 贝斯理论	213
附录 B 一些常用分布密度函数的抽样	213
附录 C 求解微分方程的近似方法	217
附录 D 三角形型函数积分式的证明	222
附录 E Mathematica 函数和指令	223
附录 F 程序选编	229

第一章 引言

物理学是研究范围很广的一门科学。每当我们试图从各个层面上理解物理现象的时候,不可回避地会遇到复杂冗长的计算。计算物理学是英文“Computational Physics”的中译文。通常人们也把它等同于计算机物理学(computer physics)。在过去半个多世纪以来,计算物理科学渗透到物理科学和工程学的各个研究方面,成为一门新兴的交叉科学。它是物理学、数学、计算机科学三者相结合的产物。计算物理学也是物理学的一个分支,它与理论物理、实验物理有着密切的联系,但又保持着自己相对的独立性。如果要给计算物理学做一个定义的话,我们可以采用下面这个有代表性的概括:计算物理学是以计算机及计算机技术为工具和手段,运用计算数学的方法,解决复杂物理问题的一门应用科学。计算物理学已经给复杂体系的物理规律、物理性质的研究提供了重要手段,对物理学的发展起着极大的推动作用。

计算物理学作为一门新兴的学科,它是怎样发展起来的?它与理论物理、实验物理有什么区别和联系?计算物理学在物理学中的应用情况如何?这就是本章要介绍的内容。

1.1 计算物理学的起源和发展

19世纪中叶以前,可以说物理学还基本上是一门基于实验的科学。1862年麦克斯韦(Maxwell)将电磁规律总结为麦克斯韦方程,进而在理论上预言了电磁波的存在。这使人们看到了物理理论思维的巨大威力。从此理论物理开始成为了一门相对独立的物理学分支。以后到了20世纪初,物理学理论经历了两次重大的突破,相继诞生了量子力学和相对论。理论物理开始成为一门成熟的学科。传统意义上的物理学便具有了理论物理和实验物理(应用物理包括在内)两大支柱,物理学便成为实验物理和理论物理密切结合的学科。正是物理学这样的“理论与实践相结合”的探索方式,大大促进了该学科的发展,并引发了20世纪科学技术的重大革命。这个革命对人类的社会生活产生了重大影响。其中一个重要的方面就是电子计算机的发明和应用。

物理学研究与计算机和计算机技术紧密结合起始于20世纪40年代。当时正值第二次世界大战时期,美国在研制核武器的工作中,要求准确地计算出与热核爆炸有关的一切数据,迫切需要解决在瞬时间内发生的复杂的物理过程的数值计算

问题。然而,采用传统的解析方法求解或手工数值计算是根本办不到的。这样,计算机在物理学研究中的应用就成为不可避免的事了,计算物理学因此得以产生。第二次世界大战之后,计算机技术的迅速发展又为计算物理学的发展打下了坚实的基础,大大增强了人们从事科学研究的能力,促进了各个学科之间的交叉渗透,使计算物理学得以蓬勃的发展。

理论物理是从一系列的基本物理原理出发,列出数学方程,再用传统的数学分析方法求出解析解。通过这些解析解所得到的结论与实验观测结果进行对比分析,从而解释已知的实验现象并预测未来的发展。实验物理是以实验和观测为基本手段来揭示新的物理现象,奠定理论物理对物理现象作进一步研究的基础,从而为发现新的理论提供依据,或者检验理论物理推论的正确性及应用范围。计算物理则是计算机科学、数学和物理学三者间新兴的交叉学科或边缘学科,是物理计算科学的基础,是研究物理学中与数学求解相关的基本计算问题的学科。它研究的主要内容是如何应用高速计算机作为工具,去解决物理学研究中极其复杂的计算问题。例如,在高能物理实验中,由于实验技术的发展和测量精度的提高,实验规模越来越大,实验数据量惊人的增加,被测实验数据在单位时间内的产额非常高,因而单靠人力和通常的电子仪器已无法完成实验设备的管理和实验数据的处理工作。又如,电子反常磁矩修正的计算,对四阶修正的手工解析计算已经相当繁杂,而对六阶修正的计算已经包含了 72 个费曼图,手工解析运算已不可能完成。类以这样的复杂系统的控制和大量繁杂的计算工作,计算机的应用就成为不可避免的了。计算物理学对解决复杂物理问题的巨大能力,使它成为物理学的第三支柱,并在物理学研究中占有重要的位置。

计算物理学与理论物理和实验物理有着密切的联系。计算物理学的研究内容涉及物理学的各个领域。一方面,计算物理学所依据的理论原理和数学方程是由理论物理提供的,其结论还需要理论物理来分析检验;另一方面,计算物理学所依赖的数据是由实验物理提供的,其结果还要由实验来检验。对实验物理而言,计算物理学可以帮助解决实验数据的分析、控制实验设备、自动化数据获取以及模拟实验过程等问题;对理论物理而言,计算物理学可以为理论物理研究提供计算数据,为理论计算提供进行复杂的数值和解析运算的方法和手段。总之,计算物理学是与理论物理、实验物理互相联系、互相依赖、相辅相成的。它为理论物理研究开辟了一个新的途径,也对实验物理研究的发展起了巨大的推动作用。

1.2 计算物理学在物理学研究中的应用

自 20 世纪 40 年代以来,由于人们受到在原子弹设计中使用计算机而取得了巨大成功的启示,计算物理的方法和技巧也迅速地从核物理向其他学科领域渗透,

从军事研究转向基础科学研究,从而大大丰富了计算物理学的内容。在 20 世纪 60 年代以前,计算机还主要用在物理问题的数值计算和模拟上。而到 20 世纪 60 年代以后计算机又进一步深入到实验室控制和数据获取自动化和理论解析运算自动化方面。1962 年,在低能物理实验中就开始了计算机与实验的联机工作。1964 年,在高能物理实验中开始采用计算机高速可靠地采集和处理数据信息,以满足粒子物理实验对高事例率、大数据量处理和大型仪器设备控制的要求。当今在我们物理学研究中计算机的应用已经是无处不在了。计算机在物理学中的应用可以大致分为 4 类,它们是计算机数值分析、计算机符号处理、计算机模拟和计算机实时控制。

通常在物理研究中,我们从已知的物理规律出发得到描写物理过程的抽象数学公式后,最后或许要做数值分析以便与实验结果对照或作为实验的参考数据。如果对一个简单的数学公式进行数值求解,也许我们还可以用纸和笔手工就计算出数值结果来,但是对更复杂系统的数学处理,我们就不得不在计算机上用计算机特有的数值计算方法来计算了。在这种工作方式下,计算机成了物理学研究的数值分析的工具。

计算机在物理学中应用的另一个重要方面是利用计算机的符号处理系统进行解析计算、公式的推导和高精度的数值计算。这在理论物理研究领域的意义就特别重大。当前在天体物理、原子核和粒子物理研究中已经广泛采用计算机符号处理系统来做复杂的公式推导和高精度计算,还发展出许多用于各个领域研究的计算机符号计算程序包。

借助于计算机与符号和数值计算程序,我们可以方便地解析和数值地计算各种复杂的数学物理问题,诸如多重不定和定积分、大型数字或者符号矩阵的计算、求解复杂的微分方程等等。随着计算机技术的高速发展,今天我们已经能够在个人微机上做复杂的符号和数值计算了。计算机的确在物理学的计算中已经起着十分重要的作用。

我们还要指出,计算机的数值计算功能对物理学研究的用途决不仅仅是可以得到数值结果,更为重要的是,它为物理学家提供了“计算机模拟实验”这个新的研究手段。例如,统计物理中有个自回避随机迁移问题,它是在随机游走中加上了一个限制,即以后的游走步子不能穿过以前各步所走过的路径。这样的问题就不再像一般的随机迁移问题那样可以用通常的微分方程来描写系统的统计行为。对这类物理问题的研究,计算机模拟实验就几乎是唯一的研究方法。即使对于一些有解析方程描述的问题,由于系统的复杂性,往往用计算机模拟比数值计算更为方便。计算机模拟实验基本上不受实验条件、时间和空间的限制,这就使它具有极大的灵活性。也就是说,只要建立起理论模型,我们就能进行计算机模拟实验,即使这样的实验现象在自然界可能是不存在的,或者该实验在时间和空间上都是在实

实验室无法进行的。因此,通过计算机模拟实验会给物理学家带来新的物理概念,发现新的物理现象。当前计算机模拟已经成为继理论和实验研究方法外,物理学研究的第三种手段。

物理实验中的计算机控制也是十分重要的。现在几乎所有的大型实验中,它的大多数实验设备都通过接口与控制计算机相连接,并结合在线数据获取和分析程序就可以对实验装置的整个实验进程做实时控制,使物理实验可以在没有人在场的情况下自己监测设备的正常运行,自动采集和分析实验数据。

一般来说,计算机在物理实验中的数据计算大致可以分为两个部分,即计算机的在线分析和离线分析。在实验装置运行过程中由计算机实现数据获取和数据分析就称为实验的在线分析。以粒子物理实验为例,在线分析的任务包括4个方面:

(1) 控制系统运行。根据物理实验对物理事例的选择要求和在线系统构成部分的管理需要,设计一定的程序逻辑,采用计算机实现对整个在线系统运行的控制。

(2) 采集实验数据。将探测器记录到的事例信息,加速器运行中的束流状态及某些仪器设备的工作状态信息采集送入计算机;计算机又以规定的格式将这些实验数据记入到计算机的外部存储设备(磁带、磁盘或光盘)中。

(3) 监视仪器状态。计算机定时或不定时地监视探测器工作状态的情况,加速器束流的流强变化等。一旦出现不正常情况,计算机将送出状态信息,通知值班人员,或自动做出预先规定好的处理。

(4) 数据在线分析。在实验进行期间,对在线系统获取的数据信息,由计算机按各种方式进行取样分析。数据分析的范围是由在线系统的分析能力决定的。在一个能力较强的系统中,数据分析还包括按一定的物理要求对事例进行判别与选择,实现粒子作用事例的图像重建。这些分析的目的是为了观察仪器设备安排和事例选择方案的实施情况,以便在实验运行期间研究和发现问题,改善实验设计。

粒子物理实验的离线分析是将实验数据送到计算中心做进一步地浓缩、过滤和理论分析工作。粒子物理的离线分析还包括对物理过程的理论模拟、探测器模拟、本底分析、理论和实验事例的分析对照等。粒子物理的离线分析又可以划分为两部分工作。一个是事例模拟;另一个是物理分析。事例模拟也就是“计算机实验”,它包括对所研究过程及可能形成该过程本底的背景过程的模拟。这个模拟过程是从理论模拟产生出终态产物的各个物理参数(包括能量、动量、方向、粒子种类等)开始,再通过探测器模拟,得到格式与实验数据记录相同的模拟数据。探测器模拟包含了终态粒子通过实验装置时,在各个探测器上留下的能量和时间的数字化信息。物理分析工作主要包括事例的径迹重建、各类事例的筛选和物理参数的计算分析。分析的数据对象既包括实验数据,也包括模拟数据。上面介绍的计算机在粒子物理研究中的应用,就是属于通常称为“计算高能物理学”(computational

high energy physics)的学科领域。

计算机在物理学研究中还有其他许多用途。比如,用于语言文字处理、通过计算机网络进行信息或科学数据的交流传递、计算机辅助教学等等。这里我们不再赘述。

计算物理学是计算机在自然科学的应用中发展较早的学科之一。虽然它的研究对象是物理学,但是它的研究方法还是可以推广到其他的自然科学领域,甚至包括社会科学、思维科学、决策和管理科学等社会科学领域。计算物理学研究的一些特点和优点,甚至它的一些研究成果都可以去支持这些领域的研究工作。毫无疑问,计算物理学的发展将对自然科学和社会科学领域的计算机应用研究起着极大的推动作用。

第二章 蒙特卡罗方法

计算机模拟实验在物理学研究中占着越来越重要的地位。从计算机模拟采用的方法来看,它大致可以分为两种类型。一种类型为随机模拟方法或统计试验方法,又称蒙特卡罗(Monte Carlo)方法。它是通过不断产生随机数序列来模拟过程。自然界中有的过程本身就是随机的过程,物理现象中如粒子的衰变过程、粒子在介质中的输运过程等等。当然蒙特卡罗方法也可以借助概率模型来解决不直接具有随机性的确定性问题。另一类为确定性模拟方法,它是通过数值求解一个个的粒子运动方程来模拟整个系统的行为,在统计物理中称为分子动力学(molecular dynamics)方法。关于分子动力学方法我们将在第六章中介绍。此外,近年来还发展了神经网络方法和元胞自动机方法。我们将在第九章介绍神经网络方法及其应用举例。

从蒙特卡罗模拟的应用来看,该类型的应用可以分为三种形式:①直接蒙特卡罗模拟。它采用随机数序列来模拟复杂随机过程的效应。②蒙特卡罗积分。这是利用随机数序列计算积分的方法。积分维数越高,该方法的积分效率就越高。③Metropolis蒙特卡罗模拟,这种模拟是以所谓“马尔可夫”(Markov)链的形式产生系统的分布序列,该方法可以使我们能够研究经典和量子多粒子系统的问题。

蒙特卡罗方法的提出可以追溯到19世纪末期,但是实际上直到20世纪40年代以后,随着电子计算机的发展,该方法才得到迅速的发展和应用。在第二次世界大战中,蒙特卡罗方法首先被美国的科学家应用于原子弹的研制中。目前这一方法已经广泛运用到物理学的许多领域。甚至像系统工程、科学管理、生物遗传、社会科学等这样一些学科领域也采用了这种研究方法。这些都充分表现出这种方法完全区别于别的方法的,具有独特功能的优越性。

2.1 蒙特卡罗方法的基础知识

1. 基本思想

对求解问题本身就具有概率和统计性的情况,例如,中子在介质中的传播、核衰变过程等,我们可以使用直接蒙特卡罗模拟方法。该方法是按照实际问题所遵循的概率统计规律,用电子计算机进行直接的抽样试验,然后计算其统计参数。直接蒙特卡罗模拟法最充分体现出蒙特卡罗方法无可比拟的特殊性和优越性,因而在物理学的各种各样问题中得到广泛的应用。该方法也就是通常所说的“计算机

实验”。蒙特卡罗方法也可以人为地构造出一个合适的概率模型,依照该模型进行大量的统计实验,使它的某些统计参量正好是待求问题的解。这也就是所谓的间接蒙特卡罗方法。下面我们举两个最简单的例子来说明间接蒙特卡罗方法应用的内涵。

尽管现在人们都认为:在当今的研究工作中离开了电子计算机,很难想像蒙特卡罗方法计算还能够进行。但是实际上远在计算机出现以前,蒙特卡罗方法就已经被仔细研究过了。著名的巴夫昂(Buffon)投针实验就是巴夫昂在 1777 年提出的求 π 近似值的方法。该实验方案是:在平滑桌面上画一组相距为 s 的平行线,向此桌面随意地投掷长度 $l=s$ 的细针,那么从针与平行线相交的概率就可以得到 π 的数值。

该实验方案的原理是基于数学统计理论所得到的结论,即在此实验中细针与平行线相交的概率为 $2/\pi$ 。这个数学统计理论的结果可以简单地计算如下:设针与平行线的垂直方向的夹角为 α ,那么针在与平行线垂直的方向上投影的长度为 $l \cdot |\cos\alpha|$ 。对于确定的 α 夹角,细针与平行线相交的概率为投影长度与平行线间距之比,即 $\frac{l \cdot |\cos\alpha|}{s} = |\cos\alpha|$ 。由于 α 是在 $[0, \pi]$ 区间均匀分布的,所以 $|\cos\alpha|$ 的平均值为

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} |\cos\alpha| d\alpha = \frac{2}{\pi} \quad (2.1.1)$$

假如在 N 次投针中,有 M 次和平行线相交。当 N 充分大时,相交的频数 M/N 就近似为细针与平行线相交的概率。因此,结合公式(2.1.1),我们得到

$$\pi \approx \frac{2N}{M} \quad (2.1.2)$$

然而,上述投针法得到实验结果的效率和精度都很差。我们现在来计算一下经过 n 次投针后得到 π 值的精度。设 p 为细针与平行线相交的概率($p=2/\pi$),则针与平行线相交的次数应满足二项式分布,其期望值为 np ,方差应为 $np(1-p)$ 。因而 $2/\pi$ 值的方差为 $p(1-p)/n$,标准误差为 $\sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}$ 。将 $p=2/\pi$ 的标准误差改写

为 π 的标准误差 $2.37/\sqrt{n}$ (这里我们必须先知道 π 值来计算,但也可以通过实验数据来估计 π 值)。这意味着实验所得的 π 值的不确定性的范围如下:

对 100 次投针为,0.2374;

对 10,000 次投针为,0.0237;

对 1,000,000 次投针为,0.0024。

显然用这种方法比用其他方法计算 π 值所引起的不确定范围要大得多。实际上,我们不当采用这种方法来计算 π 值。这里我们只是将它作为蒙特卡罗方法在表

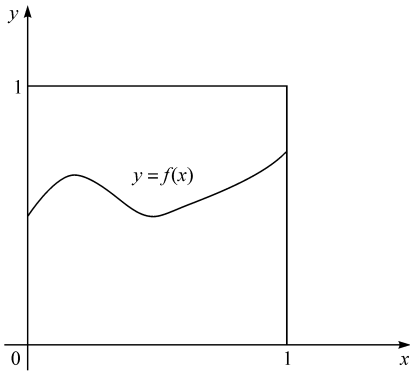


图 2.1.1 定积分计算示意图

面上与随机过程无关的领域中应用的一个典型实例。

作为第二个例子,我们考虑一个简单的定积分计算

$$I = \int_0^1 f(x) dx \quad (2.1.3)$$

假定被积函数 $y=f(x)$ 在积分范围的值是在区间 $0 \leq y \leq 1$, 如图 2.1.1 所示。这时我们可以随机地向正方形内投点, 最后统计落在曲线下的点数 M , 当总的掷点数 N 充分大时, M/N 就近似等于积分值 I 。

根据这两个例子, 我们可以将蒙特卡罗方法的基本思想总结如下: 当问题可以抽象为某个确定的数学问题时, 应当首先建立一个恰当的概率模型, 即确定某个随机事件 A 或随机变量 X (如上面例子中的投针实验中, 细针与平行线相交的事件, 求定积分中的随机变量 f), 使得待求的解等于随机事件出现的概率或随机变量的数学期望值。然后进行模拟实验, 即重复多次地模拟随机事件 A 或随机变量 X 。最后对随机实验结果进行统计平均, 求出 A 出现的频数或 X 的平均值作为问题的近似解。这种方法也叫做间接蒙特卡罗模拟。

2. 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), 并且人们可能无法事先预言它取的某一特定值。虽然这种变量的值无法预言, 但其分布是可能了解的。假定我们研究连续的随机变量, 由随机变量的分布可以得到它取某给定值的概率, 即

$$g(u) du = P[u < u' < u + du] \quad (2.1.4)$$

$g(u)$ 称为 u 的概率分布密度函数, 它表示随机变量 u' 取 u 到 $u + du$ 之间值的概率。物理学家们常常用概率密度函数来表达 u' 的分布。但是, 数学上有时采用分布函数更为方便。分布函数定义为

$$G(u) = \int_{-\infty}^u g(x) dx \quad (2.1.5)$$

则

$$g(u) = dG(u)/du \quad (2.1.6)$$

注意, $G(u)$ 是一个在 $[0, 1]$ 区间取值的单调递增函数。通常 $g(u)$ 是归一化的分布密度函数, 因而该函数对所有的 u 值范围的积分值应当为 1。

3. 随机变量的独立性

假如我们考虑两个随机变量 u' 和 v' 的分布, 则必须引进这两个变量的联合分布密度函数 $h(u, v)$, 此时带来的数学问题就更为复杂。但是在 $h(u, v) = p(u) \cdot q(v)$ 这种特殊情况下, u' 和 v' 是彼此独立的随机变量。对于两个以上的变量来说, 随机变量独立性的概念就更复杂了。此时仅考虑两个变量之间的独立性是不够的。事实上, 对所有变量有可能两两间是相互独立的, 而在三个变量, 甚至更多变量的组合之间却是相关的。我们举如下例子来说明: 如果 r 和 s 是两个均匀分布在 $[0, 1]$ 区间的相互独立的随机变量, 由此我们可以构造三个新的变量

$$\begin{aligned} x &= r \\ y &= s \\ z &= (r + s) \bmod 1 \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

此时 x, y, z 也都是均匀分布在区间 $[0, 1]$ 的随机变量, 并且所有的 (x, y) , (y, z) 和 (x, z) 组合都是独立的(括号内任一个变量值的选取并不对括号中另一个变量的取值有影响), 但是在 (x, y, z) 中, 任意两个变量的值可以确定出第三个变量的值, 此时它们之间存在明显的相关性。

4. 期望值、方差和协方差

一个函数 $f(u')$ 的数学期望值是定义为该函数的平均值

$$E\{f\} = \int f(u) dG(u) = \int f(u) g(u) du \quad (2.1.8)$$

上式中, $G(u)$ 是独立变量 u' 的分布函数。通常 u' 是在 $[a, b]$ 区间均匀分布的随机变量, 即 $dG = du / (b - a)$ 。这时的期望值可以写为

$$E\{f\} = \frac{1}{b - a} \int_a^b f(u) du \quad (2.1.9)$$

类似地, 可以定义变量 u' 的期望值为 u 的平均值

$$E\{u'\} = \int u dG(u) = \int u g(u) du \quad (2.1.10)$$

一个函数或变量的方差是可以由下式来定义的

$$V\{f\} = E\{(f - E\{f\})^2\} = \int [f - E\{f\}]^2 dG \quad (2.1.11)$$

注意, 在上式计算 f 的期望值时, 需要作一次积分, 而求方差时还需作一次积分。

方差的平方根叫作标准误差。由于标准误差与其真值有相同的量纲, 因而它比方差更具有物理意义。但是, 求标准误差时的平方根运算在数学处理时很不方便。标准误差也很容易解释为平均值的均方根误差。如果将求期望值和求方差的运算作为算符, 我们可以证明出这些算符作用在随机变量的线性组合式上的一些

简单规则。假如 x 和 y 是随机变量, c 是一个常数, 则

$$E\{cx + y\} = cE\{x\} + E\{y\} \quad (2.1.12)$$

$$V\{cx + y\} = c^2V\{x\} + V\{y\} + 2cE\{(y - E\{y\})(x - E\{x\})\} \quad (2.1.13)$$

因而期望值算符是一个线性算符, 而方差算符是非线性算符。公式(2.1.13)右边最后一项称为 x 和 y 间的协方差。如果 x 和 y 是独立随机变量, 则 x 和 y 间的协方差为零。通常协方差为正值时, 我们称 x 和 y 是正关联; 反之, 我们称 x 和 y 间是负关联。不过, 我们也要注意: ①即使 x 与 y 的协方差为零, 我们也不能肯定 x 和 y 是否是独立变量; ②尽管方差算符是非线性的, 但如果 x 和 y 是独立变量, 则

$$V\{x + y\} = V\{x\} + V\{y\} \quad (2.1.14)$$

5. 大数法则和中心极限定理

概率论中的大数法则和中心极限定理是蒙特卡罗方法的基础。大数法则反映了大量随机数之和的性质。如果在 $[a, b]$ 区间, 以均匀的概率分布密度随机地取 n 个数 u_i , 对每个 u_i 计算出函数值 $h(u_i)$, 大数法则告诉我们这些函数值之和除以 n 所得的值将收敛于函数 h 在 $[a, b]$ 区间的期望值, 即

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(u_i) \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} I_n = \frac{1}{b-a} \int_a^b h(u) du \equiv I \quad (2.1.15)$$

公式(2.1.15)的左边正是公式右边积分的蒙特卡罗估计值。大数法则保证了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。若要对收敛的程度进行研究, 并做出各种误差估计, 则要用到中心极限定理。

中心极限定理可以近似地告诉我们: 在有足够大, 但又有限的抽样数 n 的情况下, 蒙特卡罗估计值是如何分布的。该定理指出, 无论随机变量的分布如何, 它的若干个独立随机变量抽样值之和总是满足正则分布(即高斯分布)。例如, 我们有一个随机变量 η , 它满足分布密度函数 $f(x)$ 。如果我们将 n 个满足分布密度函数 $f(x)$ 的独立随机数相加: $R_n = \eta_1 + \eta_2 + \dots + \eta_n$, 则 R_n 满足高斯分布。高斯分布可以由给定的期望值 μ 和方差 σ^2 完全确定下来, 通常用 $N(\mu, \sigma^2)$ 来表示

$$N(\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp[-(x - \mu)^2 / 2\sigma^2] \quad (2.1.16)$$

中心极限定理可以给出蒙特卡罗估计值的偏差。如果公式(2.1.15)右边积分的期望值为 I , 公式左边用 n 次抽样的蒙特卡罗估计值为 I_n , 标准误差为 σ , 则当 n 充分大时, 对任意的 $\lambda (\lambda > 0)$, 有

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{Prob} \left\{ -\lambda \frac{\sigma(f)}{\sqrt{n}} \leq I_n - I < \lambda \frac{\sigma(f)}{\sqrt{n}} \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\lambda}^{\lambda} e^{-t^2/2} dt = 1 - \alpha \quad (2.1.17)$$