

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

На правах рукописи

БЕРЕЗНЕВ ВАЛЕРИЙ ПАВЛОВИЧ



**РАЗРАБОТКА НЕЙТРОННО-ФИЗИЧЕСКОГО КОДА CORNER ДЛЯ АНАЛИЗА  
СТАЦИОНАРНЫХ И НЕСТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ В РЕАКТОРАХ НА  
БЫСТРЫХ НЕЙТРОНАХ**

05.14.03 – Ядерные энергетические установки, включая проектирование, эксплуатацию и  
вывод из эксплуатации

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Научный руководитель:  
Селезнёв Евгений Фёдорович,  
доктор технических наук

Москва – 2017

# ОГЛАВЛЕНИЕ

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ .....	4
Введение .....	6
1 Обзор нейтронно-физических расчетных методов и современных программных комплексов .....	11
1.1 Детерминистический подход.....	11
1.1.1 Метод дискретных ординат .....	11
1.1.2 Метод характеристик.....	14
1.1.3 Метод сферических гармоник .....	15
1.1.4 Метод поверхностных гармоник .....	16
1.2 Стохастический подход.....	17
1.3 Гибридные методы .....	19
1.4 Инженерный подход.....	20
1.5 Выводы по главе 1 .....	22
2 Постановка задачи математического моделирования переноса нейтронов в ядерных реакторах.....	23
2.1 Нестационарные задачи .....	23
2.2 Стационарные задачи .....	25
2.2.1 Однородная задача.....	25
2.2.2 Сопряженная задача.....	26
2.2.3 Неоднородная задача .....	27
2.3 Выводы по главе 2 .....	27
3 Нейтронно-физический расчетный код CORNER .....	28
3.1 Общие сведения .....	28
3.2 Используемые приближения .....	29
3.2.1 Многогрупповое энергетическое приближение .....	29

3.2.2	Угловая аппроксимация .....	31
3.2.3	Пространственная аппроксимация.....	39
3.2.4	Улучшенное квазистатическое приближение .....	58
3.3	Структура программы и особенности реализации .....	63
3.3.1	Описание входных данных и расчетных модулей.....	63
3.3.2	Реализация методики параллельных вычислений .....	68
3.3.3	Постпроцессинг.....	69
3.4	Выводы по главе 3 .....	70
4	Апробация расчетного кода, проведение верификационных и кросс-верификационных расчетов.....	70
4.1	NEACRP 3-D Neutron Transport Benchmark Model 4.....	70
4.2	JOYO-LMFR-RESR-001 benchmark.....	78
4.3	БФС-56 и БФС-58-1 .....	83
4.4	Тестовая нестационарная задача .....	89
4.5	Выводы по главе 4 .....	91
	ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	91
	СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ .....	92

## ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

БФС	– большой физический стенд
РУ	– реакторная установка
БР	– реактор на быстрых нейтронах
ЯЭУ	– ядерная энергетическая установка
МДО	– метод дискретных ординат
а.з.	– активная зона
WDD	– weighted diamond difference
AWDD	– adaptive weighted diamond difference
DD	– diamond difference
DTW	– directional theta-weighted
TBC	– тепловыделяющая сборка
SC	– step characteristic
CMFD	– coarse mesh finite difference
МПГ	– метод поверхностных гармоник
MPI	– message passing interface
CAD	– computer aided design
БН	– реактор на быстрых нейтронах с натриевым теплоносителем
СУЗ	– система управления и защиты
АЭС	– атомная электростанция
ЭВМ	– электронно-вычислительная машина
НИОКР	– научно-исследовательские и опытно-конструкторские работы

- РС – регулирующий стержень
- АЗ – стержень аварийной защиты
- ИТКР – изотермический температурный коэффициент реактивности
- МОХ – смешанное уран-плутониевое оксидное топливо

# Введение

## Актуальность работы

Развитие технологии реакторов на быстрых нейтронах – перспективное направление ядерной энергетики, которое позволяет решить ряд важнейших задач, таких как эффективное использование ядерного топлива и обеспечение безопасности АЭС. Реакторы-размножители могут эффективно использоваться для расширенного воспроизводства ядерного топлива, для утилизации плутония, для выжигания долгоживущих компонентов отходов отработавшего топлива перед захоронением.

Россия – мировой лидер в области энергетических реакторов на быстрых нейтронах. Белоярская АЭС является единственной в мире, где работают промышленные реакторы на быстрых нейтронах (БН-600 и БН-800). Активно развиваются и другие проекты ядерных энергетических установок на быстрых нейтронах, такие как БН-1200, БРЕСТ-ОД-300, СВБР.

Таким образом, актуальность работы объясняется необходимостью проведения прецизионных расчетных исследований по решению задач переноса нейтронов с применением эффективных методов на стадии рабочего и эскизного проектирования перспективных ядерных энергетических установок на быстрых нейтронах с жидкометаллическим теплоносителем.

Кроме того, современные тенденции развития вычислительной техники диктуют повышение требований к точности моделирования нейтронно-физических процессов и способствуют переходу к широкомасштабному использованию высокоточных методов решения уравнения переноса при выполнении проектно-конструкторских работ, в расчетном обосновании и сопровождении РУ БР, а не только для проведения реперных расчетов. Значительно возросшие мощности вычислительной техники и методы распараллеливания сделали возможным переход к моделям с высокой детализацией расчетной области, максимально приближенных к реальному описанию геометрии и основных физических процессов.

Таким образом, основные направления деятельности в области нейтронно-физических расчетов связаны с разработкой новых и модификацией ранее разработанных моделей, численных методов и созданием на их основе программных комплексов нового поколения для полномасштабного моделирования основных нейтронно-физических процессов в быстрых ядерных реакторах с жидкометаллическим теплоносителем и для проведения прецизионных расчетов активной зоны и защиты ЯЭУ.

## **Цель диссертационной работы**

Основной целью диссертационного исследования являлась разработка нейтронно-физического кода CORNER для анализа стационарных и нестационарных процессов в реакторах на быстрых нейтронах.

Исходя из поставленной цели, в диссертационной работе решались следующие задачи:

- анализ методов решения уравнения переноса нейтронов;
- разработка алгоритмов решения стационарных и нестационарных задач переноса нейтронов методом дискретных ординат;
- создание вычислительного инструмента по решению задач переноса нейтронов методом дискретных ординат в трехмерной гексагональной и детальной геометрии;
- проведение расчетных исследований.

## **Научная новизна**

Впервые в рамках нейтронно-физического расчетного кода на основе метода дискретных ординат разработано и реализовано улучшенное квазистатическое приближение для решения нестационарной задачи, в котором совмещено использование теории возмущений первого порядка и асимптотических оценок для определения реактивности.

Впервые в отечественной практике разработана и реализована нодальная методика в рамках метода дискретных ординат в трехмерной гексагональной геометрии.

## **Практическая значимость**

Разработанный нейтронно-физический код CORNER входит в состав универсального расчетного кода нового поколения ЕВКЛИД/V1, поданного на аттестацию и используемого для проведения проектных расчетов РУ БРЕСТ-ОД-300 и РУ БН-1200.

Расчетный код CORNER используется в качестве контрольно-реперного модуля для аттестованного программно-технического комплекса ГЕФЕСТ800 расчетно-экспериментального сопровождения эксплуатации реактора БН-800 Белоярской АЭС (аттестационный паспорт программного средства № 404 от 14 июля 2016 года).

## **Положения, выносимые на защиту**

- 1) Разработанный нейтронно-физический расчетный код CORNER.
- 2) Результаты проведенных верификационных и кросс-верификационных расчетов.

## **Достоверность результатов**

Достоверность работы отдельных модулей нейтронно-физического кода CORNER подтверждена результатами верификационных расчетов экспериментов и кросс-верификации с другими расчетными кодами на бенчмарк-моделях.

## **Личный вклад автора**

Все результаты, выносимые на защиту, получены автором лично, а именно:

1) Разработка алгоритмов решения нестационарных и стационарных задач переноса нейтронов методом дискретных ординат.

2) Создание нейтронно-физического кода CORNER на основе метода дискретных ординат в трехмерной гексагональной и детальной геометрии, одним из модулей которого является программа для ЭВМ «Программа для решения неоднородной задачи переноса нейтронов. Версия 1.0» (Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2014619231), разработанная диссертантом в рамках работ по государственному контракту от 22.03.2013 № Н.4х.90.13.1084 «Разработка интегрированных систем кодов нового поколения для разработки и обоснования безопасности ядерных реакторов, проектирования АЭС, создания технологий и объектов ядерного топливного цикла. Этап 2013 года».

3) Проведение верификационных и кросс-верификационных исследований, анализ полученных результатов.

## **Апробация работы**

Основные этапы и положения диссертационной работы докладывались на 4 семинарах и 8 конференциях:

1) Межведомственный XXII семинар «Нейтронно-физические проблемы атомной энергетики (Нейтроника – 2011), г. Обнинск, 24 – 26 октября 2011 г.;

2) Межведомственный XXIV семинар «Нейтронно-физические проблемы атомной энергетики (Нейтроника – 2013), г. Обнинск, 5 – 8 ноября 2013 г.;

3) Межведомственный XXV семинар «Нейтронно-физические проблемы атомной энергетики (Нейтроника – 2014), г. Обнинск, 21 – 24 октября 2014 г.;

4) Межведомственный XXVII семинар «Нейтронно-физические проблемы атомной энергетики (Нейтроника – 2016), г. Обнинск, 23 – 25 ноября 2016 г.;

5) XIII Школа Молодых Ученых ИБРАЭ РАН «Безопасность и риски в энергетике» (ШМУ – 2012), г. Москва, 26 – 27 апреля 2012 г.;

- 6) XIV Школа Молодых Ученых ИБРАЭ РАН «Безопасность и риски в энергетике» (ШМУ – 2013), г. Москва, 25 – 26 апреля 2013 г.;
- 7) XV Школа Молодых Ученых ИБРАЭ РАН «Безопасность и риски в энергетике» (ШМУ – 2014), г. Москва, 24 – 25 апреля 2014 г.;
- 8) XVI Школа Молодых Ученых ИБРАЭ РАН «Безопасность и риски в энергетике» (ШМУ – 2015), г. Москва, 23 – 24 апреля 2014 г.;
- 9) Международная конференция «50 лет БФС», г. Обнинск, 28 февраля – 2 марта 2012 г.;
- 10) Десятая международная научно-техническая конференция «Безопасность, эффективность и экономика атомной энергетики» (МНТК – 2016), г. Москва, 25 – 27 мая 2016 г.;
- 11) Международная научно-техническая конференция «Инновационные проекты и технологии ядерной энергетики» (МНТК НИКИЭТ – 2012), г. Москва, 27 – 29 ноября 2012 г.;
- 12) Международная научно-техническая конференция «Инновационные проекты и технологии ядерной энергетики» (МНТК НИКИЭТ – 2016), г. Москва, 27 – 30 сентября 2016 г.

#### **Публикации по теме исследования**

По теме диссертации опубликовано 5 печатных работ в ведущих реферируемых отечественных журналах из списка, рекомендованного ВАК при Минобрнауки России:

- 1) Асатрян Д.С., Березнев В.П., Селезнев Е.Ф. Нейтронно-физический расчетный код CORNER // Ядерная физика и инжиниринг – 2015. – Т.6, – №5-6, – С. 266-273.
- 2) Березнев В.П. Нодальный Sn метод в HEX-Z геометрии // Известия вузов. Ядерная энергетика – 2015. – №3, – С. 56-62.
- 3) Asatryan D.S., Bereznev V.P., Seleznev E.F. CORNER neutronic code // Nuclear Energy and Technology – 2015. – №1, – P. 117-121.
- 4) Белов А.А., Белоусов В.И., Березнев В.П. и др. Комплекс программ ГЕФЕСТ800 для проведения эксплуатационных расчетов нейтронно-физических характеристик БН-800 в стационарном режиме // Атомная энергия. – 2015. – Т.118. – вып. 6. – С. 303-308.
- 5) Белов А.А., Белоусов В.И., Березнев В.П. и др. Комплекс программ ГЕФЕСТ800 для проведения эксплуатационных расчетов нейтронно-физических характеристик БН-800 в нестационарном режиме // Атомная энергия. – 2015. – Т.119. – вып. 1. – С. 3-8.

Другие публикации:

1) Белов А.А., Березнев В.П. Результаты использования кода GUITAR.A на модели БН-600 // Нейтронно-физические проблемы атомной энергетики «Нейтроника - 2011»: сб. докл. в 2-х т. – Обнинск: ГНЦ РФ ФЭИ, 2012. – т. 1, С. 274-280.

2) Селезнёв Е.Ф., Белов А.А., Березнев В.П. и др. Березнев. Нейтронно-физические коды // Инновационные проекты и технологии ядерной энергетики: сб. тр. междунар. науч.-техн. конф. – Москва: ОАО «НИКИЭТ», 2012. – С. 396-407.

3) Аввакумов А.В., Березнев В.П., Васекин В.Н. и др. Обоснование применимости интегрального кода нового поколения ЕВКЛИД/V1 для расчета РУ БРЕСТ-ОД-300 // Инновационные проекты и технологии ядерной энергетики: сб. докл. в 2-х т. – Москва: ОАО «НИКИЭТ», 2016. – т. 2, С. 8-19.

4) Селезнёв Е.Ф., Белов А.А., Березнев В.П. и др. Использование комплекса ГЕФЕСТ800 для проведения эксплуатационных расчетов нейтронно-физических характеристик РУ БН-800 // Десятая международная научно-техническая конференция «Безопасность, эффективность и экономика атомной энергетики» (МНТК-2016): сб. тр. междунар. науч.-техн. конф. – Москва: ОАО «Концерн Росэнергоатом», 2016. – С. 137-142.

5) Березнев В.П. Использование кинетического приближения для улучшения диффузионного решения при определении плотности потока нейтронов в реакторах на быстрых нейтронах // XII научная школа молодых ученых ИБРАЭ РАН: сб. тр. – Москва: ИБРАЭ РАН, 2011. – С. 167-169.

6) Березнев В.П. Разработка расчетных модулей на базе кинетического приближения в HEX-Z геометрии и на основе МКЭ // XIV научная школа молодых ученых ИБРАЭ РАН: сб. тр. – Москва: ИБРАЭ РАН, 2013. – С. 35-38.

7) Березнев В.П. Реализация LN метода в расчетном коде на базе Sn приближения в HEX геометрии // XV научная школа молодых ученых ИБРАЭ РАН: сб. тр. – Москва: ИБРАЭ РАН, 2014. – С. 34-37.

8) Березнев В.П. Разработка нодального Sn метода в рамках расчетного кода CORNER // XVI научная школа молодых ученых ИБРАЭ РАН: сб. тр. – Москва: ИБРАЭ РАН, 2015. – С. 31-34.

### **Структура и объем работы**

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, списка литературы из 63 библиографических ссылок. Общий объем работы составляет 97 страниц основного текста, включая 19 таблиц и 30 рисунков.

# 1 Обзор нейтронно-физических расчетных методов и современных программных комплексов

## 1.1 Детерминистический подход

### 1.1.1 Метод дискретных ординат

Метод дискретных ординат, или  $S_N$  метод, впервые был предложен в начале 1950-ых годов в работах Г. Вика и С. Чандрасекара [1] для полуаналитического решения астрофизических задач переноса излучения в однородных плоскопараллельных слоях.

Развитие МДО привело к его распространению на решение кинетического уравнения переноса нейтронов в ядерных реакторах. Первый вариант метода был предложен Б. Карлсоном в 1953 году для сферически симметричной геометрии и был основан на кусочно-линейном представлении плотности потока нейтронов как функции угловой переменной. Несколько позже появился дискретный  $S_N$  метод, получивший широкое распространение в нейтронно-физических расчетах [2]. В этом методе разностные уравнения выводятся из физических соображений методом баланса частиц в ячейке фазового пространства. В 1969 году в работе Латропа были представлены численные схемы  $S_N$  метода для двумерной прямоугольной геометрии, а в 1973 году Рид и Хил обобщили  $S_N$  метод на случай треугольной геометрии.

Суть метода дискретных ординат состоит в аппроксимации угловой зависимости путем введения дискретного набора угловых направлений и последующей оценке плотности потока нейтронов для этих направлений путем решения соответствующего уравнения переноса. В результате уравнение переноса заменяется системой из  $M$  дифференциальных уравнений, описывающих пространственно-энергетическое распределение  $\varphi_m(\vec{r}, E)$  в этих направлениях:

$$\vec{\Omega}_m \cdot \nabla \varphi_m(\vec{r}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \varphi_m(\vec{r}, E) = Q_m(\vec{r}, E), \quad m = 1, \dots, M, \quad (1.1)$$

где

$$\varphi_m(\vec{r}, E) = \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}_m, E),$$

$$\Phi(\vec{r}, E) = \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) d\vec{\Omega} \approx \sum_{m=1}^M w_m \varphi_m(\vec{r}, E),$$

$$Q_m(\vec{r}, E) = \int dE' \sum_{m'=1}^M w_{m'} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}_{m'}, E' \rightarrow \vec{\Omega}_m, E) \varphi_{m'}(\vec{r}, E') + \chi(\vec{r}, E) \int dE' \sum_{m'=1}^M w_{m'} \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \varphi_{m'}(\vec{r}, E').$$

Среди отечественных современных нейтронно-физических расчетных кодов на базе метода дискретных ординат можно выделить такие коды, как ODETTA [3,4], CORNER [5], КАТРИН [6], PMSNSYS [7], LUCKY [8], среди зарубежных – PARTISN [9], PENTRAN [10], Attila [11].

Расчетный код ODETTA предназначен для моделирования нейтронно-физических процессов в быстрых реакторах путем решения стационарного многогруппового уравнения переноса в приближении метода дискретных ординат с разрывным линейным методом конечных элементов на неструктурированных тетраэдральных сетках [12]. При решении уравнения переноса нейтронов и гамма-квантов в защитах ядерных реакторов необходимо максимально точно учитывать границы материалов (конструктивных элементов). Так как эти границы обычно являются криволинейными или же плоскими, но не параллельными друг другу, они лучше всего могут быть аппроксимированы сеткой из произвольных тетраэдров. Дополнительным преимуществом неструктурированных тетраэдральных сеток является возможность их сгущения только в тех пространственных подобластях, где такое сгущение необходимо вследствие больших градиентов искомого решения или сильной неоднородности области. При этом каждой грани одного тетраэдра точно соответствует только одна грань другого тетраэдра, поэтому не возникает необходимости проводить интерполяцию сеточного решения на границе двух ячеек, тем самым удастся избежать появления в сеточном решении дополнительной погрешности из-за интерполяции. Принципиальным приложением является расчет задач переноса нейтронов и гамма-квантов с глубоким проникновением. Рассчитываются как однородные задачи, так и неоднородные задачи с фиксированным внутренним источником, включая совместные расчеты нейтронов и гамма-квантов. Анизотропное рассеяние представляется разложением в ряд по присоединенным функциям Лежандра произвольного порядка. Для ускорения сходимости внутренних итераций используется метод пространственного ребаланса [13]. Для ускорения сходимости внешних итераций используется  $\delta$ -процесс [14]. Язык программирования – Fortran 90. В коде используются неструктурированные тетраэдральные сетки, построенные на основе CAD-модели расчетной области.

Зарубежным аналогом кода ODETTA является код Attila, разработанный в Transpire Inc. Attila – программа для расчета переноса излучения, которая подходит для решения задач дозиметрии, медицинской физики, радиационной безопасности, расчета радиационной защиты, критичности реактора и т.д. Основные особенности кода:

- прямое импортирование твердотельных моделей из ведущих CAD-систем;
- моделирование произвольной сложной геометрии за счет генерации неструктурированной тетраэдральной сетки;
- расчет как нейтральных, так и заряженных частиц;
- автоматическое создание файлов весовых окон для MCNP/MCNPX [15];
- удобный, наглядный интерфейс пользователя.

3D  $S_N$  программа КАТРИН – программа для решения уравнения переноса нейтронов, фотонов и заряженного излучения методом дискретных ординат в трехмерной геометрии. Алгоритмическое и функциональное наполнение:

- 3D  $x, y, z$  и  $r, \vartheta, z$  геометрии, ортогональные неравномерные пространственные сетки;
- предусмотрено решение прямой и сопряженной задачи, решение краевой задачи с заданными внутренними и граничными источниками, подкритической краевой задачи, задачи на собственное значение;
- для поддержания локального баланса масс в пространственной ячейке сетки использует volume fraction (VF) метод;
- анизотропия рассеяния учитывается в  $P_L$  приближении, порядок  $P_L$  приближения может меняться для различных диапазонов энергетических групп.
- распараллеливание решения уравнения переноса по пространственным подобластям с применением Koch-Baker-Alcouffe (KBA) последовательности расчета подобластей;
- для аппроксимации уравнения переноса используются следующие схемы: AWDD (2-ой порядок точности); linear discontinuous (LD) и adaptive weighted LD (AWLD) (3-ий порядок точности); linear best (LB) и adaptive weighted LB-WLD (AWLB-WLD) (4-ый порядок точности); обеспечивающие положительность и необходимый уровень монотонности разностного решения путем соответствующего выбора весовых коэффициентов схемы в разностных ячейках с большими градиентами решения.
- для ускорения внешних и внутренних итераций используется KP1 схема, согласованная с используемой разностной аппроксимацией задачи.

Программа LUCKY разработана для решения как стационарных, так и нестационарных задач в больших и сложных по геометрии реакторных системах на основе параллельных вычислений на суперкомпьютерах с распределенной памятью, применяющих MPI стандарт на большом числе процессоров. Используется только прямоугольная X-Y-Z геометрия, другие виды геометрий моделируются путем выбора

мелкого пространственного шага сетки. В программе реализована возможность расчета функционалов от полученного решения по заданным коэффициентам и вывод полученных результатов в виде, удобном для постпроцессинговой обработки.

Программа PMSNSYS, разработанная в ОКБ «ГИДРОПРОЕСС», предназначена для решения стационарного уравнения переноса нейтронов и гамма-квантов DSn-методом. Для дискретизации по угловым переменным применяются ESn-квадратурные наборы произвольного порядка. Индикатриса рассеяния рассматривается в P<sub>L</sub>-приближении. В программе PMSNSYS реализован изложенный подход, в соответствии с которым обеспечена возможность проведения нейтронно-физических расчетов на комбинированных пространственных сетках, составленных из прямых призм с правильным шестиугольным и произвольным четырехугольным (и треугольным) основанием, при аппроксимации оператора переноса на основе сочетания DD-схем и DDL-схем.

Параллельный нестационарный расчетный код PARTISN разработан в Лос-Аламосской национальной лаборатории. Поддерживаемые геометрии: 1-D (плоская, цилиндрическая или сферическая), 2-D (X-Y, R-Z или R-T) и 3-D (X-Y-Z or R-Z-T). Для пространственной аппроксимации используются алмазные и адаптивные взвешенные конечно-разностные схемы, для временной – схема Кранка-Николсона. Для внешних и внутренних итераций может быть применено диффузионное синтетическое, чебышевское ускорение по источнику деления. Угловые компоненты источника могут быть рассмотрены в P<sub>N</sub> приближении.

PENTRAN – стационарный нейтронно-физический расчетный код. Особенности:

- язык программирования – Fortran 90, параллельные вычисления с использованием MPI;
- пре- и пост- процессинг;
- адаптивная конечно-разностная методика, суть которой в автоматическом выборе конечно-разностной схемы в зависимости от размера пространственной расчетной ячейки;
- кроссплатформенность;
- поддержка только X-Y-Z геометрии;
- анизотропия рассеяния в P<sub>N</sub> приближении;
- метод ребаланса для ускорения итераций.

#### 1.1.2 Метод характеристик

Для описания сложных геометрий в 1972 году Аскью был разработан метод характеристик [16].

Методы характеристик – это разностные или разностно-аналитические аппроксимации семейства обыкновенных интегро-дифференциальных уравнений, записанных на характеристиках – траекториях движения частиц:

$$\vec{r} = (x(s), y(s), z(s)) = (x_0 + s\Omega_x, y_0 + s\Omega_y, z_0 + s\Omega_z) = \vec{r}_0 + s\vec{\Omega}.$$

Для оценки плотности потока нейтронов используется интегральное представление

$$\varphi(\vec{r}_0 + s\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E) = \varphi(\vec{r}_0, \vec{\Omega}, E) e^{-\int_0^s \Sigma_t(\vec{r}_0 + s'\vec{\Omega}, E) ds'} + \int_0^s Q(\vec{r}_0 + s''\vec{\Omega}, \vec{\Omega}, E) e^{-\int_{s''}^s \Sigma_t(\vec{r}_0 + s'\vec{\Omega}, E) ds'} ds''. \quad (1.2)$$

Впервые этот метод был реализован в расчетном коде WIMS-E, среди современных кодов можно назвать MCCG3D [17], OpenMOC [18].

Программа MCCG3D реализует метод длинных характеристик. Геометрический блок программы поддерживает как полигональную, так и криволинейную форму поверхности моделируемых объектов. Реализованы SC и DD разностные схемы. Расчетный код ориентирован на решение задач радиационной защиты реакторов. Реализованы методики ускорения расчета.

Расчетный код OpenMOC разрабатывается в Массачусетском технологическом университете с 2012 года. Предназначен для решения трехмерных реакторных задач. Поддерживает твердотельную геометрию с кривыми второго порядка. Возможны параллельные вычисления, в том числе с использованием графических процессоров. Разрабатываются CMFD методики ускорения.

### 1.1.3 Метод сферических гармоник

В методе сферических гармоник ( $P_N$  приближение), разработанном Г. Виком, для описания угловой зависимости используется разложение плотности потока нейтронов в ряд по сферическим гармоникам, в одномерном случае – в ряд по полиномам Лежандра:

$$\varphi(x, \mu, E) = \sum_{n=0}^N (2n+1) P_n(\mu) \Phi_n(x, E),$$

$$\Phi_n(x, E) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_n(\mu) \varphi(x, \mu, E) d\mu.$$

В одномерном случае система уравнений  $P_N$  метода имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{n}{2n+1} \frac{d}{dx} \Phi_{n-1}(x, E) + \frac{n+1}{2n+1} \frac{d}{dx} \Phi_{n+1}(x, E) + \Sigma_t(x, E) \Phi_n(x, E) = \\ = \int dE' \Sigma_{s,n}(x, E' \rightarrow E) \Phi_n(x, E') + S_n(x, E), \quad n=1, \dots, N \end{aligned} \quad (1.3)$$

При  $N=1$  получается диффузионное приближение.

Трехмерные расчеты в  $P_N$  приближении требуют больших вычислительных затрат, т.к. число  $P_N$  уравнений пропорционально  $(N+1)^2$ , кроме того в [19] показано, что при расчете а.з. получаемые результаты в  $P_2$  и  $P_3$  приближениях отличаются от результатов  $P_1$  приближения до 3%. Поэтому на практике используется упрощенный  $SP_N$  метод [20], предложенный Гельбардом в 1960 году. Это приближение получается из  $P_N$  уравнений для плоской геометрии, которые относительно просты, и включает специальную подстановку одномерных производных второго порядка в трехмерный оператор Лапласа. Например, система  $SP_3$  уравнений имеет вид [63]:

$$\begin{cases} -\nabla \cdot \left( \frac{1}{3\Sigma_{r,1}} \nabla (\Phi_0 + 2\Phi_2) \right) + \Sigma_{r,0} \Phi_0 = Q, \\ -\nabla \cdot \left( \frac{9}{35\Sigma_{r,3}} \nabla \Phi_2 \right) + \Sigma_{r,2} \Phi_2 = \frac{2}{5} (\Sigma_{r,0} \Phi_0 - Q). \end{cases}$$

Необходимо отметить недостаток метода сферических гармоник, связанный с тем, что на плоской границе распределение плотности потока нейтронов как функции угла рассеяния  $\mu_0$  претерпевает разрыв при  $\mu_0 = 0$  (для криволинейных поверхностей разрыв отсутствует), а любая конечная сумма полиномов Лежандра непрерывна. Таким образом, условия для плотности потока нейтронов на границах раздела и условия на свободной границе при разложении по сферическим функциям выполняются приближенно. Для более точного выполнения граничных условий используется двойное  $P_N$  приближение (метод Ивона), основанное на использовании различных разложений для разных интервалов изменения угловых переменных. Однако, оно применимо только для простых геометрий.

#### 1.1.4 Метод поверхностных гармоник

Метод поверхностных гармоник, предложенный проф. Н.И. Лалетиным в начале 1980-ых годов [21], занимает промежуточное место между детерминистическими и инженерными методами, обладая достоинствами первых по точности расчета и вторых по вычислительным затратам.

МПП является методом решения уравнения переноса нейтронов во всем объеме ядерного реактора и позволяет заменить решение одной задачи большой размерности на решение большого числа задач существенно меньшей размерности и, как следствие, имеет небольшие вычислительные затраты. Решение в каждой расчетной ячейке представляется в виде линейной комбинации пробных решений с произвольными коэффициентами. Разные пробные решения отличаются друг от друга граничными условиями. Моменты общего решения в этих ячейках приравниваются на границах между этими ячейками. В результате получаются конечно-разностные уравнения для неизвестных коэффициентов при пробных решениях.

Одна из основных идей МПП, а именно поиск решения краевой задачи в виде линейной комбинации пробных функций и некоторых коэффициентов, является широко распространенным подходом и реализуется в классе методов, называемых проекционными. Точное решение краевой задачи  $\psi(\vec{r})$  ищется в виде функции  $\varphi(\vec{r})$ , являющейся линейной комбинацией пробных или базисных функций:

$$\psi(\vec{r}) \approx \varphi(\vec{r}) = \sum_{i=1}^l c_i \varphi_i(\vec{r}),$$

где  $c_i$  – неизвестные коэффициенты,  $\varphi_i(\vec{r})$  – пробные функции. Пробные функции должны удовлетворять граничным условиям и быть линейно независимыми.

Среди расчетных кодов на основе МПП можно отметить отечественную разработку SUHAM [22]. Программный комплекс SUHAM реализует основные двумерные и трехмерные конечно-разностные уравнения метода поверхностных гармоник для реакторов с квадратной и треугольной решетками с разным числом пробных матриц на каждую ячейку.

## 1.2 Стохастический подход

Появление метода Монте-Карло датировано 1949 годом, первое описание метода приведено в статье Метрополиса и Улама [23].

Применимость метода в нейтронно-физических расчетах основывается на том, что макроскопическое сечение может быть интерпретировано как вероятность взаимодействия на единичном пути пробега нейтрона.

Метод Монте-Карло целесообразно применять при сложной геометрии, когда использование других методов затруднено.

Первый шаг – выбор направления движения нейтрона. С помощью генератора псевдослучайных чисел разыгрываются  $\xi_1, \xi_2, \dots$  из интервала  $0 \leq \xi \leq 1$ . Азимутальный угол может быть выбран равным  $\varphi = 2\pi\xi_1$ , а косинус полярного угла  $\mu = 2\xi_2 - 1$ . Такой выбор обусловлен изотропностью источника, и все начальные значения  $\varphi$  и  $\mu$  равновероятны в интервалах  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$  и  $-1 \leq \mu \leq 1$ .

Следующий шаг – нахождение места первого столкновения. Пусть сечение в выбранном направлении на расстоянии  $s$  от источника обозначено  $\sigma(s)$ , тогда вероятность того, что нейтрон испытает столкновение между  $s$  и  $s + ds$ , равна

$$p(s)ds = \sigma(s)e^{-\int_0^s \sigma(s')ds'} ds.$$

Величину  $s$  можно определить из уравнения

$$\ln \xi_3 = -\int_0^s \sigma(s') ds'.$$

Последующие случайные числа должны быть использованы для определения результата первого столкновения, места второго столкновения и т. д. Эта процедура продолжается до тех пор, пока история нейтрона не заканчивается, например, утечкой из системы или поглощением.

Основное преимущество метода Монте-Карло состоит в том, что не требуется энергетической, пространственной и угловой аппроксимации. Основной недостаток – большие расчетные времена для уменьшения статистических ошибок, которые обратно пропорциональны квадратному корню из числа моделируемых поколений нейтронов.

Расчетные коды на базе метода Монте-Карло: отечественная разработка – MCU [24] и зарубежный аналог – MCNP [25].

MCNP (Monte Carlo N-Particle Code System) – семейство программ для моделирования процесса переноса нейтронов, фотонов и электронов, разработанных в Лос-Аламосской национальной лаборатории на языке Fortran (90 и 95). Используется для решения задач в области радиационной защиты, дозиметрии, рентгенографии, медицинской физики, проектирования детекторов, ускорителей, реакторных расчетов. Поддерживается произвольная трехмерная геометрия с поверхностями первого и второго порядка. Поддерживает полноценный параллелизм с использованием протоколов OpenMP и MPI.

MCU (Monte-Carlo Universal) - это проект по разработке и практическому использованию универсальной компьютерной программы для численного моделирования процессов переноса различного вида излучений (нейтронов, гамма-квантов, электронов, позитронов) в трёхмерных системах методом Монте-Карло. Различные прикладные программы семейства MCU имеют свои специфические особенности и области использования. В совокупности они позволяют решать следующий круг проблем:

- оценка критичности и ядерной безопасности объектов использования атомной энергии;
- моделирование кампании ядерных реакторов различного типа;
- моделирование защиты от излучений, оценка радиационной безопасности;
- реакторная дозиметрия;
- оценка электрических сигналов датчиков систем внутрореакторного контроля (СВРК);
- оценка радиационных характеристик облучённого ядерного топлива (ОЯТ);
- оценка качества экспериментов;
- верификация и валидация баз данных и инженерных программ;
- оценка различных эффектов, таких как: эффекты зазоров, влияние окружения на малогрупповые константы, зависимость коэффициентов диффузии от плотности замедлителя, двойная гетерогенность и т.д.
- проектирование детектора антинейтрино;
- проектирование импульсного источника нейтронов управляемого пучком протонов;
- трансмутация актинидов и продуктов деления;
- проектирование установок для нейтронного легирования кремния.

### 1.3 Гибридные методы

Потребность в гибридных методах возникает при оптимизации реакторной защиты, определения радиационной обстановки за корпусом реактора и при многочисленных вопросах определения условий работы различных датчиков (ионизационные камеры, датчики активности кислорода в теплоносителе и др).

Детерминистические программы позволяют отвечать на большинство перечисленных вопросов, но у них у всех есть недостатки, связанные с использованием групповой структуры микросечений, и, зачастую, с невозможностью описать детальную геометрию расчетной модели. Этих недостатков лишены программы метода Монте-Карло. Однако расчеты по этим программам требуют применения методов понижения дисперсии.

Универсальным методом понижения дисперсии являются весовые окна ценности нейтронов по пространству и энергии. Расчет таких весовых окон удобно вести по детерминистическим программам.

Одним из примеров является гибридный прецизионный расчет по программе Монте-Карло MCNP с использованием детерминистической программы метода характеристик MССG3D [26].

#### 1.4 Инженерный подход

Инженерный подход при моделировании нейтронно-физических процессов связан с использованием диффузионной теории, основы которой были заложены еще в 40-ых годах XX века. Суть диффузионного приближения состоит в представлении решения уравнения переноса  $\varphi$  в виде линейной функции относительно угловой переменной  $\vec{\Omega}$ :

$$\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \frac{1}{4\pi} [\Phi(\vec{r}, E) + 3\vec{\Omega} \cdot \vec{J}(\vec{r}, E)], \quad (1.4)$$

где  $\Phi$  – интегральная по углу плотность потока нейтронов,  $\vec{J}$  – векторный ток нейтронов. Представление (1.4) приводит к диффузионному уравнению:

$$-\nabla D(\vec{r}, E) \nabla \Phi(\vec{r}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \Phi(\vec{r}, E) = Q(\vec{r}, E), \quad (1.5)$$

в котором коэффициент диффузии  $D$  устанавливает связь между током и плотностью потока нейтронов (закон Фика):

$$\vec{J}(\vec{r}, E) = -D(\vec{r}, E) \nabla \Phi(\vec{r}, E). \quad (1.6)$$

Трехмерных диффузионные коды нашли свое применение в практике расчетов быстрых реакторов благодаря низким требованиям к вычислительным ресурсам и высокой скорости получения решения. Среди отечественных программ можно выделить ГЕФЕСТ [28-29], JAR-FR [30], TRIGEX [31], среди европейских – ERANOS [32], среди американских – DIF3D [33].

Комплекс программ ГЕФЕСТ создан для эксплуатационных нейтронно-физических расчетов реактора типа БН в многогрупповом диффузионном приближении в трехмерной гексагональной геометрии. Комплекс предназначен для расчетов:

- эффективного коэффициента размножения;
- максимального запаса реактивности;
- эффективности одиночных и групп стержней СУЗ;

- полной, удельной и линейной мощности энерговыделения в ТВС;
- коэффициентов неравномерности энерговыделения в ТВС и реакторе;
- повреждающей дозы облучения ТВС;
- выгорания топлива;
- коэффициентов реактивности (температурного, мощностного, плотностного) и пустотного эффекта реактивности;
- эффективной доли запаздывающих нейтронов;
- характеристик переходных процессов для режимов нормальной эксплуатации;
- остаточного энерговыделения.

Программный комплекс TRIGEX предназначен для проведения инженерных проектных расчетов физических характеристик быстрых реакторов, а также для обработки экспериментов на критических сборках и действующих реакторах, на основе группового диффузионного приближения и трехмерной гексагональной геометрии. Рассчитываются следующие основные характеристики: эффективный коэффициент размножения нейтронов, групповые нейтронные потоки, поле энерговыделения и различные его характеристики, распределение скоростей повреждающей дозы для конструкционных материалов, скорости реакций захвата и деления для изотопов, участвующих в расчете, параметры воспроизводства и их составляющие, временное изменение изотопного состава в результате выгорания, время жизни и эффективная доля запаздывающих нейтронов, изменение реактивности по теории возмущения первого порядка или по точной теории, коэффициенты чувствительности эффективного коэффициента размножения и эффектов реактивности к изменению характеристик (параметров) из достаточно широкого набора. При построении численной схемы используется улучшенная крупносеточная дискретизация уравнения переноса в диффузионном приближении. Количество энергетических групп ограничено 26-ю. Возможно решение однородной задачи и задачи с внешним источником, а также сопряженной задачи.

Комплекс программ JARFR позволяет проводить расчеты основных нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов и их моделей на критических сборках нулевой мощности при заданных значениях размеров, составов и температур элементов конструкции этих установок. С помощью комплекса программ JARFR рассчитываются следующие нейтронно-физические характеристики:

- эффективный коэффициент размножения;
- пространственное распределение многогрупповой плотности потока нейтронов и энерговыделения из решения условно-критической задачи или решения неоднородной

задачи с внешним источником, характеризующимся заданным пространственно-энергетическим распределением;

- коэффициенты неравномерности энерговыделения по физическим зонам реактора;

- пространственное распределение скоростей реакций, параметры воспроизводства топлива, изменение нуклидного состава при выгорании топлива в процессе кампании реактора;

- пространственное распределение флюенса нейтронов и характеристик радиационного повреждения конструкционных материалов в процессе облучения;

- пространственное распределение многогрупповой ценности нейтронов;

- параметры точечной кинетики: эффективные доли запаздывающих нейтронов, время жизни мгновенных нейтронов;

- решение неоднородной сопряженной задачи с источником (для задаваемых исходными данными дробно-линейных функционалов) с ортогонализацией решения;

- пространственное распределение коэффициентов чувствительности.

## 1.5 Выводы по главе 1

Все описанные в главе методы имеют ряд преимуществ и недостатков, поэтому выбор в пользу одного из них должен основываться на понимании физики исследуемого процесса.

Недостаток метода дискретных ординат связан с вынужденной гомогенизацией среды, поскольку описание сложных расчетных областей приводит к необходимости замены криволинейных участков на кусочно-непрерывные линейные сегменты и трудности построения конечно-разностной аппроксимации удовлетворительного порядка точности на полученной пространственной сетке. Одним из путей решения данной проблемы является использование метода конечных элементов на неструктурированных сетках.

Другой недостаток  $S_N$  метода – лучевой эффект – приводит к вычислительным осцилляциям плотности потока нейтронов и характерен для задач с точечным источником и слабым рассеянием.

Метод характеристик, обладая применимостью к геометриям любой сложности, требует большего расчетного времени и вычислительных ресурсов по сравнению с методом дискретных ординат. Кроме того, для метода характеристик требуется тщательный выбор угловых направлений для каждой расчетной модели.

Все детерминистические и стохастические методы уступают диффузионному приближению по скорости получения решения. Но инженерный подход имеет границы применимости: наличие сильно поглощающей среды или источников нейтронов, выраженная пространственная гетерогенность, т.е. наличие границ раздела сред с разными свойствами.

## 2 Постановка задачи математического моделирования переноса нейтронов в ядерных реакторах

### 2.1 Нестационарные задачи

Процесс переноса нейтронов рассматривается в фазовом пространстве, изображенном на рисунке 2.1, с учетом взаимодействия нейтронов со средой и без учета взаимодействия между нейтронами.

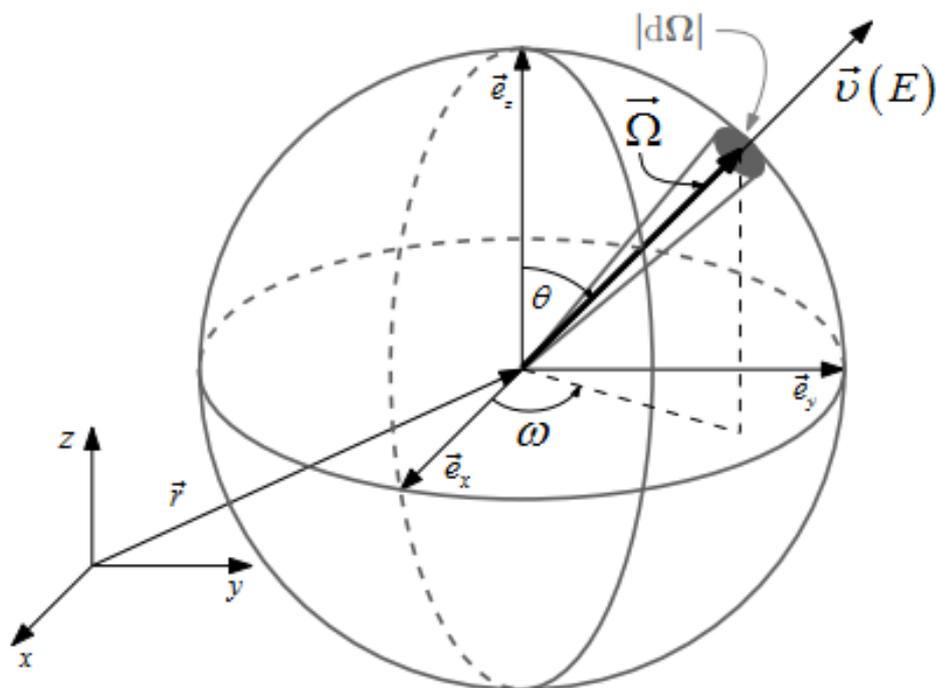


Рисунок 2.1 – Фазовое пространство в задаче переноса нейтронов

Нестационарный процесс переноса нейтронов описывается системой из линеаризованного интегро-дифференциального уравнения Больцмана относительно плотности потока нейтронов и уравнения относительно концентраций предшественников запаздывающих нейтронов с соответствующими начальными и граничными условиями:

$$\left\{ \begin{array}{l}
\left[ \frac{1}{\nu(E)} \frac{\partial}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \right] \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = \int_{4\pi} dE' \int_{\Sigma_s}(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E, t) \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) d\vec{\Omega}' + \\
+ \chi_p(E) \left( 1 - \sum_j \beta_j \right) \int \nu \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \Phi(\vec{r}, E', t) dE' + \sum_n \sum_j \chi_{d,j}^n(E) \lambda_j^n C_j^n(\vec{r}, t) + S(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t), \\
\frac{\partial C_j^n(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\lambda_j^n C_j^n(\vec{r}, t) + a_j^n \int \nu_d^n \Sigma_f^n(\vec{r}, E', t) \Phi(\vec{r}, E', t) dE', \\
\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \Big|_{\Gamma, (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) < 0} = 0, \\
\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t_0) \Big|_{t=t_0} = \varphi_0(\vec{r}, \vec{\Omega}, E), \\
C_j^n(\vec{r}, t_0) = \frac{a_j^n}{\lambda_j^n} \int \nu_d^n \Sigma_f^n(\vec{r}, E', t_0) \Phi(\vec{r}, E', t_0) dE',
\end{array} \right. \quad (2.1)$$

где используются следующие обозначения:

- $\vec{r} = (x, y, z)^T \in D \subset \mathbb{R}^3$  – радиус-вектор, пространственная переменная;
- $\vec{\Omega} \in S^2 = \{ \vec{\Omega} \in \mathbb{R}^3 : \|\vec{\Omega}\|_2 = 1 \}$  – единичный вектор направления, угловая

переменная;

- $E \in \mathbb{R}^+$  – энергия, энергетическая переменная;
- $t \in \mathbb{R}$  – время, временная переменная;
- $\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \in \mathbb{R}^+$  – плотность потока нейтронов;
- $\Phi(\vec{r}, E, t) \in \mathbb{R}^+$  – интегральная по углу плотность потока нейтронов;
- $\nu(E) \in \mathbb{R}^+$  – модуль скорости нейтронов;
- $\Sigma_t(\vec{r}, E, t) \in \mathbb{R}^+$  – полное макроскопическое сечение взаимодействия;
- $\Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E, t) \in \mathbb{R}^+$  – макроскопическое сечение рассеяния нейтронов с

направлением полета  $\vec{\Omega}'$  и энергией  $E'$ , после которого он приобретет направление полета  $\vec{\Omega}$  и энергию  $E$ ;

- $\nu \Sigma_f(\vec{r}, E, t) \in \mathbb{R}^+$  – макроскопическое сечение размножения;
- $\Sigma_f^n(\vec{r}, E', t) \in \mathbb{R}^+$  – макроскопическое сечение деления нуклида  $n$ ;
- $\chi_p(E) \in \mathbb{R}^+$  – спектр мгновенных нейтронов деления;
- $\chi_{d,j}^n(E) \in \mathbb{R}^+$  – спектр запаздывающих нейтронов  $j$ -ой группы нуклида  $n$ ;
- $\beta_j \in \mathbb{R}^+$  – доля  $j$ -ой группы запаздывающих нейтронов;

- $\lambda_j^n \in \mathbb{R}^+$  – постоянная распада  $j$ -ой группы запаздывающих нейтронов нуклида  $n$ ;
- $C_j^n(\vec{r}, t) \in \mathbb{R}^+$  – концентрация предшественников  $j$ -ой группы запаздывающих нейтронов нуклида  $n$ ;
- $S(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \in \mathbb{R}^+$  – функция распределения внешних источников;
- $a_j^n \in \mathbb{R}^+$  – относительный выход запаздывающих нейтронов  $j$ -ой группы нуклида  $n$ ;
- $\nu_d^n \in \mathbb{R}^+$  – среднее число запаздывающих нейтронов нуклида  $n$ , приходящееся на один акт деления;
- $t_0 \in \mathbb{R}$  – начальный момент времени;
- $\varphi_0(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \in \mathbb{R}^+$  – начальное распределение плотности потока нейтронов.

Уравнение переноса (2.1) отражает баланс появления и исчезновения нейтронов.

Член  $\frac{1}{v} \frac{\partial \varphi}{\partial t}$  представляет скорость изменения числа нейтронов в единичном фазовом объеме в окрестности точки  $(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ , член  $\vec{\Omega} \cdot \nabla \varphi$  – пространственная утечка, член  $\Sigma_t \varphi$  описывает взаимодействие нейтронов с ядрами среды. Правая часть уравнения (2.1) – сумма источника рассеяния  $Q_s$ , источника мгновенных нейтронов деления  $Q_{f,p}$  и источника запаздывающих нейтронов деления  $Q_{f,d}$ , которые определяются согласно выражениям

$$Q_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = \int dE' \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E, t) \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) d\vec{\Omega}' ,$$

$$Q_{f,p}(\vec{r}, E, t) = \chi_p(E) \left( 1 - \sum_j \beta_j \right) \int v \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \Phi(\vec{r}, E', t) dE' ,$$

$$Q_{f,d}(\vec{r}, E, t) = \sum_n \sum_j \chi_{d,j}^n(E) \lambda_j^n C_j^n(\vec{r}, t) .$$

## 2.2 Стационарные задачи

### 2.2.1 Однородная задача

Однородная задача переноса нейтронов в выпуклой трехмерной области  $D$  с границей  $\Gamma$  описывается стационарным уравнением без внешних источников с нулевыми граничными условиями:

$$\begin{cases} \vec{\Omega} \cdot \nabla \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \\ = \int dE' \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' + \frac{\chi(E)}{K_{eff}} \int \nu \Sigma_f(E') \Phi(\vec{r}, E') dE', \\ \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \Big|_{\Gamma, \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0} = 0, \end{cases} \quad (2.3)$$

где  $K_{eff}$  – эффективный коэффициент размножения, который фактически вводится как числовой параметр для условно-критического представления нейтронного поля в некритических реакторах, поскольку в действительности поле нейтронов в отсутствие внешних источников может быть однозначно представлено только в точно критическом реакторе, когда  $K_{eff} = 1$ .

Условно-критическое уравнение можно записать в операторном виде:

$$\hat{L}\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \lambda \hat{F}\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E),$$

где  $\hat{L}$  и  $\hat{F}$  – операторы переноса и размножения нейтронов соответственно:

$$\begin{aligned} \hat{L}\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) &= \vec{\Omega} \cdot \nabla \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) - \int dE' \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}', \\ \hat{F}\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) &= \chi(E) \int \nu \Sigma_f(E') \Phi(\vec{r}, E') dE'. \end{aligned}$$

Наибольшее собственное число  $\lambda$  условно-критической задачи соответствует  $K_{eff}$ :  $\lambda = 1/K_{eff}$ . Тогда  $K_{eff}$  можно трактовать как отношение числа рождающихся в реакторе в единицу времени нейтронов к числу исчезающих из реактора нейтронов за то же время.

### 2.2.2 Сопряженная задача

Решение сопряженного уравнения имеет физический смысл ценности нейтронов внутри рассматриваемой системы. Сопряженная функция широко используется в теории возмущений и вариационных расчетах.

Оператор  $\hat{L}$  не является самосопряженным, сопряженный ему оператор  $\hat{L}^+$ , действующий на сопряженные функции  $\varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ , определяется соотношением

$$(\varphi^+, \hat{L}\varphi) = (\varphi, \hat{L}^+\varphi^+)$$

и согласно [36] имеет вид

$$\hat{L}^+\varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \left[ -\vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_t(\vec{r}, E) \right] \varphi^+(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) - \int dE' \int_{4\pi} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}, E \rightarrow \vec{\Omega}', E') \varphi^+(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}',$$

где сопряженная функция удовлетворяет граничным условиям

$$\varphi^+ \left( \vec{r}, \vec{\Omega}, E \right) \Big|_{\Gamma, \vec{\Omega} \cdot \vec{n} > 0} = 0.$$

Таким образом, сопряженная задача имеет вид

$$\begin{cases} \vec{\Omega} \cdot \nabla \varphi^+ \left( \vec{r}, \vec{\Omega}, E \right) + \Sigma_t \left( \vec{r}, E \right) \varphi^+ \left( \vec{r}, \vec{\Omega}, E \right) = \\ = \int dE' \int_{4\pi} \Sigma_s \left( \vec{r}, \vec{\Omega}, E \rightarrow \vec{\Omega}', E' \right) \varphi^+ \left( \vec{r}, \vec{\Omega}', E' \right) d\vec{\Omega}' + \frac{\nu \Sigma_f(E)}{K_{eff}} \int \chi(E') \Phi^+ \left( \vec{r}, E' \right) dE', \\ \varphi^+ \left( \vec{r}, \vec{\Omega}, E \right) \Big|_{\Gamma, \vec{\Omega} \cdot \vec{n} > 0} = 0, \end{cases} \quad (2.4)$$

### 2.2.3 Неоднородная задача

Неоднородная задача в выпуклой трехмерной области  $D$  с границей  $\Gamma$  описывается стационарным уравнением переноса нейтронов с заданным пространственно-энергетическим распределением источников. В качестве граничных условий задается значение входящего внутрь расчетной области потока нейтронов.

$$\begin{cases} \vec{\Omega} \cdot \nabla \varphi \left( \vec{r}, \vec{\Omega}, E \right) + \Sigma_t \left( \vec{r}, E \right) \varphi \left( \vec{r}, \vec{\Omega}, E \right) = \\ = \int dE' \int_{4\pi} \Sigma_s \left( \vec{r}, \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E \right) \varphi \left( \vec{r}, \vec{\Omega}', E' \right) d\vec{\Omega}' + S \left( \vec{r}, \vec{\Omega}, E \right), \\ \varphi \left( \vec{r}, \vec{\Omega}, E \right) \Big|_{\Gamma, \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0} = \varphi_{\Gamma} \left( \vec{r}, \vec{\Omega}, E \right). \end{cases} \quad (2.5)$$

Неоднородные задачи переноса нейтронов имеют место при расчете радиационной защиты РУ.

## 2.3 Выводы по главе 2

Приведена постановка задачи математического моделирования переноса нейтронов. Выделены нестационарные и стационарные задачи. Среди стационарных отдельно рассмотрены однородные прямая и сопряженная задачи нахождения ведущего собственного числа,  $K_{eff}$ , и соответствующих собственных функций: плотности потока нейтронов в случае прямой задачи и функции ценности в случае сопряженной задачи; неоднородная задача с заданным источником.

## 3 Нейтронно-физический расчетный код CORNER

### 3.1 Общие сведения

Расчетный код CORNER основан на  $S_N$  методе дискретных ординат и  $P_m$  приближении сечения рассеяния и позволяет решать нестационарные задачи переноса нейтронов в улучшенном квазистатическом приближении в HEX-Z геометрии и стационарные задачи в HEX-Z и детальной геометрии.

Для аппроксимации пространственной зависимости реализованы WDD и нодальные схемы.

Энергетическая зависимость представлена многогрупповым приближением. В качестве константного обеспечения используется система подготовки констант CONSYST с библиотеками БНАБ-93 и БНАБ-РФ.

Дискретизация угловой переменной осуществляется за счет введения угловых квадратур. Используются  $LQ_N$  и  $P_N-T_N$  квадратурные наборы, также предусмотрена возможность задания квадратурных наборов пользователем.

Используется итерационный процесс решения, включающий внешние (по источнику деления) и внутренние (по источнику внутригруппового рассеяния) итерации.

Расчетный код CORNER разработан на языке Fortran, является консольным приложением (рисунок 3.1) и имеет модульную структуру.

Время счета зависит от количества расчетных узлов задачи, количества энергетических групп и физических зон, используемых в модели реактора, а также от заданных точностей расчета пространственно-энергетического распределения плотности потока нейтронов.

Расчетный код CORNER не требует предварительной установки.

Технические требования к аппаратному обеспечению:

- процессор с тактовой частотой не ниже 1 ГГц;
- оперативная память не менее 2 Гб;
- объем дискового пространства от 200 Мб;

```
Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences
.....
CORNER
.....
Neutronics Calculation Code
Run on 13.02.2017 at 14:28:51
Geometry section:
Geometry type: HEX-Z
Boundary conditions: vacuum
Hexagonal mesh points: 169
Axial mesh points: 38
Pitch size: 12.9900
Approximation section:
Quadrature set: LQn
Order of Sn approximation: 4
Order of Pm approximation: 1
Energy structure: 26
External iterations accuracy: 1.00E-04
Internal iterations accuracy: 1.00E-04
Max number of external iterations: 100
Max number of internal iterations: 200
Iteration process:
g      time      eps      iter
```

Рисунок 3.1 – Консольное окно расчетного кода CORNER

Рекомендованные требования, предъявляемые к программному обеспечению:

- операционная система Windows 7 SP1 (x86, x64);
- среда разработки Microsoft Visual Studio 2013 или аналогичная;
- компилятор Intel Visual Fortran Composer XE 2013 или аналогичный;
- постпроцессор VisIt 2.10 или аналогичный.

## 3.2 Используемые приближения

### 3.2.1 Многогрупповое энергетическое приближение

Основная идея группового подхода заключается в замене уравнения с непрерывной энергетической зависимостью на систему уравнений, каждое из которых соответствует выделенному на энергетической оси интервалу – группе.

Дискретизация по энергетической переменной основана на разбиении энергетического диапазона  $[E_{\min}, E_{\max}]$  на конечное число разбиений  $[E_g, E_{g-1}]$ , каждому из которых в соответствие ставится номер энергетической группы  $g$ . Верхняя граница первой группы, как правило, лежит в диапазоне 10 – 20 МэВ, а нижняя граница последней

группы лежит в диапазоне  $10^{-7} - 10^{-4}$  эВ. Суммарное число энергетических групп равно  $G$ . Нумерация групп начинается с области высоких энергий.

Многогрупповое уравнение переноса нейтронов получается интегрированием по энергетическому интервалу:

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \varphi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_t^g(\vec{r}) \varphi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \varphi^{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + \frac{\chi^g(\vec{r})}{K_{eff}} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \Phi^{g'}(\vec{r}),$$

где многогрупповые плотности потока и сечения определяются согласно соотношениям:

$$\varphi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE,$$

$$\Phi^g(\vec{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Phi(\vec{r}, E) dE,$$

$$\Sigma_t^g(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_t(\vec{r}, E) \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE}{\varphi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})},$$

$$\Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}', E') \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') dE'}{\varphi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})},$$

$$\nu \Sigma_f^g(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \nu \Sigma_f(\vec{r}, E) \varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) dE}{\varphi^g(\vec{r}, \vec{\Omega})},$$

$$\chi^g(\vec{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \chi(\vec{r}, E) dE.$$

Для вычисления групповых констант в качестве  $\varphi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$  используются модельные пространственно-энергетические распределения плотности потока нейтронов, выбор которых существенно определяет корректность многогруппового представления, поэтому любой нейтронно-физический код должен функционировать совместно с системой подготовки констант и поддерживать работу с наиболее распространенными форматами групповых констант, в том числе ANISN.

Для расчетного кода CORNER используется система подготовки констант CONSYST [34] с библиотеками ядерных данных БНАБ-93 и БНАБ-РФ [35].

### 3.2.2 Угловая аппроксимация

#### 3.2.2.1 Р<sub>М</sub> приближение

Для большинства материалов угловая зависимость сечения рассеяния определяется углом рассеяния [36]:

$$\Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}),$$

$$\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega} = \cos \theta' \cos \theta + \sin \theta' \sin \theta \cos(\omega - \omega'),$$

где  $\theta, \theta'$  – полярные углы,  $\omega, \omega'$  – азимутальные углы.

Разложение сечения рассеяния по полиномам Лежандра (Р<sub>М</sub> приближение):

$$\Sigma_s^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) = \sum_{l=0}^M \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{s,l}^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) P_l(\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}), \quad (3.1)$$

где  $\Sigma_{s,l}^{g' \rightarrow g}(\vec{r})$  –  $l$ -ый момент сечения рассеяния;  $P_l(\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega})$  – полином Лежандра  $l$ -го порядка. Используя теорему сложения полиномов Лежандра, получим представление:

$$P_l(\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) = \sum_{u=0}^l (2 - \delta_{u,0}) \frac{(l-u)!}{(l+u)!} P_l^u(\cos \theta') P_l^u(\cos \theta) \cos[u(\omega - \omega')] = \sum_{u=-l}^l Y_{lu}^*(\vec{\Omega}') Y_{lu}(\vec{\Omega}),$$

где сферические функции  $Y_{lu}(\vec{\Omega})$  определяются выражением:

$$Y_{lu}(\vec{\Omega}) = \sqrt{\frac{(l-u)!}{(l+u)!}} P_l^u(\cos \theta) e^{im\omega}.$$

В действительной форме сферические функции имеют вид [37]:

$$Y_{lu}(\vec{\Omega}) = Y_{lu}(\theta, \omega) = \left[ (2 - \delta_{u,0}) \frac{(l-|u|)!}{(l+|u|)!} \right]^{1/2} P_l^{|u|}(\cos \theta) \begin{cases} \sin(|u|\omega), m = -l, \dots, -1 \\ \cos(u\omega), m = 0, \dots, l \end{cases}$$

с нормировкой Шмидта

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} Y_{lu}(\theta, \omega) Y_{l'u'}(\theta, \omega) \sin \theta d\theta d\omega = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'} \delta_{uu'}.$$

Присоединенные полиномы Лежандра имеют вид:

$$P_l^u(\cos \theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} (\sin \theta)^u \frac{d^{u+l}}{d(\cos \theta)^{u+l}} (\sin \theta)^{2l}.$$

В итоге источник рассеяния в Р<sub>М</sub> приближении определяется выражением

$$Q_s^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} \Sigma_{s,l}^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \varphi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' = \sum_{g'=1}^G \sum_{l=0}^M (2l+1) \Sigma_{s,l}^{g' \rightarrow g}(\vec{r}) \sum_{u=-l}^l Y_{lu}(\vec{\Omega}) \Phi_{lu}^g(\vec{r}),$$

где угловые моменты плотности потока нейтронов  $\Phi_{lu}^g(\vec{r})$  имеют вид:

$$\Phi_{lu}^g(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} Y_{lu}^*(\vec{\Omega}) \varphi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}.$$

В расчетном коде CORNER предусмотрена возможность учета анизотропии рассеяния до P<sub>5</sub> приближения:

$$Y_{5,-5} = \frac{21}{8\sqrt{14}} (\eta^5 + 5\eta\mu^4 - 10\eta^3\mu^2),$$

$$Y_{5,-4} = \frac{105}{2\sqrt{35}} \xi\eta\mu(\mu^2 - \eta^2),$$

$$Y_{5,-3} = \frac{35}{8\sqrt{70}} (3\eta\mu^2 - \eta^3)(9\xi^2 - 1),$$

$$Y_{5,-2} = \frac{\sqrt{105}}{2} \xi\eta\mu(3\xi^2 - 1),$$

$$Y_{5,-1} = \frac{\sqrt{15}}{8} \eta(21\xi^4 - 14\xi^2 + 1),$$

$$Y_{5,0} = \frac{1}{8} \xi(63\xi^4 - 70\xi^2 + 15),$$

$$Y_{5,1} = \frac{\sqrt{15}}{8} \mu(21\xi^4 - 14\xi^2 + 1),$$

$$Y_{5,2} = \frac{\sqrt{105}}{4} \xi(3\xi^2 - 1)(\mu^2 - \eta^2),$$

$$Y_{5,3} = \frac{35}{8\sqrt{70}} (\mu^3 - 3\mu\eta^2)(9\xi^2 - 1),$$

$$Y_{5,4} = \frac{105}{8\sqrt{35}} \xi(\eta^4 + \mu^4 - 6\mu^2\eta^2),$$

$$Y_{5,5} = \frac{21}{8\sqrt{14}} (\mu^5 + 5\eta^4\mu - 10\eta^2\mu^3),$$

$$Y_{4,-4} = \frac{\sqrt{35}}{2} \mu\eta(\mu^2 - \eta^2),$$

$$Y_{4,-3} = \frac{\sqrt{70}}{4} \xi (3\eta\mu^2 - \eta^3),$$

$$Y_{4,-2} = \frac{\sqrt{5}}{2} \mu\eta (7\xi^2 - 1),$$

$$Y_{4,-1} = \frac{\sqrt{10}}{4} \xi\eta (7\xi^2 - 3),$$

$$Y_{4,0} = \frac{1}{8} (35\xi^4 - 30\xi^2 + 3),$$

$$Y_{4,1} = \frac{\sqrt{10}}{4} \xi\mu (7\xi^2 - 3),$$

$$Y_{4,2} = \frac{\sqrt{5}}{4} (\mu^2 - \eta^2) (7\xi^2 - 1),$$

$$Y_{4,3} = \frac{\sqrt{70}}{4} \xi (\mu^3 - 3\mu\eta^2),$$

$$Y_{4,4} = \frac{\sqrt{35}}{8} (\mu^4 + \eta^4 - 6\mu^2\eta^2),$$

$$Y_{3,-3} = \frac{\sqrt{10}}{2} \eta \left( \frac{3}{2} (1 - \xi^2) - 2\eta^2 \right),$$

$$Y_{3,-2} = \sqrt{15} \mu\eta\xi,$$

$$Y_{3,-1} = \frac{\sqrt{6}}{12} \eta (15\xi^2 - 3),$$

$$Y_{3,0} = \frac{1}{2} \xi (5\xi^2 - 3),$$

$$Y_{3,1} = \frac{\sqrt{6}}{12} \mu (15\xi^2 - 3),$$

$$Y_{3,2} = \frac{\sqrt{15}}{2} \xi (\mu^2 - \eta^2),$$

$$Y_{3,3} = \frac{\sqrt{10}}{2} \mu \left( 2\mu^2 - \frac{3}{2} (1 - \xi^2) \right),$$

$$Y_{2,-2} = \sqrt{3} \mu\eta,$$

$$Y_{2,-1} = \sqrt{3}\eta\xi,$$

$$Y_{2,0} = \frac{3\xi^2 - 1}{2},$$

$$Y_{2,1} = \sqrt{3}\mu\xi,$$

$$Y_{2,2} = \frac{\sqrt{3}}{2}(\mu^2 - \eta^2),$$

$$Y_{1,-1} = \eta,$$

$$Y_{1,0} = \xi,$$

$$Y_{1,1} = \mu,$$

$$Y_{0,0} = 1.$$

Источник деления в терминах сферических функций можно записать в виде:

$$Q_f^g(\vec{r}) = \chi^g \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} Y_{0,0} \Phi_{0,0}^{g'}(\vec{r}).$$

### 3.2.2.2 S<sub>N</sub> приближение

В методе дискретных ординат угловое распределение нейтронов оцениваются для выбранных направлений  $\vec{\Omega}_m = \Omega_m^x \vec{e}_x + \Omega_m^y \vec{e}_y + \Omega_m^z \vec{e}_z$  с компонентами

$$\Omega_m^z = \xi_m = \cos \theta_m,$$

$$\Omega_m^x = \mu_m = \cos \varphi_m \sin \theta_m,$$

$$\Omega_m^y = \eta_m = \sin \varphi_m \sin \theta_m,$$

являющимися направляющими косинусами единичного вектора  $\vec{\Omega}_m$ , поэтому  $\mu_m^2 + \eta_m^2 + \xi_m^2 = 1$ . Каждому угловому направлению соответствует точка на поверхности единичной сферы и элемент поверхности площадью  $w_m$ :  $\sum_m w_m = 4\pi$ . Элементы

поверхности  $w_m$  играют роль весов в квадратурных формулах.

Таким образом, набор  $\{\vec{\Omega}_m, w_m\}$ ,  $m=1, \dots, M$  образует квадратурную формулу и используется при вычислении источников рассеяния и деления в правой части уравнения переноса нейтронов (2.1).

В общем виде численное интегрирование осуществляется посредством квадратурных формул вида

$$\int_b^a f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n c_k f(x_k),$$

где  $c_k$  – весовые коэффициенты (веса),  $x_k$  – узлы квадратурной формулы.

Распространенными являются квадратурные формулы интерполяционного типа, получающиеся в результате замены подынтегральной функции интерполяционным полиномом Лагранжа [38], построенным по узлам квадратурной формулы.

$$L_n(x) = \sum_{k=1}^n \frac{\pi(x)}{(x-x_k)\pi'(x_k)} f(x_k),$$

где  $\pi(x) = \prod_{k=1}^n (x-x_k)$ .

Алгебраическая степень точности – наибольшая степень алгебраических полиномов, для которых эта квадратурная формула является точной.

Алгебраическая степень точности квадратурной формулы, построенной по  $n$  узлам, не может превосходить  $(2n-1)$ .

Квадратурная формула наивысшей алгебраической точности – квадратура Гаусса.

Для того, чтобы квадратурная формула, построенная по  $n$  узлам, являлась квадратурой Гаусса, необходимо и достаточно, чтобы эта формула была интерполяционной, а ее узлы являлись корнями полинома, ортогонального с единичным весом на  $[a, b]$  любому полиному степени не выше  $(n-1)$ .

Для квадратурной формулы

$$\int_b^a f(x) \rho(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) \quad (3.2)$$

веса определяются согласно выражению [39]

$$w_i = \frac{a_n}{a_{n-1} p_n'(x_i) p_{n-1}(x_i)} \int_a^b \rho(x) p_{n-1}^2(x) dx, \quad (3.3)$$

где  $p_n(x)$  – полиномы, ортогональные с весом  $\rho(x)$  на  $[a, b]$ ,  $a_n$  – коэффициент при  $x^n$  в  $p_n(x)$ .

Для полиномов Лежандра

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n,$$

ортогональных на отрезке  $[a, b] = [-1, 1]$  с весом  $\rho(x) = 1$  получим квадратурную формулу Гаусса-Лежандра, веса которой находятся согласно выражению

$$w_i = \frac{2(1 - x_i^2)}{(n+1)^2 P_{n+1}^2(x_i)}. \quad (3.4)$$

Для полиномов Чебышева первого рода

$$T_n(x) = \cos(n \cos^{-1} x),$$

ортогональных на отрезке  $[a, b] = [-1, 1]$  с весом  $\rho(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$  получим квадратурную формулу Гаусса-Чебышева, веса которой находятся согласно выражению

$$w_i = -\frac{\pi}{T_{n+1}(x_i) T_n'(x_i)}$$

Т.к. узлы квадратуры удовлетворяют равенству

$$x_i = \cos \left[ \frac{(2i-1)\pi}{2n} \right],$$

то веса квадратуры Гаусса-Чебышева имеют вид

$$w_i = -\frac{\pi \sin \left[ \frac{(2i-1)\pi}{2n} \right]}{(-1)^{i+1} n \cdot (-1)^i \sin \left[ \frac{(2i-1)\pi}{2n} \right]} = \frac{\pi}{n}. \quad (3.5)$$

Ввиду высокой точности и экономичности квадратуры Гаусса часто применяются на практике и нередко используются в виде прямого произведения одномерных квадратур для вычисления многомерных интегралов:

$$\int_{[-1,1]^d} f(x) dx = \sum_{i_1=1}^m \dots \sum_{i_d=1}^m w_{i_1}^1 w_{i_2}^2 \dots w_{i_d}^d f(x_{i_1}^1, x_{i_2}^2, \dots, x_{i_d}^d),$$

где  $x_i^l, w_i^l, i = 1, \dots, m$  – квадратурные узлы и веса в размерности  $l$ . В таком случае веса многомерной квадратурной формулы вычисляются как произведения весов одномерных квадратурных формул:

$$w_i = \prod_{l=1}^d w_i^l .$$

В расчетном коде CORNER используются квадратуры Чебышева-Лежандра [40] (обозначение  $P_N$ - $T_N$  или  $CL_N$ ), полученные как произведение одномерных квадратур Гаусса-Чебышева (узлы и веса для азимутального угла  $\omega$ ) и Гаусса-Лежандра (узлы и веса для полярного угла  $\theta$ ), рассмотренных ранее.

Покажем, что квадратура Чебышева-Лежандра порядка  $(N+1)$  позволяет точно вычислять источник рассеяния в  $P_N$  приближении.

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^\pi P_n^k(\cos \theta) \cos k\omega P_m^l(\cos \theta) \cos l\omega d\omega \sim \int_{-1}^1 \xi^{n+m} d\xi \int_{-1}^1 \frac{ay + by^2 + \dots + cy^{k+l}}{\sqrt{1-y^2}} dy ,$$

где сделаны замены переменных  $\xi = \cos \theta$ ,  $y = \cos \omega$ .

Таким образом, если  $N$  – порядок  $P_N$  приближения, то подынтегральные функции – полиномы степени не выше  $2N$ , и тогда квадратура Чебышева-Лежандра порядка  $(N+1)$  обеспечит точное значение интеграла от полинома степени  $2(N+1)-1=2N+1$ . Например, для точного вычисления источника рассеяния в  $P_5$  приближении достаточно использовать квадратуру  $P_6$ - $T_6$ . Узлы такой квадратуры для одного октанта изображены на рисунке 3.2.

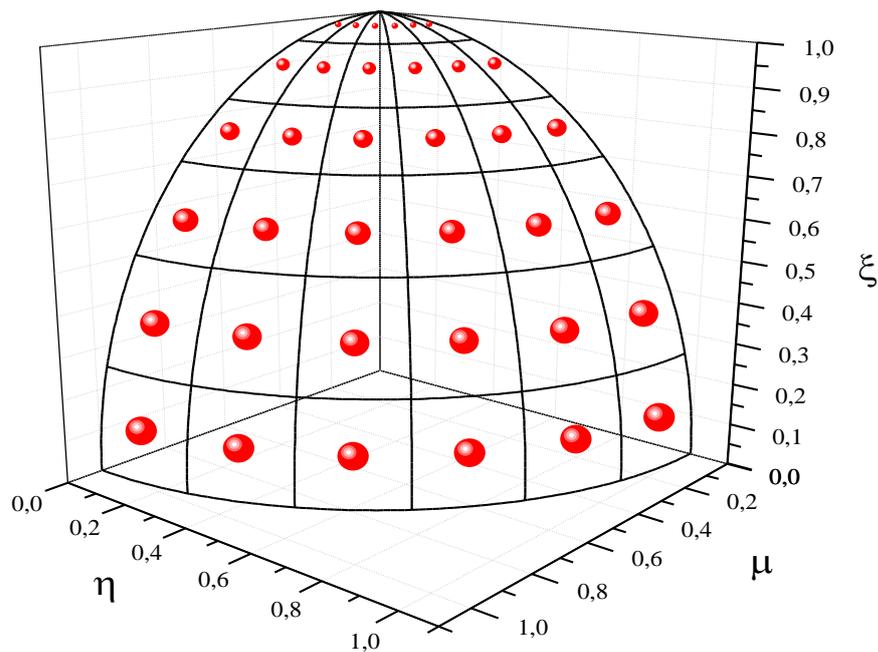


Рисунок 3.2 – Узлы и веса квадратурной формулы  $P_N$ - $T_N$  для  $N = 6$  в октанте

К широко используемым квадратурным наборам относится полностью симметричный  $LQ_N$  квадратурный набор [41], узлы которого имеют симметрию вращения относительно всех трех координатных осей. Только один направляющий косинус является независимой переменной, например,  $\mu_m$ . Поэтому равенство  $\mu_m^2 + \eta_m^2 + \xi_m^2 = 1$  можно заменить следующим:  $\mu_i^2 + \mu_j^2 + \mu_{N/2+2-i-j}^2 = 1$ , где  $i = 1, 2, \dots, N/2$ ;  $j = 1, 2, \dots, N/2 - i + 1$ . Решение этого уравнения в общем случае может быть записано в следующем виде:

$$\mu_i^2 = \mu_1^2 + \frac{2(i-1)(1-3\mu_1^2)}{N-2}, \quad i = 1, 2, \dots, N/2.$$

Таким образом, выбор значения  $\mu_1$  задает распределение направляющих косинусов осей.

Общее число направлений  $M$ , которое необходимо для задания полностью симметричной квадратуры, определяется по формуле:  $M = N(N+2)$ . Для значений  $N \geq 20$  в квадратуре появляются отрицательные значения весов, поэтому этот квадратурный набор задается таблично для  $N \leq 20$ . Пример квадратуры  $LQ_N$  для  $N = 16$  представлен на рисунке 3.3.

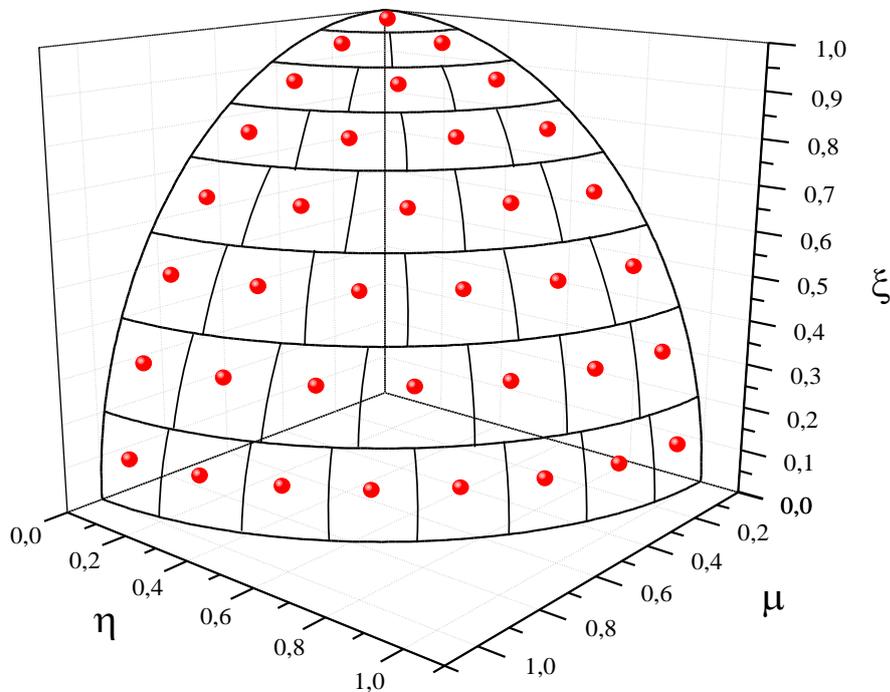


Рисунок 3.3 – Узлы и веса квадратурной формулы  $LQ_N$  для  $N = 16$  в октанте

Таким образом, в расчетном коде CORNER используются два набора угловых квадратур: полностью симметричный квадратурный набор, который обладает симметрией вращения, но имеет ограничение по порядку и поэтому, как правило, используется при расчете а.з., и квадратуры Чебышева-Лежандра, которые обладает наивысшей степенью алгебраической точности и поэтому эффективны, кроме того порядок квадратуры не ограничен. В расчетном коде CORNER предусмотрена возможность использования квадратур, задаваемых пользователем извне.

### 3.2.3 Пространственная аппроксимация

#### 3.2.3.1 WDD-схемы в HEX-Z геометрии

Пространственная расчетная сетка состоит из прямых призм с гексагональным основанием, каждая из которых моделирует высотную часть ТВС, в совокупности описывая всю а.з. В таком случае говорят о трехмерной гексагональной (HEX-Z) геометрии. Аксиальное разбиение в общем случае имеет неравномерный шаг. Такая пространственная сетка используется при покассетных (с «одной точкой на сборку») расчетах, т.е. при гомогенном представлении ТВС а.з. в плане. Пример пространственной расчетной сетки «в плане» приведен на рисунке 3.4.

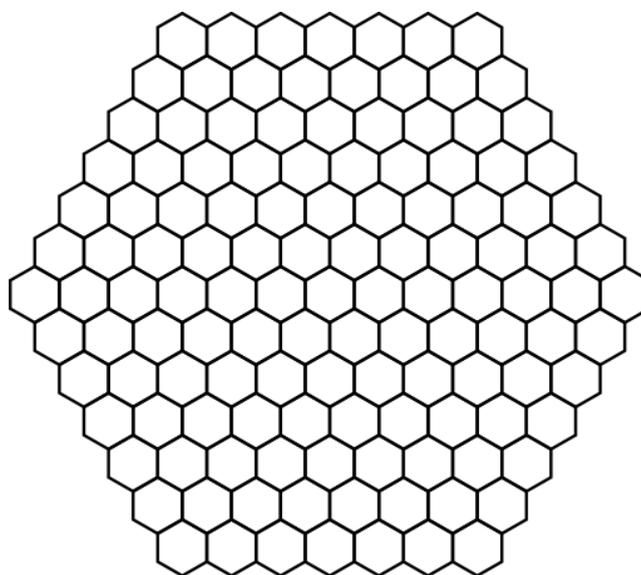


Рисунок 3.4 – Гексагональная сетка

Рассмотрим ячейку

$$D_{ijk} = \{(x, y, z) : x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}], y \in [y_-(x), y_+(x)], z \in [z_{k-1/2}, z_{k+1/2}]\},$$

$$y_{\pm}(x) = y_j \mp \frac{|x - x_i| - \Delta x}{\sqrt{3}},$$

изображенную на рисунке 3.5, с центром  $(x_i, y_j, z_k)$ . Размер «под ключ»  $\Delta x$  эквивалентен расстоянию между центрами соседних ячеек. Длина ребра  $L$  ячейки в плоскости  $(x, y)$  связана с размером «под ключ» соотношением  $\Delta x = L\sqrt{3}$ , объем ячейки равен

$$\Delta V_k = \Delta s \Delta z_k = \frac{\sqrt{3}}{2} L \Delta x \Delta z_k,$$

где  $\Delta s$  – площадь основания ячейки,  $\Delta z_k$  – высота ячейки. Предполагается, что в пределах ячейки физические свойства расчетной модели постоянны.

Введем вспомогательные направления  $u$  и  $v$  такие, что

$$\mu_m^x = \mu_m, \mu_m^u = \frac{\sqrt{3}}{2} \eta_m + \frac{1}{2} \mu_m, \mu_m^v = \frac{\sqrt{3}}{2} \eta_m - \frac{1}{2} \mu_m.$$

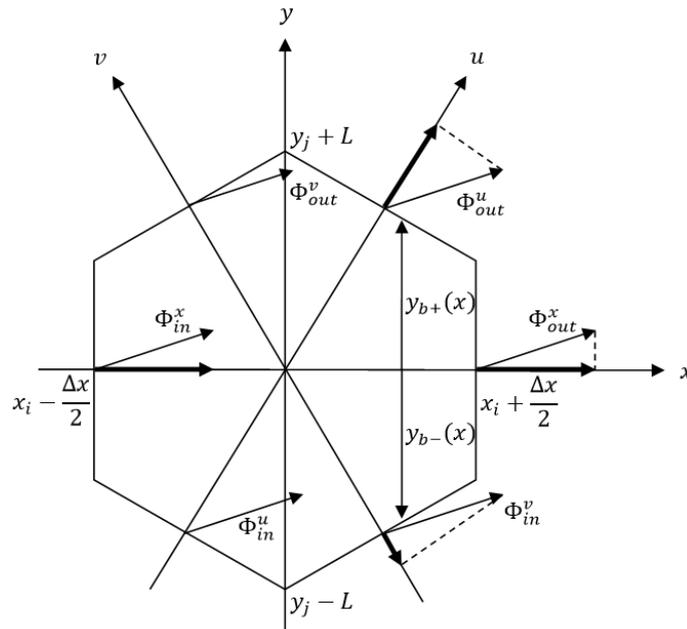


Рисунок 3.5 – Расчетная ячейка в плоскости  $XY$  и направление переноса нейтронов

Интегрируя уравнение переноса в пределах пространственной ячейки  $D_{ijk}$  для фиксированного углового направления  $\vec{\Omega}_m$  и фиксированной энергетической группы  $g$  (индексы  $g$  и  $m$  будут опускаться там, где это не противоречит пониманию) и применяя

теорему Гаусса-Остроградского, получаем балансное уравнение для усредненных в ячейке и на гранях плотностей потока нейтронов:

$$\frac{2}{3\Delta x} \sum_{\alpha \in \{x,u,v\}} |\mu^\alpha| (\Phi_{out}^\alpha - \Phi_{in}^\alpha) + \frac{|\xi|}{\Delta z_k} (\Phi_{out}^z - \Phi_{in}^z) + \Sigma_t \Phi = Q, \quad (3.6)$$

где

$$\Phi = \frac{1}{\Delta V_k} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_-(x)}^{y_+(x)} \varphi_m^g(x, y, z) dx dy dz,$$

$$Q = \frac{1}{\Delta V_k} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \int_{y_-(x)}^{y_+(x)} Q_m^g(x, y, z) dx dy dz,$$

$$\frac{1}{L\Delta z_k} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \int_{y_j-L/2}^{y_j+L/2} \varphi_m^g(x_{i+1/2}, y, z) dy dz = \begin{cases} \Phi_{out}^x, \mu_m^x > 0 \\ \Phi_{in}^x, \mu_m^x < 0 \end{cases},$$

$$\frac{2}{\Delta x \Delta z_k} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} \varphi_m^g(x, y_+(x), z) dx dz = \begin{cases} \Phi_{out}^u, \mu_m^u > 0 \\ \Phi_{in}^u, \mu_m^u < 0 \end{cases},$$

$$\frac{2}{\Delta x \Delta z_k} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_i} \varphi_m^g(x, y_+(x), z) dx dz = \begin{cases} \Phi_{out}^v, \mu_m^v > 0 \\ \Phi_{in}^v, \mu_m^v < 0 \end{cases},$$

$$\frac{1}{L\Delta z_k} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \int_{y_j-L/2}^{y_j+L/2} \varphi_m^g(x_{i-1/2}, y, z) dy dz = \begin{cases} \Phi_{in}^x, \mu_m^x > 0 \\ \Phi_{out}^x, \mu_m^x < 0 \end{cases},$$

$$\frac{2}{\Delta x \Delta z_k} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_i} \varphi_m^g(x, y_-(x), z) dx dz = \begin{cases} \Phi_{in}^u, \mu_m^u > 0 \\ \Phi_{out}^u, \mu_m^u < 0 \end{cases},$$

$$\frac{2}{\Delta x \Delta z_k} \int_{z_{k-1/2}}^{z_{k+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_i} \varphi_m^g(x, y_-(x), z) dx dz = \begin{cases} \Phi_{in}^v, \mu_m^v > 0 \\ \Phi_{out}^v, \mu_m^v < 0 \end{cases},$$

$$\frac{1}{\Delta s} \iint \varphi_m^g(x, y, z_{k-1/2}) dx dy = \begin{cases} \Phi_{in}^z, \xi_m > 0 \\ \Phi_{out}^z, \xi_m < 0 \end{cases},$$

$$\frac{1}{\Delta s} \iint \varphi_m^g(x, y, z_{k+1/2}) dx dy = \begin{cases} \Phi_{in}^z, \xi_m < 0 \\ \Phi_{out}^z, \xi_m > 0 \end{cases}.$$

Индексы «in» и «out» отвечают входящим и выходящим граням соответственно.

Введем понятие освещенности грани расчетной ячейки: если  $(\vec{\Omega}, \vec{n}) < 0$ , где  $\vec{n}$  – вектор нормали к рассматриваемой грани, то грань является освещенной, т.е. входящей, если

$(\vec{\Omega}, \vec{n}) > 0$ , то грань – выходящая. Для расчетной ячейки типа HEX-Z существует 12 вариантов освещенности (6 вариантов для боковых граней, изображенных на рисунке 3.6, и 2 варианта для оснований ячейки).

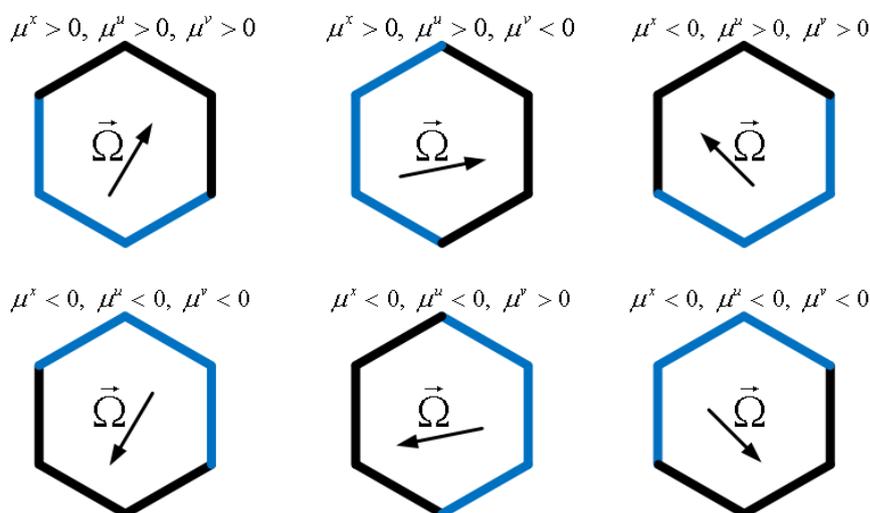


Рисунок 3.6 – Варианты освещенности боковых граней HEX-Z ячейки

Балансное уравнение (3.6) необходимо дополнить соотношениями, которые связывают значения плотности потока нейтронов на выходящих гранях со значениями на входящих. Наиболее распространенным является семейство WDD разностных схем:

$$\Phi = P^\alpha \Phi_{out}^\alpha + (1 - P^\alpha) \Phi_{in}^\alpha, \quad \alpha \in \{x, u, v, z\}$$

с весовыми коэффициентами  $P^\alpha : 0 \leq P^\alpha \leq 1$ .

Варьируя форму дополнительных соотношений, можно улучшить качество сеточного решения. Максимальный порядок аппроксимации достигается при  $P^\alpha = 1/2$ , что соответствует DD («алмазной») схеме. Согласно теореме Годунова [42], линейная конечно-разностная схема со вторым порядком аппроксимации не является положительной и монотонной.

Неположительность может приводить к появлению отрицательных значений сеточного решения. Эта проблема решается, например, использованием алгоритма нулевой коррекции [43], суть которого заключается в обнулении отрицательных значений на выходящих гранях и пересчете ячейки для сохранения баланса.

Другой недостаток – немонотонность – приводит к появлению нефизических осцилляций (новых локальных экстремумов) [44]. Для минимизации немонотонности первоначально расчет ячейки выполняется со значениями параметров, отвечающих наибольшему из возможных порядков аппроксимации. Если полученное решение не удовлетворяет условию положительности и/или монотонности, проводится коррекция сеточного решения: ячейка пересчитывается со значениями параметров, гарантирующих полное или частичное выполнение рассматриваемых условий. При коррекции порядок схемы снижается. Примером такой схемы является DTW-схема [45], представляющая собой обобщенную  $\theta$ -схему на случай  $\theta_m^\alpha = (\mu_m^\alpha)^2$ ,  $\alpha \in \{x, u, v, z\}$ . Для прямоугольной геометрии эта схема разработана в коде PENTRAN [46].

В расчетном коде CORNER обобщена DTW-схема на случай HEX-Z геометрии. Выбор весовых коэффициентов осуществляется на основе решения вспомогательной задачи. Например, для определения коэффициента  $P^x$ :

$$\begin{cases} \frac{2}{3\Delta x} \sum_{\alpha \in \{x, u, v\}} |\mu^\alpha| (\Phi_{out}^\alpha - \Phi_{in}^\alpha) + \frac{|\xi|}{\Delta z_k} (\Phi_{out}^z - \Phi_{in}^z) + \Sigma_t \Phi = Q, \\ \Phi_{out}^\alpha = 2\Phi - (1 - \theta^\alpha) \Phi_{in}^\alpha, \alpha \in \{u, v, z\}, \\ \Phi_{out}^x = \frac{1}{P^x} \Phi_m - \frac{1 - P^x}{P^x} \Phi_{in}^x = 0. \end{cases}$$

Аналогичные системы уравнений можно записать и для весов  $P^u$ ,  $P^v$  и  $P^z$ . В итоге весовые коэффициенты имеют вид:

$$P^\alpha = 1 - \frac{Q + \frac{2}{3} \frac{|\mu^\alpha|}{\Delta x} \Phi_{in}^\alpha + (\mu^\alpha)^2 \left( \frac{2}{3\Delta x} \sum_{\alpha' \neq \alpha} |\mu^{\alpha'}| \Phi_{in}^{\alpha'} + \frac{|\xi|}{\Delta z_k} \Phi_{in}^z \right)}{\left( \frac{4}{3\Delta x} \sum_{\alpha' \neq \alpha} |\mu^{\alpha'}| \Phi_{in}^{\alpha'} + \frac{2}{\Delta z_k} |\xi| \Phi_{in}^z + \Sigma_t^g \right) \Phi_{in}^x}, \quad (\alpha, \alpha') \in \{x, u, v\},$$

$$P^z = 1 - \frac{Q + \frac{|\xi|}{\Delta z_k} \Phi_{in}^z + \xi^2 \frac{2}{3\Delta x} \sum_{\alpha} |\mu^\alpha| \Phi_{in}^\alpha}{\left( \frac{4}{3\Delta x} \sum_{\alpha} |\mu^\alpha| \Phi_{in}^\alpha + \Sigma_t^g \right) \Phi_{in}^z}.$$

В качестве сравнения DD и DTW схем можно привести радиальное распределение плотности потока нейтронов (рисунок 3.5) в центральной плоскости одной из моделей реактора БН-800. В качестве альтернативного варианта взят результат, полученный из расчета по методу Монте-Карло с помощью программы ММК [47].

Как видно из рисунка 3.7, использование DD-схемы (вариант «а»), приводит к появлению осцилляций, а DTW-схема (вариант «б») позволяет существенно уменьшить уровень осцилляций.

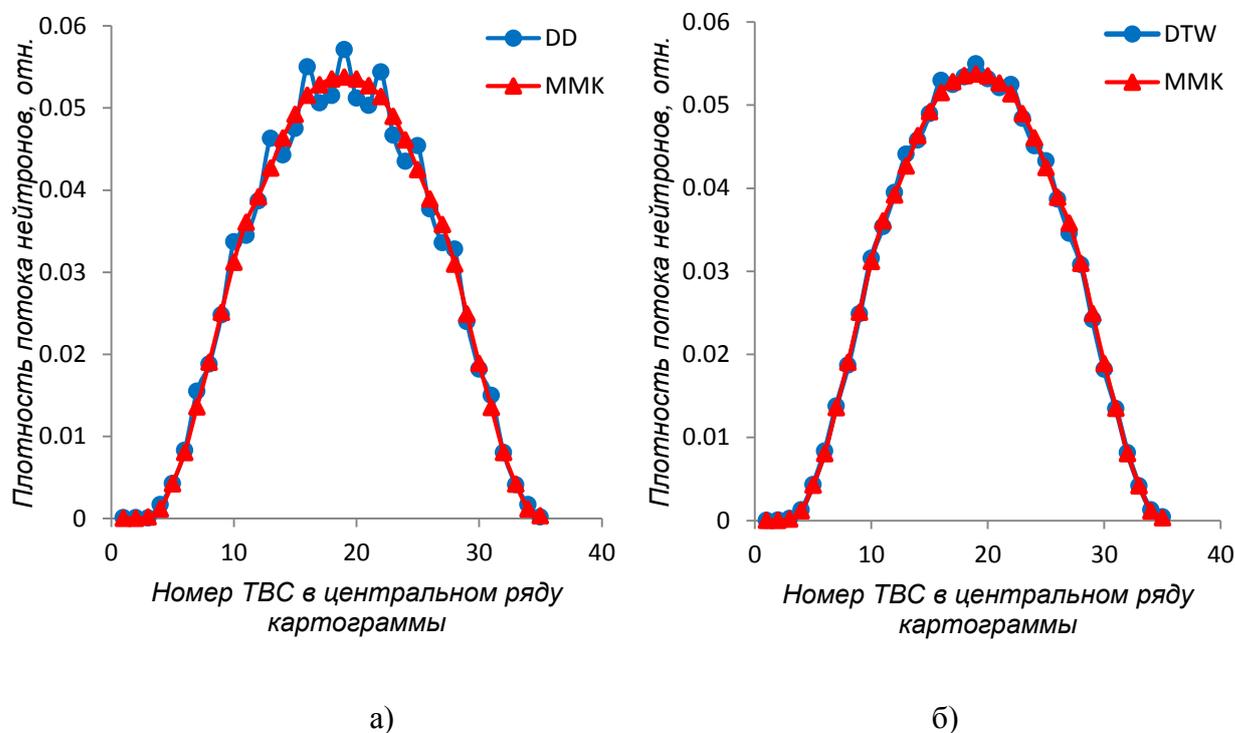


Рисунок 3.7 – Плотность потока нейтронов в центральном слое модели активной зоны реактора БН-800

### 3.2.3.2 WDD-схемы в детальной геометрии

Для детального описания внутренней структуры сборок (расположение чехла, твэлов и т.д.) HEX-Z геометрия неприменима, для этого требуется пространственная сетка, которая учитывала бы конструкционные особенности конкретной расчетной модели.

Введение такой пространственной сетки предполагает разбиение каждой исходной гексагональной ячейки на некоторое количество многоугольников. Такое разбиение будем называть вложенной сеткой. В расчетной практике нашли распространение DDL-схемы для произвольных выпуклых многоугольников [48], принцип построения которых аналогичен DD-схеме. Однако в работе [49] показано, что в общем случае DDL-схемы имеют первый порядок аппроксимации. Таким образом, введение такой мелкой сетки с одной стороны позволяет учесть конструкционные особенности исходной расчетной модели и уменьшить технологическую составляющую погрешности, но с другой стороны

понижает порядок аппроксимации конечно-разностной схемы, т.е. приводит к увеличению методической составляющей погрешности.

Второй порядок аппроксимации, максимальный для линейных конечно-разностных схем, сохраняется на сетках, ячейками которых являются параллелепипеды. В дальнейшем HEX-Z геометрию со вложенными сетками из параллелепипедов будем называть детальной. Степень детализации ограничивается лишь вычислительными ресурсами ЭВМ, наиболее современные и производительные могут позволить провести потвэльный расчет а.з.

Пример процесса построения вложенных сеток и детальной геометрии изображен на рисунке 3.8.

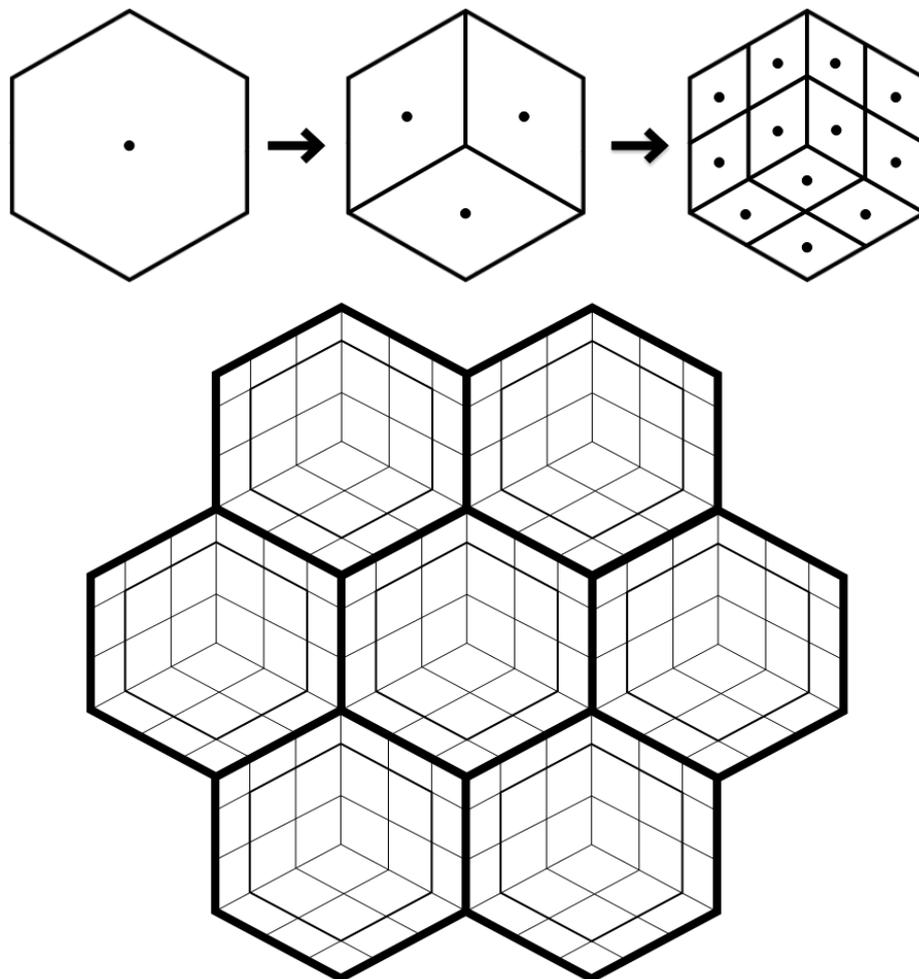


Рисунок 3.8 – Процесс построения вложенных сеток и детальной геометрии в радиальном направлении

Построение вложенной сетки предполагает задание в радиальном направлении трех независимых разбиений, представленных на рисунке 3.9:

$$h_1 = \{h_{1,1}, \dots, h_{1,K_1}\}, h_2 = \{h_{2,1}, \dots, h_{2,K_2}\}, h_3 = \{h_{3,1}, \dots, h_{3,K_3}\},$$

$$h_{1,K_1} = h_{2,K_2} = h_{3,K_3} = L.$$

Ограничимся рассмотрением случая одинаковых вложенных сеток для всех гексагональных ячеек. Такое ограничение снимает необходимость в переинтерполяции численного решения на границах гексагональных ячеек.

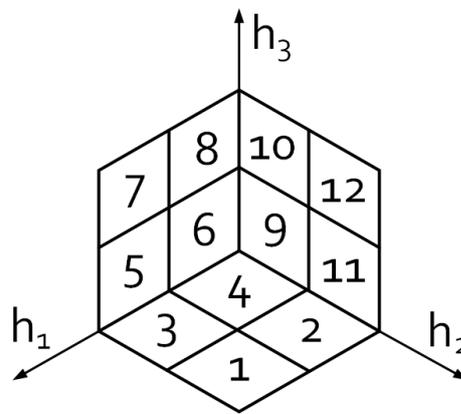


Рисунок 3.9 – Вложенная сетка и пример нумерации ячеек

Интегрируя уравнение переноса по ячейке вложенной сетки для фиксированного направления  $\vec{\Omega}_m$  и фиксированной энергетической группы  $g$  и применяя формулу Гаусса-Остроградского, получим балансное уравнения для ячейки вложенной сетки:

$$\int_S (\vec{\Omega}_m, \vec{n}) \varphi_m^g(\vec{r}) dS + \int_V \Sigma_t^g \varphi_m^g(\vec{r}) dV = \int_V Q_m^g(\vec{r}) dV,$$

$$\sum_{j=1}^6 (\vec{\Omega}_m, \vec{n}_j) \Phi_{m,j}^g \Delta S_j + \Sigma_t^g \Phi_{m,0}^g \Delta V = Q_{m,0}^g \Delta V,$$

где  $j$  – номер боковой поверхности ячейки (параллелепипеда),  $\vec{n}_j$  – внешняя нормаль к  $j$ -ой поверхности,  $\Delta S_j$  – площадь  $j$ -ой поверхности,  $\Delta V$  – объем ячейки,  $\Phi_{m,j}^g$  – усредненная по  $j$ -ой поверхности плотность потока нейтронов,  $\Phi_{m,0}^g$  и  $Q_{m,0}^g$  – усредненные по объему ячейки плотность потока нейтронов и источник соответственно:

$$\Phi_{m,j}^g = \frac{1}{\Delta S_j} \int_{S_j} \varphi_m^g(\vec{r}) dS,$$

$$\Phi_{m,0}^g = \frac{1}{\Delta V} \int_V \varphi_m^g(\vec{r}) dV,$$

$$Q_{m,0}^g = \frac{1}{\Delta V} \int_V Q_m^g(\vec{r}) dV.$$

Замыкающие соотношения WDD-схемы:

$$\Phi_0 = P_j \Phi_j + P_{j'} \Phi_{j'},$$

$$j' : \vec{n}_{j'} = -\vec{n}_j, j = 1, \dots, 6,$$

$$P_j + P_{j'} = 1, 0 \leq P_j \leq 1.$$

Порядок обхода ячеек вложенной сетки основывается на освещенности исходной HEX-Z ячейки.

Вложенная сетка позволяет выделить ячейки, моделирующие чехол сборки. Если стержень СУЗ занимает конструкционно не весь объем сборки, то его можно выделить в отдельные ячейки, как показано на рисунке 3.10. Такое представление позволит повысить точность оценки эффективности стержня СУЗ по причине учета гетерогенности среды.

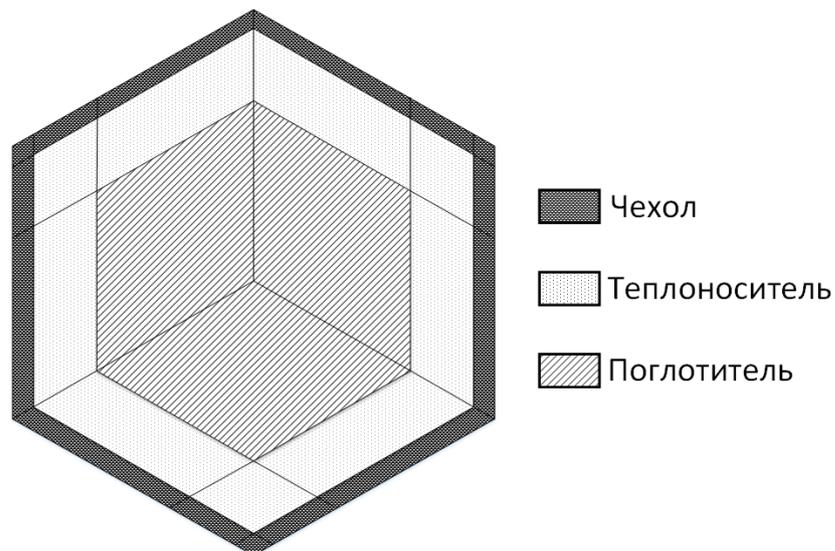


Рисунок 3.10 – Вложенная сетка с ячейками, моделирующими чехол, теплоноситель и поглотитель

При моделировании процесса опустошения (кипение теплоносителя), например, в натриевой полости для реактора типа БН, подобные вложенные сетки позволяют точнее оценивать пустотный эффект реактивности.

Кроме того, в оптически плотных средах  $\Sigma_t \Delta x \gg 1$ , например, когда размер «под ключ» превышает  $\sim 10$  см, использование мелкой сетки позволяет снизить или устранить эффект немонотонности линейной конечно-разностной схемы второго порядка аппроксимации, характерный для DD-схемы в HEX-Z геометрии [50].

Примером может служить модель реактора БН-800, в которой размер «под ключ» равен 10.04 см. Для грубосеточного расчета в HEX-Z геометрии использованы DD и DTW схемы, для мелкосеточного расчета в детальной геометрии (3 ячейки вложенной сетки, приходящиеся на 1 гексагональную ячейку) – DD-схема. Как видно из рисунка 3.11, в решении, полученном с помощью DD-схемы в HEX-Z геометрии, присутствуют нефизические осцилляции, DTW-схема снижает уровень осцилляций, но в недостаточной степени. Использование вложенной сетки (из 3 параллелепипедов на одну сборку) дает качественно верный с физической точки зрения результат (2 локальных минимума соответствуют наличию стержней СУЗ в активной зоне).

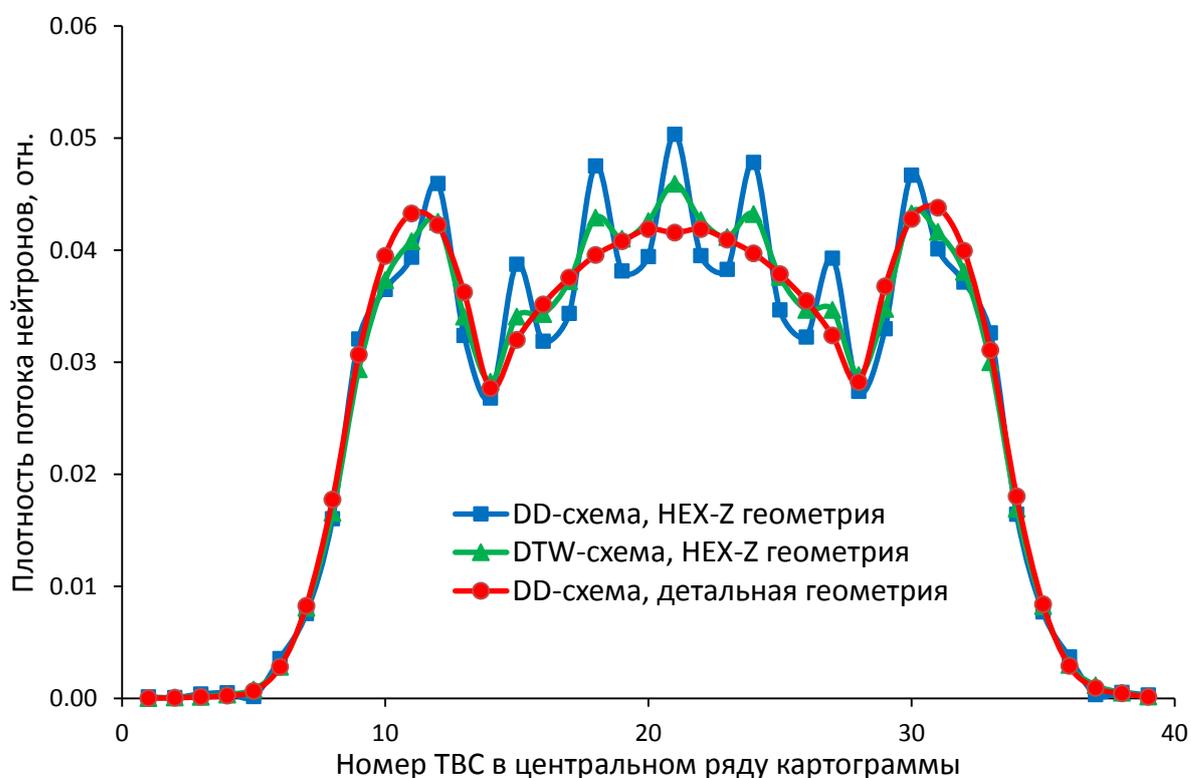


Рисунок 3.11 – Плотность потока нейтронов в центральном слое модели активной зоны реактора БН-800

Проведено численное исследование  $K_{eff}$  в зависимости от количества ячеек вложенной сетки на примере расчетной модели, описание которой приведено в подразделе 4.1. Результаты исследования приведены в таблице 3.1, в скобках указано относительное отклонение от реперного значения, в качестве которого используется результат, полученный по методу Монте-Карло.

Таблица 3.1 – Значения  $K_{eff}$  в зависимости от количества ячеек вложенной сетки

Количества ячеек вложенной сетки	$K_{eff}$ (стержни СУЗ полностью выведены из а.з.)	$K_{eff}$ (стержни СУЗ частично введены в а.з.)
1 (гексагональная ячейка)	1.09358 (-0.14%)	0.90618 (2.99%)
3	1.09102 (-0.37%)	0.86568 (-1.62%)
12	1.09357 (-0.14%)	0.87645 (-0.39%)
27	1.09402 (-0.10%)	0.87797 (-0.22%)
48	1.09416 (-0.09%)	0.87855 (-0.15%)
192	1.09431 (-0.07%)	0.87928 (-0.07%)
Реперное значение	1.0951	0.8799

Как видно из результатов, представленных в таблице 3.1, в приемлемую погрешность  $K_{eff}$  (<0.5%) укладываются расчеты, проведенные на вложенных сетках с числом ячеек > 12. Наибольшее отклонение соответствует расчету в HEX-Z геометрии (без использования вложенных сеток) для состояния, в котором стержни СУЗ введены в а.з., т.е. при наличии пространственной гетерогенности.

### 3.2.3.3 Нодалная методика

Как уже было отмечено ранее, WDD-схемы имеют порядок аппроксимации не выше второго, а DD-схема является неположительной и немонотонной.

Один из вариантов уменьшения погрешности пространственной аппроксимации – измельчение сетки – описан в подпункте 3.2.3.2. Другой путь решения обозначенной проблемы – использование нодального метода [51] повышенного порядка точности, в основе которого лежит представление плотности потока нейтронов внутри нода, элементарного объема с неизменными свойствами, в виде ряда по базисным функциям и последующее вычисление моментов разложения.

Рассмотрим стационарный процесс переноса нейтронов, который в многогрупповом  $S_N$  приближении описывается уравнением:

$$\vec{\Omega}_m \cdot \nabla \varphi_m^g(x, y, z) + \Sigma_t^g(x, y, z) \varphi_m^g(x, y, z) = \sum_{g'} \left( \Sigma_s^{g' \rightarrow g} + \frac{\chi^g}{K_{eff}} \nu \Sigma_f^{g'} \right) \Phi^g(x, y, z). \quad (3.7)$$

Индексы  $g$  и  $m$  будем опускать, когда это не противоречит содержанию.

Рассмотрим расчетную ячейку с «размером под ключ»  $\Delta x$  и высотой  $\Delta z_k$ , как изображено на рисунке 3.12, которая моделирует одну из высотных частей ТВС активной зоны РУ БР:

$$D = \left\{ \left[ -\frac{\Delta x}{2}, \frac{\Delta x}{2} \right] \times [-y_b(x), y_b(x)] \times [z_{k-1/2}, z_{k+1/2}] \right\},$$

$$y_b(x) = \frac{\Delta x - |x|}{\sqrt{3}}.$$

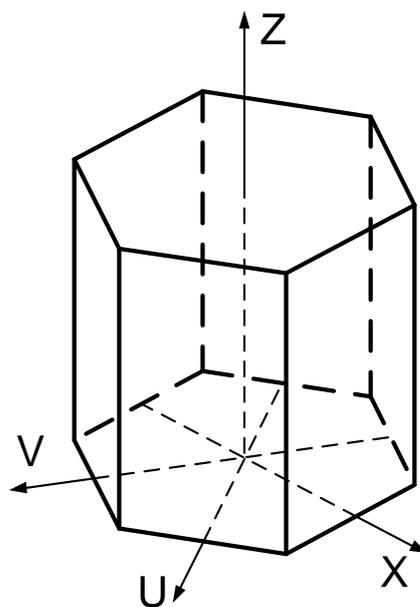


Рисунок 3.12 – Расчетная ячейка в HEX-Z геометрии

Предполагается, что в пределах расчетной ячейки значения сечений взаимодействия не изменяются.

Для удобства последующих вычислений сделаем преобразование системы координат и в дальнейшем «штрихи» будем опускать:

$$\begin{cases} x = \Delta x \cdot x', \\ y = \Delta x \cdot y', \\ z = \Delta z_k \cdot z' + z_k. \end{cases}$$

Поперечное интегрирование по  $-y_b(x) < y < y_b(x)$  и  $-1/2 < z < 1/2$  приводит к краевой задаче:

$$\begin{cases} \frac{\mu}{\Delta x} \frac{d}{dx} y_b(x) \Phi(x) + \Sigma_t y_b(x) \Phi(x) = y_b(x) Q(x) - L(x), \\ \Phi\left(-\frac{1}{2}\right) = \Phi_{x-}, \end{cases} \quad (3.8)$$

в которой для одномерного потока нейтронов  $\Phi(x)$  и источника  $Q(x)$  используются следующие обозначения:

$$\Phi(x) = \frac{1}{2y_b(x)} \int_{-1/2}^{1/2} dz \int_{-y_b(x)}^{y_b(x)} \varphi(x, y, z) dy,$$

$$Q(x) = \frac{1}{2y_b(x)} \int_{-1/2}^{1/2} dz \int_{-y_b(x)}^{y_b(x)} Q(x, y, z) dy.$$

В уравнении (3.8)  $L(x)$  – утечка нейтронов, имеющая радиальную  $L_r(x)$  и аксиальную  $L_z(x)$  составляющую

$$L(x) = L_r(x) + y_b(x) L_z(x),$$

$$L_r(x) = \begin{cases} L_{r+}(x) = \frac{\mu_u \Phi_{u+}(x) - \mu_v \Phi_{v+}(x)}{\sqrt{3} \Delta x}, & x > 0 \\ L_{r-}(x) = \frac{\mu_v \Phi_{v+}(x) - \mu_u \Phi_{u-}(x)}{\sqrt{3} \Delta x}, & x < 0 \end{cases}$$

$$L_z(x) = \frac{\xi}{\Delta z_k} [\Phi_{z+}(x) - \Phi_{z-}(x)],$$

$$\int_{-1/2}^{1/2} \varphi(x, y_b(x), z) dz = \begin{cases} \Phi_{u+}(x), & x > 0 \\ \Phi_{v+}(x), & x < 0 \end{cases}$$

$$\int_{-1/2}^{1/2} \varphi(x, -y_b(x), z) dz = \begin{cases} \Phi_{v-}(x), & x > 0 \\ \Phi_{u+}(x), & x < 0 \end{cases}$$

$$\Phi_{z\pm}(x) = \frac{1}{2y_b(x)} \int_{-y_b(x)}^{y_b(x)} \varphi\left(x, y, \pm \frac{1}{2}\right) dy.$$

Задача (3.8) имеет аналитическое решение:

$$y_b(x)\Phi(x) = \frac{1}{2\sqrt{3}} e^{-\varepsilon_x\left(x+\frac{1}{2}\right)} \cdot \Phi^{x-} + \frac{\Delta x}{\mu_x} \int_{\frac{1}{2}}^x [y_b(t)Q(t) - L(t)] e^{-\varepsilon_x(x-t)} dt. \quad (3.9)$$

где использовано обозначение для оптического шага  $\varepsilon_x = \frac{\Sigma_l \Delta x}{\mu_x}$ .

Введем базисные полиномы, ортогональные с весом  $y_b(x)$  на отрезке  $-1/2 < x < 1/2$ :

$$h(x) = \left\{ 1, x, x^2 - \frac{5}{72}, \dots \right\}: \int_{-1/2}^{1/2} y_b(x) h_i(x) h_j(x) dx = \delta_{ij} D_i^x,$$

$$D_0^x = \frac{\sqrt{3}}{4}, \quad D_1^x = \frac{5\sqrt{3}}{288}, \quad D_2^x = \frac{127\sqrt{3}}{103680}.$$

Разложим функции  $\Phi(x)$  и  $Q(x)$  по базисным полиномам, ограничиваясь вторым порядком:

$$\Phi(x) = \sum_{i=0}^2 \Phi_i^x h_i(x),$$

$$Q(x) = \sum_{i=0}^2 Q_i^x h_i(x),$$

$$L(x) = \sum_{i=0}^2 [L_{r,i}^x + L_{z,i}^x y_b(x)] h_i(x) = L_{r,0}^x + \sum_{i=0}^2 L_{z,i}^x y_b(x) h_i(x),$$

$$L_{r,0}^x = \begin{cases} L_{r+,0}^x = \frac{\mu_u \Phi_{u+} - \mu_v \Phi_{v+}}{\sqrt{3}\Delta x}, & x > 0 \\ L_{r-,0}^x = \frac{\mu_v \Phi_{v+} - \mu_u \Phi_{u-}}{\sqrt{3}\Delta x}, & x < 0 \end{cases}$$

Моменты разложения аксиальной составляющей утечки определяются согласно методике, предложенной в [52]:

$$L_{z,i}^x = \frac{\xi}{\Delta z_k} \left[ \Phi_{z^+} \frac{\Phi_{k,i}^x \Delta z_{k+1} - \Phi_{k+1,i}^x \Delta z_k}{\Phi_{k,0}^x \Delta z_{k+1} - \Phi_{k+1,0}^x \Delta z_k} - \Phi_{z^-} \frac{\Phi_{k,i}^x \Delta z_{k-1} - \Phi_{k-1,i}^x \Delta z_k}{\Phi_{k,0}^x \Delta z_{k-1} - \Phi_{k-1,0}^x \Delta z_k} \right].$$

Находим значение плотности потока на выходящей грани

$$\begin{aligned} \Phi_{x^+} &= \Phi\left(\frac{1}{2}\right) = \Phi_{x^-} e^{-\varepsilon_x} - \frac{2\sqrt{3}\Delta x}{\mu_x} \int_0^{1/2} e^{-\varepsilon_x\left(\frac{1-x}{2}\right)} dx \cdot L_{r^+,0}^x - \frac{2\sqrt{3}\Delta x}{\mu_x} \int_0^{1/2} e^{-\varepsilon_x\left(\frac{1+x}{2}\right)} dx \cdot L_{r^-,0}^x + \\ &+ \frac{2\Delta x}{\mu_x} \sum_{i=0}^2 \left[ \int_0^{1/2} (1-x) h_i(-x) e^{-\varepsilon_x\left(\frac{1+x}{2}\right)} dx + \int_0^{1/2} (1-x) h_i(x) e^{-\varepsilon_x\left(\frac{1-x}{2}\right)} dx \right] (Q_i^x - L_{z,i}^x) = \\ &= \Phi_{x^-} e^{-\varepsilon_x} + \sum_{i=0}^2 \alpha_i^x (Q_i^x - L_{z,i}^x) - \beta_+^x L_{r^+,0}^x - \beta_-^x L_{r^-,0}^x. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Вычисляя интегралы, входящие в формулу (3.10), находим значения нодальных коэффициентов:

$$\begin{aligned} \alpha_0^x &= -\frac{\Delta x}{\mu_x \varepsilon_x^2} \left[ e^{-\varepsilon_x} (\varepsilon_x - 2) + 4e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} - \varepsilon_x - 2 \right], \\ \alpha_1^x &= \frac{\Delta x}{2\mu_x \varepsilon_x^3} \left[ (e^{-\varepsilon_x} + 1)(\varepsilon_x^2 - 8) + 16e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} \right], \\ \alpha_2^x &= -\frac{\Delta x}{72\mu_x \varepsilon_x^4} \left[ (e^{-\varepsilon_x} - 1)(13\varepsilon_x^2 - 144)\varepsilon_x + (e^{-\varepsilon_x} + 1)(46\varepsilon_x^2 - 864) + e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} (-20\varepsilon_x^2 + 1728) \right], \\ \beta_+^x &= \frac{2\sqrt{3}\Delta x}{\mu_x \varepsilon_x} \left( 1 - e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} \right), \\ \beta_-^x &= \frac{2\sqrt{3}\Delta x}{\mu_x \varepsilon_x} e^{-\varepsilon_x} \left( e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} - 1 \right). \end{aligned}$$

Аналогичным образом получаются выражения для функций  $\Phi(u)$  и  $\Phi(v)$ , где переменные  $u$  и  $v$  соответствуют осям координат, изображенным на рисунке 3.10. Совершив поворот системы координат на угол  $\alpha$ , уравнение переноса в новых координатах  $(x', y', z)$  сводится к виду

$$\left( \mu' \frac{\partial}{\partial x'} + \eta' \frac{\partial}{\partial y'} + \xi \frac{\partial}{\partial z} + \Sigma_t \right) \varphi(x', y', z) = Q(x', y', z),$$

т.е. к уравнению (3.7) с новыми направляющими косинусами

$$\mu' = \mu \cos \alpha + \eta \sin \alpha ,$$

$$\eta' = -\mu \sin \alpha + \eta \cos \alpha .$$

Проводя поперечное интегрирование по  $x$  и  $y$  получаем одномерную задачу относительно переменной  $z$ :

$$\begin{cases} \frac{\xi}{\Delta z} \frac{d}{dz} \Phi(z) + \Sigma_t \Phi(z) = Q(z) - L(z) \\ \Phi\left(-\frac{1}{2}\right) = \Phi_{z^-} \end{cases}, \quad (3.11)$$

в которой  $\Phi(z)$  – одномерный поток,  $Q(z)$  – одномерный источник,  $L(z)$  – утечка нейтронов:

$$\Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{3}} \int_{-1/2}^{1/2} dx \int_{-y_b(x)}^{y_b(x)} \varphi_m^g(x, y, z) dy ,$$

$$Q(z) = \frac{2}{\sqrt{3}} \int_{-1/2}^{1/2} dx \int_{-y_b(x)}^{y_b(x)} Q_m^g(x, y, z) dy ,$$

$$L(z) = \frac{2}{3\Delta x} \sum_{s=\{x,u,v\}} \mu_s [\Phi_{s^+}(z) - \Phi_{s^-}(z)] ,$$

причем

$$\Phi_{x\pm}(z) = \sqrt{3} \int_{-\sqrt{3}/6}^{\sqrt{3}/6} \varphi(x_{\pm}, y, z) dy ,$$

$$\Phi_{u^+}(z) = 2 \int_0^{1/2} \varphi(x, y_b(x), z) dx ,$$

$$\Phi_{v^-}(z) = 2 \int_0^{1/2} \varphi(x, -y_b(x), z) dx ,$$

$$\Phi_{u^-}(z) = 2 \int_{-1/2}^0 \varphi(x, -y_b(x), z) dx ,$$

$$\Phi_{v^+}(z) = 2 \int_{-1/2}^0 \varphi(x, y_b(x), z) dx .$$

Имея аналитическое решение задачи (3.11), находим значение плотности потока на выходящей грани:

$$\Phi_{z+} = \Phi_{z-} e^{-\varepsilon_z} + \frac{\Delta z_k}{\xi} \sum_{i=0}^2 \int_{-1/2}^{1/2} e^{-\varepsilon_z \left(\frac{1}{2}-z\right)} f_i(z) dz \cdot (Q_i^z - L_i^z) = \Phi_{z-} e^{-\varepsilon_z} + \sum_{i=0}^2 \alpha_i^z (Q_i^z - L_i^z),$$

где использовано обозначение для оптического шага  $\varepsilon_z = \frac{\sum_l \Delta z_k}{\xi}$ .

Введем базисные полиномы, ортогональные с единичным весом на отрезке  $-1/2 < z < 1/2$ :

$$f(z) = \left\{ 1, z, z^2 - \frac{1}{12}, \dots \right\} : \int_{-1/2}^{1/2} f_i(z) f_j(z) dz = \delta_{ij} D_i^z,$$

$$D_0^z = 1, D_1^z = \frac{1}{12}, D_2^z = \frac{1}{180}.$$

Разложим функции  $\Phi(z)$  и  $Q(z)$  по базисным полиномам, ограничиваясь вторым порядком:

$$\Phi(z) = \sum_{i=0}^2 \Phi_i^z f_i(z),$$

$$Q(z) = \sum_{i=0}^2 Q_i^z f_i(z),$$

$$L(z) = \sum_{i=0}^2 L_i^z f_i(z) = L_0^z = \frac{2}{3\Delta x} \sum_{s=\{x,u,v\}} \mu_s (\Phi_{s+} - \Phi_{s-}).$$

Нодальные коэффициенты:

$$\alpha_0^z = -\frac{\Delta z_k}{\xi \varepsilon_z} (e^{-\varepsilon_z} - 1),$$

$$\alpha_1^z = \frac{\Delta z_k}{2\xi \varepsilon_z^2} \left[ e^{-\varepsilon_z} (\varepsilon_z + 2) + \varepsilon_z - 1 \right],$$

$$\alpha_2^z = -\frac{\Delta z_k}{6\xi \varepsilon_z^3} \left[ (e^{-\varepsilon_z} - 1) (\varepsilon_z^2 + 12) + 6\varepsilon_z (e^{-\varepsilon_z} + 1) \right].$$

В итоге имеем систему уравнений относительно плотности потока нейтронов в ячейке и на выходящих гранях:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{2}{3\Delta x} \sum_s \mu_s (\Phi_{s+} - \Phi_{s-}) + \frac{\xi}{\Delta z_k} (\Phi_{z+} - \Phi_{z-}) + \Sigma_i \Phi = Q, \quad s = \{x, u, v\} \\ \Phi_{s+} = \Phi_{s-} e^{-\varepsilon_s} + \sum_{i=0}^2 \alpha_i^s (Q_i^s - L_{z,i}^s) - \beta_+^s L_{r+,0}^s - \beta_-^s L_{r-,0}^s \\ \Phi_{z+} = \Phi_{z-} e^{-\varepsilon_z} + \sum_{i=0}^2 \alpha_i^z (Q_i^z - L_i^z) \end{array} \right. \quad (3.12)$$

Моменты разложения одномерных потоков по базисным функциям находятся с помощью метода взвешенных невязок:

$$\begin{aligned} \Phi_i^x &= \frac{1}{2\sqrt{3}D_i^x} \int_{-1/2}^{1/2} h_i(x) e^{-\varepsilon_x(x+\frac{1}{2})} dx \cdot \Phi_{x-}^m - \frac{1}{D_i} \frac{\Delta x}{\mu_x} \int_0^{1/2} h_i(x) dx \int_0^x e^{-\varepsilon_x(x-t)} dt \cdot L_+^x - \\ &- \frac{1}{D_i} \frac{\Delta x}{\mu_x} \left( \int_0^{1/2} h_i(x) dx \int_0^{1/2} e^{-\varepsilon_x(x+t)} dt + \int_0^{1/2} h_i(-x) ds \int_x^{1/2} e^{-\varepsilon_x(t-x)} dt \right) L_-^x + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{3}D_i^x} \sum_{j=0}^2 \frac{\Delta x}{\mu_x} \left[ \int_0^{1/2} h_i(x) dx \int_0^{1/2} (1-t) e^{-\varepsilon_x(t+x)} h_j(-t) dt + \right. \\ &+ \left. \int_0^{1/2} h_i(-x) ds \int_x^{1/2} (1-t) e^{-\varepsilon_x(t-x)} h_j(-t) dt + \int_0^{1/2} h_i(x) dx \int_0^x (1-t) e^{-\varepsilon_x(x-t)} h_j(t) dt \right] (Q_j^x - L_{z,j}^x) = \\ &= \Phi_{x-} \gamma_i^x + \sum_{j=0}^2 \delta_{ij}^x (Q_j^x - L_{z,j}^x) - \lambda_{+,i}^x L_{r+,0}^x - \lambda_{-,i}^x L_{r-,0}^x \end{aligned}$$

где значения соответствующих нодальных коэффициентов равны

$$\gamma_1^x = -\frac{24}{5\varepsilon_x^2} \left[ e^{-\varepsilon_x} (\varepsilon_x + 2) + \varepsilon_x - 2 \right],$$

$$\delta_{10}^x = \frac{24\Delta x}{5\mu_x \varepsilon_x^4} \left[ e^{-\varepsilon_x} (\varepsilon_x^2 - 4) + 4e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} (\varepsilon_x + 2) - 4(\varepsilon_x + 1) \right],$$

$$\delta_{11}^x = -\frac{\Delta x}{5\mu_x \varepsilon_x^5} \left[ 12e^{-\varepsilon_x} (\varepsilon_x^3 + 2\varepsilon_x^2 - 8\varepsilon_x - 16) + 192e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} (\varepsilon_x + 2) - 5\varepsilon_x^4 + 12\varepsilon_x^3 + 24\varepsilon_x^2 - 96\varepsilon_x - 192 \right],$$

$$\delta_{12}^x = \frac{\Delta x}{15\mu_x \varepsilon_x^6} \left[ e^{-\varepsilon_x} (13\varepsilon_x^4 + 72\varepsilon_x^3 - 52\varepsilon_x^2 - 1152\varepsilon_x - 1728) + e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} (-20\varepsilon_x^3 - 40\varepsilon_x^2 + 1728\varepsilon_x + 3456) - \right. \\ \left. 13\varepsilon_x^4 + 20\varepsilon_x^3 + 236\varepsilon_x^2 - 576\varepsilon_x - 1728 \right],$$

$$\gamma_2^x = -\frac{240}{127\varepsilon_x^3} \left[ (e^{-\varepsilon_x} - 1)(13\varepsilon_x^2 + 144) + 72\varepsilon_x (e^{-\varepsilon_x} + 1) \right],$$

$$\delta_{20}^x = \frac{240\Delta x}{127\mu_x \varepsilon_x^5} \left[ e^{-\varepsilon_x} (13\varepsilon_x^3 + 46\varepsilon_x^2 - 288) + e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} (52\varepsilon_x^2 + 288\varepsilon_x + 576) - 13\varepsilon_x^3 + 118\varepsilon_x^2 - 288(\varepsilon_x + 1) \right],$$

$$\delta_{21}^x = -\frac{120\Delta x}{127\mu_x \varepsilon_x^6} \left[ \begin{array}{l} e^{-\varepsilon_x} (13\varepsilon_x^4 + 72\varepsilon_x^3 + 40\varepsilon_x^2 - 576\varepsilon_x - 1152) + e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} (208\varepsilon_x^2 + 1152\varepsilon_x + 2304) - \\ 17\varepsilon_x^4 + 72\varepsilon_x^3 + 40\varepsilon_x^2 - 576\varepsilon_x - 1152 \end{array} \right],$$

$$\delta_{22}^x = -\frac{\Delta x}{381\mu_x \varepsilon_x^7} \left[ \begin{array}{l} e^{-\varepsilon_x} (-1690\varepsilon_x^5 - 15340\varepsilon_x^4 - 33120\varepsilon_x^3 + 149760\varepsilon_x^2 + 829440\varepsilon_x - 1244160) + \\ e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} (2600\varepsilon_x^4 + 14400\varepsilon_x^3 - 195840\varepsilon_x^2 - 1244160\varepsilon_x - 2488320) - \\ 381\varepsilon_x^6 + 1690\varepsilon_x^5 + 3380\varepsilon_x^4 - 33120\varepsilon_x^3 - 57600\varepsilon_x^2 + 414720\varepsilon_x + 1244160 \end{array} \right],$$

$$\lambda_{+,1}^x = \frac{12\sqrt{3}\Delta x}{5\mu_x \varepsilon_x^3} \left[ 4e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} (\varepsilon_x + 2) + \varepsilon_x^2 - 8 \right],$$

$$\lambda_{-,1}^x = \frac{12\sqrt{3}\Delta x}{5\mu_x \varepsilon_x^3} \left[ 4e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} \left( e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} - 1 \right) (\varepsilon_x + 2) - \varepsilon_x^2 + 4\varepsilon_x \right],$$

$$\lambda_{+,2}^x = \frac{240\sqrt{3}\Delta x}{127\mu_x \varepsilon_x^4} \left[ e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} (26\varepsilon_x^2 + 144\varepsilon_x + 288) + \varepsilon_x^3 + 10\varepsilon_x^2 - 288 \right],$$

$$\lambda_{-,2}^x = \frac{240\sqrt{3}\Delta x}{127\mu_x \varepsilon_x^4} \left[ e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} \left( e^{-\frac{\varepsilon_x}{2}} - 1 \right) (26\varepsilon_x^2 + 144\varepsilon_x + 288) + \varepsilon_x^3 - 36\varepsilon_x^2 + 144\varepsilon_x \right].$$

Аналогично для моментов функции  $\Phi(z)$ :

$$\begin{aligned} \Phi_i^z &= \frac{1}{D_i^z} \int_{-1/2}^{1/2} f_i(-z) e^{-\varepsilon_z \left( \frac{1}{2} - z \right)} dz \cdot \Phi_{z-} + \frac{\Delta z_k}{\xi D_i^z} \sum_{j=0}^2 \int_{-1/2}^{1/2} f_i(z) dz \int_{-1/2}^z f_j(z) e^{-\varepsilon_z(z-t)} dt \cdot (Q_j^z - L_j^z) = \\ &= \Phi_{z-} \gamma_i^z + \sum_{j=0}^2 \delta_{ij}^z (Q_j^z - L_j^z) \end{aligned}$$

$$\gamma_1^z = -\frac{6}{\varepsilon_z^2} \left[ e^{-\varepsilon_z} (\varepsilon_z + 2) + \varepsilon_z - 2 \right],$$

$$\delta_{10}^z = \frac{6\Delta z_k}{\xi \varepsilon_z^3} \left[ e^{-\varepsilon_z} (\varepsilon_z + 2) + \varepsilon_z - 2 \right],$$

$$\delta_{11}^z = -\frac{\Delta z_k}{\xi \varepsilon_z^4} \left[ e^{-\varepsilon_z} (3\varepsilon_z^2 + 12\varepsilon_z + 12) - \varepsilon_z^3 + 3\varepsilon_z^2 - 12 \right],$$

$$\delta_{12}^z = \frac{\Delta z_k}{\xi \varepsilon_z^5} \left[ e^{-\varepsilon_z} (\varepsilon_z^3 + 8\varepsilon_z^2 + 24\varepsilon_z + 24) - \varepsilon_z^3 + 4\varepsilon_z^2 - 24 \right],$$

$$\gamma_2^z = -\frac{30}{\varepsilon_z^3} \left[ e^{-\varepsilon_z} (\varepsilon_z^2 + 6\varepsilon_z + 12) - \varepsilon_z^2 + 6\varepsilon_z - 12 \right],$$

$$\delta_{20}^z = \frac{30\Delta z_k}{\xi \varepsilon_z^4} \left[ e^{-\varepsilon_z} (\varepsilon_z^2 + 6\varepsilon_z + 12) - \varepsilon_z^2 + 6\varepsilon_z - 12 \right],$$

$$\delta_{21}^z = -\frac{15\Delta z_k}{\xi \varepsilon_z^5} \left[ e^{-\varepsilon_z} (\varepsilon_z^3 + 8\varepsilon_z^2 + 24\varepsilon_z + 24) - \varepsilon_z^3 + 4\varepsilon_z^2 - 24 \right],$$

$$\delta_{22}^z = \frac{\Delta z_k}{\xi \varepsilon_z^6} \left[ e^{-\varepsilon_z} (5\varepsilon_z^4 + 60\varepsilon_z^3 + 300\varepsilon_z^2 + 720\varepsilon_z + 720) + \varepsilon_z^5 - 5\varepsilon_z^4 + 60\varepsilon_z^2 - 720 \right].$$

В общем виде формулы для вычисления моментов можно записать в виде системы:

$$\begin{cases} \Phi_i^s = \Phi_{s-\gamma_i^s} + \sum_{j=0}^2 \delta_{ij}^s (Q_j^s - L_{z,j}^s) - \lambda_{+,i}^s L_{r+,0}^s - \lambda_{-,i}^s L_{r-,0}^s \\ \Phi_i^z = \Phi_{z-\gamma_i^z} + \sum_{j=0}^2 \delta_{ij}^z (Q_j^z - L_j^z) \end{cases} \quad (3.13)$$

Алгоритм получения решения заключается в решении системы (для нулевых моментов) любым из итерационных методов, поскольку члены утечки в правой части системы уравнений (3.12) содержат неизвестные значения плотности потока. Далее из балансного уравнения вычисляется плотность потока нейтронов в ячейке. В заключении вычисляются моменты разложения. Нулевые моменты вычислять не требуется, поскольку они совпадают со средним значением плотности потока в ячейке:

$$\Phi_0^s = \Phi.$$

Описанная выше нодальная методика обладает порядком аппроксимации выше второго, но, вообще говоря, не гарантирует получение положительного решения. В данном случае может быть применен наиболее простой алгоритм коррекции отрицательных значений:

$$\Phi_{out}^s = \max(0, \tilde{\Phi}_{out}^s),$$

поскольку для вычисления плотности потока на выходящих гранях не используется балансное уравнение, и баланс нейтронов будет соблюден на этапе вычисления плотности потока  $\Phi$  в расчетной ячейке.

### 3.2.4 Улучшенное квазистатическое приближение

Наиболее затратным по времени и вычислительным ресурсам является прямой метод решения нестационарных задач. Его использование в детерминистических и тем более стохастическом подходах затруднено, особенно при необходимости анализа

динамических процессов в рамках интегрального расчетного кода (такого, как, например, ЕВКЛИД [53]).

Таким образом, для решения задач пространственной кинетики был выбран улучшенный квазистатический метод с модифицированной методикой определения реактивности. В общепринятом квазистатическом методе реактивность определяется на основе теории возмущения первого порядка. Однако практика расчетов нестационарных режимов, особенно в быстрых реакторах, показала, что такая формулировка реактивности может приводить к существенным погрешностям [54]. Поэтому в реализуемом методе реактивность определяется на основе собственных значений однородных задач, описывающих асимптотическое поведение поля нейтронов возмущенного и невозмущенного состояния реактора.

В основе метода лежит представление плотности потока нейтронов в виде произведения амплитудной функции  $T(t)$ , зависящей только от времени, и форм-функции  $\psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$ , характеризующей пространственное распределение:

$$\varphi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)T(t). \quad (3.14)$$

Преимущество представления (3.14) состоит в том, что форм-функция не сильно меняется во времени и ее расчет, являясь наиболее ресурсоемким, использует грубую сетку по времени, а расчет амплитудной функции, которая меняется часто, проводится на мелкой сетке.

С учетом представления (3.14) система уравнений для форм-функции имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[ \frac{1}{\nu^g} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{\nu^g} \frac{1}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} + \vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_t^g(\vec{r}, t) \right] \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = \sum_l \int_{4\pi} \Sigma_s^{l \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}', t) \psi^l(\vec{r}, \vec{\Omega}', t) d\vec{\Omega}' + \\ + \chi_p^g \left( 1 - \sum_j \beta_j \right) \sum_l \nu \Sigma_f^l(\vec{r}, t) \Psi^l(\vec{r}, t) + \frac{1}{T(t)} \sum_n \sum_j \chi_{d,j}^{g,n} \lambda_j^n C_j^n(\vec{r}, t), \\ \frac{\partial C_j^n(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\lambda_j^n C_j^n(\vec{r}, t) + a_j^n T(t) \sum_l \nu_d^{n,l} \Sigma_f^{n,l}(\vec{r}, t) \Psi^l(\vec{r}, t), \\ \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) \Big|_{\Gamma, (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) < 0} = 0, \\ \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t_0) T(t_0) \Big|_{t=t_0} = \varphi_0^g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \\ C_j^n(\vec{r}, t_0) = \frac{a_j^n}{\lambda_j^n} T(t_0) \sum_l \nu_d^{n,l} \Sigma_f^{n,l}(\vec{r}, t_0) \Psi^l(\vec{r}, t_0), \end{array} \right.$$

где  $\Psi^l(\vec{r}, t)$  – интегральная по углу форм-функция.

Решение уравнения для концентраций предшественников запаздывающих нейтронов может быть записано в общем виде:

$$C_j^n(\vec{r}, t) = C_j^n(\vec{r}, t_0) e^{-\lambda_j^n(t-t_0)} + a_j^n \int_{t_0}^t T(t') e^{\lambda_j^n(t'-t)} \sum_l \nu_d^{n,l} \Sigma_f^{n,l}(\vec{r}, t') \Psi^l(\vec{r}, t') dt'.$$

Для двух временных шагов  $i$  и  $i+1$  можно записать

$$C_{j,i+1}^n(\vec{r}) = C_{j,i}^n(\vec{r}) e^{-\lambda_j^n \tau} + a_j^n \int_{t_i}^{t_{i+1}} T(t') e^{\lambda_j^n(t'-t_{i+1})} \sum_l \nu_d^{n,l} \Sigma_f^{n,l}(\vec{r}, t') \Psi^l(\vec{r}, t') dt'. \quad (3.15)$$

Для вычисления интеграла используется линейное приближение подынтегральной функции:

$$f(t) = f(t_i) + \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i} (t - t_i), \quad t \in [t_i, t_{i+1}],$$

тогда выражение (3.15) принимает вид:

$$C_{j,i+1}^n(\vec{r}) = C_{j,i}^n(\vec{r}) e^{-\lambda_j^n \tau} + a_j^n \left[ \alpha_j T_i \sum_l \nu_d^{n,l} \Sigma_{f,i}^{n,l}(\vec{r}) \Psi_i^l(\vec{r}) + \gamma_j T_{i+1} \sum_l \nu_d^{n,l} \Sigma_{f,i+1}^{n,l}(\vec{r}) \Psi_{i+1}^l(\vec{r}) \right], \quad (3.16)$$

где

$$\alpha_j = \frac{\lambda_j^n \tau - 1 + e^{-\lambda_j^n \tau}}{(\lambda_j^n)^2 \tau}, \quad \gamma_j = \frac{1 - e^{-\lambda_j^n \tau}}{\lambda_j^n} - \alpha_j.$$

Конечно-разностная формулировка с использованием неявной схемы по времени приводит к системе уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[ \vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_{t,i+1}^g(\vec{r}) + \frac{1}{\nu^g \tau} \left( 1 + \frac{T_{i+1} - T_i}{T_{i+1}} \right) \right] \psi_{i+1}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_l \int_{4\pi} \Sigma_{s,i+1}^{l \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi_{i+1}^l(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + \\ + \chi_p^g \left( 1 - \sum_j \beta_j \right) \sum_l \nu \Sigma_{f,i+1}^l(\vec{r}) \Psi_{i+1}^l(\vec{r}) + \frac{1}{T_{i+1}} \sum_j \sum_n \chi_{d,j}^{g,n} \lambda_j^n C_{j,i+1}^n(\vec{r}) + \frac{1}{\nu^g \tau} \psi_i^g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \\ C_{j,i+1}^n(\vec{r}) = C_{j,i}^n(\vec{r}) e^{-\lambda_j^n \tau} + a_j^n \left[ \alpha_j T_i \sum_l \nu_d^{n,l} \Sigma_{f,i}^{n,l}(\vec{r}) \Psi_i^l(\vec{r}) + \gamma_j T_{i+1} \sum_l \nu_d^{n,l} \Sigma_{f,i+1}^{n,l}(\vec{r}) \Psi_{i+1}^l(\vec{r}) \right], \\ \psi^g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t_0) \Big|_{t=t_0} = \psi_0^g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \\ \psi_{i+1}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \Big|_{\Gamma, (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) < 0} = 0, \\ C_{j,0}^n(\vec{r}) = \frac{a_j^n}{\lambda_j^n} T_0 \sum_l \nu_d^{n,l} \Sigma_{f,0}^{n,l}(\vec{r}) \Psi_0^l(\vec{r}). \end{array} \right. \quad (3.17)$$

Таким образом, система уравнений (3.17) для форм-функции на  $(i+1)$ -ом временном шаге сводится к решению неоднородной стационарной задачи.

При использовании 8-группового представления запаздывающих нейтронов их спектр и постоянная распада не зависят от делящегося нуклида, и тогда

$$\chi_{d,j}^{g,n} = \chi_{d,j}^g,$$

$$\lambda_j^n = \lambda_j.$$

Амплитудная функция – есть решение системы уравнений точечной кинетики:

$$\begin{cases} \frac{dT(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta_{eff}(t)}{\Lambda(t)} T(t) + \sum_j \lambda_j C_{j,eff}(t), \\ \frac{dC_{j,eff}(t)}{dt} = -\lambda_j C_{j,eff}(t) + \frac{\beta_{j,eff}(t)}{\Lambda(t)} T(t). \end{cases} \quad (3.18)$$

Параметры точечной кинетики определяются согласно теории возмущения первого порядка:

$$\Lambda(t) = \frac{1}{CND(t)} \left\langle \frac{1}{v} \Psi_0^+(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) \right\rangle,$$

$$\beta_{j,eff}(t) = \frac{1}{CND(t)} \left\langle \Psi_0^+(\vec{r}) \chi_{d,j} \sum_n a_j^n \sum_l v_d^{n,l} \Sigma_f^{n,l}(\vec{r}, t) \Psi^l(\vec{r}, t) \right\rangle,$$

$$\beta_{eff}(t) = \sum_j \beta_{j,eff}(t),$$

$$C_{j,eff}(t) = \frac{1}{\Lambda(t) CND(t)} \left\langle \Psi_0^+(\vec{r}) \chi_{d,j} \sum_n C_j^n(\vec{r}, t) \right\rangle,$$

$$CND(t) = \left\langle \Psi_0^+(\vec{r}) \left( \chi_p \left( 1 - \sum_j \beta_j \right) \sum_l v \Sigma_f^l(\vec{r}, t) \Psi^l(\vec{r}, t) + \sum_j \chi_{d,j} \sum_n a_j^n \sum_l v_d^{n,l} \Sigma_f^{n,l}(\vec{r}, t) \Psi^l(\vec{r}, t) \right) \right\rangle,$$

где  $\Lambda(t)$  – время генерации мгновенных нейтронов;  $\beta_{j,eff}(t)$  – эффективная доля запаздывающих нейтронов  $j$ -ой группы;  $C_{j,eff}(t)$  – эффективные концентрации предшественников запаздывающих нейтронов  $j$ -ой группы;  $CND(t)$  – ценность нейтронов деления; оператор  $\langle \cdot \rangle$  означает интегрирование по всему объему фазового пространства  $(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$ .

Для определения параметров точечной кинетики, приведенных выше, в качестве весовой функции принято использовать сопряженную функцию  $\psi_0^{+,g}(\vec{r}, \vec{\Omega})$ , соответствующую исходному критическому состоянию (хотя однозначного выбора весовой функции нет; например, если реактор в ходе нестационарного процесса проходит через последовательность критических состояний, то неясно, функцию ценности какого из этих состояний использовать в качестве весовой функции) :

$$\left\{ \begin{aligned} & \left[ -\vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_{t,0}^g(\vec{r}) \right] \psi_0^{+,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_l \int_{4\pi} \Sigma_{s,0}^{g \rightarrow l}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi_0^{+,l}(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + \\ & + \frac{1}{K_{eff}} \left( \left( 1 - \sum_j \beta_j \right) \nu \Sigma_{f,0}^g(\vec{r}) \sum_l \chi_l^p \Psi_0^{+,l}(\vec{r}) + \sum_j \sum_n a_j^n \nu_d^{n,g} \Sigma_{f,0}^g(\vec{r}) \sum_l \chi_{d,j}^l \Psi_0^{+,l}(\vec{r}) \right), \quad (3.19) \\ & \left. \psi_0^{+,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \right|_{\Gamma, (\vec{n} \cdot \vec{\Omega}) > 0} = 0. \end{aligned} \right.$$

Неявная схема для уравнений точечной кинетики имеет вид:

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{T_{i+1} - T_i}{\tau} = \frac{\rho_{i+1} - \beta_{eff,i+1}}{\Lambda_{i+1}} T_{i+1} + \sum_j \lambda_j C_{j,eff,i+1}, \\ & \frac{C_{j,eff,i+1} - C_{j,eff,i}}{\tau} = -\lambda_j C_{j,eff,i+1} + \frac{\beta_{j,eff,i+1}}{\Lambda_{i+1}} T_{i+1}. \end{aligned} \right. \quad (3.20)$$

Решение этой системы:

$$T_{i+1} = \left( \frac{1}{\tau} T_i + \sum_j \frac{\lambda_j C_{j,eff,i}}{1 + \lambda_j \tau} \right) / \left( \frac{1}{\tau} - \frac{\rho_{i+1} - \beta_{eff,i+1}}{\Lambda_{i+1}} - \frac{\tau}{\Lambda_{i+1}} \sum_j \frac{\lambda_j \beta_{j,eff,i+1}}{1 + \lambda_j \tau} \right), \quad (3.21)$$

$$C_{j,eff,i+1} = \frac{1}{1 + \lambda_j \tau} C_{j,eff,i} + \frac{\tau \beta_{j,eff,i+1}}{\Lambda_{i+1} (1 + \lambda_j \tau)}, \quad j = 1, \dots, 8.$$

Для определения реактивности  $\rho(t)$  на  $(i+1)$ -ом временном шаге используется представление

$$\rho_{i+1} = 1 - \frac{K_{eff,0}}{K_{eff,i+1}}, \quad (3.22)$$

где  $K_{eff,0}$  – собственное значение, соответствующее начальному критическому состоянию реактора,  $K_{eff,i+1}$  – собственное значение, соответствующее возмущенному состоянию и определяемое из условно-критической задачи:

$$\left\{ \begin{aligned} & \left[ \bar{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_{l,i+1}^g(\bar{r}) \right] \psi_{i+1}^g(\bar{r}, \bar{\Omega}) = \sum_l \int_{4\pi} \Sigma_{s,i+1}^{l \rightarrow g}(\bar{r}, \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}') \psi_{i+1}^l(\bar{r}, \bar{\Omega}') d\bar{\Omega}' + \\ & + \frac{1}{K_{eff}} \left( \chi_p^g \left( 1 - \sum_j \beta_j \right) \sum_l \nu \Sigma_{f,i+1}^l(\bar{r}) \Psi_{i+1}^l(\bar{r}) + \sum_j \chi_{d,j}^g \sum_n a_j^n \sum_l \nu_d^{n,l} \Sigma_{f,i+1}^{n,l}(\bar{r}) \Psi_{i+1}^l(\bar{r}) \right), \quad (3.23) \\ & \psi_{i+1}^g(\bar{r}, \bar{\Omega}) \Big|_{\Gamma, (\bar{n} \cdot \bar{\Omega}) < 0} = 0. \end{aligned} \right.$$

Решению нестационарной задачи предшествует расчет исходного стационарного состояния (решение прямой и сопряженной условно-критической задачи) для определения  $K_{eff,0}, \psi_0^g(\bar{r}, \bar{\Omega}), \Psi_0^+(\bar{r})$ . Далее для каждого  $(i+1)$ -ого временного шага сначала рассчитываются параметры точечной кинетики (для определения реактивности решается условно-критическая задача), решаются уравнения точечной кинетики (определяется  $T_{i+1}$ ), и затем решается задача с источником для определения  $\psi_{i+1}^g(\bar{r}, \bar{\Omega})$ . Кроме этого, в начале каждого временного шага (если требуется) пересчитываются нейтронные сечения в соответствии с условиями протекания нестационарного процесса.

### 3.3 Структура программы и особенности реализации

#### 3.3.1 Описание входных данных и расчетных модулей

Описание входных данных приведено в таблицах 3.2 и 3.3.

Таблица 3.2 – Входной файл config

Параметр	Тип	Описание
Task	Character	Произвольная строка символов с описанием решаемой задачи
Problem type	Character	Тип решаемой задачи (Keff forward – прямая однородная задача, Keff adjoint – сопряженная однородная задача, Fixed source – неоднородная задача)
Geometry type	Character	Тип геометрии (HEX-Z – трехмерная гексагональная геометрия, TETRA-Z – детальная геометрия)
X-sections file	Character	Путь к файлу с групповыми константами
Geometry file	Character	Путь к файлу с описанием геометрии

Продолжение таблицы 3.2

Параметр	Тип	Описание
Boundary condition	Character	Тип граничных условия (vacuum – вакуумные г.у., reflection – г.у. отражения)
Quadrature type	Character	Тип квадратурного набора (LQn – полностью симметричный квадратурный набор, PnTn – квадратуры Чебышева-Лежандра)
Sn order	Integer	Порядок $S_N$ приближения
Energy groups	Integer	Число энергетических нейтронных групп
Legendre moments	Integer	Порядок $P_M$ приближения
External accuracy	Real	Точность сходимости внешних итераций
Internal accuracy	Real	Точность сходимости внутренних итераций
External iterations	Integer	Максимальное число внешних итераций
Internal iterations	Integer	Максимальное число внутренних итераций
Read flux	Integer	Использование подготовленного файла со значениями плотности потока нейтронов в качестве начального приближения / рестарта (0 – нет, 1 – да)
Save flux	Integer	Запись значений плотности потока нейтронов (0 – нет, 1 – да)
Write flux	Integer	Сохранение данных расчета для постпроцессинга (в *.vtk формате)

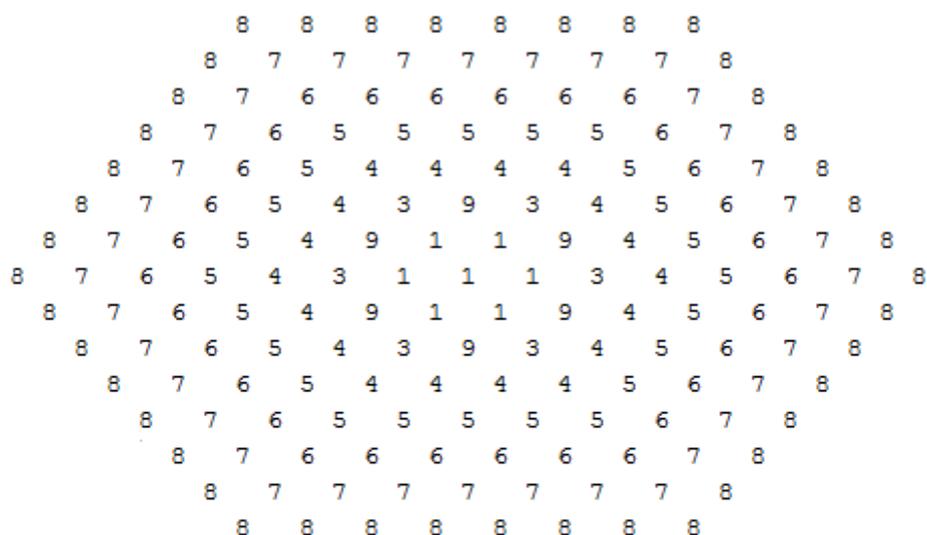
Таблица 3.3 – Входной файл с описанием геометрии

Параметр	Тип	Описание
Dx	Real	Размер “под ключ”
Nrows	Integer	Число рядов в картограмме
Ncells	Integer	Количество твс в каждом ряду картограммы
Shift	Integer	Смещение первой твс каждого ряда относительно первого ряда
Ntvs	Integer	Количество типов твс
Nmat	Integer	Количество типов материалов

Пример описания картограммы и сборок во входном файле представлен на рисунке

### 3.13. Формат описания сборок:

- первая строка – номер типа твс
- вторая строка – количество высотных слоев
- третья строка – массив с номерами типов материалов
- четвертая строка – массив с высотным разбиением



```
1
38
1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 2 2 4 4 4 4 4 4 4 4 4 4 2
0. 5. 10. 15. 20. 25. 30. 35. 40. 45. 50. 55. 60. 65. 70. 75.
```

Рисунок 3.13 – Пример описания картограммы и сборок во входном файле

Основными модулями расчетного кода CORNER являются:

- модуль конвертации многогрупповых макроконстант в формате ANISN во внутренний формат кода;
- геометрический модуль, содержащий описание картограммы а.з. и типов сборок с высотным разбиением и материальным составом;
- модуль подготовки квадратурных наборов;
- модуль обработки входных данных, содержащий параметры используемых приближений и управляющие параметры;

- диффузионный модуль для получения решения, которое будет использоваться в качестве начального приближения;
- модули нейтронно-физического расчета на основе  $S_N$  приближения;
- модуль подготовки \*.vtk файла для постпроцессинговой обработки и формирования выходного файла.

Функциональная схема работы кода CORNER представлена на рисунке 3.14.

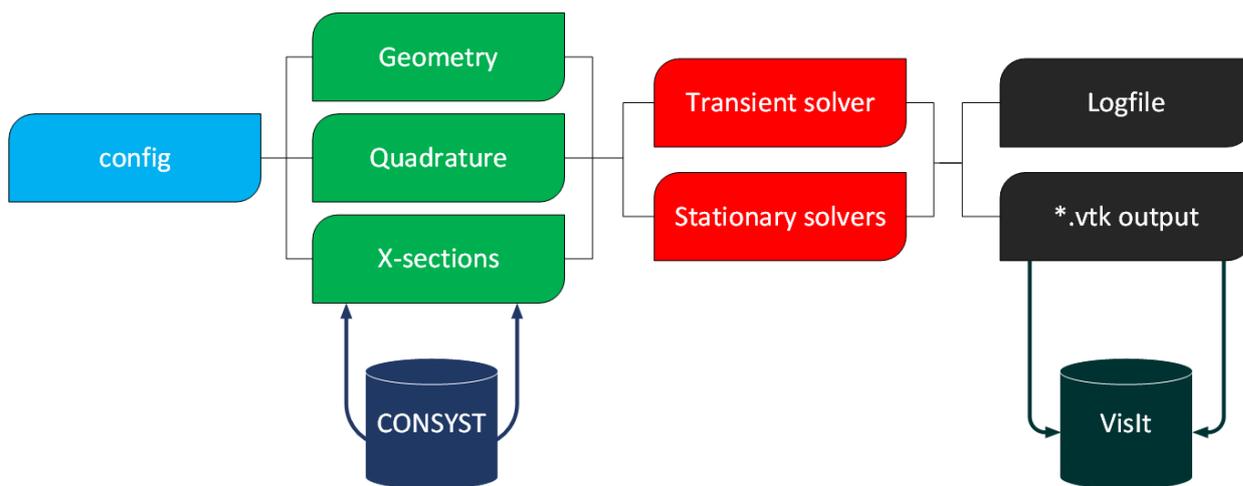


Рисунок 3.14 – Функциональная схема работы расчетного кода CORNER

Описание модулей приведено в таблице 3.4.

Таблица 3.4 – Описание модулей

Модуль	Описание
Config	Определение расположения входных данных, чтение входных параметров, проверка на корректность ввода
Geometry	Чтение данных из файла с описанием геометрии расчетной области: размер «под ключ», картограмма, типы сборок с высотным разбиением и материальным составом, описание вложенной сетки (при наличии таковой), проверка на корректность, формирование общего высотного разбиения при необходимости, определение соседей для каждой ячейки, нумерация ячеек в плоскости для всех случаев освещенности ячеек.
Groupconst	Чтение многогрупповых макроконстант из входного файла в формате ANISN
Quadsets	Модуль содержит процедуры создания квадратурных наборов двух типов: $LQ_N$ и $P_N-T_N$ , возможно добавление других квадратурных наборов, например, задаваемых пользователем из внешнего файла

Продолжение таблицы 3.4

Модуль	Описание
Diffusion	Модуль содержит решатели на основе диффузионного приближения, используемые в качестве получения начального приближения для основного расчета
Keff_adjoint	Модуль содержит процедуры решения сопряженной однородной задачи с использованием алмазной схемы с нулевой коррекцией и нодальной схемы в HEX-Z и детальной геометрии
Keff_forward	Модуль содержит процедуры решения прямой однородной задачи с использованием алмазной схемы с нулевой коррекцией и нодальной схемы в HEX-Z и детальной геометрии
Fixed_source	Модуль содержит процедуры решения неоднородной задачи с заданным источником
Beff	Расчет параметров точечной кинетики: эффективной доли запаздывающих нейтронов и времени жизни мгновенных нейтронов
Heterconst	Подготовка гетерогенных макроконстант для расчетов критических сборок
Iteration_process	Описание производного типа данных IterType для работы с итерационными процессами
Legendre	Расчет сферических функций, записанных в действительной форме и использующие в $P_m$ приближении сечения рассеяния (максимум до пятого порядка)
Main	Управляющая часть кода, вызов других процедур для проведения расчета
Logs	Набор процедур для записи данных о расчете («шапка» для консольного варианта, создание и запись лог-файла, сохранение значений скалярного потока нейтронов для дальнейшего использования в качестве начального приближения)
Nkdata	Модуль содержит табличные данные по запаздывающим нейтронам
Numerate	Модуль содержит процедуру нумерации расчетных ячеек в картограмме и процедуру нумерации граней ячейки в зависимости от углового направления
Variables	Модуль с объявлением глобальных переменных расчетного кода
Vtk	Создание файла для постпроцессинга в формате *.vtk

### 3.3.2 Реализация методики параллельных вычислений

С целью сокращения расчетного времени разработана параллельная версия расчетного кода CORNER. Для этого была использована технология OpenMP [55].

Распараллеливание проводилось по угловым направлениям. Идея такого подхода заключается в том, что на текущей внутренней итерации, т.е. для фиксированной энергетической группы, решение для выбранного углового направления не зависит от других дискретных направлений.

Проведены исследования зависимости времени расчет от порядка угловой квадратуры на примере модели, описание которой приводится в подразделе 4.1. Расчет проведен на персональном компьютере со следующими характеристиками: Intel Core i7 CPU 950 @ 3.07 GHz 3.97 GHz, 6 GB RAM.

Для оценки эффективности распараллеливания применяется следующий критерий:

$$S_p = T_1 / T_p,$$

где  $S_p$  – ускорение,  $T_p$  – время исполнения распараллеленной программы на  $p$  вычислительных ядрах,  $T_1$  – время исполнения исходной программы.

Зависимость времени расчета от порядка угловой квадратуры представлена в таблице 3.5.

Таблица 3.5 – Зависимость времени расчета от порядка угловой квадратуры

Порядок угловой квадратуры	$K_{eff}$	Время расчета, с	
		Непараллельная версия	Параллельная версия
4	0.88021	98	38
6	0.88046	195	74
8	0.88050	322	127
10	0.88054	497	189
12	0.88055	683	262
14	0.88056	968	364
16	0.88056	1233	463

Как видно из таблицы 3.4 в среднем ускорение при распараллеливании на 8 вычислительных ядрах достигает  $\sim 2.6$  раз. Для повышения эффективности распараллеливания требуется использовать другие технологии (MPI) и другой подход (распараллеливания по подобластям).

### 3.3.3 Постпроцессинг

По завершению расчета в директории Logs будет сформирован файл, содержащий информацию о расчетной модели и процесса расчета. В директории Output будет создан файл \*.vtk, в котором будет записана данные пространственной расчетной сетки и пространственно-энергетическое распределение плотности потока нейтронов.

В качестве постпроцессора на данном этапе развития расчетного кода CORNER используется открытое программное обеспечение VisIt [62], предназначенное для анализа и обработки научных данных. Пример визуализации пространственного распределения плотности потока нейтронов приведен на рисунке 3.15.

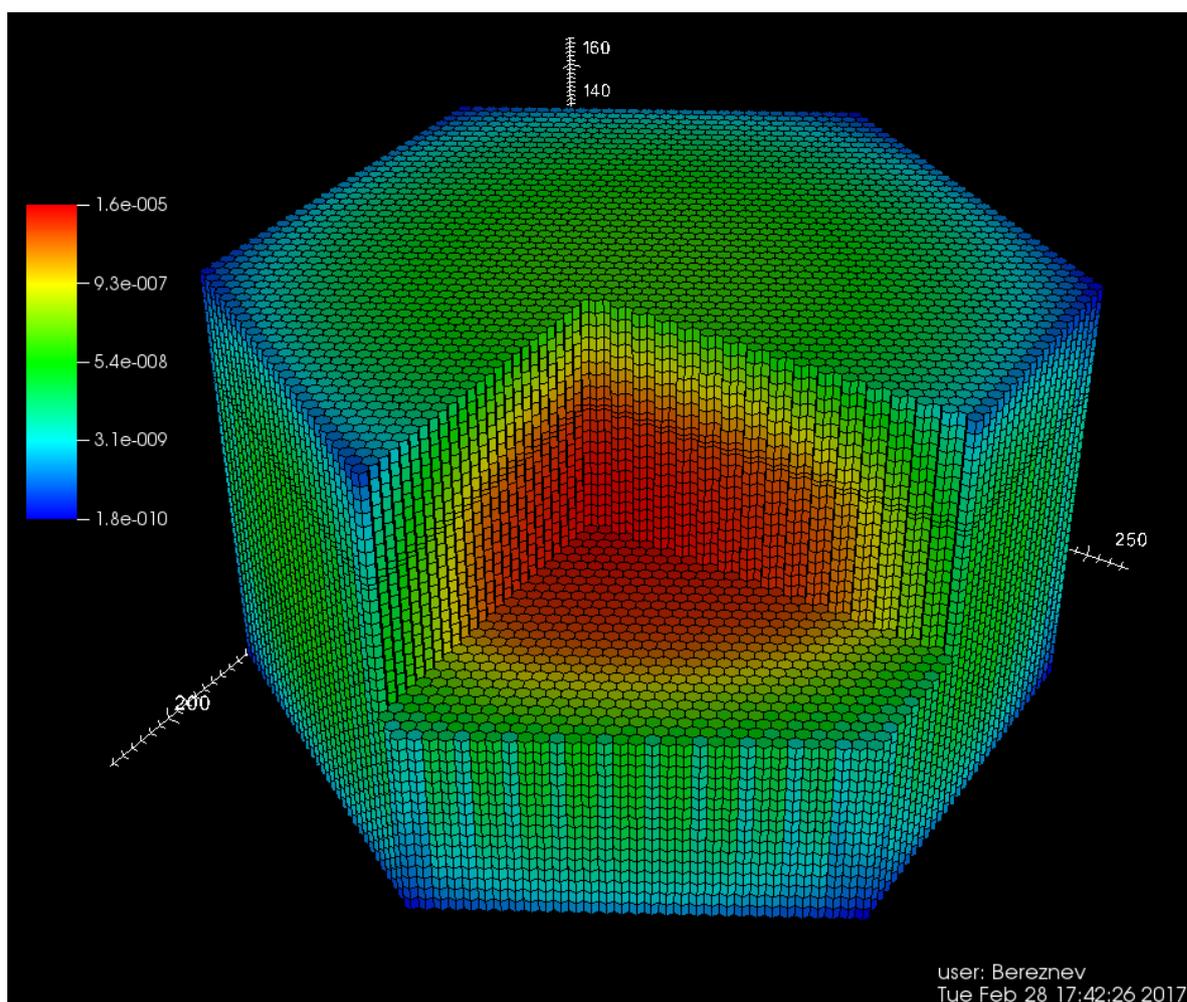


Рисунок 3.15 – Пространственное распределение плотности потока нейтронов

### 3.4 Выводы по главе 3

При решении нейтронно-физических задач с грубой пространственной сеткой, какими, в частности, являются покассетные расчеты РУ БР (например, БН-800 и БН-1200), проблема пространственной аппроксимации в  $S_N$  приближении становится весьма актуальной. В таком случае одно из возможных решений – увеличение числа расчетных точек. В случае X-Y-Z геометрии эта идея является тривиальной, поскольку разностная схема не изменяется при разбиении крупной прямоугольной ячейки на более мелкие.

Использование гексагональной геометрии при моделировании активной зоны РУ БР не всегда обеспечивает приемлемую точность расчетов по причине существенно гетерогенной структуры таких моделей.

Примером может служить модель реактора БРЕСТ-ОД-300, у которой в каждой ТВС в центральной части содержится шестигранная стальная труба, для рабочих ТВС занимая места 7 центральных твэлов, а для каналов со стержнями СУЗ, где размещена сборка пэлов, - места 37 ячеек. Такая модель существенно отличается от моделей реакторов типа БН, в которых все стержни СУЗ занимают конструктивно весь шестигранный канал.

Для учета гетерогенной структуры необходимо делать или корректную гомогенизацию, или проводить расчеты гетерогенной ячейки.

За счет введения вложенных сеток или, другими словами, использования детальной геометрии снимается проблема необходимости проведения корректной гомогенизации. Снимается проблема использования конечно-разностных схем первого порядка точности за счет вложенных сеток из параллелепипедов.

## 4 Апробация расчетного кода, проведение верификационных и кросс-верификационных расчетов

### 4.1 NEACRP 3-D Neutron Transport Benchmark Model 4

Бенчмарк-модель быстрого реактора малых размеров KNK-II предложена I. Broeders и E. Kiefhaber из Научно-исследовательского центра Карлсруэ, Германия, и описана в отчете [56].

Расчетная модель состоит из 169 гексагональных сборок, размер «под ключ» которых равен 12.99 см. Исходное аксиальное разбиение с равномерным шагом в 5 см

представлено 38 высотными слоями, тем самым определяя высоту всей расчетной модели в 190 см. Высота а.з. составляет 60 см. В расчетной модели присутствуют 6 каналов со стержнями СУЗ.

Картограмма загрузки представлена на рисунке 4.1, высотное разбиение и положение стержней СУЗ – на рисунке 4.2.

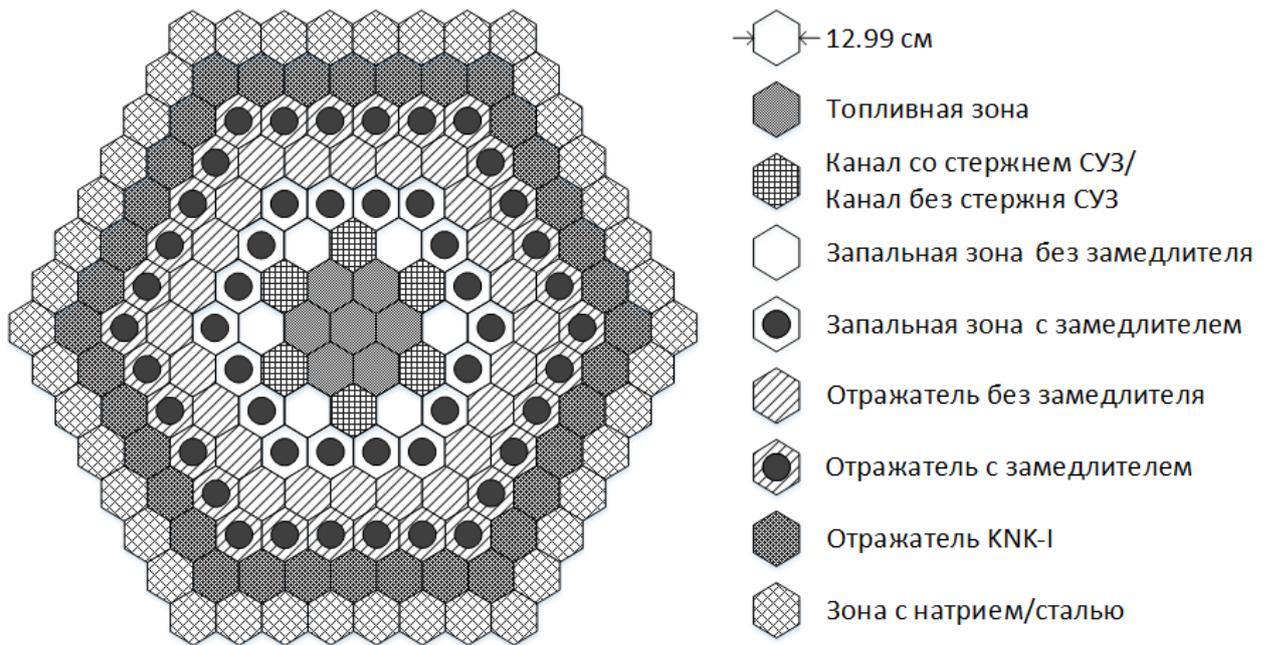


Рисунок 4.1 – Картограмма загрузки

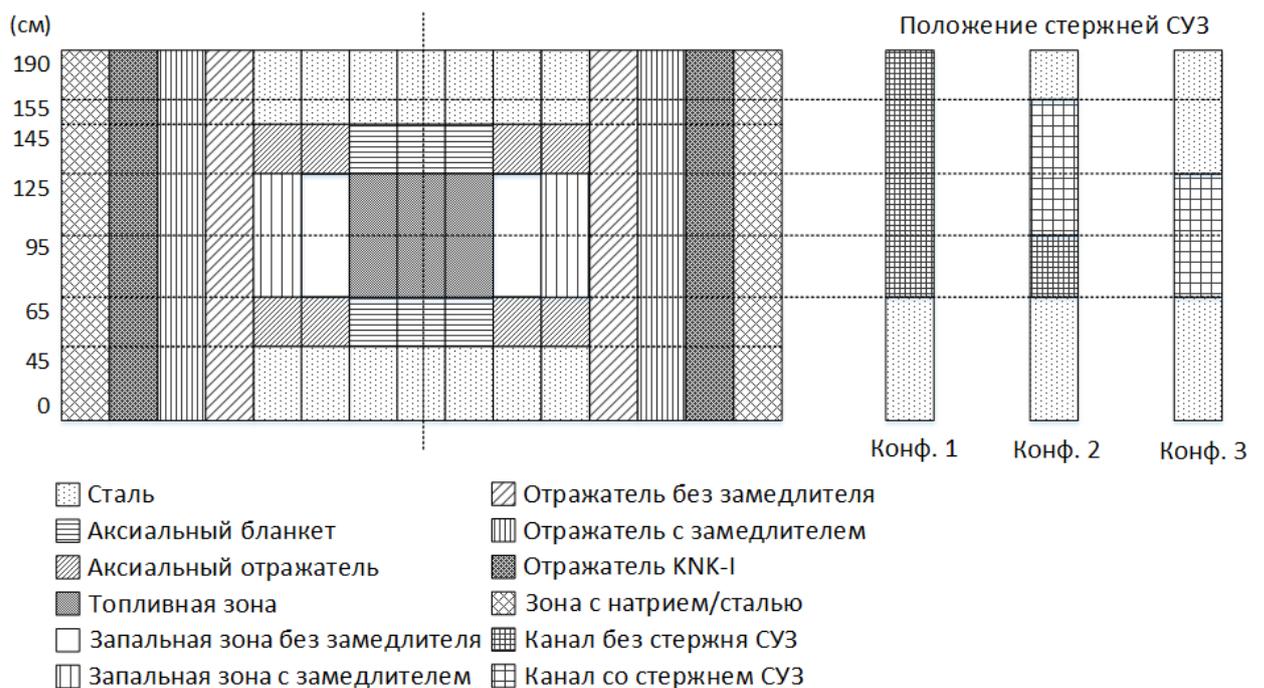


Рисунок 4.2 – Высотное разбиение и положение стержней СУЗ

В зависимости от положения стержней СУЗ рассматриваются 3 конфигурации бенчмарк-модели:

- стержни полностью выведены из а.з. (конфигурация 1);
- стержни наполовину введены в а.з. (конфигурация 2);
- стержни полностью введены в а.з. (конфигурация 3).

Для каждой конфигурации рассчитываются следующие нейтронно-физические характеристики:

- эффективный коэффициент размножения нейтронов;
- эффективность стержней СУЗ;
- усредненные по физическим зонам средние плотности потока нейтронов;

путем решения условно-критической задачи.

Энергетическая зависимость представлена 4-групповым приближением, соответствующие макроскопические сечение приведены в таблице 4.1 и 4.2.

Таблица 4.1 – 4-групповые макросечения

Тип сборки	Номер группы	$\Sigma_t$	$\nu\Sigma_f$
Сталь	1	9.83638E-02	0
	2	1.35140E-01	0
	3	2.24749E-01	0
	4	2.83117E-01	0
Аксиальный бланкет	1	1.40462E-01	2.96101E-03
	2	2.25534E-01	6.56171E-05
	3	3.27065E-01	1.14630E-04
	4	3.41224E-01	4.93483E-04
Аксиальный отражатель	1	1.32933E-01	0
	2	1.78531E-01	0
	3	2.83151E-01	0
	4	4.62167E-01	0
Топливная зона	1	1.24526E-01	1.79043E-02
	2	2.01025E-01	1.59961E-02
	3	2.86599E-01	2.40856E-02
	4	3.68772E-01	7.33104E-02

Продолжение таблицы 4.1

Тип сборки	Номер группы	$\Sigma_t$	$v\Sigma_f$
Запальная зона без замедлителя	1	1.40226E-01	1.59878E-02
	2	2.28245E-01	1.64446E-02
	3	3.25806E-01	2.71451E-02
	4	4.18327E-01	8.45807E-02
Запальная зона с замедлителем	1	1.41428E-01	1.01663E-02
	2	2.45394E-01	9.46359E-03
	3	3.98255E-01	1.87325E-02
	4	4.35990E-01	8.25335E-02
Отражатель без замедлителя	1	1.59346E-01	0
	2	2.16355E-01	0
	3	3.48692E-01	0
	4	6.24249E-01	0
Отражатель с замедлителем	1	1.39164E-01	0
	2	2.46993E-01	0
	3	4.52425E-01	0
	4	5.36256E-01	0
КНК-I отражатель	1	1.51644E-01	0
	2	1.42382E-01	0
	3	1.65132E-01	0
	4	8.04845E-01	0
Зона с натрием / сталью	1	9.65097E-02	0
	2	9.87095E-02	0
	3	1.34200E-01	0
	4	4.12670E-01	0
Канал без стержня СУЗ	1	7.27587E-02	0
	2	1.00218E-01	0
	3	1.60703E-01	0
	4	1.51576E-01	0
Канал со стержнем СУЗ	1	1.39085E-01	0
	2	2.28152E-01	0
	3	3.18806E-01	0
	4	6.27366E-01	0

Таблица 4.2 – Матрица сечения рассеяния

Тип сборки	Номер группы	$\Sigma_s^{1 \rightarrow g}$	$\Sigma_s^{2 \rightarrow g}$	$\Sigma_s^{3 \rightarrow g}$	$\Sigma_s^{4 \rightarrow g}$
Сталь	1	9.06050E-02	0	0	0
	2	7.42377E-03	1.30581E-01	0	0
	3	1.18163E-04	4.35250E-03	2.19547E-01	0
	4	1.18163E-04	3.41675E-07	4.64594E-03	2.80707E-01
Аксиальный бланкет	1	1.23805E-01	0	0	0
	2	1.45483E-02	2.17260E-01	0	0
	3	1.70276E-04	6.78885E-03	3.17948E-01	0
	4	9.37083E-07	6.04793E-06	4.38782E-03	3.31281E-01
Аксиальный отражатель	1	1.22995E-01	0	0	0
	2	9.41231E-03	1.73095E-01	0	0
	3	1.93791E-04	5.09881E-03	2.77194E-01	0
	4	1.39307E-06	7.05075E-07	5.09601E-03	4.58598E-01
Топливная зона	1	1.05964E-01	0	0	0
	2	1.12738E-02	1.89370E-01	0	0
	3	1.46192E-04	3.64847E-03	2.70207E-01	0
	4	9.62178E-07	1.06888E-06	1.80479E-03	3.18960E-01
Запальная зона без замедлителя	1	1.19887E-01	0	0	0
	2	1.30790E-02	2.15213E-01	0	0
	3	1.59938E-04	4.00117E-03	3.06885E-01	0
	4	1.07166E-06	1.82716E-06	1.67341E-03	3.60906E-01
Запальная зона с замедлителем	1	1.14337E-01	0	0	0
	2	2.09664E-02	2.12006E-01	0	0
	3	1.39132E-03	2.67269E-02	3.52093E-01	0
	4	6.10281E-05	1.08186E-03	3.29030E-02	3.70872E-01
Отражатель без замедлителя	1	1.47969E-01	0	0	0
	2	1.06607E-02	2.10410E-01	0	0
	3	2.49956E-04	5.46711E-03	3.42085E-01	0
	4	1.82565E-06	1.00157E-06	5.36879E-03	6.19306E-01
Отражатель с замедлителем	1	1.05911E-01	0	0	0
	2	2.96485E-02	1.84820E-01	0	0
	3	3.06502E-03	5.91780E-02	3.73072E-01	0
	4	1.41697E-04	2.69229E-03	7.81326E-02	5.12103E-01

Продолжение таблицы 4.2

Тип сборки	Номер группы	$\Sigma_s^{1 \rightarrow g}$	$\Sigma_s^{2 \rightarrow g}$	$\Sigma_s^{3 \rightarrow g}$	$\Sigma_s^{4 \rightarrow g}$
КНК-I отражатель	1	1.38427E-01	0	0	0
	2	1.23901E-02	1.37502E-01	0	0
	3	3.66930E-04	4.41927E-03	1.60722E-01	0
	4	1.69036E-06	1.63280E-06	3.33075E-03	7.98932E-01
Зона с натрием / сталью	1	8.83550E-02	0	0	0
	2	7.73409E-03	9.52493E-02	0	0
	3	1.94719E-04	3.22568E-03	1.30756E-01	0
	4	8.89615E-07	7.98494E-07	2.90481E-03	4.09632E-01
Канал без стержня СУЗ	1	6.63634E-02	0	0	0
	2	6.23393E-03	9.61236E-02	0	0
	3	7.02121E-05	4.01375E-03	1.56016E-01	0
	4	4.16388E-07	1.26939E-07	4.49111E-03	1.50368E-01
Канал со стержнем СУЗ	1	1.17722E-01	0	0	0
	2	1.26066E-02	1.94699E-01	0	0
	3	1.33314E-04	4.32219E-03	2.44352E-01	0
	4	1.08839E-06	1.85491E-07	3.68781E-04	3.14816E-01

В расчетах, согласно описанию бенчмарка, используются следующие критерии сходимости итерационных процессов:

- для плотности потока нейтронов  $\Phi$  :

$$\frac{\Delta\Phi}{\Phi} < 5 \cdot 10^{-4},$$

- для  $K_{eff}$  :

$$\frac{\Delta K_{eff}}{K_{eff}} < 5 \cdot 10^{-5}.$$

Нормировка для значения плотности потока нейтронов:

$$\sum_g \int_V \nu \Sigma_f^g(\vec{r}) \Phi^g(\vec{r}) dV = 1.$$

Анизотропия рассеяния учитывается за счет использования транспортного сечения  $\Sigma_{tr}$  вместо полного сечения взаимодействия  $\Sigma_t$ .

Расчет по коду CORNER проводился в  $S_4$  приближении с использованием нодальной транспортной методики. Отличительной особенностью в ней является возможность учета пространственной зависимости плотности потока нейтронов внутри расчетной ячейки (нода) до 2-го порядка. Кроме того, на гранях реализован алгоритм [52], позволяющий учитывать радиальную утечку нейтронов также со 2-ым порядком. Выбор нодального метода обусловлен необходимостью учета пространственной гетерогенности на грубой расчетной сетке. В качестве реперных выбраны расчеты по методу Монте-Карло, представленные в отчете [42].

Результаты расчета  $K_{eff}$  и эффективности стержней СУЗ представлены в таблице 4.3 (в скобках указано относительное отклонение от реперных значений).

Таблица 4.3 – Результаты расчета  $K_{eff}$  и эффективности стержней СУЗ

$K_{eff}$ (конфигурация 1)	$K_{eff}$ (конфигурация 2)	$K_{eff}$ (конфигурация 3)	Эффективность стержней СУЗ, % $\Delta k/k'$
1.0951 (-0.04%)	0.9833 (-0.01%)	0.8802 (0.03%)	22.29 (-0.06%)

Результаты расчетов показывают хорошее согласие с реперным решением.

В таблицах 4.4 – 4.6 приведены усредненные значения плотности потока нейтронов для каждой энергетической группы для всех конфигураций, усреднение проводилось в пределах выбранной физической зоны (в скобках указано относительное отклонение от реперных значений).

Таблица 4.4 – Усредненная плотность потока нейтронов (конфигурация 1)

Энергетическая группа	Топливная зона	Аксиальный бланкет	Запальная зона с замедлителем	Канал натрием
1	1.3469E-04 (-0.22%)	3.5337E-05 (0.27%)	6.5349E-05 (3.08%)	5.2755E-05 (0.49%)
2	1.0883E-04 (0.25%)	4.9553E-05 (-0.50%)	5.0163E-05 (0.34%)	5.0792E-05 (0.25%)
3	3.0799E-05 (0.09%)	2.5952E-05 (-0.96%)	2.8293E-05 (0.28%)	2.2472E-05 (-0.73%)
4	3.8298E-06 (-1.16%)	1.1887E-05 (-6.76%)	1.4483E-05 (8.20%)	1.0224E-05 (-1.37%)

Таблица 4.5 – Усредненная плотность потока нейтронов (конфигурация 2)

Энергетическая группа	Топливная зона	Аксиальный бланкет	Запальная зона с замедлителем	Канал с натрием	Стержень СУЗ
1	1.4899E-04 (1.39%)	3.7185E-05 (0.17%)	7.0380E-05 (0.13%)	1.1925E-04 (0.50%)	4.4832E-05 (1.08%)
2	1.1282E-04 (0.28%)	4.8576E-05 (-0.37%)	5.1339E-05 (-0.02%)	1.0036E-04 (0.05%)	3.6084E-05 (0.87%)
3	2.6345E-05 (-0.81%)	2.2303E-05 (-0.22%)	2.7752E-05 (0.12%)	3.6945E-05 (-0.14%)	7.7543E-06 (-0.45%)
4	2.4160E-06 (-1.46%)	8.5588E-06 (-1.25%)	1.3915E-05 (-0.27%)	1.0805E-05 (-2.45%)	6.0812E-07 (26.32%)

Таблица 4.6 – Усредненная плотность потока нейтронов (конфигурация 3)

Энергетическая группа	Топливная зона	Аксиальный бланкет	Запальная зона с замедлителем	Стержень СУЗ
1	1.6613E-04 (10.88%)	4.0836E-05 (0.43%)	7.5016E-05 (0.03%)	9.5996E-05 (0.55%)
2	1.1754E-04 (0.66%)	5.2208E-05 (0.73%)	5.1951E-05 (0.09%)	6.9687E-05 (0.54%)
3	2.1765E-05 (-0.27%)	2.3688E-05 (0.24%)	2.6978E-05 (0.07%)	1.3444E-05 0%(0.05%)
4	1.1424E-06 (-2.05%)	9.7493E-06 (-1.02%)	1.3346E-05 (-0.34%)	9.5198E-07 (-0.07%)

Из представленных результатов следует, что расчеты по коду CORNER хорошо согласуются с реперными в пределах 1%, исключение составляют значения плотности потока нейтронов в тепловой области, в которых отклонение составляет до 8% (для стержней СУЗ в конфигурации 2 – 26%). Для уменьшения погрешности в этих случаях требуется увеличить точность сходимости итерационных процессов и порядок  $S_N$  метода. Отклонение 10% в а.з. для конфигурации 3 предположительно объясняется некорректным реперным значением, о чем свидетельствуют результаты аналогичных расчетов, приведенные в отчете [42].

## 4.2 JOYO-LMFR-RESR-001 benchmark

JOYO – первый японской экспериментальный реактор на быстрых нейтронах с натриевым теплоносителем. Его строительство началось в 1970 году, а физпуск состоялся 24 апреля 1977 года.

Активная зона содержит смешанное уран-плутониевое оксидное топливо (MOX). Обогащение по плутонию составляет около 18%, обогащение по урану – 23%. Высота топливного столба 60 см. Сверху и снизу расположены бланкеты из обедненного диоксида урана высотой по 40 см. Активную зону окружает радиальный бланкет, выполненный также из обедненного диоксида урана, высотой 140 см. Обогащение бланкетов составляет 0.2%. Активная зона включает в себя 6 стержней СУЗ – 2 регулирующих стержня и 4 стержня аварийной защиты. На периферии активной зоны расположена сборка с источником нейтронов (Sb-Be).

На начальной загрузке реактора (МК-I) была проведена серия экспериментов, детальное описание и анализ результатов которых [57] позволяют отнести их к категории «benchmark» (LMFR-001).

Верификация нейтронно-физического кода CORNER проводилась на гомогенной модели реактора JOYO-МК-I, в которой все сборки моделировались прямыми призмами с гексагональным основанием. Отличие от гетерогенной модели изображено на рисунке 4.3.

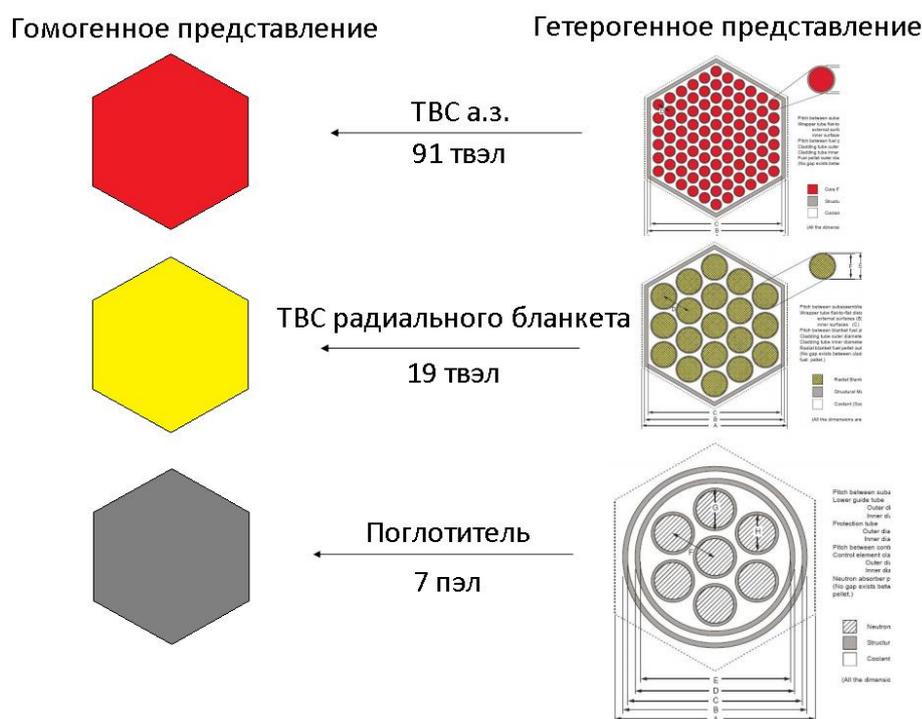


Рисунок 4.3 – Гомогенное и гетерогенное представление

Для верификации выбраны эксперименты по определению критичности, эффективности стержней СУЗ и изотермического температурного коэффициента реактивности.

Исследованы две критические конфигурации активной зоны. Обеим конфигурациям соответствует температура 250°C.

Первая конфигурация описывает активную зону, состоящую из 64 ТВС, в которой все стержни СУЗ выведены на верхние концевики (700 мм для РС и 910 мм для АЗ). Картограмма активной зоны в плане представлена на рисунке 4.4.

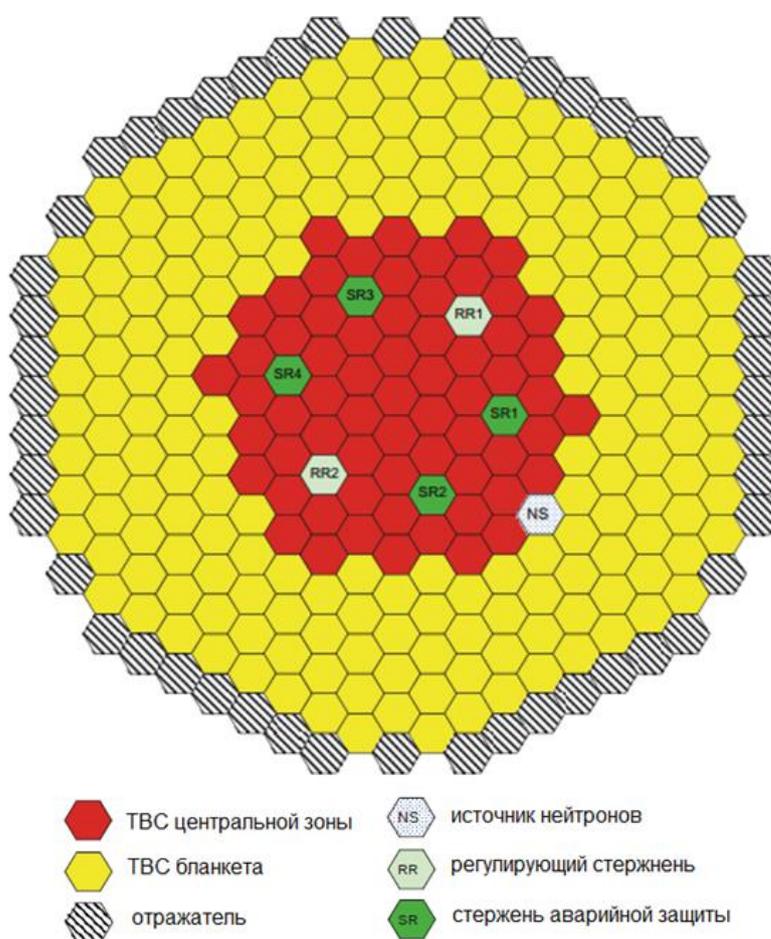


Рисунок 4.4 – Картограмма активной зоны реактора JOYO-MK-I с 64 ТВС

Вторая конфигурация описывает активную зону, состоящую из 70 ТВС, в которой два регулирующих стержня занимают промежуточное положение (RR1 – 350 мм, RR2 – 317 мм). Все стержни АЗ выведены на верхний концевик. Картограмма активной зоны с 70 ТВС в плане представлена на рисунке 4.5.

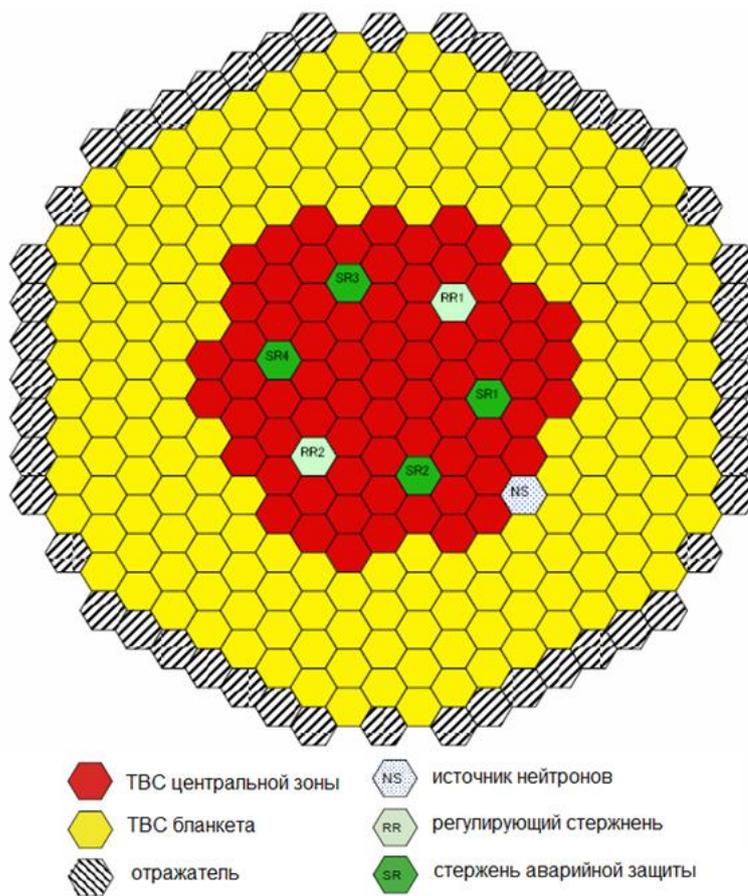


Рисунок 4.5 – Картограмма загрузки реактора JOYO-MK-I с 70 ТВС

Аксиальное расположение элементов активной зоны в зависимости от температуры, а также положение стержней СУЗ и их размеры приведены на рисунке 4.6.

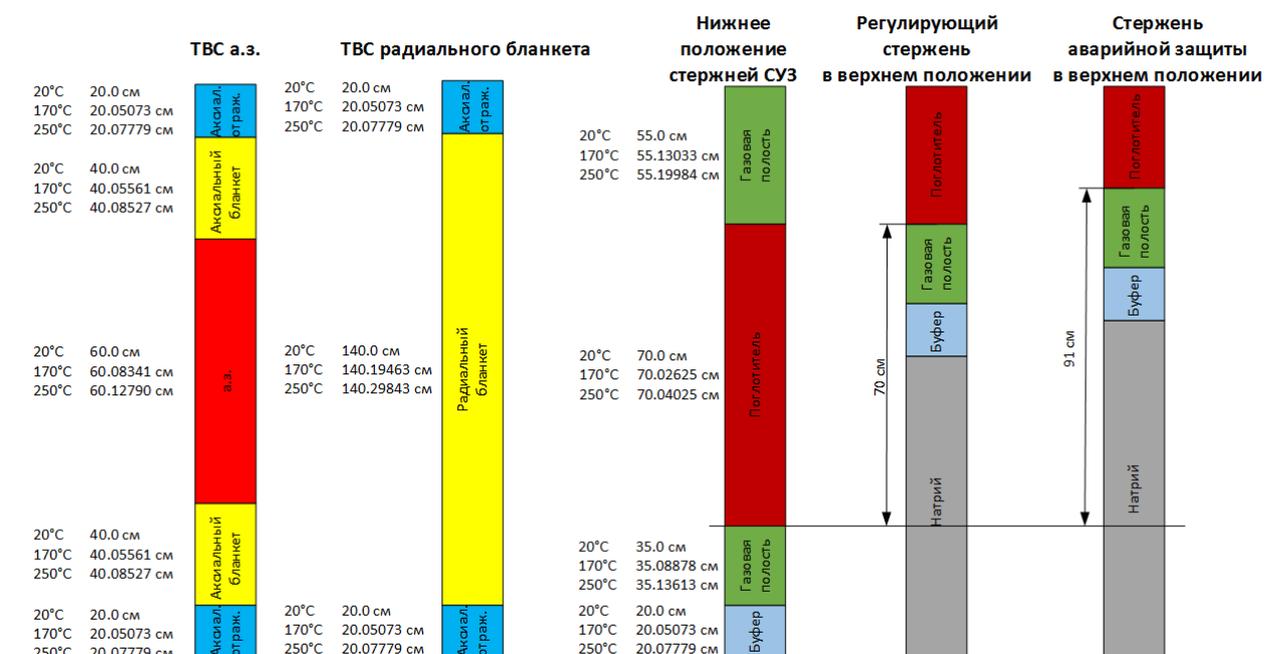


Рисунок 4.6 – Аксиальное расположение элементов активной зоны



Как видно из таблицы 4.8, отклонение расчета по CORNER находится в пределах погрешностей, заявленных в бенчмарке.

При проведении расчетов по определению эффективности СУЗ использовалась детальная геометрия, для сборок со стержнями СУЗ вложенная сетка изображена на рисунке 4.7.

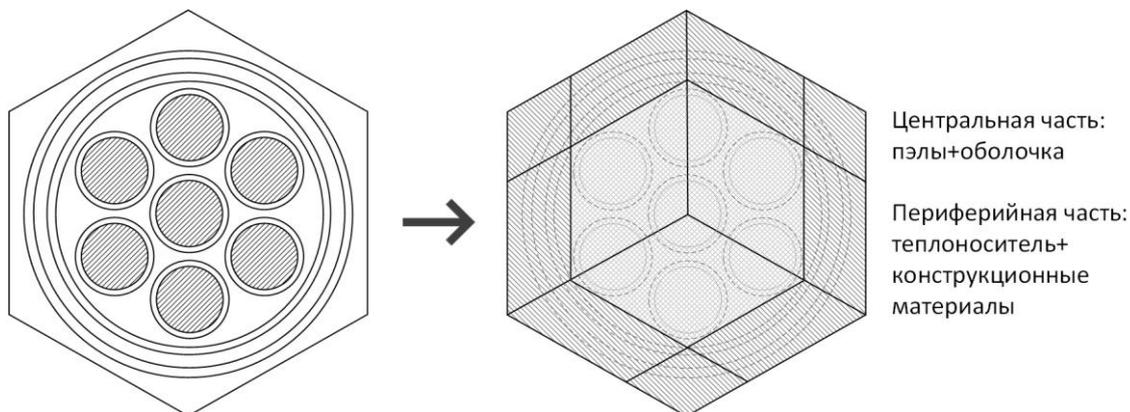


Рисунок 4.7 – Вложенная сетка для сборок с поглотителем

Картограмма для расчётов эффективности стержней СУЗ приведена на рисунке 4.8.

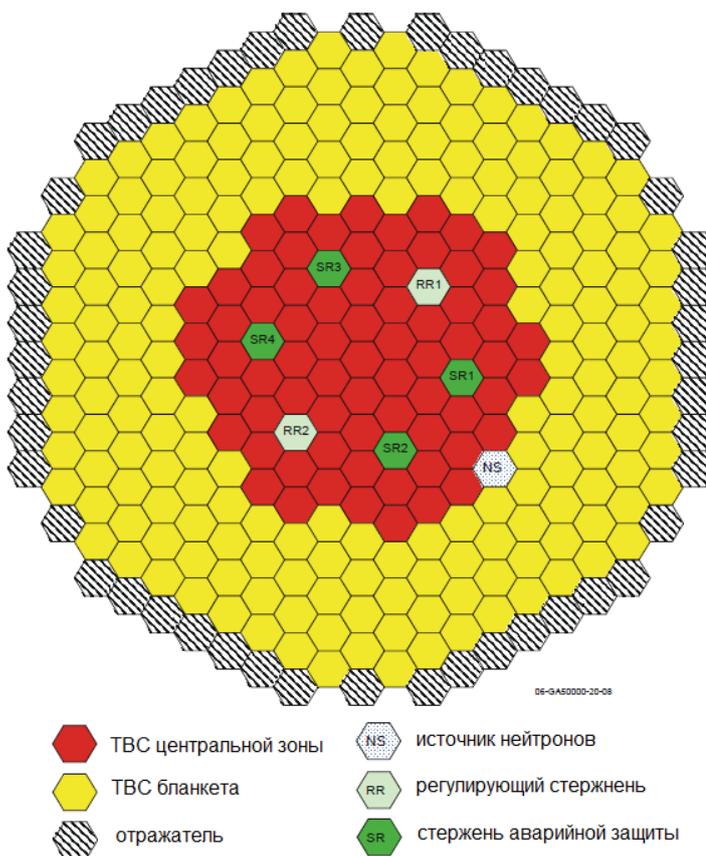


Рисунок 4.8 – Картограмма для расчётов эффективности контролируемых стержней

Формула для расчёта эффективности стержней, выглядит следующим образом:

$$CRW = \frac{K_{eff1} - K_{eff2}}{K_{eff1} \cdot K_{eff2}} \cdot \frac{100}{\beta_{эф}}, \%$$

где  $K_{eff1}$  – эффективный коэффициент размножения нейтронов, соответствующий состоянию, в котором полностью выведены все стержни СУЗ,  $K_{eff2}$  – эффективный коэффициент размножения нейтронов, соответствующий состоянию, в котором полностью введен нужный стержень.

В таблице 4.9 приведены результаты расчётов эффективности стержней.

Таблица 4.9 – Результаты расчетов эффективности стержней СУЗ

Стержень СУЗ	CORNER, ‰	Бенчмарк, ‰	Отклонение, %
SR 1	393	399.4	-1.56%
SR 2	400	403	-0.69%
SR 3	387	390.2	-0.84%
SR 4	393	395.2	-0.51%
RR 1	384	381.8	0.47%
RR 2	378	379.4	-0.48%

### 4.3 БФС-56 и БФС-58-1

Критические сборки БФС-56 и БФС-58-1 моделируют реактор типа БН.

Активная зона сборки БФС-56 представлена МОХ топливом, а активная зона сборки БФС-58-1 помимо центральной зоны малого обогащения (ЗМО) из МОХ топлива включает две периферийные зоны, среднего ЗСО и большого ЗБО обогащения, имеющие урановую загрузку. Над активной зоной расположена натриевая полость, выше которой находится борная защита, а над ней – натрий. Под активной зоной расположен бланкет из двуокиси обедненного урана.

Сборки собираются в стальных трубах диаметром 5.0 см, расположенных в гексагональной решетке с шагом 5.1 см, в которые укладываются таблетки различных материалов (топливные таблетки, таблетки, имитирующие теплоноситель и конструкционные материалы). Картограмма исходного состояния сборок БФС-56 и БФС-58-1 приведена на рисунках 4.9 и 4.10 соответственно.

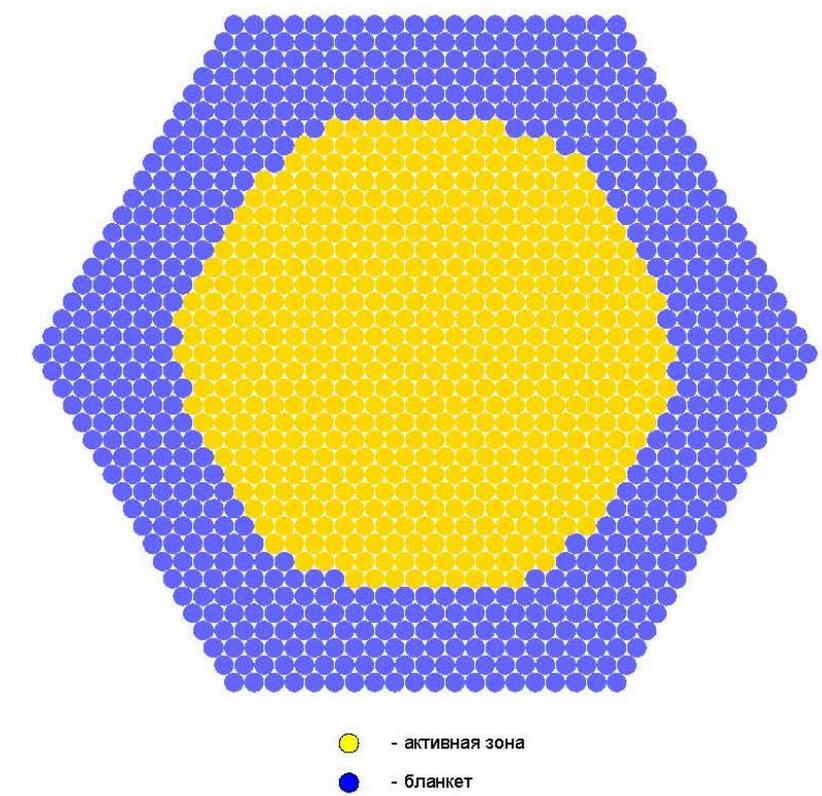


Рисунок 4.9 – Картограмма исходного состояния сборки БФС-56

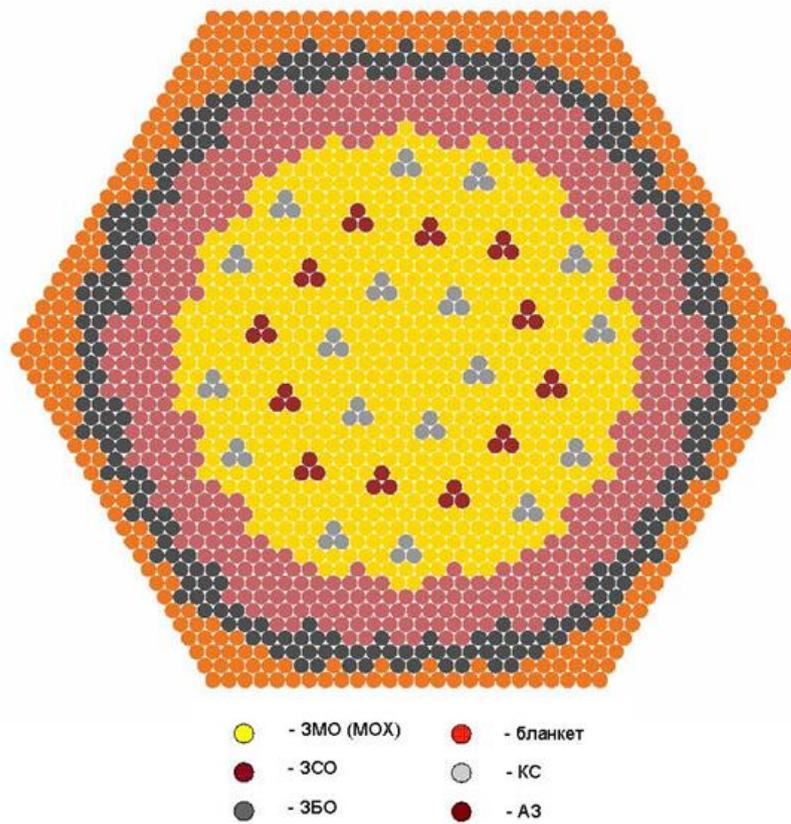


Рисунок 4.10 – Картограмма сборки исходного состояния сборки БФС-58-1

Активные зоны критических сборок БФС содержат ячейки с выраженной плоскопараллельной структурой. Структура топливных ячеек, входящих в состав сборок БФС-56 и БФС-58-1, представлена на рисунках 4.11 и 4.12 соответственно.

В рамках расчетного кода CORNER возможен учет гетерогенности топливных ячеек в аксиальном направлении аналогично алгоритму, реализованному в коде ГЕФЕСТ800 [28]. Для этого решается вспомогательная задача для каждого типа ячейки по определению в ней поля нейтронов. Расчетная схема такой задачи – это набор плоских слоев, которые имитируют таблетки ячейки. Проводится расчет пространственно-энергетического распределения плотности потока нейтронов по ячейке.

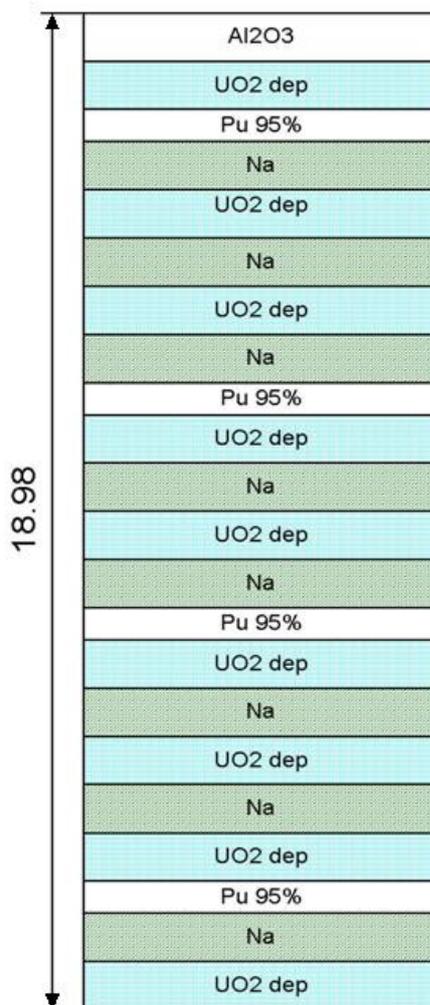


Рисунок 4.11 – Схема ячейки активной зоны сборки БФС-56

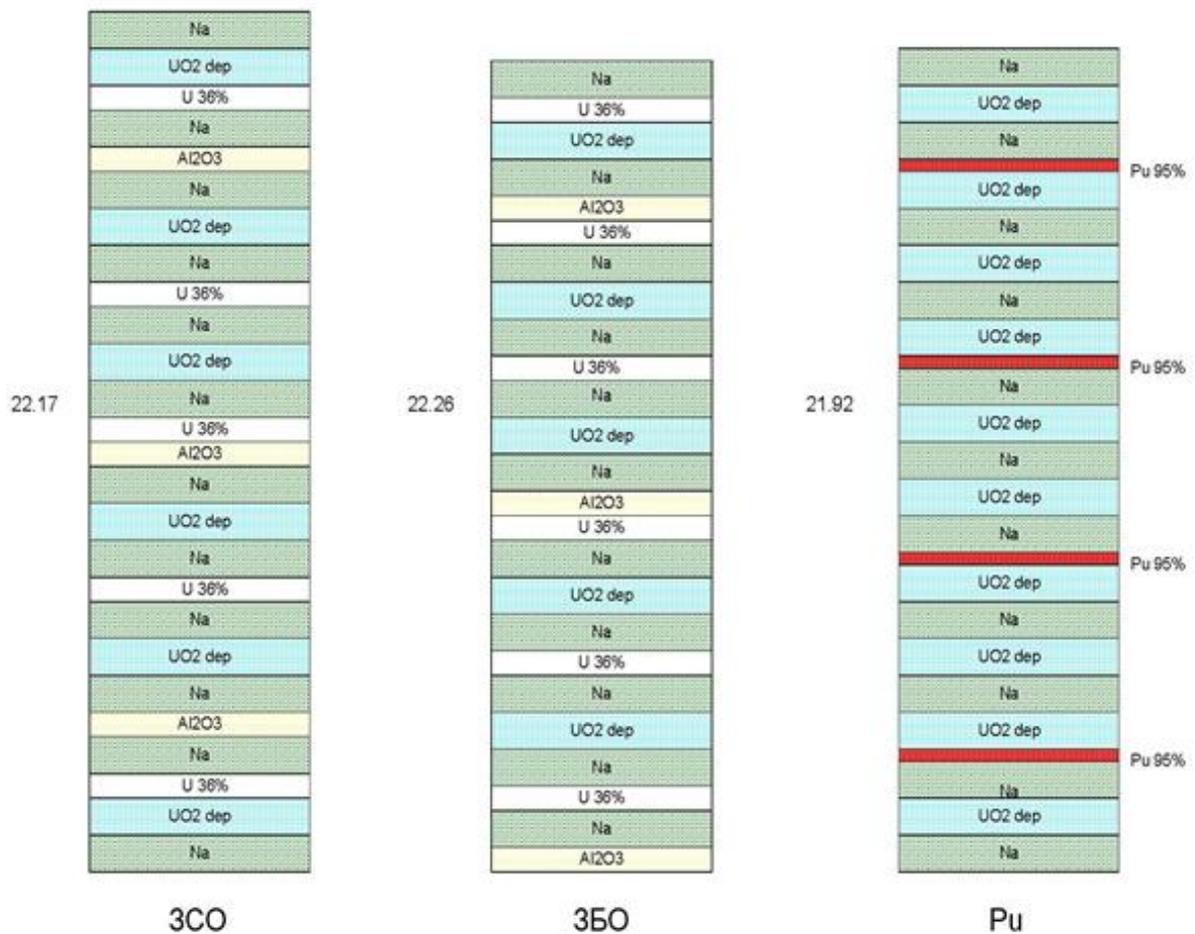


Рисунок 4.12 – Схема основных ячеек сборки БФС-58-1

Далее производится усреднение многогрупповых макроскопических сечений  $\Sigma_x^g$  типа  $x$  и спектра нейтронов деления  $\chi^g$  в пределах ячеек с весом плотностей потока нейтронов  $\varphi_k^g$  и объемов таблеток  $V_k$ :

$$\Sigma_x^g = \frac{\sum_k \Sigma_{x,k}^g \varphi_k^g V_k}{\sum_k \varphi_k^g V_k},$$

$$\chi^g = \frac{\sum_k \chi_k^g V_k \sum_{g'} v \Sigma_{f,k}^{g'} \varphi_k^{g'}}{\sum_k V_k \sum_{g'} v \Sigma_{f,k}^{g'} \varphi_k^{g'}}.$$

Подготовленные таким образом макроскопические константы используются в непосредственном покассетном расчете критических сборок БФС-56 и БФС-58-1. Влияние

эффекта гетерогенности при оценке  $K_{eff}$  для различных конфигураций критических сборок составляет ~0.7%.

Расчеты критических сборок БФС-56 и БФС-58-1 по коду CORNER проводились в 26-групповом  $S_4P_1$  приближении. Точность сходимости внешних и внутренних итераций задавалась равной  $10^{-5}$ .

Проведены оценки критичности и натриевого пустотного эффекта реактивности (НПЭР). Расчетное значение натриевого пустотного эффекта реактивности было оценено на основе собственных чисел  $K_1$  и  $K_2$  двух условно-критических задач (1 – теплоноситель присутствует в исследуемой области, 2 – теплоноситель удален из рассматриваемой области) по формуле

$$НПЭР = \left( \frac{1}{K_1} - \frac{1}{K_2} \right) \cdot 10^5, \text{ pct.}$$

Результаты расчета критических конфигураций сборок БФС-56 и БФС-58-1 приведены в таблицах 4.10 и 4.11 соответственно.

Таблица 4.10 – Результаты расчетов  $K_{eff}$  для БФС-56

Состояние	CORNER
Исходное	0.99435
Опущена полость	0.99314
Опущена полость + активная зона	0.99401

Таблица 4.11 – Результаты расчета  $K_{eff}$  для БФС-58-1

Состояние	CORNER
Исходное	0.99641
Опущена активная зона	0.99752
Опущена полость + активная зона	0.99707
Опущена полость	0.99068

В таблице 4.12 описаны расчетные состояния критсборки БФС-58-1 для оценки НПЭР.

Таблица 4.12 – Расчетные состояния БФС-58-1

Состояние	Наличие натрия		Изменение числа труб на периферии
	а.з.	полость	
1	+	+	
2а	-	+	
2б	-	+	- 5
3а	-	-	
3б	-	-	+ 58
4а	+	-	
4б	+	-	+ 5
5	+	+	

Сравнение расчетов с экспериментальными данными для НПЭР приведено в таблице 4.13 для сборки БФС-56 и в таблице 4.14 для сборки БФС-58-1.

Таблица 4.13 – Сравнение расчетных и экспериментальных значений НПЭР в рсм для БФС-56

Количество опустошенных труб и область опустошения	CORNER, рсм	Эксперимент, рсм
362 (полость)	-778	-781
362 (зона)	-538	-609

Из таблицы 4.13 следует, что расчетные значения находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными с отклонением в 3 рсм в случае опустошения натриевой полости и 71 рсм в случае опустошения активной зоны.

Таблица 4.14 – Сравнение расчетных и экспериментальных значений НПЭР в рсм для БФС-58-1

Вариант расчета	CORNER, рсм	Эксперимент, рсм
1 → 2а	112	105
2б → 3а	-648	-718
3б ← 4а	46	20
4б ← 5	-533	-624

Проведены расчеты по определению критичности и исследованию натриевого пустотного эффекта реактивности для критических сборок БФС-56 и БФС-58-1.

Из представленных результатов следует, что при процессах опустошения и возвращения натрия в активную зону наибольшее влияние оказывает эффект гетерогенности, поэтому учет гетерогенной структуры топливных ячеек БФС в аксиальном направлении позволил получить результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными значениями. При анализе экспериментов с натриевой полостью главную роль играют кинетические эффекты. Кинетическое приближение позволяет с хорошей степенью точности моделировать эксперименты с образованием полостей (опустошение натриевой полости), в которых, как показала практика расчетов, инженерные (диффузионные) программы имеют большую погрешность.

#### 4.4 Тестовая нестационарная задача

В качестве тестовой задачи моделировался нестационарный процесс ввода всех стержней СУЗ в модели прототипа реактора на быстрых нейтронах.

Кросс-верификация проводилась с расчетным кодом TIMER [59], использующим прямой метод решения задачи пространственной кинетики в диффузионном приближении.

Для сравнения рассмотрены первые 5 секунд нестационарного процесса, стержни СУЗ прекращают движение спустя одну секунду после начала их ввода. На рисунках 4.13 и 4.14 приведено сравнение относительной мощности реактора и реактивности соответственно.

Как видно из графиков, результаты хорошо согласуются между собой. Значение реактивности, представленное на рисунке 4.13, при расчете по коду CORNER получено согласно уравнению (3.22), в котором заложено рассмотрение асимптотического поведения поля нейтронов [60], в то время как в коде TIMER для определения реактивности используется обращенное решение уравнения кинетики, т.е. в первом случае реактивность можно считать причиной нестационарного процесса, а во втором случае – следствием. Таким образом, разные определения реактивности являются причиной их разных значений, относительное отклонение составляет 3%. Причиной служит тот факт, что при быстром вводе стержней СУЗ доля запаздывающих нейтронов резко увеличивается (до ~10%) и лишь спустя примерно 600 секунд выходит на асимптотику.

При анализе нестационарных процессов, важных для обоснования безопасности, т.е. таких, в которых  $\rho > 0$ , доля запаздывающих нейтронов мала ( $< 1\%$ ), поэтому и

погрешность, вносимая за счет использования методики определения реактивности, заложенной в коде CORNER, будет малой, в то время как использование теории возмущения первого порядка [36] может приводить к существенным погрешностям [54], что связано с выбором сопряженной функции в качестве весовой.

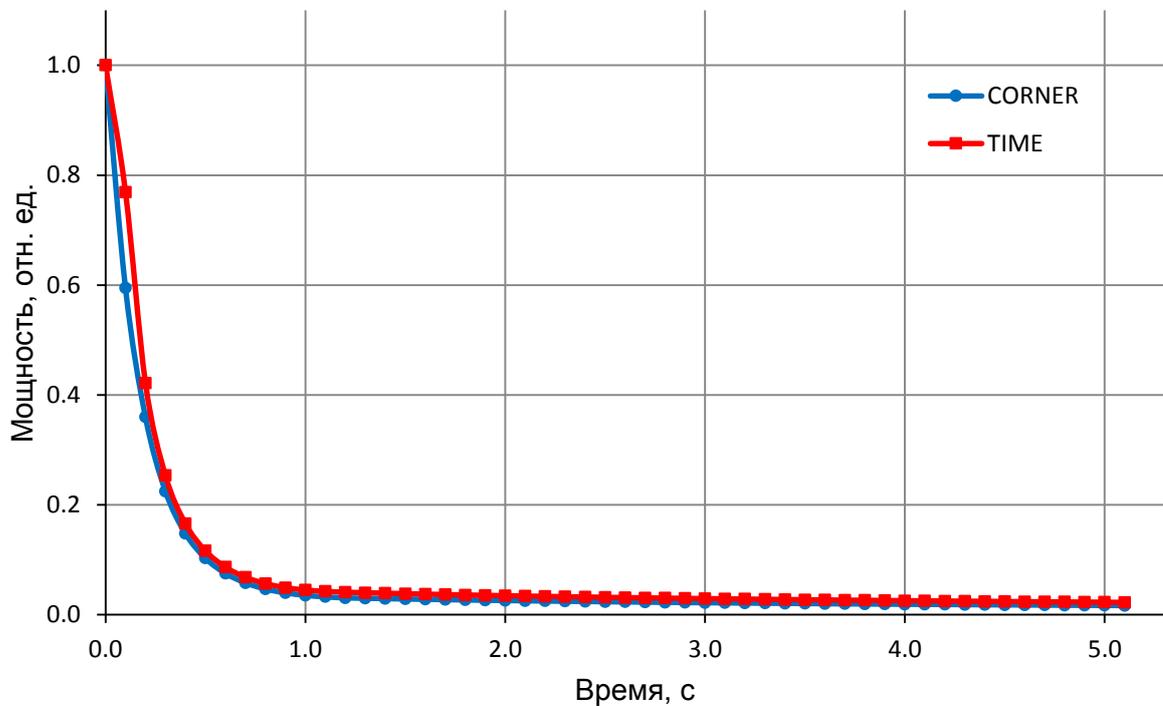


Рисунок 4.13 – Относительная мощность

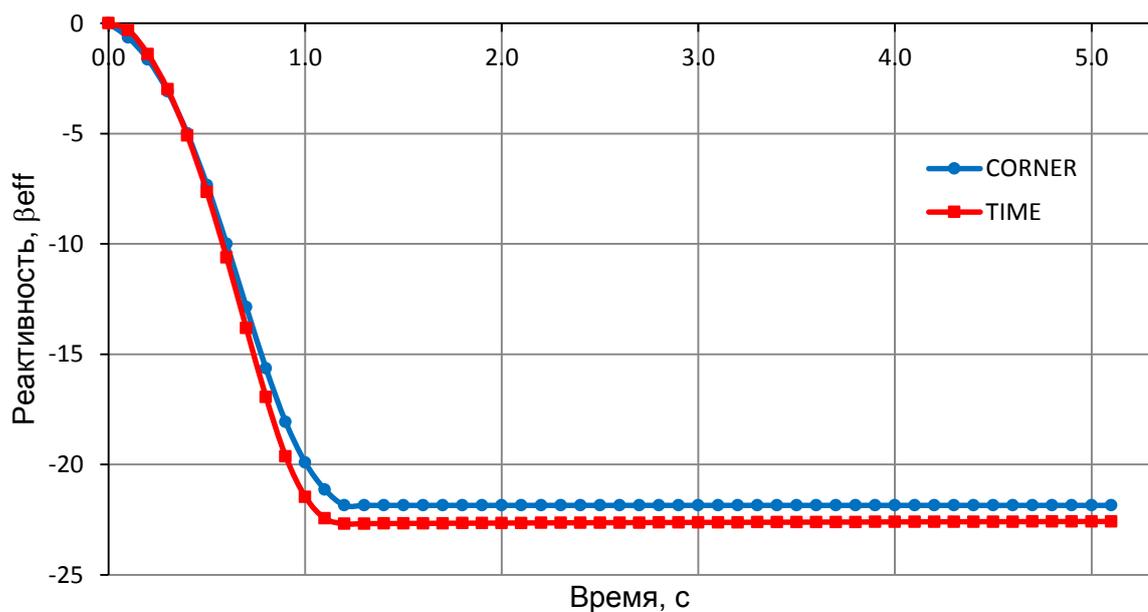


Рисунок 4.14 – Реактивность

## 4.5 Выводы по главе 4

Проведенные верификационные расчеты позволяют говорить о высоком качестве расчетного кода CORNER.

Расчет NEACRP 3-D Neutron Transport Benchmark Model 4 демонстрирует эффективность использования нодальной методики.

Расчет JOYO-LMFR-RESR-001 benchmark демонстрирует эффективность использования детальной геометрии.

Расчет БФС-56 и БФС-58-1 демонстрирует возможности кода по учету пространственной гетерогенности путем корректной гомогенизации, проводимой с помощью решения вспомогательных задач.

Тестовый расчет нестационарной задачи в улучшенном квазистатическом приближении свидетельствует о возможности применимости кода для анализа нестационарных процессов.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Необходимость анализа и обоснования безопасности перспективных РУ БР с одной стороны, и бурное развитие вычислительной техники с другой сформировали тенденции в развитии нейтронно-физических расчетов, особо стоит выделить следующие:

- развитие и разработка детерминистических программ, обладающих возможностью детального описания расчетной модели, в том числе на основе метода конечных элементов;
- разработка детерминистических и на основе метода Монте-Карло программ для анализа нестационарных процессов с использованием как прямого моделирования, так и различных приближений;
- развитие параллельных вычислений, в том числе с использованием гибридных вычислительных систем.

Несмотря на обозначенные тенденции, нужно ориентироваться на те цели, которые преследует разработка конкретного расчетного кода. Например, программное средство, которое требует длительной и сложной подготовки исходных данных, требует новейшее компьютерное обеспечение, не будет широко использоваться в промышленных масштабах, даже несмотря на высокоточный результат. Т.е. использование методов и алгоритмов, повышающих точность расчетов, детальной расчетной модели, с одной

стороны, уменьшает расчетную неопределенность при оценке функционалов нейтронного излучения, а с другой стороны, повышает требования к вычислительным ресурсам.

В расчетном коде CORNER соблюден «баланс» между точностью, детальностью описания расчетной модели, расчетным временем и доступностью, простотой использования.

Основные выводы по результатам работы:

- выполнена постановка задачи математического моделирования переноса нейтронов;
- разработан нейтронно-физический код CORNER для анализа стационарных и нестационарных процессов в реакторных установках на быстрых нейтронах;
- приведено описание расчетного кода CORNER, используемых в нем алгоритмов, методик и приближений;
- проведены верификационные и кросс-верификационные расчеты, подтверждающие высокое качество получаемого решения;
- разработанный нейтронно-физический код CORNER входит в состав универсального расчетного кода нового поколения ЕВКЛИД/V1, поданного на аттестацию и используемого для проведения проектных расчетов РУ БРЕСТ-ОД-300 и РУ БН-1200
- расчетный код CORNER используется в качестве контрольно-реперного модуля для аттестованного программно-технического комплекса ГЕФЕСТ800 расчетно-экспериментального сопровождения эксплуатации реактора БН-800 Белоярской АЭС (аттестационный паспорт программного средства № 404 от 14 июля 2016 года).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. С. Чандрасекар. Перенос лучистой энергии. – М.: ИЛ, 1953. – 432 с.
2. Б. Карлсон, Дж. Белл. Решение транспортного уравнения  $S_n$ -методом. – В сб. “Физика ядерных реакторов”. М., Атомиздат, 1959, стр.408–432.
3. Е. П. Сычугова, Е. Ф. Селезнев. Метод конечных элементов для решения уравнения переноса на неструктурированных тетраэдральных сетках. Препринт ИБРАЭ РАН № IBRAE-2014-03, 2014, 21с.
4. Е. П. Сычугова, В. И. Белоусов, С. А. Селезнев. Апробация кода ODETTA на экспериментах по защите реактора. Безопасность, эффективность и экономика атомной энергетики. Десятая международная научно-техническая конференция МНТК-2016. Сб. трудов, Москва, 2016.

5. В. П. Березнев, Е. Ф. Селезнев, Д. С. Асатрян. Нейтронно-физический расчетный код CORNER. Ядерная физика и инжиниринг, 2015, том 6, № 5–6, с. 266–273.
6. А. М. Волощенко, В. П. Крючков, “КАТРИН-2.5 – программа для решения уравнения переноса нейтронов, фотонов и заряженного излучения методом дискретных ординат в трехмерной геометрии,” Инструкция для пользователя, *Отчет ИПМ им. М. В. Келдыша РАН*, инв. № 6-21-2011, М., 2011.
7. А. А. Николаев. Создание нейтронно-физического кода на основе DS<sub>n</sub>-схем и неструктурированной сетки из прямых призм для учета пространственных неоднородностей в нетвэльной части активной зоны реакторных установок со свинцово-висмутовым теплоносителем. Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук. Москва – 2015.
8. А. В. Моряков. Программа LUCKY. Решение уравнения переноса нейтронов и гамма излучения с использованием параллельных технологий. // ВАИТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2010, вып. 4, с. 3 – 14.
9. R. E. Alcouffe, R. S. Baker, J. A. Dahl, S.A. Turner, and Robert Ward, “PARTISN: A Time-Dependent, Parallel Neutral Particle Transport Code System,” LA-UR-08-07258 (Revised Nov. 2008).
10. E. Sjoden, A. Haghigat, “PENTRAN, a Parallel Environment Neutral Particle TRANsport Code in 3-D Cartesian Geometry,” Code User’s Guide/Manual, Version 9.4.X.5, HSW Technologies LLC (2008).
11. McGhee J.M., Wareing T.A., Barnett D.A. Attila User’s Manual. Transpire Inc., 15 January 2007.
12. Discontinuous Finite Element SN Methods on Three-Dimensional Unstructured Grids. Wareing Todd A. и др. // J. Nucl. Sci. Eng., 2001, V. 138, P. 256-268.
13. Е. П. Сычугова. Исследование устойчивости и эффективности метода пространственного ребаланса для ускорения сходимости итераций в задачах переноса частиц // Математическое моделирование, 2008, т. 20, №9, с. 75-93.
14. Е. П. Сычугова.  $\delta$ -процесс ускорения сходимости внешних итераций в задачах расчета ядерных реакторов // Математическое моделирование, 2010, т. 22, №7, с. 148-160.
15. <https://www.vareximaging.com/products/attila-software>
16. J. Askew. A characteristics formulation of the neutron transport equation in complicated geometries. Technical Report AAEW-M 1108, UK Atomic Energy Establishment (1972).

17. Suslov, I. R., "Solution of Transport Equation in 2- and 3- Dimensional Irregular Geometry by the Method of Characteristics," Int. Conf. Math. Methods and Supercomputing in Nuclear Applications, Karlsruhe, April 19-23, 1993.
18. William Boyd, Samuel Shaner, Lulu Li, Benoit Forget, and Kord Smith, "The OpenMOC Method of Characteristics Neutral Particle Transport Code." Annals of Nuclear Energy, 68 (2014): 43–52.
19. Е.Ф. Селезнев. Разработка и использование эксплуатационных программ нейтронно-физического расчета реакторов. Диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук. Москва – 2000.
20. E. Gelbard. Application of the spherical harmonics to reactor problems, Tech. Rep. WAPD-BT-20, Westinghouse Atomic Power Department (Sept 1960).
21. Лалетин Н.И., Ельшин А.В. Система уточненных конечно-разностных уравнений для трехмерного гетерогенного реактора. Атомная энергия т. 60, вып. 2, 1986 г., с. 96-99.
22. Бояринов В.Ф. Реализация трехмерных уравнений метода поверхностных гармоник в комплексе программ SUHAM-3D // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2009, вып. 3, с. 44-56.
23. Nicholas Metropolis, Stanislaw Ulam, The Monte Carlo method, J. Amer. statistical assoc., V.44 (1949), No.247, P.335-341.
24. <https://mcuproject.ru/rabout.html>
25. T. Goorley, et al., "Initial MCNP6 Release Overview", Nuclear Technology, 180, pp 298-315 (Dec 2012).
26. И. Р. Суслов, И. А. Лямцев, С. В. Чернов. Гибридный метод расчета защиты ЯЭУ на основе схемы уменьшения дисперсии CADIS. Известия вузов. Ядерная энергетика, №2, 2013, с. 71 – 78.
27. ГЕФЕСТ 800 с системой подготовки констант CONSYST и библиотекой БНАБ-93. Аттестационный паспорт программного средства №404 от 14 июля 2016 года.
28. А.А. Белов, В.И. Белоусов, В.П. Березнев и др. Комплекс программ ГЕФЕСТ800 для проведения эксплуатационных расчетов нейтронно-физических характеристик БН-800 в стационарном режиме. Атомная Энергия. 2015, т.118, вып.6, с.303–308.
29. А.А. Белов, В.И. Белоусов, В.П. Березнев и др. Комплекс программ ГЕФЕСТ800 для проведения эксплуатационных расчетов нейтронно-физических характеристик БН-800 в нестационарном режиме. Атомная энергия, 2015, т.119, вып.1, с.3–8.

30. Л.Н. Ярославцева, П.А. Фомиченко, А.В. Васильев, Л.Л. Кононова. Методы и алгоритмы нейтронно-физического расчета ядерных реакторов в комплексе программ JARFR / Отчет РНЦ «Курчатовский институт», инв. № 90/1-4-95, 1995.
31. Серегин А.С., Кислицына Т.С., Цибуля А.М. Аннотация комплекса программ TRIGEX.04: Препринт ФЭИ-2846. Обнинск, 2000.
32. Doriath, J.Y., et al., “ERANOS1: The Advanced European System of Codes for Reactor Physics Calculations”, International Conference on Mathematical Methods, Karlsruhe, Germany, 1993.
33. K. L. Derstine, DIF3D: A Code to Solve One-, Two-, and Three-Dimensional Finite Difference Diffusion Theory Problems, ANL-82-64, Argonne National Laboratory, Argonne, IL (1984).
34. Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М. Программа подготовки констант CONSYST. Описание применения. Препринт ГНЦ РФ – ФЭИ – 2828. Обнинск, ФЭИ, 2000.
35. V.Grabeznoy, V.Koshcheev, G.Lomakov and G.Manturov Verification of the ABBN-RF2010 constants in calculations of shielding benchmarks. Progress in Nuclear Science and Technology, v.4, 2014, pp.587-590.
36. Белл Д., Глесстон С. Теория ядерных реакторов. Москва, Атомиздат, 1974 г.
37. А.М. Волощенко. Адаптивные положительные аппроксимации и согласованная КР1 схема ускорения итераций для уравнения переноса нейтронов в задачах радиационной защиты. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. Москва -2015.
38. В.Б. Барахнин, В.П. Шапеев. Введение в численный анализ: Учебное пособие. – СПб.: Издательство «Лань», 2005. – 112с.
39. Weisstein, Eric W. "Gaussian Quadrature." From MathWorld A Wolfram Web Resource. <http://mathworld.wolfram.com/GaussianQuadrature.html>
40. W.F. Walters. Use of the Chebyshev-Legendre quadrature set in discrete ordinate codes // Los Alamos National Laboratory Report LA-UR-87-3621, 1987.
41. Longoni G. Advanced quadrature sets and acceleration and preconditioning techniques for the discrete ordinates method in parallel computing environments. PhD thesis. University of Florida, 2004.
42. Годунов С.К., Рябенький В.С. Разностные схемы. Введение в теорию. Изд.2, перераб, и доп. — Наука, 1977, 440 с.
43. W.A. Rhoades, W.W. Engle, “A New Weighted Difference Formulation for Discrete Ordinates Calculations,” TANS 27, 1977.

44. Л.П. Басс, О.В. Николаева. Положительная схема для расчета радиационных полей в сильно гетерогенных средах и пустотах в  $(r,z)$  геометрии, часть II, препринт №2 ИПМ им. М.В.Келдыша, 1997.
45. B. Petrovic, A. Haghihat, “New Directional Theta-Weighted Sn Differencing Scheme and its Application to Pressure Vessel Fluence calculations,” Radiation Protection and Shielding Topical Meeting, Folmouth, MA, Vol. 1, pp.3-10, 1996.
46. G. Sjoden, A. Haghihat, “PENTRAN – A 3-D Cartesian parallel SN code with angular, energy, and spatial decomposition,” in Proc. Join Int. Conf. on Mathematical Methods and Supercomputing for Nuclear Applications, vol. 1, Saratoga Springs, NY, 1997.
47. A.A. Bliskavka, G.N. Manturov, M.N. Nikolaev, A.M. Tsibulya. “Abstract of the MMKKENO software package,” Preprint IPPE – 3145, Obninsk, 2008.
48. M. D. DeHart, «A Discrete Ordinates Approximation to the Neutron Transport Equation Applied to Generalized Geometries» Ph. D. Dissertation, Texas A&M University, College Station, Texas, 1992.
49. В. Е. Трощев, А. В. Шумилин, Разностная схема решения двумерного уравнения переноса на нерегулярных четырехугольных сетках, Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1986, том 26, номер 2, 230–241.
50. V.P. Bereznev, E.F. Seleznev, D.S. Asatryan. CORNER neutronic code. Nuclear Energy and Technology 1 (2015) 117–121.
51. В. П. Березнев. Нодальный Sn метод в HEX-Z геометрии. Известия вузов. Ядерная энергетика. №3 2015 г., с.56–62.
52. K. Sugino, T. Takeda. An Improvement of the Transverse Leakage Treatment for the Nodal SN Transport Calculation Method in Hexagonal-Z Geometry. Journal of Nuclear Science and Technology 33(8):620-627, August 1996.
53. Аввакумов А.В., Березнев В.П., Васекин В.Н и др. Обоснование применимости интегрального кода нового поколения ЕВКЛИД/V1 для расчета РУ БРЕСТ-ОД-300. Инновационные проекты и технологии ядерной энергетике IV Международная научно-техническая конференция IV МНТК НИКИЭТ – 2016. Сборник докладов, Том 2, сс. 8-19. Москва, 27–30 сентября 2016 г.
54. Е.Ф.Селезнев, И.С.Чернова. Анализ алгоритма улучшенного квазистатического приближения решения нестационарного уравнения переноса нейтронов. – Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов, 2017.
55. M. Hermanns. Parallel Programming in Fortran 95 using OpenMP. School of Aeronautical Engineering, Spain, 2002.

56. H. Ikeda, T. Takeda, “3-D Neutron Transport Benchmarks,” Department of Nuclear Engineering Osaka University, Japan, NEACRP L-330, 1991.

57. “Japan’s Experimental Fast Reactor JOYO MK-I Core: Sodium-Cooled Uranium Plutonium Mixed Oxide Fueled Fast Core Surrounded by UO<sub>2</sub> Blanket”. International Handbook of Evaluated Reactor Physics. Benchmark Experiments, NEA/NSC/DOC (2006) 1, OECD-NEA (2010).

58. В. П. Березнев, Е. Ф. Селезнев, Д. С. Асатрян. Нейтронно-физический расчётный код CORNER. – Известия вузов. Ядерная энергетика, №1 2015 г., с.136 – с.143.

59. И.С. Панова, Е.Ф. Селезнев. Модули нестационарных расчетов задач кинетики в комплексе ГЕФЕСТ-800, XXV научно-технический семинар. Нейтронно-физические проблемы ядерной энергетики (Нейтроника-2014), Обнинск, ФГУП ГНЦ РФ-ФЭИ, 2014.

60. Е.Ф. Селезнев. Кинетика реакторов на быстрых нейтронах. – М.: Наука, 2013, 239с.

61. G.N. Manturov, M.N. Nikolaev, A.M. Tsibulya, “CONSYST group constants system,” Preprint IPPE – 2828, Obninsk, 2000.

62. VisIt Tool Users Guide, October 2005  
<https://wci.llnl.gov/content/assets/docs/simulation/computer-codes/visit/VisItUsersManual1.5.pdf>

63. Y. Azmy, E. Sartori. Nuclear Computational Science. A Century in Review. Springer, Dordrecht, New York, 2010, 475 pp.