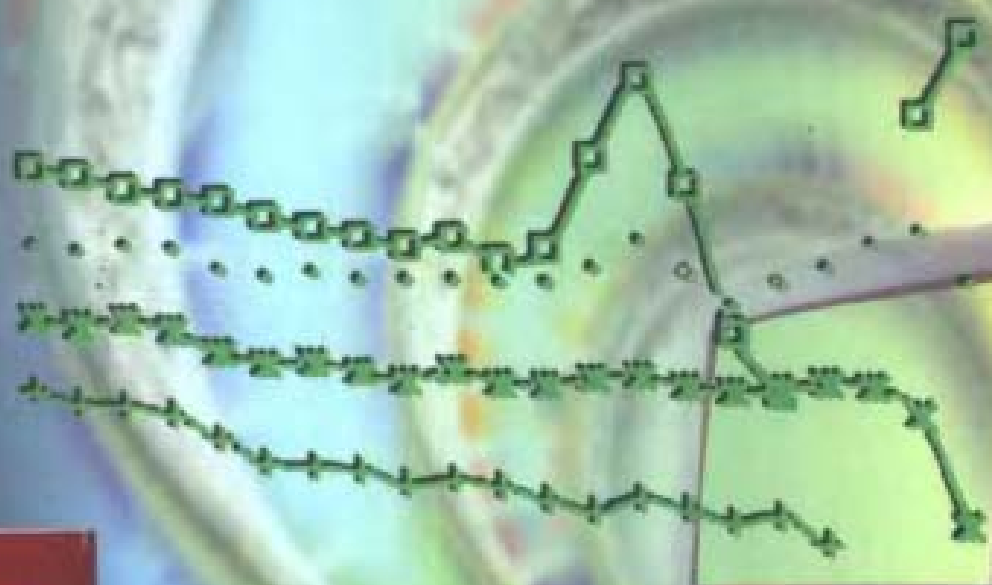


# 蒙特卡罗 方法及其应用

1993 ~ 1997

裴鹿成 主编  
王仲奇



 海洋出版社

# 蒙特卡罗方法及其应用

1993 ~ 1997

裴鹿成 主 编  
王仲奇

海洋出版社

1998 年 · 北京

## 内 容 简 介

本书收集了第六届全国蒙特卡罗学术交流会的部分论文。内容分为理论部分(包括蒙特卡罗方法基础、伪随机数产生、已知分布抽样等)和应用及软件部分(覆盖蒙特卡罗方法的主要应用领域),基本上反应了近几年来我国在蒙特卡罗方法研究和应用方面的学术水平,可供高级本科生、研究生和研究人员参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

蒙特卡罗方法及其应用/裴鹿成,王件奇主编。—北京:海洋出版社,1998.7

ISBN 7-5027-4591-2

I. 蒙… II. ①裴…②王… III. 蒙特卡罗法—学术会议—中国—文集—  
IV. 0242.1-53

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (98) 第 18192 号

责任编辑 王淑香

海洋出版社 出版发行

(100081 北京市海淀区大慧寺路 8 号)

北京兰空印刷厂印刷 新华书店发行所经销

1998 年 7 月第 1 版 1998 年 7 月北京第 1 次印刷

开本:787×1092 印张:9

字数:200 千字 印数:0—1000 册

定价:20.00 元

海洋版图书印、装错误可随时退换

## 前 言

第六届全国蒙特卡罗方法学术交流会已于1997年11月在广东湛江成功召开。编者将参与会上交流的部分论文,作为《蒙特卡罗方法及其应用》丛书的第二本,结集正式出版。本书由二十七篇论文组成,内容分为两个部分:理论部分、应用及软件部分。理论部分包括了蒙特卡罗方法基础、伪随机数的产生、已知分布抽样;应用及软件部分覆盖了蒙特卡罗方法的主要应用领域。本书基本上反映了自1993年西安会议以来我国在蒙特卡罗方法研究和应用方面的水平。愿本书能成为蒙特卡罗方法研究和应用的最重要参考书之一。

本书的出版得到了中国原子能科学研究院计算机应用研究所和北京海洋出版社的大力支持,中国原子能科学研究院计算机应用研究所电脑图文中心编辑排版了所有文编,编者在此表示诚挚的感谢。

裴鹿成 王仲奇

1998年4月

会国蒙特卡罗方法专业委员会

中国原子能科学研究院

蒙特卡罗方法研究组

# 目 录

## 理论研究部分

蒙特卡罗方法与随机性问题	裴鹿成(3)
彼得堡悖论与小概率大贡献问题	裴鹿成(10)
二维随机几何模型的蒙特卡罗研究	王仲奇(18)
“智能”型深穿透辐射输运蒙特卡罗模拟	杜凤英等(21)
MC 计算柱通量的指向概率方法	王瑞宏等(24)
非归一分布随机抽样方法研究	程锦荣等(28)
几种新的伪随机数发生器	裴鹿成(34)
离散型非归一分布的舍选抽样方法	程锦荣等(38)
Metropolis 抽样中随机游动步长因子的确定	程锦荣等(40)

## 应用及软件部分

非均匀系统的临界计算	沈雷生等(45)
光子—电子—模—核耦合输运问题的蒙特卡罗模拟	许淑艳等(50)
外部噪声法实现超混沌同步	方锦清等(55)
就地 HPGe 谱仪探测器角响应校正因子的 MC 计算	肖雪夫等(60)
闪光照相 1:1 静态样品的数值模拟	邹志高等(71)
$^6\text{Li}$ 谱仪氟响应函数 M.C. 计算	吴建华等(78)
重水球慢化 $^{252}\text{Cf}$ 刻度装置的谱特征	宁 静等(83)
二维随机摆放过程的计算机模拟	王仲奇(86)
中子- $\gamma$ 耦合输运 Monte Carlo 程序 MCNP 在 PVM 下的并行化	邓 力(88)
略论 MCNP 程序中的蒙特卡罗技巧及其不足	裴鹿成(93)
核燃料后处理临界安全程序 MCFR1.0 介绍	课题组(102)
KENO 程序在临界分析中的应用	薛小刚等(106)
OCTOPUS 燃耗计算程序系统简介	张宝成(113)

MORSE 程序中的 Monte Carlo 技巧扩充 .....	杨锦安等(117)
FAMS - MC 程序中测量修正中的应用 .....	沈冠仁等(122)
CGMC 程序及其中反应堆控制棒均匀化参数计算中的应用 .....	姚 栋等(130)
Monte Carlo 修正程序中使用数据的处理方法 .....	毛孝勇等(133)
CHMCK-Ⅲ:解任意几何临界问题的蒙特卡罗程序 .....	裴鹿成(137)



# 理论研究部分

# 蒙特卡罗方法与随机性问题

裴鹿成

(中国原子能科学研究院)

**摘要** 随着科学技术的迅速发展,越来越复杂的随机性问题被提了出来。一般来讲,对于现代科学技术中所提出来的随机性问题,除极少数情况外,要想给出它的严格解是根本不可能的,用确定性方法给出其近似解也常常是非常困难的,有时甚至也是不可能的。

蒙特卡罗方法以对随机性问题进行仿真为其基本特征<sup>[1-5]</sup>,这就决定了蒙特卡罗方法对于解决随机性问题具有很强的能力。本文给出了4个用蒙特卡罗方法解决随机性问题的实例,目的是想通过这些有趣的实例说明,对于许多用确定性方法所难以解决的随机性问题,用蒙特卡罗方法可以比较方便地解决。

## 1 Gauss 问题

Gauss 于 1812 年写信给 Laplace,提出了如下一个著名问题:在 $(0,1)$ 中任取一数,将它表示成简单连分数,试问其第  $m$  个完全商的小数部分小于  $x(0 < x < 1)$  的概率为多少?

上述 Gauss 问题可以改述成:在 $(0,1)$ 中,任取一数  $a_1$ ,按如下办法确定其后的  $a_2, a_3, \dots, a_m$ :

$$a_{i+1} = \begin{cases} \left\{ \frac{1}{a_i} \right\} & \text{当 } a_i \neq 0 \text{ 时} \\ 0 & \text{当 } a_i = 0 \text{ 时} \end{cases} \quad (1)$$

其中  $\{*\}$  表示取数  $*$  的小数部分,试问  $a_m$  小于  $x$  的概率为多少?

Gauss 问题提出后,直到 1928 年,经过长达 116 年之久,苏联数学家 Кузьмин 才给出了一个渐近结果<sup>[6]</sup>。用  $P_m(x)$  表示  $a_m$  小于  $x$  的概率,Кузьмин 的结果是

$$P_m(x) = \frac{\ln(1+x)}{\ln 2} + O(e^{-\alpha\sqrt{m}}) \quad (2)$$

公式(2)中  $\alpha$  为一正常数。到 1948 年,他又特其中的渐近误差阶改进成  $O(a^m)$ ,  $0 < \alpha < 1$ ,并且指出,这个渐近误差阶不可能再改进了。

为了解决 Gauss 问题,很明显,用蒙特卡罗方法解不仅不会遇到任何困难,而且还非常简单,其主要步骤如下:

(1) 为计算作准备

令  $n=0, P=0$

(2) 确定初值

令  $n=n+1; i=1, a_1 = \xi$  ( $\xi$  为在 $(0,1)$ 上均匀分布的随机数)

(3) 确定下一个值

$a_{i+1}$  由公式(1)确定;令  $i=i+1$

(4) 是否已经确定了  $a_m$



当  $i < m$  时,  $a_m$  尚未确定, 转至步骤(3); 否则,  $a_m$  已经确定。

(5) 记录贡献

$$P = P + \eta(a_m < x) \quad (3)$$

其中  $\eta(*)$  表示条件函数, 当条件  $*$  成立时为 1, 否则为零。

(6) 抽样是否结束

当  $n < N$  时 ( $N$  为样本总数), 抽样尚未结束, 转至步骤(2); 否则, 抽样结束, 进入下一步骤。

(7) 给出计算结果与误差

计算结果为

$$P_m(x) \approx \hat{P}_{m,N}(x) = \frac{P}{N} \quad (4)$$

误差则为<sup>[1,2,4,10]</sup>

$$P(|\hat{P}_{m,N}(x) - P_m(x)|) \leq 1.96 \sqrt{\frac{\hat{P}_{m,N}(x)(1 - \hat{P}_{m,N}(x))}{N - 1}} \approx 0.95 \quad (5)$$

其中  $P(*)$  表示事件  $*$  发生的概率。

进一步比较上述 Кузьмин 方法和蒙特卡罗方法的优缺点。由于前者所给出的实际上只是一个渐近公式, 若根据式(2)用  $\ln(1+x)/\ln 2$  作为所求  $P_m(x)$  的近似, 当  $m$  较小时, 相差可能较大; 当  $m$  较大时, 相差虽然可能较小, 可是, 在 Кузьмин 的结果中只给出了渐近误差的阶, 无法确定误差, 因此, 要想用  $\ln(1+x)/\ln 2$  确定  $P_m(x)$  对于任意  $m$  的值, 除非  $m$  足够大, 是靠不住的。蒙特卡罗方法的情况则完全不是这样, 它可以给  $P_m(x)$  对于任意  $m$  的近似值及其误差估计, 因此, 如果目的仅限于给出关于  $P_m(x)$  的数值结果, 用蒙特卡罗方法计算出来的  $\hat{P}_{m,N}(x)$ , 要比用渐近公式  $\ln(1+x)/\ln 2$  计算出来的更具有实际意义。

## 2 随机徘徊问题

处在  $S$  维空间格点上的质点, 每步向  $2S$  个相邻格点中的任一个移动的机会是均等的。所谓随机徘徊问题是问, 质点返回初给位置的概率  $P(S)$  (简称回返概率) 为多少?

早在 1921 年, Polya 曾用分析的方法确定,  $P(1) = 1, P(2) = 1, P(3) \neq 1$ <sup>[7]</sup>。可是, 大概是由于计算量太大的原因, 直到 1940 年, 事隔 19 年之久, 才由另外两位学者给出了  $P(3)$  的近似值:  $P(3) \approx 0.35$ <sup>[8]</sup>。下面我们来考虑一般的  $S$  维空间的随机徘徊问题。

用  $U_m$  表示质点随机徘徊于第  $m$  步返回初始位置的概率。根据  $U_m$  的定义, 不难看出, 当  $m$  为奇数时,  $U_m = 0$ ; 当  $m$  为偶数时,

$$u_m = \left(\frac{1}{2S}\right)^m \sum_{\substack{l_1 + \dots + l_s = m/2 \\ l_1 \geq 0, \dots, l_s \geq 0}} \frac{m!}{\left(\prod_{i=1}^s l_i!\right)^2} \quad (6)$$

另一方面, 若简单地用  $P$  表示回返概率  $P(S)$ , 则根据回返概率和  $U_m$  的定义, 一定有如下等式成立:

$$\sum_{m=1}^{\infty} u_m = \sum_{m=1}^{\infty} mp^m(1-P) = \frac{P}{1-P} \quad (7)$$

由此方程立即得到关于回返概率  $P$  的解析表达式如下:

$$P = \sum_{m=1}^{\infty} u_m / (1 + \sum_{m=1}^{\infty} u_m) \quad (8)$$

计算回返概率的确定性方法就是,用下式:

$$P_m = \sum_{m=1}^M u_m / (1 + \sum_{m=1}^M u_m) \quad (9)$$

作为  $P$  的近似估计,其中  $M$  是一个足够大的数。

按照随机徘徊问题的基本假设,与上述计算回返概率的确定性方法(9)相对应的,蒙特卡罗方法计算回返概率的详细步骤如下:

(1)为计算作准备

令  $n = 1, R = 0$ .

(2)开始第  $n$  个质点的随机徘徊

令  $m = 1, l_i = 0, i = 1, 2, \dots, 5$

(3)确定质点的新位置

令  $i = [S\xi]$ , 其中  $[*]$  表示取大于数  $*$  的最小整数

$$l_i = \begin{cases} l_i - 1 & \text{当 } |S\xi| \leq 1/2, \\ l_i + 1 & \text{当 } |S\xi| > 1/2. \end{cases}$$

(4)第  $n$  个质点的随机徘徊是否结束

当  $n < M$  时,或

$$\sum_{i=1}^S |l_i| \neq 0 \quad (11)$$

时,第  $n$  个质点的随机徘徊尚未结束,令  $m = m + 1$ ,转至步骤(3);否则,第  $n$  个质点的随机徘徊结束,记录贡献:

$$R = R + \eta \left( \sum_{i=1}^S |l_i| = 0 \right) \quad (12)$$

进入下一步骤。

(5)  $N$  个质点的随机徘徊是否已完成

当  $n < N$  时,  $N$  个质点的随机徘徊尚未完成,令  $n = n + 1$ ,转至步骤(2);否则,  $N$  个质点的随机徘徊已完成,进入下一步骤。

(6)给出计算结果

$$P_M \approx \hat{P}_M = \frac{S}{N} \quad (13)$$

比较解决随机徘徊问题的上述两种不同方法,以  $S = 3$  和  $M = 2000$  为例,在平均每秒可完成 250 万次四则运算的 CYBER170/825 机上计算,确定性方法的情况是,需要计算机 CPU 时间 260.81 分钟(其中所有阶乘计算都采用了节省机时的办法:事先算好  $N!$  存放在数组元素  $F(N)$  中,需要  $N!$  时,直接调用  $F(N)$ ),  $P \approx 0.3341$ ;蒙特卡罗方法的情况是,抽样总数  $N = 100000$ ,需要计算机 CPU 时间 74.43 分钟,  $P \approx 0.3345$ ,误差为 0.002924(置信率为 0.95)。

进一步比较两种方法的计算量与  $M$  的关系。由于式(6)中的取和数与  $M^2$ 同阶,因此,确定性方法(9)式的计算量与  $M^3$ 成正比。至于蒙特卡罗方法的计算量与  $M$  的关系,则很明显,是与  $M$  成正比。于是,为了使上述回返概率的计算结果更精确些,比如进一步取  $M = 20000$ ,即比原来的  $M$  大一个数量级,由确定性方法需要计算机 CPU 时间约 260810 分钟  $\approx$  半年,而蒙特卡罗方法仅需要 744.3 分钟  $\approx$  12.4 小时。显然,后者要比前者更实际一些。尤其是三维以上的随机徘徊问题,情况将更是如此。

### 3 随机误差干扰问题

因素  $x$  之值可由试验者使制,对  $x$  的响应之指标值为  $y$ ,由于有随机误差的干扰, $y$  对  $x$  的依赖关系实际上是

$$y = h(x, \epsilon) \quad (14)$$

其中  $\epsilon$  为随机误差。对于确定的  $y = y^*$  和任意的  $\epsilon$ ,用  $x(\epsilon)$  表示如下方程

$$y^* = h(x, \epsilon) \quad (15)$$

中关于  $x$  的解。所谓随机误差干扰问题是,扰到这样的  $x = x^*$ ,使得随机变量  $x(\epsilon)$  取  $x^*$  的可能性最大。

解决上述随机误差干扰问题存在两大困难。第一个困难是,  $h(x, \epsilon)$  的形式是未知的;第二个困难是,问题中存在随机误差  $\epsilon$  的干扰。

1951 年,Robbins 和 Monro 第一次研究了满足如下条件的随机误差干扰问题<sup>[9]</sup>:随机误差  $\epsilon$  只影响  $y$ ,即  $h(x, \epsilon)$  具有如下形式:

$$h(x, \epsilon) = h(x) + \epsilon \quad (16)$$

$h(x)$  为  $x$  的递增函数,增加速度不快于线性; $\epsilon$  服从均值为零的对称分布。所给出的算法是,对于  $x^*$  的初始近似  $x_1$ ,用下式确定出  $x_M$ :

$$x_{m+1} = x_m + b_m(y_m - y^*), m = 1, 2, \dots, M-1 \quad (17)$$

其中  $y_m$  为当  $x = x_m$  时,  $y$  的响应使;  $b_m > 0$ , 并满足条件

$$\sum_{m=1}^{\infty} b_m = \infty, \quad \sum_{m=1}^{\infty} b_m^2 < \infty \quad (18)$$

当  $M$  足够大时,用  $x_M$  作为  $x^*$  的近似。

用蒙特卡罗方法能否解随机误差干扰问题呢? 为了使这件事是可行的,假设存在与随机误差  $\epsilon$  无关的两个常数  $A$  和  $B$ ,对于任意的  $\epsilon$ ,方程(15)式在  $(A, B)$  上有唯一的根;所要计算的  $x^*$  为随机变量  $x(\epsilon)$  关于  $\epsilon$  的数学期望:

$$x^* = E(x(\epsilon) | \epsilon) \quad (19)$$

由于只要  $x(\epsilon)$  服从正态分布,条件(19)式就一定满足,因此,总的来说,上述条件不仅比 Robbins-Monro 模型的限制条件弱,而且,基本上包括了实际中所可能遇到的大多数问题。

用  $x$  表示在  $(A, B)$  上服从均匀分布的随机变量,根据对  $h(x, \epsilon)$  的值设,不难确定,对于任意的  $\epsilon$  有

$$x(\epsilon) = A + (B - A)E(\eta(g(x, \epsilon) \geq 0 | x)) \quad (20)$$

$$\text{其中: } g(x, \epsilon) = (y^* - h(A, \epsilon))(y^* - h(x, \epsilon)) \quad (21)$$

将式(20)代入到式(19)中,可以进一步得到:

博弈问题的蒙特卡罗方法如下:

(1)为计算作准备

令  $n = 1; x_1 = 0$ 。

(2)开始第  $n$  盘的博弈

令  $i = 0$ 。

(3)进行分牌

令  $i = i + 1$ 。在牌  $K_i, K_{i+1}, \dots, K_{M^2}$  是机会均等地抽出一张  $K_j$  分给编号为 1 的人:

$$j = [(M^2 - i + 1)\xi], l = [\frac{i-1}{M}] \quad (26)$$

将牌  $K_i$  与牌  $K_j$  进行对调,以保证没有发出的牌为  $K_{i+1}, K_{i+2}, \dots, K_{M^2}$ 。

(4)分牌是否结束

当  $i < M^2$  时,分牌尚未结束,转至步骤式(3);否则,分牌结束。

(5)由编号为 1 的人率先抽牌

令  $i = 1$

(6)确定下一抽牌者或结束此盘博弈

令

$$j = [(M + 1)\xi'] - 1 \quad (27)$$

当  $j \neq 0$  时,下一抽牌者为  $i = K_{M(i-1)+j}$ ,重复步骤(6);当  $j = 0$  时,此盘博弈结束。

(7)记录贡献

$$x_1 = x_1 + \eta(i = 1) \quad (28)$$

(8) $N$  次博弈是否已全部完成

当  $n < N$  时, $N$  次博弈尚未全部完成,令  $n = n + 1$ ,转至步骤(2);否则, $N$  次博弈已全部完成。

(9)给出计算结果

$$Q \approx \hat{Q} = \frac{x_1}{N}, \quad C \approx \frac{M\hat{Q} - 1}{M - 1} \quad (29)$$

取  $M = 2, 4, 8, 16; N = 50000$ ,按上述解不公平博弈问题的蒙特卡罗方法,在 Cyber170/825 机上进行了计算,计算结果、误差和所需要的计算机 CPU 时间,列人在表 1 中。从所需计算机时间看,计算上述全部 4 种情况,

表 1 解不公平博弈问题的计算结果

结果类别 $M$	$Q$	$Q$ 的误差	$C$	所需时间(分)
2	0.7140	0.003961	0.4280	0.1615
4	0.4126	0.004315	0.2168	0.5638
8	0.2241	0.003655	0.1133	2.0833
16	0.1166	0.002813	0.0577	7.9833

仅需 11 分钟不到。从计算结果及其误差看,比如有精确结果的  $M = 2$  情况,精确结果为  $Q = 0.7111$ ,蒙特卡罗方法的结果为  $\hat{Q} = 0.7140$ ,符合得相当好。至于其他 3 种情况,蒙特卡罗方法计算结果的误差也都达到了千分之几的水平,应该认为是相当满意的了。结论是,对于不公平博弈问题,蒙特卡罗方法不仅很好地克服了其他确定性方法所遇到的困难,而且,还是一种非常好的方法。

## 5 结束语

随着科学技术的迅速发展,所提出来的随机性问题变得越来越复杂,从而使得蒙特卡罗方法作为一种特殊的数值方法,必将发挥其更大的作用,解决越来越多的确定性方法所难以解决的问题。

## 参考文献

- [1] 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.北京:科学出版社,1980
- [2] 徐钟济.蒙特卡罗方法.上海:上海科学技术出版社,1985
- [3] 裴鹿成.蒙特卡罗法.中国大百科全书,数学卷,471,1988
- [4] 裴鹿成等.计算机随机模拟.长沙:湖南科学技术出版社,1989
- [5] 裴鹿成.蒙特卡罗方法发展的回顾与展望.蒙特卡罗方法及其应用(一).郑州:河南科学技术出版社,1993
- [6] G.B. 格涅坚科.丁寿田译.概率论教程.,北京:人民教育出版社,1956
- [7] G. Polya, Math. Ann., 84, 149, 1921.
- [8] W. H. McCrea and F. J. W. Whipple  
Proceedings of the Royal Society of Edinburgh, 60, 281, 1940
- [9] H. Robbins and S. Monro  
Ann. Math. Statist., 22, 1, 1951

# 彼得堡悖论与小概率大贡献问题

裴鹿成

(中国原子能科学研究院)

**摘要** 彼得堡悖论的产生始于如何使彼得堡赌博公平问题,其所以能成为悖论,是由于它利用了彼得堡赌博中的这样一个要害问题:赌客获胜概率越小的事件其所赢得的卢布越多,即本文所讲的“小概率大贡献”问题。本文的目的是想通过对彼得堡赌博问题的分析与计算看蒙特卡罗方法在解小概率大贡献问题时的困惑,介绍一种析的集团抽样方法,通过计算证实这种方法对解决小概率大贡献问题是非常有前途的。

## 1 彼得堡赌博问题

赌客与赌主二人进行赌博。赌博的规则是,投掷一个金属币直至出现国徽时为止,如果在第一次掷出国徽,则赌主给赌客一个卢布;如果在第二次掷出国徽,则赌主给赌客两个卢布;如果在第三次掷出国徽,则赌主给赌客4个卢布,等等。所谓彼得堡赌博问题走向,在每局赌博开始以前,赌客应交付给赌主多少赌金,赌博才算是公平的?

彼得堡赌博问题是于18世纪提出来的,在科学发展史中不仅非常著名,而且,对概率论的产生与发展有过重要影响。

所谓赌博是公平的,很明显,对于彼得堡赌博而言,比较合适的定义应该是,每局赌博开始前赌客交付给赌主的赌金应等于,在多局赌博中赌客所赢卢布的平均值。按照这种定义方法,有蒙特卡罗方法解彼得堡赌博问题的一般步骤如下:

(1) 开始进行赌博

令  $r = 1$

(2) 投掷金属币

产生随机数  $\xi$ , 当  $\xi < 1/2$  时, 未出现国徽, 转至步骤(3); 否则, 出现国徽, 此局赌博终止, 赌主支付给赌客  $r$  个卢布。

(3) 下次出现国徽时应支付的卢布

令  $r = 2r$

(4) 进入下一次投掷

转至步骤(2)

用  $N$  表示按上述过程进行模拟的总次数;  $r_n$  表示其中对第  $n$  局赌博进行模拟时赌主支付给赌客的卢布, 当  $N$  足够大时, 用

$$\hat{R}_n = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N r_n \quad (1)$$

作为使每局赌博公平赌客应交付给赌主的赌金的近似估计。

## 2 彼得堡悖论

按照彼得堡赌博的规则, 很明显, 在一局赌博中, 赌主支付给赌客卢布的理论平均值应为

$$\sum_{i=1}^{\infty} 2^{i-1} \frac{1}{2^i} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{2} = \infty \quad (2)$$

因此,为了使赌博是公平的,在每局赌博前赌客必须交付给赌主无限多的卢布作为赌金。显然,这一结果是极其荒诞的,任何大脑正常的人都不会作为赌客去参加这种赌博。彼得堡悖论就是,现实中应该存在的公平赌博,但从理论方面分析却无法实现。

为了解决上述彼得堡悖论中所提出来的问题,许多著名学者,如 D. Bernoulli、D'Alambert、Buffon 和 Conderset 等人,都曾先后研究过。直至 19 世纪,乃至 20 世纪,仍然有一些数学家回过头来研究这一问题。

比较值得注意的是 Poisson(1781 ~ 1840)所发表的见解。他提出来的解法的大意是,赌主支付给赌客的卢布到不超过赌主的赌本为度,超过时将支付其全部赌本。可是,由于 Poisson 的这种办法改变了彼得堡赌博中的原规则,因此,实际上并没有真正解决彼得堡悖论中所提出来的问题。

引入公平赌博的新定义如下:用  $R_n$  表示在  $n$  局赌博中赌主支付给赌客的卢布; $e_n$  表示在  $n$  局赌博中赌客交付给赌主的赌金; $P(*)$ 表示其中事件  $*$  发生的概率,如果对于任意的  $\epsilon > 0$ ,满足:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(|\frac{R_n}{e_n} - 1| > \epsilon) = 0 \quad (3)$$

则说这种赌博是公平的。根据这一新的定义,Feller 曾给出了关于  $e_n$  的结果如下:

$$e_n = \frac{n \ln n}{2 \ln 2} \quad (4)$$

$e_n$  的实际意义是什么呢?我们对彼得堡赌博作如下限定:每局赌博赌主支付给赌客的卢布不得超过  $n$ 。于是,当  $n = 2^{i^*}$  时,每局赌博客交付给赌主卢布的理论平均值为

$$\sum_{i=1}^{i^*} 2^{i-1} \frac{1}{2^i} = \sum_{i=1}^{i^*} \frac{1}{2} = \frac{i^*}{2} = \frac{n \ln n}{2 \ln 2} \quad (5)$$

$n$  局赌博中赌客交付给赌主的卢布总共为

$$n \cdot \frac{\ln n}{2 \ln 2} = e_n \quad (6)$$

同 Feller 的结果(4)式完全一样。这一结果表明,如果在  $n$  局赌博前赌客按  $e_n$  交付给赌主赌金,至少对于  $n = 2^{i^*}$  的情况,对赌主总是极其不利的,除非赌主拒绝支付每局赌博中超过  $n$  卢布的那部分。

### 3 解彼得堡赌博问题的蒙特卡罗方法

根据 Feller 的结果(4)式,某赌客去参加一次 100 局的赌博,需要交付给赌主的赌金应该为  $e_{100} = 50 \cdot \ln 100 / \ln 2 \approx 332.2$  卢布。在此情况下,赌博是否是公平的?为了能够比较肯定地回答这一问题,很显然,最好的办法是让赌客去实践(蒙特卡罗方法计算)。每次 100 局共实践了 30 万次,结果是从赌主手中共赢得了 76509 万卢布,同交付给赌主的赌金 9966 万 ( $30 \text{ 万} \times 332.2$ ) 卢布相比,超过了所交赌金的 6.677 倍,因此,按照 Feller 原则参加赌博,难说是公平的。

在上面论述 Feller 的原则并不公平时,实际上是认为,每次 100 局赌博,赌客交付给赌主 2550.3(76509 万/30 万)卢布的赌金是公平的。是不是如此呢?我们回到公平赌博的现实意义上来。很明显,公平的内涵只能是,赌客参加一次赌博,他从赌主手中得到的卢布可能比交付给赌主的赌金多,也可能少,但平均起来应正好等于交付给赌主的赌金。由于上述的 2550.3 卢布正是赌客参加 30 万次赌博中从赌主手中所得卢布的平均值,因此,赌客交付给赌主 2550.3 卢布的赌金,应该说大致上是公平的。如果还说是不公平的,那只能是由于蒙特卡罗计算得到的平均卢布值,还有统计涨落,或者是公平赌博根本不存在。

赌客参加一次 100 局的赌博,按照彼得堡悖论交付给赌主无限多的赌金,当然是荒诞的。按照 Feller 的原则,交付 332.2 卢布的赌金也不合适。那么,为什么用蒙特卡罗计算出来的结果应该相对合理一些呢?关键在于,理论的结果是无限状态的极限情况,是期望值,而现实是有限的,蒙特卡罗计算是根据客观实际对有限次赌博进行模拟的结果,因此,相对要合理一些。

#### 4 小概率大贡献问题

由于本文的主要目的不是研究彼得堡悖论本身,而是想通过彼得堡赌博问题引伸出解小概率大贡献问题时蒙特卡罗方法的困惑,为此,我们暂且抛开赌客在每一局赌博中应交付给赌主的卢布的期望值为无限多的问题,即采用类似于 Poisson 的办法:每局赌博投掷金属币的次数不得超过  $m$  次,如果超过了  $m$  次仍未出现国徽,赌主支付给赌客的卢布一律为  $2^m$  个,即相当于 Poisson 办法中规定赌主的赌本为  $2^m$  个卢布。按照这一新的规则,赌客在每一局赌博开始前应交付给赌主卢布的期望值有限,正好等于:

$$\sum_{i=1}^m 2^{i-1} \frac{1}{2^i} + \sum_{i=m+1}^{\infty} 2^m \frac{1}{2^i} = \frac{m+1}{2} \quad (7)$$

按照这一新的规则,对于不同的  $m$  取值,分别用蒙特卡罗方法进行了计算,其结果(一律模拟 100 万局)列人在表 1 中。分析表 1 中的计算结果,不难发现,从  $m=15$  开始,蒙特卡罗方法结果偏低于真值, $m$  之值越大偏低得越多,偏低最多者多达 25.97 倍。

产生这一现象的根本原因是,对于  $m > 15$  情况,赌客赢得赌主全部赌金的概率仅有  $2^{-15} \approx 3.052 \times 10^{-5}$  以下,虽然这些情况赌客可以赢得卢布高达  $2^{15} = 32768$  以上,但从表 1 中所列“出现国徽时投掷次数最大值”看出,在总计 100 万局的赌博中,竟一次也未发生。因此,用蒙特卡罗方法解彼得堡赌博问题,当  $m$  较大时计算结果偏低的根本原因是,其中的小概率( $1/2^m$ )大贡献( $2^{m-1}$ )情况虽然对赌博的结局至关重要,但却往往不能发生。

用  $m^*$  表示表 1 中出现国徽时投掷次数最大值,既然在此之后的率件根本未发生,那么,在 100 万局的赌博中它的实际理论值应为

$$\sum_{i=1}^{m^*} 2^{i-1} \frac{1}{2^i} = \frac{m^*}{2} \quad (8)$$

因此结果代替表 1 中的“理论值”后,有关结果列人在表 2 中。从表 2 中的结果看出,蒙特卡罗方法的结果相对合理多了。



表 1 计算结果比较

$m$	出现国徽 时投掷次 数最大值	计算结果 理论值	相对误差
1	1	$9.9499E-01$	$1.9671E-03$
2	2	$9.9213E-01$	$1.4132E-03$
3	3	$9.9846E-01$	$1.4611E-03$
4	4	$9.9326E-01$	$1.8611E-03$
5	5	$1.0007E+00$	$2.3880E-03$
6	6	$9.9494E-01$	$3.1335E-03$
7	7	$9.9827E-01$	$3.9995E-03$
8	8	$1.0000E+00$	$5.1386E-03$
9	9	$9.9447E-01$	$6.7097E-03$
10	10	$1.0089E+00$	$8.6599E-03$
15	15	$9.6970E-01$	$3.0540E-02$
20	19	$9.6309E-01$	$1.0307E-01$
25	19	$9.6827E-01$	$1.0337E-01$
30	19	$6.3470E-01$	$1.0427E-01$
35	19	$5.4484E-01$	$1.0411E-01$
40	19	$4.8155E-01$	$1.0307E-01$
45	19	$4.2537E-01$	$1.0372E-01$
50	19	$3.8413E-01$	$1.0337E-01$
60	19	$3.1735E-01$	$1.0427E-01$
70	19	$2.7242E-01$	$1.0411E-01$
80	19	$2.4077E-01$	$1.0307E-01$
90	19	$2.1269E-01$	$1.0372E-01$
100	19	$1.9207E-01$	$1.0337E-01$
200	19	$9.6034E-02$	$1.0337E-01$
300	19	$6.3402E-02$	$1.0438E-01$
400	19	$4.8017E-02$	$1.0337E-01$
500	19	$3.8501E-02$	$1.0313E-01$

## 5 新的集团抽样方法

集团抽样方法是由作者首先提出来的,并给出了有关集团随机变量的严格定义<sup>[1,2]</sup>。在这里我们将给出一种新的集团抽样方法,下面我们将会看到,它明显地优于原集团抽样方法。

为了叙述简单,考虑如下二重积分计算问题:

$$G = \iint g(x, y) f(x, y) dx dy, \quad (9)$$

其中  $f(x, y)$  为随机变量  $x, y$  的分布密度。用  $f(x)$  与  $f(y|x)$  分别表示分布  $f(x, y)$  的边缘分布密度与条件分布密度,则积分  $G$  可以进一步表示成如下形式:

$$G = \int f(x) dx \int f(y|x) dy g(x, y) \quad (10)$$

对于所有  $x$ , 进一步引入任意的正定函数  $I(x)$ 。由于对于任意的  $I(x)$ , 若用  $[\cdot]$  表示取其中数  $\cdot$  的整数部分, 则可以将积分 (10) 进一步写成:

$$G = \int f(x) dx \frac{1}{I(x)} \int_0^1 d\xi \int_{m=1}^{[I(x)+\xi]} f(y_m|x) dy_m g(x, y_m) \quad (11)$$

因此,有

$$G = E(\bar{G}(x'_1, x'_2, \dots, x'_M, x, y) | x'_1, x'_2, \dots, x'_M, x, y) \quad (15)$$

其中

$$\bar{G}(x'_1, x'_2, \dots, x'_M, x, y) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M I(x'_m) \frac{G(x, y)}{I(x)} \quad (16)$$

$x'_1, x'_2, \dots, x'_M$  服从分布  $f(x)$ ;  $x$  服从如下分布:

$$\sum_{m=1}^M \frac{I(x'_m)}{\sum_{m=1}^M I(x'_m)} \delta(x - x'_m) \quad (17)$$

$y$  服从分布  $f(y|x)$ 。计算积分  $G$  的新的集团抽样方法就是用  $\bar{G}(x'_1, x'_2, \dots, x'_M, x, y)$  作为无偏估计。

比较原集团抽样方法与新的集团抽样方法,很明显,前者的优点是,不要像后者那样必须保留全部的  $I(x'_m)$ ,  $m=1, 2, \dots, M$ ; 后者的优点则是其抽样只依赖于  $I(x)$  随  $x$  变化的相对值,而不像前者那样还依赖于  $I(x)$  的绝对值。

## 6 在解小概率大贡献问题中的应用

为了进一步考查新集团抽样方法在解小概率大贡献问题中的作用,仍然以彼得堡赌博为例,看新集团抽样方法是如何对其求解的,通过计算再看它的实际效果如何。

按照彼得堡赌博的规则,引入随机变量  $x$ , 当  $x=0$  时,表示投掷金属币出现字;当  $x=1$  时,表示出现国徽,则很明显,可以将赌客在每一局赌博中赢得的卢布的数学期望表示成如下形式:

$$G = \sum_{i=1}^{\infty} \prod_{j=1}^i \int f(x_1) dx_i g(x_1, x_2, \dots, x_m), \quad (18)$$

其中

$$f(x) = \frac{1}{2} \delta(x) + \frac{1}{2} \delta(x-1) \quad (19)$$

$$g(x_1, \dots, x_m) = \begin{cases} 2^{m^*} & \text{当 } m > m^* \text{ 时} \\ 2^{m^*-1} & \text{当 } m \leq m^* \\ & x_1 = \dots = x_{m-1} = 0 \\ & x_m = 1 \text{ 时} \\ 0 & \text{其他情况} \end{cases} \quad (20)$$

于是,若进一步对每次投掷均取  $I(x)=1$ , 则有新集团抽样方法解彼得堡赌博问题的步骤如下:

(1) 准备

令  $m=0$

(2) 开始进行赌博

令  $m=m+1, S_m=0, n=0$

### (3) 投掷金属币

令  $n = n + 1$ , 对  $n$  局进行第  $m$  次投掷金属币, 即产生随机数  $\xi$ , 当  $\xi < 1/2$  时, 未出现国徽, 进入下一步骤; 否则, 出现国徽,  $s_m = s_m + 1$ 。

### (4) 总共 $N$ 局赌博是否已经完成

当  $n < N$  时,  $N$  局赌博尚未完成, 转至步骤(3); 否则, 进入下一步骤。

### (5) 投掷次数是否已到 $m^*$ 次

当  $m < m^*$  时, 投掷次数尚未到  $m^*$  次, 转至步骤(2); 否则, 赌博结束。

赌客应赢得的卢布为

$$\sum_{m=1}^{m^*} 2^{m-1} \prod_{i=1}^m \frac{S_i}{N} + 2^{m^*} \prod_{i=1}^{m^*+1} \frac{S_i}{N} \quad (21)$$

同解彼得堡赌博问题的一般蒙特卡罗方法一样, 模拟次数也取为 100 万局。用新集团抽样方法计算的结果列入在表 3 中。从表 3 中清楚地看出, 无论  $m$  取值多么大, 其结果都与真值符合得较好, 一般蒙特卡罗方法所存在的  $m$  之值较大, 计算结果偏低与真值越多的现象已不再存在。由于  $m = 500$  时,  $2^{500} \approx 10^{150}$ , 早已是个天文学数字, 概率小到  $10^{-150}$ , 贡献大到  $10^{150}$ , 但计算结果与真值符合得仍然较好, 因此, 用新集团抽样方法解小概率大贡献问题会有广阔前途的。

表 3 计算结果比较

$m$	计算结果 理论值	相对误差
1	$9.9970E-01$	$1.9055E-03$
2	$1.0002E+00$	$2.2838E-03$
3	$9.9997E-01$	$2.8768E-03$
4	$1.0007E+01$	$3.8769E-03$
5	$9.9951E-01$	$6.0864E-03$
30	$9.9636E-01$	$1.0800E-02$
50	$9.9740E-01$	$1.4363E-02$
100	$9.8245E-01$	$2.3755E-02$
200	$9.9115E-01$	$3.5808E-02$
400	$9.6888E-01$	$5.1664E-02$
500	$9.7294E-01$	$6.2973E-02$

## 7 结束语

这里所讲的小概率大贡献问题在现实中普遍存在着, 如著名的“深穿透”计算问题与“管道通量”计算问题, 都属于小概率大贡献计算问题。

深穿透问题属于小概率大贡献问题的理由是, 粒子在远离开源处发生碰撞的概率很小, 可是, 由于此时的粒子正好处于要穿透的地方, 因此, 对穿透概率的贡献却非常之大。蒙特卡罗方法解深穿透问题的计算结果偏低问题早在蒙特卡罗方法开始出现的时候便被提了出来<sup>[3]</sup>, 可是, 直至如今, 除了少数简单情况解决得较好外, 几乎没有什么大的进展<sup>[2,4,5,6]</sup>。

管道通量问题是指, 粒子在一个很大的几何空间迁移与碰撞, 计算粒子通过细小管道离开原所在几何空间的通量。很明显, 管道通量问题同样属于小概率大贡献问题, 即粒子通过管道离开原所在几何空间的可能性极小, 但它却是所要计算的管道通量的全部。目前, 蒙特卡罗方法通用软件甚多, 但是, 却没有一个提供了解管道通量问题的有效的蒙特卡罗技巧。

# 二维随机几何模型的蒙特卡罗研究

王仲奇

(中国原子能科学研究院)

**摘要** 为了理解非规则摆放多体(IDMB)问题和研究随机几何模型,本文设计和选取了几个不同的二维随机几何模型,通过对这些模型的蒙特卡罗研究,有助于我们对 IDMB 问题及其难度的理解。

利用蒙特卡罗方法处理 IDMB 问题,是核工程中提出的实际问题,也是蒙特卡罗方法在几何处理方面遇到的新的理论问题<sup>[1]</sup>。从方法研究的角度出发,我们首先考察下面的二维问题:

在边长为 2 的正方形中,有若干个半径为  $r$  ( $r=0.1, 0.05, 0.01$ ) 的圆(见[2]中图 1)。圆内和圆外分别为两种不同物质。粒子从正方形的一边平行入射,记录其在相对一边的穿透几率。假设圆内物质为 A 物质,圆外为 B 物质,对粒子的宏观总截面分别为  $\Sigma_A$  和  $\Sigma_B$  粒子发生碰撞后,出射方向为各图同性,权重率分别为  $W_A$  和  $W_B$ 。

可以看出这是一个很简单的屏蔽问题,与实际中所提出的临界问题相比较,存在相当大的难度差距,然而我们不妨将其作为研究 IDMB 问题的出发点。

对上述二维 IDMB 问题,我们设计如下模型对其进行处理:

经典模型(C 模型):

前提:了解掌握正方形中每个圆的圆心位置(半径确定相等)<sup>[2]</sup>。

方法:按照常规蒙特卡罗方法进行对粒子输运历史的跟踪。在正方形中,若未进入圆,按 B 物质的宏观总截面  $\Sigma_B$  输运,进入圆后,按 A 物质的宏观总截面  $\Sigma_A$  输运,粒子的权重输运方向的改变,根据碰撞物质分别进行相应处理。

均匀模型(U 模型)

前提:不知道每个圆的具体位置,只知道圆的个数  $n_p$ ,有

$$V_A = n_p \pi r^2 \quad V_B = V - V_A$$

其中  $V$  为正方形的面积,  $V=4$ 。

方法:将 A 物质和 B 物质“打碎并充分均匀混合”,我们认为  $\Sigma_A$  和  $\Sigma_B$  混合的 A、B 物质的宏观截面为

$$\Sigma_M = \frac{V_A \Sigma_A + V_B \Sigma_B}{V}$$

粒子  $\Sigma_M$  以输运,以分枝比

$$b_A = \frac{V_A \Sigma_A}{V_A \Sigma_A + V_B \Sigma_B} \text{ 和 } b_B = \frac{V_B \Sigma_B}{V_A \Sigma_A + V_B \Sigma_B}$$

判断碰撞物质,由此进行相应的权重和输运方向的改变。

随机模型 I (R 模型):

前提:同 U 模型

方法:

(1)首先将正方形中的物质想象或由 A 物质和 B 物质,混合而成的 AB 物质(同 U 模型),粒子同样以  $\Sigma_M$  输出。

(2)根据分板比  $b_A$  判断是否与物质发生碰撞。

(3)若与 A 物质发生碰撞,则认为粒子进入 A 物质,即圆。根据圆的随机厚度<sup>[1]</sup>,确定粒子考虑碰撞在圆内的径迹长度,由此可以“确定”所进入圆的圆心(通常有两个,通过赌选择其一)。

(4)粒子在圆内以  $\Sigma_A$  输运,直至脱离圆或死亡。

(5)粒子离开圆后或没有输入圆,仍以  $\Sigma_M$  输运,直至离开系统或死亡。

(6)权重和方向改变的方法同 U 模型。

随机模型 II (RB 模型)

前提:同 U 模型,增加了对系统边缘和中心处, A 物质所占比例的了解。

方法:同 R 模型,作如下改运

根据分枝比

$$b_c = b_A \cdot r_c \quad b_b = b_A \cdot r_b$$

判断是否进入圆,其中  $r_c$  和  $r_b$  分别为 A 物质在系统中心和边缘处所占的比例。

模拟计算表明,对于某些参数来说,随着  $np$  的增大, R 模型和 C 模型逐渐靠近,(见图 1),这意味着系统中单元个数的增加,以 R 模型为代表的随机几何模型有可能可以替代以 C 模型为代表的经典模型,用以研究真实的 IDMB 问题。

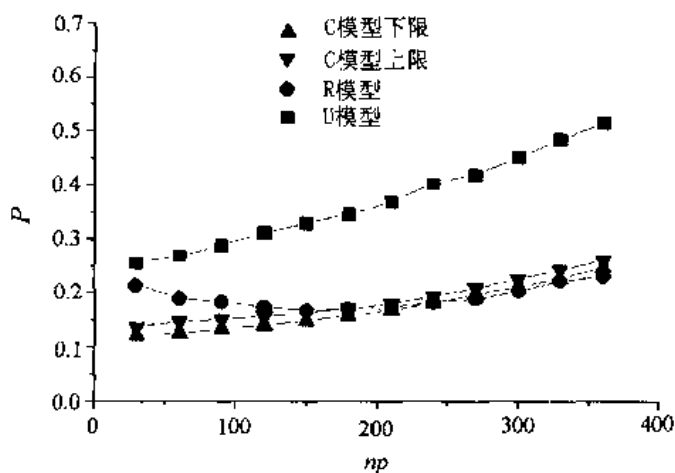


图 1 计算结果

我们从对上述二维随机几何模型的研究,得到以下一些认识,这将有助于随机几何模型的改变和对 IDMB 问题的研究。

(1)我们必须从新的角度上认识 IDMB 问题的误差

在对 C 模型的模拟计算发现,即以对于相同的  $np$ ,尤其是  $np$  不是非常大(相对于系统可容纳的单元数目)时,即  $V_A$  明显小于  $V$  时,系统中单元的排列方式是非常之多的,排列方式的不同会对计算结果带来影响, $np$  越小影响越大。这种影响带来了 C 模型计算结果的涨落,这反映了 IDMB 问题本身的涨落。因此,我们认为对随机几何模型的研究,应该能反映这一本质现象。

(2)在许多情况下,U 模型的结果优于 R 模型。然而均匀模型完全不考虑单元的几何结构,因此我们不可能利用均匀模型来研究单元中含有丰富和物理结构的 IDMB 问题。

(3)我们计算表明,随着  $np$  的增加,RB 模型并不明显优于 R 模型。考虑到 RB 模型需要人为确定两个参数  $r_c$  与  $r_b$ ,因此我们还是倾向于直接 R 模型来尝试研究真实的 IDMB 问题。

我们希望通过非常简单的随机几何模型(R 模型)来研究复杂的 IDMB 问题,对于二维问题的研究给我们带来了信心,也同时向我们表明了问题的难度。我们还要通过对二维问题的系统研究,进一步了解我们提出的随机几何模型在什么范围,和在什么程度解决 IDMB 问题。

作者曾就此问题与许多同志进行讨论,在此对这些同志尤其是对裴鹿成教授、凌玉德教授和杨锦安同志表示感谢。

## 参考文献

- [1] 王仲奇, 颗粒物理随厚度的蒙特卡罗研究, 计算物理, 1997.12. (4~5), 465;
- [2] 王仲奇, 二维随机摆放过程的模型, 本论文集。

表 1 模型 1 中各路径的贡献

$J$	$\Phi(J)$	$\sigma_{\Phi}(J)$	11	12	13
1	$0.358 \times 10^{-9}$	$0.97 \times 10^{-11}$	5	0	0
2	$0.144 \times 10^{-9}$	$0.83 \times 10^{-11}$	5	5	0
3	$0.778 \times 10^{-10}$	$0.50 \times 10^{-11}$	5	5	5
4	$0.426 \times 10^{-10}$	$0.27 \times 10^{-11}$	4	0	0
5	$0.269 \times 10^{-10}$	$0.42 \times 10^{-11}$	4	5	5
6	$0.239 \times 10^{-10}$	$0.48 \times 10^{-11}$	4	5	0
7	$0.952 \times 10^{-11}$	$0.15 \times 10^{-11}$	4	4	0
8	$0.726 \times 10^{-11}$	$0.19 \times 10^{-11}$	4	4	5
9	$0.606 \times 10^{-11}$	$0.19 \times 10^{-11}$	4	4	5
10	$0.431 \times 10^{-11}$	$0.11 \times 10^{-11}$	4	4	5
11	$0.225 \times 10^{-11}$	$0.89 \times 10^{-12}$	3	4	4
12	$0.210 \times 10^{-11}$	$0.76 \times 10^{-12}$	3	5	0

表 2 模型 2 中各路径的贡献

$J$	$\Phi(J)$	$\sigma_{\Phi}(J)$	11	12	13
1	$0.164 \times 10^{-10}$	$0.13 \times 10^{-11}$	4	0	0
2	$0.140 \times 10^{-10}$	$0.85 \times 10^{-12}$	5	0	0
3	$0.136 \times 10^{-10}$	$0.32 \times 10^{-11}$	4	5	0
4	$0.122 \times 10^{-10}$	$0.35 \times 10^{-11}$	4	5	5
5	$0.787 \times 10^{-11}$	$0.52 \times 10^{-12}$	3	0	0
6	$0.681 \times 10^{-11}$	$0.63 \times 10^{-12}$	5	5	0
7	$0.608 \times 10^{-11}$	$0.13 \times 10^{-11}$	4	4	0
8	$0.458 \times 10^{-11}$	$0.14 \times 10^{-12}$	4	4	5
9	$0.445 \times 10^{-11}$	$0.16 \times 10^{-12}$	3	5	0
10	$0.437 \times 10^{-11}$	$0.44 \times 10^{-11}$	5	5	5
11	$0.374 \times 10^{-11}$	$0.14 \times 10^{-11}$	3	5	5
12	$0.349 \times 10^{-11}$	$0.17 \times 10^{-11}$	3	5	0

表 3 表 1 中  $J=1$  到  $J=J_1$  行的  $\Phi(J)$  之和

$J$	1	2	3	4	5	6	7
$\Phi_a(J_1)$	0.499	0.700	0.808	0.868	0.905	0.939	0.952
8	9	10	11	12	13	14	16
$\Phi_a(J_1)$	0.962	0.970	0.976	0.980	0.983	0.988	0.992
$J$	18	20	22	24	30	65	
$\Phi_a(J_1)$	0.995	0.997	0.998	0.999	1.000	1.000	

表 4 表 2 中  $J=1$  到  $J=J_1$  行的  $\Phi(J)$  之和

$J$	1	2	3	4	5	6	7
$\Phi_a(J_1)$	0.141	0.262	0.380	0.485	0.553	0.661	0.663
$J_1$	8	9	10	12	14	16	18
$\Phi_a(J_1)$	0.703	0.741	0.779	0.841	0.892	0.930	0.960
$J$	20	22	24	26	29	33	64
$\Phi_a(J_1)$	0.977	0.985	0.991	0.995	0.999	1.000	1.000

表 5 对应  $k$  条路径的  $dt$  及  $Y$ (模型 1)

$k$	65	15	7
$dt$	240	183	122
$Y(\%)$	100	99	95

表 6 对应  $k$  条路径的  $dt$  及  $Y$ (模型 2)

$k$	64	17	9
$dt$	240	165	81
$Y(\%)$	100	94.6	74

## 参考文献

- [1] E. A. Straker, et al., The MORSE Code - A Multigroup Neutron and Gamma Ray Monte Carlo Transport code, ORNL - 4584(1970).
- [2] MCNP - A general Monte Carlo Code for neutron and photon transport, LA - 7396 - M(1979) Los Alamos National Laboratory Group X - 6
- [3] S. N. Gerner, J. Gonnord, and J. S. Hondricks, Nucl. Sci. Eng., 92, 280, (1986).
- [4] 赵毓武, 杜凤英, 马驰, 屏蔽介质中粒子“重要路径”的自动诊断, 核电子学与探测技术, 1996, 16(2): 264

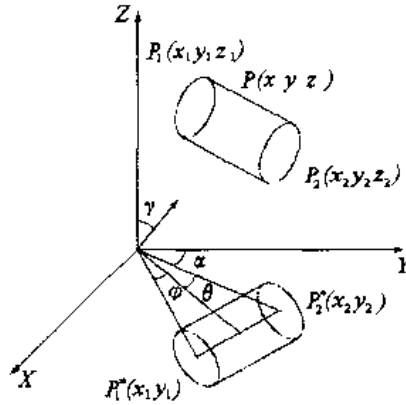


图2 几何示意图

$$x_0 = w'(u'x'_0 + v'y'_0)(1 - w'^2)^{-1/2} - (1 - w'^2)^{1/2} \cdot z'_0 \quad (1)$$

$$y_0 = (1 - w'^2)^{-1/2}(u'y'_0 - v'x'_0) \quad (2)$$

$$z_0 = u'x'_0 + v'y'_0 + w'z'_0 \quad (3)$$

同样  $P_1(x_1, y_1, z_1), P_2(x_2, y_2, z_2)$  以及  $P_1P_2$  所在直线(柱轴)方向余弦  $u, v, w$  可以确定。

$P_1^*(x_1, y_1), P_2^*(x_2, y_2)$  坐标确定后由余弦定理:

$$\cos \varphi = \frac{|OP_1^*|^2 + |OP_2^*|^2 - |P_1^*P_2^*|^2}{2|OP_1^*| \cdot |OP_2^*|} \quad (4)$$

方位角  $\cos \theta$  从  $(\cos \varphi, 1)$  中抽样确定, 精确地讲, 应从于两椭圆相切的切点连线范围内抽样, 同样地在定散射角时, 也应在两端做细致考虑, 这里仅为介绍方法的思想而做此简化。

$$\cos \theta = \cos \varphi + (1 - \cos \varphi) \xi \quad (5)$$

### 3 散射角的确定

1.  $\cos \theta$  从  $(\cos \varphi, 1)$  抽样确定后, 方位角为  $\theta$ , 散射为  $\gamma$  的出射方向所在直线的方程的确定

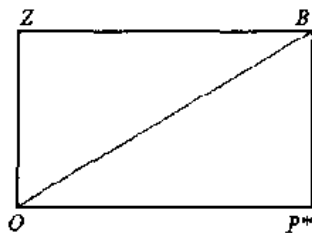


图3 方位角示意图

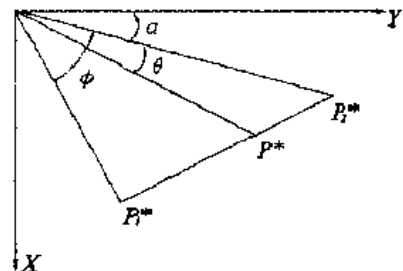


图4 散射角示意图

设  $OP^*$  所在直线方向余弦为  $u^*, v^*, w^*$ , ( $w^* = 0$ ) 则出射方向所在直线的方向余弦为:  $(\cos \gamma \operatorname{tg} \gamma u^*, \cos \gamma \operatorname{tg} \gamma v^*, \cos \gamma)$ ,



$$OB \text{ 直线方程: } \frac{x}{\operatorname{tg} \gamma \cdot u^*} = \frac{y}{\operatorname{tg} \gamma \cdot v^*} = z \quad (6)$$

2. 下面讨论  $OP^*$  所在直线的方向余弦  $U^*, V^*, W^*$  ( $W^* = 0$ ) 的确定:

$$u^* = \sin(\alpha + \theta)$$

$$v^* = \cos(\alpha + \theta)$$

$$w^* = 0$$

$$\text{其中 } \sin \alpha = \frac{y_2}{\sqrt{x_2^2 + y_2^2}}$$

$$\cos \alpha = \frac{x_2}{\sqrt{x_2^2 + y_2^2}}$$

3. 方位角  $\theta$  确定后, 散射角  $\gamma$  的变化范围

为求  $\gamma$  的变化范围, 只需求出射方向直线和探测器所在圆柱相切的条件。

探测器所在圆柱的方程:

$$[v(z - z_0) - w(y - y_0)]^2 + [w(x - x_0) - u(z - z_0)]^2 + [u(y - y_0) - v(x - x_0)]^2 = R^2 \quad (7)$$

将(6)式变为

$$x = \operatorname{tg} \gamma \cdot u^* \cdot z \quad y = \operatorname{tg} \gamma \cdot v^* \cdot z, \text{ 令 } a = \operatorname{tg} \gamma \cdot u^* \quad b = \operatorname{tg} \gamma \cdot v^* \quad (8)$$

将(8)式代入(7)化简得关于  $z$  的一元二次方程

$$\begin{aligned} & (v - wb)^2 z^2 + 2(v - wb)(wy_0 - vz_0)z + (wy_0 - vz_0)^2 \\ & + (wa - u)^2 z^2 + 2(wa - u)(uz_0 - wx_0)z + (uz_0 - wx_0)^2 \\ & + (ub - va)^2 z^2 + 2(ub - va)(vx_0 - uy_0)z + (vx_0 - uy_0)^2 - R^2 = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

令  $\Delta = 0$  得关于  $a, b$  的方程

$$Aa^2 + Bb^2 + Eab + Ca + Db + F = 0 \quad (10)$$

其中  $A, B, C, D, E, F$  可计算求得:

将  $a = \operatorname{tg} \gamma \cdot \sin(\alpha + \theta)$   $b = \operatorname{tg} \gamma \cdot \cos(\alpha + \theta)$  代入(10) 得

$$A_1(\cos \theta, \sin \theta) \operatorname{tg}^2 \gamma + B_1(\cos \theta, \sin \theta) \operatorname{tg} \gamma + C_1 = 0$$

解之得  $\operatorname{tg} \gamma = f_1(\theta)$   $\operatorname{tg} \gamma = f_2(\theta)$

进而可以确定  $\cos \gamma = [f_1(\theta), f_2(\theta)]$  的变化范围。

#### 4 统计概率的积分计算

$$\text{考虑积分 } P = \int_0^\varphi \int_{\gamma_{\min}}^{\gamma_{\max}} P_c(\theta, \gamma) d\gamma d\theta^{[1,2]}$$

不妨设光子在碰撞点发生 Compton 散射, 散射前后能量分别为  $E, E'$

$$x = \frac{E}{E'} \quad x/E = \frac{1}{E'}$$

Compton 散射满足 Klein - Nishina 散射规律, 概率密度函数为

$$f(x/E) = \begin{cases} \frac{1}{K(E)} \left[ \left( \frac{E+1-x}{EX} \right)^2 + \frac{1}{x} - \frac{1}{x^2} + \frac{1}{x^3} \right] & 1 \leq x \leq 1+2E \\ 0 & \text{其它} \end{cases} \quad (11)$$

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

$$u_l \text{ 为散射角余弦 } \cos \gamma \quad u_l = 1 - \frac{1}{E'} + \frac{1}{E} \quad x = E + 1 - E \cos \gamma \quad (12)$$

将(12)代入(11)

$$f(\cos \gamma) = \frac{1}{K(E)} \left\{ \left[1 - \frac{2(E+1)}{E^2}\right] \cdot \frac{1}{E+1-E \cos \gamma} + \left[\left(\frac{E+1}{E}\right)^2 - 1\right] \frac{1}{(E+1-E \cos \gamma)^2} + \frac{1}{(E+1-E \cos \gamma)^3} + \frac{1}{E^2} \right\}$$

这时

$$P = \int_{\cos \varphi}^1 \int_{f_1(\theta)}^{f_2(\theta)} \frac{1}{K(E)} \left[ \frac{C(E)}{a \cos \gamma + b} - \frac{d(E)}{(a \cos \gamma + b)^2} + \frac{1}{(a \cos \gamma + b)^3} + e(E) \right] \frac{-1}{\sin \gamma} d \cos \gamma \cdot \frac{-1}{\sin \theta} d \cos \theta$$

$$a = -E, b = E+1, c(E) = 1 - \frac{2(E+1)}{E^2}$$

其中

$$d(E) = \left(\frac{E+1}{E}\right)^2 - 1, e(E) = \frac{1}{E^2}$$

显然内重积分是可积的,这样就可以变二重积分为单重积分,使数值化处理变得非常简单。

## 5 讨论

尽管可以对圆柱张角进行数值化处理,但这种数值化处理所带来的计算费用的增加,常常不如用非数值化处理方法好,比如当粒子碰撞点远离圆柱到一定程度时,用什么数值化处理方法都不如用非数值化处理方法好,而且随着距离不同差别会很大,下一步将研究随碰撞点距离圆柱不同而不同的处理方法。

## 参考文献

- [1] 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, 北京: 科学出版社, 1980 年
- [2] 裴鹿成等. 计算机随机模拟, 长沙: 湖南科学技术出版社, 1989 年。
- [3] Gardner P. R., Choi H. K., Mickael M., Yacout A. M., Jin Y., and Verghese K., Nucl. Sci. and Eng., 95, 245 (1987)
- [4] Mickal M, Gardner R P. and Verghess K. Nucl. Sci. and Eng., 99: 251 ~ 266 (1998)
- [5] Garder R. P, Mickal M, ornby M, and verghess K. Nucl. sci. and Engg., 108: 240 ~ 246 (1991)
- [6] Gareler R P, Mickal M and Verghess, Nucl. Sci. and Eng., 98: 51 ~ 63 (1988)
- [7] 邓力、蔡少辉、黄正丰、黄捷. 计算物理. 1996. 13 (4)

# 非归一分布随机抽样方法研究\*

程锦荣<sup>1)</sup> 段香梅<sup>2)</sup> 杜爱军<sup>1)</sup>

(<sup>1)</sup>安徽大学物理系,合肥,<sup>2)</sup>中国科学院固体物理研究所,合肥 230031)

**摘要** 通过对非归一分布随机抽样的 Metropolis 方法、期望方法、排队方法和舍选方法的研究,给出了若个新的结论。

**关键词** 非归一分布, Metropolis 抽样方法, 期望抽样方法, 排队抽样方法, 舍选抽样方法。

## 1 引言

物理研究中,不少问题最终常归结为需要计算如下物理系综的平均观察量

$$\langle A \rangle = \frac{\int_{\Omega} A(\vec{x}) \pi(\vec{x}) d\vec{x}}{\int_{\Omega} \pi(\vec{x}) d\vec{x}} \quad (1)$$

式中,  $\vec{x}$  表示相空间  $\Omega$  中的一个点, 或一个状态, 一个位形;  $\pi(\vec{x})$  表示这个物理系综的分布;  $A(\vec{x})$  表示某个微观观察量。

由于(1)式是一个高维积分<sup>[1]</sup>, 通常的数值方法难以完成对物理系综平均观察量  $\langle A \rangle$  计算, 又由于物理系综分布  $\pi(x)$ , 仅满足非负条件而不满足归条件<sup>[1,2]</sup>, 即

$$\begin{cases} \pi(\vec{x}) \geq 0 \\ \int_{\Omega} \pi(\vec{x}) d\vec{x} \neq 1 \end{cases} \quad (2)$$

故采用一般的 Monte Carlo 方法对  $\langle A \rangle$  进行估计, 同样十分困难<sup>[2]</sup>。

由于在物理及其它领域中, 存在着大量的类似问题。因此, 采用有效方法解决由已知非归一分布的随机抽样问题, 就成了计算物理中急需解决的重要课题之一。

解决非归一分布随机抽样问题的第一个方法是由 N. Metropolis 等人于 1953 年给出的<sup>[3]</sup>, 后来人们称之为 Metropolis 方法。由于 Metropolis 方法存在着若干明显的缺点<sup>[2]</sup>, 国内外学者先后提出了 Barker 方法<sup>[4]</sup>、Hastings 方法<sup>[5]</sup>、Heat Bath 方法<sup>[6]</sup>、Pass 方法<sup>[2]</sup>、期望方法<sup>[2]</sup>和排队方法<sup>[2]</sup>等一系列解决非归一分布问题的随机抽样方法。

本文从实际计算的角度, 选择抽样分布、收敛速度、抽样效率、花费 CPU 时间、抽样中进入新状态的样本数目和子样的随机性质等指标, 对非归一分布的 Metropolis 方法、期望方法、排队方法和舍选方法进行了评价。数值计算结果表明, 期望方法和舍选方法明显地优于 Metropolis 方法和排队方法, 且期望方法更适合于抽取大样本, 舍选方法更适合于抽取小样本。

## 2 抽样方法

\* 国家高性能计算基金资助

### 2.1 连续型非归一分布

对于连续型非归一分布  $C(x)$ ,  $a \leq x \leq b$ , 本文引入均匀分布  $f(x) = 1/(b-a)$ ,  $a \leq x \leq b$ , 并采用以下方法分别产生分布  $C(x)$  的子样。

#### 2.1.1 Metropolis 方法

(1) 由分布  $f(x)$  中抽样产生  $x'_0$ , 令  $x_0 = x'_0$ ,  $m = 0$ 。

(2) 对于确定的  $m$  和  $x_m$ , 用以下具有周期边界随机游动方法产生  $x''_{m+1}$

$$x''_{m+1} = x_m + K \cdot \eta_1 \quad (3)$$

其中,  $k = (b-a)/10$ 。

$$x'_{m+1} = \begin{cases} x''_{m+1} + (b-a) & \text{当 } x''_{m+1} < a \\ x''_{m+1} & \text{当 } a \leq x''_{m+1} \leq b \\ x''_{m+1} - (b-a) & \text{当 } x''_{m+1} > b \end{cases} \quad (4)$$

(3) 由  $x'_{m+1}$  确定  $x^{n+1}$ 。当  $\xi > C(x'_{m+1})/C(x_m)$  时,  $x_{m+1} = x_m$ , 否则  $x_{m+1} = x'_{m+1}$

(4)  $m = m+1$ ,  $m < N$  时重复(2), (3);  $m \geq N$  时终止。

#### 2.1.2 期望方法

(1) 由  $f(x)$  中抽样产生  $x'_0$ , 令  $x_0 = x'_0$ ,  $E_0 = C(x'_0)$ ,  $m = 0$ ,  $n = 0$ 。

(2) 对于确定的  $m$ ,  $n$  和  $E_n$ , 由分布  $f(x)$  中抽样产生  $x'_{n+1}$

$$(3) \text{ 令 } \Delta_{n+1} = [(n+1) \frac{C(x'_{n+1})}{E_n} + \xi_2] \quad (5)$$

本文中,  $[*]$  表示取数  $*$  的整数部分。当  $\Delta_{n+1} < 1$  时, 重复(2); 否则, 产生分布  $C(x)$  的  $\Delta_{n+1}$  个样本如下:

$$x_{m+1} = \cdots = x_{m+\Delta_{n+1}} = x'_{n+1}$$

(4) 令  $m = m + \Delta_{n+1}$ ,  $n = n + 1$ ,  $E_{n+1} = E_n + C(x'_{n+1})$ 。  $m < N$  时重复(2)、(3);  $m \geq N$  时终止。

#### 2.1.3 排队方法

(1) 由  $f(x)$  中抽样产生  $x'_0$ , 令  $x_0 = x'_0$ ,  $s = C(x'_0)$ ,  $m = 0$ 。

(2) 对于确定的  $m$  和  $x_m$ , 由  $f(x)$  中抽样产生  $x'_{m+1}$ 。当  $s \leq C(x'_{m+1})$  时,  $x_{m+1} = x'_{m+1}$ ,  $s = C(x'_{m+1}) - s$ ; 否则  $x_{m+1} = x_m$ ,  $s = s - C(x'_{m+1})$

(3) 令  $m = m+1$ ,  $m < N$  时重复(2);  $m \geq N$  时终止。

#### 2.1.4 舍选方法

(1) 令  $M = \max[C(x)]$ ,  $m = 0$ 。

(2) 对于确定的  $m$ , 由分布  $f(x)$  中抽样产生  $x'_m$ 。

(3) 若  $M \cdot \xi_3 \leq C(x'_m)$ ,  $x_m = x'_m$ ; 否则, 重复(2)。

(4) 令  $m = m+1$ 。  $m < N$  时重复(2)、(3);  $m \geq N$  时终止。

### 2.2 离散型非归一分布

对于离散型非归一分布  $C(x_i) = \{C_i, x_i = x_1, x_2, \cdots, x_I\}$ , 本文引入离散型归一分布  $f(x_i) = \{1/I, x_i = x_1, x_2, \cdots, x_I\}$ , 并采用以下方法分别产生分布  $C(x_i)$  的子样。

#### 2.2.1 Metropolis 方法

(1) 令  $u_1 = x_1, u_2 = x_2, \cdots, u_I = x_I$

(2)由  $f(x_i)$  中抽样产生  $x'_0$ ;若  $u_{i-1} < x'_0 \leq u_i$ , 令  $x_0 = x'_0, l = i, m = 0$

(3)对于确定的  $i$  和  $m$ ,按以下方法产生  $x'_{m+1}$

$$n' = [i + k' \cdot \eta_2] \quad (6)$$

其中,  $k' = 1/5$ .

$$n = \begin{cases} n' + I & \text{当 } n' < 1 \\ n' & \text{当 } I \leq n' \leq I \\ n' - I & \text{当 } n' > I \end{cases} \quad (7)$$

$$x'_{m+1} = u_n \quad (8)$$

由  $x'_{m+1}$  确定  $x_{m+1}$ . 当  $\xi_4 > C(x'_{m+1})/C(x_m)$  时,  $x_{m+1} = x_m$ ; 否则  $x_{m+1} = x'_{m+1}, l = n$ .

令  $m = m + 1, m < N$  时重复(4);  $m \geq N$  时终止。

### 2.2.2 期望方法

(1)由  $f(x)$  中抽样产生  $x'_0$ , 令  $x_0 = x'_0, E_0 = C(x'_0), m = 0, n = 0$ .

(2)对于确定的  $m, n$  和  $E_n$ , 由  $f(x_i)$  中抽样产生  $x'_{n+1}$ .

(3)令  $\Delta_{n+1} = [(n+1) \frac{C(x'_{n+1})}{E_n} + \xi_5]$ . 当  $\Delta_{n+1} < 1$  时, 重复(2); 否则, 产生分布  $C(x_i)$

的  $\Delta_{n+1}$  个样本如下:

$$x_{m+1} = \cdots = x_{m+\Delta_{n+1}} = x'_{n+1}$$

令  $m = m + \Delta_{n+1}, n = n + 1, E_{n+1} = E_n + C(x'_{n+1})$ .  $m < N$  时重复、 $m \geq N$  时终止。

### 2.2.3 排队方法

(1)由  $f(x_i)$  中抽样产生  $x'_0$ , 令  $x_0 = x'_0, s = C(x'_0), m = 0$ .

(2)对于确定的  $m$  和  $x_m$ , 由  $f(x_i)$  中抽样产生  $x'_{m+1}$ , 当  $s \leq C(x'_{m+1})$  时,  $x_{m+1} = x'_{m+1}$ ,  $s = C(x'_{m+1}) - s$ ; 否则,  $x_{m+1} = x_m, s = s - C(x'_{m+1})$ .

(3)令  $m = m + 1, m < N$  时重复(2);  $m \geq N$  时终止.

### 2.2.4 舍选方法

(1)令  $M' = \max[C(x_i)], m = 0$ .

(2)对于确定的  $m$ , 由分布  $f(x_i)$  中抽样产生  $x'_m$ .

(3)若  $M' \cdot \xi_6 \leq C(x'_m)$ ,  $x_m = x'_m$ ; 否则, 重复(2).

(4)令  $m = m + 1, m < N$  时重复(2)、(3);  $m \geq N$  时终止.

其中,  $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4, \xi_5, \xi_6$  均为  $(0, 1)$  区间上均匀分布的随机数;  $\eta_1, \eta_2$  均为  $(-1, 1)$  区间上均匀分布的随机变数。

## 3 结果与分析

(1)采用上述 4 种各具代表性的抽样方法, 分别产生非归一分布  $C_k (k = 1, 2, \cdots, 8)$  不同容量的子样, 部分计算结果分别如图 1、图 2 和表 1、表 2 所示。其中

$$C_1(x) = e^{-x^2/2}, \quad -5 \leq x \leq 5$$

$$C_2(x, y) = e^{-(x^2+y^2)/2}, \quad -5 \leq x, y \leq 5$$

$$C_3(x) = 10^{-x}, \quad 0 \leq x \leq 3$$

$$C_4(x, y) = 10^{-x-y}, \quad 0 \leq x, y \leq 3$$

$$C_5(i) = \{10^{-0.06i}, i = 1, 2, \dots, 100\}$$

$$C_6(i, j) = \{10^{-0.15(i+j)}, i, j = 1, 2, \dots, 20\}$$

$$C_7(w) = \frac{w(a-w)}{(2a-w)^2} - \frac{2a(a-w)^2}{(2a-w)^3} \ln \frac{a-w}{a} + \frac{2a-w}{w} + \frac{2a(a-w)}{w^2} \ln \frac{a-w}{a}$$

$$0 \leq w \leq a, a = 511 \text{keV}$$

$$C^3(\alpha, \beta, \gamma) = ((1 - \cos \alpha)^2 + (1 - \cos \beta)^2 + (1 - \cos \gamma)^2) \cdot \frac{\sin \alpha \cdot \sin \beta \cdot \sin \gamma}{(\sin \alpha + \sin \beta + \sin \gamma)^3}$$

$$0 < \alpha < \pi, 0 < \beta < \pi, 0 < \gamma < \pi, \alpha + \beta + \gamma = 2\pi$$

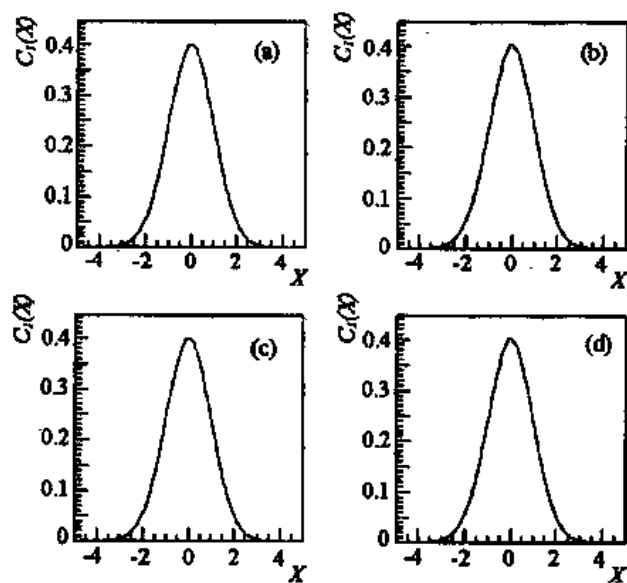


图1  $C_1(x)$ 的分抽样分布

(a) 舍选方法, (b) Metropolis方法, (c) 期望方法, (d) 排队方法

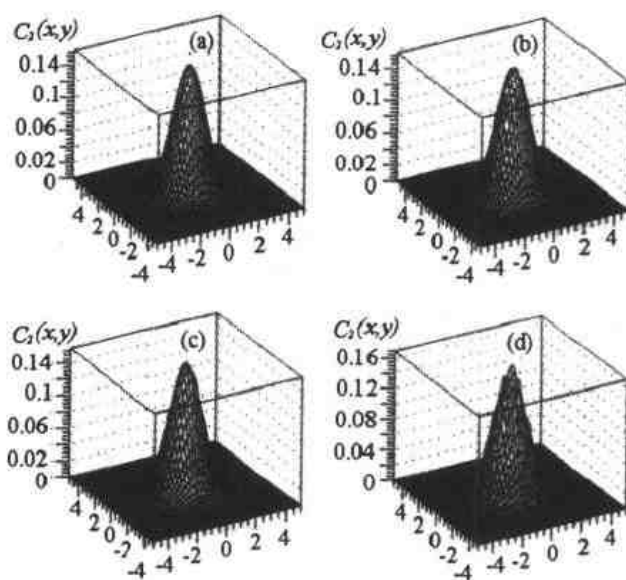


图2  $C_2(x, y)$ 的抽样分布

(a) 舍选方法, (b) Metropolis方法, (c) 期望方法, (d) 排队方法

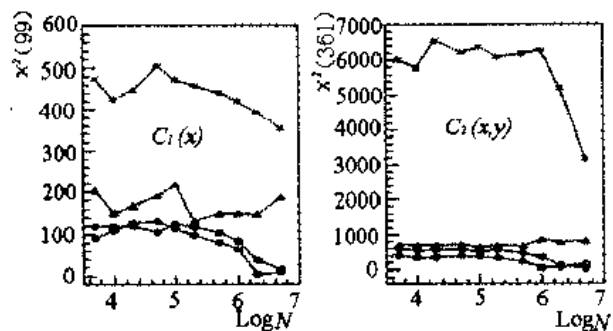


图3 拟合性  $\chi^2$  检验

○ 舍选方法,  $\triangle$  Metropolis 方法,  $\bullet$  期望方法,  $*$  排队方法

表1 部分抽样结果统计

抽 样 方 法	进入新状态数目(%)		抽样效率(%)		抽样费用(相对值)	
	$C_1(x)$	$C_2(x,y)$	$C_1(x)$	$C_2(x,y)$	$C_1(x)$	$C_2(x,y)$
舍选方法	100	100	25.0	6.3	1	1
期望方法	84.7	78.8	37.6	14.8	0.81	0.48
Metropolis 方法	80.4	70.5	100	100	0.63	0.14
排队方法	32.0	12.6	100	100	0.58	1.13

表2  $C_2(x,y)$ 的容量为  $10^6$  的样子中的连长与连数统计

期望方法		Metropolis 方法		排 队 方 法		排 队 方 法		排 队 方 法	
连长	连数	连长	连数	连长	连数	连长	连数	连长	连数
1	587793	1	497441	1	17294	25	729	49	19
2	187688	2	145667	2	14236	26	644	50	15
3	12277	3	43028	3	11930	27	509	51	25
		4	12850	4	10242	28	478	52	9
		5	3815	5	8913	29	379	53	11
		6	1225	6	7734	30	343	54	12
		7	405	7	6676	31	282	55	12
		9	39	9	5175	33	243	57	7
		10	9	10	4454	34	198	58	6
		11	4	11	3982	35	171	59	9
		12	1	12	3515	36	129	60	4
				13	3004	37	129	61	2
				14	2747	38	111	62	2
				15	2489	39	91	64	5
				16	2181	40	87	65	1
				17	1913	41	72	67	3
				18	1640	42	66	68	3
				19	1475	43	54	69	2
				20	1264	44	48	70	1
				21	1097	45	41	72	1
				22	991	46	43	74	1
				23	880	47	26	87	1
				24	771	48	24		

(2)抽样结果表明,用期望方法和舍选方法得到的关于  $C_K$  ( $K=1,2,\cdots 8$ ) 的抽样分布与原分布的差异明显地小于 Metropolis 方法和排队方法,前者的收敛速度亦明显地快于后者。

(3)本文定义连续抽取同一样本值的样本数为一个连长。抽样中,先给  $NA$  数组中的所有元素赋零。对于 Metropolis 方法和排队方法,令  $l=1$ ;若样本点滞留在原状态(取同一样本值), $l=l+1$ ;若样本点进入新状态(取不同样本值), $NA(l)=NA(l)+1, l=1$ 。对于期望方法,当  $\Delta_{n+1} \geq 1$  时,令  $NA(\Delta_{n+1})=NA(\Delta_{n+1})+1$ 。其中, $l$  和  $\Delta_{n+1}$  为连长, $NA(l)$  和  $NA(\Delta_{n+1})$  为相应的连数。当抽样次数为  $10^6$  时,在期望方法、Metropolis 方法和排队方法所产生的分布  $C_K(K=1,2,\cdots,8)$  的子样中,连长的最大值分别为:6,101,125;连长等于 1 的连数分别为: $(5.5 \sim 6.9) \times 10^5$ ,  $(2.9 \sim 6.6) \times 10^5$ ,  $(1.7 \sim 9.7) \times 10^4$ 。因为,连长越长,长连的数目越多,子样的随机性质越差。所以,就子样的随机性质而言,期望方法明显地优于 Metropolis 方法和排队方法。

(4)用舍选方法、期望方法、Metropolis 方法和排队方法产生分布  $C_K(K=1,2,\cdots,8)$  的子样,抽样中进入新状态的样本数目分别占:100%, (73~85)%, (46~80)%, (12~32)%。显然,抽样中进入新状态的样本数目越多,即每次抽得不同于前一次样本值的次数越多,子样的随机性质越好。从这个意义上说,期望方法同样优于 Metropolis 方法和排队方法。

(5)舍选方法和期望方法的抽样效率依次低于 Metropolis 方法和排队方法,产生同一分布相同容量的子样,前者的费用(CPU 时间)依次高于后者。但是,随着计算机运行速度的提高,费用问题已不再特别突出。例如,在 586 计算机上产生分布  $C_K(K=1,2,\cdots,8)$  的容量为  $10^6$  的子样,所花费的 CPU 时间均不超过 30 分钟。

(6)以上结果表明,对于非归一分布的随机抽样,期望方法和舍选方法明显地优于 Metropolis 方法和排队方法,而且,期望方法更适合于抽取大样本,舍选方法更适合于抽取小样本。

## 参考文献

- [1] 张孝泽. 蒙特卡罗方法在统计物理中的应用. 郑州:河南科学技术出版社,1991
- [2] 裴鹿成等. 计算机随机模拟. 长沙:湖南科学技术出版社,1989
- [3] Metropolis N et al. Equation of State Calculation by Fast Computing Machines. J. Chem. Phys., 1953, 21: 1087.
- [4] Barker A. Monte Carlo Calculations of the Radial Distribution Functions for a Proton-electron Plasma. Aust. J. Phys., 1965, 18: 119
- [5] Hastings W. Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and their Applications. Biometrika, 1970, 57: 97
- [6] Creutz M. Monte Carlo Study of Quantized SU(2) Gauge Theories. Phys. Rev., 1980, D21: 2308



# 几种新的伪随机数发生器

裴鹿成

(中国原子能科学研究院)

**摘要** 本文用 FORTRAN 语言编制了可直接供计算机上使用的七种标量伪随机数发生器,其中三种是用 Tausworthe 方法设计的,四种是用组合方法设计的,目的是希望能尽快地用这些伪随机发生器替代陈旧的用 Lehmer 方法(线性同余方法)设计的伪随机数发生器。本文同时还给出了六种向量伪随机数发生器,目的是想解决向量蒙特卡罗方法对向量伪随机数发生器的需要。

## 1 产生伪随机数的 Lehmer 方法

目前,各种计算机中提供给用户使用的伪随机数发生器,采用 Lehmer 提出来的线性同余方法<sup>[1]</sup>者最为普遍。

对于任意的正整数初值  $x_1$ ,用如下递推公式:

$$x_{m+1} = Ax_m \pmod{M}, \quad (1)$$

可以进一步得到  $x_2, x_3, \dots$ , 其中的乘子  $A$  和同余模  $M$  均为任意正整数。所谓线性同余方法就是,用下式获得所需要的伪随机数:

$$\xi_m = x_m/M, m = 1, 2, \dots \quad (2)$$

由于线性同余方法具有许多优点,主要是运算简单和便于在计算机上实现,使得直到今日它仍在作为产生伪随机数的主导方法被广泛使用着。线性同余方法存在的最大问题是,由它所产生的伪随机数存在着很强的相关性,早在 1968 年, Marsaglia 就曾经提出过<sup>[2]</sup>,用线性同余方法产生的伪随机数,由它所组成的  $K$  乘空间上的点:

$$P_n = (\xi_n, \dots, \xi_{n+K-1}), n = 1, 2, \dots \quad (3)$$

无论乘子与初值如何,一个可以找到个数不多于  $(K!M)^{1/K}$  的在  $K$  维空间上彼此要平行的平面:

$$C_0 + C_1x_1 + C_2x_2 + \dots + C_Kx_K = 0 \quad (4)$$

使所有的点(3)余部落在这些平面上。由于线性同余方法存在这一缺点,使得直至今日仍然有人在研究可替代它的新的产生伪随机数的方法。

## 2 Tausworthe 伪随机数发生器

用  $r$  和  $s$  表示满足条件  $0 < r < s$  的任意两个整数;  $F_2$  表示只含 0 和 1 的二元有限域。在  $\beta_i \in F_2, i = 1, 2, \dots, s$  确定的情况下,用如下递推公式:

$$\beta_{s+i} = \beta_i + \beta_{r+i} \pmod{2} \quad (5)$$

可以进一步得到  $\beta_i \in F_2, i = s+1, s+2, \dots$ 。获得 Tausworthe 伪随机数  $\xi_1, \xi_2, \dots$  的一种最简便的方法如下:

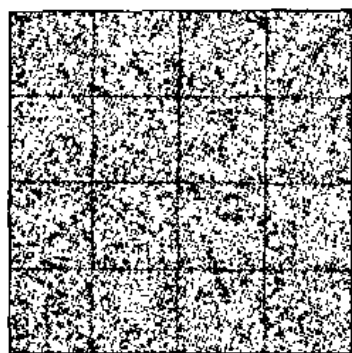


图1 分布图

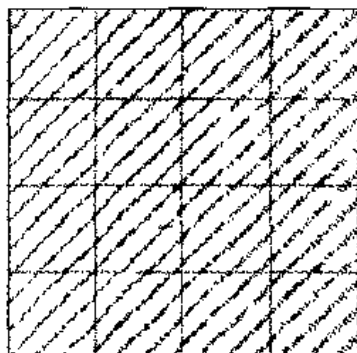


图2 分布图

组合方法的另一个优点是,为打乱原伪随机数的相关性所增加的计算量并不大,具体情况如下(微机 486,主频 66MHz):

原伪随机数发生器	109 秒/10 亿
RAN-C1 发生器	115 秒/10 亿
RAN-C2 发生器	121 秒/10 亿
RAN-C3 发和器	110 秒/10 亿
RAN-C4 发生器	117 秒/10 亿

具有素数模的线性同余方法发生器 RAN-M1 的速度为 275 秒/10 亿,比上述 4 种组合伪随机数发生器平均慢了 138%。

#### 4 向量伪随机数发生器

产生优良的伪随机数是实现蒙特卡罗计算的基础,产生优良的向量伪随机数则是实现向量蒙特卡罗计算的基础,因此,研究给出优良的向量伪随机数发生器十分重要。

本文用 NDP—FORTRAN 语言设计给出了 6 种向量伪随机数发生器,依次如下:RAN-V1, RAN-V2, RAN-V3, RAN-V4, RAN-V5, RAN-V6。

其中第一种发生器是严格按照产生伪随机数的线性同余方法实现的。详细地讲,若用线性同余方法产生的伪随机数列为  $\xi_1, \xi_2, \dots$ , 则用此向量伪随机数发生器产生的  $S$  阶向量一定是  $(\xi_s, \xi_{s+1}, \dots, \xi_{2s-1}), (\xi_{2s}, \xi_{2s+1}, \dots, \xi_{3s-1}), \dots$ , 相当于各自舍弃了它们自己的种子。第二种发生器是严格按照产生伪随机数的组合方法实现的,具有与第一种发生器完全相同的特点。第二至第六种发生器的依据都是,产生伪随机数的 Tausworthe 方法,其每一二进制位取 0 或 1 的机会是均等的,而且具有很好的独立性,在其周期内取遍所有的可能依。具体的办法是,用随机方法确定 Tausworthe 方法的初值,然后再按 Tausworthe 方法的一般准则实现。

对于上述 6 种发生器所产生的伪随机向量分别进行了二维分布点的图形检验,其中向量阶与两个分量的确定都是任意的,均获得了满意的结果。为了进一步测试这六种发生器的速度,专门将它们移植到了具有向量运算能力的 CONVEX C—120 计算机上。由于该机的 FORTRAN 语言在进行向量比过程中不允许于循环语句中出现任何形式的嵌套现象,因此,对它们验做了有关编译系统的适应性变动外,还改变了其中的嵌套语句,修改后的速度情况依次如下(CONVEX C—120 计算机主频为 28MHz,向量硬件最大维数为 128):

秒 / 兆 发生器	向量 指数	1	50	100	128
	RAN-V1	29.14	75.24	125.67	154.65
	RAN-V2	28.20	99.61	170.66	212.09
	RAN-V3	34.86	126.73	215.89	267.27
	RAN-V4	34.81	149.13	257.65	324.32
	RAN-V5	30.10	135.41	230.64	285.81
	RAN-V6	36.77	86.73	144.51	168.73

6 种发生器的周期依次为

RAN-V1	$2^{29}$
RAN-V2	$2^{31}$
RAN-V3	$(2^{124} - 1)/31$
RAN-V4	$(2^{129} - 1)/31$
RAN-V5	$(2^{31} - 1)/31$
RAN-V6	$(2^{127} - 1)/31$

本文推荐的向量伪随机数发生器是 RAN-V3 和 RAN-V4.

测试向量伪随机数发生器的速度是在桑鑫增研究员帮助下完成的,谨致谢意。

### 参考文献

- [1] D. H. Lehmer. Ann. Comp. Lab. Harvard Univ. 26, 141(1951).
- [2] G. Marsaglia. Proc. Nat. Acad. Sci. 60, 25(1968).
- [3] R. C. Tausworthe. Math. Comp. 19, 201(1965).

# 离散型非归一分布的舍选抽样方法\*

程锦荣

段香梅

(安徽大学物理系,合肥 230039)

(中国科学院固体物理研究所,合肥 230031)

张子平

(中国科学技术大学近代物理系,合肥 230026)

**摘要** 本文给出了离散型非归一分布的舍选抽样方法。实际例子的计算结果表明,这是一种较为理想和有效的方法。

**关键词** 离散型非归一分布,舍选抽样方法,拟合性检验

## 1 引言

由 Von Neumann 提出的舍选方法是一种经典的独立抽样方法<sup>[1]</sup>。只要所用的随机数满足均匀且相互独立的要求,那么由它所产生的简单子样,一定相互独立并具有相同的总体分布。对于连续型分布的随机抽样,舍选方法通常是十分有效的。因此,当用其他抽样方法产生连续型分布的子样有困难时,人们总是采用舍选方法。

对于离散型归一分布

$$F(x) = \sum_{x_i \leq x} P_i$$

一般采用直接抽样方法,即

$$x_F = x_n, \text{ 当 } \sum_{i=1}^{n-1} P_i < \xi \leq \sum_{i=1}^n P_i$$

其中,  $x_1, x_2, \dots$  为离散型随机变量  $x$  的跳跃点,  $P_1, P_2, \dots$  为相应的概率,  $\xi$  为  $(0, 1)$  区间上均匀分布的随机数。

然而,对于离散型非归一分布  $C(x_i) = \{C_i, x_i = x_1, x_2, \dots, x_l\}$ , 当  $l$  是一个相当大的整数时,由于计算归一因子  $1/\sum_{i=1}^l C_i$  非常困难,一般不宜采用直接抽样方法。为此,本文给出一种离散型非归一分布的舍选抽样方法。

## 2 离散型非归一分布的舍选抽样方法

离散型非归一分布的一般形式为

$$F(x) = M \cdot \sum_{x_i \leq x} C_i, \quad x_i = x_1, x_2, \dots, x_l$$

式中,  $0 < C_i < 1$ ,  $x_i$  为随机变量  $x$  的跳跃点,  $M$  为未知的归一化常数。

对此分布的舍选方法如下:

(1) 令  $m = 0, M' = \max(C_i)$

(2) 对于确定的  $m$ , 用直接抽样方法由分布  $f(x_i) = \left\{ \frac{1}{l}, x_i = x_1, x_2, \dots, x_l \right\}$  中产生  $x'_m$

\* 国家高性能计算基金资助

# Metropolis 抽样中随机游动步长因子的确定\*

程锦荣<sup>1)</sup> 段香梅<sup>2)</sup> 杜爱军<sup>1)</sup>

(<sup>1)</sup>安徽大学物理系,合肥 230039, <sup>(2)</sup>中国科学院固体物理研究所,合肥 230031)

**摘要** 本文给出了一种快速确定 Metropolis 抽样中随机游动步长因子最佳值的方法。实际例子的计算结果表明,这是一种简单、正确和有效的方法。

**关键词** Metropolis 方法,随机游动,步长因子

## 1 引言

著名的 Metropolis 方法是解决非归一分布随机抽样问题的一种经典方法<sup>[1]</sup>。该方法存在一些明显的缺点<sup>[2]</sup>,但至今仍在被广泛地应用<sup>[3-5]</sup>。

对于连续型非归一分布  $C(x)$ ,  $a \leq x \leq b$ , Metropolis 方法的抽样步骤为

- (1)由任意的归一分布  $C_0(x)$ ,  $a \leq x \leq b$  中抽样产生  $x'_0$ , 令  $x_0 = x'_0$ ,  $m = 0$ .
- (2)对于确定的  $m$  和  $x_m$ , 用以下具有周期边界的随机游动方法产生  $x'_{m+1}$

$$x''_{m+1} = x_m + k \cdot \eta$$
$$x'_{m+1} = \begin{cases} x''_{m+1} + (b - a) & \text{当 } x''_{m+1} < a, \\ x''_{m+1} & \text{当 } a \leq x''_{m+1} \leq b, \\ x''_{m+1} - (b - a) & \text{当 } x''_{m+1} > b. \end{cases}$$

- (3)由  $x'_{m+1}$  确定  $x_{m+1}$ 。当  $\xi > C(x'_{m+1})/C(x_m)$  时,  $x_{m+1} = x_m$ , 否则  $x_{m+1} = x'_{m+1}$ .
- (4)令  $m = m + 1$ 。当  $m < N$  时重复(2)、(3),  $m \geq N$  时终止。

其中,  $\xi$  为(0,1)区间上均匀分布的随机数,  $\eta$  为(-1,1)区间上均匀分布的随机变数,  $k$  为随机游动的步长因子。

众所周知, Metropolis 迭代抽样过程中, 随机游动步长因子  $k$  的取值对抽样结果的影响十分显著。若选取不当, 可引起很大的统计涨落, 甚至得不到预期的结果。因此, 人们一直在寻找一种能够快速而准确地选取最佳  $k$  值的方法。

## 2 最佳 $k$ 值的选取

为选取能值抽样结果的统计涨落达到最小的  $k$  值, 本文对  $k - x^2$  关系进行了仔细的研究。我们得到的部分研究结果如图 1 所示, 其中  $x^2 = \sum_{i=1}^I \frac{(n_i - N \cdot P_i)^2}{N \cdot P_i}$ ,  $I = 100$  为按等概率原则划分的子区间数目,  $N = 10^5$  为总的抽样次数,  $n_i$  为样本点落入第  $i$  个子区间内的实际频数,  $P_i = \frac{1}{I}$  为样本点落入第  $i$  个子区间内的概率。

\* 国家高性能计算基金资助

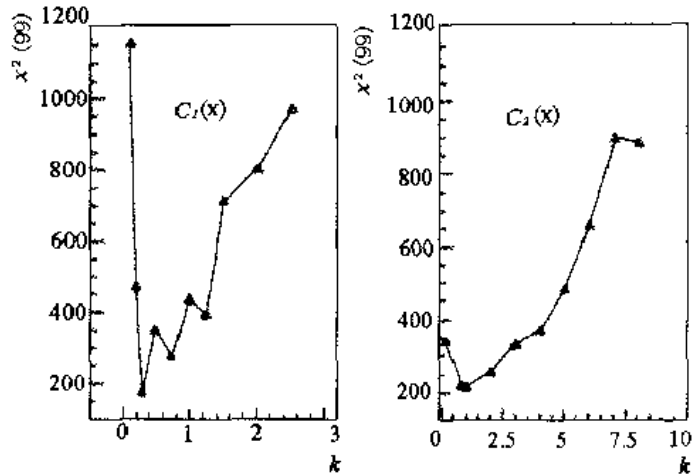


图1  $k-x^2$  关系曲线

由图1可见,欲使  $x^2$  值最小,  $k$  值应取随机变量  $x$  定义区间长度  $L$  的  $\frac{1}{10}$ . 如对分布  $C_1(x) = 10^{-x}, 0 \leq x \leq 3, L = 3, k$  的最佳值为 0.3. 对分布  $C_2(x) = e^{-x^2/2}, -5 \leq x \leq 5, L = 10, k$  的最佳值为 1. 对其他几种连续型非归一分布的研究结果,也都基本符合这一规律。

图2绘出了  $k$  取不同值时,用 Metropolis 方法得到的关于  $C_1(x)$  和  $C_2(x)$  的抽样分布曲线,抽样次数为  $10^6$ . 由图可见,当  $k = \frac{L}{10}$  时,抽样得到的分布曲线与  $C_1(x)$  和  $C_2(x)$  理论曲线符合得最好,表明本文给出的确定最佳  $k$  值的方法是切实可行的。

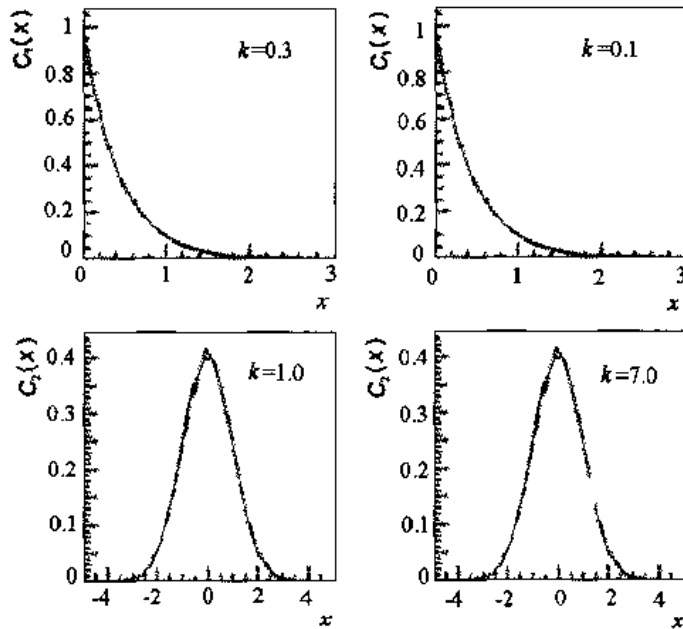


图2 抽样分布曲线与理论分布曲线

实线 理论分布曲线,虚线 抽样分布曲线

### 3 结论

对于连续型非归一分布,可以随机变量定义区间长度的十分之一作为 Metropolis 抽样中随机游动步长因子  $k$  的初始试探值(对于离散型非归一分布,  $k$  取其跳跃点总数的五分之一),然后令  $k$  在该值附近略作几次变化,以统计涨落最小作为选  $k$  的标准。大量实际例子的计算结果表明,这是一种简单、快速和有效的方法。

### 参考文献

- [1] Metropolis N et al. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. J. Chem. Phys., 1953, 21: 1087.
- [2] 裴鹿成等. 计算机随机模拟. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1989.
- [3] Binder K (ed.). Monte Carlo Methods in Statistical Physics. New York: Springer - Verlag, Berlin Heideberg, 1979, 1986.
- [4] Binder K (ed.). Applications of The Monte Carlo Method in Statistical Physics. New York: Springer - Verlag, Berlin Heideberg, 1984, 1987.
- [5] 张孝泽. 蒙特卡罗方法在统计物理中的应用. 郑州: 河南科学技术出版社, 1991.



# 应用及软件部分





# 非均匀系统的临界计算

沈雷生 薛小刚 傅学东 阮可强

(中国原子能科学研究院)

**摘要** 溶解、沉淀等工艺过程中,非均匀系统的临界计算是较难算准的问题,用常规的一些计算方法所得结果偏差较大。本文用 MCNP 蒙特卡罗程序对一系列非均匀系统的基准实验进行了计算分析,取得了较好的结果,表明点截面蒙特卡罗方法是处理这类问题的有效途径。

**关键词** 非均匀系统 临界计算 点截面蒙特卡罗方法

## 1 引言

溶解、沉淀等工艺过程中,裂变材料的分布随过程的进展而变化。在溶解过程中,初态时裂变材料以固态存在于溶剂中,溶解结束后,形成溶液系统,对应于初、末这两种状态,有关的实验数据较多,而且计算方法也较为成熟。但在溶解过程的中间阶段,情况比较复杂,系统中裂变材料以固态和溶液两种状态存在,形成非均匀系统。溶解过程中系统的反应性是变化的,其最大反应性往往出现在过程的中间,所以需要将整个过程的反应性变化计算出来,以找到最大反应性的值。对于这样的非均匀系统,有关的临界实验数据很少,国际上许多国家对非均匀系统的临界计算研究给予了高度的重视。

据俄罗斯来华专家介绍,他们为了回避这一困难,在溶解前先将裂变材料粉碎成末,分析时近似认为是一个无固体裂变材料的系统。

比利时、法国、德国、意大利、日本、美国等 8 个国家的 10 个研究机构组成联合工作小组,专门开展非均匀系统的临界计算研究工作,并于 1990 年发表了他们的研究报告<sup>[1]</sup>。结论是 SCALE 程序包难以适用于非均匀系统的临界计算,得到的  $K_{eff}$  值与实际相比偏低很多,是偏危险的。原因是 SCALE 程序包中的 NITAWL 模块不能同时处理固态与溶液中的  $^{238}\text{U}$  核的共振吸收,NITAWL 模块处理共振吸收时采用的是 Nordheim 方法,该方法是从双区(吸收区和慢化区)模型出发,求解慢化方程,而溶解过程所产生的非均匀系统,溶液中含有共振吸收核,不能看作为纯慢化区。

目前,国内用得比较多的 AMPX-KENO 程序也是用 NITAWL 模块来处理共振吸收的,因此用于非均匀系统的计算也有问题。本文利用点截面蒙特卡罗程序 MCNP 对国外发表的一些非均匀基准实验进行了校验计算。

## 2 MCNP-3B 程序简介

MCNP 是美国 Los Alamos 实验室研制的大型蒙特卡罗程序,用于中子-光子输运计算。MCNP-3B<sup>[2]</sup> 是 1989 年公开发表的版本,该程序值用精细的点截面库,能点数随核素不同而不同,从几百到几千个,能点之间的数据由线性插值给出。分点数多是为了保证从原始数据库(如 ENDF/B 库)生成的截面数据具有足够的精确度,其原则是用线性插值方法所得到的

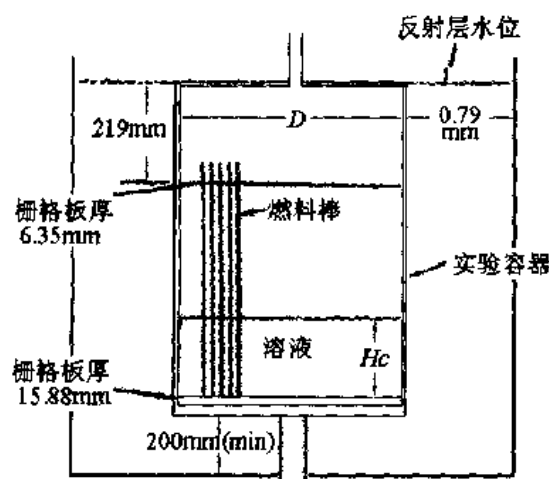


图1 实验装置图

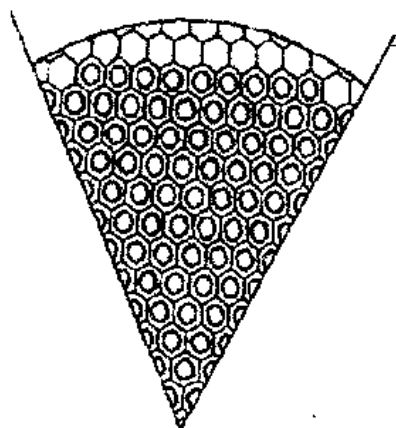


图2 方案1~4棒栅布置图

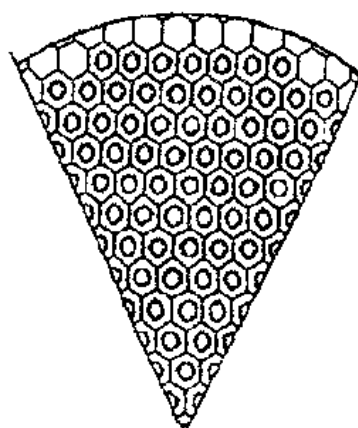


图3 方案5~8棒栅布置图

表3 燃料棒及溶液中铀同位素成分(wt%)

$^{238}\text{U}$	$95.65 \pm 0.018$
$^{236}\text{U}$	$0.022 \pm 0.002$
$^{235}\text{U}$	$4.306 \pm 0.013$
$^{234}\text{U}$	$0.022 \pm 0.002$

表4 基准实验计算结果

方案号	$K_{eff}$
1	$0.9905 \pm 0.0027$
2	$0.9838 \pm 0.0026$
3	$0.9804 \pm 0.0026$
4	$0.9824 \pm 0.0022$
5	$0.9901 \pm 0.0025$
6	$0.9863 \pm 0.0044$
7	$1.0008 \pm 0.0023$
8	$0.9848 \pm 0.0026$

### 3.2 临界计算结果

对上述8个基准实验,我们用微机版本的MCNP-3B程序进行了临界计算,计算代数数为350代,每代取500个中子,跳过前50代进行统计,得到的结果如下表4所示。

其中方案4和方案8,我们将本文的计算结果同国外用不同程序计算的结果进行了比较,详见表5、表6。

## 参考文献

- [1] Standard problem exercise on criticality codes for dissolving fissile oxides in acids. NEACRP-L-306, April 1990.
- [2] MCNP-3B Monte Carlo neutron and photon transport code system. ORNL CCC-200, 1988.
- [3] R. C. Lloyd, S. R. Bierman, E. D. Clayton and B. M. Durst. Criticality of 4.3wt% uranium-235 enriched  $\text{UO}_2$  rods in uranyl nitrate solution containing gadolinium. Nucl. Sci. Eng., 1981, 121-125.

# 光子—电子—核—核耦合输运问题的 蒙特卡罗方法模拟

许淑艳 郁金南 王玉珠 张 文

(中国原子能科学研究院)

**摘要** 本文叙述了该耦合输运问题的物理背景,物理模型及假设;提出了该耦合输运问题的模拟方法;展示了部分重要的计算结果。计算结果表明:所用模拟方法是有效的、可行的。

## 1 引言

在高科技设施中,对于关键部位材料的性能进行正确的评估,是使设施安全运行的重要保证。空间卫星和飞行器中的 CMOS 器件经受着高能粒子的辐射,各种粒子元器件的辐照损伤,是造成各种器件失灵、失控乃至事故的主要原因。有证据指出:事故的 39% 是由于元器件的故障造成的。由于其辐照损伤强度随粒子的种类和能量而异,需要研究电子元器件在空间辐照环境下辐射损伤的总剂量效应。另一方面,聚变堆中第一壁材料(SiC),等离子体的介面受到高能电子(14MeV)的辐射,碳化硅复合材料电子辐射疲劳损伤也是危及反应堆安全的重要因素。

因此,计算高技术设施中关键部位的辐射损伤,对于设施的安全运行有很重要的意义。

对于质子和其他粒子造成的辐射损伤可使用 TREEM 程序计算,而对于电子、光子造成的辐射损伤,需要专门的计算。

在以上所述物理问题中,不仅需要考虑光子与电子的耦合输运,还必须考虑光子、电子与核的联合输运,以及核与核的耦合输运问题。对于这种复杂的碰撞机制,本文使用了多分支嵌套多分支方法模拟,收到了好的效果。本文第二节,给出物理模型与假设;第三节,叙述该种耦合输运问题的模拟方法;最后,第四节,给出了部分计算结果与讨论。

## 2 物理模型与假设

### 2.1 物理模型

考虑一块晶体,形状为长方体或圆柱体。CMOS 器件结构见图 1。粒子(光子或电子)垂直入射到晶体表面。模拟粒子在晶体中的行为,计算晶体在光子、电子的辐射下的辐射损伤(包括电离损伤和位移损伤)随入射能量及晶体深度变化的曲线,从而对晶体(材料)的性能给出正确的评估。

### 2.2 反应机制

粒子入射到晶体后,与晶体内的原子核发生各种反应,归结为以下三个过程:

(1)电子与光子的耦合生成过程:电子发生韧致辐射,正电子发生静止湮灭、飞行湮灭产生光子;光子发生光电效应,康普顿散射,对生成及之生成产生电子。

(2)电子与光子产生反冲核,在电子与物质的相互作用中,韧致辐射和电子散射可使反冲核获得较大的动能而发生位移。反冲核的动量在韧致辐射中与光子、电子的动量遵从动量守恒原则,在电子散射中以确定形式给出。

在光子与物质的相互作用中,光电散应、康普顿散射及对生成也产生动能较大的反冲核,因而发生位移。反冲核与光子、电子的动量遵从动量守恒原则。

(3)核—核的耦合输运过程,具有一定能量的反冲核与晶体中的其他核又产生核与反冲核,该耦合输运过程直至核的能量小于其原子离位阈能为止。

### 2.3 所求物理量

(1)粒子在晶体中的沉积能量,沉积能谱随晶体深度变化曲线(电离损伤)。

(2)位移原子数及其分布(位移损伤)。

## 3 模拟方法

对于这种光子—电子—核—核的耦合输运问题,采用多分支嵌套多分支的方法,即把核—核的多分支方法嵌套在光子—电子的多分支方法中。具体地说:

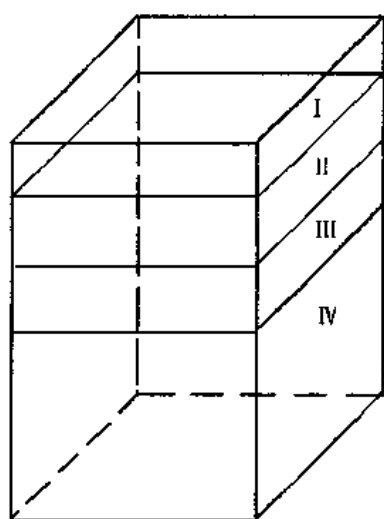
(1)对于光子—电子,使用字典式的多分支方法<sup>[1]</sup>,使用 EGS4 程序包<sup>[2]</sup>实现模拟。

(2)在光子—电子耦合输运过程中,一旦有反冲核产生,即刻进入核—核的字典式多分支方法模拟。

(3)核—核耦合输运过程结束后,回到光子—电子的耦合输运中去继续光子—电子的模拟。直至全部输运过程结束,即为一个初始入射粒子的历史结束。

(4)在字典式多分支方法中,粒子的存取方式采用“后进先出”的方法。

光子—电子—核—核耦合输运问题的模拟示意图见图 2。



CMOS 器件:分四层

第一层:氧化层( $\text{SiO}_2$ )

第二层:栅极( $\text{Al}$ )

第三层:桥结绝缘层( $\text{SiO}_2$ )

第四层:P 型及 N 型半导体及衬底( $\text{Si}$ )

图 1 CMOS 器件结构图

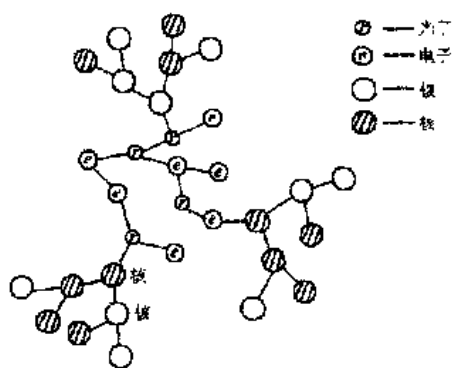


图2 光子—电子—核—核  
耦合输运问题的模拟示意图

## 4 计算结果与讨论

本文分别给出 CMOS 器件和  $S_iC$  晶体的计算结果:

### 4.1 CMOS 器件的计算结果

(1)由计算得到的沉积能量求出,在能量为  $E$  的电子辐射下,要获得  $10^6 \text{rad}$  ( $1 \text{rad} = 1 \times 10^{-2} \text{Gy}$ ) 的能量沉积,所需的人射电子数,该入射电子数随能量的变化曲线如图 3 所示。该曲线为实验提供了所需的数据。

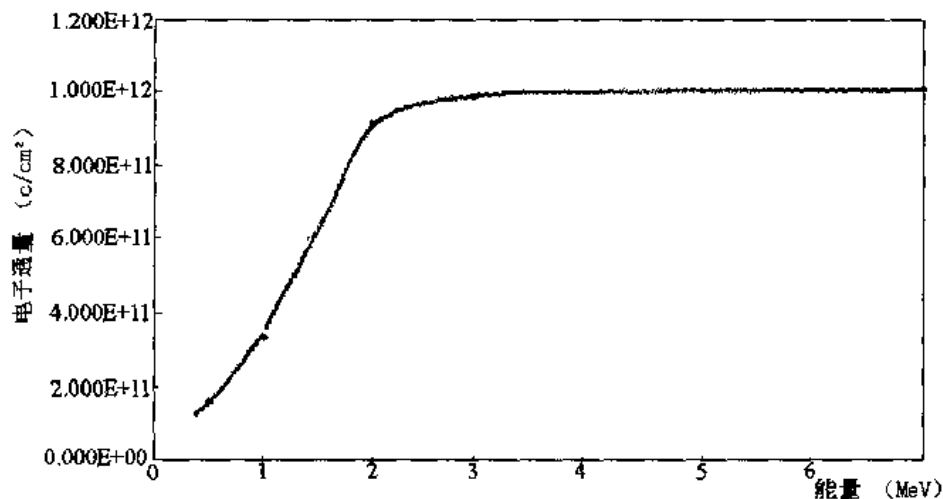


图3 CMOS 器件辐照通量与电子能量的关系

(2)在沉积能量为  $10^6 \text{rad}$  的情况下,入射能量分别为 1.17MeV 和 1.33MeV 的光子,在各层中形成的电子—空穴对的平均浓度和位移子的浓度列在表 1 中。

表 1 浓度表

层数	成分	浓度	1.17MeV	1.33MeV
第一层	SiO <sub>2</sub>	$N_{e-p}$ (对/cm <sup>3</sup> )	$3.7272 \times 10^{16}$	$3.1746 \times 10^{16}$
		$N_d$ (个/cm <sup>3</sup> )	$4.1821 \times 10^{12}$	$3.3461 \times 10^{12}$
第二层	Al	$N_{e-p}$ (对/cm <sup>3</sup> )	0	0
		$N_d$ (个/cm <sup>3</sup> )	$6.5055 \times 10^{12}$	$8.7837 \times 10^{12}$
第三层	SiO <sub>2</sub>	$N_{e-p}$ (对/cm <sup>3</sup> )	$2.7061 \times 10^{19}$	$3.1728 \times 10^{19}$
		$N_d$ (个/cm <sup>3</sup> )	$4.1820 \times 10^{13}$	$3.3463 \times 10^{12}$
第四层	Si	$N_{e-p}$ (对/cm <sup>3</sup> )	$8.4000 \times 10^{18}$	$8.4230 \times 10^{18}$
		$N_d$ (个/cm <sup>3</sup> )	$1.2632 \times 10^{14}$	$3.0962 \times 10^{14}$

表中,  $N_{e-p}$  表示电子—空穴对浓度,  $N_d$  表示移位原子的浓度。

由表 1 看出, 在 1.17MeV 和 1.33MeV 的光子辐射下, 电子—空穴对的浓度在第三层最大, 移位原子的浓度在第四层最大。

(3) 在沉积能量为  $10^6 \text{ rad}$  的情况下, 几种入射能量的电子在各层中电子—空穴的平均浓度和位移的浓度列表 2 中。

表 2 浓度表

层数	成分	浓度	0.5MeV	1.0MeV	2.0MeV	7.0MeV
第一层	SiO <sub>2</sub>	$N_{e-p}$ (对/cm <sup>3</sup> )	$8.3681 \times 10^{17}$	$1.5260 \times 10^{18}$	$3.9435 \times 10^{18}$	$4.4642 \times 10^{18}$
		$N_d$ (个/cm <sup>3</sup> )	$2.5009 \times 10^{14}$	$2.2381 \times 10^{15}$	$2.2728 \times 10^{16}$	$3.1120 \times 10^{17}$
第二层	Al	$N_{e-p}$ (对/cm <sup>3</sup> )	0	0	0	0
		$N_d$ (个/cm <sup>3</sup> )	0	$1.3435 \times 10^{15}$	$1.3701 \times 10^{16}$	$1.8082 \times 10^{17}$
第三层	SiO <sub>2</sub>	$N_{e-p}$ (对/cm <sup>3</sup> )	$1.3231 \times 10^{21}$	$5.9520 \times 10^{21}$	$4.5563 \times 10^{21}$	$1.3765 \times 10^{21}$
		$N_d$ (个/cm <sup>3</sup> )	$2.8962 \times 10^{14}$	$2.0576 \times 10^{25}$	$1.8721 \times 10^{16}$	$2.9932 \times 10^{17}$

由表 2 看出, 各种能量入射的电子, 电子—空穴对的浓度与位移子的浓度(除外第一层)均在第三层最大, 表明 CMOS 器件的第三层处于辐射损伤的峰值区。由表 2 还可看出, 在相同的沉积能量  $10^6 \text{ rad}$  情况下, 不同能量的电子, 在各层中形成的电子—空穴对浓度和位移子浓度不同。这表明单纯用沉积能量作为 CMOS 器件受到的辐射强度是不能正确反映 CMOS 器件缺陷生成值的, 还必须考虑辐射粒子的能谱效应。

由表 1、表 2 看出, 在第三层桥结区, 光子形成的电子—空穴对浓度和位移子浓度均小于电子辐射形成的相应浓度。这表明电子辐照对 CMOS 器件的性能影响大于光子辐照。

以上结果与实验结果一致。

#### 4.2 SiC 晶体的计算结果

对于 SiC 晶体计算了不同能量的电子在不同剂量下的位移损伤强度。

图 4 给出了入射能量为 14MeV 的电子, 在不同的辐照温度、不同的操作剂量及不同的高温弛豫时间, 热扩散系数随测量温度的变化情况。



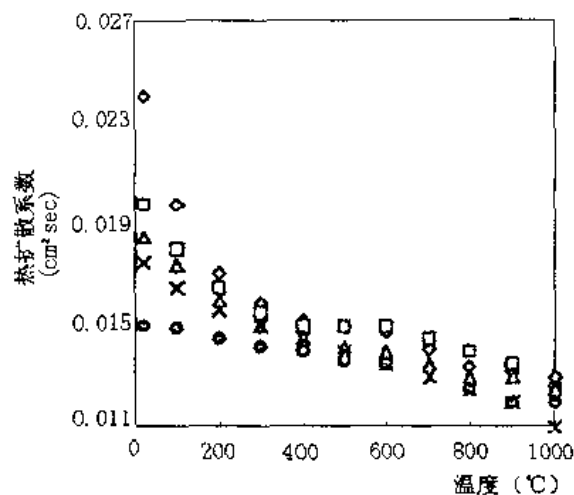


图4 热扩散系数随观测温度变化情况

图中□表示样品在  $770 \pm 70^\circ\text{C}$  下照射, 损伤剂量为 0.3dpa, 高温弛豫时间为 13.3min. △表示样品在  $570 \pm 32^\circ\text{C}$  下照射, 损伤剂量为 0.04dpa, 高温弛豫时间为 10min. ×表示样品在  $650 \pm 20^\circ\text{C}$  下照射, 损伤剂量为 0.17dpa, 高温弛豫时间为 11.4min. ○表示样口在  $815 \pm 20^\circ\text{C}$  下照射, 损伤剂量为 0.1dpa, 高温弛豫时间为 6.3min. ◇表示未被照射的样品。

由图4看出, 对于情况2和情况3, 辐照温度低于  $700^\circ\text{C}$  时, 热扩散系数随损伤剂量的增加而减小。而对于情况1, 损伤剂量为 0.2dpa, 但其热扩散系数比情况2、3大, 原因不只是由于辐照温度高 ( $700^\circ\text{C}$ ), 而且由于高温弛豫时间最长 (13.3min)。对于情况4, 辐照温度为  $815^\circ\text{C}$ , 损伤剂量为 0.1dpa, 其热扩散系数却比情况2、3减小了很多, 唯一不同的是由于主温弛豫时间比其他情况都短 (6.3min)。由此, 可以得到一个重要的结论: 当主温弛豫时间大于 6min 时, 才能减小对晶体的损伤。

1995年10月, 在莫斯科举行的“第七届国际聚变堆材料会议”上, 报告了该种实验设计、计算方法与计算结果, 引进了较大反响, 认为这一成果在国际上处于先进位置, 实验设计与计算方法首次使用。

该种物理模型与计算方法、程序也能用于其他方面, 如: 秦山核电站部件安全性能的测试与检验, 以及医学上使用的  $\gamma$ -刀, 电子刀对人体辐射部分造成的损伤等问题, 都有其实用的价值。

## 参考文献

- [1] 许淑艳. 蒙特卡罗方法在实验核物理中的应用. 北京: 原子能出版社 (1996)
- [2] 许淑艳. EGS4 通用软件包及用户使用指南. 核电脑应用, 第4期 (1994)

# 外部噪声法实现超混沌同步\*

方锦清 许淑艳

中国原子能科学研究院

**摘要** 本文研究了在白噪声和有色噪声两种类型的外部随机力驱动下实现了超混沌同步,用蒙特卡罗方法,以广义 Van der Pol 双耦合超混沌系统为典型系统,进行了模拟计算,证明该方法是可行的。

## 1 引言

自从 90 年代初发现混沌同步以来,由于在保密通讯、信息科学、医学生物、工程等领域中具有巨大的应用发展潜力,该课题的研究正在迅猛发展,几乎成为国际上高科技竞争的一个热门<sup>[1]</sup>。

迄今已经发展了许多混沌同步的方法,外部随机力在混沌同步中的建设性作用,也引起了关注,已经应用外部白噪声实现了混沌同步<sup>[2,3]</sup>。本文的目的有二点:一是将外部噪声法拓广到超混沌同步(具有至少 2 个正的李雅普诺夫指数的系统);二是不仅应用白噪声而且应用有色噪声同时研究超混沌同步。因为超混沌同步在通讯及信息应用方面具有容量大效率高等突出优点,所以它已成为该领域的前沿课题之一。为此,我们应用了蒙特卡罗方法来研究外部随机力驱动下的超混沌同步,本文将给出初步研究结果及简要讨论。

## 2 超混沌模型及物理考虑

在自然界及实验室内广泛存在耦合振子,尤其在物理、化学及生物等领域中,耦合振子的同步极为重要和相当普通,超混沌存在于这类高维耦合振子系统中,我们以著名的广义 Van der Pol 振子的双耦合系统为典型例子来研究外部噪声驱动下的超混沌同步问题,该系统包括许多有意义的情形,如它是 Ginzburg-Landau 方程的一种变形,可用于研究一些凝聚态物理问题及时空复杂性等。

广义 Van Der Pol 的双耦合系统方程组为

$$\text{系统 A:} \begin{cases} \ddot{x} = a(1 - x^2)x - x^3 + b(\sin\omega t + y) \\ \ddot{y} = a(1 - y^2)y - y^3 + b(\sin\omega t + x) \end{cases} \quad (1)$$

$$\text{系统 B:} \begin{cases} \ddot{u} = a(1 - u^2)u - u^3 + b(\sin\omega t + v) \\ \ddot{v} = a(1 - v^2)v - v^3 + b(\sin\omega t + u) \end{cases} \quad (2)$$

其中  $a, b, \omega$  分别为系统参数。

当在系统中加入外部随机力  $\eta$  后,它可以统一地写成非线性朗之万方程形式:

$$\dot{W} = F(W) + \eta \quad (3)$$

\* 本课题是核工业科学基金资助项目。

我们将研究两种外部随机力的情形:

第一 高斯白噪声, 遵循统计特性为

$$\langle \eta(t) \rangle = 0, \langle \eta(t) \eta(t') \rangle = 2D\delta(t - t') \quad (4)$$

这里  $D$  为噪声强度,  $\delta$  为狄拉克函数。

第二  $OU$  有色噪声, 服从以下方程:

$$\dot{\eta} = -\frac{1}{\tau_c} [\eta(t) + \xi(t)] \quad (5)$$

其中  $\xi(t)$  为遵循(4)式的白噪声,  $\tau_c$  为有色噪声临界关联参数。

因此求解两个系统 A 和 B 的超混沌同步问题, 归结为求解两个联立朗之万方程的问题。

假设两个系统 A、B 分别以两个矢量变量  $W_A$  和  $W_B$  表示, 即  $W_A = (X)$ ,  $W_B = (u, v)$ 。现在超混沌同步定义为

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \|W_A - W_B\| = 0 \quad (6)$$

式(6)表明: 具有不同初值条件的系统 A 和 B 在随机力作用下经长时间之后相空间轨迹在统计平均的意义上趋于重合, 即统计平均轨迹两者收敛在一起, 此时称达到了超混沌同步。

在计算两个系统超混沌同步的过程中, 可以同时计算相应的概率分布  $P(W_A, W_B, t)$ , 从而求得 A、B 系统的各自的熵:

$$H_x = - \sum_{i=1}^N P(W_{A,i}) \log_2 P(W_{A,i}) \quad (7)$$

其中  $P(W_{A,i})$  为  $W_{A,i}$  位于第  $i$  个间隔的概率,  $N$  为  $W_{A,i}$  划分的间隔数目。

$$H_y = - \sum_{i=1}^N P(W_{B,i}) \log_2 P(W_{B,i}) \quad (8)$$

这里含义与上述相同。

A 和 B 两系统的联合熵:

$$H_{xy} = - \sum_{i,j=1}^N P(W_{A,i}, W_{B,i}) \log_2 P(W_{A,i}, W_{B,i}) \quad (9)$$

其中  $P(W_{A,i}, W_{B,i})$  为  $W_A$  位于第  $i$  个间隔、 $y$  位于第  $j$  个间隔的概率。

由上可求得共同信息熵:

$$M_{xy} = H_x + H_y - H_{xy} \quad (10)$$

### 3 朗之万方程的蒙特卡罗求解方法

首先要将 A、B 系统所遵循的朗之万方程组改写成一阶自治形式。对于系统 A, 有:

$$\begin{aligned} \dot{X}_1 &= X_2 \\ \dot{X}_2 &= a(1 - X_1^2)X_2 - X_1^3 + b(\sin X_5 + X_3) + \eta(t)Q \\ \dot{X}_3 &= X_4 \\ \dot{X}_4 &= a(1 - X_3^2)X_4 - X_3^3 + b(\sin X_5 + X_1) + \eta(t)Q \\ \dot{X}_5 &= W \end{aligned} \quad (11)$$

## 4 初步结果和讨论

本节给出蒙特卡罗方法模拟计算两种类型的外部噪声,即遵循式(4)的白噪声和有色噪声式(5)作用下,系统 A 和 B 的超混沌同步的过程,所用参数与上节相同。

### 4.1 白噪声导致超混沌同步

我们研究了白噪声强度  $D$  从 0 到 1 的变化对超混沌同步的可能性。图 1 示出一个典型结果,图 1(a)为超混沌同步误差  $(X - Y)$  随迭代步数的变化,在 5 万步前两个系统各由 5000 条轨道经统计平均后两轨迹的误差很大,尔后明显减少,在 10 万步后误差约在千分之几,这也是本方法所能达到的较好误差精度范围。相应的图 1(b)示出在  $X - Y$  平面内抛弃前 10 万步迭代后的轨迹相图,上述取  $D = 0.65$ 。计算表明:只要白噪声强度足够大(约  $D \geq 0.35$ ),才能实现广义 Van der Pol 双耦合两个系统的超混沌同步。

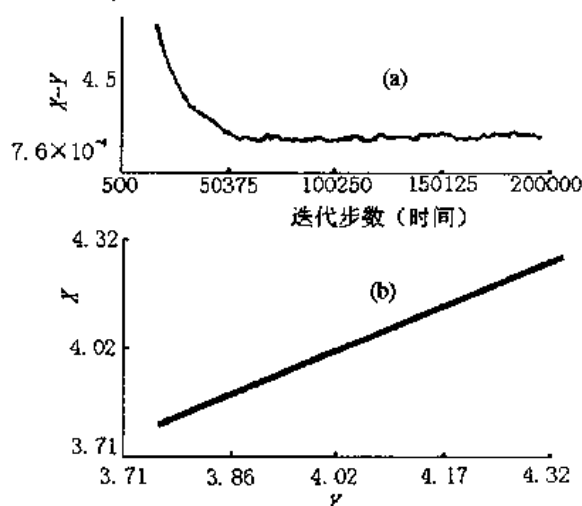


图 1 超混沌同步图

### 4.2 有色噪声实现超混沌同步

在遵循式(5)的有色噪声驱动下 A、B 两系统可以达到超混沌同步,类似于白噪声情形,同步误差随迭代步数(时间)单调地逐渐趋于 0(精度  $< 1\%$ ),比白噪声达到的同步效果更好更快,如图 2(a)所示,图 2(b)给出在迭代步数 10 万步后的同步相图,它是一条直线,系统参数  $a = 0.2, b = 7.5, \omega = 4.0$ ,有色噪声参数  $\tau_c = 0.75, D = 0.65$ ,图 2 是对两个系统各计算 5000 条轨道进行统计平均后的同步结果。在相同的参数下,我们计算了 A 和 B 系统各自的熵  $H_x$  和  $H_y$ ,发现两者完全相同,这与同步结果相一数。图 3 示出  $H_x$  随迭代步数的变化,图 4 给出了共同信息熵。从图 3、图 4 可见:熵的变化都是非周期变化,即使在达到同步之后也是如此。这说明两个系统确实处于超混沌运动状态,因为熵的剧烈变化正是系统无序的测度。

以上结果表明:不论白噪声和有色噪声都能实现超混沌系统同步,有色噪声达到的同步效果更好些。这当中有关各种熵的变化规律与参数的关系及蒙特卡罗方法的改进等问题,尚得进一步探讨。

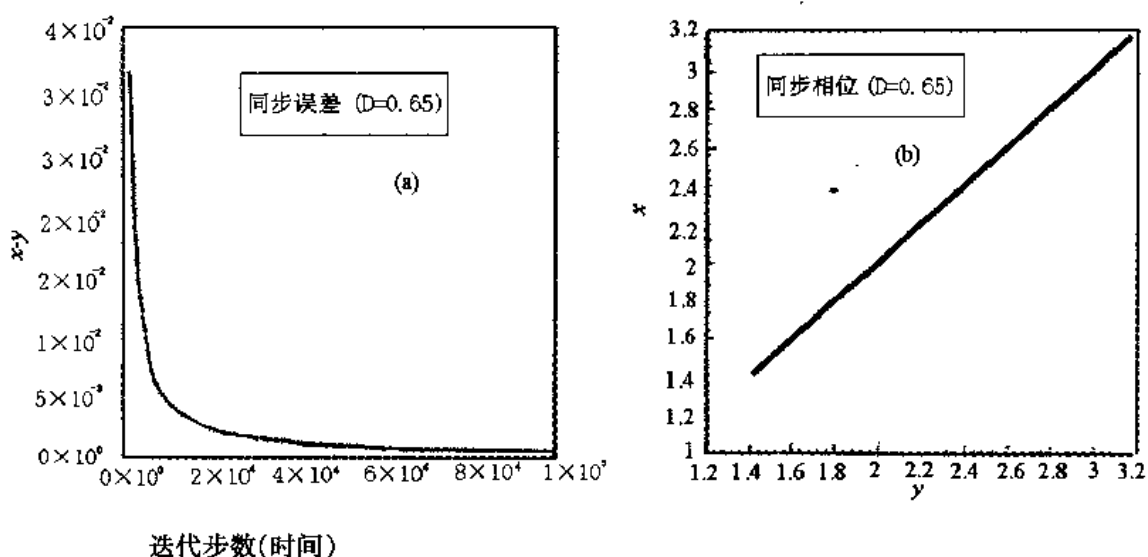


图2 有色噪声达到的超混沌同步

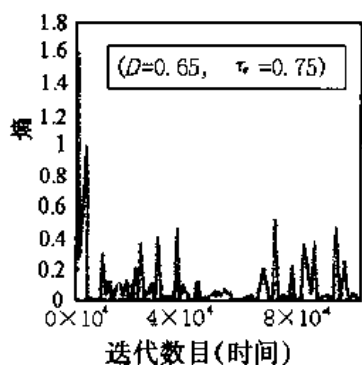


图3 系统 A 的熵随迭代数目的变化

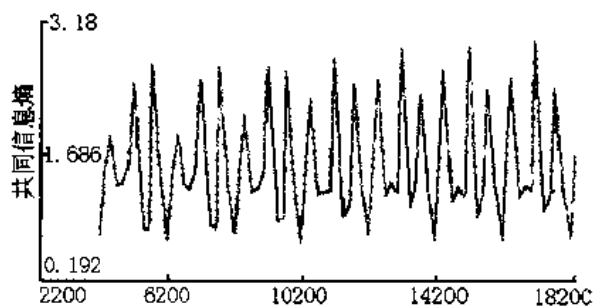


图4 共同信息熵随迭代数目的变化

## 参考文献

- [1] 方锦清, 物理学进展, 16(1996)1—74, 及 137—202
- [2] S. Fnlhy, D. R. Haman, Phys. Rev. Lett. 69(1992)761
- [3] A. Maritan, J. R. Banavar, Phys. Rev. Lett. 72(1994)1451
- [4] 许淑艳, 《蒙特卡罗方法在实验核物理中的应用》, 北京: 原子能出版社, (1996)

对于  $\gamma$  光子与 Ge 晶体材料的相互作用只考虑了光电效应,康普顿效应和电子对效应,并对这些过程中产生的次级光子和带电粒子,包括康普顿散射光子、 $\chi$  线荧光辐射光子、湮没辐射光子和光电子、康普顿反冲电子、电子对效应产生的电子正电子进行跟踪。计算中,入射  $\gamma$  光子能量限制在 60keV—3MeV,在这一能量范围内由于没有考虑 Rayleigh 效射和韧致辐射给计算结果带来的误差很小,可以忽略。

光子的截止能量为 11keV,即光子能量降到 11keV 就假定全部被吸收。

## 2.2 计算采用的光子作用截面和电子射程

$\gamma$  光子能量小于 1.0MeV,光电效应总截面  $\sigma_{ph}$  取自文献<sup>[5]</sup>,康普顿总截面  $\sigma_{com}$  取自文献<sup>[6]</sup>,能量大于或等于 1.0MeV, $\sigma_{ph}$ 、 $\sigma_{com}$  和电子对效应总截面  $\sigma_{pp}$  均取自文献<sup>[7]</sup>。电子(包括正电子)能量及相关的射程数据取自文献<sup>[8]</sup>。

计算中, $\gamma$  光子的作用截面以及电子(包括正电子)在 Ge 晶体中的射程均由上述文献中的值插值获取。

## 2.3 计算方法

蒙特卡罗计算方法的原理是模拟大量通过 Ge 晶体的单个光子的历史,按照所给定的分布函数,得到所要服从某种统计分布的物理量。

一个光子在其完全被吸收或逃脱之前用蒙特卡罗过程模拟其历史中的每一步骤。

### 2.3.1 方法简介

计算角响应校正因子( $N_f/N_0$ ),分为两步进行。首先,采用蒙特卡罗方法 分别计算探测器对置子距探测器几何中心距离相等面角度各不相同( $0^\circ \sim 90^\circ$ )的  $\gamma$  点源(如图 1 所示)的全能峰计数率  $N(\alpha)$ ,并采用角度为  $0^\circ$  时的全能峰计数率  $N_0$  进行归一的值—相对角响应因子  $N(\alpha)/N_0$ ;然后,采用下面数值积分公式求角响应校正因子:

$$N_f/N_0 = \frac{1}{\Phi} \int_0^1 R(\omega) \frac{d\Phi}{d\omega} d\omega \quad (1)$$

式中: $N_f/N_0$  是 HPGe $\gamma$  探测器的角响应校正因子;

$R(\omega)$  是探测器器的相对角响应因子  $N(\alpha)/N_0$  的拟合函数,即

$$R(\omega) = \sum_i B(i) \cdot \omega^i, \quad \omega = \cos\alpha \quad (2)$$

$B(i)$  为拟合系数;

$\Phi$  是在土壤中 呈某种分布的  $\gamma$  放射源,在地面上空某点处产生的初级  $\gamma$  光子注量率,  $\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ;

在文献 [1,4] 中,对采用数值积分求取角响应校正因子已有比较详细的叙述,在此不累述。

本节主要介绍采用蒙特卡罗方法模拟计算相对角响应因子  $N(\alpha)/N_0$  的过程。

### 2.3.2 $\gamma$ 光子源抽样和首次作用点位置抽样

描述  $\gamma$  光子运动状态的参数有位置( $x, y, z$ )、运动方向( $u, v, w$ )和能量  $E$ 。由于点源发射的初级  $\gamma$  光子是各向同性的,因而由点源发出的初级  $\gamma$  光子真正入射到谱仪探测器上的份额很小。为了提高抽样效率,考虑了两种抽样方法。一种方法是在谱仪探测器的 Ge 晶柱体外作一个辅助外接球(如图 2 所示)。首先,点源发出的初始  $\gamma$  光子的入射方向,采用辅助球偏倚抽样方法抽样<sup>[12]</sup>,然后,再判断该光子是否进入 Ge 晶柱体,如果进入 Ge 晶柱体,

则按文献<sup>[10]</sup>中的方法抽样确定在 Ge 晶柱体内的首次作用点位置;如果没有进入 Ge 晶柱体,则源重新抽样。采用该方法,虽然比原始抽样方法的效率有了很大的提高,但仍有一部分初始  $\gamma$  光子虽然进入辅助球但并未进入 Ge 晶柱体或穿出 Ge 晶柱体,它们对所求的物理量没有贡献而造成源抽样的浪费。为了进一步提高源抽样效率,本工作采用了另一种方法,即直接在 Ge 晶柱体中对入射初始  $\gamma$  光子的首次作用点位置采取均匀分布随机抽样,再求出入射初始  $\gamma$  光子在该作用点实际发生首次作用的贡献,并以此贡献为权重对沉积能量在某一记录区间(能量道)的记录进行纠偏。

对于图 3 所示 Ge 晶柱体内,其位置点均匀分布函数为

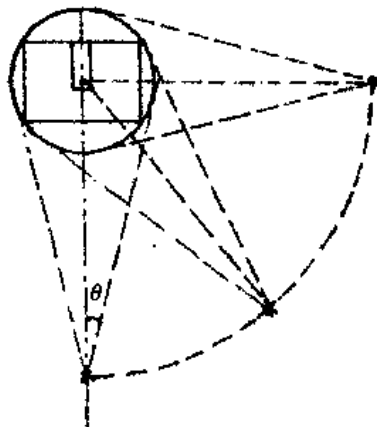


图 2 首次作用点抽样的辅助球方法示意图

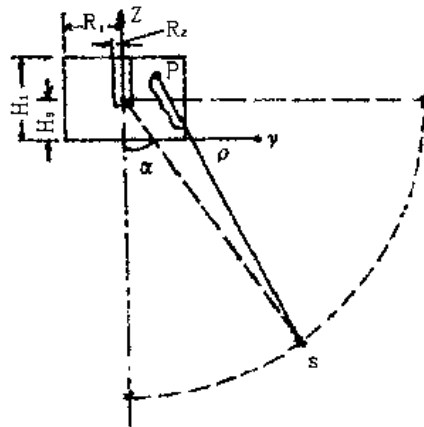


图 3 首次作用点均匀抽样方法示意图

$$f(x, y, z) = \begin{cases} \frac{1}{\pi R_1^2 H_3} & x^2 + y^2 \leq R_1^2, 0 \leq Z \leq H_3 \\ \frac{1}{\pi(R_1^2 - R_2^2)(H_1 - H_3)} & R_2^2 \leq x^2 + y^2 \leq R_1^2, H_3 < Z \leq H_1 \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad (3)$$

其抽样方法为

$$\begin{aligned} & (2\xi_1 - 1)^2 + (2\xi_2 - 1)^2 \leq 1 \quad (-) \\ & \quad \downarrow (+) \\ & X = R_1(2\xi_1 - 1); Y = R_1(2\xi_2 - 1); Z = H_1(1 - \xi_3) \\ & \quad \downarrow (-) \quad X^2 + Y^2 > R^2 \quad (-) \\ & \quad \downarrow (+) \quad \downarrow (+) \\ & X_0 = X, Y_0 = Y, Z_0 = Z \end{aligned} \quad (4)$$

如图 3 所示,初始  $\gamma$  光子的入射方向可由式(4)抽样得到的作用位置点  $P(X_0, Y_0, Z_0)$

为了从等式(10)中得到  $\theta$  值,可用逐渐逼近法,即从  $\theta = 0$  开始,逐渐递进  $\Delta\theta$ ,对等式(10)右边的表达式进行数值计算,每次的计算与  $\zeta$  进行比较,直到它等于  $\zeta$  或与  $\zeta$  的偏差小于某一很小的给定值  $\epsilon$ ,这样就得到了给定精度( $\Delta\theta + \epsilon$ )要求的  $\theta$  值。事实上,采用积分区间三分法逼近可节约计算机时。光电子极角  $\theta$  确定后,其方位角  $\Phi$  由  $(0, 2\pi)$  上的均匀分布抽样确定。光电子的位置为  $\gamma$  光子作用点位置。然后跟踪光电子(见本节(4)),直到其历史结束,并计算它在探测器中所消耗的能量。

光电子的历史结束后,沿用前面的方法判断相关的  $K-X$  线光子是否在探测器 Ge 晶体内发生作用。如果发生作用,就假定  $K-X$  线完全被吸收;反之,就假定其完全逃脱。这样就完成了一个  $\gamma$  光子始于光电效应的历史。

(2)康普顿数应过程。当入射  $\gamma$  光子与探测器 Ge 晶体发生康普顿效应, $\gamma$  光子将其部分能量传递给核外电子,产生康普顿反冲电子, $\gamma$  光子本身发生康普顿数射。散射光子的能量由 Klein Nishina 公式抽样确定:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{K(\alpha)} \left[ \left( \frac{\alpha+1-x}{\alpha x} \right) + \frac{1}{x} - \frac{1}{x^2} + \frac{1}{x^3} \right] & \text{当 } 1 \leq x \leq 2\alpha + 1 \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad (11)$$

其中  $K(\alpha)$  为归一因子:

$$K(\alpha) = \left[ 1 - \frac{2(\alpha+1)}{\alpha^2} \right] \ln(2\alpha+1) + \frac{1}{2} + \frac{4}{\alpha} - \frac{1}{2(2\alpha+1)^2} \quad (12)$$

$$x = \alpha/\alpha' \quad (13)$$

$\alpha$  与  $\alpha'$  分别为  $\gamma$  光子散射前后的能量,以  $m_0c^2$  为单位,抽样采用文献<sup>[12]</sup>的方法,其抽样效率较高。数射角  $\cos\theta_0 = 1 - 1/\alpha' + 1/\alpha$ ,方位角  $\varphi$  由  $(0, 2\pi)$  上的均匀分布抽样获取。

$$E_e = (\alpha - \alpha') \cdot m_0c^2 \quad (14)$$

$$\text{ctg}\theta_c = (1 + \alpha) \cdot \text{tg}(\theta_e/2) \quad (15)$$

其中, $\theta_c$  为  $\gamma$  光子的康普顿散射极角, $\theta_e$  为碰撞前  $\gamma$  光子运动方向与康普顿反冲电子运动方向之夹角。由于康普顿效应必须发生在一个平面上,所以反冲电子运动方向的方位角为  $\Phi + \pi$ 。上面便确定了康普顿反冲电子的状态。跟踪它的整个历史直到能量减至 11keV 或逃出晶体外。

(3)电子对产生过程。 $\gamma$  光子能量大于  $2m_0c^2$ ,就可能与探测器晶体发生第三种效应——电子对效应。在此过程中,假定由正负电子分享的动能( $E_e - 2m_0c^2$ )平均分配给正负电子:

$$E_{-e} = E_{+e} = \frac{1}{2}(E_e - 2m_0c^2) \quad (16)$$

电子、正电子相对于入射  $\gamma$  光子的极角由下式确定:

$$\theta = m_0c^2/(m_0c^2 + E_{+e}) \quad (17)$$

它们的方位角  $\Phi$  在  $(0, 2\pi)$  上均匀分布,彼此相差  $\pi$  值。

(4)电子跟踪。电子跟踪是跟踪  $\gamma$  光子产生的所有次级电子(包括正电子)。电子初态



位置是  $\gamma$  光子与晶体作用,产生该电子时的作用点位置,其初态能量和方向由本节(1)~(3)中的公式和说明确定。

电子在探测器内迁移表现为多次散射过程。在多次散射过程中,不断减少能量和改变方向。利用能量射程关系,把电子轨迹细分成若干小的轨迹长度,使得每一步迁移电子能量缩小一个常数因子  $K$ ,如果第  $n$  步的能量用  $E_n$  表示,则第  $n+1$  步散射后的能量由下面公式给出<sup>[9]</sup>:

$$E_{n+1} = K \cdot E_n \quad (18)$$

其中:  $K = 2^{1/2}$ ,  $m$  为一常数,它的含义是:经过  $m$  次迁移后,电子能量减少一半。电子的轨迹长度由能量射程关系数表<sup>[8]</sup>插值得到。电子散射后的散射角余弦为<sup>[9]</sup>

$$\cos\theta_{n+1} = \left[ \frac{E_{n+1}}{E_n} (E_n + 2m_0c^2) / (E_{n+1} + 2m_0c^2) \right]^{0.3Z} \quad (19)$$

式中,  $Z$  为 Ge 的原子序数,方位角  $\Phi$  在  $(0, 2\pi)$  上均匀分布。

对于低能电子 ( $E_e < 2\text{MeV}$ ), 用其能量射程一次直线输运。

假定只有当正电子在晶体内静止死亡(其能量小于  $10\text{keV}$ )才会发生湮灭辐射,并每次由正电子开始静止的位置各向同性地发射两个  $0.511\text{MeV}$  湮灭光子,其中一个湮灭光子的极角  $\theta_1$  和方位角  $\Phi_1$  分别由  $(0, \pi)$  和  $(0, 2\pi)$  上的均匀分布抽样确定,另一湮灭光子的极角  $\theta_2$  和方位角  $\Phi_2$  分别为  $\theta_2 = -\theta_1$  和  $\Phi_2 = \Phi_1 + \pi$ 。湮灭光子的处理方法和康普顿散射光子的处理方法相同。

#### 2.3.4 所求物理量

本节所求物理量是 HPGeY 探测器的相对角响应因子  $N(\alpha)/N_0$ , 正如 2.3.1 中所述,  $N(\alpha)$  和  $N_0$  分别是探测器对置于不同  $\alpha$  角和置于探测器对称轴延长线的点源的全能峰计数率。在测量时间相同的条件下,  $N(\alpha)$  和  $N_0$  也可以认为是全能峰的总净计数,即为能量全部沉积在 Ge 晶柱体中的总计数。

由于本文采用首次作用点均匀分布随机抽样的方法,因此,当初始  $\gamma$  光子的能量  $E_0$  全部沉积时,在相应的能量道中不是简单地加一个计数,而是加上一个计数与该初始  $\gamma$  光子在 Ge 晶柱内发生首次作用的均匀分布随机抽样点的纠缠因子  $f$  的乘积。

#### 2.3.5 计算程序

本文采用 FORTRAN 语言编制的 GED5 软件是用来计算将放射性点源置于不同角度时 HPGeY 探测器的相对角响应因子  $N(\alpha)/N_0$  和角响应校正因子  $N_f/N_0$ , 其计算流程见图 4。

### 3 计算结果及实验验证

本文对两台就地 HPGeY 谱仪探测器的相对角响应因子  $N(\alpha)/N_0$  和角响应校正因子  $N_f/N_0$  进行了计算,并与其实验结果进行比较。其中一台 HPGeY 探测器(探测器 1)的实验结果由本工作完成,另一台 HPGeY 探测器(探测器 2)的实验结果取自文献<sup>[2]</sup>。两台探测器的结构如图 5 所示,计算中采用的主要参数见表 1。

表 2 和表 3,分别给出了两台 HPGeY 探测器的相对角响应因子  $N(\alpha)/N_0$  的计算值、实验值及其相对值差值。其中,对  $E < 1\text{MeV}$  的各能量点,计算值为跟踪 5000 个初始  $\gamma$  光子的结果,对子  $E > 1\text{MeV}$  的各能量点,计算值为跟踪 10000 个初始  $\gamma$  光子的结果。从表 2 和表 3 中可看出,在实验所涉及的能量范围内( $60\text{KeV} \sim 2.204\text{MeV}$  和  $60\text{keV} \sim 1.333\text{MeV}$ ),不同

角度的  $N(\alpha)/N_0$  值,绝大多数在  $\pm 5\%$  相对偏差范围内吻合,仅少数相对偏差超出  $\pm 5\%$ ,最大为 11.8%。其相对偏差大小主要来自探测器结构参数误差对计算值的影响以及实验值不确定度大小的影响,其次为计算值受统计误差的影响。

图 6 和图 7 分别给出了上述两台 HPGe $\gamma$  探测器,当张弛长度( $\alpha/\rho$ )为三种不同值(即分别代表放射性核素浓度随土壤深度呈均匀分布、指数分布和平面分布)时的角响应校正因子  $N_f/N_0$  的计算值和实验值。如图 6 和图 7 所示,在实验涉及和环境测量所关心的能量范围内(59.5KeV ~ 2.62MeV),  $N_f/N_0$  的计算值和实验值的相对偏差均小于  $\pm 6\%$ (超出实验能量时,为计算值与实验外推值的比较)。其相对偏差主要是由  $N(\alpha)/N_0$  的计算值与实验值的相对偏差传递所致,其次是计算中对  $N(\alpha)/N_0$  和  $N_f/N_0$  进行拟合所产生的拟合误差。

上述计算工作是在一台 Compaq MT4/66 微机上完成的,其工作主频为 66MHz,计算速度平均每小时可跟踪计算 45000 ~ 48000 个初始入射  $\gamma$  光子。完成 1 台 HPGe $\gamma$  探测器的相对角响应因子及角响应校正因子的计算工作(跟踪入射  $\gamma$  光子总数为 80 万),费机时约 18 小时。

#### 4 结语

(1)本文提出的对入射  $\gamma$  光子在探测器晶体内部首次作用位置点的均匀分布随机抽样,然后再纠偏的方法,较大地提高了源抽样效率。

(2)两台就地 HPGe $\gamma$  谱探测器的  $N(\alpha)/N_0$  和  $N_f/N_0$  值的计算结果与实验结果吻合较好,说明本文中所建立的蒙特卡罗数学计算模型正确,计算机软件 GED5 实用。

(3)探测器的几何参数准确与否是影响计算值正确与否的主要因素,此外 MC 计算中统计误差也是计算值的误差源之一,采用软件 GED5 计算探测器的相对响应因子时,首先应尽可能详尽了解探测器的结构和几何尺寸,其次应跟踪足够的粒子数( $> 10000$ ),以减少计算结果的统计误差。

**致谢** 蒙特卡罗计算得到裴鹿成研究员的热情指导,实验验证得到岳清宇研究员的帮助,在此谨向上述同志表示衷心的感谢!

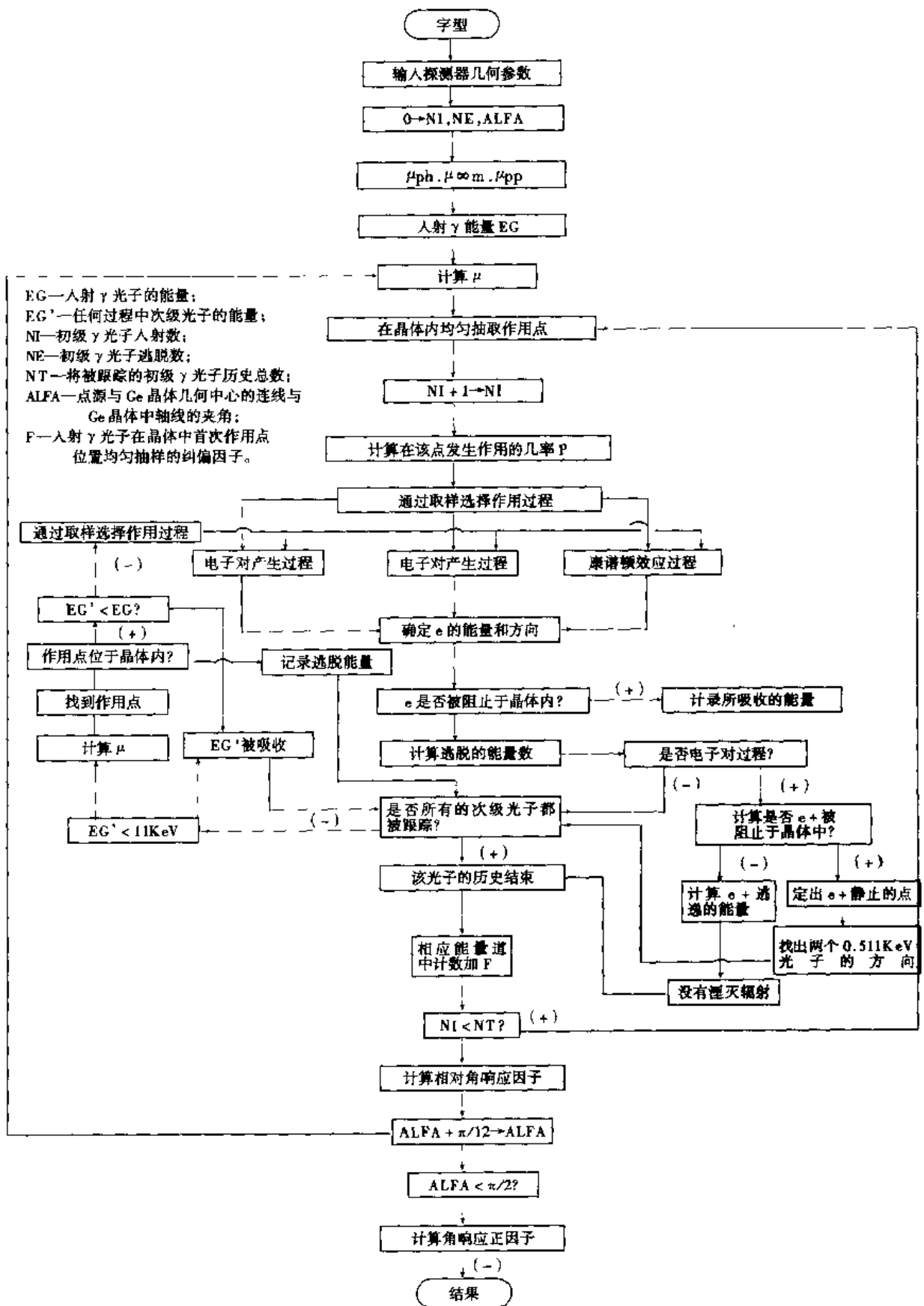
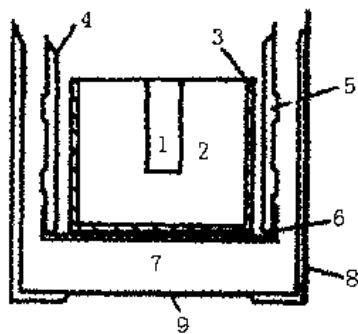


图 4. 计算流程图



1. 冷指井    2. Ge 晶体    3. Ge“死层”  
4. 铝固定筒    5. 铝加固环    6. 铝端帽  
7. 真空    8. 铝外壳    9. 入射窗

图5 HPGe 谱仪探测器结构示意图

表1 两台 HPGe 谱仪探测器的结构参数    cm

项 目	探测器 1	探测器 2
晶体尺寸	$\Phi 4.85 \times 3.75$	$\Phi 5.3 \times 6.20$
冷指井尺寸	$\Phi 1.00 \times 2.90$	$\Phi 1.20 \times 4.80$
Ge 不灵敏层厚度	0.10	0.05
铝固定筒壁厚度	0.15	0.15
铝端帽厚度	0.10	0.05
铝外壳壁厚度	0.20	0.20
入射窗厚度	0.1	0.05
晶体表面到窗的距离	0.5	0.5

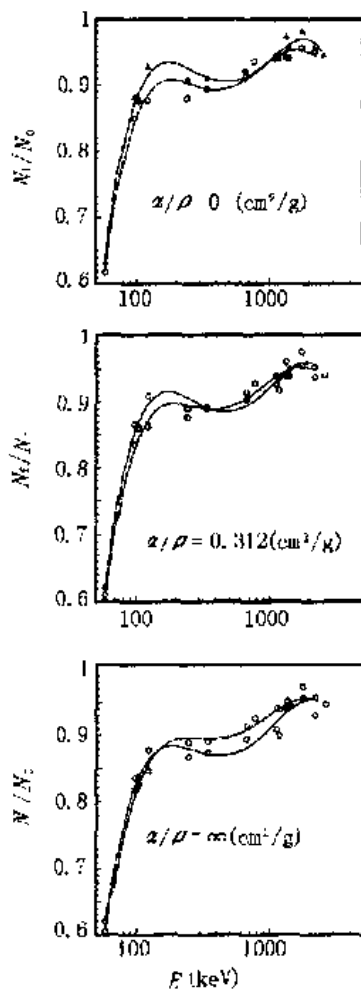


图6 探测器1的角响应校正因子

$N_f/N_0$ 的计算值与实验值

- 计算值  
●—● 实验值

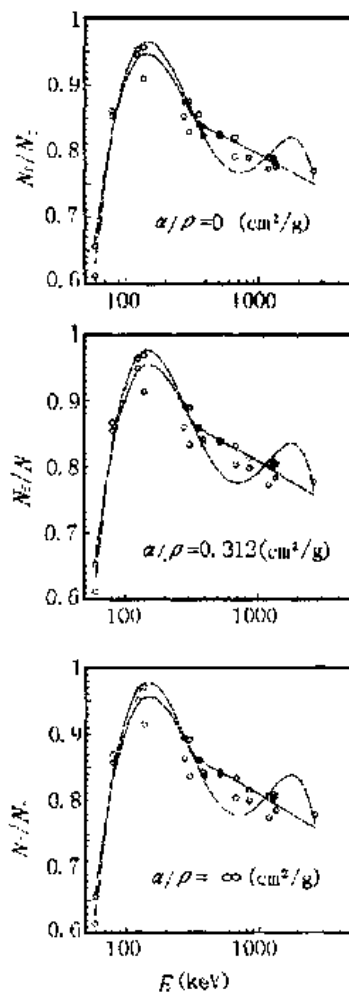


图7 探测器2的角响应校正因子

$N_f/N_0$ 的计算值与实验值

- 计算值  
●—● 实验值

表 2 探测器 1 的相对角响应因子的计算值和实验值的比较

能量 MeV	N( $\alpha$ )/N <sub>0</sub>											
	0°			30°			60°			90°		
	计算值	实验值	相对偏差*	计算值	实验值	相对偏差*	计算值	实验值	相对偏差*	计算值	实验值	相对偏差*
0.0595	1.000	1.000	0	0.751	0.710	+5.77	0.534	0.528	+1.14	0.632	0.565	+11.8
0.0974	1.000	1.000	0	0.960	0.923	+4.01	0.877	0.828	+5.92	0.804	0.809	-0.62
0.1036	1.000	1.000	0	0.968	0.940	+2.98	0.880	0.863	+1.97	0.792	0.825	-4.00
0.1218	1.000	1.000	0	0.991	0.936	+5.88	0.934	0.868	+7.60	0.856	0.833	+2.76
0.2447	1.000	1.000	0	0.991	0.921	+7.60	0.894	0.892	+7.84	0.858	0.889	-3.49
0.3443	1.000	1.000	0	0.982	0.920	+6.74	0.901	0.877	+2.74	0.877	0.892	-1.68
0.6617	1.000	1.000	0	0.979	0.938	+4.37	0.914	0.910	+0.44	0.918	0.920	-0.217
1.1203	1.000	1.000	0	1.015	0.948	+7.07	0.940	0.925	+1.62	0.893	0.938	+4.80
1.1732	1.000	1.000	0	1.002	0.954	+5.05	0.946	0.929	+1.83	0.898	0.944	-4.87
1.3325	1.000	1.000	0	1.004	0.957	+4.91	0.985	0.922	+6.51	0.960	0.929	+3.34
1.4080	1.000	1.000	0	0.985	0.962	+2.349	0.948	0.930	+1.94	0.949	0.945	-0.423
1.7645	1.000	1.000	0	0.991	0.957	+3.55	0.979	0.948	+3.27	0.972	0.950	+2.32
2.2041	1.000	1.000	0	0.991	0.954	+3.88	0.983	0.947	+3.80	0.951	0.964	-1.35
2.6144	1.000	---	---	0.977	---	---	0.936	---	---	0.970	---	---

\* 相对偏差(%)

表 3 探测器 2 的相对角响应因子的计算值和实验值的比较

能量 MeV	N( $\alpha$ )/N <sub>0</sub>											
	0°			30°			60°			90°		
	计算值	实验值	相对偏差*	计算值	实验值	相对偏差*	计算值	实验值	相对偏差*	计算值	实验值	相对偏差*
0.0595	1.000	1.000	0	0.895	0.930	-3.75	0.902	0.942	-4.25	0.958	0.933	+2.68
0.0800	1.000	1.000	0	1.102	1.080	+2.04	1.203	1.201	-0.166	1.185	1.100	+7.73
0.1221	1.000	1.000	0	1.169	1.176	-0.595	1.313	1.330	-1.28	1.273	1.208	+5.38
0.1364	1.000	1.000	0	1.170	1.120	+4.46	1.322	1.296	+2.01	1.295	1.169	+10.8
0.2763	1.000	1.000	0	1.101	1.128	-2.39	1.182	1.186	-0.337	1.179	1.167	-0.924
0.3029	1.000	1.000	0	1.086	1.114	-2.51	1.161	1.188	-2.27	1.172	1.190	+0.428
0.3560	1.000	1.000	0	1.100	1.088	+1.10	1.200	1.160	+3.45	1.180	1.175	+0.426
0.3839	1.000	1.000	0	1.118	1.036	+7.92	1.183	1.160	+1.98	1.154	1.168	-1.20
0.5110	1.000	1.000	0	1.076	1.083	-0.646	1.137	1.136	+0.0880	1.171	1.169	+0.171
0.6617	1.000	1.000	0	1.102	1.072	+2.80	1.079	1.137	-5.10	1.154	1.133	+1.85
0.8348	1.000	1.000	0	1.042	1.012	+2.96	1.118	1.083	+3.24	1.116	1.153	-3.21
1.1732	1.000	1.000	0	1.048	1.049	-0.00953	1.102	1.117	-1.35	1.086	1.134	-4.23
1.2745	1.000	1.000	0	1.058	1.034	+2.32	1.092	1.079	+1.20	1.129	1.129	0.00
1.3325	1.000	1.000	0	1.036	1.064	-2.63	1.070	1.096	-2.37	1.149	1.093	+5.12
2.6144	1.000	---	---	1.021	---	---	1.119	---	---	1.1092	---	---

\* 相对偏差(%)

# 闪光照相 1:1 静态样品的数值模拟

邹志高 梁德陪 李凯波

北京应用物理计算数学研究

**关键词** 闪光照相 照射量 能谱 散射

**摘 要** 本文计算和分析了 X 光源照射 1:1 静态样品在底片处形成的图像。分析了两类准直器的特点和照相的效果。分析了前后窗对照相图像的影响。给出了从 X 光源到底片处照射量的衰减因子,光源和底片处照射量的能谱,底片处照射量的空间分布,各部件对散射的贡献。

## 1 实验装置的布局和参数<sup>[1][2]</sup>

图 1 给出了转换靶,准直器,前窗,样品,后窗和底片的相对。图 2 和图 3 分别给出了两类准直孔的结构尺寸。

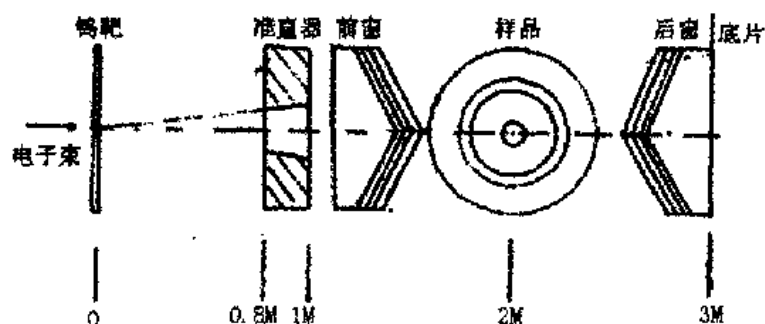


图 1 闪光照相实验装置示意图

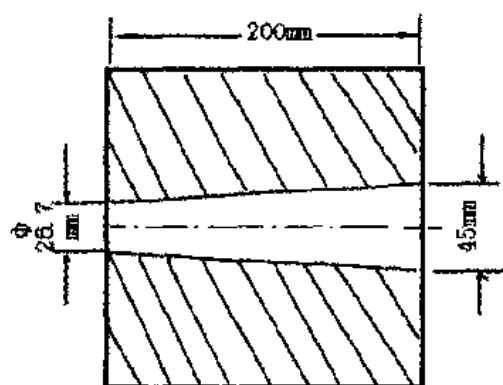


图 2 一般准直孔

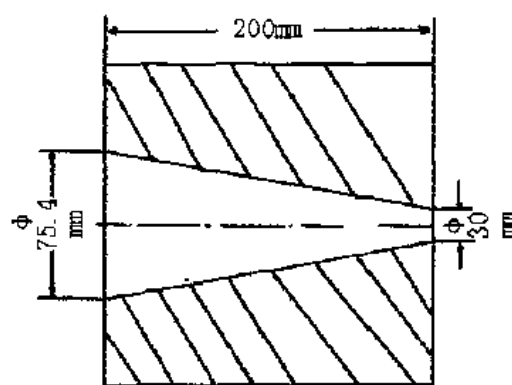


图 3 graded 准直孔

转换靶的材料用钨(W),厚度为  $\Delta = 0.762\text{mm}$ 。电子束的能量  $E_e = 17\text{MeV}$ ,样品的结构详购见表 1,我们计算了 4 个模型其差别见表 2。

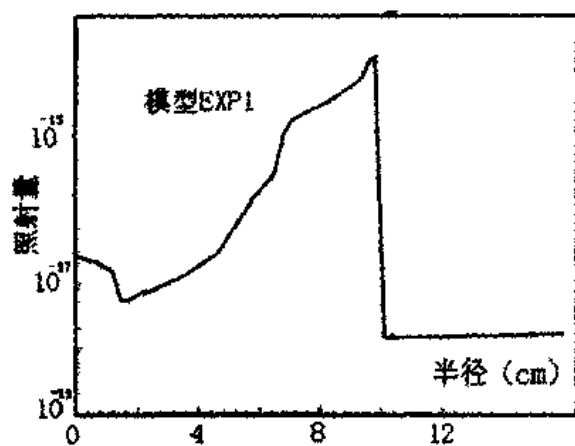


图6 底片处直穿照射量和散射量

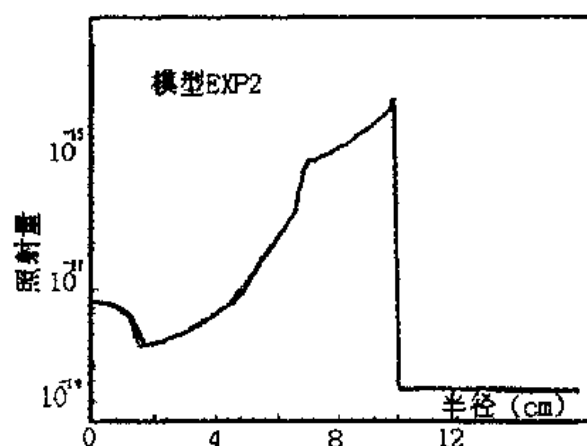


图7 底片处直穿照射量和散射量

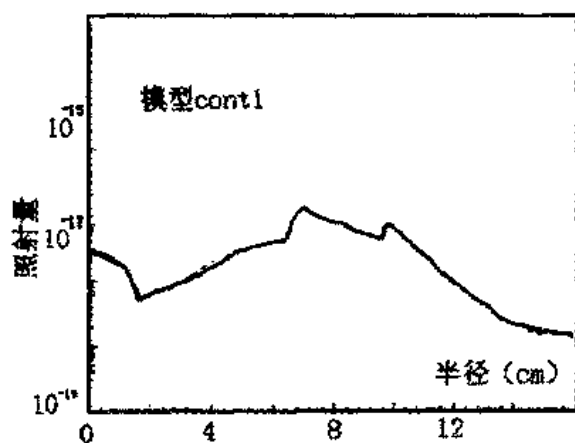


图8 底片处直穿照射量和散射量

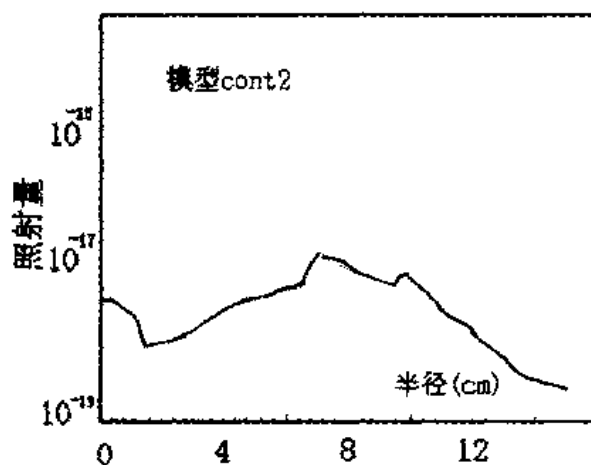


图9 底片处直穿照射量和散射量

表3 4个模型底片处的散直比和照射量的量程

模 型	(散射辐射/直穿辐射)中心	量程 = 最大直穿照射量/最小直穿照射量
exp1.一般孔无窗	8.0	53.00
exp2.一般孔有窗	31.5	5800
cont1.graded孔无窗	0.23	24.5
cont2.graded孔有窗	0.88	23.8

#### 4 各部件对散射的贡献

图10到图13分别表示了4个模型的各个部件对底片中心散射的贡献的百分率。后窗是散射的主要来源这是因为后窗离底片的距离很近。

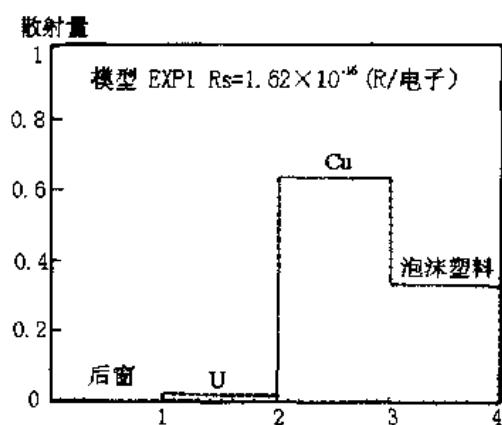


图 10 各部件对底片中心散射量百分率

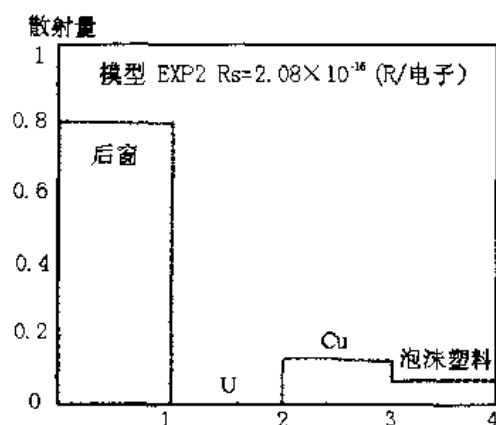


图 11 各部件对底片中心散射量百分率

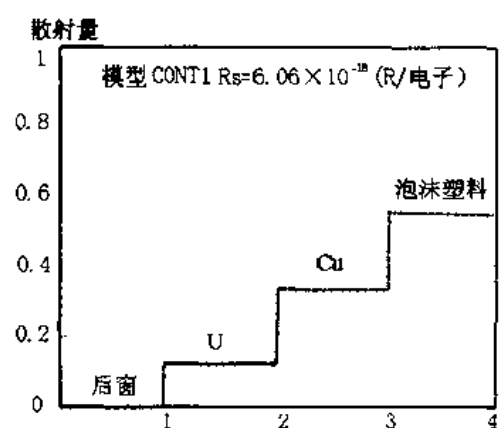


图 12 各部件对底片中心散射量百分率

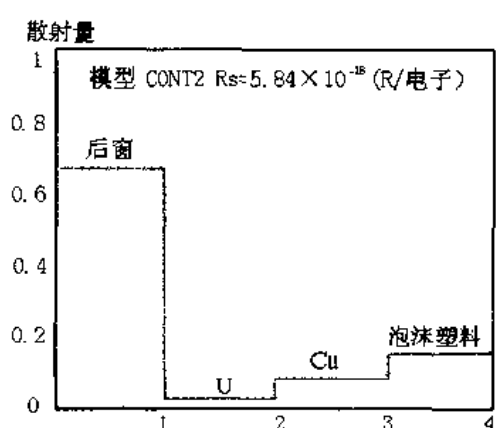


图 13 各部件对底片中心散射量百分率

## 5 底片中心的直穿能谱和散射能谱

图 14 到图 17 是各类模型底片中心的直穿照射量的能谱。图 18 到图 21 是散射照射量的能谱。

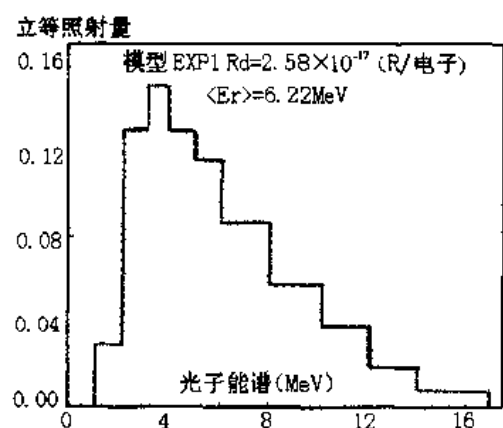


图 14 底片中心直穿照射量光子能谱

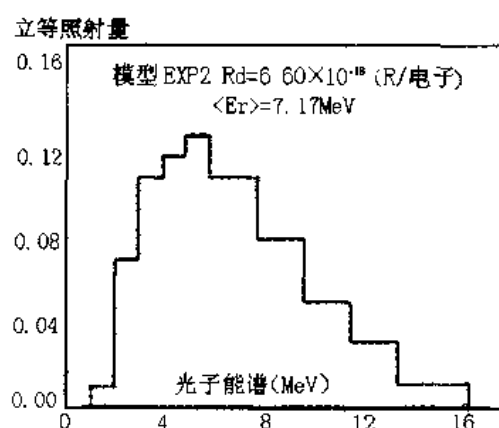


图 15 底片中心直穿照射量光子能谱



立等照射量

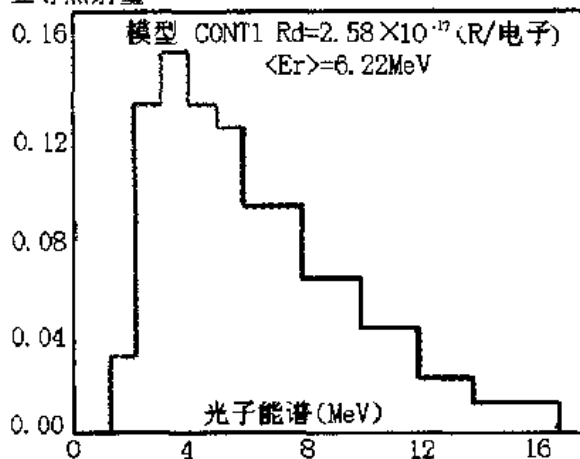


图 16 底片中心直穿照射量光子能谱

立等照射量

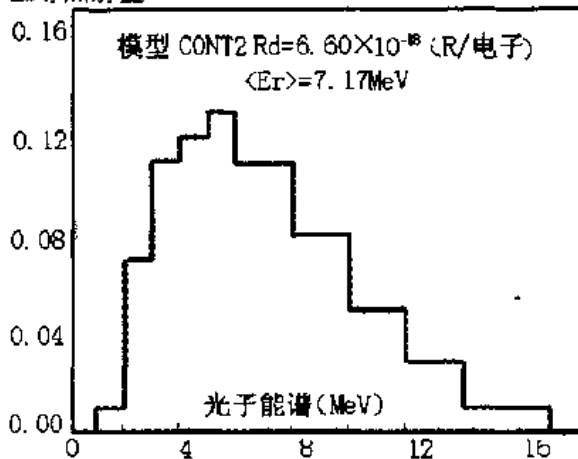


图 17 底片中心直穿照射量光子能谱

散射量

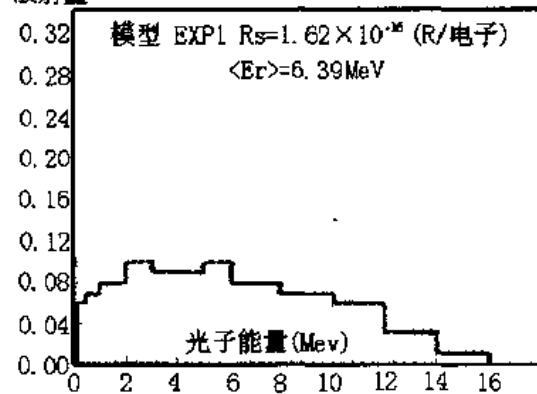


图 18 底片中心散射量光子能谱

散射量

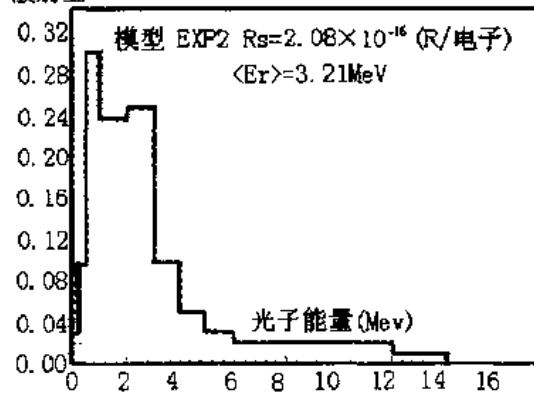


图 19 底片中心散射量光子能谱

散射量

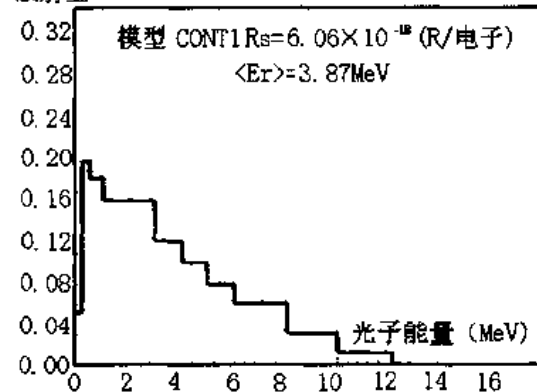


图 20 底片中心散射量光子能谱

散射量

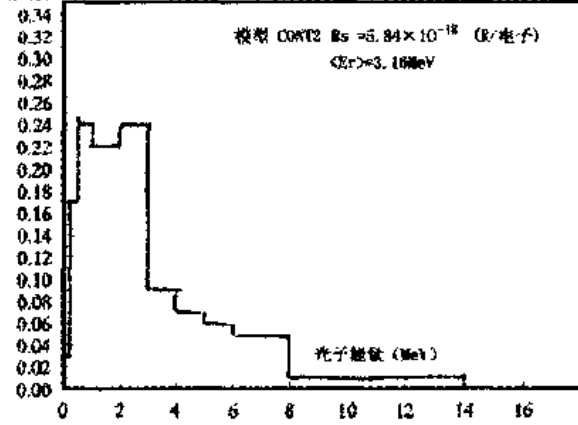


图 21 底片中心散射量光子能谱

表 4 比较了各类模型的直穿照射量和散射照射量的平均能量

测点位置(离光源的距离)		直穿照射量的平均能量 (MeV)	散射照射量的平均能量 (MeV)
1 m		6.06	/
3 m (底片中心)	exp1	6.22	6.39
	exp2	7.17	3.21
	cont1	6.22	3.87
	cont2	7.17	3.16

\* 1 伦 =  $2.58 \times 10^{-4} \text{C/kg}$

5.1 靶前 1m 远处照射量的平均能量  $\langle E_\gamma \rangle = 6.06 \text{MeV} \approx \frac{E_e}{3}$

5.2 有前后窗的模型底片处的直穿能谱较硬  $\langle E_\gamma \rangle = 7.17 \text{MeV}$  这是因为铀的质量吸收系数的极小值出现在  $E_\gamma = 4 \text{MeV}$  处  $\mu = 0.04 (\text{cm}^2/\text{g})$ , 而铅的  $\mu$  的极小值出现在  $E_\gamma = 18 \text{MeV}$   $\mu = 0.022 (\text{cm}^2/\text{g})$

5.3 散射的能谱较软  $\langle E_\gamma \rangle_{\text{散}} = 3.2 \text{MeV}$

exp1. 模型除外, 该模型的  $\langle E_\gamma \rangle_{\text{散}} = 6.39 \text{MeV}$  这是因为其他模型都要穿进几层介质经过多次散射才能到达底片, exp.1 模型散射的主要来源是铜, 光子与铜一次散射便可以到达底片。

## 6 样品的光学厚度, 前后窗的光学厚度

模型号	靶前 1m 远处照射量 (伦/电子)	底片中心处直穿照射量 (伦/电子)	样品的光学厚度 $\tau_{\text{样}}$	前后窗的光学厚度 $\tau_{\text{窗}}$	最大光学厚度 $\tau_M$
exp1	7.73(-13)	2.58(-17)	8.11	0	9.71
exp2	7.73(-13)	6.6(-18)	8.11	1.36	11
cont1	7.73(-13)	2.58(-17)	8.11	0	9.71
cont2	7.73	6.6(-18)	8.11	1.36	11

$$\tau_{\text{样}} = \ln \frac{7.73(-13)}{2.58(-17)3^2} = \ln 0.333 \times 10^4 = 8.11$$

$$\tau_{\text{窗}} = \ln \frac{2.58(-17)}{6.60(-18)} = \ln 3.91 = 1.36$$

$$\tau_{M1} = \ln \frac{7.73(-13)}{5.2(-18) \times 3^2} = \ln 0.1652 \times 10^5 = 9.71$$

$$\tau_{M2} = \ln \frac{7.73(-13)}{1.3(-18)3^2} = \ln 0.66 \times 10^5 = 11.1$$

## 7 结论

(1) 对于 1:1 样品和有前后窗的模型的最大光学厚度(沿着铀内介面的光路)  $\tau = 11$ , 物质衰减因子  $e^{-\tau} = 1/6.6 \times 10^4$ , 若底片离光源 4m 远则与靶前 1m 远处的照射是相比的几何衰减因子  $\frac{1}{R^2} = \frac{1}{16}$  总的衰减因子  $\eta = \frac{e^{-\tau}}{R^2} = 1.05 \times 10^{-6}$  这就要求光源有足够的强度, 探测器有

较高的灵敏度,噪音比较严重。

(2)与一般准直孔相比,graded 准直孔可以大幅度降低动态量程,使量程跨度小于 100 倍,这有利于将  $H-D$  曲线的工作区控制在线性范围以内(一般准直孔量程跨度超过 5000 倍)graded 准直孔可以大幅度降低散射,而且还有改进的潜力(一般准直孔散直比高达 30 倍而且无法大幅度减少)。

(3)光源的能谱约为电子能量的三分之一。

(4)前后窗的光学厚度  $\tau = 1.36$  可能更大,因为目前的前后窗是用于 1:1.5 样品照相用的,后窗是散射的主要来源占 70%,随着后窗材料的加厚散射也会加大。

## 参考文献

- [1] Michael j. George Karl H. Mueller The Use of the Monte - Carlo Method to Simulate High - Energy Radiography of Dense Objects LA - 11727 - MS January 1990
- [2] K. H. Mueller Collimation Technique for Dense Object Flash Radiography, 1984

# $^6\text{Li}$ 谱仪氚响应函数 M.C. 计算

吴建华 汪崇森 李润良

(中国工程物理研究院核物理与化学研究所 成都 525-71 信箱 610003)

**摘要** 采用 Monte Carlo 方法对 $^6\text{Li}$  夹心半导体中子探测器的氚响应函数进行计算, 计算时考虑了谱仪分辨、中子场中  $\gamma$  射线干扰等因素。

**关键词** 探测器 响应函数 计算

## 1 引言

$^6\text{Li}$  夹心半导体中子谱仪用两种技术测量中子能谱, 即“求和技术”和“氚分析技术”。氚分析技术是一较好的能谱探测技术, 主要用于测量较难测准的低能区中子能谱, 其测量下限可达到 keV 量级。

实验测得的氚谱经解谱后可求得中子能谱。解氚谱时必须知道氚响应函数。氚响应函数的物理意义是: 一个待测中子场下的单能中子, 进入探测器后, 被谱仪最终记录的各种可能能量氚粒子的概率分布。氚响应函数一般采用 Monte Carlo 计算获得。原则上讲, 氚响应函数也可由实验方法获得, 但一系列单色中子源获得十分困难。一般可由实验方法测得几个典型中子能点的氚响应函数, 用于对理论计算结果进行比较检验。

计算结果用于 CFBR - II 快中子脉冲堆中子能谱测量的数据处理。

## 2 物理条件

### 2.1 基本过程

$^6\text{Li}$  谱仪探头部分如图 1 所示。中子入射到 $^6\text{LiF}$  涂层上发生 $^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$  反应。入射能量为  $E_n$  的单能中子, 生成的  $\alpha$ 、T 粒子依一定物理运动规律飞出, 我们计算主二极管(涂 $^6\text{LiF}$ )记录到的氚分布。实验中主二极管记录到的不只是 T 粒子, 同时有  $\alpha$  粒子。氚分析技术为了能有较低的测谱下限和较宽的覆盖能区, 测谱上限定在  $E_n = 0.6\text{MeV}$ , 当  $E_n < 0.16\text{MeV}$  时, T 谱与  $\alpha$  谱自然分析, 但  $E_n > 0.16\text{MeV}$ ,  $\alpha$ 、T 谱互相叠加成混合谱。相应地我们计算的是这种  $\alpha$ 、T 混合分布, 严格地可称之为“ $\alpha$ 、T 混合响应函数”。

### 2.2 已知条件和假设

(1) CFBR - II 堆中心谱测量时, 探头置于堆心, 假定堆心中子场各向同性; 泄漏谱测量时, 探头置堆表面, 并使 $^6\text{LiF}$  涂层所在平面通过堆中心, 假定中子场平行 $^6\text{LiF}$  涂层面入射。

(2) 探测器对中子场扰动可以忽略。

(3)  $^6\text{LiF}$  涂层为圆盘型均匀分布靶, 半径 5.5mm 和 10.0mm 两种, 厚度  $0.078\text{mg}/\text{cm}^2$ 。

(4) 组装探头的半导体二极管是北京核仪器厂生产的 GM20VA 型, 灵敏面半径为 10mm, 金层厚度估算为  $0.019\text{mg}/\text{cm}^2$ ; 面对面紧放置时两二极管间距 1.6mm。

(5) 半导体二极管的本征分辨满足高斯分布, 标准偏差  $0.0114\text{MeV}$ 。

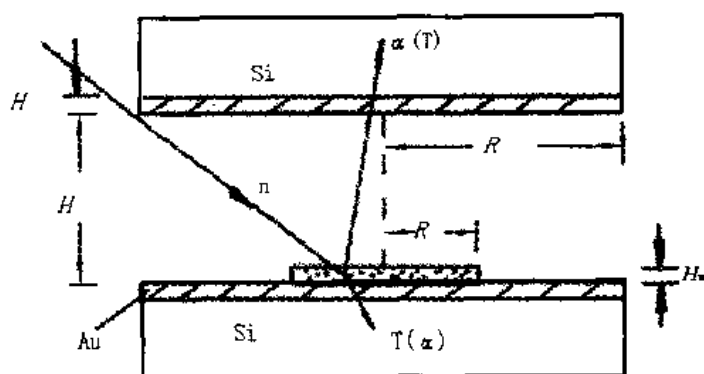


图1 探头结构示意图

$R_{Au}$ :探测器灵敏面半径;  $R_{Li}$ : ${}^6\text{LiF}$ 涂层半径;  $H_{2D}$ :两探测器间距;

$H_{Li}$ : ${}^6\text{LiF}$ 涂层厚度;  $H_{Au}$ :探测器Au层厚度。

(6)已知 $\alpha$ 、 $T$ 在Au和 ${}^6\text{LiF}$ 中的能量损失率。

(7)已知 $\gamma$ —场对探头分辨和谱仪电子学系统对探头输出信号分辨的综合影响。

(8)已知 ${}^6\text{Li}(n, \alpha)T$ 反应的角分布参数。

(9) ${}^6\text{Li}$ 谱仪测氟谱时下阈1.2MeV,上阈 $(\alpha + \gamma)$ 和脉冲幅度5.38MeV(相当于中子能量0.6MeV)。

### 3 随机抽样过程

#### 3.1 中子能量及入射方向

(1)中子能量:在0.0~1.0MeV能区内均分101个能点,先任取一能点。

(2)中子入射方向:建立标准球坐标系 $(\alpha, \gamma, z)$ ,定义中子入射角 $\theta_n, \varphi_n$ 。

a. 中子各向同性入射(堆内), $\theta_n, \varphi_n$ 随机抽样:

$$\theta_n = \cos^{-1}(2\zeta_1 - 1) \quad (1)$$

$$\varphi_n = 2\pi\zeta_2 \quad (2)$$

$\zeta$ 是(0,1)内均匀分布随机数。

随机数均来自“乘同余法”产生的伪随机数。

b. 中子平行入射(堆外), $\theta_n, \varphi_n$ 取定值:

$$\theta_n = \pi/2 \quad (3)$$

$$\varphi_n = 0 \quad (4)$$

#### 3.2 反应点

${}^6\text{LiF}$ 靶可视为一圆柱体,高度为 $H_{Li}$ ,半径为 $R_{Li}$ ,反应点在圆柱内均匀分布。

#### 3.3 $\alpha$ 、 $T$ 在质心系中的出射角

角分布参数介绍

${}^6\text{Li}(n, \alpha)T$ 反应的氟角分布在质心系中以勒让德函数展开描述为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = B_0(E_n) + B_1(E_n)\cos\theta_c + \frac{1}{2}B_2(E_n)(3\cos^2\theta_c - 1) \quad (5)$$

其中参数  $B_0(E_n)$  描述了各向同性项,其数值由微观截面  $\sigma_{n,\alpha}(E_n)$  给出:

$$B_0(E_n) = \sigma_{n,\alpha}(E_n)/4\pi \quad (6)$$

$B_1(E_n)$ 、 $B_2(E_n)$  是描述各向异性发射的参数,其数值大小反映了反应产物前冲的程度。

实际计算时作如下考虑:先不考虑上述角分布的绝对大小,因为它只涉及  ${}^6\text{Li}(n,\alpha)\text{T}$  反应已经产生,那么产物 T 在  $4\pi$  全空间内出射概率为 1。

(1) 对  $\varphi_T$  直接抽样

$$\varphi_T = 2\pi\zeta \quad (7)$$

(2) 用舍选法对  $\theta_T$  抽样

$$(B_0 + B_1 + B_2)\zeta \leq B_0 + B_1(2\zeta - 1) + \frac{1}{2}B_2(3(2\zeta - 1)^2 - 1) \quad (8)$$

$$\theta_T = \cos^{-1}(2\zeta - 1)$$

$\alpha$  粒子与 T 反向。

### 3.4 质心系—实验室系坐标变换

质心系中确定的各变量:T、 $\alpha$  粒子的速度  $V_T$ 、 $V_\alpha$ ,质心速度  $V_C$ 。

实验室系中各变量:T、 $\alpha$  粒子的速度,出射方向和能量。

### 3.5 标准球坐标系下 $\alpha$ 、T 的方向

建立一个标准球坐标系(即中子入射方向所采用的坐标系),将依赖于中子方向的坐标系下的  $\alpha$ 、T 方向参数变换到标准球坐标系中。

### 3.6 几何符合判据

谱仪记录系统要求  $\alpha$ 、T 能被主、副二极管同时记录(符合),根据探头几何条件、反应点坐标以及  $\alpha$ 、T 出射角,进行符合记录的几何判别。几何符合记录的依据是,T(或  $\alpha$ )进主二极管同时  $\alpha$ (或 T)进副二极管,符合为真;否则为假。

### 3.7 $\alpha$ 、T 穿越 ${}^6\text{LiF}$ 和 Au 层后剩余能量

$\alpha$ 、T 穿透  ${}^6\text{LiF}$  和 Au 层时受到阻滞而能量受损,这里计算 T(或  $\alpha$ )穿越  ${}^6\text{Li}$  和 Au 层进入主二极管后的能量(进入副二极管前能损被忽略)。T(或  $\alpha$ )斜穿涂层侧柱面进入二极管此类边界数应不予考虑。

为了与多道分析器的记录方式一致,能量须转化为整型值(归入某道)。

### 3.8 $\gamma$ -场对分辨影响修正

影响 T( $\alpha$ )脉冲幅度分辨的因素有三:半导体本征分辨、谱仪电子学系统分辨以及  $\gamma$ -场干扰引起的分辨。半导体本征分辨相对很好,可以不考虑。谱仪电子学系统的噪声等对信号分辨也会有些影响。我们将它与下述  $\gamma$ -分辨一并处理。 $\gamma$ -场与半导体探测器的作用机理较为复杂,理论上计算  $\gamma$ -场的影响是困难的。我们用实验方法获得了  $\gamma$ -分辨和谱仪电子学系统分辨的“综合分辨函数”。计算时用该综合分辨函数对氚能量进行修正。

$\gamma$ -分辨函数可表示为  $R_\gamma(N)$ ,把它转化为概率分布函数  $S(N)[0,1]$ ,在  $(0,1)$  内产生

一随机数  $\xi$ , 如果  $\xi$  落在  $S(M)$  与  $S(M+1)$  之间, 则 T(或  $\alpha$ ) 的能量相应落入  $M$  道址内。这就是 T(或  $\alpha$ ) 的最终能量(道数), 结果记录方式为:

$$\begin{aligned} MT(M) &= 0 \\ MT(M) &= MT(M) + 1 \end{aligned} \quad (9)$$

至此, 一次随机抽样过程结束。如此反复多次, 则可得到 T(含  $\alpha$ ) 能量分布, 这就是某中子能量下的氚响应函数, 计算结束。

以上求得的氚响应函数未考虑中子与  ${}^6\text{Li}$  反应的绝对数率, 为此在应用时还必须考虑与效率有关的  ${}^6\text{Li}$  核子总数和反应截面。

改变中子能量, 重复上述过程, 则可得到一系列中子能量下的氚响应函数。

#### 4 计算方法和使用参数检验

一般通过与实验方法测得的某些能点中子的氚响应函数比较来检验计算的正确性, 另外, 应用到解谱时也能反映出氚响应函数计算是否正确。由实验测得的热中子氚响应函数与计算结果相当一数, 见图 2, 这证明计算方法是正确的。热中子氚响应函数中不用考虑  ${}^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$  反应角分布参数, 用此不能检验其他中子能量下所用角分布参数是否恰当。反应堆上没有其他单能中子源, 在加速器上可产生某些能点的单能中子。氚响应函数计算中采用了 Mahaux 角分布数 (其他还有 Bluet, Rickard 和 Fort 参数)。用 250keV 中子垂直入射探测器时的实验值与计算值较好一致。

#### 5 结论

计算得到了  ${}^6\text{Li}$  夹心半导体谱仪在 CFBR - II 堆堆内、堆外测量时的氚响应函数, 中子能量范围 0.0 ~ 1.0MeV。图 2 显示几个典型中子能量下氚响应函数的计算结果和实验值。通过计算, 为中子能谱测量所采用的氚分析技术提供了一组较为精确的氚响应函数。它的值用较成功地解出了

低能段中子能谱。为进一步提高中子能谱低能段测量的精确性, 氚响应函数的计算还需在中子入射方向上作真实的模拟, 同时也期待有更好的  ${}^6\text{Li}(n, \alpha)\text{T}$  反应的角分布参数。

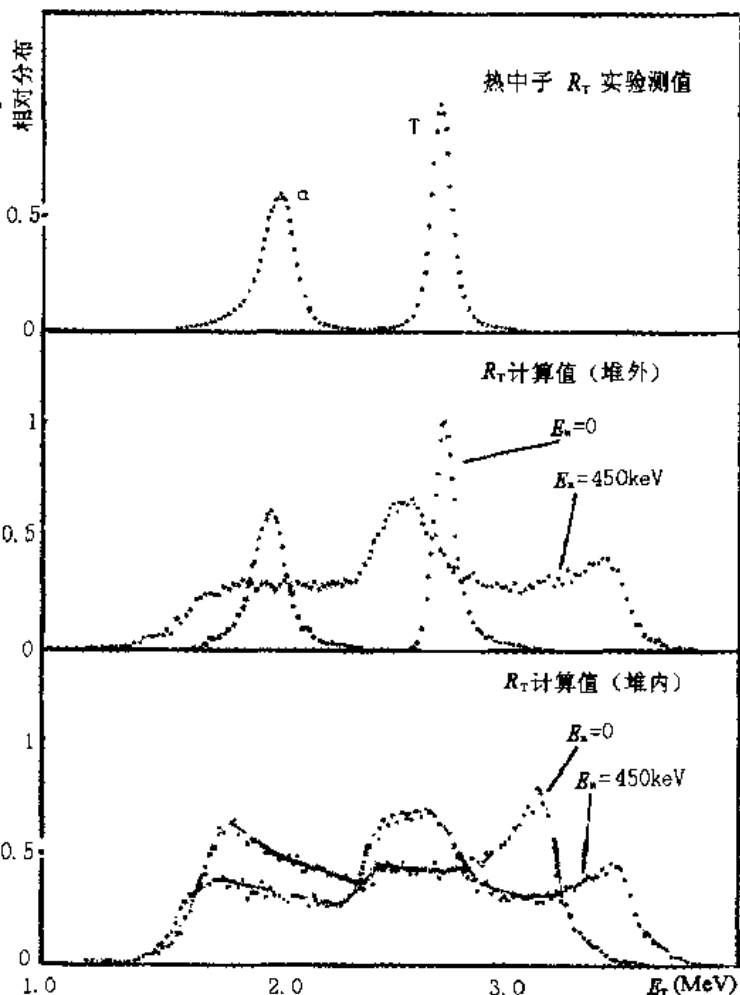


图 2 典型中子能量氚响应函数  $R_T$  计算与实测结果

## 参考文献

- [1] I. C. Rickard. Nuclear Instruments and Methods, 1972, 105:397
- [2] M. G. Silk, et al. AERE - R6060, 1970
- [3] 二机部核数据中心. 评价中子数据汇编, 北京: 原子能出版社, 1978
- [4] 吴建华等. CFBR - II 堆中子能谱测量, 1994



# 重水球慢化 $^{252}\text{Cf}$ 刻度装置的谱特征

宁静 郑金美

(北京市射线应用研究中心, 北京, 100012)

**摘要** 根据 ISO8529 推荐, 设计了中子个人剂量计的刻度标准, 即半径 15cm 重水球慢化 $^{252}\text{Cf}$ 刻度装置, 对球表面不同区域的能量分布及平均能量用 Monte Carlo 方法进行了计算, 证明了球面谱分布均匀。

**关键词** 重水球慢化 $^{252}\text{Cf}$  谱分布 平均能量

## 1 前言

根据 ISO8529 的推荐, 在半径 15cm 的重水球中心放置一个 $^{252}\text{Cf}$ 裂变中子源, 作为中子个人剂量计的刻度标准装置。这个设想最早是 Schwartz 和 Eisenhauer 提出的, 他们发现此装置的中子能谱与核反应堆中子泄漏谱很接近, 通过 Monte Carlo 计算, 选择了重水球半径为 15cm。在美国标准局(NBS)建立了如下装置(图 1), 采用 0.8mm 厚的不锈钢作为容器的外壳, 球中间有一根上下贯通的不锈钢管, 中子源置于管中间, 并且管内也充满重水。我们在设计过程中, 根据实际情况做了一些修改, 采用厚 1mm 的不锈钢作外壳, 用跑兔方法将中子源从储存室打到球心。这种设计由于球内的管未充满重水, 球的均匀性受到一定影响, 因此我们用 Monte Carlo 方法对球表面能谱的分布情况进行了计算。

## 2 计算方法

图 2 是计算重水球慢化 $^{252}\text{Cf}$ 的装置。将球面划分为 4 个环形带, 通过 4 个区域泄漏的能谱及平均能量, 就能看出球面能量分布的均匀性。球面与球心的连线与不锈钢管的夹角定义为  $\theta$ , 由于上下半球对称,  $\theta$  依次取  $25^\circ$ 、 $50^\circ$ 、 $75^\circ$ 、 $100^\circ$ 。在  $25^\circ$  环形带上, 球面不包括不锈

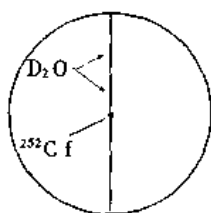


图 1 重水球

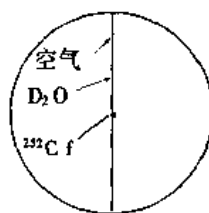


图 2 重水球慢化 $^{252}\text{Cf}$ 装置

钢管与聚乙烯接口部分。中子源体积很小, 可以看作是一点源, 各向同性,  $^{252}\text{Cf}$  的平均能量为 2.2MeV, 谱分布从 100keV 到 10MeV 为

$$B_E = \frac{2}{\sqrt{\pi} T^{3/2}} \times \sqrt{E} \times e^{-E/T} \times B$$

其中  $T = 1.42\text{MeV}$ , 谱图如下:

计算采用的是美国橡树岭的 MORSE 程序, 跟踪了 100,000 个中子。中子从球中心出发, 经过反复碰撞, 通过重水及不锈钢外壳, 或者逃出球壳或者变成热中子, 在这个过程中, 中子除了有吸收过程, 还有中子与 D、O 和 Fe 的各向异性弱性散射, 与 O 和 Fe 各向异性非

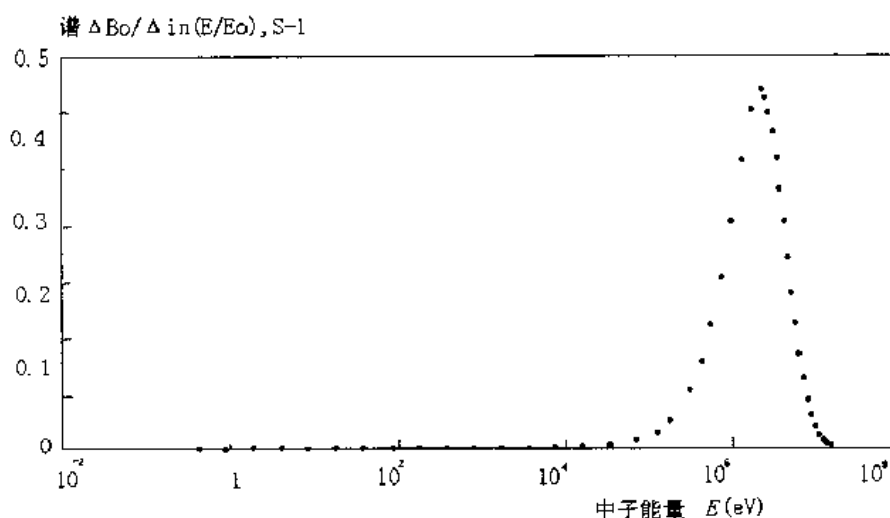


图3 谱图

弱性散射,与 O 和 Fe 的各向同性非弱性散射及与 D 和 Fe 的(n,2n)反应。

### 3 重水慢化<sup>252</sup>Cf 的谱分布

图4下面的4条曲线是从定义的4个区域表面泄漏出来的能谱,纵坐标是源强/能量间隔的对数/中子总数。从图中可以清楚地看出4条谱的形状完全相同,有一些细小的差别可以看做是 Monte Carlo 计算的统计误差。

图4最上面的曲线是从整个球泄漏出来的球表面的能谱。比较图4的5条曲线不难看出从球的不同区域出来的能谱与从整个球泄漏出来的能谱相同。这说明整个球面的谱分布均匀。

从4个区域及整个球面泄漏谱的平均能量分别为

$\theta$	平均能量(MeV)
25°	0.445
50°	0.442
75°	0.439
100°	0.437
整个球面	0.439

最大最小值之间差为1.8%,这说明各个区域的平均能量也没有明显的差别。因此可以得出结论:虽然球中间有不锈钢管,但球面能谱分布均匀,在球的任何部位中子能谱区别是可以忽略。但在实际操作中由于球的下端需要支架支撑,且支架和聚乙烯管均会对中子产生散射,因此建议采用不锈钢与聚乙烯管接口朝上的方式摆放重水球,来用 $\theta$ 为45°~135°之间的区域作为剂量计的刻度方向,这样受散射影响比较小。

# 二维随机摆放过程的计算机模拟

王仲奇

(中国原子能科学研究院)

**摘要** 作为随机几何模型的比对模型,也作为处理随机几何问题的一种手段。我们模拟了圆的随机模放过程。

在研究随机几何问题的过程中<sup>[1]</sup>,我们有可能利用计算机基于某些数学或物理方法来模拟颗粒物质堆放和自发调整过程,使容器中颗粒物质所占比例以及均匀程度,近似于实际的随机堆放。这样得到的数量,在一定程度上可以体现实际的真实情况,已知的几何特征参数又使得我们可采用经典的蒙特卡罗方法对其加以研究。

因此,随机摆放过程的模拟,既可以作对随机几何问题处理的一种近似,又为我们研究随机几何模型提供重要的比对模型<sup>[2]</sup>。

对随机摆放过程的模拟,就是寻找颗粒物质的几何特征集,使得由此构造出来的颗粒物质在容器中的空间摆放,满足某些限制(如任意两颗粒物质几何交叉的禁止,边界的限制以及一些基本的物理条件),达到一些要求(如颗粒物质所占体积比例的要求以及均匀度的要求)。

一般颗粒物质的随机摆放,是一个相当复杂的过程。作为基础,我们首先考虑二维圆的随机摆放:在正方形中对相等半径的圆进行随机摆放。

在边长为2的正方形中,摆放半径为 $r=0.1, 0.05, 0.01$ 的圆。这里我们给出一些基半数据。对于正格点摆放,分别可摆放100,400和10000个圆,当 $r=0.1$ 时,甚至可以达到105个。由此可想象,即便对二维情况,随机摆放也有一定难度。

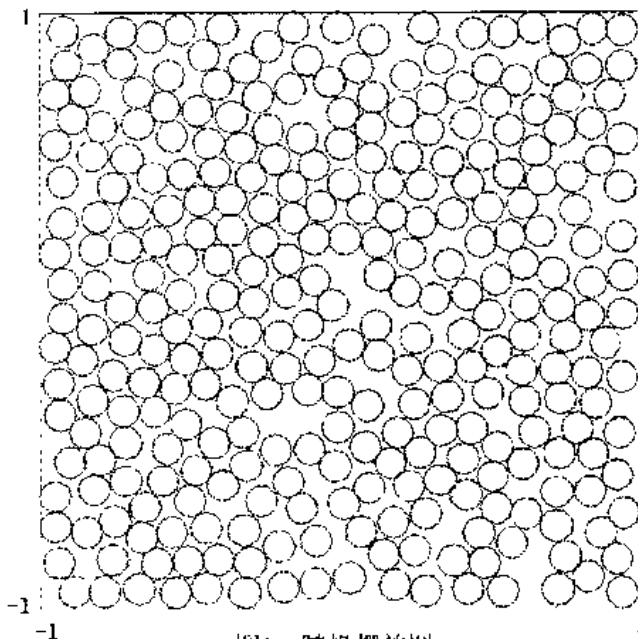


图1 随机摆放图

$$y_n^{(k)} = x_{l(n-1)+k}, n = 1, 2, \dots; k = 1, \dots, l$$

例如:取  $l = 12$ , 则

$k = 1, \{y_n^{(1)}\}$  序列为  $\{x_1, x_{13}, x_{25}, x_{37}, \dots\}$

$k = 2, \{y_n^{(2)}\}$  序列为  $\{x_2, x_{14}, x_{26}, x_{38}, \dots\}$

$k = 3, \{y_n^{(3)}\}$  序列为  $\{x_3, x_{15}, x_{27}, x_{39}, \dots\}$

$k = 12, \{y_n^{(12)}\}$  序列为  $\{x_{12}, x_{24}, x_{36}, x_{48}, \dots\}$

检验表明用此法产生的随机数子序列彼此相互独立,用不同随机数子序列进丢失 Monte Carlo 计算结果与原串行程序结果基本一致。

## 2.2 程序结构分析

我们知道,一般满足如下三原则的程序适合作并行计算:

- (1)数据独立;
- (2)大粒度循环;
- (3)负载平衡。

而并行加速比是检验并行效率的主要手段,它是由问题中纯计算量所占百分比决定的,表 1 给出了由计算占整个问题计算时间的百分比  $p\%$ ,推测并行加速比可几值的估计关系。

表 1 根据计算效率  $p\%$  推测可能的并行加速比

	2	4	8	16	32	64
50%	1.33	1.60	1.78	1.9	1.9	2.0
75%	1.60	2.29	2.91	3.4	3.7	3.8
90%	1.82	3.08	4.71	6.4	7.8	8.8
95%	1.90	3.48	5.93	9.1	12.5	15.4
99%	1.98	3.88	7.48	13.9	24.4	39.3

其中:  $N$  为处理器数

MCNP 是由美国 Los Alamos 国家实验室研制的一个大型多功能、三维几何的中子 -  $\gamma$  耦合输运 Monte Carlo 程序<sup>[1]</sup>,它满足并行计算的三个条件,适合作并行计算。3B 版程序的压缩形式共有 28415 行源码,涉及约 20 个通道,251 个子程序,27 个外部承数,由五个覆盖节组

成,基本结构如下:MCNP CALL -

IMCN	{	MCRUN	TRNSPT	
PLOT			{	OUTPUT
XACT				
MCPLOT				

其中:IMCN 为输入模块;PLOT 为输入绘图模块;XACT 为数据模块;MCRUN 为输运计算 (TRNSPT)和结果输出(OUTPUT)模块;MCPLOT 为计算结果绘图模块。

MCNP 程序诞生于八十年代初期,由于受当时计算机内存限制,从节约空间和内存考虑,程序设计中使用了覆盖结构、可调数组、动态可调数组,等价语句等。这些经济做法对串行程序非常有效,但给并行改造带来了诸多不便。在做 SMP 并行改造中遇到了很多困难,

程序展较大。相比之下,PVM 系统对程序具有较好的宽容性,对程序编法、语句格式要求不多,更没有 SMP 那样苛刻,非常适合于 MCNP 这类早期程序作并行改造。

为了预测并行效率,在作串行程序并行改造前,通过串行程序样本问题的计算,测出待并行部分在计算中所占机时百分比,经多个问题的测试显示,当样本数较大时,TRANSPT 计算量占 MCNP 整个计算量的 99%,由表 1 给出的并行加速比预估值,可断言并行化后的 MCNP 程序的加速比会很高,事实证明了这一点。

PVM 程序由 Master 和 Slave 组成,Master 为总控程序(串行做),负责任务的分发、数据传递和接受来自 Slave 的信息;Slave 为 Master 的下属分支,专门执行计算<sup>[2]</sup>。为节约计算机资源,提高计算效率,并行编程应尽量考虑把 I/O 部分和计算以外内容放在 Master 做。

### 3 PVM 版 MCNP 程序计算结果及其加速比

选用 MCNP 3B 基准问题中较有代表性的 4 个问题作为例题,作了串行程序与并行程程序的对比计算,基准问题 1、2、4、11 值用样本数分别为 360 万、180 万、120 万和 600 万,表 2,表 3 分别给出了两者的计算结果和计算时间对比;表 4,表 5 给出了并行程程序在 XXX 计算机上分别用 1、2、4、8、12 个处理器得到的每个问题的加速比以及平均加速比。加速比估计使用下面公式

$$S(P) = T_s / T_m(P)$$

其中:  $T_s$  为并行程程序 1 个处理器下完成计算任务所花 CPU 时间;  $T_m(P)$  为 PVM 并行 Master 用  $P$  个处理器完成计算任务所花 CPU 时间;

表 4 所列加速比是按上述公式计算的。另外,在表 5 中给出了另一种加速比,它是相对串行程序计算时间给出的。图 1 给出了两种情况下加速比与处理器的关系。

表 2 MCNP 与 PVM 版 MCNP(12 个处理器)样本问题结果对比

中子流		中子点通量		问题 1	
平均结果	相对误差	平均结果	相对误差		
8.21540E-1	0.0007	1.39001E-3	0.0039	串行	
8.21500E-1	0.0007	1.38183E-3	0.0033	并行	
中子面通量		中子体通量		问题 2	
2.8603E-3	0.0012	2.84218E-3	0.0055	2.85537E-3	0.0016
				串行	
2.85231E-3	0.0012	2.85359E-3	0.0055	2.85857E-3	0.0016
				并行	
$\gamma$ 体通量		$\gamma$ 沉积能		问题 4	
2.23634E-3	0.0002	1.75911E-4	0.0001	串行	
2.23815E-3	0.0002	1.76012E-4	0.0001	并行	
中子体通量		次级 $\gamma$ 流		问题 11	
1.74442	0.0044	1.09364E-1	0.0065	串行	
1.74285	0.0045	1.08465E-1	0.0066	并行	

表3 MCNP 与 PVM 版 MCNP 不同处理器时间对比

处 理 器 数	MCNP 样本问题计算时间(分)			
	问题 1	问题 2	问题 4	问题 11
串行	10.65	16.69	14.28	24.36
1	12.09	16.76	15.01	21.31
2	6.05	8.43	7.51	10.64
4	3.01	4.22	3.77	5.32
8	1.50	2.10	1.89	2.66
12	1.01	1.41	1.28	1.75

表4 MCNP 在 XXX 计算机 12 个处理器上的加速比

处 理 器 数	问题 1	问题 2	问题 4	问题 11	平 均
2	2.00	1.99	2.00	2.00	2.00
4	4.02	3.97	3.98	4.01	4.00
8	8.06	7.98	7.94	8.01	8.00
12	11.97	11.89	11.73	12.18	11.94

表5 MCNP 并行相对串行在 XXX 计算机 12 个处理器上的加速比

处 理 器 数	问题 1	问题 2	问题 4	问题 11	平 均
2	1.76	1.99	1.90	2.29	1.99
4	3.54	3.95	3.79	4.58	3.97
8	7.10	7.95	7.56	9.16	7.94
12	10.54	11.84	11.17	13.93	11.87

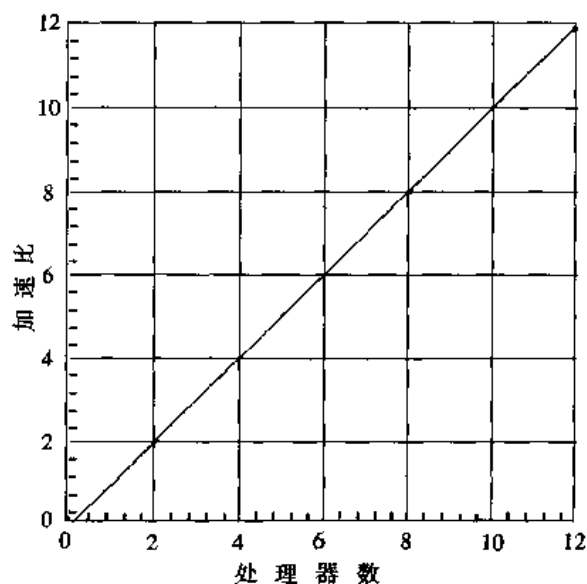


图1 MCNP 在 XXX 计算机 12 个处理器上加速比

## 4 结论

计算比较显示,PVM 版 MCNP 3B 程序在 XXX 并行机 12 个处理器的计算结果与原串行程序结果相符,两种方式给出的加速比曲线基本重合且均呈线筒增长,计算效率为 99%。

## 5 感谢

本人在开展并行计算中,得到了 YYY 公司孟念清先生的大力协助,特别是他为 XXX 并行机装上了 PVM 系统以及可视化分析软件,在我作 MCNP 串行程序的 SMP 并行化中得到了他的很多帮助和建议,付出了很多心血,使我从中受益非浅。借此,向他表示感谢!

## 参考文献

- [1] “MCNP-Ageneral Monte Carlo COde for Neutron and Photon Trnsport, Version 3A”, LA-7396-M, Rev. 2, Los Alamos Nation al Lab. (1986).
- [2] “网络并行计算与分布式编程环境”,孙家昶等编著,北京:科学出版社(1996).
- [3] IEEE, Trans. on Nuclear Science, Vol. 39, No. 4, p1035-1040
- [4] 《并行计算方法》下册,王嘉谟、沈毅主编

# 略论 MCNP 程序中的蒙特卡罗技巧 及其不足\*

裴鹿成

(中国原子能科学研究院)

**摘要** MCNP 是世界上最著名的超级蒙特卡罗程序,其能力之强,应用之广泛,含蒙特卡罗技巧之多,是任何其他蒙特卡罗程序所无法比拟的。本文分点通量计算、面与体通量计算、编倚抽样技巧、分裂与赌技巧、微扰计算、其他的问题与技巧等六个方面的内容,分别概述了 MCNP 程序中所含的主要蒙特卡罗技巧及其不足,提出了若干其他蒙特卡罗技巧,用这些技巧可以解决 MCNP 程序所遇到的一些无法克服的困难。

## 1 引言

MCNP 是美国 Los Alamos 实验室应用理论物理部的蒙特卡罗小组研制的大型蒙特卡罗中子、光子和电子输运程序,可以用于计算中子、光子和电子或它们的耦合输道问题,也可以用于计算核临界(包括次临界与超临界)问题。

MCNP 程序可以处理任意三维材料结构的粒子输运问题,几何区域的界面可以是平面、任意二次曲面和椭圆旋转环面。几何区域中的材料可以由任意多种同位素组成。

MCNP 程序使用精细的点截面数据。考虑了 ENDF 截面库给出的所有中子反应类型,对于热中子,可选用自由气体或  $S(\alpha, \beta)$  两种模型之一处理。对于光子,考虑了相干与非相干散射,并处理了光电吸收之后可能有的荧光发射及电子对产生后的就地韧致辐射光。对于电子的考虑也是非常全面的。

MCNP 程序凝聚了作者们所掌握的几乎全部重要的蒙特卡罗技巧,其中包括有,计算点通量的下次事件估计(NEE)技巧,多一次碰撞通量估计(OMCFE)技巧;计算体通量的径迹长度技巧;解一般问题的指数变换技巧、DXTRAN 技巧、分裂与赌技巧;解微扰问题的相关抽样技巧,等等。本文的第一个目的是想说明,用这些蒙特卡罗技巧可解决的问题是有条件的,其中绝大多数技巧的运用需要用户确定其中的有关参数,如果技巧的选用或参数的确定不当,不仅不会对问题的解决有帮助,反倒有可能被引入歧途。

MCNP 程序中的蒙特卡罗技巧虽然很多,也很全,但仍然没有很好地解决在用蒙特卡罗模拟实际问题时所遇到的困难,例如,它在解决“小概率大贡献”问题时,计算结果常低于真值;计算点通量问题时,存在估计量无界问题;在关心两个相近问题的差别时,分别计算这两个问题的误差常大于两个问题的差别,等等。本文的第二个目的是想在指出 MCNP 程序这一不足的同时,提出若干其他的蒙特卡罗技巧,用这些技巧虽然不可能从根本上解决在模拟实际问题时 MCNP 程序所遇到的全部困难,但在解决这些困难方面将会有突破性的进展。

\* MCNP 程序的最新版本 MCNP-4B 定于 1997 年才公开的。本文所述的 MCNP 程序主要是指 3B 版本。本文所指出的 3B 版本不足之处如果在 4B 版本中已经得到了解决,则将在本文适当处的注释的方式加以说明。



## 2 点通量计算

MCNP 程序中有关计算点通量的蒙特卡罗技巧总共有 3 种,它们分别是下次事件估计(NEE)技巧、多一次碰撞通量估计(OMCFE)技巧和环探测器记录技巧。

下次事件估计技巧即指向概率技巧,该技巧的基本原理是,对于由源发射的或碰撞的每一粒子,确定它的方向正好向着探测点的概率,源发射点或碰撞点到达探测点不再发生碰撞的概率,该粒子于此源发射点或碰撞点对探测点的通量贡献正好等于这两个概率的乘积。用  $\rho$  表示源发射点或碰撞点到探测点的距离,由于下次事件估计中存在着因子  $1/\rho^2$ ,因此,只要在探测点附近存在散射物质,下次事件估计就一定无界的,而且,其方差也是无界的。由此可见,下次事件估计技巧虽然原则上适合于解决所有点通量计算问题,但不可简单地用来解决探测点附近存在散射物质的问题。

多一次碰撞通量估计技巧的基本原理是,对于由源发射的或碰撞的每一粒子,为计算它再经过一次碰撞对探测点的通量贡献,变其间的碰撞为虚拟碰撞,选择一个抽取虚拟碰撞点的合适的分布,可使这个估计由下次事件估计技巧的  $1/\rho^2$  的奇异性变成  $1/\rho$  的奇异性。多一次碰撞通量估计技巧的优点是,虽然它的估计量仍然是无界的,但方差却是有界的,适于解决探测点附近存在散射物质情况。它的缺点是,估计量仍然是无界的,虚拟球的半径难以确定,计算量明显变大。

环探测器记录技巧的基本原理是,利用探测点的柱面对称性,用计算柱面的面通量代替对探测点的通量计算。环探测器记录技巧的优点是,同多一次碰撞通量估计技巧相似,它的估计量虽然是无界的,但方差却是有界的,即使同下次事件估计技巧比较,其计算量也明显变小。它的缺点是,估计量仍然是无界的,实际问题中很少存在有满足柱面对称条件的问题。

据以上所述,我们已经看到,由 MCNP 程序提供的仅有的 3 种计算点通量的技巧,无论是哪一种,其估计量都是无界的。由于一方面是估计量无界,另一方面是它的散学期望有界,因此,估计量无界属于“小概率大贡献”问题。就是说,由 MCNP 程序提供的计算点通量的 3 种技巧,除非是解决一些特殊的问题,都是比较差的技巧。

为了解决计算点通量的估计量无界问题,至少有如下 4 种技巧是成熟的,它们分别是,建立在碰撞概率方法基础上的方向偏倚抽样技巧<sup>[1,2,3]</sup>和多重方向偏倚抽样技巧<sup>[1,2,3]</sup>、体通量替代技巧<sup>[2,3]</sup>和伴随技巧<sup>[2,3,4]</sup>。

碰撞概率方法的基本原理是,在散射角确定的情况下,确定这样的碰撞点与散射方位角,使得此粒子恰好可经过一次散射后经过探测点。方向偏倚抽样技巧是在碰撞概率方法基础上,对散射方向进行偏倚抽样。此技巧的优点是,技巧的实施简单,在原碰撞点不与探测点重合的情况下,估计量是有界的。缺点是,它没有完全解决估计量无界问题。

建立在碰撞概率方法基础上的多重方向偏倚抽样技巧的基本原理是,对粒子所有碰撞点散射方向进行偏倚抽样。此技巧的优点是,技巧的实施简单,估计量是有界的。缺点是,由于对所有碰撞点的散射方向均进行了偏倚抽样,统计涨落常大于按原散射方向分布的抽样。

在实际问题中,往往并不需要计算点通量,而是需要计算某探测器的通量,由于这些探测器相对于整个系统而言都非常大,因此,可通过计算其上的点通量替代。本意是想将问题

非常简便,可以得到非常理想的结果,可以用它替代对点通量的计算。缺点是,在实际问题中属于球形的探测器极少。

指向柱技巧的基本原理与指向球技巧几乎完全一样,所不同的仅仅是,一个是计算确定对球所张立体角并于其中进行均匀抽样,一个是计算确定对柱所张立体角并于其中进行均匀抽样。指向柱技巧的优点是,指向球技巧中所具有的几乎它全具有。在实际问题中探测器多属于柱形,因此,指向球技巧的缺点在这里还变成了优点。指向柱技巧的缺点仅仅是在同指向球技巧比较时,在计算确定所张立体角时,前者比后者复杂。

#### 4 偏倚抽样技巧

MCNP 程序所提供的偏倚抽样技巧非常多,稍次于它所提供的众多的分裂与赌技巧。于 MCNP 程序中所含的偏倚抽样技巧有,源偏倚抽样技巧、强迫碰撞技巧、指数变换技巧以及 DXTRAN 技巧,等等。其中源偏倚抽样技巧与强迫碰撞技巧都属于局部性技巧,这些技巧虽然对某些问题非常有效,但它相对于问题的整体而言常属于一些局部性的问题,对于较为复杂的问题不会给问题的解决带来太大的好处。

指数变换技巧是非常著名的一种偏倚抽样技巧,它曾经成功地解决了平板与球形几何的穿透问题的计算。MCNP 程序中的指数变换技巧是针对一般几何情况给出的,其基本原理是,用伪截面  $\Sigma_{ex}(\vec{r}, E) = \Sigma_t(\vec{r}, E)(1 - P\mu)$  替代原问题中的总截面  $\Sigma_t(\vec{r}, E)$ , 其中  $\vec{r}$  与  $E$  分别为粒子的位置与能量,  $P$  为小于 1 的非负数,  $\mu$  为粒子运动方向与重要方向的夹角余弦,当用伪截面抽样确定了一个碰撞点  $\vec{r}'$  后,为了使结果是无偏的,需要乘上如下纠偏因子  $\bar{w}$ :

$$W = \frac{P\mu}{1 - P\mu} \int_0^{|\vec{r}' - \vec{r}|} \Sigma_t(\vec{r} + l\vec{\Omega}, E) dl, \quad (1)$$

其中,  $\vec{\Omega} = (\vec{r}' - \vec{r}) / |\vec{r}' - \vec{r}|$ 。指数变换技巧的优点是,为用户提供了一种对碰撞位置实现重要抽样的办法,当其中的任意参数  $P$  确定的比数合适时,可以明显地提高计算效率。缺点是,作为一种重要抽样技巧,它只是对粒子的自由飞行距离进行了拉长或缩短,而没有考虑其他因素的重要性,如距探测器远近的重要性等。另一个缺点是,  $P$  的大小对计算效率的影响特别敏感,若取值不当则会因连乘纠偏因子而导致权重急速变小或变大,反倒会使问题变糟。

众所周知,实施偏倚抽样技巧的关键选择合适的偏倚分布(重要性分布),使其相应估计量的统计涨落变小,又不致因此而增加不必要的麻烦,其主要困难则是二者难以兼顾。为了解决一般偏倚抽样技巧的这一困难,同时也作为克服 MCNP 程序中指数变换技巧的缺点,下次事件抽样技巧应作为其首选<sup>[6]</sup>。

下次事件抽样技巧的一般原理是,模拟跟踪一批粒子,登记它们每次碰撞后的状态及权重,用  $S_{m,j}$  与  $W_{m,j}$  分别表示第  $j$  个粒子在第  $m$  次碰撞后的状态与权重;  $I(S_{m,j})$  表示关于状态  $S_{m,j}$  的重要性,对第  $m$  次碰撞后批粒子的继续跟踪不是简单地用原状态与权重,而是用如下办法确定新的状态与权重:

几何分裂与赌技巧的一般原理是,确定与几何区域有关的重要性,用  $I_m$  表示几何区域  $m$  的重要性,当粒子由几何区域  $m$  进入到几何区域  $n$  时,如果  $I_n/I_m < 1$ ,则进行一次成功概率为  $I_n/I_m$  的赌,存活下去的粒子权重变成  $W \cdot I_m/I_n$ ,其中  $W$  为粒子的原权重;如果  $I_n/I_m > 1$ ,则进行分裂,分裂个数的数学期望为  $I_n/I_m > 1$ ,并对每一分裂的粒子分别进行跟踪,它们的权重均变为  $W \cdot I_m/I_n$ ,其他过程与一般蒙特卡罗过程相同。几何分裂与赌技巧的优点是,简单明了,可以按给定的几何区域重要性实现重要几何区域多抽样,非重要区域等抽样,从而达到提高计算效率之目的。缺点是,没有给出确定几何区域重要性  $I_m$  的原则,如果确定不当,则不仅不会提高效率,反倒会使问题变得更糟,还存在由于分裂而引起的必须进行分枝跟踪粒子的困难。

能量分裂与赌技巧同几何分裂与赌技巧完全相类似,所不同的仅仅是,那里的几何区域重要性,现在变成了能群重要性。能量分裂与赌技巧的优缺点,除了同几何分裂与赌技巧相类似外,多一个缺点是,在提高计算效率方面它远不几何分裂与赌技巧。

为了叙述简单,考虑如下二重积分计算问题:

$$G = \int f(x) dx \int f(y|x) dy g(x, y), \quad (3)$$

其中  $f(x)$  与  $f(y|x)$  分别表示分布密度与条件分布密度,  $g(x, y)$  为响应函数。对于所有的  $x$ , 引入正定函数  $I(x)$ 。积分(3)进一步写成

$$G = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \int f(x'_m) dx'_m I(x'_m) \int \delta(x - x'_m) dx \int f(y|x) dy \frac{g(x, y)}{I(x)}, \quad (4)$$

因此,若令

$$G(x'_1, \dots, x'_M, x, y) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M I(x'_m) \frac{g(x, y)}{I(x)} \quad (5)$$

其中的  $x'_1, \dots, x'_M$  服从分布  $f(x)$ ;  $x$  服从分布

$$\sum_{m=1}^M \frac{I(x'_m)}{\sum_{m=1}^M I(x'_m)} \delta(x - x'_m); \quad (6)$$

$y$  服从分布  $f(y|x)$ , 则  $G(x'_1, \dots, x'_M, x, y)$  的数学期望等于  $G$ , 计算积分  $G$  的集团抽样技巧就是用  $G(x'_1, \dots, x'_M, x, y)$  算术平均作为其近似估计<sup>[3,7]</sup>:

$$G \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N G(x'_1, \dots, x'_M, x_n, y_n). \quad (7)$$

比较分裂与赌技巧同集团抽样技巧,很明显,除了后者同前者一样可以很好地实现按重要性函数  $I(x)$  的重要抽样外,后者还比前者有更多的优点,这些优点是,这里的重要性  $I(x)$  是连续函数,而那里的重要性  $I_m$  常常是离散的,连续情况包括了高散情况;用集团抽样技巧跟踪粒子不存在分枝问题;一般情况下,后者的统计涨落小于前者;后者已经比较好地解决了确定重要性函数的原则,而前者确定重要性参数既复杂又困难。由以上所述,用集团抽样技巧替代 MCNP 程序中的分裂与赌技巧,势在必行。

## 6 微扰计算

微扰问题在核科学与技术中大量存在,因此,使通用蒙特卡罗程序中含有微扰计算能力

十分必要。所谓微扰问题是指,系统的某条件发生微小变化,确定其变化前后的所关心量之差。用蒙特卡罗方法解决微扰问题的困难在于,分别计算微扰前后所关心量,由于计算误差常大于二者之差,因此,用分别计算的微扰前后所关心量的差作为二者差的估计是行不通的。为了解决微扰计算的这一困难,在 MCNP 程序中仅提供了一种再简单不过的相关抽样技巧。该相关抽样技巧的一般原理是,对于微扰前后的两种情况分别进行计算,但保证二者的初始粒子所用的随机数彼此相同,从而使得二者对应的粒子在遇到扰动之前,两个随机游动历史完全相同,之后才叉开,部分地消除了系统相同部分的因随机游动历史不同而导致的统计涨落。很明显,由 MCNP 程序中给出的相关抽样技巧,其优点是,极易实施,可以解决很少一部分微扰计算问题。缺点是,由它所可以解决的微扰计算问题太少太少,即使可以解决的微扰计算问题,其结果也常常仅对迁移部分的结果比较好,对碰撞影响部分则给不出可信的结果。

微扰问题大体上可以分为两类<sup>[2,3]</sup>,其中一类为截面微扰问题,它的特点是,扰动区域大,但扰动参数变化小;另一类为几何微扰问题,它的特点正好与截面微扰问题相反,扰动区域小,但扰动参数变化大。按解决微扰问题的技巧分类,大体上也可以分为两类<sup>[2,3]</sup>,其中一类是基于计算差分量的相关抽样技巧;另一类则是基于计算微分量的微分蒙特卡罗技巧。比较解微扰问题的相关抽样技巧与微分蒙特卡罗技巧,前者不仅比后者易于实施,而且,前者计算结果包括各阶的微扰结果,后者的计算结果却仅包括一阶微扰的结果。由以上所述,将计算截面微扰和几何微扰的相关抽样技巧同时加入到 MCNP 程序中,既必要又适宜。\*

## 7 其他问题

有一些问题和蒙特卡罗技巧在 MCNP 程序中极本没有提到或很少提到,现分述如下:

### 7.1 一维几何计算问题

平板几何与球形几何均属一维问题,在实际问题中虽然很少有纯平板几何或球形几何问题,可是,却常有这样情况;可以通过解平板几何或球形几何问题近似得到问题的解答。在 MCNP 程序中没有考虑一维几何方法去解决,对于一维几何问题一律用三维几何方法去解决。一般地讲,对于蒙特卡罗方法而言,解一维或三维几何问题差别并不大,可是,就解决问题的技巧而言,差别有时却很大,适合解一维几何问题的非常理想的技巧,有时却完全不适合解三维几何问题,因此,硬要有解三维几何问题的技巧去解一维几何问题,情况好一点的是计算效率低,差一点的则是得不到可以信服的计算结果。由于上述原因,在 MCNP 程序中加入解一维几何问题的成熟的蒙特卡罗技巧是非常必要的。

### 7.2 精细通量分布计算

将某几何区域分成足够多的子区域,精细通量分布计算是指需要计算这些子区域上的通量,很明显,一旦得到了精细通量分布,要想知道等位面是举手可得的事。一般来讲,利用 MCNP 程序可以实现精细通量分布计算,不过,由于它需要将每个子区域都作为独立的区域描述,因此,不仅描述极其复杂,而且,计算量也非常大。解决精细通量分布计算的关键是,利用子区域的划分有规律的特点,采用径迹长度法记录通量。

---

\* 在 MCNP-4B 版本中已加入了截面微扰的能量,而且允许是一阶微扰或二阶微扰,在解决截面微扰问题方面已算是比较完美了。

### 7.3 相关量的计算问题

用  $\Phi(\alpha)$  表示与参量  $\alpha$  有关的某物理量,相关量的计算问题是指,对于给定的  $\alpha_m$ ,  $m = 1, 2, \dots, M$  计算确定  $\Phi(\alpha)$ ,  $m = 1, 2, \dots, M$ . 例如,在核测井问题中常需要知道探测仪随井深不同探测结果的变化情况,便属于相关量的计算问题。用 MCNP 程序解这类问题只能是,对于不同的  $\alpha_m$ ,  $m = 1, 2, \dots, M$ , 分别计算  $\Phi(\alpha_m)$ ,  $m = 1, 2, \dots, M$ . 解决这类问题的另一种办法是,用相关抽样技巧同时计算结出  $\Phi(\alpha_m)$ ,  $m = 1, 2, \dots, M$ . 比较这两种不同的办法,很明显,前者的缺点是,计算量大,等于  $M$  倍计算  $\Phi$  的计算量;由于是分别计算的结果,统计涨落可能使相邻的  $\Phi(\alpha_m)$  与  $\Phi(\alpha_{m+1})$  的大小被歪曲。情况完全相反,后者却很好地克服了前者的上述两个缺点:后者的计算量仅相当于  $2 \sim 3$  倍计算  $\Phi(\alpha_m)$  与  $\Phi(\alpha_{m+1})$  的大小常被很好地区别开来,甚至对于  $\Phi(\alpha_m)$  与  $\Phi(\alpha_{m+1})$  差别不大的情况都是如此。

### 7.4 孔道通量计算

孔道通量计算问题在核科学与技术中大量存在,例如,用孔道将反应堆中的中子引出,地下核试验过程中多级孔道对通量的影响等,都属于孔道计算问题。用蒙特卡罗方法解孔道计算问题,其困难是显而易见的,尤其是走向不同的多级孔道计算更为困难。MCNP 程序中的 DXTRAN 技巧可以被用来解决比较简单的孔道通量计算问题,但由于该技巧被限定在球内增加碰撞点,因此,完全用它来解决孔道通量计算问题仍然存在很大的困难,尤其是对于多级孔道计算问题,尚属于单 DXTRAN 球的 DXTRAN 技巧,更是无能为力。解决孔道通量计算问题的关键是,允许 DXTRAN 球是有限圆柱,而且应允许是多个。

### 7.5 随机几何问题

所谓随机几何是指,将大量的几何形状与物质情况完全相同的栅元随机地投入到某一容器中,投入后的结果是,小栅元的位置、倾斜与彼此相依的情况都是随机的。例如,后处理厂里的溶解槽中的“拉西环”,用“石墨球”作反应堆的中子吸收剂等,其中的“拉西环”或“石墨球”不仅量大,彼此相同,而且都是随机投入的,均属于随机几何。解几何区域中含随机几何情况的问题即为随机几何问题。用蒙特卡罗解决随机几何问题的关键是,对随机几何的描述正确,可以方便地用蒙特卡罗方法解而且不致因此而增加过多的计算量。很明显,解决好随机几何问题是相当困难的。在 MCNP 程序中没有提供可用来解决随机几何问题的技巧。

### 7.6 智能化与向量化问题

纵观 MCNP 程序,对其解题能力、几何能力和截面能力等方面,几乎都是无懈可击的,可是在通用程序的智能化和向量化的道路上,却一步也未迈出。智能化是指,将人类关于蒙特卡罗方法的全部精华集中在通用程序中;利用计算机的计算结果优化或不断优化蒙特卡罗方法自身,使最后的计算方法尽善尽美。向量化则是指,使蒙特卡罗方法适合在现代的单指令多数据流(SIMD)计算机上使用,充分利用计算机资源。很明显,使 MCNP 程序智能化和向量化问题,不是需不需做的问题,而什么时间做的问题。

## 参考文献

- [1] 裴鹿成. 计算数学, 3, 261(1980).
- [2] 裴鹿成、张孝泽著. 蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用. 北京: 科学出版社 1980 年
- [3] 裴鹿成等著. 计算机随机模拟. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1989 年
- [4] 裴鹿成. 原子能科学技术 . 1, 16(1980)
- [5] 裴鹿成、董秀芳. 北京: 原子能科学技术 . 4, 236(1963).
- [6] 裴鹿成. 彼得堡悖论与小概率大贡献问题. 见本书。

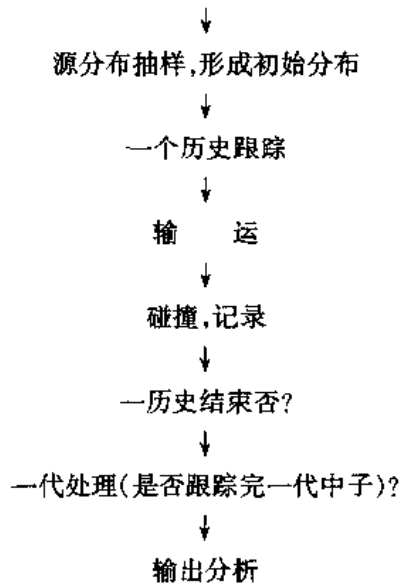
(2) 几何图形显示

- 二维几何显示,显示栅元号、曲面号、简单体号。
- 显示方式:俯视、正视、侧视、任意方向作剖面。
- 显示范围:局部或全系统。

(3) 调入截面:加工截面

$$MCAL = \begin{cases} 0 & \text{点截面数据} \\ 1 & \text{AMPX 工作库数据(任意群)} \\ 2 & \text{WIMS 69 群数据} \end{cases}$$

(4) MCRUN(执行计算)



### 3 功能描述

MCAL 主要用于核燃料后处理厂的临界安全分析,也可用于通用的核系统的临界安全分析。主要计算量是  $K_{eff}$ 、系统的各几何区通量等。现在可在 PC386 以上的微机运行,系统软件要求 DOS3.3 以上版本,NDP FORTRAN 编译。压缩的源程序有 2 万多行,展开后的源程序有 4 万 5 千行。并配有形成 AMPX 工作库的辅助程序,形成 WIMS 工作库的辅助程序。

该程序与国内、外同类程序相比,MCAL 有以下几个特点:

#### 3.1 几何能力强

可描述球、长方体、圆柱体、锥、台,四棱锥、台,四棱柱、台,六棱柱等简单几何体,这些几何体可任意取向、嵌套、叠加、组合;可用简单体及 29 种曲面(螺旋面、抛物面、锥面等)的各种组合描述复杂的几何系统(如螺旋推进器、带包壳燃料棒构成的栅格、紧密堆积的立方体栅格等);可描述多级嵌套的栅阵结构。这样对核燃料后处理厂常见的复杂几何装置如:储存容器、燃料储存室、螺旋推进器等均能描述。

模块结构:以泰山一期核电站、大亚湾核电站、中国原子能科学研究院 101 堆、49-3 堆、196 堆的燃料组件采用了模块结构描述方法。所谓模块结构就是把描述各燃料组件的参数分别构成一个独立的模块,这样可根据需要把组装好的模块(组件)任意放置、任意组合,而

不再因为组件放置不同或组合不同而重新描述每一个组件,大大地方便了用户。

### 3.2 多种截面数据

MCFR 程序配置了多种截面库:点截面库、多群的 AMPX 工作格式库, Hansen Roach 16 群库, 69 群 WIMS 库, 可使用 ENDF/B - IV, ENDF/B - V、ENDF/B - VI 微观库加工得到 MCFR 点截面格式数据。这样大大增强了程序的截面能力及问题的互检能力。

### 3.3 输运模块的两种处置方法:

一是求交点方法,二是最大截面法。对于不易求交点的区域使用最大截面法;反之,对于不适用于最大截面方法的区域使用求交点的方法。这样可回避每种方法之短,取其每种方法之所长。在一个几何系统的不同区域两种方法可交替使用。

### 3.4 多种源分布

点源、长方体源、圆柱源可供用户任意选择。

### 3.5 界面友好、绘图功能

友好的界面具有文件的建立、修改、编辑、编译、联接、运行等功能,使用灵活、方便。

有两种交互绘图功能:一是用于前端处理的绘图,绘制输入文件所指定的几何二维剖面图,便于检查几何描建的输入错误,以使修正;二是用于后端处理绘制 MCFR 产生的  $K_{eff}$ 、平均寿命与计算代数的关系曲线图。

程序运行中有进程显示,即在屏蔽上显示做  $K_{eff}$  的代数,所花费的时间,已完成计算的百分比等一些有关信息。这对用户及时了解程序运行状态是非常有用的。

## 4 计算结果分析

MCFR 用 3 种数据库数据试算了部分结果,表 1 列出 6 个基准实验方案的试算结果,并与 KENO IV 的计算结果作了比较。

从表 1 上看,用点截面、AMPX 123 群截面计算的 6 个方案结果是满意的,误差在 2% 左右。WIMS 计算的方案 2、3、5、6 的结果也是满意的,方案 1 的结果略大(主库数据转为工作库的处理程序有点问题,对重核出现总吸收截面大于总截面)。方案 4 没有计算,因为 WIMS 库在使用上有一定的局限性,即对非均匀系统特别大,均匀系统小的问题,计算结果都不好。

通过几个试算方案,说明了我们第一阶段研制程序是成功的,将提供用户试用。

## 5 第二阶段工作内容

进一步完善程序,并解决随机几何问题,对充填含硼玻璃拉希环的容器中,随机的拉希环分布进行计算分析。增加微扰计算,以解决由于介质成分和尺寸的微小变化时对  $K_{eff}$  的影响。第二阶段工作后,程序的功能达到类似英国的 MONK 程序。将为我国核燃料后处理临界安全分析提供了一个先进的有力工具。



# KENO 程序在临界分析中的应用

薛小刚 沈雷生 傅学东 阮可强

(中国原子能科学研究院, 北京 275 信箱 45 分箱, 邮编: 102413)

**摘要** 本文利用美国 B&W 公司模拟乏燃料高密度贮存的临界实验数据、美国太平洋西北实验室模拟燃料组件运输容器的临界实验数据及上海核子所的临界实验数据, 对 AMPX-KENO 蒙特卡罗程序做了验证计算。绝大多数方案计算得到的  $K_{\text{eff}}$  值的误差小于 2%, 极少数方案的误差略大于 2%。同时用该程序对重水零功率反应堆(HWZPR)的临界水位做了工程设计计算, 该堆首次临界时的实测  $K_{\text{eff}}$  值与计算值误差小于 1%。数值计算结果表明, AMPX-KENO 程序能很好地适用于低浓铀或天然金属铀、轻水或重水慢化的棒栅系统的临界计算。

**关键词** KENO 蒙特卡罗程序 应用

## 1 引言

KENO 程序是美国橡树岭国家实验室研制的多群蒙特卡罗临界计算程序, 在国际上得到了广泛应用, 随着使用经验的增多和蒙特卡罗技术的发展, 多年来已产生一系列版本的 KENO 程序, 如 KENO-IV、KENO-Va、KENO-VI 等。在我国, 1990 年原子能院开发成功 KENO-IV CYBER-825 版, 并与 AMPX 123 群截面库配套, 形成 AMPX-KENO-IV 程序包, 此后又相继开发了 KENO-IV、KENO-Va 微机版, 这两个版本的 KENO 程序在国内核工业各研究设计单位的临界分析计算中发挥了巨大的作用。

根据国家颁布的最新标准, 凡是用于临界安全分析的计算程序都必须进行详细的验证, 以确定该程序的使用范围和计算误差。因此, 近几年我们收集了大量的临界安全实验数据, 对 KENO 程序进行了验证计算, 同时在本室承担的重水零功率反应堆的工程设计中, 用 AMPX-KENO 程序进行该堆临界水位的计算。本文即是对这两方面部分工作所做的初步总结。

## 2 临界实验

### 2.1 B&W 公司基准临界实验<sup>[1]</sup>

该实验模拟轻水堆燃料组件的高密度贮存, 共 21 个实验方案, 堆芯由 9 盒  $14 \times 14$  根燃料棒组成的燃料组件以  $3 \times 3$  阵列构成, 组件之间的水隙在 0 至 4 个燃料棒距的范围 ( $0 \sim 6.54\text{cm}$ ) 内变化, 组件内燃料棒间距为  $1.636\text{cm}$ , 正方形排列, 组件之间水隙内插入装有  $\text{B}_4\text{C}$  的中子吸收棒或不锈钢板、硼化铝片, 燃料为  $\text{UO}_2$ ,  $^{235}\text{U}$  的富集度为  $2.459\text{wt}\%$ , 活性区长度为  $153.34\text{cm}$ 。

### 2.2 美国太平洋西北实验室(PNL)临界实验<sup>[2]</sup>

该实验为模拟燃料组件运输容器的临界实验。使用  $2.35\text{wt}\%$  或  $4.31\text{wt}\%$   $^{235}\text{U}$  富集度的

两种类型燃料棒,组件有  $13 \times 8$  和  $12 \times 16$  两类,组件中棒栅距离有 18.92mm 和 25.40mm 两种,实验使用的组件数为 3 个,组件外围用铅、乏铀板及钢板作反射层,实验时整个系统浸没在水中,燃料组件顶端至水面至少有 150mm 的水层。共计约有 40 个方案。

### 2.3 上海核子所临界实验<sup>[2]</sup>

中科院上海核子所零功率实验装置于 1975 年 8 月 6 日首次达到临界,在做的一系列实验中,临界实验是其最基本的实验,本文选择了 1976 年 1 月前完成的 4 个实验方案。燃料为  $\text{UO}_2$ ,  $^{235}\text{U}$  富集度为 3.054wt%,活性区高度为 702mm,小盒组件为  $7 \times 8$  阵列,大盒组件为  $15 \times 15$  阵列,栅距为 10.4mm,相邻大盒组件之间有 1mm 的水隙宽度,整个活性区结构支撑在厚度为 70mm 的铅底座上,放在厚度为 1cm 的不锈钢制的水桶中。

## 3 临界实验计算结果

本文临界实验的校验计算均采用 AMPX - KENO - Va 做机版程序,分别在频率为 90MHz 和 100MHz 的 586 型微机上进行,所有方案计算所取的能群数为 123 群,跟踪了 50000 个中子历史(计算代数 105 代,每代 500 个中子,最后的  $K_{\text{eff}}$  值为跳过前 5 代的统计结果),B&W 公司临界实验的计算结果见表 1,PNL 临界实验的计算结果见表 2,上海核子所临界实验的计算结果见表 3。

B&W 公司 21 个实验方案计算得到的  $K_{\text{eff}}$  值的误差均小于 2%。PNL 39 个实验方案  $K_{\text{eff}}$  计算值的误差除方案 9、18 略超过 2% 外,其余均小于 2%。上海核子所 4 个实验方案的  $K_{\text{eff}}$  计算值的误差均小于 1%。

表 1 B&W 公司临界实验方案计算结果

(第一种堆芯结构)

方案号	水隙宽度 (棒间距)	B <sub>4</sub> C 棒 个数	硼浓度 ( $\times 10^{-6}$ )	临界水位 (cm)	$K_{\text{eff}}$ 计算值	运行时间 (min)
I	...	...	0	143.88	$1.00990 \pm 0.00331$	6.49
II	0	0	1037	144.29	$1.00960 \pm 0.00242$	3.63
III	1	0	769	148.63	$1.00557 \pm 0.00260$	3.82
IV	1	0	764	144.88	$1.00557 \pm 0.00274$	3.82
V	1	0	762	140.38	$1.00803 \pm 0.00263$	3.82
VI	1	0	753	131.32	$1.01177 \pm 0.00233$	3.83
VII	1	0	739	120.64	$1.00800 \pm 0.00253$	3.83
VIII	1	0	721	110.04	$1.00319 \pm 0.00254$	3.85
IX	1	0	702	100.32	$1.00819 \pm 0.00270$	3.87
IV	1	84	0	145.68	$1.00799 \pm 0.00294$	5.43
V	2	64	0	144.75	$1.00401 \pm 0.00282$	5.52
VI	2	64	0	107.67	$1.00223 \pm 0.00316$	5.48
VII	3	34	0	146.15	$1.00377 \pm 0.00333$	6.02
VIII	3	34	0	111.49	$0.99907 \pm 0.00311$	5.86
IX	4	0	0	129.65	$0.99432 \pm 0.00312$	6.03

(第二种堆芯结构)

续表

方案号	水隙宽度 (棒间距)	B <sub>4</sub> C棒 个数	硼浓度 ( $\times 10^{-6}$ )	临界水位 (cm)	$K_{eff}$ 计算值	运行时间 (min)
X	3	无	143	149.12	$0.99618 \pm 0.00296$	5.19
XI	1	S.S	510	145.85	$1.00685 \pm 0.00264$	4.88
XI	1	S.S	514	149.90	$1.00449 \pm 0.00284$	4.88
XI	1	S.S	501	136.84	$1.01109 \pm 0.00285$	4.90
XI	1	S.S	493	130.42	$1.00747 \pm 0.00265$	4.91
XI	1	S.S	474	118.84	$1.01493 \pm 0.00305$	4.89
XI	1	S.S	462	111.58	$1.01473 \pm 0.00288$	4.91
XI	1	S.S	432	100.89	$1.00998 \pm 0.00280$	4.94
XII	2	S.S	217	150.17	$1.00126 \pm 0.00298$	5.27
X III	1	B/Al(5)	15	150.27	$1.01518 \pm 0.00318$	5.60
X III	1	B/Al(5a)	28	149.49	$1.01824 \pm 0.00306$	5.50
X IV	1	B/Al(4)	92	149.12	$1.01049 \pm 0.00268$	5.34
X V	1	B/Al(3)	395	151.45	$0.99501 \pm 0.00268$	4.92
X VI	2	B/Al(3)	121	149.16	$1.00529 \pm 0.00297$	5.26
X VII	1	B/Al(2)	487	149.88	$1.00473 \pm 0.00277$	4.83
X VIII	2	B/Al(2)	197	149.02	$0.99709 \pm 0.00265$	5.18
X IX	1	B/Al(1)	634	149.00	$1.00410 \pm 0.002239$	4.76
X X	2	B/Al(1)	320	148.10	$1.00193 \pm 0.00299$	5.09
X XI	3	B/Al(1)	72	151.69	$0.99259 \pm 0.00276$	5.84

表 2 PNL 临界实验方案计算结果

(乏铀反射板)

方案号	反射板与燃料 组件间距(mm)	燃料组件临界 间距(mm)	组件内燃料棒数 (行数 $\times$ 列数)	$K_{eff}$ 计算值	运行时间 (min)
1	0	$153.8 \pm 0.1$	$13 \times 8$	$0.99123 \pm 0.00315$	7.84
2	$19.56 \pm 1.02$	$153.2 \pm 0.1$	$13 \times 8$	$0.99373 \pm 0.00323$	7.39
3	$39.12 \pm 0.76$	$180.5 \pm 0.5$	$13 \times 8$	$0.99331 \pm 0.00273$	7.65
4	$54.05 \pm 1.02$	$134.9 \pm 0.2$	$13 \times 8$	$0.99220 \pm 0.00323$	7.85

(铅反射板)

续表

方案号	反射板与燃料组件间距(mm)	燃料组件临界间距(mm)	组件内燃料棒数 (行数×列数)	$K_{eff}$ 计算值	运行时间(min)
5	0	$206.2 \pm 0.1$	$13 \times 8$	$0.98551 \pm 0.00322$	8.19
6	$6.60 \pm 1.02$	$207.8 \pm 0.2$	$13 \times 8$	$0.99056 \pm 0.00354$	8.18
7	$13.21 \pm 0.76$	$190.4 \pm 0.2$	$13 \times 8$	$0.98488 \pm 0.00360$	8.28
8	$54.05 \pm 1.02$	$103.0 \pm 0.2$	$13 \times 8$	$1.00479 \pm 0.00306$	8.3
9	$\infty$	$82.4 \pm 0.3$	$13 \times 8$	$1.02324 \pm 0.00346$	7.52

(无中子吸收板,栅格距为 25.40mm)

续表

方案号	反射板与燃料组件间距(mm)	燃料组件临界间距(mm)	组件内燃料棒数 (行数×列数)	$K_{eff}$ 计算值	运行时间(min)
10	0	$128.9 \pm 0.2$	$13 \times 8$	$1.00424 \pm 0.00246$	25.4
11	$6.60 \pm 1.02$	$142.5 \pm 0.5$	$13 \times 8$	$1.00089 \pm 0.00246$	25.4
12	$13.21 \pm 0.76$	$141.2 \pm 0.1$	$13 \times 8$	$1.00032 \pm 0.00241$	25.7
13	$26.16 \pm 1.07$	$124.4 \pm 0.5$	$13 \times 8$	$1.00153 \pm 0.00228$	25.6
14	$54.05 \pm 1.02$	$98.0 \pm 0.5$	$13 \times 8$	$1.01059 \pm 0.00230$	26.1

(无中子吸收板,栅格距为 18.92mm)

续表

方案号	反射板与燃料组件间距(mm)	燃料组件临界间距(mm)	组件内燃料棒数 (行数×列数)	$K_{eff}$ 计算值	运行时间(min)
15	0	$148.7 \pm 0.2$	$12 \times 16$	$1.01778 \pm 0.00223$	23.5
16	$6.60 \pm 1.02$	$157.4 \pm 0.2$	$12 \times 16$	$1.01816 \pm 0.00242$	23.1
17	$13.21 \pm 0.76$	$158.7 \pm 0.1$	$12 \times 16$	$1.01966 \pm 0.00268$	23.1
18	$19.56 \pm 1.02$	$158.4 \pm 0.2$	$12 \times 16$	$1.02275 \pm 0.00247$	22.8
19	$26.16 \pm 1.07$	$154.5 \pm 0.1$	$12 \times 16$	$1.01394 \pm 0.00244$	23.0
20	$54.05 \pm 1.02$	$138.2 \pm 0.3$	$12 \times 16$	$1.00150 \pm 0.00260$	24.5
21	$\infty$	$129.6 \pm 0.3$	$12 \times 16$	$0.992114 \pm 0.00258$	25.8
21a	$\infty$	$129.7 \pm 0.3$	$12 \times 16$	$0.98969 \pm 0.00242$	25.9
21b	$\infty$	$129.8 \pm 0.2$	$12 \times 16$	$0.98961 \pm 0.00261$	26.0

表3 上海核子所临界实验计算结果

方案号	硼浓度 ( $\times 10^{-6}$ )	慢化剂温度 ( $^{\circ}\text{C}$ )	临界元件根数	$K_{\text{eff}}$ 计算值	运行时间 (min)
1	0	28.8	$1085 \pm 3$	$0.99523 \pm 0.00293$	9.06
2	0	28.2	$1067 \pm 3$	$0.99624 \pm 0.00312$	9.09
3	752	9.0	$2651 \pm 14$	$1.00159 \pm 0.00295$	6.50
4	933	6.8	$3441 \pm 38$	$1.00233 \pm 0.00273$	6.26

#### 4 HWZPR 的临界水位计算

在零功率反应堆的设计中临界水位是一个非常重要的参数,是衡量设计成败和设计水平的一个关键数据,也是重水零功率反应堆启动时为实验人员提供的一个重要实验依据。

HWZPR 是以重水为慢化剂,天然金属铀为燃料的零功率反应堆,采用带铅包壳的燃料芯块和铝工艺管构成的单圆柱棒燃料元件,燃料芯块直径为 35mm,首次临界实验选用栅距为 18cm 的栅格,堆芯内装载 124 根燃料元件,堆芯容器外径为 240cm,其外侧有 75cm 厚的石墨反射层。

计算采用 AMPX - KENO - IV 微机版程序,首先我们计算了南斯拉夫重水零功率堆<sup>[3]</sup>临界状态时的有效增殖因子,计算结果为  $K_{\text{eff}} = 0.9991 \pm 0.0017$ ,非常接近临界值 1.0。之后才用该程序计算 HWZPR 的临界水位,计算得到的临界水位为 128.5cm。该堆于 1996 年启动达到临界,实际测量的临界水位为 123.3cm,与设计计算值符合很好。 $K_{\text{eff}}$ 误差在 1% 以内。

#### 5 结论与讨论

临界实验的检验计算结果及 HWZPR 临界水位的计算结果表明,AMPX - KENO 程序系统能很好地用于低浓铀或天然铀、重水或轻水慢化的棒栅系统的临界分析计算。

下面简单谈谈自己在值用蒙特卡罗程序过程中的一些体会:

(1)随着大型程序微机化这一趋热的发展,一系列的蒙特卡罗程序已移植在微型机上,但在移植过程中,由于机器字长的变化,使得原来在大型机上使用得很好的产生随机数的方法可能在微型机存在问题。如仅对原程序中所带的简单例题进行计算,结果还是可以的,但对实际工程中的复杂问题,就很难得到满意的结果。因此,在微机移植时,一定要采用先进的随机数产生方法,以保证有足够长的周期和较好的均匀性。

(2)蒙特卡罗程序与扩散程序或  $S_n$  程序的显著区别在于其强大的几何描述能力,但目前的 KENO - IV、KENO - Va 等程序在使用上还有许多不便,对某些复杂几何还很难精确描述或描述非常复杂,在这方面还需进一步努力,据资料报道<sup>[4]</sup>,KENO - VI 程序与 KENO - Va 程序相比,几何描述上已有较大改进。这样才有利于像空间堆、快堆及生产厂等复杂系统临界分析计算的实际应用。

(3)国内普遍使用的 KENO - IV、KENO - Va、CHMCK 等蒙特卡罗程序均采用 AMPX 123 群截面数据库,该塔面数据取自 70 年代中的 ENDF/B4 库,数据较老,而目前国际上基本都采用 ENDF/B5、ENDF/B6 库的截面数据,所以我们使用的截面数据有待更新,这样可进一步提高计算精度。另外,对于固态 - 溶液系统,群截面很难得到准确的结果,只有采用点数面

数据。因此研制或开发蒙特卡甸程序时应尽量配备使用点截面数据的接口,以扩大程序的适用范围。

总之,蒙特卡罗方法在核工业领域将会发挥愈来愈大的作用,尤其在我国,由于受经济条件的限制,许多实验工作无法开展,在此情况下,蒙特卡罗方法作为一个较为可靠的计算手段,必将会有更加广阔的应用前景。

## 参考文献

- [1] Gary S. Hoover, M. Neil Baldwin, Ray L. Eng, Freed G. Welfare. "Critical Experiments Supporting Close Proximity Water Storage of Power Reactor Fuel", Nuclear Technology, Vol. 51, Dec. 1980.
- [2] 《蒙特卡罗临界计算程序验证数据》,上海核工程研究设计院,1995.
- [3] Proceedings of the Second United Nations International Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy, Geneva, Vol. 12(392 - 394), 1958.
- [4] D. F. Hollenbach, L. M. Petrie, and N. F. Lauenders. "KENO - VI: A Monte Carlo Criticality Program with Generalized Quadratic Geometry", Topical Meeting on Physics and Methods in Criticality Safety, Nashville, 1993.

# OCTOPUS 燃耗计算程序系统简介

张宝成

(中国核数据中心)

**摘 要** OCTOPUS 程序系统是在 SCALE 程序系统基础上建立起来的、自动连接燃耗计算程序。本文通过对不同能谱计算程序的介绍,说明使用 MCNP 程序的作用和优点。

**关键词** 程序系统,能谱计算,M-C 模拟

## 1 引言

SCALE<sup>[1]</sup>是美国辐射屏蔽情报中心用于反应堆临界安全审评的程序系统,其中包括截面处理模块,栅元参数及能量计算模块,以及临界安全分析和燃耗计算模块。其中燃耗计算程序 ORIGEN-S 模块采用的是点燃耗模型,由于它在进行燃耗分析时所考虑的燃耗链较细,因而被广泛采用。然而,在 SCALE 系统中,为 ORIGEN-S 提供燃耗区通量空间分布的是一维栅元计算程序 XSDRNPM-S,这说明限定了 ORIGEN-S 只能进行一维栅元燃耗计算,而无法进行反应堆不同燃耗区域不同位置的燃耗分布分析。

针对上述问题,荷兰能源研究中心(ECN)在荷兰政府的资助下,于 1993 年初开始着手在 SCALE 程序系统的基础上,通过引入三维能谱计算程序,并研制与 ORIGEN-S 程序的接口模块,最终形成一个自动连接的三维燃耗计算程序系统 OCTOPUS<sup>[2]</sup>。故名思意,OCTOPUS 是将许多现有的程序,通过接口模块连接起来。这当中 MCNP<sup>[3]</sup>程序因其几何适应能力强,计算结果精确而被当作能谱计算模块的首选。作者有幸参与了该系统的研制工作。本文将通过对 OCTOPUS 系统的介绍,阐述 MCNP 在该系统中的作用,希望能为国内相关的研究提供借鉴。

## 2 OCTOPUS 程序系统的总体结构

在进行燃耗计算之前,必须首先计算  $K_{\infty}$ ,给出装置的通量分布及能谱,同时获得有效群截面。随后,根据堆内功率状况,确定各燃耗区实际通量值(绝对值),并用能谱计算时获得的截面作为输入,由燃耗计算程序计算指定时间(或燃耗)步长的核密度变化情况。至此,一步燃耗计算结束。将新的核密度代入,重新进行能谱计算,重复上述过程,直至最终达到指定的燃耗深度。概括起来,燃耗计算过程可用下图 1 表示。

为了提高计算精度,通常增加一中间过程,即在图 1 的能谱计算前增加一个半时间步长燃耗计算,用得到步长中点的核密度作能谱计算,取代步长之初的数据。显然,这样得到的截面用于燃耗计算,结果将会更合理。由于计算过程中 CPU 主要花在能谱计算,因而增加半步长燃耗计算并不消耗太多的 CPU。相反,在精度得到满足的前提下,采用中间过程可适当加在时间步长,从而减少迭代次数,节约大量机时。

OCTOPUS 程序系统是在 SCALE 系统的基础上建立起来的,采用的基本截面数据库是 AMPX 格式库,因而,在引入其他程序后,编制了大量的接口模块,用于新的程序和数据与

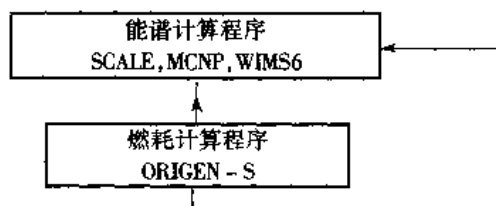


图1 燃烧计算的基本框架

AMPX 格式连接。其中包括了 WIM2AMP, EXPAM, MCP2AMP 等。同时,为了实现程序间的自动连接,该系统还包含多个数据检索和输入卡自动生成模块。所以,只需给出少量的输入数据,便可完成大量复杂反应堆燃烧计算。

在 OCTOPUS 系统中,三维燃烧计算,是通过三维能谱计算程序实现的。在能谱计算时,获得堆芯的三维空间通量分布,并根据各个燃烧步长内堆芯的总功率,得到堆内各燃烧区的功率分布情况,再由点燃烧程序(如 ORIGEN - S),对各区分别进行计算。每个时间步长,系统调用点燃烧程序的次数取决于将堆芯划分成的燃烧区个数(相当于网格数),在每个燃烧区内,认为各处的通量是一致的,即燃烧相同。

### 3 二进制接口文件(BIF)

为了实现自动连接以及输入文件的自动生成,除了 AMPX 格式数据库外, OCTOPUS 系统定义了专用二进制接口文件(BIF, Binary Interface File),用于包括模密度,通量分布,几何,截面等各种信息的传递。

BIF 接口文件由三部分组成,第一部分是数据文件总信息,包括区域数、能群数、核素个数等;第二部分包括能群结构、功率分布、各区体积等;第三部分包括各区核密度、截面值等。很显然,根据 BIF 文件中的信息以及最基本的输入数据,通过适当的程序,便可生成各个模块所需的输入数据,所有这些程序(如 BIF2ORI、BIF2SPC)已包含在 OCTOPUS 系统之中。

### 4 MCNP 程序与系统的连接

#### 4.1 MCNP 程序在 OCTOPUS 系统中的作用

众所周知,MCNP 是一个多功能、连续能量的 M - C 程序,可进行各种类型的粒子输运问题的计算,包括反应堆栅元能谱,整堆  $K_{eff}$  计算等。它的几何适应能力强,可以模拟各种复杂装置。另外,新版的 MCNP 既能接收点截面(连续能量)数据,也能采用群截面数据。该程序的灵活性和可靠性已在全球范围许多领域内得到证实,被视为经典,新的用途也在不断地被挖掘。如前所述,点燃烧程序完成整堆不同区域燃烧分布计算的关键,是进行三维能谱计算,从而获得不同区域的功率分布。在 OCTOPUS 系统中,MCNP 程序充当的便是这一角色,即根据堆内各种元件的分布情况、几何尺寸、以及核密度等信息,完成反应堆的能谱计算,获得堆芯内部的通量空间分布。当然,对于简单的一维栅元燃烧问题,MCNP 只需计算栅元能谱即可。

#### 4.2 MCNP 输出转换成 AMPX 格式库

前面已经提到,OCTOPUS 程序系统是在 SCALE 系统的基础上建立起来的,AMPX 格式截面库是其基本截面数据库,因此,MCNP 完成能谱计算后,首先需要将 MCNP 的输出结果



(包括截面和通量分布等)转换成 AMPX 权重库格式数据,这一工作由 MCP2AMP 程序进行。这里需要指出的是,MCNP 通常采用的是点截面 M-C 方法,能谱计算结束后,需要根据输出的能将点截面处理成群截面,必要时,需对空间分区进行均匀化处理。所以,在进行格式转换之前,常需要运行群截面生成程序 CONDS,以及区域均匀化程序 SMEAR。

#### 4.3 燃耗计算缺少截面数据的补充

由 MCNP 输出生成的 AMPX 数据会因为分截面数据不全而不能满足燃耗计算程序 ORIGIN-S 的需求,例如,库中只给出中子消失截面(MT101),而不给各个分截面(MT102, 103, …)。为此,需要对 AMPX 数据进行补充,即由总的 MT101 反应道数据给出分反应道数据。这里需要借助于 OCTOPUS 系统中的另一个辅助截面库 EAF 数据,该库包含类似 MT101 反应道及其所有分截面的数值。

在补充截面时,按照 EAF 中各分截面与对应“总”截面的比例关系,给出各个分截面值,即:

$$\sigma_x^A = \left( \frac{\sigma_x}{\sigma_m} \right)_{\text{EAF}} \times \sigma_m^A$$

式中,  $\sigma_x$  为分截面值,  $\sigma_m$  为“总”截面值,  $A$  表示最终 AMPX 格式库中的数据,下标 EAF 为来自 EAF 库中的数据。

补充数据的过程由 EXPAM 程序完成,经过此番补充,新的 AMPX 库包含了 ORIGIN-S 计算所需的所有数据。

#### 4.4 功率分布的计算和 BIF 文件的生成

OCTOPUS 系统中,所有能谱计算结束后,都要根据 AMPX 权重库、上一步长的 BIF 文件及输入数据给出目前步长的 BIF 文件。AMPX 权重库中,MT1099 数据实际是各区的能谱。对一示同区域之间,它反应的实际就是中子的空间通量分布。根据这些数据及该步长中给定的总功率,可以由 FLX2PWR 模块计算堆芯内部的功率分布,并用这些数据对 BIF 文件进行修正。

综上所述,MCNP 在 OCTOPUS 程序系统中的工作过程可用下图 2 表示。

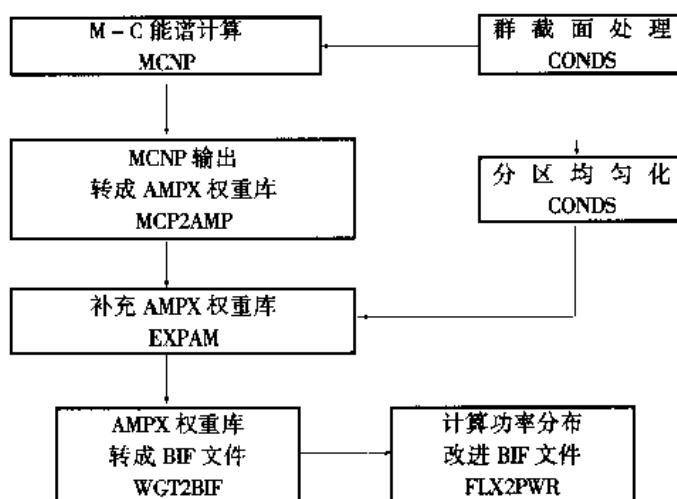


图 2 OCTOPUS 系统中 MCNP 程序工作原理

BIF 文件产生后,ORIGEN - S 程序根据各区的功率分布、截面参数、时间步长及燃耗库数据等,对各个燃耗区分别进行计算,求出核燃料和裂变产物核密度的变化,交数据提供给下一个步长的燃耗计算使用。

## 5 总结

OCTOPUS 系统的一个重要思想,是将一些好的软件拿来为我所用。本文着重介绍了是 MCNP 在 OCTOPUS 系统中进行能谱计算的过程,可用于三维能谱计算的程序很多,如 VENTURE、WIMS/E 等,这些均可用于 OCTOPUS 系统。

目前,OCTOPUS 系统已投入实际应用,其灵活性和普适性已得到荷兰国内的一致认可,并因其自动化程度高在欧洲范围内引起较大反响。荷兰能源研究中心正试图将其作为商业软件,向世界各国进行推广。

完善和充分挖掘现有软件的功能,开拓新的应用领域已成为一种潮流和趋势。SCALE 程序系统进入我国已多年,并有着广泛的用户,熟悉并使用 MCNP 及其它能谱计算程序的用户也很多,因此,我们完全有条件进行类似工作。我们愿意与兄弟单位合作,共同开展此类项目。

## 参考文献

- [1] SCALE - 4: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation, NUREG/CR - 0200 Rev.4, RSIC/CCC - 545.
- [2] Kloosterman, K.L. "Burnup System OCTOPUS", Private Communication.
- [3] Briesmeister, J.F., "MCNP - A General Monte Carlo N - partical Transport Code, version 4A", LA - 12625 - M, November 1993.

# MORSE 程序中的 Monte Carlo 技巧扩充

## —平几何穿透概率计算

杨锦安 裴鹿成

(中国原子能科学研究院)

### 1 引言

屏蔽计算是反应堆数值计算中最重要的内容之一。屏蔽计算主要有两种方法,一种是数值模拟方法,另一种是随机模拟方法, Monte Carlo 方法是属于后一种。比较二者的优缺点,前者的优点是计算速度快,缺点是只适用于简单几何问题,截面必须做群截面化处理;后者的优点是,适合解决复杂几何问题,不需做群截面化处理,缺点是比前者计算速度相对要慢。

Monte Carlo 计算屏蔽问题,存在的最大困难是在计算深穿透率问题,当穿透率小于  $10^{-6}$  时,穿透率的结果比真值偏低,穿透率越小偏低越多,而且不能简单地靠增加粒子数来解决。世界上著名的 Monte Carlo 方法通用软件 MORSE 没有很好解决这一问题。问题的严重性在于,当用该软件计算穿透率时,若属于深穿透问题,由于 Monte Carlo 方法给出的误差与穿透率结果一样比实际误差偏低,使得计算结果本来比真值低很多,但却不能发觉。基于上述原因,我们对 MORSE 程序中 Monte Carlo 技巧进行了扩充。本文就平几何穿透概率计算问题进行了探讨。

### 2 平板屏蔽问题

考虑一个典型的深穿透计算问题:粒子于平板屏蔽的一侧垂直进入其中,于平板中各向同性散射,散射几率为 0.7,散射宏观总截面为  $\Sigma$ ,其中  $m$  为粒子碰撞次数。用如下 4 种方法:(1)统计估计方法;(2)指数变换方法;(3)半解析方法;(4)伴指数变换方法计算无限平板穿透概率。

(1)统计估计方法的一般原理,是直接求出离开碰撞点后不再发生碰撞而穿过屏蔽层的概率。对穿透模率  $P$  的无偏统计量为

$$\hat{P}_E = \sum_{\substack{m=0 \\ \mu_m > 0}}^M W_m \exp\left(-\sum_i(E_m) \frac{a - X_m}{\mu_m}\right)$$

其中  $a$  表示平板屏蔽的厚度,  $X_m, E_m, \mu_m, W_m$  分别表示粒子离开第  $m$  次碰撞时的位置、能量、方向和权重。

(2)指数变换方法实际上就是用伪截面  $\bar{\Sigma}(E, \mu)$  替代原物理过程中的真实截面  $\Sigma_i(E)$ ,而其它过程不变的一种 Monte Carlo 方法。指数变换方法对穿透概率  $P$  的无偏统计量为

$$\hat{P}_{ET} = \exp(-ca) \sum_{\substack{m=0 \\ \mu_m > 0}}^M \bar{W}_m \exp\left(-\bar{\Sigma}_i(E_m)(E_m, \mu_m) \frac{a - X_m}{\mu_m}\right)$$

其中  $\bar{W}_0 = W_0$ ,  $\bar{W}_{m+1} = \bar{W}_m \Sigma_s(E_m) / \bar{\Sigma}_t(E_m, \mu_m)$ .

(3) 所谓半解析方法就是对粒子的各次碰撞位置均不采用随机抽样的办法, 而是用解析方法求出它的数学期望。半解析方法对穿透概率  $P$  的无偏统计量为

$$\hat{P}_{SE} = \sum_{m=0}^M |\mu_m| \sum_{i=0}^m A_m^i \exp\left(-\sum_t(E_i) \frac{\alpha - \bar{X}_i}{\mu_i}\right)$$

其中  $\bar{X}_m = \alpha \eta(\mu_m < 0)$ ,  $A_0^0 = 1/\mu_0$ ,

$$A_m^i = A_{(m-1)}^i \frac{\Sigma_s(E_{(m-1)})/\mu_m}{\frac{\Sigma_t(E_m)}{\mu_m - \frac{\Sigma_t(E_i)}{\mu_i}}}, i = 0, 1, \dots, m-1$$

$$A_m^m = - \sum_{i=0}^{m-1} A_m^i \exp\left(-\sum_t(E_i) \frac{\bar{X}_m - \bar{X}_i}{\mu_i}\right)$$

(4) 伴指数变换方法的一般原理是按照指数变换方法中引入的伪截面所确定的伪物理过程, 在充满与屏蔽层相同介质的全空间上进行随机游动, 于是有按照伪物理过程用位置移动方法所建立的伴随机游动历史:

$$\left\{ X_{i+1} + \alpha - X_{m+1}, E_i, \mu_i, \bar{W}_i \frac{\bar{\Sigma}_t(E_0, \mu_0) |\mu_m|}{\bar{\Sigma}_t(E_i, \mu_i) |\mu_0|} \right\}_{i=m}^0$$

根据伴 Monte Carlo 方法和一般 Monte Carlo 方法的一一对应原则, 有计算穿透概率  $p$  的伴指数变换方法的无偏统计量如下:

$$\hat{P}_A = \exp(-ca) \sum_{m=0}^{M-1} \frac{\mu_m}{\mu_0} \bar{W}_m \frac{\bar{\Sigma}_t(E_0, \mu_0)}{\bar{\Sigma}_t(E_m, \mu_m)} \exp\left(-\bar{\Sigma}_t(E_0, \mu_0) \frac{X_1 + \alpha - X_{m+1}}{\mu_0}\right)$$

$x_{m+1} \geq \max_{i \leq m}$

用以上 4 种方法计算平面几何穿透率的结果、误差及费用见表 1、2、3 及图 1、2、3。可以看出一般的 Monte Carlo 方法对于深穿透问题计算结果比真实结果偏低; 从表中亦可看出伴指数变换方法的计算结果同半解析方法的计算结果符合的很好, 且费用最低。

表 1 结果比较 (穿透概率)

自由程个数	期望估计方法	指数变换方法	半解析方法	伴指数变换方法
0.5	0.6986318	0.6985134	0.6977884	0.6975188
2	0.1848332	0.1851839	0.1844451	0.1846004
5	9.6984738E-03	9.7257569E-03	9.6707288E-03	9.6566789E-03
10	6.2235085E-05	6.5615357E-05	6.5538494E-05	6.5588370E-05
15	3.0674695E-07	4.4475109E-07	4.4173967E-07	4.4225303E-07
20	2.0631261E-09	3.1077285E-09	2.9802181E-09	2.9836968E-09

表 2 结果比较(误差)

自由程个数	期望估计方法	指数变换方法	半解析方法	伴指数变换方法
0.5	6.0604076E-04	1.1774267E-03	2.4943688E-04	4.7066802E-04
2	3.6962351E-04	4.3591560E-04	1.6182617E-04	1.8549991E-04
5	9.1732341E-05	3.4165667E-05	1.1146776E-05	1.1779158E-05
10	5.3671920E-06	4.3250097E-07	7.8599236E-08	8.5482043E-08
15	4.1197687E-10	5.6464398E-09	5.3059485E-10	5.8530142E-10
20	7.1989683E-14	7.7753012E-11	3.5753976E-12	3.9429701E-12

表 3 结果比较(费用)

自由程个数	期望估计方法	指数变换方法	半解析方法	伴指数变换方法
0.5	0.4440480	1.767575	46.50019	0.8431371
2	1.040783	1.062415	19.68630	0.7034481
5	0.1013061	1.6914072E-02	9.4707295E-02	3.1665196E-03
10	3.5677158E-04	3.7377747E-06	4.7389594E-06	1.6074333E-07
15	2.1059469E-12	7.1904110E-10	2.1680523E-10	7.8577058E-12
20	6.4356461E-20	1.3524459E-13	9.8957851E-15	3.4320036E-16

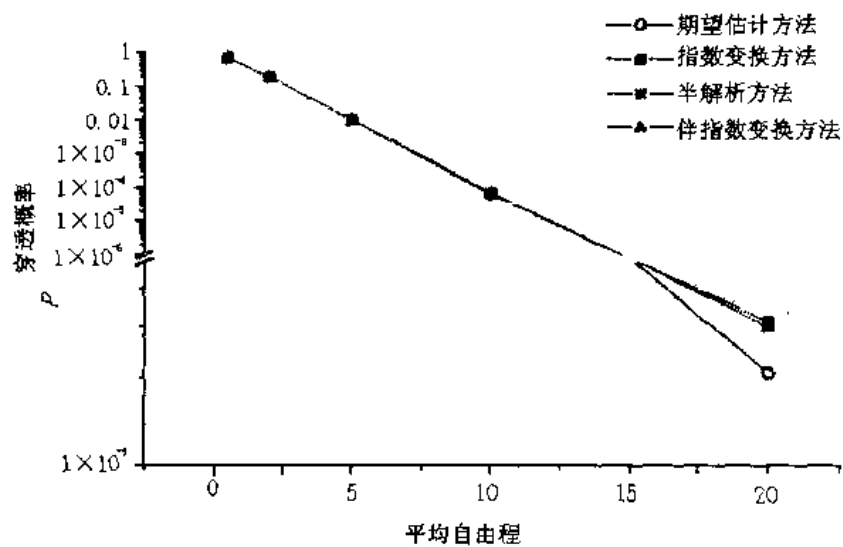


图 1 穿透概率

表 2 结果比较 (穿透概率)

R(自由程)	统计估计方法	指数变换方法	半解析方法	伴指数变换方法
0.2000E+01 (1.570347)	0.1580993	0.1587961	0.1623598	0.1584849
0.3000E+01 (2.355521)	6.4469457E-02	6.3678712E-02	7.0295304E-02	6.4094603E-02
0.5000E+01 (3.925868)	1.2027198E-02	1.2506589E-02	1.5269207E-02	1.2040386E-02
0.1000E+02 (7.851735)	3.0577366E-04	3.7548301E-04	6.6748308E-04	4.8006242E-04
0.2000E+02 (15.70347)	2.4868660E-07	8.5473135E-07	1.5729338E-06	1.1583605E-06

### 3 讨论

屏蔽问题是有关反应堆安全防护的重要问题,而穿透率的计算则是屏蔽问题的关键。在实际问题中,为了使对人体可能造成危害的有害粒子穿过屏蔽物质的份额尽可能的低,一般要将屏蔽层设计和制造的相对厚一些,也就是具有很大的平均自由程数,这样不可避免地遇到了深穿透问题。通过对 MORSE 程序的扩充,不仅可以帮助使用者克服编写复杂用户程序的困难,为使用者提供方便,同时增强了 MORSE 程序计算球几何深穿透问题的能力,为使 MORSE 程序在国内得到广泛应用起到促进作用。现上述 3 种方法可以提供用户使用。

### 参考文献

- [1] 裴鹿成等著.计算机随机模拟.长沙:湖南科学技术出版社,1989.
- [2] 裴鹿成、张孝泽著.蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用.北京:科学出版社,1980.
- [3] 金文绵、李素梅.MORSE 程序使用手册.(1987).
- [4] M. B. Emmert. The MORSE Monte Carlo Radiation Transport Code System. ORNL—4972(1975), ORNL—4972—R1(1983), ORNL—4972—R2(1984).

# FAMS - MC 程序在测量数据修正中的应用

沈冠仁 毛孝勇 张立山

(中国原子能科学研究院核物理所)

Monte Carlo 方法在核物理和中子物理实验中得到广泛的应用。在实验测量中由散射样品的大小和探测器的张角,产生的多次散射、几何因子和中子注量率衰减效应严重地影响测量数据的精确度和分布形状,用 Monte Carlo 方法进行修正,消除这三个效应的影响,是中子核数据测量中十分重要的工作之一。我们经过开发建立了一个 FAMS - MC 程序,它既能进行角分布的修正,又能进行次级中子双微分截面的修正。在我们测量的 14.1MeV 在 Be 核产生的次级中子双微分截面和在 C 核上弹性和非弹性散射角分布修正中应用,得到了很好的效果。

## 1 多次散射、几何因子和中子注量率衰减效应

在实验测量中,源中子的产生,散射样品的位置和探测器分布的几何形状如图 1 所示。

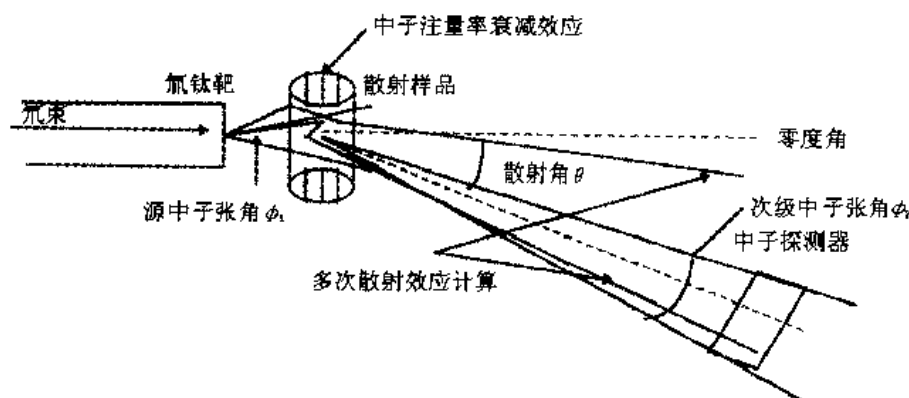


图 1 实验几何分布框图

氦束轰击氦靶,由  $T(d,n)^4\text{He}$  反应产生的源中子打到散射样品上,发生核反应产生的次级中子被中子探测器探测。从图 1 可看到,在氦束的束斑很小的情况下,源中子可作为点源处理时,由样品的大小造成源中子张角  $\varphi_1$  和探测器的大小造成次级中子张角  $\varphi_2$  组成角分辨变差的几何因子效应,核反应产生的次级中子在样品内飞行过程中,可能发生二次、三次、四次等多次散射,造成一次散射中子的丢失和多次散射中子进入探测器,改变能谱和角分布的形状,即多次散射效应,入射在样品表面的源中子注量率,在样品内部由于核反应造成源中子注量率的减少,产生注量率衰减效应。这些效应在实验中是不可避免的,而且用实验方法进行修正比较困难和误差大。现在一般都用 Monte Carlo 方法修正。它的主要优点如下:

(1)在计算中,列出全部实验工作的物理和几何条件,包括产生源中子粒子能量和核反应,发射的中心角度,样品和探测器的大小和位置及计算程序所需的各类反应截面数据。用 Monte Carlo 方法在计算机上再进行一次实验测量工作。它与在加速器上进行的实验工作比较主要优点是:

A 由于 Monte Carlo 方法计算用各反应道的反应截面随机抽样计算,因此各反应道产生的次级中子,一次和多次散射的中子可以分开记录,不仅可以精确地估算了多次散射散应,而且提供了分析可能存在的问题必要根据。

B 通过粒子轨迹的跟踪,粒子入射和发射角度得到解决,自动地修正了几何因子问题。这是用实验方法修正不能解决的。

(2)计算方法成熟,使用方便,计算精度较高,误差较小。计算成本小。它的主要缺点是:

A 计算中描述的几何条件,经过近似与实际的条件有差别,带来计算误差。

B 计算中使用的各类核数据精度直接影响计算结果。由于数据缺乏进行各中内插外推,也会带来一定的误差。

## 2 FAMS - MC 程序的主要框架结构

计算程序的主要框架结构示于图 2。主程序可以调用 5 个读入子程序,3 个功能计算子程序,一个源中子计算子程序,一个随机散产生子程序,9 个核反应计算子程序。

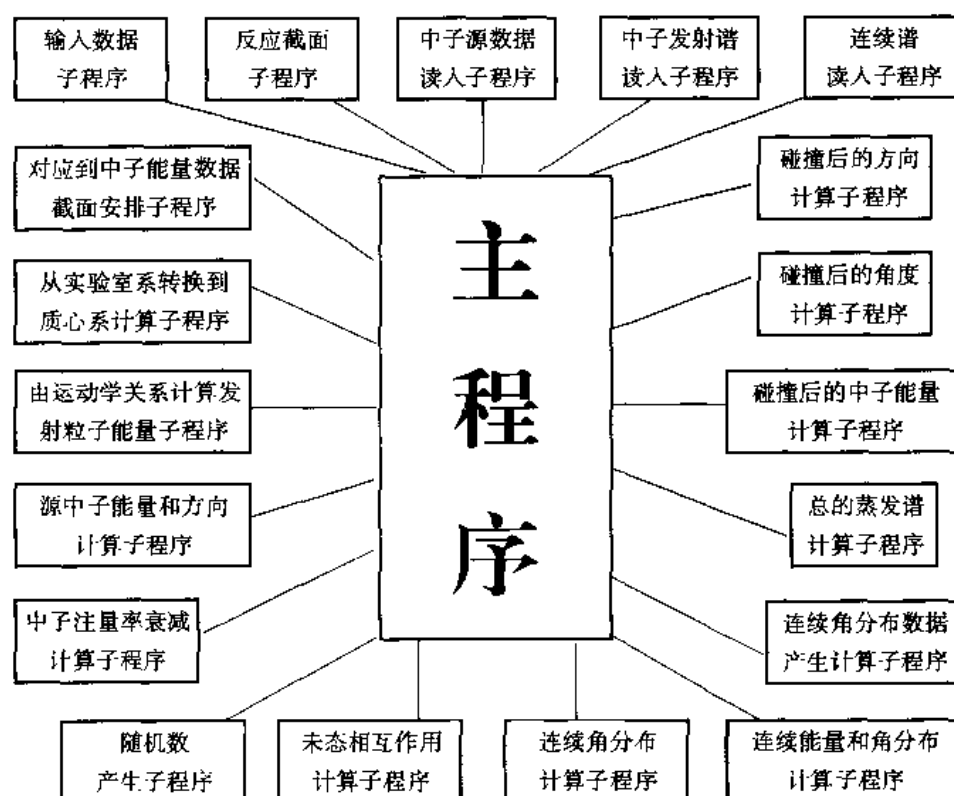


图 2 计算程序的主要框架结构示意图



### 3 Monte Carlo 计算中的主要抽样方法

FAMS - MC 程序在修正计算中, 主要抽样方法如下:

(1) 各反应道总截面: 利用其来抽取反应道发生概率: 先把各反应道数据归一化利用

公式  $P_m = \sum_{i=1}^m \Omega_i / \Omega_{\text{总}}$  为反应概率, 确定发生各反应的概率间隔, 然后产生随机数, 利用随机数和归一化以后的概率相比较, 找出和其应属于的范围, 则该概率间隔所对应的反应道即

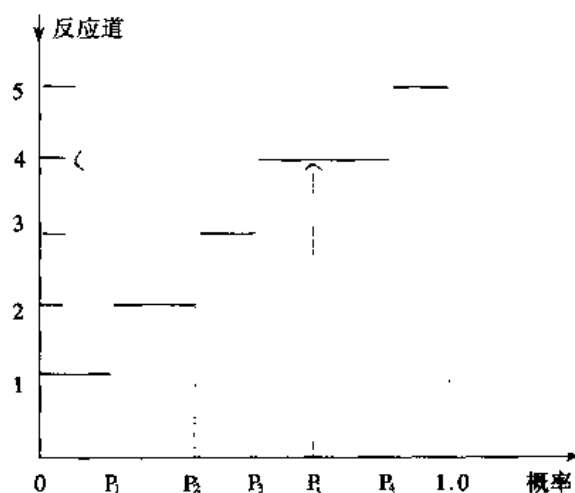


图3 抽样示意图

是所抽取的反应道。如图3所示。

(2) 角分布, 利用其来抽取反应后粒子的出射方向, 方法同上;

(3) 双微分截面, 利用其来抽取反应后中子的出射能量, 如数据库中无此项数据, 则利用动力学计算来实现;

(4) 探测, 在输入文件中指定几个探测位置及探测器张角, 则粒子在相应张角内按该时刻粒子的权重被记录。

### 4 修正计算

整个计算过程简要描述如下: 填写好输入卡, 准备好输入数据文件, 启动程序。首先调用源中子子程序计算源中子能量和发射方向, 调用随机数产生子程序进行随机抽样, 确定打到样品上的位置, 抽取那类反应, 确定核反应类型, 再用角分布数据抽取反应后发射方向, 用进行运动学计算确定出射粒子能量。如果进行双微分截面修正, 用能量角度分布数据抽取出射粒子能量, 得到程序中的理想计数。根据发射粒子在样品中的位置和穿过样品的距离, 抽取发生多次散射的概率。记录未发生多次散射的一次计数和多次散射的计数, 得到程序中的实际计数。调用注量率衰减计算子程序计算注量率衰减因子( $Z$ )。

用理想计数除以实际的一次计数确定一次计数的丢失因子( $Q$ ), 实际的一次计数除以实际的一次及多次计数之和, 确定多次散射因子( $D$ )。

$$\text{修正因子} = Q \times D \times Z$$

FAMS - MC 程序的主要计算流程如图 4 所示。其中：

$N$  代表输入参量中设定的最高散射次数， $n$  代表程序正要计算的第  $n$  次散射。

$M$  代表输入参量中设定的最大跟踪粒子数， $m$  代表程序正要计算的第  $m$  个跟踪粒子数。

$T$  代表输入参量中设定的最长计算时间， $t$  代表程序计算已经用的时间。

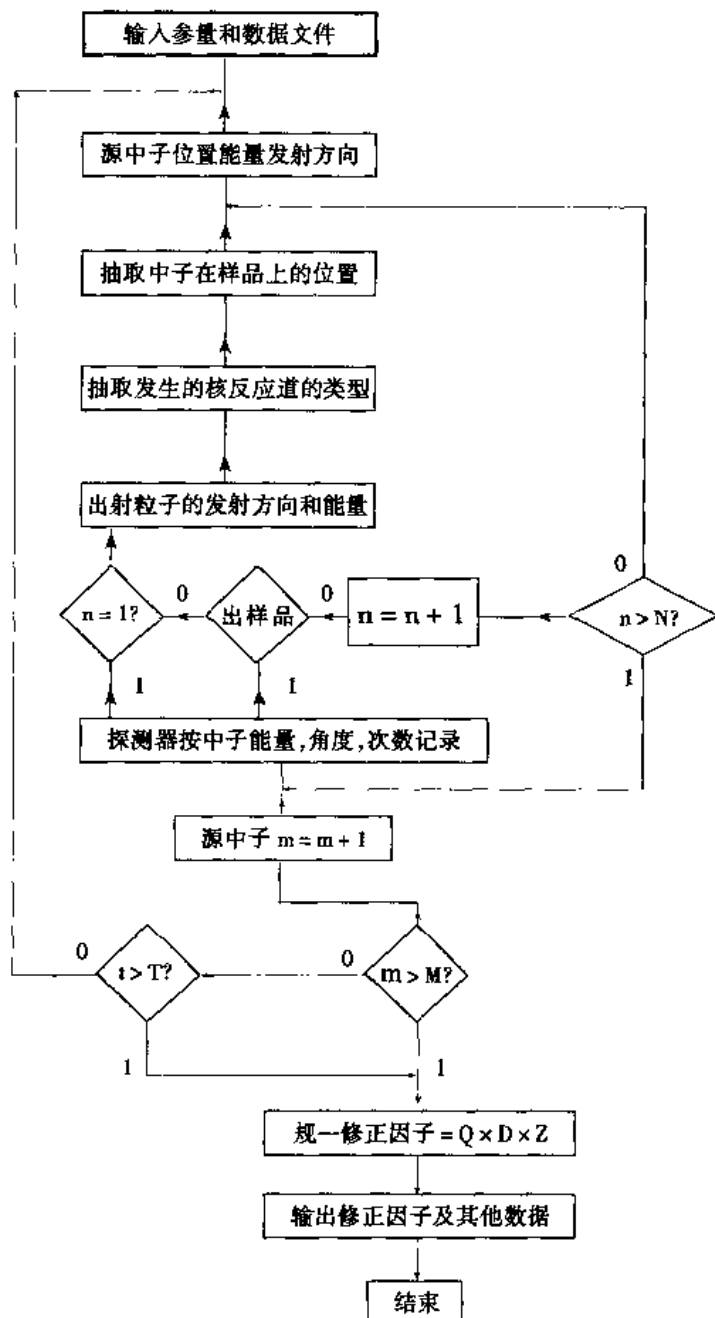


图 4 FAMS - MC 程序的主要计算流程图

## 5 MSFA - MC 程序的主要功能和应用

### (1) MSFA - MC 程序的主要功能有:

- ① 多次散射修正。可以计算一个核、10 个反应道、20 个角度的角分布和次级中子双微分截面、记录多次散射计数最大到 6 次。
- ② 进行入射中子注量率衰减因子计算。
- ③ 可以进行复合核的修正计算。
- ④ 可进行源中子的污染修正计算。
- ⑤ 对加速器束斑大的源中子可用面源进行修正计算。

### (2) FAMS - MC 程序的应用

FAMS - MC 程序用于在北京大学重离子研究所 4.5MV 静电加速器上,进行的 14.1MeV 中子在 $^9\text{Be}$ 核上产生的次级中子双微分截面和在 C 核上的弹性及非弹性散射角分布实验测量数据进行修正计算。实验条件如图 5 所示。

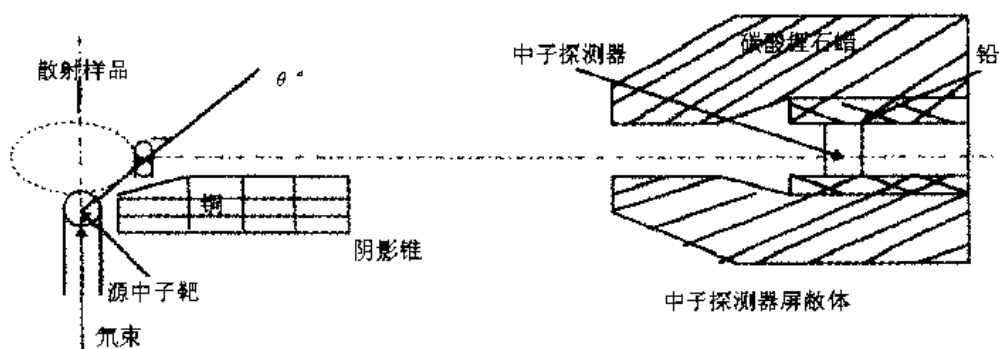


图 5 实验几何条件框图

样品沿着与氘束方向成  $100^\circ$  角的位置上,围绕着  $0^\circ$  轴线转动改变测量角度。测量数据修正结果表示在图 6 至图 9。图 6 显示在 $^9\text{Be}$ 核上弹性散射角分布修正因子,图 7 表示在 $^9\text{Be}$ 核上次级中子双微分截面的多次散射和通量衰减修正因子。图 8 和图 9 表示在 $^9\text{Be}$ 核上的次级中子双微分截面修正和未修正数据的比较。图 10 和图 11 是在 C 核上的弹性和非弹性散射角分布修正及未修正数据的比较。

修正的结果比较好。

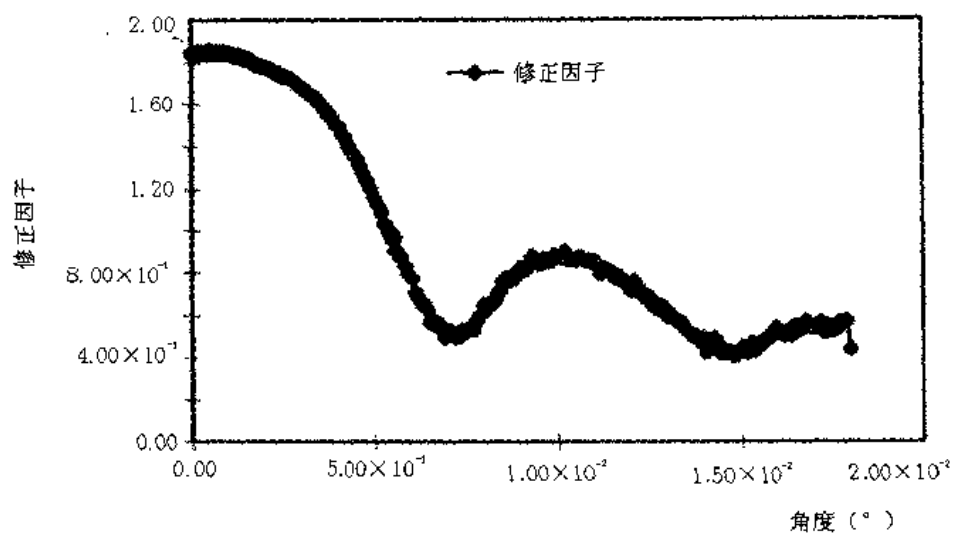


图 6 在 Be-9 核上的弹性散射角分布修正因子

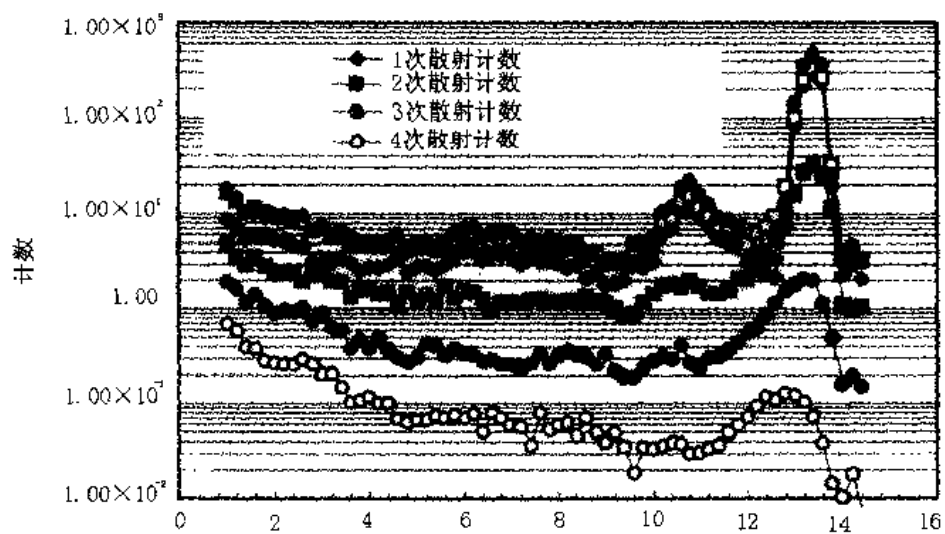


图 7 在 Be-9 核上的双微分截面多次散射修正计算结果 能量 [MeV]

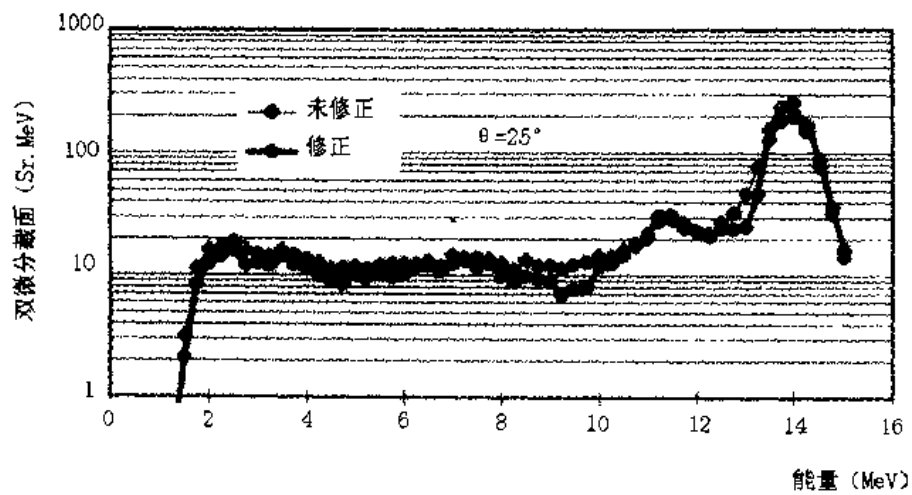


图 8 14.1MeV 中子在 Be 核上引起的次级中子双微分截面

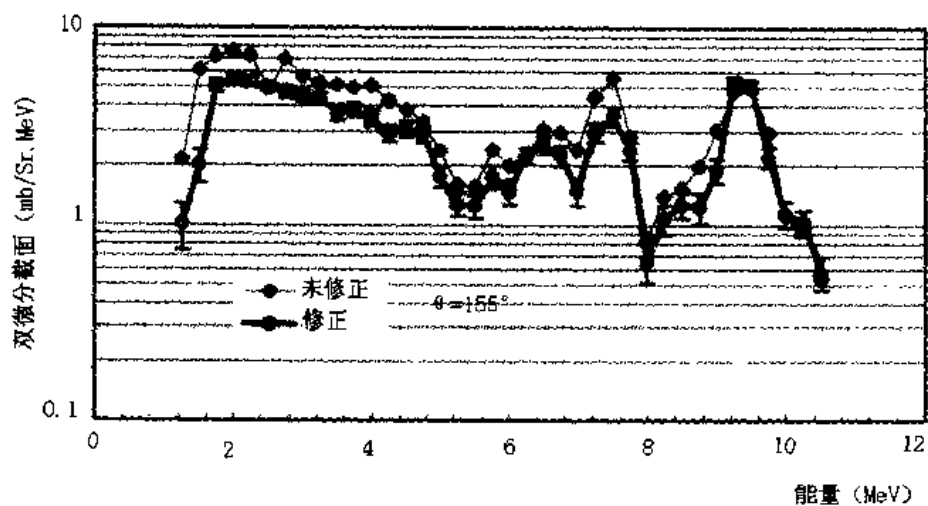


图 9 14.1MeV 中子在 Be 核上引起的次级中子双微分截面

# CGMC 程序及其在反应堆控制棒 均匀化参数计算中的应用

姚栋 张玉琴 张立吾  
(中国核动力研究设计院, 成都 610041)

**摘要** 本文介绍组合几何蒙特卡罗程序, CGMC(Combined Geometry Monte - Carlo)的模型, 主要介绍将该程序用于核反应堆燃料组件中控制棒均匀化参数的计算。

**关键词:** 蒙特卡罗程序 少群参数计算

## 1 前言

蒙特卡罗方法已广泛地用于核工程设计之中, 它具有能模拟复杂几何中粒子输运过程的特点, 成功地解决了辐射屏蔽设计中的中子和光子的输运问题。在核燃料生产和储存的临界安全分析中, 它也是最有效的工具。

在反应堆核设计方面, 过去 20 年来, 燃料组件少群参数的计算已由碰撞几率方法发展到穿透几率方法。虽然它们的计算效率较高, 然而, 对于复杂而且非均匀性很强的几何中的粒子输运问题, 这些方法就显得不足。对于这些问题, 蒙特卡罗方法由于其处理几何的能力, 就显示出其优越性。随着计算机技术的飞速发展, 蒙特卡罗方法在核设计中将起到更重要的作用。

为了满足工程设计的需要, 我们编制了组合几何蒙特卡罗程序 CGMC。本文仅简要介绍该程序的模型, 主要介绍该程序用于 3 种类型的燃料组件中控制棒少群参数的计算。

## 2 计算模型

蒙特卡罗方法是一个传统而成熟的数值计算工具, 然而在其核截面库的准备和几何处理方法和能力上得到了改进和发展<sup>[1-3]</sup>。

CGMC 程序类似于 AMPX - KENO 系统, 它由核截面库的准备, 粒子随机抽样和跟踪, 通量体积加权等三部分组成。第一部分为 WCSLP 模块, 它根据工程中具体问题的几何、物理特性, 例如, 几何形状、介质温度和材料成分, 利用 WIMS69 群截面库产生出各种材料中各核素的 69 群有效截面库。第二部分为 MGMC 模块, 它利用前面得到的有效截面库, 采用组合几何蒙特卡罗方法作粒子输运计算, 得到求解域中各材料区的中子能谱。第三部分为 FVW 模块, 它利用各材料区的中子能谱, 对各核素的 69 群有效截面作通量体积加权, 得到各核素的少群微观截面和组件的少群宏观截面。

## 3 燃料组件中控制棒少群均匀化参数的计算

### 3.1 燃料组件的描述

第一类燃料组件含有两个燃料棒环, 在中心的导向管中插入控制棒或者可燃毒物棒。

第二类燃料组件含有 16 个控制棒导向管。

第三类燃料组件由板型燃料元件和中心控制棒导向管组成。

### 3.2 控制棒的均匀化少群参数

在反应堆堆芯核设计中,必须很好解决燃料组件中控制棒的均匀化少群参数的计算。控制棒均匀化少群参数可以定义为带控制棒时组件的宏观吸收截面减去不带控制棒时组件的宏观吸收截面。下面给出利用 CGMC 程序计算得到的上述 3 类燃料组件中控制棒的均匀化少群参数。

表 1 给出了第一类燃料组件中控制棒冷态均匀化少群参数的计算值。表中同时也给出了使用碰撞几率方法 DOLPHIN 程序的计算结果,可以看出两者的计算值基本相符。

表 1 第一类燃料组件中控制棒的冷态均匀化少群参数

能群	1	2	3	4
CGMC	0.000196	0.000715	0.015714	0.028157
DOLPHIN	0.000195	0.000681	0.017428	0.026610

表 2 给出了第二类燃料组件中控制棒冷态均匀化少群参数的计算值。表中也给出了使用穿透几率方法组件计算程序 TPFAP 的计算结果。可以看出除了第三群外,其余群的值都基本相符。第三群值的偏差较大,是由各自采用的不同群常数库所致。

表 2 第二类燃料组件中控制棒的冷态均匀化少群参数

能群	1	2	3	4
CGMC	0.000364	0.001066	0.020156	0.048809
TPFAP	0.000206	0.001372	0.034733	0.047653

表 3 给出了第三类燃料组件中控制棒的冷态均匀化少群参数的计算值随中子抽样数的变化。可以看出,由于燃料组件在几何上非常复杂,前三群的值随中子的抽样数变化不大,而第四群的值在中子的抽样数达到 5 万时才基本收敛。

表 3 第三类燃料组件中控制棒的冷态均匀化少群参数

能群	1	2	3	4
1 万个中子	0.000222	0.000720	0.015920	0.049698
2 万个中子	0.000222	0.000710	0.015642	0.049880
3 万个中子	0.000220	0.000713	0.015516	0.049699
4 万个中子	0.000222	0.000711	0.015608	0.048209
5 万个中子	0.000226	0.000713	0.015719	0.047900

## 4 结论

CGMC 程序能用于各类型反应堆燃料组件少群参数的计算,其计算结果是可靠的,满足了工程设计的要求。

## 参考文献

- [1] 王耀清、李素梅等. AMPX - KENO 程序系统及临界安全基准检验计、核电脑应用, NO, 1, 2 1994.
- [2] MCNP3B, Monte Carlo Neutron And Photo Transport Code System. CCC - 200, 1989.
- [3] Morse - CG General Purpose Monte Carlo Multigroup Neutron And Gamma - Ray Transport Code With Combinatorial Geometry. CCC - 203.



# Monte Carlo 修正程序中使用数据的处理方法

毛孝勇 沈冠仁 张立山  
(中国原子能科学研究院核物理所)

## 1 引言

在中子核数据测量工作中,由样品形状因子造成多次散射和通量衰,影响着测量数据的可靠性与精确性。因此,利用 Monte Carlo 方法对其进行中子多次散射,几何因子及通量衰减的修正是得到实验测量结果特别重要一部分工作。本工作是在 FAMS - MC 修正程序中使用的库中子核数据的处理方法。经过选择和比较,B-VI 库评价中子数据是 FAMS - MC 程序选用的中子核数据,本文着重阐述在修正程序使用前对 B-VI 库评价中子数据的处理方法。

## 2 库数据的选择

由于 FAMS - MC 修正程序中需要使用评价库中子数据进行计算,但所需数据的文档和格式与库数据完全相同,因此需要先对其中我们需要的中子核数据进行适当的处理。这就首先需要熟悉评价核数据库 ENDF 的格式,根据 FAMS - MC 修正程序的需要进行处理。它包括:

- (1)文档信息,我们需要的文档有:  $MF = 3$ (中子截面),  $MF = 4$ (次级中子角分布),  $MF = 6$ (次级中子能量角度分布);
- (2)反应道及发生该反应的  $Q$  值;
- (3)插值方式(常数,线性,半对数及对数插值);
- (4)数据的格式(列表分布或是勒让德分布)等。

我们常用的数据库有日本的 JENDL3,美国的 B-VI,但由于 JENDL 库的数据不全,没有文档  $MF = 6$ ,而 B(VI 数据比较全面,而且通用性比较广,所以选用的是 B-VI 数据。

## 3 数据使用前的预处理

根据 FAMS - MC 程序修正的实验测量数据的需要,包括核素,文档信息,反应道信息,入射中子的能量,测量的能量范围,所设定的中子探测器能阈,次级中子能谱的能量间隔的资料,对库数据进行使用前的预处理。用 SYNDA.F 计算机程序对库中的反应截面、角分布次级中子能谱数据进行预处理。它利用修正所要的输入能点和数据库中能点进行的逐步比较,然后利用数据库中指出的插值方式进行插值计算。

并对插值后数据的准确度,程序中可自行进行检验,它把插值后各反应道截面之和与总截面在该能点的插值进行比较,在大于某误差范围(如 1%),则给出警示性的提示。用 SYNDAED.F 程序处理源中子谱和 PSEUDEL.F 给出虚拟能级谱。由上面的处理结果组成一个输入数据文件提供 FAMS - MC 程序使用。

#### 4 计算过程中对输入核数据的检验

在做完预处理工作后,组成的输入数据和输入参数(包括各种几何形状及实验条件)文件, FAMS-MC 修正程序进行正式的输运计算,在输运计算过程中,对输入核数据作如下处理的:

(1)各反应道总截面,利用其来抽取反应道,抽取方法如下:先把各反应道数据归一化(利用公式  $P_m = \frac{\sum_{i=1}^m \Omega_i}{\sum_{i=1}^{I_{\max}} \Omega_i}$ )为反应概率,确定发生各反应的概率间隔,然后产生随机数,利用随机数和归一化以后的概率相比较,找出和其应属于的范围,则该概率间隔所对应的反应道即是所抽取的反应道.如图 1 所示。

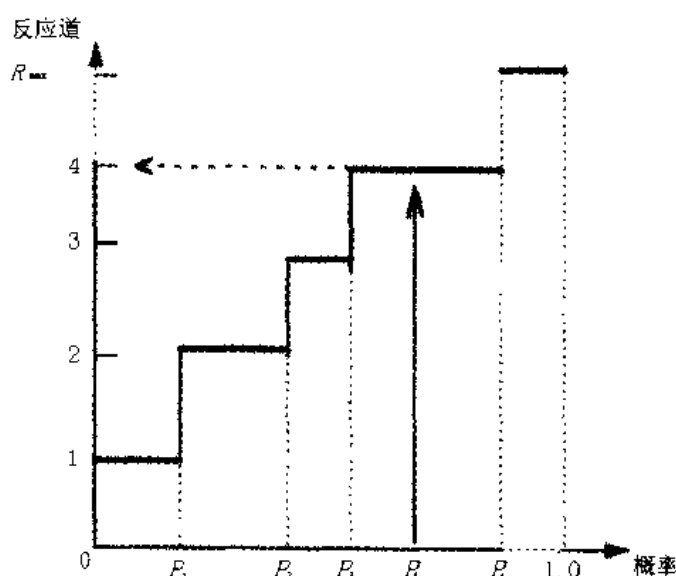


图 1 反应道抽样示意图

- (2)角分布,利用其来抽取反应后粒子的出射方向,方法同上;
- (3)双微分截面,利用其来抽取反应后中子的出射能量,如数据库中无此项数据,则利用动力学计算来实现;
- (4)探测。在输入文件中指定几个探测位置及探测器张角,则粒子在相应张角内按该时刻粒子的权重被记录。并输出输运计算结果。

把输出结果与已有的实验数据进行比较,通过观察和分析探测器记录输出,发现输入数据可能存在的问题,不断地加以改进,直到认为输入核数据可靠与精确为止。即探测器记录输出的形状应和实验基本一致且在物理上能得到合理的解释。图 2 为入射中子能量 14.1MeV 中子在<sup>9</sup>Be 核上的双微分截面测量多次散射的输运计算结果,较为合理。图 3 是 10.1MeV 中子在<sup>9</sup>Be 核上的双微分截面测量多次散射的计算结果,一次散射谱上,出现弹性峰不全和弹性峰与非弹性峰之间没有计数的现象,由此检查输入数据,发现库中 10.1MeV 中子双微分截面数据有问题,加以适当改进后,得到解决。

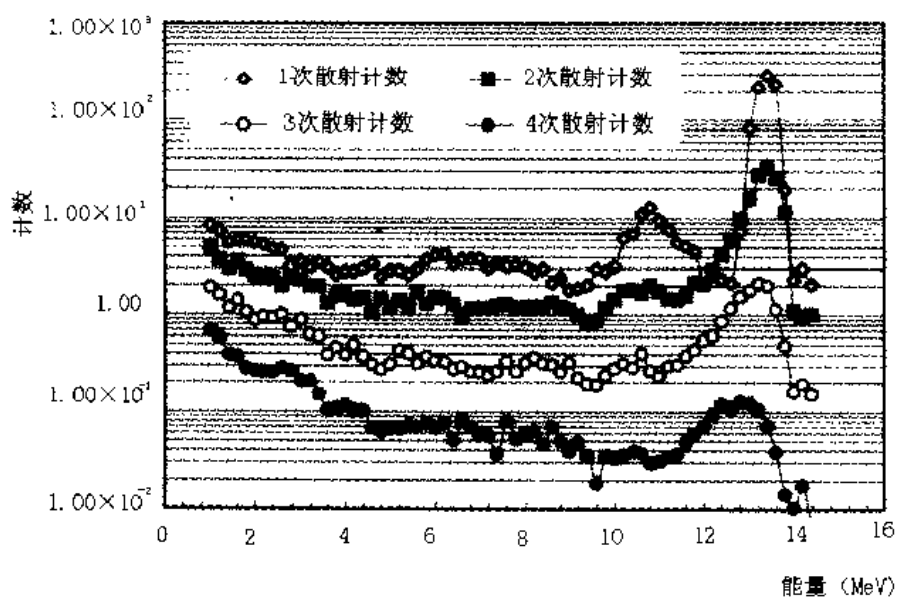


图2 14.1MeV中子在Be-9核上的多次散射计算结果

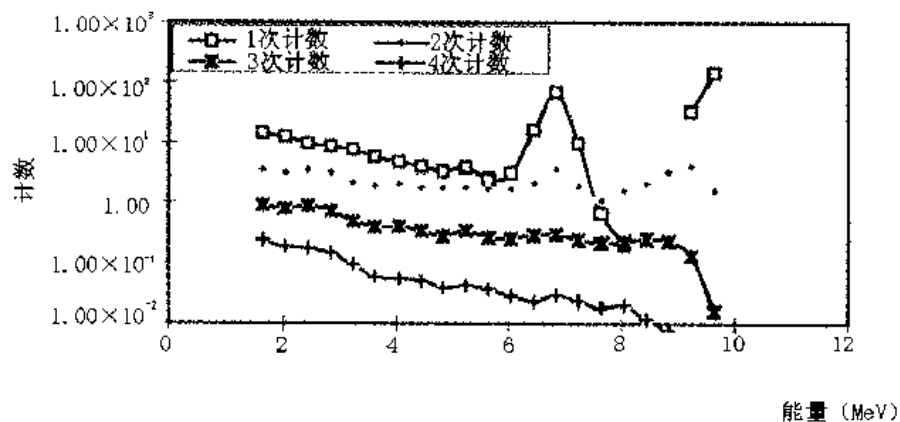


图3 14.1MeV中子在Be-9核上的多次散射计算结果

## 5 修正计算结果及比较

按照上述方法,我们处理了B-VI库中C核的中子数据,并用它进行14.1 MeV中子在核上产生的微分截面实验数据的修正计算。修正后的实验测量结果和以前其他实验室的测量数据进行比较表示在图4和图5,对此结果较为满意。

# CHMCK—Ⅲ： 解任意几何临界问题的蒙特卡罗程序

裴鹿成

(中国原子能科学研究院)

**摘要** CHMCK—Ⅲ是一个蒙特卡罗程序,是在原 CHMCK 程序、CHMCK—Ⅱ程序和 CHMCK—ⅡB 程序的基础上发展起来的,可以用来解决任意几何非均匀核系统临界计算问题。

同原 3 个程序比较,CHMCK—Ⅲ程序除保留了原各版本中已有的全部功能外,还有如下重要发展:

(1)增加了 17 种基本几何,其中包括有限圆柱环、有限下正六棱柱、矩形筒拐、椭圆筒拐、圆筒角拐、圆筒 Y 形几何、螺旋推进器、椭圆螺旋几何与方圆节几何等。

(2)对于组成栅阵区域的栅元,由原来的只允许是长方体形,改为既可以是长方体形,也可以是正六棱柱形,使用户描述栅阵区域变得更加方便。

(3)增加了对几何区域的尺寸或位置进行搜索的能力,可以很方便地确定使核系统达到指定  $K_{eff}$  时的相应几何区域的尺寸或位置。

(4)增加了可以按核系统的任意剖面的任意范围显示其物质区域分布的栅力,有利于帮助用户确定自己所描述的核系统与实际上要计算的核系统是否相一致。

同世界上最著名的 KENO 程序相比较,CHMCK—Ⅲ程序对描述系统几何的适应能力更强。主要表现在,比 KENO 程序的基本几何多椭圆旋转环、任意二次曲线旋转几何、椭圆筒拐、圆筒角拐、圆筒 Y 形几何、螺旋推进器、椭圆螺旋几何与方圆节等。

栅阵能力方面也优于 KENO 程序。主要表现在,KENO 的栅元几何形状只能是长方体形状,栅阵区域的几何形状必须是由长方体栅元堆积而成的。CHMCK—Ⅲ的栅元既可以是长方体形状,也可以是正六棱柱形状,栅阵区域的几何形状可以是任意的。

在其他方面,两个程序的情况基本相当。如在截面能力方面,二者都采用 Hansen Roach 格式的 16 群截面,或 AMPX 格式的 123 群截面。在计算速度方面,对于简单几何核系统,KENO 比 CHMCK—Ⅲ快,对于复杂几何核系统,情况却完全相反。



C0445429

## 后 记

作为我国开展蒙特卡罗方法研究与应用的重要标志,中国原子能科学研究院蒙特卡罗方法研究组建立于 1959 年。在四十周年到来之际,全国蒙特卡罗方法专业委员会和中国原子能科学研究院蒙特卡罗方法研究组计划将举行若干学术活动,请随时保持联系,以便获取最新信息。

第七届全国蒙特卡罗方法学术交流计划将于 2000 年在安徽合肥举行,有关人士请随时与全国蒙特卡罗方法专业委员会保持联系,以便获取最新信息。

全国蒙特卡罗方法专业委员会

中国原子能科学研究院蒙特卡罗方法研究组

北京 275 信箱 68 分箱,102413

Tel: 10 - 69358147

Fax: 10 - 69357008

E-mail: [zwang@mipsa.ciae.ac.cn](mailto:zwang@mipsa.ciae.ac.cn)

<http://202.38.8.71>























































