# 仿真方法

蒙特卡洛理论、随机仿真与统计计算

MarkZZZ WeChat: MarkZZZ20XX

**课程简介**

本课程系统介绍随机仿真与蒙特卡洛方法的数学理论与计算实践，以严格的概率论为基础，覆盖从伪随机数生成、方差缩减、离散事件仿真，到 MCMC、序贯蒙特卡洛、仿真优化的完整理论体系。课程强调数学严格性：每个方法均给出收敛性证明或误差界，包括 Metropolis-Hastings 的总变差收敛证明、方差缩减的数学保证、粒子滤波的 $L^2$ 误差界以及随机梯度估计的无偏性。通过系统学习，学生将掌握设计、分析和实现高效仿真算法的能力，能够将仿真方法应用于贝叶斯统计、随机优化、排队系统分析和金融工程等前沿领域。

**适合人群**

- 运筹学、统计学、应用数学、计算机科学方向的博士生及高年级硕士生
- 从事贝叶斯计算、机器学习、量化金融、系统仿真研究的科研人员
- 希望严格掌握蒙特卡洛理论基础与 MCMC 收敛性分析的研究者
- 已有随机过程与概率论基础，寻求计算统计深化的学习者

**前置知识**

- **概率论**：测度论基础、随机变量、期望、大数定律、中心极限定理
- **随机过程**：马尔可夫链（离散时间）、不变分布、遍历定理
- **线性代数**：矩阵运算、特征值、正定矩阵、Cholesky 分解
- **实分析**：极限、连续性、可测性基础、$L^p$ 空间
- **数值方法**（有益但非必须）：数值积分、优化基础

## 1 课程大纲

| 讲次 | 主题 | 内容概要 |
|---|---|---|
| 1 | 随机数生成 | 线性同余发生器（LCG）的周期与谱检验、Mersenne Twister（MT19937）的理论基础、均匀性的 $\chi^2$/KS/串行检验、逆变换法（含离散分布）的完整理论 |
| 2 | 随机变量生成 | 接受-拒绝法（AR 法）效率分析（期望试验次数证明）、组合法、多元正态生成（Cholesky/特征分解/Box-Muller）、指数族采样与理论比较 |

| 讲次 | 主题 | 内容概要 |
|---|---|---|
| 3 | 蒙特卡洛积分 | 强大数定律（Birkhoff 遍历定理）、CLT 误差界与置信区间、高维积分困难（维数诅咒）、准蒙特卡洛（低差异列、Koksma-Hlawka 不等式） |
| 4 | 方差缩减技术 | 对偶变量法（方差减小量的精确公式）、重要性采样（有效样本量 ESS）、控制变量（最优系数证明）、分层抽样（最优层分配 Neyman 公式） |
| 5 | 离散事件仿真 | 事件调度世界观、活动扫描、下一事件机制、输入建模（分布拟合、AIC/BIC）、仿真时钟推进与事件列表管理 |
| 6 | 输出分析 | 终态仿真置信区间、稳态检测（Welch 方法、CUSUM）、批均值法（批大小选择）、初始化偏差消除、再生法 |
| 7 | MCMC 基础 | Metropolis-Hastings 算法、细致平衡与不变性证明、Gibbs 采样、总变差收敛理论（谱间隙）、$\hat{R}$ 统计量与有效样本量 ESS |
| 8 | 高级 MCMC | 哈密顿蒙特卡洛（HMC）的 Leapfrog 积分器与 Metropolis 校正、NUTS 算法（No-U-Turn Sampler）、Langevin 动力学（ULA/MALA）的收敛率 |
| 9 | 序贯蒙特卡洛 | 粒子滤波（Bootstrap Filter）、重要性采样再生、$L^2$ 误差界（Del Moral 理论）、退化现象与有效粒子数、SMC 采样器 |
| 10 | 仿真优化 | 响应曲面法（RSM）、有限差分梯度估计（偏差-方差权衡）、似然比/得分函数法（无偏性证明）、路径导数（IPA）、随机梯度下降收敛性 |
| 11 | 排名选择与高效仿真 | KN 算法（Indifference-Zone 框架）、最优计算预算分配（OCBA）、高斯过程元模型（Kriging）、Expected Improvement（EI）采集函数 |
| 12 | 并行仿真与前沿 | GPU 并行蒙特卡洛（cuRAND）、量子蒙特卡洛（VMC/DMC 简介）、深度学习代理模型（Neural Network Surrogates）、仿真方法的研究前沿 |

## 2 参考书目

1. Sheldon M. Ross, *Simulation*, 5th ed., Academic Press, 2013.（蒙特卡洛与仿真的经典入门教材）
2. Averill M. Law, *Simulation Modeling and Analysis*, 5th ed., McGraw-Hill, 2015.（离散事件仿真

权威参考书）

3. Christian P. Robert and George Casella, *Monte Carlo Statistical Methods*, 2nd ed., Springer, 2004.（蒙特卡洛统计方法的经典文献，含 MCMC 理论）
4. Jun S. Liu, *Monte Carlo Strategies in Scientific Computing*, Springer, 2008.（科学计算蒙特卡洛方法综述）
5. Radford M. Neal, "MCMC Using Hamiltonian Dynamics," in *Handbook of Markov Chain Monte Carlo*, CRC Press, 2011.（HMC 的权威综述）
6. Pierre Del Moral, *Feynman-Kac Formulae: Genealogical and Interacting Particle Systems with Applications*, Springer, 2004.（粒子滤波与 SMC 的严格数学理论）
7. Michael C. Fu (ed.), *Handbook of Simulation Optimization*, Springer, 2015.（仿真优化方法综述）
8. Søren Asmussen and Peter W. Glynn, *Stochastic Simulation: Algorithms and Analysis*, Springer, 2007.（随机仿真算法的严格分析）
9. Art B. Owen, *Monte Carlo Theory, Methods and Examples*, 2013.（蒙特卡洛理论的现代处理，含方差缩减的详尽分析）
10. Gareth O. Roberts and Richard L. Tweedie, "Geometric Convergence and Central Limit Theorems for Multidimensional Hastings and Metropolis Algorithms," *Biometrika*, 1996.（MH 算法几何收敛的奠基性论文）