

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ОПТИМИЗАЦИИ ПАРАМЕТРОВ НЕЙТРОННО-ФИЗИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ С УЧЕТОМ РЕЗУЛЬТАТОВ ИНТЕГРАЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

А.А. Андрианов, О.Н. Андрианова, Ю.А. Коровин, И.С. Купцов,

А.А. Спиридонова

ИАТЭ НИЯУ МИФИ

249039, Калужская обл., г. Обнинск, Студгородок, 1



Приводится краткое описание функциональных возможностей программного комплекса оптимизации параметров нейтронно-физических моделей (нейтронные данные, технологические параметры и их ковариационные матрицы) с учетом результатов интегральных экспериментов с использованием алгоритмов нелинейной условной многопараметрической оптимизации (ПК ОНИКС). Области применения программного комплекса являются корректировка нейтронных констант, технологических параметров и их ковариационных матриц по результатам интегральных измерений, определение требований к погрешностям нейтронных данных для обеспечения целевых точностей расчета реакторных функционалов, оценка точности расчетных предсказаний реакторных характеристик (константная и технологическая неопределенность), показателей информативности и подобия интегральных экспериментов друг другу и в отношении целевого объекта. Рассмотрены некоторые примеры применения ПК ОНИКС для уточнения нейтронно-физических моделей объектов использования атомной энергии по результатам реакторно-физических экспериментов.

Ключевые слова: нейтронно-физические характеристики, бенчмарк-модель, реакторно-физический эксперимент, усвоение данных, нейтронные константы, технологические параметры.

Андрианов А.А., Андрианова О.Н., Коровин Ю.А., Купцов И.С., Спиридонова А.А. Программный комплекс оптимизации параметров нейтронно-физических моделей с учетом результатов интегральных экспериментов. // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2023. – № 2. – С. 148-161. DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2023.2.12> .

ВВЕДЕНИЕ

Оптимизация проектов инновационных ядерных реакторов и сопряженных с ними объектов топливного цикла проводится, прежде всего, с целью улучшения экономических показателей установок и их конкурентоспособности с учетом требований ядерной и радиационной безопасности. Реальным способом снижения проектных допусков и запасов, определяющих в конечном счете экономическую эффективность и конкурентоспособность установок при безусловном обеспечении требований ядерной и радиа-

© *А.А. Андрианов, О.Н. Андрианова, Ю.А. Коровин, И.С. Купцов, А.А. Спиридонова, 2023*
148

ционной безопасности, является минимизация разнообразных константных и технологических погрешностей реакторных характеристик, оценка которых в обязательном порядке осуществляется при проектировании установок. Единственным способом снижения неопределенностей предсказания реакторных характеристик является учет экспериментальных данных посредством использования специализированных алгоритмов переноса этих данных в расчеты, известных под названием «усвоение данных» (англ. data assimilation).

Вместе с тем, как правило, существует проблема нехватки экспериментальных данных по измерениям нейтронно-физических характеристик на установках, структурно подобных целевым объектам (из-за высокой стоимости соответствующих реакторно-физических экспериментов), что сказывается на ограничении возможностей выполнения всестороннего обоснования показателей эффективности и безопасности проектируемых установок. В связи с этим актуальной становится задача учета и переноса всей доступной на текущий момент экспериментальной информации, полученной в рамках альтернативных экспериментальных программ, на целевой объект, что позволяет повысить точность расчетного предсказания характеристик инновационных ядерных реакторов и сопряженных с ними объектов топливного цикла, при этом отказаться от необходимости проведения дополнительных дорогостоящих экспериментов. Совершенствование методической и инструментальной базы, используемой с целью усвоения нейтронно-физических экспериментальных данных для повышения точности расчетного предсказания реакторных характеристик в условиях недостатка экспериментальных данных, является актуальной научно-практической задачей, решение которой позволяет снижать проектные допуски и запасы и тем самым улучшать показатели экономической эффективности и конкурентоспособности проектируемых установок.

Вышеописанным и важным с практической точки зрения примером область применения процедуры усвоения нейтронно-физических данных в ядерной инженерии не ограничена: процедуру применяют также с целью разработки бенчмарк-моделей реакторно-физических экспериментов (под бенчмарк-экспериментом понимают эксперимент реперного класса с оценёнными погрешностями), планирования новых информативных измерений, корректировки нейтронных констант по результатам интегральных изменений, уточнения стационарных и нестационарных нейтронно-физических моделей, оценки константной и технологической погрешностей, определения целевых точностей нейтронных данных и точности расчетного предсказания нейтронно-физических характеристик объектов использования атомной энергии.

Существует множество возможных реализаций процедуры усвоения нейтронно-физических данных, каждая из которых имеет свои достоинства и недостатки и которые можно разделить на две группы (см. табл. 1): 1) «классический» подход, появившийся в 1970-е гг., – безусловная оптимизация (решение задачи сводится к системе линейных алгебраических уравнений); 2) современные подходы – переход от безусловной к условной постановке оптимизационной задачи (учет физических ограничений и «противоречивых» экспериментов, возможность реализации альтернативных стратегий корректировки, наличие встроенных механизмов проверки качества и «физичности» решений и пр.).

Несмотря на наличие разнообразных подходов и программных средств для усвоения нейтронно-физических данных в настоящее время ведется планомерная работа по их дальнейшему развитию и совершенствованию с целью обеспечения возможности на их основе снижения неопределенностей проектных характеристик инновационных реакторных установок, повышения точностей прогнозирования параметров ядерной безопасности, определения наиболее востребованных направлений по уточнению нейтронных данных и т.п.

Одной из таких разработок является программный комплекс оптимизации параметров нейтронно-физических моделей с учетом результатов интегральных экспериментов (ПК ОНИКС), описание функциональных возможностей которого (включая ключевые приближения, реализованные алгоритмы, области применения) приводится в работе [1]. Следует отметить, что авторы не приводят в статье описание, анализ достоинств и недостатков других программ, так как это не входит в область текущего исследования.

Таблица 1

Сопоставление подходов к усвоению нейтронно-физических данных

Методы		
Классический подход [2 – 11]	Современные подходы [1, 12 – 15]	
Безусловная оптимизация (ANL, CEA, JAEA, JSI, ORNL, ГНЦ РФ – ФЭИ, ОАО «НИКИЭТ») [6 – 9]	Стохастические методы (NRG) [10, 11]	Условная нелинейная многопараметрическая оптимизация (SG46, LANL, INL, ИАТЭ НИЯУ МИФИ) [1, 12, 15]
Особенности реализации, основные допущения		
Простота реализации (сведение к решению системы линейных алгебраических уравнений). Предположение о нормальности распределений исходных параметров. Линеаризация нейтронно-физической модели посредством расчета коэффициентов чувствительности.	Отсутствие необходимости линеаризации нейтронно-физической модели. Применимость для любых типов распределений исходных параметров. Возможность вовлечения в анализ «противоречивых» экспериментов.	Возможность прямого учета разнообразных требований к уточняемым данным. Возможность вовлечения в анализ «противоречивых» экспериментов. Возможность учета нелинейных эффектов. Возможность решения «обратной задачи» по определению требуемых точностей исходных данных.
Ограничения подхода, требования к вычислительным алгоритмам		
Отсутствие возможности учета требований к уточняемым данным. Необходимость исключения из анализа «противоречивых» экспериментов. Отсутствие встроенных механизмов диагностики нефизичности решений. Необходимость проведения дополнительного статистического анализа исходных и уточненных данных.	Повышенные требования к качеству исходных матриц погрешностей. Необходимость применения вычислительно затратных алгоритмов стохастической оптимизации и методов понижения дисперсии.	Повышенные требования к качеству исходных матриц погрешностей. Необходимость применения современных алгоритмов условной нелинейной многопараметрической оптимизации.

КРАТКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ПК ОНИКС

Функционально ПК ОНИКС позволяет вычислить оптимальные поправки к исходным модельным параметрам (нейтронные данные и технологические параметры и их погрешности), минимизирующие расчетно-экспериментальные расхождения (целевой функционал – хи-квадрат – обсуждается ниже), с учетом заданных пользователем требований к данным (например, в пределах их погрешностей) и точности расчета реакторных функционалов (набор дополнительных ограничений); определить требуемые погрешности в данных для обеспечения целевой точности расчета реакторного функционала; оценить смещения в расчетных характеристиках целевых объектов и их погрешности при использовании уточненных исходных данных; рассчитать набор показателей информативности и подобия интегральных экспериментов друг другу и в отношении целевого объекта; оценить константную и технологическую неопределенность реакторных характеристик.

Характерные особенности ПК ОНИКС: прямая имплементация алгоритмов условной

нелинейной многопараметрической оптимизации (используются алгоритмы семейства trust-region (TRM) [2], являющиеся надежными и устойчивыми, имеющими хорошие свойства сходимости, и которые могут быть применены к плохо обусловленным задачам), что обеспечивает возможность реализовать различные стратегии корректировки исходных данных и их погрешностей по результатам интегральных измерений с учетом набора требований пользователя к итоговому набору нейтронных данных и технологических параметров, оценить влияние внесенных корректировок на расчетные предсказания реакторных характеристик; отсутствие ограничений на число энергетических групп представления нейтронных данных; интеграция с современными средствами обработки и визуализации данных.

Общая постановка оптимизационной задачи по усвоению нейтронно-физических данных, решаемой с использованием ПК ОНИКС, может быть сформулирована следующим образом. Пусть \mathbf{E} – вектор измеренных в экспериментах величин, \mathbf{x} – вектор параметров (нейтронные константы и (или) технологические параметры), определяющих нейтронно-физическую модель, которая используется для расчета измеренных величин ($\mathbf{C}(\mathbf{x})$ – вектор соответствующих расчетных значений). Математическая постановка задачи сводится к нахождению минимума целевого функционала (хи-квадрат) с учетом наложенных ограничений на диапазоны варьирования модельных параметров и дополнительных ограничений, артикулирующих требования к качеству параметров модели:

$$\begin{cases} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\text{исх}})^T \mathbf{M}_x^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\text{исх}}) + (\mathbf{E} - \mathbf{C}(\mathbf{x}))^T (\mathbf{W}^T \mathbf{M}_E \mathbf{W})^{-1} (\mathbf{E} - \mathbf{C}(\mathbf{x})) \rightarrow \min, \\ h_i^{\min} \leq x_i - x_{i\text{исх}} \leq h_i^{\max} \quad (i = 1, \dots, N_x), \\ f_k^{\min} \leq F_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{\text{исх}}, \mathbf{E}, \mathbf{C}(\mathbf{x})) \leq f_k^{\max} \quad (k = 1, \dots, K), \end{cases} \quad (1)$$

где $\mathbf{x}_{\text{исх}}$ – вектор исходных значений параметров (нейтронные константы и (или) технологические параметры); h_i – ограничения на смещения параметров x_i ; F_k – метрика расчетно-экспериментальных расхождений для одного или нескольких измерений; f_k – ограничения на F_k (min и max – нижняя и верхняя границы, соответственно); \mathbf{W} – диагональная матрица весов экспериментов; $\mathbf{M}_x, \mathbf{M}_E$ – ковариационные матрицы параметров и измерений соответственно ($M_{ij} = d_i$ (дисперсия) для $i = j$; $M_{ij} = \text{cov}(x_i, x_j)$ для $i \neq j$).

Одна из главных трудностей, с которыми приходится сталкиваться при практическом применении процедуры усвоения нейтронно-физических данных, состоит в необходимости анализировать разноплановые измерения, которые зачастую оказываются противоречивыми друг другу. Рассмотрение таких экспериментальных данных по отдельности приводит к противоположным тенденциям в смещениях $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ и параметрах \mathbf{x} . В ПК ОНИКС встроены методики выявления противоречивых экспериментов, основанные на различных статистических показателях (общий и индивидуальные хи-квадрат как с учетом, так и без учета корреляций, коэффициенты корреляций различных экспериментов, коэффициент Ишикава и др.) [16], а также возможность регулировки вклада каждого эксперимента в целевой функционал при помощи матрицы весов экспериментов \mathbf{W} .

В ПК ОНИКС реализованы и традиционные подходы к корректировке нейтронных констант с учетом результатов интегральных экспериментов на основании безусловной оптимизации, использующей метод максимального правдоподобия и обобщенный метод наименьших квадратов [3 – 6]. Дополнительно реализована авторская модификация таких подходов на основе метода множителей Лагранжа, позволяющая при корректировке данных обеспечить строгое выполнение равенства расчетных и экспериментальных значений (эту модификацию имеет смысл использовать при совместной корректировке нейтронных констант и технологических параметров, например, при разработке бенчмарк-моделей реакторно-физических экспериментов).

ПК ОНИКС позволяет оценить различные метрики показателей информатив-

ности и подобия интегральных экспериментов друг другу и в отношении целевого объекта, а также способов диагностики качества решения (статистические тесты, коэффициенты подобия, коэффициент Кука, вычисление показателей «силы» и «потенциала» корректировки, проверка полученных смещений на физичность и т.п.) [16].

Поскольку в ПК ОНИКС реализованы алгоритмы условной нелинейной многопараметрической оптимизации, то это позволяет решить задачу по определению требуемых точностей нейтронных данных, обеспечивающих целевые точности расчета нейтронно-физических характеристик реакторных систем и систем внешнего топливного цикла. Классическая математическая формулировка данной задачи [3] предполагает поиск таких значений погрешностей констант (под погрешностью понимают стандартное отклонение – корень из дисперсии), чтобы оцененная на их основе константная погрешность реакторного функционала R не превышала целевую погрешность $d_{ц}$, т.е. $d_R(d_i) \leq d_{ц}$ (например, для $k_{эф}$ быстрого реактора актуальные требования [14, 15] к точности расчетного предсказания соответствует 0,2 – 0,3%). Задача определения требуемых точностей нейтронных констант сводится к минимизации так называемого функционала «затрат» F на получение информации о каждой нейтронной константе. Затраты на достижение точности $d_{i,тр}$ принято считать как произведение стоимости λ_i получения единицы информации о константе на статистический вес константы, равный $1/d_{i,тр}$. Константная погрешность реакторного функционала R определяется по формуле [3]

$$d_R = \mathbf{S}^T \mathbf{M}_\sigma \mathbf{S},$$

где $S_i = \partial R / \partial \sigma_i$ – элементы вектора коэффициентов чувствительности расчетного значения реакторного параметра к i -ой константе; \mathbf{M}_σ – ковариационная матрица погрешностей констант. Оптимизационная задача по определению требований к точностям нейтронных констант может быть сформулирована в следующем виде:

$$F = \sum_i \lambda_i / d_{i,тр} \rightarrow \min, \quad (2)$$

$$d_R = \mathbf{d}_{тр}^T \mathbf{S}_D^T \mathbf{C}_\sigma \mathbf{S}_D \mathbf{d}_{тр} \leq d_{ц}, \quad d_{i,тр} \leq d_{i,мкс} \quad (i = 1, \dots, N),$$

где $\mathbf{d}_{тр} = \{d_{i,тр}^{1/2}\}$ – вектор константных погрешностей; \mathbf{S}_D – диагональная матрица коэффициентов чувствительности ($S_{Dij} = S_i$ для $i = j$ и $S_{Dij} = 0$, для $i \neq j$); \mathbf{C}_σ – корреляционная матрица нейтронных констант, полученная из дифференциальных измерений (в данной матрице возможен учет и результатов интегральных измерений).

ТЕСТИРОВАНИЕ ПК ОНИКС

Выполненные с использованием ПК ОНИКС расчеты тестов Агентства по ядерной энергии при Организации экономического сотрудничества и развития (АЯЭ ОЭСР), разработанных с целью кросс-верификации кодов анализа неопределённостей для реакторных приложений [7], а также сопоставление с результатами расчётов других авторов, полученными с использованием схожих по функционалу зарубежных программных средств, продемонстрировали корректность методик и алгоритмов, реализованных в ПК ОНИКС; в частности, для аналогичных модельных предположений и исходных данных получены идентичные результаты.

Вычислительный модуль ПК ОНИКС разработан с использованием языка программирования Python. С целью облегчения пользователям работы с ПК ОНИКС модуль подготовки исходных данных и постобработки результатов расчетов разработан с использованием встроенного языка электронных таблиц MS Excel Visual Basic for Applications (VBA). Разработаны также ограниченные по функциональным возможностям образовательные версии ПК ОНИКС в системе компьютерной алгебры MathCAD.

НЕКОТОРЫЕ ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЯ ПК ОНИКС

Определение требований к точности нейтронных констант, обеспечивающих целевую точность расчетного предсказания стационарных нейтронно-физических характеристик

Первым примером применения ПК ОНИКС является решение задачи по определению требований к точности нейтронных констант, обеспечивающих целевую точность расчетного предсказания стационарных нейтронно-физических характеристик (в рассмотренном ниже случае – критичности) реактора на быстрых нейтронах со свинцовым теплоносителем. Суть задачи заключается в том, что в условиях высоких требований к точности расчетного предсказания характеристик инновационных реакторных установок (например, точность предсказания $k_{эф}$ должна быть $\delta k_{эф} \leq 0,3 - 0,2\%$ при исходной константой погрешности $\delta k_{эф} \geq 1\%$) необходимо сформулировать требования к точности нейтронных данных, которые позволят обеспечить желаемую точность расчета параметров проектируемого объекта. Результаты подобного анализа используются при формировании списка высокоприоритетных запросов на уточнение ядерных данных (HPRL – High Priority Request List) в АЯЭ ОЭСР.

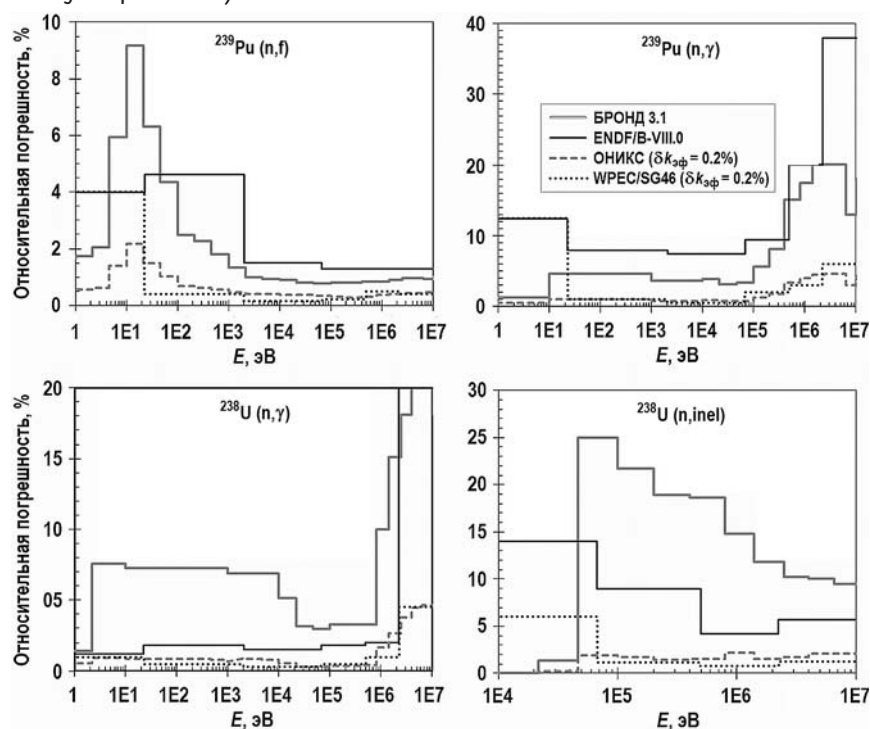


Рис. 1. Относительные погрешности основных нейтронных реакций, определяющих константную погрешность $k_{эф}$ модели свинцового быстрого реактора (сплошные линии – достигнутые погрешности, штриховые и пунктирные – требуемые погрешности)

На рисунке 1 приведены результаты решения данной задачи с использованием ПК ОНИКС в предположении, что нейтронные константы должны обеспечить целевую точность расчета $k_{эф}$ для модели быстрого реактора со свинцовым теплоносителем на уровне не более 0,2%. Здесь же приводятся результаты аналогичных оценок, выполненные зарубежными специалистами [14, 15]. Несмотря на то, что в работах зарубежных специалистов использовалась отличная от ПК ОНИКС реализация методов нелинейной оптимизации, а также исходные значения погрешностей нейтронных сечений (сплошные линии на графиках) определялись по зарубежным библиотекам оцененных ядерных дан-

ных, результаты (штриховые и пунктирные линии) имеют в целом схожие тенденции, а в значимой для быстрого реактора области энергий (1 кэВ – 1 МэВ) практически идентичны (в расчетах по ПК ОНИКС использовалась отечественная библиотека БРОНД 3.1 с оценкой, выполненной в 28-ми энергетических группах, а в работе [15] – библиотека ENDF/B-VIII.0 с оценкой по семи энергетическим группам).

Выполненные оценки демонстрируют, что для достижения целевой точности $k_{эф}$ на уровне 0,2% без учета интегральных экспериментов необходимо существенное снижение погрешностей нейтронных сечений (в семь – десять раз), что не всегда может быть достигнуто путем проведения большого числа дифференциальных измерений (измерения нейтронных сечений) из-за ограничений точности измерительной аппаратуры.

Оценка константной погрешности целевых размножающих систем с учетом результатов интегральных измерений

Второй пример применения ПК ОНИКС – расчетное предсказание характеристик размножающих систем на основании информации об измерениях критичности, выполненных в экспериментах на критических сборках. В качестве демонстрационного примера рассмотрен тест АЯЭ ОЭСР по критической безопасности систем с МОКС-топливом [17, 18], предложенный для тестирования национальных кодов и нейтронных констант, используемых для обоснования критической безопасности реакторных установок и систем внешнего топливного цикла. В данном тесте рассматриваются 15 различных целевых систем, которые моделируют переделы замкнутого ЯТЦ. Для реализации процедуры усвоения нейтронно-физических данных было отобрано 12 информативных экспериментов, выполненных на сборках БФС [19].

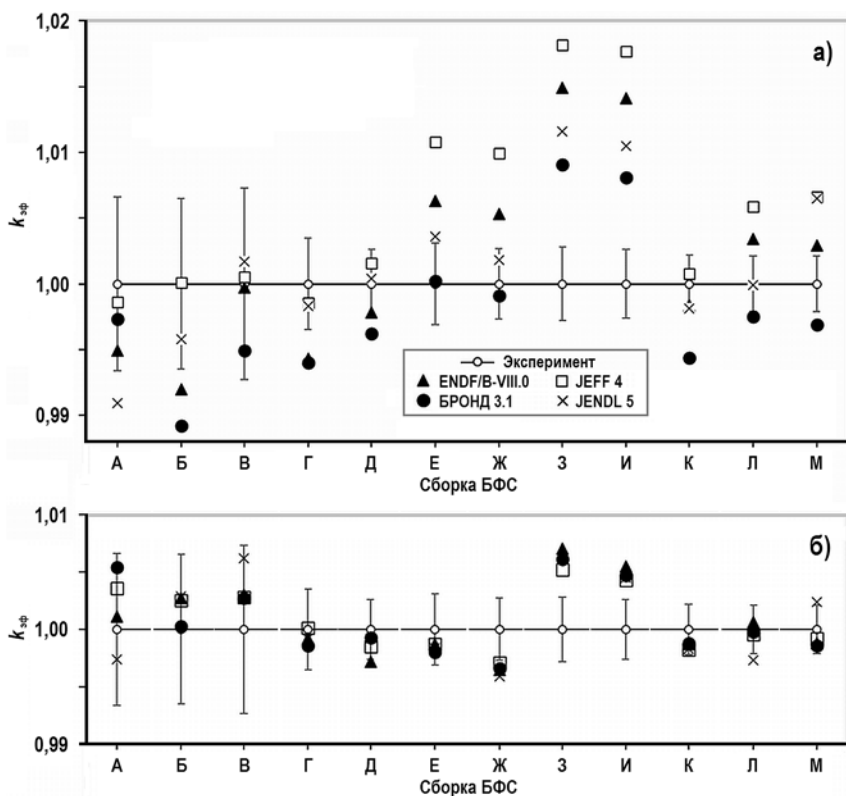


Рис. 2. Расчетно-экспериментальные расхождения в $k_{эф}$ до (а) и после (б) корректировки нейтронных констант. Обозначения сборки: А – БФС-35-1; Б – БФС-38-2; В – БФС-42; Г – БФС-97-1; Д – БФС-97-2; Е – БФС-97-3; Ж – БФС-97-4; З – БФС-99-1; И – БФС-99-2; К – БФС-101-1; Л – БФС-101-1; М – БФС-101-3

Результаты применения ПК ОНИКС для решения этой задачи с использованием различных наборов библиотек оцененных нейтронных данных показаны на рис. 2. В частности, рисунок демонстрирует, как уточнение нейтронных констант в пределах их погрешностей позволяет сократить расчетно-экспериментальные расхождения для рассмотренных интегральных экспериментов. В результате уточнения нейтронных констант по результатам интегральных измерений снижается константная погрешность расчета целевых систем (рис. 3). Следует отметить, что после корректировки различные библиотеки нейтронных данных становятся «неразличимы» по качеству – они обеспечивают в среднем одинаковые расчетно-экспериментальные расхождения (для совокупности экспериментов).

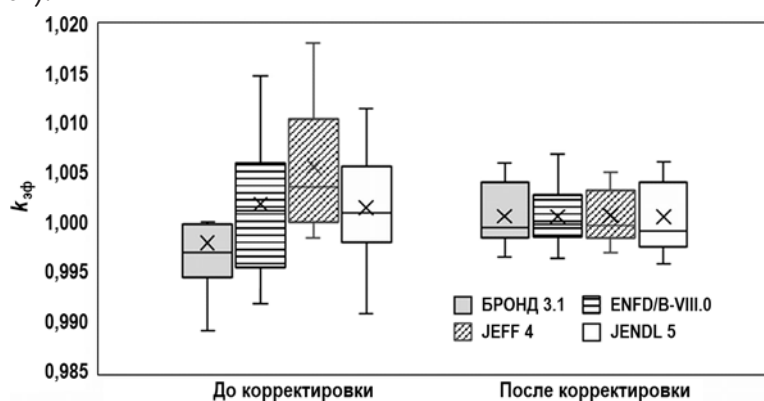


Рис. 3. Сравнение расчетной погрешности $k_{эф}$ целевой системы (на примере системы с 30%-ным содержанием плутония в МОКС-топливе и плутониевым вектором 96, 4, 0, 0% для $^{239,240,241,242}\text{Pu}$ соответственно) до и после корректировки нейтронных констант («крестики» – среднее значение; линия внутри прямоугольников – медиана; границы прямоугольника – 25 и 75% перцентиль; «усы» – минимальное и максимальное значения)

Пример совместной корректировки константных и технологических погрешностей в облучательных экспериментах

Третий пример применения ПК ОНИКС демонстрирует совместную корректировку нейтронных констант и технологических параметров применительно к задачам моделирования нуклидной кинетики. При разработке бенчмарк-моделей облучательных экспериментов могут возникать случаи, когда расхождения между расчетными и экспериментальными значениями не могут быть устранены корректировкой одних только нейтронных констант в пределах их погрешностей измерения. В таких случаях расчетно-экспериментальные расхождения могут быть вызваны другими факторами (например, неадекватностью расчётной модели, большими погрешностями технологических параметров и пр.), поэтому минимизация этих расхождений исключительно подгонкой нейтронных констант может приводить к нефизичным решениям. В тех случаях, когда надежность экспериментальных данных не вызывает сомнений, возможно осуществить корректировку расчетной модели экспериментов путем уточнения в том числе и технологических параметров в пределах их погрешностей.

Технологические параметры (размеры структурных элементов, ядерные концентрации, температуры материалов и пр.) определяют условия проведения конкретного измерения. Для задач нуклидной кинетики помимо перечисленных параметров важную роль играют режимы облучения топлива (длительность облучения и выдержки, тепловая мощность и пр.). Как правило, для данного класса задач характерно сильное влияние неопределенностей технологических параметров (в первую очередь, начального состава, табл. 2) на погрешность определения состава облученного образца. В такого рода ситуациях составляющая расчетной погрешности, обусловленная погрешностями технологических параметров (табл. 3, столбец 2), оказывается сопоставимой или даже большей по величине кон-

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ В ОБЪЕКТАХ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

стантной составляющей (табл. 3, столбец 3) в отличие от стационарных нейтронно-физических задач, где константная составляющая погрешности бывает преобладающей.

Таблица 2

Погрешности однокрупных сечений и начального состава облучаемого образца

Нуклид	Погрешность однокрупных сечений (БРОНД 3.1), %		Погрешность начального состава, %
	(n, fis)	(n, γ)	
²³⁴ U	1,8	25,1	33
²³⁵ U	0,6	5,5	3,3
²³⁶ U	0,6	3,2	–
²³⁸ U	0,7	4,5	0,04
²³⁸ Pu	2,2	26,5	50
²³⁹ Pu	0,7	4,3	0,2
²⁴⁰ Pu	1,4	5,1	4,5
²⁴¹ Pu	3,2	6,6	33
²⁴² Pu	2,5	7,6	100
²⁴¹ Am	1,0	7,4	25
^{242m} Am	2,8	17,4	–
²⁴³ Am	3,0	3,7	–
²⁴² Cm	12,4	19,2	–
²⁴³ Cm	9,6	17,7	–
²⁴⁴ Cm	4,2	17,8	–

Таблица 3

Технологическая (Т) и константная (К) составляющие погрешности расчета состава облученного топлива до и после корректировки

Нуклид	Погрешность состава облученного топлива, %			
	до корректировки		после корректировки	
	Т	К	Т	К
²³⁴ U	30	2,2	2,8	1,8
²³⁵ U	3,0	0,5	1,0	0,4
²³⁶ U	2,9	5,2	0,9	3,7
²³⁸ U	0,04	0,2	0,04	0,04
²³⁸ Pu	14	3,1	2,7	2,0
²³⁹ Pu	0,13	1,2	0,13	0,2
²⁴⁰ Pu	1,8	2,7	1,5	1,5
²⁴¹ Pu	3,9	4,8	2,9	2,5
²⁴² Pu	29	4,8	3,7	2,9
²⁴¹ Am	13	2,6	1,5	1,3
^{242m} Am	23	6,4	0,5	1,1
²⁴³ Am	47	7,6	5	3,7
²⁴² Cm	22	6,2	0,5	0,9
²⁴³ Cm	24	20,0	0,6	2,7
²⁴⁴ Cm	57	7,9	6	4,3

В этом случае совместная корректировка всех входных данных (как технологических параметров, так и нейтронных констант) приводит к их уточнению (изотопный со-

став уточняется в пределах заявленных погрешностей), снижению обеих компонент погрешности, а также к сближению расчетных и экспериментальных значений.

В таблице 3 приведены результаты совместной корректировки технологических параметров (ядерные концентрации начального состава топлива, однокрупной поток нейтронов, время выдержки) и нейтронных констант (однокрупные сечения деления и захвата, реакции $(n,2n)$, коэффициенты ветвления и пр.) для уточнения бенчмарк-модели эксперимента по исследованию облученных образцов уран-плутониевого топлива в быстром энергетическом реакторе [20]. Корректировка технологических параметров с использованием авторской модификации метода неопределённых множителей Лагранжа, реализованного в ПК ОНИКС, позволяет снизить обусловленную их неопределённостями компоненту погрешности примерно в 10 раз. В использованном алгоритме минимизируется квадратичная форма (1) при условии равенства экспериментальных и расчетных значений $\mathbf{C}(\mathbf{x}) = \mathbf{E}$. При этом предполагается, что смещения корректируемых параметров не должны превышать исходные погрешности $|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{исх}| \leq \mathbf{d}_{исх}^{1/2}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

ПК ОНИКС предназначен для корректировки нейтронных констант и технологических параметров нейтронно-физических моделей по результатам интегральных изменений, что может быть использовано для уточнения стационарных и нестационарных нейтронно-физических моделей объектов использования атомной энергии и уточнения бенчмарк-моделей реакторно-физических экспериментов, оценки константной и технологической погрешностей, а также точности расчетного предсказания нейтронно-физических характеристик реакторов и их топливных циклов, определения точностей нейтронных данных, обеспечивающих достижение целевой точности предсказания нейтронно-физических характеристик. Реализованный метод условной многопараметрической нелинейной оптимизации позволяет существенным образом расширить область применения классических подходов к усвоению нейтронно-физических данных (метод максимального правдоподобия и обобщённый метод наименьших квадратов) и сводится к последним при постановке задачи на поиск безусловного минимума. Предложенная реализация процедуры позволяет решать также и «обратные» задачи по обоснованию требований к точностям нейтронных данных и определению оптимальной совокупности дополнительных дифференциальных и интегральных экспериментов, обеспечивающих достижение целевой точности предсказания нейтронно-физических характеристик проектируемых объектов.

Благодарности

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-10154, <https://www.rscf.ru/project/23-29-10154>.

Литература

1. Андрианов А.А., Андрианова О.Н., Головки Ю.Е., Купцов И.С. ПК ОНИКС. – Программа для ЭВМ, № 2022611613. – 2022. Электронный ресурс: <https://elibrary.ru/item.asp?id=47991503> (дата доступа 20.04.2023).
2. Conn A.R., Gould N.I.M., Toint P.L. Trust region methods (MOS-SIAM Series on Optimization). – SIAM Publ. 2000. DOI: <https://doi.org/10.1137/1.9780898719857>.
3. Усачев Л.Н., Бобков Ю.Г. Теория возмущений и планирование эксперимента в проблеме ядерных данных для реакторов. – М.: Атомиздат, 1980. – 88 с.
4. Николаев М.Н., Рязанов Б.Г. О коррекции сечений по данным интегральных экспериментов. // ВАНТ. Сер. «Ядерные константы». – 1974. – Вып. 17. – С. 21-40.
5. Ваньков А.А., Воробаев А.И. К вопросу о коррекции сечений по данным интегральных экспериментов. // ВАНТ. Сер. «Ядерные константы», 1974. – Вып. 17. – С. 41-43.

6. Мантуров Г.Н. Методическое – константное и программное обеспечение нейтронно-физических расчетов быстрых реакторов и оценки погрешностей расчетных предсказаний. – Дисс. д-ра техн. наук. – М.: НИЦ «КИ», 2017. – 202 с.
7. Assessment of Existing Nuclear Data Adjustment Methodologies: Working Party on International Evaluation Co-Operation. Intermediate Report of the WPEC Subgroup 33. / Report / NEA/OECD. – Paris, 2011. – 152 p.
8. Palmiotti G., Salvatores M., Aliberti G. A-priori and a-posteriori covariance data in nuclear cross section adjustment: Issues and challenges. // Nuclear Data Sheets. – 2015. – No. 123. – PP. 41-50. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nds.2014.12.008>.
9. Климов А.Д. Метод корректировки ядерных данных на основе результатов экспериментов. // Атомная энергия. – 2014. – Т. 117. – Вып. 4. – С. 224-231. Электронный ресурс: <https://www.j-atomicenergy.ru/index.php/ae/article/view/987/968> (дата доступа 20.04.2023).
10. Hoefer A., Buss O. Assessing and improving model fitness in MOCABA data assimilation. // Ann. Nucl. Energy. – 2021. – No. 162. – P. 8. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2021.108490>.
11. Rochman D., Vasiliev A., Ferroukhi H., Zhu T., van der Marck S.C. Nuclear data uncertainty for criticality-safety: Monte-Carlo vs. linear perturbation. // Ann. Nucl. Energy. – 2016. – Vol. 92. – PP. 150-160. DOI: <https://doi.org/10.1140/epjp/i2018-12303-8>.
12. Siefman D., Hursin M., Rochman D., Pelloni S., Pautz A. Stochastic vs. sensitivity-based integral parameter and nuclear data adjustments. // Eur. Phys. J. Plus. – 2018. – No. 133. – P. 429. DOI: <https://doi.org/10.1140/epjp/i2018-12303-8>.
13. Siefman D., Hursin M., Sjostrand H., Schnabel G., Rochman D., Pautz A. Data assimilation of post-irradiation examination data for fission yields from GEF. // EPJ Nucl. Sci. Technol. – 2020. – Vol. 6. – No. 52. – P. 17. DOI: <https://doi.org/10.1051/epjn/2020015>.
14. Castelluccio D.M., Grasso G., Lodi F., Peluso V.G., Mengoni A. Nuclear data target accuracy requirements for advanced reactors: The ALFRED case. // Ann. Nucl. Energy. – 2021. – Vol. 162. – P. 108533. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2021.108533>.
15. Cabellos O. TAR Exercise: Preliminary Results WPEC Subgroup 46 (SG46) Meeting. Электронный ресурс: https://www.oecd-nea.org/download/wpec/sg46/meetings/2021-12/documents/6_WPEC_SG46_7_Dec_2021_UQ_and_Preliminary_TAR_Results_OCabellos_UPM.pdf (дата доступа 20.04.2023).
16. Methods and approaches to provide feedback from nuclear and covariance data adjustment for improvement of nuclear data files: Intermediate report. / Report / Nuclear Science NEA/OECD, NEA/NSC/R. – Paris, 2016. – 43 p.
17. Андрианова О.Н., Головки Ю.Е., Мантуров Г.Н. Верификация константного обеспечения РосФонд/БНАБ-РФ в расчетах международного теста OECD/NEA по критической безопасности систем с МОКС-топливом. // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2018. – № 3. – С. 160-170. – DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2018.3.14>.
18. Carmouz E.C., Huyghe J., Santamarina A. MOX powders calculation improvement: Criticality calculations in the context of OECD NEA benchmark. / Proceedings of GLOBAL 2017. – Сеул: Республика Корея, 2017. – P. 8.
19. International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments (ICSBEP). Электронный ресурс: https://www.oecd-nea.org/jcms/pl_20291/icsbep-handbook (дата доступа 20.04.2023).
20. Момотов В.Н., Ерин Е.А., Волков А.Ю., Куприянов В.Н., Хамдеев М.И., Тихонова Д.Е., Шадрин А.Ю., Хомяков Ю.С. Радиохимический и элементный анализ смешанного уран-плутониевого топлива, облученного в реакторе БН-600. // Радиохимия. – 2022. – Т. 64. – № 1. – С. 53-59. – DOI: <https://doi.org/10.31857/S003383112201004X>.

Поступила в редакцию 23.04.2023 г.

Авторы

Андрианов Андрей Алексеевич, доцент, к.т.н.

E-mail: andreyandrianov@yandex.ru

Андрианова Ольга Николаевна, независимый эксперт, к.т.н.

E-mail: o.n.andrianova@yandex.ru

Коровин Юрий Александрович, профессор, д.ф.-м.н.

E-mail: korovinyu@mail.ru

Купцов Илья Сергеевич, доцент, к.ф.-м.н.

E-mail: kuptsov_ilia@list.ru

Спиридонова Анастасия Алексеевна, инженер

E-mail: aaspiridonova@mephi.ru

UDC 621.039.51

A Computer Code for Optimizing the Neutronic Model Parameters Based on Results of Integral Experiments

Andrianov A.A., Andrianova O.N., Korovin Yu.A., Kuptsov I.S., Spiridonova A.A.

IATE MEPHI

1 Studgorodok, 249039 Obninsk, Kaluga Reg., Russia

ABSTRACT

The paper describes in brief the functional capabilities of a computer code for optimizing the neutronic model parameters (neutron data, process parameters, and their covariance matrices) based on results of integral experiments using conditional nonlinear multi-parameter optimization algorithms (ONIX). The code's application scope includes adjustment of constants, process parameters and their covariance matrices based on integral measurement results, formulation of requirements with respect to the neutron data uncertainties for achieving the target accuracies in calculation of the reactor functionals, and estimation of the reactor performance prediction accuracy (constant and process uncertainty), as well as the informativity and similarity metrics of integral experiments with respect to each other and in relation to the target facility. The paper also considers some examples of using the ONIX code to refine the neutronic models of nuclear facilities and fuel cycle systems based on results of reactor physics experiments.

Key words: neutronic performance, benchmark model, integral experiment, data assimilation, neutron constants, process parameters.

Andrianov A.A., Andrianova O.N., Korovin Yu.A., Kuptsov I.S., Spiridonova A.A. Computer Code for Optimising the Neutronic Model Parameters Based on Results of Integral Experiments. *Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika*. 2023, no. 2, pp. 148-161; DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2023.2.12> (in Russian).

REFERENCES

1. Andrianov A.A., Andrianova O.N., Golovko Yu.E., Kuptsov I.S. *ONIX Code: Computer Program*. Certificate RF: Computer Software, No. 2022611613, 2022. Available at: <https://elibrary.ru/item.asp?id=47991503> (accessed Apr. 20, 2023) (in Russian).

2. Conn A.R., Gould N.I.M., Toint P.L. *Trust Region Methods* (MOS-SIAM Series on Optimization). SIAM Publ., 2000; DOI: <https://doi.org/10.1137/1.9780898719857>.
3. Usachev L.N., Bobkov Yu.G. *Perturbation Theory and Experiment Planning in the Problem of Nuclear Data for Reactors*. Moscow. Atomizdat Publ., 1980, 88 p. (in Russian).
4. Nikolaev M.N., Ryazanov B.G. The Neutron Cross-Sections Correction Based on Integral Experiment Results. *VANT. Ser. Yadernye Konstanty*. 1974, iss. 17, pp. 21-40 (in Russian).
5. Van'kov A.A., Voropaev A.I. On the Issue of Neutron Cross-Sections Correction According to the Integral Experiment Results. *VANT. Ser. Yadernye Konstanty*. 1974, iss. 17, pp. 41-43 (in Russian).
6. Manturov G.N. *Methodological, Constant and Program Support of Neutron-Physical Calculations of Fast Reactors and Estimation of Calculation Prediction Uncertainties*. Dr. Sci. (Engineering) Diss. Moscow. Kurchatov Institute NRC Publ., 2017, 202 p. (in Russian).
7. *Assessment of Existing Nuclear Data Adjustment Methodologies: Working Party on International Evaluation Co-Operation*. Intermediate Report of the WPEC Subgroup 33./ Report/NEA/OECD. Paris, 2011, 152 p.
8. Palmiotti G., Salvatores M., Aliberti G. A-Priori and A-Posteriori Covariance Data in Nuclear Cross Section Adjustment: Issues and Challenges. *Nuclear Data Sheets*. 2015, no. 123, pp. 41-50; DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nds.2014.12.008>.
9. Klimov A.D. Method of Adjusting Nuclear Data on the Basis of Experimental Results. *Atomic Energy*. 2015, v. 117, iss. 4, pp. 278-288.
10. Hoefer A., Buss O. Assessing and Improving Model Fitness in MOCABA Data Assimilation. *Ann. Nucl. Energy*. 2021, no. 162, p. 8; DOI: <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2021.108490>.
11. Rochman D., Vasiliev A., Ferroukhi H., Zhu T., van der Marck S.C. Nuclear Data Uncertainty for Criticality-Safety: Monte-Carlo vs. Linear Perturbation. *Ann. Nucl. Energy*. 2016, v. 92, pp. 150-160; DOI: <https://doi.org/10.1140/epjp/i2018-12303-8>.
12. Siefman D., Hursin M., Rochman D., Pelloni S., Pautz A. Stochastic vs. Sensitivity-Based Integral Parameter and Nuclear Data Adjustments. *Eur. Phys. J. Plus*. 2018, no. 133, p. 429; DOI: <https://doi.org/10.1140/epjp/i2018-12303-8>.
13. Siefman D., Hursin M., Sjostrand H., Schnabel G., Rochman D., Pautz A. Data Assimilation of Post-Irradiation Examination Data for Fission Yields from GEF. *EPJ Nucl. Sci. Technol.* 2020, v. 6, no. 52, p. 17; DOI: <https://doi.org/10.1051/epjn/2020015>.
14. Castelluccio D.M., Grasso G., Lodi F., Peluso V.G., Mengoni A. Nuclear Data Target Accuracy Requirements for Advanced Reactors: The ALFRED Case. *Ann. Nucl. Energy*, 2021, v. 162, 108533; DOI: <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2021.108533>.
15. Cabellos O. TAR Exercise: Preliminary Results WPEC Subgroup 46 (SG46) Meeting. Available at: https://www.oecd-nea.org/download/wpec/sg46/meetings/2021-12/documents/6__WPEC_SG46_7_Dec_2021_UQ_and_Preliminary_TAR_Results_OCabellos_UPM.pdf (accessed Apr. 20, 2023).
16. *Methods and Approaches to Provide Feedback from Nuclear and Covariance Data Adjustment for Improvement of Nuclear Data Files: Intermediate report*. Nuclear Science NEA/OECD, NEA/NSC/R. Paris, 2016, 43 p.
17. Andrianova O.N., Golovko Yu.E., Manturov G.N. Verification of the ROSFOND/ABBN Nuclear Data Based on the OECD/NEA Benchmark on Criticality Safety of MOX Fueled Systems. *Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika*, 2018, no. 3, pp. 160–170; DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2018.3.14> (in Russian).
18. Carmouz E.C., Huyghe J., Santamarina A. MOX Powders Calculation Improvement: Criticality Calculations in the Context of OECD NEA Benchmark. *Proceedings of GLOBAL 2017*. Seoul 2017, p. 8.
19. International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments

(ICSBEP). Available at: https://www.oecd-nea.org/jcms/pl_20291/icsbep-handbook (accessed Apr. 20, 2023).

20. Momotov V.N., Erin E.A., Volkov A.Yu., Kupriyanov V.N., Hamdeev M.I., Tikhonova D.E., Shadrin A.Yu., Khomyakov Yu.S. Radiochemical and Elemental Analysis of Mixed Uranium-Plutonium Fuel Irradiated in the BN-600 Reactor. *Radiokhimiya*. 2022, v. 64, no. 1, pp. 53-59; DOI: <https://doi.org/10.1134/S1066362222010064> (in Russian).

Authors

Andrey A. Andrianov, Associate Professor, Cand. Sci. (Engineering)
E-mail: andreyandrianov@yandex.ru

Olga N. Andrianova, Independent Expert, Cand. Sci. (Engineering)
E-mail: o.n.andrianova@yandex.ru

Yury A. Korovin, Professor, Dr. Sci. (Phys. & Math.)
E-mail: korovinyu@mail.ru

Iliya S. Kuptsov, Associate Professor, Cand. Sci. (Phys. & Math.)
E-mail: kuptsov_ilia@list.ru

Anastasiya A. Spiridonova, Engineer
E-mail: aaspiridonova@mephi.ru