计算点通量的蒙特卡罗方法述评*

裴鹿成

（中国科学院原子能研究所）

§1 引言

应用蒙特卡罗方法计算点通量，由于以下三个原因使得它在粒子输运的计算问题中占有非常重要的地位。其一是点通量计算在实际问题中经常遇到；其二是任何局部通量计算均可通过点通量计算实现；其三是用其他方法计算点通量存在一定困难，而蒙特卡罗方法却不存在太大的困难，尤其是对于那些几何以及其他因素复杂的问题更是如此。

用 $\vec{r}^0$ 表示所要计算的点通量的所在位置，$\varphi(\vec{r}^0)$ 表示粒子在点 $\vec{r}^0$ 的点通量，其定义是 $\varphi(\vec{r}^0)d\vec{r}^0$ = 在点 $\vec{r}^0$ 的体积元 $d\vec{r}^0$ 中，粒子所经过的平均径迹长度（也称粒子的平均通量）。

为了简单起见，同时也为了不妨一般性，在这里将只考虑与能量无关的点通量计算问题。进一步引进符号：$P=(\vec{r},\vec{\Omega})$，其中 $\vec{r}$ 和 $\vec{\Omega}$ 分别表示粒子的位置和运动方向单位矢量。$\Sigma_s(\vec{r})$、$\Sigma_t(\vec{r})$ = 在点 $\vec{r}$ 处粒子的散射截面、总截面。$S(P)dP$ = 在状态 P 附近 dP 内，由源发射的粒子平均数。$T(\vec{r}'\to\vec{r}\,|\,\vec{\Omega}')d\vec{r}$ = 由点 $\vec{r}'$ 处出发的方向为 $\vec{\Omega}'$ 的一个粒子，在点 $\vec{r}$ 附近 $d\vec{r}$ 内发生碰撞的粒子平均数。$f(\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\,|\,\vec{r})d\vec{\Omega}$ = 在点 $\vec{r}$ 发生散射的一个粒子，方向由 $\vec{\Omega}'$ 变到 $\vec{\Omega}$ 附近 $d\vec{\Omega}$ 内发射的粒子平均数。$\chi(P)dP$ = 由源 $S(P)$ 引起的在状态 P 附近 dP 内发射的粒子平均数。按照定义，$\chi(P)$ 应满足如下积分方程

$$\chi(P)=\int_{P'}dP'\chi(P')K(P'\to P)+S(P), \tag{1}$$

其中核函数 $K(P'\to P)=[\Sigma_s(\vec{r})/\Sigma_t(\vec{r})]T(\vec{r}'\to\vec{r}\,|\,\vec{\Omega}')f(\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\,|\,\vec{r})$；点通量 $\varphi(\vec{r}^0)$ 由下式确定

$$\varphi(\vec{r}^0)=\int_{P'}dP'\chi(P')\frac{T(\vec{r}'\to\vec{r}^0\,|\,\vec{\Omega}')}{\Sigma_t(\vec{r}^0)}。 \tag{2}$$

* 1980年12月20日收到。

就是说，点通量计算问题的实际内容是，通过积分方程（1）计算给出发射密度$\chi(P)$，然后代入到积分（2）中计算积分。

为了计算点通量$\varphi(\vec{r^0})$，若采用一般蒙特卡罗方法，必须选取包括点$\vec{r^0}$在内的一个不大的几何体V，然后根据近似等式$\varphi(\vec{r^0})\approx\varphi(V)=\int_V d\vec{r}\,\varphi(\vec{r})/|V|$，通过计算$\varphi(V)$近似得到$\varphi(\vec{r^0})$，这里$|V|$表示几何体$V$的体积。为了使得上述近似等式能够比较准确的成立，几何体V应选得比较小，这样便给一般蒙特卡罗方法带来很大困难。这种困难主要表现在，用随机游动方法模拟了大量的粒子，却只有很少很少的粒子有可能经过几何体V（对几体V的粒子径迹长度有贡献），而绝大多数的粒子是无用的。因此，多数情况下，采用一般蒙特卡罗方法计算点通量是不适宜的，而必须考虑适合计算点通量的其他方法。

§2 倒易（Reciprocity）蒙特卡罗方法

应用蒙特卡罗方法计算点通量的一种比较早的方法是倒易蒙特卡罗方法[1]，这是一种以倒易原理为基本依据的方法。令$\phi(P'\to P)dP$ = 由状态P'出发的一个粒子，经过各次散射后于状态P附近dP内所产生的粒子平均通量。所谓倒易原理成立，即指对于任意的状态P'和状态P满足条件：$\phi(\vec{r'},\vec{\Omega'}\to\vec{r},\vec{\Omega})=\phi(\vec{r},-\vec{\Omega}\to\vec{r'},-\vec{\Omega'})$。与能量无关的粒子输运问题即满足倒易条件[2]。在倒易原理成立的情况下，容易看出，对于任意的粒子源$S(\vec{r},\vec{\Omega})$和任意的粒子通量响应函数$S^+(\vec{r},\vec{\Omega})$，成立如下等式

$$\int_{\vec{r'}}d\vec{r'}\int_{4\pi}d\vec{\Omega'}\,S(\vec{r'},\vec{\Omega'})\int_{\vec{r}}d\vec{r}\int_{4\pi}d\vec{\Omega}\,\phi(\vec{r'},\vec{\Omega'}\to\vec{r},\vec{\Omega})S^+(\vec{r},\vec{\Omega})$$

$$=\int_{\vec{r}}d\vec{r}\int_{4\pi}d\vec{\Omega}\,S^+(\vec{r},-\vec{\Omega})\int_{\vec{r'}}d\vec{r'}\int_{4\pi}d\vec{\Omega'}\,\phi(\vec{r},\vec{\Omega}\to\vec{r'},\vec{\Omega'})S(\vec{r'},-\vec{\Omega'}). \qquad (3)$$

结果（3）表明，如果倒易原理成立，则粒子源$S(\vec{r'},\vec{\Omega'})$对通量响应函数$S^+(\vec{r},\vec{\Omega})$的贡献，等于通量响应函数$S^+(\vec{r},-\vec{\Omega})$作为粒子源对原粒子源$S(\vec{r'},-\vec{\Omega'})$作为通量响应函数时的贡献。所谓倒易蒙特卡罗方法即指经过上述倒易后所建立的蒙特卡罗方法。计算点通量$\varphi(\vec{r^0})$的主要困难是，作为通量响应函数$S^+(\vec{r},\vec{\Omega})$是按δ-函数形式给出的：$S^+(\vec{r},\vec{\Omega})=\delta(\vec{r}-\vec{r^0})$。而经过倒易后，作为新的通量响应函数$S(\vec{r},-\vec{\Omega})$，如果不再是按δ-函数形式给出的，即本来的粒子源如果不是点源或可以转化成非点源问题的话，那么，类似于计算点通量的困难就不存在了。

倒易蒙特卡罗方法存在两大缺点，一是要求问题的粒子源一定不是点源，应用受到了一定的限制；二是要求问题应满足倒易条件，然而，对于与能量有关的问题，除了无限均匀物质粒子输运问题满足倒易条件[2]外，其他情况很少有能满足倒易条件，应用受到了更大的限制。

§3 伴随（Adjoint）蒙特卡罗方法

作为倒易蒙特卡罗方法的推广形式是近十余年来才发展起来的伴随蒙特卡罗方法[3][4][5]，所谓伴随蒙特卡罗方法实际上就是建立在粒子伴随输运方程基础上的蒙特卡罗方法。

引进符号：$\phi(P)dP$ = 在状态 P 附近 dP 内的粒子平均通量。$S_\phi(P)dP$ = 在状态 P 附近 dP 内由源直接引起的粒子平均通量。$\phi(P)$ 应满足如下方程

$$\phi(P)=\int_{P'}dP'\phi(P')K_\phi(P'\to P)+S_\phi(P), \tag{4}$$

其中核函数 $K_\phi(P'\to P)=[\Sigma_s(\vec{r'})/\Sigma_t(\vec{r})]f(\vec{\Omega'}\to\vec{\Omega}\mid\vec{r'})T(\vec{r'}\to\vec{r}\mid\vec{\Omega})$。

通量方程 (4) 的伴随方程如下

$$\phi^+(P)=\int_{P'}dP'\phi^+(P')K_\phi^+(P'\to P)+S_\phi^+(P), \tag{5}$$

其中 $K_\phi^+(P'\to P)=K_\phi(P\to P')$，$S_\phi^+(P)$ 为粒子状态 P 的任意函数。根据通量方程 (4) 与伴随方程 (5) 之间的关系，若令 $S_\phi^+(P)=\delta(\vec{r}-\vec{r^0})$，则可以得到

$$\varphi(\vec{r^0})=\int_P dP\,\phi(P)S_\phi^+(P)=\int_P dP\,\phi^+(P)S_\phi(P). \tag{6}$$

这一结果表明，为了计算点通量 $\varphi(\vec{r^0})$，除了可根据粒子发射密度方程 (1) 解出 $\chi(P)$，然后通过计算积分 (2) 得到外，还可以根据伴随通量方程 (5) 解出 $\phi^+(P)$，然后通过计算积分 (6) 得到。由后一过程所确定的方法即为计算点通量的伴随蒙特卡罗方法。同倒易蒙特卡罗方法相类似，在伴随蒙特卡罗方法中，由于 $S_\phi^+(P)$ 变成了粒子源（由方程(5)看出），而 $S_\phi(P)$ 变成了粒子通量的响应函数，因此，作为伴随蒙特卡罗方法的通量响应函数 $S_\phi(P)$（本来的粒子源），只要不再是 δ-函数形式给出的，那么，计算点通量的困难自然就不存在了。

由上述计算点通量的伴随蒙特卡罗方法看出，虽然它没有克服倒易蒙特卡罗方法中的第一个缺点，其应用仍然受到一定限制，然而，最为重要的是，它却很好地克服了倒易蒙特卡罗方法中的第二个缺点；这是因为伴随蒙特卡罗方法所实现的倒易是不附加任何条件的[2]。正是由于这个原因，伴随蒙特卡罗方法已经成为计算点通量的一种非常有效的方法[5]。

§4 指向概率方法

应用蒙特卡罗方法计算点通量的另一个比较早的方法是指向概率方法[6]，这是一种非常简单而且使用方便的方法。指向概率方法的基本原理是，对于粒子的每个碰撞点 $\vec{r'}$，求出在这一碰撞点发生碰撞后，方向恰好指向包括点 $\vec{r^0}$ 在内的 $d\vec{r^0}$ 的概率；由点 $\vec{r'}$ 出发到

达点$\vec{r}^0$不发生碰撞的概率；沿着指向$\vec{r}^0$的方向经过$d\vec{r}^0$的粒子径迹长度，这三个量的乘积便是粒子在点$\vec{r}'$碰撞后对点通量$\varphi(\vec{r}^0)d\vec{r}^0$的贡献。

将点通量$\varphi(\vec{r}^0)$表示成各次散射的点通量和的形式：$\varphi(\vec{r}^0)=\sum_{n=0}^{\infty}\varphi_n(\vec{r}^0)$。令$\vec{r}_n$、$\vec{\Omega}_n$和$W_n$分别表示粒子离开第$n$次碰撞时的位置、方向和权重，则粒子的历史可以用序列$\{\vec{r}_n,\vec{\Omega}_n,W_n\}_{n=0}^{\infty}$表示，其中$\vec{r}_0$和$\vec{\Omega}_0$是由分布$S(P_0)/\int dP_0 S(P_0)$中抽样确定的，$W_0=\int dP_0 S(P_0)$；在$\vec{r}_n$、$\vec{\Omega}_n$和$W_n$已经确定的情况下，$\vec{r}_{n+1}$由分布$T(\vec{r}_n\to\vec{r}_{n+1}|\vec{\Omega}_n)$中抽样确定，而$\vec{\Omega}_{n+1}$由分布$f(\vec{\Omega}_n\to\vec{\Omega}_{n+1}|\vec{r}_{n+1})$中抽样确定，$W_{n+1}=W_n\Sigma_s(\vec{r}_{n+1})/\Sigma_t(\vec{r}_{n+1})$。根据点通量的定义和指向概率方法的基本原理，注意

$$T(\vec{r}'\to\vec{r}\,|\,\vec{\Omega}')=\frac{\Sigma_t(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{r}'|^2}\exp\left\{-\int_0^{|\vec{r}-\vec{r}'|}dt\,\Sigma_t(\vec{r}'+t\vec{\Omega}')\right\}\delta\left(\vec{\Omega}'-\frac{\vec{r}-\vec{r}'}{|\vec{r}\to\vec{r}'|}\right),\qquad(7)$$

便有指向概率方法对$\varphi_n(\vec{r}^0)$的无偏估计如下[2][7]

$$\hat{\varphi}_n(\vec{r}^0)=\frac{W_n}{|\vec{r}^0-\vec{r}_n|^2}f(\vec{\Omega}_{n-1}\to\vec{\Omega}_n^0|\vec{r}_n)\exp\left\{-\int_0^{|\vec{r}^0-\vec{r}_n|}dt\,\Sigma_t(\vec{r}_n+t\vec{\Omega}_n^0)\right\},\qquad(8)$$

其中$n\geqslant1$；$\vec{\Omega}_n^0=(\vec{r}^0-\vec{r}_n)/|\vec{r}^0-\vec{r}_n|$。

§5 估计量无界问题与有限方差方法

当点$\vec{r}^0$附近不含有散射物质时，由于指向概率方法(8)中的因子$W_n/|\vec{r}^0-\vec{r}_n|^2$一定是有界的，因此，作为指向概率方法的估计量(8)也一定是有界的，是一种比较好的计算点通量的方法。然而，当点$\vec{r}^0$附近含有散射物质时，在指向概率方法的估计量(8)中，由于含有无界的因子$W_n/|\vec{r}^0-\vec{r}_n|^2$，因此，一般情况下，指向概率方法的估计量是无界的。

估计量无界问题可以分为两类：第一类为不仅估计量是无界的，而且其相应的方差还是发散的；第二类为虽然估计量是无界的，但是其相应的方差却是有限的。

对于均匀介质情况，Kalos曾经证明，指向概率方法的方差是发散的[8]。其实，对于非均匀介质情况，只要是在点$\vec{r}^0$附近含有散射物质，指向概率方法的方差就是发散的。因此，一般情况下，指向概率方法的估计量无界属于第一类估计量无界问题。

一般来说，估计量无界常常会使蒙特卡罗估计的统计涨落变大，如果方差还是发散的话，还会直接影响蒙特卡罗方法的收敛速度[9]。正是由于这些原因，解决蒙特卡罗的估计量无界问题，尤其是那些方差还是发散的问题，受到了广泛的重视。

作为解决指向概率方法估计量无界问题的第一步，是首先解决方差发散问题，方差有限的方法通称为有限方差方法。

§6 位置偏倚抽样方法

作为解决指向概率方法方差发散问题的第一个有限方差方法，是由Kalos在1963年提出来的[8]。可是，由于他是在介质均匀和各向同性散射假设下进行讨论的，也由于他所给出的位置的偏倚抽样方法不仅是近似的，而且甚为复杂，使得Kalos的方法并没有被后来在计算点通量时所真正采用。

为了计算 $\varphi_n(\vec{r^0})$，Kalos所提出来的计算点通量的办法，实际上是对粒子的第n次碰撞点$\vec{r_n}$采用偏倚抽样。详细些说就是，把指向概率方法(8)中的无界因子$W_n/|\vec{r^0}-\vec{r_n}|^2$提出来，放到对碰撞点$\vec{r_n}$的抽样分布中去，去掉原分布中的指数函数因子，使碰撞点$\vec{r_n}$的分布变成$|\vec{r^0}-\vec{r}_{n-1}|/\pi^3|\vec{r_n}-\vec{r}_{n-1}|^2|\vec{r^0}-\vec{r_n}|^2$。作为$\varphi_n(\vec{r^0})$ 的无偏估计，现在变成了

$$\hat{\varphi}_n(\vec{r^0})=W_n\Sigma_t\exp\{-\Sigma_t(|\vec{r_n}-\vec{r}_{n-1}|+|\vec{r^0}-\vec{r_n}|)\}\frac{\pi}{16|\vec{r^0}-\vec{r}_{n-1}|}. \tag{9}$$

很明显，估计量(9)的方差是有限的。

§7 最大截面(Maximum cross-section)方法

1974年，Михайлов给出了另一种计算点通量的方法[10]，他的方法的实质是，在粒子自由飞行距离按最大截面方法进行随机抽样[2][11]的基础上，对包括伪碰撞点在内的所有碰撞点采用指向概率方法。

选取最大截面如下

$$\Sigma_{\max}(\vec{r})=\begin{cases}\left(\dfrac{R}{|\vec{r}-\vec{r^0}|}\right)^2\Sigma_t(\vec{r}), & \text{当 } |\vec{r}-\vec{r^0}|\leqslant R\text{ 时},\\[2ex] \Sigma_t(\vec{r}), & \text{当 } |\vec{r}-\vec{r^0}|>R\text{ 时},\end{cases} \tag{10}$$

其中R为任意正实数。由点$\vec{r}_{n-1}$出发，按最大截面方法进行随机游动，令$\vec{r}_n^{(1)}$，$\vec{r}_n^{(2)}$，……，$\vec{r}_n^{(I_n-1)}$为伪碰撞点，$\vec{r}_n=\vec{r}_n^{(I_n)}$。此时，指向概率方法变成

$$\hat{\varphi}(r^0)=W_{n-1}\sum_{i=1}^{I_n}\frac{\Sigma_s(\vec{r}_n^{(i)})}{\Sigma_t(\vec{r}_n^{(i)})}f(\vec{\Omega}_{n-1}\to\vec{\Omega}_n^{(i)}|\vec{r}_n^{(i)})$$

$$\times\exp\left\{-\int_0^{|\vec{r^0}-\vec{r}_n^{(i)}|}\mathrm{dt}\,\Sigma_t(\vec{r}_n^{(i)}+t\vec{\Omega}_n^{(i)})\right\}\frac{1}{\max(R^2,|\vec{r^0}-\vec{r}_n^{(i)}|^2)}, \tag{11}$$

其中$\vec{\Omega}_i^{(i)}=(\vec{r^0}-\vec{r}_n^{(i)})/|\vec{r^0}-\vec{r}_n^{(i)}|$。

从表面上看，最大截面方法的估计量(11)似乎是有界的，其实并不然。事实上，当$\vec{r}_{n-1}=\vec{r^0}$时，根据上述最大截面方法无法给出一个确定的I_n，就是说，此时的I_n实际上是个无穷大量，因此，估计量(11)仍然是无界的。

§8 碰撞概率方法

同指向概率方法相类似的另一种计算点通量的方法是碰撞概率方法[2]。碰撞概率方法的基本原理是，求出这样的碰撞点$\vec{r}^*$和散射方位角，使得对于确定的粒子散射角，粒子有可能经过点$\vec{r}^0$的附近$d\vec{r}^0$。由点$\vec{r}$出发再经过一次碰撞对点通量$\varphi(\vec{r}^0)d\vec{r}^0$的贡献等于如下四个量的乘积：在满足上述条件的碰撞点$\vec{r}^*$上发生碰撞的概率；散射到满足上述条件的方位角内的概率；由点$\vec{r}^*$出发到达点$\vec{r}^0$不发生碰撞的概率；经过$d\vec{r}^0$的粒子径迹长度。

用序列$\{\vec{r}_n, \vec{\Omega}_n, W_n\}_{n=0}^{\infty}$表示某粒子的随机游动历史，根据碰撞概率方法的基本原理，便有碰撞概率方法对$\varphi_n(\vec{r}^0)$的无偏估计如下

$$\hat{\varphi}_n(\vec{r}^0) = W_{n-1}\Sigma_s(\vec{r}^*)\frac{f(\vec{\Omega}_{n-1}\to\vec{\Omega}_n|\vec{r}^*)}{f(\vec{\Omega}_{n-1}\to\vec{\Omega}_n|\vec{r}_n)}\exp\left\{-\int_0^l dt\,\Sigma_t(\vec{r}_{n-1}+t\vec{\Omega}_{n-1}) - \int_0^{l'} dt\,\Sigma_t(\vec{r}^*+t\vec{\Omega}_n^*)\right\}\frac{1}{2\pi l'|\vec{\Omega}_{n-1}\times\vec{\Omega}_n|^2},\ \text{当}\ \widehat{\vec{\Omega}_{n-1}\vec{\Omega}_n}\geqslant\widehat{\vec{\Omega}_{n-1}\vec{\Omega}_{n-1}^0}\text{时；}\tag{12}$$

其他情况下为零，其中$n\geqslant1$；其他各量的定义见图1．不难证明，碰撞概率方法（12）的方差是有限的[12]。

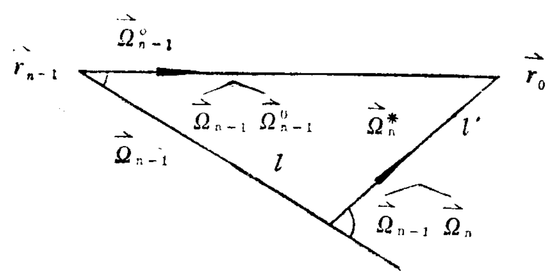

图1　碰撞点与散射方向关系图

§9 方向偏倚抽样方法

为了计算$\varphi_n(\vec{r}^0)$，若对粒子的方向$\vec{\Omega}_{n-1}$和$\vec{\Omega}_n$采用偏倚抽样，则碰撞概率方法可以得到进一步改进[2][12]。引进$\vec{\Omega}_{n-1}$的偏倚分布密度函数

$$[2(\pi-\widehat{\vec{\Omega}_{n-1}\vec{\Omega}_{n-1}^0})/\pi^2|\vec{\Omega}_{n-1}\times\vec{\Omega}_{n-1}^0|](1/2\pi)$$

和$\vec{\Omega}_n$的偏倚分布密度函数$[1/(\pi-\widehat{\vec{\Omega}_{n-1}\vec{\Omega}_{n-1}^0})|\vec{\Omega}_{n-1}\times\vec{\Omega}_n|](1/2\pi)$，当$\widehat{\vec{\Omega}_{n-1}\vec{\Omega}_n}\geqslant\widehat{\vec{\Omega}_{n-1}\vec{\Omega}_{n-1}^0}$时；其他情况下为零。此时，碰撞概率方法（12）变成

$$\hat{\varphi}_n(\vec{r}^0) = W_{n-1}f(\vec{\Omega}_{n-2}\to\vec{\Omega}_{n-1}'|\vec{r}_{n-1})\Sigma_s(\vec{r}^*)f(\vec{\Omega}_{n-1}'\to\vec{\Omega}_n'|\vec{r}^*)\times\exp\left\{-\int_0^l dt\,\Sigma_t(\vec{r}_{n-1}+t\vec{\Omega}_{n-1}') - \int_0^{l'} dt\,\Sigma_t(\vec{r}^*+t\vec{\Omega}_n^*)\right\}\frac{\pi^3}{|\vec{r}^0-\vec{r}_{n-1}|},\tag{13}$$

其中$\vec{\Omega}'_{n-1}$和$\vec{\Omega}'_n$表示是由上述分布中抽样确定的。上角标"′"是为了区别原随机游动中的$\vec{\Omega}_{n-1}$和$\vec{\Omega}_n$而加的。

很明显，方向偏倚抽样方法（13）的方差是有限的。在介质均匀和各向同性散射假设下，方向偏倚抽样方法（13）与位置偏倚抽样方法（9）完全一样。另外，也由于$\vec{\Omega}'_{n-1}$和$\vec{\Omega}'_n$的抽样非常简单，因此，方向偏倚抽样方法不仅把Kalos的位置偏倚抽样方法推广到了最一般情况，而且还把其中的抽样方法大大简化了。

§10　有界估计(Bounded estimator)方法

由于碰撞概率方法（12）中存在着因子$1/2\pi l'|\vec{\Omega}_{n-1}\times\vec{\Omega}_n|^2$，因此，虽然它的方差是有限的，但是，估计量仍然是无界的。对于位置偏倚抽样方法（9）和方向偏倚抽样方法(13)，由于在它们的估计量中均包括因子$1/|\vec{r}^0-\vec{r}_{n-1}|$，而粒子的第$n-1$次碰撞点$\vec{r}_{n-1}$实际上也是一个随机变数，存在等于$\vec{r}^0$的可能，因此，它们的方差虽然是有限的，但估计量仍然是无界的。至于最大截面方法(11)，我们已经指出过，它的估计量仍然是无界的。

在解决方差发散问题的过程中，不管上述那种方法，都有一个共同的特点，即为了计算n次散射的点通量$\varphi_n(\vec{r}^0)$，在确定粒子的第$n-1$次碰撞点$\vec{r}_{n-1}$时，上述各种方法所采用的抽样办法是相同的，都没有进行任何的偏倚抽样。在此前提下，由于当$\vec{r}_{n-1}=\vec{r}^0$时，$\varphi_n(\vec{r}^0)$本身一定是无界的，因此，只要是碰撞点$\vec{r}_{n-1}$的抽样方法不改变，要想解决计算$\varphi_n(\vec{r}^0)$的估计量无界问题是不可能的。

作为解决计算点通量的估计量无界问题的第二步，是解决估计量无界问题。估计量有界的方法通称为有界估计方法。

§11　再选择(Reselection)方法

为了解决应用蒙特卡罗方法计算点通量时的估计量无界问题，1971年，Steinberg和Kalos合作，提出了一种所谓再选择方法。再选择方法的主要步骤如下[13]：

以点$\vec{r}^0$为球心，确定一个半径为R_0的球V_0，然后，由粒子的源分布

$$\int_{4\pi}d\vec{\Omega}S(\vec{r}'_0,\vec{\Omega})\Big/\int_{\vec{r}}d\vec{r}\int_{4\pi}d\vec{\Omega}S(\vec{r},\vec{\Omega})$$

中抽样确定粒子的初始位置$\vec{r}'_0$，当$\vec{r}'_0\overline{\in}V_0$时，便取$\vec{r}_0=\vec{r}'_0$；当$\vec{r}'_0\in V_0$时对粒子的初始位置需要进行再选择，用偏倚抽样的方法重新产生粒子的初始位置$\vec{r}_0$，偏倚抽样的分布密度函数$g(\vec{r}_0)$定义在V_0上，并满足条件$\inf\limits_{\vec{r}_0\in V_0}g(\vec{r}_0)|\vec{r}_0-\vec{r}^0|^2\Big/\int_{4\pi}d\vec{\Omega}S(\vec{r}_0,\vec{\Omega})>0$，偏倚权重为

$$\frac{h(\vec{r}_0')}{\int_{4\pi} d\vec{\Omega}\, S(\vec{r}_0,\vec{\Omega})} \cdot \frac{\int_{4\pi} d\vec{\Omega}\, S(\vec{r}_0,\vec{\Omega})}{g(\vec{r}_0)}, \tag{14}$$

其中$h(\vec{r}_0')$为定义在V_0上的任意分布密度函数。

球半径R_m和第m次碰撞点$\vec{r}_m$已经确定的情况下，相类似地，以点$\vec{r}^0$为球心，确定一个半径为$R_{m+1}=\min(R_m,|\vec{r}_m-\vec{r}^0|)$的球$V_{m+1}$，以及以点$\vec{r}_m$为锥顶的包括这个球的外切锥扇体$V_{m+1}'$。然后，用通常的方法抽样确定粒子的第$m+1$次碰撞点$\vec{r}_{m+1}'=\vec{r}_m+l_m'\vec{\Omega}_m'$，当$\vec{r}_{m+1}'\overline{\in}V_{m+1}'$时，便取$\vec{r}_{m+1}=\vec{r}_{m+1}'$；当$\vec{r}_{m+1}'\in V_{m+1}'$时，对粒子的第$m+1$次碰撞点需要进行再选择，用偏倚抽样的方法重新产生粒子的第$m+1$次碰撞点$\vec{r}_{m+1}=\vec{r}_m+l_m\vec{\Omega}_m$，偏倚抽样的分布由下式给出

$$\frac{1}{\theta_M|\vec{\Omega}_m\times\vec{\Omega}_m^0|}\,\frac{1}{2\pi}\,\frac{|\vec{\Omega}_m^0\times(\vec{r}^0-\vec{r}_m)|}{l_m^2|\vec{r}^0-\vec{r}_{m+1}|^2\lambda_m},\ \text{当}\ \vec{r}_{m+1}\in V_{m+1}'\ \text{时}; \tag{15}$$

其他处为零，其中θ_M为锥扇体锥顶夹角的一半；$\lambda_m=\psi(|\vec{r}^0-\vec{r}_m|+R_{m+1})-\psi(|\vec{r}^0-\vec{r}_m|-R_{m+1})$，$\psi(u)=\tan^{-1}\{[u-\vec{\Omega}_m\cdot(\vec{r}^0-\vec{r}_m)]/|\vec{\Omega}_m\times(\vec{r}^0-\vec{r}_m)|\}$。偏倚权重为

$$\frac{2}{(1-\cos\theta_M)f(\vec{\Omega}_{m-1}\to\vec{\Omega}_m'|\vec{r}_m)Z_m}\times\frac{\theta_M|\vec{r}^0-\vec{r}_{m+1}|^2\lambda_m f(\vec{\Omega}_{m-1}\to\vec{\Omega}_m|\vec{r}_m)}{2|\vec{r}^0-\vec{r}_m|}\exp\left\{-\int_0^{|\vec{r}_{m+1}-\vec{r}_m|}dt\,\Sigma_t(\vec{r}_m+t\vec{\Omega}_m)\right\}, \tag{16}$$

其中 $Z_m=\exp\left\{-\int_0^{|\vec{r}^0-\vec{r}_m|-R_{m+1}}dt\,\Sigma_t(\vec{r}_m+t\vec{\Omega}_m)\right\}-\exp\left\{-\int_0^{|\vec{r}^0-\vec{r}_m|+R_{m+1}}dt\,\Sigma_t(\vec{r}_m+t\vec{\Omega}_m)\right\}$。

根据指向概率方法的基本原理，便有再选择方法对$\varphi_n(\vec{r}^0)$的无偏估计如下

$$\hat{\varphi}_n(\vec{r}^0)=\frac{W_n}{|\vec{r}^0-\vec{r}_n|^2}f(\vec{\Omega}_{n-1}\to\vec{\Omega}_n^0|\vec{r}_n)\exp\left\{-\int_0^{|\vec{r}^0-\vec{r}_n|}dt\,\Sigma_t(\vec{r}_n+t\vec{\Omega}_n^0)\right\}, \tag{17}$$

其中权重W_n是根据上述步骤确定的。注意$g(\vec{r}_0)$所满足的条件以及偏倚权重(14)和(16)的具体形式，不难看出，再选择方法的估计量(17)是有界的，属于有界估计方法。

1973年至1974年，Steinberg和Lichtenstein等人对再选择方法的步骤进行了简化，不象原再选择方法那样必须等到确定碰撞点$\vec{r}_{m+1}'\in V_{m+1}'$时，才对碰撞点$\vec{r}_{m+1}$进行偏倚抽样，而是采用了只要沿粒子的运动方向$\vec{\Omega}_m'$，碰撞点$\vec{r}_{m+1}'$有可能属于$V_{m+1}'$时，便对方向采用再选择（偏倚抽样），然后对迁移长度l_m直接采用偏倚抽样[14][15]。1977年Kalli和Cashwell对再选择方法又作了进一步改进，他们的工作仅仅侧重在给出更好的偏倚分布[16]。

§12　二次碰撞概率方法

计算点通量的二次碰撞概率方法实际上是碰撞概率方法的一种推广形式[12][17]。它的基本原理是(图 2)，求出这样两个碰撞点 r^*_{n-1} 和 r^*_n，使得对于确定的散射方向粒子有可能经过点 $\vec{r}^0$ 附近 $d\vec{r}^0$。由点 $\vec{r}_{n-2}$ 出发再经过二次碰撞对点通量 $\varphi_n(\vec{r}^0)d\vec{r}^0(n\geqslant 2)$ 的贡献等于如下四个量的乘积：由点 $\vec{r}_{n-2}$ 出发在点 $\vec{r}^*_{n-1}$ 上发生碰撞的概率；由点 $\vec{r}^*_{n-1}$ 出发在点 $\vec{r}^*_n$ 上发生碰撞的概率；由点 $\vec{r}^*_n$ 出发到达点 $\vec{r}^0$ 不发生碰撞的概率；经过 $d\vec{r}^0$ 的粒子径迹长度。

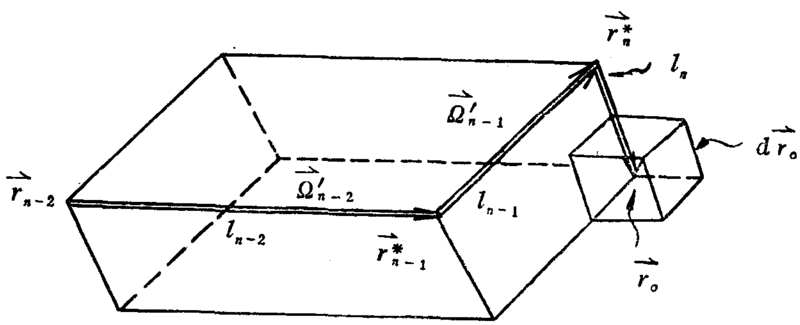

图 2　二次碰撞概率方法示意图

设某粒子的随机游动历史为 $\{\vec{r}_n, \vec{\Omega}_n, W_n\}_{n=0}^{\infty}$，根据二次碰撞概率方法的一般原理，不难证明

$$\hat{\varphi}_n(\vec{r}^0)=16W_{n-2}\pi^4 f(\vec{\Omega}_{n-3}\to\vec{\Omega}'_{n-2}|\vec{r}_{n-2})\Sigma_s(\vec{r}^*_{n-1})f(\vec{\Omega}'_{n-2}\to\vec{\Omega}'_{n-1}|\vec{r}^*_{n-1})\Sigma_s(\vec{r}^*_n)f(\vec{\Omega}'_{n-1}\to\vec{\Omega}'_n|\vec{r}^*_n)\exp\Big\{-\int_0^{|l_{n-2}|}dt\Sigma_t(\vec{r}_{n-2}+t\vec{\Omega}'_{n-2})-\int_0^{|l_{n-1}|}dt\Sigma_t(\vec{r}^*_{n-1}+t\vec{\Omega}'_{n-1})-\int_0^{|l_n|}dt\Sigma_t(\vec{r}^*_n+t\vec{\Omega}'_n)\Big\}\times\frac{|(\vec{\Omega}'_{n-2}\vec{\Omega}'_{n-1}\vec{\Omega}^0_{n-2})|^{1/2}|(\vec{\Omega}'_{n-2}\vec{\Omega}^0_{n-2}\vec{\Omega}'_n)|^{1/2}}{|(\vec{\Omega}'_{n-2}\vec{\Omega}'_{n-1}\vec{\Omega}'_n)|} \tag{18}$$

是 $\varphi_n(\vec{r}^0)$ 的一个无偏估计，其中 $\vec{\Omega}'_{n-2}=l_{n-2}\vec{\Omega}''_{n-2}/|l_{n-2}|$，$\vec{\Omega}'_{n-1}=l_{n-1}\vec{\Omega}''_{n-1}/|l_{n-1}|$，$\vec{\Omega}'_n=l_n\vec{\Omega}''_n/|l_n|$，而 $\vec{\Omega}''_{n-2}$、$\vec{\Omega}''_{n-1}$ 和 $\vec{\Omega}''_n$ 依次是由分布 $(1/\pi|\vec{\Omega}^0_{n-2}\times\vec{\Omega}''_{n-2}|)(1/2\pi)$、$(|\vec{\Omega}^0_{n-2}\times\vec{\Omega}''_{n-2}|^{1/2}/4|(\vec{\Omega}''_{n-2}\vec{\Omega}''_{n-1}\vec{\Omega}^0_{n-2})|^{1/2})(1/2\pi)$ 和 $(|\vec{\Omega}^0_{n-2}\times\vec{\Omega}''_{n-2}|^{1/2}/4|(\vec{\Omega}''_{n-2}\vec{\Omega}^0_{n-2}\vec{\Omega}''_n)|^{1/2})(1/2\pi)$ 中抽样确定的。注意二次碰撞概率方法估计量（18）中的各量的定义，不难看出，它是有界的，属于有界估计方法。

§13　重要抽样（Importance Sampling）方法

众所周知，重要抽样方法是蒙特卡罗的各种降低方差技巧中最重要的方法之一，如果重要函数选择得合适，重要抽样方法不仅具有简单和使用方便的特点，而且可以极大地减小估计量的方差。计算点通量的重要抽样方法[12][17]就充分地体现了这些特点。

引入变换 $\chi(P)=|\vec{\Omega}\times(\vec{r^0}-\vec{r})|\cdot\bar{\chi}(P)$。代入到方程（1）中，容易看到，$\bar{\chi}(P)$ 应满足如下方程

$$\bar{\chi}(P)=\int_{P'}dP'\,\bar{\chi}(P')\frac{|\vec{\Omega}'\times(\vec{r^0}-\vec{r}')|}{|\vec{\Omega}\times(\vec{r^0}-\vec{r})|}K(P'\to P)+\frac{S(P)}{|\vec{\Omega}\times(\vec{r^0}-\vec{r})|}. \tag{19}$$

根据方程（19）和 $K(P'\to P)$ 的定义，可以建立如下的粒子随机游动历史：由分布

$$\frac{\dfrac{S(\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0)}{|\vec{r^0}-\vec{r}_0|}}{\displaystyle\int_{\vec{r}_0}d\vec{r}_0\frac{S(\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0)}{|\vec{r^0}-\vec{r}_0|}}\quad\frac{1}{\pi|\vec{\Omega}_0\times\vec{\Omega}_0^0|}\quad\frac{1}{2\pi} \tag{20}$$

中抽样确定粒子的初始位置 $\vec{r}_0$ 和方向 $\vec{\Omega}_0$；初始权重为

$$\overline{W}_0=2\pi^2\int_{\vec{r}_0}d\vec{r}_0\frac{S(\vec{r}_0,\vec{\Omega}_0)}{|\vec{r^0}-\vec{r}_0|}; \tag{21}$$

粒子离开第 m 次碰撞时的位置 $\vec{r}_m$、方向 $\vec{\Omega}_m$ 和权重 $\overline{W}_m$ 确定后，碰撞位置 $\vec{r}_{m+1}$ 由分布 $T(\vec{r}_m\to\vec{r}_{m+1}|\vec{\Omega}_m)$ 中抽样确定；碰撞后的方向 $\vec{\Omega}_{m+1}$ 由分布 $(1/\pi|\vec{\Omega}_{m+1}\times\vec{\Omega}^0_{m+1}|)(1/2\pi)$ 中抽样确定；权重 $\overline{W}_{m+1}$ 由下式给出

$$\overline{W}_{m+1}=\overline{W}_m\cdot 2\pi^2\cdot|\vec{\Omega}_m\times\vec{\Omega}^0_{m+1}|\frac{\Sigma_s(\vec{r}_{m+1})}{\Sigma_t(\vec{r}_{m+1})}f(\vec{\Omega}_m\to\vec{\Omega}_{m+1}|\vec{r}_{m+1}). \tag{22}$$

根据假设知道，$W_{n-1}=\overline{W}_{n-1}|\vec{\Omega}_{n-1}\times(\vec{r^0}-\vec{r}_{n-1})|$。于是，由于在碰撞概率方法的结果（12）中，$\vec{\Omega}_n$ 是由分布 $f(\vec{\Omega}_{n-1}\to\vec{\Omega}_n|\vec{r}_n)$ 中抽样确定的，因此，若改为由分布 $(1/\pi\cdot|\vec{\Omega}_{n-1}\times\vec{\Omega}_n|)(1/2\pi)$ 中抽样确定 $\vec{\Omega}_n$，则碰撞概率方法的结果（12）变成

$$\begin{aligned}\hat{\varphi}_n(\vec{r^0})=&\overline{W}_{n-1}\pi\Sigma_s(\vec{r}^*)f(\vec{\Omega}_{n-1}\to\vec{\Omega}_n|\vec{r}^*)\\&\times\exp\left\{-\int_0^l dt\,\Sigma_t(\vec{r}_{n-1}+t\vec{\Omega}_{n-1})-\int_0^{l'}dt\,\Sigma_t(\vec{r}^*+t\vec{\Omega}_n^*)\right\}.\end{aligned} \tag{23}$$

很明显，重要抽样方法的估计量（23）是有界的，同样属于有界估计方法。

同再选择方法比较，可以非常明显地看出，重要抽样方法不仅具有抽样容易实现和随机游动步骤简单方便的特点，而且运算量也比较小。通过具体例子的计算表明，再选择方法比重要抽样方法的方差还大1至2倍[12]。

§14 计算局部通量的共域变换方法

应用蒙特卡罗方法解几何微扰问题时，它的随机游动常常是一个分枝过程，估计量的统计涨落比较大，共域变换方法就是为解决这些问题而第一次被提出来的[18]。所谓几何

微扰问题，指的是系统的几何形状发生微小变化而其他因素不变所引起的扰动。根据这一特点，不难看出，在用蒙特卡罗法解决几何微扰问题时，不管采用什么方法，其中都必然隐含着某种计算扰动区域通量的方法。由于几何微扰问题的扰动区域是局部区域，因此，实际上是隐含着某种计算局部通量方法。将共域变换方法应用于计算局部通量就是基于这样的想法给出来的。

引进如下符号：V = 问题所关心的区域；δV = 所要计算的局部通量的区域；$\phi_n^{(V)}(P)dP$ = 由源 $S(P_0)$ 发射的粒子，在区域 V 中经过几次散射后于状态 P 附近 dP 内产生的粒子平均通量；$\phi_n(\delta V)$ = 由源 $S(P_0)$ 发射的粒子，在区域 V 中经过 n 次散射后于区域 δV 上产生的粒子平均通量。

根据以上定义，不难看出，$\phi_n(\delta V)$ 可以表示成如下形式

$$\phi_n(\delta V)=\int_P dP\,\phi_n^{(V)}(P)-\int_{P-\delta V}dP\,\phi_n^{(V-\delta V)}(P)-\left\{\int_{P'}dP'\,\phi_{n-1}^{(V)}(P')\right.$$
$$\left.-\int_{P'-\delta V}dP'\,\phi_{n-1}^{(V-\delta V)}(P')\right\}\int_{4\pi}d\vec{\Omega}\,\frac{\Sigma_s(\vec{r'})}{\Sigma_t(\vec{r})}$$
$$\times f(\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}\,|\,\vec{r'})\int_{V-\delta V}d\vec{r}\,T(\vec{r'}\to\vec{r}\,|\,\vec{\Omega}),\tag{24}$$

其中 $P-\delta V$ 表示这样的积分区域，$\vec{r}$ 的积分区域为 $V-\delta V$，$\delta V\subset V$，$\vec{\Omega}$ 的积分区域不变。

分析（24）式，其中第一项和第二项一起正好表示几何区域由 $V-\delta V$ 受扰变为 V 后的经 n 次散射的通量的改变量，第三项的花括弧内的量同样是上述受扰后的通量的改变量，所不同的只是它是 $n-1$ 次散射的通量的改变量。计算局部通量的共域变换方法[19]就是利用共域变换方法的一般原理计算上述几何微扰的通量的改变量，然后再根据（24）式计算给出 $\phi_n(\delta V)$。

由于点通量为局部通量的特殊情况，因此，计算局部通量的共域变换方法包含着计算点通量的方法。计算点通量的共域变换方法属于有限方差方法，然而，与重要抽样相配合的共域变换方法则属于有界估计方法[19]。

§15　补偿旋转（Compensated rotational）方法

蒙特卡罗计算点通量的另一种方法是补偿旋转方法[20]。补偿旋转方法的基本思想是，利用球对称性首先求出由源出发的粒子（$\vec{r}_0$，$\vec{\Omega}_0$，W_0）对半径为 $R=|\vec{r^0}-\vec{r}_0|$ 的球表面的通量贡献；然后进行坐标旋转变换求出这样的 $\vec{\Omega}_0'$，如果由源出发的粒子的方向不是 $\vec{\Omega}_0$ 而是 $\vec{\Omega}_0'$ 时，该粒子经过球表面时的位置恰好等于 $\vec{r^0}$；最后用纠偏方法对由此而产生的偏倚进行补偿，求出对点 $\vec{r^0}$ 的通量贡献。

为了简单起见，只考虑均匀介质情况。用序列 $\{\vec{r}_n,\vec{\Omega}_n,W_n\}_{n=0}^{\infty}$ 表示某一粒子的随机游动历史，根据统计估计方法知道

$$\hat{\varphi}_n(|\vec{r}-\vec{r}_0|=R)=W_n\sum_{i=1}^{2}\frac{|\vec{r}_{n,i}|}{|\vec{r}_{n,i}\cdot\vec{\Omega}_n|}\exp\{-\Sigma_t|\vec{r}_{n,i}-\vec{r}_n|\},\tag{25}$$

是该粒子经过 n 次散射后对球 $|\vec{r}-\vec{r}_0|=R$ 表面的通量贡献，其中 $\vec{r}_{n,1}$ 和 $\vec{r}_{n,2}$ 依次表示粒子由 $\vec{r}_n$ 出发沿方向 $\vec{\Omega}_n$ 两次经过球表面时的位置，只一次经过或不经过球表面时，相应的项为零。

引入坐标旋转变换 $\vec{r}'_n=\vec{r}_n+(\vec{r}^0-\vec{r}_{n,1})|\vec{r}_n|/R$。于是，若用 $\vec{\Omega}_{0,1}=(\vec{r}'_1-\vec{r}'_0)/|\vec{r}'_1-\vec{r}'_0|$ 替代 $\vec{\Omega}_0$，则该粒子经过球表面时的位置恰好由 $\vec{r}_{n,1}$ 变成了 $\vec{r}^0$。完全相类似地可以确定 $\vec{\Omega}_{0,2}$。作为补偿旋转方法对点通量 $\varphi_n(\vec{r}^0)$ 的无偏估计为

$$\hat{\varphi}_n(\vec{r}^0)=\frac{W_n}{4\pi R^2}\sum_{i=1}^{2}\frac{S(\vec{\Omega}_{0,i})}{S(\vec{\Omega}_0)}\frac{\vec{r}_{n,i}}{|\vec{r}_{n,i}\cdot\vec{\Omega}_n|}\exp\{-\Sigma_t|\vec{r}_{n,i}-\vec{r}_n|\},\tag{26}$$

其中 $S(\vec{\Omega}_0)$ 表示粒子源的方向分布。

补偿旋转方法存在两个缺点，一点是它没有解决蒙特卡罗方法计算点通量时的估计量无界问题，另一点是解非均匀介质问题相当麻烦，运算量将明显增大。

§16　条件(Conditional)蒙特卡罗方法

条件蒙特卡罗方法早在1956年就出现了[21]，但真正把它应用于解决实际问题则是1961年的事[22][23]，主要是用来解决深穿透问题。1967年，缪铨生和王道忠进一步将条件蒙特卡罗方法应用于解决点通量计算问题[24]。

为了简单起见，同样只考虑均匀介质情况。假设 $|\vec{r}_0|=0$，并用序列 $\{\vec{r}_n,\vec{\Omega}_n,W_n\}_{n=0}^{\infty}$ 表示某一粒子的随机游动历史。此时，由于

$$\varphi_n(|\vec{r}|=R)=\int d\vec{r}'_{n+1}\delta(|\vec{r}'_{n+1}|-R)\varphi_n(\vec{r}'_{n+1}),\tag{27}$$

因此，若引入变换 $\vec{r}'_i=\lambda\vec{r}_i$，$i=0,1,2,\cdots,n+1$，其中 λ 为伸缩因子，则有

$$\varphi_n(|\vec{r}|=R)=\int d\vec{r}_{n+1}\lambda^3\delta(|\lambda\vec{r}_{n+1}|-R)\varphi_n(\lambda\vec{r}_{n+1}).\tag{28}$$

进一步引入与碰撞次数 n 有关的任意分布密度函数 $f_n(\lambda)$，根据 δ 函数性质，注意假设条件和迁移核 $T(\vec{r}'|\vec{r}|\vec{\Omega}')$ 的一般形式(7)，便有条件蒙特卡罗方法对 $\varphi_n(|\vec{r}|=R)$ 的无偏估计如下

$$\hat{\varphi}_n(|\vec{r}|=R)=\frac{W_n}{|\vec{r}_{n+1}|\Sigma_t}f_n\left(\frac{R}{|\vec{r}_{n+1}|}\right)\left(\frac{R}{|\vec{r}_{n+1}|}\right)^{n+1}\exp\left\{\left(1-\frac{R}{|\vec{r}_{n+1}|}\right)\sum_{i=0}^{n}\Sigma_t|\vec{r}_{i+1}-\vec{r}_i|\right\}.\tag{29}$$

为了进一步由 $\hat{\varphi}_n(|\vec{r}|=R)$ 得到条件蒙特卡罗方法对 $\varphi_n(\vec{r}^0)$ 的无偏估计，可以直接利用上述补偿旋转方法得到。如果粒子源的方向分布满足一定条件，选取合适的 $f_n(\lambda)$，还可以使条件蒙特卡罗方法对 $\varphi_n(\vec{r}^0)$ 的估计量是有界的。

同补偿旋转方法比较，条件蒙特卡罗方法虽然比较好地解决了补偿旋转方法的第一个缺点，但是，补偿旋转方法的第二个缺点它同样存在。

§17　近似估计方法

以点$\vec{r}^0$为中心，确定一个半径为R的球V，则容易确定，在第n次碰撞发生在球V内的情况下，$\varphi_n(\vec{r}^0)$应由下式给出

$$\varphi_n'(\vec{r}^0)=\int_V d\vec{r}\int_{4\pi}d\vec{\Omega}\,\chi_n(P)\exp\left\{-\int_0^{|\vec{r}^0-\vec{r}|}\mathrm{d}t\,\Sigma_t(\vec{r}+t\vec{\Omega})\right\}\frac{1}{|\vec{r}^0-\vec{r}|^2}. \tag{30}$$

如果在球V内$\chi_n(P)$是已知的，或者可以近似给出时，则可以确定出这样的C，使得

$$\varphi_n'(\vec{r}^0)=\int_V d\vec{r}\int_{4\pi}d\vec{\Omega}\,\chi_n(P)\exp\left\{-\int^{|\vec{r}^0-\vec{r}|}\mathrm{d}t\,\Sigma_t(\vec{r}+t\vec{\Omega})\right\}\frac{1}{C^2}. \tag{31}$$

蒙特卡罗计算点通量的近似估计方法就是[25]，对粒子的随机游动历史$\{\vec{r}_n,\vec{\Omega}_n,W_n\}_{n=0}^{\infty}$，用下式

$$\hat{\varphi}_n(\vec{r}^0)=\begin{cases}W_n\exp\left\{-\int_0^{|\vec{r}^0-\vec{r}_n|}\mathrm{d}t\,\Sigma_t(\vec{r}_n+t\vec{\Omega}_n)\right\}\frac{1}{|\vec{r}^0-\vec{r}_n|^2}, & \text{当 } \vec{r}_n\in V\text{时},\\ W_n\exp\left\{-\int_0^{|\vec{r}^0-\vec{r}_n|}\mathrm{d}t\,\Sigma_t(\vec{r}_n+t\vec{\Omega}_n)\right\}\frac{1}{C^2}, & \text{当 } \vec{r}_n\in V\text{时}\end{cases} \tag{32}$$

作为点通量$\varphi_n(\vec{r}^0)$的估计。

§18　小　　结

对于蒙特卡罗计算点通量的各种方法，在上面已进行了必要评论的基础上，对它们的应用范围及其好坏进一步做一简要的评论如下：

1. 伴随蒙特卡罗方法是倒易蒙特卡罗方法的推广形式，前者比后者复杂而且方差大，因此，若能用后者解决问题就不要用前者。

伴随蒙特卡罗方法有两个很大的优点，一个是它对解决具有深穿透性质的点通量计算问题，有助于同时解决计算结果比实际结果偏低的现象[26]；另一个是它有时能将几个计算点通量的方案合併在一起同时进行计算[5]。

2. 当点$\vec{r}^0$附近不含有散射物质时，指向概率方法是一个非常好的方法。它的直观意义强，程序结构简单，对于几何形状复杂、非均匀介质和各向异性散射等复杂的点通量计算问题都不会给它增加太大困难。当点$\vec{r}^0$附近含有散射物质时，为了利用指向概率方法的长处，可以利用近似估计方法克服指向概率方法方差发散的缺点。

3. 为了用有限方差方法解决点通量计算问题，最好采用方向偏倚抽样方法，因为在各种有限方差方法中它的适应范围较广，而且直观意义强，程序结构简单。它虽然比碰撞概率方法略为复杂，但它的方差要比碰撞概率方法小得多[12]。

4. 为了用有界估计方法解决点通量计算问题，最好采用重要抽样方法，因为它比其他方法具有适应性广、程序结构简单和方差小的特点[12]。若同时计算多处点的各自的点通量[13][15]，则最好采用二次碰撞概率方法，因为它受点$\vec{r}^0$的影响是局部性质的（只是最后两次碰撞时考虑），而其他方法受点$\vec{r}^0$的影响是全局性质的。

参 考 文 献

〔1〕Maynard, C. W., Nucl. Sci. Eng., 10, 97(1961).

〔2〕裴鹿成，张孝泽，蒙特卡罗方法及其在粒子运输问题中的应用，科学出版社(1980).

〔3〕Kalos, M. H., Nucl. Sci., Eng., 33, 284(1968).

〔4〕Eriksson, B., Johansson, C., Leimdorfer, M., and Kalos, M. H., Nucl. Sci. Eng., 37, 410 (1969).

〔5〕裴鹿成，科技，1，16(1980).

〔6〕裴鹿成，董秀芳，科技，4，236(1963).

〔7〕Spanier, J., and Gelbard, E. M., Monte Carlo principles and neutron transport problems, Addison—Wesley Reading, Mass. (1969).

〔8〕Kalos, M. H., Nucl. Sci. Eng., 16, 111(1963).

〔9〕裴鹿成，科技，6，422(1963).

〔10〕Михайлов, Г.А., Некоторые вопросы теории методов Монте－Карло, Новосибирск, «Наука» (1974).

〔11〕Coleman, W. A., Nucl. Sci. Eng., 32, 76(1968).

〔12〕裴鹿成，关于蒙特卡罗方法计算点通量的估计量无界问题，1978年数学年会文章.

〔13〕Steinberg, H. A., and Kalos, M. H., Nucl. Sci. Eng., 44, 406(1971).

〔14〕Steinberg, H. A., and Lichtenstein, H., Trans. Am. Nucl. Soc., 17, 259(1973).

〔15〕Steinberg, H. A., ANL—75—2, 282(1974).

〔16〕Kalli, H. J., and Cashwell, E. D., LA—6865—MS, (1977).

〔17〕裴鹿成，计算数学，3，261(1980).

〔18〕裴鹿成，解几何微扰问题的一种无分枝蒙特卡罗方法：共域变换方法，1979年计算数学年会文章，待发表.

〔19〕裴鹿成，何金声，共域变换方法在蒙特卡罗计算局部通量中的应用，待发表.

〔20〕Horowitz, Y. S., Dubi, A., and Mordechai, S., Nucl. Sci. Eng., 59, 427(1976).

〔21〕Trotter, H. F., and Tukey, J. W., Symposium on Monte Carlo methods, ed. Meyer, H. A., New York: Wiley, 64(1956).

〔22〕Drawbaugh, D. W., Nucl. Sci. Eng., 9, 185(1961).

〔23〕Penny, S. K., and Zerby, C. D., Nucl. Sci. Eng., 10, 75(1961).

〔24〕缪铨生，王道忠，条件蒙特—卡洛方法在中子点源点通量计算中的应用，全国概率统计计算学术讨论会文章(1979).

〔25〕Fraley, S. K., and Hoffman, T. J. Nucl. Sci. Eng., 70, 14(1979).

〔26〕裴鹿成，伴随蒙特卡罗方法在屏蔽计算中的应用，待发表.