

УДК 519.6

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ АНИЗОТРОПИИ РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ В P_n -ПРИБЛИЖЕНИИ

А. Н. Иванов, Н. В. Иванов
(РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

В многогрупповом приближении анизотропия рассеяния нейтронов описывается коэффициентами разложения по полиномам Лежандра. При численном решении обычно используются разложения низкого порядка из трех или пяти членов. Восстановленная из таких разложений плотность распределения косинуса угла рассеяния может принимать отрицательные значения, что делает невозможным решение задач переноса методом Монте-Карло в одинаковой постановке с разностными методами. Чтобы этого избежать, исходная плотность заменяется эквивалентной дискретной плотностью. Эквивалентность понимается в смысле совпадения моментов плотностей. Для сглаживания лучевых эффектов к дискретной плотности добавляется комбинация *треугольных* плотностей, сохраняющая два первых момента исходной плотности.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, перенос нейтронов, анизотропия рассеяния, многогрупповое приближение.

Введение

При численном решении задач переноса нейтронов используются метод Монте-Карло и разностные методы. Одним из способов проверки достоверности найденного решения является сравнение результатов, полученных при расчетах по разным методам в одинаковой постановке. С помощью разностных методов решаются уравнения переноса в многогрупповом приближении [1], и поэтому представляют интерес расчеты методом Монте-Карло в этом приближении.

В многогрупповом приближении область изменения энергии делится на конечное число групп и сечения взаимодействия нейтронов с атомами среды усредняются по энергиям групп. Усредненные сечения (групповые константы) для разных атомов вычисляются перед решением уравнения переноса и хранятся в специальных библиотеках. Групповые константы вещества состоят из сечений реакций, вероятностей перехода из группы в группу и соответствующих данных для анизотропии рассеяния в лабораторной системе координат. Для каждого перехода анизотропия рассеяния описывается плотностью распределения $p(\mu)$ косинуса угла рассеяния и хранится в виде коэффициентов разложения по полиномам Лежандра.

В разностных методах для быстрого вычисления интеграла рассеяния обычно используются разложения низкого порядка — из трех-пяти членов. В то же время известно, что для некоторых переходов распределение косинуса угла рассеяния может быть сосредоточено на небольшой части интервала $[-1, 1]$. Такие ситуации наблюдаются на легких атомах и при увеличении числа групп. Ступенчатые функции плохо аппроксимируются полиномами Лежандра, поэтому при низком порядке восстановленная из разложения плотность $p(\mu)$ может принимать отрицательные значения. Плотности с отрицательными значениями невозможно прямо моделировать методом Монте-Карло.

Для решения этой проблемы в работе [2] предложено заменить исходную плотность эквивалентной дискретной плотностью $p_d(\mu)$. Эквивалентность понимается как совпадение моментов плотностей. Дискретная плотность строится в виде взвешенной суммы дельта-функций: $p_d(\mu) = \sum_k w_k \delta(\mu - \mu_k)$,

число членов которой меньше или равно $(N + 1)/2$, где N — порядок разложения исходной плотности по полиномам Лежандра.

При небольшом числе дельта-функций дискретная плотность может приводить в расчетах к лучевым эффектам. Для их сглаживания в работе [3] предлагается добавить к дискретной плотности линейную плотность, параметры которой определяются из условия сохранения первого момента $\langle \mu \rangle$ — среднего косинуса угла рассеяния. Линейная плотность имеет недостаток — она "размазывает" ступенчатые распределения на весь интервал $[-1, 1]$.

В данной статье излагается новая методика моделирования групповой анизотропии рассеяния. Она основана на работах [2, 3] и отличается от них новым способом сглаживания лучевых эффектов. В методике строится комбинация дискретной и *треугольных* плотностей. Параметры треугольных плотностей определяются из условия сохранения первых двух моментов: $\langle \mu \rangle$ и $\langle \mu^2 \rangle$. Треугольные плотности хорошо описывают особенности анизотропии в многогрупповом приближении.

В методике выделен случай, когда восстановленная плотность $p(\mu)$ оказывается положительной даже при небольшом числе членов разложения. Для выявления такой ситуации построен метод проверки положительности плотности, а также предложен метод моделирования косинуса угла рассеяния прямо из разложения плотности по полиномам Лежандра.

Метод построения эквивалентной дискретной плотности

Метод построения дискретной плотности тесно связан с теорией квадратур Гаусса. Пусть плотность $p(\mu)$ косинуса угла рассеяния задана разложением по полиномам Лежандра $P_k(\mu)$:

$$\tilde{p}(\mu) = \sum_{k=0}^K \frac{2k+1}{2} f_k P_k(\mu), \quad f_k = \int_{-1}^1 p(\mu) P_k(\mu) d\mu, \quad f_0 = 1.$$

Здесь знак тильды используется для обозначения восстановленной из разложения плотности. Нетрудно видеть, что разложение K -го порядка точно сохраняет первые K моментов плотности $p(\mu)$:

$$M_k = \int_{-1}^1 \mu^k p(\mu) d\mu, \quad k = \overline{1, K}; \quad M_0 = \int_{-1}^1 p(\mu) d\mu = 1.$$

Из теории квадратур Гаусса следует, что для положительной весовой функции $w(\mu)$ существует набор узлов μ_i и весов w_i , $i = \overline{1, n}$, такой, что выполняется равенство

$$\int_{-1}^1 w(\mu) \mu^k d\mu = \sum_{i=1}^n w_i \mu_i^k, \quad k \leq 2n - 1.$$

При этом веса w_i положительны, а узлы μ_i принадлежат отрезку $[-1, 1]$. Беря плотность $p(\mu)$ в качестве весовой функции, получаем, что дискретная плотность вида

$$p_d(\mu) = \sum_{i=1}^n w_i \delta(\mu - \mu_i)$$

является положительной на отрезке $[-1, 1]$ и сохраняет первые $2n - 1$ момента исходной плотности $p(\mu)$. Для положительной весовой функции задача определения узлов и весов всегда имеет решение. Она сводится к построению системы ортогональных полиномов $Q_i(\mu)$, $i = \overline{1, n}$:

$$\int_{-1}^1 Q_i(\mu) Q_j(\mu) w(\mu) d\mu = \delta_{ij} N_i.$$

Здесь δ_{ij} — символ Кронекера; N_i — нормировочная константа. Узлы $\{\mu_i\}_{i=1}^n$ являются корнями полинома $Q_n(\mu)$, а веса находятся по формуле

$$w_i = \left(\sum_{k=0}^{n-1} \frac{Q_k^2(\mu_i)}{N_k} \right)^{-1}, \quad \sum_{i=1}^n w_i = 1.$$

В многогрупповом приближении восстановленная плотность $\tilde{p}(\mu)$ может принимать отрицательные значения, и поэтому нельзя использовать результаты теории квадратур Гаусса. В этом случае ортогональные полиномы должны удовлетворять дополнительным условиям (обозначим их *):

- 1) нормировочные константы N_i положительны;
- 2) корни полиномов $Q_i(\mu)$ действительны и принадлежат отрезку $[-1, 1]$.

В работе [2] показано, что такие ортогональные полиномы существуют и определяются рекуррентным соотношением

$$Q_{i+1}(\mu) = (\mu - \lambda_{i+1}) Q_i(\mu) - \sigma_i^2 Q_{i-1}(\mu), \quad Q_0(\mu) = 1, \quad Q_1(\mu) = \mu - M_1,$$

где λ_{i+1} и σ_i^2 — некоторые параметры. Для индексов $i \geq 1$ параметры λ_{i+1} и σ_i^2 находятся из соотношений

$$\sigma_i^2 = \frac{N_i}{N_{i-1}}; \quad \lambda_{i+1} = \frac{L_{i+1}}{N_i} - \frac{L_i}{N_{i-1}}; \quad N_i = \sum_{k=0}^i \alpha_k^i M_{k+i}; \quad L_{i+1} = \sum_{k=0}^i \alpha_k^i M_{k+i+1}.$$

Здесь α_k^{i+1} — коэффициенты разложения полинома $Q_{i+1}(\mu)$ по степеням μ^k :

$$Q_{i+1}(\mu) = \sum_{k=0}^{i+1} \alpha_k^{i+1} \mu^k, \quad \alpha_{i+1}^{i+1} = 1.$$

В процессе построения полиномов требуется следить за выполнением условий (*). Очевидно, что первый полином $Q_1(\mu)$ удовлетворяет этим условиям. Для каждого следующего полинома требуется их проверка. Процесс построения полиномов обрывается, когда достигается максимальная $(K+1)/2$ степень полинома или не выполняются условия (*).

Рассмотрим подробнее полином степени $n = 2$:

$$Q_2(\mu) = \mu^2 - (\lambda_1 + \lambda_2)\mu + \lambda_1\lambda_2 - \sigma_1^2, \\ \lambda_1 = M_1, \quad \lambda_2 = \frac{L_2}{\sigma_1^2} - M_1, \quad L_2 = M_3 - M_1M_2, \quad \sigma_1^2 = M_2 - M_1^2.$$

Нормировочная константа N_1 этого полинома равна σ_1^2 — дисперсии косинуса угла рассеяния, и поэтому она должна быть неотрицательной или обращаться в нуль для дельтаобразной плотности $p(\mu) = \delta(\mu - M_1)$. На практике константа N_1 может становиться отрицательной на плотностях, близких к дельта-функциям из-за недостаточной точности вычисления коэффициентов разложения по полиномам Лежандра. Таким образом, в практических расчетах не всегда удается сохранить все моменты восстановленной плотности.

Сглаживание лучевых эффектов

Дискретная плотность достаточно просто моделируется, но при малом числе дельта-функций она может приводить к лучевым эффектам в численных расчетах задач переноса нейтронов. В частности, эти эффекты могут появляться в многогрупповых расчетах, в которых обычно используются низкого порядка разложения групповой анизотропии по полиномам Лежандра. Впервые этот недостаток был отмечен в работе [3], где рассматривалось разложение третьего порядка. Для уменьшения лучевых эффектов было предложено взять сумму с весами дискретной плотности и линейной плотности, сохраняющей первый момент — средний косинус угла рассеяния. Вес и параметры линейной плотности подбирались из условия сохранения трех моментов исходной плотности. К сожалению, линейная плотность имеет существенный недостаток. Она размывает приближенную плотность $\tilde{p}(\mu)$ на весь отрезок $[-1, 1]$, что неправильно, например, для рассеяния нейтронов на легких атомах.

Групповая анизотропия рассеяния часто сосредоточена на узком участке отрезка $[-1, 1]$ и может иметь максимумы на концах отрезка. Эти особенности качественно описываются треугольными плотностями. Следовательно, для уменьшения лучевых эффектов естественно использовать сумму $\beta p_d(\mu) + (1 - \beta) p_o(\mu)$ дискретной плотности $p_d(\mu)$ и опорной плотности $p_o(\mu)$, состоящей из комбинации треугольных плотностей. Параметры последних можно подобрать из условия сохранения первых двух моментов M_1 и M_2 .

Ниже изложен алгоритм построения опорной плотности и метод выбора параметра β , приводящий к сохранению трех и пяти моментов.

Построение опорной плотности

Опорную плотность $p_o(\mu)$ будем строить в виде суммы двух плотностей

$$p_o(\mu) = \alpha \varphi(\mu) + (1 - \alpha) \psi(\mu), \quad 0 \leq \alpha \leq 1.$$

В качестве первой плотности $\varphi(\mu)$ возьмем симметричную треугольную плотность с центром в точке M_1 :

$$\varphi(\mu) = \frac{1}{a} \left(1 - \frac{|\mu - M_1|}{a} \right), \quad a > 0.$$

Отметим, что плотность $\varphi(\mu)$ будет сосредоточена внутри отрезка $[-1, 1]$, если параметр a меньше $1 - |M_1|$. Запишем формулу для расчета моментов плотности $\varphi(\mu)$:

$$\langle \mu^n \rangle_\varphi = \int_{-a}^a \mu^n \varphi(\mu) d\mu = M_1^n + \sum_{k=1}^n \frac{n(n-1)\dots(n-k+1)}{k!} M_1^{n-k} I_k(a).$$

Здесь функция $I_k(a)$ равна нулю для нечетных значений k и равна $I_k(a) = 2a^k \left[(k+2)(k+1) \right]^{-1}$ для четных k .

Вторую плотность возьмем в виде взвешенной суммы $\psi(\mu) = \lambda \psi_+(\mu) + (1 - \lambda) \psi_-(\mu)$ треугольных плотностей $\psi_+(\mu)$ и $\psi_-(\mu)$ с максимумами на концах отрезка $[-1, 1]$:

$$\begin{aligned} \psi_-(\mu) &= \frac{2(h-1-\mu)}{h^2}, & -1 \leq \mu \leq -1+h; \\ \psi_+(\mu) &= \frac{2(\mu-1+h)}{h^2}, & 1-h \leq \mu \leq 1. \end{aligned}$$

Легко видеть, что параметры λ и h должны удовлетворять ограничениям $0 \leq \lambda \leq 1$ и $0 \leq h \leq 2$. Запишем формулу для расчета моментов плотности $\psi(\mu)$:

$$\langle \mu^n \rangle_\psi = \int_{-a}^a \mu^n \psi(\mu) d\mu = \left[\lambda + (-1)^n (1 - \lambda) \right] \left[1 + \sum_{k=1}^n (-h)^k \prod_{i=1}^k \frac{n-i+1}{i+2} \right].$$

Зная $\langle \mu^n \rangle_\varphi$ и $\langle \mu^n \rangle_\psi$, легко найти моменты опорной плотности $p_o(\mu)$:

$$\langle \mu^n \rangle_o = \alpha \langle \mu^n \rangle_\varphi + (1 - \alpha) \langle \mu^n \rangle_\psi.$$

Опорная плотность зависит от четырех параметров: α , λ , a , h . Для их определения потребуем выполнения условий $\langle \mu \rangle_o = M_1$ и $\langle \mu^2 \rangle_o = M_2$.

Если дисперсия $\sigma = \sqrt{M_2 - M_1^2}$ меньше чем $(1 - |M_1|)/\sqrt{6}$, то опорную плотность можно взять равной плотности $\varphi(\mu)$, т. е. положить параметр $\alpha = 1$. При этом $a = 6\sigma$. В противном случае надо привлекать плотность $\psi(\mu)$. Можно показать, что для этой плотности минимальное значение второго момента равно

$$\langle \mu^2 \rangle_\psi^{\min} = \begin{cases} \frac{1}{3}, & |M_1| \leq \frac{1}{3}; \\ \frac{1}{3} + \frac{(3|M_1| - 1)^2}{6}, & |M_1| > \frac{1}{3}. \end{cases}$$

Если $M_2 \geq \langle \mu^2 \rangle_\psi^{\min}$, то опорную плотность можно взять равной плотности $\psi(\mu)$ и положить параметр $\alpha = 0$. В этом случае параметры h , λ определяются из условий $\langle \mu \rangle_\psi = M_1$ и $\langle \mu^2 \rangle_\psi = M_2$:

$$h = 2 - \sqrt{2(3M_2 - 1)}; \quad \lambda = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{3M_1}{3 - h} \right).$$

При $M_2 < \langle \mu^2 \rangle_\psi^{\min}$ опорная плотность будет равна комбинации плотности $\varphi(\mu)$ с максимальным значением параметра $a = 1 - |M_1|$ и плотности $\psi(\mu)$ с $\langle \mu \rangle_\psi = M_1$ и минимальным значением второго момента $\langle \mu^2 \rangle_\psi = \langle \mu^2 \rangle_\psi^{\min}$. Из условия сохранения второго момента находится параметр α :

$$\alpha = \frac{M_2 - \langle \mu^2 \rangle_\varphi^{\max}}{\langle \mu^2 \rangle_\psi^{\min} - \langle \mu^2 \rangle_\varphi^{\max}}, \quad \langle \mu^2 \rangle_\varphi^{\max} = \frac{(1 - |M_1|)^2}{6} + M_1^2.$$

Построенная опорная плотность состоит из комбинации треугольных плотностей и поэтому легко моделируется. Отметим, что при стремлении параметров a или h к нулю соответствующие треугольные плотности становятся дельта-плотностями.

Выбор параметра для сохранения трех моментов

Пусть анизотропия рассеяния задана разложением третьего порядка:

$$p_3(\mu) = \sum_{k=0}^3 \frac{2k+1}{2} f_k L_k(\mu), \quad f_0 = 1.$$

Это разложение точно описывает первые три момента исходной плотности:

$$M_1 = f_1; \quad M_2 = \frac{1 + 2f_2}{3}; \quad M_3 = \frac{3f_1 + 2f_3}{5}.$$

Построим сумму дискретной плотности и опорной плотности, сохраняющей первые два момента:

$$p_s(\mu) = \beta p_o(\mu) + (1 - \beta) p_d(\mu).$$

Потребуем, чтобы первые три момента суммы совпадали с исходными моментами:

$$\langle \mu^k \rangle_s = M_k, \quad n = 1, 2, 3.$$

Из этого требования следует, что моменты дискретной плотности имеют вид

$$\langle \mu^k \rangle_d = \frac{M_k - \beta \langle \mu^k \rangle_o}{1 - \beta}.$$

Так как опорная плотность сохраняет два момента, то при любом значении параметра β первые два момента дискретной плотности равны моментам исходной плотности:

$$\langle \mu \rangle_d = M_1; \quad \langle \mu^2 \rangle_d = M_2.$$

Третий момент будет функцией параметра β : $\langle \mu^3 \rangle_d = \frac{M_3 - \beta \langle \mu^3 \rangle_o}{1 - \beta}$.

Дискретная плотность, сохраняющая три момента, равна сумме двух дельта-функций: $p_d(\mu) = w_1 \delta(\mu - \mu_1) + w_2 \delta(\mu - \mu_2)$, где узлы μ_i и веса w_i определяются корнями полинома Q_2 , который можно записать в виде

$$Q_2(\mu, \beta) = \mu^2 - \left(\lambda_1 + \lambda_2 + \frac{\beta}{1 - \beta} \Delta M_3 \right) \mu + \lambda_1 \left(\lambda_2 + \frac{\beta}{1 - \beta} \Delta M_3 \right) - \sigma_1^2.$$

Здесь $\Delta M_3 = M_3 - \langle \mu^3 \rangle_o$; $\lambda_1 = M_1$; $\lambda_2 = L_2/\sigma_1^2 - M_1$; $\sigma_1^2 = M_2 - M_1^2$; $L_2 = M_3 - M_1 M_2$. Нормировочная константа N_1 полинома $Q_2(\mu, \beta)$ равна σ_1^2 — дисперсии косинуса угла, и поэтому условие существования полинома выполнено.

Потребуем, чтобы один из концов отрезка $[-1, 1]$ был корнем полинома $Q_2(\mu, \beta)$. Из этого требования получаем два уравнения для определения параметра β :

$$\begin{aligned} \frac{\beta}{1 - \beta} \frac{\Delta M_3 (1 - M_1)}{\sigma_1^2} &= Q_2(1), & Q_2(1, 0) &= (1 - \lambda_1)(1 - \lambda_2) - \sigma_1^2; \\ \frac{\beta}{1 - \beta} \frac{\Delta M_3 (1 + M_1)}{\sigma_1^2} &= -Q_2(-1), & Q_2(-1, 0) &= (1 + \lambda_1)(1 + \lambda_2) - \sigma_1^2. \end{aligned}$$

Решая уравнения, получаем два возможных значения β :

$$\begin{aligned} \beta_+ &= \frac{A_+}{1 + A_+}, & A_+ &= \frac{Q_2(1) \sigma_1^2}{\Delta M_3 (1 - M_1)}; \\ \beta_- &= \frac{A_-}{1 - A_-}, & A_- &= -\frac{Q_2(-1) \sigma_1^2}{\Delta M_3 (1 + M_1)}. \end{aligned}$$

В качестве искомого β необходимо выбрать значение, удовлетворяющее условию $0 \leq \beta \leq 1$. Можно показать, что выбор определяется знаком ΔM_3 , поэтому первый узел равен $\mu_1 = \Delta M_3 / |\Delta M_3|$. Вес узла определяется условием $w_1 + w_2 = 1$. Второй узел μ_2 и его вес w_2 находятся по формулам

$$\mu_2 = \frac{M_1 - w_2 \mu_1}{1 - w_2}; \quad w_2 = \frac{\sigma_1^2}{\sigma_1^2 + (\mu_1 - M_1)^2}.$$

Построенная плотность $p_s(\mu)$ сохраняет три момента. Розыгрыш случайной величины по этой плотности достаточно прост, поскольку она является суммой треугольных плотностей и дельта-функций.

Выбор параметра для сохранения пяти моментов

Пусть анизотропия рассеяния задана разложением пятого порядка:

$$p_5(\mu) = \sum_{k=0}^5 \frac{2k+1}{2} f_k L_k(\mu), \quad f_0 = 1.$$

Это разложение точно описывает первые пять моментов исходной плотности:

$$M_1 = f_1; \quad M_2 = \frac{1 + 2f_2}{3}; \quad M_3 = \frac{3f_1 + 2f_3}{5}; \quad M_4 = \frac{8f_4 + 20f_2 - 7}{35}; \quad M_5 = \frac{8f_5 + 28f_3 + 27f_1}{69}.$$

Для моделирования плотность $p_5(\mu)$ заменяем суммой дискретной плотности $p_d(\mu)$ и плотности $\varphi(\mu)$. В качестве последней возьмем построенную выше комбинацию, сохраняющую три момента M_1, M_2 и M_3 . Потребуем, чтобы у суммарной плотности $p_s(\mu) = \beta\varphi(\mu) + (1 - \beta)p_d(\mu)$ пять моментов совпадали с исходными моментами: $\langle \mu^k \rangle_s = M_k, n = \overline{1, 5}$. Из этого требования следует, что моменты дискретной плотности имеют следующий вид:

$$\langle \mu^k \rangle_d = \frac{M_k - \beta \langle \mu^k \rangle_\varphi}{1 - \beta}.$$

Так как плотность $\varphi(\mu)$ сохраняет три момента, то при любом значении параметра β три момента дискретной плотности равны моментам исходной плотности: $\langle \mu \rangle_d = M_1; \langle \mu^2 \rangle_d = M_2; \langle \mu^3 \rangle_d = M_3$. Четвертый и пятый моменты будут функциями параметра β :

$$\langle \mu^4 \rangle_d = \frac{M_4 - \beta \langle \mu^4 \rangle_\varphi}{1 - \beta}; \quad \langle \mu^5 \rangle_d = \frac{M_5 - \beta \langle \mu^5 \rangle_\varphi}{1 - \beta}.$$

Следовательно, требуется построить дискретную плотность, сохраняющую пять моментов, из которых четвертый и пятый зависят от параметра β . Такая плотность определяется корнями ортогонального полинома Q_3 . Из рекуррентного соотношения для полиномов получаем

$$Q_3(\mu, \beta) = (\mu - \lambda_3) Q_2(\mu) - \sigma_2^2 Q_1(\mu).$$

Полиномы $Q_1(\mu)$ и $Q_2(\mu)$ определяются первыми тремя моментами и поэтому не зависят от параметра β . Можно показать, что коэффициенты $\lambda_3(\beta)$, $\sigma_2^2(\beta)$ и нормировка полинома $N_2(\beta)$ зависят от параметра β следующим образом:

$$\lambda_3(\beta) = \frac{L_3 - \beta \tilde{L}_3}{\sigma_2^2 - \beta \tilde{\sigma}_2^2} - L_2; \quad \sigma_2^2(\beta) = \frac{\sigma_2^2 - \beta \tilde{\sigma}_2^2}{1 - \beta}; \quad N_2(\beta) = \frac{N_2 - \beta \tilde{N}_2}{1 - \beta}.$$

Здесь непомеченные тильдой величины определяются моментами M_k , а помеченные — моментами $\langle \mu^k \rangle_\varphi$. Для существования полинома $Q_3(\mu, \beta)$ его нормировка $N_2(\beta)$ должна быть положительной.

Отсюда получаем, что $\beta \leq N_2 / \tilde{N}_2 \equiv \beta_0$. Потребовав, чтобы один из концов отрезка $[-1, 1]$ был корнем полинома $Q_3(\mu, \beta)$, получаем два уравнения для определения параметра β :

$$\begin{aligned} A_- - \beta \left[A_- + \tilde{A}_- + (\sigma_2^2 - \tilde{\sigma}_2^2)^2 R_- \right] + \tilde{A}_- \beta^2 &= 0; \\ A_+ - \beta \left[A_+ + \tilde{A}_+ + (\sigma_2^2 - \tilde{\sigma}_2^2)^2 R_+ \right] + \tilde{A}_+ \beta^2 &= 0, \end{aligned}$$

где

$$A_\pm = (\sigma_1^2 \pm L_2) \sigma_2^2 \mp L_3 - \sigma_2^4 R_\pm; \quad \tilde{A}_\pm = (\sigma_1^2 \pm L_2) \tilde{\sigma}_2^2 \mp \tilde{L}_3 - \tilde{\sigma}_2^4 R_\pm; \quad R_\pm = \sigma_1^2 \frac{Q_2(\pm 1)}{Q_1(\pm 1)}.$$

Обозначим положительные корни этих уравнений через β_- и β_+ . Тогда искомый параметр β вычисляется из условия $0 \leq \beta \leq \min(\beta_0, \beta_-, \beta_+)$. Если такого параметра нет, то это означает, что не удастся построить сумму $p_s(\mu)$, сохраняющую пять моментов. В этом случае приходится использовать сумму, сохраняющую три момента.

Положительные разложения анизотропии рассеяния

В многогрупповом приближении существует множество переходов, для которых разложение анизотропии рассеяния по полиномам Лежандра может быть положительным даже при малом числе членов. В этих случаях естественно разыгрывать косинус угла рассеяния прямо из разложения.

Для выявления таких переходов рассмотрим алгоритм проверки положительности разложения для трех и пяти членов. Для этого перепишем разложения в виде полиномов по степеням μ^k :

$$p_3(\mu) = \sum_{k=0}^3 \frac{2k+1}{2} f_k L_k(\mu) = \frac{1}{2} (s_0 + s_2 \mu^2) + \frac{1}{2} (b_1 \mu + b_3 \mu^3);$$

$$p_5(\mu) = \sum_{k=0}^5 \frac{2k+1}{2} f_k L_k(\mu) = \frac{1}{2} (s_0 + s_2 \mu^2 + s_4 \mu^4) + \frac{1}{2} (b_1 \mu + b_3 \mu^3 + b_5 \mu^5).$$

Коэффициенты s_k и b_k связаны с коэффициентами разложения f_k соотношениями

$$s_0 = 1 - \frac{5f_2}{2} + \frac{27f_4}{8}; \quad b_1 = 3f_1 - \frac{21f_3}{2} + \frac{165f_5}{8};$$

$$s_2 = \frac{5f_2}{2} - \frac{45f_4}{4}; \quad b_3 = \frac{35f_3}{6} - \frac{385f_5}{12};$$

$$s_4 = \frac{63f_4}{8}; \quad b_5 = \frac{693f_5}{40}.$$

Алгоритм проверки положительности основан на работе В. Л. Загускина [4]. Из нее следует, что в любой точке $\mu_* \in [-1, 1]$ существует минимальная парабола $q_2(\mu) = p_k(\mu_*) + p'_k(\mu_*)\mu - C\mu^2$, которая для всех $\mu \geq \mu_*$ лежит ниже $p_k(\mu)$. Старший коэффициент параболы $C = 0,5 \max\{|p''_k(\mu)|\}$, $\mu \in [-1, 1]$. Алгоритм проверки является итерационным, и итерации строятся следующим образом.

Будем считать полином положительным, если $p_k(\mu) \geq \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$ — заданный уровень положительности. Пусть в точке $\mu_1 = -1$ значение полинома больше $\varepsilon > 0$. Строим в этой точке минимальную параболу $p_k(\mu_1) + p'_k(\mu_1)\mu - C\mu^2$ и ищем корень параболы $\mu_2 > \mu_1$. Если корень $\mu_2 \geq 1$, то полином $p_k(\mu)$ будет положительным. В противном случае проверяем значение $p_k(\mu_2)$. Если $p_k(\mu_2) < \varepsilon$, то полином отрицательный, иначе строим новую параболу в точке μ_2 .

Предложенный алгоритм демонстрируется на рис. 1.

Пусть разложение $p_k(\mu)$ положительно и нормировано. Построим алгоритм розыгрыша косинуса μ из плотности $p_k(\mu)$ для случая $k = 5$. Для этого определим сумму

$$q(\mu) = p_5(\mu) + p_5(-\mu) = s_0 + 3s_2\mu^2 + 5s_4\mu^4, \quad \int_0^1 q(\mu) d\mu = s_0 + s_2 + s_4 = 1.$$

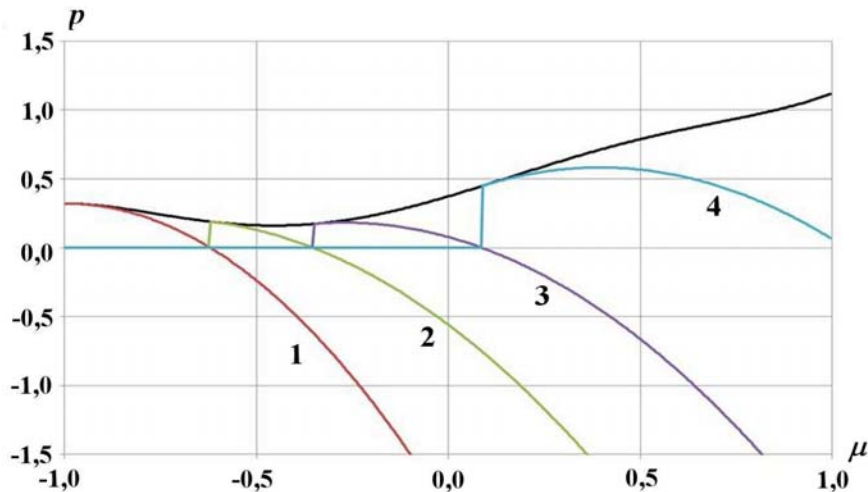


Рис. 1. Итерационная процедура проверки положительности полинома (1—4 — последовательность итераций)

Она является плотностью на отрезке $[0, 1]$. Пусть $\hat{\mu}$ — случайная величина с плотностью $q(\mu)$. Рассмотрим случайную величину μ , равную $\mu = \hat{\mu}$ с вероятностью $\alpha = p_5(\hat{\mu})/q(\hat{\mu})$ и равную $\mu = -\hat{\mu}$ с противоположной вероятностью $1 - \alpha$. Можно показать, что она имеет плотность распределения $p_5(\mu)$. Аналогично можно рассмотреть плотность $p_3(\mu)$. Следовательно, розыгрыш косинуса угла рассеяния сводится к моделированию плотности $q(\mu)$, алгоритм которого хорошо известен [5].

Изложенный метод моделирования демонстрируется на рис. 2. Кривая 1 представляет исходную плотность $p_5(\mu)$, а кривая 2 показывает симметричную часть $q(\mu)$. Результатам моделирования соответствуют маркеры.

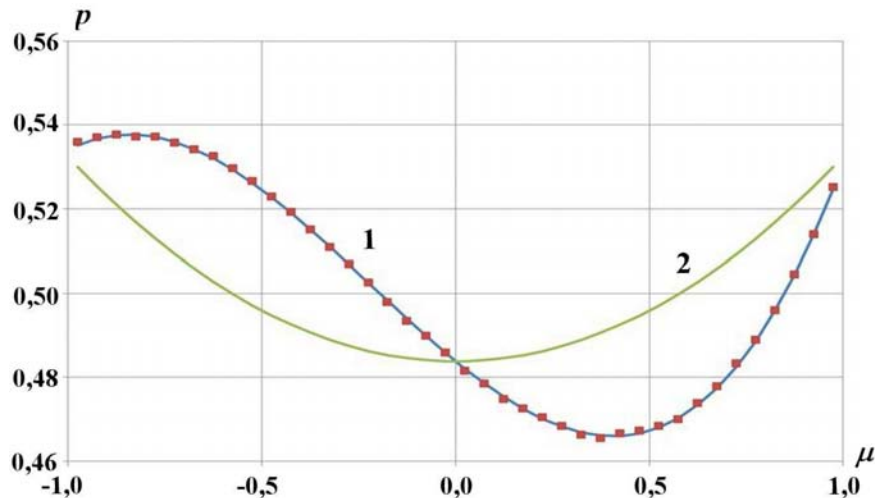


Рис. 2. Моделирование $p_5(\mu)$ с использованием симметричной плотности

Численные расчеты модельных задач

Для демонстрации качества предложенного метода рассмотрим несколько модельных задач переноса нейтронов. При решении задач использовались спектральные константы с кусочно-линейным описанием анизотропии рассеяния и 26-групповые константы с P_5 -приближением для анизотропии рассеяния.

В первой серии задач рассчитывался коэффициент размножения в бесконечной среде и для критической сборки в форме сферы. Были проведены спектральные расчеты для плутония ^{239}Pu и смеси, состоящей из водорода H и плутония ^{239}Pu . В смесь входило одинаковое число атомов обоих элементов. Радиусы сфер равнялись 6,54 и 5,89 см соответственно. Плотность материала во всех задачах была равна 15 г/см^3 .

Ниже расчеты методом Монте-Карло обозначены: СПЕКТ — спектральные; МК26С — многогрупповые со сглаживанием лучевых эффектов; МК26Д — многогрупповые без сглаживания лучевых эффектов. Одномерные многогрупповые разностные расчеты в P_5 -приближении имеют обозначение Р1Д26. Они были выполнены на достаточно подробной сетке по радиусу и косинусу полярного угла.

Табл. 1 содержит полученные коэффициенты размножения для бесконечной среды, табл. 2 — для сферы. Из таблиц видно, что если в задаче отсутствует водород, то все групповые методы дают похожие результаты, совпадающие со спектральными расчетами. Наличие водорода приводит к замедлению нейтронов и попаданию их в область резонансных сечений, а эта область, по-видимому, плохо описывается 26-групповыми константами.

На рис. 3, а, б (см. также цветную вкладку) приведены результаты расчета потока нейтронов по группам (N) на внешней границе сферы с плутонием и сферы, заполненной смесью водорода и плутония. Видно, что все методы дают близкие результаты и что в сфере с водородом проявляется медленная часть спектра.

Таблица 1

Таблица 2

K_{Φ} в бесконечной среде

K_{Φ} для сферических критических сборок

Расчет	^{239}Pu	H + ^{239}Pu
СПЕКТ	2,945562	2,426973
МК26С	2,944766	2,393473
МК26Д	2,944909	2,393511

Расчет	^{239}Pu	H + ^{239}Pu
СПЕКТ	1,000191	0,998770
МК26С	1,000110	0,990869
МК26Д	1,000255	0,991081
Р1Д26	1,000477	0,991133

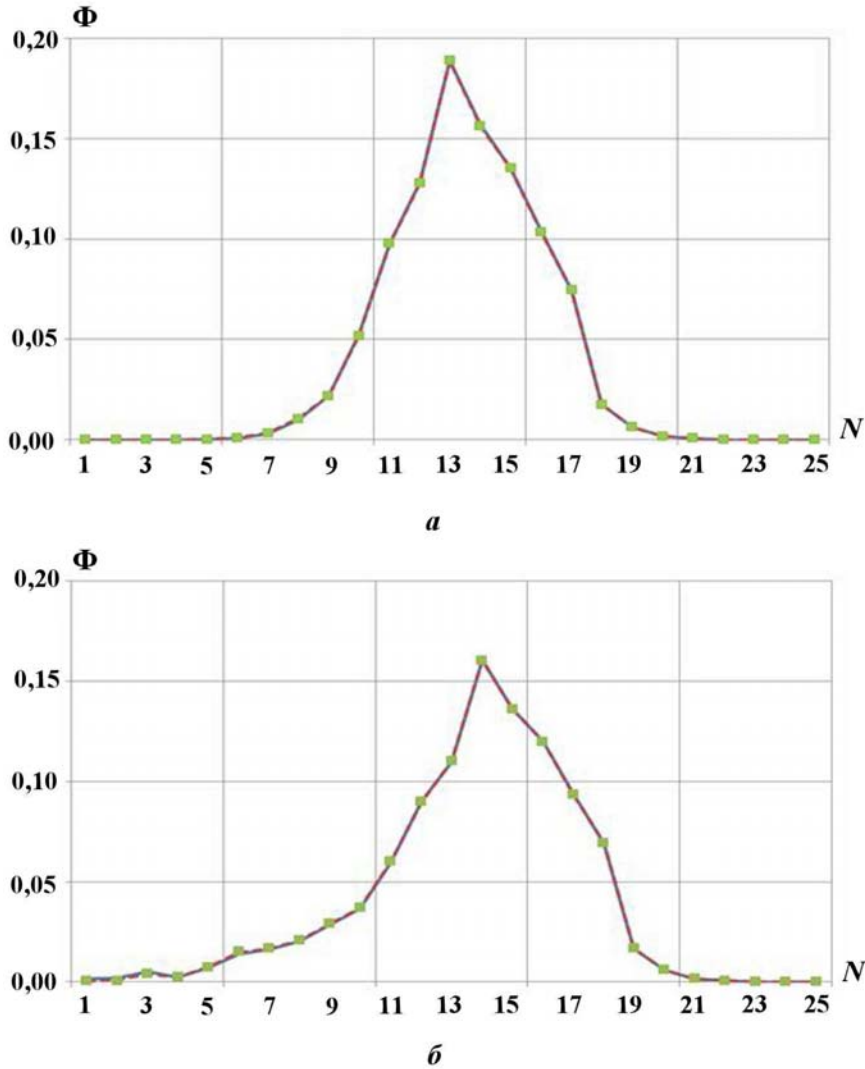


Рис. 3. Поток нейтронов $\Phi(N)$ на внешней границе сферы: *а* — с плутонием; *б* — со смесью водорода и плутония; — СПЕКТ; - - МК26С; ··· Р1Д26

В следующей задаче рассматривается прохождение нейтронов через цилиндр радиусом 5 см и длиной 10 см, который состоит из CH_2 с плотностью $0,93 \text{ г/см}^3$. Источник расположен у переднего торца цилиндра, и его распределение по энергии совпадает со спектром деления. Графики на рис. 4 (см. также цветную вкладку) показывают распределение потока нейтронов по радиусу на заднем торце цилиндра. Сетка по радиусу — равномерная с шагом 0,1 см.

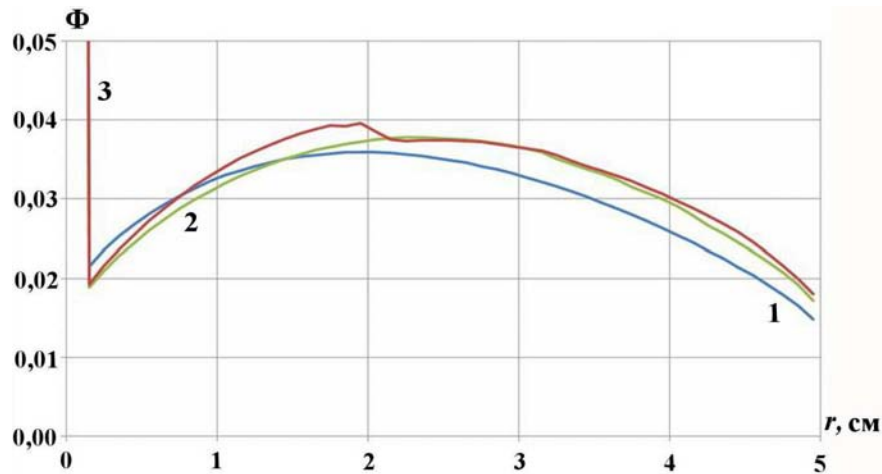


Рис. 4. Поток нейтронов $\Phi(r)$ на задней границе цилиндра: 1 — СПЕКТ; 2 — МК26С; 3 — МК26Д

Видно, что в случае МК26Д профиль потока имеет излом в районе радиуса 2 см. По-видимому, он является следствием лучевого эффекта, создаваемого дельта-функциями. Резкий всплеск на малых радиусах объясняется рассеянием вперед в лабораторной системе координат.

В настоящее время оба варианта предложенного метода являются составной частью методики С007 [6] и используются в расчетах реакторов по программе ТДМСС, созданной на базе методики С007.

Список литературы

1. Белл Д., Глестон С. Теория ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1976.
2. Sloan D. P. A New Multigroup Monte-Carlo Scattering Algorithm for Neutral and Charged-Particle Boltzmann and Fokker-Planck Calculations. Technical Report SAND83-7094. Sandia National Laboratories, 1983.
3. Brockmann H. Treatment of anisotropic scattering in numerical neutron transport // Theory Nuclear Science and Engineering. 1981. Vol. 77. P. 377–414.
4. Загускин В. Л. Вычислительная схема для ускоренного вычисления всех корней уравнения // Математическое просвещение. 1961. Вып. 6. С. 263–265.
5. Ермаков С. М., Михайлов Г. А. Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982.
6. Житник А. К., Донской Е. Н., Огнев С. П., и др. Методика С-007 решения методом Монте-Карло связанных линейных уравнений переноса нейтронов, гамма-квантов, электронов и позитронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 1. С. 17–24.

Статья поступила в редакцию 18.07.13.