

УДК 621.039.51

# Комбинированная оценка функционалов потока нейтронов с помощью коррелированной выборки

КАЗАРИЦКИЙ В. Д.

Для уменьшения статистической погрешности результатов вычисления функционалов потока нейтронов предложены различные модификации метода Монте-Карло [1]. В большинстве из них используется неаналоговое моделирование процесса переноса частиц. Однако вследствие универсальности и простоты математической формулировки аналоговые методы остаются основным инструментом в практике реакторных расчетов. В статье предложен экономный метод комбинирования оценок функционалов потока нейтронов, полученных с помощью коррелированной выборки, и детерминированной оценки для упрощенной системы. В качестве примера рассмотрена задача вычисления скорости реакций в гетерогенном реакторе с утечкой. Приведенная ситуация типична для идентификации интегральных экспериментов на критических сборках.

Аналоговые методы Монте-Карло для расчетов нейтронно-физических параметров ядерных реакторов формулируются с помощью уравнения переноса [1]

$$\Psi(x) = \int K(x' \rightarrow x) \Psi(x') dx' + \Psi_1(x). \quad (1)$$

Здесь  $x$  — точка фазового пространства;  $\Psi(x)$  — плотность столкновений нейтронов;  $\Psi_1(x)$  — плотность первых столкновений. При этом линейный функционал потока нейтронов  $J$  определяется как

$$J = \int \Psi(x) \varphi(x) dx, \quad (2)$$

где  $\varphi(x)$  — ограниченная функция. Оценивают функционал (2) осреднением по случайным траекториям величины

$$J = \sum_{i=0}^{\infty} \varphi(x_i). \quad (3)$$

Точки  $x_i$  выбирают с помощью начального распределения  $\Psi_1(x)$  и вероятности перехода  $K(x' \rightarrow x)$ . Совокупность таких точек назовем траекториями  $AT$ . Часто для нахождения другого линейного функционала

$$J^p = \int \Psi^p(x) \varphi^p(x) dx, \quad (4)$$

где функция  $\Psi^p(x)$  — решение уравнения

$$\Psi^p(x) = \int K^p(x' \rightarrow x) \Psi^p(x') dx' + \Psi_1^p(x), \quad (5)$$

можно воспользоваться теми же траекториями  $AT$ . Возникающее смещение устраняют введением весов

$$J^p = \sum_{i=0}^{\infty} W(x_i) \varphi^p(x_i), \quad (6)$$

которые вычисляются по формулам

$$W(x_0) = \frac{\Psi_1^p(x_0)}{\Psi_1(x_0)}; \quad W(x_i) = W(x_{i-1}) \frac{K^p(x_{i-1} \rightarrow x_i)}{K(x_{i-1} \rightarrow x_i)}. \quad (7)$$

Это метод коррелированных траекторий с использованием эффективных весов [2, 3], нашедший применение в расчетах малых возмущений. Веса  $W(x)$  должны быть конечными во всех возможных точках траектории  $AT$ . Флюктуации весов приводят к увеличению дисперсии оценки функционала  $J^p$  по сравнению, например, с той же оценкой, полученной на траекториях  $AT^p$  с распределениями  $\Psi_1^p(x)$  и  $K^p(x' \rightarrow x)$ . Для уменьшения дисперсии оценок типа (6) предлагается метод коррелированных процессов, или комбинированной оценки, развитый в работе [4] для определения произвольных вероятностных характеристик.

## Формулировка метода коррелированных процессов

Допустим, что известны функционалы (2). Требуется построить оценки функционалов (4) с оптимальными свойствами. Введем вектор  $\lambda$ , компоненты которого —  $n$  функционалов (4), и вектор  $\mu$  для  $m$  функционалов (2):

$$\lambda = M[R]; \quad \mu = M[V]. \quad (8)$$

Здесь  $M[\dots]$  — математическое ожидание величины в скобках;  $R$  и  $V$  —  $n$ - и  $m$ -мерные векторы; их компонентами являются функции траекторий, соответствующие оценкам (6) и (3). Статистические значения  $\lambda^*$  и  $\mu^*$  векторов  $\lambda$  и  $\mu$ , найденные с помощью  $N$  независимых траекторий, определяются соотношениями

$$\lambda^* = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N R_j; \quad \mu^* = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N V_j. \quad (9)$$

Оценка  $\lambda_0$  вектора  $\lambda$  строится в классе линейных по отношению к векторам  $\lambda^*$ ,  $\mu^*$  и  $\mu$

$$\lambda_0 = A\lambda^* + B\mu^* + C\mu, \quad (10)$$

где  $A$ ,  $B$  и  $C$  — некоторые матрицы ( $A$  размером  $n \times n$ ,  $B$  и  $C$  размером  $n \times m$ ). Из условия несмещенности для компонента  $\lambda_{0i}$  следует, что

$$B_i + C_i = 0; \quad A_i = 1. \quad (11)$$

Здесь  $A_i$ ,  $B_i$  и  $C_i$  — матрицы-строки матриц  $A$ ,  $B$  и  $C$ . Тогда для оценки  $\lambda_{0i}$  можно записать

$$\lambda_{0i} = \lambda_i^* - C_i(\mu^* - \mu). \quad (12)$$

Матрица  $C_i$  определяется из условия минимума

Таблица 1

Состав решетки реактора

Область	Внешний радиус, см	Состав	Плотность, атом/(барн·см)
Топливо	0,4915	<sup>235</sup> U <sup>238</sup> U	0,0006253 0,047205
Пустота	0,5042	—	—
Оболочка	0,5753	Al H O	0,06025 0,06676 0,03338
Замедлитель	—	—	—

дисперсии  $K_{0i}$  оценки  $\lambda_{0i}$  (12):

$$K_{0i} = M [(\lambda_{0i} - \lambda_i)^2]. \quad (13)$$

Обозначив через  $K_{R_i R_i}$  дисперсию компонента  $R_i$ , через  $K_{R_i V}$  — корреляционную матрицу компонента  $R_i$  и вектора  $V$ , а через  $K_{VV}$  — корреляционную матрицу вектора  $V$ , учитывая определения (9) и равенства

$$\left. \begin{aligned} M [(\lambda_i^* - \lambda_i)^2] &= \frac{1}{N} K_{R_i R_i}; \\ M [(\lambda_i^* - \lambda_i) (\mu^* - \mu)^T] &= \frac{1}{N} K_{R_i V}; \\ M [(\mu^* - \mu) (\mu^* - \mu)^T] &= \frac{1}{N} K_{VV}, \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

для дисперсии  $K_{0i}$  можно получить

$$K_{0i} = \frac{1}{N} (K_{R_i R_i} - 2K_{R_i V} C_i^T + C_i K_{VV} C_i^T). \quad (15)$$

В формулах (14) и (15)  $T$  — знак транспонирования матрицы. Выражение для  $C_i$  следует из условия минимума для дисперсии  $K_{0i}$

$$C_i = K_{R_i V} K_{VV}^{-1}, \quad (16)$$

где  $K_{VV}^{-1}$  — матрица, обратная  $K_{VV}$ . Отсюда для оценки  $\lambda_{0i}$  окончательно получим

$$\lambda_{0i} = \lambda_i^* - K_{R_i V} K_{VV}^{-1} (\mu^* - \mu). \quad (17)$$

Подставляя (17) в формулу (13) и принимая во внимание симметричность матрицы  $K_{VV}^{-1}$ , для дисперсии  $K_{0i}$  можно вывести

$$K_{0i} = \frac{1}{N} (K_{R_i R_i} - K_{R_i V} K_{VV}^{-1} K_{V R_i}). \quad (18)$$

Последовательность соотношений (8) — (18) кратко воспроизводит изложение оригинальной работы [4]. Дисперсия независимой оценки компонента  $\lambda_i$  по определению составляет

$$K_i = K_{R_i R_i} / N. \quad (19)$$

Таким образом, выигрыш в точности будет обуславливаться величиной  $\eta$ , равной отношению

$$\eta = K_i / K_{0i}. \quad (20)$$

Теперь, когда получены все необходимые соотношения для оценок неизвестных функционалов  $\lambda$ , следует заметить, что реальный успех применения метода зависит от того, насколько тесно связаны два рассматриваемых случайных процесса. Количественно эту связь выражают корреляционные моменты, входящие в формулу (18); их величины определяют выигрыш  $\eta$  от применения комбинированной оценки.

### Выборка для систем с различными граничными условиями

В задачах физики реакторов представляют интерес такие функционалы, как эффективный коэффициент размножения нейтронов ( $k_{эф}$ ), число (скорость) реакций, важнейшие из которых — деление и захват для ядер <sup>238</sup>U, деление ядер <sup>235</sup>U. Оценим эти величины для реактора конечных размеров, для

чего проанализируем реакторный эксперимент, проведенный в целях проверки ядерных данных [5]. В рассматриваемом уран-водном реакторе шаг гексагональной решетки 1,806 см, отношение объемов замедлителя и топлива 2,35; экспериментальный материальный параметр  $\alpha^2$  равен 57,0 м<sup>-2</sup>. Остальные данные, необходимые для расчета, приведены в табл. 1. Будем решать поставленную задачу с помощью коррелированной выборки и при этом приближенно полагать, что  $\alpha^2 = \alpha_2^2$ , т. е. считать реактор конечным только по высоте. Траектории AT будут соответствовать бесконечной решетке, для них на границах реактора ставится условие полного отражения. Функционалы потока нейтронов для реактора с утечкой оцениваются путем вычитания вкладов тех нейтронов, которые хотя бы раз достигли границы. При таком способе корреляции двух процессов подразумевается, что распределение источников нейтронов деления слабо зависит от утечки. Расчет бесконечной решетки сводится к расчету сравнительно простой цилиндрической ячейки, поэтому скорость реакций и компоненты вектора  $\mu$  можно получить заранее с большой точностью. Для этого использована программа TRIFON [6], с помощью которой решается многогрупповая система интегральных уравнений переноса нейтронов. Оценки  $\mu^*$  и  $\lambda^*$  получены методом Монте-Карло по универсальной программе МК-6 [7] с добавлением программы, реализующей коррелированную выборку. Особенности моделирования траекторий нейтронов в уран-водной решетке подробно описаны в работе [8]. Сечения для ядер <sup>238</sup>U в области разрешенных резонансов рассчитывались по формулам Брайта — Вигнера в одноуровневом приближении, в остальных случаях — с помощью группового описания. В интервале энергии нейтронов 0—0,625 эВ (область термализации) сечения представлены в 20 группах. Для вычисления сечений в этом интервале применялись константы из библиотеки TERMIT [9], в диапазоне 0,625 эВ — 10 МэВ — групповые константы БНАВ [10]. Рассеяние нейтронов разыгрывалось как изотропное в с. п. м., а в тепловой области — по среднему косинусу в лабораторной системе координат. Значение  $k_{эф}$  оценивалось методом поколений

Результаты выборки без использования весов

Вектор	Скорость реакций					$k_{эф}$
	надтепловые нейтроны			тепловые нейтроны		
	$^{238}\text{U}_c$	$^{238}\text{U}_f$	$^{235}\text{U}_f$	$^{238}\text{U}_c$	$^{235}\text{U}_f$	
$\mu$	0,1943	0,0399	0,0391	0,1490	0,3995	1,172
$\mu^*$	0,2067	0,0408	0,0388	0,1462	0,3901	1,155
	( $\pm 0,0019$ )	( $\pm 0,0010$ )	( $\pm 0,0009$ )	( $\pm 0,0017$ )	( $\pm 0,0023$ )	( $\pm 0,006$ )
$\lambda^*$	0,1715	0,0372	0,0314	0,1123	0,3020	0,943
	( $\pm 0,0018$ )	( $\pm 0,0009$ )	( $\pm 0,0008$ )	( $\pm 0,0015$ )	( $\pm 0,0022$ )	( $\pm 0,006$ )
$\lambda_0$	0,1611	0,0363	0,0317	0,1145	0,3093	0,926
	( $\pm 0,0008$ )	( $\pm 0,0003$ )	( $\pm 0,0004$ )	( $\pm 0,0008$ )	( $\pm 0,0012$ )	( $\pm 0,003$ )
$\eta$	4,9	10,8	5,1	3,8	3,1	3,1
$\rho$	0,895	0,952	0,904	0,866	0,828	0,825

с постоянным числом точек. На расчет величин, приведенных в табл. 2, затрачено 3 ч процессорного времени машины БЭСМ-6 (44 000 историй). Кроме оценок скорости реакций и соответствующих коэффициентов выигрыша, в табл. 2 содержатся коэффициенты корреляции  $\rho_{RV}$  оценок для конечной и бесконечной решеток, вычисляемые по формуле

$$\rho_{RV} = \sqrt{K_{RR}^{-1}} K_{RV} \sqrt{K_{VV}^{-1}}. \quad (21)$$

В приведенных данных обнаруживается резкое возрастание выигрыша в точности в случае приближения коэффициента корреляции к 1. Точные значения матриц  $K_{VV}$  и  $K_{RV}$  неизвестны, и поэтому, применяя формулы (16) — (19), мы использовали их статистическими значениями, полученными в процессе моделирования траекторий нейтронов. Это практически не влияет на точность оценки  $\lambda_0$ , так как ее дисперсия отличается от дисперсии оценки  $\lambda_0^*$

$$\lambda_0' = \lambda^* - K_{RV}^* (K_{VV}^*)^{-1} (\mu^* - \mu) \quad (22)$$

на величину порядка  $1/N^2$  [4]. С увеличением числа компонентов вектора  $\mu$  точность оценки компонента  $\lambda_{0i}$  вектора  $\lambda_0$  должна возрастать. Это следует из выражения (18) для дисперсии. Вклад в коэффициент  $\eta$  компонентов  $\mu_j$  ( $j \neq i$ ) определяется недиагональными членами матрицы  $K_{VV}$ . Однако в рассмотренном примере значения скорости реакций слабо коррелируют между собой, максимальный коэффициент корреляции 0,336. Исключение составляет  $k_{эф}$ , для которого коэффициент корреляции со скоростью делений  $^{235}\text{U}$  на тепловых нейтронах составляет 0,824, но и это увеличивает  $\eta$  лишь на 15%. Заканчивая анализ выборки, заметим, что траектории нейтронов в решетках с утечкой и без нее оказались разными. Для оценки скорости реакций в первой из них использованы усеченные траектории  $AT$ , построенные для бесконечной решетки. В обеих системах полностью совпадают только те траектории, которые не достигли границ реактора.

### Выборка с использованием асимптотического потока нейтронов

Построим случайную выборку так, чтобы траектории в исходной и упрощенной системах были одинаковы. Для этого используем метод изображений. Зададим зависимость плотности потока нейтронов от аксиальной координаты  $z$  в виде  $e^{i\alpha z}$ . Тогда из уравнения переноса (1) можно получить

$$K^p(x' \rightarrow x) = K(x' \rightarrow x) e^{i\alpha z(z' - z)}, \quad (23)$$

а из формулы (7) для веса нейтрона в точке поглощения  $x_n$

$$W(x_n) = e^{i\alpha z(z_0 - z_n)}. \quad (24)$$

Здесь  $z_0, z_n$  — аксиальные координаты точек рождения и поглощения нейтронов. Подобный метод применялся для оценки возмущений реактивности в работе [11]. Ячейка рассматриваемой уран-водной решетки симметричная, поэтому в формуле (24) останется только

$$W(x_n) = \cos[\alpha z(z_0 - z_n)]. \quad (25)$$

Как и в предыдущем разделе, траектории  $AT$  разыгрываются в бесконечной решетке; на них точно так же вычисляются оценки  $\mu^*$ . Одновременно оцениваются значения  $\lambda^*$ , при этом вклад каждой траектории в соответствующий функционал умножается на вес  $W$ , вычисленный по формуле (25). Результаты выборки приведены в табл. 3. Для расчета этих величин потребовался 1 ч 30 мин машинного времени; статистика — 20 000 нейтронных историй. Полученные данные показывают, что моделируемые процессы сильно коррелируют. Коэффициент выигрыша значительно возрос. Особенно большой эффект наблюдается для скорости деления ядер  $^{238}\text{U}$ . Это объясняется тем, что реакция идет на быстрых нейтронах, соответствующие траектории короткие и эффективные веса нейтронов мало отличаются от 1. В расчетах, представленных в табл. 2 и 3, используются одни и те же значения вектора  $\mu$ , поэтому

Таблица 3

## Результаты выборки с эффективными весами нейтронов

Вектор	Скорость реакций					$k_{эф}$
	надтепловые нейтроны			тепловые нейтроны		
	$^{238}\text{U}_c$	$^{238}\text{U}_f$	$^{235}\text{U}_f$	$^{238}\text{U}_c$	$^{235}\text{U}_f$	
$\mu^*$	0,2060 ( $\pm 0,0028$ )	0,0412 ( $\pm 0,0014$ )	0,0380 ( $\pm 0,0013$ )	0,1452 ( $\pm 0,0024$ )	0,3896 ( $\pm 0,0034$ )	1,153 ( $\pm 0,009$ )
$\lambda^*$	0,1808 ( $\pm 0,0025$ )	0,0386 ( $\pm 0,0013$ )	0,0328 ( $\pm 0,0012$ )	0,1233 ( $\pm 0,0022$ )	0,3290 ( $\pm 0,0030$ )	0,986 ( $\pm 0,008$ )
$\lambda_0$	0,1706 ( $\pm 0,0006$ )	0,0372 ( $\pm 0,0002$ )	0,0338 ( $\pm 0,0003$ )	0,1266 ( $\pm 0,0006$ )	0,3373 ( $\pm 0,0009$ )	1,002 ( $\pm 0,003$ )
$\eta$	17,7	40,2	17,7	13,9	10,1	9,7
$\rho$	0,971	0,987	0,971	0,963	0,949	0,947

они приведены только в табл. 2. Различия в значениях  $\mu^*$  и их стандартных отклонениях вызваны неодинаковыми объемами выборок. Наблюдающееся различие в  $\lambda^*$  нестатистическое; оно обусловлено тем, что в первой выборке не учитывается разница в распределениях источников двух систем, тем самым переоценивается утечка нейтронов. Применение асимптотического потока для вычисления нейтронных весов оправдано для реакторов с хорошо определенным  $\alpha^2$ , только в этом случае можно ограничиться основной модой.

## Заключение

Комбинированный метод вычисления линейных функционалов потока нейтронов повышает эффективность статистического моделирования за счет привлечения других численных методов. Как правило, результаты подобных расчетов подвергаются только сравнительной оценке. Упрощение исходной системы с последующим исследованием доступными детерминированными методами (не исключаются и аналитические) может дать полезную априорную информацию. Связь между исходной и упрощенной системами устанавливается с помощью коррелированной выборки. Корреляционные моменты, вычисляемые в ходе моделирования переноса нейтронов, определяют получаемый выигрыш в точности. Хотя метод коррелированной выборки не исчерпывается применением одинаковых траекторий с введением эффективных весов нейтронов, предпочтительнее использовать именно этот тип выборки (см. табл. 2 и 3). Число рассчитываемых функционалов в упрощенной и реальной системах может не совпадать, более того, это

могут быть разные функционалы. Необходимо только, чтобы они коррелировали между собой. Метод имеет много общего с методом выделения главной части, когда предполагается, что существует некоторая близкая к плотности потока функция, для которой известны соответствующие функционалы или их вычисление связано с меньшими затратами. Метод коррелированных процессов более точен, так как для него построена оптимальная оценка. Кроме того, он обладает большей универсальностью.

Автор благодарит Б. П. Кочурова, предоставившего результаты расчета по программе TRIFON и П. П. Благоволитина за обсуждение результатов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Золотухин В. Г., Усиков Д. А. Оценка реакторных параметров методом Монте-Карло. М., Атомиздат, 1979.
2. Михайлов Г. А.— Ж. вычислит. мат. и мат. физ., 1967, т. 7, № 4, с. 915.
3. Золотухин В. Г.— В кн.: Вопросы физики ядерных реакторов. Вып. 1. Обнинск, изд. ФЭИ, 1968, с. 140.
4. Пугачев В. Н. Комбинированные методы определения вероятностных характеристик. М., Советское радио, 1973.
5. Rotenstein W.— Nucl. Sci. Engng., 1976, v. 59, p. 337.
6. Бурмистров А. Я., Кочуров Б. П. Препринт ИТЭФ-107. М., 1978.
7. Казарицкий В. Д. Препринт ИТЭФ-1, М., 1978.
8. Казарицкий В. Д. Препринт ИТЭФ-137, М., 1978.
9. Михайлов В. М. Препринт ИТЭФ-119, М., 1978.
10. Абагян Л. П. и др. Групповые константы для расчета ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1964.
11. Gelbard E., Lell R.— Nucl. Sci. Engng., 1977, v. 63, p. 9.

Поступила в Редакцию 23.06.80