

用光学方法产生随机数的蒙特卡罗计算

汤 清 苏 显 涅

(四川大学物理系)

蒙特卡罗 (Monte Carlo) 方法^[1,2]是通过随机变量求解数学、物理、工程技术问题的数值方法。它的基本思想是：首先建立一个与实际问题或过程有关的概率模型或随机过程，使它的参数等于问题的解，然后通过对模型（或过程）的观察或抽样试验来计算所求参数的统计特征，最后给出所求解的近似值，而解的精确度可用估计值的标准误差来表示。

蒙特卡罗方法的优点在于能解决一些用经典方法难于求解的问题，尤其适合于求多维问题的解，例如求解高维线性代数方程组，计算效率比用经典方法高得多。此外，蒙特卡罗方法具有很大的灵活性，在计算数学中，很多不同类型的问题 例如 定积分的求解，矩阵变换，线性代数方程的求解，边界问题的求解，本征值和本征函数的计算等，均可采用这种方法^[3]。

进行蒙特卡罗计算必须产生随机数。随机数发生器有两种：伪随机数发生器和物理上的随机数发生器。利用计算机对数字序列进行算术运算和逻辑运算，可以用各种方法产生伪随机数序列。计算机产生伪随机数的主要优点是借助各种算法容易实现，因不是真正的随机数，所以可以重复计算，通过各种变换处理能够获得任意分布的随机变量。其主要缺点是现在还不能通过简单的理论分析或数字计算对这些随机数的统计性质作出推断，而只能对所产生的数字序列进行大量的统计检验之后才能对其统计性质作出判断。另外，这种序列实际上是周期性的，产生的速度也不够快。物理随机数发生器则是利用某些物理过程的性质来产生随机数。例如，可用放射性和热噪声过程来产生随机数。物理现象产生的随机数是真正的随机数，

它产生的速度快，但随机过程不能重复，也不能得到任意分布的随机数。

最近，基于对弱光统计特性的研究和二维光子探测技术的进展^[4-6]，人们提出了一种用于蒙特卡罗计算的光电系统^[7]。光学方法与 β 衰变、热噪声等基于源的时间统计性质不同，它是利用被探测光子空间坐标的统计性质，产生具有特定概率密度的双变量随机变量 (bivariate random variable)，再通过二维光子检测器、位置计数电路和计算机来完成蒙特卡罗计算。这种方法具有极高的随机数发生率，每秒可达 10^5 量级。双变量随机变量的概率密度分布可以通过弱光光场任意设定，它具有很大的灵活性，因此用光学方法产生随机数的蒙特卡罗计算正在引起人们的极大兴趣。

一、用光学方法产生的随机数

根据光电子探测理论^[8]，在空间坐标 (x', y') 探测光子的概率与该点的强度 $f(x', y')$ 成正比。因此，在空间 (x', y') 探测到光子的概率密度函数 $P[x', y' | f(x', y')]$ 为

$$P[x', y' | f(x', y')] = \frac{f(x', y')}{\iint_A f(x', y') dx' dy'}, \quad (1)$$

这里 A 代表光阴极的面积。由于探测器探测到空间何处的光子事先是不知道的，因此空间坐标 (x', y') 实际上是随机变量，因为是连续的，所以叫连续双变量随机变量。 P 叫双变量概率密度函数。所需的概率密度函数 P 可通过适当的强度分布函数 $f(x', y')$ 求得，而强度函数 $f(x', y')$ 可用透射滤光片 (transmission filter) 或贮存型阴极射线管 (storage-type CRT) 进行

强度调制而得到。图1为用光学方法产生随机数的系统示意图。

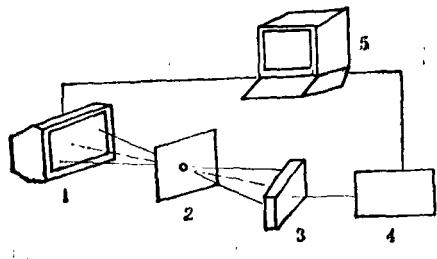


图 1

1.CRT; 2.针孔照像机; 3.二维光子计数探测器; 4.位置计数电路; 5.计算机

CRT 上的强度分布可以任意设定为 $f(x', y')$ 。当光子计数探测器接收到一个来自 CRT 的光子，并且位置计数电路向计算机输出被测光子的坐标 (x', y') 时，计算机则通过事先编好的程序产生一个与此坐标对应的数 $V(x', y')$ 。 $V(x', y')$ 是 (x', y') 的函数，它也是双变量随机变量。对一确定的 (x', y') 坐标， $V(x', y')$ 的值是随机的。产生此随机数的概率为 $P[x', y' | f(x', y')]$ ，而产生速率由探测器以及位置计数电路的响应时间所决定。采用商用的二维光子计数探测器和位置计数电路，例如由美国电子光学产品生产部 (Electro-Optical Products Division) 和表面科学实验室 (Surface Science Laboratories) 提供的装置^[6]，每 $10\mu s$ 能产生一个随机数。因此，使用这种技术每秒可产生 10^6 量级的双变量随机数。

图 2 是用二维光子计数探测器产生双变量概率密度的例子。图 2 中为三种不同分布的二维输入函数 $f(x', y')$ ，通过探测器接收来自 $f(x', y')$ 的光子，就能产生双随机变量 (x', y') 的概率密度函数。图 2(a) 中，强度分布 $f(x', y')$ 在面积 A 上为均匀分布。由(1)式，可求得概率密度函数为

$$P[x', y' | f(x', y') = 1] = 1/A.$$

图 2(b) 中的强度分布为

$$f(x', y') = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{x'^2 + y'^2}{2\sigma^2}\right),$$

这里被探测光子的空间坐标 (x', y') 是不相关

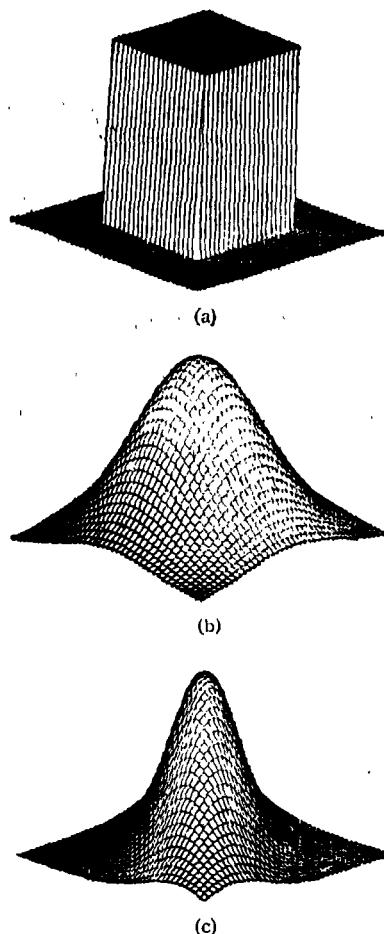


图 2 用二维光子计数探测器获得的双变量概率密度函数

- (a) 均匀分布;
- (b) 非相关的联合正态分布;
- (c) 相关的正态分布(相关系数 $\rho = 0.7$)

的。因此

$$\begin{aligned} P[x', y' | f(x', y')] &= \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left(-\frac{x'^2 + y'^2}{2\sigma^2}\right). \end{aligned}$$

图 2(c) 中的强度分布为

$$\begin{aligned} f(x', y') &= \frac{1}{2\pi\sigma^2(1 - \rho^2)^{\frac{1}{2}}} \\ &\cdot \exp\left[-\frac{x'^2 + 2\rho x'y' + y'^2}{2\sigma^2(1 - \rho^2)}\right], \end{aligned}$$

这里被探测光子的空间坐标是相关的。因此，

$$P[x', y' | f(x', y')] = \frac{1}{2\pi\sigma^2(1 - \rho^2)^{\frac{1}{2}}}$$

$$\exp \left[-\frac{x'^2 + 2\rho x' y' + y'^2}{2\sigma^2(1-\rho^2)} \right].$$

所以，用此方法可以产生所需相关系数的任何双变量概率密度函数。

二、定积分的估算

蒙特卡罗方法应用的一个主要方面为定积分的估计。

设

$$I(x, y) = \iint_A f(x', y') h(x, y; x', y') dx' dy', \quad (2)$$

式中 $f(x', y')$ 为实的非负函数， $h(x, y; x', y')$ 为任意函数， A 为光子探测器面积。另外，函数 $h(x, y; x', y')$ 和 $f(x', y')$ 是有限的。实际上，(2)式具有线性叠加积分的形式， $f(x', y')$ 代表输入， $h(x, y; x', y')$ 为系统的脉冲响应。

如图 1 所示，将 CRT 上的强度分布 $f(x', y')$ 成象到探测器上，成象过程是通过一针孔进行的（也可通过一个具有适当透过率的透镜），目的在于减小光强度，使到达探测器的光子少得足以单个地被探测。在空间 (x', y') 处探测到一光子的概率由(1)式表示，而在时间间隔 τ 内探测到 N 个光子的概率为^[8]

$$P[N | f(x', y')] = \frac{\bar{N}^N e^{-\bar{N}}}{N!}, \quad (3)$$

即遵循以 \bar{N} 为平均数的 Poisson 分布。参数 \bar{N} 为

$$\bar{N} = \frac{h\tau}{h\nu} \iint_A f(x', y') dx' dy' = \frac{n\tau}{h\nu}, \quad (4)$$

这里 n 表示探测器的量子效率， h 为普朗克常数， ν 为准单色光频率。

(3)式成立的条件是用稳定性良好的单模激光束照明，或用偏振的热源照明，且时间间隔 τ 比光的相干时间要长得多。

当探测器探测到一个光子时，计算机便产生与此光子位置 (x', y') 相对应的一个随机数 $h(x, y; x', y')$ 。设在 τ 时间间隔内，探测器接收到 N 个光子，则计算机产生了 N 个随机数，其和为

物理

$$g(x, y) = \sum_{i=1}^N h(x, y; x'_i, y'_i), \quad (5)$$

这里 N 和 (x'_i, y'_i) 都是随机变量。

统计量 $g(x, y)$ 可以用光子统计的方法求出^[4,5]。可以证明^[5,9]

$$\begin{aligned} \langle g(x, y) \rangle &= \bar{N} \iint_A dx' dy' f(x', y') \\ &\quad \cdot h(x, y; x', y'), \\ I(x, y) &= \iint f(x', y') h(x, y; x', y') dx' dy' \\ &= \frac{\langle g(x, y) \rangle}{\bar{N}}, \end{aligned}$$

式中 $\langle g(x, y) \rangle$ 为对系宗的平均。

具体过程为：在计算机内首先存入函数 $h(x, y; x', y')$ ， x, y 为参数， x', y' 为变量。在一足够长的时间 τ 内接收到的光子平均数为 \bar{N} ， \bar{N} 可以通过(4)式求得。每个光子在 CRT 上的坐标为 (x'_i, y'_i) ，计算机针对接收到的每个光子的坐标 (x'_i, y'_i) ，输出一个 $h(x, y; x'_i, y'_i)$ 值，然后取平均，则积分值 $I(x, y)$ 即为此平均值。随着探测时间 τ 的延长，探测到的光子数迅速增加，所求得的积分值的误差就越小。相对误差与探测光子数的关系为： $\delta \sim 1/\bar{N}^{1/2}$ 。通常用蒙特卡罗方法处理定积分问题时，误差为 1% 到 0.1%。

三、解线性代数方程组

用蒙特卡罗方法求解线性方程组首先是由 Von Neumann 和 Ulam 提出的，而 G. M. Morris 提出了他们的光学实现方法^[7]。

考虑如下线性方程组：

$$AX = b, \quad (6)$$

A 为 $n \times n$ 阶矩阵， X 和 b 为 $n \times 1$ 阶矩阵。

将矩阵 A 表示为

$$A = I - B,$$

式中 I 为 $n \times n$ 阶单位矩阵， B 为 $n \times n$ 阶矩阵。当 B 的特征值的模小于 1 时，方(6)式可用简单迭代法求解，即

$$x_m = b_m + \sum_i B_{mi} b_i$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i_1 i_2} B_{m i_1} B_{i_1 i_2} b_{i_2} + \cdots \\
& + \sum_{i_1 i_2 \cdots i_r} B_{m i_1} B_{i_1 i_2} \cdots \\
& B_{i_{k-1} i_k} b_{i_k} + \cdots, \quad (7)
\end{aligned}$$

式中 x_m , b_i 及 B_{mi} 等分别是矩阵 X , b 及 B 的矩阵元。选择 V_{mi} 及 P_{mi} , 使得矩阵 B 的元素 B_{mi} 为这两个因子的乘积, 即

$$B_{mi} = V_{mi} P_{mi}, \quad (8)$$

上式要求 $0 \leq P_{mi} < 1$. 再选择 V_m 及 P_m , 使向量 b 的第 m 个元素 b_m 为这两个因子的乘积, 即

$$b_m = V_m P_m. \quad (9)$$

上式同样要求 $0 \leq P_m < 1$, 进而假定下面关系成立:

$$P_m = 1 - \sum_{i=1}^n P_{mi}. \quad (10)$$

这时(7)式可写成如下形式:

$$\begin{aligned}
x_m = & V_m P_m + \sum_{i_1} V_{mi_1} V_{i_1 i_2} P_{mi_1} P_{i_2} + \cdots \\
& + \sum_{i_1 i_2 \cdots i_k} V_{mi_1} V_{i_1 i_2} \cdots V_{i_{k-1} i_k} \\
& \cdot V_{i_k} P_{mi_1} P_{i_1 i_2} \cdots P_{i_{k-1} i_k} P_{i_k} + \cdots. \quad (11)
\end{aligned}$$

Von Neumann-Ulam Monte Carlo 方法的光学系统如图 1 所示。与矩阵元 I_{mi} 相应的强度被显示在 CRT 上, 即输入函数 $f(x, y)$ 已知。此矩阵有 n 行 $n+1$ 列, 并用 I_{mi} 表示第 m 行第 i 列的强度, 用 (x_m, y_i) 表示第 m 行第 i 列在 CRT 上的坐标。从(1)式可知, 在空间坐标 (x_m, y_i) 处探测到一个光子事件的概率 P_{mi} 与该点强度 I_{mi} 成正比, 即

$$P_{mi} = \frac{I_{mi}}{\sum_{i=1}^{n+1} I_{mi}}. \quad (12)$$

在计算机中存入一数组 b_{mj} , 并建立一关系: $b_{mj} = V_{mj} P_{mj}$.

由此关系, 我们可以从一个随机数 P_{mj} 算出另一个随机数 V_{mj} 来, 而由(12)式所决定的 P_{mj} 取决于探测到的光子在 CRT 上的位置。因此 V_{mj} 是与被探测光子的坐标一一对应的随机变量。这样, 如一个来自 (x_m, y_i) 的光子被

探测, 探测到的概率为 P_{mi_1} , 位置计数电路向计算机输出此光子在 CRT 上的位置 (x_m, y_i) , 同时计算机产生一个与之相对应的随机数 V_{mi_1} 。这时定义一随机变量 $G_m = V_{mi_1}$ 。然后继续探测, 直到探测到 i_1 行 i_2 列的光子为止, 则 $G_m = V_{mi_1} V_{i_1 i_2}$ 。此过程继续进行, 直到 i_r 行 i_{r+1} 列的光子被探测到, 这个过程才中断。最后可得

$$G_m = V_{mi_1} V_{i_1 i_2} \cdots V_{i_r}. \quad (14)$$

显然, G_m 是与探测路线有关的随机变量, 而此探测路线的概率为每次探测光子的概率之积, 即

$$P_r = P_{mi_1} P_{i_1 i_2} \cdots P_{i_{r-1} i_r} P_{i_r}. \quad (15)$$

因此, 随机变量 G_m 的期望值为

$$\begin{aligned}
\langle G_m \rangle = & \sum_{i_1 i_2 \cdots i_r} V_{mi_1} V_{i_1 i_2} \cdots V_{i_{r-1} i_r} V_{i_r} \\
& \times P_{mi_1} P_{i_1 i_2} \cdots P_{i_{r-1} i_r} P_{i_r}. \quad (16)
\end{aligned}$$

将(16)式与(11)式比较, 容易看出

$$\langle G_m \rangle = x_m.$$

因此, 方程组解的一个分量 x_m 等于随机变量 G_m 的期望值。

从上面的计算可以看出, 用蒙特卡罗方法每次可以单独地确定一个所需的分量 x_m , 而通常的方法往往需要把全部分量一齐算出。因此, 用蒙特卡罗方法求解线性方程组有更高的效率, 尤其是对高维线性方程组。

参 考 文 献

- [1] Y. A. Shreider, *The Monte Carlo Method*, Pergamon, Oxford (1966).
- [2] J. M. Hammersley and D. C. Handscomb, *Monte Carlo Methods*, Wiley, New York, (1964).
- [3] R. Y. Rubinsteiin, *Simulation and the Monte Carlo Method*, Wiley, New York, (1981).
- [4] G. M. Morris, *J. Opt. Soc. Am.*, **A-1** (1984), 482.
- [5] G. M. Morris, *Appl. Opt.*, **23** (1984), 3152.
- [6] C. Firmani, *Rev. Sci. Instrum.*, **53**, (1982), 570.
- [7] G. M. Morris, *Opt. Eng.*, **24**, (1985), 86.
- [8] L. Mandel, E. C. G. Sardarshan, and E. Wolf, *Proc. Phys. Soc. London*, **84** (1964), 435.
- [9] B. Roy Frieden, *Probability, Statistical Optics and Data Testing*, New York, (1983).