

单群均匀一维球裸堆蒙卡计算

何仕杰 2021010266

1 问题描述

使用之前 SN 编程大作业的单速一维均匀裸球堆进行计算。堆尺寸： $R=145.5436\text{cm}$ ；边界条件：外表面真空；核截面数据： $\Sigma_t = 0.05/\text{cm}$ ， $\Sigma_s = 0.03/\text{cm}$ ， $\nu\Sigma_f = 0.0225/\text{cm}$ 。杜书华书 P150 页给出了不同 C 值对应的不同均匀球形裸堆临界半径 R 值（以自由程为单位）：

$$C = \frac{\Sigma_s + \nu\Sigma_f}{\Sigma_t} = 1.05$$
$$R = 7.2771817945\lambda = \frac{7.2771817945}{\Sigma_t} = 145.54326\text{cm}$$

在本题模拟中，近似认为中子只存在裂变、散射两种反应，反应前后中子能量不变，也即中子速度不变。本题目的是，通过对一定数量源中子进行若干代模拟，计算模拟有效增殖系数 k_{eff} 稳定收敛到 1 的过程。

2 理论分析

粒子输运过程是一个随机过程，输运规律是通过大量统计实验总结出来的，中子输运也是如此，因此本题采用蒙特卡罗方法模拟大量中子在单一均匀介质中的运动状况。

首先以球心为坐标原点，建立右手直角坐标系 o-xyz，粒子在介质中的运动状态可以用一组参数来描述，包括：空间位置 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ 、能量 E 和运动方向（速度矢量） $\mathbf{\Omega} = (u, v, w)$ 、时间 t 和附带的权重 W ，即以 $\mathbf{S} = (\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t, W)$ 表示。中子第 m 次碰撞后的状态参数为 $\mathbf{S}_m = (\mathbf{r}_m, E_m, \mathbf{\Omega}_m, t_m, W_m)$ ，它表示一个由源发出的中子，在介质中经过 m 次碰撞的状态。其中：
 \mathbf{r}_m ：粒子在第 m 次碰撞点的位置；
 E_m ：粒子在第 m 次碰撞后的能量；
 $\mathbf{\Omega}_m$ ：粒子在第 m 次碰撞后的运动方向；
 t_m ：粒子到第 m 次碰撞时经历的时间；
 W_m ：粒子第 m 次碰撞后的权重。

假定中子在两次碰撞之间直线运动，并且其能量与方向均不改变，则中子在介质中的运动过程可用以下碰撞点的状态序列描述：

$$\mathbf{S}_0, \mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_{M-1}, \mathbf{S}_M$$

详细表示为：

$$\mathbf{S}_0, \mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_{M-1}, \mathbf{S}_M = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_0 & \mathbf{r}_1 & \cdots & \mathbf{r}_{M-1} & \mathbf{r}_M \\ E_0 & E_1 & \cdots & E_{M-1} & E_M \\ \mathbf{\Omega}_0 & \mathbf{\Omega}_1 & \cdots & \mathbf{\Omega}_{M-1} & \mathbf{\Omega}_M \\ t_0 & t_1 & \cdots & t_{M-1} & t_M \\ W_0 & W_1 & \cdots & W_{M-1} & W_M \end{pmatrix}$$

这里 \mathbf{S}_0 为中子由源出发的状态，即初态， \mathbf{S}_M 为中子终止状态， M 为中子运动的链长，这个序

列即为中子随机运动的历史。

整个模拟过程为：

(1) 确定初始状态 \mathbf{S}_0 ：

确定粒子初始状态，实际上即为从粒子源的空间位置、能量、方向分布中抽样。源分布为：

$$f(r_0, E_0, \mathbf{\Omega}_0) = f_1(r_0)f_2(E_0)f_3(\mathbf{\Omega}_0)$$

分别从各自的分布中抽样确定初始状态。

本题中考虑在球心位置有一单能各向同性的中子点源，考虑球体的对称性，源分布为：

$$\mathbf{r}_0 = (0,0,0), \mathbf{\Omega}_0 = (0,0,1)$$

也即所有从源产生的中子的初始位置都是球心，而速度的各向同性对单个中子的模拟来说无法体现，而在本题程序中就是对 N 个中子逐一单个模拟，因此由球的对称性，每个中子初始速度可以等效为一样。

(2) 确定下一个碰撞点：

已知状态 \mathbf{S}_{m-1} ，要确定状态 \mathbf{S}_m ，首先要确定下一个碰撞点的位置 \mathbf{r}_m ，则首先要确定中子的自由程数和输运长度。中子的输运长度 L 服从如下分布：

$$f(L) = \Sigma_t(\mathbf{r}_{m-1} + L \cdot \mathbf{\Omega}_{m-1}, E_{m-1}) \exp \left\{ - \int_0^L \Sigma_t(\mathbf{r}_{m-1} + l \cdot \mathbf{\Omega}_{m-1}, E_{m-1}) dl \right\}$$

其中， Σ_t 为介质的中子宏观总截面，积分 $\rho = \int_0^L \Sigma_t(\mathbf{r}_{m-1} + l \cdot \mathbf{\Omega}_{m-1}, E_{m-1}) dl$ 称为中子输运的自由程数。

中子输运的自由程数 ρ 服从指数分布：

$$f(\rho) = e^{-\rho}, \rho \geq 0$$

先从指数分布中抽样确定自由程数 ρ ， $\rho = -\ln \xi$ ，然后从积分方程：

$$\int_0^L \Sigma_t(\mathbf{r}_{m-1} + l \cdot \mathbf{\Omega}_{m-1}, E_{m-1}) dl = -\ln \xi$$

中解出 L 。对于单一介质：

$$L = \frac{\rho}{\Sigma_t(E_{m-1})} = \frac{-\ln \xi}{\Sigma_t(E_{m-1})}$$

L 确定后，下一个碰撞点位置：

$$\mathbf{r}_m = \mathbf{r}_{m-1} + L \cdot \mathbf{\Omega}_{m-1}$$

即：

$$x_m = x_{m-1} + L \cdot u_{m-1}$$

$$y_m = y_{m-1} + L \cdot v_{m-1}$$

$$z_m = z_{m-1} + L \cdot w_{m-1}$$

(3) 确定反应类型：

通过抽取随机数确定发生裂变还是散射。

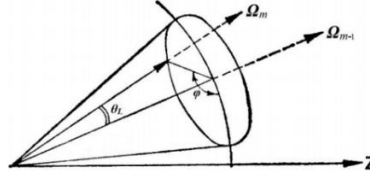
$$\text{反应类型} = \begin{cases} \text{裂变: } \xi > P_s = \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} \\ \text{散射: } \xi \leq P_s = \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} \end{cases}$$

(4) 确定散射后中子的方向：

质心系散射角 $\mu_c = \cos \theta_c = 2\xi_1 - 1$ ，实验室系散射角余弦：

$$\mu_L = \cos \theta_L = \frac{1 + A\mu_c}{\sqrt{1 + A^2 + 2A\mu_c}}$$

确定散射角后，需要确定方位角 φ ，方位角 φ 在 $[0, 2\pi]$ 上均匀分布，因此各向同性抽样。



可以由第 $m-1$ 次碰撞后的数据 Ω_{m-1} 确定第 m 次碰撞后的数据 Ω_m ：

$$u_m = \frac{bcw_{m-1}u_{m-1} - bdv_{m-1}}{\sqrt{1 - u_{m-1}^2}} + au_{m-1}$$

$$v_m = \frac{bcw_{m-1}v_{m-1} + bdu_{m-1}}{\sqrt{1 - u_{m-1}^2}} + av_{m-1}$$

$$w_m = -bc\sqrt{1 - u_{m-1}^2} + aw_{m-1}$$

$$a = \cos \theta_L; b = \sin \theta_L = \sqrt{1 - a^2};$$

$$c = \cos \varphi; d = \sin \varphi; \varphi = 2\pi\xi_2$$

当 $1 - u_{m-1}^2 \rightarrow 0$ 时，使用如下公式：

$$u_m = bc$$

$$v_m = bd$$

$$w_m = a$$

确定方向后，即可为下一次碰撞确定碰撞位置。

(5) 裂变反应：

裂变反应放出的次级中子数 $\nu(E')$ 一般不是整数。根据本题已知截面可以算出：

$$\nu(E') = \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_t - \Sigma_s} = 1.125$$

设 $I \leq \nu(E') < I + 1$ 为整数，模拟中认为裂变中子数 ν 可取如下两值：

$$P(\bar{\nu} = I) = I + 1 - \nu(E')$$

$$P(\bar{\nu} = I + 1) = \nu(E') - I$$

取随机数 ξ ，确定裂变产生的中子数 $\bar{\nu}$ ：

$$\bar{\nu} = \begin{cases} I & \xi \leq I + 1 - \nu(E') \\ I + 1 & \xi > I + 1 - \nu(E') \end{cases}$$

对于裂变后产生的中子方向 $\Omega_{new} = (u_{new}, v_{new}, w_{new})$ 进行抽样，各项同性：

$$u_{new} = \sin \theta \cos \varphi$$

$$v_{new} = \sin \theta \sin \varphi$$

$$w_{new} = \cos \theta$$

$$\cos \theta = 2\xi_1 - 1; \varphi = 2\pi\xi_2; \sin \theta = \sqrt{1 - \cos^2 \theta}$$

(6) 历史终止条件：

本题中，每一代的 N 个中子最终的结局只有两个：散射后逃出球体、裂变后产生中子，当 N 个中子一次模拟结束后，裂变产生的中子作为下一代中子的来源。

3 程序设计

使用 MATLAB 编写程序，本题程序每一代模拟 4000 个中子，由于本题中中子能量不变，时间不需要考虑，而附带的权重和一代中子裂变后产生的下一代中子数量有关，单个中子体现不出，因此描述中子的运动状态只需要空间位置 \mathbf{r} 和运动方向（速度矢量） $\mathbf{\Omega}$ 即可，再加上不同中子的序数，最终如果在程序中用一个矩阵来存储总共 N 个中子的数据，那么 \mathbf{S} 可以用 7×4000 大小的矩阵，第 1 行为中子序数，第 2、3、4 行为位置，第 5、6、7 行为方向。

每一代 4000 个中子模拟完成后，假设只有 i 个中子发生裂变反应，而 $4000 - i$ 个中子散射后位置逃出球体，使用和 \mathbf{S} 同样大小的过渡矩阵 \mathbf{S}_{tobe} 来存储裂变后产生的中子数据，第 1 行为每个中子裂变后产生的中子数目，第 2、3、4 行为发生裂变的位置，第 5、6、7 行同样为方向，但是由于裂变后中子方向均为各向同性抽样，因此可暂时不管，在获得下一代 4000 个中子的数据时再进行抽样，是同样的效果。

为保证每一代只模拟 4000 个中子，需要从上一代 4000 个中子模拟得到的 N' 个中子的数据产生下一代中子，按理来说，应该按照 \mathbf{S}_{tobe} 中第一行的不同裂变中子数为权重进行抽样，但是由于本人编程能力不足，因此使用另一个方法：直接从过渡矩阵第一列开始按权重抽样，抽样得到的中子位置和过度矩阵对应列相同，方向各向同性抽样。

计算 k_{eff} 用 \mathbf{S}_{tobe} 第一行总和（本代裂变产生中子）除以上一代裂变产生的中子。

4 结果分析

模拟 200 代，根据收敛较好的点计算可得 $k_{eff} = 1.0022$ 。

