

СТАТЬИ

УДК 621.039.514.001.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗОТОПНОЙ КИНЕТИКИ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Давиденко В.Д., Цибульский В.Ф. (ИЯР РНЦ «Курчатовский ин-т», г. Москва)

Развитие вычислительной техники существенно расширяет использование статистических методов реакторных расчетов, которые позволяют фактически напрямую моделировать физические процессы и предоставляют новые возможности. До недавнего времени метод Монте-Карло в реакторных расчетах использовался преимущественно для решения условно-критической задачи, расчета полей нейтронов, фотонов и энерговыделения в стационарных задачах, в задачах защиты от излучения. Постепенно область применения статистических методов расширяется на нестационарные задачи, в первую очередь, на расчет выгорания топлива.

Значительное увеличение вычислительных ресурсов позволило адаптировать программы Монте-Карло для решения уравнений изотопной кинетики. На основании статистических методов определяют поля нейтронов и скорость реакций отдельных изотопов, которые являются исходными данными программы детерминированного решения уравнений изотопной кинетики, например, ORIGEN, рассчитывающей изменение изотопного состава на заданном временном шаге [1]. Получают новые изотопные концентрации материалов в реакторе и переходят к расчету следующего шага.

На сегодняшний день есть несколько комплексов, реализующих подобный алгоритм, — MCU-REA [2], CONKEMO [3], UNKMK [4, 5]. Иногда этот подход определяют как расчет выгорания методом Монте-Карло, вкладывая в такое определение прецизионный характер решения, т.е. прямое моделирование физического процесса, хотя, очевидно, это не совсем так. Интегрирование уравнений выгорания и получение нового изотопного состава осуществляются на основе детерминированных расчетов в предположении постоянства свойств в течение временного шага, а статистические вычисления исполь-

зуются только для расчета скоростей реакций в материалах топливной композиции.

В настоящей работе представлен прямой (аналоговый) алгоритм решения задач изотопной кинетики, реализующий возможности статистического метода.

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

Взаимодействие нейтрона с ядрами среды приводит к делению ядра, радиационному захвату или рассеянию нейтрона, вследствие чего выделяется некоторая энергия. Последняя составляющая в силу ее относительной малости редко учитывается в расчетах, тем не менее и ею не следует пренебрегать, поскольку она может оказать заметное влияние в нестационарных процессах.

При мощности реактора P за время ΔT выделяется энергия $P\Delta T$ — суммарная энергия всех взаимодействий нейтронов с ядрами среды. Суммируя число реакций каждого сорта, можно получить как число нуклидных превращений, так и выделившуюся при этом энергию. Изменение ядерной концентрации нуклидов можно учитывать при каждом акте столкновения нейтронов с ядром или после расчета всех столкновений за время ΔT . Временной интервал ΔT должен быть достаточно малым, чтобы не внес-

ти значимые погрешности в расчет изотопной концентрации за счет временных задержек появления новых изотопов в течение временного шага.

Прямая схема расчета, при которой ядерная концентрация изменяется после каждого акта взаимодействия, даже с учетом перспектив развития вычислительных мощностей вряд ли реализуема. С одной стороны, это потребует больших вычислительных затрат, с другой, зафиксировать изменение числа ядер на единицу невозможно ввиду ограниченности представления чисел в ЭВМ.

Для практической реализации прямого алгоритма расчета изотопной кинетики сделаем простые оценки. Энергия деления одного ядра равна примерно $E_f = 200$ МэВ, энергонапряженность топлива, например, в водо-водяных реакторах составляет около 300 Вт/см³. Учитывая, что 1 МэВ = $1,6 \cdot 10^{-13}$ Дж, для расчета 1 с облучения необходима регистрация примерно 10^{13} делений в 1 см³ топлива. Разумно считать, что зафиксированная ядерная реакция произошла не с одним, а с n нейтронами. Например, если произошло деление, то выход энергии будет равен nE_f , и это приведет к образованию $2n$ осколков деления. Если произошел захват нейтрона, то это будет n радиационных захватов с соответствующим выделением энергии. Аналогичным образом следует менять и концентрацию нуклидов, т.е. расчет динамики ядерной концентрации с пакетом нейтронов $N = 10^{13}/n$ будет эквивалентен расчету реального процесса длительностью ~ 1 с. Таким образом, размер пакета определяет временной шаг реального процесса. Логично изменение ядерной концентрации фиксировать после расчета одного или нескольких пакетов историй таким образом, чтобы временной интервал, соответствующий пакету, был небольшим. В практической реализации именно размер пакета, приходящегося на единицу временного интервала, по существу и будет определять дискретность описания реального процесса выгорания.

Для нестабильных нуклидов, которые появляются в результате ядерных реакций, следует рассчитывать их радиационный распад. Разумно предположить, что нуклиды равномерно появляются в течение времени ΔT , следовательно, среднее время их распада на этом временном интервале будет равно половине временного

шага. Это касается только тех нуклидов, которые образовались в интервале ΔT . Распад нуклидов, присутствующих в системе на начало интервала, учитывается обычным способом.

Представленный способ расчета изотопной кинетики достаточно просто реализовать с помощью любых программ Монте-Карло. Приведем основные расчетные формулы. Для простоты описания будем считать, что перенос нейтронов рассчитывается в многогрупповом приближении.

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

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

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

Просуммировав уравнение (1) по всем группам, определим изменение концентрации i -го нуклида за счет поглощения. Для других типов взаимодействия уменьшение концентрации аналогично.

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

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

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

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

$$\Delta \rho_i^+ = \frac{\sum_{j=1}^J \omega_{ji} \sigma_j^g \rho_j}{\sum_{j=1}^J \sigma_j^g \rho_j} \frac{\sum_{j=1}^J \sigma_j^g \rho_j}{\sum_{j=1}^J (\sigma_{cj}^g + \sigma_{fj}^g) \rho_j} N_n^g,$$

где ω_{ji} — выход нуклида i за счет деления нуклида j ; σ_{jj}^g , σ_{cj}^g — микросечение деления и захвата соответственно.

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

$$E = \sum_{j=1}^J \Delta\rho_{cj}^- E_{cj} + \sum_{j=1}^J \Delta\rho_{jj}^- E_{jj},$$

где E_{cj} , E_{jj} — энергия, выделяющаяся при радиационном захвате и делении соответственно.

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

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

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

где λ — постоянная распада; t — время.

Для соблюдения баланса числа материнских и дочерних ядер для разного времени распада изотопов целесообразно ввести дополнительный функционал, определяющий число распавшихся ядер. Число распавшихся за время t ядер определяется как

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

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

$$\rho(t) = \rho(0) - \Delta\rho_d, \quad (2)$$

реальное изменение концентрации нуклида определяется как

$$\Delta\rho_d^r = \rho(0) - \rho(t),$$

где $\rho(t)$ определено по формуле (2). В математическом смысле $\Delta\rho_d$ и $\Delta\rho_d^r$ равны. Но, учитывая ограниченное число знаков машинного представления числа, эти величины будут отличаться.

В общем случае величина $\Delta\rho_d - \Delta\rho_d^r$ характеризует число распавшихся ядер за время t , которые нельзя учесть в изменении концентрации нуклида из-за ограниченности числа в машинном представлении. Эту величину разумно запомнить, на следующем временном шаге к ней добавить очередное значение $\Delta\rho_d$. С каждым временным шагом накопленное число «неучтенных» ядер будет нарастать, а когда их число позволит зафиксировать дисбаланс в ядерной концентрации нуклида, это автоматически будет сделано. Таким образом, даже небольшое изменение ядерной концентрации на временном шаге не приведет к дисбалансу. Накопление неучтенных ядер следует проводить также для всех типов взаимодействия.

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

Практическая реализация рассмотренной методики расчета изотопной кинетики методом Монте-Карло не вызывает сложностей. Следует только тщательно выбирать параметры расчета, к которым относятся число историй в пакете при расчете задачи переноса нейтронов и число n , характеризующее одну историю.

Данный алгоритм реализован в комплексе UNK. На основе изложенного подхода была разработана программа UNKMKB. Входящая в комплекс программа UNKMK решения уравнения переноса методом Монте-Карло в многогрупповом приближении была дополнена соответствующими вычислительными модулями. В этом же комплексе реализован и традиционный алгоритм, при котором из расчетов методом Монте-Карло берутся скорости реакций и в последующем решается система дифференциальных уравнений изотопной кинетики. Приведем некоторые результаты расчета выгорания обоими способами.

Рассматривалась стандартная ТВС ВВЭР-1000 с урановым топливом обогащением 4% и мощностью 108 Вт/см³. Традиционный расчет осуществлялся с шагом 1 сут, со статистикой 10 млн историй на расчет одного состояния. Статистическая погрешность оценки коэффициента размножения в процессе расчета выгорания составляла 0,02—0,04%. Прямое моделирование изотопной кинетики с помощью

программы UNKMKВ проводилось с шагом 400 тыс. историй. Один расчетный нейтрон был эквивалентен 10^{14} «реальным» нейтронам. С учетом мощности ТВС концентрация нуклидов изменялась примерно каждые 0,07 сут. В данном расчете статистическая погрешность коэффициента размножения составила 0,1%.

В табл. 1, 2 приведены коэффициент размножения и концентрация наиболее важных с точки зрения анализа кинетики нуклидов в зависимости от выгорания. Следует отметить, что расчеты методом Монте-Карло с учетом изотопной кинетики выполняются так, что для каждого нового пакета нейтронов изотопный состав отличается от предыдущего, т.е. близко к происходящему в реакторе. Таким образом, этот метод обеспечивает наиболее адекватное реальности моделирование выгорания, что следует иметь в виду при сравнении расчетов двумя способами. Строго говоря, в расчетах с учетом постоянной коррекции изотопного состава оценка коэффициента размножения соответствует его среднему значению на временном интервале, а в традиционных расчетах последовательного решения уравнения переноса и уравнений изотопной кинетики коэффициент размножения рассчитывается для ядерной концентрации на начало временного шага. При небольшом временном шаге эти значения должны совпадать в пределах статистических по-

грешностей.

В табл. 1 представлены расчеты с более подробным временным шагом на интервале до 5 сут, когда достигается стабилизация концентрации ксенона и нептуния, в табл. 2 — расчеты для основных делящихся нуклидов после первых 5 сут облучения.

Как следует из представленных результатов, оба расчета совпадают в пределах статистических погрешностей, что демонстрирует принципиальную возможность предлагаемого подхода к решению задач изотопной кинетики.

Прямое моделирование изотопной кинетики методом Монте-Карло логично в том смысле, что обеспечивает адекватное описание реального физического объекта. Такой способ расчета сбалансирован по ядрам среды в течение всего временного интервала для любой статистики, устанавливает точное соответствие между числом регистрируемых реакций и числом нейтронов. В традиционном подходе при последовательном решении задач переноса нейтронов для расчета скоростей реакций и на следующем этапе решения дифференциальных уравнений изотопной кинетики могут накапливаться ошибки вследствие как неточности скоростей реакций, так и численного интегрирования.

Представленная методика использует статистические возможности описания не только стационарных, но и динамических процессов,

Т а б л и ц а 1. Коэффициент размножения и ядерная концентрация ^{135}Xe и ^{239}Np в зависимости от времени облучения

τ, сут	$K_{эф}$		$^{135}\text{Xe}, 10^{-9}$		$^{239}\text{Np}, 10^{-6}$	
	UNKMK	UNKMKВ	UNKMK	UNKMKВ	UNKMK	UNKMKВ
1	1,3130	1,3125	8,41	8,55	0,43	0,44
2	1,3073	1,3068	9,56	9,62	0,75	0,76
5	1,3031	1,3021	9,67	9,71	1,32	1,32
25	1,2886	1,2885	9,74	9,76	1,73	1,73
200	1,2077	1,2067	9,88	9,91	1,85	1,86
500	1,0928	1,0891	9,28	9,31	2,09	2,08

Т а б л и ц а 2. Коэффициент размножения и ядерная концентрация ^{235}U и ^{239}Pu в зависимости от времени облучения

τ, сут	$K_{эф}$		$^{235}\text{U}, 10^{-4}$		$^{239}\text{Pu}, 10^{-5}$	
	UNKMK	UNKMKВ	UNKMK	UNKMKВ	UNKMK	UNKMKВ
5	1,3031	1,3021	8,568	8,568	0,118	0,120
50	1,2778	1,2769	8,060	8,059	2,135	2,137
100	1,2544	1,2551	7,531	7,531	4,032	4,031
300	1,1650	1,1630	5,702	5,703	8,962	8,939
500	1,0928	1,0891	4,238	4,240	11,41	11,35

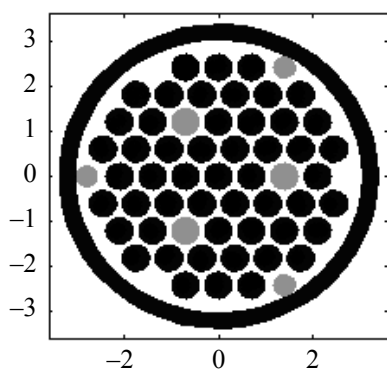
протекающих в реакторе. Выявление ее преимуществ или недостатков требует, конечно, существенно большей практики использования в сравнении с представленными здесь результатами.

Следует отметить, что рассмотренная задача с прямым моделированием изотопной кинетики решается примерно в 10 раз медленнее, чем традиционным способом. Но с увеличением числа выгорающих зон это отношение должно уменьшаться. На наш взгляд, наибольший эффект прямого моделирования с точки зрения быстродействия расчета может быть достигнут в задачах с большим (десятки и более тысяч) числом выгорающих зон.

Задачи с сильными поглотителями, например, гадолинием являются одними из наиболее сложных с точки зрения получения насыщенного результата. Большое сечение поглощения ^{157}Gd (250 кб в тепловой точке) требует повышенной детализации не только пространства (радиуса и угла), но и временного шага. Учитывая фактически непрерывный контроль изменения нейтронного спектра и изотопной концентрации, предлагаемый подход позволяет за разумное время получить насыщенный результат для задач такого типа.

Рассмотрим в качестве примера выгорание гадолиниевого стержня в модельной ТВС водяного реактора. Геометрия ТВС показана на рис. 1. Всего в ТВС две группы гадолиниевых стержней по три в каждой. На рис. 1 они выделены серым цветом. Периферийные поглотители имеют немного меньший размер, чем центральные. Твэлы и поглотители располагаются в циркониевом канале. Внутреннее и внешнее пространство заполнено водой.

Для детализации хода выгорания в каждом гадолиниевом поглотителе было введено при-



Р и с. 1. Геометрия ТВС с гадолиниевым поглотителем

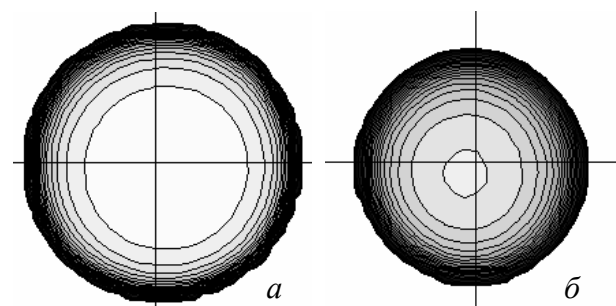
мерно 1500 регистрационных зон (по радиусу и углу) с характерным размером зоны 0,1 мм. Временной шаг расчета составлял ~0,25 сут, статистика одного шага — 5 млн историй.

Распределение концентрации ^{157}Gd в поглотителях на момент выгорания 30 ГВт-сут/т тяж. ат. приведено на рис. 2. Визуализация распределения концентрации (линии уровня одинаковой концентрации гадолиния) была сделана на основе расчетных данных. Более темные области на рис. 2 соответствуют большему выгоранию гадолиния. Периферийный поглотитель (меньшего размера) выгорает быстрее, чем центральный. Оба поглотителя выгорают неравномерно по азимуту. Пример носит иллюстративный характер и демонстрирует возможности совместного решения задач переноса нейтронов и изотопной кинетики с использованием статистических алгоритмов.

Развитие современной вычислительной базы с многопроцессорными ЭВМ открывает возможности создания виртуальных моделей реальных объектов на основе алгоритмов прямого моделирования физических процессов. Понятно, что современная практика в большом числе случаев удовлетворена уже развитым программным обеспечением. В то же время очевидно, что реальные успехи в области математического моделирования, иногда кажущиеся и неоправданными, достигаются в направлении создания математического аппарата, максимально приближающего виртуальный образ к реальности. И развитие в этом направлении вне зависимости от степени удовлетворенности существующей практики достигнутым будет продолжаться.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **ORIGEN-S**: SCALE System Module to Calculate Fuel Depletion, Actinide Transmutation, Fission Product Buildup and Decay and Associated Radiation Source Term. NUREG/CR-02000, Rev. 5, v. 2. ORNL, Sept. 1995.



Р и с. 2. Распределение концентрации ^{157}Gd в поглотителе центрального (а) и периферийного стержня (б)

2. Гомин Е.А. Статус MCU-4. — Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов, 2006, вып. 1, с. 6—32.
3. Забродская С.В., Хомяков Ю.С., Цибуля А.А. Расчет выгорания с использованием программы ORIGEN в вычислительном комплексе CONKEMO. — Там же. Сер. Ядерные константы, 2001, вып. 2, с. 98—102.
4. Davidenko V.D., Tsibulsky V.F. Monte-Carlo method in UNK complex. — In: Conf. Mathematics and Computations, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and

Biological Applications. France, Sept. 12—15 2005, CD-ROM № 124.

5. Давиденко В.Д., Цибульский В.Ф. Расчет выгорания в программе UNK. — В сб.: Нейтроника-1999. Обнинск, 2000, с. 200—203.

Поступила в Редакцию 10.06.10

УДК 621.039.562

РАЗВИТИЕ КОНЦЕПЦИИ ИЗМЕРЕНИЯ РЕАКТИВНОСТИ КАК ПРОЦЕДУРЫ КОРРЕКЦИИ ЕЕ РАСЧЕТНЫХ ЗНАЧЕНИЙ

Абрамов Б.Д. (ГНЦ РФ — ФЭИ им. А.И. Лейпунского, г. Обнинск)

В статье предлагаются новые одно- и многоточечные методы расчетно-экспериментального определения реактивности ядерного реактора, вытекающие из концепции измерения реактивности как процедуры коррекции ее расчетных значений и уточняющие известные методы математической обработки результатов измерения реактивности.

Уравнение кинетики нейтронов в реакторе запишем в виде

$$(1/v)\partial\phi/\partial t + M\phi = F_0\phi + \sum_j \lambda_j \int_{-\infty}^t \exp[-\lambda_j(t-t')] F'_j \phi_{t'} dt' + Q, \quad (1)$$

где $\phi(x, E, \Omega, t)$ — поток нейтронов; v — их скорость; $M = \Omega \nabla + \Sigma - S$, $F = F_0 + F_d$ — операторы, описывающие процессы утечки, поглощения, рассеяния и генерации мгновенных F_0 и запаздывающих нейтронов $F_d = \sum_j F_j$ в реакторе; λ_j — постоянная распада предшественника запаздывающих нейтронов; j — его номер; $Q(x, E, \Omega, t)$ — внешний источник; F' , $\phi_{t'}$ — значения оператора F и функции ϕ в момент времени t' [1—7].

Наряду с уравнением (1) для описания критических и некритических реакторов используются также условно-критические уравнения

$$M\psi = F\psi/k_{\text{эф}}; \quad M^*\psi^* = F^*\psi^*/k_{\text{эф}}, \quad (2)$$

где $\psi(x, E, \Omega, t)$ — положительное решение первого уравнения (2); $\psi^*(x, E, \Omega, t)$ — функция ценности нейтронов деления; M^* , F^* — сопря-

женные к M , F операторы; $k_{\text{эф}}$ — эффективный коэффициент размножения нейтронов в реакторе. Зависимость функций ψ , ψ^* и коэффициента $k_{\text{эф}}$ от времени определяется соответствующей (параметрической) зависимостью макроскопических сечений.

Уравнения обратной кинетики, называемые также уравнениями инверсной кинетики или обращенными решениями уравнения кинетики, используются обычно для вычисления реактивности по известным значениям потока. Напомним эти понятия.

Умножая уравнение (1) на функцию ψ^* , второе уравнение (2) — на ϕ , интегрируя по всем x, E, Ω и вычитая результаты один из другого, получаем уравнение

$$\rho = \bar{\beta} + \alpha\Lambda - \left[\bar{Q} + \sum_j \lambda_j \int_{-\infty}^t \exp[-\lambda_j(t-t')] \times \right. \\ \left. \times \langle \psi^*, F'_j \phi_{t'} \rangle dt' \right] / \langle \psi^*, F\phi \rangle \quad (3)$$

для определения реактивности $\rho = 1 - 1/k_{\text{эф}}$ по известному потоку ϕ , где

$$\alpha(t) = \frac{\langle \psi^*, v^{-1} \partial\phi/\partial t \rangle}{\langle \psi^*, v^{-1} \phi \rangle}; \quad \Lambda = \frac{\langle \psi^*, v^{-1} \phi \rangle}{\langle \psi^*, F\phi \rangle}; \\ \bar{\beta} = \frac{\langle \psi^*, F_d \phi \rangle}{\langle \psi^*, F\phi \rangle}; \quad \bar{Q} = \langle \psi^*, Q \rangle;$$

$\langle, \rangle$ — обозначение интеграла по x, E, Ω .