

与实测值进行比较。

显然, d_{xy} (或 d_{xx}, d_{yy}) 轨道放出一个电子, 即每个晶胞可放出一个电子。以 BaTiO_3 为例, $a = b = 3.986 \text{ \AA} \approx 3.99 \text{ \AA}$, $c = 4.027 \text{ \AA}$ 若单位体积内有 N 个晶胞, 则单位面积放出的能量为

$$(N \times 4.8 \times 10^{-10}) / [N \times (3.99 \times 10^{-8})^2] \approx 30.15 \times 10^4 \text{ e.s.u./cm}^2.$$

而 BaTiO_3 自发极化强度实测值^[7] 为 $26 \times 10^{-6} \text{ C/cm}^2 = 7.8 \times 10^4 \text{ e.s.u./cm}^2$ 。其次以 PbTiO_3 为例, $a = 4.000 \text{ \AA}$, $b = 4.211 \text{ \AA}$, $c = 3.875 \text{ \AA}$ 单位面积放出的能量为

$$(N \times 4.8 \times 10^{-10}) / (N \times 4.000 \times 4.211 \times 10^{-16}) \approx 28.50 \times 10^4 \text{ e.s.u./cm}^2.$$

PbTiO_3 的自发极化强度实测量^[7] $> 15 \times 10^4 \text{ e.s.u./cm}^2$

从以上两例可以看出, 就 BaTiO_3 而言,

理论推算值比报道的实测值大四倍左右, 而 PbTiO_3 的理论推算值与报道的实测值比较接近。理论推算值是从晶体处于理想状态出发的, 而实际晶体的有序排列受缺陷、杂质、气孔及温度等因素的影响, 而有一定差别。因此, 可以用上述模型来解释压电效应的机理。

参 考 文 献

- [1] H. Megaw, *Acta Cryst. Camb.*, **7**(1954), 187.
- [2] W. J. Merz, 物理译丛, **11**(1965), 3.
- [3] E. G. Resenko, A. T. Shuvayev, *Proc. of the International Meeting on Ferroelectricity, Kyoto*, (1969), 64-66.
- [4] L. 鲍林著, 卢嘉锡等译, 化学键的本质, 科学出版社, (1966), 42, 141.
- [5] H. A. Jahn and E. Teller, *Proc. Roy. Soc. A*, **161**(1937), 220.
- [6] C. A. 柯尔逊著, 陆浩等译, 原子价, 科学出版社, (1966) 253.
- [7] C. 基泰尔著, 杨顺华等译, 固体物理导论, 科学出版社, (1979), 458.

蒙特卡罗方法简介

郭 应 焕

(中国科学院高能物理研究所)

一、蒙特卡罗方法的基本原理

蒙特卡罗方法的基本原理是: 把所求解问题的结果转化为某一随机事件的概率, 并经过统计试验, 求出该事件在多次重复试验中出现的频率, 以此作为概率的近似值, 从而获得所求答案的近似解。因此, 蒙特卡罗方法的核心是进行统计试验, 所以这个算法又称为统计试验法^[1]。随机试验的具体方式称为试验概型。下面用计算圆周率 π 作例子来说明试验概型的设计和计算原理的应用。

设有一半径为 R 周长为 C 的圆, 其面积 S 为

$$S = (1/2)RC = \pi R^2, \quad (1)$$

式中 $\pi = C/2R$ 是圆周率。上式中若 $R = 1$, 则

$$S = \pi, \quad (2)$$

所以圆周率又等于半径为 1 的圆的面积。现在我们把求 π 的问题转化为一个概率问题。

在 $X-Y$ 平面上, 以原点为中心画一单位半径的圆, 并在第一象限画一个以原点为顶点, 以坐标轴为边的单位正方形 (图 1), 则单位圆在第一象限内所占的面积 (图 1 中阴影部分) 为 $\pi/4$ 。现在做一个向单位正方形中均匀投掷小球的试验, 则球落在正方形中某部分的概率显然和其面积成正比。设一共投了 n 次球, 落在阴影部分的次数为 m , 则

$$S_{\text{阴影}}/S_{\text{正方形}} = \pi/4 \approx m/n, \quad (3)$$

所以

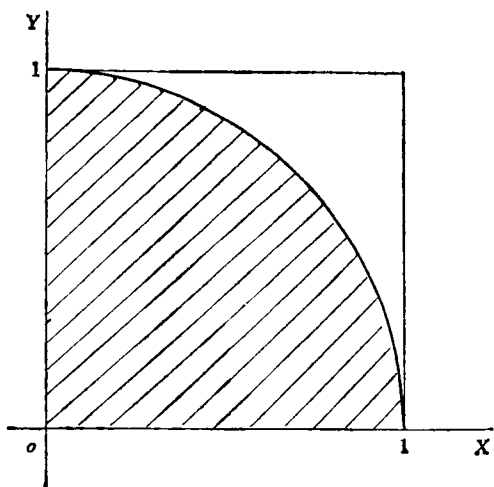


图 1

$$\pi \approx 4m/n, \quad (4)$$

由此可见, 通过向一单位正方形中均匀投掷小球的随机试验, 可求得圆周率 π 的近似值.

在用蒙特卡罗算法求解问题时, 总希望设计较优的试验概型, 以使用较少的试验次数获得较好的结果. 例如在上述计算 π 的问题中, 若把 X - Y 平面上的 $(0,1), (1,0)$ 两点连接, 则和原点构成一个等腰直角三角形 (图 2). 现在把试验概型取为向单位圆在第一象限的部分均匀投掷小球. 设在 n 次重复试验中, 有 m 次落在三角形 (图 2 的阴影部分) 中, 则

$$S_{\Delta}/S_{1/4\pi} = 2/\pi \approx m/n, \quad (5)$$

所以

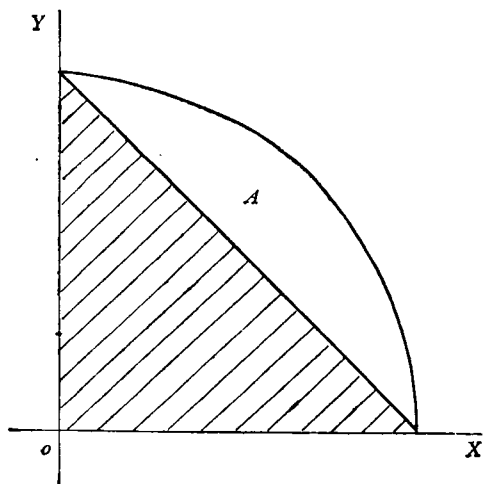


图 2

$$\pi \approx 2n/m, \quad (6)$$

显然用(6)式代替(4)式, 就可以用少的试验总次数求得 π 的较好的值.

在蒙特卡罗算法中, 除试验概型的设计技巧外, 对简化统计试验有两个常用的方法. 一个是拟蒙特卡罗法, 即把一个随机试验转化为一个确定实验. 另一个是伴随(对偶)蒙特卡罗法, 即把要计算的量转化为和其伴随(对偶)的量来设计试验概型. 这些方法也可用计算 π 的值说明.

用拟蒙特卡罗法计算 π 值的实验是, 在图 1 的单位正方形中均匀地铺上大小一样的小球, 并把球的总数 n 和在阴影部分球的数目 m 数出来, 按(4)式可求出 π 的近似值. 显然在实验中用的球越小, 求得的 π 就越准确.

用伴随蒙特卡罗法求 π 值的试验概型可由图 2 出发设计如下: 取单位圆在第一象限内的无阴影部分 A 为伴随量, 并作等腰三角形 Δabc (图 3), 则

$$S_A + S_{\Delta abc} = S_A + 1/2 = \pi/4. \quad (7)$$

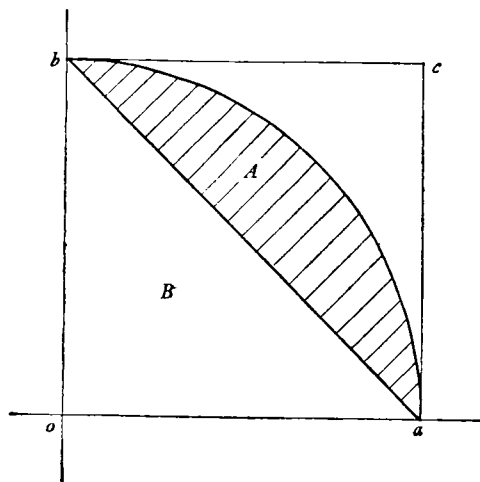


图 3

现在向图 3 中 Δabc 内均匀投掷小球. 若在 n 次试验中落在 A 内 m 次, 则由(7)式可得

$$\pi \approx 2(m+n)/n. \quad (8)$$

上式表明用这种伴随蒙特卡罗法, 能以更少的试验次数获得较好的 π 值.

以上表明, 蒙特卡罗算法的特点是用统计

试验来代替复杂的甚至是困难的计算(如上述 π 的计算)。然而在具体实现上述均匀投掷小球的试验时,就会遇到操作上的许多困难。这个算法的实际作法是,把随机试验结果(如均匀投掷小球时球的随机落点)和具有同样分布(这里是均匀分布)的随机数一一对应起来,并反过来用任意抽取这种随机数来确定统计试验的结果。这就是模拟试验。所以,蒙特卡罗算法把抽样理论(统计试验或模拟统计试验)和数值分析(即用频率作为概率的近似值)组合在一起^[2]。因而这一算法具有广泛的应用^[1-9]。

二、蒙特卡罗算法的实现

最早人们在蒙特卡罗算法中用特定分布的随机数表作随机数字抽样来模拟统计试验。这种操作是极其费时的。因此,这个算法直到1958年大型快速电子计算机出现后才得到普遍应用。这是因为用计算机模拟统计试验可以极大地提高蒙特卡罗算法的速度。当模拟统计试验时,要用到下面两条简单的定理^[3]。

定理一

相互独立并分别在 X 轴的 $[a, b]$ 区间内和 Y 轴的 $[c, d]$ 区间内均匀分布的随机数 x 和 y 组成的随机数对 (x, y) 是在 $X-Y$ 平面上长方形 $[(a, c)(a, d)(b, d)(b, c)]$ 中均匀分布的。

这个定理用独立事件积的概率等于各事件概率的积很容易得到证明。上述定理能使人们用计算机模拟向长方形 $ABCD$ (图4)中均匀投掷小球的统计试验。为此,我们在 X 的 $[ab]$ 区间内产生均匀分布的随机数 x , 并独立地在 Y 的 $[c, d]$ 区间内产生均匀分布的随机数 y , 则随机数对 (x, y) 就给出向长方形 $ABCD$ 中均匀投掷小球的落点。如果要求出在这个试验中球落到长方形内一个特定区域(如图4中由曲线 $f(x)$ 划出的区域,即阴影部分)中的数目,只要用取舍法就能实现,即首先按上述方法选取随机数对 (x, y) , 并计算 $f(x)$ 的值

$$f(x) = M. \quad (9)$$

物理

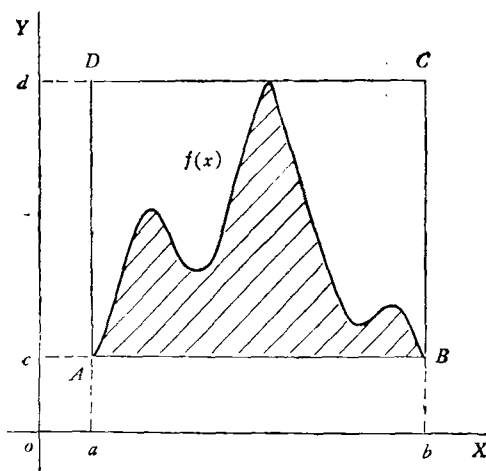


图 4

若

$$y \leq M, \quad (10)$$

就表示球落入指定区域。若选了 n 个随机数对,则满足(10)式的次数 m 即是要求的数目。

当知道了统计试验中随机变量 x 的概率密度分布函数 $p(x)$ 时,由定理一和取舍法可对随机变量 x 进行模拟抽样。设随机变量 x 的取值在 $[a, b]$ 区间内,则 $p(x)$ 满足

$$\int_a^b p(x) dx = 1. \quad (11)$$

在统计试验的模拟抽样中,由于 $p(x)$ 是已知的(图5),要决定的是在某次抽样中得到 x 的什么值。为此首先求出 $p(x)$ 的最大值 Q , 并作一矩形 $abb'a'$ (如图5所示)。然后在 $[a, b]$

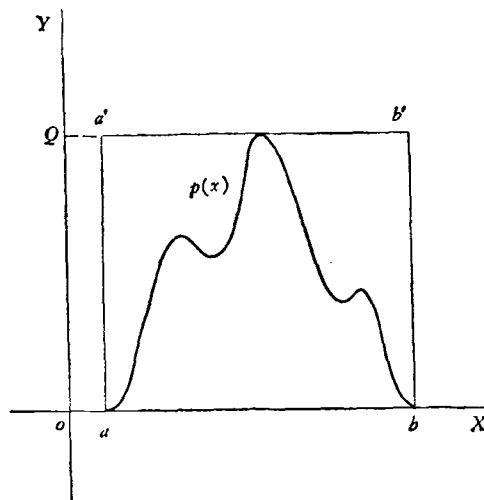


图 5

和 $[0, Q]$ 区间上选取相互独立的均匀分布随机数对 (x, y) , 计算 $p(x)$ 的值

$$p(x) = p_x.$$

如果

$$y \leq p_x,$$

则抽样成功, 并得到随机变量的试验结果为 x 值. 否则, 抽样失败而舍去这次模拟抽样. 显然由这种模拟抽样决定的随机变量 x 的概率密度一定按 $p(x)$ 分布. 由于上述模拟抽样中存在弃舍(失败), 因而要注意提高抽样效率.

在模拟统计试验中, 有时需要由已知的概率分布函数 $F(x)$ 来决定随机变量 x 的值. 对这个问题有如下定理:

定理二

设某随机变量 x 的概率分布函数为 $F(x)$, 则随机变量 $F(x)$ 在 $[0, 1]$ 区间内均匀分布.

由于概率函数的微分是概率密度函数, 而微分(或积分)运算不改变自变量空间或函数空间的标度, 因而定理是显然的.

按照定理二, 当由随机变量 x 的概率分布 $F(x)$ 进行模拟抽样时, 首先在 $[0, 1]$ 区间内选取均匀分布的随机数 r , 然后解方程 $F(x) = r$, 则求得的 x 即为模拟抽样的结果.

因为在任意区间 $[a, b]$ 内均匀分布的随机数 t 可线性地变换到在 $[0, 1]$ 区间内均匀分布的随机数 r :

$$r = (t - a)/(b - a), \quad (12)$$

所以在 $[0, 1]$ 区间内均匀分布的随机数是蒙特卡罗算法的主要工具. 现在普遍采用在 $[0, 1]$ 区间内产生均匀分布的随机数的方法是乘同余法或混同余法^[6]. 每个现代大型计算机都带有 $[0, 1]$ 区间内均匀分布随机数程序, 供用户使用.

下面用例子来说明上述定理的应用.

例 1: 在前面谈到的用蒙特卡罗法求 π 值的问题中[见(4)式], 用 $[0, 1]$ 区间内相互独立且均匀分布的随机数对 (x, y) 及取舍法, 就很容易在计算机上进行计算.

例 2: 求定积分

$$A = \int_a^b f(x) dx. \quad (13)$$

当知道 $f(x)$ 在 $[a, b]$ 内的最大值后, 根据定理一和取舍法, 用蒙特卡罗法很容易在计算机上求出 A 的近似值. 这个算法在不能给出 $f(x)$ 的原函数的解析表达式时就显出它的优越性.

例 3: 高能粒子进入物质后, 其强度 I 随深度 l 指数地减弱, 这即指数吸收, 可表示为

$$I = I_0 e^{-\lambda l}, \quad (14)$$

式中 λ 称线吸收系数. 现在设一粒子射入物质, 在(14)式即指数吸收的情况下, 用模拟抽样决定这个粒子穿入物质的深度 l . 显然 I/I_0 为粒子穿入物质深度 l 的概率函数. 因此按定理二, 先在 $[0, 1]$ 区间内选取均匀分布的随机数 r , 然后解方程 $r = e^{-\lambda l}$, 就可求出由随机抽样决定的这个粒子的穿入深度

$$l = -(1/\lambda) \ln r. \quad (15)$$

这种模拟抽样常用于追踪粒子输运历程的蒙特卡罗模拟计算中.

以上给出用计算机模拟统计试验的蒙特卡罗算法. 因此这个算法也叫作“计算机试验”.

三、蒙特卡罗算法的应用

计算问题总是归结为求一个数或一组数, 或一个量的分布. 它们通常由代数的、分析和泛函的方程决定, 或者由某个随机过程的结果决定. 前者可称为定解问题, 后者可称为概率问题. 这些问题都已有确定的程式(试验模型设计)供蒙特卡罗算法使用^[3, 6, 9]. 下面用例子简要说明蒙特卡罗算法对几类问题的处理方式.

用多重积分的蒙特卡罗算法来求算粒子的反应截面. 我们知道, 粒子间相互作用在服从各种守恒定律的条件下, 可以使粒子产生、湮灭和转化. 设 n 个粒子经过反应变成 m 个粒子, 其反应截面可表示为

$$\sigma = \frac{(2\pi)^4}{(2\pi)^{3(n+m-1)}} \frac{1}{I} \prod_{\alpha=1}^n \int \frac{d^3 P_\alpha}{N_\alpha^2}$$

$$\times \prod_{b=1}^m \int \frac{d^3 P_b}{N_b^2} \delta^4(\Sigma \mathcal{P}_b - \Sigma \mathcal{P}_a) |T_{ba}|^2, \quad (16)$$

式中 I 为相对的粒子束流因子, P 是线动量, \mathcal{P} 为 4-动量, a, b 分别表示初、末态. P_a 的积分区域是入射粒子的相对动量分布, P_b 的积分区域一般为质心系中一个超多面体. T_{ba} 为相互作用矩阵元. 这里

$$N_k = \begin{cases} \sqrt{2E_k} & (\text{对玻色子}) \\ \sqrt{E_k/m_k} & (\text{对费米子}) \end{cases} \quad (k = a \text{ 或 } b) \quad (17)$$

为粒子态的归一化因子, 其中 E_k 为粒子能量, m_k 为粒子质量. 式中已把相空间以外的其它变量如自旋等吸收到 T_{ba} 中. T_{ba} 常与 \mathcal{P}_a 有关. 当由理论给出 T_{ba} 的表达式后, (16) 式可用蒙特卡罗方法来计算. 由于在某些情形中对 T_{ba} 的具体形式并不知道, 因此就假定 T_{ba} 为一常数, 并略去末态相互作用, 则截面与末态相空间成正比. 若在同一种相互作用中, 对于不同的反应道, 由它们的相空间的比值可给出它们的截面的比值. 当把计算的比值与实验比较时, 就能了解各反应道的不同特点. 用蒙特卡罗法能较方便地算出各反应道的相空间的比值: 对一反应道, 在初、末态动量范围内作均匀随机抽样, 并用

$$\sum_{b=1}^m \mathcal{P}_b - \sum_{a=1}^m \mathcal{P}_a = 0$$

来判断反应是否实现. 在相同次数的随机抽样下, 各反应道反应实现的次数比即为末态相空间的比. 当然, 抽样次数必须很大才能给出可信的结果.

下面用模拟随机过程的蒙特卡罗法来讨论质子加速器脉冲中子源的中子产额、能谱和角分布.

设有一束能量较高 ($\gg 8\text{MeV}$) 的质子打到一定形状的、某种材料的靶上. 现在来计算次级中子的产额、能谱和角分布等. 按照假定, 入射质子的能量远大于核子在核中的结合能, 因而可略去核子间的相互作用, 把原子核看作由核子组成的费米气体系统. 这就是在高能入射粒子条件下核的费米气体结构模型. 当一个

高能质子射入核子组成的费米气体后, 就会同核中核子发生多次接连不断的碰撞, 这就是级联碰撞机制. 若已知质子 p 和中子 n 的 p-p, p-n, n-n 的碰撞微分截面及其随能量的变化, 就可以按上述核模型和反应机制对这个问题进行蒙特卡罗计算. 取一高能质子, 通过均匀随机抽样选定在核上的入射点. 由总截面通过随机抽样决定在核内的碰撞点 [见 (14) 式], 并选定碰撞对象 (质子或中子) 及其费米动量. 在碰撞点用相对论运动学及随机方向 (由微分截面通过抽样决定) 求出碰撞结果. 由于核子是费米子, 还要用泡利不相容原理判断上述碰撞结果是否实现. 然后对每个次级粒子由碰撞点出发分别进行上述跟踪, 直到所跟踪的全部参与碰撞的粒子终止在核中或飞出核外为止. 把飞出核外的中子方向、所带能量、动量存贮在计算机中. 重复上述过程, 一直达到由计算精度所决定的初始高能质子的抽样数目为止. 最后, 把由不同方向飞出的中子数目取出, 便得到中子束的角分布; 把不同能量的中子数目取出, 就

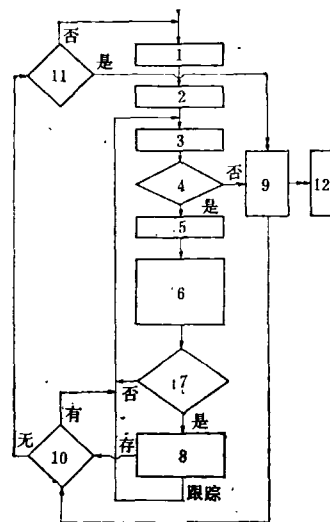


图 6 高能质子在靶上产生中子束的计算框图

1. 高能质子累计数目 n ; 2. 选定核上入射点; 3. 选定碰撞位置; 4. 判断是否在核内; 5. 选定碰撞对象; 6. 选定对象的动量、能量及次级粒子方向, 用相对论运动学计算后者的能量和动量; 7. 由不相容原理判定碰撞是否实现; 8. 对次级粒子存贮和跟踪; 9. 记录出射中子的能量、动量和方向; 10. 有无存贮的粒子; 11. 是否达到由计算精度决定的某类中子数 m_0 ; 12. 输出计算结果

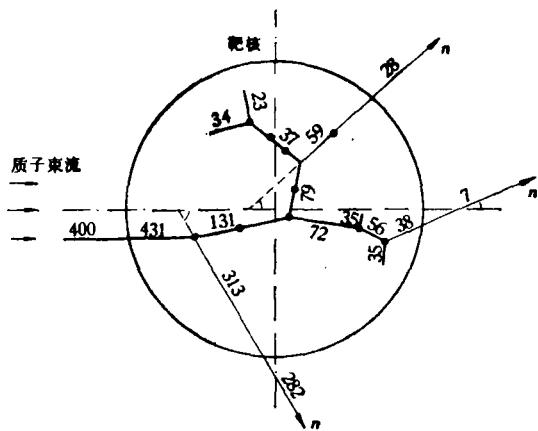


图7 400 MeV 质子在靶核中串联碰撞所得模拟计算结果的二维投影表示。图中的折线表示粒子的轨迹，数字表示能量，以 MeV 为单位。线段上的点表示由不相容原理禁戒而没有发生碰撞的位置，计算中假定核势阱深度为 31 MeV。图中还表示了出射中子相对于质子束的发射角

得到中子束的能谱：同样也可求出高能质子的中子产额。图6给出了上述算法的计算框图。图7给出了用400 MeV 质子模拟一次所得到的结果的二维投影表示。

上述表明，采用蒙特卡罗法可由最少的实验或理论数据(如上述核子间作用的微分截面)给出复杂随机过程的模拟结果。如果在上例中把核子的碰撞截面由介子或其它粒子的产生截面取代，就可获得所产生的粒子束的各种信息。若对不同的靶核及靶的形状和安排进行计算，就能选择较佳的实验条件。

这种跟踪随机过程历史的算法常用于于粒子输运过程的研究^[1,6]、射线探测器效率的计算^[7]、射线屏蔽的计算^[8]以及核爆炸最佳条件的选择^[6]等。这类蒙特卡罗算法不必用仪器设备作实验，就能取得较优设计或为较佳条件提供信息。当然，所得信息的可靠性决定于对过程模拟的真实程度、所用参数的准确性和较大的模拟试验次数。

蒙特卡罗方法还可用于实验数据的处理^[9]。有些微观过程的实验，需要用庞大的实验设备。这时，由于各种宏观因素的影响，使实验的结果或信息完全改变了微观过程的本来面貌。同时由于人们对微观过程的某些规律不认识或认识不足，这些都会给数据分析带来困难。

对这类实验数据，采用一般的数据处理方法很难把实验结果同微观过程相联系，这时可用蒙特卡罗法进行处理。这种处理方法的步骤是，首先把实验所得的全部信息采集存贮起来，同时对实验所涉及的微观过程进行模拟试验。模拟试验包括两方面：一是按某种理论或假设建立结构模型与作用机制，模拟反应过程；二是模拟粒子在实验装置中所经历的过程。在模拟试验中对所有可能达到各个探测仪器的可能信息作记录。最后把实验测定的全部信息和用蒙特卡罗法获得的模拟信息进行分析 and 比较。如果两方面的信息一致，就表明模拟试验所采用的模型与机制可能反映了实际情况。如果两方面的信息不一致，就表明所用模型与机制和实际不符合，这时可通过改变模型与机制重新进行模拟试验，直到两方面信息一致为止，以此来检验某种理论或假设。这里要注意，这种处理方式所获得的结论还需要通过其它实验进一步验证，并且其可信度取决于是否存在能给出同样模拟信息的其它模型与机制。

上述几类问题的蒙特卡罗算法表明，对于由某种数学方程表述的问题，先用方程所含的某些参数(如自变量或函数)构成一个数学或物理的随机模型，通过模拟统计试验进行抽样和数值分析；对于由随机过程链所表述的问题(如马尔科夫过程)，通过模拟实际过程来进行统计试验抽样和求算结果。因此简单地说，蒙特卡罗法是研究数学和物理过程中随机模型的工具。

有时对随机过程可用某种数学方程描述，如对粒子输运的随机过程用玻耳兹曼积分-微分方程描述^[6]。然而在有些情况下，物理过程是清楚的，但由于过程极为复杂，因而描述它的数学形式极为复杂，或根本不能给出数学表达式。这时就不能用任何解析的或数值的方法对问题求解。因此，模拟实际过程的蒙特卡罗算法就显得特别重要，而且只要求知道过程中各个环节的转移概率或概率密度即可。

和其它一切统计试验一样，由于蒙特卡罗算法的相对误差与成功抽样次数平方根的倒数

成正比^[1,6,9],所以要提高这一算法的精确度,必须大大增加成功抽样的次数。因此,即使采用高速计算机,也会极大地增加计算时间从而使费用增加,在模拟复杂随机过程进行抽样时更是如此。这是蒙特卡罗方法的缺点。

参 考 文 献

[1] 布斯连科等著,王毓云等译,统计试验法(蒙特卡罗法)及其在电子计算机上的实现,上海科学技术出版社,(1964)。
 [2] A. S. Householder et al., eds., Monte Carlo Methods, U. S. Government Printing Office, Wa-

shington, (1951).
 [3] K. Binder, ed., Monte Carlo Methods in statistical Physics, Springer-Verlag, (1979).
 [4] G. I. Marchuk et al., The Monte Carlo Methods in Atmospheric Optics, Springer-Verlag, (1980).
 [5] Daniel T. Gillespie, The Monte Carlo Method of Evaluating Integrals, NWC-TP-5714; AD-A-005891.
 [6] 裴鹿成、张孝泽,蒙特卡罗方法及其在粒子输运过程中的应用,科学出版社,(1980).
 [7] N. V. Decastro Faria and R. J. A. Levergue, Nucl. Instr. Meth., 46(1967), 325.
 [8] N. M. Schaepper, ed., Reactor Shielding for Nuclear Engineers, Virginia. (1973).
 [9] 李锡韶,实验的数学处理,科学出版社,(1980).

周期性结构和分布反馈激光器

韩全生 刘弘度

(中国科学院物理研究所)(北京大学物理系)

一、引 言

周期性结构在光学现象中起着特殊的作用,这在自然界、科学实验和技术应用中经常可以看到。阳光下昆虫的眼睛显得五光十色,是由于昆虫的眼睛是由数以千计的小眼规律地集合而成;一束白光射到光栅上就会分出各种颜色的光束,是由于光栅有密集等距的刻槽;X射线能够探测固体的结构,是由于固体中的原子以一定的规律排列着。七十年代初,利用各种新技术来制备人工周期性光波导方面有了很大的进展,特别是分布反馈概念的提出和分布反馈激光器的问世,加上集成光学发展的需要,大大地刺激了人们对这一课题的兴趣。

现在,无源介质光波导中,已成功地利用周期性结构制作光波耦合器、波导滤波器、反射器、模式转换器、调制器、偏转器以及实现声光作用、谐波振荡等等。在有源介质光波导中,周期性结构已被用来制作分布反馈激光器和分布喇格反射激光器。以上两类光波导器件都受到很大的注意和广泛的研究,取得很多成果。

本文只简略介绍一下有源器件。

二、周期性光波导的结构形式和物理特性

光波导的周期性结构主要有如下两种形式:

1. 体参数的周期性调制,如图1所示,既可以是波导芯区介质本身的调制,也可以是衬底或包层的调制。体参数包括折射率、增益、非线性

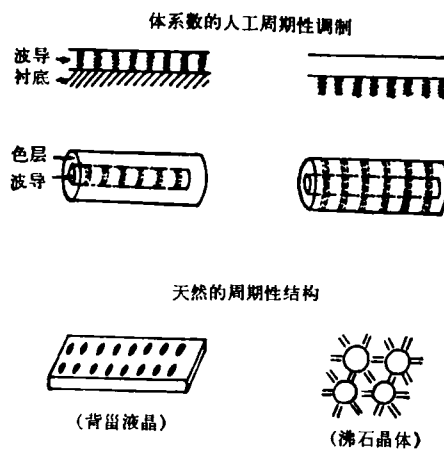


图1 体参数周期性调制的光波导