

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chang R. «J. Nucl. Mater.», 1960, v. 2, N 4, p. 335.
2. Paetz P., Lucke K. «J. Nucl. Mater.», 1972, v. 43, N 1, p. 13.
3. Lakner J. «Nucl. Sci. Abstrs», 1962, v. 17, N 4, p. 579.
4. Brimhall J., Simonen E., Kissinger H. «J. Nucl. Mater.», 1973, v. 48, N 3, p. 339.
5. Norris D. «Radiat. Effects», 1972, v. 15, N 1—2, p. 1.
6. Дамаск А., Динс Дж. Точечные дефекты в металлах. Пер. с англ. М., «Мир», 1966, с. 175.
7. Карасев В. С., Ковыршин В. Г., Яковлев В. В. «Атомная энергия», 1974, т. 37, вып. 1, с. 65.
8. Томпсон М. В. Дефекты и радиационные повреждения в металлах. Пер. с англ. М., «Мир», 1971, с. 22.
9. Крафтмахер Я. А. В сб.: Работы по физике твердого тела. Вып. 1. Новосибирск, «Наука», 1967.
10. Keys L., Motteff J. «J. Nucl. Mater.», 1970, v. 34, N 3, p. 260.
11. Paetz P., Lucke K. «Z. Metallkunde», 1971, Bd 62, N 9, S. 657.
12. Beck R. «Trans. ASME», 1962, v. 55, N 2, p. 542.
13. Дамаск А., Динс Дж. [6], с. 253.

УДК. 621. 039. 51. 12:539. 125. 52

Оценка возмущений при решении неоднородных задач теории переноса нейтронов методом Монте-Карло

УСИКОВ Д. А.

В связи с развитием вычислительных машин неуклонно повышается интерес к использованию метода Монте-Карло для моделирования процесса переноса излучений. В настоящей работе приводятся расчетные формулы для важного класса задач реакторной физики — вычисления нелокальных возмущений линейных функционалов. Рассматривается групповое представление зависимости нейтронных сечений от энергии. Описывается случай конечных возмущений в результате предельного перехода при величине параметра возмущения, стремящейся к нулю, получены формулы для производных линейных функционалов (коэффициентов чувствительности). Дисперсия расчетной схемы изучается на примере однородной односкоростной среды.

Приведены характерные точности расчетов доплеровских коэффициентов реактивности и плотностных эффектов реактивности методом Монте-Карло в реакторах и ячейках различных типов.

Метод коррелированных траекторий. Предположим, что все сечения среды являются функциями некоторого параметра α . Причем при $\alpha = 0$ получается среда, в которой организуется аналоговый процесс блуждания частиц. «Эффективный вес» частицы, принадлежащей среде с $\alpha \neq 0$, но следующей по траектории, разыгранной в среде с $\alpha = 0$, обозначим W . Через X_n обозначим совокупность фазовых координат частицы (r, E, Ω) в точке n -го соударения. Энергия E и угол полета Ω берутся в момент столкновения. Эффективный вес частицы W_n в точке n -го соударения определяется сле-

дующим образом:

$$W_n = \frac{S(X_0, \alpha)}{S(X_0, 0)} \prod_{i=1}^{n-1} \exp(-\Delta\tau_i) \frac{\Sigma_s(X_i, \alpha)}{\Sigma_s(X_i, 0)} \times \quad (1)$$

$$\times \frac{w_s(E_i, \Omega_i - E_{i+1}, \Omega_{i+1}, r_i, \alpha)}{w_s(E_i, \Omega_i - E_{i+1}, \Omega_{i+1}, r_i, 0)} \exp(-\Delta\tau_n) \frac{\Sigma(X_n, \alpha)}{\Sigma(X_n, 0)},$$

т. е. по определению $\prod_{i=1}^0 f_i = 1$. В формуле (1)

$\frac{S(X_0, \alpha)}{S(X_0, 0)}$ — отношение источников; $\Delta\tau_i =$

$$= \int_{l_{i-1}}^{l_i} [\Sigma(r, \alpha) - \Sigma(r, 0)] dl — возмущение опти-$$

ческой толщины между точками $i-1$ и i — столкновений; $\Sigma(X, \alpha)$ — полное сечение для среды (если упругое рассеяние частицы разыгрывается изотропно в лабораторной системе координат, в качестве $\Sigma(X, \alpha)$ используется транспортное сечение); $\Sigma_s(X, \alpha)$ — сечение рассеяния*; $w_s(E_i, \Omega_i \rightarrow E_{i+1}, \Omega_{i+1}, r, \alpha)$ — энергугловая индикатриса соответствующего типа рассеяния. Значения Σ_s и w_s в числителе и знаменателе формулы (1) берутся для того процесса рассеяния, который произошел в среде, где организован процесс блуждания (среда с $\alpha = 0$). Отношение $\frac{\Sigma_s(\alpha)w_s(\alpha)}{\Sigma_s(0)w_s(0)}$ должно быть конечно (среда с $\alpha = 0$ должна быть не «уже»

* Обычно в расчетах реакторов методом Монте-Карло выделяются следующие типы рассеяний (необязательно с сохранением числа частиц): упругое, неупругое, реакция $n-2n$, рассеяние на водороде, деление ядер горючего с испусканием вторичных нейтронов.

среды с $\alpha \neq 0$) на множестве возможных значений фазовых координат X частиц [1].

Остановимся подробнее на определении отношения $w = \frac{\Sigma_s(\alpha) w_s(\alpha)}{\Sigma_s(0) w_s(0)}$ при групповом описании зависимости сечений от энергии [2]:

$w = \frac{\Sigma_s(\alpha)_{\Gamma \rightarrow \Gamma}}{\Sigma_s(0)_{\Gamma \rightarrow \Gamma}}$, если нейтрон остается в той же группе Γ , где $\Sigma_s(\alpha)_{\Gamma \rightarrow \Gamma}$ — сечение реакции «остаться в той же группе»; $w = \frac{\Sigma_{s(e)}(\alpha)}{\Sigma_{s(e)}(0)}$, если нейтрон переходит в следующую группу $\Gamma + 1$, где $\Sigma_{s(e)}(\alpha)$ — сечение перехода в следующую группу.

Непрерывное слежение за энергией нейтрона: 1. Реакции разыгрываются по макроскопическим константам среды. Если нейтрон после рассеяния перешел в следующую группу энергии, то $w = \frac{\xi(\alpha) \Sigma_s(\alpha)}{\xi(0) \Sigma_s(0)}$, где ξ — средняя потеря летаргии; $\Sigma_s(\alpha)$ — сечение упругого рассеяния. Если нейтрон остается в той же группе, то $w = \frac{\Sigma_s(\alpha)[\Delta u - \xi(\alpha)]}{\Sigma_s(0)[\Delta u - \xi(0)]}$, где Δu — групповой интервал летаргии.

2. Определяется нуклид i , на котором произошло рассеяние. $w = \frac{\Sigma_{si}(\alpha)}{\Sigma_{si}(0)}$; $\Sigma_{si}(\alpha)$ — сечение рассеяния i -го нуклида.

Для неупругого рассеяния и реакции $n - 2n$ $w = \frac{\Sigma_{in(n-2n)}(\alpha)_{i \rightarrow j}}{\Sigma_{in(n-2n)}(0)_{i \rightarrow j}}$; $\Sigma_{in(n-2n)}$ — сечение неупругого перехода (реакции $n - 2n$) из группы i в группу j .

Если в схеме блуждания происходит слежение за энергией по непрерывной шкале, то при рассеянии на водороде (с сечением Σ_{sH}) $w = \frac{\Sigma_{sH}(\alpha)}{\Sigma_{sH}(0)}$. При групповом подходе w определяется аналогично случаю неупругих переходов как отношение соответствующих матричных элементов [3]. Однако и в этом случае, поскольку матричные элементы не возмущаются, $w = \frac{\Sigma_{sH}(\alpha)}{\Sigma_{sH}(0)}$.

При делениях $w = \frac{v(\alpha) \Sigma_f(\alpha) \chi(E_0, \alpha)}{v(0) \Sigma_f(0) \chi(E_0, 0)}$, где $\chi(E, \alpha)$ — спектр испущенных частиц.

Возмущение линейного функционала потока $\Delta I = \int [\Sigma_p(\alpha) \Phi(\alpha) - \Sigma_p(0) \Phi(0)] dx$,

полученное оценкой по столкновениям, рассчитывается по формуле [1]

$$\Delta I = \frac{1}{H} \sum_{i=1}^N \sum_{n=1}^{l_i} \left[W_n \frac{\Sigma_p(X_n, \alpha)}{\Sigma(X_n, \alpha)} - \frac{\Sigma_p(X_n, 0)}{\Sigma(X_n, 0)} \right], \quad (2)$$

где Σ_p — некоторая весовая функция, например $v \Sigma_f$, если определяется коэффициент размножения [3]; l_i — число столкновений в i -й истории; Φ — поток; H — число рассмотренных историй.

Оценка выражения (2) является несмещенной, так как не смещены уменьшаемое и вычитаемое [4].

Оценка производных линейных функционалов. Формулу для оценки производных $\frac{\partial I}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=0}$ можно получить непосредственно, совершая предельный переход $\lim_{\Delta \alpha \rightarrow 0} \frac{\Delta I}{\Delta \alpha}$ в формуле (2) [5, 6]. Аналогом эффективного веса W является «дифференциальный вес» D , получаемый дифференцированием формулы (1) по α :

$$D_n = \frac{S'(X_0)}{S(X_0)} + \sum_{i=1}^n \left[-\Delta \tau'_i + \frac{\Sigma'_s(X_i)}{\Sigma_s(X_i)} + \frac{w'_s(E_i, \Omega_i \rightarrow E_{i+1}, \Omega_{i+1}, r_i)}{w_s(E_i, \Omega_i \rightarrow E_{i+1}, \Omega_{i+1}, r_i)} \right] - \Delta \tau'_n + \frac{\Sigma'(X_n)}{\Sigma(X_n)}. \quad (3)$$

Штрихами отмечены производные по α (при $\alpha = 0$).

Формула определения дифференциального веса (3) справедлива для случая, когда геометрия системы не возмущается (под возмущением геометрии понимается деформация границы раздела сред разного состава), когда $\Sigma_s(X_i)$ и $w_s(X_i)$ не равны нулю. Случай возмущения геометрии рассмотрен в работах [4, 5]. Распространение метода на случай, когда не выполняется второе условие, требует проведения неаналогового моделирования траекторий по измененным вероятностям реакций.

Производная линейного функционала $I = \int \Sigma_p \Phi dx$, полученная оценкой по столкновениям, рассчитывается по формуле

$$I' = \frac{1}{H} \sum_{i=1}^N \sum_{n=1}^{l_i} D_n \frac{\Sigma_p(X_n)}{\Sigma(X_n)}. \quad (4)$$

Вследствие несмещенности формулы (2) оценка (4) также является несмещенной.

Дисперсия оценки возмущений. Даже для гомогенной односкоростной задачи вычисление дисперсии — трудоемкая работа. Поэтому опущены промежуточные выкладки, которые можно восстановить по работе [7]. Для более сложных задач (например, многогрупповых) в реальной геометрии аналогичные аналитические расчеты вряд ли возможны. Однако даже в

столь упрощенной задаче явственно очерчиваются границы применимости метода. В частности, можно сделать следующее важное наблюдение: при вычислении конечных возмущений могут получаться плохие точности [2], поэтому предпочтение следует отдавать прямым методам расчета производных (4).

Определим зависимость сечений от параметров в модельной задаче следующим образом:

$$\Sigma(\alpha) = \Sigma_0(1 + \alpha); \quad \Sigma_s = \Sigma_{s0}(1 + \alpha). \quad (5)$$

Пусть $p = \Sigma_a/\Sigma$ — вероятность захвата, причем p не зависит от α . В качестве линейного функционала рассмотрим интеграл захватов

$$I = \int p\Psi dx, \quad (6)$$

где Ψ — плотность столкновений ($\Psi = \Sigma\Phi$). $P_N = p(1-p)^{N-1}$ — вероятность захвата в N -м столкновении. Оценка интеграла (6), полученная по столкновениям (все величины приводятся на один нейтрон источника),

$$\begin{aligned} \bar{I} &= \sum_{N=1}^{\infty} pNP_N = 1; \\ \sigma_I^2 &= \sum_{N=1}^{\infty} (1-pN)^2 P_N = 1-p. \end{aligned} \quad (7)$$

Скорость сходимости оценки (6) имеет порядок $\sigma_I^2 = (1-p)/H$. Аналогичный подсчет для $\frac{\Delta I}{\alpha} = \frac{1}{\alpha} \int [p(\alpha)\Psi(\alpha) - p(0)\Psi(0)] dx$ дан в работе [7]:

$$\begin{aligned} \Delta I/\alpha &= 0; \\ \sigma_{\Delta I/\alpha}^2 &= (2-p)/[p(1+\alpha)^2 - \alpha^2]. \end{aligned} \quad (8)$$

Из анализа сходимости соответствующих рядов и интегралов при выводе формулы (8) получается следующее необходимое условие существования конечной дисперсии:

$$p > (\alpha/1 + \alpha)^2. \quad (9)$$

Допустимые значения α заключены в интервале ($\alpha_{\min}, \alpha_{\max}$):

$$\alpha_{\min} = \sqrt{p}/(1 + \sqrt{p}); \quad \alpha_{\max} = \sqrt{p}/(1 - \sqrt{p}).$$

Минимальное значение дисперсии $\sigma_{\Delta I/\alpha}^2 = [(2-p)(1-p)]/p$ достигается при $\alpha = p/(1-p)$.

Нейтрон в реакторах испытывает несколько десятков соударений до поглощения или вылета, т. е. p — обычно величина малая. Ограничения (9) чувствительно сужают сферу применимости прямых расчетов возмущений. Для расчета больших возмущений методом Монте-Карло следует применять интегрирование по пара-

метру [5], т. е. при каждом значении α рассчитывать $\partial I/\partial\alpha$ (на одной истории), а затем проводить интегрирование

$$\Delta I = \int_0^1 \frac{\partial I}{\partial\alpha} d\alpha.$$

Параметр α выбран так, чтобы при $\alpha = 0$ получалась начальная среда, а при $\alpha = 1$ — конечная.

Оценка дисперсии при расчете производных следует из формулы (8) при $\alpha = 0$

$$\sigma_I^2 = (2-p)/p.$$

При розыгрыше H историй получается следующий порядок сходимости оценки I' :

$$\sigma_{I'}^2 = (2-p)/Hp. \quad (10)$$

При малых вероятностях захвата множитель в равенстве (10) при $1/H$ достигает порядка сотни. Это означает, что для достижения той же относительной точности в оценке производной числа захватов потребуется разыграть в 100 раз больше нейтронных траекторий по сравнению с оценкой числа захватов. Оценку дисперсии (10), полученную для гомогенной односкоростной среды, по-видимому, можно считать нижней границей оценки дисперсии метода. При полных расчетах реакторов дисперсия только возрастает.

Когда область возмущения затрагивает лишь часть фазового пространства системы, оценку дисперсии (10) следует уточнить:

$$\sigma_{I'}^2 = (2-p)/Hvp, \quad (11)$$

где v — коэффициент изменения дисперсии, который в первом приближении можно считать равным отношению числа столкновений нейтронов в области возмущения к общему числу столкновений.

Следует упомянуть методы расчета возмущений, использующие моделирование уравнений для ценностей [8—12], которые позволяют, в частности, определять локальные возмущения типа задач о регулирующей способности стержней, недоступные для расчета в рассмотренной схеме [коэффициент v в формуле (11) становится мал]. Эти перспективные методы лишь недавно стали входить в практику расчетов, и для них не проведено анализа дисперсий.

Точность расчетов коэффициентов чувствительности методом Монте-Карло. Показателем эффективности расчета функционала методом Монте-Карло принято считать $\delta = \varepsilon^2 t$, где ε — относительная точность, достигнутая при вычислении данного функционала, а t —

затраченное для этого машинное время, мин. Приведенные значения эффективностей получены при решении типичных неупрощенных реакторных задач. Расчеты проводились при помощи комплекса программ АРМОТ [13] в 26-групповом или подгрупповом представлении сечений каталога АРАМАКО [14] на машине М-222 со скоростью счета 20 000 арифметических операций в секунду. В $R-Z$ -геометрии [15] рассчитывались коэффициенты чувствительности по отношению к изменению плотности веществ в зонах реактора или ячейки и доплеровский коэффициент реактивности.

Для иллюстрации эффективности вычисления возмущений выбраны следующие типичные примеры нейтронно-физических расчетов.

1. Тепловой реактор с бериллиевым замедлителем, состоящий из 13 зон. Эффективность расчета производной $K_{эфф}$ по изменению плотности веществ в зонах с горючим $\delta = 7,02$. Отношение объема возмущаемой области к общему объему реактора 0,067. Расчет производной $K_{эфф}$ по изменению плотности отражателя для того же реактора дал величину $\delta = 11,02$. В последнем случае отношение объема возмущенной области к общему объему реактора 0,73. Эффективность расчета $K_{эфф}$ для того же реактора 0,033.

2. Тепловой реактор с водородсодержащим замедлителем, состоящий из 5 зон. Отношение объема блоков горючего к общему объему — 0,041. Эффективность расчета доплеровского коэффициента реактивности $\delta = 4,24$. Эффективность расчета $K_{эфф}$ для того же реактора $\delta = 0,026$.

3. Ячейка с водородсодержащим замедлителем, состоящая из 18 зон. Отношение объемов блоков с горючим к общему объему ячейки — 0,049. Эффективность расчета доплеровского коэффициента реактивности $\delta = 1,044$ (разогреву подвергалась вся ячейка). Эффективность расчета $K_{эфф}$ $\delta = 0,024$.

Как следует из результатов расчетов, эффективность определения $K_{эфф}$ в 40—300 раз лучше, чем при определении возмущений. Другими словами, чтобы достигнуть равную относительную точность при расчете возмущений требуется разыграть в 40—300 раз больше историй по сравнению с расчетом $K_{эфф}$.

Заметим, что в расчетах предполагалось отсутствие возмущения источников деления в начале траектории нейтрона, т. е. в формуле (3)

слагаемое $S'(X_0)/S(X_0)$ равно нулю. В работе [16] показано, что это приближение дает смещение в оценках некоторых функционалов. Например, при расчете времени жизни нейтронов в реакторе смещение может быть значительным, достигая 100%. Однако при расчетах эффектов реактивности, связанных с изменением плотности, и особенно при вычислении доплеровских коэффициентов реактивности, смещение не превосходит 1% эффекта. Это подтверждают специально проведенные модельные расчеты. Физические соображения здесь просты. Как известно, эффект возмущения определяется вероятностью избежать резонансного захвата. В процессе же замедления до резонансной области нейтрон «забывает» пространственное возмущение источника. (Напомним, что интеграл источника не изменяется!). Однако для некоторых случаев возмущений геометрии или состава в небольших реакторах с сильными отражателями нельзя пренебрегать возмущением источника делений при расчетах возмущений реактивности.

Автор приносит благодарность В. Г. Золотухину за ценную научную консультацию.

Поступила в Редакцию 13/1 1976 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Золотухин В. Г. Препринт ФЭИ-72. Обнинск, 1967.
2. Абаган Л. П. и др. Групповые константы для расчета ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1964.
3. Франк-Каменецкий А. Д. В сб.: Метод Монте-Карло в проблеме переноса излучений. М., Атомиздат, 1967, с. 212.
4. Михайлов Г. А. Некоторые вопросы теории методов Монте-Карло. Новосибирск, «Наука», 1974.
5. Усиков Д. А. Препринт ФЭИ-423. Обнинск, 1973.
6. Miller L., Milley G. «Nucl. Sci. and Engng», 1970, v. 40, p. 438.
7. Усиков Д. А. Препринт ФЭИ-656. Обнинск, 1976.
8. Kalos M. «Nucl. Sci. and Engng», 1969, v. 37, p. 410.
9. Carter L., Mc. Cormick N. «Nucl. Sci. and Engng», 1970, v. 39, p. 296.
10. Спанье Дж., Гелбард Э. Метод Монте-Карло и задачи переноса нейтронов. М., Атомиздат, 1972.
11. Полевой В. Б. «Атомная энергия», 1973, т. 34, вып. 4, с. 296.
12. Цибуля А. М. Препринт ФЭИ-464. Обнинск, 1973.
13. Коробейников В. В. и др. В сб.: Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы. Вып. 18. М., изд. ЦНИИатоминформ, 1975, с. 85.
14. Хохлов В. Ф., Савоськин М. М., Николаев М. Н. В сб.: Ядерные константы. Вып. 8, ч. 3. М., изд. ЦНИИатоминформ, 1972, с. 3.
15. Усиков Д. А. Препринт ФЭИ-627. Обнинск, 1975.
16. Франк-Каменецкий А. Д., Юдкевич М. С. Препринт ИАЭ-2155. М., 1971.