

СПОСОБЫ УМЕНЬШЕНИЯ ПОГРЕШНОСТЕЙ ОЦЕНКИ КОНЦЕНТРАЦИЙ НУКЛИДОВ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ МЕТОДА ИНТЕРВАЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В ЗАДАЧАХ ИЗОТОПНОЙ КИНЕТИКИ

Д.В. Хитрик, В.В. Колесов, Д.А. Камаев, В.Ф. Украинцев

*Обнинский государственный технический университет атомной энергетики,
г. Обнинск*



Исследованы различные способы уменьшения погрешности концентраций нуклидов при использовании метода интервальных вычислений в задачах изотопной кинетики. Проведены сравнения полученных результатов с соответствующими результатами линейной теории возмущений. Обнаружено, что в ряде случаев линейная теория возмущений дает значительное занижение оценок погрешностей.

ВВЕДЕНИЕ

В статье [1], нами было приведено детальное описание использования методики интервальных вычислений для оценки погрешностей концентраций нуклидов в задаче изотопной кинетики. Основными особенностями предлагаемой методики являются гарантированность вычисляемых оценок (это всегда оценки сверху) и простота реализации на ЭВМ. Проведенные нами тестовые расчеты показали разумность получаемых оценок [1, 2]. Однако существует серьезная опасность завышения оценок погрешностей концентраций в случае, если погрешности параметров достаточно велики. Предлагаемая статья посвящена некоторым приемам, с помощью которых удалось практически убрать завышение погрешностей и достаточно близко подобраться к значениям, посчитанным точно в граничных точках при сохранении гарантированности оценки, а также результатам сравнения предлагаемой методики с достаточно широко применяемыми методами оценки погрешностей концентраций, такими как теория возмущений.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ДЛЯ ОЦЕНОК ПОГРЕШНОСТЕЙ

Математическая формулировка задачи изотопной кинетики представляет собой хорошо известную задачу Коши:

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt}(t) = K \cdot N(t) \\ N(0) = N_0 \end{cases}$$

$$k_{ij} = k_{ij}(\Phi, \sigma_f, \sigma_c, \sigma_{n2n}, \sigma_{n3n}, \dots) = k_{ij}(\bar{p}),$$

$$t = 0 \dots T.$$

Коэффициенты в соответствующей матрице зависят от некоторого вектора параметров \bar{p} , в который входят плотность потока нейтронов, микроскопические сечения, постоянные распада и т.д. Параметры предполагаются известными с некоторыми погрешностями.

Оценка погрешности концентрации в задачах изотопной кинетики есть диапазон значений, которые она может принимать, если входные параметры пробегают все значения из своих диапазонов. Эта оценка может быть завышенной или заниженной, в последнем случае существует такой набор параметров, при котором значение функции выходит за оцененные пределы. Гарантированная оценка величины — это оценка величины, в которой ее возможные значения не выходят за границы оценки при любых значениях параметров из заданных диапазонов. Гарантированная оценка может быть завышенной, но никогда не заниженной.

Рассмотрим метод, который в настоящее время широко применяется для решения данной задачи — метод теории возмущений. Популярность его объясняется простотой и возможностью качественно интерпретировать влияние тех или иных погрешностей параметров на погрешности концентраций нуклидов через так называемые коэффициенты чувствительности.

МЕТОД, ОСНОВАННЫЙ НА ЛИНЕЙНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

В основу теории возмущений положены следующие рассуждения. Пусть мы умеем решать задачу для некоторого набора параметров p . Тогда, используя разложение Тейлора в окрестности p , мы можем оценить значение концентраций в соседней возмущенной точке $p + \Delta p$ следующим образом:

$$N(t, p + \Delta p) \approx N(t, p) + \frac{\partial N}{\partial p}(t, p) \Delta p.$$

При этом все нелинейные члены формулы Тейлора исключаются из рассмотрения, что делает равенство неточным. Также существенно, что формула имеет смысл только при малых возмущениях Δp .

Для задачи определения погрешностей предполагают, что произведение модуля частной производной функции концентрации по параметру на значение приращения этого параметра определяет максимально возможное возмущение концентрации при возмущении данного параметра. Абсолютная погрешность ΔN для возмущения $\Delta p = (p_1, p_2, \dots, p_k)$ будет выглядеть следующим образом:

$$\Delta N = \sum_k \left| \frac{\partial N}{\partial p_k}(t, p) \right| \cdot |\Delta p_k|.$$

Однако такой подход обладает определенными недостатками: Во-первых, при этом нельзя работать с большими погрешностями параметров, иначе теряет смысл разложение по формуле Тейлора. Во-вторых, из-за пренебрежения членами со старшими производными получается приближенная оценка погрешности результата. Метод не применим для случая большого количества параметров. Для каждого параметра необходимо считать производную $\frac{\partial N}{\partial p_k}(t, p)$, что является трудо-

емкой операцией, сравнимой по затратам с решением исходной задачи без погрешностей. Такой расчет можно проводить, если параметров немного (десятки). Если же параметров тысячи, то обычно такие вычисления уже не проводятся.

КОМБИНИРОВАННЫЙ МЕТОД

Возможно применение комбинированного метода, также дающего гарантированные оценки погрешностей концентраций. Суть метода заключается в следующем. Обычный интервальный анализ, как уже говорилось, всегда дает гарантированные оценки. Но в ряде случаев, когда в расчетах участвуют параметры с большими погрешностями, данные оценки могут оказаться чересчур завышенными и тогда возникает необходимость в их уточнении. Причем в таких случаях оказывается, что есть некоторая небольшая группа параметров, которые особенно сильно влияют на завышение погрешности результата. Естественным будет учесть такое влияние явно, с помощью идеи теории возмущений.

Для этого воспользуемся формулой Лагранжа или формулой конечных приращений. Будем считать, что для рассматриваемой функции (изменение концентрации нуклидов с течением времени) она справедлива. Тогда выполняется следующее равенство:

$$N(p + \Delta p) = N(p) + \frac{\partial N}{\partial q}(p^*) \Delta p$$

$$p^* \in [p - \Delta p; p + \Delta p],$$

которое является точным, однако на практике никогда не используется, так как неизвестно значение p^* . Для рассматриваемой задачи бы было достаточно знать, в каких пределах может изменяться производная при условии, что значение p^* лежит в интервале $[p - \Delta p; p + \Delta p]$. Такую оценку можно получить, проведя интервальный расчет $\frac{\partial N}{\partial p}(p)$. Полученная оценка будет гарантированной и даст нам

верхнюю и нижнюю границы производной: $N'_{-p} \leq \frac{\partial N}{\partial p}(p) \leq \overline{N'_p}$. Это значит, что мы можем с уверенностью сказать, что для любого $\tilde{p} \in [p - \Delta p; p + \Delta p]$ будет выполняться неравенство

$$N(p) - \max\left(\left|N'_{-p}\right|, \left|\overline{N'_p}\right|\right) \cdot \Delta p \leq N(\tilde{p}) \leq N(p) + \max\left(\left|N'_{-p}\right|, \left|\overline{N'_p}\right|\right) \cdot \Delta p.$$

Таким образом, мы решили вопрос с гарантированностью оценки погрешности в теории возмущений. К сожалению, интервальные вычисления могут только увеличить время счета, а оно и так было большим, и такое прямое решение все также неприменимо к задачам большой размерности.

ВРЕМЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ КОМБИНИРОВАННОГО МЕТОДА

Время вычислений при использовании комбинированного метода можно уменьшить следующим образом. Разделим множество параметров на 2 неравные части. Вклад большей части (обозначим их буквой p) будем оценивать с помощью обычного интервального анализа, а вклад меньшей (обозначим их q) – с помощью интервальной теории возмущений. Имеем:

$$N(\tilde{p}, \tilde{q}) = N(\tilde{p}, q) + \frac{\partial N}{\partial q}(\tilde{p}, q^*) \Delta q$$

$$\tilde{p} \in [p - \Delta p, p + \Delta p], \quad \tilde{q}, q^* \in [q - \Delta q; q + \Delta q].$$

Первое слагаемое мы сможем оценить сверху и снизу с помощью обычного интервального анализа, в предположении, что погрешности имеются только у параметров p , а параметры q известны точно. Во втором слагаемом производную будем считать интервально, учитывая погрешности и в p , и в q . Далее нам останется только объединить получившиеся оценки: нижнюю границу для N получим как сумму нижних границ слагаемых, а верхнюю – как сумму верхних.

Важным моментом в данных рассуждениях является то, что нам не нужно считать производные по всем параметрам. Достаточно выбрать лишь несколько из тех, которые соответствуют параметрам с самыми большими значениями погрешности, чтобы получить более точные оценки по сравнению с обычным интервальным методом. В то же время, получаемые оценки остаются гарантированными.

ИНТЕРВАЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ С ДРОБЛЕНИЕМ ИНТЕРВАЛОВ

Существует и другой подход к уточнению оценок, полученных с помощью интервального анализа. Мы уже упоминали, что сильное влияние на погрешности результата оказывают большие погрешности параметров. К счастью, можно увеличить точность получаемых оценок, если решить нескольких задач с меньшими погрешностями, а затем определенным образом объединить результаты.

Чтобы проиллюстрировать идею, выберем среди параметров p один параметр $\hat{p} \in [a; b]$. Разобьем диапазон его возможных значений на n интервалов:

$[a; b] = \bigcup_n [a_i; b_i]$ и применим интервальную методику для каждого из них. Получим:

$$N(p, \hat{p}_1) \in [c_1; d_1], p_1 \in [a_1, b_1],$$

...

$$N(p, \hat{p}_i) \in [c_i; d_i], p_i \in [a_i, b_i],$$

...

$$N(p, \hat{p}_n) \in [c_n; d_n], p_n \in [a_n, b_n].$$

Принимая во внимание, что $[c_i; d_i]$ – это гарантированная оценка значений для N в случае изменения параметра p_i в пределах интервала $[a_i, b_i]$, а также учитывая, что все вместе интервалы $[a_i, b_i]$ образуют интервал $[a, b]$, можно утверждать, что значения функции N не могут выходить за пределы интервала

$$[c; d] = \bigcup_n [c_i; d_i] = [\min(c_i); \max(d_i)].$$

Приведенный метод легко распространяется на случай разбиения интервалов нескольких параметров. В таком случае нужно будет решать $n_1 \cdot n_2 \cdot \dots \cdot n_k$ задач, где k – количество параметров, а n_i – число разбиений интервала значений для i -го параметра.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Рассмотрим на двух модельных задачах, сформулированных в работе [3], какие погрешности могут быть получены с помощью изложенных выше подходов: обычного интервального метода (ИА), комбинированного интервального метода, использующего теорию возмущений (ИА ТВ), метода дробления интервалов (ИА ДИ) и метода линейной теории возмущений (ТВ).

Модельная задача 1. Будем рассматривать только радиационный захват, деление и радиоактивный распад ^{242}Pu , ^{243}Pu и ^{243}Am . Тогда система дифференциальных уравнений имеет вид:

$$\begin{aligned}\frac{dN_{Pu42}(t)}{dt} &= -\sigma_{cPu42}\Phi N_{Pu42}(t) - \sigma_{fPu42}\Phi N_{Pu42}(t) - \lambda_{Pu42}N_{Pu42}(t) \\ \frac{dN_{Pu43}(t)}{dt} &= -\sigma_{cPu43}\Phi N_{Pu43}(t) + \sigma_{cPu42}\Phi N_{Pu42}(t) - \sigma_{fPu43}\Phi N_{Pu43}(t) - \lambda_{Pu43}N_{Pu43}(t) \\ \frac{dN_{Am43}(t)}{dt} &= -\sigma_{cAm43}\Phi N_{Am43}(t) - \sigma_{fAm43}\Phi N_{Am43}(t) - \lambda_{Am43}N_{Am43}(t) + \lambda_{Pu43}N_{Pu43}(t).\end{aligned}$$

Соответствующие сечения, постоянные распада и начальные концентрации приводятся в табл. 1. Время выгорания топлива $T=100$ сут, плотность потока нейтронов $\Phi = 3,92 \cdot 10^{14}$ нейтр/(с·см²).

Таблица 1

Параметры системы уравнений

Изотоп	σ_c , барн	σ_f , барн	λ , с ⁻¹	$N_0 \times 10^{-24}$ ядер/см ³
²⁴² Pu	8.675	0.478	5.677×10^{-14}	1.0×10^{-4}
²⁴³ Pu	5.612	11.546	3.885×10^{-5}	0
²⁴³ Am	28.824	0.461	2.976×10^{-12}	0

Модельная задача 2. Будем рассматривать только радиационный захват, деление и радиоактивный распад, но для ²⁴⁰Pu, ²⁴¹Pu и ²⁴¹Am. Тогда система дифференциальных уравнений имеет вид:

$$\begin{aligned}\frac{dN_{Pu40}(t)}{dt} &= -\sigma_{cPu40}\Phi N_{Pu40}(t) - \sigma_{fPu40}\Phi N_{Pu40}(t) - \lambda_{Pu40}N_{Pu40}(t) \\ \frac{dN_{Pu41}(t)}{dt} &= -\sigma_{cPu41}\Phi N_{Pu41}(t) + \sigma_{cPu40}\Phi N_{Pu40}(t) - \sigma_{fPu41}\Phi N_{Pu41}(t) - \lambda_{Pu41}N_{Pu41}(t) \\ \frac{dN_{Am41}(t)}{dt} &= -\sigma_{cAm41}\Phi N_{Am41}(t) - \sigma_{fAm41}\Phi N_{Am41}(t) - \lambda_{Am41}N_{Am41}(t) + \lambda_{Pu41}N_{Pu41}(t).\end{aligned}$$

Соответствующие сечения, постоянные распада и начальные концентрации приводятся в табл. 2. Время выгорания топлива $T=100$ сут, плотность потока нейтронов $\Phi = 3,92 \cdot 10^{14}$ нейтр/(с·см²).

Таблица 2

Параметры системы уравнений

Изотоп	σ_c , барн	σ_f , барн	λ , сек ⁻¹	$N_0 \times 10^{-24}$ ядер/см ³
²⁴² Pu	14.867	0.621	3.360×10^{-12}	1.0×10^{-4}
²⁴³ Pu	5.288	16.923	1.525×10^{-9}	0
²⁴³ Am	23.087	0.674	5.082×10^{-11}	0

Существенное отличие первой модельной задачи от второй заключается в том, что в первой модельной задаче постоянная распада для ²⁴³Pu заметно превышает остальные постоянные распада, и как мы увидим далее существенно влияет на погрешности концентраций, получаемые при расчетах с помощью интервального анализа.

Такие простые модельные задачи позволят нам определить – не переоценивает ли предлагаемый интервальный метод реальные пределы изменения концентраций нуклидов при вариации констант. Реальные пределы изменения концентра-

ций нуклидов при изменениях одnogрупповых констант (и постоянных распада в некоторых случаях) определялись нами простым перебором их значений на верхних и нижних границах, хотя, если говорить строго, этого не совсем достаточно, т.к. максимальные изменения концентраций могут, возможно, достигаться в ряде случаев внутри интервалов изменения некоторых входных параметров.

Положим погрешности одnogрупповых констант и постоянных распада равными 15% от их значений. Оценим, насколько мы завышаем погрешности концентраций при использовании метода интервальных вычислений и сравним результаты интервальных вычислений (простого и модифицированных) с результатами линейной теории возмущений.

В табл. 3 приведены расчеты для первой модельной задачи в случае, когда погрешности заданы только для одnogрупповых констант, в табл. 4 – результаты, когда на 15% возмущается λ для ^{243}Pu (сильно превышает остальные постоянные распада). В табл. 5 и 6 приводятся аналогичные результаты для второй модельной задачи (в табл. 6 – результаты, когда на 15% возмущается λ для ^{241}Pu).

При расчетах с использованием интервального метода с дроблением интервалов, в отличие от обычного интервального метода, получаем интервалы не симметричные относительно точного (не интервального) решения задачи Коши. Поэтому в таблицах в соответствующих столбцах приводятся левый и правый интер-

Таблица 3

**Первая модельная задача.
Погрешности 15% только в одnogрупповых константах**

Нуклид	Концентрация, $\times 10^{-24}$ ядер/см ³	ИА, %	ТВ, %	ИТВ, %	ИА ДИ, %	Отклонение для угловой точки, %
^{242}Pu	9.695×10^{-5}	0.47	0.47	0.47	0.46/0.47	0.47
^{243}Pu	8.485×10^{-9}	15.54	13.96	14.10	14.84/14.78	14.65
^{243}Am	2.745×10^{-6}	16.12	15,53	15.83	15.56/15.74	15.61

Таблица 4

**Первая модельная задача.
Погрешности 15% в одnogрупповых константах и в λ для ^{243}Pu**

Нуклид	Концентрация, $\times 10^{-24}$ ядер/см ³	ИА, %	ТВ, %	ИТВ, %	ИА ДИ, %	Отклонение для угловой точки, %
^{242}Pu	9.695×10^{-5}	0.47	0.47	0.47	0.46/0.47	0.47
^{243}Pu	8.485×10^{-9}	35.92	28.34	35.92	25.96/35.03	34.74
^{243}Am	2.745×10^{-6}	57.02	15,57	34.30	15.86/16.02	15.65

Таблица 5

**Вторая модельная задача.
Погрешности 15% только в одnogрупповых константах**

Нуклид	Концентрация, $\times 10^{-24}$ ядер/см ³	ИА, %	ТВ, %	ИТВ, %	ИА ДИ, %	Отклонение для угловой точки, %
^{240}Pu	9.489×10^{-5}	0.79	0.79	0.79	0.79/0.79	0.79
^{241}Pu	4.693×10^{-6}	16.11	15.20	15.47	15.35/15.45	15.23
^{241}Am	3.081×10^{-8}	16.20	15.54	15.84	15.58/15.76	15.62

Таблица 6

**Вторая модельная задача.
Погрешности 15% в одноклассовых константах и в λ для ^{241}Pu**

Нуклид	Концентрация, $\times 10^{-24}$ ядер/см ³	ИА, %	ТВ, %	ИТВ, %	ИА ДИ, %	Отклонение для угловой точки, %
^{240}Pu	9.489×10^{-5}	0.79	0.79	0.79	0.78/0.79	0.79
^{241}Pu	4.693×10^{-6}	16.22	15.29	15.62	15.43/15.56	15.34
^{241}Am	3.081×10^{-8}	33.72	30.48	33.60	28.26/33.04	32.87

валы (в %) по отношению к точному решению задачи, которое приведено во вторых столбцах. При этом суммарный гарантированный интервал есть сумма левого и правого приведенных интервалов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из представленных результатов модельных расчетов видно, что теория возмущений в ряде случаев заметно занижает погрешности концентраций. В то же время модификации интервального анализа дают результаты, близкие к реальным значениям погрешностей. Метод интервальных вычислений с дроблением интервалов нам представляется наиболее интересным. Следует сказать несколько слов о необходимости дробления интервалов. На наш взгляд, не может быть четких рекомендаций, когда такое дробление необходимо. Однако всегда имеет смысл сделать одно разбиение интервалов неопределенности входных параметров, чтобы проверить, приведет ли оно к уменьшению гарантированных интервальных оценок результата, и на основании этого сделать вывод о необходимости дальнейшего дробления каких-либо интервалов для входных параметров.

Литература

1. Камаев Д.А., Колесов В.В., Украинцев В.Ф., Хитрик Д.В. Использование метода интервальных вычислений для получения оценок характеристик топлива и их неопределенностей в процессе кампании // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2007.
2. Kamayev D.A., Kolesov V.V., Ukraintsev V.F., Hitrik D.V. The use of interval calculation technique for fuel characteristic uncertainty estimations into a fuel cycle / Proceedings of the International Conference PHYSOR-2006. ANS-2006 (в электронном виде).

Поступила в редакцию 2.05.2007

coefficient, visualize results and define physical parameters with functional algorithms in MAPLE.

УДК 621.039.51

Uncertainties Estimation Reducing when Interval Analysis Method Is Used for Isotope Kinetics Problem \ D.V. Hitrick, V.V. Kolesov, D.A. Kamaev, V.F. Ukraintsev; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher School. Nuclear Power Engineering). – Obninsk, 2007. – 7 pages, 6 tables. – References – 2 titles.

We suggest several ways of uncertainties estimation reducing when interval analysis is used for isotope kinetics problem. We also compare our results with linear perturbation theory (sensitivity analysis). It was found that for certain cases linear perturbation theory gives us essentially underestimated values of nuclide concentrations uncertainties.

УДК 539.1

Modeling of the Interaction Dynamics for the Nuclear Reaction with Charged Particles in the Final State \ V.L. Shablov, I.A. Tyras; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher School. Nuclear Power Engineering). – Obninsk, 2007. – 5 pages, 3 illustrations. – References – 11 titles.

The method previously developed for the description of the post-collision Coulomb interaction in the reaction final state is generalized to the case of the resonance near threshold formation. Modeling of the Coulomb interaction has shown a good agreement with the experimental data for the reaction $d(^7\text{Li}, \alpha)\alpha n$ with $E_d = 6.8$ MeV. In this case, the resonance of ^5He ($E^* = 16.76$ MeV) was created.

УДК 621.039.51

The Classification of the Bifurcation Borders in the Point Model of the Xenon Oscillations \ N.A. Yakushkin; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher School. Nuclear Power Engineering). – Obninsk, 2007. – 8 pages, 1 table, 2 illustrations. – References – 9 titles.

The present work deals with bifurcation borders in the point model of xenon oscillations. The general goal of the undertaken research is to determine safe and unsafe bifurcation borders. Such classification allows determining the range of a nuclear reactor control parameters, within which the reactor remains controllable. It should be mentioned, that xenon oscillations in nuclear reactors are so complex and diverse, that they cannot be correctly described in the point model. However, the fact that the method of bifurcation borders classification based on finding the multidimensional Schwartz derivative was successfully applied to the point model gives hope, that it can be also applied to more complex and thus more adequate xenon oscillations models.