УДК 621.039.5

МЕТОДИКА СОХРАНЕНИЯ УГЛОВЫХ МОМЕНТОВ ПРИ РАСЧЕТАХ ПЕРЕНОСА НЕЙТРОНОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

В. Н. Буканов, А. В. Гриценко, В. Л. Демехин, С. М. Пугач

Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев

Проанализирован ряд приближений индикатрисы упругого рассеяния, которые используются при расчетах переноса нейтронов методом Монте-Карло. Показано, что эти приближения искажают информацию, имеющуюся в библиотеке микроконстант. Предлагается метод моделирования упругого взаимодействия, который не искажает данные, приведенные в библиотеке микроконстант. Разработан алгоритм нахождения параметров, необходимых для реализации данного метода.

Введение

Современные методы определения радиационной нагрузки корпуса реактора (КР) включают расчеты переноса нейтронов в околокорпусном пространстве (ОКП) реактора. Для этой цели используются различные программы расчета, в том числе – основанные на методе Монте-Карло (ММК-программы). Для моделирования процесса переноса нейтронов в ОКП реактора такие программы используют данные из библиотек микроконстант, которые среди прочих данных содержат данные об упругом взаимодействии нейтронов с веществом. Непосредственное использование этих данных об упругом рассеянии в ММК-программах является неэффективным, поэтому они заменяются некоторыми приближениями. Такая замена в большинстве случаев приводит к частичному искажению данных. В данной статье предлагается метод описания упругого взаимодействия, позволяющий практически без искажений сохранять всю информацию из библиотеки микроконстант.

Выбор метода представления индикатрисы рассеяния

Как правило [1], азимутальный угол рассеяния считается распределенным равновероятно в диапазоне $(0, 2\pi)$, а распределение косинусов углов рассеяния μ в диапазоне $(-1, 1)$ описывается индикатрисой упругого рассеяния. В большинстве многогрупповых библиотек микроконстант индикатриса задается значениями коэффициентов разложения B_l по полиномам Лежандра

$$W(\mu) = \frac{1}{2}\sum_{l=0}^{L}(2l+1)B_l P_l(\mu), \tag{1}$$

где $P_l(\mu)$ – полиномы Лежандра l-й степени.

В этом представлении при $L \to \infty$ угловое распределение упруго рассеянных нейтронов описывается точно. Однако в библиотеках микроконстант, которые используются при расчетах переноса нейтронов в ОКП реактора, обычно (за исключением легких нуклидов) ограничиваются несколькими первыми значениями B_l. В то же время моделирование упругого рассеяния в ММК-программе с непосредственным использованием данных, представленных в библиотеке микроконстант, требует значительного машинного времени. Поэтому на практике индикатриса рассеяния вида (1) заменяется некоторым приближением.

Одним из приближений, которое может быть непосредственно использовано при моделировании нейтронных историй в ММК-программе, является метод равновероятных диапазонов. В этом приближении индикатриса рассеяния аппроксимируется ступенчатой функцией [2, 3]

$$W^{*}(\mu)=\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N-1}\frac{1}{(\mu_{i+1}-\mu_{i})}Z(\mu_{i},\mu_{i+1}), \tag{2}$$

$$Z(\mu_{i},\mu_{i+1})=\begin{cases}1, & \text{if } \mu\in[\mu_{i},\mu_{i+1}]\\ 0, & \text{if } \mu\notin[\mu_{i},\mu_{i+1}]\end{cases}, \tag{3}$$

где N – количество равновероятных диапазонов, μ_i – границы равновероятных диапазонов, вычисляемые как решение системы интегральных уравнений

$$\int_{\mu_i}^{\mu_{i+1}}W(\mu)d\mu=\frac{1}{N},\ i=\overline{1,N-1}. \tag{4}$$

Однако в силу того, что в некоторых случаях значения $W(\mu)$ могут быть отрицательными, а значение плотности вероятности всегда должно быть положительным, при подготовке границ необходимо предусмотреть, чтобы в любом случае выполнялось условие

$$\mu_{i+1}>\mu_{i}. \tag{5}$$

Поэтому было рассмотрено несколько алгоритмов подготовки данных о границах равновероятных диапазонов для расчетов переноса нейтронов.

Первый из них заключается в том, что при отрицательном значении индикатрисы рассеяния (1) она приравнивается 0. Затем площадь под новой кривой нормируется и для определения границ равновероятных диапазонов численными методами решается система уравнений (4).

Суть второго алгоритма состоит в том, что при наличии отрицательностей в индикатрисе рассеяния вида (1) она преобразуется путем вычитания из нее своего минимального значения. Далее производятся те же процедуры, что и в первом алгоритме.

Третий алгоритм заключается в простом разбиении на диапазоны имеющейся индикатрисы рассеяния с помощью численного интегрирования методом трапеций. Учитывая, что при наличии отрицательных участков такой подход дает разные результаты в зависимости от направления интегрирования (от 1 до -1 или наоборот), был предложен так называемый синтетический метод, заключающийся в усреднении границ диапазонов по двум направлениям интегрирования.

Для выбора наиболее корректного варианта был разработан и программно реализован критерий, по которому проверялась адекватность полученных с помощью различных алгоритмов границ равновероятных диапазонов исходным данным, представленным в библиотеке микроконстант. Смысл этого критерия заключается в сравнении коэффициентов разложения, представленных в библиотеке (B_l), и коэффициентов разложения, вычисляемых по следующим зависимостям:

$$B_0^{*}=\overline{\mu_{*}^{0}}, \tag{6}$$

$$B_1^{*}=\overline{\mu_{*}^{1}}, \tag{7}$$

$$B_2^{*}=\left(3\overline{\mu_{*}^{2}}-\overline{\mu_{*}^{0}}\right)/2, \tag{8}$$

$$B_3^{*}=\left(5\overline{\mu_{*}^{3}}-3\overline{\mu_{*}^{1}}\right)/2, \tag{9}$$

$$B_4^{*}=\left(35\overline{\mu_{*}^{4}}-30\overline{\mu_{*}^{2}}+3\overline{\mu_{*}^{0}}\right)/8, \tag{10}$$

$$B_5^{*}=\left(63\overline{\mu_{*}^{5}}-70\overline{\mu_{*}^{3}}+15\overline{\mu_{*}^{1}}\right)/8, \tag{11}$$

где $\overline{\mu_*^l}$ ($l=\overline{0,5}$) – угловые моменты аппроксимации (2), которые однозначно определяются границами равновероятных диапазонов

$$\overline{\mu_*^l} = \int \mu^l \, W^*(\mu)\, d\mu = \frac{1}{N(l+1)} \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\mu_{i+1}^{l+1} - \mu_i^{l+1}}{\mu_{i+1} - \mu_i}, \; l = \overline{0,5}. \tag{12}$$

При таком подходе предполагается, что данные сохраняются, если разность соответствующих значений коэффициентов разложения достаточно мала.

Тестирование приведенных выше алгоритмов показало, что в общем случае ни один из них не сохраняет даже первый коэффициент разложения (угловой момент).

Поэтому был реализован алгоритм, в котором индикатриса рассеяния делится на положительную и отрицательную части, каждая из которых нормируется на единицу. Затем каждая из частей разделяется на равновероятные диапазоны. Вероятность использования полученных наборов диапазонов определяется соотношением начальных площадей под положительной и отрицательной частями. При этом в случае использования диапазонов под отрицательной частью весу нейтрона присваивается отрицательное значение, а чтобы сохранить баланс весов нейтронов, их значения умножаются на специальные коэффициенты.

Однако такой подход хотя и позволяет сохранять имеющуюся в библиотеке микро-констант информацию, но, с одной стороны, автоматически увеличивает объем необходимых для расчетов переноса нейтронов данных в два раза, а с другой – за счет наличия отрицательных весов сильно увеличивает дисперсию расчетных величин. В некоторых проведенных нами тестовых расчетах имели место даже отрицательные значения групповых плотностей потоков нейтронов в расчетных детекторах. Такой результат заставил продолжить поиски более подходящего приближения индикатрисы рассеяния (1).

Следующим из опробованных приближений было приближение, в котором аппроксимация (2) дополняется δ-функцией с определенной вероятностью A. Получаемое в результате приближение индикатрисы рассеяния имеет вид [4]

$$\widetilde{W}^*(\mu) = W^*(\mu)\cdot(1-A) + A\cdot\delta(\mu - \mu_T), \tag{13}$$

$$A = \frac{\overline{\mu} - \overline{\mu_*}}{\mu_T - \overline{\mu_*}}, \tag{14}$$

где μ_T – точка "расположения" δ-функции, определяемая из соотношения

$$\overline{\mu_*^2}\left(1 - \frac{\overline{\mu} - \overline{\mu_*}}{\mu_T - \overline{\mu_*}}\right) + \frac{\overline{\mu} - \overline{\mu_*}}{\mu_T - \overline{\mu_*}}\mu_T^2 = \overline{\mu^2}, \tag{15}$$

где $\overline{\mu}$ и $\overline{\mu^2}$ – первый и второй угловые моменты индикатрисы рассеяния при ее представлении в виде формулы (1). Такое приближение позволяет сохранять первый и второй угловые моменты.

Однако на практике оказалось, что в некоторых случаях приведенный алгоритм неприменим из-за того, что квадратичное уравнение (15) не имеет корней, лежащих на отрезке (-1, 1). Изменяя количество равновероятных диапазонов, причем необязательно в большую сторону, можно расширить применимость рассматриваемого подхода. Однако далеко не на все случаи. В связи с этим от данного метода также пришлось отказаться.

Далее было использовано приближение индикатрисы рассеяния суммой M взвешенных δ-функций [5]

$$\overline{\overline{W}}(\mu) = \sum_{m=1}^{M} p_m \cdot \delta(\mu - \mu_m), \qquad (16)$$

где p_m – вероятность рассеяния под углом, косинус которого равен μ_m.

Данный метод позволяет сохранить $2M-1$ угловых момента индикатрисы рассеяния [5]. Однако для его практической реализации необходимо разработать процедуру вычисления значений μ_m и p_m, в алгоритм которой было бы заложено условие сохранения имеющейся в библиотеке микроконстант информации. Для этого требуется решить задачу нелинейного программирования [6]. Анализ поставленной задачи показал, что наиболее оптимальным является минимизация функции

$$G(p_1,\ldots,p_M,\mu_1,\ldots,\mu_M) = \sum_{l=0}^{L}\left(\sum_{m=1}^{M} p_m \mu_m^l - \overline{\mu^l}\right)^2,$$

$$\text{при условиях } |\mu_m| \le 1,\ 0 \le p_m \le 1 \quad m = \overline{1,M}. \qquad (17)$$

Используемые в соотношении (17) угловые моменты индикатрисы рассеяния $\overline{\mu^l}$ могут быть получены на основании данных из библиотеки микроконстант по следующим формулам:

$$\overline{\mu^0} = B_0, \qquad (18)$$

$$\overline{\mu^1} = B_1, \qquad (19)$$

$$\overline{\mu^2} = (2B_2 + B_0)/3, \qquad (20)$$

$$\overline{\mu^3} = (2B_3 + 3B_1)/5, \qquad (21)$$

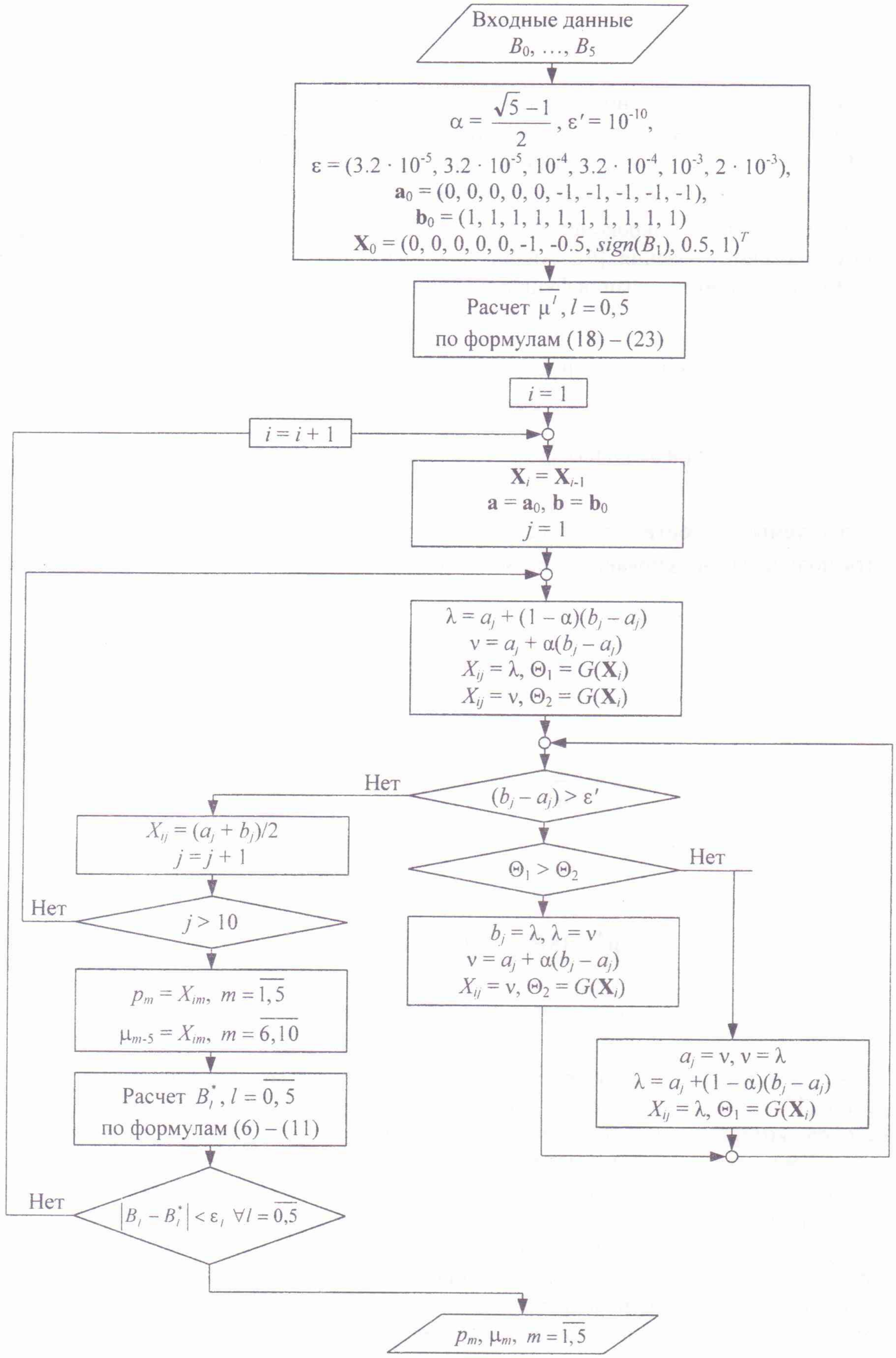
$$\overline{\mu^4} = (8B_4 + 20B_2 + 7B_0)/35, \qquad (22)$$

$$\overline{\mu^5} = (8B_5 + 28B_3 + 27B_1)/63. \qquad (23)$$

Задачи нелинейного программирования, аналогичные сформулированной в соотношении (17), достаточно хорошо изучены. Поэтому существует довольно широкий выбор методов, которые могут быть использованы для их решения. Нами был проведен анализ этих методов, в результате которого был выбран метод циклического покоординатного спуска в сочетании с методом золотого сечения [7]. Блок-схема алгоритма работы программы, использующей указанные методы, приведена на рисунке.

Критерий остановки итераций выбирался таким образом, чтобы погрешности сохранения угловых моментов были заведомо значительно ниже погрешностей, с которыми определены значения этих моментов в библиотеке микроконстант.

Описанный подход был успешно реализован для моделирования на основе имеющихся в библиотеке микроконстант данных упругого взаимодействия нейтронов с нуклидами, а также со смесями этих нуклидов, соответствующих материальному составу зон расчетной модели реактора ВВЭР-1000 в используемой ММК-программе.



Алгоритм работы программы.

Выводы

Разработан алгоритм моделирования упругого рассеяния нейтронов в сложной гетерогенной среде ядерного реактора, который практически не искажает данные, приведенные в библиотеке микроконстант. При этом непосредственное моделирование взаимодействия требует минимума входных данных и затрат машинного времени. Единственным недостатком используемого подхода являются значительные затраты машинного времени, необходимые для подготовки данных о значениях μ_m и p_m. Однако с учетом того, что эти данные рассчитываются заранее в программе подготовки макроконстант и могут использоваться для ряда независимых расчетов переноса нейтронов в ОКП реактора ВВЭР-1000, указанный недостаток не носит принципиального характера.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Франк-Каменецкий А. Д.* Моделирование траекторий нейтронов при расчете реактора методом Монте-Карло. - М.: Атомиздат, 1978. - 96 с.
2. *Parker J. B., Dicy Mk. V.* The Preparation of Nuclear Data into a form Suitable for Monte Carlo Calculations Using an Electronic Computer: Rep. 0-27/66. - Aldermaston, 1966.
3. *Блыскавка А. А., Соловьев Н. А., Шимкевич И. Ю.* Программа расчета неоднородной защиты методом Монте-Карло // Радиационная безопасность АЭС. - 1979. - Вып. 26. - С. 16.
4. *Коробейников В. В., Коробейникова Л. В.* Использование различных аппроксимаций угловых распределений в нейтронных расчетах методом Монте-Карло // ВАНТ. Сер. Физика и техника ядерных реакторов. - 1985. - Вып. 7. - С. 11 - 19.
5. *Nikolaev M. N.* Comments on the Probability Table Method // Nucl. Sci. Eng. - 1976. - Vol. 61, No. 2. - P. 286.
6. *Корн Г., Корн Т.* Справочник по математике (для научных работников и инженеров). - М.: Наука, 1977. - 832 с.
7. *Базара М., Шетти К.* Нелинейное программирование (теория и алгоритмы). - М.: Мир, 1982. - 583 с.

МЕТОДИКА ЗБЕРЕЖЕННЯ КУТОВИХ МОМЕНТІВ ПРИ РОЗРАХУНКАХ ПЕРЕНОСУ НЕЙТРОНІВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

В. М. Буканов, О. В. Гриценко, В. Л. Дємьохін, С. М. Пугач

Проаналізовано ряд наближень індикатриси пружного розсіювання, які використовуються при розрахунках переносу нейтронів методом Монте-Карло. Показано, що ці наближення спотворюють інформацію, що є в бібліотеці мікроконстант. Пропонується метод моделювання пружної взаємодії, що не спотворює дані, наведені в бібліотеці мікроконстант. Розроблено алгоритм знаходження параметрів, необхідних для реалізації даного методу.

THE INVARIANCE METHOD OF ANGULAR MOMENTS FOR MONTE-CARLO NEUTRON TRANSPORT CALCULATIONS

V. M. Bukanov, O. V. Grytsenko, V. L. Dyemokhin, S. M. Pugach

A series of approximations of an elastic scattering indicatrix used for Monte-Carlo neutron transport calculations is analysed. It is shown that these approximations garble the information available in microconstant library. The elastic interaction modelling method not garbling data from microconstant library is suggested. The algorithm of obtaining of the parameters required for realization of the given method is designed.

Поступила в редакцию 18.09.03,
после доработки – 09.12.03.