

УДК 621.039.519

ОЦЕНКА СИСТЕМАТИЧЕСКОЙ ПОГРЕШНОСТИ РАСЧЕТОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО НЕЙТРОННО-ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ ЭВМ

Калугин М.А., Олейник Д.С., Сухино-Хоменко Е.А. (НИЦ «Курчатовский ин-т», г. Москва)

Метод Монте-Карло широко используется при решении практических задач реакторной физики, в частности, для нахождения функционалов потока нейтронов, таких, как эффективный коэффициент размножения нейтронов и скорость реакций в выбранных регистрационных областях размножающей системы. Для численного решения уравнения критичности реактора (однородного стационарного уравнения переноса нейтронов) используют метод Монте-Карло с постоянным числом частиц в поколении. Все известные методы моделирования с регулированием числа частиц в поколении не позволяют получить точную оценку функционала потока даже при сколь угодно малой статистической погрешности. Систематическую погрешность, возникающую вследствие принудительного регулирования процесса, называют смещением оценки функционалов. Смещение убывает обратно пропорционально числу частиц в поколении.

В системах, размеры которых во много раз превышают площадь миграции нейтронов, достижение приемлемой оценки смещения или, другими словами, выбора числа частиц в поколении является особенно важным. Имеются общая и асимптотическая формулы для определения смещения любых оценок любых скоростей реакций, вычисляемых моделированием с принудительным регулированием числа частиц в поколении [1]. В настоящей работе для асимптотической формулы расчета смещения функционалов предложена удобная для программной реализации форма. Методика расширена также для использования при параллельных вычислениях на многопроцессорных ЭВМ. Разработанные алгоритмы апробированы при выборе числа частиц в поколении применительно к рас-

четам трехмерной полномасштабной модели ВВЭР-1000.

Формулы для расчета смещения оценок функционалов. Решение уравнения переноса нейтронов методами Монте-Карло сводится, как правило, к статистическому моделированию N последовательных поколений, на каждом из которых прослеживается M историй нейтронов. На каждом поколении определяется требуемый функционал потока x_n , $n = 1, \dots, N$. В качестве результирующей оценки принимается среднее выборочное значение по всем поколениям

$$\langle x_n \rangle = \sum_{n=1}^N x_n / N.$$

В статье рассматриваются два функционала: эффективный коэффициент размножения $k_{эф}$ и скорость реакции деления R в некоторой регистрационной области. Оценки $k_{эф}$ и R на поколении с номером n обозначим k_n и r_n соответственно.

Вследствие регулирования числа нейтронов в поколении возникает систематическая погрешность Δ_X

$$\langle x_n \rangle = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n = X + \Delta_X,$$

где X — точное решение.

Под смещением оценок функционалов в данном случае подразумевается методическое отклонение результатов от точных значений нейтронно-физических характеристик, а не смещение статистических оценок от математического ожидания моделируемого процесса.

Асимптотическая формула для вычисления систематической погрешности Δ_X имеет вид [1]

$$\Delta_X = -\frac{1}{k_{эф}} \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{N-1} \overline{\delta x_n \delta k_{n-j}}, \quad (1)$$

где $\delta x_n = x_n - \bar{x}$; $\delta k_n = k_n - \bar{k}$. Эта формула справедлива при условии, что число траекторий, моделируемых в каждом поколении, велико и, следовательно, дисперсии всех оценок малы.

Перепишем формулу (1) в виде, удобном для практической реализации:

$$\Delta_X = -\frac{1}{k_{\text{эф}}} \sum_{l=1}^{N-1} \frac{1}{(N-l)} \sum_{n=1}^{N-l} (x_{n+l} - \langle x_n \rangle) (k_n - \langle k_n \rangle).$$

Последовательности $\{x_n\}$, $\{k_n\}$, $\{r_n\}$, $n = 1, \dots, N$, представляют собой случайные процессы, поскольку каждый элемент является случайной величиной [2, 3].

Важнейшей характеристикой случайного процесса является корреляционная функция C_{nm} , которая характеризует корреляционную связь между оценками функционала на поколениях n и m . Аналогично определяется корреляционная функция связи двух случайных процессов. Для стационарного случайного процесса корреляционная функция C_{nm} зависит только от расстояния $l = m - n$ между поколениями, на которых получены оценки функционалов. Обозначим такую корреляционную функцию C_l .

Из корреляционной теории случайных процессов известно, что для стационарного случайного процесса $\{k_1, k_2, \dots, k_n, \dots, k_N\}$, где k_n — оценка $k_{\text{эф}}$ на поколении n , несмещенная и состоятельная оценка корреляционной функции вычисляется по формуле

$$C_l = \frac{1}{(N-l)} \sum_{n=1}^{N-l} (k_n - \langle k_n \rangle) (k_{n+l} - \langle k_n \rangle).$$

Нормированная на дисперсию корреляционная функция $c_l = C_l / C_0$, где $C_0 = D(k_n)$ — дисперсия случайной величины k_n , называется автокорреляционной функцией случайного процесса.

Несмещенная и состоятельная оценка корреляционной функции $C_l^{(R)}$ связи двух стационарных случайных процессов $\{k_1, k_2, \dots, k_n, \dots, k_N\}$ и $\{r_1, r_2, \dots, r_n, \dots, r_N\}$ вычисляется по аналогичной формуле

$$C_l^{(R)} = \frac{1}{(N-l)} \sum_{n=1}^{N-l} (k_n - \langle k_n \rangle) (r_{n+l} - \langle r_n \rangle),$$

нормированная корреляционная функция в этом случае

$$c_l^{(R)} = C_l^{(R)} / \sqrt{C_0 C_0^{(R)}}.$$

В этих обозначениях формулы для определения систематической погрешности функционалов $k_{\text{эф}}$ и R можно записать в виде

$$\Delta_K = -\frac{1}{k_{\text{эф}}} \sum_{l=1}^{N-1} C_l; \quad (2)$$

$$\Delta_R = -\frac{1}{k_{\text{эф}}} \sum_{l=1}^{N-1} C_l^{(R)}. \quad (3)$$

При увеличении числа поколений между оценками корреляционная связь между ними уменьшается, т.е. есть такое расстояние между поколениями L , начиная с которого корреляционная связь между оценками пренебрежимо мала.

Стационарность случайного процесса и стремление к нулю соответствующей корреляционной функции при $l \rightarrow \infty$ являются условиями состоятельности и несмещенности оценки среднего выборочного значения случайного процесса [2]. Таким образом, для практического применения формул (2), (3) параметры моделирования методом Монте-Карло должны быть выбраны так, чтобы выполнить эти условия.

Заменяя суммирование по l от 1 до $N-1$ суммированием до некоторого параметра L , формулы (2), (3) можно переписать следующим образом:

$$\Delta_K = -\frac{1}{k_{\text{эф}}} \sum_{l=1}^L C_l = -\frac{1}{k_{\text{эф}}} S_L^{(K)}; \quad (4)$$

$$\Delta_R = -\frac{1}{k_{\text{эф}}} \sum_{l=1}^L C_l^{(R)} = -\frac{1}{k_{\text{эф}}} S_L^{(R)}. \quad (5)$$

Здесь L — максимальное расстояние между поколениями, после которого корреляционная связь между оценками пренебрежимо мала; S_L — сумма L элементов корреляционной функции.

Расчет смещения оценок функционалов в многопроцессорном режиме. Основная трудность численной оценки смещения функционалов при расчете систем, размеры которых во много раз превышают площадь миграции нейтронов, заключается в необходимости моделирования большого числа поколений для вычисления корреляционной функции C_l и, следовательно, суммы S_L с приемлемой статистической погрешностью. Так, в расчете полномасштабной трехмерной модели ВВЭР-1000 с числом нейт-

ронов в поколении 200, числом поколений 500 000, полным числом историй 10^8 средне-квадратичное отклонение S_L составляет $\sim 25\%$.

В программе MCU [3] реализован алгоритм распараллеливания вычислений, в котором расчеты на разных процессорах проходят независимо. Это гарантируется выбором генератора псевдослучайных чисел [4]. Поэтому оценки смещения, полученные на каждом процессоре с номером p по формулам (4), (5), являются независимыми. Следовательно, оценку смещения можно получить усреднением смещений на каждом процессоре.

Аналогичные рассуждения можно применить и к коэффициентам корреляции C_l^p , полученным на отдельных процессорах:

$$C_l = \frac{1}{P} \sum_{p=1}^P C_l^p, \quad l = 1, 2, \dots, L, \quad (6)$$

где P — полное число процессоров.

Усреднение, выполняемое по формуле (6), хорошо известно в теории случайных процессов [2]. Если имеется несколько независимых реализаций одного и того же случайного процесса (в нашем случае P реализаций), усреднение позволяет повысить точность оценки корреляционной функции C_l .

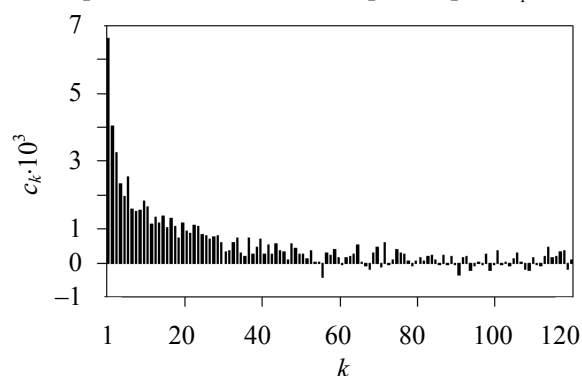
Очевидно, что в процессе расчета затруднительно вычислять коэффициенты корреляции. Задача существенно упрощается, если расчет проводить на основе оценок функционалов на поколениях, сохраненных для каждого процессора в отдельные файлы.

В практических расчетах необходимо использовать некоторый критерий выбора расстояния между поколениями L , после которого корреляционная связь между оценками пренебрежимо мала. В программе MCU для статистического анализа расчетов методом Монте-Карло используется такой [5]: если при прибавлении $L + 1$ -го и $L + 2$ -го слагаемого сумма S_L изменяется незначительно, то считается, что все C_l , $l = L + 1, L + 2, \dots$, значимо от нуля не отличаются и суммирование на этом обрывается. Параметр L определяется с использованием этого алгоритма применительно к усредненным по процессорам коэффициентам C_l , рассчитанным по формуле (6).

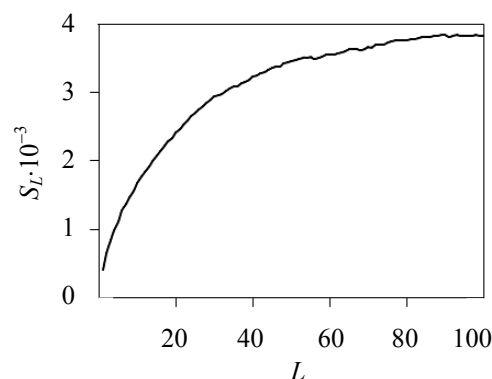
Покажем возможность применения формул (4), (5) и усреднения по процессорам для расчета

методом Монте-Карло одного из состояний ВВЭР-1000 энергоблока № 1 Ростовской АЭС при пусковых экспериментах на минимально контролируемом уровне мощности [6]. В используемой полномасштабной трехмерной модели каждая ТВС активной зоны (всего 163) разбита на 14 слоев по высоте, что составило в сумме 2282 регистрационные зоны. Проведено девять расчетов со следующим числом частиц в поколении: 200, 500, 1000, 2000, 5000, 10 000, 20 000, 50 000, 100 000, 500 000. Стационарность случайных процессов для рассматриваемых в данной работе оценок была показана в работе [7].

На рис. 1 видно, что $c_l \rightarrow 0$ при $l \rightarrow \infty$, поэтому сумма L элементов корреляционной функции S_L становится почти постоянной с некоторого L — в данном случае $L \sim 90$ (рис. 2). Это подтверждает состоятельность и несмещенность оценки среднего выборочного, а также позволяет применять формулу (5) и усреднение по процессорам для вычисления смещения. В рассматриваемом состоянии реактора $k_{эф} = 1$,



Р и с. 1. Автокорреляционная функция c_k от k , полученная при оценке смещения эффективного коэффициента размножения при числе частиц в поколении $M = 200$

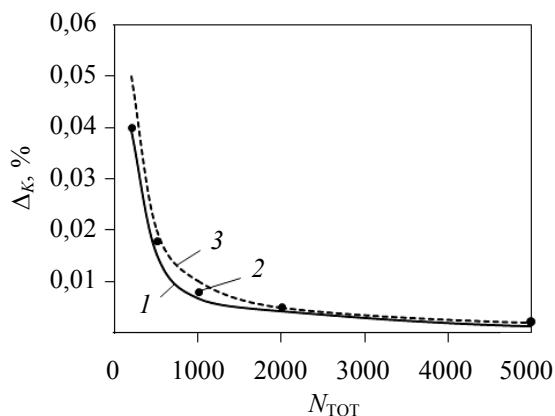


Р и с. 2. Зависимость суммы L элементов корреляционной функции S_L от параметра L , полученная при оценке смещения эффективного коэффициента размножения при числе частиц в поколении $M = 200$

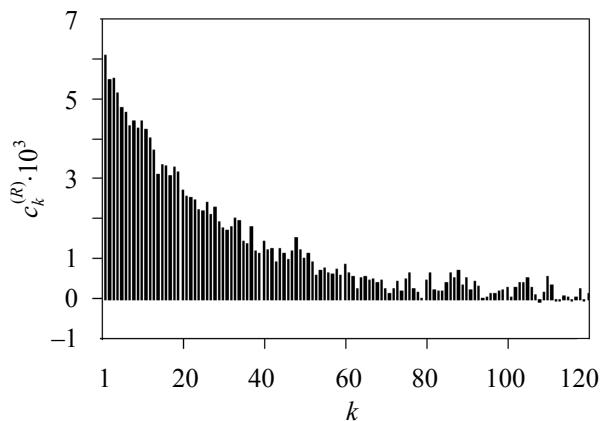
поэтому смещение в его оценке равно значению S_L при $L = 90$, взятому со знаком минус, что составляет $\Delta_K = -3,9 \cdot 10^{-4}$.

Экспериментальные оценки смещения вычисляли как отличие функционала при данном числе частиц в поколении от точного значения. В качестве точных принимали результаты при $M = 500\,000$. Теоретическая и экспериментальная оценки систематической погрешности $k_{\text{эф}}$ в зависимости от числа частиц в поколении хорошо согласуются, что подтверждает эффективность реализованных алгоритмов (рис. 3).

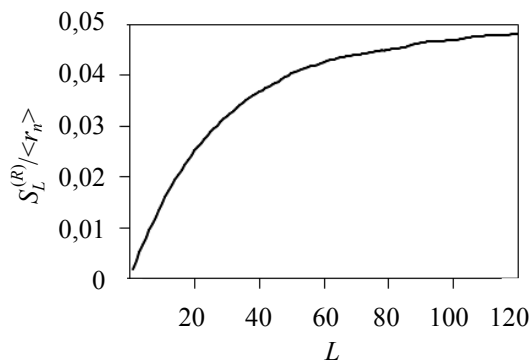
Аналогичные графики для оценки смещения скорости реакции деления представлены на рис. 4–6. На рис. 5 показана зависимость суммы S_L первых L элементов корреляционных функций при числе частиц в поколении $M = 200$. Сумма коэффициентов корреляции становится почти постоянной при $L > 120$. Корреляционная функция здесь нормирована на скорость реакции деления в данном ноде, поэтому смещение ско-



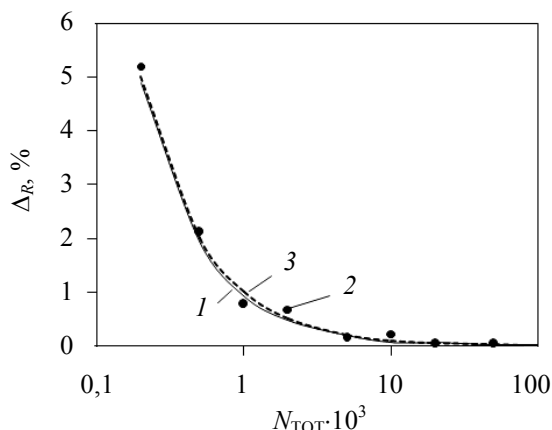
Р и с. 3. Зависимость теоретической (1) и экспериментальной оценки смещения (2) эффективного коэффициента размножения и функции $f = 10/M$ (3) от числа частиц в поколении



Р и с. 4. Нормированная корреляционная функция $c_k^{(R)}$, полученная при оценке скорости реакции деления в выбранном ноде при $M = 200$



Р и с. 5. Зависимость $S_L^{(R)}$ — суммы L элементов корреляционной функции, нормированной на скорость реакции деления в данном ноде, от параметра L при $M = 200$



Р и с. 6. Зависимость теоретической (1) и экспериментальной оценки смещения (2) скорости реакции деления в выбранном ноде и функции $f = 10/M$ (3) от числа частиц в поколении

рости реакции деления составляет $\Delta_R = -4,8\%$.

Анализ показывает, что для получения достоверной оценки $k_{\text{эф}}$ в данной задаче достаточно выбрать число частиц в поколении $M \geq 1000$. В этом случае систематическая погрешность Δ_K не превышает 0,01% (см. рис. 3). Для расчета скорости реакции деления в рассмотренном ноде следует выбирать $M \geq 10\,000$, тогда смещение Δ_R становится меньше 0,1% (см. рис. 6). Функция $f(M) = 10/M$ хорошо согласуется (с точностью до константы) с полученными теоретической и экспериментальной оценками смещения, что эмпирически подтверждает верность зависимости $\Delta_K \sim C/M$, где C — константа.

Заключение. В работе предложена методика расчета смещений оценок функционалов, полученных методом Монте-Карло с принудительным регулированием числа частиц в поколении, как для одно-, так и многопроцессорного режима расчетов. Все формулы запрограммиро-

ваны в виде отдельного модуля в составе программы MCU и апробированы при анализе смещения оценок коэффициента размножения и скорости реакции деления в выделенной регистрационной области полномасштабной активной зоны ВВЭР-1000, а также выборе одного из главных параметров расчета системы методом Монте-Карло — числа частиц в поколении.

Достоверная оценка систематических погрешностей позволяет повысить надежность результатов расчетов размножающих систем с использованием программ, реализующих метод Монте-Карло.

Формулы, приведенные в работе, универсальны и применимы при расчетах не только ВВЭР, но и любых других размножающих нейтроны систем (РБМК, PWR, BWR, хранилищ отработавшего ядерного топлива и др.).

Представленные в статье результаты получены в рамках выполнения НИР по проекту АЭС-2006.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Майоров Л.В. Оценки смещения результатов при расчете реакторов и хранилищ ядерного топлива методом

- Монте-Карло. — Атомная энергия, 2005, т. 99, вып. 4, с. 243—256.
2. Свешников А.А. Прикладные методы теории случайных функций. Изд. 2-е, перераб. и доп. М.: Наука, 1968.
3. Яглом А.М. Корреляционная теория стационарных случайных функций (с примерами из метеорологии). Л.: Гидрометеиздат, 1981.
4. Гомин Е.А. Статус MCU-4. — Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 6—32.
5. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Курс статистического моделирования. М.: Наука, 1976.
6. Олейник Д., Калугин М., Сухино-Хоменко Е. и др. Полномасштабная математическая модель переноса нейтронов в активной зоне реактора ВВЭР-1000, основанная на методе Монте-Карло и реализованная на многопроцессорных ЭВМ. Тезисы докл. 6-й Межд. научно-технич. конф. «Обеспечение безопасности АЭС с ВВЭР». ОКБ «Гидропресс», 26—29 мая 2009 г., с. 57.
7. Калугин М.А., Олейник Д.С., Сухино-Хоменко Е.А. Статистическая погрешность результатов расчетов реакторов методом Монте-Карло. — Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов, 2010, вып. 4, с. 10—18.

Поступила в Редакцию 25.02.11

УДК 621.039.58

СРЕДНЕМАСШТАБНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ С ПОЛУЧЕНИЕМ ПРОТОТИПНОГО РАСПЛАВА МАССОЙ ~100 кг И ИССЛЕДОВАНИЕ ЕГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С БЕТОНОМ

Огородников В.А., Кондрашенко А.В., Мочалов М.А., Пелесков С.А., Андросов Ю.Н., Ерунов С.В., Пешков В.В., Бликов А.О. (РФЯЦ — ВНИИЭФ, г. Саров, Нижегородская обл.), Фунтиков А.И. (ОИВТ РАН, г. Москва)

Развитие крупномасштабной ядерной энергетики в XXI в. потребует более высокого уровня безопасности АЭС. Безопасность ядерной энергетической установки становится центральным вопросом. Несмотря на то что в системе средств и способов ее безопасности на первый план будет выдвигаться максимальное использование средств внутренней защищенности, по-прежнему актуальным является развитие внешних средств, в частности, ловушек расплава активной зоны, которые предотвратят распространение радионуклидов при крупной аварии, связанной с разрушением реактора.

В РФЯЦ — ВНИИЭФ в последние 20 лет среди многих направлений исследований можно особо выделить обоснование и реализацию воз-

можности моделирования соответствующих аварийных режимов ЯЭУ с помощью неядерных источников энергии: химических взрывчатых веществ, химически активных составов и др. [1]. Поскольку проведение аварийных экспериментов с ЯЭУ в натурных условиях невозможно, большинство исследований выполнено во вне-реакторных условиях и, как правило, в уменьшенных масштабах. Этим объясняется ограниченный объем экспериментальных данных о расплаве активной зоны, который представляет собой смесь расплава оксидного топлива и конструкционных материалов активной зоны при внутрикорпусной фазе аварии или еще более сложную систему, образующуюся после взаимодействия расплава со стальным корпусом