

Национальный Исследовательский Центр «Курчатовский Институт»

На правах рукописи

Карпушкин Тимофей Юрьевич

Развитие метода ВПС для сложных геометрий и задач выгорания с использованием метода средних хорд.

Специальность: 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание учёной степени
кандидата технических наук

Москва – 2011

Работа выполнена в Национальном Исследовательском Центре «Курчатовский Институт»

Научный руководитель,
доктор технических наук

Цибульский Виктор Филиппович

Официальные оппоненты:

доктор технических наук

Ельшин Александр Всеволодович

кандидат физико-математических наук

Быков Вячеслав Парфеньевич

Ведущая организация:

ОАО «ОКБМ Африкантов»

Защита диссертации состоится "___" _____ 201 г. в ___ ч. ___ мин. на заседании диссертационного совета Д 520.009.06 в Национальном Исследовательском Центре «Курчатовский Институт» по адресу 123182, г. Москва, пл. Курчатова, д. 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЦ «Курчатовский Институт»

Автореферат разослан "___" _____ 201 г.

Учёный секретарь диссертационного совета
доктор технических наук, профессор

В. Г. Мадеев

1 ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность

Современные прогностические исследования перспектив развития атомной энергетики предполагают различные варианты, которые можно агрегировано рассматривать как три базовых сценария мирового ядерно-энергетического развития.

Низкий сценарий предполагает, что доля атомной энергетики в общем объёме энергопотребления сохранится примерно на современном уровне.

Умеренный сценарий предполагает, что масштаб роста ядерной энергетики будет ориентироваться на замещение различных видов органического топлива в электроэнергетике, и, возможно, наибольшей мотивацией такого решения станут экологические преимущества.

Высокий вариант ориентируется на крупномасштабное развитие ядерной энергетики с высокими темпами во второй половине 21-го столетия. При этом, кроме сферы электроэнергетики, ядерная энергия начнёт использоваться и для неэлектрических целей (производство пресной воды, искусственной моторное топливо, технологические процессы, требующие высокого температурного потенциала).

По всей видимости, до середины века будет преобладать умеренный сценарий с постепенной трансформацией в высокий к концу столетия. Об этом свидетельствуют прогнозы спроса на энергию до конца столетия и возможности различных энергопроизводящих технологий удовлетворить этот спрос. Исследования предсказывают, что примерно с настоящего времени возникает неудовлетворённый спрос по энергии, быстрый рост которого уже в течение следующих 40 лет не способны будут удовлетворить суммарно все технологии получения энергии при современном их состоянии и ценах. Изменить ситуацию может лишь ядерная энергетика при вовлечении в топливный цикл изотопов уран-238 и торий-232, что предусматривает значительное увеличение доли реакторов на быстрых нейтронах в общем парке ядерных реакторов. Крупномасштабное развитие ядерной энергетики предполагает выделение ядерных реакторов различной спецификации, совершенствование уже существующих моделей, внедрение новых материалов и технологий.

Вместе с тем последние события в Японии на АЭС Фукусима-1 независимо от причин возникновения и развития аварий на её энергоблоках приведут к ещё большему ужесточению требований к безопасности существующих и строящихся ядерных энергетических установок во всём мире.

Всё это подводит к выводу, что всё возрастающую роль будет иметь компьютерное моделирование при создании и исследовании всех систем ядерной установки, и в частности нейтронно-физический расчёт, которое позволит со значительно более высокой точностью, по сравнению с современными расчётами предсказывать основные характеристики реактора, в том числе и имеющие существенное значение для оценки его безопасности.

Выбор оптимальных схем конструкции, материалов, режимов и параметров при создании наиболее жизнеспособных безопасных и экономичных ядерных энергетических установок предъявляет к результатам нейтронно-физических расчётов высокие требования по точности, и даже с учётом существенного прогресса в области вычислительной техники постоянно остаётся проблема получения качественных решений с минимальными затратами времени. Не смотря на развитие компьютерной техники и появившиеся возможности значительного сокращения времени расчётов посредством внедрения технологий распараллеливания проблема прямого совершенствования алгоритмов нейтронно-физического расчёта с точки зрения сокращения временных затрат по-прежнему сохраняет свою остроту. Это связано с необходимостью проведения серийных многовариантных итерационных нейтронно-физических расчётов как на уровне ячеек и кассет, так и на уровне полномасштабных реакторов с вовлечением теплогидравлических и прочностных расчётов в этот итерационный процесс. Развитие вычислительной техники за последние десятилетия привело к тому, что стало возможным проводить за приемлемое время полномасштабный нейтронно-физический расчёт реактора методом Монте-Карло. Этот метод позволяет обходиться практически без приближений и считается эталонным, приближающимся по достоверности к эксперименту. Однако время расчёта

этим методом составляет десятки и сотни часов процессорного времени. Поэтому актуальность инженерных методов и программ расчёта сохраняется.

Таким образом, повышение точности инженерных нейтронно-физических расчётов ядерных реакторов и повышение быстродействия является важной задачей. В современных программах обычная структура расчёта представляется в виде двух этапов. Расчёт ячейки (или кассеты) реактора с использованием подробных библиотек ядерных данных и детальным описанием геометрии фрагмента. Целью этого этапа расчёта является получение усредненных по пространству ячейки и энергии малогрупповых нейтронно-физических констант с целью последующего их использования в полномасштабном расчёте реактора. На втором этапе расчёты выполняется полномасштабный расчёт реактора. Очевидно, что определяющим фактором успешного расчёта является расчёт ячейки и кассеты. Именно на этой стадии в наиболее полной степени учитываются физические особенности изотопов входящих в состав топливной композиции и геометрия ячейки. В современных программах нейтронные сечения изотопов обычно получают из файлов оцененных ядерных данных типа ENDF/B, JENDL, РОСФОНД. Решение задачи переноса нейтронов в ячейке (или кассете реактора) выполняется на основе решения уравнения переноса в интегральной или интегро-дифференциальной формах.

Наиболее распространенный способ решения таких задач - метод вероятностей первых столкновений (далее ВПС). Данный метод использует понятие вероятности первого столкновения нейтрона. При точных значениях таких вероятностей расчёт стационарного состояния, плотностей потоков и коэффициента размножения представляется рутинной задачей. Однако, аналитические способы расчёта таких вероятностей развиты лишь для простых геометрических конфигураций, чаще всего такими методами рассчитывают вероятности для многослойных плоскостей, сфер, цилиндров. Для более сложных геометрий используются численные методы расчёта. Для успешного вычисления вероятностей такими методами, в их основе должен быть подробный учёт всех геометрических особенностей данной расчётной области а также распределения материалов в ней. Это особенно важно для кассет с неравномерным распределением поглощающих материалов по периметру.

Другим важным этапом расчёта является моделирование выгорания материалов ячеек и кассет в течение заданного времени работы в реакторе. Особенностью такого расчёта является решение пространственно-энергетической задачи переноса нейтронов на каждом временном шаге. В процессе выгорания изменяются макроскопические сечения материалов, и если пространственно-энергетическая задача переноса нейтронов решается методом вероятностей первых столкновений, то необходим пересчёт матриц вероятностей для новых сечений на очередном временном шаге. Использование прямых численных способов расчёта вероятностей для сложных областей как по геометрии так и по материальному составу обычно связано с большими временными затратами и повторение таких вычислений в процессе расчёта выгорания приводит к достаточно длительному времени расчёта. Развитию методов вычисления стандартных изотропных вероятностей первых столкновений нейтронов в сложных геометрических областях и посвящена данная работа.

Актуальность работы определяется:

- необходимостью совершенствования программного обеспечения для расчёта ядерных реакторов и обеспечения на этой основе более надёжных и достоверных оценок нейтронно-физических характеристик реакторов не только в стационарном состоянии, но и в процессе выгорания топлива, когда избыточная реактивность компенсируется выгорающими поглотителями;

- повышением требований к быстродействию взаимосогласованных комплексных расчётов, в которых используются программные модули, обеспечивающие высокую точность расчёта отдельных физических процессов. Требование высокого быстродействия позволяет расширить спектр анализируемых задач;

- необходимостью эволюционной модернизации программного обеспечения в области нейтронно-физических расчётов, ориентированных на современные базы ядерных данных, в полной мере использующих возможности современной вычислительной техники и

обеспечивающих проведение вычислений в геометрически сложных областях с детальным описанием изотопной кинетики.

Цель работы.

Развитие методик и алгоритмов расчёта матриц вероятностей первых столкновений нейтронов в сложных геометрических областях, как для единичного нейтронно-физического расчёта, так и для расчётов выгорания.

Создание программы расчёта матриц вероятностей первых столкновений в произвольной в плане геометрии. Создание подпрограмм быстрого восстановления матриц вероятностей первых столкновений нейтронов на каждом шаге по выгоранию.

Научная новизна результатов работы состоит в следующем.

Разработаны оригинальные алгоритмы:

- представления произвольной в плане геометрии в виде её регулярной сеточной модели;
- последующего объединения однотипных по материалам (или регистрационным зонам) ячеек геометрической сетки в более обширные структуры;
- расчёта матриц вероятностей первых столкновений нейтронов, использующий построение лучей траекторий нейтронов от рождения до точки первого столкновения в заданной сеточной геометрии и вычисление длин хорд в регистрационных зонах;
- восстановления матриц вероятностей первых столкновений на очередном временном шаге по выгоранию на основе реперных средних хорд, рассчитанных для начального состояния;

Данные алгоритмы были реализованы в виде:

- программы **PIJMK**, входящей в пакет комплекса **UNK**, которая производит перевод любой заданной исходной геометрии на плоскости в сеточное представление, затем вычисляет матрицы первых столкновений и средние хорды до первого столкновения для заданного количества энергетических групп на основе построения нейтронных лучей в сеточной геометрии, используя заданные типы отражения от границы системы;
- подпрограмм, добавленных в модуль **CELLHI** комплекса **UNK**, предназначенных для восстановления матриц вероятностей первых столкновений для отличающейся от исходной топливной композиции на основе реперных средних хорд, рассчитанных для начального состояния.

Практическая ценность полученных результатов определяется:

- использованием комплекса **UNK** для подготовки констант, используемых затем комплексами расчёта энергетических, транспортных и транспортабельных реакторов (**BARS**, **SUNAM-U** и др.). Предполагается использование программы **PIJMK** в качестве основного модуля для расчёта стандартных и альбедных матриц вероятностей первых столкновений нейтронов в составе комплекса **UNK**.
- использованием программы **PIJMK** в составе **UNK** для расчёта изменения нуклидного состава топливной композиции в зависимости от времени с дальнейшим использованием полученных данных в расчётах кампании реактора комплексом **BARS**.

Основные положения, выносимые на защиту:

- методика автоматического преобразования геометрии расчётной области в сеточное описание с неравномерными по пространству размерами ячеек сетки;
- методика расчёта вероятностей первых столкновений нейтронов и средних хорд на основе построения траекторий нейтронов на сеточной модели геометрии;
- методика восстановления матриц вероятностей для изменённой относительно реперной топливной композиции на основе средних хорд;
- расчётно-аналитические исследования по выбору оптимальных параметров в модели восстановления матриц ВПС методом средних хорд;

- программа расчёта вероятностей первых столкновений и средних хорд методом стохастических траекторий нейтронов, подпрограммы восстановления матриц ВПС в процессе выгорания.

Апробация работы.

Результаты работы докладывались на 19 и 21 семинаре по нейтронно-физическим проблемам атомной энергетики (“Нейтроника 2008”, “Нейтроника 2010”).

Личный вклад автора.

Автор создал программный модуль РИЖК:

- разработал алгоритмы создания и преобразования сеточной модели геометрии из произвольной в плане исходной геометрии;

- разработал алгоритмы расчёта матриц ВПС и средних хорд с помощью стохастических траекторий нейтронов.

Автор создал подпрограммы восстановления матриц ВПС для изменённой топливной композиции относительно исходной с помощью средних хорд до первого столкновения.

Публикации автора.

По результатам исследований опубликовано 5 печатных работ, в том числе 3 в рецензируемых научных изданиях.

Структура и объём диссертации.

Диссертационная работа изложена на 129 страницах текста, включая 56 рисунков, 46 таблиц, состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы из 72 наименований и одного приложения.

2. СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ.

Во *введении* обоснована актуальность развития метода ВПС для геометрически сложных систем и задач выгорания. Сформулированы цель диссертационной работы и решаемые задачи. Приведены основные положения, выносимые автором на защиту, представлены научная новизна полученных результатов и их практическая значимость.

В *первой главе* автором проводится аналитический обзор литературы и существующих методов расчёта матриц вероятностей первых столкновений для различных геометрий в разных приближениях.

Метод вероятностей первых столкновений является одним из методов повышенной точности, который используется для решения интегрального транспортного уравнения переноса нейтронов в многогрупповом представлении. Идея метода состоит в том, что если для каждой энергетической группы известны вероятности первых столкновений в зоне j для нейтронов, родившихся или испытавших предыдущее рассеяние в зоне i , то нахождение пространственного распределения нейтронов в системе сводится к решению интегрального уравнения переноса нейтронов, которое представляется в виде системы линейных уравнений. Для решения таких систем уравнений разработаны современные быстродействующие алгоритмы. Таким образом, основная задача метода сводится к нахождению значений самих ВПС.

Для одномерной цилиндрической геометрии традиционно используется одна из разновидностей метода Карлвика. Для кольцевых зон такой системы в предположении азимутальной однородности и изотропности рассеяния, вероятности определяются по квадратурным формулам. Для учёта анизотропии рассеяния в используется транспортное приближение. ВПС вычисляются в элементарной ячейке различной формы: квадратной, гексагональной, прямоугольной. Основное преимущество данного метода состоит в том, что для простых одномерных и двумерных ячеек вероятности вычисляются очень быстро. Для расчёта

одномерных систем были разработаны быстродействующие модификации метода, которые основывались на приближении изотропного потока на границах зон ячейки. Для расчёта больших двумерных систем без сложной процедуры численного интегрирования был разработан метод интерфейсных токов, используемый как для получения вероятностей в двумерных системах, так и реализованный в виде матриц отклика. Для сложных геометрий существуют программы, численно интегрирующие выражение для вероятности первого столкновения, для чего каждую зону системы разбивают на элементарные объёмы.

Однако чаще всего для точных расчётов матриц вероятностей первых столкновений нейтронов в сложных геометриях используют так называемый метод лучей (ray tracing или tracking), реализованный в виде геометрического блока построения лучей в фиксированной или универсальной геометрии и взаимодействующего с ним блока расчёта вероятностей, где от вычисления интегралов шестой степени по объёму осуществлён переход к интегралам по углам вдоль луча.

Частотный метод расчёта вероятностей по случайным траекториям

Самый простой способ расчёта матриц ВПС методом лучей состоит в использовании при построении лучей элементов нейтронно-физического расчёта методом Монте-Карло. Внутри расчётной геометрической области разыгрываются координаты точки рождения нейтрона, его направление полёта, и оптический путь. Определяется номер регистрационной зоны, в которой находится точка рождения, и в соответствующую переменную-счётчик рождений NS_i^g в зоне номер i добавляется единица. Затем в направлении полёта производится процесс построения луча, как суммы хорд в пройденных лучом зонах. Пройденный оптический путь постоянно сравнивается с разыгранным оптическим путём, и при достижении их равенства вычисляются координаты точки первого столкновения, номер регистрационной зоны столкновения и к счётчику столкновений NC_{ij}^g в данной зоне j , при условии старта из зоны i , прибавляется единица. Луч обрывается и начинается процесс построения следующего луча. После построения заданного количества лучей вероятности первых столкновений вычисляются по прямому частотному определению вероятности: $P_{ij}^g = NC_{ij}^g / NS_i^g$. Достоинствами данного способа расчёта являются

- возможность отслеживания точки рождения и точки первого столкновения, с тем, чтобы вычислять на их основе различные характеристики системы, такие как средние хорды до первого столкновения, или времена;
- применимость в любой геометрии;
- отсутствие каких либо других вычислений в процессе построения луча, кроме хорд и оптических путей.

Недостаток такого метода очевиден: на одной траектории рассчитывается только единичный вклад в вероятность P_{ij}^g , а информация о длине хорд используется только для сравнения оптических путей. Поэтому данный метод применим лишь при быстрых алгоритмах построения траектории.

Вычисление вероятностей на основе информации о длинах хорд вдоль луча

Все остальные способы расчёта так или иначе используют информацию о длинах хорд вдоль луча. В их основе лежит простое соображение о том, что вероятность первого столкновения нейтрону вдоль луча внутри зоны j оптической толщины $\Delta\tau_j$ при рождении в зоне номер i есть

$$P_{ij} = \exp(-\tau) [1 - \exp(-\Delta\tau_j)],$$

где τ - оптический путь вдоль луча от точки рождения в зоне i до точки первого пересечения с зоной j .

В самом деле, для трёхмерных систем вероятность того, что нейтрон, родившийся в зоне с номером i с равномерным по зоне и изотропным распределением источников, испытает первое столкновение в зоне с номером j , выражается интегралом:

$$P_{ij} = \int_{4\pi} \frac{d\dot{\Omega}}{4\pi} \int_{V_i} \frac{dr}{V_i} f_j(r, \dot{\Omega}),$$

где $f_j(r, \dot{\Omega})$ - вероятность того, что нейтрон, родившийся в точке r системы и летящий в направлении $\dot{\Omega}$ испытает первое столкновение в зоне с номером j . Очевидно, что

$$f_j(r, \dot{\Omega}) = \exp(-\tau_j(r, \dot{\Omega})) [1 - \exp(-\Delta\tau_j(r, \dot{\Omega}))],$$

где $\tau_j(r, \dot{\Omega})$ - оптическая длина пути нейтрона от точки r вдоль направления $\dot{\Omega}$ до первого пересечения с поверхностью j -й зоны; $\Delta\tau_j(r, \dot{\Omega})$ - оптическая длина отрезка пути этого нейтрона в j -й зоне.

Вычисление интеграла методом Монте-Карло для N лучей можно произвести по формуле

$$P_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f_j(r_n, \dot{\Omega}_n).$$

В основе улучшения приведённого метода лежит соображение, что, вообще говоря, средняя вероятность нейтрону, стартовавшему из отрезка с длиной оптического пути $\Delta\tau_a$, вдоль луча с направлением $\dot{\Omega}$ испытать первое столкновение в отрезке с длиной оптического пути $\Delta\tau_b$, пролетев при этом через зоны с оптическими толщинами $\Delta\tau_1, \Delta\tau_2 \dots \Delta\tau_n$ есть

$$P_{ab} = \frac{(1 - \exp(-\Delta\tau_a)) \exp(-(\Delta\tau_1 + \Delta\tau_2 + \dots + \Delta\tau_n)) (1 - \exp(-\Delta\tau_b))}{\Delta\tau_a}$$

Поэтому в общем случае имеем

$$P_{ij} = \int_{4\pi} \frac{d\dot{\Omega}}{4\pi} \int_{S(\dot{\Omega})} \frac{dr}{S(\dot{\Omega})} U_{ij}(r, \dot{\Omega}),$$

где

$$U_{ij}(r, \dot{\Omega}) = \begin{cases} \frac{S(\dot{\Omega}) \exp(-\tau_{ij})}{\sum_{ii} V_i} [1 - \exp(-\Delta\tau_i) - \exp(-\Delta\tau_j) + \exp(-\Delta\tau_i - \Delta\tau_j)], & \text{траектория} \in i, j \\ 0, & \text{траектория} \notin i, j \end{cases}$$

Здесь \sum_{ii} - полное сечение в зоне, с номером i , которое предполагается постоянным внутри зоны; $S(\dot{\Omega})$ - площадь основания цилиндра; $\tau_{ij}(r, \dot{\Omega})$ - оптическая длина пути частицы от выхода из зоны i , до входа в зону j для траектории, начинающейся в точке r области $S(\dot{\Omega})$ в направлении $\dot{\Omega}$; $\Delta\tau, \Delta\tau_j$ - оптическая длина отрезка той же траектории в зонах i, j .

Важным преимуществом данного метода является возможность при определённом выборе угловых направлений $\dot{\Omega}$ рассчитывать вероятности одновременно и для направления $-\dot{\Omega}$.

Если исходная геометрия имеет постоянную структуру вдоль оси OZ , то все хорды, вычисленные для всех положительных направлений, принадлежащих одной вертикальной плоскости, зависят от длин хорд, вычисленных для горизонтального направления и угла между направлением $\dot{\Omega}$ и вертикалью.

Это позволяет вычислять вероятности интегрально сразу для всех направлений в вертикальной плоскости, рассчитывая только длины хорд в плоскости XOY . На практике или выбирают несколько выделенных направлений внутри плоскости, а результирующие вероятности вычисляют по квадратурной формуле с некоторыми весами (такой алгоритм реализован в модуле

UNKPII комплекса UNK), или вычисляют интеграл по углу θ в вертикальной плоскости с помощью функций Бикли:

$$P_{ij} = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \int_{S(\varphi)} \frac{dl}{S(\varphi)} U_{ij}(l, \varphi),$$

где

$$U_{ij}(l, \varphi) = \begin{cases} \frac{S(\varphi)}{\Sigma_{ii}} \left[Ki_3(\tau_{ij}) - Ki_3(\tau_{ij} + \Delta\tau_i) - Ki_3(\tau_{ij} + \Delta\tau_j) + Ki_3(\tau_{ij} + \Delta\tau_i + \Delta\tau_j) \right], & \text{при } i \neq j \\ \frac{S(\varphi)}{\Sigma_{ii}} \left[\frac{\Sigma_{ii}}{S(\varphi)} - Ki_3(0) + Ki_3(\Delta\tau_i) \right], & \text{при } i = j \\ 0, & \text{траектория } \notin i, j \end{cases},$$

$$Ki_n(\tau) = \frac{1}{2} \int_0^\pi \exp(-\tau/\sin(\theta)) \sin^{n-1}(\theta) d\theta - \text{функция Бикли}.$$

Метод "обобщённых" вероятностей первых столкновений нейтронов

Естественным развитием метода вероятностей первых столкновений для учета анизотропии рассеяния является использование P_N приближения. Транспортное уравнение переноса нейтронов в P_N приближении, записывается для коэффициентов разложения углового потока нейтронов по сферическим гармоникам. Коэффициентами в транспортном уравнении являются так называемые "анизотропные" или "обобщенные" вероятности. Интегральное транспортное уравнение переноса нейтронов в P_N приближении записывается в терминах анизотропных вероятностей. Оно выводится из третьей или интегральной формы уравнения Больцмана, в котором поток нейтронов и источник (внешний источник плюс источник нейтронов деления) разложены в бесконечный ряд по сферическим функциям Y_{lm} , а сечение рассеяния - в ряд по полиномам Лежандра P_l . Аргументом сферических функций является вектор направления полета нейтрона, а аргументом полиномов Лежандра - угол между направлениями полета нейтрона до и после столкновения. Как сферические функции, так и полиномы Лежандра образуют полные системы функций.

Во *второй главе* рассматривается частотный алгоритм вычисления изотропных матриц вероятностей первых столкновений нейтронов на основе отслеживания траектории нейтрона от рождения до точки первого столкновения в сеточной модели геометрии.

В общем случае в энергетической группе g вероятность нейтрону, рождённому в зоне i , испытать столкновение в зоне j есть

$$P_{ij}^g = \frac{\Sigma_{tj}^g}{V_i} \iint_{V_i V_j} \frac{\exp \left[- \int_0^R \Sigma_{tj}^g (r - R' \vec{\Omega}) dR' \right]}{4\pi |r - r'|} dV' dV,$$

где $r' = r - R' \vec{\Omega}$ есть точка рождения нейтрона в объёме V_i ; r - точка в объёме V_j ; R' - удаление точки r от r' в направлении $\vec{\Omega}$; $\int_0^R \Sigma_{tj}^g (r - R' \vec{\Omega}) dR'$ есть оптическая толщина; Σ_{tj}^g - полное макроскопическое сечение в точке $r' = r - R' \vec{\Omega}$.

Прямой точный аналитический расчёт по данной формуле возможен лишь для простейших геометрий. Для более сложных геометрий расчёт вероятностей ведётся численными методами, в частности, методом Монте-Карло.

Метод стохастических траекторий расчёта вероятностей первых столкновений заключается в следующем. Для каждой регистрационной зоны Ω равновероятно по ее объему разыгрывается точка рождения нейтрона и направление вылета Ω . Движение нейтронов вдоль этого направления продолжается до тех пор, пока случайно не реализуется акт столкновения, когда предварительно разыгранный оптический путь $S = -\ln(\alpha)$, где α – случайное число с равномерной плотностью распределения $[0;1]$, сравнивается с оптическим путём, пройденным нейтроном. Траектория нейтрона строится, как сумма длин хорд, в последовательно проходимых нейтроном геометрических зонах.

Пусть L_1, L_2, \dots, L_k – длины хорд в последовательно пройденных нейтроном геометрических зонах, $\Sigma_1, \Sigma_2, \dots, \Sigma_k$ – полные макроскопические сечения в данных зонах, тогда пройденный оптический путь есть $S_1 = \sum_{i=1}^k \Sigma_i L_i$. Во время полета нейтрон может столкнуться и в той зоне, где он родился, а может пролететь и несколько регистрационных зон до первого столкновения. Столкновение происходит в зоне, где $S = S_1$. После столкновения строится следующая траектория нейтрона. Число стартов NS_i из зоны i суммируется, суммируется и число столкновений NC_{ij} в зоне j нейтронов, стартовавших из зоны i . Вероятность P_{ij} определяется как отношение числа столкновений NC_{ij} нейтронов в зоне j , пришедших из зоны i , к полному числу стартов NS_i из зоны i :

$$P_{ij} = \frac{NC_{ij}}{NS_i}.$$

Таким образом, рассматривается множество лучей (траекторий), пересекающих расчётную область. Усреднение по всем траекториям позволяет определить среднее значение вероятности столкновений в каждой из регистрационных зон.

Модель геометрии

Важной частью для успешной работы алгоритма расчёта вероятностей первых столкновений методом стохастических траекторий является описание геометрии, и сам принцип работы с этой геометрией.

В данной работе предложен способ построения стохастических траекторий нейтронов в сеточной модели геометрии. Вся расчётная область покрывается очень мелкой квадратной пространственной сеткой, и все элементы, входящие в состав расчётной области (таблетка твэла, оболочка, газовый зазор между твэлом и оболочкой и прочие элементы конструкции) проецируются на эту мелкую пространственную сетку. Каждому элементу сетки приписывается номер материала, соответствующего элемента ячейки. Аналогия такого разбиения – представление картинки на экране дисплея.

В последующем, расчёт вероятностей первых столкновений происходит на мелкой квадратной сетке, что существенно упрощает поиск точек пересечения траектории нейтрона с каждым из элементов расчётной области. Такой способ работы с геометрией предполагает постоянную структуру всех геометрических объектов вдоль вертикальной оси Z , и для описания этих объектов достаточно задать фигуры в горизонтальной плоскости.

Выбор такого представления был сделан по нескольким причинам.

Во-первых, процесс построения траектории (луча) на такой сетке представляется простым и единообразным, не зависящим уже от исходной геометрии, то есть для построения траекторий может быть использован геометрический модуль, в котором реализованы алгоритмы работы с сеткой, в которую предварительно переведена исходная геометрическая конфигурация. В этом

случае подробность сеточной геометрии и её близость к реальной ограничивается только шагом сетки, реализованными алгоритмами проецирования и памятью компьютера, а процесс построения траекторий будет неизменным. Кроме того, описанные в данной работе алгоритмы объединения ячеек сетки в большие квадратные области и алгоритмы совместного использования полученной нерегулярной сетки с регулярной позволяют заметно ускорить процесс построения луча и вычисления длин хорд в регистрационных зонах.

Во-вторых в реальном реакторе исходно точная геометрия различных фрагментов активной зоны в процессе эксплуатации может трансформироваться и весьма сложным образом, и может оказаться что переход к сеточному описанию геометрии станет единственно возможным способом описание динамики геометрии задачи.

Таким образом, исходный трёхмерный геометрический объект, заполненный различными материалами, представляется в плане набором элементарных квадратов, заполненных в свою очередь определённым материалом каждый.

Предполагается, что исходные сложные построения на плоскости можно представить набором простых фигур, таких как *эллипс*, *правильный n-угольник*, *прямоугольник*, *выпуклый многоугольник* и *сегмент кольца*. Используется принцип наложения фигур: если текущая фигура частично или полностью «накладывается» на предыдущую, т.е. имеет с ней общую площадь, то общая площадь «перекрытия» заполняется материалом текущей фигуры (рис. 1). Это позволяет из набора элементарных фигур создавать более сложные геометрические объекты.

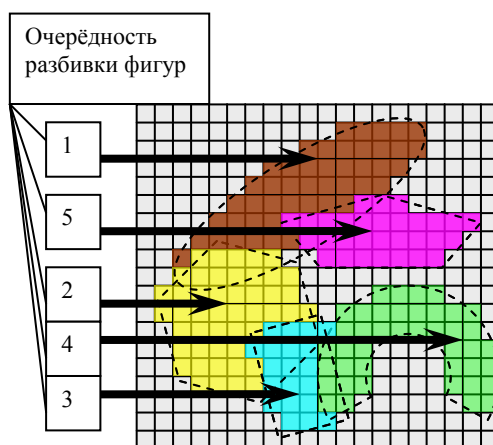


Рис. 1 Перекрытие фигур в зависимости от очередности.

Вся задача построения рабочей геометрической области сводится к разбивке последовательного списка фигур на элементарные квадраты и заполнению их соответствующими материалами или номерами зон. Элементарный квадрат считается принадлежащим фигуре, если более половины его площади находится внутри фигуры.

Для каждой из выбранных типов фигур был разработан собственный алгоритм разбивки.

Компьютерное представление разбивки следующее. Квадратная матрица соответствующей размерности создаётся исходя из максимальных размеров фигур и шага сетки. Каждый элемент матрицы – это номер материала заполнения элементарного квадрата. Индексы элемента матрицы – это индексы самого квадрата, т.е. его местоположение или нумерация относительно остальных квадратов (рис. 2).

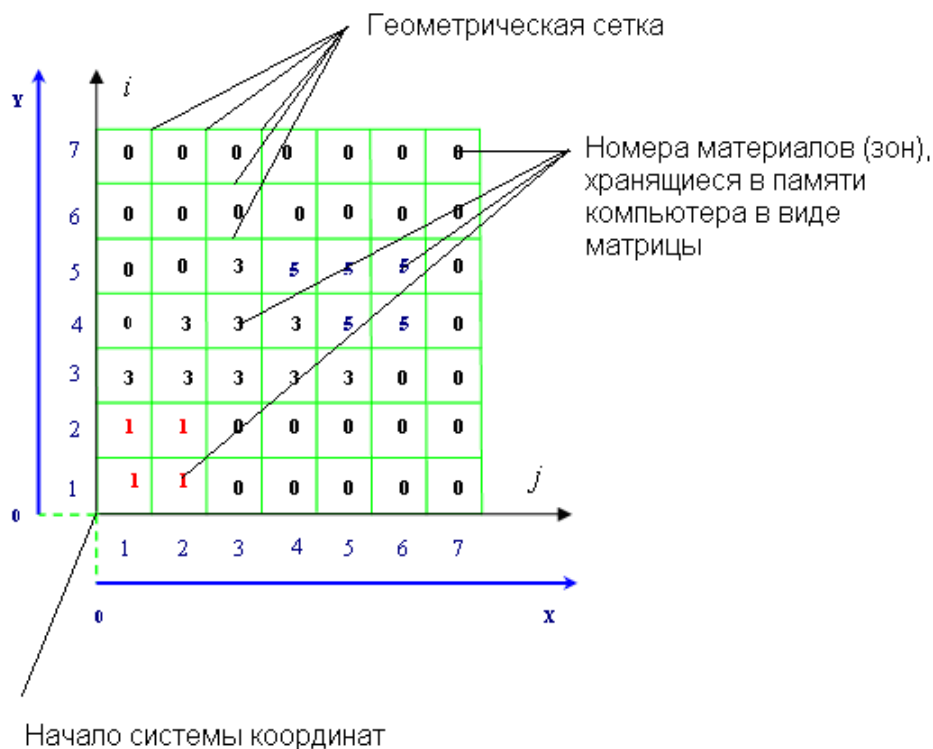


Рис. 2. Представление сеточной геометрии в памяти компьютера в виде матрицы, содержащей номера материалов или зон элементарных квадратов геометрической сетки.

Фигуры последовательно подвергаются разбивке. В соответствии с типом фигуры выбирается алгоритм разбивки или определения принадлежности элементарного квадрата фигуре, и если квадрат оказывается принадлежащим фигуре, соответствующий элемент матрицы меняет своё значение на номер материала заполнения этой фигуры. В результате после перебора всех фигур созданная матрица заполнена номерами различных материалов, либо номерами геометрических зон.

После рассмотрения перспектив использования полученной разбивки, например, для построения траекторий нейтронов в среде можно прийти к выводу, что при достаточно малом шаге временные затраты на расчёт траектории могут оказаться значительными, т.к. при её построении происходит перебор большого количества квадратов. Например, для расчёта кассеты реактора ВВЭР при пространственном шаге 0,01 см число элементарных квадратов $2736 \times 2736 = 7485696$ штук, а при шаге 0,001 см – $27262 \times 27262 = 743216644$ штуки. Т.е. существует необходимость объединения однотипных квадратов в более обширные области.

В качестве такой области был выбран так же *квадрат*. Для его описания достаточно задать координаты положения, например, центра, и длину стороны. Поиск точек пересечения лучей с границей тоже, по-видимому, не составит особого труда. Остаётся трудность с определением способа хранения параметров в памяти и доступа к ним по мере надобности.

Для хранения параметров областей и доступа к ним создаётся вторая матрица ***V*** той же размерности, что и матрица с номерами материалов заполнения элементарных квадратов (рис. 3 *a*). В этой матрице будут храниться порядковые номера объединённых квадратов (под термином «объединённый» понимается именно обширная квадратная область). Иными словами, каждому элементарному квадрату ставится в соответствие порядковый номер объединённого квадрата, которому принадлежит этот элементарный.

Если и они из того же материала (рис. 4 в) и не объединены в другие квадраты, то в памяти запоминается новый размер и новые координаты центра объединённого квадрата, а элементы матрицы \mathbf{B} , соответствующие индексам четырёх этих элементарных, заполняются порядковым номером объединённого квадрата. Затем проверяется следующий квадрат, лежащий выше по диагонали (рис. 5 а). Снова проверяется, заполнен ли он тем же материалом и не объединён ли он. Если это выполнено, то проверяются все квадраты, расположенные ниже него до нижней границы самого первого квадрата, и левее, до левой границы первого квадрата (рис. 5 б). Если все они из того же материала (рис. 5 в) и не объединены, то запоминается новый центр объединённого квадрата, его размер, и заполняются элементы матрицы \mathbf{B} , соответствующие индексам вновь захваченных элементарных квадратов, номером объединённого квадрата.

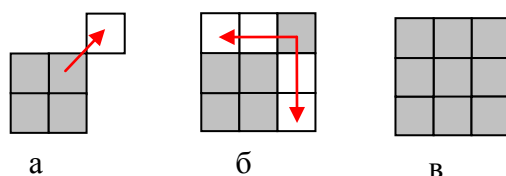


Рис. 5. Схема объединения, шаг 2.

Затем делается шаг ещё выше по диагонали и повторяется тот же алгоритм. Так происходит рост объединённого квадрата. Перебор всех мелких квадратов на сетке осуществляется по диагонали, перпендикулярной «направлению роста» объединённого квадрата.

На рис 6 представлен результат такого объединения

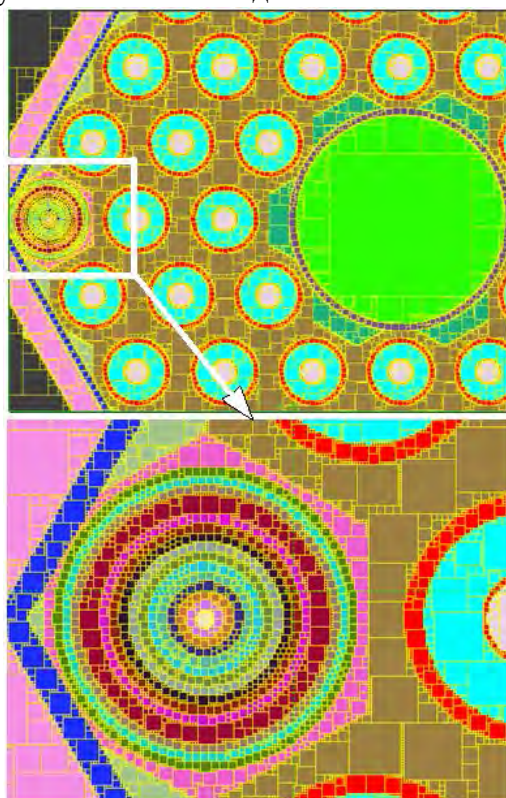


Рис. 6. Объединённые квадратные области.

Расчёт матриц ВПС

Расчёт вероятностей первых столкновений методом стохастических траекторий нейтронов был реализован в виде программного модуля PIJK, который работает в составе программного комплекса UNK. На основе информации о геометрии рассчитываемой системы и полных макроскопических сечениях материалов данный модуль производит подготовку геометрической

пространственной сетки, на которой затем производит построение траекторий нейтронов и расчёт вероятностей первых столкновений. Входная информация для работы модуля поставляется в виде двух стандартных файлов комплекса UNK: файла описания геометрии geominp.dat и файла STOTAL.DAT, содержащего полные групповые макроскопические сечения материалов. Также модуль использует файл, содержащий информацию о количестве стохастических траекторий, шаге геометрической сетки, типе отражения от границы и альбедо. Организационно модуль состоит из двух логических частей.

Первая часть отвечает за создание пространственной геометрической сетки и перенос всех геометрических объектов на эту сетку. Исходная информация файла geominp.dat, содержащего описание сложных объектов, кластеров и прочих построений, а так же материальный состав и расположение геометрических зон, преобразуется в последовательный список элементарных фигур на плоскости. В этом списке последовательно идут фигуры, описывающие геометрию материалов, затем фигуры регистрационных геометрических зон. Отдельно запоминаются параметры главной геометрической фигуры, поскольку её контуры являются границами, где стохастические траектории будут претерпевать отражение. Размер сеточной области формируется исходя из максимальных размеров фигур. Далее все фигуры из списка "проецируются" на данную сетку, то есть происходит замена фигур на систему элементарных квадратов, затем происходит объединение в обширные квадратные геометрические области. Проецирование и объединение производится два раза: по материалам и по геометрическим регистрационным зонам. Полученная информация о геометрии в виде матриц с номерами материалов (зон) и номерами объединённых областей сохраняется в файле outkv.dat.

Вторая логическая часть модуля RIJK отвечает за построение стохастических траекторий нейтронов и расчёт вероятностей первых столкновений. При работе модуля для экономии времени часть подготовки геометрии пропускается, если найден файл param.dat и файл outkv.dat с уже готовой к работе геометрической сеткой.

Построение траектории.

Основу данной части составляет подпрограмма построения стохастических траекторий или лучей нейтронов. Построение такой траектории не заканчивается до тех пор, пока для каждой энергетической группы не будет найдена своя зона первого столкновения. Каждая траектория строится, как последовательная сумма хорд в проходимых нейтроном зонах. На границе геометрической системы траектория претерпевает отражение в соответствии с заданным типом. Построение траектории начинается с розыгрыша точки рождения нейтрона, направления движения и оптического пути. Все построения траектории проецируются на плоскость XOY. Направление движения нейтрона в этой плоскости задаётся в виде вектора $\vec{dir} = (\cos \phi, \sin \phi)$, где ϕ - разыгранный угол направления в плоскости XOY. Случайные координаты x_0 и y_0 точки рождения нейтрона разыгрываются равномерно по всей геометрической области.

После определения точки рождения и направления вычисляется расстояние до границы системы.

Построение траектории ведётся на сеточной модели регистрационных зон. Так как было условлено, что начало системы координат совпадает с одним из углов пространственной сетки, то для определения индексов элементарного квадрата, где находится точка рождения нейтрона, достаточно разделить текущую координату на шаг сетки, взять от этого выражения целую часть, и прибавить единицу:

$$\begin{cases} j = \text{int}(x_0/h) + 1 \\ i = \text{int}(y_0/h) + 1 \end{cases} \quad (1)$$

При попадании точки на границу элементарного квадрата рассматривается знак соответствующей компоненты вектора направления \vec{dir} и делается вывод о попадании в тот или

иной квадрат (при равенстве такой компоненты нулю решение принимается равновероятно в пользу одного или соседнего квадрата).

По найденным индексам элементарного квадрата определяется объединённый квадрат, которому принадлежит данная точка, его положение и размер (см. рис. 3 а), и в направлении dir производится поиск точки пересечения траектории с границей данного объединённого квадрата (рис. 7).

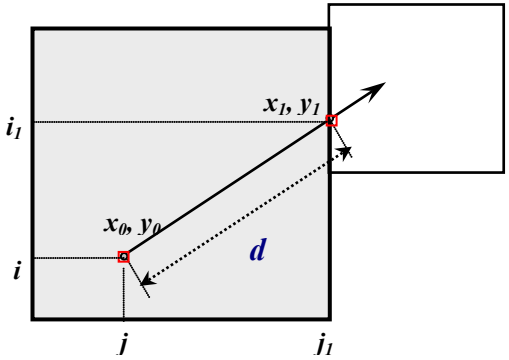


Рис. 7. Хорда d в объединённом квадрате. x_0, y_0 – начальная точка, x_1, y_1 - точка на границе объединённого квадрата в направлении движения нейтрона, являющаяся начальной точкой в соседнем объединённом квадрате.

Хорда d между начальной точкой и точкой пересечения запоминается. Для новой точки снова производится процедура поиска индексов элементарного квадрата по соотношению 1, а по ним определение положения и размеров объединённого, и строится новая хорда в объединённом квадрате. При одноимённости зон в старом и новом квадратах их хорды суммируются (рис. 8), формируя полную хорду, пройденную в регистрационной зоне. При смене номера зоны в новом квадрате вызывается подпрограмма определения зоны столкновения для всех энергетических групп (рис. 8).

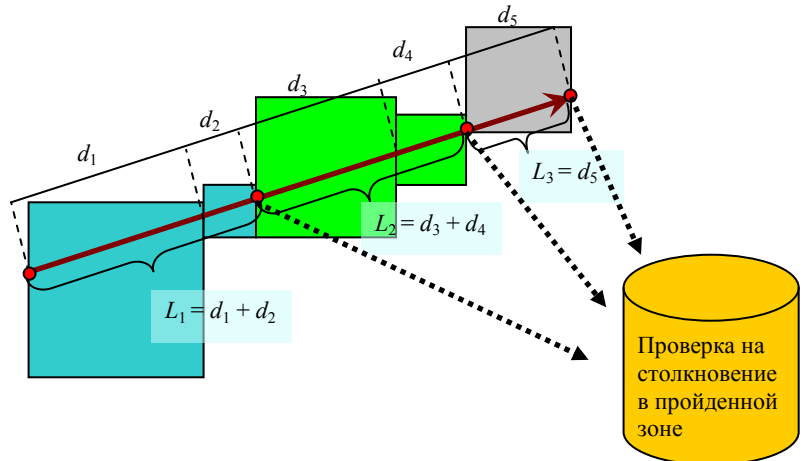


Рис. 8. Формирование хорд в регистрационных зонах. $d_1 \dots d_N$ – длины хорд в объединённых квадратных областях; $L_1 \dots L_K$ – длины хорд в зонах.

При построении траектории как суммы хорд непрерывно контролируется расстояние до границы системы R_{ref} (рис. 9). Если это расстояние больше хорды d в квадрате, то эта хорда прибавляется к хорде, пройденной в зоне целиком, а расстояние до границы уменьшается на величину d . Если R_{ref} меньше хорды d , то к хорде, пройденной в зоне, прибавляется величина R_{ref} , и производится поиск нового направления после отражения от границы системы и нового расстояния до границы системы.

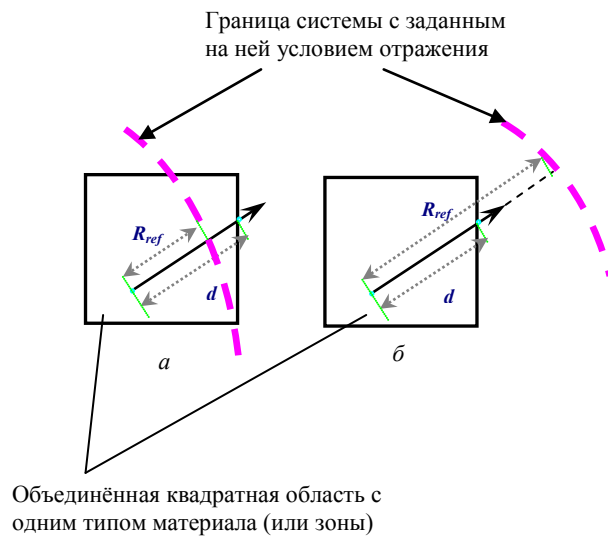


Рис. 9. Контроль расстояния до границы системы. a – пройденная хорда d в квадрате больше расстояния R_{ref} до границы, b – пройденная хорда d в квадрате меньше расстояния R_{ref} до границы.

Построение траектории продолжается, пока для каждой энергетической группы не будет найдена своя зона первого столкновения. После этого производится построение следующей траектории.

Существующая версия программного модуля предусматривает в плане два типа границ системы: отрезок и дуга окружности. Для таких границ реализованы три типа отражения луча траектории: *зеркальное*, *«белое»* (под равномерным углом), *трансляция*. Для заданного направления траектории производится поиск точек пересечения со всеми участками границы, с которыми возможно пересечение. Затем из этих точек выбирается ближайшая, к точке начала траектории. При следующем поиске пересечения с границей ищется точка, ближайшая к предыдущему пересечению (рис. 10 a). Из-за ошибок машинного вычисления реальная точка пересечения может находиться вне геометрической системы, на очень малую величину отстоять от границы. В этом случае отражённая в этой точке траектория может вновь отразиться от этой же границы и уйти из геометрической системы (рис. 10 b).

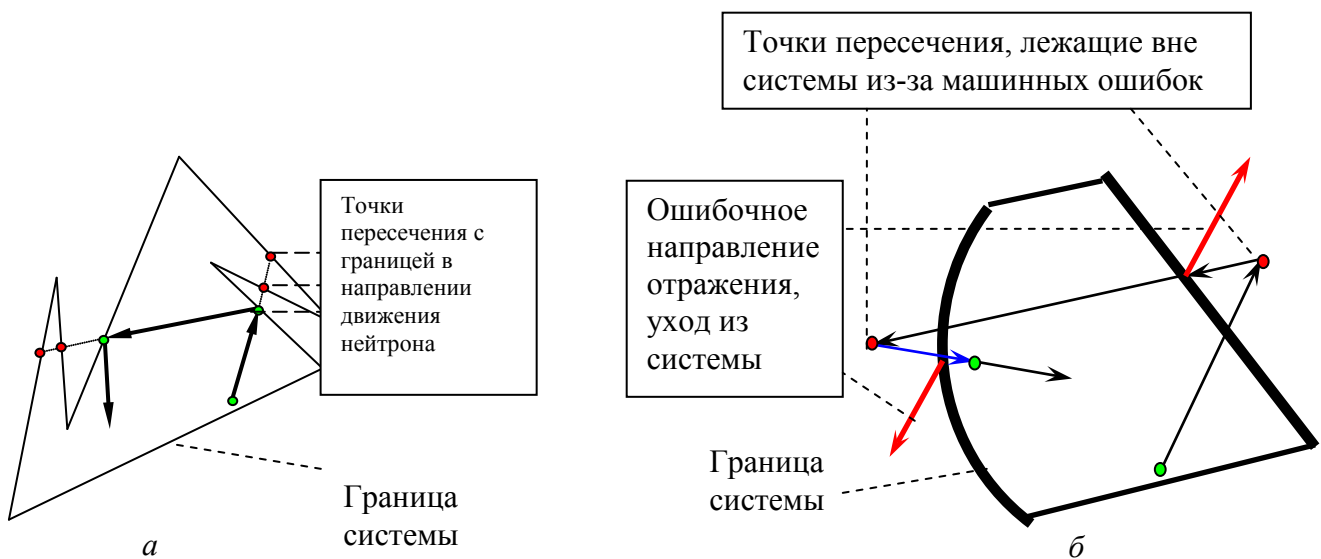


Рис. 10. a - поиск точки пересечения с границей системы в направлении движения нейтрона, выбор ближайшей точки пересечения; b - точка пересечения вне системы.

Чтобы этого избежать применяются два способа в зависимости от типа отражающей кривой. Если это отрезок, от которого траектория испытала отражение, то он временно исключается из списка возможных границ. Если граница - дуга окружности, то поиск следующей точки пересечения производится от точки, сдвинутой на малый шаг по отражённому направлению.

Расчёт матриц вероятностей первых столкновений нейтронов.

Расчёт вклада в вероятности первых столкновений нейтронов ведётся сразу для всех энергетических групп на каждой отдельной траектории. После определения точки рождения нейтрона и направления его движения случайный оптический путь $S_0^{(g)} = S = -\ln(\alpha)$, который необходимо пройти, одинаков во всех энергетических группах. Зафиксирован номер геометрической зоны, которой принадлежит точка рождения. К счётчику рождений нейтронов NS_i в данной зоне i добавляется единица.

Начинается процесс построения траектории, которая строится, как сумма хорд в проходимых нейтроном зонах.

При смене номера проходимой зоны производится проверка на столкновение нейтрона в предыдущей зоне. Оптический путь, пройденный в этой пересечённой зоне j для каждой энергетической группы g есть $\tau_j^{(g)} = L_j \Sigma_j^g$, где L_j - пересечённая хорда в данной зоне (в объёме); Σ_j^g - полное макроскопическое сечение в зоне в энергетической группе g . Каждый такой оптический путь $\tau_j^{(g)}$ сравнивается с первоначальным случайным путём $S_0^{(g)}$. Если оптический путь $\tau_j^{(g)}$ в зоне j больше случайного $S_0^{(g)}$, то делается вывод о первом столкновении нейтрона группы g в данной зоне (рис. 11), и к счётчику столкновений $NC_{ij}^{(g)}$ в зоне j нейтронов группы g прибавляется единица. Если $\tau_j^{(g)}$ меньше $S_0^{(g)}$, то первого столкновения в зоне номер j в данной энергетической группе нет, оно произойдёт где-то дальше по ходу движения. В этом случае разыгранный оптический путь для данной группы уменьшается на величину $\tau_j^{(g)}$: $S_1^{(g)} = S_0^{(g)} - \tau_j^{(g)}$.

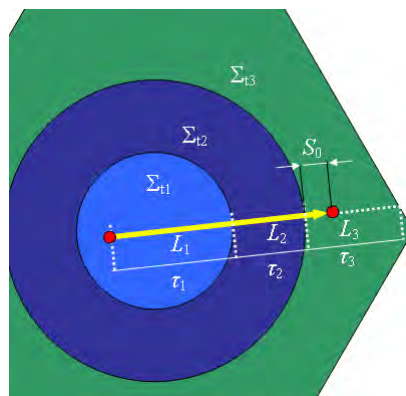


Рис. 11. Проверка на столкновение нейтрона. L_1, L_2, L_3 – хорды в зонах в направлении движения нейтрона, τ_1, τ_2, τ_3 – оптические толщины в зонах в направлении движения нейтрона

Таким образом, последовательно для всех энергетических групп осуществляется проверка на столкновение в пересечённой зоне. Затем производится проверка на столкновение в следующей пересечённой зоне, и так далее. Если для всех групп найдена своя зона первого столкновения, то траектория обрывается. Начинается построение новой траектории, к счётчику рождений NS_i в зоне снова прибавляется единица, и снова производится поиск номеров зон столкновения для всех энергетических групп.

После отработки построения заданного числа стохастических траекторий производится расчёт вероятностей первых столкновений нейтронов по классическому частотному определению вероятности:

$$P_{ij}^{(g)} = \frac{NC_{ij}^{(g)}}{NS_i}, \quad (2)$$

где $NC_{ij}^{(g)}$ - число столкновений нейтронов энергетической группы g в регистрационной зоне номер j при рождении нейтрона в зоне i ; NS_i – число рождений нейтронов в регистрационной зоне номер i .

Данный частотный способ расчёта вероятностей первых столкновений был выбран по нескольким соображениям. Во-первых, он достаточно прост в реализации и интуитивно понятен. Во-вторых, данный способ позволяет фиксировать пройденные хорды в зонах непосредственно от точки рождения нейтрона до точки первого столкновения, что позволяет затем вычислять их средние значения, и применять для исследования заданной системы и других расчётных методик. Следует отметить, что в модуле РИМК реализован и хордовый алгоритм расчёта с усреднением вкладов от лучей по весовым коэффициентам, однако данный вариант находится на стадии доработки и в данной работе не рассматривается.

Для каждой энергетической группы матрицу полученных вероятностей необходимо скорректировать с помощью соотношения взаимности:

$$P_{ij}^{(g)} \Sigma_{ti}^{(g)} V_i = P_{ji}^{(g)} \Sigma_{tj}^{(g)} V_j, \quad (3)$$

где $\Sigma_{ti}^{(g)}$ и $\Sigma_{tj}^{(g)}$ - полные макроскопические сечения в зонах i и j энергетической группы g ; V_i и V_j - объёмы этих зон. Для уменьшения влияния различной статистики при вычислении отдельной вероятности по (2) на последующую балансировку матриц вероятностей по соотношению взаимности (3) и для правильной корректировки вклада двух симметричных вероятностей $P_{ij}^{(g)}$ и $P_{ji}^{(g)}$ при балансировке полученных матриц вероятностей используются весовые коэффициенты $\omega_{ij}^{(g)}$:

$$\omega_{ij}^{(g)} = \frac{NC_{ij}^{(g)} \Sigma_{tj}^{(g)} V_j}{\Sigma_{ti}^{(g)} V_i}. \quad (4)$$

Вес пропорционален количеству столкновений $NC_{ij}^{(g)}$ в зоне i при старте из зоны j , то есть учитывает количественную статистику таких столкновений. Иными словами, чем больше число таких столкновений, тем достовернее будет вероятность $P_{ij}^{(g)}$. К примеру, если есть система из сильного поглотителя и воды, то основная масса первых столкновений нейтронов, рождённых в поглотителе, будет происходить в нём самом и до воды долетит и испытает там первое столкновение лишь незначительная доля нейтронов. В то время, как количество первых столкновений нейтронов в поглотителе, рождённых в воде будет наоборот, значительным. Также, при оценке достоверности вероятности следует учитывать объёмы зон рождения и первого столкновения, и их полные сечения.

Недиагональные элементы матрицы $P_{ij}^{(g)*}$ получаются с помощью (3) и (4):

$$P_{ij}^{(g)*} = \frac{P_{ij}^{(g)} \Sigma_{ti}^{(g)} V_i \omega_{ij}^{(g)} + P_{ji}^{(g)} \Sigma_{tj}^{(g)} V_j \omega_{ji}^{(g)}}{\Sigma_{ti}^{(g)} V_i (\omega_{ij}^{(g)} + \omega_{ji}^{(g)})}. \quad (5)$$

Диагональные элементы матрицы вычисляются, как

$$P_{ii}^{(g)*} = 1 - \sum_{j \neq i}^{N_z} P_{ij}^{(g)*}$$

Полученные матрицы последовательно для каждой энергетической группы записываются в файл RIJDAT.DAT для последующего использования.

Параллельно с обычными вероятностями первых столкновений нейтронов, рассчитываются вероятности с учётом альбедного коэффициента α на границе, характеризующего в данном методе расчёта вероятность возврата нейтрона в систему после отражения от её границы. Коэффициент считается постоянным вдоль всей границы геометрической системы. Каждой траектории приписывается вес w , первоначально равный единице. При каждом отражении от границы этот вес умножается на альбедный коэффициент α : $w^{(k)} = w^{(k-1)}\alpha$. При обнаружении столкновения нейтрона в заданной энергетической группе счётчик столкновений увеличивается не на единицу, а на величину $w^{(k)}$, где k - число отражений от границы системы при движении нейтрона заданной группы от точки рождения до точки первого столкновения. Балансировка полученных матриц осуществляется тем же способом, что и обыкновенных матриц. Исключением является лишь вычисление элементов главной диагонали, ввиду того, что сумма элементов в строке такой матрицы оказывается меньше единицы. Поэтому запоминается первоначальная сумма элементов в каждой строке, ещё до балансировки, и диагональные элементы вычисляются вычитанием не из единицы, а из этой суммы:

$$Palb_{ii}^{(g)*} = \sum_{j=1}^{N_z} Palb_{ij}^{(g)} - \sum_{j \neq i}^{N_z} Palb_{ij}^{(g)*}$$

Полученные матрицы последовательно для каждой энергетической группы записываются в файл RIJALB.DAT.

Также существует возможность одновременного расчёта матриц вероятностей с учётом утечки нейтронов, которая заменяется на поглощение и варьируется параметром BASKL. Так как возмущение вводится чистым поглощением, то это поглощение можно целиком переложить на изменение вероятности первого столкновения и решать те же системы уравнений метода ВПС с невозмущёнными сечениями, но только с изменёнными вероятностями первых столкновений.

В *третьей главе* описана методика восстановления матриц вероятностей первых столкновений нейтронов с помощью средних хорд для расчёта выгорания гетерогенных систем со сложной геометрией.

Расчёты динамики изотопного состава топлива в настоящее время являются рутинной задачей. Для решения уравнений изотопной кинетики необходимо знать плотность потока нейтронов в области, где рассчитывается выгорание, и средние по энергетическому спектру нейтронные сечения изотопов. Эта информация дополняется цепочками радиационных превращений изотопов в результате ядерных реакций, постоянными распада, выходом продуктов деления ядер. Решением системы дифференциальных уравнений изотопной кинетики на небольшом временном интервале определяется новый изотопный состав разных компонентов среды, на основании которого подготавливаются новые сечения материалов для решения пространственно-энергетической задачи переноса нейтронов на следующем шаге расчёта выгорания.

Наиболее успешно решение этих задач реализуется для простых геометрий элементарных ячеек, когда для расчёта пространственного распределения нейтронов можно использовать относительно простые и быстрые методы решения транспортной задачи. Например, распределение поля нейтронов в многослойной цилиндрической, плоской или сферической

геометрии можно оценить с помощью аналитических формул расчёта вероятностей первых столкновений. Однако, для расчёта вероятностей первых столкновений в более сложных областях необходимо использовать численные методы, что сопряжено с большими вычислительными затратами. Трудности возникают при расчёте сильных выгорающих поглотителей, например, гадолиния, которые еще называют обгорающими поглотителями. Плотность потока нейтронов в таких материалах быстро уменьшается от поверхности внутрь поглотителя. При расчёте необходимо следить за изменением изотопного состава в очень тонких слоях. Из-за большого поглощения ядерная концентрация изотопов меняется быстро и необходимо проводить вычисления с мелким временным шагом.

Качественный расчёт геометрически сложных систем с сильными выгорающими поглотителями можно получить используя метод Монте-Карло, но для этого метода требует много временных затрат. Для систем с сильными выгорающими поглотителями расчёты Монте-Карло надо выполнять с очень хорошей статистикой, чтобы статистическая погрешность расчёта была много меньше изменения размножающих свойств обусловленных изменением ядерных концентраций изотопов в процессе выгорания на небольшом временном шаге.

В настоящей работе описан приближенный метод восстановления матриц вероятностей первых столкновений по заранее рассчитанным реперным матрицам, позволяющий заметно ускорить расчёт с приемлемой точностью. Алгоритм реализован частично модулем RIJMK, частично дополнительными подпрограммами модуля CELLHI программного комплекса UNK, который имеет подробную библиотеку ядерных данных на основе файлов оцененных ядерных данных ENDF/B-6 и библиотеку выхода продуктов деления в зависимости от энергии нейтронов, вызвавших деление. В программном модуле BURNUP, интегрированном в пакет, изменение ядерной концентрации изотопов на временном шаге рассчитывается с помощью аналитических формул. В UNK реализованы аналитические методы расчёта вероятностей первых столкновений для одномерных геометрий, и основанный на методе хорд модуль численного расчёта матриц вероятностей первых столкновений для сложных геометрий.

Алгоритм решения задачи выгорания в областях со сложной геометрией следующий. Перед началом расчёта вычисляют матрицы вероятностей первых столкновений для заданной геометрии и многогрупповых сечений (89 групп), характеризующих состояние ТВС со свежим топливом. Эти матрицы запоминаются в качестве реперных. В процессе выгорания ядерная концентрация изотопов меняется, следовательно, меняются и групповые сечения. Для новых сечений следовало бы пересчитать матрицы вероятностей первых столкновений, но эта процедура длительная, и в UNK реализован алгоритм восстановления новых матриц по реперным по методике, которая, по существу, является экстраполяционной. Из реперных матриц вероятностей первых столкновений выбирается наиболее близкая матрица по состоянию материалов (с наиболее близкими полными макроскопическими сечениями) на данный момент выгорания. Элементы этой матрицы корректируются таким образом, что вероятность первых столкновений с учетом новых сечений удовлетворяет соотношению взаимности. Как показала расчётная практика, этот алгоритм пригоден для тех ситуаций, когда макросечения материалов в процессе выгорания меняются не очень сильно.

Новый алгоритм расчёта выгорания отличается от описанного, методикой восстановления новых матриц вероятностей первых столкновений. Он существенно расширяет возможности в части описания более сложных геометрий и позволяет получить более высокую точность расчёта матриц вероятностей. Существо методики состоит в следующем. При расчёте реперных матриц одновременно рассчитываются «средние хорды первых столкновений», т.е. средние отрезки луча вдоль пробега нейтрона, которые он пересекает в зонах до первого столкновения. И эти средние хорды затем используются для восстановления новых матриц.

Следует отметить, что существует несколько способов точного расчёта вероятностей первых столкновений на основе регистрации хорд в зонах в процессе построения луча траектории нейтрона. Все они так или иначе используют значение длины хорды в пройденной зоне и соответствующее этой зоне полное сечение для вычисления отдельного вклада в вероятность первого столкновения. Однако для изменившихся сечений материалов требуется повторный

расчёт всех последовательностей таких вкладов, что в сложных геометриях требует больших временных затрат. В данной работе делается попытка уйти от расчёта вероятностей с помощью отдельных длин участков пересечения луча с геометрическими зонами, заменив отдельные участки средними хордами, проходимыми нейтроном в различных зонах до его первого столкновения (рис. 12). Такой способ расчёта предполагает падение точности вычисления матриц вероятностей при всё большем отличии новых полных сечений системы от исходных, однако существенным моментом является однократность расчёта средних хорд, и быстрота восстановления вероятностей на их основе. Для больших времён выгорания, или для систем с сильными поглотителями предполагается повторный пересчёт реперных матриц ВПС и средних хорд через определённые временные интервалы.

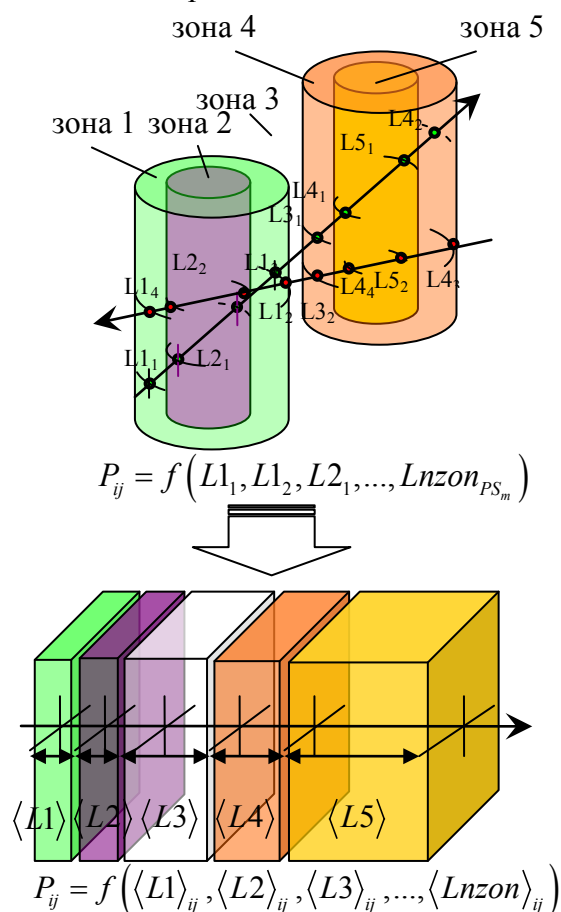


Рис. 12. Переход в вычислении вероятности от последовательности хорд к средним хордам до первого столкновения

Методика расчёта средних хорд

Реперные матрицы вероятностей рассчитываются статистическим способом. Для каждой регистрационной зоны равномерно по ее объему разыгрывается точка старта нейтрона и направление вылета. Движение нейтронов вдоль этого направления продолжается до тех пор, пока случайно не реализуется акт столкновения. Во время полета нейтрон может столкнуться и в той зоне, где он родился, а может пролететь и несколько регистрационных зон до первого столкновения. Число стартов NS_i из зоны i суммируется, суммируется и число столкновений NC_{ij} в зоне j нейтронов, стартовавших из зоны i . Вероятность P_{ij} определяется как отношение числа столкновений NC_{ij} нейтронов в зоне j , пришедших из зоны i , к полному числу стартов NS_i из зоны i : $P_{ij} = NC_{ij} / NS_i$.

Одновременно с регистрацией столкновений регистрируются хорды в последовательно проходимых при движении нейтрона зонах. Длина хорды l_{ijm}^k — это путь в зоне номер m при k

пересечении нейтрона, родившегося в зоне i и испытавшего первое столкновение в зоне j . Тогда средний путь или средняя хорда, пройденная нейтроном в зоне m :

$$L_{ijm} = \sum_{k=1}^{PS_m} l_{ijm}^k / PS_m, \tag{6}$$

где PS_m – число случаев пересечения зоны m нейтроном, родившимся в зоне i и испытавшим первое столкновение в зоне j .

Методика восстановления матриц ВПС через средние хорды

Можно предположить, что для нейтрона, родившегося в зоне i и испытавшего первое столкновение в зоне j , вероятность испытать это столкновение есть

$$P_{ij} = A_{ij} \left[\exp\left(-\sum_{m \neq j}^N \Sigma_t^m L_{ijm}\right) \left[1 - \exp(-\Sigma_t^j L_{ijj}) \right] + \left[1 - \exp(-\Sigma_t^j LII_{jjj}) \right] \right], \tag{7}$$

где Σ_t^m – полное сечение в зоне m ; L_{ijm} – средняя хорда (6), пройденная нейтроном в зоне m при рождении в зоне i и столкновении в зоне j ; Σ_t^j – полное сечение в зоне j ; L_{ijj} – средняя хорда, пройденная нейтроном в зоне j при рождении в зоне i и столкновении в зоне j ; LII_{jjj} – средняя хорда, пройденная нейтроном в зоне j при рождении в зоне j и столкновении в зоне j без прохождения других зон; A_{ij} – нормировочный коэффициент, который рассчитывается из условия равенства вероятностей P_{ij} , определенных по формуле (7) и прямым расчётом. Эти коэффициенты запоминаются после первого расчёта и используются для расчёта вероятностей при изменившихся полных сечениях.

В основе данного способа расчёта вероятностей лежит следующее простое предположение. При прохождении нейтрона сквозь вещество вероятность пройти слой толщиной L_1 с полным сечением среды Σ_1 без столкновений есть $\exp(-\Sigma_1 L_1)$. Далее, вероятность столкновения в слое L_2 , следующим за слоем L_1 и имеющим сечение Σ_2 есть $\exp(-\Sigma_1 L_1) [1 - \exp(-\Sigma_2 L_2)]$. Предположение заключается в том, чтобы применить данную схему для расчёта вероятностей первых столкновений для сложной геометрии, имея в наличии средние хорды до первого столкновения. Т.е. будем считать, что нейтрон, вылетевший из зоны i и испытавший первое столкновение в зоне j , последовательно проходит все зоны номер 1, 2, 3, ..., N , и толщина слоя каждой зоны есть величина средней хорды до столкновения для данной зоны при условии рождения в зоне i и столкновения в j (рис. 13).

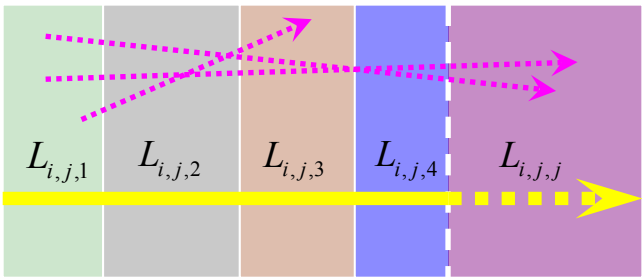


Рис. 13. Замена хорд по всем направлениям средними хордами, пройденными в зонах.

Таким образом, формула (7) для расчёта вероятностей первых столкновений имеет простой физический смысл: первое слагаемое есть вероятность нейтронов, родившихся в зоне i , долететь

до зоны j и испытать в ней столкновение, второе – вероятность нейтронов, родившихся в зоне i , испытать столкновение в ней же, без прохождения через иные зоны. Использование этой формулы для других сечений в сравнении с теми, при которых были рассчитаны реперные матрицы, ведет к правильному изменению вероятностей. Например, если в какой то из зон, на пути нейтрона из i в j полное сечение станет бесконечно малым, просто обнулится вклад в соответствующий оптический путь и вероятности корректируются в нужную сторону.

В процессе выгорания полные сечения материалов в зонах будут меняться. Подставим в формулу (7) реперные хорды и полученные на данном шаге по времени новые сечения, и скорректируем значения вероятностей P_{ij} с использованием нормировки на единицу и соотношения взаимности.

$$P_{ij}^{(1)} = \frac{[P_{ij}^{(0)}V_i\Sigma_{ii}^{(1)} + P_{ji}^{(0)}V_i\Sigma_{ij}^{(1)}]0,5}{V_i\Sigma_{ii}^{(1)}} \quad (8)$$

Диагональные элементы вычисляются, как

$$P_{ii}^{(1)} = 1 - \sum_{j \neq i}^N P_{ij}^{(1)} \quad (9)$$

Восстановленные таким образом матрицы вероятностей первых столкновений используются для решения задачи переноса в прежней геометрии, но, с новыми сечениями $\Sigma_i^{(1)}$. На следующем шаге по выгоранию вероятности восстанавливаются с помощью новых полных сечений $\Sigma_i^{(2)}$.

Комбинация средних хорд для наиболее близких реперных макросечений.

Вычисляемые на каждом шаге по времени полные сечения для данной энергетической группы могут сильно отклоняться от первоначальных реперных сечений в той же группе. Поэтому производится поиск трёх групп реперных сечений, наиболее близких к сечениям заданной группы на очередном шаге по времени (рис. 14).

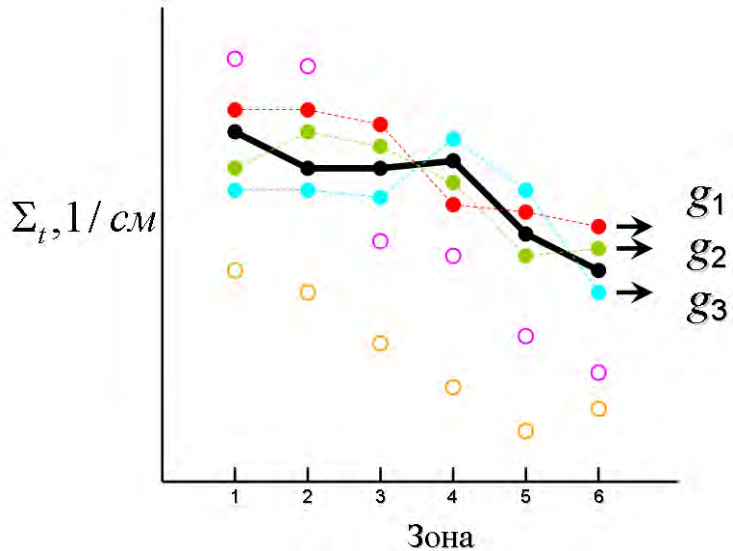


Рис. 14. Выбор трёх реперных энергетических групп g_1, g_2, g_3 с наиболее близкими полными сечениями к текущим сечениям на данном шаге по времени

Выбираются три реперных группы g_1, g_2, g_3 с наименьшим среднеквадратичным отклонением

$$\chi = \sum_{i=1}^N \left[\Sigma_{ti}^{(g)} - \Sigma_i \right]^2,$$

где Σ – реперные макроскопические групповые сечения, для которых рассчитаны средние хорды; Σ_t^g – полные макроскопические сечения энергетической группы g , для которых требуется рассчитать матрицу вероятностей первых столкновений. Суммирование производится по всем геометрическим зонам. Тогда средние хорды и коэффициенты A_{ij} для подстановки в соотношение (7) корректируются простой интерполяцией:

$$\langle B \rangle = \frac{\sum_{k=1}^3 \chi(g_k)^{-1} B^{(k)}}{\sum_{k=1}^3 \chi(g_k)^{-1}}, \quad (10)$$

где в качестве $B^{(k)}$ подставляются значения $L_{ijm}^{(k)}$, $LI_{ij}^{(k)}$, или $A_{ij}^{(k)}$, выбранные для трёх групп с минимальными среднеквадратичными отклонениями $\chi(g_1)$, $\chi(g_2)$, $\chi(g_3)$. Полученные средние хорды (рис. 15) и коэффициенты используются в восстановлении вероятностей для новых сечений Σ_t^g с помощью соотношений (3.2)–(3.5).

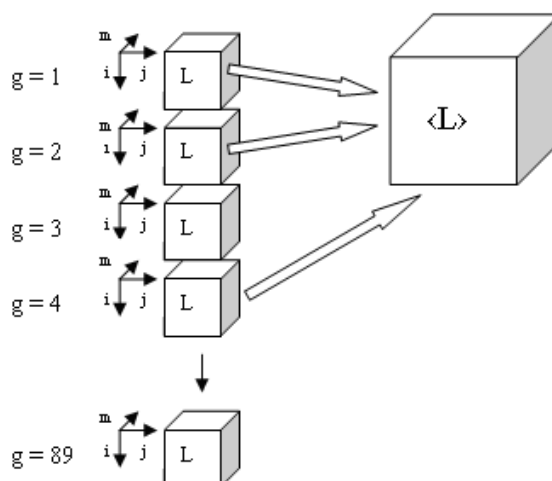


Рис.15. Выбор средних хорд ($g = 1..89$ - номера энергетических групп; L_{ijm} - массив средних хорд; $\langle L \rangle$ - результирующий массив средних хорд)

Модуль RIJMK производит расчёт средних хорд $L_{ijm}^{(g)}$, $LI_{ij}^{(g)}$ и поправочных коэффициентов $A_{ij}^{(g)}$. Восстановление матриц вероятностей на очередном шаге по выгоранию производится модулем CELLHI комплекса UNK. В этот модуль были добавлены подпрограммы для восстановления матриц вероятностей с помощью средних хорд, посредством соотношений (7)–(9).

В *четвёртой главе* приведены результаты верификационных расчётов ячеек и кассет реактора как в стационарных состояниях, так и при изменении состава топливной композиции в процессе выгорания.

Приведены результаты сравнительных расчётов стационарных состояний ячеек реакторов LWR и ВВЭР-1000 в различных состояниях топливной композиции. Расчёт проводился по

комплексу UNK в двух вариантах: с вычислением матриц ВПС аналитически и вычислением матриц ВПС модулем RIJMK частотным способом. На рис. 16 приведено относительное отклонение бесконечного коэффициента размножения при использовании модуля RIJMK от коэффициента при использовании аналитических зависимостей в вычислении матриц ВПС для всех типов рассматриваемых ячеек.

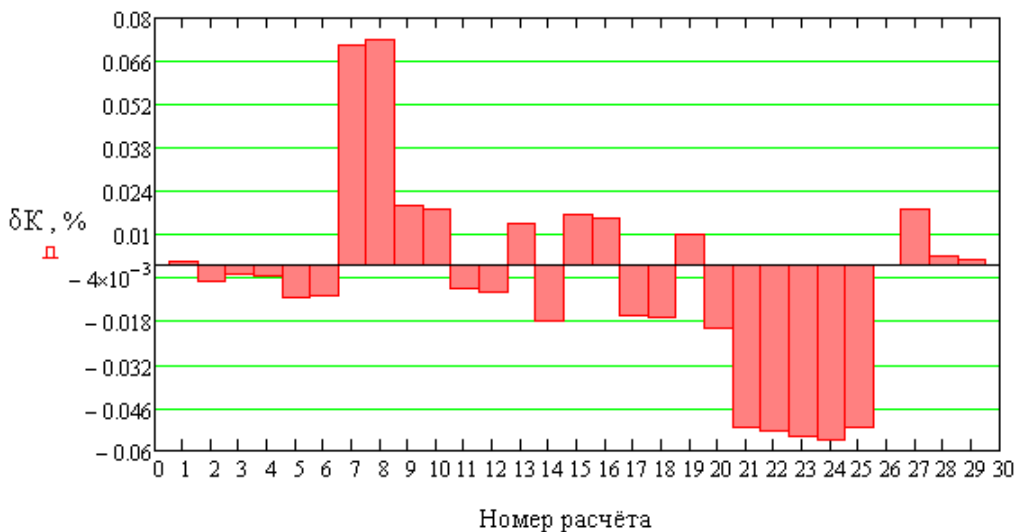


Рис. 16 Отклонение в значении K_{inf} .

Приведены результаты расчётов с помощью модуля RIJMK стационарных состояний ТВС ВВЭР-1000 с твэгами. В расчётах использовалось два вида топлива – урановое и МОХ-топливо. Рассчитывались различные состояния топливной композиции.

Приведены результаты стационарных расчётов модулем RIJMK ТВС реактора плавучего энергоблока в «холодном» и «горячем» состоянии, проведено сравнение с результатами расчётов по программам MCU-REA/1 и MCNP.

Приведены результаты расчёта изменения нуклидного состава материалов ячейки, фрагмента кассеты и кассеты реактора ВВЭР-1000 в процессе выгорания при использовании методики восстановления матриц вероятностей первых столкновений через средние хорды на каждом шаге выгорания.

Приведены результаты расчёта выгорания материалов ледокольной ТВС. Расчёт был проведён в двух вариантах: с точным вычислением матриц ВПС модулем RIJMK на каждом шаге выгорания и с восстановлением матриц ВПС по методике средних хорд, вычисленных для нескольких реперных точек по времени (рис. 17).

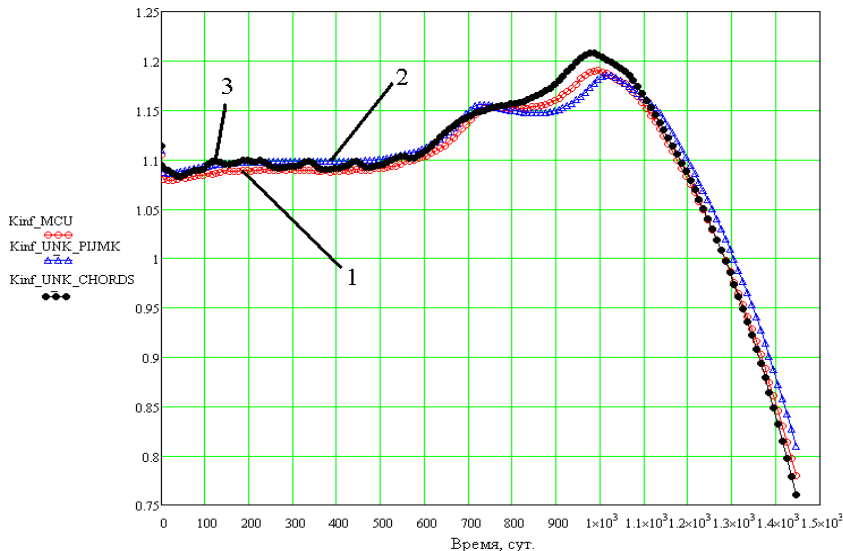


Рис.17 Изменение бесконечного коэффициента размножения в зависимости от времени. 1 – расчёт по MCU-TR; 2 – расчёт по UNK с вычислением матриц ВПС модулем RIJMK методом Монте-Карло на каждом шаге по времени; 3- расчёт по UNK с точным вычислением матриц ВПС модулем RIJMK через каждые 120 суток и восстановлением матриц ВПС через средние хорды для всех остальных состояний.

Заключение.

В работе представлены основные способы расчёта матриц вероятностей первых столкновений нейтронов. Дан обзор литературы, методов и программ расчёта матриц ВПС.

Предложен способ преобразования исходной геометрии в сеточную модель на плоскости и её использования для построения стохастической траектории нейтрона. Представлена методика расчёта вероятностей первых столкновений нейтронов методом стохастических траекторий нейтронов на сеточной модели геометрии в плоскости. Данная методика ориентирована на вычисление вероятностей первых столкновений в сложных (в плане) геометрических системах и предусматривает нестандартное задание как геометрии материалов, так и регистрационных геометрических зон внутри расчётной области. Описаны основные алгоритмы программного модуля РИМК, реализующего расчёт матриц вероятностей первых столкновений нейтронов данным способом. Этот модуль преобразует исходную геометрию в сеточную модель, затем производит расчёт вероятностей первых столкновений нейтронов на основе стохастических траекторий. Модуль полностью встроен в пакет программ UNK и использует стандартные входные и выходные файлы этого программного комплекса.

Представлен способ вычисления средних хорд до первого столкновения в процессе построения траектории нейтрона. Разработана методика вычисления вероятностей первых столкновений нейтронов для систем с изменённым материальным составом относительно реперного, на основе средних хорд до первого столкновения.

Предложен способ расчёта выгорания ячеек и кассет на основе данной методики. Вычисление средних хорд производится модулем РИМК в процессе построения стохастических траекторий нейтронов. Алгоритмы вычисления матриц ВПС через средние хорды реализованы в виде дополнительных подпрограмм-процедур, встроенных в модуль CELLHI, который входит в состав комплекса UNK и производит нейтронно-физический расчёт заданной системы методом вероятностей первых столкновений нейтронов. При расчёте выгорания материалов ячеек и кассет реактора данный модуль (при выборе соответствующего канала расчёта) производит восстановление матриц ВПС для изменившихся на новом шаге по времени полных макроскопических сечений материалов, на основе средних хорд и корректировочных коэффициентов, вычисленных для начального (свежего) состояния, или нескольких состояний топливной композиции ячейки или кассеты. Затем использует полученные матрицы для решения уравнения переноса методом ВПС. Восстановление матриц вероятностей через средние хорды происходит за время на порядки меньшее времени, затрачиваемого на точный расчёт данных матриц методом стохастических траекторий, что позволяет свести суммарное время расчёта выгорания кассеты на персональном компьютере от нескольких суток к нескольким часам. Все программы по приведённым алгоритмам реализованы на языке FORTRAN-95 [71], [72].

Проведены верификационные нейтронно-физические расчёты ячеек и кассет реакторов. Представлены результаты тестовых сравнительных расчётов бесконечного коэффициента размножения комплексом UNK для ячеек и кассет, на основе вычисленных модулем РИМК матриц ВПС методом стохастических траекторий нейтронов. Расчёты, выполненные с помощью вычисления матриц вероятностей первых столкновений модулем РИМК, для всех рассмотренных топливных композиций ячеек ВВЭР-1000 согласуются в K_{∞} с точностью не хуже 0,06% с результатами, полученными с помощью аналитического вычисления матриц. Расчёты, выполненные с помощью вычисления матриц вероятностей первых столкновений модулем РИМК, для всех рассмотренных топливных композиций ТВС ВВЭР-1000 согласуются в K_{∞} с точностью не хуже 0,2% с результатами, полученными с помощью вычисления матриц модулем UNKPIJ.

Проведён расчёт стационарного состояния кассеты плавучего энергоблока комплексом UNK с использованием модуля РИМК для расчёта матриц ВПС. Показаны сравнения бесконечного коэффициента размножения и функционалов потока для данной кассеты со значениями этих

величин, полученных расчётами по программам MCU-REA/1 и MCNP-4C2. Максимальное отклонение в K_{∞} , рассчитанного по коду UNK, от значения, полученного по MCU, составляет - 0,87% в холодном состоянии и 0,77% - в горячем.

Представлены результаты сравнительных тестовых расчётов комплексом UNK выгорания материалов ячейки, фрагмента кассеты ВВЭР-1000, и кассеты ВВЭР-1000 с МОХ топливом и твэгами. Эти результаты показывают принципиальную применимость методики восстановления матриц ВПС через средние хорды для расчёта выгорания топливных композиций с малым обогащением.

Представлены результаты расчёта бесконечного коэффициента размножения для кассеты ледокольного реактора в процессе выгорания при точном вычислении матриц ВПС модулем RIJMK на каждом временном шаге в сравнении с расчётом по программе MCU-TR. Представлены результаты расчёта бесконечного коэффициента размножения для кассеты ледокольного реактора в процессе выгорания при вычислении матриц ВПС через средние хорды. Данный тип кассеты является достаточно сложным для расчёта как по геометрии, так и по материальному составу и обогащению топливной композиции. Поэтому приведённые результаты являются показательными и свидетельствуют о пригодности модуля RIJMK для расчёта стандартных матриц ВПС в таких системах. Результаты расчёта с восстановлением матриц ВПС через средние хорды с пересчётом реперных хорд через некоторые интервалы времени также показывают возможность применения методики восстановления ВПС через средние хорды для расчёта таких систем, однако требуют её дальнейшего усовершенствования и доработки.

Публикации автора

По результатам исследований опубликовано 5 печатных работ, в том числе 3 в рецензируемых научных изданиях. Основные научные положения и выводы сдержатся в работах:

1. **Карпушкин Т.Ю., Цибульский В.Ф.** Расчёт матриц вероятностей первых столкновений методом Монте-Карло с использованием сеточной разбивки геометрии. Препринт ИАЭ-6492/5., М., 2007

2. **Карпушкин Т.Ю.** Расчёт матриц вероятностей первых столкновений и средних хорд до первого столкновения методом Монте-Карло. Вычисление матриц вероятностей первых столкновений на основе средних хорд в процессе выгорания. Препринт ИАЭ-6654/5., М., 2010.

3. **Давиденко В.Д., Карпушкин Т.Ю., Цибульский В.Ф.** Расчёт выгорания сильных поглотителей методом вероятностей первых столкновений. Атомная энергия, 2010, том 109, вып. 3, стр. 130-133.

4. **Карпушкин Т.Ю.** Расчёт выгорания методом вероятностей первых столкновений с помощью хорд до первого столкновения. ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2011, вып. 2, стр. 45-52.

5. **Карпушкин Т.Ю.** Расчёт выгорания геометрически сложной системы с сильным поглощением методом вероятностей первых столкновений. Известия вузов. Ядерная энергетика, 2011, вып. 3., стр. 3-9, г. Обнинск.