

**Modeling the Dynamic Monte Carlo method and its coupling with
thermal-hydraulics solvers using stochastic differential equations**

Tézisfüzet

HAJAS Tamás Zoltán

Témavezető: Dr. LÉGRÁDY Dávid

BME Természettudományi Kar
Fizikai Tudományok Doktori Iskola

2025

1. Bevezetés

Az atomreaktorok dinamikája egy kétirányú kölcsönhatás a neutronok hasadása által kiváltott hőfelszabadulás és a nukleáris viselkedést befolyásoló hőtranszport között. Az atomerőművek biztonsági elemzéséhez minél pontosabb szimulációra van szükség, az alkalmazott modellező eljárás viszont még mindig a kevéscsoport-elmélet egydimenziós hőátadással. Tekintettel a neutronhasadási láncok és a folyadékokkal járó hőátadás rendkívül összetett természetére, a nagyobb pontosság elérése a számítógépes erőforrások függvénye. A Nukleáris Technikai Intézetben fejlesztés alatt áll a GUARDYAN Monte Carlo reaktorkinetikai kód, ami gyakorlatilag közelítés nélkül számítja a neutronteret grafikus feldolgozó egységek (GPU) felhasználásával és működése részletesen ellenőrzött más Monte Carlo kódokkal való összehasonlításokkal és mérésekkel.

A Monte Carlo szimulációk bizonyossága statisztikai kérdés: minél kisebb a szórás, annál bizonyosabb a megoldás. A hőátadási számítások általában determinisztikus numerikus módszerekkel oldják meg a hőátadást leíró differenciálegyenleteket, ezért nem rendelkeznek statisztikai bizonytalansággal. A multifizikai számításokban a sztochasztikus Monte Carlo szimulációk összekapcsolása a termohidraulika vagy a szilárdtest mechanika determinisztikus megoldóival továbbbővíti a Monte Carlo bizonytalanságot a csatolt rendszerekbe is, amelyek maguk is sztochasztikussá válnak ezáltal. Egy nemlineáris, csatolt rendszer numerikus számítása esetén a sztochasztikus viselkedés egy nehezen kezelhető jelenség, mivel a szisztematikus tekintett modellezési és diszkretizációs hibákra ráakad a sztochasztikus jellegből fakadó zaj is, ami így egy nehezen meghatározható eredő bizonytalanságot okoz.

A Dinamikus Monte Carlo (DMC) módszer képes az időfüggő neutrontranszport megoldására az időbeli változások folytonos figyelembevételével, ezáltal valóságosan írja le a reaktorkinetikát. Következésképpen, a DMC módszer a részecske rendszerek sztochasztikusságát is reprodukálja, ami az időfüggés miatt egy sztochasztikus folyamatként írható le. A gyakorlati felhasználások során a neutrontranszport általában a neutronikai mennyiségek várható értékére vonatkozik, hiszen a neutronok analóg zaja az úgynevezett "zéró-teljesítményű" eseteken kívül elhanyagolható. A DMC módszer olyan modellezési és szórás csökkentő eljárásokat alkalmaz a várható neutronika számításához, amelyek nemanalóg neutronzajhoz vezetnek és nem elhanyagolhatóak a szimulációk során. Ebből fakad az a bizonytalanság, ami a Monte Carlo szimulációkat terheli.

A DMC szimulációkkal hajtott multifizikai számítások olyan ismeretlen zajjal terheltek, ami a DMC módszer mesterséges, nemanalóg neutronzajának a csatolt fizikai folyamattal való kölcsönhatásából származik és szükségesség teszi a csatolt számítások stabilitásának és konvergenciájának vizsgálatát.

2. Célok

A kutatásom fő célja az volt, hogy megvizsgáljuk és megértsük a termohidraulikával csatolt DMC számítások stabilitását és konvergenciáját. A direkt, gyakorlati stabilitás- és konvergenciavizsgálathoz nem állt rendelkezésre elegendő számítási kapacitás a DMC módszer nagy igénye miatt, ezért az elméleti irányt követtem a stabilitás és konvergencia leírására. Következésképpen olyan egyszerűsített csatolt modelleket kerestem, amelyek sokkal alacsonyabb számítási kapacitást igényelnek a csatolt DMC számítások fontosabb tulajdonságainak megőrzése mellett. Ehhez a determinisztikus alacsony dimenziós termohidraulikai modellek már rendelkezésre álltak, a DMC leírására képes sztochasztikus modellek viszont hiányoztak.

A másodlagos, de elengedhetetlen célja az volt a kutatásnak, hogy modellezze a DMC módszert a differenciálegyenletek formájában, tehát magát a módszert és az általa leírt sztochasztikus folyamatot. Ehhez figyelembe kellett venni a DMC módszer összes nemanalóg tulajdonságát, amelyek szintén részét képezték a zajmodellezésnek. A zajmodellezés alapjainak lerakása után felmerült annak általános kiterjesztése, ezért a DMC zaj modellezése során a neutrodiffúziós keretrendszert tűztem ki célul. Az elágazásmentes, nemanalóg átmenet-valószínűségeket és átmenet-rátákat ennek megfelelően lettek levezetve a különböző reakciókra. Ehhez köthető cél volt még a levezetett zajmodell validálása a GUARDYAN direkt DMC számításaival egyszerű Monte Carlo modellen.

3. Módszerek

Ez a munka nagymértékben épített a DMC módszerre és annak alkalmazására neutrontranszportban. Ehhez átfogóan kellett megismerni a Monte Carlo módszer használatát a Boltzmann neutrontranszport egyenletből származó integrálegyenlet megoldásához elméleti szempontból.

A DMC módszer modellezésére a matematika területének sztochasztikus analízis részét alkalmaztam, hiszen maguk a DMC szimulációk egyfajta sztochasztikus folyamatok. A DMC szimulációkat sztochasztikus differenciálegyenletekkel (SDE) írtam le, amik felfoghatóak a determinisztikus differenciálegyenletek kiterjesztéseiként sztochasztikus folyamatokra.

A csatolt DMC szimulációkat és az azokat utánozó sztochasztikus alacsony dimenziós modellek megoldásait sztochasztikus dinamikai rendszerek pályáinak tekintettem és a rájuk vonatkozó stabilitási és konvergencia definíciókat használtam.

4. Új tudományos eredmények

1. tézispont: Alkalmaztam és kiterjesztettem egy elméletet a Dinamikus Monte Carlo (DMC) módszer időfüggő neutrontranszportjának modellezésére Gauss-féle fehér zaj és átlagos részecskesúlyok feltételezése mellett az Itô-féle sztochasztikus differenciálegyenletek (SDE) terminológiáját használva. Az így kidolgozott elméleti keretrendszer alapján levezettem az elágazásmentes, nemanalóg átmenet-valószínűségeket és átmenet-rátákat az egyes alapvető neutron-diffúziós reakciókra — beleértve a kiszökést, transzportot, befogást, hasadást, szórást, bomlást és emissziót — továbbá létrehoztam a formális leírásukat az olyan szóráscsökkentő technikáknak, mint az implicit befogás, kényszerített hasadás, kényszerített bomlás és kényszerített emisszió. Felírtam a speciális Itô-féle SDE-rendszert a Véges Térfogat Módszere (FVM) és az elágazásmentes, nemanalóg átmenet-valószínűségek és átmenet-ráták felhasználásával a DMC módszer által kiváltott sztochasztikus neutronfluxusok és prekursor-koncentrációk meghatározására. [P3]

2. tézispont: Levezettem a Nem-Analóg Monte Carlo (NAMC) zajmodellek családját — a prompt (pNAMC), késő (dNAMC), kétcsoport (2gNAMC), térbeli (sNAMC) és teljes (cNAMC) zajmodelleket —, amelyek öt különböző megfogalmazását eredményezték a Sztochasztikus Pontkinetikai (SPK) egyenletnek és a diszkrétizált Sztochasztikus Heterogén Többscsoport Diffúziós (SHeMGD) egyenletnek. Analitikus megoldásokat találtam az SPK egyenlet pNAMC zajmodell által hajtott forrásmentes és szubkritikus, forrásos eseteire konstans paraméterek mellett. Megállapítottam, hogy a forrásmentes és a forrásos eset egy Geometriai Brown-mozgásra (GBM) és egy Ornstein–Uhlenbeck (OU) folyamatra vezet, ezzel szemléltetve a lineáris reaktorkinetika két eltérő sztochasztikus viselkedését különböző neutronforrás-feltételek mellett. [P3]

3. tézispont: Kiszámítottam a relatív szórásait egy kis számú ex-core detektor mintának, amelyek egy teljes zónájú VVER-440 modell rúdkiejtési kísérletének direkt DMC szimulációiból származnak. Megállapítottam, hogy egy kis számú DMC-szimulációs minta nem elegendő a bizonytalanságok trendjeinek becslésére. Ezért megvizsgáltam a DMC zajt a véges Homogén Urán-Víz Kocka (fHUWC) nevű Monte Carlo modell szubkritikus, kritikus és szuperkritikus állapotaiban, különböző szimulációs neutronszám és nagyon nagy számú szimuláció minta felhasználásával. Összehasonlítottam a prompt Nem-Analóg Monte Carlo (pNAMC) zajmodell és a késő Nem-Analóg Monte Carlo (dNAMC) zajmodell analitikus és numerikus megoldásait, egy kód-specifikus illesztett együtthatóval korrigálva, a GUARDYAN szimulációkkal teljesítmény szempontjából. Bemutattam a zajmodellek alkalmazását és jó egyezést találtam a szórások, relatív szórások és valószínűségeloszlás-függvények tekintetében. [P1] [P3]

4. tézispont: Megvizsgáltam a Nem-Analóg Monte Carlo (NAMC) zajmodellek közvetlen alkalmazásait a szórás előrejelzése és csökkentése szempontjából. Megvizsgáltam a teljesítmény és a későneutron-anyamag koncentráció relatív szórását nagyon hosszú időskálán, és előre jeleztem a Dinamikus Monte Carlo (DMC) zaj és korreláció időfüggő jellegét. Levezettem az optimális kényszerített hasadási együtthatót az elágazásmentes, nemanalóg DMC neutrontranszporthoz a NAMC formalizmus keretében és leegyszerűsített DMC számításokkal szemléltettem. Bevezettem a NAMC formalizmus által létrehozott lehetséges szóráscsökkentő technikát, a kényszerített korrelációt és leegyszerűsített DMC számításokkal demonstráltam annak képességeit. [P4]

5. tézispont: Létrehoztam két alacsony dimenziós csatolt modellt — a Sztochasztikus Egyszerűsített Alacsony Dimenziós Csatolt PWR (SSLDC-PWR) egyenletet és a Sztochasztikus Fejlett Alacsony Dimenziós Csatolt PWR (SALDC-PWR) egyenletet — az SPK-egyenlet és az átlagos fűtőelem/hűtőközeg hőmérsékletekre vonatkozó termikus mérlegegyenletek alapján a Dinamikus Monte Carlo (DMC) módszer és a Nyomottvízes Reaktorok (PWR) termohidraulikájának csatolt rendszerének modellezésére. Analitikus megoldásokat vezettem le a linearizált SSLDC-PWR egyenlet két esetére, amikor a teljesítményt Geometriai Brown-mozgásként (GBM), illetve Ornstein–Uhlenbeck (OU) folyamatként modelleztem. Meghatároztam az átlagos fűtőelem hőmérséklet varianciájának aszimptotikus viselkedését mindkét esetben. [P2] [P3] [P5]

6. tézispont: Analitikus és numerikus módszerekkel vizsgáltam a Csatolt Rendszert Egy Attraktorra (CSwOA) és a Csatolt Rendszert Több Attraktorra (CSwMAs) nevű sztochasztikus dinamikai rendszerek determinisztikus és sztochasztikus stabilitását. Szimuláltam a Sztochasztikus Egyszerűsített Alacsony Dimenziós Csatolt PWR (SSLDC-PWR) egyenlet pályáit a CSwOA rendszeren, illetve Sztochasztikus Fejlett Alacsony Dimenziós Csatolt PWR (SALDC-PWR) egyenlet pályáit a CSwMAs rendszeren feltárva azok megmaradt és elvesztett sztochasztikus stabilitását. Bemutattam, hogy unimodális, egyetlen attraktorra rendelkező rendszerben nincs különbség a determinisztikus és sztochasztikus stabilitás között. Bebizonyítottam, hogy az ilyen nemlineáris, csatolt rendszerek sztochasztikus stabilitása a Nem-Analóg Monte Carlo (NAMC) zaj hatása alatt tartalmazhat metastabil egyensúlyi állapotokat, amelyek multimodális valószínűségi sűrűségfüggvényekhez vezetnek. Ez az eredmény közvetlen hatással van a csatolt DMC számítási eredmények értékelésére. [P5]

7. tézispont: Illusztráltam a hasonlóságot a GUARDYAN–SUBCHANFLOW csatolt számítások és a Sztochasztikus Egyszerűsített Alacsony Dimenziós Csatolt PWR (SSLDC-PWR) egyenlet között a Csatolt Rendszeren Egy Attraktorra (CSwOA) azáltal, hogy szemléltettem a pályák hasonló viselkedését a stabil egyensúlyi állapot környezetében. Meghatároztam a Sztochasztikus Fejlett Alacsony Dimenziós Csatolt PWR (SALDC-PWR) egyenlet alternatív megoldását a GUARDYAN forráskonvergencia-fázisának modellezésére, valamint megjelöltem azt a görbét, amely összegyűjti az összes releváns kezdeti állapotot. [P5]

5. Publikációk

[P1] D. Legrady, G. Tolnai, **T. Z. Hajas**, E. Pazman, T. Parko and I. Pos. Full Core Pin-Level VVER-440 Simulation of a Rod Drop Experiment with the GPU-Based Monte Carlo Code GUARDYAN. *Energies*, 15(8):2712, 2022. doi: 10.3390/en15082712.

[P2] **T. Z. Hajas**, G. Tolnai and D. Legrady. Variance Analysis of the Coupling of Thermal-hydraulics and Point Kinetics with Stochastic Noise Term Modeling Dynamic Monte Carlo Behavior for later use in GUARDYAN. *International Conference on Physics of Reactors 2022 (PHYSOR 2022)*, 2502-2511, 2022. doi: 10.13182/PHYSOR22-37834.

[P3] **T. Z. Hajas**, G. Tolnai, M. Margoczi and D. Legrady. Noise term modeling of dynamic Monte Carlo using stochastic differential equations. *Annals of Nuclear Energy*, 195:110061, 2024. doi: 10.1016/j.anucene.2023.110061.

[P4] **T. Z. Hajas**, G. Tolnai, E. Pazman and D. Legrady. Optimization of the Forced Fission Coefficient via Stochastic Calculus. *International Conference on Physics of Reactors 2024 (PHYSOR 2024)*, 1591-1599, 2024. doi: 10.13182/PHYSOR24-43571.

[P5] **T. Z. Hajas**, G. Tolnai, Gy. Karolyi and D. Legrady. Stability analysis of a nonlinear coupled system driven by the non-analog Monte Carlo noise model. *Annals of Nuclear Energy*. (felülvizsgálat alatt)