

УДК 621.039

ПОГРЕШНОСТИ РАСЧЕТА ВЫГОРАНИЯ ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МЕТОДОВ СТАТИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Д. Г. Модестов
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина",
г. Снежинск Челябинской области)

При расчете изменения ядерного состава реакторного топлива одной из операций является решение условно-критической задачи переноса нейтронов. Для этого нередко применяются методы статистического моделирования, которые по сравнению с другими требуют меньше всего физических и технических приближений при постановке задачи и потому представляются наиболее точными. Однако они имеют вычислительные погрешности, которые сказываются на точности расчета задач ядерной кинетики. Представлен анализ влияния этих погрешностей на точность расчета ядерного состава. Приводятся результаты расчета методической задачи, показывающие степень влияния параметров расчета.

Ключевые слова: ядерная кинетика, численные методы, задача Коши, схема интегрирования, уравнение переноса частиц, метод поколений.

Введение

В работе [1] было рассмотрено построение схем расчета задач ядерной кинетики, которые описываются автономной системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x} = \Sigma(\mathbf{x})\mathbf{x}, \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0, \quad (1)$$

где матрица скоростей наработок $\Sigma(\mathbf{x})$ представляет собой функционал на решении стационарного уравнения переноса излучения при заданном ядерном составе. Построение схемы численного интегрирования основано на использовании элементарного решения, которое является решением вспомогательной задачи Коши для системы уравнений

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0, \quad (2)$$

в некотором смысле близкой к (1). Понятие близости определено в [1], где также показано, что в рамках используемого в [1] подхода в общем случае невозможно построение схемы выше второго порядка точности. При этом на примере методической задачи с внешним источником нейтронов продемонстрирована заметно лучшая сходимость по шагу интегрирования к точному решению результатов расчета, полученных с использованием схемы второго порядка по сравнению со схемой первого порядка точности.

Однако, кроме погрешности схемы, на точность результатов влияет погрешность расчета элементарного решения, причем при расчете наиболее важных для практики задач выгорания топлива в ядерных энергетических установках это влияние представляется существенным. В частности, здесь заметную роль играют погрешности решения уравнения переноса. При этом следует отметить, что при получении такого решения меньше всего физических и технических приближений требуют методы статистического моделирования, которые обычно используются для проведения прецизионных

расчетов. Однако и им присущи вычислительные погрешности, которые сказываются на точности расчета задач ядерной кинетики. Соответственно при построении эффективной расчетной схемы возникает потребность оценки влияния такого рода погрешностей, которое будет рассмотрено далее.

Но прежде следует остановиться на построении функции \mathbf{g} в правой части (2) для задачи выгорания ядерного топлива. Для этого, следуя работе [2], можно записать зависимость матрицы скоростей наработок для реактора, работающего на постоянной мощности, в следующем виде:

$$\Sigma(\mathbf{x}) = \Lambda + \frac{\omega(\mathbf{x})}{\mathbf{q}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{x}}.$$

Здесь Λ — матрица распадов; $\omega(\mathbf{x})$ — матрица скоростей наработок на нейтронных реакциях; $\mathbf{q}(\mathbf{x})$ — нормированный на мощность реактора вектор энерговыделения; в знаменателе дроби — скалярное произведение векторов. $\omega(\mathbf{x})$ и $\mathbf{q}(\mathbf{x})$ представляют собой функционалы на решении условно-критической задачи. В качестве правой части (2) удобно определить функцию

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left(\Lambda + \frac{\omega(\mathbf{y})}{\mathbf{q}(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{x}} \right) \mathbf{x}. \quad (3)$$

Можно видеть, что она удовлетворяет условию близости, приведенному в работе [1], и соответственно позволяет применять подход, используемый в этой работе. Один из вариантов алгоритма решения задачи Коши (2) с функцией (3) приводится в [2].

Погрешность расчета

Кроме погрешности схемы интегрирования дифференциальных уравнений, на точность результатов влияет погрешность элементарного решения. При применении методов статистического моделирования последняя складывается из погрешности методики, используемой для получения решения (2), и погрешности метода поколения, используемого для оценки компонент матрицы наработок.

Для анализа погрешностей, чтобы избежать ненужных усложнений, будет рассматриваться численное решение задачи (1) с постоянным шагом по времени τ и одинаковой статистикой на каждом шаге. Точное решение уравнения (1) будет обозначаться как $\mathbf{F}(t, \mathbf{x}_0)$. При численном интегрировании этого уравнения возникают погрешности, растущие с увеличением временного шага. Соответственно изменение состояния на n -м шаге можно представить в виде трех слагаемых:

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{F}(\tau, \mathbf{x}_{n-1}) + \tau \boldsymbol{\delta}_n + \tau \boldsymbol{\Delta}_n. \quad (4)$$

Здесь второе слагаемое пропорционально систематической погрешности $\boldsymbol{\delta}_n$, которая будет рассмотрена ниже. Третье же определяется статистической погрешностью задачи переноса $\boldsymbol{\Delta}_n$. Для простоты будем считать, что на разных шагах эти погрешности независимы и соответственно для математических ожиданий справедливы следующие соотношения:

$$M \boldsymbol{\Delta}_n = 0; \quad M \boldsymbol{\Delta}_n \boldsymbol{\Delta}_n = k_n; \quad M \boldsymbol{\Delta}_n \boldsymbol{\Delta}_m = 0, \quad (5)$$

где символом M обозначена операция вычисления математического ожидания, а k_n представляет собой ковариационную матрицу случайной величины $\boldsymbol{\Delta}_n$.

Последовательным применением (4) несложно выразить зависимость величин на заданный момент времени от величин и погрешностей на предыдущих шагах. Например, для трех шагов

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{F}(\tau, \mathbf{F}(\tau, \mathbf{F}(\tau, \mathbf{x}_{n-3}) + \tau \boldsymbol{\delta}_{n-2} + \tau \boldsymbol{\Delta}_{n-2}) + \tau \boldsymbol{\delta}_{n-1} + \tau \boldsymbol{\Delta}_{n-1}) + \tau \boldsymbol{\delta}_n + \tau \boldsymbol{\Delta}_n.$$

Данное выражение удобно разложить в степенной ряд по погрешностям. Для этого следует выделить вклад от погрешностей на m -м шаге. Полагая остальные погрешности нулевыми и учитывая групповое свойство $\mathbf{F}(t_1, \mathbf{F}(t_2, \mathbf{x})) = \mathbf{F}(t_1 + t_2, \mathbf{x})$, зависимость от указанных погрешностей можно представить в виде

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{F}((n-m)\tau, \mathbf{x}_m) = \mathbf{F}((n-m)\tau, \mathbf{F}(m\tau, \mathbf{x}_0) + \tau \boldsymbol{\delta}_m + \tau \boldsymbol{\Delta}_m).$$

С использованием этой зависимости и выделения членов, линейных по δ и не более чем квадратичных по Δ , численное решение на n -м шаге может быть представлено следующим образом:

$$\mathbf{x}_n = \mathbf{F}(n\tau, \mathbf{x}_0) + \sum_{m=1}^{n-1} \tau F_{nm}^{(1)}(\delta_m + \Delta_m) + \frac{\tau^2}{2} F_{nm}^{(2)} \Delta_m \Delta_m + \mathbf{d}_n. \quad (6)$$

Здесь обозначено $F_{nm}^{(q)} = F^{(q)}(n\tau, m\tau)$, где $F^{(q)}(t, t') \equiv \left. \frac{\partial^q \mathbf{F}(t - t', \mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^q} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{F}(t', \mathbf{x}_0)}$. Последнее слагаемое \mathbf{d}_n содержит члены с $\Delta_i \Delta_j$ при $i \neq j$, $\delta_i \Delta_j$ или $\Delta_i \delta_j$, а также члены более высоких степеней. Пренебрегая этими членами, по формуле (6) несложно получить смещение математического ожидания. С учетом (5) оно имеет вид

$$M\mathbf{x}_n - \mathbf{F}(n\tau, \mathbf{x}_0) = \sum_{m=1}^{n-1} \tau F_{nm}^{(1)} \delta_m + \frac{\tau^2}{2} F_{nm}^{(2)} k_m. \quad (7)$$

При этом отброшенные члены пропорциональны τ^q , где $q > 2$.

Кроме смещения результата, важной характеристикой погрешности является ковариационная матрица K случайной величины \mathbf{x}_n , которая определяет статистическое отклонение. Используя (6) и (7), выражение для этой матрицы в пренебрежении членами высокого порядка по τ можно записать следующим образом:

$$K\mathbf{x}_n = \tau^2 \sum_{m=1}^{n-1} \Phi(n\tau, m\tau) k_m, \quad (8)$$

где компоненты тензора четвертого ранга имеют вид $\Phi(t, t')_{ij}^{pq} = F^{(1)}(t, t')_i^p \times F^{(1)}(t, t')_j^q$.

Выражения (7) и (8) определяют отклонение численного решения от точного. Для оценки влияния схемы интегрирования следует сравнить поведение погрешности для разных значений τ при условии одинаковой трудоемкости всего расчета. Для этого систематическую погрешность, определяющую значение первого члена в выражении (7), удобно представить в виде суммы погрешностей, имеющих разную природу:

$$\delta_m = \delta_m^s + \delta_m^e + \delta_m^r + \delta_m^b. \quad (9)$$

Здесь первое слагаемое — погрешность схемы интегрирования (по определению $\delta_m^s \sim \tau^p$, где p — порядок схемы), второе — погрешность методики расчета элементарного решения. Третье и четвертое слагаемые вносят вклад только в том случае, когда в качестве задачи переноса рассматривается условно-критическая задача. Они представляют собой систематические погрешности метода поколений, связанные с размером поколения и влиянием начального распределения. Несложно показать, что при условии одинаковой трудоемкости для второго и третьего членов суммы (9) справедливо следующее асимптотическое поведение (при $\tau \rightarrow 0$):

$$\delta_m^e = \mathbf{O}(1), \quad \delta_m^r = \mathbf{O}(1). \quad (10)$$

Четвертое слагаемое в выражении (9) пропорционально погрешностям оцениваемых функционалов, которые (более детальное рассмотрение проводится, например, в [4]) можно записать следующим образом:

$$\Delta\varphi = \theta(\varphi_0 - \varphi).$$

Здесь φ — точное значение функционала; φ_0 — значение функционала на начальном поколении; θ — величина, определяемая доминантным отношением, а также количеством пассивных и активных поколений. Опуская подробности, следует отметить, что θ уменьшается с увеличением количества всех этих поколений.

Аналогично [4] можно рассмотреть два случая: когда для получения начального поколения всегда используется одна и та же конфигурация нейтронного поля и когда в этом качестве используется

конфигурация, полученная на предыдущем временном шаге. Асимптотическое поведение для них различно. Если в первом случае оно аналогично (10), т. е.

$$\delta_m^b = \sigma_m^0 + \mathbf{o}(1), \quad (11)$$

то во втором, учитывая, что на момент времени t $\varphi_0 = \varphi(t - \tau)$, справедливо следующее соотношение:

$$\delta_m^b = \sigma_m^1 \tau + \mathbf{o}(\tau). \quad (12)$$

Здесь σ_m^k ($k = 0; 1$) — некоторые величины, пропорциональные θ .

Кроме систематической погрешности, свой вклад в (7) и (8) дает ковариационная матрица k_m , которая определяется статистической погрешностью метода поколений. Так как эта матрица обратно пропорциональна числу поколений, то при фиксированной общей трудоемкости она имеет вид

$$k_m = \frac{t}{\tau} k_m^1, \quad (13)$$

где k_m^1 — ковариационная матрица, соответствующая максимально возможной статистике расчета до момента времени t .

Принимая во внимание (13) и переходя от суммирования к интегрированию, выражение для ковариационной матрицы (8) на момент времени t можно представить следующим образом:

$$K\mathbf{x}(t) = t \int_0^t \Phi(t, t') k^1(t') dt'. \quad (14)$$

Как можно видеть, статистическая погрешность не зависит от шага интегрирования.

Аналогичным образом, с учетом (9), (10), а также (11) или (12) зависимость смещения (7) от τ записывается как

$$M\mathbf{x}(t) - \mathbf{F}(t, \mathbf{x}_0) = \boldsymbol{\alpha} + \tau\boldsymbol{\beta} + \tau^p\boldsymbol{\gamma}. \quad (15)$$

Здесь $\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{\beta}$ и $\boldsymbol{\gamma}$ — зависящие от t векторные коэффициенты, полученные сверткой, подобной (14). Явные выражения этих величин, чтобы избежать излишней громоздкости, здесь приводиться не будут. Однако следует отметить, что коэффициент $\boldsymbol{\alpha}$ включает погрешности (10). Кроме того, данный коэффициент при реализации метода поколений с постоянным начальным распределением содержит вклад (11). И наконец, последний вклад в этот коэффициент, подобно (14), вносит статистическая погрешность задачи переноса. Следующий коэффициент $\boldsymbol{\beta}$ существенен при использовании альтернативного подхода к выбору начального поколения. В этом случае основной вклад в него вносит (12). Кроме того, если подходить строго, в него вносят вклад члены, квадратичные по погрешностям (10), которые были отброшены при выводе (7). Однако ввиду относительной малости этих членов по сравнению с уже учтенным линейным вкладом их рассмотрение представляется излишним. Последний коэффициент $\boldsymbol{\gamma}$ определяется расчетной схемой.

Из (14), (15) можно видеть, что принципиально неустранимая погрешность нулевого порядка индуцируется статистической погрешностью, а при использовании метода поколений — еще и погрешностью, обусловленной размером поколения. Следует отметить, что статистическая погрешность дает как в смещение, так и в ковариационную матрицу вклад, обратно пропорциональный числу поколений. А так как статистическая погрешность результата пропорциональна корню от элементов указанной матрицы, то эта погрешность должна вносить основной вклад в отклонение полученных величин от точных значений.

Однако если в качестве трудоемкости рассматривать астрономическое время счета, то статистическая погрешность нивелируется использованием многопроцессорных вычислительных комплексов. В этом случае основной вклад может дать линейный член, который при использовании схем выше первого порядка точности определяется влиянием начального поколения. Схема первого порядка увеличивает этот член за счет коэффициента $\boldsymbol{\gamma}$ в выражении (15).

Таким образом, асимптотическое поведение погрешности как минимум линейно по τ , и соответственно невозможность построения схем выше второго порядка точности не представляется существенным недостатком рассматриваемого подхода. Однако, учитывая сложность вычисления интегралов типа (14), полезно оценить влияние рассмотренных погрешностей на результаты расчета реалистичных систем.

Расчет кампании

Одной из наиболее сложных установок для задач ядерной кинетики представляется реактор на тепловых нейтронах. Поэтому для оценки погрешностей была проведена серия расчетов упрощенной модели такого реактора, подобной рассмотренной в работах [2, 3]. Модель представляет собой два вложенных соосных цилиндра: внутренний диаметром 0,757 см и высотой 353 см, изначально содержащий двуокись урана, и внешний диаметром 3,69 см с водой. Топливный цилиндр вдоль оси вращения разбивался на несколько одинаковых пространственных элементов (рассматривались значения 1 и 10), ядерный состав которых считался пространственно-постоянным. Начальные концентрации изотопов урана: $^{235}\text{U} - 0,001156^{-1}\text{см}^{-1}$, $^{238}\text{U} - 0,02186^{-1}\text{см}^{-1}$. Температура воды — 575 К, топлива — 1000 К. Расчет проводился на момент времени 1440 сут с тепловой мощностью 43,45 кВт/кгU. Решение задачи переноса проводилось по программе ПРИЗМА [5]. При этом использовался размер поколения в 1000 точек деления, так чтобы соответствующей погрешностью можно было пренебречь. Для решения вспомогательной системы уравнений (3) применялась программа РИСК [6]. Решение проводилось по алгоритму из работы [2] первого порядка точности с шагом интегрирования 1 час и первым порядком разложения нормировочного множителя с пересчетом его каждые сутки. Интервал пересчета, принимая во внимание, что минимальное значение τ равняется 1 сут, выбран из тех соображений, чтобы расчет всех задач проводился в одинаковых условиях.

В качестве результатов рассматривались концентрации ^{235}U и ^{239}Pu на конец кампании. Выбор этих ядер обосновывается их главным вкладом в энерговыделение в течение всей кампании и соответственно практической значимостью. Кроме того, методический интерес представляет их различное поведение: в то время как концентрация ^{235}U монотонно убывает, концентрация ^{239}Pu выходит на режим, близкий к стационарному. Соответственно можно ожидать, что влияние разных типов погрешностей на значения указанных величин будет различным.

В первую очередь интерес представляет влияние на результаты порядка точности схемы. Учитывая, что при больших значениях τ , как это показано в [3], для рассматриваемой системы наблюдается аксиальная численная неустойчивость, для оценки указанного влияния удобнее использовать вариант с одним пространственным элементом. Результаты расчетов показаны на рис. 1, 2, где приведены концентрации ^{235}U и ^{239}Pu на конец кампании в зависимости от шага интегрирования, полученные с разной статистикой. Сразу можно отметить, что при малых τ основной вклад в ошибку дает статистическая погрешность. Для расчета с малым числом поколений эту погрешность можно грубо оценить как отличие от значений, полученных в более точных расчетах. Наиболее заметны статистические биения для ^{239}Pu , что связано со слабым изменением концентрации этого ядра во времени и соответственно малым влиянием на нее шага интегрирования. Здесь можно отметить, что в соответствии с (14) не наблюдается заметной зависимости рассматриваемой погрешности от этого шага.

Однако интересно рассмотреть влияние статистики на смещение результата. Для этого по значениям, приведенным на рис. 1, 2, были построены сглаживающие кубические сплайны, которые показаны на рис. 3, 4 соответственно. Сразу можно отметить, что на рассматриваемом интервале поведение кривых близко к линейному. Отсюда можно сделать вывод, что при таких значениях шага интегрирования поведение смещения хорошо описывается соотношением (15). При этом для схемы второго порядка точности влияние квадратичного члена, пропорционального коэффициенту γ , пренебрежимо мало, а производная определяется коэффициентом β . Для первого порядка эта величина определяется суммой $\beta + \gamma$. Следует также отметить, что для зависимостей, полученных с малой статистикой, указанная производная несколько выше, чем для результатов более точных расчетов. Это связано с отмеченным выше уменьшением множителя σ_m^1 в соотношении (12) при

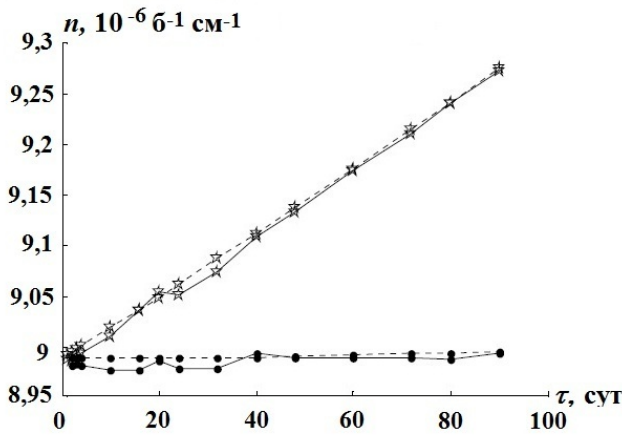


Рис. 1. Зависимость от шага интегрирования концентрации ^{235}U , $t = 1440$ сут: —☆— — схема первого порядка, 28 800 поколений; —●— — схема второго порядка, 28 800 поколений; - - ☆ - - схема первого порядка, 72 млн поколений; - - ● - - схема второго порядка, 72 млн поколений

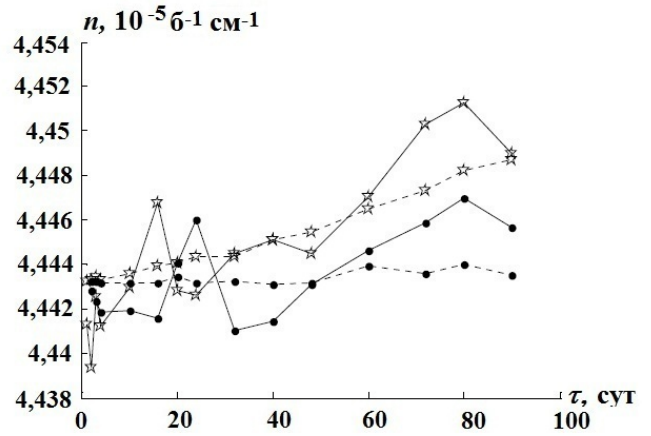


Рис. 2. Зависимость от шага интегрирования концентрации ^{239}Pu , $t = 1440$ сут: —☆— — схема первого порядка, 28 800 поколений; —●— — схема второго порядка, 28 800 поколений; - - ☆ - - схема первого порядка, 72 млн поколений; - - ● - - схема второго порядка, 72 млн поколений

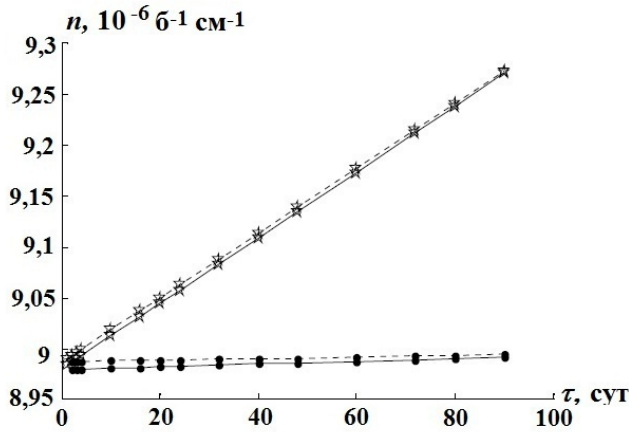


Рис. 3. Сглаженная зависимость от шага интегрирования концентрации ^{235}U , $t = 1440$ сут: —☆— — схема первого порядка, 28 800 поколений; —●— — схема второго порядка, 28 800 поколений; - - ☆ - - схема первого порядка, 72 млн поколений; - - ● - - схема второго порядка, 72 млн поколений

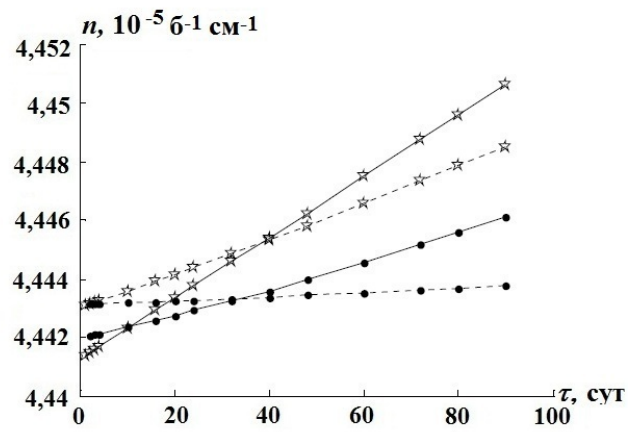


Рис. 4. Сглаженная зависимость от шага интегрирования концентрации ^{239}Pu , $t = 1440$ сут: —☆— — схема первого порядка, 28 800 поколений; —●— — схема второго порядка, 28 800 поколений; - - ☆ - - схема первого порядка, 72 млн поколений; - - ● - - схема второго порядка, 72 млн поколений

увеличении количества поколений и соответственно уменьшении коэффициента β . Экстраполяция зависимостей в точку $\tau = 0$ дает предельные значения ядерных концентраций (с точностью до погрешности приближения сплайном). Эти значения приведены в табл. 1. Видно, что значения, полученные с хорошей статистикой, практически совпадают. Для более грубых расчетов различие больше, однако оно позволяет видеть отклонение значений от точных. Это смещение определяется вторым членом суммы в выражении (7). Впрочем, оно намного меньше, чем статистические отклонения, что можно видеть при сравнении рис. 1, 2 с рис. 3, 4.

Еще одним источником отклонения от точного значения является погрешность схемы решения вспомогательной задачи (4). Она определяется слагаемым δ^e , которое входит в выражение для систематической погрешности (9) и согласно (10) является составляющей коэффициента α в выражении (15). Поэтому влияние указанной погрешности не может быть устранено уменьшением

Концентрация (в $10^{-6} \text{б}^{-1} \text{см}^{-1}$) актинидов в конце кампании

Актинид	Схема первого порядка, 28 800 поколений	Схема второго порядка, 28 800 поколений	Схема первого порядка, 72 млн поколений	Схема второго порядка, 72 млн поколений
^{235}U	8,9803	8,9795	8,9870	8,9875
^{239}Pu	44,413	44,420	44,430	44,431

шага интегрирования. В используемом здесь алгоритме решения вспомогательной задачи основными параметрами, влияющими на погрешность, являются внутренний шаг интегрирования (не превышающий τ) и метод учета изменения мощности. Уменьшение внутреннего шага не увеличивает количества межпроцессорных обменов при распараллеливании и слабо влияет на трудоемкость. Поэтому он был выбран достаточно малым, чтобы его влиянием можно было пренебречь.

Большой интерес представляет учет мощности. Для этого вычисляется нормировочный множитель, который обратно пропорционален линейному функционалу от набора ядерных концентраций (более подробно см., например, [2]). При распараллеливании вычисление данного функционала требует пересылки данных между счетными процессами. Кроме того, в рамках используемого программой РИСК алгоритма вычисления матричных функций, описанного в работе [7], пересчет нормировочного множителя требует перевычисления тензора распадов, что представляет собой наиболее трудоемкую часть указанного алгоритма. Таким образом, наиболее существенным условием построения оптимальной схемы решения вспомогательной задачи представляется минимизация количества пересчетов нормировочного множителя.

Для оценки влияния количества пересчетов было проведено несколько расчетов, в которых варьировались порядок разложения нормировочного множителя m и интервал времени его пересчета Δt . Значение $m = 0$ соответствует использованию в качестве элементарного решения матричной экспоненты, алгоритм вычисления которой приведен в [8]. При $m = 1$ в этом качестве рассматривалось решение, полученное по алгоритму из работы [2].

Результаты расчетов с $\Delta t = 24$ ч и разными значениями m приведены на рис. 5, 6. Здесь сразу видны практическая независимость концентрации ^{239}Pu от параметров расчета и заметное отличие в концентрации ^{235}U , которое составляет примерно 0,7%. Хотя эта погрешность и невелика, она сравнима с точностью радиохимических методов (около 1%). Поскольку сильной стороной методов

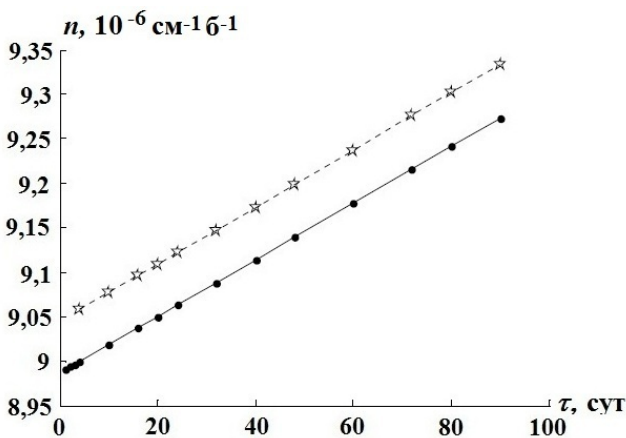


Рис. 5. Зависимость от шага интегрирования концентрации ^{235}U для алгоритмов решения вспомогательной задачи с разным порядком учета изменения мощности, $t = 1440$ сут: —●— — $m = 1$; - -☆- - - $m = 0$

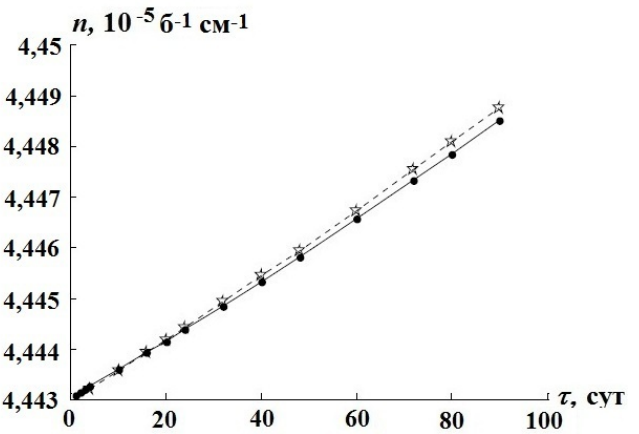


Рис. 6. Зависимость от шага интегрирования концентрации ^{239}Pu для алгоритмов решения вспомогательной задачи с разным порядком учета изменения мощности, $t = 1440$ сут: —●— — $m = 1$; - -☆- - - $m = 0$

статистического моделирования является их прецизионность, такая ошибка представляется нежелательной. Впрочем, ее можно уменьшить изменением интервала времени пересчета мощности.

Результаты, полученные с разными значениями параметров расчета вспомогательной задачи, представлены в табл. 2. Результаты в последнем столбце этой таблицы, помеченном как 1/1, можно принять за эталон, с которым следует сравнивать остальные. Впрочем, столбец, помеченный как 1/0, отличается от эталона на сотые доли процента, так же как и 24/1. Что касается остальных результатов, то можно отметить, что для ^{239}Pu не наблюдается зависимости от параметров схемы в отличие от ^{235}U , концентрация которого приближается к эталону с уменьшением времени операций пересчета, т. е. с увеличением их количества. По значениям величин, приведенным в табл. 2, можно оценить, что при одинаковой погрешности вклад в трудоемкость расчета при использовании алгоритма нулевого порядка учета изменения мощности примерно в 20–30 раз (по количеству межпроцессорных обменов) больше, чем для первого порядка.

Еще одним источником погрешности является влияние начального поколения на оцениваемые функционалы при решении задачи переноса на каждом временном шаге, которое определяется четвертым членом в (9). Асимптотическое поведение этой погрешности в зависимости от используемого подхода дается выражением (11) или (12). Однако напрямую оценить это влияние затруднительно, так как угловое и энергетическое распределения вторичных нейтронов деления слабо зависят от параметров первичного нейтрона. Поэтому влияние начального поколения на результаты решения задачи с одним пространственным элементом несущественно. Единственной значимой характеристикой представляется пространственное, и в первую очередь аксиальное распределение, которое можно учесть только в рамках задачи с разбиением топлива на несколько пространственных элементов. Но в этом случае, как показано в [3], при больших значениях τ численное решение становится некорректным. Поэтому представляется, что в качестве косвенной оценки удобнее рассмотреть влияние величин σ_m^k , определяющих значение погрешности в соотношениях (11) и (12). Одним из параметров расчета, влияющих на указанные величины, является количество пассивных поколений, с ростом которого эти величины стремятся к нулю. Поэтому были проведены расчеты по схеме первого порядка с шагом интегрирования в одни сутки и моделированием одного поколения на каждом процессе на этом шаге.

Рассматривались два подхода к реализации метода поколений: с равномерным по пространству начальным распределением точек деления и начальным поколением с предыдущего временного шага. При проведении расчетов топливный цилиндр был разбит по высоте на 10 равнообъемных элементов, в каждом из которых ядерный состав считался пространственно-постоянным. Варьировалось количество пассивных поколений. Результаты расчетов для верхнего и нижнего пространственных элементов представлены на рис. 7, 8. В силу симметрии концентрации в этих элементах должны совпадать, поэтому различия дают некоторую дополнительную (к визуально оцениваемому отклонению от гладкой кривой) оценку статистической погрешности.

Из рис. 7, 8 можно видеть, что при использовании поколения с предыдущего временного шага как для ^{235}U , так и для ^{239}Pu с точностью до статистической погрешности зависимости от количества пассивных поколений не наблюдается. В то же время при расчете с постоянным начальным поколением для ^{235}U видна сильная зависимость от указанного параметра. Но для ^{239}Pu , так же, как и в подходе с использованием поколения с предыдущего временного шага, нет видимой зависимости от этого параметра. Такое поведение связано с малой скоростью изменения концентрации

Таблица 2

Концентрация (в $10^{-6}\text{б}^{-1}\text{см}^{-1}$) актинидов в конце кампании при различных параметрах схемы решения вспомогательной задачи (Δt в часах)

Актинид	$\Delta t/m$								
	24/0	12/0	8/0	6/0	3/0	2/0	1/0	24/1	1/1
^{235}U	9,045	9,009	9,001	9,001	8,992	8,989	8,987	8,980	8,982
^{239}Pu	44,43	44,44	44,43	44,44	44,43	44,44	44,43	44,41	44,43

^{239}Pu . Для времен, при которых эта концентрация далека от стационарной, ее расчетные значения также сильно зависят от количества пассивных поколений, что видно из рис. 9, 10. Из поведения кривых на этих рисунках, а также на рис. 7, следует вывод, что для нивелирования погрешности (11) необходимо моделировать примерно 50 пассивных поколений (или больше).

При реализации распараллеливания метода поколений в виде расчета набора независимых задач на каждом процессе (обсуждение достоинств и недостатков такой реализации см. в [4]) доля активных поколений, на которых происходит оценка функционалов, получается близкой к нулю. В отличие от этого погрешность (12) несущественна даже при отсутствии пассивных поколений.

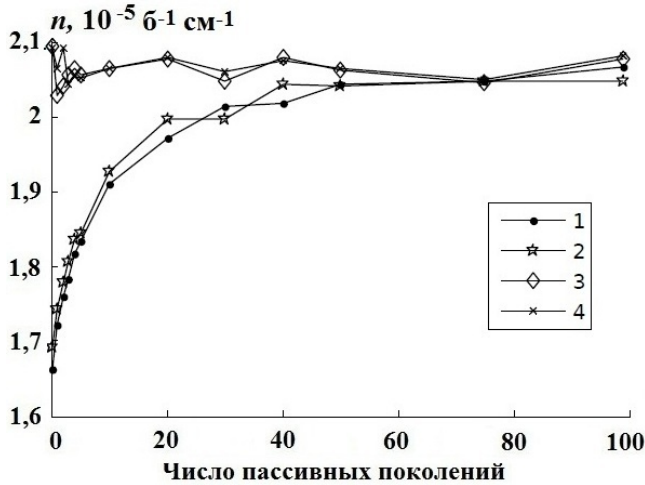


Рис. 7. Зависимость от количества пассивных поколений концентрации ^{235}U в нижней (нечетное) и верхней (четное) частях системы, $t = 1440$ сут: 1, 2 — пространственно равномерное начальное распределение точек деления; 3, 4 — начальное поколение с предыдущего временного шага

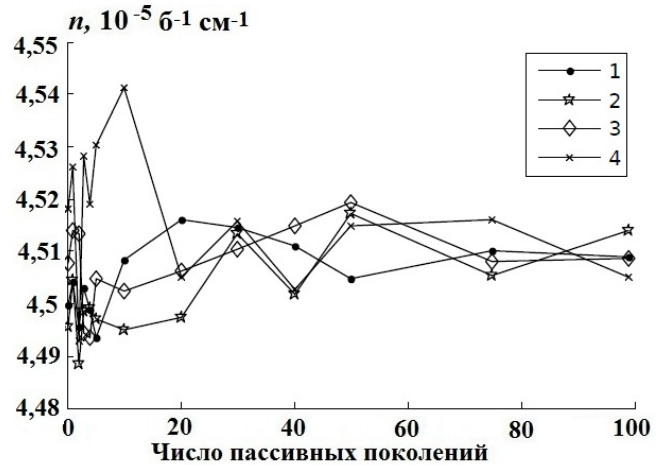


Рис. 8. Зависимость от количества пассивных поколений концентрации ^{239}Pu в нижней (нечетное) и верхней (четное) частях системы, $t = 1440$ сут: 1, 2 — пространственно равномерное начальное распределение точек деления; 3, 4 — начальное поколение с предыдущего временного шага

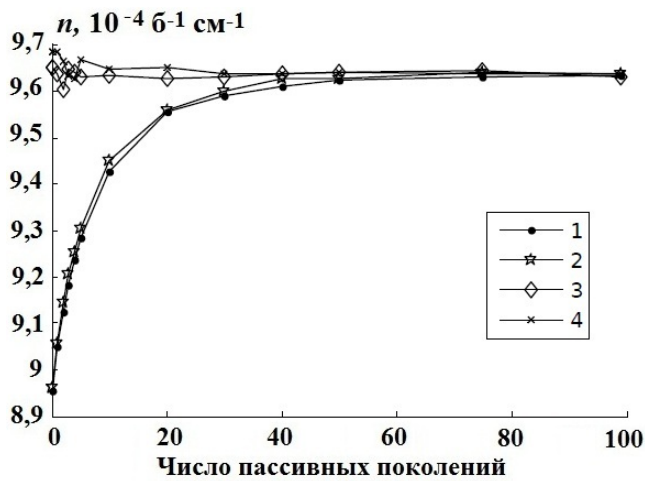


Рис. 9. Зависимость от количества пассивных поколений концентрации ^{235}U в нижней (1, 3) и верхней (2, 4) частях системы, $t = 250$ сут: 1, 2 — пространственно равномерное начальное распределение точек деления; 3, 4 — начальное поколение с предыдущего временного шага

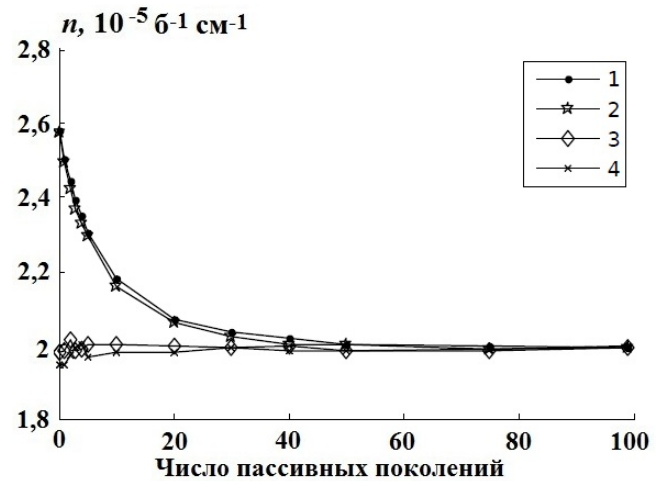


Рис. 10. Зависимость от количества пассивных поколений концентрации ^{239}Pu в нижней (1, 3) и верхней (2, 4) частях системы, $t = 250$ сут: 1, 2 — пространственно равномерное начальное распределение точек деления; 3, 4 — начальное поколение с предыдущего временного шага

При сравнении рис. 7, 8 с рис. 9, 10 отмечается рост статистической погрешности с увеличением времени функционирования системы, что соответствует соотношению (14).

Заключение

Проведен анализ погрешностей расчета выгорания топлива в ядерном реакторе с использованием методов статистического моделирования. Эти погрешности можно разделить на статистическую, которая определяется выражением (14), и систематическую, асимптотическая зависимость которой от шага интегрирования дается выражением (15).

В первую очередь представляется необходимым отметить, что доказанное в работе [1] утверждение о невозможности построения схемы выше второго порядка для задач ядерной кинетики в случае использования методов статистического моделирования для решения задачи переноса не является сильно пессимистическим. Такой вывод можно сделать из соотношения (14), а также (7), которые показывают, что дисперсия и связанное со статистикой смещение результатов расчета главным образом определяются только общим объемом выборки, используемым для решения задач переноса на всех шагах интегрирования. При этом имеется в виду, что решение указанных задач вносит основной вклад в трудоемкость расчета, пропорциональный объему выборки.

Впрочем, при малых шагах интегрирования и соответственно малых объемах выборки на каждом шаге существенный вклад в трудоемкость могут давать различные вспомогательные операции. Поэтому при таких шагах трудоемкость будет пропорциональна их количеству, как и в случае использования разностных методов для решения задачи переноса. Соответственно в ряде случаев схемы второго порядка точности могут заметно понизить трудоемкость расчета.

Приведенные результаты расчета упрощенной модели реактора на тепловых нейтронах показывают справедливость сделанных оценок. Также на примере этой модели было оценено влияние двух факторов. Одним из них является порядок учета мощности при решении вспомогательной задачи Коши. Показано существенное снижение трудоемкости при использовании первого порядка учета мощности по сравнению с нулевым. Другим фактором является способ построения начального поколения при расчете условно-критической задачи. Здесь также можно видеть существенное снижение трудоемкости при использовании поколения с предыдущего временного шага в отличие от постоянного начального поколения.

Рассмотрение задачи переноса в стационарном приближении связано с существенно более высокой скоростью процессов установления равновесной конфигурации радиационного поля по сравнению со скоростью изменения ядерного состава. Это приближение обосновывается теоремой Тихонова о сингулярно возмущенных системах уравнений. Но в качестве быстрых процессов могут рассматриваться и другие, например процессы установления теплогидравлического равновесия в ядерных энергетических установках. В соответствии с вышеприведенной теоремой при их учете в качестве стационарного состояния следует рассматривать согласованное стационарное состояние всех быстрых процессов. Некоторые аспекты решения такой задачи рассматриваются в [4]. Здесь же отмечено, что подобное усложнение не вносит дополнительных эффектов в постановку задачи ядерной кинетики и все сделанные выводы остаются в силе.

Список литературы

1. Модестов Д. Г. Построение схемы расчета задачи ядерной кинетики // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2018. Вып. 4. С. 19–28.
2. Модестов Д. Г. Интегрирование уравнений, описывающих выгорание ядерного топлива // Там же. Сер. Физика ядерных реакторов. 2011. Вып. 3. С. 63–71.
3. Модестов Д. Г. Адаптивная схема решения уравнений выгорания ядерного топлива с оценкой равновесной концентрации короткоживущих ядер // Там же. 2013. Вып. 3. С. 120–130.

4. *Модестов Д. Г.* Использование метода поколений в согласованных расчетах стационарных характеристик // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2016. Вып. 1. С. 37–47.
5. *Зацепин О. В., Кандиев Я. З., Кашаева Е. А., Малышкин Г. Н., Модестов Д. Г.* Расчеты методом Монте-Карло по программе ПРИЗМА нейтронно-физических характеристик активной зоны реактора ВВЭР-1000 // Там же. Сер. Физика ядерных реакторов. 2011. Вып. 4. С. 64–73.
6. *Модестов Д. Г.* Программа решения задач ядерной кинетики РИСК-2014: Препринт № 243. Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2014.
7. *Модестов Д. Г.* Решение уравнений радиоактивного распада // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 3. С. 54–58.
8. *Модестов Д. Г.* Интегрирование уравнений эволюции ядерного состава в постоянных радиационных полях // Там же. 2012. Вып. 1. С. 17–28.

Статья поступила в редакцию 15.02.18.

ERRORS IN THE NUCLEAR FUEL BURNUP SIMULATIONS WITH THE USE OF STATISTICAL METHODS / D. G. Modestov (FSUE "Acad. E. I. Zababakhin RFNC-VNIITF", Snezhinsk, Chelyabinsk region).

When calculating the nuclear composition variation in the reactor fuel, one of the operations is to solve the conditionally critical problem of neutron transport. For this purpose, the statistical methods of simulation are used, which require a minimal number of physical and technical approximations, as compared to the other methods, and, therefore, seem to be most accurate. However, these methods are not deprived of computational errors which affect the computational accuracy for the nuclei kinetics problems. The paper presents the analysis of such effect of computational errors on the accuracy of nuclear composition calculation results. Calculated results for a methodological problem are presented and they demonstrate the degree of influence of the calculation parameters.

Keywords: nuclei kinetics, numerical methods, Cauchy problem, integration scheme, the particle transport equation, the generation method.
