

УДК 621.039

ОЦЕНКА ВРЕМЕННОЙ ПОСТОЯННОЙ В ЗАДАЧАХ ПЕРЕНОСА ЧАСТИЦ МЕТОДАМИ СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Д. Г. Модестов

(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академика Е. И. Забабахина",
г. Снежинск Челябинской области)

Асимптотическое поведение решения уравнения переноса на больших временах определяется собственным значением оператора переноса с максимальной действительной частью — временной постоянной. Соответственно указанная величина представляется важной характеристикой динамики радиационных полей. Для ее расчета методами статистического моделирования, которые позволяют получать решение уравнения переноса с наименьшими приближениями, наиболее часто используется подход, основанный на решении условно-критической задачи с добавлением вспомогательной реакции, параметризованной пробным значением временной постоянной. Истинное значение получается подбором из условия критичности этого оператора. Недостатком используемых в настоящее время методик, основанных на указанном подходе, является ограниченная применимость.

В представленной работе рассматривается подход со вспомогательным оператором, зависящим от времени и одновременно гладко зависящим от пробного значения временной постоянной, для которого указанный недостаток отсутствует. Для нахождения решения используется алгоритм, подобный методу поколений с квадратичной скоростью сходимости в оптимальном случае. Рассматриваются вопросы существования сходимости. Приводится сравнение численного решения с аналитическим, в том числе при отсутствии сходимости.

Ключевые слова: уравнение переноса частиц, временная постоянная, метод поколений, статистическое моделирование.

Введение

Изменение радиационного поля описывается линейным уравнением переноса частиц (общий вид для частных случаев приводится, например, в [1, 2]), которое содержит действие оператора переноса на плотность радиационного поля. Свойства оператора переноса рассматриваются в работах [3, 4]. В частности, там показано, что при достаточно общих предположениях проекция на действительную ось точечной части его спектра лежит правее проекции остальной части спектра. Соответственно (см. также [1]) при условии существования точечной части асимптотическое поведение решения определяется собственным значением оператора переноса с наибольшей действительной частью. Можно показать (см. [3–6]), что оно действительно. Это соб-

ственное значение в дальнейшем для краткости будем называть, аналогично [7], временной постоянной. Асимптотическая конфигурация радиационного поля пропорциональна собственной функции, соответствующей временной постоянной, а сама данная величина представляет собой характерную скорость изменения интенсивности радиационного поля. При этом в качестве характерной скорости выхода на асимптотику можно считать расстояние между этим собственным значением и действительной частью остального спектра. Необходимо отметить, что погрешность определения временной постоянной численными методами, кроме всего прочего, зависит от указанного расстояния (чем оно больше, тем меньше погрешность).

В случае отсутствия точечного спектра (вопросы его существования рассматриваются, на-

пример, в [4]) невозможно корректно определить асимптотическую конфигурацию и соответствующую ей характерную скорость выхода на асимптотику. В качестве характерной скорости изменения интенсивности радиационного поля можно рассматривать верхнюю границу действительной части спектра оператора переноса. Однако вопрос о точности определения этой величины численными методами остается открытым. С учетом данных факторов в дальнейшем при построении методики расчета будет предполагаться существование собственного значения.

Можно утверждать, что в большинстве задач переноса частиц математическая модель получается наиболее адекватной физической, если для расчета применяются методы статистического моделирования, основы которого приводятся, например, в [8]. Поэтому использование таких методов представляется предпочтительным и при оценке временной постоянной, а также функционалов на соответствующей собственной функции.

Необходимо отметить, что вопрос о построении алгоритма нахождения временной постоянной рассматривается в течение продолжительного времени. В частности, различные подходы для задач переноса нейтронов представлены в работах [9–17]. Однако они не лишены недостатков.

Наиболее простой и в то же время радикальный подход к решению задачи предлагается в работах [9, 10]. Он основан на конечномерной аппроксимации этой задачи, а методы статистического моделирования используются для оценки элементов матрицы переходов. Хотя такой подход позволяет оценивать набор собственных значений, включая временную постоянную, точность этой оценки представляется неопределенной.

В работах [11, 12] предлагается добавление к оператору переноса фиктивной реакции поглощения с частотой α и решение соответствующей условно-критической задачи [18]. При этом временная постоянная является корнем уравнения

$$k_\alpha = 1, \quad (1)$$

где k_α — эффективный коэффициент размножения. В рамках данного подхода рассматриваются задачи только с мгновенными нейтронами и при $\alpha > 0$ (можно показать, что отрицательные значения этого параметра в общем случае недопустимы). В указанных работах схема решения представляет собой итерационный процесс с

решением условно-критической задачи методом поколений на каждой итерации.

В работе [13] также рассматривается решение условно-критической задачи и оценка k_α , но без дополнительной реакции. Такая же, как в [11, 12], зависимость от α получается с использованием весовой методики.

В работах [14–16] предлагается другой подход, основанный на решении уравнения переноса с источником, пропорциональным пробному значению временной постоянной со знаком минус. Такой подход допустим только для подкритических систем.

Следует отметить, что рассмотренные выше подходы либо используют дополнительные (к постановке задачи переноса) приближения, либо предназначены для оценки временной постоянной при условии ее принадлежности ограниченному интервалу. При этом отсутствуют алгоритмы совместного использования разных подходов. Универсальным может считаться подход, рассматриваемый в работе [17], который основан на отношении функционалов от распределения нейтронов на последующих временных шагах. Основной проблемой его использования, особенно при учете запаздывающих нейтронов, является выбор этого шага, так как от него сильно зависит трудоемкость расчета.

Далее будет представлена альтернативная универсальная методика, по трудоемкости близкая методу поколений, основанная, подобно [11, 12], на введении дополнительной фиктивной реакции.

Уравнение переноса

Вид уравнения переноса с различной степенью детализации приводится во многих работах (см., например, [1–4]). Для поставленных здесь целей это уравнение удобно представить следующим образом:

$$\frac{\partial}{\partial t} n(p, t) = \hat{P}(t) n(p, t) + s(p, t). \quad (2)$$

Здесь используются следующие обозначения: $s(p, t)$ — источник частиц; $p = (\vec{r}, \vec{v}, \theta)$ — параметры частицы (координаты, скорость и ее тип соответственно); $n(p, t)$ — плотность распределения параметров частицы в момент времени t ; $\hat{P}(t)$ — оператор переноса, в общем случае зависящий от времени. В случае переноса нейтронов, а также других нейтральных частиц оператор $\hat{P}(t)$ представляется суммой операторов:

$$\hat{P}(t) = \sum_i \hat{R}_i(t) - \vec{v} \frac{\partial}{\partial \vec{r}}. \quad (3)$$

Для заряженных частиц этот оператор содержит дополнительный член, учитывающий влияние внешних силовых полей, который здесь рассматриваться не будет. В выражении (3) \hat{R}_i является оператором реакции i -го типа. Он имеет следующий вид:

$$\hat{R}_i(t) n(p, t) = \hat{Q}_i(t) n(p, t) - \Lambda_i(p) n(p, t), \quad (4)$$

где первое слагаемое имеет смысл оператора рождения вторичных частиц и представляется следующим образом:

$$\hat{Q}_i(t) n(p, t) = \int \mu_i(p, q, t) \Lambda_i(q) n(q, t) dq. \quad (5)$$

В выражениях (4) и (5) $\Lambda_i(p)$ — частота реакции, равная произведению макроскопического сечения на модуль скорости, а $\mu_i(p, q, t)$ — дифференциальная множественность вторичных частиц. Обе эти функции неотрицательны.

Решение уравнения переноса ищется на пространстве конфигураций радиационного поля, которое определяется множеством неотрицательных функций параметров частицы, рассматриваемым как конус [5, 6] в некотором банаховом пространстве [3] (вид нормы несущественен). Для краткости этот конус в дальнейшем будет именоваться физическим. При этом вид оператора переноса, определяемый соотношениями (3)–(5), гарантирует, что решение (2) лежит в физическом конусе при условии, что источник также принадлежит этому конусу.

Если источник является мгновенным, а оператор переноса (3) не зависит от времени, то на больших временах для решения (2) устанавливается асимптотическая конфигурация радиационного поля, интегральная интенсивность которого изменяется по экспоненте с параметром, равным временной постоянной (при условии существования последней). Эти асимптотические параметры находятся решением следующего однородного уравнения:

$$\alpha n_\alpha = \hat{P} n_\alpha. \quad (6)$$

Здесь в отличие от (3) символ оператора переноса приведен без указания зависимости от времени, чтобы подчеркнуть его стационарность. Вообще говоря, решение этого уравнения не единственно. Из всех решений наиболее важна временная постоянная, которая в дальнейшем будет обозначаться α_0 .

Прежде чем построить процедуру решения (6), заметим, что в настоящее время наиболее распространенным подходом для определения характеристик размножающих систем является решение условно-критической задачи [1, 2]. Для ее построения выбирается набор реакций размножения. Сумма операторов рождения вторичных частиц в этих реакциях в дальнейшем будет обозначаться символом \hat{Q}_p . С ее использованием определяется оператор переноса без размножения:

$$\hat{P}_0 = \hat{P} - \hat{Q}_p. \quad (7)$$

Можно видеть, что \hat{P}_0 имеет вид оператора переноса (3) с нулевой множественностью на реакциях размножения. Основным критерием выбора \hat{Q}_p является подкритичность \hat{P}_0 , т. е. отрицательность его временной постоянной.

Для нахождения временной постоянной с использованием решения уравнения (1) удобно рассмотреть вспомогательную условно-критическую задачу. Для этого необходимо ввести вспомогательную реакцию, зависящую от пробного собственного значения α , а также в общем случае от времени, которая в дальнейшем будет обозначаться $\hat{R}_\alpha(t)$. С ее использованием определяется вспомогательный оператор сдвига по времени $\hat{U}_\alpha(t)$, представляющий собой решение следующей задачи Коши:

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_\alpha(t) = (\hat{P}_0 + \hat{R}_\alpha(t)) \hat{U}_\alpha(t), \quad \hat{U}_\alpha(0) = 1. \quad (8)$$

С помощью этого оператора сдвига по времени определяются следующие операторы:

$$\hat{K}_\alpha = \int_0^{t_0} (\hat{Q}_p - \hat{R}_\alpha(t) - \alpha) \hat{U}_\alpha(t) dt + \hat{U}_\alpha(t_0); \quad (9)$$

$$\hat{T}_\alpha = \int_0^{t_0} t (\hat{Q}_p - \hat{R}_\alpha(t) - \alpha) \hat{U}_\alpha(t) dt + t_0 \hat{U}_\alpha(t_0). \quad (10)$$

При этом предполагается, что интегралы существуют. Для $\hat{R}_\alpha(t)$ предполагается непрерывная зависимость от α , а при действительном значении этого параметра — справедливость следующего соотношения:

$$-\hat{R}_\alpha(t) - \alpha \geq 0. \quad (11)$$

Эта запись подразумевает, что левая часть является положительным оператором на физическом конусе (если этот оператор представляет собой

умножение на скаляр, то запись можно понимать буквально). При указанном ограничении операторы (9) и (10) также являются положительными. Можно отметить, что в случае $\alpha = 0$ и $\widehat{R}_\alpha(t) = 0$ уравнение на собственное значение

$$\widehat{K}_0 \tilde{n} = k \tilde{n}$$

эквивалентно уравнению условно-критической задачи. Оставляя пока использование оператора \widehat{T}_α , можно доказать следующее:

Утверждение 1. Пусть параметр α такой, что оператор $\int_0^{t_0} \widehat{U}_\alpha(t) dt$ обратим, а распределение \tilde{n} удовлетворяет следующему уравнению:

$$\widehat{K}_\alpha \tilde{n} = \tilde{n}. \quad (12)$$

Тогда α является собственным значением оператора переноса, а его собственная функция связана с (12) следующим образом:

$$n_\alpha = \int_0^{t_0} \widehat{U}_\alpha(t) dt \cdot \tilde{n}. \quad (13)$$

Доказательство. Подстановкой (8) в (9) получается следующее представление оператора:

$$\widehat{K}_\alpha = \int_0^{t_0} \left[(\widehat{Q}_p + \widehat{P}_0 - \alpha) \widehat{U}_\alpha(t) - \frac{\partial}{\partial t} \widehat{U}_\alpha(t) \right] dt + \widehat{U}_\alpha(t_0).$$

Принимая во внимание определение (7) и интегрируя это выражение с учетом начального условия (8) и вынесением не зависящих от времени объектов из-под интеграла, несложно получить следующее представление рассматриваемого оператора:

$$\widehat{K}_\alpha = (\widehat{P} - \alpha) \int_0^{t_0} \widehat{U}_\alpha(t) dt + 1. \quad (14)$$

Подстановка (14) в (12) показывает, что (13) удовлетворяет уравнению (6). Обратное утверждение верно вследствие обратимости оператора $\int_0^{t_0} \widehat{U}_\alpha(t) dt$. Доказательство закончено.

Отсюда следует, что если на некотором множестве α существуют точки, в которых выполняются условия утверждения 1, то эти точки принадлежат спектру оператора переноса, а соответствующие им собственные функции связаны

с (12) соотношением (13). Поэтому, принимая во внимание, что временная постоянная действительна, как это показано в [3], ее поиск можно локализовать на действительной прямой. При условии обратимости на ней оператора (13) удобно рассмотреть вспомогательную задачу на определение собственного значения оператора (9):

$$\widehat{K}_\alpha \tilde{n}_\alpha = k_\alpha \tilde{n}_\alpha. \quad (15)$$

Для каждого α существует набор решений этого уравнения, вообще говоря, комплексных, образующих непрерывные кривые при изменении указанного параметра. На каждой кривой любому корню уравнения (1) согласно утверждению 1 соответствует некоторое собственное значение оператора переноса. При этом возникают проблемы выбора кривой, соответствующей временной постоянной, и построения эффективного алгоритма нахождения этой постоянной.

Решению данных проблем может помочь оценка производной $\frac{dk_\alpha}{d\alpha}$. Для этого удобно использовать формализм сопряженного пространства [3], состоящего из непрерывных линейных функционалов, определенных на множестве распределений параметров частицы. На сопряженном пространстве можно определить функционал n_α^+ , который является решением аналогичной (15) задачи на собственное значение

$$\widehat{K}_\alpha^+ n_\alpha^+ = k_\alpha n_\alpha^+, \quad (16)$$

где \widehat{K}_α^+ — оператор, сопряженный с \widehat{K}_α . При этом считается, что n_α^+ представляет собой линейный функционал (в отличие от полулинейного, используемого в [3]). При таком определении существует k_α то же самое, что и в (15), при котором значение данного функционала на соответствующем решении указанной задачи ненулевое. В связи с этим для упрощения в дальнейшем будет использоваться следующая нормировка:

$$\langle n_\alpha^+, \tilde{n}_\alpha \rangle = 1,$$

где угловыми скобками обозначено значение функционала n_α^+ на распределении \tilde{n}_α . Несложно показать, что в этом случае производная k_α имеет следующее представление:

$$\frac{dk_\alpha}{d\alpha} = \left\langle n_\alpha^+, \frac{d\widehat{K}_\alpha}{d\alpha} \tilde{n}_\alpha \right\rangle. \quad (17)$$

Хотя представление (17) не позволяет определить значения производной во всей области

изменения параметра α , однако с его помощью это можно сделать вблизи собственного значения оператора переноса. Для этого удобно использовать следующую величину:

$$\tau_\alpha = \left\langle n_\alpha^+, \widehat{T}_\alpha \tilde{n}_\alpha \right\rangle, \quad (18)$$

которая при $\alpha = \alpha_0$ имеет смысл некоторого среднего времени [18]. При этом справедливо следующее:

Утверждение 2. Если α удовлетворяет условиям утверждения 1, то $\frac{dk_\alpha}{d\alpha} = -\tau_\alpha$.

Для доказательства можно отметить, что с учетом (7) и (8) оператор (10) представляется в виде

$$\begin{aligned} \widehat{T}_\alpha &= \int_0^{t_0} t (\widehat{P} - \alpha) \widehat{U}_\alpha(t) dt - \\ &- \int_0^{t_0} t \frac{\partial}{\partial t} \widehat{U}_\alpha(t) dt + t_0 \widehat{U}_\alpha(t_0). \end{aligned}$$

Вынося независимые от времени объекты в первом слагаемом из-под интеграла и интегрируя второе слагаемое, несложно получить

$$\widehat{T}_\alpha = (\widehat{P} - \alpha) \int_0^{t_0} t \widehat{U}_\alpha(t) dt + \int_0^{t_0} \widehat{U}_\alpha(t) dt.$$

Соответственно (18) принимает вид

$$\begin{aligned} \tau_\alpha &= \left\langle n_\alpha^+, (\widehat{P} - \alpha) \int_0^{t_0} t \widehat{U}_\alpha(t) dt \cdot \tilde{n}_\alpha \right\rangle + \\ &+ \left\langle n_\alpha^+, \int_0^{t_0} \widehat{U}_\alpha(t) dt \cdot \tilde{n}_\alpha \right\rangle. \end{aligned} \quad (19)$$

В то же время для значения производной (17) с учетом представления (14) справедливо следующее выражение:

$$\begin{aligned} \frac{dk_\alpha}{d\alpha} &= \left\langle n_\alpha^+, (\widehat{P} - \alpha) \int_0^{t_0} \frac{d\widehat{U}_\alpha(t)}{d\alpha} dt \cdot \tilde{n}_\alpha \right\rangle - \\ &- \left\langle n_\alpha^+, \int_0^{t_0} \widehat{U}_\alpha(t) dt \cdot \tilde{n}_\alpha \right\rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

Первые слагаемые в правых частях (19) и (20) могут быть представлены в виде

$$\left\langle n_\alpha^+, (\widehat{P} - \alpha) \widehat{A} \tilde{n}_\alpha \right\rangle = \left\langle (\widehat{P}^+ - \alpha) n_\alpha^+, \widehat{A} \tilde{n}_\alpha \right\rangle, \quad (21)$$

где \widehat{A} — некоторый оператор, вид которого в рассматриваемом контексте не имеет значения. Равенство правой и левой частей следует из определения сопряженного оператора [3], из него же следует равенство их обеих нулю. Действительно, n_α^+ является решением уравнения (16) с $k_\alpha = 1$. Подставляя в это уравнение оператор, сопряженный с (14), согласно правилам, обоснованным в [3], можно получить следующее соотношение:

$$\left(\int_0^{t_0} \widehat{U}_\alpha^+(t) (\widehat{P}^+ - \alpha) dt + 1 \right) n_\alpha^+ = n_\alpha^+. \quad (22)$$

Из (22), а также из того, что α является собственным значением оператора переноса, а оператор $\int_0^{t_0} \widehat{U}_\alpha^+(t) dt$ обратим, следует, что решением (16) является соответствующая сопряженная собственная функция оператора переноса. Это, в свою очередь, означает, что левая часть (21), а соответственно, и правая, равна нулю.

Таким образом, (19) и (20) определяются только вторыми слагаемыми, которые равны по абсолютной величине и различны по знаку. Доказательство закончено.

Среди кривых, образованных собственными значениями уравнения (15), можно выбрать ту, которая отвечает ведущим собственным значениям (ведущая кривая). Так как оператор (9) является положительным, то для любой точки этой кривой \tilde{n}_α принадлежит физическому конусу, а n_α^+ является положительным функционалом на нем. Соответственно вследствие положительности оператора (10) τ_α всюду положительна. Ведущая кривая пересекает прямую (1), причем в точке пересечения согласно утверждению 2 производная отрицательна. А с учетом непрерывности кривой данное пересечение единственно. Так как действительные части всех остальных собственных значений не превышают временную постоянную, точки их пересечения с (1) лежат левее нее. Таким образом, временной постоянной соответствует корень уравнения (1) для ведущей кривой. А значит, метод

поколений [18], предназначенный для нахождения ведущего собственного значения и соответствующего ему распределения, подходит и для решения задачи (6).

Алгоритм определения временной постоянной

При известном собственном значении оператора переноса соответствующая собственная функция получается при решении условно-критической задачи (15), алгоритмы решения которой достаточно хорошо разработаны (см., например, [18]). Таким образом, наиболее проблемной представляется задача определения временной постоянной. Для этого удобно выбрать некоторую монотонную и дважды непрерывно дифференцируемую функцию g , удовлетворяющую условию $g(1) = 0$, с использованием которой уравнение (1) можно представить в следующем альтернативном виде:

$$g(k_\alpha) = 0. \quad (23)$$

С учетом утверждения 2 значение этой функции при произвольном α может быть представлено начальным отрезком степенного ряда:

$$g(k_\alpha) = -g'\tau_{\alpha_0}(\alpha - \alpha_0) + g''(\tilde{\alpha}) \frac{(\alpha - \alpha_0)^2}{2}, \quad (24)$$

где $g' \equiv \left. \frac{dg(k)}{dk} \right|_{k=1}$, $g''(\alpha) \equiv \frac{d^2g(k_\alpha)}{d\alpha^2}$, а $\tilde{\alpha}$ лежит между α_0 и α . При условии близости последних значений, т. е. когда $|g'\tau_{\alpha_0}| \gg |g''(\tilde{\alpha})(\alpha - \alpha_0)|$, вторым слагаемым в правой части (24) можно пренебречь. В свою очередь, если этому условию удовлетворяют все α_i из заданной выборки, то в пренебрежении этим слагаемым справедливо соотношение

$$\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m g_i = \tau_{\alpha_0} g' \alpha_0 - \frac{\tau_{\alpha_0} g'}{m} \sum_{i=1}^m \alpha_i,$$

где для краткости обозначено $g_i \equiv g(k_{\alpha_i})$. Из этого соотношения несложно получить оценку временной постоянной. Введя обозначение $\langle \zeta \rangle \equiv \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \zeta_i$ для среднего по выборке значения ζ , эту оценку можно записать в следующем виде:

$$\alpha_0 = \langle \alpha \rangle + \frac{\langle g \rangle}{\tau_{\alpha_0} g'}. \quad (25)$$

С учетом того, что величины $\langle g \rangle$ и τ_{α_0} получаются численными методами, их значения определены с некоторыми погрешностями Δg и $\Delta \tau$ соответственно. Отсюда можно получить оценку погрешности временной постоянной в первом приближении:

$$\Delta \alpha_0 \leq \frac{1}{\tau_{\alpha_0} g'} \left(\Delta g + |\langle g \rangle| \frac{\Delta \tau}{\tau_{\alpha_0}} \right).$$

Следует отметить, что эта оценка получена в линейном приближении и не учитывает последнего члена в выражении (24), пропорционального второй производной. Поэтому, если не выполняется условие близости α_i к α_0 , необходимое для корректности этого приближения, отклонение (25) от точного значения может быть существенно выше.

Таким образом, если из каких-либо соображений известен набор α_i , близких к временной постоянной, значение последней можно уточнить по формуле (25). Для получения набора α_i удобно использовать стационарную последовательность, получаемую при решении системы уравнений (15), (23) методом простой итерации со стохастической правой частью. Алгоритм получения такой последовательности рассмотрен в [19]. В частности, показано, что при любом начальном состоянии в общем случае нестационарная последовательность сходится к стационарной при условии сходимости соответствующего неслучайного итерационного оператора. При заданных начальных распределении и пробном собственном значении ($\tilde{\mathbf{n}}^0$ и α^0) этот оператор, параметризованный натуральным числом L и действительным числом ω , можно представить следующим образом:

$$\tilde{\mathbf{n}}^{m+1} = \frac{\widehat{K}_{\alpha^m}^L \tilde{\mathbf{n}}^m}{\langle \mathbf{f}^+, \widehat{K}_{\alpha^m}^L \tilde{\mathbf{n}}^m \rangle}; \quad (26)$$

$$k = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \frac{\langle \mathbf{f}^+, \widehat{K}_{\alpha^m}^L \tilde{\mathbf{n}}^m \rangle}{\langle \mathbf{f}^+, \widehat{K}_{\alpha^m}^{L-1} \tilde{\mathbf{n}}^m \rangle}; \quad (27)$$

$$\tau = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \frac{\langle \mathbf{f}^+, \widehat{T}_{\alpha^m} \widehat{K}_{\alpha^m}^{L-1} \tilde{\mathbf{n}}^m \rangle}{\langle \mathbf{f}^+, \widehat{K}_{\alpha^m}^{L-1} \tilde{\mathbf{n}}^m \rangle}; \quad (28)$$

$$\alpha^{m+1} = \alpha^m + \omega \frac{g(k)}{g'\tau}, \quad (29)$$

где через \mathbf{f}^+ обозначен некоторый заданный положительный функционал (обычно определяемый единичной функцией).

Можно отметить, что при $\omega = 0$ итерации фактически представляют собой метод поколений [18]. В этом случае они безусловно сходятся к ведущему собственному значению и соответствующему распределению условно-критической задачи (15) при заданном значении α^0 .

Однако наибольший интерес вызывают условия сходимости при ненулевом значении ω . Как можно видеть, $\tilde{\mathbf{n}}_{\alpha_0}$ и α_0 представляют стационарную точку итерационного оператора (26)–(29). Для оценки ее устойчивости необходимо рассмотреть свойства матрицы производных. Здесь можно выделить \hat{d}_{α} – матрицу производных последующего поколения по предыдущему, зависящую от пробного значения α . В обозначениях (26) $\hat{d}_{\alpha^m} = \frac{\partial \tilde{\mathbf{n}}^{m+1}}{\partial \tilde{\mathbf{n}}^m}$. С использованием этого обозначения матрицу производных итерационного оператора удобно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial (\tilde{\mathbf{n}}^{m+1}, \alpha^{m+1})}{\partial (\tilde{\mathbf{n}}^m, \alpha^m)} = \hat{D}_0^m + \omega \hat{D}_1^m,$$

где

$$\hat{D}_0^m = \begin{pmatrix} \hat{d}_{\alpha^m} & \frac{\partial \tilde{\mathbf{n}}^{m+1}}{\partial \alpha^m} \\ 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\hat{D}_1^m = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial \tilde{\mathbf{n}}^m} \frac{g(k)}{g'\tau} & \frac{\partial}{\partial \alpha^m} \frac{g(k)}{g'\tau} \end{pmatrix}.$$

Спектр оператора \hat{D}_0^m содержит собственные значения оператора \hat{d}_{α^m} , модуль каждого из которых не превышает доминантного отношения, строго меньшего единицы, что обеспечивает безусловную сходимость (26). Соответственно следует ожидать, по крайней мере при малых ω , сохранения этого свойства при возмущении указанных собственных значений. Дополнительно в спектр \hat{D}_0^m входит значение $\chi = 1$ с собственным вектором $\xi = (\eta, 1)$, где $\eta = (1 - \hat{d}_{\alpha^m})^{-1} \frac{\partial \tilde{\mathbf{n}}^{m+1}}{\partial \alpha^m}$. Соответствующий нормированный сопряженный вектор имеет вид $\xi^+ = (\mathbf{0}, 1)$. При этом изменение единичного собственного значения определяется производной, которая имеет вид

$$\frac{d\chi}{d\omega} = \langle \xi^+, \hat{D}_1^m \xi \rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial \tilde{\mathbf{n}}^m} \frac{g(k)}{g'\tau}, \eta \right\rangle - \frac{\partial}{\partial \alpha^m} \frac{g(k)}{g'\tau}.$$

В точке $(\tilde{\mathbf{n}}_{\alpha_0}, \alpha_0)$, где $k = 1$ и соответственно $\frac{dg(k)}{g'\tau} = \frac{1}{\tau} dk$, эта производная принимает вид

$$\frac{d\chi}{d\omega} = \frac{1}{\tau} \left(\left\langle \frac{\partial k}{\partial \tilde{\mathbf{n}}_{\alpha_0}}, (1 - \hat{d}_{\alpha_0})^{-1} \frac{\partial \tilde{\mathbf{n}}_{\alpha_0}}{\partial \alpha_0} \right\rangle + \frac{\partial k}{\partial \alpha_0} \right).$$

В общем случае оценить значение этой величины непросто. Однако можно заметить, что $\hat{d}_{\alpha} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} 0$. Тогда выражение в скобках стремится к полной производной и с учетом справедливости утверждения 2 получаем

$$\frac{d\chi}{d\omega} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \left(\left\langle \frac{\partial k}{\partial \tilde{\mathbf{n}}_{\alpha_0}}, \frac{\partial \tilde{\mathbf{n}}_{\alpha_0}}{\partial \alpha_0} \right\rangle + \frac{\partial k}{\partial \alpha_0} \right) = -\frac{\tau_{\alpha_0}}{\tau}. \quad (30)$$

Вследствие отрицательности данной величины можно утверждать, что по крайней мере при малых значениях ω итерации (26)–(29) сходятся вблизи временной постоянной. В предположении $\tau \approx \tau_{\alpha_0}$ получается следующее соотношение:

$$\chi = 1 - \omega \frac{\tau_{\alpha_0}}{\tau} \approx 1 - \omega \xrightarrow{\omega \rightarrow 1} 0.$$

То есть при справедливости данного предположения и ненарушении условия сходимости при $\omega = 1$ скорость сходимости близка к квадратичной (по аналогии с методом Ньютона [20]).

Использование итераций (26)–(29) для решения уравнения (6) подразумевает определение оператора вспомогательной реакции, зависящего от пробного значения α . Подобно работам [9, 10] очевидным кандидатом на роль оператора вспомогательной реакции является

$$\hat{R}_{\alpha}(t) = -\alpha. \quad (31)$$

Этот оператор допустим, так как удовлетворяет условию (11).

Однако необходимо отметить, что оператор $\hat{P}_0 - \alpha$ подкритичен только при условии, что α превышает временную постоянную \hat{P}_0 , в частности при $\alpha \geq 0$, что фактически является обоснованием корректности алгоритмов, предлагаемых в [9, 10]. В этом случае при $t_0 = \infty$ оператор (9) и его производная имеют вид

$$\hat{K}_{\alpha} = \hat{Q}_p (\alpha - \hat{P}_0)^{-1};$$

$$\frac{d}{d\alpha} \hat{K}_{\alpha} = -\hat{Q}_p (\alpha - \hat{P}_0)^{-2}. \quad (32)$$

В противном случае интеграл в (9) расходится. Следовательно, при $\alpha_0 < 0$ использование (31) проблематично. Однако в этом случае допустим

альтернативный вид оператора вспомогательной реакции

$$\widehat{R}_\alpha(t) = 0. \quad (33)$$

В силу подкритичности \widehat{P}_0 интеграл в (9) существует, а операторы, аналогичные (32), имеют вид

$$\widehat{K}_\alpha = (\widehat{Q}_p - \alpha) (-\widehat{P}_0)^{-1}; \quad \frac{d}{d\alpha} \widehat{K}_\alpha = \widehat{P}_0^{-1}. \quad (34)$$

Таким образом, для построения универсальной схемы возможен подход, когда при $\alpha \geq 0$ оператор вспомогательной реакции определяется выражением (31), а при $\alpha < 0$ — выражением (33). Однако, как видно из (32) и (34), производная \widehat{K}_α разрывна в нуле. Это же касается и ведущего собственного значения. Такое поведение нежелательно при использовании операции (29), предполагающей гладкую зависимость от α . Для ее получения удобно рассмотреть зависящий от времени оператор, например продолжить (31) в область отрицательных значений α следующей зависимостью:

$$\widehat{R}_\alpha(t) = -\frac{\alpha}{1 - c\alpha t}, \quad (35)$$

где c — некоторая произвольная положительная постоянная. Гладкая шивка очевидна. Также видно, что при $t \rightarrow \infty$ этот оператор приближается к (33). Соответственно интеграл в (9) сходится.

Учитывая вышесказанное, далее в качестве оператора вспомогательной реакции при $\alpha \geq 0$ будет рассматриваться (31), а при $\alpha < 0$ — оператор (35).

Приближение вперед—назад

В работе [21] приведено описание упрощенной задачи переноса нейтронов в односкоростном приближении и при условии движения вдоль прямой, которое, с одной стороны, представляет компактную систему с реалистичными граничными условиями, а с другой позволяет получить аналитическое решение задачи переноса.

Для сравнения аналитического решения с численным, полученным по методике, описанной в предыдущих разделах, рассматривалась задача переноса частиц в однородном шаре с параметрами взаимодействия со средой, предложенными в [21]. Эти параметры в представлении (4), (5), приведены в табл. 1. Здесь через v обозначена скорость нейтрона с энергией 1 МэВ; Λ — частота

Таблица 1

Параметры взаимодействия

Реакция	$\Lambda/v, \text{см}^{-1}$	μ_+	μ_-
Поглощение	0,006242886	0	0
Рассеяние	0,310703634	0,9	0,1
Деление	0,060027750	1,3	1,3

реакции (Λ/v — ее макроскопическое сечение); μ_+ и μ_- имеют смысл множественности вторичных частиц, испускаемых в прямом и обратном направлениях соответственно.

Наиболее интересной представляется подкритическая система с радиусом шара, равным $R = 5 \text{ см}$ ($\alpha_0 = -0,140475 \text{ нс}^{-1}$). Вследствие подкритичности для результатов расчетов должна наблюдаться зависимость от параметра вспомогательной реакции c из (35). Было рассмотрено три его значения: 1) $c = 1$; 2) $c = 0$, эквивалентное использованию оператора вспомогательной реакции (31); 3) $c = 10^5$, аппроксимирующее $c \rightarrow \infty$, которое дает оператор (33). Значения остальных параметров, влияющих на устойчивость расчетной схемы: $t_0 = 10^{102} \text{ нс}$ (аппроксимация $t_0 \rightarrow \infty$); число поколений на итерации $L = 10$; множитель в формуле Ньютона $\omega = 1$.

Результаты приводятся в табл. 2. Здесь и далее используются следующие обозначения: k — эффективный коэффициент размножения; σ_x — погрешность величины x , оцененная по результатам моделирования; δ_α — относительное отклонение от точного значения. Можно видеть сходимость к решению уравнения (6), а также совпадение всех результатов с аналитическим решением с точностью до погрешности.

Дальнейшие расчеты с целью оценки влияния параметров на сходимость схемы проводились при значении $c = 1$. В первую очередь рассматривалась зависимость от L (число поколений на итерации). В табл. 3 приведены резуль-

Таблица 2

Зависимость расчетных характеристик от параметра вспомогательной реакции для $R = 5 \text{ см}$

c	$\alpha_0, \text{нс}^{-1}$	$\sigma_\alpha, \%$	$\delta_\alpha, \%$	k	$\sigma_k, \%$
10^5	-0,140484	0,016	0,006	1,00000	0,005
1	-0,140503	0,012	0,020	1,00000	0,005
0	-0,140475	0,010	0,000	0,999999	0,004

Таблица 3

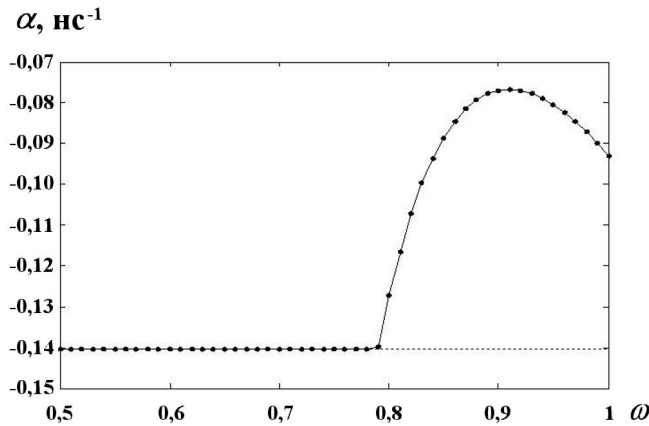
Зависимость расчетных характеристик от L для $R = 5$ см

L	$\alpha_0, \text{нс}^{-1}$	$\sigma_\alpha, \%$	k	$\sigma_k, \%$
1	-9,29766	5,999	3,25847	1,274
2	-0,140474	0,002	1,00000	0,001
5	-0,140473	0,002	1,00000	0,001

таты расчетов при разных значениях этого параметра. Здесь наблюдается сходимость для всех значений, кроме $L = 1$, для которого видно также отличие k от единицы. Принимая во внимание (30), можно утверждать, что в рассматриваемом случае сходимость существует при условии $L > 1$.

Интересно рассмотреть, как влияет на сходимость множитель в формуле Ньютона (ω). С учетом того, что итерационный процесс является неустойчивым при $L = 1$, указанное рассмотрение следует проводить при этом значении. Результаты таких расчетов приведены на рисунке. Видно, что в соответствии с (30) при малых значениях ω сходимость улучшается.

При радиусе шара $R = 10$ см система является надкритической ($\alpha_0 = 0,0349564 \text{нс}^{-1}$). Вследствие положительности собственного значения зависимость от параметра вспомогательной реакции в данном случае отсутствует. Поэтому в первую очередь были приведены расчеты при разных значениях L . Результаты приводятся в табл. 4. Здесь сходимость видна даже при $L = 1$, а также при $L = 5$. С учетом (30) отсюда можно



Зависимость расчетного собственного значения от множителя в формуле Ньютона для $R = 5$ см (--- $\alpha_0 = -0,140475 \text{нс}^{-1}$)

Таблица 4

Зависимость расчетных характеристик от L для $R = 10$ см

L	$\alpha_0, \text{нс}^{-1}$	$\sigma_\alpha, \%$	$\delta_\alpha, \%$	k	$\sigma_k, \%$	$\tau, \text{нс}$	$\sigma_\tau, \%$
1	0,0349572	0,004	0,002	1,00000	0,001	3,98150	0,001
5	0,0349574	0,004	0,003	1,00000	0,001	3,98154	0,001

сделать вывод о сходимости к аналитическому решению при любом значении параметра L в отличие от подкритического случая $R = 5$ см (см. табл. 3).

Заключение

Рассмотренная методика оценки временной постоянной методами статистического моделирования основана на решении уравнения (1). При этом используется алгоритм, подобный применяемому в методе поколений для эргодической оценки решения условно-критической задачи [18]. Предлагаемая методика универсальна в том смысле, что она может использоваться и для надкритических, и для подкритических систем.

Необходимо отметить, что сходимость итераций, в отличие от метода поколений, условная. В связи с этим для используемого здесь алгоритма предложены некоторые параметры, расширяющие область сходимости. Показано влияние этих параметров на сходимость.

Предлагаемые алгоритмы опробованы на задаче, имеющей аналитическое решение. Показана сходимость к этому решению. Однако указанная задача значительно проще большинства практических приложений. Поэтому в дальнейшем предполагается рассмотреть использование предлагаемых алгоритмов в прикладных задачах.

Список литературы

1. Белл Д., Глестон С. Теория атомных реакторов. М.: Атомиздат, 1974.
Bell D., Glesston S. Teoriya atomnykh reaktorov. M.: Atomizdat, 1974.
2. Кипин Д. Физические основы кинетики ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1974.
Kipin D. Fizicheskie osnovy kinetiki yadernykh reaktorov. M.: Atomizdat, 1974.

3. Ершов Ю. И., Шихов С. Б. Математические основы переноса нейтронов. Т. 1. Основы теории. М.: Энергоатомиздат, 1985.
Ershov Yu. I., Shikhov S. B. Matematicheskie osnovy perenosa neytronov. T. 1. Osnovy teorii. M.: Energoatomizdat, 1985.
4. Шихов С. Б., Шкурпелов А. А. Анализ нестационарного кинетического уравнения переноса нейтронов в замедляющих и размножающих средах // Теоретические и экспериментальные проблемы переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1972. С. 97–165.
Shikhov S. B., Shkurpelov A. A. Analiz nestatsionarnogo kineticheskogo uravneniya perenosa neytronov v zamedlyayushchikh i razmnozhayushchikh sredakh // Teoreticheskie i eksperimentalnye problem perenosa neytronov. M.: Atomizdat, 1972. S. 97–165.
5. Красносельский М. А. Положительные решения операторных уравнений. М.: Физматгиз, 1962.
Krasnoselskiy M. A. Polozhitelnye resheniya operatornykh uravneniy. M.: Fizmatgiz, 1962.
6. Красносельский М. А., Лифшиц Е. А., Соболев А. В. Позитивные линейные системы: метод положительных операторов. М.: Наука, 1985.
Krasnoselskiy M. A., Lifshits E. A., Sobolev A. V. Pozitivnye lineynye sistemy: metod polozhitelnykh operatorov. M.: Nauka, 1985.
7. Михайлов Г. А. Вычисление методом Монте-Карло производных функционалов от решения уравнения переноса по параметрам систем // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1967. Т. 7, № 4. С. 915–919.
Mikhaylov G. A. Vychislenie metodom Monte-Karlo proizvodnykh funktsionalov ot resheniya uravneniya perenosa po parametram system // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 1967. T. 7, № 4. S. 915–919.
8. Кольчужкин А. М., Учайкин В. В. Введение в теорию прохождения частиц через вещество. М.: Атомиздат, 1978.
Kolchuzhkin A. M., Uchaykin V. V. Vvedenie v teoriyu prokhozhdeniya chastits cherez veshchestvo. M.: Atomizdat, 1978.
9. Betzler B. R. Calculating Alpha Eigenvalues and Eigenfunctions with a Markov Transition Rate Matrix Monte Carlo Method. A dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy (Nuclear Engineering and Radiological Sciences). University of Michigan, 2014.
10. Betzler B. R., Kiedrowski B. C., Brown F. B., Martin W. R. Calculating infinite-medium α -eigenvalue spectra with Monte Carlo using a transition rate matrix method // Nuclear Engineering and Design. 2015. Vol. 295. P. 639–644.
11. Hill T. R. Efficient Methods for Time Absorption (α) Eigenvalue Calculations. Tech. Rep. LA-UR-82-3594. Los Alamos National Laboratory, 1982.
12. Brockway D., Soran P., Whalen P. Monte Carlo α Calculation. Tech. Rep. LA-UR-85-1224. Los Alamos National Laboratory, 1985.
13. Бреднихин С. А., Медведев И. Н., Михайлов Г. А. Оценка параметров критичности ветвящихся процессов методом Монте-Карло // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 2010. Т. 50, № 2. С. 362–374.
Brednikhin S. A., Medvedev I. N., Mikhaylov G. A. Otsenka parametrov kritichnosti vetvyashchikhsya protsessov metodom Monte-Karlo // Zhurnal vychisl. mat. i mat. fiz. 2010. T. 50, № 2. S. 362–374.
14. Yamamoto T., Miyoshi Y. An algorithm of α - and γ -mode eigenvalue calculations by Monte Carlo method // Proc. 7th Int. Conf. on Nuclear Criticality Safety, ICNC 2003. Tokai-mura, Ibaraki, Japan. October 20–24, 2003. Japan Atomic Energy Research Institute, 2003.
15. Yamamoto T. Higher order α -mode eigenvalue calculation by Monte Carlo power iteration // Progress in Nuclear Science and Technology. 2011. Vol. 2. P. 826–835.
16. Shim H. J., Jang S. H., Kang S. M. Monte Carlo alpha iteration algorithm for a subcritical system analysis // Science and Technology of Nuclear Installations Volume. 2015. <http://dx.doi.org/10.1155/2015/859242-15.03.2020>.
17. Shaukat N., Shim H. J., Jang S. H. Alpha eigenvalue estimation from dynamic Monte Carlo calculation for subcritical systems // Transactions of the Korean Nuclear Society Spring Meeting. ICC Jeju, Korea. May 11–13, 2016.
18. Золотухин В. Г., Майоров Л. В. Оценки параметров критичности реакторов методом Монте-Карло. М.: Энергоатомиздат, 1984.

- Zolotukhin V. G., Mayorov L. V.* Otsenki parametrov kritichnosti reaktorov metodom Monte-Karlo. M.: Energoatomizdat, 1984.
19. *Модестов Д. Г.* Метод простой итерации со стохастической правой частью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2013. Вып. 1. С. 59–68.
Modestov D. G. Metod prostoy iteratsii so stokhasticheskoy pravoy chastyu // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2013. Vyp. 1. S. 59–68.
20. *Вержбицкий В. М.* Численные методы (линейная алгебра и нелинейные уравнения). М.: Высшая школа, 2000.
Verzhbitskiy V. M. Chislennyye metody (lineynaya algebra i nelineynyye uravneniya). M.: Vysshaya shkola, 2000.
21. *Шмаков В. М.* Приближение вперед–назад в теории переноса нейтронов // Там же. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2016. Вып. 2. С. 28–40.
Shmakov V. M. Priblizhenie vpered-nazad v teorii perenosa neytronov // Tam zhe. Ser. Teoreticheskaya i prikladnaya fizika. 2016. Vyp. 2. S. 28–40.
- Статья поступила в редакцию 12.01.21.

TIME CONSTANT ESTIMATION WITH STATISTIC SIMULATION METHODS IN PARTICLE TRANSPORT PROBLEMS / D. G. Modestov (FSUE "E.I. Zababakhin RFNC-VNIITF ", Snezhinsk, Chelyabinsk region).

The asymptotic behavior of the transport equation solution at large times is determined by the transport operator eigenvalue with a maximum real part, i.e. a time constant. Accordingly, this value is an important characteristic of the radiation field dynamics. To calculate it with the statistic simulation methods that allow solving the transport equation with least approximations, the most common approach is based on solving the conditionally critical problem with an added auxiliary reaction parametrized by a trial value of time constant. The true value is obtained by selecting values according to the operator criticality condition. A restricted range of applicability is a disadvantage of the current methods based on the approach above.

The paper describes the approach with an auxiliary operator which is time dependent and, at the same time, smoothly depends on the trial time-constant value which has no such disadvantage. To solve the problem, an algorithm similar to the method of generations with a quadratic rate of convergence, in optimal case, is used. Issues of convergence are considered. Comparison between the numerical and analytical solutions is presented including the case of no convergence.

Key words: particle transport equation, time constant, method of generations, statistical simulation.
