

На правах рукописи

НАТАЛЕНКО

Анатолий Андреевич

КОМПЛЕКСНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МОДЕЛЕЙ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЧАСТИЦ И
СОЗДАНИЕ БИБЛИОТЕКИ АКТИВАЦИОННЫХ ЯДЕРНЫХ ДАННЫХ

Специальность 05.13.18 - Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2010

Работа выполнена в Обнинском институте атомной энергетики - филиале федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ».

Научный руководитель доктор физико-математических наук,
 профессор
 Коровин Юрий Александрович

Официальные оппоненты доктор физико-математических наук,
 профессор
 Галкин Валерий Алексеевич

 кандидат физико-математических наук,
 Блохин Анатолий Иванович

Ведущая организация Институт теоретической и
 экспериментальной физики имени
 А.И.Алиханова
 (ФГУП «ГНЦ РФ – ИТЭФ»)

Защита состоится «26» мая 2010 г. в 15 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 212.130.09 в Национальном Исследовательском Ядерном Университете «МИФИ» по адресу: 115409, г. Москва, Каширское шоссе, д. 31, тел. (495) 324-84-98, (495) 323-92-56.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Национального Исследовательского Ядерного Университета «МИФИ».

Автореферат разослан « 19 » апреля 2010 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
д.ф.-м.н., проф.



Леонов А.С.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации определяется необходимостью расширения энергетического диапазона традиционных реакторных библиотек для обеспечения долгосрочной перспективы развития ядерной энергетики и решения проблемы обращения с отработавшим ядерным топливом путем введения в топливный цикл инновационных энергетических установок с жестким нейтронным спектром (ЭЛЯУ и ГТЯР).

Объектом исследования являются модели взаимодействия частиц и ядер с энергиями от 150 МэВ до 1 ГэВ.

Цель и задачи исследования. Целью работы является комплексное исследование моделей взаимодействия высокоэнергетических частиц с применением технологии математического моделирования, данных вычислительных и натуральных экспериментов для создания библиотеки оцененных протонных и нейтронных активационных ядерных данных в энергетическом диапазоне первичного нуклона от 150 МэВ до 1 ГэВ.

В соответствии с целью задачами исследования стали:

1. Анализ данных вычислительных и натуральных экспериментов, и обоснование необходимости создания новой библиотеки активационных ядерных данных.
2. Исследование особенностей и областей применения моделей взаимодействия высокоэнергетических частиц с применением технологий математического моделирования и вычислительного эксперимента для расчёта активационных ядерных данных. Обоснование выбора программ для проведения расчётов.
3. Создание алгоритма для проверки адекватности моделей нуклон-ядерных взаимодействий в области энергий от 150 МэВ до 1 ГэВ на основе данных натурального эксперимента. Выбор оптимальных моделей и их параметров для проведения расчётов. Оптимизация и адаптация программ для проведения конкретных расчетов.
4. Использование данных натурального эксперимента для моделирования аппроксимирующих зависимостей и заключительной коррекции данных вычислительного эксперимента.
5. Создание проблемно-ориентированной программы для работы с файлами оцененных ядерных данных, записанных в международном формате ENDF-6.

Научные положения, выводы и рекомендации, сформулированные в диссертации, обоснованы использованием современных программ, реализующих новейшие разработки в области нуклон-ядерных взаимодействий, и сравнением результатов моделирования с экспериментальными данными на различных этапах работы, что позволило выбрать наиболее подходящие модели, определить значения

их свободных параметров и диапазоны применения. Таким образом, при создании библиотеки активационных ядерных данных применялся комплексный анализ проблемы обеспечения активационных исследований необходимыми ядерными данными, и поставленные задачи решены с максимально возможной на сегодняшний день точностью.

Научная новизна работы:

1. Разработан новый алгоритм проверки адекватности моделей высокоэнергетических нуклон-ядерных взаимодействий.
2. Впервые сформулированы рекомендации по применению современных компьютерных программ MCNPX и CASCADE/INPE, определены основные параметры каскадно-испарительных моделей, влияющие на точность расчёта высокоэнергетических активационных ядерных данных.
3. Впервые создана библиотека протонных и нейтронных активационных ядерных данных в энергетическом диапазоне первичных нуклонов от 150 МэВ до 1 ГэВ для 717 изотопов от водорода до полония.
4. Создана новая проблемно-ориентированная программа для обработки файлов оцененных ядерных данных, записанных в международном формате ENDF-6.

Практическая значимость:

1. Созданная библиотека HEAD-2009 необходима для решения широкого спектра задач в области прикладных исследований по физике электроядерных установок и технологии трансмутации долгоживущих отходов ядерного топливного цикла.
2. Разработанный алгоритм проверки адекватности моделей высокоэнергетических нуклон-ядерных взаимодействий может использоваться для уточнения параметров моделей ядерных реакций и создания более совершенных программ для моделирования нуклон-ядерных взаимодействий.

Личный вклад автора. Автор принимал непосредственное участие в разработке и реализации всех этапов создания библиотеки активационных ядерных данных. В первую очередь были выбраны экспериментальные данные из библиотеки EXFOR. Затем был проведен теоретический обзор моделей ядерных реакций (реализуемых в заданном диапазоне энергий) и доступных программ, моделирующих нуклон-ядерные взаимодействия. Используя статистический анализ, были выбраны наиболее подходящие модели для расчёта, проведена адаптация этих моделей к условиям конкретной задачи. Выполненный расчёт сечений образования остаточных ядер для 717 изотопов был завершён компиляцией файлов в формате ENDF-6. Произведено сравнение данных из библиотек HEAD-2009, EXFOR и JENDL/HE-2007. Разработана программа ADR. Данные из библиотеки HEAD-2009 использованы в расчётах обоснование безопасности ЭЛЯУ на основе реактора ELSY.

На защиту выносятся:

1. Алгоритм и результаты проверки адекватности моделей нуклон-ядерных взаимодействий в области энергий от 150 МэВ до 1 ГэВ на основе данных натурального эксперимента.
2. HEAD-2009 - библиотека протонных и нейтронных оцененных активационных ядерных данных в энергетическом диапазоне от 150 МэВ до 1 ГэВ для 717 изотопов от водорода до полония.
3. Проблемно-ориентированная программа для обработки файлов активационных ядерных данных, записанных в международном формате ENDF-6.

Апробация результатов диссертации. Результаты работы докладывались на всероссийских и международных семинарах и конференциях:

1. Безопасность АЭС и подготовка кадров. IX Международная конференция, Обнинск, 24 - 28 октября 2005 г.
2. Физические проблемы топливных циклов ядерных реакторов «ВОЛГА – 2006». XIV семинар по проблемам физики реакторов. Москва, 4 – 8 сентября 2006 г.
3. ND-2007 - International Conference on Nuclear Data for Science and Technology. Nice, France, 22 - 27 April, 2007.
4. Безопасность АЭС и подготовка кадров. X Международная конференция, Обнинск, 1 - 4 октября 2007 г.
5. XV семинар по проблемам физики реакторов («Волга-2008»). Актуальные проблемы физики ядерных реакторов – эффективность, безопасность, нераспространение. Москва, 2 - 6 сентября 2008 года.
6. Workshop on Accelerator Radiation Induced Activation (ARIA'08), Villigen, Switzerland, October 13 - 17, 2008.
7. Безопасность АЭС и подготовка кадров. XI Международная конференция, Обнинск, 29 сентября – 2 октября 2009 г.
8. Научная сессия МИФИ – 2010, Москва, 25 - 31 января, 2010.

Публикации. По материалам диссертации опубликованы 16 работ, в том числе 4 статьи - в ведущих рецензируемых научных журналах, определенных ВАК, и 12 - в материалах всероссийских и международных конференций и семинаров.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав текста, заключения, библиографического списка, включающего 143 наименований и двух приложений. Работа изложена на 146 странице, в том числе 131 страниц основного текста с 23 иллюстрациями и 22 таблицами.

Содержание работы

Во **Введении** раскрыта актуальность темы диссертации, степень её разработанности, определены цель, задачи и методология исследования. Обоснованы научная новизна и практическая значимость диссертации.

В главе 1 обозначена проблема обращения с отработавшим ядерным топливом, рассматривается перспектива трансмутации РАО в ЭЛЯУ и проведен обзор проблемы недостаточности ядерных данных для расчёта и конструирования инновационных ядерных установок.

В разделе 1.2 рассматривается привлекательная, именно с точки зрения безопасности в будущем, технология трансмутации РАО, в которой нуклиды представляющие опасность для человечества перерабатывается в стабильные изотопы и не представляют дальнейшей угрозы. Рассматривается применение ЭЛЯУ для трансмутации младших актинидов и продуктов деления, как актуальная инновационная концепция обращения с отходами ядерного топливного цикла. Исследования в области ЭЛЯУ могут быть условно разделены на три группы:

- исследования в области ускорительных технологий;
- исследования в области нейтронных мишеней;
- исследования нейтронно-физических характеристик активной зоны ЭЛЯУ.

Однако существует общая проблема, объединяющая все три направления исследований - это проблема обеспечения исследователей оцененными ядерными данными, необходимых для разработки и конструирования ЭЛЯУ.

В разделе 1.3 дается обзор существующих библиотек оцененных ядерных данных, и определяются ядерные данные необходимые для расчёта и конструирования ЭЛЯУ. В последнее десятилетие был существенно расширен энергетический диапазон требуемых ядерных данных. Специфика конструкции ЭЛЯУ предъявляет ряд новых требований по ядерным данным, в частности, оцененные протонные и нейтронные активационные ядерных данные в области энергий до 1 ГэВ требуются для:

- расчета энерговыделения и накопления продуктов глубокого расщепления *в мишени*;
- моделирования процессов переноса протонов и исследования радиационных повреждений материалов *в системе ввода тучка*.

Крупные библиотеки оцененных протонных и нейтронных активационных данных приведены в таб. 1. Также в таб. 1 представлены библиотеки NEPAD-2008 и IEAF-2005-rev1, созданная и обновленная диссертантом, соответственно.

Как видно из табл. 1 существует необходимость в создании новой высокоэнергетической библиотеки протонных активационных ядерных данных, кроме того, библиотека IEAF-2005 требует обновления, т.к. за последнее время появились более совершенные высокоэнергетические модели ядерных реакций.

В заключение Главы 1 формулируются задачи диссертационной работы, а именно:

- создание библиотеки протонных активационных ядерных данных в энергетическом диапазоне налетающего протона от 150 МэВ до 1 ГэВ. Библиотека получила название NEPAD-2008 (High-Energy Proton Activation Data);
- обновление библиотеки нейтронных активационных ядерных данных IEAF-2005, обновленная версия получила название IEAF-2005-rev2 (2009).

Так как активационные эксперименты долги, дороги и нет большого числа доступных экспериментальных установок, использование программ для моделирования ядерных реакций - единственное решение для активационных исследований. Кроме того, большинство экспериментов выполняется на мишенях с естественным изотопным составом данного элемента, таким образом, определяется только кумулятивный выход остаточных ядер. Надежные теоретические вычисления необходимы для получения независимых выходов для отдельных изотопов.

Таблица 1. Библиотеки оцененных активационных данных

Название библиотеки	Протонные данные		Нейтронные данные	
	Общее количество файлов / Диапазон зарядовых чисел ядер	Энергетический диапазон первичного нуклона	Общее количество файлов / Диапазон зарядовых чисел ядер	Энергетический диапазон первичного нуклона
The European Activation File, EAF-2007	816 / 1-100	до 60 МэВ	816 / 1-100	до 60 МэВ
Proton Activation Data File, PADF-2007	2355/ 12-88	до 150 МэВ	-	-
JENDL High Energy File 2007, JENDL/HE-2007	106 / 1-95	до 3 ГэВ	106 / 1-95	до 3 ГэВ
Joint Evaluated Fission and Fusion File, JEFF	26 / 20-83	до 200 МэВ	774 / 1-100	до 20 МэВ
TALYS-based Evaluated Nuclear Data Library, TENDL-2008	350 / 9-84	до 200 МэВ	350 / 9-84	до 200 МэВ
High-Energy Proton Activation Data, HEPAD-2008	682 / 1-84	до 1 ГэВ	-	-
The Intermediate Energy Activation File, IEAF-2005	-	-	682 / 1-84	до 1 ГэВ

В главе 2 раскрывается проблематика описания ядерных реакций в области энергий налетающей частицы более 150 МэВ.

В разделе 2.1 представлен обзор программ и моделей ядерных реакций в энергетическом диапазоне свыше 150 МэВ. В настоящее время в качестве расчётных инструментов моделирования ядерных реакций используются программы, реализующие как различные полуклассические подходы, так и модели квантово-молекулярной динамики (КМД). На рис. 1 схематично изображен подход к описанию высокоэнергетических процессов, реализуемый в современных расчётных программах. Важнейшим обстоятельством, влияющим на результаты моделирования ядерной реакции, помимо параметров каждой из модели, являются критерии для перехода между моделями.

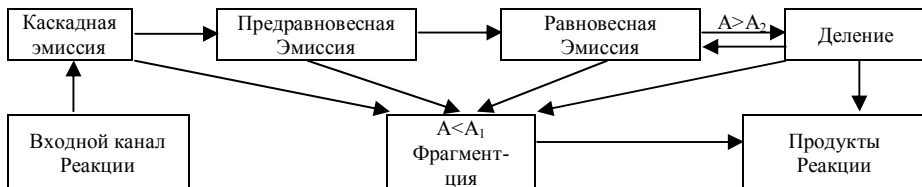


Рис. 1. Описание процессов высокоэнергетического взаимодействия

Если в процессе реакции образуется осколок с массовым числом меньшим A_1 , его дальнейшее поведение описывается в рамках модели фрагментации. Аналогично, поведение осколка с массовым числом большим A_2 описывается с помощью модели деления. Дальнейшее поведение осколков деления описывается в рамках испарительной модели.

В разделе 2.2 представлен обзор программ MCNPX 2.6c и CASCADE/INPE, которые были выбраны для создания библиотеки протонных активационных ядерных данных HEPAD-2008. Для описания ядер-ядерных взаимодействий в программу MCNPX 2.6c включены различные, указанные выше модели, есть возможность использовать их комбинации. В табл. 2 подробно представлены физические модели, реализуемые в вышеупомянутых программах и примененные для расчёта файлов HEPAD-2008.

Таблица 2. Физические модели, реализуемые в программах MCNPX 2.6c и CASCADE/INPE

Расчётная модель	Программа	Модели для различных стадий ядерной реакции				
		Внутриядерный каскад	Предравновесная стадия	Равновесная стадия	Деление	Фрагментация
Bertini/Dresner	MCNPX 26C	Bertini	MPM	Dresner	RAL	Fermi Breakup Модель
Bertini/ABLA	MCNPX 26C			ABLA		
ISABEL/Dresner	MCNPX 26C	ISABEL		Dresner	RAL	
ISABEL/ABLA	MCNPX 26C			ABLA		
INCL4/Dresner	MCNPX 26C	INCL4		Dresner	RAL	
INCL4/ABLA	MCNPX 26C			ABLA		
CEM03.01	MCNPX 26C	JINR/Dubna (с изменениями)	MEM	GEM2		Fermi Breakup модель (с изменениями)
CASCADE	CASCADE/INPE	JINR/Dubna	не рассматривается	JINR/Dubna (Weisskopf model)	JINR/Dubna	не рассматривается

В разделах 2.3-2.6 дается подробное описание и сравнительный анализ различных MBK, предравновесной, испарительной и делительной моделей, реализуемых в программах MCNPX 2.6c и CASCADE/INPE. Особое внимание уделяется свободным параметрам MBK.

В области предравновесных процессов динамика эволюции составной системы описывается через изменение числа экситонов в конфигурационном пространстве ядра по средствам мастер-уравнения экситонной модели. Плотность частично-

дырочных состояний вычисляется по формуле Вильямса. В МЕМ модели в отличие от МРМ модели рассматриваются внутриядерные переходы с уменьшением числа экситонов в конфигурационном пространстве. Учитывается принцип запрета Паули, для квадрата матричного элемента остаточного двухчастичного взаимодействия используется параметризация на основе зависимости от средней энергии, приходящейся на один экситон.

В **разделе 2.7** описаны проблемы моделирования высокоэнергетических взаимодействий. Как видно из табл. 2, даже в рамках двух программ существует значительное количество моделей, описывающих не только различные стадии ядерной реакции в рамках феноменологического подхода, но и множество моделей различных авторов, описывающих одну и ту же стадию ядерной реакции. Наибольшие трудности существуют в МВК в области высоких энергий. Дело в том, что МВК изначально создавалась как полуклассическая модель. Считалось, что при достаточно больших энергиях квантовыми эффектами можно пренебречь, но как показала дальнейшие исследования – это утверждение не совсем верно, и существует ряд эффектов, которые имеют место и при таких энергиях, например, эффекты на границе ядерного потенциала или образование кластеров. Введение же квантовых поправок в классическую, по сути, модель задача не простая, именно поэтому МВК содержит большое количество свободных параметров. В действительности, значение того или иного свободного параметра может быть извлечено (причем, не прямым образом) только из эксперимента, последних в области высоких энергии на порядки меньше, чем даже в области промежуточных энергий, не говоря уже об испарительной области.

В **главе 3** описаны методики создания библиотеки NEPAD-2008 и обновления библиотеки IEAF-2005.

В **разделах 3.1 и 3.2** изложен алгоритм выбора конкретных моделей (табл. 2) для расчёта протонных активационных ядерных данных, позволяющая получить результаты, находящиеся в наилучшем согласии с существующими экспериментальными данными. Предлагается два подхода к выбору моделей для расчёта:

- аналитический подход (на основе анализа свободных параметров моделей и руководствуясь последними достижениями в теории ядерных реакций);
- статистический подход (на основе анализа экспериментальных данных и проведения прецизионных расчётов с целью оценки корреляции расчётных и экспериментальных сечений реакций).

В рамках аналитического подхода рассматривались различия только в параметрах МВК, были выделены основные параметры, влияющие на результаты моделирования:

- распределение плотности внутриядерных нуклонов;
- значение пионного потенциала и описание пионной динамики;
- учет взаимодействия между каскадными частицами;
- учет возможности образования кластеров;
- учет эффектов отражения и преломления на границе ядерного потенциала;

- учет эффекта уменьшения плотности внутриядерных нуклонов по мере развития каскада;
- реализация метода Монте-Карло;
- критерий перехода к предравновесной стадии;
- описание реакций на легких ядрах.

Анализ этих параметров не дает стопроцентной гарантии относительно релевантности той или иной модели, но, руководствуясь современными представлениями в теории ядерных реакций и, учитывая, что представленные выше MBK довольно сильно отличаются, аналитический подход позволяет создать предварительную градацию моделей.

1. Согласно последним экспериментальным данным о структуре ядер, функция распределения плотности внутриядерных нуклонов наилучшим образом может быть смоделирована распределением Вудса-Саксона с параметром диффузности границы, извлекаемом из эксперимента. Непрерывное распределение может быть аппроксимировано различным количеством зон с постоянной плотностью нуклонов.

2. Во всех вышеупомянутых MBK пионная динамика описывается через образование и распад дельта-резонансов в реакциях нуклон-нуклонного и пион-нуклонного взаимодействия в рамках изобарной модели Штернхеймера-Линденбаума. В модели INCL4 используются уточненные данные о времени жизни дельта-резонансов. В модели Bertini учитывается лишь однопионный обмен, который в действительности преобладает лишь на больших расстояниях порядка 2 Фм и более. Во всех MBK используются упрощения для представления пионного потенциала, в то время как реальный пионный потенциал, даже в случае однопионного обмена, является суперпозицией магнитостатических дипольных потенциалов и содержит центральную спин-спиновую и тензорную части.

3. Возможность учета взаимодействий между каскадными частицами напрямую связана с алгоритмом реализации метода Монте-Карло, в частности, при пространственно-подобном подходе такой учет невозможен. Взаимодействие между каскадными частицами учтено в моделях ISABEL и INCL4.

4. Возможность образования кластеров на каскадной стадии учитывается в INCL4 и SEM03.01 моделях. Не принятие во внимание этого эффекта приводит к завышению сечений образования нуклонов на каскадной стадии и занижению сечений образования кластеров на предравновесной и испарительной стадиях.

5. В первых MBK поведение внутриядерных нуклонов описывалось в рамках классической релятивистской динамики без учета эффектов надбарьерного и подбарьерного рассеяния нуклонов на диффузионной границе ядерного потенциала. В последующем, поправки связанные с граничными эффектами, были внесены во все рассмотренные в Главе II MBK, за исключением, Bertini и ISABEL. В модели INCL4 отражение и преломление на ядерной поверхности учитывается в соответствии с формализмом Гамова.

6. Эффект уменьшения плотности внутриядерных нуклонов по мере развития каскада имеет место для любых ядер мишеней и энергий налетающих частиц. В MBK Vertini этот эффект не рассматривается.

7. Временно-подобный метод Монте-Карло реализуется в MBK ISABEL, INCL4 и CASCADE, пространственно-подобный – в моделях Vertini и CEM03.01. Преимущество временно-подобного метода состоит в возможности учесть взаимодействие между каскадными частицами, локальное изменение ядерного потенциала и плотности ядерного вещества, обусловленные предыдущими взаимодействиями. Недостаток же данного метода – это более сложный алгоритм расчёта и, как следствие, более длительное время расчёта.

8. Сравнивая различные критерии перехода к предравновесной стадии ядерной реакции, отметим, что в модели INCL4 каскадная стадия самая короткая, а в модели CEM03.01 – самая длинная. Длинная каскадная стадия более предпочтительна для реакций на тяжёлых ядрах.

9. На сегодняшний день только модель CEM03.01 описывает реакции на лёгких ядрах с массовыми числами $A \leq 5$ в рамках модели фрагментации Ферми, а не в рамках каскадно / предравновесно / испарительного подхода, который в силу малого количества нуклонов в ядрах практически не применим.

В рамках статистического подхода был проведен анализ экспериментальных данных из библиотеки EXFOR. Были рассмотрены несколько способов выбора оптимальной расчетной модели, в том числе сравнение экспериментальных и рассчитанных данных по методу наименьших квадратов, регрессионный, корреляционный и факторный анализ. В итоге автором было отдано предпочтение факторному анализу, т.к. данный подход, с одной стороны, проще всего реализуется, а с другой, дает результаты качественно подобные результатам, получаемым при применении более сложных и громоздких, с точки зрения вычислений, других методов.

Для оценки близости рассчитанных и экспериментальных данных весь диапазон экспериментальных точек был разбит на примерно равные поддиапазоны по массовому числу ядра-мишени. Каждый поддиапазон включал порядка 400 экспериментальных точек, для которых были вычислены значения сечений выхода остаточных ядер для реакций типа (p,x) . Данная процедура позволила частично нивелировать отсутствие экспериментальных данных для ряда нуклидов. В рамках факторного подхода в качестве оценочного параметра выступала линейная комбинация F- и H-факторов согласия, рассчитываемых по формулам:

$$F = 10 \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\lg \sigma_i^{\text{exp}} - \lg \sigma_i^{\text{calc}} \right)^2} \quad H = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\sigma_i^{\text{exp}} - \sigma_i^{\text{calc}}}{\Delta \sigma_i^{\text{exp}}} \right)^2},$$

где N - общее число экспериментальных точек, σ_i^{exp} - экспериментальное значение сечения, σ_i^{calc} - вычисленное значение сечения, где $\Delta\sigma_i^{\text{exp}}$ - погрешность экспериментального значения сечения

В данном случае фактор F позволяет оценить взаимосвязь между рассчитанными и экспериментальными данными, а фактор H позволяет учитывать погрешность экспериментальных данных. Оба эти фактора широко используются в подобных сравнениях. Линейная комбинация факторов согласия вычислялась в виде суммы факторов F и H с весом, равным суммарному значению каждого фактора для всех моделей в выбранном диапазоне массовых чисел ядра-мишени.

Дополнительно был проведен корреляционный анализ и анализ по МНК. Результаты анализа по МНК и корреляционного анализа совпадают с результатами факторного анализа и дают одинаковые рекомендации по выбору расчётных моделей для соответствующих диапазонов изотопов. В табл. 3 представлены модели, рекомендованные для расчёта файлов протонных активационных данных.

Таблица 3. Модели, рекомендованные для расчёта файлов протонных активационных данных

Диапазон изотопов	Расчётные модели для HEPAD-2008
1-H-1 – 10-Ne-22	CEM03.01
11-Na-23 – 13-Al-27	INCL4/Dresner
12-Mg-28 – 27-Co-55	CASCADE
29-Cu-56 – 28-Ni-59	Bertini/Dresner
26-Fe-60 – 40-Zr-89	CASCADE
38-Sr-90 – 54-Xe-124	INCL4/Dresner
50-Sn-125 – 75-Re-181	CASCADE
72-Hf-182 – 84-Po-210	CEM03.01

В разделе 3.3 описана методика формирования файлов ядерных данных HEPAD-2008. На основе выходных файлов программ MCNPX 2.6c и CASCADE/INPE производилась компиляция активационных файлов в формате ENDF-6. В качестве отборочного критерия для включения протонных данных в файлы была выбрана относительная ошибка, рассчитанная как отношение оценки дисперсии и среднего значения вероятности образования данного остаточного ядра в результате розыгрыша N историй Монте-Карло. В файлы записывались ядерные данные для выбранного канала реакции, если значение относительной ошибки не превышало 20%. Каждый файл содержит данные по сечениям протонных реакций с ядрами мишеней в энергетическом диапазоне от 150 МэВ до 1 ГэВ. Активационные данные представлены с шагом 5 МэВ в энергетическом диапазоне от 150 МэВ до 250 МэВ, 25 и 50 МэВ в энергетических диапазонах от 250 МэВ до 600 МэВ и от 600 МэВ до 1 ГэВ соответственно. Все файлы записаны в формате ENDF-6 с использованием секций

MF=3, MT=5 и MF=6, MT=5. На рис. 2 приведены несколько примеров соответствия экспериментальных данных и данных из файлов HEPAD-2008.

В разделе 3.4 описана методика обновления библиотеки нейтронных активационных ядерных данных IAEA-2005. Библиотека IAEA-2005 была создана с использованием программ MCNPX 2.5d и CASCADE/INPE и включила в себя данные по сечениям образования остаточных ядер для 682 различных изотопов от водорода до полония в энергетическом диапазоне от 150 МэВ до 1 ГэВ.

За время прошедшее с момента создания библиотеки IAEA-2005 появились более совершенные модели ядерных реакций, среди которых и модель SEM03.01. Отметим ряд основных изменений в модели SEM03.01 по сравнению с предыдущей версией SEM2k, реализованной в программе MCNPX 2.5d и примененной для расчетов нейтронных файлов ядерных данных IAEA-2005:

- добавлена возможность эмиссии кластеров на стадии внутриядерного каскада;
- появилась возможность многочастичной предравновесной эмиссии нуклонов;
- рассматривается фрагментация легких ядер (на сегодня SEM03.01 является единственной моделью в составе MCNPX 2.6c которая позволяет производить расчеты для ядер-мишеней легче лития).

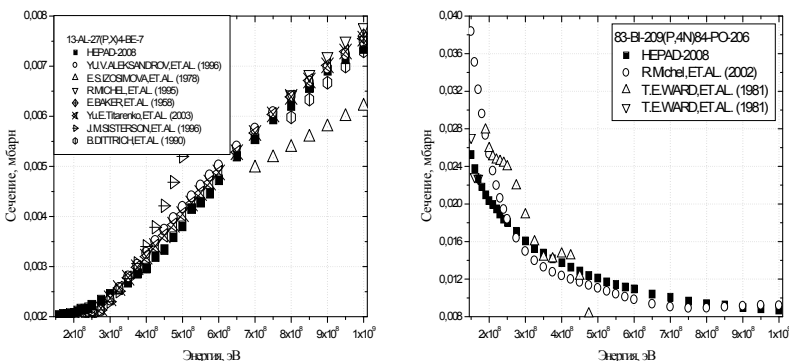


Рис 2. Сечения выхода изотопов. Сравнение данных EXFOR и HEPAD-2008

В табл. 4 приведены модели, рекомендованные на основе статистического анализа для расчёта нейтронных (IEAF-2005) и протонных (HEPAD-2008) активационных данных в различных диапазонах массовых чисел ядер-мишеней. Статистический анализ проводился на основе идентичного набора экспериментальных протонных данных. Таким образом, все изменения в рекомендациях относительно выбора моделей связаны с вышеупомянутыми изменениями и улучшениями в модели SEM03.01.

Для диапазона массовых чисел $A=125-181$ использовались разные модели CEM2k и CASCADE, но более глубокий анализ показал, что для этого диапазона модели CEM2k, CEM03.01 и CASCADE могут быть рекомендованы с одинаковой степенью точности. Для диапазонов массовых чисел $A=1-22$ и $A=206-209$ файлы нейтронной библиотеки IFAF-2005 были пересчитаны используя модель CEM03.01, в остальных диапазонах данные IFAF-2005 не требуют уточнения с применением модели CEM03.01. Всего было переоценено 23 файла для легких ядер и 16 – для тяжелых.

Таким образом, была проведена ревизия библиотеки нейтронных активационных ядерных данных IFAF-2005, обозначен ряд нуклидов, для которых данные по сечениям могут быть уточнены с использованием более современной и совершенной модели, и были проведены соответствующие расчёты. Теперь библиотека протонных активационных ядерных данных HEPAD-2008 и обновленная библиотека нейтронных активационных ядерных данных IFAF-2005-rev1 (2009) представляют собой единую библиотеку высокоэнергетических активационных ядерных данных HEAD-2009 (High Energy Activation Data).

Таблица 4. Расчетные модели, рекомендованные на основе статистического анализа и использованные при создании активационных библиотек IFAF-2005 и HEPAD -2008

Диапазон изотопов	Расчётные модели для IFAF-2005	Расчётные модели для HEPAD-2008
1-H-1 – 2-He-4	MCNPX interpolation tables	CEM03.01
3-Li-6 – 10-Ne-22	ISABEL/ Dresner	CEM03.01
11-Na-23 – 13-Al-27	INCL4/Dresner	INCL4/Dresner
12-Mg-28 – 27-Co-55	CASCADE	CASCADE
29-Cu-56 – 28-Ni-59	Bertini/ Dresner	Bertini/Dresner
26-Fe-60 – 40-Zr-89	CASCADE	CASCADE
38-Sr-90 – 54-Xe-124	INCL4/ Dresner	INCL4/ Dresner
50-Sn-125 – 75-Re-181	CEM2K	CASCADE
72-Hf-182 – 84-Po-210	CASCADE	CEM03.01

В разделе 3.5 было проведено сравнение данных из библиотек EXFOR, JENDL/HE-2007 и HEAD-2009. Всего было отобрано 103 реакции, для которых есть данные во всех трёх библиотеках. Для этих реакций были рассчитаны среднеквадратичные отклонения между данными из библиотек EXFOR и JENDL/HE-2007, и EXFOR и HEAD-2009. Предварительно была сделана полиномиальная интерполяция данных из библиотеки EXFOR там, где это было необходимо. Для 69 реакций среднеквадратичные отклонения между данными из библиотек EXFOR и HEAD-2009 оказались меньше, чем среднеквадратичные отклонения между данными из библиотек EXFOR и JENDL/HE-2007.

В разделе 3.6 описана программа ADR (Activation Data Reader). Программа ADR была создана диссертантом как вспомогательный инструментарий к библиотеке HEAD-2009, предназначена для просмотра файлов активационных ядерных данных, записанных в формате ENDF-6, и позволяет человеку, не обладающему глубокими знаниями процедур формирования файлов в формате ENDF-6, за несколько секунд получить данные о полном неупругом сечении реакции и сечениях образования остаточных ядер. Программа написана на языке программирования C# и является приложением для операционных систем, работающих под управлением Microsoft Windows. Программа выполнена в виде пользовательского графического интерфейса. Программа ADR может быть использована для обработки любых активационных данных, записанных в формате ENDF-6, и была верифицирована на таких библиотеках ядерных данных, как PADF-2007, JENDL/HE-2007 и TENDL-2008.

В главе 4 представлены результаты верификации программ ASTEC и MELCOR и ряд расчётов по оценкам последствий, возникающих вследствие частичной потери теплоносителя первого контура и нарушения целостности пучка труб парогенератора в реакторе ELSY.

В разделе 4.1 рассматривается европейский проект реактора на быстрых нейтронах, охлаждаемого жидким свинцом ELSY. Основная цель проекта – это создание экономически конкурентоспособного энергетического быстрого реактора повышенной безопасности, так же рассматривается и неэнергетическое применение ELSY, в частности, использование его для трансмутации ОЯТ и создание ЭЛЯУ на базе ELSY. Наряду с обоснованием возможностей создания тех или конструкторских решений в рамках проекта так же проводятся различные исследования в обоснование безопасности реактора и рассматриваются последствия гипотетических аварийных сценариев. Абстрагируясь от причин возникновения таких аварий, отметим, что одной из особенностей моделирования последствий различных нарушений в работе ЭЛЯУ является необходимость учитывать накопление и присутствие, как в активной зоне реактора, так и в других частях установки ряда элементов, в частности:

- различных трансурановых элементов, присутствующих в выжигаемом топливе изначально и/или накапливающихся в нём в процессе работы реактора;
- продуктов, образующихся в результате реакций глубокого расщепления в нейтронопроизводящей мишени;
- элементов, возникающих в результате активации конструкционных материалов установки в высокоэнергетических протонных полях.

Активационные ядерные данные в области энергий до 1 ГэВ необходимы для оценки последствий возможных аварий в таких установках.

В разделе 4.2 на основе экспериментальных данных интегрального теста PHEBUS FPT1 проведена верификация программного комплекса ASTEC V1.3REV2.

В разделе 4.3 проведена оценка радиационной обстановки в защитной оболочке реактора ELSY в случае попадания продуктов деления (ПД) и трансурановых элементов (ТУ) в теплоноситель первого контура с последующим нарушением целост-

ности корпуса реактора. С помощью программы ASTEC была смоделирована заключительная часть гипотетической аварии с нарушением целостности активной зоны, и изучалось распространение аргона, содержащего примеси ПД и ТУ в газообразной форме и форме аэрозолей в защитную оболочку реактора. Моделировались различные теплогидравлические условия в корпусе реактора и защитной оболочке.

В **разделе 4.4** описана верификация программы MELCOR 1.8.6 на основе экспериментальных данных интегрального теста PHEBUS FPT1.

В **разделе 4.5** изучались теплогидравлические режимы работы системы охлаждения реактора ELSY в условиях аварии. В программе MELCOR 1.8.6 были смоделированы режимы работы парогенератора, возникающие вследствие частичной потери теплоносителя первого контура (LOCA) и нарушения целостности пучка труб парогенератора (STGR).

В **заключении** приведены основные выводы и результаты работы.

В ходе диссертационной работы были получены следующие основные результаты:

1. Разработан алгоритм проверки адекватности моделей высокоэнергетических нуклон-ядерных взаимодействий, реализованных в современных компьютерных программах MCNPX и CASCADE/INPE.
2. Определены основные параметры каскадно-испарительных моделей, влияющие на точность расчёта высокоэнергетических активационных ядерных данных.
3. Сформулированы рекомендации по применению современных компьютерных программ MCNPX и CASCADE/INPE для расчёта высокоэнергетических активационных ядерных данных.
4. Создан комплекс проблемно-ориентированных программ для расчёта активационных ядерных данных на базе программ MCNPX и CASCADE/INPE.
5. Создана библиотека протонных активационных ядерных данных в энергетическом диапазоне первичных протонов от 150 МэВ до 1 ГэВ для 682 изотопов от водорода до полония.
6. Обновлено библиотека нейтронных активационных ядерных данных в энергетическом диапазоне первичных нейтронов от 150 МэВ до 1 ГэВ для 39 изотопов от водорода до полония.
7. Создана проблемно-ориентированная программа для обработки файлов оцененных ядерных данных, записанных в международном формате ENDF-6.

Список публикаций соискателя

Статьи в научных рецензируемых журналах

1. Конобеев, А.Ю. Нейтронная библиотека активационных файлов «IEAF-2005» в энергетическом диапазоне от 150 МэВ до 1 ГэВ / А.Ю. Конобеев, Ю.А. Коровин, А.А. Наталенко, С.А. Осыкин, Г.Б. Пильнов, А.Ю. Станковский, А.В. Тихоненко, У. Фишер // Известия вузов. Ядерная энергетика. - 2007. - № 2. - с. 8 - 15.

2. Конобеев, А.Ю. Библиотека протонных активационных ядерных данных NEPAD-2008 / Ю.А. Коровин, А.А. Наталенко, Г.Б. Пильнов, А.Ю. Конобеев, А.Ю. Станковский, А.В. Тихоненко // Известия вузов. Ядерная энергетика. - 2009. - № 3. - с. 97 - 105.

3. Брызгалов, А.А. Расчетно-экспериментальное моделирование теплогидравлических процессов, возникающих вследствие тяжелой аварии в защитной оболочке экспериментального реактора RHEBUS / А.А. Брызгалов, А.А. Наталенко, Ф. Де Роза, С. Тирини, Н. Вукелату // Известия вузов. Ядерная Энергетика. - 2008. - № 4. - с.76-85.

4. Брызгалов, А.А. Использование программного комплекса ASTEC для моделирования поведения продуктов деления и других элементов, поступающих в систему охлаждения легководного реактора при тяжелой аварии / А.А. Брызгалов, А.А. Наталенко, Ф. Де Роза, С. Тирини, Н. Вукелату // Известия вузов. Ядерная Энергетика.- 2008. - № 4. - с.3-14.

Материалы конференций и тезисы докладов

5. Наталенко, А.А. Оценка энергетических распределений вторичных протонов, образованных при взаимодействии нейтронов с ядрами при энергиях до 150 МэВ / А.А. Наталенко, Г.Б. Пильнов // Безопасность АЭС и подготовка кадров: тезисы докладов IX Международной конференции. Обнинск, 24 - 28 октября 2005г. - Обнинск: ИАТЭ, 2005. - ч.2. - с.111-112.

6. Коровин, Ю.А. Нейтронные и протонные активационные файлы для ядер $Z = 6-83$ в энергетическом диапазоне от 150 МэВ до 1 ГэВ / Ю.А. Коровин, А.А. Наталенко, Г.Б. Пильнов // Физические проблемы топливных циклов ядерных реакторов. - «Волга-2006»: материалы XIV семинара по проблемам физики реакторов. Москва, 4 - 8 сентября 2006 г. - М.: МИФИ, 2006.- с.212-213.

7. Korovin, Yu. Evaluation of activation nuclear data in the energy region 150MeV to 1 GeV / Yu. Korovin, U. Fischer, A. Konobeyev, A. Natalenko, G. Pilnov, A. Stan-kovskiy, A. Tikhonenko // Proc. Int. Conf. On Nuclear Data for Science and Technology ND2007, Nice, France, April 23 - 27 2007. - EDP Sciences 2008.- p.1175-1178.

8. Конобеев, А.Ю. О возможности использования каскадно-экситонных моделей SEM2k, SEM03.01, SEM03.02 и CASCADE/INPE для расчёта протонных активационных данных в энергетическом диапазоне от 150 МэВ до 1 ГэВ / А.Ю. Конобеев, Ю.А. Коровин, А.А. Наталенко, Г.Б. Пильнов, А.Ю. Станковский, А.В. Тихоненко // Безопасность АЭС и подготовка кадров. X Международная конференция. Обнинск, 1- 4 октября 2007 г. - Обнинск: ИАТЭ, 2007. - Тезисы докладов. - ч.1 - с.48-49.

9. Конобеев, А.Ю. Создание набора файлов нейтронных активационных данных в энергетическом диапазоне от 150 МэВ до 1 ГэВ / А.Ю. Конобеев, Ю.А. Коровин, А.А. Наталенко, Г.Б. Пильнов, А.Ю. Станковский // Безопасность АЭС и подготовка кадров. X Международная конференция. Обнинск, 1- 4 октября 2007 г. - Обнинск: ИАТЭ, 2007. - Тезисы докладов. - ч.1 - с.165.

10. Коровин, Ю.А. Сравнительный анализ каскадно-испарительных моделей, применяемых для расчёта протонных активационных данных в энергетическом диапазоне до 1 ГэВ / Ю.А. Коровин, И.С. Купцов, А.А. Наталенко, С.А. Осыкин // Актуальные проблемы физики ядерных реакторов – эффективность, безопасность, нераспространение – Волга-2008: материалы XV Семинара - М.: МИФИ, 2008. - с.33.

11. Korovin, Yu. Development of a new code to simulate radiation damage and gas accumulation in the structural materials of ADS / Yu. Korovin, A. Konobeyev, A. Stankovskiy, A. Natalenko // Workshop on Accelerator Radiation Induced Activation (ARIA'08), Villigen, Switzerland, 13-17 October, 2008. - Proc. PSI ARIA 08. – p.48-54.

12. Конобеев, А.Ю. Константное обеспечение активационных исследований при энергиях до 1 ГэВ – NEPAD-2008 / А.Ю. Конобеев, Ю.А. Коровин, А.А. Наталенко, Г.Б. Пильнов, А.Ю. Станковский, А.В. Тихоненко // Безопасность АЭС и подготовка кадров. XI Международная конференция, Обнинск, 29 сентября - 02 октября 2009 г. - Обнинск: ИАТЭ, 2009. - Тезисы докладов. - Том 1. - с.134-136.

13. Конобеев, А.Ю. Обновление библиотеки нейтронных активационных ядерных данных IEAF-2005 / А.Ю. Конобеев, Ю.А. Коровин, А.А. Наталенко // Безопасность АЭС и подготовка кадров. XI Международная конференция, Обнинск, 29 сентября - 02 октября 2009 г. - Обнинск: ИАТЭ, 2009. - Тезисы докладов. - Том 1. - с.136-137.

14. Брызгалов, А.А. Моделирование аварийных режимов работы парогенератора реактора ELSY с помощью программы MELCOR 1.8.6 / А.А. Брызгалов, А.А. Наталенко, Ф. Де Роза, Н. Вукелату // XI Международная конференция «Безопасность АЭС и подготовка кадров – 2009, 29 сентября - 02 октября 2009 г. - Обнинск: ИАТЭ, 2009. - Тезисы докладов. - Том 1. - с.138.

15. Конобеев, А.Ю. Библиотека оцененных активационных ядерных данных HEAD-2009 / А.Ю. Конобеев, Ю.А. Коровин, А.А. Наталенко, А.Ю. Станковский, А.В. Тихоненко // Научная сессия МИФИ – 2010, 25 - 31 января, 2010. - М.: НИЯУ МИФИ, 2010. – Аннотации докладов. – Том 1. – с.232.

16. Наталенко, А.А. Графический интерфейс для просмотра файлов активационных ядерных данных записанных в формате ENDF-6 / А.А. Наталенко // Научная сессия МИФИ – 2010, 25 - 31 января, 2010. - М.: НИЯУ МИФИ, 2010. – Аннотации докладов. – Том 1. – с.232.

17. Korovin, Yu. A. High Energy Activation Data Library (HEAD-2009) / Yu. A. Korovin, A. A. Natalenko, A. Yu. Konobeyev, A. Yu. Stankovskiy, S. G. Mashnik // Los Alamos National Laboratory Report.- 2010. - LA-UR-10-01397.