

УДК 539.1

С. А. Бреднихин<sup>1</sup>, Э. В. Усов<sup>2</sup>, С. И. Лежнин<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Новосибирский филиал  
Института проблем безопасного развития атомной энергетики РАН  
пр. Акад. Лаврентьева, 1, Новосибирск, 630090, Россия

<sup>2</sup> Новосибирский государственный университет  
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия

<sup>3</sup> Институт теплофизики СО РАН  
пр. Акад. Лаврентьева, 1, Новосибирск, 630090, Россия  
E-mail: physics@vestnik.nsu.ru

### СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ПЕРЕНОСА ЧАСТИЦ В ДЕЛЯЩЕЙСЯ НЕОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ

Рассмотрены различные способы решения задачи расчета параметров критичности для однородного шара, в котором возможны процессы рассеяния и размножения частиц, проведен сравнительный анализ результатов численных расчетов. Расчеты различных характеристик проведены при помощи решения уравнения переноса нейтронов в диффузионном приближении, а также с помощью метода Монте-Карло. Проведено также сравнение численных результатов с аналитическими оценками и известными результатами численных экспериментов. Новизна алгоритма, использованного для решения, состоит в применении метода прямого моделирования распространения ветвящегося процесса в неоднородной среде. Алгоритм позволяет проводить численную оценку различных, в том числе и временных, зависимостей. Особенностью настоящего сравнительного анализа методов расчета критических параметров является то, что он проведен применительно к системам, в которых характерный размер пространственных неоднородностей сравним с длиной свободного пробега частиц или превышает ее.

*Ключевые слова:* уравнение переноса, метод Монте-Карло, диффузионное приближение, критические параметры, поколение, длина свободного пробега.

#### Введение

Задачи численного расчета критических параметров важны во многих областях науки, связанных с моделированием ветвящихся процессов, таких как расчет нейтронно-физических характеристик реакторов. Математической моделью процесса переноса частиц является уравнение переноса. Нами рассмотрены два метода решения данного уравнения: метод диффузионного приближения и метод Монте-Карло. В системах со сложной геометрией, высокой степенью пространственной неоднородности характеристик среды и большой длиной свободного пробега частиц использование диффузионного приближения в ряде случаев может давать некорректные

результаты. Одним из альтернативных методов, пригодным для моделирования в этих условиях является метод Монте-Карло. Целью данной работы является сравнение эффективности метода Монте-Карло применительно к системам с высокой степенью пространственной неоднородности. Для этого был выбран ряд задач, для которых методом Монте-Карло были получены численные результаты для параметров критичности, которые впоследствии сравнивались с известными аналитическими оценками.

#### Расчет критического радиуса однородного шара

Первой в ряде задач была задача о нахождении критического радиуса шара, со-

\* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 09-08-13746-офи\_ц).

Авторы выражают признательность проф. В. Н. Семенову и Е. Ф. Селезневу (ИБРАЭ РАН) за полезные обсуждения и ценные замечания.

стоящего из вещества, в котором возможны процессы размножения и рассеяния частиц. Начальными данными для этой задачи являются:  $\sigma_s$  – сечение рассеяния;  $\sigma_f$  – сечение размножения;  $\nu$  – количество частиц в результате одного акта размножения. Прочие величины могут быть вычислены из данных:  $\sigma = \sigma_s + \sigma_f$  – полное сечение взаимодействия частицы со средой. Вычисляемая величина:  $k_{\text{eff}}^i$  – коэффициент размножения на одно поколение.

$$k_{\text{eff}}^i = \frac{n_{\text{in}}^i}{n_{\text{out}}^i},$$

где  $n_{\text{in}}^i$  – количество частиц, возникших в системе в результате размножения;  $n_{\text{out}}^i$  – количество частиц, вышедших из рассмотрения в результате поглощения или вылета за границу шара.

Алгоритм, использованный для численного решения, основан на методе прямого моделирования распространения ветвящегося процесса в неоднородной среде. Данный алгоритм отличается от алгоритмов, обычно используемых для расчета нейтронных характеристик с низкой дисперсией, принципиальной возможностью моделирования нейтронных характеристик при быстропротекающих процессах. Моделирование траекторий частиц ведется в восьмимерном фазовом пространстве. Точка  $X$  в данном пространстве описывается следующими координатами:

$$(r_x, r_y, r_z, w_{\text{c}\theta}, w_{\phi}, t, e, j),$$

где  $\vec{r} = (r_x, r_y, r_z)$  – координаты последней точки взаимодействия частицы;  $w_{\text{c}\theta} = \cos \theta$  – косинус полярного единичного вектора скорости в сферической системе координат;  $w_{\phi}$  – азимутальный угол вектора скорости в сферической системе координат;  $t$  – момент времени последнего взаимодействия;  $e$  – энергия частицы;  $j$  – номер поколения. Для упрощения расчетов при вычислении функционалов для каждой частицы хранятся также величины  $g$  – номер энергетической группы;  $n$  – номер последней реакции;  $\sigma_l$  – полное сечение взаимодействия среды, в которой произошла последняя реакция;  $\nu$  – скорость частицы. В процессе моделирования строится полное дерево траекторий частиц. В отличие от метода поколений данный

подход позволяет проводить расчеты различных характеристик в зависимости от времени, а не от номера поколения. Данный подход хорош также тем, что при моделировании надкритической системы до определенного значения коэффициента размножения нет необходимости прибегать к процедуре выравнивания [2], так как все моделируемое дерево помещается в оперативной памяти целиком. Это позволяет добиться снижения дисперсии при вычислении коэффициента размножения и других функционалов.

При моделировании дерева траекторий удобно использовать структуры данных типа односвязного или двусвязного списка. Ниже приведено схематичное представление алгоритма моделирования:

1) дерево траекторий на шаге  $m$  (рис. 1, а);

2) замена старых параметров частицы-головы списка на новые, после нахождения длины свободного пробега и вычисления параметров частицы в результате взаимодействия; если в результате взаимодействия траектория данной частицы оборвалась, голова списка смещается к следующей по очереди частице (рис. 1, б);

3) в случае, если после взаимодействия в результате реакций деления или реакций  $n \rightarrow 2n$ ,  $n \rightarrow 3n \dots$  возникли вторичные частицы, они добавляются в конец списка (рис. 1, в).

Обрыв траектории происходит также по достижении поколения  $G_{\text{max}}$ , при пересечении частицей границ моделируемого объема или при превышении времени  $T_{\text{max}}$ .

Вычисление следующего значения в статистической выборке, по которой оцениваются вычисляемые функционалы и их дисперсии, происходит на этапе 2, после вычисления новых значений параметров частицы и числа вторичных нейтронов в результате реакции.

Временная зависимость потока нейтронов в стационарной системе асимптотически описывается выражением

$$\Phi(\vec{r}, \vec{v}, t) = \Phi_0(\vec{r}, \vec{v}) \exp \lambda t,$$

где  $\Phi_0(\vec{r}, \vec{v})$  – собственное распределение потоков нейтронов в начальный момент времени. Важной особенностью алгоритма является возможность расчета временных зависимостей функционалов в системах, в которых происходят быстропротекающие

процессы, а значит, зависимости не являются экспоненциальными. Возможно также прямое вычисление показателя экспоненциальной зависимости  $\lambda$  в случаях, когда такая зависимость имеет место.

В результате моделирования нескольких поколений можно получить оценку для  $k_{\text{eff}}$  при данном значении радиуса  $R$ . Для определения критического радиуса необходимо найти минимум функции  $d R = |k_{\text{eff}} - 1|$ , который вычисляется при помощи стандартных алгоритмов решения нелинейных уравнений (метод Ньютона, метод касательных).

Аналитическое решение было найдено тремя методами: с помощью решения уравнения переноса в диффузионном приближении [4], с помощью решения интегрального уравнения в приближении постоянных сечений [5] и с помощью улучшенного диффузионного приближения [7].

В первом случае находилось аналитическое решение уравнения

$$D\Delta\Phi + v\sigma_{\text{fis}}\Phi - \sigma_{\text{fis}}\Phi = 0, \quad D = \frac{1}{3} \frac{\sigma_{\text{sca}}}{\sigma_{\text{tot}}^2}, \quad (1)$$

где  $\sigma_{\text{sca}}$  – сечение рассеяния нейтронов,  $\sigma_{\text{fis}}$  – сечение деления,  $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{fis}} + \sigma_{\text{sca}}$  – пол-

ное сечение,  $\nu$  – среднее число вторичных частиц.

В настоящей задаче среднее число вторичных частиц полагалось равным 3, полная длина свободного пробега  $l = 1$ , поэтому полное сечение  $\sigma_{\text{tot}} = \frac{1}{l}$  также равно 1.

Решением уравнения (1) для сферы является функция вида

$$\Phi(r) = \frac{\sin(r\sqrt{\frac{(\nu-1)\sigma_{\text{sca}}}{D}})}{r}$$

Для нахождения критического радиуса  $R_{\text{crit}}$  решается граничное условие

$$\Phi(R_{\text{extr}}) = 0,$$

где  $R_{\text{extr}} = R_{\text{crit}} + d$  – экстраполяционный радиус [4], для сферы равный  $d = \frac{4}{3}l$ .

Распределение частиц для  $\sigma_{\text{sca}} = 0,97$  показано на рис. 2.

Зависимость критического радиуса от сечения рассеяния  $\sigma_{\text{sca}}$  представлена на рис. 3 (сечение рассеяние изменялось в пределах от 0,53 до 0,97 с шагом 0,02).

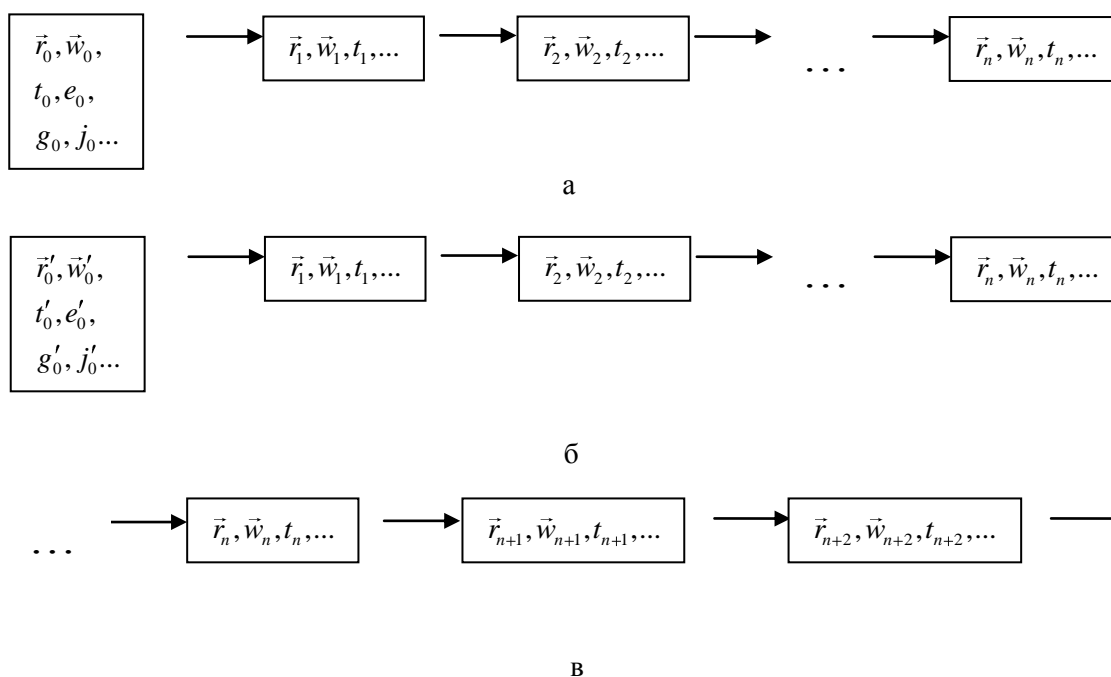


Рис. 1. Изменение дерева траекторий в процессе моделирования

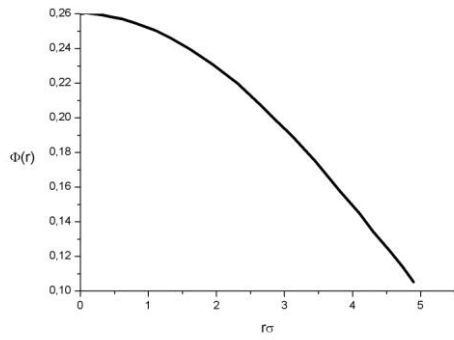


Рис. 2. Распределение потока частиц по радиусу шара в диффузионном приближении

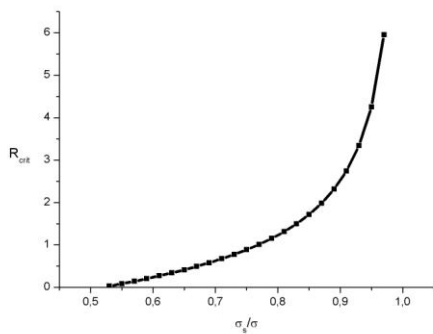


Рис. 3. Зависимость критического радиуса от сечения рассеяния в диффузионном приближении

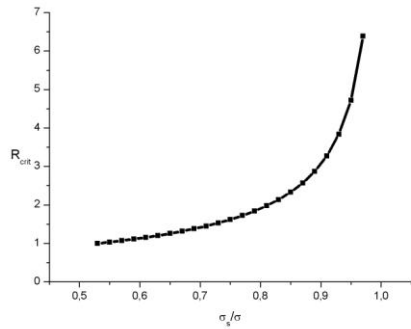


Рис. 4. Зависимость критического радиуса от сечения рассеяния (метод Сербера – Вильсона)

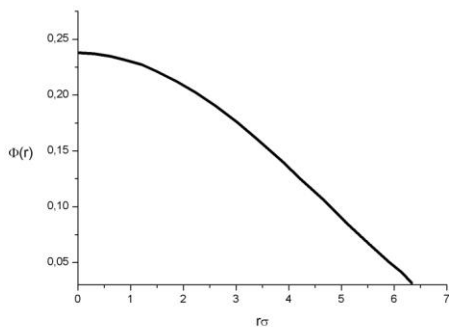


Рис. 5. Распределение потока частиц по радиусу шара по методу Сербера – Вильсона

Во втором случае рассматривалось точное интегральное уравнение для потока частиц в однопольном приближении [5]:

$$\Phi(r) = \frac{c}{4\pi l} \iiint \Phi(r') e^{-\frac{|r-r'|}{l}} \frac{dV'}{|r-r'|^2},$$

где

$$c = \frac{v\sigma_{\text{fis}} + \sigma_{\text{sca}}}{\sigma_{\text{tot}}}. \quad (2)$$

Критический радиус находился из условия Сербера – Вильсона [5; 6]. Согласно этому утверждению, интегральное уравнение, где в качестве потока использовано решение диффузионного уравнения вида  $\Phi(r) = \frac{\sin(\kappa r)}{r}$  с коэффициентом  $\kappa$ , найденным из следующего соотношения

$$1 - \frac{c}{\kappa l} \text{arctg } \kappa l = 0, \quad (3)$$

должно точно выполняться в центре сферы [5; 6].

После подстановки выражения для потока в интегральное уравнение и интегрирования по углам получаем для значения потока в нуле следующее выражение:

$$\Phi(0) = \frac{c}{l} \int_0^{R_{\text{crit}}} \frac{\sin(\kappa r') e^{-\frac{r'}{l}}}{r'} dr'.$$

Это уравнение позволяет найти критический радиус. Критический радиус, найденный из данного интегрального уравнения в большей степени соответствует реальному, поскольку область вблизи границы сферы – там, где диффузионное приближение перестает работать, дает экспоненциально малый вклад. График зависимости критического радиуса от  $\sigma_{\text{sca}}$  изображен на рис. 4, распределение потока частиц по радиусу при  $\sigma_{\text{sca}} = 0,97$  – на рис. 5.

Третий способ заключается в использовании улучшенного диффузионного приближения [7]. Критический радиус определяется из следующего соотношения с коэффициентами из соотношений (2)–(3):

$$R_{\text{crit}} = \frac{\pi}{\kappa} - \frac{0,71}{c}.$$

График зависимости критического радиуса от  $\sigma_{\text{sca}}$  изображен на рис. 6.

В проведенном расчете использовались следующие параметры:  $\sigma = 1$ ,  $v = 3$ . На рис. 7–8 представлены результаты сравнения численных и аналитических результатов. Из графика для критического радиуса видно,

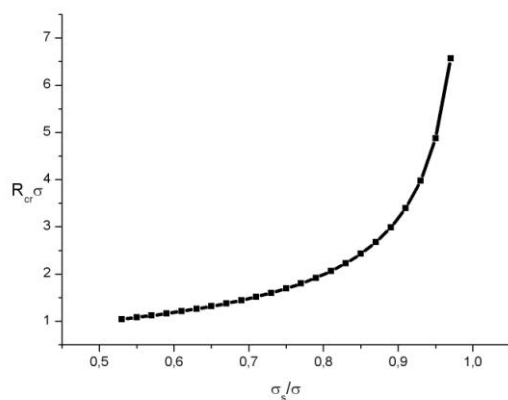


Рис. 6. Зависимость критического радиуса шара от сечения упругого рассеяния с использованием улучшенного диффузионного приближения

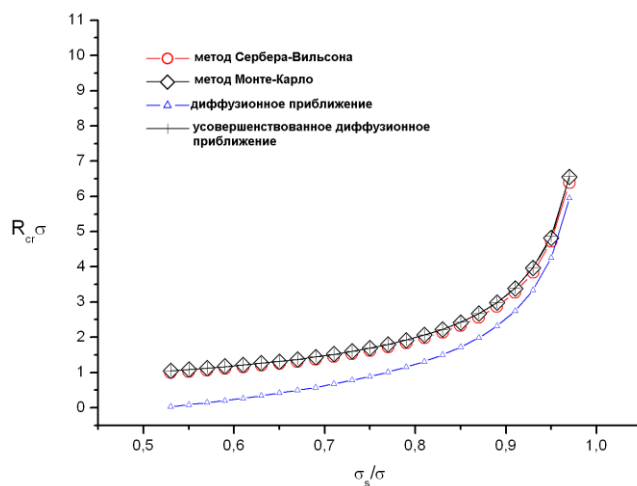


Рис. 7. Зависимость критического радиуса шара от сечения рассеяния, сравнение различных методов

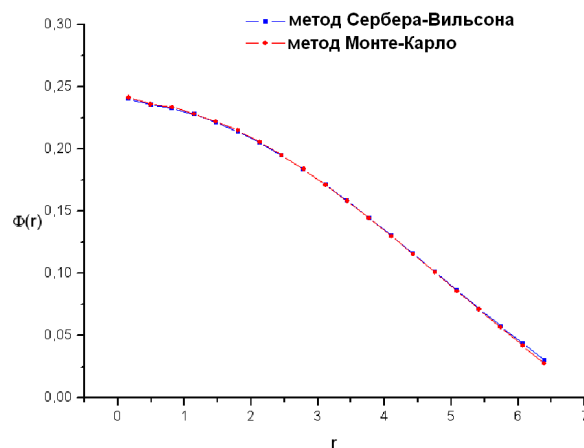


Рис. 8. Сравнение результатов численного моделирования с аналитическими результатами (метод Сербера –Вильсона) пространственного распределения потока частиц.  $\sigma_s / \sigma = 0,97$

что расчет, проведенный методом Монте-Карло, очень хорошо согласуется с решением, полученным с помощью улучшенного диффузионного приближения. Диффузионное приближение дает сильную ошибку в области малых сечений. Этот случай соответствует системам с высокой степенью пространственной неоднородности, масштаб которой сопоставим с длиной свободного пробега. Кроме того, использование метода Сербера – Вильсона дает небольшое систематическое занижение. Этот результат подтверждает обоснованность использования метода Монте-Карло для расчета систем, в которых характерный размер пространственных неоднородностей сравним с длиной свободного пробега нейтронов.

### Заключение

В рамках работы получены результаты тестовых расчетов критического радиуса однородного шара состоящего из материала, в котором возможен процесс размножения. Проведено сравнение полученных результатов с рядом известных приближенных аналитических решений. Показано, что метод Монте-Карло и улучшенное диффузионное приближение позволяют достичь более высокой точности по сравнению с другими исследованными методами при моделировании процессов переноса частиц в пространственно неоднородных системах.

### Список литературы

1. *Ермаков С. М., Михайлов Г. А.* Статистическое моделирование. М.: Наука, 1982. 296 с.
2. *Михайлов Г. А., Войтишек А. В.* Численное статистическое моделирование. М.: Академия, 2006. 368 с.
3. *Франк-Каменецкий А. Д.* Моделирование траекторий нейтронов при расчете реакторов методом Монте-Карло. М.: Атомиздат, 1978. 96 с.
4. *Бартоломей Г. Г., Бать Г. А., Байбаков В. Д., Алхутков М. С.* Основы теории и методы расчета ядерных энергетических реакторов. М.: Энергоатомиздат, 1989. 512 с.
5. *Дэвисон Б.* Теория переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1960. 520 с.
6. *Мегреблиан Р., Холмс Д.* Теория реакторов. М.: Госатомиздат, 1962. 600 с.
7. *Романов Ю. А.* Точные решения односкоростного кинетического уравнения и их использование для расчета диффузионных задач (усовершенствованный диффузионный метод) // Исследование критических параметров реакторных систем. М.: Госатомиздат, 1960. С. 3–26.

*Материал поступил в редколлегию 04.05.2009*

**S. A. Brednikhin, E. V. Usov, S. I. Lezhnin**

### MODELING METHODS COMPARATIVE ANALYSIS OF THE PARTICLES TRANSPORT IN THE INHOMOGENEOUS MEDIUM

Different ways for calculation critical parameters of homogeneous ball are considered in this article. Processes of elastic dispersion and multiplication can take place in this ball. Comparative analysis of different numerical calculation is made. Calculations of different characteristics are obtained from solving transport equation in diffusion approach and from Monte Carlo method. There is comparison between obtained results, analytical calculations and experimental data. Newness of algorithm consists in direct simulation of branching process distribution in nonhomogeneous medium. Offered algorithm allows calculating different physical values and its evolution in time. Calculation was made for systems which have free path more or equal than scale of heterogeneities.

*Keywords:* transport equation, Monte Carlo method, diffusion approach, critical parameters, generation, free path.