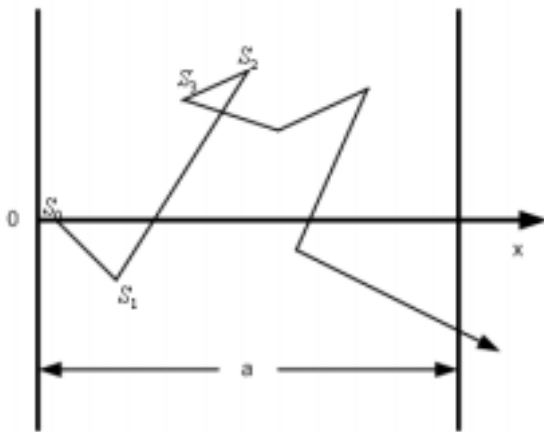


### 3. 7 粒子输运问题的蒙特卡洛模拟

#### 一、直接模拟法

直接模拟法是基于粒子输运过程的随机统计特性的考虑,认为物理上的可观测量就是大量粒子的行为共同贡献的统计结果。因此,该方法就是考虑一个一个粒子的传输,模拟它们在物质中随机运动的历史,记录其在运动中对感兴趣的物理模拟量的贡献。在对单个粒子运动历史进行大量的重复模拟之后,就可以对物理模拟量进行统计平均,得到所需要的物理结果。



中子与物质作用后,一部分会被吸收,另一部分经过多次散射后会穿透物质层透射出去。中子与物质层作用后可能会产生次级粒子,我们不考虑这些次级粒子的迁移。如果中子和物质材料中第  $m$  种原子核作用的全截面为

$$\sigma_t^m(E) = \sigma_s^m(E) + \sigma_a^m(E)$$

$\sigma_s^m(E)$  和  $\sigma_a^m(E)$  分别表示中子被一个原子核  $m$  的散射和吸收截面。

如果单位体积第  $m$  种原子核的数量记为  $\rho_m$ , 则中子作用在单位体

积内第  $m$  种元素上的总截面为

$$\Sigma_t^m(E) = \rho_m \sigma_t^m(E).$$

假如材料中有多种元素，该中子与材料作用的总截面为：

$$\Sigma_t(E) = \sum_m \Sigma_t^m(E).$$

假定中子与某一原子核散射后的角分布表示为  $d\sigma(E)/d\Omega$ ，当散射角分布对方位角  $\varphi$  是各向同性时，方位角  $\varphi$  可以被积掉，得到微分散射截面  $d\sigma(E)/d(\cos\theta)$ 。无论微分截面  $d\sigma(E)/d\Omega$  或者  $d\sigma(E)/d(\cos\theta)$ ，我们都可以得到相应的理论公式。

设在  $O$  点有一个能量为  $E_0$  的中子垂直入射到物质层中。我们记录这时该中子的状态位形为  $\vec{s}_0 = (x_0 = 0, E_0, \cos\theta_0 = 1)$ ，经过第一次碰撞后散射到状态位形  $\vec{s}_1 = (x_1, E_1, \cos\theta_1)$ ，再经过第二次碰撞后散射到状态位形  $\vec{s}_2 = (x_2, E_2, \cos\theta_2)$ ，...，如此我们依次记下该中子在物质层中运动历史上的位形点的轨迹：

$$\vec{s}_0 \rightarrow \vec{s}_1 \rightarrow \vec{s}_2 \cdots \rightarrow \vec{s}_M.$$

直到在  $\vec{s}_M$  状态，该中子被物质层吸收，透射或背射出来，或者在  $\vec{s}_M$  处该中子的能量  $E_M$  低于某一阈值，则程序就停止跟踪。

现在我们讨论程序如何具体模拟跟踪这个运动历程。

初始状态位形如前所述已经给出，假定为  $\vec{s}_0 = (x_0 = 0, E_0, \cos\theta_0 = 1)$ 。

现在要由位形  $\vec{s}_{i-1} = (x_{i-1}, E_{i-1}, \cos\theta_{i-1})$  确定下一个状态位形  $\vec{s}_i = (x_i, E_i, \cos\theta_i)$ 。

我们采用如下步骤来确定状态  $\vec{s}_i$  的各个参数：

(1) 首先确定坐标参数  $x_i$ 。中子到达  $\vec{s}_i$  状态点以前，经历过第  $i-1$  次碰撞后做匀速直线运动，其运动的自由程  $y$  满足分布密度函数  $f(y) = \Sigma_t(E_{i-1}) \cdot \exp[-y\Sigma_t(E_{i-1})]$ 。我们可以采用直接抽样法得到自由程  $y$  的抽样值，

$$y = -\frac{1}{\Sigma_t(E_{i-1})} \ln \xi .$$

则  $x_i$  由下式给出

$$x_i = x_{i-1} + y \cos \theta_{i-1} = x_{i-1} - \frac{\ln \xi}{\Sigma_t(E_{i-1})} \cos \theta_{i-1}$$

(2) 确定碰撞的原子核种类。中子与物质层中第  $m$  原子核碰撞的几率为

$$p_m^{(i-1)} = \Sigma_t^m(E_{i-1}) / \Sigma_t(E_{i-1}) .$$

则可以由离散型分布随机变量的直接抽样法，很容易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  $m$  原子核发生散射的几率为

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

同样可以采用离散型随机变量的直接法抽取。若抽样结果为吸收，则停止跟踪回到  $\vec{s}_0$  状态，开始下一个中子的跟踪；若抽样结果为散射，则进入第(4)步。

(4) 确定中子散射角  $\theta_i$  和能量  $E_i$ 。由于理论上一般给出的是质心系中的散射微分截面公式  $d\sigma(E_{i-1})/d \cos \theta_{i-1}$ ，因此我们需要首先按照质心系的微分截面抽取散射角余弦  $\cos \theta_c$ ， $\cos \theta_c$  满足的分布

密度函数为

$$f(\cos \theta_c) = \frac{d\sigma(E_{i-1})}{d \cos \theta_c} \bigg/ \int_{-1}^1 \frac{d\sigma(E_{i-1})}{d \cos \theta_c} d \cos \theta_c .$$

理论上，散射后的中子能量  $E_i$  由下式计算得到

$$E_i = \frac{1}{2} E_{i-1} [(1+r) + (1-r) \cos \theta_c] .$$

其中  $r = \left( \frac{A-1}{A+1} \right)^2$ ， $A$  是原子核质量与中子质量之比。质心系散射角  $\theta_c$  可以用下面公式换算为对应的实验室系的散射角  $\theta_L$ 。

$$\cos \theta_L = (1 + A \cos \theta_c) / \sqrt{1 + A^2 + 2A \cos \theta_c} .$$

再根据下面的球面三角公式，通过实验室系散射角  $\theta_L$  来确定  $\theta_i$ 。

$$\cos \theta_i = \cos \theta_{i-1} \cos \theta_L + \sin \theta_{i-1} \sin \theta_L \cos \varphi$$

其中  $\varphi$  为方位角。由于我们考虑的中子散射过程是各向同性的，方位角  $\varphi$  是通过抽样  $\varphi = 2\pi\xi$  确定抽样值。

按照上面的计算步骤，我们就完成了从  $\vec{s}_{i-1}$  到  $\vec{s}_i$  状态的跟踪。重复上述中子跟踪计算过程，直到中子在物质层中运动历程的终点。如果我们一共模拟了  $N$  个中子的运动过程，接下来，我们就要对感兴趣的模拟物理量进行统计平均。

以计算投射率来计算可观测的物理量：

我们定义在模拟过程中第  $n$  个中子对透射率的贡献  $\eta_n$  为

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

其中下标  $M$  为该中子在物质层中碰撞的次数。我们得到穿透物质层的中子数  $N_1$  为

$$N_1 = \sum_{n=1}^N \eta_n .$$

由此得到透射率的一个估计值为

$$\bar{P} = \frac{N_1}{N} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \eta_n$$

在  $1-\alpha$  置信水平下,  $\bar{P}$  的误差估计为

$$|\bar{P} - P| < t_{\alpha} \sigma_{\eta} / N .$$

$\sigma_{\eta}$  是  $\eta_n$  的均方差。由于  $\eta_n$  是一个二项式分布的随机变量, 所以

$$\sigma_{\eta}^2 = P(1-P) \approx \bar{P}(1-\bar{P})$$

通过对大量中子运动过程的跟踪, 我们也很容易求出透射中子的能量和角分布。只要将能量  $E$  和极角  $\theta$  分成若干个小区间, 如:

$$E_0 > E_1 > E_2 > \cdots > E_{\min} ,$$

$$0 = \theta_0 < \theta_1 < \theta_2 < \cdots < \theta_M = \pi/2$$

将透射中子的能量  $E$  和极角  $\theta$  记入图中对应区间, 统计落入各个能量区间或角度区间的中子数, 并画出直方图。这样我们就得到相应的散射中子的能量分布或角分布图形。

直接模拟法的优点: 模拟过程重复了物理过程的机制, 模拟思想朴素、简单。

直接模拟法的缺点: 当物质层较厚时, 透射率会很小, 导致误差较大。

## 二、权重法

实际上, 在模拟大量粒子穿过较厚物质层时, 只有很少数的

粒子对透射率有贡献，这时透射率估计值的误差涨落也比较大。为了克服这个缺点，可以采用对散射过程加权重的办法。

方法：记录到达某一状态的中子一定以一个概率权重  $w_i$  被散射，不再判断中子是否会被吸收。当中子离开物质或能量小于某一阈值时，就停止它的运动历程的跟踪。将散射的概率权重  $w_i$  加到状态的位形参数中，此时中子的状态描写为

$$\vec{s} = (x, E, \cos \theta, w).$$

其中  $w$  即是散射权重因子。类似在直接模拟法中，在跟踪一个中子前，先给出它的初始状态位形  $\vec{s}_0 = (x_0, E_0, \cos \theta_0, w_0)$ ，并取  $w_0 = 1$ 。在位形  $\vec{s}_{i-1} = (x_{i-1}, E_{i-1}, \cos \theta_{i-1}, w_{i-1})$  确定后，下一个状态位形  $\vec{s}_i = (x_i, E_i, \cos \theta_i, w_i)$  中的参数  $x_i, E_i, \cos \theta_i$  的确定方法与前面描述的直接模拟法相同。 $w_i$  由下面公式确定

$$w_i = w_{i-1} \cdot \frac{\Sigma_s^m(E_{i-1})}{\Sigma_t^m(E_{i-1})}.$$

上式中上标  $m$  仍然指的是第  $m$  种原子核。这时第  $n$  个中子对透射率的贡献为

$$\delta_n = \begin{cases} w_{i-1} & x > a \\ 0 & \text{其它} \end{cases}.$$

假定我们一共跟踪了  $N$  个中子，则透射率  $\bar{P}'$  的估计值为

$$\bar{P}' = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta_n.$$

它的方差为

$$\sigma_{\delta}^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta_n^2 - (\bar{P}')^2.$$

## 两种方法的方差的差别

$$\sigma_{\eta}^2 - \sigma_{\delta}^2 \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (\delta_n - \delta_n^2).$$

由于  $\delta_n \leq 1$  , 所以存在不等式

$$\sigma_{\eta}^2 > \sigma_{\delta}^2.$$

这个不等式说明权重法的方差小于直接模拟法的方差。

## 三、统计估计法

第  $n$  个被跟踪的中子在第  $i$  个状态由位形  $\vec{s}_i = (x_i, E_i, \cos \theta_i, w_i)$  描述。处在这一状态的中子直接穿透物质层的几率显然为

$$\bar{P}_n^i = \begin{cases} w_i \exp\left\{-\Sigma_i(E_i) \frac{a-x_i}{\cos \theta_i}\right\}, & \cos \theta_i > 0 \\ 0 & \text{其它} \end{cases}.$$

在这个中子的运动历程中, 每个碰撞点都有可能以几率  $\bar{P}_n^i$  透射出去。我们可以充分利用这一信息, 利用下式计算这个中子对透射率的贡献:

$$\bar{P}_n = \sum_{i=0}^{M-1} \bar{P}_n^i$$

式中  $M$  是被跟踪第  $n$  中子在物质层中的碰撞点数。如果我们一共跟踪了  $N$  个中子, 则最后得到透射率的估计值为这  $N$  个中子贡献的叠加。

$$\bar{P}^n \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \bar{P}_n = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sum_{i=0}^{M-1} \bar{P}_n^i.$$

它的方差为

$$\sigma_w^2 \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (\bar{P}_n^2) - (\bar{P})^2 .$$

这种计算透射率的方法就叫统计估计法。

除了上面介绍的直接模拟法和在此基础上发展起来的权重法和统计估计法外，还有其它许多发展出来的模拟方法，如：碰撞点积分法、半解析方法等模拟方法。这些方法发展的初衷就是要有效地降低模拟计算的方差，节约计算时间。