

第三章 蒙特卡罗方法的若干应用

-、一维积分平均值法

$$\int_{a}^{b} g(y)dy, L \le y \le M$$

作変換: $y = a + (b - a)x, g = L + (M - L)h$
 $(b - a)L + (b - a)(M - L)\int_{0}^{1} h(a + (b - a)x)dx$

1。蒙特卡罗方法在积分计算中的应用



标准积分:
$$I = \int_0^1 f(x) dx, \quad 0 \le f(x) \le 1$$

(1) 直接抽样法:

在x的定义域[0,1]上均匀随机取点,该均匀分布的随机变量记为 ξ 定义随机变量 η 为:

$$\eta = f(\xi)$$

则有:

$$I = E\{\eta\} = \lim_{n \to \infty} I_n \quad , \qquad I_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \eta_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\xi_i)$$

因此,只要抽取足够多的随机点,即n足够大时, I_n 就是积分I的一个无偏估计值。

相应的方差为:

$$V\{\eta\} = \int_0^1 [f(x) - I]^2 dx$$

可见,当f(x)在其定义域内变化较大时,方差较大。

(2) 重要抽样法:

当f(x)在其定义域内有显著的起伏变化时,可采用重要抽样法。

$$I = \int_{0}^{1} [f(x)/g(x)]g(x)dx = \int_{0}^{1} f^{*}(x)g(x)dx$$

$$(a - b) = \int_{0}^{1} f^{*}(x)g(x)dx$$

$$(a - b) = \int_{0}^{1} f^{*}(x)g(x)dx$$

适当选取偏倚分布密度函数,使得f^{*}(x)在定义域内变化平坦。

产生[0,1]区间分布密度函数为g(x)的随机变量 ξ' ,定义:

$$\eta' = f^*(\xi')$$

则有:

$$I = E\{\eta'\} = \lim_{n \to \infty} I'_n \quad , \quad I'_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \eta'_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f^*(\xi'_i)$$



相应的方差:

$$V\{\eta'\} = \int_0^1 [f^*(x) - I]^2 g(x) dx$$

 $= \int_0^1 [f^2(x) / g(x) dx - I^2]$

蒙特卡罗计算结果的方差为:

$$\sigma^{2} = \begin{cases} V\{\eta\}/n & \text{直接抽样} \\ V\{\eta'\}/n & \text{重要抽样} \end{cases}$$



二、高维积分平均值法

标准形式:
$$I = \int_0^1 \int_0^1 \cdots \int_0^1 f(\vec{x}) dx_1 dx_2 \cdots dx_s, \quad 0 \le f(\vec{x}) \le 1$$

 $\vec{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_s)$

实际物理问题中,被积函数在超立方体的积分区域里可能强烈地变化。 若在积分区域内均匀抽样,积分贡献可能主要来自少数仅仅只有几个蒙 特卡罗投点的小区域,从而导致很大的统计误差。

故采用:重要抽样法———随机点更多地投在 $f(\vec{x})$ 取值大的区间。



选取偏倚分布密度函数 $g(\vec{x})$,并定义

 $f^{*}(\vec{x}) = f(\vec{x}) / g(\vec{x})$ (要求: 方差较小)

有:

$$I = \int_0^1 \int_0^1 \cdots \int_0^1 f^*(\vec{x}) g(\vec{x}) dx_1 dx_2 \cdots dx_s$$

按照偏倚分布密度函数 $g(\vec{x})$ 在 $0 \le x_i \le 1$, $(i = 1, \dots, s)$ 区域抽取N个子样

$$\vec{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \cdots, x_{is}), \quad i = 1, 2, \cdots, N$$

则,

$$I_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f^*(\vec{x}_i)$$
 — 积分的近似值



三、一维积分的掷点法

一维积分:
$$I = \int_0^1 f(x) dx$$
, $0 \le f(x) \le 1$

定义:
$$\eta(x, y) = \begin{cases} 1, & y \le f(x) \\ 0, & y > f(x) \end{cases}$$

则有:
$$I = \int_0^1 \int_0^1 \eta(x, y) dx dy$$

在单位正方形内投N个点,落在曲线 f(x)下的有M个,则 $I \approx M / N$ 由于对y的积分可以解析计算,故此法的误差较平均值法大。

在核及粒子物理研究中,需要进行微分截面或全截面的理论预言,并与实验结果对比。

将精确的微分截面表达式进行相空间积分时

2。事例产生器

? 实验装置复杂,相空间的解析积分几乎不可能

?相空间参数的变化使积分的运算更加复杂

? 考虑到探测器的效率,必须引入各种随机统计的效应

蒙特卡洛事例产生器 ——

一个随机产生"非加权"事例的模拟程序

非加权,指末态粒子的四动量是按照精确的微分截面来产生



微分截面

$$d\sigma = \frac{d\sigma}{dx}(x)dx$$
 x 表示张开相空间的运动学变量
根据蒙特卡洛理论,总截面 $\sigma = \int d\sigma$ 的蒙特卡洛估计值为

$$\sigma' = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{d\sigma}{dx} (x_i) \cdot \int dx$$

均匀分布的随机矢量



(1) 分层抽样法

- **I** 随机地选取一个子空间
- 在这个子空间内随机地抽取一个事例样本,并计算该事例的权
 重 w 该事例参数的微分截面值与该子空间内的最大微分截面
 值的比值
- Ⅲ. 采用舍选法选择事例:取[0,1]上均匀分布随机数ξ,如果
 ξ≤w,该事例被接受,反之,该事例被舍弃
- Ⅳ. 重复上面 I. ~III. 直至获得所需的事例数



实际应用中的问题



被积函数的峰值特性很强时,分层抽样事例产生器往往不是很有效

(2) 重要抽样法

- 1. 找出一个与被积微分截面 $\frac{d\sigma}{dx}(x)$ 函数的近似表达式 $\frac{d\tilde{\sigma}}{dx}(x)$, 在相空间内解析可积,且与 $\frac{d\sigma}{dx}(x)$ 的精确表达式有相同的峰值结构
- Ⅱ 根据该近似表达式的分布,随机抽取事例样本
- III. 对产生的事例加权重 w 该事例对应的精确截面值与对应的近 似截面值的比值
- IV. 采用舍选法抽取非权重事例: 取[0, 1]区间上均匀分布随机数 ξ, 若 ξ ≤ w/w_{max},则接受该事例,反之,则舍弃该事例
- v. 重复 II. ~IV. 过程, 直至获得所需数量的事例数

实际应用中的问题

? 不具有通用性

? 当矩阵元平方的峰值特性复杂时,难于得到精确结果



随机选择一个子产生器(第*i*个)

权重
$$w_i = \frac{d\sigma_i}{d\tilde{\sigma}_i}$$

总截面值

$$\boldsymbol{\sigma} = \int d\boldsymbol{\sigma} = \sum_{i=1}^{N} \int d\boldsymbol{\sigma}_{i} = \sum_{i=1}^{N} \left\langle w_{i} \right\rangle_{d\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}_{i}} \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}_{i} = \left\langle w \right\rangle \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}$$

以近似微分截面 $d\tilde{\sigma}_i$ 分布的事例的权重因子 w_i 的平均值

其中
$$\widetilde{\sigma} = \sum_{i=1}^{N} \widetilde{\sigma}_i, \ \widetilde{\sigma}_i = \int d\widetilde{\sigma}_i \quad (i = 1, 2 \cdots, N)$$

17

 $\langle w \rangle$: 选择在[0, 1]区间上的均匀分布随机数ξ,判断满足不等式 $\sum_{j=1}^{i-1} \tilde{\sigma}_j / \tilde{\sigma} \leq \xi \leq \sum_{j=1}^i \tilde{\sigma}_j / \tilde{\sigma}$

的 i 值, 然后按照 $d\tilde{\sigma}_i$ 分布产生事例的权重因子 w 的平均值

事例产生器的效率

$$E = \frac{\left\langle w \right\rangle}{w_{\max}}$$

3。蒙特罗方法在粒子物理碰撞过程中的应用

对撞过程: **1**.直线对撞机 **2**.强子对撞机

动力学部分:矩阵元 ———— 微扰计算 运动学部分:相空间 ———— 蒙特卡罗方法产生

过程: $a+b \rightarrow 1+2+\cdots+n$

相空间体积元:

$$d\Phi_n(P, p_1, \cdots, p_n) = (2\pi)^4 \delta^{(4)}(P - \sum_{i=1}^n p_i) \prod_{i=1}^n \frac{d^4 p_i}{(2\pi)^3} \theta(p_i^0) \delta(p_i^2 - m_i^2)$$



反复利用因子化方法,有
$$d\Phi_n(P, p_1, \dots, p_n) = \frac{1}{(2\pi)^{n-2}} dM_{n-1}^2 \cdots dM_2^2 d\Phi_2(n) \cdots d\Phi_2(2)$$

其中:
$$\begin{cases} d\Phi_2(i) = d\Phi_2(q_i, q_{i-1}, p_i), \quad q_i = \sum_{j=1}^i p_j \\ M_i^2 = q_i^2, \quad (m_1 + \dots + m_i)^2 \le M_i^2 \le (M_{i+1} - m_{i+1})^2 \end{cases}$$

运动学上已知: 在 q_i 的静止系中, 有

$$d\Phi'_{2}(q_{i}, q_{i-1}, p_{i}) = \frac{1}{(2\pi)^{2}} \frac{\sqrt{\lambda(M_{i}^{2}, M_{i-1}^{2}, m_{i}^{2})}}{8M_{i}^{2}} d\varphi_{i} d(\cos\theta_{i})$$

21



其中:
$$\lambda(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 - 2xy - 2yz - 2zx$$

相空间产生步骤:

(1) 首先,取
$$i = n, q_i = P, M_i = \sqrt{q_i^2}$$
;

(2) 做Lorentz变换到 q_i 静止系;

(3) 产生[0,1]区间上的两个均匀分布的随机数 ξ_{i1}, ξ_{i2} 并取 $\varphi_i = 2\pi\xi_{i1}, \cos \theta_i = \xi_{i2}$



$$M_{i-1} = (m_1 + \dots + m_{i-1}) + \xi_{i3}(M_i - m_1 - \dots - m_i)$$

(5) 取 \vec{p}'_i 的球坐标为

$$|\vec{p}'_{i}| = \frac{\sqrt{\lambda(M_{i}^{2}, M_{i-1}^{2}, m_{i}^{2})}}{2M_{i}}, \quad \theta_{i}, \quad \varphi_{i}$$

由此得到

$$p'_{i} = (\sqrt{|\vec{p}'_{i}|^{2} + m_{i}^{2}}, \vec{p}'_{i}), \quad q'_{i-1} = (\sqrt{|\vec{p}'_{i}|^{2} + M_{i-1}^{2}}, -\vec{p}'_{i})$$

(6) 做Lorentz逆变换,变换到原来的参考系;

(7) 将*i* 置为*i*-1, 重复上述步骤, 至 *i*=1。

4。高能物理实验中蒙特卡洛方法的应用

-、实验设计中的蒙特卡洛方法的应用

研究的物理过程、本底、判选条件、探测器性能、装置中各个探测器 的设计安排……

(1) 实验装置性能的研究

例如带电粒子动量 p p = 3×10⁻² BZ ρ (GeV / c) 磁场强度 径迹曲率





根据以上公式可以抽样得到该粒子穿过这一薄层后的偏转角 θ_{空间} 再算出在下一个小薄层终点处的坐标参数*x_i*,利用得到的一系列*x*, 算出粒子的动量估计值,同粒子入射的动量值比较,就可以得到探 测装置的动量分辨率

实际跟踪时,还要考虑探测器的有限分辨率 σ ,要求对每一个x按方差为 σ^2 的高斯分布[N(x_i , σ^2)]作模糊处理

如果模拟某个探测装 置的动量分辨率很大 置的动量分辨率很大 者高磁场强度 重新安排探测器以测量更多的空间坐标参数 改进探测器位置测量精度 减小装置中材料的密度

在对实验装置进行设计的阶段,需要对探测器做大量的模拟研究, 以了解该装置中各个探测器的响应,并进一步判断该装置是否满足各 项指标的要求以及探测器的安排和设计是否合理

(2) 实验方案可行性研究

判断实验装置能否实现对理论或假说的检验是很必要的! ●利用某个实验装置判断一个共振态的自旋

 $spin \begin{cases} 0 - --- 粒子的衰变产物在静止系中的角分布各向同性 \\ 1 - --- 末态粒子在静止系中的角分布正比于<math>cos^2 \theta$

采用100个蒙卡"实验"实现衰变过程,每个实验包括30个事例 模拟衰变过程时,按照自旋为1来模拟末态粒子的产生

分析模拟实验数值,如果有好几个数值与<mark>自旋为0</mark>的预言数值一致

二、实验数据分析中的蒙特卡洛模拟方法的应用

在高能物理实验中,常常用一些大型、复杂的程序来分析实 验数据和对实验数据进行筛选分类。为了检验这些程序的可 靠性,可以采用输入一些已知数据格式的蒙卡数据,以检验 该程序能否总是成功地重建输入数据

• 粒子与固定靶相互作用试验装置

通过蒙卡程序来产生次级粒子径迹 考虑到径迹上粒子与各种物质的多重散射 考虑计数器的探测效率而引起的事件丢失 产生一些本底污染过程的事例径迹 将输入的事例径迹参数和模拟所得径迹参数比较

估计出该实验 装置的探测效 率和分辨率 在粒子物理实验中,蒙特卡洛程序可以根据过程的理论规律,产 生出主过程和本底过程事例,由此给出末态粒子的所有径迹参数, 由此计算出探测装置的探测效率和本底对全截面测量的影响

通过蒙卡方法的实验数据分析,还可以检验理论的正确与否

• 胶子的存在与否

在质心系能量为30GeV以上的正负电子 对撞机上,强子的产生机制 $2 - e^+ e^- \rightarrow \gamma \rightarrow q \overline{q}$,夸克和反夸克碎裂后成为强子。

TASSO Collaboration 的实验数据与按此机制绘制的蒙卡计算曲 线不相符。但是我们加上 $e^+e^- \rightarrow \gamma \rightarrow q\overline{q}g$ 过程,得到的蒙卡计 算曲线则与实验点符合的很好,证明了胶子的存在!

● 寻找共振态的数据分析 ── 寻找不变质量谱上的明显峰值

共振态寿命短,探测装置的分辨率有限 本底过程对主过程严重污染 共振态衰变为某几个粒子的分支比很小 主过程末态也有相同的粒子



利用蒙特卡洛模拟分析,产生出与实验相同的事例数。这样模拟100 次,绘出不变质量谱。在所有的不变质量谱图(包括真实实验的不变质 量分布图)中选出5张最有可能存在共振峰的图。如果这5张中包括真实 实验的不变质量谱,则:在95%的置信水平上,实验数据包含了共振峰 的存在,不变质量谱上模糊的峰形不是由于统计涨落引起的!



一、量子力学

$$H\Psi(\vec{x},t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x},t)}{\partial t}$$
 ——— 薛定谔方程

定义: $D_{F}(\vec{x},t;\vec{x}_{0},t_{0}) = \langle \vec{x} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t-t_{0})\right) | \vec{x}_{0} \rangle$ 费曼传播子

量子力学的基本理论告诉我们,系统的所有信息,包括基态、激发态的 能量、波函数等均可由费曼传播子给出。特别是和基态有关的信息,可 以很方便的得到。



例如,基态波函数的模方可以表示为 $|\psi_0(\vec{x})|^2 = \lim_{\tau \to +\infty} \left[D_F(\vec{x}, -i\tau; \vec{x}, 0) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} D_F(\vec{x}, -i\tau; \vec{x}, 0) d^3 \vec{x} \right)^{-1} \right]$

费曼传播子可以表达为路径积分的形式,对于简单系统,即

$$H = T + V = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$$

有:

$$D_F(\vec{x},t;\vec{x}_0,t_0) = \int D[\vec{x}(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar}S[\vec{x}(t)]\right)$$

其中,

$$S[\vec{x}(t)] = \int_{t_0}^t Ldt = \int_{t_0}^t dt \left(\frac{1}{2}m\dot{\vec{x}}(t)^2 - V(\vec{x}(t))\right) - (\mathbf{f}_0 - \mathbf{f}_0) \mathbf{f}_0 \mathbf{f}_$$



二、路径积分量子蒙特卡罗方法

实际数值计算中,费曼传播子表达为 $D_{F}(\vec{x},t;\vec{x}_{0},t_{0}) = \lim_{\varepsilon \to 0} A^{N} \int \prod_{j=1}^{N-1} d^{3}\vec{x}_{j} \exp\left[\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^{N} \left(m \frac{(\vec{x}_{n} - \vec{x}_{n-1})^{2}}{2\varepsilon} - \varepsilon V(\vec{x}_{n})\right)\right]$ $\varepsilon = (t-t_{0})/N$ 积分常数

实际计算中,N足够大即可。

 $\int_{t_0}^t dt \left(\frac{1}{2}m\dot{\vec{x}}(t)^2 - V(\vec{x}(t))\right)$





由此得到基态波函数:

$$|\psi_0(\vec{x})|^2 = Z^{-1} \int \prod_{j=1}^{N-1} d^3 \vec{x}_j \left[-\frac{\varepsilon}{\hbar} E(\vec{x}, \vec{x}_1, \cdots, \vec{x}_{N-1}, \vec{x}) \right]$$

其中

$$Z = \int d^3 \vec{x} \int \prod_{j=1}^{N-1} d^3 \vec{x}_j \left[-\frac{\varepsilon}{\hbar} E(\vec{x}, \vec{x}_1, \cdots, \vec{x}_{N-1}, \vec{x}) \right]$$

插入 δ 函数,得到:

$$|\psi_0(\vec{x})|^2 = \int d^3 \vec{x}_0 \int \prod_{j=1}^{N-1} d^3 \vec{x}_j Z^{-1} \delta(\vec{x} - \vec{x}_0) \left[-\frac{\varepsilon}{\hbar} E(\vec{x}_0, \vec{x}_1, \cdots, \vec{x}_{N-1}, \vec{x}_N = \vec{x}_0) \right]$$

36

采用Metropolis方法计算基态波函数:

首先,选择任意的、连接 *N*个时间间隔、且 $\vec{x}_N = \vec{x}_0$ 的一条路径,计算 相应的能量 $E(\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{N-1}, \vec{x}_N)$ 。然后,再接着选一系列路径,每条 路径与前一条路径最多只有一个时刻(例如 τ_j)有不同的空间点。采用 **Metropolis**方法来确定满足上述要求的新路径。其中,将随机定下的坐 标 \vec{x}_j 改变到 \vec{x}'_j 的过渡概率为 $w_{jj'} = \min[1, \exp(-\varepsilon\Delta E)]$ 。其中, ΔE 为两 条路径的能量差。对于每一条路径,利用前述公式计算被积函数 $\delta(\vec{x} - \vec{x}_0)$ 的估计值,并累加到求和之中。最终该求和所得的值与抽样路径的总数 相除得到平均值,就得到 $|\Psi_0(\vec{x})|^2$ 的数值结果。按上述方法,游走足够 多的步数后,我们就得到 $|\Psi_0(\vec{x})|^2$ 的值。



三、变分量子蒙特卡罗方法

对于任意的试探函数♥,其能量期望值满足

$$E_{try} = \langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\int |\psi(\vec{x})|^2 [\psi^{-1}(\vec{x}) H \psi(\vec{x})] d^3 \vec{x}}{\int |\psi(\vec{x})|^2 d^3 \vec{x}} \ge E_0$$

$$4\delta \hat{x} = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\int |\psi(\vec{x})|^2 [\psi^{-1}(\vec{x}) H \psi(\vec{x})] d^3 \vec{x}}{\int |\psi(\vec{x})|^2 d^3 \vec{x}} \ge E_0$$

$$4\delta \hat{x} = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\int |\psi(\vec{x})|^2 [\psi^{-1}(\vec{x}) H \psi(\vec{x})] d^3 \vec{x}}{\int |\psi(\vec{x})|^2 d^3 \vec{x}} \ge E_0$$

$$4\delta \hat{x} = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\int |\psi(\vec{x})|^2 [\psi^{-1}(\vec{x}) H \psi(\vec{x})] d^3 \vec{x}}{\int |\psi(\vec{x})|^2 d^3 \vec{x}} \ge E_0$$

对于 E_{try} 的计算,采用重要抽样法。当给定试探函数后,由**Metropolis** 方法产生 $|\psi(\vec{x})|^2$ 分布的N个位形。对于每一个位形,计算出相应的局 域能量,



则:
$$E_{try} \approx \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i / N$$

变分法步骤:

- (1) 选择一个物理上相对合理的基态试探波函数 Ψ_i ;
- (2) 利用前述方法计算与之相应的能量期望值 $E_{try}^{(i)}$;
- (3) 改变试探函数中的变分参数值,使得试探函数改变一小量,记改变后的试探函数为 Ψ_{i+1} ,并计算相应的能量期望值 $E_{trv}^{(i+1)}$;
- (4) 计算能量改变值 $\Delta E_{i+1} = E_{try}^{(i+1)} E_{try}^{(i)}$,若改变量小于**O**,则接受试 探函数的改变,否则拒绝,并回到第三步;
- (5) 反复循环,直至能量期望值不再有明显变化为止。



若上述循环至第*M*次终止,则



四、格林函数量子蒙特卡罗方法

一维扩散方程:
$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial t^2}$$

相应的格林函数: $G_0(x,y;t) = \exp\left[-(x-y)^2/(4\alpha t)\right]/\sqrt{4\pi\alpha t}$



$\int dy G_0(x, y; t) = 1$ ——格林函数归一,且与 *x*, *t* 无关。







上述的格林函数正是量子力学中的时间演化算符在坐标表象下的矩阵 元,即费曼传播子。易知

$$\exp[-(H-E_T)\tau] = \sum_n \left|\phi_n\right| \exp[-(E_n-E_T)\tau] \left\langle\phi_n\right|$$

当 $\tau \rightarrow +\infty$,或者说足够大时,上式右边的求和中只有基态才有贡献,这个算符(时间演化算符)行为就如同作用在基态波函数上。

解析计算格林函数,得到

$$G(\vec{R}, \vec{R}'; \Delta \tau) = \exp[-(V(\vec{R}) - E_T)\Delta \tau] \cdot \frac{1}{(2\pi\Delta\tau)^{3N/2}} \exp[-(\vec{R} - \vec{R}')^2 / (2\Delta\tau)] + O(\Delta\tau^2)$$

44

上面给出的是格林函数的短时间近似结果。根据此结果,我们在格林函数蒙特卡罗模拟中,就必须进行大量的短时间间隔的游走,最终使其分布近似满足基态波函数。



由 \vec{R} 游走到 \vec{R}' 的权重需乘因子 exp{-[($V(\vec{R}) + V(\vec{R}')$)/2- E_T] $\Delta \tau$ }, 模拟效率不高。

Reynolds方法



上述公式涉及的是高维积分问题。只有理想气体、谐振子系统、**lsing**模 型等极少数类型的问题可以解析求解。大多数情况下,只能借助近似方 法求出。



正则系综,
$$H = \sum_{i=1}^{N} \vec{p}_i^2 / 2m_i + \Phi(\vec{x})$$

除掉动量以外的其它的相空间坐标

当粒子间的相互作用与动量无关时,动能项的贡献是可以被积分掉的, 这相当于将Hamilton量中的动能项去掉。则,平衡态下的概率分布为 Boltzmann分布。 Boltzmann分布密度函数为:

$$p(\vec{x},T)d\vec{x} = Z^{-1}f(\Phi(\vec{x}))d\vec{x} = Z^{-1}\exp[-\Phi(\vec{x})/(k_BT)]d\vec{x}$$

$$\downarrow$$

$$Z = \int d\vec{x}\exp[-\Phi(\vec{x})/(k_BT)]d\vec{x}$$

可见,所有对应于大能量值的状态 \vec{x} 对观测量积分的贡献都很小。

随机选择 (均匀抽样) n 个状态 \vec{x}_i ,则有

$$\langle A(T) \rangle \approx \frac{\sum_{i=1}^{n} A(\vec{x}_i) f(\Phi(\vec{x}_i))}{\sum_{i=1}^{n} f(\Phi(\vec{x}_i))}$$

由于上式中大部分状态对求和的贡献是很小的,故抽样的效率是比较低 下的。为有效的进行计算,应采用重要抽样法。

用**Metropolis**方法产生**Boltzmann**分布的*n*个状态 \vec{x}_i ,则

$$\langle A(T) \rangle \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} A(\vec{x}_i)$$



一、直接模拟法

中子的状态位形: $s = (x, E, \cos \theta)$ 中子在物质层中的运动历史: $s_0 \rightarrow s_1 \rightarrow s_2 \cdots \rightarrow s_M$

$$s_{i-1} = (x_{i-1}, E_{i-1}, \cos \theta_{i-1})$$

$$s_i = (x_i, E_i, \cos \theta_i)$$

50



(2) 确定碰撞的原子核种类。

中子与物质层中的第 m种原子核碰撞的概率为:



由离散型分布随机变量的直接抽样法,确定发生碰撞的是何种 原子核。

(3) 确定碰撞的性质是吸收还是散射。



中子与第*m*种原子核发生散射的概率为

$$p_{m,s}^{(i-1)} = \sigma_s^m (E_{i-1}) / \sigma_t^m (E_{i-1})$$

 \downarrow
 $\sigma_t^m = \sigma_s^m + \sigma_a^m$
散射截面 吸收截面

由离散型分布随机变量的直接抽样法,确定是散射还是吸收。若是吸收,则停止跟踪,回到*s*₀状态;若是散射,则进入下一步。

(4) 确定中子散射角 θ_i 和能量 E_i 。



反复重复上述步骤,直至中子在物质层中的运动历程的终点。

若共模拟了N个中子的运动过程,并定义

$$\eta_n = \begin{cases} 1, & x_M \ge a \\ 0, & x_M \le a$$
或被吸收

则透射率:
$$P \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \eta_n$$





将散射的概率权重*W_i*加到状态的位形参数中。

$$w_i = w_{i-1} \frac{\sigma_{T,s}^m(E_{i-1})}{\sigma_T^m(E_{i-1})}, \qquad w_0 = 1$$

其中:

$$\sigma_T^m = \rho_m \sigma_t^m \qquad \sigma_{T,s}^m = \rho_m \sigma_s^m$$

第 *m*种原子核的数密度

此时,第**n**个中子对透射率的贡献为:
$$\delta_n = \begin{cases} w_{n-1}, & x > a \\ 0, & y \in c \end{cases}$$

透射率:
$$P \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \delta_n$$



三、统计估计法

第n个处在状态 S_i ,直接穿透物质层的概率为:

$$P_n^i = \begin{cases} w_i \exp\left\{-\sigma_T(E_i)\frac{a-x_i}{\cos\theta_i}\right\}, & \cos\theta_i > 0\\ 0, & \text{ if } \end{aligned}$$

此中子对透射率的贡献为:
$$P_n = \sum_{i=1}^{M-1} P_n^i$$
 (M为第n个中子在物质)

透射率:
$$P \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} P_n$$



THE END