



Российская Академия Наук

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

**ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ
БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ
АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ**



RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES

**NUCLEAR SAFETY
INSTITUTE**

Препринт ИБРАЭ № IBRAE-2012-04

Preprint IBRAE-2012-04

С.А. Бреднихин, С.И. Лежнин, С.А. Фролов, Д.М. Юров

**КОД NMC ДЛЯ СТАТИСТИЧЕСКОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕНОСА НЕЙТРОНОВ В
ДЕЛЯЩИХСЯ СРЕДАХ. ВАЛИДАЦИЯ И
ПРИЛОЖЕНИЯ**

УДК 519.245, 621.039.5, 621.039.6, 621.039.7

Бреднихин С.А., Лежнин С.И., Фролов С.А., Юров Д.М. Код NMC для статистического моделирования переноса нейтронов в делящихся средах. Валидация и приложения. — Препринт / Ин-т проблем безопас. развития атом. энергетики РАН, № IBRAE-2012-04. — М. : ИБРАЭ РАН, 2012. — 24 с. — Библиогр.: 10 назв. — 62 экз.

В работе представлено описание кода моделирования переноса частиц методом Монте-Карло NMC. Данный статистический код нового поколения способен решать широкий набор стандартных задач, таких как расчет потока в реакторной установке. Помимо этого, он может быть легко расширен для решения узкоспециальных задач наиболее эффективным методом.

В работе приведены:

- результаты валидации кода на расчетах эффективного коэффициента размножения и энергетического распределения плотности потока нейтронов на бенчмарк экспериментах базы INTERNATIONAL HANDBOOK OF EVALUATED CRITICALITY SAFETY BENCHMARK EXPERIMENTS;

- результаты исследования нейтронно-физических характеристик подкритического топливного blankets, предназначенного для работы в составе гибридной ядерно-термоядерной системы с источником нейтронов на базе газодинамической ловушки (ГДЛ).

На основании полученных результатов сделан вывод о возможности использования кода в научно поисковых целях для моделирования процессов переноса нейтральных частиц, а так же для апробации новых алгоритмов статистического моделирования.

©ИБРАЭ РАН, 2012

Brednikhin S.A., Lezhnin S.I., Frolov S.A., Yurov D.M. NMC Code for Statistical Modeling of Neutron Transfer in Fissile Media. — Peprint / Nuclear Safety Institute RAS IBRAE-2012-04). — Moscow : NSI RAS, 2012. — 24 p. — Bibliogr.: 10 items.

The paper describes the structure of NMC, a new generation Monte-Carlo particle transport code. The code is capable to solve a wide range of standard problems such as computation for reactor unit flux. Besides of this it can easily be refined to solve highly specialized tasks with most effective method. The paper presents:

- The results of code validation with computation of effective multiplication factor and neutron flux energy density function of benchmark experiments from INTERNATIONAL HANDBOOK OF EVALUATED CRITICALITY SAFETY BENCHMARK EXPERIMENTS;

- Results of neutron-physical characteristics study of the subcritical nuclear assembly, designed to operate in the hybrid fission-fusion system with a neutron source based on plasma gas-dynamic trap (GDT). Based on the obtained results it is concluded about the possibility of using the code for scientific search purposes for modeling of the neutral particles transport processes as well as for testing new algorithms for statistical modeling.

©Nuclear Safety Institute, 2012

Код NMC для статистического моделирования переноса нейтронов в делящихся средах. Валидация и приложения

С.А. Бреднихин, С.И. Лежнин, С.А. Фролов, Д.М. Юров

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ
НОВОСИБИРСКИЙ ФИЛИАЛ

630090, Новосибирск, проспект академика Лаврентьева, 6,

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2,

эл. почта: sbrednikhin@gmail.com

Содержание

1	Введение.....	3
2	Общие сведения о структуре кода.....	4
2.1	Управляющие объекты.....	5
2.2	Объект класса "сцена".....	5
2.3	Объект класса "решатель".....	7
2.4	Интерфейс.....	10
3	Валидация кода на различных бенчмарках.....	10
4	Расчет параметров гибридной системы с плазменным источником нейтронов.....	17
5	Заключение.....	23
	Список литературы.....	24

1 Введение

Метод Монте-Карло является одним из наиболее распространенных методов математического моделирования физических явлений, связанных с переносом частиц. Благодаря простоте алгоритма, отсутствию накладываемых методом на симметрию системы ограничений, а также сложности процессов взаимодействия частиц со средой, данный метод нашел широкое применение в задачах моделирования процессов переноса нейтронов в реакторных установках. В связи с началом бурного развития вычислительной техники в конце прошлого века, было реализовано множество кодов для моделирования процессов переноса методом Монте-Карло. Многие из этих кодов были реализованы в восьмидесятих годах XX века, и, как следствие, при их реализации не были использованы возможности методов объектно-ориентированной разработки и проектирования программных продуктов, получивших развитие примерно в это же время. Это выразилось в негибкости структуры таких кодов и привело к существенным трудностям при попытках модернизации или изменения расчетных схем.

Большинство кодов статистического моделирования используемых в атомной отрасли в настоящее время имеет ряд внутренних ограничений, делающих эти коды специализированными под определенные типы задач или ориентированными на представление данных строго в определенном виде. В качестве примера можно привести ориентированность кода MCNP на представление геометрических данных через описание границ. Этот подход носит название Boundary representation (BREP). Такое представление имеет ряд преимуществ в виде возможностей использования более сложных алгоритмов оптимизации поиска пересечений, однако оно влечет за собой усложнение входных данных. Коды MONK и GEANT используют для представления данных подход комбинаторной геометрии (CSG), позволяющий упростить задание входных данных, однако сужающий оптимизационные возможности. Другим примером ориентации на использование определенных данных может служить представление данных о взаимодействии нейтронов с веществом. Практически все коды статистического моделирования можно разделить на использующие детальное представление данных (MCNP) и групповое приближение (KENO, MMK). Лишь некоторые коды, такие как MCU, имеют возможность использования обоих подходов. Зачастую особенности функционально-ориентированной архитектуры делают работы по расширению функциональности таких кодов трудновыполнимыми и, как следствие, однократно выбранные в начале разработ-

ки алгоритмы и представления данных определяют рамки функциональности кода, которые практически не расширяются впоследствии.

На сегодняшний день задача создания статистического кода переноса частиц нового поколения, который может быть легко доработан под узкоспециальные задачи и, в то же время, будет способен решать широкий класс стандартных задач, является важной, как с точки зрения решения прикладных задач, так и с точки зрения дальнейшего развития алгоритмов метода Монте-Карло. Разработка такого кода требует построения гибкой архитектуры, способной включить в себя множество различных алгоритмов статистического моделирования, реализованных для оптимальной работы на разных аппаратных платформах с использованием множества типов данных. Данная задача наиболее удачным образом может быть решена при помощи объектно-ориентированного подхода к проектированию.

Код NMC (Neutral particles Monte-Carlo code), описанный в данной работе, использует метод статистического моделирования (Монте-Карло) на основе принципа декомпозиции всего процесса на ряд блоков и инкапсуляции их функциональности в рамках ряда объектов с унифицированными интерфейсами. Это позволяет производить простую замену одного блока на другой, более подходящий для конкретной задачи или просто более быстрый с точки зрения машинной обработки. Аналогичный подход применен к блоку подготовки входных данных, что позволяет, с одной стороны, облегчить задачу пользователя, упростив процесс описания задачи, а с другой - использовать при моделировании различные алгоритмы расчета. Также в рамках такой архитектуры возможна организация оперативного дополнения кода пользовательскими объектами без вмешательства разработчика, что позволит добиться еще большего расширения функционального наполнения. Схематическая иллюстрация принципа организации кода представлена на рисунке 1.



Рис. 1 Принцип организации архитектуры кода NMC.

В приведенных далее разделах описывается структура кода NMC с иллюстрацией принципа взаимодействия различных модулей, а также приводятся результаты валидации кода на ряде бенчмарков. Показаны также результаты моделирования нейтронно-физических процессов в гибридной ядерно-термоядерной установке с источником нейтронов на основе газодинамической ловушки открытого типа (ГДЛ).

2 Общие сведения о структуре кода

Любой алгоритм моделирования процесса включает в себя моделирование траектории частицы от ее рождения в результате деления или вылета из источника до поглощения, вылета за границу системы или деления [1]. Объектно-ориентированный подход к реализации такого алгоритма позволяет реализовать эти этапы моделирования в виде отдельных объектов, что в сочетании с возможностью наследования

позволяет реализовывать отдельные блоки, различными способами оптимизируя или принципиально изменяя отдельные части алгоритма. Такой подход приводит к универсальности кода, простоте его доработки и возможности гибкой оптимизации под различные классы задач. Архитектура кода NMC построена на данном принципе. Помимо этого, в коде NMC применяется пользовательский интерфейс на скриптовом языке программирования высокого уровня, обеспечивающий создание, удаление и связку объектов напрямую, а не через систему флагов или кейсов. Таким образом, алгоритм решения «собирается» из составляющих объектов при непосредственном участии пользователя.

Далее в данном разделе будут кратко описаны объекты, из которых состоит код и их интерфейсы. В настоящее время в коде реализован расчет с помощью групповых констант.

2.1 Управляющие объекты

Код можно условно разделить на две части, одна из которых ориентирована преимущественно на обработку входных данных, их хранение и выдачу в процессе расчета, а другая, - на проведение моделирования и генерацию результатов. Необходимая функциональность обоих блоков собрана в двух объектах, которые для краткости здесь и далее будем называть «сцена» и «решатель».

Объект класса «сцена» представляет собой управляющий объект, обеспечивающий выполнение команд, отвечающих за поиск пересечений траектории частицы с границами раздела сред и расчет сечений взаимодействия частицы с веществом в указанной точке при заданной энергии.

Объект «решатель» отвечает за процесс моделирования траекторий частиц, оперирование с выборкой точек деления (для моделирования переноса в делящихся средах) и сбор данных, необходимых для вычисления функционалов потока.

2.2 Объект класса «сцена»

На рисунке 2 представлена uml-диаграмма, описывающая состав объекта «сцена».

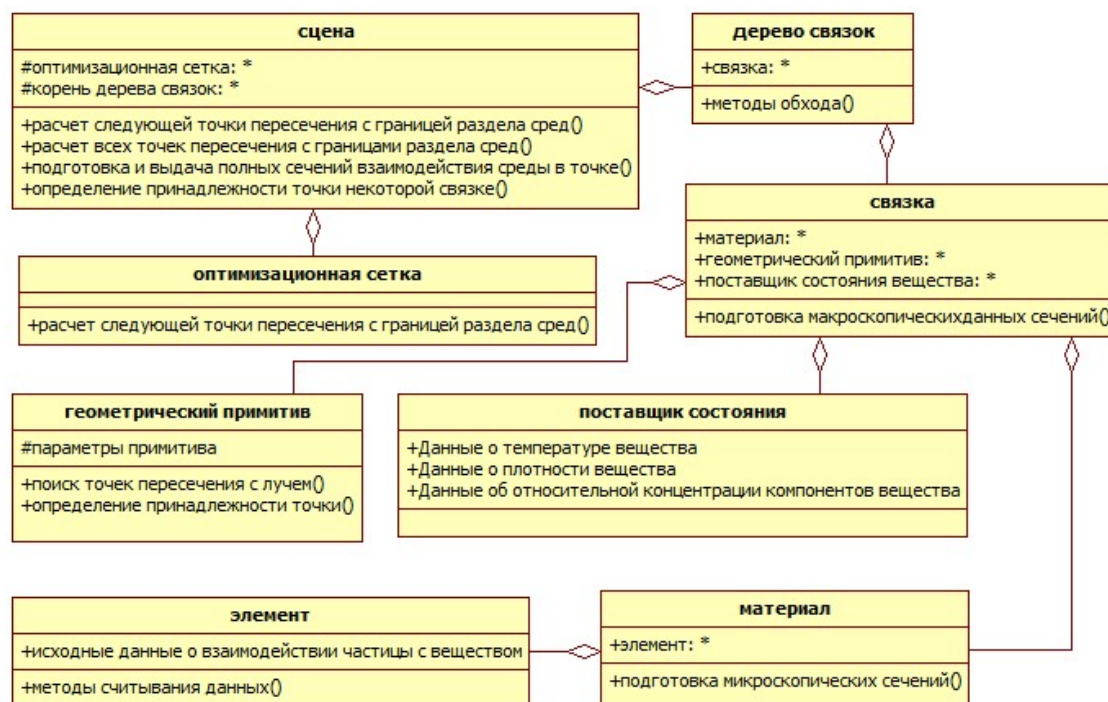


Рис.2. Состав управляющего объекта "сцена".

Приведенные здесь и далее uml-диаграммы не полностью отражают внутреннее устройство кода, и даны лишь для иллюстрации принципов построения архитектуры.

За решение задачи описания и хранения геометрических и вещественных данных в коде NMC отвечает структура-контейнер типа «дерево», отражающая так называемое дерево исключений. Данная струк-

тура, позволяющая облегчить поиск точек пересечения траектории с границами раздела сред, строится на основе представления системы в виде последовательного применения операции исключения к вложенным объемам, описывающим систему. Если внешняя граница системы ограничивает некоторую область $D_{(0)}$, то связанная область $D^{(0)}$, занимаемая средой типа $S^{(0)}$, которая характеризуется набором входящих в ее состав изотопов, представляет собой $D_{(0)} \setminus \left(\bigcup_{i=1}^{n_i} D_{i,1} \right)$, где $D_{i,1}$ – области, ограниченные поверхностями раздела сред $S^{(0)}$ и $S^{i,1}$, ограничивающих связную область. Здесь и далее нижним индексом обозначаются области внутри границы, а верхним – области, занятые веществом. В свою очередь, пользуясь тем же принципом можно выделить связанные области $D^{k,j} = D_{k,j} \setminus \left(\bigcup_{i=1}^{n_j} D_{i,j+1} \right)$. Полученные в результате такого разбиения области будут заполнены веществом с одинаковым по области набором входящих в него изотопов. Для каждой из областей $D^{k,j}$ после этого можно определить другие параметры вещества, такие как температура и концентрации изотопов, задав определенную в $D^{k,j}$ зависимость от координаты. Набор областей $D^{k,j}$ удобно представлять в виде дерева. Связывая с каждой областью набор параметров вещества и заполняя дерево исключений, получаем геометрическую структуру системы, на которой строим различные алгоритмы отбора границ, при поиске пересечений, эффективно используя сведения о вложенности областей. Для описания областей $D^{k,j}$, можно использовать принцип SCG, с применением некоторого набора примитивов – объектов специального типа, хранящих параметры некоторой замкнутой объемной области – цилиндра, шара, параллелепипеда, описываемых для произвольных значений параметров: радиусов, длин и пр. На примитивы не накладывается требование односвязности описываемых ими областей. При заполнении дерева необходимо, чтобы сохранялось условие вложенности примитивов. Ввиду сложности автоматизации построения дерева примитивов, данная задача решается на этапе формирования входного файла.

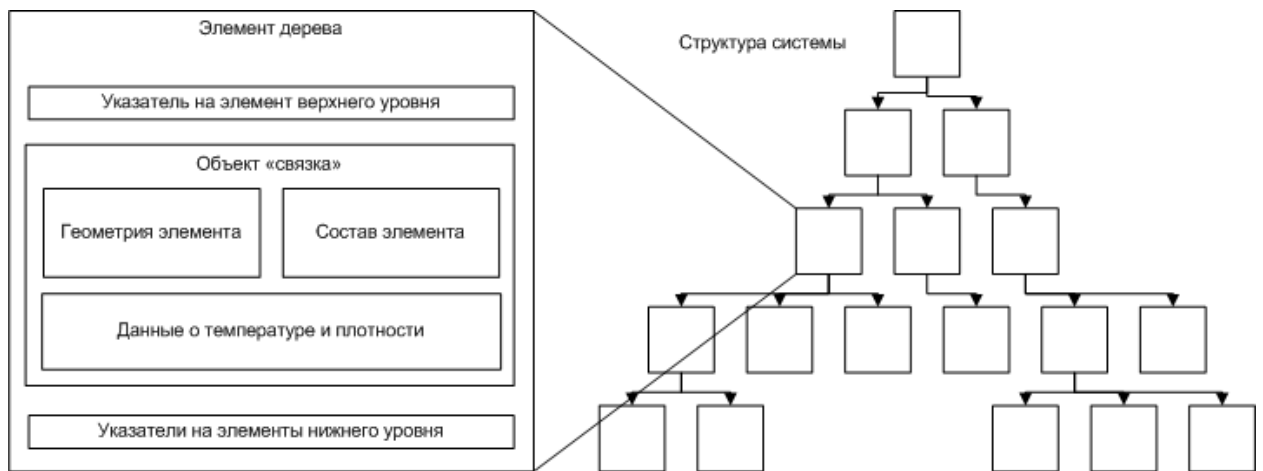


Рис.3. Структура хранения данных о геометрии, составе и состоянии вещества.

Для хранения полной информации о геометрической форме, составе и параметрах вещества используется объект «связка» (рисунок 3). Дерево исключений строится именно для этих объектов, с использованием данных геометрических примитивов, относящихся к связкам. Данные о составе вещества в элементе, концентрациях элементов и температуре и пространственных зависимостях при их наличии содержатся в нескольких объектах, входящих в состав объекта «связки». Используя данные, хранящиеся в этих объектах, могут быть вычислены сечения взаимодействия вещества в данной части системы, необходимые для моделирования.

Для ускорения работы геометрического блока применяется также равномерное разбиение пространства на подобласти. Структура данных, описывающая сетку, содержит дерево вложенности примитивов для каждой ячейки. Такое дерево в общем случае отличается от ветвей дерева сцены. Примитивы размещаются в сетке так, чтобы в ячейке присутствовала вся или часть поверхности примитива. При этом ячейка, находящаяся внутри примитива, не должна его содержать целиком. Тест на нахождение поверхности внутри ячейки в общем случае производится путем определения наличия пересечения примитива с

ячейкой В случае наличия такого пересечения проверяется, не лежат ли все вершины ячейки внутри примитива (все примитивы считаются выпуклыми). В общем случае проверка на пересечение ячейки и примитива производится с помощью алгоритма Гилберта-Джонсона-Кёрти. Для его реализации требуется лишь функция, вычисляющая координату максимально удаленной точки вдоль заданного направления, что позволяет провести реализацию для произвольного примитива. К недостаткам данного алгоритма можно отнести то, что он вычисляет пересечения выпуклых оболочек примитивов, что несколько снижает ускорение в случае невыпуклых объектов, а также не может указать, лежит ли ячейка полностью в примитиве, что опять же незначительно снижает быстродействие.

В случае многогранников проверка производится путем пересечения полупространств с ячейкой алгоритмом, описанным в [2], благодаря тому, что каждый выпуклый многогранник можно представить в виде пересечения набора полупространств. В случае если ячейка лежит вне хотя бы одного полупространства, то пересечения отсутствуют. Если ячейка лежит полностью во всех полупространствах, то ячейка внутри многогранника, иначе многогранник добавляется в дерево ячейки.

Для размещения примитива в дереве ячейки обход основного дерева примитивов производится в глубину, начиная с корня. Если условия нахождения в ячейке удовлетворены, указатель на примитив помещается в список «потомков» одного из «родителей», уже находящегося в дереве, а при его отсутствии корня дерева ячейки.

Работа сетки делится на три этапа: подготовка данных для нового луча, вычисление пересечений в текущей ячейке, вычисление и переход в следующую ячейку. Подготовка данных заключается в вычислении начальной ячейки, что для равномерной сетки делается в одну операцию, а также производится очистка списков пересечений с примитивами для предыдущего луча. Пересечения вычисляются путем обхода основного дерева примитивов в глубину. В случае отсутствия пересечения с примитивом, его дочерние примитивы не пересекаются. Для сохранения порядка следования точек пересечения производится проверка на нахождение точки пересечения в текущей ячейке путем сравнения с интервалом длин пробега в ячейке, в случае, если точка не попадает в интервал, она будет выдана при прохождении следующих ячеек, при этом все вычисленные пересечения сохраняются для последующего использования. Если точки пересечения в ячейке закончились, а реакция не произошла, проверяется взаимодействие на длине пробега в ячейке. Это позволяет уменьшить количество вычисляемых пересечений с примитивами особенно в случае наличия большого количества пустых ячеек. Переход в следующую ячейку вычисляется заранее, так как требуется знание интервала длины пробега частицы в ячейке. Пересечение траектории частицы с ячейкой производится алгоритмом, описанным в [3]. При этом производится предварительный отбор плоскостей ячейки, которые будут пересекаться траекторией. Описанный алгоритм обеспечивается объектом «оптимизационная сетка».

Подготовка групповых данных производится при помощи процессингового кода NJOY с последующим приведением их к внутреннему формату данных кода. Полученные микроскопические сечения хранятся в объектах класса «элемент». Учет самоэкранировки на основании факторов Бондаренко [4], производится на уровне функциональности объекта материал, на основании данных передаваемых ему объектом «связка». Такая схема организована для того, чтобы разделить геометрические данные и данные о материалах. Полное сечение для смеси веществ вычисляется по требованию решателя путем интерполяции по двумерной сетке температура - фоновое сечение по методике, примененной в коде BONAMI. Угловое распределение моделируется с помощью таблицы дискретных углов, вычисление которых производится в соответствии с методикой, предложенной в [9]. В настоящее время применяется разбиение на 702 группы.

2.3 Объект класса "решатель"

Как уже упоминалось в п.2.2, процесс моделирования траектории частицы от рождения до поглощения, может быть разбит на ряд блоков. Эти блоки соответствуют процессу розыгрыша случайных параметров в соответствии с субстохастическими плотностями параметров начального состояния и плотностью перехода между состояниями [1]. В основе архитектуры кода NMC лежит принцип реализации блоков в рамках отдельных объектов с унифицированным интерфейсом. Поскольку в рассматриваемых задачах субстохастическая плотность перехода естественным образом разбивается на плотность вероятности распределения длины свободного пробега и условные плотности вероятности розыгрыша типа вещества, типа взаимодействия, а также плотности вероятности параметров вторичных частиц, для реализации был выбран набор объектов, представленный на рисунке 4.

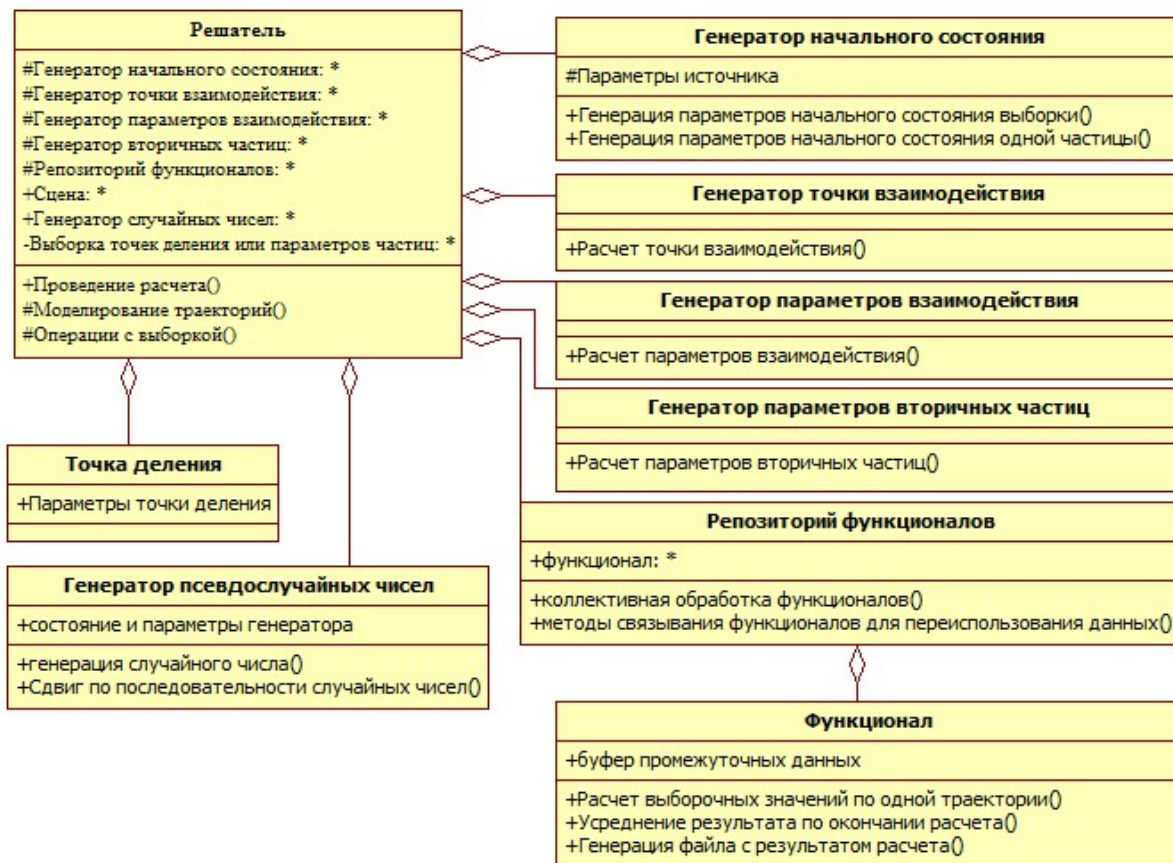


Рис. 4. Объекты для построения алгоритма решателя.

Данный набор объектов обеспечивает реализацию различных весовых и прямых алгоритмов моделирования, путем реализации соответствующих объектов генераторов и функционалов.

В методах объекта класса "решатель" реализуется метод моделирования траекторий, использующий объекты-генераторы со стандартными интерфейсами для получения данных того или иного этапа реализации траектории, либо для расчета необходимых величин на основе этих данных. Ниже кратко перечислены классы, объекты которых реализуют основные блоки алгоритма моделирования:

- Генератор начальной выборки точек деления, предназначенный для генерации значений параметров точек деления или точек взаимодействия согласно распределениям описывающим источник частиц.
 - Генератор точки взаимодействия, предназначенный для вычисления длины свободного пробега и координат следующей точки взаимодействия.
 - Генератор параметров взаимодействия, производящий розыгрыш типа вещества, типа реакции и значений параметров частицы после реакции. Также данный объект определяет количество вторичных частиц, образованных в результате взаимодействия.
 - Генератор параметров вторичных частиц, отвечающий за расчет параметров вторичных частиц, в случае моделирования переноса частиц в делящейся среде в зависимости от параметров реакции.

Функциональный блок, хранящий данные о функционалах, вычисляемых в расчете. Функционалы реализованы в виде объектов с общим интерфейсом, позволяющим вычислять выборочные значения на основе данных о точках взаимодействия траектории, а также содержащих собственные области определения и сетки. Функциональный блок предназначен для передачи данных о траектории в функционалы, вызова методов усреднения и выдачи результатов. Данный объект также отвечает за подготовку функционалов к началу расчета.

Данный набор объектов обеспечивает выполнение однотипных процедур в рамках различных алгоритмов статистического моделирования.

Связь объектов между собой осуществляется через данные на уровне решателя, путем последовательного заполнения полей структуры «данные точки взаимодействия» различными генераторами. На рисунке 5 представлена одна из возможных блок-схем реализации метода поколений с выравниванием для моделирования переноса нейтронов в делящейся среде. Данный алгоритм в более общей форме приведен в [6]. Как видно, все действия, которые могут быть унифицированы для нескольких алгоритмов моделирования траекторий, выделенные красным цветом на блок-схеме, выполняются при помощи перечисленных выше объектов. Оставшиеся действия относятся к конкретному алгоритму моделирования. Для выполнения вычислений все объекты имеют прямой доступ к данным и методам объекта класса «сцена».

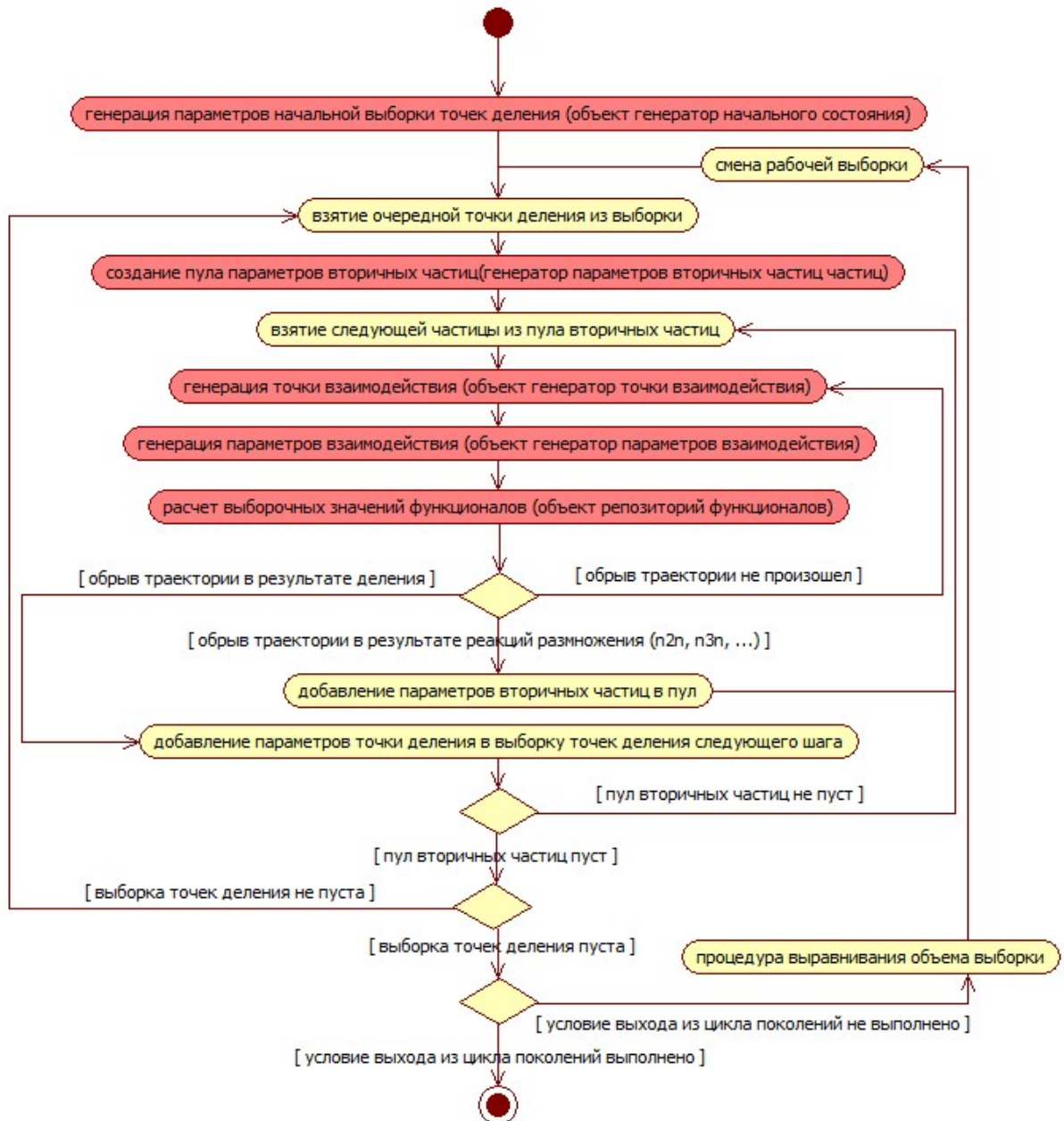


Рис.5. Алгоритм моделирования траекторий по поколениям.

В коде реализовано несколько решателей, предназначенных для задач на собственные значения и задач переноса в делящейся среде с источником. Данные решатели реализуют хорошо известные алгорит-

мы расчета по поколениям с выравниванием [6] и без, а так же алгоритмы прямого построения дерева траекторий [5].

2.4 Интерфейс

Для задания входного файла кода был применен скриптовый язык программирования TCL. Данный подход, по мнению авторов, является наиболее правильным для задания входного файла кода, написанного с применением ООП. Использование скриптового языка программирования дает следующие преимущества:

- дополняет возможности ООП по взаимозаменяемости алгоритмов и связывания с другими кодами;
- позволяет создавать сложные разветвленные сценарии расчета;
- предоставляет возможность проведения автоматической оптимизации параметров моделируемой системы;
- позволяет имитировать входной файл распространенных кодов без модификации основного кода.

Входной файл представляет собой последовательность команд создания настройки и связывания отдельных объектов кода, а также команд инициализации расчета. Особенность входного файла состоит в том, что некоторая часть функциональности объектов кода, включая функции-конструкторы полностью доступна пользователю. Таким образом, создание объекта происходит непосредственно при вызове команды-конструктора во входном файле. Комбинируя различные объекты, можно добиваться определенной функциональности кода, а также оптимального набора объектов для решения узких задач. Помимо стандартного набора объектов пользователь может использовать объекты, реализованные им самостоятельно, что позволяет модифицировать код под особенности задачи без участия разработчика.

3 Валидация кода на различных бенчмарках

Для проверки корректности работы решателей была проведена валидация кода на ряде аналитических малогрупповых бенчмарков, данные для которых приведены в [6-8], а параметры представлены в Таблице 1. Все бенчмарки представлены сферической геометрией. Достигнуто полное совпадение значений коэффициентов критичности.

Таблица 1. Параметры расчетов коэффициента размножения для аналитических задач

Название	ν	Σ_{s0}	Σ_{s1}	Радиус	Σ_{tot}
U-D2O(a)	1,808381	0.464338	0.056312624	18,30563	0,54628
U-D2O(b)	1,841086	0.464338	0.112982569	18,30563	0,54628
U-D2O(c)	1,6964	0.464338	-0.27850447	18,30563	0,54628
-	2,4	1,0	0,0	1,9865	1,0

Валидация работы кода проводилась на ряде бенчмарков базы данных INTERNATIONAL HANDBOOK OF EVALUATED CRITICALITY SAFETY BENCHMARK EXPERIMENTS. Расчеты проводились в групповом приближении с системой констант btl-700, содержащей данные по семистам энергетическим группам. В таблице 2 приведены данные по результатам расчета коэффициента размножения в сборках с быстрым спектром нейтронов.

Таблица 2. Сводная таблица результатов расчетов эффективного коэффициента размножения нейтронов в критических сборках с быстрым спектром

Название	DICE	MCNP	NMC	Название	DICE	MCNP	NMC
hci004	0,997608	0,9989	1,0028	imf005	1,0075	1,0024	1,0016
hmf001	0,99732	0,9990	1,0057	imf007	1,0082	1,003	1,0015

hmf002c1	0,9976	0,9995	0,9933	lst002c2	1,005	1,002	1,000
hmf002c2	1,00273	1,0034	1,0006	pci001	1,0045	1,0041	0,99773
hmf002c3	1,00176	1,0029	0,9961	pmf001	1,0004	0,9950	1,0016
hmf002c4	1,01174	0,9945	0,99001	pmf002	1,0003	0,9948	0,99096
hmf004	1,00674	1,0067	1,0013	pmf006	1,0019	1,0007	0,99553
hmf028	0,998633	0,9993	0,9996	pmf011	1,0015	0,9987	0,99478
icf001	0,999925	0,9992	0,9993	umf001	1,0073	1,0024	0,99935
imf003	1,0017	1,0002	1,0033	umf006	1,0078	1,0041	0,99995
imf004	1,0419	1,0138	0,98345	ust008	1,0072	1,0068	0,99683

В первом столбце таблицы 2 значится код бенчмарка в базе данных «International Handbook Of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments». Второй и третий столбцы содержат данные по экспериментальному значению коэффициента размножения, далее расположены столбцы, содержащие значения коэффициента размножения, рассчитанного при помощи кодов MCNP, KENO-Va, и кодом NMC с групповыми константами, подготовленными на основе библиотек оцененных нейтронных данных ENDF-VII.0.

На рисунках 6 и 7 приведены данные об отклонении значений k_{eff} полученных при помощи кода NMC от значений, приведенных в базе данных DICE, и полученных при помощи кода MCNP, соответственно.

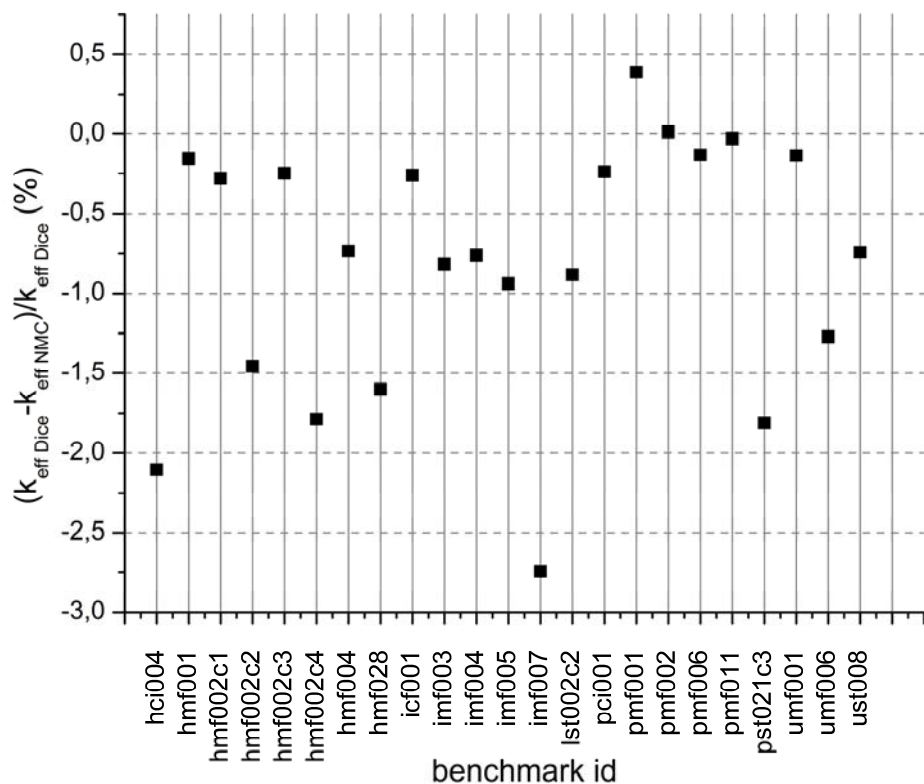


Рис.6. Графическое представление данных валидации, сравнение с данными DICE.

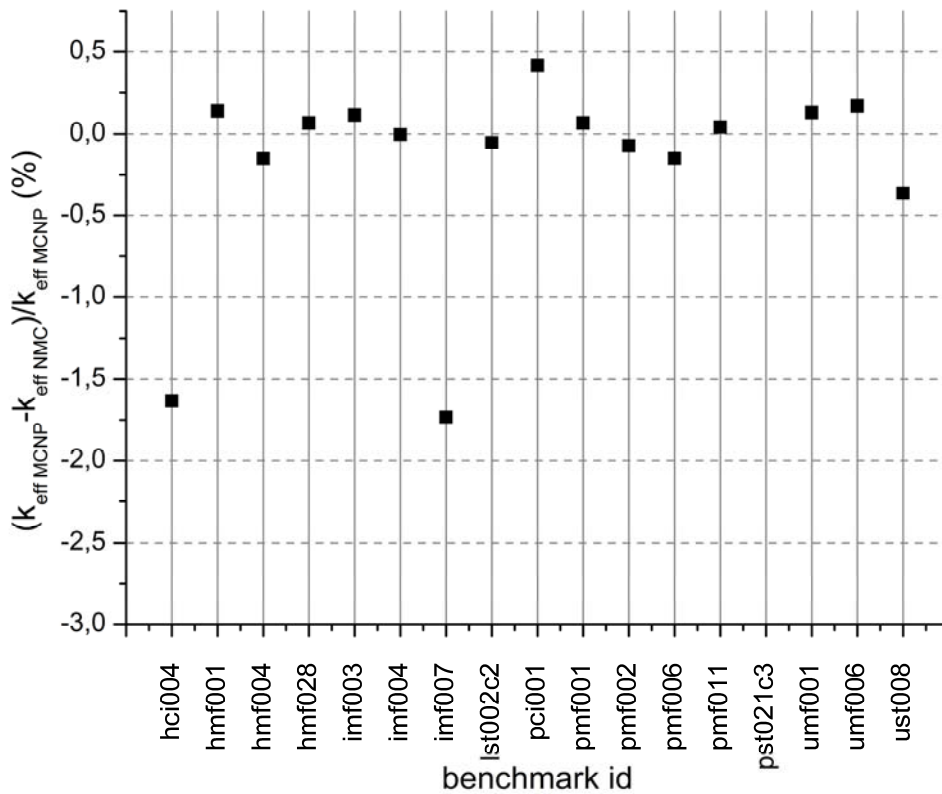


Рис.7. Графическое представление данных валидации, сравнение с результатами кода MCNP.

Сильный разброс отклонений результатов NMC от результатов базы данных DICE объясняется различием использованных систем оцененных нейтронных данных. С другой стороны, отклонения от результатов MCNP малы, так как использованы одинаковые исходные данные. Исключение составляют бенчмарки hci-004 и imf-007. Область неразрешенных резонансов в данных сборках в значительной мере перекрывается с собственным спектром сборки, что вызывает большие ошибки при использовании группового подхода. Полученный результат говорит о том, что вне области неразрешенных резонансов код работает корректно, и получаемая ошибка находится в коридоре 0,5%.

На рисунках 8-15 приведены результаты расчетов спектра плотностей потока нейтронов дляборок с быстрыми, переходными и тепловыми спектрами, а так же со спектрами в резонансной области. Во всех случаях расчетные данные показывают хорошее соответствие с данными DICE, что свидетельствует о корректности расчетов, проводимых с помощью NMC для различных систем. Сравнение спектральных характеристик проводилось для всех систем, перечисленных в таблице 2. Результаты показали аналогичное соответствие. Приведенный перечень бенчмарков включает в себя не только системы с различными спектральными характеристиками, но и системы с широким набором элементов (такие как icf-001).

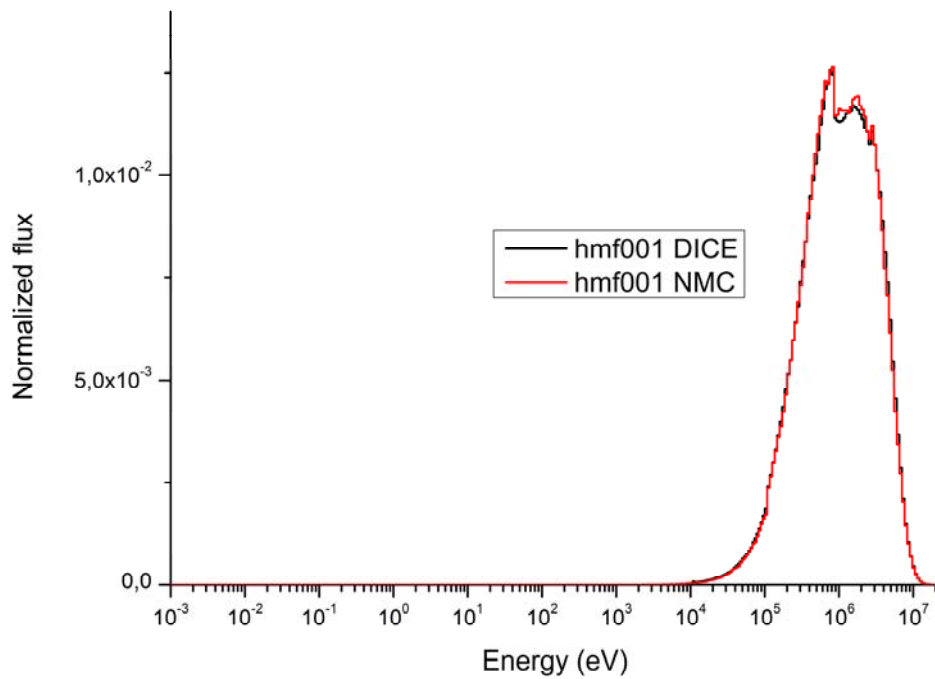


Рис.8. Спектр групповой плотности потока нейтронов. Бенчмарк *hmf-001*.

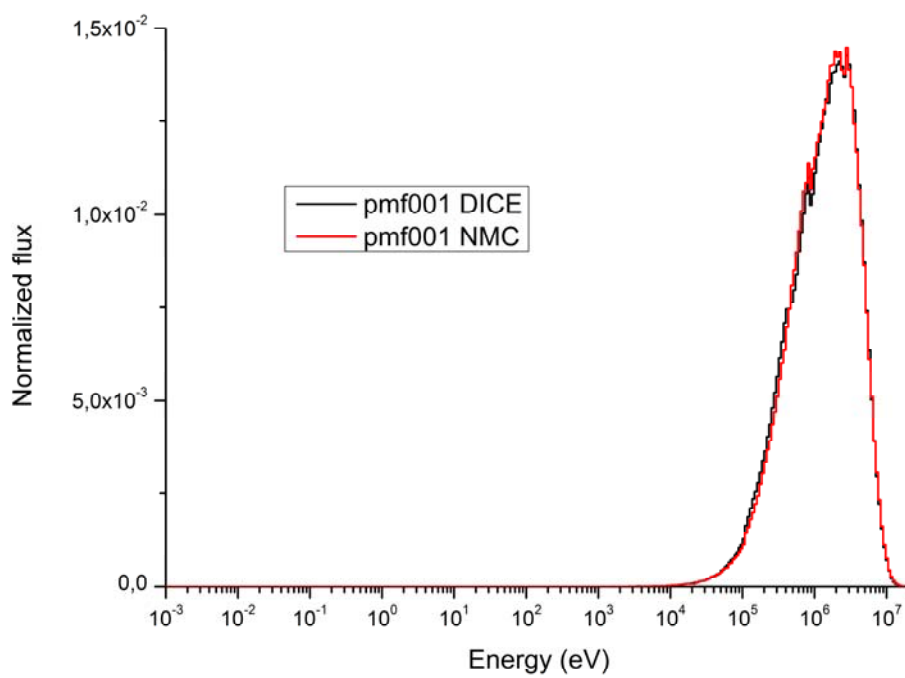


Рис.9. Спектр групповой плотности потока нейтронов. Бенчмарк *pmf-001*.

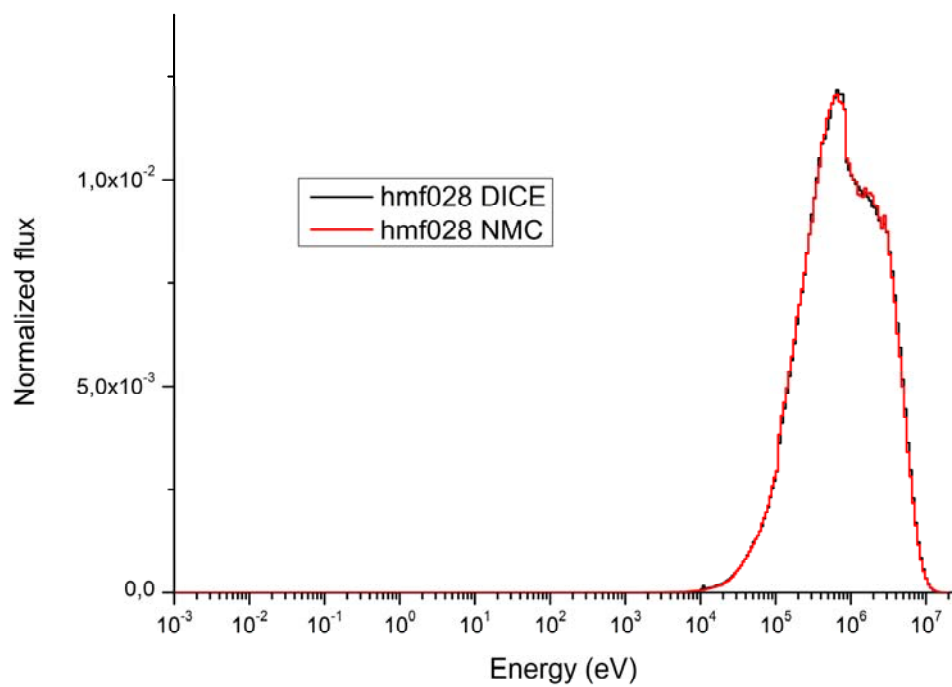


Рис.10. Спектр групповой плотности потока нейтронов. Бенчмарк hmf-028.

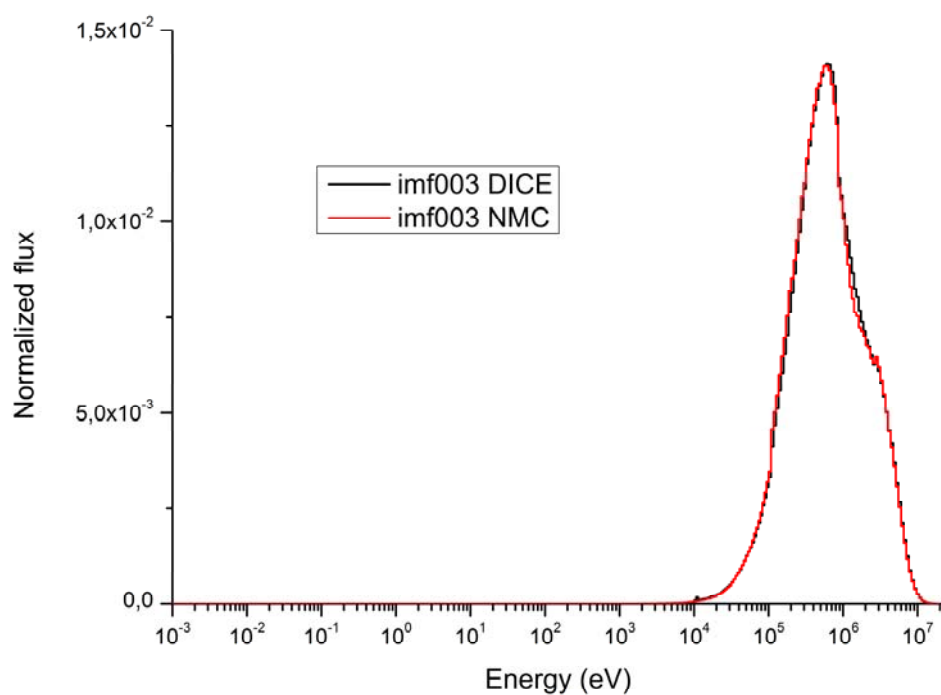


Рис.11. Спектр групповой плотности потока нейтронов. Бенчмарк imf-003.

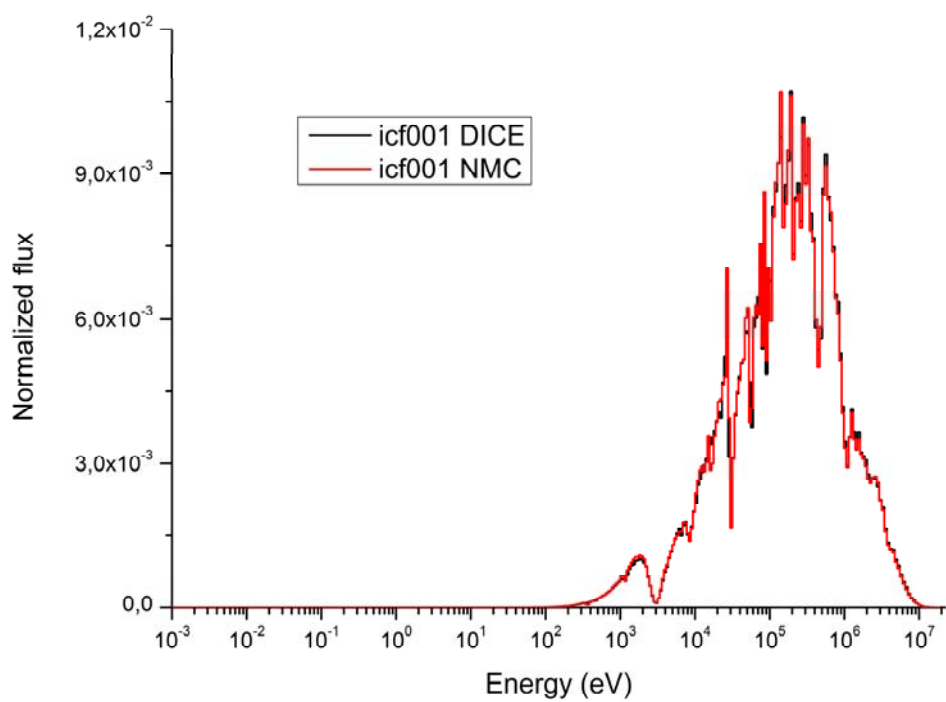


Рис.12. Спектр групповой плотности потока нейтронов. Бенчмарк icf-001.

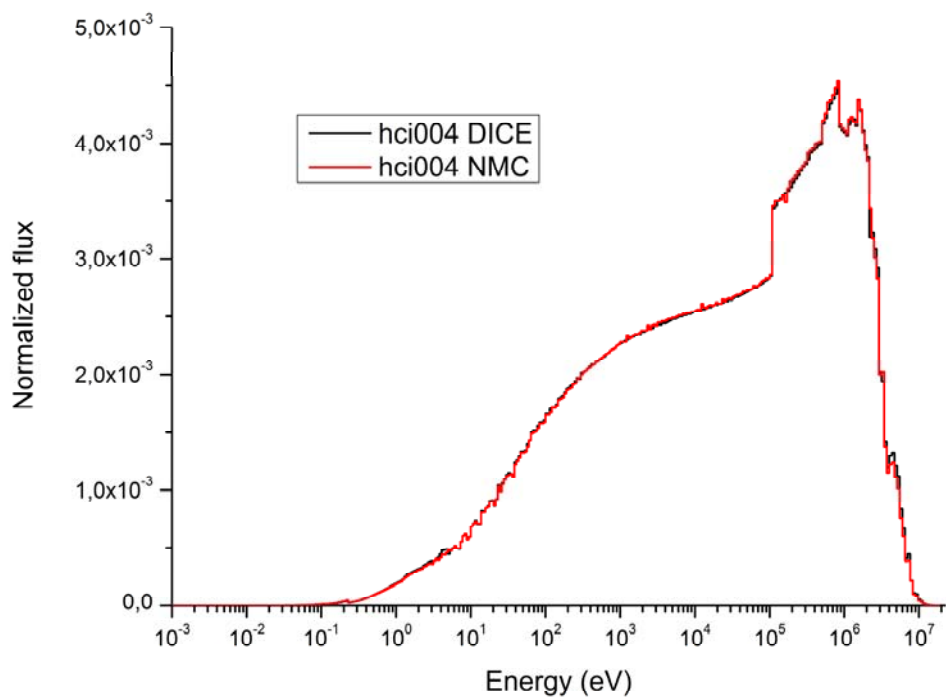


Рис.13. Спектр групповой плотности потока нейтронов. Бенчмарк hci-004.

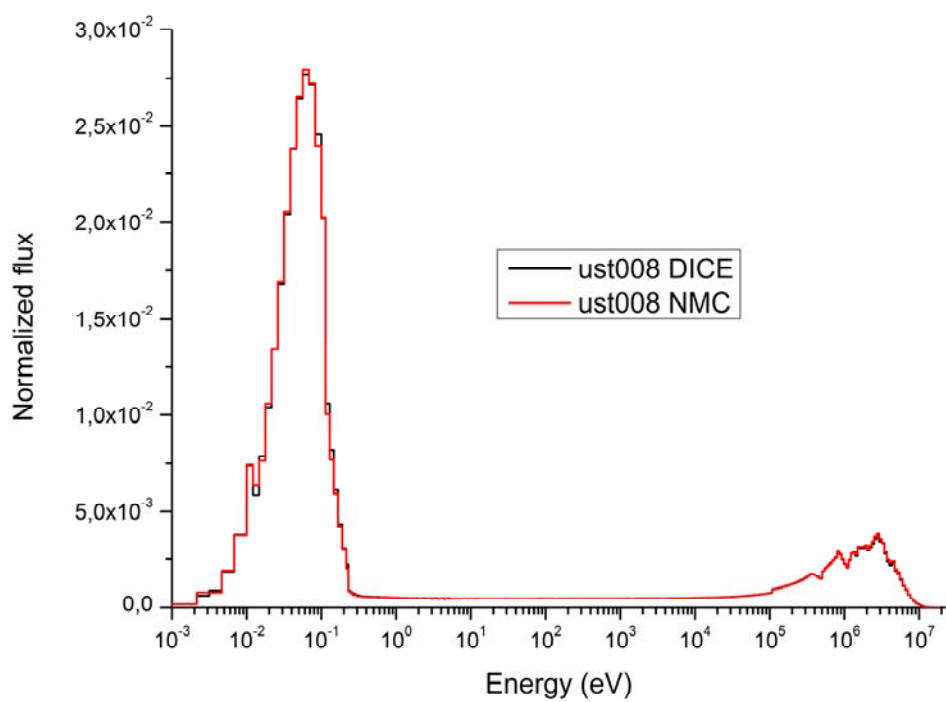


Рис.14. Спектр групповой плотности потока нейтронов. Бенчмарк ust-008.

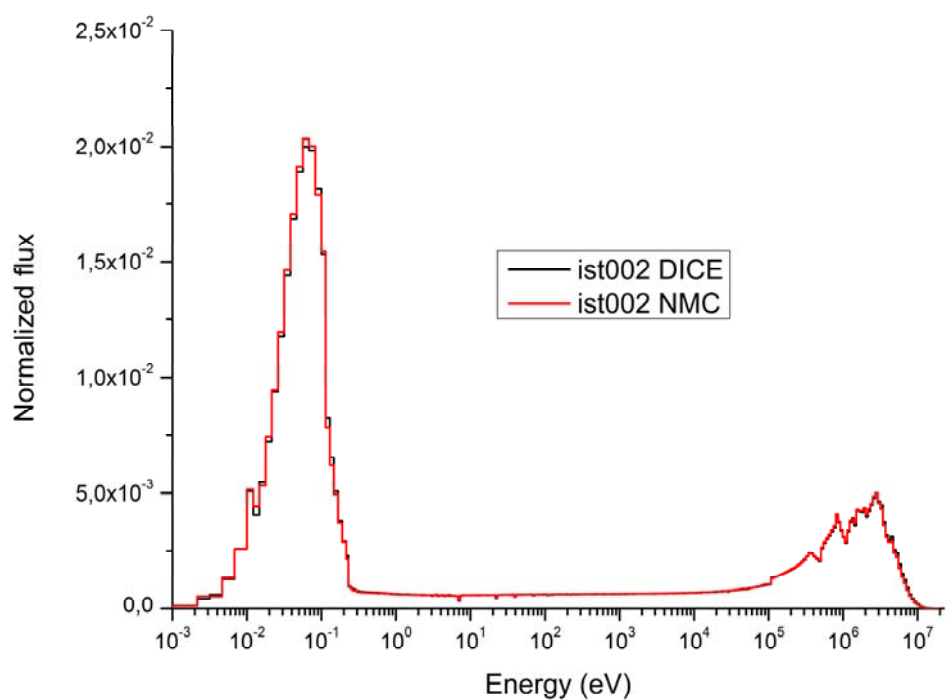


Рис.15. Спектр групповой плотности потока нейтронов. Бенчмарк ist-002.

4 Расчет параметров гибридной системы с плазменным источником нейтронов

В настоящее время особый интерес вызывает возможность создания гибридных ядерно-термоядерных (fission-fusion) систем, которые можно использовать для наработки ядерного топлива из природного урана или тория, дожигания отходов ядерного топливного цикла, для которых невозможны захоронение или выдержка, а также для создания энергетических систем средней и малой мощности (до 500 МВт выходной электрической мощности). Гибридная ядерная система представляет собой подкритический реактор деления, где в качестве внешнего источника нейтронов используется D-T плазма, в которой происходит термоядерная реакция синтеза и генерируются нейтроны с энергией 14 МэВ. Такая установка имеет ряд преимуществ по сравнению с разрабатываемыми рядом зарубежных коллективов Accelerator Driven System (ADS) - системами, где для генерации первичных нейтронов используются реакции, вызываемые ускоренным пучком частиц высокой энергии. Среди преимуществ такой установки можно выделить относительную инженерную простоту конструкции источника нейтронов, сравнительно невысокую мощность, выделяемую на первой стенке, высокий коэффициент передачи нейтронов источника в область ядерных реакций, а также возможность профилирования эмиссионной зоны источника и непрерывный режим работы, в отличие от гибридных систем на базе ускорителей. Еще одно преимущество заключается в том, что термоядерные нейтроны имеют значительно более высокую энергию по сравнению с нейтронами, генерируемыми в источнике ускорительного типа на реакции скалывания. Это дает дополнительные возможности в увеличении эффективности генерации нейтронов в активной зоне реактора при использовании соответствующих теплоносителей (например, свинца) за счет реакций $(n,2n)$ и даже $(n,3n)$. Также нейтроны с энергией 14 МэВ для ряда актинидов имеют сечение деления выше, чем в быстрой (1-3 МэВ) области.

Проектируемый источник нейтронов плазменного типа базируется на газодинамической ловушке (ГДЛ) – простейшей открытой системе для магнитного удержания плазмы. Уникальные характеристики нейтронного источника на основе ГДЛ открывают новые конструкторские возможности для создания подкритического blankets, что ведет к возможности создать компактные и эффективные машины для трансмутации актинидов с возможностью многоцелевого применения в различных этапах ядерного топливного цикла. На рисунке 16 представлена концептуальная схема такой установки.

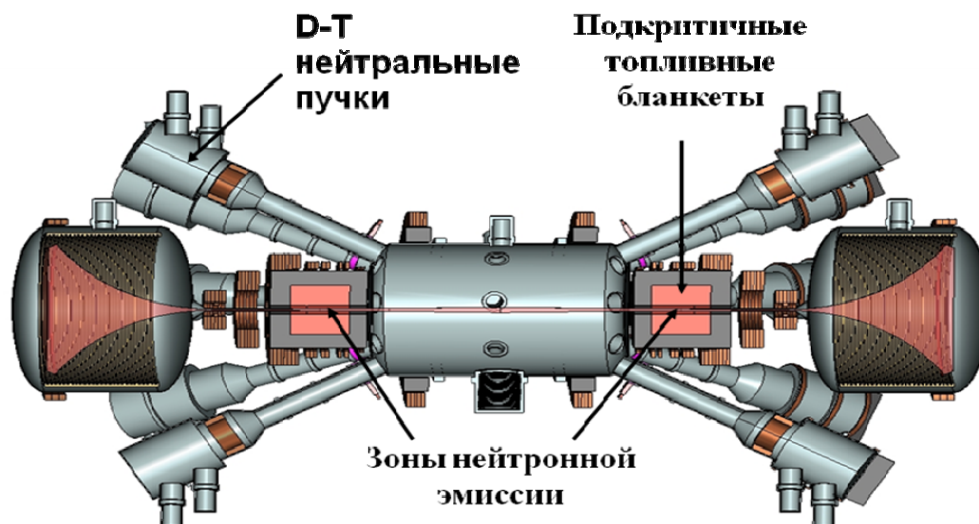


Рис.16. Концептуальная схема ядерно-термоядерной системы с источником нейтронов на базе ГДЛ.

В рамках работ по моделированию гибридных систем с источником нейтронов на базе ГДЛ были проведены расчеты эффективного коэффициента размножения нейтронов в blankets k_{eff} и коэффициента размножения нейтронов источника M_s . Как известно, первая величина характеризует возможность возникновения и скорость развития цепной реакции, а вторая величина – эффективность использования

нейтронов источника. Коэффициент M_s равен числу вторичных нейтронов, образованных в бланкете в результате деления на один нейтрон источника.

Для проверки корректности работы кода при моделировании гибридных систем были проведены расчеты интегральных характеристик, аналогичные расчетам, проведенным в работе [9]. На рисунке 13 представлены схемы гомогенизированного бланкета, для которого проводились расчеты k_{eff} и M_s . Представленный топливный бланкет является аналогом бланкета ADS системы EFIT (European Facility for Industrial Transmutation), адаптированным под использование газодинамической ловушки открытого типа в качестве источника нейтронов. Состав зон бланкета представлен в таблице 3, а результаты расчетов – в таблице 4.

На схеме А рисунка 17 светло-серая зона обозначает зону размножающего буфера, предназначенного для трансформации исходного спектра в спектр, близкий по характеристикам к спектру быстрого реактора, а также для дополнительного размножения нейтронов источника за счет реакций $(n, 2n)$ и $(n, 3n)$. Исходный спектр – узкий пик около энергии в 14 МэВ.

Необходимость наличия данного конструктивного элемента не является очевидной, так как с одной стороны он увеличивает количество нейтронов, приходящих в топливную зону, с другой стороны трансформация спектра может приводить к низким значениям M_s .

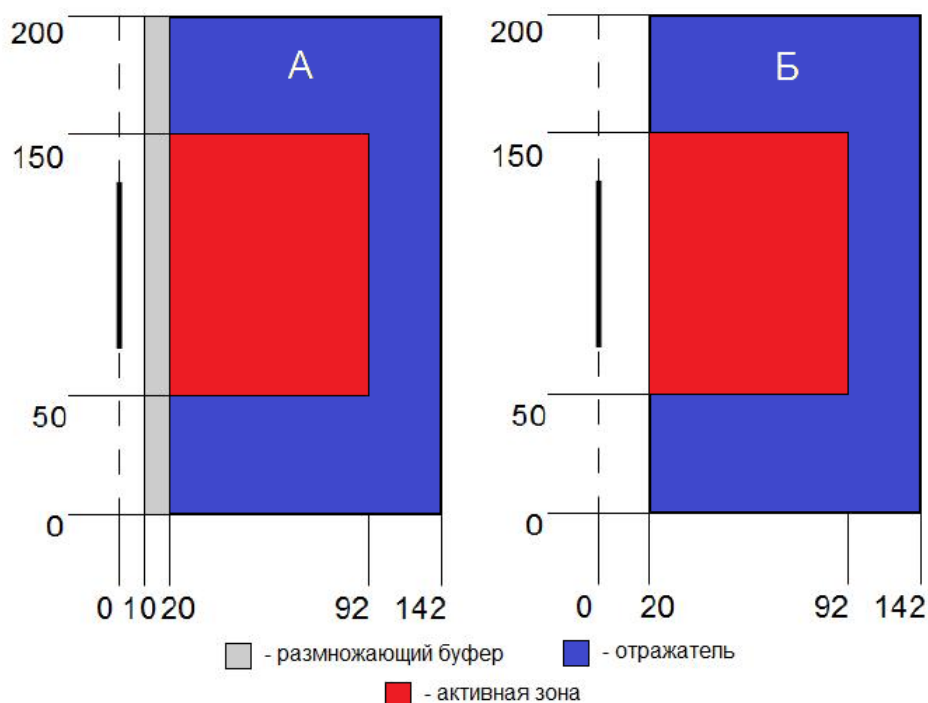


Рис. 17. Схемы топливных бланкетов использованных для проверки корректности нейтронно-физических расчетов гибридных систем. Вариант А с размножающим буфером, вариант Б без размножающего буфера. Размер указан в сантиметрах.

Таблица 3. Состав зон бланкетов изображенных на рисунке 17

Топливная зона				Отражатель		Буфер	
Изотоп	Содержание, 1/(барн*см)	Изотоп	Содержание, 1/(барн*см)	Изотоп	Содержание, 1/(барн*см)	Изотоп	Содержание, 1/(барн*см)
^{237}Np	4.377E-04	^{58}Fe	4.386E-05	^{54}Fe	2.990E-03	Pb	1.320E-02
^{238}Pu	4.226E-05	^{50}Cr	1.128E-04	^{56}Fe	4.560E-02	Bi	1.632E-02
^{239}Pu	5.051E-04	^{52}Cr	2.096E-03	^{57}Fe	1.075E-03		
^{240}Pu	2.321E-04	^{53}Cr	2.328E-04	^{58}Fe	1.344E-04		
^{241}Pu	1.232E-04	^{54}Cr	5.682E-05	^{50}Cr	3.458E-04		
^{242}Pu	9.102E-05	^{58}Ni	6.451E-05	^{52}Cr	6.422E-03		

²⁴¹ Am	8.084E-04	⁶⁰ Ni	2.384E-05	⁵³ Cr	7.134E-04		
^{242m} Am	1.089E-05	⁶¹ Ni	1.015E-06	⁵⁴ Cr	1.741E-04		
²⁴³ Am	5.827E-04	⁶² Ni	3.173E-06	⁵⁸ Ni	1.977E-04		
²⁴² Cm	4.079E-08	⁶⁴ Ni	7.792E-07	⁶⁰ Ni	7.305E-05		
²⁴³ Cm	3.326E-06	Mo	1.163E-04	⁶¹ Ni	3.111E-06		
²⁴⁴ Cm	2.371E-04	Mn	1.114E-04	⁶² Ni	9.724E-06		
²⁴⁵ Cm	3.164E-05	Pb	6.360E-03	⁶⁴ Ni	2.388E-06		
²⁴⁶ Cm	5.355E-07	Bi	7.865E-03	Mo	3.565E-04		
Zr	7.477E-03	¹⁸² W	6.984E-06	Mn	3.412E-04		
¹⁵ N	1.058E-02	¹⁸³ W	3.770E-06	Pb	4.075E-03		
⁵⁴ Fe	9.759E-04	¹⁸⁴ W	8.045E-06	Bi	5.039E-03		
⁵⁶ Fe	1.488E-02	¹⁸⁶ W	7.439E-06	¹⁸² W	2.140E-05		
⁵⁷ Fe	3.507E-04			¹⁸³ W	1.155E-05		
				¹⁸⁴ W	2.465E-05		
				¹⁸⁶ W	2.280E-05		

Таблица 4. Сравнение рассчитанных значений интегральных характеристик с опубликованными в работе [9].

	А - ранее опубликованный	А - расчетный	Б - ранее опубликованный	Б - расчетный
k_{eff}	0,95816	0,9610	0,95008	0,9535
M_s	44,38	51,38	34,75	37,1

Разница между полученными значениями k_{eff} , M_s и значениями, опубликованными в работе [9], объясняется различием использованных при расчете систем оцененных нейтронных данных. В [9] использовались полученные на основе системы JENDL-3.3 константы и код MCNP-4C2. В расчетах, проведенных авторами, использовались групповые константы, подготовленные на базе системы ENDF-VII.0.

Большое различие в значениях коэффициента размножения нейтронов источника объясняется сильной зависимостью M_s от k_{eff} в окрестности единицы, так как $M_s \xrightarrow[k_{eff} \rightarrow 1]{} \infty$.

Характерный спектр плотности потока нейтронов в бланкете гибридной системы представлен на рисунке 18.

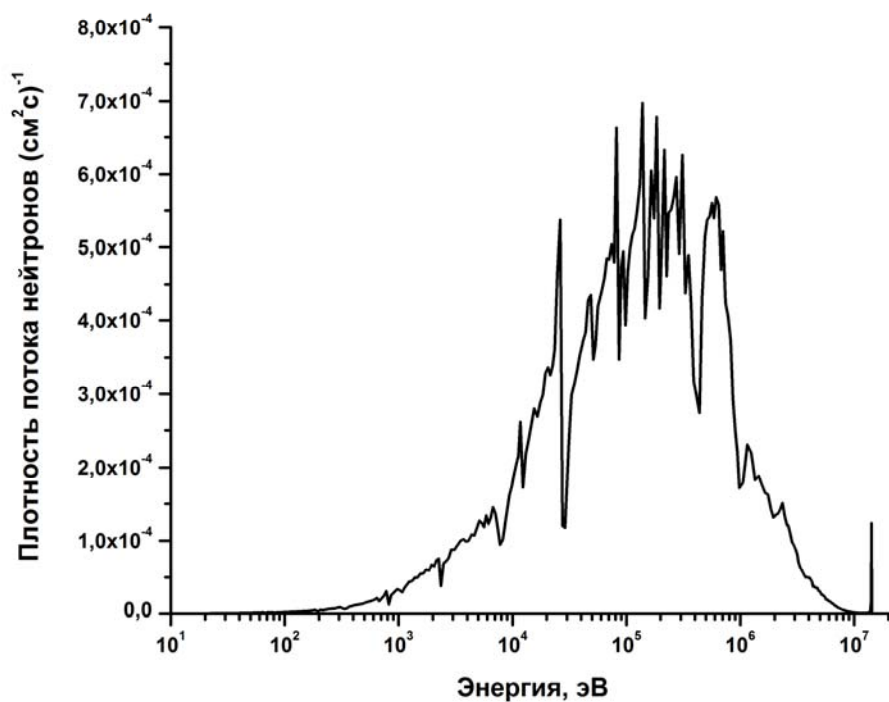


Рис.18. Спектр плотности потока нейтронов в топливном blankets гибридной установки.

В ходе работ также были проведены расчеты пространственного распределения числа реакций в одной из неомогенизованных моделей ядерной части системы, аналогичной приведенной на рисунке 17. Схема расположения элементов и результат расчета приведены на рисунках 19 и 20 соответственно. Состав зон приведен в таблице 5.

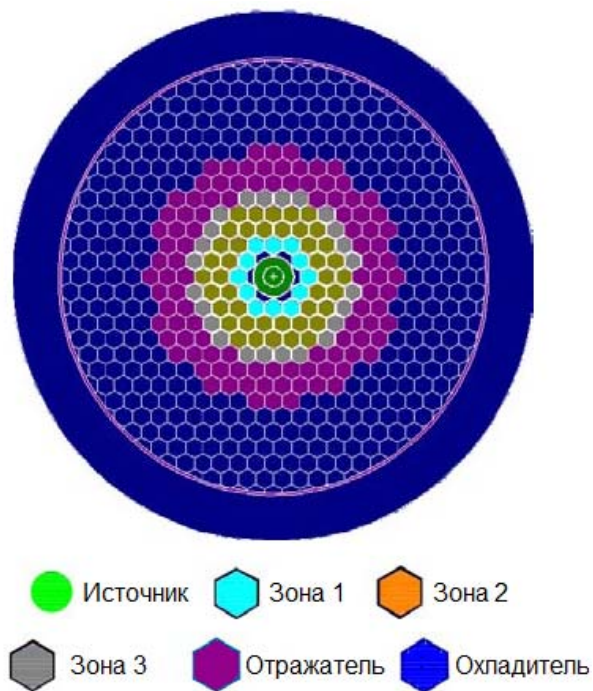


Рис. 19. Схема расположения элементов в топливной зоне установки.

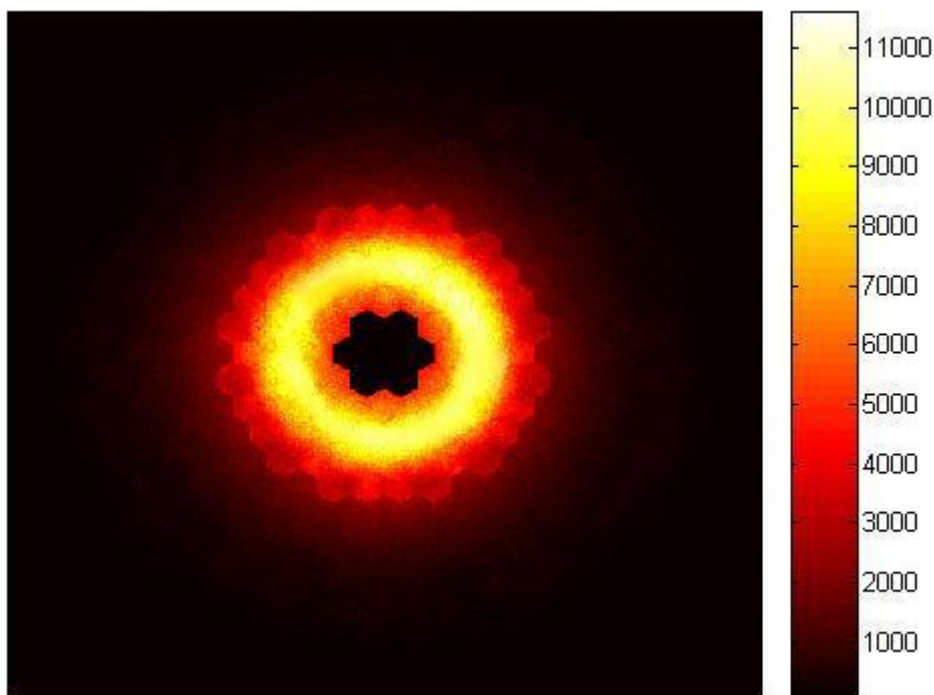


Рис.20. Пространственное распределение числа реакций в неомогенной модели blankets системы для дожига топлива.

Таблица 5. Состав зон неомогенной модели

Топливная зона 1		Топливная зона 2		Топливная зона 3		Отражатель	
Изотоп	Содержание	Изотоп	Содержание	Изотоп	Содержание	Изотоп	Содержание
²³⁷ Np	2.3366E-04	²³⁷ Np	2.7796E-04	²³⁷ Np	3.6135E-04	⁵⁴ Fe	2.990E-03
²³⁸ Pu	2.2560E-05	²³⁸ Pu	2.6837E-05	²³⁸ Pu	3.4888E-05	⁵⁶ Fe	4.560E-02
²³⁹ Pu	2.6964E-04	²³⁹ Pu	3.2076E-04	²³⁹ Pu	4.1699E-04	⁵⁷ Fe	1.075E-03
²⁴⁰ Pu	1.2390E-04	²⁴⁰ Pu	1.4739E-04	²⁴⁰ Pu	1.9161E-04	⁵⁸ Fe	1.344E-04
²⁴¹ Pu	6.5769E-05	²⁴¹ Pu	7.8238E-05	²⁴¹ Pu	1.0171E-04	⁵⁰ Cr	3.458E-04
²⁴² Pu	4.8590E-05	²⁴² Pu	5.7802E-05	²⁴² Pu	7.5143E-05	⁵² Cr	6.422E-03
²⁴¹ Am	4.3155E-04	²⁴¹ Am	5.1337E-04	²⁴¹ Am	6.6738E-04	⁵³ Cr	7.134E-04
^{242m} Am	5.8135E-06	^{242m} Am	6.9157E-06	^{242m} Am	8.9904E-06	⁵⁴ Cr	1.741E-04
²⁴³ Am	3.1107E-04	²⁴³ Am	3.7004E-04	²⁴³ Am	4.8105E-04	⁵⁸ Ni	1.977E-04
²⁴² Cm	2.1775E-08	²⁴² Cm	2.5904E-08	²⁴² Cm	3.3675E-08	⁶⁰ Ni	7.305E-05
²⁴³ Cm	1.7755E-06	²⁴³ Cm	2.1122E-06	²⁴³ Cm	2.7458E-06	⁶¹ Ni	3.111E-06
²⁴⁴ Cm	1.2657E-04	²⁴⁴ Cm	1.5057E-04	²⁴⁴ Cm	1.9574E-04	⁶² Ni	9.724E-06
²⁴⁵ Cm	1.6891E-05	²⁴⁵ Cm	2.0093E-05	²⁴⁵ Cm	2.6121E-05	⁶⁴ Ni	2.388E-06
²⁴⁶ Cm	2.8587E-07	²⁴⁶ Cm	3.4007E-07	²⁴⁶ Cm	4.4209E-07	Mo	3.565E-04
Zr	1.1017E-02	Zr	1.0249E-02	Zr	8.8018E-03	Mn	3.412E-04
¹⁵ N	1.27E-02	¹⁵ N	1.22E-02	¹⁵ N	1.14E-02	Pb	4.075E-03
⁵⁴ Fe	9.759E-04	⁵⁴ Fe	9.759E-04	⁵⁴ Fe	9.759E-04	Bi	5.039E-03
⁵⁶ Fe	1.488E-02	⁵⁶ Fe	1.488E-02	⁵⁶ Fe	1.488E-02	¹⁸² W	2.140E-05
⁵⁷ Fe	3.507E-04	⁵⁷ Fe	3.507E-04	⁵⁷ Fe	3.507E-04	¹⁸³ W	1.155E-05
⁵⁸ Fe	4.386E-05	⁵⁸ Fe	4.386E-05	⁵⁸ Fe	4.386E-05	¹⁸⁴ W	2.465E-05
⁵⁰ Cr	1.128E-04	⁵⁰ Cr	1.128E-04	⁵⁰ Cr	1.128E-04	¹⁸⁶ W	2.280E-05
⁵² Cr	2.096E-03	⁵² Cr	2.096E-03	⁵² Cr	2.096E-03		
⁵³ Cr	2.328E-04	⁵³ Cr	2.328E-04	⁵³ Cr	2.328E-04		
⁵⁴ Cr	5.682E-05	⁵⁴ Cr	5.682E-05	⁵⁴ Cr	5.682E-05		
⁵⁸ Ni	6.451E-05	⁵⁸ Ni	6.451E-05	⁵⁸ Ni	6.451E-05		
⁶⁰ Ni	2.384E-05	⁶⁰ Ni	2.384E-05	⁶⁰ Ni	2.384E-05		

61Ni	1.015E-06	61Ni	1.015E-06	61Ni	1.015E-06		
62Ni	3.173E-06	62Ni	3.173E-06	62Ni	3.173E-06		
64Ni	7.792E-07	64Ni	7.792E-07	64Ni	7.792E-07		
Mo	1.163E-04	Mo	1.163E-04	Mo	1.163E-04		
Mn	1.114E-04	Mn	1.114E-04	Mn	1.114E-04		
Pb	6.360E-03	Pb	6.360E-03	Pb	6.360E-03		
Bi	7.865E-03	Bi	7.865E-03	Bi	7.865E-03		
182W	6.984E-06	182W	6.984E-06	182W	6.984E-06		
183W	3.770E-06	183W	3.770E-06	183W	3.770E-06		
184W	8.045E-06	184W	8.045E-06	184W	8.045E-06		
186W	7.439E-06	186W	7.439E-06	186W	7.439E-06		

С помощью кода NMC были проведены оптимизационные расчеты различных конфигураций топливной части системы с целью определения зависимости интегральных характеристик установки от геометрических параметров бланкета в гомогенной модели.

Были получены зависимости коэффициента размножения нейтронов источника в зависимости от толщины буферной зоны при фиксированном значении коэффициента размножения на одно поколение. Для поддержания значения k_{eff} на одном уровне изменение толщины буфера сопровождалось изменением толщины топливной зоны при фиксированной длине бланкета. Расчеты проводились для более длинной топливной зоны. Конфигурация показана на рисунке 21. Состав зон аналогичен составу, приведенному в таблице 4. Полученная зависимость представлена на рисунке 22.

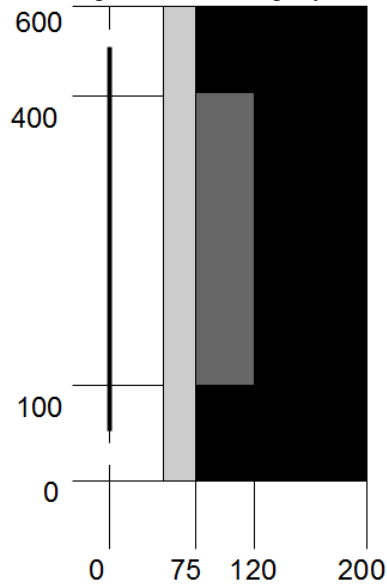


Рис. 21. Базовая схема топливного бланкета при проведении оптимизационных расчетов.

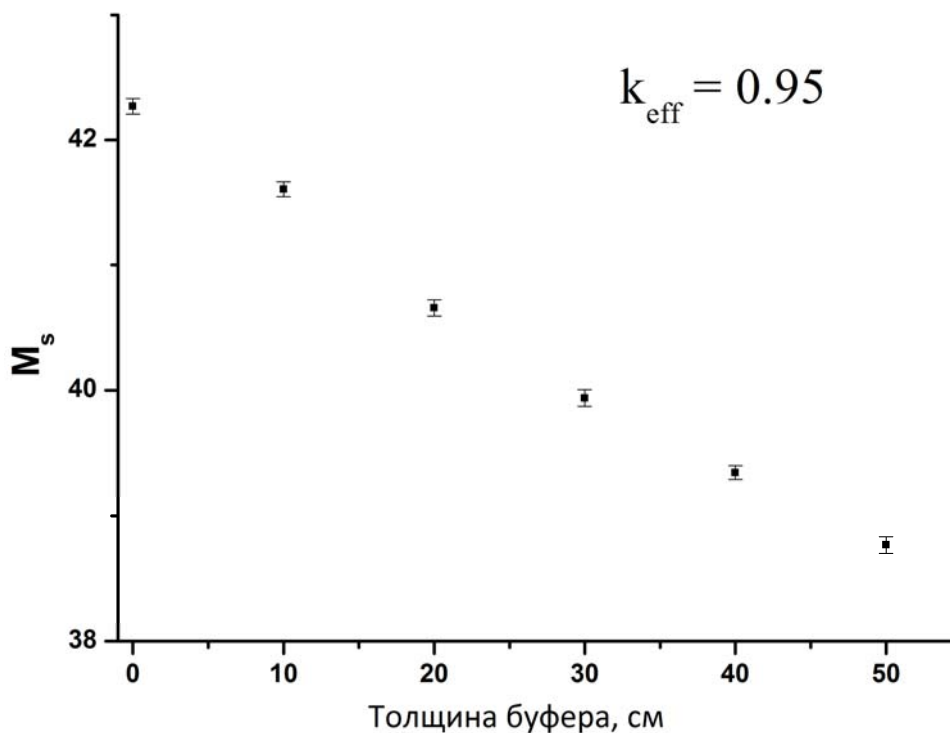


Рис.22. Зависимость коэффициента размножения нейтронов источника от толщины размножающего буфера при фиксированном значении k_{eff} .

Необходимо отметить, что данный результат может интерпретироваться лишь как свидетельство того, что в гибридной установке с данным составом активной зоны и данной геометрической конфигурацией исключение буферного элемента из схемы должно приводить к увеличению выделяемой мощности и к увеличению числа делений на один нейтрон источника. Без проведения детальных расчетов изменения концентраций нуклидов в топливной зоне бланкета нельзя однозначно указать на необходимость использования размножающего буфера, или на отсутствие такой необходимости.

5 Заключение

В рамках работы был разработан и реализован код NMC, позволяющий проводить моделирование процесса переноса нейтронов с использованием группового приближения в системах с высокоэнергетичным спектром нейтронов. Код NMC разработан с помощью методов объектно-ориентированного программирования и разработки. Данный подход в сочетании с использованием объектно-ориентированного интерфейса позволил реализовать код в виде системы взаимозаменяемых блоков, реализующих отдельные этапы моделирования, и имеющих стандартные интерфейсы.

Использование скриптового языка в качестве входного позволило существенно снизить требования к формату входного файла и сделать его более гибким и функциональным, благодаря прямому управлению составными объектами кода и стандартным возможностям языка.

Проведена валидация кода на ряде бенчмарков библиотеки INTERNATIONAL HANDBOOK OF EVALUATED CRITICALITY SAFETY BENCHMARK EXPERIMENTS, поддерживаемой агентством по атомной энергии (NEA). Полученные результаты находятся в хорошем согласии с результатами расчетов других кодов, однако для отдельных бенчмарков имеются отклонения, лежащие в пределах 0,5-1,5%, анализ и устранение которых является задачей для дальнейшей работы.

Проведено моделирование гибридной ядерно-термоядерной системы с источником нейтронов на основе газодинамической ловушки открытого типа. Полученные данные находятся в удовлетворительном согласии с данными других аналогичных расчетов. Проведенные оптимизационные расчеты позволили сделать важные выводы относительно геометрических параметров ядерной части установки.

Расчеты сложных негомогенных систем показали корректность работы геометрического блока в сочетании с высокой скоростью его работы.

Код NMC может быть доработан для использования в расчетах реакторных установок на тепловых нейтронах. Данный код является мощной и гибкой платформой как для реализации и апробации новых методов расчета, так и для проведения расчетов интегральных и локальных параметров нейтронно-физических систем. Данный код предоставляет уникальные возможности адаптации алгоритма решения и типов используемых данных для решения широкого класса задач, как нейтронной физики, так и задач моделирования переноса нейтральных частиц в целом.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ и РФФИ (грант № 12-08-12046-офи_м).

Список литературы

1. Михайлов, Г.А., Войтишек, А.В. Численное статистическое моделирование Методы Монте-Карло. М.: Издательский центр "Академия", 2006.
2. Tomas Möller, Eric Haines and Naty Hoffman, *Real-Time Rendering, Third Edition*, A.K. Peters Ltd., 2008, стр. 755.
3. Christer Ericson, *Real-Time Collision Detection*, Morgan Kaufmann Publishers, 2004, стр. 175.
4. Абагян Л.П., Базазянц Н.О., Бондаренко И.И., Николаев М.Н. Групповые константы для расчета ядерных реакторов. Атомиздат, М., 1964.
5. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. М, Наука, 1973
6. С. М. Ермаков, Г. А. Михайлов. Статистическое моделирование. "Наука", Москва, 1982.
7. Avneet Sood, R. Arthur Forster, and D. Kent Parsons. Analytical benchmark test set for criticality code verifications. *Progress in nuclear energy*. 2003.
8. Dahl, E.V. and Sjostrand, N.G. Eigenvalue Spectrum of Multiplying Slabs and Spheres for Monoenergetic Neutrons with Anisotropic Scattering, *Nuclear Science and Engineering*, 1979.
9. K. Noack, A. Rogov, A.V. Anikeev, A.A. Ivanov, E.P. Kruglyakov, Yu.A. Tsidulko. The GDT-based fusion neutron source as driver of a minor actinides burner. *Annals of Nuclear Energy* 35, pp. 1216-1222, 2008.
10. Nicolas Martin, Joachim Miss and Alain Hébert, Moment-based probability tables for angular anisotropic scattering. *Annals of Nuclear* 38, pp. 1125-1132, 2011.