

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ИНТЕРВАЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ОЦЕНОК ПОГРЕШНОСТЕЙ ХАРАКТЕРИСТИК ТОПЛИВА В ПРОЦЕССЕ КАМПАНИИ\*

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

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



В работе приведены результаты применения метода интервальных вычислений для получения гарантированных оценок погрешностей концентраций нуклидов в процессе кампании реактора. В принципе, проблема зависимости точности концентраций нуклидов, получаемых в процессе кампании, от точности одnogрупповых констант может в какой-то степени быть решена с использованием формализма коэффициентов чувствительности и линейной теории возмущений. Однако такая процедура является весьма трудоемкой и не дает гарантированных оценок для получаемых концентраций. Нами предложена и реализована методика оценки погрешностей концентраций, основанная на интервальных вычислениях. Основным преимуществом этой методики является возможность получения гарантированных оценок концентраций.

## ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ИНТЕРВАЛЬНОЙ АРИФМЕТИКИ

Рассмотрим один из методов, позволяющий автоматически анализировать погрешность в процессе вычислений – интервальную арифметику. Метод достаточно широко освещен в литературе (см., например, [1]). Поэтому мы изложим лишь основные его положения.

Основная идея метода состоит в следующем. Пусть задана функция  $f(x)$  от одной вещественной переменной  $x$  из интервала  $X = [a, b]$ , где  $a$  и  $b$  – некоторые числа, заданные точно. Диапазон изменения функции  $f(x)$  на отрезке  $X$  есть множество

$$f(X) = \{y / y = f(x), a \leq x \leq b\} \quad (1)$$

которое, вообще говоря, может не быть известно точно (например, точные границы могут не достигаться). Однако всегда можно найти числа  $c$  и  $d$ , такие что

$$c \leq f(x) \leq d \text{ при } a \leq x \leq b. \quad (2)$$

Тогда множество, определенное в (1) будет содержаться в интервале  $Y = [c, d]$ , который можно определить как интервальную функцию  $F$ , связанную с  $f$  преобразованием интервала  $X = [a, b]$  в интервал  $Y = [c, d]$  способом, описанным выше, т.е.

$$Y = F(X). \quad (3)$$

© Д.А. Камаев, В.В. Колесов, В.Ф. Украинцев, Д.В. Хитрик, 2007

\* Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 05-08-65420)

Эта интервальная функция содержит вещественную функцию  $f$  в том смысле, что  $f(x) \in F(x)$ . Также  $F$  должна быть монотонным включением – если интервалы  $X$  и  $Z$  таковы, что  $X \subset Z$ , то и интервал  $F(X) \subset F(Z)$ . Монотонная функция  $F(X)$ , являющаяся монотонным включением, называется интервальным расширением  $f$ . Аналогично можно рассмотреть интервальное расширение функции двух операндов (см. табл. 1). Ширинами интервалов  $X$  и  $Y$  являются соответственно  $b-a$  и  $d-c$ .

Таблица 1

### Основные интервальные операции

Операция	Интервальный результат	Ссылка
$[a, b] + [c, d]$	$[a+c, b+d]$	(4)
$k [a, b]$	$[k a, k b]$ , если $k \geq 0$ , $[k b, k a]$ , если $k < 0$	(5)
$[a, b] - [c, d]$	$[a-d, b-c]$	(6)
$[a, b] [c, d]$	$[\min(a c, a d, b c, b d), \max(a c, a d, b c, b d)]$	(7)
$[a, b]^{-1}$	$[1/b, 1/a]$ , если $a b > 0$ , не определено в противном случае	(8)
$[a, b]^2$	$[\min(a^2, b^2), \max(a^2, b^2)]$ , если $a b > 0$ , $[0, \max(a^2, b^2)]$ , если $a b \leq 0$	(9)
Составная операция:		
$[a, b] / [c, d] = [a, b] [c, d]^{-1}$	(не определено при $c d < 0$ )	(10)

Важность интервального анализа для оценки погрешности состоит в том, что если можно вычислить интервальное расширение какой-либо вещественной функции  $f(x)$ , то  $f(x) \in F(x)$ , если  $x \in X$ . Результатом применения интервального расширения будет интервал, в котором гарантированно лежит результат в случае, если операнды изменяются в заданных интервалах.

В табл. 1 приводятся интервальные расширения для основных арифметических операций.

Определение квадрата интервала в (9), вообще говоря, не равно  $[a, b] \cdot [a, b]$ . Его можно использовать для вычисления  $[a, b]^k$ , где  $k$  – целое число.

Если мы имеем выражение, состоящее из набора арифметических операций и библиотечных функций, являющихся интервальными расширениями (с помощью специально реализованных процедур) точных операций и библиотечных функций, то результирующий интервал будет содержать результат соответствующих вычислений в точной вещественной арифметике.

### РЕЗУЛЬТАТЫ ТЕСТОВЫХ РАСЧЕТОВ

Для проведения расчетов изотопной кинетики нами написан программный комплекс, основанный на методе матричной экспоненты. Однорупповые константы рассчитываются на основе программы MCNP. В комплексе реализована как вещественная, так и интервальная арифметика. Комплекс позволяет учитывать в расчетах практически любое число нуклидов, для которых могут быть заданы однорупповые нейтронные сечения.

Для верификации предлагаемого комплекса расчетов изотопной кинетики мы провели расчеты выгорания топлива в трехзонной ячейке LWR, содержащей MOX-топливо с обогащением 7% [2]. Спецификации ячейки приведены в табл. 2 и 3. В расчетах учитывались 359 нуклидов, для которых были рассчитаны однорупповые сечения, которые рассчитывались на основе библиотек JENDL-3.2 и JEF-2.2. Мы также использовали погрешности в однорупповых сечениях для ряда нуклидов из [3] (табл. 4).

Расчеты проводились до выгорания 50 ГВт-сут/т. Пересчет плотности потока нейтронов для сохранения линейной мощности проводился с шагом 5 ГВт-сут/т. Результаты наших расчетов для некоторых нуклидов приведены в табл. 5 в сравнении с результатами работы [2]. Как видно из таблицы, отличия полученных нами concentra-

Таблица 2

**Спецификации  
шестигранной ячейки  
с плутониевым МОХ-топливом**

$V_m/V_f$	1.1
Шаг решетки (см)	1.2204
Топливо ( $PuO_2+UO_2$ )	7.0
Обогащение по Pu (%)	900
Температура (K)	
Оболочка	Цирконий
Внешний диаметр (см)	0.95
Толщина (см)	0.065
Температура (K)	900
Замедлитель ( $H_2O$ )	
Температура (K)	600
Линейная мощность (Вт/см)	160

Таблица 3

**Ядерные концентрации  
( $\times 10^{24}/\text{см}^3$ )**

Топливо	Обогащение 7% по Pu
$U^{235}$	$6.194 \times 10^{-5}$
$U^{238}$	$2.058 \times 10^{-2}$
$Pu^{239}$	$1.367 \times 10^{-3}$
$Pu^{240}$	$6.009 \times 10^{-4}$
$Pu^{241}$	$2.418 \times 10^{-4}$
$Pu^{242}$	$1.844 \times 10^{-4}$
$O^{16}$	$4.608 \times 10^{-2}$
Оболочка	
Zr (natural)	$3.702 \times 10^{-2}$
Замедлитель	
H	$4.744 \times 10^{-2}$
O	$2.372 \times 10^{-2}$

Таблица 4

**Погрешности одnogрупповых  
констант [3]**

Нуклид	Погрешности в %	
	Сечение деления	Сечение радиационного захвата
$^{235}U$	5	5
$^{238}U$	5	5
$^{237}Np$	5	7
$^{239}Pu$	5	5
$^{240}Pu$	6	7
$^{241}Pu$	7	9
$^{242}Pu$	9	10
$^{241}Am$	4	5
$^{243}Am$	25	2
$^{242}Cm$	40	3
$^{243}Cm$	6	12
$^{244}Cm$	20	5
$^{245}Cm$	5	5

ций от результатов работы [2] прекрасно укладываются в рамки рассчитанных нами погрешностей

**ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТЕЙ ДЛЯ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ**

Для оценки качества погрешностей, получаемых по методу интервальных вычислений, рассмотрим следующую модельную задачу: будем рассматривать только радиационный захват, деление и радиоактивный распад  $^{242}Pu$ ,  $^{243}Pu$  и  $^{243}Am$ . Тогда система дифференциальных уравнений имеет вид:

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

Таблица 5

**Сравнение концентраций и их погрешностей, рассчитанных по предлагаемой программе, с результатами из работы [2]**

Ядерные концентрации ( $\times 10^{-24}$ ) для выгорания 30 ГВт-сут/т				
Изотоп	Настоящая работа		Работа [2] (Б)	(Б-А)/Б $\times 100\%$
	Концентрация (А)	Погрешности, полученные из интервального анализа		
$^{235}\text{U}$	$4.261 \times 10^{-5}$	1.9	$4.240 \times 10^{-5}$	0.5
$^{238}\text{U}$	$2.006 \times 10^{-2}$	0.1	$2.005 \times 10^{-2}$	0.05
$^{236}\text{U}$	$5.006 \times 10^{-6}$	5.9	$5.233 \times 10^{-6}$	4.3
$^{239}\text{Pu}$	$1.118 \times 10^{-3}$	4.0	$1.124 \times 10^{-3}$	0.5
$^{240}\text{Pu}$	$5.639 \times 10^{-4}$	5.4	$5.675 \times 10^{-4}$	0.6
$^{241}\text{Pu}$	$2.933 \times 10^{-4}$	10.1	$2.897 \times 10^{-4}$	1.2
$^{242}\text{Pu}$	$1.790 \times 10^{-4}$	6.1	$1.750 \times 10^{-4}$	2.3
$^{241}\text{Am}$	$2.262 \times 10^{-5}$	7.9	$2.207 \times 10^{-5}$	2.5
$^{243}\text{Am}$	$3.224 \times 10^{-5}$	14.7	$3.572 \times 10^{-5}$	9.7
$^{244}\text{Cm}$	$1.445 \times 10^{-5}$	16.1	$1.382 \times 10^{-5}$	4.6
$^{131}\text{Xe}$	$1.915 \times 10^{-5}$	8.2	$1.859 \times 10^{-5}$	3.0
$^{135}\text{Cs}$	$4.032 \times 10^{-5}$	8.2	$4.279 \times 10^{-5}$	5.6
$^{147}\text{Pm}$	$6.339 \times 10^{-6}$	8.9	$6.430 \times 10^{-6}$	1.4
Ядерные концентрации ( $\times 10^{-24}$ ) для выгорания 50 ГВт-сут/т				
Изотоп	Настоящая работа		Работа [2] (Б)	(Б-А)/Б $\times 100\%$
	Концентрация (А)	Погрешности, полученные из интервального анализа		
$^{235}\text{U}$	$3.269 \times 10^{-5}$	3.3	$3.239 \times 10^{-5}$	0.9
$^{238}\text{U}$	$1.970 \times 10^{-2}$	0.2	$1.968 \times 10^{-2}$	0.1
$^{236}\text{U}$	$6.920 \times 10^{-6}$	6.6	$7.261 \times 10^{-6}$	4.7
$^{239}\text{Pu}$	$1.006 \times 10^{-3}$	6.1	$1.007 \times 10^{-3}$	0.1
$^{240}\text{Pu}$	$5.275 \times 10^{-4}$	8.9	$5.389 \times 10^{-4}$	2.1
$^{241}\text{Pu}$	$3.026 \times 10^{-4}$	15.4	$2.976 \times 10^{-4}$	1.7
$^{242}\text{Pu}$	$1.799 \times 10^{-4}$	11.2	$1.726 \times 10^{-4}$	4.2
$^{241}\text{Am}$	$3.144 \times 10^{-5}$	12.9	$3.063 \times 10^{-5}$	2.6
$^{243}\text{Am}$	$4.242 \times 10^{-5}$	19.0	$4.900 \times 10^{-5}$	13.4
$^{244}\text{Cm}$	$3.146 \times 10^{-5}$	19.4	$2.958 \times 10^{-5}$	6.4
$^{131}\text{Xe}$	$2.709 \times 10^{-5}$	10.1	$2.591 \times 10^{-5}$	4.6
$^{135}\text{Cs}$	$6.538 \times 10^{-5}$	9.9	$7.015 \times 10^{-5}$	6.8
$^{147}\text{Pm}$	$6.922 \times 10^{-6}$	11.8	$7.309 \times 10^{-6}$	5.3

Таблица 6

**Параметры системы уравнений**

Изотоп	$\sigma_c$ , барн	$\sigma_i$ , барн	л с <sup>-1</sup>	$N_0 \times 10^{-24}$ ядер/см <sup>3</sup>
$^{242}\text{Pu}$	8.6749	0.4782	$5.677 \times 10^{-14}$	$1.0 \times 10^{-4}$
$^{243}\text{Pu}$	5.6121	11.5463	$3.885 \times 10^{-5}$	$1.0 \times 10^{-4}$
$^{243}\text{Am}$	28.8236	0.4607	$2.976 \times 10^{-12}$	0

Соответствующие сечения, постоянные распада и начальные концентрации приводятся в табл. 6. Время выгорания топлива  $T = 100$  сут, плотность потока нейтронов  $\Phi = 3.92 \cdot 10^{14}$  нейтр/(с·см<sup>2</sup>).

Такая простая модельная задача позволяет нам определить: не переоценивает ли предлагаемый интервальный метод реальные пределы изменения концентраций нуклидов при вариации констант. Реальные пределы изменения концентраций нуклидов при изменениях одnogрупповых констант определялись нами простым перебором верхних и нижних значений границ одnogрупповых констант.

Проанализируем влияние возмущения сечений на концентрации нуклидов. Будем брать возмущения сечений равными 3%.

Табл. 7 дает нам погрешности концентраций, получаемые из метода интервальных вычислений. В последних трех столбцах приведены концентрации, посчитанные для реально возмущенных сечений (например, –3%; –3%; 3%; 3%; 3%; 3% соответствует 3-процентному уменьшению сечения радиационного захвата <sup>242</sup>Pu, 3%-процентному уменьшению сечения деления <sup>242</sup>Pu, 3-процентному увеличению сечения радиационного захвата <sup>243</sup>Pu, 3-процентному увеличению сечения деления <sup>243</sup>Pu, 3-процентному увеличению сечения радиационного захвата <sup>243</sup>Am и 3-процентному увеличению сечения деления <sup>243</sup>Am), и их отличия (в %) от концентраций, рассчитанных для невозмущенных сечений.

Таблица 7

**Сравнение результатов интервальных вычислений с расчетами, использующими возмущенные сечения**

Нуклид	Концентрация ( $\times 10^{-4}$ )	Погр. (%)	–3%; –3%; 3%; 3%; 3%; 3%	3%; 3%; 3%; 3%; 3%; 3%	–3%; 3%; 3%; 3%; 3%; 3%
<sup>242</sup> Pu	$9.6947 \times 10^{-5}$	0.093	$9.7038 \times 10^{-5}$ (0.093%)	$9.6857 \times 10^{-5}$ (0.092%)	$9.7028 \times 10^{-5}$ (0.084%)
<sup>243</sup> Pu	$8.4852 \times 10^{-9}$	3.1	$8.2382 \times 10^{-9}$ (2.9%)	$8.7316 \times 10^{-9}$ (2.9%)	$8.7238 \times 10^{-9}$ (2.8%)
<sup>243</sup> Am	$9.3312 \times 10^{-6}$	0.38	$9.2958 \times 10^{-6}$ (0.38%)	$9.3120 \times 10^{-6}$ (0.21%)	$9.2958 \times 10^{-6}$ (0.38%)

Из последней таблицы видно, что как для <sup>242</sup>Pu, так и для <sup>243</sup>Pu и <sup>243</sup>Am метод интервальных вычислений практически точно задает границы (верхние или нижние) изменения концентраций при изменениях сечений в ту или иную сторону.

В качестве следующего шага планируется сравнение погрешностей, определяемых по интервальному методу с погрешностями, получаемыми из коэффициентов чувствительности и линейной теории возмущений.

### Литература

1. Алефельд Г., Херцбергер Ю. Введение в интервальные вычисления. – М.: Мир, 1987.
2. Stepanek J., Vontobel P. EIR Results for the HCLWR NEACRP Burnup Benchmark Obtained Using EIR Version of DANDE System and JEF Library: Отчет NEACRP-A-851 (1987).
3. Cathalau S., Ukraintsev V., Benslimane A. et al. Qualification of the JEF-2 Cross - sections in the Epithermal and Thermal Energy Ranges Using a Statistical Approach//Nuc. Sci. Eng. – 1995. – V. 121. – P. 326-334.

Поступила в редакцию 20.10.2006