

РОССИЙСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР “КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ”

**В О П Р О С Ы
А Т О М Н О Й
Н А У К И
И
Т Е Х Н И К И**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

СЕРИЯ:

Ф И З И К А Я Д Е Р Н Ы Х Р Е А К Т О Р О В

ИЗДАЕТСЯ С 1989 г.

ВЫПУСК 1

**Ф И З И К А И М Е Т О Д Ы Р А С Ч Е Т А
Я Д Е Р Н Ы Х Р Е А К Т О Р О В**

МОСКВА – 2006

УДК 621.039.5

Выпуски "Физика и методы расчета ядерных реакторов" готовятся Российским научным центром "Курчатовский институт" и ранее выходили в составе серии "Физика и техника ядерных реакторов". Данный выпуск тридцать седьмой.

Редакционная коллегия серии :

А.Ю. Гагаринский (главный редактор),
С.М. Зарицкий (зам. главного редактора), В.Ф. Колесов,
С.Д. Малкин, А.Е. Крошилин, Е.А. Старостина (отв. секретарь).

В выпуске "Физика и методы расчета ядерных реакторов" публикуются материалы по следующим вопросам:

- математические проблемы теории переноса и теории реакторов;
- теория и методы расчета ядерных реакторов, blankets термоядерных реакторов, радиационной защиты, переноса излучений;
- проблемы обеспечения расчетных и экспериментальных исследований программами для ЭВМ; описания и аннотации программ, комплексов и систем программ;
- расчетные исследования по физике ядерных реакторов, blankets термоядерных реакторов, радиационной защиты, переноса излучений;
- экспериментальные методы и экспериментальные исследования по физике ядерных реакторов и в перечисленных смежных областях;
- общие проблемы ядерной энергетики.

Материалы для опубликования следует направлять в Российский научный центр "Курчатовский институт" на имя главного редактора серии.

Materials related to the topics described below are published in series "Nuclear Reactor Physics":

- mathematical problems of transport and nuclear reactor theory;
- theory and calculational methods for nuclear reactors, fusion reactor blankets, radiation shielding and radiation transport;
- codes for calculational and experimental investigations; descriptions and abstracts of codes, code complexes and systems;
- calculational analysis of reactor, blanket and shielding performances and radiation transport; calculational analysis of some nuclear energy development aspects;
- experimental methods and experimental analysis in field of nuclear reactor physics and other above mentioned items;
- general problems of nuclear power.

Индекс 3646

**ISSN 0205—4671. Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, 1—132**

Светлой памяти
Льва Васильевича Майорова
п о с в я щ а е т с я



Этот выпуск посвящен памяти доктора физико-математических наук, профессора Льва Васильевича Майорова (18.07.1933 – 15.02.2005), бывшего лидером одной из ведущих научных школ России в области математического моделирования переноса излучений и теории ядерных реакторов.

В 1956 г. Лев Васильевич окончил физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова и был распределен в ОПМ ИМ АН СССР (ныне ИПМ им. М.В. Келдыша). В 1965 г. он перешел на работу заведующим лабораторией в Институт атомной энергии им. И.В. Курчатова (РНЦ “Курчатowski институт”). Содержанием научного творчества Льва Васильевича была разработка теоретических основ математического моделирования нейтронно-физических процессов в ядерных реакторах, алгоритмов и универсальных программных комплексов, предназначенных в первую очередь для расчетов ядерных реакторов различного типа. Он внес важный вклад в развитие теории рассеяния и термализации медленных нейтронов, в разработку численных методов решения уравнения переноса, в развитие теории оценок в методе Монте-Карло.

В конце 1960-х годов Л.В. Майоров был одним из организаторов вычислительного центра ИАЭ им И.В. Курчатова. При его непосредственном участии образован сектор математического обеспечения и разработана система массового обслуживания пользователей. Уже через считанные месяцы после запуска в ИАЭ первой ЭВМ БЭСМ-6 она была полностью загружена задачами института – это прежде всего заслуга Льва Васильевича. Он создал в ИАЭ такой коллектив разработчиков программного обеспечения БЭСМ-6, который стал в один ряд с сильнейшими командами в этой области (ИПМ, ОИЯИ, ИТМиВТ, ВНИИТФ).

Наиболее ярко талант Льва Васильевича как ученого и руководителя проявился при разработке теоретических основ и уникального пакета прикладных программ МСУ, предназначенного для расчетов нейтронно-физических характеристик ядерных реакторов методом Монте-Карло с точностью, лимитируемой только точностью известных ядерных данных. Программы семейства МСУ переданы более чем в 40 организаций в России и за границей и используются как инструмент прецизионного моделирования размножающих систем, частично заменяющий физические эксперименты.

Большую роль сыграл Л.В. Майоров в работах Временного Международного Коллектива (ВМК) специалистов десяти стран, созданного с целью объединения усилий в проведении экспериментальных, теоретических и расчетных исследований по физике водородных энергетических реакторов ВВЭР. Коллектив функционировал в течение 20 лет и выполнил большой объем теоретических и экспериментальных работ. Лев Васильевич является одним из авторов, составителем и редактором теоретического раздела трудов ВМК, изданных на русском и английском языках.

В последний период своей деятельности Л.В. Майоров разработал новые оригинальные методы и программы, использованные при решении в рамках ряда международных проектов таких важных прикладных задач, как анализ реакторных аварий, планирование экспериментов, сжигание в энергетических реакторах оружейного плутония, конверсия промышленных реакторов, пережигание минорных актиноидов, обнаружение скрытых взрывчатки и наркотиков и др.

Л.В. Майоров – автор и соавтор более 170 научных публикаций, в том числе четырех книг. Он был Лауреатом Государственной премии СССР (1973 г.), четырежды (1976, 1984, 1991, 1995 гг.) удостоивался премии им. И.В. Курчатова РНЦ “Курчатowski институт” за лучшую научную работу. Его труды получили широкое международное признание.

УДК 621.039.51...17

Статус MCU-4

Е.А. Гомин,

ФГУ РНЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. акад. Курчатова, 1

Для реперных расчетов ядерных реакторов разных типов широко используются разработанные в рамках проекта MCU программные средства, реализующие метод Монте-Карло для решения уравнения переноса различных видов излучения. Описана версия MCU-4, работа над которой завершена; кратко обсуждены созданные библиотеки констант и охарактеризованы возможности модулей пакета MCU-4 и собранных из них рабочих программ; приводятся примеры практически важных задач физики реакторов, для решения которых привлекались программы семейства MCU.

The status of the MCU-4. E.A. Gomin. The software, developed within the framework of the MCU project and realizing the Monte Carlo method to solve the transport equation for various kinds of radiations, is widely used for benchmark calculations of nuclear reactors of different types. The final version of the MCU-4 is described. The created nuclear data libraries are briefly discussed. The opportunities of modules of the MCU-4 package and the working codes obtained from them are characterized. The examples of practically important reactor physics tasks calculated by means of the codes from the MCU family are given.

Метод Монте-Карло (метод статистических испытаний), предложенный, как принято считать [1], в 1944 г. (или 1946? [2]) С. Уламом и Дж. фон Нейманом (первая публикация появилась в 1949 г. [3]), оказался одним из мощнейших средств математического моделирования физических процессов, которые описываются уравнением переноса. Природа метода такова, что он как будто изначально предназначен для реализации его в виде кодов для электронно-вычислительных машин (ЭВМ). С другой стороны, не будь ЭВМ, он не смог бы найти широкого применения, так как моделирование случайных величин и набор достаточной статистики вручную очень трудоемки. Коды, реализующие метод Монте-Карло, создаются с начала пятидесятих годов прошлого века.

За прошедшие годы разработан и обоснован новый раздел математики – метод Монте-Карло и созданы реализующие его программы, которые используют колоссальный объем накопленной информации о взаимодействии различного вида излучений с веществом. С развитием вычислительной техники программные средства, реализующие Монте-Карло, находят все более широкое применение, в частности, в области, связанной с проектированием, обоснованием и эксплуатацией ядерных реакторов и других объектов использования атомной энергии.

Одним из таких средств является свод (смысл термина поясняется ниже) MCU-4, разработанный в период с 1.01.95 по 31.12.04 авторским коллективом в составе: Л.П. Абагян, Н.И. Алексеев, В.И. Брызгалов, А.Е. Глушков, С.С. Городков, М.И. Гуревич, М.А. Калугин, Л.В. Майоров, С.В. Марин, Д.С. Олейник, Д.А. Шкаровский, М.С. Юдкевич и автор этой статьи. В настоящей работе подводится краткий итог десятилетней работы данного творческого коллектива.

1. Предыстория MCU

В Советском Союзе до Чернобыльской аварии ядерная энергетика развивалась достаточно интенсивно. Были разработаны и пущены в эксплуатацию АЭС с энергетическими реакторами типа ВВЭР-440, ВВЭР-1000, РБМК-1000, РБМК-1500, БН-350 и БН-600, промышленные, транспортные и космические реакторы, широкий набор исследовательских реакторов (СМ, БОР, МИР, ИГР, ИР, ИБР и многие другие). Эти реакторы имеют быстрый, промежуточный или тепловой спектры нейтронов и различаются обогащением топлива, ма-

териалами замедлителя и отражателя (вода, графит, тяжелая вода, бериллий), поглотителей и конструктивных элементов.

Большинство этих реакторов спроектировано в 50...60-е годы прошлого столетия на основе, главным образом, данных критических экспериментов. Применяемые тогда в расчетах библиотеки ядерных констант были весьма неполными, а реализованные в программах приближения довольно грубыми и недостаточно хорошо обоснованными, что не позволяло проводить надежную экстраполяцию экспериментальной информации на все режимы работы реакторов. Одна из главных причин такого положения – отсутствие мощных ЭВМ. Так, в “Курчатовском институте” большая часть реакторных расчетов с начала 70-х до конца 80-х годов проводилась на трех ЭВМ БЭСМ-6, имевших объем оперативной памяти до 30 000 сорока восьми разрядных слов и быстродействие 1 миллион операций в секунду.

Несмотря на это, с конца 60-х годов несколько научных групп в “Курчатовском институте” начали создавать расчетные программы, реализующие метод Монте-Карло, для решения некоторых задач теории переноса излучений. Был разработан комплекс программ, предназначенных для нейтронно-физических расчетов трехмерных фрагментов активных зон некоторых типов реакторов (космических, промышленных, ВВЭР и других) с учетом резонансных и термализационных эффектов, а также для расчетов бланкетов термоядерных реакторов и защиты от излучений. В этих программных средствах использовались отечественные библиотеки ядерных данных. Необходимо отметить, однако, что работы по созданию подобных программных средств проводились без общего плана и созданные коды, при всех их неоспоримых достоинствах, не были достаточно универсальными и точными [4...8].

Кроме “Курчатовского института” работы по созданию программных средств, реализующих метод Монте-Карло, проводились и в других институтах отрасли: ВНИИТФ, ВНИИЭФ, ФЭИ и других.

2. История MSU

По инициативе Л.В. Майорова и при поддержке начальника отдела Я.В. Шевелева в 1982 г. в Институте (тогда Отделении) ядерных реакторов “Курчатовского института” начались работы в рамках проекта MSU [9...49]. Общие трудозатраты по проекту вплоть до завершения MSU-4 составили около 250 человеко-лет.

Цель работ по проекту MSU – возможно точное компьютерное моделирование физических процессов переноса различного вида излучений, в первую очередь, для повышения точности и надежности оценки ядерной и радиационной безопасности объектов применения атомной энергии. Достижение этой цели предполагает выполнение работ по следующим направлениям:

- разработка и усовершенствование алгоритмов метода Монте-Карло;
- разработка пакета прикладных программ MSU со строго определенной модульной структурой;
- проведение собственных оценок ядерных данных, создание собственного банка ядерных данных;
- разработка на базе модулей пакета рабочих программ, рассматривающих реальные системы со сложной геометрией с использованием ядерных данных без каких-либо упрощений (или с минимальными упрощениями) при моделировании взаимодействия частиц с веществом;
- проверка качества (верификация и валидация) программ и констант по данным оцененных экспериментов.

К концу 1985 г. были завершены работы по созданию версии пакета MSU-1.1 для ЭВМ БЭСМ-6 [9], что позволило решать с достаточно высокой точностью широкий круг задач на

критичность. Для описания геометрии в MCU-1 применялся набор специализированных геометрических модулей как новых, так и разработанных в предыдущие годы и модернизированных с учетом новых интерфейсов. В 1987 г. пакет был установлен на ЭВМ типа ЕС, VAX, Convex и Cyber (версия MCU-1.2 [10]), а в 1988 г. на персональные компьютеры (MCU-1.3 [11]).

В течение 1989...1991 гг. разработана вторая версия пакета [12, 13]. Был написан новый физический модуль, моделирующий взаимодействие нейтрона с ядрами с учетом непрерывного изменения его энергии во всем диапазоне, и создан универсальный геометрический модуль, реализующий метод комбинаторной геометрии.

К 1994 г. закончились работы над третьей версией пакета [14], для которой были разработаны новые транспортный и регистрационный модули. Последний проводит оценку практически всех функционалов потока нейтронов, необходимых для проектирования ядерных реакторов, включая расчет всех малогрупповых констант, используемых в инженерных программах. Из модулей пакета MCU-3 собрана программа MCU-RFFI [15, 17], которая передана во многие российские организации и в некоторых из них эксплуатируется до сих пор.

3. Свод MCU-4

Введем определения некоторых терминов, которые применяются в дальнейшем изложении. Будем называть *сводом* вполне определенную совокупность пакета прикладных, специализированных рабочих, служебных программ, а также библиотек констант и специальных программ для получения (генерации) этих библиотек из файлов оцененных ядерных данных. *Пакетом прикладных программ* называется объединенная общей архитектурой определенная совокупность программных модулей.

Под *модулем* будем иметь в виду одну или несколько программных единиц с предписанной архитектурой пакета предназначением и межмодульными связями, которые регламентируются интерфейсами с полностью описанными точками входа и выхода. *Программной единицей* назовем имеющую самостоятельное значение минимальную программную компоненту, которая может использоваться в прикладных программах свода, других программах либо автономно или в служебных программах и программах генерации библиотек.

Специализированная рабочая программа – исполняемая программа, собранная из вполне определенных модулей и предназначенная для решения конкретных задач математического моделирования физических процессов. *Служебные программы* – это исполняемые программы, которые предназначены для генерации специализированных рабочих программ, запуска их на счет, визуализации входных и выходных данных и выполнения других действий, не связанных напрямую с математическим моделированием физических процессов.

Банк данных – определенная совокупность библиотек констант. *Библиотека констант* – совокупность данных по свойствам ядер или данных, необходимых для математического моделирования физических процессов переноса определенного вида излучения и взаимодействия его с веществом, возможно, в определенном энергетическом диапазоне, которая получена из измерений физических величин или их теоретических оценок с применением некоторой компьютерной обработки теоретико-экспериментальной информации.

Семейством программ MCU назовем совокупность всех специализированных рабочих программ, собранных из модулей всех версий пакета MCU. *Архитектурой* (по аналогии с термином в бифункциональных искусствах [50]) назовем определенный способ организации пространства (некоторой совокупности) компьютерных программ на основе конструкций-интерфейсов. Составные части свода MCU-4 перечислены в табл. 1, а компоненты описываются в следующих разделах.

Таблица 1. Состав свода MCU-4

Банки данных	Пакет прикладных программ	Специализированные рабочие программы	Служебные программы	Программы генерации библиотек констант
DLC/MCUDAT-1.0 DLC/MCUDAT-1.3 DLC/MCUDAT-2.1 DLC/MCUDAT-2.2	MCU-4	MCU-RFFI/A MCU-REA MCU-REA/1 MCU-REA/2 MCU-PR MCU-RR	MCUREP MCUOFFICE	DOLIPAR DOKORT DOTPC RAPAN TERMAC СТЕНЬ

3.1. Банки данных, библиотеки констант и программы для их генерации

Программы семейства MCU позволяют решать уравнения переноса нейтронов, фотонов, электронов и позитронов с точностью, ограниченной практически только точностью используемых ядерных данных. Допускается непрерывное, поточечное, подгрупповое или ступенчатое (кусочно-постоянное и групповое) представление сечений ядерных реакций.

В наиболее полном составе банк данных DLC/MCUDAT (официальные версии: 1.0, 1.3, 2.1, 2.2) включает в себя библиотеки, перечисленные в табл. П1 Приложения. Для создания DLC/MCUDAT применяются различные файлы оцененных нейтронных данных, библиотеки ядерных данных, а также собственные оценки на основе банков данных CINDA (содержит библиографические данные) [51] и EXFOR (содержит результаты измерений) [52]. Основные источники для создания библиотек констант:

- БНАБ (версии 78, 90 и 93 [53, 54]);
- LIPAR [55];
- БОФС – библиотека обобщенных фоновых спектров замедлителей [56];
- ENDF/B (версии V, VI, VI.5, VI.8 [57]);
- JENDL (версии 3.2 и 3.3 [57]);
- JEF (версия 2.2 [57]);
- BROND (версии 2 и 3 [57]);
- IRDF-90 (версия 2 [58]);
- RRDF-98 [59];
- VITAMIN/C и VITAMIN/B-6 [60].

Для получения библиотек констант, составляющих банк данных DLC/MCUDAT, используются программы генерации, перечисленные в табл. 2.

Все программы, кроме NJOY [61] и ГРУКОН [62], разработаны в рамках проекта MCU (табл. П3 Приложения). Банк данных DLC/MCUDAT-1.0 содержит информацию для 131-го изотопа, а банк DLC/MCUDAT-1.3 – для 282-х изотопов (данные для 131-го изотопа из DLC/MCUDAT-1.0).

Банк DLC/MCUDAT-2.1 содержит информацию для 282-х изотопов, причем подверглись ревизии данные для 131-го изотопа банка DLC/MCUDAT-1.0, еще для 151-го изотопа данные те же, что и в DLC/MCUDAT-1.3, и появились два новых раздела – библиотеки MULTIC и KORT. Банк DLC/MCUDAT-2.2 содержит информацию для 296-ти изотопов (для 281-го изотопа информация та же, что в DLC/MCUDAT-2.1), состав его приводится в Приложении (табл. П1, П2).

Таблица 2. Программы генерации библиотек, входящих в банк данных DLC/MCUDAT

Библиотека	Программа
ВЕСТА	СТЕНЬ
ТЕПКОН	TERMAC и DOTPC
LIPAR	DOLIPAR
KORT	DOKORT
BNAB/MCU	ГРУКОН и RAPAN
ACE	NJOY
DOSIM	NJOY

3.2. Модули

Пакет MSU является совокупностью отдельных относительно независимых модулей. В настоящее время имеются 8 типов модулей.

1. **Управляющий модуль** организует совместную работу всех модулей.
2. **Модуль траектории** осуществляет организацию моделирования отдельных траекторий частиц.
3. **Физический модуль** вырабатывает необходимые сечения взаимодействия частиц со средой и моделирует их столкновения с ядрами.
4. **Модуль источников** моделирует фазовые координаты частиц источника или начального пакета нейтронов при решении однородной задачи.
5. **Геометрический модуль** определяет местонахождения частицы, отслеживает ее перемещение по пространству и вычисляет все необходимые функции, аргументами которых служат пространственные координаты.
6. **Регистрационный модуль** накапливает статистику событий, необходимую для оценки функционалов, а потом обрабатывает эту статистику.
7. **Модуль оборудования** включает программы, которые объединяются в подмодули и могут зависеть от типа компьютера и применяемой операционной системы:
 - датчик псевдослучайных чисел;
 - программы открытия файлов, необходимых для работы, и назначения их логических номеров;
 - программы датчика времени и даты;
 - программы ввода/вывода;
 - программы бесформатного ввода;
 - подмодуль банкир, который обеспечивает ведение очередей частиц, подлежащих моделированию (первичные и вторичные нейтроны, фотоны и др.).
8. **Модуль выгорания** обеспечивает расчет изменения изотопного состава материалов в процессе работы реактора.

Все межмодульные связи осуществляются через строго регламентированные интерфейсы, определенные в описании архитектуры пакета. Для каждого модуля полностью описаны точки входа в него, а также перечислены точки входа в другие модули, которые вызываются описываемым модулем. Модуль может состоять из нескольких программных единиц (подмодулей) и содержать несколько частей, так как на разных стадиях решения задачи могут использоваться разные подпрограммы.

3.3. Программные единицы MSU-4

Полный набор программных единиц MSU-4 приведен в табл. П4 Приложения. Возможности реализованных в них алгоритмов описываются в этом разделе. Программы семейства MSU решают неоднородные, а для нейтронов и однородные уравнения переноса нейтронов, фотонов, электронов и позитронов аналоговыми и неаналоговыми (весовыми) методами Монте-Карло. Решение задач о критичности систем проводится методом поколений, число NGEN которых задается пользователем.

В каждом поколении моделируются траектории NTOT нейтронов, где NTOT – заданное пользователем постоянное число. Имеются программные средства, позволяющие обосновать правильность выбора значения NTOT для каждой конкретной задачи. Начальные фазовые координаты нейтронов нулевого поколения задаются пользователем в исходных данных для модуля источников. Моделирование истории каждого нейтрона в поколении осуществляется следующим образом:

- разыгрывается случайная траектория нейтрона, начинающаяся в заданной точке, до точки поглощения или вылета из системы;

- для каждой точки поглощения определяются случайное, не обязательно целое число (“вес”) w_n вторичных нейтронов деления, их энергия и направление полета.

После окончания моделирования траекторий всех нейтронов очередного поколения веса нейтронов нового поколения, рожденных в точке с номером n , подвергаются перенормировке. Новые веса w'_n определяются так, чтобы полный суммарный вес нейтронов нового поколения был равен заданному числу NTOT: $w'_n = \text{NTOT} w_n / \sum w_n$.

Точки поглощения нейтронов предыдущего поколения рассматриваются как точки рождения NTOT нейтронов нового поколения с единичным весом каждого. Новые нейтроны выбираются случайным образом так, чтобы математическое ожидание числа нейтронов, рожденных в точке n , было равно w'_n . Для этой цели применяется метод систематической выборки, когда в каждой точке рождается либо $[w'_n]$, либо $[w'_n] + 1$ нейтронов ($[w'_n]$ означает целую часть числа w'_n), но так, чтобы суммарное число нейтронов нового поколения было равно NTOT.

При решении задач с большим числом изотопов в системе вычисления можно существенно ускорить, используя метод суммарного изотопа. Этот метод основан на том, что в каждом материале пользователь может заменить несколько любых малозначащих неделящихся изотопов одним суммарным изотопом с нулевым сечением рассеяния и сечением поглощения, равным $\Sigma_{\text{eff}}(E) = \sum_k \rho_k \sigma_a^{(k)}(E)$, где суммирование проводится по всем малозначащим изотопам, определенным пользователем в файле исходных данных. В модуле траектории при моделировании столкновения считается, что нейтрон поглощается суммарным изотопом с вероятностью $\Sigma_{\text{eff}}(E, \mathbf{r}) / \Sigma_{\text{tot}}(E, \mathbf{r})$. Для розыгрыша поглощения на суммарном изотопе физический модуль не используется.

Реализованы традиционные методы неаналогового моделирования: весовое окно, расщепление, русская рулетка. Кроме этих методов разработан и реализован алгоритм АЛИГР. Он дает возможность, задавая некоторые поверхности-линзы, фокусировать частицы в интересующих пользователя областях пространства, что существенно уменьшает статистическую погрешность расчета при моделировании того же числа частиц при необходимости оценить функционалы их потока в малых по объему областях.

Фазовые координаты частиц источника моделируются из весьма общих распределений, в частности, пространственное распределение частиц источника задается средствами комбинаторной геометрии. Для энергетической, угловой и временной переменных предусмотрен широкий выбор стандартных одномерных распределений. Имеется возможность задавать источники, для которых энергетическое и угловое распределения коррелируют между собой.

При прослеживании траекторий нейтронов для моделирования столкновений в разных энергетических областях можно комбинировать перечисленные в табл. П1 Приложения библиотеки констант, применяя соответствующие подмодули физического модуля. Так, в быстрой энергетической области возможно использование констант библиотеки ACE с учетом всех законов взаимодействия, имеющихся в файлах оцененных нейтронных данных, или библиотеки VNAV/MCU. В области неразрешенных резонансов сечения вычисляются в подгрупповом приближении. Это же приближение можно применять и в области разрешенных резонансов, а можно использовать поточечное представление энергетической зависимости сечений с линейно-линейной интерполяцией или непрерывную зависимость сечений, вычисляя их для нужной энергии нейтрона по резонансным параметрам из библиотеки LIPAR.

В области термализации можно применить многогрупповое транспортное приближение или проводить моделирование с учетом непрерывного изменения энергии нейтрона и эф-

фехтов корреляции между изменением энергии и направления полета после рассеяния на легких ядрах с использованием данных, полученных из законов рассеяния замедлителей. В обоих случаях при необходимости учитываются когерентные эффекты. Для более тяжелых ядер розыгрыш рассеяния осуществляется по модели идеального газа.

В разработанном в рамках проекта MCU подмодуле для розыгрыша переноса фотонов применяются групповые константы и учитываются следующие эффекты: фотоэлектрический, образование пар и некогерентное рассеяние. Для моделирования рождения фотонов в результате (n, γ) реакции используются групповые константы.

При помощи специального интерфейса возможно включение в MCU программы EGS4 [63, 64], предназначенной для моделирования электронно-фотонных каскадов. В EGS4 для электронов и позитронов учитываются тормозное излучение, кулоновские рассеяния на ядрах, аннигиляция позитрона, Мёллеровское (e^-e^-) и Баба (e^+e^-) рассеяния, а для фотонов кроме перечисленных выше эффектов учитывается еще и когерентное рассеяние.

Программы MCU позволяют рассматривать геометрически очень сложные системы, что достигается применением в геометрическом модуле сочетания методов комбинаторной геометрии и выровненных сечений. Последний дает возможность рассматривать тела, ограниченные поверхностями выше второго порядка. Специальный алгоритм геометрического модуля рассчитывает системы с двойной гетерогенностью, в которых топливные зерна (микрочастицы) сферической формы распределяются равномерно в некоторой матрице. В этом случае при моделировании столкновения к макроскопическому сечению материала матрицы добавляется сечение микрочастицы, равное площади ее наибольшего круга. Если при последующем розыгрыше события оказывается, что частица взаимодействует с микрочастицей, то продолжается моделирование истории частицы внутри сферы. Именно, в локальной системе координат с началом в центре сферы определяются координаты точки и направления влета. Внутри сферы при моделировании перемещения частиц используются алгоритмы комбинаторной геометрии. Утечка из рассматриваемой системы может задаваться вектором баклинга, который учитывается при моделировании комплексным весом.

Модуль регистрации позволяет рассчитывать широкий набор функционалов потока нейтронов: эффективный коэффициент размножения; эффективную долю запаздывающих нейтронов; скорости реакций для произвольных энергетических интервалов; малогрупповые константы ячеек и кассет, в том числе коэффициент диффузии, и другие. Для фотонов предусмотрены оценки многогрупповых потоков и скоростей реакций, а для электронов кроме этих функционалов производится вычисление еще и поглощенного материалом заряда.

Вклады в оценки функционалов вычисляются модулем регистрации на всех траекториях частиц по точкам столкновений или по длине пробега. Для вычисления статистических ошибок функционалов и обеспечения возможности прерывания счета с его последующим возобновлением все истории каждой NBATCH последовательных поколений объединяются в серии. Полное число MAXSER моделируемых серий и число NBATCH задаются в исходных данных. Число промоделированных поколений при этом равно $NGEN = MAXSER/NBATCH$.

Статистическая погрешность оценок функционалов вычисляется в предположении, что вклады в оценки отдельных серий статистически независимы. Естественно, это приближение *при решении однородных задач* приемлемо лишь при достаточно больших значениях NBATCH. Имеются программные средства, обеспечивающие правильность выбора значения NBATCH для каждой конкретной задачи.

Для расчета изменения состава делящихся и поглощающих материалов реактора в процессе его работы можно применять два альтернативных модуля – BURNUP и ORIMCU. Результатом работы модуля BURNUP является зависимость от времени концентраций началь-

ных и образующихся в ядерных реакциях изотопов, имеющих период полураспада $T_{1/2}$ более суток. К ним добавлен ^{135}Xe ($T_{1/2} = 9,14$ час). Таким образом, программу BURNUP можно использовать, если время работы реактора превышает несколько суток.

Все изотопы делятся на три группы: актиноиды (144 изотопа); продукты деления и изотопы, образующиеся при захвате ими нейтрона (170 ядер); поглощающие материалы, обычно применяемые в органах системы управления и защиты реактора (10 элементов). Последняя группа может быть расширена для обеспечения расчетов активации конструкций, накопления медицинских радионуклидов и других подобных задач. При расчете кинетики изотопного состава материалов использован итерационный метод, радикально сокращающий число временных шагов.

Модуль ORIMCU решает задачи об изменении изотопного состава материалов в многозонной реакторной системе. Материалы могут включать 689 легких изотопов (например, входящих в состав конструкционных материалов), 129 актиноидов, 879 продуктов деления. Для каждого изотопа могут учитываться до 7 типов реакций. В качестве основного расчетного блока в модуле применяется программа ORIGEN-S [65, 66], моделирующая изменение изотопного состава одного материала. Включение ORIGEN-S в программу MCU дает возможность в дополнение к расчетам изменения изотопного состава материалов реактора в процессе кампании проводить оценку остаточного энерговыделения и радиационных характеристик облученного ядерного топлива.

Возможность проведения расчетов изотопного состава с использованием в рамках одной программы двух альтернативных модулей выгорания позволяет повысить ее надежность и оценить методическую погрешность каждого из них, так как транспортное уравнение решается с использованием одного и того же алгоритма и одной библиотеки ядерных данных.

Таким образом, можно выделить следующие возможности и особенности программ семейства MCU:

1. Имеется модульная структура программ.
2. При моделировании истории нейтронов:
 - допускается непрерывное, поточечное, подгрупповое и групповое (кусочно-постоянное) представление сечений взаимодействия нейтронов с ядрами;
 - в спектре деления учитываются как мгновенные, так и запаздывающие нейтроны;
 - неупругое рассеяние моделируется с применением законов, представленных в файлах оцененных ядерных данных, или по более простым приближенным моделям;
 - допускается учет температурной зависимости сечений в области неразрешенных резонансов в подгрупповом приближении;
 - доплеровское уширение резонансной кривой в области разрешенных резонансов рассчитывается по аналитическим выражениям (непрерывные зависимости сечений от энергии);
 - учитываются химические связи, тепловое движение ядер и когерентные эффекты в области термализации с использованием законов рассеяния, рассчитанных для необходимой температуры.
3. При моделировании истории фотонов генерация их в (n, γ) реакциях и взаимодействие фотонов со средой осуществляются в многогрупповом приближении.
4. Имеется возможность моделирования электронно-фотонных каскадов.
5. Геометрические возможности программы обеспечиваются совместным применением методов комбинаторной геометрии и выровненных сечений, дополненных специальным алгоритмом моделирования систем, содержащих вкрапления очень мелких зерен.
6. Существует возможность рассчитывать критические системы с утечкой нейтронов, заданной вектором материального параметра (баклинга).

7. Производится оценка всех важных функционалов потока излучений. Оцениваются все малогрупповые константы для инженерных программ расчета ядерных реакторов, включая коэффициенты диффузии.
8. Реализуются как аналоговые, так и весовые методы Монте-Карло.
9. Имеется практически универсальный модуль источников.
10. Предусматривается возможность решения задач с изменением изотопного состава материалов в процессе кампании ядерных реакторов.

3.4. Служебные программы

К таким программам относятся MCUREP и MCUOFFICE. Исходные текстовые файлы модулей пакета MCU написаны на языке GURTRAN, разработанном в рамках проекта MCU. Для упрощения сборки рабочих программ разработан препроцессор, с помощью которого пользователь может генерировать рабочие программы из имеющегося набора модулей для определенной ЭВМ и операционной системы. Все исходные текстовые файлы программных единиц MCU соответствуют входному языку GURTRAN, разработанному в рамках проекта MCU препроцессора MCUREP, в результате работы которого генерируются текстовые файлы на языке Фортран-77.

Необходимость разработки языка GURTRAN диктовалась тем, что Фортран-77, принятый при создании MCU-4 в качестве стандарта, не обеспечивал достаточных средств для написания таких больших программных комплексов, как MCU. Так, в нем отсутствуют средства, позволяющие, однажды описав некую последовательность команд, вставить ее автоматически в несколько подпрограмм или функций, поместить отдельные части модуля в исполняемые программы, работающие на шаге подготовки данных, счета и выдачи результатов, и т.д.

Рабочая версия программы для каждого конкретного компьютера и установленной на ней операционной системы генерируется пользователем из модулей пакета MCU с учетом особенностей задач, которые предполагается решать, и имеющихся вычислительных ресурсов. Файлы на языке Фортран-77 для конкретной версии создаются программой MCUREP из исходных файлов с помощью файлов параметров. В них в виде чисел задаются такие параметры, как максимально возможное число нуклидов в варианте; размер памяти, отводимой под геометрический модуль; максимальное число регистрационных зон, объектов и т.д.

При поставке программы пользователю передается файл параметров, описывающий некую "среднюю" версию для персонального компьютера, работающего под операционной системой MS-DOS или в режиме ее эмуляции. Пользователь имеет возможность отредактировать этот файл для генерации исполняемых файлов с учетом особенностей решаемых задач и имеющихся вычислительных ресурсов.

MCUOFFICE написан на языке C++ и служит для обеспечения максимума удобств пользователю MCU при работе в среде WINDOWS. Основными его функциями являются:

- генерация рабочей версии программы MCU;
- запуск задачи на счет в отдельном окне DOS;
- визуализация исходных данных для геометрического модуля и генерация сообщений об ошибках, если таковые имеются;
- обеспечение возможности редактирования текстов файла, содержащего исходные данные для MCU.

Для проверки входных данных, описывающих геометрию моделируемой системы, можно получить изображение заданной системы в виде плоских сечений с последовательным изображением материальных, регистрационных зон и объектов. Возможна генерация цветных и черно-белых изображений. Выбор сечений, типов областей, числа цветов и места рисунка (экран или файл на диске) устанавливается пользователем в интерактивном режиме.

3.5. Специализированные рабочие программы

Они осуществляют математическое моделирование переноса различного вида излучений и изменения изотопного состава материалов ядерных реакторов с применением различных библиотек констант, алгоритмов и приближений, реализованных в модулях, которые разработаны в рамках проекта MCU или заимствованы из других источников. Для разных заказчиков и различных приложений из модулей пакета MCU-4 собраны и находятся в промышленной эксплуатации следующие программы: MCU-RFFI/A [18], MCU-REA [19], MCU-PR [20], MCU-RR [22], MCU-REA/1 [24] и MCU-REA/2 [25]. Программы MCU-RFFI/A, MCU-REA и MCU-REA/1 аттестованы Ростехнадзором.

Программа MCU-RFFI/A с банком данных DLC/MCUDAT-1.0 предназначена для расчетов критичности систем с заданным изотопным составом материалов конструкций и геометрией, набираемой из тел-примитивов, которые ограничены плоскостями или поверхностями второго порядка. Такие системы могут иметь быстрый, промежуточный и тепловой спектры нейтронов. Программа рассчитывает реакторы типа ВВЭР и РБМК, транспортные, промышленные, космические, исследовательские и другие, хранилища ядерных материалов и контейнеров для их транспортировки, широкий класс критических сборок.

Программа MCU-REA с банком данных DLC/MCUDAT-2.1 как развитие программы MCU-RFFI/A предназначена для расчета нейтронно-физических характеристик (НФХ) реакторов в процессе кампании с учетом изменения изотопного состава топлива и выгорающих поглотителей (ВП). В геометрический модуль включен подмодуль выровненных сечений, что практически снимает какие-либо ограничения на геометрию рассматриваемой системы.

Программа MCU-PR (Production Reactors) с банком данных DLC/MCUDAT-1.3 служит аналогом MCU-REA, но предназначена для расчетов промышленных реакторов. Основных отличий два: она верифицирована и распространяется с константами DLC/MCUDAT-1.3 и имеется возможность при решении уравнения переноса использовать метод АЛИГР.

Программа MCU-RR с банком данных DLC/MCUDAT-2.2 позволяет проводить совместное моделирование переноса нейтронов и фотонов аналоговыми и весовыми методами Монте-Карло, а в остальном она аналогична программе MCU-PR и предназначена для расчетов исследовательских реакторов (Research Reactors – отсюда и RR в названии).

Программа MCU-REA/1 с банком данных DLC/MCUDAT-2.2 – аналог MCU-REA. Отличия в модулях выгорания: в MCU-REA/1 включены новый модуль ORIMCU и более поздняя версия модуля BURNUP. *Программа MCU-REA/2 с банком данных DLC/MCUDAT-2.2* позволяет проводить взаимосвязанное моделирование переноса нейтронов, фотонов, электронов и позитронов аналоговыми и весовыми методами Монте-Карло. Модуль выгорания отсутствует.

4. Результаты верификации аттестованных программ

Для верификации программ MCU-RFFI/A, MCU-REA и MCU-REA/1 применялись данные сборника критических экспериментов ICSBER [67]; данные, полученные на критических стендах АСТРА, РБМК, НАРЦИСС, П и других “Курчатовского института” (многие из этих экспериментов приняты в [67]); описания, подготовленные группой OECD/NEA, и т.д. В подавляющем большинстве случаев расхождение между результатами расчетов и экспериментов находится в пределах экспериментальных погрешностей [26...49].

В верификационном отчете для программы MCU-RFFI/A представлены результаты расчетов 211-ти экспериментальных конфигураций. По результатам их анализа определена следующая экспертная оценка точности, обеспечиваемой программой MCU-RFFI/A для различных размножающих нейтроны систем.

Для холодных водо-водяных систем: с низкообогащенным (до 5 %) урановым топливом, в частности, для реакторов ВВЭР погрешность $dK_{эфф} = 0,003$; с плутониевым и смешанным уран-плутониевым (МОХ) топливом $dK_{эфф} = 0,005$; с высокообогащенным (свыше 5 %) урановым топливом $dK_{эфф} = 0,006$. Для холодных уран-графитовых и уран-тяжеловодных систем $dK_{эфф} = 0,004$. Для холодных систем с высокообогащенным урановым топливом, гидридом циркония в качестве замедлителя и окисью бериллия в качестве отражателя, в частности для реактора ТОПАЗ-2, $dK_{эфф} = 0,006$. Для урановых и плутониевых систем без замедлителя:

- для топлива без разбавителей (кислород, конструкционные материалы) $dK_{эфф} = 0,005$;
- для топлива с разбавителями $dK_{эфф} = 0,015$.

Для горячих систем приведенные выше погрешности увеличиваются на величину 0,002. Методическая погрешность значений потоков нейтронов, проинтегрированных по выделенным в системе объемам, составляет 3 %. Эти погрешности зафиксированы в приложении к аттестационному паспорту программы MCU-RFFI/A (аттестационный паспорт ПС № 61 от 16.10.96). Полное число экспериментов, рассмотренных в верификационных отчетах программ MCU-REA и MCU-REA/1, равно 315-ти. Отметим, что в основном это эксперименты, оцененные и описанные группой ICSBER.

По результатам анализа определена экспертная оценка точности, обеспечиваемой программами MCU-REA и MCU-REA/1 при расчетах НФХ фрагментов активных зон реакторов типа ВВЭР-440 и ВВЭР-1000, которая внесена в приложения к паспортам аттестации этих программных средств № 115 от 02.03.2000 и № 192 от 03.03.2005, соответственно. В аттестационном паспорте программы MCU-REA (за исключением некоторых несущественных деталей и в паспорте MCU-REA/1) записаны следующие экспертные количественные оценки погрешностей.

Максимальная оцененная (наблюдавшаяся при верификации) относительная погрешность расчета коэффициента размножения в холодном состоянии для систем с низкообогащенным (до 5 %) свежим окисным урановым топливом: $\pm 0,3$ % с поглотителями из В, Gd или Dy и $\pm 0,5$ % с поглотителями из Eu. Максимальная оцененная относительная погрешность расчета коэффициента размножения в холодном состоянии для систем с плутониевым и МОХ топливом равна $\pm 0,5$ %.

Максимальная оцененная (наблюдавшаяся при верификации) относительная погрешность расчета коэффициента размножения в горячих состояниях для систем с низкообогащенным (до 5 %) свежим окисным урановым топливом до температур: 400 К – $\pm 0,3$ %; 1 800 К – $\pm 0,5$ %; плавления – $\pm 0,7$ %. Максимальная оцененная относительная погрешность расчета коэффициента размножения в горячих состояниях для систем с плутониевым и МОХ топливом – $\pm 0,7$ %.

Максимальная оцененная относительная погрешность расчета потвэльного распределения скорости реакции деления ^{235}U в свежем топливе:

- с поглотителями из В, Gd или Dy – ± 3 %;
- с поглотителями из Eu – ± 5 %;
- то же для скорости реакции деления ^{239}Pu в свежем топливе – ± 5 %.

Максимальные оцененные относительные отклонения расчетных концентраций в процессе выгорания от имеющихся экспериментальных данных и результатов международных расчетных бенчмарков составляют: ядер ^{235}U – ± 5 %; ядер ^{239}Pu – ± 5 %; ядер ^{155}Gd и ^{157}Gd – ± 10 %. Максимальная погрешность в потере реактивности при выгорании до 60 МВт·сут/кг (отклонение от результатов независимых расчетов) равна $\pm 0,02$ (абс).

5. Области применения

Описанные выше рабочие программы семейства MCU имеют свои специфические особенности и области использования. В совокупности же они позволяют решать следующий круг проблем:

- оценка критичности и ядерной безопасности объектов применения атомной энергии;
- моделирование кампании ядерных реакторов различного типа;
- расчет параметров и эффектов, которые не могут быть вычислены с необходимой точностью по инженерным программам и измерены в критических экспериментах;
- моделирование защиты от излучений, оценка радиационной безопасности;
- реакторная дозиметрия;
- расчет сигналов датчиков внутриреакторного контроля распределения энерговыделения;
- оценка радиационных характеристик облученного ядерного топлива;
- трансмутация актиноидов и продуктов деления;
- оценка качества библиотек ядерных данных;
- оценка качества экспериментов;
- верификация инженерных программ расчета ядерных реакторов.

Далеко не полный перечень примеров использования MCU (подробнее см. [68...107]) приводится в этом разделе.

5.1. Реакторы типа ВВЭР

Наиболее широкое применение программы семейства MCU, начиная с версии MCU-1, нашли в расчетах реакторов типа ВВЭР. Практически во всех перечисленных выше областях использования программы MCU были применены. Из работ, выполненных за последние годы, можно отметить следующие.

Разработана методика учета изменения величины межкассетного зазора при расчете энерговыделения в кассете реактора типа ВВЭР-1000. С использованием этой методики проведены оценки локального всплеска энерговыделения в топливе из-за деформаций ТВС в процессе эксплуатации. Выполнено исследование эффектов, связанных с возмущением нейтронного поля вблизи стыковочного узла автоматической регулирующей компенсирующей кассеты в реакторе ВВЭР-440. Посчитаны флюенсы быстрых нейтронов с энергией выше 0,5 МэВ на поверхности и в толще корпусов реакторов блоков 1 и 2 Кольской АЭС и блоков 3...5 Нововоронежской АЭС. Расчеты проведены для всех кампаний или для всех кампаний после отжига корпуса реактора. Сделана прогнозная оценка флюенса для планируемых кампаний.

Выполнены расчеты переходной функции нейтронного бета-эмиссионного детектора системы внутриреакторного контроля (СВРК). Рассчитаны коэффициенты чувствительности датчиков. Результаты анализа проведенных расчетов указали на необходимость коррекции результатов расчетов инженерных нейтронно-физических программ и на существенную зависимость тока детектора от используемого спектра электронов, рождающихся в эмиттере. Есть все основания полагать, что более широкие исследования помогут улучшить описание зависимости переходных коэффициентов от локальных характеристик активной зоны – выгорания, отравления, плотности теплоносителя и т.п.

Программы MCU применялись в рамках российско-американского проекта по утилизации оружейного плутония (совместно с Ок-Риджской национальной лабораторией, США) и “French-German-Russian Trilateral Project on Civil Uses of Plutonium from Dismantled Russian Nuclear Weapons Subject to Arms Reduction”. Разработан и просчитан по MCU представительный набор математических тестов, в который вошли варианты ячеек и кассет для верификации инженерных спектральных программ, а также набор задач для проверки качества

крупно- и мелкосеточных реакторных программ расчета ВВЭР. Использование в вычислениях сделанных в рамках проекта MCU оценок констант изотопов плутония существенно улучшило согласие расчетов с данными измерений.

С применением программ MCU проведена проверка качества экспериментов, выполненных на стендах П и СКфиз (РНЦ “Курчатовский институт”), ZR-6 (Венгрия) и LR-0 (Чехия). Описания критических конфигураций стендов П, СКфиз и ZR-6 приняты группой ICSBER и помещены в выпускаемый этой группой сборник. С привлечением экспериментальной информации, полученной на стендах П и СКфиз, ориентированных на изучение нейтронной физики ВВЭР, программа дополнительно верифицирована применительно к расчетам новых видов топлива: твэлы с гомогенными поглотителями (Gd) и напыленным на топливные таблетки слоем ZrB_2 или B_4C толщиной от 4 до 50 микрон; поглотителей: гафний, диспрозий.

Кроме того, на этих экспериментах проверена точность предсказания программой MCU-REA эффектов возмущения поля нейтронов при введении датчиков СВРК для определения поправочных коэффициентов в показания этих датчиков.

Создана полномасштабная трехмерная модель сборки LR-0 в виде описания ее средствами программы MCU. Сборка LR-0 предназначена для изучения облучения нейтронами и фотонами корпуса реактора типа ВВЭР. При проведении экспериментов измеряются эффективный коэффициент размножения и распределение энерговыделения. Сборка имеет активную зону из кассет, практически не отличающихся от кассет ВВЭР. Имеется имитация выгородки, корпуса и прочих элементов реактора, сделанных так, что можно проводить измерения потоков нейтронов и фотонов в достаточно представительном наборе точек. Ведутся работы по доведению экспериментов на этой сборке до уровня, отвечающего международным требованиям.

5.2. Реакторы типа РБМК

Впервые программа MCU применительно к РБМК была использована в мае 1986 г. при анализе причин аварии на Чернобыльской АЭС. В 90-х годах сколько-нибудь широкого применения программы MCU в расчетах РБМК не находили.

В последнее время у специалистов, занимающихся повышением безопасности, эксплуатацией и улучшением топливного цикла РБМК, вновь возник интерес к MCU. В настоящее время разработана и просчитана по MCU-REA первая версия банка математических тестов для верификации инженерных программ расчета РБМК. В эту версию включены двумерные и трехмерные модели ячеек и полячеек для исследования эффектов обезвоживания, температурных и других эффектов с учетом выгорания топлива обогащениями 2 и 2,4 %, содержащего эрбиевый поглотитель.

Проводятся расчетные исследования:

- зависимости эффективности кластерного регулирующего органа от глубины выгорания;
- распределения радиационного энерговыделения в материалах конструктивных элементов активной зоны РБМК-1000;
- связи между электрическим сигналом внутрореакторных датчиков (ВРД) РБМК-1000 с гафниевым эмиттером и энерговыделением. Проводится подготовка расчетных зависимостей коэффициентов коррекции токов ВРД на выгорание эмиттера и ТВС.

Разработан интерфейс между MCU-REA/1 и инженерной программой ТРОЙКА расчета активной зоны РБМК-1000 (входит в комплекс ЭНЕРГИЯ, разработанный во ВНИИАЭС), который позволяет автоматизировать получение исходных данных на языке MCU из данных программы ТРОЙКА. Это дало возможность приступить к расчетам по MCU полномасштабных трехмерных активных зон РБМК-1000 в выгоревшем состоянии. Объем входной

информации на языке MCU для таких вариантов составляет около 4,5 Мбайт, и задать его без ошибок “вручную” практически невозможно.

С использованием программ MCU проведена проверка качества экспериментов, выполненных на стенде РБМК (РНЦ “Курчатовский институт”). Описания критических конфигураций стенда приняты группой ICSBER и помещены в выпускаемый этой группой сборник. Расчеты реакторов типа РБМК по программам MCU-RFFI/A, MCU-REA/1 и MCU-REA/2 проводятся в РНЦ “КИ”, НИКИЭТ и ВНИИАЭС.

5.3. Высокотемпературные газоохлаждаемые реакторы (ВТГР)

В настоящее время ВТГР с призматическими ТВС, которые содержат топливо в виде частиц микротоплива (МТ), диспергированных в графитовой матрице топливных элементов, разрабатываются в Японии (проект НТТР) и совместно Россией, США, Францией и Японией (газотурбинный модульный гелиевый реактор – ГТ-МГР). Одной из важных проблем при физическом расчете реакторов такого типа является учет случайного гетерогенного распределения МТ в графитовой матрице топливных элементов, которые в свою очередь гетерогенно размещены в замедлителе (так называемая “двойная гетерогенность”). Разработанный и реализованный в рамках MCU оригинальный метод учета двойной гетерогенности размещения топлива позволил эффективно использовать MCU для исследования НФХ реакторов типа ВТГР.

Программа MCU-REA верифицировалась по экспериментальным данным, представленным японской стороной в рамках проекта НТТР, и сейчас применяется при проектировании ГТ-МГР, предназначенного для выработки тепла с температурой до 1000°C для осуществления технологических процессов в различных отраслях промышленности и производства электроэнергии с высоким коэффициентом полезного действия в газотурбинном цикле. Реактор проектируется с учетом возможного сжигания в нем избыточного оружейного плутония. Разработан с проведением расчетов по программе MCU набор тестовых задач для верификации инженерных программ расчета ГТ-МГР. Для полномасштабной модели активной зоны проведена оценка зависимости коэффициента реактивности от температуры для двух вариантов загрузки, для которых оценивалась и неравномерность радиального распределения скорости реакции деления по треугольной сетке.

Проведена оценка зависимости коэффициента реактивности от положения стержней во внешнем отражателе первого варианта загрузки с оценкой аксиальной и радиальной (по треугольной сетке) неравномерностей скорости деления, для двух положений стержня регулирования рассчитаны распределения энерговыделения по топливным компактам. С использованием программы MCU выполнен расчетный анализ экспериментов, проведенных на стенде АСТРА (РНЦ “КИ”) в рамках проекта Pebble Bed Module Reactor (ЮАР).

5.4. Реакторные паропроизводительные установки для подводного и надводного флотов

Применение метода Монте-Карло на основе пакета MCU в различных проектах реакторов транспортного назначения началось на ЭВМ типа VAX и Convex в 1989...90 гг. По инициативе Отделения транспортных реакторов авторами MCU-1.2 проведена работа по адаптации программы на ЭВМ VAX с существенным расширением возможностей пакета под новые задачи. С этого момента MCU постоянно используется при решении различных задач, связанных с развитием транспортной энергетики. Программа применяется для проведения реперных расчетов, совершенствования инженерных методик, изучения различных сложных структур активной зоны с тесной решеткой топливных стержней при наличии сильно поглощающих ВП и переменном температурно-плотностном поле теплоносителя.

Особые перспективы у метода появились после разработки блока выгорания и создания соответствующих библиотек. Быстрое развитие вычислительной техники и совершенствова-

ние численных методов открывают перспективу моделирования кампании реактора с выгоранием топлива и ВП с компенсацией изменения реактивности органами управления. Работы в этом направлении уже ведутся. Для обоснования применения программы MCU-RFFI/A к расчетам реакторных паропроизводительных установок для подводного и надводного флотов проведена ее верификация с привлечением результатов критических экспериментов с высокообогащенным топливом и водяным замедлителем, выполненных в РНЦ “КИ” и принятых в сборник ICSBER.

5.5. Бортовые энергетические реакторные установки для космических аппаратов

В РНЦ “КИ” программы семейства MCU служат единственным инструментом для расчетного исследования НФХ реакторов космического назначения на быстрых, промежуточных и тепловых нейтронах. В частности, эта программа широко использовалась для моделирования и расчетов НФХ реактора-преобразователя ТОПАЗ-2 с высокообогащенным урановым топливом в гидридциркониевом замедлителе с бериллиевым отражателем как в номинальных условиях, так и аварийных ситуациях с попаданием реактора в воду и мокрый песок. Верификация программы применительно к этому типу реакторов проводилась с использованием данных экспериментов, проведенных на стенде НАРЦИСС РНЦ “КИ”. Описания стенда и критических конфигураций сборок, моделирующих реактор ТОПАЗ-2 на стенде НАРЦИСС, приняты в сборник ICSBER.

5.6. Промышленные реакторы

Программа MCU-PR является важным инструментом при расчетах промышленных реакторов. Особенно широкое применение она получила на первых стадиях российско-американского проекта по переводу промышленных уран-графитовых реакторов типа АДЭ в энергетический режим ввиду отсутствия в то время соответствующих надежных инженерных программ.

5.7. Исследовательские реакторы

В НИИАР широко используются программы MCU-RFFI/A и MCU-RR для расчетных обоснований ядерной и радиационной безопасности работ в системах обращения со свежим и облученным ядерным топливом, а также для расчетов загрузки, распределения энерговыделения, эффектов реактивности для активных зон и облучательных устройств исследовательских реакторов с водой в качестве теплоносителя:

- СМ – корпусной реактор с высокообогащенным топливом на основе диоксида урана в металлической матрице с бериллиевым отражателем;
- МИР – петлевой реактор с высокообогащенным топливом на основе уран-алюминиевой композиции с бериллиевой кладкой в активной зоне и отражателе;
- ВК-50 – корпусной кипящий реактор с твэлами типа ВВЭР с естественной циркуляцией теплоносителя.

Аналогичные расчеты проводятся и для активной зоны реактора БОР-60 на быстрых нейтронах с натрием в качестве теплоносителя.

На импульсном исследовательском реакторе ИГР (г. Семипалатинск) проведены эксперименты с целью изучения поведения твэлов типа ВВЭР-1000 в условиях, моделирующих аварии с возрастанием реактивности. По программе MCU-PR рассчитаны функции распределения энерговыделения по объему твэлов, помещенных в экспериментальный канал. Работа была важной частью большой программы по анализу прочностных испытаний твэлов в аварийных ситуациях. Результаты применены при создании базы данных NUREG/IA-0156.

В ПИЯФ РАН (г. Гатчина) программа MCU-PR используется для разработки нового твэла высокопоточного исследовательского реактора ПИК, строящегося в Гатчине. Целью этой разработки является существенное (до 40 %) снижение содержания ^{235}U в твэле.

В Национальном ядерном центре Казахстана по программе MCU-REA проводятся расчетные исследования в обоснование перевода реактора ВВР-К на низкообогащенное топливо (грант МНТЦ № К503р). Рассмотрены варианты активных зон как с легководным, так и с бериллиевым боковыми отражателями. Получены результаты первого этапа расчетных исследований, в которых рассматривались восьми- и четырехтрубная (в которой размещается исполнительный орган канала системы управления и защиты) ТВС с твэлами на основе композиции $UO_2 + Al$.

5.8. Хранилища облученного ядерного топлива и средств транспортировки

MCU-RFFI/A использовалась для обоснования ядерной безопасности хранилищ облученного ядерного топлива и средств транспортировки для Ростовской, Тяньваньской (Китай) и Куданкулам (Индия) АЭС с реакторами ВВЭР-1000. Проведена экспертиза качества проекта сухого хранилища облученного ядерного топлива, разработанного американской фирмой Duke Engineering & Services для Запорожской АЭС (Украина). Необходимо было провести экспертизу на предмет удовлетворения предложенного проекта требованиям регламентирующих документов стран СНГ. Расчеты по программе MCU показали, что в режиме нормальной эксплуатации предлагаемый проект удовлетворяет действующим правилам. Но в случае нетривиальных событий, например, заполнения чистой водой корзины хранилища предлагаемый проект не соответствует действующим в СНГ правилам.

5.9. Реакторы-пережигатели минорных актиноидов

Проблемой пережигания минорных актиноидов, возникающих в процессе эксплуатации ядерных реакторов, занимаются научные коллективы в разных странах. Предлагаются различные концепции, схемы, способы и реакторы для пережигания, в частности, концепция каскадного подкритического жидкосолевого реактора, управляемого ускорителем протонов. Для обоснования работоспособности такого реактора и выбора его оптимальных параметров в рамках работ по гранту МНТЦ-1486 применялась программа MCU-REA с улучшенным алгоритмом расчета методом Монте-Карло систем с внешним источником нейтронов, имеющих величину $K_{эфф} \sim 0,95$.

5.10. Энергетический реактор большой мощности с водяным теплоносителем на закритических параметрах и топливом в виде шаровых микротвэлов

Одна из особенностей такого реактора, разработка которого осуществляется по гранту МНТЦ № 2546, заключается в том, что в активной зоне теплоноситель имеет большие градиенты температуры и плотности. Определение нейтронно-физических и теплогидравлических параметров такой системы должно проводиться на основе совместного решения стационарных уравнений кинетики и теплогидравлики. На практике активная зона разбивалась на большое число зон с кусочно-постоянными свойствами, для каждой из которых в процессе итераций необходимо пересчитывать температурно-плотностные характеристики и групповые сечения в области термализации. Для автоматизации этого процесса использована методика подготовки тепловых сечений, описанная в [107]. Отпала необходимость в предварительной трудоемкой (“ручной”) подготовке групповых сечений в области термализации при изменении температуры среды.

Полученный опыт и методические наработки этого проекта легли в основу другого проекта по разработке концепции высокопоточного исследовательского ядерного реактора с активной зоной на основе шаровых твэлов малого диаметра, выполняемого в рамках гранта РФФИ совместно с ОИЭЯИ “Сосны” НАН Беларуси. В настоящее время эти работы продолжаются.

5.11. Природный ядерный реактор ОКЛО

Выполнены расчеты НФХ свежей зоны природного ядерного реактора ОКЛО, открытого в Габоне в 1972 г. Одной из программ, которая применялась в этих исследованиях, была MCU-REA. По результатам выполненного анализа авторами делается следующий вывод [107]: “Для скорости относительного изменения электромагнитной константы α получены наиболее точные ограничения, из которых следует, что $\frac{\dot{\delta\alpha}}{\alpha} = 0$. Этот вывод может измениться после учета выгорания зоны”.

А при попытке учесть выгорание авторы статьи, столкнувшись с определенными трудностями, пришли к следующему заключению: “Следует признать, что метод Монте-Карло непригоден для расчетов выгорания больших реакторов”. Разработчики программы MCU-REA не могут согласиться со вторым выводом и считают, что трудности с расчетом выгорания при определенных условиях могут быть преодолены и попытаются это доказать практически. Возможно, что учет выгорания позволит пересмотреть и первый вывод.

Заключение

Приведено описание свода MCU-4, включающего в себя банки ядерных данных и программы генерации библиотек констант, модули и пакет прикладных программ, служебные и специализированные рабочие программы. Работа над сводом MCU-4 завершена. Рабочие программы семейства MCU-4 позволяют проводить моделирование методом Монте-Карло взаимосвязанного переноса нейтронов, фотонов, электронов и позитронов в системах с практически произвольной геометрией на основе первичной информации о взаимодействии различных видов излучений с веществом. Возможен учет изменения изотопного состава материалов ядерных реакторов в процессе кампании.

Даны примеры использования этих программ для проектирования и обоснования физических характеристик ядерных реакторов практически всех типов, эксплуатируемых или разрабатываемых в России, и обоснования ядерной безопасности хранилищ и средств транспортировки облученного ядерного топлива. Описаны созданные с помощью MCU наборы математических тестовых задач, предназначенные для проверки качества инженерных программ расчета НФХ ядерных реакторов разного типа. Начиная с 1.01.2005 г. ведутся работы по созданию MCU-5. Первые результаты выполнения этого проекта описаны в работе [108], помещенной в настоящем сборнике.

Автор выражает свою искреннюю признательность коллегам за консультации и ценные замечания, сделанные ими после ознакомления с рукописью данной статьи, Н.И. Алексеёву, В.П. Быкову, Ю.Е. Ванееву, Е.С. Глушкову, С.В. Марину, Д.С. Олейнику, Н.Л. Чичулину, Д.А. Шкаровскому и М.С. Юдкевичу.

Приложение. Состав свода MCU-4

Таблица П1. Состав банка данных DLC/MCUDAT

Библиотека	Энергетическая область: E_n – энергия нейтрона, E_ϕ – энергия фотона	Комментарии
ACE	$E_n < 20$ МэВ	Поточечно представленные нейтронно-физические константы, полученные из файлов оцененных ядерных данных.
БНАБ/MCU	$E_n < 10,5$ МэВ	Расширенная и модифицированная версия 26-групповой системы констант БНАБ-93.
LIPAR	$E_n < E_{pp}$, где E_{pp} – верхняя граница области полностью разрешенных резонансов, своя для каждого изотопа	Параметры разрешенных резонансов.
MULTIC	$E_n < 20$ МэВ	302-групповая библиотека, содержащая, в частности, данные по температурной зависимости подгрупповых параметров в области неразрешенных резонансов (ФЭИ).
KORT	$E_n < 5$ эВ	Поточечно представленные сечения в низкоэнергетической области.
ТЕПКОН	$E_n < 1$ эВ	40-групповые сечения в области термализации.
ВЕСТА	$E_n < 4,8$ эВ	Библиотека констант реакторных замедлителей для моделирования рассеяния медленных нейтронов с учетом непрерывного изменения энергии нейтронов в области термализации, содержащая данные в виде вероятностных таблиц.
BURNUP		Данные для расчета изменения изотопного состава материалов (выходы, периоды полураспада и т.д.).
DOSIM	Зависит от порога реакции	Поточечно представленные сечения реакций активационных детекторов, полученные из дозиметрических и других файлов оцененных ядерных данных.
PHOTONS	$E_n < 20$ МэВ, 10 кэВ $< E_\phi < 20$ МэВ	Библиотека групповых сечений рождения фотонов в результате нейтронных взаимодействий с ядрами среды, полученная из данных библиотек VITAMIN/C и VITAMIN/B-6.
PHOTONT	Зависит от использованной оценки	Библиотека групповых сечений взаимодействия фотонов с ядрами среды, полученная из данных библиотек VITAMIN/C (от 10 кэВ до 14 МэВ) и VITAMIN/B-6 (от 10 кэВ до 30 МэВ).
PHOTONK	1 кэВ $< E_\phi < 20$ МэВ	Библиотека фотонных керма-факторов в поточечном представлении, полученная в основном из файлов ENDF/B-6.5.

Для моделирования электронно-фотонных каскадов применяется собственная библиотека программы EGS-4 в области энергий фотонов и электронов от 20 МэВ до 10 кэВ. Программа ORIMCU, которая может использоваться в расчетах как альтернативный модуль выгорания, имеет свою внутреннюю библиотеку констант.

Таблица П2. Нуклидный состав банка данных DLC/MCUDAT-2.2

	Z-имя-А		Z-имя-А		Z-имя-А		Z-имя-А
1	2	3	4	5	6	7	8
1	1-H-1	2	1-H-2	3	2-HE	4	2-HE-3
5	2-HE-4	6	3-LI-6	7	3-LI-7	8	4-BE-9
9	5-B	10	5-B-10	11	5-B-11	12	6-C
13	7-N	14	8-O	15	9-F-19	16	11-NA-23
17	12-MG	18	13-AL-27	19	14-SI	20	15-P-31
21	16-S	22	17-CL	23	19-K	24	20-CA

1	2	3	4	5	6	7	8
25	22-TI	26	23-V	27	24-CR	28	24-CR-50
29	24-CR-52	30	24-CR-53	31	24-CR-54	32	25-MN-55
33	26-FE	34	26-FE-54	35	26-FE-56	36	26-FE-57
37	26-FE-58	38	27-CO-59	39	28-NI	40	28-NI-58
41	28-NI-60	42	28-NI-61	43	28-NI-62	44	28-NI-64
45	29-CU	46	30-ZN	47	31-GA	48	34-SE-77
49	34-SE-78	50	34-SE-80	51	34-SE-82	52	35-BR-79
53	35-BR-81	54	36-KR-80	55	36-KR-82	56	36-KR-83
57	36-KR-84	58	36-KR-85	59	36-KR-86	60	37-RB-85
61	37-RB-86	62	37-RB-87	63	38-SR	64	38-SR-86
65	38-SR-87	66	38-SR-88	67	38-SR-89	68	38-SR-90
69	39-Y-89	70	39-Y-90	71	39-Y-91	72	40-ZR
73	40-ZR-90	74	40-ZR-91	75	40-ZR-92	76	40-ZR-93
77	40-ZR-94	78	40-ZR-95	79	40-ZR-96	80	41-NB-93
81	41-NB-95	82	42-MO	83	42-MO-95	84	42-MO-96
85	42-MO-97	86	42-MO-98	87	42-MO-99	88	42-MO-100
89	43-TC-99	90	44-RU-100	91	44-RU-101	92	44-RU-102
93	44-RU-103	94	44-RU-104	95	44-RU-105	96	44-RU-106
97	45-RH-103	98	45-RH-105	99	46-PD-104	100	46-PD-105
101	46-PD-106	102	46-PD-107	103	46-PD-108	104	47-AG
105	47-AG-107	106	47-AG-109	107	47-AG-110m	108	47-AG-111
109	48-CD	110	48-CD-110	111	48-CD-111	112	48-CD-112
113	48-CD-113	114	48-CD-114	115	48-CD-115m	116	48-CD-116
117	49-IN	118	49-IN-113	119	49-IN-115	120	50-SN
121	50-SN-116	122	50-SN-117	123	50-SN-118	124	50-SN-119
125	50-SN-120	126	50-SN-122	127	50-SN-123	128	50-SN-124
129	50-SN-125	130	50-SN-126	131	51-SB-121	132	51-SB-123
133	51-SB-124	134	51-SB-125	135	51-SB-126	136	52-TE-122
137	52-TE-123	138	52-TE-124	139	52-TE-125	140	52-TE-126
141	52-TE-127m	142	52-TE-128	143	52-TE-129m	144	52-TE-130
145	52-TE-132	146	53-I-127	147	53-I-129	148	53-I-131
149	53-I-135	150	54-XE-128	151	54-XE-129	152	54-XE-130
153	54-XE-131	154	54-XE-132	155	54-XE-133	156	54-XE-134
157	54-XE-135	158	54-XE-136	159	55-CS-133	160	55-CS-134
161	56-CS-135	162	55-CS-136	163	55-CS-137	164	56-BA
165	56-BA-134	166	56-BA-135	167	56-BA-136	168	56-BA-137
169	56-BA-138	170	56-BA-140	171	57-LA-139	172	57-LA-140
173	58-CE-140	174	58-CE-141	175	58-CE-142	176	58-CE-143
177	58-CE-144	178	59-PR-141	179	59-PR-142	180	59-PR-143
181	60-ND-142	182	60-ND-143	183	60-ND-144	184	60-ND-145
185	60-ND-146	186	60-ND-147	187	60-ND-148	188	60-ND-150
189	61-PM-147	190	61-PM-148	191	61-PM-148m	192	61-PM-149
193	62-SM	194	62-SM-147	195	62-SM-148	196	62-SM-149
197	62-SM-150	198	62-SM-151	199	62-SM-152	200	62-SM-153
201	62-SM-154	202	63-EU	203	63-EU-151	204	63-EU-152
205	63-EU-153	206	63-EU-154	207	63-EU-155	208	63-EU-156
209	64-GD	210	64-GD-A(*)	211	64-GD-152	212	64-GD-154
213	64-GD-155	214	64-GD-156	215	64-GD-157	216	64-GD-158
217	64-GD-160	218	65-TB-159	219	65-TB-160	220	66-DY
221	66-DY-A(*)	222	66-DY-156	223	66-DY-158	224	66-DY-160
225	66-DY-161	226	66-DY-162	227	66-DY-163	228	66-DY-164

1	2	3	4	5	6	7	8
229	68-ER	230	68-ER-166	231	68-ER-167	232	68-ER-168
233	72-HF	234	72-HF-174	235	72-HF-176	236	72-HF-177
237	72-HF-178	238	72-HF-179	239	72-HF-180	240	73-TA-181
241	74-W	242	74-W-180	243	74-W-182	244	74-W-183
245	74-W-184	246	74-W-186	247	77-IR-191	248	77-IR-193
249	79-AU-197	250	82-PB	251	83-BI-209	252	90-TH-230
253	90-TH-232	254	91-PA-231	255	91-PA-233	256	92-U-232
257	92-U-233	258	92-U-234	259	92-U-235	260	92-U-236
261	92-U-237	262	92-U-238	263	93-NP-237	264	93-NP-238
265	93-NP-239	266	94-PU-236	267	94-PU-238	268	94-PU-239
269	94-PU-240	270	94-PU-241	271	94-PU-242	272	94-PU-243
273	94-PU-244	274	95-AM-241	275	95-AM-242	276	95-AM-242m
277	95-AM-243	278	95-AM-244	279	96-CM-242	280	96-CM-243
281	96-CM-244	282	96-CM-245	283	96-CM-246	284	96-CM-247
285	96-CM-248	286	97-BK-249	287	97-BK-250	288	98-CF-249
289	98-CF-250	290	98-CF-251	291	98-CF-252	292	98-CF-253
293	98-CF-254	294	00-FP-233**	295	00-FP-235**	296	00-FP-239**

(*) В 64-GD-A и 66-DY-A включены только четные изотопы Gd и Dy, соответственно.

** FP – это продукты деления ^{233}U , ^{235}U и ^{239}Pu , соответственно. В число продуктов деления не включены сильно поглощающие изотопы ^{113}Cd , ^{149}Sm , ^{151}Sm , ^{155}Gd и ^{157}Gd .

В некоторых случаях естественная смесь состоит только из одного изотопа. Потребитель может задавать или элемент, или изотоп. Константы их, естественно, совпадают. Ниже приводится список этих элементов и включенных в предыдущую таблицу изотопов.

Элемент	Z-имя-A	Элемент	Z-имя-A	Элемент	Z-имя-A	Элемент	Z-имя-A
Be	4-BE-9	F	9-F-19	Na	11-NA-23	Al	13-AL-27
P	15-P-31	Mn	25-MN-55	Co	27-CO-59	Y	39-Y-89
Nb	41-NB-93	Rh	45-RH-103	Cs	55-CS-133	Pr	59-PR-141
Au	79-AU-197	Bi	83-BI-209				

Таблица ПЗ. Разделы DLC/MCUDAT, включенные в аттестованные библиотеки

Раздел DLC/MCUDAT	Библиотека			
	DLC/MCUDAT-1.0	DLC/MCUDAT-1.3	DLC/MCUDAT-2.1	DLC/MCUDAT-2.2
ACE	+	+	+	+
БНАБ/MCU	+	+	+	+
LIPAR	+	+	+	+
MULTIC	+	+	+	+
KORT	+	+	+	+
ТЕПКОН	+	+	+	+
ВЕСТА	+	+	+	+
BURNUP	-	+	+	+
DOSIM	-	-	+	+
PHOTONS	-	-	+	+
PHOTONT	-	-	+	+
PHOTONK	-	-	+	+

Не являются разделами DLC/MCUDAT, но могут использоваться в расчетах собственные библиотеки кодов EGS-4 и ORIGEN-S, каждая из которых располагается в отдельной директории с поддиректориями.

Т а б л и ц а П 4. Программы генерации библиотек констант

Программа	Раздел DLC/MCUDAT
СТЕНЫ	ВЕСТА
ТЕРМАС и ДОТРС	ТЕПКОН
DOLIPAR	LIPAR
DOKORT	KORT
RAPAN	BNAB/MCU

Т а б л и ц а П 5. Модули и программные единицы пакета MCU-4

Тип модуля пакета	Программная единица	Объем информации, кбайт	
Управляющий	CG4	23,5	
	Транспортный	TM4	61,8
		TG4	68,5
		ALIGR	36,5
		ALPUST	1,0
Физический	СОФИЗМ	56,1	
	ФИМБРОЕН	129,0	
	ФИМТОЕН	102,4	
	МОФИТТГ	130,9	
	FIMUL	32,1	
	FARION	116,1	
	PIN	37,9	
	POIRES	49,7	
	RAPAN	130,7	
	ФОТОН	125,6	
	MCUEGS	144,0	
	DOSIM	7,8	
	PB4	9,3	
	Геометрический	NCG	253,7
SCG		144,0	
MBC		41,2	
Источника	SRC	68,9	
Регистрации	REGM4	105,2	
	RUSER	13,2	
Выгорания	BR1D	24,0	
	BR2D	37,4	
	BURNUP3	237,0	
	BDOPK	20,3	
	ORIMCU	100,5	
Оборудования	ENVIR	79,3	
Всего		2 300	

Не являются частью пакета, но могут использоваться при создании рабочих программ коды EGS-4 и ORIGEN-S, каждый из которых располагается в отдельной директории с поддиректориями.

Гомин Евгений Алексеевич, контактный тел.: 196-98-11; e-mail: gomin@adis.vver.kiae.ru

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. <http://www.geocities.com/CollegePark/Quad/2435/history.html>
2. Улам С. Приключения математика. – Москва-Ижевск: РХД, 2001.
3. *Metropolis N., Ulam S.* The Monte Carlo method // J. Amer. Statistical Assoc. 1949. Вып. 44, № 247. – С. 335 – 341.
4. *Майоров Л.В.* Программный комплекс ММКФК для расчета реакторов методом Монте-Карло, разработанный А.Д. Франк-Каменецким // ВАНТ. Сер. ФизТЯР. Вып. 8(21) и 9(22). 1981. – С. 7 – 15.
5. *Франк-Каменецкий А.Д., Шаталов Г.Е.* Модули соударений программ расчета реакторов методом Монте-Карло при групповом описании констант взаимодействия. Там же. – С. 57 – 61.
6. *Каминский А.С., Майоров Л.В.* Программа PIT для расчета потоков медленных нейтронов методом Монте-Карло с учетом термализации. Там же. – С. 76 – 77.
7. *Майоров Л.В., Франк-Каменецкий А.Д., Шаталов Г.Е.* Комплекс программ для решения задач переноса методом Монте-Карло / В кн. “Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике”. – Новосибирск: СО АН СССР, 1979. – С. 114 – 121.
8. *Кожневиков А.Н. и др.* МОКДИФ – программа расчета характеристик поля нейтронов в одномерной геометрии. Препринт ИАЭ-2977. 1977.
9. *Лиман Г.Ф., Майоров Л.В., Юдкевич М.С.* Пакет программ MCU для решения методом Монте-Карло задач переноса излучений в реакторах // ВАНТ. Сер. ФизТЯР. Вып. 7. 1985. – С. 27 – 31.
10. *Владимирова Т.М., Гомин Е.А., Гуревич М.И. и др.* Мобильная версия пакета для решения методом Монте-Карло задач переноса излучений MCU-1.2. Отчет ИАЭ инв. № 36/822887. 1987.
11. *Владимирова Т.М., Носовский И.В., Романов А.С., Чистякова В.А.* Пакет программ MCU для решения методом Монте-Карло задач переноса излучений. Версия MCU-1.3 для РС. Отчет ИАЭ инв. № 36/1-780-89. 1989.
12. *Gomín E.A., Maiorov L.V., Yudkevich M.S.* Some Aspects of Monte Carlo Method Application to Nuclear Reactor Analysis // Progress in Nuclear Science. Vol. 24, NN 1...3, 1990.
13. *Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Гомин Е.А. и др.* Пакет программ MCU-2 для расчета методом Монте-Карло нейтронно-физических характеристик ядерных реакторов. Отчет ИАЭ инв. № 36/1-1493-91. 1991.
14. *Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Гомин Е.А. и др.* Программа MCU-3 для расчета методом Монте-Карло нейтронно-физических характеристик ядерных реакторов. Тома 1...5. Препринты ИАЭ-5772/5, -5777/5, -5736/5, -5741/5, -5739/5. 1994.
15. *Гомин Е.А., Гуревич М.И., Майоров Л.В., Марин С.В.* Описание применения и инструкция для пользователя программы MCU-RFFI расчета методом Монте-Карло нейтронно-физических характеристик ядерных реакторов. Препринт ИАЭ-5837/5. 1994.
16. *Gurevich M.I., Bryzgalov V.I.* The Neutrons Flux Density Calculation by Monte Carlo Code for the Double Heterogeneity Fuel / Proc. of the Int. Conf. on Reactor Physics and Reactor Computations. Tel-Aviv. January 23 – 26, 1994, pp. 190 – 196.
17. *Gomín E.A., Maiorov L.V.* The MCU-RFFI Monte Carlo Code for Reactor Design Applications / Proc. of Int. Conf. on Mathematics and Computation, Reactor Physics, and Environmental Analyses, April 30 – May 4, 1995, vol. 2, pp. 1136 – 1141, Portland, Or., USA.
18. *Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Брызгалов В.И. и др.* Программа MCU-RFFI/A. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 32/1-14-298. 1998.
19. *Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Брызгалов В.И. и др.* Программа MCU-REA с библиотекой ядерных данных DLC/MCUDAT-2.1. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/7-98. 1998.
20. *Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Брызгалов В.И. и др.* Программа MCU-PR с библиотекой ядерных данных DLC/MCUDAT-1.3. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/6-98. 1998.
21. *Gomín E.A., Maiorov L.V.* The MCU Monte Carlo Code for 3D Depletion Calculation(invited) / Proc. of Int. Conf. on Mathematics and Computation, Reactor Physics, and Environmental Analyses in Nuclear Applications, September 27 – 30, 1999, vol. 2, pp. 997 – 1006, Madrid, Spain.
22. *Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Брызгалов В.И. и др.* Программа MCU-RR с библиотекой ядерных данных DLC/MCUDAT-2.1. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/16-2000. 2000.

23. **Gomin E.A., Gurevich M.I., Maiorov L.V.** Status of MCU. Programme and Book of Abstracts. Advanced Monte Carlo on Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications, Monte Carlo 2000, October 23 – 26, 2000, pp. 2003 – 2004, Lisbon, Portugal.
24. **Гомин Е.А., Майоров Л.В.** (редакторы). Программа MCU-REA/1 с библиотекой констант DLC/MCUDAT-2.2. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/38-2004. 2004.
25. **Гомин Е.А., Майоров Л.В.** (редакторы). Программа MCU-REA/2 с библиотекой констант DLC/MCUDAT-2.2. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/47-2004. 2004.
26. **Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Гомин Е.А. и др.** Верификация программы MCU-RFFI/A. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/1-133-96. 1996.
27. **Алексеев А.Н., Гомин Е.А., Гуревич М.И. и др.** Верификация программы MCU на серии критических экспериментов с высокообогащенным топливом и водяным замедлителем. Препринт ИАЭ-6009/5. 1996.
28. **Bryzgalov V.I., Glushkov A.E., Gomin E.A. et al.** Verification of the MCU Code on Small-Size Space Reactors / Proc. of Int. Conf. on the Physics of Reactors Physor 96, September 16 – 20, 1996, pp. 138 – 147, Mito, Ibarahi, Japan.
29. **Chachin D.V., Gomin E.A.** Validation of the MCU-RFFI/A Code Applying to Highly Enriched U-235 and U-233 Metal Systems / Proc. of Joint Int. Conf. on Mathematical Methods and Supercomputing for Nuclear Applications. October 5 – 9, 1997, pp. 243 – 252, Saratoga Springs, N.Y., USA.
30. **Гомин Е.А., Чачин Д.В.** Валидация программы MCU-RFFI/A применительно к металлическим системам из высокообогащенного по U-235 и U-233 топлива. Препринт ИАЭ-6047/5. 1997.
31. **Yudkevich M.S., Manturov G.N., Primm R.T.** Validation of MCU and KENO Monte Carlo Codes for Application to VVER/PWR Reactors with MOX Fuel Loading // Trans. Am. Nucl. Soc., 79, 287, 1998.
32. **Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Гомин Е.А. и др.** Верификация программы MCU-REA. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/8-98. 1998.
33. **Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Гомин Е.А. и др.** Верификация программы MCU-PR. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/9-98. 1998.
34. **Gomin E., Kalugin M., Maiorov L., Yudkevich M.** Calculational Burnup Credit Benchmark no.2 (CB2). MCU results. Published in: L. Markova. Final Evaluation of CB2 Results and Preliminary Evaluation of CB3 Results (VVER-440 Burnup Credit Benchmark) / 5th Meeting of AER Working Group E on Physical Problems on Spent Fuel, Radwaste and Decommissioning of Nuclear Power Plants, Rez, Czech Republic, April 11 – 12, 2000.
35. **Alexeyev N.I., Gomin E.A., Gurevich M.I. et al.** Modeling of Benchmark Experiments Performed at ZR-6 Critical Facility and Validation of the MCU-REA Code / Proc. of the ANS Int. Topical Meeting on Advances in Reactor Physics and Mathematics and Computation into the Next Millennium PHYSOR-2000. May 7 – 12, 2000, p. XI.D.1, Pittsburg, Pen., USA.
36. **Gomin E., Kalugin M., Shkarovsky D.** MCU Results for the Benchmark on the VENUS-2 Core Measurements / 3rd TFRPD Meeting, OECD/Nuclear Energy Agency, France, 14 – 16 June 2000.
37. **Gomin E., Kalugin M., Shkarovsky D.** KRITZ-2 Experim. Benchmark Preliminary Analysis. Там же.
38. **Bychkov S., Kalugin M., Lazarenko A., Shkarovsky D.** International Calculational Benchmark VVER-1000 Assembly with Burnable Absorbers. Comparison of results obtained with various codes / Joint Technical Meeting on MOX Fuel Disposition in VVER-1000. Moscow, 24 – 28 July 2000.
39. **Gomin E., Kalugin M.** VENUS-2 Experimental Benchmark MCU Analysis / 5th TFRPD Meeting, OECD/Nuclear Energy Agency, Chester, United Kingdom, 25 – 26 October 2001.
40. **Gomin E., Kalugin M., Maiorov L.** MCU Results for the CROCUS Experimental Benchmark / 12th WPPR Meeting. Там же.
41. **Алексеев Н.И., Городков С.С., Марин С.В.** Верификация программы MCU-REA/2 применительно к расчетам показаний детекторов прямой зарядки системы внутриреакторного контроля ВВЭР-1000. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/11-2002. 2002.
42. **Алексеев Н.И., Гомин Е.А., Гуревич М.И. и др.** Обоснование программы MCU-REA/2 с библиотекой констант DLC/MCUDAT-2.2 применительно к расчетам прохождения быстрых нейтронов в железо-водных конструкциях. Верификационный отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/15-2002. 2002.
43. **Абагян Л.П., Брызгалов В.И., Гомин Е.А. и др.** Верификация программы MCU-REA применительно к расчетам критичности и выгорания топлива реакторов типа РБМК. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/33-2003. 2002.

44. *Калугин М.А., Майоров Л.В.* Верификация программы MCU-REA применительно к расчетам изменения изотопного состава материалов реакторов типа ВВЭР с использованием модуля ORIMCU. Верификационный отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/19-2003. 2003.
45. *Алексеев Н.И., Гомин Е.А., Гуревич М.И. и др.* Верификация программы MCU-REA/2 с библиотекой констант DLC/MCUDAT-2.2 применительно к расчету плотности потока нейтронов с $E > 0,5$ МэВ на корпусах реакторов ВВЭР-440/230. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/32-2003. 2003.
46. *Калугин М.А., Юдкевич М.С.* Верификация программы MCU-REA/1.0 применительно к расчетам изменения изотопного состава материалов реакторов типа ВВЭР с использованием модуля ORIMCU. Верификационный отчет. Редакция 2. Отчет ИЯР РНЦ “КИ” инв. № 36/08-2004. 2004.
47. *Gomin E., Kalugin M., Oleyunik D.* VVER Core Computational Benchmark Final Analysis. Report NEA/NSC/DOC(2005)10, OECD, 2005.
48. *Брызгалов В.И., Городков С.С., Юдкевич М.С.* Отчет о верификации и обосновании программного средства MCU-REA/1 применительно к расчетам нейтронно-физических характеристик объектов использования атомной энергии типа РБМК с учетом изменения изотопного состава их материалов в процессе кампании. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/05-2005. 2005.
49. *Алексеев Н.И., Гомин Е.А., Гуревич М.И. и др.* Верификация программы MCU-REA/2 с библиотекой констант DLC/MCUDAT-2.2 применительно к расчету плотности потока нейтронов с $E > 0.5$ МэВ на корпусах реакторов ВВЭР-440/230. Редакция 2. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/27-2005. 2005.
50. *Власов В.Г.* Архитектура. Словарь терминов. – М.: Дрофа, 2004.
51. *CD-CINDA 2000.* NEA DATA BANK.
52. *EXFOR V. 1.20,* May 2001. NEA DATA BANK.
53. *Абагян Л.П., Базазянц Н.О., Николаев М.Н., Цибуля А.М.* Групповые константы для расчета реакторов и защиты. – М.: Энергоиздат, 1981. – С. 1 – 231.
54. *Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М.* Система групповых констант БНАБ-93. Рекомендованные справочные данные. – М.: ЦНИИАтоминформ, 1995.
55. *Абагян Л.П. и др.* Библиотека резонансных параметров LIPAR-5 // ВАНТ. Сер. Ядерные константы, 1995, вып. 1 – 2. – С. 19 – 40.
56. *Лиман Г.Ф., Майоров Л.В.* Программа NEWRAS для расчета дифференциальных сечений рассеяния медленных нейтронов // ВАНТ. Сер. ФиТЯР. Вып. 8(21). 1981. – С. 32 – 38.
57. <http://www-nds.iaea.org/epd197/>
58. *International Reactor Dosimetry File (IRDF-90, v. 2).* IAEA-NDS-141, Rev. 2, 1993.
59. *Vadikov S.A. et al.* Status of Russian Dosimetry File / Proc. of the 9th Int. Symposium on Reactor Dosimetry, Sept. 2 – 6, 1996, Prague, Czech Republic. Hamid Ait Abderrahim et al. Eds., World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1998, pp. 480 – 488.
60. *VITAMIN-B6 – A Fint-Group Cross Section Library Based on ENDF/B-VI Release 3 for Radiation Transport Applications,* RSIC, DLC-184, 1996.
61. *MacFarlane R.E. and Muir D.W.* The NJOY Nuclear Data Processing System. LA-12740, LANL, 1994.
62. *Синица В.В.* Программа расчета групповых констант на основе библиотек оцененных нейтронных данных // ВАНТ. Сер. Ядерные константы, 1984, вып. 5 (59). – С. 34 – 38.
63. *Nelson W.R., Hirayama H., Bielajev A.F.* The EGS4 Code System, Stanford Linear Accelerator Center Report SLAC-265 (Stanford Calif.), 1985. См. также
64. <http://www.slac.stanford.edu/pubs/slacreports/slac-r-265.html>
65. *ORIGEN-S:* SCALE system module to calculate fuel depletion, actinide transmutation, fission product buildup and decay, and associated radiation source terms. NUREG/CR-0200, rev. 5, vol. 2, sec. F7, ORNL/NUREG/CSD-2/V2/R5, RSIC code package CCC-545, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN (September 1995).
66. *Ryman J.C., Hermann O.W.* Origen-S Data Libraries. NUREG/CR-0200, rev. 5, vol. 3, sec. M6, ORNL/NUREG/CSD-2/V3/R5.
67. *International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments.* NEA/NSC/DOC(95)03 OECD, Paris, 1995.
68. *Алексеев Н.И., Андрианов Г.Я., Ионов В.С. и др.* Поглотители из Hf, В₄С и Ду в сборках типа ВВЭР. Эксперименты и расчеты. Тезисы докладов 9-го семинара по проблемам физики реакторов: “Проблемы безопасности ядерно-энергетических установок”. Т. 1, с. 163 – 165, т. 2, с. 20 – 22. МИ-ФИ, б/о “Волга”, 4 – 9 сентября 1995 г.

69. **Артемов В.Г., Ельшин А.В., Иванов А.С. и др.** Система тестов и опыт верификации комплекса программ нейтронно-физического расчета САПФИР_ВВР-РС для различных типов реакторов. Там же, т. 1, с. 126.
70. **Алексеев Н.И., Андрианов Г.Я., Болотов П.А. и др.** Анализ ядерной безопасности бассейна выдержки ВВЭР-1000 при снижении плотности теплоносителя // Атомная энергия. Т. 81. Вып. 4. 1996. – С. 243 – 249.
71. **Markina N.V., Ryasanov D.K., Gomin E.A. et al.** The Experimental and Calculational Investigation of Radiation Fields in the SM High Flux Research Reactor / Proc. of the 9th Int. Symp. on Reactor Dosimetry, September 2 – 6, Prague, Czech Republic, 1996, pp. 110 – 117.
72. **Alexeyev N.I., Astakhov S.A., Gomin E.A. et al.** Nuclear Safety Analysis of Project of Zaporozhskaya NPP Dry Spent Fuel Storage System Using the MCU Code / Proc. of the 1996 Topical Meeting: Radiation Protection & Shielding, April 21 – 25, 1996, pp. 930 – 937, No. Falouth, Massachusetts, USA.
73. **Bryzgalov V.I., Glushkov A.E., Glushkov E.S. et al.** Verification of the MCU Code on Small-Size Space Reactors / Proc. Int. Conf. on the Physics of Reactors PHYSOR 96. Vol. 2, pp. 138 – 147. September 16 – 20, 1996. Mito, Ibaraki, Japan.
74. **Алексеев Н.И., Астахов С.А., Пономаренко Г.Л. и др.** Расчетные исследования по обеспечению ядерной безопасности хранения топлива для АЭС с ВВЭР-640. Этапы 1...3. Отчеты РНЦ “КИ” инв. №№ 32/1-19-97, 32/1-90-97, 32/1-223-97. 1997.
75. **Kiriushin A.I., Ponomarev-Stepnoi N.N., Glushkov E.S. et al.** Project of the GT-MHR high-temperature helium reactor with gas turbine // Nuclear Engineering and Design, 173, 1997, pp. 119 – 129.
76. **Гомин Е.А., Марин С.В., Носовский И.В., Цыганков Е.А.** Разработка методики учета изменений межкассетного зазора при расчете энерговыделения и уточнение на его основе всплесков энерговыделения в топливе из-за деформации ТВС. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 32/1-61-398. 1998.
77. **Осадчий А.И., Тебин В.В., Алексеев Н.И., Гуревич М.И.** Оптимизация распределения поглотителя в области стыковочного узла кассеты АРК (конструкция МСЗ-РНЦ “КИ”) в составе фрагмента активной зоны реакторов ВВЭР-440. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 32-1-67-498. 1998.
78. **Zaritsky S., Gurevich M., Osmera B. et al.** Check and Visualisations of the Input Data Using the Geometrical Module of the Monte Carlo Code MCU: WWER-440 Pressure Vessel Dosimetry Benchmarks / Proc. of the 1198 ANS Radiation Protection and Shielding Division Topical Conf. Vol. 2, pp. 325 – 330. April 19 – 23, 1998, Nashville, Tennessee, USA.
79. **Zaritsky S., Osmera B., Gurevich M., Mikus J.** Database for WWER-1000 Reactor Pressure Vessel. IAEA TP Project RER/4/017. December 1998. Nuclear Research Institute, Rez, Czech Republic.
80. **Egorova L.A., Kalugin M.A., Maiorov L.V. et al.** Data Base on the Behavior of High Burnup Fuel Rods with Zr-1%Nb Cladding and UO₂ Fuel (VVER Type) under Reactivity Accident Conditions. Description of Test Procedures and Analytical Methods. International Agreement Report. NUREG/IA-0156, NSI RRC 2179. Published by U.S. Nuclear Regulatory Commission. V. 2, pp. 1 – 241. Washington, 1999.
81. **Egorova L.A., Kalugin M.A., Maiorov L.V. et al.** Data Base on the Behavior of High Burnup Fuel Rods with Zr-1%Nb Cladding and UO₂ Fuel (VVER Type) under Reactivity Accident Conditions. Test and Calculation Results. Там же. Vol. 3, pp. 1 – 754.
82. **Glushkov E.S., Gomin E.A., Bryzgalov V.I., Lobyntsev V.A.** Benchmark Calculations for the HTTR’s Start-Up Core Physics Experiments (Monte Carlo Calculation Results). Prepared for IAEA Coordinated Research Program and published in JAERI Report (Japan), JAERI – memo 11 – 30, March 1999, pp. 6 – 7, 193 – 194.
83. **Glushkov E.S., Gomin E.A., Bryzgalov V.I., Lobyntsev V.A.** Benchmark Problems of HTTR Core Physics (Phase 2) Monte Carlo Results. Prepared for IAEA Coordinated Research Program and published in Working Material of Second Research Coordination Meeting of the IAEA CRP-5 “Evaluation of High Temperature Gas-Cooled Reactors”. Tsinghua University, Beijing, China, 18 – 22 October 1999. Reproduced by the IAEA, Vienna, Austria.
84. **Abagyan L.P., Alexeyev N.I., Gomin E.A. et al.** The Use of the Codes from MCU Family for Calculations of VVER Type Reactors / Proc. of the 10th AER Int. Topical Meeting. September 18 – 22, 2000, vol. 1, pp. 352 – 364, Moscow, Russia.
85. **Kalugin M.A., Lazarenko A.P., Kalashnikov A.G., Gehin J.C.** VVER-1000 Weapons-Grade MOX Computational Benchmark Analysis. II.B.-1 / In Proc. of PHYSOR 2000, ANS Int. Topical Meeting on Advances in Reactor Physics and Mathematics and Computation into the Next Millennium. May 7 – 12, 2000,

Pittsburgh, Pennsylvania, USA. Published by the ANS, Inc. 555 North Kensington Avenue, La Grange Park, IL 60526, USA. ISBN: 0-89448-655-1; ANS Order No. 2700281.

86. **Lazarenko A.P., Kalugin M.A., Bychkov S.A. et al.** Benchmark calculations for VVER-1000 fuel assemblies using uranium or MOX fuel. II.B.-2. Там же.

87. **Нукитин В.П., Оглоблин Б.Г., Пономарев-Степной Н.Н. и др.** Космические ядерные энергетические установки “Енисей” // Атомная энергия, т. 88, вып. 2, 2000. – С. 95 – 108.

88. **Bolobov P.A., Bolshagin S.N., Bychkov S.A. et al.** Core Benchmarks Description Report. ORNL/SUB/00-85B99398V-6. Prepared by RRC KI. Published by ORNL, May 2001.

89. **Gomin E., Kalugin M., Maiorov L.** Comparison of MCU with Production Codes. Report RRC KI, August 2001.

90. **D'Hondt P. (SCK/CEN), Gehin J. (ORNL), Kalugin M. (RRC Kurchatov) et al.** Reactor Based Plutonium Disposition – Physics and Fuel Behaviour Benchmark Studies of an OECD/NEA Experts Group / In Proc. of the GLOBAL 2001 – Int. Conf. on Back-End of the Fuel Cycle: From Research to Solutions, Sept. 9 – 13, 2001, Paris, France. To be published.

91. **Gomin E., Kalugin M.** VENUS-2 Experimental Benchmark MCU Analysis / 5th TFRPD Meeting, OECD/Nuclear Energy Agency, Chester, United Kingdom, 25 – 26 October 2001.

92. **Gomin E., Kalugin M., Maiorov L.** MCU Results for the CROCUS Experimental Benchmark / 12th WPPR Meeting. Там же.

93. **Клочков Е.П., Рисованный В.Д., Ванеев Ю.Е. и др.** Радиационные характеристики европийсодержащих органов СУЗ реактора СМ-2 после длительной эксплуатации // Атомная энергия. Т.93. Вып. 2. 2002. – С. 114 – 117.

94. **Петров Ю.В., Котова Л.М.** Снижение концентрации урана в твэлах реактора ПИК. Там же. – С. 117 – 120.

95. **Петров Ю.В., Ерыкалов А.Н., Котова Л.М. и др.** Реактор ПИК-2 с пониженным расходом высокообогащенного урана // Атомная энергия. Т. 95. Вып. 4. 2003. – С. 261 – 270.

96. **Предварительный** расчетно-проектный анализ вариантов реактора с генерацией пара высоких параметров. Отчет № 9 ФГУП ВНИИАМ, ISTC № 2546, PNNL – T2 – 0240, 2003.

97. **Бродкин Э.Б., Гагаринский А.А., Гуревич М.И. и др.** Прогнозный расчет флюенса для планируемого периода эксплуатации 2-го блока КАЭС. Реперный расчет флюенса в корпусе реактора методом Монте-Карло. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/31-2003. 2003.

98. **Filippov G.A., Vagojavlensky R.G., Vykov V.P. et al.** Perspectives of safe and cost-effective APP powerunit creation with a shell-type micro fuel elements reactor under supercritical pressure of light-water of the heat transfer medium. IAEA Int. Conf. on Fifty Years of Nuclear Power – the Next Fifty Years, 27 June – 2 July 2004, Obninsk.

99. **Алексеев Н.И., Гуревич М.И., Зарицкий С.М. и др.** Обоснование безопасности при эксплуатации. Расчет флюенса нейтронов с $E > 0,5$ МэВ, накопленного на внутренней поверхности и в толще корпуса реактора ВВЭР-440 3-го блока Нововоронежской АЭС. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/43-2004-АС/19-2004. 2004.

100. **Алексеев Н.И., Гуревич М.И., Зарицкий С.М. и др.** Обоснование безопасности при эксплуатации. Расчет флюенса нейтронов с $E > 0,5$ МэВ, накопленного на внутренней поверхности и в толще корпуса реактора ВВЭР-440 4-го блока Нововоронежской АЭС. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/45-2004-АС/21-2004. 2004.

101. **Пономарев-Степной Н.Н., Брызгалов В.И., Глушков Е.С. и др.** Использование программы MCU для анализа результатов критических экспериментов с шаровыми твэлами ВТГР на стенде “Астра” // Атомная энергия. Т. 97. Вып. 4. 2004. – С. 244 – 252.

102. **Alexeyev N.I., Krainov Yu.A., Kravchenko Yu.Ya. et al.** Evaluations of VVER physics experiments: regular hexagonal (1.27 cm pitch) lattices of low-enriched U(6.5 wt. % ^{235}U)O₂ fuel rods in light water at different core critical dimensions. Preprint RRC KI IAE-6348/4, p. 32. Moscow-2005.

103. **Alexeyev N., Krainov Yu., Kravchenko Yu., Tsvetkov V.** VVER physics experiments: regular hexagonal (1.27 cm pitch) lattices of low-enriched U(6.5 wt. % ^{235}U)O₂ fuel rods in light water at different core critical dimensions. Vol. IV. LEU-COMP-THERM-085. NEA/NSC/DOC/(95)03/IV. Nuclear Science Committee “International Handbook of Evaluation Criticality Safety Benchmark Experiments”. Nuclear Energy Agency, Organization for Economic Cooperation and Development. 2005.

104. *Пономарев-Степной Н.Н., Глушков Е.С., Гомин Е.А. и др.* Эксперименты на критическом стенде НАРЦИСС по исследованию ядерной безопасности при попадании топливных элементов КЯ-ЭУ в воду. Препринт ИАЭ-6379/4, 2005.
105. *Алексеев Н.И., Бродкин Э.Б., Гуревич М.И. и др.* Обоснование безопасности при эксплуатации. Расчет флюенса нейтронов с $E > 0,5$ МэВ, накопленного на внутренней поверхности и в толще корпуса реактора ВВЭР-440 1-го блока Кольской АЭС. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/25-2005. 2005.
106. *Алексеев Н.И., Бродкин Э.Б., Гуревич М.И. и др.* Обоснование безопасности при эксплуатации. Расчет флюенса нейтронов с $E > 0,5$ МэВ, накопленного на внутренней поверхности и в толще корпуса реактора ВВЭР-1000 5-го блока Нововоронежской АЭС. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/26-2005. 2005.
107. *Петров Ю.В., Назаров А.И., Онегин М.С. и др.* Нейтронно-физический расчет свежей зоны природного ядерного реактора ОКЛО // Атомная энергия. Т. 98. Вып. 4. 2005. – С. 306 – 316.
108. *Гомин Е.А., Гуревич М.И., Шкаровский Д.А.* Использование обобщенных спектров нормальных колебаний замедлителей при моделировании переноса медленных нейтронов методом Монте-Карло. Настоящий сборник. – С. 32 – 44.

Статья поступила в редакцию 17 ноября 2006 г.
Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 6 – 32.

УДК 621.039.5

Использование обобщенных спектров нормальных колебаний замедлителей при моделировании переноса медленных нейтронов методом Монте-Карло

Е.А. Гомин, М.И. Гуревич, Д.А. Шкаровский,

ФГУ РНЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. акад. Курчатова, 1

Для описания рассеяния медленных нейтронов в программах решения уравнения переноса нейтронов используются сечения рассеяния или вероятностные таблицы, получаемые из хранящихся в файлах оцененных ядерных данных законов рассеяния, которые однозначно определяются так называемыми обобщенными спектрами нормальных колебаний замедлителей и табулируются для заданного набора температур на сетках по передаче энергии и импульса при помощи вычислительных программ. В новой программе, разработанной в рамках достаточно хорошо известного проекта MSU, реализована возможность автоматического расчета законов рассеяния для нужных температур непосредственно по обобщенным спектрам на шаге ввода исходных данных для варианта. Описаны реализованные в новой версии подмодуля ФИМТОЭН, работающего в области термализации (тепловой области) нейтронов, алгоритмы расчета сечений рассеяния нейтронов и методика моделирования взаимодействия медленных нейтронов с ядрами.

The use of generalized spectra of normal oscillations of moderators for slow neutron transport modeling by means of the Monte Carlo method. E.A. Gomin, M.I. Gurevich, D.A. Shkarovsky. For the description of scattering of slow neutrons the codes for neutron transport calculations use the neutron scattering cross-sections or probability tables obtained from the scattering laws stored in the evaluated nuclear data files. These laws are uniquely defined by the so-called generalized spectra of normal fluctuations of moderators and are tabulated for the set of temperatures on grids of energy and impulse transfer by means of specialized codes. In the new code, developed within the frameworks of the well-known MSU project, the opportunity of automatic calculation of scattering laws for the necessary temperatures directly from the generalized spectra at the step of the task's initial data input is realized. The algorithms of neutron scattering cross-sections calculation and the technique of the slow neutrons with nucleus interaction modeling, realized in the new version of the FIMTOEN submodule intended for calculation of thermal neutrons, are described.

Во всех файлах оцененных ядерных данных (BROND, ENDF/B, JEFF, JENDL, CENDL) [1], в том числе и современных [2], для описания рассеяния медленных нейтронов хранятся законы рассеяния. С использованием программ обработки из этих законов получают сечения рассеяния или вероятностные таблицы, применяемые в программах решения уравнения переноса нейтронов. Законы рассеяния однозначно определяются так называемыми обобщенными спектрами нормальных колебаний замедлителей (их еще называют обобщенными фоннными спектрами) и табулируются для заданного набора температур на сетках по передаче энергии и импульса при помощи вычислительных программ.

Обобщенный же спектр определяется по экспериментальным данным о дифференциальных сечениях или их интегральных моментах так, чтобы рассчитанные сечения наилучшим образом (по тому или иному критерию) описывали результаты измерений. В этом смысле обобщенный спектр служит первичной информацией о взаимодействии медленных нейтронов с веществом, законы же рассеяния являются результатами расчетной обработки первичной информации.

Быстродействие и оперативная память современных компьютеров позволяют при решении уравнения переноса по крайней мере в программах, реализующих метод Монте-Карло, насчитывать законы рассеяния для нужных температур на шаге ввода исходных данных для варианта. Эта возможность реализована в новой программе, разработанной в рамках достаточно хорошо известного проекта MCU [3]. Тем самым снимается вопрос о достаточности имеющейся в файлах оцененных ядерных данных информации по температурной зависимости законов рассеяния. Эта проблема особенно важна при проектировании ядерных реакторов нового поколения на стадии выбора оптимальных параметров нового аппарата.

1. Общие сведения из теории рассеяния медленных нейтронов

Под областью термализации понимается область весьма низких значений энергий нейтрона, для которых при расчете рассеяния важно учитывать тепловое движение и химические связи ядер вещества рассеивателя, а также эффекты интерференции нейтронных волн, рассеянных на разных ядрах (ссылки на оригинальные статьи см. в [4...10]). Дебройлевская длина волны нейтронов таких энергий существенно превышает размеры ядер и соответствует межатомным расстояниям в веществе. Взаимодействие медленных нейтронов с веществом оказывается зависящим от деталей атомной структуры рассеивателя, а также от особенностей теплового движения атомов вещества и существующих между ними химических связей.

В наиболее общем случае полное сечение рассеяния нейтронов на ядрах замедлителя можно представить в виде суммы сечений некогерентного неупругого и упругого рассеяния, когерентного упругого и неупругого рассеяния [4]. При когерентном рассеянии складываются амплитуды волн, рассеянных коллективом атомов как целым, а при некогерентном – квадраты амплитуд отдельных рассеянных волн, поэтому сечение некогерентного рассеяния есть просто сумма сечений рассеяния на отдельных центрах.

Под упругим рассеянием (для жидкостей правильнее говорить о квазиупругом рассеянии), когда обсуждаются проблемы термализации нейтронов, понимается такое рассеяние, при котором энергия нейтрона остается прежней, а изменяется только направление его движения. При неупругом рассеянии меняются и направление полета, и энергия нейтрона.

В реакторных приложениях неупругое рассеяние *всегда* рассматривается в некогерентном приближении, а сечение упругого рассеяния считается или полностью когерентным (для таких замедлителей, как С, Ве, ВеО), или полностью некогерентным. Используемая в MCU методика расчета сечений когерентного рассеяния описана в [9], а алгоритмы моделирова-

ния упругого когерентного рассеяния достаточно просты и хорошо известны [11], поэтому основное внимание уделим описанию моделирования некогерентного рассеяния.

Для полноты изложения и упрощения понимания описываемых алгоритмов приведем некоторые общеизвестные сведения из теории рассеяния медленных нейтронов [4, 5]. В общем случае динамика вещества описывается так называемыми пространственно-временными коррелятивными функциями, которые представляются в виде суммы *автокоррелятивной и парной коррелятивной функций*, впервые введенных в теорию рассеяния нейтронов Ван Хове, по имени которого их обычно и называют. В русской литературе эти же функции называются еще *автокорреляционной и интерференционной корреляционной функциями*.

Формулы для корреляционных функций получаются с применением законов квантовой механики, поэтому они комплексны. Но в классическом пределе они имеют вполне прозрачный физический смысл. Так, автокоррелятивная функция $G_s(\mathbf{r}, t)$ суть вероятность обнаружить в окрестности $d\mathbf{r}$ около точки \mathbf{r} в момент t ту же самую частицу системы, которая в начальный момент времени была в начале координат. Так называемая *шириная* функция $\Gamma(t)$ имеет смысл величины среднего квадратичного отклонения ядра от начала координат по истечении времени t и связана с $G_s(\mathbf{r}, t)$ простым соотношением

$$\Gamma(t) = \frac{1}{3} \int r^2 G_s(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}. \quad (1)$$

В *борновском приближении* потенциал взаимодействия нейтронов с рассеивающей системой рассматривают как малое возмущение, т.е. считается, что рассеиватель слабо возмущает волновую функцию нейтрона. Подставляя ядерный потенциал Ферми $U(\mathbf{r}) = C\delta(\mathbf{r})$ в уравнение Шредингера и решая его на расстояниях, больших по сравнению с областью взаимодействия нейтрона с ядром, находят волновую функцию рассеянного нейтрона. Амплитуда волновой функции обратно пропорциональна расстоянию от рассеивающего ядра и прямо пропорциональна так называемой *амплитуде рассеяния* $f(\theta)$ (θ – косинус угла рассеяния). Функция $f(\theta)$ связана с сечением рассеяния $\sigma(\theta)$ соотношением $\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$.

Принимая во внимание тепловое движение ядер и проведя термодинамическое усреднение по всем возможным энергетическим состояниям ядер рассеивателя, получают выражения для дважды дифференциального сечения рассеяния замедлителя. В *некогерентном приближении* считается, что динамика ядра-рассеивателя полностью описывается автокоррелятивной функцией. *Гауссово приближение* соответствует представлению функции $G_s(\mathbf{r}, t)$ в виде гауссовой функции по пространственной координате

$$G_s(\mathbf{r}, t) = [2\pi\Gamma(t)]^{-3/2} \exp\{-r^2/[2\Gamma(t)]\}. \quad (2)$$

Окончательно в некогерентном гауссовом приближении дважды дифференциальное сечение рассеяния нейтронов выражается через *несимметризованный закон рассеяния* $S(q, \varepsilon)$:

$$\sigma_s(E_i \rightarrow E_f, \mu) dE_f d\mu = \sigma_{\text{free}} \frac{(M+1)^2}{2M^2} \sqrt{\frac{E_f}{E_i}} \cdot S(q, \varepsilon) dE_f d\mu, \quad (3)$$

где E_f и E_i – соответственно конечная и начальная энергии нейтрона; $\mu = \cos\theta$, θ – угол рассеяния; M – атомный вес (масса) рассеивающего ядра; σ_{free} – сечение рассеяния на свободном ядре; $\varepsilon = E_i - E_f$ – переданная энергия; $q = (E_i + E_f - 2\sqrt{E_i E_f} \cdot \cos\theta)/M$ и используется система единиц, в которой постоянные Планка, Больцмана и масса нейтрона равны 1.

Закон рассеяния зависит только от свойств рассеивающей среды, не зависит от начальной и конечной энергий нейтрона, нормирован на 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} S(q, \varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (4)$$

и имеет смысл плотности вероятности того, что ядро, получившее импульс q , приобретает при этом энергию ε . В некогерентном гауссовом приближении закон рассеяния $S(q, \varepsilon)$ однозначно определяется так называемым обобщенным фононным спектром $g(\omega)$ (или обобщенным спектром нормальных колебаний) замедлителя:

$$S(q, \varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{q\Gamma_0(t) - i\varepsilon t} dt, \quad (5)$$

где

$$\Gamma_0(t) = \int_0^{\infty} \frac{g(\omega)}{2\omega} \operatorname{cth}\left(\frac{\omega}{2T}\right) [\cos(\omega t) - 1] d\omega + i \int_0^{\infty} \frac{g(\omega)}{\omega} \sin(\omega t) d\omega. \quad (6)$$

Здесь T – температура замедлителя в энергетических единицах. При $q \rightarrow 0$ закон рассеяния $S(q, \varepsilon)$ связан с функцией $g(\omega)$ следующими соотношениями:

$$p(\omega) = \frac{1}{T} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{\omega^2 \tilde{S}(q, \omega)}{q}, \quad (7)$$

$$g(\omega) = p(\omega) \operatorname{sh}[\omega/(2T)] / [\omega/(2T)], \quad (8)$$

$$\tilde{S}(q, \varepsilon) = S(q, \varepsilon) e^{-\varepsilon/(2T)}. \quad (9)$$

Функция $\tilde{S}(q, \varepsilon)$ называется симметризованным законом рассеяния.

Для гармонического кристалла $g(\omega)$ идентичен спектру частот его нормальных колебаний и величина $g(\omega)$ есть относительная доля нормальных колебаний ядер замедлителя, приходящихся на интервал частот от ω до $\omega + d\omega$. Для других систем $g(\omega)$ есть спектральная плотность функции корреляции скоростей атомов замедлителя. Обобщенный спектр, как правило, определяется из измерений дифференциальных сечений рассеяния или их интегральных моментов. Спектр $g(\omega)$ нормирован на единицу:

$$\int_0^{\infty} g(\omega) d\omega = 1. \quad (10)$$

В области $\omega < 0$ он определяется симметрично:

$$g(-\omega) = g(\omega). \quad (11)$$

Отметим, что интеграл для $\Gamma_0(t)$ определен для любых неотрицательных суммируемых на $(0, \infty)$ функций g и даже для ограниченных мер Радона, в частности, для δ -функций аргумента ω . Спектры нормальных колебаний $g(\omega)$ зависят от физической модели замедлителя и ведут себя по-разному в области низких частот при $\omega \rightarrow 0$: $g(\omega) = a\omega^2$ для кристаллов, $g(\omega) = g(0) \neq 0$ для жидкости, $g(\omega) = \delta(\omega) + a\omega^2$ для газа.

Иногда спектр нормальных колебаний g представляется в виде суммы

$$g(\omega) = g_1(\omega) + g_2(\omega), \quad (12)$$

где g_2 – так называемая регулярная часть, которая имеет в точке 0 оценку $O(\omega^2)$; g_1 может в точке 0 не быть равным 0 и даже образовывать δ -функцию. При условии, что в нуле $g(\omega) = O(\omega^2)$, закон рассеяния можно представить другой, эквивалентной (5) формулой

$$S(q, \varepsilon) = e^{-\lambda q} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{q\Gamma(t) - i\varepsilon t} dt. \quad (13)$$

Ширинная функция $\Gamma(t)$ дается выражением

$$\Gamma(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{g(\omega)}{2\omega} \left[1 + \operatorname{cth} \left(\frac{\omega}{2T} \right) \right] e^{i\omega t} d\omega \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\omega) e^{i\omega t} d\omega \quad (14)$$

и

$$\lambda = \Gamma(0) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(\omega) d\omega, \quad (15)$$

$$\varphi(\omega) = \frac{g(\omega)}{2\omega} \left[1 + \operatorname{cth} \left(\frac{\omega}{2T} \right) \right] = \frac{g(\omega)}{\omega(1 - e^{-\omega/T})}. \quad (16)$$

Часть спектра $g(\omega)$, соответствующая малым значениям ω , определяет поведение закона рассеяния $S(q, \varepsilon)$ при малых значениях ε .

Если спектр частот представляется в виде суммы (12), то закон рассеяния можно вычислить как свертку:

$$S(q, \varepsilon) = S_1(q, \varepsilon) S_2(q, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} S_1(q, \varepsilon') S_2(q, \varepsilon - \varepsilon') d\varepsilon'. \quad (17)$$

Функции $S_1(q, \varepsilon)$ и $S_2(q, \varepsilon)$ (законы рассеяния мод g_1 и g_2) при этом вычисляются по формулам (5) и (6) с заменой спектра $g(\omega)$ на его ненормированные составляющие $g_1(\omega)$ и $g_2(\omega)$.

Закон рассеяния представляется в виде суммы *сингулярной* и *регулярной* частей

$$S(q, \varepsilon) = S_{\text{sing}}(q, \varepsilon) + S_{\text{reg}}(q, \varepsilon). \quad (18)$$

Сингулярная часть выписывается аналитическими формулами и может содержать в себе δ -функции, а регулярная часть рассчитывается численно. В случае, когда рассеивающая среда – кристалл, $g(\omega) \approx \omega^2$ при $\omega \rightarrow 0$, и в законе рассеяния сингулярная часть описывает упругое рассеяние:

$$S_{\text{sing}}(q, \varepsilon) = e^{-\lambda q} \delta(\varepsilon). \quad (19)$$

Регулярная часть, описывающая неупругое рассеяние, рассчитывается с использованием алгоритмов, описанных далее.

2. Алгоритмы подмодуля ФИМТОЭН для расчетов законов и сечений рассеяния медленных нейтронов в некогерентном гауссовом приближении

Л.В. Майоров в [7] обратил внимание на то, что из (13) вытекает следующее очень интересное рекуррентное соотношение, пригодное для вычисления закона рассеяния $S(q, \varepsilon)$,

$$S(q_1 + q_2, \varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} S(q_1, \varepsilon - \varepsilon') S(q_2, \varepsilon') d\varepsilon'. \quad (20)$$

Это выражение – следствие гауссова приближения, ответственного за то, что в формуле (13) q входит линейно в показатель экспоненты. Фурье-трансформанта $\exp[(q_1 + q_2)\Gamma(t)]$ является произведением Фурье-трансформант $\exp[q_1\Gamma(t)]$ и $\exp[q_2\Gamma(t)]$ и, следовательно, выполняется соотношение (20).

При $q \rightarrow 0$ закон рассеяния $S(q, \varepsilon)$ связан со спектром $g(\omega)$ собственных колебаний замедлителей выражениями, которые могут быть получены разложением в (13) $\exp[q\Gamma(t)]$ в ряд (первые члены фононного разложения, см. (7), (8)):

$$S(\Delta q, \varepsilon) = e^{-\lambda\Delta q} \delta(\varepsilon) + e^{-\lambda\Delta q} \lambda\Delta q \frac{g(\varepsilon)}{\varepsilon(1 - e^{-\varepsilon/T})} \text{ для кристалла;}$$

$$S(\Delta q, \varepsilon) = e^{-\lambda\Delta q} \lambda\Delta q \frac{g(\varepsilon)}{\varepsilon(1 - e^{-\varepsilon/T})} \text{ в других случаях.} \quad (21)$$

Здесь $g(\omega)$ – полный фононный спектр, который для расчетов по программе МСУ берется из библиотеки БОФС.

Для некоторых моделей замедлителей [7, 10] в библиотеке БОФС (см. Приложение) обобщенный фононный спектр $g(\omega)$ представлен в виде суммы

$$g(\omega) = A_a g_a(\omega) + (1 - A_a) g_b(\omega). \quad (22)$$

Спектры g , g_a и g_b нормированы на 1, а A_a – вес низкочастотной части спектра $g_a(\omega)$; $(1 - A_a)$ – вес остальной части спектра $g_b(\omega)$.

Полагается, что $g_a(\omega) = 0$ при $\omega > \omega_{\min}$, где ω_{\min} – величина, задаваемая в фононном спектре, а закон рассеяния $S_a(q, \varepsilon)$ с хорошей точностью можно описать известной асимптотической формулой Нелкина – Паркса [8]. Тогда полный закон рассеяния вычисляется по формуле (17), а описываемые ниже алгоритмы используются при вычислениях законов рассеяния $S_b(q, \varepsilon)$, отвечающих доли полного фононного спектра $g_b(\omega)$.

Для замедлителей, отличных от кристаллов, упругая часть закона рассеяния полагается равной нулю. Задавшись достаточно малым Δq , закон рассеяния можно вычислить по формулам (21). Для больших, чем Δq , значений квадрата передачи импульса на подмножестве сетки $q = i\Delta q$, $i = 1, 2, \dots$, закон рассеяния можно вычислять, рекуррентно применяя (20). При этом для кристаллов получится

$$S_{\text{sing}}(q + \Delta q, \varepsilon) = e^{-\lambda(q+\Delta q)} \delta(\varepsilon); \quad (23)$$

$$S_{\text{reg}}(q + \Delta q, \varepsilon) = e^{-\lambda q} S_{\text{reg}}(\Delta q, \varepsilon) + e^{-\lambda\Delta q} S_{\text{reg}}(q, \varepsilon) + \int_{-\infty}^{\infty} S_{\text{reg}}(q, \varepsilon - \varepsilon') S_{\text{reg}}(\Delta q, \varepsilon') d\varepsilon'. \quad (24)$$

Для остальных замедлителей S_{sing} и первые два слагаемых в правой части (24) равны нулю.

Последовательность вычислений: $q = \Delta q, 2\Delta q, 3\Delta q, \dots$. Начиная с третьего шага в качестве приращения по q можно выбирать значения большие, чем Δq , из уже насчитанных, т.к. формула (20) справедлива при любых Δq , не обязательно малых. Вычисление закона рассеяния по формуле (20) производится для положительных значений передачи энергии, а в области $\varepsilon < 0$ в программе определяется $S(q, |\varepsilon|)$ и затем из соотношения *детального баланса* [4, 5]

$$S(q, -|\varepsilon|) = S(q, \varepsilon) e^{-|q|(2T)}. \quad (25)$$

Введем безразмерные величины α и β : $\alpha = q/T$ и $\beta = \varepsilon/T$. Для наименьшего значения квадрата передачи импульса $\Delta q = \alpha_0 T$ закон рассеяния вычисляется по формулам (21), для рекуррентного вычисления других значений q используется свертка (23), (24). Сетка значений q , для которых вычисляется закон рассеяния, выбирается следующим образом.

Значение α_0 выбрано равным $1/1024$. Закон рассеяния вычисляется сначала для значений α_n^{nod} (сетка опорных значений), определяемых выражением $\alpha_0^{\text{nod}} = \alpha_0$, $\alpha_n^{\text{nod}} = 2\alpha_{n-1}^{\text{nod}}$ ($1 \leq n \leq N_b$). Наибольшее значение сетки опорных значений по α определяется формулой $N_b = [\log_2(\alpha_{\text{max}}/\alpha_0)] + 1$. Здесь $\alpha_{\text{max}} = q_{\text{max}}/T$, $q_{\text{max}} = Q_{\text{max}}/M$, $Q_{\text{max}} = 5 \text{ eV}$, [...] – целая часть числа.

После того, как закон рассеяния вычислен для опорных значений α , производится расчет закона рассеяния в дополнительных точках по α , которые определяются при помощи двух величин: α_{add} – задаваемое значение величины α , начиная с которой будут вычисляться дополнительные законы рассеяния и N_{add} – количество дополнительных точек на интервале $(\alpha_k^{\text{nod}}, \alpha_{k+1}^{\text{nod}})$, в которых будет вычисляться закон рассеяния. При этом α_{add} заменяется на ближайшее из опорных значений $\alpha_k^{\text{nod}} \leq \alpha_{\text{add}}$, а N_{add} на ближайшее значение $(2^n - 1) \leq N_{\text{add}}$. Значения α_i^{add} , в которых дополнительно вычисляется закон рассеяния, определяются соотношениями $\alpha_i^{\text{add}} = \alpha_k^{\text{nod}} + i\Delta\alpha_k$, $i = 1, \dots, N_{\text{add}}$, $\Delta\alpha_k = \alpha_k^{\text{nod}}/(N_{\text{add}} + 1)$.

Шкала значений ε_j , для которых рассчитывается закон рассеяния, определяется фоновым спектром. В заданном в библиотеке фоновом спектре находятся минимальный интервал $h = \min(\Delta\varepsilon)$ и $\varepsilon_j = h_j$, $j = 0, 1, \dots$. Вычисление интеграла (20) осуществляется численно в предположении, что каждая из функций $S(\Delta q, \varepsilon)$ и $S(q, \varepsilon)$ квадратична по ε между опорными точками. Суммирование производится до тех пор, пока вклад от очередного интервала в значение интеграла не станет меньше наперед заданного малого числа.

Расчет $S(q + \Delta q, \varepsilon)$ производится в порядке возрастания ε , начиная с 0, и прекращается, когда его значение в очередной точке ε_{cur} станет очень малым: $S(q + \Delta q, \varepsilon_{\text{cur}}) < 10^{-6} S_{\text{max}}(q + \Delta q, \varepsilon)$, где $S_{\text{max}}(q + \Delta q, \varepsilon)$ – максимальное значение закона рассеяния при $\varepsilon < \varepsilon_{\text{cur}}$. По мере увеличения величины q функция $S(q, \varepsilon)$ становится все более плавной функцией ε . При вычислении $S(q, \varepsilon)$ для заданного q и каждого ε вычисление интеграла (20) производится дважды – с текущим значением шага интегрирования $\Delta\varepsilon$ и с шагом $2\Delta\varepsilon$, и если полученные значения различаются между собой менее, чем на некоторое заданное малое число, то для всех последующих значений q и ε интегрирование проводится с удвоенным шагом. Таким образом, для каждого замедлителя выбирается своя *максимально подробная сетка по ε* , а количество точек по q в настоящее время задано равным 294.

После того, как законы рассеяния посчитаны, по формуле (3) рассчитываются дважды дифференциальные сечения рассеяния для выбранных сеток начальных и конечных энергий. Сетка начальных энергий выбирается так, чтобы полные сечения рассеяния можно было вычислять, используя линейно-линейную интерполяцию. В настоящее время в программе применяется 70 точек по начальной энергии. Сетка конечных энергий привязана к начальной энергии. По насчитанным дважды дифференциальным сечениям рассеяния для каждого элемента E_i сетки начальных энергий табулируются:

- вероятность рассеяться с уменьшением энергии $P_i^{\text{down}} = \int_0^{E_i} p(E_i, E) dE$;

- два массива границ равновероятных отрезков конечной энергии, один для рассеяния с уменьшением энергии ($E' < E$), другой – с увеличением энергии. В настоящее время для каждой начальной энергии в программе задаются 64 равновероятных интервалов по конечной энергии. Количество интервалов для рассеяния с увеличением или уменьшением энергии различно для каждой начальной энергии в пределах этих 64-х интервалов.

Границы $E_j(E_i)$ равновероятных интервалов в каждом таком наборе (для начальной энергии E_i ; индексы принадлежности к наборам, описывающим рассеяние с уменьшением или

увеличением энергии, опущены) задаются так, чтобы

$$\int_{E_{j-1}(E_i)}^{E_j(E_i)} p(E_i, E') dE' = P_i / N_i ;$$

$j = 1, 2, \dots, N_i - 1$. Здесь N_i – количество интервалов; если происходит рассеяние с уменьшением энергии, то $P_i = P_i^{\text{down}}$, $E_0(E_i) = 10^{-5}$, $E_{N_i}(E_i) = E_i$, а при увеличении энергии $P_i = 1 - P_i^{\text{down}}$, $E_0(E_i) = E_i$; $E_{N_i}(E_i)$ выбирается так, чтобы длина последнего интервала была вдвое больше длины предыдущего. Если бы сечение рассеяния с ростом конечной энергии E' уменьшалось строго экспоненциально, такой выбор означал бы, что в качестве длины последнего интервала берется удвоенная длина интервала половинной вероятности, построенного на том же месте.

Для каждого значения начальной энергии с индексом i из заданного набора и 201-го соответствующего значения конечной энергии вычисляются наборы таблиц равновероятных значений косинуса угла рассеяния μ_{ij}^k , $k = 1, \dots, 16$.

Подготовленные описанным образом таблицы равновероятных энергетических и угловых отрезков используются подмодулем ФИМТОЭН при моделировании рассеяния медленных нейтронов. Типичное время расчета этих таблиц для одной температуры замедлителя составляет от 1 до 10 с на персональном компьютере с тактовой частотой 3,4 ГГц.

3. Моделирование взаимодействия тепловых нейтронов со средой

В подмодуле ФИМТОЭН применяется непрерывное слежение за энергией нейтрона. Сечения поглощения и деления принимаются такими же, как для свободных ядер. Для большинства нуклидов сечения поглощения в тепловой области подчиняются “закону $1/v$ ”: $\sigma_a(v) = \sigma_{a,0} v_0 / v$ (v – скорость нейтрона, $v_0 = 2200$ м/с, $\sigma_{a,0}$ – сечение при $v = v_0$), а для всех резонансных нуклидов в этой энергетической области резонансы полностью разрешены.

При моделировании истории нейтрона для каждой его энергии сечения поглощения и деления нуклидов вычисляются или по “закону $1/v$ ”, или путем обращения к программам RAPAN и POIRES [3], рассчитывающим резонансные сечения для любой температуры на основе библиотек LIPAR и KORT [3]. Библиотека LIPAR содержит оценки параметров разрешенных резонансов, давая возможность по аналитическим формулам вычислить непрерывную зависимость сечений от энергии нейтрона для любой заданной температуры.

В библиотеке KORT для набора температур содержится в поточечном представлении информация о сечениях взаимодействия нейтронов с ядрами в области энергий нейтронов от 10^{-5} до 5 эВ. Кроме сечений в библиотеку включено ν – полное число вторичных нейтронов на деление. В библиотеке содержатся изотопы, у которых отклонение поведения сечения от “закона $1/v$ ” в области энергий до 4,65 эВ превышает 2 %. Для получения сечений при необходимой энергии используется линейно-линейная интерполяция.

Библиотека ВЕСТА [3] для набора температур содержит данные о рассеянии медленных нейтронов основными реакторными замедлителями в энергетическом диапазоне от 10^{-5} до 4,65 эВ. Эти данные хранятся в форме вероятностных таблиц, описанных выше. Если в

библиотеке ВЕСТА отсутствуют данные, необходимые для расчета варианта, то они насчитываются по описанным в разделе 2 алгоритмам на шаге ввода исходных данных для программы MSU и сохраняются во временном разделе библиотеки для возможного применения при решении других задач.

В ФИМТОЭН верхняя энергетическая граница области работы подмодуля формально ничем не ограничена и задается в исходных данных. Учет химических связей возможен для энергий нейтрона $E \leq 4,8$ эВ, а учет когерентных эффектов при $E \leq 0,2$ эВ, что определяется выбранными на данный момент граничными энергиями. Для энергий, превышающих 4,8 эВ, процесс рассеяния можно моделировать по модели идеального газа с учетом теплового движения ядер либо по кинематическим формулам в приближении неподвижного ядра (в практических расчетах это обычно ядра с массой $M > 16$), с которым взаимодействует нейтрон. В практических расчетах верхняя граница обычно задается равной 2,15 или 4,65 эВ.

При розыгрыше столкновения сначала определяется нуклид, с которым взаимодействует нейтрон, после чего – тип реакции. В случае реакции деления вычисляются энергии и углы полета вторичных частиц. Энергии рассчитываются, исходя из непрерывного спектра деления Уатта, с параметрами, зависящими от разделившегося ядра, а направления полета вторичных нейтронов определяются в предположении изотропного в лабораторной системе координат распределения.

При розыгрыше рассеяния по кристаллическим моделям предполагаются известными следующие функции: $P_e(E)$ – вероятность упругого рассеяния при энергии нейтрона E ; $p(E, E')$ – плотность вероятности нейтрону с энергией E после взаимодействия приобрести энергию E' ; $p_\mu(E, E')$ – плотность вероятности нейтрону, имеющему до взаимодействия энергию E , а после взаимодействия E' , рассеяться на угол, косинус которого равен μ . При розыгрыше рассеяния сначала с помощью $P_e(E)$ определяется тип рассеяния – с изменением энергии или без. В случае рассеяния с изменением энергии разыгрывается энергия нейтрона после столкновения. Розыгрыш осуществляется по заранее подготовленным наборам равновероятных отрезков конечных энергий для каждого элемента сетки начальных энергий.

При розыгрыше столкновения нейтрона с энергией $E \in [E_{i-1}, E_i)$ значение энергии E' после столкновения вычисляется следующим образом. Сначала интерполируется вероятность рассеяться с уменьшением энергии $P^{\text{down}} = P_{i-1}^{\text{down}} + (P_i^{\text{down}} - P_{i-1}^{\text{down}})(E - E_{i-1}) / (E_i - E_{i-1})$. Используются два случайных числа ξ_0 и ξ_1 , равномерно распределенные на $[0, 1]$. Первое употребляется для принятия решения: рассеивать нейтрон с уменьшением или увеличением энергии. При $\xi_0 < P^{\text{down}}$ выбирается уменьшение, и в последующей игре будут применяться соответствующие наборы равновероятных интервалов. В противном случае – увеличение, будут использованы другие наборы.

Затем с помощью ξ_1 и таблиц $E_j(E_i)$ определяются два значения E'_1 и E'_2 по формулам:

$$j_1 = \xi_1 N_{i-1} + 1 \text{ (целая часть, номер интервала); } \xi_2 = \xi_1 N_{i-1} + 1 - j_1 \text{ (остаток); } E'_1 = E_{j_1-1}(E_{i-1}) + \xi_2 [E_{j_1}(E_{i-1}) - E_{j_1-1}(E_{i-1})]; j_2 = \xi_1 N_i + 1; \xi_3 = \xi_1 N_i + 1 - j_2; E'_2 = E_{j_2-1}(E_i) + \xi_3 [E_{j_2}(E_i) - E_{j_2-1}(E_i)].$$

Тогда конечная энергия E' определяется как $E' = E'_1 + (E'_2 - E'_1)(E - E_{i-1}) / (E_i - E_{i-1})$.

Такая процедура розыгрыша эквивалентна линейной интерполяции функции вероятности с последующим стандартным обращением ее. Интерполяция проводится вдоль изовысот функции вероятности. Проекция линий интерполяции на плоскость E, E' не пересекаются и вблизи прямой $E = E'$ параллельны ей. Косинус угла рассеяния рассчитывается по заранее подготовленным таблицам границ равновероятных отрезков косинуса угла рассеяния. При-

меняется линейная интерполяция и по начальной, и по конечной энергиям нейтрона для выбора того или иного набора. Внутри выбранного отрезка μ разыгрывается из равномерного распределения. Новые направляющие косинусы полета находятся по полученному значению μ с использованием стандартных процедур моделирования рассеяния в лабораторной системе координат. Для рассеяния без изменения энергии нейтрона вышеописанное представление косинуса угла рассеяния применяется для расчетов в некогерентном приближении. В этом случае тоже используется линейная интерполяция по энергии.

Упругое рассеяние в когерентном приближении рассчитывается по следующей схеме [11]. Для $E \leq E_{\text{coh}}^{\text{max}}$ данные хранятся в виде набора параметров D_k , где $\sigma_{el} = D_k/E$ для $E_{B_k} \leq E \leq E_{B_{k+1}}$, $\sigma_{el} = 0$ для $E < E_{B_1}$, где E_{B_k} – брэгговские энергии, полученные из параметров решетки по программе ELCOHR [9], которая вызывается из ФИМТОЭН на шаге подготовки данных к расчету.

Для случайной энергии E ($E_{B_k} \leq E \leq E_{B_{k+1}}$) $P_i = D_i/D_k$, $i = 1, \dots, k$, представляет дискретное распределение вероятности, из которого происходит выборка для получения индекса i , представляющего рассеяние на i -м пике Брэгга. Из соотношения $\mu = 1 - 2 E_{B_i}/E$ получаются значение μ косинуса угла рассеяния и далее новые направляющие косинусы полета нейтрона. Для $E > E_{\text{coh}}^{\text{max}}$ расчет упругого рассеяния производится в некогерентном приближении, как описано выше.

Розыгрыш рассеяния по модели идеального свободного газа, которая может быть применена для любых замедлителей при энергии нейтрона $E \geq 4$ эВ, а для второстепенных по важности замедлителей при любых энергиях нейтрона, осуществляется по модернизированному алгоритму работы [15] с учетом рекомендаций [16] без каких-либо табуляций или других приближений.

Заключение

В [7] сделано следующее утверждение: “На ЭВМ БЭСМ-6 за 0,5...2 мин по программе NEWRAS можно рассчитать до 10 000 точек матрицы закона рассеяния, что делает ненужным хранение в библиотеке нейтронных данных этих матриц в противоположность тому, как это принято в файлах ENDF/B”. Через 25 лет после того, как Л.В. Майоров написал эти слова, действительно стало ненужным хранение в библиотеке констант матриц рассеяния. При расчете каждого варианта по MCU на шаге подготовки данных для дальнейшего моделирования историй нейтронов используются спектры нормальных колебаний.

Послесловие

Идея расчета законов рассеяния с применением рекуррентных соотношений типа свертки принадлежит Л.В. Майорову и впервые опубликована в выпуске ВАНТ, посвященном светлой памяти Альберта Давидовича Франк-Каменецкого, который стоял у истоков практических расчетов реакторов и ячеек методом Монте-Карло в “Курчатовском институте”. Тот выпуск ВАНТ был подготовлен и выпущен в основном благодаря усилиям Л.В. Майорова. Этим двух крупнейших специалистов в области реакторной физики связывали совместная творческая работа и дружба. Первой же научной проблемой, которой Л.В. Майоров занимался еще в 50-е годы, работая в ИПМ им. М.В. Келдыша, была проблема термализации нейтронов. Описания разработанных им алгоритмов и программы для ЭВМ М-220 (совместно с В.Ф. Турчиным и М.С. Юдкевичем) опубликованы в трудах III Женевской конференции в 1964 г.

Первая версия программы NEWRAS, предназначенной для расчета сечений рассеяния медленных нейтронов, написана Л.В. Майоровым на Фортране для ЭВМ БЭСМ-6 в 1974 г. Впоследствии Г.Ф. Лиман сделал значительные изменения в программе, которые существенно увеличили ее быстродействие, и составил библиотеку БОФС. Алгоритмы программы NEWRAS достаточно подробно описаны в [6], ее полное описание содержится в [9]. Материалы последней работы использованы в документации по новой версии MCU. Описанные в разделе 2 алгоритмы реализованы в программе СТЕНЬ, которая входит в пакет MCU.

Приложение. Состав библиотеки БОФС обобщенных фононных спектров замедлителей

Имя	Тип	Комментарий	Источник
H	H2OK	Водород в воде, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269 [12, 13]
H	H2OU	Водород в воде, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
H	ES-1	Водород в воде, T = 293 К	ESCH, YEATER ET ALL. NUCL. SCI. ENG: 46, 223-235 (1971) [14]
H	ES-2	Водород в воде, T = 293 К	ESCH, YEATER ET ALL. NUCL. SCI. ENG: 46, 223-235 (1971)
H	H300	Водород в воде, T = 295 К	EGELSTAFF, POOLE. EXPERIMENTAL NEUTRON THERMALIZATION. 1969
H	H301	Водород в воде, T = 295 К	EGELSTAFF, POOLE. EXPERIMENTAL NEUTRON THERMALIZATION. 1969
H	H550	Водород в воде, T = 550 К	EGELSTAFF, POOLE. EXPERIMENTAL NEUTRON THERMALIZATION. 1969
H	BUTL	Водород в воде, T = 300 К	HAYWOOD MODEL. BUTLAND, CHUDLEY. AEEW-R 814
H	2T0	Водород в воде, T = 300 К	HAYWOOD MODEL. BUTLAND, CHUDLEY. AEEW-R 814
H	C6H6	Водород в бензоле, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
H	BZ29	Водород в бензоле, T = 295 К	EGELSTAFF, POOLE. EXPERIMENTAL NEUTRON THERMALIZATION. 1969
H	CH2K	Водород в полиэтилене, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
H	PE29	Водород в полиэтилене, T = 300 К	EGELSTAFF, POOLE. EXPERIMENTAL NEUTRON THERMALIZATION. 1969
H	CH4	Водород в метане, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
H	YH	Водород в гидриде иттрия, T = 0,0255 эВ	SEMENOV, SSP, V28, N1, P260 (1985) (IN RUS)
H	ZRHK	Водород в гидриде циркония, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
H	ZRH2	Водород в гидриде циркония, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
H	ZR30	Водород в гидриде циркония, T = 300 К	EGELSTAFF, POOLE. EXPERIMENTAL NEUTRON THERMALIZATION. 1969
D	D2OK	Дейтерий в тяжелой воде, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
D	D300	Дейтерий в тяжелой воде, T = 300 К	EGELSTAFF, POOLE. EXPERIMENTAL NEUTRON THERMALIZATION. 1969

D	D540	Дейтерий в тяжелой воде, T = 540 K	EGELSTAFF, POOLE. EXPERIMENTAL NEUTRON THERMALIZATION. 1969
BE	BEK	Бериллий, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
BE	BE29	Бериллий, T = 295 K	EGELSTAFF, POOLE. EXPERIMENTAL NEUTRON THERMALIZATION. 1969
BE	BEOK	Бериллий в окиси бериллия, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
BE	BE02	Бериллий в окиси бериллия, T = 295 K	EGELSTAFF, POOLE. EXPERIMENTAL NEUTRON THERMALIZATION. 1969
BEO	BEOK	Окись бериллия, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
C	CK	Графит, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
C	C300	Графит, T = 300 K	EGELSTAFF, POOLE. EXPERIMENTAL NEUTRON THERMALIZATION. 1969
C	1800	Графит, T = 1 800 K	EGELSTAFF, POOLE. EXPERIMENTAL NEUTRON THERMALIZATION. 1969
C	C6H6	Углерод в бензоле, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
C	UCK	Углерод в карбиде урана, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
O	BEOK	Кислород в двуокиси бериллия, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
O	UO2K	Кислород в двуокиси урана, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
ZR	ZRH2	Цирконий в гидриде циркония, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
U	UCK	Уран в карбиде урана, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269
U	UO2K	Уран в двуокиси урана, T = 0,0255 эВ	KOPPEL, HOUSTON. ENDF-269

Гомин Евгений Алексеевич, контактный тел.: (499) 196-98-11, e-mail: gomin@adis.vver.kiae.ru

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. IAEA Nuclear Data Centre, <http://www-nds.iaea.org>
2. *Mattes M., Keinert J.* Thermal Neutron Scattering Data for the Moderator Materials H₂O, D₂O and ZrH_x in ENDF-6 Format and as ACE Library for MCNP(X) Codes. IAEA, INDC(NDS)-0470, Distr. AC, Vienna, 2005.
3. *Гомин Е.А.* Статус MCU-4. Настоящий сборник. – С. 6 – 32.
4. *Гуревич И.И., Тарасов Л.В.* Физика нейтронов низких энергий. – М.: Наука. 1965. – С. 608.
5. *Методы* расчета полей тепловых нейтронов в решетках реакторов / Под ред. д.т.н. Я.В. Шевелева. – М.: Атомиздат, 1974. – С. 312.
6. *Игелстафф П.А., Пул М.Дж.* Экспериментальная термализация нейтронов / В кн. [5]. – С. 17 – 85.
7. *Лиман Г.Ф., Майоров Л.В.* Программа NEWRAS для расчета дифференциальных сечений рассеяния медленных нейтронов // ВАНТ. Сер. ФизТЯР. Вып. 8(21). 1981. – С. 32 – 38.
8. *Nelkin M.S., Parks D.E.* Effects of chemical binding on nuclear recoil // Phys. Rev., 1960, vol. 119, p. 1060.
9. *Лиман Г.Ф.* Программы CALCST и ELCOHR для расчета полных и упругих когерентных сечений рассеяния медленных нейтронов // ВАНТ. Сер. ФизТЯР. Вып. 5(27). 1982. – С. 74.
10. *Лиман Г.Ф., Майоров Л.В.* NEWRAS-2 – система подпрограмм для расчета сечений рассеяния медленных нейтронов. Отчет ИАЭ им. И.В. Курчатова инв. № 36/65678. 1979.
11. *Briesmeister J.F.* (editor). MCNP – a General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4A. Los Alamos National Laboratory Report LA-12625, 1993.
12. *Koppel J.U. et al.* GASKET – the unified code for thermal neutron scattering, USAEC Report, GA-7417, 1966.

13. **Koppel J.U., Houston D.H.** Reference for ENDF for thermal neutron scattering data. GA-8774, 1978.
14. **Esch L.J. et al.** The temperature dependence of neutron inelastic scattering from water // Nucl. Sci. Eng., 1971, vol. 46, p. 741.
15. **Eriksson John R.** A Slow Neutron Scattering Routine from the Gas Model. 1970, Technical Notes, pp. 307 – 309.
16. **Андросенко П.А., Малков М.Р.** Прецизионное моделирование рассеяния тепловых нейтронов в ПК BRAND. Научная сессия МИФИ-2005 / Сб. научных трудов. Т. 5. 2005. – С. 160 – 161.

Статья поступила в редакцию 17 ноября 2006 г.
Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 32 – 44.

УДК 519.68
**Решение краевых задач методом Монте-Карло
в приближении теории переноса излучений**

П.А. Андросенко, В.Л. Ломтев,
Обнинский государственный технический университет атомной энергетики,
249040, г. Обнинск Калужской обл., Студгородок, 1

Проведено математическое обоснование (применительно к методам статистического моделирования) возможности формулировки краевых задач для уравнений параболического и/или эллиптического типа в неоднородных трехмерных областях и граничных условий в терминах теории переноса излучений. В рамках единого подхода рассмотрено соответствующее асимптотическое приближение краевой задачи уравнением переноса. Показаны приближения, вносимые данным подходом в случаях нестационарной и стационарной задач. Исследована точность этих приближений при увеличении реального масштаба сечения и на основании тестовых расчетов предложена статистическая модель, позволяющая построить оценки максимального правдоподобия для искомых функционалов от решения краевой задачи.

Solution of boundary problems by Monte Carlo method in approximation of radiation transfer theory. P.A. Androsenko, V.L. Lomtev. Mathematical substantiation (in application to statistical simulation methods) of possibility of boundary problems formulation for equations of parabolic and/or elliptic type in heterogeneous three-dimensional areas and boundary conditions in terms of radiation transfer theory is given. In the context of unified approach the appropriate asymptotic approximation of boundary problem by transfer equation is considered. The approximations brought in cases of nonstationary and stationary problems by given approaches are shown. The accuracy of these approximations on increasing of real cross-section scale is investigated and on the base of test computations the statistical model that allows to make maximum likelihood estimates for functionals from the boundary problem solution is proposed.

Решение краевых задач математической физики для уравнений параболического и/или эллиптического типа в неоднородных трехмерных областях является сложной и актуальной проблемой. Подобные уравнения описывают широкий класс физических задач, например, задачи диффузии примесей, электростатики, теплопроводности, некоторые плазменные задачи и другие.

В настоящее время для решения указанных задач в их реальной практической постановке используются в основном численные (детерминистические) методы: конечных разностей, конечных элементов, другие вариационные (синтетические) методы. Во многих случаях применение этих методов дает хорошие результаты, но пределы применимости детерминистических методов на практике сужаются громоздкостью вычислительного алгоритма и су-

щественной зависимостью времени счета от числа узлов пространственной сетки, числа координатных функций и т.д., которые в многомерных задачах приходится увеличивать для достижения желаемой точности. На практике нередко встречаются ситуации, когда решение поставленной в сложной трехмерной области краевой задачи необходимо знать лишь в отдельных “характерных” точках или подобластях. В этом случае может оказаться полезным использование метода Монте-Карло, характерной особенностью которого является слабая зависимость его эффективности от геометрии и числа измерений задачи.

В рамках метода Монте-Карло можно выделить несколько основных подходов к решению рассматриваемого класса задач. Наиболее распространен метод, основанный на моделировании процесса “блуждания по сферам” [1, 2]. В основе метода лежат специальные интегральные уравнения второго рода, ядра которых определяются фундаментальными решениями для оператора Лапласа. Методами блужданий по сферам успешно решаются задачи точечной оценки решения и производных для уравнений второго порядка эллиптического вида. Однако сферой эффективного применения данной группы методов являются в основном краевые задачи для уравнений с постоянными коэффициентами. Наличие границ раздела и подобластей с различными значениями коэффициентов в расчетной области приводит к значительным вычислительным трудностям, а именно, приходится моделировать процесс блуждания по сферам в каждой подобласти, а границу раздела рассматривать как пропускающий-отражающий экран. Это приводит к резкому росту вычислительных затрат даже при незначительном усложнении внутренней структуры расчетной области и затрудняет эффективное применение подобных методов для решения многих задач из рассматриваемого класса.

Другая группа методов Монте-Карло основана на использовании решений граничных интегральных уравнений теории потенциала [3]. Получаемые интегральные уравнения порождают легко реализуемые на компьютерах Марковские цепи случайных блужданий по границе. Кроме того, в этом подходе существует возможность оценивать решение или производные от него в большом количестве точек практически без дополнительных вычислительных затрат. Однако для этого подхода пока практически отсутствуют результаты, касающиеся эффективного решения краевых задач для областей со сложной внутренней структурой. Следует отметить еще процесс блуждания по сетке, когда методом Монте-Карло решается линейная система алгебраических уравнений, получающаяся после замены соответствующего дифференциального оператора уравнения на разностный. Конечно же, в этом случае решение методом Монте-Карло сходится к разностному решению, а не решению исходной задачи.

Преодолевают перечисленные трудности, связанные с реализацией статистических методов в областях со сложной внутренней структурой, метод Монте-Карло, основанный на применении диффузионного приближения линейной теории переноса. Следует отметить простоту программной реализации данного подхода на компьютерах, обусловленную возможностью использования с минимальными изменениями огромного запаса программных средств (особенно геометрических модулей), накопленного для решения задач переноса излучений. Такая возможность высказана в работе [4], но вопросы интерпретации внутренних граничных условий рассмотрены не были, что, как уже отмечалось, очень важно для рассматриваемого класса задач. Не обсуждались также вопросы точности вводимых приближений и оценки точности получаемого решения.

В настоящей работе в рамках единого подхода дается математическое обоснование возможности формулировки краевых задач для уравнений параболического и/или эллиптического типа в неоднородных трехмерных областях и граничных условий в терминах теории переноса излучений. Исследуется точность применяемых приближений и на основе результатов решения модельных задач предлагается методика построения оценок максимального правдоподобия для получаемого решения.

1. Постановка задачи

Рассмотрим для многозонной ограниченной области G с границей Γ трехмерного евклидова пространства следующую краевую задачу. Задано линейное параболическое (эллиптическое) дифференциальное уравнение второго порядка

$$a(\mathbf{r})\partial T(\mathbf{r},t)/\partial t + \nabla K(\mathbf{r})\nabla T(\mathbf{r},t) + q(\mathbf{r},t) = 0 \quad (1)$$

с граничными условиями третьего рода

$$K(\mathbf{r})[\mathbf{n}\nabla T(\mathbf{r},t)]_{\Gamma} = h(\mathbf{r}_{\Gamma},t)[T(\mathbf{r}_{\Gamma},t) - T_0(\mathbf{r}_{\Gamma},t)] \quad (2)$$

и начальными условиями

$$T(\mathbf{r}, 0) = 0. \quad (3)$$

Здесь \mathbf{r} – радиус-вектор точки в области G ; \mathbf{r}_{Γ} – радиус-вектор точки на границе Γ ; q – плотность источника; t – время; \mathbf{n} – внутренняя нормаль к границе Γ ; T – решение (предполагается, что выполнены условия, при которых существует и единственно классическое решение задачи (1)...(3)). Функции q , a , K , h удовлетворяют условиям $q \geq 0$, $a \geq 0$, $K > 0$, $h \geq 0$, подробнее про них будет сказано ниже.

Задача (1)...(3) может описывать различные физические процессы. Например, при $a(\mathbf{r}) = v^{-1}(\mathbf{r})$, $K(\mathbf{r}) = D(\mathbf{r})$ (v – скорость частиц, D – коэффициент диффузии, T – плотность потока) получим уравнение диффузии; при $a(\mathbf{r}) = -\rho(\mathbf{r})c(\mathbf{r})$ (ρ , c – соответственно плотность и удельная теплоемкость; K , h – коэффициенты теплопроводности и теплоотдачи, соответственно; T – температура; T_0 – температура окружающей среды) получим уравнение теплопроводности с условиями на границе конвективного теплообмена ($h \neq 0$) или Неймана ($h = 0$) и так далее.

В дальнейшем изложении будет рассматриваться, как правило, краевая задача для уравнения теплопроводности, но все полученные результаты справедливы и в случае общей постановки задачи (1)...(3) с точностью до обозначений.

2. Приближение теории переноса

Ниже описан метод решения задачи (1)...(3), основанный на использовании диффузионного приближения для кинетического уравнения. Удобно рассмотреть отдельно само уравнение переноса и граничные условия.

Уравнение переноса излучения. Рассмотрим в области G односкоростное интегро-дифференциальное уравнение переноса

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, t)}{\partial t} + \mathbf{\Omega}\nabla\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, t) + \Sigma(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, t) = \int \Sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}' \rightarrow \mathbf{\Omega})\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', t)d\mathbf{\Omega}' + S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, t), \quad (4)$$

где применены общепринятые в теории переноса обозначения.

Выпишем хорошо известные соотношения диффузионного P_1 -приближения для уравнения (4), следуя в основном [5]. Воспроизведение этих результатов оправдано необходимостью, во-первых, подчеркнуть используемые приближения и, во-вторых, отметить качество вносимых приближений в зависимости от величины полного сечения $\Sigma(\mathbf{r})$.

Будем предполагать, что в (4) источник и сечение рассеяния изотропны, т.е.

$$S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, t) = S_0(\mathbf{r}, t)/(4\pi); \quad (5)$$

$$\Sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) = \Sigma_s(\mathbf{r})/(4\pi), \quad (6)$$

а также отсутствие поглощения

$$\Sigma(\mathbf{r}) = \Sigma_s(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Тогда после интегрирования (4) по $d\boldsymbol{\Omega}$ с учетом предположений (5)...(7) получим из уравнения переноса соотношение

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = S_0(\mathbf{r}, t), \quad (8)$$

где приняты следующие обозначения: $\Psi(\mathbf{r}, t) = \int \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t) d\boldsymbol{\Omega}$ – интегральная по направлениям плотность потока и $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \int \boldsymbol{\Omega} \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t) d\boldsymbol{\Omega}$ – соответствующая плотность тока.

Разложим решение уравнения переноса $\Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t)$ в ряд по $\boldsymbol{\Omega}$:

$$\Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t) = \frac{1}{4\pi} [\Psi(\mathbf{r}, t) + 3\boldsymbol{\Omega} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)] + \dots \quad (9)$$

Это представление означает, что $\Phi(\cdot, \boldsymbol{\Omega}, \cdot)$ полагается “почти изотропным” (зависящим линейно от $\boldsymbol{\Omega}$). Назовем (9) *Приближением 1*. После подстановки (9) в (4), умножения последнего скалярно на $\boldsymbol{\Omega}$ и интегрирования по $d\boldsymbol{\Omega}$ с учетом (5)...(7) получим

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{1}{3} \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) + \Sigma(\mathbf{r}) \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0. \text{ Отсюда, введя обозначение } D(\mathbf{r}) = 1/[3\Sigma(\mathbf{r})], \text{ имеем}$$

$$\frac{3D(\mathbf{r})}{v} \frac{\partial \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + D(\mathbf{r}) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) + \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (10)$$

Стационарный случай. Остановимся сначала на стационарном случае уравнения (4). Тогда (10) выражает закон Фика $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -D(\mathbf{r}) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t)$, подставляя который в (8), получим $\nabla D(\mathbf{r}) \nabla \Psi(\mathbf{r}) + S_0(\mathbf{r}) = 0$, что с точностью до обозначений совпадает со стационарным случаем уравнения (1) (здесь переменная t как аргумент функций Ψ и S_0 опущена).

Итак, для стационарного случая решение уравнения (1) находится посредством решения стационарного уравнения (4) с использованием единственного приближения – *Приближения 1*. Понятно, что анизотропия $\Phi(\cdot, \boldsymbol{\Omega}, \cdot)$ возрастает в областях, близких к источнику, внешней границе системы и границам раздела сред с резко отличающимися свойствами. Можно, однако, “подавить” анизотропию плотности потока в этих областях, изменив масштаб реального сечения взаимодействия $\Sigma(\mathbf{r})$ так, чтобы анизотропия существовала лишь в незначительной части пространства по сравнению с оптическими размерами всей системы. Действительно, при $\Sigma(\mathbf{r}) \rightarrow \infty$ из (10) в пределе получается соотношение $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0$ и, следовательно, $\Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t)/(4\pi)$.

Нестационарный случай. Исключив $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ из (8) и (10), получим телеграфное уравнение

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla D(\mathbf{r}) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{v \Sigma(\mathbf{r})} \left[\frac{\partial S_0(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \frac{1}{v} \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} \right] = S_0(\mathbf{r}, t), \text{ которое с точностью до}$$

$$\text{обозначений совпадает с (1) лишь при выполнении условия } \frac{1}{v \Sigma(\mathbf{r})} \left[\frac{\partial S_0(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \frac{1}{v} \frac{\partial^2 \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} \right] = 0.$$

Назовем его *Приближением 2*, которое означает, что плотность потока и источник “не сильно” зависят от времени. Отметим, что, как и в случае *Приближения 1*, точность *Приближения 2* улучшается с увеличением масштаба реального сечения взаимодействия.

$$\text{Исключить } \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \text{ из (8) и (10) тоже можно, сделав } \textit{Приближение 3} \quad \frac{3D(\mathbf{r})}{v} \frac{\partial \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0,$$

которое также приводит (4) к аналогу уравнения (1), т.е.

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla D(\mathbf{r}) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) + S_0(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (11)$$

причем увеличение масштаба сечения $\Sigma(\mathbf{r})$ и здесь улучшает точность *Приближения 3*.

Итак, решение уравнения (1) находится посредством решения уравнения (4) с использованием *Приближений 1, 2* или *1, 3*. Точность всех принятых приближений улучшается с увеличением масштаба реального сечения взаимодействия.

Г р а н и ч н ы е у с л о в и я. Рассмотрим для (4) граничные условия для альbedo α и с поверхностным источником g (нормаль к Γ направлена внутрь среды), а именно,

$$\mathbf{n}\Omega\Phi(\mathbf{r}_\Gamma, \Omega, t) \Big|_{(\Omega\mathbf{n}) > 0} = g(\mathbf{r}_\Gamma, \Omega, t) \Big|_{(\Omega\mathbf{n}) > 0} - \int_{(\Omega'\mathbf{n}) < 0} \alpha(\mathbf{r}_\Gamma, \Omega' \rightarrow \Omega, t) \mathbf{n}\Omega'\Phi(\mathbf{r}_\Gamma, \Omega', t) d\Omega'. \quad (12)$$

Будем считать, что поверхностный источник изотропен и испускает частицы в полусфере с центром в точке \mathbf{r}_Γ , ограниченной касательной к внутренней поверхности Γ , т.е.

$$g(\mathbf{r}_\Gamma, \Omega, t) \Big|_{(\Omega\mathbf{n}) > 0} = \frac{1}{2\pi} g(\mathbf{r}_\Gamma, t). \quad \text{Подставим это выражение в (12) и воспользуемся } \textit{Приближением 1}$$

(далее индекс “ Γ ” у пространственной координаты \mathbf{r}_Γ опущен):

$$\frac{1}{4\pi} (\mathbf{n}\Omega) [\Psi(\mathbf{r}, t) + 3\Omega\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)] \Big|_{(\Omega\mathbf{n}) > 0} = \frac{g(\mathbf{r}, t)}{2\pi} - \frac{\alpha(\mathbf{r}, t)}{4\pi} \int_{(\Omega'\mathbf{n}) < 0} (\mathbf{n}\Omega) f(\Omega, \Omega') [\Psi(\mathbf{r}, t) + 3\Omega\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)] d\Omega'. \quad (13)$$

Здесь принято, что $\alpha(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, t) = \alpha(\mathbf{r}, t) f(\Omega, \Omega')$.

Рассмотрим сначала случай $f(\Omega, \Omega') = \delta(\Omega + \Omega')$, что в переносе соответствует отражению частиц от границы по направлению, противоположному направлению “прихода”. Тогда из (13) для условия $\Omega\mathbf{n} > 0$ получим $(\mathbf{n}\Omega) [\Psi(\mathbf{r}, t) + 3\Omega\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)] = 2g(\mathbf{r}, t) + \alpha(\mathbf{r}, t) (\mathbf{n}\Omega) [\Psi(\mathbf{r}, t) - 3\Omega\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)]$. Проинтегрируем это соотношение на полусфере $\Omega\mathbf{n} > 0$ (для краткости записи опустим пространственно-временные аргументы у всех функций):

$$\Psi \int (\mathbf{n}\Omega) d\mathbf{n} + 3 \int (\mathbf{n}\Omega)(\Omega\mathbf{j}) d\Omega = 2g \int d\Omega + \alpha \left[\Psi \int (\mathbf{n}\Omega) d\Omega - 3 \int (\mathbf{n}\Omega)(\Omega\mathbf{j}) d\Omega \right]. \quad (14)$$

Для стационарного случая из (10) имеем $\mathbf{j} = -D\nabla\Psi$; аналогично и для нестационарной задачи, если воспользоваться *Приближением 3*. Тогда интегралы с двойным скалярным произведением выражаются как

$$\int_{\Omega\mathbf{n} > 0} (\mathbf{n}\Omega)(\Omega\mathbf{j}) d\Omega = -D \int_{\Omega\mathbf{n} > 0} (\mathbf{n}\Omega)(\Omega\nabla\Psi) d\Omega = -D \frac{2\pi}{3} (\mathbf{n}\nabla\Psi).$$

Поскольку $\int_{(\Omega\mathbf{n}) > 0} (\mathbf{n}\Omega) d\Omega = 2\pi \int_0^1 \mu d\mu = \pi$, то из (14) получим $\Psi - 2D(\mathbf{n}\nabla\Psi) = 4g + \alpha[\Psi + 2d(\mathbf{n}\nabla\Psi)]$

и окончательно

$$D(\mathbf{r}_\Gamma)(\mathbf{n}\nabla\Psi(\mathbf{r}_\Gamma, t)) = \frac{1}{2} \frac{1 - \alpha(\mathbf{r}_\Gamma, t)}{1 + \alpha(\mathbf{r}_\Gamma, t)} \left[\Psi(\mathbf{r}_\Gamma, t) - \frac{2g(\mathbf{r}_\Gamma, t)}{1 + \alpha(\mathbf{r}_\Gamma, t)} \right]. \quad (15)$$

Непосредственной подстановкой нетрудно убедиться, что граничное условие (12) приводится к виду (15) и при других угловых распределениях отраженного излучения, например, для $f(\Omega, \Omega') = f(\theta, \chi, \theta', \chi') = \delta(\theta - \theta')\delta(\chi - \pi - \chi')$ – случай зеркального отражения (χ – азимутальный угол) или для $f(\Omega, \Omega') = (2\pi)^{-1}$ – случай матовой рассеивающей поверхности.

Итак, (15) с точностью до обозначений совпадает с (12). Напомним, что при получении (15) применялось *Приближение 1* для стационарной задачи (1) и *Приближения 1* и *3* для нестационарного случая. Граничное условие (12) при $g = 0$ приводит, очевидно, к аналогу (2) в виде $D(\mathbf{r}_\Gamma)[\mathbf{n}\nabla\Psi(\mathbf{r}_\Gamma, t)] = \frac{1}{2} \frac{1 - \alpha(\mathbf{r}_\Gamma, t)}{1 + \alpha(\mathbf{r}_\Gamma, t)} \Psi(\mathbf{r}_\Gamma, t)$, позволяя решать задачу (1)...(3) посредством решения уравнения переноса, причем $T_0(\mathbf{r}_\Gamma, t) = T_0 = \text{const}$ (в этом случае T_0 – аддитивная константа в решении и можно полагать $T_0 = 0$).

Необходимо заметить, что для случая стационарного уравнения (1) при $T_0 = \text{const}$ описываемый подход к решению поставленной задачи уже рассматривался в [4], затем был повторен в [6]. Представляется, что по сравнению с этими работами здесь приведено строгое обоснование корректности метода решения, причем для более общего случая.

Очевидно, что при решении уравнения переноса аналог граничного условия (12) можно задавать и на внутренних границах. Для уравнения теплопроводности, например, это дает возможность учесть “прокачку” теплоносителя по внутренним каналам в рассчитываемой системе, если удастся свести условия теплообмена к виду (12) на внутренних границах. При этом в уравнении переноса появятся внутренние поверхностные источники.

Изменение масштаба реального сечения. Как уже отмечалось, решение задачи (1)...(3) посредством решения уравнения (4) с граничными условиями (12) возможно, если допустить *Приближение 1* для стационарного случая и *Приближения 1* и *3* для нестационарного. Точность этих приближений улучшается при увеличении масштаба реального сечения, и решение задачи (4), (12) аппроксимирует решение задачи (1)...(3), т.е.

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \gamma^{-1} \Psi_\gamma(\mathbf{r}, t) + \Delta_\gamma(\mathbf{r}, t), \quad (16)$$

где γ – масштаб изменения реальных сечений в задаче (4), (12); Ψ_γ – плотность потока при заданном γ ; Δ_γ – функция-невязка: $\Delta_\gamma(\mathbf{r}, t) \rightarrow 0$ при $\gamma \rightarrow 0$.

После подстановки (16) в (1) и сравнения с (11) получим (полагая, что γ достаточно большое, т.е. $\Delta_\gamma \approx 0$)

$$\Sigma(\mathbf{r}) = \gamma/[3K(\mathbf{r})]; \quad (17)$$

$$v(\mathbf{r}) = \gamma/\alpha(\mathbf{r}). \quad (18)$$

Член уравнения (1), соответствующий источнику, остается постоянным при изменении масштаба сечения. Отметим, что из (17) и (18) следует, что точность *Приближения 1* есть $O(\gamma^{-1})$, а *Приближений 2, 3* – $O(\gamma^{-2})$.

После подстановки (16) в (2) и сравнения с (15) получим

$$\alpha(\mathbf{r}_\Gamma, t) = [\gamma - 2h(\mathbf{r}_\Gamma, t)]/[\gamma + 2h(\mathbf{r}_\Gamma, t)]; \quad (19)$$

$$g(\mathbf{r}_\Gamma, t) = T_0(\mathbf{r}_\Gamma, t) \gamma/[\gamma + 2h(\mathbf{r}_\Gamma, t)], \quad (20)$$

т.е. поверхностный источник в граничном условии (12) меняется при изменении масштаба сечения. Итак, выбирая достаточно большой масштаб сечения γ , можно получить приближение к решению задачи (1)...(3) посредством решения уравнения переноса (4) с граничными условиями (12). При этом исходные характеристики для (4), (12) вычисляются из (17)...(20).

3. Расчетное исследование точности приближения

Сформулированный приближенный метод решения краевой задачи (1)...(3) имеет один заметный недостаток, касающийся оценки точности получаемого решения, а именно, неиз-

вестен точный или приближенный вид функции-невязки Δ_γ , которая является отклонением приближенного решения задачи от точного. В работе [6] приведены результаты вычислительных экспериментов, показывающие, что невязка Δ_γ монотонно стремится к нулю с ростом масштаба сечений γ , однако длительность расчетов резко возрастет с увеличением γ . В связи с этим важное значение приобретает вопрос об оценке значения невязки Δ_γ при конечной величине масштаба сечений и, таким образом, оценке точного решения задачи.

В рамках программного комплекса BRAND [7] проведен ряд вычислительных экспериментов по применению рассматриваемого метода для решения краевых задач для уравнения теплопроводности в сферической, цилиндрической и прямоугольной декартовой геометрии. Эти задачи легко могут быть решены аналитически или конечно-разностными методами. Сравнение результатов, полученных с помощью рассматриваемого приближенного метода, с точным решением позволяет сделать предположения о виде зависимости функции-невязки Δ_γ от масштаба сечений. Ниже кратко описываются несколько модельных задач, обсуждаются результаты их решения и предлагается модификация рассматриваемого метода для получения оценок точного решения задачи (1)...(3).

Рассмотрим распределение температуры в однородном шаре с радиусом $R = 20$ ($K = 1$) от точечного источника тепла $q = 1$, помещенного в центр шара. На поверхности шара заданы условия конвективного теплообмена ($h = 0,05$) со средой при температуре $T_0 = 0$. Решение уравнения теплопроводности в стационарном случае имеет вид (здесь r – текущее значение радиуса)

$$T(r) = 1/(4\pi r). \quad (21)$$

Соответствующая краевая задача для уравнения переноса решалась методом Монте-Карло при различных масштабах сечений. На рис. 1...3 приведены результаты и статические погрешности (одна “сигма”) для расчетов ряда функционалов (ниже использовано обозначение $\Psi(\mathbf{r}, t) \equiv \Psi(\mathbf{r}) = \Psi(x; y; z)$).

На рис. 4 приведены аналогичные результаты при различных значениях γ для следующей задачи. Рассматривался однородный ($K = 1$) параллелепипед $0 \leq x \leq 2, 0 \leq (y, z) \leq 1$ с условиями конвективного теплообмена ($h = 1$) на границе со средой при $T_0 = 0$. Источники тепла $q = 1$ равномерно распределены по кубу $0 \leq (x, y, z) \leq 1$. Стационарное уравнение теплопроводности решалось конечно-разностным методом, а методом Монте-Карло оценивался функционал $I(\gamma) = \gamma^{-1}\Psi(1,5; 0,5; 0,5)$.

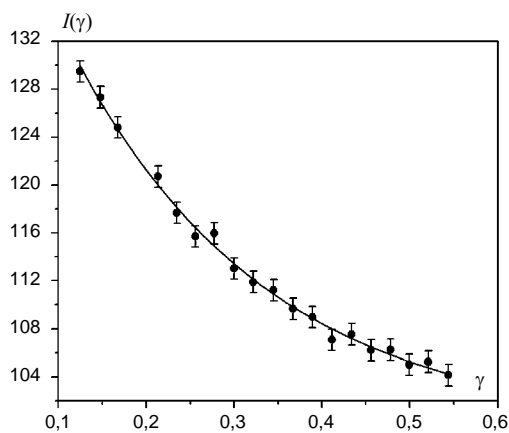


Рис. 1. Оценки функционала $I(\gamma) = \int_5^{15} \gamma^{-1}\Psi(r)dr$

для сферической геометрии

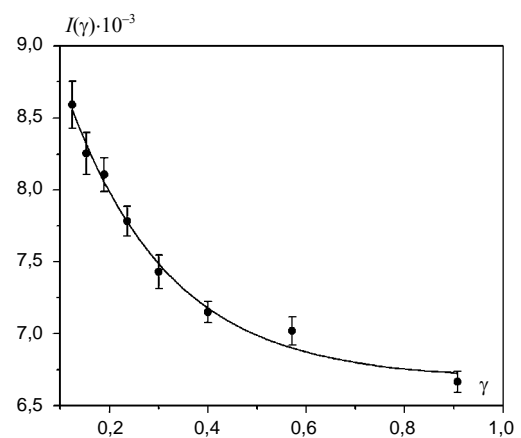


Рис. 2. Оценки функционала $I(\gamma) = \gamma^{-1}\Psi(12; 0; 0)$ для сферической геометрии

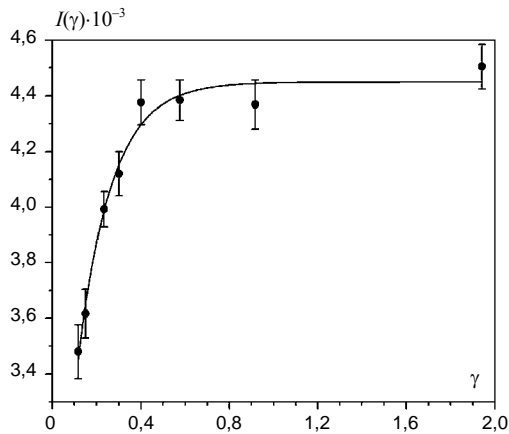


Рис. 3. Оценки функционала $I(\gamma) = \gamma^{-1}\Psi(18; 0; 0)$ для сферической геометрии

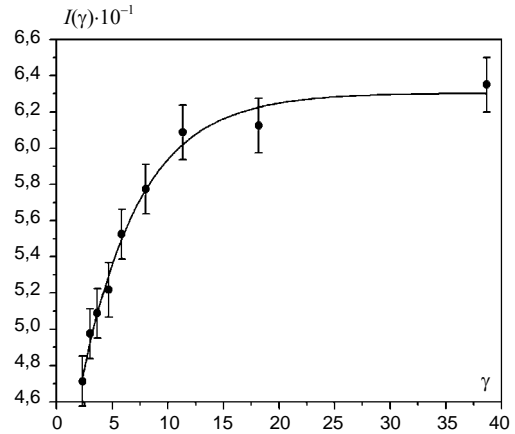


Рис. 4. Оценки функционала $I(\gamma) = \gamma^{-1}\Psi(1, 5; 0, 5; 0, 5)$ в декартовой геометрии

На рис. 1...4 приведены также сплошные кривые, на которые прекрасно “ложатся” результаты расчетов методом Монте-Карло. Из представленных данных можно получить следующую функциональную зависимость:

$$I(\gamma) = I_T + c_1 \exp(-c_2 \gamma), \quad (22)$$

где I_T – точное значение температурного функционала; c_1, c_2 – некоторые коэффициенты, значения которых подобраны специальным образом для каждого случая. Таким образом, предполагается явное выражение для функции-невязки $\Delta_\gamma = c_1 \exp(-c_2 \gamma)$ с двумя неизвестными коэффициентами.

Рассмотрим следующую статистическую модель:

$$\tilde{I}(\gamma_i) = I_T + c_1 \exp(-c_2 \gamma) + \varepsilon_i, \quad (23)$$

где γ_i – масштабы сечений; $\tilde{I}(\gamma_i)$ – оценки Монте-Карло для уравнений переноса; ε_i – статистические ошибки расчетов методом Монте-Карло; I_T, c_1, c_2 – неизвестные параметры. Если сделать некоторые предположения о функции распределения статистических ошибок ε_i , то можно построить статистические оценки I_T, c_1, c_2 и путем сравнения \tilde{I}_T и точного значения I_T сделать выводы о справедливости предлагаемой зависимости (22).

Т а б л и ц а точных значений и МП-оценок функционалов

Номер рисунка	I_T	\tilde{I}_T	$\tilde{\sigma}, \%$
1	$1,00 \cdot 10^2$	$0,99 \cdot 10^2$	1,4
2	$6,63 \cdot 10^{-3}$	$6,67 \cdot 10^{-3}$	2,0
3	$4,42 \cdot 10^{-3}$	$4,47 \cdot 10^{-3}$	1,3
4	$6,23 \cdot 10^{-1}$	$6,23 \cdot 10^{-1}$	1,5

В таблице приведены результаты вычисления оценок максимального правдоподобия (МП-оценок) \tilde{I}_T , описанных ниже, их статистические погрешности и точные значения четырех функционалов I_T , описанных выше. Полное (в пределах статистических погрешностей) совпадение МП-оценок и точных результатов говорит о справедливости, по крайней мере для рассматриваемых задач, предлагаемой модели (23).

4. Оценки максимального правдоподобия

Будем считать, что закон распределения случайных погрешностей оценок является нормальным. Принимая это приближение, запишем функцию правдоподобия для вектора $\mathbf{Q} = (I_T, c_1, c_2)$ неизвестных параметров в статистической модели (23) в виде

$L(\mathbf{Q}) = (2\pi \det \mathbf{R})^{-m/2} \exp[-0,5\boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{R}^{-1} \boldsymbol{\varepsilon}]$, где m – число точек по масштабу сечений γ_i , при которых проводились расчеты оценок \tilde{I}_T ; $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)$ – вектор случайных ошибок расчетов методом Монте-Карло; \mathbf{R} – матрица ($m \times m$) ковариаций \tilde{I}_T .

Логарифмическая функция правдоподобия имеет вид $l(\mathbf{Q}) = \ln[L(\mathbf{Q})] = [-\pi m - 0,5\pi \ln(\det \mathbf{R})] - 0,5\boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{R}^{-1} \boldsymbol{\varepsilon}$, а МП-оценкой вектора \mathbf{Q} будет $\mathbf{Q} = (\tilde{I}_T, \tilde{c}_1, \tilde{c}_2) = \arg[\max_{\mathbf{Q}} l(\mathbf{Q})]$, и в точке экстремума $l(\mathbf{Q})$ выполняется равенство

$$dl(\mathbf{Q})/d\mathbf{Q} = 0. \text{ Учитывая, что } \varepsilon_i = I_T - c_1 \exp(-c_2 \gamma_i) - \tilde{I}(\gamma_i), \text{ получим систему уравнений} \quad (24)$$

$$\mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F} \mathbf{Q} - \mathbf{F} \mathbf{R}^{-1} \tilde{I}(\gamma) = 0,$$

где $\tilde{I}(\gamma) = [\tilde{I}(\gamma_1), \tilde{I}(\gamma_2), \dots, \tilde{I}(\gamma_m)]$; $\mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & \exp(-c\gamma_1) & -c_1\gamma_1 \exp(-c_2\gamma_1) \\ 1 & \exp(-c\gamma_2) & -c_1\gamma_2 \exp(-c_2\gamma_2) \\ \cdot & \dots & \dots \\ \cdot & \dots & \dots \\ 1 & \exp(-c\gamma_m) & -c_1\gamma_m \exp(-c_2\gamma_m) \end{bmatrix}$.

Система (24) распадается на систему двух линейных (относительно \tilde{I}_T и \tilde{c}_1) уравнений

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{F}_2^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}_2 \tilde{I}_T &= \mathbf{F}_2 \mathbf{R}^{-1} \tilde{I}(\gamma); \\ \mathbf{F}_2^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}_2 \tilde{c}_1 &= \mathbf{F}_2 \mathbf{R}^{-1} \tilde{I}(\gamma); \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

и нелинейное уравнение для \tilde{c}_2

$$\mathbf{F}_3^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F}_3 \tilde{c}_2 = \mathbf{F}_3 \mathbf{R}^{-1} \tilde{I}(\gamma), \quad (26)$$

где \mathbf{F}_2 – матрица, составленная из первых двух столбцов матрицы \mathbf{F} ; \mathbf{F}_3 – третий столбец матрицы \mathbf{F} . Решения системы уравнений (25) и уравнения (26), а также исследования характера экстремума $l(\mathbf{Q})$ находятся стандартным способом и здесь опускаются.

Известно, что МП-оценки при достаточно общих условиях, включающих и рассматриваемый случай, обладают свойствами асимптотической несмещенности, нормальности и эффективности. Из этого следует, что вектор \mathbf{Q} распределен нормально с математическим ожиданием $[I_T, c_1, c_2]$ и дисперсией

$$\tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{m} (\mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F})^{-1} \Big|_{\mathbf{Q} = \tilde{\mathbf{Q}}}, \quad (27)$$

следовательно, могут быть вычислена оценка относительной погрешности \tilde{I}_T и стандартным способом построен доверительный интервал.

Таким образом, можно сформулировать следующий метод оценки линейных функционалов от решения краевой задачи (1)...(3): для задачи (4) с граничными условиями (12) методом Монте-Карло при различных масштабах сечений γ_i оцениваются функционалы $I(\gamma)$ и соответствующая матрица \mathbf{R} ковариаций; путем решения системы (25) и уравнения (26) вычисляются МП-оценки искомых величин I ; оценки статистических погрешностей расчета \tilde{I}_T получаются из соотношения (27) в предположении нормальности \mathbf{Q} .

Предложенный метод успешно применен к ряду задач для уравнения теплопроводности. Следует отметить, что предполагаемая зависимость (22) не имеет строгого математического обоснования. Известно лишь [8], что зависимость $\Delta_\gamma = c_1 \exp(-c_2 \gamma)$ выполняется строго при

$\gamma \rightarrow \infty$, т.е. асимптотически. Справедливость этого соотношения при конечных γ обоснована только расчетным путем для ряда модельных задач.

Заключение

Рассмотрены вопросы решения методом Монте-Карло краевых задач математической физики для уравнений параболического и/или эллиптического типа в неоднородных трехмерных областях. Предлагаемый подход основан на применении диффузионного приближения линейной теории переноса. Математически строго получены условия, при которых уравнение типа диффузии с соответствующими граничными и начальными условиями асимптотически эквивалентно нестационарному односкоростному уравнению переноса без поглощения с изотропным рассеянием и альбедными граничными условиями. Введена статистическая модель, в рамках которой построены МП-оценки для функционалов от решения краевой задачи. Приведено сопоставление расчетных результатов с аналитическими решениями для ряда модельных задач. Полное (в пределах статистических погрешностей) совпадение МП-оценок и точных результатов говорит о справедливости, по крайней мере для рассматриваемых задач, предложенной статистической модели. Отмечена простота компьютерной реализации данного метода, обусловленная возможностью использования с минимальными изменениями огромного запаса программных средств, накопленного для решения методом Монте-Карло задач переноса излучений.

Андросенко Петр Александрович, контактные тел.: (48439) 78-446, 78-447; e-mail: peter@iate.obninsk.ru

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Елепов Б.С., Кронберг А.А., Михайлов Г.А., Сабельфельд К.К.* Решение краевых задач методом Монте-Карло. – Новосибирск: Наука, 1980.
2. *Ермаков С.М., Некруткин В.В., Сипин А.С.* Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики. – М.: Наука, 1984.
3. *Сабельфельд К.К., Симонов Н.А.* Алгоритмы случайного блуждания по границе для решения краевых задач // Численные методы механики сплошной среды, 1983, т. 14, 1. – С. 116.
4. *Фрейли С.К., Хоффман Т.Дж., Стивенс П.Н.* Решение задач теплопроводности методом Монте-Карло // Теплопередача, 1980, т. 102, 1. – С. 133.
5. *Цвайфель П.* Физика реакторов. – М.: Атомиздат, 1977.
6. *Ванев Ю.Е., Чухлов А.Г.* Программа ТМК расчета температуры в сложной трехмерной геометрии // ВАНТ. Сер. ФиТЯР, 1985, вып. 7. – С. 59.
7. *Андросенко А.А., Андросенко П.А.* Комплекс программ BRAND для расчетов характеристик переноса излучения методом Монте-Карло. Там же. – С. 33.
8. *Шихов С.Б., Троянский В.Б.* Теория ядерных реакторов. – М.: Энергоиздат, 1983.

Статья поступила в редакцию 17 сентября 2006 г.
Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 44 – 53.

УДК 621.039.5+519.85

Теоретические основы, алгоритм вычисления методом Монте-Карло производных $k_{эф}$ по групповым макроскопическим сечениям и особенности реализующей его опции в коде MMKKENO

А.А. Блыскавка, М.Н. Николаев, А.М. Цибуля,

ФГУП “ГНЦ РФ-ФЭИ”, 249020, г. Обнинск Калужской обл., пл. Бондаренко, 1

На основе ранее полученных оценок методом Монте-Карло производных $k_{эф}$ по произвольному параметру выведены оценки для производных $k_{эф}$ по групповым макроскопическим константам и описаны основные особенности опции в MMKKENO, реализующей вычисление этих производных.

The theoretical background and algorithm for Monte Carlo calculation of k_{eff} derivative over group macroscopic cross sections and features of the code MMKKENO corresponding option. A.A. Blyskavka, M.N. Nikolaev, A.M. Tsibulya. The estimations of derivatives k_{eff} on group macroscopical constants are deduced on the basis of estimations received before by the Monte Carlo method of derivatives k_{eff} on any parameter. Main features of the option in MMKKENO realizing calculation of these derivatives are described.

В [1] была развита теория оценок методом Монте-Карло производных эффективного коэффициента $k_{эф}$ размножения нейтронов по некоторому параметру. Эта теория и положена в основу описываемого в работе алгоритма расчета производных $k_{эф}$ по групповым макроскопическим сечениям материалов реактора.

Запишем уравнения для распределения плотности Q источников деления и ценности Q^+ нейтронов спектра деления [2] в виде

$$k_{эф}Q(\mathbf{r}) = \int Q(\mathbf{r}')P(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r})d\mathbf{r}' ; \quad (1)$$

$$k_{эф}Q^+(\mathbf{r}) = \int Q^+(\mathbf{r}')P(\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}')d\mathbf{r}' , \quad (2)$$

где $P(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r})$ – число нейтронов, появившихся в точке \mathbf{r} при делениях, порожденных нейтронами, происшедшими от одного нейтрона спектра деления, испущенного в точке \mathbf{r}' .

Пусть $k_{эф}, Q, Q^+, P$ достаточно гладко зависят от некоторого параметра α . Тогда, продифференцировав (1) по α , умножив полученное выражение на $Q^+(\mathbf{r})$, проинтегрировав его по \mathbf{r} и учтя, что $Q^+(\mathbf{r})$ удовлетворяет уравнению (2), имеем

$$\frac{\partial k_{эф}}{\partial \alpha} = \frac{\iint Q^+(\mathbf{r})Q(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial \alpha} P(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r})d\mathbf{r}'d\mathbf{r}}{\int Q^+(\mathbf{r})Q(\mathbf{r})d\mathbf{r}} . \quad (3)$$

В (1)...(3) и дальше для сокращения записи опущена зависимость всех величин от α .

По определению

$$P(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}) = \iint \frac{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \Psi(\mathbf{r}'; \mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)d\mathbf{\Omega}dE , \quad (4)$$

где $\Psi(\mathbf{r}'; \mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ удовлетворяет уравнению

$$\Psi(\mathbf{r}'; x) = \int K(x_0 \rightarrow x) \Psi(\mathbf{r}'; x_0) dx_0 + \frac{\chi(\mathbf{r}', E)}{4\pi} T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r} / \Omega, E), \quad (5)$$

в котором использованы следующие обозначения: $x_0 = (\mathbf{r}_0, \Omega_0, E_0)$, $x = (\mathbf{r}, \Omega, E)$ – совокупности трех координат радиус-векторов \mathbf{r}_0 и \mathbf{r} (пространственное местоположение), двух компонент векторов Ω_0 и Ω (направление движения частицы) и энергий E_0 и E до столкновения;

$$T(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r} / \Omega, E) = e^{-\tau(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}, E)} \frac{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2} \delta\left(\Omega - \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}\right);$$

$\tau(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}, E)$ – оптическое расстояние между точками \mathbf{r}_0 и \mathbf{r} для частицы с энергией E ;

$$K(x_0 \rightarrow x) = \frac{\Sigma_s(\mathbf{r}_0; \Omega_0, E_0 \rightarrow \Omega, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}_0, E_0)} T(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r} / \Omega, E) = C(\Omega_0, E_0 \rightarrow \Omega, E / \mathbf{r}_0) T(\mathbf{r}_0 \rightarrow \mathbf{r} / \Omega, E);$$

$\Sigma_s(\mathbf{r}_0; \Omega_0, E_0 \rightarrow \Omega, E)$ – рассчитанная на единицу длины плотность вероятностей частице в результате рассеяния в точке \mathbf{r}_0 изменить направление Ω_0 движения и энергию E_0 на Ω и E , соответственно; $\Sigma_t(\mathbf{r}, E)$ – полное макроскопическое сечение материала;

$v\Sigma_f(\mathbf{r}, E) = \sum_i \rho_i(\mathbf{r}) v_i(E) \sigma_{f,i}(E)$; $\rho_i(\mathbf{r})$ – концентрация i -го изотопа; $v_i(E)$ – полное число нейтронов, испускаемых при делениях изотопа i нейтронами с энергией E ; $\sigma_{f,i}(E)$ – сечение деления i -го изотопа; $\chi(\mathbf{r}, E)$ – спектр деления, который принимается независимым от энергии нейтрона, вызвавшего деление; δ – функция Дирака.

Дифференцируя (4) по параметру α , получим

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} P(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}) = \iint \Psi(\mathbf{r}'; \mathbf{r}, \Omega, E) \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\frac{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \right] d\Omega dE + \iint \frac{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(\mathbf{r}'; \mathbf{r}, \Omega, E) d\Omega dE, \quad (6)$$

где $\frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(\mathbf{r}'; \mathbf{r}, \Omega, E)$ удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(\mathbf{r}'; x) &= \int K(x_0 \rightarrow x) \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(\mathbf{r}'; x_0) dx_0 + T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r} / \Omega, E) \frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{\chi(\mathbf{r}', E)}{4\pi} + \\ &+ \frac{\chi(E, \mathbf{r}')}{4\pi} \frac{\partial}{\partial \alpha} T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r} / \Omega, E) + \int \Psi(\mathbf{r}'; x_0) \frac{\partial}{\partial \alpha} K(x_0 \rightarrow x) dx_0, \end{aligned} \quad (7)$$

получающемся из (5) дифференцированием по параметру α . Умножим (6) на $Q(\mathbf{r}')/k_{эф}$ и

проинтегрируем по \mathbf{r}' . Используя формальные обозначения $\Psi(x) = \frac{1}{k_{эф}} \int Q(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}'; x) d\mathbf{r}'$

и $\frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(x) = \frac{1}{k_{эф}} \int Q(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(\mathbf{r}'; x) d\mathbf{r}'$, получим

$$\frac{1}{k_{эф}} \int Q(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial \alpha} P(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}) d\mathbf{r}' = \iint \Psi(x) \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\frac{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \right] d\Omega dE + \iint \frac{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(x) d\Omega dE. \quad (8)$$

$\Psi(x)$ и $\partial\Psi(x)/\partial\alpha$ удовлетворяют соответственно уравнениям

$$\Psi(x) = \int K(x_0 \rightarrow x) \Psi(x_0) dx_0 + \frac{1}{k_{\text{эф}}} \int \frac{\chi(\mathbf{r}', E)}{4\pi} Q(\mathbf{r}') T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r} / \Omega, E) d\mathbf{r}', \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(x) &= \int K(x_0 \rightarrow x) \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(x_0) dx_0 + \frac{1}{k_{\text{эф}}} \int Q(\mathbf{r}') T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r} / \Omega, E) \frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{\chi(\mathbf{r}', E)}{4\pi} d\mathbf{r}' + \\ &+ \frac{1}{k_{\text{эф}}} \int \frac{\chi(\mathbf{r}', E)}{4\pi} Q(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial \alpha} T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r} / \Omega, E) d\mathbf{r}' + \int \Psi(x_0) \frac{\partial}{\partial \alpha} K(x_0 \rightarrow x) dx_0, \end{aligned} \quad (10)$$

которые получаются из (5) и (7) после умножения на $Q(\mathbf{r}')/k_{\text{эф}}$ и интегрирования по \mathbf{r}' .

Теперь после подстановки (8) в (3) и с учетом того, что по определению

$$Q(\mathbf{r}) = \iint \frac{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \Psi(x) d\Omega dE, \text{ получим}$$

$$\frac{\partial k_{\text{эф}}}{\partial \alpha} = \frac{k_{\text{эф}} \left\{ \int Q^+(\mathbf{r}) \Psi(x) \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\frac{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \right] dx + \int Q^+(\mathbf{r}) \frac{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(x) dx \right\}}{\int Q^+(\mathbf{r}) \frac{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \Psi(x) dx}. \quad (11)$$

Введем функцию $F(x)$, равную ценности вторичных нейтронов, возникающих в результате поглощения в точке \mathbf{r} нейтрона, летящего в направлении Ω с энергией E [3]:

$$F(x) = \frac{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{k_{\text{эф}} \Sigma_a(\mathbf{r}, E)} Q^+(\mathbf{r}). \text{ Выразив в (11) } Q^+(\mathbf{r}) \text{ через } F(x), \text{ имеем}$$

$$\frac{1}{k_{\text{эф}}} \frac{\partial k_{\text{эф}}}{\partial \alpha} = \frac{\int F(x) \left\{ \frac{\Sigma_a(\mathbf{r}, E)}{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)} \Psi(x) \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\frac{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \right] + \frac{\Sigma_a(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(x) \right\} dx}{\int F(x) \frac{\Sigma_a(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \Psi(x) dx}. \quad (12)$$

Отметим еще, что

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\frac{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \right] \frac{\Sigma_a(\mathbf{r}, E)}{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)} &= \left[\frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)} - \frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} \Sigma_t(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \right] \frac{\Sigma_a(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)}. \text{ Поэтому} \\ \frac{1}{k_{\text{эф}}} \frac{\partial k_{\text{эф}}}{\partial \alpha} &= \frac{\int F(x) \frac{\Sigma_a(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \left\{ \Psi(x) \left[\frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)} - \frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} \Sigma_t(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \right] + \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(x) \right\} dx}{\int F(x) \frac{\Sigma_a(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)} \Psi(x) dx}. \end{aligned} \quad (13)$$

Это окончательное выражение для производной $k_{\text{эф}}$ по параметру α , деленной на $k_{\text{эф}}$. Обозначим числитель формулы (13) через I , знаменатель через J и $y_i = (\mathbf{r}_{i-1}, \Omega_i, E_i)$.

Можно показать (см. Приложение), что несмещенной оценкой по поглощениям для функционала I на однородной цепи Маркова с характеристиками:

$$\begin{aligned} \tilde{S}(y_1) &= \frac{Q(\mathbf{r}_0) \tilde{\chi}(\mathbf{r}_0, E_1)}{k_{\text{эф}} 4\pi} \text{ (распределение точек рождения);} \\ \tilde{\chi}(\mathbf{r}_0, E_1) &\text{ – неаналоговый (моделируемый) спектр деления;} \\ \tilde{T}(y_1 \rightarrow x_1) &\text{ – плотность вероятностей первых переходов (транспортная} \\ &\text{ составляющая неаналогового ядра перехода);} \\ \tilde{K}(x_i \rightarrow x_{i+1}) &\text{ – плотность вероятностей дальнейших переходов} \\ &\text{ (произведение составляющей рассеяния на транспортную} \\ &\text{ составляющую неаналогового ядра перехода);} \\ \Sigma_a(x_i)/\Sigma_t(x_i) &\text{ – вероятность обрыва цепи в результате поглощения} \end{aligned} \quad (14)$$

является случайная величина

$$\begin{aligned} \xi(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l) &= F(x_l) \left[\frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} v \Sigma_f(x_l)}{v \Sigma_f(x_l)} - \frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} \Sigma_t(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} + \frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{\chi(\mathbf{r}_0, E_1)} + \frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} T(y_1 \rightarrow x_1)}{T(y_1 \rightarrow x_1)} + \sum_{i=1}^{l-1} \frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} K(x_i \rightarrow x_{i+1})}{K(x_i \rightarrow x_{i+1})} \right] \times \\ &\quad \times W_T(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l), \end{aligned} \quad (15)$$

$$\text{где } W_T(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l) = \frac{S(y_1) T(y_1 \rightarrow x_1)}{\tilde{S}(y_1) \tilde{T}(y_1 \rightarrow x_1)} \prod_{i=1}^{l-1} \frac{K(x_i \rightarrow x_{i+1})}{\tilde{K}(x_i \rightarrow x_{i+1})}; \quad S(y_1) = \frac{Q(\mathbf{r}_0) \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{k_{\text{эф}} 4\pi};$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} K(x_i \rightarrow x_{i+1}) &= \frac{\partial}{\partial \alpha} [C(x_i \rightarrow y_{i+1}) T(y_{i+1} \rightarrow x_{i+1})] = \\ &= T(y_{i+1} \rightarrow x_{i+1}) \frac{\partial}{\partial \alpha} C(x_i \rightarrow y_{i+1}) + C(x_i \rightarrow y_{i+1}) \frac{\partial}{\partial \alpha} T(y_{i+1} \rightarrow x_{i+1}). \end{aligned}$$

Для знаменателя (13) несмещенной оценкой по поглощениям на вышеопределенной однородной цепи Маркова является случайная величина

$$\eta(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l) = F(x_l) W_T(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l). \quad (16)$$

Оценки по поглощениям для функционалов I и J выбраны потому, что они открывают возможность простого вычисления выборочного значения для функции $F(x)$. В качестве такого в точке поглощения естественно принять число потомков поглощенного нейтрона после заданного количества поколений NAPR (это и служит одним из приближений в алгоритме вычисления производных $k_{\text{эф}}$ по макроскопическим сечениям) [3]. Сразу же отметим, что значение $F(x)$ равно нулю, если хотя бы в одном последующем поколении (включая исходное) поглощение произойдет не в делящейся среде или случится утечка. Особо следует подчеркнуть, что в выражениях ξ (15) и η (16) производные по α и все остальные входящие в них величины вычисляются при конкретных (заданных) значениях α .

Теперь детализируем оценки для случая многогруппового приближения в ММККЕНО [4] (модифицированном КЕНО Va), когда поглощение моделируется явно и исключены расщепление и русская рулетка. Характеристики моделируемой цепи Маркова в этом случае следующие:

$$\begin{aligned}
\tilde{S}(y_i) &= S(y_i) = \frac{Q(\mathbf{r}_0) \chi^{g_i}(m_0)}{k_{\text{эф}} 4\pi}; \\
\tilde{T}(y_1 \rightarrow x_1) &= T(y_1 \rightarrow x_1) = \Sigma_t^{g_i}(m_1^{j_1}) \exp\left(-\sum_{n=1}^{j_1} \Sigma_t^{g_i}(m_1^n) S_{1,n}\right); \\
\tilde{K}(x_i \rightarrow x_{i+1}) &= \tilde{C}(x_i \rightarrow y_{i+1}) T(y_{i+1} \rightarrow x_{i+1}); \\
\tilde{C}(x_i \rightarrow y_{i+1}) &= \frac{\Sigma_s^{g_i}(m_i) \tilde{\Sigma}_s^{g_i \rightarrow g_{i+1}}(m_i)}{\Sigma_t^{g_i}(m_i) \tilde{\Sigma}_s^{g_i}(m_i)} f^{g_i \rightarrow g_{i+1}}(m_i, \mu_i); \\
T(y_i \rightarrow x_i) &= \Sigma_t^{g_i}(m_i^{j_i}) \exp\left(-\sum_{n=1}^{j_i} \Sigma_t^{g_i}(m_i^n) S_{i,n}\right); \\
C(x_i \rightarrow y_{i+1}) &= \frac{\tilde{\Sigma}_s^{g_i \rightarrow g_{i+1}}(m_i)}{\Sigma_t^{g_i}(m_i)} f^{g_i \rightarrow g_{i+1}}(m_i, \mu_i); \\
\Sigma_a(x_i) / \Sigma_t(x_i) &= \Sigma_a^{g_i}(m_i) / \Sigma_t^{g_i}(x_i), \tag{17}
\end{aligned}$$

где m_i – номер физической (материальной) зоны для пространственной точки \mathbf{r}_i ; m_i^n – номер физической зоны для пространственных точек из интервала $(\mathbf{r}_{i,n-1}, \mathbf{r}_{i,n})$, входящего в интервал $(\mathbf{r}_{i-1}, \mathbf{r}_i)$; n изменяется от 1 до j_i ; $\mathbf{r}_{i,0} = \mathbf{r}_{i-1}$; $\mathbf{r}_{i,j_i} = \mathbf{r}_i$; $\mathbf{r}_{i,n} = \mathbf{r}_{i,n-1} + \Omega_i S_{i,n}$; $S_{i,n}$ – длина интервала $(\mathbf{r}_{i,n-1}, \mathbf{r}_{i,n})$; g_i – номер энергетической группы, которой принадлежит E_i ; μ_i – косинус угла между направлениями Ω_i и Ω_{i+1} ; $\Sigma_t^{g_i}(m_i)$ – полное макроскопическое сечение для группы g_i и физической зоны m_i ; $\Sigma_s^{g_i}(m_i)$ – групповое макроскопическое сечение рассеяния для группы g_i и физической зоны m_i , включающее макроскопические сечения упругого и неупругого рассеяния и реакций $(n, 2n)$, $(n, 3n)$; $\tilde{\Sigma}_s^{g_i \rightarrow g_{i+1}}(m_i)$ – макроскопическое сечение перехода из группы g_i в группу g_{i+1} для физической зоны m_i в результате упругого и неупругого рассеяния и реакций $(n, 2n)$, $(n, 3n)$, причем для реакции $(n, 2n)$ сечение умножено на 2, а для реакции $(n, 3n)$ – на 3; $\tilde{\Sigma}_s^{g_i}(m_i) = \sum_{g_{i+1}} \tilde{\Sigma}_s^{g_i \rightarrow g_{i+1}}(m_i)$; $\Sigma_a^{g_i}(m_i)$ – макроскопическое сечение поглощения в группе g_i для физической зоны m_i ; $f^{g_i \rightarrow g_{i+1}}(m_i, \mu_i)$ – индикатриса рассеяния при переходе из группы g_i в группу g_{i+1} для физической зоны m_i ; j_i – число чередующихся вдоль луча Ω_i физических зон до точки столкновения; m_i^n – номер этих зон; $S_{i,n}$ – отрезки, проходимые в этих зонах.

В ММККЕНО неизотропные индикатрисы рассеяния задаются или в P_1 -, или в P_3 -, или в P_5 -приближениях. В P_3 -приближении они имеют вид

$$f^{g_i \rightarrow g_{i+1}}(m_i, \mu_i) = \sum_{j=1}^2 P_j^{g_i \rightarrow g_{i+1}}(m_i) \delta(\mu - \mu_j(m_i)), \text{ а в } P_5\text{-приближении –}$$

$$f^{g_i \rightarrow g_{i+1}}(m_i, \mu_i) = \sum_{j=1}^3 P_j^{g_i \rightarrow g_{i+1}}(m_i) \delta(\mu - \mu_j(m_i)), \text{ где } \mu_j(m_i) \text{ – косинус угла рассеяния для зоны}$$

m_i ; $P_j^{g_i \rightarrow g_{i+1}}(m_i)$ – вероятность рассеяться на угол с косинусом μ_j . При этом P_j и μ_j в КЕНО V_a вычисляются из условий сохранения первых четырех (для P_3 -приближения) или первых шести (для P_5 -приближения) моментов исходных индикатрис рассеяния, заданных коэффициентами разложения по полиномам Лежандра соответственно в тех же приближениях.

Ставится задача оценить производные $k_{эф}$ по следующим макроскопическим величинам: $v\Sigma_f, \chi, \Sigma_t, \tilde{\Sigma}_s^{g' \rightarrow g}, p_1, p_2$ (если в задаче используется P_3 -приближение), p_1, p_2, p_3 (если в задаче используется P_5 -приближение) для NGP энергетических групп и МАТТ различных материалов, применяемых в рассчитываемой системе.

Наборы производных по первым трем макросечениям представляют собой прямоугольные матрицы размерности (NGP×МАТТ). Наборы производных по остальным величинам представляются двумя матрицами: для рассеяния вниз ($g' \leq g$) – матрицей размерности (NGPD×NGP×МАТТ), где NGPD – максимальное (по группам и материалам) количество переходов вниз (включая и само в себя); для рассеяния вверх ($g' > g$) – матрицей размерности (NGPU×NGPT×МАТТ), где NGPU – максимальное (по группам и материалам) количество переходов вверх, а NGPT = NGP – IGFI + 1 (IGFI – минимальный по материалам номер группы с переходами вверх).

В таблице приведен вид оценок ξ для производных по параметру α на цепи (17). В записи оценок используется символ Кронекера $\delta_{m,n}$, определяемый как

$$\delta_{m,n} = \begin{cases} 1, & \text{если } m = n; \\ 0, & \text{если } m \neq n. \end{cases}$$

Т а б л и ц а оценок ξ для производных по параметру α на цепи (17)

α	Оценка ξ
$v\Sigma_f^g(m)$	$\frac{1}{v\Sigma_f^g(m)} \delta_{g,g_i} \delta_{m,m_i} W_T(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l) F(x_l)$
$\chi^g(m)$	$\frac{1}{\chi^g(m)} \delta_{g,g_1} \delta_{m,m_0} W_T(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l) F(x_l)$
$\Sigma_t^g(m)$	$-\sum_{i=1}^l \sum_{n=1}^{j_i} S_{i,n} \delta_{g,g_i} \delta_{m,m_i^n} \times W_T(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l) F(x_l)$
$\tilde{\Sigma}_s^{g \rightarrow g'}(m)$	$\left[\sum_{i=1}^{l-1} \frac{1}{\tilde{\Sigma}_s^{g \rightarrow g'}(m)} \delta_{g,g_i} \delta_{g',g_{i+1}} \delta_{m,m_i} \right] W_T(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l) F(x_l)$
$P_j^{g \rightarrow g'}(m)$ ($j=1, 2, 3$)	$\left[\sum_{i=1}^{l-1} \frac{1}{P_j^{g \rightarrow g'}(m)} \delta_{g,g_i} \delta_{g',g_{i+1}} \delta_{m,m_i} \right] W_T(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l) F(x_l)$

Общую схему алгоритма вычисления производных $k_{эф}$ по макроскопическим сечениям в MMCKENO можно описать следующим образом. Используется метод поколений с постоянным числом точек деления в поколении N , сущность которого такова. При поглощении каждого нейтрона текущего поколения ему приписывается в точке поглощения x_l вес $W_T(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l) v\Sigma_f(x_l) / \Sigma_a(x_l)$ (при утечке этот вес равен 0). Таким образом, по завершении моделирования нейтронов текущего поколения будет получена последовательность из N таких весов. Члены этой последовательности делятся на $k_{эф}$, полученное на этом поколении (оно, кстати, равно сумме весов, деленной на N). Рассматриваем полученную последовательность как дискретное распределение для выборки по нему N точек деления.

Применим систематическую выборку. Для этого умножим все члены нормированной последовательности на N . Целые части от членов так преобразованной последовательности весов равны количеству повторений соответствующей точки деления в следующем поколении. Сумма целых частей $M \leq N$. Для выборки недостающих $N - M$ точек деления сформируем последовательность из дробных частей и нормируем ее на единицу. Рассматривая так полученную последовательность как распределение, выберем по нему случайным образом $N - M$ недостающих точек деления. Такова процедура формирования источника для следующего поколения.

Далее, при моделировании истории каждого нейтрона текущего поколения на прямолинейном участке, в точках столкновения, рассеяния и поглощения во вспомогательных массивах запоминаются: тип производной (соответствующий ей номер), номер физической зоны, номер группы перед столкновением, номер группы после рассеяния, множитель вклада в оценку производной, соответствующий событию. После завершения истории поглощением в размножающей среде вычисляется значение $F(x_i)$ в заданном приближении. Затем последовательно просматриваются параметры во вспомогательных массивах, согласно вкладу и $F(x_i)$ определяется полный вклад в оценку, а с помощью других параметров (номера физической зоны, исходной энергетической группы, группы перехода и тип производной) этот вклад заносится в соответствующий массив для производных $k_{\text{эф}}$.

Значение $F(x_i)$ вычисляется так. Для $\text{NAPR} = 1$ оно равно $v\Sigma_f(x_i)/\Sigma_a(x_i)$. При больших NAPR из точки x_i , начиная с определения номера группы, согласно спектру деления для физической зоны, которая соответствует точке x_i , моделируется история нейтрона до следующего поглощения. Если это поглощение произошло в неделящейся зоне, значение F равно нулю, и описанная в абзаце выше обработка не требуется. В противном случае F равно предыдущему значению $(v\Sigma_f(x_i)/\Sigma_a(x_i))$, умноженному на $v\Sigma_f/\Sigma_a$ в полученной точке поглощения. Это значение $F(x_i)$ для $\text{NAPR} = 2$. Описанная в этом абзаце процедура продолжается до исчерпания NAPR или до поглощения в неделящейся среде.

Таков вкратце алгоритм вычисления производных $k_{\text{эф}}$ по макроскопическим константам в соответствующей опции MMKKENO. Полученные по окончании расчета производные записываются в два файла последовательного доступа, имеющие одинаковую структуру. Первый файл содержит значения производных, второй – значения выборочных среднеквадратичных отклонений для них. Эти файлы и являются входными данными для специального программного комплекса, который вычисляет с их помощью коэффициенты чувствительности $k_{\text{эф}}$ к микроскопическим данным.

Приложение. Доказательство несмещенности оценки ξ на цепи (14)

Вероятность l -звенной цепи $(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l)$ равна

$$\tilde{S}(y_1)\tilde{T}(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{i=1}^{l-1} \tilde{K}(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_i)}{\Sigma_t(x_i)} d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l. \text{ Поэтому}$$

$$\begin{aligned} M\xi &= \sum_{l=1}^{\infty} \int \dots \int \tilde{S}(y_1)\tilde{T}(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{i=1}^{l-1} \tilde{K}(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_i)}{\Sigma_t(x_i)} \xi(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l) d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l = \\ &= \sum_{l=1}^{\infty} \int \dots \int \tilde{S}(y_1)\tilde{T}(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{i=1}^{l-1} \tilde{K}(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_i)}{\Sigma_t(x_i)} F(x_l) \left[\frac{\partial}{\partial \alpha} v\Sigma_f(x_l) - \frac{\partial}{\partial \alpha} \Sigma_t(x_l) + \frac{\partial}{\partial \alpha} \chi(\mathbf{r}_0, E_1) \right] + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\partial T(y_1 \rightarrow x_1)}{\partial \alpha} + \sum_{i=1}^{l-1} \frac{\partial K(x_i \rightarrow x_{i+1})}{K(x_i \rightarrow x_{i+1})} \left] W_T(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l) d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l = \\
& = \sum_{l=1}^{\infty} \int \dots \int S(y_1) T(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{i=1}^{l-1} K(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) \left[\frac{\partial v \Sigma_f(x_l)}{\partial \alpha} - \frac{\partial \Sigma_t(x_l)}{\partial \alpha} \right] + \\
& + \frac{\partial \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{\chi(\mathbf{r}_0, E_1)} + \frac{\partial T(y_1 \rightarrow x_1)}{T(y_1 \rightarrow x_1)} + \sum_{i=1}^{l-1} \frac{\partial K(x_i \rightarrow x_{i+1})}{K(x_i \rightarrow x_{i+1})} \left] d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l.
\end{aligned}$$

В последнем преобразовании использовано выражение для $W_T(\mathbf{r}_0, x_1, \dots, x_l)$ из (15). Разобьем последнюю сумму по l на две, включив в первую два первых члена, заключенные в квадратные скобки, а во вторую оставшиеся члены.

Первая сумма может быть преобразована так:

$$\begin{aligned}
& \sum_{l=1}^{\infty} \int \dots \int S(y_1) T(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{i=1}^{l-1} K(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) \left[\frac{\partial v \Sigma_f(x_l)}{\partial \alpha} - \frac{\partial \Sigma_t(x_l)}{\partial \alpha} \right] \times \\
& \times d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l = \sum_{l=1}^{\infty} \int \dots \int \frac{Q(\mathbf{r}_0) \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{k_{\text{эф}} 4\pi} T(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{i=1}^{l-1} K(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) \times \\
& \times \left[\frac{\partial v \Sigma_f(x_l)}{\partial \alpha} - \frac{\partial \Sigma_t(x_l)}{\partial \alpha} \right] d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l = \int \Psi(x_l) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) \left[\frac{\partial v \Sigma_f(x_l)}{\partial \alpha} - \frac{\partial \Sigma_t(x_l)}{\partial \alpha} \right] dx_l,
\end{aligned}$$

т.к. слева записан ряд Неймана для этого интеграла. Также использовано выражение для $S(y_1)$ из (14).

Вторая сумма преобразуется к виду

$$\begin{aligned}
& \sum_{l=1}^{\infty} \int \dots \int S(y_1) T(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{i=1}^{l-1} K(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) \left[\frac{\partial \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{\chi(\mathbf{r}_0, E_1)} + \frac{\partial T(y_1 \rightarrow x_1)}{T(y_1 \rightarrow x_1)} + \right. \\
& \left. + \sum_{i=1}^{l-1} \frac{\partial K(x_i \rightarrow x_{i+1})}{K(x_i \rightarrow x_{i+1})} \right] d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l = \iint \frac{Q(\mathbf{r}_0) \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{k_{\text{эф}} 4\pi} T(y_1 \rightarrow x_1) \frac{\Sigma_a(x_1)}{\Sigma_t(x_1)} F(x_1) d\mathbf{r}_0 dx_1 + \\
& + \iint \frac{Q(\mathbf{r}_0) \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{k_{\text{эф}} 4\pi} \frac{\partial T(y_1 \rightarrow x_1)}{\partial \alpha} \frac{\Sigma_a(x_1)}{\Sigma_t(x_1)} F(x_1) d\mathbf{r}_0 dx_1 + \sum_{l=2}^{\infty} \int \dots \int \frac{Q(\mathbf{r}_0) \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{k_{\text{эф}} 4\pi} T(y_1 \rightarrow x_1) \times \\
& \times \prod_{i=1}^{l-1} K(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) \left[\frac{\partial \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{\chi(\mathbf{r}_0, E_1)} + \frac{\partial T(y_1 \rightarrow x_1)}{T(y_1 \rightarrow x_1)} \right] d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{l=2}^{\infty} \int \dots \int \frac{Q(\mathbf{r}_0) \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{k_{\text{эф}} 4\pi} T(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{i=1}^{l-1} K(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) \sum_{i=1}^{l-1} \frac{\partial K(x_i \rightarrow x_{i+1})}{\partial \alpha} \times \\
& \times d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l = \iint \frac{Q(\mathbf{r}_0)}{k_{\text{эф}}} \frac{\partial \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{\partial \alpha} T(y_1 \rightarrow x_1) \frac{\Sigma_a(x_1)}{\Sigma_t(x_1)} F(x_1) d\mathbf{r}_0 dx_1 + \\
& + \iint \frac{Q(\mathbf{r}_0) \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{k_{\text{эф}} 4\pi} \frac{\partial}{\partial \alpha} T(y_1 \rightarrow x_1) \frac{\Sigma_a(x_1)}{\Sigma_t(x_1)} F(x_1) d\mathbf{r}_0 dx_1 + \\
& + \sum_{l=2}^{\infty} \int \dots \int \frac{Q(\mathbf{r}_0)}{k_{\text{эф}}} \frac{\partial \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{\partial \alpha} T(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{i=1}^{l-1} K(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l + \\
& + \sum_{l=2}^{\infty} \int \dots \int \frac{Q(\mathbf{r}_0) \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{k_{\text{эф}} 4\pi} \frac{\partial}{\partial \alpha} T(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{i=1}^{l-1} K(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l + \\
& + \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{l=i+1}^{\infty} \int \dots \int \frac{Q(\mathbf{r}_0) \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{k_{\text{эф}} 4\pi} T(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{j=1}^{i-1} K(x_j \rightarrow x_{j+1}) \frac{\partial K(x_i \rightarrow x_{i+1})}{\partial \alpha} \prod_{m=i+1}^{l-1} K(x_m \rightarrow x_{m+1}) \times \\
& \times \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l.
\end{aligned}$$

В последней сумме произведена перестановка суммирований. Ее можно переписать иначе:

$$\begin{aligned}
& \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{l=i+1}^{\infty} \int \dots \int \frac{Q(\mathbf{r}_0) \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{k_{\text{эф}} 4\pi} T(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{j=1}^{i-1} K(x_j \rightarrow x_{j+1}) \frac{\partial K(x_i \rightarrow x_{i+1})}{\partial \alpha} \prod_{m=i+1}^{l-1} K(x_m \rightarrow x_{m+1}) \times \\
& \times \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l = \\
& = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{l=i+1}^{\infty} \int \dots \int \Psi_i(x_i) \frac{\partial K(x_i \rightarrow x_{i+1})}{\partial \alpha} \prod_{m=i+1}^{l-1} K(x_m \rightarrow x_{m+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) dx_i \dots dx_l = \\
& = \sum_{l=2}^{\infty} \int \dots \int \Psi(x_l) \frac{\partial K(x_1 \rightarrow x_2)}{\partial \alpha} \prod_{m=2}^{l-1} K(x_m \rightarrow x_{m+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) dx_1 \dots dx_l.
\end{aligned}$$

Выше было использовано, что

$$\Psi_i(x_i) = \int \dots \int \frac{Q(\mathbf{r}_0) \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{k_{\text{эф}} 4\pi} T(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{j=1}^{i-1} K(x_j \rightarrow x_{j+1}) d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_{i-1}; \quad \Psi(x_i) = \sum_{i=1}^{\infty} \Psi_i(x_i).$$

Итак, получено:

$$\sum_{l=1}^{\infty} \int \dots \int S(y_1) T(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{i=1}^{l-1} K(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) \left[\frac{\partial \chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{\partial \alpha} \frac{1}{\chi(\mathbf{r}_0, E_1)} + \frac{\partial T(y_1 \rightarrow x_1)}{\partial \alpha} \frac{1}{T(y_1 \rightarrow x_1)} + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{i=1}^{l-1} \frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{K(x_i \rightarrow x_{i+1})}{K(x_i \rightarrow x_{i+1})} \left] d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l = \iint \frac{Q(\mathbf{r}_0)}{k_{\text{эф}}} \frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{\chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{4\pi} T(y_1 \rightarrow x_1) \frac{\Sigma_a(x_1)}{\Sigma_t(x_1)} F(x_1) d\mathbf{r}_0 dx_1 + \\
& + \iint \frac{Q(\mathbf{r}_0)}{k_{\text{эф}}} \frac{\chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{4\pi} \frac{\partial}{\partial \alpha} T(y_1 \rightarrow x_1) \frac{\Sigma_a(x_1)}{\Sigma_t(x_1)} F(x_1) d\mathbf{r}_0 dx_1 + \\
& + \sum_{l=2}^{\infty} \int \dots \int \frac{Q(\mathbf{r}_0)}{k_{\text{эф}}} \frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{\chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{4\pi} T(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{i=1}^{l-1} K(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l + \\
& + \sum_{l=2}^{\infty} \int \dots \int \frac{Q(\mathbf{r}_0)}{k_{\text{эф}}} \frac{\chi(\mathbf{r}_0, E_1)}{4\pi} \frac{\partial}{\partial \alpha} T(y_1 \rightarrow x_1) \prod_{i=1}^{l-1} K(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l + \\
& + \sum_{l=2}^{\infty} \int \dots \int \Psi(x_1) \frac{\partial K(x_1 \rightarrow x_2)}{\partial \alpha} \prod_{i=2}^{l-1} K(x_i \rightarrow x_{i+1}) \frac{\Sigma_a(x_l)}{\Sigma_t(x_l)} F(x_l) d\mathbf{r}_0 dx_1 \dots dx_l.
\end{aligned}$$

В этом выражении уже несложно усмотреть ряд Неймана для интеграла

$$\int \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(x) \frac{\Sigma_a(x)}{\Sigma_t(x)} F(x) dx \quad (\text{см. (10)}). \quad \text{Таким образом}$$

$$\begin{aligned}
M\xi & = \int \Psi(x) \frac{\Sigma_a(x)}{\Sigma_t(x)} F(x) \left[\frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} \nu \Sigma_f(x)}{\nu \Sigma_f(x)} - \frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} \Sigma_t(x)}{\Sigma_t(x)} \right] dx + \int \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(x) \frac{\Sigma_a(x)}{\Sigma_t(x)} F(x) dx = \\
& = \int F(x) \frac{\Sigma_a(x)}{\Sigma_t(x)} \left\{ \left[\frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} \nu \Sigma_f(x)}{\nu \Sigma_f(x)} - \frac{\frac{\partial}{\partial \alpha} \Sigma_t(x)}{\Sigma_t(x)} \right] \Psi(x) + \frac{\partial}{\partial \alpha} \Psi(x) \right\} dx, \quad \text{что и требовалось доказать.}
\end{aligned}$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Блыскавка А.А.** Об оценках методом Монте-Карло производной и возмущений $k_{\text{эф}}$: Препринт ФЭИ-920. – Обнинск, 1979.
2. **Усачев Л.Н.** Уравнение для ценности нейтронов, кинетика реактора и теория возмущений / Сб. "Реакторостроение и теория реакторов". – М.: АН СССР, 1955. – С. 251 – 268.
3. **Франк-Каменецкий А.Д., Юдкевич М.С.** Расчет времени жизни мгновенных нейтронов в реакторе методом Монте-Карло: Препринт ИАЭ-2155. 1971.
4. **Блыскавка А.А., Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М.** Программный комплекс CON-SYST/ММККЕНО для расчета ядерных реакторов методом Монте-Карло в многогрупповом приближении с индикатрисами рассеяния в P_n -приближении: Препринт ФЭИ-2887. – Обнинск, 2001.

Статья поступила в редакцию 23 ноября 2006 г.
 Вопросы атомной науки и техники.
 Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 54 – 63.

УДК 621.039.5+519.85

Об алгоритме вычисления эффективной доли запаздывающих нейтронов методом Монте-Карло и некоторых особенностях его реализации в программе ММККЕНО

А.А. Блыскавка, А.М. Цибуля,

ФГУП “ГНЦ РФ-ФЭИ”, 249020, г. Обнинск Калужской обл., пл. Бондаренко, 1

Обоснован и кратко описан алгоритм вычисления $\beta_{\text{эф}}$ методом Монте-Карло, реализованный в программном комплексе ММККЕНО. Алгоритм не требует задания $Q^+(\mathbf{r})$ – ценности нейтронов спектра деления, а в прямом моделировании вычисляет линейно связанную с ней $F(x)$ – ценность вторичных нейтронов, входящую в формулу для $\beta_{\text{эф}}$, представленного как отношение двух билинейных функционалов.

The Monte Carlo algorithm for calculation of delayed neutrons effective fraction and some features of its realization in the code ММККЕНО. А.А. Blyskavka, А.М. Tsybulya. The algorithm of calculation by a Monte Carlo method of β_{eff} , realized in program complex ММККЕНО is proved and briefly described. The algorithm doesn't require the task $Q^+(\mathbf{r})$ – the worth of fission neutrons, and in direct modelling calculates linearly connected with it $F(x)$ – the worth of secondary neutrons which are included in the formula for β_{eff} , presented as the relation of two bilinear functionals.

Одним из важных параметров в кинетике ядерных реакторов является $\beta_{\text{эф}}$ – эффективная доля запаздывающих нейтронов в реакторе. Согласно [1]

$$\beta_{\text{эф}} = \int Q_d(\mathbf{r})Q_d^+(\mathbf{r})d\mathbf{r} / \int Q(\mathbf{r})Q^+(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{r}) &= \iint v\Sigma_f(\mathbf{r}, E)\Phi(\mathbf{r}, \Omega, E)d\Omega dE; \\ Q^+(\mathbf{r}) &= \iint \frac{\chi(\mathbf{r}, E)}{4\pi}\Phi^+(\mathbf{r}, \Omega, E)d\Omega dE; \\ Q_d(\mathbf{r}) &= \iint v_d\Sigma_f(\mathbf{r}, E)\Phi(\mathbf{r}, \Omega, E)d\Omega dE; \\ Q_d^+(\mathbf{r}) &= \iint \frac{\chi_d(\mathbf{r}, E)}{4\pi}\Phi^+(\mathbf{r}, \Omega, E)d\Omega dE; \end{aligned} \quad (2)$$

$Q(\mathbf{r})$, $Q_d(\mathbf{r})$ – плотности источников нейтронов деления и запаздывающих нейтронов, соответственно; $Q^+(\mathbf{r})$, $Q_d^+(\mathbf{r})$ – ценности нейтронов деления и запаздывающих нейтронов, соответственно; $\chi(\mathbf{r}, E)$, $\chi_d(\mathbf{r}, E)$ – спектры нейтронов деления и запаздывающих нейтронов, соответственно, которые в данной работе для каждого делящегося изотопа принимаются независимыми от энергии нейтрона, вызвавшего деление. Зависимость $\chi_d(\mathbf{r}, E)$ от \mathbf{r} определяется координатной зависимостью вкладов различных изотопов в плотность делений:

$$\chi_d(\mathbf{r}, E) = \frac{\int_0^\infty dE' \sum_i \rho_i(\mathbf{r})\beta_i(E')v_i(E')\sigma_{f,i}(E')\chi_{d,i}(E', E)}{\int_0^\infty dE' \sum_i \rho_i(\mathbf{r})\beta_i(E')v_i(E')\sigma_{f,i}(E')}, \text{ где } \rho_i(\mathbf{r}) \text{ – концентрация } i\text{-го изотопа;}$$

$v_i(E')$ – полное число нейтронов, испускаемых при делении изотопа i нейтронами с энергией E' ; $\beta_i(E')v_i(E') = v_{d,i}(E')$ – суммарное число запаздывающих нейтронов, испускаемых

при делении изотопа i нейтронами с энергией E' ; $\chi_{d,i}(E', E)$ – спектр запаздывающих нейтронов, усредненный по всем предшественникам; $\sigma_{f,i}(E')$ – сечение деления i -го изотопа; $\nu\Sigma_f(\mathbf{r}, E) = \sum_i \rho_i(\mathbf{r})\nu_i(E)\sigma_{f,i}(E)$; $\nu_d\Sigma_f(\mathbf{r}, E) = \sum_i \rho_i(\mathbf{r})\nu_{d,i}(E)\sigma_{f,i}(E)$ – среднее число запаздывающих нейтронов, испускаемых при делении нейтроном энергии E ; $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$, $\Phi^+(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ – поток и ценность нейтронов, удовлетворяющие соответственным условно-критическим уравнениям с собственным числом $k_{эф}$; $(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ – местоположение, направление движения и энергия нейтрона, соответственно.

В [2] предложен алгоритм вычисления $\beta_{эф}$ методом Монте-Карло для случая аналогового моделирования и в предположении, что $Q^+(\mathbf{r})$ известно. В разработанном нами алгоритме это предположение снято, а оценки для $\beta_{эф}$ распространены и на случай неаналогового моделирования.

Введем, как и в [3], ценность вторичных нейтронов, возникающих в результате поглощения в точке \mathbf{r} нейтрона с энергией E :

$$F(\mathbf{r}, E) = \frac{\nu\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{k_{эф}\Sigma_a(\mathbf{r}, E)} Q^+(\mathbf{r}) . \quad (3)$$

Тогда непосредственно из определения ценности нейтронов $\Phi^+(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$ как функции, пропорциональной уровню мощности, устанавливаемому в эквивалентном критическом реакторе в результате впуска одного нейтрона в точку $(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$, как показано в работе [3], вытекает следующее выражение:

$$\Phi^+(x) = \int p_a(x \rightarrow y) F(y) d\mathbf{r}' , \quad (4)$$

где $p_a(x \rightarrow y)$ – плотность вероятности поглощения в точке y нейтрона, стартующего из точки x :

$$p_a(x \rightarrow y) = T(x \rightarrow y) \frac{\Sigma_a(y)}{\Sigma_t(y)} + \sum_{j=1}^{\infty} \int \dots \int T(x \rightarrow x_1) \prod_{n=1}^{j-1} K(x_n \rightarrow x_{n+1}) K(x_j \rightarrow y) \frac{\Sigma_a(y)}{\Sigma_t(y)} dx_1 \dots dx_j , \quad (5)$$

где $K(x_n \rightarrow x_{n+1})$ – ядро интегрального уравнения переноса для плотности столкновений $\Psi(x) = \Sigma_t(x)\Phi(x)$; $T(x \rightarrow y)$ – транспортная составляющая этого ядра; $x = (\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$; $y = (\mathbf{r}', \mathbf{\Omega}', E')$; $x_j = (\mathbf{r}_j, \mathbf{\Omega}_j, E_j)$; $\Sigma_a(y)$ – макроскопическое сечение поглощения;

$\Sigma_t(y)$ – макроскопическое полное сечение ($\Sigma_a(y)$ и $\Sigma_t(y)$ не зависят от $\mathbf{\Omega}$).

Обозначим числитель и знаменатель в (1) через I и J , соответственно. Тогда, используя (2), I и J можно представить в форме

$$I = \iiint d\mathbf{r} d\mathbf{\Omega} dE \iiint \nu_d \Sigma_f(\mathbf{r}, E) \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) \chi_d(\mathbf{r}, E') \Phi^+(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E') d\mathbf{\Omega}' dE' ; \quad (6)$$

$$J = \iiint d\mathbf{r} d\mathbf{\Omega} dE \iiint \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, E) \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) \chi(\mathbf{r}, E') \Phi^+(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E') d\mathbf{\Omega}' dE' , \quad (7)$$

а после подстановки (4)

$$I = \iiint d\mathbf{r} d\mathbf{\Omega} dE \iiint \nu_d \Sigma_f(\mathbf{r}, E) \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) \chi_d(\mathbf{r}, E') p_a(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E' \rightarrow x') F(x') d\mathbf{\Omega}' dE' d\mathbf{r}' ; \quad (8)$$

$$J = \iiint d\mathbf{r} d\mathbf{\Omega} dE \iiint \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, E) \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) \chi(\mathbf{r}, E') p_a(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E' \rightarrow x') F(x') d\mathbf{\Omega}' dE' d\mathbf{r}' , \quad (9)$$

где $x' = (\mathbf{r}', \mathbf{\Omega}', E')$.

Для вычисления функционалов (8) и (9) методом Монте-Карло используем такую схему метода поколений с постоянным числом N точек деления в поколении. История каждого нейтрона поколения заканчивается поглощением или утечкой. Поглощенному нейтрону приписывается вес $W_m v \Sigma_f(x_m) / (k_1 \Sigma_a(x_m))$, где W_m – вес нейтрона перед поглощением в точке x_m , k_1 – оценка по поглощениям $k_{эф}$ на траекториях текущего поколения. Для утекшего нейтрона этот вес равняется нулю. Очевидно, что сумма $W_m v \Sigma_f(x_m) / \Sigma_a(x_m)$, деленная на N , равна k_1 , т.к. такое выражение является оценкой по поглощениям для $k_{эф}$ на поколении. Если теперь веса поглощенных нейтронов поделить на N , то сумма так измененных весов будет равна 1. Поэтому последовательность этих весов можно рассматривать как дискретное распределение точек деления для следующего поколения и с помощью его получить N исходных точек для следующего поколения.

Введем понятие “сочлененной траектории” для двух следующих друг за другом поколений – предыдущего и последующего. Две траектории будем называть сочлененными, если траектория предыдущего поколения порождает траекторию последующего. Обозначим первую из этих траекторий $\alpha_1 = \{\mathbf{r}_0^{(1)}, x_1^{(1)}, \dots, x_m^{(1)}\}$ (траектория начинается в фазовой точке $y_1^{(1)} = (\mathbf{r}_0^{(1)}, \mathbf{\Omega}_1^{(1)}, E_1^{(1)})$ и заканчивается в фазовой точке $x_m^{(1)}$ – точке поглощения нейтрона), вторую – $\alpha_2 = \{\mathbf{r}_0^{(2)}, x_1^{(2)}, \dots, x_l^{(2)}\}$ (траектория начинается в фазовой точке $y_1^{(2)} = (\mathbf{r}_0^{(2)}, \mathbf{\Omega}_1^{(2)}, E_1^{(2)})$ и заканчивается в фазовой точке $x_l^{(2)}$), где $x_i^{(1)} = (\mathbf{r}_i^{(1)}, \mathbf{\Omega}_i^{(1)}, E_i^{(1)})$, $x_i^{(2)} = (\mathbf{r}_i^{(2)}, \mathbf{\Omega}_i^{(2)}, E_i^{(2)})$. При этом $\mathbf{r}_m^{(1)} = \mathbf{r}_0^{(2)}$ по определению.

Нетрудно показать (см. Приложение), что несмещенными оценками по поглощениям для функционалов I и J на сочлененных траекториях неаналоговой однородной цепи Маркова с характеристиками:

$\tilde{S}(y_1) = \frac{Q(\mathbf{r}_0) \tilde{\chi}(\mathbf{r}_0, E_1)}{k_{эф} 4\pi}$ – распределение точек рождения; $\tilde{\chi}(\mathbf{r}_0, E_1)$ – неаналоговый (моделируемый) спектр деления; $\tilde{T}(y_1 \rightarrow x_1)$ – плотность вероятностей первых переходов (транспортная составляющая неаналогового ядра перехода); $\tilde{K}(x_i \rightarrow x_{i+1})$ – плотность вероятностей дальнейших переходов (произведение составляющей рассеяния на транспортную составляющую неаналогового ядра перехода); $\Sigma_a(x_m) / \Sigma_t(x_m)$ – вероятность обрыва цепи в результате поглощения;

будут соответственно

$$\xi(\alpha_1, \alpha_2) = \frac{v_d \Sigma_f(\mathbf{r}_m^{(1)}, E_m^{(1)})}{v \Sigma_f(\mathbf{r}_m^{(1)}, E_m^{(1)})} k_1 \frac{\chi_d(\mathbf{r}_0^{(2)}, E_1^{(2)})}{\chi(\mathbf{r}_0^{(2)}, E_1^{(2)})} W_2(y_1^{(2)}, x_1^{(2)}, \dots, x_l^{(2)}) F(x_l^{(2)}); \quad (10)$$

$$\eta(\alpha_1, \alpha_2) = k_1 W_2(y_1^{(2)}, x_1^{(2)}, \dots, x_l^{(2)}) F(x_l^{(2)}), \quad (11)$$

где $W_2(y_1^{(2)}, x_1^{(2)}, \dots, x_l^{(2)}) = \frac{\chi(y_1^{(2)}) T(y_1^{(2)} \rightarrow x_1^{(2)})}{\tilde{\chi}(y_1^{(2)}) \tilde{T}(y_1^{(2)} \rightarrow x_1^{(2)})} \prod_{i=1}^{l-1} \frac{K(x_i^{(2)} \rightarrow x_{i+1}^{(2)})}{\tilde{K}(x_i^{(2)} \rightarrow x_{i+1}^{(2)})}$.

Использование оценок по поглощениям открывает возможность в процессе моделирования поколений вычислять значение $F(x_j)$ в точках поглощения x_j . В качестве выборочного значения случайной величины, математическое ожидание которой равно $F(x_i^{i,j})$ – значению функции F в точке поглощения i -го нейтрона j -го поколения, берется $N_{j+n}^{i,j}$ – количество потомков i -го нейтрона j -го поколения в поколении $(j+n)$. Значение n , при

котором достигается удовлетворительное приближение для функции F , равно числу итераций, необходимых для установления равновесного распределения нейтронов в реакторе [3].

Реализация описанного алгоритма в программе MMKKENO [4] привела к созданию специальной опции кода, в которой $\beta_{эф}$ служит дополнительным функционалом к остальным характеристикам реактора, рассчитываемым и ранее. Вычисляется n значений $\beta_{эф}$ и выборочных средних квадратических отклонений для них. Эти величины вычислены для разных приближений функции F (значения F вычисляются как количество потомков поглощенного нейтрона в первом последующем поколении, втором и так далее, n -м последующем поколении). По этим значениям $\beta_{эф}$ пользователь в определенной мере может судить о том, какое n достаточно, так как наблюдается свойство сходимости. Следует также подчеркнуть, что с ростом n растет и выборочное среднее квадратическое отклонение для $\beta_{эф}$. Алгоритм вычисления $\beta_{эф}$ организован так, что требуется только моделирование еще n ($n = 10$ в программе) дополнительных поколений для вычисления $N_{M+n}^{i,M}$ (M – номер последнего поколения, участвовавшего в оценивании).

Тестирование опции проводилась на нескольких моделях реакторов типа БН, в частности, на критических сборках БФС-54-2 и БФС-56 измерялись $\beta_{эф}$ [5]. Получены следующие экспериментальные значения: для БФС-54-2 $\beta_{эф} = 0,0074$; для БФС-56 $\beta_{эф} = 0,0035$.

Расчетные значения, полученные по созданной опции (моделировались 2 020 поколений, 20 из которых предварительные, по 5 000 нейтронов в поколении), для $n = 5$ таковы: для БФС-54-2 $\beta_{эф} = 0,00736$ (0,00001); для БФС-56 $\beta_{эф} = 0,00363$ (0,00001).

Приложение. Доказательство несмещенности оценки $\xi(\alpha_1, \alpha_2)$

Вероятность сочлененной траектории с m -звеньями в предыдущем поколении и l -звеньями в последующем поколении равна

$$\begin{aligned} & \tilde{S}(y_1^{(1)}) \tilde{T}(y_1^{(1)} \rightarrow x_1^{(1)}) \prod_{j=1}^{m-1} \tilde{K}(x_j^{(1)} \rightarrow x_{j+1}^{(1)}) \frac{\sum_a(x_m^{(1)})}{\sum_t(x_m^{(1)})} W_1(\mathbf{r}_0^{(1)}, x_1^{(1)}, \dots, x_m^{(1)}) \frac{v \sum_f(x_m^{(1)})}{k_1 \sum_a(x_m^{(1)})} \times \\ & \times \frac{\tilde{\chi}(y_1^{(2)})}{4\pi} \tilde{T}(y_1^{(2)} \rightarrow x_1^{(2)}) \prod_{i=1}^{l-1} \tilde{K}(x_i^{(2)} \rightarrow x_{i+1}^{(2)}) \frac{\sum_a(x_l^{(2)})}{\sum_t(x_l^{(2)})} d\mathbf{r}_0^{(1)} dx_1^{(1)} \dots dx_m^{(1)} dy_1^{(2)} dx_1^{(2)} \dots dx_l^{(2)}, * \end{aligned}$$

где $W_1(\mathbf{r}_0^{(1)}, x_1^{(1)}, \dots, x_m^{(1)}) = \frac{\chi(y_1^{(1)}) T(y_1^{(1)} \rightarrow x_1^{(1)})}{\tilde{\chi}(y_1^{(1)}) \tilde{T}(y_1^{(1)} \rightarrow x_1^{(1)})} \prod_{j=1}^{m-1} \frac{K(x_j^{(1)} \rightarrow x_{j+1}^{(1)})}{\tilde{K}(x_j^{(1)} \rightarrow x_{j+1}^{(1)})}$. Поэтому

$$\begin{aligned} M\xi(\alpha_1, \alpha_2) &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \int \dots \int \tilde{S}(y_1^{(1)}) \tilde{T}(y_1^{(1)} \rightarrow x_1^{(1)}) \prod_{j=1}^{m-1} \tilde{K}(x_j^{(1)} \rightarrow x_{j+1}^{(1)}) \frac{\sum_a(x_m^{(1)})}{\sum_t(x_m^{(1)})} W_1(\mathbf{r}_0^{(1)}, x_1^{(1)}, \dots, x_m^{(1)}) \frac{v \sum_f(x_m^{(1)})}{k_1 \sum_a(x_m^{(1)})} \times \\ & \times \frac{\tilde{\chi}(y_1^{(2)})}{4\pi} \tilde{T}(y_1^{(2)} \rightarrow x_1^{(2)}) \prod_{i=1}^{l-1} \tilde{K}(x_i^{(2)} \rightarrow x_{i+1}^{(2)}) \frac{\sum_a(x_l^{(2)})}{\sum_t(x_l^{(2)})} \frac{v_d \sum_f(x_m^{(1)})}{v \sum_f(x_m^{(1)})} k_1 \frac{\chi_d(y_1^{(2)})}{\chi(y_1^{(2)})} W_2(y_1^{(2)}, x_1^{(2)}, \dots, x_l^{(2)}) F(x_l^{(2)}) \times \\ & \times d\mathbf{r}_0^{(1)} dx_1^{(1)} \dots dx_m^{(1)} dy_1^{(2)} dx_1^{(2)} \dots dx_l^{(2)}. \end{aligned}$$

*) В этой записи следует пояснить (напомнить), что $W_1(\mathbf{r}_0^{(1)}, x_1^{(1)}, \dots, x_m^{(1)}) \frac{v \sum_f(x_m^{(1)})}{k_1 \sum_a(x_m^{(1)})}$ – веро-

ятность точки деления для следующего поколения. (Если точнее, то увеличенная в N раз, где $N = \text{const}$, в задаче входит и в числитель, и в знаменатель в формулу (1) и поэтому для упрощения записи может быть опущена).

Подставив выражения для W_1 и W_2 и выполнив сокращения, получим

$$M\xi(\alpha_1, \alpha_2) = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \int \dots \int S(y_1^{(1)}) T(y_1^{(1)} \rightarrow x_1^{(1)}) \prod_{j=1}^{m-1} K(x_j^{(1)} \rightarrow x_{j+1}^{(1)}) \frac{v_d \Sigma_f(x_m^{(1)})}{\Sigma_t(x_m^{(1)})} \times \\ \times \frac{\chi_d(y_1^{(2)})}{4\pi} T(y_1^{(2)} \rightarrow x_1^{(2)}) \prod_{i=1}^{l-1} K(x_i^{(2)} \rightarrow x_{i+1}^{(2)}) F(x_i^{(2)}) d\mathbf{r}_0^{(1)} dx_1^{(1)} \dots dx_m^{(1)} dy_1^{(2)} dx_1^{(2)} \dots dx_l^{(2)}.$$

Перепишем полученное выражение, нарушая некоторые условности, но улучшая наглядность будущих выводов, в виде

$$M\xi(\alpha_1, \alpha_2) = \iint \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} \int \dots \int S(y_1^{(1)}) T(y_1^{(1)} \rightarrow x_1^{(1)}) \prod_{j=1}^{m-1} K(x_j^{(1)} \rightarrow x_{j+1}^{(1)}) d\mathbf{r}_0^{(1)} dx_1^{(1)} \dots dx_{m-1}^{(1)} \right\} \frac{v_d \Sigma_f(x_m^{(1)})}{\Sigma_t(x_m^{(1)})} \times \\ \times \frac{\chi_d(y_1^{(2)})}{4\pi} \left[\sum_{l=1}^{\infty} \int \dots \int T(y_1^{(2)} \rightarrow x_1^{(2)}) \prod_{i=1}^{l-1} K(x_i^{(2)} \rightarrow x_{i+1}^{(2)}) F(x_i^{(2)}) dx_1^{(2)} \dots dx_l^{(2)} \right] dx_m^{(1)} dy_1^{(2)}.$$

Выражение в фигурных скобках является рядом Неймана для плотности столкновений $\Psi(x_m^{(1)})$, а выражение в квадратных скобках – рядом Неймана для $\Phi(y_1^{(2)})$ (ср. с (4), (5)). И поэтому

$$M\xi(\alpha_1, \alpha_2) = \iint \frac{v_d \Sigma_f(x_m^{(1)})}{\Sigma_t(x_m^{(1)})} \Psi(x_m^{(1)}) \Phi^+(y_1^{(2)}) dx_m^{(1)} dy_1^{(2)} = \\ = \int \dots \int v_d \Sigma_f(x_m^{(1)}) \Phi(x_m^{(1)}) \Phi^+(y_1^{(2)}) dx_m^{(1)} d\Omega_1^{(2)} dE_1^{(2)}$$

(переменные интегрирования так переписаны потому, что $\mathbf{r}_m^{(1)} = \mathbf{r}_0^{(2)}$). Таким образом, несмещенность оценки $\xi(\alpha_1, \alpha_2)$ доказана. Несмещенность $\eta(\alpha_1, \alpha_2)$ доказывается абсолютно аналогично.

Контактный адрес – e-mail: abbn@ippe.ru

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Усачев Л.Н.* Уравнение для ценности нейтронов, кинетика реактора и теория возмущений / Сб. "Реакторостроение и теория реакторов". – М.: АН СССР, 1955. – С. 251 – 268.
2. *Камаева О.Б., Полевой В.Б.* Расчет $\beta_{\text{эф}}$ методом Монте-Карло. Алгоритм и программа MCDEN: Препринт ФЭИ-1744. – Обнинск, 1985.
3. *Франк-Каменецкий А.Д., Юдкевич М.С.* Расчет времени жизни мгновенных нейтронов в реакторе методом Монте-Карло. – Препринт ИАЭ-2155. 1971.
4. *Блыскавка А.А., Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М.* Программный комплекс CONSYST//ММККЕНО для расчета ядерных реакторов методом Монте-Карло в многогрупповом приближении с индикатрисами рассеяния в R_n -приближении: Препринт ФЭИ-2887. – Обнинск, 2001.
5. *Дулин В.А., Матвиенко И.П., Михайлов Г.М.* Применение модели двух групп мгновенных нейтронов для анализа измерений $\beta_{\text{эф}}$ методом Росси-альфа // Атомная энергия, т. 80, вып. 1, 1996. – С. 61.

Статья поступила в редакцию 23 ноября 2006 г.
Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 64 – 68.

УДК 621.039

Динамическая визуализация траекторий частиц при расчете по программе MCU

М.И. Гуревич, О.В. Тельковская, Д.А. Шкаровский,
ФГУ РНЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. акад. Курчатова, 1

Создано программное средство – модуль UTRACE как часть программного комплекса MCU OFFICE, который служит для подготовки исходных данных и обработки результатов для программы MCU, предназначенной для решения уравнения переноса излучений методом Монте-Карло. Модуль позволяет осуществить динамическую визуализацию (анимацию) траекторий частиц при расчетах по программе MCU.

Dynamic visualization of trajectories of particles calculated by the MCU code. M.I. Gurevich, O.V. Tel'kovskaya, D.A. Shkarovsky. The software – UTRACE module is created. The module is a part of the program complex MCU OFFICE which serves for preparation of the input data and processing of the results for the MCU code intended for the decision of radiation transport equation by means of the Monte Carlo method. The module allows carrying out dynamic visualization (animation) of trajectories of particles at calculations by means of MCU.

При проведении современных расчетов реальных ядерных энергетических установок возникает проблема задания, контроля и обработки больших объемов информации. Проект MCU [1] содержит средства подготовки исходных данных и обработки результатов, которые упрощают использование программы MCU. Эти средства собраны в служебный программный комплекс MCU OFFICE [2].

В состав программного комплекса MCU OFFICE, предназначенного для работы в среде Windows, входят следующие программы:

- текстовый редактор для подготовки исходных данных;
- программа MCU Viewer для визуализации геометрии моделируемой системы с генерацией сообщений об ошибках, если таковые имеются, а также рядом других возможностей;
- программа MCU Run для запуска задачи на счет в отдельном окне DOS;
- программа MCU Make для генерации рабочей версии программы MCU (в дальнейшем просто программы MCU).

1. Возможности программы MCU Viewer

Одной из программ, входящих в комплекс MCU OFFICE, является программа MCU VIEWER визуализации исходных данных для геометрического модуля NCG программы MCU и результатов расчетов. Основная функция этой программы – двумерная визуализация данных расчетного варианта программы MCU. С ее помощью можно получать цветные и черно-белые двумерные изображения рассчитываемой системы и визуально контролировать правильность ее описания. Необходимо отметить, что при построении этих изображений применяется тот же модуль программы MCU, который осуществляет построение траектории частицы в процессе расчета, что позволяет пользователю видеть ту же картинку, которую “видит” программа.

MCU VIEWER осуществляет полный контроль заданной системы с помощью двумерных сечений, проверяя правильность задания не только геометрии с помощью просмотра картинки, измерения расстояний на ней с помощью мыши и т.п., но и материалов и других специфических характеристик геометрических областей, из которых состоит любая задаваемая система. Примеры работы программы приведены на рис. 1 и 2.

Для получения трехмерных изображений в программу MCU Viewer встроен конвертер AltNCG [3], преобразующий описание геометрии на языке NCGSIM, используемом геометрическим модулем программы MCU, в описание на языке MAXScript [4]. Это позволяет получать трехмерные изображения моделируемой системы с помощью программы 3D Studio Max [4]. Примеры работы конвертера приведены на рис. 3 и 4.

Трехмерное изображение рассчитываемой системы может потребоваться для дополнительного контроля точности задания исходных данных. При задании сложных трехмерных геометрий, состоящих из сочленений различных деталей, полезно обеспечить возможность визуального контроля точности соединения деталей в трехмерном представлении. Кроме того, иногда бывает полезным рассмотреть в трехмерном представлении отдельные детали рассчитываемой системы. Помимо этого можно выделить еще такую область применения трехмерной визуализации, как создание иллюстраций для включения в документацию и презентации.

Конвертер AltNCG является независимой программой, которая в качестве входных данных использует объектный файл геометрического модуля программы MCU. Пользователь может влиять на процесс конвертирования, изменяя значения таких параметров, как цвет и прозрачность материалов отображаемой системы, освещение, движение камеры и т.д., для получения нужного ему результата.

Результатом работы конвертера служит текстовый файл, который может быть загружен непосредственно в программу, используемую для генерации трехмерного изображения. При этом у пользователя нет необходимости серьезного изучения применяемого пакета трехмерной графики, благодаря возможности задания нужных параметров с помощью конвертера. После конверсии можно воспользоваться всеми возможностями программного обеспечения пакета трехмерной графики (например, создание стереоизображения, анимации и т.п.).

2. Трехмерная анимация процесса расчета

Для динамической визуализации (анимации) траекторий частиц при расчетах методом Монте-Карло по программе MCU разработано специальное программное средство – модуль UTRACE. При использовании программы, реализующей метод Монте-Карло, можно получить координаты точек, в которых частица меняет свои параметры (направление полета, энергию и т.п.). Полученные данные могут быть преобразованы во входные данные для ка-

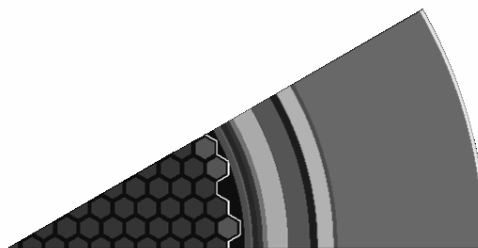


Рис. 1. Расчетная модель ВВЭP-440 (горизонтальное сечение)



Рис. 3. Расчетная модель ВВЭP-440

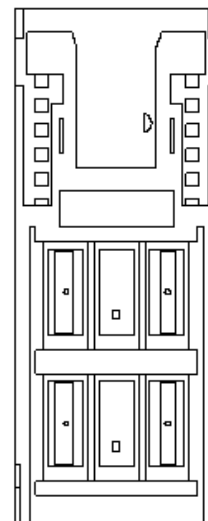
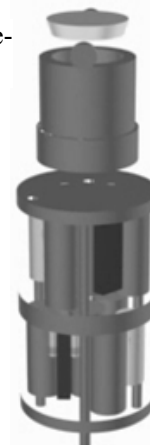


Рис. 2. Расчетная модель сборки образцов свидетелей, устанавливавшейся в ВВЭP-1000 (вертикальное сечение)

Рис. 4. Расчетная модель сборки образцов свидетелей, устанавливавшейся в ВВЭP-1000



кого-либо трехмерного графического пакета и отображены на фоне трехмерной модели рассчитываемой системы. При этом можно воспроизводить на экране полет частиц с учетом как их траектории, так и энергии. Полученная трехмерная анимация может сохраняться в файл для последующего изучения или демонстрации.

В последнее время в связи с бурным ростом производительности компьютеров этот подход получает все большее распространение в мировой практике. В качестве одного из примеров реализации этой идеи можно привести программу Moritz [5], с помощью которой осуществляются трехмерная визуализация геометрии и анимация траекторий частиц для программы MCNP [6].

Интерес к такому динамическому трехмерному представлению расчетов обусловлен тем, что оно может способствовать лучшему пониманию природы изучаемых явлений. Получение информации “изнутри” расчета помогает более правильному выбору параметров расчета (например, расщепления при неаналоговом моделировании, количества частиц в одном поколении при расчете эффективного коэффициента размножения системы и т.д.), выявлению ошибок или погрешностей самой применяемой модели (например, в задании источника частиц).

Для обеспечения пользователя программы MCU вышеперечисленными возможностями и служит модуль UTRACE. На этапе выполнения расчета модуль UTRACE создает бинарный файл, в который записывается информация о координатах точек рождения, столкновения, поглощения или вылета из системы, а также значения энергии частицы в этих точках.

Поскольку количество получаемых в расчете точек очень велико, при анимации необходимо сократить их количество. Тогда анимация не будет занимать продолжительное время и будет эффективной. В противном случае станет практически невозможно выделить для наблюдения одну частицу, траектория которой потеряется среди множества траекторий других частиц. Для решения этой проблемы обычно используют различные фильтры (например, учитываются траектории только тех частиц, которые попали в детектор) как на этапе накопления информации о траекториях в процессе расчета, так и при преобразовании этой информации в файл для программы визуализации после расчета.

Для программы MCU при решении задачи на собственное значение естественными фильтрами, применяемыми на этапе расчета, служат запись точек столкновения одного или нескольких выбранных поколений либо уменьшение количества частиц в одном поколении. Для обеспечения возможности записи точек столкновения только одного поколения модуль UTRACE при каждом следующем запуске MCU на продолжение счета создает файл заново для накопления траекторий. При необходимости можно последовательно накопить несколько таких файлов и создать несколько анимационных фильмов. Такой способ можно использовать, например, для визуального изучения изменения пространственного распределения нейтронов поколения по моделируемой системе в зависимости от номера этого поколения.

После окончания расчетов, т.е. на этапе финальной обработки, данные, накопленные в бинарном файле, преобразуются в текстовый файл на языке MAXScript, используемом программой 3D Studio Max. При преобразовании данных можно определить ряд параметров и получить различные варианты анимации. Пользователь может выбрать один из четырех фильтров (режимов работы модуля), применяемых на этапе преобразования информации.

1. Все частицы анимируются последовательно. Этот режим непосредственно соответствует схеме расчета. Следующая частица рождается после поглощения или вылета из системы предыдущей частицы.

2. Все частицы одного поколения рождаются в один момент времени. Частицы следующего поколения рождаются одновременно после поглощения или вылета из системы частицы предыдущего поколения с самым большим временем жизни.

3. Все частицы анимируются одновременно с учетом реального времени рождения и поглощения. В момент поглощения частицы одного поколения с последующим делением ядра из этой точки вылетает соответствующая частица следующего поколения.

4. То же, что и режим 3, однако частицы первого поколения анимируются последовательно. В этом режиме сначала отображается траектория первой частицы первого поколения со всеми порождаемыми ею частицами, затем отображается траектория второй частицы первого поколения и т.д. Визуализация заканчивается после исчерпания частиц первого поколения.

Помимо этого можно управлять следующими параметрами анимации:

- временем рождения первой частицы;
- длительностью паузы. В режиме 1 – между поглощением или вылетом из системы предыдущей частицы и рождением следующей частицы. В режиме 2 – между поглощением или вылетом из системы частицы предыдущего поколения с самым большим временем жизни и рождением следующей частицы;
- множителем для замедления времени: $T_{\text{анимации}} = T_{\text{реальное}} \cdot \text{Множитель}$;
- радиусом частицы;
- цветом частицы;
- скоростью движения пленки (кадров в секунду);
- фиксированной энергией частицы. При положительном значении этого параметра считается, что частица не изменяла свою энергию при столкновениях и имела энергию, равную заданной, а также рядом других специальных параметров.

В получаемом после преобразования файле содержатся такие команды для программы 3D Studio Max, как задание радиуса частицы, ее цвета, скорости пленки, а также установка положения частицы для каждого кадра.

После загрузки в программу 3D Studio Max файла, содержащего трехмерную модель рассчитываемой системы, ранее полученную с помощью конвертера AltNCG, а также анимации, созданной с помощью модуля UTRACE, пользователь, наблюдая за движением частиц, может приближать, удалять или вращать систему, управлять движением камеры и т.д. Иными словами, пользователю доступны все функции 3D Studio Max – одной из лидирующих программ в области трехмерной визуализации и анимации в мире.

3. Пример использования модуля UTRACE

На рис. 5...7 представлены результаты работы модуля UTRACE. При получении этих рисунков применен режим, в котором все частицы визуализируются с учетом реального времени рождения и поглощения. В момент поглощения частицы одного поколения с последующим делением ядра из этой точки вылетает соответствующая частица следующего поколения.

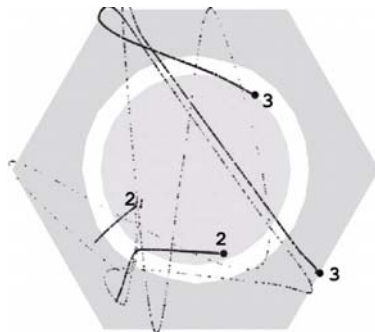


Рис. 5. Траектории частиц при расчете ячейки ZR-6 (вид сверху)

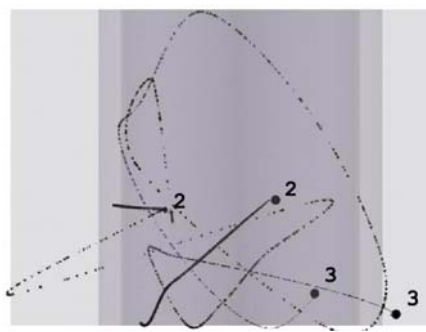


Рис. 6. Траектории частиц при расчете ячейки ZR-6 (вид спереди)

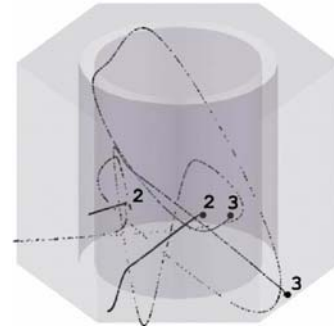


Рис. 7. Траектории частиц при расчете ячейки ZR-6 (вид в перспективе)

ления. При этом сначала отображается траектория первой частицы первого поколения со всеми порождаемыми ею частицами, затем отображается траектория второй частицы первого поколения и т.д. Визуализация заканчивается после исчерпания всех частиц первого поколения. Расчет выполнялся для двумерной модели ячейки сборки ZR-6 [7] (ZR-6 lattice 12.7/3.6/0.0). В качестве граничного условия на поверхностях гексагонального контейнера системы использовалось отражение.

При создании рисунков для получения следов полета частиц, что необходимо для отображения их траекторий на рисунке и не требуется при создании фильма, использована имеющаяся в 3D Studio Max система частиц SuperSpray. При этом чем медленнее скорость частицы, тем более плотный след она оставляет. На рисунках приведен интервал времени $0,8 \cdot 10^{-6}$ с. Цифрами отмечены номера поколений, к которым принадлежат частицы. Из рисунков видно, что в некоторый момент времени с участием одной из частиц второго поколения происходит реакция деления с вылетом двух нейтронов, принадлежащих третьему поколению.

Заключение

Применение модуля UTRACE при анализе модели рассчитываемой системы позволяет существенно повысить понимание ее динамики, а также надежность получаемых с помощью этой модели результатов. Наличие в проекте MCU средства анимации траекторий частиц UTRACE, наряду с программой визуализации MCU Viewer и конвертером AltNCG, обеспечивает проекту уровень визуализации, соответствующий современному мировому уровню в области аналогичных расчетных приложений.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 05-07-90335-в.

Шкаровский Денис Александрович, контактный тел.: (499) 196-94-89, e:mail: d.s@nm.ru

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Гомин Е.А.** Статус MCU-4 // Настоящий сборник. – С. 6 – 32.
2. **Шкаровский Д.А., Алексеев А.Н.** Программный комплекс MCU OFFICE. Описание применения и инструкция для пользователя. Отчет ИЯР РНЦ “КИ” инв. № 36/21-2002, 2002.
3. **Гуревич М.И., Тельковская О.В., Шкаровский Д.А.** Графическое представление исходных данных и результатов расчетов для программы MCU // Атомная энергия, 2005. Т. 99. Вып. 3. – С. 163 – 166.
4. **Autodesk** Media and Entertainment: <http://www.discreet.com>
5. **Van Ripper K.A.** Animation of MCNP particle tracks in MORITZ // The Monte Carlo Method: Versatility Unbounded in a Dynamic Computing World. Chattanooga, Tennessee, April 17 – 21, 2005. American Nuclear Society, LaGrange Park, IL.
6. **Briesmeister J.F.** (editor). MCNP – a General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4A. Los Alamos National Laboratory Report LA 12625. 1993.
7. **Final** report TIC, vol. 3. Experimental investigations of the physical properties of WWER-type uranium-water lattices. Akademiai KIADO. Budapest. 1991.

Статья поступила в редакцию 23 ноября 2006 г.
Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 69 – 73.

УДК 621.039.5+519.85

Современный статус комплекса программ BRAND

П.А. Андросенко, В.И. Белоусов, А.В. Коньков, А.Г. Царина,
Обнинский государственный технический университет атомной энергетики,
249040, г. Обнинск Калужской области, Студенческий городок, 1

Описывается современный статус версии комплекса программ BRAND, ориентированной на прямое использование информации из файлов оцененных ядерных данных в формате ENDF-6. Перечисляются этапы создания прецизионной версии комплекса, направленной на моделирование переноса нейтронов и фотонов. Излагаются новые алгоритмы, разработанные для моделирования процесса переноса электронов методом индивидуальных соударений. Приводится ряд новых результатов применения комплекса в задачах оценки первичной радиационной повреждаемости материалов и радиационной медицины.

The modern status of program complex BRAND. P.A. Androsenko, V.I. Belousov, A.V. Kon'kov, A.G. Tsarina. The modern status of version of program complex BRAND made for direct use of information from estimated nuclear data files of format ENDF-6 is described. The stages of creating the precision complex version, directed to simulation of neutron and photon transfer, are enumerated. New algorithms, built for electron transfer simulation by method in individual collisions, are stated. A number of new results of complex usage in tasks of material primary radiation damage and radiation medicine is given.

Комплекс программ BRAND (**BR**others **AND**rosenko) [1] начал разрабатываться в ГИЦ РФ-ФЭИ им. акад. А.И. Лейпунского с начала 80-х годов, а с середины 90-х комплекс разрабатывается совместно ФЭИ и Обнинским государственным техническим университетом атомной энергетики. Изначально комплекс предназначался для моделирования методом Монте-Карло исключительно нейтронно-физических экспериментов, но удачно выбранная структура разбиения на модули позволила очень быстро распространить BRAND на задачи расчета защиты от излучений, реакторные задачи, задачи радиационной медицины и другие, охватив моделирование совместного переноса нейтронов, фотонов и заряженных частиц. Затем стало понятно, что комплекс легко “переводится” и на решение краевых задач математической физики (алгоритмы блуждания по границе и сетке). В разные годы многие специалисты внесли свой вклад в развитие комплекса. Это, в первую очередь, Андросенко А.А., который стоял у истоков работы. Далее следует отметить Болонкину Г.В., Ломтева В.Л., Пупко С.В., Артамонова С.Н., Дубровину С.И., Кривцова А.С., Шимкевич И.Ю. В последние годы заметный вклад в развитие BRAND внесли Компаниец А.В., Жолудов Д.Л., Малков М.Р. Следует отметить, что вопросы построения монте-карловских программных комплексов для решения задач переноса излучений неоднократно обсуждались с Гоминым Е.А. и Майоровым Л.В.

Как хорошо известно, отличительной чертой метода Монте-Карло является его приспособленность к решению многомерных задач в условиях реальной трехмерной геометрии и с подробным учетом всей имеющейся информации о взаимодействии излучения с веществом. Накопленные на сегодняшний день данные о характеристиках взаимодействия частиц различных типов с материалами настолько обширны, что просто сама работа с этими данными уже представляет собой весьма нетривиальную задачу. Требования же повышения точности расчетов диктуют необходимость использования самой современной информации, которая содержится в библиотеках файлов оцененных данных (отечественная BROND, зарубежные ENDF/B, JENDL, FENDL и др.).

В сложившейся современной вычислительной практике файлы оцененных данных применяются, как правило, после некоторой предварительной подготовки – процессинга, что к неопределенности исходных данных Δ_0 (рис. 1) может добавлять еще и технологические (Δ_{Tech}) и константные (Δ_1) неопределенности, привносимые используемыми приближениями и упрощениями. При таком подходе неопределенность Δ_0 в принципе невозможно выделить “в чистом виде”. С другой стороны, применение информации из файлов оцененных данных “напрямую” такую возможность предоставляет. В последние годы развитие реперной версии BRAND идет именно по этому пути. На сегодняшний день в рамках этой версии можно моделировать процессы переноса нейтронов, фотонов и электронов во всем диапазоне энергий, который задан в библиотеках оцененных данных в формате ENDF-6 [2, 3]. Конечно же, такое моделирование приводит к резкому увеличению времени счета (на порядок и более) и подобные расчеты необходимо рассматривать именно как реперные. В настоящей статье перечислим уже завершенные разработки и подробнее остановимся на вновь полученных результатах.

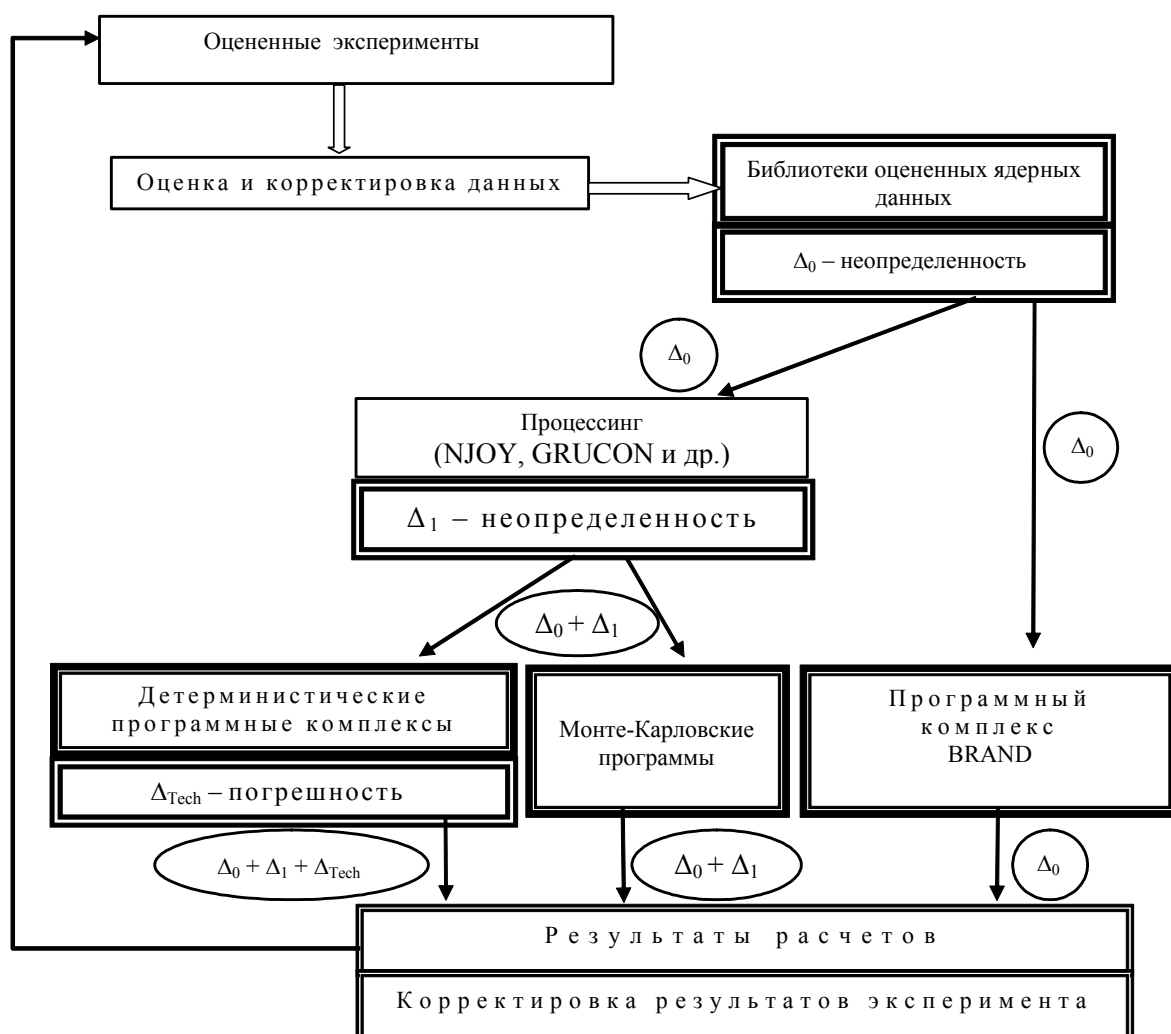


Рис. 1. Использование различных численных методов и программ для проведения анализа результатов оцененных экспериментов

1. Моделирование переноса нейтронов и фотонов

Работа над алгоритмами и программными модулями для моделирования процесса переноса нейтронов непосредственно по информации из файлов оцененных данных на сегодняшний день практически завершена. Результаты достаточно полно опубликованы [4...10], поэтому ограничимся только перечислением основных этапов, которых в хронологическом порядке можно выделить три:

- разработка алгоритмов и программ для поточечного представления сечений взаимодействия нейтронов с веществом (файл MF = 3), описания анизотропии упругого рассеяния (MF = 4), точного моделирования двумерных энерго-угловых характеристик неупругих взаимодействий (файлы MF = 5 и 6) [4, 5];
- восстановление значений сечений взаимодействия по резонансным параметрам и моделирование значений сечений в области неразрешенных резонансов [6, 7];
- разработка алгоритмов и программ для моделирования переноса тепловых нейтронов (файл MF = 7) [8...10].

Работу над алгоритмами и программными модулями для моделирования процесса переноса первичных и вторичных фотонов также можно считать практически завершенной. Здесь тоже ограничимся лишь перечислением основных этапов:

– создание первой версии фотонного константного модуля, основанного на библиотеке сечений Сторма, Израэля и моделировании комптоновского рассеяния по закону Клейна – Нишины – Тамма [11, 12];

– разработка алгоритмов и программ для поточечного представления сечений взаимодействия фотонов с веществом (файл MF = 23) [5] и точного моделирования характеристик когерентного и некогерентного рассеяния фотонов (MF = 27) [5, 6].

Более подробно остановимся на особенностях моделирования в комплексе BRAND процессов взаимодействия электронов с веществом, т.к. эти результаты пока не опубликованы. Сам перенос электронов моделируется аналогично переносу нейтронов и фотонов, заменяется лишь константный (физический) модуль.

2. Моделирование переноса электронов

Информация, необходимая для моделирования процесса переноса электронов, бралась из библиотеки EEDL [13] формата ENDF-6. Использовались два файла этой библиотеки.

Файл 26 (MF = 26), предназначенный для представления данных о фотонно- и электронно-атомном взаимодействиях, в котором представлены следующие реакции (номер реакции – MT) взаимодействия электрона с веществом: упругое взаимодействие (MT = 526), тормозное излучение (MT = 527), возбуждение атома (MT = 528), электроионизация атома (MT = 534...599). Все данные хранятся в виде таблиц, для восстановления информации между узлами заданной сетки применяется линейная интерполяция.

В файле 28 (MF = 28) содержится информация о процессе релаксации атома после электроионизации. Процесс релаксации остаточного атома взаимодействия после ионизации приводит к испусканию дополнительных фотонов и электронов. Представление данных использует реакцию атомной релаксации (MT = 533). Файл предназначен для хранения данных об энергиях подболочек, излучаемых энергиях, вероятностях перехода и других параметрах данного взаимодействия, необходимых в свою очередь для вычисления спектров излученных атомом фотонов и электронов.

Разработаны пять (по количеству реакций) основных алгоритмов моделирования характеристик вторичных частиц после реакции, а также алгоритмы и программы считывания данных файлов формата ENDF-6 и представления их в виде файла данных программного

комплекса BRAND. Все представленные алгоритмы реализованы в виде модулей на алгоритмическом языке программирования Fortran-90 и включены в состав комплекса. Модули успешно протестированы в автономном режиме на предмет совпадения по критерию χ^2 эмпирических и теоретических функций распределения моделируемых характеристик.

При **упругом взаимодействии** электрон продолжает свое движение с той же энергией E_0 , что и до столкновения со средой, рассеявшись на некоторый угол. Новых частиц при таком взаимодействии не порождается.

Для моделирования косинуса μ угла отклонения вылетающего электрона от вектора направления движения налетающего электрона в файле заданы плотности $f_{\xi}(E, \mu)$ углового распределения, зависящие от аргумента μ и энергии E налетающего электрона, как от параметра. Плотности распределения заданы для дискретного набора энергий, и сначала проводится поиск значений энергий на сетке E_1 и E_2 , для которых $E_1 \leq E_0 \leq E_2$ и соответственно $f_{\xi}(E_1, \mu) \leq f_{\xi}(E_0, \mu) \leq f_{\xi}(E_2, \mu)$. По плотностям распределения $f_{\xi}(E_1, \mu)$ и $f_{\xi}(E_2, \mu)$ моделируются два значения μ_1 и μ_2 , соответственно, по одному и тому же псевдослучайному числу F , равномерно распределенному в интервале $[0, 1]$. Далее из уравнений

$$F = \int_{-1}^{\mu_0} f_{\xi}(E_0, \mu) d\mu = \int_{-1}^{\mu_1} f_{\xi}(E_1, \mu) d\mu = \int_{-1}^{\mu_2} f_{\xi}(E_2, \mu) d\mu$$
 с учетом того, что точки (E_1, μ_1) , (E_2, μ_2) и (E_0, μ_0) лежат на одной прямой, вычислим μ_0 по формуле

$$\mu_0 = \frac{\mu_1(E_2 - E_0) + \mu_2(E_0 - E_1)}{E_2 - E_1}. \quad (1)$$

Функция плотности вероятности углового распределения представлена дискретным способом лишь на отрезке $[-1, \mu']$, а в оставшемся до единицы отрезке $[\mu', 1]$ плотность представлена аналитической функцией $f_{\xi}(E, \mu) = A/(\eta + 1 - \mu)^2$ и легко моделируется методом обратных функций. Параметр A можно выразить явным образом через величину η , т.е. $A = f(\eta + 1 - \mu')^2$, где $f = f_{\xi}(E, \mu')$ – значение функции плотности углового распределения в точке μ' . В свою очередь параметр η вычисляется по формуле

$$\eta = \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha mc}{0,885p} \right) Z^{2/3} \left[1,13 + 3,76(\alpha Z/\beta)^2 \sqrt{\frac{\tau}{\tau+1}} \right], \quad (2)$$

где $\beta = \frac{v}{c} = \sqrt{1 - \left(\frac{1}{\tau+1} \right)^2}$, $\tau = \frac{E}{mc^2}$, $p = \frac{1}{c} \sqrt{E(2mc^2 + E)}$ – импульс электрона, α – константа тонкой структуры, m – масса покоя электрона, v – скорость электрона, Z – атомный номер, а c – скорость света в вакууме.

При **тормозном излучении** электрон продолжает свое движение с энергией E_e меньшей, чем энергия E_0 до столкновения со средой, но в том же направлении, что и до столкновения. Также порождается фотон, энергия и направление движения которого определяются вероятностными законами, заданными в файле. Таким образом, моделирование характеристик реакции разбивается на две составляющие по количеству порождаемых частиц.

Фотон. Распределение энергии порожденного фотона задано в файле аналогично угловому распределению упругого взаимодействия: заданы наборы энергетических плотностей распределения $f_{\xi}(E, E_p)$, зависящих от аргумента E_p – энергии вылетающего фотона и энергии налетающего электрона, как от параметра. Совершенно аналогично предыдущему пункту из уравнений

$$F = \int_0^{E_{p0}} f_{\xi}(E_0, E_p) dE_p = \int_0^{E_{p1}} f_{\xi}(E_1, E_p) dE_p = \int_0^{E_{p2}} f_{\xi}(E_2, E_p) dE_p$$

получим формулу для энергии фотона после реакции тормозного излучения $E_{p0} = \frac{E_{p1}(E_2 - E_0) + E_{p2}(E_0 - E_1)}{E_2 - E_1}$. Косинус μ_p на-

правления движения фотона определяется формулой $\mu_p = (2\gamma - 1 - \beta)/(2\gamma\beta - 1 - \beta)$, где γ равномерно распределена в интервале $[0, 1]$, а β и τ берутся из соотношения (2).

Электрон. Для моделирования энергии вылетающего электрона в файле таблично заданы энергии, которые необходимо вычитать из исходной энергии E_0 налетающего электрона. Для определения вычитаемой величины проводится поиск двух соседних с E_0 энергий E_1 и E_2 таких, что $E_1 \leq E_0 \leq E_2$, и вычисляется $f_0 = f(E_0)$ по формуле, полностью аналогичной соотношению (1), $f_0 = f_1 + (f_2 - f_1)(E_0 - E_1)/(E_2 - E_1)$. Здесь весь ход моделирования идентичен алгоритму розыгрыша косинуса μ_0 угла при упругом взаимодействии. В итоге $E_e = E_0 - f_0$.

При **возбуждении атома** электрон теряет часть своей энергии и передает ее остаточному атому. Направление движения электрона при этом не меняется. Моделирование энергии электрона после реакции возбуждения атома полностью совпадает с алгоритмами пункта *Электрон* предыдущего раздела, поскольку в файле данные о потерях энергии задаются совершенно идентично как для тормозного излучения, так и для реакции возбуждения атома.

При **электроионизации атома** появляется электрон с некоторой энергией, меньшей E_0 , и налетающий электрон теряет часть своей начальной энергии. Оба электрона движутся в том же направлении, что и налетающий электрон, причем один из них считается “рассеянным”, другой – “освобожденным”. Поскольку разницы между этими двумя частицами нет никакой, кроме энергии, то тот электрон, у которого энергия меньше, считается освобожденным, другой же – рассеянным.

Здесь необходимо упомянуть о перераспределении энергии релаксации атома с последующим возможным вылетом радиационных фотонов и выбиваемых с уровней атома электронов. Подробнее описание этого процесса представлено в следующем разделе “Релаксация атома”.

Схема моделирования энергии E_e освобожденного электрона повторяет пункт *Фотон* раздела “Тормозное излучение” для порождаемого фотона, поэтому приведем лишь основные формулы для моделирования: находим интервал $E_1 \leq E_0 \leq E_2$ для энергии E_0 налетающего

электрона; из уравнений $F = \int_{-1}^{E_{e0}} f_{\xi}(E_0, E_e) dE_e = \int_{-1}^{E_{e1}} f_{\xi}(E_1, E_e) dE_e = \int_{-1}^{E_{e2}} f_{\xi}(E_2, E_e) dE_e$ после

моделирования E_{e1} и E_{e2} аналогично (1) находим искомое $E_{e0} = \frac{E_{e1}(E_2 - E_0) + E_{e2}(E_0 - E_1)}{E_2 - E_1}$.

Энергия рассеянного электрона определяется по формуле $E_{e'} = E_0 - E_{\min} - E_{e0}$, где E_{\min} – минимальная энергия, необходимая электрону, чтобы выбить электрон атома с заданной электронной оболочки.

Релаксация атома. Атом может переходить в состояние релаксации из-за нескольких видов фотонно-электронного взаимодействия. При этом происходит передача некоторого количества энергии атому, которое в свою очередь распределяется по электронным уровням атома, выделяя радиационные фотоны или выбивая с более высоких уровней электроны.

Энергия электрона до взаимодействия и первоначальный электронный уровень, откуда был выбит электрон, определяются заранее, в данном случае они просто запоминаются при моделировании реакции электроионизации атома. Кратко схема моделирования процесса релаксации атома выглядит следующим образом. Данные файла релаксации атома (MF = 28) содержат таблицы переходов для каждого электронного уровня атома, которые показывают возможные энергетические переходы по электронным уровням с указанием номера уровня, а также вероятности данного перехода, количество электронов на уровне в невозбужденном состоянии атома и энергию, выделяемую при этом процессе замещения вакансии уровня электроном. Радиационные переходы указаны в таблице переходов и содержат один номер более высокого уровня атома, с которого будет взят электрон, при этом выделяется фотон с энергией, равной кванту энергии между уровнями.

Нерадиационные переходы, т.е. с выделением электрона вместо фотона, располагаются в таблице переходов ниже и содержат информацию о двух номерах уровней атома, откуда будут взяты электроны, причем один из них будет помещен на исходный уровень, а другой будет излучен атомом. После того, как произошло замещение, начальная энергия должна быть уменьшена на величину, равную кванту энергии между уровнями. Эта величина указана в таблице переходов. В случае, если величина начальной энергии остается положительной, производится следующий шаг моделирования и процесс замещения продолжается с одного из уровней, откуда взят электрон. При выборе уровня надо исходить из правила предпочтения более низкого уровня по отношению к остальным, с которых взяты электроны атома. Если дальнейшие переходы невозможны, а величина начальной энергии остается положительной, процесс моделирования релаксации атома прекращается, а оставшаяся энергия передается атому, т.е. считается поглощенной в веществе.

В качестве примера применения разработанной версии BRAND рассмотрим следующую задачу *внутрисосудистой радиотерапии*, предложенную в качестве международного теста для сопоставления различных программ расчета дозовых полей (проблема P2, QUADOS2002 [14]). Внутрисосудистая игла диаметром 0,46 мм и длиной 31 мм из сплава никель-титан помещена в артерию, окруженную стандартным водяным фантомом. Геометрия системы достаточно сложная: есть воздушные внутренние полости и вставки из различных материалов, торец иглы имеет форму полусферы. Внутри иглы также расположен источник β -частиц (электронов) цилиндрической формы (диаметр 0,24 мм, длина 27 мм, активность 7 ГБк), представляющий собой изотоп фосфора ^{32}P . Энергетический спектр источника задан табулированным распределением в диапазоне от 0 до 1,8 МэВ. Требуется оценить распределение поглощенной дозы вдоль оси источника на расстоянии 1 мм от внутренней стенки артерии без тромбоцита. На рис. 2 представлены результаты сравнений расчетов по BRAND (статистическая погрешность менее 5 %) и программе MCNP (данные взяты из [14]). Совпадение результатов следует признать очень хорошим.

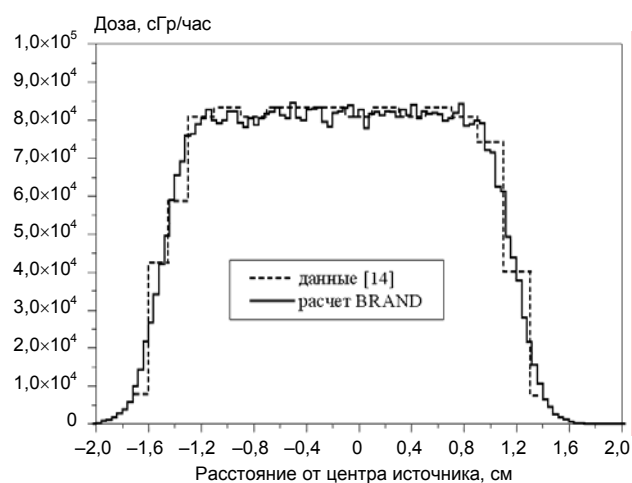


Рис. 2. Распределение поглощенной дозы β -излучения вдоль оси источника

Энергетический спектр источника задан табулированным распределением в диапазоне от 0 до 1,8 МэВ. Требуется оценить распределение поглощенной дозы вдоль оси источника на расстоянии 1 мм от внутренней стенки артерии без тромбоцита. На рис. 2 представлены результаты сравнений расчетов по BRAND (статистическая погрешность менее 5 %) и программе MCNP (данные взяты из [14]). Совпадение результатов следует признать очень хорошим.

3. Некоторые новые приложения BRAND

Ниже приводятся результаты математического моделирования двух не совсем типичных на сегодняшний день для комплекса BRAND задач. В первом случае (рост радиационно-индуцированных дефектов) результаты решения уравнения переноса излучения используются как исходные данные для имитационной модели роста скоплений дефектов в материале. Во втором случае результаты математического моделирования кровеносной системы опять-таки применяются как исходные данные для специального пространственного источника фотонов при использовании белковых микросфер в задачах лучевой терапии.

Рост радиационно-индуцированных дефектов. Радиационные кластеры представляют собой области, содержащие в себе большие количества точечных дефектов, сформировавшихся в результате образования в процессе облучения вакансий и междоузлий, их последующей миграции и взаимодействия между собой. Они играют важную роль в радиационно-индуцированных изменениях структуры и физико-механических свойств материалов, влияя на движение дислокаций при деформации и вызывая радиационное упрочнение, снижение пластичности, изменение характеристик упругости. Для количественного анализа их влияния необходимо знать такие характеристики радиационных кластеров, как концентрацию, размеры, внутреннюю структуру, количество содержащихся в них точечных дефектов.

В работе [15] описана построенная на основе метода Монте-Карло трехмерная имитационная модель роста скоплений дефектов в материале при воздействии различных внешних условий, в том числе радиационного облучения. Модель учитывает размеры зарождающихся в образцах скоплений дефектов, отслеживает время их появления и ростовые изменения. Механизм взаимодействия заложен в ядро коагуляции, а интенсивность и области образования структурных изменений в материале определяются начальными распределениями и заложенными в модель константами (влияние внешних условий). Это позволяет получать подробную картину эволюции существующих в образцах структур.

Для тестирования построенной модели образования и роста дефектов кластеров рассмотрены данные, приведенные в [16], где в качестве методов исследования применялись просвечивающая электронная микроскопия и полевая ионная микроскопия. Объектами исследования выступали промышленная сталь X16H15M2 (ЭИ-844) в аустенизированном состоянии и модельный материал Pt (чистоты 99,99 %) в исходном состоянии и после облучения в реакторе ИВВ-2М при температуре ~310 К до различных значений флюенса промежуточных и быстрых нейтронов (с энергией $E > 0,1$ МэВ).

В рассматриваемом случае для тестирования построенной модели из всего спектра возможных структур, которые образуются в конструкционном материале, выбраны только объекты-кластеры со следующими механизмами образования и взаимодействия.

Эволюцию системы разбиваем на три этапа.

I этап. В начальный момент времени ($t = 0$) формируются области первичной повреждаемости (формально считается, что происходит зарождение кластеров). Концентрация кластеров в единице объема материала определялась по формуле $n_c = \gamma \left(\sqrt{1 + 2gt/\gamma} - 1 \right)$, где

$\gamma = \mu S / (\pi d_c^2)$; $g = 4\alpha G / (a^3 m_0)$; G – скорость радиационных повреждений, сна/с; a – период решетки; α – каскадная эффективность; d_c – средний диаметр кластера; m_0 – количество вакансий в кластере в момент его образования; S – удельная площадь стоков для точечных дефектов (площадь стоков в единице объема). Распределены они равномерно по всему объему материала. При появлении каждого объекта разыгрываются три случайные величины, соответствующие координатам объектов в объеме. Массив направлений движения граней имеет шесть компонент, так как рост происходит во все стороны.

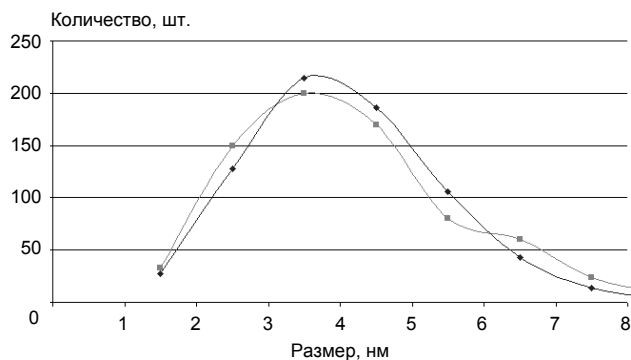


Рис. 3. Распределение по размерам кластеров в образце стали ЭИ-844, облученном при температуре ~310 К до флюенса нейтронов $F = 2 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-2}$ (с $E > 0,1 \text{ МэВ}$), по результатам электронной микроскопии [16] и численного моделирования

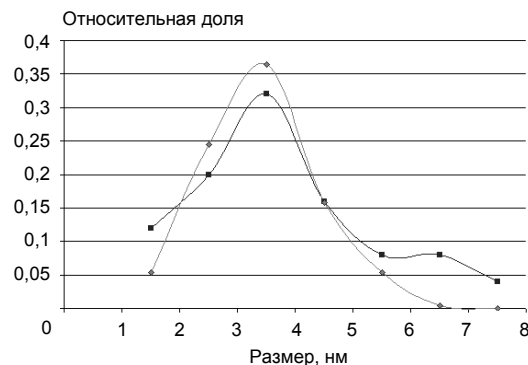


Рис. 4. Распределение радиационных кластеров по размерам в платине, облученной нейтронами до флюенса $F = 3,5 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-2}$ (с $E > 0,1 \text{ МэВ}$), полученное по данным полевой ионной микроскопии [16] и численного моделирования

II этап. Рост кластеров за счет вероятности образования дефектов в ближайшей к нему окрестности, т.е. вероятности того, что в момент времени t в окрестности размером $v\Delta t$ рассматриваемой области могут быть выбиты из решетки атомы, где v – скорость роста, Δt – временной интервал, происходит во всех направлениях. Более того, скорость роста каждого из кластеров различна и ее распределение по объектам соответствует нормальному распределению с параметрами $N(a, \sigma^2)$, которые подбираются для каждого вида материала.

III этап. Взаимодействие (коагуляция) всех объектов, находящихся в объеме материала. На рис. 3 и 4 представлены результаты численного моделирования процесса роста дефектов кластеров и экспериментальные данные. Для обоих случаев размер объектов, соответствующих кластерам, в начальный момент времени соотносится с размерами объема материала, как 1:1000, среда разбита на 200 элементарных слоев, количество шагов по времени равно 100, полное число историй метода Монте-Карло равно 1000, что обеспечивает статистическую погрешность менее 5%. Для каждого вида материала выбраны параметры, представленные в таблице.

Т а б л и ц а параметров моделирования

Название материала	Количество кластеров	$v \sim N(a, \sigma^2)$	
		a	σ^2
Сталь ЭИ-844	725	0,5	0,32
Платина	1000	0,6	0,16

Как видно из приведенных графиков, для подобранных для обоих случаев моделирования значений параметров распределения при определении скорости разрастания всех кластеров в системе получено хорошее согласование с экспериментальными данными для как стали ЭИ-844, так и платины.

Одна задача лучевой терапии. Рассматриваются математическая модель построения кровеносной системы и дальнейшее ее применение для получения поля точечных источников фотонов при использовании белковых микросфер. По полученному распределению источников методом Монте-Карло оцениваются дозовые нагрузки на органы.

Одним из современных методов радионуклидной терапии служит применение в качестве носителей лечебных радионуклидов белковых микросфер, которые вводятся в кровеносную систему в непосредственной близости от пораженной раковыми клетками области. Основными преимуществами такой формы радиотерапии являются возможности введения значительной активности непосредственно в пораженную область и обеспечение значительно меньшей утечки активности из органа по сравнению с введением коллоидных растворов.

В литературе нет описания результатов исследований, позволяющих на основе модельных представлений спрогнозировать распределение микросфер по сосудистому дереву с целью оптимизации дозовых нагрузок как на пораженную область, так и на орган в целом. В настоящем исследовании проведено математическое моделирование распределения микросфер по артериальному дереву и получена оценка дозовых нагрузок на пораженную раковыми клетками область в зависимости от численности вводимых микросфер, их диаметра и особенностей сосудистого ветвления в пораженной области. Работа состояла из двух основных этапов.

Этап 1. Создание математической модели артериального дерева на основе эмпирических законов ветвления [17...19]. Исследования структуры кровеносной системы дают основания полагать, что конструкция и функционирование кровеносной системы отвечают принципам минимальных затрат биологического материала, который расходуется на ее построение, и минимальной работы, необходимой для продвижения по ней крови (так называемый “принцип оптимальности конструкции”).

При создании математической трехмерной модели кровеносной системы считалось, что ветвление каждого из его сосудов проходит в соответствии с принципом оптимальности конструкции, а также согласно предложенному Мюрреем [17] и хорошо согласующемуся с экспериментальными данными эмпирическому соотношению между диаметрами материнского и дочерних сосудов в каждом акте ветвления: $d_0^3 = d_1^3 + d_2^3$. Углы ветвления θ_1 и θ_2 , т.е. углы отклонения дочерних ветвей от материнского сосуда, вычислялись таким образом, чтобы работа, необходимая для поддержания потока крови через данный сосуд, была минимальной: $\cos\theta_1 = (r_0^4 + r_1^4 - r_2^4)/(2r_0^2 r_1^2)$; $\cos\theta_2 = (r_0^4 + r_2^4 - r_1^4)/(2r_0^2 r_2^2)$.

Строение кровеносной системы в пораженной раковыми клетками области органа имеет ряд особенностей, в частности, более интенсивное ветвление сосудистого дерева. При моделировании этот аспект учитывался уменьшением длины сосудов между соседними ветвлениями. В качестве иллюстрации на рис. 5 показаны результаты моделирования кровеносной системы крысы. Необходимо учесть, что картинка модели сосудистого дерева не отображает реальных диаметров образующих его сосудов.

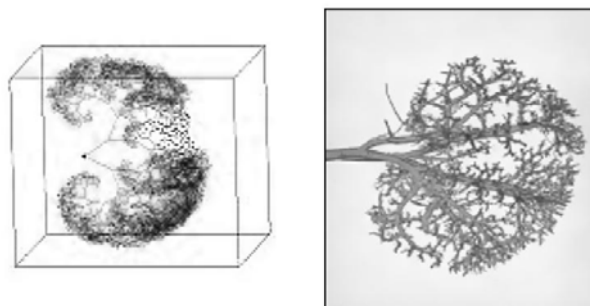


Рис. 5. Результат моделирования кровеносной системы на основе эмпирических законов ветвления сосудистого дерева и распределения микросфер заданного диаметра по кровеносному дереву (слева) и кровеносная система почки крысы [19] (справа)

Этап 2. Моделирование распределения микросфер заданного диаметра по построенному сосудистому дереву и анализ создаваемых этими микросферами дозовых полей как на пораженную раковыми клетками область, так и на весь орган, используя возможности программного комплекса BRAND. Для оценки дозового поля, создаваемого вводимыми в кровеносную систему органа микросферами, применялся следующий метод: для каждой из вводимых микросфер разыгрывалась ее “история”, т.е. моделировалось ее случайное движение с током крови по сосудам до того момента, когда диаметр микросферы станет равным диаметру сосуда. Полученная таким образом картина распределения микросфер по сосудистому дереву использовалась для оценки параметров создаваемого в органе дозового поля с целью выбора микросфер наиболее оптимального для терапевтических целей диаметра.

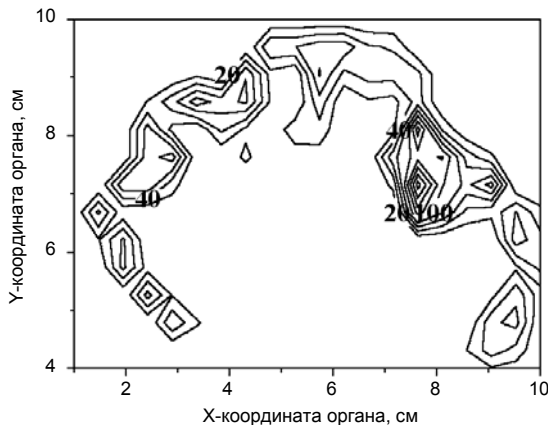


Рис. 6. Кривые изодозной нагрузки (отн. ед.) на весь орган (фрагмент 10×6 см). Опухоль расположена в прямоугольнике $x \in [7, 9]$, $y \in [6, 8]$ см, сечение в плоскости через центр пораженной области

мации о характеристиках взаимодействия частиц с веществом напрямую из файлов библиотек оцененных ядерных данных. Появилась возможность оценивать накопление и рост первичных радиационных дефектов в материалах. Есть все основания получаемые результаты расчетов рассматривать как реперные.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 06-08-01428-а).

Андросенко Петр Александрович, контактный тел.: (48439)78446, e.mail: peter@iate.obninsk.ru

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Андросенко А.А., Андросенко П.А.** Комплекс программ BRAND для расчетов характеристик переноса излучения методом Монте-Карло // ВАИТ. Сер.ФиТЯР, 1985, вып. 7. – С. 33.
2. **ENDF-201.** ENDF/B-VI Summary Documentation (Резюмирующая документация по ENDF/B-VI), edited by Rose P.F. Brookhaven National Laboratory Report BNL-NCS-1741, 4th Edition, 1991.
3. **ENDF-102.** Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files, ENDF-6. BNL-NCS-44945-01/04-Rev., Informal Report, Revised April 2001, N.Y., 11973-5000.
4. **Androsenko A.A., Androsenko P.A. et al.** Monte Carlo Simulation of Neutron Transport Process, Photons and Charged Particles. Preprint FEI-2205, Obninsk, 1991.
5. **Андросенко А.А., Андросенко П.А., Болонкина Г.В., Дубровина С.И., Кривцов А.С., Пупко С.В.** Интегрированный константный модуль комплекса программ BRAND. Препринт ФЭИ-2565, Обнинск, 1996.
6. **Androsenko P.A., Joloudov D.L., Kompaniyets A.V.** Monte Carlo Simulation of Neutron and Photon Transport with Direct Utilization of Information from Evaluated Nuclear Data Files. Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications / Proc. of Monte Carlo 2000 Conf., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2001, p. 871.
7. **Компаниец А.В.** Развитие и приложения метода Монте-Карло в задачах переноса нейтронов и фотонов с использованием информации из файлов оцененных данных. Кандидатская диссертация, Обнинск, 2000.
8. **Androsenko P.A., Malkov M.R.** Simulation of Thermal Neutron Transport Processes Directly from the Evaluated Nuclear Data Files. Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications / Proc. of Monte Carlo 2000 Conf., Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2001, p. 67.

Из результатов моделирования распределения микросфер по построенному артериальному дереву видно (рис. 6), что величина поглощенной дозы на пораженную область может значительно (до 10 раз) отличаться от средних по органу значений, что необходимо учитывать при планировании курсов лечения методами корпускулярной лучевой терапии.

Заключение

На сегодняшний день программный комплекс BRAND является достаточно уникальным прецизионным инструментом по моделированию задач теории переноса излучений методом Монте-Карло. Имеется возможность оценки разнообразных линейных функционалов от плотности столкновений нейтронов, фотонов и электронов при использовании информации

9. **Андросенко П.А., Малков М.Р., Соловьев Н.А.** Точное моделирование рассеяния нейтронов методом Монте-Карло по модели идеального газа и приближению наикратчайшего времени столкновения // Изв. ВУЗов. Ядерная энергетика, № 3, 2004.
10. **Малков М.Р.** Методика и алгоритмы статистического моделирования взаимодействия тепловых нейтронов с веществом на основе файлов оцененных данных. Кандидатская диссертация, Обнинск, 2005.
11. **Андросенко П.А.** Константный модуль для моделирования методом Монте-Карло переноса нейтронного, первичного и вторичного гамма-излучения // ВАНТ. Сер. ФиТЯР, 1985, вып. 7. – С. 45.
12. **Андросенко П.А., Попова Г.В.** Эффективный метод моделирования распределения Клейна – Нишины – Тамма // Журнал вычисл. математики и математ. физики, т. 21, № 4, 1981.
13. **Perkins S.T., Cullen D.E. and Seltzer S.M.** Tables and Graphs of Electron-Interaction Cross Sections from 10 eV to 100 GeV Derived from the LLNL Evaluated Electron Data Library (EEDL), Z = 1-100, UCRL-50400, vol. 31, Lawrence Livermore National Laboratory, 1991.
14. **Price R.A.** Endovascular Radiotherapy. QUADOS-2003 (Problem P2), Bologna workshop, July 14 – 16, 2003. ENEA, Rome, 2004, p. 109.
15. **Царина А.Г., Андросенко П.А.** Построение модели процесса роста скоплений дефектов при облучении // ВАНТ. Сер. Материаловедение и новые материалы, 2004, вып. 1(62). – С. 368 – 382.
16. **Козлов А.В., Ивченко В.А., Попова Е.В. и др.** Первичная повреждаемость и накопление радиационных дефектов в ГЦК-металлах при низкотемпературном нейтронном облучении / Отр. семинар “Физика радиационных повреждений материалов атомной техники”, Обнинск, 2005.
17. **Murray C.D.** The Physiological Principle of Minimum Work. I. The Vascular System and the Cost of Blood Volume / Proc. Natl. Acad. Sci. 1926, 12, pp. 207 – 214.
18. **Sherman T.F.** On Connecting Large Vessels to Small. The Meaning of Murray’s Law // J. Gen. Physiol. 1981, 78, pp. 431 – 453.
19. **Zamir M.** Arterial Branching within the Confines of Fractal L-System Formalism // J. Gen. Physiol. Vol. 118, September 2001, pp. 267 – 275.

Статья поступила в редакцию 05 сентября 2006 г.
Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 74 – 84.

УДК 621.039.51:621.039.573
**Разработка комплекса программных средств
для сопровождения эксплуатации исследовательских реакторов**

Ю.Е. Ванеев,
ФГУП “ГНЦ РФ НИИАР”, 433510, г. Дмитровград-10 Ульяновской обл.

Приведено описание разработок программного обеспечения нейтронно-физических расчетов исследовательских реакторов (ИР) НИИАР при решении задач расчетного сопровождения их эксплуатации. Основное внимание уделено формированию в рамках проекта MCU версии прецизионной программы MCU-RR, учитывающей специфику ИР и решаемых на них задач. Отмечены особенности использования этой программы при моделировании реакторных экспериментов и кампаний.

Development of software tools in support of research reactors operation. Yu.E. Vaneyev. Software tool developments for neutron-physical computations of the RIAR research reactors in support of their operation are described. The focus is on the MCU-RR precision code developed under the MCU project to account the research reactors features. The paper addresses the issues of this code application for simulation of reactor experiments and campaigns.

Расчетное сопровождение эксплуатации (РСЭ) ИР наряду с экспериментальными методами призвано обосновывать безопасные и оптимальные параметры загрузки активной зоны, не превышение пределов безопасной работы реактора в процессе кампании, достижение требуемых характеристик облучательных устройств (ОУ), модернизацию ОУ и элементов активной зоны. В настоящее время РСЭ большинства ИР (с водой в качестве теплоносителя) осуществляется по методикам 60...70 годов прошлого века с использованием для каждого ИР своего инженерного программного средства (ПС). При этом обязательно участие физика, анализирующего применимость этого ПС в каждой конкретной ситуации, поскольку используемые приближения, не учитывая в полной мере специфику ИР, не всегда обеспечивают требуемую точность расчетов. В результате такие ПС ограничены в применении, не реализуя все возможности РСЭ, поэтому планирование экспериментов, перегрузок и кампаний осуществляется, главным образом, на основе накопленного инженерным персоналом опыта эксплуатации реактора.

Для ослабления влияния субъективного фактора, снижения вероятности ошибочных решений при таком планировании на энергетических реакторах используют различные системы информационной поддержки персонала, имеющие в своем составе программные комплексы инженерного класса для моделирования состояний активной зоны в процессе эксплуатации реактора. Отсутствие нормативных, лицензионных требований к разработкам подобных программных комплексов для отечественных ИР и известные экономические проблемы создали ситуацию, при которой, с одной стороны, без целевого финансирования существующие инженерные ПС не совершенствуются для повышения точности расчетов ИР и, как следствие, со временем перестают отвечать требованиям практики, а с другой, возрастает потребность в совершенствовании РСЭ ИР в связи с ужесточением требований со стороны Ростехнадзора России к обоснованиям безопасности, необходимостью проведения обоснований проектов модернизации ОУ и активных зон ИР в соответствии с изменяющимися запросами “рынка облучательных услуг”, экономией средств на дорогостоящие экспериментальные обоснования и, наконец, кадровой нестабильностью среди инженерного персонала ИР, использующего ПС для расчетного сопровождения их эксплуатации.

Отсюда вытекает актуальность разработки на основе современных компьютерных технологий универсального (применимого для любых ИР) вычислительного комплекса с объектно-ориентированными компонентами, который обеспечит приемлемую для практики оперативность и более высокую точность расчетов по сравнению с программами инженерного класса, а также доступность этого комплекса инженерному персоналу, планирующему перегрузки и кампании ИР.

Цель данной работы – описание прошедших стадий и текущего состояния разработок такого комплекса, основным компонентом которого является прецизионная программа нейтронно-физического расчета ИР, адаптированная к решению задач расчетного сопровождения их эксплуатации.

1. Требования к “базовому” ПС и их реализация

Основные требования к вычислительному комплексу, который разрабатывается в НИИАР для решения задач РСЭ ИР, сформулированы в работе [1]. В качестве базового компонента этого комплекса выбрана программа прецизионного класса, в которой реализован метод Монте-Карло в трехмерной геометрии. Такой выбор, сделанный в НИИАР еще в начале 90-х годов, обусловлен спецификой и разнообразием ИР, сосредоточенных на одном предприятии [2], необходимостью проведения нейтронно-физических расчетов для решения задач РСЭ этих ИР, включая расчеты для обоснований ядерной и радиационной безопасности систем обращения с ядерным топливом.

Выбор прецизионной программы в составе отечественного проекта MCU [3], инициированного в РНЦ “Курчатовский институт” Л.В. Майоровым, связан с тем, что, не уступая по точности моделирования ни одному из зарубежных кодов, эта программа имеет такое важное преимущество, как возможность относительно оперативных разработок различных модификаций. Убедительное подтверждение этому – разработки в течение ~10 лет нескольких версий программы MCU-RR (Research Reactors) [4] по техническим заданиям, в которых НИИАР (по инициативе и непосредственном участии автора статьи) последовательно формулировал требования к разработкам в соответствии с возникающими запросами практики.

1.1. ПС для расчетов параметров облучения материалов

Основное назначение ИР – облучение перспективных топливных, конструкционных и поглощающих материалов для последующего анализа эффектов воздействия на них реакторного излучения, а также облучение мишеней и накопление в них трансплутониевых элементов и “легких” радионуклидов. На стадии планирования таких экспериментов проводят оценку основных параметров реакторного (нейтронного и фотонного) излучения в каналах с ОУ. Для этого используют результаты проведенных ранее измерений с однотипными устройствами или обобщенные данные из Сборника нейтронно-физических характеристик каналов облучения (если он имеется). При отсутствии подобной информации или для более точного определения этих характеристик с учетом особенностей ОУ применяют прецизионные программы и разработанные на их основе расчетные модели.

Первый пакет требований к прецизионной программе, разрабатываемой в рамках проекта MCU, сформулирован в “Программе совместных работ ИЯР РНЦ “КИ” и ГНЦ НИИАР”, подписанной сторонами в 1996 г. в период разработки “Сборника нейтронно-физических характеристик каналов облучения реактора СМ”. Технические задания на разработку содержали следующие основные требования.

1) Для обоснования работоспособности элементов конструкции реактора, температурных режимов испытаний материалов и изделий в каналах, радиационной безопасности на этапах их транспортировки, исследований и хранения необходимо проводить расчеты радиационного энерговыделения (или поглощенной энергии) от нейтронов и фотонов. Для этого следует реализовать алгоритм генерации фотонов при взаимодействии нейтронов с ядрами среды, а также разработать модуль переноса фотонов и соответствующие библиотеки констант.

2) Для повышения эффективности расчетов при определении функционалов плотности потоков нейтронов и фотонов в областях, удаленных от активной зоны (каналы на периферии отражателя, корпус реактора), или в малых объемах фазового пространства (мишени, мониторы, фрагменты облучаемых изделий) нужно реализовать алгоритмы неаналогового моделирования.

3) При моделировании нейтронно-активационных экспериментов важно проводить расчеты скоростей реакций на ядрах элементов, входящих в состав мониторов сопровождения (например, $^{197}\text{Au}(n, \gamma)$, $^{58}\text{Ni}(n, p)$, $^{235}\text{U}(n, f)$ и т.п.), поэтому необходимо реализовать алгоритм вычисления любых скоростей реакций, сечения которых будут содержаться в специальной “дозиметрической” библиотеке.

4) Для некоторых систем (закрученного крестообразного твэла, ТВС с множеством таких твэлов) бывает затруднено описание их геометрической формы или внутренней структуры с помощью стандартного набора тел-примитивов геометрического модуля. В этом случае следует использовать известный метод выравнивания полных сечений [5], для чего нужно разработать соответствующий модуль и интерфейсы для его связи с геометрическим и управляющим модулями.

Перечисленные основные требования реализованы сначала в версии MCU-4/SM, а с 2000 г. в версии MCU-RR следующим образом.

1.1.1. Модуль генерации и переноса фотонов, а также алгоритм совместного расчета характеристик нейтронного и фотонного излучений в реакторе созданы в НИИАР в 1985...87 гг. (при участии Л.В. Майорова и автора статьи) еще в первых версиях программ ММКФК [6, 7] и MCU (версия MCU-1.1/DV для ЭВМ типа БЭСМ-6 [8]). В современных версиях (MCU-4, MCU-4/SM, MCU-RR) разработчики этого проекта реализовали по сути тот же самый алгоритм, но на более совершенной константной базе (многогрупповая библиотека VI-TAMIN/C и поточечно заданные сечения из файлов ENDF/B). В этих версиях первоначально не вычислялись значения мощности радиационного энерговыделения и поглощенной дозы – важнейших функционалов, применяемых в радиационной физике и дозиметрии. Однако такая возможность предоставлена пользователям в рамках USER-подмодуля – совокупности подпрограмм, тексты которых пишет сам пользователь и к которым предусмотрены обращения на различных стадиях моделирования историй частиц. Соответствующий подмодуль PNDOS [9] для программы MCU-RR, разработанный в НИИАР в 2000 г., позволяет вычислять следующие характеристики:

- мощность поглощенной фотонной дозы $D_\gamma(m)$ в материале m регистрационной зоны (путем суммирования теряемой фотонами энергии при столкновениях);
- мощность поглощенной фотонной дозы $D_\gamma(l)$ для нуклидов l из заданного списка и биологической ткани $D_\gamma^{\text{ЭКВ}}$ в объеме регистрационной зоны и на поверхности цилиндрического детектора (с применением соответствующих керма-факторов в предположении электронного равновесия);
- мощность поглощенной нейтронной дозы $D_n(l)$ для нуклидов l из заданного списка (путем суммирования теряемой нейтронами энергии при упругом рассеянии) и биологической ткани $D_n^{\text{ЭКВ}}$ в объеме регистрационной зоны и на поверхности цилиндрического детектора (с использованием керма-факторов из работы [10]).

1.1.2. Для расчета характеристик полей реакторного излучения вне активной зоны Л.В. Майоровым разработан оригинальный алгоритм, впервые примененный для реактора ИГР, получивший название АЛИГР [11]. Применительно к реактору СМ в версии MCU-4/SM этот алгоритм реализован следующим образом. На первом этапе решается задача “на критичность” и запоминаются параметры нейтронов, вылетающих из активной зоны в отражатель. На втором этапе решается неоднородная задача с заданным поверхностным источником нейтронов, влетающих в отражатель. При этом каждый нейтрон из источника может быть “расщеплен” на заданное число нейтронов, суммарный вес которых совпадает с весом исходного нейтрона. Запоминаются параметры нейтронов, влетающих в каналы облучения. Если на этом этапе требуемая точность расчета не достигнута, то реализуется третий этап, на котором решается неоднородная задача о распределении нейтронов в каналах при заданных источниках на их внешней поверхности. На третьем этапе также может быть использована процедура “расщепления” для уменьшения статистической погрешности расчета.

В версии MCU-RR возможности алгоритма АЛИГР расширены путем преобразования массива параметров нейтронов, пересекающих выделенную поверхность, в особый вид поверхностного источника, с которым может работать комбинаторный модуль источников. Кроме того, обеспечено одновременное формирование поверхностных источников нейтронов и фотонов, введена защита накапливаемой информации от аварийных остановов (возможность рестарта), реализована более надежная оценка погрешностей результатов моделирования. Из других неаналоговых методов в программе MCU-RR реализованы известные методы “расщепления-рулетки” и “весового окна” [10].

1.1.3. Для расчетов по программе MCU-4/SM скоростей реакций нейтронов с заданными нуклидами сечения этих реакций в поточечном представлении записывают в специальную “дозиметрическую” библиотеку DOZIM, которая в настоящее время в основном сформирована на основе дозиметрического файла IRDF [12]. В процессе моделирования реализованы

выборка значений этих сечений для текущей энергии нейтрона в момент столкновения (или пересечения границы между геометрическими зонами) и свертка их с применяемой оценкой потока.

1.1.4. Модуль, реализующий метод выравнивания полных сечений (МВПС), разработан в 1996 г. для программы MCU-4/SM с использованием (как и в геометрическом модуле NCG) комбинаторного принципа, а также особых МВПС-структур с нелинейными преобразованиями координат. При подключении модуля МВПС соответствующим образом модифицированы геометрический и управляющий модули, а также программа визуализации геометрии.

Таким образом, в результате реализации перечисленных выше требований в версии MCU-4/SM и перенесения этих разработок в современную версию MCU-RR создано прецизионное ПС, обеспечивающее решение задач расчетного сопровождения экспериментов в каналах облучения ИР.

1.2. ПС для моделирования кампаний

Как правило, при эксплуатации ИР применяют режим частичных перегрузок активной зоны, в которой даже в стартовом состоянии большинство рабочих ТВС имеет частично выгоревшее топливо. Нуклидный состав топлива в каждой такой ТВС традиционно получали на предварительной стадии, используя специализированные программы расчета выгорания (WIMS-D4, САПФИР и др.) и накапливая результаты расчетов в архивах концентраций и макросечений для их последующего применения в основном расчете. Реализация идеи непосредственного моделирования выгорания топлива в процессе кампании ИР с использованием прецизионной программы MCU-RR представлялась в середине 90-х годов достаточно трудоемкой процедурой даже с автоматизированным обменом данными между MCU-RR и заранее подготовленным архивом концентраций изотопов в выгорающем топливе. Однако при наметившейся тенденции существенного увеличения скорости компьютерных вычислений эта идея открывала новые, никем еще не реализованные возможности повышения точности расчетов при моделировании кампаний ИР.

Поэтому еще в 1996 г. перед авторами проекта MCU была поставлена задача – разработать интерфейс для подключения к программе MCU-4/SM модуля “выгорания”, который может представлять собой модификацию существующей программы “выгорания” или новую разработку. По рекомендации Л.В. Майорова разработчики использовали оба эти направления. В качестве основы выбрана широко применяемая американская программа ORIGEN-S [13], обеспечивающая получение разнообразной информации об изменениях нуклидного состава и радиационных характеристик различных материалов при нейтронном облучении. Параллельно была начата разработка новой программы BURNUP [14] с весьма ограниченными на начальном этапе возможностями. В результате созданы версии MCU-ORI и MCU-REA [15] для расчетов выгорания топлива в ячейках реакторов РБМК и ВВЭР. Соответствующие модули “выгорания” включены также в состав версии MCU-RR со следующими особенностями.

1.2.1. В версии модуля выгорания BURNUP-1, включенной в аттестованную ГАН РФ программу MCU-REA, после моделирования периода облучения на этапе выдержки не сохраняется концентрация ^{135}I , что не позволяет моделировать “йодную яму” при остановке реактора. Соответствующее требование при разработке программы MCU-RR предусматривало реализацию такой возможности в версии модуля BURNUP-3.

1.2.2. При моделировании методом Монте-Карло выгорания топлива значительную экономию памяти и времени счета можно получить, заменяя многочисленные неделящиеся слабо поглощающие нейтроны изотопы (из вводимого пользователем списка) одним эффективным изотопом с нулевым сечением рассеяния и макросечением поглощения нейтронов, рав-

ным сумме макросечений объединяемых изотопов. Таким списком задают так называемый эффективный (суммарный, обобщенный) осколок в расчетах выгорания по программе MCU-RR с модулем BURNUP-3.

1.2.3. В реакторах СМ и МИР в качестве отражателя и замедлителя нейтронов используют блоки из бериллия, в которых при облучении накапливаются ядра лития-6 и гелия-3, увеличивающие сечения поглощения нейтронов в этих блоках. В связи с этим сформулировано требование о включении в модуль BURNUP-3 соответствующих цепочек превращений ядер для моделирования процесса “отравления” бериллия. При реализации такой возможности введены два искусственных изотопа:

- BE_1, у которого все сечения совпадают с сечениями бериллия-9 за исключением сечения поглощения, равного сечению реакции ${}^6\text{Li}(n, \alpha)$;
- BE_2, у которого все сечения равны нулю за исключением сечения поглощения, равного сечению реакции ${}^3\text{He}(n, \gamma)$.

В результате при задании концентраций изотопов ${}^6\text{Li}$ и ${}^3\text{He}$, равных концентрации бериллия-9, обеспечивается корректность расчетов как “отравления” бериллия, так и критичности.

1.2.4. В процессе моделирования кампании ИР необходимо дискретно изменять положения компенсирующих органов (КО) СУЗ для компенсации выгорания топлива в активной зоне. В программе MCU-RR набор таких положений для заданных моментов времени вводит пользователь в виде текстового файла, в соответствии с которым перед началом расчета каждого шага по времени корректируется раздел файла исходных данных для геометрического модуля.

Таким образом, в программе MCU-RR реализован уникальный алгоритм моделирования кампаний ИР, не требующий предварительной подготовки архива концентраций нуклидов в выгорающем топливе, позволяя моделировать “выдержку” топлива на остановленном реакторе, “отравление” облучаемого бериллия, задавать произвольный график работы реактора и изменять в процессе кампании высотные положения КО.

1.3. Реализация режима распараллеливания вычислений

Самым эффективным и широко применяемым в настоящее время способом значительного увеличения производительности компьютерных вычислений является распараллеливание вычислительного процесса в локальной сети персональных компьютеров – в так называемых “кластерах”. Первые “кластеры” появились в России сначала в закрытых научных центрах, в вычислительном центре РАН, потом на отраслевых предприятиях, а в настоящее время и в крупных учебных заведениях. НИИАР – один из первых государственных научных центров, где в 1999 г. разработан собственный “кластер” ASIR для централизованного обучения оперативного персонала ИР с использованием функционально-аналитических тренажеров.

В 2001 г. после установки на этот “кластер” программ MCNP и MCU-RR он стал одновременно применяться и для текущих расчетов активных зон ИР. В том же году на “кластере” ASIR впервые реализован режим распараллеливания вычислений в программе MCU-RR с использованием системы PVM [16]. В 2002 г. тот же режим реализован с применением системы MPI на “кластере” MBC-1000/М (ВЦ РАН) [17]. “Распараллеленная” версия MCU-RR/P в настоящее время может быть поставлена в принципе на любом “кластере”, что доказано при проведении расчетов по этой версии на “кластерах” в НИИАР и ВНИИЭФ. Показано также, что версия программы MCU-RR в ОС LINUX обеспечивает увеличение скорости счета на ~20 % по сравнению с версией этой программы в ОС WINDOWS, а переход в перспективе к 64-разрядной ОС на компьютерах фирмы AMD обеспечит дополнительное ускорение счета (предположительно в 1,5 раза).

Реализация режима распараллеливания вычислений в программе MCU-RR, содержащей перечисленные выше модули, при достаточном числе задействованных процессоров в составе “кластера” приближает эту программу по скорости счета к комплексам инженерных ПС, моделирующим кампанию реактора.

Таким образом, в результате многолетней, поэтапной разработки программы MCU-RR сформировано уникальное прецизионное ПС, решающее задачи РСЭ ИР с приемлемой для практики оперативностью и более высокой точностью по сравнению с инженерными ПС.

2. Разработка имитатора активной зоны ИР

В состав разрабатываемого в НИИАР вычислительного комплекса кроме универсальных компонентов: “кластера”, прецизионной программы MCU-RR и стандартных ПС для автоматизации моделирования, которые могут использоваться для расчетов любых ИР, должны входить и объектно-ориентированные компоненты, отражающие особенности конструкции моделируемых реакторных систем:

- база данных с параметрами моделей ТВС, ОУ, органов СУЗ, а также результатами моделирования;
- базовая расчетная MCU-модель активной зоны с облучательными каналами;
- ПС для автоматизации формирования MCU-моделей различных состояний активной зоны, графического отображения этих моделей и результатов моделирования.

В этот перечень могут быть включены также инженерные ПС, обеспечивающие достаточную для практики точность расчетов нейтронно- и/или теплофизических характеристик активной зоны.

Объединение перечисленных ПС для решения задач текущего (оперативного) сопровождения перегрузок и кампаний данного ИР определено в работе [1] как имитатор активной зоны этого реактора (ИМЗОР или IMCOR в английской транскрипции), который позволяет вычислять следующие характеристики:

- эффекты реактивности для стартовой загрузки активной зоны (эффективность органов СУЗ, эффекты перегрузок ТВС и ОУ) перед началом очередной кампании;
- мощности каждой ТВС и максимально напряженного твэла в каждой ТВС, запас до кризиса теплообмена на поверхности этих твэлов в заданные моменты кампании;
- выгорание топлива в каждой ТВС;
- характеристики условий облучения материалов и изделий в каналах, а также элементов конструкции самих реакторов.

Первый подобного рода имитатор (IMCOR_SM) разработан в НИИАР в 2005 г. для активной зоны высокопоточного исследовательского реактора СМ, в котором применяются стержневые твэлы крестообразного поперечного сечения, размещаемые в ТВС квадратного профиля. Программа MCU-RR позволяет разработать прецизионную расчетную модель активной зоны этого реактора с детальным заданием геометрии всех элементов конструкции и выделением каждого из ~6 000 твэлов. Однако скорость счета по такой модели примерно в 4 раза меньше по сравнению с вариантом, когда используются гомогенные модели ТВС, а различие в точности расчета $K_{эф}$ и средних по объемам ТВС скоростей реакций незначительно. С другой стороны, применение только гомогенных моделей ТВС не позволяет получать значения мощности максимально напряженных твэлов. В связи с этим разработана определенная технология моделирования, в соответствии с которой на предварительном этапе для каждого типа ТВС ($m_{ТВС}$) с использованием ее гетерогенной (потвэльной) модели проводят варианты расчеты активной зоны, на основе которых:

- получают потвэльные распределения энерговыделения $\{q_T\}$ и выгорания топлива $\{\alpha_T\}$ в зависимости от влияющих на эти величины факторов (тип ТВС в соседних ячейках и их выгорание α_C , положение КО $P_{КО}$);

- выделяют область (зону) в объеме ТВС, включающую группу из ~10 твэлов вблизи твэла с максимальным энерговыделением q_T^{\max} , находят средние по этой группе твэлов значения энерговыделения \bar{q}_T и выгорания $\bar{\alpha}_T$;
- обосновывают равенство между \bar{q}_T , $\bar{\alpha}_T$ и соответствующими удельными величинами $q^{\text{гом}}$ и $\alpha^{\text{гом}}$ для аналогично выделенной зоны в гомогенной модели ТВС;
- вычисляют значения коэффициента неравномерности энерговыделения $K_T = \bar{q}_T^{\max} / \bar{q}_T$ для набора значений параметров $m_{\text{ТВС}}$, $\bar{\alpha}_T$, α_C , $P_{\text{КО}}$ и заносят полученный массив $\{K_T\}$ в базу данных.

Основной расчет последовательности состояний в ходе кампании проводят с применением гомогенных моделей ТВС, в каждой из которых выделена зона с максимальным удельным энерговыделением $q^{\text{гом}}$ и с тем же числом твэльных ячеек, что и при вычислении \bar{q}_T и $\bar{\alpha}_T$. На финальной стадии, используя результаты расчета $q^{\text{гом}}$ и $\alpha^{\text{гом}}$ для выделенных зон в заданные моменты кампании и архивные значения параметра $K_T(m_{\text{ТВС}}, \alpha^{\text{гом}}, \alpha_C, P_{\text{КО}})$, определяют значения $q_T^{\max} = K_T q^{\text{гом}}$ в каждой ТВС, а при наличии модуля, вычисляющего критические тепловые потоки на поверхности твэлов, определяют запас до кризиса теплообмена.

Подготовленный однократно для данного реактора архив потвэльных распределений энерговыделения $\{q_T\}$ и выгорания топлива $\{\alpha_T\}$ для всех типов ТВС и набора условий облучения позволяет преобразовать кусочно-постоянные профили этих величин (из расчета состояний активной зоны с гомогенными моделями ТВС) в соответствующие потвэльные распределения. Такое преобразование дает избыточную информацию для обоснования загрузки и кампании ИР, но может быть востребовано при моделировании некоторых экспериментов.

Оснащение имитатора IMCOR средствами графического отображения активной зоны, перегрузок ТВС, перемещений органов СУЗ, результатов моделирования, а также преобразования экранных образов в файлы исходных данных для программы MCU-RR, делает такой имитатор доступным инженерам службы эксплуатации реактора, не имеющим представления о форматах ввода-вывода информации в применяемой прецизионной программе.

В настоящее время завершаются этапы разработки и верификации перечисленных ПС с использованием эксплуатационных тестов для реактора СМ. После демонстрации возможностей имитатора IMCOR_SM, обобщения опыта его разработки, доказательства универсальности изложенного подхода и его применимости к любому ИР должно быть принято решение о разработке в НИИАР нового “кластера” специально под задачи РСЭ как реактора СМ, так и других ИР.

Заключение

Результаты выполненных в течение последних 10 лет работ, направленных на повышение точности решения задач, возникающих в процессе РСЭ ИР, в сочетании с дальнейшим развитием вычислительной техники и системного программного обеспечения, позволили совершить переход к универсальной прецизионной программе MCU-RR, минуя трудоемкие пути совершенствования специализированных инженерных ПС. Став основой разрабатываемого в НИИАР вычислительного комплекса, включающего дополнительно локальную сеть персональных компьютеров и системы распараллеливания вычислительного процесса, программа будет с достаточной для практики точностью и оперативностью моделировать текущие и прогнозируемые состояния любых ИР в процессе их нормальной эксплуатации.

Программа MCU-RR в ближайшее время может стать элементом и более глобальной вычислительной системы, в которой нейтронно-физический блок с описанными выше возможностями соединен с теплогидравлическим блоком, чтобы моделировать наряду со стационарными режимами и переходные процессы не только в ИР, но и в опытных установках (типа ВК-50) и реакторах АЭС.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ванев Ю.Е., Марихин Н.Ю.** Современная технология разработки имитаторов активных зон исследовательских реакторов для оперативного сопровождения их эксплуатации // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов, 2005, вып.1. – С. 92 – 99.
2. **Цыканов В.А.** Исследовательские реакторы института и внутриреакторные методы исследования: Препринт НИИАР-1(682). – М.: ЦНИИАтоминформ, 1986.
3. **Gomin E., Maiorov L.** The MCU Monte Carlo Code for 3D Depletion Calculation / Proc. of Int. Conf., September 27 – 30, 1999. Madrid, Spain. Vol. 2. – P. 997 – 1006.
4. **Ванев Ю.Е., Булычева Л.В., Дорофеев А.Н. и др.** Опыт использования пакета программ MCU для обоснований ядерной и радиационной безопасности работ в топливном цикле исследовательских реакторов НИИАР / Тез. докл. межд. научно-техн. конф. “Исследовательские реакторы: наука и высокие технологии”. Димитровград, 25 – 29 июня 2001 г. – Димитровград: НИИАР, 2001. – С. 238 – 239.
5. **Франк-Каменецкий А.Д.** Моделирование траекторий нейтронов при расчете реакторов методом Монте-Карло. – М.: Атомиздат, 1978.
6. **Ванев Ю.Е., Иванов Е.Р.** Программа NGMK-10 совместного расчета характеристик полей нейтронов и гамма-квантов / ВАНТ. Сер. ФиТЯР, 1985, вып. 7. – С. 57 – 59.
7. **Майоров Л.В.** Программный комплекс ММКФК для расчета реакторов методом Монте-Карло, разработанный А.Д. Франк-Каменецким // ВАНТ. Сер. ФиТЯР, 1981, вып. 8(21). – С. 7 – 20.
8. **Ванев Ю.Е.** Аннотация составного физического модуля ФС-Д // ВАНТ. Сер.ФиТЯР, 1987, вып. 1. – С. 26 – 27.
9. **Ванев Ю.Е., Марихин Н.Ю.** Разработка и тестирование подмодуля PNDOUS в составе программы MCU-RR для расчетов дозовых характеристик нейтронных и фотонных полей // Сб. трудов семинара “Нейтроника-2000”. – Обнинск: ФЭИ, 2001.
10. **Briesmeister Judith F.** (Editor). MCNP – A General Monte Carlo Code, Version 4B”, LA-1265-M, Issued: March 1997.
11. **Kalugin M.A., Mayorov L.V.** Application of the Monte-Carlo method for analyzing the IGR reactor experiments // Proc. of Radiation Protection & Shielding Topical Meeting. No. Falmouth, Mass., April 21 – 25, 1996. ANS, 555 Kensington Avenue, La Grange Park, Ill. 605525 USA.
12. **International** Reactor Dozimetry File (IRDF-90, v. 2). IAEA-NDS-141, Rev. 2, 1993.
13. **ORIGEN-S**: SCALE system module to calculate fuel depletion, actinide transmutation, fission product buildup and decay, and associated radiation source terms. NUREG/CR-0200, Rev. 5, Vol. 2, Sec. F7, ORNL/NUREG/CSD-2/V2/R5, RSIC code package CCC-545, ORNL, Oak Ridge, TN (September 1995).
14. **Юдкевич М.С.** Программа BURNUP: Препринт РИЦ “КИ”. ИАЭ-6048/5, 1997.
15. **Программа** MCU-REA с библиотекой констант DLC/MCUDAT-2.1. Аттестационный паспорт ПС № 115 от 02.03.2000. – М.: НТЦ ЯРБ ГАН России, 2000.
16. **Марихин Н.Ю., Ванев Ю.Е.** Новый подход к задачам расчетного сопровождения эксплуатации исследовательских реакторов с использованием программы MCU / Сб. рефератов и статей “Новые технологии для энергетики, промышленности и строительства”. – Димитровград: НИИАР, 2002. – С. 206 – 213.
17. **Гуревич М.И., Марихин Н.Ю.** Некоторые проблемы реализации расчета реакторов методом Монте-Карло на многопроцессорной ЭВМ МВС-1000/М / ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2002, вып.4. – С. 15 – 22.

Статья поступила в редакцию 02 мая 2006 г.
Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 84 – 92.

УДК 621.039.5+519.85
**Расчеты критичности полномасштабных загрузок РБМК
по программе MCU-REA/1**

Е.А. Гомин, С.С. Городков, М.И. Гуревич,
ФГУ РНЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. акад. Курчатова, 1,
М.Н. Бабайцев, А.С. Немиров,
ВНИИАЭС, 109507, Москва, Ферганская ул., 25

Описаны расчеты различных состояний реальных загрузок РБМК по программе MCU-REA/1, основанной на методе Монте-Карло. Наряду с традиционно детальным моделированием взаимодействия нейтронов с веществом, большое внимание уделено унификации описания сложной трехмерной геометрии отдельных ячеек и зависимости их материального состава от выгорания топлива, плотности теплоносителя и температур составляющих материалов. В процессе расчетов оценено влияние на результат ряда неопределенностей входных данных и некоторых неизбежных в настоящее время упрощений. С учетом этих трудностей авторы рассматривают первые проделанные шаги в расчетах полномасштабных активных зон РБМК как вполне успешные.

Criticality calculation of full-scale RBMK cores using MCU-REA/1 code. E.A. Gomin, S.S. Gorodkov, M.I. Gurevich, M.N. Babaytsev, A.S. Nemirov. Calculations of real states of some RBMK reactor loads are described. They were carried out with the help of MCU-REA/1 Monte Carlo code. Along with traditional detailed modeling of neutron-medium interactions proper attention was focused on unified description of complex 3D geometry of different cells and dependence of component materials on depletion, temperature and density distribution. In calculation process was evaluated influence of some input data uncertainties and unavoidable at present simplifications. Taking into account these difficulties authors consider first full-scale calculations of RBMK cores to be quite successful.

“...Метод Монте-Карло является в принципе наиболее универсальным эталонным методом. Однако он требует много, иногда практически бесконечно много, машинного времени. Его нельзя непосредственно применить к расчету систем, размеры которых велики по сравнению с длиной пробега нейтрона; с его помощью нельзя получить детальную информацию о распределении нейтронов. Такие задачи зачастую непосильны даже для самых мощных вычислительных машин...”

Эти слова написаны Я.В. Шевелевым чуть более 30 лет назад в предисловии к сборнику [1], в котором, в частности, цитировались выполненные по методу Монте-Карло двумерные односкоростные расчеты элемента симметрии кассеты водо-водяного реактора с 10-ю различными микроячейками. Судя по приводимой погрешности, в одном варианте моделировались сто тысяч историй. Для расчетов использовалась заработавшая незадолго до того в “Курчатовском институте” ЭВМ БЭСМ-6 с оперативной памятью 30 кслов и хранением информации сначала на магнитных лентах, а десять лет спустя на дисках объемом 7 Мб.

15 лет спустя, за год до Чернобыля, стал возможен двумерный расчет свежей полиячейки РБМК с достаточно корректным моделированием геометрии и взаимодействия нейтронов с веществом. На моделирование 3,5 тысяч историй требовался час процессорного времени БЭСМ-6, которая обслуживала к тому же более сотни пользователей. Примерно в это же время начался стремительный рост производительности ЭВМ. И нынешний персональный компьютер с трехмегагерцевым процессором затратил бы на эти 3,5 тысяч историй всего 12 секунд.

Все это время программисты вели постоянную работу над повышением эффективности программ и расширением их возможностей. Отмеченные Шевелевым преграды на пути применения метода Монте-Карло были своего рода вызовом для разработчиков MCU-REA/1 [2]. В результате их усилий к настоящему времени возможности MCU-REA/1 достиг-

ли весьма высокого уровня. Так, упомянутый выше расчет полячейки РБМК стал в свое время возможен благодаря созданию ориентированного на решение именно этой задачи геометрического модуля. В мае 1986 г. сразу после Чернобыльской аварии Л.В. Майоров с сотрудниками спешно отбирали данные о наиболее важных нуклидах в выгоревшем топливе, которые необходимо учесть для оценки величины парового коэффициента РБМК.

За прошедшие с того времени годы кардинально расширены и уточнены библиотеки оцененных ядерных данных, создан универсальный геометрический модуль, стало возможно учитывать (и рассчитывать) изотопный состав из почти трехсот изотопов для сотен различных материалов. Эти достижения сделали возможными в том числе и расчеты реальных полномасштабных загрузок больших реакторов, в частности РБМК. В предлагаемой работе говорится только о расчетах на критичность, но получение детальной информации о распределении нейтронов, о котором говорил Шевелев, – задача ближайшего времени. Собственно, к ее решению авторы MCU-REA/1 приступили уже несколько лет назад, столкнувшись при этом с принципиальными, хотя и преодолимыми трудностями, которые исследуются, в частности в [3, 4].

В описываемых расчетах критичности полномасштабных загрузок РБМК по сравнению с ранее проводившимся по MCU расчетом [5] описание активной зоны и ее изотопного состава гораздо более близко к реальности. Экспериментальный факт строгой критичности ($K_{эф} = 1$) рассмотренных состояний позволяет судить по результатам расчетов о точности, обеспечиваемой программой MCU-REA/1.

Полученные результаты демонстрируют возможности применения MCU-REA/1 не только в качестве бенчмарка для верификации инженерных программ расчета реактора, в данном случае РБМК, и уточнения используемых ими библиотек макроконстант и нейтронно-физических моделей. Более важная область – расчеты эффектов реактивности, особенно в некоторых новых ситуациях, когда появляются сомнения в достоверности инженерных программ, настроенных по набору известных ранее состояний. Еще одна из возможных областей применения – непосредственные расчеты планируемых критических экспериментов при подготовке будущих РБМК к физическому пуску.

1. Расчеты свойств начальной загрузки РБМК

В этом разделе использованы данные об экспериментах на начальной загрузке реактора РБМК-1000 IV энергоблока Чернобыльской АЭС во время его физического пуска, проводившегося в конце 1983 г. Они содержатся в отчете комиссии по физпуску [6]. По ходу работ несколько раз достигалось критическое состояние полностью загруженного холодного реактора, соответствующее наличию или отсутствию воды в группах каналов и различному положению органов регулирования. Ниже описаны расчеты эффективного коэффициента $K_{эф}$ размножения нейтронов этих критических состояний с помощью программы MCU-REA/1.

1.1. Краткая информация о расчетной модели реактора

Начальная загрузка реактора РБМК-1000 IV энергоблока Чернобыльской АЭС в технологических каналах (ТК) содержала 1 386 тепловыделяющих сборок (ТВС) с топливом 2 % обогащения. Для компенсации избыточной реактивности в 234-х ТК находились дополнительные поглотители (ДП) с втулками из бористой стали, а 41 ТК остался незагруженным (НТК). Все ТК входят в контур многократной принудительной циркуляции теплоносителя (КМПЦ).

КОСУЗ – контур охлаждения каналов СУЗ включает 12 каналов с высотными датчиками контроля энерговыделения (ДКЭВ) и 211 каналов с подвижными поглощающими стержнями, из них 24 – укороченные стержни-поглотители (УСП) с длиной поглощающей части 3 м.

Во всех экспериментах УСП были полностью введены в активную зону, и их положение не менялось. Они находились на верхних концевиках (ВК), что соответствует 3,5 м по указателю положения (УП). Также постоянным во всех критических состояниях было положение 24-х стержней аварийной защиты (АЗ), поднятых в самое верхнее положение – на ВК, что соответствует 0,2 м по УП. Три группы по четыре стержня СУЗ в каждой выделены как автоматические регуляторы (АР-1, АР-2, АР-3). Прочие стержни в дальнейшем обозначаются как ручные регуляторы (РР). Положение нижних концевиков (НК) для стержней СУЗ этого типа соответствовало 6,7 м по УП.

Активная зона по радиусу окружена тремя слоями неохлаждаемого отражателя из 444 сплошных графитовых колонн и одним слоем охлаждаемого отражателя из 156 колонн с водой в каналах, расположенных на оси ячейки. К ним еще относят 4 канала КОСУЗ, расположенных практически симметрично на периферии активной зоны. Таким образом, вся рассчитываемая область состоит из 2 488 колонн. Высота каждой колонны 8 м (7 м приходится на активную зону и по 0,5 м на нижний и верхний торцевые отражатели). Нейтроны, вылетающие за пределы расчетной области, картограмма которой показана на рис. 1, считаются поглотившимися.

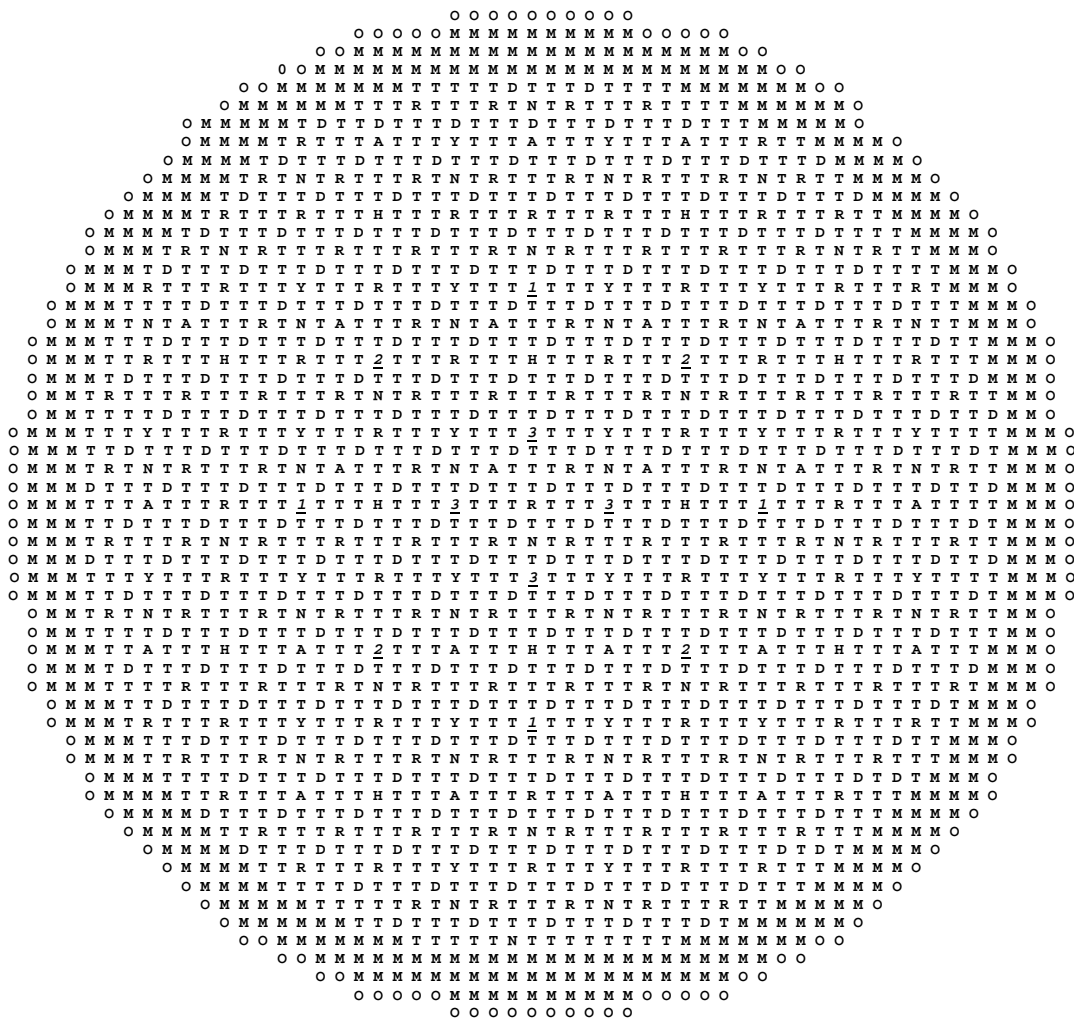


Рис. 1. Картограмма загрузки рассчитываемой области реактора РБМК-1000. Ячейки: Т – ТВС; D – ДП; А – АЗ; R – РР; Y – УСП; 1, 2, 3 – АР-1, 2, 3; N – НТК; H – ДКЭВ; O – охлаждаемый отражатель; M – неохлаждаемый отражатель

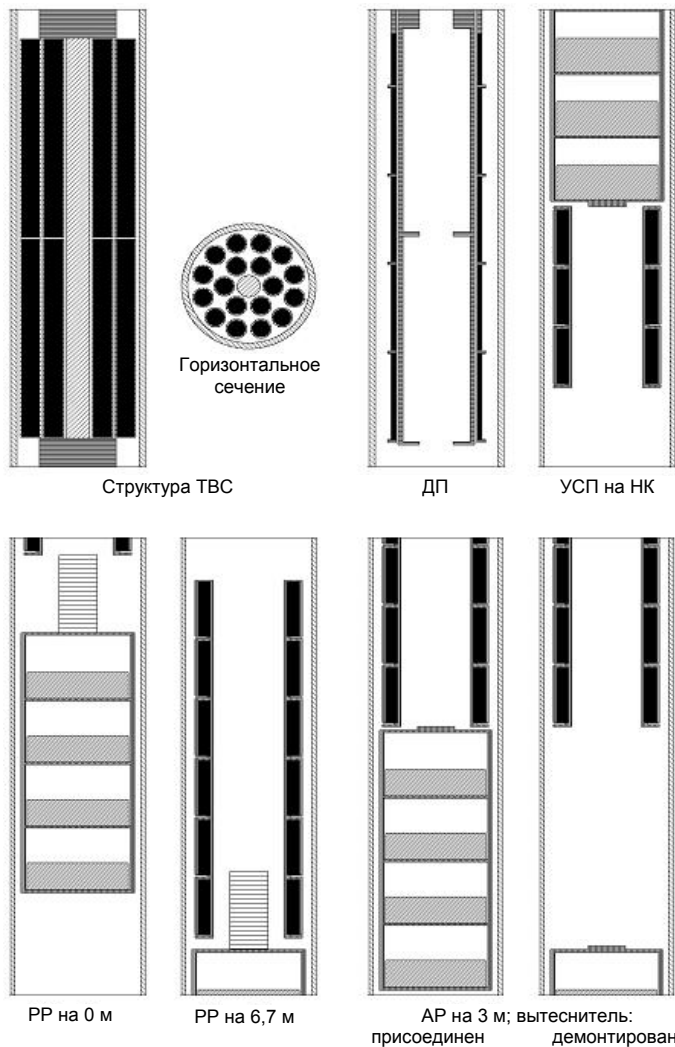


Рис. 2. Геометрические модели наиболее сложных ячеек IV блока ЧАЭС

На рис. 2 показана структура конструктивно наиболее сложных ячеек реактора, как ее моделирует MCU-REA/1. На этом и следующих далее аналогичных рисунках, полученных с помощью графопостроителя MCU, масштаб по горизонтали в 25 раз крупнее, чем по вертикали. На рис. 2 при изображении вертикальной структуры ТВС для наглядности внешнее кольцо твэлов повернуто на 15° . Дистанционирующие решетки, отсутствие которых повысило бы $K_{эф}$ на $\sim 1\%$, гомогенизированы по теплоносителю. Сравнение этого приближения с более точной моделью, когда решетка имитировалась 18-ю надетыми на твэлы колечками той же высоты и с той же полной массой, не выявило различий в пределах статистической погрешности ($\delta K_{эф} \leq 0,1\%$) в двух расчетах с одним миллионом историй в каждом.

Изображенная структура стержней АР отражает внесенные изменения, когда для обеспечения устойчивой работы системы автоматического регулирования вытеснители АР были демонтированы и погружены на дно каналов. В пусковых экспериментах вытеснители АР были жестко соединены с их поглощающей частью, и их относительное положение было, как у РР на НК.

1.2. Результаты расчета критических состояний

Критические состояния начальной загрузки достигались при проведении экспериментов по измерению эффектов реактивности при обезвоживании КМПЦ и КОСУЗ, взвешиванию и градуировке стержней СУЗ. Каждый раз реактор выводился в критическое состояние путем извлечения стержней РР в установленном порядке. В подавляющем большинстве расчетов этих состояний моделировались 20 миллионов историй нейтронов. Расчет каждого варианта занимал ~ 20 часов на ПК с 1 ГГц процессором.

Следует отметить, что в реакторе РБМК, размеры активной зоны которого во много раз превышают длину миграции нейтронов, даже небольшие изменения локальных характеристик могут вызвать значительные изменения (перекосы) в распределении нейтронных полей. Из-за этого вклад отдельных участков активной зоны в реактивность будет сильно меняться. При расчете большого реактора методом Монте-Карло с ростом числа историй локальные значения нейтронного потока будут медленно приближаться к своим точным значениям. Были опасения, что и $K_{эф}$ также может “ползти”. Для проверки такой возможности в расче-

тах нескольких состояний промоделировано по 120 миллионов историй. Во всех случаях уточненное значение $K_{эф}$ лежало в пределах статистической погрешности, указываемой в финальной выдаче MCU-REA/1. В расчетах с 20-ю миллионами историй статистическая погрешность оценки $K_{эф}$ составляет $\sim 0,02\%$.

Подготовка исходных данных для расчета полномасштабной загрузки РБМК согласно описанной выше модели представляет собой значительную проблему в связи с большим количеством различных ячеек, составляющих реактор, и их сложной структурой. В целях упрощения и автоматизации подготовки файла входных данных, объем которых составлял в данном случае ~ 85 кбайт, для MCU-REA/1 разработано специальное программное средство, называемое Конвертор Данных для расчета методом Монте-Карло (КДМК) [7].

Постепенно сложилась вычислительная модель реактора, заметим – не окончательная, которая дала возможность неплохо воспроизвести $K_{эф}$ одиннадцати критических состояний холодной активной зоны РБМК. Эти результаты приведены в табл. 1 и 2. По всем вариантам максимальное, минимальное и среднее отклонения $K_{эф}$ от единицы составляют $-0,27$, $-0,07$ и $-0,17\%$, соответственно, а среднеквадратичное отличие $K_{эф}$ от среднего $\pm 0,06\%$.

Таблица 1. Результаты расчетов критических состояний при измерении эффектов обезвоживания КМПЦ и КОСУЗ

№	Вода в КМПЦ			Вода в КОСУЗ	Количество РР, извлеченных для достижения критического состояния	$K_{эф} - 1, \%$
	ТВК	ДП	НТК			
1	есть	есть	есть	есть	15 РР на ВК, 16-й РР на 3,0 м	-0,22
2	есть	есть	есть	нет	12 РР на ВК, 13-й РР на 2,4 м	-0,27
3	нет	есть	есть	есть	45 РР на ВК, 46-й РР на 1,0 м	-0,16
4	нет	нет	есть	есть	67 РР на ВК, 68-й РР на 2,9 м	-0,13
5	нет	нет	нет	есть	50 РР на ВК, 51-й РР на 3,0 м	-0,13
6	нет	нет	нет	нет	45 РР на ВК, 46-й РР на 2,0 м	-0,13

Таблица 2. Результаты расчетов критических состояний в экспериментах по взвешиванию и градуировке стержней СУЗ

№	Положение стержней РР и АР				$K_{эф} - 1, \%$	
	Количество извлеченных РР		АР-1	АР-2		АР-3
1	4 РР на ВК, 5-й РР на 2,4 м		3,5 м	ВК	3,5 м	-0,19
2, 3	4 РР на ВК, 5-й РР на 1,5 м		3,5 м	3,5 м	3,5 м	-0,17
4	5 РР на ВК, 6-й РР на 6,2 м		3,5 м	3,5 м	3,5 м	-0,12
5	15 РР на ВК, 16-й РР на 1,0 м		НК	НК	НК	-0,24
6	18 РР на ВК		3,0 м	3,0 м	3,0 м	-0,07

1.3. О роли параметров в полномасштабных расчетах реакторов

В процессе получения результатов из табл. 1 и 2 просчитано не менее 200 вариантов. Их большое количество объясняется постепенным накоплением опыта прецизионных полномасштабных нейтронно-физических расчетов такого сложного реактора, как РБМК. Необходимость такого накопления вызвана не только недостаточным личным опытом авторов работы, но также и новизной задачи, неготовностью для нее нужной информации и отсутствием оценки важности отдельных составляющих этой информации.

В качестве иллюстрации к сказанному приведем далее некоторые результаты предварительных расчетов, которые могут оказаться полезными для оценки влияния ряда параметров вычислительной модели РБМК на значение $K_{эф}$. Наилучшим способом получения таких оценок было бы поочередное введение соответствующих поправок в некую “базовую” модель, например ту, результаты использования которой приведены в табл. 1 и 2. Эта работа может

быть выполнена в дальнейшем, но ниже приводятся изменения эффективного коэффициента размножения $\delta K_{эф}$ после введения соответствующих поправок в какой-то промежуточный вариант расчета состояний 1...6. Прочерк означает, что это изменение $K_{эф}$ не посчитано. Напомним, что расчет всех 6-ти состояний на одном ПК, тогда в 1 ГГц, требовал 5 суток. А за такое время могли всплыть старые ошибки либо новые любопытные поправки, которые не терпелось проверить, либо первые результаты запущенного расчета не обещали существенных изменений величины $K_{эф}$.

Поскольку оцениваемая MCU-REA/1 статистическая погрешность расчета $K_{эф}$ $\sim 0,02$ %, то для приводимых ниже разностей она, соответственно, $\sim 0,03$ %. Итак,

♦ замена ошибочно использованных кластерных ДП (2 641) на штатные ДП (1 814) значительно повысила $K_{эф}$:

№ варианта	1	2	3	4	5	6
$\delta K_{эф}$, %	+1,38	+1,85	–	–	–	–

♦ замена гомогенизированного по вытеснителям стержней СУЗ графита на реальную структуру пустота-графит привела к заметному и неравномерному по состояниям сдвигу $K_{эф}$:

$\delta K_{эф}$, %	–0,02	0,02	0,91	0,93	0,98	0,96
---------------------	-------	------	------	------	------	------

♦ переход от приближенного описания поглощающего элемента стержней СУЗ в виде одного элемента к более точному, изображенному на рис. 2, привел к небольшому и равномерному по состояниям повышению $K_{эф}$:

$\delta K_{эф}$, %	0,17	0,18	0,23	0,11	0,17	0,13
---------------------	------	------	------	------	------	------

При этом уточнении произошло увеличение поверхности, которой и поглощает практически черный поглотитель. Но часть поглотителя заменилась водой и алюминием. Суммарный эффект, как видим, предсказать довольно трудно. Заметим здесь, что программных препятствий для еще более детального описания реальной геометрии каналов нет, а усложненное описание геометрии чревато не столько замедлением счета, сколько повышением вероятности какой-либо ошибки. Поэтому, пока бумажные чертежи кодирует человек, геометрию следует по возможности упрощать, соблюдая следующие “законы сохранения”: у сильных поглотителей сохранять величину поверхности, а у слабых – объем. Ну, а уж топливо описывать более тщательно. К сожалению, это правило сформулировано задним числом, когда кодирование геометрии было уже завершено;

♦ описание геометрии ТВС полагает длину твэлов равной 346 см, но ядерные концентрации первоначально соответствовали длине 350 см, что снижало общую массу топлива на 1,14 %. Соответствующее увеличение концентрации следующим образом увеличило $K_{эф}$:

$\delta K_{эф}$, %	0,22	0,18	0,08	0,18	0,08	0,12
---------------------	------	------	------	------	------	------

♦ в некий момент увеличение сечения поглощения свежего графита с 3,4 до 4,2 мб в тепловой точке, вызванное отравлением примесями, впоследствии выгорающими, промоделировано добавлением двух ядер ^{10}B на 10^7 ядер углерода. Это соответствовало ядерной концентрации ^{10}B $1,68 \cdot 10^{-8}$ в файле входных данных и привело к заметному и неравномерному понижению $K_{эф}$:

$\delta K_{эф}$, %	–1,06	–1,04	–1,35	–1,28	–1,33	–1,27
---------------------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

♦ в дальнейшем концентрация ^{10}B была снижена до $1,45 \cdot 10^{-8}$, но добавлен кадмий с концентрацией $6,21 \cdot 10^{-9}$ в соответствии с данными [8]. Это также несколько снизило $K_{эф}$:

$\delta K_{эф}$, %	–0,22	–0,27	–0,23	–0,24	–	–
---------------------	-------	-------	-------	-------	---	---

♦ проверено различие между подмодулями МОФИТТГ (групповое транспортное приближение) и ФИМТОЭН (поточечное представление сечений, корректный учет корреляции между изменением энергии нейтрона и направления его полета после рассеяния) составного физического модуля [2], по-разному описывающими перенос тепловых нейтронов. Исполь-

зование последнего, более точного, увеличивает время счета в полтора раза, т.е. на несколько часов, и приводит к следующим изменениям в $K_{эф}$:

$\delta K_{эф}, \%$	0,12	0,06	–	–	0,07	0,12
---------------------	------	------	---	---	------	------

Их сочли небольшими, а использование подмодуля ФИМТОЭН излишне накладным, и далее все расчеты проводились с МОФИТТГ;

◆ по завершении пусковых экспериментов и подготовке к выводу реактора на минимальный контролируемый уровень (МКУ) мощности в активной зоне произошли некоторые изменения. В частности, для обеспечения устойчивой работы системы автоматического регулирования вытеснители стержней АР были демонтированы и погружены на дно каналов. Неучет этого изменения, отраженного на рис. 2, увеличил бы $K_{эф}$ состояния № 6 табл. 2 на 0,2 %;

◆ длительное время концентрация примеси Hf согласно [9] полагалась равной $1,105 \cdot 10^{-5}$ в цирконии-125 (трубы каналов) и $1,35 \cdot 10^{-5}$ в цирконии-110 (покрытие твэлов). В соответствии с данными [8] эта концентрация уменьшена до $0,442198 \cdot 10^{-5}$, что привело к следующему повышению $K_{эф}$:

$\delta K_{эф}, \%$	0,39	0,41	0,35	–	–	–
---------------------	------	------	------	---	---	---

◆ но, используя из ранней версии [8] концентрации не только примеси Hf, но и легирующей добавки Nb, отсюда перенесено ошибочное, уменьшенное на порядок значение этой концентрации в оболочках твэлов. А тут еще искажение масштаба на наших рисунках типа рис. 2 не помешало Г.Б. Давыдовой (РНЦ “КИ”) обратить внимание на явно (не для нашего – для ее опытного взгляда) излишнюю толщину штока телескопического соединения поглотителя с вытеснителем стержней СУЗ – 3,8 см вместо 2,5 см. Одновременное исправление этих ошибок привело к следующему изменению $K_{эф}$:

$\delta K_{эф}, \%$	0,03	–0,06	–0,18	–0,04	–0,06	0,05
---------------------	------	-------	-------	-------	-------	------

◆ после этого пересчета обнаружилось, что верхний и нижний концы ТВС считались алюминиевыми, а они на самом деле стальные. Это было последнее исправление, учтенное авторами в базовой, на данный момент, модели РБМК, и оно привело к следующему изменению $K_{эф}$:

$\delta K_{эф}, \%$	0	–0,01	–0,04	–0,06	–0,05	–0,08
---------------------	---	-------	-------	-------	-------	-------

Необходимая информация об активной зоне РБМК накапливалась постепенно. То же можно сказать и об обнаружении ошибок. По ходу этой трехгодичной работы авторам приходилось неоднократно отвлекаться на другие задачи. Поэтому, в частности, не все замеченные ошибки были немедленно исправлены. После того, как на некоторых вариантах убеждались в их малой, порядка 0,1 % $K_{эф}$, роли, работа над их исправлением откладывалась, как оказалось, на неопределенное время;

◆ так, например, не было окончательно учтено, что 12 каналов ДКЭВ при расчете всех вышеуказанных экспериментов, кроме шестого из табл. 2, оставались обезвоженными, т.е. вокруг заполнявшей канал гильзы, считавшейся пустой, отсутствовала пленка воды толщиной 0,6 см;

◆ также пока не проведена замена материала вышеупомянутых штоков со стали (ошибка) на алюминий.

С грустью оглядываясь на перечисленные выше ошибки, остается только утешаться, что без автоматизации подготовки входных данных с помощью интерфейса КДМК количество ошибок вообще погрело бы под собой всю эту задачу.

В заключение этого пункта обратимся еще раз к концентрациям примесей. Их количество может меняться от образца к образцу. Поэтому неопределенность в них только отчасти может быть объяснена различием справочников, где многие малые концентрации приводятся со знаком < (меньше чем). Расчетчик может брать непосредственно эти цифры, а может, как зачастую делается, их половинные значения. Иногда это довольно заметно меняет ре-

зультаты и открывает возможности для их коррекции в желательную сторону. Как, впрочем, и учет/неучет многих мелких эффектов. Перечислив здесь если не все, то многие из этих эффектов, авторы надеются избежать упреков в подобной намеренной коррекции.

1.4. Расчет подкритичности

Измерения подкритичности во время физического пуска IV блока Чернобыльской АЭС выполнялись с помощью реактиметра по ходу следующего процесса: в критических состояниях табл. 1 сначала сбрасывались стержни РР, извлеченные при выходе в критическое состояние, затем “вдогонку” сбрасывались 24 стержня АЗ. Измеренное значение подкритичности доходило до $K_{эф} - 1 = -0,05$. Быстрый спад нейтронного потока при таких подкритичностях да еще с учетом движения стержней – сложный пространственно-временной процесс. Поэтому статический расчет $K_{эф}$ методом Монте-Карло для состояний со всеми опущенными РР и опущенными РР и АЗ даст только приближенное представление о процессе затухания нейтронного потока. Результаты таких статических расчетов приведены в табл. 3. Колонки “MCU” содержат разность рассчитанных $K_{эф}$ для сборки в критическом состоянии и той же сборки с погруженными стержнями СУЗ. Колонки “эксп.” получены умножением значений подкритичности из табл. 5 на стр. 17 [6] на 0,0064 – принятое в [6] значение эффективной доли запаздывающих нейтронов. Колонки “MCU-эксп.” содержат разность величин из двух предыдущих колонок.

Т а б л и ц а 3. Подкритичность 1 – $K_{эф}$ состояний реактора при измерении эффектов обезвоживания

№	Сброс РР			+ сброс АЗ		
	MCU	Эксперимент	MCU-эксперимент	MCU	Эксперимент	MCU-эксперимент
1	0,013	0,012	0,001	0,024	0,028	-0,004
2	0,016	0,012	0,005	0,032	0,028	0,004
3	0,041	0,028	0,012	0,059	0,044	0,015
4	0,049	0,035	0,014	0,065	0,051	0,014
5	0,040	0,028	0,011	0,057	0,045	0,013
6	0,044	0,031	0,013	0,065	0,051	0,015

Полагаем, что одной из причин систематического превышения величин подкритичности в расчетах по MCU-REA/1 может быть требование консервативности оценок подкритичности, предъявляемое к упрощенной программе, обслуживающей реактиметр, которая в данном случае может давать заниженный результат измерения, но не должна завывать его.

1.5. Вывод на МКУ

Вывод осуществлен из критического состояния № 6 табл. 2 после разогрева активной зоны за счет работающих циркуляционных насосов до температуры ~110 °С воды в КМЩ и графитовой кладке и извлечения дополнительно 10 РР.

Моделирование второго шага по MCU-REA/1 увеличило расчетное $K_{эф}$ (0,9993) на 0,7 %. Повышение температуры всех материалов уменьшило $K_{эф}$ всего на 0,05 %. Таким образом, расчетная критичность 1,0063 реактора превысила наблюдаемую на 0,63 %! После неплохих результатов из табл. 1 и 2 это показалось многовато и заставило задуматься над возможными неучтенными или некорректно учтенными эффектами.

- ◆ Если бы не было разогрева графита, это понизило бы $K_{эф}$ на 0,46 %. Но нам подтвердили, что эта величина измеряется достоверно и на недогрев графита рассчитывать не следует.
- ◆ Серебряные эмиттеры ДКЭВ, размешанные по центральным стержням всех ТВС, уменьшили $K_{эф}$ на 0,06 % и далее не учитывались.
- ◆ Уменьшение плотности воды в КМЩ на ~5 % вследствие ее разогрева не привело к заметному изменению $K_{эф}$.

♦ Все материалы внутри каналов КОСУЗ, вода которых сохраняла комнатную температуру, оставлены неразогретыми, что понизило $K_{эф}$ на 0,15 %.

♦ Равномерно по топливу добавлен ксенон в количестве, соответствующем работе реактора на 5 % уровне мощности в течение 12-ти часов. Это заметно (на 0,25 %) уменьшило $K_{эф}$.

С учетом двух последних пунктов для МКУ получен $K_{эф} = 1,0025$. Сколько времени и по какому графику мощности на самом деле происходил вывод на МКУ, нам выяснить не удалось. Конечно, даже если мы правы со временем, логичнее было предположить линейный рост мощности, что примерно в два раза уменьшило бы количество ксенона. Но ведь и ксенон не вырабатывался равномерно по топливу: больше там, где больше энерговыделение, а значит, где больше и роль его поглощения.

Учитывая, что критическое состояние реактора на МКУ – финальная стадия динамического процесса, результат статического расчета по MCU-REA/1 можно признать удовлетворительным. А необходимость дополнительного исследования роли некоторых параметров еще раз подчеркивает многообразие и сложность происходящих в реакторе процессов.

2. Полномасштабные активные зоны РБМК в рабочем состоянии

Для расчета рабочих состояний требуется гораздо больше входной информации по сравнению с расчетами свежих холодных состояний. Поэтому возможности КДМК пришлось существенно расширить. Первый вариант этого интерфейса детально моделировал геометрию активной зоны и сложное движение стержней управления. Это дало возможность провести многовариантные расчеты критических состояний свежей холодной загрузки реактора РБМК-1000, достигнутых в процессе пусковых экспериментов на IV энергоблоке Чернобыльской АЭС (п. 1 данной работы). Теперь этот интерфейс берет информацию о конкретном состоянии реактора РБМК из соответствующих файлов базы данных, входящей в состав комплекса программ ЭНЕРГИЯ (БДЭ), разработанного во ВНИИАЭС. Сам же интерфейс имеет свою внутреннюю библиотеку данных, содержащую лишь общие материально-геометрические характеристики РБМК.

2.1. Дополнительная информация о геометрии расчетной модели реактора

Отличия этой информации от приведенной в п. 1.1 обусловлены постоянно накапливаемыми конструктивными изменениями отдельных типов ячеек и увеличением количества этих типов. По сравнению с первой загрузкой описанного в п. 1.1 четвертого блока ЧАЭС изменился тип ДП, увеличено количество поглощающих звеньев в стержнях СУЗ старого

Таблица 4. Ячейки, информация о которых имеется в библиотеке КДМК

Описание	Тип
Стержень быстрой аварийной защиты СУЗ 2505	BAZ
ДКЭВ высотный	DKEB
РР – стержень регулирующий СУЗ 2091-01	PP
УСП – стержень компенсирующий 2093	YCP
НТК	CB
Стержень ДП кластерный 2641	DP KL
ТВС с топливом 2,4 %	2,4 %
ТВС с топливом 2,6 % + 0,41 % Ег	2,6 % ERB
РР – стержень регулирующий СУЗ 2477-01	PP 2477
Кластерный регулирующий орган (КРО) 2399	DPC
Стержень ДП кобальтовый 2365	DPCOB

типа, появились новые типы регулирующих органов, кобальтовые ДП. Для отражения этих изменений расширена внутренняя библиотека общих материально-геометрических данных РБМК, заложенная в КДМК. Ее нынешнее содержание отражено в табл. 4. Характеристика Тип соответствует кодировке ячеек в картограммах загрузки рабочих состояний активных зон в БДЭ.

На рис. 3 показана геометрия новых наиболее сложных ячеек, как она промоделирована в программе MCU-REA/1. Программных препятствий для еще более детального описания реальной геометрии каналов нет. Здесь же следует отметить, что конвертор правильно отражает плавное изменение глубины погружения стержней СУЗ, вводя для каждого нового значения глубины свое описание геометрии. Таких разных стержней с различными глубинами погружения набирается 50...70, и каждой из них сопоставляется соответствующее геометрическое описание в файле входных данных.

2.2 Входная информация о конкретном рабочем состоянии

Информация из БДЭ к программе MCU-REA/1 передается в виде набора файлов, содержащих: интегральные энерговыделения в МВт-сут/кг; атомные плотности ксенона-135; плотность теплоносителя; температуры топлива, графитового замедлителя, графитовых втулок, стенок каналов, теплоносителя; картограммы типов ячеек в загрузке и глубин погружений стержней СУЗ.

Все файлы, кроме двух последних, содержат указанные средние характеристики для каждого из 14 полуметровых слоев активной зоны последовательно сверху вниз от 0,5 до 7,5 м по высоте нашей модели РБМК. Характеристики каждого слоя состоят из 1 884 чисел по числу ячеек активной зоны, как бы читаемой по строкам слева направо, сверху вниз. Необходимые характеристики для слоев 0...0,5 и 7,5...8 м считаются такими же, как в ближайших слоях. Эти данные известны с заметной погрешностью, поскольку являются результатами расчетов по приближенным алгоритмам, корректируемыми по показаниям систем реакторного контроля. Поэтому они используются в качестве параметров прецизионного расчета за отсутствием более точных. Насколько это может ухудшить результаты расчета – должен показать опыт.

В программе MCU-REA/1 одно и то же вещество при разных заданных температурах рассматривается как различные материалы. И буквальная трактовка, например, температур замедлителя приведет к списку из тысяч графитов. Попытки задать такой список программе достаточно бессмысленны, поскольку интуитивно ясно, что по многим причинам чрезмерная детализация, приведя к тяжелой нагрузке на компьютер, вряд ли сделает расчет существенно более точным.

Поэтому для каждой из характеристик интерфейс сначала находит границы области изменения предложенных значений. Затем эта область делится на заданное число интервалов, чтобы в каждый интервал попадало одинаковое количество этих значений. Так определяются границы интервалов, а затем значение величины, характеризующей каждый интервал так, чтобы выше и ниже этого значения лежала половина значений в пределах интервала.

Предварительный анализ информации из БДЭ показал, что на ближайшее время вполне приемлемо считать плотность воды в КОСУЗ равной единице, а температуры воды и стенок каналов КМПЦ и КОСУЗ лежащими в пределах только одного, своего для каждого контура, интервала. Число интервалов для существенно меняющихся величин задается пользователем. Этими величинами, относящимися к полуметровому высотному сегменту ячейки, являются: плотность воды в КМПЦ; температуры графита замедлителя и втулки; интегральное энерговыделение топлива; температура топлива; концентрация ядер ксенона-135 в топливе; “историческая” плотность воды, при которой происходило выгорание.

Для температуры графита или плотности воды, разбитых в описываемых расчетах на 10 интервалов, увеличение их числа практически не создаст никаких проблем для MCU-REA/1. С характеристиками топлива надо быть осмотрительнее, поскольку число различных, с точки зрения MCU-REA/1, материалов пропорционально произведению числа интервалов всех четырех величин – выгорания, температуры, концентрации ксенона и исторической плотности воды и по предварительной оценке превышает несколько сотен. А если в реакторе имеется топливо разных концентраций, то, по-видимому, это произведение надо умножить еще и на количество различных видов топлива.

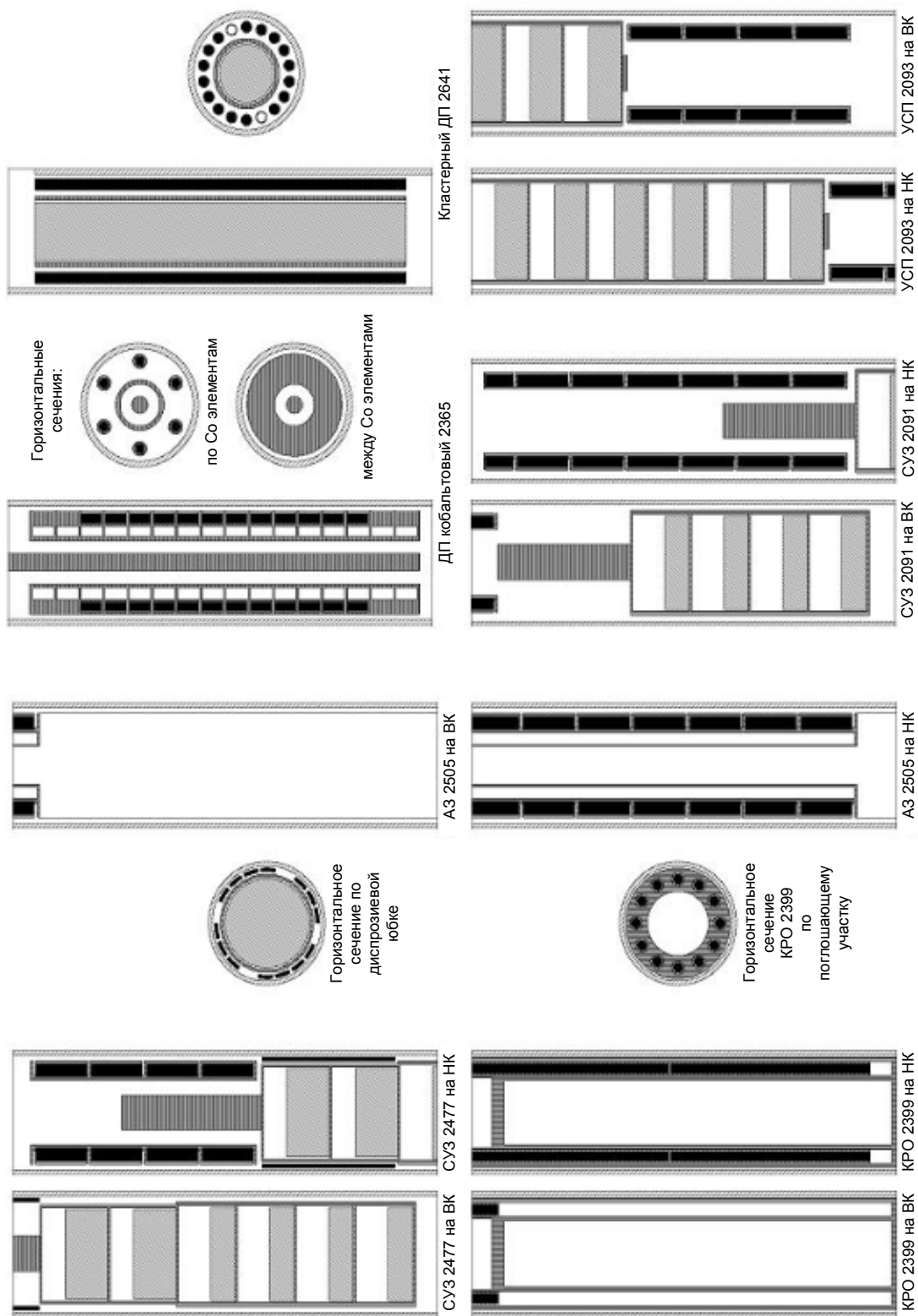


Рис. 3. Геометрические модели некоторых современных сложных ячеек РБМК

Здесь отчасти помогает сам интерфейс, который выбрасывает из полного списка топлива с такой комбинацией четырех параметров, которая не встречается в данном состоянии. Кроме того ясно, что влияние на изотопный состав плотности воды, при которой произошло выгорание, так называемой исторической плотности, возрастает примерно пропорционально глубине выгорания. Поэтому, если по исторической плотности пользователь задаст $N_{инт}$ интервалов, то интерфейс разобьет весь диапазон выгораний также на $N_{инт}$ интервалов и будет считать, что для меньших выгораний, попадающих в первый интервал, задан один интервал по плотности, для второго – два и только для самого последнего $N_{инт}$ -го с максимальными выгораниями будут заданы все $N_{инт}$ интервалов исторической плотности. Применение этих двух способов экономии входной информации может дать неплохой результат. Так, при числе интервалов по выгораниям, температуре, ксенону и воде, равном 40, 3, 2 и 2, соответственно, общее количество веществ, описывающих топливо для некоторого рабочего состояния, оказалось всего 223 вместо $40 \times 3 \times 2 \times 2 = 480$.

Выбирая количество интервалов, на которые надо разбить весь диапазон изменения какого-либо параметра, полезно иметь представление о влиянии этого изменения на рассчитываемую величину, в данном случае на $K_{эф}$.

При выгорании цилиндризованной ячейки РБМК от 0 до 30 Мвт·сут/тU ее K_{∞} уменьшается примерно на 40 %. Добавление стационарного ксенона-135 в такой свежей ячейке уменьшает K_{∞} примерно на 5 %. Увеличение температуры топлива на 100 °С уменьшает $K_{эф}$ примерно на 0,15 %. Не так уж и много, но сам диапазон температур рабочего состояния примерно 600 °С. Наличие воды в ячейке изменяет спектр нейтронов так, что K_{∞} одного и того же состояния цилиндризованной ячейки при изотопных составах, соответствующих наибольшему выгоранию при исторических плотностях теплоносителя 0 и 1, будут различаться примерно на 2 %.

Из приведенных выше данных следует, что число интервалов по выгоранию должно быть примерно в десять раз больше, чем по другим параметрам. Если в рассчитываемой активной зоне присутствуют несколько видов топлива, то разумно выбирать соотношение между задаваемым для них количеством интервалов выгорания в зависимости от числа ТВС с соответствующим топливом. Приводимые ниже результаты, где это не оговорено специально, получены при количестве интервалов по топливу, его температуре, ксенону, исторической плотности воды соответственно 40, 3, 2 и 2.

Если файл входных данных для полномасштабного расчета холодного свежего состояния РБМК содержал ~80 кбайт информации, то аналогичный файл для рабочего состояния содержит ~6 Мбайт. Три четверти его объема занимает изотопный состав нескольких сотен материалов, большинство из которых – разные сорта топлива при различных уровнях выгорания и отравления. Впрочем, поскольку пользователь создает этот файл с помощью специальной программы-интерфейса, то ему и заглядывать придется не в этот файл, а в инфовыдачу интерфейса.

2.3. Изотопный состав топлива

Для определения изотопного состава, соответствующего заданному выгоранию, использовались предварительно насчитанные по MCU-REA/1 библиотеки для каждого сорта топлива. Они формировались на основании расчетов выгорания в двумерной цилиндрической ячейке с несколько увеличенным, по сравнению с эквивалентной, радиусом 14,985 см из-за увеличенного количества графита. Эти расчеты весьма близки к тем, которые проводились при создании бенчмарков для верификации инженерных программ расчета РБМК-1000 [10].

Как и в прежних расчетах, твэлы во внешнем и внутреннем кольцах разбивались на пять равнообъемных концентрических зон каждый для учета радиальной неравномерности выгорания. С учетом симметрии получалось всего десять выгорающих зон. В расчетах полно-

масштабных загрузок предполагалось, что все 18 твэлов имеют одинаковый состав. А информация об их изотопном составе в библиотеке получалась усреднением соответствующих составов в десяти зонах твэлов. Такое усреднение даже при максимальном выгорании повышает K_{∞} ячейки менее чем на 0,2 %.

Расчет выгорания ячейки проводился с помощью модуля BURNUP [11] при пяти значениях плотности теплоносителя: 0,1, 0,3, 0,5, 0,7 и 0,9 г/см³. Все пять изотопных составов, соответствующих определенному выгоранию, входили в библиотеку – отдельный текстовый файл, содержащий концентрации ~300 изотопов в данном типе топлива, достигшего при определенной плотности окружающего теплоносителя определенной степени выгорания. Эти данные служат опорными точками сплайновой интерполяции при получении изотопных составов для заданного выгорания при заданной исторической плотности воды в полномасштабных расчетах рабочих состояний. Считается, что историческая плотность равна плотности теплоносителя для данного высотного сегмента ТВС. Структура библиотек достаточно прозрачна, делая их пригодными для применения в программах других разработчиков.

Каждое делящееся вещество, а их, напомним, несколько сотен во входном файле MCU-REA/1, задается явно упомянутым списком из ~300 изотопов. К началу моделирования историй нейтронов этот список существенно укорачивается благодаря использованию метода суммарного изотопа [2], позволяя в каждом материале заменить все малозначащие для конкретной задачи неделимые изотопы одним суммарным изотопом. Таким образом в каждом из нескольких сотен веществ, задаваемых в файле входных данных для полномасштабного расчета рабочего состояния, максимально реалистично учитывается только ~20 изотопов.

В ячеечных расчетах изотопного состава уран-эрбиевого топлива 2,6 % ²³⁵U + 0,41 % Er начальные ядерные концентрации соответствовали 112,61 кг урана на ТВК, его обогащение 2,598 % + 0,406 % Er, а достигнутое энерговыделение равнялось 29,82 МВт·сут/кгU. В ячеечных расчетах изотопного состава уранового топлива с обогащением 2,4 % начальные ядерные концентрации соответствовали 114,38 кг урана на ТВК, его обогащение 2,4 %, а достигнутое энерговыделение равнялось 26,84 МВт·сут/кгU. Для составления библиотек по одному сорту топлива требуется сосчитать около сотни вариантов по одному миллиону историй каждый.

Одним из параметров расчета выгорания ячейки служит уровень мощности. От него может зависеть не только концентрация ксенона-135, но в более слабой степени и концентрации некоторых других изотопов. Мы полагали, что уровень мощности за рассчитываемый период времени убывает от ~25 МВт/тU примерно в два раза. Глядя назад, можно сказать, что эта, впрочем, нетрудная детализация была излишней.

Действительно, отравление ¹³⁵Xe играет заметную роль в работе реактора. Его средняя концентрация в полуметровых сегментах ТВС бралась сначала из файла концентраций ксенона, получаемого вместе с другими данными из БДЭ. Но эту концентрацию можно вычислить и из данных о мощности ТВС, также взятых из БДЭ. Дело в том, что модуль BURNUP программы MCU-REA/1 применяет результаты уже выполненных расчетов выгорания для гораздо более быстрого расчета изотопного состава при других временных графиках энерговыделения. Таким образом рассчитаны концентрации ¹³⁵Xe в топливе при исторической плотности 0,5 и в те же моменты по выгоранию, но при девяти уровнях мощности в последние 5 дней, составляющих 0, 0,25, 0,5, 0,75, 1, 1,25, 1,5, 1,75 и 2 от “номинального” уровня, соответствующего этому энерговыделению.

Полученные так концентрации ¹³⁵Xe объединены во вспомогательную библиотеку и служили опорными точками для интерполяции при получении концентрации ¹³⁵Xe, соответствующей указанной мощности и энерговыделению. Сравнение результатов расчетов, проведенных с использованием двух разных наборов концентраций ¹³⁵Xe, показало, что данные БДЭ весьма близки к полученным более сложным образом результатам MCU-REA/1.

2.4. О роли параметров в расчетах рабочих состояний полномасштабных сборок

Эти результаты получены в ходе доработки и проверки описываемого варианта интерфейса, которые проводились в основном на двух состояниях 3-го блока Смоленской АЭС – от 26.05.99 и 15.10.03. Увеличение числа интервалов температур топлива, концентрации ^{135}Xe и выгорания должно приводить к понижению $K_{эф}$. Знак эффекта объясняется тем, что в областях с более высоким значением этих величин, например, в центре активной зоны больше поток нейтронов, а стало быть, и вес значений и их отрицательное влияние на $K_{эф}$.

Из наших расчетов следует, что:

- ◆ удвоение числа интервалов по выгоранию понизило $K_{эф}$ всего на 0,08 %, а замена разных выгораний их средним по реактору значением повысила $K_{эф}$ на 3,2 %!
- ◆ увеличение числа интервалов по температуре топлива с 3 до 6 понизило $K_{эф}$ всего на 0,07 % (при статистической погрешности расчетов 0,02 %);
- ◆ удвоение числа интервалов по ксенону не изменило $K_{эф}$, а по исторической плотности воды повысило $K_{эф}$ всего на 0,04 % (при статистической погрешности расчетов 0,02 %);
- ◆ удаление пленки воды на поверхности пустых каналов, находящихся на ВК стержней БАЗ с пленочным охлаждением, увеличивает $K_{эф}$ на 0,08 %, а полная замена пустоты на воду уменьшает $K_{эф}$ на 0,57 %;
- ◆ температура поглотителей считалась равной температуре воды в соответствующем канале. Ее увеличение на 120 °С не изменило $K_{эф}$;
- ◆ уменьшение температуры топлива на 300 °С увеличило $K_{эф}$ для состояния от 15.10.03 на 0,43 %, откуда следует, что температурный коэффициент топлива $\alpha_T = -1,4e^{-5} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$. Такое же уменьшение для состояния от 26.05.99 дало $\alpha_T = -1,2e^{-5} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$. Это хорошо согласуется со значением $-1,2e^{-5} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$, приведенным в [12];
- ◆ уменьшение температуры графита на 200 °С уменьшило $K_{эф}$ для состояния от 15.10.03 на 0,77 %, откуда следует, что температурный коэффициент по графиту $\alpha_C = 3,8e^{-5} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$. Такое же уменьшение для состояния от 26.05.99 дало $\alpha_C = 4,8e^{-5} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$. Эти значения близки к $6e^{-5} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$, приведенному в [12];
- ◆ удаление дистанционирующих решеток увеличило $K_{эф}$ на 0,52 %;
- ◆ ко времени проведения первых расчетов задание геометрии стержней СУЗ-2477 еще не было подготовлено и вместо него использовалось описание СУЗ-2091, которое вместе с описанием УСП взято из расчетов пусковых экспериментов на IV блоке ЧАЭС [12]. Добавление одного отсутствовавшего на ЧАЭС звена в УСП и СУЗ-2091 уменьшило $K_{эф}$ на 0,47 %;
- ◆ адекватное описание геометрии стержней СУЗ-2477-01, т.е. фактическая замена 75-ти стержней 2091-01 на 2477-01, увеличило $K_{эф}$ состояния от 15.10.03 на 0,35 %. Это утверждение в свое время вызвало сомнения у Г.Б. Давыдовой, которые она сформулировала так: “Замена ст.2091 на ст.2477 может дать положительную реактивность, только если они были полностью извлечены. Если стержни были погружены полностью или частично, плюса быть не может”. Авторы к тому времени от других специалистов уже слышали аналогичные, но менее четкие сомнения. Теперь же стало ясно, что именно следует проверить в первую очередь. И оказалось, что из 75-ти стержней СУЗ 2091, временно заменявших стержни 2477 в модели рабочего состояния от 15.10.03 3-го блока САЭС, 46 находились на ВК, а 17 были погружены менее чем на половину. Таким образом, опыту Г.Б. Давыдовой наша оценка не противоречит.

2.5. Роль выгорающих примесей

О роли примесей бора и кадмия в графите и гафния и ниобия в цирконии стенок каналов и оболочек твэлов известно еще со времени расчета полномасштабных свежих загрузок. Присутствие одного атома кадмия и двух атомов B^{10} на 14 миллионов атомов углерода понижало $K_{эф}$ полномасштабной загрузки на $\sim 1,3$ %. Примеси в цирконии количественно более

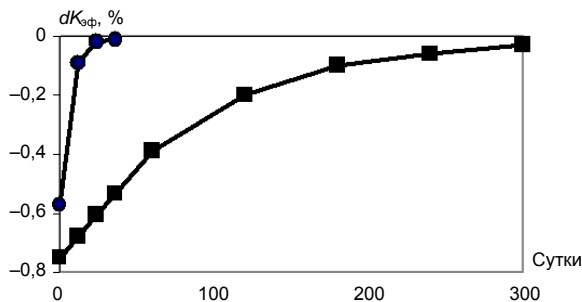


Рис. 4. Вклад в $K_{эф}$ примесей $^{10}\text{В}$ (■) и Cd (●) в графите

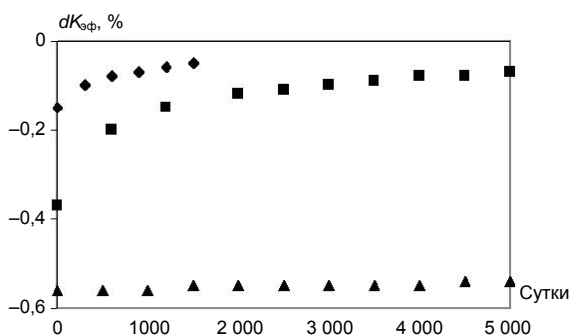


Рис. 5. Вклад в $K_{эф}$ добавки Nb (▲) в циркониевых сплавах ячейки, а также примесей Hf в оболочках ТВЭЛ (◆) и трубах каналов (■)

значительны: один атом гафния на 10 тысяч атомов циркония и 50...100 атомов ниобия понижали $K_{эф}$ полномасштабной загрузки на ~1 %. Логично предположить, что раз эти примеси сильно поглощают, значит, они должны быстро выгорать и их можно не рассматривать в расчетах рабочих состояний. К сожалению, мнения экспертов В.К. Давыдова (НИКИЭТ) и Г.Б. Давыдовой, не согласившихся с нашей логикой, стали известны нам ближе к концу описываемой работы. А до того мы, ничтоже сумняшеся, искали причины завышения расчетных значений $K_{эф}$ в других местах, впрочем, не без пользы для своего кругозора.

После того, как проблема выгорающих примесей осозналась, ее численная оценка для однородной решетки на номинальном уровне мощности была выполнена с помощью модуля BURNUP за пару дней. Ее результаты представлены ниже. Рис. 4 подтверждает, что в отработавшем много лет РБМК исследуемые примеси в графите можно не учитывать, но если придется рассчитывать блок, проработавший меньше года, то роль бора и кадмия может быть заметной.

А вот рис. 5 показывает, что ниобий практически не выгорает, постоянно понижая $K_{эф}$ на ~0,5 %. Гафний выгорает более заметно, и поглощение нейтронов на его ядрах понижается, но не слишком быстро. Выгорание гафния в ТВС можно учесть практически точно. Для этого весь гафний надо переместить из циркония во внешние зоны ТВЭЛ и пересчитать библиотеки изотопного состава. В описываемых расчетах мы просто оставили в ТВС согласно рис. 5 половину начального гафния. В современных блоках РБМК, проработавших не один десяток лет, гафнием, оставшимся в стенках каналов, можно пренебречь. Но в расчетах новых блоков, если они будут, возможность его учета в программе придется предусмотреть.

2.6. Результаты расчета критичности рабочих состояний

В табл. 5 представлены результаты расчетов $K_{эф}$ десяти рабочих состояний различных блоков АЭС с РБМК-1000. Статистическая погрешность их расчета составляет ~0,02 %. Рабочие состояния четырех разных блоков рассортированы в табл. 5 по их дате. Видно, что со временем падает почти до нуля число ТВС с топливом обогащения 2,4 %, которые постепенно заменяются ТВС с топливом 2,6 % с добавкой эрбия. Заметно меняются количество и типы стержней СУЗ и уменьшается количество ДП в активной зоне.

Напомним – для холодных свежих загрузок (не включая сюда МКУ) средняя погрешность, т.е. среднее отклонение расчетных значений $K_{эф}$ от 1 (точного значения), была -0,17 %, среднеквадратичное отклонение от среднего $\pm 0,06$ %, максимальное -0,12 %. Та же средняя погрешность расчетов критичности десяти рабочих состояний равна +0,21 %. Разброс результатов в табл. 5 вокруг среднего значения составляет ~0,18 %, а максимальное отклонение от него не более 0,35 %.

Таблица 5. Состав активной зоны в различных рабочих состояниях и рассчитанные значения критичности этих состояний

Сорт канала	АЭС	САЭС									ЛАЭС
	№ блока	3	1	3	1	3	2	3	2	1	1
	Дата	26.05	23.11	01.12	07.08	15.10	05.12	22.01	26.02	14.04	15.12
	Год	99	99	99	02	03	03	04	04	04	03
Тип	Количество ячеек в загрузке										
1	BAZ	24	24	24	24	24	24	24	24	24	21
2	DKEB	16	17	17	17	16	17	17	17	17	6
3	PP 91	155	67	154	55	80	55	79	30	30	101
5	YCP	32	32	32	32	32	32	32	32	32	32
6	CB	4	1	1	4	1	8	4	8	6	4
8	DP KL	76	76	63	39	30	25	30	25	24	0
10	2,4 %	1 581	1 584	1 497	918	236	525	133	429	339	63
12	2,6 %ER	0	0	100	700	1 394	1 103	1 494	1 199	1 292	1 612
21	PP 77	0	75	0	99	75	99	75	99	99	35
23	KRO 99	0	0	0	0	0	0	0	25	25	0
51	DPCO	0	0	0	0	0	0	0	0	0	14
$K_{эф} - 1, \%$		0,3	0,13	0,11	0,1	0,55	-0,14	0,33	0,14	0,33	0,27

Таким образом, среднее расчетное значение $K_{эф}$ при переходе от холодных свежих к рабочим состояниям увеличилось на 0,4 %, а средний разброс отдельных значений вокруг среднего возрос в три раза до не таких уж больших 0,18 %. Результаты всех расчетов изображены на рис. 6, причем для рабочих состояний, где это возможно, они сгруппированы по номерам блоков.

Судя по этому рисунку, переход к рабочим состояниям повышает расчетное $K_{эф}$ и увеличивает его разброс около среднего значения. Принимая во внимание, сколько при этом переходе приходится привлекать новой информации, полученной в результате штатных измерений и обработанной по инженерным программам, и какова степень ее достоверности, это общее изменение группы результатов не представляется значительным, а скорее выглядит обнадеживающим.

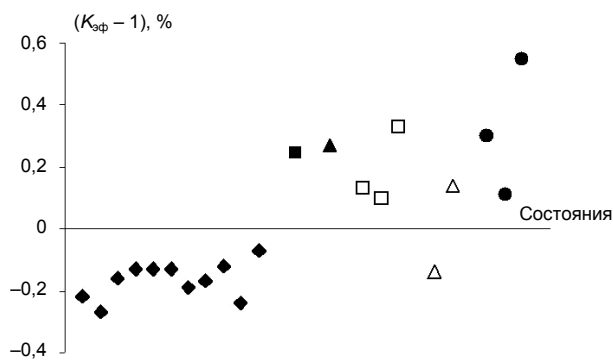


Рис. 6. Результаты расчета $K_{эф}$ всех критических состояний: ◆ – холодные свежие состояния и ■ – МКУ IV блока ЧАЭС. Рабочие состояния: ▲ – ЛАЭС; □ – 1-го, △ – 2-го, ● – 3-го блоков САЭС

Заключение

В процессе этой работы авторы получили ряд замечаний, в том числе весьма полезных и конструктивных, от коллег по цеху – реакторных специалистов. На два из них хотелось бы ответить именно в этом пункте.

1. “Объективных неопределенностей в исходных данных так много и они так велики, что расчет по прецизионной программе теряет смысл!” Почти так, если расчет – один. Попадание его результата в “десятку”, а в данном случае $K_{эф}$ в единицу, может оказаться просто везением. Про два десятка аналогичных результатов так уже сказать нельзя. Если они ложатся рядом с единицей, а факты их преднамеренной коррекции не установлены, придется признать, что возможно систематическое получение результатов такого высокого уровня качества.

Надо учесть и то, что квадрат суммарной ошибки результата равен сумме квадратов его погрешностей, вносимых неопределенностями отдельных независимых исходных параметров. Поэтому, если есть сто таких параметров, и неопределенность каждого из них вносит в результат 1%-ю погрешность, то суммарная погрешность результата будет ~10 %. А появление еще ста параметров, каждый из которых вносит погрешность ~0,1 %, практически не отразится на общей ошибке.

2. "В настоящее время вряд ли кого-то интересуют расчеты абсолютной величины эффективного коэффициента размножения". Да, конечно, если они проводятся постфактум. Если же это будут предварительные результаты во время пусковых экспериментов, то, конечно, нет. Гораздо чаще важны не значения $K_{эф}$ различных состояний, а их разности, на основе которых определяются разные коэффициенты реактивности. Этим коэффициентам будет гораздо больше доверия, если будет известно, ценой каких приближений и корректировок получены соответствующие $K_{эф}$.

Возвращаясь к теме данной работы, отметим, что наши первые проделанные шаги в расчетах $K_{эф}$ полномасштабных активных зон РБМК вполне успешны. Дальнейшее движение в этом направлении представляется разумным. Это прежде всего разрешение вопросов, возникавших по ходу описываемых расчетов, и анализ причин систематического отклонения, который позволит разработчикам прецизионных программ лучше выяснить роль отдельных малых эффектов. Так, некоторое общее завышение $K_{эф}$ рабочих состояний может быть обусловлено систематическим занижением уровня энерговыработки. При значении этого возможного занижения, например, на 1 % $K_{эф}$ повысится на 0,2 %.

Желательно исследовать модели, альтернативные цилиндризованной ячейке при расчете библиотек изотопного состава, и понять, насколько эти составы могут различаться и как их различия проявятся в полномасштабных расчетах рабочих состояний. Данные рис. 6 не противоречат предположению о том, что для каждого блока возможны существование индивидуального среднего значения и, следовательно, меньший разброс результатов для всех его состояний. В дальнейшем эта информация повысит качество предсказания эффектов реактивности.

Уже в описанных расчетах предпринята попытка расчета не только $K_{эф}$, но и показаний датчиков контроля радиального энерговыделения ДКЭ(р). Проведение детальных расчетов значительно большего количества разнообразных состояний с последующим анализом их результатов поможет выбрать наиболее важные направления исследований в этой области.

Авторы выражают искреннюю признательность Г.Б. Давыдовой и В.К. Давыдову за многочисленные обсуждения и полезные рекомендации. Работа выполнена при поддержке ФГУП концерн "Росэнергоатом".

Городков Сергей Сергеевич, контактный тел.: (+7-499)196-92-79; e-mail: ssg@adis.vver.kiae.ru

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Шевелев Я.В.** (редактор). Сборник "Методы расчета полей тепловых нейтронов в решетках реакторов". – М.: Атомиздат, 1974.
2. **Гомин Е.А., Майоров Л.В.** (редакторы). Программа MCU-REA/1 с библиотекой констант DLC/MCUDAT-2.2. Отчет РНЦ "КИ" инв. № 36/38-2004, 2004.
3. **Майоров Л.В.** Оценки смещения результатов при расчете реакторов и хранилищ ядерного топлива методом Монте-Карло // Атомная энергия, 99(4), 2005. – С. 243 – 256.
4. **Олейник Д.С.** Расчет слабосвязанных систем методом Монте-Карло. Там же. – С. 256 – 264.
5. **Chachin D.V., Kalugin M.A., Ivanov V.I.** Whole Reactor RBMK-1000 Calculations with the MCU-RFFI/A Code / Proc. of Annual Meeting of Nucl. Tech. 98. 26 – 28 May, 1998. KERNTECHNISCHE GESELLSCHAFT, e. V, p. 49.

6. **Физический** пуск реактора РБМК-1000 IV блока Чернобыльской АЭС. Отчет пусковой комиссии 12.356. – М.: 1985.
7. **Гуревич М.И., Тельковская О.В., Немиров А.С.** Программа КДМК для автоматического формирования исходных данных на языке MCU-REA для расчетов полномасштабных активных зон РБМК-1000 с использованием системы подготовки данных о состоянии РУ РБМК-1000. Технич. справка по договору № 2002/4.1.1.1.1.15/509/9/2358 от 23.07.2002 г.
8. **NEA/NSC/DOC(95)03.** International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments. September 2004 Edition.
9. **Рабочее ТЗ** на набор тестовых задач по договору № 904 “Разработка атласа реперных нейтронно-физических бенчмарков для уточнения библиотек макроконстант и верификации инженерных программ расчета РБМК-1000 с целью повышения качества эксплуатационных расчетов РБМК”. Отчет ИЯР РНЦ “КИ” инв. № 36/30-2000, 2000.
10. **Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Брызгалов В.И. и др.** Использование программы MCU-REA применительно к задачам создания бенчмарков для верификации инженерных программ расчета РБМК-1000. Отчет РНЦ “КИ” инв. № 36/18-2001, 2001.
11. **Юдкевич М.С.** Модуль BURNUP-3 для расчета изменения изотопного состава реактора в процессе кампании. – С. 11.1 – 11.16 в [1].
12. **Информация** об аварии на Чернобыльской АЭС и ее последствиях, подготовленная для МАГАТЭ // Атомная энергия, т. 61, вып.5, 1986. – С. 301 – 320.

Статья поступила в редакцию 23 ноября 2006 г.

Вопросы атомной науки и техники.

Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 93 – 110.

УДК 621.039.546
Расчетные нейтронно-физические “бенчмарк”-исследования
реактора типа ГТ-МГР

В.Ф. Бояринов, В.И. Брызгалов, Е.С. Глушков, Е.А. Гомин, М.И. Гуревич, В.Д. Давиденко,
П.А. Фомиченко, В.Ф. Цибульский, М.С. Юдкевич,
ФГУ РНЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. акад. Курчатова, 1,
Е.В. Марова, Ю.П. Сухарев,
ФГУП “ОКБМ”, 603074, г. Н. Новгород, Бурнаковский пр., 15,
Е.Ф. Митенкова, Н.В. Новиков,
ИБРАЭ РАН, 115191, Москва, Б. Тульская ул., 52

Представлено краткое описание постановки задачи и анализ результатов расчетного “бенчмарк” исследования топливных ячеек реактора ВТГР модульного типа. Расчетный анализ выполнен при помощи программ, позволяющих проводить проектные расчеты реакторов типа ВТГР.

“Benchmark” neutronic computational investigations of the GT-MHR type reactor. V.F. Boyarinov, V.I. Bryzgalov, E.S. Glushkov, E.A. Gomin, M.I. Gurevich, V.D. Davidenko, P.A. Fomichenko, V.F. Tsibulsky, M.S. Yudkevich, E.V. Marova, Yu.P. Sukharev, E.F. Mitenkova, N.V. Novikov. Paper presents a brief description and analysis of benchmark computational investigation results for fuel cell of a module type HTGR. Computational analysis is fulfilled using codes involved in HTGR design calculations.

Конструктивное исполнение активной зоны и топливной композиции реакторов ВТГР определяет особенности поведения нейтронно-физических характеристик и трудности при их расчетном и экспериментальном моделировании, что усугубляется в случае использова-

ния топлива на основе чистого плутония, применения эрбиевого выгорающего поглотителя (ВП), а также стремления достичь высокой глубины выгорания топлива.

Дополнительно при проектировании ВТГР накладываются жесткие ограничения, определяемые обеспечением работоспособности топлива. В первую очередь они связаны с необходимостью выравнивания полей энерговыделения, чтобы максимальная температура топлива не превышала 1 600 °С в любом режиме эксплуатации и при расхолаживании реактора.

Сравнение результатов ранее проведенных расчетов нейтронно-физических характеристик реактора ГТ-МГР по проектным программам WIMS-D4 и JAR-HTGR и реперным программам, использующим метод Монте-Карло (MCU, MCNP5), позволило оценить следующие неопределенности результатов расчета [1]:

- изотопного состава топлива в процессе выгорания (~10 %);
- распределения энерговыделения как в радиальном, так и аксиальном направлениях (~20 %);
- эффективности стержневой системы СУЗ и резервной системы останова (~20 %);
- температурного коэффициента реактивности (~20 %).

Отмеченные физические особенности в совокупности с заявленными ограничениями предопределили необходимость оценки неопределенностей основных расчетных нейтронно-физических характеристик реактора ВТГР с плутониевым топливом, выделения факторов, их определяющих, верификации применяемых расчетных моделей и методик, а также получения обоснованных результатов для верификации расчетных кодов. Необходимость этого подчеркивается тем, что программы нейтронно-физического расчета, используемые при проектировании ВТГР, в основном тестируются в рамках расчетных и экспериментальных benchmark исследований ВТГР с урановым топливом. С этой целью проводятся поэтапные benchmark исследования реактора ВТГР с призматическими топливными блоками, начиная с элементарных ячеек топливного компакта, ВП, ячейки ТВС и заканчивая расчетами 2D и 3D моделей реактора.

В настоящее время в разработке расчетных моделей и проведении расчетных оценок по различным кодам (как проектным, так и прецизионным – WIMS-D4, UNK, MCU, MCNP5, MONTEBURNS 1.0, MICROBURN) принимают участие специалисты РНЦ “КИ”, ОКБМ и ИБРАЭ. В рамках работы группы по газоохлаждаемым реакторам Координированного исследовательского проекта CRP5 (МАГАТЭ) представительную серию расчетов провели специалисты Франции по программам APOLLO2, TRIPOLI4, а специалисты Турции и Кореи начали проведение исследований. Здесь представлены краткое описание бенчмарк задач, полученные к настоящему времени результаты, анализ возможных причин расхождений в результатах расчетов по различным программам. Проанализированы возможные пути снижения погрешности определяемых характеристик.

1. Постановка задачи поэтапного benchmark исследования реактора типа ГТ-МГР

Применение чистого плутония в качестве топлива реактора ВТГР определяет отсутствие представительных экспериментальных данных и собственно экспериментов, которые можно было бы использовать для верификации программ. Задача оценки неопределенностей рассчитываемых нейтронно-физических характеристик реактора с плутониевым топливом и эрбием в активной зоне в этой связи приобретает первостепенное значение и может быть решена путем проведения benchmark расчетов.

Актуальность проведения поэтапных расчетных benchmark исследований определяется необходимостью оценки неопределенностей при анализе основных нейтронно-физических характеристик реактора ВТГР с плутониевым топливом по различным программам, выделения факторов, их определяющих, а также верификации расчетных моделей, методик и в

дальнейшем получения обоснованных результатов для верификации программ, применяемых для обоснования проекта ГТ-МГР.

В настоящее время в рамках работ по верификации программ разработаны benchmark модели следующих топливных ячеек, отражающих структуру и конструкцию топливной композиции ВТГР с призматической активной зоной (рис. 1 — на цветной вкладке) [1...3].

На начальной стадии benchmark исследований рассмотрены ЯТК и ЯВП как с учетом, так и без учета гетерогенности размещения топливных частиц и частиц ВП. Обобщающая краткая информация об участниках исследований простых ячеек и используемых программах представлена в табл. 1.

Таблица 1. Участники benchmark исследований, применяемые коды и библиотеки, номенклатура проведенных исследований

Код/библиотека	Температура, К	Расчеты без выгорания					Расчеты с выгоранием		
		ЯТК	ЯТК1	ЯТК2	ЯВП гом	ЯВП гет	ЯТК	ЯВП_ гом	ЯВП_ гет
Россия									
MCNP4 MONTEBURNS 1.0 [4...7] (ENDF/B-6 ENDB/B-5)	300	✓	✓	✓					
	600	✓	✓	✓					
	900	✓	✓	✓					
	1 200	✓	✓	✓			✓	✓	✓
WIMS-D4 [8...11] (UKNDL, ENDF/B-6, FOND2.2, WLUP)									
UNK [12] (ENDF/B-6)									
MICROBURN [13, 14] (ENDF/B-3, ENDF/B-5)	300	✓							
	600	✓							
	900	✓							
	1 200	✓					✓		
СЕА, Франция									
APOLLO2 CEA93_V6 (JEF 2.2)	300	✓	✓	✓	✓				
	600	✓	✓	✓	✓				
	900	✓	✓	✓	✓				
	1 200	✓	✓	✓	✓		✓	✓	
TRIPOLI4 (JEF2.2)	300		✓	✓	✓				
	1 200		✓	✓	✓				
TRIPOLI4 (JEF3.0)	300		✓	✓	✓				
	1 200								

2. Результаты benchmark исследований топливных ячеек

При проведении benchmark исследований простых ячеек значения параметров, полученные в расчетах по различным программам, сравнивались со значениями, усредненными по результатам этих расчетов. Таким образом, все используемые программы в плане сравнения поставлены в одинаковые условия без выделения какой-либо из них в качестве реперной [15].

Влияние степени гомогенизации топливной композиции

Расчеты без выгорания позволили определить влияние гомогенизации топливной композиции на коэффициент размножения и скорости реакций для изотопов плутония в зависимости от температуры. В этом случае исключается из рассмотрения влияние разницы состава библиотек в части осколков и различия в цепочках превращений основных изотопов.

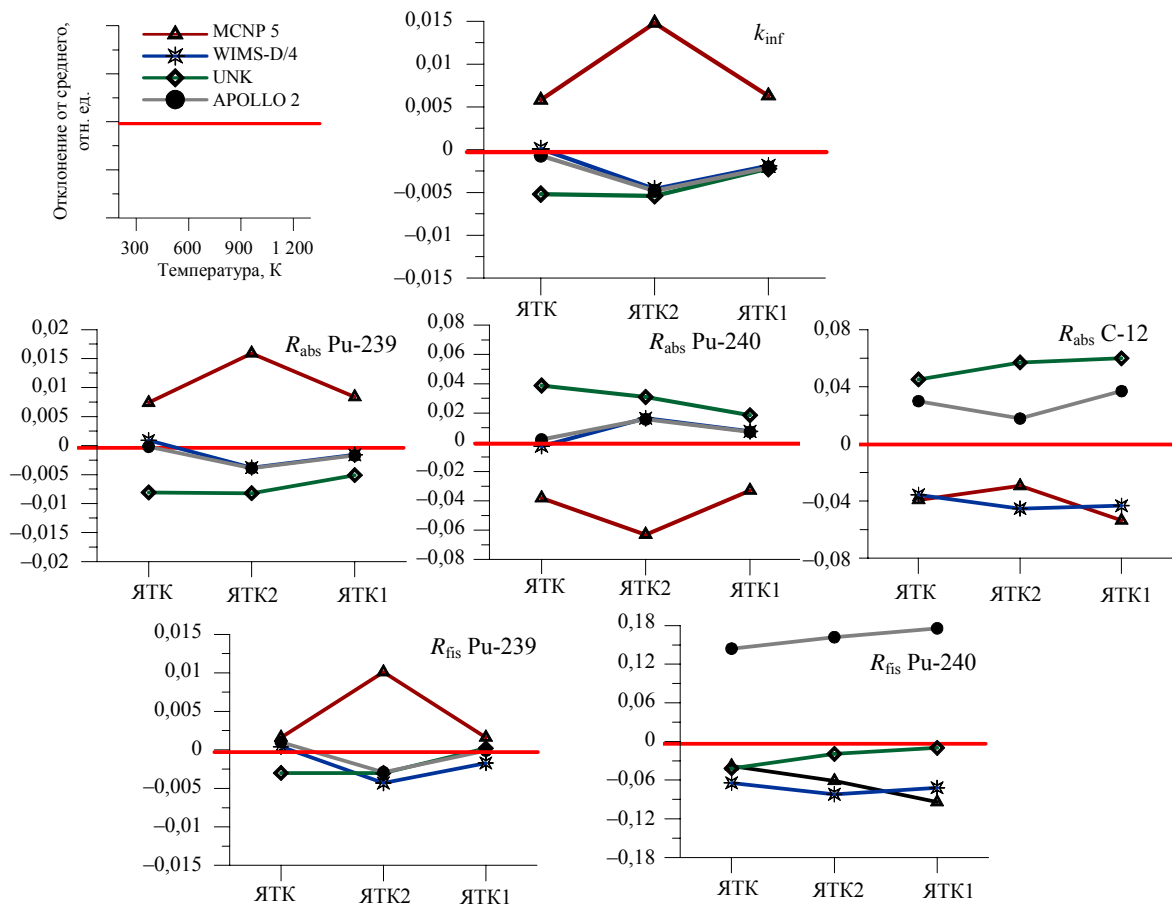


Рис. 2. Разница в нейтронно-физических функционалах основных изотопов плутония для ЯТК в зависимости от типа ячеек

Максимальное различие в значениях коэффициента размножения ячейки (рис. 2, 1 200 К) на уровне 1,5 % достигается в случае гомогенизации топливной композиции в пределах топливного компакта при наличии выделенного внешнего слоя графита (ЯТК2). По-видимому, это определяется учетом блокировки отдельных изотопов, а также появлением выделенного слоя графита. При переходе к гетерогенному заданию топливных частиц в топливном компакте (ячейка ЯТК) разница снижается до 0,5 %.

Эта тенденция повторяется и в поведении скоростей реакций поглощения (R_{abs}) и деления (R_{fis}) для основных изотопов. В качестве примера на рис. 2 представлены результаты для Pu-239, Pu-240 и C-12. Характерным является возрастание различия в результатах скорости реакции поглощения на графите при переходе к гомогенным ячейкам (ЯТК1, ЯТК2).

Влияние библиотек ядерно-физических данных

Необходимо отметить, что максимальное отличие в результатах, полученных по различным программам при расчетах ЯТК без выгорания, характерно для температуры 900 К, в то время как в области рабочих (1 200 К) и более низких температур (300 и 600 К) разница сокращается почти на 30 %, что свидетельствует, вероятно, о влиянии отличий констант в разных библиотеках (рис. 3).

Расчеты с выгоранием проводились для следующих моделей:

- ячейки с гетерогенным заданием топливных частиц (ЯТК) с целью анализа поведения концентраций основных изотопов плутония, актинидов, скоростей реакций для них и коэффициента размножения ячейки на протяжении кампании;

• ЯВП для получения зависимости концентраций, скорости реакции поглощения и доли поглощения для рассматриваемых изотопов эрбия (Er-166, Er-167, Er-168).

Получено, что с увеличением выгорания различие в значениях коэффициента размножения ЯТК изменяется, однако не превышает 1,7 % (рис. 4). Максимальное отклонение на уровне 25 % в скорости реакции деления Pu-239 и до 45 % в скорости реакции поглощения на Pu-240 характерно для APOLLO2. При этом разница в концентрациях Pu-239 ($\rho_{\text{Pu-239}}$) не превышает 1,5 %, а Pu-240 – 5 %. Поведение характеристик, представленных на рис. 4, свидетельствует о близости ядерных данных для рассматриваемых изотопов из библиотек FOND2.2 и ENDF-B и их отличии от данных JEF 2.2.

На начало цикла отклонение в скоростях реакции поглощения не превышает 1 и 4 % для Pu-239 и Pu-240, соответственно, в то время как на 250 сут оно достигает 25 и 45 %. Поведение скоростей реакции деления аналогично при меньшем порядке величины отклонений – не более 25 %. Более существенная разница характерна для концентраций и скоростей реак-

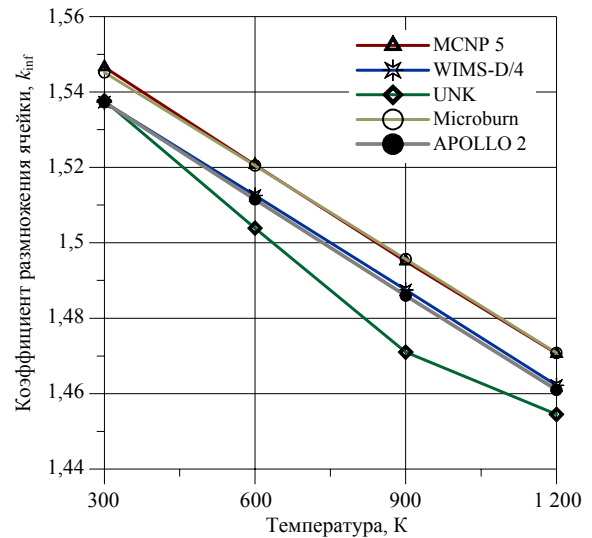


Рис. 3. Поведение k_{inf} в ячейке ЯТК

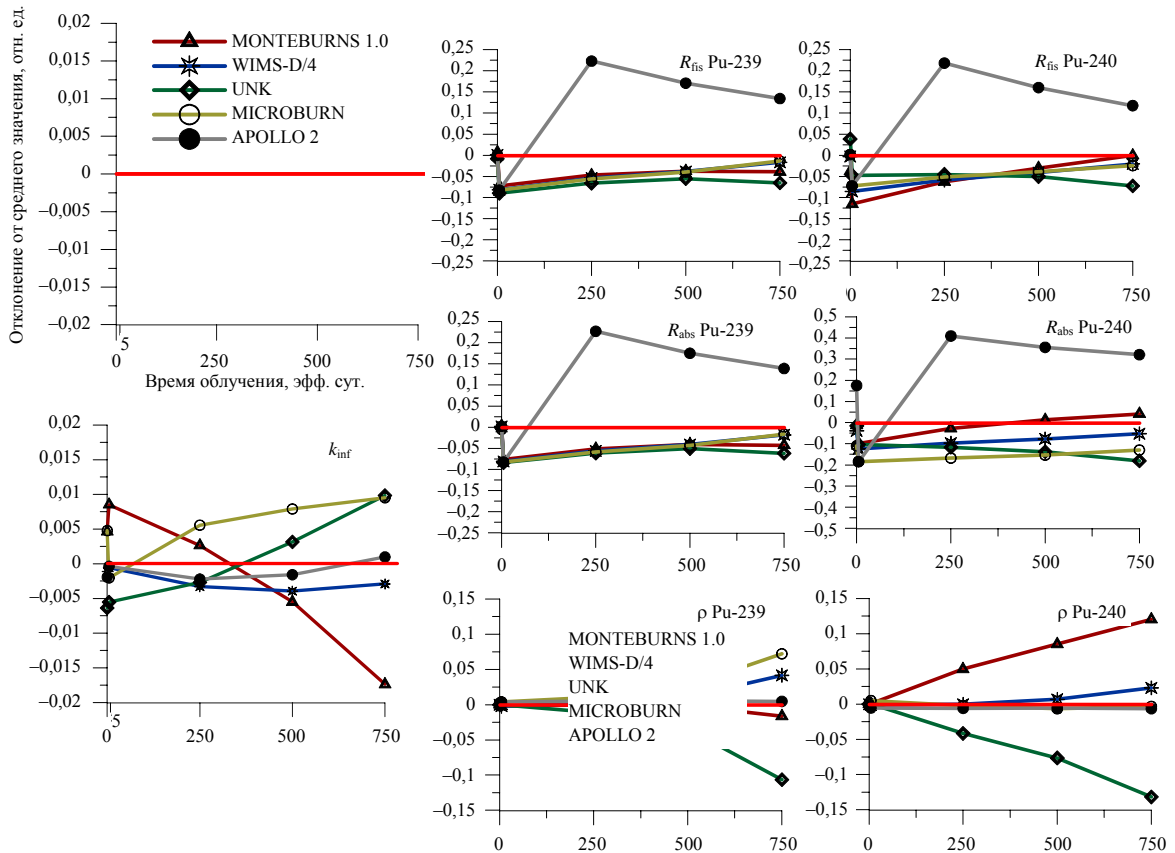


Рис. 4. Отклонение основных нейтронно-физических функционалов для основных изотопов плутония в ЯТК в зависимости от выгорания

ций изотопов Am и Cm. Скорее всего, в первую очередь это определяется используемыми данными библиотек, а вторым фактором является различие цепочек перехода изотопов тяжелых атомов, реализованных в разных программах, что определяет различие в результатах практически до 100 %.

Правомерность вывода о существенном влиянии применяемых ядерных данных подтверждается результатами расчетов, проведенных ранее в рамках benchmark исследований простых ячеек реактора ГТ-МГР. Они выявили существенную разницу в величине скорости реакции поглощения на C-12 (занижение до 30 %) для WIMS-D4 при использовании данных библиотеки UKNDL по сравнению с результатами, полученными по программам MCNP5, UNK и MICROBURN, применяющими данные библиотек ENDF/B-4, 6.

Сравнительный анализ ядерных данных графита, используемых в различных программах, позволил определить источник столь ощутимой разницы в величинах скорости реакции поглощения для графита. Сравнение зависимости от энергии сечений радиационного захвата графита (UKNDL и библиотека, созданная в рамках проекта WLUP под эгидой МАГАТЭ) с данными библиотек ENDF/B-6 и JENDL 3.2 приведено на рис. 5.

Как видно из рис. 5, в тепловой области энергий сечения поглощения графита различных библиотек совпадают, основное различие лежит в области энергий быстрых нейтронов. Влияние данной области и определяет различие поглощения на графите. Это подтверждается изменением рассчитываемой величины скорости реакции поглощения на ^{12}C при замене данных библиотеки UKNDL, с использованием которых проводились benchmark расчеты на начальном этапе, на данные библиотеки МАГАТЭ. Сравнение выполнено для однозонной гомогенной ЯТК при температуре 1 200 К (рис. 6). Это обусловило необходимость ревизии ядерных данных для ^{12}C и последующую модернизацию применяемой библиотеки WIMS-D4 путем замены базовых данных UKNDL по графиту. Следует заметить, при использовании MCNP5 получено, что при замене исходных данных для ^{12}C из ENDF/B-5 на константы из JENDL3 значение R_{abs} для ^{12}C увеличивается на 7 %.

Появление эрбия в расчетной ячейке приводит к увеличению отклонения в коэффициенте размножения ячейки до ~2 % на 500, 750 сут (рис. 7). Учет гетерогенности размещения частиц ВП (рис. 7; 0 сут) приводит к росту разницы в результатах скоростей реакции. Если

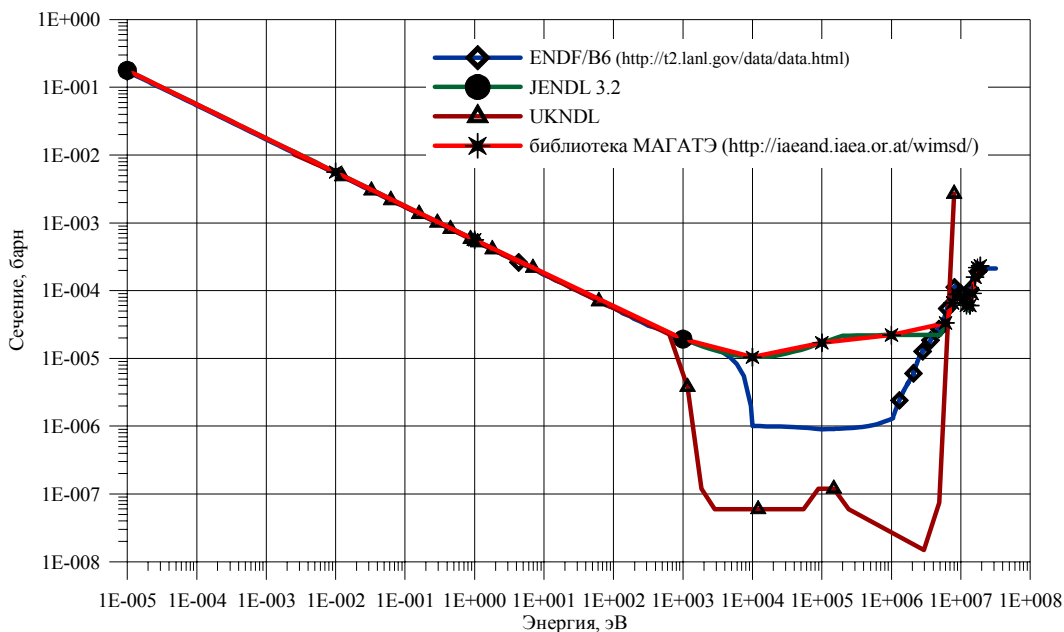


Рис. 5. Поведение сечения радиационного захвата углерода-12 в зависимости от энергии

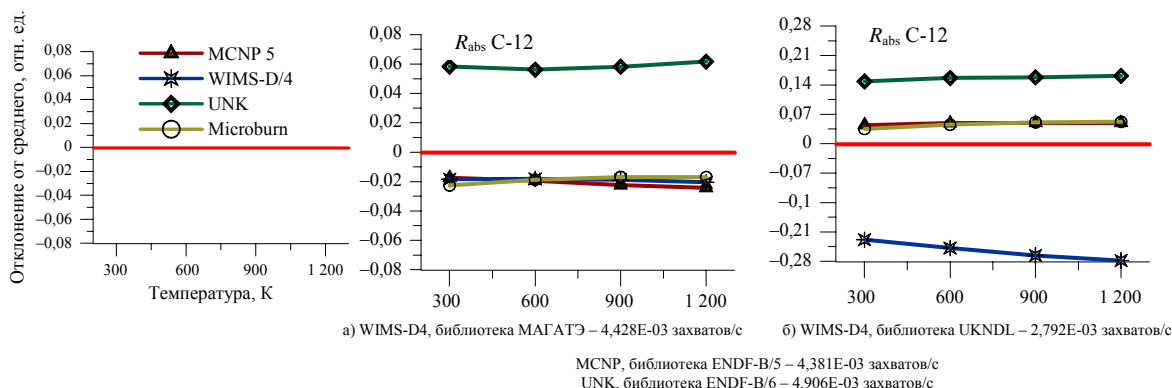


Рис. 6. Влияние замены констант сечения захвата углерода-12 в WIMS-D4

различие в результатах для коэффициента размножения и суммарной доли поглощения на изотопах эрбия не превышает 0,4 %, то разница в скоростях реакции поглощения на Er-166 возрастает с 4 до 12 %, а для Er-168 составляет ~85 %.

Влияние на поведение рассматриваемых нейтронно-физических функционалов оказывают в первую очередь применяемые ядерные данные, а вторым фактором служат реализованные в программах цепочки переходов. Эти два фактора определяют возрастание различия в значениях коэффициента размножения ячеек по мере роста выгорания, которое достигает 2 и 3,5 % для соответственно гомогенной и гетерогенной ЯВП (рис. 7).

Более существенная разница характерна для концентраций и скоростей реакций. Обращает на себя внимание разница в доле поглощения на четных изотопах эрбия, которая к концу кампании достигает 15 % как при гомогенном, так и гетерогенном задании ВП. Это определяется различием в скоростях реакции на изотопах эрбия и накапливаемой в процессе выгорания разницей в их концентрациях.

В качестве следующего шага при проведении benchmark исследований реактора типа ВТТР детально проработана спецификация для расчетов модельной ячейки ТВС, задающая конструкцию и материальный состав ТВС. В рамках проведенных расчетов по программе WIMS-D4 апробированы различные модели представления топливной композиции (табл. 2).

Т а б л и ц а 2. Краткое описание расчетных моделей ТВС, используемых в различных программах

Расчетная программа	MCU [16...20]	WIMS-D4			UNK	MCNP4C
Метод расчета	Монте-Карло	S_8	S_8	S_8	ВПС	Монте-Карло
Расчет	прямой расчет детальной модели ТВС	Модель 1 – расчет эквивалентной модели ТВС	Модель 2 – расчет эквивалентной модели ТВС	Модель 3 – расчет полной модели ТВС	прямой расчет детальной модели ТВС	прямой расчет детальной модели ТВС
Размещение топливных частиц	спец. методика учета двойной гетерогенности	детальное задание	гомогенно в пределах компакта	детальное задание	детальное задание	детальное задание в регулярной решетке
Размещение частиц ВП	гомогенно в пределах компакта	гомогенно в пределах компакта	гомогенно в пределах компакта	гомогенно в пределах компакта	гомогенно в пределах компакта	гомогенно в пределах компакта
Энергетическая структура	непрерывная зависимость от энергии	69 групп	69 групп	69 групп	89 групп (до 7 000 групп по изотопам)	непрерывная зависимость от энергии

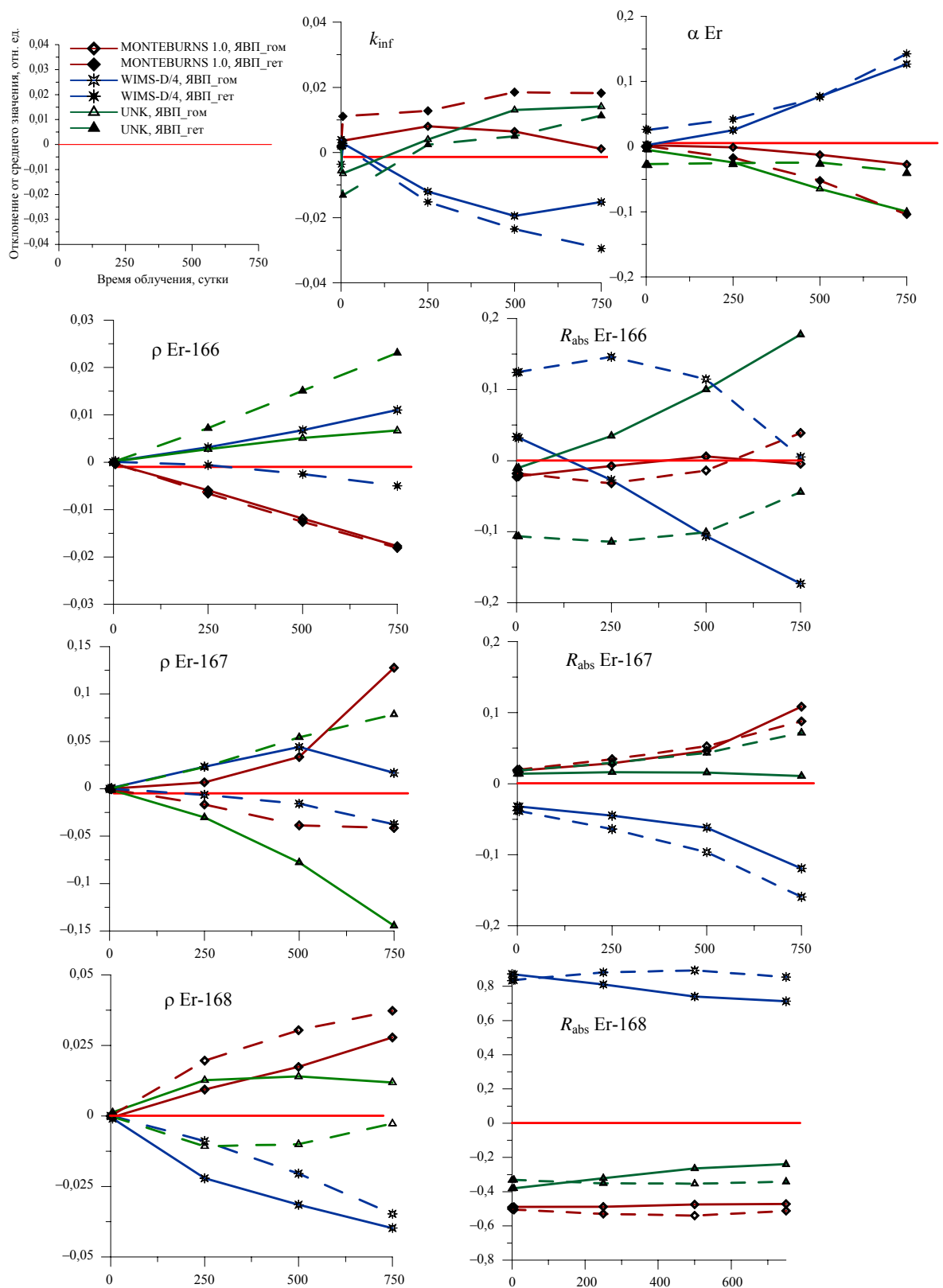


Рис. 7. Результаты расчета ЯВП

Рассматриваемые варианты двух первых моделей эквивалентных ячеек ТВС для WIMS-D4 представлены на рис. 8. Альтернативный подход проиллюстрирован на рис. 9 (рис. 8 и 9 – на цветной вкладке). Расчет по WIMS-D4 при использовании любого из этих подходов проводится в три этапа: на этапе расчета ЯТК получают резонансные сечения для топливных изотопов, на этапе расчета ЯВП – резонансные сечения для эрбия, на заключительном этапе расчет с применением различных моделей ТВС проводится с резонансными сечениями, полученными на первых двух этапах. Результаты расчетов приведены в табл. 3. В качестве репера при сравнении нейтронно-физических функционалов используются результаты, полученные по программе MCU, реализующей метод Монте-Карло, с модулем выгорания BURNUP. Расчеты по MCU/BURNUP выполнялись для ТВС с детальным описанием реальной геометрии.

Таблица 3. Результаты расчета коэффициента размножения ячейки ТВС и изотопного состава в зависимости от выгорания, полученные с применением различных моделей по WIMS-D4, в сравнении с результатами MCU

Момент кампании	k_{inf} , процентное содержание изотопов	MCU	UNK		WIMS-D4					
		Детальная модель	Детальная модель		Модель 1		Модель 2		Модель 3	
			Значение	Значение	UNK-MCU MCU	Значение	WIMS-MCU MCU	Значение	WIMS-MCU MCU	Значение
Начало цикла	k_{inf}	1,139	1,1300	-0,008	1,1360	-0,0026	1,1302	-0,0077	1,1350	-0,0035
	Er-167	0,229	0,229	0,000	0,2290	0,0000	0,2290	0,0000	0,2290	0,0000
	Pu-239	0,9175	0,9175	0,000	0,9175	0,0000	0,9175	0,0000	0,9175	0,0000
	Pu-240	0,0653	0,0653	0,000	0,0653	0,0000	0,0653	0,0000	0,0653	0,0000
	Pu-241	0,0116	0,0116	0,000	0,0116	0,0000	0,0116	0,0000	0,0116	0,0000
	Pu-242	0,0042	0,0042	0,000	0,0042	0,0000	0,0042	0,0000	0,0042	0,0000
(1/3) 280 сут	k_{inf}	1,093	1,094	0,001	1,0843	-0,0080	1,0723	-0,0189	1,0860	-0,0064
	Er-167	0,111	0,104	-0,063	0,1090	-0,0180	0,1204	0,0847	0,0950	-0,1441
	Pu-239	0,551	0,524	-0,049	0,5468	-0,0076	0,5540	0,0054	0,5470	-0,0073
	Pu-240	0,108	0,106	-0,019	0,1059	-0,0194	0,0845	-0,2176	0,1110	0,0278
	Pu-241	0,083	0,092	0,108	0,0876	0,0554	0,1041	0,2542	0,0830	0,0000
	Pu-242	0,009	0,009	0,000	0,0085	-0,0556	0,0092	0,0222	0,0080	-0,1111
(2/3) 560 сут	k_{inf}	1,108	1,123	0,014	1,1024	-0,0051	1,0999	-0,0073	1,1030	-0,0045
	Er-167	0,035	0,028	-0,200	0,0330	-0,0571	0,0435	0,2429	0,0260	-0,2571
	Pu-239	0,242	0,202	-0,165	0,2374	-0,0190	0,2549	0,0533	0,2370	-0,0207
	Pu-240	0,110	0,102	-0,073	0,1055	-0,0409	0,0730	-0,3364	0,1150	0,0455
	Pu-241	0,122	0,130	0,066	0,1283	0,0516	0,1470	0,2049	0,1210	-0,0082
	Pu-242	0,026	0,028	0,077	0,0235	-0,0962	0,0252	-0,0308	0,0220	-0,1538
(3/3) 840 сут	k_{inf}	1,035	1,007	-0,027	1,0331	-0,0018	1,0879	0,0511	1,0210	-0,0135
	Er-167	0,006	0,003	-0,500	0,0051	-0,1500	0,0077	0,2833	0,0050	-0,1667
	Pu-239	0,033	0,012	-0,636	0,0331	0,0030	0,0479	0,4515	0,0310	-0,0606
	Pu-240	0,079	0,045	-0,430	0,0626	-0,2076	0,0431	-0,4544	0,0720	-0,0886
	Pu-241	0,080	0,061	-0,238	0,0848	0,0600	0,0974	0,2175	0,0810	0,0125
	Pu-242	0,062	0,069	0,113	0,0549	-0,1145	0,0550	-0,1129	0,0530	-0,1452

Сравнивая результаты, полученные по WIMS-D4, с реперным решением, можно отметить, что использование модели топливного блока с гетерогенным представлением топливных частиц приводит к снижению неопределенности расчета коэффициента размножения и изотопного состава, которая составляет в этом случае порядка 1 % для коэффициента размножения, для концентраций Pu-239 – 1,5 %, Pu-240, Pu-241, Pu-242 и Er-167 – не выше 10 % на всем протяжении кампании за исключением момента времени 840 сут, когда отклонение для концентраций Pu-240 и Er-167 достигает 20 %.

Заключение

Полученные результаты расчетов моделей элементарных ЯТК и ЯВП, а также призматической ТВС реактора ВТГР позволили сделать следующее:

- 1) выявить различия используемых библиотек ядерных данных (в частности, для четных изотопов плутония и эрбия);
- 2) определить необходимость ревизии и модернизации библиотек ядерных данных (например, библиотеки программы WIMS-D4 в части ядерных данных для графита) и цепочек переходов и распада изотопов при выгорании топлива, реализованных в программах;
- 3) доработать и верифицировать расчетные модели для детерминистических кодов с упрощенным описанием геометрии рассчитываемых объектов.

Необходимо продолжить работу по детальному сравнению библиотек ядерных данных и анализу методических подходов при формировании расчетных моделей фрагментов реактора ВТГР с призматической кольцевой активной зоной. В этой связи следует также продолжить работу по определению чувствительности нейтронно-физических функционалов по отношению к данным по графиту, изотопам плутония и актинидов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Бояринов В.Ф., Глушков Е.С., Давиденко В.Д., Марова Е.В., Митенкова Е.Ф., Новиков Н.В., Сухарев Ю.П., Фомиченко П.А., Цибульский В.Ф.* Предварительный анализ результатов расчета нейтронно-физических бенчмарк-моделей ячеек реактора типа ГТ-МГР, “Нейтроника-2004”, октябрь 26 – 29, 2004, г. Обнинск.
2. *Бояринов В., Глушков Е., Давиденко В., Марова Е., Митенкова Е., Новиков Н., Сухарев Ю., Фомиченко П., Цибульский В.* Разработка и расчет нейтронно-физических бенчмарк-моделей ячеек реактора типа ГТ-МГР, НТР-2004, Пекин, INET, сентябрь 22 – 24, 2004.
3. *Раздел* в TECDOC МАГАТЭ “Benchmark исследования реактора типа ГТ-МГР”, 2004 г., 2005.
4. *Poston D.I., Trellue H.R.* User's Manual, Version 2.0 for MONTEBURNS, version 1.0, LA-UR-99-4999, September 1999, PSR-455.
5. *Brismester J.F.* (ed). MCNP – a General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4B, Report LA-12625-M, Los Alamos Laboratory, March 1997.
6. *Croff A.G.* A User's Manual for ORIGEN2 Computer Code, Oak Ridge National Laboratory Document ORNL/TM-7175, July 1980.
7. *MacFarlane R.* The NJOY Nuclear Data Processing System, ver. 91.0, LA-12740-M (October 1994).
8. *Dunford C.* ENDF Utility Codes, Version 6,7. Vienna. 1992. 18 p. (Prepr. IAEA-NDS-29).
9. *Askew J.R. et al.* A General Description of the Lattice Code WIMS, JBWES, Oct. 1966.
10. *WIMSD5*, NEA Data Bank Documentation, No. 1507/02, 1996.
11. *WLUP-WIMS* Library Update. IAEA Final Report of a Coordinated Research Project, 2003, <http://www.nds.iaea.org/wimsd/>.
12. *Давиденко В.Д., Цибульский В.Ф.* Detailed Calculation of Neutron Spectrum in Cell of a Nuclear Reactor / Int. Conf. on the Physics of Nuclear Science and Technology, Oct. 5 – 8, 1998, Long Island, New York, pp. 1755 – 1760.

13. **Brogli R.H., Koch P.K.** MICROBURN. A two-region spectrum-burnup code to calculate self-shielding factors, Gulf General Atomic Company, 1973.
14. **Wälti P., Koch P.** MICROX. A two-region flux spectrum code for the efficient calculation of group cross sections, Gulf General Atomic Company, 1972.
15. **Бояринов В.Ф., Брызгалов В.И., Глушков Е.С., Гомин Е.А., Гуревич М.И., Давиденко В.Д., Марова Е.В., Митенкова Е.Ф., Новиков Н.В., Сухарев Ю.П., Фомиченко П.А., Цибульский В.Ф., Юдкевич М.С.** Benchmark исследования моделей реактора типа ГТ-МГР, “Нейтроника-2005”, ноябрь 08 – 10, 2005, г. Обнинск.
16. **Bryzgalov V.I., Glushkov A.E., Glushkov E.S. et al.** Verification of the MCU Code on Small-Size Space Reactors / Int. Conf. on Physics of Reactor, PHYSOR 96, Mito, Ibaraki, Japan, vol. 2, p.c-138, September 16 – 20, 1996.
17. **Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Брызгалов В.И. и др.** Программа MCU-RFFI/A с библиотекой ядерных данных DLC/MCUDAT-1.0. Заявитель и разработчик РНЦ “Курчатовский институт“. Паспорт аттестации ПС № 61 от 10.07.96. Федеральный надзор России по ядерной и радиационной безопасности, 1996.
18. **Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Брызгалов В.И. и др.** Программа MCU для расчета методом Монте-Карло ядерных реакторов. Верификация РНЦ “КИ”. Препринт ИАЭ-5751/5, 1994.
19. **Gurevich M.I., Bryzgalov V.I.** The Neutrons Flux Density Calculation by Monte Carlo Code for the Double Heterogeneity Fuel / Proc. of the Int. Conf. on Reactor Physics and Reactor Computations, Tel-Aviv, January 23 – 26, 1994, pp. 190 – 196.
20. **Юдкевич М.С.** Программа BURNUP для расчета изотопной кинетики в течение кампании топлива в ядерном реакторе. Препринт ИАЭ-6048/5, 1997.

Статья поступила в редакцию 21 апреля 2006 г.
Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 110 – 120.



Рис. 1. Расчетные модели поэтапного бенчмарк исследования элементарных ячеек реактора типа ВТГР с призматической активной зоной



Рис. 8. Геометрия расчетных моделей ячеек топливного блока



Рис. 9. Поэтапный подход к расчету ячейки топливного блока

УДК 621.039.518.4

Расчетное моделирование экспериментов на критическом стенде АСТРА по изучению физических особенностей ВТГР с кольцевой активной зоной

*В.Ф. Бояринов, Е.С. Глушков, Е.А. Гомин, Г.В. Компаниец,
А.М. Крутов, В.А. Невиница, П.А. Фомиченко,*

ФГУ РНЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. акад. Курчатова, 1,

Е.В. Марова, Ю.П. Сухарев,

ФГУП “ОКБМ”, 603074, г. Н. Новгород, Бурнаковский пр., 15

Представлен расчетный анализ результатов экспериментов по изучению пространственного распределения скорости реакции деления ^{235}U в критической сборке с кольцевой активной зоной и различными конфигурациями макетов органов СУЗ, введенных во внутренний графитовый отражатель. Расчетный анализ выполнялся при помощи программ, предназначенных для проектных расчетов реактора типа ВТГР.

Calculation analysis of experimental study of HTGR model with annular core on ASTRA critical facility. V.F. Boyarinov, E.S. Glushkov, E.A. Gomin, G.V. Kompaniets, A.M. Krutov, V.A. Nevinitza, P.A. Fomichenko, E.V. Marova, Yu.P. Sukharev. Paper presents calculation analysis of some measurements of ^{235}U fission rate spatial distribution in the critical assembly with annular core and different configurations of safety rods, placed into graphite inner reflector. Calculation analysis is fulfilled with codes commonly used in HTGR design calculations.

В настоящее время в мире ведутся разработки ВТГР модульного типа (ВТГР-М) с газовой турбиной, таких как RBMR с шаровыми топливными элементами (ЮАР) [1] и ГТ-МГР с призматическими ТВС (США, Россия, Франция, Япония) [2]. Реакторы такого типа обладают принципиальными преимуществами по безопасности, связанными с отсутствием плавления активной зоны при авариях с потерей теплоносителя.

Такие реакторы имеют следующие особенности, влияющие на их нейтронно-физические характеристики:

- топливо в виде частиц с многослойным покрытием, размещенных в графитовой матрице твэлов, – такая конструкция приводит к двойной гетерогенности размещения топлива в активной зоне и требует проверки нейтронно-физических расчетов по результатам интегральных экспериментов с использованием топливных элементов этого типа;
- большое отношение высоты активной зоны к ее диаметру ($H/D = 1,5 \dots 3$) приводит к чувствительности высотного энергораспределения к положению регулирующих стержней и необходимости экспериментальных исследований эффективности стержней и их интерференции;
- кольцевая активная зона, характеризующаяся высокой радиальной неравномерностью энергораспределения с наличием максимумов на границах активной зоны с внутренним (ВО) и боковым (БО) графитовыми отражателями, и др.

Эти особенности требуют тщательной проверки программ расчета нейтронно-физических характеристик. Важное значение для верификации программ имеют эксперименты на критических сборках, моделирующих физические особенности проектируемых ВТГР-М.

В РНЦ “КИ” имеется критический стенд АСТРА [3...7], на котором проводятся эксперименты по изучению нейтронно-физических особенностей реакторов такого типа. Перед проведением планируемых на стенде АСТРА экспериментов всегда проводится их расчетное обоснование по разработанной в РНЦ “КИ” программе МСУ метода Монте-Карло. Расчеты по МСУ позволяют правильно спланировать экспериментальные исследования и обосновать их ядерную безопасность, при этом результаты расчетов по МСУ хорошо согласуются с экспериментальными данными [6].

Экспериментальные исследования на критическом стенде АСТРА охватывают следующий круг вопросов:

- экспериментальное моделирование полей энерговыделения (измерения распределений скорости реакции деления);
- измерение эффективности органов СУЗ и коэффициентов их интерференции, определение градуировочных характеристик органов регулирования;
- измерение параметров нейтронной кинетики;
- экспериментальное моделирование физического пуска реактора.

Поскольку АСТРА является критическим стендом, а не действующим реактором, на нем возможно определение исходных данных по основным материалам и элементам критической сборки с большей точностью, чем в работающем на мощности реакторе, так как в условиях критического стенда неопределенность в знании температур материалов существенно меньше, а неопределенность изотопного состава топлива определяется только технологией его изготовления, поскольку эффекты выгорания, зашлаковывания и отравления в условиях критического стенда отсутствуют. Это позволяет использовать результаты экспериментов для верификации программ нейтронно-физического расчета высокотемпературных газографитовых реакторов [6, 7].

В проектных исследованиях реактора ВТГР возможно рассмотрение следующих концепций выравнивания энерговыделения: размещение в ВО “тяжелых” поглощающих стержней ($6 \dots 7 \beta_{эф}$); размещение на границе активной зоны и отражателя профилирующих погло-

шающих элементов; профилирование обогащения и содержания выгорающего поглотителя внешнего слоя топливных элементов. Настоящая работа посвящена исследованию выравнивания полей энерговыделения при помощи размещения поглощающих стержней в ВО.

1. Эксперименты по выравниванию полей энерговыделения

В проведенных экспериментах активная зона критической сборки представляла собой кольцевую засыпку шаровых топливных элементов на основе диоксида урана (рис. 1). При такой компоновке графитовый отражатель располагается как внутри, так и снаружи активной зоны.

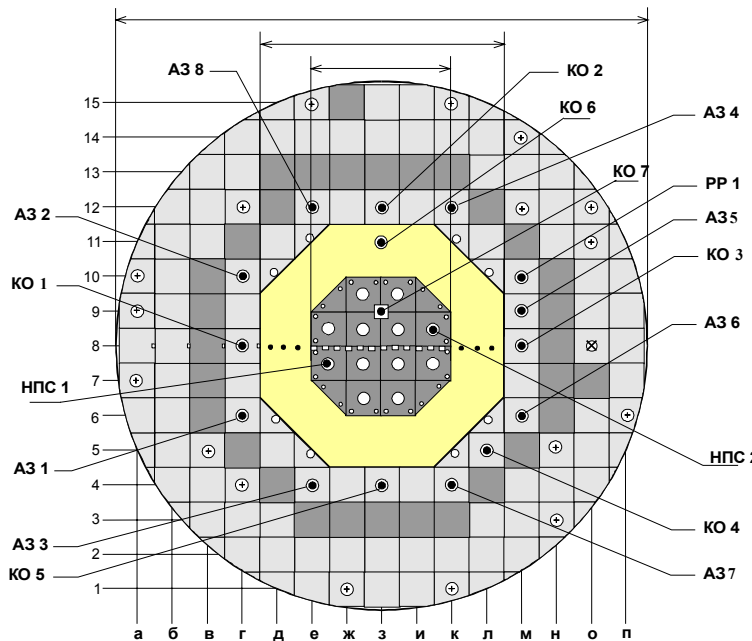


Рис. 1. Схема поперечного сечения критической сборки с кольцевой активной зоной на стенде АСТРА: КО1 – КО7 – компенсирующие органы регулирования; АЗ1 – АЗ8 – органы аварийной защиты; РР – орган ручного регулирования; НПС1, НПС2 – неизвлекаемые поглощающие стержни; заштрихованные области БО – графитовые блоки без отверстий

Исследование влияния органов регулирования, размещенных в ВО, на характер радиальной неравномерности распределения скорости реакции деления ^{235}U проводилось поэтапно. На первом этапе в пространство между внешним и внутренним отражателями было загружено количество шаровых твэлов, достаточное для достижения критического состояния с минимальным запасом реактивности, при этом все компенсирующие органы регулирования и органы аварийной защиты находились в выведенном состоянии. В этом состоянии проведены измерения распределения скорости реакции деления ^{235}U по высоте и радиусу сборки (по направлению 8 на рис. 1). Кроме того, в целях дальнейшей постройки сборки выполнены измерения эффективности органов регулирования и определение их градуировочных характеристик.

Затем в ВО был установлен неизвлекаемый поглощающий стержень (НПС), добавлено необходимое для достижения критичности количество шаровых топливных элементов, после чего измерения повторены. Третья конфигурация получена из второй установкой второго НПС в ВО и увеличением высоты шаровой засыпки, в которой выполнен такой же объем экспериментов.

2. Расчетные исследования

Расчетный анализ экспериментов по измерению распределений скорости реакции деления проводился при помощи программ JAR [8, 9] (модифицированной для расчета тепловых реакторов) и WIMS-D/4 [10...12], используемых в проектных расчетах реактора ВТГР-М. При расчетах по программе JAR область изменения энергии нейтронов была разбита на 13 групп. Макроскопические и микроскопические (для расчета распределений скорости реак-

ции) константы в 13-ти группах подготовлены по программе WIMS-D, при этом для области энергий ниже 4 эВ учитывалась термализация нейтронов.

В ходе расчетов проанализированы методики подготовки макроскопических констант в 13-ти группах для различных элементов компоновки критической сборки. Особое внимание обращалось на учет прострелов нейтронов в графитовых блоках с аксиальным отверстием цилиндрической формы, в каналах для органов СУЗ, собственно в моделях поглощающих частей органов СУЗ, в засыпке шаровых топливных и графитовых (в верхнем отражателе) элементов.

В настоящей работе выполнены две серии расчетов. В первой для учета утечки нейтронов в радиальном и аксиальном направлениях использовались коэффициенты диффузии, подготовленные при помощи программы WIMS-D стандартным образом, т.е. путем усреднения по зонам эквивалентной ячейки транспортного сечения с весовыми факторами плотности потока нейтронов и объемов зон (далее – Standard). В другой серии расчетов для учета утечки нейтронов в аксиальном направлении (через цилиндрический канал) применялись коэффициенты диффузии, подготовленные при помощи опции ARIADNE программы WIMS-D. В радиальной плоскости по-прежнему использовались коэффициенты диффузии, подготовленные стандартным образом.

Различие между радиальными (поперечными) и аксиальными (продольными) коэффициентами диффузии учитывалось в программе JAR при решении конечно-разностного уравнения диффузии нейтронов.

Результаты расчета эффективного коэффициента размножения конфигураций 1...3 приведены в табл. 1. В этих конфигурациях сборка находилась в критическом состоянии, неопределенность фиксации критического состояния не превышала $4,2 \cdot 10^{-6}$.

Таблица 1. Эффективный коэффициент размножения в конфигурациях 1...3

Конфигурация	1	2	3
JAR, WIMS (Standard)	1,01440	1,00917	1,01969
JAR, WIMS (Ariadne)	0,99662	0,99524	1,01089

Ниже (в табл. 2, 4, 6) приводятся результаты расчетного анализа экспериментов по измерению радиальных распределений скорости реакции деления ^{235}U . При анализе отклонений экспериментальные и расчетные величины нормированы на среднее значение. Интегральные характеристики точности расчета скорости реакции деления ^{235}U приведены в табл. 3, 5, 7, а сами распределения скорости реакции деления – на рис. 2...5 (на цветной вкладке).

Таблица 2. Скорости реакции деления урана-235 в радиальном направлении измерений (относительные единицы) в конфигурации 1

x, см *	Эксперимент	JAR+WIMS (Standard)	(P-Э)/Э, % (Standard)	JAR+WIMS (Ariadne)	(P-Э)/Э, % (Ariadne)
1	2	3	4	5	6
↓Боковой отражатель↓					
50	0,396	0,419	5,7	0,419	5,7
75	0,759	0,745	-1,8	0,750	-1,1
100	0,729	0,741	1,6	0,753	3,2
↓Активная зона↓					
108,5	0,668	0,613	-8,2	0,625	-6,5
118,5	0,678	0,623	-8,0	0,636	-6,2
128,5	0,764	0,703	-8,1	0,715	-6,5

Окончание табл. 2

1	2	3	4	5	6
↓Внутренний отражатель↓					
139	0,918	1,005	9,4	1,014	10,4
147,3	1,257	1,211	-3,7	1,213	-3,5
155,6	1,252	1,328	6,1	1,324	5,8
164	1,369	1,408	2,9	1,398	2,2
172,3	1,443	1,439	-0,3	1,423	-1,4
180,5	1,432	1,453	1,5	1,434	0,2
189	1,494	1,459	-2,3	1,442	-3,5
197,3	1,506	1,449	-3,8	1,432	-5,0
205,6	1,418	1,433	1,1	1,418	0,0
214	1,365	1,387	1,6	1,381	1,2
222,3	1,273	1,296	1,9	1,295	1,7
230,6	1,143	1,161	1,6	1,166	2,0
↓Активная зона↓					
246,5	0,752	0,707	-6,0	0,720	-4,3
256,5	0,655	0,624	-4,8	0,638	-2,6
266,5	0,643	0,613	-4,8	0,626	-2,7

Расстояние от наружной поверхности БО (слева) до оси канала

Таблица 3. Интегральные характеристики точности расчета для конфигурации 1

Область	Максимальные отклонения		Средние отклонения		Средние квадратичные отклонения	
	Standard	Ariadne	Standard	Ariadne	Standard	Ariadne
БО	5,7	5,7	1,83	2,59	3,59	3,82
АЗ	-8,2	-6,5	-6,6	-4,8	6,81	5,08
ВО	9,4	10,4	1,32	0,83	3,87	4,14

Таблица 4. Скорости реакции деления урана-235 в радиальном направлении измерений (относительные единицы) в конфигурации 2

x, см *	Эксперимент (среднее)	JAR+WIMS (Standard)	(P-Э)/Э, % (Standard)	JAR+WIMS (Ariadne)	(P-Э)/Э, % (Ariadne)
1	2	3	4	5	6
↓Боковой отражатель↓					
50	0,423	0,397	-6,0	0,397	-6,1
75	0,725	0,693	-4,4	0,697	-3,9
100	0,644	0,666	3,5	0,675	4,9
↓Активная зона↓					
108,5	0,568	0,538	-5,3	0,547	-3,7
118,5	0,547	0,520	-4,9	0,530	-3,1
128,5	0,569	0,543	-4,7	0,552	-3,0
↓Внутренний отражатель↓					
139	0,630	0,696	10,5	0,704	11,8
147,3	0,700	0,790	12,9	0,793	13,3
155,6	0,878	0,946	7,8	0,945	7,7

Окончание табл. 4

1	2	3	4	5	6
164	1,126	1,170	3,9	1,163	3,3
172,3	1,356	1,335	-1,6	1,322	-2,5
180,5	1,447	1,451	0,3	1,436	-0,8
189	1,582	1,557	-1,6	1,540	-2,6
197,3	1,656	1,623	-2,0	1,606	-3,0
205,6	1,673	1,661	-0,7	1,647	-1,5
214	1,655	1,661	0,4	1,654	0,0
222,3	1,550	1,591	2,7	1,589	2,5
230,6	1,426	1,451	1,7	1,455	2,0
↓Активная зона↓					
246,5	0,992	0,911	-8,2	0,922	-7,0
256,5	0,894	0,816	-8,7	0,829	-7,2
266,5	0,879	0,810	-7,9	0,822	-6,5

Расстояние от наружной поверхности БО (слева) до оси канала

Таблица 5. Интегральные характеристики точности расчета для конфигурации 2

Область	Максимальные отклонения		Средние отклонения		Средние квадратичные отклонения	
	Standard	Ariadne	Standard	Ariadne	Standard	Ariadne
БО	-6,0	-6,1	-2,3	-1,7	4,77	5,04
АЗ	-8,7	-7,2	-6,6	-5,1	6,81	5,41
ВО	12,9	13,3	2,86	2,52	5,57	5,93

Таблица 6. Скорости реакции деления урана-235 в радиальном направлении измерений (относительные единицы) в конфигурации 3

x, см *	Эксперимент (среднее)	JAR+WIMS (Standard)	(С-Э)/Э, % (Standard)	JAR+WIMS (Ariadne)	(А-Э)/Э, % (Ariadne)
1	2	3	4	5	6
↓Боковой отражатель↓					
50	0,613	0,553	-9,8	0,552	-10,0
75	1,008	0,952	-5,6	0,952	-5,6
100	0,867	0,900	3,8	0,906	4,4
↓Активная зона↓					
108,5	0,815	0,720	-11,6	0,726	-10,9
118,5	0,738	0,686	-7,1	0,693	-6,1
128,5	0,782	0,702	-10,2	0,708	-9,4
↓Внутренний отражатель↓					
139	0,768	0,876	14,1	0,881	14,8
147,3	0,849	0,960	13,2	0,962	13,4
155,6	1,142	1,111	-2,7	1,110	-2,8
164	1,270	1,326	4,4	1,321	4,1
172,3	1,473	1,464	-0,6	1,456	-1,2
180,5	1,589	1,534	-3,5	1,524	-4,1
189	1,639	1,558	-4,9	1,548	-5,5

Окончание табл. 6

1	2	3	4	5	6
197,3	1,585	1,525	-3,8	1,515	-4,4
205,6	1,330	1,442	8,4	1,436	7,9
214	1,245	1,277	2,6	1,275	2,4
222,3	1,015	1,069	5,3	1,070	5,4
230,6	0,909	0,960	5,6	0,964	6,1
↓Активная зона↓					
246,5	0,768	0,714	-7,0	0,721	-6,1
256,5	0,679	0,695	2,4	0,702	3,5
266,5	0,778	0,727	-6,5	0,733	-5,7

* Расстояние от наружной поверхности БО (слева) до оси канала

Таблица 7. Интегральные характеристики точности расчета для конфигурации 3

Область	Максимальные отклонения		Средние отклонения		Средние квадратичные отклонения	
	Standard	Ariadne	Standard	Ariadne	Standard	Ariadne
БО	-9,8	-10,0	-3,85	-3,73	6,86	7,10
АЗ	-11,6	-10,9	-6,7	-5,8	8,02	7,38
ВО	14,1	14,8	3,18	3,0	7,0	7,23

3. Обсуждение результатов

Анализ расхождений расчета и эксперимента показывает, что применение обоих методов расчета приводит к достаточно близким результатам. Так, для большинства точек ВО отклонение рассчитанных значений от экспериментальных не превышает погрешности измерений 5 % с доверительной вероятностью 90 % (как правило, отклонение не выходит даже за рамки 3 %). Однако следует отметить, что наиболее проблемными оказались области ВО, примыкающие к активной зоне. В этих областях отклонение рассчитанных значений от экспериментальных достигает 10...15 % (особенно в случае введенных в ВО “тяжелых” органов регулирования).

При расчете активной зоны учет аксиальной анизотропии утечки нейтронов (опция Ariadne) приводит в среднем к меньшим на 1 % отклонениям от экспериментальных значений, чем расчет с коэффициентами диффузии, рассчитанными стандартным путем. Тем не менее при введенных в ВО двух поглощающих стержнях величина отклонений рассчитанных скоростей реакций от экспериментальных значений достигает 11 %. При одном введенном в ВО поглощающем стержне или без него при расчете по опции Ariadne величина отклонений рассчитанных значений скоростей реакций от экспериментальных либо не выходит за пределы погрешности эксперимента, либо превышает ее на 1 %; в случае расчета с коэффициентами диффузии, подготовленными стандартным образом, величина отклонений от эксперимента достигает 8 %.

Максимальная погрешность в БО (в случае отсутствия стержней или при одном стержне) не превышает 6 %, а при двух стержнях достигает 10 %.

Следует отметить, что при анализе результатов обращает на себя внимание тенденция к росту отклонения рассчитанных значений скорости реакции деления ^{235}U по отношению к экспериментальным значениям с ростом числа борных поглотителей, введенных в ВО. Это хорошо видно из табл. 8. При этом очевидно, что ошибки в моделировании органов СУЗ влияют на точность расчета распределений скоростей реакций деления сильнее, чем наличие

Таблица 8. Среднеквадратичное отклонение рассчитанных значений скорости реакции деления ^{235}U от экспериментальных данных в конфигурациях 1...3

Конфигурация/Число НПС в отражателе	1/0	2/1	3/2
JAR, WIMS (Standard)	4,86	5,85	7,29
JAR, WIMS (Ariadne)	4,39	5,67	7,25

к существенному снижению неравномерности энерговыделения по сравнению со случаем, когда органы регулирования отсутствуют. Это показано на рис. 5 – введение одного НПС приводит к снижению неравномерности распределения скорости реакции деления в прилегающей области активной зоны и перекосу распределения скорости реакции в противоположной области, при этом в области, отдаленной от места введения органа СУЗ, неравномерность распределения скорости реакции возрастает. Введение двух НПС приводит к практически симметричным распределениям в диаметрально противоположных областях активной зоны, при этом различие между максимальными и минимальными значениями скорости реакции (по выбранному направлению) существенно меньше, чем в случае отсутствия НПС.

Таким образом, расчетные распределения скорости реакции деления достаточно близки к экспериментальным результатам, полученным на стенде АСТРА, что создает принципиальную возможность использования программ JAR и WIMS-D/4 в проектных расчетах реактора типа ВТГР-М для решения задачи выравнивания полей энерговыделения путем поиска оптимальных мест расположения органов СУЗ в ВО.

Заключение

В работе проведен расчетный анализ экспериментов по выравниванию полей энерговыделения в ВТГР с кольцевой активной зоной при помощи органов регулирования, размещенных во внутреннем отражателе. Определены величины типичных и максимальных отклонений рассчитанных значений скорости реакции деления ^{235}U от экспериментальных значений и показано, что существует тенденция к снижению точности расчета локальных полей энерговыделения с увеличением числа органов регулирования, введенных во внутренний отражатель.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Mulder E.J.* Pebble Bed Reactor with Equalized Core Power Distribution Inherently Safe and Simple, Forschungszentrum Jülich, JÜL-3632, Jan. 1999.
2. *Kiriushin A.I., Ponomarev-Stepnoi N.N., Glushkov E.S. et al.* Project of the GT-MHR high-temperature helium reactor with gas turbine // Nucl. Eng. and Des., 173, 1997, p. 119 – 129.
3. *Bykov A.A., Gagarinsky A.Yu., Glushkov E.S. et al.* Programs of experiments with critical assemblies at the Russian Research Centre “Kurchatov Institute” // Nucl. Sci. and Eng., v. 145, 2003, p. 181 – 187.
4. *Ponomarev-Stepnoi N.N., Kukharkin N.E., Glushkov E.S. et al.* Experiments on HTR criticality parameters at the ASTRA facility of the “Kurchatov Institute” // Nucl. Eng. and Des., v. 222, June 2003, p. 215 – 229.
5. *Пономарев-Степной Н.Н., Кухаркин Н.Е., Глушков Е.С. и др.* Эксперименты на критическом стенде АСТРА в обоснование нейтронно-физических параметров ВТГР модульного типа. Препринт ИАЭ-6340/4, 2004.
6. *Пономарев-Степной Н.Н., Брызгалов В.И., Глушков Е.С. и др.* Использование программы MCU для анализа результатов критических экспериментов с шаровыми твэлами ВТГР на стенде АСТРА // Атомная энергия, 2004, т. 97, вып. 4. – С. 243 – 252.

или отсутствие учета аксиальной анизотропии утечки нейтронов в каналах с аксиальными отверстиями (т.е. наличие или отсутствие учета прострелов нейтронов).

Следует также отметить, что размещение в ВО “тяжелых” (6...7 $\beta_{эф}$) органов регулирования приводит

7. **Давиденко В.Д., Цибульский В.Ф.** Расчет эффективности органов регулирования критсборки АСТ-РА / В кн.: “Алгоритмы и программы для нейтронно-физических расчетов ядерных реакторов (Нейтроника-96)”, Обнинск, 1998. – С. 65 – 68.
8. **Ярославцева Л.Н.** Комплекс программ JARB для расчета нейтронно-физических характеристик ядерных реакторов // ВАНТ. Сер. ФиТЯР, вып. 8 (37), 1983. – С. 41 – 43.
9. **Ярославцева Л.Н., Фомиченко П.А., Алексеев П.Н.** Верификация стационарных и нестационарных алгоритмов в комплексе JAR / В кн.: “Алгоритмы и программы для нейтронно-физических расчетов ядерных реакторов (Нейтроника-92)”, Обнинск, 1994. – С. 34 – 37.
10. **Askew J.R. et al.** A General Description of the Lattice Code WIMS. JBWES, Oct., 1966.
11. **WIMSD5**, NEA Data Bank Documentation, No. 1507/02, 1996.
12. **WLUP-WIMS** Library Update. IAEA Final Report of a Coordinated Research Project, 2003.

Статья поступила в редакцию 21 ноября 2006 г.
Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 120 – 128.

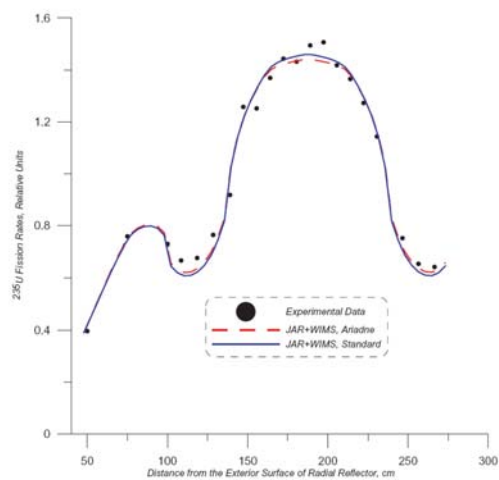


Рис. 2. Распределение скорости реакции деления урана-235 в диаметральной направлении измерений для конфигурации 1

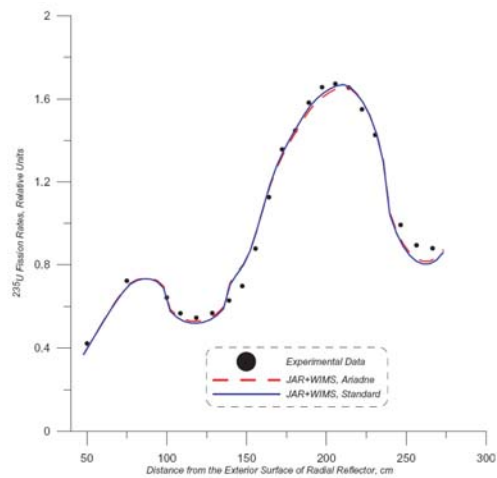


Рис. 3. Распределение скорости реакции деления урана-235 в диаметральной направлении измерений для конфигурации 2

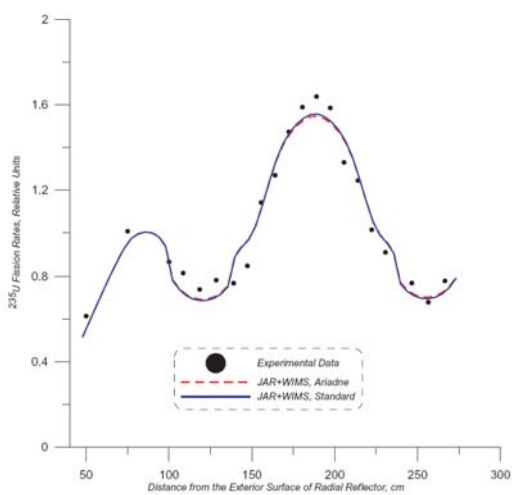


Рис. 4. Распределение скорости реакции деления урана-235 в диаметральной направлении измерений для конфигурации 3

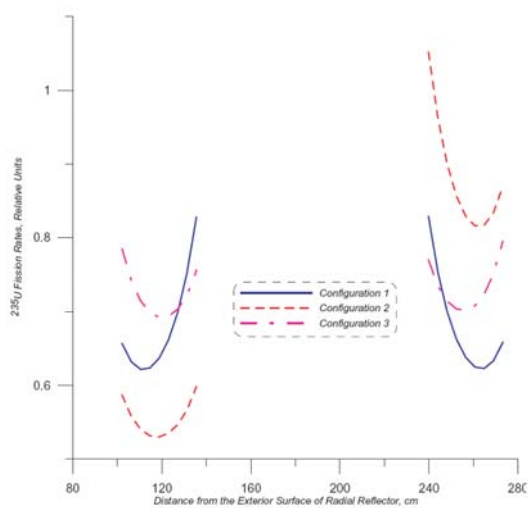


Рис. 5. Распределение скорости реакции деления урана-235 в диаметральной направлении измерений в активных зонах конфигураций 1...3 (расчет)

СОДЕРЖАНИЕ

Лев Васильевич Майоров.....	5
<i>Гомин Е.А.</i> Статус MSU-4.....	6
<i>Гомин Е.А., Гуревич М.И., Шкаровский Д.А.</i> Использование обобщенных спектров нормальных колебаний замедлителей при моделировании переноса медленных нейтронов методом Монте-Карло	32
<i>Андросенко П.А., Ломтев В.Л.</i> Решение краевых задач методом Монте-Карло в приближении теории переноса излучений	44
<i>Блыскавка А.А., Николаев М.Н., Цибуля А.М.</i> Теоретические основы, алгоритм вычисления методом Монте-Карло производных $k_{эф}$ по групповым макроскопическим сечениям и особенности реализующей его опции в коде MMKKENO	54
<i>Блыскавка А.А., Цибуля А.М.</i> Об алгоритме вычисления эффективной доли запаздывающих нейтронов методом Монте-Карло и некоторых особенностях его реализации в программе MMKKENO.....	64
<i>Гуревич М.И., Тельковская О.В., Шкаровский Д.А.</i> Динамическая визуализация траекторий частиц при расчете по программе MSU	69
<i>Андросенко П.А., Белоусов В.И., Коньков А.В., Царина А.Г.</i> Современный статус комплекса программ BRAND	74
<i>Ванеев Ю.Е.</i> Разработка комплекса программных средств для сопровождения эксплуатации исследовательских реакторов	84
<i>Гомин Е.А., Городков С.С., Гуревич М.И., Бабайцев М.Н., Немиров А.С.</i> Расчеты критичности полномасштабных загрузок РБМК по программе MSU-REA/1	93
<i>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.</i> Расчетные нейтронно-физические “бенчмарк”-исследования реактора типа ГТ-МГР	110
<i>Бояринов В.Ф., Глушков Е.С., Гомин Е.А., Компаниец Г.В., Крутов А.М., Невиница В.А., Фомиченко П.А., Марова Е.В., Сухарев Ю.П.</i> Расчетное моделирование экспериментов на критическом стенде АСТРА по изучению физических особенностей ВТГР с кольцевой активной зоной.....	120

CONTENTS

Lev Vasil'evich Maiorov	5
<i>Gomin E.A.</i> The status of the MCU-4	6
<i>E.A., Gurevich M.I., Shkarovsky D.A.</i> The use of generalized spectra of normal oscillations of moderators for slow neutron transport modeling by means of the Monte Carlo method	32
<i>Androsenko P.A., Lomtev V.L.</i> Solution of boundary problems by Monte Carlo method in approximation of radiation transfer theory	44
<i>Blyskavka A.A., Nikolaev M.N., Tsibulya A.M.</i> The theoretical background and algorithm for Monte Carlo calculation of k_{eff} derivative over group macroscopic cross sections and features of the code MMKKENO corresponding option	54
<i>Blyskavka A.A., Tsibulya A.M.</i> The Monte Carlo algorithm for calculation of delayed neutrons effective fraction and some features of its realization in the code MMKKENO	64
<i>Gurevich M.I., Tel'kovskaya O.V., Shkarovsky D.A.</i> Dynamic visualization of trajectories of particles calculated by the MCU code	69
<i>Androsenko P.A., Belousov V.I., Kon'kov A.V., Tsarina A.G.</i> The modern status of program complex BRAND	74
<i>Vaneyev Yu.E.</i> Development of software tools in support of research reactors operation	84
<i>Gomin E.A., Gorodkov S.S., Gurevich M.I., Babaytsev M.N., Nemirov A.S.</i> Criticality calculation of full-scale RBMK cores using MCU-REA/1 code	93
<i>Boyarinov V.F., Bryzgalov V.I., Glushkov E.S., Gomin E.A., Gurevich M.I., Davidenko V.D., Fomichenko P.A., Tsibulsky V.F., Yudkevich M.S., Marova E.V., Sukharev Yu.P., Mitenkova E.F., Novikov N.V.</i> "Benchmark" neutronic computational investigations of the GT-MHR type reactor	110
<i>Boyarinov V.F., Glushkov E.S., Gomin E.A., Kompaniets G.V., Krutov A.M., Nevinitsa V.A., Fomichenko P.A., Marova E.V., Sukharev Yu.P.</i> Calculation analysis of experimental study of HTGR model with annular core on ASTRA critical facility	120

Правила оформления статей

При подготовке статьи в сборник автор должен руководствоваться стандартом “Оригиналы авторские и текстовые издательские” (ОСТ 29.115 – 88). К авторским оригиналам, передаваемым для издания, предъявляются следующие требования:

1. Экземпляр статьи должен быть первым, отпечатан на одной стороне листа формата А4 шрифтом № 12 через 2 интервала. Статья должна быть составлена в следующем порядке: индекс УДК; заглавие; инициалы и фамилии авторов; место работы каждого автора с почтовым адресом; аннотация на русском и английском языках (не более 10 строк каждая); текст; список литературы; рисунки; подрисуночные подписи (на отдельном листе).

2. Статья должна также предоставляться обязательно в виде электронной версии обычным шрифтом № 11 Times New Roman, междустрочный интервал – одинарный, в редакторе Word 97 или более поздних версий. Текст не форматируется, в качестве имени файла используется ФИО первого автора статьи. Кавычки в тексте ставятся при английской раскладке клавиатуры (“..”).

3. Содержание статьи должно быть кратким и четким. Исключаются общие рассуждения, известные положения. Не допускается дублирование материала в тексте, таблицах, подрисуночных надписях. Необходимо соблюдать единообразие в написании терминов, наименований физических величин и единиц измерения, условных обозначений, сокращений, символов. Наименования и обозначения единиц физических величин необходимо приводить в системе СИ.

Необходимо обращать внимание на написание прописных и строчных букв: русские и греческие буквы (α , β , γ , ϕ и т.д.) набираются прямо, а латинские (x , y , z , w и т.д.) – курсивом. Те же требования в обозначениях нужно соблюдать при написании индексов и степеней в формулах. Обозначения матриц и векторов набираются полужирным шрифтом прямо. Формулы, включенные в текст, следует набирать без увеличения интервала между строками, например b/d , $\exp(x/e)$.

4. Таблицы нумеруются, каждая таблица должна иметь заголовок. Сокращения в графах таблицы не допускаются. В тексте необходимы ссылки на все таблицы. Таблицы печатаются в общем тексте после первой ссылки.

5. Формулы и буквенные обозначения величин должны быть размечены и сразу расшифрованы. Формулы нумеруются арабскими цифрами, номер ставится с правой стороны листа в круглых скобках. Нумеровать следует только те формулы и уравнения, на которые есть ссылка в последующем изложении. Формулы выполняются в редакторе Equation 3.0 при невозможности набора на клавиатуре ($x_n^2, y_m^n, \sqrt{x}, \int_0^1 x, \frac{1}{y}$ и т.д.). Подстрочные и надстрочные индексы вводятся с клавиатуры ($x_3, \text{км}^2$ и т.д.), греческие буквы вставляются через Меню *Вставка* → *символ*.

6. В тексте статьи рисунок обязательно представляется на отдельном листе формата не более А4. На рисунках допускается минимальное число обозначений – краткие цифровые (по порядку номеров слева направо или по часовой стрелке) или буквенные обозначения. Все пояснения выносятся в подрисуночные подписи. На обороте каждого рисунка указываются фамилии авторов, название статьи, номер рисунка, обозначения верха и низа. Внутренние надписи на рисунках набираются шрифтом № 10. Внизу каждого рисунка должны быть

приведены его номер и подрисуночная подпись шрифтом № 10. При наличии нескольких различных графиков на одном рисунке каждый из них обозначается русскими буквами а), б), в) и т.д. и расшифровывается.

В компьютерном виде рисунки представляются в отдельных файлах, выполненные в графических редакторах *Paint*, *PhotoShop*, *CorelDraw* в черно-белом цвете (фотографии в растровом формате *tif*, *dpi-300*). Рисунки в Word не вставлять кроме случаев, когда рисунок изначально выполнен в Word.

7. Ссылки на литературу в тексте даются по порядку арабскими цифрами в квадратных скобках. Список литературы составляется в той же последовательности, в которой приводятся ссылки на литературу. Фамилии и инициалы авторов набираются полужирным курсивом.

8. Список литературы следует оформлять в соответствии с Государственным стандартом “Библиографическое описание документа” (ГОСТ 7. 1-2003), в частности, необходимо указать :

а) для журнальных статей – фамилии и инициалы авторов (не менее трех первых), название статьи, название журнала (без кавычек), год, том, выпуск, номер, страницы;

б) для книг – фамилии и инициалы авторов, полное название книги, место издания, издательство (без кавычек), год издания;

в) для авторефератов диссертаций – фамилию и инициалы автора, название автореферата диссертации, на соискание какой ученой степени написана диссертация, место и год защиты;

г) для препринтов – фамилии и инициалы авторов, название препринта, наименование издающей организации, шифр и номер, место и год издания;

д) для патентов – фамилии и инициалы авторов, название патента, страну, номер и класс патента, дату и год заявления и опубликования патента;

е) для отчетов – фамилии и инициалы авторов, название отчета, инвентарный №, наименование организации, год выпуска;

ж) для электронных источников – полный электронный адрес, позволяющий обратиться к публикации.

9. В конце текста перед списком литературы указываются контактный телефон и, желательно, адрес электронной почты.

Вниманию читателей

научно-технического сборника

"Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов"!

Редколлегия сборника "ВАНТ. Серия: Физика ядерных реакторов" информирует авторов и читателей сборника об организации со II полугодия 2007 г. подписки на "ВАНТ. Серия: Физика ядерных реакторов". Сборник включен в Каталог "Издания органов научно-технической информации" Агентства "Роспечать" (индекс 66675, подписная цена 200 руб. за один экземпляр).

Напоминаем, что "ВАНТ. Серия: Физика ядерных реакторов" по-прежнему издается в трех выпусках: Физика и методы расчета ядерных реакторов, Динамика и безопасность ядерных энергетических установок и Импульсные реакторы и простые критические сборки.

Призываем заинтересованных специалистов поддержать активной подпиской сборник "ВАНТ. Серия: Физика ядерных реакторов".