

蒙特卡罗方法计算 ${}^6\text{Li}$ 玻璃和 ${}^{10}\text{B}$ 中子探测器的相对效率

李素梅

蒙特卡罗方法是计算中子探测器的常用方法^[1,2]。本文用该方法计算了中子在 ${}^{10}\text{B}$ 或 ${}^6\text{Li}$ 玻璃样品中的通量衰减因子及多次散射修正因子。用相关方法和微分方法计算了截面误差对通量衰减及多次散射修正因子的影响。在NOVA-840机上用FORTRAN-5语言编制了计算程序。初步计算表明,计算结果与已有结果基本符合。

关键词 多次散射修正, 通量衰减因子, 相关方法, 微分方法。

一、计算原理

实验装置如图1所示,其中XYZ为绝对座标,xyz为相对座标。单能平行光束中子源入射到闪烁体样品上,与样品中的某种介质发生反应,其中如果跟 ${}^6\text{Li}$ 或 ${}^{10}\text{B}$ 发生反应,产生引起闪光的 α 或 γ 粒子。由于闪光,探测器可探到这些粒子。计算的目的是给出探测效率,借此即可确定入射的中子强度。

如果样品是无限薄,探测效率可由 ${}^{10}\text{B}(n, \alpha, \gamma){}^7\text{Li}$ 或 ${}^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$ 反应截面 $\sigma_{n,\alpha}$ 和单位面积的靶核数 N (原子/cm²)直接计算,即

$$\varepsilon = N \cdot \sigma_{n,\alpha}$$

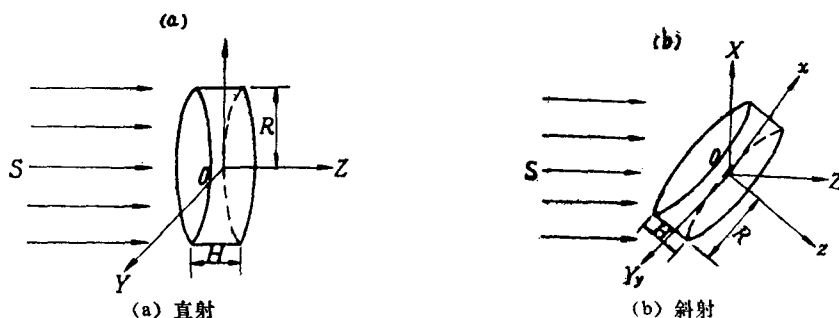


图1 实验装置示意图

但实际上,样品是有一定厚度的,并含有Si, O, ${}^6\text{Li}$, Ce等许多元素,中子与这些元素的多次散射可能引起明显的误差,因此对效率不仅要作通量衰减修正,而且必须作多次散射修正。

二、计算的基本公式

探测效率 ε 实际上是平均一个入射中子在样品上所产生的 (n, α) 反应数,即 ε 可表

示为:

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^{\infty} I_i = I_1 \frac{\sum_{i=1}^{\infty} I_i}{I_1} = N \cdot \sigma_{n,\alpha} \cdot f_1 \cdot f_2 \quad (1)$$

其中 f_1, f_2 分别为所要计算的通量衰减因子及多次散射修正因子。它们分别为:

$$f_1 = \iint S(P_0) T(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r} | E_0, \vec{\Omega}_0) / \sum_i(\vec{r}, E_0) \cdot H dV dP_0, \quad (2)$$

$$f_2 = \sum_{i=1}^{\infty} I_i / I_1. \quad (3)$$

这里, H 为样品厚度; P 为中子状态, 由中子的位置 \vec{r} 、能量 E 和运动方向 $\vec{\Omega}$ 组成; $S(P) dP$ 为于状态 P 附近 dP 内独立源发射的粒子或然数目; I_i 为中子第 i 次碰撞所产生的 (n, α) 反应数, 即

$$I_i = \iint \frac{\sum_{n,\alpha}(\vec{r}, E')}{\sum_i(\vec{r}, E')} \chi_{i-1}(P') T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E', \vec{\Omega}') dV dP', \quad (4)$$

其中 $\sum_{n,\alpha}(\vec{r}, E') / \sum_i(\vec{r}, E')$ 为 (n, α) 反应的概率, $\chi_i(P')$ 为经过 i 次碰撞从 P' 点发射的单位 P' 内的粒子密度, 其积分方程为:

$$\begin{aligned} \chi_i(P) &= \int \chi_{i-1}(P_{i-1}) K(P_{i-1} \rightarrow P) dP_{i-1} \\ &= \int \dots \int S(P_0) K(P_0 \rightarrow P_1) \dots K(P_{i-1} \rightarrow P) dP_{i-1} \dots dP_0. \end{aligned} \quad (5)$$

其中 $K(P' \rightarrow P) dP = T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E', \vec{\Omega}') C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}) dP$, 其符号含义同参考文献[3]。

考虑截面误差对 f_1, f_2 的影响, 我们引进扰动参量 β 以后, f_1 和 f_2 变成与 β 有关的量, 那么(2)、(3)两式可写为:

$$f_1(\beta) = \iint S(P_0) T(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r} | E_0, \vec{\Omega}_0, \beta) / \sum_i(\vec{r}, E_0, \beta) \cdot H dV dP, \quad (6)$$

$$f_2(\beta) = \sum_{i=1}^{\infty} I_i(\beta) / I_1(\beta). \quad (7)$$

并用

$$df_1(\beta) \simeq f_1(\beta + \Delta\beta) - f_1(\beta), \quad (8)$$

$$df_2(\beta) \simeq f_2(\beta + \Delta\beta) - f_2(\beta), \quad (9)$$

表示 β 的改变量为 $\Delta\beta$ 时, 对 $f_1(\beta), f_2(\beta)$ 的影响。对(8)、(9)式的计算采用了两种方法, 一是相关方法, 即建立在同一随机游动的基础上, 同时计算 $f_1(\beta + \Delta\beta), f_1(\beta)$ 及 $f_2(\beta + \Delta\beta), f_2(\beta)$ 。另一种方法是用所谓微分蒙特卡罗方法^[4,5], 该方法建立在带有微分扰动权重的随机游动基础上。如果(6)、(7)式两边对 β 取微分有:

$$df_1(\beta) = \iint (S P_0) \frac{dT'}{T'} T(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r} | E_0, \vec{\Omega}_0, \beta) / \sum_i(\vec{r}, E_0, \beta) \cdot H dV dP_0, \quad (10)$$

$$df_2(\beta) = \frac{I_1(\beta) \sum_{i=1}^{\infty} dI_i(\beta) - \sum_{i=1}^{\infty} I_i(\beta) dI_1(\beta)}{I_1^2(\beta)}, \quad (11)$$

这里 $T' = T(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r} | E_0, \vec{\Omega}_0, \beta) / \Sigma_i(\vec{r}, E_0, \beta)$ 。

三、微分量 $dI_i(\beta)$, 相关量 $I_i(\beta + \Delta\beta)$ 的表达式

由 (4) 式知:

$$\begin{aligned} dI_i(\beta) = & \iint d\Sigma_{n,\alpha}(\vec{r}, E', \beta) \chi_{i-1}(P', \beta) T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E', \vec{\Omega}', \beta) / \Sigma_i(\vec{r}, E', \beta) dV dP' \\ & + \iint \Sigma_{n,\alpha}(\vec{r}, E', \beta) d\chi_{i-1}(P', \beta) T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E', \vec{\Omega}', \beta) / \Sigma_i(\vec{r}, E', \beta) dV dP' \\ & + \iint \Sigma_{n,\alpha}(\vec{r}, E', \beta) \chi_{i-1}(P', \beta) dT' dV dP'. \end{aligned} \quad (12)$$

在不考虑源受扰的情况下, 由 (5) 式知

$$\begin{aligned} d\chi_i(P, \beta) = & \int \cdots \int S(P_0) K(P_0 \rightarrow P_1, \beta) \cdots K(P_{i-1} \rightarrow P, \beta) \cdot \\ & \sum_{l=1}^i \left(\frac{dT'_l}{T'_l} + \frac{d\Sigma'_{s,l}}{\Sigma'_{s,l}} \right) dP_{i-1} \cdots dP_0. \end{aligned} \quad (13)$$

其中, $\Sigma'_{s,l} = \Sigma_s(\vec{r}, E_l, \beta) C(E_l, \vec{\Omega}_l \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}, \beta)$; $C(E_l, \vec{\Omega}_l \rightarrow E, \vec{\Omega} | \vec{r}, \beta) dE d\vec{\Omega}$ 表示扰动参量为 β 时, 在 \vec{r} 处发生碰撞的一个中子, 由能量 E_l 、方向 $\vec{\Omega}_l$ 变成能量为 E 、方向为 $\vec{\Omega}$ 附近 $dE d\vec{\Omega}$ 内的中子平均数目。将 (13) 式代入 (12) 有:

$$\begin{aligned} dI_i(\beta) = & \iint \frac{\Sigma_{n,\alpha}(\vec{r}, E, \beta)}{\Sigma_i(\vec{r}, E, \beta)} \chi_i(P', \beta) T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E', \vec{\Omega}', \beta) \times \\ & \left[\sum_{l=1}^{i-1} \left(\frac{dT'_l}{T'_l} + \frac{d\Sigma'_{s,l}}{\Sigma'_{s,l}} \right) + \frac{dT'}{T'} + \frac{d\Sigma_{n,\alpha}(\vec{r}, E, \beta)}{\Sigma_{n,\alpha}(\vec{r}, E, \beta)} \right] dV dP', \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} dI_1(\beta) = & \iint \frac{\Sigma_{n,\alpha}(\vec{r}, E_0, \beta)}{\Sigma_i(\vec{r}, E_0, \beta)} \left[\frac{dT'}{T'} + \frac{d\Sigma_{n,\alpha}(\vec{r}, E_0, \beta)}{\Sigma_{n,\alpha}(\vec{r}, E_0, \beta)} \right] \times \\ & S(P_0) T(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r} | E_0, \vec{\Omega}_0, \beta) dV dP_0. \end{aligned} \quad (15)$$

相关量 $I_i(\beta + \Delta\beta)$ 的表达式为:

$$\begin{aligned} I_i(\beta + \Delta\beta) = & \iint \frac{\Sigma_{n,\alpha}(\vec{r}, E, \beta + \Delta\beta)}{\Sigma_i(\vec{r}, E, \beta + \Delta\beta)} \chi_{i-1}(p', \beta) T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E', \vec{\Omega}', \beta) \times \\ & \times \prod_{l=1}^{i-1} \frac{T(\vec{r}_l \rightarrow \vec{r}_{l+1} | E_l, \vec{\Omega}_l, \beta + \Delta\beta)}{T(\vec{r}_l \rightarrow \vec{r}_{l+1} | E_l, \vec{\Omega}_l, \beta)} \cdot \frac{C(E_l, \vec{\Omega}_l \rightarrow E_{l+1}, \vec{\Omega}_{l+1} | \vec{r}_{l+1}, \beta + \Delta\beta)}{C(E_l, \vec{\Omega}_l \rightarrow E_{l+1}, \vec{\Omega}_{l+1} | \vec{r}_{l+1}, \beta)} \\ & \times \frac{T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E', \vec{\Omega}', \beta + \Delta\beta)}{T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E', \vec{\Omega}', \beta)} dV dP', \end{aligned} \quad (16)$$

$$I_1(\beta + \Delta\beta) = \iint \frac{\Sigma_{n,\alpha}(\vec{r}, E, \beta + \Delta\beta)}{\Sigma_i(\vec{r}, E, \beta + \Delta\beta)} S(P_0, \beta) T(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r} | E_0, \vec{\Omega}_0, \beta) \times$$

$$\times \frac{T(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r} | E_0, \vec{\Omega}_0, \beta + \Delta\beta)}{T(\vec{r}_0 \rightarrow \vec{r} | E_0, \vec{\Omega}_0, \beta)} dV dP' \quad (17)$$

四、蒙特卡罗模拟中子历史

在选定右手直角坐标系下, 中子状态参量以

$$S_n = (\vec{r}_n, E_n, \vec{\Omega}_n, W_n)$$

表示, 其中 $\vec{r}_n(X_n, Y_n, Z_n)$ 为中子第 n 次碰撞的位置; $\vec{\Omega}_n(U_n, V_n, W_n)$ 为中子第 n 次碰撞后的方向; E_n 为中子第 n 次碰撞后的能量; W_n 为中子第 n 次碰撞后的权重。

中子初始状态 $S_0(\vec{r}_0, E_0, \vec{\Omega}_0, W_0)$ 的选取。平行光束直射样品(图 1(a)), 中子的初始状态是不难得到的。样品围绕 Y 轴旋转某一个角度 θ (图 1(b)), 则初始状态可进行如下选取: 让平行光束均匀打在包住样品的长方体的一个面上, 长方体其 X 方向的边长为 $\sqrt{4R^2 + H^2} \sin(\pi - \theta - \alpha)$, Y 方向的边长为 $2R$, Z 方向的边长为 $\sqrt{4R^2 + H^2}$ 。这里, $\alpha = \cos^{-1}(H/\sqrt{4R^2 + H^2})$ 。在这个面上抽取中子, 在(图 1(a))绝对坐标系下其状态 $\vec{r}(X, Y, Z)$, $\vec{\Omega}(U, V, W)$ 分别为:

$$\begin{aligned} X_1 &= \sqrt{4R^2 + H^2} \sin(\pi - \theta - \alpha) (\xi^* - 0.5), \\ Y_1 &= R(2\xi_1 - 1), \\ Z_1 &= -\sqrt{4R^2 + H^2}/2, \\ U_1 &= 0, \quad V_1 = 0, \quad W_1 = 1. \end{aligned}$$

然后进行坐标变换, 得到相对坐标下的 $\vec{r}_1(x, y, z)$, $\vec{\Omega}_1(u, v, w)$ 为:

$$\begin{aligned} z_1 &= Z_1 \cos\theta - X_1 \sin\theta, \\ y_1 &= Y_1, \\ x_1 &= Z_1 \sin\theta + X_1 \cos\theta, \\ u_1 &= \sin\theta, \quad v_1 = 0, \quad w_1 = \cos\theta. \end{aligned}$$

并由 $\vec{r}_1(x_1, y_1, z_1)$ 点出发, 沿 $\vec{\Omega}_1(u_1, v_1, w_1)$ 方向求出与样品的交点 $\vec{r}_0(x_0, y_0, z_0)$, 再取 \vec{r}_0 做为中子的初始位置, 即

$$\begin{aligned} x_0 &= x_1 + l_1 \cdot u_1, \\ y_0 &= y_1 + l_1 \cdot v_1, \\ z_0 &= z_1 + l_1 \cdot w_1. \end{aligned}$$

l_1 为 $\vec{r}_1(x_1, y_1, z_1)$ 到 $\vec{r}_0(x_0, y_0, z_0)$ 的距离, $\vec{\Omega}_1(u_1, v_1, w_1)$ 方向作为初始方向 $\vec{\Omega}_0$, E_0 为常数, 初始权重 $w_0 = 1$ 。

中子输运时, 考虑样品比较小, 强迫中子在样品里碰撞三次, 其输运密度函数为:

$$\frac{\sum_i^* (E, \beta) \exp[-\sum_i (E, \beta) l_i]}{1 - \exp[-\sum_i (E, \beta) l_i]}, \quad 0 \leq l \leq l' \quad (18)$$

权重纠偏因子为 $1 - \exp[-\sum_i (E, \beta) l_i]$, 其 l' 为在 \vec{r}_n 位置沿 $\vec{\Omega}_n$ 方向在样品穿越的距离。三次以上碰撞不限制。

中子与核发生三种反应: 吸收、弹性散射、 (n, α) 或 (n, γ) 。发生 (n, α) 这种反应认为

* ξ 为均匀分布在 $(0, 1)$ 上的随机数。

** 均匀介质, 截面与位置 r 无关。

中子死亡, 采用简单加权方法处理碰撞后中子的权重, 然后确定与某种核发生反应, 中子每次碰撞用碰撞点估计法记录 (n, α) 反应数及相应的扰动量、相关量。

五、 (n, α) 反应数 $I(\beta)$ 、扰动量 $dI(\beta)$ 、相关量 $I(\beta + \Delta\beta)$ 的估计值

令 $P_{i,j}(\beta)$ 为第 j 个中子第 i 次碰撞对 (n, α) 反应数的贡献, 即

$$P_{i,j}(\beta) = W_{i-1,j} \frac{\Sigma_{n,\alpha}(E_{i-1}, \beta)}{\Sigma_i(E_{i-1}, \beta)}, \quad (19)$$

这里, $W_{i,j}$ 为第 j 个中子第 i 次碰撞后的权重。如果跟踪 N 个中子, 则 (n, α) 反应数 I 的估计值为:

$$I(\beta) \simeq \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^K P_{i,j}(\beta). \quad (20)$$

根据(14)公式, 在计算 (n, α) 反应数 $I(\beta)$ 的估计时, 同时得到 $dI(\beta)$ 的估计, 即

$$dI(\beta) \simeq \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^K dP_{i,j}(\beta). \quad (21)$$

这里,

$$\left. \begin{aligned} dP_{i,j}(\beta) &= P_{i,j}(\beta) \cdot W_{i-1,j}^d(\beta), \\ W_{0,j}^d(\beta) &= \frac{dT'}{T'} + \frac{d\Sigma_{n,\alpha}(\beta)}{\Sigma_{n,\alpha}(\beta)}, \\ W_{i,j}^d(\beta) &= \sum_{s=1}^i \left(\frac{dT'_s}{T'_s} + \frac{d\Sigma'_{s,i}}{\Sigma'_{s,i}} \right) + \frac{dT'}{T'} + \frac{d\Sigma_{n,\alpha}}{\Sigma_{n,\alpha}}. \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

$i = 1, 2, \dots$

相应的相关估计:

$$I(\beta + \Delta\beta) \simeq \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^K P_{i,j}(\beta + \Delta\beta). \quad (23)$$

这里,

$$\left. \begin{aligned} P_{i,j}(\beta + \Delta\beta) &= W_{i-1,j}(\beta) \cdot W_{i-1,j}(\beta + \Delta\beta) \frac{\Sigma_{n,\alpha}(E_{i-1}, \beta + \Delta\beta)}{\Sigma_i(E_{i-1}, \beta + \Delta\beta)}, \\ W_{0,j}(\beta + \Delta\beta) &= \frac{T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E', \vec{\Omega}', \beta + \Delta\beta)}{T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E', \vec{\Omega}', \beta)}, \\ W_{i,j}(\beta + \Delta\beta) &= W_{i-1,j}(\beta + \Delta\beta) \frac{C(E_{i-1}, \vec{\Omega}_{i-1} \rightarrow E_i, \vec{\Omega}_i | \vec{r}_i, \beta + \Delta\beta)}{C(E_{i-1}, \vec{\Omega}_{i-1} \rightarrow E_i, \vec{\Omega}_i | \vec{r}_i, \beta)}. \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

根据(2)~(11), (12)~(17)式就可得到通量衰减因子 $f_1(\beta)$, $f_1(\beta + \Delta\beta)$, $df_1(\beta + \Delta\beta)$ 及多次散射修正因子 $f_2(\beta)$, $df_2(\beta)$, $f_2(\beta + \Delta\beta)$ 的估计值。对图1(a)装置的样品, 通量衰减因子解析处理。

六、计算结果及分析

根据上述方法，在 NOVA-840 机上用 FORTRAN-5 语言编制了计算程序，为校验程序的可靠性，试算了一些方案。图 2 和图 3 给出了本文与 Lamaza^[6] 计算结果的比较。

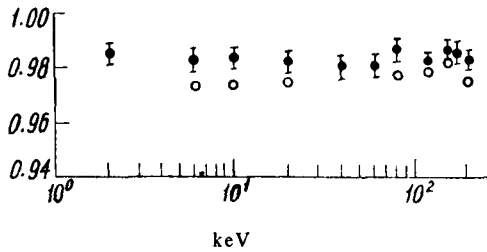


图 2 直径为 5cm、厚为 0.05 cm ⁶Li 玻璃的多次散射修正因子的倒数
○ 本文计算值；● Lamaza 计算值。

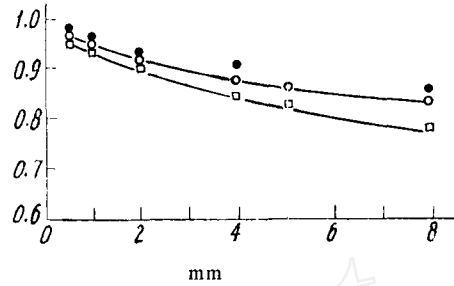


图 3 多次散射修正因子的倒数数值随厚度的变化
●——10 keV, Lamaza 计算值；
○——10 keV, 本文；□——200 keV 本文。

图 2 给出直径为 5 cm、厚为 0.05 cm ⁶Li 玻璃的多次散射修正因子的倒数。能量在 6 ~ 200 keV 范围内修正因子基本上是平的，约为 3% 左右的修正。修正因子随能量变化的趋势与 Lamaza 计算的结果是一致的，但比 Lamaza 的结果低 1~1.5%，这是由于使用的截面不同。

图 3 给出两种能量修正因子随厚度的变化情况。由图可见修正因子随厚度的增加越来越大，这是因为样品厚，使得中子在样品多次散射次数增加的缘故。

表 1 给出微分方法和相关方法计算截面误差对修正因子的影响。由表可见同样的截面误差对不同的样品厚度所引起的修正量不同，它随厚度的增加而增加。不同的截面误差对同一厚度所引起的修正量也不一样，截面误差大，影响就大。两种方法计算结果基本一致。

表 1 微分方法和相关方法计算截面误差对修正因子的影响

输入参数				计算结果		
几	何	入射能量点	截面误差	微分方法	相关方法	
θ	R, cm	E_0, keV	H, cm	$\Delta\Sigma, \%$	$d f_2(\beta)$	$\frac{f_2(\beta + \Delta\beta) - f_2(\beta)}{f_2(\beta)}$
0°	2.5	200	0.05	9	0.0045	1.041—1.036
0°	2.5	200	0.1	9	0.0096	1.076—1.064
0°	2.5	200	0.5	9	0.03	1.229—1.203
0°	2.5	150	0.05	9	0.004	1.026—1.022
0°	2.5	150	0.1	9	0.0078	1.045—1.038
0°	2.5	150	0.5	9	0.023	1.141—1.120
0°	2.5	6	0.05	6	0.003	1.032—1.029
0°	2.5	6	0.1	6	0.006	1.054—1.049
0°	2.5	6	0.5	6	0.0189	1.173—1.159

物理模型及实验数据是由郭太昌、石宗仁同志提供的，并在物理上给予很大帮助，作者表示感谢。

参 考 文 献

- [1] J. M. Neill et al., *Nucl. Instrum. Methods*, **82**, 162 (1970).
- [2] H. O. Zetterström et al., *ibid.*, **42**, 277 (1966).
- [3] 裴鹿成、张孝泽，蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用，科学出版社，1980年，第六章。
- [4] 裴鹿成、计算数学，2，60 (1978)。
- [5] 张孝泽，分枝方法与权重方法的等价性，原子能所内部资料，1978年。
- [6] C. P. Lamaza, NBS-493 (1978), p. 37.

(编辑部收到日期：1980年1月22日)

第二届反应堆热工流体学术报告会在厦门市举行

中国核学会和中国工程热物理学会下属的反应堆热工流体专业组于4月20日至26日在厦门市召开了第二届反应堆热工流体学术报告会。核工业部、水利电力部、机械工业部以及全国各有关高等院校共31个单位、137人参加了学术交流会。中国工程热物理学会副理事长、中国机械科学研究院副院长王新民同志，核工业部一院总工程师，反应堆热工流体专业组组长赵仁凯同志，二院总工程师籍孝宏同志，水利电力部核电局副总工程师符德璠同志，西安交通大学副校长陈学俊教授等多位专家参加了会议，并在会上做了指导性的报告。

会议交流了自第一届会议以来取得的科技成果，探讨了今后为核电站安全和服务的科研方向。有10人在大会上作了发言，70人次在小组会上宣读了学术报告。会议共收到115篇学术交流报告。

这次交流会正值浙江海盐县秦山核电站和广东核电站开始兴建之际，所以与核电站安全直接有关的热工水力问题得到了会议的极大重视。这次会议对进一步组织各方面的技术力量，解决核电站安全中的重大热工水力问题发挥了积极的推动作用。

(钱、陈)