

# Развитие комплекса программ MARS для решения радиационно-физических задач проектирования электроядерных установок

И.Л.Ажгирей, И.А.Курочкин, В.В.Таланов  
ГНЦ РФ Институт физики высоких энергий, Протвино, Россия

## Введение

Стратегия развития любого проекта в области программного обеспечения определяется кругом решаемых задач. Расчетное моделирование электроядерной установки фактически является новым классом задач моделирования радиационно-физических проблем, объединяющих методики, до сих пор развивающиеся в “реакторных” и “ускорительных” областях. Нами предприняты определенные усилия по развитию комплекса программ MARS [1] по направлению к возможности решения проблем, типичных для проектирования электроядерных установок [2], [3], [4], в первую очередь решаемых методами радиационной физики.

## 1. Классификация задач

Имея в виду достаточно общую схему электроядерной установки, можно условно подразделить расчетные задачи на несколько этапов:

- Решение радиационных проблем, связанных с проектированием сильноточных ускорителей — расчеты и минимизация потерь пучка, прогнозирование радиационных эффектов — разогрева, наведенной радиоактивности, радиационных повреждений. тот же круг проблем возникает при моделировании транспортировки пучка от ускорителя до мишени.
- Описание взаимодействия сильноточного пучка с мишенью — расчет пространственного распределения энерговыделения и расчет выхода вторичных частиц, главным образом нейтронов; трансмутация ядер мишени либо долгоживущих радиоактивных отходов каскадными частицами.
- Расчет переноса нейтронов и энерговыделения в blankets.
- Решение вопросов радиационной безопасности на всех этапах, прогнозирование возможного уровня радиационного загрязнения окружающей среды.

## 2. Развитие комплекса MARS

### 2.1. О применении метода Монте–Карло в моделировании электроядерных установок

Метод Монте–Карло безусловно является наиболее адекватным средством моделирования ядерно–физических процессов. Однако он является довольно трудоемким и навряд ли может быть рекомендован для массовых расчетов поведения и оптимизации параметров электроядерных систем. В то же время ММК–расчеты являются естественным средством для настройки и нормировки упрощенных аналитических кодов, используемых для этих целей [4], и должны развиваться параллельно им.

Аналитические коды являются наиболее удобными для описания динамики отжига топлива и трансмутации радиоактивных отходов, эволюции отравления топлива продуктами деления. Но узловые моменты проекта должны быть подтверждены более точными “полномасштабными” расчетами методом Монте-Карло.

## 2.2. Представление геометрии и моделирование транспорта частиц

Точное представление геометрии является безусловно необходимым на этапе “ускоритель–мишень”. Что касается расчетов транспорта и взаимодействия нейтронов в системе “топливо–охладитель”, то любые упрощения геометрии, используемые в аналитических приложениях, должны быть обоснованы точными расчетами. Таким образом, эффективное и гибкое представление геометрии является одним из ключевых моментов моделирования.

Исторически представления геометрии и алгоритмы моделирования транспорта в Монте-Карло программах можно считать восходящими к задачам расчета переноса нейтронов и гамма-квантов в различных приложениях реакторной физики, физики космических лучей и ШАЛ.

Представления геометрии, используемые в программах моделирования переноса излучения методом Монте-Карло, можно разделить на два класса. К первому, называемому “аналитическим”, относятся представления геометрии в виде набора аналитически (что и обуславливает его название) заданных поверхностей и тел — ориентированных поверхностей, тел вращения и их комбинаций. Впервые такой подход был предложен в 1972 году для программы MORSE [5], [6]. Аналитическое представление геометрии было использовано в разработанном в ИФВЭ программном коде MARS4 [7], а также в хорошо известной программе FLUKA [8], [9].

Второй класс составляют представления геометрии расчетной задачи в виде набора элементарных объемов (“*shapes*”) — параллелепипедов, цилиндров, сфер и т.д. — каждый из которых может иметь независимую локальную систему координат (“*local reference frame*”), привязанную к главной (“*master*”) системе координат, и может быть произвольно ориентирован или вложен в другой объем. В своем “чистом” виде такой подход к описанию геометрии реализован в разработанном в CERN программном комплексе GEANT3 [10].

Существуют также различные приложения, в которых два описанных класса представлений геометрии объединяются, например задача использования в программе моделирования описания геометрии, созданного в САД-системе. Для ее решения, например, для комплекса GEANT3 было предложено описание геометрии, использующее как аналитические тела, так и элементарные объемы [11].

Каждому классу представлений геометрии соответствует свой метод транспорта частиц. Определяющим в данном случае является ответ на вопрос, что в данном представлении геометрии выгоднее делать с точки зрения затрат счетного времени. В первом случае требуется решать систему уравнений для определения точек пересечения некоторого луча с заданными поверхностями, что упрощает работу разработчика программы, поскольку не требует применения сложных алгоритмов (например, монография [12]).

Во втором случае от разработчика программы требуется программная реализация процедур локализации границы, перебора элементов и обхода деревьев [13]. Однако

сложности на стадии разработки, как показала практика использования, компенсируются наглядностью получаемого в результате описания геометрии и простотой его создания и модификации.

Именно поэтому разработанный в ИФВЭ программный комплекс MARS [1], [14] в качестве основного использует представление геометрии в виде набора элементарных объемов [15]. Такой подход к описанию геометрии позволяет легко и естественно переходить при создании и изменении геометрии расчетной задачи от конструкторских спецификаций и чертежей элементов установок к описанию геометрии, готовой к использованию в программе моделирования. Использование гибкого и вместе с тем мощного аппарата описания геометрии в виде набора элементарных объемов позволяет решать сложные расчетные задачи моделирования радиационной обстановки на экспериментальных установках и ускорителях заряженных частиц [16].

Для расчетов энерговыделения в протонных мишенях из металлических и солевых расплавов разработан алгоритм быстрого моделирования транспорта частиц в объектах, описанных иррегулярным набором элементарных объемов, используемых для расчетов гидродинамики мишени. Для ускорения процедуры перебора элементов применяется процедура кеширования объекта, представленного нетипичным с точки зрения классического подхода методом. Это существенно снижает затраты на расчет и позволяет провести моделирование каскадных процессов, разогрева и динамики мишени в едином формате данных.

### 2.3. Константное обеспечение

Условно физические константы для данной задачи можно разделить на “реакторные” и “каскадные” по энергии взаимодействия частиц. Как первые, так и вторые нуждаются в тщательной верификации, прежде чем быть использованными для расчетов ЭЯУ. В последнее время этой проблеме уделяется большое внимание [17]. Параметры адрон–ядерного взаимодействия в области энергий налетающего адрона от 10 МэВ до 3 ГэВ наиболее точно описываются на основе модифицированной каскадно–экситонной модели для средних и тяжелых ядер [18], [19], [20] и комбинации модели внутриядерного каскада и модели ферми–развала для легких ядер [21].

Однако задача расчета по каскадно–экситонной модели сама по себе достаточно трудоемка, поэтому использование ядерных моделей внутри транспортных кодов достаточно громоздко. Оптимальным кажется сочетание феноменологического описания ядерных взаимодействий, как в MARS, дополненное предварительно рассчитанными параметрами адрон–ядерного взаимодействия по модифицированной каскадно–экситонной модели для особо интересных групп ядер. Например, при расчетах трансмутации радиоактивных отходов для описания процессов взаимодействия адронов с долгоживущими трансактиноидами MARS использует сечения, рассчитанные в работе [22] методом внутриядерного каскада.

Сравнения результатов моделирования адронных каскадов по программам серии MARS с циклом экспериментов по измерению энерговыделения в протяженных мишенях из различных материалов на пучке бустера У-70 ИФВЭ показали хорошее согласие экспериментальных и расчетных данных [23].

## 2.4. Транспорт частиц пучка в ускорителе

В комплекс MARS входит программа STRUCT'96 для расчетов потерь возмущенных частиц пучка после взаимодействия с ядрами остаточного газа в вакуумной камере или элементами системы локализации потерь [24].

## 2.5. Расчеты уровней остаточной радиоактивности

Для расчетов уровней наведенной радиоактивности используется программа MARACT [25] комплекса MARS. Гамма-кванты, рождающиеся при спонтанном распаде нестабильных ядер, транспортируются в той же геометрии, в которой проводится моделирование транспорта адронного каскада и нейтронов. В качестве “источника” используются результаты расчетов распределений ядер-остатков и продуктов нейтронных реакций по программе MARS.

## Список литературы

- [1] Ажгирей И.Л. и др. – Препринт ИФВЭ 93-19, Протвино, 1993.
- [2] C.D.Bowman et al. NIMA 320(92),p.336.
- [3] Барашенков В.С. и др. АЭ, 76(94), с.65.
- [4] C.Rubbia et al. – CERN/AT/95-44(ET).
- [5] Straker E.A. et al. The MORSE Code with Combinatorial Geometry. DNA-2860T (May 1972).
- [6] Emmet M.V. The MORSE Monte Carlo Radiation Transport Code System. ORNL-4972, 1975.
- [7] Байшев И.С. и др. – Препринт ИФВЭ 78-2, Серпухов, 1977.
- [8] Aarnio P.A. et al. – CERN/TIS-RP/168(86), CERN/TIS-RP/190(87).
- [9] Ferrari A. et al. – Nucl. Intsr. and Meth. B71(92) 412.
- [10] GEANT: Detector Description and Simulation Tool. CERN Program Library Long Writeups Q123.
- [11] Brun R. et al. – CERN 90-10, vol.III, 1990, p.2.
- [12] Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. – М.: Наука, 1975.
- [13] Таланов В.В. – Препринт ИФВЭ 94-137, Протвино, 1994.
- [14] Ажгирей И.Л. и др. – Доклад на 6-й всероссийской конференции по радиационной защите, Обнинск, 1994.
- [15] Таланов В.В. – Препринт ИФВЭ 92-99, Протвино, 1992.

- [16] Azhgirey I. et al. – CERN CMS TN/94-265, CERN CMS TN/94-266, CERN CMS TN/94-267, CERN CMS TN/95-053, CERN CMS TN/95-054, CERN CMS TN/95-060, CERN CMS TN/95-063, CERN CMS TN/95-102.
- [17] F.Atchison. In: Proc. of the Specialists Meeting on Accelerator – Based Transmutation, p. 440, PSI, Villigen, Mar. 24-26, 1993.
- [18] Mashnik С.Г., Тонеев В.Д. – Препринт ОИЯИ Р4-8417, Дубна, 1974.
- [19] S.G.Mashnik. – Preprint JINR E-92-320, Dubna, 1992.
- [20] Живописцев Ф.А. и др. Модели предравновесных ядерных реакций., Москва, 1987.
- [21] Ботвина А.С. и др., – Препринт ИЯИ-П-0657, Москва, 1990.
- [22] V.A.Konshin, – Preprint JAERI-Research 95-010.
- [23] V.I.Beljakov-Bodin et al. NIMA 295(1990), p. 140; Беляков-Бодин В.И. и др. АЭ, 70(1991), стр. 339; V.I.Beljakov-Bodin et al. NIMA 314(1992), p. 508;
- [24] I.Baishev et al. SSCL-MAN-0034, 1994.
- [25] И.С.Байшев и др. – Препринт ИФВЭ 91-118. Протвино, 1991.