

ОЦІНКА СКЛАДОВИХ СИСТЕМАТИЧНОЇ ПОХИБКИ ПРИ РОЗРАХУНКАХ КРИТИЧНИХ СИСТЕМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

В. В. Ількович¹, В. В. Гальченко¹, В. І. Макодим²

¹Національний технічний університет України «КПІ», Київ

²ТОВ «Холтек Україна», Київ

Виконано аналіз факторів, що впливають на формування систематичної похибки при розрахунках критичних систем методом Монте-Карло для комп'ютерних кодів MCNP та SCALE. Показано, що на систематичну похибку впливають нелінійність ітераційного процесу розрахунку та невизначеність початкового розподілу джерел нейтронів. Виконано оцінку складових систематичної похибки на прикладі розрахункової моделі з набору експериментальних даних або бенчмарк-задач. Наведено рекомендації стосовно до мінімізації систематичної похибки при розрахунках критичних систем методом Монте-Карло.

Ключові слова: критична система, систематична похибка, метод Монте-Карло, нелінійність ітераційного процесу, невизначеність початкового розподілу джерел.

Вступ

Характеристики фізичних процесів в ядерних установках можна визначати експериментально й теоретично. Безумовно, реальне уявлення про фізичний процес (теплообмін, рух рідини, транспорт частинок тощо) може дати тільки експеримент. Експериментальні дослідження фізичних процесів на самій ядерній установці або неможливі в принципі, або пов'язані з різними великими труднощами. Створення експериментальних стендів надзвичайно дорого, та все одно це буде лише натурна модель, а реальний фізичний процес апроксимуватиметься через критерії подібності. Теоретичні ж дослідження визначають, швидше, результати рішення задачі згідно з математичною моделлю, що використовується, а не характеристики самого процесу [1].

На сьогодні існує достатньо велика кількість різних комп'ютерних програм, які можуть виконувати розрахунки транспорту частинок. Вважається при цьому, що математичне моделювання на основі методу статистичних випробувань (або методу Монте-Карло [2]) є найбільш точним, а отримувані результати найбільш представницькими. Комп'ютерні програми, створені на основі методу Монте-Карло, застосовуються для вирішення широкого класу задач практично у всіх областях науки й техніки, у тому числі й в області фізики ядерних установок. Наприклад, для обґрунтування ядерної та радіаційної безпеки систем транспортування й зберігання відпрацьованого ядерного палива (ВЯП), визначення флюенса нейтронів на корпус реактора тощо. Базуючись на цих розрахунках, формуються дозволи на продовження експлуатації енергоблоків атомних електричних станцій, транспортування і зберігання ВЯП. Та оскільки рівень висновків, що робляться на підставі таких розрахунків, достатньо високий, то важливим є розуміння рівня точності отримуваних результатів.

У роботі наводиться аналіз чинників, що впливають на формування систематичної похибки й зміщення результатів розрахунків методом Монте-Карло для комп'ютерних кодів MCNP [3] і SCALE [4], які безпосередньо застосовуються сьогодні для вирішення вищевказаних задач, на прикладі розрахункової моделі з набору бенчмарк-експериментів [5].

Природа систематичної похибки числового експерименту

Зазвичай в комп'ютерних кодах на основі методу Монте-Карло точність розрахунків залежить від параметрів моделювання, що задаються користувачем, серед яких число нейтронів у поколінні M , число активних поколінь L , число перших неактивних поколінь l , а також визначення розподілу джерел нейтронів нульового покоління ψ_0 .

Зміщення результатів при розрахунку ефективного коефіцієнта розмноження обернено пропорційне кількості нейтронів у поколінні [6]. Систематична похибка, яка пов'язана з цією причиною, незначна для $M \geq 10000$ [7]. Для сучасних обчислювальних засобів використання такої кількості нейтронів у поколінні є проблемою лише з точки зору наявності необхідного розрахункового часу. Цей час може бути доволі суттєвим у розрахунках при формуванні технічних звітів (наприклад, при обґрунтуванні ядерної безпеки басейнів витримки з ВЯП тощо), а результат при цьому має бути отриманий з довірчою точністю. Таким чином, питання про достатню кількість нейтронів у поколінні та достатню кількість поколінь є все ще відкритим.

У роботі [8] систематичну похибку розрахунку було представлено у вигляді суми двох складових.

1. Перша складова систематичної похибки виникає через нелінійність ітераційного процесу й залежить лише від кількості нейтронів у поколінні [9]:

$$\Delta(M) = \lim_{N \rightarrow \infty} k_{ef}^{calc}(M, N) - \lim_{M, N \rightarrow \infty} k_{ef}^{calc}(M, N),$$

де $k_{ef}^{calc}(M, N)$ – розрахункове значення ефективного коефіцієнта розмноження нейтронів; N – кількість промодельованих поколінь, яка є сумою кількості перших неактивних поколінь та активних поколінь нейтронів $N = l + L$.

2. Друга складова систематичної похибки виникає у зв'язку з тим, що в розрахунковій задачі використовується початковий розподіл джерел нейтронів, який не відповідає фізиці процесу моделювання. Друга складова систематичної похибки зменшується зі зростанням числа промодельованих поколінь.

$$\Delta(k_{ef}, \psi_0, l, L) = \frac{1}{L} \sum_{n=l}^{l+L} ([k_{ef}]_n - k_{ef}),$$

де $k_{ef} = k_{ef}(\psi_\infty)$ – значення ефективного коефіцієнта розмноження, яке розраховано при відносно великих значеннях l і L (зміна яких не призводить до істотної зміни результату); $[k_{ef}]_n$ – значення ефективного коефіцієнта розмноження, яке розраховане при значеннях l і L , що використовуються.

У роботі [8] був проведений аналіз впливу кількості нейтронів у поколінні на першу складову систематичної похибки. Зміщення результатів при розрахунку тестових задач добре узгоджується з асимптотичною формулою, яка була отримана автором. Ця асимптотична формула для визначення зміщення оцінки k_{ef} була перетворена в компактну й зручну для практики формулу в роботі [10]:

$$\Delta(M) \leq \frac{\delta}{k_{ef} \cdot M},$$

де δ – характеристика системи й вибраного алгоритму моделювання.

Для слабозв'язаних систем значення δ можуть досягати порядку декількох десятків. Характерним прикладом подібних систем є сховища з ВЯП.

У задачах на власні числа існує додаткова проблема у визначенні джерела нейтронів. Саме тому, з метою не враховувати результати розрахунку на етапі збіжності заданого джерела до розрахункового, у програмних забезпеченнях на основі методу Монте-Карло реалізована певна кількість неактивних поколінь. У роботі [11] був проведений аналіз впливу визначення джерел нейтронів нульового покоління на другу складо-

ву систематичної похибки при визначенні швидкостей реакцій поділу для слабозв'язаних систем. Аналіз результатів розрахунків тестових задач показав, що значення параметра l можуть досягати ~ 1000 .

Таким чином, на формування систематичної похибки впливають кількість нейтронів у поколінні й розподіл джерел нейтронів нульового покоління. Проте досвід показує, що не тільки ці причини викликають зміщення математичного очікування від його істинного значення. Позначимо зміщення, яке викликане рештою причин, Δ_Ω . Отже, систематичну похибку розрахунку Δ можна представити у вигляді суми

$$\Delta = \Delta(M) + \Delta(k_{ef}, \psi_0, l, L) + \Delta_\Omega.$$

Величина Δ_Ω залежить від багатьох факторів, таких як невизначеність при заданості вхідних даних, вибір та використання бібліотек нейтронно-фізичних констант, версія комп'ютерного коду, тип процесору тощо. Відхилення розрахованого значення ефективного коефіцієнта розмноження нейтронів від його експериментального значення буде завжди й обумовлене саме цією складовою систематичної похибки. У дослідженнях, що виконувалися, ця складова не досліджувалася, та присутня як стала складова в усіх наведених результатах.

Розрахункова схема експериментального стенду з оцінки критичності

Експериментальна модель базується на тепло-виділяючих збірках (ТВЗ) і стрижнях системи керування та захисту, які аналогічні до тих, що використовуються для реакторів РВПК (рис. 1).

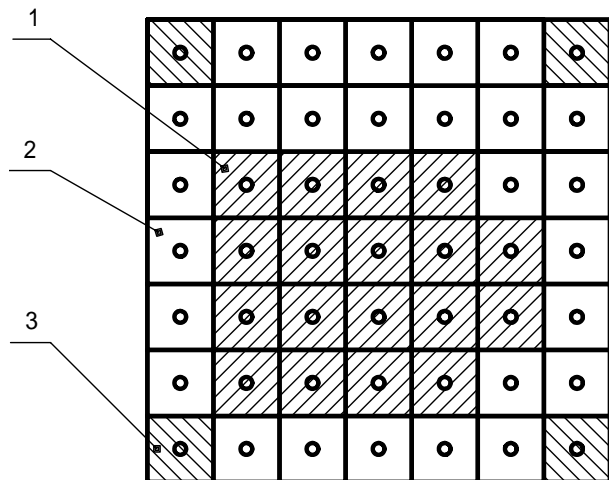


Рис. 1. Розрахункова схема експериментального стенду: 1 – графітовий блок з паливною збіркою; 2 – графітовий блок; 3 – графітовий блок з поглинаючим стрижнем.

Графітова кладка експериментальної моделі РВПК зібрана з блоків у формі прямокутних паралелепіпедів із центральними вертикальними кільцевими отворами для розміщення трубних технологічних каналів. Графітова кладка представлена прямокутною решіткою, що складаються з 324 каналів (18×18). ТВЗ експериментального стенду складається з 18 стрижневих твелів, розміщених по двох концентричних колах з центральною трубкою. До складу ТВЗ входять також 10 дистанціонуючих решіток. Як ядерне паливо для експериментального стенду використовується уран зі збагаченням $\sim 2\%$ по ^{235}U у формі пігулок з діоксиду урану, які розміщені в трубних оболонках між верхніми й нижніми кінцевими елементами. Стрижень-поглинач складається з трьох рівних секцій, кожна з яких містить

поглинаючу частину та кінцеві деталі. Поглинаюча частина складається з двох коаксіальних трубок, між якими розміщені кільця поглинача.

Визначення першої складової систематичної похибки

Аналіз впливу зміни кількості нейтронів у поколінні на систематичну похибку був проведений з використанням різних енергетичних груп SCALE5 і неперервного енергетичного спектра нейтронів MCNP5. Оскільки друга складова систематичної похибки зменшується згідно з законом $1/L$, то для усунення впливу початкового розподілу джерел нейтронів на систематичну похибку розрахунки були проведені з відносно великим значенням L . Результати розрахунків наведено на рис. 2.

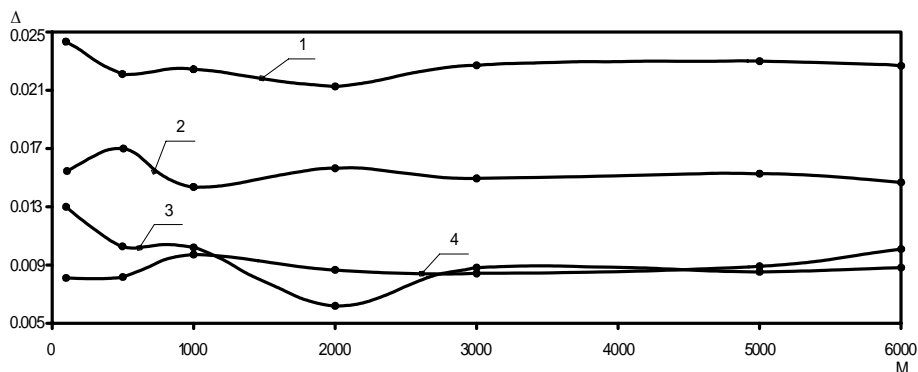


Рис. 2. Залежність першої складової систематичної похибки від кількості нейтронів у поколінні: 1 – 27 енергетичних груп; 2 – 44 енергетичних груп; 3 – 238 енергетичних груп; 4 – неперервний енергетичний спектр нейтронів.

За результатами проведених розрахунків можна зробити такі висновки:

1) у випадку різних енергетичних груп нейтронів зміщення результатів подібні й при $M \geq 3000$ систематичні похибки практично не змінюються;

2) у випадку використання комп'ютерного коду MCNP5 прийнятну систематичну похибку можна отримати також при $M \geq 3000$, хоча в порівнянні зі SCALE5 (238 енергетичних груп) результат виявився менш стійкий до зміни кількості нейтронів у поколінні. Відхилення системати-

чної похибки в точці $M = 6000$ (крива 4) від попередніх двох значень зникне при подальшому збільшенні кількості нейтронів у поколінні.

Визначення другої складової систематичної похибки

Оскільки перша складова систематичної похибки зменшується згідно з законом $1/M$, то для дослідження впливу початкового розподілу джерел нейтронів на систематичну похибку було вибрано відносно велику кількість нейтронів у поколінні. Результати розрахунків наведено на рис. 3.

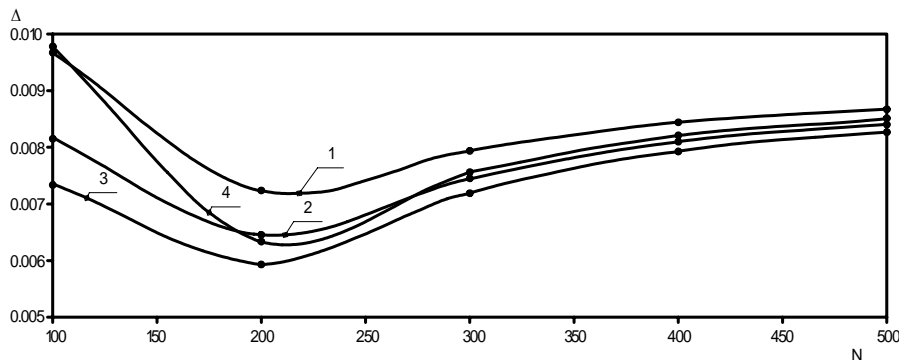


Рис. 3. Залежність систематичної похибки від кількості промодельованих поколінь з різними значеннями неактивних поколінь: 1 – $l = 10$; 2 – $l = 20$; 3 – $l = 30$; 4 – $l = 50$.

Таким чином, якщо буде задана недостатня кількість неактивних поколінь, то ми матимемо збільшення систематичної похибки через наявність невідповідного початкового розподілу джерел нейтронів (криві 1, 2, 3). Для усунення цієї похибки необхідна реалізація більшої кількості активних поколінь. І навпаки, якщо буде задіяна більша кількість неактивних поколінь, ніж необхідно, то при одній і тій же кількості поколінь збільшува-

тиметься похибка, пов'язана з втратою частини розрахункової інформації (крива 4), або у разі збільшеної кількості поколінь ця похибка приведе до збільшення розрахункового часу.

Усунення другої складової систематичної похибки для різних енергетичних груп і неперервного спектра нейтронів збільшенням кількості промодельованих поколінь представлено на рис. 4.

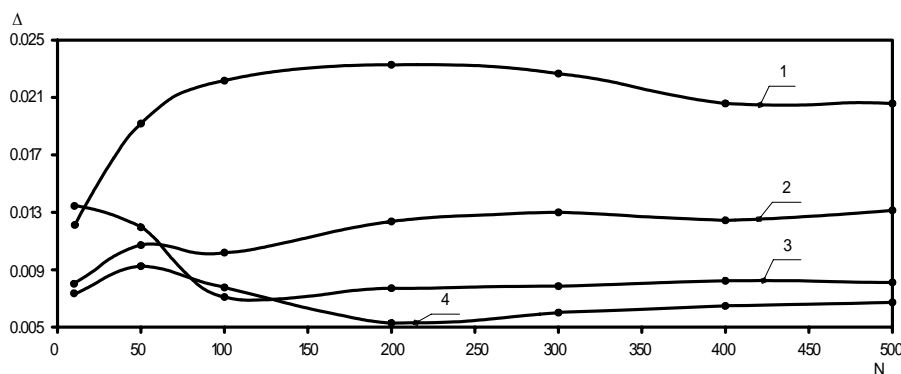


Рис. 4. Залежність другої складової систематичної похибки від кількості промодельованих поколінь для групового й неперервного спектра нейтронів: 1 – 27 енергетичних груп; 2 – 44 енергетичних груп; 3 – 238 енергетичних груп; 4 – неперервний енергетичний спектр нейтронів.

Якщо врахувати, що в точці $N = 0$ систематична похибка відсутня (початкове значення $k_{ef} = 1$, яке в MCNP задається користувачем, а в SCALE використовується за мовчазної згоди), то можна прослідкувати яскраво виражений подібний хід кривих 3 і 4: різке збільшення систематичної похибки до досягнення максимуму зі збільшенням кількості промодельованих поколінь, а потім – зменшення похибки. Для кривих 1 і 2 спостерігається тільки збільшення систематичної похибки до досягнення практично постійного значення зі збільшенням N .

Аналізуючи рис. 2 та 4, можна бачити, що криві не сходяться до одного й того самого значення зміщення, як очікувалося, це пов'язано з тим, що в розрахунках використовуються хоч і великі, але все ж таки скінченні значення параметрів моделювання. Тому всі криві на цих рисунках ще мають тренд або до зменшення, або збільшення. Якщо далі одночасно збільшувати як значення M , так і значення N , то величина відхилення буде чітко прямувати до свого сталого значення, і, наприклад, для 4-ї кривої при $M > 10000$ і $N > 500$ відхилення буде мало відрізнятися від 0,0086.

Висновки

На систематичну похибку розрахунку впливають кількість нейтронів у поколінні й почат-

ковий розподіл джерел нейтронів. Отримані результати показують, що для мінімізації систематичних похибок більш вагомим є кількість поколінь нейтронів та кількість неактивних поколінь. Насправді, за малої кількості поколінь і навіть при значній кількості нейтронів у поколінні як перша, так і друга складові систематичної похибки будуть достатньо великими, а результати, які при цьому отримують, є непоказними. Особливо це відчутно в розрахунках слабозв'язаних систем.

Розрахунки показують, що при $M, N \rightarrow \infty$ (одночасного збільшення як M , так і N) результати розрахунків прямують до свого постійного зміщення від експериментального значення. Очевидно, що наявність цього зміщення і є третьою складовою систематичною похибки, що пов'язана з невизначеністю в заданості вхідних даних, вибором бібліотек нейтроно-фізичних констант тощо.

Наведені розрахунки показують значно сильніше зміщення результатів при використанні в SCALE 27 та 44 групових бібліотек нейтроно-фізичних констант. Це свідчить про наявність зміщення значень самих констант у бібліотеці та недооцінку в резонансній та тепловій області енергій. Ця похибка “автоматично” переходить у розрахунки та залишається на рівні “неврахованої” кодом постійної складової.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости / Пер. с англ.; Под ред. В. Д. Виоленского. - М.: Энергоатомиздат, 1984. - 124 с.
2. Соболев И.М. Метод Монте-Карло. - М.: Наука, 1972. - 63 с.
3. X-5 Monte Carlo Team. MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5. - Vol. I - III. - New Mexico: Los Alamos National Laboratory, 2003.
4. SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analysis for Licensing Evaluation. NUREG/CR-0200, Rev. 6 (ORNL/NUREG/CSD-2R6), Vols. I, H, and m, May 2000. Available from Radiation Shielding Information Center at Oak Ridge National Laboratory as CCC-545.
5. Validation of SCALE for Criticality Safety Analysis of VVER and RBMK Fuel Designs, NUREG/CR-6736, PNNL-1369, January 2002.
6. Forrest B. Brown. Fundamentals of Monte Carlo Particle Transport. - New Mexico: Los Alamos National Laboratory, 2008.
7. Forrest B. Brown, William R. Martin, Russell D. Mosteller. Monte Carlo - Advances and Challenges. - New Mexico: Los Alamos National Laboratory, 2008.
8. Майоров Л.В. Оценка смещения результатов при расчете реакторов и хранилищ ядерного топлива методом Монте-Карло // Атомная энергия. - 2005. - № 4. - С. 243 - 256.
9. Олейник Д.С. Разработка и исследование алгоритмов расчета слабосвязанных систем методом Монте-Карло. <http://mcu.vver.kiae.ru/rinfo.html>.
10. Brissender R., Garliuck A. Biases on the estimation of kef and its error by Monte Carlo methods // Ann. Nucl. Energy. - 1986. - Vol. 113, No. 2. - P. 63 - 83.
11. Олейник Д.С. Расчет слабосвязанных систем методом Монте-Карло // Атомная энергия. - 2005. - № 4. - С. 256 - 264.

ОЦЕНКА СОСТАВЛЯЮЩИХ СИСТЕМАТИЧЕСКОЙ ПОГРЕШНОСТИ ПРИ РАСЧЕТАХ КРИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

В. В. Илькович, В. В. Гальченко, В. И. Макодим

Выполнен анализ факторов, которые влияют на формирование систематической погрешности при расчетах критических систем методом Монте-Карло для компьютерных кодов MCNP и SCALE. Показано, что на систематическую погрешность влияют нелинейность итерационного процесса расчета и неопределенность начального распределения источников нейтронов. Выполнена оценка составляющих систематической погрешности на примере расчетной модели из набора экспериментальных данных или бенчмарк-задач. Приведены рекомендации относительно минимизации систематической погрешности при расчетах критических систем методом Монте-Карло.

Ключевые слова: критическая система, систематическая погрешность, метод Монте-Карло, нелинейность итерационного процесса, неопределенность начального распределения источников.

ESTIMATION OF THE SYSTEMATIC ERROR CONSTITUENTS IN THE CALCULATIONS OF THE CRITICAL SYSTEMS BY THE MONTE CARLO METHOD

V. V. Ilkovich, V. V. Galchenko, V. I. Makodym

Analysis of factors which influence on systematic error formation in the calculations of the critical systems by the Monte Carlo method for the MCNP and SCALE computer codes is executed. It has been shown that non-linearity of iteration process of calculation and uncertainty in initial neutron sources distributing effect on a systematic error. The estimation of systematic error constituents is executed on example of calculation model from the benchmark problems. Recommendations are resulted to minimization of the calculations systematic error for critical systems by the Monte Carlo method.

Keywords: critical system, systematic error, Monte Carlo method, non-linearity of iteration process, uncertainty in initial sources distributing.

Надійшла до редакції 16.06.09,
після доопрацювання – 12.11.09.