15. PRISPEVEK

Hibridne kode za transport delcev

. . .

Bor Kos

Transport delcev

Transport nevtronov, ki nastajajo v reaktorju (pri fisiji elementov, kot so ^{233}U, ^{235}U, ^{239}Pu, ^{241}Pu itd.) oziroma v raznih fuzijskih reakcijah (v DD, DT, DHe plazmi itd.), popisuje Boltzmanova transportna enačba. Enačba 15.1 popisuje statično časovno neodvisno razmerje med nastajanjem in izgubo nevtralnih delcev v ne-pomnoževalnem sredstvu (Garcés, 2013),

$$\begin{aligned}&\hat{\Omega}\cdot\nabla\psi(\bar{r},\hat{\Omega},E)+\Sigma_t(\bar{r},E)\psi(\bar{r},\hat{\Omega},E)=\\&\quad=\int_0^\infty\int_{4\pi}\Sigma_s(\bar{r},\hat{\Omega}'\cdot\hat{\Omega},E'\to E)\psi(\bar{r},\hat{\Omega}',E')d\hat{\Omega}'dE'+q(\bar{r},\hat{\Omega},E)\,,\end{aligned}\tag{15.1}$$

kjer je $\bar{r}$ prostorski vektor, $\hat{\Omega}$ enotski vektor, ki določa smer gibanja, E energija in ψ kotni fluks, integral katerega po celotne prostorskem kotu 4π je nevtronski fluks. Σ_t je totalni makroskopski presek ter Σ_s makroskopski sipalni presek. Člen q predstavlja izvor delcev. Enačbo 15.1 lahko s transportnim operatorjem

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{H}-\boldsymbol{S},$$

kjer sta $\boldsymbol{H}$ in $\boldsymbol{S}$ zapisana z enačbama

$$\boldsymbol{H}\psi=\hat{\Omega}\cdot\nabla\psi+\Sigma_t\psi\,,\tag{15.2}$$

in

$$\boldsymbol{S}\psi=\int_0^\infty\int_{4\pi}\Sigma_s(\bar{r},\hat{\Omega}'\cdot\hat{\Omega},E'\to E)\psi(\bar{r},\hat{\Omega}',E')d\hat{\Omega}'dE'\,,\tag{15.3}$$

prepišemo v enačbo

$$\boldsymbol{L}\psi=q\,.\tag{15.4}$$

Rešitev enačbe 15.4, ob definiranih robnih pogojih, je kotni fluks, ki ga lahko uporabimo v splošnem za izračun odziva, kjer fluks pomnožimo s poljubno odzivno funkcijo. Transportni operator $\boldsymbol{L}$ je sebi-neadjungiran. Z enačbo

15.5 definiramo nov adjungirani transportni operator $\boldsymbol{L}^{\dagger}$, ki je adjungiran operatorju $\boldsymbol{L}$.

$$\boldsymbol{L}^{\dagger}\psi^{\dagger} = (\boldsymbol{H}^{\dagger} - \boldsymbol{S}^{\dagger})\psi^{\dagger} = q^{\dagger}, \tag{15.5}$$

S pomočjo adjugiranega transportnega operatorja lahko zapišemo identiteto

$$\langle \psi, q^{\dagger} \rangle = \langle \psi^{\dagger}, q \rangle \,, \tag{15.6}$$

ki nas privede do spoznanja, da je adjungirani fluks $\psi^{\dagger}$ sorazmeren odzivu detektorja. Adjungiranemu fluksu lahko zaradi tega dejstva pripišemo lastnost *pomembnosti* za odziv detektorja.

Deterministične metode

Reševanje analitičnih enačb 15.4 in 15.5 je nemogoče za primere kompleksnih geometrij in realnih materialnih sestav. Pri determinističnih izračunih enačbe rešujemo numerično pri čemer neodvisne spremenljivke diskretiziramo. Pri metodi S_N, ki je uporabljena v kodi Denovo, je energija diskretizirana v posamične energijske grupe, v večini primerov gre za razdelitev od nekaj 10 grup do nekaj 100. Kotna odvisnost je diskretizirana s približkom diskretnih ordinat, sipalni preseki pa so aproksimirani s pomočjo Legendrovih polinomov. Prostor diskretiziramo s pomočjo metode končnih elementov. Transportno enačbo za fluks 15.4 lahko prepišemo v obliko

$$\boldsymbol{L}\psi = s \,, \tag{15.7}$$

kjer faktor s predstavlja vse robne in notranje izvore delcev. Reševanje teh enačb je spominsko zahtevna operacija; zahtevnost je močno odvisna predvsem od natančnosti prostorske ter energijske delitve problema.

Metode Monte Carlo

Pri metodah Monte Carlo za transport nevtronov makroskopske preseke interpretiramo kot verjetnosti za dogodek na enoto dolžine in simuliramo zgodovino posameznih delcev z naključnim vzorčenjem. S simulacijo velikega števila življenj posameznih delcev lahko aproksimiramo povprečne vrednosti želenih veličin. Pri pristopu Monte Carlo nam ni treba direktno obravnavati transportne enačbe (15.1) zato se lahko izognemo diskretizaciji prostora/energije in s tem povezanih napak v simulacijah. Privzeta slabost metod Monte Carlo je njihova statistična narava, saj se k pravi vrednosti približujemo le s korensko odvisnostjo od števila delcev, $\mathcal{O}(1/\sqrt{N})$. Pri problemih, kjer je detektor na veliki razdalji od izvora nevtronov ali pri problemih s ščitenjem, tako imenovane *analogne* simulacije v končnem računskem času ne dosežejo statistične negotovosti rezultatov, ki bi bila sprejemljiva. Da bi izboljšali statistično negotovost, uporabimo redukcijo variance kjer utežimo vzorčenje ne da bi spremenili fizikalne lastnosti odziva problema.

Splošno cenilko (*angl.* tally) definiramo s pomočjo enačbe

$$\langle T \rangle = \int \int P(\bar{r}, \bar{v}) T(\bar{r}, \bar{v}) d\bar{r} d\bar{v} \,, \tag{15.8}$$

kjer imata $\bar{r}$ in $\bar{v}$ običajni pomen, $P(\bar{r}, \bar{v})$ je gostota delcev in $T(\bar{r}, \bar{v})$ funkcija cenilke, ki je ne-ničelna le na območju cenilke. Pri redukciji variance želimo povečati vzorčenje delcev, ki dajejo velik T, oziroma velik odziv na ceniliki, pri čemer moramo ohranjati gostoto delcev P in s tem $\langle T \rangle$. To dosežemo tako, da delcem pripišemo *uteži*, ki ponazarjajo število fizičnih delcev, ki jih predstavlja simulirani delec. Zgodovine delcev naključnega sprehoda, ki dajo odziv na cenilki so torej efektivno prednostno vzorčene.

Hibridne kode

Kot smo videli v prejšnjih poglavjih, lahko transport nevtronov simuliramo s pomočjo hitrih, manj točnih determinističnih metod ali z računsko potratnimi, točnimi Monte Carlo metodami. Ideja novih, *hibridnih metod* je združevanje dobrih lastnosti obeh skupin metod preko redukcije variance. Eden od načinov kombiniranja metod Monte Carlo in determinističnih metod je izračunavanje pomembnosti posameznega delca s pomočjo adjungiranega fluksa.

Reakcijsko hitrost, R, za poljubno reakcijo lahko zapišemo kot

$$R = \int_P \left[\frac{\psi^\dagger q P}{\hat{q}(P)} \right] \hat{q}(P) dP \,, \tag{15.9}$$

kjer je P prostor vseh neodvisnih spremenljivk, $\psi^\dagger$ adjungirani fluks, q gostota izvora, $\hat{q}$ pa gostota izvora s teoretično optimalno gostoto verjetnosti, ki minimizira varianco R, in za katero veljata zvezi $\hat{q}(P) \geq 0$ in $\int_P \hat{q}(P) dP = 1$. $\hat{q}$ lahko zapišemo z

$$\hat{q}(P) = \frac{\psi^\dagger q(P)}{\int_P \psi^\dagger q(P) dP} \,. \tag{15.10}$$

S pomočjo teže delcev zadostimo pogoju, da se gostota delcev ohranja pri prehodu iz $q(P)$ v $\hat{q}(P)$. Identiteto zapišemo z enačbo

$$w(P)\hat{q}(P) = w_0 q(P) \tag{15.11}$$

in preko nje izpeljemo utež posameznega delca $w(P)$ kot

$$w(P) = \frac{\int_P \psi^\dagger q(p) dP}{\psi^\dagger(P)} = \frac{R}{\psi^\dagger(P)} \,. \tag{15.12}$$

Ker bi bil izračun adjungiranega fluksa časovno enako zahteven, kot izračun fluksa z metodami Monte Carlo, naredimo nezahteven izračun na grobi prostorski mreži z determinističnimi metodami in rešitve uporabimo za tvorbo utežnih oken, ki jih nato uporablja koda Monte Carlo. To je le eden od načinov združevanja determinističnih izračunov in izračunov Monte Carlo. V prihodnosti načrtujemo razvoj novih metod.

Uporaba hibridnih kod

Hibridna koda ADVANTG (Mosher in sod., 2015) na podlagi fluksa in adjnigranega fluksa, izračunanega z deterministično kodo Denovo (metoda S_N; Evans in sod., 2010), preko metode FW-CADIS tvori prostorsko in energijsko odvisna utežna okna. Format datoteke z utežnimi okni je primeren za stohastično kodo MCNP5 (X-5 Monte Carlo Team, 2003). Hibridna koda ADVANTG je že bila uspešno uporabljena za pospeševanje analognih izračunov Monte Carlo na modelu tipične tlačnovodne jedrske elektrarne in največjega delujočega tokamaka na svetu, JET. Na sliki 15.1 je na levi prikazan adjungirani fluks v tipični tlačnovodni jedrski elektrarni s cenilkama v prvem in drugem predelku ter na desni adjungirani fluks v JET-u, izračunan za cenilko, označeno z odebeljeno krožnico. Hibridno kodo ADVANTG bomo v prihodnosti testirali na raznih referenčnih eksperimentih (*angl.* benchmark), predvsem za potrebe pospeševanja problemov z visoko atenuacijo nevtronov.

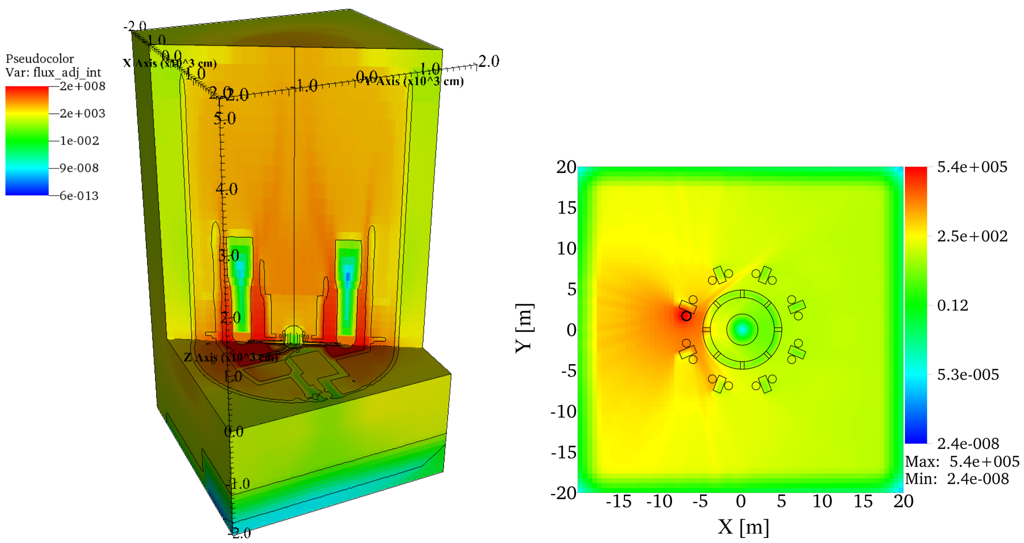
Literatura

Evans, T. M., A. S. Stafford in sod. (2010). »Denovo: A New Three-Dimensional Parallel Discrete Ordinates Code in SCALE«. V: *Nuclear Technology* 171, str. 171–200.

Garcés, M.P. (2013). *Activation Neutronics for the Swiss Nuclear Power Plants*. ETH-Zürich.

Mosher, Scott W., Seth R Johnson in sod. (2015). *ADVANTG An Automated Variance Reduction Parameter Generator*.

X-5 Monte Carlo Team (2003). *MCNP - Version 5, Vol. I: Overview and Theory*. Teh. poročilo LA-UR-03-1987. Los Alamos National Laboratory.



Slika 15.1: Adjungirana fluksa, izračunana za cenilki v prvem in drugem predelku tipične tlačnovodne jedrske elektrarne (na levi) in za cenilko označeno z odebeljeno krožnico na mestu ene izmed fisijskih celic v tokamaku JET (na desni).