

$$b_k b_{i_1} \cdots b_{i_{m-1}} d_{i_m} = \tilde{d}_{k, i_1, \dots, i_m}$$

是一个与指标 $(k, i_1, i_2, \dots, i_{m-1}, i_m)$ 有关的量, 而

$$p_{i,1}, p_{i,2}, \dots, p_{i,j}, \dots, p_{i,n} \quad i = 1, 2, \dots, n$$

可理解为从第 i 个点随机游动至各点的概率, 因此 $\tilde{d}_{k, i_1},$

\dots, \tilde{d}_{i_m} 是一个与游动路径有关的量, x_k 便是所有 \tilde{d} 的数学期

望之和。于是当从点 k 出发作 m 步随机游动时, 实际上可以得到 $B^r d, r \leq m$ 的各个子样:

$$b_k d_{i_1}, b_k b_{i_1} d_{i_2}, \dots, b_k b_{i_1} \cdots b_{i_r} d_{i_{r+1}}, \dots,$$

$$b_k b_{i_1} \cdots b_{i_{m-1}} d_{i_m}.$$

这样的过程进行 N 次, 再取算术平均值就可以获得有限近似值

$$x^{(m)} = d + Bd + B^2d + \dots + B^m d$$

的第 k 个分量 $x_k^{(m)}$ 的近似估计值。 m 和 N 越大, $x_k^{(m)}$ 与 x_k 就越逼近。这种方法的特点是无须求出所有其他各分量的近似值。

六、线性代数方程组的蒙特卡罗解法之二

考虑线性代数方程组

$$Ax = f, \quad A = \{a_{ij}\}_{n \times n}, \quad f = \{f_i\}_n,$$

对此我们构造一个二项式

$$V(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n \alpha_i \left(\sum_{k=1}^n a_{ik} x_k - f_i \right)^2,$$

$$\alpha_i > 0, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

而不等式

$$V(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq C = \text{const}$$

代表一个 n 维椭球，而它的球心 $(\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n)$ 正是我们问题的解。

现在假定这个椭球位于 n 维超矩形

$$A_1 < x_1 < B_1,$$

$$A_2 < x_2 < B_2,$$

\vdots

$$A_n < x_n < B_n,$$

之内部。于是我们取 n 维超矩形内均匀分布的随机数 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$,

$$x_k = A_k + (B_k - A_k)\xi_k \quad k = 1, 2, \dots, n$$

来验证条件 $V(x_1, \dots, x_n) \leq c$ 是否满足。若满足这个条件，我们就作为子样记录下来；否则再取另一个 n 维随机数。这样记录下来的子样序列应该是在超椭球内部均匀分布的。于是这些子样的平均值便是方程组解的近似估计。

从以上这些例子中我们已经看到蒙特卡罗方法应用范围之广。灵活地应用它在很大程度上取决于人们对问题的深刻的理解和丰富的想象力。在以后各章中，我们还将介绍其他各种应用问题的蒙特卡罗解法。

实验题 3：上半平面上简化的扩散问题（如图 2—5，e）在 O 点有个扩散源，发出的粒子速度为 v ， v 是 $(0, 1)$ 之间的随机数，每隔单位时间粒子改变游动方向（碰

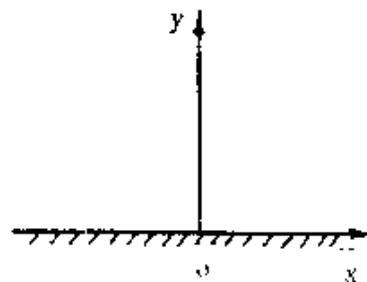


图 2—5, e

撞)，其新游动方向是在 $(0, 2\pi)$ 上均匀分布的。粒子对壁 $y = 0$ 是弹性镜面反射。计算从源 O 发出500个粒子，经过100个单位时间后，粒子各自的位置；并绘图，画出 x 方向的密度分布 $\rho(x)$ 。

实验题4：在上题中，设在 $x = 2$ 处置一高度为2的吸收壁（如图2—5，f），然后作同样的实验。（注：粒子碰到吸收壁后被吸收，游动终止。）

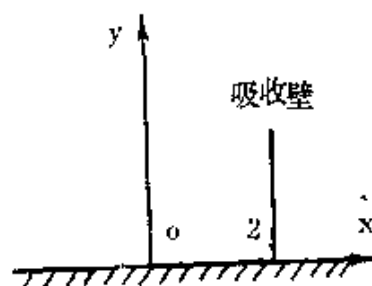


图2—5, f

第三章 从已知分布实现随机抽样

为了应用更为一般的随机变量来解决各种实际问题，我们必须要实现从已知分布的抽样。有了这方面的知识和技巧，在处理问题时就有了更大的灵活性和更高的效率。

§1 从已知分布的随机抽样

设 $F(x)$ 为某一已知的分布函数，我们的目的是如何产生相互独立，具有相同分布函数 $F(x)$ 的随机抽样序列 x_1, x_2, \dots, x_N 。这里，称 N 为容量，称 x_k 为子样。有时将具有分布函数 $F(x)$ 的子样记为 x_F （对应于密度函数 $f(x)$ ，则记为 x_f ）。事实上，随机数是一种从单位矩形分布中的抽样。本章中，我们假设在随机数已知的情况下，如何对已知分布实现随机抽样。在前一章，对随机数讨论了其①均匀性，②独立性，③费用等问题。由于随机抽样品质的好坏根本上取决于所假设的随机数的品质的好坏，因此在本章中，我们将只着重于讨论随机抽样的费用问题。

一、直接抽样法

若 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ 为随机数，则

$$x_n = \inf_{F(t) \geq \xi_n} t$$

见图3—1, a 即

$$x_F = \inf_{F(t) \geq \xi} t$$

事实上,

$$P\{x_F < x\} = P\left\{\inf_{F(t) \geq \xi} t < x\right\}$$

$$< x\} = P\{\xi \leq F(x)\}$$

$$\text{左连续} \underline{P}\{\xi < F(x)\}$$

$$= F(x).$$

这种方法可直接利用来

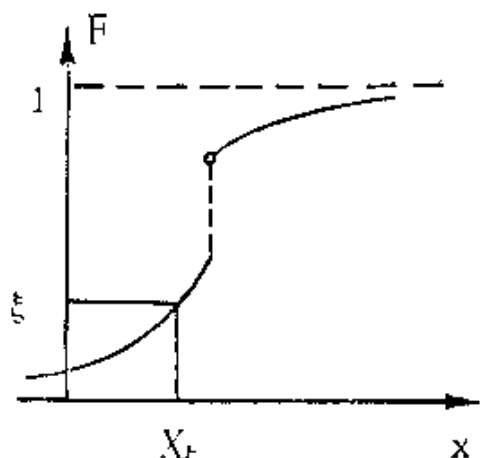


图3—1, a

产生任意的离散型分布 (图3—1, b);

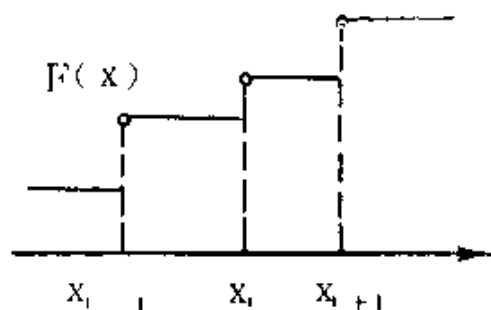


图3—1, b

$$F(x) = \sum_{x_i < x} p_i, \text{ 当随机数 } \xi \text{ 满足}$$

$$\sum_{j=1}^{i-1} p_j < \xi \leq \sum_{j=1}^i p_j \text{ 时, 取}$$

$$x_F = x_i.$$

此外,对存在反函数 $F^{-1}(y)$ 的连续分布函数 $F(x)$, (见图3—1, c) 有

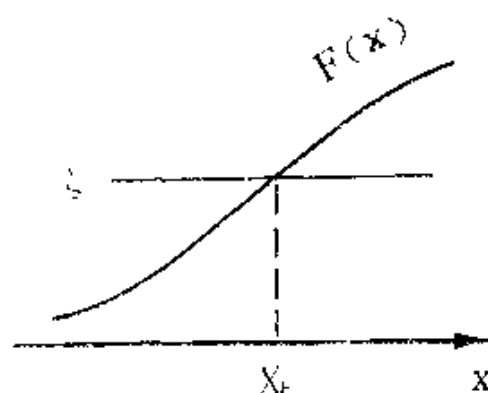


图3—1, c

$$x_F = \inf_{F(t) \geq \xi} t = F^{-1}(\xi).$$

二、挑选抽样法

设 $f(x)$ 是定义在 $(0, 1)$ 上的有界密度函数:

$$0 \leq f(x) \leq M,$$

而 $\{\xi_i, \eta_i\}$ 为随机数对, 令 $X_i = \xi_i$, $Y_i = M\eta_i$, 根据条件 $M\eta_i \leq f(\xi_i)$ (见图3—1, d), 选出序列

$$(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \dots, (X_N, Y_N)$$

从而得到序列 X_1, X_2, \dots, X_N .

由于

$$P\{x < \xi \leq x + dx\} = P\{x < \xi \leq x + dx, 0 < M\eta \leq f(\xi)\}$$

$$= P\{x < \xi \leq x + dx, 0 < M\eta \leq f(\xi)\}$$

$$\div P\{0 < M\eta \leq f(\xi)\}$$

$$= dx \cdot \frac{f(x)}{M} \div \left(\frac{1}{M}\right) = dx f(x).$$

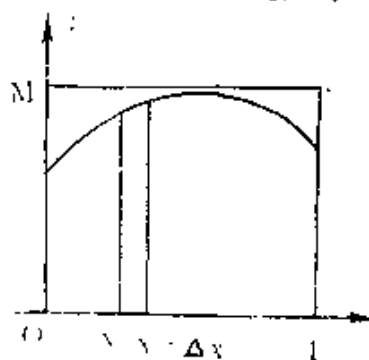
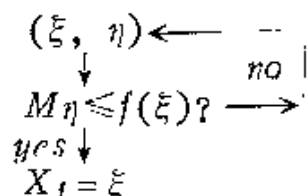


图3—1, d

所以序列 $\{X_k\}$ 的分布密度为 $f(x)$ 。

这种方法简单易行，其程序流程如下：



三、复合抽样法

在实际问题中经常遇到一些复杂的分布，它们具有条件分布的特征，诸如：

$$f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} p_k f_k(x), \quad p_k \geq 0, \quad \sum_k p_k = 1,$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_2(x|y) dF_1(y),$$

$$F(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x|y) dF_1(y)$$

等等。对这种复合分布我们可以利用两步抽样来实现。首先从分布 $F_1(y)$ 抽样产生 Y_{F_1} ，然后从分布 $f_2(x|Y_{F_1})$ （或 $\Phi(x|Y_{F_1})$ ）抽样产生 $X_{f_2(x|Y_{F_1})}$ 或 $X_{\Phi(x|Y_{F_1})}$ ，令

$$X_I = X_{f_2(x|Y_{F_1})} \quad (\text{或 } X_{\Phi(x|Y_{F_1})}).$$

事实上，这样的抽样满足：

$$P\{x \leq X_I < x + dx\} = P\{x \leq X_{f_2(x|Y_{F_1})} < x + dx\}$$

$$= \left\{ \int f_2(x|Y) dF_1(Y) \right\} dx = f(x) dx$$

所以 X_1 服从分布密度 $f(x)$ 。

四、抽样费用

本段中讨论上述各抽样法产生一个子样的代价(平均值)。所谓费用可以是所化费的工作量,机时或计算机费用。从分布 $F(x)$ 中抽样产生子样 X_F 的费用记为 $C(X_F)$,那么直接抽样的费用为

$$C(X_F) = C(\xi) + \int_0^1 C\left(\inf_{F(t) \geq \xi} t\right) d\xi.$$

对挑选抽样来说,并不那么简单。要挑选,就产生一个效率问题。挑选抽样的效率为

$$E = P\{M\xi \leq f(\eta)\} = \frac{1}{M} \int_0^1 f(\eta) d\eta = \frac{1}{M},$$

M 越大,效率越低,于是平均费用为

$$C(X_I) = \frac{1}{E} \{C(\xi, \eta) + \int C(M\xi \leq f(\eta)) d\eta\}$$

其中 $C(\xi, \eta)$ 为产生 (ξ, η) 的费用, $C(M\xi \leq f(\eta))$ 为进行一次比较的费用。

复合抽样的费用不仅依赖于第一次抽样,而且还依赖于第二次抽样,所以其平均费用为

$$C(X_f) = C(Y_{F_1}) + \int C(X_{f_2}(x|Y)) dF_1(Y)$$

特别是,对第一种复合分布的情况应为:

$$C(X_f) = C(Y_{F_1}) + \sum_n p_n C(X_{f_n}).$$

§2 随机抽样的一般方法

在本节我们将对许多常见的分布给出一般的随机抽样的方法。

一、加抽样法

这种方法是针对如下形式的加分布函数而设计的一种抽样方法：

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} p_n f_n(x), \quad p_n \geq 0, \quad \sum_n p_n = 1,$$

其中 $f_n(x)$ 是与参数 n 有关的分布密度函数, $n=1,2,\dots$ 。这实际上是复合分布的一种特殊情况。根据复合抽样方法,应采用两步抽样。首先按

$$F(y) = \sum_{n \leq y} p_n$$

用直接抽样法确定 n 、 $F(n-1) < \xi \leq F(n)$,然后按 $f_n(x)$ 产生抽样:

$$X_I = X_{I_n}.$$

其费用为

$$C(X_I) = C(\xi) + \sum_{n=1}^{\infty} p_n \{C(\xi \leq F(n)) + C(X_{I_n})\}.$$

二、乘抽样法

如下分布称为乘分布:

$$f(x) = H(x) f_1(x)$$

其中 $f_1(x)$ 为任意分布密度函数, $H(x) \leq M$ 。乘分布的抽样方

法为：首先从 $f_1(x)$ 中抽样 X_{f_1} ，然后取一随机数 ξ ，若有 $M\xi \leq H(X_{f_1})$ （见图3—2，a）则取 $X_f = X_{f_1}$ 。其程序流程如下：

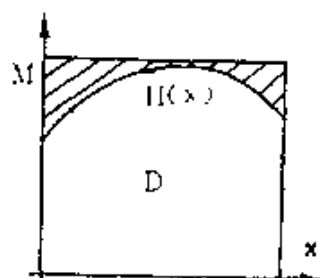
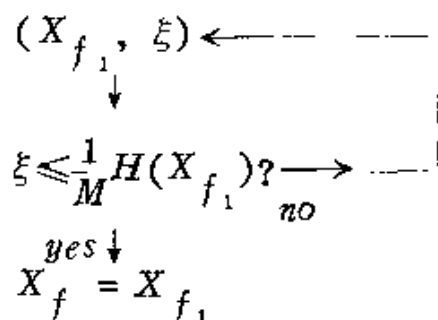


图3—2，a

下面我们证明 上述 抽样 法的正
确性：

$$\begin{aligned}
 P\{x < X_f \leq x + dx\} &= P\{x < X_{f_1} \leq x + dx \mid \\
 &\quad (X_{f_1}, M\xi) \in D\} \\
 &= P\{x < X_{f_1} \leq x + dx, M\xi \leq H(x)\} \div \\
 &\quad P\{(X_{f_1}, M\xi) \in D\} \\
 &= f_1(x) dx \frac{H(x)}{M} \div \left(\int f_1(x) \int_0^{H(x)/M} d\xi dx \right) \\
 &= f_1(x) H(x) \frac{dx}{M} \div \left(\frac{1}{M} \int f_1(x) H(x) dx \right) \\
 &= f_1(x) H(x) dx.
 \end{aligned}$$

这个方法的优点是可以降低挑选抽样中的上界 M ，从而提高方法的效率 $E = \frac{1}{M}$ 。 $f_1(x)$ 和 $f(x)$ 越是相近，则 M 可以取得越小（接近于1）。此方法的费用是

$$C(X_f) = \frac{1}{E} \{ C(X_{f_1}) + C(\xi) + \int C(\xi \leq \frac{H(x)}{M}) \cdot f_1(x) dx \}.$$

三、减抽样法

设密度函数 $f(x)$ 可表为

$$f(x) = A_1 f_1(x) - A_2 f_2(x)$$

其中 A_1 和 A_2 为非负实数， $f_1(x)$ 和 $f_2(x)$ 为任意两个分布密度函数。这种分布称为减分布。

一个办法是将 $f(x)$ 改写为

$$f(x) = (A_1 - A_2 \frac{f_2(x)}{f_1(x)}) f_1(x) = H(x) f_1(x)$$

设 $m = \inf_x \{f_2(x)/f_1(x)\}$ ，则 $H(x) \leq A_1 - mA_2$ ；

另一个办法是将 $f(x)$ 改写为

$$f(x) = (A_1 \frac{f_1(x)}{f_2(x)} - A_2) f_2(x) = H(x) f_2(x)$$

此时 $H(x) \leq (A_1/m - A_2) = (A_1 - mA_2)/m$ 。无论那一种办法都归结为乘抽样的情况。

四、乘加抽样法

设密度函数 $f(x)$ 可表为

$$f(x) = \sum_n H_n(x) f_n(x)$$

其中 $H_n(x) \geq 0$ ， $f_n(x)$ 为任意的分布密度函数， $n = 1, 2, \dots$ ，这种分布称为乘加分布。

下面只考虑两项的情况来说明此方法的思想。设

$$f(x) = H_1(x)f_1(x) + H_2(x)f_2(x)$$

将上式改写为

$$\begin{aligned} f(x) &= p_1 \cdot \frac{H_1(x)f_1(x)}{p_1} + p_2 \cdot \frac{H_2(x)f_2(x)}{p_2} \\ &= p_1 \bar{f}_1(x) + p_2 \bar{f}_2(x) \end{aligned}$$

其中 $p_i = \int H_i(x)f_i(x)dx$, $i = 1, 2$, $p_1 + p_2 = 1$, 于是将其归结为复合抽样。

五、乘减抽样法

设密度函数 $f(x)$ 可表为

$$f(x) = H_1(x)f_1(x) - H_2(x)f_2(x)$$

于是, 一个办法是将 $f(x)$ 改写为

$$\begin{aligned} f(x) &= f_1(x)\{H_1(x) - H_2(x)f_2(x)/f_1(x)\} \\ &= f_1(x)H(x) \end{aligned}$$

其中

$$H(x) \leq M_1(1 - m), \quad H_1(x) \leq M_1,$$

$$\frac{H_2(x)f_2(x)}{H_1(x)f_1(x)} \leq m;$$

另一个办法则是将 $f(x)$ 改写为

$$\begin{aligned} f(x) &= f_2(x) \left\{ \frac{H_1(x)f_1(x)}{f_2(x)} - H_2(x) \right\} \\ &= f_2(x)H(x), \end{aligned}$$

$$H(x) \leq M_2 \left\{ \frac{1}{m} - 1 \right\}, \quad H_2(x) \leq M_2.$$

无论用哪一种办法都归结为乘抽样的情况。

六、对称抽样法

设密度函数 $f(x)$ 可表为

$$f(x) = f_1(x) + H(x)$$

其中 $H(x)$ 为任意的奇函数, 即有 $H(-x) = -H(x)$; 而 $f_1(x)$ 为任意分布密度函数且为一偶函数, 即有 $f_1(-x) = f_1(x)$. 这种分布称为对称分布。

将 $f(x)$ 改写为:

$$f(x) = f_1(x) \left[1 + \frac{H(x)}{f_1(x)} \right] = f_1(x) H(x)$$

$$\text{令 } H_1(x) = \frac{1}{2} H(x)$$

如图3—2, b、3—2, c所示, 若我们单纯用挑选抽样法, 那么只有50%的效率; 但注意到 $H(x)$ 关于点 $(0, 1)$ 的中心对称性, 可以作如下改进:

从分布 $f_1(x)$ 产生抽样 X_{f_1} , 并且考虑二维抽样 $(\pm X_{f_1}, \xi)$, 对 X_f 作如下选择:

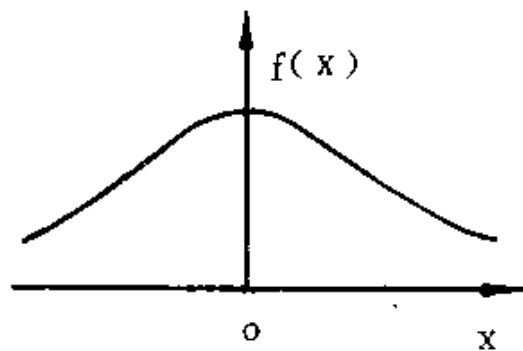


图3—2, b

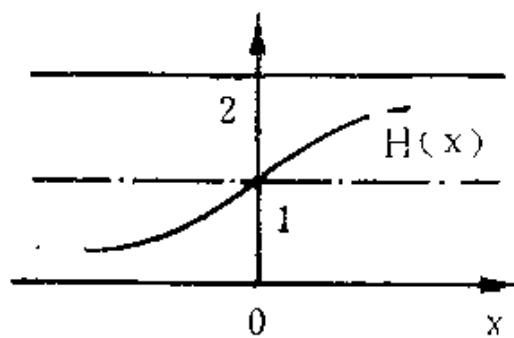
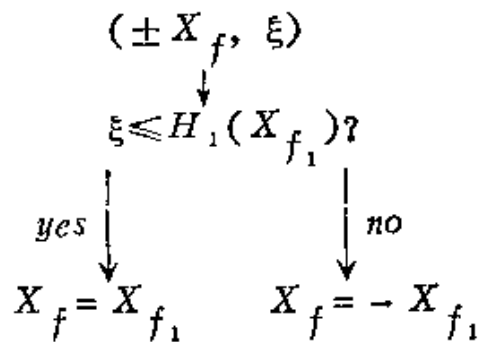


图3—2, c



根据这种方法，我们有如下正确性的证明：

$$\begin{aligned}
 \{x < X_f \leq x + dx\} &= \{x < X_{f_1} \leq x + dx, \xi \leq H_1(x)\} \cup \\
 &\{x < -X_{f_1} \leq x + dx, \xi > H_1(x)\} \\
 &= \{x < X_{f_1} \leq x + dx, \xi \leq H_1(x)\} \cup \{x < -X_{f_1} \leq x + dx, \\
 &\quad \xi \leq H_1(-x)\}。
 \end{aligned}$$

这种抽样的费用显然为

$$C(X_f) = C(X_{f_1}) + C(\xi) + C(\xi \leq H_1(X_{f_1}))。$$

七、积分抽样法

设密度函数 $f(x)$ 可表为

$$f(x) = \frac{\int_{-\infty}^{H(x)} f_0(x, y) dy}{\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{H(x)} f_0(x, y) dy}$$

称它为积分分布，其中 $f_0(x, y)$ 为任意二维分布密度函数， $H(x)$ 为任意函数。见图 3—2, d 。

对此，我们作如下抽样

(挑选抽样)：

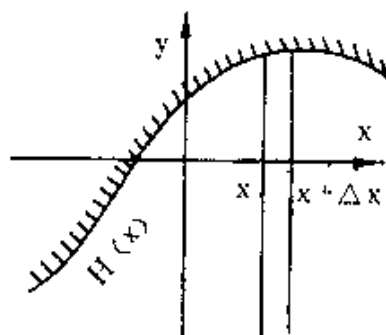
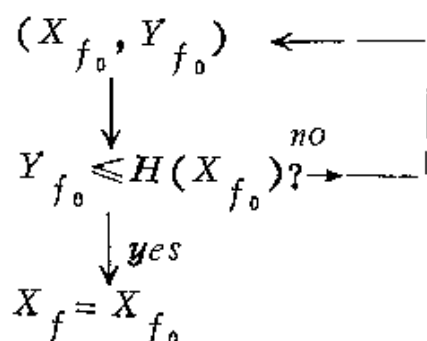


图3—2, d

根据这种作法，我们有

$$\{x < X_f \leq x + dx\} = \{x < X_{f_0} \leq x + dx \mid Y_{f_0} \leq H(X_{f_0})\}$$

所以其概率应为

$$P\{x < X_f \leq x + dx\} = f(x) dx =$$

$$= \frac{P\{x < X_{f_0} \leq x + dx, Y_{f_0} \leq H(x)\}}{P\{Y_{f_0} \leq H(x)\}}$$

从而我们证明了方法的正确性。

这种抽样的费用为

$$C(X_f) = \frac{1}{E} \{C(X_{f_0}, Y_{f_0}) + C(Y \leq H(x))\},$$

这里 $E = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{H(x)} f_0(x, y) dx dy$ 是效率因子。

§3 进一步推广

下面我们主要讨论前面所介绍方法的进一步推广的可能

性，以便我们能获得一些更为有效的抽样方法。

一、直接抽样的推广

已知随机变量 ξ 的分布密度函数为 $f_{\xi}(x)$ 。另有一随机变量 $\eta = \varphi(\xi)$ ， ξ 与 η 之间存在一一对应关系，且 φ 为单调上升（或者下降）的函数，因而存在反函数 ϕ ，使 $\xi = \phi(\eta)$ 。现在，我们要求 η 的分布密度函数 $f_{\eta}(y)$ 。事实上：

$$\begin{aligned} f_{\eta}(y) &= P\{y < \eta \leq y + dy\} / dy = P\{y < \varphi(\xi) \leq y + dy\} / dy \\ &= P\{\phi(y) < \xi \leq \phi(y + dy)\} / dy \quad [\text{或者为 } \phi(y) > \xi \geq \phi(y + dy)] \\ &= P\{\phi(y) < \xi \leq \phi(y) + \phi'(y)dy\} / dy \\ &= [F_{\xi}(\phi(y) + \phi'(y)dy) - F_{\xi}(\phi(y))] / dy \\ &= f_{\xi}(\phi(y)) |\phi'(y)|. \end{aligned}$$

在上节的直接抽样中， ξ 假定是个随机数，而 $\xi = F(\eta)$ （即 $\eta = F^{-1}(\xi)$ ）， $f_{\xi} = 1$ ，

$$f_{\eta}(y) = F'(y) = f_{\xi}(F(\eta)) F'(y) = F'(y)$$

只是本段的一个特例而已。

转而考虑二维随机变量的情况。设二维随机变量 $\xi = (\xi_1, \xi_2)$ 的分布密度为 $f_{\xi_1, \xi_2}(x, y)$ ，而另一个二维随机变量 $\eta = (\eta_1, \eta_2)$ 满足变换

$$\eta_1 = \varphi_1(\xi_1, \xi_2), \quad \eta_2 = \varphi_2(\xi_1, \xi_2)$$

且此变换可逆：

$$\xi_1 = \phi_1(\eta_1, \eta_2), \quad \xi_2 = \phi_2(\eta_1, \eta_2).$$

现在，要求 (η_1, η_2) 的分布密度 $f_{\eta_1, \eta_2}(u, v)$ 。为此我们考虑 $(\xi_1, \xi_2) \in \Omega$ 和 $(\eta_1, \eta_2) \in \Omega'$ 的概率，这里 Ω 为 (ξ_1, ξ_2) 的任一确定区域，而 Ω' 为相对应的 (η_1, η_2) 的某一区域。则应有

$$P\{(\xi_1, \xi_2) \in \Omega\} \equiv P\{(\eta_1, \eta) \in \Omega'\}.$$

事实上,

$$\begin{aligned} P\{(\xi_1, \xi_2) \in \Omega\} &= \iint_{\Omega} f_{\xi}(x, y) dx dy = \iint_{\Omega'} f_{\xi}(\phi_1, \phi_2) \\ &\quad |J| du dv \\ &= \iint_{\Omega'} f_{\eta}(u, v) du dv = P\{(\eta_1, \eta_2) \in \Omega'\} \end{aligned}$$

这里 J 是 ϕ_1, ϕ_2 的雅可比矩阵, $|J|$ 是其行列式的模。所以我们有

$$f_{\eta}(u, v) = f_{\xi}(\phi_1(u, v), \phi_2(u, v)) |J|,$$

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial \phi_1}{\partial u} & \frac{\partial \phi_1}{\partial v} \\ \frac{\partial \phi_2}{\partial u} & \frac{\partial \phi_2}{\partial v} \end{pmatrix} (u, v).$$

二、复合抽样的推广

已知一个二维随机变量 (ξ, η) 的分布密度函数为 $f_0(x, y)$ 。设随机变量 $v = \varphi(\xi, \eta)$, 并且有 $\xi = \phi(v, \eta)$, 即满足关于 ξ 的可逆性要求。现在, 要求 v 的分布密度。事实上, 我们根据

$$\begin{aligned} F_v(u) &= P\{v < u\} = \iint_{\varphi(x, y) < u} f_0(x, y) dx dy = \\ &= \int_{-\infty}^u \int_{-\infty}^{\infty} f_0(\phi(u, y), y) dy du |\phi'_u(u, y)| \\ &= \int_{-\infty}^u f_v(u) du \end{aligned}$$

我们推得 v 的分布密度函数 $f_v(u)$ 为

$$f_v(u) = \int_{-\infty}^{\infty} f_0(\phi(u, y), y) |\phi'_u(u, y)| dy.$$

对 $v = \varphi(\xi, \eta) = \xi = \phi(v, \eta)$ 的特例, 我们得到上节的复合分布

$$f_v(u) = \int_{-\infty}^{\infty} f(u, y) dy = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(u|y) f_2(y) dy.$$

下面是几种经常遇到的特例:

$$(1) \quad f_0(x, y) = f_1(y), \quad \xi = F_2(v - \eta) = \phi(v, \eta), \\ v = F_2^{-1}(\xi) + \eta,$$

$$f_v(u) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(y) f_2(u - y) dy,$$

它的抽样方法为: $Z_f = Z_{f_1} + Z_{f_2}$.

$$(2) \quad f_0(x, y) = f_1(y), \quad \xi = F_2\left(\frac{v}{\eta}\right) = \phi(v, \eta), \\ v = F_2^{-1}(\xi) \eta,$$

$$f_v(u) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(y) f_2\left(\frac{u}{y}\right) \frac{1}{|y|} dy,$$

它的抽样方法为: $Z_f = Z_{f_1} \cdot Z_{f_2}$

$$(3) \quad f_0(x, y) = f_1(y), \quad \xi = F_2(v\eta) = \phi(v, \eta), \\ v = \frac{1}{\eta} F_2^{-1}(\xi),$$

$$f_v(u) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(y) f_2(uy) |y| dy,$$

它的抽样方法为: $Z_f = Z_{f_2} / Z_{f_1}$ 。

我们示范性地证明(2)的抽样法的正确性。事实上,

$$\begin{aligned} \{u < Z_f \leq u + du\} &= \bigcup_{Z_{f_1}} \{Z_{f_1}, u < Z_{f_1} Z_{f_2} \leq \\ &\quad u + du\} \\ &= \bigcup_{Z_{f_1}} \{Z_{f_1}, \frac{u}{Z_{f_1}} < Z_{f_2} \leq \frac{u + du}{Z_{f_1}}\} \end{aligned}$$

所以有

$$\begin{aligned} f(u) du &= P\{u < Z_f \leq u + du\} = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(y) f_2\left(\frac{u}{y}\right) \\ &\quad \frac{du}{|y|} dy. \end{aligned}$$

上面其他公式的证明完全类似。

三、偏倚抽样法

已知分布 $\tilde{f}(x)$ 中的抽样, 我们要从 $\tilde{f}(x)$ 的抽样中获得另一个分布 $f(x)$ 的抽样。为此, 我们利用一般权函数的公式

$$f(x) = w(x) \cdot \tilde{f}(x)$$

这里 $w(x)$ 为权重因子。由于

$$\begin{aligned} f(x) dx &= P\{x < Z_f \leq x + dx\} = W(Z_f) P\{x < Z_{\tilde{f}} \leq \\ &\quad x + dx\} \\ &= W(x) \tilde{f}(x) dx \end{aligned}$$

可以将 $W(x)$ 理解成事件的重复次数，于是 $f(x)$ 的一个子样 Z_f 提供 $f(x)$ 分布中的 $W(Z_f)$ 个子样 Z_{f_1} 。这种处理方法在许多应用问题中十分有用。

四、多维分布抽样方法

我们考虑二维分布 $f(x, y)$ ，利用边缘分布将 $f(x, y)$ 改写成

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

这里 $f_1(x)$ 和 $f_2(y|x)$ 分别为 $f(x, y)$ 的边缘分布和条件分布，于是有

$$X_f = X_{f_1}, \quad Y_f = Y_{f_2}(y|X_{f_1})$$

这样的抽样法的费用显然为

$$C(X_f, Y_f) = C(X_{f_1}) + C(Y_{f_2}(y|X_{f_1})).$$

最后，还要指出对多维分布的抽样可以利用前节中所介绍的方法，诸如乘抽样，乘加抽样等等，这里不再赘述。

§4 某些常用分布的随机抽样

在本节中我们要介绍统计物理和数学中常见的一些分布。其中有关于粒子空间位置的分布函数，粒子能量的分布函数，粒子运动方向的分布函数和一些著名的数学分布函数等。对这些分布的抽样法而言，经济性仍然是我们关注的主要因素。因为它们在实际问题的应用中将被亿、万次地重复使用。

一、粒子位置分布的随机抽样

(1) 圆均匀分布

圆均匀分布即指点均匀地分布在圆内的分布(图3—4, a)。设圆的半径为 R_0 , 点到中心的距离为 r , 则 r 的分布密度函数为:

$$f(r) = \begin{cases} \frac{2r}{R_0^2} & \text{当 } 0 \leq r < R_0 \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

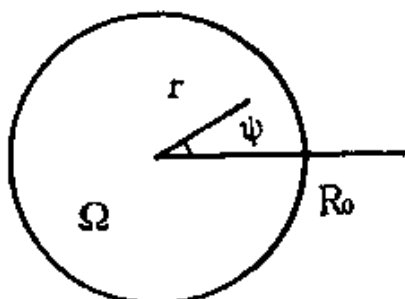


图3—4, a

事实上, 在笛氏直角坐标系中密度函数为

$$f(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{\pi R_0^2} & (x, y) \in \Omega, \\ 0 & (x, y) \notin \Omega. \end{cases}$$

利用极坐标 (r, φ) 得到

$$\iint_{\Omega} \frac{1}{\pi R_0^2} d\sigma_{xy} = \iint_{\Omega} \frac{2r}{2\pi R_0^2} dr d\varphi = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \int_0^{R_0} \frac{2r}{R_0^2} dr$$

所以有

$$f(r, \varphi) = f_1(\varphi) f_2(r), \quad f_1(\varphi) = \frac{1}{2\pi}, \quad f_2(r) = \frac{2r}{R_0^2}$$

$$F_2(r) = r^2/R_0^2 \quad (0 \leq r \leq R_0).$$

用直接抽样法(见本章§1, —)可得

$$Zr = F_2^{-1}(\xi) = R_0 \sqrt{\xi}.$$

开方运算在电子计算机上是很费时间的, 因此方法不经济。

用挑选抽样法, 首先作变换 $r = R_0 \eta$, 于是根据§3, 一知

$$f_{\eta}(y) = f_r(R_0 y) R_0 = \begin{cases} 2y & y \in (0, 1), \\ 0 & y \notin (0, 1). \end{cases}$$

对分布 $f_{\eta}(y)$ (图 3—4, b) 用挑选抽样法:

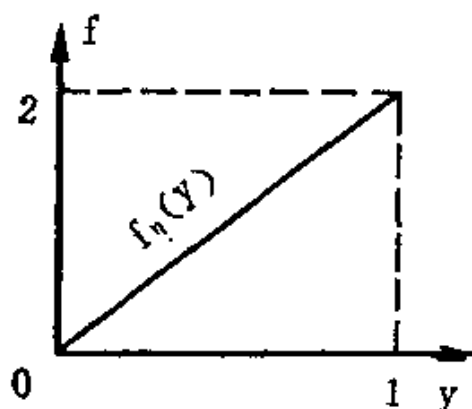
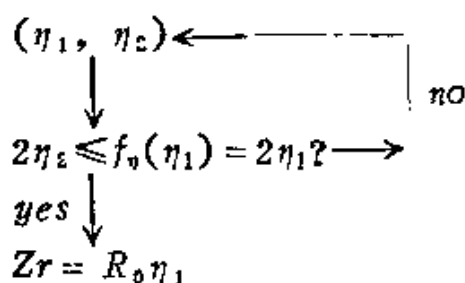


图3—4, b



这种方法的效率 $E = \frac{1}{2}$ 。为了减少这一消费, 可以根据

对称抽样的作法, 取

$$Zr = R_0 \max(\eta_1, \eta_2)。$$

下面我们证明这种抽样法的正确性。

事实上, 令 $\eta = \max(\eta_1, \eta_2)$, 则

$$\begin{aligned} f_{\eta}(x) dx &= P\{x < \eta \leq x + dx\} = P\{x < \max(\eta_1, \eta_2) \leq x + dx\} \\ &= P\{x < \eta_1 \leq x + dx, \eta_2 \leq x\} + P\{\eta_1 \leq x, x < \eta_2 \leq x + dx\} \end{aligned}$$

$$= xdx + xdx = 2xdx$$

从而得到

$$f_{\eta}(x) = 2x.$$

(2) 环均匀分布

环均匀分布是指点均匀地分布在半径为 R_0 ，外半径为 R_1 的环内的分布（图 3—4，c）。令点到中心的距离为 r ，则 r 的分布密度为：

$$f(r) = \begin{cases} \frac{2r}{R_1^2 - R_0^2} & \text{当 } r \in (R_0, R_1) \\ 0 & \text{当 } r \notin (R_0, R_1) \end{cases}$$

对这种分布同样不应使用直接抽样法，应该使用复合抽样法或对称抽样法。先作变换 $r = (R_1 - R_0)\xi + R_0$,

$$f_{\xi}(x) = \frac{1}{R_1 + R_0} \cdot$$

$$[2(R_1 - R_0)x + 2R_0]$$

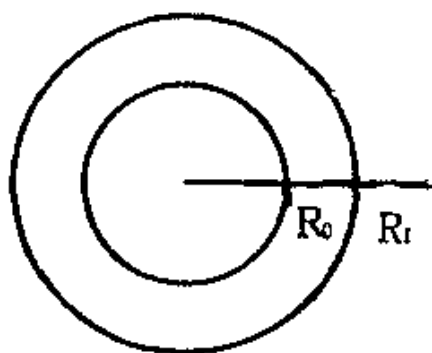


图3—4, c

$$\begin{aligned} &= \frac{R_1 - R_0}{R_1 + R_0} \cdot 2x + \frac{2R_0}{R_1 + R_0} \cdot 1 \\ &= p_1 \cdot 2x + p_2 \cdot 1 \end{aligned}$$

其中 $p_1 = \frac{R_1 - R_0}{R_1 + R_0}$, $p_2 = \frac{2R_0}{R_1 + R_0}$, $p_1 + p_2 = 1$ 。用复合抽

样法的流程为（每次需用两个或三个随机数）：

$$\begin{array}{l}
 \xi_1 \\
 \downarrow \\
 \xi_1 \leq p_1 ? \xrightarrow{\text{no}} Zr = (R_1 - R_0)\eta_3 + R_0 \\
 \downarrow \text{yes} \\
 Zr = (R_1 - R_0)\max(\eta_1, \eta_2) + R_0
 \end{array}$$

更为经济的，可以用对称抽样法（每次只需两个随机数见图 3—4，d）：

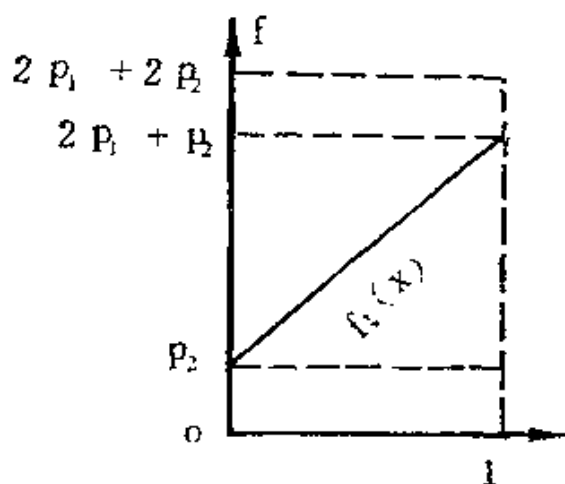


图 3—4, d

$$\begin{array}{l}
 (\xi, \eta) \begin{cases} f_\xi(\xi) \geq 2(p_1 + p_2)\eta \rightarrow Zr = (R_1 - R_0)\xi + R_0, \\
 f_\xi(\xi) < 2(p_1 + p_2)\eta \rightarrow Zr = (R_1 - R_0)(1 - \xi) + R_0 \\
 \quad = R_1 - (R_1 - R_0)\xi \end{cases}
 \end{array}$$

（3）球均匀分布

均匀分布在半径为 R 的球内，其分布密度函数在笛氏坐标系中为：

$$f(x, y, z) = \begin{cases} \frac{3}{4\pi R^3} & \text{当 } x^2 + y^2 + z^2 \leq R^2 \\
 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

在球坐标系 (r, θ, φ) 中, $0 \leq r \leq R, 0 \leq \theta \leq \pi, 0 \leq \varphi < 2\pi$, 容易求得其分布密度为:

$$f(r, \theta, \varphi) = \frac{3}{4\pi R^3} r^2 \sin \theta = \frac{3r^2}{R^3} \cdot \frac{\sin \theta}{2} \cdot \frac{1}{2\pi} \\ = f_r(r) \cdot f_\theta(\theta) \cdot f_\varphi(\varphi)$$

其中 $f_r(r) = \frac{3r^2}{R^3}$, $f_\theta(\theta) = \frac{\sin \theta}{2}$, $f_\varphi(\varphi) = \frac{1}{2\pi}$. 为了从

$f_r(r) = \frac{3r^2}{R^3}$ 中抽样, 先作变换 $r = R\eta$, 于是从§3、一知

$$f_\eta(y) = f_r(Ry)R = 3y^2 \quad y \in (0, 1).$$

从 $f_\eta(y)$ 的抽样与(1)类似, 取

$$Z_\eta = \max(\eta_1, \eta_2, \eta_3),$$

$$Z_r = RZ_\eta$$

在笛氏坐标系中可直接对 $f(x, y, z)$ 用挑选抽样法:

$$(\eta_1, \eta_2, \eta_3) \leftarrow \dots$$

$$\downarrow$$

$$\eta_1^2 + \eta_2^2 + \eta_3^2 \leq 1 ? \quad \text{no} \quad \text{yes}$$

$$\downarrow$$

$$X_f = R\eta_1, Y_f = R\eta_2, Z_f = R\eta_3$$

抽样效率为 $\pi/6 \cong 0.524$.

(4) 球壳均匀分布

球壳是指内半径为 R_0 , 外半径为 R_1 的空心球体。其径向 r 的分布密度为

$$f(r) = \begin{cases} \frac{3r^2}{R_1^3 - R_0^3} & \text{当 } r \in (R_0, R_1) \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

引入变换 $r = (R_1 - R_0)\xi + R_0$, 则可将上面的分布变为一个与 x 有关的加分布:

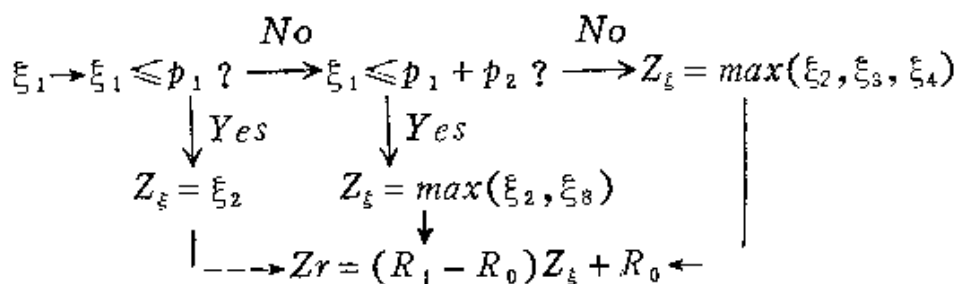
$$\begin{aligned} f_{\xi}(x) &= (R_1 - R_0) \cdot f((R_1 - R_0)x + R_0) \\ &= 3 \cdot \frac{R_1 - R_0}{R_1^3 - R_0^3} [(R_1 - R_0)^2 x^2 + 2R_0(R_1 - R_0)x + R_0^2] \\ &= p_1 \cdot 1 + p_2 \cdot 2x + p_3 \cdot 3x^2 \\ &= p_1 f_1(x) + p_2 f_2(x) + p_3 f_3(x) \end{aligned}$$

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

$$\lambda = R_1^2 + R_1 R_0 + R_0^2,$$

$$f_1(x) = 1, f_2(x) = 2x, f_3(x) = 3x^2.$$

于是有球壳均匀分布的加抽样法如下:



(5) 指数分布

指数分布的分布密度函数如下:

$$f(x) = \begin{cases} e^{-x} & x \geq 0 \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

它是许多应用问题中最重要的分布之一。根据直接抽样方法可取

$$X_f = -\ln \xi$$

这需要计算对数，不经济。为寻求有效的方法，将 $f(x)$ 改写成

$$f(x) = e^{-x} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n} f_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n f_n(x),$$

$$\text{其中 } f_n(x) = \begin{cases} e^{-(x-n)} & x \in (n, n+1) \\ 0 & \text{其他} \end{cases}, \quad p_n = e^{-n}.$$

首先，我们注意到

$$\begin{aligned} & P\{x \leq \xi_1 < x+dx, \xi_1 > \xi_2 > \xi_3 > \cdots > \xi_{i+1}\} \\ &= dx \int_0^x d\xi_2 \int_0^{\xi_2} d\xi_3 \cdots \int_0^{\xi_i} d\xi_{i+1} = \frac{x^i}{i!} dx. \end{aligned}$$

因此，

$$\begin{aligned} & P\{\xi_1 \nless \xi_2\} + P\{\xi_1 > \xi_2 > \xi_3 \nless \xi_4\} + \cdots \\ &= 1 - P\{\xi_1 > \xi_2\} + P\{\xi_1 > \xi_2 > \xi_3\} - \\ & \quad P\{\xi_1 > \xi_2 > \xi_3 > \xi_4\} + \cdots \end{aligned}$$

将事件 A 记为

$$\{A\} = \left(\bigcup_{k=0}^{\infty} \{\xi_1 > \cdots > \xi_{2k+1} \nless \xi_{2k+2}\} \right) \cap \{\xi_1 \in (x, x+dx)\},$$

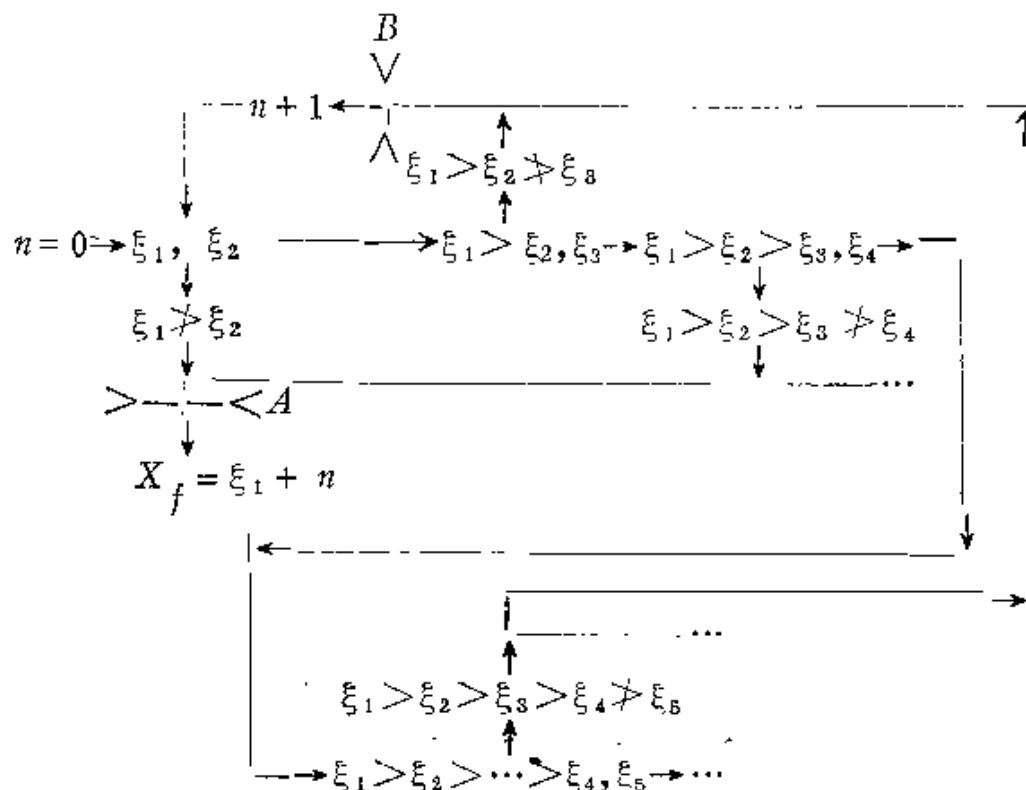
则

$$P\{A\} = \begin{cases} e^{-x} dx & 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

令事件 B 为 $B = \overline{\bigcup_x \{A\}}$ ，则有

$$P\{B\} = 1 - \int_0^1 P\{A\} = 1 - \int_0^1 e^{-x} dx = e^{-1}.$$

根据上面的分析，冯·诺伊曼给出如下抽样方法：



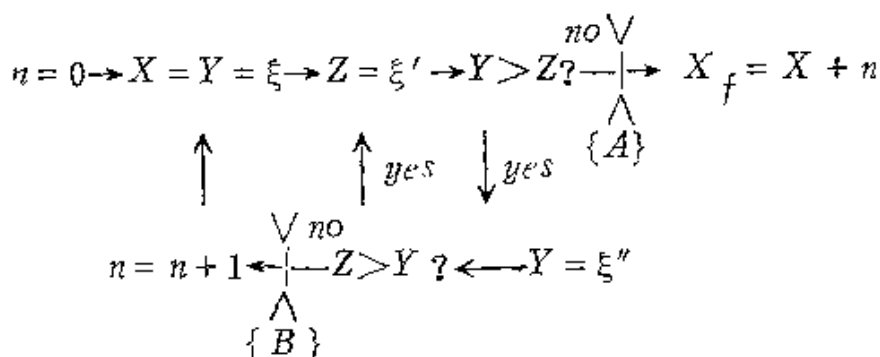
这个抽样过程事件可表为

$$\{A\} \cup \{B, A\} \cup \{B, B, A\} \cup \dots \cup \{B, B, \dots, B, A\} \cup \dots$$

抽样方法的正确性可从下式得知，

$$\begin{aligned} P\{x \leq X_f < x + dx\} &= \sum_{n=0}^{\infty} P\{\overbrace{B, B, \dots, B}^n, A\} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n} P\{A\} \\ &= e^{-n} e^{-(x-n)} dx = e^{-x} dx. \end{aligned}$$

该过程的程序流程图总结如下：



每产生一个 f 的抽样 X_f 所需的随机数的平均个数为:

$$N = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n} (nN_B + N_A),$$

$$N_A = 2P(A_1) + 4P(A_2) + \dots,$$

$$N_B = 3P(B_1) + 5P(B_2) + \dots,$$

由于

$$N = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n} (nN_B + N_A) \leq (N_A + N_B) \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)e^{-n},$$

$$N_A + N_B = 2 + P\{\xi_1 > \xi_2\} + P\{\xi_1 > \xi_2 > \xi_3\} + \dots \leq 1 + e,$$

所以
$$N \leq \frac{(1+e)e}{e-1} \cong 5.88.$$

(6) 截尾指数分布

截尾指数分布的一般形式如下:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{e^{-x}}{1 - e^{-L}} & \text{当 } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

这种分布的直接抽样方法如下

$$X_f = -\ln[1 - (1 - e^{-L})\xi].$$

为了避免对数运算, 可以采用近似—修正抽样方法。为此引

入近似分布

$$f_a(x) = \begin{cases} \frac{\lambda+L}{L} \frac{\lambda}{(\lambda+x)^2} & \text{当 } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

其中 $\lambda = \frac{L}{e^{\frac{L}{2}} - 1}$ 。对此分布的直接抽样方法：

$$F_a(x) = \frac{\lambda+L}{L} \left[\lambda \frac{x}{\lambda+x} \right], \quad F_a^{-1}(\xi) = \frac{\lambda L \xi}{\lambda + L - L \xi}$$

$$= \lambda \left(\frac{\lambda + L}{\lambda + L \xi'} - 1 \right),$$

$$\xi' = 1 - \xi,$$

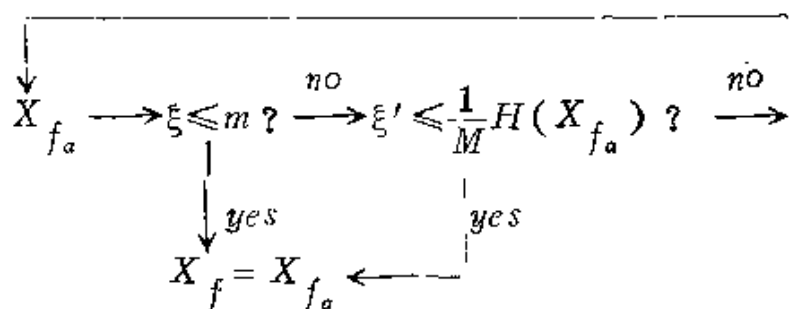
$$X_{f_a} = \lambda \left(\frac{\lambda + L}{\lambda + L \xi} - 1 \right).$$

我们可以将 $f(x)$ 表为：

$$f(x) = m f_a(x) + (1-m) H(x) f_a(x),$$

其中 $H(x) = \left(\frac{f(x)}{f_a(x)} - m \right) / (1-m)$, $m = \inf_x \left\{ \frac{f(x)}{\xi f_a(x)} \right\}$,

设 $H(x) \leq M$, 则有截尾指数分布的近似—修正方法如下：



这种方法有概率 m 的可能不必计算超越函数,

$m = \frac{L\lambda}{(L+\lambda)} \cdot \frac{1}{(1-e^{-L})}$ 。各种 L 所对应的 m 值列于下表

$\frac{L}{m}$	0.5,	1,	2,	3
	0.99,	0.96,	0.85,	0.70

(7) 自由程分布

粒子迁移的自由程 x 服从分布

$$f(x) = \begin{cases} \Sigma(x) e^{-\int_0^x \Sigma(s) ds} & \text{当 } x \geq 0 \\ 0 & \text{其他,} \end{cases}$$

这里 $\Sigma(x)$ 表示粒子总截面。指数分布是自由程分布的最简单情况。自由程的分布函数为

$$\begin{aligned} F(x) &= \int_0^x f(x) dx = \int_0^x \Sigma(x) e^{-\int_0^x \Sigma(s) ds} dx \\ &= 1 - e^{-\int_0^x \Sigma(s) ds}, \end{aligned}$$

因而其直接抽样方法需要解如下方程

$$\int_0^x \Sigma(s) ds = -\ln \xi$$

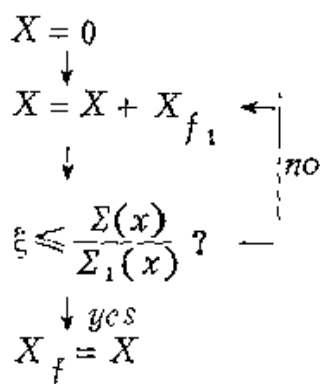
这是十分困难的。

引入假想的粒子总截面 $\Sigma_1(x)$ (见图 3—4, e), 满足

$$\Sigma_1(x) \geq \Sigma(x), (x \geq 0)$$

由 $\Sigma_1(x)$ 所确定的自由程分布用 $f_1(x)$ 表示, 对 $f_1(x)$ 用直接抽样法容易实现且运算量小。

那么, 对 $f(x)$ 的抽样可以如下进行 (流程 a)



(流程 a)

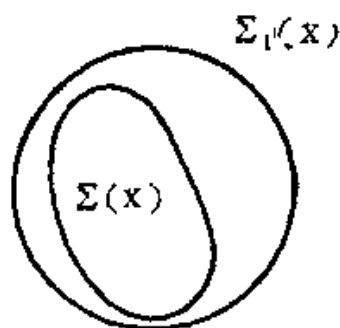
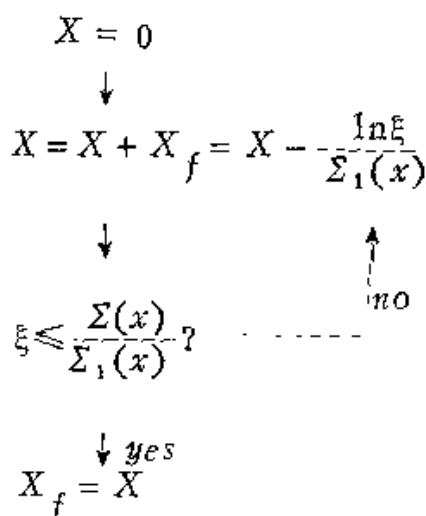


图 3—4, e



(流程 b)

通常取 $\Sigma_1(x) = \Sigma_1 = \sup_x \Sigma(x)$, 于是 $f_1(x) = \Sigma_1 e^{-x\Sigma_1}$ 为指数分布, 对这样的 $f(x)$ 的抽样可如流程 b 进行。

二、粒子能量分布的随机抽样

(1) 光子散射能量分布

以 $m_e c^2$ 为能量单位, 其中 m_e 为电子的静止质量, c 为光速。令光子散射前后的能量依次为 α 和 α' , 引入新变量 $x = \alpha/\alpha'$, 则 x 服从如下分布:

$$f_a(x) = \begin{cases} \frac{1}{K(\alpha)} \left\{ \left(\frac{\alpha+1-x}{\alpha x} \right)^2 + \frac{1}{x} - \frac{1}{x^2} + \frac{1}{x^3} \right\} \\ \text{当 } 1 \leq x \leq 2\alpha + 1 \\ 0 \quad \text{其他,} \end{cases}$$

其中 $K(\alpha)$ 为归一因子,

$$K(\alpha) = \left[1 - \frac{2(\alpha+1)}{\alpha^2} \right] \ln(2\alpha+1) + \frac{1}{2} + \frac{4}{\alpha} - \frac{1}{2(2\alpha+1)^2}.$$

该分布即为光子散射能量分布。

注意到

$$\begin{aligned} \left(\frac{\alpha+1-x}{\alpha x} \right)^2 + \frac{1}{x} - \frac{1}{x^2} + \frac{1}{x^3} &= \frac{1}{x^3} + \frac{2\alpha+1}{\alpha^2} \cdot \frac{1}{x^2} + \\ &+ \left(1 - 2\frac{\alpha+1}{\alpha^2} \right) \frac{1}{x} + \frac{1}{\alpha^2}, \end{aligned}$$

当 $\alpha \geq 1 + \sqrt{3}$ 时 $f_a(x)$ 形成加分布形式。事实上, $f_a(x)$ 可表为:

$$\begin{aligned} f_a(x) &= \frac{2\alpha^2}{(2\alpha+1)^2} \frac{1}{K(\alpha)} \cdot f_{a,1}(x) + \left[\frac{2}{\alpha} + \frac{2\alpha}{(2\alpha+1)^2} \right] \cdot \\ &\frac{1}{K(\alpha)} \cdot f_{a,2}(x) + \left(1 - 2\frac{\alpha+1}{\alpha^2} \right) \cdot \frac{\ln(1+2\alpha)}{K(\alpha)} \cdot \\ &\cdot f_{a,3}(x) + \frac{2}{\alpha} \cdot \frac{1}{K(\alpha)} \cdot f_{a,4}(x), \end{aligned}$$

这里 $f_{a,1}(x) = \frac{2\alpha+1}{\alpha^2} \frac{2\alpha+1-x}{x^3}, f_{a,2}(x) = \frac{2\alpha+1}{2\alpha} \frac{1}{x^2},$

$$f_{a,3}(x) = \frac{1}{\ln(1+2\alpha)} \frac{1}{x}, f_{a,4}(x) = \frac{1}{2\alpha}.$$

由于

$$f_{a,1} = 2 \left(\frac{2\alpha+1-x}{2\alpha x} \right) \left(\frac{2\alpha+1}{2\alpha x^2} \right) = 2\phi(x)\phi'(x),$$

引进变换

$$t = \phi(x) = \frac{2\alpha+1-x}{2\alpha x}, \quad t \in (0, 1)$$

而 $x = \frac{2\alpha+1}{2\alpha t+1},$

分布密度 $f_{a,1}(x)$ 化为:

$$f_{a,1}(t) = 2t;$$

另一方面, 对分布 $f_{a,2}(x), f_{a,3}(x)$ 应用直接抽样法, 得到

$$F_{a,2}(x) = \left(\frac{2\alpha+1}{2\alpha} \right) \left(1 - \frac{1}{x} \right),$$

$$F_{a,2}^{-1}(\xi) = \frac{2\alpha+1}{2\alpha(1-\xi)+1} = \frac{2\alpha+1}{2\alpha\xi'+1},$$

$$F_{a,3}(x) = \frac{\ln x}{\ln(1+2\alpha)}, \quad F_{a,3}^{-1}(\xi) = e^{\xi \ln(1+2\alpha)}$$

——(见倒数分布)

所以当 $\alpha \geq 1 + \sqrt{3}$ 时可以这样抽样

$$K = K(\alpha) \xi_1 - \frac{2\alpha^2}{(2\alpha+1)^2} \leq 0 ? \xrightarrow{\text{yes}} \downarrow$$

$$\text{no} \downarrow X_{f_a} = X_{f_{a,1}} = \frac{2\alpha+1}{2\alpha \max(\xi_2, \xi_3) + 1}$$

$$K = K - \left[\frac{2}{\alpha} + \frac{2\alpha}{(2\alpha+1)^2} \right] \leq 0 ? \xrightarrow{\text{yes}} \downarrow$$

$$\text{no} \downarrow X_{f_a} = X_{f_{a,2}} = \frac{2\alpha+1}{2\alpha \xi_2 + 1}$$

$$K = K - \frac{2}{\alpha} \geq 0 ? \xrightarrow{\text{yes}} \downarrow$$

$$\text{no} \downarrow X_{f_a} = X_{f_{a,3}} = e^{\xi_2 \ln(1+2\alpha)}$$

(见倒数分布)

$$X_{f_a} = X_{f_{a,4}} = 2\alpha \xi_2 + 1.$$

在不限定条件 $\alpha \geq 1 + \sqrt{3}$ 的情况下, 用乘加抽样法,

$$f_a(x) = H_1(x)f_{a,1}(x) + H_2(x)f_{a,2}(x),$$

其中

$$f_{a,1}(x) = \frac{2\alpha+1}{2\alpha} \frac{1}{x^2}, \quad f_{a,2}(x) = \frac{1}{2\alpha};$$

$$H_1(x) = \frac{2\alpha}{(2\alpha+1)K(\alpha)} \left[1 + \left(\frac{\alpha+1}{\alpha} - \frac{x}{\alpha} \right)^2 \right],$$

$$H_2(x) = \frac{2\alpha}{K(\alpha)} \cdot \frac{(x-1)^2}{x^3}。$$

(2) 光子伴随散射能量分布

设光子散射前后的能量分别为 α, α' ，所谓光子伴随散射能量分布是指在 α' 已经确定的情况下，光子散射前能量 α 所服从的分布。引入新变量

$$x = \frac{\alpha'}{\alpha},$$

则 x 服从如下分布

$$f_{\alpha'}(x) = \begin{cases} \frac{1}{K^+(\alpha')} \left[x - 1 + \frac{1}{x} + \left(1 - \frac{1}{\alpha'} + \frac{x}{\alpha'}\right)^2 \right] \\ \text{当 } \frac{\alpha'}{\alpha_M} \leq x \leq 1 \\ 0 \quad \text{其他,} \end{cases}$$

这里 α_M 为满足

$$\alpha_M \geq \frac{\alpha'}{1 - 2\alpha'}$$

的任何可能值， $K^+(\alpha')$ 为归一化因子。

引入两个分布密度函数 $f_{\alpha', 1}(x)$ 和 $f_{\alpha', 2}(x)$ ，在条件 $\alpha' / \alpha_M \leq x \leq 1$ 满足时，它们为

$$f_{\alpha', 1}(x) = \frac{\alpha_M}{\alpha_M - \alpha'}, \quad f_{\alpha', 2}(x) = \frac{\alpha'}{\alpha_M - \alpha'} \cdot \frac{1}{x^2},$$

在其他点处均为零。相应的 $H_1(x, \alpha')$ 和 $H_2(x, \alpha')$ 分别为：

$$H_1(x, \alpha') = \frac{\alpha_M - \alpha'}{\alpha' K^+(\alpha')} \left[\left(1 - \frac{1}{\alpha'} + \frac{x}{\alpha'}\right)^2 + 1 \right],$$

$$H_2(x, \alpha') = \frac{\alpha_M - \alpha'}{\alpha' K^+(\alpha')} (x-1)^2 x.$$

于是, 分布 $f_{\alpha'}(x)$ 有如下新形式:

$$f_{\alpha'}(x) = H(x, \alpha') f_{\alpha'_1}(x) + H_2(x, \alpha') f_{\alpha'_2}(x),$$

对此可用乘加抽样法, 其效率为:

$$E = K^+(\alpha') \frac{27\alpha' \alpha_M}{(54\alpha' + 4\alpha_M)(\alpha_M - \alpha')}.$$

(3) 光子伴随散射波长分布

设光子散射前后的波长分别为 λ 和 λ' , 则光子伴随散射波长 λ 服从如下分布:

$$f_{\lambda'}(\lambda) =$$

$$\begin{cases} \frac{1}{K^{++}(\lambda')} \frac{\lambda^2}{\lambda'^2} \left[\frac{\lambda'}{\lambda} + \frac{\lambda}{\lambda'} - 1 + (1 - \lambda' + \lambda)^2 \right] & \text{当 } \lambda'_0 \leq \lambda \leq \lambda', \\ 0 & \text{其他,} \end{cases}$$

其中 $K^{++}(\lambda')$ 为归一化因子, $\lambda' - 2 \leq \lambda'_0 \leq \lambda'$ 。

令 $\alpha = 2(1 - \lambda') + \frac{1}{\lambda'}$, $\beta = (1 - \lambda')^2 - 1$, 引进变换

$$\lambda = ax + b = \frac{\lambda' - \lambda'_0}{2} x + \frac{\lambda' + \lambda'_0}{2}, \quad -1 \leq x \leq 1,$$

则分布 $f_{\lambda'}(\lambda)$ 变成如下形式:

$$f_{\lambda'}(x) =$$

$$\begin{cases} \frac{1}{K^{++}(\lambda')} \frac{a}{\lambda'^2} (Ax^4 + Bx^3 + Cx^2 + Dx + E) & \text{当 } -1 \leq x \leq 1, \\ 0 & \text{其他,} \end{cases}$$

其中 $A = a^4$, $B = (4b + \alpha)a^3$, $C = (6b^2 + 3ab + \beta)a^2$,

$$D = (4b^3 + 3ab^2 + 2\beta b + \lambda')a, E = b^4 + \alpha b^3 + \beta b^2 + \lambda' b.$$

显然有 $A \geq 0$, 按照分布密度函数的定义, 有 $E \geq 0$.

而

$$C = [3b(2b + \alpha) + \beta]a^2 = [3b(2 - \lambda' + \lambda'_0 + \frac{1}{\lambda'}) + (1 - \lambda')^2 - 1]a^2$$

$$= [\lambda' + 3\lambda'_0 - \frac{1}{2}\lambda'^2 + \frac{3}{2}\lambda'_0{}^2 + \frac{3}{2}(1 + \frac{\lambda'_0}{\lambda'})]a^2,$$

由于 $2 - \lambda' + \lambda'_0 \geq 0$, 所以也有 $C \geq 0$. 从而有对称分布

$$f_{\lambda'}(x) = f_{\lambda',1}(x) + H(x),$$

其中 $f_{\lambda',1}(x)$ 为偶函数, $H(x)$ 为奇函数。

$$f_{\lambda',1}(x) = \frac{1}{K^{++}(\lambda')} \frac{a}{\lambda'^2} \left\{ \left(\frac{2A}{5}\right) \frac{5}{2} x^4 + \left(\frac{2C}{3}\right) \frac{3}{2} x^2 + (2E) \frac{1}{2} \right\},$$

$$H(x) = \frac{1}{K^{++}(\lambda')} \frac{a}{\lambda'^2} \{Bx^3 + Dx\},$$

对此可采用对称抽样法。

注意：设 η 为 $(-1, 1)$ 之间均匀分布的随机数， ξ 为 $(0, 1)$ 之间均

匀分布的随机数。则容易说明，分布 $f(x) = \frac{5}{2}x^4, x \in$

$(-1, 1)$ 的抽样为：

$$X_f = \text{sign} \eta \max(|\eta|, \xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4)$$

分布 $f(x) = \frac{3}{2}x^2, x \in (-1, 1)$ 的抽样为：

$$X_f = \text{sign} \eta \max(|\eta|, \xi_1, \xi_2).$$

由此容易产生 $f_{\lambda', 1}(x)$ 的抽样：

$$K = \left(\frac{2}{5}A + \frac{2}{3}C + 2E \right) \xi_1$$

↓

$$K = K - \frac{2}{5}A \leq 0 ? \xrightarrow{\text{yes}} X_{f_{\lambda', 1}}$$

$$\text{no} \downarrow = \text{sign} \eta_2 \max(|\eta_2|, \xi_3, \xi_4, \xi_5, \xi_6,)$$

$$K = K - \frac{2}{3}C \leq 0 ? \xrightarrow{\text{yes}} X_{f_{\lambda', 1}}$$

$$\text{no} \downarrow = \text{sign} \eta_2 \max(|\eta_2|, \xi_3, \xi_4)$$

$$X_{f_{\lambda', 1}} = \eta_2$$

然后对 $f_{\lambda', 1}(x)$ 用对称抽样：

$$\begin{array}{c}
 (X_{f_{\lambda',1}}, \eta) \\
 \downarrow \\
 X_{f_{\lambda'}} = X_{f_{\lambda',1}} \xleftarrow{\text{yes}} \eta \leq \frac{BX_{f_{\lambda',1}}^3 + DX_{f_{\lambda',1}}}{AX_{f_{\lambda',1}}^4 + CX_{f_{\lambda',1}}^2 + E} \stackrel{?}{\longrightarrow} \text{no}
 \end{array}$$

$$X_{f_{\lambda'}} = -X_{f_{\lambda',1}}.$$

(4) 非弹性散射能量分布

非弹性散射能量分布为:

$$f(x) = \begin{cases} a^2 x e^{-ax} & x \geq 0 \\ 0 & \text{其他,} \end{cases}$$

它是指数分布:

$$f_1(x) = \begin{cases} a e^{-ax} & x \geq 0 \\ 0 & \text{其他,} \end{cases}$$

的复合分布:

$$\begin{aligned}
 f(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x-y) f_1(y) dy = \int_0^x a^2 e^{-a(x-y)} e^{-ay} dy \\
 &= a^2 x e^{-ax} \quad (x \geq 0).
 \end{aligned}$$

因而有复合分布抽样

$$X_f = X_{f_1} + X_{f_1} = -\frac{\ln \xi_1}{a} - \frac{\ln \xi_2}{a} = -\frac{1}{a} \ln \xi_1 \xi_2.$$

注意: 当分布密度函数 $f(x)$ 为

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} f_1(x-y) f_1(y-z) f_1(z) dz$$

$$= \frac{a^3}{2!} x^2 e^{-ax} \quad (x \geq 0)$$

时, 其抽样为

$$X_f = X_{f_1} + X_{f_1} + X_{f_1} = -\frac{1}{a} \ln \xi_1 \xi_2 \xi_3。$$

(5) $C^{12}(n, n', 3\alpha)$ 反应的能量分布

中子与碳核发生 $C^{12}(n, n', 3\alpha)$ 反应, 散射后中子能量 E 服从如下分布

$$f(x) = \begin{cases} \frac{105}{16} x^{-\frac{1}{2}} (1-x)^2 & 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{其他} \end{cases}$$

其中 $x = E/E_{max}$, E_{max} 是最大可能能量. 作变换 $x = y^2 = \phi(y)$, 则可得到关于 y 的 $C^{12}(n, n', 3\alpha)$ 反应的能量分布

$$f(y) = \begin{cases} \frac{105}{8} y^2 (1-y^2)^2 & 0 \leq y \leq 1 \\ 0 & \text{其他,} \end{cases}$$

引进三个分布密度函数 $f_1(y)$, $f_2(y)$ 和 $f_3(y)$, 当 $0 \leq y \leq 1$ 时, 它们分别为

$$f_1(y) = 30y^2(1-y)^2, \quad f_2(y) = 60y^3(1-y)^2,$$

$$f_3(y) = 105y^4(1-y)^2,$$

在其他点处均为零。则分布 $f(y)$ 可表为:

$$f(y) = \frac{105}{8} [y^2(1-y)^2 + 2y^3(1-y)^2 + y^4(1-y)^2]$$

$$= \frac{7}{16} f_1(y) + \frac{7}{17} f_2(y) + \frac{1}{8} f_3(y)。$$

因而可以用加抽样法和后面要讲到的 β -分布抽样法。

(6) 中子裂变谱分布

中子裂变谱分布的一般形式为:

$$f(E) = \begin{cases} c e^{-\frac{E}{A}} s h \sqrt{B E} & E \in (E_{min}, E_{max}) \\ 0 & \text{其他} \end{cases}$$

其中常数 $A, B, C, E_{min}, E_{max}$ 均为与元素有关的量。

引入指数分布

$$f_1(E) = \begin{cases} \frac{\lambda}{\gamma} e^{-\frac{E}{\gamma}} & E \in (E_{min}, E_{max}) \\ 0 & \text{其他} \end{cases}$$

其中 λ 是归一化因子, γ 为任意参数。令

$$f_2(E) = f_1(E)$$

相应的 $H_1(E)$ 和 $H_2(E)$ 为

$$H_1(E) = \frac{c\gamma}{2\lambda} e^{-\left(\frac{1}{A} - \frac{1}{\gamma}\right)E + \sqrt{B E}}$$

$$H_2(E) = \frac{c\gamma}{2\lambda} e^{-\left(\frac{1}{A} - \frac{1}{\gamma}\right)E - \sqrt{B E}},$$

于是中子裂变谱分布 $f(E)$ 可以表为

$$f(E) = H_1(E)f_1(E) - H_2(E)f_2(E)$$

容易确定 $H_1(E)$ 的上界为:

$$H_1(E) \leq M_1 = \frac{c\gamma}{2\lambda} e^{\frac{1}{4} - \frac{B}{1/A - 1/\gamma}},$$

对此可用乘减抽样方法。为了提高抽样效率，应选取 ν 使 M_1 达到最小，容易确定

$$\gamma = A \left[1 + \frac{A}{8} \frac{B}{B} \left(\sqrt{1 - \frac{16}{A} \frac{B}{B}} + 1 \right) \right]。$$

三、粒子方向分布的随机抽样

(1) 平行束入射角余弦分布

当粒子平行入射到球表面上时，若粒子方向与向径夹角余弦 $\cos\theta$ 用 μ 来表示(如图3—4, f)，则 μ 遵从如下分布

$$f(\mu) = \begin{cases} 2\mu & \mu \in (0, 1) \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

若用直接抽样法，那么在计算正弦函数时会出现平方根运算，

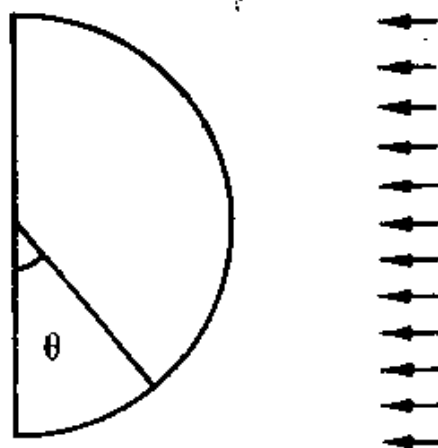


图3—4, f

$$Z_{\cos\theta} = \max\{\xi_1, \xi_2\}, \quad Z_{\sin\theta} = (1 - Z_{\cos\theta}^2)^{\frac{1}{2}}。$$

为了避免这种困难，采用乘抽样法：

$$f(\mu) = H(\mu)f_1(\mu), \quad f_1(\mu) = \frac{1}{(1+\mu)\sqrt{1-\mu^2}},$$

$$H(\mu) = 2\mu(1+\mu)\sqrt{1-\mu^2} \leq M$$

$$= \frac{5+2\sqrt{13}}{27} \sqrt{22-2\sqrt{13}},$$

对 $f_1(\mu)$ 再利用复合抽样法:

$$f_1(\mu) = \frac{1}{(1+\mu)\sqrt{1-\mu^2}}, \quad \mu = \frac{1-x^2}{1+x^2},$$

$$f_{1,\xi}(x) = 1 \quad x \in (0,1).$$

于是抽样方法成为:

$$\begin{array}{l} Z_{f_1} = \frac{1-\xi^2}{1+\xi^2} \xleftarrow{\text{no}} \\ \downarrow \\ \xi' \leq \frac{1}{M} H(Z_{f_1})? \xleftarrow{\text{no}} \\ \downarrow \text{yes} \\ Z_{\cos\theta} = \frac{1-\xi^2}{1+\xi^2}, \quad Z_{\sin\theta} = \frac{2\xi}{1+\xi^2} \end{array}$$

(2) 散射方位角余弦的分布

散射方位角余弦 $x =$

$\cos\chi$ (见图 3—4, g), 遵从如下分布

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \\ x \in (-1,1) \\ 0 \quad \text{其他。} \end{cases}$$

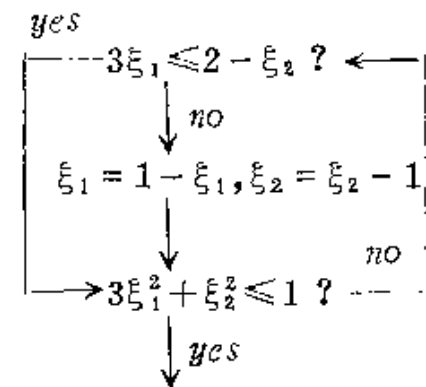


图 3—4, g

按冯·诺伊曼给出的方法进行抽样: 设 ξ 是 $(0,1)$ 中的随机数, η 是 $(-1,1)$ 中均匀分布的随机数, 则抽样程序为:

$$\begin{array}{l} (\xi, \eta) \rightarrow \xi^2 + \eta^2 \leq 1? \xrightarrow{\text{yes}} Z_{\cos\chi} = \frac{\xi^2 - \eta^2}{\xi^2 + \eta^2}, \quad Z_{\sin\chi} = \frac{2\xi\eta}{\xi^2 + \eta^2} \\ \uparrow \quad \quad \quad \downarrow \text{no} \end{array}$$

可以利用对称抽样的思想（如图 3—4, h 所示）来提高抽样的效率：



$$Z_{\cos\varphi} = \frac{3\xi_1^2 - \xi_2^2}{3\xi_1^2 + \xi_2^2},$$

$$Z_{\sin\chi} = \frac{2\sqrt{3}\xi_1\xi_2}{3\xi_1^2 + \xi_2^2}.$$

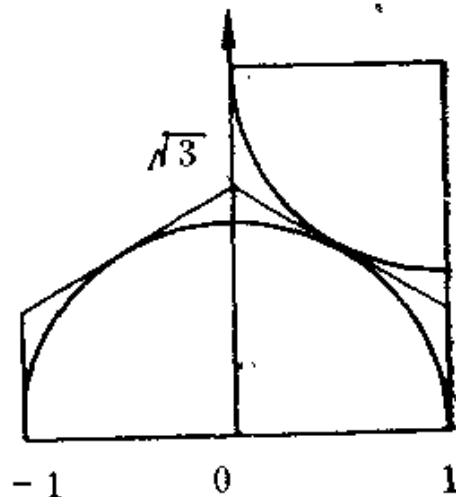


图 3—4, h

这样做可以将效率从原来的 $\frac{\pi}{4} = 0.785$, 提高到

$$\frac{\pi}{2\sqrt{3}} \cong 0.906.$$

(3) 各向同性散射角余弦分布

各向同性散射角余弦 $x = \cos\alpha$ 遵从如下分布：

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} & x \in (-1, 1) \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

利用乘抽样法：

$$f(x) = H_1(x)f_1(x), \quad H_1(x) = (1 + 1 \times 1)\sqrt{1 - x^2} \leq$$

$$3\sqrt{3}/4,$$

$$f_1(x) = \frac{1}{2(1+|\times|)} \sqrt{1-x^2},$$

对 $f_1(x)$ 的抽样做法和 (1) 相同。

对分布 $f(x)$ 的另一种抽样是积分抽样法:

$$f_0(x, y) = \frac{1}{4} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, x \in (-1, 1), 0 \leq y \leq 2/(1+|\times|)$$

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\lambda\sqrt{1-x^2}} f_0(x, y) dy / \int_{-\infty}^{\lambda\sqrt{1-x^2}} dx \int_{-\infty}^{\lambda\sqrt{1-x^2}}$$

$$f_0(x, y) dy = \frac{1}{2}.$$

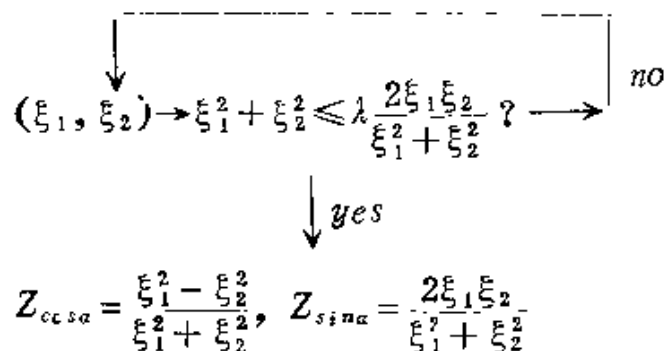
这是因为

$$\int_{-\infty}^{\lambda\sqrt{1-x^2}} f_0(x, y) dy = \frac{1}{4\sqrt{1-x^2}} \cdot \lambda\sqrt{1-x^2} = \frac{\lambda}{4},$$

其中 $\lambda = 8/3\sqrt{3}$, 并且有 $\lambda\sqrt{1-x^2} \leq \frac{2}{1+|\times|}$. 作变量代

换 $x = \frac{\xi_1^2 - \xi_2^2}{\xi_1^2 + \xi_2^2}$, $y = \xi_1^2 + \xi_2^2$, 得到新的分布 $f_{0,s}(u, v) = 1$.

于是抽样程序如下:



为了确定各向同性散射的方向 $\vec{\Omega} = u\vec{i} + v\vec{j} + w\vec{k}$,
其中

$$u = \sin\alpha \cos\chi$$

$$v = \sin\alpha \sin\chi$$

$$w = \cos\alpha,$$

因此可用联合抽样法来产生 u, v, w 的抽样。

(4) 质心系各向同性散射角余弦分布

在质心系各向同性散射假设下, 为了得到实验室系散射角余弦 $\cos\alpha$, 需要首先抽样确定质心系散射角余弦 $\cos\alpha_c$, 然后通过变换

$$\cos\alpha = \frac{1 + A \cos\alpha_c}{\sqrt{1 + A^2 + 2A \cos\alpha_c}}$$

得到 $\cos\alpha$ 。其中 A 为被碰撞核的原子质量数。但是这里需要进行开方运算, 为避免这一困难, 需直接求出 $x = \cos\alpha$ 所遵从的分布

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{2A} \left(\frac{A^2 - 1 + 2x^2}{\sqrt{A^2 - 1 + x^2}} + 2x \right) & x \in (-1, 1) \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

很明显上式的第一项为偶函数, 第二项为奇函数, 因此可用对称抽样法。

(5) 中子与氢核碰撞时的散射角余弦分布

中子与氢核发生碰撞, 当中子能量 $E > 10 \text{ MeV}$ 时, 散射角余弦 $x = \cos\alpha$ 的分布如下:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1 + 2\left(\frac{E}{90}\right)^2(2x^2 - 1)^2}{2x \left[1 + \frac{2}{3}\left(\frac{E}{90}\right)^2 \right]} & x \in [0, 1] \\ 0 & \text{其他} \end{cases}$$

对此分布可采用加抽样法。

(6) 中子弹性散射角余弦分布

中子弹性散射角余弦分布常以勒让德多项式的展开形式给出, 散射角余弦 $x = \cos \alpha$ 的分布为:

$$f(x) = \begin{cases} \sum_{l=0}^n \frac{2l+1}{2} f_l P_l(x) & x \in (-1, 1) \\ 0 & \text{其他,} \end{cases}$$

其中 $P_l(x)$ 为 l 阶勒让德多项式。通常采用 $f(x)$ 的近似分布

$$f_a(x) = \sum_{k=0}^n \Phi_k \delta(x - x_k)$$

其中 $\delta(*)$ 是 δ -函数, Φ_k 和 x_k 的最好选择是

$$\Phi_k = \frac{\sum_{l=0}^n \frac{2l+1}{2} f_l P_l(x_k)}{\sum_{l=0}^n \frac{2l+1}{2} [P_l(x_k)]^2}$$

$x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ 为 $P_{n+1}(x) = 0$ 的根。在实际问题中, 由于勒让德多项式的展开项数不够, Φ_k 中可能出现负值, 此时可以采用如下分布:

$$f_a^*(x) = \sum_{k=0}^n \phi_k \delta(x - x_k)$$

其中

$$\phi_k = \frac{|\Phi_k|}{\sum_{k=0}^n |\Phi_k|}$$

对于分布 $f_a^*(x)$ 可以采用加抽样法。

四、若干常见数学分布的随机抽样

(1) β -分布

β -分布的一般形式是:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{(N+1)!}{n!(N-n)!} x^n (1-x)^{N-n} & 0 \leq x \leq 1 \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

β -分布的抽样方法如下: 首先产生 $N+1$ 个随机数 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{N+1}$, 将其重新按大小排列: $\xi'_1 \leq \xi'_2 \leq \dots \leq \xi'_n \leq \xi'_{n+1} \leq \dots \leq \xi'_{N+1}$, 则

$$Z_f = \xi'_{n+1}.$$

因为随机数 ξ'_{n+1} 落入区间 $(x, x+dx)$ (见图 3-4, i) 的概率为:

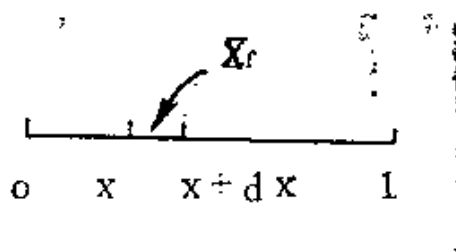


图 3-4, i

$$dx x^n (1-x)^{N-n} \frac{(N+1)!}{n!(N-n)!} = dx f(x)$$

(2) 倒数分布

倒数分布的一般形式为:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{\ln a} \frac{1}{x} & x \in (1, a) \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

采用乘抽样法:

$$f(x) = H_i(x) \cdot f_i(x)$$

$$f_i(x) = \frac{1}{i(a^{1/i} - 1)} \frac{x^{1/i}}{x} \quad x \in (1, a)$$

$$H_i(x) = \frac{i(a^{1/i} - 1)}{\ln a \cdot x^{1/i}} \leq \frac{i(a^{1/i} - 1)}{\ln a} = M$$

其中 i 为一适当的自然数。对 $f_i(x)$ 采用直接抽样法。

(3) 柯西分布

柯西分布的一般形式为：

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\lambda}{\lambda^2 + (x - \mu)^2}, \lambda > 0.$$

考虑其特殊情况

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

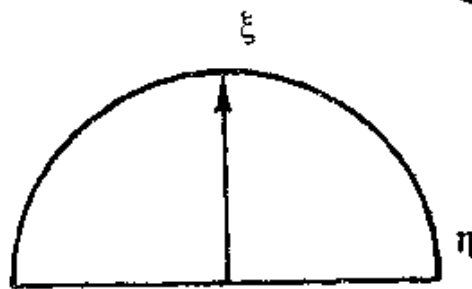
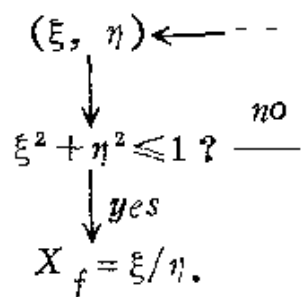


图3—4, i

采用冯·诺伊曼给出的抽样方法（见图3—4, i）：



(4) 正态分布

正态分布是一个非常重要的分布，其一般形式为：

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \quad x \in (-\infty, \infty).$$

引入如下分布：

$$f_1(y) = \begin{cases} y e^{-\frac{y^2}{2}} & y \geq 0 \\ 0 & \text{其他,} \end{cases}$$

而 $f_2(x)$ 为遵从散射方位角余弦的分布,即

$$f_2(x) = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, \quad |x| < 1,$$

则容易证明,正态分布可以表示成如下复合分布

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{|y|} f_2\left(\frac{x}{y}\right) f_1(y) dy,$$

所以有复合分布抽样

$$Z_f = Z_{f_1} Z_{f_2}.$$

(5) 拉普拉斯分布

拉普拉斯分布的一般形式为:

$$f(x) = \frac{1}{2\lambda} e^{-\frac{|x-\mu|}{\lambda}} \quad \lambda > 0.$$

考虑其特殊情况

$$f(x) = \frac{1}{2} e^{-|x|} = \begin{cases} \frac{1}{2} e^{-x} & x \geq 0 \\ \frac{1}{2} e^x & x < 0. \end{cases}$$

引入指数分布

$$f_1(x) = e^{-x} \quad x \geq 0.$$

采用指数分布的抽样

$$Z_f = (\text{Sgn } \eta) \cdot Z_{f_1}.$$

(6) 麦克斯韦分布

麦克斯韦分布的一般形式为:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{2\beta^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} \sqrt{x} e^{-\beta x} & x \geq 0 \\ 0 & \text{其他} \end{cases}$$

$$\text{令} \quad f_1(x) = \frac{2\beta}{3} e^{-\frac{2\beta}{3}x} \quad x \geq 0$$

将 $f(x)$ 记为

$$f(x) = H(x) \cdot f_1(x)$$

对此采用乘抽样法。

(7) 对数分布

对数分布的一般形式为：

$$f(x) = \begin{cases} -\ln x & 0 < x \leq 1 \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

$$\text{令} \quad f_1(x) = f_2(x) \equiv 1 \quad x \in (0, 1)$$

则对数分布可以表示成复合分布形式：

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{|y|} f_1(y) f_2\left(\frac{x}{y}\right) dy \\ &= \int_0^1 \frac{1}{|y|} f_2\left(\frac{x}{y}\right) dy = \int_x^1 \frac{1}{y} dy. \end{aligned}$$

复合抽样方法为：

$$Z_f \doteq \xi_1 \cdot \xi_2.$$

(8) 指数函数分布

指数函数分布的一般形式为：

$$E_n(x) = \begin{cases} \int_1^{+\infty} \frac{e^{-xy}}{y^n} dy & x \geq 0 \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

引进两个分布函数

$$f_1(y) = ny^{n-1} \quad y \geq 1$$

$$f_2(x|y) = ye^{-xy} \quad x \geq 0,$$

则指数函数分布可以表示成如下的复合分布:

$$E_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_2(x|y)f_1(y)dy,$$

对此采用复合分布抽样法。首先对于 $f_1(y)$ 再进行变量代换

$$y = \frac{1}{z}, \text{得到}$$

$$f_1(z) = nz^{n-1} \quad z \in (0,1).$$

于是有:

$$Z_{E_n} = -\ln \xi_0 \max(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n).$$

实验题 5: 用冯·诺伊曼方法在微机上产生指数分布抽样,
 $N=1000$ 。根据样本绘制分布密度函数。

实验题 6: 用复合分布抽样法在微机上产生正态分布抽样,
 $N=1000$ 。根据样本绘制分布密度函数。

第四章 蒙特卡罗方法的应用

本章中我们将进一步介绍蒙特卡罗方法在许多实际问题中的应用，其中包括计算多重积分的各种技巧和粒子输运问题等等。

§1 计算多重积分

多重积分的计算在许多领域里一直是人们关心的重要课题。用传统数值方法计算会导致巨大费用，因而常常失效。但是，人们发现可以用概率方法求解。用蒙特卡罗方法求积分的基本原则是：任何一个定积分，都可看作某个随机变量的数学期望，只要能实现该随机变量的抽样，那末就能获得其近似解。

一、求积分的一般方法

设欲求定积分

$$\theta = \int_{V_s} G(P) dP,$$

其中， $P = P(x_1, \dots, x_s)$ 表示 S 维空间的点， V_s 表示积分区域。取 V_s 上任一概率密度函数 $f(P)$ ，它满足条件：当 $P \in V_s$ ， $G(P) \neq 0$ 时，有 $f(P) \neq 0$ 。令

$$g(P) = \begin{cases} G(P)/f(P) & \text{当 } f(P) \neq 0 \text{ 时} \\ 0 & \text{当 } f(P) = 0 \text{ 时} \end{cases},$$

则定积分 θ 可改写为:

$$\theta = \int_{V_s} g(P) f(P) dP = M[g(P)]$$

即 θ 是随机变量 $g(P)$ 的数学期望, 而随机变量 P (S 维) 的分布密度函数为 $f(P)$ 。

从分布 $f(P)$ 中抽样, 得到随机变量 P 的 N 个样本: P_i , $i = 1, 2, \dots, N$, 则我们有 θ 的无偏估计:

$$\theta_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(P_i)$$

选取 $f(P)$ 最简单的方法是取 V_s 上的均匀分布:

$$f(P) = \begin{cases} 1/|V_s| & \text{当 } P \in V_s, \\ 0 & \text{其他} \end{cases}$$

这里 $|V_s|$ 表示区域 V_s 的体积, 因而有

$$g(P) = |V_s| G(P)。$$

由于不同的随机变量常常可以具有相同的期望值, 因此, 为了用蒙特卡罗方法计算定积分 θ , 存在一个如何选择最佳的 $f(P)$ 的问题。

根据加强大数定律, θ_N 以概率 1 收敛于 θ :

$$P \left\{ \lim_{N \rightarrow \infty} \theta_N = \theta \right\} = 1。$$

若设 $g(P)$ 的不为零的有限方差 σ_g^2 存在, 即

$$\sigma_g^2 = \int_{V_s} (g(P) - \theta)^2 f(P) dP < +\infty。$$

于是我们还有近似误差估计式, 即在 $1 - \alpha$ 的置信水平下有:

$$|\theta_N - \theta| < \frac{X_a \sigma_a}{\sqrt{N}}.$$

从而，我们知道为提高精确度只有两个办法：增加 N 或者减小 σ_a 。

$f(P)$ 的两种不同的选择 $f_1(P)$ 和 $f_2(F)$ 的费用比是，

$$\frac{W_1}{W_2} = \frac{c_1 \sigma_a^2}{c_2 \sigma_a^2}.$$

这里 c_1, c_2 是一次抽样所需费用，所以 $c\sigma_a^2$ 越小越经济。

二、重要抽样

设欲求定积分

$$\theta = \int_{V_s} g(P) f(P) dP$$

其中 $f(P)$ 为一 S 维分布密度函数。我们用 V_s 上另一分布密度函数 $f_1(P)$ ，它满足条件：当 $P \in V_s$ ， $g(P)f(P) \neq 0$ 时，有 $f_1(P) \neq 0$ 。令

$$g_1(P) = g(P)W(P),$$

$$W(P) = \begin{cases} f(P)/f_1(P) & \text{当 } f_1(P) \neq 0 \\ 0 & \text{当 } f_1(P) = 0 \end{cases},$$

则有

$$\begin{aligned} \theta &= \int_{V_s} g_1(P) f_1(P) dP = \int_{V_s} g(P) W(P) f_1(P) dP \\ &= M[g_1(P)]. \end{aligned}$$

称 $W(P)$ 为权重因子。根据从分布 $f_1(P)$ 的抽样， $P_i, i=1, 2, \dots, N$ ，我们获得近似值

$$\theta_{1N} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g_1(P_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(P_i) W(P_i) ,$$

它是 θ 的又一个无偏估计。

现在，我们观察它的方差 σ_{g_1} ：

$$\sigma_{g_1}^2 = M[g_1^2] - \theta^2 = \int_{V_s} \frac{g^2(P)f^2(P)}{f_1(P)} dP - \theta^2 .$$

为使 $\sigma_{g_1}^2$ 达到极小值， $f_1(P)$ 应取

$$f_1(P) = \frac{|g(P)|f(P)}{\int_{V_s} |g(P)|f(P)dP} .$$

特别地，当 $g(P) \geq 0$ 时，有

$$f_1(P) = \frac{g(P)f(P)}{\int_{V_s} g(P)f(P)dP} = \frac{g(P)f(P)}{\theta} .$$

此时 $\sigma_{g_1} = 0$ ，即 g_1 的方差为零。这表明 $f_1(P)$ 是与被积函数 $g(P)f(P)$ 成比例的。即被积函数大的地方，也就是对积分 θ 贡献大的区域， $f_1(P)$ 也大，因而在这些地方抽样就多，点就取得密；反之，在 $g(P)f(P)$ 小的地方应少取抽样。也就是说应根据对 θ 贡献的重要性取样。

三、多段抽样

多段抽样，就是抽样分几段进行。先做一些抽样，得到

关于最优分布的一些知识，然后，再用这较优的分布抽样，得到结果的较好估计。本段只限于讨论在某个已知单参数密度函数族 $f_0(P, \alpha)$ 中，选取最优的 α 的重要抽样问题，并限于两段抽样。

设有一单参数密度函数族 $f_0(P, \alpha)$ ，对 $[a, b]$ 中的每一个 α 它都满足上段中 $f_1(P)$ 相同的条件：当 $P \in V_s$ ， $g(P)f(P) \neq 0$ 时，有 $f_0(P, \alpha) \neq 0$ 。于是积分可以改写为

$$\theta = \int_{V_s} g(P)f(P)dP = \int_{V_s} \frac{g(P)f(P)}{f_0(P, \alpha)} f_0(P, \alpha) dP$$

令

$$\hat{g}_\alpha = \begin{cases} g(P)f(P)/f_0(P, \alpha) & \text{当 } f_0(P, \alpha) \neq 0 \\ 0 & \text{当 } f_0(P, \alpha) = 0, \end{cases}$$

因此 $\theta = M[\hat{g}_\alpha]$.

根据前段推导可得：

$$\sigma_{\hat{g}_\alpha}^2 = I(\alpha) - \theta^2 = \int_{V_s} \frac{g^2(P)f^2(P)}{f_0^2(P, \alpha)} \cdot f_0(P, \alpha) dP - \theta^2 .$$

要使 $\sigma_{\hat{g}_\alpha}$ 达到极小，实际上就是求 $\min_{\alpha} I(\alpha)$ 。对此需求 α 的最佳值。

现在设 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_J$ 是一组 α 值，而 $f_1(P)$ 为另一个满足上述密度函数条件的函数，于是可用蒙特卡罗方法求积分

$$I(\alpha_j) = \int_{V_s} \frac{g^2(P)f^2(P)}{f_0(P, \alpha_j)f_1(P)} f_1(P) dP$$

$$j = 1, 2, \dots, J ,$$

从中选择使 I 达到最小的 α 值，将其记为 $\hat{\alpha}$ 。实际计算时，我们可取 α 中的某个值 α_0 ，使

$$f_1(P) = f_0(P, \alpha_0) .$$

根据分布密度 $f_1(P)$ 产生子样序列, $P_i, i = 1, \dots, N_1$, 并且在计算 $I(\alpha_0)$ 的近似值的同时计算

$$\hat{g}_{\alpha_0, N_1} = \frac{1}{N_1} \sum_{i=1}^{N_1} \frac{g_1(P_i) f(P_i)}{f_0(P_i, \alpha_0)} ;$$

然后根据所选的 $\hat{\alpha}$, 从分布密度函数 $f_0(P, \hat{\alpha})$ 产生子样序列 $Q_j, j = 1, 2, \dots, N_2$ 来计算

$$\hat{g}_{\hat{\alpha}, N_2} = \frac{1}{N_2} \sum_{j=1}^{N_2} \frac{g(Q_j) f(Q_j)}{f_0(Q_j, \hat{\alpha})} ;$$

最后, 作为 θ 的近似估计取 \hat{g}_{N_1, N_2} 如下:

$$\hat{g}_{N_1, N_2} = W \hat{g}_{\alpha_0, N_1} + (1 - W) \hat{g}_{\hat{\alpha}, N_2}, \quad 0 < W < 1,$$

若 $\sigma_{\hat{g}_{\alpha_0}} = \sigma_1, \sigma_{\hat{g}_{\hat{\alpha}}} = \sigma_2$, 则 W 的最佳选择为

$$W_{opt} = \sigma_2^2 / (\sigma_1^2 + \sigma_2^2) .$$

四、俄国轮盘赌和分裂

(1) 俄国轮盘赌和分裂

设要计算定积分

$$\theta = \int_{V_s} g(P) f(P) dP ,$$

我们将 $g(P)$ 分裂成 n 个: $g_i(P) = g(P)/n, i = 1, 2, \dots, n$, 于是

$$\theta_i = \int_{V_s} g_i(P) f(P) dP \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

$$\theta = \sum_{i=1}^n \theta_i ,$$

这样的做法称为分裂。

若选取 $0 < q < 1$ ，令

$$\theta_q = \int_{V_q} \frac{1}{q} g(P) f(P) dP,$$

则

$$\theta = q\theta_q + (1-q)\cdot 0,$$

这种做法称为俄国轮盘赌。

分裂技巧是将大的 $g(P)$ 化为许多小的 $g_i(P)$ 之和，而轮盘赌的技巧则是将小 $g(P)$ 化为大的 $g_q(P)$ 。交替使用这两种方法可以达到减小方差、降低抽样费用的目的。

(2) 重要区域和不重要区域

考虑二重积分

$$\theta = \iint_{V_2} g(x, y) f(x, y) dx dy .$$

令 R 是 V_2 上 x 的积分区域。我们称对积分 θ 贡献大的积分区域为重要区域，否则称为不重要区域。设 $R = R_1 + R_2$ ，其中 R_1 是重要区域， R_2 为不重要区域，且两者互不相交。又令 θ 是 V_2 上相应于 y 的积分区域。由于 $f(x, y)$ 是 V_2 上联合分布密度函数，可令

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

其中 $f_1(x)$ 是边际分布，而 $f_2(y|x)$ 是条件分布。于是 θ 可表为

$$\theta = \int_R \left(\int_Q g(x, y) f_2(y|x) dy \right) f_1(x) dx$$

按照通常的蒙特卡罗方法，由 $f(x, y)$ 抽样 (x, y) 的步骤是：从 $f_1(x)$ 中产生抽样 x_i ，再由 $f_2(y|x_i)$ 中产生抽样 $y_i, i = 1, 2, \dots, N$ ；然后用统计平均

$$\hat{\theta}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i, y_i)$$

作为 θ 的一个无偏估计。

现在，改变抽样方案如下：

①当 $x_i \in R_1$ 时，定义一个整数 $n(x_i) \geq 1$ ，对一个 x_i ，抽 $n(x_i)$ 个 $y_{ij}, j = 1, 2, \dots, n(x_i)$ 。以平均值

$$\bar{g}_{1i} = \frac{1}{n(x_i)} \sum_{j=1}^{n(x_i)} g(x_i, y_{ij})$$

代替前式中的 $g(x_i, y_i)$

②当 $x_i \in R_2$ 时，定义一个函数 $q(x_i): 0 < q(x_i) < 1$ ，以抽样值

$$\bar{g}_{2i} = \begin{cases} g(x_i, y_i)/q(x_i) & \xi < q(x_i), \\ 0 & \xi \geq q(x_i), \end{cases}$$

代替前式中的 $g(x_i, y_i)$ 。这里 ξ 为随机数。

在这个方案中，①中用的是分裂的技巧，②中用的是俄国轮盘赌的技巧，而使估计的期望值不变，估计的有效性增高。

(3) 方差和费用问题

令

$$\theta_x = \int_Q g(x, y) f_2(y|x) dy,$$

$$\sigma_x^2 = \int_Q (g - \theta_x)^2 f_2(y|x) dy,$$

于是我们有下列等式:

$$\begin{aligned}
 \theta &= \int_R \theta_x f_1(x) dx, \\
 \sigma_g^2 &= \int_{V_s} (g - \theta)^2 f_2(y|x) f_1(x) dx dy \\
 &= \int_{V_s} (g - \theta_x + \theta_x - \theta)^2 f_2(y|x) dy f_1(x) dx \\
 &= \iint_{RQ} [(g - \theta_x)^2 + 2(g - \theta_x)(\theta_x - \theta) + (\theta_x - \theta)^2] \cdot \\
 &\quad f_2(y|x) f_1(x) dy dx \\
 &= \int_R \sigma_x^2 f_1(x) dx + \int_R (\theta_x - \theta)^2 f_1(x) dx.
 \end{aligned}$$

另一方面

$$\begin{aligned}
 \theta &= \int_{R_1} f_1(x) dx \int_Q g(x, y) f_2(y|x) dy + \\
 &+ \int_{R_2} f_1(x) dx \int_Q g(x, y) f_2(y|x) dy = \text{I} + \text{II},
 \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
 \text{I} &= \int_{R_1} f_1(x) \sum_{i=1}^{n(x)} \int_Q g_i f_2(y|x) dy dx \\
 &= \int_{R_1} \frac{f_1(x)}{n(x)} \sum_{i=1}^{n(x)} \int_Q g(x, y) f_2(y|x) dy dx \\
 &= \int_{R_1} \frac{f_1(x)}{n(x)} \sum_{i=1}^{n(x)} \theta_x dx,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Pi = \int_{R_2} f_1(x) dx \int_Q [q(x) \cdot \frac{g(x,y)}{q(x)} + \\ + (1-q(x)) \cdot 0] f_2(y|x) dy. \end{aligned}$$

改变抽样方案后的方差应为：

$$\begin{aligned} \sigma_2^2 = \int_{R_1} (\theta_x - \theta)^2 f_1(x) dx + \int_{R_1} \frac{\sigma_x^2}{n(x)} f_1(x) dx + \\ + \int_{R_2} \int_Q \frac{g(x,y)^2}{q(x)} f_2(y|x) dy f_1(x) dx - \int_{R_2} \theta_x^2 f_1(x) dx. \end{aligned}$$

若 $n(x) = \text{const.}$, $q(x) = \text{const.}$, 则第二, 三项成为

$$\frac{1}{n} \int_{R_1} \sigma_x^2 f_1(x) dx + \frac{1}{q} \int_{R_2} \int_Q g^2 f_2(y|x) f_1(x) dy dx$$

可以通过适当选择 $n(x)$, $q(x)$ 来降低抽样的费用。

§2 解辐射屏蔽问题

辐射屏蔽问题是蒙特卡罗方法应用最早的领域之一。本节讨论用直接模拟法解屏蔽问题。

一、屏蔽问题

在应用工程中, 人们常常要用一种吸收材料做的屏蔽物挡住辐射物 (例如光子、中子)。我们所关心的是经屏蔽后射线的强度和它的能量分布, 这就是屏蔽问题。在本节中, 我们假定: (1) 粒子在两次碰撞间的路程是直线; (2) 粒子间的相互作用可以忽略。

蒙特卡罗方法的实质是用数学方法模拟一定数量的粒子

的运动状况，从中总结出一种统计的规律性。

本节中讨论**平板屏蔽模型**。设屏蔽板厚度为 a ，辐射源为 S （如图4—2,a），其强度已知，能量及方向分布律均已知，问题是求穿透率及其方向、能量分布。所谓穿透率是指由源发出的平均一个粒子穿透屏蔽的数目。

二、直接模拟方法

（1）状态参数及状态序列

状态参数 S 通常包括粒子的位置 \vec{r} ，能量 E ，运动方向 $\vec{\Omega}$ ，记为

$$S = (\vec{r}, E, \vec{\Omega})。$$

有时，还需要另外的参数，如时间 t 和权重因子 w 。于是状态参数记为

$$S' = (\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t, w)。$$

对于平板问题，状态参数可取为

$$S = (z, E, \cos\alpha)$$

其中 z 为粒子位置坐标， α 为粒子运动方向与 z 轴的夹角（如图4—2,b）。

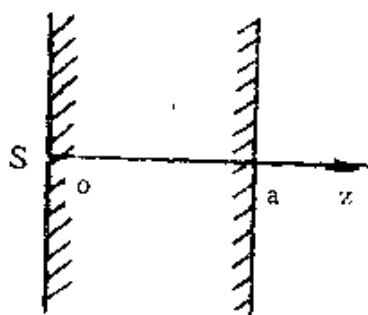


图 4—2, a

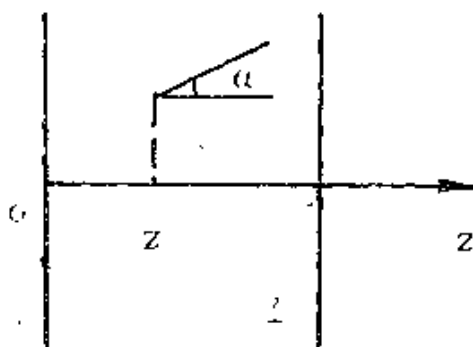


图 4—2, b

对于球对称问题，状态参数可取为

$$\mathbf{S} = (r, E, \cos\theta),$$

其中 r 为径向距离， θ 为粒子运动方向与向径的夹角（如图 4—2，c）。

特别地，用

$$\mathbf{S}_m = (\vec{r}_m, E_m, \vec{\Omega}_m)$$

$$\mathbf{S}_m' = (\vec{r}_m, E_m, \vec{\Omega}_m, t_m, w_m)$$

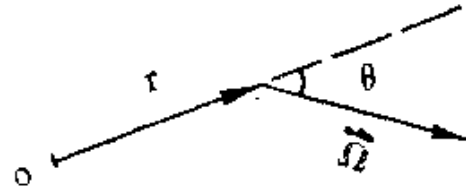


图 4—2，c

表示一个从源发出的粒子，

在介质中经过 m 次碰撞后的状态，其中， \vec{r}_m 为粒子第 m 次碰撞点的位置， E_m 为第 m 次碰撞后的能量， $\vec{\Omega}_m$ 为第 m 次碰撞后的运动方向， t_m 为粒子到第 m 次碰撞时经历的时间， w_m 为粒子第 m 次碰撞后的权重。

状态序列 一个由源发出的粒子在介质中运动，通常经过若干次碰撞，或者穿透屏蔽层，或者被介质吸收，或者由屏蔽反射回来。粒子所经历的状态可用以下的碰撞点的状态序列加以描述：

$$\mathbf{S}_0, \mathbf{S}_1, \dots, \mathbf{S}_{M-1}, \mathbf{S}_M.$$

这里 \mathbf{S}_0 是初始状态， \mathbf{S}_M 是终止状态， M 称为粒子游动的链长。更详细地，状态的历史记录可以用矩阵描述：

$$\begin{pmatrix} \vec{r}_0 & \vec{r}_1 & \cdots & \vec{r}_{M-1} & \vec{r}_M \\ E_0 & E_1 & \cdots & E_{M-1} & E_M \\ \vec{\Omega}_0 & \vec{\Omega}_1 & \cdots & \vec{\Omega}_{M-1} & \vec{\Omega}_M \end{pmatrix}.$$

(2) 模拟运动过程

确定初始状态 \mathbf{S}_0 源分布密度函数通常满足下列条件：

$$\mathbf{S}(z_0, E_0, \cos\alpha_0) = \mathbf{S}_1(z_0)\mathbf{S}_2(E_0)\mathbf{S}_3(\cos\alpha_0).$$

由源发出一个粒子,实际上就是由源分布抽样得到 $S_0 = (z_0, E_0, \cos\alpha_0)$ 。对于平板屏蔽模型有

$$S_1(z_0) = \delta(z_0)$$

这里 $\delta(z)$ 是 δ -函数,它满足如下条件:

$$\delta(z) = 0, \quad z \neq 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(z) dz = 1。$$

如果源是单能(\bar{E})、单向平行入射,与Z轴夹角余弦为 $\mu = \cos\bar{\alpha}$,那么有

$$S_2(E_0) = \delta(E_0 - \bar{E}),$$

$$S_3(\cos\alpha_0) = \delta(\cos\alpha_0 - \mu)。$$

由此,容易抽样得到 S_0 。

确定下一个碰撞点 已知状态 S_{m-1} ,要确定 S_m ,首先要确定下一个碰撞点坐标 z_m 。从物理上知道,中子相邻两次碰撞的关系为:

$$T(z_{m-1} \rightarrow z_m | E_{m-1}, \cos\alpha_{m-1}) dz_m$$

$$= \begin{cases} \frac{\Sigma_t(E_{m-1})}{|\cos\alpha_{m-1}|} e^{-\Sigma_t(E_{m-1}) \frac{z_m - z_{m-1}}{\cos\alpha_{m-1}}} dz_m \\ \text{当 } \frac{z_m - z_{m-1}}{\cos\alpha_{m-1}} > 0, \\ 0 \quad \text{其他} \end{cases}$$

$$(m = 1, 2, \dots)$$

这里, $\Sigma_t(E_{m-1})$ 是中子能量为 E_{m-1} 时,介质的总截面。这是一个指数分布,所以有

$$z_m = z_{m-1} - \frac{\ln \xi}{\Sigma_t(E_{m-1})} \cos \alpha_{m-1}.$$

ξ 为 $(0,1)$ 上均匀分布的随机数。如果 $z_m \geq a$ 或 $z_m \leq 0$ ，中子历史结束。前者表示中子穿透屏蔽，后者表示中子被平板反射回来。

确定碰撞的原子核 一般介质是由性质不同的几种原子核组成。中子与核碰撞，先要确定与哪种核碰撞，然后才能确定碰撞的类型，碰撞后中子的能量与运动方向。

设介质由 A, B, C 三种原子核组成，其核密度分别为 N_A, N_B, N_C ，则介质的中子总截面 $\Sigma_t(E_{m-1})$ 为

$$\Sigma_t(E_{m-1}) = \Sigma_t^A(E_{m-1}) + \Sigma_t^B(E_{m-1}) + \Sigma_t^C(E_{m-1}),$$

其中 $\Sigma_t^A, \Sigma_t^B, \Sigma_t^C$ 分别是核 A, B, C 的宏观总截面。它们的定义为：

$$\Sigma_t^{(\cdot)}(E_{m-1}) = N_{(\cdot)} \cdot \sigma_t^{(\cdot)}(E_{m-1}),$$

这里 $\Sigma_t^{(\cdot)}, N_{(\cdot)}$ 和 $\sigma_t^{(\cdot)}$ 分别表示 (\cdot) 核的宏观总截面、核密度和微观总截面。由于中子总截面表示中子与核碰撞可能性的大小，因此，与 A, B, C 碰撞的概率分别是：

$$p_A = \Sigma_t^A(E_{m-1}) / \Sigma_t(E_{m-1}),$$

$$p_B = \Sigma_t^B(E_{m-1}) / \Sigma_t(E_{m-1}),$$

$$p_C = \Sigma_t^C(E_{m-1}) / \Sigma_t(E_{m-1}).$$

利用标准抽样方法，容易确定碰撞核是 A, B, C 中哪一种。

确定碰撞类型 确定了碰撞的核后，就要进一步确定碰

撞的性质。中子和核碰撞可以发生多种反应，如弹性散射、非弹性散射， $n-2n$ 反应，裂变、俘获等等。设它们的微观截面分别为 σ_{el}^A 、 σ_{in}^A 、 $\sigma_{(n,2n)}^A$ 、 σ_f^A 、 σ_c^A ，则有

$$\sigma_t^A(E_{m-1}) = \sigma_{el}^A(E_{m-1}) + \sigma_{in}^A(E_{m-1}) + \sigma_{(n,2n)}^A(E_{m-1}) + \sigma_f^A(E_{m-1}) + \sigma_c^A(E_{m-1}),$$

而吸收截面 $\sigma_a^A = \sigma_f^A + \sigma_c^A$ 。在屏蔽问题中，常常只考虑弹性散射和吸收两种，即

$$\sigma_t^A(E_{m-1}) = \sigma_{el}^A(E_{m-1}) + \sigma_a^A(E_{m-1})$$

此时，发生弹性散射的概率为

$$p_{el}^A = \sigma_{el}^A(E_{m-1}) / \sigma_t^A(E_{m-1}).$$

确定碰撞后的能量和方向 如果碰撞为吸收，那么中子历史终止；如果为弹性散射，设

$$A = \frac{m_{核}}{m_{中}},$$

其中 $m_{核}$ ， $m_{中}$ 分别为核子和中子的质量。 θ_c 为质心系中中子散射前后的夹角（偏转角）。 $\mu_c = \cos\theta_c$ 可从质心系中弹性散射角分布 $f_c(\mu_c)$ 中抽样产生，

$$f_c(\mu_c) = \sigma_{el}(\mu_c, E_{m-1}) / \int_{-1}^1 \sigma_{el}(\mu_c, E_{m-1}) d\mu_c$$

这里 $\sigma_{el}(\mu_c, E_{m-1})$ 是弹性散射微分截面积，它和弹性散射截面积的关系是

$$\sigma_{el}(E_{m-1}) = 2\pi \int_{-1}^1 \sigma_{el}(\mu_c, E_{m-1}) d\mu_c。$$

中子能量 E_m 由下式计算:

$$E_m = \frac{E_{m-1}}{2} [(1+r) + (1-r)\cos\theta_c]$$

其中 $r = \left(\frac{A-1}{A+1} \right)^2$ 。

其次, 设 θ_L 为在实验室系 (L系) 中, 中子散射前后方向间的夹角, $\mu_L = \cos\theta_L$, 那么它与 $\mu_c = \cos\theta_c$ 有如下关系:

$$\mu_L = (1 + A\mu_c) / \sqrt{1 + A^2 + 2A\mu_c}。$$

碰撞后, 中子运动的方向 $\cos\alpha_m$ 则由下式所决定

$$\cos\alpha_m = \cos\alpha_{m-1}\cos\theta_L + \sin\alpha_{m-1}\sin\theta_L\cos\chi$$

这里 χ 是 $(0, 2\pi)$ 上均匀分布的方位角 (参看图 4—2, d)。

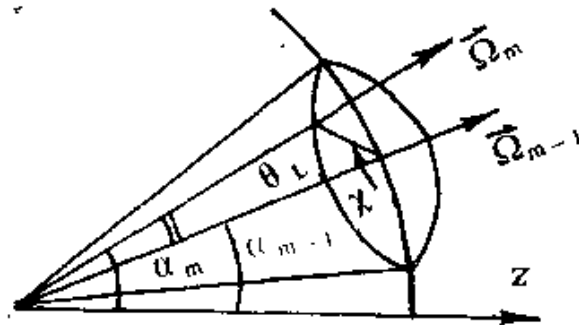


图 4—2, d

若实验室系中弹性散射角分布用微分截面 $\sigma'_{el}(\mu_L, E_{m-1})$

形式给出, 这时, 可先由

$$f_L(\mu_L) = \sigma'_{el}(\mu_L, E_{m-1}) / \int_{-1}^1 \sigma'_{el}(\mu_L, E_{m-1}) d\mu_L$$

抽样得到 $\mu_L = \cos\theta_L$ ，然后根据上面给出的 $\cos\alpha_m$ 的表达式确定 α_m ，最后能量 E_m 可由下式求出

$$E_m = \left(\frac{E_{m-1}}{A+1} \right)^2 \left[\mu_L + \sqrt{A^2 + \mu_L^2 - 1} \right]^2。$$

至此，我们确定了碰撞后的能量 E_m 和方向 $\cos\alpha_m$ 。

作中子历史记录 根据上述程序可作出每个中子碰撞过程记录如下：

$$\begin{pmatrix} z_0 & z_1 & \cdots & z_i & \cdots & z_M \\ E_0 & E_1 & \cdots & E_i & \cdots & E_M \\ \cos\alpha_0 & \cos\alpha_1 & \cdots & \cos\alpha_i & \cdots & \cos\alpha_M \end{pmatrix}$$

$$z_M \geq a \text{ 或 } z_M \leq 0$$

根据每一中子的历史记录可以作出下列估计：

① **穿透率** 设第 n 个中子对穿透的贡献为

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

如果我们共跟踪了 N 个中子，则穿透率 p 的一个无偏估计为

$$\hat{p}_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \eta_n,$$

$$\sigma_{\hat{p}}^2 = p(1-p) \approx \hat{p}_N(1-\hat{p}_N)$$

还可估计其误差为

$$|\hat{p}_N - p| \leq X_{\alpha} \sigma_{\hat{p}} / \sqrt{N}。$$

② **能量、方向角的分布** 可以从穿透的中子历史中取出 E_M , $\cos\alpha_M$ ，作出穿透中子的能量、方向角的分布估计。

三、加权方法

直接模拟方法的物理含义简单而又直观，但是效率低。

当穿透率在 10^{-6} 到 10^{-8} 的数量级时, 平均要跟踪 10^6 到 10^8 个中子才能有一个穿透。若我们要求穿透率的相对误差小于1%, 即

$$\varepsilon = \frac{|\hat{p}_N - p|}{p} \leq \frac{X_a \sigma_p}{\sqrt{Np}} < 1\% ,$$

那么, N 要大到惊人的数量级: $10^{10} \sim 10^{14}$ 。这样的运算量显然是太大了。为了避免这个困难, 我们对弹性散射和吸收利用权重因子来处理, 在中子碰撞历史记录中增加权重因子 w :

$$\left(\begin{array}{cccccc} z_0 & z_1 & \cdots & z_m & \cdots & z_M \\ E_0 & E_1 & \cdots & E_m & \cdots & E_M \\ \cos \alpha_0 & \cos \alpha_1 & \cdots & \cos \alpha_m & \cdots & \cos \alpha_M \\ w_0 & w_1 & \cdots & w_m & \cdots & w_M \end{array} \right)$$

对源中子, 一般取 $w_0 = 1$, 经过碰撞中子权重的变化是

$$w_m = w_{m-1} \frac{\sigma_{c1}^{(\cdot)}(E_{m-1})}{\sigma_t^{(\cdot)}(E_{m-1})} .$$

因而, 第 n 个中子历史对穿透屏蔽的贡献为

$$\zeta_n = \begin{cases} w_{M-1} & z_M \geq a, \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

如果我们跟踪了 N 个中子, 则穿透率 p 的无偏估计为

$$\hat{p}_N = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \zeta_n .$$

其方差估计为

$$\sigma^2(\xi) \cong \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \xi_n^2 - (\bar{p}_N)^2$$

$$\sigma^2(\eta) \cong \bar{p}_N(1 - \bar{p}_N),$$

因而有

$$\sigma^2(\eta) - \sigma^2(\xi) \cong \bar{p}_N - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \xi_n^2$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \xi_n(1 - \xi_n) \geq 0.$$

这说明加权法的方差小于直接法的方差。但一般说来，利用加权法后计算量要增加。

此外，加权法还有其他处理方法。例如**无吸收处理**，由于

$$\Sigma_t(E) = \Sigma_{el}(E) + \Sigma_a(E),$$

其中

$$\Sigma_{el}(E) = \sum_A \sum_{e1} A_{e1}(E),$$

$$\Sigma_a(E) = \sum_A \sum_a A_a(E),$$

此时权重因子为：

$$w_m = w_{m-1} \cdot \frac{\Sigma_{el}(E_{m-1})}{\Sigma_t(E_{m-1})}.$$

又例如考虑各种类型碰撞的**平均次级中子数** $\bar{\nu}$ ：

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\sigma_t} (\sigma_{el} + \sigma_{in} + 2\sigma_{(n,2n)} + 3\sigma_{(n,3n)} + \nu_f \sigma_f)$$

这里 ν_f 为裂变次级中子数。于是碰撞后的权重为：

$$W_m = W_{m-1} \cdot \vec{p}$$

§3 输运方程的蒙特卡罗解法

用直接模拟法可以解一些简单粒子输运问题，其方法简单，物理概念清楚。但是对于一些复杂的粒子输运问题，我们必须依据输运方程的理论来设计蒙特卡罗解法。

这里研究的是不带电的粒子的输运问题。

一、玻耳兹曼方程及其积分方程形式

假定粒子在介质中运动时，其相互间的作用可以忽略，那么粒子在介质中的运动规律服从玻耳兹曼方程：

$$\begin{aligned} & \frac{\partial N}{\partial t} + v \vec{\Omega} \cdot \nabla N + \Sigma_t(\vec{r}, E) N(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) v \\ &= \iint \Sigma_s(\vec{r}, E') v N(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) \times C(E' \rightarrow \\ & \quad E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, |\vec{r}) dE' d\Omega' + S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (I) \end{aligned}$$

这里积分是在系统能量范围、 4π 立体角内进行的，其中， $N(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) dv dE d\vec{\Omega}$ 为在 \vec{r} 点的体积元 dv 中，能量在 $(E, E+dE)$ 内，方向在 $\vec{\Omega}$ 附近的 $d\vec{\Omega}$ 内的粒子数目； $S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) dv dE d\vec{\Omega} dt$ 为在时间 $(t, t+dt)$ 内， \vec{r} 点的体积元 dv 中，能量在 $(E, E+dE)$ 内，方向在 $\vec{\Omega}$ 附近的 $d\vec{\Omega}$ 内的由外源发出的粒子数目； $C(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega} | \vec{r}) dE d\Omega$ 为在 \vec{r} 点一个能量为 E' 、方向为 $\vec{\Omega}'$ 的粒子，碰撞后转化为能量 E 、方向为 $\vec{\Omega}$ 的粒子的概率密度； $\Sigma_t(\vec{r}, E)$ 是在 \vec{r} 处能量为 E 的粒子的总截面积（衰减系数）， v 是相应于能量 E 的粒子速度， $\nabla = \text{grad} = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$ 为梯度算子。

如果引进通量 $\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = vN(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$

通量 φ 的物理意义是每单位时间、单位体积、单位能量、单位立体角内的粒子径迹长度；亦等于在与 $\vec{\Omega}$ 方向垂直的平面上单位时间、单位能量、单位立体角内，在单位面积上通过的粒子数目。那么，方程 (I) 变为

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \nabla \varphi + \Sigma_t(\vec{r}, E) \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \\ &= \iint \Sigma_t(r, E') \varphi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) \times C(E' \rightarrow E, \\ & \quad \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega} | \vec{r}) dE' d\vec{\Omega}' + S(\vec{\Omega}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (\text{II}) \end{aligned}$$

如果系统状态与时间无关，即 $\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\partial N}{\partial t} \equiv 0$ ，那么问题变为定态的。于是定态方程为：

$$\begin{aligned} & \vec{\Omega} \cdot \nabla \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \\ &= \iint \Sigma_t(\vec{r}, E') \varphi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') C(E' \rightarrow E, \\ & \quad \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega} | \vec{r}) dE' d\vec{\Omega}' + S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (\text{III}) \end{aligned}$$

边界条件是：当 $\vec{r} \in V_s$ ，且 $\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0$ 时，有

$$\varphi(\vec{r}, E, \vec{n}) = 0,$$

这里 V_s 为系统的自由表面， \vec{n} 为 V_s 上 \vec{r} 处的外法线方向单位矢量 (图 4—3, a)。

现在，我们要将上面的微分—积分方程 (III) 化为一个与之等价的第二类弗莱特霍姆积分方程。为此令

$$\begin{aligned} \chi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \\ &+ \iint \Sigma_t(\vec{r}, E') \varphi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') C(E' \rightarrow E, \\ & \quad \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega} | \vec{r}) dE' d\vec{\Omega}'. \quad (\text{IV}) \end{aligned}$$

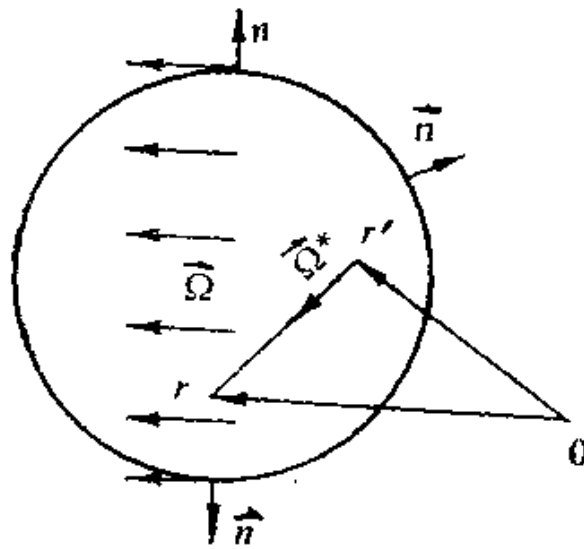


图 4-5

于是方程 (II) 化为

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \chi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (V)$$

我们称 $\chi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ 为发射密度或离开碰撞的密度。

为解方程 (V) 引进特征线

$$\frac{d\vec{r}}{dl} = \vec{\Omega}, \quad \vec{r} = \vec{r}_0 + \vec{\Omega}l,$$

方程 (V) 可化为特征线上的常微分方程

$$\frac{d\varphi}{dl} + \Sigma_t \varphi = \chi, \quad \frac{d\vec{r}}{dl} = \vec{\Omega},$$

注意到边界条件为零, 从而可以求出

$$\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_0^{|\vec{r}-\vec{r}_0|} \chi(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) e^{-\int_0^{|\vec{r}-\vec{r}'|} \Sigma_t(\vec{r}'+l\vec{\Omega}, E) dl} d\vec{\Omega}$$

这里 $d\vec{\Omega}$ 表示在 $\vec{\Omega}$ 方向上的线元。利用极点在 \vec{r} 的球坐标系，将上式改写成体积分：

$$\begin{aligned}\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) &= \int_V \chi(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) \exp \cdot \\ &\cdot \left\{ - \int_0^{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Sigma_t(\vec{r}' + l\vec{\Omega}, E) dl \right\} \cdot \\ &\cdot |\vec{r}' - \vec{r}|^{-2} \delta(\vec{\Omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) dV' \\ &= \int_V \chi(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) \varphi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega} | \vec{r}') dv' \quad (\text{VI})\end{aligned}$$

其中 V 表示系统的几何空间， φ^* 为微分算符 $\vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_t$ 的格林函数：

$$\begin{aligned}\varphi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega} | \vec{r}') &= \delta(\vec{\Omega} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|}) \exp \cdot \\ &\cdot \left\{ - \int_0^{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Sigma_t(\vec{r}' + l\vec{\Omega}, E) dl \right\} / |\vec{r} - \vec{r}'|^2\end{aligned}$$

将 (IV) 代入 (VI)，并引进记号：

$$S_\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int_V S(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) \varphi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega} | \vec{r}') dv',$$

$$\begin{aligned}K_\phi(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) &= \\ &= \Sigma_t(\vec{r}', E') C(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega} | \vec{r}') \varphi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega} | \vec{r}')\end{aligned}$$

最后，我们得到一个与 (III) 等价的第二类弗莱特霍姆积分方程：

$$\varphi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \iiint K_\phi(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \cdot$$

$$\varphi(\vec{r}', E', \vec{\Omega}') dv' dE' d\vec{\Omega}' + S_\phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (\text{VII})$$

这是一个关于通常量 φ 的第二类弗莱特霍姆线性积分方程, K_ϕ 称为核函数。

二、核函数的表示

本段讨论核函数的表示形式和它们的物理含义, 以便于利用蒙特卡罗方法求解。

令

$$\begin{aligned} T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) &= \varphi^*(\vec{r}, E, \vec{\Omega} | \vec{r}') \Sigma_t(\vec{r}, E) \\ &= \Sigma_t(\vec{r}, E) \exp \left\{ - \int_0^{|\vec{r} - \vec{r}'|} \Sigma_t(\vec{r}' + l\vec{\Omega}, E) dl \right\} \cdot \\ &\quad \frac{\delta(\vec{\Omega} - \vec{\Omega}^*)}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \end{aligned}$$

这里 $\vec{\Omega}^* = (\vec{r} - \vec{r}') / |\vec{r} - \vec{r}'|$ 。那么有

$$K_\phi(\vec{r}', E', \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \Sigma_t(\vec{r}', E') \cdot$$

$$T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) C(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega} | \vec{r}') / \Sigma_t(\vec{r}, E)$$

称 $T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega})$ 为**迁移核**, 其物理意义是由 \vec{r}' 点的体积元 dv' 内发出的粒子, 在 \vec{r} 点进入碰撞的密度, 即 $T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) dv'$ 表示由 \vec{r}' 点的体积元 dv' 内出发的、能量为 E 、方向为 $\vec{\Omega}$ 的粒子在 \vec{r} 点碰撞的概率。

设 $S = |\vec{r} - \vec{r}'|$, dA 是与 $\vec{\Omega}^*$ 方向垂直的面积元, ds 是在 $\vec{\Omega}^*$ 上的线元 (图 4—3, b), 因此

$$d\vec{\Omega}^* = dA / |\vec{r} - \vec{r}'|^2,$$

于是我们有

$$\begin{aligned} &T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{\Omega}) dv' \\ &= \Sigma_t(\vec{r}' + S\vec{\Omega}, E) \exp \left\{ - \int_0^S \Sigma_t(\vec{r}' + l\vec{\Omega}, E) dl \right\} \cdot \end{aligned}$$

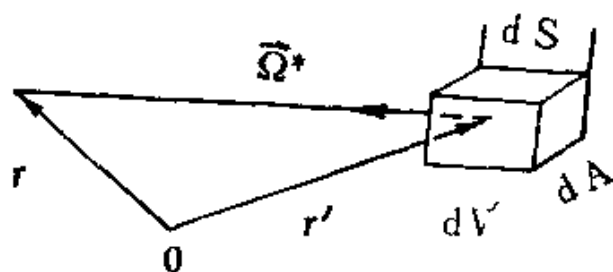


图 4—3, b

$$\cdot \delta(\vec{Q} - \vec{Q}^*) d\vec{Q}^* ds$$

又根据 δ -函数的性质推得

$$T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{Q}) dv'$$

$$= \begin{cases} \Sigma_i(\vec{r}' + s\vec{Q}, E) \exp \left\{ - \int_0^s \Sigma_i(\vec{r}' + l\vec{Q}, E) dl \right\} ds & \vec{Q} \in d\vec{Q}^*, \\ 0 & \vec{Q} \notin d\vec{Q}^*. \end{cases}$$

此式表明, 由 \vec{r}' 发出的粒子, 只有在沿着其运动方向 \vec{Q}^* 的半射线上, 才有可能在点 \vec{r} 处发生碰撞。

引进变换

$$\rho = \int_0^s \Sigma_i(\vec{r}' + l\vec{Q}, E) dl, \quad s = |\vec{r} - \vec{r}'|,$$

则

$$d\rho = \Sigma_i(\vec{r}' + s\vec{Q}, E) ds$$

于是分布 $T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \vec{Q})$ 变成了著名的指数分布

$$f(\rho) = \begin{cases} e^{-\rho} & \rho \geq 0, \\ 0 & \text{其他。} \end{cases}$$

称 $C(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega} | \vec{r})$ 为 **碰撞核**, $C(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega} | \vec{r}) dE d\vec{\Omega}$ 表示一个具有能量为 E' , 方向为 $\vec{\Omega}'$ 的粒子, 在 \vec{r} 点进入碰撞, 碰撞后能量在 $(E, E + dE)$ 内, 方向为 $\vec{\Omega}$ 的立体角邻域 $d\vec{\Omega}$ 内的可能的粒子数。一般它有如下形式:

$$C(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega} | \vec{r}) = \sum_{A,i} \alpha_{Ai}(E') \frac{N_A(\vec{r}) \sigma_i^A(E')}{\Sigma_i(\vec{r}, E')} \cdot f_{Ai}(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}),$$

这里, $N_A(\vec{r})$ 为 \vec{r} 点的核 A 的核密度, $\sigma_i^A(E')$ 是入射粒子能量为 E' 时, 与核 A 发生第 i 种反应的微观截面, $\alpha_{Ai}(E')$ 是发生这种反应后, 产生的次级粒子数; $f_{Ai}(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ 是入射粒子能量为 E' , 方向为 $\vec{\Omega}'$ 时, 与核 A 发生第 i 种反应后, 粒子的能量、方向归一化分布函数。求和号 $\sum_{A,i}$ 是对 \vec{r}

处, 各种核和各种反应取的。当然不包括“杀死”粒子的情况 (如俘获), 事实上, 此时 α_{Ai} 应取为零。总之, 分布 C 是一种复合分布形式。

三、积分方程的解

为简便起见, 令

$$P = (\vec{r}, E, \vec{\Omega}), \quad P' = (\vec{r}', E', \vec{\Omega}'), \quad |\vec{\Omega}| = |\vec{\Omega}'| = 1.$$

考虑一般形式的积分方程

$$\varphi(P) = S_\varphi(P) + \int K_\varphi(P' \rightarrow P) \varphi(P') dP'$$

积分是对整个空间取的。不失一般性, 设

$$S_{\varphi}(P) \geq 0, \quad \int S_{\varphi}(P') dP' = 1.$$

于是该方程有下列诺伊曼级数解:

$$\varphi(P) = \sum_{m=0}^{\infty} \varphi_m(P)$$

其中

$$\varphi_0(P) = S_{\varphi}(P),$$

$$\varphi_1(P) = \int K_{\varphi}(P_0 \rightarrow P) \varphi_0(P_0) dP_0,$$

.....

$$\begin{aligned} \varphi_m(P) &= \int K_{\varphi}(P_{m-1} \rightarrow P) \varphi_{m-1}(P_{m-1}) dP_{m-1} \\ &= \int \cdots \int \underbrace{K_{\varphi}(P_0 \rightarrow P_1) K_{\varphi}(P_1 \rightarrow P_2) \cdots}_{m} \\ &\quad K_{\varphi}(P_{m-1} \rightarrow P) S_{\varphi}(P_0) dP_0 dP_1 \cdots dP_{m-1}, \end{aligned}$$

.....

可以证明, 如果有

$$0 < \sup_P \int K_{\varphi}(P \rightarrow P') dP' < 1, \quad K_{\varphi} \geq 0,$$

则诺伊曼级数收敛, 且是方程的解。

每一项 $\varphi_m(P)$ 有其明显的物理意义。首先, $\varphi_0(P) = S_{\varphi}(P)$, 是源直接发出的粒子通量, 即源密度; $\varphi_1(P)$ 是经过一次碰撞后产生的发射通量; ..., $\varphi_m(P)$ 表示经过 m 次碰撞后的发射通量。总之, 每经过一次积分算子作用

$$\int K_{\varphi}(P_e \rightarrow P) dP_e,$$

相当于粒子经历了一次输运和碰撞。

四、蒙特卡罗方法解输运问题 (I)：逐项求积法

输运问题是要求解积分方程解的一个特定的线性泛函：

$$\varphi(P) = S_{\omega}(P) + \int K_{\omega}(P' \rightarrow P) \varphi(P') dP' ,$$

$$I = \int \varphi(P') f(P') dP' ,$$

这里， $f(P)$ 为某个已知函数。根据前面的诺伊曼级数解，可以得到 I 的级数解：

$$I = \sum_{m=0}^{\infty} I_m ,$$

$$I_m = \int \varphi_m(P) f(P) dP \quad m = 0, 1, \dots$$

一般说来， I_m 是一个 $6 \times (m+1)$ 重积分。

I_0 的蒙特卡罗求积 根据定义

$$I_0 = \int S_{\omega}(P) f(P) dP$$

又因为 $S_{\omega}(P)$ 是一个源密度函数，利用蒙特卡罗求积分的原理，可以从分布 $S_{\omega}(P)$ 中抽样 P_0 ，而后取 $f(P_0)$ 的统计平均而获得 I_0 的一个无偏估计。

I_m 的特卡罗求积 由于

$$I_m = \int \cdots \int_{\sim m+1 \sim} S_{\omega}(P_0) K_{\omega}(P_0 \rightarrow P_1) K_{\omega}(P_1 \rightarrow P_2) \cdots K_{\omega}(P_{m-1} \rightarrow P_m) f(P_m) dP_0 dP_1 \cdots dP_m ,$$

虽然有

$$S_{\omega}(P_0) K_{\omega}(P_0 \rightarrow P_1) \cdots K_{\omega}(P_{m-1} \rightarrow P_m) \geq 0 ,$$

但是在一般情况下

$$\int_{\sim m+1 \sim} \cdots \int S_{\omega}(P_0) K_{\omega}(P_0 \rightarrow P_1) \cdots K_{\omega}(P_{m-1} \rightarrow P_m) dP_0 dP_1 \cdots dP_m \neq 1,$$

而经常是小于 1，因此 $S_{\omega}(P_0) K_{\omega}(P_0 \rightarrow P_1) \cdots K_{\omega}(P_{m-1} \rightarrow P_m)$ 不是一个联合密度函数。这是因为系统几何是个有限空间 V ，有一部分粒子会从系统中逃脱或“被杀死”。为了能够应用蒙特卡罗方法，我们只需要引进归一化因子，使

$$S_{\omega}(P_0) \prod_{i=1}^m \frac{K_{\omega}(P_{i-1} \rightarrow P_i)}{\int K_{\omega}(P_{i-1} \rightarrow P_i) dP_i}$$

成为一个联合密度分布函数，称 $\int K_{\omega}(P_{i-1} \rightarrow P_i) dP_i$ 为粒子从状态 P_{i-1} 到状态 P_i 的**生存概率**，而取

$$\begin{aligned} \bar{f}(P_m) &= \left\{ \prod_{i=1}^m \int K_{\omega}(P_{i-1} \rightarrow P_i) dP_i \right\} f(P_m) \\ &= \bar{f}(P_0, P_1, \cdots, P_m) \end{aligned}$$

的统计平均值为 I_m 的一个无偏估计。

现在，给出抽样步骤如下：

(1) 从 $S_{\omega}(P)$ 中抽样，得 $P_0 = (\vec{r}_0, E_0, \vec{Q}_0)$ ；

(2) 对任何 $l \geq 1$ ，从 $K_{\omega}(P_{l-1} \rightarrow P_l) / \int K_{\omega}(P_{l-1} \rightarrow P_l) \cdot dP_l$ 中抽样，得 $P_l = (\vec{r}_l, E_l, \vec{Q}_l)$ 。

五、蒙特卡罗方法解输运问题(II)：输运游戏

本段介绍一种更为概括的方式解输运问题。设

$$0 < \int K_{\omega}(P \rightarrow P') dP' < 1,$$

于是，输运游戏方法步骤如下：

(1) 从 $S_e(P)$ 中抽样产生 P_0 ；

(2) 对任何 $l \geq 1$ ，计算生存概率

$$p(P_{l-1}) = \int K_e(P_{l-1} \rightarrow P_l) dP_l ;$$

(3) 若 $\xi < p(P_{l-1})$ ，则从分布密度

$$\begin{aligned} \tilde{K}(P_{l-1} \rightarrow P_l) \\ = K_e(P_{l-1} \rightarrow P_l) / \int K_e(P_{l-1} \rightarrow P_l) dP_l \end{aligned}$$

中抽样产生 $P_l = (\tilde{r}_l, E_l, \tilde{\Omega}_l)$ ，然后重复 (2)，

(3)；

(4) 若 $\xi \geq p(P_{l-1})$ ，则游戏终止，得状态序列

$$P_0, P_1, \dots, P_M.$$

和一个 I 的抽样

$$F_1 = f(P_M) / (1 - p(P_M)).$$

F_1 的统计平均便是 I 的一个无偏估计。

事实上，状态序列

$$P_0, P_1, \dots, P_M$$

在 P_0 的邻域 dP_0 ， P_1 的邻域 dP_1 ， \dots ， P_M 的邻域 dP_M 的概率为

$$\begin{aligned} H(P_0, P_1, \dots, P_M) dP_0 dP_1 \dots dP_M \\ = S_e(P_0) \prod_{l=1}^M p(P_{l-1}) \tilde{K}(P_{l-1} \rightarrow P_l) \cdot \\ \cdot (1 - p(P_M)) dP_0 dP_1 \dots dP_M. \end{aligned}$$

其次， F_1 求平均值应为

$$\langle F_1 \rangle_M = \int \dots \int P_1(P_M) H(P_0, P_1, \dots, P_M) dP_0 \dots dP_M$$

$$= \int \cdots \int f(P_M) S_{\pi}(P_0) \prod_{i=1}^M K_{\pi}(P_{i-1} \rightarrow P_i) dP_0 \cdots dP_M = I_M$$

所以

$$\hat{F}_1 = \sum_M \langle F_1 \rangle_M = \sum_{M=0}^{\infty} I_M = I \quad .$$

§4 特征值问题的蒙特卡罗解法

求具有一定位势的薛定谔方程的最小特征值问题和一个含裂变物质的核系统的临界安全问题的计算都可归结为一个齐次积分方程

$$\lambda f(P) = \int K(P' \rightarrow P) f(P') dP'$$

的最大特征值的计算问题。设方程的特征值和特征函数为 $\{\lambda_K, f_K(P)\}$ ，并且有

$$|\lambda_0| > |\lambda_1| \geq |\lambda_2| \cdots,$$

进一步假定 $\{f_K(P)\}$ 构成完备系，那么对任一初始源分布 $S_0(P)$ 可按 $\{f_K(P)\}$ 进行展开，即有

$$S_0(P) = \sum_{K=0}^{\infty} \alpha_K f_K(P) \quad .$$

对初始源分布 $S_0(P)$ 进行源迭代计算

$$S_n(P) = \int S_{n-1}(P') K(P' \rightarrow P) dP' \quad .$$

根据特征函数的性质

$$\lambda_K f_K(P) = \int K(P' \rightarrow P) f_K(P') dP' \quad ,$$

于是我们有等式

$$S_n(P) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \lambda_k^n f_k(P) \quad \circ$$

因而，对于任何函数 $g(P)$ ，只要

$$\int f_0(P)g(P)dP \neq 0$$

都有

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\int S_{n+1}(P)g(P)dP}{\int S_n(P)g(P)dP} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_0 \frac{\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_0}\right)^{n+1} \alpha_k \int f_k(P)g(P)dP}{\sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_0}\right)^n \alpha_k \int f_k(P)g(P)dP} \\ &= \lambda_0 \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\alpha_0 \int f_0(P)g(P)dP +}{\alpha_0 \int f_0(P)g(P)dP +} \\ & \quad + \frac{\sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_0}\right)^{n+1} \alpha_k \int f_k(P)g(P)dP}{\sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_0}\right)^n \alpha_k \int f_k(P)g(P)dP} = \lambda_0 \end{aligned}$$

而

$$\begin{aligned} S_n(P) &= \lambda_0^n \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_0}\right)^n \alpha_k f_k(P) = \lambda_0^n \left\{ \alpha_0 f_0(P) + \right. \\ & \quad \left. + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\lambda_k}{\lambda_0}\right)^n \alpha_k f_k(P) \right\} \approx \alpha_0 \lambda_0^n f_0(P) \end{aligned}$$

注意到 $\alpha_0 \lambda_0^n f_0(P)$ 与 $f_0(P)$ 是成正比例的。

设 $S_{n-1}(P)$ 是一个归一化密度分布，再引进权重因子

$$W(P') = \int K(P' \rightarrow P) dP$$

那么，函数

$$\bar{K}(P' \rightarrow P) = \frac{K(P' \rightarrow P)}{\int K(P' \rightarrow P) dP}$$

构成归一化密度函数。于是，可以用直接抽样法来实现这个迭代：

(1) 从 $S_{n-1}(P)$ 产生抽样 P' ；

(2) 计算积分

$$\int K(P' \rightarrow P) dP = W(P')$$

作为权重因子；

(3) 从 $K(P' \rightarrow P)$ 产生 $W(P')$ 个抽样 P ；

(4) 归一化得到 $S_n(P)$ 的分布。

当 n 充分大使 $S_n(P)$ 趋于稳定后，求 λ_0 ：

(1) 从 $S_n(P)$ 产生抽样 P_i ，取 $g(P_i)$ ；

(2) 从 $\bar{K}(P_i \rightarrow P)$ 产生 $W(P_i)$ 个抽样 Q_i ；

$$(3) \quad \lambda_0 \approx \frac{\sum_i w(P_i) g(Q_i)}{\sum_i g(P_i)}$$

参 考 书 目

- [1] 概率论与数理统计 复旦大学数学系主编
上海科技出版社
- [2] 蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用 裴鹿成、张孝
泽著 科学出版社
- [3] A Short Course in Computational Probability and Statistics
W. Freiberger U. Grenander
Spring—Verlag.
- [4] Метод Статистических Испытаний (统计试验法)
Н. П. Еусленко Ю. А. Шрейдер