

1. Бартоломей Г.Г., Бать Г.А., Байбаков В.Д., Алхутов М.С. Основы теории и методы расчета ядерных энергетических реакторов. М.: Энергоатомиздат, 1989.
2. Терешонок В.А., Степанов В.С., Поваров В.П., Лебедев О.В. Исследование поведения реакторной установки ВВЭР-1000 в переходном режиме, вызванном малым снижением мощности. — Атомная энергия, 2002, т. 93, вып. 4, с. 319—320.
3. Аверьянова С.П., Косоуров К.Б., Семченков Ю.М. и др. Исследование ксеноновых переходных процессов в ВВЭР-1000 на Тяньваньской АЭС (Китай). — Там же, 2008, т. 105, вып. 4, с. 183—190.
4. Аверьянова С.П., Ковель А.И., Мамичев В.В., Филимонов П.Е. Развитие, внедрение и современное состояние расчетной программы «Имитатор реактора». — Там же, с. 237—240.
5. Аверьянова С.П., Косоуров К.Б., Семченков Ю.М. и др. Испытание усовершенствованных алгоритмов управления энерговыделением ВВЭР-1000 в условиях маневренных режимов на Тяньваньской АЭС (Китай). — Там же, 2007, т. 103, вып. 5, с. 277—282.

Поступила в Редакцию 19.05.11

УДК 621.039.519.2

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ПРОВЕРКА КОРРЕКТНОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ АЛГОРИТМА НОРМАЛИЗАЦИИ ПОКОЛЕНИЙ В РАСЧЕТАХ ЯЭУ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Гуревич М.И., Тельковская О.В., Чукбар Б.К., Шкаровский Д.А. (НИЦ «Курчатовский ин-т», г. Москва)

Процессы, происходящие внутри активной зоны ядерно-энергетических установок (ЯЭУ), часто моделируются с помощью решения однородного уравнения переноса нейтронов методом Монте-Карло. Для этого используется метод поколений, включающий, как и все алгоритмы задач на максимальное собственное значение, процесс нормализации, который состоит в сохранении нормы вектора, например, суммы абсолютных значений компонентов результата каждой итерации. Среди разных методов нормализации, применяемых в методе Монте-Карло, алгоритм, предложенный А.Д. Франк-Каменецким [1], характеризуется простотой реализации при минимальной дисперсии получаемых вторичных частиц. В силу этого он входит в пакет программ MCU [2].

При работе с большим числом частиц в поколении (оно может достигать 1 млн) возникает необходимость анализа качества используемых датчиков псевдослучайных чисел. При таком числе частиц необходима проверка статистических характеристик алгоритма нормализации.

В настоящей статье использовано упрощение — вес вторичных частиц одинаков, что соответствует реализации алгоритма [1].

Нормализация в самом общем виде сводится к следующему: набор нейтронов, получаемый при моделировании деления ядер и имеющий случайную сумму статистических весов, преобразуется в набор со стандартной в пределах до-

пустимого интервала суммой весов [1, 3]. Набор частиц, полученный при моделировании, будем называть вторичными нейтронами, преобразованный — очередным поколением нейтронов. При нормализации не возникает новых фазовых координат частиц — любая частица из поколения имеет фазовые координаты, взятые от какой-либо частицы из набора вторичных нейтронов. Будем считать, что новая частица получена из старой.

Равноправие вторичных частиц соблюдается в следующем смысле. Пусть w_1, w_2 — вес двух частиц до нормализации, W_i — суммарный вес частиц, полученных из i -й частицы. Тогда случайные величины W_i имеют математическое ожидание, удовлетворяющее равенству

$$M(W_1)/M(W_2) = w_1/w_2. \quad (1)$$

Алгоритм [1] можно описать следующим образом.

Имеется фиксированное для данного расчета число N , и каждое поколение состоит из N частиц с весом 1. На вход блока нормализации поступает H частиц с весом $w_{0,0}, w_{1,0}, \dots, w_{H-1,0}$ и с суммарным весом $W_0 = w_{0,0} + w_{1,0} + \dots + w_{H-1,0}$. Суммарный вес приводится к требуемому N , вес $w_{j,0}$ заменяется на вес $w_j = w_{j,0}N/W_0$. Теперь суммарный вес набора вторичных частиц совпадает с суммарным весом поколения. Образуется шкала

Вторичной частице с номером j будет соответствовать отрезок $[v_j, v_{j+1})$.

$$\begin{aligned} v_0 &= 0; v_1 = w_0; v_2 = w_0 + w_1; \dots; \\ v_H &= w_0 + w_1 + \dots + w_{H-1} = N. \end{aligned}$$

Далее берем псевдослучайное число ξ из $(0,1)$, и k -я частица нового поколения получается из той вторичной частицы, в отрезок которой попадает точка $\xi + k$ (номера частиц поколения также начинаются с нуля). Если вторичная частица имеет вес W , то из нее гарантированно получается $[W]$ частиц и с вероятностью $W-[W]$ еще одна дополнительная частица. Здесь $[W]$ — целая часть числа W . Разброс числа полученных частиц минимален. Операцию приведения суммарного веса можно считать точной, веса вторичных частиц считаются одинаковыми, т.е. они примут значение $w_j = w = N/H$.

Будем оценивать правильность работы алгоритма для различных значений H . Если $H \leq N$, то N представимо в виде $N = LH + M$, где $H > M \geq 0$ и $L > 0$. При любом ξ из каждой вторичной частицы получается L частиц, всего (LH) частиц. Выбор остальных частиц будет точно таким же, как если бы число частиц в поколении было M , а не N . Так что в дальнейшем будет считаться, что $H > N$. В этом случае из каждой вторичной частицы получается не более одной в поколении — вторичная частица или выбирается, или не выбирается для использования.

Предположим, что числа N и H имеют нетривиальный наибольший общий делитель m , т.е. $N = mn$, $H = mh$, и числа n и h взаимно просты. Тогда в шкале $\{v_i\}$ значения являются целыми для $i = 0, h, 2h, \dots, mh$. Поэтому выбор частицы с номером i всегда сопровождается выбором всех частиц с номерами, сравнимыми с i по модулю h . В этом случае формирование из h вторичных частиц поколения из n частиц полностью описывает формирование из H вторичных частиц поколения из N частиц.

Достаточно исследовать случай, когда $H > N$ и числа N и H взаимно просты. Для этого можно применить модификацию критерия Пирсона для проверки частот, описанную далее.

Предположим, имеется последовательность из M независимых в совокупности одинаково распределенных случайных векторов $\mathbf{x}_k$ размерности H . Математическое ожидание любого $\mathbf{x}_k$ есть вектор $\mathbf{c}$, ковариационная матрица — $\mathbf{K}_x$, ее ранг — h . Существуют унитарная матрица $\mathbf{U}$ и диагональная матрица с неотрицательными элементами $\mathbf{\Lambda}$, такие, что $\mathbf{K}_x = \mathbf{U}^* \mathbf{\Lambda}^2 \mathbf{U}$. Преобразование $\mathbf{y}_k = \mathbf{U}(\mathbf{x}_k - \mathbf{c})$ дает последовательность независимых в совокупности одинаково распределенных случайных векторов $\mathbf{y}_i$ размерности H с

нулевым математическим ожиданием и ковариационной матрицей $\mathbf{\Lambda}^2$. Можно считать, что все h ненулевых элементов ковариационной матрицы лежат в первых h строках и последние $H-h$ элементов векторов тождественно равны 0. Из этого следует, что последние $H-h$ компонентов векторов $\mathbf{y}_k$ тождественно равны 0.

Обозначим $\mathbf{V}$ матрицу из h строк и H столбцов, элемент с индексом (i,i) которой будет равен $1/\Lambda_{ii}$, а все прочие элементы равны нулю. Векторы размерности h $\mathbf{z}_k = \mathbf{V}\mathbf{y}_k$ независимы в совокупности и одинаково распределены, они имеют нулевое математическое ожидание и единичную ковариационную матрицу. Распределение случайного вектора

$$\mathbf{Z} = (\mathbf{z}_1 + \mathbf{z}_2 + \dots + \mathbf{z}_M)/M^{1/2}$$

для достаточно больших значений M в силу центральной предельной теоремы будет [5, 6] близко к нормальному распределению с нулевым математическим ожиданием и единичной ковариационной матрицей. Квадрат нормы вектора $\mathbf{Z}$ имеет распределение, примерно равное χ^2 с h степенями свободы [5].

Обозначим $\mathbf{u}_m$ m -й столбец матрицы $\mathbf{U}^*$, λ_m — диагональный элемент на m -й строке матрицы $\mathbf{\Lambda}$. $\mathbf{X}$ обозначим сумму из M исходных векторов

$$\mathbf{X} = \mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2 + \dots + \mathbf{x}_M.$$

Тогда квадрат нормы вектора $\mathbf{Z}$ можно выразить через эти величины

$$|\mathbf{Z}|^2 = [(\mathbf{u}_1, \mathbf{X} - M\mathbf{c})^2/\lambda_1^2 + |(\mathbf{u}_2, \mathbf{X} - M\mathbf{c})|^2/\lambda_2^2 + \dots + |(\mathbf{u}_h, \mathbf{X} - M\mathbf{c})|^2/\lambda_h^2]/M. \quad (2)$$

Гипотезу о распределении векторов $\mathbf{x}_i$ можно проверить по критерию χ^2 , если удастся найти матрицы $\mathbf{U}$ и $\mathbf{\Lambda}$.

Для проверки гипотезы о том, что при данных значениях N и H алгоритм обеспечивает теоретическое распределение результатов, каждому значению ξ_k сопоставим вектор-столбец $\mathbf{x}_k$, в котором j -я позиция равна 1, если j -я вторичная частица выбрана, и 0 в противном случае. Гипотеза предполагает, что статистические характеристики алгоритма нормализации те же, что и при использовании в качестве случайных чисел действительно независимых случайных величин, равномерно распределенных на $(0,1)$. В этом случае математическое ожидание и ковариационную матрицу можно рассчитывать следующим образом.

Математическое ожидание любого вектора $\mathbf{x}_i$ есть столбец с $w = N/H$ в любой позиции. Это число есть вероятность выбора любой вторичной частицы. Вероятность $p_{\alpha\beta}$ одновременной выборки частиц с номерами α и β есть вероятность того, что открытые отрезки $(\alpha w, (\alpha+1)w)$ и $(\beta w, (\beta+1)w)$ одновременно содержат числа, сравнимые с ξ по модулю целых чисел, т.е. числа, разность которых и ξ есть целое число [7]. Следовательно, вероятность $p_{\alpha\beta}$ есть длина пересечения образов отрезков $(\alpha w, (\alpha+1)w)$ и $(\beta w, (\beta+1)w)$ при отображении числа на его дробную часть. Из этого очевидно

$$p_{\alpha\beta} = p_{0,\beta-\alpha}; \quad p_{0\alpha} = p_{\alpha 0} = p_{0,H-\alpha}. \quad (3)$$

Матрица $(p_{\alpha\beta})$ — циркулянт [8] и симметрична.

Все соответствующие вторичным частицам отрезки состоят из N малых отрезков длиной $1/H$ вида $(a/H, (a+1)/H)$, где a — некоторое целое число. Два отрезка $(a/H, (a+1)/H)$ и $(b/H, (b+1)/H)$ при проецировании на единичную окружность либо совпадают при $a \equiv b \pmod{H}$, либо не имеют общих внутренних точек. Пересечение образов отрезков $(0, w)$ и $(\alpha w, (\alpha+1)w)$ представляет набор из нескольких упомянутых малых отрезков, и их число равно числу целых чисел из набора $\alpha N, \alpha N+1, \dots, \alpha N+N-1$, сравнимых по модулю H с одним из чисел $0, 1, \dots, N-1$. В каждом наборе все числа попарно не сравнимы по модулю H , и для каждого числа из одного набора существует в другом не более одного сравнимого с ним числа.

Обозначим упомянутое количество сравнимых пар чисел D_α . Тогда

$$p_{0\alpha} = D_\alpha/H.$$

Таким образом, ковариационная матрица также циркулянт и симметрична, поскольку ее элементы есть

$$K_{\alpha\beta} = p_{\alpha\beta} - w^2.$$

Циркулянт размерности H осуществляет свертку в пространстве функций на группе вычетов по модулю H [8], следовательно, ковариационная матрица приводится к диагональному виду преобразованием Фурье на этой группе.

Искомое преобразование $\mathbf{x}_k$ в $\mathbf{y}_k$ определяется формулой

$$y_{kj} = H^{-1/2} \sum_{\alpha=0}^{H-1} (\mathbf{x}_{k\alpha} - \mathbf{c}_\alpha) \exp(2\pi i j \alpha / H).$$

Величины с индексами j и α означают компоненты соответствующих векторов.

Собственные значения ковариационной матрицы в силу равенств (3) получаются применением к ее первой строке ненормированного преобразования Фурье, т.е. предыдущей формулы без множителя $H^{-1/2}$:

$$(\lambda_j)^2 = \sum_{\alpha=0}^{H-1} K_{0\alpha} \exp(2\pi i j \alpha / H).$$

В используемых обозначениях первая строка матрицы есть $\mathbf{K}_{0\alpha} = (\mathbf{D}_\alpha/H - w^2)$. Постоянная строка $(-w^2, -w^2, \dots, -w^2)$ преобразуется в строку $(-w^2 H, 0, 0, \dots, 0)$. Поэтому достаточно вычислить ненормированное преобразование Фурье от строки (D_α) .

Введем величину $u_{lj\alpha}$ по следующему правилу. При $l \equiv j + \alpha N \pmod{H}$ она равна 1, в противном случае — 0. Тогда

$$D_\alpha = \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{j=0}^{N-1} u_{lj\alpha}.$$

Обозначим ненормированное преобразование Фурье строки (D_α) через (D_β^*) .

Вследствие взаимной простоты чисел H и N существует целое число L , такое, что $LN \equiv 1 \pmod{H}$. Для любых l и j сравнение $l \equiv j + \alpha N \pmod{H}$ равносильно сравнению $\alpha \equiv (l - j) L \pmod{H}$. Неотрицательное число $\alpha < H$ однозначно определено числами l и j .

В сумме

$$\sum_{\alpha=0}^{H-1} u_{lj\alpha} \exp(2\pi i \beta \alpha / H)$$

точно один экземпляр $u_{lj\beta}$ отличен от нуля, сумма равна $\exp(2\pi i L(l - j)\beta/H)$.

Следовательно, для $\beta \neq 0$

$$D_{\beta}^* = \sum_{\alpha=0}^{H-1} D_{\alpha} \exp\left(\frac{2\pi i \beta \alpha}{H}\right) = \left[\sum_{l=0}^{N-1} \exp\left(\frac{2\pi i \beta l L}{H}\right) \right] \left[\sum_{j=0}^{N-1} \exp\left(-\frac{2\pi i \beta j L}{H}\right) \right].$$

Последнее выражение в силу сравнения $LN \equiv 1 \pmod{H}$ преобразуется в равенство

$$D_{\beta}^* = \frac{1 - \cos(2\pi\beta/H)}{1 - \cos(2\pi\beta L/H)}.$$

Аналогично для случая $\beta = 0$ получаем $D_{\beta}^* = N^2$.

Собственное число с индексом 0 есть

$$\lambda_0 = D_0^*/H - w^2 H = H^{-1} N^2 - (N/H) = 0.$$

Остальным значениям индекса β соответствуют собственные числа

$$(\lambda_{\beta})^2 = \frac{D_{\beta}^*}{H} = \frac{1}{H} \frac{1 - \cos(2\pi\beta/H)}{1 - \cos(2\pi\beta L/H)} = \frac{\sin^2(\pi\beta/H)}{H \sin^2(\pi\beta L/H)}.$$

Таким образом, для фиксированного числа вторичных частиц и размера поколения получено как собственное число идеальной ковариационной матрицы, так и унитарное преобразование У, которое есть дискретное преобразование Фурье. Поскольку его нужно провести лишь один раз для суммы векторов выборки, затрачиваемое время не играет большой роли даже для очень больших величин H и N .

В большинстве программных реализаций быстрого преобразования Фурье предлагается ненормированная версия — без множителя $H^{-1/2}$. Поэтому формулы (2), (3) удобно преобразовать к виду

$$Y_j = \sum_{\alpha=0}^{H-1} (X_{\alpha} - c_{\alpha}) \exp\left(\frac{2\pi i j \alpha}{H}\right);$$

$$|Z|^2 = \{ [Y_1 |\sin(\pi L/H)/\sin(\pi/H)|]^2 + \dots + [Y_{H-1} |\sin(\pi L(H-1)/H)/\sin(\pi(H-1)/H)|]^2 \} / M.$$

Как известно [7], проверка на взаимную простоту чисел $H > N > 0$ и вычисление $L = (1/N) \pmod{H}$ сводятся к простым итерациям (алгоритм Евклида)

$$p_0 = H; \quad c_0 = 0;$$

$$p_1 = N; \quad c_1 = 1;$$

$$a_k = [p_{k-1}/p_k]; \quad p_{k+1} = p_{k-1} - a_k p_k; \quad c_{k+1} = c_{k-1} - a_k c_k.$$

Если числа H и N взаимно просты, то для некоторого m целое число $p_m = 1$ и целое число $c_m = 1/N \pmod{H}$, т.е. можно положить $L = c_m$. Если $N = rn$, $H = rH$ при $r > 0$, для некоторого m целое число $p_m > 1$, следующее число $p_{m+1} = 0$. В этом случае $c_m = (1/n) \pmod{h}$. Нет нужды делать новые вычисления при переходе от пары $\{H, N\}$ к паре $\{h, n\}$.

Для последовательности $\{a_k\}$ выполнено неравенство $a_k < H$, поэтому соответствующие вычисления можно проводить с 31-разрядным целым положительным числом. При расчете последовательности $\{c_k\}$ такого ограничения нет, но достаточно проводить вычисления по модулю H . Следовательно, достаточно обеспечить действия с целыми числами в пределах $[0, H^2]$.

Для 32-разрядного представления целых чисел возникает ограничение $H < 2^{31/2} \approx 49\,000$. Такое число вторичных частиц даже при вычислениях на однопроцессорной ЭВМ может оказаться недостаточным, тем более оно недостаточно при полномасштабных расчетах реакторов на кластерах. При расчетах на кластерах поколение едино для всех процессоров, а нормализация есть единый процесс, так как систематическое смещение оценки в методе Монте-Карло обратно пропорционально числу нейтронов в поколении [9].

Стандартное для современных процессоров представление действительных чисел с двойной точностью имеет 53-разрядную мантиссу, так что не сложно организовать расчет при $H < 2^{25} \approx 32 \cdot 10^6$, что можно считать удовлетворительным.

Статистическая проверка корректности работы алгоритма нормализации для любых фиксированных значений числа частиц в поколении и числа вторичных частиц не требует значительных затрат вычислительных ресурсов. Для проверки корректности применения алгоритма в расчетах по программе MCU рассматривался набор значений числа вторичных частиц при одном и том же числе частиц в поколении, при этом использовался стандартный для программы MCU датчик случайных чисел, основанный на последовательности Фибоначчи [10]. В качестве тестовых значений использовали наборы H , N , характерные и для относительно небольших, и для полномасштабных расчетов реакторов (см. таблицу).

Исследование датчика случайных чисел

Выборочное значение $\chi^2, Z ^2$	Наибольший общий делитель	95%-ный квантиль распределения χ^2	Суммарная вероятность	Число вторичных частиц H
Число частиц в поколении $N = 1000$, число испытаний 20 тыс.				
1078,4	1	1074,7	0,9574	1001
1035,3	1	1076,8	0,7736	1003
105,6	10	124,3	0,668	1010
149,1	8	154,3	0,9124	1024
233,3	5	240,5	0,9072	1035
155,6	8	165,3	0,8674	1104
271,3	5	272,8	0,9432	1185
299,4	5	287,9	0,9824	1255
217,6	8	219,9	0,938	1504
257,5	8	277,1	0,791	1928
Число частиц в поколении $N = 10\,000$, число испытаний 20 тыс.				
10 203,0	1	10 233,7	0,9236	10 001
10 232,1	1	10 235,8	0,9472	10 003
1078,4	10	1074,7	0,9574	10 010
0110,1	1	10 260,1	0,7246	10 027
2081,0	5	2127,7	0,8238	10 115
2597,5	4	2668,6	0,7486	10 204
2200,5	5	2166,7	0,9842	10 305
12 563,9	1	12 761,2	0,658	12 501
3802,7	4	3893,6	0,7302	15 004
4882,0	4	4917,6	0,9008	19 028

Из приведенных результатов видно, что с уровнем значимости 0,05 алгоритм [1] с генератором псевдослучайных чисел по алгоритму [10] удовлетворяет требованиям к нормализации

частиц в поколениях для полномасштабных расчетов ЯЭУ методом Монте-Карло.

Работа поддержана грантом РФФИ № 10-07-00614-а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Золотухин В.П., Майоров Л.В. Оценка параметров критичности реакторов методом Монте-Карло. М.: Энергоатомиздат, 1984.
2. Гомин Е.А. Статус MCSU-4. — Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 6—32.
3. Blomquist B., Gelbard E. Alternative implementation of the Monte Carlo power method. — Nucl. Sci. Engng, 2002, v. 141, № 2, p. 85—100.
4. MCNPTM — a General Monte Carlo N -Particle Transport Code. Version 4B. LA-1265-M, 1997.
5. Тюрин Ю.Н., Макаров А.Л. Статистический анализ данных на компьютере. М., ИНФРА-М, 1998.
6. Феллер В. Введение в теорию вероятностей. Т. 2. М.: Мир, 1967.
7. Манин Ю.И., Панчишкин Д.Д. Введение в современную теорию чисел. М., МЦНМО, 2009.
8. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. М.: Наука, 1984.
9. 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.
10. Marsaglia G., Zaman A., Tsang W.W. Toward a universal random number generator. — Statistics & Probability Lett., 1990, v. 9, № 1, p. 35—39.

Поступила в Редакцию 03.05.2011

УДК 621.039.577:629.78

ДИФФУЗИЯ КОМПОНЕНТОВ И ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ ТОПЛИВА ПО ПОВЕРХНОСТИ СООБЩАЮЩИХСЯ ПОЛОСТЕЙ ТЕРМОЭМИССИОННОГО ЭЛЕКТРОГЕНЕРИРУЮЩЕГО КАНАЛА

Агафонов В.Р., Ярыгин В.И. (ГНЦ РФ — ФЭИ им. А.И. Лейпунского, г. Обнинск)

Наиболее привлекательные массогабаритные характеристики космических ЯЭУ обеспечивает встраиваемый в реактор-преобразователь многоэлементный термоэмиссионный электрогенерирующий канал (ЭГК). Невысокие требования к ресурсу, относительная простота и технологичность обусловили выбор для ЯЭУ первого поколения «Топаз» ЭГК с вентиляцией полостей твэлов через межэлектродные зазоры

[1]. Указанная особенность сохранена в некоторых современных разработках ЭГК, ориентированных на использование в составе ЯЭУ второго поколения с ресурсом 5—10 лет и более [2—4]. Однако выход компонентов и продуктов деления топлива в межэлектродный зазор, их влияние на эмиссионно-адсорбционные характеристики электродов и выходные электрические характеристики ЯЭУ недостаточно изучены [5].