

ISSN 0205—4671

РОССИЙСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР  
“КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ”

# ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

Физика ядерных реакторов

ВЫПУСК

1

2010

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**

ИЗДАЕТСЯ С 1989 г.

МОСКВА – 2010

Сборники "Вопросы атомной науки и техники" (ВАНТ) включены в Перечень ведущих изданий Высшей аттестационной комиссии (ВАК). Подписные индексы ОАО Агентство "Роспечать": 66675 в каталоге "Издания органов научно-технической информации" и 32067 с 2010 г. в каталоге "Газеты. Журналы".

Выпуски "Физика и методы расчета ядерных реакторов" подготавливаются Российским научным центром "Курчатовский институт".

*Статьи, поступающие в редакцию, рецензируются. При перепечатке и цитировании ссылка на сборник ВАНТ обязательна. Перепечатка материалов допускается только с письменного разрешения редакции.*

#### **Редакционная коллегия серии :**

главный редактор – Ю.М. Семченков;

заместители главного редактора – С.М. Зарицкий, В.Ф. Колесов, А.Е. Крошин, В.В. Пчелин;  
ответственный секретарь – Е.А. Старостина;

члены редколлегии – П.Н. Алексеев, Е.В. Бурлаков, А.Ю. Гагаринский,  
М.П. Лизоркин, В.Д. Павлов, Я.И. Штромбах.

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

- математические проблемы теории переноса и теории реакторов;
- теория и методы расчета ядерных реакторов, бланкетов 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, бланкетов 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.

**Перспективы и проблемы использования в реакторах  
легководного теплоносителя сверхкритического давления  
для повышения эффективности ядерного топливного цикла**

*П.Н. Алексеев, Ю.М. Семченков, А.А. Седов, С.А. Субботин, А.В. Чибиняев,*  
РНЦ "Курчатовский институт", 123182, Москва, пл. Курчатова, 1  
Поступила в редакцию 17.07.2009 г.

Проводится анализ тенденций развития электропроизводящего сектора энергетики России и мира в настоящее время и в ближайшем будущем. Сопоставляются тенденции роста цен на ресурсы органического и ядерного топлива, применяемого для производства электроэнергии. Выполняется анализ конкурентоспособности производства электроэнергии на АЭС по сравнению с ТЭС на угле и газе. Рассматривается эффективность открытого и разных вариантов замкнутого ядерного топливного цикла (ЯТЦ). Определяются требования к легководным реакторам (ЛВР) в сценарии динамично развивающейся атомной энергетики (АЭ) России. Приводятся результаты анализа эффективности топливоиспользования для различных вариантов корпусных ЛВР со сверхкритическими параметрами теплоносителя. Перечисляются преимущества и проблемы реакторов с водой сверхкритического давления (СКД).

*Ключевые слова:* установленная мощность, цены на органическое топливо, цены на природный уран, себестоимость электроэнергии, легководные реакторы, ядерный топливный цикл, теплоноситель сверхкритического давления.

**Prospective and Problems of Application of Light Water Supercritical Coolant in Reactors for Upgrading Efficiency of the Nuclear Fuel Cycle.** *P.N. Alekseev, Yu.M. Semchenkov, A.A. Sedov, S.A. Subbotin, A.V. Chibinyaev, RRC "Kurchatov Institute", 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182.* An analysis of current and near future trends of electroproducing sector development of Russia's and World's energies is presented in this paper. Tendencies of prices growth for fossil and nuclear fuel used in electro generation at FFPP and NPP are compared. It is analyzed a competitive ability of electricity production at NPP comparatively with coal and gas power plants. Efficiency of open and a few variants of closed nuclear fuel cycles are considered. Number of requirements to light water reactors for scenario of dynamically development of the Russia's nuclear power is listed. Results of analysis of fuel consumption efficiency for a few variants of vessel-type reactors with light water supercritical coolant are given. Benefits and problems of SCW reactors are reviewed.

*Key Words:* Available Capacity, Fossil Fuel Prices, Nature Uranium Prices, Electricity Prime Cost, Light Water Reactors, Nuclear Fuel Cycle, Supercritical Coolant.

### 1. Место АЭС в конкуренции разных ветвей энергопроизводства в России и мире

Стратегия развития производства электроэнергии в России базируется на сохранении лидирующих позиций газовых и угольных ТЭС, а также на увеличении доли АЭС в общем балансе мощностей [1] (рис. 1)<sup>1</sup>.

Доля ТЭС, использующих газовый энергоноситель, по-прежнему значительно превышает все остальные составляющие электропроизводства в России. Заниженные по сравнению с мировыми внутренние цены на газ ниже цен на уголь в 1,5 раза, что

тормозит у нас развитие угольного сектора электропроизводства. Однако прогноз до 2020 г. показывает, что ситуация с соотношением цен газ-уголь изменится на прямо противоположную [2] (рис. 2), что будет стимулировать развитие мощностей угольных ТЭС.

Цены на газовый энергоноситель будут неуклонно расти, что связано с исчерпанием дешевого газового ресурса (рис. 3). Снижение давления газа в эксплуатируемых скважинах потребует привлечения новых дорогостоящих технологий и энергоресурсов для откачки газа. Кроме того, потребуются проведение геологоразведки и освоение новых северных месторождений, что также приведет к эскалации цены на газ.

<sup>1</sup> Рис. 1...3, 5...8, 10...17 помещены на цветной вкладке

Россия является второй страной в мире по разведанным запасам угля [3] (рис. 4). Тем не менее ежегодная добыча угля в нашей стране в 10 раз ниже, чем в Китае [4]. В 90-х гг. прошлого столетия в мире (кроме Китая) существовала тенденция на снижение добычи угля. Однако в конце 90-х, когда цены на газ стали стремительно расти, возродился интерес энергопроизводящих компаний к углю и добыча угля вновь стала повышаться.

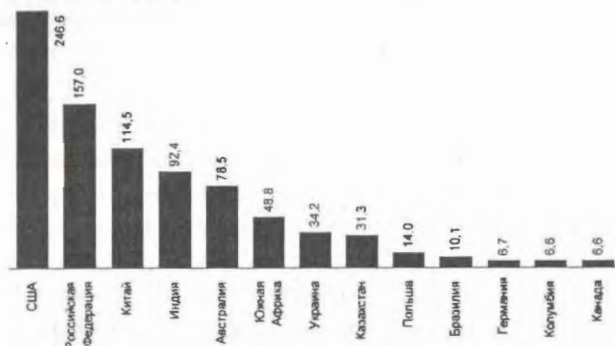


Рис. 4. Доказанные запасы угля (млрд. т) по странам по состоянию на конец 2004 г.

На сегодняшний день мировые цены на газовый энергоноситель в 2,5...3 раза выше, чем на уголь [3]. Это объясняет преобладающую над остальными долю угольных ТЭС в общем мировом электропроизводстве (рис. 5), возрастающую с 41 % в 2005 г. до 47 % в 2030 г. [5]. Доля же АЭС в мировом производстве электричества останется примерно на одном и том же уровне 10...12 %, несмотря на полуторный прирост их мощностей.

После 1998 г. в России также, хотя и меньшими темпами чем в мире, наметилась тенденция к росту добычи угля [4, 6] (рис. 6, 7). Согласно генеральной схеме развития российского энергетического рынка уже в ближайшем будущем должны произойти

существенное развитие угольных мощностей и увеличение доли угля в топливном балансе на 10 % к 2015 г. и 14 % к 2020 г. При этом доля угольных ТЭС повысится с 25 до 35 % [7].

Характерной особенностью структуры себестоимости электроэнергии на органических топливах является большая топливная составляющая (табл. 1): от 55...65 % на угольных ТЭС до 75...85 % на газовых и газомазутных ТЭС [8]. С другой стороны, тепловая энергетика работает в открытом топливном цикле – здесь не существует возможности, как в ЯТЦ, получать вторичное топливо при сжигании первичного. Поэтому основным стимулом увеличения экономичности этих станций становится снижение расхода топлива на 1 кВт-час произведенной энергии, что означает соответствующее повышение КПД станций.

Сегодня в России большинство паротурбинных ТЭС, работающих на угле при докритических давлениях пара 130...160 ат, имеет КПД станции на уровне 30...32 %, а удельный расход топлива 380...400 гут/кВт-час. Паротурбинные ТЭС, работающие на газе при докритических давлениях пара, имеют более высокий КПД станции на уровне 38...40 %, а удельный расход топлива 330...340 гут/кВт-час.

Стремление снизить удельный расход топлива на ТЭС постоянно стимулирует разработку технологий и тепловых схем для повышения КПД станции. Так, при применении газового энергоносителя чрезвычайно экономичным оказался бинарный газопаровой цикл, который использует теплоту газов на выхлопе ГТУ для генерации пара, поступающего на паровую турбину. Данная схема не только позволяет дости-

Таблица 1. Структура себестоимости электропроизводства в России, %

Затраты	Электропроизводящие станции			
	АЭС	ТЭС (уголь)	ТЭС (мазут, газ)	ГЭС
Топливо	35,2	65,0	75,0	–
Амортизация	44,5	18,2	10,2	82,3
Заработная плата и отчисления на страхование	7,3	6,0	5,0	5,0
Вспомогательные материалы + текущий ремонт	7,4	5,3	5,3	4,9
Прочие затраты (общестанционные расходы)	5,6	5,5	4,5	7,8

гать высокого КПД станции (47...48 % даже при докритических давлениях пара на входе в паровую турбину), но и значительно упростить и удешевить технологическую схему получения электроэнергии.

Угольные станции стали развиваться по пути карнотизации паротурбинного цикла Ренкина и повышения параметров пара (давления и температуры основного и промежуточных перегревов). На рис. 8 представлена диаграмма повышения КПД европейских угольных станций с СКД турбинами по мере освоения новых технологий, конструкционных материалов и повышения параметров паровых перегревов [9]. Как видно из приведенной диаграммы, КПД угольных станций в перспективе пересечет рубеж 50 %.

Кроме того, в последнее время произошел технологический прорыв в повышении эффективности электропроизводства при сжигании угля за счет совмещения процесса IGCC (Integrated Gasification Combined Cycle) газификации угля с бинарным газопаровым циклом и применения технологии PFBC (Pressurized Fluidized Bed Combustion) флюидизации угольной пыли под давлением в газификаторах.

Использование СКД турбины в бинарном газопаровом цикле (даже при не очень

высоких параметрах пара: 250 бар, 540.°С) дает КПД такой гибридной станции на уровне 51...52 %, а кроме того позволяет на 25 % снизить выбросы CO<sub>2</sub> и на 95...99 % сократить выбросы окислов азота NO<sub>x</sub> и серы SO<sub>x</sub> [9]. При этом расход угля на таких ТЭС снижается до 230...240 гут/кВт-час и, как видно из приведенной ниже табл. 2, удельная стоимость угольного топлива становится в 2,1...2,8 раза ниже топливной составляющей газовых ТЭС и даже ниже удельной стоимости ядерного топлива, применяемого на АЭС.

Цены на органические энергоносители довольно нестабильны и зависят от конъюнктуры рынка и тенденций в мировой экономике. Однако ценовой тренд, взятый по достаточно длительному периоду времени, показывает примерно 6,2 %-ный ежегодный прирост цены на газ [10] (рис. 9) и 4,5 %-ный прирост цены на уголь [11] (рис. 10), используемый для производства электроэнергии. При таком соотношении тенденций роста цен разрыв между ценами на газ и уголь будет все время нарастать и, как показывает прогноз [12], к 2025 г. удельная цена (долл/ГДж) на газ будет примерно в 3...3,5 раза выше цены на уголь.

Сохранению данной тенденции в ближайшем будущем будет способствовать

**Таблица 2.** Сравнение стоимостных показателей для разных типов электростанций (в базисном режиме), рассчитанных разными организациями: 1 – EIA, 2 – MINIFI, 3 – University Essen, 4 – ECN [3]

Показатель	Организации, проводившие оценки															
	1				2				3				4			
	Угольные ТЭС				Парогазовые ТЭС				АЭС							
Коэффициент дисконтирования, %	8	8	10	9	8	8	10	9	8	8	9					
КПД, %	36,7	43,5	38,6	45,4	53	57,1	55	58,5	32,8	36,1	33					
Годовая продолжительность работы, час	7 446	8 000	7 500	7 500	7 446	8 000	7 500	7 500	7 446	7 500	7 500					
Удельные капитальные вложения, долл/кВт установленной мощности	1 300	1 750	1 025	1 500	500	658	525	675	2 000	2 079	2 312					
Срок службы, лет	40	35	35	30	40	25	25	20	40	60	40					
Срок стр.-монтаж. работ, мес	48	36	36	–	24	26	24	–	60	78	–					
Цена топлива, долл/гут	54	50,4	75,6	50,4	159	148	149	126	–	58	–					
Себестоимость эл/энергии, 10 <sup>-3</sup> долл/кВт-час	42	43,9	42,5	43,7	41	44,7	43,8	48,7	67	38	51,2					

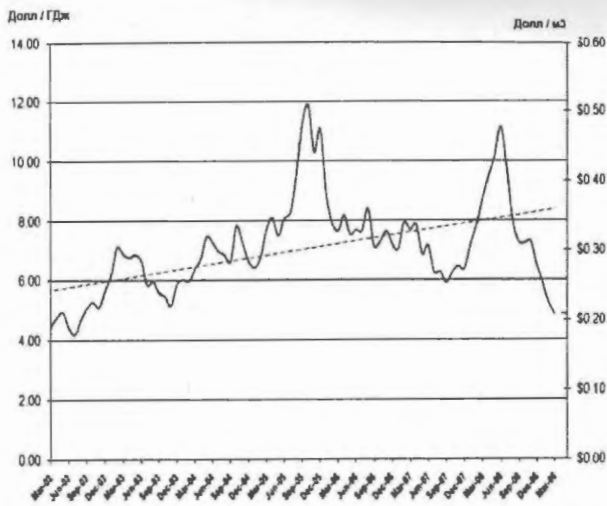


Рис. 9. Динамика цен на газ (в долл/ГДж слева и долл/м<sup>3</sup> справа) с марта 2002 по март 2009 г. (пунктиром показана линия тренда)

значительно большее истощение газового ресурса по сравнению с угольным. Таким образом, в ближайшие 20...30 лет АЭС придется конкурировать не только с газовой, но и набирающей обороты угольной энергетикой. Причем, если 30...40 лет назад ядерная опция имела существенные преимущества перед угольной по удельным затратам на топливо и отсутствию выбросов CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub> и SO<sub>x</sub>, теперь после существенных технологических модернизаций угольные ТЭС опережают АЭС практически по всем составляющим себестоимости электроэнергии и становятся значительно более привлекательными для инвесторов из-за в 1,5 раза более низких капитальных затрат и в 1,5...2 раза меньших сроков строительства станции (табл. 2). Образно говоря, "угольный паровоз" умчался вперед, а "ядерный бронепоезд" никак не может разогнаться из-за собственной тяжести.

Действительно, основное достижение АЭС на сегодняшний день – это приблизительно 5 %-ное выгорание при 5 %-ной по U<sup>235</sup> загрузке топлива в реактор в открытом ЯТЦ. При этом в случае 0,2 %-ного содержания U<sup>235</sup> в отвальном уране после процесса обогащения для деления одного кг ядер в реакторе необходимо получить 180 кг природного урана в виде исходного сырья – урановой смолки U<sub>3</sub>O<sub>8</sub>. Таким образом, КПД использования ядерного горючего на АЭС на сегодняшний день составляет

~ 0,5...0,6 %, что меньше КПД применения хвороста для приготовления горячей пищи первобытными людьми. Остальные 99,5 % тяжелых атомов (т.а.), которые потенциально могут участвовать в процессе энергопроизводства, частично лежат на складах отвального урана, а частью в хранилищах ОЯТ (отработанного ядерного топлива).

Такое топливоиспользование экономически приемлемо в эпоху бурного роста мощностей АЭС, когда цена на природный уран (в виде U<sub>3</sub>O<sub>8</sub>) была на уровне 10...30 долл/кг. Однако, на сегодняшний день в мире цена на уран перешла рубеж 100 долл/кг, а цена разделительной работы превысила 130...160 долл/ЕРР [13]. Как видно из рис. 11, в течение длительного времени (1988-2004 гг.) цена на уран была достаточно стабильной и не превышала 20 долл/фунт (45 долл/кг) [14]. С января 2003 г. цены на уран начали расти со среднегодовым трендом 27 %. Прогнозы разных аналитиков, представленные на рис. 12, оценивают повышение цены урана к 2012 г. до 90...212 долл/фунт (190...435 долл/кг) [15].

Быстрый рост цен на уран, также как и на природный газ, связан с исчерпанием ресурсов дешевого урана стоимостью менее 80 долл/кг. На рис. 13 представлена диаграмма доказанных ресурсов урана по цене 80...130 долл/кг в разных странах мира [16].

На примере России можно продемонстрировать, насколько быстро исчерпаем этот ресурс. Согласно данным [16] на АЭС в мире сейчас введено 370 ГВт установленных мощностей, которые в совокупности потребляют 65 000 т урана в год. Россия в настоящее время снабжает топливом каждый шестой реактор в мире [17], т.е. поставляет на рынок порядка 10...11 тыс. т урана в год. Легко подсчитать, что при ресурсе относительно дешевого урана в 180 тыс. т (рис. 13) и таком ежегодном расходе его хватит всего лишь на 18...19 лет. Согласно данным [18] Россия располагает ресурсом 540 тыс. т, но с учетом более дорогого урана (по цене от 80 до 300 долл/кг).

Еще более интенсивно топливо на рынок поставляют страны с большим, чем у России, урановым ресурсом – Казахстан (в

**Таблица 3.** Примерные приведенные стоимости основных технологий в открытом топливном цикле PWR и в ЯТЦ с рециклом U и Pu из ОЯТ,  $10^{-3}$  долл/кВт-час

Составляющие цикла	Открытый цикл	Рецикл
Получение сырья $U_3O_8$	5,9	4,075
Конверсия $U_3O_8$ в $UF_6$	0,75	0,175
Обогащение	3,325	2,575
Фабрикация низкообогащенного урана	1,1	0,85
Фабрикация смешанного MOX топлива	–	0,825
Конечная часть цикла	0,375	1,975
Суммарная стоимость	10,975	10,475

1,5 раза) и Австралия (в 2,2 раза). Таким образом, повышение цен на уран неизбежно, так как ценовой рост служит практически единственной обратной связью, сдерживающей истощение ресурса.

В табл. 3 представлена структура топливной составляющей электроэнергии в открытом ЯТЦ реактора PWR [19] при следующих ценах: природный уран – 68 долл/кг  $U_3O_8$ , конверсия – 6,8 долл/кг U, обогащение – 130 долл/ЕРР, фабрикация первой загрузки – 225 долл/кг, перегрузки – 200 долл/кг, транспортировка ОЯТ – 36 долл/кг, удаление ОЯТ – 275 долл/кг.

Простая оценка на основе данных табл. 3 показывает, что при повышении за три года цены урана до уровня 200...400 долл/кг сырьевая составляющая в цене на топливо в открытом ЯТЦ возрастет соответственно в 3...6 раз. При этом даже в отсутствие роста цен на обогащение удельная цена топлива повысится в 2,3...4 раза, топливная составляющая цены на электроэнергию на АЭС – до 48...63 %, а увеличение самой цены может оказаться в широком диапазоне 18...65 %. Цены же на уголь при этом повысятся в среднем только на 12...14 %. При таком соотношении роста цен АЭС станут проигрывать в конкурентной борьбе с ТЭС на газе и угле уже через ближайшие несколько лет.

Таким образом и сами АЭС, и весь ЯТЦ нуждаются в серьезной модернизации, чтобы существенно повысить КПД топливоиспользования и вернуть конкурентоспособность АЭ в строю с тепловой энергетикой на газе и угле. Повышение экономичности АЭС должно идти по пути снижения капитальных затрат, повышения КПД и улучшения нейтронного баланса в реакторах. ЯТЦ

же должен модернизироваться по пути увеличения доли рециклирования топлива, что будет иметь следствием соответствующее снижение расхода природного урана и количества захораниваемых ВРАО (высоко-радиоактивных отходов).

## 2. Необходимость замыкания топливного цикла

Базируясь на данных [19] (табл. 3), можно оценить, в какой степени с ростом цены на природный уран рецикл отработанного топлива становится экономически привлекательным. Так, при повышении цены урана до уровня 200...400 долл/кг (при стабильной цене обогащения) цена на рециклированное топливо станет на 22...25 % меньше цены топлива в открытом цикле. При росте цен на обогащение экономия от рециклирования еще более увеличится.

В открытом топливном цикле удельный расход природного урана определяется КПД АЭС ( $\eta_{АЭС}$ ), отношением процента разделившихся ядер ( $\alpha$ ) к проценту обогащения топлива ( $x$ ), содержанием  $U^{235}$  в отвале ( $y$ ), содержанием  $U^{235}$  в природном уране ( $c_0$ ) и при  $x \gg y$  практически не зависит от самого обогащения топлива:

$$g_{c_0} = \frac{0,365}{\eta_{АЭС}(\alpha/x)/1,05} \frac{(x-y)}{(c_0-y)x} \approx \frac{0,384}{\eta_{АЭС}(\alpha/x)} \frac{1}{(c_0-y)},$$

т т.а./ГВт-год эф.

На рис. 14 приведена зависимость  $g_{c_0}$  от  $\alpha/x$  и  $\eta_{АЭС}$  при  $x = 5 \%$ ,  $y = 0,2 \%$  в открытом ЯТЦ. Видно, что КПД АЭС может достаточно сильно влиять на расход природного урана. Так, увеличение КПД с 31 до 43 %

снижает расход природного урана на 28 % при одном и том же  $\alpha/x$ . Однако, если при повышении КПД АЭС ухудшается нейтронный баланс в активной зоне и  $\alpha/x$  снижается, то расход урана может не только не уменьшиться, но даже и возрасти.

В отличие от расхода природного урана расход топлива через АЭС в *открытом и замкнутом* ЯТЦ определяется процентом  $\alpha$  выгоревших т.а. в реакторе и не зависит от отношения  $\alpha/x$  (рис. 15):

$$g_{\text{АЭС}} = \frac{0,384}{\eta_{\text{АЭС}} \alpha}, \text{ т т.а./ГВт-год эф.}$$

В открытом цикле хранилища ОЯТ заполняются со скоростью, определяемой расходом топлива через АЭС. Поэтому в последнее время в мире появилась тенденция повышения выгорания топлива в ЛВР в целях экономии на хранении ОЯТ.

В замкнутом ЯТЦ (ЗЯТЦ) вместо хранения всего ОЯТ необходимо хранить только небольшую его часть (ВРАО), остающуюся после переработки топлива. Современные водные методы переработки топлива приводят к образованию большого количества жидких РАО, что делает репроцессинг и захоронение переработанных отходов еще достаточно дорогими. Поэтому в этой части ЯТЦ необходима смена технологического поколения, чтобы в полной степени достичь преимуществ ЗЯТЦ в сокращении объемов захораниваемых ВРАО и снизить потери топлива при его переработке.

Замыкание топливного цикла принципиально снизит расход природного урана и минимизирует зависимость АЭ от быстро исчерпаемого ресурса  $U^{235}$ , позволяя в перспективе перейти на более, чем в 100 раз, превосходящий ресурс  $U^{238}$ . При включении  $Th^{232}$  в ЗЯТЦ ресурс ядерного топлива может быть еще удвоен [20].

На рис. 16 приведены оценки [21] по энергоемкости разных вариантов U-Pu топливных циклов. Видно, что замыкание топливного цикла может в разы и даже на порядки повысить эффективность топливоиспользования при введении в ЗЯТЦ легководных реакторов с высоким коэффициентом конверсии топлива (Advanced LWR) и быстрых реакторов-наработчиков избыточного плутония (LMFBR).

Однако, для принципиального повышения конкурентоспособности АЭ как отрасли замкнутый топливный цикл должен быть создан на новом технологическом уровне, обеспечивая дистанционные операции с высокофоновыми радиоактивными материалами и существенно снижая объемы РАО при переработке ОЯТ.

Модернизация ЯТЦ также сопряжена с необходимостью обновления реакторного парка усовершенствованными ЛВР с высоким коэффициентом конверсии топлива ( $CR = 0,85 \dots 1,0$ ) и вводом быстрых реакторов-наработчиков Pu с достаточно большим коэффициентом воспроизводства топлива ( $BR = 1,4 \dots 1,6$ ).

### 3. Место инновационных ЛВР в структуре развивающейся АЭ XXI века

Если рассматривать АЭ как отрасль, способную в будущем компенсировать дефицит электропроизводства в России, то уже к 2030 г. установленные мощности АЭС должны составлять в сумме 90 ГВт, а к 2050 г. – 170 ГВт. Такие масштабы АЭ определяются внутренними потребностями России по наращиванию электрогенерации и общей задачей улучшения качества жизни в России до уровня, хотя бы примерно равного среднеевропейскому.

На основе системного анализа возможных вариантов развития АЭ, отличающихся типами реакторов, структурой топливного цикла и доступными ресурсами (интегральное и годовое потребление урана, разделительные работы, мощности заводов по переработке ОЯТ и производству топлива, хранилища ОЯТ, обращение с РАО, машиностроительная база, обеспечение кадрами), в [22] предложен основной вариант стратегии развития АЭ, обеспечивающий достижение поставленных целей и решение приоритетных задач (рис. 17).

Данная концепция развития АЭ основывается на поэтапном вводе в структуру АЭ инновационных ЛВР (ВВЭР-М, ВВЭР-S) и быстрых реакторов-бридеров (БР-S) с наработкой избыточного плутония до 270...300 кг/ГВт в год.

Согласно этой стратегии модернизация ВВЭР вначале идет по пути повышения вы-

горания топлива (до 60...65 ГВт·сут/т) и перехода на пятикратные перегрузки топлива. Дальнейшее продвижение направления ВВЭР осуществляется с ориентиром на разработку к 2020 г. проектов реактора СУПЕР-ВВЭР со средним за время работы АЭС расходом природного урана на уровне 150 т/ГВт в год (ВВЭР-М) и далее ВВЭР-S, обладающего возможностью работы в системе АЭ с замкнутым топливном циклом с самообеспечением топливом и обеспечивающего снижение среднего за время работы АЭС расхода природного урана до 130 т/ГВт в год.

#### **4. Перспективы и проблемы использования ЛВР с СКД теплоносителем для повышения эффективности ЯТЦ**

К началу 60-х гг. прошлого века стало очевидным, что несмотря на хорошие эксплуатационные качества коммерческих ЛВР, надежность и безопасность этих установок, они не могут обеспечить потребности быстро развивающейся АЭ. Осознав эти первые результаты развития АЭ, наиболее технологически развитые страны мира (США, Россия, Англия, ФРГ, Франция) предприняли попытки создания реакторов-бридеров, способных использовать потенциал изотопа  $U^{238}$  для обеспечения быстрой наработки плутониевого топлива. Для решения этой проблемы предпринят масштабный НИОКР по двум реакторным ветвям: натриевой и водяной.

В водяном направлении появился целый спектр концептуальных проектов быстрых реакторов с паровым теплоносителем и водой СКД. Параметры водяного теплоносителя должны минимизировать поглощение и замедление нейтронов в активной зоне, что привело к необходимости применения тесных топливных решеток, а это в свою очередь обусловило высокий уровень температур теплоносителя (600...650 °С) и конструкционных материалов (700...750 °С) в активных зонах.

К 70-80-м годам водяное направление создания реакторов-бридеров уступило натриевому, в котором удалось и получить надлежащий спектр нейтронов, и обосно-

вать достижение приемлемого КВ, и разработать высокотемпературные конструкционные материалы, а также технологию теплоносителя, обеспечивающую совместимость конструкционных материалов с натриевым теплоносителем до 710 °С в номинале и до 850 °С в аварийных режимах.

В последние 10 лет возобновился интерес к ЛВР с СКД теплоносителем. В международной программе G-4 перед этими реакторами выдвигаются следующие цели: достижение высокого КПД машзала АЭС, значительное снижение удельных капитальных затрат на сооружение АЭС и существенное сокращение сроков строительства. Требование эффективного топливоиспользования стало уходить на второй план.

В настоящее время в ряде стран идет НИР по изучению вопросов теплофизики СКД флюидов, совместимости перспективных конструкционных материалов с СКД теплоносителем, водно-химического режима, нейтронно-теплогидравлической устойчивости, радиационной безопасности, радиолиза и др.

Как ни странно, вопросам эффективности топливных циклов реакторов СКД уделяется значительно меньше внимания. А тем не менее вопрос топливоиспользования является основным с точки зрения эффективности данного типа реакторов в системе АЭ.

Неотъемлемым свойством всех реакторов с водяным СКД теплоносителем служит высокое давление рабочей среды (24 МПа и выше), а также высокая агрессивность данного теплоносителя (особенно при температурах выше 500 °С) по отношению к известным конструкционным материалам. Оба этих неприятных момента обуславливают высокую долю конструкционных элементов в ТВС реактора для обеспечения достаточного уровня прочности и надежности работы кассет во все время топливной кампании (до 30 000 часов).

В качестве основных кандидатных конструкционных материалов для активных зон СКД реакторов сейчас рассматриваются аустенитные стали и высоконикелевые сплавы. В этих материалах доля хрома колеблется в пределах 9...17 %, а доля никеля

– 14...70 %, которые в отличие от циркония являются достаточно сильными поглотителями нейтронов. Причем в тепловой и резонансной частях нейтронного спектра они значительно эффективней поглощают нейтроны, чем в быстрой. Сочетание высокой доли конструкционных материалов в СКД реакторах и большого сечения поглощения в них приводит к ухудшению нейтронного баланса в активной зоне.

Флагманами разработок СКД реакторов в мире сейчас являются американский проект SCWR (INEEL, [23]) и европейский проект HPLWR (AREVA, [24]). Оба проекта основываются на обеспечении теплового спектра нейтронов в активной зоне. Для обеспечения замедления нейтронов до тепловой области в ТВС этих реакторов имеются специальные каналы, пройдя через которые, вода со входа реактора поступает в твэльный пучок. Доля конструкционных материалов в активной зоне достигает 24...25 %.

Оценки нейтронно-физических характеристик и топливных циклов этих реакторов [25, 26] показали, что в открытом топливном цикле, наряду с желаемой величиной выгорания 55...65 МВт·сут/кг т.а. при 5 %-ном обогащении топлива по  $U^{235}$ , реально достижимое выгорание не превышает 29...31 МВт·сут/кг т.а. При этом расход природного урана достигает 240 т т.а./ГВт·год(эф).

Посмотрев на рис. 14, нетрудно убедиться по соотношению выгоревших т.а. к загруженным, что такой же расход природного урана может быть достигнут в открытом топливном цикле классического PWR или ВВЭР при КПД АЭС на уровне 28 %, например, в ВВЭР-440. Но давление теплоносителя в ВВЭР-440 в 2 раза ниже, чем давление в СКД реакторах типа SCWR или HPLWR, а температуры оболочек твэлов ниже на 300...350 °С.

После такого несложного анализа становится очевидно, что даже при выигрыше в капитальной составляющей стоимости электроэнергии на АЭС с тепловыми СКД реакторами они не дают никаких преимуществ ЯТЦ, т.е. системе АЭ в целом.

В работе [27] изучались варианты замены топлива в SCWR с  $UO_2$  на смешанный оксид  $PuO_2-ThO_2$ , а также на смешанный гидрид плутония с торием 10 %  $PuH_2-90$  %  $ThH_2$ . Результаты расчетов показали – простая замена  $UO_2$  на  $PuO_2-ThO_2$  не дает выигрыша в топливоиспользовании. Гидридная же композиция в сочетании с увеличением шага топливной решетки увеличила выгорание в 1,8 раза при сохранении массы  $U^{235}$  в активной зоне. Однако, в работе не сравнивался эффект от применения плутоний-ториевых гидридных композиций в SCWR и PWR.

Опыт американского реактора LWBR [28] показал, что на докритических давлениях и неэкзотических топливных композициях  $UO_2-ThO_2$  можно достичь высоких показателей топливоиспользования с коэффициентом конверсии 0,9. Кроме того следует подчеркнуть, что применение гидридов при высоких температурах весьма проблематично, так как они имеют склонность к термическому разложению и выделению газообразного водорода.

Наилучшие показатели топливоиспользования могут быть достигнуты в СКД реакторах, работающих в быстром спектре нейтронов. Так, в японском проекте одноконтурного реактора SCFR [27] с быстрорезонансным спектром нейтронов удастся в замкнутом топливном цикле обеспечить самообеспечение реактора плутониевым топливом, применяя MOX топливо с содержанием 11,7 % делящихся атомов в активной зоне, по три радиальных и аксиальных бланкетных слоев из дейтерида отвалного урана. Достижимое выгорание – 41 МВт·сут/кг.

Переход с одноконтурной схемы реакторной установки на двухконтурную позволяет иметь в I контуре теплоноситель с температурой входа в реактор, с запасом превышающей точку псевдофазового перехода, т.е. по сути теплоноситель, являющийся паром СКД. Так, в активной зоне реактора ПСКД-600 [29] средняя плотность теплоносителя не превышает 140 кг/м<sup>3</sup>.

Используя при этом конструкцию ТВС, аналогичную как в реакторах типа БН, удастся обеспечить в активной зоне спектр

нейтронов, близкий к спектру реакторов типа БН. При этом, применяя МОХ топливо в активной зоне со средним обогащением 17 % по плутонию (11,5 % по делящимся атомам), торцевые и боковые бланкеты с оксидом отвалного урана, можно достичь среднего выгорания топлива в активной зоне на уровне 65 МВт·сут/кг. Нарботка плутония в активной зоне и бланкетах в таком варианте реактора дает возможность осуществить режим самообеспечения топливом в замкнутом топливном цикле.

### Заключение

Из проведенного в данной работе анализа можно сделать следующие выводы.

1) Тепловая энергетика за последние 15...20 лет совершила технологический рывок по пути улучшения топливоиспользования на газовых и угольных ТЭС. КПД лучших из этих станций уже превышают 50 %. На угольных ТЭС после совмещения бинарного газопарового цикла, газификации угля и фильтрации отработанных зол принципиально увеличился КПД станций (до 47...48 %), на 25 % снизились выбросы углекислоты и на 95 % окислов азота и серы. Удельная стоимость угля стала в некоторых случаях даже ниже, чем на АЭС.

2) Тенденции развития энергетики в мире и России показывают, что в ближайшем будущем (до 2030 г.) прирост мощностей будет происходить в основном за счет газовых и угольных ТЭС, причем доля угольных в общем энергетическом балансе будет неуклонно расти. Таким образом, АЭ придется все тяжелее доказывать свою конкурентоспособность.

3) При сохраняющейся тенденции роста цены на природный уран уже через несколько лет станет рентабельным рецикл урана и плутония в ЛВР. Однако, имеющиеся технологии по переработке топлива и компактированию ВРАО еще не в полной мере реализуют преимущества ЗЯТЦ. Необходимо технологический прорыв в совершенствовании репроцессинга топлива и обращения с ВРАО.

4) В XXI веке понадобится не только разработка новых технологий переработки

топлива, но и полное обновление реакторного парка. От ЛВР потребуется постепенное снижение расхода природного урана с дальнейшим переходом на ЗЯТЦ вплоть до достижения режима самообеспечения этих реакторов топливом в уран-плутониевом цикле с целью перехода с ресурса  $U^{235}$  на ресурс  $U^{238}$ . В дальнейшем ЛВР должны освоить и уран-ториевый цикл с целью вовлечения в АЭ ториевого ресурса.

5) Реакторы с СКД теплоносителем могут рассматриваться как опция инновационных ЛВР. Однако, для обеспечения приемлемой эффективности топливоиспользования и особенно достижения режима самообеспечения реактора топливом необходимо создать в активной зоне достаточно жесткий спектр нейтронов, что требует сочетания низкой плотности теплоносителя в реакторе и тесной топливной решетки в ТВС. Более всего для этой цели подходит двухконтурная ЯЭУ с паровым СКД теплоносителем в I контуре.

### Список литературы

1. *Кожуховский И.С.* Региональные аспекты стратегии развития ОАО РАО "ЕЭС России" и опыт взаимодействия с субъектами РФ. Доклад на совещании "О проблемах комплексного социально-экономического развития регионов и основных итогах за I полугодие 2007 года", Мин-во регионального развития РФ, Москва, 07.09.2007, [www.e-apbe.ru/actions/rao\\_doklad.pps](http://www.e-apbe.ru/actions/rao_doklad.pps) (дата обращения: 10.04.2009 г.).
2. *Воронин В.П.* Перспективы развития электроэнергетики в условиях либерализации газового рынка. Выступление зам. Предс. Правления РАО "ЕЭС России" на Всерос. совещ. "Энергоэффективность – основа устойчивого развития экономики России", 30.10.2002, <http://www.rao-ees.ru/ru/news/speech/confer/show.cgi?prez301002voronin.htm> (дата обращения: 10.04.2009 г.).
3. *Вагнер А.А., Волкова Е.А., Ермаков В.В. и др.* Новая генерация: "Вторая угольная волна", рынок газа и реформа тепловой электроэнергетики. Доклад Аналит. центра "Эксперт", 2006, <http://www.raexpert.ru/conference/2006/gas/> (дата обращения: 11.04.2009 г.).
4. *Мироносецкий С.Н.* Рост спроса на электроэнергию и возможности угольной генерации в России. Доклад на 3-м ежегодном профес. энергет. форуме "Развитие российской электроэнергетики: генерация, сети, рынок, инвестиции",

- 20 сентября 2006 г., Москва, Марриотт Гранд Отель, <http://www.e-m.ru/er/2006-10/23039/> (дата обращения: 12.04.2009 г.).
5. *International Energy Annual 2005* (June-October 2007). Projections: EIA, World Energy Projections Plus (2008), web site [www.eia.doe.gov/iea](http://www.eia.doe.gov/iea) (дата обращения: 11.04.2009 г.).
6. **Щадов В.М.** Роль России в мировой угольной промышленности. Аналит. обзор Росэнерго на инф.-аналит. Горнопромышл. портале России, 2007, <http://www.miningexpo.ru/articles/332> (дата обращения: 12.04.2009 г.).
7. **Кожуховский И.С.** Энергетический баланс и прогноз развития российского энергорынка: проблемы и риски. Доклад на конф. АПБЭ "Рынок электроэнергии: реформа и инвестиции", 09.04.2008, <http://www.e-m.ru/20sept/p20s/plen/02.ppt> (дата обращения: 12.04.2009 г.).
8. **Болдырев В.М., Гительман Л.Д., Сиданов И.А.** Экономика, организация и планирование на АЭС. М.: Энергоатомиздат, 1986.
9. *The Coal Resource*. A comprehensive overview of coal of World Coal Institute 2005, Cambridge House, 180 Upper Richmond Road, Putney, London SW15 2SH, UK, 2005.
10. *Natural Gas Prices – Historical and Forecast*. Energyshop<sup>™</sup>, M<sup>3</sup>&W Inc., 2009, [www.energyshop.com](http://www.energyshop.com) (дата обращения: 13.04.2009 г.).
11. *Coal Price Comparison of Different Time Period*. Global Info Mine, 2009, <http://www.infomine.com/Investment/HistoricalCharts/ShowCharts.asp?c=coal> (дата обращения: 13.04.2009 г.).
12. *Fuel Price Forecast Comparison*. IRP CC1017 Workshop, Electric Utility Tallahassee, 10.27.2005 [http://www.talgov.com/you/electric/pdf/irp\\_charts\\_101705.pdf](http://www.talgov.com/you/electric/pdf/irp_charts_101705.pdf) (дата обращения: 14.04.2009 г.).
13. *UxC Nuclear Fuel Price Indicators*. The UxC Consulting Company, LLC, April 2009, [http://www.uxc.com/review/uxc\\_Prices.aspx](http://www.uxc.com/review/uxc_Prices.aspx) (дата обращения: 14.04.2009 г.).
14. **Southwood M., Gray P., Bonter M.** Uranium Market Outlook. Commodities Analysis. Goldman Sachs JBWere, 13 March 2007, <http://www.nupowerresources.com.au/Portals/0/Documents/GoldmanSachsJBWere-UraniumMar07.pdf> (дата обращения: 15.04.2009 г.).
15. **Wrixon R.** Uranium. A Newcomer's Perspective. Australian Uranium Conf., Fremantle, 24 July 2008, [www.uranio.com.au/pdf/ura\\_con\\_pres\\_2.pdf](http://www.uranio.com.au/pdf/ura_con_pres_2.pdf) (дата обращения: 15.04.2009 г.).
16. *Supply of Uranium* (June 2008). World Nuclear Association, <http://www.world-nuclear.org/info/inf75.html> (дата обращения: 16.04.2009 г.).
17. **Ядерная энергия, человек и окружающая среда**. Новости РНЦ КИ, февр. 2009, [www.kiae.ru/fe\\_09.doc](http://www.kiae.ru/fe_09.doc) (дата обращения: 16.04.2009 г.).
18. *Reasonably Assured Resources plus Inferred Resources*. to US\$ 130/kg U, 01.01.2007, from OECD NEA & IAEA, Uranium 2007: Resources, Production and Demand ("Red Book").
19. *Справочник по ядерной энерготехнологии*. Пер. с англ. / Ф. Ран, Ч. Браун; под ред. В.А. Легасова. М.: Энергоатомиздат, 1989.
20. **Price R., Blaise J.R.** Nuclear fuel resources: Enough to last? // NEA updates, NEA News 2002 – No. 20.2.
21. *Nuclear Proliferation and Civilian Nuclear Power* / Report DOE/NE 0001/2, Vol. VIII-IX, Washington, DC, June 1980.
22. **Велихов Е.П., Гагаринский А.Ю., Субботин С.А., Цибульский В.Ф.** Россия в мировой энергетике XXI века. М.: ИздАт, 2006.
23. **Buongiorno J.** The Supercritical Water Reactor (SCWR) / ANS, 2002 Winter Meeting – November 18, 2002.
24. **Schulenberg T., Starflinger J., Heinecke J.** Three Pass Core Design Proposal for a High Performance Light Water Reactor / 2nd COE-INES Yokohama, Nov. 26-30, 2006.
25. **Maráczy Cs., Hegyi Gy., Hordósy G. et al.** High Performance Light Water Reactor Core Calculations. KFKI Atomic Energy Research Institute, Hungary, <http://sstc.kiev.ua/aer17/reports/029.doc> (дата обращения: 16.04.2009 г.).
26. **MacDonald Ph. et al.** Feasibility Study of Supercritical Light Water Cooled Reactors for Electric Power Production. Final Report 12th Quarterly Report INEEL/EXT-04-02530, Nuclear Energy Research Initiative Project 2001-001.
27. **Ishiwatari Y., Oka Y., Koshizuka S.** Breeding Ratio Analysis of a Fast Reactor Cooled by Supercritical Water // J. NST, Sept. 2001, Vol. 38, No. 9, pp. 703–710.
28. **Shippingport LWBR (Th/U Oxide) Fuel Characteristics for Disposal Criticality Analysis**. Report DOE/SNFREP-05 1, 1976.
29. **Алексеев П.Н., Прошкин А.А., Седов А.А. и др.** Физико-технические особенности и экономический потенциал двухконтурной ЯЭУ с быстрым реактором, охлаждаемым паровым теплоносителем сверхкритического давления. Труды семинара "Теплофизика-2008", Обнинск, октябрь 2008 г.

Контактная информация –

Седов Алексей Александрович, нач. лаб., тел.: (499)196-90-72, e-mail: [sedov@dhtp.kiae.ru](mailto:sedov@dhtp.kiae.ru)

Вопросы атомной науки и техники.

Сер. Физика ядерных реакторов, 2010, вып. 1, с. 3–12.

А.А. Ковалишин,

РНЦ "Курчатовский институт", 123182, Москва, пл. Курчатова, 1

Поступила в редакцию 20.05.2009 г.

Представлено описание основных принципов, на которых базируется метод поверхностных гармоник (МПГ). На примере одномерной задачи показаны характерные черты метода и алгоритмы построения конечно-разностных уравнений. Цель работы – популяризация МПГ в среде специалистов.

*Ключевые слова:* уравнение переноса, поверхностные гармоники, реактор.

**Basic Principles of the Surface Harmonics Method. Flat Geometry.** A.A. Kovalishin, RRC "Kurchatov Institute", 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182. Main principles underlying the surface harmonics method (SHM) are described. In frame of one-dimensional problem there are demonstrated the specific features of the method and algorithms of finite-difference equations construction. The aim of this work is the popularization of SHM among specialists.

*Key Words:* Transport Equation, Surface Harmonics, Reactor.

### Введение

Метод поверхностных гармоник разработан почти 40 лет назад профессором Н.И. Лалетиным совместно с А.В. Ельшиным и развивается с тех пор им, его сотрудниками и учениками [1...5]. Преимущества метода признаны научным сообществом, МПГ используется в некоторых программах расчета реакторов [6...9], однако широкого распространения не получил. Связано это, на мой взгляд, с тем, что изложение основ и принципов МПГ выполнено в духе 50-х годов и требует для усвоения материала изучения большого объема дополнительной литературы и, вообще говоря, большого количества времени. В данной работе сделана попытка более доступного изложения основ МПГ, что, по мнению автора, должно помочь специалистам освоить этот метод и в конечном итоге привести к более широкому его применению.

МПГ имеет множество преимуществ, не будем здесь их все перечислять, оставляя читателю определить их самостоятельно, тем более, что преимущества, как правило, определяются потребностями решения конкретной задачи. Укажем лишь главное, на наш взгляд, свойство метода – последовательное уточнение решения с увеличением номера приближения.

По сути МПГ – это метод построения конечно-разностных уравнений из уравне-

ния переноса. Полученные конечно-разностные уравнения дают решение, которое приближает решение исходного уравнения переноса с любой наперед заданной точностью. Точность уравнений МПГ зависит от номера приближения. В этом смысле МПГ может рассматриваться с двух сторон:

– во-первых, это один из множества методов решения уравнения переноса для областей с заданными граничными условиями; в этом смысле по своим функциональным возможностям он стоит в одном ряду с методами вероятностей первых столкновений (ВПС), характеристик, дискретных ординат и т.д.;

– во-вторых, МПГ позволяет получить конечно-разностные уравнения для реактора, не прибегая к приближениям, приводящим к трудноконтролируемым погрешностям; в этом своем качестве он стоит в одном ряду с методом гомогенизации как альтернатива последнему; надо отметить, что МПГ не является единственной альтернативой, здесь можно указать также во многом идеологически схожие метод источников-стоков Фейнберга – Галанина и метод Б.П. Кочурова.

Данная статья – первая из задуманного цикла методических работ, посвященных МПГ. Здесь на основе уравнений для плоского реактора демонстрируются основные принципы построения конечно-разностных уравнений. При этом, чтобы избежать из-

лишнего усложнения, мы сознательно пошли на некоторые упрощения и пренебрегли математической строгостью изложения, оставляя за рамками некоторые важные моменты. Те же, кого интересует математический строгий вывод уравнений МПГ, могут найти его в оригинальных работах [1...5].

### 1. Простейшее конечно-разностное уравнение диффузии

Для примера начнем с одномерной однопроводной задачи в диффузионном приближении. Рассмотрим одномерный реактор, состоящий из гомогенных ячеек размером  $h$ . Каждая ячейка характеризуется своим набором констант  $D_i, \Sigma_{ai}, \nu \Sigma_{fi}$ ,  $i$  – индекс ячейки. Для такого реактора нужно решить диффузионное уравнение вида

$$\frac{\partial D(x)}{\partial x} \frac{\partial \Phi}{\partial x} - \Sigma_a(x) \Phi + \frac{\nu \Sigma_f(x) \Phi}{K_{эф}} = 0. \quad (1)$$

Чтобы решить это уравнение, необходимо свести его к конечно-разностному аналогу. В самом простейшем случае поступим следующим образом.

1) Представляем решение в  $i$ -й ячейке в виде ряда Тейлора относительно центра ячейки

$$\Phi_i(x) = \Phi_i(0) + \frac{\partial \Phi_i(0)}{\partial x} x + O(h^2). \quad (2)$$

2) Интегрируем уравнение (1) в пределах одной ячейки от  $-h/2$  до  $h/2$ , используя при этом выражение (2). Тогда

$$\frac{D_i}{h} \left( \frac{\partial \Phi(h/2)}{\partial x} - \frac{\partial \Phi(-h/2)}{\partial x} \right) - \Sigma_{ai} \Phi_i(0) + \frac{1}{K_{эф}} \nu \Sigma_{fi} \Phi_i(0) + O(h^2) = 0. \quad (3)$$

3) Теперь нужно выразить производные на границе через значения  $\Phi$  в соседних ячейках, для чего воспользуемся опять же рядом Тейлора, но разложение проведем на границе ячеек  $i$  и  $i+1$ :

$$\Phi_i(0) = f_i - \frac{\partial f_i}{\partial x} \frac{h}{2} + O(h^2) = f_i - \frac{1}{D_i} J_i \frac{h}{2} + O(h^2);$$

$$\begin{aligned} \Phi_{i+1}(0) &= f_{i+1} + \frac{\partial f_{i+1}}{\partial x} \frac{h}{2} + O(h^2) = \\ &= f_{i+1} + \frac{1}{D_{i+1}} J_{i+1} \frac{h}{2} + O(h^2); \quad J_i = D_i \frac{\partial f_i}{\partial x}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь  $f_i$  – поток на границе со стороны ячейки  $i$ . Теперь воспользуемся тем, что на границе между соседними ячейками токи  $J$  и потоки  $f$  слева и справа должны быть равны. Тогда, вычитая уравнения (4) друг из друга, получим выражения для токов

$$\begin{aligned} J_i &= \frac{2}{h} \frac{1}{1/D_i + 1/D_{i+1}} (\Phi_{i+1} - \Phi_i) + O(h) = \\ &= \frac{1}{h} \frac{2D_i D_{i+1}}{D_i + D_{i+1}} (\Phi_{i+1} - \Phi_i) + O(h). \end{aligned} \quad (4a)$$

Подставим теперь выражение для токов в уравнение (3) и получим классическое конечно-разностное уравнение для плоского реактора

$$\begin{aligned} \frac{1}{h^2} \sum_{j=i\pm 1} \frac{2D_i D_j}{D_i + D_j} (\Phi_j - \Phi_i) - \Sigma_{ai} \Phi_i + \\ + \frac{1}{K_{эф}} \nu \Sigma_{fi} \Phi_i + O(h) = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Это уравнение можно получить разными способами, необязательно вводить разложение в ряд Тейлора, можно, например, использовать метод конечных элементов или различные балансные соотношения. Но при таком выводе получается оценка точности  $O(h)$  этого уравнения; интересно, что, применяя тот же подход для реактора, состоящего из одинаковых ячеек, точность уравнения будет  $O(h^2)$ . Оценка точности уравнения говорит о том, что нужно использовать очень маленький шаг сетки, чтобы с помощью уравнения (5) получить решение исходной задачи (1). Маленький шаг также означает большую размерность системы уравнений.

Дальнейшее уточнение модели возможно, если применим в разложении (4) большее количество членов. В этом случае придем к классическим нодальным методам. Точность уравнения при этом увеличится, но все равно погрешность останется конечной, т.е. для получения решения уравнения (1) с заданной точностью нужно использовать какой-то шаг сетки, который, вообще говоря, зависит от самой задачи. Если фун-

кция  $\Phi$  меняется слабо, то можно применять большой шаг, например, для задач, в которых  $\Phi = \text{const}$ , формула (5) будет давать точное решение. А что делать, если ячейка имеет внутреннюю структуру и введение мелкого шага сопряжено с непреодолимыми трудностями?

## 2. Основы МПГ

Оказывается, можно получить аналог уравнения (5), который будет давать точное решение уравнения (1) для заданного шага сетки. Решение уравнения (1) для ячейки  $i$  имеет вид

$$\Phi_i(x) = \tilde{C}_{i,1} \exp(\alpha_i x) + \tilde{C}_{i,2} \exp(-\alpha_i x), \quad (6)$$

$$\text{где } \alpha_i = \sqrt{\frac{\Sigma_{ai} - v \Sigma_f / K_{эф}}{D_i}}.$$

Константы  $\tilde{C}_{i,2}$  определяются из условия непрерывности токов и потоков на границах соседних ячеек. Заметим, что решение (6) точное. Симметризуем выражение (6) так, чтобы оно содержало четную и нечетную функции координат относительно центра ячейки, тогда

$$\begin{aligned} \Phi_i(x) &= \tilde{C}_{i,1} \exp(\alpha_i x) + \tilde{C}_{i,2} \exp(-\alpha_i x) = \\ &= C_{i,1} \text{ch}(\alpha_i x) + C_{i,2} \text{sh}(\alpha_i x). \end{aligned} \quad (7)$$

Основная суть МПГ заключается в этой формуле. Дальше пойдет некоторое достаточно большое количество нудных арифметических действий и обозначений, от которых, к сожалению, никуда не деться.

1) Выражение для тока, *втекающего в ячейку*, и потока на границе  $i$ -й ячейки имеет вид (+ относится к правой границе, а - к левой)

$$\begin{aligned} \Phi_i(\pm h/2) &= C_{i,1} \text{ch}(\alpha_i h/2) \pm C_{i,2} \text{sh}(\alpha_i h/2); \\ j_i(\pm h/2) &= D_i \partial \Phi_i(\pm h/2) / \partial x = \\ &= D_i \alpha_i C_{i,1} \text{sh}(\alpha_i h/2) \pm D_i \alpha_i C_{i,2} \text{ch}(\alpha_i h/2). \end{aligned} \quad (8)$$

2) Введем замену переменных, используя для этого обычные для МПГ обозначения

$$D_i \alpha_i C_{i,1} \text{sh}(\alpha_i h/2) = \delta I_i, \quad D_i \alpha_i C_{i,2} \text{ch}(\alpha_i h/2) = I_i^s. \quad (8a)$$

Уравнения (8) в этих переменных будут иметь вид

$$\Phi_i(\pm h/2) = \varphi_i \delta I_i \pm \psi_i I_i^s; \quad j_i(\pm h/2) = \delta I_i \pm I_i^s, \quad (9)$$

где

$$\varphi_i = \frac{1}{D_i \alpha_i} \frac{\text{ch}(\alpha_i h/2)}{\text{sh}(\alpha_i h/2)} = \frac{1}{D_i \alpha_i} \text{cth}(\alpha_i h/2),$$

$$\psi_i = \frac{1}{D_i \alpha_i} \frac{\text{sh}(\alpha_i h/2)}{\text{ch}(\alpha_i h/2)} = \frac{1}{D_i \alpha_i} \text{th}(\alpha_i h/2). \quad (10)$$

3) Сложим вторые из уравнений (9) для разных граней ячейки. В этом случае получим аналог балансного уравнения

$$j_i(h/2) + j_i(-h/2) = 2\delta I_i. \quad (11)$$

Умножим второе из уравнений (9) на  $\psi_i$  и вычтем из первого, тогда

$$\Phi_i(\pm h/2) - \psi_i j_i(\pm h/2) = (\varphi_i - \psi_i) \delta I_i. \quad (12)$$

4) Рассмотрим границу ячеек  $i$  и  $i+1$ . На этой границе должны выполняться условия равенства потоков слева и справа от границы, а также токов через границу. Нужно помнить о направлении токов, т.е. втекающий ток в ячейку  $i$  равен вытекающему из ячейки  $i+1$ . Тогда

$$j_i(h/2) = -j_{i+1}(-h/2) = j, \quad \Phi_i(h/2) = \Phi_{i+1}(-h/2) = f.$$

С учетом этих равенств уравнения (12) для ячеек  $i$  и  $i+1$  и общей грани запишутся в виде

$$\begin{aligned} f - \psi_i j &= (\varphi_i - \psi_i) \delta I_i; \\ f + \psi_{i+1} j &= (\varphi_{i+1} - \psi_{i+1}) \delta I_{i+1}. \end{aligned} \quad (13)$$

Вычтем первое уравнение из второго, выразим  $j$  через переменные  $\delta I$  и получим

$$j = \frac{(\varphi_{i+1} - \psi_{i+1}) \delta I_{i+1} - (\varphi_i - \psi_i) \delta I_i}{\psi_{i+1} + \psi_i}. \quad (14)$$

Здесь ток через грань выражен через неизвестные величины соседних ячеек. Попробуем преобразовать его так, чтобы было похоже на разностный закон Фика (4а). Для этого введем новые переменные

$$\tilde{\Phi}_i = (\varphi_i - \psi_i) \delta I_i, \quad \tilde{D}_i = \frac{h}{2} \frac{1}{\psi_i}. \quad (15)$$

Тогда выражение (14) запишется так же, как и выражение (4а):

$$\begin{aligned} j &= \frac{2}{h} \frac{1}{1/\tilde{D}_i + 1/\tilde{D}_{i+1}} (\tilde{\Phi}_{i+1} - \tilde{\Phi}_i) = \\ &= \frac{1}{h} \frac{2\tilde{D}_{i+1}\tilde{D}_i}{\tilde{D}_{i+1} + \tilde{D}_i} (\tilde{\Phi}_{i+1} - \tilde{\Phi}_i). \end{aligned} \quad (16)$$

5) Теперь осталось только подставить выражение (16) для токов через грани ячейки в аналог балансного уравнения (11), разделить его на  $h$  и получить конечно-разностное уравнение МПГ

$$\sum_{j=i\pm 1} \frac{1}{h^2} \frac{2\tilde{D}_j \tilde{D}_i}{\tilde{D}_j + \tilde{D}_i} (\tilde{\Phi}_j - \tilde{\Phi}_i) - \frac{2}{h} \delta I_i = 0. \quad (17)$$

Выразим в уравнении (17) величину  $\delta I$  через  $\Phi$  с волной, используя для этого первое из выражений (15), тогда

$$\frac{2}{h} \delta I_i = \frac{2}{h} \frac{1}{\varphi_i - \psi_i} \tilde{\Phi}_i = \tilde{\Sigma}_i \tilde{\Phi}_i, \quad (18)$$

где  $\tilde{\Sigma}_i = \frac{2}{h} \frac{1}{\varphi_i - \psi_i}$ , и уравнение (17) примет

вид обычного конечно-разностного уравнения, но с иначе определенными коэффициентами,

$$\sum_{j=i\pm 1} \frac{1}{h^2} \frac{2\tilde{D}_j \tilde{D}_i}{\tilde{D}_j + \tilde{D}_i} (\tilde{\Phi}_j - \tilde{\Phi}_i) - \tilde{\Sigma}_i \tilde{\Phi}_i = 0. \quad (19)$$

Коэффициенты, входящие в уравнение (19), называются эффективными сечениями.

Процедура получения уравнений МПГ прописана достаточно подробно – это формулы с (6) по (19). Итого 14 формул. Заметим, что для получения традиционного уравнения понадобилось 6 формул (считая (4а)). Таким образом, процедура получения уравнений МПГ всего в 2 с небольшим раз сложнее, чем получение обычного конечно-разностного уравнения. К сожалению, совсем без формул понять МПГ невозможно, поскольку прийти к конечному результату можно только через некоторую последовательность хитроумных, хотя и чисто арифметических действий, самое сложное из которых – это замена переменных.

### 3. Замечания методического характера

Далее сделаем несколько предварительных замечаний относительно дальнейшего изложения. МПГ есть метод решения уравнения переноса в решетках реакторов, где, как известно, решение зависит от угловых и энергетических переменных, элементарные ячейки могут представлять собой геомет-

рически сложные подобласти и задача, для решения которой разработан МПГ, гораздо сложнее, чем одномерное одногрупповое диффузионное уравнение для реактора, состоящего из гомогенных ячеек. Тем не менее при получении конечно-разностных уравнений для более сложных случаев используются ровно те же приемы, что и в вышестоящем разделе. Обращаю внимание на переход от формулы (7) к формуле (19).

Здесь можно сделать следующее утверждение: если

1) решение внутри подобласти можно представить в виде суммы симметричных (в нашем случае это  $\text{ch}$ ) и антисимметричных (это  $\text{sh}$ ) элементарных решений и 2) на границах потребовать непрерывности четных (в нашем случае это поток  $\Phi$  или нулевая производная) и нечетных (это ток  $J$  или первая производная) моментов решения, то можно получить уравнение конечно-разностного вида (19).

Приемы, с помощью которых можно выполнить такой переход, для всех рассмотренных ниже случаев аналогичны тем, что приведены выше для диффузионного уравнения. Перефразируя великого Фейнмана [10], можно сказать, что сейчас мы находимся на вершине горы, когда установлены основные принципы теории. Дальше пойдет спуск с горы, когда будут применяться общие принципы к решению частных задач.

### 4. Предельный переход при малых размерах ячейки

Посмотрим, как ведет себя конечно-разностное уравнение МПГ при размерах ячейки, стремящихся к нулю. Для этого нужно проследить, как меняются коэффициенты  $D$  и  $\Sigma$ , входящие в уравнение (19):

$$\tilde{D}_i = \frac{h}{2} \frac{1}{\psi_i} = \frac{h}{2} \frac{1}{\frac{1}{D_i \alpha_i} \text{th}\left(\frac{h}{2} \alpha_i\right)} \xrightarrow{h \rightarrow 0} \frac{h}{2} \frac{1}{\frac{1}{D_i \alpha_i} \frac{h}{2} \alpha_i} = D_i;$$

$$\tilde{\Sigma}_i = \frac{2}{h} \frac{1}{\varphi_i - \psi_i} = \frac{2}{h} \frac{1}{\frac{1}{D_i \alpha_i} \text{cth}\left(\frac{h}{2} \alpha_i\right) - \frac{1}{D_i \alpha_i} \text{th}\left(\frac{h}{2} \alpha_i\right)} \xrightarrow{h \rightarrow 0} \frac{2}{h} \frac{1}{\frac{1}{D_i \alpha_i} \frac{2}{h \alpha_i}} = \alpha_i^2 D_i = \Sigma_i.$$

Здесь использовались следующие разложения гиперболических функций в нуле:  
 $\operatorname{sh}x \xrightarrow{x \rightarrow 0} x$ ,  $\operatorname{ch}x \xrightarrow{x \rightarrow 0} 1$ ,  $\operatorname{th}x = \operatorname{sh}x/\operatorname{ch}x \xrightarrow{x \rightarrow 0} x$ ,  
 $\operatorname{cth}x = \operatorname{ch}x/\operatorname{sh}x \xrightarrow{x \rightarrow 0} 1/x$ .

Таким образом, эффективные константы стремятся к традиционным, а уравнение МПГ – к простейшему конечно-разностному уравнению. Этот факт очень удобен для анализа уравнений и контроля процедуры подготовки констант.

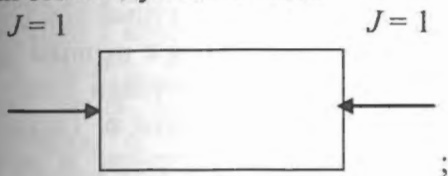
### 5. Гетерогенность

Пусть ячейка имеет гетерогенную стру-

гомогенная	$\Phi_i = \frac{\text{поток симметричного решения}}{\text{ток симметричного решения}} = \frac{\Phi_s(h/2)}{J_s(h/2)} = -\frac{\operatorname{ch}(h\alpha_i/2)}{D_i\alpha_i\operatorname{sh}(h\alpha_i/2)} = \frac{1}{D_i\alpha_i} \operatorname{cth}(h\alpha_i/2);$
гетерогенная	$\Phi_i = \frac{\text{поток симметричного решения}}{\text{ток симметричного решения}} = \frac{\Phi_s(h/2)}{J_s(h/2)} = \frac{?}{?}.$

Знак вопроса означает, что точного аналитического выражения в общем случае нет, однако можно прописать процедуру получения  $\Phi$ . Одна из возможных процедур следующая.

1) Нужно выделить симметричную часть решения, для чего задаем на границах ячейки ток следующего вида:



здесь и далее стрелками показаны направления втекания токов.

2) Решаем задачу для ячейки, причем для решения можно использовать те же уравнения МПГ, записанные для гомогенных зон внутри ячейки. Результатом решения будет поток на границе ячейки.

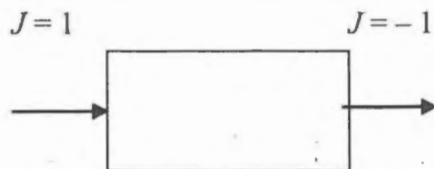
3) Берем отношение потока к току и получаем  $\Phi$ .

Похожую процедуру можно привести и для  $\Psi$  – отношения потока на границе ячейки к току для антисимметричной задачи:

гомогенная	$\Psi_i = \frac{\text{поток антисимметричного решения}}{\text{ток антисимметричного решения}} = \frac{\Phi_a(h/2)}{J_a(h/2)} = -\frac{\operatorname{sh}(h\alpha_i/2)}{D_i\alpha_i\operatorname{ch}(h\alpha_i/2)} = \frac{1}{D_i\alpha_i} \operatorname{th}(h\alpha_i/2);$
гетерогенная	$\Psi_i = \frac{\text{поток антисимметричного решения}}{\text{ток антисимметричного решения}} = \frac{\Phi_a(h/2)}{J_a(h/2)} = \frac{?}{?}.$

Знак вопроса так же, как и ранее, означает, что точного аналитического выражения нет. Следующие три действия дают процедуру получения антисимметричной составляющей для гетерогенной ячейки.

1) Нужно выделить антисимметричную часть решения, для чего задаем ток на границах ячейки следующего вида:



2) Решаем задачу для ячейки, результатом будет поток на границе ячейки.

3) Берем отношение потока к току и получаем  $\Psi$ .

## 6. Многогрупповость

Снова рассмотрим реактор, состоящий из гомогенных ячеек, в двухгрупповом приближении, тогда в каждой ячейке справедлива система уравнений

$$\left. \begin{aligned} D_1 \frac{\partial^2 \Phi_1(x)}{\partial x^2} - (\Sigma_{a1} + \Sigma^{1 \rightarrow 2}) \Phi_1(x) + \\ + \frac{1}{K_{\text{эф}}} \nu \Sigma_{f1} \Phi_1(x) + \frac{1}{K_{\text{эф}}} \nu \Sigma_{f2} \Phi_2(x) = 0; \\ D_2 \frac{\partial^2 \Phi_2(x)}{\partial x^2} + \Sigma^{1 \rightarrow 2} \Phi_1(x) - \Sigma_{a2} \Phi_2(x) = 0. \end{aligned} \right\} (20)$$

Здесь индексы 1 или 2 соответствуют энергетической группе, индекс ячейки опущен.

Введем вектор группового потока

$$\Phi(x) = \begin{bmatrix} \Phi_1(x) \\ \Phi_2(x) \end{bmatrix}, \text{ тогда систему уравнений}$$

(20) можно переписать в следующем виде:

$$\frac{\partial^2 \Phi(x)}{\partial x^2} - A \Phi(x) = 0, \quad (21)$$

где

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\Sigma_{a1} + \Sigma^{1 \rightarrow 2} - \nu \Sigma_{f1}/K_{\text{эф}}}{D_1} & -\nu \Sigma_{f2}/K_{\text{эф}} \\ -\Sigma^{1 \rightarrow 2}/D_2 & \Sigma_{a2}/D_2 \end{bmatrix}.$$

Матрица  $A$  размерности 2 имеет два собственных вектора и соответствующие им собственные числа. Это означает, что для них должны быть выполнены следующие уравнения:

$$A e_1 = \alpha_1^2 e_1, \quad A e_2 = \alpha_2^2 e_2, \quad e_1 = \begin{bmatrix} e_1^1 \\ e_1^2 \end{bmatrix}, \quad e_2 = \begin{bmatrix} e_2^1 \\ e_2^2 \end{bmatrix}. \quad (22)$$

Тогда решение уравнения (20) в ячейке можно представить в виде

$$\Phi(x) = [e_1 a \text{ch}(\alpha_1 x) + e_2 b \text{ch}(\alpha_2 x)] + [e_1 c \text{sh}(\alpha_1 x) + e_2 d \text{sh}(\alpha_2 x)], \quad (23)$$

где  $a, b, c, d$  — четыре константы, которые должны быть определены из условия сшивки токов и потоков на границах соседних ячеек. Подстановкой убеждаемся, что выражение (23) удовлетворяет уравнению (20) для любых  $a, b, c, d$ . Обратим внимание на то, как сгруппированы функции в выражении (23). Снова имеет место выделение симметричной и антисимметричной частей так, как это было в одногрупповом случае. Приведем выражение (23) к виду уравнения (7), тогда

$$\Phi(x) = \text{ch}(x) \cdot C_1 + \text{sh}(x) \cdot C_2, \quad (24)$$

$$\text{где } \text{ch}(x) = \begin{bmatrix} e_1^1 \text{ch}(\alpha_1 x) & e_2^1 \text{ch}(\alpha_2 x) \\ e_1^2 \text{ch}(\alpha_1 x) & e_2^2 \text{ch}(\alpha_2 x) \end{bmatrix}, \quad C_1 = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix},$$

$$\text{sh}(x) = \begin{bmatrix} e_1^1 \text{sh}(\alpha_1 x) & e_2^1 \text{sh}(\alpha_2 x) \\ e_1^2 \text{sh}(\alpha_1 x) & e_2^2 \text{sh}(\alpha_2 x) \end{bmatrix}, \quad C_2 = \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix}.$$

Дальше следуют ровно те же арифметические действия, что и после уравнения (7) для одногруппового случая. Тогда  $\Phi$  и  $\Psi$  будут матрицами размерностей, равных числу групп. Здесь можно указать процедуру получения этих матриц. Так же, как и в одногрупповом случае, следующим шагом после уравнения (24) (аналог (7) для одногрупповой задачи) будет получение уравнений

$$\Phi_i(\pm h/2) = \varphi_i \delta I_i \pm \psi_i I_i^x, \quad j_i(\pm h/2) = \delta I_i \pm I_i^x; \quad (25)$$

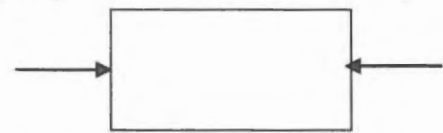
их аналог — уравнения (9) для случая одной группы, но там, где раньше ток и поток на границе были одним числом, сейчас получился вектор размерности числа групп. Пусть теперь выполняются следующие условия:

$$\delta I_i = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad I_i^x = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

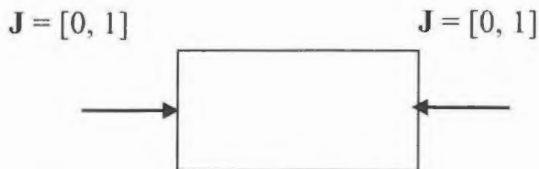
В соответствии со вторым уравнением (25) это означает, что на границах ячейки задан симметричный единичный ток в первой группе. В соответствии с первым уравнением поток на границе ячейки будет равен первому столбцу матрицы  $\Phi$ . Таким образом, для получения матрицы  $\Phi$  можно предложить следующую процедуру, повторяющую аналогичную для одной группы:

1) нужно выделить симметричную часть решения, для чего задаем на границах ячейки ток следующего вида:

$$J = [1, 0] \qquad J = [1, 0]$$



2) решаем задачу для ячейки. Результатом будет групповой поток на границе ячейки  $[\Phi_1(h/2), \Phi_2(h/2)]$  в соответствии с приведенными выше соображениями, а полученный вектор граничного потока будет первым столбцом матрицы  $\Phi$ . Для получения второго столбца нужно решить следующую задачу:



Полученный в результате решения поток на границе будет вторым столбцом матрицы  $\Phi$ . Аналогичную процедуру нужно проделать с антисимметричным током для получения матрицы  $\Psi$ .

### 7. Свертка в группы

Обычно расчет ячеек производится в большом числе групп, а расчет реактора в малом. В этом разделе покажем, как происходит групповая свертка в МПГ. Итак, пусть расчет ячейки происходит в 4-х группах, назовем их мелкими, а расчет реактора в 2-х группах, назовем их крупными. Как обычно, первая группа самая быстрая. При этом имеется следующее разбиение по группам:

Крупная группа	Номера мелких групп в составе крупной
1	1, 2
2	3, 4

В терминологии МПГ это означает, что на границах ячеек необходимо сшивать токи и потоки в крупных группах. Чтобы поставить задачу, нужны внутригрупповые спектры токов. Предположим, что имеем информацию о качественном поведении токов внутри крупных групп, полученную, например, из какой-либо вспомогательной задачи. Такое предположение означает, что для всех границ между ячейками зависимость тока  $J_i^g$  нейтронов от энергии  $E$  внутри группы имеет вид

$$J_i^g(E) = C_i^g j^g(E).$$

Здесь  $g$  – индекс крупной группы;  $i$  – индекс границы между ячейками;  $j^g(E)$  – универсальная для всех границ, нормированная, внутригрупповая зависимость тока от энергии. Справедливость такого утверждения неочевидна, и обоснование этого предположения выходит за рамки настоящей работы.

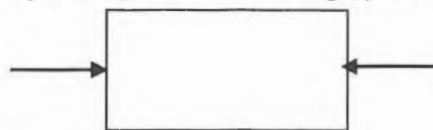
Таким образом, пусть известны спектры токов  $j^1, j^2, j^3, j^4$  такие, что  $j^1 + j^2 = 1$ ,  $j^3 + j^4 = 1$ ; здесь индекс относится к мелкой

группе. На границах ячеек необходимо потребовать непрерывность “крупных” токов и потоков:  $J^1 = J_1^1 + J_2^1$ ,  $J^2 = J_3^2 + J_4^2$ ,  $\Phi^1 = \Phi_1^1 + \Phi_2^1$ ,  $\Phi^2 = \Phi_3^2 + \Phi_4^2$ .

Здесь верхний индекс относится к крупной группе, а нижний – к мелкой. В принципе этих условий и результатов предыдущего раздела достаточно, чтобы построить уравнения МПГ самостоятельно, однако приведем ниже описание алгоритма получения матрицы  $\Phi$ , предполагая, что ячейки могут быть гетерогенными.

1) Нужно выделить симметричную часть решения, для чего задаем на границах ячейки ток следующего вида:

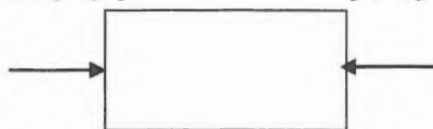
$$J = [j^1, j^2, 0, 0] \quad J = [j^1, j^2, 0, 0]$$



2) Решаем задачу для ячейки. Результатом будет групповой поток на границе ячейки  $[\Phi_1(h/2), \Phi_2(h/2), \Phi_3(h/2), \Phi_4(h/2)]$  в соответствии с приведенными выше соотношениями, а из полученного вектора граничного потока первый столбец матрицы  $\Phi$  получается по следующему правилу:  $\Phi = [\Phi_1(h/2) + \Phi_2(h/2), \Phi_3(h/2) + \Phi_4(h/2)]^T$ .

3) Для получения второго столбца нужно решить следующую задачу:

$$J = [0, 0, j^3, j^4] \quad J = [0, 0, j^3, j^4]$$



Из полученного решения потока на границе получается второй столбец матрицы  $\Phi = [\Phi_1(h/2) + \Phi_2(h/2), \Phi_3(h/2) + \Phi_4(h/2)]^T$ .

Аналогичную процедуру нужно проделать с антисимметричным током для получения матрицы  $\Psi$ .

Полученное в результате решение уже не будет точным даже для случая гомогенных ячеек и диффузионного уравнения. Однако можно сказать, что основной принцип МПГ – последовательное уточнение решения с увеличением номера приближения здесь соблюден. Увеличение номера приближения в данном случае – это увеличение числа групп.

## 8. Недиффузионность

Рассмотрим теперь плоский реактор, состоящий, как и прежде, из ячеек одинакового размера  $h$ . Все ячейки имеют симметричную внутреннюю структуру. Построим конечно-разностные уравнения МПГ, исходя из уравнения переноса, а не из уравнения диффузии, как до сих пор.

Для однозначного определения решения уравнения переноса в ячейке необходимо задать граничные условия. Известно, что граничные условия в таком случае можно задать двумя эквивалентными способами. Первый – задать угловое распределение на границе для половинного интервала углов, например, втекающих в область нейтронов. Этот способ обычно применяется в методах ВПС, методе характеристик, различных модификациях метода дискретных ординат. В таком случае угловое распределение вытекающих из области нейтронов будет получено в результате решения. Второй способ – задать на границах области только нечетные (или только четные) моменты углового распределения. В этом случае результатом решения задачи являются четные (либо нечетные) моменты углового распределения. Будем использовать второй способ.

Потребуем на границе ячеек непрерывность  $2N$  первых моментов разложения решения по сферическим гармоникам. Пусть  $a_k$  – коэффициенты разложения решения на границе по соответствующим сферическим гармоникам,  $k = 0 \dots 2N - 1$ . Индекс ячейки здесь и далее опущен.

Введем следующие векторы, разделив коэффициенты с четными и нечетными номерами:

$$\mathbf{J}(\pm h/2) = \begin{bmatrix} a_1(\pm h/2) \\ a_3(\pm h/2) \\ \dots \\ a_{2N-1}(\pm h/2) \end{bmatrix}; \quad \Phi(\pm h/2) = \begin{bmatrix} a_0(\pm h/2) \\ a_2(\pm h/2) \\ \dots \\ a_{2N-2}(\pm h/2) \end{bmatrix}.$$

Тогда из того, что сказано относительно граничных условий и линейности уравнения переноса, следует, что четные коэффициенты определяются через нечетные как

$$\Phi(h/2) = \mathbf{A}\mathbf{J}(h/2) + \mathbf{B}\mathbf{J}(-h/2);$$

$$\Phi(-h/2) = \mathbf{B}\mathbf{J}(h/2) + \mathbf{A}\mathbf{J}(-h/2), \quad (26)$$

где  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{B}$  – матрицы размерности  $N$ . В этих выражениях применяются всего две матрицы вместо четырех. Происходит это потому, что предполагается внутренняя симметрия ячеек относительно поворота на 180 градусов относительно центра.

Введем новые переменные, используя для них уже знакомые обозначения

$$\delta\mathbf{I} = (\mathbf{J}(h/2) + \mathbf{J}(-h/2))/2,$$

$$\mathbf{I}^x = (\mathbf{J}(-h/2) - \mathbf{J}(h/2))/2.$$

Очевидно, что

$$\mathbf{J}(\pm h/2) = \delta\mathbf{I} \pm \mathbf{I}^x. \quad (27)$$

Подставляя это выражение в (26) для граничных потоков, получим знакомое соотношение

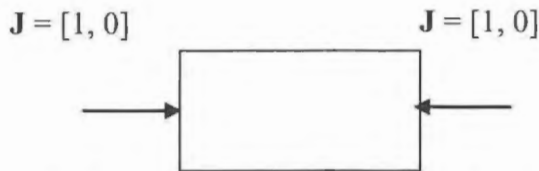
$$\Phi(\pm h/2) = (\mathbf{A} + \mathbf{B})\delta\mathbf{I} \pm (\mathbf{A} - \mathbf{B})\mathbf{I}^x = \phi\delta\mathbf{I} \pm \psi\mathbf{I}^x. \quad (28)$$

Здесь также введены обычные обозначения для матриц. Уравнения (27) и (28) имеют вид уравнений (9), а следовательно, применяя те же приемы из условий сшивки моментов на границах соседних ячеек, можно получить конечно-разностные уравнения вида (19). Входящие в эти уравнения коэффициенты будут матрицами размерности  $N$ .

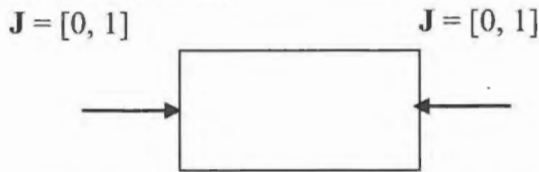
Укажем теперь процедуру получения матриц, которая оказывается очень похожа на ту, которая применялась для нахождения многогрупповых матриц. Пусть для описания угловой зависимости используются по 2 четных и нечетных моментов, тогда  $N = 2$ . Пусть теперь выполняются следующие условия:  $\delta\mathbf{I}_i = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ ;  $\mathbf{I}_i^x = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ .

В соответствии с уравнением (27) это означает, что на границах ячейки задан симметричный по пространству единичный ток в первой группе ( $a_1 = 1, a_3 = 0$ ). В соответствии с уравнением (28) вектор четных моментов распределения на границе ячейки в такой задаче будет равен первому столбцу матрицы  $\phi$ . Таким образом, для получения матрицы  $\phi$  можно предложить следующую процедуру.

1) Нужно выделить симметричную часть решения, для чего задаем на границах ячейки ток следующего вида:



2) Решаем задачу для ячейки. Результатом будут коэффициенты  $a_0$  и  $a_2$  для углового разложения, вектор  $[\Phi_1(h/2), \Phi_2(h/2)]$  в соответствии с приведенными выше соображениями будет первым столбцом матрицы  $\Phi$ . Для получения второго столбца нужно решить следующую задачу, в которой ненулевым оказывается уже только второй нечетный момент:



Полученный в результате решения вектор четных моментов распределения на границе будет вторым столбцом матрицы  $\Phi$ . Аналогичную процедуру нужно проделать с антисимметричным током для получения матрицы  $\psi$ .

### 9. Матрицы реакций

Как правило, при решении уравнений для реактора не нужна информация о детальной функции распределения, а интересна некоторая последовательность функционалов от решения: среднее по ячейке поглощение, среднее по ячейке деление и т.д. Таким образом, в общем случае уравнения переноса интересуемся интегралами вида

$$\frac{1}{V4\pi} \int \int \int \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E) \Sigma_y(\mathbf{r}, \Omega, E) dV d\Omega dE = R_y, \quad (29)$$

где  $\Phi$  – решение задачи;  $\Sigma_y$  – сечение процесса  $y$  ( $y$  – поглощение, деление и т.п.); интеграл берется по телесному углу, интересующему объему и энергетическому интервалу.

Вернемся снова к одностороннему диффузионному уравнению. Подставив выражение (7) для решения в (29), получим

$$\begin{aligned} R_y &= \frac{1}{H} \int_{-h/2}^{h/2} \Phi(x) \Sigma_y dx = \\ &= C_{i,1} \frac{1}{H} \int_{-h/2}^{h/2} \Sigma_y \operatorname{ch}(xy) dx = r_y C_{i,1}. \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь учтено, что интеграл от антисимметричной пробной функции равен нулю и интересующий нас функционал оказался зависящим только от амплитуды симметричной пробной функции. Этот же результат оказывается справедливым и в более общем случае, когда используются уравнение переноса и большее количество групп, нужно только, чтобы ячейка была симметрична относительно поворота вокруг геометрического центра.

В случае нескольких групп  $r_y$  является матрицей размерности, равной числу групп. Выражение (30) можно переписать в более удобном виде, когда скорости реакций выражаются не через константы  $C$ , а сразу через искомые неизвестные. Применяя для этого (15) и (8а), получим

$$\begin{aligned} r_y C_{i,1} &= r_y \frac{1}{D_{i,\alpha} \operatorname{sh}(\alpha, h/2)} \delta I_i = \\ &= \left[ r_y \frac{1}{D_{i,\alpha} \operatorname{sh}(\alpha, h/2)} (\varphi_i - \psi_i)^{-1} \right] \tilde{\Phi}_i = \tilde{R}_y \tilde{\Phi}_i. \end{aligned}$$

Выражение, стоящее в квадратных скобках, называется матрицей (размерности 1 в данном случае) реакции и позволяет получить скорости различных реакций непосредственно через неизвестные, относительно которых построено уравнение (19).

### 10. Условно-критическая задача

Особое место в приложениях занимает условно-критическая задача, поэтому необходимо привести уравнение (19) к виду задачи на собственное значение. Как видно,  $K_{эф}$  входит как параметр в исходное уравнение (1) и, следовательно, включено в коэффициенты уравнений (19). Эту связь нетрудно проследить, используя предыдущие выкладки, отметим, что, очевидно, такая связь нелинейна.

“Обычное”  $K_{эф}$  вводилось из соображений, вызванных необходимостью получения основной гармоники нестационарного уравнения из задачи на собственное значение. Также принципиально важно, чтобы получившийся в результате оператор условно-критической задачи был знакоопределенным, чтобы можно было применять стандартные итерационные методы. Всем этим условиям отвечает задача, в которой

оператор, отвечающий за рождение нейтронов, был бы вынесен в правую часть. Используя эти рассуждения, разобьем уравнение (19) так, чтобы оператор рождения нейтронов стоял справа. Для этого применим соответствующую матрицу реакций

$$\sum_{j=\pm 1} \frac{1}{h^2} \frac{2\tilde{D}_j \tilde{D}_i}{\tilde{D}_j + \tilde{D}_i} (\tilde{\Phi}_j - \tilde{\Phi}_i) - (\tilde{\Sigma}_i - \tilde{R}_f) \tilde{\Phi}_i = \frac{1}{K_{эф}} \tilde{R}_f \tilde{\Phi}_i. \quad (31)$$

Введенное таким образом собственное значение обеспечивает нужные свойства оператора и близко к “настоящему”  $K_{эф}$  из уравнения (1). Если в задаче  $K_{эф} = 1$ , то  $\tilde{K}_{эф}$  и  $K_{эф}$  совпадают. При расчетах критсборок и работающих реакторов, как показывает практика, различие между  $\tilde{K}_{эф}$  и  $K_{эф}$  принципиально, поскольку лежит вне пределов требуемой точности. Для расчетов сильно подкритических систем это различие может сказаться и тогда поступают следующим образом: после решения уравнения (31) полученное  $\tilde{K}_{эф}$  используют в качестве параметра для расчетов коэффициентов уравнения (31) и повторяют процедуру. В результате таким образом организованный итерационный процесс сходится к “настоящему”  $K_{эф}$ , а сам он получил название сверхвнешних итераций.

### Заключение

Описаны основные принципы, на которых базируется МПГ. На примере одномерной задачи представлены характерные черты метода и алгоритмы построения конечно-разностных уравнений. Эта работа носит больше педагогический характер и по этой причине изложение построено на принципах от частного к общему. Хотя излишний примитивизм изложения вызвал нарекания авторов МПГ, мне все-таки кажется, что данная работа будет способствовать лучшему пониманию МПГ в среде специалистов и в конечном итоге вызовет более широкое применение этого метода. Строгое математическое изложение в авторской интерпретации всегда можно найти в соответствующих работах, некоторые из которых приведены в списке литературы.

1. *Лалетин Н.И.* Уточненные схемы для расчета неоднородных решеток. Сб. трудов ВМК “Теоретические исследования по физике урановодных решеток типа ВВЭР”, Akademiai Kiado, Budapest, 1993, т. 2, с. 387.
2. *Лалетин Н.И., Ельшин А.В.* Вывод конечно-разностных уравнений гетерогенного реактора. 1. Квадратная решетка блоков. Препринт ИАЭ-3280/5, 1980.
3. *Лалетин Н.И., Ельшин А.В.* То же. 2. Квадратная, треугольная и двойная решетки блоков. Препринт ИАЭ-3458/5, 1981.
4. *Лалетин Н.И., Ельшин А.В.* То же. 3. Трехмерный реактор. Препринт ИАЭ-4090/5, 1985.
5. *Лалетин Н.И.* Об уравнениях гетерогенного реактора // ВАНТ. Сер. Физика и техника ядерных реакторов, 1981, вып. 5(18), с. 31.
6. *Laletin N.I., Kovalishin A.A.* The Influence of the Higher Surface Harmonics Method by Calculations RBMK and VVER Lattices. Proc. Int. Conf. PHYSOR-96, V. 1, A-249-A249, Mito, Japan, 1996.
7. *Laletin N.I., Kovalishin A.A., Sultanov N.V., Laletin M.N.* Complex SVS for neutron-physical calculations in uranium-water reactors, Biological Applications / Int. Conf. on Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear Application, Avignon, France, September 12-15, 2005, on CD-ROM, European Nuclear Society.
8. *Гольцев А.О., Ковалишин А.А., Краюшкин А.В. и др.* Применение метода поверхностных гармоник в программе расчета РБМК-СТЕРАН. В материалах 13-го семинара по проблемам физики реакторов “Топливные циклы АЭС: экономичность, безопасность, нераспространение”, ВОЛГА-2004, МИФИ, 2-6 сентября 2004 г.
9. *Афанасьев А.А., Гольцев А.О., Лалетин Н.И. и др.* Метод поверхностных гармоник в программе СТЕРАН. В трудах 16-го семинара НЕЙТРОНИКА-2005 “Нейтронно-физические проблемы атомной энергетики”, Обнинск, ГНЦ РФ-ФЭИ, 8-10 ноября 2005 г.
10. *Фейнман Р.* Статистическая физика. М.: Платон, 2007.

Контактная информация –

*Ковалишин Алексей Анатольевич, нач. лаб., тел.: +7(499)196-95-34; e-mail: kaa@adis.vver.kiae.ru*

Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов, 2010, вып. 1, с. 13–22.

## Расчеты эффективного коэффициента диффузии в четных приближениях метода поверхностных псевдоисточников

А.А. Ковалишин, Н.И. Лалетин,

РНЦ "Курчатовский институт", 123182, Москва, пл. Курчатова, 1

Поступила в редакцию 19.09.2009 г.

Представлено обоснование того, почему для расчета коэффициента диффузии предпочтительней применять четные приближения метода поверхностных псевдоисточников (МППИ). Аналитически показано, что для  $G_0$ -приближения достигается гомогенный предел в случае стремления размеров ячейки к нулю.

*Ключевые слова:* уравнение переноса, поверхностные гармоники, коэффициент диффузии.

**The Effective Diffusion Coefficient Calculations by Even-Approximations of Surface Pseudo Source Method.** A.A. Kovalishin, N.I. Laletin, RRC "Kurchatov Institute", 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182. The background for using add approximations of surface pseudo source method for diffusion coefficient calculation is given. It is analytically proved that for  $G_0$ -approximation the homogenization limit is achieved in the case when the cell size approaches to zero.

*Key Words:* Transport Equation, Surface Harmonics, Diffusion Coefficient.

### Введение

Вопрос о том, что же такое коэффициент диффузии нейтронов и, самое важное, каким образом эту необходимую для практических расчетов величину вычислять, неоднократно раскрывался различными авторами [1...3]. Тем не менее в этом вопросе не существует, на наш взгляд, должной ясности. Это связано прежде всего с тем, как и в каких уравнениях должна быть использована вычисленная величина. Цель настоящей работы – уточнение алгоритмов расчетов, относящихся к наиболее спорной части проблемы – расчетам поперечных коэффициентов диффузии в решетках реакторов.

Обычно в уравнениях математической физики коэффициент диффузии определяется как коэффициент пропорциональности между градиентом потока  $\Phi$  и током  $\mathbf{J}$  нейтронов:

$$\mathbf{J} = -D\nabla\Phi. \quad (1)$$

Но в практических расчетах всегда или почти всегда выражение (1) заменяется следующим конечно-разностным аналогом:

$$J_x = D(\Phi_i - \Phi_j)/h, \quad (2)$$

где  $h$  – шаг конечно-разностной сетки, который всегда конечен, и более того, ячейка сетки, как правило, негомогенная. В этом

случае коэффициент диффузии должен быть каким-либо образом усреднен.

Коэффициент диффузии, входящий в выражения вида (2), назовем эффективным или коэффициентом диффузии ячейки. Напомним здесь, как классическая теория гомогенизации переходит от представления (1) к (2). Рассмотрим для выяснения сути процедуры вычисления эффективных коэффициентов диффузии простую одномерную решетку, состоящую из гетерогенных ячеек (рис. 1).

Рассмотрим одномерное односкоростное уравнение переноса

$$\mu \frac{\partial \varphi(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma(x)\varphi(x, \mu) = \frac{c}{2} \int_{-1}^1 \Sigma_s(x)\varphi(x, \mu)d\mu. \quad (3)$$

В соответствии с теорией гомогенизации (см., например, [4]) решение ищем в виде

$$\varphi_n(x, \mu) = \bar{\Phi}_0^n \varphi_s^n(x, \mu) + \bar{\Phi}_1^n \varphi_{as}^n(x, \mu). \quad (4)$$

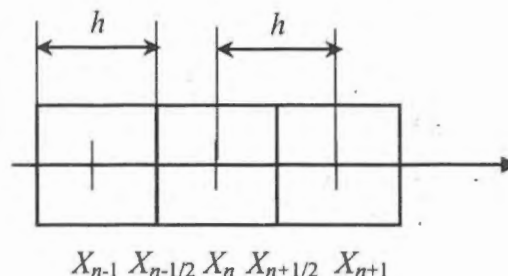


Рис. 1. Расчетная сетка для одномерного уравнения

Здесь  $\bar{\Phi}_0^n$  и  $\bar{\Phi}_1^n$  – соответственно средние поток и градиент потока по ячейке  $n$ ;  $\varphi_s^n(x, \mu)$  – симметричное относительно центра ячейки распределение с нормировкой  $\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \varphi_s^n(x, \mu) d\mu dx = 1$ , обычно в качестве него выступает решение, полученное из задачи с бесконечной решеткой;  $\varphi_{as}^n(x, \mu)$  – антисимметричное распределение в ячейке, определяющее при получении среднего коэффициента диффузии.

Подставим (4) в (3) и проинтегрируем по  $d\mu$ , затем по  $\mu d\mu$ :

$$\frac{\partial}{\partial x} (\bar{\Phi}_0^n J_s(x) + \bar{\Phi}_1^n J_{as}(x)) + \Sigma_a(x) (\bar{\Phi}_0^n \Phi_s(x) + \bar{\Phi}_1^n \Phi_{as}(x)) = 0; \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (\bar{\Phi}_0^n l_s(x) + \bar{\Phi}_1^n l_{as}(x)) + \Sigma(x) (\bar{\Phi}_0^n J_s(x) + \bar{\Phi}_1^n J_{as}(x)) = 0. \quad (6)$$

Здесь

$$\Sigma_a(x) = \Sigma(x) - c\Sigma_s(x);$$

$$J_s(x) = \int_{-1}^1 \varphi_s(x, \mu) \mu d\mu; \quad J_{as}(x) = \int_{-1}^1 \varphi_{as}(x, \mu) \mu d\mu;$$

$$\Phi_s(x) = \int_{-1}^1 \varphi_s(x, \mu) d\mu; \quad \Phi_{as}(x) = \int_{-1}^1 \varphi_{as}(x, \mu) d\mu;$$

$$l_s(x) = 3 \int_{-1}^1 \varphi_s(x, \mu) \mu^2 d\mu; \quad l_{as}(x) = 3 \int_{-1}^1 \varphi_{as}(x, \mu) \mu^2 d\mu.$$

Величина  $l_s$  названа в работе [5] локальным уровнем нейтронов. Проинтегрировав теперь уравнение (5) по  $dx$  от  $x_{n-1/2}$  до  $x_{n+1/2}$

$$(J(x_{n+1/2}) - J(x_{n-1/2})) + \bar{\Sigma}_a \bar{\Phi}_0^n h = 0, \quad (7)$$

получим обычное балансное уравнение.

Проинтегрируем теперь уравнение (6) по  $dx$  от  $x_{n-1/2}$  до  $x_{n+1/2}$ :

$$(l_s^n(x_{n+1/2}) - l_s^n(x_{n-1/2})) \bar{\Phi}_0^n + (l_{as}^n(x_{n+1/2}) - l_{as}^n(x_{n-1/2})) \bar{\Phi}_1^n + \int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} \Sigma(x) J_s(x) \bar{\Phi}_0^n dx + \int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} \Sigma(x) J_{as}(x) \bar{\Phi}_1^n dx = 0.$$

Первая сумма и первый интеграл в этом выражении пропадают из-за симметрии и в результате получаем

$$2l_{as}^n(x_{n+1/2}) = \bar{\Sigma}_{tr}^n \bar{J}_{as}^n h, \quad (8)$$

где

$$\bar{\Sigma}_{tr}^n = \frac{\int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} \Sigma(x) J_{as}^n(x) dx}{h \bar{J}_{as}^n}, \quad \bar{J}_{as}^n = \frac{1}{h} \int_{x_{n-1/2}}^{x_{n+1/2}} J_{as}^n(x) dx. \quad (9)$$

Дальнейший шаг в получении конечно-разностных уравнений – это требование равенства токов и потоков на границах соседних ячеек:

$$\begin{aligned} \Phi_s^{n-1}(x_{n-1/2}) \bar{\Phi}_0^{n-1} + \Phi_{as}^{n-1}(x_{n-1/2}) \bar{\Phi}_1^{n-1} &= \\ = \Phi_s^n(x_{n-1/2}) \bar{\Phi}_0^n - \Phi_{as}^n(x_{n-1/2}) \bar{\Phi}_1^n &= f_{n-1/2}; \\ J_{as}^{n-1}(x_{n-1/2}) \bar{\Phi}_1^{n-1} = J_{as}^n(x_{n-1/2}) \bar{\Phi}_1^n &= J_{n-1/2}. \end{aligned} \quad (10)$$

Заметим, что  $l = \Phi + 2\Phi_2$ , где  $\Phi_2$  – второй лежандровский момент распределения. Для получения выражения (2) необходимо сделать еще два предположения. Первое – применим обычное для диффузионной теории допущение  $l(x) \cong \Phi(x)$  и второе – равенство поверхностных и объемных величин:

$$\Phi_s^n(x_{\pm 1/2}) = \bar{\Phi}_s^n; \quad J_{as}^n(x_{\pm 1/2}) = \bar{J}_{as}^n. \quad (11)$$

Тогда из (8), (10) и (11) получим

$$\begin{aligned} J(x_{n-1/2}) &= 2(3\bar{\Sigma}_{tr}^{n-1} + 3\bar{\Sigma}_{tr}^n)^{-1} (\bar{\Phi}_0^n - \bar{\Phi}_0^{n-1}) / h = \\ &= \frac{2D_n D_{n-1}}{h(D_n + D_{n-1})} (\bar{\Phi}_0^n - \bar{\Phi}_0^{n-1}), \end{aligned} \quad (12)$$

где  $D = 1/(3\bar{\Sigma}_{tr})$ .

Уравнения (12) и (7) дают конечно-разностное уравнение диффузии относительно средних по ячейке потоков. Заметим также, что при сделанных предположениях теория гомогенизации дает однозначную формулу (9) для определения коэффициента диффузии.

## 1. Предельные значения для эффективного поперечного коэффициента диффузии

Входящий в выражение (12) коэффициент диффузии обратно пропорционален  $\bar{\Sigma}_{tr}$ , усредненной по токовой составляющей антисимметричной функции. Прежде чем перейти к дальнейшему рассмотрению проблемы, приведем одно преобразование, позволяющее перейти от интеграла в (9) к поверхностным величинам, что намного удобнее.

Рассмотрим двумерную многозонную цилиндрическую ячейку, в которой реша-

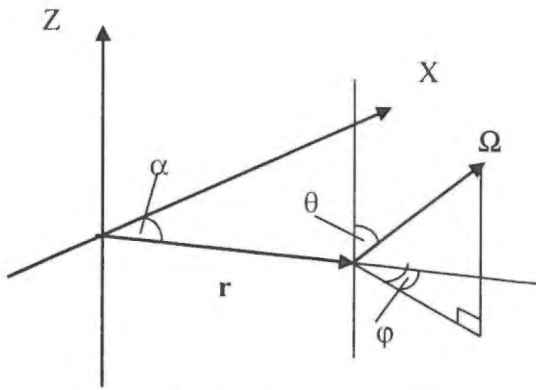


Рис. 2. Система координат

ется антисимметричная по оси X задача. Все обозначения входящих в уравнение величин даны на рис. 2. Здесь использована система координат, обычная для большинства учебников, но отличная от системы, выбранной в [6]:

$$\sin \theta \cos \varphi \frac{\partial \Phi_{as}(r, \alpha, \Omega)}{\partial r} + \frac{\sin \theta \sin \varphi}{r} \times \left( \frac{\partial \Phi_{as}(r, \alpha, \Omega)}{\partial \varphi} - \frac{\partial \Phi_{as}(r, \alpha, \Omega)}{\partial \alpha} \right) + \Sigma(r) \Phi_{as}(r, \alpha, \Omega) = \Sigma_s \frac{1}{4\pi} \int \Phi_{as}(r, \alpha, \Omega) d\Omega. \quad (13)$$

Умножим уравнение (13) на ток  $j_x = (\mathbf{e}_x \cdot \Omega) = \sin \theta \cos(\varphi + \alpha)$  вдоль оси X и проинтегрируем по объему и угловой переменной:

$$Rl_c(R) = \int_0^R \Sigma(r) J_x(r) r dr. \quad (14)$$

Здесь  $R$  – внешний радиус ячейки,

$$l_c(r) = \int_{2\pi}^{\pi} d\alpha \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta \cos \varphi \cos(\varphi + \alpha) \Phi_{as}(r, \alpha, \theta, \varphi) d\varphi$$

– уровень в цилиндрической геометрии,

$$J_x(r) = \int_{2\pi}^{\pi} d\alpha \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \sin \theta \cos(\varphi + \alpha) \Phi_{as}(r, \alpha, \theta, \varphi) d\varphi$$

– ток по оси X.

Таким образом, для вычисления коэффициента диффузии можно предложить следующий рецепт:

- 1) в ячейке решается антисимметричная по какой-либо компоненте задача;
- 2) на внешней границе ячейки вычисляются  $l(R)$  и  $J(R)$ , далее, так как по определению в

антисимметричной задаче ток меняется слабо (почти константа), делается предположение  $J(R) = \bar{J}$ ;

3) используя (9) и (14), получим выражение для коэффициента диффузии

$$D = -RJ(R)/l(R), \quad (15)$$

куда входят только граничные величины.

До сих пор не уточнялось, какими свойствами должна обладать антисимметричная функция, определяющая во всей процедуре получения эффективного коэффициента диффузии. Говорилось лишь о ее свойстве антисимметрии. Для выяснения этого вопроса рассмотрим бесконечную среду, состоящую из одинаковых двухзонных ячеек. Выделим в такой среде эффективную цилиндрическую ячейку, состоящую из зон, которые характеризуются сечениями  $\Sigma_1$  и  $\Sigma_2$  и радиусами  $R_1$  и  $R_2$ ,  $(R_1/R_2)^2 = p < 1$ .

Для простоты положим для обеих зон  $\Sigma = \Sigma_s$ , что в данном случае не столь важно, но поможет избежать дальнейших усложнений. Интуитивно понятно, что коэффициент диффузии такой ячейки должен зависеть от ее размера. Очевидно также, что при стремлении размеров ячейки к 0 должны выполняться равенства

$$\bar{\Sigma} = p\Sigma_1 + (1-p)\Sigma_2; \quad \bar{D} = 1/(3\bar{\Sigma}). \quad (16)$$

Выражение (16) – так называемый гомогенный предел, когда сечения усредняются по объемам зон. Если размеры ячейки велики, то для получения антисимметричной функции можно использовать диффузионное приближение, в этом случае решается задача

$$\left. \begin{aligned} \Delta \Phi_{as}^1 / (3\Sigma_1) &= 0, & r \leq R_1; \\ \Delta \Phi_{as}^2 / (3\Sigma_2) &= 0, & R_1 \leq r \leq R_2. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Верхний индекс при  $\Phi$  в данном случае указывает на номер зоны от центра ячейки. Так как нужна антисимметричная функция, то решение в полярных координатах ищем в виде

$$\Phi_{as}^1(r, \alpha) = A \cos \alpha; \quad \Phi_{as}^2(r, \alpha) = B r \cos \alpha + C \cos \alpha / r.$$

Здесь  $\alpha$  – азимутальный угол, в этом случае

$$\bar{D} = D_2 \frac{1-p((D_2-D_1)/(D_2+D_1))}{1+p((D_2-D_1)/(D_2+D_1))}. \quad (18)$$

Формула (18) – это так называемый диффузионный предел. Заметим, что выражение, определяемое (16), всегда меньше либо равно выражению (18). Естественно ожидать, что реальное значение коэффициента диффузии ячейки должно лежать между этими двумя пределами и достигать каждого из них в своем предельном случае. Впервые предельные соотношения для коэффициента диффузии получены, видимо, в [1].

## 2. Предпочтительность использования четных $G_n$ -приближений МППИ

Заметим, что имеется дело с нестандартной задачей в том смысле, что здесь вряд ли применимо предположение о ведущей роли потока, так как определяющими являются ток и другие нечетные моменты решения. Ранее в работах [7...10] показано, что при решении антисимметричной задачи методом сферических гармоник нечетные  $P_{2n+1}$ -приближения не дают правильного значения коэффициента диффузии в случае малых размеров ячеек, т.е. гомогенный предел не достигается.

Для дальнейшего изучения свойств антисимметричной функции выберем МППИ [6], который наиболее удобен, поскольку полученные здесь величины согласуются с уточненными конечно-разностными уравнениями метода поверхностных гармоник [8]. Этот метод состоит в следующем.

Рассмотрим некоторый объект, состоящий из однородных зон (плоский, сферический, цилиндрический слой) с двумя границами  $r_{s1}$  и  $r_{s2}$ . Выберем два набора функций углов  $\{u_n(\Omega)\}$ ,  $n = 1...N$ , и  $\{w_k(\Omega)\}$ ,  $k = 1...2N$ ; первый набор функций определит угловое распределение источников на границах зон, второй – моменты решения, которые будут сшиваться на границах соседних зон.

Решение внутри однородной зоны ищется в виде

$$\Phi(\mathbf{r}, \Omega) = \sum_n G^n(\mathbf{r}_{s1} \rightarrow \mathbf{r}, \Omega) g_{s1}^n + \sum_n G^n(\mathbf{r}_{s2} \rightarrow \mathbf{r}, \Omega) g_{s2}^n,$$

где  $G^n(\mathbf{r}_{s1(s2)} \rightarrow \mathbf{r}, \Omega)$  – плотность потока нейтронов, создаваемая источником на границе  $r_{s1}$  ( $r_{s2}$ ) (при этом угловая зависимость ис-

точника определяется функцией  $u_n(\Omega)$ );  $g_{s1}^n$  – мощность соответствующего псевдоисточника. Величины  $g_{s1}^n$  определяются из условий непрерывности на границах соседних зон моментов решения

$$\int_{4\pi} \Phi^i(\mathbf{r}_{s2}, \Omega) w_k(\Omega) d\Omega = \int_{4\pi} \Phi^{i+1}(\mathbf{r}_{s1}, \Omega) w_k(\Omega) d\Omega, \quad k = 1...2N;$$

здесь  $i$  – индекс зоны.

Вычисления коэффициента диффузии рассматривались в [11], но здесь покажем, что в рассматриваемой проблеме выгоднее использовать четные приближения  $G_{2n}$ , а не применяемые в работе [11] нечетные приближения.

Для решения задачи нужно выбрать функции  $\{u_n(\Omega)\}$  и  $\{w_k(\Omega)\}$ . Набор функций  $\{w_k(\Omega)\}$  определит, какие моменты решения будут непрерывны внутри ячейки, в том числе и на поверхностях раздела сред, а какие могут испытывать разрыв. Естественно (в соответствии с (15)) в качестве непрерывных моментов решения выбрать ток по оси  $X$  и уровень в цилиндрической геометрии:

$$j_n = w_1 = \sin\theta \cos(\varphi + \alpha);$$

$$l = w_2 = 3\sin^2\theta \cos\varphi \cos(\varphi + \alpha). \quad (19)$$

Чтобы выбрать функции, определяющие угловую зависимость источника, приведем следующие рассуждения.

Известно, что если внутри области имеется распределение нейтронов  $\Phi(\mathbf{r}, \Omega)$ , то вне области оно может быть заменено на поверхностный источник, расположенный на границе области, вида  $(\Omega \mathbf{n}) \Phi(\mathbf{r}_s, \Omega)$ . В этом случае наблюдатель, находящийся вне области, не сможет определить, чем вызвано регистрируемое им излучение: поверхностным источником на границе области либо распределением внутри области.

Обычно для решения симметричной задачи полагают, что по степени важности вклада угловых моментов решение может быть упорядочено следующим образом [4]:

$$\Phi(\mathbf{r}, \Omega) = \frac{1}{4\pi} \Phi_0(\mathbf{r}) + \frac{3}{4\pi} (\mathbf{J}(\mathbf{r}) \Omega) + \dots$$

Отсюда следует, что определяющим в решении есть поток, а следовательно, основной вклад должен создавать поверхностный источник  $u_1(\mathbf{r}, \Omega) = (\Omega \mathbf{n}) \Phi(\mathbf{r}, \Omega) = (\Omega \mathbf{n})$ , т.е. нечетные относительно  $\Omega$  угловые моменты.

В случае же решения антисимметричной задачи решение по степени важности вклада угловых моментов должно быть упорядочено следующим образом:

$$\Phi(\mathbf{r}, \Omega) = (\mathbf{e}_x \Omega) J_x + \frac{1}{4\pi} \Phi_0(\mathbf{r}) + \dots, \text{ где } \mathbf{e}_x -$$

орт оси  $Ox$ ,  $J_x$  —  $x$ -компонента тока. Тогда в качестве основного поверхностного источника, определяющего решение, нужно выбрать

$$u_1(\Omega) = (\Omega \mathbf{n})(\mathbf{e}_x \Omega) = \sin^2 \theta \cos \varphi \cos(\alpha + \varphi), \quad (20)$$

т.е. четные относительно  $\Omega$  моменты.

Возьмемся к двухзонной ячейке. Прежде всего интересно поведение коэффициента диффузии при малых размерах, т.е. будет ли достигнут гомогенный предел (16) в случае использования четных либо нечетных источников. Для такого анализа наиболее удобна функция Грина для среды без рассеяния, так как при малых размерах системы основной вклад будут давать первопрелетные нейтроны.

Удобство работы с первопрелетной функцией Грина в данном случае определяется также и тем, что в отличие от, например, функции Грина для бесконечной среды здесь можно достаточно просто получить значения необходимых интегралов в предельном случае. Для самого же предельного случая, когда  $R_2 \rightarrow 0$ ,  $(R_1/R_2)^2 = p$ ,  $\Sigma_{s1} = \Sigma_1$ ,  $\Sigma_{s2} = \Sigma_2$ , можно получить аналитическое решение антисимметричной задачи. Действительно, если  $R_2 \rightarrow 0$ , среду можно рассматривать как гомогенную и в этом случае:

$$\varphi_{as}(r, \alpha, \theta, \varphi) = r \cos \alpha - \cos(\alpha + \varphi) \sin \theta / \bar{\Sigma}, \quad (21)$$

где  $\bar{\Sigma} = p \Sigma_1 + (1-p) \Sigma_2$ , а следовательно, по-

$$G^j = 4 \int_0^{\pi/2} \sin \theta d\theta \int_0^{\arcsin R_d/R_s} d\varphi \int_0^{2\pi} \left[ e^{\frac{\Sigma_{bc}}{\sin \theta} \cos(\alpha' + \varphi')} - e^{\frac{\Sigma_{dc}}{\sin \theta} \cos(\alpha'' + \varphi'')} \right] \cos(\alpha + \varphi) \sin^2 \theta d\alpha =$$

$$= 4\pi \int_0^{\pi/2} \sin^3 \theta d\theta \int_0^{\arcsin R_d/R_s} \left[ e^{\frac{\Sigma_{bc}}{\sin \theta}} - e^{\frac{\Sigma_{dc}}{\sin \theta}} \right] d\varphi \xrightarrow{R_d \rightarrow 0} 8\pi \Sigma \left[ \int_0^{\pi/2} \sin^2 \theta d\theta \right] R_s \left[ \int_0^{\arcsin R_d/R_s} \sqrt{1 - \left(\frac{R_s}{R_d}\right)^2 \sin^2 \varphi} d\varphi \right] =$$

верхностные источники, которые можно использовать, могут быть только двух видов:

$$u_{\text{чет}}(\Omega) = (\Omega \mathbf{n})(\mathbf{e}_x \Omega) = \sin^2 \theta \cos \varphi \cos(\alpha + \varphi) - \text{четный},$$

$$u_{\text{нечет}}(\Omega) = (\Omega \mathbf{n})(\mathbf{e}_x \Omega) = \cos \alpha \cos \varphi \sin \theta - \text{нечетный}.$$

Из (21) следует, что в предельном случае  $R_2 \rightarrow 0$  мощности всех источников других видов должны быть равны 0.

Рассмотрим сначала случай четных моментов источников и так называемое  $\tilde{G}_0$ -приближение, когда на каждой поверхности задается только один источник и сшиваются на поверхностях раздела только два момента решения. Тильда показывает, что в решении не отбрасывается вклад от вторых моментов, но он однозначно связан с первой составляющей решения. В этом случае в качестве источника выберем (20), а в качестве сшиваемых на границах моментов в соответствии с (19) выберем ток по оси  $X$  и уровень для цилиндризованной ячейки:

$$w_1 = j_x = \cos(\varphi + \alpha) \sin \theta;$$

$$w_2 = l = 3 \sin^2 \theta \cos \varphi \cos(\varphi + \alpha).$$

Напомним, что если на поверхности  $r_s$  задан источник вида  $u_n(\Omega)$ , а на регистрирующей поверхности  $r_d$  нужно вычислить момент от функции распределения  $w_n(\Omega)$ , то в этом случае моменты первопрелетной функции Грина имеют вид

$$G_n'(r_s \rightarrow r_d) = \int_0^{4\pi} \frac{\exp(-\Sigma |r_s - r_d|)}{|\mathbf{n} \Omega'|} w_n(\Omega) u_n(\Omega) d\Omega, \quad (22)$$

где  $\Omega' = \Omega'(\Omega)$ ,  $|r_s - r_d| = f(\Omega)$ ,  $\Sigma$  — сечение среды. Далее будем также использовать обозначения:  $G^j$  — ток, в этом случае  $w_n$  в (22) равно  $w_1$  из (19);  $G^l$  — уровень, в этом случае  $w_n$  в (22) равно  $w_2$  из (19).

Вычислим необходимые моменты для случая, когда  $R_d > R_s$  и  $R_d \rightarrow 0$ . Смысл приведенных ниже величин понятен из рис. 3.

$= 2\pi^2 R_s \Sigma E(R_s/R_d) (E(x) - \text{эллиптический интеграл второго рода});$

$$\begin{aligned}
 G' &= 12 \int_0^{\pi/2} \sin^4 \theta d\theta \int_0^{\arcsin R_d/R_s} d\varphi \int_0^{2\pi} \left[ e^{\frac{\Sigma I_{BC}}{\sin \theta} \cos(\alpha' + \varphi')} - e^{\frac{\Sigma I_{AC}}{\sin \theta} \cos(\alpha'' + \varphi'')} \right] \cos(\alpha + \varphi) \cos \varphi d\alpha = \\
 &= 12\pi \int_0^{\pi/2} \sin^4 \theta d\theta \int_0^{\arcsin R_d/R_s} \left[ e^{\frac{\Sigma I_{BC}}{\sin \theta}} - e^{\frac{\Sigma I_{AC}}{\sin \theta}} \right] \cos \varphi d\varphi \xrightarrow{R_d \rightarrow 0} = \\
 &= 24\pi \Sigma \left[ \int_0^{\pi/2} \sin^3 \theta d\theta \right] R_s \left[ \int_0^{\arcsin R_d/R_s} \sqrt{1 - \left(\frac{R_s}{R_d}\right)^2} \sin^2 \varphi \cdot \cos \varphi d\varphi \right] = 3\pi^2 \Sigma R_s^2 / R_d.
 \end{aligned}$$

Вычислим необходимые моменты для случая, когда  $R_d < R_s$  и  $R_s \rightarrow 0$ . Смысл приведенных ниже величин понятен из рис. 4.

Моменты первопродетной функции Грина имеют вид

$$\begin{aligned}
 G^j &= -4 \int_0^{\pi/2} \sin \theta d\theta \int_0^{\pi/2} d\varphi \int_0^{2\pi} \left[ e^{-\frac{\Sigma I_{BC}}{\sin \theta}} \sin^2 \theta \cos(\alpha' + \varphi') \cos(\alpha + \pi + \varphi) + \right. \\
 &\quad \left. + e^{\frac{\Sigma I_{AC}}{\sin \theta}} \sin^2 \theta \cos(\alpha'' + \varphi'') \cos(\alpha + \varphi) \right] d\alpha = \\
 &= -4 \int_0^{\pi/2} \sin^3 \theta d\theta \int_0^{\pi/2} d\varphi \int_0^{2\pi} \left[ e^{\frac{\Sigma I_{BC}}{\sin \theta}} \cos^2(\alpha + \varphi + \pi) + e^{\frac{\Sigma I_{AC}}{\sin \theta}} \cos^2(\alpha + \varphi) \right] d\alpha \xrightarrow{R_s \rightarrow 0} \\
 &\rightarrow -4\pi \int_0^{\pi/2} \sin^3 \theta d\theta \int_0^{\pi/2} \left[ e^{\frac{\Sigma I_{BC}}{\sin \theta}} + e^{\frac{\Sigma I_{AC}}{\sin \theta}} \right] d\varphi = -\frac{4\pi^2}{3}; \\
 G^i &= -12 \int_0^{\pi/2} \sin^4 \theta d\theta \int_0^{\pi/2} d\varphi \int_0^{2\pi} \left[ e^{\frac{\Sigma I_{BC}}{\sin \theta}} \cos(\alpha' + \varphi') \cos(\alpha + \pi + \varphi) \cos(\varphi + \pi) + \right. \\
 &\quad \left. + e^{\frac{\Sigma I_{AC}}{\sin \theta}} \cos(\alpha'' + \varphi'') \cos(\alpha + \varphi) \cos \varphi \right] d\alpha = \\
 &= -12 \int_0^{\pi/2} \sin^4 \theta d\theta \int_0^{\pi/2} d\varphi \int_0^{2\pi} \left[ -e^{\frac{\Sigma I_{BC}}{\sin \theta}} \cos^2(\alpha + \varphi + \pi) + e^{\frac{\Sigma I_{AC}}{\sin \theta}} \cos^2(\alpha + \varphi) \right] \cos \varphi d\alpha = \\
 &= -12\pi \int_0^{\pi/2} \sin^4 \theta d\theta \int_0^{\pi/2} \left[ -e^{\frac{\Sigma I_{BC}}{\sin \theta}} + e^{\frac{\Sigma I_{AC}}{\sin \theta}} \right] \cos \varphi d\varphi \xrightarrow{R_s \rightarrow 0} 12\pi \Sigma \left[ \int_0^{\pi/2} \sin^3 \theta d\theta \right] \Sigma \int_0^{\pi/2} (I_{BC} - I_{AC}) \cos \varphi d\varphi = 4\pi^2 \Sigma R_d.
 \end{aligned}$$

С помощью полученных выражений для первопродетной функции Грина найдем теперь коэффициент диффузии двухзонной ячейки в предположении, что внешний ра-

диус ячейки  $R_2 \rightarrow 0$  при фиксированном отношении объемов  $p = (R_1/R_2)^2$ . Для этого запишем условия сшивки уровня и тока на границах зон:

$$\left. \begin{aligned}
 G_1'(R_1 \rightarrow R_1) g_1 &= G_2'(R_1 \rightarrow R_1) g_2 + G_2'(R_2 \rightarrow R_1) g_3; \\
 G_1'(R_1 \rightarrow R_1) g_1 &= G_2'(R_1 \rightarrow R_1) g_2 + G_2'(R_2 \rightarrow R_1) g_3; \\
 G_2'(R_1 \rightarrow R_2) g_2 + G_2'(R_2 \rightarrow R_2) g_3 &= j; \\
 G_2'(R_1 \rightarrow R_2) g_2 + G_2'(R_2 \rightarrow R_2) g_3 &= l; \\
 D &= -R_2 j / l.
 \end{aligned} \right\}$$

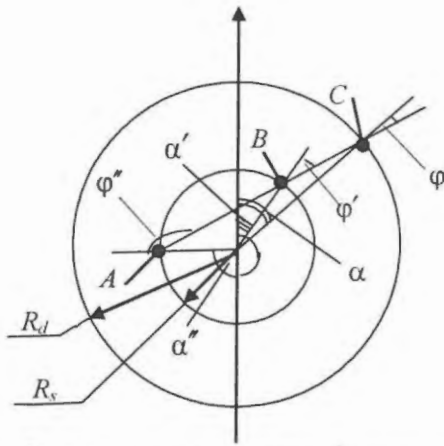


Рис. 3. Вычисление моментов функции Грина для первопролетных нейтронов,  $R_d > R_s$ :  $\varphi' = \arcsin(R_d \sin\varphi/R_s)$ ,  $\varphi'' = \pi - \arcsin(R_d \sin\varphi/R_s)$ ,  $\alpha' = \alpha + \varphi - \varphi'$ ,  $\alpha'' = \pi + \alpha + \varphi + \varphi'$ ,  $l_{BC} = R_d \cos\varphi - R_s \cos\varphi'$ ,  $l_{AC} = R_d \cos\varphi + R_s \cos\varphi'$

Здесь  $g_1$  — мощность источника на поверхности  $R_1$ , действующего в первую зону;  $g_2$  — мощность источника на поверхности  $R_1$ , действующего во вторую зону;  $g_3$  —

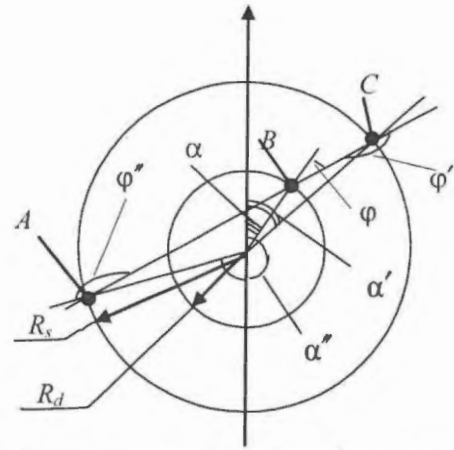


Рис. 4. Вычисление моментов функции Грина для первопролетных нейтронов,  $R_s > R_d$ :  $\varphi' = \pi + \arcsin(R_d \sin\varphi/R_s)$ ,  $\varphi'' = \pi - \arcsin(R_d \sin\varphi/R_s)$ ,  $\alpha' = \pi + \alpha + \varphi - \varphi'$ ,  $\alpha'' = \alpha + \varphi - \varphi''$ ,  $l_{BC} = R_s \cos\varphi' - R_d \cos\varphi$ ,  $l_{AC} = R_s \cos\varphi' + R_d \cos\varphi$

мощность источника на поверхности  $R_2$ , действующего во вторую зону;  $G_{\text{ток}}^{\text{ток}}$  (уровень — номер зоны) — (поверхность источника → поверхность детектора). Тогда

$$D = R_2 \frac{G_2'(R_2 \rightarrow R_2) - G_2'(R_1 \rightarrow R_2)u}{G_2'(R_2 \rightarrow R_2) - G_2'(R_1 \rightarrow R_2)u};$$

$$u = \frac{G_2'(R_2 \rightarrow R_1)G_1'(R_1 \rightarrow R_1) - G_2'(R_2 \rightarrow R_1)G_1'(R_1 \rightarrow R_1)}{G_2'(R_1 \rightarrow R_1)G_1'(R_1 \rightarrow R_1) - G_2'(R_1 \rightarrow R_1)G_1'(R_1 \rightarrow R_1)}$$

$$= \frac{(-4/3)4\Sigma_1 R_1 - 4\Sigma_2 R_1(-4/3)}{[2R_1\Sigma_2 E(1)]4\Sigma_1 R_1 - 2\Sigma_2 R_1(-4/3)} \Big|_{R_2 \rightarrow 0} = \frac{2(\Sigma_2 - \Sigma_1)}{\Sigma_2}; \Rightarrow$$

$$D = -R_2 \frac{(-4/3) - 2\Sigma_2 R_2 E(R_1/R_2)(2(\Sigma_2 - \Sigma_1)/\Sigma_2)}{4\Sigma_2 R_2 - 2(R_1/R_2)R_1\Sigma_2(2(\Sigma_2 - \Sigma_1)/\Sigma_2)} \Big|_{R_2 \rightarrow 0}$$

$$= \frac{R_2/3}{\Sigma_2(R_2 - (R_1^2/R_2)) + (R_1^2/R_2)\Sigma_1} = \frac{1}{3} \frac{1}{\Sigma_2(1-p) + \Sigma_1 p}; p = \left(\frac{R_1}{R_2}\right)^2,$$

т.е. получен искомый однородный предел.

Для нечетных приближений в силу (21) в данной конкретной задаче для моделирования окружения можно использовать только один нечетный источник на внешней границе ячейки. Известно, что в этом случае (так называемое  $G_1$ -приближение) однородный предел не достигается. В силу (21) мощности всех других источников при  $R_2 \rightarrow 0$  должны быть равны 0. Возможно, однако, применяя нечетные приближения выше  $G_n$ , добиться правильных результатов за счет постановки граничных условий на внешней границе ячейки. Действительно, в

этом случае нужно на внешней границе помимо тока задавать дополнительные угловые моменты (что противоречит (21)) и использовать коэффициенты перед ними как подгоночные параметры. В этом случае каждый раз необходимо решать задачу на определение углового распределения на внешней границе, т.е. такой путь оказывается более трудоемким и искусственным.

Чтобы решить задачу для всех значений  $R_2$ , т.е. продемонстрировать, что эффективный коэффициент диффузии достигает предельных значений как для малых, так и больших размеров, используем функцию

Грина для бесконечной среды. Необходимые моменты выглядят следующим образом. Пусть  $R_s$  – радиус поверхности источ-

ника в среде с сечениями  $\Sigma_s$  и  $\Sigma$ ,  $R_d$  – радиус поверхности детектора.

При  $R_s < R_d$ :

$$G' = \frac{9}{4} \Sigma R_s \pi \left( \int_0^1 \frac{2(1-c)^2 v^3 I_1(\Sigma R_s/v) K_1(\Sigma R_d/v)}{N(0,v)} dv - \int_0^1 \frac{(1-v^2) v I_1(\Sigma R_s/v) K_1(\Sigma R_d/v)}{N(1,v)} dv \right) + F'_{as}(v_0);$$

$$F'_{as}(v_0) = \begin{cases} \frac{3\pi R_s^2}{2 R_d} \Sigma, & c=1; \\ \frac{9}{4} \Sigma R_s \pi \frac{2(1-c)^2 v_0^3 I_1(\Sigma R_s/v_0) K_1(\Sigma R_d/v_0)}{N(0,v_0)}, & c \neq 1; \end{cases}$$

$$G' = \frac{3}{4} \Sigma R_s \pi \left( \int_0^1 \frac{(1-c)^2 v^2 I_1(\Sigma R_s/v) (K_0(\Sigma R_d/v) + K_2(\Sigma R_d/v))}{N(0,v)} dv - \int_0^1 \frac{(1-v^2) v I_1(\Sigma R_s/v) K_1(\Sigma R_d/v)}{\Sigma R_d N(1,v)} dv \right) + F'_{as}(v_0);$$

$$F'_{as}(v_0) = \begin{cases} \frac{\pi R_s^2}{2 R_d^2}, & c=1; \\ \frac{3}{4} \Sigma R_s \pi \frac{(1-c)^2 v_0^2 I_1(\Sigma R_s/v_0) (K_0(\Sigma R_d/v_0) + K_2(\Sigma R_d/v_0))}{N(0,v_0)}, & c \neq 1. \end{cases}$$

При  $R_d < R_s$ :

$$G' = \frac{9}{4} \Sigma R_s \pi \left( \int_0^1 \frac{2(1-c)^2 v^3 K_1(\Sigma R_s/v) I_1(\Sigma R_d/v)}{N(0,v)} dv - \int_0^1 \frac{(1-v^2) v K_1(\Sigma R_s/v) I_1(\Sigma R_d/v)}{N(1,v)} dv \right) + F'_{as}(v_0);$$

$$F'_{as}(v_0) = \begin{cases} \frac{3\pi}{2} R_s \Sigma, & c=1; \\ \frac{9}{4} \Sigma R_s \pi \frac{2(1-c)^2 v_0^3 K_1(\Sigma R_s/v_0) I_1(\Sigma R_d/v_0)}{N(0,v_0)}, & c \neq 1; \end{cases}$$

$$G' = -\frac{3}{4} \Sigma R_s \pi \left( \int_0^1 \frac{(1-c)^2 v^2 K_1(\Sigma R_s/v) (I_0(\Sigma R_d/v) + I_2(\Sigma R_d/v))}{N(0,v)} dv - \int_0^1 \frac{(1-v^2) v K_1(\Sigma R_s/v) I_1(\Sigma R_d/v)}{\Sigma R_d N(1,v)} dv \right) + F'_{as}(v_0);$$

$$F'_{as}(v_0) = \begin{cases} -\frac{\pi}{2}, & c=1; \\ -\frac{3}{4} \Sigma R_s \pi \frac{(1-c)^2 v_0^2 K_1(\Sigma R_s/v_0) (I_0(\Sigma R_d/v_0) + I_2(\Sigma R_d/v_0))}{N(0,v_0)}, & c \neq 1. \end{cases}$$

Здесь  $I_n(x)$  – функции Бесселя,  $K_n(x)$  – функции Мак-Дональда,  $c = \Sigma_s/\Sigma$ ,  $v_0$  –

корень уравнения  $\frac{c v_0}{2} \ln \left( \frac{v_0 + 1}{v_0 - 1} \right) = 1$ ;

$$N(n,v) = \begin{cases} \left( \frac{c}{v^2 - 1} - \frac{1}{v^2} \right) \frac{c v^3}{2}, & n=0, v > 1; \\ \left( \left( 1 + \frac{c v}{2} \ln \left( \frac{v+1}{1-v} \right) \right)^2 + \frac{(c \pi v)^2}{4} \right) v, & n=0, v \leq 1; \\ v(-1)^n, & n \neq 0. \end{cases}$$

При  $R_s = R_d$  и  $v \rightarrow 0$  используются следующие асимптотические соотношения для функций Бесселя [12]:

$$I_n(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} \sqrt{\frac{1}{2\pi x}} \cdot \exp x, K_n(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \cdot \exp(-x).$$

Тогда, учитывая, что  $|N(n, \nu)| \rightarrow \nu$  при  $\nu \rightarrow 0$ , для входящих в интегралы комплексов получим следующее асимптотическое выражение с точностью до знака:

$$\frac{I_n(R\Sigma/\nu)K_m(R\Sigma/\nu)}{|N(k, \nu)|} \xrightarrow{x \rightarrow 0} \frac{\nu}{2R\Sigma} \frac{1}{|N(k, \nu)|} \xrightarrow{x \rightarrow 0} \frac{1}{2R\Sigma},$$

$$\forall n, m, k,$$

откуда следует, что все интегралы существуют.

На рис. 5 (3-я стр. цветной вкладки) представлена зависимость коэффициента диффузии двухзонной ячейки от оптической толщины  $\Sigma_1 R_1 + \Sigma_2 (R_2 - R_1)$ . Параметры ячейки следующие:  $\Sigma_1 = 0,01$ ,  $\Sigma_2 = 0,78$ ,  $p = 5/11$ .

Коэффициент диффузии вычислялся в двух приближениях МППИ ( $G_0$  и  $G_2$ ) с применением функции Грина для бесконечной среды. В случае  $G_2$  использовались 2 источника:

$q_1 = (\mathbf{e}_x \Omega \chi \mathbf{n} \Omega)$ ,  $q_2 = (\mathbf{e}_x \Omega \chi \mathbf{n} \Omega) - (\mathbf{n} \Omega)^2 \cos \alpha$   
и на границах зон требовалась непрерывность угловых моментов:

$$j_n = (\Omega \mathbf{n}) \cos \alpha, \quad j_\tau = (\Omega \boldsymbol{\tau}) \sin \alpha,$$

$$l_c = (\Omega \mathbf{e}_x \chi \Omega \mathbf{n}), \quad l = (\Omega \mathbf{n})^2 \cos \alpha,$$

где  $\mathbf{n}$  и  $\boldsymbol{\tau}$  — соответственно нормальный и тангенциальный орты к поверхности зоны. Можно наблюдать, что в соответствии с теоретическими предсказаниями коэффициент диффузии плавно меняется от гомогенного предела до диффузионного. Отметим, что эти результаты получены в низших приближениях МППИ.

### Заключение

Представлен краткий обзор определенных коэффициента диффузии для гетерогенной среды. Приведено обоснование того, почему для расчета коэффициента диффузии предпочтительней применять четные приближения МППИ. Аналитически показано, что для  $G_0$ -приближения достигается гомогенный предел в случае стремления размеров ячейки к нулю. На примере простейшей двухзонной ячейки показано, как меняется коэффициент диффузии в зависимости от размера ячейки. Получены формулы моментов функции Грина для расчетов антисимметричной пробной функции. Да-

ны рекомендации, уточняющие алгоритмы расчетов, относящихся к наиболее спорной части проблемы — расчетам поперечных коэффициентов диффузии в решетках реакторов.

### Список литературы

1. Лалетин Н.И. Ослабление излучения в гетерогенных защитах. В сб. "Вопросы физики защиты реакторов". М.: Атомиздат, 1963.
2. Лалетин Н.И. Об уравнениях гетерогенного реактора // ВАНТ. Сер. Физика и техника ядерных реакторов, 1981, вып. 5(18), с. 31.
3. Benoist P. A simple new expression of the radial diffusion coefficient for fuelled channels // AEEW Trans., 1962, 4.
4. Фейнберг С.М., Шихов С.Б., Троянский В.Б. Теория ядерных реакторов, т. 1. М.: Атомиздат, 1978.
5. Theoretical Investigation of the Physical Properties of WWER-Type Uranium-Water Lattices, под. ред. Л.В. Майорова. Budapest, Akademiai Kiado, 1994.
6. Лалетин Н.И. В кн. "Методы расчета полей тепловых нейтронов в решетках реакторов", под ред. Я.В. Щелева. М.: Атомиздат, 1974.
7. Лалетин Н.И., Бояринов В.Ф. Эффективный однострунный коэффициент диффузии нейтронов в решетках реакторов // Атомная энергия, 1985, т. 59, вып. 2, с. 91–96.
8. Лалетин Н.И., Ельшин А.В. Вывод конечно-разностных уравнений гетерогенного реактора. 1. Квадратная решетка блоков. Препринт ИАЭ-3280/5, 1980.
9. Лалетин Н.И., Ельшин А.В. То же. 2. Квадратная, треугольная и двойная решетки блоков. Препринт ИАЭ-3458/5, 1981.
10. Лалетин Н.И., Ельшин А.В. То же. 3. Трехмерный реактор, Препринт ИАЭ-4090/5, 1985.
11. Бояринов В.Ф. Многогрупповой расчет антисимметричных распределений нейтронов в цилиндрической ячейке // Атомная энергия, 1986, т. 61, вып. 5, с. 324.
12. Гродштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматлит, 1963.

#### Контактная информация —

Ковалишин Алексей Анатольевич, нач. лаб.,  
тел.: +7(499)196-95-34, e-mail: [kaa@adis.vver.kiae.ru](mailto:kaa@adis.vver.kiae.ru)

Вопросы атомной науки и техники.  
Сер. Физика ядерных реакторов, 2010, вып. 1,  
с. 23–31.

## Моделирование взаимодействий электронов и позитронов с веществом в программе MCU-PD

*А.С. Кулаков,*

РНИЦ "Курчатовский институт", 123182, Москва, пл. Курчатова, 1

Поступила в редакцию 10.06.2009 г.

В прикладном пакете программ MCU метод Монте-Карло используется для решения уравнений переноса нейтронов, фотонов, электронов и позитронов. Пакет имеет модульную структуру, и каждая рабочая версия формируется из модулей и подмодулей в зависимости от решаемой задачи. В рамках данной статьи описаны подмодуль БЕТА моделирования взаимодействия электронов и позитронов с веществом и подмодуль БЕГ генерации фотонов в электронных и позитронных реакциях с веществом, входящие в составной физический модуль СОФИЗМ программы MCU-PD. Дана краткая характеристика библиотеки констант, входящей в базу данных MCUDB50 и поддерживающей работу программы MCU-PD.

*Ключевые слова:* метод Монте-Карло, прикладной пакет программ MCU, моделирование взаимодействия электронов и позитронов, база данных MCUDB50.

**Simulation of Electron and Positron Interactions with Matter in MCU-PD Code.** *A.S. Kulakov, RRC "Kurchatov Institute", 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182.* Monte Carlo method is used in MCU code for simulation of neutrons, photons, electrons and positrons transport. The code is consisting of modules. A current version of the code consists of set of modules which depends on current task. Two modules BETA and BEG are considered. BETA simulate interactions of electrons and positrons with matter. BEG generates photons by electron and positron reactions with matter. These modules are included in complex physical module SOFIZM of MCU-PD code. Short specification of MCUDB50 data base is also considered. This data base is used for the calculations by MCU code.

*Key Words:* Monte Carlo Method, MCU Code, Simulation of Electron and Positron Interactions, MCUDB50 Data Base.

### Введение

Дальнейшее развитие и совершенствование методов расчета нейтронно-физических характеристик ядерных реакторов и возросшие возможности вычислительных машин позволяют применять метод Монте-Карло [1] в качестве инструмента для проведения прецизионных расчетов, в ряде случаев расчетов инженерного уровня и для решений самосогласованного переноса различных видов излучений. Характерным примером последнего может служить задача моделирования фотон-электрон-позитронного переноса в датчиках прямой зарядки системы внутриреакторного контроля.

Для программы MCU-PD [2...6] семейства MCU разработаны подмодуль БЕТА для описания взаимодействия электронов и позитронов с веществом и подмодуль БЕГ для процессов генерации вторичных частиц

в электронных и позитронных реакциях. Оба подмодуля входят в составной физический модуль СОФИЗМ. Подмодули предназначены для определения электронных и позитронных полей в элементах активных зон ядерных реакторов при решении задач, связанных с расчетом датчиков прямой зарядки системы внутриреакторного контроля и радиационного нагрева материалов, а также определения дозовых характеристик электронного и позитронного излучений.

В подмодуле БЕТА [6] моделируются такие процессы взаимодействия электронов и позитронов с веществом, как упругое рассеяние электронов и позитронов на ядрах среды, неупругое рассеяние электронов и позитронов на связанных атомных электронах с ионизацией и возбуждением атомов, неупругое взаимодействие электронов и позитронов с кулоновским полем ядер и атомных электронов с испусканием тормозного

излучения и аннигиляция позитронов на электронах. Работа подмодуля поддерживается библиотекой ядерных данных в поточечном представлении энергетической зависимости сечений при сочетании аналитического и библиотечного описаний сечений взаимодействия.

В подмодуле используется метод катастрофических столкновений [7...9], в котором все столкновения делятся на две группы: катастрофические, т.е. сопровождающиеся значительной потерей энергии или изменением направления движения, и некатастрофические, в которых потеря энергии и изменение угла рассеяния малы.

При некатастрофических столкновениях угол рассеяния и переданная энергия разыгрываются не после каждого пробега  $\lambda$  до столкновения, а после конечного расстояния  $s$  ( $s \geq 20 \lambda$ ) в соответствии с распределениями, характеризующими многократное рассеяние (распределения Мольера, Гоудсмита – Саундерсона, Ландау, Блунка – Лейзеганга) [10...17]. При этом предварительно задаются максимально возможный угол  $\theta_{\text{кат}}$  рассеяния и потерянная энергия  $W_{\text{кат}}$ , ниже которых (при  $\theta < \theta_{\text{кат}}$  и  $W < W_{\text{кат}}$ ) столкновения группируются и моделируются методом многократных столкновений, а выше ( $\theta > \theta_{\text{кат}}$  и  $W > W_{\text{кат}}$ ) моделируются по схеме индивидуальных столкновений.

Данный метод в отличие от чистого метода индивидуальных столкновений (БРАНД [18]) или многократных столкновений (ETRAN [19], EGS4 [20], MCNP5 [21]) сочетает в себе экономичность, точность, корректный учет параметров вторичных частиц и гибкость за счет возможности варьирования параметров моделирования. При нулевых значениях параметров  $\theta_{\text{кат}}$  и  $W_{\text{кат}}$  моделирование происходит по схеме индивидуальных столкновений. Подобный подход реализован в программе PENELOPE [22].

Подмодуль БЕГ [6] моделирует рождение вторичных фотонов и электронов в электронных и позитронных реакциях и является совокупностью подпрограмм, моделирующих параметры вторичных частиц.

## 1. Взаимодействие электронов и позитронов с веществом

При прохождении через вещество электроны и их античастицы позитроны испытывают электромагнитные взаимодействия с атомными электронами и ядрами. Из всех возможных видов взаимодействия применительно к реакторным задачам для энергетической области от 0 до 20 МэВ выделяются следующие реакции:

- упругие взаимодействия электронов и позитронов с кулоновским полем ядер;
- неупругие взаимодействия электронов и позитронов со связанными атомными электронами с ионизацией и возбуждением атомов;
- неупругие взаимодействия электронов и позитронов с кулоновским полем ядер и атомных электронов с испусканием тормозного излучения;
- аннигиляция позитронов на электронах.

Дифференциальное сечение рассеяния электронов или позитронов на атомах в элемент телесного угла  $d\Omega$  около направления  $(\theta, \varphi)$  со скоростью  $v$  в кулоновском поле ядра с зарядом  $Z_e$  при однократном упругом рассеянии описывается релятивистской формулой Резерфорда [23]

$$\frac{d\sigma_p}{d\Omega} = \left( \frac{Z_e^2}{m_e c^2} \right)^2 \left( \frac{1-\beta^2}{\beta^2} \right) \frac{1}{4\sin^4(\theta/2)}, \quad (1)$$

где  $\sigma_p$  – сечение рассеяния Резерфорда,  $\beta = v/c$ ,  $c$  – скорость света в вакууме,  $m_e$  – масса покоя электрона.

Из (1) следует, что вероятность кулоновского рассеяния заряженной частицы на угол  $\theta$  возрастает при уменьшении угла  $\theta$  рассеяния. В связи с этим заряженная частица, движущаяся в плотной среде, должна испытывать на своем пути большое количество последовательных актов упругого рассеяния на малые углы с малой потерей энергии. Этот процесс называется многократным кулоновским рассеянием. Вероятность упругого рассеяния возрастает с уменьшением энергии электронов или позитронов.

Соотношение сечений рассеяния позитронов и электронов меньше единицы при одинаковых энергии и угле рассеяния. Оно

уменьшается с увеличением угла  $\theta$  рассеяния и заряда  $Z$  рассеивающего вещества. В нерелятивистской области ( $\beta < 1$ ) сечения позитронов и электронов равны [24].

При рассеянии электронов больших энергий ( $E > 5$  МэВ) на малые и большие углы начинает проявляться эффект экранирования ядра внешними атомными электронами, который приводит к уменьшению сечений рассеяния, особенно в случае малых углов  $\theta$  рассеяния. Влияние экранирования уменьшается с увеличением энергии  $E$  электронов и уменьшением заряда  $Z$  ядер при данном угле  $\theta$  рассеяния [24].

Влияние конечности размеров ядра сказывается при рассеянии электронов больших энергий  $E$  на большие углы  $\theta$ . Так как при рассеянии на большие углы  $\theta$  прицельный параметр имеет малое значение, то электрон взаимодействует только с частью заряда ядра. При этом угол  $\theta$  отклонения меньше, чем в кулоновском поле точечного заряда [24].

Упругое рассеяние неполяризованных электронов и позитронов на изолированном покоящемся нейтральном атоме с атомным номером  $Z$  рассматривается в приближении бесконечной массы ( $\sim 3600 Z m_e$ ), при котором состояние атома-мишени не изменяется в результате взаимодействия. Рассеяние характеризуется отклонением траектории налетающей частицы от первоначальной на полярный  $\theta$  и азимутальный  $\varphi$  углы. Так как рассматриваются неполяризованные частицы, то отклонение аксиально симметрично относительно первоначального направления движения во всех видах взаимодействий.

В рамках модели статического поля [23, 25] в широком диапазоне энергий (от  $\sim 10^2$  до  $\sim 10^8$  эВ) дифференциальное сечение упругого рассеяния электронов и позитронов получается из решения волнового уравнения Дирака для движения частицы в экранированном центральном поле ядра. Дифференциальное сечение упругого рассеяния электрона и позитрона с кинетической энергией  $E$  в элемент телесного угла  $d\Omega$  около направления  $(\theta, \varphi)$  имеет вид [25]

$$d\sigma_{yn}/d\Omega = |f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2, \quad (2)$$

где  $f(\theta)$  и  $g(\theta)$  – прямая и обратная комплексные амплитуды рассеянных волн.

Дифференциальные сечения в представлении парциальных волн (2) точно учитывают спиновые и другие релятивистские эффекты и эффекты от конечности размеров ядер.

Электроны и позитроны также испытывают неупругие столкновения, при которых они теряют энергию. При этом необходимо учитывать коллективный характер взаимодействия с веществом. Модель взаимодействия электронов и позитронов с твердыми телами при неупругих взаимодействиях базируется на представлении о двух системах: ионов, внутренние оболочки которых не изменяются по сравнению с оболочками свободного атома, и электронного газа, образуемого из валентных электронов [23]. В электронном газе нормальных металлов одночастичные и коллективные возбуждения электронов разделяются и описываются в рамках диэлектрической теории.

Рассеяние электронов и позитронов происходит и за счет неупругих столкновений с атомными электронами. Если энергия  $E$  налетающей частицы больше энергии связи электрона в атоме, то данное взаимодействие считается столкновением двух свободных частиц [24].

Вероятность рассеяния электронов на электронах много меньше, чем на ядрах, так как сечение рассеяния электронов на электронах пропорционально  $Z$ , тогда как сечение рассеяния на ядрах пропорционально  $Z^2$ . Отношение вероятностей рассеяния электронов и позитронов всегда больше единицы [23, 24].

Основным механизмом энергетических потерь электронов и позитронов при  $E < \sim 0,5$  МэВ служат неупругие взаимодействия со связанными атомными электронами, при которых теряемая частицей энергия расходуется на возбуждение и ионизацию атомов. Энергию, теряемую на ионизацию и возбуждение, можно считать локально поглощенной около траектории частицы. При переходе в основное состояние происходит эмиссия жесткого рентгеновского излучения или Оже-электронов [24].

Ионизационные потери электронов зависят от плотности ионизируемого вещества и слабо зависят от  $Z$ . Они уменьшаются с ростом кинетической энергии  $E$ , достигают минимума при  $E \approx 2m_e c^2$  и затем медленно растут с энергией как  $\ln E$ . При  $E/(m_e c^2) \sim \sim 0,1$  относительная разность потерь энергии на ионизацию у электронов и позитронов не превышает 10 %. С увеличением  $E$  различие уменьшается [24].

Неупругое рассеяние заряженной частицы определяется потерей энергии  $W$  и энергией  $Q$  отдачи. В борновском приближении  $Q$  и  $W$  определяются через мощность обобщенного атомного осциллятора (МОО). МОО расщепляется на вклады от различных атомных электронных оболочек. Каждая атомная оболочка  $k$  характеризуется количеством  $Z_k$  электронов на оболочке и энергией  $U_k$  ионизации. В [26] предложено моделировать МОО каждой электронной оболочки как единичный  $\delta$ -осциллятор. МОО всего атома состоит из двух слагаемых.

Первое слагаемое представляет резонансные дальние взаимодействия при малых  $Q$ , которые описываются единичным резонансом при  $W_k$ . Второе слагаемое соответствует близким взаимодействиям при больших  $Q$ , когда электроны-мишени свободны и покоятся ( $Q = W$ ). Суммирование по  $k$  проводится по всем связанным электронным оболочкам (и области проводимости в случае проводников), а парциальная мощность  $f_k$  осциллятора отождествляется с количеством электронов на  $k$ -й оболочке, т.е.  $f_k = Z_k$ . Предполагается, что выполняется соотношение [27, 28]

$$\sum_k f_k \ln W_k = Z \ln I, \quad (3)$$

где  $I$  – средняя энергия возбуждения.

Модель на основе МОО – приближенная и применяется для описания взаимодействия частиц и эмиссии  $\delta$ -электронов только с внешних оболочек атомов, поскольку процессы ионизации внутренних оболочек имеют малую вероятность и могут описываться отдельно. Внешними считаются электронные оболочки, отличные от  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек или с  $U_j < 200$  эВ, где  $U_j$  – энергия ионизации оболочки  $j$ .

Дважды дифференциальные сечения по  $Q$  и  $W$  неупругих столкновений электронов и позитронов, полученные по модели МОО, представляются в виде суммы слагаемых, описывающих вклады от дальних и близких взаимодействий [24],

$$\frac{d^2 \sigma_{\text{ну}}}{dWdQ} = \frac{d^2 \sigma_{\text{д.прод}}}{dWdQ} + \frac{d^2 \sigma_{\text{д.поп}}}{dWdQ} + \frac{d^2 \sigma_{\text{бл}}}{dWdQ}. \quad (4)$$

Дальние взаимодействия удовлетворяют соотношению  $W < H$ ; если  $W > H$ , взаимодействие называется близким;  $H \approx \approx 10^4 \dots 10^5$  эВ. При близких взаимодействиях, в отличие от дальних, учитываются квантовомеханические эффекты. Вклады от дальних взаимодействий делятся на продольные и поперечные. При поперечных дальних взаимодействиях пренебрегается изменением угла налетающей частицы.

Бликие взаимодействия электрона со свободным покоящимся электроном в рамках борновского приближения описываются формулой Меллера [29]. В конечном состоянии получаются два неразличимых свободных электрона. Более быстрый из них рассматривается как первичный, а второй как  $\delta$ -электрон. Максимальная разрешенная передача энергии в близких столкновениях  $W_{\text{max}} = E/2$ .

Бликие взаимодействия позитрона со свободным покоящимся электроном в рамках борновского приближения описываются формулой Баба [30]. Максимальная потеря энергии при столкновениях позитронов с энергией  $E$ :  $W_{\text{max}} = E$ .

Ионизация внутренних электронных  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек с  $U_j > 200$  эВ рассматривается как независимый процесс, не влияющий на состояние налетающей частицы. Предполагается, что при неупругих взаимодействиях налетающая частица вызывает только испускание электрона отдачи ( $\delta$ -электрона), а атом-мишень считается невозбужденным. Используются полные сечения ионизации, опубликованные в [31] на основании фотоэлектрических сечений, полученных из файлов EPDL [32].

При энергиях  $E > \sim 0,5$  МэВ электронов и позитронов начинают проявляться и увеличиваются с ростом  $E$  радиационные потери энергии. В результате столкновения с

ядром вещества электрон или позитрон отклоняется от первоначального направления движения и тормозится за счет электромагнитного излучения в поле ядра. В отличие от ионизационных потерь, которые пропорциональны  $Z$ , радиационные потери пропорциональны  $Z^2$ . Потери на излучение при  $E \leq m_e c^2$  слабо зависят от энергии, а при  $E \gg m_e c^2$  быстро растут с увеличением энергии. При больших энергиях электроны и позитроны теряют энергию в основном за счет излучения.

Эффект торможения электронов и позитронов происходит и в поле электронов. Интенсивность тормозного излучения в поле электронов в  $Z$  раз меньше, чем в поле ядер. Для учета вклада тормозного излучения в поле электронов в выражении сечения тормозного излучения  $Z^2$  заменяется на  $Z(Z + \eta)$  [24], где параметр  $\eta$  отвечает за возникновение тормозного излучения в поле атомных электронов.

Спектр тормозного излучения непрерывный. Максимальное значение энергии кванта тормозного излучения равно начальной кинетической энергии  $E = h\nu_{\max}$  налетающего электрона или позитрона.

При малых энергиях налетающих электронов сечения радиационных потерь не зависят от энергии электронов и средние радиационные потери постоянны. При больших энергиях сечение радиационных потерь растет как  $\ln E$ , а  $dE/dx \sim E \ln E$ , если не учитывать экранирования [24], которое проявляется в уменьшении вероятности испускания квантов малой энергии по сравнению с вероятностью испускания квантов большой энергии.

При высоких энергиях различие сечений тормозного излучения для электронов и позитронов мало. В области низких энергий сечение тормозного излучения позитрона меньше, чем электрона [24].

Дифференциальное сечение тормозного излучения описывается полуэмпирической формулой Бете – Гайтлера с учетом экранирования, выведенной в рамках борновского приближения [33, 34]. Общепринято выражать его в виде [23]

$$\frac{d\sigma_{\text{top}}}{dW_\gamma} = \frac{Z^2}{\beta^2} \frac{1}{W_\gamma} \chi(Z, E, \kappa), \quad (5)$$

где  $W_\gamma$  – энергия испускаемого фотона;  $\kappa = W_\gamma/E$  – приведенная энергия фотона, принимающая значения от 0 до 1; функция  $\chi(Z, E, \kappa)$  – градуированное дифференциальное сечение тормозного излучения.

В [35, 36] содержатся таблицы дифференциальных сечений для всех элементов ( $Z = 1 - 99$ ) с энергиями электронов от 1 кэВ до 10 ГэВ, где отдельно затабулированы дифференциальные сечения эмиссии в экранированных полях ядер и атомных электронов и полные дифференциальные сечения. Электрон-ядерное дифференциальное сечение тормозного излучения вычислялось комбинацией аналитической высокоэнергетической теории с результатами парциально-волновых вычислений [37] эмиссии тормозного излучения на экранированных атомных полях при энергиях  $> 2$  МэВ. Дифференциальное сечение для электрон-электронного тормозного излучения получено по теории Хауга [38] в комбинации с экранирующей поправкой, которая содержит некогерентные функции рассеяния Хартри – Фока.

Дифференциальное сечение для позитронов получается умножением электронного дифференциального сечения на множитель  $F(Z, E)$ :

$$d\sigma_{\text{top}}^{(+)} / dW = F(Z, E) d\sigma_{\text{top}}^{(-)} / dW. \quad (6)$$

Множитель  $F(Z, E)$  равен отношению тормозных излучений позитронов и электронов и вычислен в [39, 40].

Позитроны испытывают единственную реакцию поглощения – аннигиляцию на электронах, в результате которой рождаются фотоны. Наиболее вероятна двухфотонная аннигиляция.

Сечение аннигиляции позитронов в полете составляет  $\approx 10\%$  от полного сечения аннигиляции, при этом испускаемые фотоны имеют различную энергию. Остальные  $\approx 90\%$  процессов – аннигиляция свободных позитронов на свободных электронах в покое. В этом случае считается, что энергия у обоих фотонов одинаковая. Вероятность аннигиляции падает с увеличением кинетической энергии [24].

Дифференциальное сечение двухфотонной аннигиляции в системе центра масс позитрона и электрона получено Гайтлером [41]. В [20] данное дифференциальное сечение преобразовано к системе координат, в которой электрон покоится. Тогда

$$\frac{d\sigma_{\text{ан}}}{d\zeta} = \frac{\pi r_e^2}{(\gamma+1)(\gamma^2-1)} [S(\zeta) + S(1-\zeta)], \quad (7)$$

где  $S(\zeta) = -(\gamma+1)^2 + (\gamma^2 + 4\gamma + 1)/\zeta - 1/\zeta^2$ ;  $\gamma = 1 + E/(m_e c^2)$  – полная энергия позитрона в единицах его энергии покоя;  $\zeta = E_{\gamma}^{\text{мин}} / (E + m_e c^2)$ ;  $E_{\gamma}^{\text{мин}}$  – испускаемый фотон с минимальной энергией.

## 2. Моделирование взаимодействия электронов и позитронов с веществом в подмодуле БЕТА

Схематическое представление процесса моделирования взаимодействия электронов и позитронов со средой представлено на рис. 1. На схеме не отражены логические связи между модулями и между подмодулями составного физического модуля СО-ФИЗМ, в состав которого входит подмодуль БЕТА.

После того, как модулем траекторий выработывается команда о проведении об-

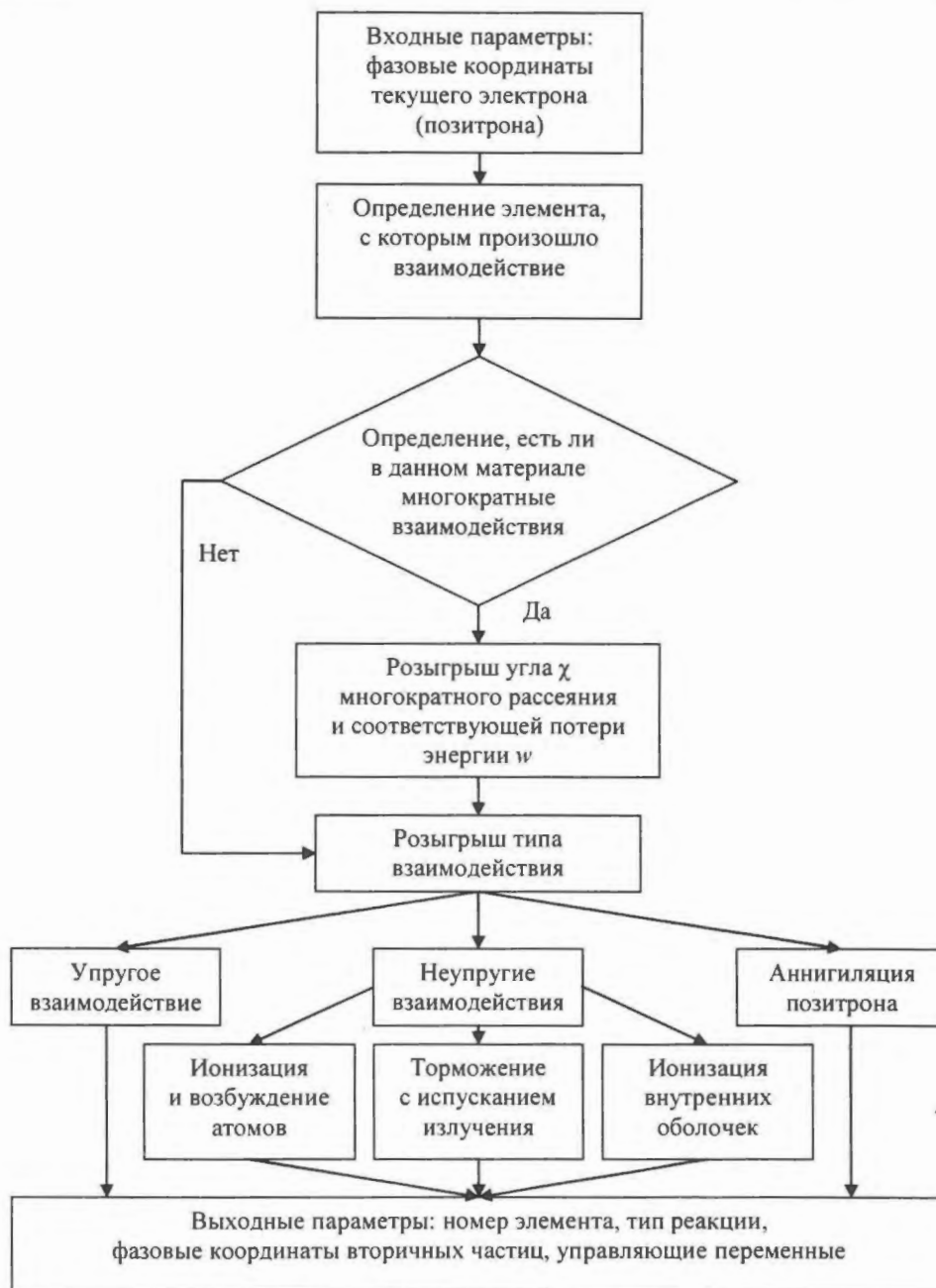


Рис. 1. Упрощенная схема моделирования взаимодействий

работки третьего или четвертого типа частиц (электронов или позитронов), содержащихся в банке частиц, устанавливаются значения управляющих параметров, по которым модули программы настраиваются на моделирование переноса электронов и позитронов. После выборки из банка частиц фазовых координат очередного электрона или позитрона, также как и после каждого акта взаимодействия, производится проверка значения его энергии. Если оказывается, что энергия меньше заданного пользователем некоторого значения энергии обреза  $E_{\text{погл}}$ , то моделирование переноса завершается и производится выборка фазовых координат следующего электрона или позитрона.

При наличии признака расчета методом индивидуальных соударений определяется длина свободного пробега, проходимая электроном или позитроном без столкновения,

$$s = \int_0^{\infty} x p_0(x) dx = \Sigma_{\text{пол}}^{-1} \int_0^{\infty} x \exp(-\Sigma_{\text{пол}} x) dx = \Sigma_{\text{пол}}^{-1}$$

и по ней делается вывод о пересечении границы данного материала, вылете частицы за границы системы или акте взаимодействия. Если событие трактуется как столкновение (взаимодействие), то подпрограммами подмодуля определяется элемент, с которым взаимодействует электрон или позитрон.

При смешанной схеме [42, 43] расчета методом катастрофических соударений для учета многократного рассеяния на шаге  $s$  разыгрывается дополнительная точка  $\tau$  на отрезке  $[0, s]$ , в которой частица испытывает многократное (слабое) взаимодействие, теряет энергию  $w$  и рассеивается на угол  $\chi$  в соответствии с распределениями угла рассеяния и потерь энергии при многократных взаимодействиях на шаге  $s$  (рис. 2). Далее по прохождении расстояния  $s - \tau$  разыгрывается тип реакции при катастрофическом взаимодействии из дискретных вероятностей. При этом, если траектория частицы пересекает границу при пробеге на отрезке  $[0, \tau]$ , то на границе материала траектория останавливается и моделирование в новом материале начинается со слабого взаимодействия.

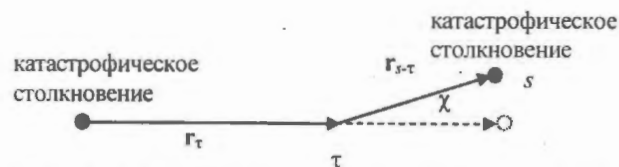


Рис. 2. Моделирование суммарного эффекта многократных (слабых) взаимодействий между двумя последовательными катастрофическими столкновениями

Если траектория частицы пересекает границу при пробеге на отрезке  $[\tau, s]$ , то на границе материала траектория останавливается, а моделирование в новом материале опять начинается со слабого взаимодействия. На этом уровне подпрограммы подмодуля БЕТА обеспечивается расчет полного сечения взаимодействия  $\Sigma_{\text{пол}} = 1/\lambda_{\text{пол}} = N(\sigma_{\text{уп}} + \sigma_{\text{нр}} + \sigma_{\text{тор}} + \sigma_{\text{ион}} + \sigma_{\text{ан}})$  электрона или позитрона заданной энергии со средой, где  $\lambda_{\text{пол}}$  – полная длина свободного пробега электронов или позитронов,  $N$  – атомная концентрация вещества,  $\sigma_{\text{уп}}$  – сечение упругого взаимодействия электронов или позитронов,  $\sigma_{\text{нр}}$  – сечение неупругого взаимодействия электронов или позитронов,  $\sigma_{\text{тор}}$  – сечение тормозного излучения электронов или позитронов,  $\sigma_{\text{ион}}$  – сечение ионизации внутренних оболочек электронов или позитронов,  $\sigma_{\text{ан}}$  – сечение аннигиляции позитронов.

В процедурах определения элемента, с которым происходит взаимодействие электрона или позитрона, и розыгрыша типа ядерной реакции используется информация об энергетической зависимости сечений ядерных реакций, содержащаяся в рабочей библиотеке. Библиотека задачи создается при первом запуске программы, если среди управляющих параметров расчетного варианта имеется указание на проведение расчетов с моделированием переноса электронов и позитронов. В этом случае при обработке исходных данных расчетного варианта на основе информации, содержащейся в базе ядерно-физических констант MCUB50, формируется рабочая библиотека, содержащая данные для нуклидов, которые встречаются во входном потоке к физическому модулю.

### 2.1. Многократные столкновения

В подмодуле БЕТА используются четыре параметра моделирования, задаваемые

мые пользователем и определяющие характер многократных столкновений: ССМ1, ССМ2, ССМ3 и ССМ4 (ССМ – Condensed Collision Model). ССМ1 определяет средний угол рассеяния при некатастрофических (многократных) взаимодействиях и пороговое значение угла  $\theta_{\text{кат}}$ , ССМ2 – максимальную долю энергии, теряющуюся при неупругих взаимодействиях за один шаг. ССМ3 и ССМ4 определяют максимальную удельную потерю энергии за счет неупругого рассеяния  $W_{\text{нy}}$  и тормозного излучения  $W_{\text{тор}}$ . В случае, если для данного материала заданы значения ССМ1 = ССМ2 = ССМ3 = ССМ4 = 0, то моделирование детализируется, т.е. происходит по схеме индивидуальных взаимодействий.

В качестве функции распределения угла  $\chi$  рассеяния в процессе многократного столкновения после пробега  $s$  применяется распределение  $F(\chi, s)$  Гоудсмита – Саундерсона [14, 15], в котором можно использовать любое выражение для сечения однократного рассеяния и применять его для любых углов рассеяния [44]. В качестве функции распределения потерь энергии  $w$  в процессе многократного столкновения после пробега  $s$  используется распределение  $P(w, s)$  Блунка – Лейзеганга [17]. В подмодуле реализован алгоритм моделирования, описанный в [42, 43].

## 2.2. Моделирование взаимодействия электронов и позитронов в методе катастрофических взаимодействий

**Упругое рассеяние.** Для расчета сечений упругого рассеяния методом катастрофических соударений применяется программа ELSEPA [45], любезно предоставленная ее авторами и включенная в подмодуль БЕТА. По ней рассчитываются дифференциальные (2), полные и транспортные сечения (два первых момента), необходимые для моделирования многократных рассеяний:

$$\sigma_{\text{yn}} = \int (d\sigma_{\text{yn}}/d\Omega) d\Omega = 2\pi \int_0^\pi (|f(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2) \sin \theta d\theta,$$

$$\sigma_{\text{yn},1} = \int (1 - \cos \theta) (d\sigma_{\text{yn}}/d\Omega) d\Omega,$$

$$\sigma_{\text{yn},2} = \frac{3}{2} \int (1 - \cos^2 \theta) (d\sigma_{\text{yn}}/d\Omega) d\Omega.$$

Полярное отклонение  $\mu = (1 - \cos \theta)/2$  в каждом индивидуальном столкновении ге-

нерируется по дифференциальным сечениям из базы данных ELSEPA с использованием интерполяционной схемы из [46]. Азимутальный угол  $\phi$  для электрона или позитрона генерируется из равномерного распределения  $\phi = 2\pi\xi$ , где  $\xi$  – случайное число, равномерно распределенное на отрезке  $[0, 1]$ .

Парциально-волновые дифференциальные сечения применяются и для процедуры смешанного моделирования, в которой катастрофические соударения с  $\mu > \mu_{\text{кат}}$  разыгрываются индивидуально. Значения  $\mu$  сведены в таблицы в зависимости от логарифма энергии. Для получения значения  $\mu$  из таблицы используется метод интерполяции с весами функции распределения плотности вероятности (ФПВ) для  $E_i$  и  $E_{i+1}$  с применением метода обратной функции [47].

**Неупругое рассеяние.** При моделировании неупругих взаимодействий методом катастрофических соударений на основе дважды дифференциального сечения (4) рассчитывается полное сечение неупругих взаимодействий

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{нy}} &= \int_0^{W_{\text{max}}} \frac{d\sigma_{\text{нy}}}{dW} dW = \int_0^{W_{\text{max}}} \left( \int_{Q_-}^{Q_+} \frac{d^2\sigma_{\text{нy}}}{dW dQ} dQ \right) dW = \\ &= \int_0^{W_{\text{max}}} \left( \frac{d\sigma_{\text{нy, прод}}}{dW} + \frac{d\sigma_{\text{нy, поп}}}{dW} + \frac{d\sigma_{\text{бл}}}{dW} \right) dW, \end{aligned}$$

где  $Q_-$ ,  $Q_+$  – соответственно минимальная и максимальная допустимые энергии отдачи, заданные уравнением

$$Q_{\pm} = \sqrt{(cp \pm cp')^2 + m_e^2 c^4 - m_e c^2},$$

$p$  и  $p'$  – импульс соответственно до и после рассеяния;  $d\sigma_{\text{нy}}/dW$  – дифференциальное сечение энергетических потерь, позволяющее вычислять потери энергии  $W$  и угол  $\theta$  рассеяния с использованием аналитических методов.

Рассматривается смешанное моделирование, при котором моделируются только тяжелые столкновения с потерей энергии большей, чем значение  $W_{\text{нy}}$ . На первом этапе моделирования выбирается активный осциллятор, для которого необходимо знать ограниченное снизу  $W_{\text{нy}}$  полное сечение

$$\sigma(W_{\text{ну}}) \equiv \int_{W_{\text{ну}}}^{W_{\text{max}}} \frac{d\sigma}{dW} dW = \sigma_{\text{прод}}(W_{\text{ну}}) + \sigma_{\text{поп}}(W_{\text{ну}}) + \sigma_{\text{бл}}(W_{\text{ну}}) = \sum_k \sigma_k(W_{\text{ну}})$$

как вклад  $\sigma_k(W_{\text{ну}})$  каждого осциллятора. Активный осциллятор выбирается из дискретных вероятностей  $p_k = \sigma_k(W_{\text{ну}})/\sigma(W_{\text{ну}})$ . С увеличением значения  $W_{\text{ну}}$  осцилляторы с  $W_k < W_{\text{ну}}$  устраняются из суммы.

Значения  $W$  и  $Q$  (или  $\cos\theta$ ) получаются из соответствующего дифференциального сечения. При близких столкновениях  $Q = W$  и угол рассеяния получается непосредственно из энергетических потерь.

В дальних взаимодействиях с  $k$ -м осциллятором  $W = W_k$ , а  $W_k$  известно из (3). Вклады поперечных и продольных взаимодействий в ограниченное сечение определяют относительные вероятности этих видов взаимодействия. При дальних поперечных взаимодействиях углового отклонения частицы нет ( $\cos\theta = 1$ ). При дальних продольных взаимодействиях случайная выборка из ФПВ энергии  $Q$  отдачи выполняется методом обратных функций.

С найденными потерями энергии  $W$  и энергии  $Q$  отдачи полярный угол  $\theta$  рассеяния вычисляется из соотношения

$$\cos\theta = \frac{E(E + 2m_e c^2) + (E - W)(E - W + 2m_e c^2) - Q(Q + 2m_e c^2)}{2\sqrt{E(E + 2m_e c^2)(E - W)(E - W + 2m_e c^2)}}$$

Моделирование близких взаимодействий электронов и позитронов различается. Для обеих частиц применяется метод исключения с пробными значениями из вспомогательного распределения. Далее алгоритм продолжается с использованием метода исключения для получения из ФПВ значения  $k = W/E$ . После получения энергетических потерь  $W = kE$  полярный угол  $\theta$  рассеяния определяется из соотношения

$$\cos^2\theta = \frac{E - W}{E} \frac{E + 2m_e c^2}{E - W + 2m_e c^2}$$

Азимутальный угол  $\phi$  для рассеянного электрона или позитрона генерируется из равномерного распределения  $\phi = 2\pi\xi$ . Подробно алгоритм описан в [6].

*Тормозное излучение.* При моделировании случаев эмиссии тормозного излучения методом катастрофических соударений ( $W$

$> W_{\text{тор}}$ ) нижняя граница при интегрировании дифференциального сечения эмиссии тормозного излучения (5) выбирается больше нуля из-за расходимости при малых энергиях фотонов (инфракрасная катастрофа). Соответствующее полное сечение

$$\sigma_{\text{тор}}(E, W_{\text{тор}}) \equiv \int_{W_{\text{тор}}}^E \frac{d\sigma_{\text{тор}}}{dW} dW = \frac{Z^2}{\beta^2} \int_{\kappa_{\text{тор}}}^1 \frac{1}{\kappa} \chi(Z, E, \kappa) d\kappa,$$

где  $\kappa_{\text{тор}} = W_{\text{тор}}/E$ .

Для сетки по кинетическим энергиям  $E_i$  величина легко вычисляется по табулированным дифференциальным сечениям с применением линейной интерполяции по  $\kappa$ . Для позитронов данное соотношение умножается на фактор  $F(Z, E)$ .

В подмодуле БЕТА считываются градуированные дифференциальные сечения тормозного излучения из файлов базы данных и кубической сплайн-интерполяцией/экстраполяцией по  $\ln E$  готовится таблица для логарифмической сетки в 200 значений энергий и разбиения по  $\kappa$  в 32 точки, которая хранится в памяти. Эта энергетическая сетка охватывает весь диапазон энергий, рассматриваемый при моделировании, и позволяет быстро линейно интерполировать градуированные дифференциальные сечения по переменной  $\ln E$ . Подробно алгоритм описан в [6].

*Ионизация внутренних оболочек.* Получение вакансий на внутренних оболочках моделируется

точно в виде отдельной реакции ионизации. Рассматривается процесс, когда электрон или позитрон с энергией  $E$  взаимодействует с  $i$ -й внутренней  $K$ -,  $L$ - или  $M$ -оболочкой атома элемента  $Z$  и ионизирует ее при условии, что для данной оболочки выполняется неравенство  $U_j > 200$  эВ. ФПВ  $i$ -й ионизированной оболочки можно представить в виде дискретной случайной величины  $p_i = \sigma_{\text{ион},i}(Z, E)/\sigma_{\text{ион}}(Z, E)$ , где  $\sigma_{\text{ион},i}(Z, E)$  – сечение ионизации  $i$ -й оболочки и  $\sigma_{\text{ион}}(Z, E)$  – полное атомное сечение ионизации  $\sigma_{\text{ион}}^{(\pm)}(E) = \sum_i \sigma_{\text{ион},i}^{(\pm)}(E, Z)$ .

Вероятности ионизации внутренних оболочек определяются из соответствующих парциальных сечений оболочек. Если ионизация происходит на внутренних  $K$ -,  $L$ -

и  $M$ -оболочках, кинетическая энергия и направление полета налетающего электрона или позитрона не изменяются; остаточный атом с вакансией на оболочке впоследствии переходит в основное состояние, испуская рентгеновские кванты и Оже-электроны.

*Аннигиляция позитронов.* При моделировании реакции двухфотонной аннигиляции полное сечение имеет следующий вид:

$$\sigma_{\text{ан}} = \int_{\zeta_{\text{min}}}^{\zeta_{\text{max}}} \frac{d\sigma_{\text{ан}}}{d\zeta} d\zeta = \frac{\pi r_e^2}{(\gamma+1)(\gamma^2-1)} \times \left\{ (\gamma^2+4\gamma+1) \ln[\gamma+(\gamma^2-1)^{1/2}] - (3+\gamma)(\gamma^2-1)^{1/2} \right\}.$$

### 3. Моделирование подмодулем БЕГ процессов генерации вторичных частиц в электронных и позитронных реакциях

Фотоны как вторичный источник излучения возникают при эмиссии тормозного излучения электронов или позитронов, аннигиляции позитронов и в процессе ионизации внутренних оболочек электронами или позитронами при релаксации возбужденных атомов. Вторичные электроны возникают в реакции неупругого рассеяния электронов или позитронов ( $\delta$ -электроны) и также в процессе ионизации внутренних оболочек электронами или позитронами при релаксации возбужденных атомов.

*Эмиссия  $\delta$ -электронов.* В модели МОО каждый осциллятор соответствует оболочке с  $f_k$  электронами и энергией  $U_k$  ионизации. После катастрофического столкновения с электроном на внутренней оболочке первичный электрон или позитрон имеет кинетическую энергию  $E - W$ ,  $\delta$ -электрон испускается с кинетической энергией  $E_{\text{вт}} = W - U_i$  и остаточный ион остается в возбужденном состоянии с вакансией на  $i$ -й оболочке, которая соответствует энергии  $U_i$  возбуждения. Эта энергия снимается эмиссией жесткого рентгеновского излучения или Оже-электронов.

Во избежание двойного подсчета считается, что энергия  $U_i$  возбуждения остаточного иона выделяется тут же. Если ионизация происходит на внешней оболочке или в области проводимости, то начальная энергия  $\delta$ -электрона приравнивается  $W$ , а флуоресцентное излучение не моделируется, что

эквивалентно уносу  $\delta$ -электроном энергии возбуждения атома-мишени.

Для получения начального направления  $\delta$ -электрона предполагается, что электрон-мишень первоначально покоится, т.е. полярный угол  $\theta_{\text{вт}}$  эмиссии совпадает с углом  $\theta'$  отдачи, и выполняется соотношение

$$\cos^2 \theta_{\text{вт}} = \frac{W^2/\beta^2}{Q(Q+2m_e c^2)} \left( 1 + \frac{Q(Q+2m_e c^2) - W^2}{2W(E+m_e c^2)} \right)^2.$$

В случае близких взаимодействий ( $Q = W$ ) данное выражение упрощается до соотношения  $\cos \theta_{\text{вт}} = \sqrt{\frac{W}{E}} \sqrt{\frac{E+2m_e c^2}{W+2m_e c^2}}$ . Азимутальный

угол эмиссии равен  $\varphi_{\text{вт}} = \pi + \varphi$ , где  $\varphi$  — азимутальный угол первичного электрона.

Несмотря на то, что атомные электроны движутся и угловое распределение испускаемых  $\delta$ -электронов уширяется, применяемая модель правильно описывает среднее начальное направление  $\delta$ -электронов. При этом направления движения  $\delta$ -электронов сглаживаются последующими упругими и неупругими взаимодействиями после короткой длины пробега.

*Розыгрыш энергии тормозных фотонов.* ФПВ для приведенной энергии  $k = W_\gamma/E$  тормозного фотона имеет вид

$$p(E, k) = k^{-1} \chi(Z, W_\gamma, k) \Theta(k - k_{\text{top}}) \Theta(1 - k),$$

где  $k_{\text{top}} = W_{\text{top}}/E$  и  $\chi(Z, W_\gamma, k)$  вычисляются линейной интерполяцией по  $\ln E$  и  $k$  из хранящейся в памяти таблицы. Таким образом,  $\chi(Z, W_\gamma, k)$  рассматривается как кусочно-линейная функция  $k$ . Для получения  $k$  из ФПВ с энергией  $E_i$  на заданной сетке интерполированное градуированное дифференциальное сечение выражается кусочно-линейной функцией от  $k$  и вводится кумулятивная функция распределения, которая для кусочно-линейной  $\chi(Z, W_\gamma, k)$  вычисляется точно. Алгоритм розыгрыша объединяет методы обратной функции и исключения.

Для получения значения  $k$  из таблицы используется метод интерполяции с весами ФПВ для  $E_i$  и  $E_{i+1}$ . В данном случае необходим только розыгрыш  $k$  из табулированной ФПВ, т.е. для энергий на сетке  $E_i$ . Более подробно алгоритм описан в [6].

Угловое распределение испускаемых тормозных фотонов. Направление испускаемого тормозного фотона определяется полярным  $\theta_\gamma$  и азимутальным  $\varphi_\gamma$  углами. Для изотропных сред дифференциальное сечение тормозного излучения независимо от  $\varphi_\gamma$  и выражается формулой

$$\frac{d^2\sigma_{\text{тор}}}{dW_\gamma d\cos\theta_\gamma} = \frac{Z^2}{\beta^2} \frac{1}{W_\gamma} \chi(Z, E, \kappa) p(Z, E, \kappa, \cos\theta_\gamma),$$

где  $p(Z, E, \kappa, \cos\theta)$  – ФПВ для  $\cos\theta$ .

Численные значения форм-функций  $p(Z, E, \kappa, \cos\theta_\gamma)$  получены в парциально-волновом приближении [23, 48] для следующих опорных точек:  $Z = 2, 8, 13, 47, 79, 92$ ;  $E = 1, 5, 10, 50, 100, 500$  кэВ и  $\kappa = 0; 0,6; 0,8; 0,95$ . В подмодуле БЕТА применяется параметризация, позволяющая получать случайное значение  $\cos\theta_\gamma$  простым способом. Для позитронов предполагается, что форм-функции те же, что и у электронов.

Угловое распределение фотонов тормозного излучения описывается на основе полуэмпирических аналитических формул, полученных Киркпатриком и Видеманном [49], модифицированных Стетхэмом [50].

Форм-функции в модифицированном дипольном приближении в системе координат, где налетающий электрон или позитрон покоится, имеют вид [50]

$$p(\cos\theta') = 3(A(1 + \cos^2\theta')/2 + (1 - A)(1 - \cos^2\theta'))/4,$$

где  $A \in [0, 1]$ .

Для розыгрыша случайного значения  $\cos\theta'_\gamma$  используется алгоритм, комбинирующий два метода исключения. (Подробнее см. в [6]). После этого преобразованием Лоренца  $\cos\theta_\gamma = \frac{\cos\theta'_\gamma + \beta'}{1 + \beta' \cos\theta'_\gamma}$  производится переход в систему координат, где налетающий электрон или позитрон движется.

Генерация испускаемых фотонов при аннигиляции позитронов. В результате аннигиляции испускаются два фотона с энергиями

$$E_\gamma^{\min} = \zeta(E + 2m_e c^2), \quad E_\gamma^{\max} = (1 - \zeta)(E + 2m_e c^2)$$

в направлениях, заданных уравнениями

$$\cos\theta_\gamma^{\min} = (\gamma^2 - 1)^{-1/2} (\gamma + 1 - 1/\zeta),$$

$$\cos\theta_\gamma^{\max} = (\gamma^2 - 1)^{-1/2} (\gamma + 1 - 1/(1 - \zeta))$$

и азимутальными углами  $\varphi_\gamma^{\min}$  и  $\varphi_\gamma^{\max} = \varphi_\gamma^{\min} + \pi$ .

Алгоритм моделирования генерации фотонов при аннигиляции позитронов изложен в работе [20].

Релаксация возбужденных атомов. Возбужденные ионы с вакансией на внутренней оболочке возвращаются в свое основное состояние посредством цепочки радиоактивных и нерадиоактивных переходов. При радиоактивном переходе вакансия заполняется электроном с наружной оболочки и излучается рентгеновский квант с характеристической энергией. При нерадиоактивном переходе вакансия заполняется внешним электроном, а избыток энергии высвобождается посредством эмиссии электрона с более дальней оболочки (Оже-электроны).

Каждый нерадиоактивный переход генерирует дополнительную вакансию, которая в свою очередь мигрирует в сторону менее связанных оболочек. Образование вакансий на внутренних оболочках и их последующее возвращение в основное состояние моделируются детально, так как испускаемые высокоэнергетические рентгеновские кванты и/или электроны могут переносить энергию на большие расстояния от возбужденного иона.

В подмодуле БЕГ моделируется испускание характеристического излучения и Оже-электронов, которые возникают в результате рождения вакансий на  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочках при фотоэффекте, некогерентном рассеянии и электронной или позитронной ионизации. Релаксация этих вакансий отслеживается до тех пор, пока заполнятся  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочки, т.е. пока вакансии не мигрируют на  $N$ - и более удаленные оболочки.

Для упрощения описания процессов ионизации внешних оболочек принимается, что, когда происходит ионизация  $M$ -й или более удаленных оболочек, ион испускает вторичный  $\delta$ -электрон с кинетической энергией  $E_{\text{вт}}$ , равной энергии, переданной первичной частицей:

- при некогерентном рассеянии фотонов  $E_{\text{пер}} = E - E'$ ,
- при фотоэлектрическом эффекте  $E_{\text{пер}} = E$ ,

- при ионизации электронами (позитронами)  $E_{\text{пер}} = W$  (вся энергия возбуждения иона уносится испускаемым электроном и флуоресцентное излучение не моделируется).

В случае ионизации внутренних  $i$ -х оболочек ( $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочки) считается, что электрон испускается с кинетической энергией  $E_{\text{вт}} = E_{\text{пер}} - U_i$ , где  $U_i$  – энергия ионизации возбужденной оболочки, и атом-мишень остается с вакансией на оболочке  $i$ . Принимаются во внимание только характеристическое излучение и Оже-электроны, испущенные на первых стадиях процесса релаксации. Данное излучение изотропно.

Используются следующие обозначения для описания возможных переходов:

– с излучением:  $S0 - S1$  (электрон с  $S1$  оболочки занимает вакансию на оболочке  $S0$ ; остается дырка на  $S1$  оболочке). Данный радиоактивный переход происходит у элементов с  $Z > 18$  и с заполненной  $M$ -оболочкой;

– без излучения:  $S0 - S1 - S2$  (электрон с  $S1$  оболочки занимает вакансию в оболочке  $S0$  и высвобождаемая энергия уносится электроном из  $S2$  оболочки; этот процесс оставляет две вакансии на  $S1$  и  $S2$  оболочках).

Переходы без излучения типа  $L1 - L2 - Xq$ , которые приводят к переходу электрона между двумя  $L$ -подоболочками и испусканию электрона с внешней оболочки  $Xq$ , являются  $L$ -переходами Костера – Кронига.

Информация, подготовленная для каждого элемента, состоит из таблиц, содержащих возможные переходы, вероятности переходов и энергии испущенных характеристических излучений или электронов для ионизированных атомов с единственной вакансией на  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочках. Вероятности переходов получены из LLNL Evaluated Atomic Data Library [51].

Энергии характеристических излучений при переходах с излучением и экспериментальные значения длин волн характеристического излучения берутся из [52]. Энергия вторичного испущенного электрона при переходе без излучения  $S0 - S1 - S2$  берется равной  $E_{\text{вт}} = U_{S0} - U_{S1} - U_{S2}$ , где  $U_{S_i}$  – энергия связи электрона оболочки  $S_i$  в нейтральном атоме. Энергии испускания полу-

чаются в предположении, что наличие вакансий не вносит изменений в энергию ионизации возбужденных электронных оболочек.

#### 4. Структура подмодулей

Структура подмодулей определяется архитектурой составного физического модуля СОФИЗМ. Обмен информацией осуществляется через формальные параметры специализированного набора подпрограмм-интерфейсов. В связи с этим в структуре подмодулей присутствуют подпрограммы розыгрыша типа процесса, определения характеристик продуктов реакции и макроскопических сечений и другие.

Подмодули состоят из двух частей, в каждой из которых содержатся подпрограммы, обеспечивающие работу программы на стадиях:

- подготовки и обработки исходных данных (считывание информации об изотопном составе, перекодировка имен изотопов по внутренней таблице имен, подготовка рабочих библиотек констант переноса фотонов);
- моделирования взаимодействия частиц с веществом (розыгрыш физического процесса взаимодействия частицы с веществом и генерация выборочных значений из законов распределений физических величин).

Подпрограммы, входящие в первый раздел, программно связаны с другими модулями программы только через внешние носители информации. Результатом их работы является рабочая библиотека расчетного варианта. Подпрограммы второго раздела написаны в рамках требований, сформулированных для подпрограмм составного физического модуля.

#### 5. Библиотеки ELEC DATA, POSI DATA и SHELL DATA описания взаимодействия электронов и позитронов с веществом и описания рождения вторичных частиц для подмодулей БЕТА и БЕГ

Банк данных MCUDB50, поддерживающий работу программы MCU, включает в себя несколько разделов (библиотек), каж-

дый из которых содержит сечения и другие константы взаимодействия нейтронов, фотонов, электронов и позитронов со средой в определенной энергетической области и применяется разными подмодулями составного физического модуля программы MCU. Константы, описывающие взаимодействие электронов и позитронов с веществом в подмодуле БЕТА, представлены библиотеками ELECADATA и POSIDATA.

Библиотеки ELECADATA и POSIDATA содержат данные по энергетической зависимости сечений взаимодействия электронов и позитронов с веществом в поточечном представлении в энергетической области от 100 эВ до 100 МэВ.

Библиотека сечений взаимодействия электронов записана в поддиректории с именем ELECADATA. В поддиректории содержатся 99 файлов с именами eeldZZ.ele, 99 файлов с именами brZZ.ele и 99 файлов с именами siZZ.ele, где символ ZZ соответствует атомному номеру элемента  $ZZ = 01 - 99$ .

Файлы eeldZZ.ele содержат полные сечения  $\sigma_{уп}$ , первые и вторые транспортные сечения  $\sigma_{уп,1}$ ,  $\sigma_{уп,2}$  упругого рассеяния электронов нейтральными атомами с  $Z = 01 - 99$  в интервале энергий от 50 эВ до 100 МэВ, а также дифференциальные сечения  $d\sigma_{уп}/d\mu$  для угла рассеяния в диапазоне  $[0, \pi]$ . Данные вычислены по программе ELSEPA [45].

Файлы brZZ.ele содержат отградуированные атомные сечения тормозного излучения электронов и позитронов (в шкалах по спектрам энергетических потерь) и полные суммарные радиационные сечения электронов для сетки по кинетическим энергиям  $E$  электрона и приведенным энергиям  $W/E$  фотона. Сетки выбраны таким образом, чтобы использовать log-log интерполяцию кубическими сплайнами по  $\ln E$  и линейную интерполяцию по  $W/E$  (32 точки по приведенным энергиям фотона). Краткое описание методов, применяемых для вычисления базы данных, и приведенная таблица даны в [39].

Файлы siZZ.ele содержат интегральные сечения ионизации внутренних  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек электронами с кинетическими энергиями в интервале от 100 эВ до 1 ГэВ.

Эти сечения оценивались с помощью оптической модели с использованием фотоэлектрических сечений [32, 53, 54], рассчитанных из файлов phZZ.gam.

Библиотека сечений взаимодействия позитронов записана в поддиректории с именем POSIDATA. В поддиректории содержатся 99 файлов с именами peldZZ.pos и 99 файлов с именами siZZ.pos, где символ ZZ соответствует атомному номеру элемента  $ZZ = 01 - 99$ .

Файлы peldZZ.pos содержат полные сечения  $\sigma_{уп}$ , первые и вторые транспортные сечения  $\sigma_{уп,1}$ ,  $\sigma_{уп,2}$  упругого рассеяния позитронов нейтральными атомами с  $Z = 01 - 99$  в интервале энергий от 50 эВ до 100 МэВ, а также дифференциальные сечения  $d\sigma_{уп}/d\mu$  для угла рассеяния в диапазоне  $[0, \pi]$ . Данные вычислены по программе ELSEPA [45].

Файлы siZZ.pos содержат интегральные сечения ионизации внутренних  $K$ -,  $L$ - и  $M$ -оболочек позитронами с кинетическими энергиями в интервале от 100 эВ до 1 ГэВ. Эти сечения оценивались с помощью оптической модели с применением фотоэлектрических сечений [32, 53, 54], рассчитанных из файлов phZZ.gam.

Остальная численная информация (параметры аналитического углового распределения тормозных фотонов, полученные подгонкой под бенчмарковские эталонные формы в парциально-волновом приближении в [48]) хранится во внутренней базе данных подмодуля БЕТА.

Интегральные и дифференциальные сечения неупругих взаимодействий электронов и позитронов и аннигиляции позитронов непосредственно оцениваются по аналитическим дифференциальным сечениям. В расчетах используются только сечения до нужной верхней энергии.

Библиотека SHELLDATA содержит данные об атомах, взятые из LLNL Evaluated Atomic Data Library [51]. Каждая строка в файле relaxdata.dan описывает атомный переход. Перечислены величины атомных номеров элементов, численные обозначения активных электронных оболочек, вероятности перехода и энергии испускаемого рентгеновского излучения или Оже-электронов [6].

## Заключение

Представлены сведения, касающиеся описания основ физики взаимодействия электронов и позитронов со средой, методов моделирования их взаимодействия с веществом, реализованных в подмодуле БЕТА составного физического модуля СОФИЗМ программы MCU-PD, и константно-го обеспечения для решения задач взаимодействия электронов и позитронов с веществом. Также описан подмодуль БЕГ, предназначенный для моделирования электронно-фотонных каскадов в процессе взаимодействия частиц с веществом.

Подмодули БЕТА и БЕГ используются в программе MCU-PD, дающей возможность проводить моделирование процессов переноса нейтронов, фотонов, электронов и позитронов аналоговыми и неаналоговыми (весовыми) методами Монте-Карло на основе оцененных ядерных данных в системах с трехмерной геометрией.

Применение подмодулей БЕТА и БЕГ в составе программы MCU-PD позволит проводить взаимосвязанные расчеты переноса нейтронов, фотонов, электронов и позитронов для описания физических процессов в датчиках прямой зарядки внутриреакторного контроля реакторов типа ВВЭР и др., более точно оценивать радиационное энерговыделение в элементах конструкций без использования приближения KERMA-факторов.

Работа выполнена при поддержке ОАО "ТВЭЛ".

## Список литературы

1. *Метод Монте-Карло в проблеме переноса излучений.* Под ред. чл.-корр. АН СССР Г.И. Марчука. М.: Атомиздат, 1967.
2. *Гомин Е.А.* Статус MCU-4 // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 6–32.
3. *Алексеев Н.И., Городков С.С., Шкаровский Д.А. и др.* Разработка программы MCU-PD2006 для расчета нейтронно-физических характеристик активных зон реактора ВВЭР-1200 АЭС-2006, реализующей для решения уравнения переноса нейтронов метод Монте-Карло на основе информации, хранящейся в файлах оцененных ядерных данных. Отчет ИЯР РНЦ "Курчатовский институт", № 36-03/18-08, 2008.
4. *Олейник Д.С., Шкаровский Д.А., Юдкевич М.С. и др.* Разработка модуля расчета изменения изотопного состава материалов реактора в процессе его эксплуатации, подключение модуля к программе MCU-PD2006. Отчет ИЯР РНЦ "Курчатовский институт", № 36-03/19-08, 2008.
5. *Гомин Е.А., Кулаков А.С., Марин С.В. и др.* Общее описание подмодулей ФОТОН, ГАММА И НЕГА, предназначенных для моделирования взаимодействия фотонов с веществом и рождения фотонов в нейтронных реакциях. Отчет ИЯР РНЦ "Курчатовский институт", № 36-03/23-08, 2008.
6. *Гомин Е.А., Кулаков А.С., Алексеев Н.И. и др.* Общее описание. Подмодуль БЕТА – моделирование взаимодействий электронов и позитронов с веществом. Подмодуль БЕГ – моделирование электрон-позитрон-фотонных каскадов. Отчет ИЯР РНЦ "Курчатовский институт", № 36-03/35-08, 2008.
7. *Schneider D.O., Cormack D.V.* // Rad. Res., 1958, 11, 418.
8. *Berger M.J.* Monte Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles // Methods in Computational Physics, 1963, vol. 1, eds. B. Alder, S. Fernbach and M. Rotenberg (Academic Press, New York), pp. 135–215.
9. *Andreo P., Brahma A.* Restricted energy-loss straggling and multiple scattering of electrons in mixed Monte Carlo procedures // Rad. Res., 1984, 100, 16–29.
10. *Калашиников Н.П., Ремизович В.С., Рязанов М.И.* Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. М.: Атомиздат, 1980.
11. *Moliere G.* Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I. Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld // Z. Naturforsch., 1947, 2a, 133–145.
12. *Moliere G.* Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen II. Mehrfach und Vielfachstreuung // Z. Naturforsch., 1948, 3a, 78–97.
13. *Lewis H.W.* Multiple scattering in an infinite medium // Phys. Rev., 1950, 78, 526–529.
14. *Goudsmit S.A., Saunderson J.L.* Multiple scattering of electrons // Phys. Rev., 1940, 57, 24–29.
15. *Goudsmit S.A., Saunderson J.L.* Multiple scattering of electrons II // Phys. Rev., 1940, 58, 36–42.
16. *Landau L.* On the energy loss of fast particles by ionization // J. Phys. U.S.S.R., 1944, 8, 201–207.
17. *Blunck O., Leisegang S.* Zum Energieverlust schneller Elektronen in dünnen Schichten // Z. Physik, 1950, 128, 500–505.

18. *Андросенко А.А., Андросенко П.А.* Комплекс программ BRAND для расчетов характеристик переноса излучения методом Монте-Карло // ВАНТ. Сер. Физика и техника ядерных реакторов, 1985, вып. 7, с. 33.
19. *Berger M.J., Seltzer S.M.* Chapters 7, 8 and 9 in Monte-Carlo Transport of Electrons and Photons, eds. T.M. Jenkins, W.R. Nelson and A. Rindi (Plenum, New York), 1988.
20. *Nelson W.R., Hirayama H., Rogers D.W.O.* The EGS4 Code System. Report SLAC-265 (Stanford Linear Accelerator Center, Stanford, CA), 1985.
21. *Forrest B. Brown* (ed.). MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5. LANL Report LA-UR-03-1987, Los Alamos, 2003.
22. *Salvat F., Fernandez-Varea J.M., Sempau J.* PENELOPE, a code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport. Technical report, OECD Nuclear Energy Agency, Issy-les-Moulineaux, France, 2003.
23. *Аккерман А.Ф.* Моделирование траекторий заряженных частиц в веществе. М.: Энергоатомиздат, 1991.
24. *Стародубцев С.В.* Полное собрание научных трудов в 6-ти томах. (Отв. ред. Р о м а н о в А.М.). Т. 2. Ядерная физика. Кн. 2. Взаимодействие излучений с веществом. Ташкент: Фан, 1969.
25. *Мотт Н., Мессу Г.* Теория атомных столкновений: Пер. с англ. под ред. Е.Е. Н и к и т и н а. М.: Мир, 1969.
26. *Liljequist D.* A simple calculation of inelastic mean free path and stopping power for 50 eV – 50 keV electrons in solids // J. Phys. D: Appl. Phys., 1983, 16, 1567–1582.
27. *Fano U.* Penetration of protons, alpha particles and mesons // Ann. Rev. Nucl. Sci., 1963, 13, 1–66.
28. *Inokuti M.* Inelastic collisions of fast charged particles with atoms and molecules – the Bethe theory revisited // Rev. Mod. Phys., 1971, 43, 297–347.
29. *Möller C.* Zur Theorie des Durchgangs schneller Elektronen durch Materie // Ann. Physik, 1932, 14, 531–585.
30. *Bhabha H.J.* The scattering of positrons by electrons with exchange on Dirac's theory of the positron // Proc. R. Soc. (London) A, 1936, 154, 195–206.
31. *Mayol R., Salvat F.* Cross sections for K-shell ionisation by electron impact // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 1990, 23, 2117–2130.
32. *Cullen D.E., Hubbell J.H., Kissel L.* EPDL97 The evaluated data library, 97 version. Report UCRL-50400, vol. 6, rev. 5 (Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA), 1997.
33. *Tsai Y.S.* Pair production and bremsstrahlung of charged leptons // Rev. Mod. Phys., 1974, 46, 815–851.
34. *Bethe H.A., Heitler W.* On the stopping of fast particles and on the creation of positive electrons // Proc. R. Soc. (London) A, 1934, 146, 83–112.
35. *Seltzer S.M., Berger M.J.* Bremsstrahlung spectra from electron interactions with screened atomic nuclei and orbital electrons // Nucl. Instrum. Meth. B, 1985, 12, 95–134.
36. *Seltzer S.M., Berger M.J.* Bremsstrahlung energy spectra from electrons with kinetic energy 1 keV – 10 GeV incident on screened nuclei and orbital electrons of neutral atoms with  $Z = 1 - 100$  // At. Data Nucl. Data Tables, 1986, 35, 345–418.
37. *Pratt R.H., Tseng H.K., Lee C.M., Kissel L.* Bremsstrahlung energy spectra from electrons of kinetic energy  $1 \text{ keV} \leq T_1 \leq 2000 \text{ keV}$  incident on neutral atoms  $2 \leq Z \leq 92$  // At. Data Nucl. Data Tables, 1977, 20, 175–209.
38. *Haug E.* Bremsstrahlung and pair production in the field of free electrons // Z. Naturforsch., 1975, 30a, 1099–1113.
39. *Kim L., Pratt R.H., Seltzer S.M., Berger M.J.* Ratio of positron to electron bremsstrahlung energy loss: an approximate scaling law // Phys. Rev. A, 1986, 33, 3002–3009.
40. *Berger M.J., Seltzer S.M.* Stopping Power of Electrons and Positrons. Report NBSIR 82-2550 (National Bureau of Standards, Gaithersburg, MD), 1982.
41. *Гайтлер В.* Квантовая теория излучения: Пер. с англ. М.: ИИЛ, 1956.
42. *Fernandez-Varea J.M., Mayol R., Baro J., Salvat F.* On the theory and simulation of multiple elastic scattering of electrons // Nucl. Instrum. Meth. B, 1993, 73, 447–473.
43. *Baro J., Sempau J., Fernandez-Varea J.M., Salvat F.* Simplified Monte Carlo simulation of elastic electron scattering in limited media // Nucl. Instrum. Meth. B, 1994, 84, 465–483.
44. *Аккерман А.Ф., Никитишев Ю.М., Ботвин В.А.* Решение методом Монте-Карло задач переноса быстрых электронов в веществе. Алма-Ата: Наука, 1972.
45. *Salvat F., Jablonski A., Powell C.J.* ELSEPA – Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules // Comput. Phys. Commun., 2005, 165, 157–190.
46. *Benedito E., Fernandez-Varea J.M., Salvat F.* Mixed simulation of the multiple elastic scattering of electrons and positrons using partial-wave differential cross sections // Nucl. Instrum. Meth., 2001, B 174, 91–110.

47. *Соболь И.М.* Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.  
48. *Kissel L., Quarles C.A., Pratt R.H.* Shape functions for atomic-field bremsstrahlung from electrons of kinetic energy 1 – 500 keV on selected neutral atoms  $1 \leq Z \leq 92$  // *At. Data Nucl. Data Tables*, 1983, 28, 381–460.  
49. *Kirkpatrick P., Wiedmann L.* Theoretical continuous X-ray energy and polarization // *Phys. Rev.*, 1945, 67, 321–339.  
50. *Statham P.J.* The generation, absorption and anisotropy of thick-target bremsstrahlung and the implications for quantitative energy dispersive analysis // *X-Ray Spectrom.*, 1976, 5, 154–168.  
51. *Perkins S.T., Cullen D.E., Chen M.H., Hubbell J.H., Rathkopf J., Scofield J.* Tables and graphs of atomic subshell and relaxation data derived from the LLNL evaluated atomic data library (EADL),  $Z = 1 - 100$ . Report UCRL-50400, vol. 30 (Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA), 1991.

52. *Bearden J.A.* X-ray wavelengths // *Rev. Mod. Phys.*, 1967, 39, 78–124.  
53. *Cullen D.E., Chen M.H., Hubbell J.H., Perkins S.T., Plechaty E.F., Rathkopf J.A., Scofield J.H.* Tables and graphs of photon-interaction cross sections from 10 eV to 100 GeV derived from the LLNL evaluated photon data library (EPDL). Report UCRL-50400, 1989, vol. 6, rev. 4, parts A and B. (Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA).  
54. *Saloman E.B., Hubbell J.H., Scofield J.H.* X-ray attenuation cross sections for energies 100 eV to 100 keV and elements  $Z = 1$  to  $Z = 92$  // *At. Data Nucl. Data Tables*, 1988, 38, 1–197.

Контактная информация –  
Кулаков Андрей Сергеевич, с. н. с., тел.: (499)  
196-92-79, e-mail: [novik@adis.vver.kiae.ru](mailto:novik@adis.vver.kiae.ru)

Вопросы атомной науки и техники.  
Сер. Физика ядерных реакторов, 2010, вып. 1,  
с. 32–47.

УДК 621.039

## Расчет нейтронно-физических характеристик активной зоны ВВЭР-1000 методом Монте-Карло по программе MCU-PD, сравнение с результатами расчетов по программе БИПР-7А и экспериментальными данными

*В.Г. Дементьев, Д.С. Олейник,*  
РНИЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. Курчатова, 1  
Поступила в редакцию 28.07.2009 г.

Применение метода Монте-Карло для моделирования переноса нейтронов в ядерных реакторах насчитывает более 50 лет. Рост производительности компьютеров и разработка все более совершенных алгоритмов, программного и константного обеспечения расчетов позволяют решать все более сложные задачи, включая трехмерные расчеты полномасштабных активных зон. Приводятся краткие описания полномасштабной трехмерной модели активной зоны ВВЭР-1000, алгоритмов и методов, реализованных в программах MCU-PD и БИПР-7А, и сравнение полученных по ним результатов расчетов, а также сравнение их с экспериментом.

*Ключевые слова:* программа MCU-PD, метод Монте-Карло, ВВЭР-1000, БИПР-7А.

**Monte Carlo Calculation of Neutron Characteristics of VVER-1000 Core by MCU-PD Code and Comparison of the Results with BIPR-7A Code and Experimental Data.** *V.G. Dement'ev, D.S. Oleynik, RRC “Kurchatov Institute”, 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182.* Application of a Monte Carlo method for simulating of neutron transport in nuclear reactors has more than fifty years of history. Fast progress of computer power and development of more and more perfect algorithms, codes and nuclear data bases allow solving more challenging problems, including three-dimensional calculations of full-scale reactor cores. Concise description of developed full-scale model of VVER-1000 core, annotation of algorithms and methods for the MCU-PD and BIPR-7A codes and results comparison between themselves and with experimental data are presented in this paper.

*Key Words:* MCU-PD Code, Monte Carlo Method, VVER-1000, BIPR-7A.

В ближайшем будущем предполагается широкое использование программы MCU-PD [1] (РНЦ “Курчатовский институт”), которая реализует метод Монте-Карло, для расчетов нейтронно-физических характеристик активной зоны реакторной установки ВВЭР-1200 в рамках проекта АЭС-2006. Для этого необходимо верифицировать программу и проверить ее надежность на примерах расчета реальных полномасштабных зон реакторных установок типа ВВЭР и в сравнении с экспериментом.

В ходе верификации программы MCU-PD разработана полномасштабная трехмерная модель ВВЭР-1000 1-го блока Волгодонской АЭС [2]. Технические характеристики модели (геометрические размеры фрагментов реактора, материальный состав и др.) основаны на проектных данных и данных по пусковым экспериментам этого блока [3]. Явно описывались такие детали, как полости в топливных таблетках, каналы в выгородке, высотная структура поглощающих стержней системы управления и защиты.

На основе этой модели по программе MCU-PD рассчитаны 20 критических и подкритических состояний ВВЭР-1000 на минимально контролируемом уровне мощности, достигнутых во время физического пуска 1-го блока Волгодонской АЭС. К этим расчетам привлекалась известная инженерная программа БИПР-7А [4] с существенно упрощенной моделью переноса нейтронов.

По двум программам получены распределения энерговыделения в тепловыделяющих сборках (ТВС) активной зоны реактора и высотное распределение энерговыделения отдельно взятых ТВС. Эти расчеты потребовали моделирования около миллиарда историй нейтронов для каждого состояния, что оказалось возможным благодаря адаптации программы MCU-PD к выполнению вычислений с применением современной многопроцессорной вычислительной техники [5].

## 1. Краткое описание программ MCU-PD и БИПР-7А

1) Программа MCU-PD предназначена для решения аналоговыми и неаналоговыми (весовыми) методами Монте-Карло неоднородных уравнений переноса нейтронов, фотонов, электронов и позитронов в заданной системе с учетом изменения нуклидного состава ее материалов в процессе облучения. Для нейтронов программа решает и однородное уравнение (задачи о критичности систем, размножающих нейтроны).

Система состоит из конечного числа геометрических зон, ограниченных плоскостями или поверхностями второго порядка, параметры которых задаются пользователем. Каждая зона заполнена материалом, который определяется температурой; списком нуклидов, содержащихся в нем; ядерной концентрацией нуклидов.

Геометрический модуль моделирует трехмерные системы с произвольной геометрией, используя комбинаторный подход, основанный на описании сложных пространственных форм (зоны) комбинациями простых тел или поверхностей с помощью теоретико-множественных операций пересечения, дополнения и объединения на базе некоторого набора типов тел-примитивов. Для обеспечения эффективности счета все тела ограничены плоскостями или поверхностями второго порядка. Возможно задание сетей и решеток, получаемых размножением некоторых исходных элементов, заданных с помощью комбинаторики.

При описании зон методом комбинаторной геометрии все их границы состоят из кусков плоскостей или квадратичных поверхностей, поэтому при наличии деталей с более сложными граничными поверхностями их необходимо аппроксимировать большим числом зон.

В программе реализован метод выровненных сечений, снимающий это ограничение и описывающий, например, винтовые структуры твэлов некоторых типов реакторов или образующиеся в процессе эксплуатации изгибы ТВС ВВЭР-1000. Специаль-

ный алгоритм учитывает эффекты двойной гетерогенности, когда твэлы содержат десятки тысяч микротвэлов.

Все граничные условия делятся на два класса, отображающие симметрии и физические свойства системы. В программе можно задать следующие симметрии: зеркальная, поворотная, сдвиговая (трансляционная). Можно применять следующие физические граничные условия: утечка, т.е. черная поглощающая поверхность; белое отражение; граничные условия, соответствующие задаче с утечкой, заданной баклингом. Кроме условий утечки и отражения допускается их комбинация.

Константное обеспечение программы составляет банк данных MCADB50, состоящий из набора разделов, которые могут использоваться в расчетах разными подмодулями составного физического модуля. Банк MCADB50 содержит информацию для 375-ти нуклидов.

Физический модуль учитывает эффекты непрерывного изменения энергии частицы при столкновениях, а также непрерывную и ступенчатую зависимости сечений от энергии. Ниже описываются некоторые особенности моделирования только нейтронных взаимодействий.

При генерации нейтронов деления допускается применение спектра деления мгновенных и запаздывающих нейтронов. В быстрой энергетической области учитывается анизотропия упругого рассеяния в системе центра масс, имеется возможность проводить моделирование неупругих столкновений с учетом законов, содержащихся в файлах оцененных ядерных данных.

В области неразрешенных резонансов сечения вычисляются по подгрупповым параметрам или с использованием  $f$ -факторов Бондаренко, в обоих случаях с учетом температурной зависимости применяемых параметров.

В области разрешенных резонансов допускаются групповое, подгрупповое и точечное представления сечений. Сечения наиболее важных нуклидов описываются непрерывной функцией, так как при моделировании для каждого значения энергии нейтрона они вычисляются по резонансным

параметрам. Такая схема позволяет проводить расчеты непосредственно с использованием данных по резонансным параметрам без предварительной подготовки таблиц сечений и оценивать температурные эффекты через аналитические зависимости сечений от температуры.

Моделирование столкновений в области термализации проводится либо в многогрупповом транспортном приближении, либо по модели непрерывного изменения энергии с учетом корреляций между изменениями энергии и угла при рассеянии. В обоих случаях учитываются химические связи, тепловое движение ядер и когерентные эффекты для упругого рассеяния. Сечения рассеяния замедлителей рассчитываются для каждой нужной температуры по фононным спектрам, содержащимся в соответствующем разделе банка MCADB50.

Регистрируются эффективный коэффициент размножения нейтронов, распределение энерговыделения по ТВС и отдельным твэлам, эффективная доля запаздывающих нейтронов и другие функционалы потока нейтронов. Программа MCU-PD позволяет выполнять расчеты на многопроцессорных компьютерах [5].

Распараллеливание программы MCU-PD осуществлено на базе программного интерфейса MPI (Message Passing Interface) [6] – наиболее распространенного стандарта интерфейса обмена данными в параллельном программировании. Реализации библиотеки MPI существуют для большого числа компьютерных платформ. При работе в режиме многопроцессорных вычислений программа применяет для расчета все доступные ей процессоры. Общая схема расчета при этом остается такой же, как и при расчете на одном процессоре.

2) Программа БИПР-7А предназначена для расчетов параметров критичности, эффектов и коэффициентов реактивности, дифференциальных и интегральных эффективностей органов регулирования, трехмерных распределений мощности в активных зонах ВВЭР-440 и ВВЭР-1000, расчетного моделирования процессов выгорания и перегрузок топлива, переходных процессов на Xe-135 и Sm-149.

В программе используется двухгрупповое диффузионное приближение. Система уравнений баланса нейтронов решается на редкой трехмерной гексагональной в плане сетке, узлы которой совпадают с центрами ТВС. В уравнении баланса нейтронов эффективно применяются 7 узлов в поперечном сечении ТВС (в центре и по углам). Учет перетечек тепловых нейтронов выполняется в приближении двух полупространств. Расчет коэффициентов реактивности и других параметров точечной кинетики производится на основе теории возмущения в одnogрупповом приближении.

Программа использует библиотеки коэффициентов аппроксимации многопараметрических зависимостей двухгрупповых нейтронных сечений, коэффициентов диффузии ТВС и их производных, подготовленные по программе ТВС-М [7].

Принято считать, что не менее 95 % результатов расчета, полученных по программе БИПР-7А, имеют погрешность не более 12 %.

Программа выверена и имеет лицензию Ростехнадзора России на применение для проведения проектных и эксплуатационных физических расчетов ВВЭР.

## 2. Тестовые расчеты

2.1. *Описание расчетной модели.* В ходе верификации и взаимной проверки программ MCU-PD и БИПР-7А разработана полномасштабная трехмерная модель ВВЭР-1000 1-го блока Волгодонской АЭС [2].

Активная зона состоит из гексагональных ТВС различного типа, отличающихся материальным составом топлива, и окружена отражателем, в состав которого входят, начиная от центра: водяной зазор (1 мм от контура ТВС), стальная выгородка с заполненными водой цилиндрическими каналами, шахта реактора, вода, корпус реактора.

ТВС состоит из 331-й гексагональной ячейки. По геометрии и конфигурации материалов различают четыре типа ячеек: с окисным топливом разного обогащения по изотопу U-235 (1,6, 2,4, 3,3 и 3,7 % весовых), центральная трубка/направляющий

канал, каналы с выгорающим поглотителем и поглощающим элементом, который может перемещаться по вертикали. При вводе в ТВС выгорающих поглотителей или поглощающих элементов происходит вытеснение воды из направляющих каналов активной зоны.

Каналы с поглощающими элементами в определенных ТВС, входящих в органы регулирования системы управления и защиты (ОР СУЗ), образуют группы общим числом 10. Положение группы задается процентом ее извлечения (от 0 до 100 %) из активной зоны.

2.2. *Результаты расчетов.* По программам MCU-PD и БИПР-7А рассчитаны 20 критических и подкритических состояний трехмерной полномасштабной модели активной зоны ВВЭР-1000 1-го блока Волгодонской АЭС при различных расположениях ОР СУЗ (табл. 1).

При проведении расчетов выбранных состояний активной зоны по программе MCU-PD использовались следующие параметры моделирования:

- нейтроны нулевого поколения распределялись равномерно по объему, занятому топливом в активной зоне;
- число нейтронов в поколении  $M = 3\ 000$ ;
- число поколений, объединенных в серию для корректной оценки статистической погрешности,  $N_{BAT} = 400$ ;
- число промоделированных поколений 34 000, из них 400 отброшены, т.е. число активных поколений 33 600, а число промоделированных активных историй 1,008 миллиардов.

В расчетах по программе MCU-PD применялась модель описания всего реактора без наличия симметрии в исходных данных. Главное преимущество такой модели заключается в возможности проведения оценки достоверности статистической погрешности вычисленных значений функционалов. Эта оценка получается из анализа отклонения результатов для симметрично расположенных ТВС, которое должно согласовываться с величиной статистической погрешности.

“Перспективы и проблемы использования в реакторах легководного теплоносителя сверхкритического давления для повышения эффективности ядерного топливного цикла”

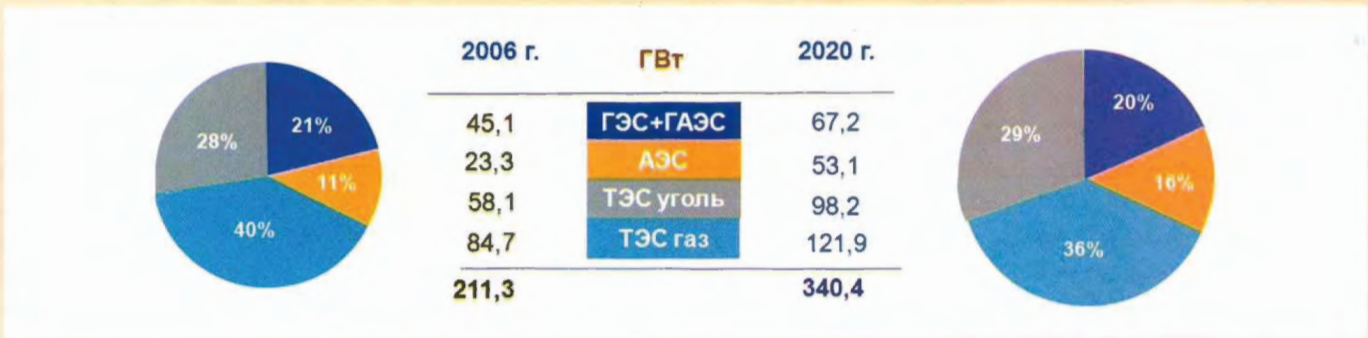


Рис. 1. Прогноз роста электропроизводящих мощностей в России до 2020 г.: ГАЭС – гидроаккумулирующие электростанции



Рис. 2. Динамика изменения соотношения российских цен на газ (голубой цвет) и уголь (бордовый цвет)

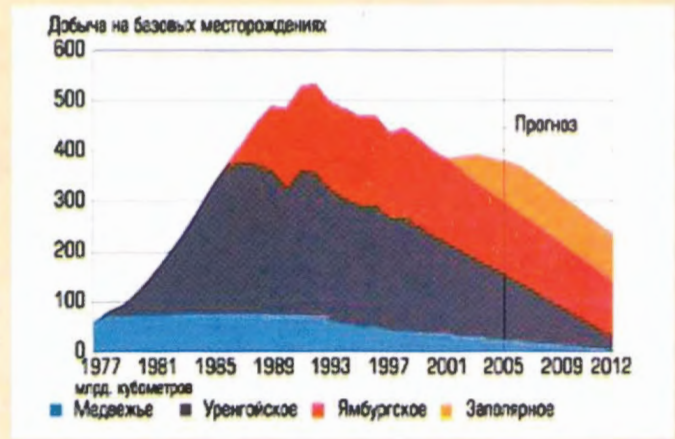


Рис. 3. Прогноз добычи газа (млрд. м³/год) на базовых месторождениях ОАО “Газпром”

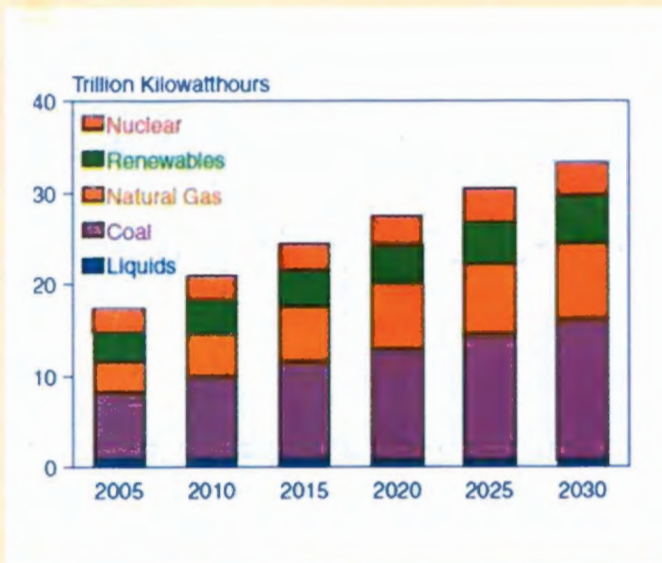


Рис. 5. Мировой рынок энергии по видам энергопроизводства (прогноз до 2030 г.)

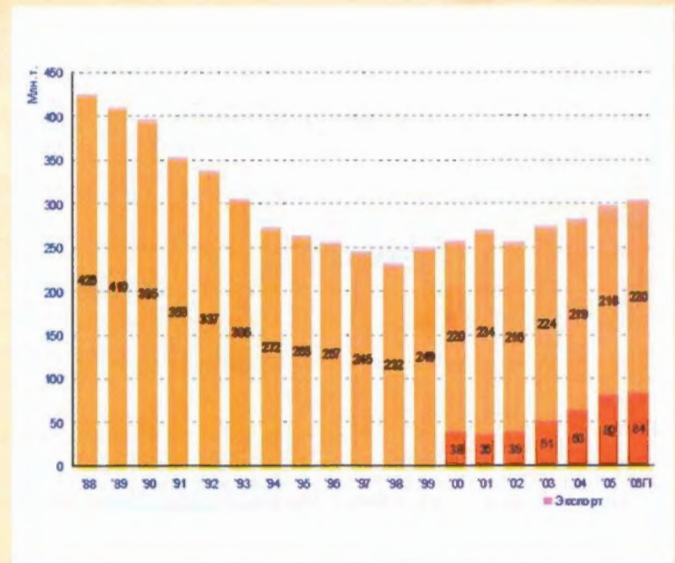


Рис. 6. Динамика добычи угля (млн. т) в России

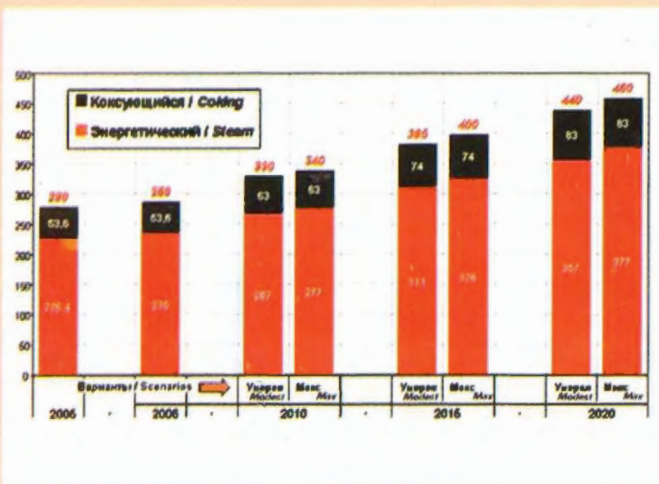


Рис. 7. Прогноз добычи угля (млн. т) в России до 2020 г.

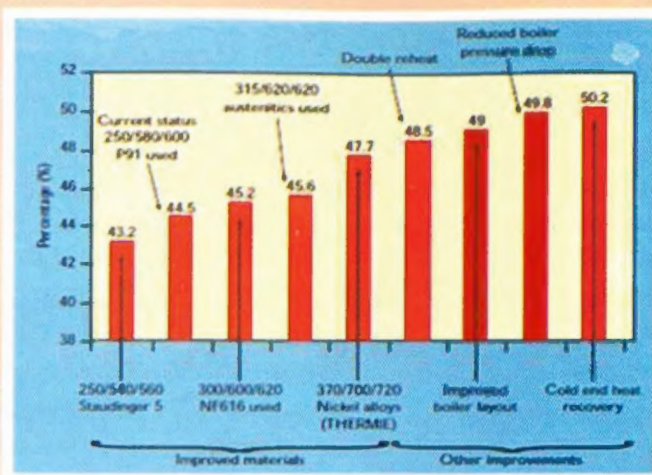


Рис. 8. Пути повышения КПД ТЭС с СКД котлами, работающими на сжигании угля (данные нормированы на мощность 700 МВт блока и давление 40 миллибар в конденсаторе)



Рис. 10. Динамика цен на уголь (долл/т) (NYMEX фьючерс) с мая 2004 г. по май 2009 г. (синим цветом показана линия тренда)

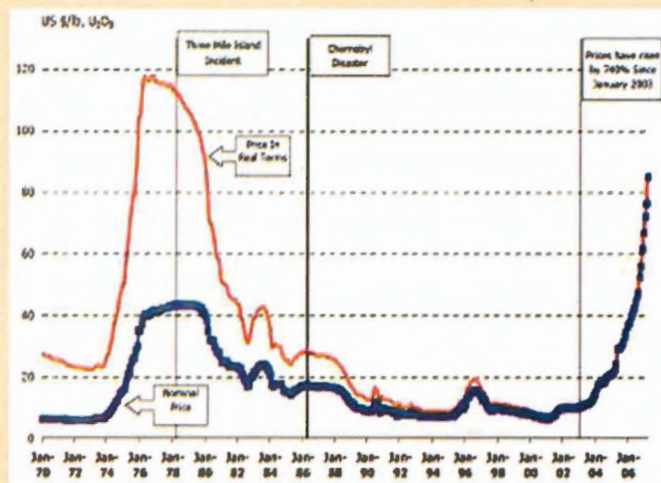


Рис. 11. Цена на уран (долл/фунт  $U_3O_8$ ) с января 1970 г. по январь 2006 г.

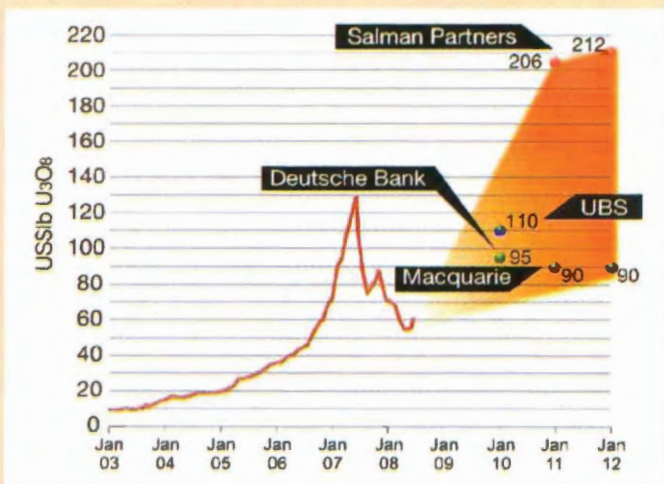


Рис. 12. Цена на уран (долл/фунт  $U_3O_8$ ) с 2003 по 2009 гг. и прогноз до 2012 г.

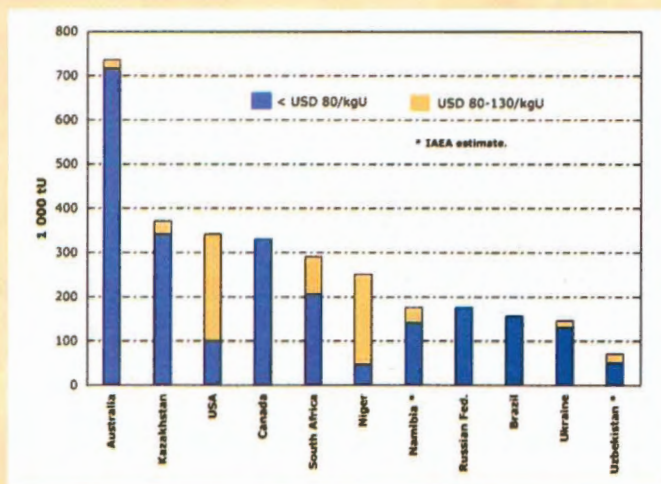


Рис. 13. Доказанные данные по разведанным запасам урана по цене до 130 долл США /кг  $U_3O_8$

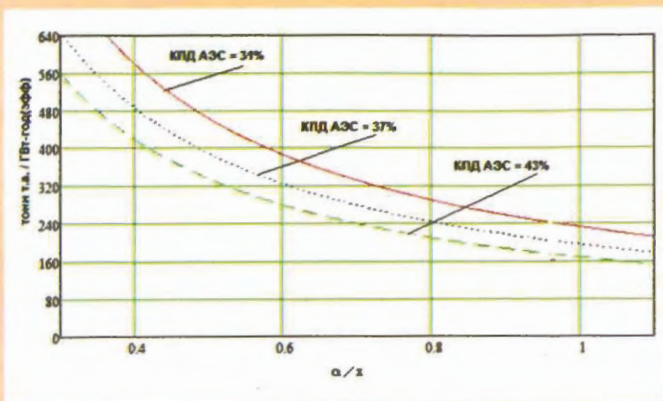


Рис. 14. Удельный расход природного урана в зависимости от отношения  $\alpha/x$  и КПД АЭС при  $x = 5 \%$ ,  $y = 0,2 \%$  в открытом ЯТЦ

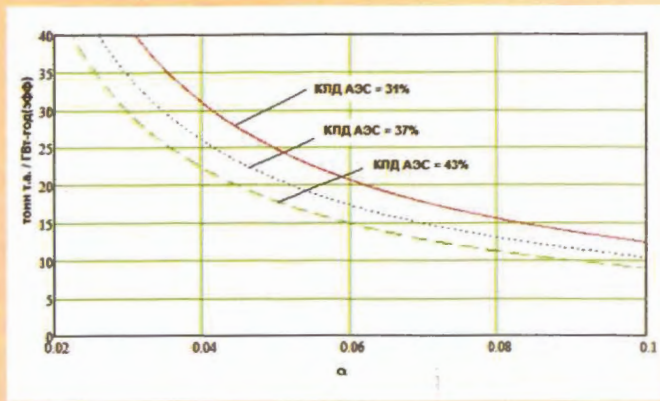


Рис. 15. Удельный расход топлива в реакторе в зависимости от выгорания  $\alpha$  и КПД АЭС при  $x = 5 \%$ ,  $y = 0,2 \%$

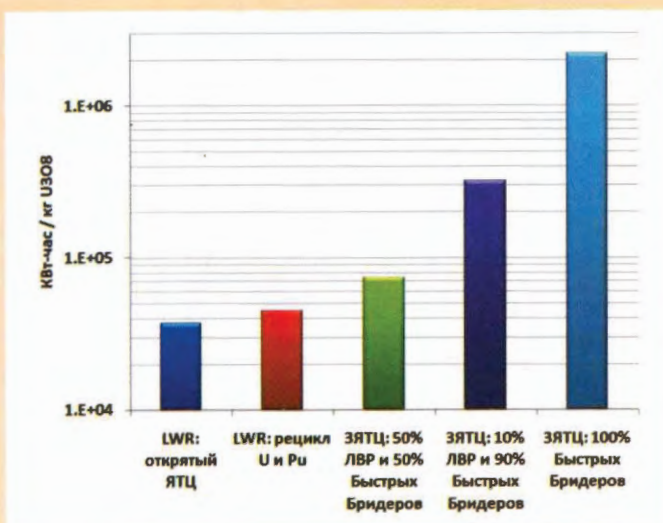


Рис. 16. Данные оценок по эффективности различных топливных циклов

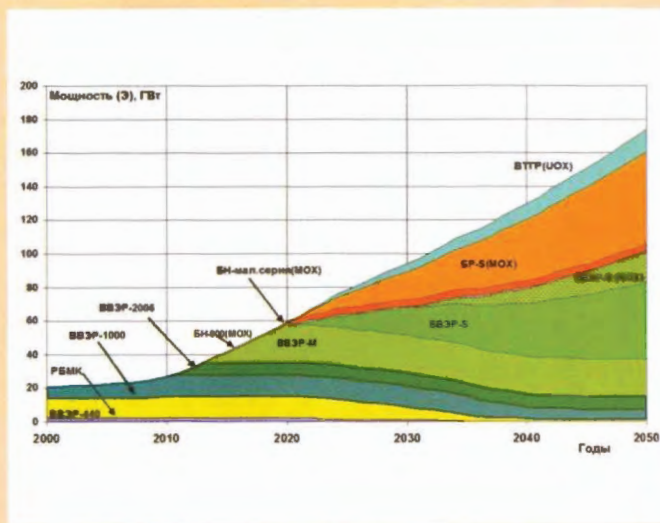


Рис. 17. Структура АЭ России на период до 2050 г. (сценарий интенсивного развития)

Рисунок к статье А.А. Ковалишина и Н.И. Лалетина  
 "Расчеты эффективного коэффициента диффузии  
 в четных приближениях метода поверхностных псевдоисточников"

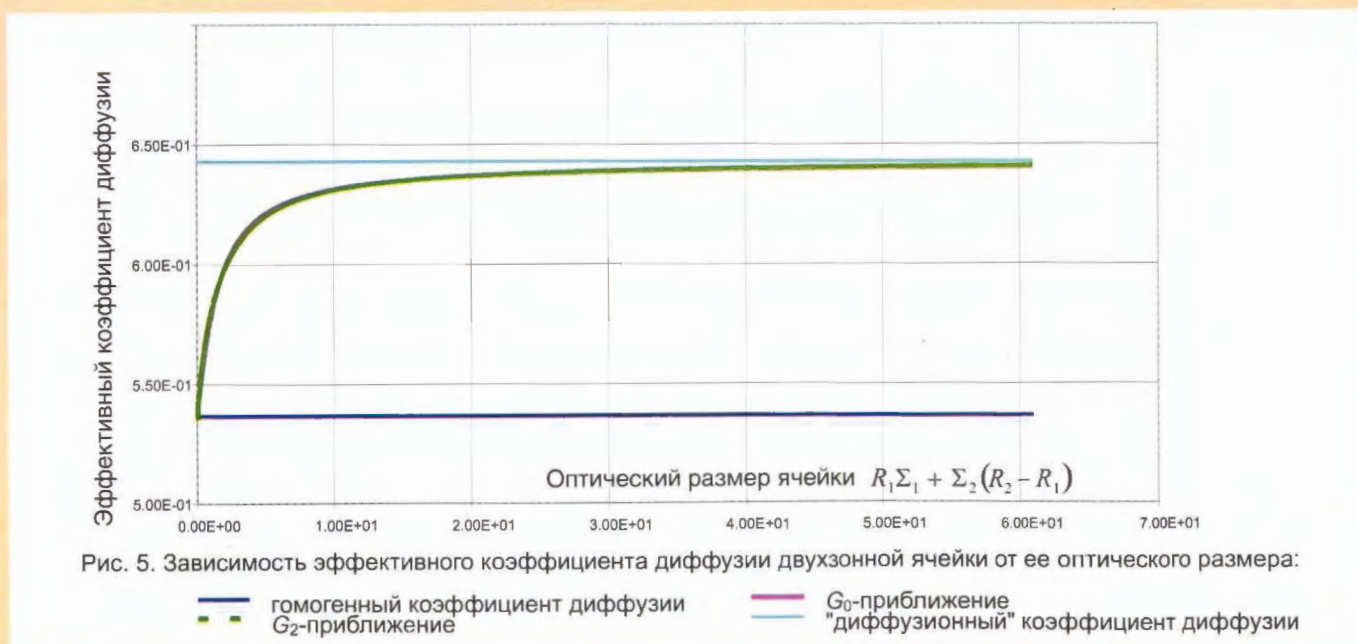


Рис. 5. Зависимость эффективного коэффициента диффузии двухзонной ячейки от ее оптического размера:

- гомогенный коэффициент диффузии
- $G_2$ -приближение
- $G_0$ -приближение
- "диффузионный" коэффициент диффузии

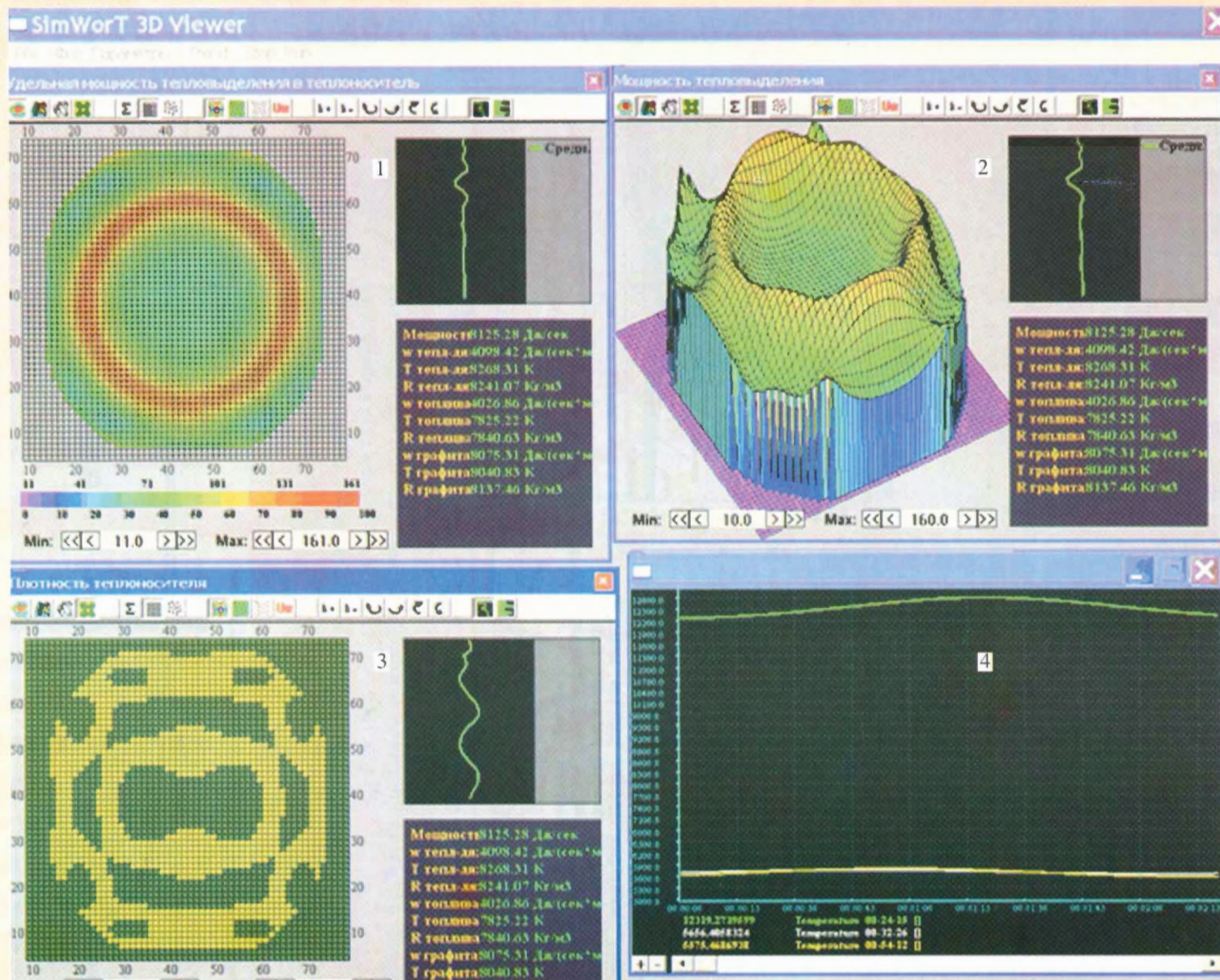


Рис. 5. Представление результатов расчета в SimWorT 3D Viewer: 1 – энергосвечение в теплоносителе в среднем сечении активной зоны и среднее высотное энергосвечение в теплоносителе; 2 – энергосвечение в среднем сечении активной зоны и среднее высотное энергосвечение; 3 – плотность теплоносителя в среднем сечении активной зоны и среднее высотное распределение плотности; 4 – изменение во времени максимальной температуры топлива (верхняя кривая), теплоносителя и стенки канала (нижние кривые)

Таблица 1. Параметры состояния 1-го блока ВВЭР-1000 Волгодонской АЭС

№ состояния	№ регул. группы	Положение регул. группы, %	№ группы на НКВ <sup>*)</sup>	T, °C	P, кг/см <sup>3</sup>	Плотность воды, г/см <sup>3</sup>	Концентрация борной кислоты, г/кг
2	10	82	—	278,5	161,0	0,77974	7,39
7	10	64	9	271,1	159,7	0,76716	6,90
8	10	55	8	279,3	157,2	0,76547	6,76
9	10	63	7	279,7	158,5	0,76492	7,26
10	10	61	6	279,5	157,7	0,76517	6,90
11	10	70	4	279,8	157,8	0,76463	7,10
12	10	58	2	279,3	157,2	0,76547	7,10
13	10	56	1	279,3	158,0	0,76558	7,31
15	10	25	—	279,2	158,7	0,76587	7,23
17	9	70	10	279,2	158,5	0,76584	7,14
20	9	26	10	279,2	157,2	0,76565	6,77
21	8	66	9, 10	279,8	158,2	0,76469	6,60
A1	10	80	—	278,2	158,2	0,76764	7,39
A2	—	—	1...10	278,2	158,2	0,76764	7,39
A3	—	—	1...10, кроме ТВС № 17	278,2	158,2	0,76764	7,39
A4	10	80	—	279,3	158,5	0,76566	7,39
A5	—	—	1...10	279,3	158,5	0,76566	7,39
A6	—	—	1...10, кроме ТВС № 38	279,3	158,5	0,76566	7,39
A7	10	62	—	279,3	161,0	0,76602	7,39
A8	—	—	1...10	279,3	161,0	0,76602	7,39

\*) НКВ — нижний концевой выключатель

Как показало сравнение на примере распределения энерговыделения в ТВС активной зоны, все результаты лежат в пределах трех статистических отклонений ( $3\sigma$ ) от соответствующих значений среднего выборочного энерговыделения в симметрично расположенных ТВС. Около 65,8 % результатов отклоняются не более чем на одну  $\sigma$  и менее 0,1 % — более чем на  $2\sigma$ . Результаты этого сравнения подтвердили правильность расчета статистической погрешности по программе MCU-PD.

В результате проведенных расчетов для каждого варианта получены значения эффективного коэффициента размножения нейтронов, распределения энерговыделения по ТВС активной зоны и высотного распределения энерговыделения отдельно взятых ТВС. По высоте активная зона равномерно разбивалась на 42 одинаковых по объему слоя.

В табл. 2 приводятся результаты расчетов эффективного коэффициента размножения нейтронов, полученные по программам

MCU-PD и БИПР-7А. Статистическая погрешность (одно стандартное отклонение) в оценке эффективного коэффициента размножения нейтронов по программе MCU-PD  $\approx 0,003\%$ . Результаты расчетов  $K_{эф}$ , полученные по программам MCU-PD и БИПР-7А, демонстрируют хорошее согласие между собой (различие составляет менее 0,15 %).

В табл. 3 приведены значения эффективности сброса аварийной защиты (АЗ), полученные расчетным путем по программам MCU-PD и БИПР-7А, а также различные экспериментальные оценки, в качестве которых даны значения, зафиксированные непосредственно в эксперименте с помощью реактиметра [8] и полученные путем обработки показаний вне реакторных ионизационных камер по специальной методике [9] для устранения пространственных эффектов.

Оба вида экспериментальных оценок содержат погрешности. Экспериментальные значения в колонке “Реактиметр” не

**Таблица 2.** Эффективный коэффициент размножения нейтронов

№ состояния	MCU-PD	БИПР-7А	Отклонение <sup>*)</sup> , %
2	1,0025	1,0039	- 0,15
7	1,0019	1,0030	- 0,11
8	1,0022	1,0030	- 0,08
9	1,0026	1,0032	- 0,06
10	1,0017	1,0024	- 0,07
11	1,0028	1,0030	- 0,02
12	1,0026	1,0026	0,00
13	1,0023	1,0034	- 0,11
15	1,0028	1,0036	- 0,08
17	1,0031	1,0034	- 0,03
20	1,0025	1,0025	0,00
21	1,0014	1,0016	- 0,02
A1	1,0025	1,0040	- 0,14
A2	0,9391	0,9398	- 0,07
A3	0,9551	0,9545	0,06
A4	1,0026	1,0039	- 0,13
A5	0,9389	0,9394	- 0,06
A6	0,9517	0,9515	0,02
A7	1,0020	1,0032	- 0,12
A8	0,9387	0,9395	- 0,08

\*) отклонение в оценках  $K_{эф}$  рассчитывалось как разница результатов MCU-PD и БИПР-7А, отнесенная на результат, полученный по MCU-PD

**Таблица 3.** Эффективность сброса А3 с учетом начального состояния, %

№ состо- яния	Расчет		Эксперимент	
	MCU-PD	БИПР-7А	Реактиметр	Методика <sup>*)</sup>
A2	6,74	6,80	6,38 ± 0,38	7,5 ± 0,7
A3	4,96	5,16	5,76 ± 0,35	5,8 ± 0,5
A5	6,77	6,84	6,32 ± 0,38	7,5 ± 0,7
A6	5,34	5,49	5,85 ± 0,35	6,2 ± 0,6
A8	6,72	6,76	6,39	6,7 ± 0,5

\*) результаты получены сотрудником РНЦ "Курчатовский институт" Цыгановым С.В.

учитывают влияние параметров запаздывающих нейтронов и пространственных эффектов, а также качество измерения токов ионизационных камер, которое сказывается и на точности результатов в колонке "Методика".

Расчетные данные, полученные по программам, хорошо согласуются между собой (в пределах ~ 3 %), тогда как различие с экспериментальными данными, скорректированными с учетом пространственных эффектов, достигает 15 %. Это обуславливается влиянием указанных выше погрешностей на оценку экспериментальных данных.

Различия в распределении энерговыделения по ТВС активной зоны между программами MCU-PD и БИПР-7А равны ~ 11

% для критических и подкритических состояний со всеми погруженными ОР СУЗ. Данное отклонение не выходит за пределы суммы погрешностей, заявленных разработчиками программ MCU-PD и БИПР-7А.

Для подкритических состояний с застрявшей группой ОР СУЗ (состояния А3, А6) различие много больше. В данном варианте в энергонапряженных ТВС результаты расчета по программе БИПР-7А достаточно хорошо согласуются с полученными по программе MCU-PD, а в малонапряженных ТВС, где энерговыделение в десятки раз меньше среднего, различия в результатах достигают ~ 40 %, что требует дополнительного анализа причин такого большого расхождения.

Результаты сравнения покассетного распределения энерговыделения с учетом его высотной зависимости по программам MCU-PD и БИПР-7А приведены в табл. 4. Более 90 % результатов отклоняются друг от друга не более, чем на 10 %. Однако существует небольшое число значений функционалов, для которых отклонения между программами превышают 20 % и отмечаются в граничных слоях активной зоны. Это объясняется в первую очередь используемыми в БИПР-7А краевыми условиями, которые вычисляются предварительно по мелкосеточным программам, и константным обеспечением этой программы.

**Таблица 4.** Результаты сравнения покассетного распределения энерговыделения с учетом его высотной зависимости, полученные по программам MCU-PD и БИПР-7А (6 720 значений)

Интервал	Доля результатов, %
до 1 %	17,2
от 1 до 3 %	25,3
от 3 до 5 %	21,4
от 5 до 10 %	26,7
от 10 до 20 %	7,1
больше 20 %	2,3

На рис. 1 показано характерное высотное распределение энерговыделения в ТВС, на которую погруженные ОР СУЗ оказывают пренебрежимо малое влияние. Легко заметить, что энерговыделение на границе активной зоны по высоте, полученное по двум программам, имеет наибольшее относительное отклонение друг от друга.

Ярким примером неравномерности высотного распределения энерговыделения служат результаты в ТВС с неполностью погруженной группой ОР СУЗ. На рис. 2

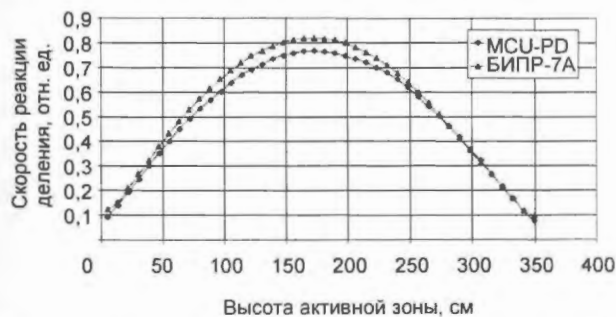


Рис. 1. Распределение скорости реакции деления в ТВС № 96 по высоте активной зоны для состояния № 2

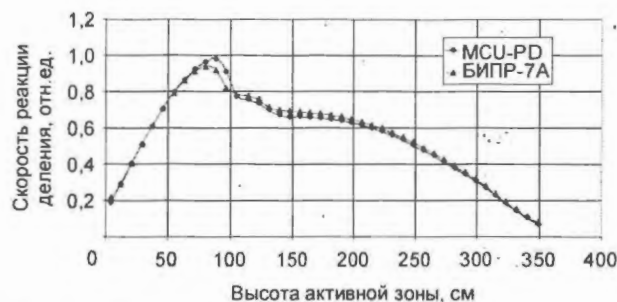


Рис. 2. Распределение скорости реакции деления в ТВС № 112 по высоте активной зоны для состояния № 15

изображено высотное распределение в ТВС с погруженной на 75 % 10-й группой для состояния № 15. Первый незначительный перепад в распределении энерговыделения по высоте на уровне ~ 140 см от низа активной зоны вызван появлением титаната диспрозия, у которого макроскопическое сечение поглощения в тепловой области меньше, чем у карбида бора. Второй рост энерговыделения по высоте на уровне ~ 110 см вызван тем, что в этом месте заканчивается поглощающий элемент.

### Заключение

Разработана полномасштабная трехмерная модель ВВЭР-1000 1-го блока Волгодонской АЭС, технические характеристики которой (геометрические размеры фрагментов реактора, материальный состав и др.) основаны на проектных данных и данных по пусковым экспериментам этого блока.

На основе разработанной модели проведены расчеты 20-ти критических и подкритических состояний по программам MCU-PD и БИПР-7А, что оказалось возможным благодаря использованию современной многопроцессорной вычислительной техники. Результаты расчетов демонстрируют хорошее согласие между собой. Различие в  $K_{эф}$  составляет менее 0,15 %.

Оценки эффективности сброса АЗ, полученные по программам, хорошо согласуются между собой (в пределах ~ 3 %), тогда как различие с экспериментальными данными, скорректированными с учетом пространственных эффектов, достигает 15 %. Это обуславливается влиянием погрешностей экспериментальных оценок.

Разработанная трехмерная полномасштабная модель ВВЭР-1000 1-го блока Волгодонской АЭС и полученные результаты могут быть использованы при верификации современных инженерных и реперных программ, предназначенных для обоснования безопасности реакторов типа ВВЭР и разработанных различными предприятиями отрасли.

Программа MCU-PD2006 создается при поддержке концерна ОАО "ТВЭЛ". Представленные результаты получены в ходе выполнения работ по проекту АЭС-2006.

Авторы статьи приносят благодарность С.С. Городкову за помощь в задании исходных данных программы MCU-PD.

### Список литературы

1. *Алексеев Н.И., Гомин Е.А., Олейник Д.С. и др.* Разработка программы MCU-PD2006 для расчета нейтронно-физических характеристик активных зон реактора ВВЭР-1200 АЭС-2006, реализующей для решения уравнения переноса нейтронов метод Монте-Карло на основе информации, хранящейся в файлах оцененных ядерных данных. Отчет ИЯР РНЦ "Курчатовский институт", инв. № 36-03/18-08, 2008.
2. *Алексеев Н.И., Гомин Е.А., Олейник Д.С. и др.* Разработка полномасштабной трехмерной компьютерной модели реактора ВВЭР-1000. Отчет ИЯР РНЦ "Курчатовский институт", инв. № 36-03/42-08, 2008.
3. *Аверьянова С.П. и др.* Разработка физической части проекта первой и последующих загрузок с УТВС для вновь вводимых в эксплуатацию блоков с серийным реактором ВВЭР-1000. Отчет ИЯР РНЦ "Курчатовский институт", инв. № 32/1-89-499, 1999.

4. *Аттестационный паспорт* программного средства БИПР-7А (версия 1.3). Регистрационный номер паспорта аттестации ПС № 137 от 21.02.2002.

5. *Гуревич М.И., Олейник Д.С., Шкаровский Д.А.* Адаптация программы MCU-PD к параллельным вычислениям на многопроцессорных компьютерах // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2009, вып. 4, с. 66–77.

6. *MPI: A Message Passing Interface Standard, Version 2.1*, June 23, 2008, <http://www.mpi-forum.org/docs/mpi21-report.pdf> (дата обращения: 28.07.2009).

7. *Lazarenko A.P., Sidorenko V.D.* Status and Development of Multi-Group Spectral Code TVS-M for Preparation of Constants for BIPR-7A and PERMAK-A Codes of VVER Physical Calculations. 14<sup>th</sup> AER Symposium on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, September 13-17, Espoo, Finland.

8. *Цыганов С.В., Шишков Л.К.* Измерение эффективности органов регулирования ВВЭР // Атомная энергия, март 2004, т. 96, вып. 3.

9. *Аверьянова С.П., Кравченко А.Ю., Крайнов Ю.А. и др.* Расчетный анализ экспериментальных данных физического пуска первого блока Волгодонской АЭС. Рос.-укр. семинар по эксплуатации и внедрению нового топлива ВВЭР, Москва, 24-26 апреля 2002 г.

*Контактная информация –*

*Олейник Дмитрий Сергеевич, с.н.с., тел.: (499)196-98-11, e-mail: [oleynik@adis.vver.kiae.ru](mailto:oleynik@adis.vver.kiae.ru)*

Вопросы атомной науки и техники.  
Сер. Физика ядерных реакторов, 2010, вып. 1,  
с. 47–58.

## Исследование некоторых моделей и приближений, применяемых при расчете ТВС высокотемпературного газоохлаждаемого реактора ГТ-МГР

*В.Ф. Бояринов, П.А. Фомиченко,*

РНЦ "Курчатовский институт", 123182, Москва, пл. Курчатова, 1

Поступила в редакцию 15.06.2009 г.

Описаны основные нейтронно-физические модели, разработанные в Отделении перспективных ядерно-энергетических систем (ОПЯЭС) ИЯР РНЦ "Курчатовский институт" в качестве проектных моделей для расчета характеристик блочных ТВС высокотемпературного газоохлаждаемого реактора ГТ-МГР, а именно, модели расчета выгорания топлива и изотопов выгорающего поглотителя, расчета ТВС в фиксированных точках по выгоранию с подготовкой нейтронных констант в заданном числе энергетических групп для полномасштабного расчета реактора. Предложена модельная задача для изучения расчетных приближений. Результатом этого изучения стала разработанная поэтапная методика подготовки групповых гомогенных сечений ТВС и ее частей, внедренная в практику проектных расчетов ГТ-МГР.

*Ключевые слова:* ГТ-МГР, ТВС, нейтронно-физическая модель, WIMS-D.

**Investigation of Some Models and Approximations Applied at Calculation of Fuel Assemblies of High Temperature Gas Cooled Reactor GT-MHR.** *V.F. Boyarinov, P.A. Fomichenko, RRC "Kurchatov Institute", 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182.* Main neutron-physical models applied in Division of Advanced Nuclear Power Systems of RRC "Kurchatov Institute" as design models for calculation of fuel assembly characteristics of High Temperature Gas Cooled Reactor GT-MHR have been described, namely, models for calculation of fuel burn up, depletion of burnable poison isotopes, fuel assemblies for fixed values of burn up with preparing the neutron constants in given number of energy groups for full-scale reactor calculation. Model task for study of some calculational approximations has been proposed. Result of this study is step-by-step model for preparing the group homogeneous cross sections of fuel assembly and its parts which have been applied in practice of design calculations of GT-MHR.

*Key Words:* GT-MHR, Fuel Assembly, Neutron-Physical Model, WIMS-D.

### Введение

В течение 10 лет в ОПЯЭС ИЯР РНЦ "Курчатовский институт" проводятся нейтронно-физические расчеты различных вариантов модульного гелиевого реактора с газовой турбиной (ГТ-МГР). В результате анализа практики проведения нейтронно-физических расчетов в обоснование проекта ГТ-МГР с использованием программ WIMS-D4 [1] и JAR [2] к 2002 г. разработана специальная расчетная методика, применяемая в настоящее время в качестве проектной. Первая программа используется для подготовки гомогенных макросечений ТВС и ее частей, а вторая – решения трехмерного группового уравнения диффузии.

На этапе разработки концептуального проекта ГТ-МГР применялись следующие подходы: подготовка гомогенизированных нейтронных макроконстант для ТВС или ее

частей в 13-групповом приближении и использование шести пространственных точек на ТВС при решении диффузионного уравнения на этапе полномасштабного расчета реактора. В данной работе с применением нодальных возможностей метода поверхностных гармоник (МПГ) [3, 4] и комплекса программ SUHAM-W-2D [5, 6], реализующего расчеты по МПГ, на предложенной модельной задаче проведена проверка этих приближений, а также изучены основные физические модели, применяемые для подготовки гомогенных макросечений ТВС и ее частей.

С использованием программы WIMS-D4 разработана поэтапная методика для подготовки этих сечений. Основные положения методики, подробно описанные в статье, окончательно сформировались в 2002 г. В дальнейшем эта поэтапная методика совершенствовалась и модернизировалась.

лась, но основные этапы сохранились. Все конкретные исследования и расчеты в настоящей работе проведены для плутониевого топлива и эрбиевого выгорающего поглотителя.

### 1. Поэтапная методика для подготовки гомогенных макросечений ТВС ГТ-МГР и ее частей

Программа WIMS-D4 применяется в ОПЯЭС ИЯР для подготовки гомогенных макросечений ТВС ГТ-МГР и ее частей. Следующие два ограничения не дают использовать программу WIMS-D4 непосредственно (за один запуск программы) для расчета этих сечений. Во-первых, геометрия ТВС ГТ-МГР довольно сложная для представления в расчетной модели, и, во-вторых, в программе WIMS-D4 существуют принципиальные ограничения, связанные с одновременным учетом резонансной блокировки резонансных изотопов топлива и выгорающего поглотителя (Er), если они пространственно разделены, т.е. находятся в разных зонах ТВС. Чтобы обойти эти ограничения, разработана поэтапная методика расчета гомогенных сечений ТВС.

Следует отметить, что если в качестве выгорающего поглотителя применяется материал, не содержащий резонансных изотопов, то эта поэтапная методика также пригодна, но можно использовать и более простые методики.

#### 1.1. Модель расчета выгорания топлива

На этом этапе расчета в ТВС выделяется трехмерная гексагональная в плане ячейка топливного компакта с шагом 1,9 см. В качестве модели этой ячейки выбирается бесконечная по высоте кластерная ячейка топливного компакта с эквивалентной в плане цилиндрической границей с  $N$  цилиндрическими топливными стержнями с четырехслойной оболочкой. Диаметр топливных стержней выбирается из условия сохранения средней хорды в топливе. Затем этот диаметр немного увеличивается, чтобы получить ближайшее целое число стержней при условии сохранения объема топлива в топливном компакте. Четырехслойная оболочка "намазывается" слой за слоем

на топливные стержни также с условием сохранения их объемов в топливном компакте.

В принципе четырехслойная оболочка без потери точности может быть объединена в один слой, но изначально и в расчетах, приведенных в данной работе, использовалась четырехслойная оболочка. Построенная кластерная ячейка имеет один центральный стержень и три кольца топливных стержней. Внешний радиус топливного компакта равен  $R_1 = 0,625$  см. Внешняя зона кластерной ячейки топливного компакта состоит из графита блока (ТВС) с плотностью  $\gamma = 1,73$  г/см<sup>3</sup> и его внешний радиус равен  $R_2 = 0,99757$  см. Расширенная кластерная ячейка топливного компакта имеет две дополнительные зоны (рис. 1).

Первая дополнительная зона  $R_3$  состоит из однородной смеси гелия, выгорающего поглотителя и дополнительного графита ТВС, приходящегося на один топливный компакт, а вторая  $R_4$  — из графита внешнего и внутреннего отражателей.

Транспортный расчет такой расширенной кластерной ячейки проводится с помощью программы WIMS-D4 в 43-х энергетических группах с максимально возможным делением энергетической шкалы в окрестности резонанса <sup>240</sup>Pu (~ 1 эВ). Эта расширенная кластерная ячейка топливного компакта применяется для расчета выгорания топлива, но не для расчета выгорания изотопов выгорающего поглотителя, хотя изотопы выгорающего поглотителя тоже горят, но с резонансными сечениями, соответствующими бесконечному разбавлению.

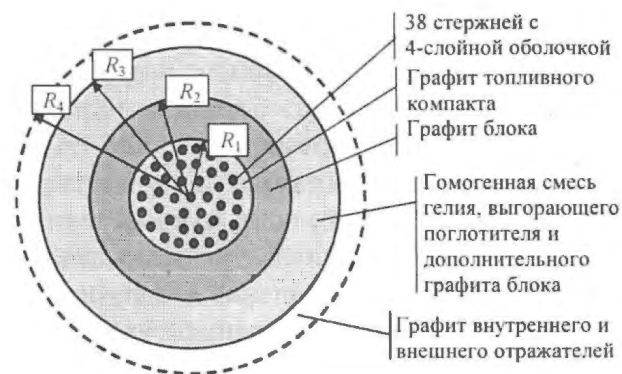


Рис. 1. Расширенная кластерная ячейка топливного компакта

## 1.2. Модель расчета выгорания изотопов выгорающего поглотителя

На этом этапе расчета строится модель суперячейки (рис. 2) для расчета выгорания изотопов выгорающего поглотителя. Ячейка компакта с выгорающим поглотителем располагается в центре суперячейки. Компакт с выгорающим поглотителем ( $R_1 = 0,625$  см) помещается в центре последней ячейки. В данной работе рассматривается гомогенная модель компакта с выгорающим поглотителем, т.е. выгорающий поглотитель и графит матрицы компакта с плотностью  $\gamma = 1,7$  г/см<sup>3</sup> гомогенно перемешаны внутри данного компакта. При расчетах этот компакт делился на 4 подзоны. Внешняя зона  $R_2$  ячейки компакта с выгорающим поглотителем состоит из графита блока.

Затем определяется число ячеек топливного компакта, ячеек с каналом для гелия и количество дополнительного графита в ТВС, приходящихся на одну ячейку с компактом выгорающего поглотителя. Все эти материалы располагаются в следующей зоне суперячейки с внешним радиусом  $R_3$ . Все топливные стержни с объединенной оболочкой явно расположены в фоновом материале этой зоны, состоящей из гомогенной смеси гелия и графита. Последняя зона суперячейки с внешним радиусом  $R_4$  состоит из графита внешнего и внутреннего отражателей.

Транспортный расчет такой суперячейки проводится с помощью программы WIMS-D4 в 51-й энергетических группах с дополнительным максимально возможным

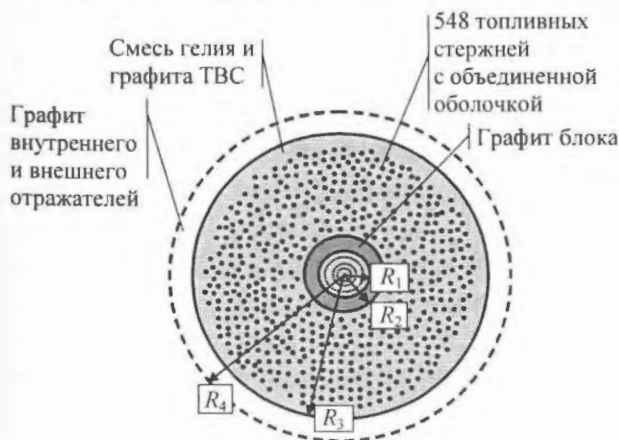


Рис. 2. Суперячейка для расчета выгорания изотопов выгорающего поглотителя

делением энергетической шкалы в окрестности резонанса <sup>167</sup>Er (~ 0,5 эВ). Построенная таким образом суперячейка используется для расчета выгорания изотопов выгорающего поглотителя, но не для расчета выгорания топлива, хотя изотопы топлива также выгорают, но с резонансными сечениями, соответствующими бесконечному разбавлению.

## 1.3. Модель расчета групповых гомогенных сечений ТВС в фиксированных точках по выгоранию

На этом этапе расчета строится модель ТВС для ее расчета в отдельных фиксированных точках по выгоранию. Вначале кластерная ячейка топливного компакта заменяется цилиндрической ячейкой топливного компакта с центральным топливным стержнем с объединенной оболочкой и топливным кольцом с объединенной оболочкой, присоединенной к внутренней и внешней сторонам топливного кольца.

Расположение и толщина топливного кольца выбираются отдельно для каждого значения выгорания из условия равенства  $k_{\infty}$  этих двух ячеек. Изотопный состав топлива в цилиндрической ячейке берется одинаковым в центральном топливном стержне и топливном кольце и равным изотопному составу, усредненному по всем топливным стержням кластерной ячейки топливного компакта.

В расчетной модели ТВС выбранные цилиндрические топливные компакты помещаются на место кластерных топливных компактов, а сама ТВС берется с цилиндрической внешней границей. Для каждого значения выгорания резонансные сечения всех резонансных изотопов берутся извне:

- резонансные сечения изотопов, расположенных в топливе, берутся из расчета расширенной кластерной ячейки топливного компакта, усредненные по всем топливным стержням;
- изотопный состав и резонансные сечения изотопов выгорающего поглотителя берутся из расчета суперячейки, усредненные по всем зонам выгорающего поглотителя.

Транспортный расчет такой модели ТВС проводится по опции PIJ-PERSEUS программы WIMS-D4 с применением 51-группового приближения, и его результаты используются для приготовления малогрупповых гомогенных сечений ТВС или ее частей. Специальные расчетные исследования в дальнейшем показали, что для корректного формирования спектра нейтронов в ТВС необходимо учесть графит отражателя.

Следует также отметить, что пространственная модель, применяемая на этом этапе, в дальнейшем без потери точности упрощена и приближена к модели, используемой на втором этапе.

## 2. Расчетное исследование двумерной модельной задачи

### 2.1. Двумерная модельная задача

В качестве объекта исследования выбран двумерный сектор симметрии реактора ГТ-МГР с кольцевой активной зоной, представленный на рис. 3 и состоящий из 2-х типов гексагональных блоков – ТВС и графитовых блоков отражателей.

Блок первого типа – стандартная ТВС ГТ-МГР с компактами выгорающего поглотителя и без отверстия для стержня СУЗ (рис. 4). Блок второго типа – это графитовый блок без отверстия для контрольного стержня. Радиальный зазор между блоками 0,25 см, а температура всех материалов равна 1 200 К. Все исследования проводились для варианта активной зоны с плутониевым топливом и эрбиевым выгорающим поглотителем.

### 2.2. 51-групповые спектры нейтронов для расчета гомогенных сечений ТВС

Спектры нейтронов, с помощью которых 51-групповые сечения материалов в модели ТВС свертываются в групповые се-

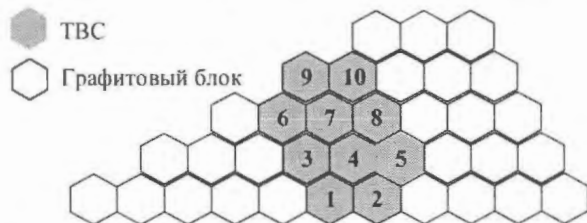


Рис. 3. Двумерный сектор симметрии ГТ-МГР (30°)

чения с меньшим числом групп, должны учитывать графит (отражатель), расположенный вне активной зоны, а также значение  $k_{эф}$  рассчитываемого объекта. Когда рассчитывается работающий реактор, вообще говоря,  $k_{эф} = 1$ . Для рассматриваемой двумерной модельной задачи это не так.

Пусть  $R_c$  – внешний радиус дополнительного графитового слоя вокруг ТВС, учитывающий графит отражателя. Для фиксированного значения  $R_c$  после расчета расширенной модели ТВС по опции “Pin-cell” программы WIMS получим 51-групповые сечения всех материалов. Далее с использованием этих сечений по программе WIMS решаются следующие три задачи:

- 1) 51-групповой расчет гетерогенной расширенной модели ТВС на  $k_{\infty}$ , результатом которого является 51-групповой спектр гомогенизированной ТВС (без внешнего графита) (спектр № 1);
- 2) 51-групповой расчет бесконечной гомогенной среды с 51-групповыми сечениями, полученными в задаче № 1, – расчет на  $k_{\infty}$ ; результат – 51-групповой спектр № 2;
- 3) 51-групповой расчет гомогенной среды с 51-групповыми сечениями, полученными в задаче № 1, и критическим ( $k_{эф} = 1$ ) баклингом; результат – 51-групповой спектр № 3.

Все три задачи дают разные 51-групповые спектры гомогенизированной ТВС (без внешнего графита). Рис. 5...7 демонстрируют эти спектры, нормированные на единицу (интеграл нейтронного спектра по энергии равен единице), с различным значением

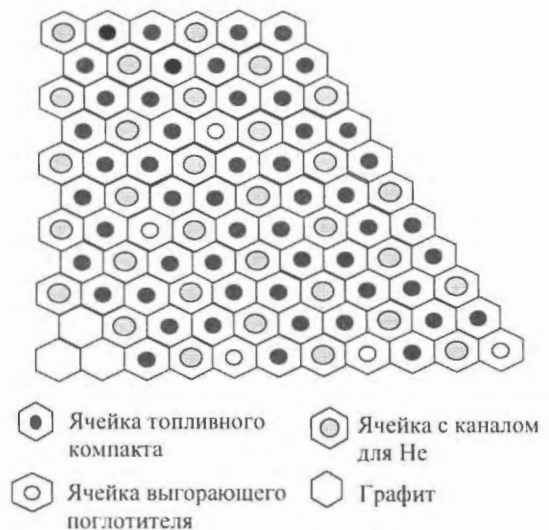


Рис. 4. Сектор симметрии ТВС (90°)

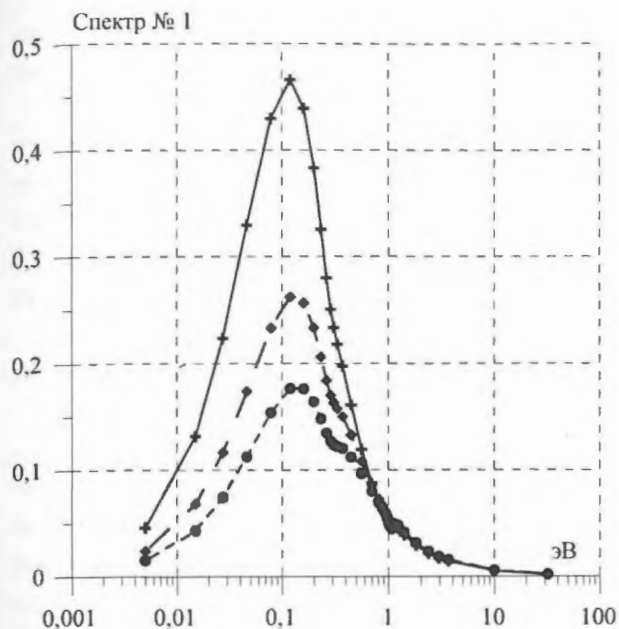


Рис. 5. Спектр нейтронов в гомогенизированной ТВС при расчете задачи № 1: • –  $R_c = R_{ТВС}$ ; ♦ –  $R_c = 21,0$  см; + –  $R_c = 25,0$  см

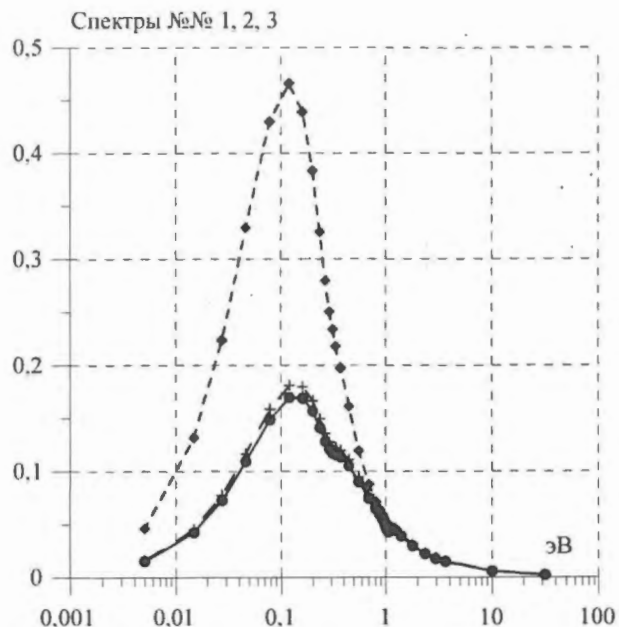


Рис. 7. Нейтронные спектры в ТВС с  $R_c = 25,0$  см: ♦ – спектр № 1; + – спектр № 2; • – спектр № 3

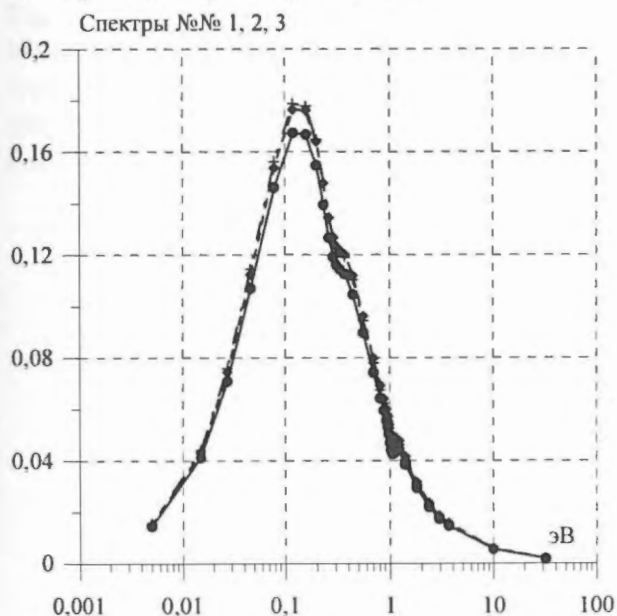


Рис. 6. Нейтронные спектры в ТВС с  $R_c = R_{ТВС}$ : ♦ – спектр № 1; + – спектр № 2; • – спектр № 3

толщины дополнительного графитового слоя (с разным значением  $R_c$ ).

Из анализа этих рисунков можно сделать следующие выводы:

- спектры нейтронов в задаче № 3 слабо зависят от толщины дополнительного графитового слоя вокруг ТВС;
- нейтронные спектры в задачах №№ 2 и 3 близки;
- спектр нейтронов № 1 сильно отличается от спектров №№ 2 и 3 и это отличие тем значительней, чем больше толщина

дополнительного графитового слоя вокруг ТВС.

### 2.3. Учет графита отражателя при подготовке констант для ТВС

В общем случае значение внешнего радиуса  $R_c$  дополнительного слоя графита вокруг ТВС будет разным для каждой ТВС. Выбор различных значений  $R_c$  для каждой ТВС – довольно громоздкая и вряд ли оправданная процедура из-за присутствия других, не менее серьезных расчетных приближений. В разработанной методике предлагается выбрать одно значение  $R_c$  для всех ТВС активной зоны, которое даст некоторый усредненный спектр в активной зоне.

Предлагается следующий критерий для выбора значения  $R_c$ . Выбираются два наиболее близких расчета:

- первый расчет – это 51-групповой расчет на  $k_\infty$  гетерогенной ТВС с дополнительным слоем графита;
- второй расчет – это 51-групповой расчет двумерного сектора симметрии ГТ-МГР, состоящего из двух типов ТВС и представленного на рис. 3. 51-групповые сечения гомогенизированной ТВС берутся из первого расчета.

51-групповые сечения графита в обоих расчетах берутся одинаковыми.

Второй расчет проводится с помощью МПГ с тремя пробными матрицами на каждую ТВС, при этом при расчете пробных матриц ТВС применялась сетка с 331-й пространственной точкой на каждую ТВС.

Обозначим  $k_0^{(i)}$  как отношение реакций деления и поглощения в ТВС в задаче №  $i$ . Выбор значения  $R_c$  проводится из условия равенства значений  $k_0$  в расчетах №№ 1 и 2. На рис. 8 показано, что только  $k_0^{(i)}$  в задаче № 1 может быть равно  $k_0$  двумерного сектора симметрии модельной задачи при определенном значении  $R_c$ , а именно, при  $R_c = 22,1$  см. Учитывая, что расчет № 2 с шестью пробными матрицами для такого объекта может увеличить  $k_0$  до 0,3 %, получим значение  $R_c = 22,24$  см.

#### 2.4. Пространственная дискретизация

Для изучения влияния пространственной дискретизации проведены три типа 51-групповых расчетов двумерной модели ГТ-МГР. В расчете первого типа проводился диффузионный расчет с одной пространственной точкой на ТВС с однородными сечениями.

В расчетах второго и третьего типа расчеты проводились с помощью МПГ в два

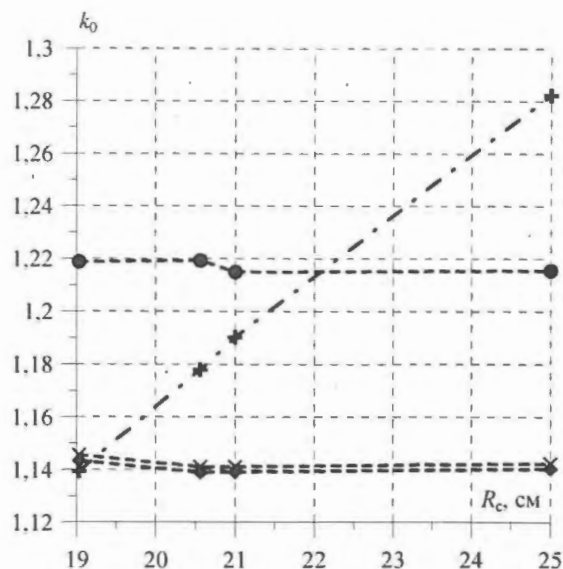


Рис. 8.  $k_0$  в ТВС и двумерном секторе ГТ-МГР: + – задача № 1; × – задача № 2; ♦ – задача № 3; • – двумерный сектор симметрии ГТ-МГР

этапа: сначала рассчитывались многогрупповые пробные матрицы для всех типов блоков, а затем использовался МПГ как нодальный метод решения диффузионного уравнения. В расчете второго типа каждая ТВС разделялась на 7 шестиугольников, а в расчете третьего типа – на 331 шестиугольник. Все расчеты применяли 51-групповые спектры из задачи № 1. В табл. 1 представлены значения  $k_{эф}$ , а в табл. 2 – значения

Таблица 1. Значения  $k_{эф}$  в 51-групповых расчетах двумерного сектора ГТ-МГР

Число точек на ТВС при расчете пробных матриц	$R_c$	
	21,0 см	25,0 см
1	1,0976 (- 2,5)*	1,0984 (- 2,5)*
7	1,1248 (- 0,1)	1,1255 (- 0,1)
331	1,1260	1,1266

\* Процентное отклонение от значения в расчете 3-го типа (331 точка на ТВС)

Таблица 2. Реакция деления в ТВС в 51-групповых расчетах двумерного сектора ГТ-МГР

Номер ТВС	1 точка на ТВС		7 точек на ТВС		331 точка на ТВС	
	$R_c$		$R_c$		$R_c$	
	21,00	25,00	21,00	25,00	21,00	25,00
1	2,58*	2,57*	0,12*	0,12*	1,0436	1,0438
2	4,10	4,08	0,32	0,32	0,8946	0,8949
3	- 5,17	- 5,15	- 0,41	- 0,41	1,2307	1,2302
4	11,80	11,70	0,75	0,75	0,8333	0,8340
5	- 8,81	- 8,79	- 0,50	- 0,50	1,0097	1,0092
6	- 6,17	- 6,15	- 0,47	- 0,46	1,2377	1,2372
7	11,90	11,80	0,74	0,74	0,8550	0,8556
8	- 2,94	- 2,93	- 0,11	- 0,11	0,9543	0,9541
9	11,80	11,80	0,74	0,74	0,8610	0,8616
10	- 2,60	- 2,60	- 0,10	- 0,10	0,9797	0,9796
Макс. отклонение	11,90	11,80	0,75	0,75	-	-

\* Процентное отклонение от значения в расчете 3-го типа (331 точка на ТВС)

скорости реакции деления для всех рассчитанных случаев.

Видно, что расчет с 7 точками на ТВС при расчете пробных матриц дает достаточную для проектных расчетов точность: отклонение от расчета с 331-й точками на ТВС не превышает 0,1 % в  $k_{эф}$  и 0,8 % в реакции деления.

### 2.5. Изучения влияния числа энергетических групп

Для изучения влияния числа энергетических групп на результаты полномасштабных расчетов проводились расчеты двумерного сектора ГТ-МГР с максимальной пространственной дискретизацией (331 точка на ТВС при расчете пробных матриц) с использованием 2-х, 13-ти и 51-го группового приближений. В табл. 3 и 4 представлены процентные отличия значений соответственно  $k_{эф}$  и скорости реакции деления, рассчитанных в 2-х и 13-ти группах, от значений, рассчитанных в 51-групповом приближении.

**Таблица 3.** Процентные отличия  $k_{эф}$ , рассчитанные в 2-х и 13-ти группах, от значений, рассчитанных в 51-групповом приближении

Число расчетных групп	$R_c$	
	21,0 см	25,0 см
2	0,07	7,09
13	-0,12	0,39

Видно, что расчет с двумя энергетическими группами дает большие отклонения от 51-групповых расчетов: до 7 % в  $k_{эф}$  и до 17,5 % в скорости реакции деления. В то же время расчет с 13-ю энергетическими группами дает достаточную для проектных расчетов точность: отличия от 51-групповых расчетов не превышают 0,4 % в  $k_{эф}$  и 0,7 % в скорости реакции деления.

### 2.6. Оценка точности 13-групповых расчетов с 7-ю точками на ТВС

На этапе концептуального проектирования ГТ-МГР в качестве проектных подходов использовались 13-групповые конечно-разностные расчеты по программе JAR с 6-ю точками (ячейками треугольной формы) на ТВС или блок отражателя. 13-групповые расчеты с 7-ю точками (7 шестиугольников) на ТВС, выполняемые с помощью МПГ по комплексу SUHAM-W [6], описаны в предыдущих разделах и очень близки к проектным расчетам.

В табл. 5 представлены процентные отличия  $k_{эф}$  и скорости реакции деления в ТВС ( $\delta F$ ), рассчитанные в 13-ти группах с 7-ю точками (шестиугольниками) на ТВС, от соответствующих значений, рассчитанных с применением 51-группового приближения и 331-й точек (шестиугольников) на ТВС. Видно, что эти отличия для такого объекта не превышают 0,3 % в  $k_{эф}$  и 1,5 % в скорости реакции деления в ТВС.

**Таблица 4.** Процентные отличия скорости реакции деления, рассчитанные в ТВС в 2-х и 13-ти группах, от значений, рассчитанных в 51-групповом приближении

Номер ТВС	2 группы		13 групп		
	$R_c$	21,00	25,00	21,00	25,00
1		3,02	2,80	0,03	-0,03
2		4,29	4,08	-0,01	-0,06
3		-6,91	-6,66	-0,22	-0,18
4		16,50	15,70	0,62	0,44
5		-13,60	-13,00	-0,61	-0,44
6		-6,62	-6,28	-0,01	0,02
7		17,30	16,50	0,67	0,49
8		-4,99	-4,73	-0,27	-0,18
9		17,50	16,70	0,70	0,51
10		-4,42	-4,21	-0,25	-0,15
Макс. откл.		17,50	16,70	0,70	0,49

**Таблица 5.** Процентные отличия  $k_{эф}$  и скорости реакции деления в ТВС ( $\delta F$ ), рассчитанные в 13-ти группах с 7-ю точками на ТВС, от соответствующих значений, рассчитанных с использованием 51-й групп и 331-й точек на ТВС

$R_c$	21,00	25,00
$\delta k_{эф}, \%$	0,03	-0,03
Номер ТВС	$\delta F, \%$	
1	0,18	0,11
2	0,34	0,28
3	-0,67	-0,61
4	1,47	1,26
5	-1,19	-1,01
6	-0,53	-0,47
7	1,51	1,30
8	-0,40	-0,31
9	1,54	1,32
10	-0,37	-0,27
Макс. откл.	1,54	1,32

### 3. Расчет выгорания топлива

Модель расчета выгорания топлива описана в разделе 1.1, где изучено влияние учета графита отражателя и присутствия выгорающего поглотителя на выгорание изотопов топлива. Применялись три расчетные модели. Конфигурация, представленная на рис. 1, использовалась в качестве основной модели. В модели № 1 ячейка ограничивалась внешним радиусом  $R_3$ , при этом выгорающий поглотитель не учитывался в третьей (от центра) зоне. Модель № 2 отличается от модели № 1 добавлением четвертой зоны (внешний радиус  $R_4$ ), учитывающей графит отражателя. Модель № 3 отличается от модели № 2 учетом выгорающего поглотителя в третьей зоне.

В качестве демонстрации на рис. 9 и 10 представлены кривые изменения ядерных плотностей изотопов  $^{240}\text{Pu}$  и  $^{241}\text{Pu}$  в этих трех расчетных моделях выгорания. Видно, что учет как графита отражателя, так и выгорающего поглотителя существенно влияет на изменение ядерных плотностей изотопов  $^{240}\text{Pu}$  и  $^{241}\text{Pu}$  в процессе выгорания топлива.

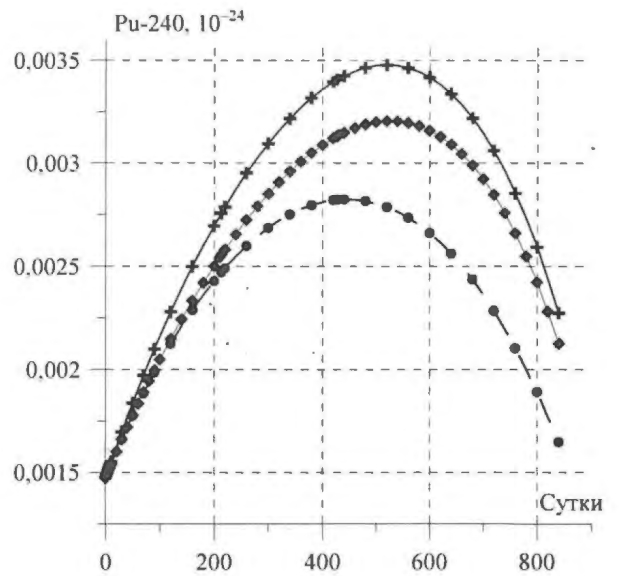


Рис. 9. Изменения ядерной плотности  $^{240}\text{Pu}$ : ● – без учета выгорающего поглотителя и графита отражателя; + – без учета выгорающего поглотителя и с учетом графита отражателя; ◆ – с учетом выгорающего поглотителя и графита отражателя

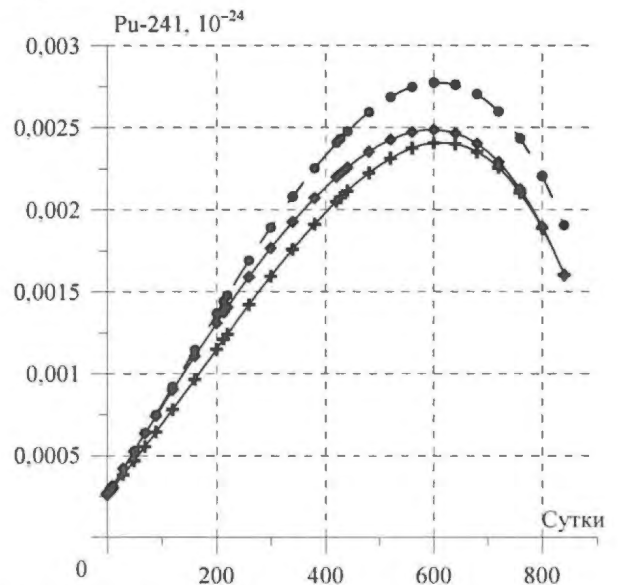


Рис. 10. Изменения ядерной плотности  $^{241}\text{Pu}$ : ● – без учета выгорающего поглотителя и графита отражателя; + – без учета выгорающего поглотителя и с учетом графита отражателя; ◆ – с учетом выгорающего поглотителя и графита отражателя

### Заключение

Описаны основные нейтронно-физические модели, применяемые в ОПЯЭС ИЯР в качестве проектных моделей на этапе расчетов ТВС ГТ-МГР, а именно, для

расчетов выгорания топлива и изотопов выгорающего поглотителя, для расчета ТВС при фиксированных значениях выгорания. Все модели реализованы с использованием программы WIMS-D4.

Предложена модельная задача для исследования расчетных приближений. Изучены следующие вопросы:

- выбор 51-группового спектра нейтронов, применяемого для подготовки малогрупповых сечений ТВС и ее частей;
- влияние учета графита отражателя, числа энергетических групп и пространственной дискретизации на расчет нейтронно-физических характеристик ГТ-МГР и выгорание изотопов топлива.

Следующие основные выводы следуют из выполненного исследования:

- при выборе 51-группового спектра нейтронов в ТВС, используемого для подготовки гомогенных сечений ТВС и ее частей, необходимо учитывать графит внутреннего и внешнего отражателей;
- при расчетах объекта такого типа, как в предложенной модельной задаче (отсутствие поглощающих стержней, одинаковая начальная композиция для всех топливных компактов), 13-групповые расчеты с 6 точками на ТВС, применяемые в качестве проектных расчетов, имеют достаточную для практики точность: отличие от 51-группового расчета с 331-й точками на ТВС не превышает 0,3 % в  $k_{эф}$  и 1,5 % в скорости реакции деления в ТВС;
- двухгрупповые расчеты, использованные в качестве проектных на раннем этапе изучения, неприемлемы: ошибка в скорости реакции деления достигает 20 %; в случае большей гетерогенности как внутри ТВС (присутствие стержней поглотителя, гетерогенное задание выгорающего поглотителя и др.), так и внутри рассчитываемого объекта (разные ТВС), эти ошибки могут возрасти;

- учет как графита отражателя, так и выгорающего поглотителя существенно влияет на выгорание топливных изотопов.

Результаты работы доложены на конференции M&C-2003 [7].

#### Список литературы

1. *Askew J.R. et al.* A General Description of the Lattice Code WIMS, JBWES, Oct. 1966.
2. *Ярославцева Л.Н.* Комплекс программ JARB для расчета нейтронно-физических характеристик ядерных реакторов // ВАНТ. Сер. Физика и техника ядерных реакторов, 1983, 8(37), с. 41–43.
3. *Лалетин Н.И.* Об уравнениях гетерогенного реактора // ВАНТ. Сер. Физика и техника ядерных реакторов, 1981, вып. 5(18), с. 31–46.
4. *Laletin N.I., Sultanov N.V., Boyarinov V.F. et al.* Surface Harmonics and Surface Pseudosources Methods // Proc. of PHYSOR-90, Marseilles, France, April 23-27, 1990, v. 2, pp. XII-39, ANS/ENS, 1990.
5. *Boyarinov V.F.* SUHAM-2.5 Code for Solving 2D Finite-Difference Equations of the Surface Harmonics Method in Square and Triangular Lattices / Proc. of Annual Meeting on Nuclear Technology '99, Karlsruhe, Germany, May 18-20, 1999, pp. 23–26.
6. *Бояринов В.Ф.* Комплекс программ SUHAM-2D для решения двумерных нейтронно-физических задач в активной зоне ядерных реакторов // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2009, вып. 2, с. 48–58.
7. *Boyarinov V.F.* Investigation of Some Models and Approximations Applied at Calculation of GT-MHR Fuel Assemblies / Proc. of the M&C2003 conf., Gatlinburg, Tennessee, USA, April 6-11, 2003.

Контактная информация –

Бояринов Виктор Федорович, нач. лаб., тел.: (499)196-90-48, e-mail: [Boyarinov@dhtp.kiae.ru](mailto:Boyarinov@dhtp.kiae.ru)

Вопросы атомной науки и техники.  
Сер. Физика ядерных реакторов, 2010, вып. 1,  
с. 59–67.

## Расчетный анализ эффективности работы устройства локализации расплава для ВВЭР-1200

Ю.А. Звонарев, Д.Ф. Цуриков, В.Л. Кобзарь, А.М. Волчек, Н.П. Киселев,  
РНИЦ "Курчатовский институт", 123182, Москва, пл. Курчатова, 1,  
В.Ф. Стрижов, А.С. Филиппов, Е.В. Моисеенко,  
ИБРАЭ РАН, 113191, Москва, Б. Тульская ул., 52  
Поступила в редакцию 02.11.2009 г.

Приведено краткое описание расчетного кода ГЕФЕСТ-УЛР и представлены результаты расчетного анализа поведения кориума в устройстве локализации расплава (УЛР) для ВВЭР-1200 (проект АЭС-2006). Рассматриваются физико-химические и теплофизические процессы во время формирования и охлаждения бассейна кориума в УЛР в случае протекания тяжелых аварий на АЭС-2006 с реакторной установкой (РУ) ВВЭР-1200. Определены основные параметры кориума, включая его компонентный состав, структуру, изменение во времени температуры, плотности, агрегатного состояния. Оценен минимальный запас до кризиса теплоотдачи на наружной стенке УЛР.

*Ключевые слова:* запроектная авария, устройство локализации расплава, код ГЕФЕСТ-УЛР, кориум, жертвенный материал, физико-химическое взаимодействие, теплофизические процессы, расчетный анализ.

**Numerical Investigation of Corium Behaviour in Core Catcher for VVER-1200.** *Yu.A. Zvonarev, D.F. Tsurikov, V.L. Kobzar', A.M. Volchek, N.P. Kiselev, RRC "Kurchatov Institute", 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182, V.F. Strizhov, A.S. Filippov, E.V. Moiseenko, NSI RAS, 52, B. Tul'skaya St., Moscow, 113191.* A brief description of the HEFEST-ULR calculating code and results of numerical investigation of corium behaviour in a core catcher for VVER-1200 (NPP-2006 project) are given. Physical-chemical and thermalphysic processes during corium pool formation and cooling in the core catcher are examined in case of severe accidents on the NPP-2006 with VVER-1200. The main corium parameters including its composition, structure, temperature evolution, density, and aggregative state are defined. A minimal margin for critical heat flux on the external surface of the core catcher is estimated.

*Key Words:* Beyond Design Basis Accident, Core Catcher, Code HEFEST-ULR, Corium, Sacrificial Material, Physicochemical Interaction, Thermal Physic Processes, Analytical Calculation.

### Введение

В проекте АЭС-2006 в качестве одного из технических средств, специально предусмотренных для управления запроектными авариями (ЗПА) и образующих четвертый уровень глубоко эшелонированной защиты, служит УЛР. Оно предназначено для уменьшения до безопасного уровня радиационных последствий тяжелых аварий, в которых при длительном осушении активной зоны при низком давлении в I контуре происходит ее разрушение с последующим проплавлением корпуса реактора. Повышение безопасности достигается за счет предотвращения выхода жидких и твердых радиоактивных материалов за пределы УЛР, чем обеспечивается исключение повреждения системы герметичного ограждения зоны локализации аварий.

Целями управления ЗПА на этапе выхода расплава активной зоны за пределы корпуса реактора в помещения защитной оболочки являются локализация твердых и расплавленных материалов активной зоны, внутрикорпусных устройств и корпуса реактора в пределах подреакторного помещения бетонной шахты и снижение до приемлемого уровня воздействия вышедшего из корпуса расплава на конструкции защитной оболочки.

Основными функциями, выполнение которых обеспечивает работоспособность УЛР, служат следующие:

– прием и размещение в своем внутреннем объеме жидких и твердых компонентов кориума, фрагментов активной зоны и конструкционных материалов реактора;

- устойчивая передача тепла от кориума к охлаждающей воде и гарантированное охлаждение расплава кориума;
- предотвращение выхода кориума за установленные границы зоны локализации;
- обеспечение подкритичности кориума в бетонной шахте;
- минимизация выноса радиоактивных веществ в пространство герметичной оболочки;
- минимизация выхода водорода.

## 1. Постановка задачи

При разработке УЛР для АЭС-2006 реализован эволюционный подход с опорой на уже имеющиеся разработки с применением ранее апробированных научно-технических решений проектов УЛР для АЭС “Тяньвань” и “Куданкулам”, в частности:

- выбор в качестве базового конструкторского решения сухого водоохлаждаемого тигля в подреакторном пространстве;
- использование “жертвенных” материалов (ЖМ) из смеси оксидов железа и алюминия (ЖМ предназначен для снижения энтальпии, плотности, температур ликвидуса и солидуса расплава кориума, поступившего в УЛР, и после взаимодействия с кориумом образует многокомпонентную смесь с новыми физическими свойствами);
- применение двухслойного корпуса УЛР для предотвращения его разрушения под действием термических напряжений;
- использование оксида гадолиния в составе ЖМ для обеспечения подкритичности расплава.

Указанные обстоятельства предоставили возможность применять результаты ранее проведенного расчетно-экспериментального обоснования технических решений по проектам УЛР для АЭС “Тяньвань” в Китае и “Куданкулам” в Индии для предварительного обоснования работоспособности УЛР для АЭС-2006. Другим важным обстоятельством при разработке УЛР для АЭС-2006 являлось условие максимальной степени унификации оборудования УЛР для Нововоронежской АЭС-2 и Ленинградской АЭС-2. Конструкция унифицирован-

ного УЛР для АЭС-2006 схематически представлена на рис. 1.

Вместе с тем унификация проекта, а также изменения в проекте УЛР, связанные с изменением активной зоны РУ АЭС-2006 и использованием дополнительных пассивных систем безопасности, привели к необходимости ревизии ранее разработанных для АЭС “Тяньвань” и “Куданкулам” исходных данных по параметрам расплава, поступающего в УЛР. В первую очередь это относится к необходимости учета изменения энерговыделения, увеличения массы и температуры расплава, изменения динамики его поступления в УЛР. Для учета названных обстоятельств применялся унифицированный перечень исходных данных, разработанный на основе анализа протекания тяжелых аварий на НВАЭС-2 и ЛАЭС-2.

При расчетном анализе работоспособности УЛР требуется обосновать выполнение им своих перечисленных выше функций и в первую очередь прием в своем внутреннем объеме жидких и твердых компонентов кориума и их гарантированное охлаждение. В то же время нельзя не отметить, что использованная ранее методика оценки теплового режима УЛР, основанная на точечном описании пространственно распределенных параметров, может только очень грубо учесть эффекты неоднородности распределения массы, температуры и т.п., которые имеют первостепенную важность для получения количественных результатов. Это особенно существенно при анализе событий на стадии заполнения УЛР расплавом, его вторичного разогрева, расслоения и взаимодействия с ЖМ.

В связи с этим для анализа поведения кориума в УЛР для АЭС-2006 разработан специализированный код ГЕФЕСТ-УЛР в 2-мерной осесимметричной постановке со “сквозной” методикой расчета, базирующейся на полном наборе математических моделей всех основных физических процессов в УЛР. Код создан путем модификации и развития модуля ГЕФЕСТ [1] тяжеловарийного кода СОКРАТ, предназначенного для описания поведения расплава на днище реактора, путем включения в него

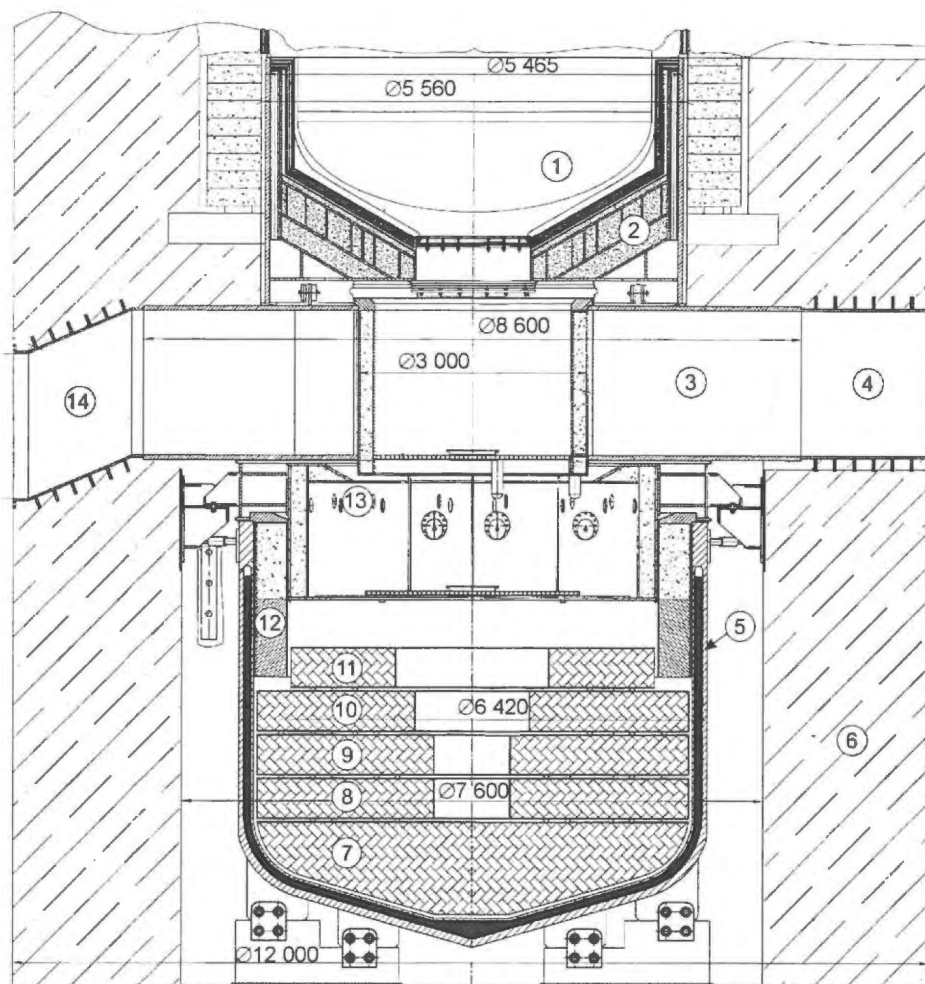


Рис. 1. Конструкция УЛР: 1 – корпус; 2 – плита нижняя; 3 – ферма-консоль; 4 – технологический коридор; 5 – корпус УЛР с опорами; 6 – бетонная шахта; 7 – наполнитель (блок 1); 8 – наполнитель (блок 2); 9 – наполнитель (блок 3); 10 – наполнитель (блок 4); 11 – наполнитель (блок 5); 12 – тепловая защита фланца корпуса; 13 – площадка обслуживания; 14 – вентиляционный коридор

ряда дополнительных математических моделей физико-химического взаимодействия компонентов расплава и ЖМ, газовой выделение, граничного охлаждения и др.

## 2. Краткое описание основных моделей кода ГЕФЕСТ-УЛР

Подробное описание моделей поведения расплава, реализованных в модуле ГЕФЕСТ, приведено в [1]. Ниже дается описание только дополнительно разработанных для ГЕФЕСТ-УЛР математических моделей, связанных с физико-химическим взаимодействием компонентов кориума и ЖМ.

Внутренний объем корпуса УЛР заполнен ЖМ на основе оксидов железа и алюминия, который предназначен для доокисления кориума, его разбавления в целях уменьшения плотности объемного энерго-

выделения и увеличения поверхности теплообмена расплава с корпусом УЛР, охлаждаемым снаружи водой. Физико-химическое взаимодействие компонентов расплава с ЖМ начинается при определенной температуре в условиях контакта двух материалов и включает в себя: разогрев, плавление, растворение, разложение, химические реакции компонентов ЖМ и расплава.

Химические реакции в УЛР могут быть поделены на две группы: происходящие непосредственно на фронте плавления и происходящие в объеме расплава при смешивании продуктов реакций и не прореагировавшего ЖМ с массой кориума. В разработанной модели эти реакции рассматриваются по отдельности, при этом первая группа реакций оказывает влияние на состояние малого объема на фронте плавления, а вторая – на весь бассейн расплава.

При разработке модели сделаны следующие предположения:

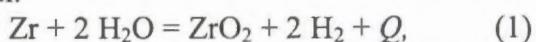
– тепловой поток, подводимый к поверхности ЖМ, определяется как теплом, выделяющимся в реакционном слое во фронте плавления, так и теплообменом при свободной конвекции. Параметрами, задающими величину потока, служат разность температур в реакционном слое и характерная температура поверхности;

– тепловой поток отводится от реакционного слоя во фронте плавления к объему расплава в процессе свободно-конвективного теплообмена. Интенсивность последнего определяется разностью температур реакционного слоя и объема расплава, а также ориентацией поверхности ЖМ;

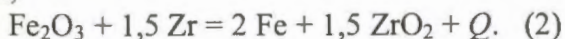
– массообмен реакционного слоя во фронте плавления с ЖМ и расплавом состоит в притоке оксидов железа и неокисленного Fe из блока ЖМ в реакционный слой, в поступлении в него Zr и компонентов стали (Cr, Ni, Fe) из расплава кориума. Из реакционного слоя в расплав кориума поступают продукты химической реакции и непрореагировавшие компоненты ЖМ (оксид алюминия, избыток жертвенной стали или оксида железа). В случае стратифицированного расплава они распределяются в соответствующие слои.

Во фронте плавления ЖМ могут присутствовать следующие химически активные вещества: в твердой фазе – Fe, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O (в составе бетона ЖМ), в расплаве – Zr, Fe, Cr, Ni. Эти вещества вступают в реакцию с разной интенсивностью, в частности, при одновременной реакции Zr и Fe с кислородом вклад железа в химическое тепловыделение составляет около 4 %, т.е. при наличии циркония вклад железа оказывается пренебрежимо мал. В связи с этим реакции во фронте плавления можно разделить на четыре группы в соответствии с плотой и скоростью их протекания.

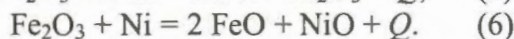
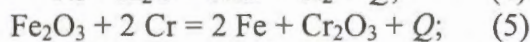
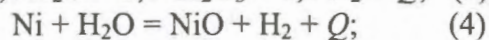
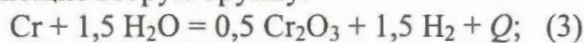
В первую группу входят наиболее быстро протекающие реакции окисления циркония:



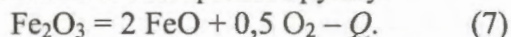
где  $Q$  – тепло, выделяющееся в ходе реакции;



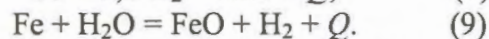
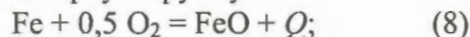
Эти реакции происходят в первую очередь и длятся до исчерпания реагентов в зоне реакции. После завершения этих реакций при наличии реагентов проходят аналогичные реакции окисления Cr и Ni, входящих в состав нержавеющей стали, составляющие вторую группу:



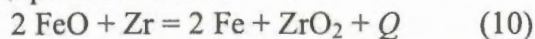
Если по завершении реакций второй группы остается Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, он будет разлагаться под действием температуры, эта реакция представляет собой третью группу:



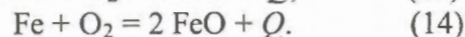
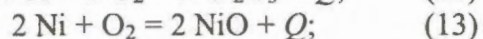
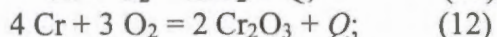
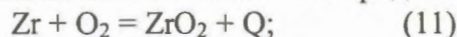
Выделившийся в результате этой реакции кислород и оставшаяся от предыдущих реакций вода окисляют железо, содержащееся в расплаве и ЖМ. Эти реакции составляют четвертую группу:



После завершения реакций на фронте плавления и перед смешиванием продуктов реакции с ванной расплава моделируются аналогичные реакции, проходящие в объеме. Здесь могут проходить реакции (1), (3), (4), (8), (9), а также реакция замещения железа цирконием в FeO



и реакции окисления металлов кислородом:



В гомогенном расплаве могут проходить все эти реакции при наличии реагирующих веществ. В случае стратифицированного расплава возможные реакции зависят от взаимного расположения слоев и области, в которой происходило разрушение ЖМ. Так как оксидный слой практически не содержит химически активных веществ, в случае стратифицированного расплава реакции проходят в основном в объеме металлического слоя.

Код ГЕФЕСТ-УЛР содержит также модели генерации неконденсируемых газов: кислорода – в результате восстановления гематита и водорода – в результате дегид-

ратации содержащихся в бетоне соединений кальция и последующего окисления металлических компонентов кориума выделившимся водяным паром. Полное описание моделей кода ГЕФЕСТ-УЛР изложено в [2].

### 3. Верификация моделей кода ГЕФЕСТ-УЛР

Для верификации моделей кода ГЕФЕСТ-УЛР применялись аналитические тесты, кросс-верификация с помощью кодов улучшенной оценки и непосредственно экспериментальные данные, что позволило верифицировать модели, описывающие все наиболее важные теплофизические и физико-химические процессы, протекающие в процессе локализации и охлаждения кориума в УЛР. Перечень верифицируемых моделей и использованный верификационный базис приведены в таблице, а результаты верификации кода ГЕФЕСТ-УЛР – в [2].

### 4. Исходные данные для проведения расчетов

При анализе протекающих в УЛР процессов моделируется часть конструкции УЛР, включающая в себя корпус УЛР и все пять блоков наполнителя. Расчет осуществляется на сетке конечных элементов, состоящей из 11 600 элементов и 11 798 узловых точек. Сетка покрывает пространственную область, ограниченную внешней поверхностью корпуса УЛР.

Блоки наполнителя УЛР моделируются как конструкции, состоящие из нескольких материалов, таких как сталь, ЖМ, бетон. Внутри области, занимаемой загрузкой, имеются воздушные пустоты. Расположение элементов конструкции в расчетной модели максимально соответствует реальной конфигурации загрузки УЛР. Имеющиеся отклонения расчетной конфигурации от реальной связаны главным образом с двумерностью (осесимметричностью) расчетной модели и невозможностью отразить в полной мере расположение пластин ЖМ в блоках наполнителя, для чего в общем случае необходимо трехмерное представление.

Распределение ЖМ в расчетной модели задано в соответствии со средними аксиальным и радиальным распределениями массы во внутреннем объеме корпуса. При этом материалы располагались на расчетной сетке таким образом, чтобы площадь поверхности раздела между ячейками, заполненными ЖМ, и пустотами в загрузке была близка к реальной.

В исходных данных задаются параметры кориума, поступающего в УЛР в ходе тяжелой аварии. Конкретные значения этих параметров зависят от особенностей сценария тяжелой аварии. При этом имеют значение как особенности энергоблока, применительно к которому рассматривается гипотетическая авария, так и набор исходных событий аварии.

Сценарии для расчетного анализа выбирались по следующим критериям:

**Т а б л и ц а** экспериментов и тестов, включенных в верификационную базу кода ГЕФЕСТ-УЛР

Верификационный базис	Верифицируемая модель процесса
Тест: аналитическое решение задачи Стефана	Распространение фронта плавления
Тест: задача о радиационном теплообмене двух вложенных цилиндров	Температура приграничных областей в условиях теплообмена излучением с границ
Тест: нестационарная температура стержня с граничным условием 3-го рода	Теплоотдача от горячего металла к воде
Кросс-верификация: численный CFD-расчет задачи гидродинамики	Конвективная теплопередача в стратифицированном расплаве
Эксперименты программы РАСПЛАВ с солевыми расплавами – имитаторами кориума [3]	Конвективный теплообмен в условиях формирования корки на охлаждаемой стенке
Крупномасштабные интегральные эксперименты программы РАСПЛАВ серии AW-200 [4]	Динамика формирования бассейна расплава в натурном кориуме
Эксперименты серии SACR [5]	Взаимодействие кориума с ЖМ

- максимальная мощность остаточных тепловыделений;
- максимальная температура поступающего расплава;
- минимальная степень окисления кориума, так как большое количество неокисленного циркония в составе кориума обеспечивает значительное энергосодержание при его доокислении в УЛР.

На основе данных критериев выбраны следующие три базовых сценария для анализа:

- большая течь Ду850 с отказом активной части САОЗ на ЛАЭС-2,
- малая течь Ду70 с отказом активной части САОЗ на ЛАЭС-2,
- большая течь Ду850 с отказом активной части САОЗ на НВАЭС-2.

Результаты расчетного анализа выбранных сценариев с помощью тяжелоаварий-

ного кода СОКРАТ приведены в [6]. Полученные данные по параметрам расплава, поступающего в УЛР из разрушенного корпуса реактора, используются в качестве граничных условий при моделировании поведения расплава в УЛР. В исходных данных задаются массы компонентов кориума (оксида урана, оксида циркония, циркония, стали), поступающих в УЛР, и средняя температура поступающего расплава.

### 5. Результаты анализа поведения кориума в УЛР

Результаты моделирования поведения кориума в УЛР в ходе аварии с большой течью Ду850 на ЛАЭС-2 приведены на рис. 2...6. Данный сценарий характеризуется относительно ранним приходом расплава в УЛР (2 часа 5 минут после начала аварии)

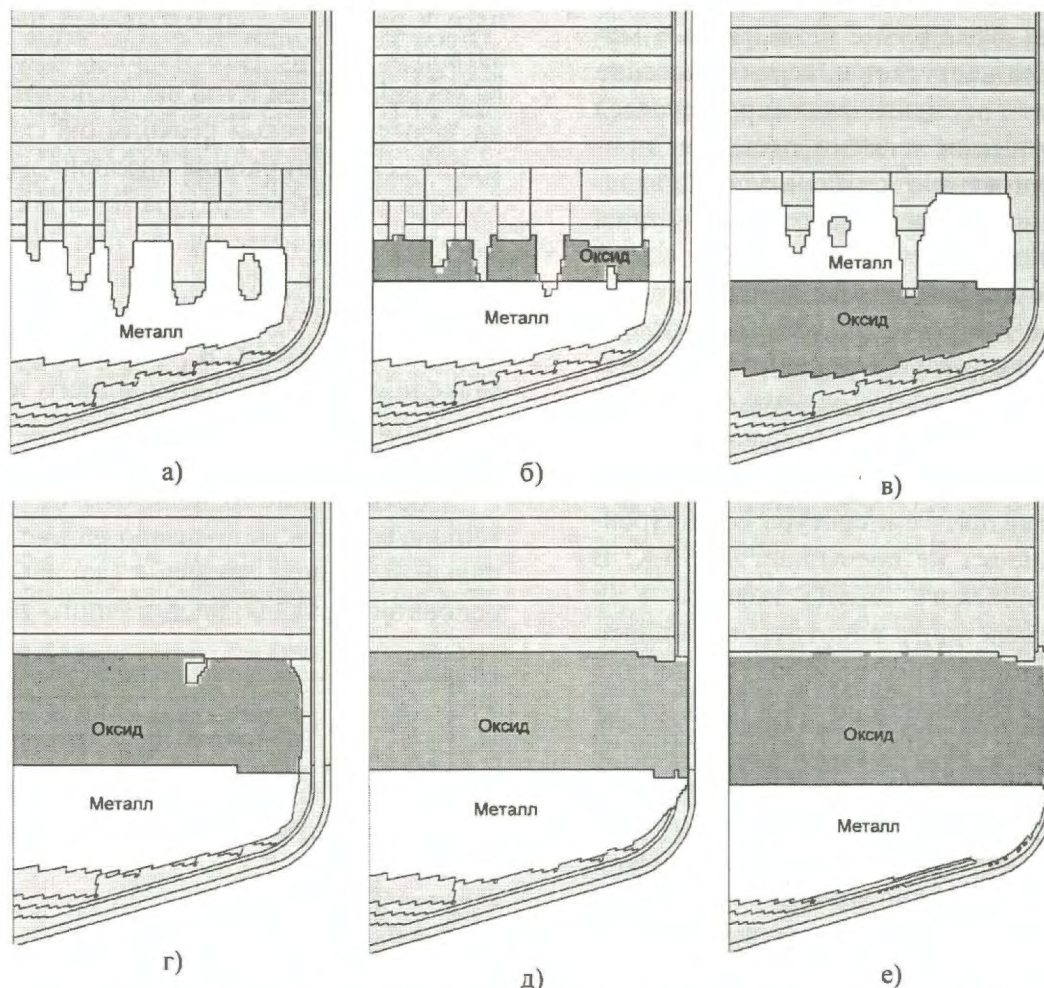


Рис. 2. Динамика формирования бассейна расплава в УЛР при аварии с большой течью Ду850 на ЛАЭС-2: а) 4 минуты от момента поступления расплава в УЛР – гомогенный расплав; б) поступило 65 т стали: сверху – легкие оксиды, внизу – металлы; в) нормальное расслоение: сверху – металлы, внизу – оксиды; г) инверсное расслоение: сверху – оксиды, внизу – металлы; д) фронт бассейна расплава достиг внешней стенки УЛР; е) расплав начал застывать

и, следовательно, большой мощностью остаточных тепловыделений (~ 28 МВт), а также высокой температурой приходящего кориума (~ 2 800 К) и низкой степенью его окисления (~ 25 %). В течение первых 6-ти минут поступающий в УЛР расплав содержит только металлическую фазу кориума. В этот период 67 т поступившей в УЛР стали взаимодействуют с ЖМ, вызывая его частичное расплавление.

Незадолго до начала поступления оксидной фазы кориума происходит расслоение бассейна расплава с выходом легких оксидов ( $ZrO_2$ ,  $Al_2O_3$ ,  $FeO$ ) в верхний слой. Вскоре после поступления в УЛР первых порций оксидного кориума, содержащего  $UO_2$ , тяжелая оксидная фаза опускается в нижнюю часть бассейна расплава. Далее происходит насыщение оксидной фазы кориума легкими оксидами, плотность ее уменьшается, вследствие чего на 40-й минуте процесса наступает инверсия бассейна расплава и его оксидная фаза перемещается вверх. Насыщение легкими оксидами приводит к понижению температуры плавления оксидного расплава до величины 1 900...2 000 К.

Через 2 часа после начала поступления кориума в УЛР происходит проплавление внутренней стенки корпуса УЛР и керамического наполнителя в межстенном пространстве двойного корпуса в его цилиндрической части. Внешняя стенка корпуса при этом не плавится. Температура ее внутренней поверхности не превышает 1 350 К. В районе конического днища корпуса УЛР фронт расплава почти вплотную приближается к внешней стенке корпуса, но не достигает ее внутренней поверхности. К концу первых суток процесса распространение фронта бассейна расплава в радиальном направлении прекращается. Начинается застывание оксидной фазы кориума. На внутренней поверхности внешней стенки корпуса образуется корка из застывших оксидов. Динамика формирования бассейна расплава представлена на рис. 2.

На рис. 3 приведены осредненные температуры кориума. Наиболее высоких значений температуры достигают в течение первых 3-х часов после начала поступления

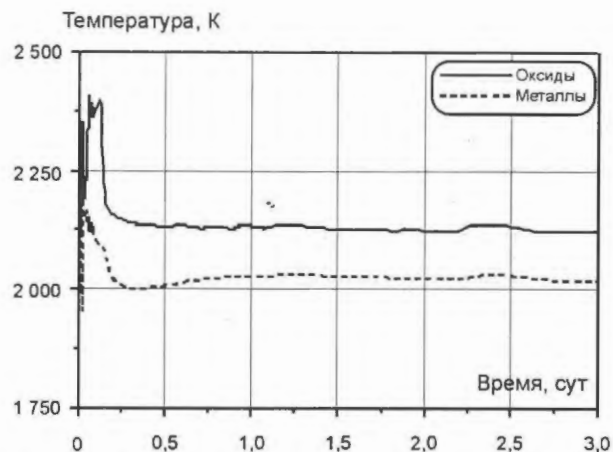


Рис. 3. Средняя температура кориума в УЛР при аварии с большой течью Ду850 на ЛАЭС-2

кориума. Это связано с тем, что в этот период отсутствует водяное охлаждение верхней поверхности бассейна расплава — из консервативных предположений принято, что вода подается на расплав только через 3 часа в результате срабатывания пассивных затворов. Кроме того, температура расплава увеличивается из-за выделяющегося тепла экзотермической реакции окисления металлического циркония кислородом гематита. Средняя температура оксидного слоя кориума поднимается в этот период до 2 400 К. После начала подачи воды на кориум температура его начинает достаточно быстро снижаться и стабилизируется на значениях 2 150 К для оксидного и 2 000 К для металлического слоев расплава. Начинается медленное остывание расплава.

Соотношение отводимых от расплава тепловых потоков показано на рис. 4. В начальный период времени (до двух часов) основной составляющей полного теплового

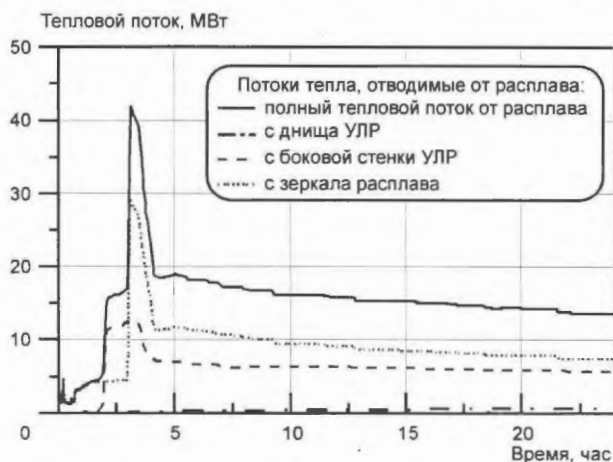


Рис. 4. Потоки тепла, отводимые от расплава при аварии с большой течью Ду850 на ЛАЭС-2

потока, отводимого от расплава, является теплоотвод излучением с зеркала расплава на уровне примерно 8 МВт. Через 2 часа после начала поступления расплава в УЛР отводимый поток увеличивается до 16 МВт за счет теплосъема с боковой стенки корпуса УЛР. При подаче воды сверху на зеркало расплава имеет место всплеск теплоотвода от УЛР до 43 МВт. Затем тепловые потоки снижаются и стабилизируются.

Изменение химического состава оксидной фазы кориума в период времени от расслоения расплава до стабилизации состава кориума показано на рис. 5. До поступления в УЛР оксида урана оксидный слой состоит только из легких оксидов. Вскоре после поступления  $UO_2$  его массовая доля в оксидной фазе поднимается до 56 %. Затем разбавление расплава оксидами железа и алюминия обеспечивает снижение концентрации  $UO_2$  в оксидной фазе кориума до 40 % по массе. Содержание  $ZrO_2$  в оксидном слое снижается с 46 до 13 %. Динамика расхода гематита в химических реакциях взаимодействия расплава с ЖМ представлена на рис. 6.

Одним из наиболее важных параметров при обосновании работоспособности УЛР служит величина теплового потока, снимаемого водой с внешней поверхности корпуса. Максимальные значения теплового потока сопоставлены с величинами критического теплового потока для поверхностей с соответствующим углом наклона, взятыми из работы [7]. Максимальное значение теплового потока, зафиксированное в расчете,

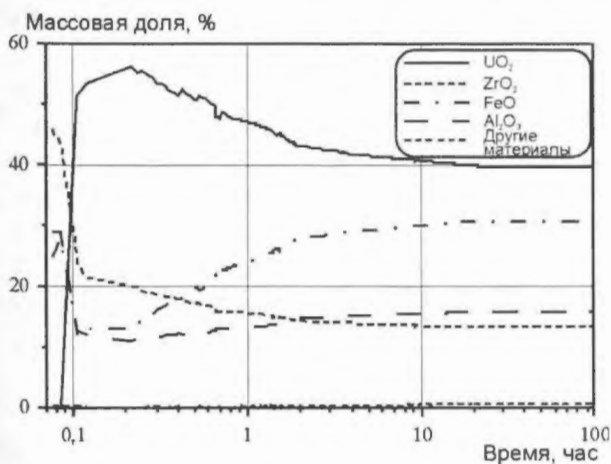


Рис. 5. Изменение во времени состава оксидной фазы кориума при аварии Ду850 на ЛАЭС-2

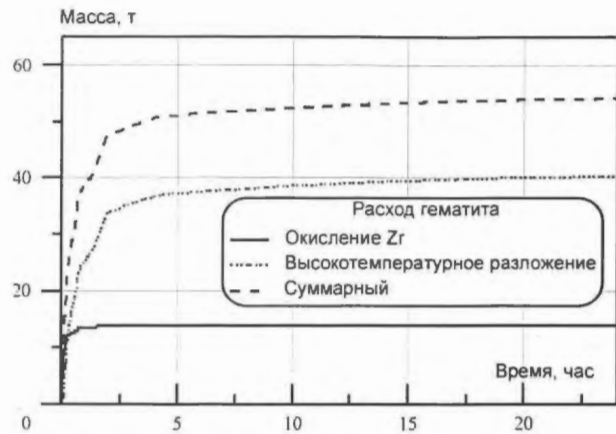


Рис. 6. Расход гематита в химических реакциях при аварии с большой течью Ду850 на ЛАЭС-2

составляет  $0,38 \text{ МВт/м}^2$  и достигается через 3,5 часа после начала поступления расплава в УЛР на вертикальной стенке на высоте 2 м от днища корпуса. Эта высотная отметка находится в области расположения оксидного слоя кориума в цилиндрической части корпуса УЛР. Минимальный запас до кризиса теплоотдачи на внешней поверхности УЛР составляет  $\sim 3$ .

Сценарии аварий с малой течью Ду70 на ЛАЭС-2 и с большой течью Ду850 на НВАЭС-2 характеризуются значительно более поздним приходом расплава в УЛР (10 и 36 часов после начала аварии, соответственно), следствием чего является существенно меньшее остаточное энерговыделение в кориуме, чем в рассмотренном выше сценарии. Данное обстоятельство приводит к еще менее напряженному тепловому режиму работы УЛР в рассмотренных сценариях.

Заметная генерация пара начинается примерно через 2,5 часа после начала поступления расплава в УЛР, когда прогреваются основная масса ЖМ и стенка УЛР. После подачи воды на зеркало расплава скорость генерации пара резко возрастает и достигает для случая аварии с большой течью Ду850 на ЛАЭС-2 максимального значения 14 кг/с. Примерно через час после этого скорость генерации водяного пара постепенно снижается и не превышает значения 6 кг/с.

Похожая картина наблюдается и для других рассмотренных сценариев аварий. На рис. 7 представлены данные по генерации пара для аварии с малой течью Ду70 на ЛАЭС-2.

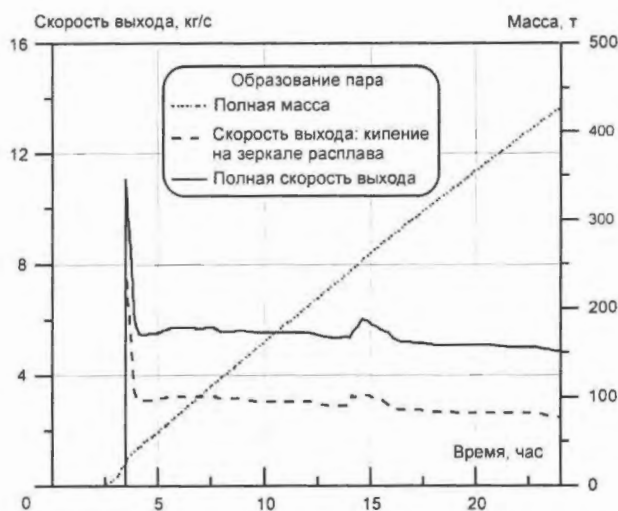


Рис. 7. Генерация пара при аварии с малой течью Ду70 на ЛАЭС-2

### 6. Результаты расчетов образования водорода в УЛР

Практически весь поступающий в УЛР металлический цирконий связывается с кислородом в реакции с гематитом без образования водорода. Учитывается генерация водорода за счет окисления циркония паром, находящимся над поверхностью расплава, от начала поступления расплава в УЛР до момента инверсии металлической и оксидной фаз расплава, но его доля в общем балансе невелика. Основной вклад в генерацию водорода вносит реакция окисления железа при взаимодействии с водой, выпаренной из бетона. В моделях кода ГЕФЕСТ-УЛР учитывается также образование водорода в результате разложения содержащихся в воде гидразина и аммиака, а также радиолиза и термической диссоциации воды.

Выполненные оценки выхода водорода для случая аварии с большой течью Ду850 на ЛАЭС-2 показывают, что основной вклад в генерацию водорода вносит реакция окисления железа при взаимодействии с водой, выпаренной из бетона (рис. 8). Согласно расчету она составляет 48 кг. Консервативные оценки генерации водорода из всех других источников дополнительно дают еще 26,4 кг водорода.

Таким образом, полное количество водорода, образовавшегося в течение 10 часов из всех возможных источников, составляет 74,4 кг. При этом следует отметить, что в более длительной перспективе выде-



Рис. 8. Генерация водорода в УЛР при взаимодействии расплава с бетоном для аварии с большой течью Ду850 на ЛАЭС-2

ление водорода может продолжаться, хотя и существенно менее интенсивно (меньше 0,7 кг/час), за счет разложения гидразина и аммиака.

Сценарий аварии с малой течью Ду70 на ЛАЭС-2 по сравнению с течью Ду850 характеризуется на 10 часов более поздним приходом расплава в УЛР после начала аварии. Это приводит к меньшему остаточному энерговыделению в корииуме. Однако, масса переместившегося в УЛР корииума в сценарии с малой течью почти на 50 % больше, чем для сценария с большой течью (~ 250 т), и степень окисления корииума существенно более высокая (75 % по сравнению с 25 % для Ду850). Сравнительный анализ результатов моделирования двух указанных сценариев, проведенный в [8], показывает, что хронология и характер протекающих процессов подобны и различия в результатах расчетов невелики.

Поступление в УЛР большего количества расплава приводит к большему прогреву нижней части УЛР в течение более длительного времени. Большая длительность процесса прогрева УЛР в сценарии с малой течью Ду70 приводит к генерации водорода в течение большего промежутка времени, но фактически при той же полной выделившейся массе ~ 50 кг.

В работе [8] выполнено также моделирование поведения УЛР в ходе аварии с большой течью Ду850 на НВАЭС-2. Этот сценарий отличается существенно более

поздним разрушением корпуса реактора, чем все сценарии, рассмотренные для ЛАЭС-2, поэтому мощность остаточного энерговыделения в данном случае еще ниже, чем для аварии с малой течью Ду70 на ЛАЭС-2. Полученные в расчетах [8] значения температур кориума для этого сценария в среднем ниже, чем для сценариев, смоделированных для ЛАЭС-2, поэтому основные характеристики газовой выделения, хотя и подобны рассмотренным, представляются более мягкими. За счет окисления металлов паром, выделившимся из бетона, образуются ~ 44 кг водорода, как показано на рис. 9.

В результате выполненных с помощью кода ГЕФЕСТ-УЛР расчетов проанализированы процессы образования водорода в УЛР для трех сценариев тяжелых аварий на АЭС-2006 (НВАЭС-2 и ЛАЭС-2): с большой течью Ду850 на ЛАЭС-2, с малой течью Ду70 на ЛАЭС-2, с большой течью Ду850 на НВАЭС-2.

Анализ результатов расчетов показал, что основной вклад в генерацию водорода вносит реакция окисления железа при взаимодействии с водой, выпаренной из бетона. Максимальное количество образовавшегося из бетона водорода (~ 50 кг) получено для аварии с малой течью Ду70 на ЛАЭС-2. Оценки генерации водорода из всех других источников дополнительно дают еще порядка 25 кг водорода.

Таким образом, полное количество водорода, образующегося в УЛР из всех воз-

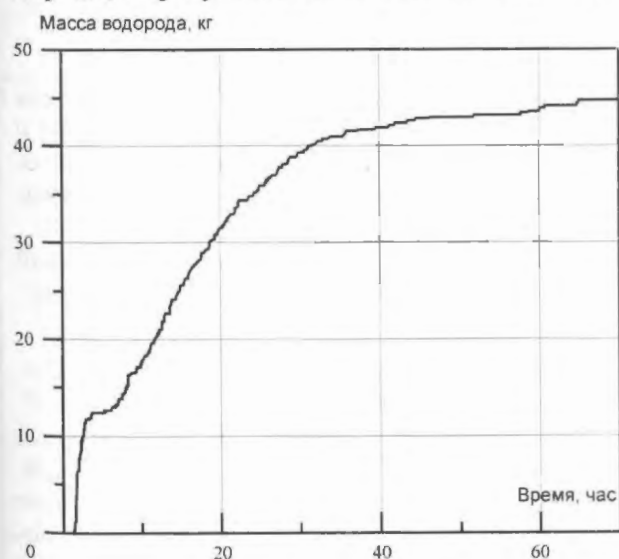


Рис. 9. Генерация водорода в УЛР при взаимодействии расплава с бетоном для аварии с большой течью Ду850 на НВАЭС-2

можных источников при тяжелых авариях на АЭС с ВВЭР-1200 для всех трех рассмотренных сценариев, не превышает 75 кг.

Следует отметить, что расчетный анализ эффективности работы УЛР выполнен в рамках консервативного подхода с выбором для анализа, как показано в разделе 4, наиболее тяжелых сценариев аварий с точки зрения обеспечения локализации и охлаждения расплава. В настоящее время ведется разработка модуля для выполнения анализа неопределенности и чувствительности результатов расчетов по коду ГЕФЕСТ-УЛР к неопределенностям входных данных для расчета.

### Заключение

Результаты расчетного анализа поведения кориума с помощью кода ГЕФЕСТ-УЛР показали, что унифицированное УЛР для АЭС-2006 (НВАЭС-2, ЛАЭС-2) эффективно выполняет свои функции по приему, удержанию и долговременному охлаждению кориума. В частности:

- в расчетах не зафиксировано плавление наружной стенки корпуса УЛР. Максимальная температура внутренней поверхности стенки для всех рассмотренных сценариев аварий не превышает значения 1350 К. Минимальный запас до кризиса теплоотдачи на внешней поверхности УЛР составляет ~3;

- скорость генерации водяного пара достигает максимального значения 14 кг/с при подаче воды сверху на зеркало расплава, но примерно через час после этого скорость генерации водяного пара постепенно снижается и не превышает значения 6 кг/с;

- практически весь поступающий в УЛР металлический цирконий связывается с кислородом в реакции с гематитом без образования водорода. Основной вклад в генерацию водорода вносит реакция окисления железа при взаимодействии с водой, выпаренной из бетона. Максимальное количество водорода, образующегося в УЛР из всех возможных источников при тяжелых авариях на АЭС-2006 с ВВЭР-1200 для всех трех рассмотренных сценариев, не превышает 75 кг.

## Список литературы

1. *Игнатьев А.И., Киселев А.Е., Семенов В.Н. и др.* ГЕФЕСТ: численное моделирование процессов в нижней части реактора ВВЭР при тяжелой аварии. Препринт ИБРАЭ № ИБРАЭ-2003-13. М.: 2003.
2. *Звонарев Ю.А., Цуриков Д.Ф., Киселев Н.П. и др.* Разработка и верификация расчетной модели УЛР в виде, пригодном для интеграции в расчетный код СОКРАТ, включающей модели поведения расплава, физико-химических взаимодействий расплава с жертвенным материалом. Отчет о НИР РНЦ "Курчатовский институт" инв. № 90-12/01-20-08, 2008.
3. *Asmolov V., Abalin S., Surenkov A. et al.* Results of Salt Experiments Performed During Phase I of RASPLAV Project. RP-TR-33, RRC KI, Moscow, 1998.
4. *Asmolov V., Abalin S., Strizhov V. et al.* Behaviour of Corium Melt Pool under External Cooling, Rasplav Final Report, RRC KI, Moscow, July 2000.
5. *Бешта С.В., Хабенский В.Б., Грановский В.С. и др.* Эксперимент Sacr-7. Техническая информация. НИТИ, 2000.
6. *Проклов В.Б., Пылев С.С., Киселев А.Е. и др.* Разработка унифицированного перечня исходных данных в обоснование унификации материалов и конструкции УЛР. Отчет о НИР РНЦ "Курчатовский институт" инв. № 90-12/01-18-08, 2008.
7. *Rempe J.L., Sun K.Y., Cheung F.B., Kim S.B.* In-Vessel retention of molten corium: lessons learned and outstanding issues // Nuclear Technology, Vol. 161, March 2008.
8. *Звонарев Ю.А., Цуриков Д.Ф., Филиппов А.С. и др.* Расчетное исследование поведения кориума в устройстве локализации расплава для АЭС-2006. Препринт ИАЭ-6591/4, 2009.

Контактная информация –

Киселев Николай Павлович, с. н. с., тел.:  
(499)196-72-82, e-mail: [nk@nsi.kiae.ru](mailto:nk@nsi.kiae.ru)

Вопросы атомной науки и техники.

Сер. Физика ядерных реакторов, 2010, вып. 1,  
с. 68–78.

УДК 681.06+519.68

## Интеллектуальная оболочка вычислительного объекта и ее специальное программное обеспечение

*В.Ф. Токаренко,*

РНЦ "Курчатовский институт", 123182, Москва, пл. Курчатова, 1,  
*И.М. Беляков, А.М. Варгин, О.А. Воронова, Ю.Ф. Данилов,  
А.А. Деулин, В.В. Евдокимов, Д.В. Кульнев, П.С. Лобанов,  
М.С. Самигулин, Г.П. Семенов, Р.М. Шагалиев, Т.В. Шемякина,*  
РФЯЦ-ВНИИЭФ, 607188, г. Саров Нижегородской обл., пр-т Мира, 37  
Поступила в редакцию 22.07.2009 г.

В разработанной распределенной многопроцессорной вычислительной системе (PMBC) базовым элементом является вычислительный объект (ВО), состоящий из интеллектуальной оболочки (ИО) и самого кода или системы кодов. ИО обеспечивает обмен данными между ВО, а также обменивается данными с самим кодом. Изложено описание основных функций, выполняемых ИО, и их программной реализации.

*Ключевые слова:* распределенная многопроцессорная вычислительная система, вычислительный объект, интеллектуальная оболочка, программное обеспечение, персональный компьютер, супер-ЭВМ.

**The Intellectual Cover of Computing Object and Its Special Software.** *V.F. Tokarenko, RRC "Kurchatov Institute", 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182, I.M. Belyakov, A.M. Vargin, O.A. Voronova, Yu.F. Danilov, A.A. Deulin, V.V. Evdokimov, D.V. Kul'neev, P.S. Lobanov, M.S. Samigulin, G.P. Semenov, R.M. Shagaliev, T.V. Shemyakina, RFNC-VNIIEF, 37, Mira Ave., Sarov, Nizhni Novgorod region, 607188.* The computing object, consisting of intellectual environment (IE) and the code or system of codes is a base element of distributed multiprocessor computing system. IE provides data exchange between computing objects, and also exchanges the data with a code. The description of the basic functions of IE and their program realization are presented.

*Key Words:* Distributed Multiprocessor Computing System, Computing Object, Intellectual Cover, Software, Personal Computer, Super Computer.

В статье [1] дано описание разработанной технологии создания самонастраивающейся системы решения задач ядерной энергетики на РМВС с супер-ЭВМ, которая на базе существующего верифицированного прикладного программного обеспечения (ППО) решает как первоочередные, так и перспективные задачи ядерной энергетики на современных РМВС с супер-ЭВМ.

В этой же статье изложены методы подготовки кодов для включения их в среду РМВС и дано описание программных блоков, реализующих такое подключение. Настоящая и последующие публикации преследуют цель изложить в краткой форме инструкции пользователя этой системы. В данной статье изложены задачи, решаемые программным обеспечением (ПО) ИО ВО, и его структура.

В разработанной версии ВО ИО выполняет следующие функции:

- определяет точки синхронизации для обмена информацией между ВО;
- организует получение и передачу обменных функций кода;
- выводит код на очередную точку синхронизации;
- управляет кодом в глобальных точках синхронизации (запись контрольных точек для продолжения расчета и т.д.);
- вызывает соответствующие конверторы для преобразования информации к внутреннему виду кода.

ПО, реализующее перечисленные функции, названо агентом ИО. Агент разработан на базе программного пакета PSS (Parallel Scalable Suit) [2, 3] и служит составной частью ПО интеллектуальной среды распределенной библиотеки ППО [4].

Внутри ВО управление ИО кодом реализовано по алгоритму, приведенному на рис. 1. Обмен данными между ВО организован по схеме рис. 2. Здесь в скобках указаны имена функций ИО. Дадим краткое описание функций, приведенных на схемах рис. 1 и 2.

*Инициализация соединения задачи и агента –*  
 C++: int pss\_init (unsigned int rank\_appl, unsigned int type\_appl, const char \*task\_name);  
 Фортран: subroutine pss\_init (rank\_appl, type\_appl, task\_name, err, & len\_task\_name).



Рис. 1. Алгоритм ИО управления кодом

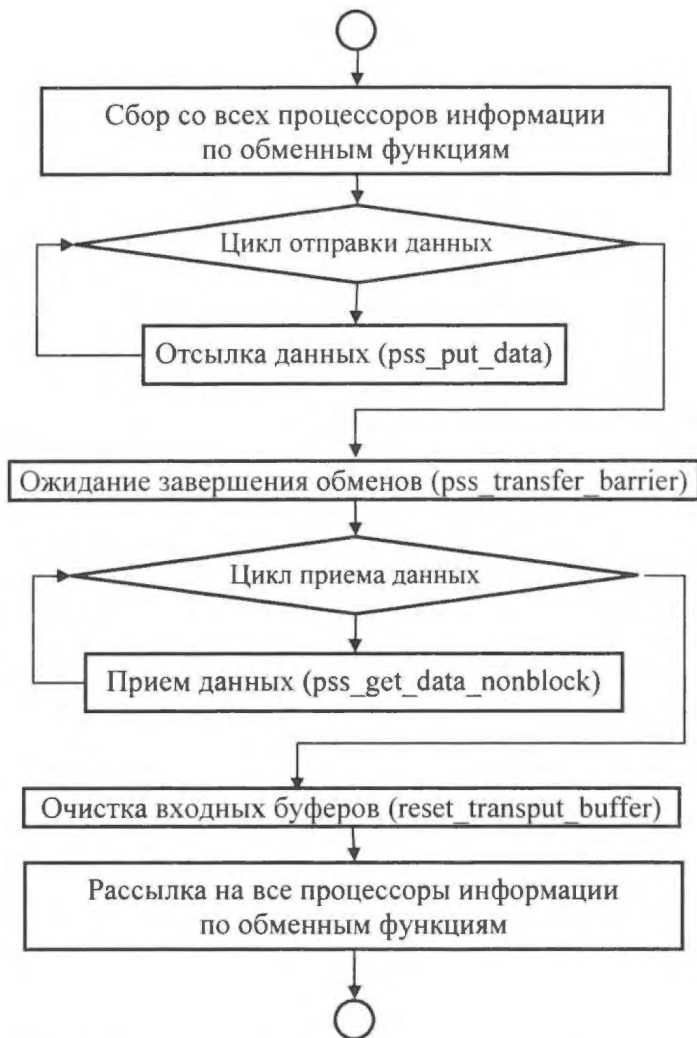


Рис. 2. Алгоритм обмена физическими данными между БО

Здесь `rank_appl` – ранг параллельного приложения, а если приложение последовательное, то этот параметр игнорируется; `type_appl` – может принимать два значения `APPL_SEQ` и `APPL_MPI`, если приложение последовательное или параллельное, соответственно; `task_name` – имя задачи, которая проводит инициализацию.

*Завершение соединения задачи и агента ИО –*

С++: `int pss_finalize (void);`

Фортран: `subroutine pss_finalize (err).`

После данного вызова все последующие обращения к любым API-функциям специального ПО ИО, в том числе к `pss_init (...)`, запрещены.

*Функции синхронизации физического времени.*

Для работы с физическим временем реализованы две функции определения общего времени:

- `pss_get_global_time_sync`,
- `pss_get_global_time_sync_max`.

Получение шага по времени до следующей глобальной точки синхронизации –

С++: `int pss_get_global_time_sync (double wishful_gl_time_sync, double *pnext_gl_time_sync);`

Фортран: `subroutine pss_get_global_time_sync (wishful_gl_time_sync, & pnext_gl_time_sync).`

Здесь

`wishful_gl_time_sync` – желаемый временной шаг глобальной синхронизации (входной параметр);

`pnext_gl_time_sync` – шаг, полученный ИО согласно желаемым шагам всех участвующих приложений и критериям, на которые сконфигурирована задача через паспорт ИО (выходной параметр).

Проверка синхронизации времен различных процессов, полученных при считывании разреза –

С++: `int pss_get_global_time_sync_max (double wishful_gl_time_sync, double *pnext_gl_time_sync);`

Фортран: `subroutine pss_get_global_time_sync_max (wishful_gl_time_sync, & pnext_gl_time_sync).`

Здесь

`wishful_gl_time_sync` – момент физического времени, которому соответствует разрез, записанный кодом (входной параметр);

`pnext_gl_time_sync` – момент физического времени, полученный ИО исходя из времен, поданных кодами в ИО (выходной параметр).

Функция `pss_get_global_time_sync_max` берет максимум из времен, поданных всеми кодами. Если хотя бы у одного кода участника расчета полученное от ИО время отличается от собственного времени больше, чем на допустимую погрешность, то код должен остановить расчет средствами ИО. Если для кода время разреза неактуально для проведения расчета, он должен передать в ИО отрицательное число.

После вызова любой из этих двух функций данные, которые посылаются другими

агентами и относятся к предыдущей точке синхронизации, не будут записываться в стек приема обслуживающего агента ИО. Данная функция относится к коллективным операциям.

#### *Управление расчетом.*

Получение информации о последующих действиях кода –

C++: `int pss_get_mind (unsigned int wishful_mind, unsigned int *pmind_resulting);`

Фортран: `subroutine pss_get_mind (wishful_mind, pmind_resulting, err).`

Данная функция вырабатывает информацию о последующих действиях кода: закрытие, сохранение и закрытие, продолжение счета, сохранение и продолжение счета. Эта функция относится к коллективным операциям.

Здесь `wishful_mind` – желаемые действия и возможности; `pmind_resulting` – действие, выработанное ИО путем взятия побитового логического ИЛИ из всех желаемых кодами действий и применения особых правил, например, требования на сохранение результатов каждые три часа.

Набор желаемых действий и возможностей задается через битовую маску, значения битов в которой заданы в файле `macros_constf.h` (`macros_const.h`):

- `PSS_Mind_BadCalcStatus=1` – ошибка расчета (АВОСТ),
- `PSS_Mind_NeedStop=2` – требование останова,
- `PSS_Mind_CanNotSave=4` – нет возможности сохранения разреза,
- `PSS_Mind_NeedSave=8` – есть потребность в сохранении разреза,
- `PSS_Mind_HaveNewData=16` – есть данные для обмена на текущей точке синхронизации,
- `PSS_Mind_CanNotExchange=32` – нет возможности обмена данными на текущей точке синхронизации.

Чтобы код мог сообщить ИО свои желаемые действия, необходимо в качестве параметра `wishful_mind` подать целое чис-

ло, полученное путем сложения параметров из приведенного выше списка. Например, битовая маска, равная `PSS_Mind_NeedStop + PSS_Mind_NeedSave`, заказывает сохранение разреза и останов счета.

#### *Выполнение обмена физическими обменными функциями через ИО.*

Алгоритм обмена физическими данными содержит следующие основные пункты:

- передача всех имеющихся физических данных через обменные функции,
- ожидание окончания обмена,
- прием из входного буфера необходимых данных,
- очистка входного буфера.

Очистка буфера приема данных в агенте ИО:

C++: `int pss_reset_transput_buffer();`

Фортран: `subroutine pss_reset_transput_buffer (err).`

Данную функцию необходимо вызывать после завершения обмена информацией, чтобы избежать получения задачей старых данных, которые присланы на предыдущих точках синхронизации.

Ожидание завершения всех обменов:

C++: `int pss_transfer_barrier();`

Фортран: `subroutine pss_transfer_barrier (err).`

Вызов данной функции приводит к ожиданию завершения всех обменов между ИО и синхронизации всех кодов в точке вызова данной функции.

Прием и передача данных: функции передачи физических данных являются блокирующими типа точка-точка операциями.

Неблокирующая передача данных –

C++: `int pss_put_data (const void *buf, int count, unsigned int type_data, unsigned int physical_type_data, char *dest, unsigned int anchor_point, const void *grid, int size_grid, unsigned int type_data_grid, err);`

Фортран: `subroutine pss_put_data (buf, count, type_data, & physical_type_data, dest, anchor_point, grid, & size_grid, type_data_grid, err).`

Здесь

`buf` – адрес начала буфера передаваемых физических данных,

count – количество передаваемых данных,  
type\_data – тип передаваемых данных,  
physical\_type\_data – физический смысл данных,  
dest – имя класса приемника данных,  
anchor\_point – точка привязки,  
grid – адрес буфера, где хранится сетка,  
size\_grid – размер сетки (в данной реализации должно быть подано значение, равное count + 1),  
type\_data\_grid – тип данных в буфере сетки.

Прием сообщения с блокировкой –

```
C++: int pss_get_data_nonblock (void *buf,  
int count, unsigned int physical_type_data,  
unsigned int anchor_point, unsigned int type_data,  
const void *grid, int size_grid, unsigned int type_data_grid, err);
```

Фортран: subroutine pss\_get\_data\_nonblock (buf, count, type\_data, & physical\_type\_data, anchor\_point, grid, & size\_grid, type\_data\_grid, err).

В случае отсутствия запрошенных данных во входном буфере в качестве результата работы функции (err) будет возвращено значение > 0, а в случае ошибки – < 0. Смысл параметров данной функции такой же, как у функции передачи данных. При приеме сообщения не важен класс источника сообщения, так как задача требует определенные физические данные и ей неважно, кто их предоставил. Блокировка гарантирует, что после возврата из функции все элементы сообщения уже будут приняты и расположены в буфере buf. Набор данных, доставляемых во входной буфер, зависит от перечня физических классов кода, который заявлен в паспорте ВО данного кода.

Перечень констант, перечисляющих идентификаторы типов физических функций, физических классов кодов и типов данных для передачи/приема буфера и сетки, задан в файле macros\_constf.h (macros\_const.h для C++).

Описание типов передаваемых данных: pss\_int, pss\_float, pss\_double, pss\_char.

Описание типов обменных функций:

- pss\_func\_statinfo\_chanelnum,
- pss\_func\_total\_power,
- pss\_func\_coolant\_power,

- pss\_func\_coolant\_temp,
- pss\_func\_coolant\_density,
- pss\_func\_fuel\_power,
- pss\_func\_fuel\_temp,
- pss\_func\_fuel\_density,
- pss\_func\_graphite\_power,
- pss\_func\_graphite\_temp,
- pss\_func\_graphite\_density.

Идентификаторы классов кодов:

- pss\_code\_neutronics,
- pss\_code\_thermo\_hydro\_dynamics.

Идентификаторы признака последовательного или параллельного приложения:

- APPL\_MPI – приложение параллельное (проведена инициализация MPI (вызвана MPI\_Init)),
- APPL\_SEQ – приложение последовательное.

## Заключение

ИО разработаны для кодов STEPAN и KOBRA [5], MCU [6], KORAT-3D [7], PATEG [8], SimWort 3D [9]. Путем подключения этих кодов к соответствующим ИО созданы ВО, с помощью которых выполнены связанные расчеты нейтронно-физических и теплогидравлических процессов в активной зоне РБМК [1]. Результаты расчетов показали принципиальную возможность объединения независимых кодов с помощью ИО для проведения связанных расчетов на РМВС с компьютерами разного класса и под управлением различных операционных систем.

## Список литературы

1. Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Деулин А.А. и др. Технология разработки распределенных вычислительных систем на базе супер-ЭВМ для решения комплексных задач ядерной энергетики // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2009, вып. 4, с. 26–54.
2. Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Варгин А.М. и др. Программное обеспечение PSS\_IS (версия 1.0). Рекламно-техническое описание. Отчет РНЦ “Курчатовский институт” и РФЯЦ-ВНИИЭФ, гос. рег. № 0120.0810069, инв. № 36-10/16-09, 2009.

3. *Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Деулин А.А. и др.* Технология разработки программных комплексов, ориентированных на СуперЭВМ, для исследований функционирования сложных технических систем на всех этапах их жизненного цикла. Этап № 3. Экспериментальные исследования поставленных перед НИР задач. Шифр 2007-4-1.4-00-06-085. Отчет РНЦ "Курчатовский институт", гос рег. № 0120.0810069, инв. № 46-21/14-08. 2008.

4. *Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Деулин А.А. и др.* Распределенная библиотека ППО и ее интеллектуальная среда // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2009, вып. 4, с. 55–65.

5. *Краюшкин А.В., Бабайцев В.Н., Глембоцкий А.В. и др.* Верификационный отчет по программе STEPAN/КОВРА для анализа аварий в РБМК. Отчет РНЦ "Курчатовский институт", инв. № 33-02/30, 2002.

6. *Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Глушков А.Е. и др.* Программа MCU-REA\_2 с библиотекой констант DLC/MCUDAT-2.2. Отчет РНЦ "Курчатовский институт", № 36/19-2001, 2001.

7. *Федотова Л.П., Шагалиев Р.М.* Математическая методика KORAT-3D численного решения трехмерных групповых задач диффузии

нейтронов на регулярных и нерегулярных пространственных сетках // ВАНТ. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики, 1994, вып. 4.

8. *Самигулин М.С., Воронова О.А., Данилов Ю.Ф. и др.* Системный двухжидкостной термогидравлический код РАТЕГ. Моделирование термогидравлики ВВЭР-1000 на внутрикорпусной стадии тяжелой аварии. В сб. "Вопросы безопасности ЯЭС с ВВЭР". Том 2. Анализ аварийных ситуаций: компьютерные коды и экспериментальные исследования. Труды научно-практ. семинара, С.-Петербург, 12-14 сентября 2000 г.

9. *Данилов В.А., Зенков А.Д., Малкин С.Д. и др.* Компьютерная технология SimPort™: опыт внедрения // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2002, вып. 3, с. 64–71.

*Контактная информация –*

*Токаренко Виктор Федорович, нач. лаб., тел.: (499)196-70-16, e-mail: tvf@dhtp.kiae.ru*

*Вопросы атомной науки и техники.*

*Сер. Физика ядерных реакторов, 2010, вып. 1, с. 78–83.*

УДК 681.06+519.68

## Конверторы для интеллектуальных оболочек

*В.Ф. Токаренко,*

РНЦ "Курчатовский институт", 123182, Москва, пл. Курчатова, 1,  
*И.М. Беляков, А.М. Варгин, О.А. Воронова, Ю.Ф. Данилов,  
А.А. Деулин, В.В. Евдокимов, Д.В. Кульнев, П.С. Лобанов,  
М.С. Самигулин, Г.П. Семенов, Р.М. Шагалиев, Т.В. Шемякина,*  
РФЯЦ-ВНИИЭФ, 607188, г. Саров Нижегородской обл., пр-т Мира, 37  
Поступила в редакцию 22.07.2009 г.

Приводится описание структуры и функций конвертора и алгоритма разработки конвертора для конкретного кода.

*Ключевые слова:* вычислительный объект, интеллектуальная оболочка, конвертор, файл конфигурации, интерполяция данных.

**Converters for Intellectual Covers.** *V.F. Tokarenko, RRC "Kurchatov Institute", 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182, I.M. Belyakov, A.M. Vargin, O.A. Voronova, Yu.F. Danilov, A.A. Deulin, V.V. Evdokimov, D.V. Kul'neev, P.S. Lobanov, M.S. Samigulin, G.P. Semenov, R.M. Shagaliev, T.V. Shemyakina, RFNC-VNIIEF, 37, Mira Ave., Sarov, Nizhni Novgorod region, 607188.* The description of structure and functions of the converter and algorithm of its realization for a concrete code are presented.

*Key Words:* Computing Object, Intellectual Cover, Converter, File of Configuration, Interpolation of Data.

Как уже отмечалось в предыдущей статье (с. 78–83), цель данных публикаций – изложить в краткой форме инструкцию подготовки кодов для включения в среду распределенной многопроцессорной вычислительной системы. В этой статье изложены методы создания конверторов для перевода стандартных данных в формат кода и из формата кода в стандартный формат.

В разработанной технологии [1] для создания системы конвертирования информации реализованы стандартные входные и выходные конверторы [2...4], но также оставлена возможность подключения специальных конверторов для кодов. Выбор и загрузка конверторов производятся динамически средствами интеллектуальных оболочек (ИО) согласно информации, указанной в файле описателя вычислительного объекта (ВО). Для каждой загружаемой копии конвертора существует свой конфигурационный файл, который загружается и обрабатывается средствами ИО, и содержащаяся в нем информация передается в конвертор через специальные подпрограммы ИО.

Стандартный конвертор реализован так, что он независим от архитектуры и операционной системы и обладает легкой переносимостью на различные ЭВМ. Принципы функционирования конверторов и примеры их реализации для конкретных кодов приведены в работе [1]. В этой статье будут рассмотрены технология разработки конвертора и структура его программного обеспечения.

**Создание конвертора кода.** Процесс создания конвертора кода разделяется на два этапа. На первом создается файл конфигурации конвертора; объем информации, задаваемой в файле конфигурации, описан ниже. Ко второму этапу пользователь приступает только в случае необходимости специфической обработки данных, не предусмотренной в рамках реализации стандартного конвертора. Пользователь вносит необходимые изменения в открытые коды пользовательских функций конвертора и самостоятельно получает объектный файл, путь и имя которого указывает в описателе ВО.

Файл конфигурации создается на этапе создания конвертора кода и содержит в себе необходимую информацию для работы конвертора, обеспечивающего корректный обмен информацией внутри системы, связывающей несколько ВО. В файле конфигурации содержится следующая информация:

- учетная информация;
- описания нестандартных физических размерностей, используемых кодом, с указанием принципа приведения к стандартным обменным размерностям;
- описание обменных функций, имеющих нестандартные физические размерности;
- карта пересчета привязок;
- пользовательская информация.

Файл записывается в формате xml и представляет следующую структуру:  
<converter>

*Учетная информация:*

- info
- Name = "Code1 converter"
- Version = "1.1"
- Comment = "Конвертор для кода 1"
- Author = "Иванов И. РФЯЦ ВНИИЭФ"
- Date = "2007.11.11"

*Описания нестандартных физических размерностей, используемых кодом, с указанием приведения к стандартным обменным размерностям.* Информация о нестандартных размерностях, используемых в коде (в случае, если некоторые из свойств опущены, к ним применяются следующие значения по умолчанию: user="0" a="0" b="1" c="0" d="1" e="1"; здесь приведены значения параметров показанной ниже формулы (1) пересчета размерности):

- user\_dimensionality
- user\_dim name="dimen1" user="0" a="1" b="2" c="3" d="4" e="5"
- user\_dim name="dimen2" a="1" b="2"
- user\_dim name="dimen3" user="1"
- user\_dim name="grid\_convert" d="100" — ключевое имя правила задает правило пересчета высотных сеток.

*Описание обменных функций, имеющих нестандартные физические размерности:*

- user\_exchange\_functions
- func name="Fuel:Temperature" dim="dimen 1"
- func name="Total:Power" dim="dimen3"  
Зарезервировано для пользовательского специального конвертора:
- user\_data
- file\_name="user\_additional\_info.txt"

*Описание карты приведения привязок к общему формату.* Значение свойства is\_full, отличное от нуля, свидетельствует о том, что любая принятая точка привязки кода должна быть найдена в карте пересчета, в противном случае ненайденная точка не конвертируется и не вызывает ситуации ошибки:

- transfer\_map is\_full="0"  
Привязки точки к точке:
- point local="00" global="1000"  
Привязки вектора к вектору:
- vector local\_a="01" local\_b="1000" global\_a="00" global\_b="999"
- transfer\_map

*Пользовательская информация.* Для создания своего собственного конвертора пользователю необходимо внести изменения в подпрограммы инициализации и завершения, приведения физических размерностей, пересчета точек привязки и интерполяции.

Для обменной функции, нестандартная физическая размерность которой определена в файле конфигурации конвертора, приведение физических размерностей ведется по следующему алгоритму.

1. Если поле user имеет нулевое значение, то пересчет производится по формуле

$$\text{Global\_Value} = a + b(c + d\text{Local\_Value})^e. \quad (1)$$

2. В противном случае в зависимости от направления конвертирования пересчет физической размерности производится в подпрограммах, переписываемых пользователем в специальном конверторе и имеющих следующий интерфейс:

- int IOConv\_LocalToGlobalValue (double \*buf, int count, unsigned int physical\_type\_data, unsigned int anchor\_point),

- int IOConv\_GlobalToLocalValue (double \*buf, int count, unsigned int physical\_type\_data, unsigned int anchor\_point),  
где buf – адрес начала буфера передаваемых физических данных, count – количество передаваемых данных, physical\_type\_data – физический смысл данных, anchor\_point – точка привязки.

Для пересчета точек привязки из локальной нумерации к общепринятой обменной и обратно в файле конфигурации конвертора задается карта связывания. Она представляет собой список проекций диапазонов точек в принятой в данном коде нумерации на общепринятую обменную систему нумерации.

Если принят признак, что карта является полной, то точка, не найденная в таблице пересчета, вызывает ошибочную ситуацию. Таблица должна задавать однозначное соответствие в обоих направлениях пересчета. В противном случае на этапе загрузки будет вызвана ошибочная ситуация.

В случае создания специального конвертора автор может переписать функции конвертирования:

- int IOConv\_LocalToGlobalAnchorPoint (unsigned int local\_anchor\_point, unsigned int global\_anchor\_point, int is\_full\_map, IOConv\_MapTable \*map\_table),
- int IOConv\_GlobalToLocalAnchorPoint (unsigned int local\_anchor\_point, unsigned int global\_anchor\_point, int is\_full\_map, IOConv\_MapTable \*map\_table),

где local\_anchor\_point и global\_anchor\_point – соответственно локальная и обменная точки привязки, is\_full\_map – признак полноты карты пересчета, IOConv\_MapTable – список структур, описывающий таблицу пересчета.

Структура IOConv\_MapTable имеет следующий вид.

struct IOConv\_MapTable:

- int is\_diapozon – признак диапазона или точки;
- unsigned int local\_a – локальное значение;
- unsigned int local\_b – local\_a если is\_diapozon = 0;
- unsigned int global\_a – общепринятое обменное значение;

- unsigned int global\_b – global\_a если is\_diapozon = 0;
- void\* next – следующий элемент таблицы.

Перед получением вектора обменной функции кодом-получателем во входном конвертере производится интерполяция физических величин с сетки отправителя на сетку получателя. Автор специального конвертера также может описать свою подпрограмму интерполяции согласно следующему описанию функции:

```
int IOConv_InterpolValue
(unsigned int physical_type_data, unsigned int
anchor_point, const double *source_buf, int
source_count, const double *source_grid, int
source_size_grid, unsigned int source_type_
data_grid, const double *dest_buf, int dest_
count, const double *dest_grid, int dest_size_
grid, unsigned int dest_type_data_grid),
```

где physical\_type\_data – физический смысл данных; anchor\_point – точка привязки; source\_buf, dest\_buf – адрес начала буфера физических данных кода источника и получателя, соответственно; source\_count, dest\_count – количество передаваемых данных; source\_grid, source\_size\_grid, dest\_grid, dest\_size\_grid – сетки отправителя и получателя и их размерности; source\_type\_data\_grid и dest\_type\_data\_grid – тип используемых сеток кодами отправителя и получателя.

Выбор алгоритма интерполяции может задаваться отдельно для каждой обменной функции через файл конфигурации конвертера.

Для нормального функционирования конвертера разработаны подпрограммы инициализации и завершения работы конвертера. Автор специального конвертера также имеет возможность переписать данные подпрограммы согласно собственным нуждам.

Инициализация конвертера:

```
int IOConv_Init (IOConv_Info* info, char*
user_config_file).
```

Инициализация работы конвертера происходит после загрузки и обработки файла конфигурации, построения таблиц нестандартных величин и карты пересчета точек привязки. В аргументе user\_config\_file передается путь к файлу пользовательских

данных в случае специального конвертера int IOConv\_Finalize (void).

Завершение работы конвертера и освобождение используемой памяти. Все последующие обращения к конвертеру, в том числе к IOConv\_Init (...), запрещены.

**Реализация системы конвертирования.** Система конвертирования обменных функций, средства динамического подключения конвертеров, прототип конвертера пользователя являются составной частью интеллектуальной среды распределенной библиотеки ППО и находятся в директории converter, описание которой приведено в работе [5]. Здесь же дается краткое описание основных программных блоков этой директории:

- iocnv.h содержит объявление служебных структур, необходимых для хранения данных базового конвертера, загружаемых из xml-файла конфигурации;
- iocnv\_proto.h содержит объявления интерфейсов API-функций базового и пользовательского конвертеров, а также некоторых служебных функций базового конвертера;
- iocnv\_base.c – базовая часть конвертера, включающая функции:
  - инициализации и завершения работы,
  - преобразования физических величин,
  - интерполяции физических величин на сетку получателя;
- iocnv\_user.c – прототип пользовательской части конвертера, в котором содержатся объявления функций пользователя, соответствующих функциям базового конвертера;
- iocnv\_config.c реализует анализ xml-файла конфигурации и инициализацию конвертера начальными данными, а также выполняет анализ функций базового конвертера и его служебных функций. Реализация функций пользовательского конвертера осуществляется блоком iocnv\_user.c, доступным для свободного редактирования пользователем;
- iocnvif.h содержит описание интерфейса динамического конвертера и агента ИО. Интерфейс реализован в виде трех структур: собственно интерфейса конвертера,

интерфейсов преобразования глобальных значений в локальные и локальных значений в глобальные. В интерфейсах преобразования содержатся указатели на функции, которые будут связаны с функциями конвертора пользователя;

- `iosonv_load.c` реализует два метода динамической загрузки конвертора и связывание интерфейса с пользовательскими функциями конвертора. Один метод выполняет загрузку объектного кода конвертора, а второй осуществляет его выгрузку с освобождением занимаемых ресурсов.

### Заключение

Особенностью реализации конвертора является то, что она не имеет зависимостей от архитектуры и операционной системы целевой ЭВМ. Разработаны конверторы для кодов PATEG[6], KORAT-3D [7], STEPAN и KOBRA [8]. Реализовано подключение конверторов к ИО этих кодов

При использовании конверторов проведены тестовые связанные расчеты с участием программ KORAT-3D, PATEG, STEPAN, KOBRA и SimWort 3D [9]. На этих тестах выполнены отладка и тестирование всех функций системы конвертирования. Результаты проведенных расчетов показали корректность работы и подтвердили достаточную функциональность полученной разработки.

### Список литературы

1. Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Деулин А.А. и др. Технология разработки распределенных вычислительных систем на базе супер-ЭВМ для решения комплексных задач ядерной энергетики // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2009, вып. 4, с. 26–54.
2. Деулин А.А. Создание программ конвертации расчетных данных разнородных процессов для моделирования сложных технических систем. Отчет ИЯР РНЦ “Курчатовский институт” по договору подряда № 2/11.4032, инв. № 12-46/75-07, 2007.
3. Деулин А.А. Включение программы-конвертора в РБППО и комплексное тестирование.

Отчет ИЯР РНЦ “Курчатовский институт” по договору подряда № 2/11.4032, инв. № 12-46/89-08, 2008.

4. Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Деулин А.А. и др. Технология разработки программных комплексов, ориентированных на СуперЭВМ, для исследований функционирования сложных технических систем на всех этапах их жизненного цикла. Этап № 3. Экспериментальные исследования поставленных перед НИР задач. Шифр 2007-4-1.4-00-06-085. Отчет РНЦ “Курчатовский институт”, гос. рег. № 0120.0810069, инв. № 46-21/14-08, 2008.

5. Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Деулин А.А. и др. Распределенная библиотека ППО и ее интеллектуальная среда // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2009, вып. 4, с. 55–65.

6. Самигулин М.С., Воронова О.А., Данилов Ю.Ф. и др. Системный двухжидкостной термогидравлический код PATEG. Моделирование термогидравлики ВВЭР-1000 на внутрикорпусной стадии тяжелой аварии. В сб. “Вопросы безопасности ЯЭС с ВВЭР”. Том 2. Анализ аварийных ситуаций: компьютерные коды и экспериментальные исследования. Труды научно-практ. семинара, С.-Петербург, 12-14 сентября 2000 г.

7. Федотова Л.П., Шагалев Р.М. Математическая методика KORAT-3D численного решения трехмерных групповых задач диффузии нейтронов на регулярных и нерегулярных пространственных сетках // ВАНТ. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики, 1994, вып. 4.

8. Краюшкин А.В., Бабайцев В.Н., Глембоцкий А.В. и др. Верификационный отчет по программе STEPAN/KOBRA для анализа аварий в РБМК. Отчет РНЦ “Курчатовский институт”, инв. № 33-02/30, 2002.

9. Данилов В.А., Зенков А.Д., Малкин С.Д. и др. Компьютерная технология SimPort™: опыт внедрения // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2002, вып. 3, с. 64–71.

Контактная информация –

Токаренко Виктор Федорович, нач. лаб., тел.: (499)196-70-16, e-mail: [tyf@dhtp.kiae.ru](mailto:tyf@dhtp.kiae.ru)

Вопросы атомной науки и техники.  
Сер. Физика ядерных реакторов, 2010, вып. 1,  
с. 83–87.

## ИС РБПО под управлением операционной среды Windows и методы отладки комплексных задач на эмуляторах

*В.Ф. Токаренко,*

РНЦ "Курчатовский институт", 123182, Москва, пл. Курчатова, 1,  
*И.М. Беляков, А.М. Варгин, О.А. Воронова, Ю.Ф. Данилов,*  
*А.А. Деулин, В.В. Евдокимов, Д.В. Кульнев, П.С. Лобанов,*  
*М.С. Самигулин, Г.П. Семенов, Р.М. Шагалиев, Т.В. Шемякина,*  
 РФЯЦ-ВНИИЭФ, 607188, г. Саров Нижегородской обл., пр-т Мира, 37,  
*В.А. Данилов,*  
 ОАО "СНИИП", 123060, Москва, ул. Расплетина, 5  
 Поступила в редакцию 22.07.2009 г.

Изложены описание интеллектуальной среды (ИС) распределенной библиотеки прикладного программного обеспечения (РБПО) для компьютеров с операционной средой (ОС) Windows и технология эмуляции вычислительной среды супер-ЭВМ на персональных компьютерах.

*Ключевые слова:* многопроцессорные вычислительные системы, супер-ЭВМ, вычислительный объект, программные комплексы, интеллектуальная среда, распределенная библиотека прикладного программного обеспечения.

**The Distributed Library of the Applied Software and Its Intellectual Environment under Windows and Methods of Debugging of Complex Tasks on Emulators.** *V.F. Tokarenko, RRC "Kurchatov Institute", 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182, I.M. Belyakov, A.M. Vargin, O.A. Voronova, Yu.F. Danilov, A.A. Deulin, V.V. Evdokimov, D.V. Kul'neev, P.S. Lobanov, M.S. Samigulin, G.P. Semenov, R.M. Shagaliev, T.V. Shemyakina, RFNC-VNIIEF, 37, Mira Ave., Sarov, Nizhni Novgorod region, 607188, V.A. Danilov, JSC "SNIP", 5, Raspletina St., Moscow, 123060.* The description of the intellectual environment of the applied software distributed library for computers under Windows and technology of emulation of the computing environment of the super computer on the personal computers are presented.

*Key Words:* Multiprocessor Computing Systems, Super Computer, Computing Object, Code Complexes, Intellectual Environment, Distributed Library of Applied Software.

Разработана версия технологии для проведения связанных расчетов в ИС РБПО под управлением ОС Windows [1...7]. Эта версия также позволяет эмулировать ОС супер-ЭВМ под Windows и тем самым выполнять отладочные работы с кодами на персональных компьютерах прежде, чем ставить их на супер-ЭВМ. В качестве проверки работоспособности и для отладки данной технологии проведено подключение к ИС РБПО Windows-приложения SimWorT 3D Viewer [8], которое проводит динамическую визуализацию расчетов.

**Версия интеллектуальной оболочки (ИО) для ОС Windows.** Программное обеспечение (ПО) для ОС Windows реализовано на языке C++. Коммуникационная часть ИО представляет собой набор агентов, каждый из которых взаимодействует со сво-

им расчетным кодом и пересылает данные другим агентам. В соответствии с главным требованием к ИО кода разработан API (Application Program Interface) пользователя для взаимодействия агента ИО и счетного приложения. В данной версии API пользователя реализованы возможности:

- 1) обеспечения глобальных точек синхронизации для обмена информацией между счетными приложениями;
- 2) управления кодом в глобальных точках синхронизации (завершение, сохранение и завершение, продолжение счета, сохранение результатов и продолжение счета);
- 3) получения и передачи обменных функций кода.

Также реализованы стандартные конверторы, вызов которых преобразует информацию к внутреннему виду счетного кода или к общему виду для передачи данных между агентами.

Агент ИО является консольным приложением. Описание его командной строки приведено ниже:

```
pss_agent.exe [-v] [-c conffile] [-x path xml data] [--ioconv]
```

-v – задает уровень отладки (количество необходимой отладочной информации, необходимой для разработчиков агента ИО, которая будет записана в файл ведения “логов”);

-c conffile – задает конфигурационный файл. Если данным ключом файл конфигураций не определен, то по умолчанию будет использоваться файл с названием aio.conf в текущем каталоге;

-x path xml data – определяет путь, где расположены паспорта и описатели задач, с которыми должен работать агент. По умолчанию – папка xml\_data в текущем каталоге;

--ioconv – говорит о необходимости применения конверторов при передаче данных.

Агент ИО является трехпоточным MPI-приложением. Основной поток (функция main ()) проводит инициализацию агента: чтение конфигурационного файла, загрузка данных о своей задаче. Далее запускается либо поток, обслуживающий соединение агента ИО с задачей и производящий дальнейшую пересылку данных, либо поток, исполняющий роль шлюза (gateway) между агентами, расположенными на разных машинах. Запуск того или иного потока определяется конфигурационным файлом агента ИО.

Пример конфигурационного файла без шлюза:

```
kora_t3d 0 n1
msc 1 n2
```

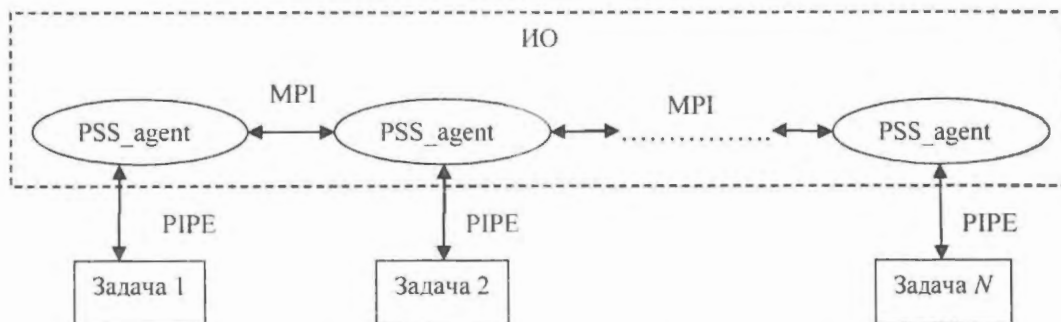


Рис. 1. Схема запущенных агентов ИО без шлюзов

В первом столбце записываются названия задач, во втором – номера процессоров, на которых они будут выполняться, в третьем – название хостов, на которых будут запущены задачи.

Пример конфигурационного файла со шлюзом (запускается как клиент):

```
msc 0 n2
gateway 1 host_name::5002
```

Назначение столбцов такое же, как и в предыдущем примере, но название второй задачи описано как gateway. Это как раз и говорит о том, что она будет запущена как шлюз. В третьем столбце определяется (записывается) информация, необходимая для связи шлюзов между собой. Первое значение до двоеточия – это имя хоста, на котором запущен другой шлюз, далее – его IP-адрес и третье – порт. Указание имени и IP-адреса необязательно – для соединения достаточно одного из них. Следует обратить внимание на то, что, если имя хоста или его IP-адрес не указаны, шлюз запускается как сервер:

```
skora_t3d 0 n2
gateway 1 ::5002
```

После запуска предыдущих 2-х запускается поток, обслуживающий прием MPI-сообщений от других агентов. Общая схема запущенных агентов ИО без шлюзов представлена на рис. 1.

На рис. 2 показана общая схема запущенных агентов ИО со шлюзами. Агент ИО типа шлюз не обслуживает какой-либо расчетный код, в его задачу входят лишь получение данных по MPI или TCP и в случае необходимости пересылка их дальше, используя TCP или MPI, соответственно.

Передача данных между кодом расчета и агентом ИО осуществляется посредством

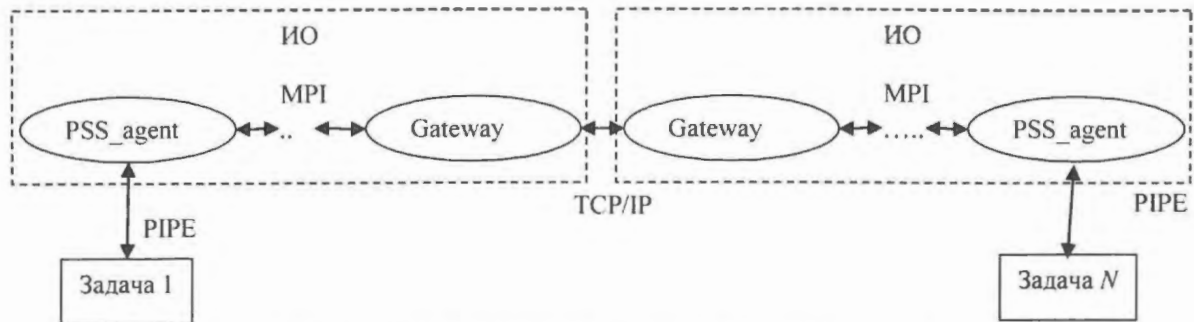


Рис. 2. Схема запущенных агентов ИО со шлюзами

именованных каналов (PIPE). Для передачи данных между агентами ИО применяется технология MPI (стандарт MPI 1.1). Передача данных между шлюзами осуществляется посредством сокетов по протоколу TCP/IP.

**IPC ИО.** Среди множества различных средств межпроцессного взаимодействия для обмена данными между агентом ИО и исполнимого последовательного или мастер-процесса параллельного приложения выбраны именованные каналы. PIPE подходит для решения поставленных задач передачи данных, являясь при этом легким и удобным в обращении средством.

Именованные каналы обладают рядом преимуществ по сравнению с другими средствами межпроцессного взаимодействия в рамках поставленных требований к свойствам системы, обеспечивая взаимодействие неродственных процессов, не требуя реализации механизма контроля досту-

па к общим ресурсам. Именованные каналы позволяют со стороны разработчиков ПО ИО реализовать поддержку выполнения в рамках задачи как 32, так и 64-разрядных приложений.

В ОС Windows именованные каналы могут работать в двунаправленном режиме, следовательно, для отправки и приема данных достаточно использовать только один канал, установленный в режим байтов. Но так как задача и агент ИО должны обмениваться и служебной информацией для организации контроля над приемом/передачей данных, синхронизации и прочих целей, необходимо создание еще одного канала для обмена сервисной информацией, который устанавливается в режим сообщений. Таким образом, структуру связи между агентом ИО и задачей можно представить схемой, изображенной на рис. 3

Представленные на рис. 3 функции обмена данными и сервисными сообщениями (write\_data\_pipe\_canal, read\_data\_pipe\_canal, write\_msg\_pipe\_canal, read\_msg\_pipe\_canal,

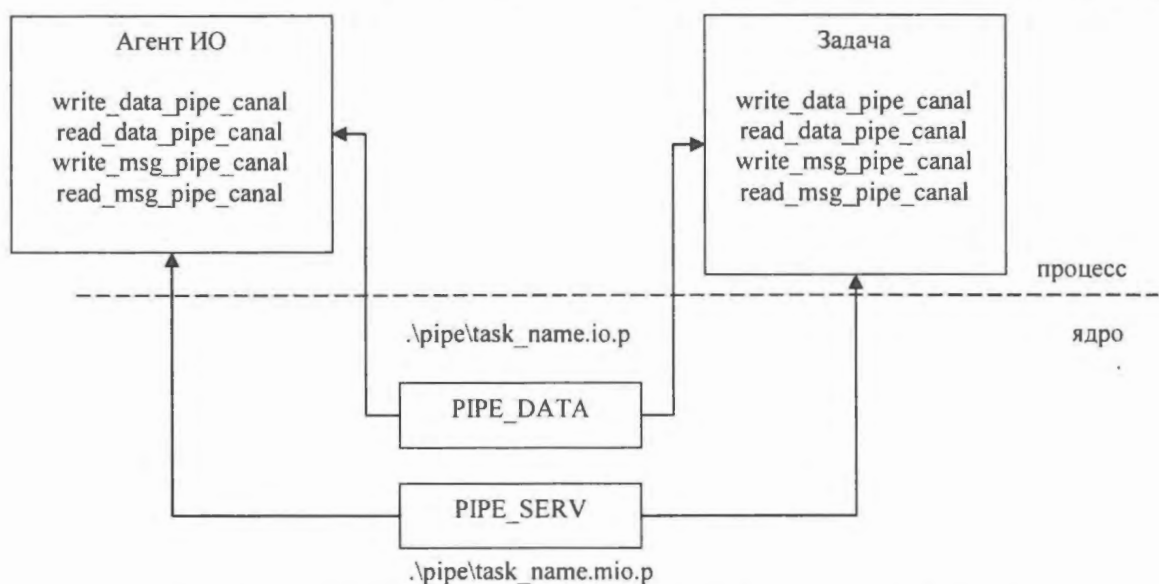


Рис. 3. Структура связей между агентом ИО и исполняемым кодом

`write_msg_pipe_canal`, `read_msg_pipe_canal`) являются обертками Win API-функций чтения/записи в файлы `ReadFile` и `WriteFile`. Они написаны для удобства работы с PIPE и логического разделения каналов на каналы передачи данных и сервисных сообщений.

Любое взаимодействие агента ИО и исполняемого кода (получение следующей глобальной точки синхронизации, определение дальнейших действий и др.) сводится к процедурам передачи и приема данных. Опишем принцип этих процедур в точке синхронизации. Через сервисный канал `PIPE_SERV` задача сообщает агенту ИО о характере своих действий, а именно, что она хочет: передать или получить данные. Отдельный поток агента ИО, прочитав пожелания задачи и в зависимости от них, или принимает от нее данные, читая канал `PIPE_DATA`, или после конвертации данных из общего вида к виду задачи передает их ей, записывая в канал `PIPE_DATA`, если таковые имеются.

Следует отметить, что, если задача требует данные, которые еще не доставлены, агент ИО через сервисный канал `PIPE_SERV` сообщает приложению о невозможности завершить операцию, что приводит к блокировке исполняемого кода. Блокировка снимается при поступлении в сервисный канал `PIPE_SERV` сообщения о наличии данных, далее задача производит чтение данных из канала `PIPE_DATA`. Тем самым может возникнуть нежелательная блокировка взаимодействующих компонентов общей системы при использовании блокирующих типа точка-точка API-функций `pss_put_data(...)` и `pss_get_data(...)`.

Чтобы избежать данной ситуации, необходимо сначала передать все физические данные и лишь потом приступить к приему.

**TCP/IP ИО.** Передача данных между агентами-шлюзами осуществляется с применением сокетов по сетевому протоколу TCP/IP. Данный протокол поддерживается многими современными операционными системами, что делает его использование универсальным и эффективным. Он реализует связь с установлением соединения, обеспечивая надежную безошибочную передачу данных.

Сокеты могут работать в двунаправленном режиме, поэтому для передачи данных и сервисных сообщений по определенному протоколу создается одно соединение. Но для еще большей гарантии правильности и надежности передаваемых данных создается еще одно соединение, применяемое для пересылки сервисных сообщений подтверждения. Общая структура связи между шлюзами представлена на рис. 4.

Любое взаимодействие агента ИО и исполняемого кода (получение следующей глобальной точки синхронизации, определение дальнейших действий и др.) сводится к процедурам передачи и приема данных. Опишем принцип этих процедур в точке синхронизации. Через основное соединение один из шлюзов сообщает другому о характере своих действий, а именно, что он хочет: передать или получить данные.

Отдельный поток агента-шлюза ИО, прочитав пожелания другого агента-шлюза и в зависимости от них, или принимает от него данные, или передает ему через основной канал. После каждого получения сообщений или данных по второму соединению отправляется уведомление об их получении. Агент-шлюз, дождавшись подтверждения, продолжает свою работу. При его отсутствии некоторое время по приходе уведомления другого события или уведомления, отличного от ожидаемого, агент-шлюз отмечает наличие ошибки в "лог-файле"

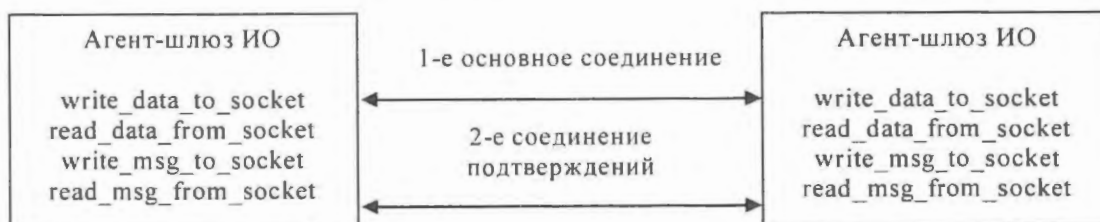


Рис. 4. Структура связей между шлюзами

для поиска причины и дальнейшего ее устранения и завершает свою работу.

**MPI ИО.** Для реализации MPI части агента выбран пакет mpich 1.2.2. Приведем список MPI-функций, на которых основано взаимодействие агентов ИО:

- 1) int MPI\_Barrier (MPI\_Comm comm);
- 2) int MPI\_Allreduce (void \*sbuf, void \*rbuf, int count, MPI\_Datatype datatype, MPI\_Op op, MPI\_Comm comm);
- 3) int MPI\_Send (void \*buf, int count, MPI\_Datatype datatype, int dest, int msgtag, MPI\_Comm comm);
- 4) int MPI\_Get\_count (MPI\_Status \*status, MPI\_Datatype datatype, int \*count);
- 5) int MPI\_Recv (void \*buf, int count, MPI\_Datatype datatype, int source, int msgtag, MPI\_Comm comm, MPI\_Status \*status);
- 6) int MPI\_Iprobe (int source, int msgtag, MPI\_Comm comm, int \*flag, MPI\_Status \*status).

Первая функция используется для синхронизации работы агентов. Все агенты ИО выходят на барьер в двух случаях – после установки контакта со своей задачей и в глобальных точках синхронизации. Также MPI\_Barrier (...) вызывается в API-функции pss\_initialize (...), если эту функцию вызывает параллельное приложение.

Вторая функция применяется для вычисления глобальных точек синхронизации. Так как данную функцию вызывает поток, обслуживающий соединение агента ИО с задачей, то на время ее выполнения поток, занимающийся приемом MPI-сообщений, должен быть остановлен для корректной работы системы.

Последующие три функции используются непосредственно для пересылки и приема данных между агентами. Опишем эту процедуру. При получении данных агентом ИО от своей задачи происходит их конвертирование к стандартному виду и мгновенная пересылка получателем – вызов MPI\_Send (...). Все агенты ИО содержат поток, обслуживающий прием MPI-сообщений. В этом потоке, в цикле, вызывается шестая функция MPI\_Iprobe (MPI\_ANY\_SOURCE, MPI\_ANY\_TAG, ...).

При обнаружении прихода сообщения проверяется, содержит ли оно служебную информацию или данные, также проверяется источник сообщения, чтобы не получить чужую информацию. Если пришли данные, то получаем информацию о количестве данных – вызов MPI\_Get\_count (...), выделяем буфер и вызываем MPI\_Recv (...), данные хранятся до востребования задачей или до тех пор, пока исполняемый код не потребует очистить стек приема. Если же пришла служебная информация, то выполняются необходимые действия по закрытию, сохранению и др.

**Генератор управляющих команд и данных.** Основное назначение данной компоненты – генерация последовательности функций WPSS\_API, которые обрабатываются управляющей программой. Генерация команд и данных производится как на основе созданных пользователем файлов сценариев, так и при вводе команд в среде GUI. При этом пользователю предоставляются удобные средства для автоматизации подготовки файлов сценариев. Предусмотрена процедура для проверки корректности задания сценариев. Данные для расчетного кода формируются в “родном” для него формате. Таким образом, можно промоделировать работу любой задачи, с которой должен быть “связан” код отлаживаемого ВО.

**Паспорт ВО.** Для каждого ВО, включаемого в систему, разработчиками системы или разработчиком данного ВО подготавливается паспорт ВО, который характеризует данный ВО. Как правило, паспорт ВО готовится один раз и является неизменным для всех задач, использующих данный ВО. В текущей реализации в паспорте ВО указываются следующие параметры:

- уникальное имя, под которым он идентифицируется в системе;
- класс физического кода;
- параллельный или последовательный код;
- версия данного кода;
- параметры, определяющие область применимости данного кода.

Данные паспорта ВО используются ИО системы при ее инициализации. Паспорт подготавливается в формате xml либо с помощью графического приложения GenPassport, либо в обычном текстовом редакторе.

Пример такого паспорта для программы KORAT [9]:

- ```

passport
• task_name korat3d_v3_2 /task_name
• mode parallel /mode
• version3.2 /version
• range_min 100 /range_min
• range_max 200 /range_max
• task_classes
• class_name Neutron /class_name
• task_classes /passport
  
```

Если же создается паспорт для шлюза, то нужно указать имя задачи как gateway и описать классы задач, которые находятся на другом конце соединения.

Пример паспорта для шлюза:

- ```

passport
• task_name gateway /task_name
• task_classes amount = "1"
• class_name Neutronics /class_name
• /task_classes /passport
  
```

#### **Описатель ВО для данной задачи.**

Данные паспорта являются, как правило, неизменными. Данные для конкретного расчета могут изменяться в зависимости от типа задачи, в которой применяется данный вычислительный код (ВО). Поэтому параметры описания ВО для конкретного задания могут выделяться в отдельный файл либо быть составной частью паспорта.

Файл описателя ВО подготавливается так же, как и паспорт, в формате xml либо с помощью графического приложения GenDescrib, либо в обычном текстовом редакторе. Данные описателя ВО используются ИО системы при ее инициализации для установки требуемых связей (каналов) с другими ВО данной задачи.

Ниже дается пример файла описателя ВО для программы KORAT [9]:

- ```

describe_task
• task_name korat3d_v3_2 /task_name
resource
• exec /path_to_exe/korat3dm /exec
  
```

- numproc 20 /numproc
  - memory 8GB /memory
  - /resource
  - initial\_time\_sink 0.4 /initial\_time\_sink
- ```

contacts
• class physical_class1 /class
• class physical_class2 /class
• /contacts
  
```

Inbox

- Size 1GB /size
- Data TEPLO1 /data
- Converter standard /converter
- conv\_file /path\_to\_file/korat\_in1.xml /conv\_file
- /inbox

Inbox

- Size 0.5GB /size
- Data TEPLO2 /data
- Converter standard /converter
- conv\_file /path\_to\_file/korat\_in2.xml /conv\_file
- /inbox

Outbox

- Data Pressure /data
- Converter standard /converter
- conv\_file /path\_to\_file/korat\_out1.xml /conv\_file
- /outbox
- /describe\_task

При создании описателя для шлюза нужно имя задачи поменять на gateway и описать классы задач, с которыми он должен устанавливать соединения.

Пример описателя для шлюза:

- ```

task
• task_name gateway /task_name
• contacts amount="2"
• class Neutronics /class
• class Thermohydrodynamics /class
• /contacts
• /task
  
```

**WPSS\_API.** Коды обмениваются информацией со своим агентом ИО, используя специально разработанные API-функции. Для корректной работы системы определен следующий порядок вызовов API-функций в точках синхронизации: pss\_get\_mind () – определяем поведение кода, pss\_put\_data (...) – передача данных,

`pss_get_data (...)` – прием, `pss_get_gl_time_sinc (...)` – определяем следующую глобальную точку синхронизации, `reset_transput_buffer (...)` – сброс буфера.

Ниже представлено описание вызовов данных функций на примере языка С. Для языка FORTRAN реализованы wrapper (обертки) для этих функций, осуществляющие их вызов из программ, написанных на языке FORTRAN.

*Функции инициализации –*

`int pss_init (unsigned int rank_appl, unsigned int type_appl, const char *task_name)`

Инициализация соединения задачи и агента: `rank_appl` – ранг параллельного приложения; если приложение последовательное, этот параметр игнорируется; `type_appl` – может принимать два значения `APPL_SEQ` и `APPL_MPI`, если приложение последовательное или параллельное, соответственно; `task_name` – имя задачи, которая проводит инициализацию.

`int pss_finalize (void)`

Завершение соединения задачи и агента ИО. Все последующие обращения к любым API-функциям специального ПО ИО, в том числе к `pss_init (...)`, запрещены.

*Функции передачи физических данных –* являются блокирующими типа точка-точка операциями

`int pss_put_data (const void *buf, int count, unsigned int type_data, unsigned int physical_type_data, char *dest, unsigned int anchor_point, const void *grid, int size_grid, unsigned int type_data_grid)`

Блокирующая передача данных: `buf` – адрес начала буфера передаваемых физических данных; `count` – количество передаваемых данных; `type_data` – тип передаваемых данных; `physical_type_data` – физический смысл данных; `dest` – имя класса приемника данных; `anchor_point` – точка привязки; `grid` – адрес буфера, где хранится сетка; `size_grid` – размер сетки; `type_data_grid` – тип данных в буфере сетки.

Блокировка гарантирует корректность повторного применения всех параметров после возврата из функции. Это означает, что после возврата из данной функции можно использовать любые присутствующие в вызове функции переменные без опасения испортить передаваемое сообщение.

`int pss_get_data (void *buf, int count, unsigned int physical_type_data, unsigned int anchor_point, unsigned int type_data, const void *grid, int size_grid, unsigned int type_data_grid)`

Прием сообщения с блокировкой. Смысл параметров данной функции такой же, как у функции передачи данных. При приеме сообщения не важен класс источника сообщения, так как задача требует определенные физические данные и ей неважно, кто их доставил. Блокировка гарантирует, что после возврата из функции все элементы сообщения уже будут приняты и расположены в буфере `buf`.

*Функции синхронизации –*

`int pss_get_global_time_sinc (double wishful_gl_time_sinc, double *pnnext_gl_time_sinc)`

Данная функция позволяет получить следующую глобальную точку синхронизации: `wishful_gl_time_sinc` – желаемый временной шаг глобальной синхронизации, `pnnext_gl_time_sinc` – шаг, полученный ИО путем взятия максимума из всех желаемых. После вызова этой функции данные, которые посылаются другими агентами и относятся к предыдущей точке синхронизации, не будут записываться в стек приема обслуживающего агента ИО. Данная функция относится к коллективным операциям.

*Функции управления –*

`int pss_get_mind (unsigned int wishful_mind, unsigned int *pmind_resulting)`

Данная функция вырабатывает информацию о последующих действиях кода – закрытие, сохранение и закрытие, продолжение счета, сохранение и продолжение счета: `wishful_mind` – желаемое действие, `pmind_resulting` – действие, полученное ИО путем взятия минимума из всех желаемых и применения особых правил, например, требования на сохранение результатов каждые три часа. Эта функция относится к коллективным операциям.

Функция очистки стека приема данных в агенте ИО: `int reset_transput_buffer()`. Данную функцию необходимо вызывать после завершения обмена информацией, чтобы избежать получения задачей старых данных, которые присланы на предыдущих точках синхронизации.

*Программа SimWorT 3D Viewer и ее интеграция с ИО.* Технология SimPorT™ [8] обладает широким набором программ, обеспечивающих практически все известные способы визуализации результатов моделирования и данных о модели. Одной из таких программ является программа для просмотра трехмерных массивов – SimWorT 3D Viewer, специально разработанная для динамического просмотра результатов трехмерного моделирования нейтронно-кинетических и теплогидравлических процессов в активной зоне реактора.

Программа SimWorT 3D Viewer позволяет просматривать двумерные массивы в виде как трехмерных поверхностей, так и плоских картограмм, а также срезы по слоям или среднее значение по всем слоям, сохраняя историю моделирования для основных физических величин и воспроизводя впоследствии ход расчета.

Программа SimWorT 3D Viewer отображает среднее распределение физических величин по высоте активной зоны и их значения для отдельно выбранных каналов. Кроме того, в программу SimWorT 3D Viewer включены графики зависимости от времени для основных физических величин активной зоны с возможностью выбора отдельных каналов.

Программа SimWorT 3D Viewer предназначена в первую очередь для контроля за результатами расчета во время расчета в режиме online.

Использование программы SimWorT 3D Viewer на данном этапе также имело целью отработать технологию интеграции внешних графических программ с ИО. В настоящее время разработано много графических программ для пространственного отображения трехмерных распределений нейтронно-физических и теплогидравлических величин активной зоны реактора, программ для отображения работы управляющих стержней, датчиков, не говоря уже об обычных 3D графиках или графиках от времени. Часть этих программ имеет открытый интерфейс или доступные исходные коды. Поэтому эти программы можно интегриро-

вать с ИО, в связи с чем имеет смысл разработать необходимые библиотеки и интерфейс для легкой интеграции этих программ с ИО без нарушения их работоспособности.

*Интеграция SimWorT 3D Viewer с ИО.* Интеллектуальная оболочка обеспечивает обмен информацией между расчетными приложениями как передачу данных, так и получение. Соответственно, возникает возможность подключения к ИО графических приложений, которые только получают данные и отображают их в различной форме. Для подключения таких программ к ИО необходимо выполнить такой же набор операций, что и для расчетных приложений, а именно:

- организовать управляющий алгоритм подключаемой программы согласно принятым договоренностям;
- описать перечень используемых обменных функций и их размерностей, картограмму перевода точек привязки к стандартным точкам привязки в файле конфигурации конвертора.

Графические приложения в отличие от расчетных имеют свои особенности. Например, эти программы не так требовательны к получаемым данным (что дают, то и выводят), нет требований к остановке расчета. Они не влияют на ход расчета, их можно открыть неограниченное количество и т.д. Организация работы программы SimWorT 3D Viewer с ИО на данном этапе как раз и имела целью выявить особенности таких программ и отработать технологию их интеграции с ИО.

SimWorT 3D Viewer является Windows-приложением, с помощью которого решались дополнительные задачи отладки:

- библиотеки PSS\_API, работающей в среде MS Windows;
- работы агента ИО, работающего в среде MS Windows;
- версии библиотеки MPI WMPI для ОС Windows;
- совместной работы приложений, работающих в разных операционных системах.

*Модификация алгоритма программы SimWorT 3D Viewer.* Чтобы организовать

работу программы SimWorT 3D Viewer с ИО, в нее внесены следующие изменения:

- добавлена библиотека PSS\_API, версия MS Windows;
- создан дополнительный модуль pss\_connection.cpp, в который выведены все интерфейсные программы (инициализация соединения с агентом ИО, окончание работы, функция получения данных от агента ИО);
- организован дополнительный поток, используемый при приеме данных от агента ИО, чтобы получение данных от агента ИО не мешало отображению графиков. С точки зрения программирования это аналогично написанию программы-клиента в протоколе TCP/IP, в которой поток создается для взаимодействия клиента с сервером;
- программа на данном этапе только получает данные и выводит то, что дают. Соответственно, нет требований остановки расчета, если данные некорректны, и т.д. Поэтому применяется только флаг PSS\_Mind\_HaveNewData;
- в программе поддерживаются два режима работы: автономный и расчетный. В автономном режиме данные генерируются специальными функциями. Автономный режим используется для отладки графических программ. В расчетном режиме данные получают от агента ИО.

Рассмотрим схематично, какие изменения в текстах внесены в программу SimWorT 3D Viewer. В главной функции Windows-приложения создан поток GetDataThreadFun для организации получения данных от агента ИО и инициализировано соединение Windows-приложения и агента ИО:

```
int WINAPI WinMain ()
{ Инициализация, создание основного окна.
Создание потока для получения данных от
агента ИО.
CreateTread (NULL, 0, (LPTHREAD_ ST-
ART_ROUTINE)GetDataThreadFun, NULL,
0, &RDID)
Инициализация соединения Windows-при-
ложения и агента ИО, обязательно включает
функцию pss_init().
InitConnection();
```

Потоковая функция GetDataThreadFun() организуется в виде бесконечного цикла, в который вызывается функция по получению данных GetDataFromAgent() и последующему отображению полученных данных в графической форме DisplayData() (заметим, что во время получения данных от агента ИО на графиках могут отображаться ранее полученные данные):

```
int WINAPI GetDataThreadFun()
{ while(1) { GetAndDisplayData();
Sleep( 50 );} }
void GetAndDisplayData()
{Получение данных от агента ИО
GetDataFromAgent();
Вывод данных
DisplayData();}
```

Рассмотрим функцию получения данных от агента ИО. В отличие от расчетных задач:

- программа SimWorT 3D Viewer не выдает сообщений об ошибках расчета, требований останова и прочее, только сообщение – есть данные для обмена (флаг PSS\_Mind\_HaveNewData);
- расчета нет, значит, нет времени синхронизации, пишем минимальное;
- на данном этапе программа SimWorT 3D Viewer только получает данные, поэтому пропускаем функцию передачи данных pss\_put\_data() и сразу пишем pss\_transfer\_barrier().

```
void GetDataFromAgent()
{ вырабатывает информацию о последую-
щих действиях кода, а именно, есть данные
для обмена в текущей точке синхрониза-
ции, флаг PSS_Mind_HaveNewData.
unsigned int SyncMask |= PSS_Mind_Have
NewData;
pss_get_mind (SyncMask, &SyncMask Re-
sult);
Синхронизация времени процесса, так как
своего времени нет, то пишем 0
pss_get_global_time_sync (/*MyStep*/0, &
CurSyncStep);
if ( (SyncMaskResult & PSS_Mind_ Have-
NewData) && !(SyncMaskResult & PSS_
Mind_CanNotExchange) )
```

```
{ Ожидание завершения всех обменов между ИО
pss_transfer_barrier ();
получение данных от агента ИО с использованием функции
pss_get_data_nonblock();
Очистка стека приема данных в агенте ИО
pss_reset_transput_buffer (); }}
```

*Паспорт и конвертор.* Программа отображает то, что дают, поэтому имеет простой конвертор, выводит данные в той размерности, которую дают расчетные коды. В программе отсутствуют описания нестандартных физических размерностей. Ниже приведен паспорт программы:

```
passport
• task_name 3D_SimWorT_Viewer task_name
• mode seq /mode
• version 1.0_test /version
• range_min -100 /range_min
• range_max 100 /range_max
• task_classes amount="2"
• class_name Neutronics /class_name
• class_name Thermohydrodynamics /class_name
• /task_classes
• /passport
```

SimWorT 3D Viewer отображает любые массивы размерности не более 56×56, поэтому карта привязки не связана с каким-либо расчетным кодом, а имеет только сплошное построчное заполнение массива. Такая карта упрощает получение данных от агента ИО.

*Пример применения SimWorT 3D Viewer* для отображения расчетной информации кодов KORAT [9] и PATEГ [10], подготовленных для взаимодействия между собой посредством ИО. Запуск и расчет кодов производились на удаленной Unix-машине. Все необходимые данные посредством шлюзового механизма передавались агенту на Windows-машине, который взаимодействовал непосредственно с SimWorT 3D Viewer. Таким образом, получена возможность визуально наблюдать за ходом расчета, как показано на рис. 5 (4-я стр. цветной вкладки).

## Заключение

Реализованная версия ИС РБППО для Windows не только позволила проводить предварительную отладку при подключении кодов к ИС РБППО, но и дала возможность провести совместные расчеты с работой приложений под управлением различных ОС.

При тестировании проведены расчеты тестовых задач с использованием объединенных кодов KORAT-3D [9] и PATEГ [10], а также STEPAN и KOBRA [11] совместно с программой динамической визуализации SimWorT 3D Viewer.

## Список литературы

1. Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Деулин А.А. и др. Технология разработки распределенных вычислительных систем на базе супер-ЭВМ для решения комплексных задач ядерной энергетики // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2009, вып. 4, с. 26–54.
2. Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Варгин А.М. и др. Программное обеспечение PSS\_IS (версия 1.0). Рекламно-техническое описание. Отчет РНЦ “Курчатовский институт” и РФЯЦ-ВНИИЭФ, гос. рег. № 0120.0810069, инв. № 36-10/16-09, 2009.
3. Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Деулин А.А. и др. Технология разработки программных комплексов, ориентированных на СуперЭВМ, для исследований функционирования сложных технических систем на всех этапах их жизненного цикла. Этап № 3. Экспериментальные исследования поставленных перед НИР задач. Шифр 2007-4-1.4-00-06-085. Отчет РНЦ “Курчатовский институт”, гос. рег. № 0120.0810069, инв. № 46-21/14-08, 2008.
4. Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Деулин А.А. и др. Распределенная библиотека ППО и ее интеллектуальная среда // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2009, вып. 4, с. 55–65.
5. Семенов Г.П. Разработка среды отладки вычислительных объектов на базе эмулятора РБ ППО в ОС Windows. Отчет ИЯР РНЦ “Курчатовский институт” по этапу I договора подряда № 2/11.4032, инв. № 12-46/70-07, 2007.
6. Семенов Г.П. То же. Отчет ИЯР РНЦ “Курчатовский институт” по этапу II договора подряда № 2/11.4032, инв. № 12-46/80-08, 2008.

7. *Семенов Г.П.* То же, инв. № 12-46/88-08, 2008.

8. *Данилов В.А., Зенков А.Д., Малкин С.Д. и др.* Компьютерная технология SimPort<sup>TM</sup>: опыт внедрения // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2002, вып. 3, с. 64–71.

9. *Федотова Л.П., Шагалиев Р.М.* Математическая методика KORAT-3D численного решения трехмерных групповых задач диффузии нейтронов на регулярных и нерегулярных пространственных сетках // ВАНТ. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики, 1994, вып. 4.

10. *Самигулин М.С., Воронова О.А., Данилов Ю.Ф. и др.* Системный двухжидкостной термогидравлический код РАТЕГ. Моделирование термогидравлики ВВЭР-1000 на внутрикорпусной стадии тяжелой аварии. В сб. "Вопросы

безопасности ЯЭС с ВВЭР". Том 2. Анализ аварийных ситуаций: компьютерные коды и экспериментальные исследования. Труды научно-практ. семинара, С.-Петербург, 12-14 сентября 2000 г.

11. *Краюшкин А.В., Бабайцев В.Н., Глембоцкий А.В. и др.* Верификационный отчет по программе STEPAN/КОВРА для анализа аварий в РБМК. Отчет РНЦ "Курчатовский институт", инв. № 33-02/30, 2002.

*Контактная информация –*

*Токаренко Виктор Федорович, нач. лаб., тел.: (499)196-70-16, e-mail: [tvf@dhtp.kiae.ru](mailto:tvf@dhtp.kiae.ru)*

Вопросы атомной науки и техники.  
Сер. Физика ядерных реакторов, 2010, вып. 1,  
с. 88–98.

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <i>Алексеев П.Н., Семченков Ю.М., Седов А.А., Субботин С.А., Чибиняев А.В.</i> Перспективы и проблемы использования в реакторах легководного теплоносителя сверхкритического давления для повышения эффективности ядерного топливного цикла.....                                                                          | 3  |
| <i>Ковалишин А.А.</i> Основные принципы метода поверхностных гармоник. Плоская геометрия.....                                                                                                                                                                                                                             | 13 |
| <i>Ковалишин А.А., Лалетин Н.И.</i> Расчеты эффективного коэффициента диффузии в четных приближениях метода поверхностных псевдоисточников.....                                                                                                                                                                           | 23 |
| <i>Кулаков А.С.</i> Моделирование взаимодействий электронов и позитронов с веществом в программе MCU-PD.....                                                                                                                                                                                                              | 32 |
| <i>Деметьев В.Г., Олейник Д.С.</i> Расчет нейтронно-физических характеристик активной зоны ВВЭР-1000 методом Монте-Карло по программе MCU-PD, сравнение с результатами расчетов по программе БИПР-7А и экспериментальными данными.....                                                                                    | 47 |
| <i>Бояринов В.Ф., Фомиченко П.А.</i> Исследование некоторых моделей и приближений, применяемых при расчете ТВС высокотемпературного газоохлаждаемого реактора ГТ-МГР.....                                                                                                                                                 | 59 |
| <i>Звонарев Ю.А., Цуриков Д.Ф., Кобзарь В.Л., Волчек А.М., Киселев Н.П., Стрижов В.Ф., Филиппов А.С., Моисеенко Е.В.</i> Расчетный анализ эффективности работы устройства локализации расплава для ВВЭР-1200.....                                                                                                         | 68 |
| <i>Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Варгин А.М., Воронова О.А., Данилов Ю.Ф., Деулин А.А., Евдокимов В.В., Кульнев Д.В., Лобанов П.С., Самигулин М.С., Семенов Г.П., Шагалиев Р.М., Шемякина Т.В.</i> Интеллектуальная оболочка вычислительного объекта и ее специальное программное обеспечение.....                        | 78 |
| <i>Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Варгин А.М., Воронова О.А., Данилов Ю.Ф., Деулин А.А., Евдокимов В.В., Кульнев Д.В., Лобанов П.С., Самигулин М.С., Семенов Г.П., Шагалиев Р.М., Шемякина Т.В.</i> Конверторы для интеллектуальных оболочек.....                                                                          | 83 |
| <i>Токаренко В.Ф., Беляков И.М., Варгин А.М., Воронова О.А., Данилов Ю.Ф., Деулин А.А., Евдокимов В.В., Кульнев Д.В., Лобанов П.С., Самигулин М.С., Семенов Г.П., Шагалиев Р.М., Шемякина Т.В., Данилов В.А.</i> ИС РБПО под управлением операционной среды Windows и методы отладки комплексных задач на эмуляторах..... | 88 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <i>Alekseev P.N., Semchenkov Yu.M., Sedov A.A., Subbotin S.A., Chibinyayev A.V.</i> Perspective and Problems of Application of Light Water Supercritical Coolant in Reactors for Upgrading Efficiency of the Nuclear Fuel Cycle.....                                                                                                                                 | 3  |
| <i>Kovalishin A.A.</i> Basic Principles of the Surface Harmonics Method. Flat Geometry.....                                                                                                                                                                                                                                                                          | 13 |
| <i>Kovalishin A.A., Laletin N.I.</i> The Effective Diffusion Coefficient Calculations by Even-Approximations of Surface Pseudo Source Method.....                                                                                                                                                                                                                    | 23 |
| <i>Kulakov A.S.</i> Simulation of Electron and Positron Interactions with Matter in MCU-PD Code..                                                                                                                                                                                                                                                                    | 32 |
| <i>Dement'ev V.G., Oleynik D.S.</i> Monte Carlo Calculation of Neutron Characteristics of VVER-1000 Core by MCU-PD Code and Comparison of the Results with BIPR-7A Code and Experimental Data.....                                                                                                                                                                   | 47 |
| <i>Boyarinov V.F., Fomichenko P.A.</i> Investigation of Some Models and Approximations Applied at Calculation of Fuel Assemblies of High Temperature Gas Cooled Reactor GT-MHR.....                                                                                                                                                                                  | 59 |
| <i>Zvonarev Yu.A., Tsurikov D.S., Kobzar' V.L., Volchek A.M., Kiselev N.P., Strizhov V.F., Filippov A.S., Moiseenko E.V.</i> Numerical Investigation of Corium Behaviour in Core Catcher for VVER-1200.....                                                                                                                                                          | 68 |
| <i>Tokarenko V.F., Belyakov I.M., Vargin A.M., Voronova O.A., Danilov Yu.F., Deulin A.A., Evdokimov V.V., Kul'neev D.V., Lobanov P.S., Samigulin M.S., Semenov G.P., Shagaliev R.M., Shemyakina T.V.</i> The Intellectual Cover of Computing Object and Its Special Software.....                                                                                    | 78 |
| <i>Tokarenko V.F., Belyakov I.M., Vargin A.M., Voronova O.A., Danilov Yu.F., Deulin A.A., Evdokimov V.V., Kul'neev D.V., Lobanov P.S., Samigulin M.S., Semenov G.P., Shagaliev R.M., Shemyakina T.V.</i> Converters for Intellectual Covers.....                                                                                                                     | 83 |
| <i>Tokarenko V.F., Belyakov I.M., Vargin A.M., Voronova O.A., Danilov Yu.F., Deulin A.A., Evdokimov V.V., Kul'neev D.V., Lobanov P.S., Samigulin M.S., Semenov G.P., Shagaliev R.M., Shemyakina T.V., Danilov V.A.</i> The Distributed Library of the Applied Software and Its Intellectual Environment under Windows and Methods of Complex Tasks on Emulators..... | 88 |

## 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 (не более 10 строк); ключевые слова – все вышперечисленное на русском и английском языках; текст; список литературы; таблицы; рисунки; подрисуночные подписи (на отдельном листе).**

2. Статья должна также предоставляться обязательно **в виде электронной версии обычным шрифтом № 12 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. **Каждая таблица печатается на отдельном листе, а в электронном виде представляется в отдельном файле.**

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 редакторах Equation 3.0 или MathType 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 № 11**. Внизу каждого рисунка должны быть

приведены его номер и **подрисуночная подпись шрифтом № 11**. 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 “Библиографическая ссылка” (ГОСТ Р 7.0.5–2008), 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 (включая дату обращения к источнику)**, позволяющий обратиться к публикации.

9. В конце текста указывается контактная информация об авторах статьи: фамилия, имя и отчество (полностью), должность, телефон, e-mail и по желанию автора – домашний почтовый адрес.

## Уточненная информация для читателей

научно-технического сборника

**“Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов”!**

Редколлегия сборника “ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов” информирует авторов и читателей сборника об организации подписки на “ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов”. Подписные индексы ОАО Агентство “Роспечать”: 66675 со II полугодия 2007 г. в каталоге “Издания органов научно-технической информации” и 32067 с 2010 г. в каталоге “Газеты. Журналы”.

Напоминаем, что “ВАНТ. Сер. 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”.

## **ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ**

С е р и я: Физика ядерных реакторов

**Выпуск 1**

Ответственный за выпуск **С.М. Зарицкий**  
(тел./факс: (499)196-71-98, e-mail: zaritsky@adis.vver.kiae.ru)

Редактор **В.В. Пчелин**  
(тел./факс: (499)196-99-44, e-mail: pchelin@adis.vver.kiae.ru)

Подписано в печать 15.03.10. Формат 70×108/16  
Печать офсетная. Усл. печ. л. 13,5. Уч.-изд. л. 15,0. Тираж 200. Индекс 3646. 10 статей. Заказ 13

Отпечатано в Российском научном центре “Курчатовский институт”  
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, 1

Индекс 3646

ISSN 0205—4671. Вопросы атомной науки и техники.  
Сер. Физика ядерных реакторов, 2010, вып. 1, 1—104