



Федеральная служба по экологическому, технологическому и атомному надзору

ФЕДЕРАЛЬНОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ

«Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности»



О погрешностях программ нейтронно-физического расчета, определяемых при их валидации/верификации

М.С. Онегин, НИЦ «Курчатовский институт» - «ПИЯФ», Гатчина

А.И. Попыкин, Н.А. Старова ФБУ «НТЦ ЯРБ», Москва

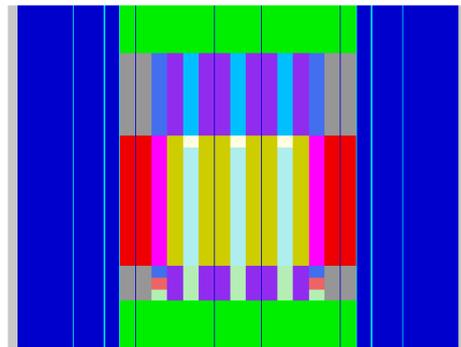
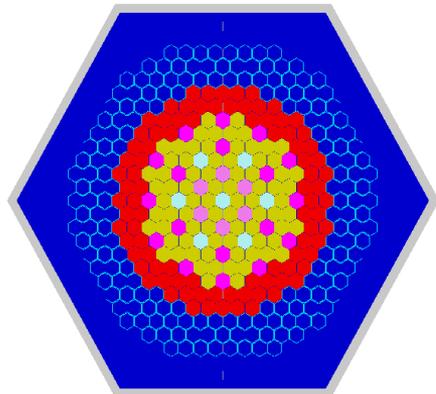
Научно-техническая конференция
«Нейтронно-физические проблемы атомной энергетики (Нейтроника-2024)»
31.05 2024 г.

Согласно Положению о проведении верификации и экспертизы программных средств по направлению «Нейтронно-физические расчеты» (РБ-061-11):

- п. 12. Рекомендуется оценивать методическую и **константную компоненты погрешности** ПС. Эти компоненты погрешности могут оцениваться как совместно, так и по отдельности
- п. 15. Оценку методической и **константной компонент погрешности** для инженерных ПС (пункт 23 настоящего Положения) рекомендуется выполнять путём сравнения результатов расчетов с соответствующими результатами, полученными по реперным ПС (пункт 22 настоящего Положения).
- п. 22. ПС для решения однородного или неоднородного линейного уравнения переноса, погрешность которых в области применимости определяется только **погрешностью используемых файлов оцененных ядерных данных** (без учёта погрешности исходных технологических данных – например, геометрических размеров, материального состава), считаются реперными ПС. При этом файлы оцененных ядерных данных могут использоваться в расчете либо непосредственно, либо в виде библиотек, предусмотренных форматом ПС. **В качестве библиотеки файлов оцененных ядерных данных рекомендуется использовать библиотеку РОСФОНД.** В случае использования других библиотек файлов оцененных ядерных данных в верификационном отчете ПС и пункте 4 приложения к аттестационному паспорту ПС рекомендуется приводить соответствующие пояснения.

Подготовка констант

Основой в определении погрешности результатов нейтронно-физического расчета по прецизионным программам для ЭВМ является система оцененных нейтронных (ядерных) данных.



Нейтронно-физический расчет

Библиотека н/ф констант в рабочем формате

Файлы оцененных ядерных данных (ОЯД)

Обработка ОЯД

Библиотека микросечений

Подготовка макросечений



Файлы оцененных ядерных данных

В настоящее время наибольшее распространение и применение в нейтронно-физических расчетах получили следующие ФОЯД:

- **ENDF** (Evaluated Nuclear Data Files), США;
- **JEFF** (Joint Evaluated Fission and Fusion Nuclear Data Library), Европа;
- **JENDL** (Japanes Evaluated Nuclear Data Libraries), Япония;
- **БРОНД** (библиотеки российских оцененных нейтронных данных), Россия.
- **CENDL** (Chinese Evaluated Nuclear Data Library), Китай
- **РОСФОНД** (Российская библиотека файлов оцененных нейтронных данных), РФ

п. 22 РБ-061-11:

«...В качестве библиотеки файлов оцененных ядерных данных рекомендуется использовать библиотеку РОСФОНД. В случае использования других библиотек файлов оцененных ядерных данных в верификационном отчете ПС и пункте 4 приложения к аттестационному паспорту ПС рекомендуется приводить соответствующие пояснения»

Библиотека ОЯД - национальный стандарт!

Список программ:

- NJOY – США
- FUDGE - США
- ГРУКОН – РФ
- FRENDY – Япония
- АСЕМАКЕР/PREPRO – МАГАТЭ
- NECP-Atlas – Китай
- RULER – Китай
- GAIA – Франция
- GALILEE – Франция

Целесообразность аттестации этих программ или отдельных расчетов (полученных библиотек констант)?

Национальный Исследовательский Центр
"Курчатовский Институт"

Пакет программ ГРУКОН
для переработки оцененных
ядерных данных

Руководство пользователя

Синица В.В.

декабрь, 2021

LA-UR-17-20093

The NJOY Nuclear Data Processing System,
Version 2016

Original Author: R. E. MacFarlane
Theoretical Division
Los Alamos National Laboratory

Contributing Authors
D. W. Muir
R. M. Boisvert
A. C. Kahler
J. L. Conlin
W. Haack

Current Editor: A. C. Kahler

Original Issue: December 19, 2016

Updated for NJOY2016.53
November 7, 2019

Abstract

The NJOY Nuclear Data Processing System, version 2016, is a comprehensive computer code package for producing pointwise and multigroup cross sections and related quantities from evaluated nuclear data in the ENDF-4 through ENDF-6 legacy card-image formats. NJOY works with evaluated files for incident neutrons, photons, and charged particles, producing libraries for a wide variety of particle transport and reactor analysis codes.

- Документированные интегральные эксперименты являются в настоящее время основным инструментом верификации и валидации программ для ЭВМ нейтронно-физического расчета.
- Возможно использование интегральных экспериментов для оценки и переоценки ядерных данных отдельных изотопов для включения их в системы ранее оцененных ядерных данных.
- Возможно снижение константной составляющей погрешности результатов расчетов нейтронно-физических функционалов за счет учета интегральных экспериментов.

В последнем случае задача (в групповом представлении констант) разбивается на ряд отдельных этапов.

Нахождение ковариационных матриц для рассматриваемого набора сечений

Определение коэффициентов чувствительности

(коэффициентов влияния) того же набора сечений на измеряемую интегральную величину, которая будет использована для коррекции, по ним можно найти константную составляющую погрешности исходного набора сечений.

Формирование квадратичного функционала отклонений

(отклонений измеренных и рассчитанных величин), при его минимизации определяется новый набор сечений и находится новая погрешность.

Заключение о непротиворечивости полученного результата

Система **ИНДЭКС** –
Исправление
Нейтронных
Данных на основе
Экспериментов на
Критических
Сборках

Необходимость
аттестации?

Стохастические

- SCALE/XSUSA (ORNL, США)
- TRIUM (ФЭИ, РФ)
- NUDUNA (AREVA, Франция)
- KIWI (LLNL, США)
- MCNP-ACAB (LANL, США)
- комплекс программ TALYS (NRG)

Детерминистические

- SCALE/Tsunami (ORNL, США)
- RIB (CEA, Франция)
- ИНДЕКС (ФЭИ, РФ)

Примеры оценки константной составляющей погрешности



Вклад различных сечений нейтронных реакций в значение константной составляющей погрешности $k_{эф}$ (кассета ВВЭР)

Нуклид, реакция	Вклад в неопределенность $k_{эф}$, (% $\Delta k/k$) (ENDF/B- VII.1)
^{235}U	0,36
$^{238}\text{U}(n,g)$	0,27
$^{235}\text{U}(n,g)$	0,17
Корреляция $^{235}\text{U}(n,f)$ и $^{235}\text{U}(n,g)$	0,119
$^{235}\text{U} \chi(E)$	0,110
$^{235}\text{U}(n,f)$	0,105
$^1\text{H}(n,g)$	0,093
$^{238}\text{U}(n,n')$	0,067
$^{238}\text{U}\bar{\nu}$	0,055
$^{91}\text{Zr}(n,g)$	0,048
$^{92}\text{Zr}(n,g)$	0,043
Корреляция $^{238}\text{U}(n,n)$ и $^{238}\text{U}(n,g)$	0,029
$^{238}\text{U}(n,n)$	0,019
$^{238}\text{U} \chi(E)$	0,014
$^{16}\text{O}(n,n)$	0,014
$^1\text{H}(n,n)$	0,013
$^{238}\text{U}(n,f)$	0,012
$^3\text{He}(n,p)$	0,011
Корреляция $^{238}\text{U}(n,n')$ и $^{238}\text{U}(n,n)$	0,011
$^{90}\text{Zr}(n,g)$	0,010
$^{238}\text{U}(n,2n)$	0,009
$^{16}\text{O}(n,\alpha)$	0,009
...	
Суммарное значение $\Delta = \sqrt{\sum \delta_{ij}^2}$	0,54

Вклад различных сечений нейтронных реакций в значение константной составляющей погрешности $k_{эф}$ (Реактор БРЕСТ-ОД-300)

Нуклид, реакция	Вклад в неопределенность $k_{эф}$, (% $\Delta k/k$) (ENDF/B- VII.1)
$^{238}\text{U} n,n'$	0,974
$^{238}\text{U} n,\text{gamma}$	0,298
$^{239}\text{Pu} n,\text{gamma}$	0,254
^{239}Pu fission	0,227
^{239}Pu chi	0,18
$^{238}\text{U} n,n'$	0,176
^{238}U nubar	0,159
^{238}U chi	0,131
$^{56}\text{Fe} n,n'$	0,124
$^{239}\text{Pu} n,n'$	0,107
$^{207}\text{Pb} n,n'$	0,099
$^{56}\text{Fe} n,\text{gamma}$	0,098
$^{206}\text{Pb} n,n'$	0,083
$^{14}\text{N} n,\text{alpha}$	0,075
^{239}Pu nubar	0,065
^{240}Pu chi	0,063
^{239}Pu fission	0,061
$^{240}\text{Pu} n,\text{gamma}$	0,058
^{56}Fe elastic	0,051
$^{208}\text{Pb} n,n'$	0,051
^{240}Pu fission	0,044
^{238}U fission	0,043
...	
Суммарное значение $\Delta = \sqrt{\sum \delta_{ij}^2}$	1,17

Примеры оценки константной составляющей погрешности



Первый метод

Определение сдвига в расчетах эффективного коэффициента размножения нейтронов, обусловленного неточностями используемых ядерных данных.

Проведение серии расчетов близких (в смысле нейтронно-физических характеристик) критических сборок (бенчмарк экспериментов) и экстраполяции расчетных эффективных коэффициентов размножения полученных для этихборок на исследуемый реактор [*][**].

Второй метод

Обобщенный линейный метод наименьших квадратов (GLLS – Generalized Linear Least-Squares method) (реализован в комплексе программ SCALE в программе TSURFER)

Вывод

Первый метод анализа предсказывает сдвиг эффективного коэффициента размножения нейтронов в расчетах с использованием библиотеки нейтронных данных ENDF/B-7.1, равный -0,01% с дисперсией 0,5%, тогда как во втором методе предсказываемый сдвиг составляет величину -0,02% с дисперсией 0,25%.

* Broadhead B.L., Rearden B.T., Hopper C.M., Wagschal J.J., Parks C.V. Sensitivity- and Uncertainty-Based Criticality Safety Validation Techniques. *Nuclear Science and Engineering*, 2004, Vol. 146, p. 340 -366.

** Rearden B.T., Williams M.L., Jessee M.A., Mueller D.E. and Wiarda D.A. Sensitivity and uncertainty analysis capabilities and data in SCALE. *Nuclear technology*, 2011, Vol.174, p.236 – 288.

Текущее состояние

В целях проведения экспертизы заказчик направляет в адрес ОНТП, в том числе, отчет, включающий результаты обоснования использования программы для электронных вычислительных машин при построении расчетной модели (расчетных моделей) процессов, влияющих на безопасность объектов использования атомной энергии и (или) видов деятельности в области использования атомной энергии, требования к структуре и содержанию которого приведены в приложении № 2 к «Порядку проведения экспертизы программ для электронных вычислительных машин, используемых в целях построения расчетных моделей процессов, влияющих на безопасность объектов использования атомной энергии и (или) видов деятельности в области использования атомной энергии» (утвержден Приказом Ростехнадзора от 04.04.2023 № 141, далее – Порядок).

Для обсуждений:

- Целесообразность аттестации процессинговых программ или отдельных расчетов (полученных библиотек констант), выполненных по ним
- Практическое применение только системы РОСФОНД
- Специальная процедура аттестации программ, в которых реализована методики оценки константной составляющей погрешности?
- Целесообразность включения в актуализированную редакцию документа РБ-061-11 рекомендации по использованию оценок константной составляющей для различных типов реакторов для верификации и валидации программ для ЭВМ

п.16 Приложения № 2 к Порядку:

«В разделе «Обоснование значений погрешностей и неопределенностей расчетных результатов с использованием программы для ЭВМ» должно быть представлено описание методики обоснования погрешности расчетных результатов, обеспечиваемой при использовании программы для ЭВМ при обосновании безопасности конкретного ОИАЭ и (или) вида деятельности в области использования атомной энергии. При описании методики должны быть приведены:

- *перечисление неопределенностей, обуславливающих погрешность результатов расчетов, с указанием того, какие из неопределенностей проанализированы в Отчете, а какие неопределенности должны быть проанализированы при обосновании безопасности конкретного ОИАЭ и (или) вида деятельности в области использования атомной энергии;*
- *примеры применения указанной методики.»*

п. 24(в) Приложения № 2 к Порядку:

«в разделе «Обоснование значений погрешностей и неопределенностей расчетных результатов с использованием программы для ЭВМ» дополнительно к сведениям, указанным в пункте 16 настоящего приложения, должны быть представлены результаты оценки погрешности расчетов, обусловленной неопределенностью ядерных данных, используемых в программе для ЭВМ.»



ETSON

EUROPEAN
TECHNICAL SAFETY
ORGANISATIONS
NETWORK

Спасибо за внимание!