Оценка эффекта малых возмущений в многовариантных расчетах по программе ПРИЗМА-Д

Я.З. Кандиев, А.А. Малахов, Е.В. Серова, С.Г. Спирина

Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт им. академика Е.И. Забабахина (РФЯЦ-ВНИИТФ)
Снежинск, Россия 456770

Программа ПРИЗМА.Д предназначена для решения методом Монте-Карло задач, связанных с расчетом ядерных реакторов и критических сборок, в качестве источника берутся точки деления, распределенные по собственной функции. В программе заложены широкие возможности по описанию геометрии системы, состава материалов, получению необходимых результатов и неаналоговому моделированию. Предусмотрена возможность, проводить расчеты прохождения частиц различной природы: нейтроны, фотоны, электроны, позитроны и тяжелые заряженные частицы с учетом их взаимных превращений.

Программа позволяет решать широкий круг задач. Например, таких, как:

1. оценка $K_{эфф}$ – эффективный коэффициент размножения нейтронов, $t_ж$ – среднее время жизни нейтрона от деления до деления, $\nu_{ср}$ – среднее число частиц, рожденных при делении;
2. получение некоторых параметров (флюенс, спектр, доза) поля (n, γ) – излучения в ближней зоне реактора;
3. воздействие (n, γ) – излучения на системы, помещенные в зоне реактора;
4. выход (n, γ) – излучения реактора через коллиматор и моделирование траекторий частиц для получения результатов в системах за коллиматором;
5. для задач ядерной безопасности производятся расчеты $K_{эфф}$ и числа нейтронов, пересекающих контейнер для двух случаев: без зеркального отражения на границе контейнера и с зеркальным отражением;

и другие задачи.

В программе ПРИЗМА_Д в процессе расчета задачи применяется лексикографический способ обработки дерева траекторий. Этот способ удобен для обработки ветвящихся процессов, но имеет тот недостаток, что предыстория частицы забывается. Однако часто возникает необходимость оценить вклад в результат частиц, побывавших в той или иной ситуации. Для получения таких результатов был разработан метод меченых частиц. Суть метода заключается в следующем. Частица маркируется определенным типом метки в зависимости от ситуации, в которой она находится, и задаются результаты по условиям. Условие представляет собой перечень типов меток, которыми должна быть помечена (или не помечена) частица. С помощью логических операций можно задавать сложные условия, куда входят комбинации определенных меток и других параметров частиц. Соответствующий результат заносится лишь в случае выполнения этого условия. Процедуру пометки и стирания можно заказать на следующих этапах моделирования траектории частицы:

- в источнике, после получения начальных параметров частицы;
- в момент соударения частицы;
- после выбора типа взаимодействия;
- после розыгрыша соударения;

- в момент пересечения частицей поверхности, отделяющей одну область от другой.

Кроме того, имеется широкий круг задач (например, задачи по оптимизации формы и состава защиты от излучения), в которых возникает необходимость оценить эффект влияния малых изменений (возмущений) отдельных параметров системы на характеристики излучения. Для таких задач полезно коррелировать расчеты разных вариантов, когда траектории частиц в различных вариантах в начальной своей части, начиная от источника до зоны возмущения, совпадают. Задачи рассматриваются в следующей общей постановке:

В систему с источником и детектором вкладывается объем V, который вносит некоторую неоднородность в среду (в частности объем может содержать в себе детектор). Требуется оценить влияние неоднородности для следующих случаев:

1. Варианты с меняющимся составом. Варианты отличаются составом вещества, заполняющего объем V.

2. Варианты с нарастающим объемом V. Размеры объема меняются по правилу:

$V(1) = V_1$, $V(2) = V_1 + V2$,..., $V(k) = V_1 + V_2 + ... + V_k$.

3. Варианты с перемещающимся объемом. Варианты отличаются тем, что объемы V(i) , i=1,…,k помещаются в разные места системы, причем эти объемы могут различаться геометрией и составом.

4. Варианты с возмущением концентрации. Меняется концентрация элементов вещества, заполняющих некоторую область системы. Различие в концентрации задается через сложное вещество, составленное из нескольких простых веществ: меняется весовая концентрация одного или нескольких веществ (в частном случае меняется только плотность вещества, заполняющего область), при этом сумма весовых концентраций должна быть равна 1.

В задачах переноса излучения трудно оценить эффект малых возмущений, применяя прямой метод Монте-Карло, так как ожидаемая разность откликов часто бывает на несколько порядков меньше самих результатов. Для решения таких многовариантных задач разработан и реализован специальный способ моделирования траектории с использованием метода меченых частиц, позволяющий получать в одном расчете коррелированные результаты для всех вариантов задачи.

В задачах, соответствующих случаям 1-3, можно выделить два сорта траекторий:

- траектории, не пересекающие зону возмущения (они являются общими для всех вариантов задачи и составляют большую часть всех траекторий);
- траектории, пересекающие зону возмущения и имеющие общую часть для всех вариантов задачи, пока частица не попадает в зону возмущения.

С учетом этой особенности был разработан специальный способ моделирования траекторий частиц. Суть способа: каждому варианту задачи соответствует свой номер метки (на частицу источника наносятся все эти метки), при влете частицы в возмущенный объем, она расщепляется на две частицы - одна продолжает блуждание в геометрии, отвечающей варианту с возмущенным объемом с меткой, соответствующей этому варианту (остальные метки стираются); другая - в геометрии, отвечающей варианту с невозмущенным объемом (стирается метка, соответствующая варианту с возмущенным объемом, остальные сохраняются). В условия для получения результатов для каждого варианта входит соответствующий номер метки. В случае 4 (для задач с возмущением концентрации) для всех вариантов задачи строится единая совмещенная траектория, соответствующая невозмущенному варианту, смещение траекторий для других вариантов

компенсируется соответствующими весовыми множителями.

Однако, поскольку точки деления (источника) должны быть распределены по собственной функции, то возникает дополнительная проблема, связанная с тем, что возмущение, вносимое в систему, влияет на распределение точек деления для каждого варианта задачи. Эту проблема решается следующим образом:

Рассмотрим блок-схему работы программы ПРИЗМА_Д.

- ИСТ - начальное распределение нейтронов в системе;
- ОСД_0 - получение первых точек деления;
- цикл 1 – установление точек деления по собственной функции;
- цикл 3 - счет пакетов.

В этом цикле:

- модуль ОСД - получение очередного поколения;
- модуль ОСК - моделирование траектории нейтронов, испускаемых из банка точек деления текущего поколения (при необходимости могут применяться неаналоговые способы моделирования);
- цикл 2 – моделирование вторичных частиц других типов;

В случае расчета многовариантной задачи с возмущением применяется метод «малых итераций по делениям» (МИД), который позволяет в модуле ОСК проводить дополнительные итерации для установления точек деления.

Предположим, задано M вариантов возмущения. Задается число N, которое определяет число итераций по делениям во второй части счетного цикла. На первом шаге в качестве источника для всех вариантов берутся точки деления поколения для невозмущенного варианта задачи, полученные в первой части счетного цикла. В модуле ОСК моделирование истории производится до поглощения, до вылета из системы или до достижения нейтрона N+1 деления в цепочке делений. Результаты для каждого варианта, полученные на i-м шаге($1 \le i \le N$), нормируются на $n_{m,i}$ – число делений на предыдущем (i-1) шаге. Например, если $n_{m,i+1}$ – точки делений, полученные на i-м шаге, то $n_{m,i+1}/n_{m,i}$ – несмещенная оценка $K_{эфф}$. Таким образом, задавая число малых итераций N, можно учесть влияние возмущений на распределение точек делений источника для каждого варианта задачи. Число N выбирается пользователем в зависимости от степени влияния возмущений.

Число делений $n_{m,i}$, полученное в результате счета очередного пакета частиц источника для невозмущенного варианта, величина случайная. Поэтому нормировка результатов для конкретного варианта производится после расчета пакета историй. Для того, чтобы оценить эффект влияния возмущения необходимо задать сложное условие, определяющее разность между соответствующими результатами невозмущенного и возмущенного вариантов. В этом случае после расчета историй берутся уже отнормированные величины.

Рассмотрим примеры тестовых расчетов для задач с возмущением с применением метода «Малых итераций по делениям». В каждом из них оценивалось изменение Кэфф., в зависимости от вносимого в систему возмущения. Также для каждой из задач подсчитана эффективность многовариантного расчета, по сравнению с расчетами отдельных вариантов. Эффективность подсчитывалась по следующей формуле:

Относительная эффективность многовариантного расчета

$$\sigma(\Delta K_i) = \sigma(K_0 - K_i)$$ - независимые результаты

$$\sigma'(\Delta K_i) = \sigma'(K_0 - K_i)$$ - коррелированные результаты

$$\alpha_i = \frac{\sigma'(\Delta K_i)}{\sigma(\Delta K_i)}, i = \widehat{0,k}$$

$$V_i = \begin{cases} \alpha_i^2, \alpha_i > 1 \\ 0, \alpha_i = 1 \\ -1/\alpha_i^2, \alpha_i < 1 \end{cases}$$

Выигрыш многовариантного расчета по сравнению с независимыми расчетами равен

$$V = \frac{T_H}{T_M} * \sum V_i,$$

T_H - полное время независимых расчетов
T_M - время многовариантного расчета

Рассмотрим первую задачу:

Рассматривалась критическая сборка Godiva [3] со следующими параметрами. Сборка представляет собой однородный шар радиуса 8.741см, заполненный ураном (U^{235} 94.73%, U^{238} 5.27%) с плотностью 18.74г/см^3 . Рассматривались две задачи – задача с меняющейся плотностью и задача с меняющейся концентрацией, число вариантов 8.

Задача с меняющейся плотностью

Зависимость ΔКэфф от возмущения плотности в сборке Godiva

Ro, г/см^3	Δ $K_{эфф}(\sigma)$			
	MCNP, независимый расчет	MCNP, коррелированный расчет	ПРИЗМА-Д, независимый расчет	ПРИЗМА-Д, коррелированный расчет
18.74	0.998063 (0.080)		0.99987 (0.0041)	0.99975 (0.020)
18.8			0.00261 (2.22)	0.002648 (0.081)
19.0			0.011500 (0.50)	0.01144 (0.082)
19.4			0.028910 (0.20)	0.02885 (0.084)
20.0	0.05499 (2.1)	0.05282 (0.28)	0.054580 (0.11)	0.05453 (0.087)
21.1	0.09467 (1.17)	0.09302 (0.3)	0.100370 (0.059)	0.10028 (0.095)
23.5	0.19389 (0.6)	0.18683 (0.34)	0.194380 (0.032)	0.1941 (0.12)
26.0	0.28256 (0.43)	0.27110 (0.38)	0.283790 (0.022)	0.2833 (0.18)

Выигрыш :

$$(744.4+37.2+5.7+1.6-2.6-14.1-67.0)*\frac{8}{1}\approx 5600$$

В таблице приведены результаты для программы MCNP (независимый и коррелированный расчеты), так и для программы ПРИЗМА_Д (также независимый и коррелированный расчеты). В первой строке таблицы приводятся значения Кэфф. для невозмущенного варианта. В остальных строчках значения $\Delta K_{эфф}$ для каждого варианта возмущения. В скобках приведены статистические погрешности результатов в процентах. Время расчета многовариантной задачи по программе ПРИЗМА_Д примерно равно времени расчета одного независимого варианта. Если сравнивать статистические погрешности в коррелированном и независимом расчетах видно, что для небольших возмущений погрешность коррелированного расчета существенно лучше. С увеличением возмущения погрешность результата также увеличивается, и по последним строчкам таблицы видно, что у результатов независимых расчетов погрешность лучше, чем у результатов коррелированного расчета. Для этой задачи была подсчитана суммарная эффективность многовариантного расчета по сравнению с независимыми расчетами 8 вариантов. Она составила величину порядка $5*10^3$.

Следующая задача с меняющейся концентрацией.

Задача с меняющейся концентрацией

Зависимость ΔКэфф от возмущения концентрации U^{238} в сборке Godiva

Доля U^{238},%	Δ $К_{эфф}$(σ)			
	MCNP, независимый расчет	MCNP, коррелированный расчет	ПРИЗМА-Д, независимый расчет	ПРИЗМА-Д, коррелированный расчет
5.27			0.999920 (0.0023)	0.999957 (0.0047)
6.0			-0.00381 (2.2)	-0.003772 (0.066)
7.5			-0.01164 (0.52)	-0.01159 (0.058)
10.0			-0.02481 (0.28)	-0.02482 (0.048)
13.0	-0.04233 (2.85)	-0.04251 (1.98)	-0.04102 (0.16)	-0.04105 (0.041)
26.0	-0.12292 (0.9)	-0.11749 (2.9)	-0.11620 (0.049)	-0.11613 (0.042)
38.0	-0.20778 (0.54)	-0.19346 (3.83)	-0.19338 (0.032)	-0.1927 (0.16)
50.0	-0.30269 (0.36)	-0.28273 (4.7)	-0.27988 (0.025)	-0.2810 (0.47)

Выигрыш :

$$(1111+80.4+34+15.2+1.4-25-353.4)*\frac{1}{14} \approx 61.6$$

В задаче рассматривалось 8 вариантов, весовая концентрация U^{238} менялась от 5.27% до 50%. Результаты представлены в таблице 2. Для невозмущенного варианта, когда доля U^{238} составляла 5.27%, приведены значения $К_{эфф}$, для остальных вариантов приведены значения $ΔК_{эфф}^{(i)} = К_{эфф}^{(i)} - К_{эфф}^{(1)}$,где i- номер варианта. Время расчета по программе ПРИЗМА.Д многовариантной задачи примерно в 14 раз больше суммарного времени восьми независимых расчетов.

Задача с нарастающим объемом на примере критической сборки Godiva.

Задача с нарастающим объемом

Зависимость Кэфф и ΔКэфф от радиуса сборки Godiva

Радиус, см	ПРИЗМА-Д, независимый расчет, $К_{эфф}$	ПРИЗМА-Д, независимый расчет, $ΔК_{эфф}$	ПРИЗМА-Д, коррелированный расчет, $К_{эфф}$	ПРИЗМА-Д, коррелированный расчет, $ΔК_{эфф}$
8.741	0.99988 (0.0098)		1.0001 (0.080)	
9.0	1.0175 (0.0102)	-0.0176 (8.1)	1.0181 (0.072)	-0.01808 (0.90)
9.1	1.0238 (0.0099)	-0.0239 (5.9)	1.0246 (0.070)	-0.02454 (0.79)
9.2	1.0302 (0.0100)	-0.0303 (4.7)	1.0309 (0.068)	-0.03079 (0.72)
9.3	1.0362 (0.0100)	-0.0363 (3.9)	1.0368 (0.065)	-0.03676 (0.66)
9.4	1.0420 (0.0100)	-0.0421 (3.4)	1.0426 (0.064)	-0.04256 (0.62)
9.5	1.0476 (0.0100)	-0.0477 (3.0)	1.0483 (0.062)	-0.04820 (0.59)
9.6	1.0531 (0.0100)	-0.0540 (2.7)	1.0536 (0.060)	-0.05355 (0.56)

Выигрыш :

$$(80.8+55.6+42.6+34.9+30.0+25.8+23.2)*\frac{8}{1} \approx 2300$$

В задаче рассматривалось 8 вариантов, невозмущенный вариант – сборка Godiva, описанная выше, в последующих вариантах происходило наращивание шара слоем U^{238},

радиус сборки менялся от 8.741см до 9.6см. В таблице для радиуса 8.741 приведены значения $К_{эфф}$, для остальных значений радиуса приведены значения $К_{эфф}$ и $\Delta К_{эфф} = К_{эфф}^{(i)} - К_{эфф}^{(1)}$,где i- номер варианта. Время расчета по программе ПРИЗМА.Д многовариантной задачи и время расчета отдельного варианта примерно одинаково.

Последний пример - задача с перемещающимся объемом.

Система представляла собой цилиндр радиусом $R_ц = 10$см со сквозным каналом радиусом $R_к = 4$см. Длина цилиндра 20см (границы $z_л$=-10см, $z_п$=10см). Состав активной зоны U^{235} 0.99235%, U^{238} 0.00747%. Рассматривалось движение вдоль канала сферической капли R=1.5см, заполненной абсолютным поглотителем. Рассматривались следующие положения капли:

система без капли (невозмущенный вариант),

z=-10.0, -7.5, -5.0, -3.0, -2.0, -1.0, 0.0 (центр канала).

Задача с перемещающимся объемом

Зависимость Кэфф и ΔКэфф от положения капли в канале

Расстояние от левой границы,см	ПРИЗМА-Д, независимый расчет, $К_{эфф}$	ПРИЗМА-Д, независимый расчет, $\Delta К_{эфф}$	ПРИЗМА-Д, коррелированный расчет, $К_{эфф}$	ПРИЗМА-Д, коррелированный расчет, $\Delta К_{эфф}$
∞	1.001311 (0.0034)		1.001199 (0.0077)	
-10.0	1.001088 (0.0034)	0.000223 (21.6)	1.001008 (0.0077)	0.000191 (1.5)
-7.5	0.998437 (0.0035)	0.002870 (1.7)	0.998319 (0.0078)	0.00288 (0.36)
-5.0	0.993444 (0.0034)	0.007867 (0.6)	0.993267 (0.0079)	0.00793 (0.21)
-3.0	0.989505 (0.0035)	0.011806 (0.4)	0.989411 (0.0079)	0.01179 (0.17)
-2.0	0.988041 (0.0035)	0.013260 (0.4)	0.987979 (0.0080)	0.01322 (0.16)
-1.0	0.987110 (0.0035)	0.014200 (0.3)	0.987092 (0.0080)	0.01411 (0.15)
0.0	0.98680 (0.0035)	0.014511 (0.3)	0.986772 (0.0080)	0.01443 (0.15)

Выигрыш :

$$(207.4+22.2+8.4+5.8+5.3+5.1+4.8) * \frac{8}{2} \approx 1036$$

Результаты приведены в таблице. Для невозмущенного варианта приведены значения $К_{эфф}$, для остальных вариантов приведены значения $К_{эфф}$ и $\Delta К_{эфф} = К_{эфф}^{(i)} - К_{эфф}^{(1)}$,где i- номер варианта. Время расчета по программе ПРИЗМА.Д многовариантной задачи в два раза больше времени расчета отдельного варианта.

ВЫВОДЫ:

Реализованный метод МИД наиболее эффективно “работает” при малых возмущениях. В случае, когда эффект возмущения превышает 10% от оцениваемой величины, метод в некоторых случаях начинает проигрывать по сравнению с независимыми расчетами вариантов.

Главный недостаток метода заключается в необходимости задавать число малых итераций: с одной стороны, при большом числе итераций существенно увеличивается время расчета, с другой стороны, при очень малом числе итераций точки деления возмущенных вариантов не успевают выйти на распределение по собственной функции. Однако опыт эксплуатации показывает, что для подавляющего большинства задач достаточно 5 итераций. Кроме того, т.к. результаты выдаются по каждой итерации, то

можно проследить за сходимостью оцениваемой величины и скорректировать число итераций.

Список литературы.

1. **Arnautova M.A., Kandiev Ya.Z., Lukhminsky B.E., Malishkin G.N.** Monte-Carlo simulation in nuclear geophysics. In comparison of the PRIZMA Monte-Carlo program and benchmark experiments. - Nucl.Geophys, 1993, v.7, №3, p. 407-418.
2. **Кандиев Я.З., Серова Е.В.** Меченые частицы в расчетах задач переноса излучения методом Монте-Карло по программе ПРИЗМА.- Атомная энергия, 2005,
3. **Hendricks J.S., Carter L.L., McKinney G.W.** MCNP perturbation capability for Monte Carlo criticality calculations. - In: proc. of the Sixth Inter. Conf. on Nuclear Criticality Safety, France, September 20-24, 1999, v.1 , p.269.
4. **Rief H.** A synopsis of Monte Carlo perturbation algorithms, J. Comp. Physics, 1994, №11, p.33-48.
5. **Nagaya Y., Mori T.** Evaluation of Perturbation Effect due to Fission-Source Change in Eigenvalue Problems by Monte Carlo Methods. - Proc. Int. Topl. Mtg. Advances in Reactor Physics and Mathematics and Computation into the Next Millennium (PHYSOR 2000), Pittsburgh, Pennsylvania, May 7-12, 2000.
6. **Бусленко Н.П., Голенко Д.И. и др**. Метод статистических испытаний (метод Монте-Карло). Справочная Математическая Библиотека: Физматгиз, 1962