

На правах рукописи



Давиденко Владимир Дмитриевич

РАЗРАБОТКА ДЕТЕРМИНИРОВАННЫХ МОДЕЛЕЙ ПОВЫШЕННОЙ
ТОЧНОСТИ И ПРОГРАММНЫХ КОМПЛЕКСОВ ДЛЯ ПРЯМОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ЯДЕРНЫХ
РЕАКТОРАХ

Специальность 05.13.18

«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
доктора технических наук

Москва – 2017

Работа выполнена в Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт»
(НИЦ «Курчатовский институт»)

Официальные оппоненты:

Ельшин Александр Всеволодович,
доктор технических наук, начальник отдела
ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова»,
г. Сосновый Бор, Ленинградская область;

Селезнев Евгений Федорович,
доктор технических наук,
заведующий лабораторией ИБРАЭ РАН,
г. Москва;

Щукин Николай Васильевич,
доктор физико-математических наук,
профессор, НИЯУ МИФИ, г. Москва.

Ведущая организация:

АО ГНЦ Российской Федерации
Физико-Энергетический Институт
им. А.И. Лейпунского

Защита диссертации состоится 22 мая 2018 г. в 14 ч. 00 мин. на заседании Диссертационного Совета Д 520.009.06 на базе Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» по адресу 123182, Россия, г. Москва, пл. Академика Курчатова, д.1

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЦ «Курчатовский институт», а также на официальном сайте www.nrcki.ru.

Автореферат разослан «___» _____ 2018 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук



А.С. Колокол

Общая характеристика работы

Актуальность работы определяется повышением требований к точности предсказания характеристик реакторов при обосновании их безопасности для достижения высокой степени достоверности и надежности новых проектных предложений ядерных энергетических объектов. Удовлетворение этих требований все в большей степени концентрируется на разработке новых расчетных методик, обеспечивающих комплексное математическое моделирование физических процессов с максимальным приближением в их программном описании к природе (реальным процессам) как с использованием статистических, так и детерминированных расчетных методик.

Цели диссертационной работы формулируются в следующем виде.

Разработка математических моделей и вычислительных программных комплексов для прямого моделирования транспорта нейтронов и γ -квантов с использованием как стохастического метода Монте-Карло, так и детерминированной методики на основе метода характеристик, на базе одинаковых геометрического модуля и системы многогрупповых констант генерированной из файлов оцененных ядерных данных. Комбинированные расчеты характеристик реакторов на таком уровне, пожалуй, единственный путь повышения их достоверности.

Разработка математической методики прямого моделирования для задач изотопной кинетики, и ее программная реализация с использованием стохастического моделирования изотопных превращений в результате радиоактивного распада и в процессе выгорания ядерного топлива.

Исследование и анализ влияния факторов неопределенностей ядерных данных при решении задач изотопной кинетики как в процессе выгорания топлива, так и при расчете остаточного энерговыделения.

Практическая значимость работы заключается в разработке методик и программ для решения задач нейтронной физики, задач изотопной кинетики в материалах, подвергнутых нейтронному облучению, созданию законченного взаимосогласованного программного комплекса для прямого моделирования физических процессов, протекающих в реакторе. Разработанные программные средства активно используются в научных организациях Российской Федерации, в том числе и в процессе обучения студентов в ведущих вузах.

Научная новизна представленных материалов состоит в следующем.

Впервые разработан и реализован прямой стохастический метод решения уравнений изотопной кинетики, в котором задачи пространственного переноса нейтронов и ядерные реакции при их взаимодействии со средой рассматриваются одновременно.

Реализован метод Монте-Карло решения уравнения переноса на основе сеточного геометрического модуля, обеспечивающего большую скорость расчетов и высокую статистическую достоверность расчетных результатов. Получены оценки его эффективности как по быстродействию, так и по точности получаемых результатов.

Разработаны оригинальные методики, прикладные программы и стандарты формирования групповых библиотек ядерных данных на основе библиотек оцененных ядерных данных (ENDF/B, JEF, JENDLE, РОСФОНД) для решения уравнений переноса излучений (нейтроны и γ -кванты) и уравнений изотопной кинетики.

Выполнена верификация разработанных библиотек на основе ряда исследований реакторов ВВЭР.

Проведен анализ и оценка точностей ядерных данных, влияющих на значения рассчитываемых функционалов как по концентрациям нуклидов, так и по остаточному энерговыделению.

Достоверность результатов подтверждается большим объемом конкретных расчетных исследований, проведенных на основе представленных в диссертации методов решения задач переноса и изотопной кинетики.

Положения, выносимые на защиту.

Методика и программная реализация метода Монте-Карло для решения уравнения переноса в групповом приближении с использованием оригинального сеточного геометрического модуля, обеспечивающего высокую скорость счета.

Методика и программная реализация прямого комплексного расчета физических процессов, обусловленных транспортом нейтронов и изотопной кинетикой, с использованием стохастических алгоритмов для обеих задач: переноса нейтронов и нуклидной эволюции в процессе выгорания топлива.

Методика и программная реализация решения уравнений изотопной кинетики и остаточного энерговыделения с точностью, соответствующей экспериментально подтвержденным точностям данных в файлах оцененных ядерных данных.

Методика и программная реализация формирования многогрупповых библиотек ядерных данных на основе современных файлов оцененных ядерных данных для решения стационарных и нестационарных уравнений переноса нейтронов и γ -квантов, задач изотопной кинетики.

Апробация работы. Результаты работы многократно докладывались на следующих российских и международных научных семинарах, и конференциях:

Семинары «Нейтроника». Алгоритмы и программы для нейтронно-физических расчетов ядерных реакторов. Обнинск -1996, 1997, 1998, 1999, 2006.

Семинары по проблемам физики реакторов. Москва. МИФИ, СОЛ «Волга» 1995, 2000, 2004.

Международная конференция по физике ядерных реакторов и технологий, Нью-Йорк, США, 1998.

Международная конференция по физике ядерных реакторов “PHYSOR-2006” Ванкувер, Канада, 2006; PHYSOR-2006,

Публикации. По теме работы опубликовано более 100 научных работ в виде научных статей в отечественных и зарубежных журналах, и сборниках докладов, препринтов и научно-технических отчетов НИЦ «Курчатовский Институт». Из них 20 в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК.

Личный вклад автора. В работе представлены результаты многолетней работы по созданию различных вычислительных методик и программных средств, ориентированных на комплексные нейтронно-физические исследования реакторов различного типа. В диссертации представлены результаты: в которые вклад автора является определяющим. К ним относятся:

Разработка и программная реализация решения уравнения переноса методом Монте-Карло в многогрупповом приближении.

Разработка и программная реализация решения задач изотопной кинетики прямым моделированием ядерных реакций преобразования нуклидов методом Монте-Карло.

Разработка и программная реализация решения задач изотопной кинетики,

Исследования и анализ точностей расчета изотопных концентраций в зависимости от библиотечных неопределенностей ядерных данных.

Разработка и программная реализация методик генерации библиотек для нейтронно-физических расчетов на основе современных файлов оцененных ядерных данных.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, приложения и списка литературы из 124 наименований. Работа изложена на 254 страницах, содержит 95 рисунков и 57 таблиц.

Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность работ, ориентированных на повышение точности предсказания характеристик реакторов при обосновании их безопасности для достижения высокой степени достоверности и надежности новых проектных предложений ядерных энергетических объектов. Удовлетворение этих требований все в большей степени концентрируется на разработке новых расчетных методик, обеспечивающих комплексное математическое моделирование физических процессов с максимальным приближением в их

программном описании к природе (реальным процессам) как с использованием статистических, так и детерминированных расчетных методик.

Развитие ядерной энергетики в мире носит неравномерный характер. В значительной степени это зависит от общественного мнения по отношению к атомной энергетике и общего состояния энергетического рынка. Аварии на Три-Майл Айленде (1979 год) и в Чернобыле (1986 год) привели фактически к полному прекращению наращивания мощностей, заказов на строительство новых АЭС в течение 20 лет практически не было. Установленные в мире мощности стабилизировались в районе 380 ГВт, а основные работы в этот период были связаны с модернизацией эксплуатируемых станций, повышением их надёжности и безопасности.

В течение последних нескольких десятилетий темп роста энергопотребления в мире остается постоянным и составляет примерно 2-3% в год. В результате стабилизации установленных мощностей атомной энергетики доля атомной генерации электроэнергии снизилась с 17% (1986 год) до 11% (2014 год).

К началу этого века на энергетическом рынке сложилась ситуация, когда в результате интенсивного роста экономик развивающихся стран, в первую очередь, Китая, потребности в энергоресурсах стали интенсивно расти. Это привело к большому увеличению цен на органическое топливо и, естественно, перспективы развития атомной энергетики стали выглядеть более привлекательно. Большая часть исследователей в энергетической области ожидали ядерный ренессанс. Однако, авария на Фукусиме (2011) опять привела к пересмотру взглядов относительно перспектив развития атомной отрасли.

Принимая во внимание неустойчивое отношение к перспективам развития атомной энергетики, все же следует, полагать, что ее присутствие на энергетическом рынке сохранится. Интерес к ядерной энергетике, по разным причинам, проявляют ряд стран, такие как Белоруссия, Бразилия, Иран, Турция, Саудовская Аравия и т.д. не обладающих ядерными технологиями. Т.е. не только страны импортеры традиционных энергоресурсов, но и экспортеры.

Весьма вероятно, что в обозримом будущем, практически во всех регионах мира будет происходить строительство новых АЭС, что, безусловно, потребует и новых разработок, и дополнительного обоснования безопасной эксплуатации существующих типов реакторов, и освоения новых технологий обращения с ОЯТ и РАО, и совершенствования топливного цикла.

Вряд ли при этом удастся ограничиться существующими на настоящее время расчетно-аналитическими методиками для обоснования приемлемости новых разработок. Развитие вычислительных возможностей, накопление опыта эксплуатации АЭС,

совершенствование нормативной базы будут постоянно требовать создания новых и модернизации существующих программных комплексов, которые, несомненно, являются основой в обосновании безопасной и надежной эксплуатации ядерных энергетических объектов. Все более актуальными становятся разработки качественно новых подходов к моделированию физических процессов в ядерных реакторах, которые позволят удовлетворить повышенные требования к безопасности и эффективности эксплуатации АЭС.

Также это касается и стратегических направлений развития ядерной энергетики. Предприятия по фабрикации ядерного топлива и переработке отработанного, приемлемые для одних стран, в силу режима нераспространения, не годятся для других. Темпы развития ядерной энергетики зависят от характеристик стран и регионов, их уровня развития, наличия и потребности в энергии. Эти работы должны проводиться на основе как современных данных, так и современных программных средств.

Последние десятилетия характеризуются постоянным ростом вычислительных мощностей, что, весьма вероятно, будет продолжаться и в дальнейшем.

Интенсивное развитие вычислительной техники в течение предыдущих десятилетий предопределило и развитие математического моделирования. Фактически уже сейчас можно осуществлять прямое моделирование физических процессов, протекающих в ядерных реакторах, причем не только стохастическими, но и детерминистическими методами. Под прямым моделированием обычно понимается применение алгоритмов Монте-Карло, реализующих вычислительный аналог протекающих физических процессов. Конечно, экспериментальные данные характеризующие соответствующие процессы, могут содержать погрешности, но сам механизм развития явления моделируется в полном объеме без приближений. Например, при решении задачи переноса нейтронов, акт столкновения нейтронов с ядром среды учитывает особенности геометрии реактора и расположения в нем разных материалов, координаты столкновения, направление полета нейтрона до и после столкновения. Все эти характеристики столкновения учитываются без упрощения по отношению к реальному объекту.

До недавнего времени вычислительные мощности не позволяли получать детерминистическими методами результаты, соответствующие такому же минимальному набору упрощений математических моделей физических процессов, как в стохастических методах. Например, для решения энергетической задачи необходимо использовать групповое приближение, пространственный перенос нейтронов требует пространственной гомогенизации свойств среды. Обычными приближениями транспорта нейтронов являются диффузионное приближение, метод вероятностей первых столкновений или другие приближения.

В настоящее время развитие вычислительных ресурсов предоставило существенно большие перспективы для применения детерминированных методик решения реакторных задач. Такие методы решения уравнения переноса, как, например, метод характеристик или S_n – метод, позволяют получать результаты по точности вполне сопоставимые с результатами стохастического метода (метод Монте-Карло).

Метод Монте-Карло представляет собой фактически статистический расчет интегральных функционалов изучаемого объекта, его точность зависит от набранной статистики, и если такую характеристику как коэффициент размножения можно получить достаточно оперативно, то локальные характеристики требуют существенных временных затрат. Чем меньше объект расчетной области, тем больше времени необходимо затратить на получение достоверного результата. Детерминистические методы лишены этого недостатка, хотя также не позволяют получать значения функционалов в точке, а только в некоторой окружающей ее области.

Статистические и детерминистические методы должны дополнять друг друга в расчетных исследованиях, и в случае использования одинаковых подходов как при подготовке сечений, так и в описании геометрии расчетной области, должны давать одинаковые по точности результаты.

Таким образом, термин «прямое моделирование физических процессов» расширяется. Под ним следует понимать не только расчет методом Монте-Карло, но и расчет с использованием детерминистической методики, в которой упрощения реальной задачи не приводят к погрешностям, превышающим погрешности метода Монте Карло, и в которых за счет более детальных расчетов можно получить насыщенный результат, не меняющийся при дальнейшем дроблении шага пространственной сетки и временного шага, детализации энергетического разбиения. Здесь ещё раз следует обратить внимание на то, что погрешности расчетов методом Монте-Карло обусловлены не только практически достижимой статистикой результатов, но и погрешностями задания геометрии и погрешностями библиотек ядерных данных.

Это касается не только решения задач переноса нейтронов или γ -квантов, но и задач изотопной кинетики. Решение уравнений выгорания, соответствующее по точности описания трансмутации нуклидов реальным процессам, также означает прямое моделирование изотопной кинетики. И не важно, реализован ли этот процесс стохастическим методом или описан соответствующими дифференциальными уравнениями и их аналитическими решениями.

В **первой главе** анализируются проблемы и цели разработки программных комплексов, ориентированных на повышение точности расчета функционалов,

описывающих поведение реактора в различных состояниях и моментах времени. Этот процесс включает в себя не только совершенствование существующих и разработку новых методик решения задач переноса, изотопной кинетики и т.п., но и совершенствование описания физических свойств рассматриваемых объектов, библиотек ядерных данных.

Наиболее очевидным ориентиром их развития является программная реализация методик, физических и математических моделей, обеспечивающих максимально адекватное соответствие природным процессам, протекающих в ядерном реакторе. При этом не следует, как это иногда делается, автоматически относить к такому моделированию исключительно стохастические методы. Расчетная практика во многих случаях убедительно демонстрирует, что и расчеты, основанные на детерминированных методиках решения задач переноса излучения, обеспечивают результаты требуемой точности. При одинаковой степени детализации расчетной области и системы описания физических свойств, расчеты как методом Монте-Карло, так и другими транспортными методами будут иметь одинаковый порядок точности. Это, в частности, следует из результатов расчетов теста C5G7, анализируемом в диссертации, в котором ряд транспортных программ показывают эквивалентные методу Монте-Карло значения расчетных функционалов.

С самого начала работы (с 1986 года), автор ориентировался в своих исследованиях и разработках методик на создание комплексных программных средств, имеющих стандартизованную логическую структуру, способную легко их наращивать новыми функциональными возможностями. На основе сформулированных требований к программному модулю разработаны программы решения уравнения переноса в диффузионном и транспортном (S_n -метод и метод вероятностей первых столкновений) приближениях. После включения в комплекс программ подготовки констант и модуля выгорания, можно было говорить о создании комплекса программ для нейтронно-физических исследований ядерных реакторов. Реализация предложенных способов стандартизации расчетных модулей в виде законченного программного продукта, получившего название Программная Система Кристалл, которая ориентирована на выполнение всего комплекса проектных расчетов с необходимыми для них точностями, легла в основу кандидатской диссертации автора.

ПС Кристалл неплохо зарекомендовала себя как инструмент расчетных исследований физики ВТГР. Принципиальной особенностью этого программного комплекса была возможность проведения расчета с использованием разных приближений уравнения переноса нейтронов. Например, пространственные области, где размещались органы регулирования, рассчитывались методом вероятности первых столкновений, область

больших полостей - методом дискретных ординат, а большая часть активной зоны и отражателя рассчитывалась в рамках диффузионного приближения.

Развитие вычислительных мощностей в последние 10-15 лет позволило пересмотреть принципы, на которых следует строить программные комплексы. К концу 80 годов появился свободный доступ к файлам оцененных ядерных данных, таких как ENDF/B, JENDLE, содержащих обширную информацию о нейтронно-физических сечениях нуклидов позволила кардинально пересмотреть подходы к формированию проблемно-ориентированных библиотек ядерных данных, решению задач изотопной кинетики.

Программный комплекс обычно включает в себя следующие составные части.

Константное обеспечение:

Константное обеспечение следует формировать исключительно на основе файлов оцененных ядерных данных. Следует предусмотреть универсальность структуры библиотеки комплекса, возможность оперативной генерации файлов нейтронно-физических констант. Желательна возможность оперативного изменения групповой структуры библиотеки и ее автоматическое формирование. Для повышения оценки точности расчетов необходимо наличие нескольких вариантов библиотеки, основанных на различных системах файлов, оцененных ядерных данных.

Подготовка малогрупповых констант для выполнения полномасштабных расчетов.

Возможность подготовки малогрупповых констант для реакторных расчетов в произвольном числе энергетических групп на основе расчетов не только элементарных ячеек, но и фрагментов расчетной области (кассет, блоков и т.п.). Стандартизованная структура представления сечений, позволяющая проводить расчеты на основе данных полученных по другим программным средствам.

Процесс формирования малогрупповых констант, на сегодняшний день необходим для существующих программ, ориентированных на современные вычислительные ресурсы. Снятие этих ограничений приведет к стиранию разницы между ячейчными и реакторными программами. Еще десять лет назад термин ячейчная программа подразумевал детальный расчет одномерной ячейки с последующей сверкой сечений в небольшое число групп для расчета кассеты или реактора. Сегодня под ячейчной программой понимается то же самое, но в качестве расчетной области фигурируют не только одномерные ячейки, но и фрагменты реакторов, кассеты или блоки. Естественно, что при дальнейшем развитии вычислительной техники возникнет возможность расчета всего реактора с точностями и детализацией сечений, соответствующих сегодняшним точностям ячейчных программ.

Решение уравнения переноса

Модули решения уравнения переноса являются фактически основными в программном комплексе. В данном случае речь идет, конечно, о полномасштабных расчетах реакторов или его фрагментов. Тем не менее, четкие требования, которым он должен обладать, сформулировать достаточно сложно, да фактически в этом нет необходимости. Единственное требования, которое следует к нему предъявлять, это работа с данными, в частности групповыми константами, подготавливаемыми другими модулями комплекса, что в принципе и так очевидно. Существует достаточно большое количество методов решения уравнения переноса, начиная от диффузионного приближения и заканчивая методом Монте-Карло. Все они имеют право быть включены в состав комплекса. Более того, даже желательна однотипность некоторых вычислительных модулей (использующих одинаковое приближение решения уравнения переноса). Различия в результатах позволят в этом случае более качественно проводить процесс отладки модулей, а их совпадения повысят достоверность получаемых результатов. Использование разных приближений также позволит более точно определить области их применения и соответствующие точности.

Решение уравнений изотопной кинетики

Использование только файлов оцененных ядерных данных в качестве характеристик нуклидов для решения уравнений изотопной кинетики. Универсальность структуры библиотеки, возможность оперативного включения данных по выходам продуктов деления новых нуклидов. Прямой расчет остаточного энерговыделения на основе данных по распадам всех известных нестабильных нуклидов (таких нуклидов порядка 1500) из файлов оцененных ядерных данных.

Структура комплекса

Все расчетные модули как подготовки констант, так и решения уравнений переноса и кинетики, должны являться отдельными (независимыми) программами, передача данных между которыми осуществляется через внешние файлы. Также отдельными, независимыми программами должны являться программы выдачи расчетной информации. Организация расчетов должна осуществляться путем запуска соответствующих программ последовательно, в цикле, или параллельно.

Примерно к середине 90-х были сформированы основные требования, предъявляемые к таким прецизионным программным средствам, ориентированным на проведение ячеечных расчетов. На основе этих положений, в 1996 году начал разрабатываться комплекс UNK. Основной целью разработки стало сведение к минимуму, использования разного рода приближений в детерминистических расчетах, и получение расчетных точностей, соответствующих точностям прецизионных методов.

На первом этапе разработки основное внимание уделялось анализу файлов оцененных ядерных данных, формированию на их основе библиотеки комплекса и обоснование высокой точности решения уравнения переноса в расчетах элементарных ячеек. Расширение функциональных возможностей комплекса потребовало разработки алгоритмов расчета фрагментов ядерных реакторов (кассет и блоков). И, в конечном итоге, это привело к созданию вычислительных модулей, позволяющих проводить расчеты всей реакторной установки. Параллельно разрабатывались алгоритмы решения уравнения изотопной кинетики и гамма-переноса.

К 1998 году была готова библиотека комплекса, программы ее генерации, модули расчета спектра нейтронов в ячейках реактора.

К 2000 году была закончена работа по разработке модуля выгорания. Также было завершено создание модулей решения уравнения переноса в двумерной и трехмерной геометрии методом характеристик (программа UNKGRO) и вероятностей первых столкновений (программа UNKPIJ). К 2003 году был разработан модуль решения уравнения переноса методом Монте-Карло (программа UNKMK). В 2007 году был разработан альтернативный программе UNKPIJ модуль расчета вероятностей первых столкновений методом Монте-Карло.

В процессе эксплуатации комплекса выявились некоторые недостатки разработанной библиотеки, связанные с неудачным энергетическим разбиением быстрой области, что не позволяло получать приемлемые результаты в расчетах быстрых реакторов. Накопленный опыт использования был учтен при разработке новой версии библиотеки. Была расширена тепловая область (с 2.15 до 4.65 eV), увеличено число групп, детализированы реакции взаимодействия вида (n,α) , (n,t) , (n,p) и т.п.. Для более качественного учета анизотропии рассеяния в библиотеку комплекса включены моменты разложения сечения рассеяния. К 2007 году структура библиотеки была сформирована и все расчетные модули комплекса были полностью адаптированы к ней.

Таким образом, примерно за 10 лет, удалось построить комплекс, отвечающий всем современным требованиям по точностям, широкими возможностями использования в расчетных исследованиях реакторов любых типов различными методами решения уравнений переноса и изотопной кинетики.

Эффективность разработанного программного комплекса UNK по точности расчета и степени детализации нейтронного спектра в районе резонанса U_{238} 66,7 eV демонстрируется на рис. 1 в сравнении с расчетом по программе MCU. На рис. 2 представлен спектр нейтронов, полученных по программе UNK в диапазоне энергий 20-215 eV.

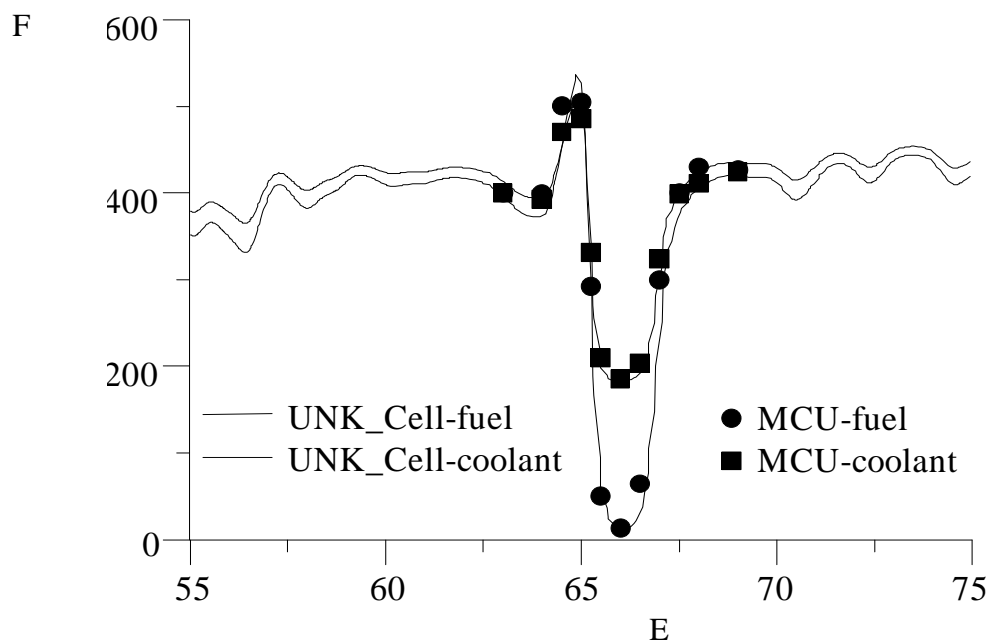


Рис. 1. Нейтронный спектр в ячейке BWR ($E_0=66.2\text{eV}$)

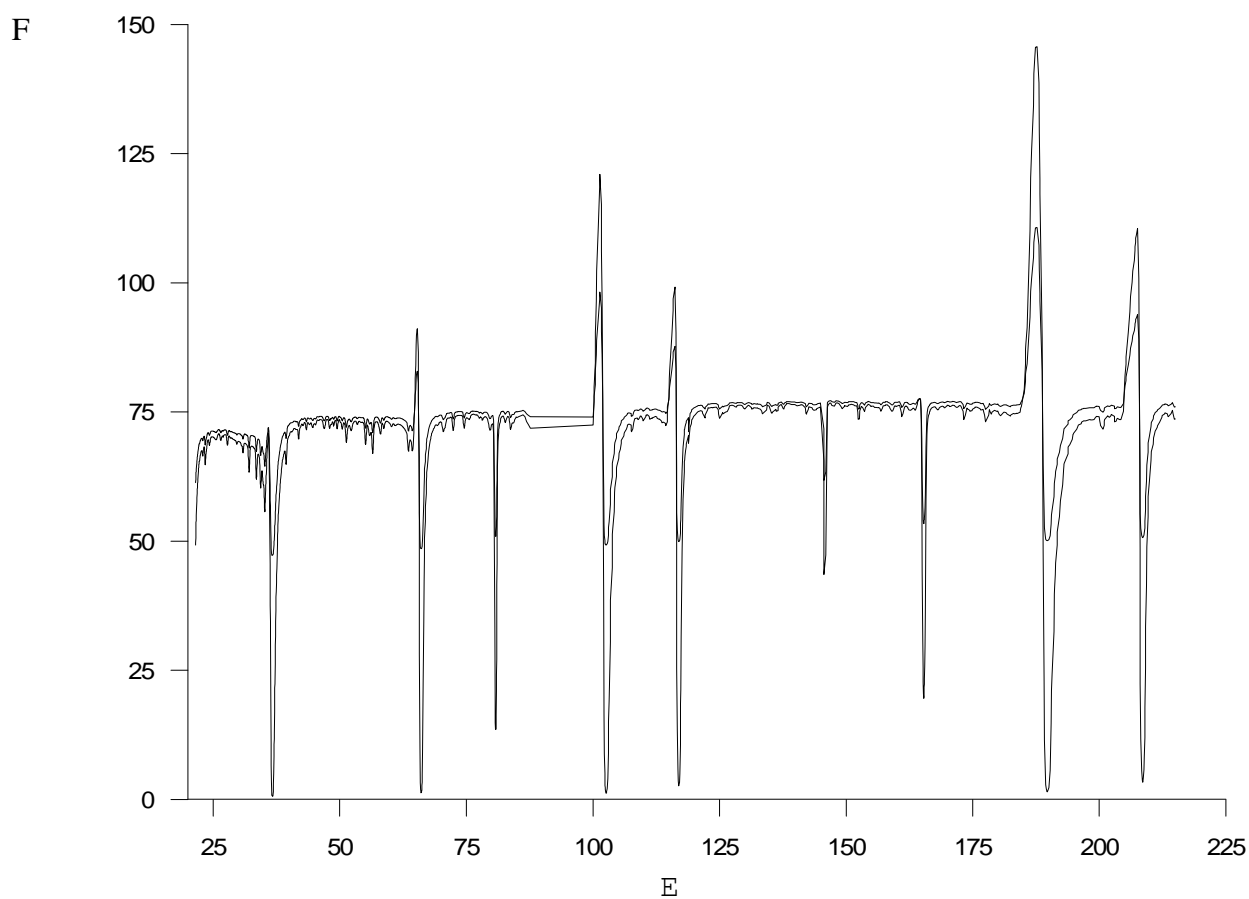


Рис. 2. Нейтронный спектр в ячейке BWR в диапазоне энергии 20 -215 eV.

Таким образом, уровень детализации расчетного спектра комплексом UNK вполне соответствует детализации программой Монте-Карло.

В настоящее время комплекс UNK используется для обучения студентов в следующих институтах: МИФИ, ОИАТЭ, МЭИ, а также в ряде научных организациях. Модули комплекса UNK были интегрированы в ряд программ и программных комплексов:

Комплекс SUNAM, который разрабатывается с 1995 года. В его основе используется решение уравнения переноса методом поверхностных гармоник.

Комплекс ПРОСТОР, предназначенный для расчетного моделирования реакторной установки ВВЭР-1000. Нейтронно-физические константы для используемых в загрузке реактора кассет готовятся с помощью комплекса UNK.

Программы SKETCH-N также использует библиотеки малогрупповых констант, подготовленные с помощью комплекса UNK. Впоследствии, эта библиотеки были интегрирована в программную систему ShIPR.

Программный комплекс BARS, ориентированный на полномасштабное моделирование стационарных состояний и динамики реакторов.

Представленные примеры программных средств, использующих комплекс UNK, свидетельствует о последовательном переходе разработчиков на современные библиотеки ядерных данных и методы работы с ними. С другой стороны, этот переход, хоть и косвенно, но свидетельствует о достаточно эффективном использовании комплекса UNK в самых широких областях нейтронно-физических исследований.

Библиотека комплекса UNK

Библиотека комплекса UNK состоит не только из нейтронных сечений, но также включает в себя данные, необходимые для задач динамики и изотопной кинетики, данные по источникам γ -квантов и их сечениям взаимодействия, и полностью использует информации, содержащихся в современных файлах оцененных ядерных данных, без каких-либо сторонних оценок.

Для формирования библиотечных файлов был разработан специальный модуль LIBGEN комплекса UNK. Он включает в себя программу, которая на основе выходного файла программы NJOY формирует файл библиотеки UNK. В общем случае для каждого нуклида в библиотеке потенциально могут присутствовать набор файлов, содержащих следующие данные:

- 1.Сечения взаимодействия нейтрона с ядром;
- 2.Термализационные матрицы;
- 3.Характеристики запаздывающих нейтронов;
- 4.Источники γ -квантов, образующихся в результате взаимодействия нейтронов с ядром нуклида;
- 5.Сечения взаимодействия γ -квантов с ядром;

6. Выходы продуктов деления;

Данные по каналам переходов нестабильных нуклидов, периодам полураспадов, и энергиям, выделяемым за счет α и β -распада и γ -излучения, энергиям, выделяемым за счет реакций захвата, деления и рассеяния нейтрона объединены в общие файлы.

Помимо так называемой стандартной библиотеки комплекса UNK (ее основа практически полностью идентична библиотеке ENDF/B-VI), созданы библиотеки на основе других систем файлов оцененных ядерных данных. Таким образом, расчеты по комплексу UNK можно проводить, используя JEF-2.2, JENDLE-3.2, JENDLE-3.3, РОСФОНД. Процесс генерации библиотеки для комплекса UNK полностью автоматизирован, время ее генерации занимает примерно 2 часа на современных вычислительных средствах.

Следует отметить, что данные по нейтронным сечениям нуклидов любой из указанных выше библиотек представляют собой оценку, которую рекомендуют авторы библиотеки на текущий момент времени. Эти данные представлены с некоторой погрешностью. Влияние этой погрешности на конкретный результат может в некоторых случаях оказаться значимым.

В таблице 1 приведены коэффициенты размножения ячейки LWR с урановым топливом, полученные по программе UNK с использованием разных библиотек и отклонения между ними. Аналогичные результаты для MOX-топлива приведены в таблице 2. Представленные в таблицах состояния ячеек отличаются разной температурой топлива, оболочки и воды.

Таблица 1. Коэффициент размножения ячейки LWR с UOX топливом

Ячейка	ENDF/B-VI	РОСФОНД	JEFF.3.1	ENDF/B-VII	Откл (max-min)/min, %
UOX 1	1.39006	1.39490	1.39114	1.39642	0.46
UOX 2	1.33391	1.33835	1.33412	1.33996	0.45
UOX3	1.29974	1.30366	1.29960	1.30542	0.45
UOX 4	1.31472	1.31885	1.31476	1.32055	0.44

Таблица 2. Коэффициент размножения ячейки LWR с MOX топливом.

Ячейка	ENDF/B-VI	РОСФОНД	ENDF/B-VII	Откл (max-min)/min, %
MOX 1	1.21912	1.22049	1.21838	0.17
MOX 2	1.20535	1.20639	1.20453	0.15
MOX 3	1.26571	1.26642	1.26516	0.10
MOX 4	1.25243	1.25288	1.25179	0.09

Повышение точности расчетов систем с быстрым спектром потребовало уточнения группового разбиения стандартной библиотеки UNK и явилось основной причиной разработки новой, модифицированной библиотеки комплекса. Было увеличено числа энергетических групп в быстрой области до 78 (против 24 в старой версии) с более мелким разбиением в области пороговых сечений, отдельно выделены моменты разложения сечений рассеяния для учета анизотропии рассеяния нейтронов. Тепловая область (область термализации) расширена до 4.65 эВ, и выбрана более подробная энергетическая сетка (144 энергетических группы против 65 в старой версии). Выбор границ тепловых групп проведен с учетом всех нуклидов имеющих резонансы в области термализации. Наиболее значимы среди них следующие: Sm¹⁴⁹ (9.76*10⁻² эВ, 8.80*10⁻¹ эВ) Cd¹¹³ (1.86*10⁻¹ эВ), Eu¹⁵¹ (4.61*10⁻¹ эВ, 3.27*10⁻¹ эВ), Ir¹⁹¹ (6.54*10⁻¹ эВ), Ir¹⁹³ (1.303 эВ), In¹¹⁵ (1.457 эВ, 3.86 эВ), Pu²⁴⁰ (1.055 эВ), U²³³ (1.75 эВ, 2.32 эВ), Dy¹⁶³ (1.71 эВ), Eu¹⁵³ (2.456 эВ, 3.294 эВ, 3.368 эВ, 3.71 эВ, 3.944 эВ), Gd¹⁵⁵ (2.64 эВ) и др.

Расширено число термализационных матриц рассеяния, которые учитывают молекулярные и кристаллические связи изотопов в молекулах (сделаны матрицы рассеяния для водорода в воде, в полиэтилене, в гидриде циркония). Добавлены в виде сечений и матриц все реакции, присутствующие в файлах оцененных ядерных данных, в частности, (n, α), (n,d), (n,t), (n,p).

Фактически, в новой библиотеке UNK присутствует вся информация, содержащаяся в файлах оцененных ядерных данных, записанная в 222-групповом приближении. Перечисленные дополнения библиотеки ядерных данных позволяют рассматривать программу UNK в качестве универсальной по отношению к реакторам различных типов программы, что расширяет область ее применения. На рис. 3 представлены результаты расчетов теплового спектра в графите для ряда температуры 810 К в сравнении с экспериментальными данными.

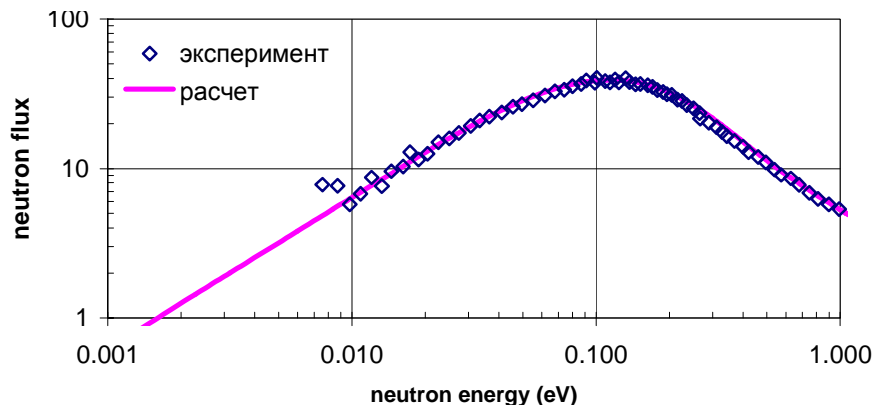


Рис. 3. Сравнение экспериментальных и расчетных спектров нейтронов в графите при температуре среды 810 К.

Библиотека ядерных данных комплекса UNK по сечениям источников γ -квантов за счет взаимодействия нейтронов с нуклидами сгенерирована из файлов оцененных ядерных данных ENDF/B-VI, JENDLE-3.2 и JEF-2.2 и содержит данные примерно для 50 нуклидов. При формировании библиотек использовалась стандартная 21-групповая энергетическая структура. Библиотека ядерных данных комплекса UNK по сечениям взаимодействия γ -квантов с нуклидами и содержит данные для 87 элементов. Она полностью сгенерирована из файлов ENDF/B-VI.

Решение задачи по переносу γ -квантов состоит в последовательном решении задачи по переносу нейтронов, формировании на ее основе распределенного источника γ -квантов и расчете γ -переноса. В результате можно получить пространственное распределение γ -квантов в расчетной области и энерговыделение за счет взаимодействия γ -квантов с нуклидами среды.

Для решения этой задачи, помимо специально разработанных модулей генерации библиотечных файлов, были разработаны:

Программа GSOUR, рассчитывающая источники γ -квантов в каждой зоне расчетной области на основе полученных в результате решения уравнения переноса нейтронов потоков и скоростей реакций поглощения, деления и рассеяния.

Программа UNKGAM – программа решения уравнения переноса γ -квантов методом характеристик. Программа UNKGAM – это модернизация программы UNKGRO, позволяющая проводить расчеты задач с распределенным по области источником.

Программа GSOUR для каждого материала, входящего в расчетную область, подготавливает 21-групповые макросечения взаимодействия γ -квантов со средой. Эти данные использует программа UNKGAM, в результате работы которой получаются потоки γ -квантов и скорости реакций взаимодействия γ -квантов со средой (поглощение и рассеяние).

Отдельно следует рассмотреть источники γ -квантов, связанные с распадом нестабильных нуклидов, появляющихся в результате нейтронного облучения. Очевидно, что наиболее значим этот источник в топливе. Для его расчета надо знать изотопный состав облучаемого топлива и спектр γ -квантов, появляющихся в результате распада для всех нестабильных нуклидов. Т.е для расчета γ -источников, образующихся в результате распада нестабильных изотопов, необходимо также проводить расчеты изменения изотопного состава в процессе выгорания.

В процессе работы реактора на мощности основной вклад в источник γ -квантов за счет распада дают короткоживущие ядра, поэтому было сделано следующее упрощение. Источник γ -квантов за счет деления нуклидов (мгновенные γ -кванты - библиотечные файлы) умножается на соответствующий коэффициент, чтобы учесть и запаздывающие

γ -кванты. Этот коэффициент зависит от делящегося ядра и лежит в пределах 1.8-2.1. Коэффициенты были рассчитаны на основе имеющейся в библиотеке ENDF/B-VI информации (интегральные выходы мгновенных и запаздывающих γ -квантов в результате деления). При такой методике расчета, конечно, вносится предположение о равенстве спектров γ -квантов, образовавшихся за счет деления и γ -квантов, получившихся в результате распада нестабильных изотопов.

Для проверки правильности решения задачи переноса и библиотек групповых констант взаимодействия γ -квантов с веществом были проведены тестовые расчеты для канала РБМК (стартовая загрузка). Результаты расчетов по программе UNKGAM сравнивались с аналогичными расчетами по программе MCNP-4A, имеющей собственную библиотеку ядерных данных. В таблице 3 приведены результаты расчета энерговыделения в материалах канала РБМК за счет γ -квантов.

Таблица 3. Энерговыделение в материалах канала РБМК за счет γ -квантов.

Материал	MCNP	UNKGAM	(1-UNK/MCNP),%
Графит	33.41	35.65	-6.70
Труба	6.191	6.652	-7.45
Стержень	1.449	1.514	-4.49
Вода	1.934	2.048	-5.89
Оболочки	5.552	5.451	1.82
Топливо внутреннее	17.79	17.15	3.60
Топливо внешнее	33.68	31.55	6.32
Сумма	100.0	100.0	0.00
Отношение мощности γ к нейтронной мощности, G/N, %	9.20	10.65	-15.76

Данное сравнение следует рассматривать как демонстрацию того, что программа UNKGAM при расчете переноса γ -квантов дает непротиворечивые результаты. В настоящее время трудно сделать окончательное заключение о причинах различия в полученных результатах. Эти различия могут быть обусловлены как различиями в расчетах источников, так и библиотеками ядерных данных, на что указывает расхождение в доле γ -мощности, полученное по сравниваемым программам. Но в целом, учитывая те разбросы значений, которые присутствуют в разных файлах оцененных ядерных данных, комплекс UNK обеспечивает вполне удовлетворительную точность расчета в том числе и для задач переносу γ -квантов.

Во **второй главе** обсуждаются проблемы и методы решения задач изотопной кинетики.

Анализ изменения изотопного состава топливной композиции как в процессе работы реактора, так и после его остановки, является одной из основных задач нейтронно-физических исследований.

В диссертации рассматривается методика, реализованная в программе решения уравнений изотопной кинетики BURNU, её верификация и возможности. Программа разработана в рамках работ по созданию комплекса UNK, но, как и любой другой модуль комплекса может быть использована как независимое программное средство.

Одной из проблем в решении задач изотопной кинетики является вопросы, связанные с представлением продуктов деления в расчетной схеме. В процессе деления ядер возникает более тысячи осколков. Но всего лишь порядка 200 из них присутствуют в библиотеках ядерных данных по нейтронным сечениям. Возможны два подхода к расчету нуклидного состава топлива в процессе облучения в реакторе:

- учитывать все продукты деления, т.е. использовать прямые выходы, а для нуклидов, отсутствующих в библиотеках по нейтронным сечениям, использовать нулевые сечения взаимодействия.

- учитывать только те нуклиды, сечения которых известны, и использовать для них предварительно рассчитанные кумулятивные выходы, т.е. принять периоды полураспадов нуклидов, не включенных в расчетную схему, равными нулю.

Обе схемы расчета максимально полно используют имеющуюся информацию по характеристикам продуктов деления. При этом, не исключены и промежуточные схемы учета, когда часть нуклидов исключается из рассмотрения с соответствующей коррекцией выходов.

Идеальный вариант - учет всех продуктов деления со своими сечениями - на сегодняшний день нереализуем по причине неполноты ядерных данных.

Оба подхода нельзя назвать идеальными. С одной стороны, учет всех продуктов деления приводит к тому, что доля поглощения на осколках в процессе расчета несколько занижается, поскольку суммарный выход нуклидов с известными сечениями поглощения составляет примерно 90% общего выхода. Но эта доля увеличивается в процессе выгорания топлива за счет распада нуклидов с «нулевыми» сечениями поглощения. Т.е. при длительных облучениях разница между расчетами будет невелика. Но и в расчете с ограниченным числом нуклидов оценка суммарного поглощения в продуктах деления не является точной, хотя, в некотором смысле, она более приемлема. Фактически сечения поглощения отсутствующих нуклидов в этом случае приравниваются к сечениям нуклидов, в которые они распадаются, а это не совсем верно. Таким образом, обе схемы дают приближенную оценку поглощения в продуктах деления.

Выбор расчетной схемы следует проводить исходя из конкретной задачи. Для расчетов выгорания топлива на номинальном режиме вполне достаточно ограниченного числа продуктов деления. При расчете переходных режимов, например, изменении мощности, желательно использовать полное число осколков. Это касается также расчетов остаточного энерговыделения. Для оценки энерговыделения на длительных временах выдержки (более 5 суток) достаточно использовать ограниченное число осколков. Расчет остаточного энерговыделения на временах меньших 5 суток и непосредственно при работе реактора, необходимо использовать все продукты деления.

В программе BURNUP реализованы обе схемы учета нуклидов. Также разработан специальный модуль, который на основе файлов оцененных ядерных данных формирует библиотеку программы.

Для каждого нуклида, включенного в расчетную схему выгорания, необходимо решить уравнение, которое в общем виде выглядит следующим образом:

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_j \bar{\omega}_{ji} \sigma_{fj} N_j \Phi + \sigma_{\gamma i-1} N_{j-1} \Phi + \sum_k \lambda_{k-i} N_k - \sigma_{ai} N_i \Phi - \lambda_i N_i, \quad (1)$$

здесь первый член суммы характеризует приток концентраций нуклида i за счет делящегося j -го нуклида, а $\bar{\omega}_{ji}$ - выход i -го нуклида при делении.

второй и третий члены суммы характеризуют приток концентраций нуклида i за счет реакции σ_{γ} (под индексом γ понимается реакция поглощения, $(n,2n)$, (n,α) и аналогичных) и за счет α или β распада изотопа k . Последние два члена суммы характеризуют убыль концентрации нуклида i за счет поглощения и распада соответственно.

Для решения уравнения (1) на временном шаге используется полуаналитическая схема расчета. Для семи последовательных превращений нуклидов (распад, поглощение или реакция $(n,2n)$, (n,α) и аналогичные им) используются аналитические решения уравнения (1). Более длинные цепочки трансмутаций рассчитываются численно.

Число последовательных превращений было выбрано в результате серии тестовых расчетов выгорания так, чтобы погрешность в оценке количества продуктов деления по сравнению с количеством разделившихся ядер не менялась при увеличении длины цепочки. Погрешность в оценке (при фиксированной длине рассматриваемых цепочек) зависит от временного шага интегрирования уравнения (1). Как показала практика расчетов на различных топливных композициях, при расчете с временным шагом в 1 Мвт-сут/кг она не превышает 0.05%. Погрешность фактически характеризует вклад в изменение концентраций цепочек с восемью и более переходами. Дальнейшее уменьшение шага интегрирования уравнения (1) естественно приведет к уменьшению погрешности.

Для расчета на ограниченном количестве продуктов деления и тяжелых нуклидов (т.е. с известными сечениями поглощения) длина цепочки может быть снижена до 4-х последовательных превращений. Длина цепочки зависит от периодов полураспада рассматриваемых нуклидов и, поскольку в этой схеме отсутствуют нуклиды с периодом полураспада, не превышающих несколько часов, то это и позволяет ограничить ее длину, оставаясь в пределах аналогичной погрешности (0.05%).

Расчет ядерных концентраций нуклидов проводится по следующей аналитической формуле:

$$N_i(t) = \sum_{r=1}^i \frac{1}{\gamma_i} \prod_{k=r}^i \gamma_k \times \left\{ F \varpi_r \left[\frac{1}{\prod_l^i \lambda_l^*} - \sum_{j=r}^i \frac{e^{-\lambda_j^* t}}{\lambda_j^* \prod_{m=r}^i (\lambda_m^* - \lambda_j^*)} \right] + N_r^0 \left(\sum_{j=r}^i \frac{e^{-\lambda_j^* t}}{\lambda_j^* \prod_{m=r}^i (\lambda_m^* - \lambda_j^*)} \right) \right\}, \quad (2)$$

где $\gamma_{i-1} = k_{i-1} \lambda_{i-1} \dots$ или $\dots k_{i-1} \sigma \Phi$, в зависимости от типа перехода нуклида $i-1$ в i (распад или реакция взаимодействия); коэффициент k характеризует долю выхода нуклида по соответствующему каналу перехода;

$$\lambda^* = \lambda + \sigma \Phi, \dots u \dots (\lambda_m - \lambda_j) = 1 \dots \text{когда} \dots m = j;$$

F -скорость деления.

Полное число уравнений выгорания может составлять несколько тысяч. Естественно необходима какая-то структуризация последовательности их решений. Для этой цели был разработан специальный алгоритм формирования уравнений.

В библиотеке программы BURNUP все возможные каналы трансмутаций нуклидов записаны в виде набора пар родительских и дочерних нуклидов с соответствующим им типом перехода (распад, поглощение и т.п.) и их долей. Принцип действия разработанного алгоритма расчета концентраций состоит в следующем.

На первом этапе рассчитываются убыли всех нуклидов за счет распада и поглощения. Под поглощением здесь понимается сумма всех каналов убыли нуклида за счет захвата нейтрона, реакций $(n,2n)$, $(n,3n)$, (n,α) и т.п. Затем, последовательно выбираются пары переходов нуклидов, записанные в библиотечном файле, например, $\Gamma^{135}(\beta)\text{Xe}^{135}$. Для Xe^{135} формируются данные для решения уравнения выгорания, и рассчитывается увеличение концентрации Xe^{135} за счет распада Γ^{135} . Далее, для Xe^{135} из списка пар переходов выбираются пути его трансмутаций. Таких каналов два: $\text{Xe}^{135}(\beta)\text{Cs}^{135}$ и $\text{Xe}^{135}(\text{cap})\text{Xe}^{136}$. Формируются данные для решения двух уравнений выгорания для Xe^{136} это $\Gamma^{135}(\beta)\text{Xe}^{135}(\text{cap})\text{Xe}^{136}$, для Cs^{135} - $\Gamma^{135}(\beta)\text{Xe}^{135}(\beta)\text{Cs}^{136}$. Рассчитываются увеличения концентраций Xe^{136} и Cs^{135} , за счет распада Γ^{135} . Далее выбираются пары переходов для Xe^{136} и Cs^{135} и формируются очередные данные для решения уравнений выгорания. В конечном

итоге, для каждого нуклида библиотеки и каждого канала его трансмутации, формируется «дерево» возможных переходов с соответствующим расчетом концентраций всех дочерних нуклидов. Максимальная длина цепочки, составляет 7 переходов. Реакции $(n,2n)$ и $(n,3n)$, из библиотечного файла пар переходов исключены, чтобы не вызвать заикливания алгоритма, и учитываются отдельно.

Реализованный в программе BURNUP подход к организации вычислений, как показала многолетняя эксплуатация комплекса UNK, является достаточно удачным. Фактически программа решений уравнений выгорания работает только с библиотечными файлами. Расчет с различными библиотеками также не вызывает сложностей, просто меняются соответствующие файлы. Сама же библиотека формируются автоматически на основе файлов оцененных ядерных данных с помощью специального модуля.

Расчет остаточного энерговыделения в облученном топливе и конструкционных материалах реактора является одной из важнейших задач физики реакторов. Данные по остаточному энерговыделению актуальны не только при анализе аварийных ситуаций в реакторе, связанных с потерей теплоносителя, но и при проектировании хранилищ отработавшего топлива с целью учета нормативных требований ядерной безопасности, а также на предприятиях по переработке отработавшего топлива. В связи с постоянным накоплением в системе ядерной энергетики долгоживущих нуклидов, точная оценка энерговыделения в системных исследованиях также играет не последнюю роль.

Для верификации расчета остаточного энерговыделения, с точки зрения автора, следует использовать табулированные данные, рекомендованные Atomic Energy Society of Japan. Эти данные существуют для всех значимых делящихся изотопов и представляют собой поточечную зависимость величины энерговыделения для единичного акта деления нуклида.

На рис 4 приведена зависимость остаточного энерговыделения осколков, образовавшихся в результате деления U^{235} , рассчитанного по программе BURNUP в сравнении с табулированными данными. Расчет проводился с библиотекой продуктов деления, полученной из файлов оцененных ядерных данных JNDC. Использовалось ограниченное число нуклидов с соответствующими кумулятивными выходами.

Как следует из рис. 4, начиная со времени выдержки после облучения 10^6 сек., что составляет примерно 10 суток, результаты программы BURNUP практически совпадают с табулированными данными.

Учет всех продуктов деления дает более точную оценку энерговыделения. На рис 5. приведена зависимость спада энерговыделения, рассчитанная по программе BURNUP, в сравнении с табулированными данными, а на рис .6 – относительная ошибка.

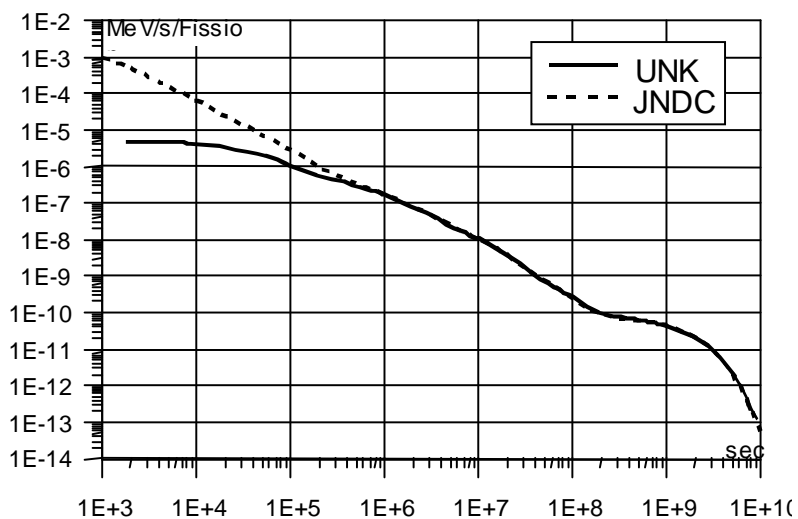


Рис 4. Остаточное энерговыделение осколков $U-235(T)$

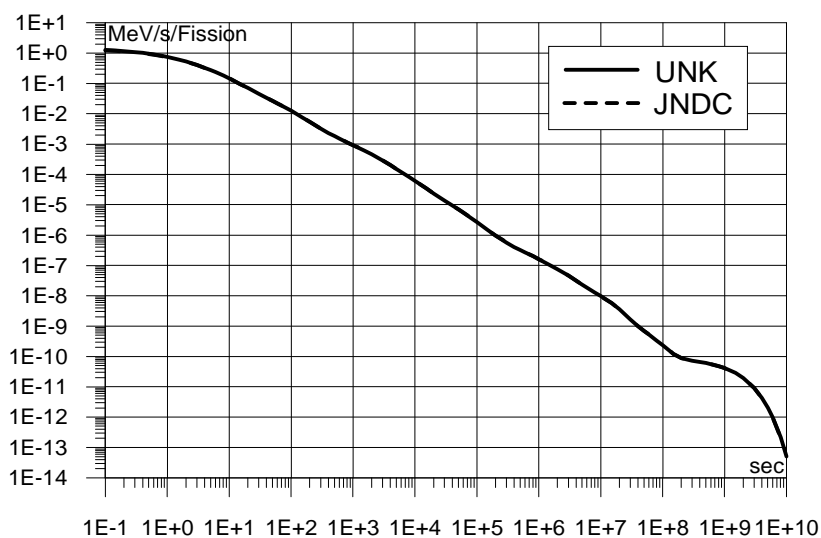


Рис 5. Остаточное энерговыделение осколков $U-235(T)$ с учетом всех продуктов деления

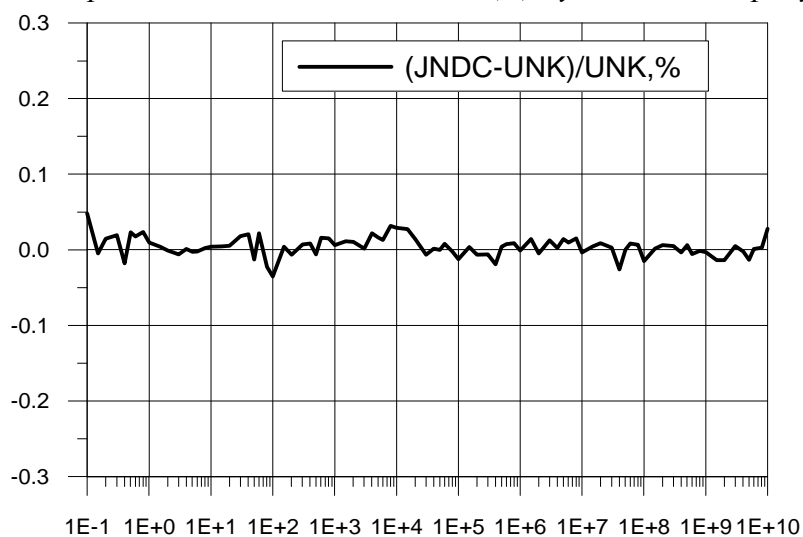


Рис 6. Относительная ошибка в энерговыделении осколков $U-235(T)$ при учете всех продуктов деления

Как следует из рис 6, различия между расчетной и табулированной величиной остаточного энерговыделения практически отсутствуют. На всем рассматриваемом временном интервале погрешность не превышает 0.05%.

Для других делящихся нуклидов картина различий в целом аналогичная.

Приведенные в диссертации результаты сравнительных расчетов позволяют сделать следующие выводы. Расчет по программе BURNUP комплекса UNK остаточного энерговыделения от единичного акта деления тяжелого нуклида практически совпадает с табулированными данными. Это означает, что реализованный в программе выгорания алгоритм расчета нуклидных концентраций не вносит дополнительных погрешностей в рассчитываемые функционалы, и, следовательно, программа UNK может быть использована не только для расчета остаточного энерговыделения, но и для анализа неопределенностей между различными библиотеками оцененных ядерных данных по продуктам деления.

Наиболее распространенными в настоящее время являются три библиотеки ядерных данных: ENDF/B-VI, JEF-2.2 и JENDL-3.2 (JNDC FP). Для программы BURNUP были сформированы три библиотеки, сгенерированные на их основе. Представленный в диссертации анализ данных показал, что все библиотеки дают не только в той или иной степени разные выходы продуктов деления, но и разные наборы нуклидов-продуктов деления, а также разные цепочки трансмутаций продуктов деления за счет распада и выходы по каналам распада.

На рис. 7 приведены относительные отклонения в выходах продуктов деления U235 библиотек ENDF/B и JEF по сравнению с библиотекой JNDC. Выходы от деления других нуклидов U и Pu качественно не отличаются от приведенных на рис. 7.

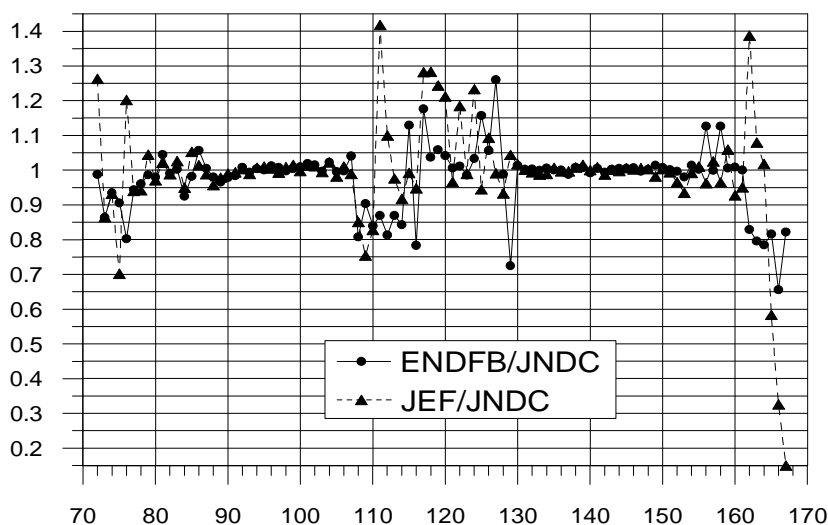


Рис 7. Отношение выходов осколков U-235(T)

Библиотеки практически не отличаются друг от друга в области значимых значений выходов осколков (массовые числа в интервалах 88-108 и 130-150). Различия в этой области

не превышают 5%. Для остальных массовых чисел различия достаточно существенные, но небольшой выход этих осколков нивелирует разницу и не оказывает существенного влияния на расчет выгорания, но может повлиять на расчет остаточного энерговыделения. В тоже время оценки ядерных концентраций конкретных нуклидов могут существенно отличаться при использовании различных библиотек, что, безусловно, следует иметь в виду. Это особенно важно при верификации программ выгорания. Представленные данные показывают, что отличия в концентрациях продуктов деления могут в значительной степени отличаться, и отличия эти будут связаны не с методической, а с библиотечной погрешностью.

Что касается менее исследованных нуклидов (Am и Cm), то различия в выходах продуктов деления для них более значимы. Использование различных библиотек в расчетных исследованиях топливных композиций с большой долей нуклидов Am и Cm, может привести к достаточно большим неопределенностям в расчетных функционалах при расчете глубоких выгораний и оценке энерговыделения от продуктов деления как в процессе работы реактора, так и при расхолаживании.

На рис 8 приведены относительные отклонения в периодах полураспада между библиотеками ENDF/B-VI и JNDC FP в зависимости от периода полураспада. Здесь рассматриваются только те нуклиды, которые участвуют в решении уравнений изотопной кинетики программы BURNUP в режиме ограниченного количества нуклидов. Период полураспада Eu^{155} согласно данным ENDF/B-VI на 6% меньше, а $\text{Cd}^{113\text{m}}$ на 4.4% больше по сравнению с данными JNDC. Выходы этих осколков в результате деления составляют порядка 10^{-4} , поэтому эти различия не могут оказать существенного влияния ни на расчет выгорания, ни на расчет остаточного энерговыделения. Но в процессе верификации программных средств, эти различия следует иметь в виду.

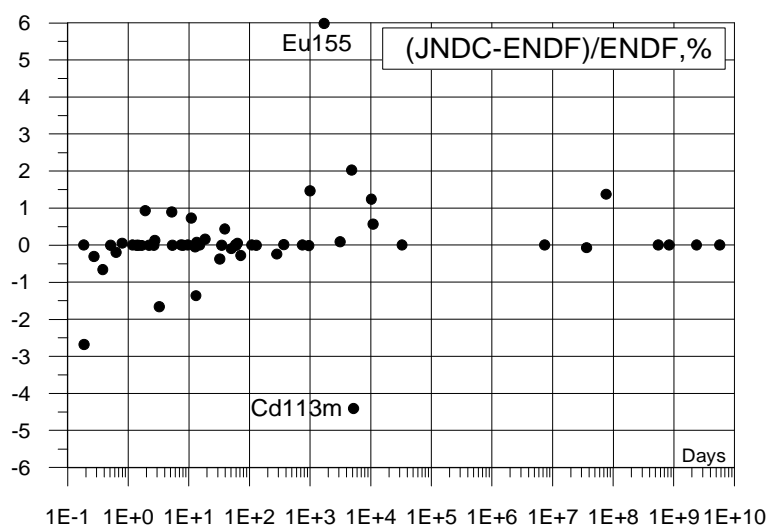


Рис 8. Отклонения в периодах полураспада

На рис 9 приведено распределение энерговыделения в твэлах канала РБМК. Расчет проводился по комплексу UNK с помощью программы метода Монте-Карло UNKMK. В твэлах канала было выделено порядка 30 тысяч регистрационных зон.

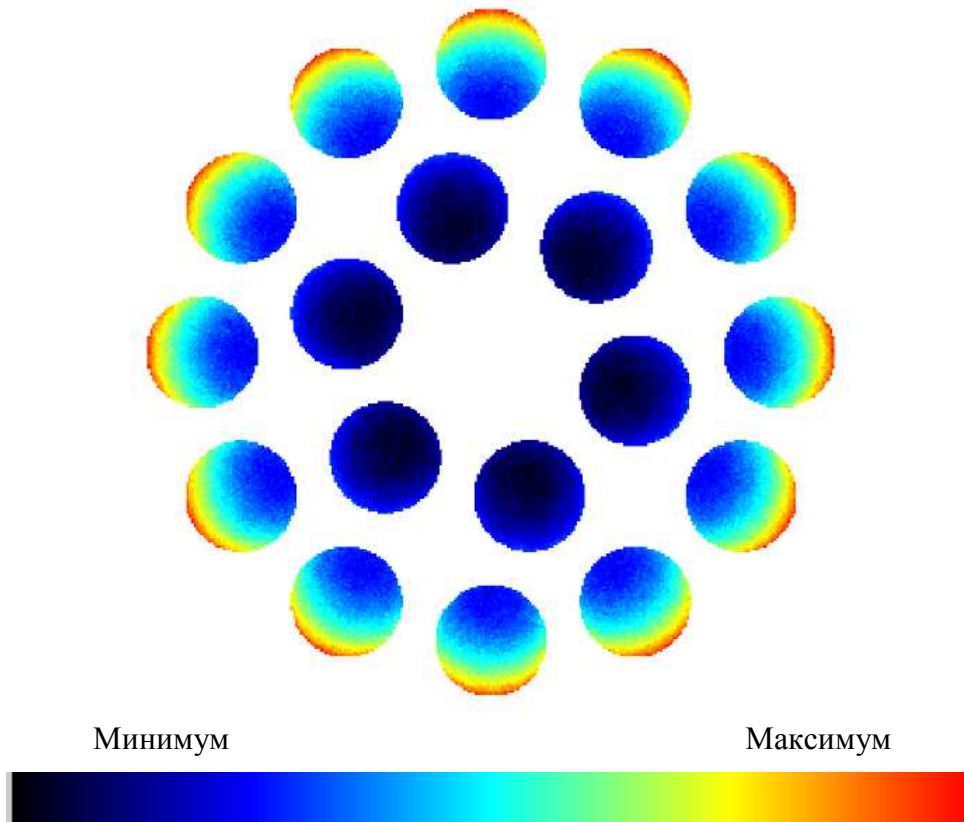


Рис 9. Распределение энерговыделения в топливном канале РБМК

Представленное энерговыделение показывает, что для повышения точности расчета, введение концентрических зон в твэлах не желательно. Введение регистрационных зон следует проводить с учетом полученного энерговыделения таким образом, чтобы во всех частях этих зон оно было примерно одинаковым.

Также следует учитывать и распределение температур. Достаточно очевидно, что максимальная температура топлива с учетом показанного на рис. 10 энерговыделения должна сместиться от центра твэла в сторону максимума энерговыделения. Расчетные значения максимальной и среднеобъемной температуры топлива при этом также поменяются.

В диссертации рассматривается выгорание гадолиниевого поглотителя, который используются преимущественно в транспортных реакторах. Большие сечения захвата Gd^{155} и Gd^{157} требуют для получения насыщенного результата вводить в поглощающем стержне десятки и даже сотни регистрационных зон. Учитывая, что сечение захвата в тепловой точке имеет порядок 800 тысяч барн, получение насыщенного результата даже при таких разбиениях невозможно.

На рис 10 показано распределение концентраций Gd^{157} по радиусу гадолиниевого стержня для разных глубин выгорания в модельной кассете водоводяного реактора.

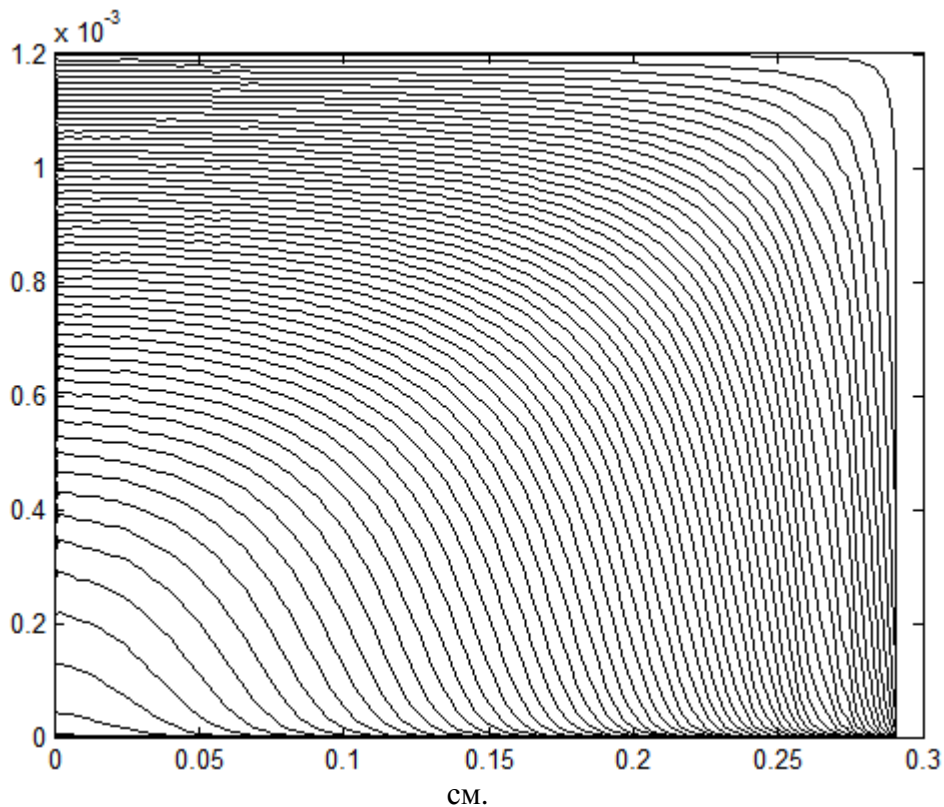


Рис 10. Распределение концентрации Gd^{157} по радиусу стержня в процессе облучения.

Гадолиний не только «обгорает», но и выгорает. В процессе облучения концентрация Gd^{157} в центральной части стержня практически равномерно уменьшается. Это связано с захватом быстрых нейтронов, длина свободного пробега которых существенно больше радиуса стержня.

В третьей главе представлено описание разработанных алгоритмов решения уравнения переноса и изотопной кинетики методом Монте-Карло.

В программном комплексе UNK для решения уравнения переноса в двумерных и трехмерных геометриях методами Монте-Карло, характеристик и вероятностей первых столкновений реализован оригинальный геометрический модуль. Его принцип действия состоит в следующем. Вся расчетная область в плане разбивается на набор квадратиков относительно маленького размера. Каждому квадратику ставится в соответствие номер материала и номер регистрационной зоны, в которой квадратик располагается. В случае, если квадратик попадает на границы областей, то дополнительно определяются доли регистрационных зон, попадающих в него. Квадратику присваивается номер зоны и, соответственно, материала, занимающего наибольшую площадь. По высоте задаются кусочно-постоянные свойства.

Такой подход сводит практически любую расчетную область к стандартной XYZ-геометрии. Это существенно упрощает логику расчета характеристических линий, поскольку в этом случае необходимо анализировать только пересечения прямой с плоскостями, причем плоскости параллельны осям координат. Простота этого алгоритма позволяет добиться существенного выигрыша во времени по сравнению с традиционными геометрическими модулями при расчете траекторий движения. Для таких методов как вероятности первых столкновений или характеристик это быстроедействие не столь актуально, как для метода Монте-Карло, но существенно упрощает логику расчета характеристик. Кроме того, что немаловажно, использование общего геометрического модуля всех методов решения уравнения переноса нейтронов, реализованных в комплексе UNK, позволяет весьма точно оценить их эффективность как по точности рассчитываемых функционалов, так и по временным затратам.

Каждый метод решения уравнения переноса имеет свои особенности и требует некоторых дополнительных приемов обработки геометрии, повышающих быстроедействие. Поэтому в комплексе UNK, геометрический модуль разделен на блоки. Основной блок разбиения расчетной области на основе представленного выше алгоритма (программа UNKDIR) и дополнительные, для каждого метода в отдельности.

Алгоритм разбиения расчетной области на квадратики, реализованный в программе UNKDIR состоит в следующем. Формируется сетка (двумерная матрица) квадратиков полностью покрывающая в плане расчетную область. Последовательно для каждого квадратика определяются зоны и материалы, которые его содержат. При этом учитывается последовательность описания неоднородностей расчетной области. Последний в описании материал и зона ставится в соответствие текущему квадратику. Учет последовательности в описании неоднородностей расчетной области позволяет существенно упростить процедуру описания геометрических особенностей, обойтись стандартными и достаточно простыми геометрическими структурами. Размер квадратика разбиения выбирается исходя из геометрических размеров элементов расчетной области. В представленном ниже примере он равен 0.567 мм. Канал РБМК имеет размеры 25x25см. Таким образом, сетка разбиения будет иметь размер 441x441. Визуализация этой сетки, полученной программой UNKDIR, приведена на рис 11.

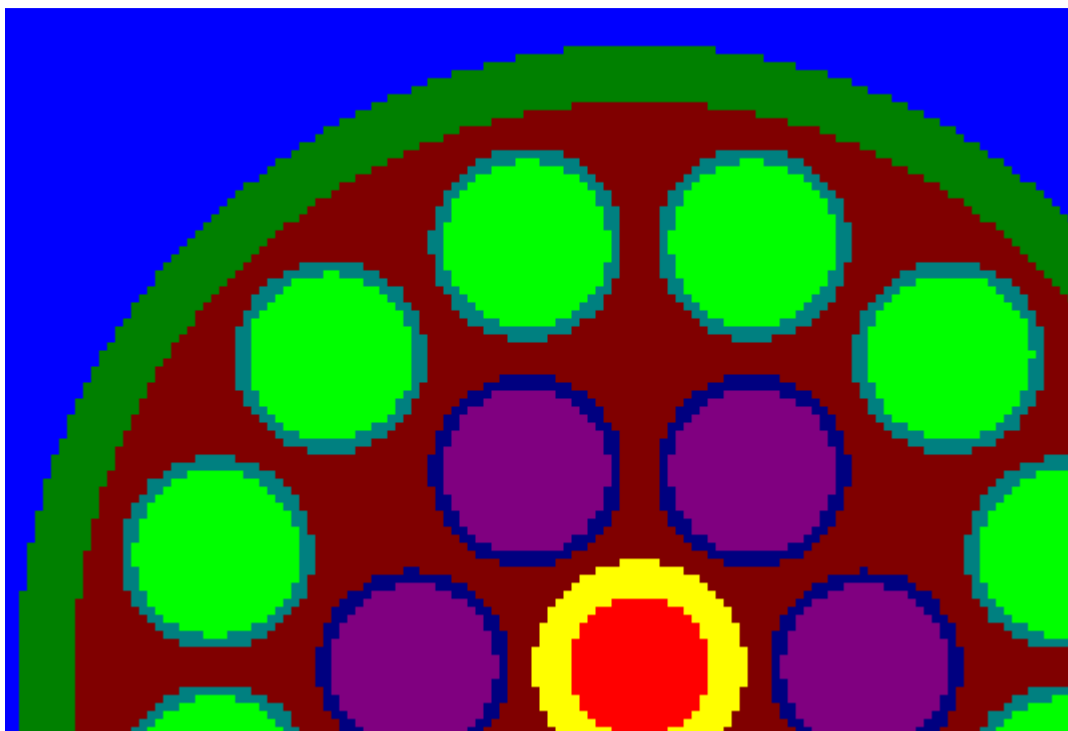


Рис 11. Часть сетки разбиения канала РБМК

Изменение реальной границы на кусочно- линейную должно привести к некоторым погрешностям в расчете траекторий (характеристик) за счет изменений оптических путей и, следовательно, к погрешностям в рассчитываемых функционалах. Это является основным, и, по всей видимости, единственным недостатком, разработанного геометрического модуля.

Объемная погрешность является систематической. Она уменьшается при уменьшении размера квадратиков разбиения, но всегда остается. В диссертации приведен результаты расчетного определения этой погрешности на основе математического бенчмарка C5G7.

Для ряда геометрических конфигураций в геометрическом модуле реализован механизм расчета траекторий движения нейтрона в реальной, т.е. без какой-либо объемной погрешности, геометрии.

Размер в плане задачи C5G7 равен 64.26см (1/4 часть области с соответствующими граничными условиями). В расчетах по программе UNKMK размер квадратика менялся в диапазоне от 0.0035, до 0.042 см.

При размере 0.0035 см., общее число квадратиков составляет $18225 \times 18225 \approx 332$ млн. Занимаемый при этом для описания геометрии объем оперативной памяти составляет примерно 1.5 Гб.

На рис. 12 приведена зависимость коэффициента размножения и доверительный интервал равный одной σ задачи C5G7-2D от размера квадратика. Жирными линиями выделено значение, полученное по программе UNKMK-R (расчет в реальной геометрии) с доверительным интервалом, равным одной σ , пунктиром – равным 0.0001.

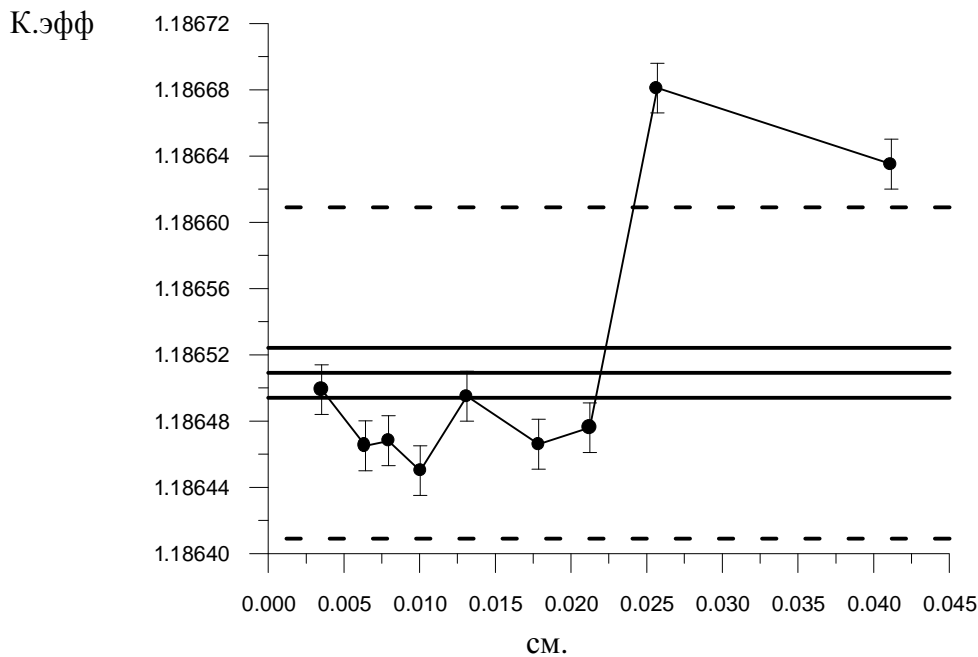


Рис 12. Зависимость коэффициента размножения от размера квадрата

Как следует из рис. 12, начиная с размера квадрата равного 0.02 см, значения коэффициента размножения стабилизируются в пределах 0.01% абс, по сравнению с результатом UNKMK-R. В пределах $2 \cdot \sigma$ расчеты по UNKMK-R и UNKMK совпадают. Более крупные размеры квадрата (>0.025 см.) дают некоторую погрешность в оценке коэффициента размножения, не превышающую 0.015% абс.

При расчете локальных функционалов, например, энерговыделения в твэлах, погрешность может оказаться существенно выше. Но, с другой стороны, и статистическая погрешность оценки локальных функционалов существенно выше интегральных. Поэтому для оценки объемной погрешности, вносимой в расчет локальных функционалов, необходима достаточно большая статистика. На сегодняшний день временные затраты на такие расчеты неприемлемо большие. В проведенных исследованиях удалось выяснить, что при статистике до 5 млрд. историй оценки энерговыделения в твэлах при расчетах как по программе UNKMK, так и по программе UNKMK-R, в большинстве своем совпадают в пределах своих статистических ошибок (рассматривался интервал в $3 \cdot \sigma$), т.е фактически идентичны. Статистическая погрешность оценки энерговыделения в твэлах составляет при этом несколько десятых процента. В целом можно сделать аналогичный вывод, что объемная погрешность в оценке локальных функционалов вполне приемлема.

Исходя из размера квадрата равного 0.01 см. можно получить размеры расчетной области, для которой погрешность в объемах будет пренебрежимо мала. Если оставаться в рамках доступности 2.0 Гбайта оперативной памяти, то размер расчетной области может составить примерно 185x185 см. Естественно, что при симметрии расчетной области или

цилиндрической внешней границы, размеры могут быть соответственно увеличены. Таким образом, становится вполне доступным полномасштабный расчет реактора типа ВВЭР.

Реализованный алгоритм разбиения расчетной области на набор квадратиков имеет блочную структуру и может быть легко дополнен дополнительными стандартными элементами в случае возникновения такой необходимости. Поскольку при разбиении учитывается последовательность задания элементов, можно описать достаточно сложные нестандартные геометрические конфигурации. Один из примеров, результат сеточного представления твэла лепесткового типа, представлен на рис 13. Эта геометрия задана исключительно из стандартных элементов.

Для геометрического модуля программы Монте-Карло сетки квадратиков, каждому из которых поставлен в соответствие номер материала и номер регистрационной зоны полностью достаточно. Но, учитывая особенности этого метода, целесообразно ввести дополнительные характеристики геометрической сетки, исключительно для повышения быстродействия.

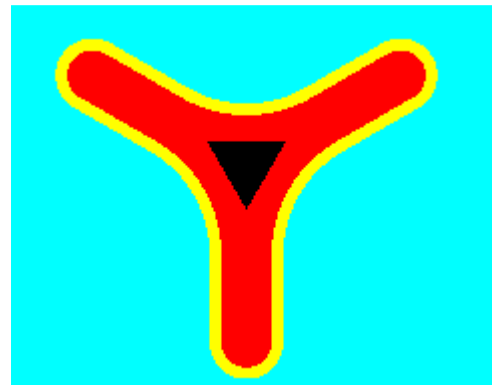


Рис 13. Пример геометрической области

Наиболее трудоемкая часть геометрического модуля расчета траекторий состоит в необходимости определения точки пересечения траектории частицы с границами областей. Но учитывая стандартные размеры и форму квадратиков этих объектов, алгоритм расчета в геометрическом модуле комплекса UNK точек пересечения достаточно прост и, следовательно, достаточно быстродействующий. Для определения координат точки пересечения с границами необходима только одна операция, а именно определение точки пересечения прямой с плоскостью. Ситуация еще больше упрощается, поскольку плоскости параллельны осям координат. Даже в таком простом виде, алгоритм работает достаточно эффективно и быстрее традиционных подходов.

В диссертации рассматривается специальный алгоритм повышения быстродействия геометрического модуля реализованный для комплекса UNK. Последовательно, для каждого квадратика сетки разбиения расчетной области с помощью специального алгоритма определяется число N характеризующее соседние квадратики, в которых свойства среды одинаковые, т.е. совпадают с текущим. На рис 14 показан фрагмент разбивки с рассчитанными индексами N для каждого квадратика в районе границы двух областей. Так, для выделенного более темным цветом квадратика с индексом 2, область с неизменными физическими свойствами, ограничена черной границей. Таким образом, для частицы,

находящейся в этом квадратике, оптический путь можно сразу рассчитать и проанализировать до границы выделенной области. Число определений точек пресечения с границей сокращается в три раза, соответственно увеличивается и быстродействие.

5	5	4	4	4	3	3	3	2	2	2	2	2	1	1	1	1	1	1
5	4	4	3	3	3	2	2	2	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0
5	4	3	3	2	2	2	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	4	3	2	2	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
4	3	3	2	1	1	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	2	2
4	3	2	2	1	0	0	0	0	0	1	1	1	2	2	2	2	2	3
4	3	2	1	1	0	0	0	1	1	1	2	2	2	3	3	3	3	3
4	3	2	1	0	0	0	1	1	2	2	2	3	3	4	4	4	4	4
4	3	2	1	0	0	0	1	2	2	3	3	4	4	5	5	5	5	5

Рис 14..Индексация элементарных квадратиков

Следует отметить еще несколько преимуществ рассмотренного геометрического модуля. Скорость расчета не зависит от числа регистрационных зон. Каждому квадратику поставлен в соответствие номер материала и номер регистрационной зоны. Введение дополнительных регистрационных зон не приводит к увеличению числа границ в расчетной области, в отличие от традиционного подхода, и поэтому на скорость расчета не влияет.

Сеточный геометрический модуль эффективно работает при использовании так называемого метода выровненного сечения.

Для определения номера зоны, в которой находится точка, столкновения, геометрическому модулю программы UNKMK требуется фактически две операции целочисленного деления. Учитывая, что размеры квадратиков одинаковые, номер квадратика и, следовательно, номер регистрационной зоны определяется простым делением. Номер по z в силу неравномерности сетки разбиения определяется ненамного сложнее.

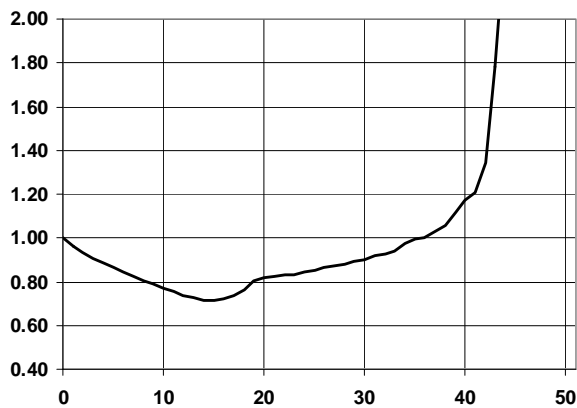
Очевидно, что алгоритм определения по точке взаимодействия номера регистрационной зоны в традиционных геометрических модулях более сложен и, следовательно, требует больших временных затрат.

Практика использования программы UNKMK показала, что гарантированное увеличение скорости счета с использованием метода выровненного сечения можно получить только при расчете водо-водяных реакторов без органов регулирования или твэгов, а также быстрых реакторов. В реакторах РБМК, ГТМГР использование метода выровненного сечения приводит в существенному замедлению счета. Основной объем этих реакторов занимает графит, сечение которого существенно меньше сечений других материалов,

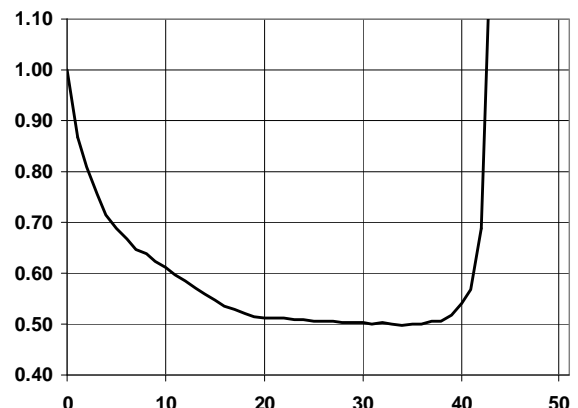
поэтому общее увеличение числа столкновений в данном случае не компенсируется простотой алгоритма расчета.

Тем не менее, для любых задач можно добиться увеличения скорости расчета. Для этих целей в программе UNKMK был разработан групповой метод выровненного сечения. Суть его заключается в том, что эффективный рассеиватель добавляется только в некоторые группы. Для определения области эффективности группового метода выровненного сечения на основе программы UNKMK была разработана программа UNKMKVS, которая последовательно добавляет дополнительное сечение в энергетических группах и определяет скорость расчета. На основе её результатов те группы, в которых метод выровненного сечения дает выигрыш по времени.

На рис. 15 приведена относительная скорость расчета (среднее время, затрачиваемое на расчет одной истории) в зависимости от числа энергетических групп, в которых используется метод выровненного сечения для реактора ГТМГР. За единицу принята скорость расчета без использования этого метода. Нумерация групп – по уменьшению энергии. Аналогичная зависимость для водо-водяного реактора с поглощающими гадолиНИЕВЫМИ стержнями приведена на рис 16.



$N_{\text{группы}}$



$N_{\text{группы}}$

Рис 15. Относительная скорость расчета ГТМГР в зависимости от числа групп с выровненными сечениями

Рис 16. Относительная скорость расчета водоводяной сборки с гадолиНИЕВЫМИ стержнями в зависимости от числа групп с выровненными сечениями

Таким образом, для реакторов типа ГТМГР, область эффективности метода выровненного сечения лежит в пределах 17 верхних энергетических групп (энергетический интервал - выше 1000 eV), для водяных реакторов с поглотителем - 36 верхних (область энергий выше 0.8 eV). В этом случае скорость расчета увеличивается в первом случае на 30%, во втором в два раза.

Следует отметить еще одну возможность эффективного использования сеточного геометрического модуля. Она касается оперативного, в процессе расчета, изменения границ

регистрационных зон. В процессе облучения, как известно, топливо разбухает и постепенно занимает весь доступный объем. Этот процесс можно моделировать, последовательно заменяя материалы в топливном зазоре на материалы топлива. Естественно, для этого нужны специально разработанные методы расчета распухания и транспорта нуклидов топливной композиции, но при использовании данного геометрического модуля такая задача вполне решаема даже на тех вычислительных мощностях, которые сейчас имеются.

На сегодняшний день программа UNKMK как в качестве независимого программного средства, так и как модуль комплекса UNK верифицирована достаточно подробно, чтобы делать выводы о качестве и точности расчетных функционалов.

В диссертации рассматриваются две задачи, решение которых в силу повышенных требований к вычислительным ресурсам малодоступны другим программным средствам.

Первая из них – расчет поглощения в родиевых детекторах, используемых в реакторах ВВЭР для оценки мощности, демонстрирует функциональные возможности программы UNKMK как независимой программной единицы. В общем случае представленное ниже решение задачи с родиевым детектором, который занимает незначительную область в объеме активной зоны ВВЭР (порядка 10^{-9}), можно рассматривать в качестве примера прямого моделирования физического процесса, исключаящее последовательное упрощение реальной гетерогенной структуры.

Вторая задача – потвэльный расчет выгорания высокотемпературного графитового реактора ГТМГР, демонстрирует функциональные возможности комплекса UNK как единого целого, включающего в себя подготовку макроконстант, расчета состояний реактора (методом Монте-Карло) и расчет выгорания. Данная задача также является примером прямого моделирования физических процессов, протекающих в реакторе в процессе его работы.

Представленные в диссертации результаты расчетов, демонстрируя функциональные возможности комплекса UNK, показывают также реальность существенного расширения спектра задач, которые могут быть решены современными расчетными методами, а именно прямого моделирования физических процессов, протекающих в ядерных реакторах различного типа.

Рассматривался двумерный слой реактора ГТМГР по геометрии полностью соответствующий проекту, включая геометрии топливных колонн и отражателей. В качестве топливной загрузки использовался оксид плутония. С учетом симметрии в реакторе располагается порядка 18 тысяч выгорающих зон, включающих в себя как топливные компакты (ТВЭЛы), так и эрбиевые поглотители.

Расчет выгорания по комплексу UNK проводился со статистикой 60 миллионов на одно состояние. Шаг по выгоранию составлял 10 суток. Мощность реактора соответствовала проектной. В соответствии с вычислительными возможностями сегодняшнего дня, расчет одного шага выгорания занимал бы примерно 6 часов, примерно половина из которых тратилась бы на решение уравнения переноса методом Монте-Карло, а вторая половина - на решение уравнений изотопной кинетики и подготовки групповых констант для расчета следующего шага выгорания. Расчет проводился до времени кампании 700 суток. Таким образом, общее время расчета составит примерно 3 недели.

На рис. 17 представлены в графическом виде профили энерговыделения для нескольких характерных точек кампании. Нормировка энерговыделения проведена для каждой точки. Также представлены значения в процентах максимальных отклонений от среднего энерговыделения в твэлах и коэффициент неравномерности. Отметим, что представленные результаты реакторного расчета выгорания получены с помощью специально разработанных модулей визуализации рассчитываемых функционалов комплекса UNK. Неравномерность абсолютных значений рассматриваемых функционалов отражена специальной цветовой гаммой.

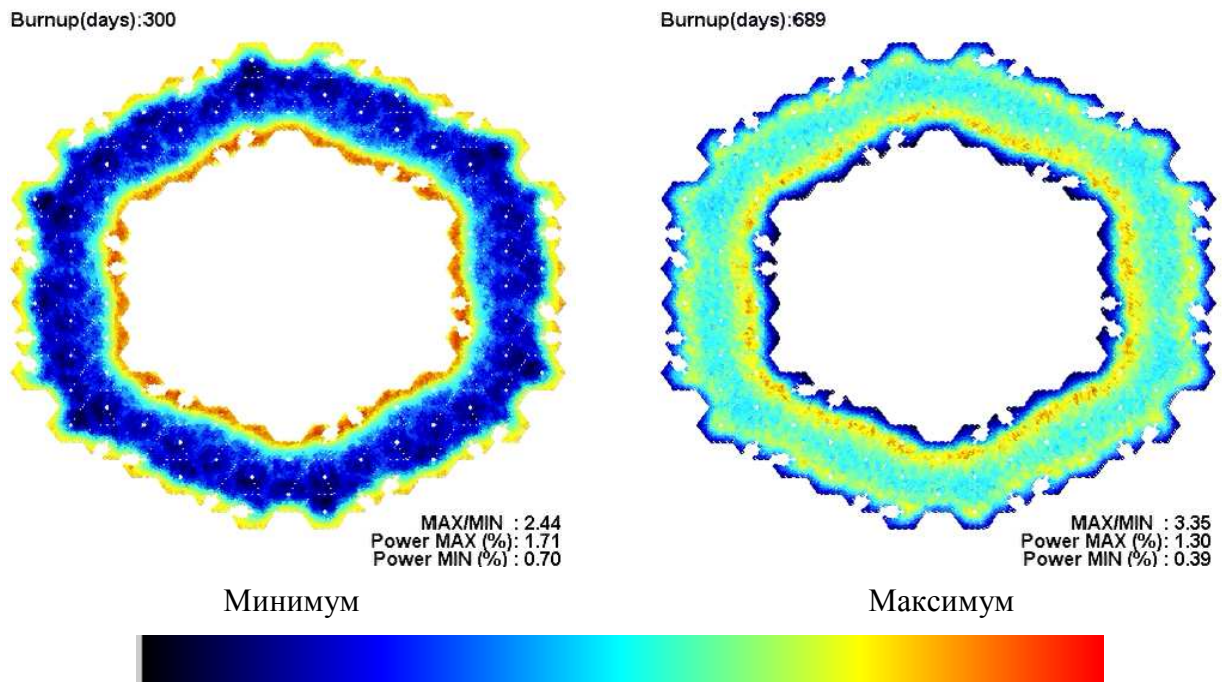


Рис. 17. Энерговыделение в ГТМГР в зависимости от времени кампании

В начале кампании максимум энерговыделения наблюдается в периферийных твэлах активной зоны. Причем во внутренней части энерговыделение больше, чем во внешних рядах твэлов. Несмотря на выгорание Pu^{239} , за счет накопления Pu^{241} эта неравномерность сохраняется, примерно до 200-300 суток облучения (около трети кампании реактора). В дальнейшем, по мере выгорания Pu^{241} , области с максимальными энерговыделениями

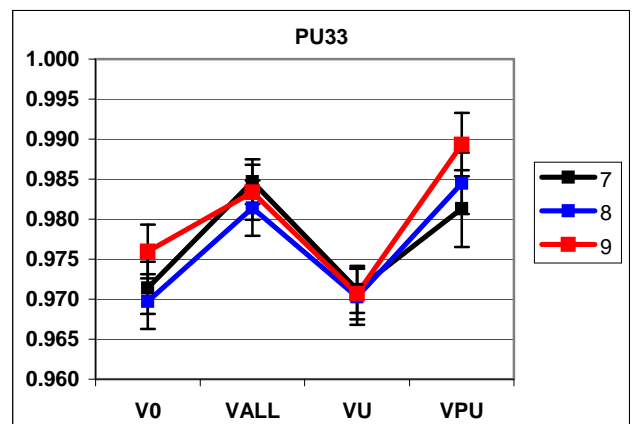
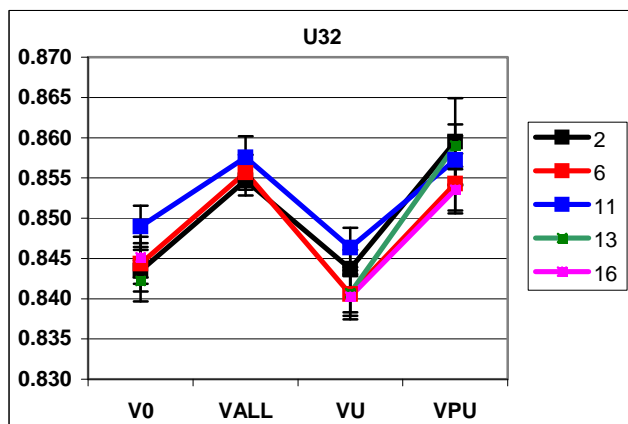
смещаются во внутреннюю часть активной зоны. Периферийные твэлы активной зоны к этому моменту практически выгорели.

Для восстановления поля энерговыделения в работающем реакторе ВВЭР-1000 используется комплексная методика, которая включает в себя как экспериментальные измерения, так и результаты расчетов. Расположенные в ряде кассет работающего реактора родиевые детекторы регистрируют ток, образующийся в результате бета-распада родия-104. Этот ток умножается на предварительно рассчитанный коэффициент чувствительности, представляющий собой отношение энерговыделения шести ближайших к детектору твэлов к току в детекторе, что в конечном итоге дает абсолютное значение линейного энерговыделения в этих твэлах.

Коэффициенты чувствительности рассчитываются для всех типов кассет, использующихся в загрузке реактора, и зависят от вида топлива, глубины выгорания (как топлива, так и родиевого детектора) и ряда других параметров. При этом предполагается, что эти коэффициенты не зависят от местоположения кассет в реакторе. Т.е. влиянием местоположения кассеты в реакторе на коэффициенты чувствительности пренебрегают.

Приведенные в диссертации результаты расчетов позволяют сделать вывод, что с точностью до 1% (1σ) отношение энерговыделения 6 центральных твэлов к поглощению в родии детектора не зависят ни от местоположения кассет, ни от количества погруженных стержней.

Полученные данные позволяют сделать один весьма интересный вывод. В диссертации рассматривается последовательный переход от одного варианта расположения органов регулирования к другому. На рис. 18 для четырех типов кассет представлены значения отношения энерговыделения к поглощению в зависимости от номера варианта.



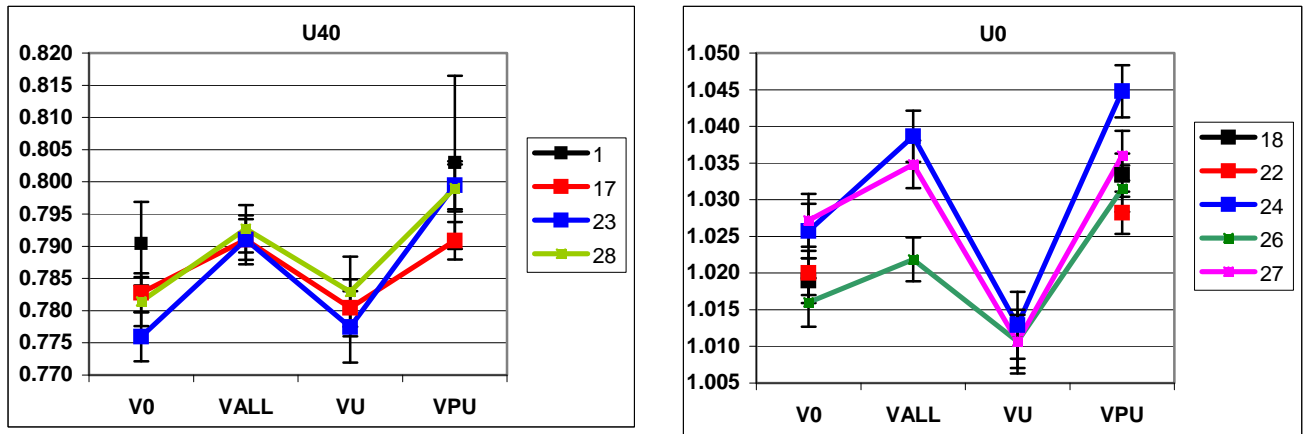


Рис 18. Отношение энерговыделения (по 6 центральным твэлам кассет) к поглощению в родие

Как видно из рис 18, имеется закономерность в распределении результатов. Переход от одного рассмотренного состояния к другому приводит к систематическому изменению коэффициента чувствительности во всех кассетах. Эффект очень незначительный и, если рассматривать статистическую погрешность в 3σ (99% доверительный интервал), практически пропадает. Тем не менее, можно сделать предположение, что расположение органов регулирования влияет на коэффициенты чувствительности кассет, и это влияние не зависит от местоположения кассет в активной зоне. В зависимости от расположения и количества органов регулирования меняется спектр в реакторе и, учитывая, что сечение родия-103 имеет сильный резонанс в районе 1eV, это приводит к систематическому изменению скорости поглощения в родии.

В диссертации рассматривается прямой алгоритм решения задач изотопной кинетики, в котором впервые наряду со статистическим методом решения задачи транспорта нейтронов одновременно статистическим же методом решается и задача изменения нуклидного состава топлива.

При расчете переноса нейтронов методом Монте-Карло регистрируются ядерные реакции каждого нейтрона, в том числе и такие, которые приводят к изменению изотопного состава: поглощение, деление, реакции (n,α) , $(n,2n)$, (n,d) и ряда других. Если одновременно с переносом нейтронов рассчитывать изменение изотопного состава, то будет реализован процесс прямого статистического расчета изотопной кинетики. При этом исчезновение одних изотопов и появление других необходимо рассчитывать таким образом, чтобы были учтены особенности ядерных превращений, связанные не только с захватом нейтрона или деления, но и с радиационным распадом.

Взаимодействие нейтрона с ядрами среды приводит к делению ядра, радиационному захвату или рассеянию нейтрона, вследствие чего выделяется некоторая энергия. Последняя составляющая, в силу ее относительной малости, редко учитывается в расчетах, тем не менее

и ею не следует пренебрегать, поскольку она может оказать заметное влияние в нестационарных процессах.

При мощности реактора P за время ΔT выделяется энергия $P \cdot \Delta T$ - суммарная энергия всех взаимодействий нейтронов с ядрами среды. Суммируя число реакций каждого сорта, можно получить как число нуклидных превращений, так и выделившуюся при этом энергию. Изменение ядерной концентрации нуклидов можно учитывать при каждом акте столкновения нейтронов с ядром или после расчета всех столкновений за время ΔT . Временной интервал ΔT должен быть достаточно малым, чтобы не внести значимые погрешности в расчет изотопной концентрации за счет временных задержек появления новых изотопов в течение временного шага.

Представленный способ расчета изотопной кинетики достаточно просто реализовать с помощью любых программ Монте-Карло.

Для повышения статистической представительности изменять изотопную концентрацию следует изменять для всех нуклидов в зоне, где зафиксирована реакция, с учетом парциальных составляющих соответствующей реакции. Уменьшение концентрации i -го нуклида за счет поглощения в g -й энергетической группе:

$$\Delta \rho_i^- = \frac{\sigma_i^g \rho_i}{\sum_{j=1}^J \sigma_j^g \rho_j} N_n^g, \quad (3)$$

где ρ – концентрация нуклида; σ_j^g – микросечение поглощения j -го нуклида в g -й группе; J – число нуклидов в зоне; N_n^g – число зарегистрированных поглощений в g -й энергетической группе.

Увеличение концентрации дочернего нуклида равно сумме уменьшений нуклидов предшественников. В общем виде этот баланс записывается как:

$$\Delta \rho_i^+ = \sum_{k=1}^{K_i} \omega_{ki} \Delta \rho_k^-, \quad (4)$$

где K_i – число нуклидов, переходящих в результате соответствующего взаимодействия в нуклид i ; ω_{ki} – переход нуклида k в нуклид i .

При наличии в зоне делящихся нуклидов увеличение концентрации осколков деления счет деления в g -й группе также проводится с учетом скоростей деления:

$$\Delta\rho_{fi}^+ = \frac{\sum_{j=1}^J \omega_{ji} \sigma_{ff}^g \rho_j}{\sum_{j=1}^J \sigma_{ff}^g \rho_j} \frac{\sum_{j=1}^J \sigma_{ff}^g \rho_j}{\sum_{j=1}^J (\sigma_{cj}^g + \sigma_{ff}^g) \rho_j} N_n^g, \quad (5)$$

где ω_{ji} - выход нуклида i за счет деления нуклида j ; σ_{ff}^g , σ_{cj}^g – микросечения деления и захвата.

Для делящихся нуклидов энергию деления и захвата следует рассматривать отдельно. Т.е. при регистрации поглощения в зоне с делящимися нуклидами выделявшаяся энергия рассчитывается следующим образом:

$$E = \sum_{j=1}^J \Delta\rho_{cj}^- E_{cj} + \sum_{j=1}^{J_f} \Delta\rho_{ff}^- E_{ff}, \quad (6)$$

где E_{cj} , E_{ff} - энергия, выделяющаяся при радиационном захвате и делении соответственно.

Очевидно, что представленная схема является сбалансированной как по числу ядер, так и по энерговыделению на временном интервале расчета выгорания при условии стабильности всех рассматриваемых нуклидов. Учет распада нестабильных изотопов в данной схеме расчета изотопной кинетики следует рассмотреть более подробно.

Сам по себе расчет изменения концентрации нуклида за счет распада не представляет сложностей. Зависимость концентрации от времени имеет вид

$$\rho(t) = \rho(0) \cdot \exp(-\lambda t) \quad (7),$$

где λ – постоянная распада; τ – время.

Чтобы в точности соблюсти баланс числа материнских и дочерних ядер для разного времени распада изотопов, вводится дополнительный функционал, определяющий количество распавшихся ядер. Число распавшихся за время τ ядер определяется как:

$$\Delta\rho_d = \rho(0) - \rho(\tau) = \rho(0)[1 - \exp(-\lambda\tau)], \quad (8)$$

число оставшихся ядер нуклида на момент времени τ в этом случае составит

$$\rho(\tau) = \rho(0) - \Delta\rho_d, \quad (9)$$

реальное изменение концентрации нуклида определяется как

$$\Delta\rho_d^r = \rho(0) - \rho(\tau), \quad (10)$$

где $\rho(\tau)$ определено по формуле (7). В математическом смысле $\Delta\rho_d$ и $\Delta\rho_d^r$ равны. Но, учитывая ограниченное число знаков машинного представления числа, эти величины будут отличаться.

В общем случае, величина $\Delta\rho_d - \Delta\rho_d^r$ характеризует число распавшихся ядер за время τ , которые нельзя учесть в изменении концентрации нуклида из-за ограниченности числа в машинном представлении. Эта величина запоминается и на следующем временном шаге к ней очередное значение $\Delta\rho_d$. С каждым временным шагам накопленное количество «неучтенных» ядер будет нарастать, а когда их число позволит зафиксировать дисбаланс в ядерной концентрации нуклида, это будет сделано автоматически.

Энерговыведение за счет распада рассчитывается путем умножения убыли концентрации всех нестабильных нуклидов на соответствующую им энергию, выделяющуюся при распаде одного ядра.

На основе изложенного подхода была разработана программа UNKMKВ. Программа UNKMK была дополнена соответствующими вычислительными модулями.

Для верификации разработанного алгоритма в диссертации была рассмотрена стандартная ТВС реактора ВВЭР-1000 с урановым топливом с обогащением 4 % и мощностью 108 Вт/см³. Традиционный расчет проводился с шагом 1 сутки, со статистикой 10 млн. историй на одно состояния. Статистическая погрешность оценки коэффициента размножения в процессе расчета выгорания составляла 0,02-0,04%. Прямое моделирование изотопной кинетики с помощью программы UNKMKВ проводилось с шагом 400 тысяч историй. Один расчетный нейтрон был эквивалентен 10¹⁴ "реальным" нейтронам. С учетом мощности ТВС, концентрации нуклидов изменялись примерно каждые 0,07 сут. В данном расчете статистическая погрешность коэффициента размножения составляет 0.1%.

Коэффициент размножения и ядерные концентрации наиболее важных с точки зрения анализа кинетики нуклидов в зависимости от времени облучения, полученные с использованием программ UNKMK (традиционный подход) и UNKMKВ (прямое моделирование) приведены в таблицах 3 и 4. В таблице 3 представлены результаты с более подробным временным шагом, на интервале до 5 суток, когда достигается стабилизация концентраций Xe135 и Np-239, в таблице 4 – для основных делящихся нуклидов (U-235 и Pu-239) после первых 5 суток облучения.

Таблица 3. Коэффициент размножения и ядерная концентрация 135-Xe и 239-Np в зависимости от времени облучения.

Время обл. (сут.)	K _{эф}		135-Xe, 10 ⁻⁹		239-Np, 10 ⁻⁶	
	UNKMK	UNKMKВ	UNKMK	UNKMKВ	UNKMK	UNKMKВ
1	1.3130	1.3125	8.41	8.55	0.43	0.44
2	1.3073	1.3068	9.56	9.62	0.75	0.76

5	1.3031	1.3021	9.67	9.71	1.32	1.32
25	1.2886	1.2885	9.74	9.76	1.73	1.73
200	1.2077	1.2067	9.88	9.91	1.85	1.86
500	1.0928	1.0891	9.28	9.31	2.09	2.08

Таблица 4. Коэффициент размножения и ядерные концентрации ^{235}U и ^{239}Pu в зависимости от времени облучения.

Время обл. (сут.)	$K_{эф}$		$^{235}\text{U}, 10^{-4}$		$^{239}\text{Pu}, 10^{-5}$	
	UNKMK	UNKMKВ	UNKMK	UNKMKВ	UNKMK	UNKMKВ
5	1.3031	1.3021	8.568	8.568	0.118	0.120
50	1.2778	1.2769	8.060	8.059	2.135	2.137
100	1.2544	1.2551	7.531	7.531	4.032	4.031
300	1.1650	1.1630	5.702	5.703	8.962	8.939
500	1.0928	1.0891	4.238	4.240	11.41	11.35

Следует отметить, что расчеты с учетом изотопной кинетики при расчетах Монте-Карло выполняются так, что для каждого нового пакета нейтронов изотопный состав отличается от предыдущего, т.е. близко к тому, как это происходит в реакторе. Таким образом, этот метод обеспечивает наиболее приближенное к реальности моделирование выгорания. Это следует иметь в виду при сравнении расчетов двумя способами. В расчете с учетом постоянной коррекции изотопного состава оценка коэффициента размножения соответствует его среднему значению на временном интервале, в традиционном расчете последовательного решения уравнения переноса и уравнений изотопной кинетики коэффициент размножения рассчитывается для ядерных концентраций на начало временного шага. При небольшом временном шаге эти значения должны совпадать в пределах своих статистических погрешностей. Это и показывают представленные результаты. Оба расчета совпадают в пределах статистических погрешностей, что демонстрирует принципиальную возможность предлагаемого подхода к решению задач изотопной кинетики.

Прямое моделирование изотопной кинетики методом Монте-Карло более логично в том смысле, что оно обеспечивает более адекватное описание реального физического объекта. Такой способ расчета сбалансирован по ядрам среды в течение всего временного интервала для любой статистики, устанавливает точное соответствие между числом регистрируемых реакций и числом нейтронов.

Представленная методика использует статистические возможности описания не только стационарных, но и динамических процессов, протекающих в реакторе. Выявление ее преимуществ или недостатков требует, существенно большей практики использования.

Следует отметить, что рассмотренная задача при прямом моделировании изотопной кинетики решается примерно в 10 раз медленнее, чем традиционным способом. Но, с увеличением числа выгорающих зон, это отношение должно уменьшаться. Наибольший эффект прямого моделирования с точки зрения быстродействия расчета может быть достигнут в задачах с большим (тысячи и более) числом выгорающих зон.

Задачи с сильными поглотителями, например, гадолинием, являются одними из наиболее сложных с точки зрения получения насыщенного результата. Большое сечение поглощения Gd^{157} требует повышенной детализации не только по пространству (по радиусу и углу), но и временному шагу. Учитывая фактически непрерывный учет изменения нейтронного спектра и изотопной концентрации, предлагаемый подход позволяет за разумное время получить насыщенный результат для задач такого типа.

В диссертации рассматривается прямое моделирование выгорания гадолиниевого стержня в ТВС водяного реактора. Геометрия ТВС показана на рис. 19. Всего в ТВС располагаются две группы гадолиниевых стержней, по три в каждой, которые выделены серым цветом. Периферийные поглотители имеют меньший размер, чем центральные. Твэлы и поглотители располагаются в циркониевом канале. Внутреннее и внешнее пространство заполнено водой.

Для детализации хода выгорания в каждом гадолиниевом поглотителе было введено примерно 1500 регистрационных зон (по радиусу и углу) с характерным размером зоны 0,1 мм. Временной шаг расчета составлял примерно 0,25 сут, статистика одного шага 5 млн историй.

Распределение концентраций ^{157}Gd в поглотителях на момент выгорания 30 Гвт·сут/т.тяж.ат. приведено на рис. 20.

Визуализация распределения концентрации (линии уровня одинаковой концентрации

гадолиния) была сделана на основе расчетных данных. Более темные области соответствуют большему выгоранию гадолиния. Периферийный поглотитель (меньшего размера) выгорает быстрее, чем центральный. Оба поглотителя выгорают неравномерно по азимуту. Пример носит иллюстративный характер и демонстрирует потенциальные возможности совместного решения задач переноса нейтронов и изотопной кинетики с использованием статистических алгоритмов.

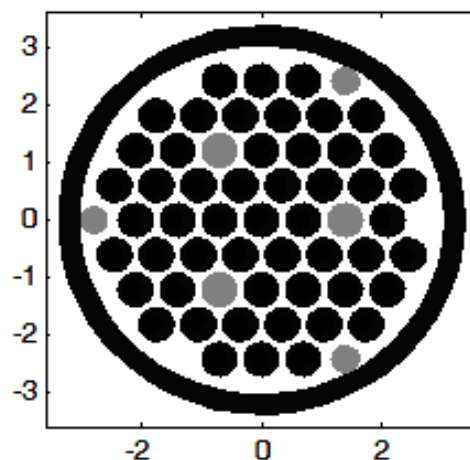


Рисунок 19. Геометрия модельной ТВС водяного реактора.

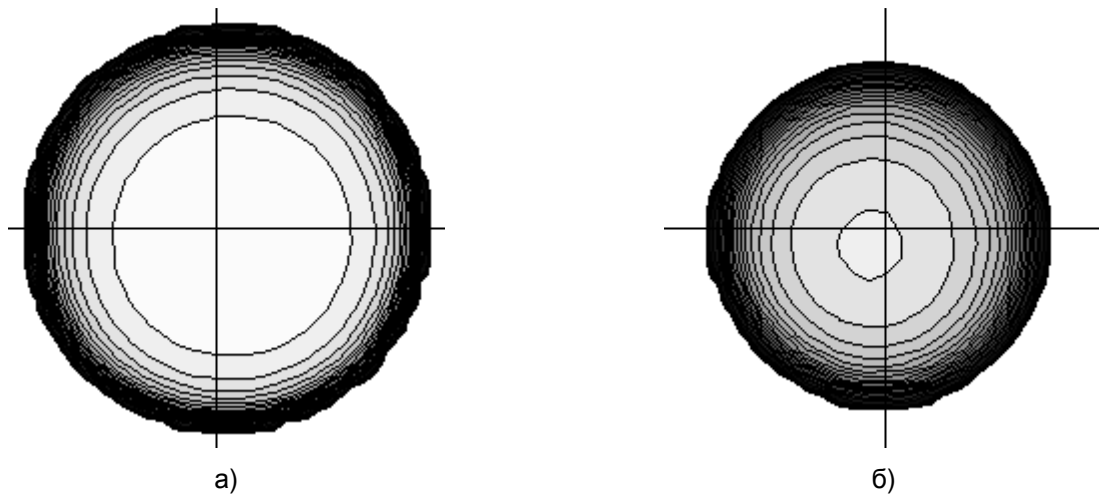


Рисунок 20. Распределение концентраций ^{157}Gd в поглотителе центрального (а) и периферийного (б) стержня на момент выгорания 30 Гвт·сут/т.тяж.ат.

В диссертации приведены результаты прямого моделирования выгорания в твэлах канала РБМК, полученное с помощью программы UNKMK. Результаты этих расчетов для U^{235} и Er^{167} приведены на рис. 21.

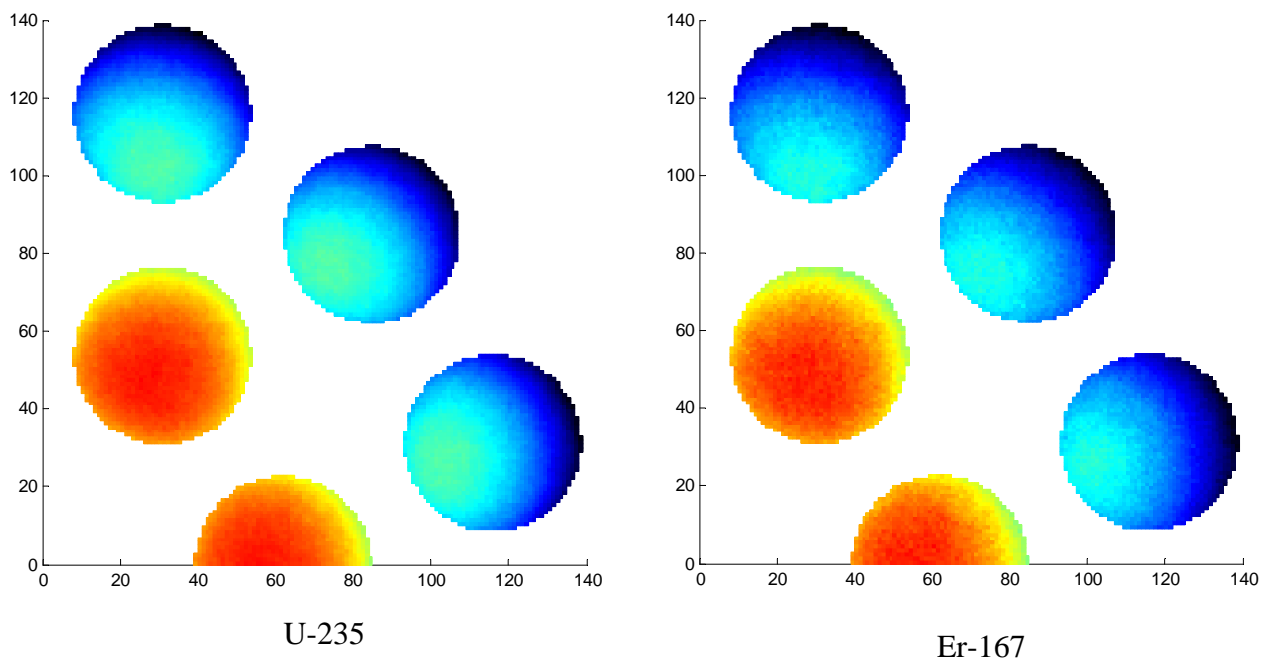


Рисунок 21. Распределение концентраций U^{235} и Er^{167} в твэлах канала РБМК на момент выгорания 100 суток.

Представленные результаты расчета РБМК также как кассеты с гадолиниевыми стержнями носят демонстративный характер. Тем не менее, распределение Er^{167} показывает, что его содержание в центральном ряде твэлов явно избыточно и его количество для начальной загрузки можно оптимизировать. Разработанный программный комплекс на базе программы UNKMKB позволяет провести за разумные временные сроки оптимизировать стартовую топливную загрузку, как по содержанию Er^{167} , так и по обогащению урана,

повысив тем самым эффективность топливоспользования, без ущерба нормам безопасности всего реактора.

Конечно, современная практика расчётных исследований в большом количестве случаев удовлетворена уже развитым программным обеспечением. В то же время очевидно, что реальные успехи в области математического моделирования, должны происходить в направлении создания расчетного аппарата, максимально приближающего виртуальный образ к реальности. И развитие в этом направлении, вне зависимости от степени удовлетворенности существующей практикой достигнутым, будет продолжаться.

В заключении сформулированы основные выводы диссертационной работы

В диссертации рассмотрены вопросы, связанные с математическим моделированием процессов переноса нейтронов и γ -квантов в ядерных реакторах, эволюции нуклидного состава топлива в процессе облучения и трансмутации радиоактивных нуклидов в материалах, присутствующих в реакторе. Для всех рассмотренных математических моделей разработаны численные алгоритмы и вычислительные программы, обеспечивающие вычисления пространственно-энергетического распределения полей нейтронов, поля энерговыделения, обусловленного делением ядер и радиоактивным распадом нестабильных изотопов, изотопных полей в топливе и других материалах.

Характерной особенностью разработанных методик и программ является их ориентация на проведение расчетов с высокой точностью. Разработки в рамках детерминированных и статистических вычислительных алгоритмов ориентированы на получение результатов, погрешность которых не превышает неопределенности ядерных данных, используемых в расчетах.

При решении задачи переноса нейтронов, наиболее приближенной по своему содержанию к классическим задачам математической физики, используются детерминированные методы, основанные на методе характеристик в рамках многогруппового энергетического приближения. Причем, разработанные алгоритмы обеспечивают получение насыщенного, в математическом смысле, решения, когда дальнейшее дробление пространственной сетки и угловой квадратуры уже не вызывает значимых изменений в результатах расчетов. С аналогичными целевыми ориентирами реализован алгоритм, основанный на статистических расчетах, метод Монте-Карло. В этом случае получение насыщенного результата требует очень большой статистики, что оказывается особенно важным при расчетах физически больших систем.

Решение задач, связанных с эволюцией изотопного состава в процессе выгорания топлива или радиоактивного распада нестабильных изотопов, реализовано с использованием оригинальных численных схем решения систем дифференциальных уравнений изотопной

кинетики, основанных на комбинировании аналитического решения с численным интегрированием. Разработанный алгоритм позволяет с высокой точностью проводить вычисления изотопной эволюции в условиях, когда константы уравнений (преимущественно это постоянные распада) сильно, на несколько порядков, меняются в изотопной цепочке, и использование стандартных схем может генерировать накопление значительной вычислительной ошибки.

Все нейтронно-физические и изотопные вычисления базируются на современном константном обеспечении, которое генерируется специально разработанными программами из файлов оцененных ядерных данных, таких как ENDF/B, JEF-2.2, JENDLE и РОСФОНД.

В работе приведено описание разработанных методик и их практическая реализация в виде программных комплексов, представлены результаты верификационных расчетов. В целом, разработанные методики ориентированы на проведение расчетных исследований по вопросам физики реакторов не только для существующих типов, но и для других перспективных разработок. Они эффективны при изучении проблемных вопросов резонансной блокировки, особенностей спектральных эффектов в области термализации, переноса γ -квантов, нуклидной кинетики как в процессе облучения, так и при расхолаживании. Все разработанные программные средства обладают приемлемым быстродействием.

Эффективность разработанных программных средств как по точности рассчитываемых функционалов, так и по быстродействию, подтверждена представленными в диссертации результатами расчетных исследований, математических и физических тестовых задач. Также представлены результаты расчетного анализа на ряде достоверных международно-признанных экспериментальных данных, опубликованных в литературе.

Приоритетным методом для решения задач переноса нейтронов и γ -излучения в диссертации рассматривается статистическая методика и программа, основанная на методе Монте-Карло, которая обеспечивает расчет в многогрупповом приближении на основе оригинального сеточного геометрического модуля. Особенностью специально разработанного сеточного модуля является отображение реальной геометрии в расчетном пространстве в виде маленьких квадратов, при этом по мере уменьшения размера квадратов повышается и точность описания геометрии. По существу, это пиксельное описание геометрии аналогично отображению сложной геометрической картинке на экране дисплея. Сеточный геометрический модуль обеспечивает конверсию реальной геометрии в точечную в автоматическом режиме, представляя заданную стандартным образом геометрию в удобном для вычисления формате. Скорость расчета траектории нейтрона с учетом пересечения границ разных областей в разработанном модуле, является, по всей видимости,

максимально возможной. Представленные в диссертации результаты расчетных исследований демонстрируют возможность обеспечить на персональном компьютере многогрупповой полномасштабный расчет реактора со статистикой в несколько миллиардов историй за приемлемое время.

Реализация этого алгоритма расчета переноса нейтронов позволила разработать методику и программные средства для прямого моделирования процесса выгорания топлива без использования математических методов решения дифференциальных уравнений изотопной кинетики. Этот алгоритм реализован впервые. Непосредственно в процессе расчета транспорта нейтронов в пределах расчетного объема, при каждом столкновении нейтронов с ядрами среды, статистически определяется ядерная реакция, реализованная при данном столкновении. В соответствии с типом ядерной реакции и их количеством рассчитывается изменение ядерной концентрации материнского ядра и приращение ядерных концентраций дочерних ядер или соответствующих продуктов деления в случае реализации реакции деления. По существу, данный алгоритм является прямым аналогом процесса изменения нуклидного состава топлива, и его успешная численная реализация оказалась возможной благодаря разработке быстрого алгоритма транспорта нейтронов, и, конечно, повышению быстродействия современных ЭВМ. Важность практической реализации этого алгоритма заключается ещё и в том, что он наглядно демонстрирует возможность реализации и других процессов взаимодействия нейтронов с ядрами среды на основе стохастических алгоритмов.

Одновременно с реализацией описанного выше стохастического алгоритма разработаны и детерминированные программы решения задач изотопной кинетики, основанные на традиционном подходе. Суть их заключается следующем. С использованием методики Монте-Карло рассчитывается пространственно-энергетическое распределение поля нейтронов, которое нормируется на заданный уровень мощности и, далее, используется для решения дифференциальных уравнений изотопной кинетики на небольшом временном интервале. Далее, для нового набора изотопных концентрации выполняется новый расчет поля нейтронов, и таким образом реализуется пошаговый процесс расчета выгорания топлива. Сравнение этих двух алгоритмов показало, что оба они обеспечивают получение практически одинаковых результатов в случае использования достаточно мелкого временного шага для детерминированных вычислений.

Для реализации указанных выше методов прямого моделирования физических процессов потребовалась разработка новых подходов к формированию библиотек нейтронно-физических констант, констант распада нестабильных изотопов, матриц выхода нуклидов, образующихся в процессе деления ядер в зависимости от энергии нейтрона,

вызвавшего деление. Формирование спектра нейтронов деления реализовано как для мгновенных, так и для запаздывающих нейтронов. По существу, из современных файлов ядерных данных при подготовке констант для проведения расчетов используется вся информация о взаимодействии нейтронов с ядрами среды.

В диссертации представлены описания соответствующих методик и программная реализация формирования многогрупповых библиотек ядерных данных на основе современных файлов оцененных ядерных данных для решения стационарных и нестационарных уравнений переноса нейтронов и γ -квантов, задач изотопной кинетики.

Представленные в диссертации результаты исследований показывают, что точность рассчитываемых функционалов, детализированных как по энергетической, так и по пространственной сетке, сопоставима с точностями программ, реализующих метод Монте-Карло для решения переноса нейтронов и γ -квантов с поточечным представлением сечений взаимодействия. Следовательно, разработанные подходы к формированию библиотек физических констант, и сами библиотеки позволяют их использовать для прямого моделирования физических процессов различного типа в ядерных реакторах.

Таким образом, разработанные методики и программные комплексы позволяют проводить расчетные исследования повышенной точности реакторов различного типа, начиная с подготовки библиотек на основе файлов оцененных ядерных данных (ENDFB, JEF, JENDLE, РОСФОНД), решения уравнений переноса нейтронов и гамма-квантов с учетом изменения нуклидного состава топлива в процессе выгорания и расчета остаточного энерговыделения в реакторе после его остановки.

Все разработанные программы зарегистрированы в государственном фонде алгоритмов и программ.

Основные положения диссертационной работы изложены в **публикациях**:

1. Давиденко В.Д., Цибульский В.Ф. Метод характеристик со стохастическим выбором угловых направлений // Математическое моделирование. - Т. 15. - №8. – С. 75-87. – 2003.

2. Давиденко В.Д., Цибульский В.Ф. Моделирование изотопной кинетики методом Монте-Карло // Атомная энергия. 2010. Т. 109. № 4. С. 183-187.

3. Давиденко В.Д., Лобынцев В.А., Цибульский В.Ф., Разработка Программной Системы Кристалл для проектных расчетов реакторов, Атомная Энергия, т.69, вып.4, стр. 203, М. 1990.

4. Давиденко В.Д., Лобынцев В.А., Цибульский В.Ф., Чибиняев А.В., Методики и модули программной системы Кристалл для расчета реакторов, ВАНТ, Сер. Физика Ядерных Реакторов, вып.4, стр.30-37, 1992.

5. Глушков Е.С., Давиденко В.Д., Каминский А.С. и др., Физические характеристики критических сборок с шаровыми твэлами ВТГР, ВАНТ, Сер. Физика ядерных реакторов, вып.1, стр. 62-72, 1993.

6. Пономарев-Степной Н.Н., Алексеев П.Н., Давиденко В.Д., Субботин С.А., Цибульский В.Ф., Сравнение направлений развития ядерной энергетики в XXI в. на основе расчетов материальных балансов // Атомная энергия. - Т.91. -В. 5. - 2001.

7. В.Д. Давиденко, В.А. Стукалов, С.А. Субботин, В.Ф. Цибульский. Развитие ядерной энергетики и обеспечение АЭС топливом, ISSN1811-7866 // Бюллетень по Атомной Энергии. - декабрь 2004.

8. Бояринов В.Ф., Брызгалов В.И., Глушков Е.С., Гомин Е.А., Гуревич М.И., Давиденко В.Д., Фомиченко П.А., Цибульский В.Ф., Юдкевич М.С., Марова Е.В., Сухарев Ю.П., Митенкова Е.Ф., Новиков Н.В. Расчетные нейтронно-физические «бенчмарк»-исследования реактора типа ГТ-МГР. Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов. 2006. № 1. С. 110-120.

9. Кодочигов Н.Г., Сухарев Ю.П., Марова Е.В., Бояринов В.Ф., Брызгалов В.И., Глушков Е.С., Гомин Е.А., Гуревич М.И., Давиденко В.Д., Компаниец Г.В., Крутов А.М., Невиница В.А., Фомиченко П.А., Цибульский В.Ф., Юдкевич М.С., Митенкова Е.Ф., Новиков Н.В. Расчетно-экспериментальные исследования нейтронно-физических характеристик активной зоны ГТ-МГР. Атомная энергия. 2007. Т. 102. № 1. С. 63-68.

10. Бояринов В.Ф., Давиденко В.Д., Полисмаков А.А., Цибульский В.Ф. Верификация комплекса программ SUNAM-2D на расчетах выгорания топлива в ТВС ВВЭР-1000 с урановым и МОХ топливом. Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов. 2009. № 3. С. 36-43.

11. Гольцев А.О., Давыдова Г.Б., Давиденко В.Д.. Влияние депрессии потока нейтронов в ячейке РБМК на величину максимальной и средней температуры топлива. // Известия Томского политехнического университета. Энергетика, Т.314, №4, с.5-7, 2009г.

12. Давиденко В.Д., Карпушкин Т.Ю., Цибульский В.Ф. Расчет выгорания сильных поглотителей методом вероятностей первых столкновений. Атомная энергия. 2010. Т. 109. № 3. С. 130-132.

13. Цибульский В.Ф., Давиденко В.Д., Лобынцев В.А., Пономарев-Степной Н.Н., Прошкин А.А., Родионова Е.В., Цибульский С.В. Топливо повышенного обогащения в ВВЭР. Атомная энергия. 2010. Т. 108. № 3. С. 155-159.

14. Белов И.А., Давиденко В.Д., Ковалишин А.А., Колокол А.С., Пономарев-Степной Н.Н., Степанов А.С., Субботин А.С., Родионова Е.В., Прошкин А.А., Цибульский В.Ф.,

Цибульский С.В. Концепция быстрых реакторов с открытым топливным циклом. Атомная энергия. 2012. Т. 113. № 2. С. 67-73.

15. Давиденко В.Д., Пономарев-Степной Н.Н., Родионова Е.В., Цибульский В.Ф. Важные процессы при выгорании топлива в быстрых реакторах с малым запасом реактивности. Атомная энергия. 2012. Т. 112. № 6. С. 371-372.

16. Зимин В.Г., Выговский С.Б., Семёнов А.А., Давиденко В.Д., Цибульский В.Ф. Расчётный анализ экспериментов по определению коэффициентов реактивности на ВВЭР-1000 3-го блока Калининской АЭС с помощью программного комплекса простор. Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов. 2013. № 4. С. 34-45.

17. Климов А.Д., Давиденко В.Д., Цибульский В.Ф., Цибульский С.В. Изменение температурного коэффициента реактивности в легководных реакторах при выгорании топлива. Атомная энергия. 2014. Т. 116. № 1. С. 3-5.

18. Давиденко В.Д., Пономарев-Степной Н.Н., Цибульский В.Ф. Возможность радиационно-эквивалентного захоронения отходов при переработке. Атомная энергия. 2014. Т. 116. № 1. С. 55-56.

19. Андрианова Е.А., Давиденко В.Д., Цибульский В.Ф. Радиоактивность в замкнутом топливном цикле атомной энергетики. Энергия: экономика, техника, экология. 2014. № 9. С. 2-7.

20. Андрианова Е.А., Давиденко В.Д., Цибульский В.Ф., Цибульский С.В. Варианты замыкания ядерного топливного цикла. Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов. 2014. № 1-2. С. 60-67