

**ФИЗИКА
ЯДЕРНЫХ
РЕАКТОРОВ**

В.Г. ЗОЛОТУХИН, Д.А. УСИКОВ

**ОЦЕНКА
РЕАКТОРНЫХ
ПАРАМЕТРОВ
МЕТОДОМ
МОНТЕ-КАРЛО**

В. Г. ЗОЛОТУХИН, Д. А. УСИКОВ

ОЦЕНКА РЕАКТОРНЫХ ПАРАМЕТРОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

(Теория возмущений)



МОСКВА АТОМИЗДАТ 1979

Золотухин В. Г., Усиков Д. А. Оценка реакторных параметров методом Монте-Карло (Теория возмущений). — М.: Атомиздат, 1979. — 96 с.

Книга посвящена систематическому изложению вопроса оценки возмущения параметров ядерных реакторов методом Монте-Карло в отличие от ранее написанных работ, где рассматривались лишь отдельные вопросы расчета реакторов этим методом.

Специальная глава отведена рассмотрению относительно мало исследованного вопроса конкретных оценок возмущений реактивности в реакторе. Особое внимание уделено практическим приложениям.

Книга рассчитана на инженеров-физиков и научных работников, студентов физических факультетов университетов, аспирантов, специализирующихся в области расчетов ядерных реакторов.

Рис. 9. Список литературы 56 наименований.

Серия «Физика ядерных реакторов», № 15.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	3
1. Различные формулировки кинетического уравнения	5
1.1. Неоднородные уравнения переноса	5
1.2. Однородные уравнения переноса	8
2. Вычисление конечных возмущений методом коррелированных траекторий	12
2.1. Формулировка метода	12
2.2. Связь с классической теорией возмущений	14
2.3. О вычислении эффективных констант методом Монте-Карло	22
2.4. Расчет возмущений эффективного коэффициента размножения методом Монте-Карло	27
2.5. Групповой расчет	31
2.6. Дисперсия метода	32
2.7. Потеря точности при вычислении малых возмущений	46
2.8. Структура программы для расчетов на ЭВМ	48
2.9. Формулы обработки при групповом расчете	52
3. Вычисление производных по возмущению методом коррелированных траекторий	54
3.1. Предельный переход	54
3.2. Подгрупповой расчет. Доплер-эффект	55
3.3. Возмущение плотности	59
3.4. Возмущение геометрии	61
3.5. Дисперсия метода	65
3.6. Формулы обработки результатов при групповом расчете	69
4. Метод интегрирования по параметру	71
4.1. Случай нарушения взаимной непрерывности мер	71
4.2. Формулировка метода	72
4.3. Итерация источников в методе интегрирования по параметру	73
4.4. Линейные переходы	77
4.5. Некоторые особенности организации программы для ЭВМ	77
Приложение 1. Подгрупповое описание резонансной области сечений	79
Приложение 2. Описание сечений и их температурных производных в области разрешенных резонансов	85
Список литературы	88

ВВЕДЕНИЕ

Среди численных методов решения уравнений переноса Больцмана метод Монте-Карло имеет то преимущество, что он позволяет учитывать все многообразие процессов взаимодействия излучения с веществом. Метод Монте-Карло в простейшем варианте даже не нуждается в формулировке кинетических уравнений. По существу на электронно-вычислительной машине моделируется реальный процесс распространения частиц (нейтронов, γ -квантов). Метод прямого моделирования распространения излучения в веществе получил название *аналогового* моделирования. При помощи аналогового моделирования эффективно решаются такие задачи, как определение коэффициента размножения ядерного реактора, потоков частиц в достаточно представительных областях фазового пространства системы, дозы облучения в задачах защиты и другие функционалы [7, 20, 25, 30, 34, 43].

На следующей ступени развития метода Монте-Карло начали применять *неаналоговый* метод моделирования, математический аппарат при этом существенно усложнился. Использование неаналоговых методов значительно повысило статистическую точность расчетов и расширило круг решаемых задач [5, 9, 18, 19, 23—25, 33].

Все неаналоговые методы Монте-Карло можно условно разбить на два класса. В первом—моделируются прямые уравнения Больцмана, во втором—сопряженные. По существу эти два класса отличаются лишь выбором и интерпретацией сечений и вероятностей переходов [52, 53]. Любой новый результат, достигнутый при развитии методов решения задач одного класса, может быть применен в сопряженной задаче. В частности, это касается описываемой в настоящей работе теории возмущений в рамках метода Монте-Карло. Изложение ведется применительно к прямым уравнениям, но результаты могут быть стандартным образом переформулированы для сопряженной задачи.

Дальнейшее развитие метода Монте-Карло для решения уравнений переноса излучения шло по пути одновременного моделирования прямого и сопряженного уравнений [10, 35, 49]. В рамках этого подхода стало возможным эффективно решать задачи, в которых возмущение носит локальный ха-

рактик (по пространству, углам и энергии). В общем случае стационарная задача переноса излучения может быть трижды локальна: по источнику, по возмущению и по детектору.

В настоящей работе описаны методы расчета различных возмущений в стационарных системах, не использующие техники сопряженного моделирования [5, 9, 23, 25, 33]. Эти методы выгодно отличаются простотой процесса моделирования. Для них достаточно полно исследованы статистические точности [39], с их применением решено большое число практических задач. Описываемая ниже теория возмущений наиболее эффективно применяется при решении следующих задач [41]: 1) определение доплеровских коэффициентов реактивности реакторов и ячеек, 2) определение коэффициентов чувствительности по отношению к коэффициентам реактивности, тепловыделению и другим функционалам в зависимости от изменения концентрации различных конструкционных материалов и горючего, примесей, осколков деления и т. п., 3) влияние геометрии и состава материалов на дозы излучений при расчетах защиты. Главное ограничение метода заключается в предположении, что возмущения затрагивают значительную часть фазового пространства системы (например, концентрация горючего меняется в большей части твэла, температура меняется в большом объеме отражателя и т. п.).

Теория возмущений построена таким образом, чтобы существующие программы метода Монте-Карло могли быть легко модифицированы для расчета различных возмущений.

1. РАЗЛИЧНЫЕ ФОРМУЛИРОВКИ КИНЕТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

1.1. Неоднородные уравнения переноса

За исходную математическую формулировку явлений переноса излучения примем интегро-дифференциальную форму кинетического уравнения Больцмана:

$$\Omega \nabla \Phi(r, \Omega, E) + \Sigma(r, \Omega, E) \Phi(r, \Omega, E) = S(r, \Omega, E) + \int d\Omega' dE' W_s(r; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega) \Phi(r, \Omega, E), \quad (1.1)$$

где $\Phi(r, \Omega, E)$ — поток нейтронов или квантов; $S(r, \Omega, E)$ — плотность источников; $\Sigma(r, \Omega, E)$ — полное сечение взаимодействия; $W_s(r; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega)$ — сечение перехода частицы, находящейся в точке r , из состояния с энергией E' и углом полета Ω' в состояние E, Ω .

Преобразуем уравнение (1.1) в интегральную форму [51]. Допустим, что r — фиксированная точка и введем $r' = r - R\Omega$, где R — переменная. Тогда

$$\frac{d\Phi(r', \Omega, E)}{dR} = \frac{dx'}{dR} \frac{\partial \Phi}{\partial x'} + \frac{dy'}{dR} \frac{\partial \Phi}{\partial y'} + \frac{dz'}{dR} \frac{\partial \Phi}{\partial z'} = -\Omega_{x'} \frac{\partial \Phi}{\partial x'} - \Omega_{y'} \frac{\partial \Phi}{\partial y'} - \Omega_{z'} \frac{\partial \Phi}{\partial z'} = -\Omega \nabla \Phi(r', \Omega, E). \quad (1.2)$$

Введем множитель $\exp\left(-\int_0^R \Sigma(r - R'\Omega, \Omega, E) dR'\right)$.

Тогда

$$\begin{aligned} & -\frac{d}{dR} \left\{ \Phi(r', \Omega, E) \exp\left(-\int_0^R \Sigma(r - R'\Omega, \Omega, E) dR'\right) \right\} = \\ & = \exp\left[-\int_0^R \Sigma(r - R'\Omega, \Omega, E) dR'\right] \left[-\frac{d\Phi(r', \Omega, E)}{dR} + \right. \\ & \left. + \Sigma(r', \Omega, E) \Phi(r', \Omega, E) \right] = \exp\left[-\int_0^R \Sigma(r - R'\Omega, \Omega, E) dR'\right] \times \\ & \times [\Omega \Delta \Phi(r', \Omega, E) + \Sigma(r', \Omega, E) \Phi(r', \Omega, E)] = \end{aligned}$$

$$= \exp \left[- \int_0^R \Sigma(r - R'\Omega, \Omega, E) dR' \right] \left[S(r', \Omega, E) + \int dE' d\Omega' W_s(r'; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega) \Phi(r', \Omega', E') \right]. \quad (1.3)$$

Проинтегрируем уравнение (1.3) от $R=0$ до $R=\infty$, предположив, что член в левой части уравнения равен нулю при $R=\infty$. В результате получим интегральную форму уравнения Больцмана для потока:

$$\Phi(r, \Omega, E) = \int_0^{\infty} dR \exp \left(- \int_0^R \Sigma(r - R'\Omega, \Omega, E) dR' \right) \times \\ \times \left[S(r - R\Omega, \Omega, E) + \int dE' d\Omega' W_s(r - R'\Omega; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega) \times \right. \\ \left. \times \Phi(r - R\Omega, \Omega', E') \right]. \quad (1.4)$$

Величину $\tau(r, R, \Omega, E) = \int_0^R \Sigma(r - R'\Omega, \Omega, E) dR'$ называют *оптическим расстоянием* между точками r и $r - R\Omega$ или *оптической толщиной*.

Интегральное уравнение для плотности столкновений

$$\Psi(r, \Omega, E) = \Sigma(r, \Omega, E) \Phi(r, \Omega, E)$$

легко выводится из уравнения (1.4):

$$\Psi(r, \Omega, E) = \int_0^{\infty} dR \Sigma(r, \Omega, E) \exp(-\tau(r, R, \Omega, E)) \times \\ \times \left(S(r - R\Omega, \Omega, E) + \int dE' d\Omega' \frac{W_s(r - R\Omega; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega)}{\Sigma(r - R\Omega, \Omega', E')} \times \right. \\ \left. \times \Psi(r - R\Omega, \Omega', E') \right). \quad (1.5)$$

Величину

$$\Psi_1(r, \Omega, E) = \int_0^{\infty} dR \Sigma(r, \Omega, E) \exp(-\tau(r, R, \Omega, E)) \times \\ \times S(r - R\Omega, \Omega, E) \quad (1.6)$$

называют *плотностью первых соударений источника*. С учетом обозначения (1.6) уравнение (1.5) принимает вид

$$\Psi(r, \Omega, E) = \int_0^{\infty} dR \Sigma(r, \Omega, E) \exp(-\tau(r, R, \Omega, E)) \int dE' d\Omega' \times \\ \times \frac{W_s(r - R\Omega; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega)}{\Sigma(r - R\Omega, \Omega', E')} \Psi(r - R\Omega, \Omega', E') + \Psi_1(r, \Omega, E). \quad (1.7)$$

Уравнение (1.7) будем для краткости записывать в виде

$$\Psi(x) = \int K(x' \rightarrow x) \Psi(x') dx' + \Psi_1(x), \quad (1.8)$$

где x — точка фазового пространства r, Ω, E . Интеграл в выражении (1.8) равен

$$\int_0^{\infty} dR \Sigma(r, \Omega, E) \exp(-\tau(r, R, \Omega, E)) \int dE' d\Omega' \times \\ \times \frac{\mathcal{W}_s(r - R\Omega; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega)}{\Sigma(r - R\Omega, \Omega', E')} \Psi(r - R\Omega, \Omega', E').$$

Ядро $K(x' \rightarrow x)$ естественно разбивается в произведение:

$$K(x' \rightarrow x) = T(r' \rightarrow r; E) \frac{\Sigma_s(r', \Omega', E')}{\Sigma(r', \Omega', E')} \mathcal{W}_s(r'; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega).$$

Функция $T(r' \rightarrow r; E) = \Sigma(r, \Omega, E) \exp[-\tau(r, R, \Omega, E)]$ называется *функцией пропускания*. Уравнение (1.6) в операторной записи будет иметь вид $\Psi_1(x) = \int T(x' \rightarrow x) S(x') dx'$.

$\mathcal{W}_s(r; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega)$ — энерго-угловая индикатриса рассеяния. Функция $T(r' \rightarrow r; E)$ не нормирована на единицу:

$\int_0^{\infty} T(r' \rightarrow r; E) dR \leq 1$ вследствие того, что вероятность утечки из системы отлична от нуля.

Операторная запись уравнения (1.8)

$$\Psi = K\Psi + \Psi_1. \quad (1.9)$$

Уравнение (1.9) имеет формальное решение

$$\Psi = (I - K)^{-1} \Psi_1, \quad (1.10)$$

которое может быть представлено в виде ряда Неймана

$$\Psi = \sum_{i=0}^{\infty} K^{(i)} \Psi_1, \quad (1.11)$$

где

$$K^{(0)} \Psi_1 = \Psi_1;$$

$$K^{(1)} \Psi_1 = \int K(x' \rightarrow x) \Psi_1(x') dx';$$

$$K^{(2)} \Psi_1 = \int K(x' \rightarrow x'') K(x'' \rightarrow x) \Psi_1(x') dx' dx''$$

и т. д.

Уравнение для ценности $\Psi^+(x)$ относительно некоторого функционала $I = (\Psi, \varphi)$ выводится аналогично (1.7):

$$\Psi^+(r, \Omega, E) = \int_0^\infty dR \Sigma(r, \Omega, E) \exp(-\tau(r, R, \Omega, E)) \times \\ \times \int dE' d\Omega' \frac{W_s(r + R\Omega; E, \Omega \rightarrow E', \Omega')}{\Sigma(r + R\Omega, \Omega, E)} \Psi^+(r + R\Omega, \Omega', E') + \\ + \varphi(r, \Omega, E),$$

или в операторной записи:

$$\Psi^+(x) = \int K(x \rightarrow x') \Psi^+(x') dx' + \varphi(x); \\ \Psi^+ = K^+ \Psi^+ + \varphi. \quad (1.12)$$

Так как $\Psi(x)$ и $\Psi^+(x)$ имеют вероятностную интерпретацию плотностей столкновений, эти функции положительны; ядро $K(x' \rightarrow x)$ положительно при всех x' и x . Для уравнений переноса естественно рассматривать конус положительных функций в пространстве L_1 , в котором норма определяется как $\|f\| = \int f(x) dx$.

Норма оператора в L_1 определяется как $\|K\| = \sup \|Kf\|$; супремум берется для всех $f(x) > 0$, удовлетворяющих нормировке $\int f(x) dx = 1$. Нетрудно показать, что таким образом определенная норма эквивалентна

$$\|K\| = \sup \int K(x \rightarrow x') dx', \quad (1.13)$$

где супремум берется по всем допустимым x .

Необходимым и достаточным условием сходимости ряда Неймана (1.11) [25, с. 57—58] является существование такого целого $n_0 \geq 1$, при котором для всех $N > n_0$

$$\|K^N\| < 1. \quad (1.14)$$

С точки зрения физики переноса появление $n_0 \geq 1$ в формуле (1.14) означает, что среда может быть размножающей (тогда для некоторых x может оказаться $\int K(x \rightarrow x') dx' > 1$), но размножение таково, что среда подкритическая, так что число частиц в системе с ростом номера поколения стремится к нулю.

1.2. Однородные уравнения переноса

Важный класс уравнений в физике реакторов составляют различные постановки задачи на собственные значения. В качестве последних могут выступать различные параметры размножающей системы, вариации которых приводят систему в критическое состояние. В частности, задача на эффек-

тивный коэффициент размножения $K_{эф}$ в интегральной форме имеет вид:

$$\Psi = K\Psi + \frac{1}{K_{эф}}F\Psi; \quad (1.15)$$

$$F\Psi = \int_0^{\infty} dR \Sigma(r, \Omega, E) \exp(-\tau(r, R, \Omega, E)) \times \\ \times \int dE' d\Omega' \Psi(r - R\Omega, \Omega', E') \frac{\Sigma_f(r - R\Omega, \Omega', E')}{\Sigma(r - R\Omega, \Omega', E')} \times \\ \times \chi(r - R\Omega; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega).$$

Здесь $\Sigma_f(r, \Omega, E)$ — сечение деления; $\chi(r; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega)$ — плотность нейтронов деления, испускаемых в состояние E, Ω от нейтрона, вызвавшего деление в состоянии E', Ω' ; $\int \chi(r; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') dE' d\Omega' = \nu(r, \Omega, E)$ — среднее число нейтронов деления от нейтрона, поглощенного при энергии E . Обычно χ не зависит от Ω' , и распределение вторичных частиц по углам принимается изотропным в лабораторной системе координат. Величина $K_{эф}$ называется эффективным коэффициентом размножения нейтронов в реакторе.

Однородное сопряженное уравнение имеет вид

$$\Psi^+ = K^+\Psi^+ + \frac{1}{K_{эф}}F^+\Psi^+, \quad (1.16)$$

где

$$F^+\Psi^+ = \int_0^{\infty} dR \Sigma(r, \Omega, E) \exp(-\tau(r, R, \Omega, E)) \times \\ \times \int dE' d\Omega' \Psi^+(r + R\Omega, \Omega', E') \frac{\Sigma_f(r + R\Omega, \Omega, E)}{\Sigma(r + R\Omega, \Omega, E)} \times \\ \times \chi(r + R\Omega; E, \Omega \rightarrow E', \Omega').$$

Хорошо известно [2, 16, 36], что ценность $\Psi^+(r, \Omega, E)$ может быть интерпретирована как асимптотический уровень мощности, на который выходит критическая система при впуске в нее в точке r одного нейтрона с энергией E и направлением Ω в момент $t=0$. В критической системе все функции ценности по отношению к произвольным функционалам пропорциональны друг другу. Так как в системе независимо от фазовых координат r, Ω, E впускаемого нейтрона устанавливается собственный поток излучения, ценности $\Psi^+(x)$ для всех функционалов $\phi(x)$ равны однородной ценности с точностью до константы.

Существует удобная физическая интерпретация для $K_{эф}$: $K_{эф}$ есть отношение числа нейтронов последующего и предыдущего поколений [36]. Для доказательства этого факта за-

метим, что $(e, F\Psi)$ (где e — единичная функция) есть число частиц, родившихся в реакторе в единицу времени. Далее, пусть в систему впускается (e, Ψ_1) частиц, причем Ψ_1 распределено в соответствии с собственной функцией Ψ , т. е. $\Psi_1 = cF\Psi$. Источник Ψ_1 в соответствии с неоднородным уравнением переноса $\Psi = K\Psi + \Psi_1$ порождает плотность $\Psi' = (I-K)^{-1}\Psi_1$ и, следовательно, число частиц следующего поколения будет равно

$$(e, F\Psi') = (e, F(I-K)^{-1}\Psi_1) = c(e, F(I-K)^{-1}F\Psi). \quad (1.17)$$

С другой стороны, согласно уравнению (1.15),

$$F\Psi = K_{\text{эф}}(I-K)\Psi. \quad (1.18)$$

После подстановки (1.18) в (1.17):

$$(e, F\Psi') = cK_{\text{эф}}(e, F\Psi).$$

Окончательно получаем, что отношение числа рожденных частиц нового поколения к числу впущенных равно

$$\frac{cK_{\text{эф}}(e, F\Psi)}{(e, \Psi_1)} = \frac{cK_{\text{эф}}(e, F\Psi)}{c(e, F\Psi)} = K_{\text{эф}}.$$

Интерпретация $K_{\text{эф}}$ как отношения числа нейтронов следующего поколения к числу нейтронов предыдущего лежит в основе определения $K_{\text{эф}}$ методом Монте-Карло [42]. Если H — число впущенных частиц и Ψ — плотность столкновений, обусловленная ими, то $K_{\text{эф}}$ является линейным функционалом

$$K_{\text{эф}} = \frac{1}{H} \left(\Psi, \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma} \right),$$

где ν — среднее число вторичных нейтронов; Σ_f — сечение деления; Σ — полное сечение.

Отметим также, что $K_{\text{эф}}$ можно получить, моделируя сопряженное уравнение

$$K_{\text{эф}} = \frac{(e, F+\Psi^+)}{(e, \Psi_1^+)},$$

где $\Psi_1^+ = \frac{1}{K_{\text{эф}}} F+\Psi^+$ — источник ценности.

Наконец, возможен и третий способ получения $K_{\text{эф}}$. Как уже отмечалось, $K_{\text{эф}} = \frac{(e, F\Psi)}{(e, \Psi_1)}$. Запишем сопряженное уравнение относительно функционала $(e, F\Psi) = (F+e, \Psi)$:

$$\Psi_e^+ = K+\Psi_e^+ + F+e. \quad (1.19)$$

Легко проверить, что $(F^+e, \Psi) = (\Psi_e^+, \Psi_1)$, следовательно, если решать уравнение (1.19), то $K_{эф}$ определяется формулой

$$K_{эф} = (\Psi_e^+, \Psi_1) / (e, \Psi_1).$$

Уравнение (1.19) можно моделировать методом Монте-Карло, и тогда статистическая оценка $K_{эф}$ задается формулой

$$K_{эф} = \frac{1}{(e, \Psi_1) H} \sum_{i=1}^H \sum_{k=0}^{N_i} \Psi_1(x_i),$$

где H — число историй (равное числу впущенных частиц), рассмотренных при моделировании сопряженного уравнения; N_i — число соударений в i -й истории; x_i — фазовые координаты точек соударений.

Однако, как указано в предисловии, в настоящей работе не рассматриваются алгоритмы моделирования сопряженных уравнений.

2. ВЫЧИСЛЕНИЕ КОНЕЧНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ МЕТОДОМ КОРРЕЛИРОВАННЫХ ТРАЕКТОРИЙ

2.1. Формулировка метода

Вычисление возмущений функционалов потока методом коррелированных траекторий, или, как еще говорят, методом коррелированной выборки, является наиболее употребляемым и разработанным приемом вычисления возмущений методом Монте-Карло. Наиболее эффективно он применяется для расчета возмущений, затрагивающих значительную часть фазового пространства систем, например таких, как эффект Доплера, возмущения в составах блока горючего, замедлителя или отражателя. Некоторые задачи, связанные с изменением геометрии, также решаются методом коррелированных траекторий.

Метод становится неэффективным, когда возмущение локально. Типичной задачей такого рода является расчет эффективности органов регулирования ядерных реакторов. Так как в методе коррелированных траекторий блуждание частиц моделируется по их естественным переходным вероятностям, частица весьма редко посещает локально возмущающуюся область, и дисперсия расчета становится непомерно большой. Для расчета задач, связанных с локальными возмущениями, используются методы Монте-Карло, связанные с формулами классической теории возмущений, и строятся процессы, моделирующие сопряженные уравнения переноса [10].

Предположим, что все сечения среды являются функциями некоторого параметра α . При этом значению $\alpha = 0$ будем соотносить среду, в которой организуется аналоговый процесс блуждания частиц. Частице, принадлежащей среде $\alpha \neq 0$, но следующей по траектории, разыгранной в среде $\alpha = 0$, присвоим так называемый эффективный вес, который обозначим W . Через x_n обозначим совокупность фазовых координат частицы r, Ω, E в точке n -го соударения. Энергия E и угол Ω берутся в момент непосредственно перед столкновением. Эффективный вес W_n в точке n -го соударения определяется следующим образом:

$$W_n = \frac{S(x_0, \alpha)}{S(x_0, 0)} \prod_{i=1}^{n-1} \exp(-\Delta\tau_i) \frac{\Sigma_s(x_i, \alpha)}{\Sigma_s(x_i, 0)} \times \\ \times \frac{w_s(r_i; E_i, \Omega_i \rightarrow E_{i+1}, \Omega_{i+1}; \alpha)}{w_s(r_i; E_i, \Omega_i \rightarrow E_{i+1}, \Omega_{i+1}; 0)} \exp(-\Delta\tau_n). \quad (2.1)$$

Величина $\frac{W_n \Sigma(x_n, \alpha)}{\Sigma(x_n, 0)}$ имеет полезную физическую интерпретацию как текущее эффективное число частиц, движущихся по данной траектории в возмущенной среде.

Для того чтобы формула (2.1) охватывала также случай $n=1$, принято по определению: $\prod_{i=1}^0 f_i = 1$.

$\frac{S(x_0, \alpha)}{S(x_0, 0)}$ — отношение для источников двух сред ($\alpha \neq 0$ и $\alpha = 0$) в точке x_0 начала траектории.

$$\Delta \tau_i = \tau(r, R_i, \Omega, E, \alpha) - \tau(r, R_i, \Omega, E, 0) = \\ = \int_0^{R_i} [\Sigma(r_{i-1} - R' \Omega_i, \Omega_i, E_i, \alpha) - \Sigma(r_{i-1} - R' \Omega_i, \Omega_i, E_i, 0)] dR',$$

где $\Delta \tau_i$ — разность оптических толщин по траектории полета частицы между $(i-1)$ -м и i -м соударениями для сред в $\alpha \neq 0$ и $\alpha = 0$. $\Sigma(x, \alpha)$ — полное сечение для среды α . Если упругое рассеяние частицы разыгрывается изотропно в лабораторной системе координат, то в качестве $\Sigma(x, \alpha)$ берется транспортное сечение [43]. $\Sigma_s(x, \alpha)$ — сечение рассеяния. Обычно в расчетах реакторов методом Монте-Карло выделяются следующие типы рассеяния (не обязательно с сохранением числа частиц): упругое, неупругое, реакция ($n-2n$), рассеяние на водороде, деление с испусканием ν вторичных нейтронов. $w_s(r; E_i, \Omega_i \rightarrow E_{i+1}, \Omega_{i+1}; \alpha)$ — энерго-угловая индикатриса соответствующего типа рассеяния. Σ_s и w_s в числителе и знаменателе формулы (2.1) берутся для того процесса, который произошел в среде, где организован процесс блуждания (среда $\alpha = 0$).

Отношение $\Sigma_s(\alpha) w_s(\alpha) / \Sigma_s(0) w_s(0)$ должно быть конечным для всех возможных x_n . Среда $\alpha = 0$ должна быть «не уже» среды $\alpha \neq 0$ [9]. Любая последовательность $x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow \dots \rightarrow x_n$, которая может иметь место в среде $\alpha \neq 0$, не должна быть запрещенной (отсутствовать) в среде $\alpha = 0$. Если это условие не выполняется, может произойти смещение в рассчитываемых величинах. Сказанное можно пояснить на простом примере вычисления одномерного интеграла методом Монте-Карло $I = \int_a^b f(x) P(x) dx$, где $P(x)$ — плот-

ность вероятности: $P(x) \geq 0$; $\int_a^b P(x) dx = 1$. Несмещенной

оценкой интеграла является сумма $\hat{I} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$, где значения x_i выбираются согласно плотности вероятности $P(x)$.

Если точки x_i разыгрывать не по $P(x)$, а по другой плотности $P_0(x)$: $P_0(x) \geq 0$; $\int_a^b P_0(x) dx = 1$, то несмещенной оценкой

интеграла будет сумма $\hat{I} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) W_i$, где $W_i = P(x_i)/P_0(x_i)$.

Смещение в оценке интеграла появится, если неправильно задать $P_0(x)$. Например, определить $P_0(x)$ для интервала $a_1 < x < b_1$, причем (a_1, b_1) лежит внутри интервала (a, b) .

Линейный функционал $I = \int \Psi \varphi dx$ находится по формуле

$$I = \frac{1}{H} \sum_{i=1}^H \sum_{n=1}^{N_i} W_n \varphi(x_n, \alpha) \frac{\Sigma(x_n, \alpha)}{\Sigma(x_n, 0)},$$

а возмущение линейного функционала $\Delta I = \int (\Psi \varphi - \Psi_0 \varphi_0) dx$ — по формуле

$$\Delta I = \frac{1}{H} \sum_{i=1}^H \sum_{n=1}^{N_i} \left[W_n \varphi(x_n, \alpha) \frac{\Sigma(x_n, \alpha)}{\Sigma(x_n, 0)} - \varphi(x_n, 0) \right], \quad (2.2)$$

где H — число рассмотренных историй; N_i — число столкновений в i -й истории; φ — некоторая весовая функция, например $v \Sigma f / \Sigma$, если определяется коэффициент размножения; вес W_n определяется формулой (2.1).

2.2. Связь с классической теорией возмущений

В этом разделе выводятся условия «малости» возмущений при расчетах методом Монте-Карло, которые эквивалентны допущениям классической теории малых возмущений [36]. Кинетическое уравнение будет использоваться в представлении плотности рассеяний:

$$\Psi_s(x) = \frac{\Sigma_s(x)}{\Sigma(x)} \Psi(x) = \Sigma_s(x) \Phi(x). \quad (2.3)$$

В этом представлении уравнение (1.8) примет вид

$$\Psi_s(x) = \int K_s(x' \rightarrow x) \Psi_s(x') dx' + \Psi_{1s}(x), \quad (2.4)$$

где

$$K_s(x' \rightarrow x) = \frac{\Sigma(x')}{\Sigma_s(x')} K(x' \rightarrow x) \frac{\Sigma_s(x)}{\Sigma(x)};$$

$$\Psi_{1s}(x) = \frac{\Sigma_s(x)}{\Sigma(x)} \Psi_1(x).$$

Полное сечение перехода при рассеянии

$$W_s(r; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega) = \sum_{\mu, \nu} \Sigma_{s, \mu, \nu}(r, E') w_{s, \mu, \nu}(r; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega), \quad (2.5)$$

где $\Sigma_{s, \mu, \nu}(r, E)$ — макроскопическое сечение рассеяния ν -го типа на μ -м элементе; $w_{s, \mu, \nu}$ — соответствующая функция рассеяния.

Полное сечение рассеяния

$$\Sigma_s(r, E) = \int W_s(r; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') d\Omega' dE' = \sum_{\mu, \nu} \Sigma_{s, \mu, \nu}(r, E). \quad (2.6)$$

При прямом моделировании вероятность для частицы погибнуть сразу после рассеяния в точке x равна $g(x) = 1 - \int K_s(x \rightarrow x') dx' > 0$, а вероятность следующего рассеяния есть $1 - g(x)$. Такой процесс рано или поздно оборвется, закончившись гибелью частицы после l рассеяний.

Уравнение, сопряженное к (2.4) относительно функционала $I = (\Psi_s, \Phi)$, имеет вид

$$\Psi_s^+(x) = \int K_s(x \rightarrow x') \Psi_s^+(x') dx' + \Phi(x). \quad (2.7)$$

Для дальнейшего изложения понадобится теорема, дающая алгоритм оценки нелинейных функционалов определенного типа.

Математическое ожидание случайной величины

$$\xi = \sum_{k=1}^l \varphi(x_k) \sum_{i=1}^k G(x_{i-1}, x_i) \quad (2.8)$$

равно

$$M\xi = \iint \Psi_s(x) K_s(x \rightarrow y) \Psi_s^+(y) G(x, y) dx dy + \iint S(x_0) T(x_0 \rightarrow x) \frac{\Sigma_s(x)}{\Sigma(x)} \Psi_s^+(x) G(x_0, x) dx_0 dx. \quad (2.9)$$

Представим ξ в виде

$$\xi = G(x_0, x_1) \sum_{i=1}^l \varphi(x_i) + \sum_{j=1}^{l-1} G(x_j, x_{j+1}) \sum_{i=j+1}^l \varphi(x_i)$$

и найдем математическое ожидание второго члена

$$M \sum_{j=1}^{l-1} G(x_j, x_{j+1}) \sum_{i=j+1}^l \varphi(x_i) = M\beta_l = \sum_{l=2}^{\infty} \int \dots \int_{X \times l} \Psi_{1S}(x_1) \times \\ \times K_s(x_1 \rightarrow x_2) \dots K_s(x_{l-1} \rightarrow x_l) g(x_l) \beta_l dx_1 \dots dx_l =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{l=2}^{\infty} \int_{X \times l} \dots \int \Psi_{1s}(x_1) K_s(x_1 \rightarrow x_2) \dots K_s(x_{l-1} \rightarrow x_l) \times \\
&\times \beta_l dx_1 \dots dx_l - \sum_{l=2}^{\infty} \int_{X \times (l+1)} \dots \int \Psi_{1s}(x_1) K_s(x_1 \rightarrow x_2) \dots \times \\
&\times K_s(x_l \rightarrow x_{l+1}) \beta_l dx_1 \dots dx_{l+1} = \iint \Psi_{1s}(x_1) K(x_1 \rightarrow x_2) \times \\
&\times \beta_2 dx_1 dx_2 + \sum_{l=3}^{\infty} \int_{X \times l} \dots \int \Psi_{1s}(x_1) K_s(x_1 \rightarrow x_2) \dots \times \\
&\times K_s(x_{l-1} \rightarrow x_l) (\beta_l - \beta_{l-1}) dx_1 \dots dx_l = \\
&= \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{i=1}^l \int_{X \times (i+1)} \dots \int \Psi_{1s}(x_1) K_s(x_1 \rightarrow x_2) \dots K_s(x_l \rightarrow x_{l+1}) \times \\
&\times \varphi(x_{l+1}) G(x_i, x_{l+1}) dx_1 \dots dx_{l+1} = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{l=i}^{\infty} \int_{X \times (i+1)} \dots \int \times \\
&\times \Psi_{1s}(x_1) K_s(x_1 \rightarrow x_2) \dots K_s(x_l \rightarrow x_{l+1}) \varphi(x_l) \times \\
&\times G(x_i, x_{l+1}) dx_1 \dots dx_{l+1} = \iint \Psi_s(x) G(x, y) \times \\
&\times K_s(x \rightarrow y) \Psi_s^+(y) dx dy.
\end{aligned}$$

Аналогично можно показать, что среднее значение случайной величины $G(x_0, x_1) \sum_{i=1}^l \varphi(x_i)$ равно

$$\iint S(x_0) T(x_0 \rightarrow x) \frac{\Sigma_s(x)}{\Sigma(x)} \Psi_s^+(x) G(x_0, x) dx_0 dx.$$

Теорема доказана.

Пусть возмущенная среда характеризуется измененными сечениями $\Sigma'(r, E)$, $W'_s(r; E, \Omega \rightarrow E', \Omega')$. Чтобы не загромождать выкладок, мы предположим, что распределение источников $S(r, \Omega, E)$ и весовая функция $\varphi(r, \Omega, E)$ не возмущены, и что возмущение происходит вследствие изменения макроскопических сечений $\Sigma'(r, E)$, $\Sigma_{s, \mu, \nu}(r, E)$, как функций координат и энергий, а не функций индикатрис рассеяния $w_{s, \mu, \nu}$.

Определим теперь блуждание частицы в выборочном пространстве Q , включающем, помимо $x = (r, \Omega, E)$, также сорт μ рассеивающего ядра и тип ν рассеяния, так что траекторией блуждающей частицы будет последовательность значений

$$Q_0 = (r_0, \Omega_0, E_0); Q_1 = (r_1, \Omega_1, E_1, \mu_1, \nu_1); Q_l = (r_l, \Omega_l, E_l, \mu_l, \nu_l), \quad (2.10)$$

характеризующих как точки рассеяния, направление и энергию до рассеяния, так и сорт и тип рассеяния. Частица испытывает l рассеяний, после чего гибнет в результате поглощения или утечки из среды.

Плотность вероятностной меры траектории (2.10), содержащей l рассеяний, пропорциональна величине

$$dP_l(\cdot) = \prod_{k=1}^l \Sigma_{s, \mu_k, \nu_k}(x_k) \exp[-\tau(x_{k-1}, x_k)]. \quad (2.11)$$

Справедливо следующее основное утверждение: при условии абсолютной непрерывности мер $P'_l(\cdot)$ относительно соответствующих мер $P_l(\cdot)$ возмущение δI функционала I равно математическому ожиданию по невозмущенной траектории случайной величины:

$$\xi = \sum_{i=1}^l (W_i - 1) \varphi(x_i), \quad (2.12)$$

где

$$W_i = \prod_{k=1}^i \frac{\Sigma'_{s, \mu_k, \nu_k}(x_k)}{\Sigma_{s, \mu_k, \nu_k}(x_k)} \exp(-\delta\tau(x_{k-1}, x_k)), \quad (2.13)$$

$\delta\tau(x_{k-1}, x_k) = \tau'(x_{k-1}, x_k) - \tau(x_{k-1}, x_k)$ — возмущение оптического расстояния между точками r_{k-1} и r_k для энергий E_k .

Требование абсолютной непрерывности мер является необходимым и достаточным условием существования производной Радона—Никодима [45] $\frac{dP'_l(\cdot)}{dP_l(\cdot)}$, равной весу W_i .

Если мера $P'_l(\cdot)$ не обращается в нуль на некотором множестве Q_0 $P_l(\cdot)$ — нулевой меры, т. е. не выполнено условие $P_l(\cdot)$ — непрерывности меры $P'_l(\cdot)$, то, очевидно, при блуждании с невозмущенной мерой $P_l(\cdot)$ частица никогда не «посетит» множества Q_0 и, следовательно, интеграл по Q_0 в возмущенном случае не может быть оценен с помощью блуждания с мерой $P_l(\cdot)$. Например, если исследуется влияние вакуумной полости на рассматриваемый функционал, то, очевидно, блуждание следует организовать в заполненной среде.

Тогда $W_i = 0$ или $W_i = \prod_{k=1}^i \exp(-\delta\tau(x_{k-1}, x_k))$ в зависимости от того, было ли в числе предшествующих рассеяний хоть одно в возмущенной области, или не было.

Из формулы (2.13), в частности, следует, что если при этом всегда $\delta\tau(x_{l-1}, x_l) = 0$, то $\delta I = -\sum_{i=1}^l \varphi(x_i)$, где j — мо-

мент первого достижения возмущенной области (случай корреляционного метода, использованного М. Бергером [9]).

Рассмотрим теперь случай малых возмущений. Если изменения таковы, что $W_i \approx 1$, то разлагая W_{i-1} в ряд по степеням $\ln W_i$ и удерживая первые члены относительно $\delta\Sigma$ и $\delta\Sigma_{s, \mu, \nu}$, получаем из формул (2.12) и (2.13):

$$\delta I = M \sum_{i=1}^l \varphi(x_i) \left\{ - \sum_{k=1}^i \delta\tau(x_{k-1}, x_k) + \sum_{k=1}^i \frac{\delta\Sigma_{s, \mu_k, \nu_k}(x_k)}{\Sigma_{s, \mu_k, \nu_k}(x_k)} \right\}.$$

Полагая $G(x, y) = \delta\tau(x, y)$ и используя уравнение (2.9), найдем:

$$\begin{aligned} M \sum_{i=1}^l \varphi(x_i) \sum_{k=1}^i \delta\tau(x_{k-1}, x_k) &= \iint \Psi_s(x) K_s(x \rightarrow y) \Psi_s^+(y) \times \\ &\times \delta\tau(x, y) dx dy + \iint S(x_0) T(x_0 \rightarrow x_1) \frac{\Sigma_s(x_1)}{\Sigma(x_1)} \times \\ &\times \delta\tau(x_0, x_1) \Psi_s^+(x_1) dx_0 dx_1 = \iint \Phi(x) \frac{\exp(-\tau(x, y))}{|r-r'|^2} \times \\ &\times \Sigma_s(x, y) \delta\tau(x, y) \Sigma_s(y) \Psi_s^+(y) \delta\left(\Omega - \frac{r'-r}{|r'-r|}\right) dx dy + \\ &+ \iint S(x_0) \Sigma_s \frac{\exp(-\tau(x_0, x))}{|r-r_0|^2} \delta\tau(x_0, x) \Psi_s^+(x) \times \\ &\times \delta\left(\Omega - \frac{r-r_0}{|r-r_0|}\right) dx_0 dx. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Запишем сопряженное интегро-дифференциальное и интегральное уравнения для ценности $\Phi^+(r, \Omega, E)$ относительно функционала $I = \int \Sigma_s(x) \Phi(x) \varphi(x) dx$:

$$\begin{aligned} -\Omega \nabla \Phi^+(r, \Omega, E) + \Sigma(r, E) \Phi^+(r, \Omega, E) &= \\ = \int W_s(r; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \Phi^+(r, \Omega', E') d\Omega' dE' + \\ + \Sigma_s(r, E) \varphi(r, \Omega, E); \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} \Phi^+(r, \Omega, E) &= \int_0^\infty dR \exp(-\tau(r, R, \Omega, E)) \left[\Sigma_s(r+R\Omega, \Omega, E) \times \right. \\ &\times \varphi(r+R\Omega, \Omega, E) + \int d\Omega' dE' W_s(r+R\Omega; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \times \\ &\times \Phi^+(r+R\Omega, \Omega', E') \left. \right]. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Применяя стандартный прием, т. е. умножая выражение (1.1) на $\Phi^+(r, \Omega, E)$, а (2.15) на $\Phi(r, \Omega, E)$, интегрируя и вычитая полученные равенства друг из друга, найдем

$$I = (\Psi_s, \varphi) = (\Psi_s^+, \Psi_{1s}) = (S, \Phi^+).$$

Выбирая в качестве S δ -функцию

$$S(r, \Omega, E) = \delta(r-r_0) \delta(\Omega-\Omega_0) \delta(E-E_0),$$

получаем:

$$\Phi^+(r_0, \Omega_0, E_0) = (\Phi_0 \Sigma_s, \Psi_s^+);$$

$$\Phi_0(r, \Omega, E) = \int_0^\infty dR \exp(-\tau(r, R, \Omega, E)) \delta(r-r_0-R\Omega) \times \\ \times \delta(\Omega-\Omega_0) \delta(E-E_0).$$

После подстановки Φ_0 в выражение $(\Phi_0 \Sigma_s, \Psi_s^+)$ и интегрирования δ -функций

$$\Phi^+(r, \Omega, E) = \int_0^\infty dR \exp(-\tau(r, R, \Omega, E)) \times \\ \times \Sigma_s(r+R\Omega, E) \Psi_s^+(r+R\Omega, \Omega, E). \quad (2.17)$$

Сравнивая уравнения (2.17) и (2.16), находим

$$\Sigma_s(r, E) \Psi_s^+(r, \Omega, E) = \Sigma_s(r, E) \varphi(r, \Omega, E) + \\ + \int \mathcal{W}_s(r; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \Phi^+(r, \Omega', E') d\Omega' dE'$$

и далее, согласно (2.15):

$$\Sigma_s(r, E) \Psi_s^+(r, \Omega, E) = -\Omega \nabla \Phi^+(r, \Omega, E) + \\ + \Sigma(r, E) \Phi^+(r, \Omega, E). \quad (2.18)$$

Для первого члена уравнения (2.14), помещая начало координат в точку r и учитывая (2.18), найдем:

$$\iint \Psi_s(x) K_s(x \rightarrow y) \Psi_s^+(y) \delta\tau(x, y) dx dy = \\ = \int dr d\Omega dE d\Omega' dE' \Phi(r, \Omega, E) \mathcal{W}_s(r; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \times \\ \times \int_0^\infty dR \exp[-\tau(r, R, \Omega', E')] \cdot \int_0^R \delta\Sigma(r+R'\Omega', E') dR' \times \\ \times \left[-\frac{\partial \Phi^+(r+R\Omega', \Omega', E')}{\partial R} + \Sigma(r+R\Omega, E') \Phi^+(r+R\Omega', \Omega', E') \right],$$

откуда после интегрирования по частям с учетом обычно принимаемых граничных условий для Φ и Φ^+ получим:

$$\iint \Psi_s(x) K_s(x \rightarrow y) \Psi_s^+(y) \delta\tau(x, y) dx dy =$$

$$= \int dr d\Omega dE d\Omega' dE' \Phi(r, \Omega, E) W_s(r; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \times \\ \times \int_0^{\infty} dR \exp(-\tau(r, R, \Omega', E')) \delta\Sigma(r + R\Omega', E') \times \\ \times \Phi^+(r + R\Omega', \Omega', E')$$

и, полагая $z = r + R\Omega'$, запишем:

$$\int \Psi_s(x) K_s(x \rightarrow y) \delta\tau(x, y) \Psi_s^+(y) dy dx = \\ = \int dz d\Omega' dE' \delta\Sigma(z, E') \Phi^+(z, \Omega', E') \times \\ \times \left\{ \int_0^{\infty} \exp[-\tau(z, R, \Omega', E')] dR \int d\Omega dE W_s(z - R\Omega'; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \times \right. \\ \left. \times \Phi(z - R\Omega', \Omega, E) \right\} = \int dr d\Omega dE [\Phi(r, \Omega, E) - \\ - \Phi_0(r, \Omega, E)] \delta\Sigma(r, E).$$

Аналогично легко показать, что

$$\iint S(x_0) T(x_0 \rightarrow x) \frac{\Sigma_s(x)}{\Sigma(x)} \delta\Sigma(x_0, x) \Psi_s^+(x) dx_0 dx = \\ = \int \delta\Sigma(r, E) \Phi^+(r, \Omega, E) \Phi_0(r, \Omega, E)$$

и окончательно

$$M \sum_{k=1}^l \varphi(x_k) \sum_{i=1}^k \delta\tau(x_{i-1}, x_i) = \int \delta\Sigma(r, E) \Phi(r, \Omega, E) \Phi^+(r, \Omega, E),$$

т. е. приходим к первому члену формулы малых возмущений [17].

Исходя из формулы (2.9), справедливой и для расширенного выборочного пространства Q , можно прийти к следующему результату:

$$M \sum_{i=1}^l \varphi(x_i) \sum_{k=1}^i \frac{\delta\Sigma_{s, \mu_k, \nu_k}(x_k)}{\Sigma_{s, \mu_k, \nu_k}(x_k)} = \\ = \int \Phi^+(r, \Omega, E) dr d\Omega dE \int \delta W_s(r; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega) \times \\ \times \Phi(r, \Omega', E') d\Omega' dE' + \int \Phi(r, \Omega, E) \varphi(r, \Omega, E) \delta\Sigma_s(r, E) dr d\Omega dE,$$

дающему остальные члены формулы для малых возмущений.

Предположим теперь, что выборочные пространства возмущенной и невозмущенной систем таковы, что не выполняется условие непрерывности одной меры относительно другой, например одна из сред представляет собой смесь кремния

и кислорода, а другая — водорода и кислорода. В таком случае следует основное блуждание организовать в такой среде, которая имеет вероятностную меру P_i^* (\cdot), относительно которой меры P_i' (\cdot) и P_i (\cdot) абсолютно непрерывны. Тогда математическое ожидание случайной величины

$$\xi = \sum_{i=1}^l (W_i^{*'} - W_i^*) \varphi(x_i), \quad (2.19)$$

где

$$W_i^{*'} = \prod_{k=1}^i \frac{\Sigma_{s, \nu_k, \nu_k}'(x_k)}{\Sigma_{s, \nu_k, \nu_k}^*(x_k)} \exp[-\tau'(x_{k-1}, x_k) - \tau^*(x_{k-1}, x_k)];$$

$$W_i^* = \prod_{k=1}^i \frac{\Sigma_{s, \nu_k, \nu_k}(x_k)}{\Sigma_{s, \nu_k, \nu_k}^*(x_k)} \exp[-\tau(x_{k-1}, x_k) - \tau^*(x_{k-1}, x_k)],$$

равно δI , так что возмущение функционала δI может быть получено с помощью блуждания с мерой P_i^* (\cdot).

Интересно отметить, что в случае взаимной непрерывности мер P_i (\cdot) и P_i' (\cdot) можно указать такое промежуточное состояние A^* с мерой P_i^* (\cdot), что формула малых возмущений будет давать результат с точностью до членов третьего порядка малости относительно возмущений в сечениях. Разложим разность весов $W_i^{*'} - W_i^*$ в ряд по степеням логарифмов весов

$$W_i^{*'} - W_i^* = \ln W_i^{*'} - \ln W_i^* + \frac{1}{2} (\ln^2 W_i^{*'} - \ln^2 W_i^*) +$$

$$+ \frac{1}{6} (\ln^3 W_i^{*'} - \ln^3 W_i^*) + \dots = \ln W_i \left[1 + \frac{1}{2} \ln W_i^{*'} W_i^* + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{6} (\ln^2 W_i^{*'} + \ln W_i^* - \ln W_i^{*'} \ln W_i^*) + \dots \right]$$

и потребуем, чтобы $W_i^{*'} W_i^* = 1$. Тогда $W_i^{*'} - W_i^* \cong \ln W_i$ с точностью до членов третьего порядка малости относительно изменений в сечениях и

$$\ln W_i = - \sum_{k=1}^i \delta \tau(x_{k-1}, x_k) + \sum_{k=1}^i \ln \frac{\Sigma_{s, \nu_k, \nu_k}'(x_k)}{\Sigma_{s, \nu_k, \nu_k}^*(x_k)}.$$

В аналогичные формулы теории малых возмущений войдут поток и ценность в состоянии A^* . Это состояние может быть определено из условия $W_i^{*'} W_i^* = 1$, которое, как легко

видеть, удовлетворяется, если сечения $\Sigma^*(r, E)$ и $\Sigma_{s, \mu, \nu}(r, E)$ выбирать следующим образом:

$$\Sigma^*(r, E) = \frac{1}{2} [\Sigma'(r, E) + \Sigma(r, E)];$$

$$\Sigma_{s, \mu, \nu}^* = (\Sigma'_{s, \mu, \nu} \Sigma_{s, \mu, \nu})^{1/2}. \quad (2.20)$$

Следовательно, полное сечение является средним арифметическим, а сечения рассеяния — средним геометрическим соответствующих сечений в возмущенной и невозмущенной системах.

2.3. О вычислении эффективных констант методом Монте-Карло

Пусть A' — возмущенная задача, возникающая при идеализации реальной задачи A , описываемой уравнениями переноса (2.4). В общем случае оператор задачи A' может иметь другую структуру. Во многих случаях, однако, возмущенная задача A' также описывается общим интегральным уравнением переноса

$$\Psi'_s(x) = \Psi'_{1s}(x) + \int K'_s(x' \rightarrow x) \Psi'_s(x') dx', \quad (2.21)$$

так, что ядро $K'_s(x' \rightarrow x)$ и источники Ψ'_{1s} определяют некоторый марковский процесс блуждания в пространстве Q . Тогда возмущение $\delta I = I' - I$ линейного функционала плотности рассеяний $I = \int \Psi_s(x) \varphi(x) dx$ равно математическому ожиданию случайной величины (2.12) по траектории, управляемой невозмущенной переходной вероятностью $K_s(x' \rightarrow x)$. Вес W_i есть производная Радона-Никодима dP'_i/dP_i возмущенной меры $P'_i(\cdot)$, определяемой ядром $K'_s(x' \rightarrow x)$ и распределением источников Ψ'_{1s} . Поскольку производная W_i существует при абсолютной непрерывности меры $P'_i(\cdot)$ относительно $P_i(\cdot)$, это условие необходимо для представления возмущения в виде (2.12).

Определим теперь набор линейных функционалов с весовыми функциями $\varphi_j(x)$, $j = 1, 2, \dots, n$, которые, чтобы не загромождать выкладок, будем считать неизменяющимися при переходе от A к A' , и образуем «функцию потерь»

$$q = \sum_{j=1}^n P_j \delta I_j^2 = \sum_{j=1}^n P_j (M \xi_j)^2; \quad \xi_j = \sum_{i=1}^n (W_i - 1) \varphi_j(x_i) \quad (2.22)$$

отличную от нуля вследствие идеализации задачи. Мера возмущенной задачи зависит от ряда параметров $a = (a_1, a_2, \dots, a_m)$, которые естественно выбрать так, чтобы

они минимизировали функцию потерь $q(a_1, a_2, \dots, a_m)$.
Уравнения для определения этих значений

$$\frac{\partial q}{\partial a_p} = \sum_{j=1}^n P_j \frac{\partial}{\partial a_p} \left[M \sum_{i=1}^l (W_i - 1) \varphi_j(x_i) \right]^2 = 0 \quad (2.23)$$

нелинейны в общем случае. Мы рассмотрим более частный случай, когда меры $P'_i(\cdot)$ и $P_i(\cdot)$ взаимно непрерывны (эквивалентны) и, следовательно, существует $\ln W_i$. Как показано выше, удержание линейных членов относительно возмущений макроскопических сечений в разложении $\ln W_i$ эквивалентно приближению, даваемому формулой малых возмущений. Поэтому, предполагая линейную зависимость $\ln W_i$ от параметров a_p , $p = 1, 2, \dots, m$

$$\begin{aligned} \ln W_i = f_0(x_1, x_2, \dots, x_i) + \sum_{p=1}^m a_p f_p(x_1, x_2, \dots, x_i) = \\ = f_i^{(0)} + \sum_{p=1}^m a_p f_i^{(p)}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

получаем первое приближение a_0 как решение системы линейных нормальных уравнений

$$\left. \begin{aligned} \sum_{j=1}^n P_j C_j^{(0)} \bar{C}_j^{(k)} = - \sum_{p=1}^m a_p \sum_{j=1}^n P_j C_j^{(p)} C_j^{(k)}; \\ C_j^{(k)} = M \sum_{i=1}^l f_i^{(k)} \varphi_j(x_i), \quad k = 1, 2, \dots, m, \end{aligned} \right\} \quad (2.25)$$

предварительно определив значения коэффициентов $C_j^{(0)}$, $C_j^{(k)}$ методом Монте-Карло.

Для получения следующего приближения используем представление возмущения δI_j в виде

$$\delta I_j = M^* \sum_{i=1}^l (W_i^* - W_i^*) \varphi_j(x_i); \quad (2.26)$$

$$W_i^* = dP'_i/dP_i^*; \quad W_i = dP_i/dP_i^*; \quad (2.27)$$

где $P_i^*(\cdot)$ — мера блуждания в состоянии A^* , промежуточном между A и A' и определяемом условием $dP_i^{*2} = dP'_i dP_i$, при выполнении которого формула

$$\delta I_j \cong M^* \sum_{i=1}^l \varphi_j(x_i) \ln W_i - M^* \sum_{i=1}^l \varphi_j(x_i) \left[f_i^{(0)} + \sum_{p=1}^m a_p f_i^{(p)} \right] \quad (2.28)$$

будет точно до членов третьего порядка малости относительно изменений в макросечениях. Теперь решение системы (2.25) с соответствующими коэффициентами

$$C_j^{*(k)} = M^* \sum_{i=1}^l f_i^{(k)} \varphi_j(x_i), \quad k = 0, 1, 2, \dots, m \quad (2.29)$$

дает приближение следующего порядка к параметрам a и т. д.

Из этого краткого описания метода следует, что ему может быть придана детерминистическая формулировка, основанная на теории возмущений и применения метода наименьших квадратов. Однако сомнительно, что он будет полезен при независимом от метода Монте-Карло применении, так как требует вычисления функций потока и ценности для промежуточного состояния A^* .

Описанный алгоритм рассчитан на случай сильного перепределения задачи, когда число m искомым параметров a_p меньше числа n функционалов. Такой подход является попыткой эффективного описания части реального поля излучения с помощью небольшого числа параметров подгонки a_p . Это не исключает, однако, классического подхода к проблеме вычисления эффективных констант, требующего минимизации возмущения одного функционала $q = \delta I$ [16].

Остается открытым вопрос о связи между числом последовательных приближений и статистической точностью расчета коэффициентов нормальных уравнений методом Монте-Карло.

Рассмотрим теперь задачу определения эффективных микроскопических сечений. Особенностью задачи является то, что блуждание нейтронов, описываемое возмущенным оператором, происходит в фазовом пространстве \tilde{X} , точками которого являются совокупности (r, Ω, γ) , где γ — номер группы. Групповое кинетическое уравнение

$$\begin{aligned} & \Omega \nabla \Phi^j(r, \Omega) + \Sigma^j(r) \Phi^j(r, \Omega) = \\ & = S^j(r, \Omega) + \sum_i \int \Sigma_s^{i \rightarrow j}(r, \Omega' \rightarrow \Omega) \Phi^i(r, \Omega') d\Omega' \end{aligned} \quad (2.30)$$

описывает блуждание, плотность меры которого в пространстве X' пропорциональна величине

$$\begin{aligned} dP'_i = & \frac{S^{\gamma_1}}{(\Delta E)_{\gamma_1}} \prod_{k=1}^i \Sigma_s^{\gamma_k \rightarrow \gamma_{k+1}}(r_k, \Omega_k \rightarrow \Omega_{k+1}) \times \\ & \times \exp(-\tau'(r_{k-1}, r_k, \gamma_k)), \end{aligned} \quad (2.31)$$

где γ_k — номер энергетического интервала, которому принадлежит энергия испытывающего k -е рассеяние нейтрона; ΔE_{γ} — ширина группы γ . Соответствующая невозмущенная

мера dP_i блуждания в пространстве X' получается интегрированием по всевозможным энергиям после рассеяний, принадлежащим группам $\gamma_2, \dots, \gamma_i$ соответственно

$$d\tilde{P}_i(\cdot) = S(E_1) \int_{\gamma_2} dE_2 \int_{\gamma_3} dE_3 \dots \int_{\gamma_i} dE_i dP_i(\cdot).$$

Так как функция рассеяния $\omega_{s,\mu,\nu}(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E)$ содержит δ -функцию по энергии после рассеяния, интегрирование сразу приводит к результату

$$d\tilde{P}_i(\cdot) = S(E_1) \prod_{k=1}^i \Sigma_{s,\mu_k,\nu_k}(r_k; E_k, \Omega_k \rightarrow E_{k+1}, \Omega_{k+1}) \times \\ \times \exp[-\tau(r_{k-1}, r_k, E_k)], \quad (2.32)$$

где $\Sigma_{s,\mu,\nu}(r; E', \Omega' \rightarrow E, \Omega)$ — дифференциальное макроскопическое сечение рассеяния ν -го типа на ядре μ -го сорта; E_1 — энергия, с которой начинается траектория (по определению, E_k есть энергия перед k -м рассеянием, поэтому $E_0 = E_1$). Процесс случайного блуждания не будет марковским, однако формула (2.12) для возмущения δI справедлива. Дальнейшее развитие общего подхода, намеченного выше, зависит от конкретного представления функции рассеяния $\Sigma_s'^{i \rightarrow j}(r, \Omega' \rightarrow \Omega)$ многогруппового уравнения (2.30). Например, в транспортном приближении [16]

$$\Sigma_s'^{i \rightarrow j}(r, \Omega' \rightarrow \Omega) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\mu,\nu} \Sigma_{s,\mu,\nu}^{i \rightarrow j}(r) [1 + 3\bar{\mu}_{i,j,\mu,\nu}(\Omega, \Omega')], \quad (2.33)$$

так что при фиксированных значениях $\bar{\mu}_{i,j,\mu,\nu}$ эффективными параметрами являются сечения $\Sigma_{s,\mu,\nu,h}^{i \rightarrow j}$ групповых переходов типа μ, ν в h -й зоне и полные групповые сечения $\Sigma_{p,h}$. Тогда согласно выражениям (2.31), (2.32) и (2.33)

$$\ln W_i = \ln \frac{S T_i}{S(E_1) (\Delta E)_{\gamma_i}} + \sum_{p,q,h,\mu,\nu} d_{p,q,h,\mu,\nu,i} \times \\ \times \ln \Sigma_{s,h,\mu,\nu}^{p \rightarrow q} + \ln \prod_{k=1}^i \frac{(1 + 3\bar{\mu}_{k,k+1,\mu,\nu}(\Omega_k, \Omega_{k+1}))}{4\pi \Sigma_{s,\mu_k,\nu_k}(r_k, E_k, \Omega_k \rightarrow \Omega_{k+1})} + \\ + T_i - \sum_{p,h} \Sigma_{p,h}' l_{p,h,i}, \quad (2.34)$$

где $d_{p,q,h,\mu,\nu,i}$ — число столкновений в зоне h типа μ, ν за первые i рассеяний, которые сопровождалось переходом из p -й группы в q -ю; $l_{p,h,i}$ — полный пробег нейтронов p -й группы в h -й зоне за первые i рассеяний.

В общем случае эффективные параметры должны быть выбраны так, чтобы $\ln W_i$ линейно зависел от них. Тем параметрам, от которых $\ln W_i$ зависит нелинейно, следует придать определенные значения, наиболее близкие к действительным.

В случае, когда эффективными являются полное сечение и сечение рассеяния в энергетических группах, т. е. когда речь идет об эффективном осреднении энергетической зависимости сечений в пределах группы, в то время как функции рассеяния в возмущенной и невозмущенной задачах совпадают, имеем

$$\ln W_i = \ln \prod_{k=1}^i \frac{\sigma'_{s, \mu_k, \nu_k}(E_k)}{\sigma_{s, \mu_k, \nu_k}(E_k)} \times \exp [\tau(r_{k-1}, r_k, E_k) - \tau'(r_{k-1}, r_k, E_k)]. \quad (2.35)$$

Представляя $\ln \sigma'_{s, \mu, \nu}(E)$ и $\sigma'_{\mu}(E)$ в виде кусочно-постоянных функций, получаем линейную зависимость $\ln W_i$ от $a_{\mu, \nu, p}$ и $b_{\nu, \nu, p}$:

$$\left. \begin{aligned} \ln \sigma'_{s, \mu, \nu}(E) &= \sum_p a_{\mu, \nu, p} \Delta_p(E); \\ \sigma'_{\mu}(E) &= \sum_p b_{\mu, p} \Delta_p(E); \\ \ln W_i &= \sum_{\mu, \nu, p} (a_{\mu, \nu, p} d_{\mu, \nu, p, i} - \sum_{k=1}^i \ln \sigma_{s, \mu, \nu}(E_k)) \times \\ &\times \Delta_p(E_k) \delta_{\mu, \mu_k} \delta_{\nu, \nu_k} - \sum_{\mu, p} [b_{\nu, p} \sum_{k, h} l_{k, h} \rho_{\mu, h} \times \\ &\times \Delta_p(E_k) - \sum_{k, h} l_{k, h} \rho_{\mu, \nu} \sigma_{\mu}(E_k) \Delta_p(E_k)], \end{aligned} \right\} \quad (2.36)$$

где $d_{\mu, \nu, p, i}$ — число рассеяний типа ν на ядре μ -го сорта с энергией, принадлежащей p -й группе за первые i рассеяний; $l_{k, h}$ — пробег нейтрона между $(k-1)$ -м и k -м рассеянием в h -й зоне; $\rho_{\mu, h}$ — концентрация ядер μ -го сорта в h -й зоне.

Очевидно применение этого алгоритма для получения малогрупповых эффективных констант из многогрупповых.

Проиллюстрируем теперь, каким образом может быть осуществлено осреднение констант в случае, когда требуется минимизировать вариацию одного функционала. В этом случае линеаризованное уравнение

$$\delta I \cong \sum_{i=1}^l \varphi(x_i) \ln W_i = 0 \quad (2.37)$$

может быть удовлетворено приравниванием нулю членов формулы малых возмущений, относящихся к физическим величинам одинакового характера. Например, если $\ln W_i$ представлен в виде (2.36), уравнение (2.37) удовлетворяется, если

$$\left. \begin{aligned} a_{\mu, \nu, \rho} &= \frac{M \sum_{i=1}^l \varphi(x_i) \sum_{k=1}^i \ln \sigma_{s, \mu, \nu}(E_k) \Delta_p(E_k) \delta_{\mu, \nu_k} \delta_{\nu, \nu_k}}{M \sum_{i=1}^l \varphi(x_i) d_{\mu, \nu, \rho, i}}; \\ b_{\mu, \nu} &= \frac{M \sum_{i=1}^l \varphi(x_i) \sum_{k, h} l_{k, h} \rho_{\mu, h} \sigma_{\nu}(E_k) \Delta_p(E_k)}{M \sum_{i=1}^l \varphi(x_i) \sum_{k, h} l_{k, h} \rho_{\mu, h} \Delta_p(E_k)}. \end{aligned} \right\} (2.38)$$

Остается открытым вопрос о том, каким образом следует распорядиться выбором эффективных параметров, чтобы минимизировать некоторую функцию потерь для промежуточного числа функционалов.

2.4. Расчет возмущений эффективного коэффициента размножения методом Монте-Карло

Методы расчета возмущений функционалов неоднородных задач переноса могут быть использованы для расчета возмущений эффективного коэффициента размножения. Запишем возмущенное и невозмущенное однородные уравнения соответственно

$$K'_{\text{эф}} \theta'(x) = \int \theta'(x') \{a P_{m, f}(x' \rightarrow x)\} dx'; \quad (2.39)$$

$$K_{\text{эф}} \theta^+(x) = \int \theta^+(x') \{a P_{m, f}(x \rightarrow x')\} dx'. \quad (2.40)$$

Здесь $\theta(x)$ — плотность источников деления; $P_{m, f}(x' \rightarrow x)$ — плотность вероятности рождения нейтрона деления в точке x от нейтрона, родившегося в точке x' ; $a = \max_x \frac{\nu \Sigma_f}{\Sigma_a}$ — нормировочный коэффициент, учитывающий множественность рождения нейтронов деления [42] (максимум берется по всему фазовому пространству X системы), где ν — среднее число нейтронов деления; Σ_f — сечение деления; Σ_a — сечение захвата ($\Sigma_a = \Sigma_c + \Sigma_f$); Σ_c здесь сечение поглощения.

Умножив уравнение (2.39) на $\theta^+(x)$, (2.40) на $\theta'(x)$, интегрируя и вычитая уравнения друг из друга, получим

$$\Delta K_{\text{эф}} = K'_{\text{эф}} - K_{\text{эф}} = \frac{\iint \theta'(x') dx' \Delta \{a P_{m, f}(x' \rightarrow x)\} \theta^+(x) dx}{\iint \theta'(x) \theta^+(x) dx}. \quad (2.41)$$

Полагая в первом приближении $\theta^+ = I$, получаем

$$\begin{aligned} \Delta K_{\text{эф}} &= \frac{\int \theta'(x') dx' (\Delta \{aP_{m, f}(x' \rightarrow x)\}) dx}{\int \theta'(x) dx} = \\ &= \frac{\int \theta'(x') dx' \Delta \{aP_{m, f}(x')\}}{\int \theta'(x) dx}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Заметим, что

$$\Delta \{aP_{m, f}(x')\} = \Delta J(x'), \quad (2.43)$$

где

$$\begin{aligned} J(x') &= \int \Sigma_a(x) \Phi_{x'}(x) a \left\{ \frac{\nu_f \Sigma_f}{a \Sigma_a} \right\} dx = \\ &= \int \frac{\nu_f \Sigma_f}{\Sigma_t} \Psi_{x'}(x) dx = \int \varphi(x) \Psi_{x'}(x) dx, \end{aligned} \quad (2.44)$$

($\Phi_{x'}(x)$ есть поток нейтронов в точке x , создаваемый одним нейтроном деления, родившимся в x'). В расчете на один нейтрон деления в возмущенной системе

$$\Delta K_{\text{эф}} \approx \Delta J; \quad J = \int \Psi(x) \varphi(x) dx; \quad \Psi = \Sigma_t \Phi; \quad \varphi = \nu_f \Sigma_f / \Sigma_t.$$

В случае малых возмущений можно положить $\theta'(x) = \theta(x)$ и, следовательно, задача сводится к оценке возмущения функционала плотности столкновений. Используя (2.12), находим

$$\Delta K_{\text{эф}} \cong M \sum_{i=1}^l \left(\frac{\nu_f \Sigma_f}{\Sigma_t} \right)_i (W_{g, i} - 1); \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} W_{g, i} &= \frac{dP'_{f, i}}{dP_{f, i}}; \quad dP_{f, i} = \Sigma_s(x_0 \rightarrow x_1) \exp[-\tau(x_0, x_1)] \times \\ &\times \Sigma_s(x_1 \rightarrow x_2) \exp[-\tau(x_1, x_2)] \dots \Sigma_s(x_{i-2} \rightarrow x_{i-1}) \times \\ &\times \exp[-\tau(x_{i-1}, x_i)] \nu_f \Sigma_f(x_i) = \\ &= \exp(-T_i) \left[\prod_{k=1}^{i-1} \Sigma_s(x_{k-1} \rightarrow x_k) \right] \nu_f \Sigma_f(x_i), \end{aligned} \quad (2.46)$$

где T_i — оптическое расстояние, проходимое нейтроном деления от точки рождения до точки i -го столкновения.

Конечно, требуется выполнение условия непрерывности возмущенной меры относительно невозмущенной. В случае

гладкой зависимости сечений от некоторого параметра t (например, температуры) мы получим непосредственно из (2.46)

$$dK_{\text{эф}}/dt \cong M \sum_{l=1}^l (\nu_f \Sigma_f / \Sigma_t)_l \times \\ \times \left\{ (d \ln \Sigma_f / dt)_i + \sum_{k=1}^l (d \ln \Sigma_s / dt)_k - dT_l / dT \right\}, \quad (2.47)$$

где $(d\Sigma/dt)_k$ означает температурную производную соответствующего сечения в точке x_k фазового пространства.

В качестве следующего примера рассмотрим случай расчета возмущения, вносимого гомогенизацией активной зоны в рамках многогруппового метода. Применяя основную формулу для случая фазового пространства (r, Ω, γ) , где γ —номер группы, которой принадлежит энергия рассеивающегося нейтрона, получаем

$$\Delta K_{\text{эф}} = \sum_{l=1}^l (\nu_f \Sigma_f / \Sigma_t)_l \{ (dP_{\text{гет}} / dP_{\text{гом}})_{l-1} - 1 \}, \quad (2.48)$$

где

$$\frac{dP_{\text{гет}, l}}{dP_{\text{гом}, l}} = \exp [-(T_{\text{гет}, l} - T_{\text{гом}, l})] \times \\ \times \left(\frac{\nu_f \Sigma_{f, \text{гет}}}{\nu_f \Sigma_{f, \text{гом}}} \right)_l \prod_{k=1}^l \frac{\Sigma_{s, \text{гет}}^{\gamma_{k-1} \rightarrow \gamma_k}(x_k)}{\Sigma_{s, \text{гом}}^{\gamma_{k-1} \rightarrow \gamma_k}(x_k)}.$$

Суммирование здесь идет по всем траекториям, начало которых (т. е. точка деления) принадлежит активной зоне гетерогенного реактора.

В качестве следующего примера рассмотрим расчет эффективности отражателя реактора, используемого в системе регулирования.

Если вакуумная полость в реакторе объема V_0 замещается неделяющимся материалом с полным сечением $\Sigma_t(r, E)$ и сечением рассеяния $\Sigma_s(r, E)$ (при этом его функция рассеяния есть $\omega_s(r; E, \Omega \rightarrow E', \Omega')$), то по теории малых возмущений

$$\frac{\Delta K_{\text{эф}}}{K_{\text{эф}}} \text{ЦНД} = - \left[\int_{V_0} \Sigma_t(r, E) \Phi(r, \Omega, E) \Phi^+(r, \Omega, E) dr d\Omega dE - \right. \\ \left. - \int_{V_0} \Phi(r, \Omega, E) dr d\Omega dE \Sigma_s(r, E) \int \omega_s(r; E, \Omega, \rightarrow E', \Omega') \times \right. \\ \left. \times \Phi^+(r, \Omega', E') d\Omega' dE' \right] = \int_{V_0} \Sigma_t(r, E) \Phi(r, \Omega, E) \times$$

$$\begin{aligned} & \times [\Phi^+(r, \Omega, E) - \frac{\Sigma_s(r, E)}{\Sigma_t(r, E)} \int \omega_s(r; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \times \\ & \times \Phi^+(r, \Omega', E') d\Omega' dE']. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Используем в качестве Φ^+ решение Φ_1^+ интегрального уравнения

$$\begin{aligned} \Phi_1^+(r, \Omega, E) = & \int_0^\infty \exp(-\tau(r, R, \Omega, E)) dR \Sigma_s(r + R\Omega, E) \times \\ & \times \int \omega_s(r + R\Omega; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \Phi_1^+(r + R\Omega, \Omega', E') d\Omega' dE' + \\ & + \int \exp(-\tau(r, R, \Omega, E)) \nu_f \Sigma_f(r + R\Omega, E) \Phi_1^+(r + R\Omega, \Omega, E) dR. \end{aligned}$$

Запишем приближенное выражение для $\Phi_1^+(r, \Omega, E)$ вблизи границы реактора с вакуумом, вынося значение подынтегральной функции $\Sigma_s \int \omega_s \Phi_1^+ d\Omega' dE'$ из-под знака интеграла по R в точке $R = 0$:

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \exp[-\tau(r, R, \Omega, E)] dR \Sigma_s(r + R\Omega, E) \times \\ & \times \int \omega_s(r; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \Phi_1^+(r + R\Omega, \Omega', E') d\Omega' dE' \cong \\ & \cong \frac{\Sigma_s(r, E)}{\Sigma_t(r, E)} [1 - \exp(-T(r, \Omega, E))] \times \\ & \times \int \omega_s(r; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \Phi_1^+(r, \Omega', E') d\Omega' dE', \end{aligned} \quad (2.50)$$

где $T(r, \Omega, E)$ — оптическое расстояние от точки r до границы реактора по направлению Ω для нейтрона с энергией E . С учетом уравнения (2.50) получим из (2.49)

$$\begin{aligned} \frac{\Delta K_{\text{эф}}}{K_{\text{эф}}} \text{ЦНД} = & \int_{V_0} \Sigma_s(r, E) \Phi(r, \Omega, E) \exp(-T(r, \Omega, E)) \times \\ & \times \int \omega_s(r; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \Phi_1^+(r, \Omega', E') d\Omega' dE' - \\ & - \int_{V_0} \Sigma_t(r, E) \Phi(r, \Omega, E) dr d\Omega dE \int_0^\infty \exp(-\tau(r, R, \Omega, E)) \times \\ & \times \nu_f \Sigma_f(r + R\Omega, E) \Phi_1^+(r + R\Omega, \Omega, E) dR. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Вторым членом в уравнении (2.51) можно пренебречь в случае расположения возмущенной области вблизи границы реактора, поскольку подынтегральное выражение отлично от нуля только для направлений нейтронов, движущихся от отражателя к активной зоне, а поток этих нейтронов мал. Учи-

тывая также, что для $\Phi^+ = \Phi_1$ ценность нейтронов деления есть просто $K_{эф}$, получаем

$$\Delta K_{эф} \cong \int_{V_0} \Phi(r, \Omega, E) \Sigma_s(r, E) \exp[-T(r, \Omega, E)] \times \\ \times dr d\Omega dE \int \omega_s(r; E, \Omega \rightarrow E', \Omega') \Phi_1^+(r, \Omega', E') d\Omega' dE'. \quad (2.52)$$

Применяя к интегралу (2.52) основную теорему об оценке билинейных функционалов, получим

$$\Delta K_{эф} \cong M \sum'_i \exp[-\tau(r_i, \Omega_i, E_i)] \sum_{k>i}^i \left(\frac{\nu_f \Sigma_f}{\Sigma_t} \right)_k, \quad (2.53)$$

где штрих означает суммирование по всем рассеяниям в возмущенной области в процессе блуждания нейтрона, а $\sum_{k>i} (\nu_f \Sigma_f / \Sigma_t)_k$ есть вклад в цепную реакцию всех столкновений после посещения этой области.

2.5. Групповой расчет

Остановимся на определении отношения (см. формулу (2.1)):

$$\omega = \frac{\Sigma_s(x, \alpha) \omega_s(\alpha)}{\Sigma_s(x, 0) \omega_s(0)}.$$

Рассмотрим различные методы учета энергетической зависимости сечений.

Групповое представление энергетической шкалы [4]. $\omega = \frac{\Sigma_s(\alpha)_{\Gamma \rightarrow \Gamma}}{\Sigma_s(0)_{\Gamma \rightarrow \Gamma}}$, если нейтрон остается в той же группе Γ после рассеяния. Здесь $\Sigma_{s \Gamma \rightarrow \Gamma}$ — сечение реакции «остаться в той же группе». $\omega = \frac{\Sigma_s(\alpha)_{\Gamma \rightarrow \Gamma+1}}{\Sigma_s(0)_{\Gamma \rightarrow \Gamma+1}}$, если нейтрон переходит в следующую группу $\Gamma+1$. Здесь $\Sigma_{s \Gamma \rightarrow \Gamma+1}$ — сечение перехода в следующую группу.

Непрерывное слежение за энергией нейтрона. Если реакция разыгрывается по макроконстантам среды, то $\omega = \frac{\xi(\alpha) \Sigma_s(\alpha)}{\xi(0) \Sigma_s(0)}$ (нейтрон после рассеяния переходит в следующую группу), или $\omega = \frac{(\Delta u - \xi(\alpha)) \Sigma_s(\alpha)}{(\Delta u - \xi(0)) \Sigma_s(0)}$ (нейтрон остается в той же группе после рассеяния). Здесь ξ — средняя потеря летаргии; Σ_s — сечение упругого рассеяния; Δu — групповой интервал летаргии.

Если определяется нуклид, на котором произошло рассеяние, то $\omega = \Sigma_{sl}(\alpha) / \Sigma_{sl}(0)$, где Σ_{sl} — сечение рассеяния на i -м нуклиде.

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

Если за энергией следят по непрерывной шкале, то при рассеянии на водороде (с сечением Σ_{sH}) $\omega = \Sigma_{sH}(\alpha) / \Sigma_{sH}(0)$. Та же формула остается справедливой и при групповом описании сечений водорода, так как матричные элементы $\Sigma_{sH}(i \rightarrow j)$ не возмущаются.

В случае деления $\omega = \frac{\nu(\alpha) \Sigma_f(\alpha) \chi(E, \alpha)}{\nu(0) \Sigma_f(0) \chi(E, 0)}$, где $\chi(E)$ — спектр испущенных вторичных частиц; ν — число вторичных частиц; Σ_f — сечение деления.

2.6. Дисперсия метода

Общие формулы для дисперсии оценок возмущений линейных функционалов обычно малопоказательны. В современном расчете ядерного реактора или защиты методом Монте-Карло используется большое число ядерно-физических констант, моделируются сложные физические процессы и геометрия систем, так что получить для достаточно общего случая легко вычисляемую и точную формулу для подсчета статистических погрешностей — задача трудновыполнимая. Поэтому, получив общие формулы, переходят к их частным выражениям для специально подобранных модельных задач [15]. Если модель выбрана удачно, то результаты, полученные при ее исследовании, дают важную информацию о дисперсиях в упрощенных задачах.

Конечно, все достаточно развитые комплексы программ Монте-Карло в процессе расчета основных величин определяют также и статистические погрешности их вычислений. Но из-за сравнительно высокой стоимости подобных расчетов существует потребность в методах, которые позволили бы решить вопрос об ожидаемых точностях до проведения расчетов. Теоретические исследования дисперсий расчетов необходимы также при сравнении различных оценок. Нередко теоретический анализ показывает малую эффективность какого-либо метода уменьшения дисперсии, тем самым освобождая программиста от излишних усложнений расчетной программы.

Вывод формул дисперсий при расчетах методом коррелированных траекторий, в соответствии со сказанным выше, проведем в два этапа. Сначала получим общие формулы, а

затем детализируем их для специально подобранной задачи. Некоторые простые рассуждения укажут, как следует уточнить формулы рассмотренной однопрупповой гомогенной модели на случай многогрупповых гетерогенных расчетов. Окончательные формулы для дисперсии расчета на выбранной модели получены двумя методами: как частный случай общих формул и прямым вычислением, в котором хорошо видна «физика» накопления ошибок при расчетах возмущений.

В заключение раздела приводятся точности, полученные при решении типичных неупрощенных задач реакторной физики, и очерчивается «область эффективности» метода коррелированных траекторий при вычислении различных возмущений.

Общие формулы для подсчета дисперсий. Выкладки, проводимые здесь формально, можно обосновать введением обрывающихся траекторий (цепей) Маркова, как это сделано в работе [25]. Преимущество формального подхода прежде всего обнаруживается в компактной записи формул и сведения доказательств к элементарным алгебраическим преобразованиям.

Первыми выводятся формулы для дисперсии оценки линейного функционала потока по столкновениям [6], т. е. для «основной» оценки в терминах работы [25]. Совершенно аналогичный прием применяется для вычисления дисперсии оценки возмущения линейного функционала потока в методе коррелированных траекторий, что позволяет опустить здесь значительно более громоздкие, но по существу те же вычисления и сразу записать результат.

Запишем уравнение переноса для плотности столкновений $\Psi(x)$ в виде

$$\Psi(x) = \int K(x' \rightarrow x) \Psi(x') dx' + \Psi_1(x), \quad (2.54)$$

или в операторной форме записи $\Psi = K\Psi + \Psi_1$.

Рассмотрим линейный функционал потока

$$I = \int \Psi(x) \varphi(x) dx = (\Psi, \varphi). \quad (2.55)$$

Запишем уравнение, сопряженное уравнению (2.54) относительно функционала (2.55),

$$\Psi^+(x) = \int K(x-x') \Psi^+(x') dx' + \varphi(x). \quad (2.56)$$

Операторная запись: $\Psi^+ = K^+\Psi^+ + \varphi$.

Решение уравнений (2.55) и (2.56) можно записать в виде ряда Неймана

$$\left. \begin{aligned} \Psi &= (I-K)^{-1}\Psi_1 = \sum_{l=0}^{\infty} K^{(l)}\Psi_1; \\ \Psi^+ &= (I-K^+)^{-1}\varphi = \sum_{l=0}^{\infty} K^{+(l)}\varphi. \end{aligned} \right\} \quad (2.57)$$

Основную оценку функционала (2.55) методом Монте-Карло получают осреднением по траекториям величины

$$I = \sum_{l=0}^{\infty} \varphi(x_l), \quad (2.58)$$

где x_l — выбираются согласно начальному распределению $\Psi_1(x)$ и затем согласно переходным вероятностям $K(x' \rightarrow x)$ (моделирование прямого уравнения). Если x_l выбирать согласно начальному распределению $\varphi(x)$ и переходным вероятностям $K(x \rightarrow x')$ (моделирование сопряженного уравнения), то основную оценку можно получить осреднением по траекториям величины

$$I = \sum_{l=0}^{\infty} \Psi_1(x_l). \quad (2.59)$$

Несмещенность выражений (2.58) и (2.59) легко показывается (M — знак математического ожидания или первого момента):

$$\begin{aligned} M(I) &= M\left(\sum_{l=0}^{\infty} \varphi(x_l)\right) = (\varphi, \Psi_1) + (\varphi, K\Psi_1) + \dots = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (\varphi, K^{(l)}\Psi_1) = (\varphi, \Psi); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} M(I) &= M\left(\sum_{l=0}^{\infty} \Psi_1(x_l)\right) = (\Psi_1, \varphi) + (\Psi_1, K^+\varphi) + \dots = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (\Psi_1, K^{+(l)}\varphi) = (\Psi_1, \Psi^+). \end{aligned}$$

Дисперсия оценки выражения (2.58) определяется по формуле

$$\sigma_I^2 = M\left[\sum_{l=0}^{\infty} \varphi(x_l)\right]^2 - (\varphi, \Psi)^2 = M_2 - I^2.$$

Вычислим второй момент M_2 :

$$\begin{aligned}
 M_2 &= M \left[\sum_{i=0}^{\infty} \varphi(x_i) \right]^2 = M \left\{ \left[\sum_{j=0}^{\infty} \varphi(x_j) \right] \left[\sum_{i=0}^{\infty} \varphi(x_i) \right] \right\} = \\
 &= M \left[2 \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{i=0}^j \varphi(x_j) \varphi(x_i) - \sum_{i=0}^{\infty} \varphi^2(x_i) \right] = \\
 &= 2 \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{i=0}^j [\varphi, (K^{+(j-i)} \varphi)(K^{(i)} \Psi_1)] - (\varphi^2, \Psi) = \\
 &= 2 (\Psi \Psi^+, \varphi) - (\varphi^2, \Psi).
 \end{aligned}$$

При вычислении M_2 использовано правило Коши [13, с. 133]:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n a_k b_{n-k} = \left(\sum_{k=0}^{\infty} a_k \right) \left(\sum_{k=0}^{\infty} b_k \right).$$

Окончательно получаем

$$\sigma_I^2 = 2(\Psi \Psi^+, \varphi) - (\varphi^2, \Psi) - (\varphi, \Psi)^2 \quad (2.60)$$

Аналогичный вывод для дисперсии оценки выражения (2.59) приводит к формуле

$$\sigma_I^2 = 2(\Psi \Psi^+, \Psi_1) - (\Psi_1^2, \Psi^+) - (\Psi_1, \Psi^+)^2. \quad (2.61)$$

В работах [8, 15] приводится характеристическая функция случайной величины (2.58)

$$\alpha(t) = M[\exp(itI)] = 1 + \int Y(x, t) \{ \exp[it\varphi(x)] - 1 \} dx,$$

где $Y(x, t)$ — решение интегрального уравнения

$$Y(x, t) = \Psi_1(x) + \int \exp[it\varphi(x')] K(x' \rightarrow x) Y(x', t) dx'.$$

Выражения для $M(I)$ и σ_I^2 могут быть получены по обычным правилам:

$$\begin{aligned}
 M(I) &= \frac{1}{i} \frac{\partial \alpha}{\partial t} \Big|_{t=0}; \\
 \sigma_I^2 &= \frac{1}{i^2} \frac{\partial^2 \alpha}{\partial t^2} \Big|_{t=0} - [M(I)]^2,
 \end{aligned}$$

если учесть легко проверяемые равенства:

$$\begin{aligned}
 Y(x, 0) &= \Psi(x); \\
 Y'|_{t=0} &= i(I-K)^{-1} K \varphi \Psi; \quad \alpha'(0) = i(\varphi, \Psi); \\
 \alpha''(0) &= 2i(Y', \varphi) + i^2(\varphi^2, \Psi); \\
 (Y', \varphi) &= i((I-K)^{-1} K \varphi \Psi, \varphi) = i(K \varphi \Psi, (I-K)^{-1} \varphi) = \\
 &= i(K \varphi \Psi, \Psi^+) = i(\varphi \Psi, K^+ \Psi^+) = \\
 &= i(\varphi \Psi, \Psi^+ \varphi) = i(\Psi \Psi^+, \varphi) - i(\varphi^2, \Psi).
 \end{aligned}$$

В качестве примера вычислим дисперсию оценки числа поглощений для односкоростной гомогенной среды с вероятностью захвата при столкновении, равной p . Уравнения (2.54) и (2.56) при этом имеют вид

$$\Psi = (1-p)\Psi + 1; \Psi^+ = (1-p)\Psi^+ + p,$$

откуда

$$\Psi = 1/p; \Psi^+ = 1. \quad (2.62)$$

Подставляя эти значения в выражения (2.60) и (2.61), находим соответственно: для оценки (2.58) $\sigma_I^2 = 1-p$; для оценки (2.59) $\sigma_I^2 = 2(1-p)/p$.

Определим теперь дисперсию оценки возмущения линейного функционала. Допустим, что траектория частицы разбивается согласно уравнению $\Psi_0 = K_0\Psi_0 + \Psi_{10}$. Тогда оценку возмущения функционала $\Delta I = (\Psi, \varphi) - (\Psi_0, \varphi_0)$ можно получить осреднением по траекториям величин

$$\Delta I = \sum_{i=0}^{\infty} [W(x_i) \varphi(x_i) - \varphi_0(x_i)], \quad (2.63)$$

где $W(x_i) = W(x_{i-1}) \frac{K(x_{i-1} \rightarrow x_i)}{K_0(x_{i-1} \rightarrow x_i)}$ (для $i \geq 1$)

и $W(x_0) = \frac{\Psi_1(x_0)}{\Psi_{10}(x_0)}$ (для $i = 0$).

Причина внешнего отличия формулы (2.63) от аналогичной формулы (2.1) заключается в различном определении фазовых координат x_n и вытекающем отсюда различии в весах W_n . Если вычислить $K(x_{i-1} \rightarrow x_i)$, то сократится полное сечение Σ , используемое в качестве нормировочного множителя в функции пропускания и в отношении Σ_s/Σ . Это сокращение проведено в записи формулы (2.1). Однако вклады в оценки функционалов в принятой схеме производятся, когда точка столкновения уже определена, но тип столкновения (рассеяние, деление) еще не определен. Таким образом, в этой точке сокращение полного сечения не может быть произведено. Несократившееся отношение $\Sigma(x_n, \alpha)/\Sigma(x_n, 0)$ перенесено в формулу оценки (2.2).

Определение веса по формуле (2.1) удобно при вычислении, так как может быть записано в рекуррентной форме

$$W_0 = S(x_0, \alpha)/S(x_0, 0);$$

перед столкновением $W_n = W_{n-1} \exp(-\Delta\tau_n)$; после столкновения (деления) $W_n = W_{n-1} \frac{\Sigma_s(x_n, \alpha)}{\Sigma_s(x_n, 0)}$.

В этой главе нет необходимости детализировать состояние x_n . Поэтому можно работать с общим выражением (2.63).

Несмещенность (2.63) можно показать так же, как это было сделано выше. Дисперсия оценки (2.63) вычисляется аналогично тому, как была вычислена дисперсия оценки (2.58). Записываем окончательный результат:

$$\begin{aligned} \sigma_{\Delta I}^2 = & 2(\Psi^+\chi, \varphi) + 2(\Psi_0\Psi_0^+, \varphi_0) - 2(\Psi\Psi^+, \varphi_0) - \\ & - 2(\Psi_0^+\Psi, \varphi) - (\chi, \varphi^2) + 2(\varphi\varphi_0, \Psi) - (\Psi_0, \varphi_0^2) - \\ & - ((\Psi, \varphi) - (\Psi_0, \varphi_0))^2 \end{aligned} \quad (2.64)$$

Здесь $\Psi_0^+(x)$ и $\chi(x)$ являются решениями соответствующих уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \Psi_0^+ &= K_0^+ \Psi_0^+ + \varphi, \\ \chi(x) &= \int \frac{K^2(x' \rightarrow x)}{K_0(x' \rightarrow x)} \chi(x') dx' + \frac{\Psi_1^2(x)}{\Psi_{10}(x)} \end{aligned} \right\} \quad (2.65)$$

Возможность вычисления возмущения функционала методом коррелированных траекторий связана с существованием решения уравнения (2.65) для (χ) . Отличие ядра оператора $\frac{K^2(x' \rightarrow x)}{K_0(x' \rightarrow x)}$ вместо $K_0(x' \rightarrow x)$ в уравнении, описывающем прямое моделирование, указывает на возможность ситуации, когда, несмотря на существование решения прямого уравнения, вычислить возмущение некоторого функционала методом коррелированных траекторий не удастся. Подробнее эти случаи и возникающие при этом ограничения на метод рассматриваются ниже при решении модельной задачи.

Модельная задача. Основная расчетная формула (2.1) указывает на следующие четыре источника колебания весов вкладов:

- 1) флуктуации $S(x_0)/S_0(x_0)$ в точке рождения частицы x_0 ;
- 2) флуктуации разности оптических толщин $\Delta\tau_l$ вследствие случайности длины пробега частицы;
- 3) флуктуации отношений $\Sigma_s(x_i)/\Sigma_{s_0}(x_i)$ и $\Sigma(x_i)/\Sigma_0(x_i)$ вследствие случайности x_i ;
- 4) флуктуации отношения энерго-угловых индикатрис

$$\frac{w_s(x_i \rightarrow x_{i+1})}{w_{s_0}(x_i \rightarrow x_{i+1})}$$

Наиболее просто вычислить флуктуацию первого типа в предположении, что остальные три источника флуктуаций отсутствуют. Допустим, вычисляется возмущение интеграла захватов в гомогенной односкоростной среде (p — вероятность захвата):

$$\Delta I = \int \Psi p dx - \int \Psi_0 p dx,$$

где Ψ и Ψ_0 — плотности столкновений соответственно в возмущенной и невозмущенной средах.

Моменты случайной величины $W = S(x_0)/S_0(x_0)$ примем равными: $\bar{W} = M(W) = 1$; $\sigma_W^2 = M(W^2) - \bar{W}^2 = r$.

Очевидно, среднее значение функционала ΔI будет равно нулю, а дисперсия

$$\sigma_{\Delta I}^2 = M \left[\sum_{N=1}^{\infty} P_N (W - 1)^2 \right], \quad (2.66)$$

где $P_N = \rho(1-\rho)^{N-1}$ — вероятность захвата в N -м столкновении. Вычисления (2.66) дают значение $\sigma_{\Delta I}^2 = r$.

Рассмотрение случаев 2), 3), 4) приводит к качественно новой ситуации. При некоторых характеристиках среды дисперсия расчета возмущения может сделаться бесконечной.

В качестве модели вновь выберем гомогенный односкоростной случай. Вначале рассмотрим возмущение оптических толщин, причем формулу для дисперсии выведем прямым способом. Затем, на этой же простейшей модели рассмотрим, помимо флуктуаций 2), также случаи 3) и 4). Формулы для дисперсий получим как частный случай общих формул (2.64). Фактически, как видно из структуры формулы (2.52), достаточно вычислить дисперсии от флуктуации какого-либо одного отношения, например $\Sigma_s(x_i)/\Sigma_{s_0}(x_i)$, так как другие ($\Sigma(x_i)/\Sigma_0(x_i)$ и w_i/w_{i_0}) входят в формулу однотипно.

Определим следующим образом зависимость сечений от параметра возмущения α :

$$\left. \begin{aligned} \Sigma(\alpha) &= \Sigma_0(1+\alpha); \\ \Sigma_s(\alpha) &= \Sigma_{s_0}(1+\alpha). \end{aligned} \right\} \quad (2.67)$$

Пусть $\rho = \Sigma_a/\Sigma$ — вероятность захвата, зависящая от α . Рассмотрим функционал захватов $I = \int \rho \Psi dx$. Определим $\Delta I/\alpha = (1/\alpha) \int [p(\alpha) \Psi(\alpha) - p(0) \Psi(0)] dx$. Формула для оценки среднего значения $\overline{\Delta I/\alpha}$ имеет, согласно выражению (2.63), вид

$$\frac{\Delta I}{\alpha} = \frac{1}{\alpha} \frac{1}{H} \sum_{i=1}^H \sum_{n=1}^{N_i} \left[W_n \frac{\Sigma_p(x_n, \alpha)}{\Sigma(x_n, \alpha)} - \frac{\Sigma_p(x_n, 0)}{\Sigma(x_n, 0)} \right]; \quad (2.68)$$

где W_n задается формулой (2.52).

Учитывая указанные выше предположения (2.67) относительно зависимости сечений от α , получаем следующие выражения для оценки $\overline{\Delta I/\alpha}$ по одной траектории:

$$\overline{\Delta I/\alpha} = \sum_{N=1}^{\infty} P_N \int_N d\gamma Z(N, \gamma),$$

где

$$Z(N, \gamma) = \frac{\rho}{\alpha} \sum_{n=1}^N \left[(1 + \alpha)^n \prod_{i=1}^n u_i - 1 \right];$$

$$\int_N d\gamma = \underbrace{\int_0^1 \dots \int_0^1}_{N \text{ раз}} d\gamma_1 \dots d\gamma_n.$$

Так как длина пробега $l_i = -(1/\Sigma_0) \ln \gamma_i$, то

$$u_i = \frac{\exp[-\Sigma_0(1 + \alpha) l_i]}{\exp(-\Sigma_0 l_i)} = \exp[-(\Sigma_0(1 + \alpha) - \Sigma_0) l_i] = \gamma_i^\alpha,$$

где γ_i — стандартное случайное число ($0 \div 1$).

При возмущении, равном нулю

$$\begin{aligned} \frac{\overline{\Delta I}}{\alpha} &= \rho \sum_{N=1}^{\infty} P_N \int_N d\gamma \sum_{n=1}^N \left((1 + \alpha)^n \prod_{i=1}^n u_i - 1 \right) = \\ &= \rho \sum_{N=1}^{\infty} P_N \left(\sum_{n=1}^N \frac{(1 + \alpha)^n}{(1 + \alpha)^n} - N \right) = 0. \end{aligned}$$

Для конечности интегралов $\int_0^1 \gamma^\alpha d\gamma$ требуется выполнить *ограничение 1*: $\alpha > -1$.

Дисперсия $\sigma_{\Delta I/\alpha}^2$ определяется по формуле

$$\begin{aligned} \sigma_{\Delta I/\alpha}^2 &= \sum_{N=1}^{\infty} P_N \int_N d\gamma Z^2(N, \gamma) = \\ &= (\rho^2/\alpha^2) \sum_{N=1}^{\infty} P_N \int_N d\gamma \left(\sum_{n=1}^N (1 + \alpha)^n \prod_{i=1}^n \gamma_i^\alpha - N \right)^2. \quad (2.69) \end{aligned}$$

Обозначим $r = (1 + \alpha)^2/(2\alpha + 1)$. Определим

$$\begin{aligned} Q &= \int_N d\gamma \left[\sum_{n=1}^N (1 + \alpha)^n \prod_{i=1}^n \gamma_i^\alpha \right]^2 = \\ &= \int_N d\gamma [\gamma_1^\alpha (1 + \alpha) + \gamma_1^\alpha \gamma_2^\alpha (1 + \alpha)^2 + \dots + \gamma_1^\alpha \gamma_2^\alpha \dots \gamma_N^\alpha (1 + \alpha)^N]^2 = \\ &= \int_N d\gamma \gamma_1^{2\alpha} (1 + \alpha)^2 [1 + \gamma_2^\alpha (1 + \alpha) + \dots + \gamma_2^\alpha \dots \gamma_N^\alpha (1 + \alpha)^{N-1}]^2 = \\ &= r \int_{N-1} d\gamma \{1 + \gamma_2^\alpha (1 + \alpha) [1 + \gamma_3^\alpha (1 + \alpha) + \dots + \gamma_3^\alpha \dots \gamma_N^\alpha (1 + \alpha)^{N-2}]\}^2 = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= r \left\{ 1 + 2(N-1) + r \int_{N-2}^N d\gamma [1 + \gamma_3^\alpha (1 + \alpha) + \dots + \right. \\
&\quad \left. + \gamma_3^\alpha \dots \gamma_N^\alpha (1 + \alpha)^{N-2}] \right\}^2 = \\
&= r \{ 1 + 2(N-1) + r[1 + 2(N-2) + r(\dots)] \} = \\
&= r + r^2 + \dots + r^N + 2r[(N-1) + r(N-2) + \dots + r^{N-2}]. \quad (2.70)
\end{aligned}$$

Для вычисления суммы членов ряда (2.70) воспользуемся следующими формулами, которые легко доказываются дифференцированием по r выражения для суммы членов геометрической прогрессии:

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^n r^i &= \frac{r - r^{n+1}}{1 - r}; \\
\sum_{i=1}^n i r^i &= \frac{r - (n+1)r^{n+1} + nr^{n+2}}{(1-r)^2}.
\end{aligned}$$

Определим

$$S = a_0 b_0 + a_1 b_1 + \dots + a_n b_n,$$

где $a_i = a_0 r^i$; $b_i = b_0 + id$. Тогда

$$S = a_0 b_0 \frac{1 - r^{n+1}}{1 - r} + a_0 d \frac{r - (n+1)r^{n+1} + nr^{n+2}}{(1-r)^2}.$$

Для случая ряда (2.70) $a_0 = 1$; $b_0 = N-1$; $d = -1$; $n = N-2$. Следовательно,

$$\begin{aligned}
Q &= \frac{r - r^{N+1}}{1 - r} + 2r \left[\frac{1 - r^{N-1}}{1 - r} (N-1) - \right. \\
&\quad \left. - \frac{r - (N-1)r^{N-1} + (N-2)r^N}{(1-r)^2} \right] = \\
&= \frac{r}{(1-r)^2} [2N(1-r) + (r^N - 1)(r+1)].
\end{aligned}$$

Так как $\int_N d\gamma \sum_{n=1}^N (1 + \alpha)^n \prod_{i=1}^n \gamma_i^\alpha = N$, то

$$\int_N d\gamma \left[\sum_{n=1}^N (1 + \alpha)^n \prod_{i=1}^n \gamma_i^\alpha - N \right]^2 = Q - N^2. \quad (2.71)$$

При выводе формул (2.70) встречались интегралы $\int_0^1 \gamma^{2\alpha} d\gamma$, которые существуют при $\alpha > -1/2$. Таким образом возникает

ограничение 2: ($\alpha > -1/2$), которое оказывается более сильным, чем сформулированное выше ограничение 1 ($\alpha > -1$) и, следовательно, включает его в себя.

Чтобы закончить вычисление дисперсий, вычислим ряд

$$\sum_{N=1}^{\infty} P_N (Q - N^2). \quad (2.72)$$

Воспользуемся соотношениями

$$\sum_{N=1}^{\infty} N P_N = 1/p; \quad (2.73)$$

$$\sum_{N=1}^{\infty} N^2 P_N = (2-p)/p^2; \quad (2.74)$$

$$\sum_{N=1}^{\infty} r^N P_N = pr/(1-r+pr). \quad (2.75)$$

Для сходимости ряда (2.75) необходимо выполнить *ограничение 3*: $r(1-p) < 1$, или эквивалентное ему

$$p > \left(\frac{\alpha}{1+\alpha} \right)^2. \quad (2.76)$$

Ограничение 3 более сильное, чем ограничение 2. Таким образом, ограничение 3 является основным условием существования дисперсии $\sigma_{\Delta I/\alpha}^2$.

Вычислив ряд (2.70) с помощью соотношений (2.73) — (2.75), получаем окончательную формулу для дисперсии:

$$\sigma_{\Delta I/\alpha}^2 = \frac{1}{\alpha^2} \frac{(1+e)(r-1)}{1-re} = \frac{1+e}{p(1+\alpha)^2 - \alpha^2}, \quad (2.77)$$

где по определению $e = 1-p$ — вероятность рассеяния.

Выведем теперь формулу (2.77) из общих выражений для дисперсии (2.64). Рассмотрим более общую модель. Предположим, что кроме полного сечения Σ возмущаются вероятности захвата p , а также введем энергетическую зависимость для изучения зависимости дисперсии от объема фазового пространства, в котором отлична от нуля весовая функция φ .

Обозначения Σ , p , e — соответственно полное сечение, вероятность захвата и вероятность рассеяния ($p+e=1$) для возмущенной среды. Σ_0 , p_0 , e_0 — те же величины ($p_0+e_0=1$) для невозмущенной среды. Предположим, что после рассеяния частица переходит в состояние с новой энергией E , согласно плотности $M(E)$ ($\int_0^{\infty} M(E) dE = 1$). Источник $S(E)$ не

возмущается ($\int_0^{\infty} S(E) dE = 1$). Для рассматриваемой модели выберем вид функций S , M , φ , приведенный на рис. 2.1. Прямое уравнение

$$\Psi(E) = \int_0^{\infty} eM(E) \Psi(E') dE' + \Psi_1(E) \quad (2.78)$$

имеет решение

$$\Psi(E) = (e/p) M(E) + \Psi_1(E). \quad (2.79)$$

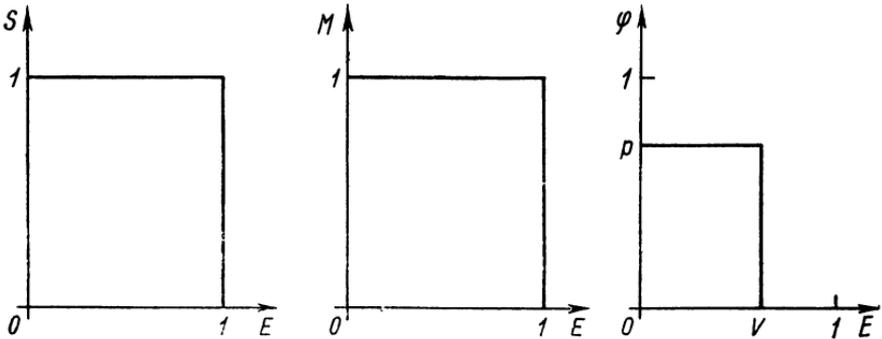


Рис. 2.1. Зависимость функций S , M и φ от энергии в модельной задаче

Сопряженное уравнение

$$\Psi^+(E) = \int_0^{\infty} eM(E') \Psi^+(E') dE' + \varphi(E) \quad (2.80)$$

имеет решение

$$\Psi^+(E) = (e/p) \int_0^{\infty} M(E) \varphi(E) dE + \varphi(E) \quad (2.81)$$

Прежде чем решать характеристическое уравнение

$$\begin{aligned} \chi(E) = & \int_0^{\infty} \frac{e^2 \Sigma^2 \exp(-2\Sigma x)}{e_0 \Sigma_0 \exp(-\Sigma_0 x)} dx \times \\ & \times \int_0^{\infty} dE' \frac{M^2(E)}{M(E)} \chi(E') + \frac{\Psi_1^2(E)}{\Psi_{10}(E)}, \end{aligned} \quad (2.82)$$

постараемся его упростить.

На пути от источника до первого соударения частица приобретает вес $W_0 = (\Sigma/\Sigma_0) \exp(-\Delta\tau)$. Вследствие случайности

$\Delta\tau$, этот вес флуктуирует. Проведя осреднение $\Psi^2(E)/\Psi_{10}(E)$ по этим флуктуациям, получаем

$$M \left[\frac{\Psi_1^2(E)}{\Psi_{10}(E)} \right] = \int_0^{\infty} \frac{\Sigma^2 \exp(-2\Sigma x)}{\Sigma_0 \exp(-\Sigma_0 x)} dx = r, \quad (2.83)$$

где $r = t^2/(2t - 1)$; $t = \Sigma/\Sigma_0$.

Для существования интеграла (2.83) необходимо выполнить условие $2\Sigma > \Sigma_0$ или $2t > 1$. Очевидно, что эти условия эквивалентны ранее сформулированному ограничению 2.

Окончательно получаем следующее характеристическое уравнение для задачи:

$$\chi(E) = frM(E) \int_0^{\infty} \chi(E') dE' + S(E)r, \quad (2.84)$$

которое имеет решение:

$$\chi(E) = \frac{fr^2}{1-fr} M(E) + rS(E), \quad (2.85)$$

где $f = e^2/e_0$.

Для сходимости ряда Неймана в уравнении (2.84) требуется выполнить условие

$$fr < 1. \quad (2.86)$$

Нетрудно убедиться, что в случае невозмущенных вероятностей рассеяния ($e_0 = e$) ограничение (2.86) эквивалентно сформулированному выше ограничению 3 ($re < 1$).

Подставив решение (2.79), (2.81) и (2.85) в общее выражение для дисперсии (2.64), с учетом конкретного выбора функций S , M , φ получаем следующее выражение для дисперсии оценки функционала $\Delta I = (\varphi, \Psi) - (\varphi_0, \Psi_0)$:

$$\sigma_{\Delta I}^2 = V[pr/(1-fr) - (p_0/p)](2eV + p). \quad (2.87)$$

Зависимость множителя $2eV + p$ от V показана на рис. 2.2.

В частном случае при $p_0 = p$ ($e_0 = e$) и $V = 1$ получается ранее выведенная прямым способом формула (2.77)

$$\sigma_{\Delta I}^2 = \frac{(1+e)(r-1)}{1-re}. \quad (2.88)$$

В другом частном случае, когда возмущается сечение рассеяния, но не возмущается полное сечение ($\Sigma = \Sigma_0$), выражение для дисперсии (полагаем $V = 1$) может быть записано в следующем виде:

$$\sigma_{\Delta I}^2 = \frac{(e_0 - e)^2}{p(e_0 - e^2)}. \quad (2.89)$$

Знаменатель формулы (2.89) всегда больше нуля, так как должно быть выполнено условие сходимости (2.86) ряда Неймана

$$f < 1 \text{ или } e^2 < e_0.$$

Исследуем подробнее случай, когда возмущается лишь оптическое расстояние. Выясним на этом примере, насколько ограничительно условие конечности дисперсии оценки возмущения ($fr < 1$). Как и прежде, предположим $\Sigma = \Sigma_0(1 + \alpha)$. Ограничение $fr < 1$ указывает, что допустимы значения параметра возмущения α , лежащие в интервале

$$\alpha_{\text{мин}} = -\sqrt{\bar{p}}/(1 + \sqrt{\bar{p}}); \quad \alpha_{\text{макс}} = \sqrt{\bar{p}}/(1 - \sqrt{\bar{p}}). \quad (2.90)$$

Минимальное значение дисперсии на одну траекторию

$$\sigma_{\Delta I/\alpha}^2 = e(e+1)/p \quad (2.91)$$

достигается при $\alpha = p/e$.

Нейтрон одного поколения испытывает в реакторе несколько десятков соударений до поглощения или вылета, т. е.

p — обычно величина малая. Допустим $p = 1/25$, тогда $\alpha_{\text{мин}} = -1/6$, $\alpha_{\text{макс}} = 1/4$. Таким образом, ограничение $fr < 1$ чувствительно сужает сферу применимости расчетов возмущений. Рассмотренная модель характеризует самый неблагоприятный случай — возмущение затрагивает всю область фазового пространства. Когда же возмущению подвергается

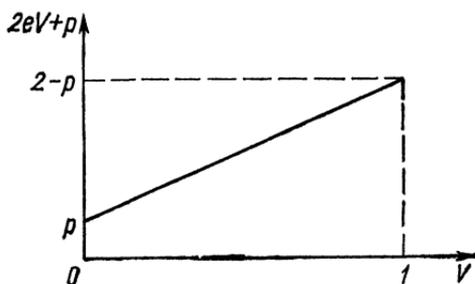


Рис. 2.2. График функции $2eV + p$ от аргумента V

лишь часть системы, увеличивается вероятность вылета из области возмущения (по энергии, пространству, углам или в результате захвата), а она может оказаться много больше, чем просто вероятность захвата частицы в системе. Например, при определении кампании реактора учитывают отравление для блоков горючего, которые занимают часть системы. К тому же сечения сильно возмущаются лишь в нескольких энергетических группах.

Чтобы конкретизировать эти рассуждения, вернемся к модели гомогенной среды и рассмотрим случай, когда возмущения сечения захвата (рассеяния) происходят лишь в некоторой области энергий (рис. 2.3).

Характеристическое уравнение имеет вид

$$\chi(E) = M \left[\frac{e^2}{e_0} r\omega + e_0(1-\omega) \right] \int_0^1 \chi(E') dE' + S[r\omega + (1-\omega)]. \quad (2.92)$$

Условие сходимости ряда Неймана уравнения (2.92):

$$\frac{e^2}{e_0} r\omega + e_0(1-\omega) < 1. \quad (2.93)$$

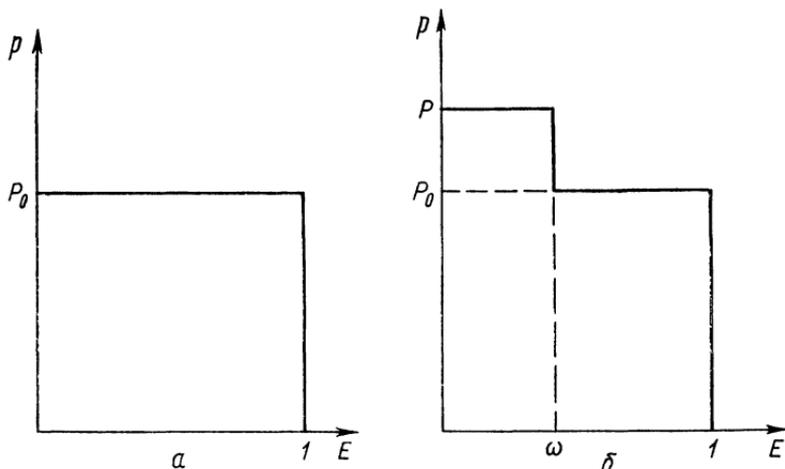


Рис. 2.3. Зависимость вероятного захвата p до возмущения (а) и после возмущения (б) от энергии нейтрона

Покажем, что ограничение (2.93) менее жестко, чем (2.86) ($\frac{e^2}{e_0} r < 1$). Для этого преобразуем неравенство (2.93):

$$\frac{e^2}{e_0} r < \frac{1 - e_0(1-\omega)}{\omega}. \quad (2.94)$$

Правая часть (2.94) всегда больше правой части (2.86), равной единице:

$$\frac{1 - e_0(1-\omega)}{\omega} - 1 = \frac{(1-\omega)p_0}{\omega} > 0,$$

так как $\omega < 1$.

Вычислим для примера значения $\alpha_{\text{мин}}$ и $\alpha_{\text{макс}}$, согласно ограничению (2.93), и сопоставим их со значениями из (2.90). Так же, как в примере (2.88), предположим, что сечение рассеяния не возмущается ($e=e_0$). Примем $p=1/25$, $\omega=1/25$. Получаем $\alpha_{\text{мин}} = -5/12$, $\alpha_{\text{макс}} = 5/2$. Сравним со значениями, получаемыми из (2.90): $\alpha_{\text{мин}} = -1/6$ и $\alpha_{\text{макс}} = 1/4$.

Интересно отметить, что применение метода выравнивания полных сечений — метода максимальных сечений (см. [25], а также разд. 3.3 настоящей работы) расширяет область допустимых возмущений, имеющих конечную дисперсию. В методе максимальных сечений при помощи введения фиктивных сечений (рассеяние на которых не изменяет угла полета и энергии частицы) добиваются равенства полных сечений в исходной и возмущенной средах. Для односкоростной модели это означает, что дисперсия оценки возмущения определяется формулой (2.89), а условие конечности дисперсии имеет вид $e^2/e_0 < 1$, где

$$\left. \begin{aligned} e &= (\Sigma_e + \Sigma_{\phi}) / \Sigma_{\text{макс}}; \\ e_0 &= (\Sigma_{e0} + \Sigma_{\phi0}) / \Sigma_{\text{макс}}; \\ \Sigma_{\text{макс}} &= \Sigma_a + \Sigma_e + \Sigma_{\phi} = \Sigma_{a0} + \Sigma_{e0} + \Sigma_{\phi0}. \end{aligned} \right\} \quad (2.95)$$

Здесь $\Sigma_{\text{макс}}$ — полное сечение, одно и то же в обеих средах; $\Sigma_{\phi0} = \Sigma_{\text{макс}} - \Sigma_0$ и $\Sigma_{\phi} = \Sigma_{\text{макс}} - \Sigma$ — фиктивные сечения исходной и возмущенной сред. Из формул (2.95) следует ограничение на конечность дисперсии: $\Sigma_a / \Sigma_{\text{макс}} < 2 - \Sigma_{a0} / \Sigma_a$. Так как $\Sigma_{\text{макс}}$ можно, в принципе, выбрать сколь угодно большим, то конечности дисперсии можно добиться, если полнить условие $\Sigma_{a0} / \Sigma_a < 2$ или эквивалентное условие $(\Sigma / \Sigma_0) \rho_0 < 2\rho$. Так, при $\rho = \rho_0$ необходимо, чтобы выполнялось условие $\Sigma < 2\Sigma_0$.

2.7. Потеря точности при вычислении малых возмущений

Вклад эффекта Доплера в $K_{\text{эф}}$ реактора имеет порядок $10^{-4} - 10^{-6} K_{\text{эф/град}}$. Если провести расчет этого эффекта методом Монте-Карло, задав константы в исходной среде, например при 300 К, а в возмущенной при 301 К, то сечения будут отличаться весьма мало, так что в формуле (2.1) разности оптических толщин будут близки к нулю, отношения сечений к единице, и суммарный вес будет мало отличаться от единицы. Соответственно в формуле (2.2), по которой рассчитывается эффект изменения функционала, будут вычитаться близкие величины. В конечном счете окажется, что вследствие ограниченности разрядной сетки ЭВМ произойдет пропажа знаков. Спрашивается, насколько этот эффект ограничивает возможности расчета возмущений? Или, конкретно, для примера расчета доплер-эффекта, каков минимальный интервал приращения температуры, при котором можно вычислить $K_{\text{эф}}$ с приемлемой точностью?

Этот вопрос исследовался экспериментально. В комплексе программ АРМОИТ [12] имеется возможность вычислить непосредственно температурную производную $K_{\text{эф}}$ (модуль

№ 32)*, и при этом не происходит пропажи знаков (см. разд. 3.3), и вычислить $\Delta K_{эф}$ при любом приращении констант (модуль № 38). Была выбрана ячейка натурального реактора, геометрия которой представлена на рис. 2.4.

На нижней поверхности H и боковой B задавались зеркальные отражения, на верхней V — вылеты нейтронов.

По модулю № 32 была вычислена производная $K' = \partial K / \partial \rho$ от изменения плотности ρ , заштрихованной на рисунке зоны, содержащей вещество замедлителя. Затем вычислялась конечно-разностная аппроксимация той

же производной $\hat{K}' = \Delta K / \Delta \rho$ для разных значений $\Delta \rho$ при помощи модуля № 38. Расчет проводился таким образом, чтобы траектории совпадали в расчетах по двум модулям. Другими словами, последовательность фазовых координат X_1, X_2, \dots, X_n точек столкновения была одинаковой при расчетах по обоим модулям, и этим исключались статистические флуктуации в разностях двух расчетов

K' и \hat{K}' . Уменьшая теперь $\Delta \rho$, можно проследить, как будет вести себя величина \hat{K}' по отношению к K' .

Результаты расчета представлены на рис. 2.5. По оси ординат отложено число десятичных знаков, совпадающих в K'

и \hat{K}' . По оси абсцисс — относительная величина возмущения ϵ ($\Delta \rho = \rho_0 \epsilon$, где ρ_0 — исходная плотность).

Из рисунка видно, что в зависимости от последовательности случайных чисел потеря точности может происходить по-разному. Но главная закономерность ясно видна: при больших и малых ϵ точность ухудшается. Расхождения K' и

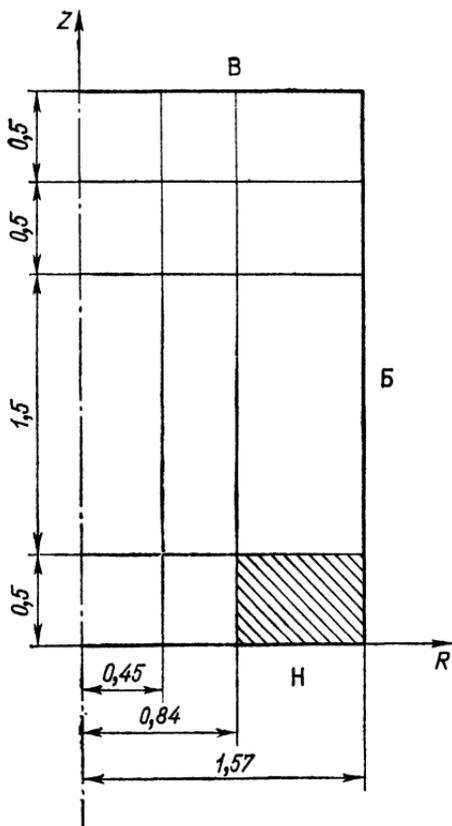


Рис. 2.4. Ячейка реактора в R — Z -геометрии (все размеры указаны в см)

* Номера модулей взяты из работы [12].

\hat{K}' при малых ε объясняются потерей знаков в машине, при больших ε — увеличением дисперсии расчета. Оптимум (максимум на рисунке) достигается при $\varepsilon \approx 10^{-5}$. Эксперимент проводился на машине М-222, содержащей 45 разрядов в двоичном представлении числа. Для машин с меньшим числом разрядов этот максимум, очевидно, сдвигается влево.

Более детальный анализ показывает, что в формуле (2.1) при $\varepsilon < 10^{-5}$ смещение в расчетном функционале за счет знаков, потерянных при вычитании близких чисел в машине, не

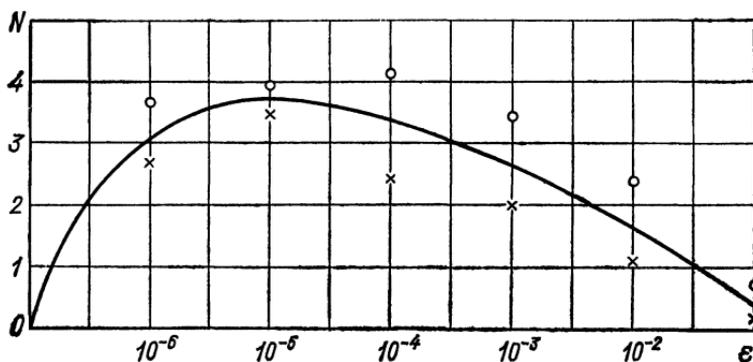


Рис. 2.5. Точность конечно-разностной аппроксимации: \times — первая серия расчетов; \circ — вторая серия расчетов с иной последовательностью случайных чисел в обоих модулях; — — — — осредненная кривая по двум расчетам

превосходит числа знаков, потерянных в разности $\Sigma(\alpha) - \Sigma(0)$. Этот результат очень важен. Так как методы Монте-Карло дают значения функционалов с точностью, как правило, не превосходящей трех десятичных знаков (несколько десятков тысяч историй), то можно заключить, что даже для довольно малых возмущений пригодны программы, рассчитывающие конечные приращения (типа модуля № 38). Здесь стоит отметить, что в программах, вычисляющих конечные возмущения, легче учесть различные возмущения, чем при расчетах производных, где требуется более громоздкий способ подготовки констант для задания возмущений.

2.8. Структура программы для расчетов на ЭВМ

Программы для расчета возмущений в ядерных реакторах могут быть построены на базе обычных программ метода Монте-Карло. Они обладают той же общей структурой: 1) ввод исходных данных; 2) подготовка нейтронно-физических констант; 3) расчет Монте-Карло; 4) обработка результатов счета.

Их отличительной особенностью является присутствие двух систем констант — для исходного и возмущенного состояния системы. Если основными расчетными функционалами являются потоки в отдельных зонах и группах, то программы рассчитывают также два набора этих функционалов — соответственно исходному и возмущенному состояниям систем. Знание потоков и их возмущений для всех зон и энергетических групп предоставляет достаточную информацию для вычисления всех линейных функционалов и их возмущений (чисел процессов, тепловыделений, активаций, коэффициента размножения и т. п.). Достаточность зонно-групповых потоков связана с тем, что при групповом представлении констант они являются величиной постоянной внутри энергетической группы и геометрической зоны и могут быть вынесены за знак интеграла: $\int \Sigma \Phi dx = \Sigma \int \Phi dx$.

Нейтронно-физические константы для расчета подразделяются на два типа: относящиеся к основному и возмущенному состояниям системы. При задании исходных констант программист использует два массива, имеющих размерность числа геометрических зон, в которых указывает соответствие между номером зоны в геометрии системы и номером физического состава этой зоны для основного и возмущенного состояния зоны.

Разделение понятий «геометрическая» и «физическая» зоны всегда полезно. Во-первых, экономится машинная память и время на подготовку констант, во-вторых, предварительный анализ наличия возмущения в данной геометрической зоне позволяет в процессе расчета исключить ненужные вычисления экспонент с нулевым показателем степени. Упрощается также структура подпрограмм, подготавливающих константы для расчета. Все физические константы, безотносительно к тому, соответствуют ли они основному или возмущенному состоянию системы, вычисляются единообразно. Например, если требуется определить доплер-эффект, связанный с изменением температуры в какой-либо геометрической зоне, то готовятся два набора констант, соответствующие исходной и возмущенной температуре. Эти константы получают различные физические номера.

Разделение понятий «расчетная зона» и «геометрическая зона» ведет к более глубокой перестройке структуры программы. Поясним термин «расчетная зона». Под ним понимается совокупность геометрических зон, для которых не требуется выводить информацию по отдельным геометрическим составляющим зоны, а предполагается вывод интегральной информации. В практике расчетов эта ситуация встречается довольно часто, и, казалось бы, введение понятия «расчетная зона», подобно понятию «физическая зона», должно

привести к экономии машинной памяти. Однако следует учесть, что тогда набор потоков для расчетных зон не образует полный набор для вычисления линейных функционалов, так как расчетная зона может содержать различные физические зоны. Расчетная зона как единица измерения потребностей в машинной памяти не дает возможности определить произвольный линейный функционал в программе обработки после завершения основного расчета. При таком подходе функционалы, вообще говоря, должны определяться в процессе счета, загружая дополнительными операторами геометрический блок и блок розыгрыша реакций, что, естественно, приводит к снижению скорости счета.

Распространенное мнение заключается в том, что нерентабельно создавать универсальные программы с геометрией «на все случаи жизни», с большим списком вычисляемых функционалов. Это приведет только к снижению быстродействия, увеличит объем и сложность программы, что в свою очередь потребует больших затрат времени на ее отладку. Целесообразней программы узкого назначения — специализированные модули — включать в библиотеку комплекса и далее, согласно потребностям текущего задания на расчет, набирать из модулей необходимую цепочку [3, 12]. Специализированные модули собираются из различных геометрических блоков, подпрограмм типов реакций и т. п. [43].

Перейдем к подробному описанию структуры программы для вычисления возмущений методом коррелированных траекторий. Как уже отмечалось, программа сохраняет обычную структуру, она состоит из двух блоков: геометрического и блока розыгрыша реакций.

Геометрический блок. На вход блока поступают фазовые координаты частицы после предыдущего столкновения (или координаты в точке влета в систему): энергия E , три координаты радиус-вектора r и две координаты угла полета Ω . При расчетах нестационарных процессов, времени жизни частиц и т. п. добавляется седьмая координата — время жизни частицы τ . Помимо фазовых координат r , Ω , E , τ необходимо также иметь еще две дополнительные характеристики частицы: вес W_0 для частицы в невозмущенной системе и W — в возмущенной. Итого девять координат. Иногда полезно расширить этот минимум, включив избыточную информацию (например, три направляющих косинуса для характеристики Ω), с целью уменьшить число арифметических операций в геометрическом блоке. Иногда список координат можно уменьшить. Например, вес W_0 в невозмущенной среде всегда равен единице; из-за осевой симметрии достаточно иметь два параметра для определения r ; не учитывается время жизни τ и т. п. Если имеется достаточный объем оперативной памяти, можно посоветовать выделить десять ячеек

памяти под координаты частицы. Этого числа должно хватить для решения большинства задач.

Назначение геометрического блока — определить фазовую координату следующей точки столкновения. Если не используется метод максимальных сечений, то в геометрическом блоке моделируется траектория частицы и при этом вычисляются длины пробега l_i в каждой пересекаемой частицей зоне i . Согласно этим длинам пробега вычисляется текущее значение W (см. формулу (2.1)) на каждой границе раздела сред. Пусть $W^{(i)}$ — вес на границе i , тогда вес частицы на следующей пересекаемой границе $i+1$ вычисляется по формуле

$$W^{(i+1)} = W^{(i)} \exp(-\Delta\tau_i),$$

где $\Delta\tau_i$ — разность оптических длин $\Delta\tau_i = l_i (\Sigma_i - \Sigma_{oi})$.

Если произошло столкновение, то последнее значение l_i берется как расстояние от последней пересеченной границы до точки столкновения. Иногда частица может не вылетать за пределы зоны между последовательными столкновениями. Тогда l_i — расстояние между предыдущей и последующей точками соударений.

Удобно вести вычисления в безразмерных длинах. Уменьшается количество арифметических операций деления, упрощается логика геометрического блока [38]. Например, при оценке по столкновениям в счетчик следует заносить значение, равное единице для невозмущенной среды и текущее значение W_n для возмущенной. Делить на полное сечение можно в программе обработки. Аналогично, при оценках по длинам пробега суммируются безразмерные длины. Все сказанное, естественно, относится к тому случаю, когда накапливаются функционалы потока отдельно для всех геометрических зон и групп.

Блок розыгрыша реакций. После того как определена координата очередной точки соударения, геометрический блок передает управление в блок розыгрыша типа реакций. Очередность розыгрыша реакций программируется с учетом их вероятностей (вначале проверяются наиболее вероятные и т. д.). Если ведется поизотопный розыгрыш, вначале просматриваются изотопы с наибольшим полным сечением. Когда тип реакции определен, находятся новые координаты Ω , E , а также новое значение веса W_n , согласно формуле (2.1):

$$W_n = W_r \Sigma_r(x_i, \alpha) / \Sigma_r(x_i, 0),$$

где W_r — вес на выходе геометрического блока; $\Sigma_r(x)$ — сечение происшедшей реакции типа r .

Если при данном типе реакций возмущение затрагивает энерго-угловую индикатрису, то вес модифицируется дальше:

$$W_{ii} = W_{ii} \frac{w_s(\alpha)}{w_s(0)},$$

где W_{ii} — вес после домножения на отношение энерго-угловых индикатрис.

При групповом способе описания сечений и при полном зонно-групповом вычислении потоков (плотностей столкновений) нет необходимости умножать вес в последней точке соударения частицы на $\Sigma(x_n, \alpha)/\Sigma(x_n, 0)$ (см. формулу (2.2)). Это можно проделать в конце счета в программе обработки.

2.9. Формулы обработки при групповом расчете

Пусть $\Phi[\gamma, i, n]$ — основной расчетный массив, определяемый в геометрическом блоке программы Монте-Карло.

Здесь γ — индекс энергетической группы; i — индекс геометрической зоны; $n=1$ — сумма безразмерных длин пробега всех разыгранных частиц в группе γ в зоне i ; $n=2$ — сумма весов (2.1). Суммирование проведено в точках соударений для всех разыгранных частиц в группе γ в зоне i ; $n=3$ — число соударений всех разыгранных частиц в группе γ в зоне i .

Величины $\Phi[\gamma, i, 1]$ и $\Phi[\gamma, i, 2]$ представляют собой интегралы плотностей столкновений в невозмущенной среде в группе γ в зоне i , оцененные соответственно по длинам пробега ($n=1$) и по столкновениям ($n=2$). $\Phi[\gamma, i, 3]$ — соответствующая плотность столкновений в возмущенной среде.

Среднее число соударений на историю в невозмущенной среде \bar{n}_0 и в возмущенной \bar{n}_1 определяется по формулам:

$$\bar{n}_0 = \frac{1}{N} \sum_{\text{По всем группам } \gamma} \sum_{\text{По всем зонам } i} \Phi[\gamma, i, 1];$$

$$\bar{n}_1 = \frac{1}{N} \sum_{\text{По всем группам } \gamma} \sum_{\text{По всем зонам } i} \Phi[\gamma, i, 2],$$

где N — число рассмотренных историй.

Коэффициент размножения, определенный по длинам пробега $K_{пр}$ и по столкновениям $K_{ст}$, вычисляется по формулам (для невозмущенной среды):

$$K_{пр} = \frac{1}{N} \sum_{\text{По всем группам } \gamma} \sum_{\text{По всем зонам } i} \frac{v_{\Sigma f, \gamma, i}}{\Sigma_{tr, \gamma, i}} \Phi[\gamma, i, 1];$$

$$K_{ст} = \frac{1}{H} \sum_{\text{По всем группам } \gamma} \sum_{\text{По всем зонам } i} \frac{\nu \Sigma_{f, \gamma, i}}{\Sigma_{tr, \gamma, i}} \Phi[\gamma, i, 2].$$

Здесь $\nu \Sigma_{f, \gamma, i}$ — произведение числа вторичных нейтронов деления ν на сечение деления Σ_f в группе γ в зоне i (для невозмущенной среды); $\Sigma_{tr, \gamma, i}$ — транспортное сечение в группе γ в зоне i (для невозмущенной среды). Эти же величины, помеченные штрихом, относятся к возмущенной среде.

Приращение коэффициента размножения $\Delta K = K' - K$ определяется по формуле

$$\Delta K = \frac{1}{H} \sum_{\text{По всем группам } \gamma} \sum_{\text{По всем зонам } i} \left\{ \frac{(\nu \Sigma_{f, \gamma, i})'}{\Sigma_{tr, \gamma, i}} \Phi[\gamma, i, 2] - \frac{\nu \Sigma_{f, \gamma, i}}{\Sigma_{tr, \gamma, i}} \Phi[\gamma, i, 3] \right\}.$$

Линейный функционал активаций $A = \int \Sigma_n \Phi dx$ для индикатора, помещенного в зону i , деленный на объем зоны $V[i]$, определяется по формуле (для невозмущенной среды)

$$A = \frac{1}{HV[i]} \sum_{\text{По всем группам } \gamma} \frac{\Sigma_{n, \gamma, i}}{\Sigma_{tr, \gamma, i}} \Phi[\gamma, i, 2],$$

где $\Sigma_{n, \gamma, i}$ — сечение индикатора в группе γ в зоне i .

В предположении, что сечения индикатора не возмущаются, можно получить следующую формулу для приращения активаций ΔA :

$$\Delta A = \frac{1}{HV[i]} \sum_{\text{По всем группам } \gamma} \frac{\Sigma_{n, \gamma, i}}{\Sigma_{tr, \gamma, i}} (\Phi[\gamma, i, 2] - \Phi[\gamma, i, 3]).$$

Одновременно с расчетом функционалов можно подсчитывать их статистические точности. Для этого используется известная оценка «средний квадрат минус квадрат среднего». Одновременно с основными величинами суммируются их квадраты. Соображения о возможности экономии машинной памяти при оценке погрешностей изложены в работе [40].

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПРОИЗВОДНЫХ ПО ВОЗМУЩЕНИЮ МЕТОДОМ КОРРЕЛИРОВАННЫХ ТРАЕКТОРИЙ

3.1. Предельный переход

Непосредственный переход к вычислению производных оправдан по нескольким причинам. Во-первых, появляется возможность вычислять сколь угодно малые возмущения, не опасаясь пропажи знаков за разрядной сеткой машины. Во-вторых, отпадает необходимость вычислять экспоненты при определении весов, ускоряется алгоритм. В-третьих, и это обстоятельство может оказаться решающим, непосредственный расчет производной, в отличие от прямых вычислений конечных возмущений, имеет конечную дисперсию (за исключением некоторых особых случаев). Метод интегрирования по параметру, описываемый в гл. 4, основанный на последовательном вычислении производных для промежуточных сред, позволяет также определять конечные возмущения.

Непосредственное вычисление производных находит применение при определении доплеровского коэффициента реактивности, плотностных эффектов реактивности, эффектов от изменения геометрии. Программы вычисления производных могут быть получены простой модификацией обычных программ Монте-Карло, предназначенных для прямых расчетов.

Формулу для оценки производной линейного функционала $I = (\Psi, \varphi)$ можно получить, совершив предельный переход $\lim_{\Delta\alpha \rightarrow 0} \Delta I / \Delta\alpha$ в формуле (2.2). Дифференциальным аналогом эффективного веса W является «дифференциальный вес» D , получаемый дифференцированием формулы (2.1) по α :

$$D_n = \frac{S'(x_0)}{S(x_0)} + \sum_{i=1}^{n-1} \left[-\Delta\tau'_i + \frac{\Sigma'_s(x_i)}{\Sigma_s(x_i)} + \frac{w'_s(r_i; E_i, \Omega_i \rightarrow E_{i+1}, \Omega_{i+1})}{w_s(r_i; E_i, \Omega_i \rightarrow E_{i+1}, \Omega_{i+1})} \right] - \Delta\tau'_n. \quad (3.1)$$

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

Дифференциальный вес определяется вдоль траектории частицы, разыгрываемой согласно правилам аналогового моделирования. Формула (3.1) для определения дифференциального веса справедлива для случаев, когда: 1) геометрия системы не возмущается, 2) $\Sigma_s(x_i) \neq 0$; $w_s(x_i) \neq 0$. Рас-

пространение метода на случай, когда не выполняется второе условие, требует ведения неаналогового моделирования траекторий по измененным вероятностям реакций и описывается далее. На практике второй случай встречается часто, например при изучении влияния малых примесей, и при этом ведется поизотопный розыгрыш реакций или в среду вводится водород.

Производная линейного функционала $I = (\Psi, \varphi)$ при условиях 1) и 2), полученная оценкой по столкновениям, рассчитывается по формуле

$$I' = \frac{1}{H} \sum_{i=1}^H \sum_{n=1}^{N_i} \left\{ \left(D_n + \frac{\Sigma'(x_n)}{\Sigma(x_n)} \right) \varphi(x_n) + \varphi'(x_n) \right\}, \quad (3.2)$$

которая получена как предельный случай из формулы (2.2). Здесь H — число рассмотренных историй; N_i — число столкновений в i -й истории. Вследствие несмещенности (2.2) оценка (3.2) также является несмещенной.

По-видимому, можно пользоваться не только оценкой производной по столкновениям (3.2), но и по длинам пробега. Однако эта оценка еще плохо изучена.

3.2. Подгрупповой расчет. Доплер-эффект

В гетерогенных средах величина доплер-коэффициента может быть связана с геометрией системы [16] и корректно рассчитана лишь методами Монте-Карло. Доплеровский коэффициент реактивности ядерного реактора определяется степенью влияния температуры на полные и парциальные сечения взаимодействия нейтронов с ядром. При расчете доплеровского коэффициента задаются $\frac{\partial \Sigma_x(E, T)}{\partial T}$ — производ-

ные сечения типа x (захват, деление и т. д.), взятые при энергии налетающего нейтрона E и температуре среды T . Детальный ход сечений от энергии можно восстановить по резонансным параметрам (см. Приложение 2). Ниже будет рассмотрен более экономичный, чем восстановление детального хода сечения [54], подгрупповой метод учета зависимости резонансных параметров от температуры. Расчеты натуральных реакторов показывают высокую эффективность метода.

Подробное изложение существа подгруппового метода описания резонансной структуры сечений дано в Приложении 1. Здесь мы рассмотрим формулы для расчета производных линейных функционалов в случае, когда сечения заданы в подгрупповой форме. По ходу изложения будут сформулированы основные положения подгруппового метода. Однако здесь нас будет больше интересовать вычислительный аспект задачи.

Определим $K(x' \rightarrow x)$ — ядро перехода частицы из состояния x' в состояние x в подгрупповом методе описания сечений.

1. Функция пропускания (плотность вероятности $T(l)$ того, что частица испытывает столкновение при прохождении отрезка длиной l) в гомогенной среде равна

$$T(l) = \sum_{p=1}^{\Pi} a_p \Sigma_p \exp(-\Sigma_p l), \quad (3.3)$$

где $p = 1, 2, \dots, \Pi$ (Π — число подгрупп); a_p — доля подгрупп ($a_p \geq 0$; $\sum_{p=1}^{\Pi} a_p = 1$); Σ_p — подгрупповые полные сечения.

Формулу (3.3) можно получить при следующей физической интерпретации: нейтрон может двигаться в среде, имея лишь одно из Π возможных полных сечений Σ_p ; a_p — вероятность, с которой нейтрон «попадает» на полное сечение Σ_p . Вероятность попадания в ту или иную подгруппу не зависит от энергии нейтрона в группе.

2. Пусть в точке $l = 0$ появился нейтрон с энергией E' и направлением полета Ω' (точка фазового пространства x'). Тогда он имеет следующую вероятность пройти без столкновения расстояние l в гомогенной среде и затем рассеяться в направлении Ω , имея энергию E (попасть в точку фазового пространства x):

$$K(x' \rightarrow x) = \sum_{p=1}^{\Pi} a_p \Sigma_p \exp(-\Sigma_p l) \frac{\Sigma_{sp}}{\Sigma_p} W_s(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E). \quad (3.4)$$

Здесь Σ_{sp} — сечение рассеяния в p подгруппе; $W_s(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E)$ — энерго-угловая индикатриса. Условие нормировки

$$\int W_s(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E) d\Omega dE = 1.$$

В формуле (3.4) отражены следующие два допущения: 1) вероятность рассеяния зависит от того, в какой подгруппе находится нейтрон, и 2) индикатриса, определяющая потерю энергии при рассеянии, не зависит от того, в какой подгруппе рассеялся нейтрон.

Рассмотрим далее управляющее ядро переходов в подгрупповом методе для гомогенной среды, содержащей I различных изотопов. Определим вектор подгрупп m как мультииндекс, содержащий I чисел. Каждое из них может быть любым целым положительным числом — $1, 2, \dots, \Pi_i$. Π_i — максимальное число подгрупп i -го изотопа. Например, если имеется три изотопа, то запись $m = (2, 1, 3)$ означает, что ней-

трон находится во второй подгруппе первого изотопа, в первой подгруппе второго изотопа и в третьей подгруппе третьего изотопа. Проекция вектора m на его i -ю компоненту обозначается i_p . Например, проекция вектора $m = (2, 1, 3)$ на его вторую компоненту равна единице. В методе Монте-Карло вектор подгрупп генерируется после каждого рассеяния (или рождения) нейтрона. Для этого последовательно определяют, на каких подгруппах каждого изотопа находится нейтрон. Вероятность попасть на p подгруппу i -го изотопа равна доле $a_p^{(i)}$ изотопа.

Определим производящую функцию $\chi_i(x' \rightarrow x)$ ядра перехода на i -м изотопе следующим образом:

$$\chi_i(x' \rightarrow x, t) = \sum_{p=1}^{\Pi_i} a_p^{(i)} \exp(\Sigma_{sp}^{(i)} W_{si}(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E) t - \Sigma_p^{(i)} l). \quad (3.5)$$

Здесь $W_{si}(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E)$ — энерго-угловая индикатриса рассеяния на i -м изотопе. Ядро перехода (3.4) получается из производящей функции следующим образом:

$$K(x' \rightarrow x) = \left. \frac{\partial \chi_i(x' \rightarrow x, t)}{\partial t} \right|_{t=0}.$$

3. Производящая функция смеси изотопов есть произведение производящих функций отдельных изотопов:

$$K(x' \rightarrow x) = \frac{\partial}{\partial t} \prod_{i=1}^I \chi_i(x' \rightarrow x, t) \Big|_{t=0}.$$

4. В случае гетерогенных сред справедливо утверждение пункта 3, но производящую функцию (3.5) ядра перехода на изотопе модифицируют следующим образом:

$$\chi_i(x' \rightarrow x, t) = \sum_{p=1}^{\Pi_i} a_p^{(i)} \exp \left[\rho_i(l) \sigma_{sp}^{(i)} W_{si}(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E) t - \int_0^l \rho_i(\xi) \sigma_p^{(i)} d\xi \right].$$

Здесь $\rho_i(\xi)$ — концентрация i -го изотопа вдоль луча Ω' ; $\sigma_p^{(i)}$ — полное сечение взаимодействия для нейтрона в p подгруппе i -го изотопа; $\sigma_{sp}^{(i)}$ — сечение рассеяния на p подгруппе i -го изотопа.

Запишем теперь аналог формулы (3.1) для вычисления дифференциального веса применительно к подгрупповому методу учета резонансов. Как было указано выше, нейтрон движется в среде, имея полное сечение взаимодействия со-

гласно разыгранному вектору подгрупп, и далее испытывает рассеяние на изотопе i . Ядро такого элементарного перехода:

$$K(x_{j-1} \rightarrow x_j) = a_m \exp \left(- \int \Sigma_m dl \right) \Sigma_{sp}^{(i)} W_{si}(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E), \quad (3.6)$$

где

$$a_m = \prod_{i=1}^I a_p^{(i)}; \quad \Sigma_m = \sum_{i=1}^I \Sigma_p^{(i)}.$$

Совершив предельный переход в выражении (3.6) при параметре возмущения $\alpha \rightarrow 0$, получаем следующий аналог формулы для дифференциального веса (3.1) в подгрупповом методе описания сечений:

$$D_n = D_{n-1} + \sum_{i=1}^I (a_p^{(i)})' / a_p^{(i)} - \int \Sigma_m' dl + (\Sigma_{sp}^{(i)})' / \Sigma_{sp}^{(i)}. \quad (3.7)$$

В связи с тем, что $\sum_{p=1}^{\Pi_i} a_p^{(i)} = 1$, при осреднении суммы

$\sum_{i=1}^I (a_p^{(i)})' / a_p^{(i)}$ по многим траекториям сохранятся те слагаемые, которые принадлежат изотопам, не встречающимся нейтрону на его пути от точки x_{j-1} до точки x_j . Поэтому эти слагаемые можно опустить. Сокращенную сумму будем записывать так: $\sum_{i(x_{j-1} \rightarrow x_j)} (a_p^{(i)})' / a_p^{(i)}$. Получаем окончательную

формулу для расчета дифференциального веса вдоль траектории нейтрона:

$$\begin{aligned} D_n = & \frac{S'(x_0)}{S(x_0)} + \sum_{j=1}^{n-1} \left(\sum_{i(x_{j-1} \rightarrow x_j)} \frac{(a_p^{(i)})'}{a_p^{(i)}} - \int_{x_{j-1}}^{x_j} \Sigma_m' dl + \right. \\ & + \frac{w_{si}'(r_j; E_j, \Omega_j \rightarrow E_{j+1}, \Omega_{j+1})}{w_{si}(r_j; E_j, \Omega_j \rightarrow E_{j+1}, \Omega_{j+1})} + \\ & \left. + \sum_{i(x_{n-1} \rightarrow x_n)} \frac{(a_p^{(i)})'}{a_p^{(i)}} - \int_{x_{n-1}}^{x_n} \Sigma_m' dl. \right) \end{aligned}$$

Формула оценки производной I' согласно (3.2) имеет вид

$$I' = \frac{1}{H} \sum_{i=1}^H \sum_{n=1}^{N_i} \left[\left(D_n + \frac{\Sigma_m'(x_n)}{\Sigma_m(x_n)} \right) \varphi(x_n) + \varphi'(x_n) \right].$$

3.3. Возмущение плотности

Плотность материала (горючего, конструкционного) в каждой геометрической зоне реактора или ячейки может изменяться в разной степени, в то же время все процессы изменения плотности должны быть функцией одного параметра α . Любая функция от параметра пригодна для описания изменения плотности, если она обладает свойством при $\alpha = 0$ давать плотности, при которых рассчитывается сборка (ячейка), а при $\alpha \approx 0$ в ее разложении в ряд Тейлора остаются только постоянный и линейный члены. Оказывается, удобно выбрать экспоненциальную функцию

$$\rho_i(\alpha) = \rho_{i0} \exp(\alpha b_i), \quad (3.8)$$

где i — номер зоны. Удобство этой функции в том, что в выражение для дифференциального веса (3.1) входят комбинации Σ'_s/Σ_s . После подстановки в (3.1) выражений Σ'_s/Σ_s при $\alpha=0$ получаем

$$\frac{\Sigma'_s}{\Sigma_s} = \frac{(\tau_{sp}(\alpha))'}{\sigma_{sp}(\alpha)} \Big|_{\alpha=0} = b. \quad (3.9)$$

Слагаемые, описывающие возмущение оптической толщины в формуле (3.1) $\tau' = (\Sigma l)' = \Sigma' l$, могут быть преобразованы к виду

$$\tau' = \frac{\Sigma'}{\Sigma} \Sigma l. \quad (3.10)$$

Следовательно, выражение (3.10) также приводится к виду

$$\tau' = b\tau, \quad (3.11)$$

где b — определенная в формуле (3.8) константа возмущения; τ — безразмерная длина пробега.

Таким образом, получается простой алгоритм вычисления дифференциального веса: в точке соударений к предыдущему значению прибавляется выражение (3.9), а при пролетах через зоны вычитается (3.11).

Функция (3.8) при малых α разлагается в ряд

$$\rho_i(\alpha) = \rho_{i0} (1 + \alpha b_i).$$

Производную функционала по параметру α можно рассматривать как составленную из частных производных

$$\frac{dI}{d\alpha} = \sum_i \frac{\partial I}{\partial \rho_i} \frac{d\rho_i}{d\alpha} = \sum_i \frac{\partial I}{\partial \rho_i} \rho_i b_i.$$

В частности, если изменение плотности вещества происходит в одной зоне, то приращение ΔI функционала I можно вычислить по формуле

$$\Delta I \approx \frac{dI}{d\alpha} \Delta\alpha \approx \frac{dI}{d\alpha} \frac{\Delta\rho}{\rho b}.$$

В этом случае наиболее естественно задать $b = 1$. Рассчитываемая программой величина $dI/d\alpha$ окажется тогда интегральным параметром по данному возмущению.

Рассмотрим важную модификацию формулы (3.1) при организации блуждания по методу максимальных сечений, используемому в задачах со сложной геометрией. Сущность метода заключается в том, что полные сечения во всей системе (в данной группе) принимаются равными $\Sigma_{\text{макс}}$ — максимальному из сечений при данной энергии E . Формально это сводится к добавлению к левой и правой частям кинетического уравнения переноса, записанного в интегро-дифференциальной форме, члена $\Sigma_{\phi} \Phi$, где $\Sigma_{\phi} = \Sigma_{\text{макс}} - \Sigma$:

$$\Omega \nabla \Phi + \Sigma_{\text{макс}} \Phi = S + \int W_s(x' \rightarrow x) \Phi(x') dx' + \Sigma_{\phi} \Phi.$$

Член $\Sigma_{\phi} \Phi$ в правой части можно внести под знак интеграла: $\int \Phi(x') \Sigma_{\phi}(x') \delta(x-x') dx'$. Теперь очевидна его интерпретация как рассеяния с сечением Σ_{ϕ} — так называемым «фиктивным сечением» — в результате взаимодействия, при котором не меняется ни энергия, ни направление полета частицы. Далее, если предположить, что максимальное сечение выбрано одинаковым для исходной и возмущенной среды, то $\partial \Sigma_{\phi} / \partial \alpha = -\partial \Sigma / \partial \alpha$. Формула для вычисления дифференциального веса (3.1) принимает простой вид

$$D_n = \frac{S'(x_0)}{S(x_0)} + \sum_{j=1}^{n-1} P_j, \quad (3.12)$$

где $P_j = \Sigma'_{si} / \Sigma_{si} + w'_{si} / w_{si}$, если произошло рассеяние, или $P_j = -\Sigma'(x_j) / \Sigma_{\phi}(x_j)$, если произошло фиктивное рассеяние.

Формула (3.1), как отмечалось, имеет ограниченную область применения. Если Σ_{si} (или соответствующее полное сечение) мало, т. е. исследуется влияние малых примесей, то отношение $\Sigma'_{si} / \Sigma_{si}$ (или $\Sigma'_{\phi} / \Sigma_{\phi}$) велико, а вероятность испытать рассеяние по типу Σ_{si} мала настолько, что ни один нейтрон, даже в большой выборке, не даст вклада в функционалы от возмущения примеси. Другими словами, дисперсия рассчитываемой величины возмущения при $\Sigma_{si} \rightarrow 0$ делается сколь угодно большой. При этом наблюдается ситуация, когда ценность траектории по отношению к прямым величинам и их производным сильно отличается. В таком случае применяются вспомогательные траектории для расчета ценности [25] или принимается компромиссное решение. Исходные вероятности переходов модифицируются таким образом, чтобы уменьшить дисперсию рассчитываемых производных и вместе с тем достаточно точно оценивать точки деления, которые необходимо знать для итерации источников. Это можно сде-

лать следующим образом. Пусть $\Sigma_{st}(\alpha) = \sigma_{st} \alpha$ и $\alpha \rightarrow 0$, т. е. изотоп вводится в среду. В момент, когда разыгрывается тип соударения, все вероятности процессов заменяются на новые. Например, вероятности P_1, P_2, \dots, P_n на P'_1, P'_2, \dots, P'_n ($\sum_{j=1}^n P_j = 1; \sum_{j=1}^n P'_j = 1$). Так как изменяются вероятности переходов, то частица на траектории приобретает вес

$$W_0^{(n)} = W_0^{(n-1)} \frac{K(x_{n-1} \rightarrow x_n)}{K_0(x_{n-1} \rightarrow x_n)}. \quad (3.13)$$

Здесь $W_0^{(n)}$ — вес в n -м столкновении; $K_0(x_{n-1} \rightarrow x_n)$ — ядро перехода немодифицированное; $K(x_{n-1} \rightarrow x_n)$ — измененное ядро перехода. Согласно выражению (3.13) частица приобретает вес P_j/P'_j , если взаимодействие идет по каналу j . Если j оказалось равным i , то член P_j в формуле (3.12) в результате описанной модификации окажется конечным и равным

$$\frac{\sigma_{st}}{\sigma_{st}\alpha} \frac{\sigma_{st}\alpha/\Sigma}{P'_i} = \frac{\sigma_{si}}{P'_i \Sigma}.$$

При этом данная траектория в дальнейшем по-прежнему дает вклады в функционалы производной потока, но имеет нулевой вес по отношению к функционалам потока, так как по условию $\alpha \rightarrow 0$, откуда $\sigma_{st} \alpha / P'_i \Sigma \rightarrow 0$.

Аналогичный прием применяется при расчетах по методу максимальных сечений для устранения расходимости в членах Σ'/Σ_ϕ в тех зонах, где $\Sigma_\phi \rightarrow 0$.

3.4. Возмущение геометрии

Задачи, в которых требуется определить эффект от изменения геометрии, типичны для физики ядерных реакторов и защиты от излучений. Это — расчеты органов регулирования, неоднородностей в защите, температурных эффектов расширения материалов. Как правило, эффекты требуется найти в сложной геометрии, что делает применение метода Монте-Карло особенно привлекательным.

Вначале рассмотрим задачу о движении плоскости раздела двух сред (рис. 3.1), а затем распространим результат на случай произвольных поверхностей и их произвольных возмущений (деформаций).

Пусть π — плоскость, разделяющая среды разного состава, Z — ось, перпендикулярная плоскости. За начало отсчета примем пересечение оси Z с плоскостью π . Пусть в результа-

те изменения параметра α на величину $\Delta\alpha$ граница переместилась вправо на величину ΔZ . Сечения, относящиеся к левому полупространству, будем отмечать индексом 1, а к правому — 2. Предположим, что после перемещения границы сечения в левом и правом полупространствах не изменились.

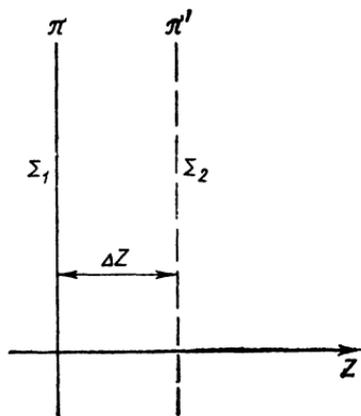


Рис. 3.1. К задаче о движении плоскости раздела двух сред. Изменение геометрии задается сдвигом плоскости раздела π на расстояние ΔZ . π' — новое положение плоскости

Вычислим производную по перемещению границ раздела сред от интеграла столкновений $I = \int_{-\infty}^{+\infty} \Sigma(z) \Phi(z) dz$.

$$\begin{aligned} \frac{\partial I}{\partial \alpha} = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta z} & \left[\int_{-\infty}^0 \Sigma_1 \tilde{\Phi}(z) dz + \int_0^{\Delta z} \Sigma_1 \Phi(z) dz + \right. \\ & + \int_{\Delta z}^{\infty} \Sigma_2 \tilde{\Phi}(z) dz - \int_{-\infty}^0 \Sigma_1 \Phi(z) dz - \int_0^{\Delta z} \Sigma_2 \Phi(z) dz - \\ & \left. - \int_{\Delta z}^{\infty} \Sigma_2 \Phi(z) dz \right] = \int_{-\infty}^{\infty} \Sigma(z) \Phi'(z) dz + \Phi(0) (\Sigma_1 - \Sigma_2). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Здесь $\tilde{\Phi}(z)$ — значение потоков, устанавливающихся в среде со смещенной границей. По определению

$$\Phi'(z) = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\tilde{\Phi}(z) - \Phi(z)}{\Delta z}.$$

Второе слагаемое в формуле (3.14) рассчитывается обычным образом, как поток на поверхности π . Дифференцирование по параметру элементарного ядра перехода $K(x' \rightarrow x)$

аналогично вычислению (3.14) и приводит к следующим формулам в зависимости от точки столкновения z :

$$\left. \begin{aligned}
 z < 0 \quad \frac{\partial}{\partial \alpha} K(x_{j-1} \rightarrow x_j, \alpha) &= 0; \\
 z = 0 \quad \frac{\partial}{\partial \alpha} K(x_{j-1} \rightarrow x_j, \alpha) &= \\
 &= [\Sigma_{s1}(\alpha) W_{s1}(E_{j-1}, \Omega_{j-1} \rightarrow E_j, \Omega_j) - \\
 &- \Sigma_{s2} W_{s2}(E_{j-1}, \Omega_{j-1} \rightarrow E_j, \Omega_j)] \exp\left(-\int_{l_{j-1}}^{l_j} \Sigma(l) dl\right) \delta(z); \\
 z > 0 \quad \frac{\partial}{\partial \alpha} K(x_{j-1} \rightarrow x_j, \alpha) &= \\
 &= \Sigma_{s2} W_{s2}(E_{j-1}, \Omega_{j-1} \rightarrow E_j, \Omega_j) \times \\
 &\times \frac{\Sigma_2 - \Sigma_1}{|\mu|} \exp\left[-\int_{l_{j-1}}^{l_j} \Sigma(l) dl\right].
 \end{aligned} \right\} (3.15)$$

Здесь μ — косинус угла, образованного направлением полета Ω с осью Z .

Наличие δ -функции в формуле (3.15) в точке $z = 0$ указывает на необходимость введения искусственного процесса блуждания частицы, который, в отличие от естественного, давал бы отличные от нуля вероятности столкновения на границах раздела сред. Например, это может быть обеспечено ядром перехода следующего вида:

$$\begin{aligned}
 K(x_{j-1} \rightarrow x_j, \alpha) &= P_0 \Sigma_s W_s(x_{j-1} \rightarrow x_j) \times \\
 &\times \exp\left(-\int_{l_{j-1}}^{l_j} \Sigma(l) dl\right) + P_1 W_{s1}(x_{j-1} \rightarrow x_j) \delta(z) + \\
 &+ P_2 W_{s2}(x_{j-1} \rightarrow x_j) \delta(z),
 \end{aligned} \quad (3.16)$$

где $P_0 + P_1 + P_2 = 1$.

В расчетном алгоритме очередная точка взаимодействия находится следующим образом.

1. Согласно P_0, P_1, P_2 определяется тип процесса.
2. Если процесс пошел по типу P_0 , то по обычным правилам определяется длина пробега и далее тип столкновения. Если произошло рассеяние, то нейтрон дает вклад в дифференциальный вес, равный $(\Sigma_2 - \Sigma_1)/|\mu|$, если он до этого пересек границу раздела, либо нуль в противоположном случае. Далее траектория продолжается с весом $W_0 = 1/P_0$.

3. Если процесс пошел по типу P_1 , то нейтрон испытывает принудительное рассеяние на границе раздела. Дифференциальный вес увеличивается на

$$\frac{\Sigma_{s1} \exp \left(- \int_{l_{j-1}}^{l_j} \Sigma(l) dl \right)}{P_1} . \quad (3.17)$$

Дальнейший вес траектории становится равным нулю.

4. Если процесс пошел по типу P_2 , то дифференциальная производная увеличивается на

$$\frac{\Sigma_{s2} \exp \left(\int_{l_{j-1}}^{l_j} \Sigma(l) dl \right)}{P_2} \quad (3.18)$$

и нейтронная траектория продолжается с нулевым весом.

Обобщение на произвольное число границ, испытывающих возмущение, заключается в том, что увеличивается число членов вида $P_k W_{sk} \delta(z - z_k)$ в формуле (3.16), общее число которых равно удвоенному числу границ.

С целью уменьшения дисперсии расчета ядро (3.16) выбирается так, чтобы вклады (3.17), (3.18) сделать в среднем одинаковыми.

Рассмотрим произвольную деформацию поверхности. Пусть r_π — некоторая точка на поверхности π . В результате изменения параметра на величину $\Delta\alpha$ поверхность деформируется так, что точка r_π переходит в точку r'_π . Вектор $g = \lim_{\Delta\alpha \rightarrow 0} (r'_\pi - r_\pi) / \Delta\alpha$ полностью характеризует деформацию поверхности при бесконечно малом изменении параметра α . Далее, пусть $n(r_\pi)$ — вектор нормали к поверхности π в точке r_π . Используя введенные обозначения, запишем общее выражение для формулы (3.14)

$$I'(z) = \int \Sigma(x) \Phi'(x) dx + \\ + \int d\pi \int d\Omega \int dE \Phi(x) (\Sigma_{(-)} - \Sigma_{(+)}) (g, n). \quad (3.19)$$

Здесь $\Phi'(x)$ — производная потока по параметру α ; $\Sigma_{(-)}$ и $\Sigma_{(+)}$ — сечения на границе раздела π . Если пересекать поверхность π , двигаясь в направлении $(\Omega, n) > 0$, то знаком $(-)$ отмечено сечение до пересечения границы, а знаком $(+)$ — соответствующее сечение после пересечения границы раздела сред. Интегрирование во втором слагаемом формулы (3.19) ведется по поверхности раздела π и по всем углам Ω ; (g, n) — скалярное произведение.

Для вычисления производной потока необходимо весовые вклады (3.17) и (3.18) умножить на величину $\frac{(g, n)}{|(\Omega, n)|}$.

Соответственно модифицируется и вклад в производную при пролете нейтрона через границу раздела (процесс типа P_0). Он становится равным

$$\frac{(\Sigma_{(-)} - \Sigma_{(+)})(g, n)}{|(\Omega, n)|} \quad (3.20)$$

Вычисление второго интеграла в формуле (3.19) сводится к суммированию величин (3.20) при каждом пересечении нейтроном границы раздела, умноженных на вес, приобретенный частицей к этому моменту ее истории.

В заключение следует отметить, что алгоритм расчета возмущений геометрии можно построить, исходя из уравнений теории малых возмущений [32]. При этом осуществляется явный расчет функции ценности.

3.5. Дисперсия метода

Этот раздел построен аналогично разделу 2.6. Вначале рассматривается общее выражение для дисперсии оценки производной методом коррелированных траекторий, полученное предельным переходом из выражения (2.64). Затем выводятся формулы для дисперсии оценки производных рассмотренной в разделе 2.6 модельной задачи. Для нескольких натуральных задач приводятся эффективности расчета производных коэффициента размножения нейтронов реакторов и ячеек от изменения плотности и доплер-эффектов.

Производная от функционала $I = (\Psi, \varphi)$ есть по определению $I' = \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{(\Psi, \varphi) - (\Psi_0, \varphi_0)}{\alpha}$, где α — параметр возмущения.

Причем, при $\alpha = 0$ возмущенная и невозмущенная системы совпадают. Дисперсия оценки производной $\sigma_{I'}^2$ находится как вторая производная от $\sigma_{\Delta I}^2$, определенной для конечных возмущений формулой (2.64)

$$\sigma_{I'}^2 = \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \sigma_{\Delta I}^2}{\partial \alpha^2} \right|_{\alpha=0}.$$

Первая производная $\left. \frac{\partial \sigma_{\Delta I}^2}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0}$ должна быть равна нулю.

Покажем это:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \sigma_{\Delta I}^2 \Big|_{\alpha=0} &= 2[(\Psi^{+\prime} \chi, \varphi) + (\Psi^+ \chi', \varphi) + \\ &+ (\Psi^+ \chi, \varphi')] - 2[(\Psi' \Psi^+, \varphi_0) + (\Psi \Psi^{+\prime}, \varphi_0)] - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -2[(\Psi_0^+ \Psi', \varphi) + (\Psi_0^+ \Psi, \varphi')] - (\chi', \varphi^2) - \\
& -2(\chi, \varphi \varphi') + 2[(\varphi' \varphi_0, \Psi) + (\varphi \varphi_0, \Psi')] - \\
& -2[(\Psi, \varphi) - (\Psi_0, \varphi_0)][(\Psi', \varphi) + (\Psi, \varphi')] |_{\alpha=0}. \quad (3.21)
\end{aligned}$$

Как следует из выражения (2.65),

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \chi(x) = \Psi(x). \quad (3.22)$$

Очевидно также, что

$$\begin{aligned}
\lim_{\alpha \rightarrow 0} \Psi(x) &= \Psi_0(x); \quad \lim_{\alpha \rightarrow 0} \Psi^+(x) = \Psi_0^+(x); \\
\lim_{\alpha \rightarrow 0} \varphi(x) &= \varphi_0(x). \quad (3.23)
\end{aligned}$$

Производная характеристической функции находится из уравнения (2.65)

$$\frac{\partial \chi}{\partial \alpha} = \int \frac{2K K' \chi}{K_0} dx + \int \frac{K^2 \chi'}{K_0} dx + \frac{2\Psi_1 \Psi_1'}{\Psi_{10}}. \quad (3.24)$$

При $\alpha \rightarrow 0$ уравнение (3.24) переходит в следующее уравнение, записанное в операторной форме:

$$\chi' = 2K' \chi + K \chi' + 2\Psi_1'. \quad (3.25)$$

С учетом (3.23) уравнение (3.25) можно также записать в следующем виде:

$$\chi' = 2K' \Psi + K \chi' + 2\Psi_1'. \quad (3.26)$$

С другой стороны, дифференцирование по параметру основного уравнения $\Psi = K\Psi + \Psi_1$ дает выражение

$$\Psi' = K' \Psi + K \Psi' + \Psi_1'. \quad (3.27)$$

Сравнивая уравнение (3.26) и (3.27), находим, что

$$\chi' = 2\Psi'. \quad (3.28)$$

Перепишем (3.21) (при $\alpha=0$), учитывая соотношение (3.23), в следующей форме:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \alpha} \sigma_{\Delta \alpha}^2 |_{\alpha=0} &= 2(\Psi_0^{+'}(\chi - \Psi_0), \varphi_0) + \\
& + 2(\Psi_0^+(\chi' - 2\Psi'), \varphi_0) + (\varphi_0^2, 2\Psi' - \chi') + \\
& + 2(\Psi_0^+(\chi - \Psi_0), \varphi') + 2(\varphi' \varphi_0, \Psi_0 - \chi). \quad (3.29)
\end{aligned}$$

После подстановки выражений (3.22) и (3.28) в (3.29) получаем $\partial \sigma_{\Delta \alpha}^2 / \partial \alpha = 0$.

Вторая производная по α от дисперсии $\sigma_{\Delta I}^2$ при $\alpha = 0$ есть дисперсия оценки производной в методе коррелированных траекторий. Формулу $\sigma_{j'}^2 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \sigma_{\Delta I}^2}{\partial \alpha^2}$ можно получить, если продифференцировать по α выражение (3.21). Формула для дисперсии $\sigma_{j'}^2$ из-за громоздкости не представляет интереса. Например, в случае невозмущающейся весовой функции φ

$$\sigma_{j'}^2 = 2 (\Psi^{+'}\Psi', \varphi_0) + (\Psi^{+}Z, \varphi_0) - \\ - \frac{1}{2} (Z, \varphi_0) - (\Psi', \varphi_0)^2,$$

где $\Psi' = K_0\Psi' + K'\Psi + \Psi_1'$; $\Psi^{+'} = K_0+\Psi^{+'} + K^{+'}\Psi^{+} + \varphi'$;

$$Z = K_0Z + 2 \int \frac{(K')^2}{K_0} \Psi dx + \frac{2(\Phi_1')^2}{\Phi_{10}}.$$

Более важно установить, при каких возмущениях можно получить конечную дисперсию оценки производной. Вопрос сводится к следующему: при каких возмущениях существует вторая производная характеристического уравнения (2.65)? Двойное дифференцирование по α (при $\alpha=0$) уравнения (2.65) дает следующее уравнение для определения χ'' :

$$\chi'' = K_0\chi'' + R, \quad (3.30)$$

где

$$R(x) = \int \left[\frac{2(K')^2}{K_0} + 2K'' \right] \Psi dx' + 4K'\Psi' + \\ + \frac{2(\Psi_1')^2}{\Psi_{10}} + 2\Psi_1'.$$

Уравнение (3.30) можно формально рассматривать как уравнение переноса в среде с источником частиц $R(x)$. Предположим, что функция источника $R(x)$ существует при всех допустимых x . В частности, требуется, чтобы функция источника Ψ_{10} не была равна нулю везде, где не равна нулю производная Ψ_1' , и чтобы ядро $K_0(x' \rightarrow x)$ было ненулевым везде, где отлична от нуля производная ядра $K'(x' \rightarrow x)$.

Ядром уравнения (3.30) является $K(x' \rightarrow x)$ — то же самое, что и в основном уравнении $\Psi = K\Psi + \Psi_1$. Таким образом, уравнение (3.30) при условии существования источника $R(x)$ всегда имеет решение, если имеет решение основное уравнение.

Получим теперь формулы для дисперсии оценки производной модельной задачи, рассмотренной в разд. 2.6. Для этого продифференцируем (2.87) по α . Заметим, что

$$\left. \begin{aligned} e' + p' &= 0 \quad (\text{из } e + p = 1); \\ e'' + p'' &= 0; \\ f' \Big|_{\alpha=0} &= \left(\frac{e^2}{e_0} \right)' \Big|_{\alpha=0} = 2e'; \\ f'' \Big|_{\alpha=0} &= 2 \left(\frac{(e')^2}{e_0} + e'' \right); \\ r' \Big|_{\alpha=0} &= \left(\frac{t^2}{2t-1} \right)' \Big|_{\alpha=0} = 0; \\ r'' \Big|_{\alpha=0} &= 2(t')^2; \\ f \Big|_{\alpha=0} &= e_0; \\ r \Big|_{\alpha=0} &= 1. \end{aligned} \right\} \quad (3.31)$$

Подстановка (3.31) в первую производную по α от выражения (2.87) дает, как и ожидалось, $\frac{\partial \sigma_{\Delta I}^2}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=0} = 0$.

Дисперсия оценки производной находится двукратным дифференцированием (2.87) по α при $\alpha=0$

$$\sigma_{f'}^2 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \sigma_{\Delta I}^2}{\partial \alpha^2} \Big|_{\alpha=0} = V \left(1 + \frac{2eV}{p} \right) \left[(t')^2 + \frac{(e')^2}{ep} \right]. \quad (3.32)$$

В частных случаях

$$\text{при } V = 1 \text{ и } e' = 0 \quad \sigma_{f'}^2 = \frac{(t')^2 (1+e)}{p}; \quad (3.33)$$

$$\text{при } V = 1 \text{ и } t' = 0 \quad \sigma_{f'}^2 = \frac{(e')^2 (1+e)}{ep^2}. \quad (3.34)$$

Если зависимость сечений от параметров выбрать так, как это было сделано для конечных возмущений: $t=1+\alpha$; $e=1+\alpha$, то формулы (3.33) и (3.34) примут вид

$$\sigma_{f'}^2 = (1+e)/p; \quad (3.35)$$

$$\sigma_{f'}^2 = (1+e)/ep^2. \quad (3.36)$$

Формулу (3.35) можно получить также непосредственно из выражения (2.77), положив $\alpha=0$. Формулы (3.35) и (2.91) отличаются множителем e — вероятностью рассеяния — величиной, обычно близкой к единице. Следовательно, дисперсия (3.35) близка к минимальной (2.91); дисперсия непосредственного вычисления производных почти не улучшается.

Показателем эффективности расчета какого-либо функционала методом Монте-Карло принято считать $\delta = \varepsilon^2 t$ [25],

где ε — относительная точность, достигнутая при вычислении данного функционала; t — затраченное для этого машинное время. Относительная точность ε вычисляется как $\varepsilon = \sigma/I$, где σ — корень из дисперсии оценки функционала; I — значение оценки функционала. Так как величина ε убывает пропорционально $1/\sqrt{N}$, где N — число рассмотренных историй, а время счета в свою очередь пропорционально числу рассмотренных историй, то эффективность оказывается не зависящей от времени счета t .

Приводимые ниже эффективности расчета производных получены при решении типичных неупрощенных задач [41]. Все расчеты проводились на ЭВМ М-222 с быстродействием около 20 000 арифметических операций в секунду. Геометрия расчетов цилиндрическая с произвольным разбиением на зоны по высоте и радиусу цилиндров.

Для реактора на тепловых нейтронах, состоящего из 13 зон, при расчете производной $K_{эф}$ по изменению плотности зон с горючим получено $\delta = 7,02$; при расчете производной $K_{эф}$ по изменению плотности отражателя $\delta = 11,02$. Для реактора на тепловых нейтронах с водородсодержащим замедлителем с пятью зонами при расчете эффекта Доплера $\delta = 1,044$. Для тепловой ячейки с водородсодержащим замедлителем, состоящей из трех зон, $\delta = 1,7$. Для реактора на быстрых нейтронах с девятью зонами при расчете производной $K_{эф}$ по плотности органов регулирования $\delta = 4$.

3.6. Формулы обработки результатов при групповом расчете

Как видно из формулы (3.1) для дифференциального веса, при расчетах производных линейных функционалов требуются отношения производных физических констант к самим константам или, другими словами, производные от натуральных логарифмов констант: $\Sigma'_x/\Sigma_x = \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \Sigma_x$.

При групповом описании сечений эти константы определяются для каждой энергетической группы. Приведем основные расчетные формулы при групповом представлении сечений, используемые в программе обработки [12, с. 130—131].

Пусть $\Phi[\gamma, i, n]$ — основной расчетный массив, определяемый в геометрическом блоке программы Монте-Карло (см., например, [12], с. 151, перфокарты 173—178 по распечатке алгольного текста).

γ — индекс энергетической группы; i — индекс геометрической зоны; $n=1$ — сумма безразмерных длин пробега всех разыгранных частиц в группе γ в зоне i ; $n=2$ — сумма дифференциальных весов. Суммирование происходит в точках соударений для всех разыгранных частиц в группе γ в зоне i ;

$n=3$ — число соударений всех разыгранных частиц в группе Γ в зоне i . Производная коэффициента размножения определяется по формуле

$$\frac{\partial K}{\partial \alpha} = \frac{1}{H} \sum_{\text{По всем группам } \Gamma} \sum_{\text{По всем зонам } i} \frac{\nu \Sigma_{f, \Gamma, i}}{\Sigma_{tr, \Gamma, i}} \left(\Phi[\Gamma, i, 3] \frac{\nu \Sigma'_{f, \Gamma, i}}{\nu \Sigma_{f, \Gamma, i}} + \Phi[\Gamma, i, 2] \right);$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial K}{\partial \alpha} &= \frac{1}{H} \sum_{\text{По всем группам } \Gamma} \sum_{\text{По всем зонам } i} \left\{ \left(\Phi[\Gamma, i, 2] + \frac{\Sigma'_{tr, \Gamma, i}}{\Sigma_{tr, \Gamma, i}} \Phi[\Gamma, i, 3] \right) \times \right. \\ &\quad \times \left. \frac{\nu \Sigma_{f, \Gamma, i}}{\Sigma_{tr, \Gamma, i}} + \left(\frac{\nu \Sigma_{f, \Gamma, i}}{\Sigma_{tr, \Gamma, i}} \right)' \Phi[\Gamma, i, 3] \right\} = \\ &= \frac{1}{H} \sum_{\text{По всем группам } \Gamma} \sum_{\text{По всем зонам } i} \frac{\nu \Sigma_{f, \Gamma, i}}{\Sigma_{tr, \Gamma, i}} \left(\Phi[\Gamma, i, 3] \frac{\nu \Sigma'_{f, \Gamma, i}}{\nu \Sigma_{f, \Gamma, i}} + \Phi[\Gamma, i, 2] \right). \end{aligned}$$

Здесь H — число рассмотренных историй; $\nu \Sigma_{f, \Gamma, i}$ — произведение числа вторичных нейтронов деления ν на сечение деления Σ_f в группе Γ в зоне i ; $\Sigma_{tr, \Gamma, i}$ — транспортное сечение в группе Γ в зоне i ;

$$\nu \Sigma'_{f, \Gamma, i} = \frac{\partial}{\partial \alpha} (\nu \Sigma_{f, \Gamma, i}).$$

Производная линейного функционала $I = \int \Phi \Sigma_n dx$, например активации индикатора в зоне i , деленная на объем зоны $V[i]$, определяется по формуле

$$\frac{\partial I}{\partial \alpha} = \frac{1}{H \cdot V[i]} \sum_{\text{По всем группам } \Gamma} \frac{\Sigma_{n, \Gamma, i}}{\Sigma_{tr, \Gamma, i}} \Phi[\Gamma, i, 2],$$

где $\Sigma_{n, \Gamma, i}$ — сечение индикатора в группе Γ в зоне i . Предполагается, что Σ_n не возмущается.

4. МЕТОД ИНТЕГРИРОВАНИЯ ПО ПАРАМЕТРУ

4.1. Случаи нарушения взаимной непрерывности мер

Определять возмущения конечной величины, иногда даже и не малой, необходимо при расчетах компенсационной способности органов регулирования, эффектов кампании, эффектов гомогенизации, при переходе от упрощенной геометрии, в которой проводился расчет, к реальной и во многих других случаях. Это большой и важный класс задач в реакторной физике и физике защиты.

Разберем недостатки прямого метода вычисления возмущений при расчетах по коррелированным траекториям. Во-первых, как уже отмечалось в разд. 2.1, прямой расчет не всегда возможен. В некоторых типах возмущений дисперсия оценки возмущения может быть бесконечной. Установить до или в процессе расчета этот факт затруднительно.

Другая трудность может возникнуть, если траектории в возмущенной и исходной среде имеют существенно различную вероятность реализации. Если из двух сред лишь в среде 1 возможна любая траектория из среды 2, то блуждание частицы следует организовывать в среде 1. Это необходимое условие несмещенности приводит к тому, что некоторые траектории возможны только для среды, в которой организовано блуждание. Если множество неэффективных для оценки траекторий велико, то сильно увеличивается дисперсия оценки возмущения. Приведем пример. Допустим, определяется возмущение при переходе от гомогенной среды, содержащей два изотопа (скажем, ^{235}U и ^{12}C), к гетерогенной, составленной из последовательно чередующихся слоев этих изотопов. Реакции разыгрываются поизотопно. Траектории разыгрываются в гомогенной среде, как более широкой. Если организовать блуждание частиц в гетерогенной среде, то будет невозможна, например, такая последовательность столкновений: на углероде в той зоне, где содержится в гетерогенной среде ^{235}U , и далее на ^{235}U в той зоне, где в гетерогенной среде содержится ^{12}C . В то же время в гомогенной среде такая последовательность реакций возможна. Допустим, как это часто бывает в подобных задачах, что объемные доли ^{235}U и ^{12}C сохраняются для гомогенной и гетерогенной сред. Тогда очевидно, что существует большая вероятность столкновения в гомогенной среде на том изотопе, которого в дан-

ной точке пространства нет в гетерогенной среде. Если при этом происходит детальное слежение за энергией, то в таком случае траектория частицы будет дальше идти с нулевым весом (отношение энерго-угловых индикатрис равно нулю) по отношению к функционалам гетерогенной среды. Если теперь устремить размеры отдельных зон ^{235}U и ^{12}C к нулю, сохраняя их относительный объем, то наблюдается парадоксальная ситуация: физически одна и другая среды совпадают (уменьшая размеры слоев, мы произвели гомогенизацию), но относительная ошибка прямого расчета возмущения методом коррелированных траекторий стремится к бесконечности.

Для эффективного решения задач описанного типа методом Монте-Карло может быть применен метод интегрирования по параметру [37].

4.2. Формулировка метода

Введем в рассмотрение некоторый параметр α , характеризующий рассчитываемую сборку, который изменяется от нуля до единицы. Условимся, что при $\alpha=0$ — первая среда, а при $\alpha=1$ — вторая. При промежуточных значениях $0 < \alpha < 1$ пусть существуют некоторые среды, промежуточные между первой и второй. Потребуем, чтобы были непрерывными по α производные по α любых величин, характеризующих промежуточные среды (концентрация изотопов, геометрические размеры, температура и т. п.). Тогда, если I — оцениваемый функционал, то

$$\Delta I = I_2 - I_1 = \int_0^1 \frac{\partial I}{\partial \alpha} d\alpha = \int_0^1 I'(\alpha) d\alpha. \quad (4.1)$$

Интеграл (4.1) можно вычислить двойной рандомизацией. Вначале равномерно разыгрывается случайное число α на отрезке $0 \div 1$, затем, при данном α , методом Монте-Карло рассчитывается значение производной $I'(\alpha)$. Для этого реализуется случайная траектория Θ . Если $\mu(\Theta|\alpha)$ — вероятностная мера траектории при данном α , то интеграл (4.1) можно записать как двойной интеграл

$$\Delta I = \int_0^1 d\alpha \int_{\Theta} I'(\alpha, \Theta) d\mu(\Theta|\alpha).$$

Пусть проведено N случайных выборок параметра α , и при каждом α M историй разыграно для определения $I'(\alpha)$.

Величина

$$\Delta I = \frac{1}{NM} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M I'(\alpha_i, \theta_j) \quad (4.2)$$

является статистической оценкой интеграла (4.1).

Оценим ошибку определения (4.2). Предположим, что случайное число α и траектория Θ выбираются согласно плотности вероятностной меры $d\mu(\alpha, \Theta)$. Если проведено $H = MN$ реализаций α и Θ , то

$$\sigma_{\Delta I}^2 = \frac{M(I')^2 - M^2(I')}{H},$$

где $\sigma_{\Delta I}^2 = \int [I'(\alpha, \Theta)]^2 d\mu(\alpha, \Theta)$;

$$M(I') = \int I'(\alpha, \Theta) d\mu(\alpha, \Theta).$$

Интегрирование ведется по всем траекториям и всем значениям α . Введем в рассмотрение функцию $\Psi(\alpha, \Theta) = I'(\alpha, \Theta) - I'(\alpha)$ с нулевым средним значением и дисперсией (при данном α)

$$\sigma_{\Psi(\alpha, \Theta)}^2 = \int [\Psi(\alpha, \Theta)]^2 d\mu(\Theta|\alpha).$$

Для простоты расчетов допустим, что случайная (по Θ) величина $\Psi(\Theta, \alpha)$ не зависит от α . Тогда выражение (4.2)

можно записать в виде $\Delta I = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (I'_i - \Psi_i)$, где I'_i и Ψ_i —

независимые случайные величины и, следовательно,

$$\sigma_{\Delta I}^2 = \frac{\sigma_{I'}^2 + \sigma_{\Psi}^2/M}{N}. \quad (4.3)$$

Нетрудно видеть, что минимум достигается при минимально возможном значении M (т. е. при $M = 1$). Таким образом, наименьшей дисперсией обладает схема, при которой разыгрывается лишь одна траектория для определения $I'(\alpha)$ при данном α . Второй вывод из анализа формулы (4.3) следующий: выбирать переход от сборки начальной к сборке конечной следует так, чтобы

$$\int [I'(\alpha) - M(I')]^2 d\alpha = \min.$$

4.3. Итерация источников в методе интегрирования по параметру

Для того чтобы применить метод интегрирования по параметру к расчету реактора, находящегося в условно-критическом состоянии, следует решить две задачи: как получать

источники $S(x, \alpha)$ и как вычислять производные по параметру α от источников $S'(x, \alpha)$?

За основу примем метод итерации источников, описанный в работе [42]. Кратко суть метода состоит в следующем. В массиве S , имеющем T_0 элементов, записаны фазовые координаты точек деления T_0 нейтронов. При разыгрывании очередного поколения выпускаются все T_0 нейтронов. Координаты тех T_1 нейтронов, из числа впущенных в систему, которые вызвали деление, записываются в массив S на место T_0 нейтронов предыдущего поколения. Выбор элементов из числа T_1 для заполнения источника S производится случайным образом.

В описанной схеме итерации источников все нейтроны разбиваются на поколения. Отношение числа нейтронов последующего и предыдущего поколений (величина пропорциональная $\nu T_1/T_0$) является эффективным коэффициентом размножения [42].

Вероятность деления при соударениях нейтрона с ядрами горячего нормируется таким образом, чтобы в каждом акте деления рождался один нейтрон. Если

$$a = \max(\nu \Sigma_f / \Sigma_a)$$

(максимум берется по всему фазовому пространству), то нормированная на один нейтрон вероятность деления есть $\nu \Sigma_f / a \Sigma_a$. Таким образом, в описываемой схеме итерации источников коэффициент размножения равен $a T_1 / T_0$.

Описанная схема отличается простотой реализации, но в оценках $K_{эф}$ и в других функционалах возникают систематические отклонения от истинных значений порядка $1/T_0$ [10]. По-видимому, подобным недостатком обладает любая схема пополнения.

Отметим, что рассмотренная схема пополнения источника соответствует решению однородного уравнения на критичность. Эту схему нельзя применять для других уравнений на собственные значения, например при вычислении времени жизни [31]. В этом случае надо либо вести вычисления ценности [44], либо пополнять источник нейтронами, имеющими одинаковое время жизни. В последнем случае фактически моделируется нестационарный процесс переноса нейтронов.

Изменяя α от нуля до единицы постепенно, можно добиться того, чтобы источники нейтронов деления соответствовали при каждом α рассматриваемому состоянию системы. Разобьем интервал изменения α на N сегментов так, чтобы величина сегмента была равна $1/N$. В точке $\alpha=0$ проведем некоторое число итераций источника (обычно около десяти), чтобы правильно описать распределение нейтронов деления в исходной системе. Затем начнем двигаться по отрезку $0 \div 1$, выпуская нейтроны в точках $0, \Delta\alpha, 2\Delta\alpha, \dots, 1$, т. е. все-

го разыгрывается H историй. Если выпущенный нейтрон вызывает деление, то новая координата вписывается случайным образом на место одной из T_0 старых координат массива S .

Данная схема представляет в некотором смысле «запаздывающий» источник. Однако величина этого запаздывания может быть сделана произвольно малой дальнейшим дроблением интервала изменения α , т. е. увеличением числа рассматриваемых историй H . Оценим величину запаздывания. Пусть b — вероятность вызвать деление. Будем для простоты предполагать b не зависящим от α . Как нетрудно подсчитать, вероятность того, что при значении параметра α из массива S выбирается нейтрон, рожденный при значении $\alpha - n\Delta\alpha$, равна $P(\alpha - n\Delta\alpha) = c(1 - c)^n$, где $c = b/T_0$. Среднее значение \bar{n} равно

$$\bar{n} = \sum_{n=0}^{\infty} np(\alpha - n\Delta\alpha) = T_0/b - 1. \quad (4.4)$$

В реальных расчетах обычно $T_0 \approx 400$, $b \approx 1/3$, откуда $\bar{n} = 1200$. Если всего в расчете разыграно 100 000 историй, то функция источника запаздывает на 0,012 единиц в масштабе изменения α .

Из формулы (4.4) видно, что смещение функционала из-за запаздывания источника имеет порядок q/H , где q — ошибка определения производной функционала на траектории вследствие запаздывания источника.

Такое понятие, как разность ΔI каких-либо линейных по потоку функционалов в двух сборках, имеет смысл при условии, что какой-либо функционал потока не изменяется при переходе от одной рассматриваемой сборки к другой. Удобно принять в качестве такого функционала интегральный источник. Тогда $\int \frac{\partial S}{\partial \alpha} dx = 0$. Интегрирование ведется по всему фазовому пространству.

Рассмотрим процедуру нормировки, связанную с требованием сохранения интегрального источника. Пусть после пополнения источника S в нем содержится T_0 частиц, относящихся к возмущенной среде (мы временно перешли к расчету конечных возмущений методом коррелированных траекторий). Эти частицы имеют начальные веса W_i ($i = 1, 2, \dots, T_0$). Для того чтобы источник нового поколения содержал интегрально T_0 частиц, следует изменить вес всех частиц в массиве источника в $T_0 / \sum_{i=1}^{T_0} W_i$ раз. Новый вес i -й частицы будет определяться тогда по формуле

$$W_i^H = W_i T_0 / \sum_{j=1}^{T_0} W_j. \quad (4.5)$$

При вычислении производных должна быть проведена та же процедура по отношению к дифференциальным начальным весам. Дифференцирование уравнения (4.5) по параметру возмущения дает

$$D_i^H = D_i \frac{T_0}{\sum_{j=1}^{T_0} W_j} - W_i T_0 \frac{\sum_{j=1}^{T_0} D_j}{\left(\sum_{j=1}^{T_0} W_j\right)^2}, \quad (4.6)$$

где $D_i = W_i'$ — дифференциальный вес, набранный частицей к концу предыдущего поколения.

При возмущении, стремящемся к нулю, $W_i \rightarrow 1$, так что уравнение (4.6) можно упростить

$$D_i^H = D_i - \frac{\sum_{j=1}^{T_0} D_j}{T_0}. \quad (4.7)$$

Нетрудно видеть, что суммарный дифференциальный вес источника в результате описанной процедуры становится равным нулю

$$\sum_{i=1}^{T_0} D_i^H = \sum_{i=1}^{T_0} D_i - \sum_{j=1}^{T_0} D_j = 0.$$

Распространенным приближением является $D_i^H = 0$ для всех частиц нового поколения. Как отмечалось выше, это приближение эквивалентно рассмотрению ценности по отношению к одному поколению.

В работе [44] 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 вычислениях доплеровских коэффициентов, смещение в оценке коэффициентов не превосходит 1% от значения 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 (4.5) 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 [2].

4.4. Линейные переходы

Наиболее просто изменять параметры среды, сделав их линейными функциями α . Например, если изменяются концентрации какого-либо вещества, то

$$\rho(\alpha) = \rho_1 + \rho_2\alpha, \quad (4.8)$$

где ρ_1 — начальная концентрация (сборка $\alpha=0$); $\rho_2 = \rho_k - \rho_n$ — разность конечной и начальной концентраций. Если расчеты ведутся по макросечениям, для них записываются те же формулы.

Поиск максимума при различных α величин $a = v\Sigma_f/\Sigma_a$ предельно упрощается, так как $a = (a_1 + b_1\alpha)/(a_2 + b_2\alpha)$ — дробнолинейная функция α . Максимум достигается при крайних значениях α : если $b_1a_2 - b_2a_1 > 0$, то при $\alpha=1$, в противном случае — при $\alpha=0$.

Линейные переходы оставляют независимыми от α суммарно по сборке доли нуклидов каждого сорта. Это обстоятельство благоприятно в том смысле, что при всех α сборка близка по коэффициенту размножения к исходной, и, таким образом, обеспечивается плавное изменение производной, переход оказывается оптимальным.

4.5. Некоторые особенности организации программы для ЭВМ

Программы, вычисляющие конечные возмущения методом интегрирования по параметру, можно построить таким образом, чтобы вызывать константы с дисков или барабанов в оперативную память погруппно. Как известно, этот прием, практически не сказываясь на быстродействии программы, позволяет существенно экономить оперативную память машины и, следовательно, расширять допускаемое число расчетных геометрических зон и функционалов. Так же, как в обычных расчетах реакторов и ячеек по методу Монте-Карло, организуется пакет нейтронов, содержащий фазовые координаты T_0 частиц. При рассмотрении каждого следующего нейтрона из пакета происходит наращивание параметра состояния среды α на величину $1/H$, где H — общее число историй, запланированное в данном расчете. Таким образом, общее число историй H оказывается равным iT_0 , где i — число прогонок.

Если рассмотрены все H историй, но еще не достигнута требуемая статистическая точность в оценках функционалов, то расчет можно продолжить, двигаясь в обратном направлении: от состояния $\alpha=1$ к $\alpha=0$.

При линейном описании зависимости сечений от α вычисления текущих значений сечений требуют нескольких арифме-

тических операций, что составляет малый процент общего числа операций в геометрическом блоке и блоке реакций, и практически не оказывается на общем времени счета. Комплексы вида Σ'_s / Σ_s при определении концентрации по формуле (4.8) вычисляются также по простой формуле $\frac{\Sigma'_s}{\Sigma_s} = \frac{\rho_2}{\rho_1 + \rho_2 \alpha}$.

На первый взгляд может показаться, что простая формула вычисления констант (4.8) слишком груба. Например, не учитываются факторы блокировки резонансной структуры, которые зависят от концентраций. На самом деле следует вычислять точно лишь сечения начального ($\alpha=0$) и конечного ($\alpha=1$) состояний. Промежуточные сечения могут быть любыми, в том числе линейными функциями от начального и конечного состояний.

К сожалению, в программах, реализующих метод интегрирования по параметру, набор потоков по зонам и группам не составляет полную информацию, так как сечения зависят от α и меняются в каждой зоне и группе в процессе счета. Следовательно, все необходимые функционалы должны определяться в процессе счета, а не в программе обработки в конце счета.

Программы метода интегрирования по параметру строятся на базе программ вычисления производных после их ординарной переработки. Если константы начального и конечного состояний отличаются незначительно, то программа метода интегрирования по параметру фактически проведет вычисление производной $I' = \Delta I / \Delta \alpha$.

Таким образом, имеет смысл всегда программировать именно вычисления методом интегрирования по параметру, рассматривая задачи по вычислению производных как частный случай, лежащий в области действия программы.

ПОДГРУППОВОЕ ОПИСАНИЕ РЕЗОНАНСНОЙ
ОБЛАСТИ СЕЧЕНИЙ

При расчете доплеровских коэффициентов реактивности методом Монте-Карло необходимо воспользоваться тем или иным описанием зависимости резонансного хода сечений от температуры. В разд. 3.2 было принято подгрупповое описание сечений. Вследствие того, что это описание начало использоваться сравнительно недавно, еще не все физики и математики с ним знакомы, метод не описан подробно ни в одной монографии, мы нашли необходимым изложить здесь основные результаты подгруппового описания сечений в резонансной области применительно к расчету методом Монте-Карло.

Подгрупповое описание резонансной структуры сечений успешно применяется в области неразрешенных резонансов, а также в той области, где средние потери энергии при соударениях нейтронов с ядрами больше характерной ширины резонансов. В области же так называемых выделенных резонансов используется точное описание резонансной структуры при помощи формул Брейта—Вигнера. Расчет производных от сечений по температуре в области выделенных резонансов проводился в работе [54]. Там же указан эффективный и точный алгоритм вычисления основных формул, впервые предложенный в работе [56]. Для того чтобы завершить описание температурной зависимости сечений, мы излагаем здесь основные результаты этих работ.

Существует, по крайней мере, три способа учета резонансов неразрешенной области, которые можно применять в расчетах по методу Монте-Карло. Первый из них — прямое моделирование статистических распределений параметров резонансов. На основании соответствующих статистик [14] последовательно разыгрываются расстояния до ближайших к энергии E резонансов, ширины резонансов для различных каналов реакций и на основании этих данных определяются сечения реакций.

Во втором способе применяется предваряющая расчет «расстановка» резонансов [27]. При этом параметры резонансов и их положение выбираются таким образом, чтобы удовлетворить критериям согласия с теоретическими статистиками. Например, добиваются того, чтобы нейтронные ширины выбранной конфигурации резонансов описывались хи-квадрат распределением с одной степенью свободы, расстояния между уровнями подчинялись распределению Вигнера, отсутствовали корреляции между ширинами соседних уровней и т. д. Полученная квазислучайная реализация соответствующих статистик табулируется, и далее расчет ведется как при разрешенных резонансах.

В последнее время разработан и нашел широкое применение третий способ описания резонансной структуры сечений, получивший название «подгруппового метода» [21, 28, 29]. Этот метод применяется также в области разрешенных резонансов в том случае, когда достаточно много резонансов умещается в интервале средней потери энергии нейтронов при рассеяниях. Применение подгруппового метода оказалось весьма успешным, по крайней мере, по двум причинам: он удачно развивает групповые принципы описания сечений и позволяет корректно и в то же время компактно учесть резонансную гетерогенность (пространственно-энергетическую корреляцию сечений одинаковых изотопов, разделенных средами иного изотопного состава). Применение подгруппового метода весьма перс-

пективно для задач защиты от нейтронного излучения. Существует оцененная библиотека подгрупповых 26-групповых констант АРАМАКО [47].

Кратко опишем основные положения подгруппового метода и его реализацию в расчетах Монте-Карло.

Выделим некоторый интервал энергий ΔE , содержащий достаточно много резонансов. На рис. П.1 показана одна из возможных последовательностей потерь энергий при столкновениях нейтрона в этом интервале энергий.

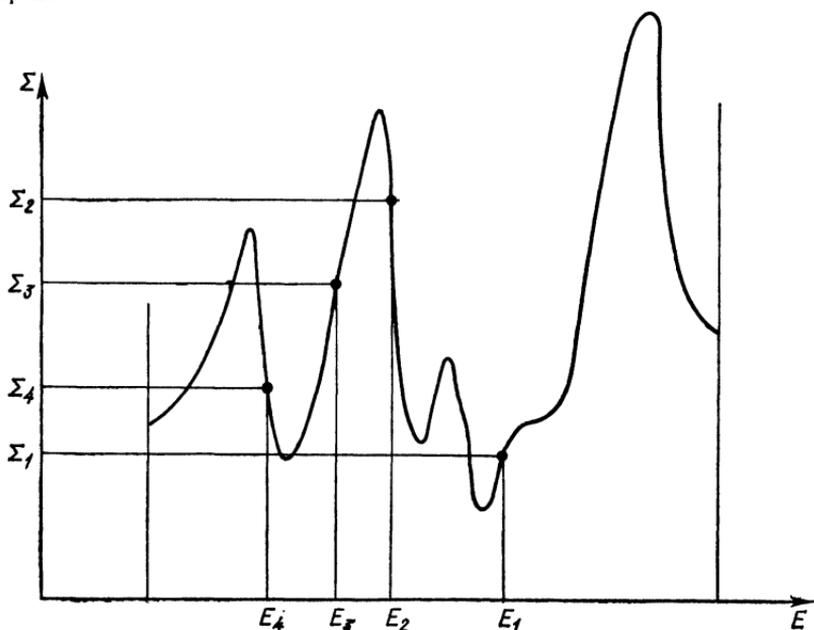


Рис. П.1. Возможная последовательность потери энергии нейтронов в упругих соударениях на изотопе в области выраженного резонансного хода сечений

Замедляющийся нейтрон при каждом значении энергии E_i имеет свое полное сечение взаимодействия с веществом Σ_i . Вследствие резонансной структуры это сечение флуктуирует от соударения к соударению. Основная идея подгруппового метода заключается в том, чтобы спектр возможных значений Σ при соударениях нейтронов с ядрами в интервале энергий ΔE задать некоторым достаточно простым распределением вероятностей $P(\Sigma)$. При этом следует учесть, что резонансный ход сечений полных и парциальных сечений сильно коррелирует (рис. П.2).

Для учета этой корреляции следует использовать совместную плотность вероятности $P(\Sigma_x, \Sigma)$ взаимодействия нейтрона при столкновениях с полным сечением Σ и парциальным Σ_x .

Выведем уравнение переноса в Σ -подгрупповом представлении [29]. Рассмотрим кинетическое уравнение в интегральной форме

$$\Phi(r, \Omega, u) = \int_0^{\infty} dR \int d\Omega' \int du' W(r-R\Omega, r, u') \Sigma_s(r-R\Omega, u' \rightarrow u, \Omega\Omega') \times \\ \times \Phi(r-R\Omega, \Omega', u') + S_1(r, \Omega, u), \quad (\text{П.1})$$

где $W(r-R\Omega, r, u)$ —вероятность для нейтрона с латаргией u пролететь без столкновения от точки рождения $(r-R\Omega)$ до рассматриваемой точки r ;

$\Sigma_s(r, R\Omega, u' \rightarrow u, \Omega\Omega')$ — суммарное дифференциальное сечение рассеяния всех реакций, сопровождающихся вылетом вторичных нейтронов с лётаргией и под углом $\arccos(\Omega\Omega')$ к направлению Ω' движения первичного нейтрона, имевшего лётаргию u' .

Усредним уравнение (П.1) около лётаргии u по интервалу Δu , содержащему достаточно большое число резонансов, чтобы усредненный поток представлял собой плавную функцию лётаргии, и в то же время достаточно узкому, чтобы усредненный поток $\Phi(r, \Omega, u)$ слабо изменялся на интервале порядка Δu и мог поэтому характеризоваться средней в интервале Δu лётаргией u .

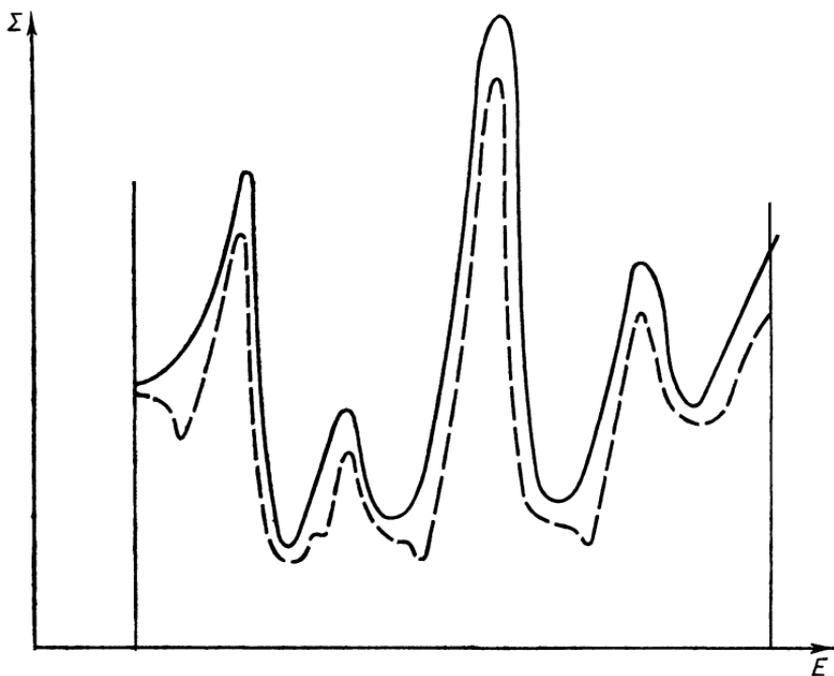


Рис. П.2. Энергетический ход полного сечения (сплошная линия) и сечения упругого рассеяния (пунктирная линия)

Определим $P(r, u, \Sigma)$ — плотность вероятности найти среди нейтронов, равномерно распределенных по интервалу Δu , такие нейтроны, которые в точке r взаимодействуют с полным сечением Σ , а также плотность потока $\Phi(r, u, \Omega, \Sigma)$ этих нейтронов и соответствующее им дифференциальное сечение рассеяния

$$P(r, u, \Sigma) = \frac{1}{\Delta u} \lim_{\Delta \Sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta \Sigma} \int_{\Sigma - \frac{\Delta \Sigma}{2}}^{\Sigma + \frac{\Delta \Sigma}{2}} d\Sigma' \int_{u - \frac{\Delta u}{2}}^{u + \frac{\Delta u}{2}} du' \delta(\Sigma_t(u') - \Sigma'); \quad (\text{П.2})$$

$$\Phi(r, u, \Omega, \Sigma) = \frac{1}{\Delta u} \lim_{\Delta \Sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta \Sigma} \int_{\Sigma - \frac{\Delta \Sigma}{2}}^{\Sigma + \frac{\Delta \Sigma}{2}} d\Sigma' \int_{u - \frac{\Delta u}{2}}^{u + \frac{\Delta u}{2}} du' \Phi(r, \Omega, u') \delta(\Sigma_t(u') - \Sigma'); \quad (\text{П.3})$$

$$\Sigma_s(r, u' \rightarrow u, \Omega \Omega', \Sigma) = \frac{1}{\Delta u P(r, u, \Sigma)} \lim_{\Delta \Sigma \rightarrow 0} \int_{\Sigma - \frac{\Delta \Sigma}{2}}^{\Sigma + \frac{\Delta \Sigma}{2}} d\Sigma' \int_{u' - \frac{\Delta u}{2}}^{u' + \frac{\Delta u}{2}} du'' \times \\ \times \Sigma_s(r, u'' \rightarrow u, \Omega \Omega') \delta(\Sigma_t(u'') - \Sigma'). \quad (\text{П.4})$$

При сделанных предположениях относительно Δu величины $P(\Sigma)$, $\Phi(\Sigma)$ и $\Sigma_s(\Sigma)$ слабо зависят от выбора величины этого интервала, поэтому в дальнейшем эта зависимость не учитывается.

Из изложенного ясно, что

$$\Phi(r, \Omega, u) = \int d\Sigma \Phi(r, u, \Omega, \Sigma). \quad (\text{П.5})$$

Предположим, что резонансы узки по сравнению с приращением летаргии при рассеянии, так что число нейтронов, попадающих в результате рассеяния в интервал du около летаргии u , не коррелирует со значениями, которые имеют сечения среды при этой летаргии. Другими словами, примем, что даже для упругого рассеяния на наиболее тяжелом ядре, для которого максимальное приращение q летаргии при рассеянии минимально, интеграл рассеяния является плавной функцией летаргии, и запишем

$$\int_{u - q_{\text{мин}}}^u du' \Sigma_e(u' \rightarrow u) \Phi(u') du' \approx \int_{u - q_{\text{мин}}}^u \frac{du'}{\Delta u'} \int_{u' - \Delta u'/2}^{u + \Delta u'/2} du'' \times \\ \times \Sigma_e(u'' \rightarrow u) \Phi(u'') du'' = \int_{u - q_{\text{мин}}}^u du' \int d\Sigma \Sigma_e(u' \rightarrow u, \Sigma) \Phi(u', \Sigma). \quad (\text{П.6})$$

В области неразрешенных резонансов сделанные предложения практически всегда хорошо выполняются. Уравнение (П.1), усредненное по интервалу Δu , становится уравнением для $\Phi(r, u, \Omega, \Sigma)$:

$$\Phi(r, u, \Omega, \Sigma) = \int_0^{\infty} dR \int d\Sigma'' W(r - R\Omega, r, u, \Sigma'', \Sigma) P(r - R\Omega, u, \Sigma'') \times \\ \times \int du' \int d\Sigma' \int d\Omega' \Sigma_s(r - R\Omega, u' \rightarrow u, \Omega \Omega', \Sigma') \times \\ \times \Phi(r - R\Omega, u', \Omega', \Sigma'). \quad (\text{П.7})$$

Таким же образом определяется сопряженное уравнение, например для ценности по отношению к асимптотической мощности:

$$\Phi^+(r, u, \Omega, \Sigma) = \int_0^{\infty} dR \int d\Sigma'' W(r, r + R\Omega, u, \Sigma, \Sigma'') \times \\ \times \int du' \int d\Omega' \Sigma_s(r + R\Omega, u \rightarrow u', \Omega' \Omega, \Sigma') \times \\ \times \int d\Sigma' P(r + R\Omega, u', \Sigma') \Phi^+(r + R\Omega, u', \Omega', \Sigma') + \varphi(r, \Omega, u). \quad (\text{П.8})$$

В уравнениях (П.7) и (П.8) величина $W(r, r', u, \Sigma, \Sigma')$ означает условную вероятность того, что нейтрон, движущийся из точки r по направлению к точке r' , имеющий летаргию, близкую к рассматриваемой летаргии u , и полное сечение взаимодействия со средой в точке r , равное Σ , дойдет без столкновения до точки r' и в этой же точке будет иметь полное сечение взаимодействия со средой, равное Σ' .

Если точки r и r' лежат в пределах одной и той же гомогенной зоны или в зонах одинакового состава, то

$$W(r, r', u, \Sigma, \Sigma') = \delta(\Sigma - \Sigma') w(r, r', u, \Sigma),$$

где $w(r, r', u, \Sigma)$ — обычное оптическое ослабление, рассчитываемое при фиксированном значении полного сечения. Если же точки r и r' лежат в зонах с разными составами, то, например, для смежных зон

$$W(r, r', u, \Sigma, \Sigma') = Q(r, r', u, \Sigma, \Sigma') w(r, r_s, u, \Sigma) w(r_s, r', u, \Sigma),$$

где r_s — точка пересечения луча $r' - r$ с границей между зонами; $Q(r, r', u, \Sigma, \Sigma')$ — плотность условной вероятности того, что нейтрон, имеющий летаргию в окрестности данной летаргии Δu , имеет в одной среде полное сечение взаимодействия, равное Σ , и при этом во второй среде взаимодействует с полным сечением Σ' . В гетерогенной среде, состоящей из достаточно тонких гомогенных зон, нейтрон будет иметь заметную вероятность пересечь на своем пути несколько (скажем, N) границ между зонами. При этом $W(r, r', u, \Sigma, \Sigma')$ есть оптическое ослабление, умноженное на условную плотность вероятности $Q(r, r', u, \Sigma, \Sigma_1, \Sigma_2, \dots, \Sigma_{N-1}, \Sigma')$ иметь в каждой из пересекаемых зон указанные полные сечения (при этом в зонах, которым принадлежат точки r и r' , полные сечения равны соответственно Σ и Σ'). Эта условная вероятность и определяет обобщенное граничное условие для рассматриваемых уравнений в Σ -представлении (П.7) и (П.8).

δ -Подгрупповое представление, которое обычно называется просто подгрупповым, получается в результате дальнейшего упрощения подгрупповых уравнений (П.7) и (П.8).

Рассмотрим физические предпосылки этих упрощений. Пусть на пластину вещества падает мононаправленный поток нейтронов $\Phi_{in}(E)$, отличный от нуля в области энергии от E_H до E_B . Пусть поток предпола-

гается нормированным $\int_{E_H}^{E_B} \Phi_{in}(E) dE = 1$. Поток не испытавших столкновения частиц, прошедших через пластину толщиной x , назовем функцией пропускания $T(x)$

$$T(x) = \int_{E_H}^{E_B} \Phi_{in}(E) \exp(-\Sigma(E)x) dE,$$

где $\Sigma(E)$ — полное сечение, как функция энергии. Функция $T(x)$ называется «модулированной изотопом i » (ураном, железом или т. п.), если поток падающего излучения $\Phi_{in}(E)$ получен, в свою очередь, как поток нерассеянного излучения, прошедшего через слой вещества, состоящего из изотопа типа i . Подгрупповое описание основывается на следующих экспериментальных фактах.

1. Функция $T(x)$ может быть описана рядом экспонент

$$T(x) = \sum_{p=1}^{\Pi} a_p \exp(-\Sigma_p x), \quad (\text{П.9})$$

где

$$a_p \geq 0; \quad \sum_{p=1}^{\Pi} a_p = 1; \quad \Sigma_p > 0.$$

2. Функция $T(x)$ не зависит в пределах допустимой точности от вида зависимости $\Phi_{fl}(E)$, если только не является модулированной тем же изотопом, для которого определяется функция пропускания $T(x)$.

Представлению функции пропускания в виде суммы экспонент можно дать наглядную физическую интерпретацию. Когда среда имеет резонансную структуру, каждый нейтрон, приходящий в интервале энергий ΔE , испытывает столкновение, имея вполне определенное значение полного сечения. Если упростить картину реального хода сечений и представить себе форму резонанса в виде ступенчатой пирамиды, а поток предположить постоянным в пределах ΔE , то Σ_p — есть полное сечение для p ступеньки (подгруппы), a_p — есть вероятность попасть на сечение данной ступеньки (подгруппы). Величины a_p получили название долей p подгруппы.

Допущение 2 оправдывается тем, что резонансов в неразрешенной области энергий много и нет корреляции в положении этих резонансов для различных изотопов.

3. После столкновения нейтрон «забывает» о том, в какой подгруппе p он находился до столкновения. Другими словами, величины a_p и Σ_p зависят лишь от энергии налетающего нейтрона.

4. Для каждой подгруппы p заданы величины парциальных сечений Σ_{xp} , т. е. Σ_{ap} , Σ_{fp} , Σ_{inp} и т. п. Нейтрон подгруппы p имеет полное сечение Σ_p и вероятность реакции по каналу x , равную Σ_{xp}/Σ_p .

Подгрупповой подход позволяет корректно учитывать гетерогенные резонансные эффекты. Допустим, нейтрон пересекает три среды, из которых первая и третья состоят из одного и того же изотопа. Нейтрон в этих средах будет взаимодействовать, имея одно и то же полное сечение. Если нейтрон находился в первой среде, скажем, в первой подгруппе, то долетев до третьей среды без промежуточных столкновений, он будет находиться в той же подгруппе. В общем случае эту ситуацию можно охарактеризовать следующим образом. После очередного соударения нейтрона в среде согласно вероятности $a_p^{(i)}$ разыгрывается, на какую подгруппу p каждого изотопа i попадает нейтрон. Этот набор подгрупп, который имеет нейтрон на рассматриваемом отрезке его истории, называется «вектором подгрупп». После очередного столкновения нейтронов процесс определения подгрупп повторяется, но уже при новой энергии нейтрона.

Поясним сказанное на простом примере. Допустим, среда состоит из нескольких геометрических и физических зон, которые содержат суммарно два различных изотопа. Пусть первый из них имеет две подгруппы и a_{11} , a_{12} — доли этих подгрупп, а второй — три подгруппы с соответствующими долями a_{21} , a_{22} , a_{23} . Прежде чем рассмотреть судьбу данного нейтрона, разыгрывается, согласно долям, на каких подгруппах первого и второго изотопа будет находиться нейтрон. Пусть получилось: для первого — подгруппа 1, для второго — 3. Теперь длины свободного пробега и вероятности реакций должны разыгрываться согласно определенным подгруппам независимо от того, в какой из зон произошло столкновение.

Переход к δ -подгрупповому представлению позволяет практически реализовать вычисление потоков $\Phi(r, u, \Omega, \Sigma)$. Запишем δ -подгрупповые уравнения, получив их в результате описанных выше упрощений из общих Σ -подгрупповых уравнений (П.7) и (П.8). Аппроксимируем непрерывные распределения взвешенными δ -функциями:

$$P(r, u, \Sigma) \approx \sum_{p=1}^{\Pi(r, u)} a_p(r, u) \delta(\Sigma - \Sigma_p(r, u)); \quad (\text{П.10})$$

$$\Phi(r, u, \Omega, \Sigma) \approx \sum_{p=1}^{\Pi(r, u)} \Phi_p(r, \Omega, u) \delta(\Sigma - \Sigma_p(r, u)); \quad (\text{П.11})$$

$$\Sigma_S(r, u' \rightarrow u, \Omega\Omega', \Sigma) \approx \sum_{p=1}^{\Pi(r, u)} \Sigma_{Sp}(r, u' \rightarrow u, \Omega\Omega') \delta(\Sigma - \Sigma_p(r, u)). \quad (\text{П.12})$$

Здесь функции $a_p(r, u)$, $\Sigma_p(r, u)$ и целочисленная функция $\Pi(r, u)$ не зависят от r в пределах гомогенных зон. Как отмечено в работах [27—29], вполне удовлетворительная точность расчета $\bar{\Phi}(r, \Omega, u) = \sum_{p=1}^{\Pi(r, u)} \Phi_p(r, \Omega, u)$ достигается при аппроксимации распределений двумя, тремя, максимум четырьмя δ -функциями. Сделанное приближение означает переход от Σ -представления к δ -представлению, в котором уравнения (П.7) и (П.8) принимают вид

$$\begin{aligned} \Phi_p(r, \Omega, u) &= \int_0^{\infty} dR \sum_{k=1}^{\Pi(r-R\Omega, u)} W(r-R\Omega, r, u, \Sigma_k, \Sigma_p) \times \\ &\times a_k(r-R\Omega, u) \int du' \int d\Omega' \sum_{n=1}^{\Pi(r-R\Omega, u')} \Sigma_{Sn}(r-R\Omega, u' \rightarrow \\ &\rightarrow u, \Omega\Omega') \Phi_n(r-R\Omega, \Omega', u') + S_1(r, \Omega, u); \end{aligned} \quad (\text{П.13})$$

$$\begin{aligned} \Phi_p^+(r, \Omega, u) &= \int_0^{\infty} dR \sum_{k=1}^{\Pi(r+R\Omega, u)} W(r, r+R\Omega, \Sigma_p, \Sigma_k) \times \\ &\times \int du' \int d\Omega' \Sigma_{Sk}(r+R\Omega, u \rightarrow u', \Omega'\Omega) \sum_{n=1}^{\Pi(r+R\Omega, u')} \Phi_n^+(r+R\Omega, \Omega', u') + \\ &+ \varphi(r, \Omega, u). \end{aligned} \quad (\text{П.14})$$

Интегрирование уравнений в δ -представлении по групповым интервалам летаргии позволяет перейти к подгрупповому представлению, описанному в работах [21, 28]. В выражениях (П.13) и (П.14) $W(r', r, u, \Sigma_k, \Sigma_p)$ имеет прежний смысл, но переменные Σ_k и Σ_p — подгрупповые сечения могут принимать лишь немногие дискретные значения.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

ОПИСАНИЕ СЕЧЕНИЙ И ИХ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ В ОБЛАСТИ РАЗРЕШЕННЫХ РЕЗОНАНСОВ

Информация об отдельных резонансах содержится, например, в таких библиотеках, как СОКРАТОР [11], ENDF/B. Точный расчет сечений при данной энергии E по резонансным параметрам осуществляется сложными алгоритмами и требует сравнительно большого расхода машинного времени. Однако он применялся при расчете реакторов методом Монте-Карло [54], когда требовалось определить величины доплеровских коэффициентов реактивности. Для вычислений температурных производных сечений использовался быстрый алгоритм определения комплексного интеграла вероятности, входящего в выражения для сечений и их температурных производных [56].

В результате дифференцирования обычных формул для сечений с учетом доплеровского уширения можно получить следующие выражения:

$$\frac{1}{N_a} \frac{\partial \Sigma_a}{\partial T} = \sigma_0 \frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma} \frac{\partial \Psi(\theta, x)}{\partial T};$$

$$\frac{1}{N_a} \frac{\partial \Sigma_s}{\partial T} = \alpha_0 \frac{\Gamma_n}{\Gamma} \frac{\partial \Psi(\theta, x)}{\partial T} + (\alpha_0 \sigma_p g \Gamma_n / \Gamma)^{1/2} \frac{\partial X(\theta, x)}{\partial T},$$

где N_a — концентрация. Остальные обозначения — обычно принятые [14]. Дифференциалы, описывающие форму линий, могут быть найдены простым дифференцированием функций $\Psi(\theta, x)$ и $\chi(\theta, x)$:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial T} = \frac{1}{2T} \left[\left(\frac{x^2 - 1}{2\theta} - 1 \right) \Psi - \frac{x}{\theta} \chi - \frac{1}{2\theta} \right];$$

$$\frac{\partial \chi}{\partial T} = \frac{1}{2T} \left[\left(\frac{x^2 - 1}{2\theta} - 1 \right) \chi - \frac{x}{\theta} \Psi - \frac{x}{2\theta} \right].$$

Функции $\Psi(\theta, x)$ и $\chi(\theta, x)$ являются, соответственно, действительной и комплексной частью интеграла вероятности:

$$\Psi(\theta, x) = \frac{\theta \sqrt{\pi}}{2} \operatorname{Re} W \left(\frac{\theta x}{2}, \frac{\theta}{2} \right);$$

$$\chi(\theta, x) = \frac{\theta \sqrt{\pi}}{2} \operatorname{Im} W \left(\frac{\theta x}{2}, \frac{\theta}{2} \right);$$

$$W(z) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-t^2)}{z - t} dt.$$

При помощи $Q-D$ алгоритма разложения в цепную дробь в работе [48] получены два выражения для аппроксимации комплексного интеграла вероятности с любой степенью точности. Для малых значений модуля z интеграл представляется цепной дробью:

$$W(z) = \exp(-z^2) + \frac{2iz\nu}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{1}{\nu - 1/3} + \frac{2/45}{\nu + 1/21} + \dots + \frac{2r(2r-1)}{(4r-3)(4r+1)(4r-1)^2} \dots \right], \quad (\text{II.15})$$

$$\nu + \frac{1}{(4r-1)(4r+3)} + \dots$$

где $\nu = -1/2z^2$. Для больших значений модулей z используется цепная дробь:

$$W(z) = \frac{2iz}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{1}{\nu - 1} - \frac{2}{\nu - 5} - \dots - \frac{2r(2r-1)}{(\nu - 4r - 1)} - \dots \right].$$

На рис. П.3 приводится карта сходимости разложений (II.15) и (II.16). Сплошными линиями показаны области применимости асимптотических разложений (II.16), пунктирными — разложения (II.15). Для того чтобы определить, сколько членов в разложении, цепную дробь надо взять для данных θ/x и $\theta/2$; чтобы получить значение функций Ψ и χ с точностью до пяти десятичных знаков, следует найти соответствующую область на карте сходимости и определить количество членов, которое для асимптотических выражений помечено буквой A , для малых модулей z — буквой T .

С появлением библиотеки подгрупповых констант АРАМАКО [47] отпала необходимость длительного определения температурных производных по параметрам резонансов. В библиотеке АРАМАКО имеется информация о температурной зависимости подгрупповых параметров — долей и сечений, на основании которой легко рассчитываются температурные производные.

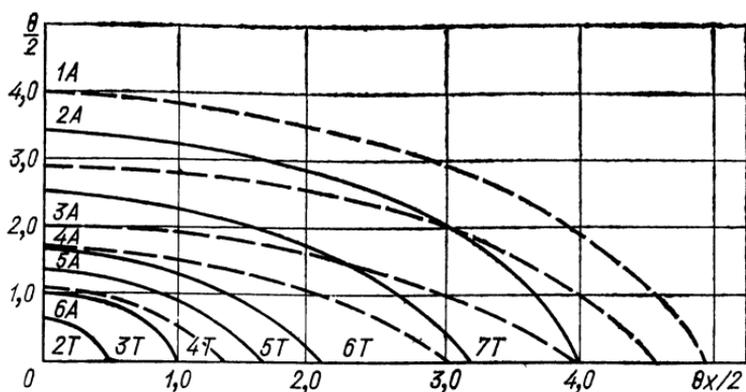


Рис. П.3. Карта сходимости разложений в цепную дробь для $W(z)$ в представлении с точностью до пяти десятичных знаков $\text{Re } W(z)^n - \text{Re } W(z)^{n-1} < 10^{-5}$; $\text{Im } W(z)^n - \text{Im } W(z)^{n-1} < 10^{-5}$:
 --- цепная дробь для разложения (П.15);
 ——— цепная дробь для разложения (П.16)

Вероятно, со временем все реже будут использоваться алгоритмы вычисления сечений по резонансным параметрам в расчетах реакторов и защиты. Но эти методы будут находить применение в задачах по определению резонансных активаций тонких индикаторов или при модельных расчетах резонансных эффектов [55].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Абагян Л. П., Николаев М. Н., Петрова Л. В. Расчет сечения U-238 по программе Уран.—«Бюл. информ. центра по ядерным данным», 1967, вып. 4, с. 392—419.
2. Блыскавка А. А. Некоторые алгоритмы вычисления возмущений реактивности методом Монте-Карло. Препринт ФЭИ-718. Обнинск, 1976.
3. Блыскавка А. А. Система модульного программирования алгоритмов расчета ядерных реакторов методом Монте-Карло. Препринт ФЭИ-719. Обнинск, 1976.
4. Групповые константы для расчета ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1964. Авт.: Л. П. Абагян, Н. О. Базазянц, И. И. Бондаренко, М. Н. Николаев.
5. Ермаков С. М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. М., «Наука», 1975.
6. Ермаков С. М., Золотухин В. Г. Применение метода Монте-Карло для расчета защиты от ядерных излучений.— В кн.: Вопросы физики защиты реакторов. М., Атомиздат, 1963, с. 171.
7. Ермаков С. М., Михайлов Г. А. Курс статистического моделирования. М., «Наука», 1976.
8. Золотухин В. Г. Решение задач переноса излучения методом Монте-Карло. Препринт ФЭИ-91. Обнинск, 1967.
9. Золотухин В. Г. О применении метода Монте-Карло к расчету функционалов потока, их возмущений и эффективных констант.— В сб. ФЭИ: Вопросы физики ядерных реакторов, вып. 1, т. 1. М., Атомиздат, 1968, с. 185—196.
10. Золотухин В. Г. Анализ смещения оценок реакторных параметров методом Монте-Карло с постоянным числом нейтронов деления.— В кн.: Труды Физико-энергетического института. М., Атомиздат, 1974, с. 185.
11. Колесов В. Е., Николаев М. Н. Формат библиотеки рекомендованных данных для расчета реакторов.— В кн.: Ядерные константы, вып. 8, ч. 4. М., ЦНИИАтоминформ, 1972, с. 3.
12. Комплекс программ для расчета гетерогенных ячеек методом Монте-Карло.—«Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы», 1975, вып. 18, с. 85. Авт.: В. В. Коробейников, А. Я. Курапова, Г. Н. Мантуров, М. Н. Николаев, Б. Г. Рязанов, С. Х. Саберов, Д. А. Усиков.
13. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М., «Наука», 1974.
14. Лейн А., Томас Р. Теория ядерных реакций при низких энергиях. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1960.

15. **Майоров Л. В., Франк-Каменецкий А. Д.** Сравнительная эффективность различных оценок в методе Монте-Карло. Препринт ИАЭ-1791. М., 1969.
16. **Марчук Г. И.** Численные методы расчета ядерных реакторов. М., Атомиздат, 1958.
17. **Марчук Г. И., Орлов В. В.** К теории сопряженных функций. — В кн.: Нейтронная физика. М., Госатомиздат, 1961.
18. **Метод Монте-Карло в атмосферной оптике.** Под ред. Г. И. Марчука. Новосибирск, «Наука», 1976.
19. **Метод Монте-Карло в проблеме переноса излучений.** Под ред. Г. И. Марчука. М., Атомиздат, 1967.
20. **Метод статистических испытаний (метод Монте-Карло).** Сер. «Справочная математическая библиотека». М., «Физматгиз», 1962.
21. **Метод подгрупп для расчета распространения нейтронов в резонансных средах.** — «Атомная энергия», 1970, т. 29, с. 11 (ч. I), 1971, т. 30, с. 426 (ч. II). Авт.: М. Н. Николаев, А. А. Игнатов, Н. В. Исаев, В. Ф. Хохлов.
22. **Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике.** Под ред. Г. И. Марчука. Новосибирск, изд. ВЦ СО АН СССР, 1976.
23. **Михайлов Г. А.** О расчетах возмущений ядерных реакторов методом Монте-Карло. — «Журн. вычисл. матем. и матем. физики», 1966, т. 6, № 2, с. 380—384.
24. **Михайлов Г. А.** Некоторые замечания об использовании сопряженных решений для улучшения алгоритмов метода Монте-Карло. — В кн.: Исследование операций и статистическое моделирование. Л., изд. ЛГУ, 1972, ч. I, с. 112.
25. **Михайлов Г. А.** Некоторые вопросы теории методов Монте-Карло. Новосибирск, «Наука», 1974.
26. **Михайлус Ф. Ф.** Расчет резонансного поглощения нейтронов в однородных средах. — В кн.: Теория и методы расчета ядерных реакторов. М., Госатомиздат, 1962, с. 160.
27. **Методика расчета групповых сечений в области неразрешенных резонансов.** — В кн.: Труды трехстороннего советско-бельгийско-голландского симпозиума по некоторым проблемам физики быстрых реакторов. М., ЦНИИАтоминформ, 1970, т. 1.
28. **Николаев М. Н., Игнатов А. А.** Метод подгрупп. — «Бюл. информ. центра по ядерным данным», 1966, вып. 3, с. 409.
29. **Николаев М. Н., Усиков Д. А.** Формулировка граничных условий в методе подгрупп. — «Атомная энергия», 1973, т. 34, с. 112.
30. **Поле излучения точечного мононаправленного источника гамма-квантов.** М., Атомиздат, 1974. Авт.: В. Г. Золотухин, Л. Р. Кимель, А. И. Ксенофонтов, О. И. Лейпунский, А. М. Панченко.
31. **Пупко В. Я., Струтинский Р. М.** Применение квазистационарных уравнений переноса нейтронного потока и ценности нейтронов в исследовательских проблемах кинетики реактора. — В кн.: «Труды физико-энергетического института». М., Атомиздат, 1974, с. 174.

32. Сидоренко Л. Л., Хисамутдинов А. И. О вычислении методами Монте-Карло производных дозы по параметрам поверхностей многослойной защиты. Новосибирск. Изд. ВЦ СО АН СССР, 1976.
33. Соболев И. М. Численные методы Монте-Карло. М., «Наука», 1973.
34. Спанье Дж., Гелбард Э. Метод Монте-Карло и задачи переноса нейтронов. М., Атомиздат, 1972.
35. Статистическое моделирование в математической физике. Под ред. Г. И. Марчука. Новосибирск, изд. ВЦ СО АН СССР, 1976.
36. Усачев Л. Н. Уравнения для ценности нейтронов, кинетика реактора и теория возмущений. — В кн.: «Реакторостроение и теория реакторов». М., изд. АН СССР, 1955, с. 251.
37. Усиков Д. А. Интегрирование по параметру как способ расчета конечных возмущений в реакторных сборках методом Монте-Карло. Препринт ФЭИ-423. Обнинск, 1973.
38. Усиков Д. А. Геометрический модуль на языке АЛГОЛ для расчета реакторов и ячеек в $R-Z$ -геометрии методом Монте-Карло. Препринт ФЭИ-627. Обнинск, 1975.
39. Усиков Д. А. К вопросу о дисперсии оценки возмущений методом Монте-Карло. Препринт ФЭИ-656. Обнинск, 1976.
40. Усиков Д. А. Суммирование квадратов вкладов как оценка дисперсии расчета методом Монте-Карло. — «Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы», 1976, вып. 21, с. 252.
41. Усиков Д. А. Оценка возмущений при решении неоднородных задач теории переноса нейтронов методом Монте-Карло. — «Атомная энергия», 1977, т. 42, с. 19.
42. Франк-Каменецкий А. Д. Расчет коэффициента размножения ядерного реактора методом Монте-Карло. — В кн.: Метод Монте-Карло в проблеме переноса излучений. Под ред. Г. И. Марчука. М., Атомиздат, 1967, с. 212.
43. Франк-Каменецкий А. Д. Моделирование траекторий нейтронов при расчете реакторов методом Монте-Карло. М., Атомиздат, 1978.
44. Франк-Каменецкий А. Д., Юдкевич М. С. Расчет времени жизни мгновенных нейтронов в реакторе методом Монте-Карло. Препринт ИАЭ-2155. М., 1972.
45. Халмош П. Теория меры. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1953.
46. Хисамутдинов А. И. Оценка функционала от решения сопряженного уравнения переноса методом Монте-Карло. — «Журн. вычисл. матем. и матем. физики». 1968, т. 8, № 2, с. 467.
47. Хохлов В. Ф., Савоськин М. М., Николаев М. Н. Комплекс программ АРАМАКО для расчета групповых макро- и блокированных микросечений на основе 26-групповой системы констант в подгрупповом представлении. — В кн.: Ядерные константы. Вып. 8. Ч. 3. М., ЦНИИ-атоминформ, 1972, с. 3.
48. Prompt-neutron lifetime calculations in fast assemblies. — «Trans. Amer. Nucl. Soc.», 1964, v. 7, p. 514. Auth.: P. Asaoka et al.
49. Carter L. L., McCormick N. J. Coupled sampling with the Monte Carlo method in neutron transport calculations. — «Nucl. Sci. and Engng», 1970, v. 39, p. 296—310.

50. **Davey W. G.** Selected fission cross sections for ^{232}Th , ^{233}U , ^{234}U , ^{235}U , ^{236}U , ^{237}Np , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{240}Pu and ^{242}Pu . — «Nucl. Sci. and Engng», 1968, v. 32, p. 35—45.
51. **Irving D. C.** The Adjoint Boltzmann equation and its simulation by Monte Carlo. — «Nucl. Engng and Design», 1971, v. 15, p. 273.
52. **Kalos M. H.** Monte Carlo integration of the adjoint neutron transport equation. — «Nucl. Sci. and Engng», 1970, v. 39, p. 296—310.
53. **Levitt L. B., Spanier J. A.** A new non-multigroup adjoint Monte Carlo technique. — «Nucl. Sci. and Engng», 1969, v. 37, N 2, p. 278.
54. **Miller L. B., Miley G. H.** Some Monte Carlo techniques for the calculation of Doppler coefficients. — «Nucl. Sci. and Engng», 1970, v. 40, p. 438—448.
55. **Nelson P.** Relationships between various definitions of prompt-neutron lifetime. — «Nucl. Sci. and Engng», 1971, v. 43, p. 154—158.
56. **O'Shea D. M., Thacher H. C.** Computation of resonance line shape functions. — «Trans. Amer. Nucl. Soc.», 1963, v. 6, N 1, p. 36.

ИБ № 460

**Валерий Григорьевич Золотухин
Даниэль Алексеевич Усиков**

**ОЦЕНКА РЕАКТОРНЫХ
ПАРАМЕТРОВ
МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО
(теория возмущений)**

**Редактор Г. Б. Казьмина
Художественный редактор А. Т. Кирьянов
Обложка художника А. И. Шаварда
Технический редактор О. Н. Адаскина
Корректор З. А. Авдюшева**

**Сдано в набор 04.01.79
Подписано к печати 15.06.79. Т-11910.
Формат 60×90/16. Бумага тип. № 2.
Гарнитура литературная. Печать высокая.
Усл. печ. л. 6,0. Уч.-изд. л. 5,66.
Тираж 1520 экз. Зак. изд. 75136
Зак. тип. 59. Цена 85 к.**

**Атомиздат, 103031 Москва К-31,
ул. Жданова, 5**

УВАЖАЕМЫЙ ЧИТАТЕЛЬ!

Атомиздат выпускает в свет в 1980 г. книги:

Зизин М. Н., Шишков Л. К. Тестовые нейтронно-физические расчеты ядерных реакторов. 8 л. (Физика ядерных реакторов) 1 р. 20 к. (книга объявлена в плане 1980 г., позиция 78).

Книга содержит описание тестовых задач, а также все необходимые исходные данные и результаты решения этих задач по известным программам. Для одномерной геометрии тесты приводятся в кинетическом и диффузионном приближении, для дву- и трехмерной геометрии только в диффузионном приближении. Число энергетических групп в тестах от 1 до 6. Приводится тест для двумерного гетерогенного расчета методом Галанина—Фейнберга, а также задачи по оптимизации ксеноновых переходных процессов в реакторе и задачи на поиск максимума мощности реактора.

Для программистов, создающих программы, и физиков и инженеров-физиков при проверке работоспособности эксплуатируемых программ для расчета ядерных реакторов.

Кочуров Б. П. Численные методы в теории гетерогенного реактора. 8 л. (Физика ядерных реакторов) 1 р. 20 к. (книга объявлена в плане 1980 г., позиция 79).

Цель предлагаемой книги — дать представление о возможностях численных методов теории гетерогенного реактора для расчетов сложных по составу критических сборок и реакторов. Излагаются методы расчета, основанные на непосредственном решении гетерогенных уравнений и предназначенные для расчетов небольших и средних критических сборов и реакторов, а также методы, основанные на представлении гетерогенных уравнений в разностной форме и позволяющие рассчитывать большие реакторы. Приведен один из возможных способов определения матрицы блоков, а также ее радикальной и осевой составляющих, характеризующих миграцию нейтронов. Затронуты некоторые вопросы, связанные с применением методов теории возмущения и оптимизации для расчета гетерогенных реакторов.

Для специалистов, работающих в области физики реакторов.