

# ПРОГРАММА MCU-REA И ЕЁ БИБЛИОТЕКА КОНСТАНТ DLC/MCUDAT-2.1.

## 1. НАЗВАНИЕ ПРОГРАММЫ

MCU-REA

## 2. ЭВМ

Программа разработана как машинно-независимая. Она апробирована на процессорах, программно совместимых с Pentium.

## 3. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Программа рассчитывает нейтронно-физические характеристики (НФХ): эффективный коэффициент размножения, скорости реакций и другие функционалы потока нейтронов в ячейках, полячейках и фрагментах активных зон различных типов реакторов с заданным составом.

Обеспечена возможность расчётного предсказания изотопного состава материалов реактора и его размножающих свойств в зависимости от длительности кампании.

Для каждого рассчитываемого состояния реактора методом Монте-Карло решается однородное уравнение переноса нейтронов с использованием оценённых ядерных данных и с детальным описанием законов взаимодействия нейтронов с веществом, без упрощений в описании геометрии и с учётом различных граничных условий: утечка через внешнюю поверхность, белое и зеркальное отражение, трансляционная симметрия, поворотная симметрия. Кроме того, можно вычислять функционалы потока нейтронов для конечных и бесконечных неоднородных гетерогенных решёток с трансляционной симметрией и с утечкой, заданной вектором баклинга, в частности, решать задачу об асимптотической решётке (проблема Бенуа).

## 4. МЕТОД РЕШЕНИЯ

Для решения однородного кинетического уравнения используются традиционные аналоговые методы Монте-Карло в приближении постоянного числа нейтронов  $M$ , задаваемого пользователем, в поколениях. Решение в этом приближении сходится к точному при увеличении  $M$ .

При моделировании историй нейтронов программа позволяет использовать непрерывное, поточечное и ступенчатое описание

зависимости сечений от энергии и учитывать непрерывное изменение энергии при столкновениях.

Программа MSU-REA позволяет рассчитывать трёхмерные системы практически любой сложности.

Система представляется как объединение однородных геометрических зон, каждая из которых описывается как булевская комбинация набора простых тел (метод комбинаторной геометрии). В распоряжении пользователя имеются 19 типов тел (цилиндры, конус, шар, параллелепипеды и т.д.). Описание геометрии систем, содержащих регулярно повторяющиеся элементы, облегчается использованием методов размножения, позволяющих задать повторяющийся элемент только один раз. Для систем, содержащих элементы со сложной внутренней структурой, существует возможность их многоуровневого иерархического описания. Иерархичность задания геометрии уменьшает объём задаваемой информации и снижает требования к объёму оперативной памяти компьютера. Правильный учёт симметрии и краевых условий также облегчает задание геометрии.

При описании зон методом комбинаторной геометрии все их границы состоят из кусков плоскостей или квадратичных поверхностей, поэтому при наличии деталей с более сложными граничными поверхностями их необходимо аппроксимировать очень большим числом зон. В программе реализован метод выровненных сечений, позволяющий снять это ограничение и описывать, например, образующиеся в процессе эксплуатации изгибы кассет реактора ВВЭР-1000.

Специальный алгоритм позволяет учитывать эффекты двойной гетерогенности, когда тепловыделяющие элементы содержат десятки тысяч микротвэлов.

Каждой геометрической зоне пользователь приписывает ряд атрибутов: номер материала, номер регистрационной зоны (произвольное объединение геометрических зон из одинаковых материалов), номер регистрационного объекта (например, ячейка или кассета) и пр. Эти атрибуты могут генерироваться автоматически с использованием минимальной информации, задаваемой пользователем.

Для проверки входных данных, описывающих геометрию моделируемой системы, можно визуализировать изображение заданной системы в виде плоских сечений с последовательным изображением материальных зон, регистрационных зон и объектов. Возможна генерация цветных и черно-белых изображений. Выбор сечений, типов областей, числа цветов и места рисунка (экран или файл на диске) устанавливаются пользователем в интерактивном режиме.

Рассчитываются следующие величины: коэффициент размножения нейтронов; эффективная доля запаздывающих нейтронов; набор малогрупповых констант (включая коэффициенты диффузии) и потоки нейтронов для регистрационных объектов; скорости ядерных реакций для отдельных нуклидов и их смесей в заданных пространственно-энергетических интервалах.

Пространственные интервалы - это регистрационные зоны,

регистрационные объекты или система в целом. Границы энергетических интервалов задаются пользователем.

Для расчета коэффициента размножения нейтронов используются оценки по числу столкновений, числу поглощений и комбинированные оценки. Остальные функционалы вычисляются с помощью оценок по столкновениям или по длине пробега в зоне.

Расчёты могут проводиться с использованием спектра деления мгновенных и запаздывающих нейтронов. В быстрой энергетической области учитывается анизотропия упругого рассеяния в системе центра масс, имеется возможность проводить моделирование неупругих столкновений с учётом законов, содержащихся в файлах оценённых нейтронных данных.

В области неразрешённых резонансов сечения вычисляются по подгрупповым параметрам или с использованием  $f$ -факторов Бондаренко. В области разрешённых резонансов допускается как подгрупповое, так и поточечное описание сечений. Сечения наиболее важных нуклидов описываются “бесконечным” числом точек, так как при моделировании в каждой энергетической точке они вычисляются по резонансным параметрам. Такая схема позволяет проводить расчёты непосредственно с использованием данных по резонансным параметрам без предварительной подготовки таблиц сечений и оценивать температурные эффекты через аналитические зависимости сечений от температуры.

Моделирование столкновений в области термализации проводится по выбору пользователя либо в многогрупповом транспортном приближении, либо по модели непрерывного изменения энергии с учётом корреляций между изменением энергии и угла при рассеянии. В обоих случаях учитываются химические связи, тепловое движение ядер, а для упругого рассеяния и когерентные эффекты.

Расчёт изменения изотопного состава реактора в процессе кампании проводится при заданной зависимости средней мощности энерговыделения в системе от времени. При решении дифференциальных уравнений изменения изотопного состава зон в зависимости от времени используются усреднённые по каждой выгорающей зоне одногрупповые сечения нейтронно-физических реакций. Пользователь задаёт временные интервалы, в начале которых эти сечения должны уточняться. Общая схема расчёта такова. Для заданного начального состояния системы решается задача на критичность методом Монте-Карло и вычисляются все НФХ, в частности, одногрупповые сечения и мощности энерговыделения для всех выгорающих зон. Затем для каждой зоны аналитически решаются уравнения выгорания для первого временного интервала и определяются средние плотности изотопов в зонах в зависимости от времени, в частности, для конечного момента времени интервала. После этого вновь решается уравнение критичности для нового изотопного состава системы и вычисляются новые значения сечений, а также функция распределения энерговыделения по зонам. Процесс повторяется циклически для всех временных интервалов до окончания кампании. Выгорающие зоны могут содержать делящиеся изотопы или поглотители. Определяется содержание

в выгорающих зонах всех изотопов актинидов и продуктов деления с периодом полураспада более чем одни сутки, всего более 250 изотопов. Выгорающими поглотителями могут быть практически любые традиционные и перспективные материалы.

Точность расчёта задач на критичность методом Монте-Карло ограничена в основном точностью используемых библиотек ядерных данных.

Константное обеспечение программы MCU-REA составляет банк нейтронно-физических данных DLC/MCUDAT-2.1, состоящий из следующих разделов:

- ❖ ACE - библиотека поточечно представленных нейтронно-физических констант, получаемых при помощи программы NJOY из файлов оценённых ядерных данных;
- ❖ БНАБ/MCU - расширенная и модифицированная версия 26-групповой системы констант БНАБ-93;
- ❖ LIPAR - резонансные параметры в области полностью разрешённых резонансов;
- ❖ MULTIC - разработанная в ФЭИ 301-групповая библиотека, содержащая, в частности, данные по температурной зависимости подгрупповых параметров в области неразрешённых резонансов;
- ❖ ТЕПКОН - многогрупповые сечения в области термализации;
- ❖ ВЕСТА - библиотека для моделирования столкновений нейтронов с ядрами с учётом непрерывного изменения энергии нейтронов в области термализации, заданная в форме вероятностных таблиц, полученных из законов рассеяния  $S(\alpha, \beta)$ .

DLC/MCUDAT-2.1 содержит информацию для 281 изотопа (см. Таблицу 1).

## 5. ОГРАНИЧЕНИЯ СЛОЖНОСТИ ЗАДАЧИ

Принципиальных ограничений по сложности моделируемых систем программа не имеет.

## 6. ТИПИЧНОЕ ВРЕМЯ СЧЁТА

Время счёта зависит от изотопного состава материалов реактора, сложности геометрии моделируемой системы и необходимой статистической погрешности оцениваемых функционалов.

Время счёта зависит и от квалификации пользователя при выборе физической модели, задании исходных данных для описания геометрии и при выборе временного шага расчёта выгорания.

## 7. ОСОБЕННОСТИ ПРОГРАММЫ

Программа MCU-REA разработана в рамках проекта MCU и является развитием программы MCU-RFFI/A, аттестованной Госатомнадзором РФ для расчёта критичности широкого класса размножающих нейтроны систем.

Рабочая версия программы для каждой конкретной ЭВМ и установленной на ней операционной системы генерируется из модулей пакета MCU с использованием его препроцессора. Исходные текстовые файлы модулей записаны на входном языке препроцессора, который перед трансляцией модулей и сборкой программы генерирует текстовые файлы на языке Фортран-77. Параметры, определяющие объём памяти, необходимой для решения некоторого класса задач, задаются пользователем при генерации программы с учётом их сложности.

Из особенностей программы по сравнению с другими программами семейства MCU отметим возможность расчёта изменения эффективного коэффициента размножения, изотопного состава топлива и выгорающих поглотителей в процессе работы реактора и существенное расширение геометрических возможностей за счёт включения подмодуля выровненных сечений.

Следует также отметить, что программа графического представления информации была практически полностью переписана и теперь имеет современный оконный интерфейс. По сравнению с предыдущей версией, помимо удобства доступа, обеспечен ряд новых возможностей, например, получение координат точки, указанной курсором, выделение фрагментов картинки и многое другое.

Существенно расширена библиотека констант.

## 8. ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЕ И СОПУТСТВУЮЩИЕ ПРОГРАММЫ

Для модификации библиотек констант тепловых нейтронов ТЕПКОН и ВЕСТА используются разработанные в рамках проекта MCU программы TERMAC и СТЕНЬ.

## 9. СОСТОЯНИЕ ПРОГРАММЫ

Программа депонирована в ОФАП ЯР в декабре 1998 г. (инв. № 429 ОФАП ЯР).

Она аттестована Госатомнадзором РФ для расчётов нейтронно-физических характеристик реакторов типа ВВЭР в процессе кампании (см. [1]).

Имеется полная документация по программе [2, 3].

## 10. ССЫЛКИ

1. Аттестационный паспорт программного средства. Программа MCU-REA с библиотекой констант DLC/MCUDAT-2.1. Регистрационный

номер паспорта аттестации ПС 115 от 2.03.2000. Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности Федерального надзора России по ядерной и радиационной безопасности, Москва, 2000.

2. Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Брызгалов В.И. и др. Программа MCU-REA с библиотекой ядерных данных DLC/MCUDAT-2.1. Отчёт РНЦ КИ инв. №36/7-98, Москва, 1998.
3. Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Брызгалов В.И. и др. Верификация программы MCU-REA. Отчёт РНЦ КИ инв. №36/8-98, Москва, 1998.

## 11. ТРЕБОВАНИЯ К ЭВМ

Тексты программы MCU-REA с библиотекой DLC/MCUDAT-2.1 и описанием программы занимают 440 Мбайт на жёстком диске, минимальный объём оперативной памяти – 64 Мбайт.

Основной объём памяти на диске (405 Мбайт) занимает библиотека ACE, так что, если нет необходимости подробного расчета в верхней части энергетического спектра, то необходимый объём памяти на диске может быть значительно уменьшен.

## 12. ЯЗЫКИ ПРОГРАММИРОВАНИЯ

Фортран-77.

Исходные текстовые файлы модулей программы на входном языке препроцессора пакета MCU, который генерирует текстовые файлы на языке Фортран-77.

Графический интерфейс программы визуализации написан на языке C++.

## 13. ОПЕРАЦИОННАЯ СИСТЕМА

MS-DOS, WINDOWS-95, WINDOWS-98, WINDOWS-NT .

## 14. ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Программа разработана в РНЦ-"Курчатовский институт" при поддержке концерна "Росэнергоатом". Распространяется на коммерческой основе. По вопросам приобретения программы следует обращаться к Е.А. Гомину (телефон 1969811, адрес электронной почты: [gomin@adis.vver.kiae.ru](mailto:gomin@adis.vver.kiae.ru)).

## 15. АВТОРЫ ПРОГРАММЫ

Абагян Л.П., Алексеев Н.И., Брызгалов В.И., Глушков А.Е., Гомин Е.А.,

Гуревич М.И., Калугин М.А., Майоров Л.В., Марин С.В., Шкаровский Д.А., Юдкевич М.С.

## 16. ИМЕЮЩИЕСЯ МАТЕРИАЛЫ

Программа MSU-REA в форме препроцессорных текстов на языке MCUREP, текстов на языке Фортран-77 и нескольких вариантов загрузочных модулей под конкретные тип ЭВМ, операционную систему, транслятор и распределение памяти. Полная документация на русском и английском языках и верификационный отчёт на бумаге и электронном носителе в виде текстов редактора WORD.

## 17. РУБРИКИ И КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Уравнение переноса, нейтрон, критичность, метод Монте-Карло, оценённые ядерные данные, выгорание, вычислительная программа.

Таблица 1. Содержание библиотеки DLC/MCUDAT-2.1.

N	Изотоп	N	Изотоп	N	Изотоп	N	Изотоп
1	1-H - 1	54	38-SR-89	107	49-IN-115	160	57-LA-139
2	1-H - 2	55	38-SR-90	108	50-SN	161	57-LA-140
3	2-HE	56	39-Y - 89	109	50-SN-116	162	58-CE-140
4	2-HE- 3	57	39-Y -90	110	50-SN-117	163	58-CE-141
5	2-HE- 4	58	39-Y -91	111	50-SN-118	164	58-CE-142
6	3-LI- 6	59	40-ZR	112	50-SN-119	165	58-CE-143
7	3-LI- 7	60	40-ZR-90	113	50-SN-120	166	58-CE-144
8	4-BE- 9	61	40-ZR-91	114	50-SN-122	167	59-PR-141
9	5-B	62	40-ZR-92	115	50-SN-123	168	59-PR-141
10	5-B - 10	63	40-ZR-93	116	50-SN-124	169	59-PR-142
11	5-B - 11	64	40-ZR-94	117	50-SN-125	170	59-PR-143
12	6-C	65	40-ZR-95	118	50-SN-126	171	60-ND-142
13	7-N	66	40-ZR-96	119	51-SB-121	172	60-ND-143
14	8-O	67	41-NB- 93	120	51-SB-123	173	60-ND-144
15	9-F-19	68	41-NB-95	121	51-SB-124	174	60-ND-145
16	11-NA-23	69	42-MO	122	51-SB-125	175	60-ND-146
17	12-MG	70	42-MO- 95	123	51-SB-126	176	60-ND-147
18	13-AL-27	71	42-MO- 96	124	52-TE-122	177	60-ND-148
19	14-SI	72	42-MO- 97	125	52-TE-123	178	60-ND-150
20	15-P -31	73	42-MO- 98	126	52-TE-124	179	61-PM-147
21	16-S	74	42-MO- 99	127	52-TE-125	180	61-PM-148
22	17-CL	75	42-MO-100	128	52-TE-126	181	61-PM148m
23	19-K	76	43-TC- 99	129	52-TE-127m	182	61-PM-149
24	20-CA	77	44-RU-100	130	52-TE-128	183	62-SM
25	22-TI	78	44-RU-101	131	52-TE-129m	184	62-SM-147
26	23-V	79	44-RU-102	132	52-TE-130	185	62-SM-148
27	24-CR	80	44-RU-103	133	52-TE-132	186	62-SM-149
28	25-MN-55	81	44-RU-104	134	53-I -127	187	62-SM-150
29	26-FE	82	44-RU-105	135	53-I -129	188	62-SM-151
30	27-CO-59	83	44-RU-106	136	53-I -131	189	62-SM-152
31	28-NI	84	45-RH-103	137	53-I -135	190	62-SM-153
32	29-CU	85	45-RH-103	138	54-XE-128	191	62-SM-154
33	30-ZN	86	45-RH-105	139	54-XE-129	192	63-EU
34	31-GA	87	46-PD-104	140	54-XE-130	193	63-EU-151
35	34-SE-77	88	46-PD-105	141	54-XE-131	194	63-EU-152
36	34-SE-78	89	46-PD-106	142	54-XE-132	195	63-EU-153
37	34-SE-80	90	46-PD-107	143	54-XE-133	196	63-EU-154
38	34-SE-82	91	46-PD-108	144	54-XE-134	197	63-EU-155
39	35-BR-79	92	47-AG	145	54-XE-135	198	63-EU-156
40	35-BR-81	93	47-AG-107	146	54-XE-136	199	64-GD
41	36-KR-80	94	47-AG-109	147	55-CS-133	200	64-GD
42	36-KR-82	95	47-AG-110m	148	55-CS-133	201	64-GD-152
43	36-KR-83	96	47-AG-111	149	55-CS-134	202	64-GD-154
44	36-KR-84	97	48-CD	150	56-CS-135	203	64-GD-155
45	36-KR-85	98	48-CD-110	151	55-CS-136	204	64-GD-156
46	36-KR-86	99	48-CD-111	152	55-CS-137	205	64-GD-157
47	37-RB-85	100	48-CD-112	153	56-BA-	206	64-GD-158
48	37-RB-86	101	48-CD-113	154	56-BA-134	207	64-GD-160
49	37-RB-87	102	48-CD-114	155	56-BA-135	208	65-TB-159
50	38-SR	103	48-CD-115m	156	56-BA-136	209	65-TB-160
51	38-SR-86	104	48-CD-116	157	56-BA-137	210	66-DY
52	38-SR-87	105	49-IN	158	56-BA-138	211	66-DY

N	Изотоп	N	Изотоп	N	Изотоп	N	Изотоп
53	38-SR-88	106	49-IN-113	159	56-BA-140	212	66-DY-156
213	66-DY-158	231	74-W	249	92-U -236	267	96-CM-246
214	66-DY-160	232	74-W -180	250	92-U -237	268	96-CM-247
215	66-DY-161	233	74-W -182	251	92-U -238	269	96-CM-248
216	66-DY-162	234	74-W -183	252	93-NP-237	270	98-CF-252
217	66-DY-163	235	74-W -184	253	93-NP-239	271	00-FP-233
218	66-DY-164	236	74-W -186	254	94-PU-236	272	00-FP-235
219	68-ER	237	75-RE	255	94-PU-238	273	00-FP-239
220	68-ER-166	238	79-AU-197	256	94-PU-239	274	FP-U5-St*
221	68-ER-167	239	82-PB	257	94-PU-240	275	FP-U5-SL**
222	68-ER-168	240	83-BI-209	258	94-PU-241	276	FP-U8-St*
223	72-HF	241	90-TH-230	259	94-PU-242	277	FP-U8-SL**
224	72-HF-174	242	90-TH-232	260	95-AM-241	278	FP-PU9-St*
225	72-HF-176	243	91-PA-231	261	95-AM-242m	279	FP-PU9-SL**
226	72-HF-177	244	91-PA-233	262	95-AM-243	280	FP-PU1-St*
227	72-HF-178	245	92-U -232	263	96-CM-242	281	FP-PU1-SL**
228	72-HF-179	246	92-U -233	264	96-CM-243		
229	72-HF-180	247	92-U -234	265	96-CM-244		
230	73-TA-181	248	92-U -235	266	96-CM-245		

\* - St- сумма стабильных слабо поглощающих (не выгорающих) изотопов.

\*\* - SL- сумма коротко живущих изотопов.