

第三章 光子输运问题的模拟

1. 问题模型
2. 直接模拟方法
3. 加权法
4. 蒙特卡罗程序结构



第三章 光子输运问题的模拟

这里，我们以计算 NaI(Tl) 晶体对光子的响应为例，介绍蒙特卡罗方法解决粒子输运问题的基本方法和技巧。

对于其它粒子输运问题，其模拟的基本方法是一样的，其差别只在于记录的不同以及技巧的不同。因此，这些方法和技巧对于诸如辐射传播、多次散射和通量计算等一般粒子输运问题都是适用的。



粒子的输运问题带有明显的随机性质，粒子的输运过程是一个随机过程。粒子的运动规律是根据大量粒子的运动状况总结出来的，是一种统计规律。蒙特卡罗模拟，实际上就是模拟相当数量的粒子在介质中运动的状况，使粒子运动的统计规律得以重现。不过，这种模拟不是用实验方法，而是利用数值方法和技巧，即利用随机数来实现的。



1. 问题模型

在辐射测量中，NaI(Tl) 晶体作为一种常用的闪烁体用于测量光子的计数率和能谱。

这里，我们只是简单地模拟低能光子在晶体内的输运以及产生的能量沉积，忽略次级光子和电子的产生情况。

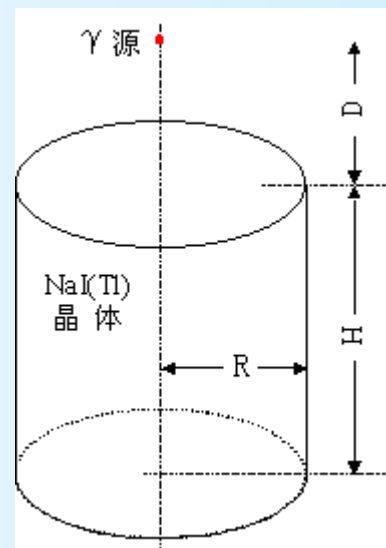
在模拟过程中，假定粒子在两次碰撞之间按直线运动，且粒子之间的相互作用可以忽略。



这里，我们用一个圆柱体的 NaI(Tl) 晶体来测量一个 γ 源。晶体半径为 R ，高为 H ；源在晶体中心轴上，与晶体距离为 D 。

我们要计算晶体对该 γ 源发射光子的探测效率，光子能量沉积谱。

坐标系假定以晶体底面为 XY 平面，中心轴为 Z 轴。



2. 直接模拟方法

直接模拟方法就是直接从物理问题出发，模拟粒子的真实物理过程。

- 1) [状态参数与状态序列](#)
- 2) [粒子与物质作用过程](#)
- 3) [模拟运动过程](#)
- 4) [记录结果](#)



1) 状态参数与状态序列

粒子在介质中的运动的状态，可用一组参数来描述，称之为**状态参数**。它通常包括：粒子的空间位置 r ，能量 E 和运动方向 Ω ，以 $S = (r, E, \Omega)$ 表示。

有时还需要其他的参数，如粒子的时间 t 和附带的权重 W ，这时**状态参数**为 $S' = (r, E, \Omega, t, W)$ 。

状态参数通常要根据所求问题的类型和所用的方法来确定。

例如，对于球对称几何，取 $S = (r, E, \cos\theta)$

其中 r 表示粒子所在位置到球心的距离， θ 为粒子的运动方向与其所在位置的径向夹角。



粒子第 m 次碰撞后的状态参数为

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

或

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

它表示一个由源发出的粒子，在介质中经过 m 次碰撞后的状态，其中

\mathbf{r}_m : 粒子在第 m 次碰撞点的位置

E_m : 粒子第 m 次碰撞后的能量

$\boldsymbol{\Omega}_m$: 粒子第 m 次碰撞后的运动方向

t_m : 粒子到第 m 次碰撞时所经历的时间

W_m : 粒子第 m 次碰撞后的权重

有时，也可选为粒子进入第 m 次碰撞时的状态参数。



一个由源发出的粒子在介质中运动，经过若干次碰撞后，直到其运动历史结束（如逃出系统或被吸收等）。假定粒子在两次碰撞之间按直线运动，其运动方向与能量均不改变，则粒子在介质中的运动过程可用以下碰撞点的**状态序列**描述：

$$S_0, S_1, \dots, S_{M-1}, S_M$$

或者更详细些，用

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

来描述。这里 S_0 为粒子由源出发的状态，称为初态， S_M 为粒子的终止状态。 M 称为粒子运动的链长。

这样的序列称为粒子随机运动的历史，模拟一个粒子的运动过程，就变成确定状态序列的问题。



2) 粒子与物质作用过程

粒子在运动过程中会与物质发生反应，即发生碰撞。粒子到达碰撞点的距离即为该粒子本次输运距离。由于碰撞是随机发生的，所以输运距离 L 是一随机变量。

假设 L 服从分布 $f(L)$ ，即粒子在与出发点距离 $l \sim l+dl$ 中间发生碰撞的概率为：

$$P(l \leq L < l + dl) = f(l)dl$$



对于单个原子核来说，其微观截面反映了粒子与其发生作用的有效面积。假如粒子与核能发生多种作用，则这些有效面积之和即为其微观总截面 σ_t 。如果这种原子核的核密度为 N ，则在单位体积内这种原子核的有效作用面积

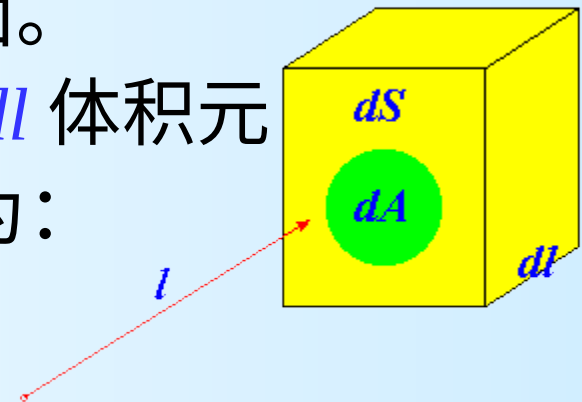
$\Sigma_t = N \cdot \sigma_t$ ，即为其宏观总截面。

如图所示，一个进入 $dV = dS \cdot dl$ 体积元的粒子在内发生碰撞的概率为：

$$dA/dS = \Sigma_t(l) \cdot dV/dS = \Sigma_t(l) \cdot dl$$

而粒子要进入该体积元的概率为：

$$P(L > l) = \int_0^\infty f(l) dl = 1 - F(l)$$



所以，粒子在距离出发点 l 处的体积元 dV 内发生碰撞的概率为：

$$P(l \leq L < l + dl) = P(L > l) \cdot \frac{dA}{dS} = f(l)dl$$

即：

$$\Sigma_t(l) \cdot (1 - F(l)) \cdot dl = dF(l)$$

$$1 - F(l) = \exp\left(- \int \Sigma_t(l) dl\right)$$

$$f(l) = F'(l) = \Sigma_t(l) \cdot \exp\left(- \int \Sigma_t(l) dl\right)$$



3) 模拟运动过程

(1) 确定初始状态 S_0 :

确定粒子的初始状态，实际上就是要从粒子源的空间位置、能量和方向分布中抽样。设源分布为

$$f(\mathbf{r}_0, E_0, \boldsymbol{\Omega}_0) = f_1(\mathbf{r}_0) f_2(E_0) f_3(\boldsymbol{\Omega}_0)$$

则分别从各自的分布中抽样确定初始状态。

对于单向点源： $\mathbf{r}_0 = (0, 0, H)$, $\boldsymbol{\Omega}_0 = (0, 0, -1)$

对于各向同性点源：

$$w_0 = \left(1 - \frac{D}{\sqrt{D^2 + R^2}} \right) \cdot \xi - 1$$

$$\mathbf{r}_0 = \left(D \cdot \frac{\sqrt{1 - w_0^2}}{-w_0}, 0, H \right), \quad \boldsymbol{\Omega}_0 = (\sqrt{1 - w_0^2}, 0, w_0)$$



(2) 确定下一个碰撞点：

已知状态 S_{m-1} ，要确定状态 S_m ，首先要确定下一个碰撞点的位置 r_m 。在相邻两次碰撞之间，中子的输运长度 L 服从如下分布：

$$f(L) = \Sigma_t(r_{m-1} + L, \Omega_{m-1}, E_{m-1}) \exp \left\{ - \int_0^L \Sigma_t(r_{m-1} + l, \Omega_{m-1}, E_{m-1}) dl \right\}$$

其中， Σ_t 为介质的中子宏观总截面，积分 $\int_0^L \Sigma_t(r_{m-1} + l, \Omega_{m-1}, E_{m-1}) dl$

称为粒子输运的自由程数，系统的大小通常就是用系统的自由程数表示的。

粒子输运的自由程数 ρ 服从指数分布：

$$f(\rho) = e^{-\rho} \quad \rho \geq 0$$



因此，从 $f(L)$ 中抽样确定 L ，就是要先从指数分布抽样确定自由程数 ρ ， $\rho = -\ln \xi$ ；然后再从积分方程 $\int_{r_{m-1}}^{r_m} \Sigma_t(r_{m-1} + l, E_{m-1}) dl = -\ln \xi$ 中解出 L 。

对于单一介质

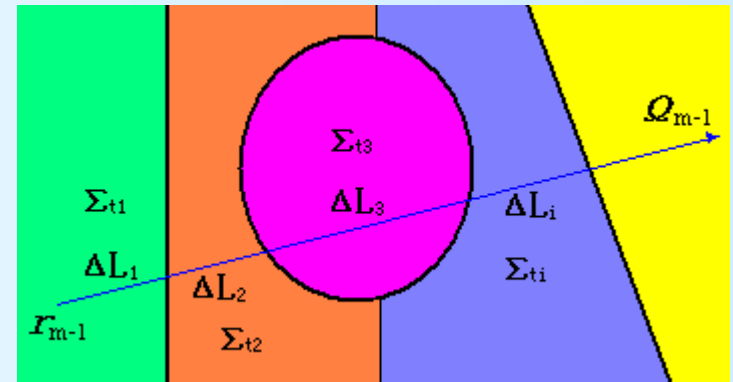
$$L = \frac{\rho}{\Sigma_t(E_{m-1})} = - \frac{\ln \xi}{\Sigma_t(E_{m-1})}$$

对于多层介质，如果

$$\sum_{i=1}^{I-1} \Delta L_i \cdot \Sigma_{t,i}(E_m) \leq \rho < \sum_{i=1}^I \Delta L_i \cdot \Sigma_{t,i}(E_m)$$

则

$$L = \sum_{i=1}^{I-1} \Delta L_i + \frac{\rho - \sum_{i=1}^{I-1} \Delta L_i \cdot \Sigma_{t,i}(E_m)}{\Sigma_{t,I}(E_m)}$$



最大截面法

对于多层介质，或其他介质密度与位置有关的问题，在求 ΔL_i ($i=1, 2, \dots, I_{max}$) 时，如果系统形状复杂，计算是非常烦杂的。在这种情况下，使用最大截面法更方便。

最大截面抽样方法为：

$$\begin{array}{c}
 L_1 = 0 \\
 \downarrow \\
 L_1 = L_1 - \frac{\ln \xi_1}{\Sigma_{t, \max}(E_m)} \leftarrow \\
 \downarrow \\
 \xi_2 \leq \frac{\Sigma_t(\mathbf{r}_m + L_1 \boldsymbol{\Omega}_m, E_m)}{\Sigma_{t, \max}(E_m)} > \\
 \downarrow \leq \\
 L = L_1
 \end{array}$$

其中

$$\Sigma_{t, \max}(E) = \max_r \Sigma_t(\mathbf{r}, E)$$



L 确定后，则下一个碰撞点的位置

$$\mathbf{r}_m = \mathbf{r}_{m-1} + L \cdot \boldsymbol{\Omega}_{m-1}$$

即

$$x_m = x_{m-1} + L \cdot u_{m-1}$$

$$y_m = y_{m-1} + L \cdot v_{m-1}$$

$$z_m = z_{m-1} + L \cdot w_{m-1}$$

如果 $z_m \leq 0$ 、或 $z_m \geq D$ 、或 $x_m^2 + y_m^2 \geq R^2$ 则光子飞出晶体，光子历史终止。



(3) 确定被碰撞的原子核：

通常介质由几种原子核组成，光子与核碰撞时，要确定与哪一种核碰撞。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 ，则介质的宏观总截面为：

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

其中 Σ_t^A 、 Σ_t^B 、 Σ_t^C 分别为核 A 、 B 、 C 的宏观总截面。其定义如下：

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

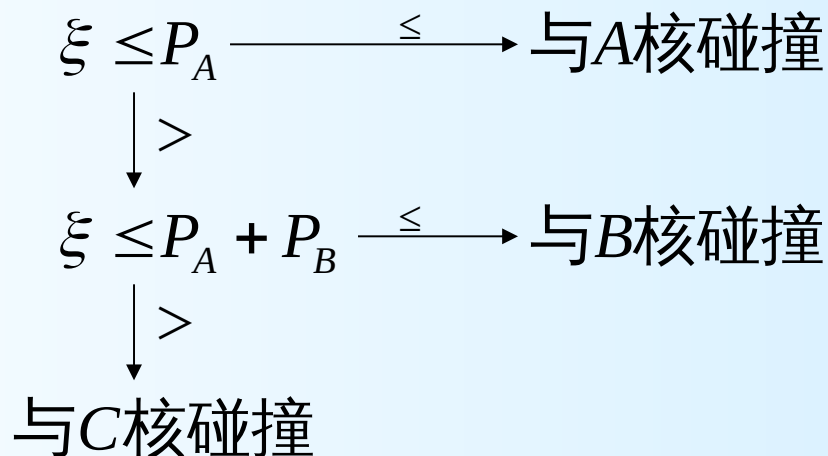
$\Sigma_t^{(\cdot)}(E_{m-1})$ 、 $N_{(\cdot)}$ 、 $\sigma_t^{(\cdot)}(E_{m-1})$ 分别表示 (\cdot) 核的宏观总截面、核密度和微观总截面。



由于光子截面表示光子与核碰撞可能性的大小，因此，很自然地，光子与 A 、 B 、 C 核发生碰撞的几率分别为：

$$P_A = \frac{\Sigma_t^A(E_{m-1})}{\Sigma_t(E_{m-1})}, \quad P_B = \frac{\Sigma_t^B(E_{m-1})}{\Sigma_t(E_{m-1})}, \quad P_C = \frac{\Sigma_t^C(E_{m-1})}{\Sigma_t(E_{m-1})}$$

利用离散型随机变量的抽样方法，确定碰撞核种类：



(4) 确定碰撞类型：

确定了碰撞的核 (比如 B 核) 后, 就要进一步确定碰撞类型。低能光子与核的反应类型有光电效应和康普顿效应, 它们的微观截面分别为

$$\sigma_{pe}^B(E_{m-1}) \text{ 和 } \sigma_c^B(E_{m-1})$$

则有
$$\sigma_t^B(E_{m-1}) = \sigma_{pe}^B(E_{m-1}) + \sigma_c^B(E_{m-1})$$

各种反应发生的几率分别为

$$\begin{aligned} P_{pe} &= \sigma_{pe}^B(E_{m-1}) / \sigma_t^B(E_{m-1}) \\ P_c &= \sigma_c^B(E_{m-1}) / \sigma_t^B(E_{m-1}) \end{aligned}$$



利用离散型随机变量的抽样方法，确定反应类型。

即抽取随机数 ξ ，若 $\xi \leq P_{pe}$ ，则为光电效应，此时光子的历史终止。

否则，则为康普顿效应，这时就要进一步确定康普顿散射后光子的能量和方向。



(5) 确定碰撞后的能量与运动方向：

光子发生康普顿散射后，其能量分布密度函数为：

$$f(x/\alpha) = \frac{1}{K(\alpha)} \left[\left(\frac{\alpha + 1 - x}{\alpha \cdot x} \right)^2 + \frac{1}{x} - \frac{1}{x^2} + \frac{1}{x^3} \right], \quad 1 \leq x \leq 1 + 2\alpha$$

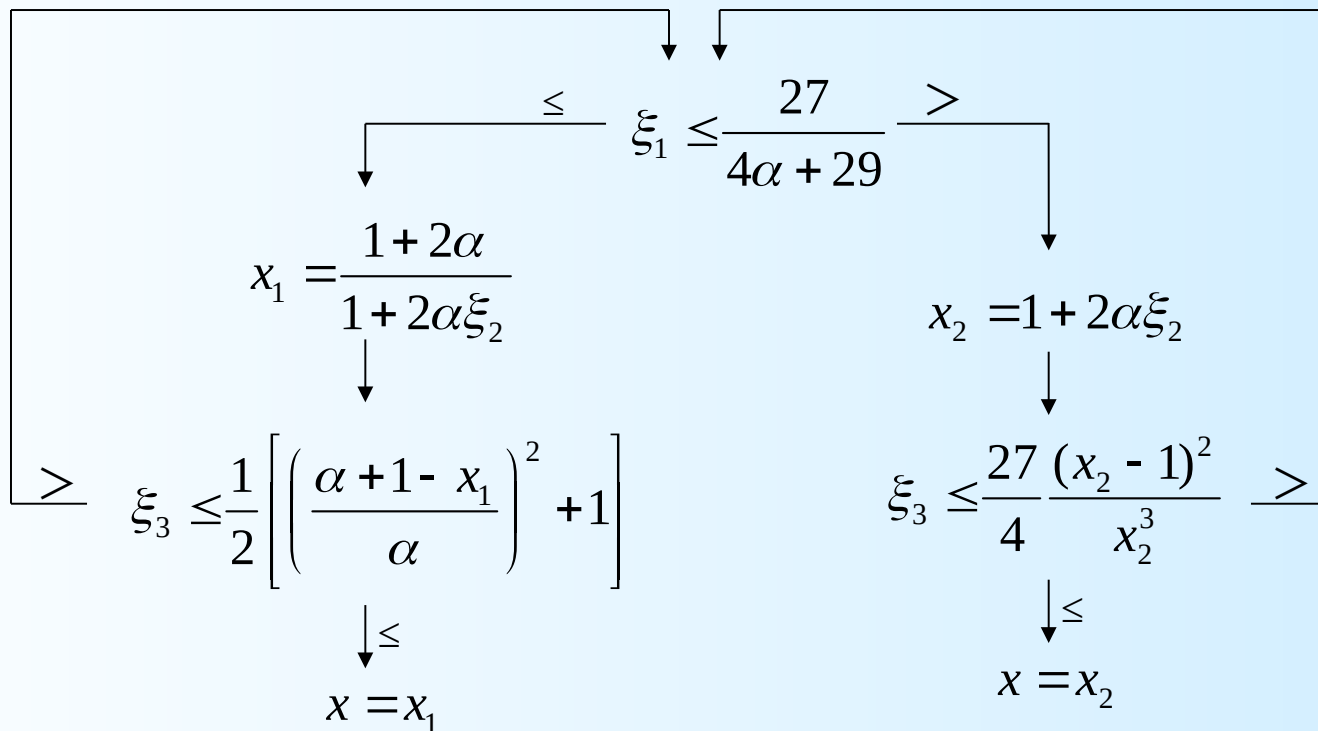
其中， $K(\alpha)$ 为归一因子。

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

$x = \alpha/\alpha'$ ， α 和 α' 分别为光子散射前后的能量，以 m_0c^2 为单位， m_0 为电子静止质量， c 为光速， α 即 E/m_0c^2 ， $\alpha' = E'/m_0c^2$ 。



光子康普顿散射能量分布的抽样方法为：



x 的抽样确定后，散射后的能量为：

$$E_{m+1} = \alpha' \cdot m_0 c^2 = \frac{\alpha}{x} \cdot m_0 c^2 = \frac{E_m}{x}$$

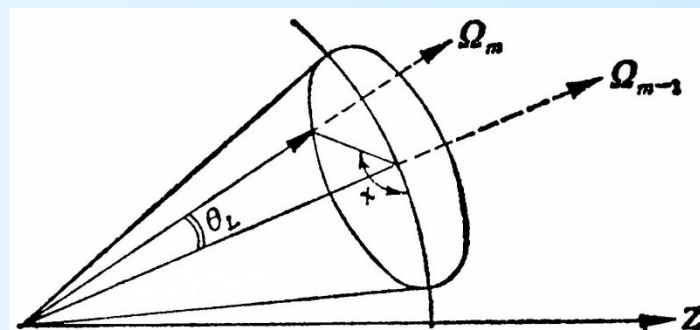


光子的康普顿散射角与其散射前后的能量有关，它的散射角余弦 $=\cos\theta_L$ 的分布密度函数为：

$$f(\mu_L) = \delta\left(1 - \frac{1}{\alpha'} + \frac{1}{\alpha} - \mu_L\right)$$

抽样方法为：

$$\mu_L = 1 - \frac{1}{\alpha'} + \frac{1}{\alpha}$$



散射角 θ_L 确定后，还需要确定方位角并最终确定散射后光子的运动方向。



令 $a = \cos \theta_L$, $b = \sin \theta_L = \sqrt{1 - a^2}$,
 $c = \cos \varphi$, $d = \sin \varphi$

方位角 φ 在 $[0, 2\pi]$ 上均匀分布。

则

$$u_m = \frac{-bcw_{m-1}u_{m-1} + bdv_{m-1}}{\sqrt{u_{m-1}^2 + v_{m-1}^2}} + au_{m-1}$$

$$v_m = \frac{-bcw_{m-1}v_{m-1} - bdu_{m-1}}{\sqrt{u_{m-1}^2 + v_{m-1}^2}} + av_{m-1}$$

$$w_m = bc\sqrt{u_{m-1}^2 + v_{m-1}^2} + aw_{m-1}$$

当 $u_{m-1}^2 + v_{m-1}^2 \rightarrow 0$ 时，不能使用上述公式，可用下面的简单公式：

$$u_m = bc$$

$$v_m = bd$$

$$w_m = aw_{m-1}$$



至此，由 S_{m-1} 完全可以确定 S_m 。

因此，当光子由源出发后，即 S_0 确定后，重复步骤 (2) ~ (5)，直到光子游动历史终止。于是得到了一个光子的随机游动历史 S_0 ， S_1 ，...， S_{M-1} ， S_M ，即

$$\left(\begin{array}{ccccc} \mathbf{r}_0, & \mathbf{r}_1, & \cdots, & \mathbf{r}_{M-1}, & \mathbf{r}_M \\ E_0, & E_1, & \cdots, & E_{M-1}, & E_M \\ \Omega_0, & \Omega_1, & \cdots, & \Omega_{M-1}, & \Omega_M \end{array} \right)$$

也就是模拟了一个由源发出的光子的运动过程。



以上模拟过程可分为两大步：第一步确定粒子的初始状态 S_0 ，第二步由状态 S_{m-1} 来确定状态 S_m 。这第二步又分为两个过程：第一个过程是确定碰撞点位置 r_m ，称为输运过程；第二个过程是确定碰撞后粒子的能量及运动方向，称为碰撞过程。对于光子，碰撞过程是先确定能量，再确定散射角以及运动方向。重复这两个过程，直至粒子的历史终止。

这种模拟过程，是解任何类型的粒子输运问题所共有的，它是蒙特卡罗方法解题的基本手段。



4) 记录结果

在获得光子的随机游动历史后，我们要对所计算的物理量进行估计。对于 NaI(Tl) 晶体，我们要计算探测效率和光子能量沉积谱。考察每个光子的随机游动历史，如果它从源出发直接穿透晶体 ($M=0$)，则该光子没有被记录，其对探测效率的贡献为零；否则，如果光子在晶体内发生了反应，则必定会有能量损失，能够被记录到，其对探测效率的贡献为 1。



设第 n 个光子对探测效率的贡献为 η_n ，则

$$\eta_n = \begin{cases} 1, & \text{当 } M > 0 \\ 0, & \text{当 } M = 0 \end{cases}$$

如果我们共跟踪了 N 个光子，则记录到的光子数为：

$$N_c = \sum_{n=1}^N \eta_n$$

则探测效率的近似值为：

$$\hat{\eta}_N = \frac{N_c}{N} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \eta_n$$

它是探测效率的一个无偏估计。



我们称这种直观地模拟过程和估计方法为直接模拟方法。在置信水平 $1 - \alpha = 0.95$ 时， 的误差为：

$$|\hat{\eta}_N - \eta| < \frac{\chi_\alpha \sigma_\eta}{\sqrt{N}} \approx \frac{2\sigma_\eta}{\sqrt{N}}$$

其中 σ_η 为 η_n 的均方差，由于 η_n 是一个服从二项分布的随机变量，所以

$$\sigma_\eta^2 = \eta(1 - \eta)$$

或

$$\hat{\sigma}_\eta^2 = \hat{\eta}_N(1 - \hat{\eta}_N)$$



为了得到光子能量沉积谱，将能量分成若干个间隔：

$$E_{\min} = E_I < \cdots < E_1 < E_0 = E_{\max}$$

其中 E_{\max} , E_{\min} 分别表示能量的上、下限，对于有记录的光子，要先计算其沉积能量 E_D ：

$$E_D = E_0 - E_M$$

然后根据 E_D 所处的能量间隔进行记录，若沉积能量 E_D 属于第 i 个能量间隔 ΔE_i ，则在第 i 个能量计数器中加 "1"。



跟踪 N 个光子后，则光子能量沉积谱为：

$$\hat{P}_i = \frac{N_i}{N \cdot \Delta E_i} \quad i = 1, 2, \dots, I$$

其中 N_i 为第 i 个能量间隔的光子记录数。

归一后得到能谱分布的概率密度函数：

$$\hat{P}_i^* = \frac{\hat{P}_i}{\hat{\eta}_N} = \frac{N_i}{N_c \cdot \Delta E_i} \quad i = 1, 2, \dots, I$$



在实际的测量系统中，并不能精确地测量到光子的沉积能量值，实际测量到的值是有一定的统计涨落的，而且该涨落是服从高斯分布的。因此，要模拟实际的测量情况，最终记录的沉积能量就是一个正态分布的随机变量：

$$E'_D = E_D + \sigma \cdot x$$

其中 E_D 是其计算的沉积能量， x 是服从标准正态分布的随机变量， σ 是对应沉积能量处的能量统计涨落的标准差。它与该能量处的能量分辨率 r 有以下关系：

$$\sigma = \frac{r \cdot E_D}{2\sqrt{2\ln 2}} \approx 0.4247 \cdot r \cdot E_D$$



正态分布的近似抽样

我们知道，随机数 ξ 的期望值为 $1/2$ ，方差为 $1/12$ ，则随机变量

$$X_n = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i - \frac{1}{2}}{\sqrt{\frac{1}{12n}}}$$

渐近正态分布，因此，当 n 足够大时便可用 X_n 作为正态分布的近似抽样。特别是 $n = 12$ 时，有

$$X_{12} = \sum_{i=1}^6 (\xi_{2i} - \xi_{2i-1})$$



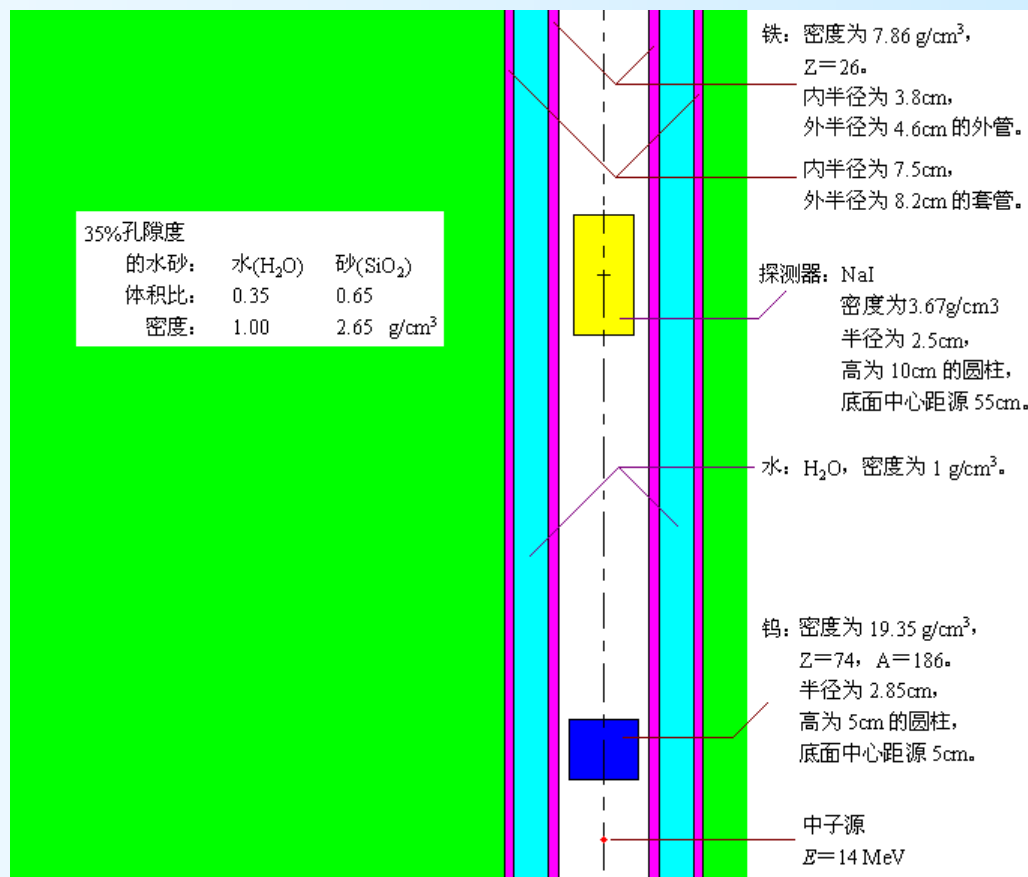
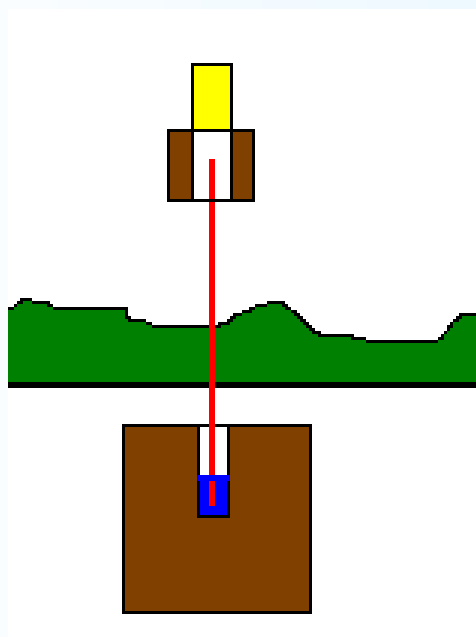
3. 加权法

加权法是蒙特卡罗方法解粒子输运问题中很常用的手段。

- 1) [加权法思想](#)
- 2) [偏移抽样方法](#)
- 3) [指数变换法](#)
- 4) [俄国轮盘赌和分裂](#)



NaI(Tl) 晶体测量光子响应的实际例子：



1) 加权法思想

对于很多深穿透的问题，在直接模拟时，由于模拟的粒子距离指定区域很远，在运输过程中要发生多次碰撞，很容易被吸收，使其很难到达指定区域。因此在模拟大量的粒子后，往往只有极少数粒子进入指定区域，从而可以记录相应的贡献。



每次碰撞时，光子很有可能被吸收而停止跟踪。如果改变模拟方法，在判断碰撞类型 $\xi \leq P_{pe}$ 时，可以认为光子的 P_{pe} 部分被吸收，而其余部分 (P_c) 是康普顿散射，即人为地把光子分成两部分，一部分散射，一部分吸收。继续跟踪部分只代表部分光子，因此需要一个权重因子来反映其所代表的比例。

也就是说，我们利用粒子权重的变化来反映继续跟踪的部分。这就是简单加权法的基本思想。



显然，在加权法中光子的权重 W 已成为光子状态参数的组成部分。这时光子历史成为：

$$\left(\begin{array}{ccccc} \mathbf{r}_0, & \mathbf{r}_1, & \cdots, & \mathbf{r}_{M-1}, & \mathbf{r}_M \\ E_0, & E_1, & \cdots, & E_{M-1}, & E_M \\ \boldsymbol{\Omega}_0, & \boldsymbol{\Omega}_1, & \cdots, & \boldsymbol{\Omega}_{M-1}, & \boldsymbol{\Omega}_M \\ W_0, & W_1, & \cdots, & W_{M-1}, & W_M, \end{array} \right)$$

对源光子，取 $W_0=1$ 。

经过碰撞光子权重的变化为：

$$W_m = W_{m-1} \frac{\sum_c (E_{m-1})}{\sum_t^B (E_{m-1})} = W_{m-1} \cdot P_c^B$$



2) 偏移抽样方法

使用蒙特卡罗方法计算积分

$$I = \int g(x) f(x) dx$$

时, 可考虑将积分 I 改写为

$$I = \int \frac{g(x) f(x)}{f^*(x)} \cdot f^*(x) dx = \int g^*(x) \cdot f^*(x) dx$$

其中 $f^*(x)$ 为一个与 $f(x)$ 有相同定义域的新的分布密度函数。于是可以这样计算积分 I :

$$\hat{I}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g^*(X_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(X_i)}{f^*(X_i)} \cdot g(X_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N W(X_i) \cdot g(X_i)$$

这里 X_i 是从 $f^*(x)$ 中抽取的第 i 个子样。



由此可以看出，原来由 $f(x)$ 抽样，现改为由另一个分布密度函数 $f^*(x)$ 抽样，并附带一个权重纠偏因子

$$W(x) = f(x) / f^*(x)$$

这种方法称为偏倚抽样方法。

从 $f(x)$ 中抽取的 X_f ，满足

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

而对于偏倚抽样，有

$$W(X_{f^*}) \cdot P(x \leq X_{f^*} < x + dx) = W(x) f^*(x) dx = f(x) dx$$

一般情况下， X_f 是具有分布 $f(x)$ 总体的简单子样的个体，只代表一个。 X_{f^*} 是具有分布 $f^*(x)$ 总体的简单子样的个体，但不代表一个，而是代表 $W(X_{f^*})$ 个，这时 X_{f^*} 是带权 $W(X_{f^*})$ 服从分布 $f(x)$ 。



3) 指数变换法

对于深穿透的问题，粒子要输运到远距离区域很困难，但是如果能够人为地延长粒子的输运距离，则就有可能使较多的粒子输运到较远的区域。

考虑如下伪过程：宏观总截面为

$$\Sigma_t^*(E) = \Sigma_t(E)(1 - C \cdot \cos \alpha), \quad |C| < 1$$

其中 α 为粒子的运动方向与指定方向的夹角。

如果 $C > 0$ ，则当粒子朝向指定方向运动时， $\cos \alpha > 0$ ，

$\Sigma_t^*(E) < \Sigma_t(E)$ ，粒子输运得更远；而当粒子背离指定方向运动时， $\cos \alpha < 0$ ， $\Sigma_t^*(E) > \Sigma_t(E)$ ，粒子输运距离缩短。总的来看，粒子加强了向指定方向运动的能力，使得指定区域内模拟跟踪的粒子数目的比例增加。



用伪过程进行粒子输运显然与实际情况不符合，会产生偏差，所以要调整粒子的权重来进行纠偏。

如果粒子的输运距离为：

$$s = - \frac{1}{\Sigma_t^*} \ln \xi$$

则需要纠偏的权重比例为：

$$W_c = \frac{\Sigma_t e^{-\Sigma_t s}}{\Sigma_t^* e^{-\Sigma_t^* s}} = \frac{e^{-C \cos \alpha \Sigma_t s}}{1 - C \cdot \cos \alpha}$$



4) 俄国轮盘赌和分裂

采用加权法进行粒子输运，粒子的权重会变大或变小。如果粒子的权重太大，可能会引起较大的统计涨落，要避免这种情况，就需要对粒子进行分裂。

设整数 $n > 1$ ，对于权重为 W 的粒子，将其分裂为 n 个权重为 W_i 的粒子，然后对这 n 个粒子分别进行跟踪，其中：

$$W_i = W/n$$

这就是分裂技巧。



如果粒子的权重太小，则它对结果的贡献也很小，继续跟踪的意义不大，这时停止跟踪可以节约计算时间，但是会对结果产生偏差。

假定粒子权重为 W ，令 $0 < q < 1$ ， $W_q = W/q$ ，则：

$$W = q \cdot W_q + (1 - q) \cdot 0$$

于是 W 变为一个两点分布的随机变量的期望值：

$$P(W = W_q) = q$$

$$P(W = 0) = 1 - q$$

该概率模型可以通过以下方法实现：

取随机数 ξ ，如果 $\xi \leq q$ ，则继续跟踪，同时粒子的权重变为 W_q ；反之则停止跟踪。这种方法就是俄国轮盘赌。



通常可以在不同的区域以及不同的能量段设定不同的权重范围。如果某个区域粒子权重范围设定为 $W_L < W_S < W_{UP}$ ，当粒子的权重 $W > W_{UP}$ 时，就分裂为 n 个权重为 W/n 的粒子，其中 $n = [W/W_{UP}] + 1$ 。

这样，每个分裂粒子的权重仍控制在设定的范围内。

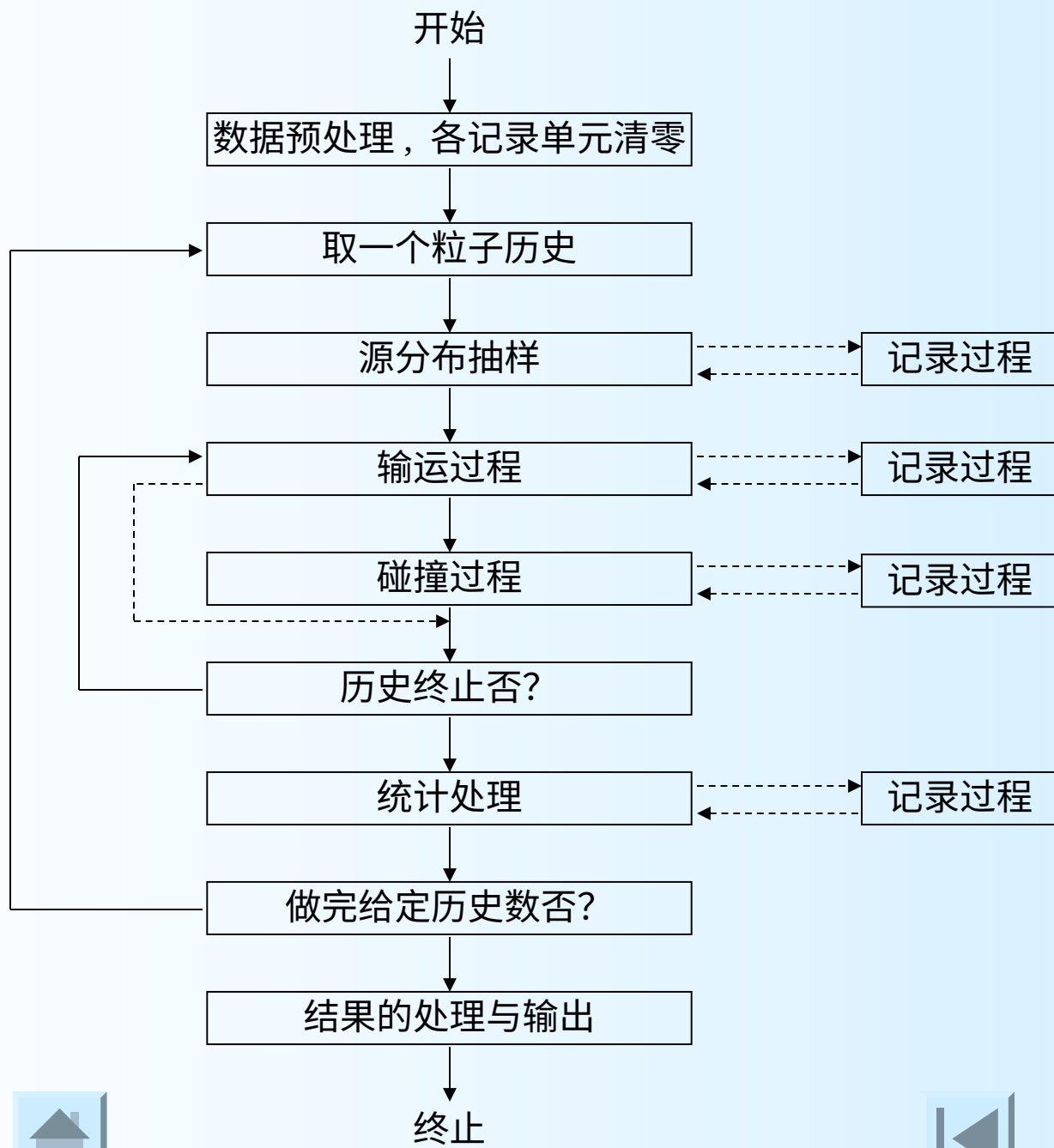
而当粒子的权重 $W < W_L$ 时，就进行俄国轮盘赌，其存活概率为 $q = W/W_S$ ，存活粒子的权重为 W_S ，同样也控制在设定的范围内。同时，大部分粒子在进行俄国轮盘赌时被杀死，这样即节约了计算时间，又保持了结果的无偏。



4. 蒙特卡罗程序结构

在电子计算机上，蒙特卡罗方法解粒子输运问题的程序，一般都可分为：源抽样，空间输运过程，碰撞过程，记录过程和结果的处理与输出等部分。





至于粒子历史终止条件，根据问题的几何条件、物理假定，处理方法，可归纳为以下几种：

- 1) 粒子从系统逃脱；
- 2) 粒子经碰撞被吸收；
- 3) 经俄国轮盘赌后，历史被终止；
- 4) 粒子能量低于给定能量（阈能）；
- 5) 粒子位置越过某一界面；
- 6) 粒子飞行时间超过给定时间；

