НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«Курчатовский институт»

На правах рукописи

**Чукбар Борис Константинович**

# РАСШИРЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ ПРОГРАММЫ MCU ДЛЯ РАСЧЁТОВ ПРОЕКТИРУЕМЫХ ЯДЕРНО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УСТАНОВОК

Специальность 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание учёной степени
кандидата технических наук

Научный руководитель:
доктор физ.-мат. наук Гуревич Михаил Исаевич

**Москва – 2014**

## Оглавление

Список сокращений и условных обозначений .....1
Введение .....3
Глава 1 Моделирование реакторов ВТГР (микротопливо).....12
1.1 ТВЭЛ с микротопливом.....12
1.2 Регулярные решётки.....13
1.3 Метод CORN и гомогенизация покрытия зёрен.....13
1.4 Изучение моделей микротоплива на примере параметров стенда АСТРА...15
Рассматриваемые модели.....18
Реализация.....20
1.5 Результаты расчётов.....23
1.6 Анализ пределов применимости CORN.....24
Анализ результатов расчёта.....27
1.7 Анализ приближений модели CORN.....28
Глава 2 Моделирование случайных засыпок шаровых ТВЭЛов.....44
2.1 Концепция ВТГР с шаровыми ТВЭЛами.....44
2.2 Стенд АСТРА.....44
2.3 Стенд PROTEUS.....46
2.4 Моделирование загрузки шаров с учётом средней плотности упаковки.....47
2.5 Расчёты по варьированию загрузки активной зоны.....48
2.6 Анализ результатов расчётов.....50
Глава 3 Реализация многоуровневой иерархии сетей в геометрическом модуле пакета программ MCU.....52
3.1 Роль иерархии сетей в описании ЯЭУ с микротопливом.....52
3.2 Проблемы хранения цепочек локальных координат для иерархии сетей.....54
3.3 Проблема атрибутов зон.....57
3.4 Применение многоуровневой иерархии к модификации алгоритма CORN...77
Глава 4 Расчеты с источниками D+T нейтронов (термоядерные источники нейтронов) .....80
4.1 Модификация физического модуля MCU для возможности регистрации скоростей ряда пороговых реакций.....80
4.2 Расчеты различных конфигураций бланкета ТИН. Выбор оптимальной толщины экрана бланкета.....89
Анализ результатов расчётов.....102
Заключение.....103
Литература.....105

Список сокращений и условных обозначений

| | | |
|---|---|---|
| ENDF/B | – | Evaluated Nuclear Data File version B |
| GT-MHR/ГТ-МГР | – | Gas Turbine-Modular Helium Reactor, Модульный гелиевый реактор с газовой турбиной. |
| HTR | – | High Temperature Reactor |
| MCNP | – | Monte Carlo N-Particle Code System |
| MCU | – | Monte Carlo Universal Code System |
| PROTEUS<br>HTR-PROTEUS | – | Критический стендовый исследовательнский реактор, располагавшийся в Швейцарии |
| АСТРА | – | Критический стендовый исследовательский реактор, расположенный в России, НИЦ “Курчатовский Институт” |
| Зерно | – | Шар из делящегося материала диаметром доли миллиметра |
| Керн | – | Зерно с одним или более слоями покрытия |
| ТИН | – | Термоядерный Источник Нейтронов, разрабатываемый в России, НИЦ “Курчатовский Институт” |
| Бланкет | – | Специальная рабочая зона, расположенная вокруг активной зоны установки. Используется, например, для наработки $U^{233}$ из $Th^{232}$ |

# Введение

Развитие энергетики требует разработки новых типов ядерно-энергетических установок (ЯЭУ), по многим параметрам существенно отличающихся от эксплуатируемых в настоящее время. Поэтому в различных организациях ведутся работы по проектированию перспективных вариантов подобных устройств. Для анализа безопасности проектируемых аппаратов, для оптимизации их параметров необходима совокупность экспериментальных, теоретических и расчетных исследований. При этом расчетные исследования, как наиболее дешевые, начинают играть большую роль уже на этапах эскизного проектирования. Важную роль среди них играют нейтронно-физические расчеты.

В числе перспективных ЯЭУ рассматриваются ядерные реакторы с так называемым микротопливом. В настоящее время микротопливо является незаменимым компонентом высокотемпературных реакторов (ВТГР) [1] Уже давно был создан ряд критических сборок с микротопливом (АСТРА, ГРОГ, PROTEUS), ведутся разработки новых ЯЭУ, основанных на использовании микротоплива [2,4,5].

Основой микротоплива служит топливная частица, состоящая из зерна делящегося материала (в дальнейшем этот шарик будем называть керном), покрытого несколькими сферическими слоями оболочки. Геометрия и материалы невыгоревших топливных частиц совершенно одинаковы. Эти топливные частицы равномерно перемешаны с материалом так называемой матрицы. Для ВТГР материалом матрицы служит графит. Такая конфигурация создает очень большую поверхность делящегося вещества, что позволяет обеспечивать эффективный теплосъем и не допускать больших перепадов температуры внутри топлива. Кроме того, такая конструкция способна лучше удерживать газообразные продукты распада [6]. Для существующих и разрабатываемых в настоящее время реакторов и критических стендов, которые предназначены работать в тепловом спектре, существенным является то, что размер керна таков, чтобы осуществлять частичную блокировку резонансов на $^{238}$U, что позволяет называть такие системы системами с двойной гетерогенностью. Микротопливо может оказаться перспективным и для других типов ЯЭУ.

Еще одним важным направлением перспективных исследований является проектирование термоядерных источников нейтронов для наработки топлива или сжигания минорных актинидов из отработанного топлива ядерных реакторов. Частью этих разработок является создание бланкетов для утилизации термоядерных нейтронов, в первую очередь 14.1 Мэвных D+T нейтронов. Для этого необходимы, в том числе, и расчеты переноса этих нейтронов, а также вызванных ими вторичных нейтронов. Представляют

также интерес скорости протекающих при этом ядерных реакций, оценки изменений нуклидных составов и активаций материалов.

В силу этого описанные в диссертации усовершенствования программ и проведенные расчетные исследования, связанные с микротопливом и бланкетами термоядерных источников нейтронов, являются актуальными.

При разработке новых типов ЯЭУ большую роль играют прецизионные нейтронно-физические расчеты. Их значение для оценки параметров проектируемых аппаратов даже существеннее, чем для существующих, для которых успешно применяются инженерные методы расчета, имеющие ограниченную область применения, но прекрасно приспособленные, за счет большого количества экспериментальных данных, к соответствующему типу реактора.

Современные прецизионные программы для нейтронно-физических расчетов являются, как правило, универсальными, т.е. обладают возможностями описания устройств очень разнообразной геометрии и материального состава. Большая часть из них, применяемая для расчета скоростей реакций, в том числе в активной зоне реактора, основана на методе Монте-Карло. В мире используется несколько таких универсальных программ, самой распространенной является американская программа MCNP [7,8]. В нашей стране широко используется созданная в РНЦ «Курчатовский институт» программа MCU [9,10], она аттестована РосТехНадзором для оценки безопасности всех российских энергетических реакторов, а также и для ряда других ЯЭУ. Эта программа широко используется при проектировании новых аппаратов. Поэтому анализ ее возможностей для расчета систем с микотопливом или бланкетов термоядерных установок, определение пределов применимости и создание необходимых дополнительных возможностей имеет теоретическую и практическую значимость.

Реакторы и сборки с микротопливом обладают особенностью, которую трудно сопоставить с теми, что встречаются в более традиционных реакторах. Во всех ЯЭУ, кроме ВТГР, считается, что геометрия и материальный состав детерминированы. Элемент случайности возникает только в результате технических допусков и возможной деформации конструкции, возникающей в процессе работы. Неопределенность нуклидного состава, меняющегося в процессе выгорания топлива, может возникать в результате неточности измерений. Обычно все геометрические и химические характеристики ЯЭУ известны со значительной точностью.

Описание геометрии существующих ЯЭУ для входных данных программ, работающих по методу Монте-Карло, представляет трудность в первую очередь за счет колоссального объема описываемых деталей, это проблемы создания удобного интерфейса с пользователем.

Микротопливо принципиально не может быть описано точно. Для него возможно лишь макроскопическое описание. Кроме информации о геометрии и материале самой топливной частицы, известна лишь их концентрация, т.е. среднее число частиц на единицу объема. Доля объема, занимаемого частицами в существующих ЯЭУ не превышает 7% , но в будущем она может быть увеличена. Топливные частицы не представляют собой регулярной решетки. В одном топливном элементе содержатся десятки тысяч частиц, случайный розыгрыш их положения без пересечения является сложной задачей, кроме того в этом случае потребовались бы колоссальные объемы для хранения такой информации. Поэтому для расчетов обычно либо используют представление этих частиц в виде регулярных решеток, либо используют алгоритм, вычисляющий случайные положения топливных частиц в процессе моделирования траектории нейтрона (этот подход применен в алгоритме CORN программы MCU). Эти алгоритмы основаны на гипотезе, что размеры микротоплива очень малы, кроме того, предполагается не высокая их концентрация.

Эти подходы не являются точными, поэтому существенно было провести исследования применимости алгоритма CORN для различных концентраций с учетом этих приближений. Проводилось исследование и сравнение результатов с алгоритмами, использующими регулярные решетки.

Была предложена модификация алгоритма CORN и метод представления микротоплива возмущенными регулярными решетками.

Для описания систем с несколькими естественными уровнями геометрии был модифицирован геометрический модуль программы MCU: была введена возможность использовать несколько вложенных уровней систем координат в процессе счета. Эти результаты свидетельствуют о научной новизне работы.

Существуют две концепции конструкции высокотемпературных реакторов. В первой микротопливо размещается в цилиндрических компактах, которые уже регулярно размещаются в активной зоне. Вторая, более важная, концепция состоит в использовании шаровых ТВЭЛов, состоящих из внутреннего шара микротопливом внешней графитовой оболочки. Эти шаровые ТВЭЛы образуют случайную засыпку, о которой известен только занимаемый объем и

общее число ТВЭЛов. Концентрация засыпки, т.е. отношение объема ТВЭЛов к общему объему зоны обычно составляет ≈0.6, что достаточно близко к концентрации самой плотной решетки $\pi/(3\sqrt{2})\approx 0.74$ [11].

Аккуратное моделирование случайной засыпки является сложной задачей, так как необходимо учитывать не только невозможность пересечений, но и статическую устойчивость конфигурации. Подобная задача решалась в [12], но приведенные так методы очень трудоемки и дают лишь приближенное решение. Поэтому при моделировании шаровой засыпки автор использовал приближенное представление, основанное на модифицированных гранецентрированных решетках шаров.

В диссертации изучались возможности этих приближений на примере критических стендов АСТРА и PROTEUS, в котором в загрузке были перемешаны ТВЭЛы и чисто графитовые шары. Изучалось влияние на критичность различных способов организации пустот, обеспечивающих нужную концентрацию. Была показана чувствительность критичности к этим случайным реализациям, этот факт может оказаться существенным для реакторов с непрерывной перегрузкой.

При расчетах связанных с бланкетами термоядерных источников нейтронов было необходимо учитывать целый ряд реакций, не существенных для спектров ЯЭУ. В этом случае некоторые такие реакции не только важны, но и становятся определяющими. Например, нейтроны с энергией 14.1 Мэв вызывают активацию алюминия в основном в процессе $n\rightarrow n+\alpha$ реакций, и в ряде установок это может стать основным источником радиационного излучения. Была проведена модификация подмодуля FARION физического модуля программы MCU, позволяющая регистрировать реакции $n\rightarrow\alpha$, $n\rightarrow n+\alpha$, $n\rightarrow 3n$, $n\rightarrow n+p$, $n\rightarrow p$ и ряд других.

Была исследована проблема оптимизации спектра нейтронов в жидко-солевом бланкете на основе расплава FLiNaK с тетрафторидом $^{132}$Th. С помощью введения свинцового экрана, не только смягчающего спектр, но и дающего дополнительные нейроны в результате $n\rightarrow n+n$ реакции, удалось свести к минимуму реакции с калием, приводящие к образованию нуклидов, изменяющих редокс потенциал солевого расплава, а также минимизировать скорость реакций $n\rightarrow n+n$ и $n\rightarrow 3n$ в тории, правда дающих дополнительные нейтроны, но приводящих к генерации $^{231}$Pa, который дает начало неприятным цепям трансмутации (следует отметить, что в работе [13] показано, что $^{231}$Pa может рассматриваться как компонент топлива ядерных реакторов, но это вызывает положительный температурный эффект, что может быть опасно).

Упомянутые модификации программы, предложение об использовании свинцового экрана и выбор для него оптимальной толщины также показывают научную новизну работы.

Целью работы было создание надежных методов нейтронно-физических расчетов для реакторов с микротопливом. Для этого исследовались существующие алгоритмы и исследовалась их область применимости, а также были предложены их модификации. Второй целью было создание более удобных и эффективных средств расчета многоуровневых систем, прежде всего систем с микротопливом, описываемым регулярными решетками.

Третьей целью было проведение нейтронно-физических расчетов для выбора конфигурации жидко-солевого ториевого бланкета термоядерного источника нейтронов (ТИН).

При определении пределов применимости способов расчета высокотемпературных реакторов использовались следующие методы:

- сравнение расчетов одной системы с помощью различных ее моделей, например статистического описания положений топливных частиц и представлений в виде регулярных решеток;
- сравнение различных реализаций случайного представления засыпки шаров, причем варьировались не только положения изымаемых шаров, но и положение гранецентрированной решетки;
- сравнение проведенных расчетов критической сборки PROTEUS с результатами ее расчета по программе MCNP, описанной в работе [5];
- сравнение расчетов критических сборок с экспериментальными данными;
- для модификации геометрического модуля программы MCU использовался язык Фортран 95;
- расчеты бланкета термоядерного источника нейтронов проводились по схеме неоднородной задачи с источником.

Существенно, что системы двойной гетерогенности подобные микротопливу, могут использоваться не только для топлива, но и для выгорающих поглотителей. Важным является существование резонансного поглощения с таким большим сечением, что диаметр частицы сопоставим с длиной пробега. Иначе можно просто провести гомогенизацию.

Диссертация состоит из введения, 4 глав и заключения.

В первой главе исследуются проблемы микротоплива. Дается описание нескольких видов топливных частиц. Описаны возможные компоновки ЯЭУ с микротопливом, как с шаровыми засыпками, так и с цилиндрическими топливными компактами.

Показана невозможность гомогенизации микрочастиц ввиду очень малых средних пробегов нейтронов в веществе керна при энергиях резонансного поглощения. Эти средние пробеги малы даже по сравнению с размерами кернов. Оболочка, состоящая из углерода и карбида кремния, не имеет подобных резонансов и может быть гомогенизирована в веществе.

Описывается ранее реализованный в программе MCU алгоритм CORN. Указываются два его основных приближения: пренебрежение размером керна по отношению к размерам области с ТВЭЛом и пренебрежение невозможностью двух топливных микрочастиц пересечься, причем здесь при строгом рассмотрении должен учитываться не только керн, но и его оболочки.

Проведен анализ того, при каких процессах может проявиться эффект конечности размера керна. Показано, что для этого поток тепловых нейтронов должен быть существенно не изотропен. Предложена модификация алгоритма CORN, учитывающая размеры кернов, дающая возможность не гомогенизировать оболочку, но приводящая к существенному замедлению скорости расчета.

Далее рассматривается модель, учитывающая «парные взаимодействия», т.е. невозможность пересечения покидаемой микрочастицы и следующей микрочастицы, без учета остальных. Показано, что при существующих размерах и концентрациях микрочастиц существенных изменений в результате применения этой модели не вносится.

Вторая глава посвящена моделированию активных зон со случайной засыпкой шаровых ТВЭЛов. Рассмотрены два способа представления засыпки с известными числами шаров и концентрацией. Первый способ (простейший) это представление засыпки в виде решетки максимальной плотности, расстояния между узлами которой раздвинуты так, что при размещении шаровых ТВЭЛов с центрами в этих узлах, концентрация получилась бы равной истинной. Подобное представление очень удобно для задания исходных данных и обеспечивает быстродействие при моделировании, но действительности мало соответствуют, так как ТВЭЛы никогда не соприкасаются, и как бы парят в пустоте, кроме того, часть из них оказывается перерезанной границами активной зоны, т.е. возникают неполные куски шаров. Однако, как показали расчеты критической сборки АСТРА, подобное представления случайной засыпки дает вполне удовлетворительный результат.

Другой способ также основан на решетке наибольшей плотности. На практике удобнее всего использовать гранецентрированную решетку. В этом случае расстояние в

решетке выбирается исходя из реальных размеров ТВЭЛов, т.е. шары в ней соприкасаются. Из решетки убираются все шары, часть которых оказалась вне активной зоны. Также изымаются шары, лежащие выше экспериментально известной верхней границы засыпки.

Следующий этап - это случайное изъятие нескольких шаров так, чтобы число шаров стало соответствовать реальному.

В некоторых сборках с шаровыми ТВЭЛами, кроме шаров с топливом, используются и чисто графитовые шары. Их положение случайно, известно лишь общее их количество. Для такой сборки следующий этап состоит в случайном выборе тех шаров, которые далее будут рассчитываться как графитовые.

Для критической сборки PROTEUS была создана программа, генерирующая модель засыпки по известным числам топливных и графитовых шаров и их концентрациям. В главе описаны созданные этой программой модели, отличающиеся как сдвигами исходной решетки, так и правилами выбора удаляемых шаров и позиций для ТВЭЛов. Показано, что хотя эти модели отвечают исходным параметрам, значения критичности колеблются на 0.5%.

В третьей главе описывается модификация геометрического модуля с целью использования иерархий систем координат любой степени вложенности.

В геометрическом модуле программы MCU в настоящее время имеется лишь два уровня систем координат, используемых во время счета: глобальная система и система локальных координат ячеек сетей. Более сложные иерархические системы геометрии реализуются применением конструкции решеток, в которых иерархия присутствует лишь на уровне ввода, при счете локальные координаты уже превращены в глобальные. Это приводит к значительному увеличению используемых ресурсов памяти и к снижению быстродействия. Кроме того, при использовании решеток не всегда удобно задавать соотношения геометрических областей (зон) соответствующих их материалам или областям регистрации скоростей реакций.

При описании высокотемпературных реакторов возникают, например ГТ МГР [14] геометрические иерархии до 4 уровней, что потребовала модификации геометрического модуля.

В главе описана реализация иерархии сетей и ячеек, являющаяся ориентированным ациклическим двудольным графом с единой вершиной. Кроме того, сделано ограничение, состоящее в том, что любой путь от вершины к фиксированному ребру состоит из одинакового числа дуг, так что на графе возможно ввести уровни. При реализации решались две проблемы.

Первая состояла в возникновении цепочек локальных координат, характеризующих частицу. Кроме того, возникает цепочка расстояний до границ зон, несущих последовательность вложенных сетей, а также номера этих зон. Также возникают цепочки индексов в сетях.

Хотя упомянутые параметры связаны - теоретически достаточно знать лишь глобальные координаты частицы, их перевычисление достаточно трудоемкий процесс, чреватый к тому же возникновением скачков по зонам из-за ошибок округления. Поэтому было желательно хранить эти параметры в очередях частиц, ожидающих моделирования. В главе описана созданная автором модификация подмодуля БАНКИР, позволяющая манипулировать очередями с элементами произвольной длины и не требующая особых дополнительных ресурсов памяти.

Вторая проблем связана с тем, что в иерархических геометриях номер атрибута зоны (номер материала, номер области интегрирования и т.д.) может зависеть не только от номера зоны и ее положения в иерархии, но и от индексов ее положения в сети того или иного уровня. Теоретически номер аргумента может зависеть от всей совокупности индексов. Необходимо было дать пользователю мощный, но в то же время простой способ устанавливать правила зависимости.

В главе описан созданный аппарат указателей атрибутов и картограмм атрибутов, позволяющий устанавливать зависимости с минимальной избыточностью вводимой информации. При создании сложной иерархии сетей, снабженных картограммами атрибутов пользователь и, особенно, группа пользователей, работающая над одним проектом, легко может совершить ошибку, создав некорректный граф или не обеспечив всех требуемых картограмм. В главе подробно описаны алгоритмы проверки корректности входных данных, позволяющие выявить подобные ошибки.

В четвертой главе излагаются работы по расчету бланкета ТИН. Развитие термоядерных источников нейтронов вызвало необходимость выбора наиболее эффективных методов производства ядерного топлива с их помощью. В работе описаны нейтронно-физические расчеты для исследования возможных конструкций жидко-солевого бланкета для производства топлива из тория для стационарного источника на основе шарового токамака. Удалось установить наиболее многообещающий вариант конструкции установки - вариант со свинцовым экраном между бланкетом и стенкой вакуумной камеры, толщиной 12.5 см, и бланкетом из *FLiNaK* с примесью $ThF_4$.

Была проведена оценка сверху эффективности работы установки, а также основные источники нежелательного поглощения нейтронов. Проведён анализ библиотеки сечений реакций ENDF/B7. Установлена существенность высокопороговых реакций для расчётов с термоядерными нейтронами, которые не играли существенной роли в случае ядерных реакторов. Это привело к необходимости адаптации для таких расчетов универсального пакета программ MCU решения уравнения переноса нейтронов методом Монте-Карло .

# Глава 1 Моделирование реакторов ВТГР (микротопливо)

## 1.1 ТВЭЛ с микротопливом

Микротопливо представляет собой микрочастицы из делящегося материала с покрытием, заключённые в графитовую матрицу, обычно исполняемую в форме шаровых твэлов. Частица из делящегося материала представляет собой сферу и называется зерном. Имеются различные варианты исполнения твэлов с микротопливом, варьирующиеся по следующим параметрам: размеру графитовой матрицы и её покрытию, составу делящегося материала зёрен, количеству, толщине и составу покрытий зёрен.

Распространено использование 3-4 слоёв покрытия, состоящих из пироуглерода PyC и карбида кремния SiC. В качестве делящегося материала чаще всего применяются оксиды урана различной степени обогащения. Характерные размеры делящейся части зерна составляют полмиллиметра в диаметре и доходят до миллиметра вместе с покрытием. Характерные концентрации зёрен в матрице – 50…170 см$^{-3}$. Микротопливо может использоваться как в установках с шаровыми ТВЭЛами, так и в установках, использующих цилиндрические компакты [15-17].

Характерные размеры шарового твэла, содержащего микротопливо, составляют 5…6 см в диаметре, из которых 1…1,5 см занимает внешнее графитовое покрытие, не содержащее зёрен. Засыпка активной зоны может состоять из 5…10 и более тысяч шаровых твэлов. Точное положение зёрен в графитовой матрице неизвестно, поэтому при расчётном моделировании твэлов возникает проблема описания взаимодействия нейтронов с делящимся материалом.

Технологический процесс создания микротоплива включает механизмы, способствующие регулярному распределению зёрен в матрице. Это облегчает задачу моделирования распределения зёрен и позволяет рассматривать только те методы моделирования, которые соответствуют достаточно регулярному распределению.

Для моделирования микротоплива, как правило, используются два метода. Первый состоит в детерминированном регулярном расположении зёрен в топливном шаре [1,2,18-20], а второй – в приближённом моделировании взаимодействия нейтрона с зёрнами с помощью статистических приближний [21].

В рамках моделирования ТВЭЛов содержащих микротопливо, считается допустимой гомогенизация оболочек топливных зёрен с графитовой матрицей. В большинстве случаев, оболочки выполнены из пироуглерода или карбида кремния, сечения которых не имеют существенных резонансных пиков. Допустимость гомогенизации оболочек подтверждена во многих случаях сравнением с

экспериментальными данными. Вместе с тем, гомогенизация самих топливных зёрен является недопустимым приближением и сразу же вызывает заметные отклонения (от процента и выше) более точного моделирования и реальных результатов. Это связано с наличием значительных резонансных сечений в делящемся материале, которые приводят к длине пробега в данном материале сопоставимой с размером зерна. Гетерогенное исполнение демонстрирует повышенную реактивность при той же массе топлива, нежели гомогенизированный вариант.

### 1.2 Регулярные решётки

Широко распространено моделирование ТВЭЛов с микротопливом в виде регулярных детерминированных решёток зёрен [1, 5, 18, 19, 22]. Данное приближение подтверждено многочисленными сравнениями с экспериментальными данными. Эффективность данной модели связана с технологическим процессом создания ТВЭЛов с микротопливом, включающим механизмы создания достаточно случайного распределения зёрен. В качестве дополнительного расширения данной модели можно рассматривать использование возмущённых регулярных решёток. В исходном варианте зачастую необходимо определённое нарушение регулярности, в виде изъятия «лишних» зёрен из решётки до достижения количества соответствующего реально производимым образцам. Также возможно рассмотрение возмущения связанного со случайным сдвигом зёрен в пределах ячеек Вигнера решётки, что создаёт модель более соответствующую действительности. Так как расхождения при использовании данной модели и более грубой в виде регулярной решётки минимальны, широкое применение получила более грубая и простая в реализации модель регулярной решётки.

В данной работе использовались наиболее простые в реализации решётки – кубические, как регулярные, так и возмущённые регулярные.

### 1.3 Метод CORN и гомогенизация покрытия зёрен

Статистическая метод CORN – это метод моделирования двойной гетерогенности среды, реализованный в качестве модуля в программном пакете MCU [21]. Его основное применение состоит в приближённом моделировании матриц материала с дисперсией микротоплива. Многочисленные расчёты верифицировали данный метод [3,4,14-17,23,24].

Метод CORN рассматривает модель установки, разделённую на два пространства – основное, содержащее геометрическое описание установки, включая шаровые твэлы, и пространство зерна. Его структура описывается средствами геометрического модуля пакета MCU [25]. В основном пространстве зёрна делящегося материала отсутствуют,

графитовая матрица равномерно заполняет весь объём топливных шаров с сохранением общего числа ядер графитовой матрицы, покрытие зёрен гомогенизируется с ней.

Далее, для упрощения изложения будем считать, что рассматривается только один тепловыделяющий элемент, в котором матрица и зёрна занимают область Q с объемом $V_Q$. $n_k$ – концентрация зёрен делящегося материала в одном шаровом ТВЭЛе, а r – их радиус. Очевидно, что суммарный объем зёрен есть $V_k=4\pi r^3 n_k V_Q/3$, а объем матрицы $V_0=V_Q-V_k$. Общее количество зёрен $N=V_Q n_k$. Пренебрежём тем фактом, что отдельные зёрна не могут пересекаться одно с другим. Тогда множество всех допустимых положений центров всех зёрен будет декартово произведение QxQx…Q N раз. Обозначим это множество $B_M$. Через $B_H$ будет обозначаться истинное множество положений центров всех зёрен с учётом невозможности пересечений. Случайность расположения зёрен означает, что плотность распределения вероятности на множестве $B_H$ есть константа. Очевидно, что $B_M \subset B_H$ и что, если $V_k/V_M<<1$, то разность $B_M \backslash B_H$ очень мала. В этом случае можно заменить при моделировании множество $B_H$ на множество $B_M$.

Последнее означает, что вероятность для движущегося нейтрона войти в зерно на интервале (s,ds) есть Sds, где $S=\pi r^2 n$. Эта формула полностью аналогична правилу образования макроскопических сечений из микросечений.

Используется два пространства – первое пространство для описания тепловыделяющего элемента в целом, и второе – для описания одного зерна. При рассмотрении движения в тепловыделяющем элементе матрица с зёрнами считается гомогенной средой с макроскопическим сечением $S_{com}=S_{mt}(V_0/V_Q) + S$, где $S_{mt}$ - полное макроскопическое сечение вещества матрицы. Поправка $V_0/V_Q$ обеспечивает сохранение общего числа нуклидов матрицы. При розыгрыше события столкновения с вероятностью $S_{mt}/S_{com}$ происходит моделирование взаимодействия с одним из ядер матрицы. С вероятностью $S/S_{com}$ моделируется вход в зерно. Далее происходит переход во второе пространство. Очевидно, что точка входа в зерно равномерно распределена по её проекции на плоскость, перпендикулярную направлению полёта нейтрона. Поэтому моделирование этой точки несложно. Если для внутренности зерна используется сферическая система координат (ρ,θ,φ), причём «вертикальна» ось совпадает с направлением полёта, то ρ точки входа есть внешний радиус.

$\theta = -\arcsin(\xi_1^{1/2})$, $\varphi = 2\pi(\xi_2)$

, где $\xi_1$ и $\xi_2$ случайные числа.

Точка входа в зерно вместе с координатами этой точки в первом пространстве однозначно определяет положение центра зерна.

В ходе разработки вычислительных моделей связанных с микротопливом был предложен метод частичной гомогенизации покрытия микротоплива, для упрощения расчётов [14, 26]. В этом приближении покрытие зёрен гомогенизируется с графитовой матрицей, заполняя новый объем с новыми концентрациями элементов. Новые концентрации атомов вычисляются по формуле:

$$\rho_{jnew} = V_{new}^{-1}(V_0\rho_{0j} + N_k\sum_{i=1}^{4}V_i\rho_{ij})$$

, где $\rho_{jnew}$ - искомая концентрация j-го элемента после гомогенизации, $V_0$ – объем матрицы до гомогенизации, $V_{new}$ - новый объем графитовой матрицы с учётом освобождённого гомогенизацией покрытия зёрен объемом, $\rho_{ij}$ - старая концентрация j-го элемента в i-ом слое, $V_i$ - объем i-го слоя, содержащего гомогенизируемый элемент, $N_k$ – количество зёрен в матрице. Объем i-го слоя материала ищется по формуле:

$$V_i = \frac{4}{3}\pi(R_i^3 - R_{i-1}^3)$$

, где $R_i$ - внешний радиус гомогенизируемого слоя, $R_{i-1}$ - внутренний радиус гомогенизируемого слоя.

Новый объем графитовой матрицы определяется по формуле:

$$V_{new} = V_0 + N_k(V_1 + \ldots + V_4)$$

Учитывая использование в покрытии зёрен материалов не имеющих значительных резонансных пиков, гомогенизация покрытий широко применяется при моделировании микротоплива. В случае если элементы не имеют больших пиков резонансного поглощения, эффект экранирования не настолько важен для решения расчётных задач. Следовательно, важно не конкретное положение данного элемента, а концентрация его нуклидов во всём микротопливе. Допустимость данного упрощения подтверждена результатами экспериментов [3, 4].

### 1.4 Изучение моделей микротоплива на примере параметров стенда АСТРА

В ходе изучения детерминированных моделей расположения зёрен и возможного влияния незначительных возмущения была проведена серия расчётов. За основу был взят вариант ТВЭЛов с микротопливом используемых в стенде АСТРА [3,4]. Эти ТВЭЛы имею зёрна с четырьмя слоями покрытия [рисунок 1.4.1].

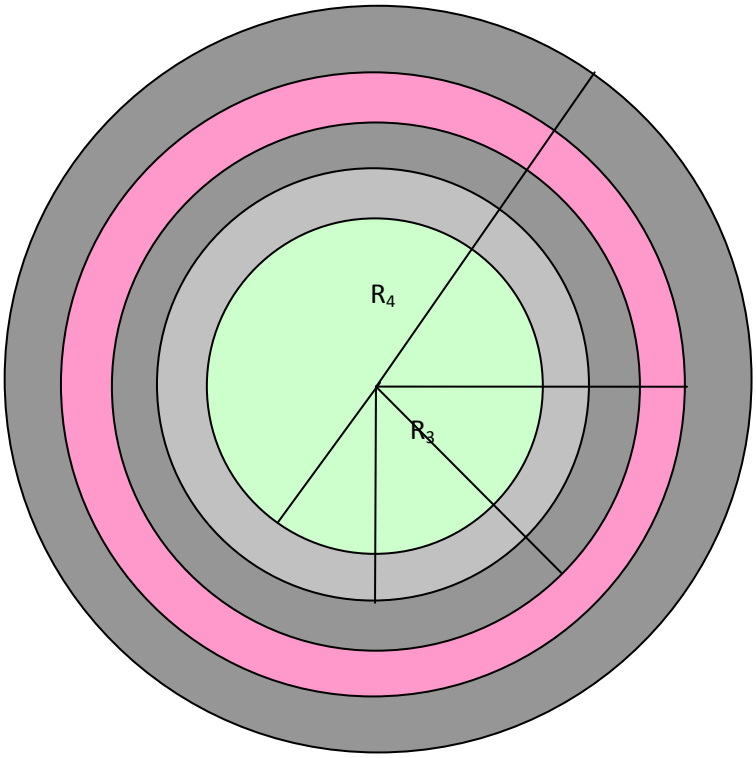



Рисунок 1.4.1 Разрез топливного зерна

Таблица 1.4.1 Размеры микроячейки и зерна

| Параметр | Значение (см) |
|---|---|
| Наружный радиус зерна, $R_0$ | $2.555 \cdot 10^{-2}$ |
| Наружный радиус слоя 1 покрытия, $R_1$ | $3.495 \cdot 10^{-2}$ |
| Наружный радиус слоя 2 покрытия, $R_2$ | $4.215 \cdot 10^{-2}$ |
| Наружный радиус слоя 3 покрытия, $R_3$ | $4.725 \cdot 10^{-2}$ |
| Наружный радиус слоя 4 покрытия, $R_4$ | $5.295 \cdot 10^{-2}$ |
| Ребро кубической микроячейки, A | $2.5677 \cdot 10^{-1}$ |

Таблица 1.4.2 Атомные плотности материалов микротоплива без примесей.

| Изотоп | Атомная плотность (атом/барн·см) |
|---|---|
| Зерно из $UO_2$. Плотность диоксида урана за вычетом примесей – 10,25066 г/см$^3$ | |
| $^{234}$U (0.197 % массы) | $4{,}5789 \cdot 10^{-5}$ |
| $^{235}$U (20.91 % массы) | $4{,}8394 \cdot 10^{-3}$ |
| $^{236}$U (0.162 % массы) | $3{,}7334 \cdot 10^{-5}$ |
| $^{238}$U (78.731 % массы) | $1{,}7991 \cdot 10^{-2}$ |
| $^{16}$O | $4{,}5828 \cdot 10^{-2}$ |
| Покрытие микротоплива – слой 1 (буферный), пироуглерод (PyC) с плотностью 1,00810 г/см$^3$ за вычетом примесей | |
| $^{12}$C | $5{,}0544 \cdot 10^{-2}$ |
| Покрытие микротоплива – слой 2 пироуглерод (PyC) с плотностью 1,94633 г/см$^3$ за вычетом примесей | |
| $^{12}$C | $9{,}7585 \cdot 10^{-2}$ |
| Покрытие микротоплива – слой 3 карбид кремния (SiC) с плотностью 3,25386 г/см$^3$ за вычетом примесей | |
| $^{12}$C | $4{,}8870 \cdot 10^{-2}$ |
| $^{28}$Si | $4{,}8870 \cdot 10^{-2}$ |
| Покрытие микротоплива – слой 4 пироуглерод (PyC) с плотностью 1,88644 г/см$^3$ за вычетом примесей | |
| $^{12}$C | $9{,}4583 \cdot 10^{-2}$ |

Таблица 1.4.3 Атомные плотности графитовой матрицы микроячейки.

| Изотоп | Атомная плотность (атом/барн·см) |
|---|---|
| Графит матрицы сердечника и оболочки ТЭ плотностью 1,885 г/см$^3$ вместе с примесями (борный эквивалент – $B_{ест}$). | |
| $^{12}$C | $9{,}4510 \cdot 10^{-2}$ |
| $^{10}$B | $2{,}0681 \cdot 10^{-8}$ |
| $^{11}$B | $8.4300 \cdot 10^{-8}$ |

Данные зёрна помещены в графитовую матрицу, со средней плотностью 59.07 на см$^3$. Возможные примеси в зёрнах не учитываются поскольку они не имеют ярко выраженных резонансных пиков поглощения. Возможные примеси в графитовой матрице учитываются с помощью борного эквивалента.

Для упрощения моделирования, на основе вышеописанных параметров рассматривался куб с 64 зёрнами с покрытием. Для соответствия концентрации зёрен в объеме графитовой матрицы значению для микротоплива, используемого в стенде

АСТРА, брался куб с длиной ребра 1.02708 см. Куб таких размеров позволяет рассмотреть несколько различных конфигураций. Расчёт проводился в бесконечной среде, куб имел граничные условия трансляции. Нейтрон вышедший за грань появляется на противоположной грани с тем же самым единичным вектором направления движения и той же самой энергией. В такой модели из-за отсутствия утечки нейтронов из зоны реакции, полученные значения реактивности будут намного превышать единицу.

В ряде рассматриваемых моделей куб разбит на 64 одинаковых кубика-микроячейки (4x4x4), в каждый из которых отдельно помещается одно зерно.

**Рассматриваемые модели.**

Расчёты по статистической модели сравнивались как с расчётами по регулярным моделям, так и случайным моделям. В работе [26] описано сравнение статистической модели с кубической, объемно-центрированной и гранецентрированной решётки. Но в упомянутой исследовании не рассматривались ни случайные расположения, ни собирание зёрен в кластеры.

Как было сказано выше, для удобства в большинстве моделей использовано разделение на 4x4x4 кубика-микроячейки. При рассмотрении моделей считается, что центр координат помещён в вершину куба, а координаты $x_1$,$x_2$,$x_3$ точек куба меняются в пределах от 0 до D. Координаты зёрен записываются как $C_{mj}$, где m – номер зерна; j – номер координаты. R – внешний радиус зерна с покрытием (r – радиус зерна, при гомогенизации покрытий). В случаях, где требуется использование псевдослучайных чисел, используется величина $\zeta_m$ – псевдослучайное число из интервала (0, 1). При регулярных и возмущённых расположениях зёрен используется нумерация ячеек по следующему принципу:

$m=1+i_1+4i_2+16i_3$

, где $i_j$ – порядковый номер зерна при движении по j-ой координате, который может принимать значения 0, 1, 2, 3.

Где это возможно, рассматривались модели как с обычными зёрнами, так и с гомогенизацией покрытия зёрен с графитовой матрицей. Для обозначения расчётов используются индексы “A.B.C”, соответствующие моделям расчёта. Индекс A соответствует общему типу рассматриваемой модели. Индекс B принимает следующие значения:

1. Сохранение покрытия микротоплива
2. Гомогенизация покрытия микротоплива
3. Гомогенизация покрытия, соприкосновение зёрен делящегося материала

Индекс C соответствует номеру рассматриваемого варианта в случае, если применялось несколько реализаций случайного распределения.

**Равномерная модель**

В этой модели считается, что зёрна располагаются в центрах 64-ёх ячеек. Данная модель подразумевает отсутствие каких-либо скоплений зёрен и снижение шанса нейтрона войти в другое зерно сразу после выхода из первого. Эта модель будет рассмотрена как в случае зёрен с покрытием (**1.1**), так и зёрен с гомогенизацией покрытия с графитовой матрицей (**1.2**).

$C_{mj}=(D/4)(i_j+0.5)$

**Кластерная модель**

Зёрна снова помещаются каждое в свою ячейку. Но при этом они смещаются к углам микроячеек, таким образом, чтобы образовывать скопления по восемь близкорасположенных зёрен. Данная модель будет рассматриваться в следующих вариациях: кластеры из соприкасающихся зёрен (**2.1**); кластеры из зёрен на расстоянии касания, с последующей гомогенизацией покрытия (**2.2**); кластеры из соприкасающихся сердцевинами зёрен с гомогенизированными покрытиями (радиус r в формуле вместо R) (**2.3**).

Эта модель предназначена для изучения эффекта локальных скоплений зёрен.

$$C_{mj} = (D/4)(i_j + 0.5) + (-1)^{i_j}(D/8 - R)$$

**Модель со случайным расположением в ячейках**

Мы помещаем зёрна в отдельные ячейки, случайным образом располагая их относительно центров ячеек. При этом зёрна могут только касаться стенок ячеек, но не выходить за их грани. Здесь и далее используется генератор псевдослучайных чисел [27], дающий достаточно случайную последовательность для решения нашей задачи. Как и в предыдущих случаях, эта модель рассматривается как зёрен с покрытием (**3.1**), так и зёрен с гомогенизированным покрытием (**3.2**).

$$C_{mj} = (D/4)(i_j + 0.5) + (2\zeta_{mj} - 1)(D/8)$$

**Модель со случайным расположением в кубе (вписанная)**

Эта модель состоит в том, что мы помещаем зёрна случайным образом по всему кубу. При этом зёрна могут только касаться друг друга и стенок куба, не выходя за его грани. Для генерации используется вышеупомянутый генератор псевдослучайных чисел.

Рассматривались случаи как зёрен с покрытием (**4.1**), так и зёрен с гомогенизированным покрытием (**4.2**).

В этой модели средняя концентрация зёрен в окрестности граней куба меньше, чем в его внутренней части, что означает неравномерность распределения. Генерация начинается с выработки координат центров зёрен по формуле:

$$\mathrm{C}_{\mathrm{mj}} = \zeta_{mj}(D - 2R) + R$$

Если при этом хотя бы для одной пары n<m выполняется $|\mathbf{C}_{\mathrm{m}} - \mathbf{C}_{\mathrm{n}}|<2\mathrm{R}$, то полученный набор центров бракуется и вырабатывается новый, и так пока не возникнет расположение, в котором шары не пересекаются

**Модель со случайным расположением в кубе (транслируемая)**

Этот вариант случайного расположения зёрен в кубе обеспечивает равномерность распределения. Правило, что зёрна не могут «накладываться» друг на друга, сохраняется. Но теперь если часть зерна выходит за грань куба, то мы достраиваем с противоположной стороны зерно вне куба, часть которого попадает внутрь куба и представляет в точности тот кусочек вылезшего зерно, который оказался вне куба. Иными словами мы транслируем зёрна при пересечении граней. Рассматривались случаи как зёрен с покрытием (**5.1)**, так и зёрен с гомогенизированным покрытием (**5.2**).

$$\mathrm{C}_{\mathrm{mj}} = \zeta_{mj} D$$

Так же проводилась проверка отсутствия пересечения шаров.

**Гомогенная модель**

В этой модели полностью гомогенизируется графитовая матрица с зёрен и их покрытием (6). Эта модель рассматривается, для того чтобы убедиться, что гомогенизация второго уровня гетерогенности (зёрен в матрице) недопустима.

**Статистическая модель**

Реализованная модулем CORN [21] программного пакета MCU [23]. Рассматривалась вместе с гомогенизацией покрытия зёрен (7). Для построения графика относительных отклонений результатов от полученного по этой модели значения, производилось деление $k_{eff}$ на $k_{eff}$ полученное по статистической модели, с соответствующим перерасчётом погрешности.

**Реализация**

Использовалась программа MCU [23] созданная для получения различных функционалов, в том числе $k_{eff}$, в моделях реакторов или их отдельных компонент.

Программа MCU предназначена для моделирования процессов переноса нейтронов методом Монте-Карло на основе оценённых ядерных данных в системах с трёхмерной геометрией. Программа позволяет моделировать системы, состоящие из объёмных элементов практически произвольной формы. Ранее описанный статистический алгоритм позволяет учитывать эффекты двойной гетерогенности в полных моделях критических сборок, когда тепловыделяющие элементы содержат десятки тысяч микротвэлов.

Для ряда моделей была необходима генерация случайного смещения (в ячейках или кубе). В качестве генератора псевдослучайных чисел был использован вариант встроенный в программу MCU.

При генерации различных моделей со случайным расположением каждый вариант модели генерировался отдельно, продолжая использовать генератор псевдослучайных чисел с того места, на котором было закончено его использование предыдущей генерацией. Это даёт отсутствие совпадений в получаемых результатах.

При генерации смещений в ячейках использовался принцип генерации случайного числа в пределах, равных $\pm(A/2-R)$, где $A$ – длина ребра куба-микроячейки, а $R$ – внешний радиус зерна с учётом покрытия (r – радиус зерна, в случае гомогенизации покрытия). То есть зёрна не могли выходить за пределы микроячейки.

Генерация случайного расположения зёрен по всему кубу реализована следующим образом. Независимо генерировалось случайное расположение всех 64 зёрен в кубе. После этого проверялось, возможное наложение. В случае нахождения такого наложения генерировались новое расположение 64 зёрен и так далее. Полное отбрасывание предыдущих результатов в случае пересечения зёрен обеспечивает равномерность распределения по допустимому объему пространства для всех зёрен. В случае попыток размещения зёрен по одной мы неизбежно сталкиваемся с неравномерностью распределения.

В случае модели случайного расположения в кубе («вписанной»), расположение центров зёрен генерировалось с учётом невозможности пересечения граней куба-контейнера. То есть в пределах от R до D-R, где D – ребро куба-контейнера, R – радиус внешнего слоя зерна (зерна, в случае гомогенизации покрытия).

Интересно, что результаты работы алгоритма показали насколько объем пространства всех допустимых расположений центров шаров меньше объема пространства всех расположений 64 точек в кубе. Среднее число генераций 64 по «вписанной» модели на одно допустимое расположение для зёрен составляло порядка $10^5$.

В случае модели случайного расположения в кубе («транслируемой») после генерации расположения 64-ёх зёрен и проверки наличия пересечения (с учётом

трансляции) проверялся выход за границы граней, рёбер и углов куба-контейнера для каждого зерна. В случае нахождения таковых достраивались необходимые зёрна снаружи куба-контейнера, которые, при его пересечении, давали эффект трансляции. К примеру, в случае пересечения зерном радиуса *R* грани куба перпендикулярной оси X, достраиваемое зерно имело те же самые координаты по Y и Z, но получало новую координату по X равную X1-2Dsgn(X1), где D – ребро куба-контейнера, X1 – координата вышедшего за грань зерна, с учётом знака, а sgn – функция знака числа.

## 1.5 Результаты расчётов

Таблица 1.5 Результаты расчётов

| № | Кэфф | ΔК | Примечание |
|---|---|---|---|
| 1.1.1 | 1,733 | 0,09 | Обычные зёрна по центрам ячеек |
| 1.2.1 | 1,732 | 0,05 | Зёрна с гомогенизацией покрытия по центрам ячеек |
| 2.1.1 | 1,737 | 0,09 | Обычные зёрна в кластерах, касание |
| 2.2.1 | 1,736 | 0,1 | Зёрна с гомогенизацией покрытия на расстоянии касания обычных |
| **2.3.1** | **1,756** | **0,09** | **Зёрна с гомогенизацией покрытия в кластерах, касание** |
| 3.1.1 | 1,734 | 0,1 | Обычные зёрна случайно смещённые в ячейках |
| 3.1.2 | 1,734 | 0,1 | |
| 3.1.3 | 1,735 | 0,09 | |
| 3.1.4 | 1,736 | 0,09 | |
| 3.1.5 | 1,735 | 0,09 | |
| 3.2.1 | 1,737 | 0,09 | Зёрна с гомогенизацией покрытия случайно смещённые |
| 3.2.2 | 1,734 | 0,1 | |
| 3.2.3 | 1,736 | 0,1 | |
| 3.2.4 | 1,735 | 0,11 | |
| 3.2.5 | 1,736 | 0,09 | |
| 4.1.1 | 1,733 | 0,09 | Обычные зёрна случайно в кубе (вписанная) |
| 4.1.2 | 1,735 | 0,08 | |
| 4.1.3 | 1,733 | 0,08 | |
| 4.1.4 | 1,732 | 0,1 | |
| 4.1.5 | 1,734 | 0,1 | |
| 4.2.1 | 1,733 | 0,09 | Зёрна с гомогенизацией покрытия случайно в кубе (вписанная) |
| 4.2.2 | 1,733 | 0,08 | |
| 4.2.3 | 1,734 | 0,1 | |
| 4.2.4 | 1,734 | 0,09 | |
| 4.2.5 | 1,733 | 0,09 | |
| 5.1.1 | 1,734 | 0,1 | Обычные зёрна случайно в кубе (трансляция) |
| 5.1.2 | 1,733 | 0,1 | |
| 5.1.3 | 1,733 | 0,1 | |
| 5.1.4 | 1,735 | 0,08 | |
| 5.1.5 | 1,734 | 0,1 | |
| 5.2.1 | 1,731 | 0,1 | Зёрна с гомогенизацией покрытия случайно в кубе (трансляция) |
| 5.2.2 | 1,733 | 0,09 | |
| 5.2.3 | 1,733 | 0,09 | |
| 5.2.4 | 1,735 | 0,1 | |
| 5.2.5 | 1,733 | 0,09 | |
| **6.2.1** | **1,617** | **0,1** | **Полная гомогенизация** |
| 7.2.1 | 1,735 | 0,1 | Статистическая модель CORN |

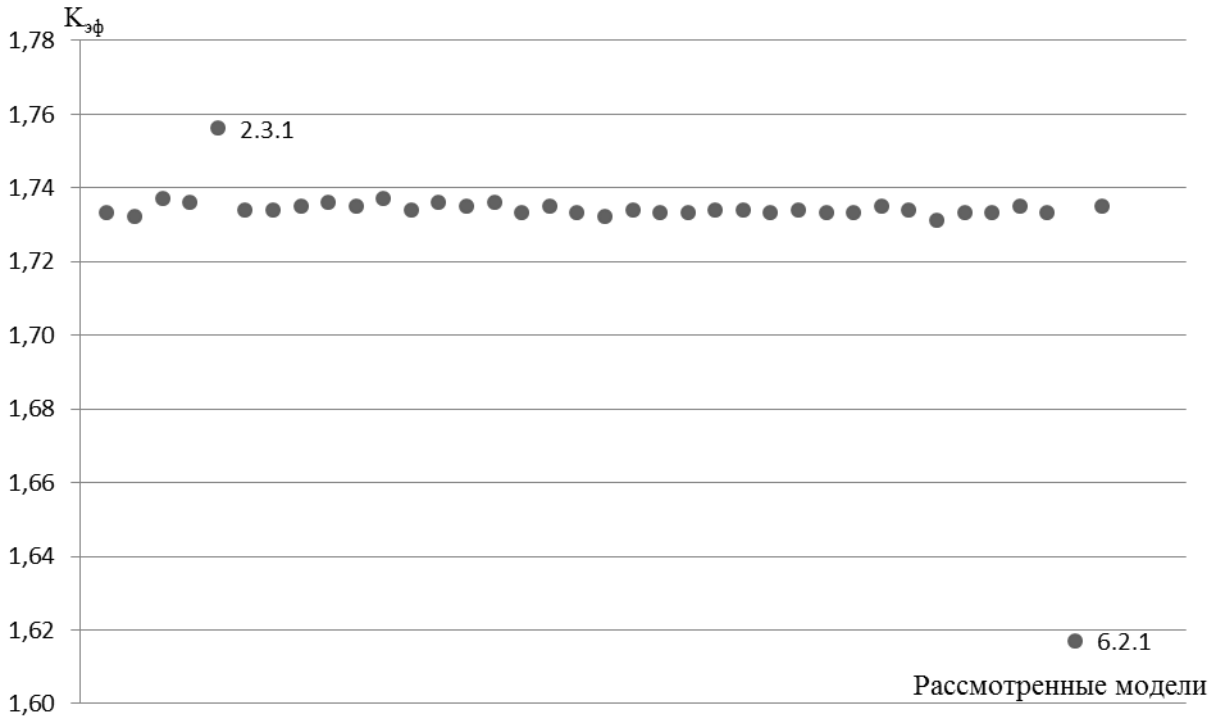



Рисунок 1.5.1 Результаты расчётов (выделены отклонения, лежащие за пределами погрешности расчётов)

В полученных результатах существует два значительных отклонения.

Первое соответствует модели с кластерами из зёрен с гомогенизированными покрытиями на расстоянии касания. Стоит заметить, что на практике такой случай невозможен, так как касанию зёрен мешает их покрытие. Результат ожидаем, так как при такой близости зёрен большую роль начинает играть экранирование резонансного поглощения. 8 зёрен практически слеплены в один шар.

Второе отклонение соответствует полной гомогенизации. Оно также ожидаемо, потому что в таком случае полностью пропадает эффект экранирования резонансного поглощения.

За исключением этих двух легко объяснимых отклонений результаты совпадают с учётом погрешностей вычисления. Таким образом, статистическая модель подтверждена в пределах точности расчётов. Также подтверждена допустимость частичной гомогенизации. Результаты, полученные с помощью этих приближений, хорошо согласуются с различными рассмотренными конфигурациями [28].

### 1.6 Анализ пределов применимости CORN

Не смотря на подтверждение достаточной точности расчётов с использованием CORN и гомогенизацией покрытий, не стоит забывать о допущениях, совершаемых при

использовании данных методов моделирования. В данной работе, помимо изложенных выше расчётов, была проведена серия расчётов, исследующая точность данных методов в случаях крайне высоких концентраций топливных зёрен. За основу модели для данной серии расчётов был взят шаровой ТВЭЛ стэнда PROTEUS [5, 22] располагающегося в Институте Пауля Шеррера (Швейцария) и являвшегося бенчмарк экспериментом до 2011 г. Шаровой элемент имеет общий диаметр 6 см. Графитовая матрица ТВЭЛа имеет диаметр 4,7 см, тогда как наружная часть является графитовым покрытием той же плотности, не содержащим микротоплива.

Содержание зёрен в шаровых твэлах PROTEUS составляет 9 394 зёрен на один шар. Это даёт концентрацию зёрен 172,806 см$^{-3}$, что почти в три раза выше, чем в случае стенда АСТРА. Зёрна данного ТВЭЛа также имеют покрытие из 4 слоёв, и незначительно отличается от параметров зерна АСТРА.

Таблица 1.6.1 Размеры микроячейки и зерна

| Параметр | Значение (см) |
|---|---|
| Зерно из $UO_2$. Плотность диоксида урана за вычетом примесей – 10,88 г/см$^3$ | |
| Наружный радиус зерна, $R_0$ | $2{,}51\cdot10^{-2}$ |
| Наружный радиус слоя 1 покрытия, $R_1$ | $3{,}425\cdot10^{-2}$ |
| Наружный радиус слоя 2 покрытия, $R_2$ | $3{,}824\cdot10^{-2}$ |
| Наружный радиус слоя 3 покрытия, $R_3$ | $4{,}177\cdot10^{-2}$ |
| Наружный радиус слоя 4 покрытия, $R_4$ | $4{,}577\cdot10^{-2}$ |

Таблица 1.6.2 Атомные плотности зерна без примесей

| Изотоп | Атомная плотность (атом/барн·см) |
|---|---|
| $^{234}$U (0.197 % массы) | $3{,}3079\cdot10^{-5}$ |
| $^{235}$U (20.91 % массы) | $4{,}1172\cdot10^{-3}$ |
| $^{236}$U (0.162 % массы) | $2{,}0499\cdot10^{-5}$ |
| $^{238}$U (78.731 % массы) | $2{,}0135\cdot10^{-2}$ |
| $^{16}$O | $4{,}8612\cdot10^{-2}$ |
| Покрытие микротоплива – слой 1 (буферный), пироуглерод (PyC) с плотностью 1,05 г/см$^3$ за вычетом примесей | |
| $^{12}$C | $5{,}2640\cdot10^{-2}$ |
| Покрытие микротоплива – слой 2 пироуглерод (PyC) с плотностью 1,90 г/см$^3$ за вычетом примесей | |
| $^{12}$C | $9{,}5254\cdot10^{-2}$ |
| Покрытие микротоплива – слой 3 карбид кремния (SiC) с плотностью 3,.20 г/см$^3$ за вычетом примесей | |
| $^{12}$C | $4{,}8055\cdot10^{-2}$ |
| $^{28}$Si | $4{,}8055\cdot10^{-2}$ |
| Покрытие микротоплива – слой 4 пироуглерод (PyC) с плотностью 1,.89 г/см$^3$ за вычетом примесей | |

| | |
|---|---|
| $^{12}C$ | 9,4752E-02·$10^{-2}$ |

Таблица 1.6.3 Атомные плотности графитовой матрицы

| Изотоп | Атомная плотность (атом/барн·см) |
|---|---|
| Графит матрицы сердечника и оболочки ТЭ плотностью 1,89 г/см$^3$ вместе с примесями | |
| $^{12}C$ | 8,6842·$10^{-2}$ |
| $^{10}B$ | 1,9393·$10^{-9}$ |
| $^{11}B$ | 7,8061·$10^{-9}$ |
| Ag | 9,6706·$10^{-10}$ |
| Ca | 2,4154·$10^{-7}$ |
| Cd | 4,7791·$10^{-10}$ |
| Cl | 4,4135·$10^{-8}$ |
| Co | 1,1505·$10^{-9}$ |
| Cr | 3,6312·$10^{-8}$ |
| Dy | 3,2097·$10^{-11}$ |
| Eu | 3,4322·$10^{-11}$ |
| Fe | 5,5104·$10^{-8}$ |
| Gd | 3,3169·$10^{-11}$ |
| $^{6}Li$ | 5,7034·$10^{-9}$ |
| $^{7}Li$ | 6,9441·$10^{-8}$ |
| Mn | 8,1647·$10^{-9}$ |
| Ni | 8,8864·$10^{-9}$ |
| S | 1,7893·$10^{-10}$ |
| Ti | 1,0831·$10^{-8}$ |
| V | 4,4334·$10^{-9}$ |
| H | 1,1581·$10^{-5}$ |
| O | 5,7904·$10^{-6}$ |

При анализе рассматривался один шаровой ТВЭЛ, с граничным условием частичного отражения нейтрона. Рассматривались концентрации зёрен как соответствующие PROTEUS, так и во много раз превышающие его паспортные значения. В данной главе изложены результаты расчётов во втором случае. Концентрации зёрен задавались заведомо во много раз превышающие используемую в PROTEUS с целью нахождения верхнего предела применимости метода CORN совместно с гомогенизацией покрытий. Графы таблицы несут следующую информацию:

- Вариант расчёта – указывается на сколь мелкую кубическую решётку дробилась графитовая матрица. Для разбиения считается, что шар вписан в куб, который делится на сетку. Также указывается какое число зёрен размещалось в ТВЭЛе в данном варианте. В случае использования решётки 52x52x52 и числе зёрен ниже 66758 использовалось последовательно изъятие зёрен с использованием генератора случайных чисел до требуемого уровня.

- Corn – $K_{eff}$, полученно для данного расчёта с использованием метода CORN и с гомогенизацией покрытия. В скобках указано стандартное отклонение для данного расчёта.
- Регулярная решётка - $K_{eff}$, полученно для данного расчёта с использованием регулярной решётки зёрен в ТВЭЛе и без гомогенизации покрытия.
- Относительное отклонение – вычислялось по формуле $\delta=C/R-1$, где C – результат, полученный методом CORN и с гомогенизацией покрытия, а R – результат, полученный регулярной решёткой зёрен без гомогенизации покрытия.
- Отражение – вероятность отражения нейтрона при пересечении границы модели (ТВЭЛа).

Таблица 1.6.4 Результаты анализа верхней границы применимости метода CORN

| Вариант расчёта | Corn | Регулярная решётка | Относительное отклонение | Отражение |
|---|---|---|---|---|
| 35x35x35, 21247 зёрен | 0.211810 (0.000169) | 0.211392 (0.000168) | 0,001977369 | 97% |
| 40x40x40, 31408 зёрен | 0.234133 (0.000171) | 0.233838 (0.000172) | 0,001261557 | 97% |
| 45x45x45, 45025 зёрен | 0.256761 (0.000173) | 0.257325 (0.000171) | -0,002191781 | 97% |
| 52x52x52, 55000 зёрен | 0.270850 (0.000177) | 0.272033 (0.000180) | -0,004348737 | 97% |
| 52x52x52, 60000 зёрен | 0.277959 (0.000176) | 0.278661 (0.000176) | -0,00251919 | 97% |
| 52x52x52, 66758 зёрен | 0.286344 (0.000178) | 0.287435 (0.000176) | 0,035845678 | 97% |
| 52x52x52, 21247 зёрен | 0.731818 (0.000318) | 0.731469 (0.000307) | 0,000477122 | 99% |
| 52x52x52, 66758 зёрен | 0.711382 (0.000292) | 0.714428 (0.000293) | -0,004263551 | 99% |

**Анализ результатов расчёта**

Как можно видеть из результатов, CORN сохраняет высокую степень точности (до долей процента), пока речь не заходит об исключительно высоких концентрациях зёрен (от 50000 и выше на шаровой ТВЭЛ). Подобные концентрации, скорее всего, не будут использоваться в разрабатываемых на данный момент ВТГР с использованием ТВЭЛов с микротопливом, поскольку при таких количествах зёрен сильно снижается содержание самой графитовой матрицы, и как следствие – замедляющего материала. Как можно видеть на примере 99% отражения нейтронов, это способно вызвать обратную зависимость $K_{eff}$ от содержания делящегося материала в ТВЭЛе. Тем не менее, в ближайших планах углублённое расчётное исследование данного вопроса, с целью определения влияния конкретных факторов на возникающую погрешность. Растущая с количеством зёрен ошибка может быть вызвана как допущениями метода CORN, так и серьёзным изменением состава графитовой матрицы при гомогенизации покрытия многочисленных зёрен.

### 1.7 Анализ приближений модели CORN

В алгоритме CORN сделаны два основных предположения: совпадение точек входа в керн и выхода из него; независимость положения центров кернов друг от друга.

Первое предположение приводит к тому, что матрица фактически занимает весь объем ТВЭЛа. Если при этом сохранить плотность матрицы, то получится, что масса ее вещества больше, чем в действительности. Поэтому в алгоритме CORN плотность матрицы уменьшают, она будет умножена на величину $(1–N4\pi r^3/3)=1–V_{k0}$, т.е. на отношение реального объема, занимаемого матрицей, ко всей среде. Символом $V_{k0}$ обозначена доля объема, занимаемого керном.

Оценим теперь среднее расстояние между зернами с учетом их конечного размера, для модели с гомогенизированными оболочками топливных частиц. Для случайного отрезка длины $D$ проведенного в среде с микротопливом в среднем сумма длин пересечений с кернами будет равна $DN4\pi r^3/3$, так как для среднего отрезка доля его длины, соответствующая зернам, должна быть равной доле объема, ими занимамой. Средняя хорда керна есть $r4/3$. Так, что среднее число пересечений есть $LN\pi r^2$. Суммарная длина пересечений матрицы есть $D(1– N4\pi r^3/3)$.

Поэтому средний пробег в прозрачной матрице был бы

$L_M=(1– N4\pi r^3/3)/(\pi r^2 N)$, а эффективная плотность $N_M = N/(1-(4\pi/3)r^2N)$

Отметим, что в этом выводе нигде не используется случайность положения зерен, за исключением того, что при случайном положении прямой средняя хорда будет равна $r4/3$. Это верно при очень широких допущениях.

Для больших (относительно средних пробегов) областей с микротопливом используемые в алгоритме CORN приближения корректны. Средний отрезок между кернами в алгоритме CORN есть $L=1/(N\pi r^2)$. Фактически он равен $L_M$. Тогда, если обозначить через $\sum_t$ макроскопическое сечение в матрице, то средний оптический путь между зернами будет

$$\sum_t * L_M = \sum_t *(1– N4\pi r^3/3)/(\pi r^2 N)$$

В алгоритме CORN макроскопическое сечение будет модифицировано множителем $(1–N4\pi r^3/3)$, так что средний оптический путь будет равен.

$$\sum_t *(1–N4\pi r^3/3)*L = \sum_t *(1– N4\pi r^3/3)/(\pi r^2 N)$$

Таким образом, средний оптический путь между кернами при моделировании совпадает с истинным.

Однако, легко видеть, что оценка потока при этом будет завышена, так как длина пробегов в матрице при моделировании увеличена в $1/(1– V_{k0})$ раз. Проблемы возникают в

связи с конечностью областей с микротопливом: их размеры остаются неизменными, а пробеги алгоритм увеличивает. Это легко видеть на следующем примере.

Будем рассматривать кусок траектории частицы, состоящий из отрезка в матрице длиной $\ell_M$ и хорды в керне длиной $\ell_K$. Обозначим через $\sum_M$ и $\sum_K$ соответствующие полные макроскопические сечения. Будем считать, что $\sum_M \ell_M \ll \sum_K \ell_K$. Средняя длина $\ell_M$ есть $(1-V_k)/(N\pi r^2)$, а $\ell_K \approx 4/3r$. Пренебрегая возможностью рассеяния в матрице, получаем, что столкновение частицы в керне произойдет с вероятностью $1-\exp(\sum_K \ell_K)$, и в среднем оно будет в точке

$$\frac{1-e^{-\ell_K \Sigma_K}(1+\ell_K \Sigma_K)}{\Sigma_K(1-e^{-\ell_K \Sigma_K})}+\ell_M$$

При достаточно черном керне это будет приблизительно $\ell_M$. При относительно прозрачном $\ell_M+1/2\ \ell_K$.

В то же время алгоритм CORN при тех же предпосылках в среднем отнесет точку столкновения к положению

$$1/(N\pi r^2)= \ell_M+\ell_K$$

т.е. дальше по направлению луча. Если в этой точке рождаются нейтроны деления, имеющие существенно большую длину пробега и все это происходит вблизи границы топлива, то вероятность для них покинуть топливо может увеличиться.

Описанные в разделе 1.7 сравнения расчетов по модели CORN и расчетов с возмущенными регулярными решетками не показали значимых отклонений. Однако, это можно объяснить двумя причинами. Во-первых, плотность кернов была недостаточно велика. Во-вторых, в рассматриваемых модельных расчетах поток тепловых нейтронов был почти изотропным, поэтому увеличение при движении к границе топлива компенсируется уменьшением при движении от границы.

Тем не менее, учитывая возможность создания микротоплива с большими концентрациями кернов, был реализован альтернативный вариант алгоритма CORN, в котором учитывалось смещение положения частицы при движении в пределах керна, т.е. его конечные размеры. При это надо было учесть, что при случайном выборе положения керна он может оказаться «перерезанным» границей области. Поэтому в алгоритме, даже при движении внутри керна, контролируется граница внешней зоны геометрии, а если она достигается, считается, что частица вышла из керна. Это ведет к дополнительным вычислительным затратам.

В алгоритме CORN, даже при модификации учитывающей размер керна, остается допущение, что после выхода из керна траектория продолжится независимо от того, сколько пройдено от выхода. Все точки матрицы считаются равноправными. Такое

предположение фактически приводит к возможности зерен пересекаться. При малом размере зерен и малой концентрации вероятности пересечения покинутого керна и керна, в который войдет частица, мала. Однако, в существующих топливах для ВТГР это не всегда верно, особенно если учесть наличие покрытия. В действительности, выйдя из топливного шара, частица должна пройти, по крайней мере, две толщины покрытия пока она вновь не попадет в керн.

Реальная совместная плотность распределения кернов устроена очень сложно, так как кроме парных ограничений существуют ограничения, связанные с положением троек, четверок и т.д. Это хорошо видно на очень плотных упаковках кернов, уже напоминающих случайные засыпки шаров.

Считая концентрацию не слишком большой, сделаем некоторые оценки, учитывая лишь ограничения связанные с положением двух шаров.

Сначала оценим вероятность того, что алгоритм приведет к пересечению шаров.

Пусть радиус керна вместе с оболочкой есть $r$, а число кернов в единице объема есть $N$. Алгоритм CORN трактует число $N$, как плотность вероятности того, что в данной точке находится центр керна. Под положением керна всегда понимается точка его центра.

Если центр шара, покидаемый частицей, находится в точке 0, то область, для которой керн, в ней лежащий пересекается с покидаемым керном, есть шар радиуса $cr$. Т.е. вероятность, что моделируемый алгоритмом следующий керн пересечется с исходным, есть $4\pi(cr)^3N/3$. Если пренебречь наличием оболочек, то $cr=2r$. При учете оболочки толщиной $d_{cl}$ имеем $cr=2(r+d_{cl})$. Для стенда АСТРА это число, без учета оболочек, есть 0.02555, для PROTEUS – 0.02510, уже эти числа не очень малы, а возможны и большие концентрации. Поэтому требуется построение более точной модели, если не для проведения штатных расчетов, то для анализа их корректности.

Будем рассматривать следующую модель.

Частица, движущаяся в матрице, может исходно находится в двух положениях:

- частица далеко от последнего керна, плотность распределения очередного керна постоянна, как в алгоритме CORN;
- частица недавно покинула керн, плотность распределения зависит от пройденного от выхода расстояния и от угла между нормалью к поверхности покидаемого керна и направления движения частицы.

Будет считаться, что после рассеяния на ядре матрицы частица находится в первом положении. Это достаточно разумно, так как даже в тепловой области свободный пробег в графите существенно больше, чем размеры шара.

Второе предположение – только парные ограничения – состоит в следующем. Пусть U область допустимого положения кернов, т.е. керн из данной области не пересекается с покидаемым керном. Тогда плотность распределения положений следующего керна постоянна в области U и равна некоторому числу $N_k$, вне области U она равна 0. Очевидно, что $N_k$ зависит от $N$.

Для дальнейшего будут использоваться обозначения, поясненные на рис. (1.7.1). На рисунке центр покидаемого керна лежит в начале координат, точка выхода на оси 0X. направление полета лежит в плоскости 0ZX. Рисунок есть сечение плоскостью 0ZX.

*cr* – радиус шара, где нет центров других кернов;

*r* – радиус керна;

0 – центр покидаемого керна;

A – точка выхода из керна: 0A=*r*

B – текущее положение точки

*s*=AB – путь, пройденный от выхода из керна;

λ – угол между нормалью в точке выхода AK и направлением полета AB

Для того, чтобы частица в точке B вошла в новый керн, его центр должен находится на полусфере с центром в точке B, радиусом *r* и отсеченной плоскостью перпендикулярной направлению полета, и лежащая по другую сторону от точки A. Пересечение этой плоскости с плоскостью рисунка есть прямая FM, F и M – точки пересечения ограничивающей полусферу окружности с плоскостью рисунка.

Точки на противоположной полусфере, не подходят в качестве центра следующего керна – для них в точке B частица выходит из керна, а не входит в него.

Кроме того, возможные центры следующего керна должны лежать вне шара с центром в точке O и радиусом *cr* иначе предыдущий и новый керн пересекутся.

Сфера с центром в точке B и упомянутая большая сфера пересекутся по окружности в плоскости, перпендикулярной отрезку OB и его продолжению OC. Точки пересечения этой окружности с плоскостью рисунка обозначены $C_0$, $C_1$.

Точка D – середина отрезка $C_0C_1$, это центр упомянутой окружности.

α – угол между отсекающей плоскостью и отрезком BL или что то же самое между $BM_0$ и BL;

β – угол между $BC_0$ и BL.

Обозначим через U(λ,s) описанное множество точек полусферы вне шара радиусом *cr*, через $U_p(\lambda,s)$ проекцию этого множества на плоскость, перпендикулярную направлению полета. Через $S(\lambda,s)r^2$, обозначим площадь множества $U_p(\lambda,s)$. Очевидно, что

условная вероятность вхождения в новый керн на отрезке пути [$s$,$s$+δ] для очень малых δ при условии, что путь длиной $s$ пройден в матрице есть $r^2 N_k S(\lambda,s)\delta$

Поэтому требуется вычислить площадь S(λ,s), для чего требуются следующие достаточно простые стереометрические вычисления.

Сделаем поворот координат вокруг оси OY и сдвиг так, чтобы полусфера, где может лежать центр следующего керна, находилась в верхнем полупространстве (см. рис. 1.7.2) Рассматривается случай, когда β>α. В этом случае проекция частично ограничена проекцией окружности $C_0C_1$ на горизонтальную плоскость, а частично сечением сферы радиуса $r$ с центром в B с горизонтальной плоскостью.

Обозначим через $E_0$ и $E_1$ точки пересечения окружности $C_0C_1$ с горизонтальной плоскостью, на рисунке точка E их проекция на плоскость рисунка. Тогда $C_1E$ проекция на плоскость рисунка той части окружности, которая ограничивает допустимую часть полусферы U(λ,s). Вторая ограничивающая ее кривая – это часть горизонтальной окружности, проекция которой на плоскость рисунка есть EF.

Из рисунка видно, что фигура $U_p(\lambda,s)$ включает в себя полную проекцию круга, ограниченного окружностью $C_0C_1$. Эта проекция есть, очевидно, эллипс. Так как все площади пропорциональны $r^2$, будем считать $r$=1

В этом случае BD=cos(β)

Центр эллипса есть точка G – проекция центра круга D на горизонтальную плоскость, BG=cos(β)cos(α), что ясно из рисунка

Большая полуось эллипса – это проекция горизонтального радиуса окружности, который есть длина $DC_0$=sin(β)

Малая полуось эллипса – это проекция радиуса $DC_0$ на горизонтальную плоскость, т.е. sin(β)sin(α).

Таким образом, уравнение эллипса есть

$$\frac{(x-\cos(\beta)\cos(\alpha))^2}{(\sin(\alpha)\sin(\beta))^2}+\frac{y^2}{(\sin(\beta))^2}=1$$

В точках $E_0$ и $E_1$ окружности $C_0C_1$ и горизонтальная окружность пересекаются, поэтому значение координаты $y$ в них проще получить из уравнения горизонтальной окружности $x^2+y^2=1$.

Соответствующая координата $x_E$, как видно из рисунка есть

BE=BD/cos(α)=cos(β)/cos(α)

Таким образом, $y_E^2$= 1- (cos(β)/cos(α))$^2$

В точке $E_0$ окружность пересечения сфер $C_0C_1$ и горизонтальная окружность имеют касательные, лежащие в касательной к сфере плоскости, которая перпендикулярна

горизонтальной плоскости, поэтому касательные эллипса – проекции $C_0C_1$ и горизонтальной окружности совпадают. Поэтому 6унок фигуры $U_p(\lambda,s)$ имеет вид (см. рис. 1.7.3).

Площадь $S(\lambda,s)$ может вычисляться как сумма площади эллипса и фигуры $E_0HE_1F$.

Площадь эллипса есть

π<большая полуось> <малая полуось> т.е. $\pi \sin(\alpha)(\sin(\beta))^2$.

В силу единичности радиуса горизонтальной окружности из элементарной геометрии следует, что площадь сегмента $E_0EE_1F$ есть

$$arccos(x_E) - x_E y_E = arccos(\cos\beta / \cos\alpha) - {\cos\beta\sqrt{(\cos\alpha)^2 - (\cos\beta)^2}}/{(\cos\alpha)^2}$$

Превратив растяжением по осям эллипс в единичную окружность, также получаем площадь сегмента $E_0EE_1F$

$$[\sin\beta][\sin\alpha\sin\beta]arccos\left[\frac{GE}{\sin\alpha\sin\beta}\right] - GE \cdot y_E$$

Так как $GE = {\cos\beta(\sin\alpha)^2}/{\cos\alpha}$ получаем выражение

$$(\sin\beta)^2\sin\alpha\, arccos\left[\frac{\sin\alpha\cos\beta}{\sin\beta\cos\alpha}\right] - \frac{(\sin\alpha)^2\cos\beta}{(\cos\alpha)^2}\sqrt{(\cos\alpha)^2 - (\cos\beta)^2}$$

Добавочная площадь $E_0HE_1F$ есть разность упомянутых сегментов, поэтому окончательная формула есть

$$\pi(\sin\beta)^2\sin\alpha + arccos\left[\frac{\cos\beta}{\cos\alpha}\right] + (\sin\beta)^2\sin\alpha\, arccos\left[\frac{\sin\alpha\cos\beta}{\sin\beta\cos\alpha}\right] - \cos\beta\sqrt{(\cos\alpha)^2 - (\cos\beta)^2}$$

Если угол β меньше или равен углу α, то вся часть сферы с центром в точке B, находящаяся вне большой сферы лежит в верхней полусфере. Поэтому ее проекция есть целый эллипс с площадью

$$\pi(\sin\beta)^2\sin\alpha$$

Остается только вычислить значения углов α и β через исходные величины λ и *s* Из треугольника OAB на рис. 1.7.1

$$(OB)^2 = r^2 + s^2 + 2rs\cos\lambda$$

следовательно, $\cos\alpha = \sin\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) = {r\sin\lambda}/{\sqrt{r^2 + s^2 + 2rs\cos\lambda}}$

В треугольнике $OBC_0$ $OC_0 = cr$, $BC_0 = r$ . а β – внешний угол. Следовательно,

$$\cos\beta = \frac{(c^2 - 2)r^2 - s^2 - 2rs\cos\lambda}{2r\sqrt{r^2 + s^2 + 2rs\cos\lambda}}$$

Дифференцирование по $s$ дает, что выражение $\cos\alpha - \cos\beta$ монтонно возрастает, т.е. угол α, став меньше β, остается таким

Из рис.1.7.4. видно, что если $s \geq r\left(\sqrt{c^2 - (1-\sin\lambda)^2} - \cos\lambda\right)$, то полусфера с центром в точке B лежит вне большой сферы.

Также очевидно, что при $\sqrt{r^2 + s^2 + 2rs\cos\lambda} \leq r(c-1)$ то полусфера с центром в точке B лежит внутри большой сферы, и $S(\lambda, s) = 0$

Таким образом, получаем окончательные расчетные формулы для S(λ,s)

$S(\lambda, s) = 0$ при $\sqrt{r^2 + s^2 + 2rs\cos\lambda} \leq r(c-1)$

$S(\lambda, s) = \pi \sin\alpha\,(\sin\beta)^2$ при β≤α

$$S(\lambda, s) = \sin\alpha\,(\sin\beta)^2\left(\pi - arccos\left({\tan\alpha}/{\tan\beta}\right)\right) + arccos\left[\frac{\cos\beta}{\cos\alpha}\right] - \cos\beta\sqrt{(\cos\alpha)^2 - (\cos\beta)^2}$$

при β>α, $s < r(r - \cos\lambda)$

S(λ,s)=π при $s \geq r\left(\sqrt{c^2 - (1-\sin\lambda)^2} - \cos\lambda\right)$

Далее следует оценить соотношение между исходной плотностью кернов $N$ и поправленной плотностью $N_k$. При этом требуется, чтобы результирующая плотность с учетом запрещенных областей совпадала с исходной.

Для случайного отрезка длины $L$ проведенного в среде с микротопливом в среднем сумма длин пересечений с кернами будет равна $LN4\pi r^3/3$ Средняя хорда керна есть $r4/3$. Так, что среднее число пересечений есть $LN\pi r^2$. Суммарная длина пересечений матрицы есть $L(1- N4\pi r^3/3)$

Поэтому средний пробег в прозрачной матрице был бы

$L_M=(1- N4\pi r^3/3)/(\pi r^2 N)$, а эффективная плотность $N_M = N/(1-(4\pi/3)r^2N)$

Естественно требовать, чтобы поправленная плотность $N_k$ была бы выбрана так, чтобы средний пробег в прозрачной матрице был бы равен $L_M$

Для фиксированных значений λ среднее расстояние до следующего керна есть

$$L_c(\lambda) = \int_0^\infty s(r^2 N_k)\,S(\lambda, s)\,exp\left(-r^2 N_k \int_0^s S(\lambda, q)dq\right)ds = \int_0^\infty r^2 N_k s e^{-r^2 N_k \tau}\,d\tau \quad (1.4.2)$$

где $\tau(s) = \int_0^s S(\lambda, q)dq$ не зависит от $N$ и $r^2$

Если обозначить через $f(\lambda)$ плотность распределения угла λ, а через $F(\lambda)$ соответствующую функцию распределения, то среднее расстояние от точки выхода до следующего керна будет равно

$$L_{cF} = \int_0^{\pi/2} f(\lambda) L_c(\lambda)\, d\lambda = L_c\left(\frac{\pi}{2}\right) - \int_0^{\pi/2} F(\lambda) L'_c(\lambda)\, d\lambda$$

и требуется, чтобы $L_{cF}(r, N_k) = L_M(r, N)$

Ясно, что алгоритм без учета парных взаимодействий, может быть применим в случае, когда $N_k \approx L_M$

На рисунке 1.7.5. приведены графики функции $S(\lambda,s)$, $\lambda = 0$, $\pi/6$, $\pi/3$, $\pi/2$ для микротоплива критической сборки PROTEUS: $r = 0.0251$, $cr = 0.04577$. Видно, что при любом значении $s$ $S(\lambda,s)$ монотонно убывает с ростом $\lambda$. Следовательно, при фиксированном $s$ монотонно убывает значение $\tau$, и, наоборот, при фиксированном $\tau$ монотонно возрастает значение $s$. Получается, что $L_c(\lambda)$ монотонно растет с увеличением значения $\lambda$.

Выражение для $L_c(\lambda) = L_c(\lambda,N_k)$ можно записать в форме

$$L_c(\lambda, N_k) = \int_0^{\infty} s\left(\frac{t}{r^2 N_k}\right) e^{-t} dt$$

из чего следует, что $L_c(\lambda,N_k)$ монотонно убывает с ростом значения $N_k$, что согласуется с интуицией.

Пусть имеются два распределения угла $\lambda$ с функциями распределения $F$ и $G$, причем первое более вытянутое вперед, что означает $F > G$ для любого $\lambda$. В силу монотонного возрастания $L_c(\lambda)$ получаем неравенство

$$L_{cF} < L_{cG}$$

верное для любого значения $N_k$. График $L_{cF}(N_k)$ лежит под графиком $L_{cG}(N_k)$, и они оба убывают, следовательно, решение уравнения $L_M = L_c(\lambda,N_k)$ для первой функции будет меньше, чем для второй. Отсюда для любой функции $F$ получаются оценка

$$N_{k0} < N_{kF} < N_{k90}$$

где $N_{k0}$, $N_{kF}$, $N_{k90}$ есть поправленные плотности для случая, когда $\lambda$ тождественно равно 0, распределение $\lambda$ есть $F$ и, когда $\lambda$ тождественно равно $\pi/2$.

Численно были исследованы зависимости $L_{cF}$ от $N_k$ и получены оценки для $N_{kF}$. Для величин $r$ и $c$ брались значения, отвечающие сборке PROTEUS. В качестве плотности топливных чатиц бралось истинное значение для микротоплива этой борки 178.8, а также модельное значение 350, заведомо большее, чем используемые для ВТГР плотности.

Исследовались следующие распределения, перечисленные в порядке убывания их вытянутости вперед.

1. Все частицы летят строго перпендикулярно поверхности керна: $f(\lambda) = \delta_0$.
2. Керн почти прозрачен для быстрых нейтронов деления. Предполагается достаточная его прозрачности для тепловых нейтронов, что делает плотность

генерации нейтронов деления равномерно распределенных по объему керна. Если направление полета нейтрона деления составляет угол θ с вектором от центра керна до точки деления, то угол λ с нормалью в точке выхода удовлетворяет равенству $\sin(\lambda) = \rho\sin(\theta)$, где ρ – отношение расстояния точки деления от центра к радиусу керна. Так как плотность распределения угла θ есть $0.5\sin(\theta)$, а плотность распределения величины ρ есть $3\rho^2$, то не сложные вычисления дают, что плотность распределения для угла λ есть $f(\lambda) = 3\sin(\lambda)\cos^2(\lambda)$.

3. Быстрые нейтроны или нейтроны промежуточной области с энергией, сильно отличающейся от резонанса, проходят керн практически без столкновений, поэтому поток в любой части керна одинаков, и плотность распределения для угла λ есть $f(\lambda) = 2\sin(\lambda)\cos(\lambda)$.
4. Вариант так же как и второй относится к нейтронам деления, но рассматривается другой предельный случай – керн очень черен для тепловых нейтронов, и все рождения вторичных частиц происходять на поверхности, тогда плотность распределения для угла λ есть $f(\lambda) = \sin(\lambda)$.

Для расчета $L_c(\lambda,N_k)$ использовался следующий прием, близкий к описанным в работе [29]. Обозначим через $w(t) = w(t, \lambda,N_k)$ выражение

$$w = \int_0^t sr^2 N_k S(\lambda,s) Exp\left(-r^2 N_k\ \tau\ (s)\right) ds$$

где значение τ определено выражением (1.4.3).

Дифференцирование дает систему обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dw}{dt} = tr^2 N_k S(\lambda,t) Exp\left(-r^2 N_k\ \tau\ (t)\right)$$

$$\frac{d\tau}{dt} = S(\lambda,t)$$

Таким образом, значение $w(t, \lambda,N_k)$ можно получить численно с помощью любого интегратора ОДУ. Хотя можно показать, что система не особенно жесткая [30], в работе использовался интегратор ode15s [29].

Не представляет труда определит, до каких значений свободной переменной надо интегрировать систему для получения предела с необходимой точностью..

При $cr \le s$, как видно из последней строки формул (1.4.1) $S(\lambda,s)=\pi$, так что $\tau(\lambda,s) > \pi(s - cr)$ , следовательно для достаточно больших величин $A$ разность между пределом и значением $w$ оценивается простым выражением.

$$L_c - w(A) = \int_A^\infty sr^2 N_k S(\lambda,s) Exp\left(-r^2 N_k\, \tau\,(s)\right) ds < \int_A^\infty sr^2 N_k \pi Exp(-r^2 N_k \pi (s - cr)\,) ds$$
$$= Exp\left(\pi r^2 N_k (cr - A)\left(A + 1/(\pi r^2 N_k)\right)\right)$$

Для $N_k$ близких к $N_{PROTEUS}$ = 171.8 уже при $A$ = 25 разность между $w(A)$ и предельным значением меньше $10^{-9}$. Тем более это выполняется для больших значений $N_k$. Поэтому при расчетах интегрирование ОДУ всегда велось до значения 25.

На рисунке 1.7.6. и 1.7.7. приведены графики выхода функции $w$ для углов λ = 0, π/6, π/3, π/2, параметры микротоплива соответствуют критической сборке PROTEUS: $r$ = 0.0251, $cr$ = 0.04577, $N$ = 171.8. Из рисунка видно, что полученные кривые практически совпадают, их предельные значения для рассмотренных четырех значений угла есть 2.9670, 2.9694, 2.9765, 2.9871 соответственно, и они почти не различимы. также видно, что область, где кривая не напоминает экспоненциальный выход на константу очень мала по сравнению с длиной выхода на предельное значение.

На рисунке 1.7.7 приведены аналогичные графики для гипотетического случая $r$ = 0.0251, $cr$ = 0.04577, $N$ = 350. В этом случае кривые уже различимы и их предельные значения есть 1.4910, 1.4943, 1.5006, 1.5154 соответственно. Однако, и в этом случае относительная разность между крайними значениями меньше 2 %.

В таблицах 1.7.1. и 1.7.2 приведены рассчитанные значения средних расстояний между кернами для всех типов распределений, а также средние расстояния между кернами для обычного алгоритма $L_{CORN}$ =1/(π$r^2N$) и подправленным значением $L_M$=(1–$N4\pi r^3/3$)/(π$r^2N$) .

Таблица 1.7.1.

| Плотность 1 $\delta_0$ | Плотность 2 $3\sin(\lambda)\cos^2(\lambda)$ | Плотность 3 $2\sin(\lambda)\cos(\lambda)$ | Плотность 4 $\sin(\lambda)$ | CORN | CORN подправленный |
|---|---|---|---|---|---|
| 2.967 | 2.969 | 2.971 | 2.974 | 2.924 | 2.891 |

Из таблицы видно, что различные разумные плотности распределения угла λ дают практически одинаковые средние длины пробега. Средняя длина пробега для алгоритма CORN уже заметно меньше, что легко объясняется игнорированием покрытия, двойная толщина которого составляет 0.0412, т.е. почти совпадает разницу между длиной алгоритма CORN и длиной в первой колонке. Более значительная разница наблюдается между значениями в первых 4 колонках и средней подправленной длиной для алгоритма CORN - $L_M$. Это объясняется тем, что при подправке учитывается, что «выпадение» объема, занимаемого зернами из объема матрицы, и вводится понятие эффективной

плотности, который для рассматриваемого случая составит 174.8. При учете парных взаимодействий область, запрещенная для центров зерен, еще расширяется, так что эффективная плотность должна быть еще расширена. Численный расчет дает, что эффективная плотность 177.5 дает практическое совпадение с $L_M$. Отметим, что эти незначительные изменения легко компенсируются в обычном алгоритме CORN коррекцией плотности матрицы, приводящей к совпадению средних оптических путей между зернами для штанного алгоритма и подправленных вариантов.

Для случая плотности топливных частиц 350 оценки среднего расстояния между зернами различаются сильнее.

Таблица 1.7.2.

| Плотность 1 $\delta_0$ | Плотность 2 $3\sin(\lambda)\cos^2(\lambda)$ | Плотность 3 $2\sin(\lambda)\cos(\lambda)$ | Плотность 4 $\sin(\lambda)$ | CORN | CORN подправленный |
|---|---|---|---|---|---|
| 1.491 | 1.495 | 1.497 | 1.501 | 1.444 | 1.410 |

Из таблицы видно, что различные разумные плотности распределения угла λ дают и в этом случае дают средние длины пробега, отличающиеся меньше чем на 1 процент. Однако, для совпадения с длиной модифицированной длиной пробега алгоритма CORN нужно более существенно изменить эффективную плотность. Численный расчет дает, что эффективная плотность 372.0 дает практическое совпадение с $L_M$. Это почти 8% от исходного значения, в то время как подправленная плотность есть всего 358. В то же время описанные в п 1.4. численные эксперименты показывают прекрасное совпадение расчетов по алгоритму CORN с коррекцией плотности матрицы и расчетов с регулярными или возмущенными регулярными решетками. Это можно объяснить лишь отсутствием поглощения в графите и относительно большими размерами ТВЭЛов, так что существенно реальное отношение нуклидов матрицы и зерен, а также геометрии зерна, а мелкие подробности размещения не так сказываются. Во всяком случае при другом материале матрицы и зерен использование алгоритма CORN при плотности порядка 350 должно быть обосновано.

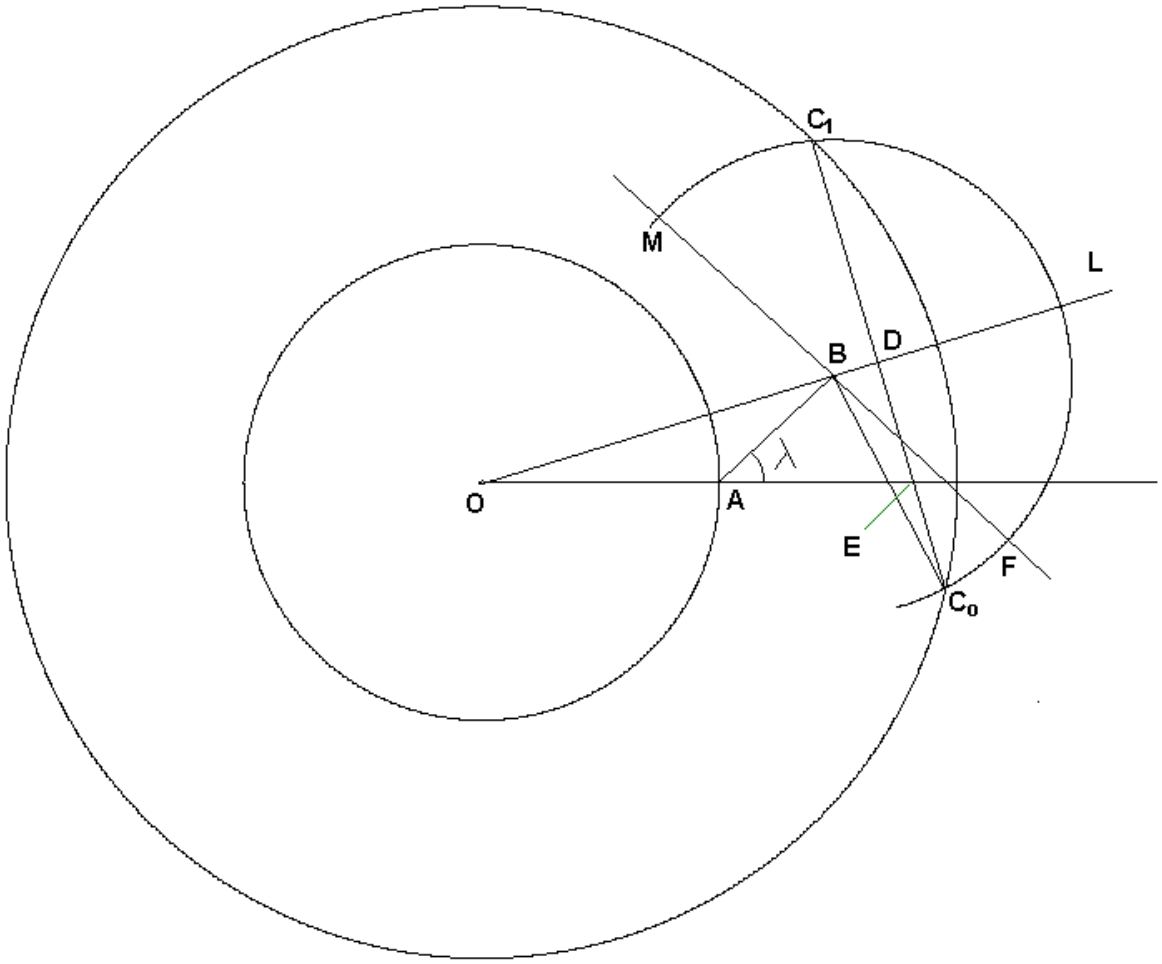



Рисунок 1.7.1.

Выход нейтрона с поверхности керна и вход в следующий керн. Сечение плоскостью, содержащей центр старого керна и прямую полета нейтрона в матрице.

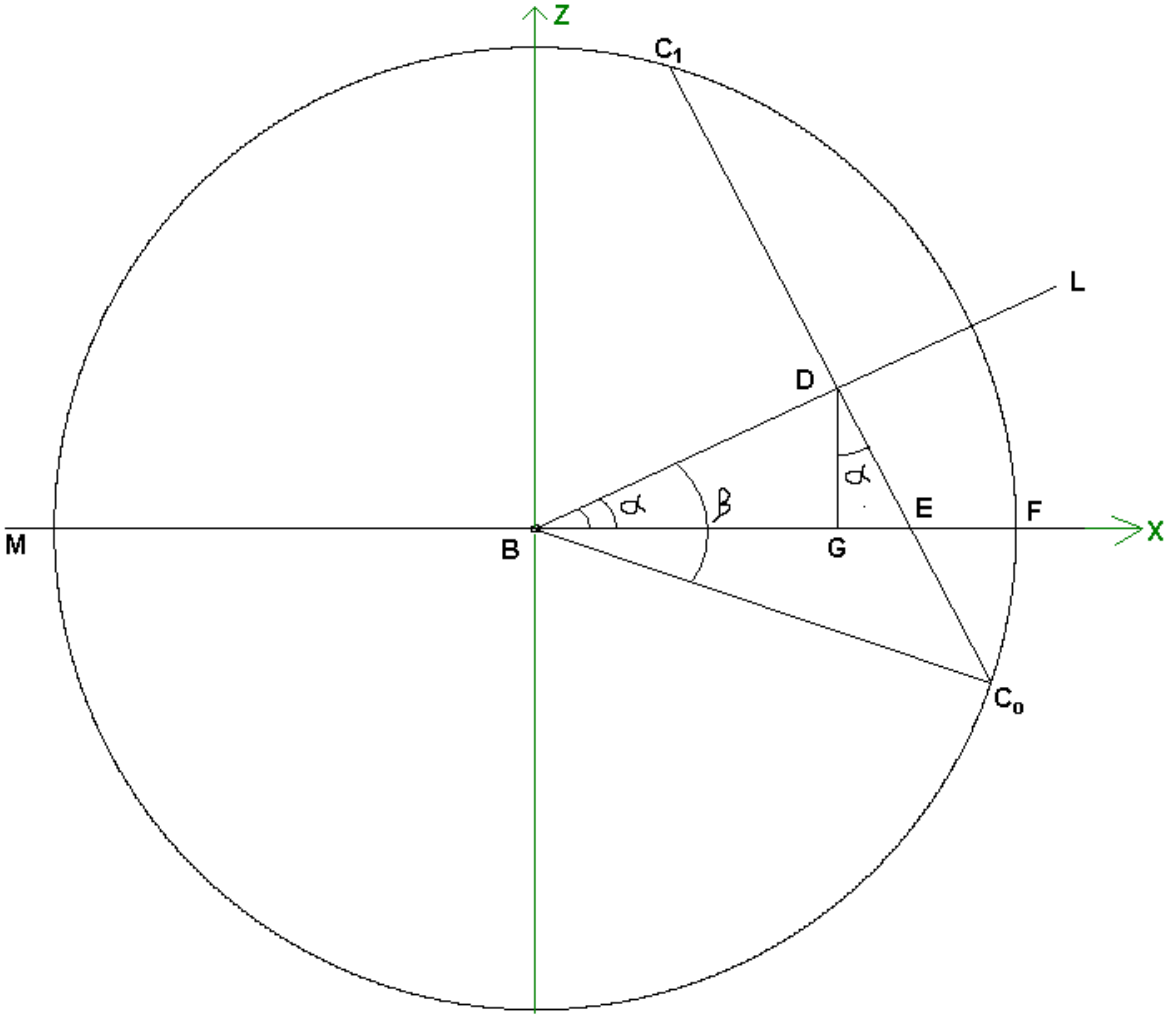



Рисунок 1.7.2.

Схема возможных положений центра керна, куда входит нейтрон в точке B, движущийся в направлении OZ.

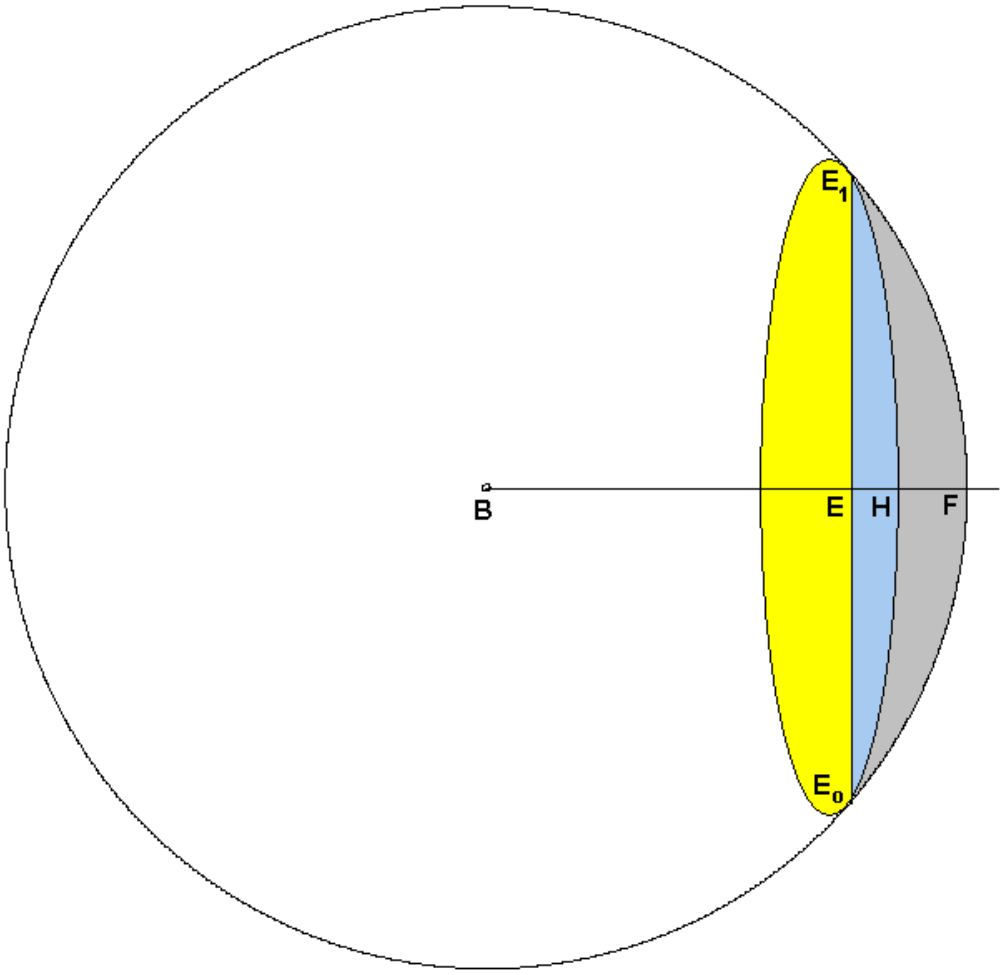



Рисунок 1.7.3.

Проекция множества возможных положений центра нового керна на плоскость, перпендикулярную направлению движения нейтрона.

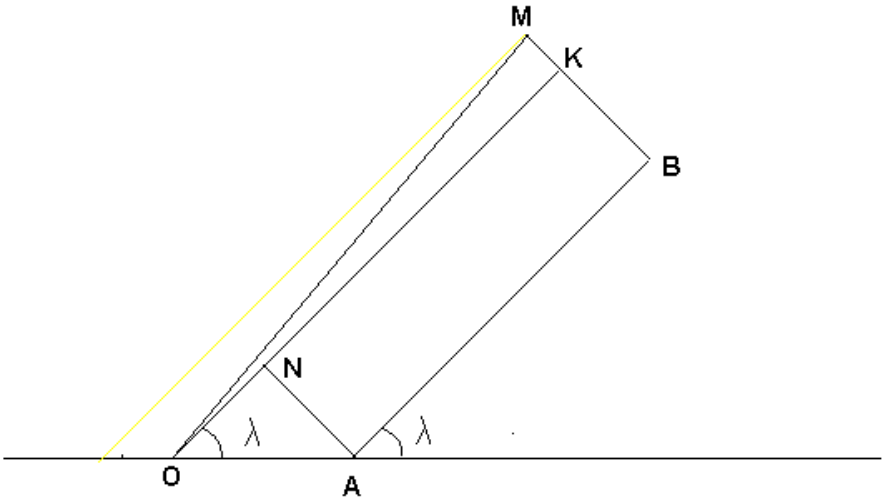



Рисунок 1.7.4.

Расчет расстояния влияния предыдущего керна.

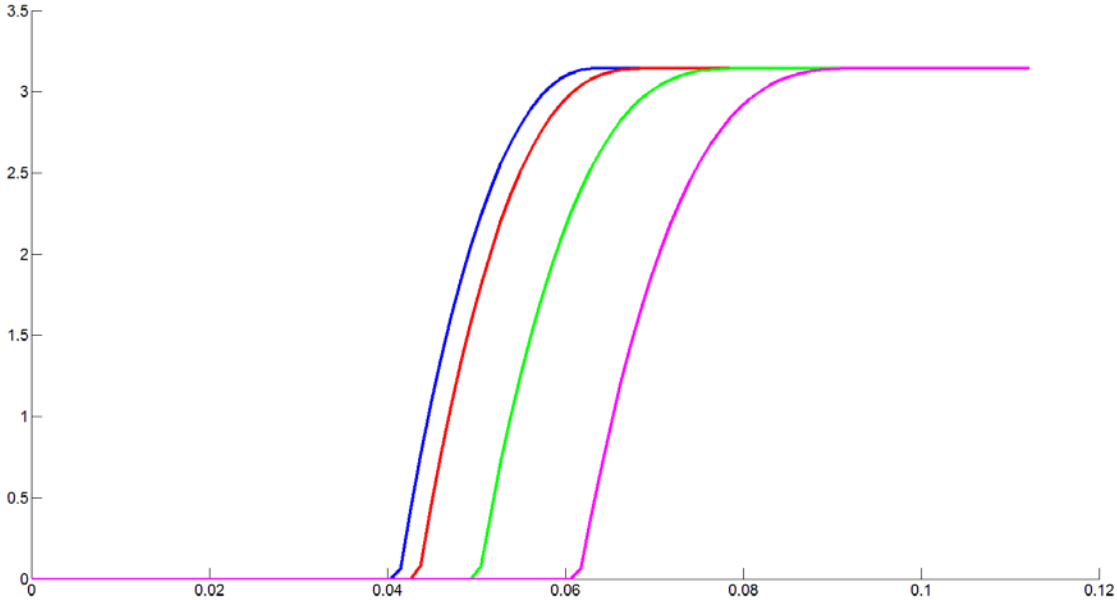



Рисунок 1.7.5.

Графики функции $S(\lambda,s)$ для λ, равного 0, 30, 60 и 90 градусам

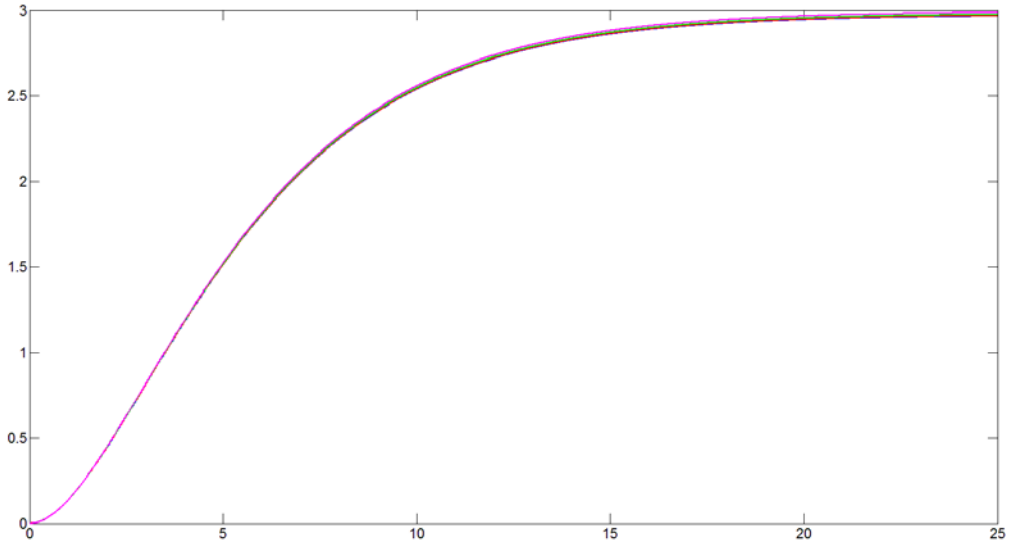



Рисунок 1.7.6.

График выхода на предельное значение $L_c(\lambda,N)$ для $\lambda = 0, \pi/6, \pi/3, \pi/2,$

$r = 0.0251$, $cr = 0.04577$, $N = 171.8$.

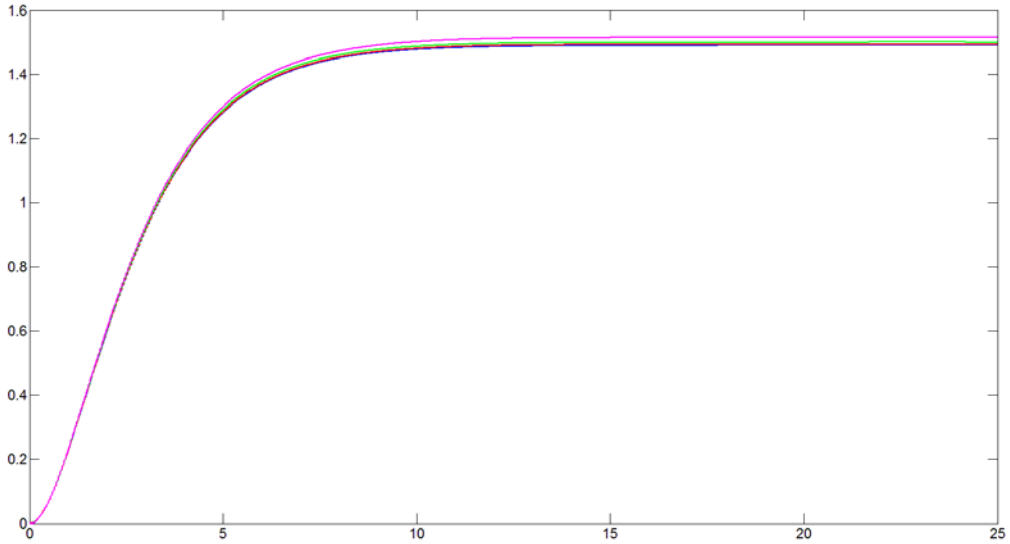



Рисунок 1.7.7.

График выхода на предельное значение $L_c(\lambda,N)$ для $\lambda = 0, \pi/6, \pi/3, \pi/2,$

$r = 0.0251$, $cr = 0.04577$, $N = 350$

# Глава 2 Моделирование случайных засыпок шаровых ТВЭЛов

## 2.1 Концепция ВТГР с шаровыми ТВЭЛами

Концепция реактора с непрерывной загрузкой сравнительно малых по размерам ТВЭЛов сравнительно недавно получила распространение [1-5,14-17,18-20,22,24]. Суть концепции состоит в возможности производить безостановочную перезагрузку делящегося материала. Данная концепция основана на использование шаровых ТВЭЛов размеров порядка 4-6 см в диаметре, содержащих зёрна делящегося материала диаметром в доли миллиметра. Малый размер ТВЭЛов и шарообразная форма позволяют загружать данные ТВЭЛы сверху в активную зону, благодаря специально проектируемой системе, а также выгружать выгоревшие ТВЭЛы снизу. Малый размер зёрен делящегося материала обеспечивает хорошую выгораемость делящегося материала, а общий дизайн системы позволяет производить одновременную выгрузку выгоревших ТВЭЛов и загрузку новых без остановки реактора, снижая затраты на обслуживание. Так как топливные ТВЭЛы состоят из графитовой матрицы с зёрнами делящегося материала, обеспечивается эффект гетерогенности структуры активной зоны. Также возможна загрузка индентичных по размеру шаровых элементов, состоящих из замедлителей или поглотителей, позволяя широко варьировать загрузку активной зоны не внося конструктивных изменений в саму установку.

Одним из основных параметров загрузки зоны шаровыми ТВЭЛами является плотность упаковки. Она расчитывается следующим образом:

$$f_i = \frac{N_E \cdot V_E}{V_{AZ}}$$

, где $N_E$ – количество шаровых элементов в активной зоне, $V_E$ – объем одного шарового элемента, а $V_{AZ}$ – объем активной зоны [31]

## 2.2 Стенд АСТРА

АСТРА – критический стенд, расположенный в НИЦ “КИ” [3,4,31]. Данный стенд использовался для проведения различных экспериментов, в первую очередь с шаровыми ТВЭЛами, содержащими микротопливо. Цилиндрический корпус стенда имеет внешний диаметр 3,82 м и высоту 4,63 м. В корпусе имеются наружный и внутренний графитовые отражатели восьмиугольного сечения. Внутренний восьмиугольник по наружной границе имеет сторону $d_1$ = 99,54 см и диагональ $d_2$ = =105,73 см, внешний восьмиугольник по внутренней границе имеет сторону $D_1$ = =175,56 см и диагональ $D_2$ = 178,19 см. Во

внутреннем отражателе имеются два неизвлекаемых поглощающих стержня и один компенсирующий орган управления. Во внешнем отражателе расположены 8 стержней аварийной защиты, остальные 7 стержней компенсирующего органа управления, стержень ручного управления, экспериментальные каналы, ионизационные камеры и нейтронные счётчики.

Активная зона располагается в восьмиугольном вертикальном слое между двумя отражателями с расстояниями $T_1$ = 38,01 см между сторонами отражателей и $T_2$ = 36,23 см между диагоналями отражателей. Она выделена жёлтым цветом на рисунке горизонтального разреза установки [рисунок 2.2.1]. Высота засыпки активной зоны может достигать 321 см. Количество шаров в этом случае достигает 30 000. Графитовая матрица твэла имеет диаметр 5 см, общий диаметр с покрытием 6 см. Концентрация зёрен в твэле составляет 59,072 см$^{-3}$. Загрузка состоит из твэлов с возможным использованием графитовых шаров-замедлителей выше активной зоны в качестве дополнительного отражателя. Также проводились эксперименты с использование замедлительных и поглотительных шаровых элементов в активной зоне. Плотность упаковки для данного варианта стэнда варьировалась от 0,599 до 0,606.

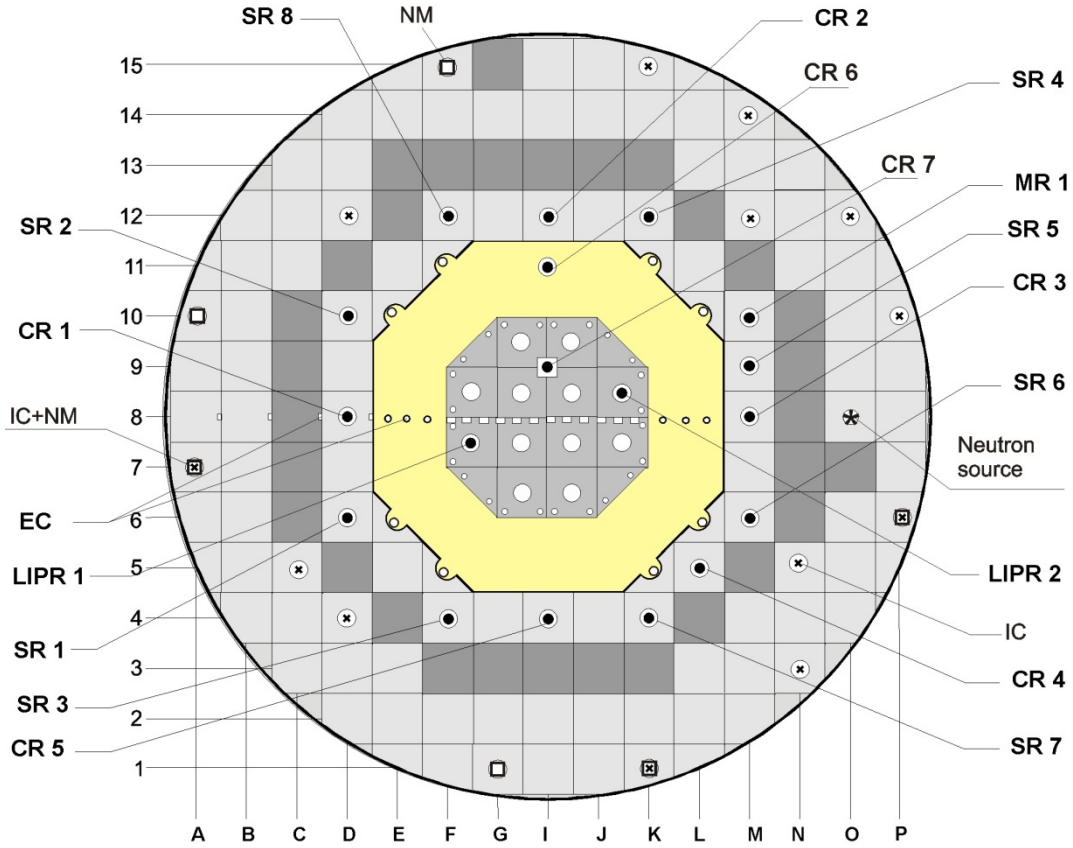



Рисунок 2.2.1 Горизонтальный разрез стенда АСТРА в рассматриваемом варианте

### 2.3 Стенд PROTEUS

Критический стенд PROTEUS располагается в Институте Пауля Шеррера (Швейцария) и являлся бенчмарк экспериментом [5, 22] до 2011 г., в том числе на нём проводились опыты с шаровыми твэлами с микротопливом. Стенд PROTEUS имеет высоту почти 3,5 м и диаметр 3,27 м, на [рисунке 2.3.1] представлен его вертикальный разрез. Отражатели выполнены из графита, верхний и нижний имеют толщину 78 см, тогда как боковой 101 см.

Активная зона занимает центральную цилиндрическую секцию высотой 151 см и диаметром 125,5 см. Обеспечение безопасности и контроля реактивности осуществляется стержнями безопасности и контроля, а также одним автоматическим стержнем контроля, управляемым через показания ионизационной камеры. Все стержни вводятся в вертикальные отверстия в боковом графитовом отражателе

Активная зона PROTEUS заполняется двумя типами шаров – твэлами, содержащими микротопливо в графитовой матрице, и графитовыми без микротоплива. Последние исполнены из графита, используемого в матрице топливных шаров. Оба типа шаров имеют общий диаметр 6 см. Графитовая матрица твэла имеет диаметр 4,7 см, тогда как наружная часть является графитовым покрытием той же плотности, не содержащим микротоплива.

Содержание зёрен в шаровых твэлах PROTEUS составляет 9 394 зёрен на один шар. Это даёт концентрацию зёрен 172,806 см$^{-3}$, что почти в три раза выше, чем в случае стенда АСТРА. Высота загрузки активной зоны – 1.51м. Стандартная загрузка активной зоны состоит из 9 840 шаров с варьирующейся пропорцией твэлов и графитовых элементов. В данной статье рассматривалась модель с пропорцией 1 к 1. Плотность упаковки в рассматриваемом случае составляет 0,596.

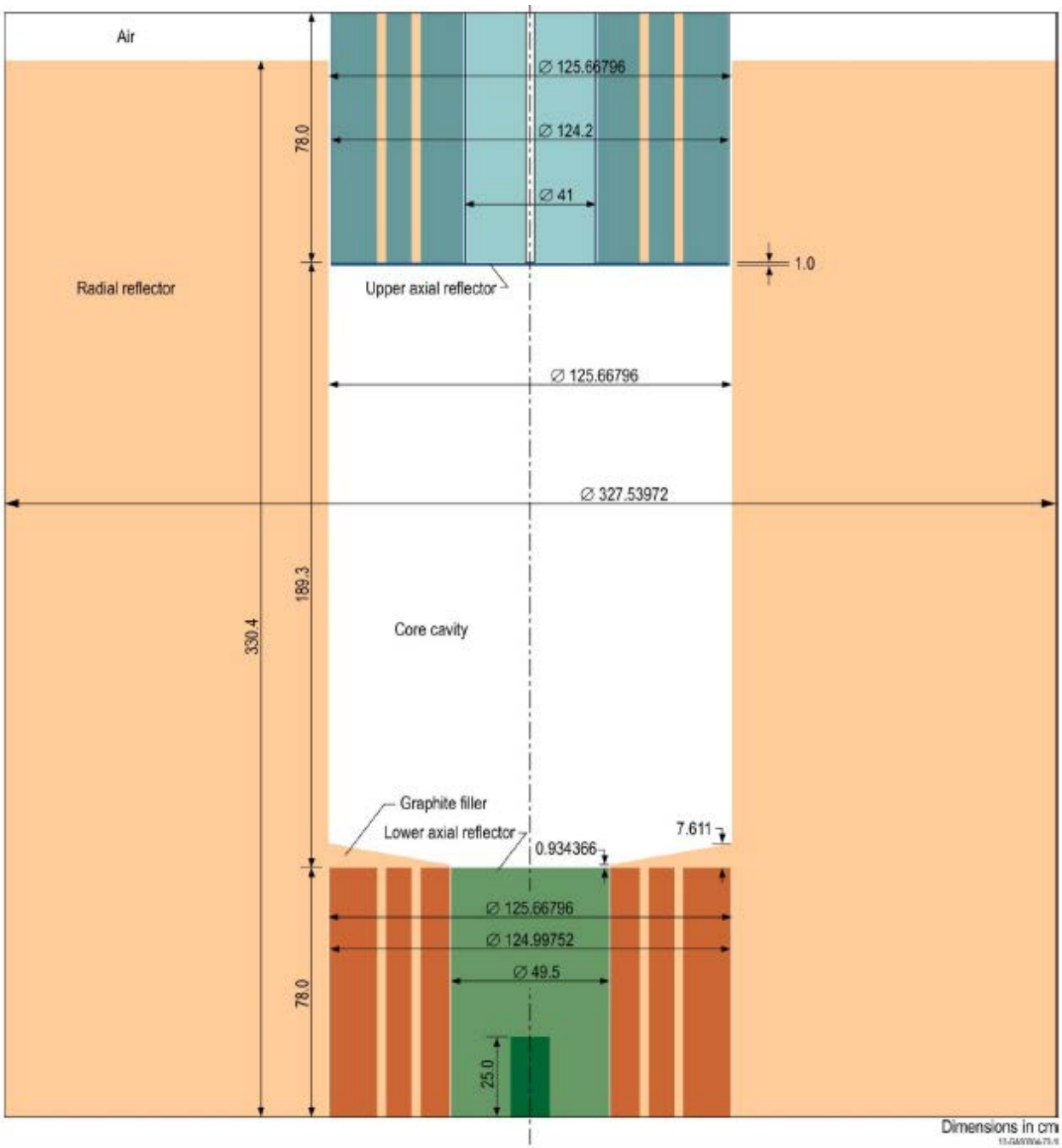



Рисунок 2.3.1 Вертикальный разрез стенда PROTEUS

### 2.4 Моделирование загрузки шаров с учётом средней плотности упаковки

Методы загрузки активной зоны шаровыми ТВЭЛами реальных реакторов позволяют достичь достаточно высокой плотности упаковки, близкие к 0,6 [3-5,22,31]. Но относительная случайность расположения шаров ставит задачу моделирования загрузки при создании расчётной модели для дальнейших исследований. Реализация метода моделирования загрузки активной зоны с учётом действия силы тяжести, веса шаров и возникающего в совокупности эффекта неравномерного уплотнения, то есть уплотнения нижней части загрузки за счёт давления верхней, является не решённой задачей. На

данный момент распространено использование различных типов регулярных и возмущённых регулярных решёток для приближённого моделирования загрузки. Можно выделить два основных метода. Первый состоит в использовании регулярной решётки, расширяемая до того уровня, когда число шаров, остающихся в активной зоне, соответствует реальной загрузке. Недостаток данного метода в том, что он создаёт «простреливаемые» полости. В определённых направлениях активная зона не содержит или почти не содержит шаровых элементов, приводя к неестественным длинам пробега нейтронов при моделировании. Альтернативой служит использование плотной регулярной решётки, из которой затем случайным образом извлекаются шары до необходимого значения. Данный метод также содержит серьёзные недостатки, зачастую приводя к возникновению значительных и нереалистичных полостей (когда случайным образом изымаются 2-3 и более соседних шаров) и не до конца решает проблему «прострелов», так как один из главных её источников – регулярность исходной используемой решётки.

Не смотря на перечисленные недостатки, на данный момент оба метода остаются основными при моделировании загрузок активной зоны шаровыми элементами и, обычно, дают достаточно точную картину при дальнейшем моделировании траекторий элементарных частиц. В данной работе также изучался вопрос применимости и степени возможной ошибки данного метода моделирования, с акцентом на плотные регулярные решётки со случайным последовательным изъятием шаров, завершаемым случайным последовательным разделением на топливные и замедлительные шаровые элементы.

### 2.5 Расчёты по варьированию загрузки активной зоны

В данной работе были произведены серии расчётов, направленных на изучение влияния различных вариантов генерации загрузки активной зоны. В качестве основы для модели расчётов была взята модель установки PROTEUS, описанная в статье [5]. За основу генерации загрузки активной зоны была взята плотная гранецентрированная решётка шаров, накладывающаяся на активную зону. Далее убираются все шары, частично или полностью выходящие за пределы активной зоны. Следом начинается случайное последовательное извлечением шаров до необходимого значения в 9840. Последний этап – случайное последовательное распределение шаров на ТВЭЛы и замедлительные. Пропорция топливных шаровых элементов к замедлительным составляла 1 к 1 во всех вариантах. Рассматривалось влияние следующих факторов:

1. Небольших геометрических сдвигов регулярной решётки по трём основным направлениям

2. Варьирование количества слоёв, то есть высоты загрузки, при сохранении общего количества шаровых элементов

3. Введение неравномерной зависимости вероятности выборки изъятия шарового элемента при извлечении лишних по высоте. Повышенная вероятность изъятия шаровых элементов в верхней части активной зоны и пониженная в нижней

Результаты расчётов по первому фактору приведены в [таблица 2.5.1]. “Смещение” обозначает смещение в сантиметрах гранецентрированной кубической решётки шаров относительно начала координат по осям “X/Y/Z”. “Вариант” обозначает вариант рассматриваемого расчёта, подразумевая использование новой генерации данного типа загрузки активной зоны. $K_{eff}$ обозначает эффективный коэффициэнт размножения нейтронов, полученный при расчёте данной модели. Std dev – стандартное отклонение полученного результата. Отдельного внимания заслуживают варианты 14a, 14b и 14c, в которых была удалена коническая графитовая часть в нижней части активной зоны. Активная зона при генерации загрузки была соответствующим образом расширена до полноценного цилиндра.

Таблица 2.5.1

| Вариант расчёта | $K_{eff}$ | std dev |
|---|---|---|
| 2/2/2 смещение, вариант 10a | 1.017843 | 0.000331 |
| 2/2/2 смещение, вариант 10b | 1.019217 | 0.000328 |
| 2/2/2 смещение, вариант 10c | 1.018339 | 0.00033 |
| 2/2/2 смещение, вариант 10d | 1.019080 | 0.000325 |
| 2/2/2 смещение, вариант 10e | 1.019248 | 0.000335 |
| 0/0/2 смещение, вариант 11a | 1.019768 | 0.000331 |
| 0/0/2 смещение, вариант 11b | 1.019748 | 0.000331 |
| 0/0/2 смещение, вариант 11c | 1.019588 | 0.000332 |
| 0/0/2 смещение, вариант 11d | 1.019849 | 0.00032 |
| 0/0/2 смещение, вариант 11e | 1.018356 | 0.000331 |
| 2/2/0 смещение, вариант 12a | 1.022601 | 0.000342 |
| 2/2/0 смещение, вариант 12b | 1.021921 | 0.000329 |
| 2/2/0 смещение, вариант 12c | 1.022114 | 0.000329 |
| 2/2/0 смещение, вариант 12d | 1.021938 | 0.000324 |
| 2/2/0 смещение, вариант 12e | 1.021854 | 0.000326 |
| 2/2/0 смещение, вариант 14a | 1.027466 | 0.000331 |
| 2/2/2 смещение, вариант 14b | 1.021083 | 0.000330 |
| 0/0/2 смещение, вариант 14c | 1.022165 | 0.000339 |

Как легко заметить, $K_{eff}$ значительно превышает 1. Это связано с несовершенством используемой модели, что можно заключить из проведённого

независимой группой расчёта на основе той же модели стенда с использованием MCNP5 [5] (погрешность указана в виде ординарной дисперсии):

$$K_{eff} = 1{,}01736 \pm 0{,}00007$$

Хотя значение, полученное экспериментально для данного типа загрузки стенда PROTEUS соответствует следующему:

$$K_{eff} = 1{,}0039 \pm 0{,}0036$$

Тем не менее, для цели нашего исследования наличие абсолютной систематической ошибки, связанной с неточностью исходной модели, не несёт серьёзных последствий, поскольку исследуется относительное влияние факторов на конечный результат.

Далее приводятся расчёты по второму фактору. Стандартная загрузка состоит из 34 горизонтальных слоёв шаров:

Таблица 2.5.2

| Вариант расчёта | $K_{eff}$ | std dev |
|---|---|---|
| 2/2/2 смещение, вариант 15a (35 слоёв) | 1.011375 | 0.000327 |
| 2/2/2 смещение, вариант 15b (33 слоя) | 1.026020 | 0.000326 |
| 2/2/2 смещение, вариант 15c (32 слоя) | 1.035575 | 0.000332 |
| 2/2/2 смещение, вариант 15d (34 слоя, стандартная загрузка) | 1.017158 | 0.000334 |

Для исследования третьего фактора, был введён “вес”, определяющий вероятность выбора слоя для дальнейшего случайного изъятия одного шара из него. Снизу-вверх, для первых 15 слоёв был введён вес = 10, для следующих 10 вес = 12, для оставшихся 9 слоёв вес = 15. Результаты приведены в таблице:

Таблица 2.5.3

| Вариант расчёта | $K_{eff}$ | std dev |
|---|---|---|
| 2/2/2 смещение, вариант 16a | 1.017857 | 0.000324 |
| 2/2/2 смещение, вариант 16b | 1.018894 | 0.000327 |
| 2/2/2 смещение, вариант 16c | 1.020250 | 0.000331 |
| 2/2/2 смещение, вариант 16d | 1.018894 | 0.000327 |
| 2/2/2 смещение, вариант 16e | 1.020692 | 0.000319 |

### 2.6 Анализ результатов расчётов

Из результатов расчётов были сделаны следующие выводы:

- Использованная модель установки PROTEUS содержит неточности, приводящие к систематической ошибке, завышающей результат на ~2%. Данный вывод подтверждается независимыми расчётами по этой модели с использованием программного кода MCNP5.

- Сдвиги регулярной гранецентрированной кубической решётки, используемой для создания загрузки активной зоны вышеописанным способом, имеют заметное влияние на результат вычислений. Различия в результатах доходят до ~0,5%, что необходимо учитывать при расчётах подобных систем. Варианты 14a, 14b, 14c продемонстрировали серьёзное изменение Keff. На основе этого было выдвинуто предположение, что главную роль в данном отклонении сыграла смещённость самой активной части зоны в нижнюю часть системы, относительно центра всей активной зоны.
- Варьирование высоты загрузки активной зоны при сохранении общего количества шаров продемонстрировало ожидаемый эффект снижения Keff при увеличении количества слоёв и повышении в обратном случае. Данные результаты подчёркивают необходимость как можно более точного определения размеров активной зоны при моделировании.
- Результаты по неравномерному изъятию шаров из слоёв, с увеличением вероятности снизу-вверх, позволили в первом приближении оценить возможные эффекты неравномерного уплотнения загрузки активной зоны в реальных условиях. Средние отклонения составили до ~0.1%. В рамках текущей примитивной реализации данного эффекта ещё рано судить о влиянии данного фактора. Однако, результат безусловно подчеркнул необходимость более глубокого изучения данного воспроса. Особо стоит отметить, что PROTEUS представляет собой одну из более компактных систем, использующую лишь порядка 10 тысяч шаровых элементов. АСТРА использует 30 тысяч и в случаях подобных установок с большей загрузкой активной зоны, эффект неравномерного уплотнения может проявляться с большей силой, чем даже по примитивной предварительной оценке выше.

# Глава 3 Реализация многоуровневой иерархии сетей в геометрическом модуле пакета программ MCU

## 3.1 Роль иерархии сетей в описании ЯЭУ с микротопливом

Для высокотемпературных реакторов (ВТГР) используется топливо, состоящее из графитовой матрицы, включающей большое число топливных микрочастиц (TRISO). Технология изготовления такого топлива обеспечивает равномерное распределение частиц в матрице, но конкретное распределение частиц случайно и точно не известно. Для моделирования подобной структуры используются два способа:

- статистическое представление, например описанный в главе 1, алгоритм CORN, для которого положение каждой конкретной частицы явно не задается при вводе;
- представление в виде регулярной решетки того или иного вида.

В обоих случаях требуется, чтобы число микрочастиц в единице объема совпадало с реальным.

Оба эти способа являются огрублениями. В алгоритме CORN не учитывается невозможность для частиц пересекаться. В представлениях решетками не учитывается случайность расположения, в частности, возможность образования локальных кластеров.

Описание высокотемпературного реактора или критической сборки с шаровыми ТВЭЛами по смыслу требует, по крайней мере, трех уровней геометрии: вся установка содержит решетку шаровых ТВЭЛов, а каждый шар содержит решетку топливных микрочастиц.

При использовании статистических методов описания, например, алгоритма CORN в пакете программ MCU [10,25], нижний уровень не нужен явно. При втором способе описания микрочастиц избежать трех уровней нельзя.

В реакторе HT-MGR [17] геометрия имеет 4 уровня иерархии: весь реактор включает решетку тепловыделяющих сборок (ТВС); каждая из них содержит решетку шестиугольных ячеек, соответствующих топливным компактам [17] или трубам для теплоносителя; наконец каждый топливный компакт содержит решетку топливных микрочастиц.

В программе MCU существует 2 способа представления повторяющихся структур [10,32]: сети (NET) и решетки (LATT). Далее будут использоваться обозначения входного языка геометрического модуля программы MCU NET и LATT, чтобы не путать геометрический смысл термина «решетка» (например, [11,33]) и более специальный смысл, вкладываемый в тот термин в упомянутом входном языке [32]. Термин сеть употребляется, так как не вносит путаницы. Слово решетка используется там, где

контекст не допускает разночтения, например, в конструкциях «элемент решетки» или «развертывание решетки» [32].

Для конструкции NET во внутреннем представлении геометрии, используемого в процессе моделирования траекторий нейтронов, явно сохраняется иерархическая структура. При использовании конструкции LATT все внутренние объекты прототипа элемента (тела, зоны и т.п.) повторяются столько раз, сколько используется тот прототип, а их локальные координаты преобразуются в глобальные координаты всей рассчитываемой системы. То не только требует значительного расхода памяти, но и может существенно снизить быстродействие.

В версиях пакета программ MCU до MCU-5 включительно единственным способом создать иерархию из 3 уровней была конструкция LATT, элементы которой содержат конструкцию NET.

Именно так были реализованы расчеты реактора HT-MGR (конструкция LATT с элементами колонн ТВС, в колонны ТВС вложены сети ячеек). Топливные микрочастицы моделировались с помощью алгоритма CORN.

Аналогично, в первых вариантах расчетов сборки PROTEUS с использованием регулярных решеток топливных микрочастиц совокупность шаровых ТВЛов была описана как конструкция LATT, а каждый из них содержал сеть топливных микрочастиц.

В распространяемой в настоящее время версии MCU-6 допускается конструкция LATT внутри элемента сети. Это очень удобно для моделирования элементов сетей, внутри которых имеется небольшое число повторяющихся объектов, например, для топливных каналов реактора РБМК. Регулярная решетка топливных микрочастиц в шаровом ТВЭЛе или компакте слишком велика для эффективного применения такого способа.

Потому возник вопрос о расширении возможностей пакета программ MCU.

Иерархия геометрических объектов тем или иным способом реализуется в развитых пакетах программ, связанных с моделированием в трехмерном пространстве [7,8], например, в трехмерной графике.

По доступному описанию работы с такими программами, например, с программой MCNP-5, нельзя точно утверждать, когда во внутреннем представлении сохраняются локальные системы координат, а когда нет. По косвенным признакам можно предположить, что в программе MCNP-5 иерархия систем координат сохраняется, но подробности алгоритма реализации установить невозможно.

Для дальнейшего понадобятся несколько понятий, относящихся к структурам сетей..

Каждая сеть состоит из массива ячеек одинаковой формы. Массив имеет в программе MCU размерность 2 или 3. В дальнейшем можно считать размерность всегда равной 3, а двумерная сеть – это трехмерная сеть, в которой третий индекс может принимать лишь одно значение ноль. Существующие в программе MCU отличия этих двух типов сетей не для данной работы не существенны.

Сеть имеет диапазон явно вводимых индексов в виде целочисленного параллелепипеда – $\{(i,j,k)\} \mid 0 \le i \le N_i,\ 0 \le j \le N_j,\ 0 \le k \le N_k\ \}$. Имеется картограмма Map(0:$N_i$, 0:$N_j$, 0:$N_k$,), в которой каждому набору явно вводимых индексов соответствует имя прототипа ячейки, занимающей данную позицию. Кроме того, сеть окружена необходимым числом гомогенных ячеек, служащих для полного заполнения объема несущей сеть зоны [9,10,25].

Таким образом, в сети каждой зоне соответствует номер (имя) зоны соответствующего прототипа и индексы данной ячейки. В случае иерархического вложения сетей возникает иерархия набора индексов, например, для 2-го уровне вложения – это $\{(i_1,j_1,k_1), (i_2,j_2,k_{22})\}$, где первая тройка определяет позицию ячейки сети, вложенной в основную геометрию, а вторая тройка – ячейку сети, вложенную в зону ячейки из предыдущего уровня.

Будем назвать подобную совокупность троек индексов ***полным индексом***, а число троек в нем его длиной, обозначаемую как ДПИ (***длина полного индекса***).

Даже в в двухуровневом случае возникают разные значения ДПИ зон – у зон основной геометрии индексов нет, и ДПИ = 0, у зон ячеек сети ДПИ = 1. Разные значения ДПИ характерны для вложенных сетей, например при описании сборки PROTEUS с помощью регулярных решеток топливных ячеек для зоны внутреннего топливного шарика или любого слоя TRISO ДПИ = 2 – {<индексы шарового ТВЭЛа>,<индексы микрочастицы>}. Для оболочки шарового ТВЭЛа ДПИ = 1.

При реализации иерархии сетей для программы MCU пришлось решить 2 проблемы.

### 3.2 Проблемы хранения цепочек локальных координат для иерархии сетей. (Реализация очередей с элементами переменной длины в виде разветвленных списков)

Одним из основных программных блоков пакета MCU является так называемый «банкир». Этот блок поддерживает ведение очередей с различными приоритетами частиц, ожидающих моделирования.

Наличие очередей вытекает из самой сущности метода Монте-Карло [34] – прямого моделирования физических процессов для частиц различных типов с разными

механизмами возникновения новых частиц. Без наличия очередей невозможно моделировать процессы, в которых частица по мере прохождения своей истории вызывает появление нескольких новых частиц. Важную роль в возникновении очередей играет использование метода поколений для решения условно-критических задач, а также методы не аналогового моделирования, связанные с расщеплением частиц (расщепление на поверхностях, весовое окно и т.п.). Также наличие очередей создает удобства для различных нестандартных методов, например анализа отклика на импульсный источник.

В простейшем случае член очереди мог бы содержать лишь тип моделируемой частицы и вектор ее координат в расширенном фазовом пространстве - {typ, $r,E,\Omega,t$}, где

- typ - тип частицы (нейтрон, фотон, электрон, …):
- $r$ –пространственные координаты;
- $E$ - энергия;
- $\Omega$ - направление полета;
- $t$ - время.

Использование не аналогового моделирования вызывает введение дополнительной переменной $w$ – статистический вес [34].

При таком составе члена очереди его выборка потребует провести достаточно времяемкие вычисления для получения информации, уже имевшейся в момент поступления члена в очередь.

Типичным примером такой информации служит номер геометрической зоны, содержащий данную точку. В процессе моделирования движения частицы при пересечении границы зоны номер следующей вычисляется без особых трудностей с помощью списков примыкающих зон [25]. Однако, определить номер зоны по произвольной точке пространства задача достаточно трудоемкая.

При отсутствии дополнительной информации для определения зоны основной геометрии, содержащей данную точку, необходимо последовательно проверять все зоны основной геометрии, пока не обнаружится искомая. Число этих зон во многих расчетах достигает сотен тысяч. Если зона содержит сеть, то такой же перебор придется делать для зон ячейки, содержащей точку.

Сходная проблема возникает при взаимодействии модуля источника, генерирующего фазовые координаты частиц, и геометрического модуля, который по этим координатам определяет, в какой зоне лежит точка, учитывая иерархию, если она присутствует. В случае решения однородной задачи источник срабатывает лишь при формировании нулевого поколения, так что трудоемкость поиска зоны , содержащей точку, очень слабо влияет на время решения задачи. При решении неоднородной задачи

источник часто бывает локализован в нескольких зонах, и для него строится список, уже встречавшихся зон, аналогичный списку соседей.

При многоуровневой структуре следует сохранять не один номер, а последовательность номеров, каждый член последовательности соответствует зоне соответствующего уровня. Например, в случае представления микрочастиц с помощью регулярной решетки для реактора HT-MGR это может выглядеть так:

- <номер активной зоны в основной геометрии> - уровень 0;
- <номер зоны ТВС, содержащей сеть компактов и труб> - уровень 1;
- <номер зоны ячейки, содержащей топливный компакт> - уровень 2;
- <номер зоны топливного шарика в ячейке микротоплива> - уровень 3.

Помимо этого в данном примере для идентификации положения частицы требуется знать полный индекс, состоящий из 12 целых чисел. Принципиальным является, то что хотя бы часть сетей оказываются реально трехмерными, ни один из индексов не принимает единственное значение.

Расчет движения в ячейке сети ведется в локальных координатах той ячейки. Однако, так как необходимо иметь возможность не полных ячеек, перерезанных границей текущей зоны, требуется контролировать пересечения границ зон предыдущих уровней иерархии и делать геометрические вычисления в соответствующих системах координат.

Необходимость отслеживать координаты точки в системе 0-го уровня – основной системе координат – связана также с их использованием используются не только геометрическим модулем, но и другими, например, для регистрации событий.

Информация о положении точки в локальной системе любого уровня вместе с индексами ячеек формально достаточна для определения координат во всех системах, но то требует больших расходов времени, не говоря уже о внесении новых ошибок округления. Потому имеет смысл сохранять координаты начала отрезка свободного полета во всех системах координат. (Напомним, что в программах метода Монте-Карло удобно во внутренних вычислениях геометрического модуля иметь текущие координаты точки $\boldsymbol{x}$ в виде $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x_0} + \Omega s$, где $\boldsymbol{x_0}$ - координаты начала отрезка свободного полета, а $s$ – пройденное расстояние).

Таким образом, кроме вектора координат в расширенном фазовом пространстве член очереди должен содержать дополнительную информацию, объем которой может существенно изменяться в зависимости от положения точки в иерархической геометрической структуре, т.е. нужны очереди с членами переменной длины.

Существует еще несколько причин, не связанных с расчетами высокотемпературных реакторов, стимулирующих создание очередей с членами

переменной длины. Для реализации, например, коррелированных траекторий требуется вместе с частицей, подлежащей моделированию, сохранять состояние генератора псевдослучайных чисел. Объем этой информации зависит от генератора, например, для генератора MARSALA составляет около 400 байт.

При реализации очередей с переменными элементами длины было не выгодно использовать стандартные операции с управляемой памятью, так как постоянные запросы функций манипуляций с ней вызвали бы изоишнии расходы времени. Вместо этого была использована блочная структура. Весь массив памяти, отведены под банк сосоит из блоков стандартной длины. Сам этот массив лежит в управляемой памяти и может быть расширен в случае переполнения, однако, это происходит сравнительно редко. Одинаковость блоков позволяет просто производить выделение памяти и возврат ее с помощью стандартной техники списка свободного места.

Элемент очереди состоит из одного или нескольких блоков. Каждый из них содержит ссылку на следующий блок данного элемента. В последнем блоке элемента эта ссылка пуста. Головной блок элемента содержит также паспорт блока, состоящий из ссылки на следующий элемент (т.е. головной блок), ссылку на предыдущий элемент, длину действительного и длину целочисленного массивов элемента. В последнем блоке элемента часть его может не быть использована, но не представляет труда так подобрать длину блока, чтобы этот расход памяти не был обременителен. Таким образом, очередь представлет двойной список: список головных блоков, к каждому из которых может быть прицеплен список дополнительных блоков.

### 3.3 Проблема атрибутов зон. Картограммы атрибутов и необходимость ссылки на картограмму любого вышестоящего уровня, прямые и относительные указатели уровня картограммы

Разбиение на геометрические зоны, независимо от применения иерархий предполагает использование ступенчатых функций на этих областях пространства. Простейшим примером являются номера материалов различных деталей конструкции, которые, в свою очередь, определяют зависимости сечений от энергии (предполагается возможность замены непрерывного изменения плотности и температуры ступенчатыми функциями).

Основными результатами расчета переноса нейтронов методом Монте-Карло являются оценки интегралов потоков и скоростей реакций по заданным пользователем областям пространства (с учетом также разбиения шкалы энергии по группам). Эти области являются объединением геометрических зон, таким образом, разбиению пространства на области интегрирования соответствует целочисленная функция номеров

этих областей, постоянная на зоне. Может существовать несколько независимых систем разбиения, т.е. целочисленных ступенчатых функций. В программе MCU есть две таких системы: регистрационные зоны и регистрационные объекты. Номера их называются регистрационными и объектными номерами [9,10,32]. Очень часто различные группы одинаковых деталей имеют разные номера для получения пространственных распределений потока и скоростей ядерных реакций.

Значения подобных целочисленных функций, постоянных на зонах будем называть атрибутами зон, они могут пониматься как отображения множества геометрических зон в множество натуральных чисел.

Необходима возможность удобного назначения атрибутов в иерархических системах, причем это назначение должно мочь зависеть от индексов в сетях. Под элементом множества зон следует понимать множество областей, на которые разбито пространство, а не множество прототипов зон. Например, две одинаковых полости трубок теплоносителя даже в одной ТВС реактора HT-MGR в этой трактовке разные геометрические зоны.

Эта возможность является принципиально необходимой, так как значения физических величин (например, скорости деления) могут существенно различаться в одинаковых деталях, и выявление подобных неравномерностей зачатую является основной целью расчета.

Номера материалов также могут зависеть от индекса ячейки. Простейшим примером этого может служить различная температура и плотность теплоносителя в разных каналах. Следующий пример – это загрузка с выгоревшим топливом, а выгорание зависит от положения ТВЭЛа.

В предыдущих версиях программы MCU с одним уровнем вложенности сетей эта проблема решалась путем введения условных номеров атрибутов и картограмм [9,10,32]. Каждая картограмма являлась целочисленным массивом размерности 2 или 3 в зависимости от размерности сети. Каждой явно допустимой совокупности индексов соответствовал элемент массива. Для условного атрибута с номером *m* из *m*-ой картограммы брался атрибут с индексами, соответствовавшими индексам текущей ячейки, в качестве реального значения этого атрибута. Фактически это отображение

$$I_a \times I_{net} \to \mathbf{N}$$

где $I_a$ – это множество условных атрибутов данного типа (например, условные регистрационные номера, условные регистрационные объекты и т.д.) $I_{net}$ – множество явно задаваемых индексов, а $\mathbf{N}$ – натуральные числа.

Даже в этой очень простой схеме возможны некоторые проблемы: сеть состоит из ячеек с разными прототипами, в них используются разные наборы условных атрибутов. Для того, чтобы отображение работало как можно быстрее, оно реализовано с помощью одного трех- или четырехмерного массива, т.е. множество $I_\alpha$ включает все возможные условные атрибуты всех используемых в сети прототипов ячеек. Так что большое число элементов совокупного массива картограмм могло никогда не использоваться.

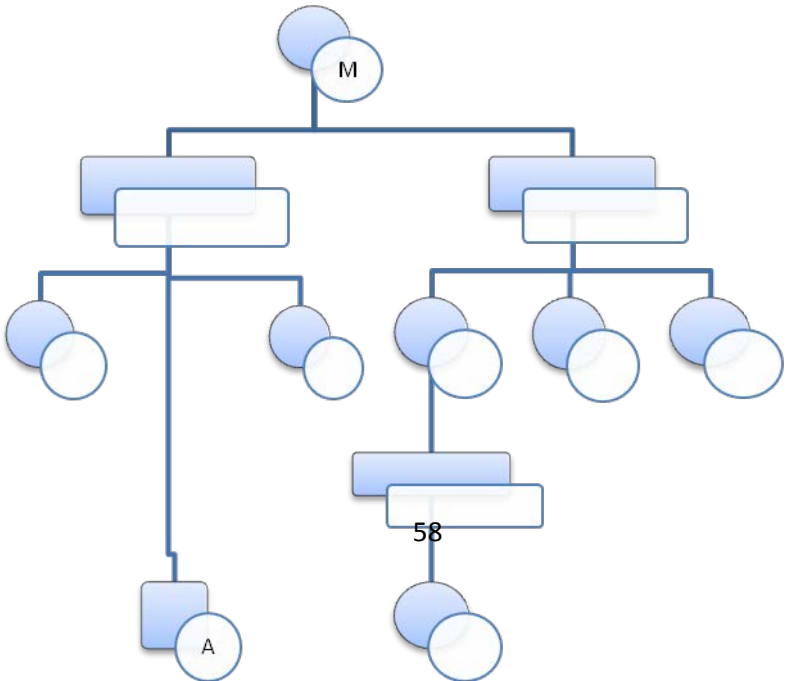
Рассмотрим несколько искусственный пример. Сеть состоит из двух типов ячеек A и B, причем B занимает лишь одну позицию. В прототипе ячейки A вообще нет условных атрибутов, а в прототипе ячейки B имеется 10 разных условных атрибутов. В результате требуется иметь 10 картограмм, хотя в каждой из них используется только одна позиция.

При многих уровнях вложения сетей проблема существенно сложнее, так как отображение может зависеть от любой из компонент совокупного индекса.

Возникающая проблема связана не с реализацией такой многоуровневой структуры – использованию указателей [35] или индексов одномерных массивов, играющих роль указателей, делает это чисто технической работой (Использование одномерных массивов, содержащих индексы в качестве указателей, используется, например, в формате ACE библиотеки ENDF/B [36])

Однако, для пользователя руками задать такую сложную структуру прототипов ячеек, сетей и картограмм может оказаться весьма обременительно. Для упрощения структуры ввода при реализации были сделаны описанные ниже ограничения. Анализ существующих расчетов по программе MCU пока не выявил, где эти ограничения были бы обременительны для пользователя.

Соотношения между сетями и прототипами ячеек можно представить в виде двудольного ориентированного графа [37,38]: вершины – это сети и прототипы ячеек. Если в сети используется прототип, то от сети к нему идет дуга. Если в прототипе ячейки



описана сеть, то от прототипа к сети идет дуга. Очевидно, что граф сетей и прототипов должен быть ациклическим как ориентированный граф, иначе геометрия становится бессмысленной. В графе есть выделенная вершина, соответствующая основной геометрии. Это есть единственная вершина (по смыслу построения графа) в которую не входит никакая дуга. Из последних двух утверждений следует, что граф связный. Это просто доказать, но ясно и по смыслу – каждый объект как-то в результате вложен в основную геометрию.

С учетом лишь этих ограничений можно было бы рассматривать геометрию, в которой существуют пути разной длины от выделенной вершины до некоторой иной вершины. Например, на следующем рисунке один путь от основной геометрии M до прототипа ячейки A имеет длину два, а другой путь – длину 4. Само по себе это не бессмысленно в иерархических геометрических системах. Например, одинаковые болты могут использоваться как в основной конструкции, так и в повторяющихся узлах.

Однако, сети соответствуют не просто повторяющимся элементам, а регулярным структурам примыкающих один к другому элементов одной формы, заполняющих часть пространства без щелей. Поэтому для использования сетей подобный случай не характерен (болт сам по себе не может быть прототипом ячейки). С другой стороны возможность различных длин путей от выделенной вершины до объекта создает дополнительные трудности для описанной ниже генерации атрибутов зон.

В созданной реализации требуется, чтобы длина любого пути от основной геометрии до данного объекта одинакова. Подобное ограничение вместе с двудолностью графа позволяет ввести уровни объектов по следующему правилу.

Основная геометрия имеет уровень 0. Сети, которые она непосредственно содержит, имеют также уровень 0.

Сети уровня 0 состоят из ячеек, прототипы которых имеют уровень 1. И так далее: сети уровня m состоят из ячеек, прототипы которых имеют уровень m+1; прототип ячейки уровня m может содержать сети уровня m. Максимальный уровень прототипа ячейки всегда на 1 больше максимального уровня сети. Отметим, что более жесткое ограничение, требующее, чтобы граф был обязательно деревом, привело бы к излишнему дублированию объектов. Например, в критической сборке LR0 MOKUP-3 имеются кассеты с разными расположениями кластерных трубок. При описании этой сборки в виде двухуровневой иерархии сетей, разные с такой точки зрения кассеты соответствовали бы разным прототипам ячеек первого уровня, но прототипы второго уровня ячеек ТВЭЛов и кластерных трубок использовались в обеих сетях первого уровня.

При требованию к графу быть деревом потребовались бы несколько одинаковых прототипа ТВЭЛов, для каждого типа кассет свой. Аналогично возникло бы дублирование кластерных трубок.

При работе с графом сетей и прототипов ячеек удобнее использовать матрицу смежности, а матрицу не инциндентности или список ребер [37], что связано с двудольностью этого графа. Поэтому при наличии M сетей и N прототипов ячеек вместо квадратной битовой матрицы смежности (M+N)*(M+N) достаточно иметь две прямоугольные матрицы размерности M*N и N*M. Существенным является то, что число прототипов ячеек N, как правило, очень невелико. (Ранее, когда отсутствовали картограммы материалов, некоторые генераторы исходных данных, например KDMK [39], создавали большое число прототипов ячеек, отличавшихся номерами материалов из-за различного выгорания, температуры топлива или плотности теплоносителя. При использовании созданных опций такая ситуация мало вероятна.

Число сетей M может быть и не малым, если используются решетки, элементы которых содержат сети. Типичный случай – используемый сейчас описания реакторов типа ВВЭР или соответствующих им критических сборок. Использование нескольких уровней может сильно сократить их число.

Таким образом, прямоугольные матрицы смежности не требуют для своего хранения больших объемов памяти.

В описанных далее алгоритмах матрицы смежности используются для продвижения по дугам вперед. В случае разреженных матриц для этого удобно представлять каждую строку матрицы смежности в виде списка позиций, в которых стоит 1, а не 0. Алгоритм получения матрицы дуг от сетей к прототипам легко позволяет это сделать, эта матрица заполняются по строкам, Однако матрица от прототипов к сетям заполняются более сложным образом, и она хранится в виде битовой матрицы. В созданной реализации не потребовались даже отсутствующие в Фортране95 операции с битовыми массивами, для этой матрицы используются массивы типа INTEGER(1).

### Значения указателей атрибутов

Так как память ЭВМ в настоящее время является достаточно доступным ресурсом , хранение во время моделирования траекторий многочисленных четырехмерных массивов-картограмм не является затруднительным. В настоящем разделе обсуждаются не проблемы алгоритмов моделирования, когда информация уже приведена во внутреннее

представление, а вопрос, как пользователь соответствие указателей атрибутов их истинным значениям.

Существуют два способа назначения зонам в сетях их атрибутов.

*Картограммы атрибутов.*

Способ картограмм предполагает, что пользователь явно определяет атрибут для каждой зоны. Способ является развитием описанного выше применения картограмм в программе MCU для одноуровневых сетей.

При описании зоны в прототипе ячейки пользователь определяет указатель регистрационного номера (в существующих версиях MCU используется термин уловный указатель), в следующей форме

[<уровень>]Z=<номер>

где <уровень> – целое число, а <номер> – натуральное число. В дальнейшем конструкцию Z<уровень> для регистрационных зон и 0<уровень> для регистрационных объектов будем называть заголовком указателя. При отсутствии конструкции <уровень> указатель есть прямое задание регистрационного номера, равное <номер>, оно не изменяется, где бы ячейка не использовалась. (По соображениям преемственности конструкция iZ эквивалентна конструкции 0Z и соответственно конструкция iO эквивалентна конструкции 0O ). В дальнейшем в случае прямого задания номера атрибута в зоне или картограмме будем говорить об абсолютном номере.

Каждая сеть может быть снабжена набором картограмм регистрационных номеров, представляющих из себя четырехмерный массив.

PN(Mp,0:Ni-1,0:Nj-1,0:Nk-1)

где Mp – максимальный номер в указателях ссылающихся на эту картограмму, а множество явно задаваемых индексов есть $\{0\le i<Ni, 0\le j<Nj, 0\le k<Nk\}$. Элементом этого массива служат целые числа одного из двух видов: натуральное число или $-(2^{24}+y*2^{16}+n)$, где y имеет смысл уровня указателя атрибута, а n его номера. При вводе данных пользователь может задавать элемент картограммы не виде отрицательного числа, а в форме <уровень>:<номер>.

Во время моделирования траекторий для определения текущего значения атрибута используется следующий алгоритм. Пусть ячейка лежит в следующем пути по иерархии

$\{Main=Ce\ell\ell_0\to N\ell t_0\to Ce\ell\ell_1\to N\ell t_1\to Ce\ell\ell_2\to N\ell t_3\to\ldots\to Ce\ell\ell_{\ell-1}\to N\ell t_{\ell-1}\to Ce\ell\ell_\ell\}$

где $Ce\ell\ell_\ell$ – прототип нашей ячейки. Пусть далее ячейка имеет полный индекс

$\{(i_m,j_m,k_m\},m=0,\ldots,\ell-1\}$

Если в зоне ячейки указатель регистрационного атрибута имеет форму $\eta Z=\nu$ и $\eta$ не отрицательно, то число $\eta$ должно не превосходить глубину вложения последней сети $\ell-1$. Если указатель регистрационного атрибута имеет вид $-\zeta Z=\nu$, $\zeta>0$, то число $\zeta$ не должно превосходить глубины вложения $\ell$, а картограмма берется из сети $N\ell t_\eta$, где $\eta=\ell-\zeta$. Кроме того число $\nu$ не должно превосходить числа картограмм регистрационных указателей для сети $N\ell t_\eta$ из указанного пути. Оба эти неравенства гарантированы проверкой, осуществляемой при вводе данных.

Из набора картограмм сети $N\ell t_\eta$ выбирается элемент $PN(\nu,i\nu,j\nu,k\nu)$

Если это положительное число, то оно и служит регистрационным номером.

Если же это отрицательное число $-(2^{24}+y*2^{16}+n)$ то величина $\eta$ заменяется на y, величина $\nu$ на n и процедура замены повторяется.

Таким образом, указатель атрибута может при неотрицательном «уровне» определять, с какого уровня иерархии брать картограмму, что удобно при создании одним пользователем всех описаний сетей и прототипов для одной установки.

Отрицательный «уровень» дает возможность определять уровень иерархии сети относительно уровня объекта (прототипа или сети), в котором этот указатель атрибута присутствует. Это удобно, если прототип создается для использования в разных описаниях установок на разном уровне, например прототип ячейки с частями шаровых ТВЭЛов.

Способ кодирования указателей атрибутов в картограммах приводит к ограничениям:

$|\langle\text{уровень}\rangle| < 2^8$, $|\langle\text{номер}\rangle| < 2^{16}$

Однако, практически эти значения всегда много меньше указанных пределов

На вводе также проверяется допустимость y и n: $y < l$, а n не превосходит числа картограмм соответствующей сети.

Сети уровня0 в своих картограммах могут иметь лишь положительные числа.

*Автоматическое назначение атрибутов зон.*

Автоматическое назначение можно рассматривать лишь для регистрационных и объектных номеров. В случае материальных номеров оно бессмысленно, так как номер материала в описании геометрии должен совпадать с номером этого материала в описании материалов, т.е. автоматическая генерация подобных номеров не может производиться.

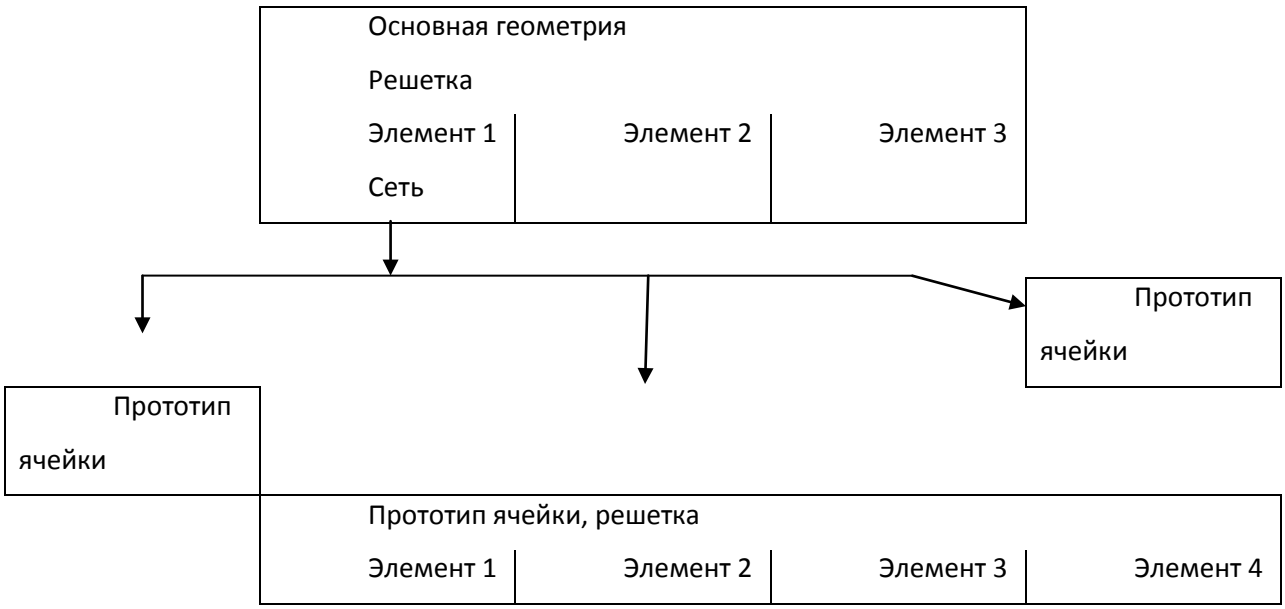
Напротив, регистрационные и объектные номера – это по существу лишь этикетки областей пространства. Главное, что от них требуется – это совпадение на зонах,

объединяемых в одну область интегрирования, и отсутствие совпадения в противном случае. Это величины номинальной шкалы [40].

Пользователю нужна лишь возможность простым способом разбить пространство на нужные ему области и узнать, какой номер получила каждая из них. Узнать их он может, например, изучая графическое представление полученной геометрии. В штатном для программы MCU визуализаторе [9,10], на экране всегда высвечиваются значения атрибутов в точке, указанной курсором.

Это позволяет автоматически генерировать конкретные значения регистрационных и объектных номеров на основании указаний пользователя о разбиении пространства, которые могут быть и не прямые. Описанное в предыдущем подразделе использование указателей атрибутов и соответствующих картограмм, хотя и не является приямым, не вызывает никакого автоматизма. В настоящее время автоматическое назначение номеров атрибутов связано только с применением конструкции Lattice.

В реализованной версии геометрического модуля Lattice могут вкладываться в ячейки сетей любого уровня. Следовательно, не прямым образом конструкция Lattice может быть вложена в другую Lattice, что иллюстрирует следующий рисунок.




Однако, из MCU-6 сохранен запрет вкладывать конструкцию Lattice непосредственно в элемент решетки. Это ограничение вызвано трудоемкостью в этом случае автоматически генерировать номера атрибутов, что будет ясно из дальнейшего.

Вложение конструкции Lattice в прототип ячейки вызывает необходимость иметь возможность автоматической генерации не только номеров атрибутов и номеров указателей атрибутов.

Под развертыванием решетки будет пониматься процесс генерации тел, зон, сетей на основании описаний решетки и прототипов ее элементов. Совокупность тел, зон, сетей, соответствующих одной позиции решетки и соответствующих, поэтому, одному прототипу называется элементом решетки.

Автоматические назначения номеров осуществляются в процессе развертывания Lattice. Сложность связана с преобразованием одной зоны прототипа элемента в набор зон, лежащих в разных элементах, иначе дело свелось бы к простой перенумерации набора имен атрибутов, заданных пользователем. Такая простая перенумерация была, в частности сделана еще в программе MCU-5 для групп материалов.

Для генерации номеров при развертывании Lattice используются ***помеченные указатели***, каждый из которых имеет следующую форму

i<БЗ><Т><БУР>=<имя>

где i – признак помеченного указателя;

<БЗ> не обязательное значение базы генерируемых номеров.

<БЗ>::=<пусто>|[<неотрицательное целое>}

<Т> – тип : регистрационные или объектные номера

Т::=Z|0

<БУР> – будущий уровень условного указателя

<БУР>::= <пусто>|<натуральное число>

<имя> – этикетка, служащая для различения помеченных указателей с одинаковыми прочими членами.

<имя>::= <натуральное число>

Не имело смысла дать возможность использовать для этого члена идентификаторы, так как крайне мало вероятно, что в одном прототипе элемента решетки возникнет больше десяти различных имен.

Помеченный указатель может лежать и в картограмме атрибутов, в этом случае он имеет другую форму —$(y*2^{16}+n)+2^{30}$, где y – значение уровня, n играет роль значения <имя>.

При развертывании Lattice в основной геометрии или прототипе ячейки, в каждом экземпляре зоны помеченный указатель преобразуется к виду

<Т><БУР>=<номер>

где <Т> и <БУР> совпадают с теми, что были в исходном помеченном указателе.

<номер> – это натуральное число.

Для зон прототипа элемента решетки, имеющих одинаковые помеченные указатели в каждом экземпляре элемента эти номера совпадают, но для разных экземпляров одной и той же зоны, номера обязательно различны.

В случае наличия конструкции <БЗ> пользователь сам берет на себя назначение номеров, по существу, автоматизма нет. При развертывании Lattice каждый элемент независимо от его прототипа имеет порядковый номер генерации $n_{gen}$, начинающийся с 1. В сгенерированной зоне <номер> получается по правилу

<номер>=<БЗ>+$n_{gen}$

В случае отсутствия члена <БЗ> работает настоящая автоматическая генерация, алгоритм которой существенно сложнее.

Под носителем решетки будем понимать то, куда вкладывается конструкция Lattice. Это может быть основная геометрия или прототип ячейки.

Результат работы идеального алгоритма генерации номеров должен был бы удовлетворять следующим правилам:

1. в одном элементе решетки зоны, имевшие в прототипе одинаковые помеченные указатели, имеют одинаковые указатели (или абсолютные номера);
2. все эти зоны имеют указатель отличный от этих зон любого другого элемента той же решетки;
3. все они имеют указатель, отличный от зон того же элемента, которые в прототипе имеют иной помеченный указатель;
4. все эти зоны имеют указатель, отличный от зоны носителя, заданной помимо данной Lattice.

Отметим, что в случае использования члена <БЗ> даже второе правило может быть нарушено, хотя <БЗ> и будут различны. Например, зоны

A X–Y# i[1020]OO =1

B U V # i[1040]O =2

в первом и 21-ом экземпляре дадут зоны с одинаковым объектным номером 1041. Пользователь, назначая базы, легко может ошибиться, когда число элементов и использование прототипов элементов в решетке будет изменяться.

В созданной программе для генерации указателей атрибутов и абсолютных номеров используются разные алгоритмы.

Алгоритм для указателей состоит в следующем.

Обозначим через $M_{XB}(T,Y_p)$ максимальное значение номера в зонах носителя решетки, в которых имеется указатель <T><БУР>=<номер>, со значением <T> равным T и <БУР> равным $Y_p$. Символы T и $Y_p$ здесь обозначают конкретные значения <T> и

<БУР>. Значение этой функции определено в любой момент фазы ввода после появления описания носителя решетки.

Пусть в прототипе элемента решетки имеются зоны с помеченным указателем $iTY_p$=<имя>, причем минимальное значение <имя> есть $M_{nm}$.

В момент начала размещения очередного элемента решетки из данного прототипа запоминается максимальное уже использованное значение номера для данных T и $Y_p$

Basa= $M_{XB}(T,Y_p)$

Номер указателя образованной зоны будет равен <имя>+ Basa.

Предположим, что в прототипе элемента решетки отсутствуют помеченные указатели с теми же значениями <T> и <БУР> и с членом <БЗ>, а также указатели атрибутов с заголовком $TY_p$. В этом случае после окончания размещения данного элемента решетки, можно гарантировать, что $M_{XB}(T,Y_p)$= Basa+ $M_{nm}$

В любом случае выполняются правила 1,2.

Правило 3 также выполнится, если во всех прототипах элементов решетки использованных в данной Lattice отсутствуют соответствующие зоны с членом <БЗ>, в противном случае они могут «наехать» на уже размещенные. Правило 4 может быть фактически нарушено еще и более сложным путем.

В носителе решетки имеется вложенная сеть, ссылающаяся на некоторый прототип ячейки K, а в ячейке K в зоне задан указатель $TY_p$ =<номер>, со значением <номер>, которое не могло быть учтено при развертывании решетки, так как ячейка в этот момент не была введена.

Указанные недостатки не играют большой роли для генерации указателей атрибутов по следующим причинам:

- номера указателей атрибутов должны быть согласованы с картограммами номеров атрибутов, поэтому их число не может быть велико и вряд ли будут использованы сложные генерации их;
- при использовании указателей атрибутов более вероятна ошибка в задании картограмм, все равно полученное распределение зон подлежит дополнительному контролю.

Поэтому был реализован вышеописанный неидеальный алгоритм. С генерацией абсолютных номеров, которых в современных описаниях реакторов бывают миллионы, так поступать нельзя.

Пользователь должен иметь гарантированную возможность создать уникальный номер.

В версиях MCU до 5-ой включительно уникальность гарантировалась отсутствием аналога конструкции <БЗ>, и отсутствием возможности вложения решетки в прототип ячейки. Все запросы на развертывание решеток стояли после ввода не только основной геометрии и всех прототипов ячеек и элементов решеток. Поэтому было достаточно все время учитывать максимальные значения номеров всех типов атрибутов.

В MCU-6 появились решетки, вложенные в прототипы ячеек, и несмотря на отсутствие члена <БЗ>, уже появилась возможность доя абсолютного номера «наехать» на сгенерированный. Правда ввиду малого использования пока возможности решетки в прототипе ячейки, это не привело к каким-либо ошибкам

В предлагаемой версии геометрического модуля для генерации гарантированно уникальных номеров атрибутов создан иной алгоритм. Он действует совершенно независимо для регистрационных и объектных номеров, поэтому будет дано описание, применительно к объектным номерам.

Достаточно естественно считать, что общее число объектных номеров меньше $2^{30}$.

Любой помеченный атрибут, вызывающий генерацию уникальных объектных номеров имеет вид iO=n, если он в описании зоны или $-(2^{30}+n)$, если он в картограмме объектных номеров. Число n здесь это <имя>. Эти формы совершенно эквивалентны. Более того, если в прототипе элемента решетки одновременно встречаются обе эти формы с одним значением n, то в одном элементе решетки они получат одинаковые значения и в зоне и в картограмме.

Конструкция iO=n может много раз участвовать в развертывании решетки и при каждом акте генерирования нового элемента решетки должен образовываться уникальный номер.

В начале работы ввода геометрического модуля обнуляются две целые величины:

$N_{0ob}$ – максимальный уже использованный объектный номер;

$N_{0ot}$ – число образованных уникальных номеров.

При появлении абсолютного объектного номера A, не важно в описании зоны или в картограмме, корректируется первая величина по правилу

$N_{0ob} = \max(N_{0ob}, A)$

При появлении конструкции iO=n или $-(2^{30}+n)$ происходит коррекция второго числа по правилу

$N_{0ot} = N_{0ot} + 1$

В результирующую картограмму записывается положительное значение $2^{31} + N_{0ot}$. В случае зоны получается конструкция $O = 2^{31} + N_{0ot}$.

После окончания работы компилятора с языка NCGSIM [32], когда все описания зон и картограммы введены, а все решетки развернуты проводится сканирование таблицы атрибутов, куда помещаются номера атрибутов, заданных в зонах, а также все картограммы. Любой объектный номер, превышающий $2^{31}$ очевидно положительный, преобразуется по правилу

$N \rightarrow N - 2^{31} + N_{0ob}$

Таким образом различные сгенерированные объектные номера остаются различными, они отличаются от всех объектных номеров, заданных как абсолютные, или полученных из помеченных указателей с членом <БЗ>. Кроме того, в множестве объектных номеров не создается новых не использованных отрезков.

Отметим, что использованный алгоритм не требует сколько-нибудь серьезных расходов машинного времени – используется один проход по таблице и картограммам.

*4. Алгоритмы проверки корректности заданного пользователем описания иерархии сетей и полноты определения значений атрибутов. Алгоритмы основаны на представлении схемы иерархии в виде двудольного графа и его матриц смежности*

В входных данных геометрического модуля может присутствовать большое количество описаний прототипов ячеек и сетей, причем нет точного порядка, по которому они перечисляются. Единственное ограничение состоит в том, что прототип должен быть описан раньше, чем его имя встретится в картограмме одной и сетей. Поэтому пользователь легко может сделать две ошибки, нарушающие вышеописанные требования:

- возникший граф ячейки/сети не будет иметь строгой структуры уровней и даже, возможно не будет ациклическим ориентированным графом;
- набор картограмм атрибутов некоторой сети не будет соответствовать множеству указателей атрибутов, использованных в ячейках, связанных с данной сетью; учитывать требуется не только указатели атрибутов в прототипах, непосредственно указываемых в основной картограмме сети, но и в прототипах или картограммах, к которым можно пройти по дугам графа, и значения которых определяются через данную сеть с помощью конструкции <уровень>.

В процедуре проверки используется требование, чтобы совокупность трехмерных картограмм одного вида атрибута (например, регистрационные номера) представляла четырехмерный массив, или, что то же самое, совокупность номеров указателей атрибутов, соответствующих картограмм (номеров картограмм) представляла целочисленный отрезок {1,2,…,L} без пропусков. Это требовании связано прежде всего с

необходимостью быстрого преобразования указателей атрибутов в их значения во время счета.

Указанное ограничение не противоречит удобству пользователя – ему нет особой нужды использовать номера указателей с пропусками. Поэтому требовании об отрезке номеров картограмм сохраняется и на уровне ввода.

Отметим, что отказ от данного требования для ввода не вызвал бы существенных изменений в изложенных ниже алгоритмах проверки корректности. Они бы свелись к замене максимального номера, определяющего отрезок, на шкалу использованных номеров. Операция максимума, возникающая при объединении отрезков, заменилась бы на побитное включающее ИЛИ.

Для описании алгоритмов используется наиболее общеизвестный язык ANSI C с комментированной каждой операцией, нумерация массивов соответствует языку C – начальный элемент массива имеет индекс 0. Приведенные тексты служат объяснению алгоритмов и не являются текстами реализованных программ.

Проверка делается в два этапа. Первый из них – это определение уровня каждого объекта, при этом проверяется ацикличность и однозначность уровней. В результате создаются два целочисленных массива уровней объектов.

YpCell(N) и YpNet(M),

где N - общее число прототипов ячеек, включая основную геометрию, а M – общее число сетей. Смысл символов N и M в данном разделе не меняется. Начальное значение этих массивов – это -1 в каждой позиции.

В момент начала работы алгоритма проверки уже созданы и заполнены массивы матриц смежности:

- CELLNET(N,M) – дуги от прототипов к сетям, это битовая (в реализации INT(1)) матрица;
- NETLinArc(M+1) и ListArcNC(NArc) - дуги от сетей к прототипам в виде упакованной матрицы смежности; величина NArc – это общее число дуг, в массиве ListArcNC дугам, идущим от сети j соответствуют элементы с индексами NETLinArc(j-1), NETLinArc(j-1)+1,…; значение этих элементов есть номера прототипов, к которым ведут дуги; в последнем элементе массива NETLinArc для удобства записано число NArc.

Алгоритм начинается с установки 0 в YpCell(0) – элемент, соответствующий основной геометрии. Устанавливается начальное значение текущего уровня TekYp = 0.

```
// цикл по уровнем TekYp
while(1) {
  // цикл по ячейкам текущего уровня
```

```
nProtwNet = 0;     /* число ссылок на сети из прототипов
                      текущего уровня */
for(j=0, j<N, j++) {
  if(YpCell[j] != TekYp) continue;
  // прототип j имеет текущий уровень
  // цикл по сетям, к которым ведут дуги из данного прототипа
  for(i=0, i<M, i++) {
    if(CELLNET[j,i] == 0) continue; // к сети I нет дуги
    nProtwNet++;                    // счет числа ссылок
    // Проверка, нет ли нарушения уровневой структуры
    if(YpNet[i] == TekYp) continue;/* на сеть уже была ссылка
         с того же уровня, что не нарушает корректности */
    if(YpNet[i] >= 0) Error(I,j);  /* на сеть была ссылка с
         иного уровня - нарушение корректности, диагностика */
    /* на данную сеть еще не ссылались, она получает уровень
       ссылающегося на нее прототипа */
    YpNet[i] = TekYp;
    /* цикл по прототипам (номера в k), к которым ведут дуги
       от сети I. В цикле m – индекс в массиве ListArcNC */
      for(m = NetLinArc[i], m < NetLinArc[i+1], m++) {
        k = ListArcNC[m];    //  номер прототипа конца дуги
        if(YpCell(k) == TekYp+1) continue; /* на прототип
            уже была ссылка с того же уровня, что не нарушает
            корректности */
        if(YpCell(k) => 0) Error(k,i,j) ; /* на прототип
          была ссылка с иного уровня – диагностика
          некорректности структуры */
    /* на прототип еще не ссылались, он получает уровень
       ссылающейся на нее сети плюс 1 */
       *YpCell[k] = TekYp+1;
      }  /* конец проверки дуг из сети i */
    }  /* конец проверки дуг из прототипа j */
  }  /* конец перебора прототипов текущего уровня TekYp */
if(nProtwNet == 0) break; //ссылок нет – это последний уровень
TekYp++;   // переход к следующему уровню
```

```
}  // конец первого этапа проверки
```

Массивы уровней полностью сформированы, произведена проверка однозначности определения уровней. Из однозначности следует отсутствие циклов в графе – иначе к узлу можно было бы пройти более длинным путем, сделав петлю.

В массиве уровней могут сохраняться отрицательные значения элементов, так как некоторые сети и прототипы ячеек были описаны, но не использованы. Подобная ситуация не должна трактоваться как ошибка, так как пользователь, возможно, производит расчет серии вариантов, причем в одних вариантах некоторый прототип ячейки или сеть используются, а в других – нет. Обязательное их удаление из исходных данных потребует от пользователя дополнительной работы и, вероятно, вызовет появление связанных с ней ошибок.

В конце работы первого этапа проверки значение переменная TekYp равно максимальному значению уровней прототипов ячеек, а максимальный уровень сетей равен TekYp. Этот максимальный уровень прототипов запоминается в переменной mxYC.

В настоящее время часто производятся расчеты с сотнями сетей и большим количеством прототипов ячеек. Введение иерархии сетей не может привести к изменению этой ситуации – по крайней мере останутся старые варианты.

Поэтому, там где это не требует существенных программных разработок осуществлялась оптимизация затрат времени. С этой целью перед вторым этапом проверки осуществляется следующее.

Во временной памяти создается массив yIndCl[N], заполненный последовательными числами 0, 1, … , N-1. Затем производится совместное упорядочение массивов yPCell и yIndCl по значениям элементов первого массива. В результате в массиве yIndCl в начале идут номера не использованных прототипов, а в соответствующих позициях yPCell стоят -1; затем идет номер элемента массив yPCell, соответствующего основной геометрии, в нем стоит число 0. Далее номера прототипов ячеек первого уровня, в них в массиве yPCell стоят 1, и так далее.

Аналогично создается массив yIndNt[M], заполняется 0, 1, … и упорядочивается совместно с массивом yPNet по значениям yPNet. В результате получаются списки прототипов и сетей в порядке их уровней.

Во втором этапе проверки используется то, что в процессе ввода описаний прототипов ячеек и сетей для определяются два массива по видам атрибутов:

- MpY[m] – максимальное значение положительных значений конструкции <уровень> для атрибута вида m;

- MnY[m] – максимальное значение абсолютных значений отрицательных конструкций <уровень> для атрибута вида m.

Должны быть выполнены условия: MpY[m] <= mxYP[m], MnY[m] <= mxYP[m], однако, к моменту окончания ввода прототипов значение mxYP[m] еще не определено.

В управляемой памяти создаются два массива.

Массив bYkAp[MpY+1,N,NTA], где N – общее число прототипов, NTA – число видов атрибутов, равное для программы MCU трем, соответствует указателям с неотрицательной конструкцией <уровень>. Величина элемента bYkAp[iy,jc,ka] означает максимальное значение конструкции <номер> в указателях атрибутов вида ka, лежащих в прототипе ячейки номер jc и имеющих значение конструкции <уровень> iy.

Массив bYkAn[MpY,N,NTA], соответствует указателям с отрицательной конструкцией <уровень>. Величина элемента bYkAn[iy,jc,ka] означает максимальное значение конструкции <номер> в указателях атрибутов вида ka, лежащих в прототипе ячейки номер jc и имеющих значение конструкции <уровень> -iy-1.

Оба этих массива могут расширяться в процессе ввода.

Число картограмм атрибута ka в сети должно быть не меньше, чем любой элемент в указанных массивах, который относится к данной сети прямо или косвенно.

Для упрощения описания сделаем несколько предположений, которые отличны от реализованных алгоритмов несущественными деталями интерфейсовю

Для сети номер jn значение функции NKap(jn,ka) есть число картограмм для атрибута вида ka.

Значение функции Dim1Net(jn) есть число всех явно задаваемых индексов.

Значение функции AtpNet(in,jn,ka,ind) равно содержимому элемента картограммы номер in атрибутов вида ka сети номер jn для одномерного индекса ind. Ясно, что, если явно описанные трехмерные индексы сети описаны неравенствами

$0 \le i \le N_i$, $0 \le j \le N_j$, $0 \le k \le N_k$,

то индекс (i,j,k) переходит в одномерный индекс

$ind = k + (N_k + 1)*j + (N_k + 1)*(N_j + 1)*i$

если используется построчная запись, как в языках C и PASCAL, или , наоборот,

$ind = i + (N_i + 1)*j + (N_k + 1)*(N_j + 1)*k$

как в языке FORTRAN.

В процессе второго этапа алгоритма проверки формируются значения элементов двух трехмерных целочисленных массивов: gmxYpCl[MxYP+1,N,NTA] и gmxYpNt[MxYP,M,NTA]. К моменту начала второго этапа проверки значения всех

размерностей уже определены, и массивы могут быть сразу размещены в управляемой памяти без дальнейшего расширения. Начальные значения элементов массвов -1.

По окончании проверки значение элемента gmxYpCl[ny,jc,ka] соответствует числу картограмм на уровне ny атрибута вида ka, необходимых для прототипа ячейки jc с учетом сетей и прототипов ячеек, которым можно пройти по дугам от данного прототипа ячейки.

По окончании проверки значение элемента gmxYpNt [ny,jn,ka] соответствует числу картограмм на уровне ny атрибута вида ka, необходимых для сети jn с учетом сетей и прототипов ячеек, которым можно пройти по дугам от данной сети.

Алгоритм можно описать следующей схемой.

```
/* Заполнение массива gmxYpCl для максимального номера уровня MxYP из
массвов bYkAp и bYkAn. В прототипах ячеек максимального уровня сетей не содержится.
//
        joc = n-1;
        while (YpCell[joc] == mxYP) {
          jc = yIndcl[joc];
          for(ka=0, ka<NTA, ka++) {
            for(iy=0, iy<MpY, iy++) gmxYpCl[iy,jc,ka] = bYkAp[iy,jc,ka];
            for(iy=0, iy<MnY, iy++) {
              if(bYkAn[iy,jcka] <0) continue;
              iz = mxYP-iy-1;     // уровень, который указывается относительно текущего
        //   Если указывается несуществующий уровень, делается диагностика
              if(iz < 0) nrgs_Error(iy,jc,ka);
        /*     Результат в gmxYpCl[iz,jc,ka] объединяет (максимум для отрезков) чисел для
прямых
               и относительных ссылок */
              gmxYpCl[iz,jc,ka] = max(bYkAp[gmxYpCl[iz,jc,ka], if(bYkAn[iy,jcka]);
            }
          }
          joc--;
        }
        /* В данный момент индекс joc указывает на номер индекс последнего прототипа
ячейки с
           уровнем, на единицу меньшим максммального, т. е. на уровень, для которого
будут
```

сейчас заполняться массивы. Это верно для каждого прохода следующего цикла */

```
//-------  Цикл по уровням снизу вверх -------
jon = M-1;
teky = MxYP        // текущий уровень до начала цикла
while(1) {
  teky--;
  // цикл по сетям текущего уровня
  while(jon >=0 && YpNet(jon) == teky) {
    jn = yIndNt[jon];
    nDim = Dim1Net(jn)        // размер данной сети
   //  цикл по прототипам ячеек, к которым ведут дуги из данной сети
    for(m = NetLinArc[jn], m < NetLinArc[jn+1], m++) {
      jd = ListArcNC[m];
      // цикл по видам атрибутов
      for(ka = 0, ka<NTA, ka++) {
        // хватает ли в данной сети картограмм
        if(gmxYhCl(teky,jd,ka] > NKap(jn,ka))  nrgs_Error(teky,jn,jd,ka);
        /* объединение требований ячеек данной сети к наличию картограмм на
           вышестоящих уровнях в массиве gmxYpCn */
        for(iy=0, iy < teky, iy++)
            gmxYpCn[iy,jn,ka] = max(gmxYpCn[iy,jn,ka], gmxYpCl[iy,jd,ka]);
      }
    }
    /* добавление требований данной сети к наличию картограмм на вышестоящих уровнях
        в массиве gmxYpCn из-за содержимого ее картограмм атрибутов *.
    for (ka=0, ka<NTA; ka++) {
      nKp = NKAP(jn,ka):
      /* перебор картограмм атрибутов вида ka и учет содержащихся там указателей
         атрибутов */
      for(iyk=0, iyk<nKp, iyk++) {
        for(ie=0,ie<nDim, ie++) {
            atp = atpNet(iyk,jn,ka,ie);
            if(atp < 2^16) continue;
```

```
        // обработка указателя атрибута из картограмм
        mh = (int) atp/2^16;
        numer = atp – mh*2^16;
        iy = mh-256;
        if(iy < 0) iy = teky+iy;
        if(iy<0 || iy >= teky) nrgs_Error(iy,jn,ka);
        gmxYpCn[iy,jn,ka] = max(gmxYpCn[iy,jn,ka], numer);
      }          // конец перебора по элементам картограммы
    }          // конец перебора по номерам картограмм
  }
  jon--;
}          // конец сетей текущего уровня
// Если это уже сети нулевого уровня, проверка завершена
 if(teky == 0) break;
// Формировка требований к числу картограмм от ячеек текущего уровня.
 while(YpCell[joc] == tekyp) {
  jc = yIndCl[joc];
  // цикл по видам атрибутов
  for(ka=0, ka<NTA, ka++) {
    if(MpY[ka] >=tekyp) nrgs_Error(-1,jc,ka);
    if(MnY[ka] > tekyp) nrgs_Error(-2,jc,ka);
    // Учет прямых указателей атрибутов в зонах прототипа ячейки
    for(iy=0,  iy<MpY, iy++)
        gmxYpCl[iy,jc,ka] = max(gmxYpCl[iy,jc,ka],bYkAp[iy,ic,ka];
    // Учет относительных указателей атрибутов в зонах прототипа ячейки
    for(iy=0,  iy<MnY, iy++) {
      if(bYkAn[iy,jc,ka} < 0) continue;
      iz – tekyp-iy-1;
     gmxYpCl[iz,jc,ka] = max(gmxYpCl[iz,jc,ka],bYkAn[iy,ic,ka];
    }
    // учет требований вложенных сетей
    m =jon+1;
    while(m<N && yPNet[m] == tekyp) {
     jn = yIndNt[m];
     if(CELLNET[jn,jc] == 0) continue;
```

```
        // Это вложенная сеть
        for(iy=0, iy<tekyp, iy++)
            gmxYpCl[iz,jc,ka] = max(gmxYpCl[iz,jc,ka],gmxYpCn[iy,jn,ka]);
        m++
      }
    }                                    // конец цикла по видам атрибутов
  }
  tekyp--;
}
```

Из приведенного алгоритма виден смысл предварительного упорядочения по уровням в массивах yPCell, yPNet. Переборы по прототипам атрибутов и сетям находятся во внутренних циклах, а упорядочение позволяет перебирать лишь объекты нужного уровня. Это еще одна иллюстрация эффективности упорядочения, отмеченная Д Кнутом [41].

Алгоритм проверки достаточно громоздок, однако, он работает только в фазе ввода данных расчета методом Монте-Карло, для которого ввод – относительно короткая операция.

Имеется очевидная возможность распараллеливания второго этапа алгоритма проверки по видам атрибутов. Так как в программе MCU в настоящее время имеется лишь 3 вида их, эта возможность не была реализована.

Иерархия сетей была использована для описания стендов «АСТРА» и «PROTEUS». Она может использоваться не только для высокотемпературных реакторов, но и для, например, реакторов типа ВВЭР или ПВР. В то же время конструкция канальных реакторов не так хорошо для этого подходит. Описать 18 твэлов ректора топливного каналаРБМК в виде сети сложно, так как они не укладываются в структуру сдвиговой решетки.

### 3.4 Применение многоуровневой иерархии к модификации алгоритма CORN

Наличие иерархии вложенных сетей и произвольности длины элемента очереди частиц создало основу для указанной в п. 1.7. модификации алгоритма CORN, учитывающей конечность размера зерен. Эта модель предусматривает возможность появления зерен, перерезанных границами зоны, содержащей микротопливо (это есть приближение расчетного метода, в действительности топливные частицы не разрушаются, и это есть одно из самых ценных их свойств). Старая реализация алгоритма была мало

приспособлена к такой возможности. Наличие иерархии локальных систем координат делает эту проблему легко разрешимой. Кроме того автоматически появляется возможность иметь внутри зерна структуру, например, сферических слоев.

Введено два понятия: специальный прототип ячейки, изображающий топливную частицу – зерно; специальная сеть, изображающая микротопливо.

Контейнер специального прототипа ячейки всегда есть шар. Его внутренняя геометрия, материальный состав и прочие атрибуты зон описаны стандартными для прототипов ячеек средствами. Единственным ограничением является невозможность содержать внутренние сети.

Обычные сети не могут ссылаться в своих картограммах на с специальный прототип ячейки.

Зона носитель специальной сети, т.е. зона содержащая микротопливо, как и в реализации старого алгоритма в качестве материала содержит материал матрицы.

Специальная сеть имеет единичную размерность по каждому из трех индексов, т.е. все ее картограммы состоят из лишь одного элемента. Она не имеет корневого вектора, но в своем заголовке содержит эффективную плотность зерен микротоплива $N_{\mathrm{k}}$. Картограмма имен прототипов ячеек [10] может содержать только имя одного из специальных контейнеров.

При попадании нейтрона в носитель специальной сети по тем же правилам, что в обычном алгоритме CORN (см п.1.3.) по радиусу зерна и эффективной плотности вычисляется эффективное макросечение и условная вероятность входа в зерно при условии столкновения.

*При возникновении события входа* в зерно по обычным правилам пункта 1.3. вычисляются координаты положения центра зерна, т.е. координаты вектора сдвига при переходе от локальных координат зерна к координатам зоны-носителя. Затем работает стандартный алгоритм входа в сеть, с возникновение нового уровня локальных координат и расстояния до границы зоны-носителя. Координаты центра зерна сохраняются в массиве последовательности локальных координат непосредственно за координатами внутри зерна.

Рассмотрим, как реализуются при этом различные события в истории нейтрона.

*При столкновении* осуществляется стандартная для блужданий нейтрона внутри ячейки сети процедура – все координаты в последовательности, от глобальных до текущих, корректируются на пройденный до столкновения путь. Координаты центра зерна не корректируются, но длина действительного массива их учитывает, так что при

запаковке, они сохраняются. В случае поглощения нейтрона и рождения вторичных частиц весь запакованный массив записывается в очередь вторичных частиц.

*При выходе нейтрона на границу зоны, содержащей микротопливо,* или зоны носителя предыдущего уровня срабатывает стандартный для иерархии сетей процесс подъема по иерархии геометрий, также включающий корректировку на пройденный до столкновения путь.

*При новом запуске геометрического модуля* после столкновения или после выборки из очереди частиц, ожидающих моделирование, срабатывает стандартный для иерархии сетей процесс пересчета расстояний до границ носителей. Единственная нестандартность состоит в том, что в распаковке участвует и массив координат центра зерна.

*При достижении границы сферического контейнера специальной ячейки* производится корректировка всей последовательности координат на пройденный до столкновения путь и единственное не стандартное для сетей действие – немедленный переход на предыдущий уровень, т.е. в матрицу микротоплива.

Таким образом, модифицированный алгоритм CORN почти не требует введения функций помимо используемых для иерархии обычных сетей.

# Глава 4 Расчеты с источниками D+T нейтронов (термоядерные источники нейтронов)

## 4.1 Модификация физического модуля MCU для возможности регистрации скоростей ряда пороговых реакций.

Интенсивные потоки высокоэнергетических нейтронов могут найти применение в технологиях пере работки ядерных отходов, получения топлива для ядерных реакторов путём трансмутации, а также, исследования свойств материалов. Источниками нейтронов могут служить ядерные ректоры, установки импульсного термоядерного синтеза, установки стационарного термоядерного синтеза, ускорители заряжённых частиц [44].

Ядерные реакторы не могут дать нейтроны высоких энергий (более 5 МэВ). Апробированные технологии, ускорителей заряженных частиц и импульсного термоядерного синтеза, теоретически, могут достичь трансмутации отходов ядерной промышленности на грани окупаемости, но масштабы их использования серьёзно ограниченны импульсным характером работы существующих установок и малыми размерами зоны реакции. На данный момент стационарные термоядерные установки являются основными кандидатами на решение описанных выше проблем [44-46].

Энерготехнологический комплекс ТИН включает в себя [47, 48]:

- стационарный источник нейтронов синтеза DT на основе ТОКАМАКа с обеспечивающими работу технологическими системами;
- бланкет, где производится формирование нейтронных потоков, реакции деления, захвата нейтронов и трансмутации нуклидов, вырабатывается высокотемпературное тепло;
- химико-технологическую часть, ответственную за приготовление и переработку топливных нуклидов, в том числе в непрерывном режиме.

Основным источником нейтронов в данной установке служит реакция [49]:

$D + T \rightarrow {}^{4}He + n + 17.6$ МэВ,

дающая нейтроны энергии 14.1 МэВ.

ТИН обладает следующими преимуществами:

• стационарный режим работы, позволяющий накапливать значительный флюенс нейтронов в больших объемах;

• возможность переделки базовой установки термоядерного синтеза на стадии проектирования;

• наиболее высокие теоретические показатели по совокупности плотности потока, энергий и долговременности излучения нейтронов.

Ввиду многих неопределённостей в будущей конструкции установки, необходим анализ возможных решений с помощью математического моделирования. Особо стоит отметить необходимость как можно точней учитывать энергетические пороги реакций и резонансные пики сечений взаимодействия нейтронов и атомов при моделировании. Это напрямую влияет на точность оценки потоков нейтронов, их энергии и скорости радиоактивного загрязнения материалов в установке. В случае 14.1 МэВ нейтронов начинают протекать реакции, которые не могут или почти не протекают в ядерных реакторах, с энергиями менее 5 МэВ.

На данный момент одним из основных направлений ТИН является проектирование установки для получения топлива для ядерных реакторов, на основе цепочек захвата $Th^{232}$:

$$Th^{232} \rightarrow (\gamma, 0.9348c) \rightarrow Th^{233} \rightarrow (\beta_-, 22.1мин) \rightarrow Pa^{233} \rightarrow (\beta_-, 27дней) \rightarrow U^{233}$$

В скобках указаны образующиеся в ходе реакции частицы, и скорость протекания реакции. Исходя из скорости протекания реакций в цепочке, есть возможность извлекать Pa из цикла и получать конечный U уже за пределами установки. В качестве самого перспективного способа доставки $Th^{232}$ и из влечения продуктов реакций из бланкета, был вы бран жидко-солевой расплав FLiNaK с примесью $Th^{232}F^4$. FLiNaK является расплавом фторидов Li, Na и K. Данный расплав характеризуется низкими температурами плавления, порядка 45$^o$C [50]. Его состав позволяет сохранять физические свойства в условиях сильных магнитных полей, создаваемых катушками термоядерного реактора.

Все, проведенные расчеты велись по программе MCU-5 [48] с библиотекой ядерных констант ENDF/B-7.

Существует целый спектр реакций, которые могут происходить внутри ТИНа, приводящих к изменению нуклидного состава веществ как бланкета, так и прочих частей ТИН. Особое внимание стоит уделять реакциям внутри бланкета, вызывающим изменение

редокс-потенциала расплава. Поэтому необходим анализ цепочек, приводящих к появлению других элементов.

В качестве примера таких вредных реакций, можно привести цепочки на калии:

$K^{39} \rightarrow (\alpha\ \ , 0.0104\ с) \rightarrow Cl^{36} \rightarrow (\beta^{-}, 3.1*10^{5}$ лет) $\rightarrow Ar^{36}$

$K^{39} \rightarrow (\alpha+n, 0.0018\ с) \rightarrow Cl^{35}$

Для $K^{40}$ наиболее существенен радиационный захват, переводящий его в $K^{41}$.

$K^{41} \rightarrow (\alpha\ \ , 0.0006\ с) \rightarrow Cl^{38} \rightarrow (\beta^{-}, 37.3$ мин) $\rightarrow Ar^{38}$

$K^{41} \rightarrow (p+n, 0.0004\ с) \rightarrow Ar^{40}$

Решение любой нейтронной задачи должно включать определение скоростей реакций нейтронов с атомами, что позволяет определить скорость образования радиоактивных изотопов, учесть появление вторичных нейтронов, понять как тот или иной элемент установки влияет на пространственный поток нейтронов.

Задача ТИН ставит перед нами проблему расчёта поведения термоядерных высокоэнергетических ней тронов (14.1 МэВ) в области установки. Важно исследовать не только поток нейтронов как таковой, но и скорость протекания основных реакций, вызывающих необратимые изменения в элементах установки. Это не только позволит оценить степень её радиоактивности при данном времени работы, но и возможные изменения в эффективности тех или иных компонент после продолжительного облучения ней тронами. Поэтому были проведены не только рас чётные исследования, но и анализ данных библиотеки ENDF/B7 по сечениям, с помощью специально написанной для этого программой. Используются номера реакций принятые в библиотеках ENDF/ B. Исходя из энергии нейтронов и рассматриваемых нуклидов, список интересующих нас реакций следующий:

- 2 – упругое рассеяние
- 3 – поглощение
- 4 – не упругое рассеяние
- 16 – (n, 2n)
- 17 – (n, 3n)

• 18 – деление

• 22 – (n, n + α)

• 24 – (n, 2n + α)

• 28 –(n, n + p)

• 101 – захват

• 102 – радиационный захват

• 103 – (n, p)

• 107 –(n, α)

Реакции (*n,* 2 *n*) и (*n,* 3*n*) увеличивают нейтронный поток в установке, что может поднять эффективность. Необходимость их учёта обусловлена тем, что термоядерные нейтроны обладают достаточно большими энергиями, чтобы вызывать эти реакций. Как показал анализ библиотек, основной вклад в этих ре акциях могут дать такие элементы как свинец и торий. У остальных элементов максимальные сечения реакций (*n,* 2*n*) и (*n,* 3*n*) составляют в лучшем случае доли барна, и хотя они могут вносить некоторый вклад в нейтронный поток, этот вклад можно рас сматривать лишь как побочный эффект их наличия в установке.

Вклад свинца и тория в нейтронный поток за счёт реакций (*n,* 2*n*) и (*n,* 3*n*) может быть значителен. Свинец рассматривается как один из возможных вариантов экрана, в том числе из-за эффекта размножения нейтронов. Рассмотрение тория или урана, как возможного материала для экрана, едва ли разумно. Это связано с тем, что предполагаемое время работы установки порядка года. Твердотельный экран выгорит намного раньше. Реакции (*n,* 2 *n*) и (*n,* 3*n*) представляют повышенный интерес в случае солевого бланкета с фторидом тория. С одной стороны они увеличивают поток нейтронов внутри бланкета. С другой они меняют изотопный состав, что может негативно сказаться на конечной эффективности трансмутации. Вместо перехода в $Pa^{233}$ (и после дующего превращения в $U^{233}$), атом $Th^{232}$ теряется на производстве нейтронов. Возникает цепочка:

$$Th^{232} \rightarrow (n \rightarrow n + n) \rightarrow Th^{231} \rightarrow (\beta_-) \rightarrow Pa^{231} \rightarrow (\beta_- + \gamma) \rightarrow Pa^{232} \rightarrow (\beta_-) \rightarrow U^{232}$$

В результате возникает весьма опасный нуклид $U^{232}$.Можно рассматривать эту реакцию как положительную. Она даёт дополнительный нейтрон, причём именно в

солевом бланкете. Система постоянной прокачки и поддержания состава расплава позволяет восполнять убыль тория и удалять вредны примеси Распад способствует значительному увеличению нейтронного потока, но сопровождается образованием радиоактивных осколков, которые необходимо удалять из системы. На данном этапе исследования реакция распада рассматривается скорее как отрицательная. Несмотря на появляющиеся нейтроны, очистка того же жидко-солевого бланкета от радиоактивных осколков серьёзно усложнится, что может негативно сказаться как на надёжности, так и на цене установки. Стоит отметить, что радиоактивные осколки дополнительно нарушают баланс расплава, из-за иной валентности.

Главный недостаток делящихся размножителей заключается в необходимости утилизации продуктов распада, что добавляет дополнительные затраты на поддержание установки и дополнительно снижает её целесообразность в сравнении с ядерными реакторами-бридерами.

Как и распад, поглощение нейтрона может приводить к образованию радиоактивного элемента. Для солевого расплава *FLiNaK* также существенно изменение валентности. С помощью учёта этих реакций можно установить эффективность трансмутации $Th^{232}$ в $U^{233}$.

Для $Th^{232}$ реакция радиационного захвата является полезной, приводя к образованию $Pa^{233}$, и последующей наработке $U^{233}$. У $Th^{232}$ скорость реакции захвата высока и для быстрых нейтронов, и вероятность этой реакции значительно выше остальных. Выделение наработанного $Pa^{233}$ (будущего $U^{233}$) из расплава *FLiNaK*, с последующим удалением из него вредных примесей, может оказаться технологически сравнительно лёгким процессом.

Ранее в программе MCU реакция (n, 3n) учитывалась вместе с реакцией (n, 2n), приближённым образом, так как программа исходно предназначалась для расчётов поведения нейтронов в установках с ядерными энергиями нейтронов. В таком случае энергии нейтронов слишком малы, чтобы реакция (n, 3n) могла вносить существенный вклад.

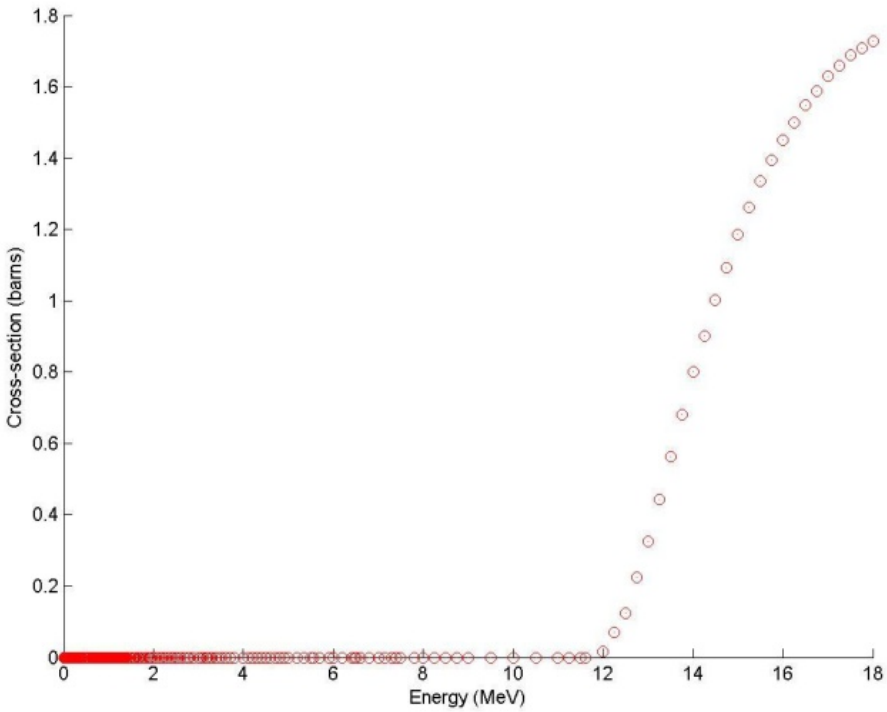



Рисунок 4.1.1 $Th^{232}$– 17-ая реакция

Из приведённого графика видно, что более точный учёт (n, 3n) может повлиять на конечный результат расчётов, учитывая заметное содержание $Th^{232}$ в расплаве FLiNaK и большую область, которую занимает сам бланкет. Существование данной проблемы привело к доработке модуля моделирования взаимодействия нейтронов с ядрами (физического модуля) MCU, с целью полноценного учёта сечений реакции (n, 3n) в расчётах. Дальнейшие расчёты с доработанной версией MCU подтвердили необходимость данных изменений.

Следующие задачи решались в ходе работы над ТИН:

1. Определение оптимальных вариантов состава бланкета;
2. Установление степени влияния экрана, оптимальной толщины экрана;
3. Определение оптимальных вариантов состава экрана;
4. Оценка сверху эффективности различных вариантов установки ТИН в качестве источника нейтронов;
5. Составление рекомендаций по конструкции ТИН на основе пунктов выше.

Модель несёт условный характер и предназначена для грубых оценок, в виду своей упрощённости. Геометрическая модель расчетов термоядерного источника нейтронов

(ТИН) с указанием основных конструкционных элементов представлена на [рисунках 4.1.2-4.1.3].

Внешний контур модели имеет вид цилиндра радиусом 200.8 см и высотой 301.6 см [51].

Внутри цилиндра расположены: вакуумная камера, окруженная со всех сторон первой стенкой. Первая стенка окружена экраном, за которым расположен бланкет. За бланкетом располагается отражатель, с целью компенсировать утечку из него. Также в модели имеются центральный сердечник и катушки полоидального магнитного поля (КПМП).

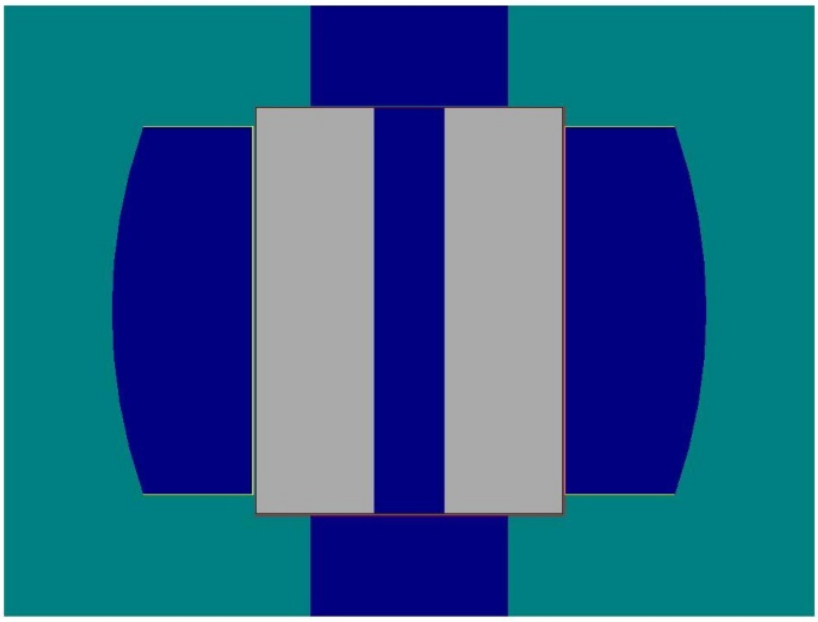


Рисунок 4.1.2 Вертикальное сечение расчётной модели ТИН

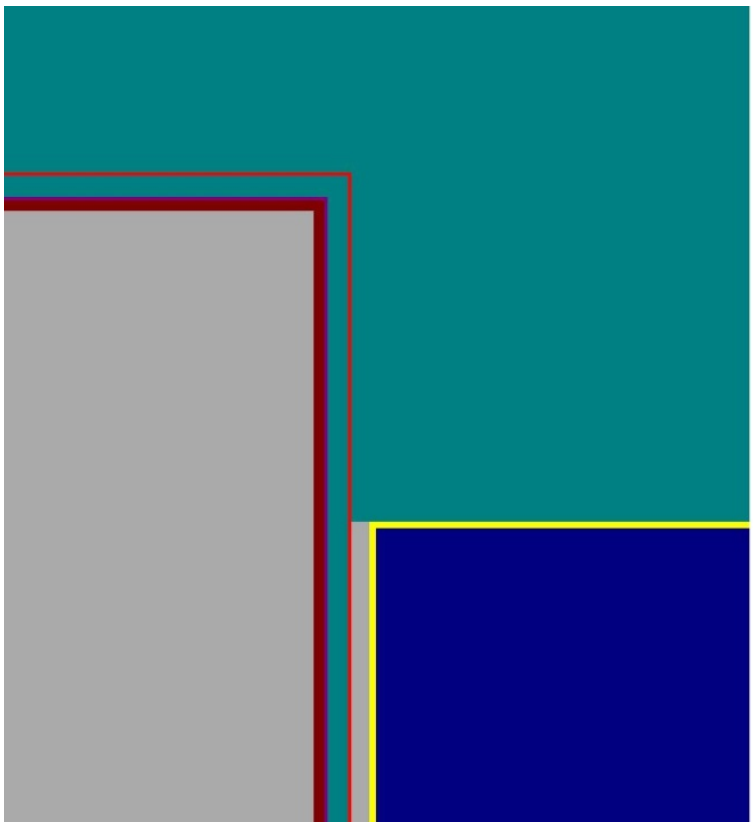


Рисунок 4.1.3 Вертикальное сечение, первая стенка и стенка бланкет

Сердечник ТИН изготовлен из меди и имеет вид цилиндра радиусом 20 см и высотой 200 см. Полоидальные катушки представлены двумя цилиндрами, расположенными над и под сердечником, радиусом 50 см и высотой 50 см каждый. Первоначально рас сматривались медные катушки, однако в последних вариантах конструкции медь была заменена на бериллий.

Вакуумная камера имеет вид цилиндра радиусом 75 см и высотой 200 см. Первая стенка, окружающая вакуумную камеру со всех сторон, является ее внешней границей. В первоначальных расчётах она состояла из трёх слоёв. Первый слой состоял из вольфрама и имел толщину 3 мм. Второй слой состоял из обычной воды и имел толщину 3 мм. Третий слой состоял из сплава ванадия (92%) с титаном (4%) и хромом (4%). Толщина слоя была равна 2 мм. Плотность сплава равна 6.09 г/см$^3$ [51]. В ходе работы над ТИН был предложен альтернативный вариант первой стенки, в связи с высокими потерями нейтронов на вольфраме. Он состоит из четырёх слоёв [рисунок 4.1.3]. Внутренний слой состоит из бериллия, толщиной 3мм. Далее располагается слой сплава хромоциркониевой бронзы (99.1% меди, 0.8% хрома, 0.1% циркония) плотностью 8.44 г/см3 толщиной 1мм. Далее слой обычной воды, толщиной 6мм, и, наконец, слой железа, толщиной 1мм. Был добавлен вакуумный зазор между первой стенкой и бланкетом, в целях термоизоляции.

За первой стенкой расположен экран, варьируемой толщины (вплоть до отсутствия). Исследовались варианты покрытия камеры экраном как вплоть до полоидальных катушек, так и только боковой стороны вакуумной камеры, за которой расположена основная часть бланкета. Рассматривались следующие варианты материалов для экрана:

• Природный Pb (свинец)

• Чистый изотоп $Pb^{204}$

• Чистый изотоп $Pb^{206}$

• Природный Li (литий)

• Чистый изотоп $Li^{7}$

• Природный Be (бериллий)

• Расплав фторидов Li и Be (FLiBe)

За экраном располагается бланкет, заполняющий весь свободный объем установки. Рассматривались следующие варианты состава бланкета:

- FLiNaK с 15%-ой добавкой $ThF_4$
- FLiNaK с 15%-ой добавкой $ThF_4$ и 5% добавкой $BeF_2$
- FLiBe с 15%-ой добавкой $ThF_4$
- FLiBe с 15%-ой добавкой $ThF_4$ и 5% добавкой $BeF_2$
- FLiNaK с 30%-ой добавкой $ThF_4$
- FLiBe с 30%-ой добавкой $ThF_4$
- FLiNaK с 15%-ой добавкой $U^{238}F_4$
- FLiNaK с 30%-ой добавкой $U^{238}F_4$

Бланкет заключён в сосуд из сплава N i, M o, Cr, Fe (72%, 17%, 7%, 4%, соответственно), разделённый на 12 секций по азимуту. Толщина стенок и перегородок между секциями 2 мм.

Также рассматривалось два варианта состава проводящих катушек в непосредственной близости от источника нейтронов:

• природная Cu (медь)

• природный Be (бериллий)

Модель источника нейтронов представляет собой цилиндрический слой с внешним радиусом 70 см, внутренним радиусом 50 см и высотой 60 см, центр которого совпадает с центром модели ТИН. Пространственное распределение нейтронов по объему источника и направление их вылета изотропны. Источник моноэнергетический, с энергией для нейтронов D –T реакции, равной 14.1 МэВ [51]. Результаты нормировались на один нейтрон источника.

### 4.2 Расчеты различных конфигураций бланкета ТИН. Выбор оптимальной толщины экрана бланкета

Для анализа путей увеличения эффективности бланкета важную роль играет оценка поглощения нейтронов во всех элементах установки, в первую очередь стенкой вакуумной камеры и катушками. Причём, при трансмутации $Th^{232}$с использование бланкета FLiNaK неизбежно существенное отражение замедленных нейтронов назад к первой стенке. Гистограмма на [рисунке 4.2.1] показывает поглощения для варианта установки с медными катушками, 10 см экраном из природного Pb, и бланкетом в виде FLiNaK (с чистым изотопом $Li^7$) с 15% добавкой $Th^{232}F_4$.

Как легко видеть, медь в катушках служит источником заметных потерь нейтронов. Фактически, доля поглощения ею нейтронов определяется не столько конструкцией установки за пределами вакуумной камеры, сколько изотропным излучением нейтронов, вызывающим их попадание на катушки. Поэтому стоит воспринимать потери на катушках как неизбежное зло.

Значительны потери на вольфраме, не смотря на его малую толщину в установке. Была проведена серия расчётов с различными изотопами вольфрама, на основе вышеупомянутой модели, они дали следующие результаты [рисунок 4.2.2]

Рисунок 4.2.1

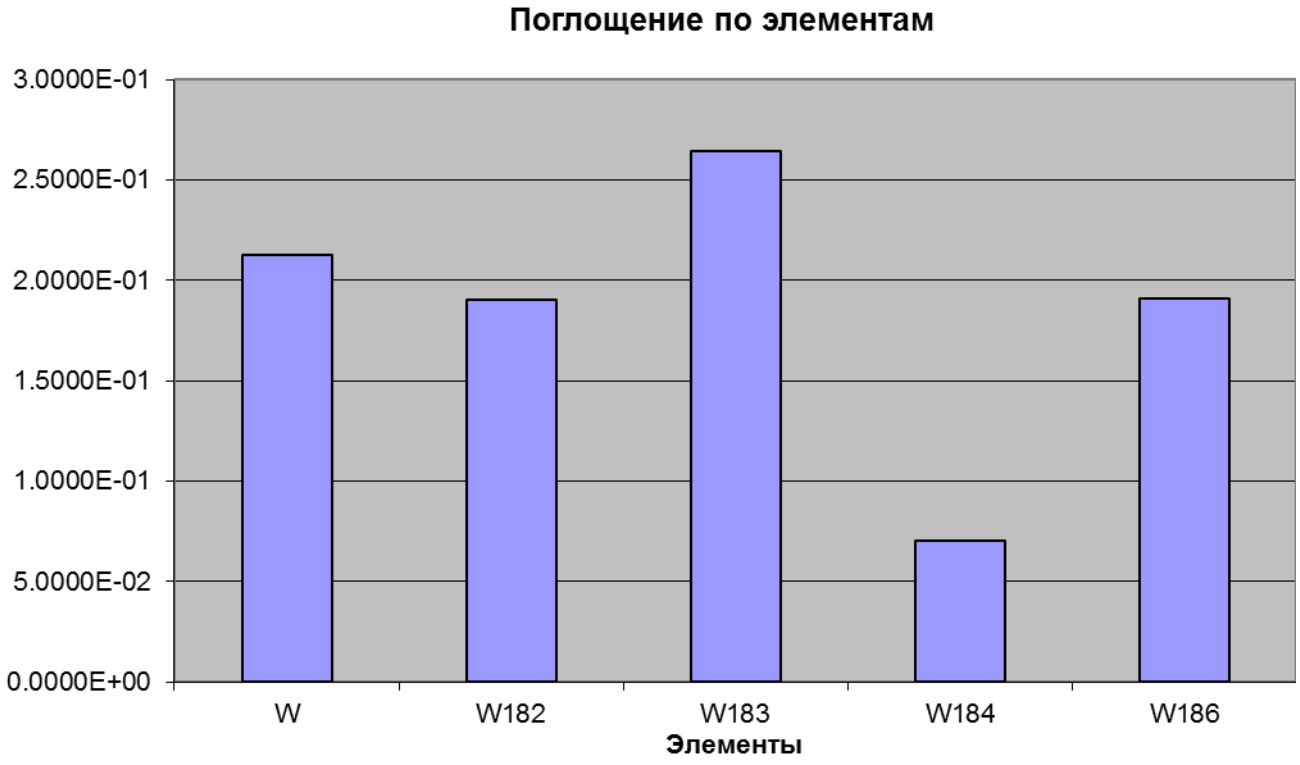



Рисунок 4.2.2

*FLiNaK* смесь расплавов *LiF*, *NaF*, *KF*, существующая в жидком состоянии при сравнительно низких температурах, от 45$^{o}$ градусов Цельсия. Сохраняет приемлемую вязкость и текучесть в условиях сильных магнитных полей. Данный расплав позволяет нам примешивать к нему фториды практически любых желаемых элементов, осуществлять очистку от радиоактивных осколков и наработанных изотопов в рабочем режиме установки. Предпочтительной является 15% доля в расплаве, но возможно увеличение содержания до 30%, без существенного увеличения температуры плавления. Гомогенная природа расплава положительно сказывается на эффективности поглощения нейтронов нужными элементами, добавленными в него. Недостатком является высокая химическая активность *FLiNaK*, предъявляющая повышенные требования к изолированию его от других частей установки, в первую очередь от воды в системе охлаждения.

Рисунок 4.2.3

В качестве самой многообещающей примеси в *FLiNaK*, рассматривается фторид 232-го изотопа тория ($Th^{232}F_4$). В отличие от урана, реакции ней тронов на тории приводят к более "чистым" цепочкам, сильно снижая загрязнение бланкета радиоактивными осколками. Большая часть взаимодействий на $Th^{232}$ (от 70-80%) приводят к получению $U^{233}$, который может служить высокоэффективным топливом для ядерных реакторов. В отличие от тория, радиоактивные распады для цепочек преобразования $U^{238}$ в плутоний протекают с намного большей скоростью, что неизбежно приведёт к нежелательным

реакциям нейтронов с уже образовавшимся в бланкете топливом, до того, как система прокачки успеет его вывести за пределы установки. На следующей диаграмме приведено поглощение на один нейтрон источника интегрально по всем химическим элементам в старой модели установки для случая 12.5 см не облегающего экрана из природного *Pb*.

Общее поглощение на $Th^{232}$ составляет 0.907 на один нейтрон источника, что является очень высоким показателем. Однако, нас интересует в первую очередь реакция радиационного захвата, которая составляет уже 0.683 на один нейтрон источника.

Высокая эффективность поглощения нейтронов на *Th* доказывает приемлемые замедляющие характеристики расплава *FLiNaK* в больших объемах, что позволяет отказаться от каких-либо отдельных секций с замедлителем, и сполна использовать эффективность гомогенной природы бланкета. Скорости прохождения вредных реакций, в первую очередь на *F* и *K*, вызывают определённые проблемы с поддержанием чистоты жидкого бланкета. Это, без сомнения, должно отразиться на проектировании систем очистки и их режимах работы.

Расчёты подтвердили обоснованность выбора системы $FLiNaK + Th^{232}$, предлагая весьма высокую верхнюю оценку эффективности установки относительно излучаемого потока нейтронов на данном этапе. Поглощение составляет до 90% нейтронов излучения. Не смотря на оценочный характер расчетов, уже на этом этапе стали очевидны преимущества использования фторида тория относительно урана.

В новой модели были получены схожие результаты, что послужило доказательством возможности сократить размеры бланкета, при условии наличия отражателей, компенсирующих утечку из него. Для варианта с 0.5см экраном из Pb захват на $Th^{232}$ составил 0.954.

Долгое время исследовалась возможность добавления 5%-ов $BeF_2$ в *FLiNaK*, для повышения эффективности замедления. Как показали расчёты, примесь не даёт заметной эффективности, но даже ухудшает работу установки. На следующей диаграмме приведено поглощение в старой модели по элементам интегрально во всей установке на один нейтрон источника, в случае 12.5 см не облегающей стенки из природного Pb.

В качестве альтернативы, в расчётах рассматривалось использование *FLiBe*, являющегося расплавом фторидов бериллия и лития. Недостатком *FLiBe* является существенное увеличение температуры плавления при добавлении $Th^{232}F_4$. Расчёты показывали для него сходные с *FLiNaK* результаты по взаимодействию нейтронов (а кое-

где и чуть более высокие), но, скорее всего, данный вариант невозможно реализовать из физико-химических соображений.

В новой модели удалось значительно сократить объем бланкета без ущерба эффективности его работы. В следующей таблице приведены расчёты для данного случая

Бланкет *FLiBe* + 30% $Th^{232}F_4$

**

*FLiBe* даёт более хорошие результаты, чем *FLiNaK*. Это связано с высоким поглощением на *K*, которое велико как в высокоэнергетической области, так и в тепловой. Оно и послужило основной причиной для рассмотрения альтернативы в виде *FLiBe*.

Рисунок 4.2.4

Общее поглощение на $Th^{232}$ (в нормировке на один источник нейтрона) составило 0.912 без примеси, и 0.916 с примесью. Уже здесь видно, что усложнение состава расплава не даёт достаточно высоких результатов. Скорость протекания реакции захвата составляет 0.907 при отсутствии примеси, и 0.908 при её наличии.

Из этих расчётов можно заключить, что лучше избегать добавления $BeF_2$ в расплав. Любые дополнительные примеси будут усложнять систему прокачки и очистки бланкета, что нежелательно, не смотря на наличие технологических решений. При этом существенного прироста эффективности данная добавка не даёт.

Использование отражающего экрана на границе установки, а также в верхней и нижней её части, дало неоднозначные результаты. Наблюдаемый прирост эффективности был сравнительно мал. В основном он заключался в частичном возврате нейтронов, пролетающих бланкет почти не взаимодействуя (то есть угловой утечки). Сам же бланкет, при достаточной толщине, сводил нежелательную утечку из него к минимуму. В случае верхнего и нижнего экранов также стоит помнить о том, что, скорее всего, эти секции будут в дальнейшем заняты различными компонентами термоядерного реактора, в первую очередь дивертором, а также защитой внешних катушек. В последнем случае стоит пояснить, что внутренние катушки, располагающиеся непосредственно в плотном потоке высокоэнергетических нейтронов, предполагается защитить с помощью дорогостоящих составов. Высокая цена такой защиты ставит под вопрос её использование для внешних катушек, при возможности защитить их более стандартными методами (например, железоводная защита). Под вопросом и сама целесообразность добавления отражателя, находящегося за бланкетом. Как показали расчёты, попытка заменить внешнюю (почти не работающую) часть бланкета экраном фактически не меняет положение дел, давая в лучшем случае процентный прирост эффективности. Долгое время наиболее разумным казалось использование отражателя между бланкетом и установкой, и заполнение всего остального доступного объема установки бланкетом, увеличивая шанс замедления нейтрона и его реакции на $Th^{232}$. Тем не менее, в дальнейшем и от этого варианта пришлось отказаться.

Исходя из этого, в данной главе приводятся только расчёты, связанные с экраном между бланкетом и первой стенкой.

Расчёты показали, что свинец может быть использован в качестве экрана для бланкета. Более того, в определённых условиях он даёт самый значительный прирост эффективности из рассмотренных вариантов. Однако степень положительного эффекта и само его наличие сильно зависят от состава бланкета.

В случае бланкета из тяжёлой воды, то есть стремления к наработке нейтронов теплового спектра, природный свинец совершенно не подходит для установки. Причиной тому служит сильное поглощение нейтронов, замедлившихся в тяжёлой воде и отражённых назад на экран. Стоит отметить, что это поглощение свойственно в первую очередь одному изотопу свинца, входящему в состав природного. А именно – $Pb^{206}$. В случае наличия финансово выгодной технологии получения очень чистого изотопа $Pb^{204}$, можно рассматривать свинец в качестве экрана для бланкета из тяжёлой воды. На следующей

диаграмме приведены интегральные поглощения нейтронов в природном свинце для старой модели, в случае бланкета из тяжёлой воды и экранах между первой стенкой и бланкетом. Варьируется толщина экрана из природного свинца, от 10 до 55 сантиметров с шагом 5 см. Все результаты нормированы на один нейтрон источника.

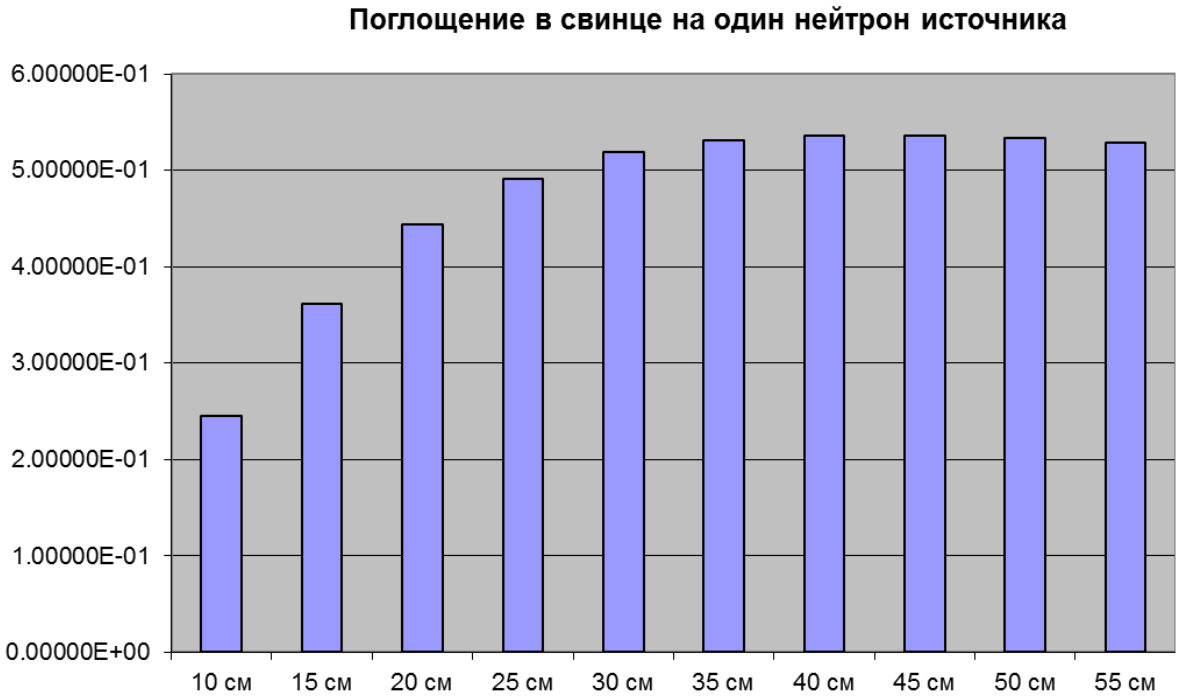



Рисунок 4.2.5

По этой диаграмме легко понять, что наращивание толщины экрана (а значит, эффективности размножения нейтронов) необратимо приводит к ещё большему поглощению замедленных нейтронов, отражённых в его сторону. Расчёты показали, что в случае использования природного свинца для экрана при бланкете из $D_2O$, эффективность установки не только не вырастает (относительно варианта без экрана), но и падает, с ростом толщины экрана.

Также расчёты по свинцовому экрану показали, что основной прирост эффективности установки даёт только слой свинца ~10-15 см толщиной. Дальнейшее наращивание толщины начинает снижать эффективность. На следующей диаграмме приведено интегральное поглощение на свинце, в случае экрана перед бланкетом и *FLiNaK* с примесью $Th^{232}F_4$в случае различных толщин экрана. Всё нормировано на один нейтрон

источника.

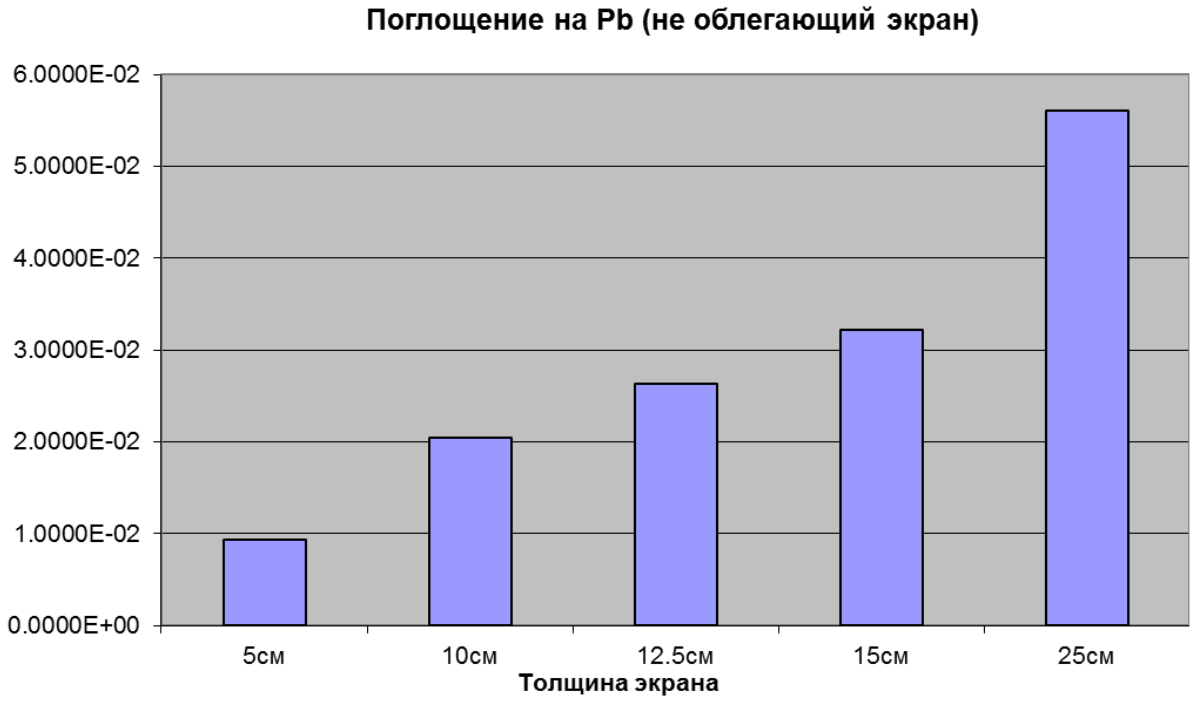



Рисунок 4.2.6

Как говорилось ранее, даже в случае менее эффективных замедлителей, потери нейтронов на поглощении свинцом достаточно заметны. Уже для 25 см экрана поглощение составляет порядка 6% нейтронов, излучаемых источником. Обратимся теперь к скорости протекания реакции захвата на $Th^{232}$ в описанном выше случае. Следующая диаграмма демонстрирует вероятность поглощения одного нейтрона источника с протеканием данной реакции, в зависимости от толщины свинцового

экрана

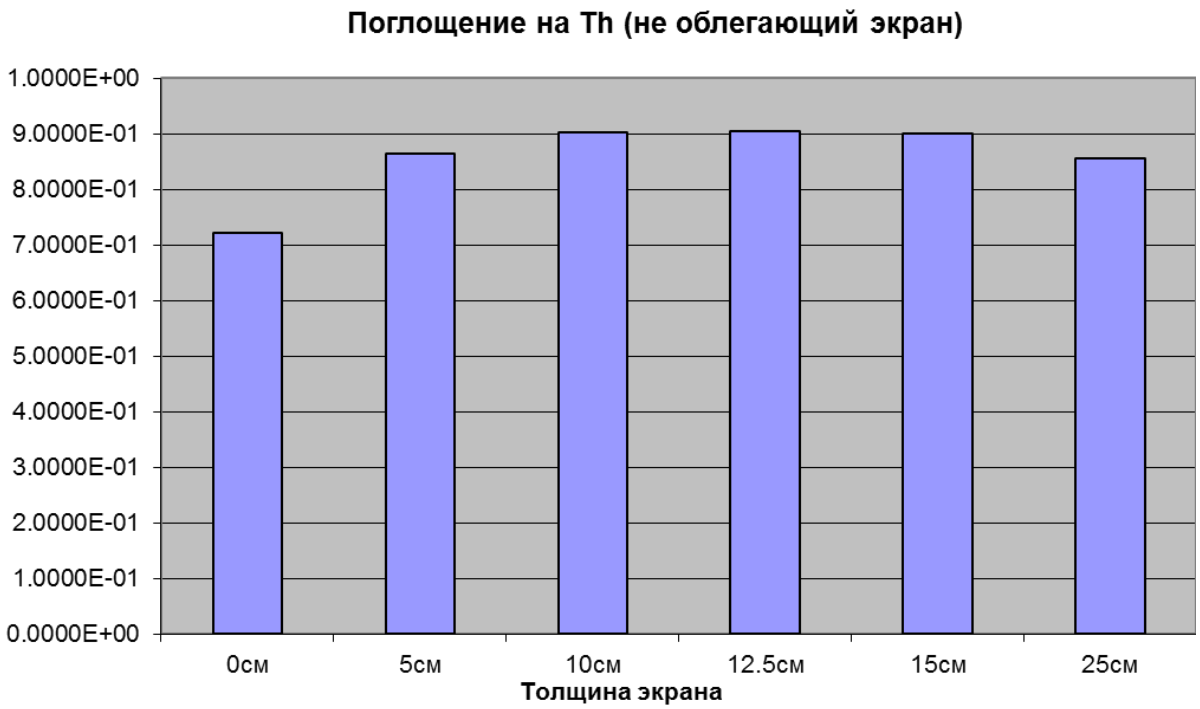



Рисунок 4.2.7

Имеется максимум протекания полезной реакции при толщине свинцового экрана порядка 12.5см, составляющий 0.907 на один нейтрон источника. Дальнейшее наращивание свинцового экрана лишь сводит на нет всю его эффективность. Разумеется, не последнее место здесь занимает и значительный вес свинца, который будет служить дополнительной нагрузки для конструкции установки. Это также послужило поводом рекомендовать толщину экрана не более 10-15см.

*Be* показал хорошие размножающие свойства, давая до 0.626 реакций (n,2n) на один нейтрон источника, в случае новой модели и толщины 1см. При использовании FLiBe+30%$Th^{232}F_4$ достигался захват на тории до 0.994, что является лучшим результатом. Стоит отметить, что *Be* также значительно легче *Pb*, что делает его более предпочитаемым материалом с конструктивной точки зрения. Он показал себя одним из самых перспективных материалов для экрана на данном этапе работ.

Не смотря на хорошие результаты использования экранов из свинца и бериллия, на данный момент рассматривается вариант бланкета без экрана как такового. Причиной тому послужил рост потерь, связанных как с угловой утечкой при доработке качественной модели, так и рост нежелательного поглощения на первой стенке нейтронов, отражённых экраном. Также стоит учитывать, что в случае «оголения» бланкета вырастут не только вредные реакции на быстрых нейтронах, но и размножение (n,2n) и (n,3n) реакциями на

$Th^{232}$. Как показали расчёты, последнее способно компенсировать отсутствие размножения на экране, хотя и усложнит задачу очистки прокачиваемого расплава от нежелательных элементов, образовавшихся в ходе реакций. В следующей таблице показаны результаты, полученные в ходе расчётов.

Бланкет $FLiBe$+30% $ThF_4$

| Экран | *Be* - 1см | Нет |
|---|---|---|
| Стенка | 0.2 см | 0.2 см |
| $Th^{232}$ (n,2n) | 0.0467 | 0.106 |
| $Th^{232}$ (n,3n) | 0.0111 | 0.042 |
| $Th^{232}$ (распад) | 0.0168 | 3.73 |
| $Th^{232}$ (захват) | 0.994 | 0.987 |
| Экран (n,2n) | 0.626 | |
| Никель (погл.) | 0.101 | 0.0773 |
| Никель (n,2n) | $6.53*10^{-4}$ | $2.51**10^{-3}$ |
| Бериллий (погл.) | 0.212 | 0.0942 |
| Бериллий (n,2n) | 0.924 | 0.315 |

Самым многообещающим оказался вариант с бланкетом из *FLiNaK* без примесей и с экраном из *Pb* толщиной 0.5см. Интегральный захват на $Th^{232}$ составил 0.954 на один нейтрон источника, что является весьма многообещающим значением, даже для оценки сверху.

Основные потери составили:

- *K* – 0.164
- *Cu* – 0.0906
- *Be* – 0.0882
- *F* – 0.0659
- *Fe* – 0.0513

Таким образом, в ходе проделанной работы был установлен наиболее предпочтительный вариант конструкции установки ТИН на данном этапе. Также была оценена сверху эффективность установки. Были установлены и исследованы основные цепочки вредных реакций, а также оценена скорость их протекания. В качестве побочного, но не менее

значимого результата, была обнаружена необходимость доработки программного пакета MCU, способствовавшая повышению точности результатов расчётов в условиях термоядерных энергий нейтронов.

Термоядерные энергии нейтронов предъявляют особые требования к программе MCU при расчётах. MCU предназначалась для расчётов ядерных установок. Это привело к ряду упрощений при учёте реакций, которые позволительны для области ядерных энергий нейтронов, но недопустимы для термоядерных энергий. Причиной является пороговый характер реакций. Реакции, несвойственные для ядерных энергий, начинают вносить более значимый вклад при термоядерных энергиях.

В качестве примера, можно привести 16-ую (n,2n) и 17-ую (n,3n) реакции. Они являются пороговыми, причём 17-ая (n,3n) начинает проявлять себя при энергиях более 10 МэВ. Из-за этого, данная реакция учитывалась в MCU приближённо, так как практически не проявляла себя при ядерных энергиях. При термоядерных энергиях необходим более точный учёт.

Сходная проблема существует и с некоторыми другими реакциями. В MCU не выделялись 103-ая (n,p) и 107-ая (n, α) реакции из общей 101-ой (захвата). Причиной также служит наличие порога, из-за чего степень загрязнения данными реакциями ядерных реакторов крайне мала. Однако, при термоядерных энергиях эти реакции начинают играть существенную роль.

Исходя из приведённых выше проблем, были сделаны проверки порогов сечений, путём анализа библиотек ENDF/B специально написанной программой. Они привели к осознанию необходимости адаптации программы MCU, для более точного учёта данных реакций в условиях термоядерных энергий нейтронов. В частности – разделения 16-ой (n,2n) и 17-ой (n,3n) реакций, а также выделение реакций 103 (n p) и 107 (n, α) из общего захвата. В качестве иллюстрации необходимости данных изменений, можно привести графики сечений, созданных этой программой:

- Для 16-ой (z,2n) и 17-ой (z,3n) реакций на торие ($Th^{232}$);
- Для 103 (z,p) и 107 (z, α) реакций на природном калии ($K$).

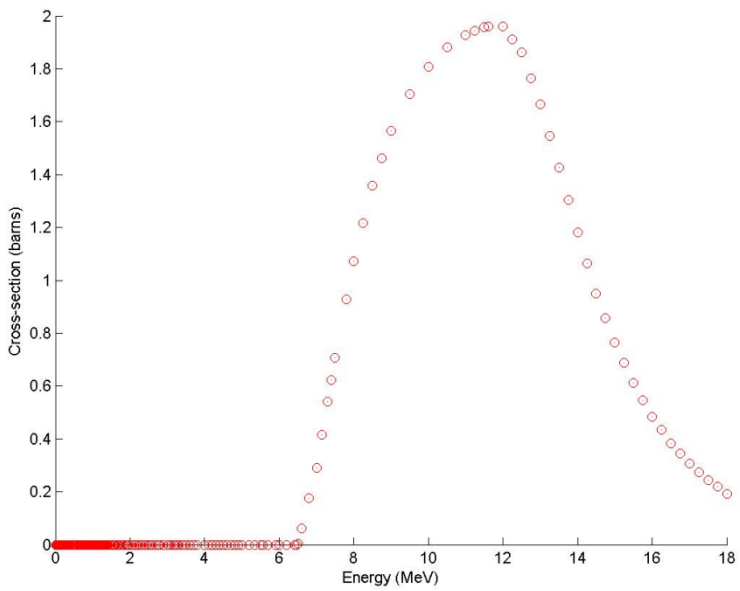



Рисунок 4.2.8 (z,2n) реакции на тории ($Th^{232}$)

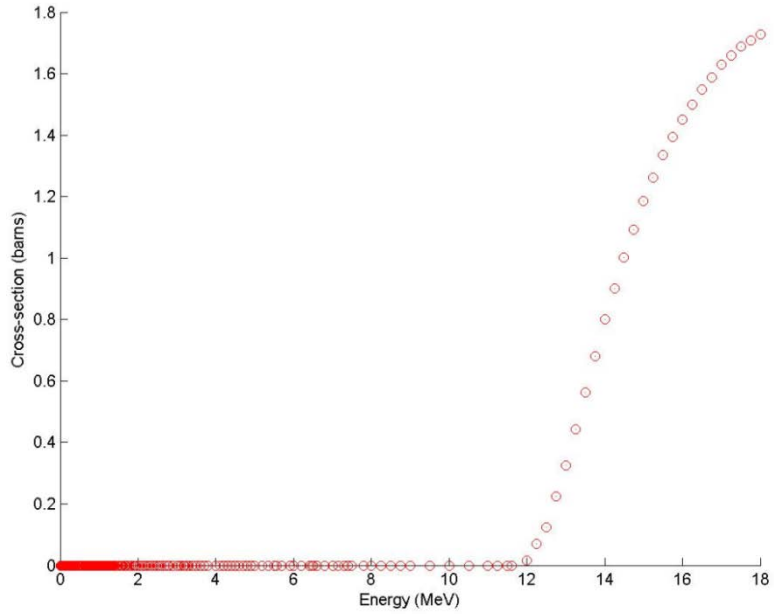



Рисунок 4.2.9 (z,3n) на тории ($Th^{232}$)

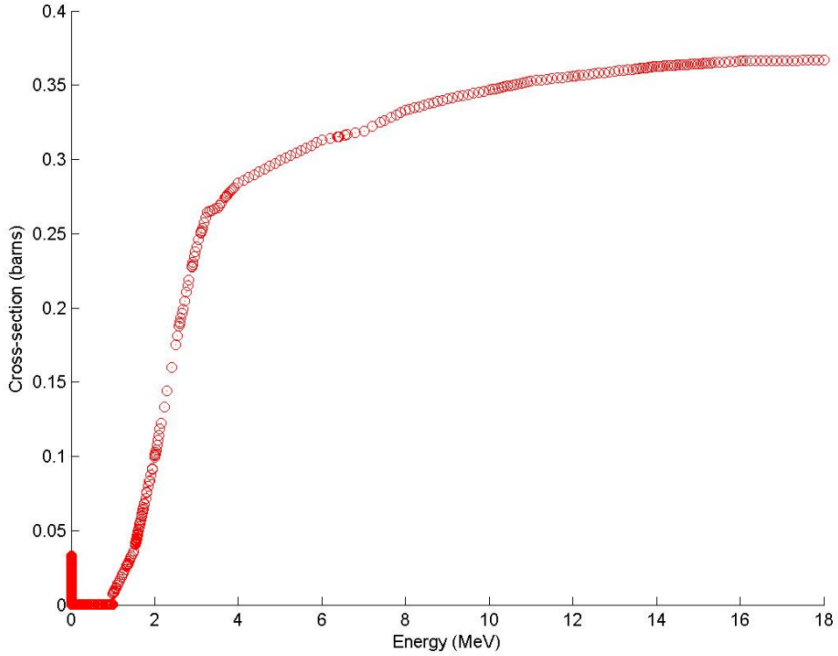



Рисунок 4.2.10 (z,p) реакция на природном калии (*K*).

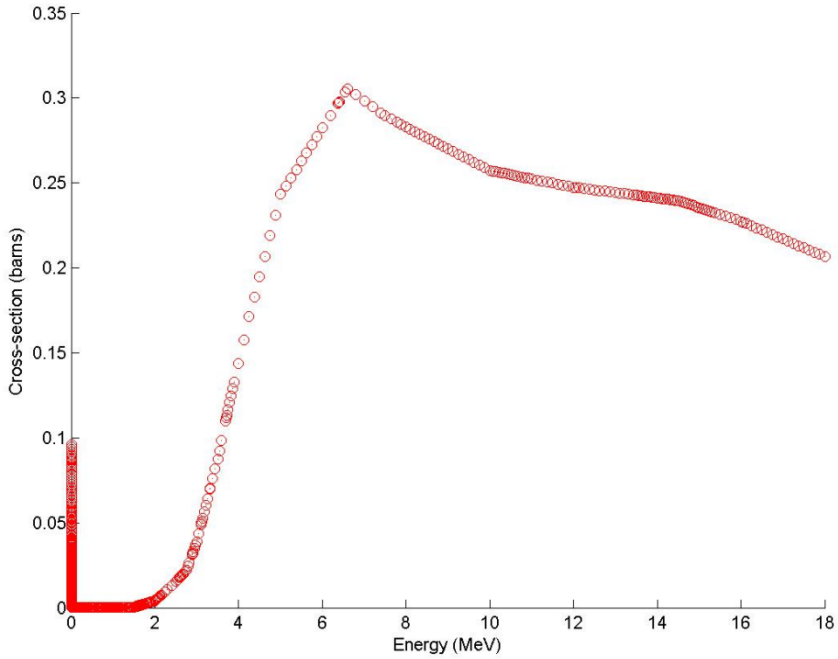



Рисунок 4.2.11 (z, α) реакция на природном калии (*K*).

Дальнейшие расчёты продемонстрировали влияние данных изменений на конечный результат. И хотя это влияние было слишком мало, чтобы представлять интерес при качественных оценках, сама необходимость повышения точности расчётов в сфере высокоэнергетических нейтронов не вызывает сомнений.

**Анализ результатов расчётов:**

В ходе проделанной работы удалось установить наиболее многообещающий вариант конструкции установки, с позиции нейтронно-физического расчёта. Им оказался вариант с экраном из $Pb$, толщиной 0.5см, бланкетом из $FLiNaK$ с 30% примесью $Th^{232}F_4$ и отражателем из графита. Была проведена оценка сверху эффективности работы установки, а также основные источники нежелательного поглощения нейтронов. Интегральный захват на $Th^{232}$ составил 0.954 на один нейтрон источника. Основные потери составили:

- $K$ – 0.164
- $Cu$ – 0.0906
- $Be$ – 0.0882
- $F$ – 0.0659
- $Fe$ – 0.0513

Было рассмотрено несколько вариантов экранов, и установлены самые многообещающие материалы. Ими оказались свинец и бериллий, за счёт высоких скоростей протекания реакции (n,2n) . Рассмотрен и вариант отсутствия экрана, когда в качестве размножителя используется сам $Th^{232}$ внутри бланкета. Результаты оказались достаточно удовлетворительными, и почти не уступающими вариантам с экранами [51-54].

Также был проведён анализ библиотеки сечений реакций ENDF/B7, специально написанной программой. В результате была установлена существенность определённых реакций для расчётов с высокоэнергетическими нейтронами, которые не играли роли в случае ядерных энергий. Это привело к необходимости адаптации MCU для повышения точности.

# Заключение

В работе проведено углублённое исследование методов моделирования топлива двойной гетерогенности. Исследованы верхние пределы применимости подмодуля CORN моделирования топлива двойной гетерогенности программного пакета MCU.

Произведено сравнительное моделирование с использованием регулярных решёток, возмущённых регулярных решёток и подмодуля CORN. Исследовано влияние гомогенизации покрытий зёрен. Исследованы методы моделирования загрузки активной зоны ВТГР, включая варьирование плотности упаковки и приближённое моделирование неравномерности плотности упаковки по высоте активной зоны. Подтверждена ошибочность модели критического стенда PROTEUS, использованной при моделировании в статье [5].

Произведена доработка геометрического, транспортного и физического модулей программы MCU. Введена возможность вложения сетей произвольной глубины. Расширены средства определения атрибутов зон. Введена возможность управления очередями частиц с элементами разной длины. Расширен набор регистрирумых типов ядерных реакций для нейтронов высоких энергий (>14.1 МэВ).

Опубликованы следующие труды, содержащие результаты работы [28,51-54]

Результатами диссертационной работы можно считать следующие:

1. Показано, что для шаровых ТВЭЛов с графитовой матрицей и с топливом из оксида урана даже для плотностей микротоплива порядка 850 ед./см$^3$, что в пять раз превышает плотность в существующих установках, не наблюдается существенных разночтений между результатами алгоритма CORN и результатами, полученными при моделировании регулярными решетками.
2. Проведен анализ геометрических приближений, используемых в алгоритме CORN. Предложена модификация этого алгоритма, учитывающая конечность размеров зерен топливных частиц. Для плотности 350 ед./см$^3$ возникают различия в основных геометрических характеристиках в модели CORN и в модели, учитывающей конечность размеров зёрен и парные взаимодействия между ними.
3. Показано, что описание стенда PROTEUS содержит неточности, так как расчеты по программе MCU дают ту же завышенную оценку, что и проведенные ранее во Франции расчеты по программе MCNP-5. При моделировании случайной засыпки шаровых ТВЭЛов вместе с чисто графитовыми шарами случайности в реализации могут приводить к колебаниям критичности порядка 0.5%. Наиболее существенным является получающиеся изменения высоты засыпки при сохранении числа шаров.

4. Для моделирования высокотемпературных реакторов, геометрия которых представляет иерархию с числом уровней до 4, была проведена модификация геометрического модуля программы MCU, состоящая в обеспечении возможности создавать иерархию сетей. Реализованы очереди частиц, ожидающих моделирования, с элементами различной длины, задаваемой при постановке элементов в очередь. Проанализированы методы определения атрибутов зоны (номера материала, областей интегрирования и т.д.) в системах с развитой иерархией и реализована возможность ссылок на картограммы атрибутов, находящихся на любом уровне иерархии. Обеспечена автоматическая генерация подобных ссылок.
5. Модифицирован один из подмодулей физического модуля программы MCU, что позволяет регистрировать более широкий набор ядерных реакций, в том числе n→3n, n→α, n→p, n→n+α, n→n+p, n→T. С помощью этой модификации проведены расчеты бланкета термоядерного источника нейтронов на основе тетрафторида $^{232}$T в расплаве FLiNaK . Оптимизировался полезный радиационный захват в тории с ограничением как n→n+n реакции на тории так и пороговых реакций на K и F. Предложен свинцовый экран, дающий дополнительные нейтроны и смягчающий энергию нейтронов подпороговых нежелательных реакций. Найдена оптимальная толщина этого экрана.

# Литература


[1] ***Seker V., Colak U.*** HTR-10 full core first criticality analysis with MCNP // Nuclear Engineering and Design, 2003, 222, p. 263–270.

[2] ***Chang H., Raepsaet X., Damian F., Lee Y.-K., Koberl O., Jing X., Yang Y.*** Analysis of HTR-10 First Criticality with Monte Carlo Code Tripoli-4.3. 2nd Int. Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology, Beijing, China, September 22-24, 2004, #Paper C11, p. 1–10.

[3] ***Пономарев-Степной Н.Н., Брызгалов В.И., Глушков Е.С., Гомин Е.А., Демин В.Е., Компаниец Г.В., Лобынцев В.А., Носов В.И., Поляков Д.Н., Смирнов О.Н., Тельковская О.В., Гуревич М.И.*** Использование программы MCU для анализа результатов критического эксперимента с шаровыми твэлами ВТГР на стенде “Астра” // Атомная энергия, октябрь 2004, т. 97, вып. 4, с. 243–252.

[4] ***Гарин В.П., Глушков А.Е., Глушков Е.С., Гомин Е.А., Гуревич М.И., Зимин А.А., Компаниец Г.В., Кухаркин Н.Е., Лобынцев В.А., Носов В.И., Поляков Д.Н., Пономарев-Степной Н.Н., Смирнов О.Н., Тельковская О.В., Чуняев Е.И.*** Оценённые бенчмарк эксперименты на критических сборках, моделирующие особенности ВТГР на стенде АСТРА // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2009, вып. 2, с. 75–95.

[5] ***Bess John D., Sterbentz James W., Snoj Luka, Lengar Igor, Köberl Oliver.*** HTR-Proteus Pebble Bed Experimental Program Cores 9 & 10: Columnar Hexagonal Point-on-Point Packing with a 1:1 Moderator-to-Fuel Pebble Ratio // NEA/NSC/DOC (2006)1, INL/EXT-12-27057, Idaho National Laboratory (INL), March 2013.

[6] ***S.V. Bakulin, V.P. Garin, E.S. Glushkov et al.*** Study of HTGR Nuclear Safety at the GROG and ASTRA Facilities // Proceedings of the Fifth International Conference on Nuclear Criticality Safety, Albuquerque, NM, USA, September 17-21, 1995, v1, p. 6-18 - 6-24.

[7] MNCP-4B: Monte Carlo N-Particle Transport Code System // RSIC Computer Code Collection, CCC-200, Oak Ridge National Laboratory, 1997

[8] MCNP – A General Monte Carl N-Particle Transport Code, verson 4B // March 1997, Edited by Judith F. Briesmeister, Los Almos National Laboratory manual, LA-12625, 1997

[9] ***А.Н. Алексеев, С.Н. Большагин, Е.А. Гомин, М.И. Гуревич и др.*** Статус MCU-5 // ВАНТ сер. Физика ядерных реакторов, вып. 4, с. 4-23, 2011

[10] ***Гуревич М.И., Шкаровский Д.А.*** «Расчет переноса нейтронов методом Монте-Карло по программе MCU» // Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

[11] ***К. Роджерс*** Укладки и покрытия // Москва, “Мир”, 1968

[12] ***Itasca Consulting Group, Inc*** UDEC(Universal Distinct Elemental Code) // Version 4.0 Minneapolis, ICG, 2004

[13] ***А.Н. Шмелёв, Г.Г. Куликов, Э.Ф. Крючков, Е.Г. Куликов, В.А. Курнаев, Г.Х. Салахутдинов, В.Н. Ермаков*** Потенциальная роль гибридных синтез-деление

наработчиков топлива в замкнутом (U-Pu) топливном цикле с вовлечением тория // Препринт, МИФИ, 002-2013, Москва, 2013

[14] ***Бояринов В.Ф., Брызгалов В.И., Глушков Е.С., Гомин Е.А., Гуревич М.И., Давиденко В.Д., Фомиченко П.А., Цибульский В.Ф., Юдкевич М.С., Марова Е.В., Сухарев Ю.П., Митенкова Е.Ф., Новиков Н.В.*** Расчётные нейтронно-физические “бенчмарк”-исследования реактора типа ГТ-МГР. Там же, 2006, вып. 1, с. 110–119.

[15] ***Бояринов В.Ф., Брызгалов В.И., Глушков Е.С., Гомин Е.А., Гуревич М.И., Давиденко В.Д., Фомиченко П.А., Цибульский В.Ф., Юдкевич М.С., Марова Е.В., Сухарев Ю.П., Митенкова Е.Ф., Новиков Н.В.*** Расчётно-экспериментальные исследования нейтронно-физических характеристик активной зоны ГТ-МГР // Атомная энергия, январь 2007 г., т. 102, вып. 1, с. 75–81.

[16] ***Глушков Е.С., Гуревич М.И., Фомиченко П.А., Осипов С.Л., Песков Р.А., Сорокин С.Е., Сухарев Ю.П.*** Результаты верификации программы MCU-HTR на примере решения проектных нейтронно-физических задач ВТГР // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2012, вып. 4, с. 46–53.

[17] ***Осипов С.Л., Сорокин С.Е., Сухарев Ю.П., Глушков Е.С., Гуревич М.И., Фомиченко П.А.*** Результаты расчёта нейтронно-физических характеристик 3D модели реактора ГТ-МГР по коду MCU-HTR. Там же, 2013, вып. 2, с. 15–24.

[18] ***Colak U., Seker V.*** Monte Carlo criticality calculations for a pebble bed reactor with MCNP. Nuclear Mathematical and Computational Sciences: A Century in Review, A Century Anew Gatlinburg, Tennessee, April 6-11, 2003, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL (2003), p. 1–9.

[19] ***Abedi A., Vosoughi N., Bagher M.G.*** An Exact MCNP Modeling of Pebble Bed Reactors / World Academy of Science, Engineering and Technology, 2011, 59, p. 959–963.

[20] ***Ilas D., Gehin J.*** HTTR Fuel Block Simulations with Scale / PHYSOR 2010 – Advances in Reactor Physics to Power the Nuclear Renaissance, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, May 9-14, 2010, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL, 2010, p. 263–270.

[21] ***Bryzgalov V.I., Gurevich M.I.*** The neutrons flux density calculations by Monte-Carlo code for the double geterogeneity fuel / Proc. of the Int. Conf. on Reactor Phys. and Reactor Comp. Tel-Aviv, Jan 23-26, 1994, p. 190.

[22] ***Critical experiments*** and reactor physics calculations for low enriched high temperature gas cooled reactors. IAEA-TECDOC-1249, Printed by the IAEA in Austria, October 2001.

[23] ***Alexeyev N.I., Bryzgalov V.I., Chachin D.V., Glushkov A.E., Gomin E.A., Shkarovsky D.A., Gurevich M.I.*** Comparison of the criticality experiment calculation results by the MCU-RFFI/A, MCNP, MONK and KENO codes / Proc. of the Int. Conf. on the Physics of Nuclear Science and Technology. October 5, 1998, Long Island, Vol. 2, P. 1060–1067.

[24] ***Брызгалов В.И., Гомин Е.А., Каминский А.С., Субботин Е.С., Тебин В.В., Гуревич М.И.*** Расчётно-экспериментальное исследование двойной гетерогенности твэлов ВТГР. Там же, 1989, вып. 2, с. 44–49.

[25] ***Гуревич М.И.*** Алгоритмы поиска геометрических зон // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 1994, вып. 3, с. 68–82.

[26] ***Forrest B. Brown*** Monte Carlo advances and challenges // Frederic Joliot/Otto Hahn Summer School, Karlsruhe Germany (2005).

[27] ***И.М. Соболь*** Численные методы Монте-Карло // Москва, «Наука», 1973 г.

[28] ***Чукбар Б.К.*** Верификация статистического метода CORN моделирования микротоплива для случаев повышенного содержания зёрен // В печати, ВАНТ «Физика Ядерных Реакторов»

[29] **Л.Ф.Шампайн, И.Гладвел, с.Томпсон.** Решение обыкновенных дифференциальных уравнений с использованием MATLAB // «ЛАНЬ», Санкт-Петербург – Москва – Краснодар, 2009.

[30] **Э.Хайрер, Г.Вайнер.** Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. // Москва, «Мир», 1999.

[31] ***Н.Н. Пономарев-Степной, Н.Е. Кухаркин, Е.С. Глушков, А.А. Бобров, В.Ф. Бояринов, В.П. Гарин, А.Е. Глушков, В.Н. Гребенник, М.И. Гуревич, С.В. Данелия, В.Е. Демин, А.А. Зимин, Г.В. Компаниец, А.М. Крутов, В.А. Лобынцев, Е.В. Марова, В.А. Невиница, С.Г. Недорезов, В.И. Носов, Д.Н. Поляков, Е.Н. Самарин, О.Н. Смирнов, Б.С. Степеннов, Ю.П. Сухарев, П.А. Фомиченко, Е.И. Чуняев*** БЕНЧМАРК КРИТИЧЕСКИЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ НА СБОРКАХ СТЕНДА АСТРА С ГРАФИТОВЫМ ЗАМЕДЛИТЕЛЕМ И КОЛЬЦЕВОЙ АКТИВНОЙ ЗОНОЙ ИЗ ШАРОВЫХ ТВЭЛОВ ВТГР // ИАЭ, Российский научный центр «Курчатовский институт», Москва, 2007

[32] ***Гуревич М.И., Алексеев Н.И.*** Программа MCU для расчета методом Монте-Карло нейтронно-физических храктеристик ядерных реакторов. Язык описания геометрии NCGSIM для геометри ческого модуля NCG // Препринт ИАЭ 5771/5 Москва-1994

[33] ***Дж. Касселс*** Введение в геометрию чисел // Москва, «Мир», 1965

[34] ***Дж.Спанье, Э. Гелбард*** Метод Монте-Карло и задачи переноса нейтронов // Москва, «Атомиздат», 1972.

[35] ***Scott Meyers*** Effective C++ *//* 3rd edition***,*** Addison-Wesley, 2005

[36] ENDF-102, Data formats and procedures for the evaluated nuclear data file, ENDF-6 // BNL-NCS-44945-01/04-Rev., Informal Report, Revised April 2001. Written by the Members of the Cross Section Evaluation Working Group, Edited by: V.McLane, National Nuclear Data center Brookhaven National Laboratory Upton, N.Y. 11973-5000

[37] ***О.Оре*** Теория графов // Москва, «Наука», 1968

[38] ***С.П. Иглин*** Математические расчёты на базе MATLAB // Санкт-Петербург, «БХВ-Петербург», 2005

[39] ***Зинаков Д.Л., Гуревич М.И., Тельковская О.В., Дружинин В. Е.*** Конвертор исходных данных для полномасштабного расчета РБМК по универсальной программе MCU // Атомная энергия, 2013, т.113, вып. 6, с. 319-323

[40] ***Ю.Н. Тюрин, А.Л. Макаров*** Статистический анализ данных на компьютере // Москва, «ИНФРА М», 1998

[41] ***Д. Кнут*** Искусство программирования для ЭВМ, сортировка и поиск // Москва, «Мир», 1978

[42] ***С.М. Ермаков, Г.А. Михайлов*** Статистическое моделирование // Второе издание, дополненное, Москва, Наука, главная редакция физико-математической литературы, 1982

[43] ***Гуревич М.И.*** Роль очередей в архитектуре пакетов программ для решения уравнений методом Монте-Карло // ВАНТ Серия:Физика ядерных реакторов N4, 1994 стр 23-36

[44] ***B.V. Kuteev, A.A. Borisov, A.A. Golikov et al.***,Tokamak-based MW-Range Fusion Neutron Sources // DOE Workshop on Fusion-Fission Hybrid Reactors, Gaithersburg, Maryland, USA, September 30 – October 2, 2009.

[45] ***Б.В. Кутеев, В.И. Хрипунов*** Современный взгляд на гибридный термоядерный реактор // ВАНТ сер. Термоядерный синтез, вып. 1, с.3, 2009

[46] ***B.V. Kuteev, P.R. Goncharov, V.Yu. Sergeev, V.I. Khripunov*** Intense Fusion Neutron Sources // Plasma Physics Reports, 2010, vol.36, No.4, pp.281-317

[47] ***А.Ю. Днестровский, А.А. Голиков, Б.В. Кутеев, Р.Р. Хайрутдинов, М.П. Грязневич*** Исследование стационарного режима работы нейтронного источника на основе ТОКАМАКа // ВАНТ сер. Термоядерный синтез, вып. 4, 2010

[48] ***А.Н. Алексеев, С.Н. Большагин, Е.А. Гомин, М.И. Гуревич и др.*** Статус MCU-5 // ВАНТ сер. Физика ядерных реакторов, вып. 4, с. 4-23, 2011

[49] ***John Wesson*** Tokamaks // 3rd edition, Clarendon-Press Oxford, 2004

[50] ***П.Н. Алексеев, М.И. Гуревич, А.А. Дудников, А.А. Седов, А.А. Фролов, А.Л. Шимкевич*** Концепция бланкета для ториевого цикла ТИН // Совещание по стационарным режимам работы термоядерного источника нейтронов (ТИН), Москва, 21-22 февраля 2011

[51] ***Б.В. Кутеев, А.В. Жиркин, М.И. Гуревич, Б.К. Чукбар, Ю.Е. Титаренко, В.Ф. Батяев, В. Гудовски*** Расчётный анализ нейтронно-физических характеристик термоядерного источника в трёхмерной геометрии // 4-ое международное совещание по нейтронным источникам в Звенигороде, июнь 2011

[52] ***B.V. Kuteev, A.V. Spitsyn, A.V. Golubeva, V.I. Khripunov, M.I. Gurevich, B.K. Chukbar, A.V. Zhirkin, A.B. Sivak, V.M. Chernov, D.A. Blokhin, M.V. Leontieva-Smirnova, M.M. Potapenko*** Materials for Fusion Neutron Source // 15th International Conferences on Fusion Reactor Materials (ICFRM-15), Charlesstone, october 2011

[53] ***Б.В. Кутеев, А.В. Жиркин, Б.К. Чукбар, В.Ф. Батяев, Ю.Е. Титаренко, К.В. Павлов, А.Ю. Титаренко, С.Н. Юлдашев, В. Гудовски*** Нейтронно-физические исследования термоядерного источника нейтронов для получения максимального потока тепловых нейтронов // ВАНТ “Термоядерный синтез”, в.1, 2013

[54] ***Б.К. Чукбар, М.И. Гуревич*** Выбор конфигурации жидко-солевого ториевого бланкета термоядерного источника нейтронов // SCVRT2011 Труды Международных научных конференций “Ситуационные центры и информационно-аналитические системы класса 4i”, Москва-Протвино, 2011