

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 621.039:519.23

ОЦЕНКА НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ И АНАЛИЗ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ В ЗАДАЧАХ МОДЕЛИРОВАНИЯ НУКЛИДНОЙ КИНЕТИКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДУЛЯ SUN ПРОГРАММЫ BPSD

Чертовских О.И., Белов А.А. (ИБРАЭ РАН, г. Москва), Андрианова О.Н. (НИЯУ МИФИ, г. Москва)
e-mail: chertovskih@ibrae.ac.ru

Анализ неопределенности и чувствительности является важным этапом оценки точности расчетного обоснования проектных характеристик реакторных установок с быстрым спектром нейтронов и характеристик облученных материалов, циркулирующих в замкнутом топливном цикле [1]. В задачах нуклидной кинетики основным источником погрешностей являются неопределенности, обусловленные неточностью ядерных данных (нейтронные сечения, постоянные распада, коэффициенты ветвления и др.) и технологических параметров (начальный состав загружаемого топлива, кампания реактора, время выдержки, плотность нейтронного потока, тепловая мощность и др.).

Применительно к реакторным установкам с быстрым спектром нейтронов и замкнутому топливному циклу в ИБРАЭ РАН разрабатывается расчетный код BPSD для моделирования нуклидной кинетики, расчета активности и остаточного тепловыделения облученного топлива. Код предназначен для моделирования облучения материалов в быстрых реакторах в режиме как нормальной эксплуатации, так и при нарушении нормальной эксплуатации [2, 3].

Для BPSD разработан модуль анализа чувствительности и неопределенности SUN, который позволяет выполнить детерминистическую и стохастическую оценку неопределенности применительно к нуклидной кинетике, обусловленную неопределенностью ядерных данных и технологических параметров. Одновременная реализация двух взаимосогласованных методов оценки неопределенности позволяет расширить область применения BPSD.

Детерминистический метод основан на предположении о слабой зависимости рассчитываемого функционала $r = r(x_1, \dots, x_n)$ от исходных данных $x_1, \dots, x_n$ и применимости его разложения в ряд Тейлора с точностью до членов первого порядка [4]. В этом случае относительную погрешность δ_r функционала r оценивают по формуле

$$\delta_r^2 = \mathbf{S}^T \mathbf{W}(\mathbf{x}) \mathbf{S},$$

где $\mathbf{S}$ — вектор с элементами $\partial f_r / \partial x_i \cdot x_i / f_r$ (так называемые коэффициенты чувствительности функционала r к изменению исходных данных x_i); $\mathbf{W}(\mathbf{x})$ — ковариационная матрица относительной погрешности ядерных данных или технологических параметров. В отличие от стационарных нейтронно-физических в задачах нуклидной кинетики число исходных данных мало по сравнению с числом вычисляемых параметров. Коэффициенты чувствительности для данного класса задач могут быть рассчитаны путем прямого возмущения исходных данных без применения теории возмущения.

Стохастический метод оценки неопределенности основан на формировании случайных выборок согласно заданному распределению и выполнении многократных вариантных расчетов с последующей статистической обработкой результатов [5]. Состав облученного топлива можно представить в виде функции $\mathbf{N}(t) = f(t, \mathbf{x}, \mathbf{y})$ от входных данных: набор ядерных констант $\mathbf{x}$ и технологических параметров $\mathbf{y}$. На основе функций плотности распределения $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ формируются векторы случайных входных данных $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ и $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T$, для которых путем многократных расчетов с помощью кода BPSD формируется набор случайных значений характеристик облученного топлива $\mathbf{N}_i(t) = f(t, \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$, $i = 1, \dots, n$. На основе статистической обработки $\mathbf{N} = \{\mathbf{N}_i\}$ определяются погрешности расчета состава облученного топлива $D(\mathbf{N}) = M[\mathbf{N} - M(\mathbf{N})]^2$, где $D(\mathbf{N})$ — дисперсия; $M(\mathbf{N})$ — математическое ожидание. Данный метод более универсальный, но вместе с тем и более затратный. В SUN реализованы равномерный, нормальный и логарифмически нормальный многомерный тип распределения. Последнее требуется для моделирования распределения ядерных констант и технологических параметров, погрешность которых велика, что в случае нормального распределения может приводить к некорректным результатам [6].

Модуль SUN представляет собой надстройку над BPSD, осуществляющую в соответствии с реализованными алгоритмами оценки неопределенности подготовку исходных данных, параллельные многовариантные расчеты и статистическую обработку их результатов.

Тестовая задача. В качестве примера использования SUN рассмотрен тест, который основан на послереакторных исследованиях твэлов со смешанным уран-плутониевым топливом, облученных в БН-350 на границе зоны малого обогащения в 1984—1988 гг. [7]. В серии испытаний был изучен состав и определены характеристики (коэффициент воспроизводства, выгорание) облученных образцов топлива в активной зоне и торцевом экране. В настоящей работе в иллюстративных целях был выбран твэл, состав топлива которого после облучения исследовался без разделения активной части и нижнего торцевого экрана для исключения неточностей, связанных с определением границ активной зоны при его разделке, а также для моделирования реальных условий регенерации топлива, где такое разделение не предусматривается.

Образцы облучали в течение двух микрокампаний длительностью 86,9 и 87,2 эф. сут, затем ТВС помещали во внутриреакторное хранилище на 75,7 эф. сут. Содержание плутония в топливе на начало облучения составляло 21%. Изотопный состав плутония следующий, %: ^{238}Pu 0,01, ^{239}Pu 94,95, ^{240}Pu 4,75, ^{241}Pu 0,28, ^{242}Pu 0,01, ^{241}Am не менее 0,02, содержание ^{235}U в обедненном уране 0,3%.

С помощью кода BPSD было рассчитано изменение изотопного состава, требуемые для этих вычислений нейтронно-физические данные (одногрупповые сечения, спектр и плотность потока нейтронов для разных зон) были приняты в качестве исходных констант [2, 3].

Коэффициенты чувствительности и случайные выборки характеристик облученного топлива рассчитывали для 47 актиноидов — ^{228}Th , ^{230}Pa , ^{232}U , ^{236}Np и ^{238m}Np , ^{236}Pu и ^{238}Pu , ^{241}Am и ^{242m}Am , ^{242}Cm , ^{249}Bk , ^{249}Cf и двух эффективных осколков деления FP35 и FP39. Входными данными в расчетах являются одногрупповые нейтронные сечения радиационного захвата и деления σ_c , σ_f , постоянные распада λ , вероятность образования ^{242m}Am , а также технологические параметры: плотность потока нейтронов, нормированная на среднюю мощность и начальный состав образца топлива ρ . Для плотности потока нейтронов и вероятности образования ^{242m}Am относительная погрешность принята равной 4 и 4,5% соответственно, относительная погрешность остальных данных приведена в табл. 1. Погрешность одногрупповых сечений была вычислена на основе ковариационных матриц погрешностей оцененных ядерных данных из отечественной библиотеки БРОНД 3.1 и зарубежных ENDF/B-VIII (2018), JENDL-5 (2021), TENDL 2021 (2021), JEFF 4T (2022).

Т а б л и ц а 1. Относительная погрешность исходных данных, %

Нуклид	$\delta\rho$	$\delta\lambda$	Мин—макс	
			$\delta\sigma_c$	$\delta\sigma_f$
^{234}U	100	0,24	7—26	2—28
^{235}U	3,92	0,07	2—7	1—2
^{236}U	—	0,17	3—28	1—33
^{238}U	0,02	0,07	1—5	1—2
^{237}Np	—	0,33	5—22	2—4
^{238}Pu	1,54	0,11	8—46	1—10
^{239}Pu	0,11	0,12	3—6	1
^{240}Pu	1,68	0,11	4—23	1—6
^{241}Pu	15,83	0,04	6—15	1—6
^{242}Pu	50	0,29	5—10	2—9
^{241}Am	4,52	0,14	2—9	1—8
^{242m}Am	—	1,42	17—59	3—<100
^{243}Am	—	0,2	4—10	2—8
^{242}Cm	—	0,04	19—63	3—<100
^{243}Cm	—	0,34	16—66	3—10
^{244}Cm	—	0,17	12—25	3—13
^{245}Cm	—	1,18	16—55	2—5

В табл. 1 приводится минимальная и максимальная относительная погрешность одногрупповых сечений, вычисленная по различным библиотекам. Для сопоставления методов принята консервативная оценка погрешности одногрупповых сечений, соответствующая максимальному значению из табл. 1.

В табл. 2 приведены оценки составляющих неопределенности, полученные детерминистическим методом на основе вычисления коэффициентов чувствительности и стохастическим на основе формирования выборок разной размерности 100 и 10 000. Детерминистическим методом оценена константная погрешность минимальной и максимальной погрешности одногрупповых сечений. Разброс погрешности одногрупповых сечений, оцененной по ковариационным матрицам разных библиотек, приводит к существенным отличиям погрешности рассчитываемых величин. Особенно сильно это различие проявляется в определении числа ядер актиноидов ^{240}Pu — ^{242}Pu , америкия и кюрия. Результаты тестовых расчетов свидетельствуют о согласии оценок неопределенности, которые выполнены двумя принципиально разными методами, реализованными в модуле SUN, для всех нуклидов и всех рассчитанных функционалов.

Время расчета константной составляющей погрешности стохастическим методом для 10 000 вариантов составило ~2 ч, детерминистическим — ~12 мин.

Оценки показывают, что с учетом разброса погрешностей одногрупповых нейтронных сечений, оцененных по различным библиотекам, константная

Таблица 2. Относительная погрешность параметров облученного топлива, обусловленная неопределенностью исходных данных, %

Параметр	Р/Э, отн. ед.	Технологические параметры			Ядерные данные		
		Детерминистический метод	Стохастический метод		Детерминистический метод (мин—макс)	Стохастический метод	
			100	10 000		100	10 000
Изотопная доля нуклида:							
^{234}U	0,21	47,6	45,5	46,9	0,2—1,1	1,2	1,1
^{235}U	0,99	2,2	1,9	1,9	0,1—0,3	0,4	0,3
^{236}U	0,86	4,3	4	4,2	1,6—5,6	5,5	5,5
^{238}U	1	0,01	0,01	0,01	0,001	0,001	0,001
^{238}Pu	1,14	3,5	3,1	3,4	1,4—6,1	6,4	6,1
^{239}Pu	0,99	0,2	0,2	0,2	0,1—0,3	0,2	0,3
^{240}Pu	1	1,8	1,6	1,8	1,3—2,8	2,7	2,8
^{241}Pu	1,13	5,5	5,3	5,5	2,2—12,6	12,6	12,9
^{242}Pu	1,13	15,8	14,1	15,4	3,5—9,5	9,6	9,6
Интегральные характеристики:							
$\rho(^{241}\text{Am})/\rho(\text{Pu})$	0,76	3,8	3,4	3,7	0,7—3,7	3,7	3,8
$\rho(^{242}\text{Cm})/\rho(\text{Pu})$	0,54	5,1	4,5	5	2,1—9,7	9,1	9,6
выгорание	0,99	3,8	3,4	3,8	0,8	0,9	0,8
локальный КВ	1,03	0,1	0,2	0,1	1—3,3	3,0	3,3

и технологическая составляющие погрешности параметров облученного топлива сопоставимы. Расчетно-экспериментальные расхождения лежат в пределах суммарной погрешности, обусловленной неопределенностью нейтронных констант и технологических параметров.

Подобная ситуация наблюдается и при анализе других экспериментов по облучению образцов топлива. Это свидетельствует о необходимости оценивать в нуклидной кинетике технологические погрешности, которые оказываются сопоставимыми с константной неопределенностью, в отличие от стационарных нейтронно-физических задач, где константная составляющая погрешности является преобладающей.

Заключение. Рассмотренный пример показывает согласованность оценок неопределенности концентрации нуклидов двумя методами, реализованными в модуле SUN. Модуль может быть использован и в случае большой неопределенности исходных данных, как ядерных данных, так и технологических параметров. Показано, что в рассмотренном тесте оценки константного и технологического компонентов погрешности сопоставимы и в совокупности могут объяснять расчетно-экспериментальные отклонения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мантуров Г.Н. Методическое, константное и программное обеспечение нейтронно-физических расчетов быстрых реакторов и оценки погрешностей расчетных предсказаний. Дис. на соискание ученой степени д.т.н. М., НИЦ «Курчатовский институт», 2017.
2. Селезнев Е.Ф., Белов А.А., Белоусов В.И., Чернова И.С. Модернизация программы расчета задачи нуклидной кинетики BPSD. — Изв. вузов. Ядерная энергетика, 2018, вып. 4, с. 115—127.
3. Белов А.А., Крячко М.В., Чертовских О.И. Расчет эксперимента по облучению конструкционных материалов в потоке термоядерных нейтронов кодом выгорания BPSD. — Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерно-реакторные константы, 2021, № 4, с. 47—62.
4. Глебов В.Б., Куликов Г.Г., Хромов В.В. и др. Расчет чувствительности реакторных характеристик к константам с учетом изменения нуклидного состава реактора в процессе кампании. — Там же, 1991, № 1, с. 11—17.
5. Diez C., Cabellos O., Rochman D. e.a. Monte Carlo uncertainty propagation approaches in ADS burn-up calculations. — Ann. Nucl. Energy, 2013, v. 54, p. 27—35.
6. Андрианова О.Н. Методические аспекты составляющей погрешности в расчетах реакторных характеристик, обусловленной резонансной структурой нейтронных сечений. — Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерно-реакторные константы, 2017, № 1, с. 74—86.
7. Гончаров Р.К., Звонарев А.В., Колыженков В.А. и др. Отношения средних сечений ряда топливных нуклидов в зоне малого обогащения и в уран-плутониевом модуле реактора БН-350. — Атомная энергия, 1989, т. 66, вып. 5, с. 353—354.

Поступило в Редакцию 30.12.22