

KFK-297:2

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Februar 1965

Gesellschaft für Ker: forschung m.b.H.
Zentralbücherei

KFK 297

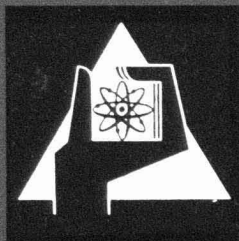
Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

20. Aug. 1965

Lösung der Transportgleichung mit Hilfe der
Monte-Carlo-Methode

Ulrich Möller

Nicht erwidern



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.
KARLSRUHE

Februar 1965

K F K 297

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

Gesellschaft für Kernforschung m.b.H.
Zentralbücherei

Lösung der Transportgleichung mit Hilfe der
Monte-Carlo-Methode

von

Ulrich Möller

Gesellschaft für Kernforschung m.b.H., Karlsruhe

Lösung der Transportgleichung mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode

In zwei in sich abgeschlossenen Teilen enthält dieser Bericht die theoretischen und praktischen Grundlagen eines Monte-Carlo-Codes zur Behandlung neutronenphysikalischer Probleme.

Teil A: Monte-Carlo-Methoden für Fredholmsche Integralgleichungen zweiter Art

Teil B: Monte-Carlo-Verfahren zur Lösung der homogenen Transportgleichung

Am Anfang jedes Teiles befindet sich Inhaltsverzeichnis und Zusammenfassung des Inhalts, am Ende das Literaturverzeichnis.

A. Monte-Carlo-Methoden für Fredholmsche Integralgleichungen zweiter Art

1. Zusammenfassung
2. Allgemeines Monte -Carlo-Verfahren
 - 2.1 Lösung des Problems
 - 2.2 Fehlerstatistik
3. Spezielle Monte-Carlo-Prozesse
 - 3.1 Straight forward sampling
 - 3.2 Sampling mit Gewichten (Erwartungswerten)
 - 3.3 Splitting and russisches Roulette
 - 3.4 Korrelation
 - 3.5 Importance sampling
 - 3.6 Systematic sampling
 - 3.7 Stratified sampling

1. Zusammenfassung

Es wird eine allgemeine Darstellung des Monte-Carlo-Verfahrens für Fredholm-sche Integralgleichungen zweiter Art gegeben. Im Unterschied zu anderen Darstellungen 1)2)3)4) wird hier die Aufgabe in den Vordergrund gestellt, Stichproben bestimmter, mit der Lösungsfunktion der Integralgleichung zusammenhängender Verteilungen zu produzieren.

Auf diese Stichproben können dann die üblichen statistischen Methoden 5)6)7) angewandt werden. Das ermöglicht unter Umständen eine sehr effektive Ausnutzung des Zufallswanderungsprozesses.

2. Allgemeines Monte Carlo Verfahren

Gesucht ist eine Schätzung von

$$\bar{z} = \int z(R)g(R)dR, \text{ wenn}$$

$$g(R) = \int_A k(R/R')g(R')dR' + q(R) \text{ ist und } k(R/R') \text{ sowie } q(R) \text{ beliebige}$$

Funktionen sind.

2.1) Lösung des Problems

Sei $g(R) = \sum_i g_i(R)$ die Entwicklung der Lösung der betrachteten Integralgleichung in eine Neumannsche Reihe, d.h.

$$g_i(R) = \int_A k(R/R') g_{i-1}(R')dR', \quad i = 2, 3, 4, \dots$$

$$g_1(R) = q(R)$$

Wir wollen den Erwartungswert

$$\bar{z} = \sum_i \int_A z(R,i) g_i(R)dR \text{ schätzen.}$$

Wir betrachten hier einen allgemeineren Erwartungswert, der für $z(R,i) = z(R)$ wegen der Existenz der Neumannschen Reihe in den gewünschten Erwartungswert übergeht.

Nach Einsetzen aller $g_i(R)$ in \bar{z} wird

$$\bar{z} = \sum_i \int_A \dots \int_A z(R,i) \prod_{v=1}^{i-1} [k(R_{v+1}/R_v) dR_v] q(R_1) dR_1 dR \quad (R_i = R)$$

(Für $i = 1$ ist das Produkt $\prod_{v=1}^{i-1} \dots$ durch 1 zu ersetzen)

In diesem i -fachen Integral stehen nur noch bekannte Funktionen, so daß \bar{z} leicht mit den üblichen Methoden zur Schätzung von Integralen ermittelt werden kann.

Zur Abkürzung wird der Vektor

$$(R_1, R_2, \dots, R_i) = X_i \text{ gesetzt.}$$

Wir zerlegen den Integranden

$$\begin{aligned} k(R/R') &= m(R/R') \cdot p(R/R'), & \int_A p(R/R') dR &\leq 1, & p(R/R') &\geq 0 \\ q(R) &= w_1(R) \cdot f_1(R) & \int_A f_1(R) dR &= 1, & f_1(R) &\geq 0 \end{aligned}$$

Benutzen wir die Definitionen

$$\begin{aligned} w_1(X_1) &= m(R/R_{i-1}) w_{i-1}(X_{i-1}) \\ f_1(X_1) &= \prod_{v=1}^{i-1} p(R_{v+1}/R_v) f_1(R_1) \end{aligned}$$

(Das Produkt ist für $i = 1$ wieder durch 1 zu ersetzen), so wird

$$\bar{z} = \int \int \dots \int z(R, i) w_1(X_1) f_1(X_1) dX_1$$

$f_1(X_1)$ ist definitionsgemäß eine (nichtnormierte) Wahrscheinlichkeitsdichte.

Sind also $X_1^{(v)}$ zufällig aus $f_1(X_1)$ gewählt ($v = 1, 2, \dots, N$),

so ist

$$\hat{z} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{v=1}^N z(R_1^{(v)}) w_1(X_1^{(v)}) \text{ eine Schätzung von } \bar{z}.$$

Die Methode des zufälligen Auswählens von Vektoren X_1 sieht man sofort an der Definition von f_1 als Produkt von Wahrscheinlichkeiten. Man wähle zufällig Werte $R_1^{(v)}$ ($v = 1, 2, \dots, N$) aus der auf 1 normierten Dichte $f_1(R)$. Bei gegebenem $R_\mu^{(v)}$ wähle man nacheinander für $\mu = 1, 2, \dots, i-1$ Koordinaten $R_{\mu+1}^{(v)}$ aus der Verteilung $p(R/R_\mu^{(v)})$. Dieser Auswahlprozeß kann als Zufallswanderungsprozeß (random walk) fiktiver Teilchen gedeutet werden. Man deute $f_1(R)$ als Quellstoßdichte fiktiver Teilchen, deren Übergangswahrscheinlichkeitsdichte von R' nach R durch $p(R/R')$ gegeben ist. Jedem Teilchen wird an jedem Stoßort ein Gewicht $w_1(X_1)$ zugeordnet.

Die Stichprobe $X_1^{(v)}$ ($v = 1, 2, 3, \dots, N$) ist also gegeben durch die Stoßkoordinaten eines Systems von N Teilchen, deren Dichte für den ersten Stoß der Teilchen $f_1(R)$ ist. Die Bewegung der Teilchen im Bereich A geschieht durch zufälliges Springen von (Stoß)ort zu (Stoß)ort. Die Übergangswahrscheinlichkeit für ein Teilchen, vom Stoßort R' zum Stoßort R zu gelangen, ist $p(R/R')$.

Ein Teilchen stirbt, wenn ^{es} zufällig den Bereich A (möglich, da $\int_A p(R/R') dR < 1$ erlaubt ist) verläßt oder wenn sein Gewicht $w_1(X_1)$, das jedem Stoßort jedes Teilchens zugeordnet wird, Null ist.

Damit gilt also der folgende Monte-Carlo Prozeß zur Schätzung von

$$\bar{z} = \int_A z(R) g(R) dR, \text{ wenn } g(R) \text{ durch eine Fredholmsche Integralgleichung}$$

$$\text{gegeben ist: } g(R) = \int_A k(R/R') g(R') dR' + q(R)$$

1. Zerlegung von Kern und Quelle der gegebenen Gleichung

$$k(R/R') = m(R/R') \cdot p(R/R'), \quad p(R/R') \geq 0, \quad \int_A p(R/R') dR \leq 1$$

$$q(R) = w_1(R) \cdot f_1(R), \quad f_1(R) \geq 0, \quad \int_A f_1(R) dR = 1$$

2. Zufällige Auswahl eines $R_1^{(v)}$ mit der Wahrscheinlichkeit $f_1(R) dR$

3. Zufällige Auswahl der Stoßorte $R_{i-1}^{(v)}$ aus $p(R/R_{i-1}^{(v)})$ bei gegebenem

$R_{i-1}^{(v)}$ und Berechnung der zugehörigen Gewichte

$$w_i^{(v)} = m(R_i^{(v)}/R_{i-1}^{(v)}) w_{i-1}^{(v)} \quad \text{nacheinander für } i = 2, 3, \dots$$

4. Der Prozeß ist beendet, wenn das Teilchen "stirbt", d. h. wenn entweder $w_i^{(v)} = 0$ oder ein $R_i^{(v)}$ außerhalb A liegt (Leckage).

5. Die Schritte 2. - 4. werden für $v = 1, 2, \dots, N$ durchgeführt

6. $\hat{z} = \frac{1}{N} \sum_i \sum_v z(R_i^{(v)}) w_i^{(v)}$ ist eine erwartungstreue Schätzung von

$$\bar{z} = \int_A z(R) g(R) dR$$

Hängt $z = z(R, i)$ von i (Stoßnummer) explizit ab, ist \hat{z} eine Schätzung von

$$\bar{z} = \sum_{i=1}^{\infty} \int_A z(R, i) g_i(R) dR, \text{ wobei } R/R$$

$$g(R) = \sum_{i=1}^{\infty} g_i(R) \text{ und } g_i(R) = \int_A k(R/R') g_{i-1}(R') dR' \text{ sind.}$$

Nach den bisher beschriebenen Verfahren kann \bar{z} nur geschätzt werden, wenn der

Integrationsbereich von \bar{z} von Null verschieden ist. Es erhebt sich die Frage,

ob $\bar{z}(R) = z(R) \hat{g}(R)$ geschätzt werden kann, d. h. gibt es eine Schätzung $g(R)$ von $g(R)$

$$\bar{k}(R) = \int_A k(R/R') g(R') dR' \text{ kann durch } \hat{k}(R) = \frac{1}{N} \sum_i \sum_v k(R/R_i^{(v)}) w_i(X_i^{(v)})$$

erwartungstreu geschätzt werden.

Wegen der Existenz der Integralgleichung für $g(R)$ ist

$$g(R) = \bar{k}(R) + q(R)$$

$$\hat{g}(R) = \hat{k}(R) + q(R)$$

Wir geben noch eine häufig verwendbare spezielle Gruppe von Zerlegungen an

$$w_1(R) = \frac{\bar{n}_1}{g^{\mathbf{x}}(R)}, \quad f_1(R) = \frac{q(R) g^{\mathbf{x}}(R)}{\bar{n}_1}$$

$$m(R/R') = \frac{g^{\mathbf{x}}(R')}{g^{\mathbf{x}}(R)} \bar{n}_2 (/R'), \quad p(R/R') = k(R/R') \frac{g^{\mathbf{x}}(R)}{g^{\mathbf{x}}(R')} \frac{1}{\bar{n}_2 (/R')}$$

$$\bar{n}_1 = \int_A q(R) g^{\mathbf{x}}(R) dR$$

$$|\bar{n}_2 (/R')| \geq \left| \int k(R/R') \frac{g^{\mathbf{x}}(R)}{g^{\mathbf{x}}(R')} dR \right|$$

$$p(R/R') \geq 0$$

$$f_1(R) \geq 0$$

2.2) Fehlerstatistik

Die Varianz von \hat{z} ist gegeben durch

$$s^2 = \overline{\hat{z}^2} - \bar{z}^2 = \frac{1}{N} (\overline{y^2} - \bar{z}^2),$$

da die Größen $y = \sum_i z(R_1^{(v)}) w_i(X_i^{(v)})$ voneinander unabhängig sind.

Eine Schätzung von $\overline{y^2}$ ist durch

$$\hat{y}^2 = \frac{1}{N} \sum_v y^2(X^{(v)}) \text{ gegeben.}$$

Setzen wir $t^2 = \overline{y^2} - \bar{z}^2$, so ist

$$\hat{t}^2 = \frac{N}{N-1} (\hat{y}^2 - \hat{z}^2) \text{ eine erwartungstreue Schätzung von } t^2.$$

Nach dem zentralen Grenzwertsatz ist die Wahrscheinlichkeit, daß

$$\left| \frac{\hat{z} - \bar{z}}{\hat{t}} \right| \leq \xi$$

$$P\left(\left| \frac{\hat{z} - \bar{z}}{\hat{t}} \right| \leq \xi\right) = \phi(\xi \sqrt{N}), \text{ wenn } \phi \text{ die Fehlerfunktion ist.}$$

Es gilt also:

1. Die Wahrscheinlichkeit, daß $\left| \frac{\hat{z} - \bar{z}}{t} \right| \leq \varepsilon$, ε vorgegeben, ist $\phi(\varepsilon \sqrt{N})$, wobei $\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^x e^{-\frac{x^2}{2}} dx$ ist.

$\frac{N}{N-1} (\hat{y}^2 - \hat{z}^2)$ ist eine erwartungstreue Schätzung von t^2 .

$$\hat{y}^2 = \frac{1}{N} \sum_v \left[\sum_i z(R_i^{(v)}) w_i^{(v)} \right]^2$$

2. Die nicht eindeutig gegebene Zerlegung von Kern und Quelle beeinflusst neben der Zahl der Variablen der Integralgleichung den Fehler.

3. Spezielle Monte-Carlo Prozesse

Nach der Art der Festlegung der zum Teil unbestimmten Funktionen $m(R/R')$, $w_1(R)$, $p(R/R')$, $f_1(R)$ unterscheidet man verschiedene Monte Carlo Verfahren

3.1) Straight forward sampling

Bei Problemen, die ihrer Natur nach Zufallswanderungen von Teilchen sind, ist es möglich, $m(R/R') = 1$ und $w_1(R) = \text{const.}$ zu setzen, so daß $w_i(R) = w_1$ gilt.

Monte Carlo Prozesse dieser Art wollen wir straight forward sampling nennen.

In den in der Literatur üblichen Darstellungen 1)2)3)4) ist die Art der Schätzung stets eng an den speziell verwendeten random walk Prozeß gebunden. Das führt dazu, daß dort meistens von straight forward Monte Carlo gesprochen wird, wenn außer den genannten Bedingungen für den random walk nur Schätzfunktionen der Art $z(R) = \sum \gamma(R - R_v)$ verwendet werden.

$$\gamma(R - R_v) = \gamma \left[\gamma(x - x_{v\mu}) \right], \text{ wenn } R \text{ ein Vektor ist,}$$

$\gamma(x) = 0$ für $x < 0$, $\gamma(x) = 1$ für $x \geq 0$. In diesem Falle werden also stets Anzahlen bestimmter Stoßübergänge registriert, d. h. die Erwartungswerte für bestimmte Übergänge geschätzt. Da diese Übergänge aber durch Teile des Integralkerns beschrieben sind, kann die Statistik häufig verbessert werden, wenn die betrachteten Teile des Integralkerns als Schätzfunktion $z(R)$ verwendet werden.

Beispiel

$\int_A \int_A k(R/R') g(R') dR dR'$ soll geschätzt werden. Im Falle der üblichen

Darstellungen wird die Zahl aller Ereignisse registriert, bei denen ein Teilchen einen Stoß in A' und den nächsten in A hat.

Zur Statistik trägt also nur ein Teil der Stichprobe bei. Läßt sich dagegen $\int_A k(R/R') dR'$ leicht analytisch berechnen, so können wir

$z(R) = \int_A k(R/R') dR'$ setzen. In diesem Falle wird jeder Stoß zur Schätzung von $z(R)$ herangezogen, wodurch sicherlich der Fehler der Schätzung verkleinert wird.

3.2) Sampling mit Gewichten (Erwartungswerten)

An sich kann man jedes Monte Carlo Verfahren als Sampling mit Gewichten bezeichnen. In der Literatur bezeichnet man meistens Monte Carlo Verfahren, deren zugehörige Integralgleichung $m(R/R') = 1$ prinzipiell zulassen, als Prozesse mit Gewichten, wenn $m(R/R') \neq 1$ ist. Wir geben hierfür ein Beispiel

$P(/R') = \int_A k(R/R') dR < 1$ sei explizit analytisch zu berechnen.

$P(/R')$ ist die Wahrscheinlichkeit, daß ein Teilchen, das in R' ist, noch einen weiteren Stoß in A macht.

Sei $m(R/R') = P(/R')$ und $P(R/R') = \frac{k(R/R')}{P(/R')}$

Der statistische Fehler gegenüber dem straight forward sampling wird verkleinert, da wir das zufällige Ereignis "nicht Verschwinden nach einem Stoß" durch seinen Erwartungswert ersetzen konnten. Man bezeichnet diese Verfahren besser als Sampling mit Erwartungswerten.

3.3) Splitting und russisches Roulette

Wir betrachten ein Teilgebiet A_1 von A

a) Splitting:

Ein Teilchen gelange auf seiner Wanderung in den Bereich A_1 . Vor dem ersten Stoß in A_1 zerlegen wir das Teilchen in n neue Teilchen, deren Gewichte alle gleich dem $\frac{1}{n}$ -fachen des Gewichtes des ursprünglichen "Mutterteilchens" sind. Im Mittel werden n Wanderungen an Stelle des einen in A_1 fortgesetzt.

h) Russisches Roulette

Wieder gelange ein Teilchen nach A_1 . Wir multiplizieren sein Gewicht mit $\frac{1}{q}$ ($0 < q \leq 1$) und setzen den random walk nur mit der Wahrscheinlichkeit q fort. Es wird also im Mittel nur der Bruchteil q der random walks in A_1 fortgesetzt.

Die Erwartungstreue der Schätzungen bleibt in jedem Falle erhalten, die Varianz wird verkleinert beim Splitting und vergrößert beim russischen Roulette. Hiermit haben wir eine Möglichkeit, die Statistik in bestimmten Phasenraumbereichen zu verändern, z.B. kann man die Varianz von Schätzungen in A_1 dadurch verbessern, daß auf Teilchen, die in A_1 eintreten, Splitting und auf Teilchen, die den Bereich A_1 verlassen, Russisches Roulette angewandt wird.

Eine anschauliche Überlegung zeigt die Erwartungstreue der Schätzungen und die Änderung der Varianz.

Beim Splitting wird im Mittel ein Wert $z(R) \cdot w$ durch n Werte $\frac{1}{n} z(R) \cdot w$ ersetzt. Die Summe über diese n -Werte stellt ein mittleres $z(R) \cdot w$ dar. Über diese mittleren $z(R) \cdot w$ wird im Sinne von Abschnitt 2.) gemittelt, d.h. man erhält ein \hat{z} , dessen statistischer Fehler im Mittel verkleinert wird, da mehr Stöße berücksichtigt werden.

Analog wird beim russischen Roulette im Mittel nur der Bruchteil q von $z(R) \cdot \frac{w}{q}$ -Werten an Stelle eines $z(R) \cdot w$ -Wertes in der Schätzung \hat{z} berücksichtigt (siehe auch Abschnitt 3.5), wodurch der statistische Fehler vergrößert wird.

3.4) Korrelation

Wir geben ein Beispiel:

Zwei verwandte Probleme kann man häufig simultan behandeln, wenn geeignete Zerlegungen der Kerne und Quellen möglich sind. Es sei gesucht:

$$\overline{\Delta z} = \overline{z_b} - \overline{z_a} = \int_A z_b(R) g_b(R) dR - \int_A z_a(R) g_a(R) dR,$$

wenn $\overline{z_b} \approx \overline{z_a}$ ist, $g_i(R)$, ($i = a, b$) genüge dabei den Gleichungen

$$g_i(R) = \int_A k_i(R/R') g_i(R') dR' + q_i(R)$$

Es mögen Zerlegungen der Kerne und Quellen so existieren, daß allein die Gewichtsfunktionen vom Parameter i abhängen

$$k_i(R/R') = m_i(R/R') \cdot p(R/R')$$

$$q_i(R) = w_{1i}(R) \cdot f_1(R) \quad i = a, b$$

Da die Stoßkoordinaten allein aus $p(R/R')$ und $f_1(R)$ zufällig gewählt werden, unterscheiden sich die Stichproben für $g_a(R)$ und $g_b(R)$ nur in den Gewichten. Man kann also in einem random walk Prozeß zwei Verteilungen realisieren, indem man für jeden Stoß zwei Gewichte berechnet.

$$\hat{z}_i = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{v}} z_i(R_{\mathbf{v}}) w_i(R_{\mathbf{v}})$$

$$\hat{z}_b - \hat{z}_a = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{v}} \left[z_b(R_{\mathbf{v}}) w_b(R_{\mathbf{v}}) - z_a(R_{\mathbf{v}}) w_a(R_{\mathbf{v}}) \right]$$

Damit ist eine Schätzung der gesuchten Differenz gefunden, bei der die Differenzbildung fast gleicher Zahlen im Endergebnis vermieden wird.

Wenn die beiden Integralgleichungen stark von einander abweichende Kerne und Quellen haben, ist es wegen der im allgemeinen ungünstigen Statistik (Fehler) wenig sinnvoll, beide Integralgleichungen mit den gleichen Verteilungen zu behandeln.

3.5) Importance sampling

Es ist eine Zerlegung von Kern und Quelle in Faktoren gesucht, so daß die Varianz s^2 einer Schätzung \hat{z} zum Minimum wird.

Wir zeigen, wenn der Kern $k(R/R')$ und die Schätzfunktion $z(R)$ nicht negativ sind, gibt es ein perfektes Sampling, d.h.

$$\overline{(\hat{z})^2} = \bar{z}^2 \quad (s^2 = 0)$$

Wir betrachten die am Ende des Abschnittes 2.2) gegebene Zerlegung und setzen die dort auftretende Funktion $g^*(R)$ als Lösung einer Importance-Gleichung mit $z(R)$ als Quelle an

$$g^*(R) = \int_A k(R/R') g^*(R') dR' + z(R)$$

Aus dieser Integralgleichung sowie der für $g(R)$ folgt sofort

$$\bar{q} = \int_A q(R) g^*(R) dR = \bar{z} = \int_A z(R) g(R) dR$$

$$\bar{n}_1 = \bar{q}$$

$$\bar{n}_2 (/R) \geq 1 - \frac{z(R)}{g^*(R)}$$

Im Falle $k(R/R') \geq 0$, $z(R) \geq 0$ ist $z(R) \leq g^*(R)$.

(Neumannsche Reihe für $g^*(R)$ besteht nur aus positiven Gliedern)

$$\bar{n}_2 (/R) = 1 \text{ ist daher widerspruchsfrei.}$$

Es gilt also jetzt die Zerlegung

$$w_1(R) = \frac{\bar{q}}{g^*(R)}, \quad f_1(R) = \frac{q(R) g^*(R)}{\bar{q}}$$

$$m(R/R') = \frac{g^*(R')}{g^*(R)}, \quad p(R/R') = k(R/R') \frac{g^*(R)}{g^*(R')}$$

Sei $R_i^{(\nu)}$ ($\nu = 1, 2, 3, \dots, N$, $i = 1, 2, 3, \dots$) eine Stichprobe von $f_1(R_i^{(\nu)})$

Wegen $q(R) = w_1(R) \cdot f_1(R)$ kann \bar{z} erwartungstreu geschätzt werden durch

$$\hat{z} = \frac{1}{N} \sum_{\nu} g^*(R_1^{(\nu)}) w_1(R_1^{(\nu)}) \text{ oder } \hat{z} = \frac{1}{N} \sum_{\nu} \sum_i z(R_i^{(\nu)}) w_i(R_i^{(\nu)})$$

Berücksichtigt man $w_1(R) = \frac{\bar{z}}{g^*(R)}$, so ist unabhängig von N

$$\hat{z} = \bar{z} = \frac{\bar{z}}{N} \sum_{\nu} \sum_i \frac{z(R_i^{(\nu)})}{g^*(R_i^{(\nu)})}$$

Analog ist wegen der Unabhängigkeit der $R_1^{(\nu)}$

$$\begin{aligned} \overline{\hat{z}^2} &= \frac{1}{N^2} \left[\sum_{\nu} g^*(R_1^{(\nu)}) \cdot w_1(R_1^{(\nu)}) \right]^2 \\ &= \frac{1}{N^2} \left[N \bar{z}^2 + N(N-1) \bar{z}^2 \right] = \bar{z}^2 \end{aligned}$$

$$s^2 = \overline{\hat{z}^2} - \bar{z}^2 = 0 = \frac{1}{N} (\overline{y^2} - \bar{y}^2)$$

$$\overline{\hat{z}^2} = \bar{z}^2 = \frac{1}{N} \sum_{\nu} \left[\sum_i \frac{z(R_i^{(\nu)})}{g^*(R_i^{(\nu)})} \right]^2$$

Unabhängig von N ist also die Varianz der Schätzung \hat{z} gleich 0.

Die angegebene Zerlegung ist also perfekt, jede ausgewählte Koordinate $R_i^{(\nu)}$

muß also die Berechnung von \bar{z} gestatten.

Es ist

$$\hat{z} = w_1(R_1(\mathcal{V})) \cdot g^*(R_1(\mathcal{V})) = \bar{z}$$

Um mit einer Koordinate $R_1(\mathcal{V})$ \hat{z} exakt zu schätzen, muß außer

$$\bar{z} \left(w_1 = \frac{\bar{z}}{g^*} \right) \text{ auch noch } g^*(R) \text{ bekannt sein.}$$

In der Praxis kennt man natürlich weder \bar{z} noch g^* .

3.6) Systematic sampling

Der Bereich A möge in Bereiche A_i zerlegt sein. Die random walks werden mit festen Anzahlen B_i Teilchen aus den Bereichen A_i durchgeführt. Sei $b_i = \int f_1(R) dR$. Die Teilchen in A_i werden zufällig aus $\frac{f_1(R)}{b_i}$ gewählt. $B_i = N \cdot b_i$, wenn N die vorgegebene Zahl aller Teilchen ist.

3.7) Stratified sampling

Das systematic sampling kann modifiziert werden. Sei B_i^* die beliebig vorgegebene Zahl von Teilchen in A_i und $w_1(R)$ das Gewicht aus $q(R) = w_1(R) \cdot f_1(R)$

$$w_1^{*(i)} = \frac{B_i w_i}{B_i^*} \text{ ist das Gewicht der Quellteilchen aus } A_i.$$

Herrn Sanitz danke ich sehr für die vielen wertvollen Beiträge zu dieser Arbeit.

L i t e r a t u r

- 1) G. Goertzel u.a. Monte Carlo Methods in Transport Problems
Progr. Nucl. Energy 2 (Math.) (1958) 315
- 2) H. Kahn Applications of Monte Carlo, AECU - 3259 (1954)
- 3) E.D. Cashwell A Practical Manual on the Monte Carlo Method
C.J. Everett for Random Walk Problems, London (1959)
- 4) J. Spanier Monte Carlo Methods and their Applications
WAPD-195 (1959)
- 5) M. Fisz Wahrscheinlichkeitsrechnung und Statistik,
Berlin (1958)
- 6) H. Cramér Mathematical Methods of Statistics,
Princeton (1946)
- 7) J.L. Doob Stochastic Processes, New York, London (1953)

B. Monte-Carlo-Verfahren zur Lösung der homogenen Transportgleichung

Zusammenfassung:

Diese Arbeit enthält die theoretischen Grundlagen eines Rechenprogramms zur Lösung der zeitabhängigen Transportgleichung.

Die Verwendung von Erwartungswerten an Stelle der "straight forward"-Schätzfunktionen, die zur Vereinfachung des Programms oder zur Verkürzung der Rechenzeit führt, wird behandelt.

Es wird gezeigt, wie mit Hilfe sogenannter Einflußfaktoren die Statistik in den einzelnen Reaktorbereichen, Energie- und Winkelgruppen in vorgegebener Weise beeinflußt werden kann.

Die Zeitabhängigkeit und die damit zusammenhängende Eigenwertberechnung wird ausführlich diskutiert.

Es wird die Art der Berechnung der Schätzungen (Reaktionsraten, Leckageraten, Neutronenflüsse, Neutronendichten und Energieübergangsraten) beschrieben.

Die Berechnung der Wirkungsquerschnitte geschieht mit Hilfe eines an anderer Stelle beschriebenen Unterprogramms ⁹⁾.

Ebenfalls an anderer Stelle ⁶⁾ sind Blockdiagramme zur Realisierung der benötigten Verteilungen gegeben.

Desgleichen erscheint die eigentliche Bedienungsanleitung für das Programm, die die Beschreibung der Ein- und Ausgabe, Fehlerstops und -kommentare usw. enthält, in einem von dieser Arbeit getrennten Bericht ¹²⁾.

I n h a l t :

1. Die Boltzmann-Gleichung
 - 1.1 Quellverteilungen
 - 1.1.1 Homogener Fall
 - 1.1.2 Inhomogener Fall
2. Neutronenlaufzeit und Eigenwert
3. Zerlegung des Integrationsbereiches
4. Zufallswanderung der Neutronen
 - 4.1 Grundsätzliche Zerlegung des Kerns der Transportgleichung in Gewichtsfunktion und Übergangswahrscheinlichkeit
 - 4.2 Grundsätzliche Zerlegung der Quelle der Transportgleichung in Gewicht und Wahrscheinlichkeit
 - 4.3 Zufällige Auswahl der Koordinaten und Angabe der Gewichte für Quellneutronen
 - 4.4 Zufällige Auswahl eines weiteren Stoßortes und Berechnung des zugehörigen Gewichtes
 - 4.4.1 Energie und Richtung
 - 4.4.2 Ort
 - 4.4.3 Kernsorte und Reaktionsart
 - 4.4.4 Flugzeit
 - 4.4.5 Einflußfaktoren
 - 4.4.6 Gewicht
 - 4.4.7 Kleine Gewichte
5. Ende des Neutronenschicksals (Leckage)
 - 5.1 Raumleckage
 - 5.2 Zeitleckage
 - 5.3 Einflußleckage
 - 5.4 Gewichtsleckage
6. Schätzungen
 - 6.1 Eigenwert und Zeitmomente
 - 6.2 Reaktionsraten und Flüsse
 - 6.3 Leckageraten
 - 6.4 Übergangsraten
 - 6.5 Kritizität und Eigenwert

• Die Boltzmann-Gleichung

Die Stoßdichte $f_{ij}(s,t)$ der Neutronen ist gegeben durch ¹⁾²⁾

$$f_{ij}(s,t) = \sum_{i',j' \in A} \sum_{j' \neq \text{capt.}} k(s, i, j / s', i', j') f_{i',j'}(s', t - \frac{|r - r'|}{|p|}) ds' + q_{ij}(s,t)$$

Es bedeuten

$s = (x, y, z, u, v, w, E)$, Ortsvektor im 6-dimensionalen Phasenraum.

$R = (s, i, j, t)$

$ds = dx dy dz d\varphi d\vartheta dE$: Phasenraumelement

$ds = dr d\omega dE$.

A: Teilbereich des Phasenraums

$r = (x, y, z)$: Ortsvektor in kartesischen Koordinaten

$o = (u, v, w)$, $|o| = 1$: Richtungsvektor

$$u = \cos \alpha = \cos \varphi \sin \delta, \quad 0 \leq \alpha \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

$$v = \cos \beta = \sin \varphi \sin \delta, \quad 0 \leq \beta \leq \pi, \quad 0 \leq \delta \leq \pi$$

$$w = \cos \gamma = \cos \varphi, \quad 0 \leq \gamma \leq \pi$$

α, β, γ : Winkel zwischen Flugrichtung und den Koordinatenachsen.

E: Energie im Laborsystem

$$p = |p| \cdot o, \quad |p| = \sqrt{\frac{2}{m} E}, \quad m: \text{Masse des Neutrons}$$

p: Geschwindigkeit

t: Zeit

i: Kernart, Bezeichnung des Atomkerns (z.B. Pu 239, O 16, Th 232 usw.)

j: Stoßart, Art der Kernreaktion (elastische Streuung, inelastische Streuung, Spaltung usw.) Die Summation über j' erfolgt über alle Kernreaktionen außer Einfang.

$q_{ij}(s,t) \geq 0$: Neutronenquelle.

Die gestrichenen und ungestrichenen Koordinaten gehören zu zwei aufeinanderfolgenden Stößen.

Wir benutzen die Ausdrücke Stoß, Stoßort, Stoßkoordinaten u. ä. im allgemeinen Sinne³⁾. Ein Stoß ist also die zufällige Änderung des gesamten Vektors (s, i, j) . (Die Zeitkoordinate t nehmen wir teilweise nicht in den Stoßvektor auf, da sie aus zwei aufeinanderfolgenden Stößen eindeutig definiert ist durch $t = t' + \frac{|r - r'|}{|p|}$). Leakage im Sinne unserer früheren Definition³⁾ sind also Übergänge $(s', i', j') \rightarrow$

(s, i, j), bei denen s' außerhalb A liegt oder j' = capture ist.

Der Stoßort wird durch die Stoßkoordinaten (s, i, j) definiert. Den Zusammenstoß eines Neutrons mit einem Kern, bei dem nur E und o geändert werden, nennen wir physikalischen Stoß und den zugehörigen Vektor r physikalischen Stoßort. Durch den Flug des Neutrons werden nur die Raumkoordinaten r geändert. Zu einem Stoß eines Neutrons gehört ein physikalischer Stoß und ein Flug.

Als Stoßkoordinaten definieren wir den Satz von Koordinaten (s, i, j), der unmittelbar vor einem physikalischen Stoß, also unmittelbar nach einem Flug, gilt. Der Stoßvektor (s, i, j) enthält somit Energie und Richtung, die sich aufgrund des letzten physikalischen Stoßortes eingestellt haben, den 3-dimensionalen Raumvektor, sowie Kernart und Stoßart des nächsten physikalischen Stoßes.

$f_{ij}(s, t)$ ist die Stoßdichte (Stoßzahl pro Phasenraumeinheit, Kernart, Stoßart und sec) von Neutronen, die am Phasenraumort s an einer Kernsorte i die Reaktion j zur Zeit t ausführen.

$f(s, t) = \sum_i \sum_j f_{ij}(s, t)$ ist die totale Stoßdichte

$$f_{ij}(s, t) = \sum_i \varphi(s, t) \sigma_{ij}(s)$$

$$\varphi(s, t) = n(s, t) \cdot |p| \quad : \text{Neutronenfluß}$$

$\Sigma_{ij}(s) = N_i(r) \sigma_{ij}(E, o)$: makroskopischer Wirkungsquerschnitt (cm^{-1})
der Kernart i für die Reaktion j,

$\sigma_{ij}(E, o)$: entsprechender mikroskopischer Querschnitt +
(cm^2)

$N_i(r)$: Kernzahldichte (cm^{-3})

$n(s, t)$: Neutronenzahldichte

Der Kern der Integralgleichung gibt die mittlere Zahl von Neutronen an, die auf Grund des Stoßes eines Neutrons am Orte (s', i', j') ohne Zwischenstöße zum Stoßort (s, i, j) gelangen.

Bekanntlich ist

$$k(s, i, j / s', i', j') = \frac{\Sigma_{ij}(s)}{\Sigma_t(s)} \frac{\Sigma_t(s)}{4\pi |r - r'|^2} e^{-\int_0^{|r-r'|} \Sigma_t(r-ol, o, E) dl} \cdot \mathbf{V}_{i', j'}(E', o', E, o) \frac{\Sigma_{i', j'}(r', o' \rightarrow o, E' \rightarrow E)}{\Sigma_{i', j'}(s')}$$

+ Die Möglichkeit zur Berechnung aller benötigten Wirkungsquerschnitte ist an anderer Stelle ⁹⁾ beschrieben.

$\Sigma_t(s) = \sum_i \sum_j (\Sigma_{ij}(s))$ ist der totale Wirkungsquerschnitt

$$\Sigma_{i',j'}(s') = \int \Sigma_{i',j'}(r', o' \rightarrow o, E' \rightarrow E) dE do$$

$\nu_{i',j'}$ ist die Zahl der Neutronen, die bei einer Reaktion j' eines Neutrons mit einem Kern i' entstehen.

$\Sigma_{i',j'}(r', o' \rightarrow o, E' \rightarrow E)$ ist der Übergangswirkungsquerschnitt im Raumpunkt r' der Kernsorte i' für Neutronen, die bei der Reaktion j' die Richtung von o' in o und die Energie von E' in E ändern.

$$\text{Sei } f_{ij}(s) = \sum_{i',j'} \int_A k(s, i, j / s', i', j') e^{-\frac{\lambda |r-r'|}{|p|}} f_{i',j'}(s') ds'$$

das Eigenwertproblem, das sich aus der homogenen zeitabhängigen Gleichung durch den Separationsansatz $f_{ij}(s,t) = e^{\lambda t} f_{ij}(s)$ ergibt.

$f_{ij}^{(\gamma)}(s)$ sei eine Eigenlösung zum Eigenwert λ_γ .

1.1 Quellverteilungen

1.1.1 Homogener Fall

Es sind die positive Eigenlösung $f_{ij}^{(o)}(s)$ und der zugehörige (reelle) Eigenwert λ_o gesucht.

Für $t \rightarrow \infty$ gilt ²⁾.

$$f_{ij}(s,t) = A_o f_{ij}^{(o)}(s) e^{\lambda_o t}, \text{ wenn die Quelle}$$

$$q_{ij}(s,t) = q_{ij}(s) = \sum_r A_r f_{ij}^{(r)}(s) \geq 0 \text{ für } t = 0$$

$$q_{ij}(s,t) = 0 \text{ für } t \neq 0 \text{ ist.}$$

Für beliebige $t \geq 0$ gilt mit $q_{ij}(s) = A_o f_{ij}^{(o)}(s)$

$$f_{ij}(s,t) = A_o e^{\lambda_o t} f_{ij}^{(o)}(s).$$

Hieraus folgt für die Quellverteilung eines Monte Carlo Prozesses, der eine Stichprobe von $f_{ij}^{(o)}(s) e^{\lambda_o t}$ liefern soll ³⁾:

Die Quellneutronen entstehen zur Zeit $t = 0$ mit einer Verteilung

$q_{ij}(s)$, die möglichst gut mit $f_{ij}^{(0)}(s)$ übereinstimmt.

Als Quellfunktion kann der Fluß vorgegeben werden, wie er z. B. aus einer Mehrgruppenrechnung für das Problem folgt. (Ist $\varphi(s)$ eine Lösung der Transportgleichung für den Fluß, so ist $\Sigma_{ij} \varphi(s) = f_{ij}(s)$ die zugehörige Lösung der Stoßdichte, wie man durch Division der Stoßdichtegleichung mit Σ_{ij} sofort sieht.) Die aus dem vorgegebenen Fluß $\varphi(s)$ berechenbare Funktion $q_{ij}(s) = \Sigma_{ij} \varphi(s)$ ist die gewünschte Quelle, wobei $\varphi(s)$ näherungsweise die positive Grundeigenfunktion des Problems sein sollte.

1.1.2 Inhomogener Fall

Es ist die positive zeitunabhängige Lösung der Transportgleichung gesucht, deren Quelle $q_{ij}(s, t) = q_{ij}(s) \geq 0$, wenn der Eigenwert $\lambda_0 < 0$ ist.

Dieses Problem ist widerspruchsfrei. Die Zeit geht hier in den gesamten Monte Carlo Prozess nicht ein. Die Neutronen werden nach ihrem zufälligen Entstehen gemäß $q_{ij}(s)$ bis zu ihrem Verschwinden verfolgt. Die Realisierung der Quelle bietet keine prinzipiellen Schwierigkeiten⁶⁾, sie hängt jedoch so stark vom jeweiligen Problem ab, daß an dieser Stelle darüber nichts gesagt werden kann.

2. Neutronenlaufzeit und Eigenwert

Um den Einfluß der Quelle auf die Ergebnisse steuern zu können, werden in den Schätzungen nur Stoßwerte berücksichtigt, an denen die Laufzeiten der Neutronen einen vorzugebenden Wert $\tau_0 \geq 0$ überschritten haben. Die Gesamtlaufzeit (census time) $\tau \geq \tau_0$ jedes Neutrons sei ebenfalls vorgegeben.

$$\overline{z_{ij}(s, \tau)} = \sum_{i,j} \int_{\tau_0}^{\tau} z_{ij}(s, t) f_{ij}(s, t) ds dt \text{ sei ein gesuchter Erwartungswert.}$$

Im Falle des homogenen Problems kann der größte Eigenwert bei geeignet gegebenem τ_0 und τ aus

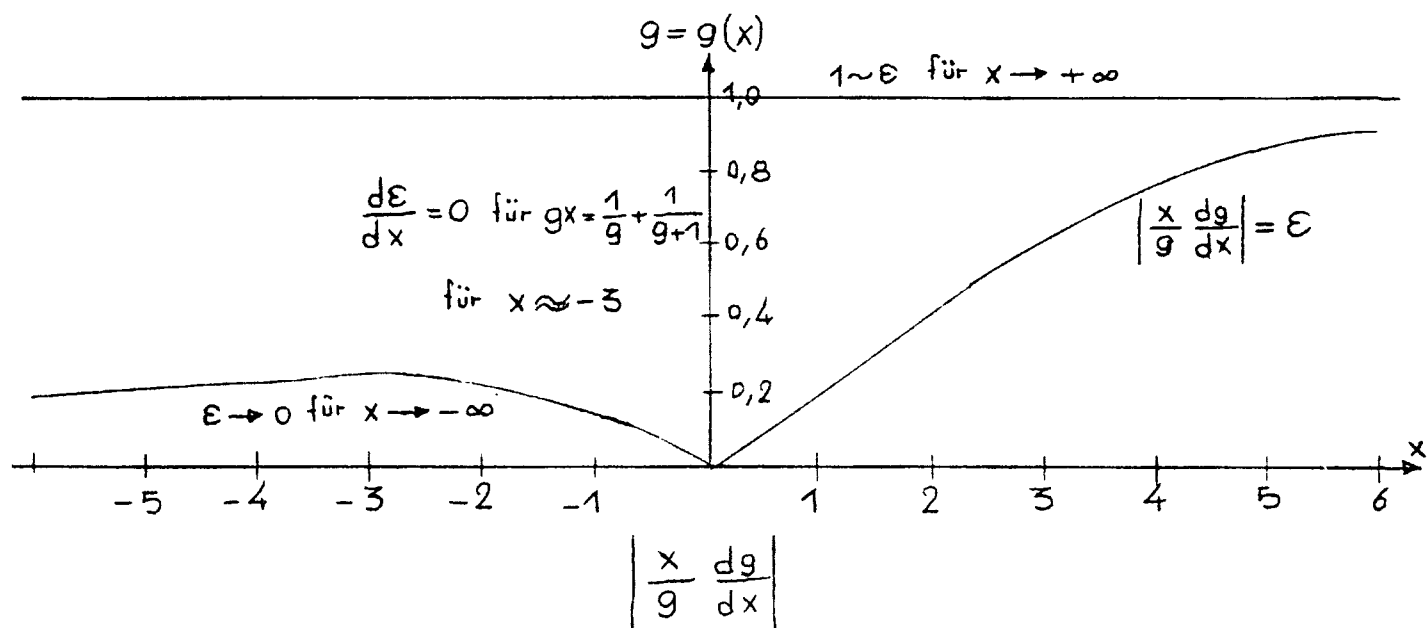
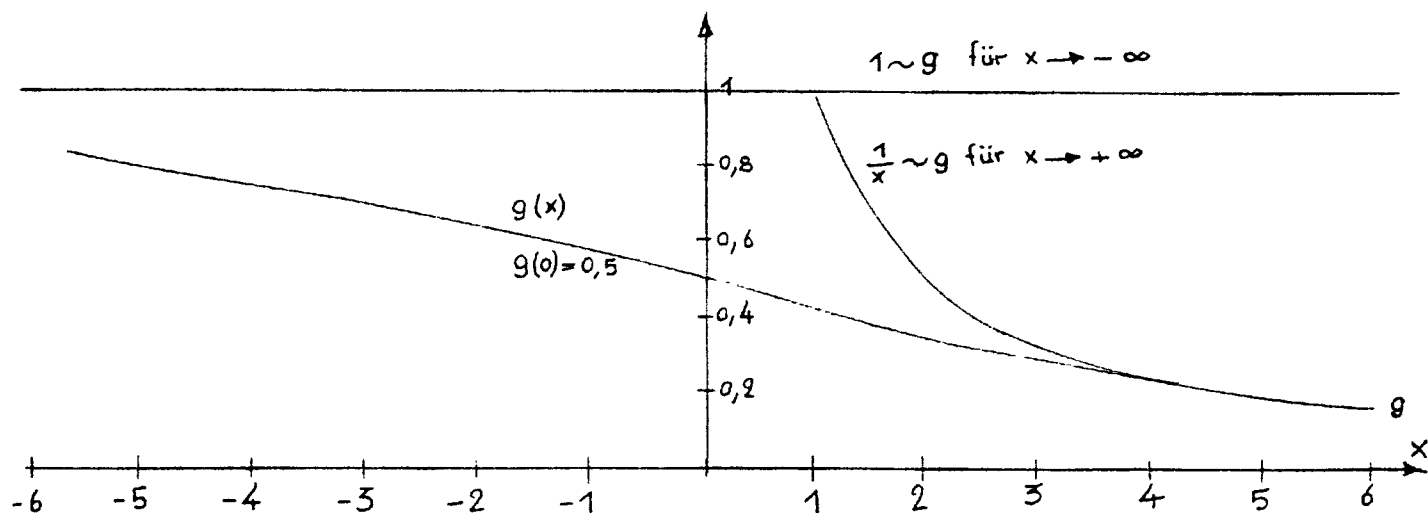
$$\frac{\tau - t}{\tau} = \frac{1}{\lambda_0} \left(1 - \frac{\lambda_0 (\tau - \tau_0)}{e^{\lambda_0 (\tau - \tau_0)}} \right)^{-1} \text{ bestimmt werden.}$$

Um Aussagen über die Größenordnung von τ_0 und τ zu bekommen, betrachten wir neben der oben angegebenen Bestimmungsgleichung für λ_0 die Ableitung

$$\frac{\partial \overline{\tau - t}}{\partial \lambda_0} \text{ Mit den Abkürzungen } g = \frac{1}{\tau - \tau_0} \frac{\tau - t}{\tau} \text{ und } x = \lambda_0 (\tau - \tau_0) \text{ wird}$$

=7=

$$g = \frac{1}{x} \left(1 - \frac{x}{e^x - 1} \right) \quad \rightarrow \quad \frac{x}{g} \frac{dg}{dx} = 1 - (1 - xg) \left(\frac{1}{g} - 1 \right)$$



Zur Abkürzung wird weiter $\epsilon = \left| \frac{x}{g} \frac{dg}{dx} \right|$ gesetzt.

Wenn g mit einem relativen Fehler $\frac{\Delta g}{g}$ bekannt ist, ist der relative Fehler von x (d.h. also von λ_0) gegeben durch $\frac{\Delta x}{x} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\Delta g}{g}$.

Ist $x > 0$, wird bei gegebenem Fehler von g der Fehler von x um so größer, je kleiner x ist. ($\epsilon(3) \approx 0.60$, $\epsilon(4) \approx 0.75$). Im Falle $x < 0$ nimmt der Fehler mit wachsendem Abstand von Maximum von $\epsilon(x)$ zu, das durch $gx = \frac{1}{g} + \frac{1}{g+1}$ bestimmt ist und etwa -3 beträgt.

($\xi(-3) \approx 0.25$). Negative Eigenwerte lassen sich schlechter schätzen als positive. $\tau - \tau_0$ sollte im Falle negativer Eigenwerte so gewählt werden, daß $x = \lambda_0 (\tau - \tau_0) \approx -3$ wird. $\tau - \tau_0$ im Falle positiver Eigenwerte sollte unter der Bedingung $x = \lambda_0 (\tau - \tau_0) \approx 3$ gewählt werden. Die folgenden allgemeinen Argumente zur Auswahl von τ und τ_0 sollten ebenfalls beachtet werden.

a) Bei vorgegebener Zahl der Stöße (Kosten) einer Rechnung wird der Fehler der Schätzungen größer mit wachsendem $(\tau - \tau_0)$, d.h. je kleiner die Zahl der random walks ist. Mit zunehmender Zahl der Stöße pro random walk wird die Korrelation erhöht, d.h. die effektive Zahl von unabhängigen Stößen wird kleiner. Außerdem werden weniger Neutronen aus der Quelle entnommen, d.h. es wird weniger vorgegebene Information über die Stoßdichteverteilung verwendet.

Da in praktischen Fällen 2 Stöße eines random walks, zwischen denen mehr als etwa 5 Stöße liegen, unabhängig sind und die Quelle meistens nur sehr fehlerhaft die verlangte Stoßdichte darstellt, ist die Abhängigkeit des Fehlers von $\tau - \tau_0$ (bei fester Stoßzahl) sicherlich schwach.

b) Bei vorgegebener Zahl der Stöße sind die statistischen Fehler um so ungenauer zu schätzen, je größer $\tau - \tau_0$ ist. Wegen der bestehenden Korrelation kann die Varianz einer Schätzung nur mit ganzen random walks geschätzt werden.

c) τ_0 darf nicht zu klein gewählt werden, da eine Voraussetzung der Rechnung ist, daß die Grundwelle in einem Teil des Bereichs $\langle 0, \tau \rangle$ allein vorhanden ist.

d) $\tau - \tau_0$ hängt von der Art des behandelten Reaktors und von den Energiebereichen ab, in denen die Schätzungen gemacht werden sollen, $\tau - \tau_0$ wird um so größer sein, je kleiner die mittlere Energie der Schätzungen ist.

Ist die Neutronenenergie 1 MeV, so ist $\Delta\tau \approx 5 \cdot 10^{-9}$ sec die mittlere Laufzeit zwischen 2 Stößen. Für 1eV ist die entsprechende Zeit etwa $5 \cdot 10^{-6}$ sec. Um Schätzungen im Resonanzgebiet der Spalt- und Brutstoffe noch einigermaßen vernünftig zu erhalten, sollte $\tau - \tau_0 \approx 10^{-6}$ sec sein.

3. Zerlegung des Integrationsbereiches

Zur praktischen Verwendung der Einflußfunktion, für die Berechnung der Schätzungen und zur zweckmäßigen Auswahl der Quellneutronen wird der gesamte in Betracht kommende 6-dimensionale Phasenraum A in Teilbereiche

$A_\nu = (E_\alpha, \varphi_\beta, r_\gamma), \nu = 1, 2, \dots, \alpha = 1, 2, \dots, \beta = 1, 2, \dots, \gamma = 1, 2, \dots$ zerlegt.

E_α = Energiebereich, φ_β = Winkelbereich, r_γ = Ortsbereich, $(\alpha, \beta, \gamma) = 1$. Der Energiebereich ist durch die beiden Energiegrenzen definiert. Der Winkelbereich wird durch zwei $\cos \vartheta$ -Werte definiert, wobei ϑ der Winkel zur z-Achse des zugrundeliegenden kartesischen Koordinatensystems ist.

Der Ortsbereich wird durch die ihn begrenzenden Flächen und die in ihm vorhandene homogene Materialmischung definiert. Jede Fläche ist durch einen Funktionstyp (z.B. Kugel, Ebene u. a.) und durch die Parameter der zugehörigen Flächengleichung definiert. Ein Bereich kann von mehreren Flächen begrenzt werden. Die vorzugebenden Funktionen, Einfluß und Stoßdichte, werden innerhalb jedes Teilbereiches A_ν konstant angenommen (vgl. Abschn. 4.1). Die berechneten Schätzungen sind Integrale über die Teilbereiche A_ν (vgl. Abschn. 6).

4. Zufallswanderungen der Neutronen

4.1 Grundsätzliche Zerlegung des Integralkerns der Transportgleichung in Gewichtsfunktion und Übergangswahrscheinlichkeit

Eine rechentechnisch und statistisch günstige Faktorenzerlegung ³⁾¹¹⁾ des Integralkerns (Abschn. 1) in Gewichtsfunktion $m(s, i, j / s', i', j')$ und Wahrscheinlichkeitsdichte $p(s, i, j / s', i', j')$ ist definiert durch

- a) Die Teilchenzahl $\nu_{i, j}$, die nur für $j' = \text{fission}$ und für $n-2n$ -Reaktionen von 1 verschieden ist (für $j' = \text{capture}$ ist $\nu_{i, j}$ nicht definiert), wird der Gewichtsfunktion m zugerechnet.
- b) Im ganzen Integralkern k tritt der Neutroneneinfang nur einmal als Koordinate des neuen Stoßes im Querschnitt $\Sigma_{ij}(s)$ auf. Daher kann das zufällige Ereignis "Einfang" sehr einfach durch seinen Erwartungswert berücksichtigt werden ³⁾¹¹⁾, wodurch im allgemeinen eine Verbesserung der Statistik zu erwarten ist.

$$\frac{\Sigma_{ij}(s)}{\Sigma_t(s)} = \frac{\Sigma_t - \Sigma_c}{\Sigma_t} \cdot \frac{\Sigma_{ij}}{\Sigma_t - \Sigma_c} \quad (t = \text{total}, c = \text{capture})$$

Für alle Reaktionen \neq capture ist $\frac{\Sigma_{ij}}{\Sigma_t - \Sigma_c}$ auf 1 normiert.

Diese Funktion wird zur zufälligen Auswahl der Indizes i, j ($j \neq$ capture) herangezogen, wird also zur Übergangswahrscheinlichkeit p gerechnet.

Der Erwartungswert für Nichteinfang $\frac{\Sigma_t - \Sigma_c}{\Sigma_t}$ wird der Gewichtsfunktion m zugeschlagen.

Zu beachten ist also, daß $j \neq$ capture jetzt ist, also daß $\Sigma(\Sigma_{ij}) = \Sigma_t - \Sigma_c$ gilt. Das bedeutet, daß im Falle i, j -unabhängiger Schätzfunktionen $z(s)$ die Erwartungswerte

$$\bar{z}_* = \iint_A t(s) (\Sigma_t - \Sigma_c) \varphi(s, t) ds dt \quad \text{lauten an Stelle von}$$

$$\bar{z} = \iint_A z(s) \Sigma_t \varphi(s, t) ds dt.$$

- c) Die Fehlerstatistik soll möglichst mit extern vorzugebenden Zahlen zu beeinflussen sein.

Gegeben sei eine positive, von i, j und t unabhängige, im übrigen willkürliche Funktion $g^+(s)$. Diese Funktion wird im Sinne des Importance sampling ¹⁾¹¹⁾ verwendet.

Für praktische Zwecke wird die Einflußfunktion $g^+(s)$ innerhalb jedes (in Abschn. 3.) definierten Phasenraumteilbereiches konstant angesetzt.

$$g^+(s) = g_\nu^+ \quad \text{für } s \in A_\nu$$

Zur Verkleinerung des Zahlenaufwandes (der zusätzliche Rechenaufwand ist klein) wird jedes g_ν^+ in Faktoren nach den (im Abschn. 3) definierten Koordinatengruppen zerlegt.

$$g_\nu^+ = g_\alpha^+ \cdot g_\beta^+ \cdot g_u^+ \quad \text{für } s \in A_\nu \quad \text{oder } E \in E_\alpha, \quad \theta \in \theta_\beta, \quad r \in r_\gamma,$$

E_α = Energiebereich, θ_β = Winkelbereich, r_γ = Ortsbereich.

Die Zerlegung des Integralkerns lautet somit

Gewichtsfunktion:

$$m(s, i, j / s', i', j') = \frac{\Sigma_t(s) - \Sigma_c(s)}{\Sigma_t(s)} \cdot \nu_{i', j'}(s', s) \cdot \frac{g^+(s')}{g^+(s)} \cdot \bar{n}_2(/s')$$

Übergangswahrscheinlichkeitsdichte:

$$p(s, i, j / s', i', j') = \frac{\Sigma_{ij}(s)}{\Sigma_t(s) - \Sigma_c(s)} \cdot \frac{\Sigma_t}{4\pi |r - r'|^2} \cdot e^{-\int_0^{|r-r'|} \Sigma_t(r - \rho \ell, o, E) d\ell} \cdot \frac{\Sigma_{i', j'}(r', o' \rightarrow o, E' \rightarrow E)}{\Sigma_{i', j'}(s')} \cdot \frac{g^+(s)}{g^+(s')} \cdot \frac{1}{\bar{n}_2(/s')}$$

$\bar{n}_2(/s')$ ist ein Normierungsfaktor, der das Integral über die Übergangswahrscheinlichkeitsdichte auf kleiner oder gleich 1 setzt.

$\bar{n}_2(/s')$ wird so gewählt, daß $p(/s', i', j') = \Sigma_{i, j_A} \int p(s, i, j / s', i', j') ds$ die

Wahrscheinlichkeit für ein Neutron am Stoßort s', i', j' ist, noch einen weiteren Stoß in A zu machen. Im Falle $g^+ = \text{const.}$ ist dann $\bar{n}_2(/s') = 1$.

4.2 Grundsätzliche Zerlegung der Quelle der Transportgleichung in Gewicht und Wahrscheinlichkeit

Nach den Ergebnissen des Abschnittes 1.1.1 soll die Quelle zur Zeit $t = 0$ möglichst gut mit der gesuchten Stoßdichte $f_{ij}(s, o)$ (Grundwelle) übereinstimmen. $q(s, t) = 0$ für $t \neq 0$.

Da $f_{ij}(s, o)$ (als gesuchte Funktion) nicht sehr genau vorgegeben werden kann und um die Menge der anzugebenden Daten möglichst klein zu halten, wird nur die totale Stoßdichte vorgeschätzt.

Eine der Zerlegung des Kerns (Abschn. 4.1) entsprechende Faktorenzersetzung der Quelle lautet

$$w_1(s) = \frac{\Sigma_t(s) - \Sigma_c(s)}{\Sigma_t(s)} \cdot \frac{1}{g^+(s)}$$

$$f_1(s) = \frac{\Sigma_{ij}(s)}{\Sigma_t(s) - \Sigma_c(s)} \cdot g(s) \cdot g^+(s)$$

$$j \neq \text{capture}, \quad \Sigma_{i,j} \int_A f_1(s, i, j) ds = 1 \quad (\text{Normierung})$$

Die vorzugebende Stoßdichte $g(s)$ wird ganz analog der Zerlegung der Einflußfunktion $g^+(s)$ (Abschn. 4.1) in Faktoren nach den (im Abschn. 3) definierten Koordinatengruppen zerlegt. Ebenfalls wird $g(s) = g_\nu$ ($s \in A_\nu$) in jedem Phasen/teilbereich wieder konstant angenommen.

$$g(s) = g_\nu = g_\alpha \cdot g_\beta \cdot g_\gamma \quad \text{für } s \in A_\nu \quad \text{oder } E \in E_\alpha, \quad o \in o_\beta, \quad r \in r_\gamma$$

(vgl. Abschn. 4.1).

4.3 Zufällige Auswahl der Koordinaten und Angabe der Gewichte für Quellneutronen

Zur Auswahl der Quellkoordinaten wird systematic sampling ¹⁾¹¹⁾ für die Koordinaten s und straight forward sampling für die Indizes i, j verwendet.

Die Zerlegung der Quelle in Gewicht und Wahrscheinlichkeit (Abschn. 4.2) lautet:

$$w_{1\nu} = \frac{\Sigma_t(s) - \Sigma_c(s)}{\Sigma_t(s)} \frac{1}{g_\nu^+}$$

$$f_{1\nu} = \frac{\Sigma_{ij}(s)}{\Sigma_t(s) - \Sigma_c(s)} g_\nu g_\nu^+$$

$$\Sigma_{\nu} \int_{A_\nu} g_\nu g_\nu^+ \quad \text{do } dr \, dE = 1 \quad \text{ist die Normierung.}$$

$$\Sigma_{i,j} \int_{A_\nu} f_{1\nu} ds = \int_{A_\nu} g_\nu g_\nu^+ \quad \text{do } dE \, dr \text{ ist die Wahrscheinlichkeit für einen}$$

Stoß (ohne capture) in A_ν .

$$\frac{N_\nu}{N} = \int_{A_\nu} g_\nu g_\nu^+ \quad \text{do } dE \, dr \text{ definiert also die Zahl der aus } A_\nu \text{ zu wählenden Neutronen } N_\nu \text{ mit den Gewichten } w_{1\nu}, \text{ wenn } N \text{ die vorgegebene Zahl}$$

aller Quellneutronen ist $(N = \sum_{\nu} N_{\nu})$.

Im Sinne von systematic sampling werden die N_{ν} Teilchen aus A_{ν} nacheinander und für alle ν gestartet. Die bei diesem Verfahren zur Gewinnung von Quellneutronen auftretenden Neutronenzahlen kleiner als 1 werden mit den zugehörigen Gewichten multipliziert, das Produkt wird als Gewicht eines ganzen Neutrons angesehen (inverses splitting). Im Gegensatz zum russischen Roulette, das verwendet werden könnte, wird dafür gesorgt, daß in jedem Bereich, für den $g_{\nu} \neq 0$ ist, wenigstens ein Neutron startet.

Damit wird die gegebene Zerlegung in Quelle und Gewicht für praktische Zwecke in korrekter Weise leicht modifiziert. Zusammenfassend sind mit $N_{\nu} = M_{\nu} + \xi_{\nu}$, M_{ν} ganz, $0 \leq \xi_{\nu} < 1$,

aus dem Bereich A_{ν} also zu starten:

- a) M_{ν} Neutronen mit dem Gewicht $w_{1\nu}$,
- b) 1 Neutron mit dem Gewicht $w_{1\nu} \cdot \xi_{\nu}$.

Innerhalb eines jeden A_{ν} werden der Raumvektor r und die Energie E aus Gleichverteilungen ⁶⁾ zufällig gewählt. Die Richtungscosinus werden aus der isotropen Winkelverteilung ⁶⁾ zufällig ermittelt.

Die Indizes i, j ($j = \text{capture}$) werden aus der Verteilung $\frac{\Sigma_{ij}(s)}{\Sigma_t(s) - \Sigma_c(s)}$ zufällig gewählt ⁶⁾.

Alle Neutronen werden zur Zeit $t = 0$ gestartet.

Die noch freie Normierung der Einflußfaktoren wird aus rechentechnischen Gründen festgelegt durch

$$\sum_{\nu} \frac{1}{g_{\nu}} = \text{Anzahl der Phasenraumteilbereiche.}$$

Das mittlere Startgewicht der Neutronen liegt damit in der Nähe von 1.

4.4 Zufällige Auswahl eines weiteren Stoßortes und Berechnung des zugehörigen Gewichtes

Gesucht sind die Stoßkoordinaten $R = (s, i, j, t)$ und das Gewicht w eines Neutrons, das seinen unmittelbar (zeitlich) davor liegenden Stoß in $R' = (s', i', j', t')$ mit dem Gewicht w' hatte. Die Zerlegung des Integralkerns in Gewichtsfunktion und Wahrscheinlichkeitsdichte ist in Abschn. 4.1 gegeben.

4.4.1 Energie und Richtung

Bei gegebenen i' , j' , s' ($j' \neq \text{capture}$) wird zunächst nach der auf 1

normierten Wahrscheinlichkeit $\frac{\Sigma_{i',j'}(r',o' \rightarrow o, E' \rightarrow E)}{\Sigma_{i',j'}(s')}$ die neue Richtung o und die neue Energie E bestimmt.

a) Spaltung

Die Richtung wird aus der isotropen Winkelverteilung und die Energie aus dem Spaltspektrum $F_{i'}(E) = A_{i'} e^{-B_{i'} E} \cdot \sinh \sqrt{C_{i'} E}$ ($A_{i'}$, $B_{i'}$, $C_{i'}$ = Kernparameter) zufällig gewählt ⁶⁾.

b) Elastische Streuung

Es wird zufällig die Flugrichtung n des Neutrons nach dem Stoß im CS (Schwerpunktsystem Kern-Neutron) so gewählt, daß (no') verteilt ist wie (anisotrope Streuung)

$$\frac{1}{2} \varphi_{i'}(E', (no')) = \frac{1}{2} \sum_{\nu} A_{i',\nu}(E') P_{\nu}(no'), \quad P_{\nu} = \text{Legendrepolynome.}$$

Dies geschieht praktisch wie folgt:

Die Verteilung wird als Potenzreihe geschrieben

$$\frac{1}{2} \varphi_{i'}(E', (no')) = \frac{1}{2} \sum_{\nu} B_{i',\nu}(E') (no')^{\nu}.$$

Aus rechentechnischen Gründen werden die $B_{i',\nu}(E')$ stückweise konstant angenommen (diese Aufteilung steht in keinem Zusammenhang mit der im Abschnitt 3 gegebenen Zerlegung des Phasenraumes).

Wird n aus der isotropen Winkelverteilung zufällig gewählt, ⁶⁾ so ist (no') gleichverteilt zwischen -1 und $+1$.

(Wenn n isotrop in einem äußeren Koordinatensystem ist, ist n das auch in einem Bezugssystem mit o' als Richtung der z -Achse. Aus der Definition der isotropen Verteilung folgt dann unmittelbar die Behauptung).

Damit können zufällige Zahlen $x = (no')$, n zufällig aus der gewünschten Winkelverteilung bestimmt werden ⁶⁾.

Ist $B_{i',\nu} = 1$ für $\nu = 0$ und $B_{i',\nu} = 0$ für $\nu \neq 0$

(Isotrope Streuung), so wird n allein aus der isotropen Winkelverteilung ermittelt, an (no') sind keine Bedingungen zu stellen ⁶⁾. Nach

der Auswahl der Flugrichtung im CS nach dem Stoß sind die benötigten Größen aus Gründen der Energie- und Impulserhaltung gegeben durch:

Energie nach dem Stoß:

$$E = C_{i'}^2 E'$$

Flugrichtung (LS) nach dem Stoß

$$o = \frac{1}{C_{i'} (A_{i'} + 1)} (A_{i'} n + o')$$

$$C_{i'}^2 = 1 - \frac{2A_{i'}}{(A_{i'} + 1)^2} (1 - (no'))$$

$A_{i'}$ = Massenzahl (bezogen auf Neutronenmasse) des Stoßkerns i'

c) Inelastische Streuung

Die Flugrichtung n des Neutrons nach dem Stoß im CS wird zufällig aus der isotropen Winkelverteilung gewählt ⁶⁾.

Die Bestimmung der Koordinaten E und o hängt davon ab, ob die Neutronenenergie E' in einem Gebiet liegt, in dem die einzelnen Anregungsniveaus diskret liegen oder nur statistisch zu erfassen sind.

α) Diskrete Niveaus

Die Nummer des Anregungsniveaus ($\nu = 1, 2, \dots$), d. h. der inelastische Energieverlust wird zufällig aus der eindimensionalen diskreten Verteilung

$$p_{i'}(\nu) = \frac{\sigma_{i'n'\nu}(E')}{\sigma_{i'n'}(E')} \quad \text{bestimmt } 6). \quad \sigma_{i'n'\nu} \quad \text{ist der Wirkungsquerschnitt}$$

des ν -ten Niveaus, $\sigma_{i'n'} = \sum_{\nu} \sigma_{i'n'\nu}(E')$, summiert über alle Niveaus, ist der totale inelastische Querschnitt.

Ist $\epsilon_{i'}$ der Energieverlust (im CS) am ν -ten Niveau des Kernes i' und n die zufällig gewählte Flugrichtung (CS), so gilt nach den Stoßgesetzen:

$$E^2 = C_{i'}^2 E'$$

$$o = \frac{1}{C_{i', (A_{i', +1})}} \left(n A_{i', d_{i', +} o' \right)$$

$$C_{i'}^2 = 1 + \frac{2A_{i'}}{(A_{i', +1})^2} \left((no') d_{i', -1} \right) - \frac{\xi_{i', \nu}}{E'} \frac{A_{i', +1}}{A_{i'}} \left(\frac{A_{i'}}{A_{i', +1}} \right)^2$$

$$d_{i'}^2 = 1 - \frac{\xi_{i', \nu}}{E'} \frac{A_{i', +1}}{A_{i'}}$$

Diese Formeln gelten unter der Voraussetzung $d_{i'}^2 \geq 0$.

β) Statistisch verteilte Niveaus

Ist $F' = \frac{A_{i'}}{A_{i', +1}} E'$, so kann ein Wert F zufällig aus dem inelastischen Streuspektrum ¹⁰⁾ $V(F' \rightarrow F) = D_{i', (F')} \cdot F \cdot e^{-2\sqrt{A_{i'}(F'-F)}, 0 \leq F \leq F'$ gewählt werden ⁶⁾. (F ist die Energie von Kern und Neutron nach dem Stoß im CS, die sogenannte Energie der Relativgeschwindigkeit im CS).

Es gilt:

$$E = \frac{A_{i'}}{A_{i', +1}} \left(F + \frac{1}{(A_{i', +1})} \left\{ F' + 2 (A_{i', +1}) \cdot \sqrt{FF'} \cdot (no') \right\} \right)$$

$$o = \frac{1}{\sqrt{E'}} \sqrt{\frac{A_{i'}}{A_{i', +1}}} \left(\sqrt{F'} \cdot n + \frac{\sqrt{F'}}{A_{i', +1}} o' \right)$$

d) n - 2 n Reaktion

Die Wahrscheinlichkeitsdichte ¹²⁾ ist: $V(F' \rightarrow F) = \frac{2}{M} \sqrt{F (M - F)}$,

$M = \left(\frac{A}{A+1} \right) [F' - \Sigma]$. Σ = Schwellenenergie (CS)

Im übrigen gelten die Formen des Abschnittes α/β)

4.4.2 O r t

Die neuen Ortskoordinaten r werden mit Hilfe der eindimensionalen Verteilung (siehe Abschn. 4.1)

$$D'(d) = \Sigma_t(r, E, o) e^{-\int_0^d \Sigma_t(r - lo, E, o) dl}$$

bestimmt, $d = |r - r'|$,

$$r = r' + d o$$

Mit $x = \int_0^d \Sigma_t(r - lo, E, o) dl$ geht die Wahrscheinlichkeitsdichte

über in $f(x) = e^{-x}$

Die Wirkungsquerschnitte sind innerhalb jedes Teilbereiches r_ν , (siehe Abschn. 3) konstant, d.h.

$$x = \sum_{\nu=0}^{\alpha} \Sigma_{t\nu} d_\nu$$

$\nu = 0, 1, 2, \dots, \alpha$ sei dabei eine Numerierung der vom Neutron durchlaufenen Bereiche. Der Bereich $\nu = 0$ enthalte den alten Stoßort (r'), der Bereich $\nu = \alpha$ den neuen Stoßort (r). d_ν ist die Flugstrecke, die das Neutron im Bereich ν zurücklegt, wenn es den Bereich ganz durchfliegen würde, $\Sigma_{t\nu}$ ist der totale Querschnitt im Bereich ν . Die gesuchte Entfernung ist dann

$$d = \sum_{\nu=0}^{\alpha} d_\nu$$

Damit folgt das folgende Verfahren zur Auswahl der neuen Koordinaten r . Es wird zufällig ein x aus der Exponentialverteilung ⁶⁾ gewählt. Nacheinander wurden $d_0, d_1, d_2, \dots, d_\mu$ berechnet, wobei μ durch

$$\sum_{\nu=0}^{\mu-1} d_\nu \cdot \Sigma_{t\nu} \leq x \leq \sum_{\nu=0}^{\mu} d_\nu \cdot \Sigma_{t\nu} \text{ gegeben ist. Mit}$$

$$d_\alpha = \frac{x - \sum_{\nu=0}^{\mu-1} \Sigma_{t\nu} d_\nu}{\Sigma_{t\alpha}} \text{ ist}$$

$$d = \sum_{\nu=0}^{\alpha} d_\nu \text{ und } r = r' + d \cdot o$$

4.4.3 Kernsorte und Reaktionsart

Die Indizes i (Kernsorte) und j (Art der Reaktion, * capture) werden (siehe Abschn. 4.1.) aus der zweidimensionalen diskreten Verteilung

$$P_{ij} = \frac{\Sigma_{ij}(s)}{\Sigma_t(s) - \Sigma_c(s)} \text{ zufällig ausgewählt } ^6).$$

4.4.4 Flugzeit

Die Flugzeit vom Stoßort r' zum Ort r ist gegeben durch $t = t' + \frac{d}{|p|}$,

$d = |r-r'|$ (Flugstrecke), $|p| = \sqrt{\frac{2}{m} E}$ (Geschwindigkeitsbetrag),
 $m =$ Neutronenmasse.

4.4.5 Einflußfaktoren

Die in der Zerlegung des Integralkerns (Abschn. 4.1.) angegebenen Faktoren $\frac{g_{\nu}^+}{g_{\nu}^+}$ werden mit Hilfe des Splitting und russischen Roulettes ³⁾¹¹⁾ berücksichtigt.

Aus weiter unten genauer erklärten rechentechnischen Gründen wird die angegebene Integralkernzerlegung jedoch modifiziert. Der zweite Stoß (erster Stoß nach dem Quellstoß) wird ohne die Importancefaktoren behandelt. Abgesehen von der Notwendigkeit für das verwendete Verfahren, erscheint es auch wenig sinnvoll, die Statistik der ersten Stöße, die aufgrund der vorgegebenen Quelle nicht brauchbar ist, zu beeinflussen.

Seien $R'' \in A_{\nu''}$, $R' \in A_{\nu'}$, und $R \in A_{\nu}$ drei aufeinanderfolgende Stoßorte.

Statt $\frac{g_{\nu}^+}{g_{\nu}^+}$ in der Zerlegung, verwenden wir für die praktische Ausführung $\frac{g_{\nu'}^+}{g_{\nu''}^+}$ für alle Stöße von dritten ab.

Diese Modifikation ändert die Fehlerstatistik nicht stark, wenn die mittleren Änderungen der Stoßkoordinaten in A_{ν} kleiner sind als die Dimensionen der Bereiche A_{ν} . Durch diese Modifikation soll verhindert werden, daß einmal ermittelte Stoßvektoren R nicht berücksichtigt werden, nur um die Statistik in vorgegebener Weise zu verschlechtern. Die Importancefaktoren g_{ν}^+ werden also in der folgenden Form verwendet.

$\frac{g_{\nu'}^+}{g_{\nu''}^+} \leq 1$: Das Neutron erreicht den Ort R (in A_{ν}) nur mit der Wahrscheinlichkeit $\frac{g_{\nu'}^+}{g_{\nu''}^+}$. Erreicht das Neutron den Ort R , so ist das Gewicht in R um den Faktor $\frac{g_{\nu''}^+}{g_{\nu'}^+}$ erhöht.

Bei Verwendung der ursprünglichen Zerlegung (Abschnitt 4.1) ist $\frac{g_{\nu'}^+}{g_{\nu''}^+}$ die Wahrscheinlichkeit, daß das Neutron den Punkt R überhaupt erreicht. Zu dieser Entscheidung ist aber die Kenntnis des Punktes R notwendig. Es ist unrationell, einmal ausgewählte Stoßorte wegzulassen, nur um die Statistik genau im vorgegebenen Sinne zu verschlechtern.

$\frac{g_{\nu'}^+}{g_{\nu''}^+} > 1$: Vom Orte R starten $\frac{g_{\nu'}^+}{g_{\nu''}^+}$ Neutronen, jedes mit dem um $\frac{g_{\nu''}^+}{g_{\nu'}^+}$ verkleinerten Gewicht. Ursprünglich ist $\frac{g_{\nu'}^+}{g_{\nu''}^+}$ die Zahl der Neutronen, die von R' in den Bereich A starten. Diese Aussage ist rechnerisch nur mit sehr großem Aufwand zu bewältigen.

Da die Faktoren $\frac{g_{\nu'}^+}{g_{\nu''}^+}$ im allgemeinen nicht ganz sind, wird das Splitting analog der Auswahl der Anzahl der Quellneutronen (Abschn. 4.3) noch weiter modifiziert.

Ist $\frac{g_{\nu'}^+}{g_{\nu''}^+} = M_{\nu} + \epsilon_{\nu}$, M_{ν} ganz, $0 \leq \epsilon_{\nu} < 1$, so werden vom Punkt R aus M_{ν} Neutronen mit dem um $\frac{g_{\nu''}^+}{g_{\nu'}^+}$ und ein Neutron mit dem um $\epsilon_{\nu} \cdot \frac{g_{\nu''}^+}{g_{\nu'}^+}$ verkleinerten Gewicht weiter verfolgt. Aus rechentechnischen Gründen kann innerhalb eines random walks nicht beliebig oft Splitting stattfinden, da die Koordinaten, die Anzahlen und die Gewichte der Splittingneutronen notiert werden müssen. Jedes Mal, wenn Splitting stattfindet, wird ein Neutron (mit dem entsprechend verkleinerten Gewicht) weiter verfolgt und der Rest wird als Gruppe mit den Angaben (R, w, Zahl der Neutronen) notiert. Nach jedem Neutronenverlust (siehe Abschn. 5) wird ein neues Splittingneutron gestartet. Erst wenn alle Splittingneutronenschicksale ebenfalls beendet sind, wird ein neues Quellneutron gestartet. Wenn die Zahl der vorgemerkten Splitting-Gruppen eine gegebene Anzahl übersteigt, findet solange kein Splitting mehr statt, bis wieder Platz für Notierungen durch den Start von Splittingneutronen nach Neutronenverlusten vorhanden ist. Bezgl. Splitting ist also eine Art Sättigung möglich. Die Größe des Vormerkbereiches wird so gewählt, daß in praktischen Fällen sehr selten Sättigung auftritt.

Über die Wirkung der Einflußfaktoren kann also jetzt gesagt werden:

Je größer g_{ν}^+ , um so besser wird im allgemeinen die Statistik in A, auf Kosten der Statistik in Bereichen der Umgebung kleinerer g_{ν}^+ . Nach theoretischen Untersuchungen ³⁾¹¹⁾ werden spezielle Schätzungen im allgemeinen dadurch genauer ausgeführt (bei gleichem Aufwand), daß die g^+ als Integrale über die Lösung der Importancegleichung mit der Schätzfunktion als Quelle angesetzt werden.

4.4.6 Das Gewicht

Mit den Ergebnissen der Abschnitte 4.2, 4.3 und 4.4.5 kann jetzt leicht das Gewicht eines Neutrons am Stoßort R angegeben werden, wenn der davorliegende Stoß in R' und der vor R' liegende Stoß in R'' stattfand.

Vom dritten Stoß an ist

$$w = \frac{\Sigma_t(s) - \Sigma_c(s)}{\Sigma_t(s)} \cdot \nu_{i'j'} \cdot \frac{g_{\nu''}^+}{g_{\nu'}^+} \cdot w'$$

Für den zweiten Stoß gilt

$$w = \frac{\Sigma_t(s) - \Sigma_c(s)}{\Sigma_t(s)} \cdot \nu_{i'j'} \cdot w_1(s')$$

$$w_1(s) = \frac{\Sigma_t(s) - \Sigma_c(s)}{\Sigma_t(s)} \cdot \frac{1}{g_{\nu}^+} \quad \text{ist das Gewicht des Quellstoßes}$$

$\nu_{i'j'} = 1$ für Streuung. $\nu_{i'j'} = 2$ für n - 2n - Reaktion

$\nu_{i'j'}(E') = a_{0i'} + a_{1i'}E' + a_{2i'}E'^2$ für Spaltung ($a_{\mu i'}$ = Kernparameter).

4.4.7 Kleine Gewichte

Um zu verhindern, daß unnötig viele Stöße mit Gewichten, die im Mittel sehr kleine Beiträge zu den Schätzungen liefern, registriert werden, werden die Faktorenzerlegungen von Kern und Quelle noch einmal modifiziert. Ist das Gewicht w am Stoßort R kleiner als ein Grenzwert $p_0 \leq 1$,

so erreicht das Neutron den Ort nur mit der Wahrscheinlichkeit p_c . Wenn es aufgrund des Zufalls den Punkt R erreicht, erhöht sich das Gewicht w um den Faktor $\frac{1}{p_0}$.

Das bedeutet theoretisch, daß in die Zerlegung von Kern und Quelle ein Faktor $p^+(w)$ aufgenommen und im Sinne des russischen Roulette behandelt wird.

$$p^+(w) = 1 \quad \text{für } p^+ > p_0$$

$$p^+(w) = p_0 \quad \text{für } p^+ \leq p_0$$

5. Ende des Neutronenschicksals (Leckage)

Das Ende eines Splittingneutrons (seine Leckage), bzw. sein letzter Stoß liegt vor, wenn eine der unten beschriebenen Bedingungen eintritt. Der auf den letzten Stoß folgende Stoß wird nicht direkt aus den Wahrscheinlichkeitsdichten des Integralkerns zufällig gewählt, sondern aus der Liste der Splittingneutronen des gleichen Schicksals oder aus der Quelle. Als Schicksal eines Neutrons bezeichnen wir die Summe aller Stöße, die aus einem Quellstoß entstanden sind, d.h. die Summe aller Splittingneutronen, die aus einem Quellneutron entstanden sind. Das Ende eines Neutronenschicksals (Gesamtschicksal) ist also durch den letzten Stoß des letzten Splittingneutrons definiert, der Anfang durch den Quellstoß eines Neutrons.

5.1 Raumleckage

Wenn ein Neutron beim Übergang zum nächsten Stoßort Ortskoordinaten r annimmt, die nicht im Integrationsbereich A liegen, sprechen wir von Raumleckage oder einfach Leckage.

5.2 Zeitleckage

Wenn die Laufzeit eines Neutrons eine bestimmte Zeitmarke (census time τ) überschreitet, sprechen wir von Zeitleckage des Neutrons. Die Laufzeit t ist der zeitliche Abstand eines Stoßes eines Neutronenschicksals vom Quellstoß. Die Splittingneutronen starten also im Mittel mit $t > 0$.

(vgl. Abschn. 2)

5.3 Einflußleckage

Erreicht ein Neutron aufgrund der zufälligen Entscheidung des russischen Roulette für die Einflußfaktoren g_{ν}^{+} den nächsten Stoßort nicht, so nennen wir diesen Neutronenverlust Einflußleckage.

5.4 Gewichtsleckage

Ist das Gewicht eines Neutrons kleiner als die vorgegebene Zahl p_0 , so kann das Neutron aufgrund des russischen Roulette für das Gewicht verschwinden. Dieses Verschwinden nennen wir Gewichtsleckage.

Zum Abschluß sei bemerkt: Wäre auch der γ -Einfang ein zufälliges Ereignis (und nicht durch Erwartungswerte berücksichtigt), so wäre er als Leckage bzgl. der Koordinate j (Art der Reaktion) zu interpretieren. Man hätte dann noch eine "Reaktionsleckage" zu berücksichtigen.

6. Schätzungen

Abweichend von der üblichen Schreibweise wird aus rechentechnischen Gründen der Erwartungswert einer Funktion $z_{ij}(s, t)$ in A_{ν} definiert durch

$$\overline{z_{\nu}} = \sum_{\substack{i,j \\ j \neq \text{capt.}}} \int_{A_{\nu}} \int_{t_0}^{\tau} z_{ij}(s, t) f_{ij}(s, t) \frac{\Sigma_t(s)}{\Sigma_t(s) - \Sigma_c(s)} dt ds,$$

wobei $f_{ij}(s, t) = e^{\lambda t} f_{ij}(s)$ und $f_{ij}(s)$ die Grundwelle zum reellen (größten) Eigenwert λ ist.

Eine Schätzung von $\overline{z_{\nu}}$ ist

$$\widehat{z_{\nu}} = \frac{1}{N} \sum_n z_{injn}(s_n, t_n) g_n$$

$$g_n = w_n \frac{\Sigma_t(s_n)}{\Sigma_t(s_n) - \Sigma_c(s_n)}$$

n = alle Stöße aus A_{ν} , N = Zahl aller Schicksale (Quellstöße)

Diese Definition liefert für i, j - unabhängige Funktionen z die Form

$$\bar{z}_V = \int_{A_V} \int_{t_0}^{\tau} z(s,t) f(s,t) ds dt \text{ mit } f(s,t) \text{ als totaler Stoßdichte.}$$

Es ist $|\hat{z} - \bar{z}| \leq \mathcal{J}$ mit der Wahrscheinlichkeit $\phi\left(\frac{\mathcal{J}}{s} \sqrt{N}\right)$.

$\phi(x)$ = Fehlerfunktion, s^2 = Varianz von \hat{z} .

Eine "vernünftige" Schätzung der Varianz von \hat{z} , s^2 , ist gegeben durch 6)

$$s^2 = \frac{N}{N-1} (\hat{z}^2 - \hat{z}^2)$$

$$\hat{z}^2 = \frac{1}{N} \sum_m \left[\sum_n z_{injn} (s_{nm}, t_{nm}) g_{nm} \right]^2$$

n ist zu summieren über alle Stöße eines Gesamtschicksals (alle aus einem Quellstoß folgenden Stöße)

m ist zu summieren über alle Schicksale.

Da $\phi(2) \approx 0,95$ ist, gilt für praktische Zwecke

$$\mathcal{J} = \frac{2s}{N} = \frac{2}{\sqrt{N-1}} \sqrt{\hat{z}^2 - \hat{z}^2}$$

6.1. Eigenwert

Die Berechnung des Eigenwertes ist im Abschn. 2 genau beschrieben. Es werden dazu die Schätzungen zweier Zeitmomente benötigt, genauer von

$$z_{ij}^{(1)}(s,t) = 1, \quad z_{ij}^{(2)}(s,t) = \tau - t, \text{ wobei } \tau \text{ die Laufzeit ist.}$$

6.2. Reaktionsraten und Flüsse

Eine Reihe von Schätzungen wird mit Hilfe von Erwartungswerten berechnet. Nach den Formeln des Abschnittes 6 erhält man für

$$z(s) = \frac{\sum_{ij}}{\sum_t}, \quad \frac{\nu_{ij} \sum_{ij}}{\sum_t}, \quad \frac{1}{\sum_t}, \quad \frac{1}{|p| \sum_t}, \quad 1 \text{ bei fest vorgegebenen}$$

i, j

Schätzungen \hat{z}_ν von

$$\bar{z} = \overline{(\Sigma_{ij}\varphi)_\nu}, \quad \overline{(\nu_{ij}\Sigma_{ij}\varphi)_\nu}, \quad \overline{\varphi_\nu}, \quad \overline{n_\nu}, \quad \overline{(\Sigma_t \cdot \varphi)}$$

Bei geeigneter Wahl des Zeitintegrationsintervalles $\langle \tau_0, \tau \rangle$ gilt

$$\overline{(\Sigma_{ij}\varphi)_\nu} = c(\tau) \int_{A_\nu} \Sigma_{ji}(s) \varphi(s) ds \quad (i, j \text{ vorgegeben})$$

$$c(\tau) = \frac{1}{\lambda} (e^{\lambda\tau} - e^{\lambda\tau_0})$$

$$\varphi(s, t) = e^{\lambda t} \varphi(s)$$

$\varphi(s)$ = Grundwelle des Neutronenflusses, zum (größten) Eigenwert λ gehörend.

n = Neutronendichte, p = Neutronengeschwindigkeit.

Analog zu $\overline{(\Sigma_{ij}\varphi)_\nu}$ sind die übrigen angegebenen Erwartungswerte definiert.

Die Summation in der Schätzfunktion z ist über alle Stoßorte aus A zu erstrecken.

Die gleichen Erwartungswerte könnten natürlich auch "straight forward" geschätzt werden. In diesem Fall ist bei vorgegebenen i und j und variablen i' und j'

$$z(s', i', j') = \delta_{ii'} \delta_{jj'}, \text{ zu setzen } (\delta_{ii'} = \text{Kroneckersymbol}).$$

In diesem Falle werden in der Schätzung nur die Stöße aus A_ν berücksichtigt, deren Indizes i', j' mit den vorgegebenen Indizes i, j übereinstimmen. Das bedeutet eine um so schlechtere Statistik gegenüber dem Verfahren mit Erwartungswerten, je kleiner $\frac{\Sigma_{ij}}{\Sigma_t}$ ist.

6.3 Leckageraten

Gesucht ist die Zahl der Neutronen, die einen vorgegebenen Ortsbereich \mathcal{V}_1 , verlassen (Bezeichnungen siehe auch Abschn. 3). Die Stoßdichte am Orte (s', t') aller Neutronen, die am Orte $r' \in \mathcal{V}_1$ einen Übergang von $o' \rightarrow o, E' \rightarrow E$ vollziehen, ist gegeben durch

$$\sum_{i',j'} \frac{\Sigma_{i',j'}(r', o' \rightarrow o, E' \rightarrow E)}{\Sigma_{i',j'}(r', o', E')} f_{i',j'}(s', t') =$$

$$c(\tau) \cdot \sum_{i',j'} \left[\Sigma_{i',j'}(r', o' \rightarrow o, E' \rightarrow E) \varphi(s') \right]$$

Ist d_1 der Abstand vom Stoßort $r' \in r_1$, zum Durchstoßpunkt der Fluggeraden $r' + (d \cdot o)$, $d \geq 0$ durch die Begrenzungsfläche von r_1 , so ist

$e^{-\Sigma_{t1} d_1}$, $\Sigma_{t1} = \Sigma_t(r', E, o)$, die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Neutron den Bereich r_1 verläßt, wenn es zuletzt am Punkte r' mit der Richtung o und der Energie E war. Die mittlere Zahl aller Neutronen, die mit der Energie E und der Richtung o den Bereich r_1 nach einem Stoß in r' verlassen, ist

$$z_1(r') = e^{-\Sigma_{t1} d_1} c(\tau) \int_{E'} \int_{o'} \sum_{i',j'} \left[\nu_{i',j'}(E') \Sigma_{i',j'}(r', o' \rightarrow o, E' \rightarrow E) \varphi(r', E', o') \right] do' dE'$$

(Die Integrationen über E' und o' sind über den gesamten Definitionsbereich zu erstrecken).

Ist d_μ die Fluglänge eines Neutrons im Bereich d_μ , das diesen Bereich, ohne zu stoßen, durchfliegt und $\Sigma_{t\mu}$ der zugehörige totale Querschnitt,

$$\text{so ist } \gamma_\nu(r^{(\nu)}) = e^{\sum_{\mu=1}^{\nu-1} \{ \Sigma_{t\mu} d_\mu \}} z_\nu(r^{(\nu)}), \nu \geq 1, (\gamma_1(r') = z_1(r'))$$

die mittlere Zahl aller Teilchen, die den Bereich r_1 verlassen, nachdem sie in $r^{(\nu)} \in r_\nu$ zuletzt gestoßen haben und nacheinander die Bereiche $r_{\nu-1}, r_{\nu-2}, \dots, r_2, r_1$, ohne zu stoßen durchflogen haben. Die Zahl aller Neutronen, die im Mittel den Bereich r_1 mit der Energie E und der Richtung o verlassen, ist

$$\gamma = \sum_{\mathcal{R}} \int_{r_{\mathcal{R}}} \gamma_{\mathcal{R}}(r^{(\mathcal{R})}) dr^{(\mathcal{R})} \text{ (es ist über alle Reaktorbereiche zu summieren).}$$

Gesucht ist eine Schätzung von

$$\bar{\gamma}_{\alpha\beta} = \int_{o_\beta} \int_{E_\alpha} \gamma \, dE \, do$$

Zur praktischen Durchführung wird γ zerlegt.

$$\gamma = \int_{r_1} z_1(r') \, dr' + \sum_{\xi > 1} \int_{r_\xi} \gamma_\xi(r^{(\xi)}) \, dr^{(\xi)} = \gamma_1 + \gamma_2. \text{ Es werden}$$

also die Anteile abgespalten, die durch Neutronen bestimmt sind, die den Bereich r_1 ganz durchlaufen ohne zu stoßen. Die beiden Summanden werden nach verschiedenen Verfahren geschätzt.

Da zur Berechnung des neuen Stoßortes (siehe Abschn. 4.4.2) der Ausdruck $\Sigma_{t1} d_1$ für jeden Stoß berechnet werden muß (um zu prüfen, ob 2 Stöße nacheinander im gleichen Bereich stattfinden), ist es rechnerisch nicht aufwendig, $\bar{\gamma}_1$ mit Hilfe von Erwartungswerten zu schätzen (Verbesserung der Statistik).

Wegen der im Abschn. 4.1 gegebenen Zerlegung des Kerns ist die Wahrscheinlichkeitsdichte durch

$$\Sigma_{i',j'}(r', o' \rightarrow o, E' \rightarrow E) \varphi(r', E', o', t) \text{ und das Gewicht durch}$$

$g_n = \nu_{i',j'}(E') \cdot g'$ gegeben, wenn g' das Gewicht am Stoßort s', i', j', t' ist. (vgl. Abschn. 4.4.6).

$$\hat{\gamma}_1 = \frac{1}{N} \sum_n e^{-\Sigma_t(r_1^{(n)}, E^{(n)}, o^{(n)}) d_1} g_n, \text{ wobei } r_1^{(n)} \in r_1, E^{(n)} \in E_\alpha, o^{(n)} \in o_\beta$$

Durch diese Art zu schätzen wird erreicht, daß jeder Stoßort r zur Schätzung der Leckageraten herangezogen wird. Jedoch muß zusätzlich für jeden Stoßort eine Exponentialfunktion berechnet werden.

$\bar{\gamma}_2$ wird "straight forward" geschätzt. Es ist nicht sinnvoll, auch hier mit Erwartungswerten zu arbeiten, da einerseits die $\Sigma_{t\mu} d_\mu$ zum Teil

erst mit sehr großem Aufwand berechnet werden müssen, und andererseits $\bar{\gamma}_2$ in den meisten Fällen klein gegen $\bar{\gamma}_1$ ist.

In diesem Falle werden alle Gewichte g_n registriert von Neutronen, die den Bereich r_1 durchfliegen ohne zu stoßen. Man sieht unmittelbar ein, daß die so gewählte Stichprobe die gewünschte Leckage-Verteilung besitzt.

Ganz analog wird die Leckage $L_0^{(\nu)}$ von Neutronen im Energiebereich E_a und des Richtungsbereiches ω_β aus beliebigem Bereich r_ν ins Vakuum behandelt.

6.4 Übergangsraten

Als Funktion der vorgegebenen Indizes i, j soll die Zahl der N_e Neutronen geschätzt werden, die bei einem Stoß von einem Energie- und Winkelbereich in einen anderen gelangen.

Analog den Betrachtungen des Abschnittes 6.3 ist

$\Sigma_{i,j'}(r', \omega' \rightarrow \omega, E' \rightarrow E) \varphi(s', t')$ die mittlere Zahl der Neutronen, die aufgrund eines j' -Stoßes am Kern i' am Orte r' ihre Richtung von ω' in ω und ihre Energie von E' in E ändern.

Leider ist hier, außer bei Spaltung, nur mit ganz erheblichem Aufwand die Verwendung von Erwartungswerten möglich, und wenn man diesen Aufwand schon treibt, ist es besser, gleich den ganzen Kern $k(R/R')$ für jeden Stoßort und jedes interessierende R zu berechnen. Dadurch ergibt sich jedoch ein ganz anderes Monte Carlo Verfahren, das an dieser Stelle nicht weiter ausgeführt werden soll.

Der Erwartungswert

$$\bar{z}_{ij} = C(\tau) \int_{A_{\nu'}} ds' \int_{\omega_\beta} \int_{E_\alpha} \nu_{ij} \Sigma_{ij}(r', \omega' \rightarrow \omega, E' \rightarrow E) \varphi(s') dE d\omega$$

gibt die mittlere Zahl aller Neutronen, die bei einer j -Reaktion am Kern i im Phasenraumbereich $A_{\nu'}$ ihre Energie und Richtung so ändern, daß sie in den Bereichen E_α bzw. ω_β liegen. In der Schätzung \hat{z}_{ij} , außer für Spaltung, sind alle Gewichte der Neutronen zu addieren, die in $A_{\nu'}$ einen j -Stoß am Kern i machen, wobei die Energie nach dem Stoß im Bereich E_α und die Richtung in ω_β liegt.

Im Falle j-Spaltung ist

$$\nu_{ij} \cdot \Sigma_{ij}(r', o' \rightarrow o, E' \rightarrow E) = F_i(E) \nu_i \Sigma_{if}(E') \quad (\text{vgl. Abschn. 4.4.1a) u. 6.2}).$$

Mit Schätzungen von $\overline{\nu_i \Sigma_{if}}$, der angenommenen Isotropie der Spaltneutronen (im LS) und dem über die Energiegruppen integrierten Spaltspektrum

$$\overline{F_{i\alpha}} = \int_{E_\alpha} F_i(E) dE$$

können dann die gesuchten Spaltübergänge mit den re-

lativen Fehlern der totalen Raten ermittelt werden.

6.5 Kritizität und Eigenwert

$$k_{\text{eff}} = \frac{\sum_i \nu_{if} \Sigma_{if} + 2 \Sigma_{2n} / \Sigma_t}{\sum_i \{ \Sigma_{if} + \Sigma_{ic} + \Sigma_{2n} \} / \Sigma_t + L_0}$$

Die auftretenden Reaktionsraten

sind über den ganzen Phasenraum A zu erstrecken, L_0 ist die Gesamtleckage aus A.

$$\lambda = \frac{\sum_i \{ \nu_{if} \Sigma_{if} + 2 \Sigma_{2n} \} / \Sigma_t - \sum_i \{ \Sigma_{if} + \Sigma_{ic} + \Sigma_{2n} \} / \Sigma_t - \bar{L}_0}{\frac{1}{v \Sigma_t}}$$

ist der zu k_{eff} gehörende Zeiteigenwert. Wenn keine Oberwellen vorhanden sind in der Stoßdichte, stimmt dieser Wert mit dem in Kap. 2 gegebenen überein.

L i t e r a t u r

- 1) A. M. Weinberg, E. P. Wigner: The Physical Theory of Neutron Chain Reactors, Chicago 1958
- 2) B. Davison: Neutron Transport Theory, Oxford 1958
- 3) U. Möller: Monte Carlo Methoden für Fredholmsche Integralgleichungen zweiter Art, Teil A des vorliegenden Berichtes
- 4) H. Cramér: Mathematical Methods of Statistics, Princeton 1946
- 5) M. Fisz: Wahrscheinlichkeitsrechnung und Statistik, Berlin 1958
- 6) U. Möller: Realisierung von Verteilungen des Neutronentransports für Monte Carlo Aufgaben, KFK-Bericht Nr. 298/65 , Teil A (1964)
- 7) Reactor Physics Constants, ANL - 5800 (1958)
- 8) L. Cranberg u. a.: Fission Neutron Spectrum of U 235: Phys. Rev. 103 (1956) 662
N. Nereson: Fission Neutron Spectrum of Pu 239, Phys. Rev. 88, (1952) 823
- 9) U. Möller: Wirkungsquerschnitte für Monte Carlo Aufgaben, KFK-Bericht Nr. 298/65 , Teil B (1964)
- 10) B. T. Feld, H. Feshbach u. a.: Final Report of the Fast Neutron Data Project NYO - 636 (1951)
- 11) H. Kahn: Application on Monte Carlo, AECU (1954)
E. D. Cashwell, C. J. Everett: A Practical Manual on the Monte Carlo Method for Random walk Problems, London 1959
J. Spanier: Monte Carlo Methods and Their Applications, WAPD - 195 (1959)
G. Goertzel u. a.: Monte Carlo Methods in Transport Problems, Progr. Nucl. Energ. 2 (Math) (1958) 315
Symposium on Monte Carlo Method, New York (1954)
E. L. Kaplan: UCRL - 5120 - T (Rev.)
- 2) R. R. Johnston: A General Monte Carlo Neutronics Code, LAMS - 2856 (1963)