



Софийски университет „Св. Климент Охридски”
Физически факултет
специалност „Ядрена техника и ядрена енергетика“

Дипломна работа за придобиване на образователно-
квалификационна степен „бакалавър”

Метод Монте Карло за моделиране на неутронния пренос за реакторни приложения

Борис Панайотов
ФН: 30369

Научен ръководител:
доц. д-р Ивайло Христосков

Научен консултант:
доц. д-р Пламен Петков

София, септември 2025 г.

Съдържание

1.	Увод	3
2.	Методи на Монте Карло за неутронна преносна задача.....	3
3.	Основни означения и принципи.....	4
	Означения и определения	4
	Характеристики на изчислителния модел.....	5
4.	Процес на проследяване на историята на частица	8
	Етапи на историята на частица	8
	Раждане и избор на посока и енергия на родената частица	8
	Отбор на път до стълкновение	11
	Метод на преобразуването	11
	Метод на мнимите стълкновения.....	14
	Отбор на вид на стълкновението и нуклид.....	18
	Отбор на посока и енергия след разсейване	19
	Енергетична група.....	20
	Посока.....	20
	Отбор на посока след отражение	24
	Огледално гранично условие	24
	Бяло гранично условие.....	25
	Периодично гранично условие.....	26
5.	Статистики за скаларния поток.....	26
	Статистика на стълкновенията.....	27
	Трекова статистика.....	28
6.	Резултати от програмната реализация.....	30
	Гранични условия.....	31
	Сравнение на методи за отбор на пробег до стълкновение.....	37
	Производителност на методите за оценка на потока.....	42

Сравнение с независимо референтно решение.....	45
Метод и модел	45
Резултати и изводи	46
7. Заключение.....	51
Цитирани източници	52
8. Приложение.....	54
Метод на преобразуването	54
Пресичане на лъч с равнина	56
Пресичане на лъч с цилиндрична повърхност.....	57
Разпределение на пробег до състъкновение	59
Локализация на точка в триъгълната решетка на касетата	59
Намиране на материална зона	61
Случаен отбор от дискретна случайна величина	62

1. Увод

Предмет на тази дипломна работа е изграждането и изследването на изчислителна процедура по Монте Карло за моделиране на неутронния пренос за реакторни приложения. Създадената за целта програмна реализация е наречена МСТ.

Обособена цел на изследването е сравняването на два метода за отбор на пробег до стълкновение – метода на мнимите стълкновения (ММС), известен и като „делта трекинг“ (delta tracking) [1, 2, 4, 7, 9] и прякото прилагане на метода на преобразуването (МП) [4, 6].

Изчислителният модел приблизително съответства на една горивна касета за ВВЕР-1000. Източникът е фиксиран, изотропен и точков или обемно еднороден в избрана позиция. Сеченията са двугрупови и са подготвени със средствата на програмния комплекс SCALE [3]. Процесите на неутронно размножение не се отчитат. Процедурата може да бъде обобщена пряко за други разпределения на източника, за размножаваща среда и за повече енергетични групи или непрекъснати енергии, но това е оставено извън рамките на настоящото разглеждане.

Направено е сравнение с независимо решение на преносната задача, получено по метода на дискретните ординати с програмата NEWT [8]. Доброто съгласие показва състоятелността на създадената изчислителна процедура и коректността на нейната програмна реализация.

2. Методи на Монте Карло за неутронна преносна задача

Най-общо, Монте Карло методите са вид изчислителни методи, базиращи се на отбор на случайни величини. Тези методи намират широко приложение при численото решаване на различни класове интегрални уравнения. Пример за такова приложение е неутронната преносна задача.

В настоящата дипломна работа ще разгледаме реализация на Монте Карло подхода за решаване на неутронна преносна задача с фиксиран източник. Решаването на такава задача се основава на последователно проследяване на историите на индивидуални частици, получени от източника. Това проследяване се състои в числено симулиране на поведението от свободни прелитания и стълкновения на частицата в материалната среда.

Резултатите от проследяването на тези истории формират случайна извадка и се обработват статистически за получаване на оценки на стойността на различни физически величини – напр. скаларен поток, скорости на реакции и др.

3. Основни означения и принципи

Тук ще въведем някои определения и означения, на които ще се позоваваме в следващите части на дипломната работа. Също така ще опишем някои основни характеристики на нашия изчислителен модел.

Означения и определения

Вероятността $\mathbb{P} \in [0,1]$ е числова мярка в пространството на събитията Ω . Практическа представа за вероятността за дадено събитие е относителната честота на настъпване на това събитие при клонящ към безкрайност брой опити (наблюдения).

Случайна величина X е закон за изобразяване на събития в числа. Този закон се определя по волята на наблюдателя или от природата на процеса на наблюдение. Някое число x , получено по този закон, е стойност на случайната величина X .

Функция на вероятностно разпределение (кумулативно вероятностно разпределение или просто вероятностно разпределение) е:

$$F_X(x) = \mathbb{P}(X \leq x) \quad (3.1.1)$$

Функция на плътността на вероятността (разпределение на плътността на вероятността или просто вероятностна плътност) е:

$$f_X(x) = \frac{d}{dx} F_X(x), \text{ така че } f_X(x)dx = \mathbb{P}(x \leq X \leq x + dx) \quad (3.1.2)$$

Математическото очакване на произволна случайна величина X ще означаваме с $E(X)$:

$$E(X) = \int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx. \quad (3.1.3)$$

За дисперсията $\sigma^2(X)$ на произволна случайна величина X е в сила следното равенство:

$$\sigma^2(X) = E\left((X - E(X))^2\right) = \int_{-\infty}^{\infty} (x - E(X))^2 f_X(x)dx = E(X^2) - E(X)^2. \quad (3.1.4)$$

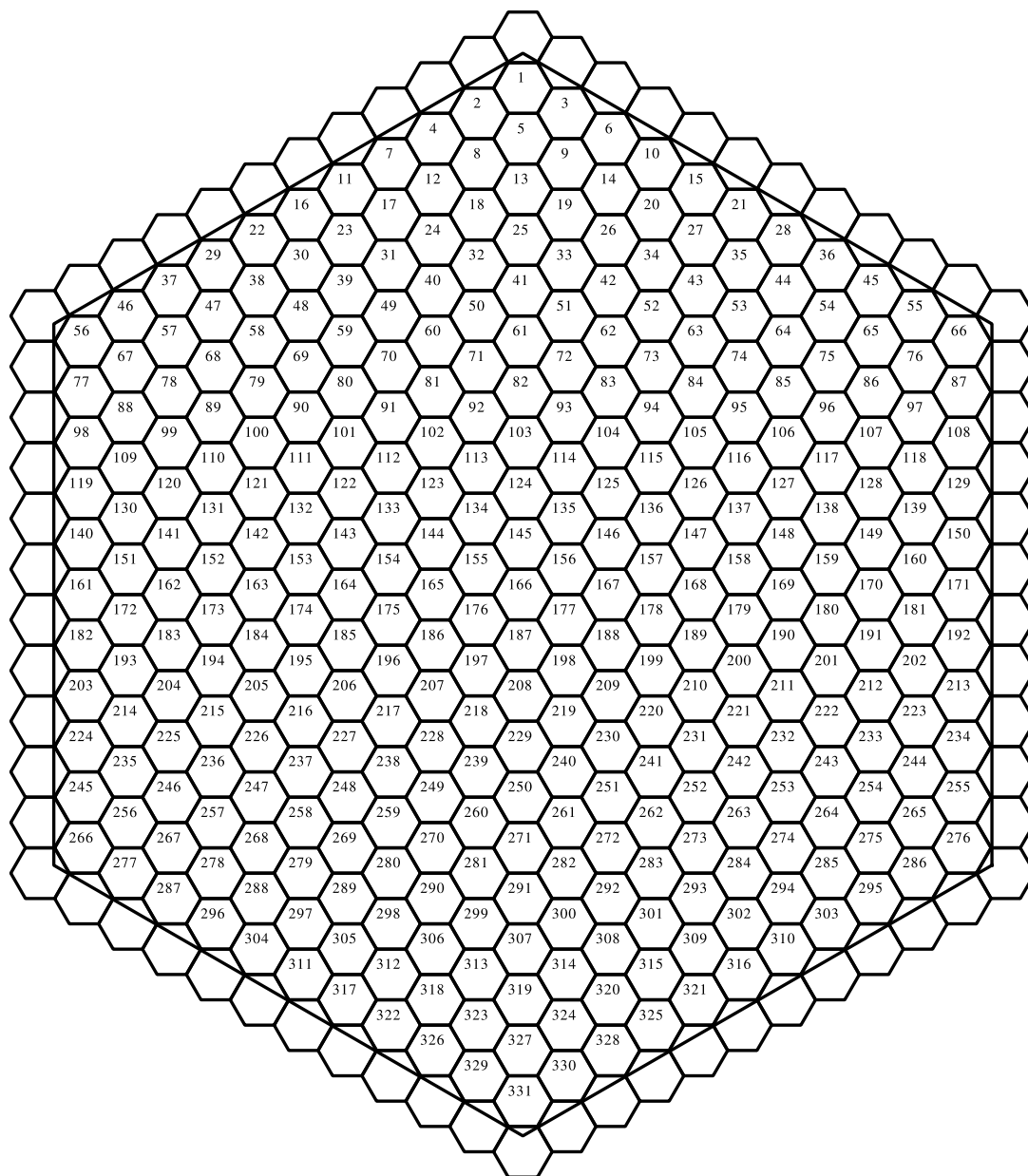
Случайната величина X е равномерно разпределена с вероятностно разпределение $U(a, b)$, ако за нея е в сила:

$$f_X(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & : a \leq x \leq b \\ 0 & : x < a, b < x \end{cases} \quad (3.1.5)$$

Отборът на стойност на избрана случайна величина от нейното вероятностно разпределение почти винаги се свежда до преобразуване на резултата от случаен отбор на равномерно разпределена случайна величина. В зависимост от разпределението и пространството на събитията за избраната случайна величина често се налага неколнократен отбор от равномерното разпределение и съответно прилагане на специфични за избраното разпределение преобразувания или процедури върху резултатите. Равномерното разпределение играе такава централна роля в практиката, защото процесът на отбор от него е концептуално най-прост и най-практичен за машинна реализация.

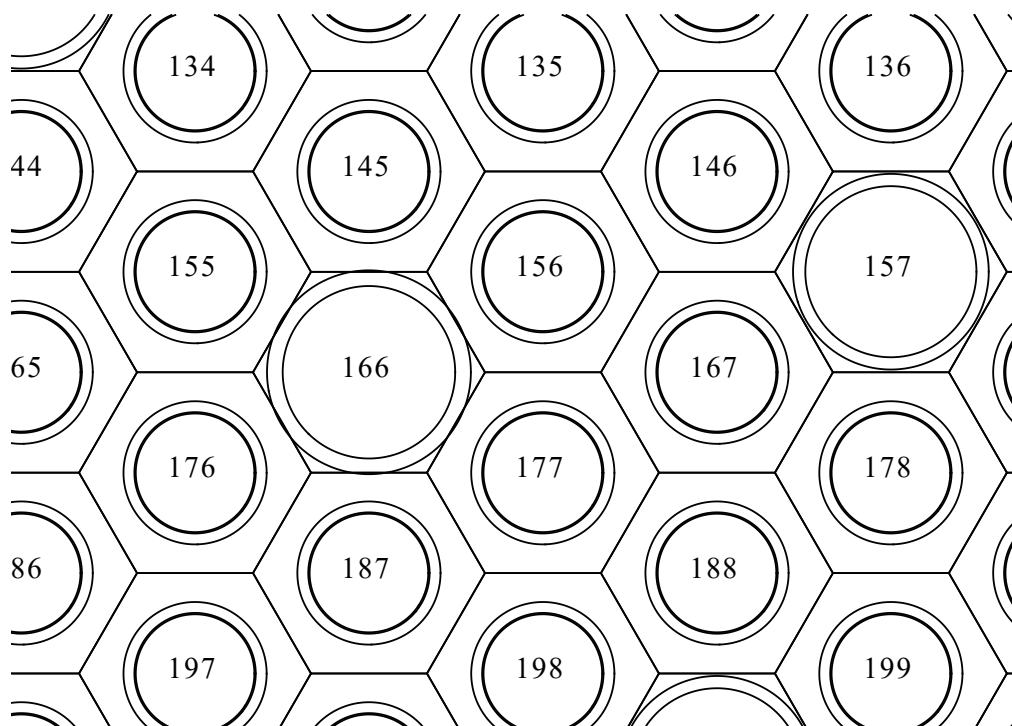
Характеристики на изчислителния модел

Нашият изчислителен модел наподобява горивна касета тип ТВСА за ВВЕР-1000. Той е съставен от елементарни клетки с формата на прави правилни шестоъгълни призми, подредени в триъгълна решетка, както е показано на Фигура 3.1. Върху решетката е наложена по-голяма права правилна шестоъгълна призма, която представя границите на касетата. Елементарните клетки са описани хетерогенно, както е илюстрирано на Фигура 3.2. Извън границите на касетата е възможно да има отражателен материал, или на нейните граници да са поставени условия на отражение или свободна повърхност. Фиксираният неутронен източник е изотропен. Той може да бъде: а) точков, разположен по оста на избрана клетка или б) обемно еднороден в избрана материална зона на избрана клетка. Конфигурацията е онагледена на Фигура 3.1.



Фигура 3.1. Геометрия на изчислителния модел и номерация на клетките.

Геометричните и материални характеристики на разглежданата горивна касета са описани в Таблица 3.1. Сеченията за неутронни реакции, съответстващи на хомогенния материален състав на зоните на всяка клетка, са двугрупови с разсейване с придобиване на енергия. Енергетичните граници на групите са $2.0\text{E}+07$, 0.625 , $1.0\text{E}-05$ eV. Редът на разложение на сеченията на разсейване е P_5 . Сеченията са пресметнати със средствата на програмния комплекс SCALE [13, 14].



Фигура 3.2. Хетерогенно представяне на клетките.

Таблица 3.1. Характеристики на модела на горивна касета.

напречен размер на касетата	23.71487 cm
напречен размер на елементарната клетка	1.2812 cm
височина на горивния стълб	353 cm
брой горивни елементи	312
направляващи канали	18 бр., в позиции 61, 70, 73, 111, 114, 116, 123, 157, 163, 169, 175, 209, 216, 218, 221, 259, 262, 271
централна тръба	1 бр., в позиция 166
радиус на горивния стълб	0.3785 cm
вътрешен и външен радиус на обвивката	0.3865, 0.4565 cm
вътрешен и външен радиус на направляващия канал	0.545, 0.625 cm
вътрешен и външен радиус на централната тръба	0.52, 0.625 cm
горивен материал 1: в периферните клетки	UO ₂ с обогатяване 3.0 %, нулево изгаряне, плътност 10.329 g/cm ³
горивен материал 2: в позиции 41, 100, 106, 226, 232, 291	UO ₂ с обогатяване 3.6 % + 5 % Gd ₂ O ₃ , нулево изгаряне, плътност 10.329 g/cm ³
горивен материал 3: във всички останали горивни позиции	UO ₂ с обогатяване 4.4 %, нулево изгаряне, плътност 10.329 g/cm ³
материал на обвивката, направляващите канали и централната тръба	Zr + 1 % Nb, плътност 6.44 g/cm ³
забавител	H ₂ O + 1 g/kg B, плътност 0.715 g/cm ³

4. Процес на проследяване на историята на частица

Тук ще разгледаме отделните етапи в историята на една частица, тяхната последователност и особености.

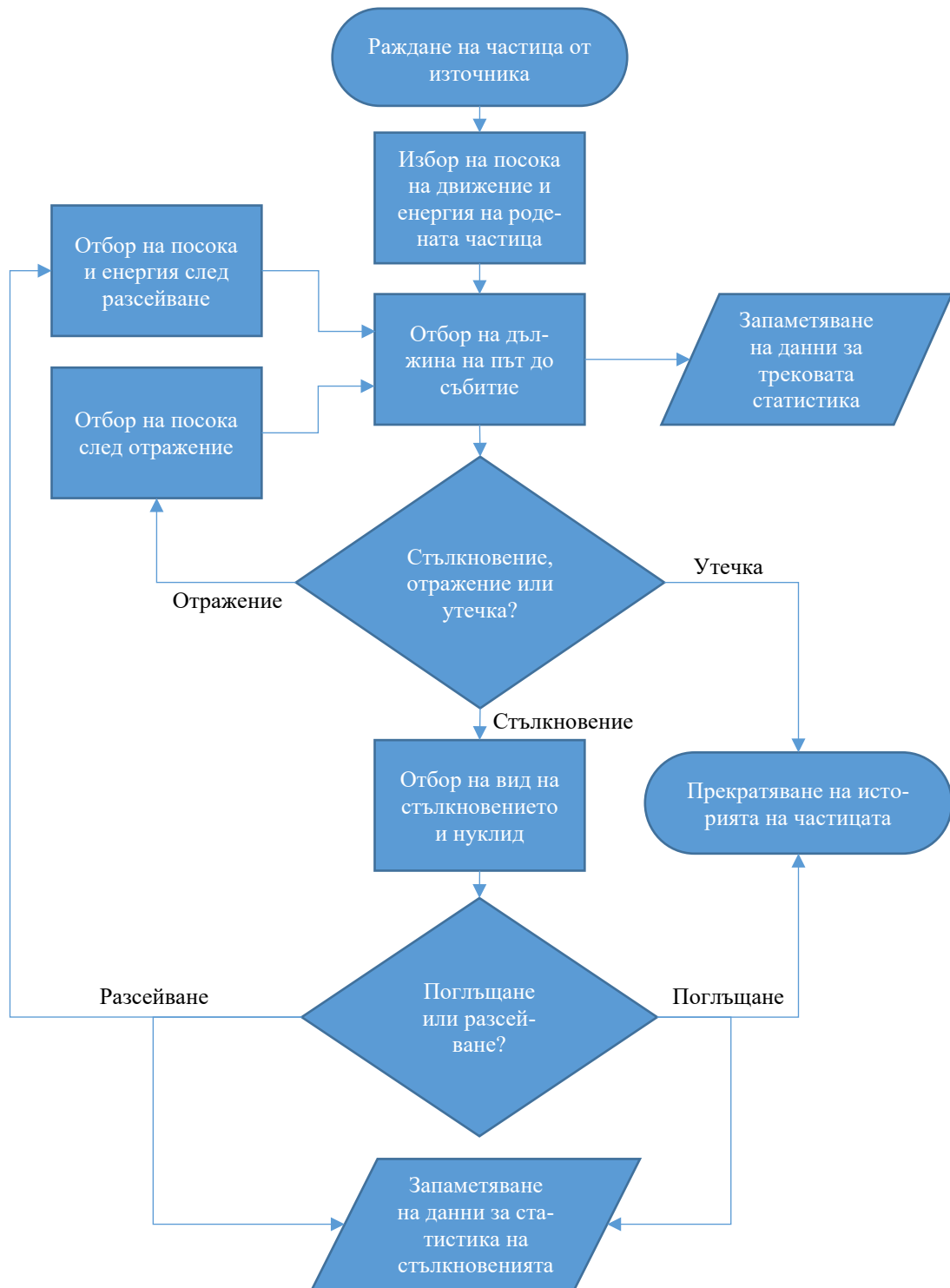
Етапи на историята на частица

Проследяването на историята на индивидуална частица включва етапи, съответстващи на процесите и събитията, които една истинска частица може да претърпи. Тези етапи, както и тяхната хронологична и логическа последователност са онагледени и систематизирани в блок-схемата на Фигура 4.1.

Следва да опишем всяка от процедурите, спомагащи проследяването на индивидуалните истории.

Раждање и избор на посока и енергия на родената частица

В общия случай, конкретният вид на този етап от историята на дадена частица зависи от вида на източника. При нас той е моноенергетичен (в рамките на групово енергетично приближение), съответно изборът на група единствено се изразява в задаване на предварително избраната енергия (енергетична група) на частицата. Също така сме избрали източникът да бъде изотропен, тоест излъчващ с равна вероятност във всички посоки. Ще опишем процеса на отбиране на посока на движение на частица от такъв източник в тримерното пространство.



Фигура 4.1. Блок-схема на процеса на проследяване на историята на индивидуална частица.

Описваме посоката на движение чрез единичния вектор Ω . В сферични координати този вектор се представя като (θ, ψ) , където $\theta \in [0, \pi]$ е полярен ъгъл, а $\psi \in [0, 2\pi)$ е азимутален ъгъл.

Изискването за изотропност на източника е равносилно на изискване вероятността за излъчване на частица в даден елементарен пространствен ъгъл да е пропорционална на големината на този пространствен ъгъл $d\Omega$.

Ако вероятностната плътност на посоката на излъчване означим с f_Ω , то това условие може да се запише като:

$$f_\Omega(\Omega)d\Omega = C d\Omega, \quad (4.1.1)$$

където C е константа, която нормира f_Ω :

$$\int_{4\pi} f_\Omega(\Omega)d\Omega = 1, \quad (4.1.2)$$

което, заедно с (4.1.2) значи, че:

$$1 = \int_{4\pi} C d\Omega = 4\pi C; \quad C = \frac{1}{4\pi}. \quad (4.1.3)$$

$d\Omega$ се представя в сферични координати като:

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\psi. \quad (4.1.4)$$

Тъй като θ и ψ са независими:

$$f_\Omega(\Omega)d\Omega = f_\theta(\theta)f_\psi(\psi)d\theta d\psi, \quad (4.1.5)$$

където f_θ и f_ψ са вероятностните плътности на θ и ψ при изотропно излъчване.

Така, замествайки в (4.1.1) получаваме:

$$f_\theta(\theta)f_\psi(\psi)d\theta d\psi = \frac{\sin \theta d\theta d\psi}{4\pi}. \quad (4.1.6)$$

Като отчетем нормировката на f_θ и f_ψ като вероятностни плътности, (4.1.6) дава следния резултат:

$$\begin{aligned} f_\theta(\theta) &= \frac{\sin \theta}{2}, \\ f_\psi(\psi) &= \frac{1}{2\pi}. \end{aligned} \quad (4.1.7)$$

На този резултат се основава и следната процедура, която ние прилагаме за отбор на посока на излъчване Ω от изотропен източник:

- 1) Отбор на полярен ъгъл θ с помощта на метода на преобразуването (вж. Приложението) за разпределение F_θ с вида:

$$F_\theta(\theta) = \int_0^\theta f_\theta(\theta')d\theta' = \frac{1-\cos \theta}{2}. \quad (4.1.8)$$

2) Отбор на азимутален ъгъл ψ от равномерното разпределение $U(0, 2\pi)$.

Отбор на път до стълкновение

Основен предмет на настоящата дипломна работа е сравнението на два метода за изпълнение на тази стъпка в проследяването на историята на излъчените от източника частици. Ще опишем всеки от тези методи поотделно.

Метод на преобразуването

Този метод се състои в пряко прилагане на метода на преобразуването за отбиране на стойност на случайна величина. Този метод е обсъден и обоснован в Приложението. Както споменаваме там, прилагането на този подход за отбиране на стойност от дадено разпределение изисква познаване на явния вид на съответната функция на разпределение.

За неутрони разпределението на пътя до стълкновение е функция на пълното макроскопично сечение Σ_t за съответната енергия. Вероятностната плътност f_U на разстоянието u до стълкновение на неутрона има вида:

$$\begin{aligned} f_U(u) &= \Sigma_t(\mathbf{r}_0 + u\mathbf{\Omega}) \exp(-\tau(u)), \\ \tau(u) &= \int_0^u \Sigma_t(\mathbf{r}_0 + u'\mathbf{\Omega}) du', \end{aligned} \quad (4.2.1)$$

където $\mathbf{r}_0$ е началната позиция на неутрона, $\mathbf{\Omega}$ е единичният вектор на посоката му на движение, а $\tau(u)$ е мярка за оптичестката дължина на пътя на неутрона от началната му позиция до разстояние u . Тази зависимост е обоснована в Приложението.

В случай, че материалната среда се състои от множество хомогенни обеми, какъвто случай разглеждаме и ние, интегралът в $\tau(u)$ може да се опрости и да се сведе до следната сума:

$$\tau(u) = \int_0^u \Sigma_t(\mathbf{r}_0 + u'\mathbf{\hat{\Omega}}) du' = \sum_{i=1}^{N+1} \Sigma_t^i \times (u_i - u_{i-1}), \quad (4.2.2)$$

където $u_i, i = 1, \dots, N$ са разстоянията до преминаване през граници на хомогенни обеми по траекторията на неутрона, $u_0 = 0, u_{N+1} = u$, а Σ_t^i е пълното макроскопично сечение на хомогенния обем, в който се намира участъкът $[u_{i-1}, u_i]$ от траекторията на неутрона.

Методът на преобразуването за конкретната задача, съгласно описаното в Приложението, се свежда до следната процедура:

- 1) Отбиране на стойност ξ от равномерното разпределение $U(0, 1)$. ($\xi \in [0, 1)$)
- 2) Намиране на стойност u , за която $F_U(u) = \xi$ е изпълнено.

В нашия изчислителен модел сме осъществили горната процедура чрез следния алгоритъм:

- 1) Отбираме от $U(0, 1)$ стойност на ξ и я запамятаваме.
- 2) Неутронът започва с начални координати $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 = \text{col}(x_0, y_0, z_0)$ и посока на движение $\mathbf{\Omega}$. Текущия пробег означаваме с $u^t = 0$.
- 3) Намираме разстоянията $u_i^m, i = 1, \dots, N^m$ от текущата позиция $\mathbf{r}$ до пресичане на граница на материална зона в текущата клетка (вж. Приложението). Намираме и разстоянието u^l до напускане на текущата клетка, използвайки формулата за пресечната точка на лъч и равнина, която сме обосנוвали в Приложението:

$$u^l = \frac{(\mathbf{p}-\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{n}}}{\mathbf{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{n}}}, \quad (4.2.3)$$

където $\mathbf{p}$ е точка върху стената, през която неутронът би напуснал текущата клетка, а $\hat{\mathbf{n}}$ е единичен вектор външно нормален на тази стена.

Дефинираме разстоянията $u_i, i = 0, \dots, N$ от текущата позиция $\mathbf{r}$, където $N := N^m + 1$, като $u_0 := 0, u_N := u^l$ и $u_i := u_i^m, i = 1, \dots, N^m$, които указват точките ограничаващи материално хомогенни участъци от траекторията на неутрона.

- 4) Проверяваме дали позицията $\mathbf{r}^l = \mathbf{r} + u^l \mathbf{\Omega}$ на напускане на текущата клетка е извън касетата. Ако това е така, то намираме разстоянието u^a до напускане на касетата, прилагайки уравнение (4.2.3) за нейните очертания. Намираме най-голямата стойност $k \in \{0, \dots, N\}$, за която $u_k < u^a$. предефинираме разстоянията $u_i, i = 0, \dots, N$, така че $N := k + 1$ и $u_{k+1} = u^a$, а стойностите на останалите u_i запазваме непроменени, по този начин отрязвайки поредицата от точки ограничаващи материално хомогенните участъци.

- 5) Последователно сравняваме ξ с $1 - \exp(-\tau(u_i + u^t))$ за $i = 0, \dots, N$. За целта изчисляваме всяко следващо $\tau(u_i)$ с помощта на (4.2.2) като

$$\tau(u_i + u^t) = \tau(u_{i-1} + u^t) + \Sigma_t^i \times (u_i - u_{i-1}), \quad (4.2.4)$$

където Σ_t^i е пълното макроскопично сечение за материалната зона на текущата клетка, в която се намира участъкът $[u_{i-1} + u^t, u_i + u^t]$ от траекторията на неутрона.

- а. Ако $1 - \exp(-\tau(u_i + u^t)) < \xi$ за всяко $i = 0, \dots, N$, то променяме текущата позиция $\mathbf{r}$ като $\mathbf{r} = \mathbf{r} + u_N \mathbf{\Omega}$ (отиваме на границата на клетката или касетата, в зависимост от стойността на u_N). Ако u_N е разстоянието до напускане на касетата, то прилагаме съответните гранични условия. В противен случай текущата клетка става тази съседна на досегашната през стената, върху която лежи точката на пресичане $\mathbf{r}^l$. Текущият пробег u^t става $u^t + u_N$ и се връщаме на стъпка 3.
- б. Ако намерим най-малкото k , за което $\xi \leq 1 - \exp(-\tau(u_k + u^t))$, то $F_U(u^c) = \xi$ за някое $u^c \in [u_{k-1} + u^t, u_k + u^t]$ (неутронът претърпява стълкновение някъде в този интервал). Точната стойност на това разстояние u^c получаваме* чрез формулата:

$$u^c = u^t + u_{k-1} + \frac{\ln\left(\frac{1}{1-\xi}\right) - \tau(u_{k-1} + u^t)}{\Sigma_t^k}. \quad (4.2.5)$$

Чрез това разстояние u^c намираме и координатите на точката на стълкновение $\mathbf{r}^c$:

$$\mathbf{r}^c = \mathbf{r}_0 + u^c \mathbf{\Omega}. \quad (4.2.6)$$

Определянето на Σ_t^i за целите на стъпка 5 изисква определяне на материалната зона на текущата клетка, в която се намира текущата позиция на неутрона $\mathbf{r}$. Съответната процедура е описана в Приложението.

След изпълнението на този алгоритъм резултатите за разстоянието до и координатите на точката на стълкновение се предават на следващите стъпки в процеса на проследяване на историята на индивидуална частица, онагледен на Фигура 4.1.

(*) Формулата за разстоянието u^c се получава чрез преобразуване на неговото дефиниционно равенство:

$$\xi = F_U(u^c) = 1 - \exp(-\tau(u^c)) = 1 - \exp(-\tau(u_{i-1} + u^t) - \Sigma_t^i(u^c - u_{i-1} - u^t)), \quad (4.2.7)$$

където сме отчели (4.2.2). Преобразуваме (4.2.7) така, че да изразим u^c :

$$\begin{aligned} 1 - \xi &= \exp(-\tau(u_{i-1} + u^t) - \Sigma_t^i(u^c - u_{i-1} - u^t)) \leftrightarrow \\ -\ln(1 - \xi) - \tau(u_{i-1} + u^t) &= \Sigma_t^i(u^c - u_{i-1} - u^t), \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

Коего се свежда до:

$$u^c = u^t + u_{i-1} - \frac{\ln(1-\xi) + \tau(u_i + u^t)}{\Sigma_t^i}, \quad (4.2.9)$$

или:

$$u^c = u^t + u_{k-1} + \frac{\ln\left(\frac{1}{1-\xi}\right) - \tau(u_{k-1} + u^t)}{\Sigma_t^k}, \quad (4.2.10)$$

което е и търсената формула.

Важно е да отбележим, че формулата (4.2.5) остава валидна във всички случаи, тъй като $\xi < 1$ ($\xi = 1$ би означавало частица, която търпи стълкновение на безкрайно голямо разстояние, което разбира се отговаря на непоследима в крайно време история).

Метод на мнимите стълкновения

Този метод най-общо се състои в отбиране на позиции на мними стълкновения чрез метода на преобразуването (вж. Приложението), приложен за разпределение получено на основата на т.нар. мажориращо сечение, и последващо прилагане на схема на отхвърляне и приемане на тези мними стълкновения. Схемата е такава, че гарантира правилния вид на разпределението на позиция на стълкновение. Общата процедура е следната:

- 1) Намиране на мажориращо сечение Σ_t^m , за което е изпълнено, че $\Sigma_t^m \geq \Sigma_t$ за всяко макроскопично сечение Σ_t в точка от възможната траектория на неутрона.
- 2) Текущата позиция на неутрона $\mathbf{r}$ започва като $\mathbf{r}_0$.
- 3) Чрез метода на преобразуването (вж. Приложението) се отбира разстояние u до мнимо стълкновение, като методът се прилага за разпределението F_{u_t} , което има вида:

$$F_{u_t}(u) = 1 - \exp(-\Sigma_t^m u). \quad (4.3.1)$$

- 4) Отбира се стойност ξ от разпределението $U(0, 1)$. Тя се сравнява с отношението $\Sigma_t(\mathbf{r} + u\mathbf{\Omega})/\Sigma_t^m$, където $\Sigma_t(\mathbf{r} + u\mathbf{\Omega})$ е пълното макроскопично сечение в точката на мнимо стълкновение, намерена в стъпка 3, $\mathbf{r} + u\mathbf{\Omega}$.
 - a. Ако $\xi > \Sigma_t(\mathbf{r} + u\mathbf{\Omega})/\Sigma_t^m$, то позицията на мнимо стълкновение се отхвърля. Текущата позиция на неутрона $\mathbf{r}$ става позицията на мнимо стълкновение $\mathbf{r} + u\mathbf{\Omega}$. Връщаме се на стъпка 3.
 - b. Ако $\xi \leq \Sigma_t(\mathbf{r} + u\mathbf{\Omega})/\Sigma_t^m$, то позицията на мнимо стълкновение $\mathbf{r} + u\mathbf{\Omega}$ се приема като търсената позиция на истинско стълкновение.

Състоятелността на тази процедура подлежи на обосноваване. Строго доказателство за нейната валидност е публикувано от Coleman [9]. Тук ще се ограничим до това да покажем, че желаният резултат съответства на описаната процедура.

Първо ще въведем някои означения:

- $f_{u_d}(a \rightarrow b)$ – вероятностна плътност за получаване на позиция на реално стълкновение $\mathbf{r}_0 + b\mathbf{\Omega}$ след мнимо стълкновение в точка $\mathbf{r}_0 + a\mathbf{\Omega}$. (При $a = 0$ това е безусловното плътностно разпределение на резултата от процедурата.)
- $f_U(a \rightarrow b) := \Sigma_t(\mathbf{r}_0 + b\mathbf{\Omega}) \exp\left(-\int_a^b \Sigma_t(\mathbf{r}_0 + u'\mathbf{\Omega}) du'\right)$ – физическата вероятностна плътност неутронът започнал движение в посока $\mathbf{\Omega}$ от позиция $\mathbf{r}_0$ да претърпи първо стълкновение в позиция $\mathbf{r}_0 + b\mathbf{\Omega}$, при условие, че не е претърпял стълкновение до позицията $\mathbf{r}_0 + a\mathbf{\Omega}$.
- $q(u) := \frac{\Sigma_t(\mathbf{r}_0 + u\mathbf{\Omega})}{\Sigma_t^m}$,
- $\bar{q}(u) := 1 - q(u)$,
- $\Sigma_t(u) := \Sigma_t(\mathbf{r}_0 + u\mathbf{\Omega})$,
- u_t – случайна величина с разпределение F_{u_t} , дефинирано в (4.3.1).

Процедурата, предписана от метода на мнимите стълкновения, ще съответства на физическата реалност, ако $f_{u_d} = f_U$. Проверката на това равенство може да стане чрез следното уравнение за f_{u_d} , отчитащо структурата на процедурата на метода на мнимите стълкновения:

$$f_{u_d}(0 \rightarrow u)du = f_{u_t}(u)q(u)du + \left(\int_0^u f_{u_t}(u')\bar{q}(u')f_{u_d}(u' \rightarrow u)du'\right)du, \quad (4.3.2)$$

където сме използвали, че $\mathbb{P}(\xi \leq q(u)) = q(u)$, защото ξ е равномерно разпределена. Това уравнение е израз на факта, че методът на мнимите стълкновения може да даде резултат за действителното разстояние до стълкновение $u_d = u$ по един от два начина: а) резултатът от стъпка 3) е именно $u_t = u$ и той е директно приет от стъпка 4) (първият член от дясно на равенството, директно мнимо стълкновение на разстояние u и негово приемане), или б) резултатът от стъпка 3) първоначално е по-малък от u_d , съответно $u_t = u'$, след което той не е приет от стъпка 4), но продължението на процедурата довежда до краен резултат $u_d = u$ (вторият член от дясно на равенството, неприемане на първо мнимо стълкновение в u' и последващо достигане до краен резултат u). Интегралът в (4.3.2) съответства на всички възможни позиции на първо мнимо стълкновение.

Вместо в диференциален вид, това равенство може да се запише директно за вероятностните плътности:

$$f_{u_d}(0 \rightarrow u) = f_{u_t}(u)q(u) + \int_0^u f_{u_t}(u')\bar{q}(u')f_{u_d}(u' \rightarrow u)du'. \quad (4.3.3)$$

Процедурата ще съответства на физическата реалност, ако заместването на f_U в (4.3.3) на мястото на f_{u_d} прави равенството истинно. В такъв случай, след като направим съответните замествания в дясната страна на (4.3.3), тя придобива следния явен вид:

$$\Sigma_t^m \exp(-\Sigma_t^m u) \frac{\Sigma_t(u)}{\Sigma_t^m} + \int_0^u \Sigma_t^m \exp(-\Sigma_t^m u') \left(1 - \frac{\Sigma_t(u')}{\Sigma_t^m}\right) \Sigma_t(u) \exp(-\int_{u'}^u \Sigma_t(u'')du'') du'. \quad (4.3.4)$$

Този израз се опростява по следния начин:

$$\Sigma_t(u) \exp(-\Sigma_t^m u) + \int_0^u (\Sigma_t^m - \Sigma_t(u')) \Sigma_t(u) \exp\left(-\int_0^{u'} \Sigma_t^m du'' - \int_{u'}^u \Sigma_t(u'')du''\right) du', \quad (4.3.5)$$

където второто събираемо се свежда до

$$\int_0^u (\Sigma_t^m - \Sigma_t(u')) \Sigma_t(u) \exp\left(-\int_0^{u'} (\Sigma_t^m - \Sigma_t(u''))du'' - \int_0^u \Sigma_t(u'')du''\right) du'. \quad (4.3.6)$$

Това представяне ни позволява да извадим независещите от u' множители пред интеграла по следния начин

$$\Sigma_t(u) \exp(-\int_0^u \Sigma_t(u'') du'') \int_0^u (\Sigma_t^m - \Sigma_t(u')) \exp\left(-\int_0^{u'} (\Sigma_t^m - \Sigma_t(u''))du''\right) du'. \quad (4.3.7)$$

Оставащото под интеграла лесно се интегрира по du' , което води до следния общ вид на това събираемо:

$$\Sigma_t(u) \exp(-\int_0^u \Sigma_t(u'') du'') (1 - \exp(-\int_0^u (\Sigma_t^m - \Sigma_t(u))du')), \quad (4.3.8)$$

или

$$\Sigma_t(u) (\exp(-\int_0^u \Sigma_t(u'') du'') - \exp(-\int_0^u \Sigma_t^m du')). \quad (4.3.9)$$

Заместваме този резултат в (4.3.5) и получаваме:

$$\begin{aligned} & \Sigma_t(u) \exp(-\Sigma_t^m u) + \Sigma_t(u) (\exp(-\int_0^u \Sigma_t(u'') du'') - \exp(-\int_0^u \Sigma_t^m du')) \\ & = \Sigma_t(u) \exp(-\int_0^u \Sigma_t(u'') du'') = f_U(0 \rightarrow u). \end{aligned} \quad (4.3.10)$$

Последното равенство показва, че процедурата съответства на физическата реалност, тъй като заместването на f_U в (4.3.3) на мястото на f_{u_d} прави равенството истинно.

Остава да опишем алгоритъма, който прилага метода на мнимите стълкновения за отбор на път до стълкновение в нашия изчислителен модел.

- 1) Определяме мажориращото сечение Σ_t^m спрямо всички материали в касетата. Текущата позиция на неутрона $\mathbf{r}$ започва с начална стойност $\mathbf{r}_0$, а посоката му на движение е $\mathbf{\Omega}$.
- 2) Чрез мажориращото сечение се определя разстояние от текущата позиция $\mathbf{r}$ до мнимо стълкновение u по метода на преобразуването за разпределение F_{u_t} с вида

$$F_{u_t}(u) = 1 - \exp(-\Sigma_t^m u). \quad (4.3.11)$$

- 3) Чрез това разстояние се определя позиция на мнимо стълкновение $\mathbf{r}_t = \mathbf{r} + u\mathbf{\Omega}$.
- 4) Проверява се дали тази позиция е извън касетата.
 - a. Ако е извън нея, то се проверява за наличие и вид на рефлекторен материал около нейните граници.
 - i. Ако рефлектор няма, то се проверяват граничните условия на съответната стена на касетата. Ако условието е на свободна повърхност, то историята на неутрона се прекратява. Ако ли не, то се намира точката на напускане на касетата $\mathbf{r}_i$. Текущата позиция на неутрона $\mathbf{r}$ става $\mathbf{r}_i$. Посоката на движение на неутрона $\mathbf{\Omega}$ се променя в съгласие с граничните условия. Връщаме се на стъпка 2.
 - ii. Ако около касетата има рефлектор, то пълното му макроскопично сечение се запамятава като Σ_t^c . Текущата позиция на неутрона $\mathbf{r}$ става позицията на мнимо стълкновение $\mathbf{r}_t$.
 - b. Ако позицията на мнимо стълкновение е в границите на касетата, то се идентифицира клетката (вж. Приложението), в която се намира тази позиция. След това се определя материалната зона на тази клетка, в която се намира точката $\mathbf{r}_t$. Пълното макроскопично сечение на тази материална зона се запамятава като Σ_t^c . Текущата позиция на неутрона $\mathbf{r}$ става $\mathbf{r}_t$.
- 5) Отбира се стойност ξ от равномерното разпределение $U(0, 1)$. Тази стойност се сравнява с Σ_t^c / Σ_t^m .
 - a. Ако $\xi > \Sigma_t^c / \Sigma_t^m$, то мнимото стълкновение се отхвърля. Връщаме се на стъпка 2.

б. Ако $\xi \leq \Sigma_t^c / \Sigma_t^m$, то мнимото стълкновение се приема за истинско.

След изпълнението на този алгоритъм резултатите за разстоянието до и координатите на точката на стълкновението се предават на следващите стъпки в процеса на проследяване на историята на индивидуална частица онагледен на Фигура 4.1.

Вижда се, че прилагането на метода на мнимите стълкновение изисква единствено идентифициране на клетката, в която се намира дадена позиция. За настоящия изчислителен модел тази геометрична задача се решава съвсем икономично, а в общия случай е нужно само да се определи знакът на $s = g(\mathbf{r})$, където $g(\mathbf{r}) = 0$ е уравнението на ограждащата повърхнина на някое тяло. Това отново е много по-икономично от решаването на геометрични задачи, подобни на описаните по повод на метода на преобразуването.

От друга страна, ако пълните макроскопични сечения в системата се различават много помежду си, то броят на отхвърлените позиции на мнимо стълкновение ще стане относително голям. Също така, този метод позволява оценяване на потока единствено чрез скоростта на стълкновения, но не и чрез т.нар. трекова статистика. Недостатъкът на това ограничение е, че статистическата неопределеност на оценката чрез скорост на стълкновения е обикновено по-голяма от тази на трековата оценка, и то особено в материали с малко пълно макроскопично сечение. Допълнителен недостатък е, че за разлика от прякото прилагане на метода на преобразуването, тук не е възможно да се натрупват статистики за броя пресичания на дадена повърхнина, а оттам и за тока през нея.

Отбор на вид на стълкновението и нуклид

След като е установена позиция на стълкновение в хода на проследяване на историята на даден неутрон е нужно да се определи какъв е видът на това стълкновение и кой е нуклидът, с който то е настъпило. Това може да стане по следната обща процедура:

- 1) Определяме с кой нуклид е настъпило стълкновението като използваме съотношението между парциалните пълни макроскопични сечения $\Sigma_t^{n,g}$ на нуклидите в материалната зона, в която настъпва стълкновението.
- 2) Чрез отношението на микроскопичното сечение за поглъщане $\sigma_a^{n,g}$ към пълното микроскопично сечение $\sigma_t^{n,g}$ на нуклида, с който настъпва стълкновението, определяме дали неутронът се поглъща или разсейва.

Нека N_i е броят на различните видове нуклиди в съответната материална зона, а n е индекс на един от тези нуклиди. С p_n ще обозначаваме вероятността, при условие, че

в този обем е настъпило сътълкновение, то да е станало именно с нуклида с индекс n . Тази вероятност е пропорционална на съответното парциално пълно макроскопично сечение $\Sigma_t^{n,g}$ на нуклида:

$$p_n = \frac{\Sigma_t^{n,g}}{\sum_{m=1}^{N_i} \Sigma_t^{m,g}}. \quad (4.4.1)$$

От това равенство следва, че:

$$\sum_{m=1}^{N_i} p_m = 1, \quad (4.4.2)$$

което значи, че отборът на нуклида, с който настъпва сътълкновението, е отбор от дискретна случайна величина (вж. Приложението).

За да осъществим такъв отбор е нужно да уточним големините на вероятностите p_n , съответно ни трябва точни стойности за парциалните пълни макроскопични сечения. По начало ние разполагаме с пълните микроскопични сечения $\sigma_t^{n,g}$ за съответните нуклиди и тяхната ядрена концентрация $\gamma_{i,m}^n$ в материалната зона m на клетката i . Те са ни достатъчни за определяне на парциалните макроскопични сечения $\Sigma_t^{n,g}$:

$$\Sigma_t^{n,g} = \gamma_{i,m}^n \sigma_t^{n,g}. \quad (4.4.3)$$

Определянето на резултата (разсейване или поглъщане) от сътълкновението става чрез просто отбиране на равномерно разпределена стойност $\xi \in U(0, 1)$ и нейно сравнение с отношението $\sigma_a^{n,g} / \sigma_t^{n,g}$. При $\xi \leq \sigma_a^{n,g} / \sigma_t^{n,g}$ имаме поглъщане, а в противен случай – разсейване (отбор от дискретна случайна величина с две възможни стойности).

Отбор на посока и енергия след разсейване

Разсейването от даден нуклид променя посоката на движение и енергетичната група на неутрона. Количествено, тези промени зависят от микроскопичните сечения на разсейване на разсейващият нуклид. Тези сечения са функция на ъгъла на разсейване и ние ги представяме в следния вид чрез разложение по полиноми на Лежандър:

$$\sigma_{g \rightarrow g'}^n(\mu) = \sum_{l=0}^L (2l+1) \sigma_{g \rightarrow g'}^{n,l} P_l(\mu), \quad (4.5.1)$$

където $\sigma_{g \rightarrow g'}^n$ е сечението на разсейване от нуклида n , от енергетична група g към g' , като функция на косинуса на ъгъла на разсейване $\mu = \cos \theta$, L е максималният ред на разложение по полиноми на Лежандър, l е редът за разглежданото събираемо в разложението, $\sigma_{g \rightarrow g'}^{n,l}$ е l -тият момент на сечението за разсейване, а P_l е полином на Лежандър

от l -та степен. В по-нататъшните ни разглеждания множителят $(2l + 1)$ се приема за включен в съответните моменти на сеченията $\sigma_{g \rightarrow g'}^{n,l}$, защото такъв е форматът на изпъл-
званата библиотека с претеглени микроскопични сечения [13].

Енергетична група

Вероятността за разсейване на неутрона от енергетична група g към енергетична група g' е пропорционална на нулевия момент на сечението за разсейване. Това ни позволява да запишем вероятността за съответния енергетичен преход $p_{g \rightarrow g'}$ като съответното микроскопичното сечение $\sigma_{g \rightarrow g'}^{n,0}$ отнесем към пълното микроскопично сечение на разсейване $\sigma_{s,g}^n$ за дадените нуклид n и енергетична група g :

$$p_{g \rightarrow g'} = \frac{\sigma_{g \rightarrow g'}^{n,0}}{\sigma_{s,g}^n} = \frac{\sigma_{g \rightarrow g'}^{n,0}}{\sum_{h=1}^G \sigma_{g \rightarrow h}^{n,0}}, \quad (4.5.2)$$

където G е броят на енергетичните групи. От (4.5.2) очевидно следва:

$$\sum_{h=1}^G p_{g \rightarrow h} = 1. \quad (4.5.3)$$

Това значи, че отборът на енергетична група се свежда до отбор от дискретна случайна величина (вж. Приложението) с вероятности p_h , $h = 1, \dots, G$, където $p_h = p_{g \rightarrow h}$.

Посока

Съществува ротационна симетрия на вероятностното разпределение на посоката на движение след разсейване Ω' спрямо тази преди неутрона да се разсее Ω . Резултатът от разсейването можем параметрично да представим чрез двойка ъгли (θ, ψ) , където $\theta \in [0, \pi]$ е полярен ъгъл спрямо Ω , тоест $\theta = \arccos(\Omega \cdot \Omega')$, а ψ е азимутален ъгъл. За удобство също сме положили $\mu := \cos \theta$, $\mu \in [-1, 1]$. Ротационната симетрия на ψ на практика значи, че този ъгъл винаги е равномерно разпределен в интервала $[0, 2\pi)$.

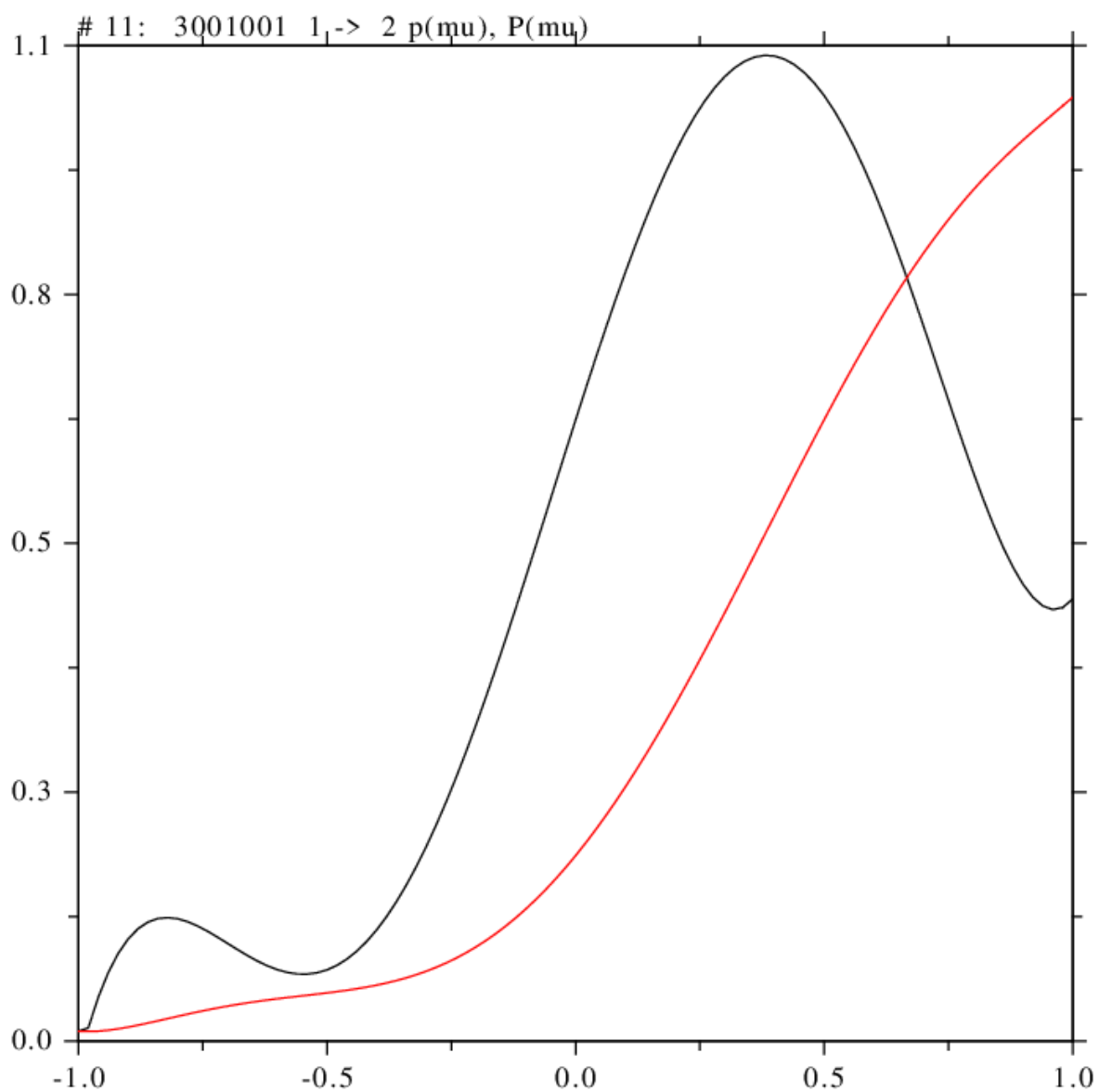
За разпределението на полярния ъгъл от друга страна знаем, че микроскопичното сечение за разсейване $\sigma_{g \rightarrow g'}^n(\mu)$ на даден ъгъл $\theta = \arccos \mu$ е пропорционално на плътността на вероятността за разсейване на този ъгъл. Ъгълът на разсейване е именно полярният ъгъл θ , което означава, че, за да изразим вероятностната плътност f_μ на неговия косинус, е достатъчно да нормираме микроскопичното сечение за разсейване:

$$f_\mu(\mu) = \frac{\sigma_{g \rightarrow g'}^n(\mu)}{\int_{-1}^1 \sigma_{g \rightarrow g'}^n(\mu) d\mu} = \frac{1}{2} \frac{\sigma_{g \rightarrow g'}^n(\mu)}{\sigma_{g \rightarrow g'}^{n,0}}, \quad (4.5.4)$$

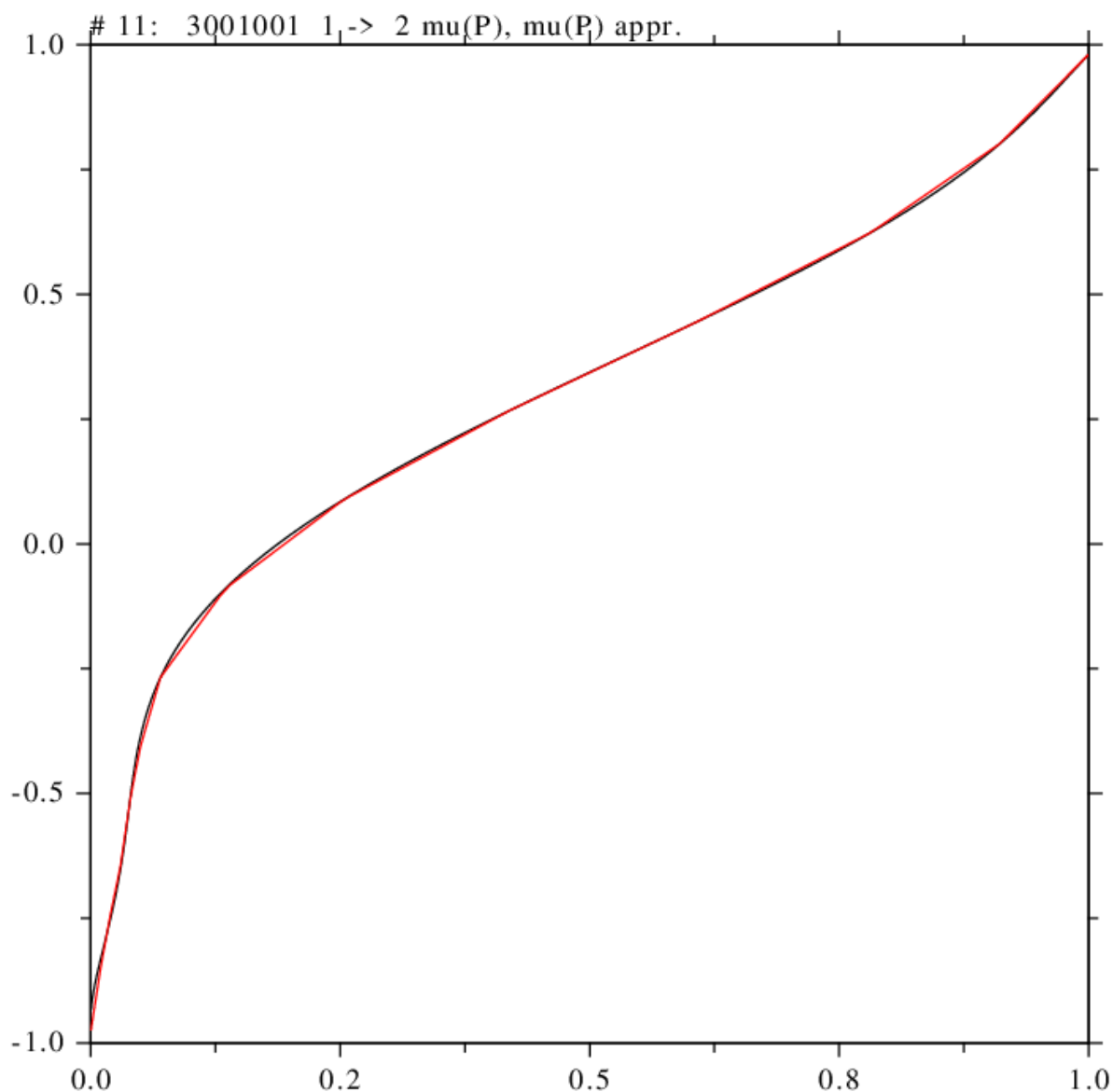
където, за да получим второто равенство, сме приложили разложението в полиноми на Лежандър (4.5.1) и сме взели предвид техните основни свойства на ортогоналност. За да можем да се възползваме от метода на преобразуването е нужно да изразим и кумулативното разпределение F_μ на μ , което правим като просто интегрираме плътността:

$$F_\mu(\mu) = \int_{-1}^{\mu} f_\mu(\mu') d\mu' = \frac{1}{2\sigma_{g \rightarrow g'}^{n,0}} \int_{-1}^{\mu} \sigma_{g \rightarrow g'}^n(\mu') d\mu' = \frac{1}{2\sigma_{g \rightarrow g'}^{n,0}} \sum_{l=0}^L \sigma_{g \rightarrow g'}^{n,0} \int_{-1}^{\mu} P_l(\mu') d\mu', \quad (4.5.5)$$

където отново сме отчели разложението по полиноми на Лежандър. L е редът на P_N приближението, което прилагаме в нашия изчислителен модел. В случая $L = 5$ и това ни води до вид на вероятностната плътност $f_\mu(\mu)$ и разпределението $F_\mu(\mu)$ подобен на този показан на Фигури 4.2 и 4.3. Конкретният пример показан на фигурите е за енергетичен преход от първа към втора група при стълкновение с водород в молекулата на водата. На Фигура 4.3 е показана и линейната интерполация на $F_\mu^{-1}(\xi)$, която използваме като приближение за целите на метода на преобразуването.



Фигура 4.2. Плътност на вероятностното разпределение $f_\mu(\mu)$ – черна линия и кумулативна функция $F_\mu(\mu)$ – червена линия, за енергетичен преход от първа към втора група при стълкновение с ^1H във водна молекула.



Фигура 4.2. Обратна кумулативна функция $F_{\mu}^{-1}(\xi)$ – черна линия и прекъснато-линейна интерполация – червена линия, за енергичен преход от първа към втора група при стълкновение с ^1H във водна молекула.

На основата на тези резултати е конструиран и нашият алгоритъм за намиране на ъглите θ и ψ , характеризиращи разсейването:

- 1) Прилагане на метода на преобразуването с разпределението (4.5.5) за получаване на стойност на косинуса на ъгъла на разсейване μ .
- 2) Получаване на азимуталния ъгъл на разсейване ψ като стойност отбрана от равномерното разпределение $U(0, 2\pi)$.

След като получим θ и ψ използваме следния алгоритъм, за да получим новата посока на движение на неутрона Ω' :

- 1) Избираме произволен единичен вектор $\hat{\mathbf{v}}$, перпендикулярен на оригиналната посока на движение $\mathbf{\Omega}$. Този вектор използваме за ос на въртене, около която да завъртим вектора $\mathbf{\Omega}$ на ъгъл θ . Това завъртане става чрез формулата на Родриг [10]:

$$\tilde{\mathbf{\Omega}} = \mathbf{\Omega} \cos \theta + (\hat{\mathbf{v}} \times \mathbf{\Omega}) \sin \theta + (\mathbf{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{v}})\hat{\mathbf{v}}(1 - \cos \theta), \quad (4.5.6)$$

където с $\tilde{\mathbf{\Omega}}$ сме означили вектора след завъртането. Фактът, че $\hat{\mathbf{v}}$ е перпендикулярен на $\mathbf{\Omega}$ ни позволява да опростим формула (4.5.6) до:

$$\tilde{\mathbf{\Omega}} = \mathbf{\Omega} \cos \theta + \tilde{\mathbf{v}} \sin \theta, \quad (4.5.7)$$

където $\tilde{\mathbf{v}} := \hat{\mathbf{v}} \times \mathbf{\Omega}$. Видът на (3.5.7) не зависи от конкретния избор на $\hat{\mathbf{v}}$, а тъй като $\mathbf{\Omega}$ и $\hat{\mathbf{v}}$ са единични, то $\tilde{\mathbf{v}}$ също е единичен и перпендикулярен на $\mathbf{\Omega}$. Това означава, че за целите на тази стъпка е достатъчно да изберем произволен единичен вектор $\tilde{\mathbf{v}}$ перпендикулярен на $\mathbf{\Omega}$ и да приложим уравнение (4.5.7).

- 2) Завъртаме получения в стъпка 1) вектор $\tilde{\mathbf{\Omega}}$ на ъгъл ψ около оригиналния вектор $\mathbf{\Omega}$. Завъртането отново осъществяваме чрез формулата на Родриг, която в случая има вида:

$$\mathbf{\Omega}' = \tilde{\mathbf{\Omega}} \cos \psi + (\mathbf{\Omega} \times \tilde{\mathbf{\Omega}}) \sin \psi + \mu \mathbf{\Omega}(1 - \cos \psi). \quad (4.5.8)$$

Отбор на посока след отражение

Нашият изчислителен модел позволява на границите на касетата да се задават различни гранични условия. При отражение на неутрон от някоя от тези граници, неговата посока на движение се променя по начин, зависещ от конкретните гранични условия. Накратко ще разгледаме какви видове гранични условия позволява нашият модел и как те влияят на посоката на движение на неутроните.

Огледално гранично условие

При това гранично условие неутроните се отразяват от стените на касетата подобно на светлинни лъчи от огледална повърхност (т.е. ъгълът на падане е равен на ъгъла на отражение). Ако единичният външен нормален към повърхността на отражение в точката на отражение вектор означим с $\hat{\mathbf{n}}$, то при такива условия на отражение посоката след отражение $\mathbf{\Omega}'$ можем да изразим като:

$$\mathbf{\Omega}' = \mathbf{\Omega} - 2(\mathbf{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{n}})\hat{\mathbf{n}}, \quad (4.6.1)$$

където $\mathbf{\Omega}$ е посоката на движение на неутрона преди отражението.

Бяло гранично условие

При това гранично условие посоката на движение на нейтрона след отражението му е случайна и равномерно разпределена (изотропно отражение). Възможните посоки са единствено тези насочени към вътрешността на касетата. Това множество от посоки може да се представи в сферичен вид спрямо вътрешната нормала чрез полярен ъгъл $\theta \in [0, \pi/2)$ и азимутален ъгъл $\psi \in [0, 2\pi)$. Аналогично на изотропния източник на нейтрони, за вероятностната плътност $f_{\Omega'}$ на посоката след отражение можем да запишем:

$$f_{\Omega'}(\Omega')d\Omega = Cd\Omega. \quad (4.6.2)$$

В случая на отражение обаче възможните посоки на отражение са само тези сочещи към вътрешността на касетата, което променя условието за нормировка на $f_{\Omega'}$ по следния начин

$$\int_{2\pi+} f_{\Omega'}(\Omega')d\Omega = \int_{2\pi+} Cd\Omega = 2\pi C = 1; \quad C = \frac{1}{2\pi}. \quad (4.6.3)$$

Елементарния пространствен ъгъл $d\Omega$ можем да изразим чрез θ и ψ като:

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\psi. \quad (4.6.4)$$

Тъй като θ и ψ са независими като случайни променливи:

$$f_{\Omega'}(\Omega')d\Omega = f_{\theta}(\theta)f_{\psi}(\psi)d\theta d\psi. \quad (4.6.5)$$

След като заместим в (3.6.2) получаваме:

$$f_{\theta}(\theta)f_{\psi}(\psi)d\theta d\psi = \frac{\sin \theta d\theta d\psi}{2\pi}, \quad (4.6.6)$$

където f_{θ} и f_{ψ} са вероятностните плътности на θ и ψ при отражение с бяло гранично условие. Като отчетем нормировката на f_{θ} и f_{ψ} , (4.6.6) води до следния резултат:

$$\begin{aligned} f_{\psi}(\psi) &= \frac{1}{2\pi}; \quad \psi \in [0, 2\pi), \\ f_{\theta}(\theta) &= \sin \theta; \quad \theta \in [0, \pi/2). \end{aligned} \quad (4.6.7)$$

На основата на горния резултат, нашият изчислителен модел прилага следния алгоритъм за отбор на посоката след отражение при бяло гранично условие:

- 1) Отбор на стойност на ψ от $U(0, 2\pi)$.
- 2) Отбор на стойност на θ по метода на преобразуването за разпределението:

$$F_{\theta}(\theta) = \int_0^{\theta} f_{\theta}(\theta')d\theta' = 1 - \cos \theta. \quad (4.6.8)$$

- 3) Получаване на междинен вектор $\tilde{\Omega}$, като в зависимост от отразяващата стена:

- а. За една от околните стени на касетата:

$$\tilde{\Omega} = \text{col}(\cos \theta, \sin \theta \cos \psi, \sin \theta \sin \psi). \quad (4.6.9)$$

За да получим крайната посока след отражение Ω' завъртаме $\tilde{\Omega}$ около оста z на такъв ъгъл, че при $\theta = 0$, Ω' да е вътрешен нормален вектор за отразяващата стена.

- б. За горната или долната стена на касетата:

$$\tilde{\Omega} = \text{col}(\sin \theta \cos \psi, \sin \theta \sin \psi, \cos \theta). \quad (4.6.10)$$

Ако отражението е от долната стена, то $\Omega' = \tilde{\Omega}$. Ако ли не, то $\Omega' = -\tilde{\Omega}$.

Периодично гранично условие

При това гранично условие вместо да променим посоката на движение на неутрона при неговото достигане на точка върху някоя от стените на касетата, променяме текущата му позиция на точка, симетрична на прободната и лежаща върху срещуположната стена на касетата, без да променяме посоката на движение на неутрона. Конкретно, ако радиус-вектора на прободната точка означим с r_0 , а единичния перпендикулярен на външно нормалния на съответната стена на касетата вектор означим с $\hat{n}$, то радиус-векторът r_1 на новата позиция на неутрона ще бъде:

$$r_1 = r_0 - 2(r_0 \cdot \hat{n})\hat{n} \quad (4.6.11)$$

Това гранично условие има физически смисъл единствено за радиалните стени на касетата и съответно се прилага в комбинация с огледално или бяло гранично условие за горната и долната стена.

5. Статистики за скаларния поток

По време на проследяването на историите трупаме данни за микроскопични характеристики на тези истории. В тази част от дипломната работа ще се занимаем с методологията ни за натрупване и обработка на данни с цел определяне на относителна оценка за разпределението на скаларния неутронен поток.

Искаме да получим относителна оценка за средния скаларен неутронен поток Φ_i^g по клетки i и енергетични групи g . Оценката ще бъде относителна дотолкова доколкото скаларният поток е свързан с броя неутрони преминаващи през дадена част от пространството за единица време, а Монте Карло подходът в нашия изчислителен модел не отчита по никакъв начин времеви ефекти. Именно това ни дава свобода в нормировката на

резултата по време и прави крайния резултат относителен. Независимото проследяване на историята на всеки неутрон прави най-естествено нормирането по време да стане по средната честота на излъчване на един неутрон от източника (която не влияе на нашия изчислителен модел), което на практика е нормиране на резултата към един неутрон от източника. Такова представяне е естествено и често срещано в други приложения на Монте Карло методите. Въпреки това, за да осигурим по-добра нагледност на резултатите, ние се възползваме от възможността за произволна нормировка на резултатите като най-накрая нормираме получените оценки към единичен среден по клетки и енергетични групи поток $\bar{\Phi}$.

Остава въпросът как ще оценим макроскопичната характеристика Φ_i^g чрез микроскопичните параметри на проследените истории. Ще разгледаме два начина за изграждане на такава оценка.

Статистика на стълкновенията

Този метод за оценка на скаларния поток Φ_i^g се основава на следната зависимост:

$$R^g = \Sigma_t^g \Phi^g, \quad (5.1.1)$$

където R^g е скоростта на стълкновение за неутрони в енергетична група g в единица обем, Σ_t^g е пълното макроскопично сечение за този обем, а Φ^g е съответният скаларен поток. Сумарният брой стълкновения за една неутронна история в материална зона m на клетка i , когато неутронът е в енергетична група g , означаваме с $c_m^{i,g}$. Този брой е случайна величина. Проследяването на неутронна история ни дава реализация на тази случайна величина за $\forall i = 1, \dots, N_p$, $\forall m = 1, \dots, N_m^i$ и $\forall g = 1, \dots, G$, където N_p е броят на клетките, N_m^i са съответните бройки материални зони в клетка i , а G – броят на енергетичните групи. Именно математическите очаквания $E(c_m^{i,g})$ на тези случайни величини, отнесени към обемите V_m^i на съответните материални зони, са относителна оценка за съответните скорости на стълкновения $R_m^{i,g}$, нормирани към единичен неутрон от източника. Това значи, че можем да получим желаната относителна оценка за скаларния поток $\Phi_m^{i,g}$ по материални зони на клетки и енергетични групи като:

$$\Phi_m^{i,g} = \frac{E(c_m^{i,g})}{\Sigma_{m,t}^{i,g} V_m^i}, \quad (5.1.2)$$

където $\Sigma_{m,t}^{i,g}$ е пълното макроскопично сечение в материална зона m на клетка i и енергетична група g . Нека с $c_{m,k}^{i,g}$ означим реализацията на $c_m^{i,g}$ получена от проследяването на k -тата от общо N на брой неутронни истории. Тогава оценка $\widetilde{\mu}_{c_m^{i,g}}$ за математическото очакване $E(c_m^{i,g})$ можем да получим като:

$$\widetilde{\mu}_{c_m^{i,g}} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N c_{m,k}^{i,g}. \quad (5.1.3)$$

Неопределеността на тази оценка $\widetilde{\sigma}_{E(c_m^{i,g})}$ можем да получим чрез извадковото стандартно отклонение:

$$\widetilde{\sigma}_{E(c_m^{i,g})} = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{k=1}^N \left(c_{m,k}^{i,g} - \widetilde{\mu}_{c_m^{i,g}} \right)^2}. \quad (5.1.4)$$

Директното прилагане на тази формула е непрактично за програмна реализация. Можем да доведем (5.1.4) до по-практичен вид, ако отчетем (3.1.4):

$$\begin{aligned} \widetilde{\sigma}_{E(c_m^{i,g})} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N \left(c_{m,k}^{i,g} - \widetilde{\mu}_{c_m^{i,g}} \right)^2} = \frac{1}{\sqrt{N}} \widetilde{\sigma}_{c_m^{i,g}} \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{E(c_m^{i,g^2}) - E(c_m^{i,g})^2} \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N c_{m,k}^{i,g^2} - \left(\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N c_{m,k}^{i,g} \right)^2}, \end{aligned} \quad (5.1.5)$$

където $\widetilde{\sigma}_{c_m^{i,g}}$ е неотместена оценка за неопределеността на $c_m^{i,g}$ като случайна величина. Съответното относително стандартно отклонение $\widetilde{\eta}_{E(c_m^{i,g})}$ е:

$$\widetilde{\eta}_{E(c_m^{i,g})} = \frac{\widetilde{\sigma}_{E(c_m^{i,g})}}{\widetilde{\mu}_{c_m^{i,g}}}. \quad (5.1.6)$$

Нормирането по осреднения по клетки и енергетични групи поток $\bar{\Phi}$ става по следния начин:

$$\bar{\Phi} = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \sum_{g=1}^G \widetilde{\mu}_{c_m^{i,g}}, \quad (5.1.7)$$

$$\overline{\mu}_{c_m^{i,g}} = \frac{\widetilde{\mu}_{c_m^{i,g}}}{\bar{\Phi}}, \quad (5.1.8)$$

където $\overline{\mu}_{c_m^{i,g}}$ е желаният нормиран резултат.

Трекова статистика

Този метод за оценка на скаларния поток Φ_i^g се основава на следната връзка:

$$\Phi^g = v^g N^g, \quad (5.2.1)$$

където Φ^g е скаларният поток на неутрони в група g с модул на скоростта v^g и неутронна плътност N^g в малка област от пространството. Валидна интерпретация на тази зависимост е, че скаларният поток е равен на пътя изминат от неутроните в единица обем, за единица време. За една неутронна история, сумарният път изминат от този неутрон в материална зона m на клетка i , когато той е в енергетична група g означаваме с $l_m^{i,g}$. Този път е случайна величина. Отчитайки последната интерпретация на (5.2.1) виждаме, че математическите очаквания $E(l_m^{i,g})$ на тези случайни величини са относителни оценки за произведението $V_m^i \Phi_m^{i,g}$ между обема V_m^i на материална зона m на клетка i и съответния среден скаларен поток $\Phi_m^{i,g}$ в нея, нормиран към средната честота на излъчване на неутрони от източника,. Записваме това по следния начин:

$$\Phi_m^{i,g} = \frac{E(l_m^{i,g})}{V_m^i}. \quad (5.2.2)$$

Проследяването на N на брой неутронни истории ни дава следните оценки $\widetilde{\mu}_{l_m^{i,g}}$ за математическите очаквания $E(l_m^{i,g})$:

$$\widetilde{\mu}_{l_m^{i,g}} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N l_{m,k}^{i,g}, \quad (5.2.3)$$

където $l_k^{i,g}$ е съответният път в материална зона m на клетка i и енергетична група g по време на k -тата неутронна история. Оценки за стандартните отклонения $\widetilde{\sigma}_{E(l_m^{i,g})}$ на тези оценки можем да намерим като:

$$\widetilde{\sigma}_{E(l_m^{i,g})} = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{k=1}^N (l_{m,k}^{i,g} - \widetilde{\mu}_{l_m^{i,g}})^2}. \quad (5.2.4)$$

Аналогично на неопределеността при трековата статистика можем да получим следния по-практичен вид на $\widetilde{\sigma}_{E(l_m^{i,g})}$:

$$\widetilde{\sigma}_{E(l_m^{i,g})} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{E(l_m^{i,g^2}) - E(l_m^{i,g})^2} \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N l_{m,k}^{i,g^2} - \left(\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N l_{m,k}^{i,g}\right)^2}. \quad (5.2.5)$$

Съответната оценка $\widetilde{\eta}_{E(l_m^{i,g})}$ на относителната неопределеност получаваме като

$$\widetilde{\eta}_{E(l_m^{i,g})} = \frac{\widetilde{\sigma}_{E(l_m^{i,g})}}{\widetilde{\mu}_{l_m^{i,g}}}. \quad (5.2.6)$$

Нормирането по осреднения по клетки и енергетични групи поток $\bar{\Phi}$ става аналогично на статистиката по стълкновения:

$$\bar{\Phi} = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} \sum_{g=1}^G \widetilde{\mu}_{l_m}^{i,g}, \quad (5.2.7)$$

$$\overline{\mu_{l_m}^{i,g}} = \frac{\widetilde{\mu_{l_m}^{i,g}}}{\bar{\Phi}}, \quad (5.2.8)$$

където $\overline{\mu_{l_m}^{i,g}}$ е желаният нормиран резултат.

Броят стълкновения в хода на една неутронна история е типично по-малък от броя пресичания на неутронната траектория с тела от изчислителния модел. Това означава, че дисперсията на статистиката $\widetilde{\mu_{c_m}^{i,g}}$ ще бъде очаквано по-голяма от дисперсията на статистиката $\widetilde{\mu_{l_m}^{i,g}}$. В този смисъл трековата статистика за потока се предпочита пред статистиката на стълкновенията, когато е възможно да бъде получена. В нашия случай такава възможност има само при прекия метод на преобразуването.

6. Резултати от програмната реализация

Програмната реализация MCT е написана на Fortran 90, компилирана от компилаторите ifort и ifx на Intel и gfortran от GCC, а после изпълнена от Intel Core i7-12700H. Програмата позволява конфигурация на всевъзможни входящи параметри на изчислителния модел, но ние тук ще се ограничим до разглеждане на ефекта на следните параметри върху резултатите за относителния скаларен неутронен поток, осреднен по клетки и материални зони на клетки: вид гранични условия на стените на касетата, метод за отбор на пробег до стълкновение (метод на преобразуването, метод на мнимите стълкновения), вид статистика за определяне на потоците (статистика на стълкновенията, трекова статистика). Също така ще разгледаме влиянието на специфичната конфигурация на тези входни параметри върху производителността на изчислителния модел. Накрая, ще сравним резултатите получени чрез изпълнение на нашия изчислителен модел с референтни такива, получени по метода на дискретните ординати с програмата NEWT [8] от програмния комплекс SCALE.

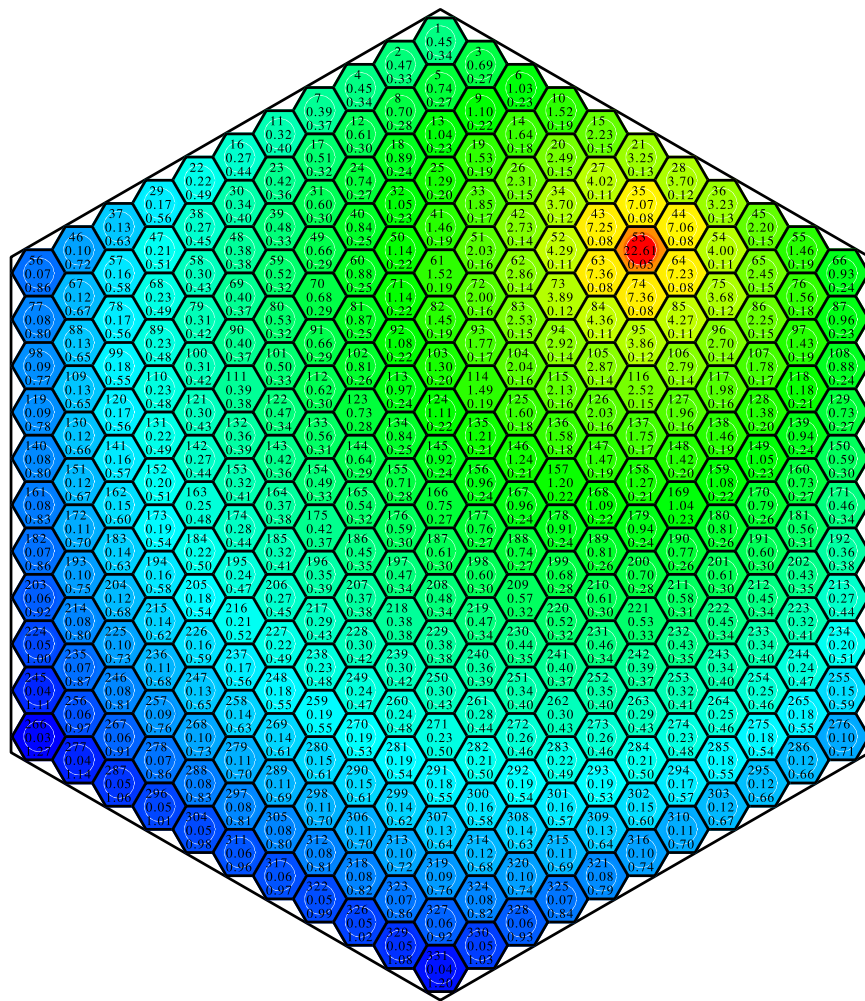
Навсякъде по-долу източникът е само в първа група. С изключение на сравнението с референтно решение, редът на разложение на сеченията за разсейване е P_5 .

Гранични условия

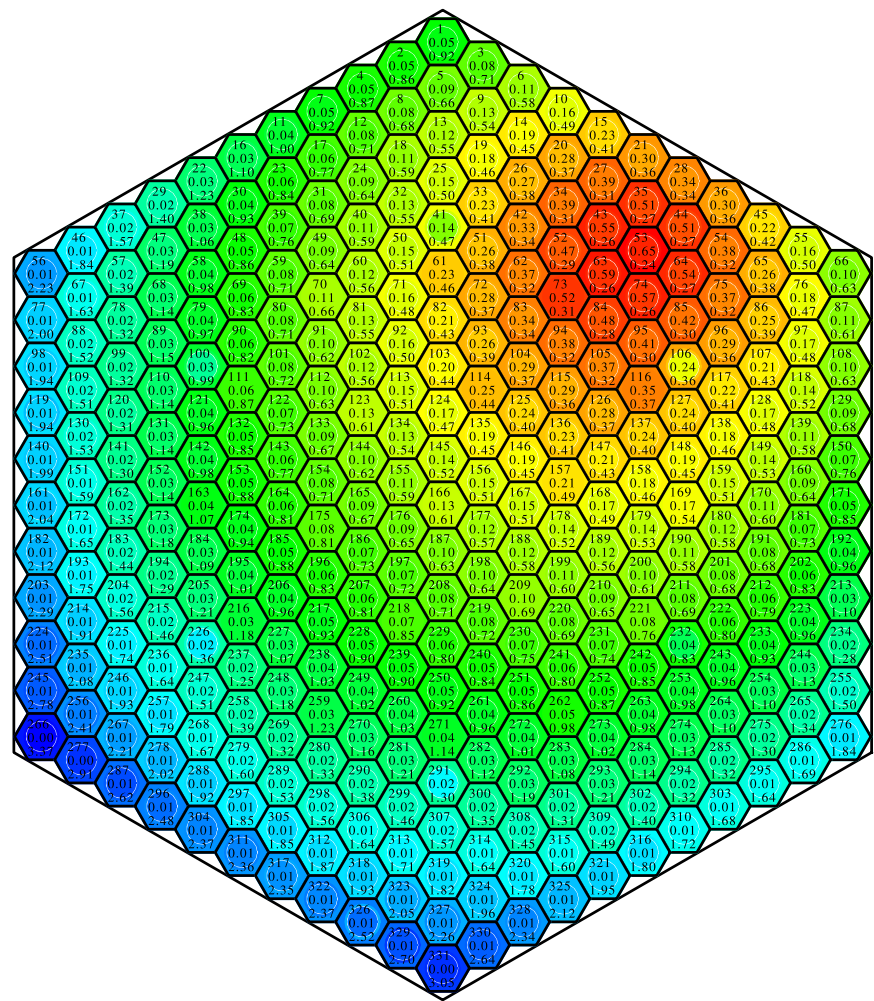
Изчислителният ни метод най-общо позволява четири вида гранични условия за дадена стена на касетата: свободна повърхност, бяло отражение, огледално отражение и периодично гранично условие. На всяка от осемте стени на касетата може да се зададе вид гранично условие поотделно. Докато всеки от останалите видове гранични условия би могъл да се зададе за произволна стена на касетата, периодично гранично условие може да се зададе единствено върху радиалните ѝ стени. Така имаме свобода на избор на вид гранично условие за горната и долната стена на касетата. В такава ситуация е естествен изборът както на гранично условие на бяло отражение, така и такова на огледално, за тези стени. За нашите цели този избор не оказва никакво влияние върху резултатите, най-вече поради факта, че резултатите, които получаваме за потока, са осреднени по пълния обем на съответната клетка или материална зона на клетка, тоест по цялата ѝ височина. По тази причина ще разглеждаме единствено резултати получени при бяло отражение на горната и долната стена при периодично гранично условие на радиалните стени.

За простота ще разгледаме единствено резултати получени за фиксиран точков източник. Резултатите за разпределен в дадена материална зона на дадена клетка източник са изцяло аналогични. В изчислителния ни модел точковият източник е разположен в избрана позиция по оста на някоя избрана клетка (аксиалното разположение се дава в сантиметри спрямо екваториалната равнина на касетата). За настоящите цели сме избрали източник в екваториалната равнина по оста на клетка номер 53. Редно е да отбележим, че ако клетката на източника е избрана да бъде централната (номер 166), то се очаква резултатите получени с периодично и огледално гранично условие да са напълно идентични. Това е и поведението, което наблюдаваме в нашите резултати.

На Фигури 6.1–6.4 сме представили графично резултатите за относителните осреднени потоци по клетки и техните материални зони при различни гранични условия на стените на касетата. Цветът на дадена материална зона отговаря на относителния поток в нея, а освен това във всяка клетка са изписани 3 числа – номерът на клетката, обемно осредненият относителен скаларен поток в нея в съответната енергетична група и относителното стандартно отклонение на последната стойност в проценти. Всички резултати са получени като за отбор на пробег до стълкновение е използван методът на преобразуването, а оценките за потока са получени чрез статистика на стълкновенията.

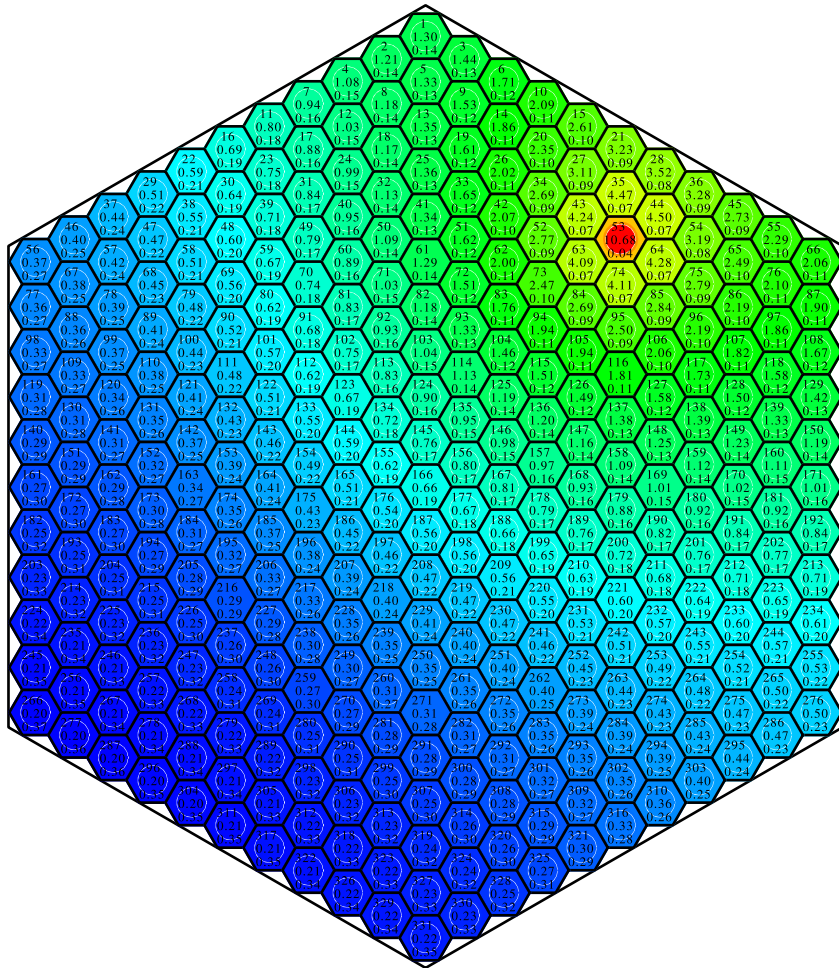


(a)

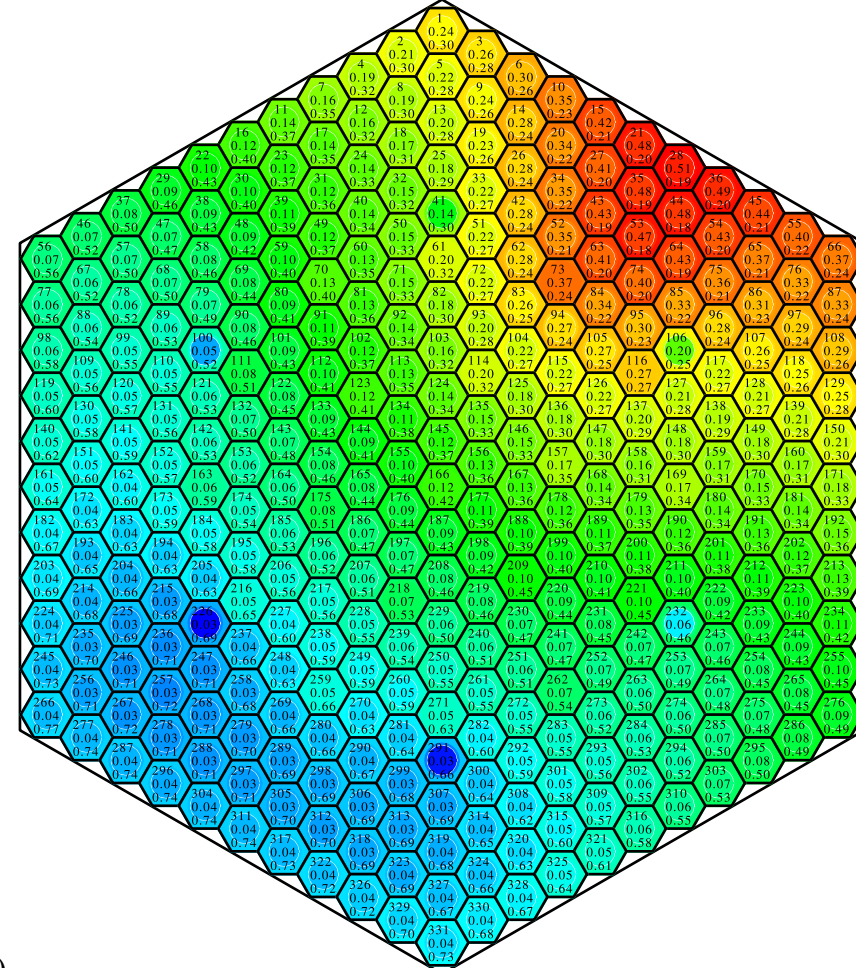


(б)

Фигура 6.1. Среден по клетки и материални зони скаларен поток при гранични условие на свободна повърхност на стените на касетата. Получен с метод на преобразуването за отбор на пробег до състъкновение и статистика на състъкновенията за потока. (а) – Поток в първа група. (б) – Поток във втора група. Брой неутронни истории – 10^7 . Номер на клетка на източника – 53. Аксиално положение на източника 0 см.

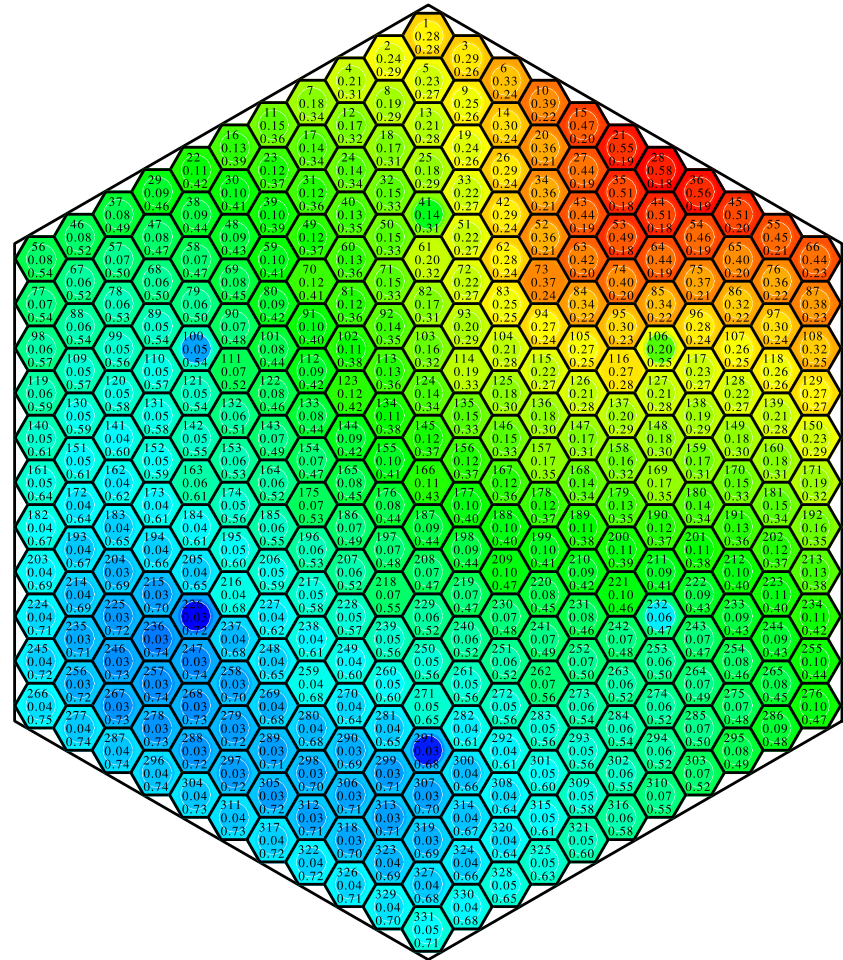
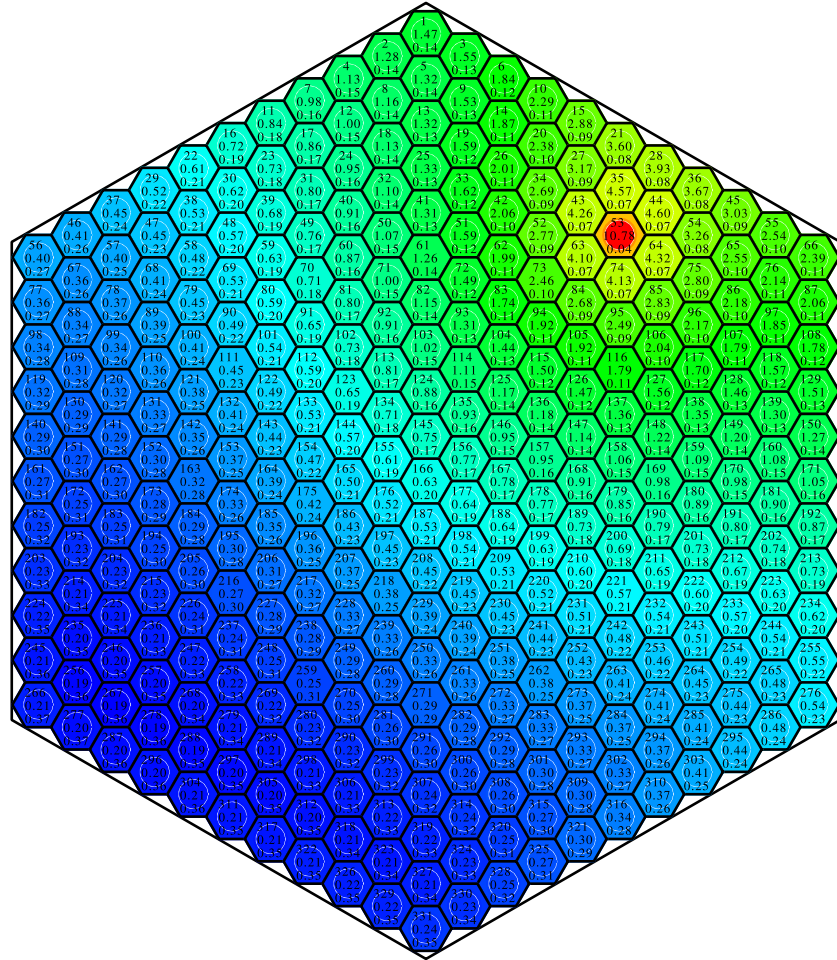


(a)



(б)

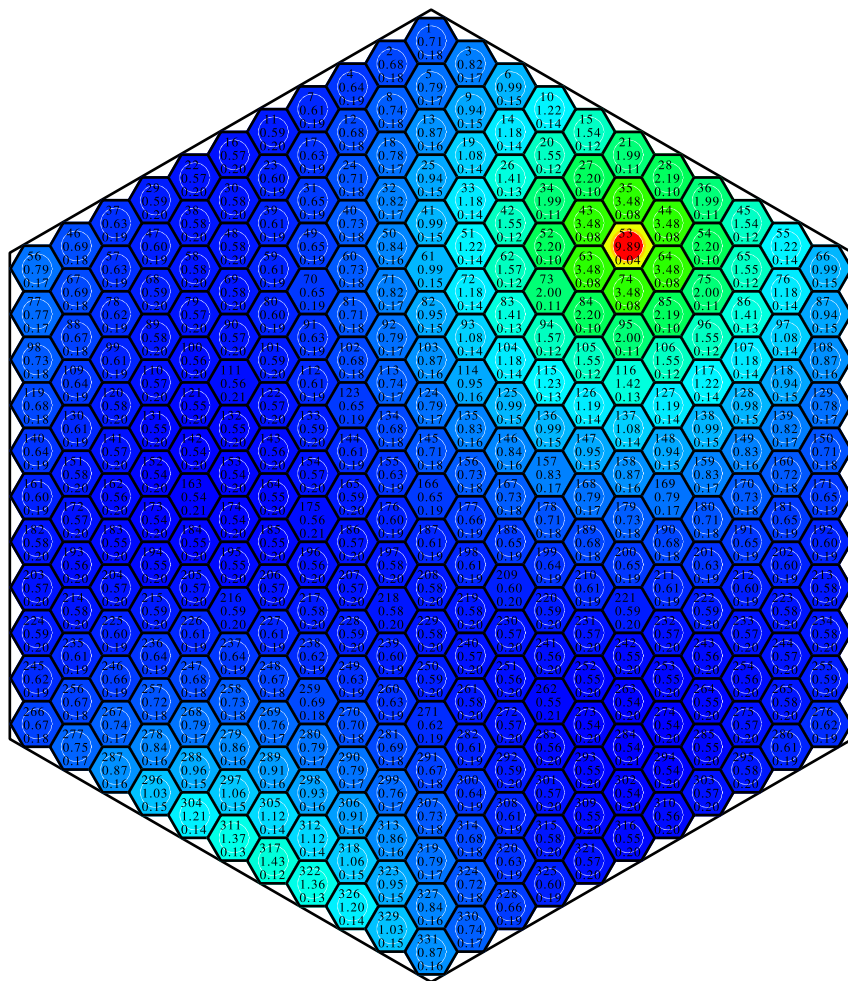
Фигура 6.2 Среден по клетки и материални зони скаларен поток при гранично условие на огледално отражение на стените на касетата. Получен с метод на преобразуването за отбор на пробег до стълкновение и статистика на стълкновенията за потока. (а) – Поток в първа група. (б) – Поток във втора група. Брой неутронни истории – 10^7 . Номер на клетка на източника – 53. Аксиално положение на източника 0 ст.



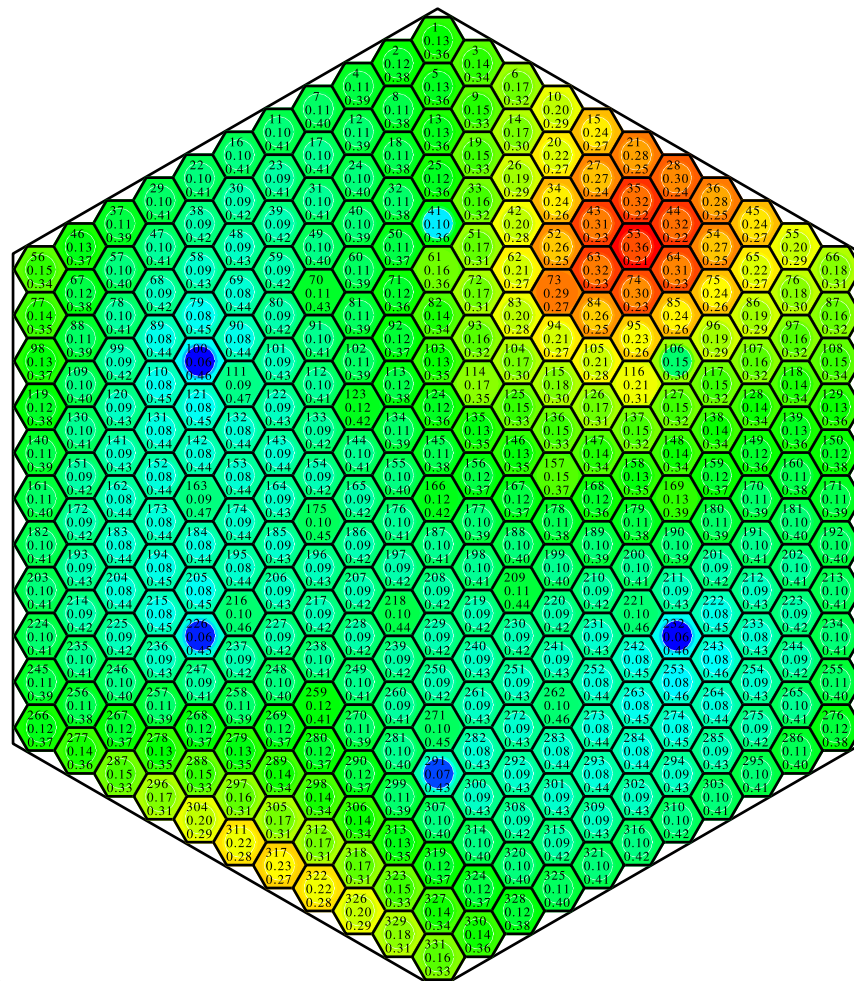
(a)

(б)

Фигура 6.3 Среден по клетки и материални зони скаларен поток при гранично условие на бяло отражение на стените на касетата. Получен с метод на преобразуването за отбор на пробег до съткновение и статистика на съткновенията за потока. (а) – Поток в първа група. (б) – Поток във втора група. Брой неутронни истории – 10^7 . Номер на клетка на източника – 53. Аксиално положение на източника 0 см.



(a)



(б)

Фигура 6.4 Среден по клетки и материални зони скаларен поток при **периодично гранично условие** на стените на касетата. Получен с метод на преобразуването за отбор на пробег до стълкновение и статистика на стълкновенията за потока. (а) – Поток в първа група. (б) – Поток във втора група. Брой неутронни истории – 10^7 . Номер на клетка на източника – 53. Аксиално положение на източника 0 ст.

Всяка от фигурите ясно показва експоненциалното намаляване на потока в първа енергетична група с отдалечаване от източника. Най-ясно и силно изразено е това намаляване при граничното условие на свободна повърхност (Фигура 6.1), което е така именно поради липсата на възможност за каквото и да е отражение обратно към обема на касетата в такъв случай.

В контраст с това, в случая на гранично условие на огледално отражение (Фигура 6.2) ясно виждаме как след първоначалното бързо намаляване на потока при малко отдалечаване от клетката на източника, потокът започва да спада значително по-бавно, достигайки почти постоянно ниво след дадено разстояние. Това е така, защото отразените от стените на касетата неутрони имат възможност да компенсират за това намаляване в отдалечените от източника области на касетата.

В случая на гранични условия на бяло отражение (Фигура 6.3) наблюдаваме подобен ефект, но с допълнително „натрупване“ на поток в областите на касетата близки до нейните стени. Това натрупване е следствие на обстоятелството, че при такива гранични условия се оказва, че при наличие на напречна за границата анизотропна компонента на потока, в по-голямата част от случаите ъгълът на отражение на неутрона спрямо нормалата на стената е по-голям от този на падане (разфокусиране на потока). Тази анизотропна компонента на потока, създаден от точков източник, е по-силно изразена на по-малки разстояния до него и при среди с по-малко пълно макроскопично сечение. Разбира се, в области от граничната повърхност, които са вдлъбнати от гледна точка на точковия източник, този ефект на фокусиране в близост до границата ще е още по-силно изразен, което е именно това, което наблюдаваме в клетките по ръбовете на касетата.

Периодичните гранични условия (Фигура 6.4) водят до резултати наподобяващи тези за гранично условие на огледално отражение. Основната разлика в случая е, че практически тези гранични условия променят топологията на касетата, което е и обяснението за завишения поток, който наблюдаваме в близост до стената на касетата долу вляво на Фигура 6.4. При тези гранични условия тази област се оказва също „близка“ до източника, посредством стената на касетата горе вдясно на същата фигура.

Резултатите във втора енергетична група цялостно наподобяват тези в първа за съответните гранични условия, но с характерно много по-слабо изразени и по-плавни пикове на потока в съответните области на касетата. Това е следствие на факта, че в про-

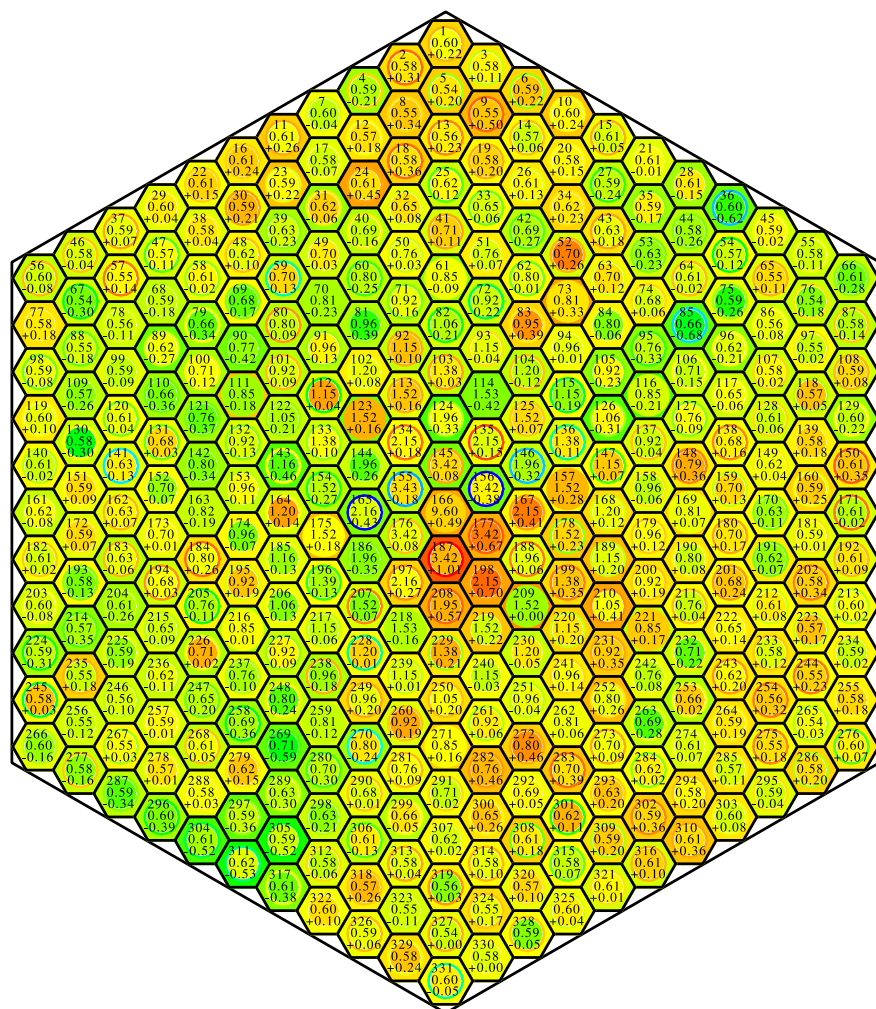
цеса на достигане на даден неутрон до втора група (процеса на неговото забавяне) информацията за мястото на неговото раждане постепенно се губи. Затова и този ефект се наблюдава най-слабо при гранично условие на свободна повърхност – неутроните във втора група, участвали в статистиката там са имали най-малко „време“ (на практика най-кратък път) за забавяне.

Сравнение на методи за отбор на пробег до стълкновение

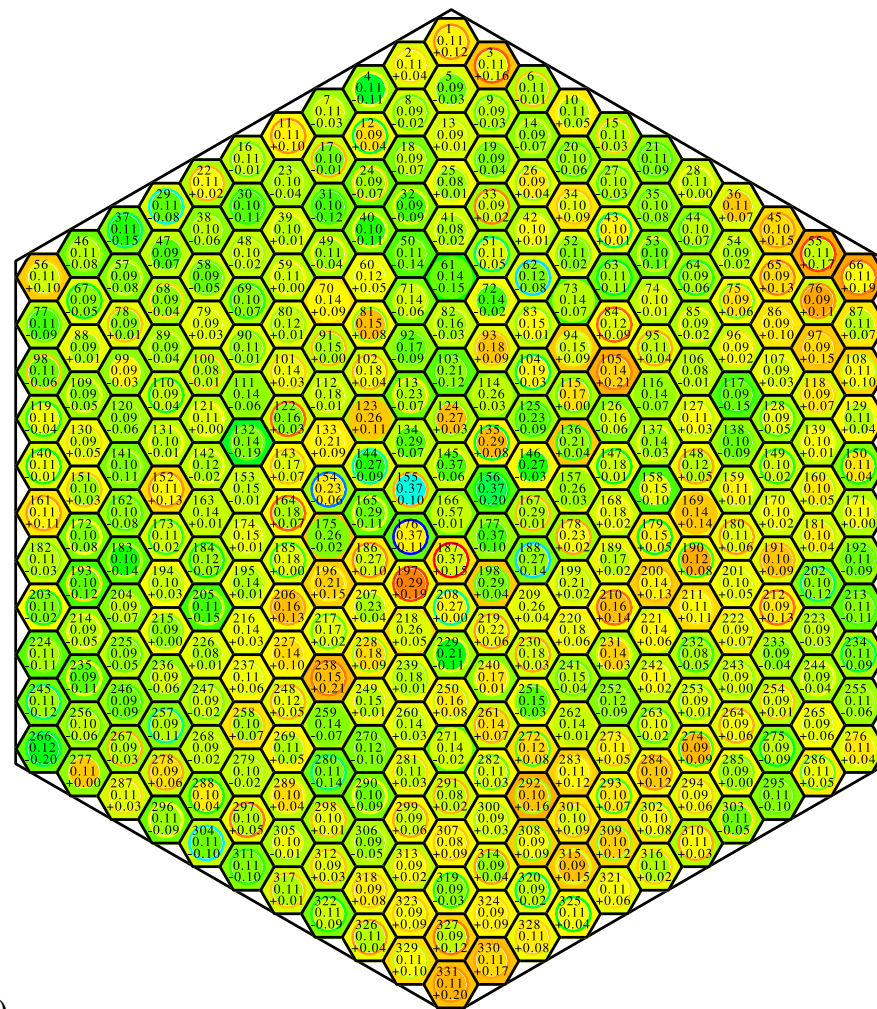
Както вече неколнократно споменахме, изчислителният ни модел позволява два различни метода за отбор на пробег до стълкновение – методът на преобразуването и методът на мнимите стълкновения. Освен това, имаме два начина за оценяване на потока чрез натрупаната по време на проследяването на историите статистика – статистика на стълкновенията и трекова статистика. Трековата статистика е изцяло „неестествена“ за метода на мнимите стълкновения – той разглежда единствено и само позициите на стълкновение в касетата без да натрупва информация за изминатия до това стълкновение път на неутрона. Поради това, когато използваме изчислителния ни модел с метода на мнимите стълкновения, резултатите ще получаваме единствено със статистика на стълкновенията.

Ще сравним резултатите за относителния поток получени с различните методи за отбор на пробег до стълкновение и различните начини за образуване на статистическа оценка за тях. На Фигура 6.5 сме представили графично сравнение между резултати получени с метода на мнимите стълкновения и статистика на стълкновенията за потока, и резултати получени с метода на преобразуването и трекова статистика за потока, при гранични условия на бяло отражение и точков източник разположен *в центъра* на касетата.

Цветовите на отделните зони обозначават действителната разлика между стойностите за относителния поток получени по единия и по другия метод за съответната материална зона. Във всяка клетка има три числа – номер на клетката, относителен поток за клетката, оценен чрез метода на мнимите стълкновения и статистика на стълкновенията за потока, и действителната разлика между оценката за същия поток получена чрез метода на преобразуването и трекова статистика за потока и горната оценка получена по другия метод, *умножена по 100*. Резултатите показват много добро съвпадение между методите и в двете енергетични групи.



(a)



(б)

Фигура 6.5. Сравнение между оценките получени по метода на преобразуването с трекова статистика за потока и по метода на мнимите стълкновения със статистика на стълкновенията за потока при гранични условия на бяло отражение. (а) – Поток в първа група. (б) – Поток във втора група. Брой неутронни истории – 10^7 . Номер на клетка на източника – 166. Аксиално положение на източника 0 см.

В Таблица 6.1 и 6.2 количествено сме сравнили резултатите за относителния поток осреднен по клетки, получени по възможните за нашия изчислителен модел различни методи, в двете енергетични групи. За всяка двойка резултати сме представили минималното и максималното относително отклонение между тях за дадена клетка, средното квадратично на действителните отклонения между резултатите на двата метода по клетки, както и средното квадратично на стойностите на относителните отклонения между резултатите за всички клетки. От резултатите в таблицата виждаме, че съвпадението между различните методи за оценяване на относителния поток е много добро. Наблюдаваме също и очаквания ефект на още по-добро съвпадение между резултатите, получени чрез трекова статистика и статистика на стълкновенията, когато те са приложени за едни и същи неутронни истории. Този ефект е очакван, защото между такива резултати следва да съществува много силна корелация.

Таблица 6.1. Сравнение между методи за оценяване на относителния поток в първа група. Гранично условие на бяло отражение. (МП – Метод на преобразуването; MMC – Метод на мнимите стълкновения; CC – Статистика на стълкновенията; TC – Трекова статистика; МП/СС (TC) – Резултат получен с МП/СС по същите истории както този за МП/TC)

Min.	RMSA	MMC/CC		MII/TC		MII/CC (TC)	
Max.	RMSR						
MII/CC		-0.74%	1.40e-4	-1.01%	1.21e-4		
		+1.23%	0.34%	+0.68%	0.28%		
MMC/CC				-0.90%	1.23e-4		
				+1.05%	0.30%		
MII/TC						-0.49%	6.59e-5
						+0.49%	0.15%

Таблица 6.2. Сравнение между методи за оценяване на относителния поток във втора група. Гранично условие на бяло отражение. (МП – Метод на преобразуването; MMC – Метод на мнимите стълкновения; CC – Статистика на стълкновенията; TC – Трекова статистика; МП/СС (TC) – Резултат получен с МП/СС по същите истории както този за МП/TC)

Min.	RMSA	MMC/CC		MII/TC		MII/CC (TC)	
Max.	RMSR						
MII/CC		-1.99%	4.63e-5	-1.72%	3.99e-5		
		+1.77%	0.72%	+1.68%	0.61%		
MMC/CC				-1.74%	4.27e-5		
				+1.76%	0.67%		
MII/TC						-0.81%	1.76e-5
						+1.03%	0.27%

На Фигура 6.6 са показани детайли за 30-градусов сектор на решението във вариант МП/TC.

МП/ТС ПЪРВА ГРУПА

		# тип		66 1	
зона: поток		rsd %		0: 0.60 0.16	
				1: 0.58 0.27	
				2: 0.59 0.30	
				3: 0.59 0.26	
				4: 0.62 0.23	
				76 3	
				0: 0.54 0.14	
				1: 0.54 0.25	
				2: 0.54 0.28	
				3: 0.54 0.24	
				4: 0.54 0.20	
				86 3	
				0: 0.56 0.13	
				1: 0.56 0.23	
				2: 0.56 0.26	
				3: 0.56 0.22	
				4: 0.56 0.18	
				96 3	
				0: 0.62 0.12	
				1: 0.62 0.22	
				2: 0.62 0.25	
				3: 0.62 0.21	
				4: 0.62 0.17	
				106 2	
				0: 0.71 0.11	
				1: 0.71 0.20	
				2: 0.71 0.23	
				3: 0.71 0.19	
				4: 0.71 0.15	
				116 4	
				0: 0.85 0.11	
				1: 0.85 0.15	
				2: 0.85 0.15	
				3: 0.85 0.15	
				4: 0.00 0.00	
				126 3	
				0: 1.05 0.09	
				1: 1.05 0.16	
				2: 1.06 0.18	
				3: 1.06 0.15	
				4: 1.06 0.12	
				136 3	
				0: 1.38 0.07	
				1: 1.38 0.14	
				2: 1.39 0.16	
				3: 1.39 0.13	
				4: 1.38 0.11	
				146 3	
				0: 1.96 0.06	
				1: 1.95 0.12	
				2: 1.96 0.13	
				3: 1.96 0.11	
				4: 1.96 0.09	
				156 3	
				0: 3.42 0.05	
				1: 3.37 0.09	
				2: 3.40 0.10	
				3: 3.42 0.08	
				4: 3.45 0.06	
				166 5	
				0: 9.60 0.02	
				1: 12.01 0.02	
				2: 6.25 0.04	
				3: 5.62 0.04	
				4: 0.00 0.00	

МП/ТС ВТОРА ГРУПА

										# тип		66 1	
зона: поток										rsd %		0: 0.11 0.36	
												1: 0.10 0.62	
												2: 0.11 0.68	
												3: 0.11 0.62	
												4: 0.12 0.53	
												76 3	
												0: 0.09 0.32	
												1: 0.09 0.58	
												2: 0.09 0.67	
												3: 0.09 0.58	
												4: 0.10 0.46	
												86 3	
												0: 0.09 0.32	
												1: 0.08 0.58	
												2: 0.09 0.68	
												3: 0.09 0.58	
												4: 0.09 0.45	
												87 1	
												0: 0.11 0.34	
												1: 0.10 0.60	
												2: 0.10 0.67	
												3: 0.11 0.59	
												4: 0.11 0.49	
												96 3	
												0: 0.09 0.32	
												1: 0.08 0.58	
												2: 0.08 0.69	
												3: 0.08 0.58	
												4: 0.09 0.45	
												106 2	
												0: 0.30 0.32	
												1: 0.05 0.54	
												2: 0.07 0.67	
												3: 0.08 0.54	
												4: 0.09 0.41	
												107 3	
												0: 0.09 0.32	
												1: 0.08 0.58	
												2: 0.09 0.69	
												3: 0.09 0.57	
												4: 0.09 0.45	
												108 1	
												0: 0.11 0.34	
												1: 0.10 0.59	
												2: 0.10 0.69	
												3: 0.11 0.59	
												4: 0.11 0.49	
												116 4	
												0: 0.29 0.31	
												1: 0.14 0.40	
												2: 0.14 0.40	
												3: 0.14 0.40	
												4: 0.00 0.00	
												117 3	
												0: 0.09 0.31	
												1: 0.08 0.57	
												2: 0.09 0.66	
												3: 0.09 0.56	
												4: 0.09 0.43	
												126 3	
												0: 0.24 0.28	
												1: 0.15 0.43	
												2: 0.16 0.50	
												3: 0.16 0.43	
												4: 0.17 0.33	
												127 3	
												0: 0.11 0.28	
												1: 0.10 0.51	
												2: 0.11 0.60	
												3: 0.11 0.51	
												4: 0.11 0.39	
												128 3	
												0: 0.09 0.31	
												1: 0.09 0.56	
												2: 0.10 0.64	
												3: 0.10 0.54	
												4: 0.11 0.42	
												129 1	
												0: 0.11 0.34	
												1: 0.10 0.59	
												2: 0.10 0.67	
												3: 0.11 0.58	
												4: 0.11 0.48	
												136 3	
												0: 0.21 0.21	
												1: 0.19 0.38	
												2: 0.20 0.44	
												3: 0.21 0.38	
												4: 0.22 0.29	
												137 3	
												0: 0.14 0.25	
												1: 0.13 0.46	
												2: 0.14 0.54	
												3: 0.14 0.45	
												4: 0.15 0.35	
												138 3	
												0: 0.10 0.29	
												1: 0.09 0.54	
												2: 0.10 0.64	
												3: 0.10 0.54	
												4: 0.11 0.42	
												139 3	
												0: 0.10 0.31	
												1: 0.09 0.56	
												2: 0.09 0.67	
												3: 0.09 0.56	
												4: 0.10 0.44	
												146 3	
												0: 0.18 0.22	
												1: 0.16 0.41	
												2: 0.17 0.47	
												3: 0.18 0.41	
												4: 0.19 0.31	
												147 3	
												0: 0.12 0.27	
												1: 0.11 0.49	
												2: 0.12 0.57	
												3: 0.12 0.49	
												4: 0.13 0.38	
												148 3	
												0: 0.10 0.30	
												1: 0.09 0.55	
												2: 0.09 0.68	
												3: 0.10 0.55	
												4: 0.10 0.43	
												149 3	
												0: 0.11 0.33	
												1: 0.10 0.58	
												2: 0.11 0.66	
												3: 0.11 0.58	
												4: 0.11 0.48	
												156 3	
												0: 0.15 0.26	
												1: 0.26 0.30	
												2: 0.33 0.25	
												3: 0.25 0.30	
												4: 0.00 0.00	
												157 4	
												0: 0.21 0.15	
												1: 0.14 0.44	
												2: 0.15 0.52	
												3: 0.15 0.44	
												4: 0.16 0.34	
												158 3	
												0: 0.24 0.11	
												1: 0.10 0.52	
												2: 0.11 0.61	
												3: 0.11 0.52	
												4: 0.11 0.40	
												159 3	
												0: 0.09 0.30	
												1: 0.09 0.55	
												2: 0.10 0.66	
												3: 0.10 0.55	
												4: 0.10 0.43	
												160 3	
												0: 0.10 0.31	
												1: 0.09 0.56	
												2: 0.09 0.66	
												3: 0.10 0.57	
												4: 0.10 0.44	
												166 5	
												0: 0.14 0.29	
												1: 0.20 0.27	
												2: 0.20 0.28	
												3: 0.20 0.29	
												4: 0.00 0.30	
												167 3	
												0: 0.17 0.18	
												1: 0.17 0.40	
												2: 0.18 0.48	
												3: 0.18 0.40	
												4: 0.19 0.31	
												168 3	
												0: 0.22 0.14	
												1: 0.14 0.41	
												2: 0.14 0.40	
												3: 0.14 0.40	
												4: 0.00 0.00	
												169 4	
												0: 0.29 0.10	
												1: 0.10 0.59	
												2: 0.10 0.66	
												3: 0.10 0.55	
												4: 0.10 0.43	
												170 3	
												0: 0.30 0.11	
												1: 0.11 0.58	
												2: 0.11 0.66	
												3: 0.11 0.58	
												4: 0.11 0.48	
												171 1	
												0: 0.10 0.33	
												1: 0.10 0.58	
												2: 0.11 0.66	
												3: 0.11 0.58	
												4: 0.11 0.48	

Производителност на методите за оценка на потока

Производителността на различните методи за оценка на относителния поток, които нашия изчислителен модел позволява ще оценим посредством „показател на качеството“ (Figure of Merit). Стойността на този параметър за даден метод за оценка ще означаваме с M_m , където m е индекс указващ за кой метод се отнася тази стойност. За произволно m , M_m ще определяме по формулата [5]:

$$M_m = \frac{1}{T_m R_m^2}, \quad (6.3.1)$$

където T_m е времето за изпълнение на изчисленията по метода m , а R_m^2 е оценка за дисперсията на получените резултати. Важно е да отбележим, че характерното за получените по тази формула стойности на M_m е, че те нямат принципна зависимост от броя проследени неутронни истории N . Това е така, защото при нашите методи за оценка на относителния поток времето T_m е пропорционално на този брой N , а както в нашия случай, така и като цяло по правило при Монте Карло методите дисперсията R_m^2 е обратнопропорционална на N [4, 5]. По този начин така получената стойност за M_m ще характеризира именно използвания метод за получаване на оценката за потока и ще бъде толкова по-голяма, колкото за по-кратко време се достига дадена стойност на дисперсията. Отбелязваме, че M_m е относителна оценка на производителността, която има смисъл единствено за сравнение на резултати получени при една и съща конфигурация на изчислителния модел и получени при изпълнение от една и съща изчислителна машина.

Тъй като в нашия случай ние получаваме отделни оценки за неопределеността на относителната ни оценка за потока във всяка клетка, не е тривиален въпросът как да получим единствена, скаларна оценка за дисперсията на целия краен резултат (за всички клетки наведнъж). С оглед на относителността на M_m , за стойност на R_m^2 избираме сумата на квадратите на оценката за относителното стандартно отклонение на резултата, получен за всяка клетка в дадена енергетична група, както и за двете енергетични групи взети заедно.

Резултатите за T_m , R_m^2 и M_m систематизираме в Таблица 6.3-6.6. Отново ще разглеждаме единствено резултати за точков източник поставен в центъра на касетата, тъй като положението на източника не оказва голям ефект върху резултатите за M_m .

Таблица 6.3. Сравнение между различни методи за определяне на относителния поток чрез показател на качеството при гранични условия (ГУ) на свободна повърхност.

ГУ: Свободна повърхност; Енергетична група: 1				ГУ: Свободна повърхност; Енергетична група: 2			
m	T_m, s	$R_m^2, a. u.$	$M_m, a. u.$	m	T_m, s	$R_m^2, a. u.$	$M_m, a. u.$
МП/СС	31.21	6.74e-3	4.75	МП/СС	31.21	7.30e-2	0.439
ММС/СС	3.78	6.96e-3	38.0	ММС/СС	3.78	7.29e-2	3.63
МП/ТС	31.21	6.76e-4	47.4	МП/ТС	31.21	1.23e-2	2.60
ГУ: Свободна повърхност; Енергетична група: 1+2							
m	T_m, s	$R_m^2, a. u.$	$M_m, a. u.$				
МП/СС	31.21	7.97e-2	0.402				
ММС/СС	3.78	7.98e-2	3.31				
МП/ТС	31.21	1.30e-2	2.47				

Таблица 6.4. Сравнение между различни методи за определяне на относителния поток чрез показател на качеството при гранични условия (ГУ) на огледално отражение.

ГУ: Огледално отражение; Енергетична група: 1				ГУ: Огледално отражение; Енергетична група: 2			
m	T_m, s	$R_m^2, a. u.$	$M_m, a. u.$	m	T_m, s	$R_m^2, a. u.$	$M_m, a. u.$
МП/СС	240.68	7.56e-4	5.50	МП/СС	240.68	4.58e-3	0.907
ММС/СС	31.50	7.56e-4	42.02	ММС/СС	31.50	4.59e-3	6.92
МП/ТС	240.68	9.25e-5	44.94	МП/ТС	240.68	8.71e-4	4.77
ГУ: Огледално отражение; Енергетична група: 1+2							
m	T_m, s	$R_m^2, a. u.$	$M_m, a. u.$				
МП/СС	240.68	5.34e-3	0.779				
ММС/СС	31.50	5.34e-3	5.94				
МП/ТС	240.68	9.63e-4	4.31				

Таблица 6.5. Сравнение между различни методи за определяне на относителния поток чрез показател на качеството при гранични условия (ГУ) на бяло отражение.

ГУ: Бяло отражение; Енергетична група: 1				ГУ: Бяло отражение; Енергетична група: 2			
m	T_m, s	$R_m^2, a. u.$	$M_m, a. u.$	m	T_m, s	$R_m^2, a. u.$	$M_m, a. u.$
МП/СС	230.42	7.81e-3	5.56	МП/СС	230.42	4.51e-3	0.964
ММС/СС	32.09	7.80e-3	39.27	ММС/СС	32.09	4.50e-3	6.91
МП/ТС	230.42	9.91e-5	43.78	МП/ТС	230.42	8.68e-4	5.00
ГУ: Бяло отражение; Енергетична група: 1+2							
m	T_m, s	$R_m^2, a. u.$	$M_m, a. u.$				
МП/СС	230.42	5.29e-3	0.821				
ММС/СС	32.09	5.29e-3	5.89				
МП/ТС	230.42	9.67e-4	4.49				

Таблица 6.6. Сравнение между различни методи за определяне на относителния поток чрез показател на качеството при периодично гранично условие (ГУ).

ГУ: Периодично; Енергетична група: 1				ГУ: Периодично; Енергетична група: 2			
m	T_m, s	$R_m^2, a. u.$	$M_m, a. u.$	m	T_m, s	$R_m^2, a. u.$	$M_m, a. u.$
МП/СС	237.46	7.49e-4	5.62	МП/СС	237.46	4.52e-3	0.932
ММС/СС	31.41	7.49e-4	42.49	ММС/СС	31.41	4.51e-3	7.05
МП/ТС	237.46	8.52e-5	49.41	МП/ТС	237.46	7.92e-4	5.31
ГУ: Периодично; Енергетична група: 1+2							
m	T_m, s	$R_m^2, a. u.$	$M_m, a. u.$				
МП/СС	237.46	5.27e-3	0.800				
ММС/СС	31.41	5.26e-3	6.05				
МП/ТС	237.46	8.78e-4	4.80				

Резултатите в таблиците категорично водят до следните изводи – в първа енергетична група комбинацията от метод на преобразуването и трекова статистика има най-висок показател на качеството независимо от избора на гранични условия, във втора енергетична група комбинацията от метод на мнимите стълкновения и статистика на стълкновенията е с най-висока стойност на същия показател. Резултатът за двете групи взети заедно води до напълно аналогични изводи като този за втора група. Това е очаквано, тъй като неопределеностите на потоците във втора група цялостно са на порядъци по-високи от тези в първа група, поради което, събирайки квадратите на относителните стандартни отклонения за двете групи накуп, неопределеностите във втора група се оказват с драстично по-голям принос в общата сума.

От таблиците виждаме, че превъзходството на комбинацията от метода на преобразуването и трековата статистика в първа група варира в рамките на около 5 до 25%, а превъзходството на метода на мнимите стълкновения и статистиката на стълкновенията във втора група, съответно и при двете групи взети заедно варира в рамките на 20 до 45%. Тази разлика в съотношението на показателите на качеството на двата метода в двете енергетични групи е причинена най-вече от различните макроскопични сечения на материалите в тези групи. Средата е много по-„непрозрачна“ за неутрони във втора група, което силно намалява ползата от прилагане на трековата статистика, намалявайки средния брой пресечени клетки до следващо стълкновение. Това ясно показва, как това кой е по-подходящият и по-производителен метод измежду метода на преобразуването и метода на мнимите стълкновения силно зависи от конкретната задача. За задачи, в които пътят на неутрон до стълкновение средно включва преминаване през множество

клетки (в общия случай множество виртуални детектори), прилагането на метода на преобразуването с трекова статистика е по-целесъобразно. Обратно, за задачи, при които същият път на неутрон средно включва малък брой пресичания на граници на клетки, прилагането на метода на мнимите стълкновения със статистика на стълкновения ще бъде по-благоприятно. Изследвания от литературата подобни на настоящото водят до подобни резултати и изводи [11, 12].

Таблиците също така категорично показват и изключително лошата производителност на метода на преобразуването в комбинация със статистика на стълкновенията. Това отново е очакван резултат, тъй като със статистиката на стълкновенията и двата метода за отбор на пробег до стълкновение достигат до една и съща крайна информация от проследяването на неутронните истории, но методът на преобразуването я достига с решаване на повече и по-сложни геометрични задачи (пресичане с граници на клетки и техните материални зони в сравнение с проста локализация на точката на мнимо стълкновение).

Сравнение с независимо референтно решение

Метод и модел

Потвърждение за валидността на резултатите получени чрез МСТ получаваме чрез сравнение с независимо решение на преносната задача. Независимото решение, което сме избрали е получено с програмата NEWT [8] от програмния комплекс SCALE [3].

В NEWT се прилага методът на дискретните ординати за материални тела с достатъчно произволна форма. За отчитане на връзката между средния и граничните потоци в едно тяло се прилага опростен метод на характеристиките – т. нар. *extended step characteristic approach* (ESC).

NEWT има следните ограничения:

- могат да се решават единствено двумерни задачи;
- допуска се единствено изотропен и обемно еднородно разпределен източник в избран набор от материални тела;
- видовете гранични условия, които се допускат, са единствено такива на свободна повърхност и на бяло отражение;
- резултатът е единствено във вида на еднотрупови скаларни потоци;

- на практика не е възможно да се опишат малките хлабини между горивото и обвивката).

В съответствие с тези ограничения, за целите на сравнението с NEWT, МСТ е променен по следния начин:

- утечката или отражението от аксиалните граници на касетата не се отчитат;
- при бяло отражение компонентата на единичния вектор на посоката на движение по оста на касетата след отражение е нулева;
- източникът е изотропен и обемно еднородно разпределен в избрана материална зона от избрана клетка;
- газовите хлабини на горивните клетки са премахнати от модела.

По този начин, характеристиките на изчислителните модели стават следните:

NEWT: P_3S_8 приближение; източник разпределен в централната зона на централната клетка; липса на газова хлабина между горивото и обвивката.

МСТ: P_3 разложение на сеченията за разсейване; източник разпределен в централната зона на централната клетка; липса на газова хлабина между горивото и обвивката;

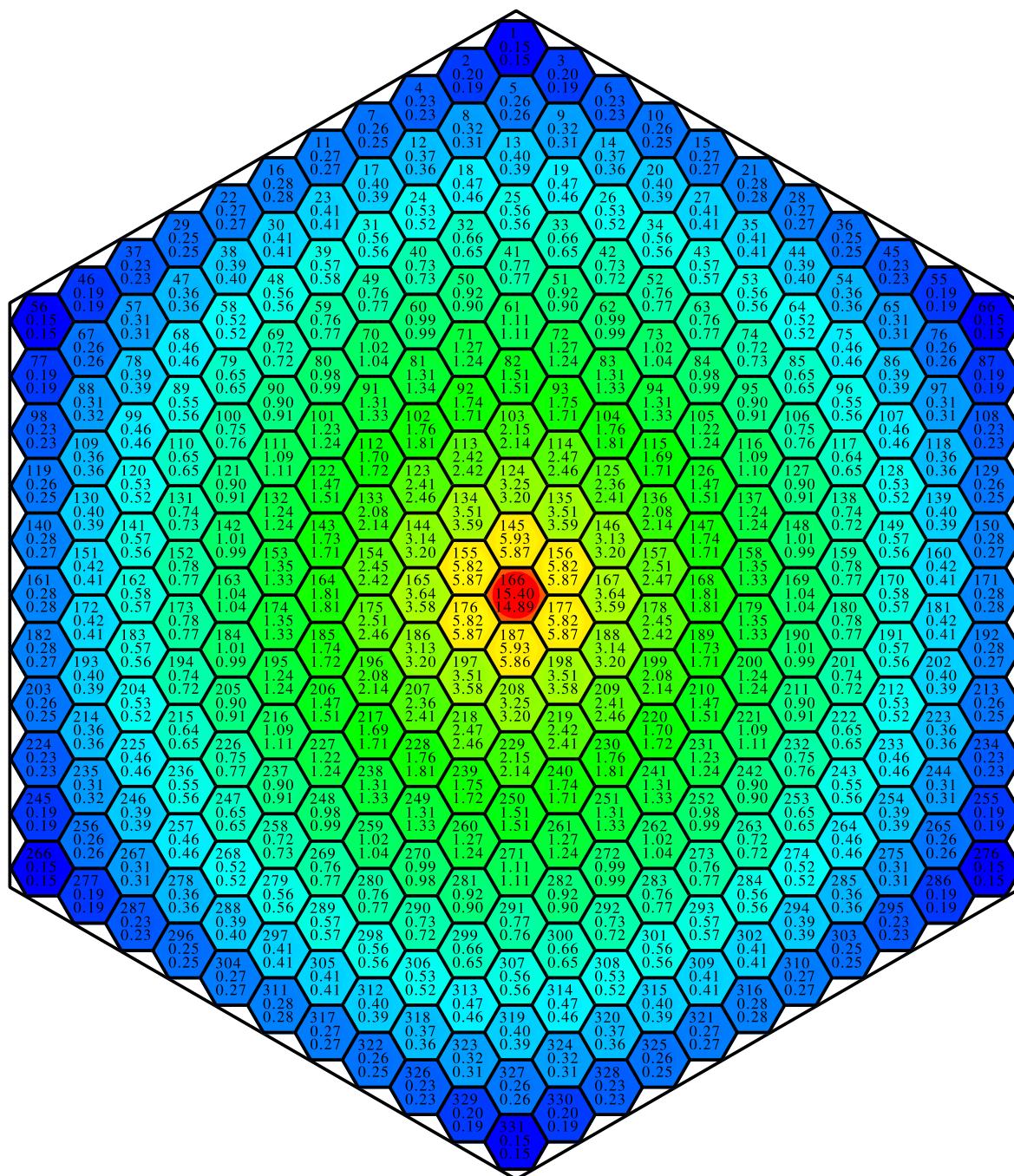
Резултатите от МСТ са получени като за метод на отбор на пробег до стълкновение е избран методът на преобразуването и е приложена трекова статистика за намиране на скаларния поток.

Резултати и изводи

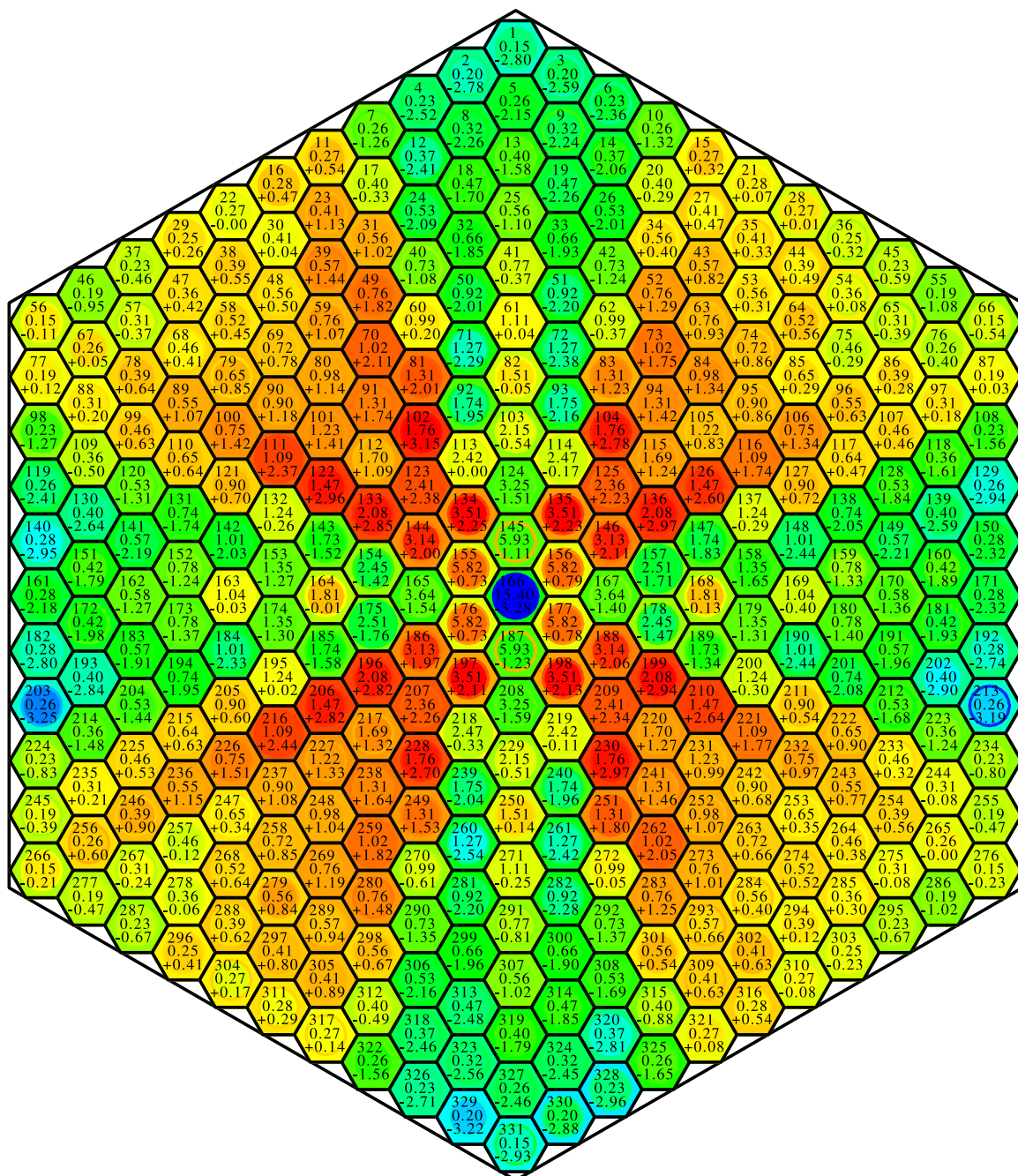
Резултатите сме представили на Фигури 6.7–6.10.

Като отчетем методическите и принципни разлики между NEWT и МСТ, както и статистическата неопределеност на резултатите от МСТ, съгласието на МСТ с независимото решение на преносната задача предоставено от NEWT е достатъчно добро. Това съгласие ни позволява да заключим, че процедурата на моделиране на неутронния пренос в МСТ е състоятелна.

Гранично условие на свободна повърхност



Фигура 6.7. Едногрупови резултати за скаларния поток по клетки и материални зони получени независимо с NEWT (горе) и МСТ (долу) при гранично условие на **свободна повърхност**. Цветното кодиране на материалните зони е пропорционално на потока в тях.

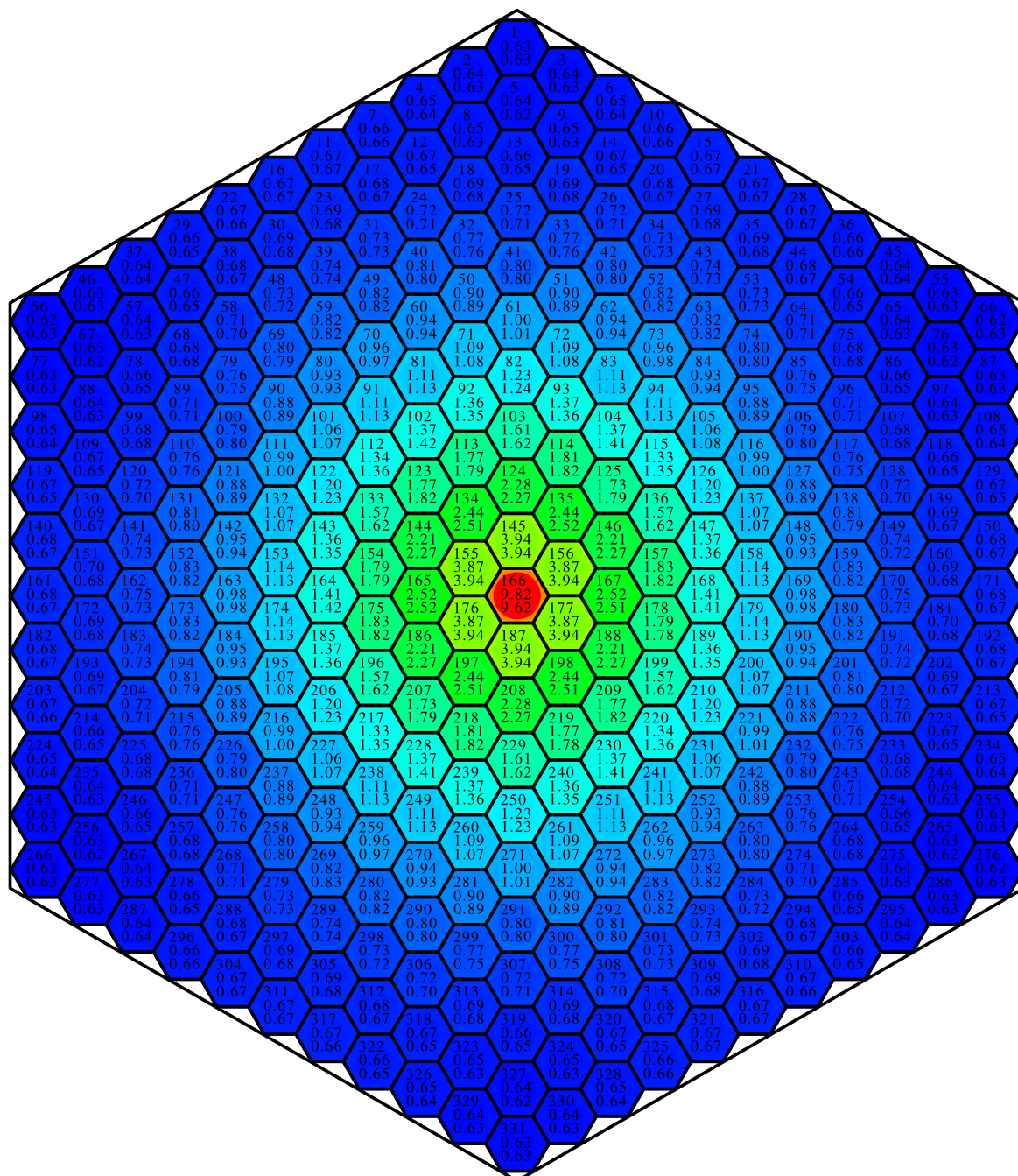


Фигура 6.8. Относително отклонение на резултата на еднотруповия скаларен поток получен с МСТ (долу, в проценти) от този получен с NEWT (горе) при гранични условия на **свободна повърхност**. Цветното кодиране на материалните зони е пропорционално на относителната разлика между двата резултата..

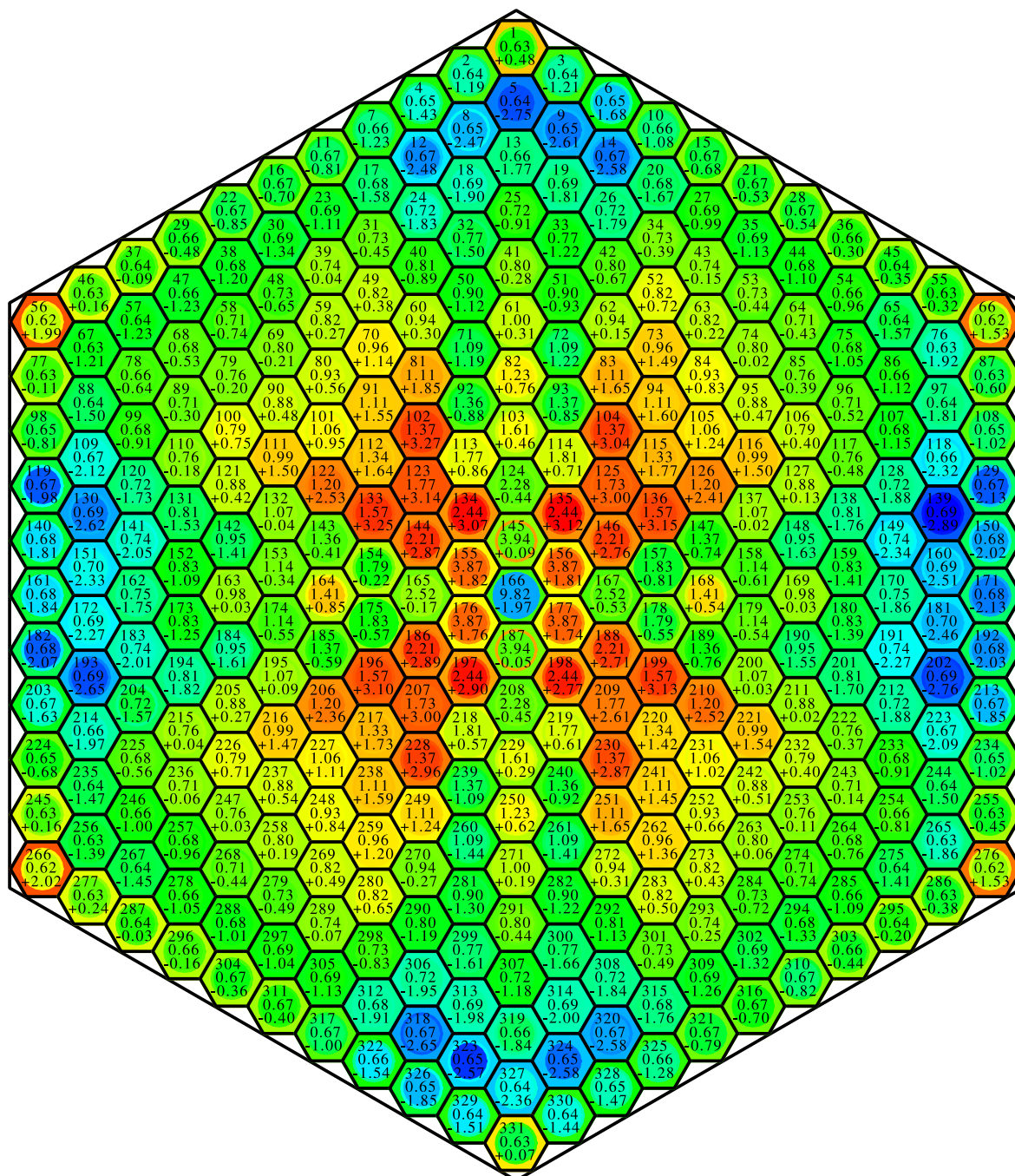
Минималната относителна разлика между оценките за потока получени с МСТ и NEWT в тази конфигурация е -3.28% в клетка 166, а максималната е $+3.15\%$ в клетка 102. Средното квадратично на действителните разлики между резултатите по клетки е $3.52E-2$, средното квадратично на относителните такива е 1.57% .

Гранично условие на бяло отражение

Минималната относителна разлика между оценките за потока получени с МСТ и NEWT в тази конфигурация е -2.89% в клетка 139, а максималната е $+3.27\%$ в клетка 102. Средното квадратично на действителните разлики между резултатите по клетки е $2.79E-2$, средното квадратично на относителните такива е 1.47% .



Фигура 6.9. Едногрупови резултати за скаларния поток по клетки и материални зони получени с независимо с NEWT (горе) и МСТ (долу) при гранично условие на бяло отражение. Цветното кодиране на материалните зони е пропорционално на потока в тях.



Фигура 6.10. Относително отклонение на резултата на еднотруповия скаларен поток получен с MCT (долу, в проценти) от този получен с NEWT (горе) при гранични условия на бяло отражение. Цветното кодиране на материалните зони е пропорционално на относителната разлика между двата резултата.

7. Заключение

Създадени са изчислителна процедура и програмна реализация за моделиране на неутронния пренос по метода Монте Карло.

За една горивна касета на ВВЕР-1000 са решени двугрупови преносни задачи с фиксиран източник при различни гранични условия.

Сравнени са качествата на и е проверено съгласието между два метода за отбор на пробег до стълкновение – метода на преобразуването и метода на мнимите стълкновения, както и на два подхода за оценяване на скаларния поток – чрез скоростта на стълкновения и чрез трекова статистика

Резултатите от създадената програмна реализация МСТ са сравнени с независимо детерминистично решение на преносната задача, получено по метода на дискретните ординати с програмата NEWT от програмния комплекс SCALE. Доброто им съгласие удостоверява състоятелността на създадената изчислителна процедура и коректността на нейната програмна реализация

Работата с фиксиран източник и две енергетични групи не е принципно ограничение за приложените процедури и методи. Обобщаването им с цел отчитане на неутронното размножение, а също и за по-голям брой енергетични групи или непрекъснати енергии, може да стане пряко и е възможен предмет на бъдеща работа.

Цитирани източници

- [1] E. R. Woodcock et al. *Techniques used in the GEM code for Monte Carlo neutronics calculations in reactors and other systems of complex geometry*. ANL-7050. Argonne National Laboratory., 1965.
- [2] J. Leppänen. *Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code*. PhD thesis, Helsinki University of Technology, 2007.
- [3] *Scale: A Comprehensive Modeling and Simulation Suite for Nuclear Safety Analysis and Design*, ORNL/TM-2005/39, Version 6.1, June 2011. Available from Radiation Safety Information Computational Center at Oak Ridge National Laboratory as CCC-785.
- [4] И. Христосков, *Записки на лекционния курс по „Изчислителни методи в ядрените технологии“*, 2023.
- [5] X-5 Monte Carlo Team, *MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5*, Rev. 2/1/2008, vol. I: Overview and Theory, Los Alamos National Laboratory, 2003.
- [6] E. E. Lewis and W. F. Miller, Jr., *Computational Methods of Neutron Transport*, New York, John Wiley & Sons, 1984.
- [7] I. Lux and L. Koblinger, *Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations*, Boca Raton, Florida: CRC Press, 1991.
- [8] M. A. Jessee and M. D. DeHart, *NEWT: A new transport algorithm for two-dimensional discrete-ordinates analysis in non-orthogonal geometries*, ORNL/TM-2005/39, Version 6.1, Sect. F21, ORNL, 2011.
- [9] W. A. Coleman, „*Mathematical Verification of a Certain Monte Carlo Sampling Technique and Applications of the Technique to Radiation Transport Problems.*“ *Nuclear Science and Engineering*, vol. 31, № 1, pp. 76-81, 1968.
- [10] Belongie, Serge. "Rodrigues' Rotation Formula." From MathWorld--A Wolfram Resource, created by Eric W. Weisstein.
<https://mathworld.wolfram.com/RodriguesRotationFormula.html>
- [11] J. Leppänen, *Performance of Woodcock delta-tracking in lattice physics applications using the Serpent Monte Carlo reactor physics burnup calculation code*. *Annals of Nuclear Energy*, vol. 37, issue 5, 715-722. 2010
- [12] T. Rehak, A. Rineiski, R. Stieglitz, and E. Fridman, "Weighted delta-tracking in scattering media," in *Proc. Int. Conf. on Mathematics and Computational Methods*

Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2017), Jeju, Korea, Apr. 16–20, 2017

- [13] S. M. Bowman and M. E. Dunn, *SCALE Cross-section libraries*, ORNL/TM-2005/39, Version 6.1, Sect. M4, ORNL, June 2011.
- [14] S. Goluoglu, D. F. Hollenbach, N.F. Landers, L. M. Petrie, J. A. Bucholz, C. F. Weber, C. M. Hopper, *The material information processor for SCALE*, ORNL/TM-2005/39, Version 6.1, Sect. M7, ORNL, June 2011.

8. Приложение

Метод на преобразуването

Методът на преобразуването се основава на пресмятане на обратната функция на разпределение на избраната величина с аргумент случайна величина с равномерно разпределение $U(0, 1)$. Ще изложим мотивацията на този подход.

Нека вероятностното разпределение, от което искаме случайно да отберем стойност означим с F , а съответната вероятностна плътност – с f . Ще разгледаме две случайни величини X и Y , между които е налице следната връзка:

$$Y = \psi(X), \quad (\text{П1.1})$$

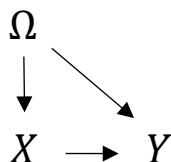
където функцията ψ е *обратимо* изображение на X в Y . За такива две случайни величини и техните вероятностни плътности е в сила следното равенство:

$$f_Y(y)|dy| = f_X(x)|dx|, \quad (\text{П1.2})$$

където $y = \psi(x)$ и, тъй като ψ е обратима, $dx = \psi^{-1}(y + dy) - \psi^{-1}(y)$, от което естествено следва, че

$$\frac{dx}{dy} = \frac{d}{dy} \psi^{-1}(y). \quad (\text{П1.3})$$

Валидността на (П1.2) е осигурена от факта, че съответстващите си стойности на величините X и Y имат един и същ първообраз в пространството на събитията. Фигура П1.1 онагледява това твърдение.



Фигура П1.1. Връзка между случайните променливи X и Y и пространството на събитията.

Така на основата на (П1.2) можем да запишем следното за вероятностната плътност на Y :

$$f_Y(y) = \left| \frac{dx}{dy} \right| f_X(x) = \left| \frac{d}{dy} \psi^{-1}(y) \right| f_X(x). \quad (\text{П1.4})$$

Разглеждането на (П1.4) показва, че валидността на равенството $f_Y(y) = f(y)$, където f е търсеното разпределение, лесно може да бъде осигурена, ако изберем $f_X(x) = 1$ и $\psi(x) = F^{-1}(x)$:

$$f_Y(y) = f_X(x) \left| \frac{d}{dy} \psi^{-1}(y) \right| = \left| \frac{d}{dy} F(y) \right| = \frac{d}{dy} F(y) = f(y), \quad (\text{П1.5})$$

където второто равенство следва от избора ни за f_X и ψ , а третото – от факта, че F като кумулативна функция на вероятностно разпределение е ненамаляваща. От предположението за вида на f_X и факта, че стойностите на X като аргументи на F^{-1} трябва да принадлежат на $[0, 1]$ следва, че X е с вероятностно разпределение $U(0, 1)$. Така (П1.5) на практика означава, че стойност на случайна величина Y , получена посредством следната зависимост:

$$y = F^{-1}(x), \quad (\text{П1.6})$$

където x е стойност на случайна величина с разпределение $U(0,1)$, ще има вероятностно разпределение F .

По този начин, методът на преобразуването предписва следната двустъпкова процедура за отбиране на стойност x от случайна величина X с вероятностно разпределение F_X :

- 1) Отбор на стойност ξ от равномерното разпределение $U(0, 1)$.
- 2) Получаване на желаната стойност x на случайната величина X като $x = F_X^{-1}(\xi)$.

В зависимост от вида на вероятностното разпределение на разглежданата случайна величина и изчислителните цели най-общо се разграничават два начина за практическо приложение на гореописания подход.

При подходящ вид на разпределението F на разглежданата случайна величина методът на преобразуването може да се осъществи чрез директно използване на функцията F^{-1} в явен вид. Често срещан пример за такъв случай е когато избраната величина е разпределена експоненциално. Наистина, нека случайната величина X има експоненциално разпределение

$$f_X(x) = \Sigma \exp(-\Sigma x), \quad (\text{П1.7})$$

където Σ е положителна константа. Съответно функцията на вероятностното разпределение на величината X е

$$F_X(x) = 1 - \exp(-\Sigma x), \quad (\text{П1.8})$$

а нейната обратна съответно е

$$F_X^{-1}(\xi) = -\frac{1}{\Sigma} \ln(1 - \xi). \quad (\text{П1.9})$$

За целите на метода на преобразуването ξ е стойност отбрана от равномерното разпределение $U(0, 1)$, а в такъв случай $(1 - \xi)$ е стойност от същото разпределение. Последно, това значи, че прилагането на метода на преобразуването за отбиране на стойност от експоненциално разпределение се свежда до отбиране на стойност ξ от разпределението $U(0, 1)$ и заместване на тази стойност в следната формула

$$x = -\frac{1}{\Sigma} \ln \xi, \quad (\text{П1.10})$$

което гарантира, че x ще е стойност отбрана от експоненциално разпределение.

В практиката обаче, разпределението F и вероятностната плътност f често не са достъпни в аналитичен вид. В такива случаи най-често се прилага следният приблизителен подход.

В зависимост от изчислителните цели и вида на изследваната случайна величина, избираме подходящ набор от възможни стойности на случайната величина $x_i, i = 1, \dots, N$. После, табулираме функцията на разпределение $F_X(x_i)$. Методът на преобразуването се прилага чрез подходящо интерполиране между аргументите x_i за отбрана от $U(0, 1)$ стойност на F_X .

Пресичане на лъч с равнина

Движението на частица в материална среда включва нейно преминаване през фиктивни или реални материални граници. Ако съответната граница е плоска, геометричната задача се свежда до намиране на пресечната точка на съответстващ на траекторията на частицата лъч с равнина.

Първо ще въведем математическата постановка на задачата, заедно със съответните означения:

$\mathbf{r}_0$ – радиус-вектор на началната точка на лъча.

$\mathbf{\Omega}$ – единичен вектор указващ посоката на лъча.

$\mathbf{p}$ – радиус-вектор на точка, лежаща в разглежданата равнина.

$\hat{n}$ – единичен вектор перпендикулярен на равнината.

Търсим радиус-вектора $\mathbf{x}$ на точката, лежаща върху лъча, която лежи и в разглежданата равнина (ако такава точка съществува). Радиус-векторът на тази точка, тъй като тя лежи в равнината, има следното свойство:

$$(\mathbf{x} - \mathbf{p}) \cdot \hat{n} = 0. \quad (\text{П2.1})$$

Това, че точката също така лежи върху лъча, ни позволява да запишем нейния радиус-вектор по следния начин:

$$\mathbf{x} = \mathbf{r}_0 + \lambda \mathbf{\Omega}, \quad (\text{П2.2})$$

където λ е реален неотрицателен параметър. Това значи, че решаването на задачата се свежда до намиране на правилната стойност на λ . За да направим това, заместваме (П2.2) в (П2.1):

$$(\mathbf{r}_0 + \lambda \hat{r} - \mathbf{p}) \cdot \hat{n} = 0, \quad (\text{П2.3})$$

което се свежда до

$$\lambda \mathbf{\Omega} \cdot \hat{n} = (\mathbf{p} - \mathbf{r}_0) \cdot \hat{n}, \quad (\text{П2.4})$$

или

$$\lambda = \frac{(\mathbf{p} - \mathbf{r}_0) \cdot \hat{n}}{\mathbf{\Omega} \cdot \hat{n}}, \quad (\text{П2.5})$$

ако $\mathbf{\Omega} \cdot \hat{n} \neq 0$. Ако $\mathbf{\Omega} \cdot \hat{n} = 0$ и $(\mathbf{p} - \mathbf{r}_0) \cdot \hat{n} = 0$, то за λ съществуват безброй много решения, а ако $\hat{r} \cdot \hat{n} = 0$ и $(\mathbf{p} - \mathbf{r}_0) \cdot \hat{n} \neq 0$, то решения за λ не съществуват, съответно, лъчът и равнината не се пресичат (успоредни са). При условие, че $\mathbf{\Omega} \cdot \hat{n} \neq 0$, $(\mathbf{p} - \mathbf{r}_0) \cdot \hat{n} \neq 0$ и векторът $\hat{n}$ е избран (ако $\hat{n}$ отговаря на условията, които сме задали към него, то $-\hat{n}$ също ще отговаря на тях) така, че $(\mathbf{p} - \mathbf{r}_0) \cdot \hat{n} > 0$, то знакът на получената от уравнение (П2.5) стойност на λ ще се определя изцяло от знака на $\mathbf{\Omega} \cdot \hat{n}$. По този начин намирането на знака на този израз ни дава индикатор за това дали частицата се разпространява приближавайки се към стената и пресичайки я в дадена точка, или се разпространява отдалечавайки се от нея. Ако $(\mathbf{p} - \mathbf{r}_0) \cdot \hat{n} = 0$, а $\mathbf{\Omega} \cdot \hat{n} \neq 0$, то $\lambda = 0$ е единственото решение, независимо от знака на $\mathbf{\Omega} \cdot \hat{n}$.

Пресичане на лъч с цилиндрична повърхност

В нашия изчислителен модел хетерогенното представяне на клетките в касетата става чрез цилиндрични повърхности, ограничаващи материалните зони на клетката.

Поради това при проследяването на неутронните истории (специално с метода на преобразуването) включва решаването на геометричната задача за пресечните точки на лъч и цилиндрична повърхност. Избираме координатна система, с ос z успоредна на оста на цилиндричната повърхност и център лежащ върху същата ос. Тогава пресечните точки можем да намерим като решения на следната система:

$$\begin{cases} \mathbf{r}_c = \mathbf{r}_0 + u_c \mathbf{\Omega} \\ x_c^2 + y_c^2 = R^2 \end{cases} \quad (\text{П3.1})$$

където $\mathbf{r}_c = \begin{pmatrix} x_c \\ y_c \end{pmatrix}$ е търсената точка на пресичане, $\mathbf{r}_0$ е началната точка на лъча, $\mathbf{\Omega}$ е вектор означаващ посоката му, а u_c е разстоянието по лъча до пресичане на повърхността, което всъщност търсим. Решаваме системата с просто заместване:

$$\begin{aligned} \begin{cases} \begin{pmatrix} x_c \\ y_c \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} + u_c \begin{pmatrix} \Omega_x \\ \Omega_y \end{pmatrix} \\ x_c^2 + y_c^2 &= R^2 \end{cases} &\Leftrightarrow \\ \begin{cases} \begin{pmatrix} x_c \\ y_c \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} + u_c \begin{pmatrix} \Omega_x \\ \Omega_y \end{pmatrix} \\ (x_0 + u_c \Omega_x)^2 + (y_0 + u_c \Omega_y)^2 &= R^2 \end{cases} &\Leftrightarrow \\ \begin{cases} \begin{pmatrix} x_c \\ y_c \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} + u_c \begin{pmatrix} \Omega_x \\ \Omega_y \end{pmatrix} \\ x_0^2 + y_0^2 + 2u_c(x_0 \Omega_x + y_0 \Omega_y) + u_c^2(\Omega_x^2 + \Omega_y^2) &= R^2 \end{cases} &\Leftrightarrow \\ \begin{cases} \begin{pmatrix} x_c \\ y_c \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} + u_c \begin{pmatrix} \Omega_x \\ \Omega_y \end{pmatrix} \\ \mathbf{r}_0^2 + 2u_c \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{r}_0 + u_c^2 \mathbf{\Omega}^2 &= R^2 \end{cases} & \quad (\text{П3.2}) \end{aligned}$$

Тоест, след като решим квадратното уравнение:

$$u_{c1,2} = \frac{-\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{r}_0 \pm \sqrt{(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{r}_0)^2 - \mathbf{\Omega}^2(\mathbf{r}_0^2 - R^2)}}{\mathbf{\Omega}^2}. \quad (\text{П3.3})$$

В зависимост от стойността на $(\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{r}_0)^2 - \mathbf{\Omega}^2 \mathbf{r}_0^2$ квадратното уравнение в (П3.2) може да има 0, 1 или 2 решения, което съответства на трите възможности за броя пресечни точки между лъч и цилиндрична повърхност.

Разпределение на пробега до стълкновение

Нека F_U е разпределението на разстоянието на свободно прелитане на неутрон с начална позиция $\mathbf{r}_0$ и посока на движение $\mathbf{\Omega}$ до стълкновение. Това разпределение можем да получим като отчетем факта, че вероятността $\mathbb{P}(u \leq U \leq u + du)$ неутронът да претърпи първо стълкновение на разстояние в интервала $[u, u + du]$ има вида:

$$\mathbb{P}(u \leq U \leq u + du) = [1 - \mathbb{P}(U \leq u)]\Sigma_t(\mathbf{r}_0 + u\mathbf{\Omega})du, \quad (\text{П3.1})$$

където $1 - \mathbb{P}(U \leq u)$ е вероятността за избягване на стълкновение на разстояние до u , а $\Sigma_t(\mathbf{r}_0 + u\mathbf{\Omega})du$ е диференциално малката вероятност за стълкновение в интервала $[u, u + du]$. Уравнението (П3.1) е еквивалентно на

$$\frac{d}{du}F_U(u) = (1 - F_U(u))\Sigma_t(\mathbf{r}_0 + u\mathbf{\Omega}). \quad (\text{П3.2})$$

Това е диференциално уравнение с разделени променливи и се свежда до:

$$\frac{dF_U(u)}{1 - F_U(u)} = \Sigma_t(\mathbf{r}_0 + u\mathbf{\Omega})du, \quad (\text{П3.3})$$

а решението на това уравнение при физически обоснованото начално условие $F_U(0) = 0$ е:

$$\ln(1 - F_U(u)) = \int_0^u \Sigma_t(\mathbf{r}_0 + u'\mathbf{\Omega})du', \quad (\text{П3.4})$$

или просто:

$$F_U(u) = 1 - \exp(-\tau(u)), \quad (\text{П3.5})$$

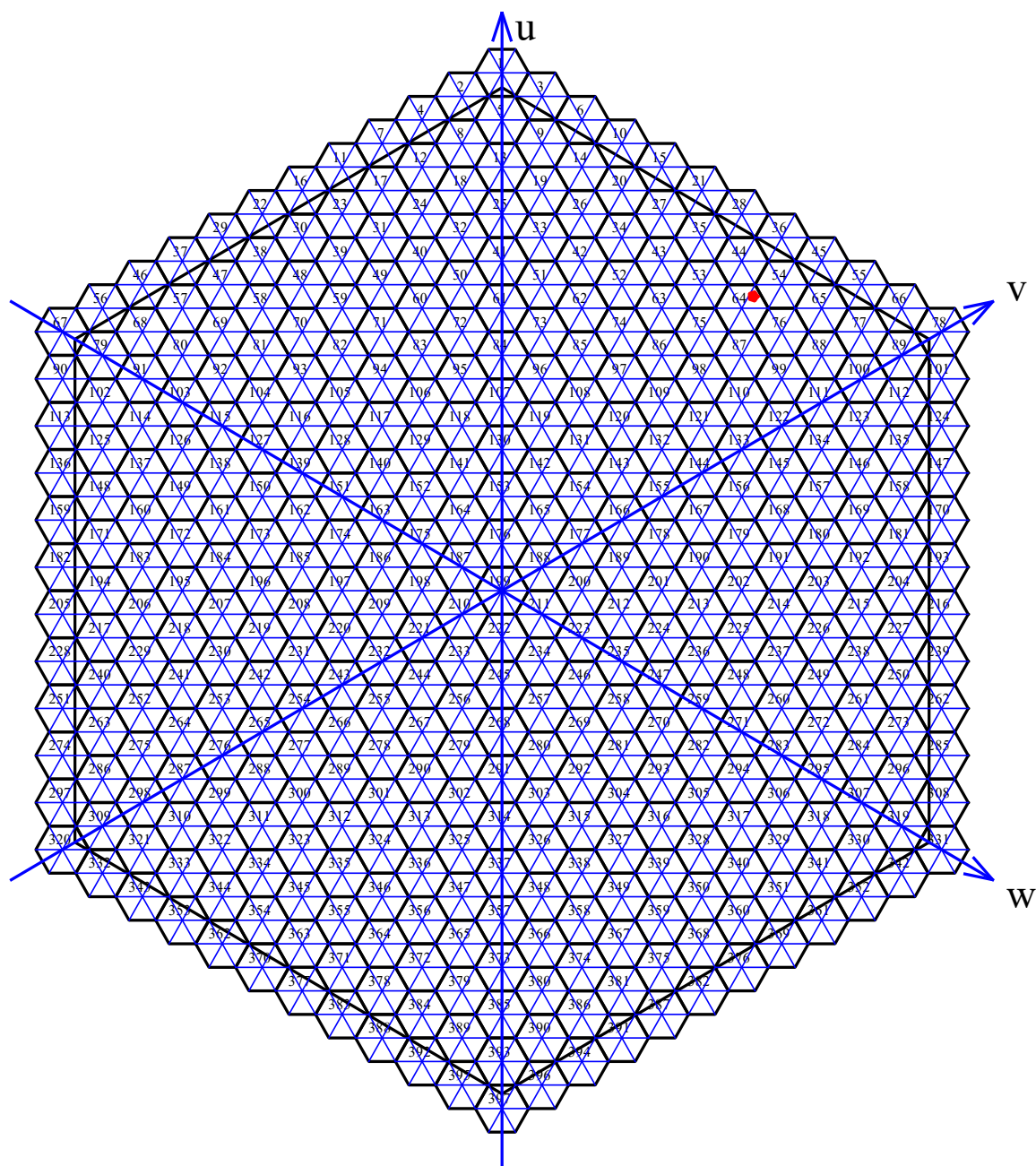
където $\tau(u)$ има вида положен в (4.2.2).

Този вид на функцията на разпределение на разстоянието на свободно прелитане u дава и желанния резултат за вероятностната плътност на тази величина:

$$f_U(u) = \frac{d}{du}F_U(u) = \Sigma_t(\mathbf{r}_0 + u\mathbf{\Omega}) \exp(-\tau(u)). \quad (\text{П3.6})$$

Локализация на точка в триъгълната решетка на касетата

Важна стъпка в метода на мнимите стълкновения е определянето на пълното макроскопично сечение в точката на мнимо стълкновение. Тъй като нашият изчислителен модел е за горивна касета за ВВЕР-1000, определянето на това сечение задължително включва намиране на шестостенната клетка, в който се намира точката на мнимо стълкновение. Ще опишем конструирания от нас за целта алгоритъм.



Фигура П4.1. Горивна касета с помощна мрежа за локализиране.

Алгоритъмът ни се възползва от специфичната геометрия на касетата. На Фигура П4.1 тази геометрия заедно с помощни за алгоритъма структури са онагледени. Той се състои от две части, както следва.

Част I. Предварително конструиране на указателен масив.

Целта ни в тази част е да конструираме масив $n^s(i, j, k)$, всеки елемент на който може да се съпостави с триъгълник от Фигура П4.1. Както виждаме на нея, всеки от тези триъгълници се намира изцяло в дадена клетка на касетата. Съответно, ще искаме всеки елемент $n^s(i, j, k)$ на този масив да има стойност n , където n е номерът на клетката, в

която се намира съответният триъгълник. За целта идентифицираме триъгълниците с помощта на три координатни оси. Те, както и избраното номериране на клетките са представени на Фигура П4.1. Именуваме осите u, v и w и ги разделяме на интервали с дължина полустъпката на решетката от клетки. По този начин сините прави на Фигура П4.1 са всъщност правите перпендикулярни на осите и преминават през границите на тези интервали. Така, за всеки триъгълник на фигурата ще съществува по точно един интервал от всяка от осите, така че ако вземем проекцията на произволна точка в съответния триъгълник по някоя от осите, то тази проекция задължително ще се намира в съответния интервал по тази ос. Това предполага номериране на всеки от интервалите, например оста u , без ограничение на общността, така че проекцията u_x на произволна точка по u да се намира в интервал номер $[u_x/h]$, където h е полустъпката на решетката, а $[x]$ е цялата част на x . Така елементите на масива $n^s(i, j, k)$ можем да получим като за всяка клетка с номер n изберем точка от най-десния горен триъгълник в нея (подобно на точката в клетка 64 показана на Фигура П4.1) и за нея пресметнем индексите $i = [u_p/h]$, $j = [v_p/h]$ и $k = [w_p/h]$, където u_p, v_p и w_p са проекциите на точката върху координатните оси, а i, j и k са номерата на интервалите съответстващи на тези проекции. Отчитайки позицията на триъгълника в клетката и посоките на осите, можем да присвоим стойностите $n^s(i - 1:j - 1, j - 1:k - 1:k) = n$.

Тази част от алгоритъма се изпълнява еднократно. При нужда от локализиране на точка по време на проследяването на дадена история се прилага единствено следващата част.

Част II. Локализиране на произволна точка с помощта на локализиращия масив.

Нека проекциите на точката, която трябва да локализираме върху осите u, v и w са u_p, v_p и w_p . Тогава клетката, в която се намира разглежданата от нас точка ще е тази с номер $n^s([u_p/h], [v_p/h], [w_p/h])$.

Намиране на материална зона

Тъй като клетките в горивната касета, разглеждана от нашия изчислителен модел, са описани хетерогенно (Фигура 3.2), намирането на материалните свойства на дадена точка в касетата изисква, след като вече знаем в коя клетка се намира тази точка, да уточним и материалната зона, в която е. В нашия изчислителен модел материалните зони са ограничени от коаксиални цилиндрични повърхности. Това значи, че за намирането

на материалната зона на клетка, в която се намира дадена точка е достатъчно да намерим разстоянието между точката и общата за цилиндричните повърхности ос и да го сравним с радиусите на цилиндричните повърхности. Ако x_a и y_a са координатите на тази ос в перпендикулярна за нея равнина, а x_p и y_p са координатите на проекцията на точката върху същата равнина, то това радиално разстояние r ще е

$$r = \sqrt{(x_p - x_a)^2 + (y_p - y_a)^2}. \quad (\text{П5.1})$$

Случаен отбор от дискретна случайна величина

Дискретна наричаме случайна величина X с краен, дискретен набор от възможни стойности $x_i, i = 1, \dots, N$. Вероятността за реализация на всяка от тези стойности можем да означим с p_i , като:

$$p_i := \mathbb{P}(X = x_i). \quad (\text{П5.1})$$

Нека дефинираме $\xi_i, i = 0, \dots, N$ като:

$$\xi_i = \sum_{n=1}^i p_n. \quad (\text{П5.2})$$

Разбира се, $\xi_0 = 0$ и $\xi_N = 1$, тъй като X е случайна величина.

Лесно можем да забележим, че, ако ζ е стойност на случайна величина Z с равномерно разпределение $U(0, 1)$, то:

$$\mathbb{P}(\xi_{i-1} < Z \leq \xi_i) = \int_{\xi_{i-1}}^{\xi_i} f_Z(\zeta) d\zeta = \xi_i - \xi_{i-1} = p_i, \quad (\text{П5.3})$$

тъй като вероятностната плътност на Z има вида $f_Z(\zeta) = 1$.

Този резултат мотивира следната процедура за отбор:

- 1) Конструирание на множеството от стойности $\xi_i, i = 1, \dots, N$ за дискретната случайна величина X на основата на уравнение (П5.2).
- 2) Отбор на равномерно разпределена стойност $\zeta \in U(0, 1)$.
- 3) Намиране на k , за което $\xi_{k-1} < \zeta \leq \xi_k$.
- 4) Получаване на отбраната от X стойност като x_k .

В нашата програмна реализация стъпка 3 се осъществява чрез двоично търсене.