

УДК 519.6

УЧЕТ ТЕПЛООВОГО ДВИЖЕНИЯ АТОМОВ СРЕДЫ ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ПЕРЕНОСА НЕЙТРОНОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

А. Н. Иванов, Н. В. Иванов
(РФЯЦ—ВНИИЭФ)

Рассматривается проблема учета теплового движения атомов среды в методе Монте-Карло. Предлагаются эффективные схемы моделирования траекторий нейтронов, основанные на предварительно рассчитанных тепловых сечениях для базовой температуры.

Широкий круг задач переноса нейтронов требует учета движения атомов среды. Ограничимся рассмотрением теплового движения, описываемого распределением Максвелла. Существует два подхода к учету теплового движения.

При первом подходе, который применяется в разностных методах, холодные сечения и индикатрисы рассеяния усредняют по распределению Максвелла. Усредненные сечения и индикатрисы рассеяния табулируют, и полученные таблицы используют в численных расчетах. Недостатками такого подхода являются большие размеры оперативной памяти для хранения таблиц и ошибки, связанные с интерполяцией между узловыми значениями.

Второй подход применяется в программах, использующих метод Монте-Карло, и основан на методе "максимального сечения" [1, 2]. В отличие от первого подхода он базируется только на холодных сечениях и поэтому не требует построения дополнительных таблиц. Ниже излагаются особенности реализации этого подхода в программе С95 [3].

Определим некоторые величины, которые потребуются в дальнейшем:

1. Распределение тепловых скоростей атома сорта n

$$p_n(\vec{u}) = \left(\frac{M_n}{2\pi T(\vec{r})} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{M_n \vec{u}^2}{2T(\vec{r})} \right),$$

где M_n — масса атома n ; $T(\vec{r})$ — температура среды в точке \vec{r} .

2. Тепловая частота столкновений с атомом n

$$\lambda_n(v, T) = \int \sigma_n(g) g p_n(\vec{u}) d\vec{u},$$

где $\sigma_n(g)$ — холодное сечение; $\vec{g} = \vec{v} - \vec{u}$ — относительная скорость.

3. Распределение скоростей атома при столкновении с нейтроном, имеющим скорость \vec{v} ,

$$q_n(\vec{u}) = \frac{\sigma_n(g) g p_n(\vec{u})}{\lambda_n(v, T)}.$$

4. Макроскопическая тепловая частота столкновений

$$\Lambda(\vec{r}, v, T) = \sum \alpha_n(\vec{r}) \int \sigma_n(g) g p_n(\vec{u}) d\vec{u} = \sum \alpha_n(\vec{r}) \lambda_n(v, T),$$

где $\alpha_n(\vec{r})$ — концентрация атомов n .

5. Вероятность столкновения с атомом n

$$\beta_n(\vec{r}, v, T) = \frac{\alpha_n(\vec{r}) \lambda_n(v, T)}{\Lambda(\vec{r}, v, T)}$$

Используя введенные величины, уравнение переноса нейтронов можно записать в следующем виде:

$$\frac{df}{dt} + \Lambda(\vec{r}, v, T) f(t, \vec{r}, \vec{v}) = \int \Lambda(\vec{r}, v', T) \sum \beta_n(\vec{r}, v', T) q_n(\vec{u}) K_n(\vec{g}' \rightarrow \vec{g}) f(t, \vec{r}, \vec{v}') d\vec{u} d\vec{v}' \quad (1)$$

Здесь $\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}}$ — производная вдоль траектории нейтрона; K_n — холодная индикатриса рассеяния, которую в общем случае можно представить в виде суммы по реакциям:

$$K_n(\vec{g} \rightarrow \vec{g}') = \sum_i \chi_{ni}(g) K_{ni}(\vec{g} \rightarrow \vec{g}')$$

где $\chi_{ni}(g) = \frac{\sigma_{ni}(g)}{\sigma_n(g)}$; $K_{ni}(\vec{g} \rightarrow \vec{g}')$ — вероятность и индикатриса рассеяния реакции i .

Хорошо известно, что решение уравнения переноса методом Монте-Карло сводится к моделированию траекторий нейтронов. Схема моделирования траекторий, соответствующих уравнению (1), имеет простой вид:

1. Из экспоненциального закона с частотой $\Lambda(\vec{r}, v, T)$ разыгрывается время до столкновения нейтрона.
2. В точке столкновения по вероятностям β_n определяется сорт атома n .
3. Из распределения $q_n(\vec{u})$ выбирается скорость атома n и вычисляется относительная скорость \vec{g} .
4. По индикатрисе $K_n(\vec{g} \rightarrow \vec{g}')$ разыгрывается состояние нейтрона после столкновения.

Несмотря на простоту, реализация этой схемы практически невозможна из-за сложного вида распределения $q_n(\vec{u})$ скоростей атома, с которыми сталкивается нейтрон. Чтобы упростить схему, воспользуемся методом максимального сечения. Для этого построим для произведения $\sigma_n(g) g p_n(\vec{u})$ мажоранту $h_n^m(g, \vec{u})$:

$$\sigma_n(g) g p_n(\vec{u}) \leq h_n^m(g, \vec{u})$$

и потребуем, чтобы она удовлетворяла двум условиям. Во-первых, чтобы легко вычислялась максимальная частота столкновений $\lambda_n^m(v, T) = \int h_n^m(g, \vec{u}) d\vec{u}$. Во-вторых, чтобы достаточно просто моделировалось распределение скоростей атома $q_n^m(\vec{u}) = h_n^m(g, \vec{u}) / \lambda_n^m$. Прибавим к уравнению переноса тождество

$$(\Lambda_m - \Lambda) f(t, \vec{r}, \vec{v}) = \sum \int \alpha_n \lambda_n^m(v', T) q_n^m(\vec{u}) (1 - \gamma_n(g', \vec{u})) K_\delta(\vec{g}' \rightarrow \vec{g}) f(t, \vec{r}, \vec{v}') d\vec{u} d\vec{v}'$$

где $\Lambda_m(\vec{r}, v, T) = \sum \alpha_n(\vec{r}) \lambda_n^m(v, T)$ — максимальная макроскопическая частота; $\gamma_n(g, \vec{u}) = \frac{\sigma_n(g) g p_n(\vec{u})}{h_n^m(g, \vec{u})}$ — вероятность "фиктивного" столкновения; $K_\delta(\vec{g} \rightarrow \vec{g}')$ — индикатриса фиктивного рассеяния.

Термин *фиктивное рассеяние* используется для обозначения столкновений, при которых относительная скорость нейтрона не изменяется. После несложных преобразований уравнение переноса (1) принимает следующий вид:

$$\frac{df}{dt} + \Lambda_m(\vec{r}, v, T) f(t, \vec{r}, \vec{v}) = \int \Lambda_m(\vec{r}, v', T) \sum \tilde{\beta}_n(\vec{r}, v', T) q_n^m(\vec{u}) \tilde{K}_n(\vec{g}' \rightarrow \vec{g}) f(t, \vec{r}, \vec{v}') d\vec{u} d\vec{v}'$$

где $\tilde{\beta}_n(\vec{r}, v', T) = \frac{\alpha_n q(\vec{r}) \lambda_n^m(v', T)}{\Lambda_m(\vec{r}, v', T)}$ — новая вероятность столкновения с атомом n ; $\tilde{K}_n(\vec{g}' \rightarrow \vec{g}) = \gamma_n K_n(\vec{g}' \rightarrow \vec{g}) + (1 - \gamma_n) K_\delta(\vec{g}' \rightarrow \vec{g})$ — новая индикатриса рассеяния.

Из полученного уравнения следует такая схема моделирования траекторий:

1. Из экспоненциального закона с частотой $\Lambda_m(\vec{r}, v, T)$ разыгрывается время до столкновения нейтрона.
2. В точке столкновения нейтрона по вероятностям $\tilde{\beta}_n$ определяется сорт атома n .
3. Из распределения $q_n^m(\vec{u})$ выбирается скорость атома и вычисляется относительная скорость \vec{g} .
4. С вероятностью γ_n по индикатрисе $K_n(\vec{g} \rightarrow \vec{g}')$ разыгрывается реальное рассеяние, а с вероятностью $1 - \gamma_n$ состояние нейтрона не меняется.

Очевидно, что при соответствующем выборе мажоранты реализация этой схемы не вызывает затруднений. Выбор мажоранты является критическим элементом схемы. При неудачном выборе число фиктивных столкновений может быть настолько большим, что затраты на их моделирование окажутся неприемлемыми.

В программе С95 мажоранта строится следующим образом. Произведение $\sigma_n(g) g p_n(\vec{u})$ записывается в сферической системе координат с полярной осью направленной по скорости нейтрона \vec{v} , и находится σ_n^m — максимум холодного сечения $\sigma_n(g)$. В результате получается

$$\sigma_n(g) \sqrt{v^2 + u^2 - 2vu \mu} p_n(u) u^2 \leq \sigma_n^m [v + u] p_n(u) u^2 \equiv h_n^m(v, u).$$

Построенная мажоранта удовлетворяет указанным выше условиям. Можно показать, что при определении максимума холодного сечения достаточно ограничиться окрестностью относительных энергий E_r около текущей энергии нейтрона E :

$$E \left(\max \left\{ 0, 1 - y \sqrt{\frac{T}{EM_n}} \right\} \right)^2 \leq E_r \leq E \left(1 + y \sqrt{\frac{T}{EM_n}} \right)^2,$$

где y — безразмерный параметр, определяющий диапазон учитываемых скоростей атома. Значение этого параметра обычно берется ≈ 5 .

Когда нейтрон оказывается в области энергий с резонансным поведением сечений, максимальное сечение σ_n^m может сильно отличаться от реального сечения. В результате возникает большое число фиктивных столкновений, что резко удорожает стоимость расчетов. При решении некоторых практических задач на одно реальное столкновение приходится до нескольких сотен фиктивных столкновений. Поэтому задача уменьшения числа фиктивных столкновений имеет важное практическое значение.

Для решения этой задачи авторами разработан метод моделирования траекторий, основанный на холодных индикатрисах рассеяния и тепловых сечениях, предварительно рассчитанных для некоторой базовой температуры. Идея состоит в том, что при усреднении холодных сечений по распределению Максвелла резонансы размываются и поэтому тепловые сечения имеют более гладкое поведение. Кроме того, большинство процессов взаимодействия нейтрона с веществом носит пороговый характер и эти пороги находятся в области достаточно больших энергий, где эффект теплового движения становится малым. В области малых и средних энергий основными процессами являются упругое рассеяние, поглощение и деление, холодные сечения которых имеют достаточно гладкое поведение на этих энергиях.

Предположим, что тепловые сечения $\sigma_n(v, T)$ для температуры T известны, и рассмотрим среду с температурой $T_1 = T + \Delta T$. Отметим, что для распределения Максвелла имеет место тождество

$$\left(\frac{M_n}{2\pi T_1} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m\vec{u}^2}{2T_1}\right) = \left(\frac{M_n}{2\pi T} \right)^{3/2} \left(\frac{M_n}{2\pi \Delta T} \right)^{3/2} \int \exp\left(-\frac{m(\vec{u} - \vec{u}_2)^2}{2T}\right) \exp\left(-\frac{m\vec{u}_2^2}{2\Delta T}\right) d\vec{u}_2.$$

Используя это тождество, можно сделать следующее:

1. Скорость атома разложить на сумму: $\vec{u} = \vec{u}_1 + \vec{u}_2$.
2. Тепловую частоту столкновений для температуры T_1 записать в виде интеграла:

$$\lambda_n(v, T_1) = \int \sigma_n(g_2, T) g_2 p_n(\vec{u}_2, \Delta T) d\vec{u}_2,$$

где $\vec{g}_2 = \vec{v} - \vec{u}_2$; $\sigma_n(g_2, T)$ — сечение столкновения для базовой температуры T ; $p_n(\vec{u}, \Delta T)$ — распределение Максвелла для температуры ΔT .

3. Распределение скоростей атомов при столкновении с нейтроном представить в виде произведения:

$$q_n(\vec{u}) = q_n^{(2)}(\vec{u}_2) \sum_i \chi_{ni}(g_2, T) q_{ni}^{(1)}(\vec{u}_1/\vec{g}_2),$$

где $\chi_{ni}(g_2, T) = \frac{\sigma_{ni}(g_2, T)}{\sigma_n(g_2, T)}$ — вероятность реакции i . Распределение $q_n^{(2)}$ является распределением слагаемого \vec{u}_2 и определяется базовыми сечениями и распределением Максвелла с температурой ΔT :

$$q_n^{(2)}(\vec{u}_2) = \frac{g_2 \sigma_n(g_2, T) p_n(\vec{u}_2, \Delta T)}{\lambda_n(v, T_1)}.$$

Распределение $q_{ni}^{(1)}$ является распределением слагаемого \vec{u}_1 и определяется холодными сечениями и распределением Максвелла с температурой T :

$$q_{ni}^{(1)}(\vec{u}_1/\vec{g}_2) = \frac{|\vec{g}_2 - \vec{u}_1| \sigma_{ni}(|\vec{g}_2 - \vec{u}_1|) p_n(\vec{u}_1, T)}{g_2 \sigma_{ni}(g_2, T)}.$$

Используя введенные величины, уравнение переноса нейтронов в среде с температурой $T_1 = T + \Delta T$ можно привести к виду

$$\frac{df}{dt} + \Lambda f(t, \vec{r}, \vec{v}) = \int \Lambda(\vec{r}, v', T_1) \sum \beta_n(\vec{r}, v', T_1) q_n^{(2)}(\vec{u}_2) K_n(\vec{g}' \rightarrow \vec{g}) f(t, \vec{r}, \vec{v}') d\vec{u}_1 d\vec{u}_2 d\vec{v}'.$$

Здесь $\Lambda(\vec{r}, v, T_1) = \sum \alpha_n(\vec{r}) \lambda_n(v, T_1)$ — макроскопическая тепловая частота столкновений в среде с температурой T_1 ; β_n — вероятность столкновения с атомом n при температуре T_1 ; $K_n(\vec{g} \rightarrow \vec{g}') = \sum_i \chi_{ni}(g_2, T) q_{ni}^{(1)}(\vec{u}_1/\vec{g}_2) K_{ni}(\vec{g} \rightarrow \vec{g}')$ — новая индикатриса рассеяния, выраженная через холодные индикатрисы $K_{ni}(\vec{g} \rightarrow \vec{g}')$.

Очевидно, что распределения $q_n^{(2)}$ и $q_{ni}^{(1)}$ сложны для прямого моделирования. Для упрощения воспользуемся методом максимального сечения. Построим для произведения $\sigma_n(g_2, T) g_2 p_n(\vec{u}_2, \Delta T)$ мажоранту $h_n^m(g_2, \vec{u}_2)$ такую, что легко вычисляется максимальная частота столкновений $\lambda_n^m(v, T_1) = \int h_n^m(g_2, \vec{u}_2) d\vec{u}_2$ и достаточно просто моделируется распределение скоростей $q_n^m(\vec{u}_2) = \frac{h_n^m(g_2, \vec{u}_2)}{\lambda_n^m(v, T_1)}$.

Затем прибавим к уравнению переноса соответствующее тождество. В результате получим следующее уравнение переноса:

$$\frac{df}{dt} + \Lambda_m f(t, \vec{r}, \vec{v}) = \int \Lambda_m(\vec{r}, v', T_1) \sum \tilde{\beta}_n(\vec{r}, v', T_1) q_n^m(\vec{u}_2) \tilde{K}_n(\vec{g}' \rightarrow \vec{g}) f(t, \vec{r}, \vec{v}') d\vec{u}_1 d\vec{u}_2 d\vec{v}'. \quad (2)$$

Здесь:

$\Lambda_m(\vec{r}, v, T_1) = \sum \alpha_n(\vec{r}) \lambda_n^m(v, T_1)$ — максимальная макроскопическая частота;

$\tilde{\beta}_n = \frac{\alpha_n(\vec{r}) \lambda_n^m(v, T_1)}{\Lambda_m}$ — новая вероятность столкновения с атомом n ;

$\gamma_n(g_2, T) = \frac{g_2 \sigma_n(g_2, T) p_n(\vec{u}_2, \Delta T)}{h_n^m(g_2, \vec{u}_2)}$ — вероятность фиктивного столкновения;

$\tilde{K}_n(\vec{g} \rightarrow \vec{g}') = \gamma_n K_n(\vec{g} \rightarrow \vec{g}') + (1 - \gamma_n) K_\delta(\vec{g} \rightarrow \vec{g}')$ — новая индикатриса рассеяния.

Из уравнения (2) следует такая схема моделирования траекторий:

1. Из экспоненциального закона с частотой $\Lambda_m(\vec{r}, v, T)$ разыгрывается время до столкновения нейтрона.
2. В точке столкновения нейтрона по вероятностям $\tilde{\beta}_n$ определяется сорт атома n .
3. Из распределения $q_n^m(\vec{u}_2)$ выбирается скорость \vec{u}_2 и вычисляется скорость $\vec{g}_2 = \vec{v} - \vec{u}_2$.
4. С вероятностью $1 - \gamma_n(g_2, T)$ столкновение считается фиктивным и состояние нейтрона не изменяется.
5. В случае реального столкновения по вероятностям $\chi_{ni}(g_2, T)$ определяется тип реакции. По условному распределению $q_{ni}^{(1)}(\vec{u}_1/\vec{g}_2)$ разыгрывается скорость \vec{u}_1 и вычисляется относительная скорость $\vec{g} = \vec{g}_2 - \vec{u}_1$. Затем по индикатрисе $K_{ni}(\vec{g} \rightarrow \vec{g}')$ разыгрывается состояние нейтрона после реального столкновения.

Отметим, что при построении мажоранты требуется максимум базового сечения $\sigma_n(g_2, T)$ в интервале энергий, определяемом температурой ΔT . В частности, при $\Delta T = 0$ интервал стягивается в точку и фиктивные столкновения исчезают.

На первый взгляд, при реализации схемы может составить проблему розыгрыш скорости \vec{u}_1 по условной плотности $q_{ni}^{(1)}(\vec{u}_1/\vec{g}_2)$. Однако, как уже отмечалось, в области энергий, где существенны эффекты теплового движения, основными процессами являются упругое рассеяние, поглощение и деление. Очевидно, что при поглощении скорость \vec{u}_1 не нужна. Распределение вторичных нейтронов на делении слабо зависит от текущей энергии первичного нейтрона. Проблема розыгрыша скорости \vec{u}_1 на упругом рассеянии решается с помощью метода Неймана, т. е. путем построения достаточно простой мажоранты для плотности $q_{ni}^{(1)}(\vec{u}_1/\vec{g}_2)$. Разыгранные по этой мажоранте скорости принимаются или отвергаются с соответствующей вероятностью отказа.

Конечно, для построения мажоранты потребуется максимум холодного сечения упругого рассеяния на интервале энергий, определяемом температурой T . Однако это обстоятельство не означает возврат к схеме, основанной на холодных сечениях. Во-первых, моделирование отказов требует заметно меньших вычислительных затрат, чем моделирование фиктивных столкновений. Во-вторых, холодные сечения упругого рассеяния имеют достаточно гладкое поведение и поэтому число отказов обычно невелико. С другой стороны, гладкость упругих сечений позволяет перейти на приближенный метод моделирования, в котором в качестве максимума сечения берется холодное сечение в текущей энергии нейтрона. При таком приближении отказы сводятся к минимуму и, кроме того, при моделировании траекторий не требуются данные по холодным сечениям.

Для иллюстрации точности предложенных схем моделирования рассмотрим следующую модельную задачу. Среда состоит из атомов водорода, учитывается только упругое изотропное рассеяние в системе центра масс. Источник нейтронов изотропный и моноэнергетический. Холодное сечение имеет вид суммы постоянного сечения σ_0 и одиночного резонанса прямоугольной формы

$$\sigma(E_r) = \begin{cases} 0, & E_r < E_* - H; \\ \sigma_{r0}, & E_* - H \leq E_r \leq E_* + H; \\ 0, & E_r > E_* + H, \end{cases}$$

где $E_* = 0,5$ эВ; $H = 0,01$ эВ; $\sigma_{r0} = 50$. Графики холодного сечения и соответствующего теплового сечения для температуры $0,1$ эВ приведены на рис. 1.

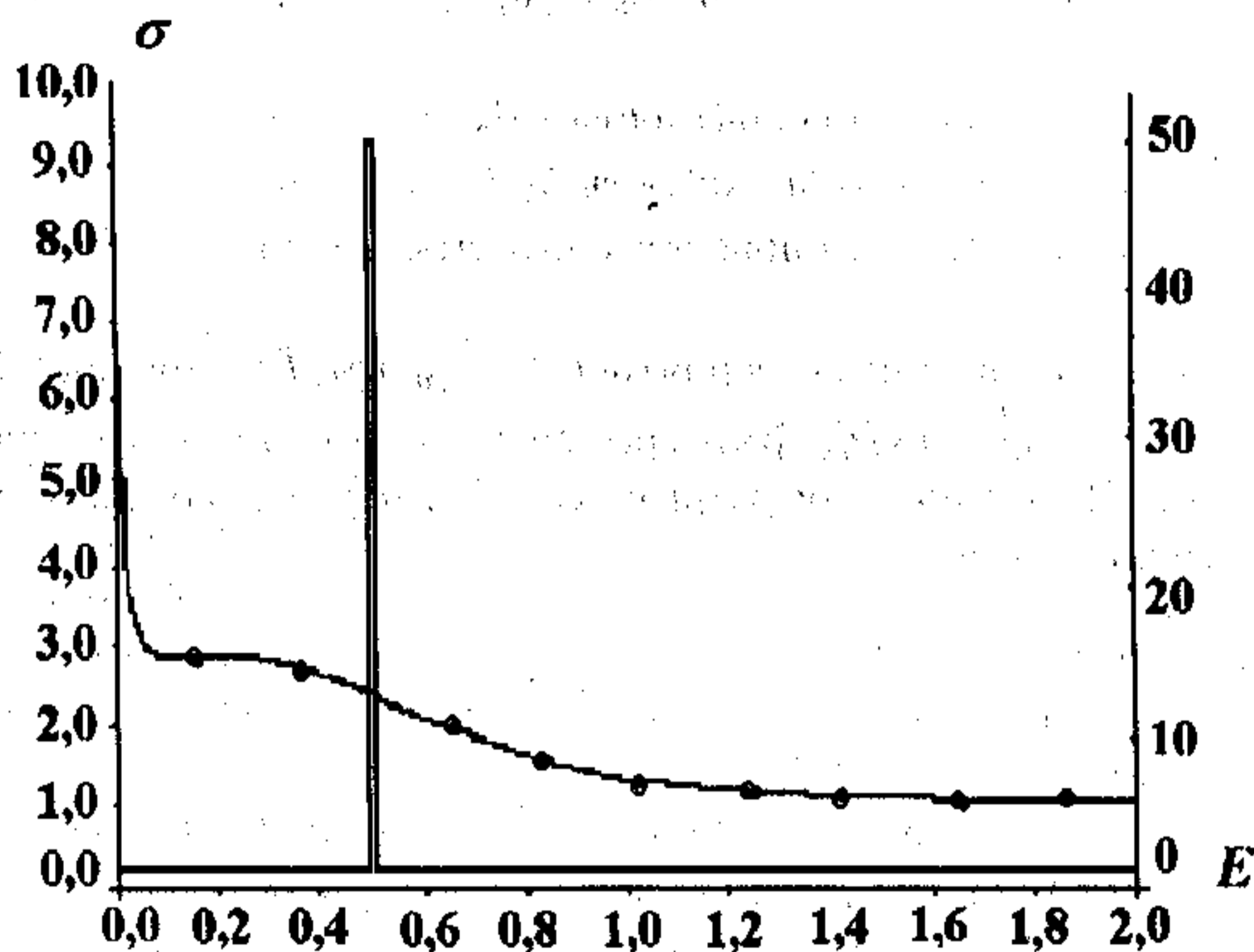


Рис. 1. Тепловое (—) и холодное (-o-) сечения, $T = 0,1$ эВ

Для рассматриваемой задачи можно аналитически найти спектр нейтронов после одного столкновения. На рис. 2 приводятся результаты численного расчета этого спектра для точной и приближенной схем моделирования для нескольких значений начальной энергии нейтрона E_0 . В качестве базовой температуры взята температура $T_0 = 0,1$ эВ, приращение температуры ΔT равно $0,02$ эВ.

Из приведенных графиков видно, что точная схема, как следовало ожидать, воспроизводит аналитические результаты. Спектры, вычисленные по приближенной схеме, могут заметно отличаться от аналитического спектра, и величина расхождения зависит от начальной энергии. В реальных задачах нейтрон испытывает множество столкновений и расхождение нивелируется, так что точность приближенной схемы оказывается достаточной для большинства приложений.

В заключение сделаем одно замечание. Из рис. 1 видно, что при малых энергиях тепловое сечение ведет себя, как $1/v$. Аналогичное поведение имеют все реальные сечения взаимодействия. Следовательно, при малых энергиях базовая тепловая частота столкновений близка к константе и поэтому в этой области энергий более эффективными будут мажоранты, основанные на максимуме частоты столкновений.

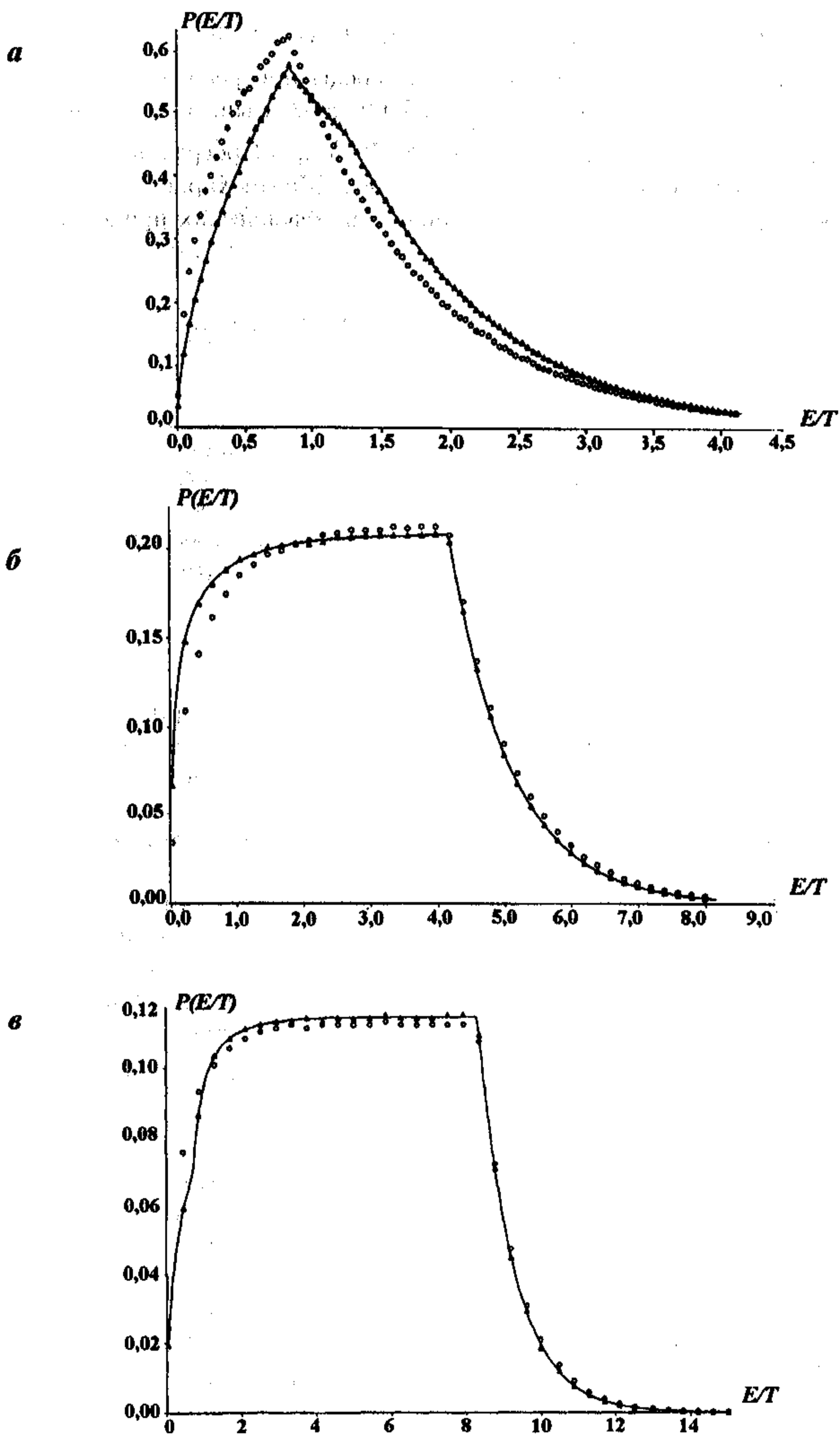


Рис. 2. Спектр нейтронов: *a* — $E_0 = 0,1$; *б* — $E_0 = 0,5$; *в* — $E_0 = 1,0$; — — — аналитический спектр; Δ — точная схема; \circ — приближенная схема

Список литературы

1. *Соболь И. М.* Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.
2. *Иванов Н. В.* Учет теплового движения атомов среды при решении методом Монте-Карло задач переноса нейтронов // Тр. РФЯЦ—ВНИИЭФ. 2002. Вып. 3. С. 88—95.
3. *Кочубей Ю. К., Житник А. К., Артемьева Е. В. и др.* Программа С95. Моделирование совместного переноса нейтронов и γ -квантов методом Монте-Карло // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000. Вып. 2. С. 49—52.