

## РОКОКО – СИСТЕМА КОНСТАНТНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ РАСЧЕТА РЕАКТОРОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

**Г.М. Жердев, Т.С. Кислицина, М.Н. Николаев**

*АО «ГНЦ РФ-ФЭИ им. А.И. Лейпунского»*

*249033 Россия, Калужская обл., г. Обнинск, пл. Бондаренко, 1*

**Р**

Система РОКОКО [1] предназначена для константного обеспечения расчетов методом Монте-Карло как нейтронных полей, так и порождаемых ими полей гамма-излучения. Исходной базой ядерных данных, используемых в системе, является российская национальная библиотека оцененных нейтронных данных РОСФОНД-10 [2 – 4]. Особенность системы состоит в том, что расчетчику предоставляется возможность оптимизировать степень детальности описания энергетических зависимостей нейтронных сечений: сечения основных топливных, конструкционных материалов и теплоносителя могут быть описаны так детально, как это предусмотрено оцененными данными; сечения второстепенных нуклидов (минорных актинидов, продуктов деления и т.п.) могут описываться в 299-групповом приближении БНАБ [5] с учетом резонансной самоэкранировки методом подгрупп или вовсе без учета самоэкранировки. Энергетическая зависимость гамма-излучения описывается в 127-групповом Р-5-приближении [6]. Оптимизация степени детальности позволяет существенно сократить время счета без сколь-нибудь значимого влияния на результат и его погрешность. При расчете энерговыделения в нейтронных реакциях и в матрицах образования гамма-квантов при желании могут быть учтены вклады от распада образующихся в этих реакциях радионуклидов (с периодом полураспада менее трех лет). Энергетическая зависимость анизотропии упругого рассеяния описывается детально и при групповом или подгрупповом описании сечений путем задания 33-х границ 32-х равновероятных интервалов по косинусу угла рассеяния. Эффекты термализации при расчете нейтронных полей учитываются либо в приближении идеального газа, либо с помощью 72-групповых термализационных матриц, построенных на основе термализационных файлов, включенных в библиотеку РОСФОНД (в случаях, когда таковые файлы в ней содержатся).

В системе содержатся описания детальности зависимостей сечений и угловых распределений упругого рассеяния на всех многоизотопных элементах; связь между углом рассеяния и потерей энергии в этом случае устанавливается с помощью зависящего от энергии эффективного атомного веса. Программные коды написаны на языке ФОРТРАН. Система легко встраивается в расчетные программы, реализующие метод Монте-Карло.

**Ключевые слова:** ядерные данные, расчет полей излучений методом Монте-Карло, комбинации детальности и группового описания энергетической зависимости сечений.

© Г.М. Жердев, Т.С. Кислицина, М.Н. Николаев, 2018

## ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Система РОКОКО (Расчет и Организация КОмбинированных КОнстант) предназначена для константного обеспечения расчетов методом Монте-Карло нейтронных и порождаемых ими фотонных полей в ядерных реакторах. Предусмотрена возможность детального описания энергетических зависимостей нейтронных сечений (как это делается в известной программе MCNP [7]). Однако сечения нуклидов, входящих в состав реактора в низкой концентрации, могут описываться и не столь детально – в мультигрупповом приближении с учетом резонансной самоэкранировки методом подгрупп или вовсе без учета самоэкранировки. Это, естественно, повышает скорость вычислений, что существенно при выполнении многовариантных инженерных расчетов. Таким образом, РОКОКО позволяет пользователю самому определять степень детальности описания энергетических зависимостей сечений.

Программы комплекса РОКОКО написаны на языке ФОРТРАН. Работоспособность комплекса проверена при использовании разных версий компиляторов (GNU, LAHEY, INTEL и др.). Комплекс состоит из трех частей.

Первая часть – комплекс программ COMBINE предназначен для формирования бинарной библиотеки исходных констант на основе файлов оцененных данных в формате ENDF6 [4] и групповых констант в формате БНАБ [5]. Пользователями этой части комплекса являются разработчики системы. В частности, авторами с помощью комплекса COMBINE на основе файлов библиотеки РОСФОНД [2 – 4] и групповых констант БНАБ-РФ [6] сформирована версия бинарной библиотеки VIBIN-2016. Имеется и версия VIBIN-V7, созданная на основе библиотеки ENDF/B-VII. В будущем по мере необходимости могут быть сформированы и другие версии бинарной библиотеки. Комплекс COMBINE описан достаточно подробно, так что новые версии могут создаваться и без участия авторов.

Вторая часть используется непосредственно в расчете. Процедурами этого блока считывается расчетное задание и на его основе формируется оперативная библиотека для требуемого состава материалов и в формате, удобном для моделирования. В частности, матрицы неупругого рассеяния, термализационные, спектров деления представляются в виде накопленных вероятностей процессов. Здесь же формируются подгрупповые параметры резонансных изотопов для заданных температур и составов, а константы с детальным слежением за энергией нейтрона пересчитываются под заданные температуры сред. Все эти данные формируются только для изотопов, присутствующих в среде, и записываются в специальный независимый от вычислительной платформы обменный файл (имеется в виду бинарный либо текстовый файл универсального формата, одинаково читаемый различными компиляторами и в разных операционных системах, что дает возможность пользователю подготовить библиотеку, например, на офисном компьютере, а выполнить вычисления на суперкомпьютере). Процедуры этого блока объединены в автономный исполняемый модуль-программу COLIBRY [8].

Третья часть предназначена для непосредственного использования в программах моделирования, реализующих метод Монте-Карло, и состоит из нескольких процедур. Главная процедура COLIBRY вызывается при выполнении расчета лишь единожды. Она обращается к обменной библиотеке, подготовленной второй частью комплекса, и размещает их в соответствующих общих массивах, которые доступны всем оперативным процедурам.

Ниже перечисляются оперативные процедуры. Первая из них – GEFIS имеет параметры INUC, NGFIS, ig, E и ves (здесь и далее параметры процедур выделяются подчеркиванием). Очевидно, что спектр деления определяется тем, при делении какого нуклида INUC рожден нейтрон и какой энергетической группе NGFIS принадлежал нейтрон, вызвавший деление. Процедура на основе этих параметров определяет группу ig и энергию E нейтрона деления. Параметр ves по умолчанию равен единице. Предусмотрена возмож-

ность искусственно повысить выход нейтронов высоких энергий, и в этом случае параметр  $\text{ves}$  служит для компенсации искажения спектра деления. В первом поколении, когда  $\text{INUC}$  и  $\text{NGFIS}$  еще не определились, принимается, что нейтрон образовался при делении первого нейтрона из списка (заведомо делящегося) под действием нейтронов 50-й группы (в которой все делящиеся изотопы имеют отличные от нуля сечения деления). Отметим, что имеется расширенная версия этой процедуры, названная  $\text{GEFISBETA}$ , которая кроме функций, выполняемых процедурой  $\text{GEFIS}$ , формирует массив  $\text{vesD}$ , восемь элементов которого представляют собой вероятности того, что испущенный нейтрон деления (группы  $\text{ig}$  с энергией  $E$ ) образован в результате распада предшественника соответствующей группы запаздывающих нейтронов. Процедура  $\text{GEFISBETA}$  предназначена для использования в расчетах эффективных долей запаздывающих нейтронов.

Процедура  $\text{SIGMA}$  имеет параметры  $\text{SIGMAC}$ ,  $\text{SABS}$ ,  $\text{SFNU}$ ,  $\text{KERM}$ ,  $E$ ,  $\text{NG}$ ,  $m$ . Для нейтрона с энергией  $E$ , лежащей в группе  $\text{NG}$  в физической зоне  $m$ , она определяет макроскопическое полное сечение  $\text{SIGMAC}$ ,  $\text{SABS}$  – макроскопическое сечение поглощения, «сечение образования нейтронов деления»  $\text{SFNU} = \nu \cdot \Sigma_f$  и  $\text{KERM}$  – значение керма. Энергия и номер группы передаются между оперативными процедурами автоматически. Для определения этих величин процедура  $\text{SIGMA}$  вычисляет сначала микроскопические константы всех изотопов, входящих в состав зоны  $m$  для энергии рассматриваемого нейтрона. Если нейтрон образовался в рассматриваемой зоне, то для энергии этого нейтрона определяются сечения всех входящих в ее состав нуклидов. Если нейтрон попал в зону после пересечения ее границы, микроконстанты определяются только для тех нуклидов, для которых они не были определены в предыдущих зонах на пути пролета нейтрона. Микроконстанты заносятся в общие массивы для дальнейшего использования в процедуре  $\text{COLLY}$  и, если потребуется, в процедурах регистрации (не входящих в систему  $\text{POKOKO}$ ). Процедура  $\text{SIGMA}$  обрабатывает и данные для гамма-квантов, которым приписываются группы с номерами от 301 до 427 (если расчетным заданием предусмотрено прослеживание траекторий гамма-квантов, порожденных нейтронами: число гамма-групп указано равным 127).

Процедура  $\text{COLLY}$  имеет параметры  $m$ ,  $\text{NG}$ ,  $E$ ,  $r$ ,  $n$ ,  $\text{etha}$ ,  $\text{NG1}$ ,  $E1$ ,  $\text{mulab}$ ,  $y_i$ ,  $\text{ngam}$ ,  $\text{ugam}$ . Для столкновения нейтрона, происшедшего в зоне  $m$ , при энергии  $E$ , лежащей в группе  $\text{NG}$ , она определяет тип столкновения:  $r = 1$  – упругое рассеяние;  $r = 2$  – неупругое рассеяние;  $r = 3$  – поглощение. Определяется также  $n$  – номер нуклида, с которым произошло столкновение; среднее число вторичных нейтронов деления, образующихся при этом поглощении,  $E1$  и  $\text{NG1}$  – энергия и номер группы рассеянного нейтрона;  $\text{mulab}$  – косинус угла рассеяния в лабораторной системе координат;  $y_i$  – множественность рассеянных нейтронов (превышает единицу при наличии вклада реакций  $(n, xn)$  в неупругое рассеяние);  $\text{ngam}$  – номер группы гамма-кванта, испущенного при неупругом рассеянии или захвате;  $\text{ugam}$  – число этих квантов (301 J  $\text{ngam}$  J 427).

Таким образом, для подключения системы  $\text{POKOKO}$  к программе расчета реакторов методом Монте-Карло достаточно, чтобы перед решением конкретной задачи в ней вызывалась подпрограмма  $\text{COLIBRY}$  (на вход которой подается лишь файл обменной библиотеки). Затем в начале каждой разыгрываемой траектории должна вызываться процедура  $\text{GEFIS}$  (определяющая энергию и группу нейтрона деления). Процедура  $\text{SIGMA}$  вызывается перед прослеживанием трека нейтрона (или фотона), лежащего в пределах той зоны, в которой рассматриваемый нейтрон или фотон родился в результате того или иного процесса, или зоны, в которую он попал при пересечении границы. Процедура  $\text{COLLY}$  вызывается при рассмотрении каждого столкновения.

Таким образом, процедуры предоставляют вызывающей программе всю информацию, необходимую для прослеживания нейтронной траектории, а если требуется, то и траектории гамма-кванта, порожденного в нейтронной реакции. Предоставляются также вели-

чины, необходимые для оценки коэффициента размножения и энерговыделения по длинам пробега, по столкновениям и поглощениям. Поскольку для каждого участка трека нейтрона, лежащего в пределах физической зоны, процедура SIGMA для всех входящих в ее состав нуклидов определяет микроконстанты, программа, обращаясь к РОКОКО, может включить в себя регистрационные процедуры, оценивающие такие функционалы, как скорости реакций на изотопах, заблокированные мультигрупповые константы и пр.

В файле исходных данных для процедур второго блока, входящих в модуль COLIBRY, указываются

- MZONE – число физических зон (т.е. зон, различающихся составом или температурой);
- NIS – полное число нуклидов, входящих в состав хотя бы одной зоны;
- число нейтронных групп БНАБ MGRN  $\leq 299$  – в группах с номерами, большими 227 (т.е. при энергиях, меньших 4.64 эВ), при расчетах учитывается тепловое движение атомов; для отказа от такого учета следует задать меньшее число групп (например, 298);
- число гамма-групп MGRG, равное либо нулю, либо 127 (как указывалось выше, гамма-квантам приписываются номера групп от 301 до 427);
- NUCLIST – перечень из NIS нуклидов: четырехсимвольные наименования изотопов и двухсимвольные наименования многоизотопных элементов;
- ID – массив из NIS признаков детальности описания структуры сечений каждого нуклида: ID = 2 при детальном описании структуры сечений; ID = 1 при использовании 299-группового приближения с учетом внутригрупповой структуры сечений методом подгрупп; ID = 0 – 299групповое приближение без учета резонансной самоэкранировки;
- THERM – массив номеров термализационных матриц системы констант БНАБ (если этот номер положен равным нулю, то учет термализации будет выполнен в приближении свободного газа);
- TZONE – массив температур физических зон (MZONE значений) (нуклиды с ID = 1 или 2, содержащиеся в зонах с разными температурами, при расчете будут рассматриваться как разные нуклиды);
- RO – двумерный массив ядерных концентраций: для каждой зоны должны быть указаны концентрации всех нуклидов.

Следует отметить, что перечисленные выше ключевые слова параметров задания могут быть заменены аналогами, принятыми в системе константного обеспечения CONSYST [9].

## ОПИСАНИЕ АЛГОРИТМОВ

При расчетах сечения «детальных» нуклидов вне резонансной области описываются столь детально, насколько они представлены в файлах оцененных данных. В области разрешенных резонансов используются детальные энергетические зависимости сечений, рассчитанные для температуры 300 К с помощью модулей RECONR и BROADER комплекса NJOY [7, 8]. Для зон с температурами выше комнатной детальные сечения пересчитываются с помощью процедуры DOPPLER, реализующей алгоритм, подобный используемому в модуле BROADER [8]. В области неразрешенных резонансов структура сечений описывается методом подгрупп. Подгрупповые параметры вычисляются в программе COLIBRY на основе таблиц факторов резонансной самоэкранировки системы констант БНАБ-РФ [6]. Энергоугловые распределения нейтронов, испытавших неупругое рассеяние или образовавшихся в результате реакций ( $n, xn$ ), описываются в 299-групповом приближении с использованием матриц вероятностей и средних косинусов межгрупповых переходов из системы констант БНАБ-РФ. Опыт сравнения 299-группо-

вых расчетов с расчетами с детальным описанием процессов неупругих взаимодействий показал, что погрешности не только в коэффициенте размножения, но и в групповых потоках оказываются меньшими, чем погрешности, обусловленные неточным знанием сечений этих процессов. Что касается упругого рассеяния, то в расчетах используются угловые распределения, представленные в форме 33-х границ 32-х равновероятных интервалов по косинусу угла рассеяния в системе центра инерции, вычисляемых на основе исходных файлов с той детальностью по энергии, с которой эти распределения в них представлены. Для всех изотопов эти угловые распределения были сформированы с помощью модуля ACER [11] комплекса NJOY.

Сечения «подгрупповых» ( $ID = 1$ ) и групповых ( $ID = 0$ ) нуклидов описываются в 299-групповом приближении БНАБ. При этом для «подгрупповых» нуклидов резонансная структура сечений в области как неразрешенных, так и разрешенных резонансов описывается с использованием подгрупповых параметров, полученных на основе таблиц факторов самоэкранировки, проинтерполированных к температуре рассматриваемой зоны. В области неразрешенных резонансов, где для описания структуры сечений, как правило, достаточно двух подгрупп, определение подгрупповых параметров выполняется по упрощенному алгоритму. В области разрешенных резонансов, где двух подгрупп зачастую недостаточно, используется включенная в COLIBRY универсальная процедура получения подгрупповых параметров на основе факторов самоэкранировки [12]. Что касается упругого рассеяния, то вне зависимости от значения  $ID$  используется детальное описание энергетических зависимостей границ равновероятных интервалов.

Энергоугловые распределения нейтронов в области термализации описываются либо в мультигрупповом приближении с использованием термализационных матриц БНАБ-РФ, либо по модели свободного газа с использованием алгоритма, описанного в работе [13]. Как говорилось, температурная зависимость детальных сечений учитывается с помощью процедуры DOPPLER, приводящей содержащиеся в BIBIN детальные сечения, соответствующие комнатной температуре, к температурам, указанным в расчетном задании.

Энерговыделение при упругом, неупругом рассеянии, при захвате и при делении рассчитывается с использованием 299-групповых констант БНАБ. Детальность энергетической зависимости энерговыделения в пределах каждой группы такая же, как детальность описания сечений. Если в расчетном задании предусмотрен расчет распротранения гамма-квантов, образующихся в нейтронных реакциях ( $MGRG = 127$ ), то используются таблицы локального энерговыделения, в противном случае – таблицы полного энерговыделения, т.е. учитывающие и энергию, уносимую гамма-квантами. И в том, и в другом случаях в данных по энерговыделению учитывается вклад от распада продуктов нейтронных реакций (с периодом полураспада до трех лет).

Образование гамма-квантов учитывается для реакций захвата, неупругого рассеяния и деления. Используются 299127-групповые матрицы выходов гамма-квантов из БНАБ-РФ [6]. В этих матрицах учтен и выход гамма-квантов при распаде продуктов соответствующих реакций. Расчет переноса гамма-квантов осуществляется в 127-групповом приближении с использованием макроскопических констант. Анизотропия как когерентного, так и некогерентного рассеяния учитывается путем задания для каждого межгруппового перехода вероятностей рассеяния на каждый из трех заданных углов. Вероятности и углы определены из условия сохранения пяти угловых моментов.

Отметим особенность описания взаимодействия нейтронов с ядрами природных многоизотопных элементов. Формат библиотек файлов оцененных данных предусматривает возможность представления данных для природных смесей многоизотопных элементов, однако реально эта возможность используется для описания сечений лишь несколь-

ких малоупотребительных в инженерной практике материалов (например, таких как платина). В системе РОКОКО предусмотрена возможность детального описания структуры сечений всех природных многоизотопных элементов. Сечения всех изотопов приводятся к единой энергетической сетке, которая прореживается путем отбрасывания энергетических узлов, в которых сечения элементов могут быть восстановлены линейной интерполяцией из соседних узлов с заданной точностью (обычно 0.1%). Энергетические зависимости сечений элементов определяются сложением сечений изотопов сечений с весом их концентраций. Угловые распределения нейтронов, упруго рассеянных на изотопах, представленные в форме разложений по полиномам Лежандра, берутся непосредственно из файлов оцененных данных. Коэффициенты разложения для всех изотопов приводятся к единой энергетической сетке и затем усредняются с весом концентраций и сечений упругого рассеяния. В каждой точке энергетической сетки восстанавливается детальная зависимость вероятности рассеяния от угла рассеяния в системе центра инерции, после чего определяются 33 границы 32-х равновероятных интервалов по углу рассеяния. Вычисляется и хранится параллельно с сечениями энергетическая зависимость эффективной массы элемента, определенная таким образом, чтобы сохранить среднюю потерю энергии при рассеянии. Энергоугловые распределения неупругого рассеяния, как и для отдельных элементов, описывается в многогрупповом приближении БНАБ-РФ. Использование энергетических зависимостей сечений для природных элементов существенно сокращает число нуклидов, входящих в состав среды, и благодаря этому снижает затраты машинного времени на проведение расчета. Смещение результатов при использовании этого приближения практически несущественно.

### ТЕСТИРОВАНИЕ

Для проверки работоспособности системы РОКОКО была написана программа расчета критичности бесконечной среды –  $k_{inf}$ . В ней были предусмотрены оценки коэффициентов размножения по поглощениям  $k_{inf,0}$  и по столкновениям  $k_{inf,1}$ . Оценка по длинам пробега не проводилась, так как в бесконечной гомогенной среде летящий нейтрон заведомо испытает в этой среде столкновение, и оценки по столкновениям и по длинам пробега будут отличаться лишь тем, что в последнем случае погрешность будет несколько выше (к погрешности оценки по столкновениям добавится погрешность выборочной оценки средней длины пробега). Размножение нейтронов за счет реакций ( $n, xn$ ) учитывалось путем умножения веса нейтрона на среднюю множественность нейтронов, испускаемых в результате процессов неупругого рассеяния. Траектории рассчитывались при аналоговом рассмотрении поглощений. Оценки, полученные в нескольких первых поколениях, при усреднении результатов по всем поколениям не учитывались – в этих поколениях устанавливался стационарный спектр нейтронов деления. После розыгрыша всех поколений результаты, полученные во всех поколениях (кроме нескольких отброшенных), усреднялись, вычислялись дисперсии каждой из оценок ( $D_0$  и  $D_1$ ) и коэффициент корреляции между ними ( $\rho$ ). После этого на основе метода наименьших квадратов вычислялась комбинированная оценка коэффициента размножения ( $k_{inf}$ ) и ее дисперсия ( $D$ ):

$$comb = (1 - C) \cdot k_{inf,0} + C \cdot k_{inf,1},$$

$$D = \sqrt{C^2(k_{inf,0})^2 + C \cdot (1 - C) \cdot \rho \cdot k_{inf,0} \cdot k_{inf,1} + (1 - C)^2 \cdot (k_{inf,1})^2},$$

где

$$C = \frac{D - \rho \cdot \sqrt{D_0 \cdot D_1}}{D_0 + D_1 - 2\rho \sqrt{D_0 \cdot D_1}}.$$

Программа  $k_{inf}$  предназначалась для выполнения верификационных расчетов. Верификация проводилась путем сравнения результатов расчета с данными, получен-

ными с помощью программы MCNP-5 [7], «привязанной» к библиотеке РОСФОНД. Для того, чтобы можно было судить о значимости расхождений в результатах, для сравнения выбирались среды, для которых были известны результаты экспериментального определения  $k_{inf}$  (с определенными погрешностями). Другой мерой значимости расхождений служило различие между результатами расчетов по MCNP-5, выполненных с использованием библиотек РОСФОНД и ENDF/B-7. Расчеты по MCNP-5 проводились так же, как расчеты по  $k_{inf}$ , с аналоговым рассмотрением поглощений. Далее будут приведены результаты расчета  $k_{inf}$  для четырех сред.

Первой из них являлась среда из урана с обогащением 5.56% – SCHERZO-5.56 [14]. То, что обогащение 5.56% обеспечивает равенство  $k_{inf}$  единице (с точностью 0.25%), было выявлено в результате расчетного анализа серии экспериментов, выполнявшихся на критических сборках SNEAK, ERMINE и HARMONIE. Расчетные результаты были получены на одном и том же однопольном персональном компьютере. В каждом расчете разыгрывалось 1020 поколений по 2000 траекторий в каждом. Двадцать первых поколений являлись предварительными, следующие 1000 – активными; в них и производилась оценка рассчитываемых величин. Результаты таковы:

$$\begin{aligned} k_{inf} &= 0.99750 \pm 0.00041 \text{ (время счета 107 с),} \\ \text{MCNP(RF): } k_{inf} &= 0.99778 \pm 0.00043 \text{ (время счета 174 с),} \\ \text{MCNP(B7): } k_{inf} &= 0.99288 \pm 0.00043 \text{ (время счета 140 с).} \end{aligned}$$

Таким образом, отличие результатов расчета по  $k_{inf}$  и по MCNP, составляющее 0.028%, намного ниже статистической погрешности этой разности, равной  $\pm 0.56\%$ . Время счета по  $k_{inf}$  для этой задачи оказалось в полтора раза ниже, чем по MCNP (очевидно, в основном, за счет преимущества многогруппового описания спектров вторичных нейтронов неупругого рассеяния и реакций ( $n, xn$ )).

Результаты расчетов на основе библиотеки РОСФОНД согласуются с экспериментально оцененной величиной  $1.0000 \pm 0.0025$  в пределах погрешности последней.

Результат расчета на основе библиотеки ENDF/B-7 ниже экспериментального значения на 0.5%, что вдвое превышает экспериментальную погрешность.

Для другого тестового расчета была выбрана среда из нержавеющей стали с небольшой добавкой высокообогащенного урана, которая исследовалась на стенде КОБРА в ГНЦ РФ-ФЭИ (сборка КБР-9). Условия проведения эксперимента и методы введения расчетных поправок на гетерогенность и конечный размер исследовавшейся зоны (прошедшие международную экспертизу) подробно описаны в работе [15]. Содержание урана 90%-го обогащения составляло 90.2% по числу ядер. Остальными компонентами являлись железо, никель и хром с небольшими примесями углерода, кислорода, кремния, титана и марганца (табл. 1).

Таблица 1

**Состав среды КБР-9 (приведены числа ядер в объеме барн·см)**

C	3.1453E-4	Mn	8.2518E-4	Si	6.7256E-4	Ti	4.7341E-4	<sup>235</sup> U	3.7041E-4
O	8.3126E-4	Fe	4.7217E-2	Ni	6.5656E-3	Cr	1.2788E-2	<sup>238</sup> U	4.0125E-5

Экспериментальная оценка  $k_{inf}$  для этой среды  $1.108 \pm 0.009$ . Как и в случае SCHERZO-5.56 в расчетах разыгрывалось 1020 поколений по 2000 траекторий; данные первых двадцати траекторий отбрасывались. Результаты таковы:

$$\begin{aligned} k_{inf} &= 1.10807 \pm 0.00051 \text{ (время счета 83 мин),} \\ k_{inf} \text{ (элемент)} &= 1.10840 \pm 0.00041 \text{ (время счета 64 мин),} \\ \text{MCNP(RF): } k_{inf} &= 1.10841 \pm 0.00041 \text{ (время счета 103 мин),} \\ \text{MCNP(B7): } k_{inf} &= 1.11139 \pm 0.00050 \text{ (время счета 102 мин).} \end{aligned}$$

Результат, полученный по  $k_{inf}$  с изотопным розыгрышем траекторий, совпал с

результатом, полученным по MCNP на основе той же библиотеки РОСФОНД. Эти результаты совпадают и с экспериментальным значением. Практически такой же результат получен и при поэлементном задании состава конструкционных материалов, что дает заметное снижение времени счета. Расчет по MCNP с использованием библиотеки ENDF/B-7 приводит к небольшому завышению  $k_{inf}$ .

Аналогичные результаты были получены и при расчетах, исследовавшихся на стенде КОБРА сред с  $k_{inf} \gg 1$ , содержащих в качестве основного материала никель (КБР-7), молибден (КБР-10), хром (КБР-15) и цирконий (КБР-16). Результаты расчетов с детальным слежением за энергией нейтрона совпали с таковыми, полученными по MCNP-РОСФОНД, в пределах статистических погрешностей, но требовали на 20% меньшего времени. При элементном описании состава сред выигрыш во времени возрастал до 30 – 40%.

Были рассмотрены еще две тестовые задачи. В первой из них рассматривалась бесконечная среда того же состава, что и невыгоревшая активная зона быстрого реактора СВБР. Она содержала 23 нуклида (в том числе пять делящихся). Полученные результаты таковы:

$$\begin{aligned} \text{kinfin: } k_{inf} &= 1.2465 \pm 0.0005 \text{ (время счета 20 мин),} \\ \text{MCNP: } k_{inf} &= 1.2459 \pm 0.0005 \text{ (время счета 21 мин).} \end{aligned}$$

При поэлементном описании состава зоны время счета сокращается до 17 мин.

В следующей задаче рассматривалась среда того же состава, что и выгоревшая (до 11% тяжелых атомов) активная зона СВБР, содержавшая 169 нуклидов. В расчетах по kinfin детально описывались 52 нуклида, концентрации которых превышали 0.5%. Остальные описывались в подгрупповом приближении. Результаты таковы:

$$\begin{aligned} \text{kinfin: } k_{inf} &= 1.1436 \pm 0.0003 \text{ (время счета 52 мин),} \\ \text{MCNP: } k_{inf} &= 1.1437 \pm 0.0003 \text{ (время счета 209 мин).} \end{aligned}$$

Полученные данные наглядно показывают преимущество группового описания нуклидов, содержащихся в мизерных концентрациях. Это и естественно, поскольку искать сечения, соответствующие получившейся в процессе розыгрыша энергии, приходится для всех нуклидов вне зависимости от их концентрации.

Наконец, рассчитывались водные растворы высокообогащенного уранил-нитрата и плутония. Характеристики растворов и результаты расчета  $k_{eff}$  приведены в табл. 2.

Таблица 2

**Результаты расчетов критичности водных растворов плутония и высокообогащенного урана с использованием разных программ и библиотек констант**

Раствор	ММК-РФ	MCNP5 (РОСФОНД)	MCNP5 (ENDF/B-VII)	Отличие от MCNP5 (РОСФОНД)	
				ММК-РФ	ENDF/B-VII
Pu+H <sub>2</sub> O	0.99388(8)	0.99369(10)	0.99404(10)	0.02%	0.04%
U+H <sub>2</sub> O	0.90857(8)	0.90880(10)	0.90889(10)	-0.03%	0.01%

Значимых расхождений в спектрах нейтронов не обнаружено (лишь при энергиях  $< 10^{-3}$  эВ потоки нейтронов, рассчитанные по MCNP-5, оказались на 2 – 5% ниже рассчитанных по kinfin).

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Тестирование показало, что РОКОКО обеспечивает возможность получения тех же результатов, что и MCNP, с меньшими затратами времени за счет группового описания индикатрис неупругого рассеяния, возможностью группового или подгруппового описания сечений нуклидов с низкой концентрацией и детального описания сечений элементов (для которых нет файлов оцененных данных).

Включение РОКОКО в программу ММКФК [16], выполненное В.Б. Полевым, позволило выявить и устранить ряд недостатков. Разумеется, недостатки еще остались и по мере их выявления будут устраняться. Надо полагать, что включение РОКОКО в другие программы также не приведет к серьезным трудностям.

Представляется целесообразным использовать систему РОКОКО в программах прецизионных инженерных расчетов энергетических реакторов, в которых повышение быстродействия позволит решать задачи, более сложные, чем задачи на критичность (решение пространственно-временных задач, оценка локальных функционалов и пр.), повысить качество расчетов и расширить область применения [17, 18].

Авторы выражают глубокую признательность В.Н. Кощееву, Г.Б. Ломакову, В.В. Коробейникову за помощь, оказанную ими в работе; В.Б. Полевому, продемонстрировавшему возможность подключения системы РОКОКО к инженерным программам, и Е.В. Жемчугову, разработавшему и предоставившему одну из ключевых подпрограмм системы – подпрограмму SUBGROUPS.

### Литература

1. Кислицина Т.С., Николаев М. Н. РОСОСО. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2016612400 от 26.02.2016 г.
2. Николаев М. Н. РОСФОНД – российская национальная библиотека оцененных нейтронных данных // В мире науки. – 2006. – № 9. – С. 78-81.
3. Забродская С.В., Игнатюк А.В., Кощеев В.Н., Манохин В.Н., Николаев М.Н., Проняев В.Г. РОСФОНД – российская национальная библиотека оцененных нейтронных данных // ВАНТ. Серия: Ядерные константы. – 2007. – № 1-2. – С. 3-21.
4. РОСФОНД – Российская библиотека Файлов Оцененных Нейтронных Данных. / Под ред. Николаева М.Н. Электронный ресурс: <https://www.ippe.ru/reactors/reactor-constants-database/rosfond-neutron-database> (дата обращения 20.12.2017).
5. Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М. Система групповых констант БНАБ-93. Часть 1. Ядерные константы для расчета нейтронных и фотонных полей излучения // ВАНТ. Серия: Ядерные константы. – 1996. – № 1. – С. 59.
6. Кощеев В.Н., Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М. Библиотека групповых констант БНАБ-РФ для расчетов реакторов и защиты // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2014. – № 3. – С. 93-101.
7. Z-5 Monte-Carlo Team (Forrest Brown – team leader and 20 coworkers). MCNP – A General Monte-Carlo N-Particle Transport Code, Ver. 5, Overview and Theory, LA-UR-03-1987, Vol. I-III. – LANL, 2003.
8. Кислицина Т.С., Николаев М. Н. COLIBRY. Свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2016620322 от 11.03.2016 г.
9. Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Поляков А.Ю., Цибуля А.М. Аннотация программы CONSYST // ВАНТ. Серия: Ядерные константы. – 1999. – № 2. – С. 148.
10. NJOY99.0 Code System for Producing Pointwise and Multigroup Neutron and Photon Cross Sections from ENDF/B Data. RSICC Peripheral Shielding Routine Collection. Oak Ridge National Laboratory. Documentation for PSR-480/NJOY99.0 Code Package (March 2000).
11. MacFarlane R.E., Kahler A.C. Method for Processing ENDF/B-VII with NJOY. // Nuclear Data Sheets. – 2010. – Vol. 111. – No. 12. – PP. 2739-2890.
12. Жемчугов Е.В. Программа SUBGROUPS. Электронный ресурс: <http://jini-zh.org/subgroups/subgroups.html> (дата обращения: 20.07.2017).
13. Eriksson J.R. A Slow Neutron Scattering Routine from the Gas Model. // Nucl. Sci. Eng. – 1970. – Vol. 41. – PP. 307-309.
14. Chaudat J.P., Darrouzet M., Fisher E.A. Experiment in Pure Uranium Lattices with Unit K<sub>∞</sub> Assemblies: SNEAK818Z, UK1 and UK5 in ERMINE and HARMONIE. KFK-1865 (CEA-R-4552). 1974.
15. NEA Nucl. Sci. Committee. International Handbook of Evaluated Criticality Safety

Benchmark Experiments. Vol. II, HCI-005. k-infinity Experiments in Intermediate Neutron Spectra for Various Structural Materials.

16. Франк-Каменецкий А.Д. Моделирование траекторий нейтронов при расчете реакторов методом Монте-Карло. – М.: Атомиздат, 1978. – 96 с.

17. Осецкая М.М., Украинцев В.Ф., Галковская В.Е. Управление топливной составляющей (начальной и заключительной стадий ЯТЦ) себестоимости электроэнергии при формировании производственной программы на АЭС России. // Экономика и предпринимательство. – 2017. – № 4-2 (81-2). – С. 590-599.

18. Осецкая М.М., Жердев Г.М., Алленых М.А. Оценка влияния расходов на топливо на производственную программу электроэнергетических предприятий России. // Фундаментальные исследования. – 2017. – № 10-2. – С. 381-386.

Поступила в редакцию 13.04.2017 г.

#### Авторы

Жердев Геннадий Михайлович, ведущий научный сотрудник, канд. физ.-мат. наук

E-mail: jerdev@ippe.ru, zherdev@ippe.ru

Кислицына Тамара Семеновна, старший инженер

E-mail: abbn@ippe.ru, bnaab@ippe.ru

Николаев Марк Николаевич, главный научный сотрудник, д-р физ.-мат. наук

E-mail: mnikolaev@ippe.ru

UDC 621.039.31.17

## **ROCOCO – A SYSTEM OF PROVIDING NUCLEAR DATA FOR MONTE CARLO REACTOR CALCULATIONS**

Jerdev G.M., Kislitsyna T.S., Nikolaev M.N.

JSC «SSC RF-IPPE n.a. A.I. Leypunsky»

1, Bondarenko sq., Obninsk, Kaluga reg., 249033 Russia

#### ABSTRACT

The ROCOCO [1] system is designed to provide Monte Carlo calculations of neutron fields and gamma fields generated by them. The initial database of nuclear data used in the system is the Russian national library of evaluated neutron data (ROSFOND) [2 – 4]. The specific feature of the system is that the estimator is provided with the opportunity to optimize the levels of descriptions of neutron cross-section energy dependences. The cross-sections of the main fuel and structural materials as well as those of the coolant can be described in such detail as provided for by the evaluated data; the cross-sections of the secondary nuclides (minor actinides, fission products, etc.) can be described in the 299-group ABBB approximation [5] with allowance for resonance self-shielding by the subgroup method or without regard for self-shielding at all. The energy dependence of gamma rays is described in the 127-group P-5 approximation [6]. Optimizing the level of detail makes it possible to significantly reduce the counting time without any significant impact on the result and its error. If desired, when calculating the energy release in neutron reactions or in gamma-quanta formation matrices, contributions from the decay of radionuclides formed in these reactions (with a half-life of less than three years) can be taken into account. The energy dependence of elastic scattering anisotropy is detailed in the case of a group or subgroup description of the cross-sections

by specifying 33 boundaries of 32 equiprobable cosine intervals of the scattering angle. The thermalization effects in calculations of neutron fields are taken into account either in the ideal gas approximation or with the help of 72-group thermalization matrices built on the basis of thermalization files included in the ROSFOND library (in cases where such files are contained therein).

It should be noted that the system contains descriptions of detailed dependences of elastic scattering cross-sections and angular distributions on all multi-isotope elements; the relationship between the scattering angle and the energy loss in this case is established with the help of an energy-dependent effective atomic weight.

The programs of the system are written in FORTRAN. The system is easily integrated into the calculation programs implementing the Monte Carlo method.

**Key words:** nuclear data, radiation field calculation using the Monte Carlo method, combination of detailed and group descriptions of cross-section energy dependences.

#### REFERENCES

1. Kislitsyna T.S., Nikolaev M.N. ROCOCO. Certificate of state registration of the computer program No. 2016612400 of February 26, 2016 (in Russian).
2. Nikolaev M.N. RUSFOND – Russian national library of evaluated neutron data. *Vmire nauki*. 2006, no. 9, pp. 78-81 (in Russian).
3. Zabrodszkaya S.V., Ignatyuk A.V., Koshcheev V.N., Manochin V.N., Nikolaev M.N., Pronyaev V.G. RUSFOND – Russian national library of evaluated neutron data. *VANT. Ser.: Yadernye konstanty*. 2007, no. 1-2, pp. 3-21 (in Russian).
4. RUSFOND – Russian file library of evaluated neutron data.  
Available at: <https://www.ippe.ru/reactors/reactor-constants-datacenter/rosfond-neutron-database> (accessed: 20.12.2017) (in Russian).
5. Manturov G.N., Nikolaev M.N., Tsiboulya A.M. The group constants system ABBN-93. Part 1. Nuclear constants for neutron and photon radiation fields calculation. *VANT. Ser.: Yadernye konstanty*. 1996, no. 1, p. 59 (in Russian).
6. Koshcheev V.N., Manturov G.N., Nikolaev M.N., Tsiboulya A.M. ABBN-RF group constants library for nuclear reactor and shielding calculations. *Izvestiya vuzov. Yadernaya energetika*. 2014, no. 3, pp. 93-101 (in Russian).
7. Z-5 Monte-Carlo Team (Forrest Brown – team leader and 20 coworkers). MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Ver. 5, Overview and Theory, LA-UR-03-1987, Volumes I-III. LANL (2003).
8. Kislitsyna T.S., Nikolaev M. N. COLIBRY. Certificate of state registration of the database No. 2016620322 of March 11, 2016 (in Russian).
9. Manturov G.N., Nikolaev M.N., Polyakov A.Ju., Tsiboulya A.M. CONSYST Program description. *VANT. Ser.: Yadernye konstanty*. 1999, no. 2, p. 148 (in Russian).
10. NJOY99.0 Code System for Producing Pointwise and Multigroup Neutron and Photon Cross Sections from ENDF/B Data. RSICC Peripheral Shielding Routine Collection. Oak Ridge National Laboratory. Documentation for PSR-480/NJOY99.0 Code Package (March 2000).
11. MacFarlane R.E., Kahler A.C. (2010) Method for Processing ENDF/B-VII with NJOY. *Nuclear Data Sheets*. 2010, v. 111, no. 12, pp. 2739-2890.
12. Zhemchugov E.V. SUBGROUPS program. Available at: <http://jini-zh.org/subgroups/subgroups.html> (accessed: 20.12.2017) (in Russian).
13. Eriksson J.R. A Slow Neutron Scattering Routine from the Gas Model. *Nucl. Sci. Eng.* 1970, v. 41, pp. 307-309.
14. Chaudat J.P., Darrouzet M., Fisher E.A. Experiment in Pure Uranium Lattices with Unit K". Assemblies: SNEAK818Z, UK1 and UK5 in ERMINE and HARMONIE. KFK-1865 (CEA-R-4552). 1974.

15. NEA Nucl. Sci. Committee. International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments. Vol. II, HCI-005. k-infinity Experiments in Intermediate Neutron Spectra for Variouse Structural Materials.

16. Frank-Kameneckij A.D. *The neutrons trajectories modeling in the reactors calculation by Monte Carlo*. Moscow. Atomizdat Publ., 1978, 96 p. (in Russian).

17. Osetskaya M.M., Ukraintsev V.F., Galkovskaya V.Ye. Management of the initial and final stages of the nuclear fuel cycle in order to form a fuel cost's component of electricity of the production program at Russian nuclear power plants. *Ekonomika i predprinimatel'stvo*. 2017, no. 4-2 (81-2), pp. 590-599 (in Russian).

18. Osetskaya M.M., Zherdev G.M., Allenykh M.A. Estimation of fuel cost impact on energy enterprises production program in Russia. *Fundamental'nye issledovaniya*. 2017, no. 10-2, pp. 381-386 (in Russian).

#### **Autors**

Jerdev Gennady Mikhailovich, Leading Resercher, Cand.Sci. (Phys.-Math.)

E-mail: jerdev@ippe.ru, zherdev@ippe.ru

Kislitsyna Tamara Semenovna, Senior Engeneer

E-mail: bnab@ippe.ru, bnab@ippe.ru

Nikolaev Mark Nikolaevich, Senior Resercher, Dr. Sci. (Phys.-Math.)

E-mail: mnikolaev@ippe.ru