

УСОВЕРШЕНСТВОВАННЫЙ ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС CASCADEX 1.2 ДЛЯ РАСЧЕТА РЕАКЦИЙ ГЛУБОКОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ

А.А. Андрианов*, А.Ю. Конобеев, Ю.А. Коровин*, И.С. Купцов*,
А.Ю. Станковский*****

**Обнинский институт атомной энергетики НИЯУ МИФИ, г. Обнинск*

***Institut für Reaktorsicherheit, Forschungszentrum Karlsruhe, Karlsruhe*

****CEA, IRFU, SPHN, F-91191 Gif-sur-Yvette, Institut Curie-Centre de protontherapie
d'Orsay, Bât. 101 du Centre Universitaire d'Orsay, BP65, 91402 Orsay*



Приведено описание усовершенствованной версии программного комплекса CASCADEX 1.2, предназначенного для расчета реакций глубокого расщепления и дано описание интерактивной среды IViS CASCADEX, обеспечивающей возможность проведения многовариантных серийных расчетов, осуществления обоснованного выбора параметров моделей по результатам количественного сопоставления с экспериментом и включающей в себя широкий спектр средств обработки и представления результатов расчетов. Приведены результаты использования разработанных программных средств для задач совершенствования константного обеспечения.

Ключевые слова: модели ядерных реакций, программные комплексы, расчет высокоэнергетических нуклон-ядерных взаимодействий, интерактивные среды, расчет спектров образования продуктов глубокого расщепления.

Key words: nuclear reaction models, program complex, high-energy nuclear-nuclear interaction calculation, interactive programs, spallation products.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время проявляется устойчивый интерес к ядерным реакциям, протекающим при высоких энергиях. Это вызвано расширением областей науки и техники, где данного рода реакции играют значительную роль. К их числу следует отнести разработку высокоэнергетических нейтронных источников, наработчиков редких изотопов, необходимость решения задач по оценке радиационной обстановки вблизи ускорителей и обоснованию стратегий трансмутации отходов ядерной энергетики. Для этих целей разными научными коллективами разработано множество программ, основанных на использовании модели внутриядерного каскада, описывающей испускание быстрых частиц в результате каскада двухнуклонных соударений в объеме ядра, и статистической модели испарения частиц и деления (CEM, INCL и др.).

© А.А. Андрианов, А.Ю. Конобеев, Ю.А. Коровин, И.С. Купцов, А.Ю. Станковский, 2011

В то же время, несмотря на многообразие программных средств, целесообразность разработки и совершенствования отечественного инструментария продиктована тем обстоятельством, что на часть зарубежных программ существуют внеэкономические ограничения на приобретение и использование, а с частью сопряжены затраты, значительно превышающие стоимость собственных разработок и проводимых на их основе исследований. При этом имеющийся спрос на данного рода разработки в ряде развивающихся стран говорит об их экспортном потенциале.

УСОВЕРШЕНСТВОВАННАЯ ВЕРСИЯ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА CASCADeX 1.2

Краткое описание CASCADeX

Программа CASCADeX (CASCAD eXtended) [1] является расширенной версией программы CASCADE/INPE [2], которая в свою очередь является развитием программы CASCADE, разработанной в Объединенном институте ядерных исследований (г. Дубна) рабочей группой В.С. Барашенкова [3]. В таблице 1 представлено краткое описание особенностей CASCADeX.

Интегрирование CASCADeX и TALYS 1.2

TALYS – программа, разрабатываемая в NRG в Петтене (Нидерланды) и CEA в Брюйер-ле-Шатель (Франция), и предназначенная для моделирования ядерных реакций, протекающих с ядрами при взаимодействии с легкими налетающими частицами (n , p , d , t , ^3He , ^4He , γ). TALYS представляет собой универсальный инструмент как для анализа микроскопических экспериментов, так и генерации ядерных данных для различных приложений [9].

Программа TALYS предназначена для моделирования ядерно-ядерных взаимодействий (прямые реакции, реакции, идущие через составное ядро, предравновесные реакции и реакции деления) в диапазоне энергий от 1 кэВ до 200 МэВ и основана на совокупности современных моделей ядерных реакций (оптическая модель и модель связанных каналов, модель множественной эмиссии в рамках формализма Хаузера-Фешбаха, разнообразные модели деления и др.).

В версию 1.2 программного комплекса TALYS, выпущенную в декабре 2009 г., внесены обновления, касающиеся более детального описания микроскопической структуры ядра, моделей ядерных реакций, и расширенный набор сервисных функций. Отмеченные модификации TALYS привели к необходимости переработки программного комплекса CASCADeX, на основе которого появилась его новая версия CASCADeX 1.2. Данные модификации обеспечили более устойчивую работу комплекса и расширили его функциональные возможности.

Для начала работы с программой требуется сформировать входной файл, содержащий информацию о типе налетающей частицы, ядре мишени и статистику. Также могут быть введены дополнительные параметры, такие как энергия перехода к испарительной стадии реакции, тип модели испарения, an -, af -факторы, дающие возможность корректировки формы массовых распределений, опция, обеспечивающая подключение модуля, учитывающего образование кластеров.

Первоначально выполняется процедура, моделирующая процесс внутриядерного каскада и описывающая испускание частиц в результате каскада двухнуклонных соударений в объеме ядра, после этого моделируются на основе статистической модели процессы испарения частиц и деления в рамках моделей, заложенных в TALYS 1.2.

В новой версии CASCADeX предусмотрена возможность учета процессов образования кластеров на основе модели нарушения ядерных связей [12].

Таблица 1

Модельные особенности CASCADeX

Быстрая каскадная стадия	
Сечения нуклон-нуклонных упругих и неупругих взаимодействий	Неупругие и упругие нуклон-нуклонные взаимодействия при каскадной стадии рассчитываются согласно [4–6]
Средний потенциал, в котором находятся нуклоны (V_p, V_n)	Предполагается, что нуклоны находятся в потенциальной яме вида $V(r) = \xi + \frac{P_f^2}{2m}$, где m – масса нуклона, ξ – средняя энергия связи нуклона в ядре и P_f – импульс Ферми
Форма ядра	Сфера радиуса $R = 1,07 A^{\frac{1}{3}}$ фм (A – массовое число ядра). Потенциал Вудса-Саксона
Выход легких ядер на стадии каскада	Используется модель движущегося источника [7, 8]
Запрет Паули	Учитывается
Учет предравновесия и критерий перехода к испарительной стадии, если предравновесие не учитывается	Предравновесие не учитывается. Переход к испарительной стадии осуществляется при определенном значении энергии, когда набранная популяция частиц после каскадной стадии обрабатывается в рамках модели девозбуждения, реализованной в программе TALYS 1.2. Эта энергия перехода на испарительную стадию возбужденного ядра является параметром модели. Она может варьироваться от 0 до 200 МэВ
Модель девозбуждения	
Плотности уровней	Приближение постоянной температуры в совокупности с моделью ферми-газа [9]
Сечение обратной реакции σ_{inv}	Расчитывается в рамках оптической модели [9]
Барьеры деления	Взяты из работы [10]
Фрагментация при делении	Моделируется в рамках модели, предложенной в [11]
Перечень каналов де-экситации	Конкуренция между делением, эмиссией частиц и фотонов [10]
Возможность учета изомеров	Учет изомеров в программе CASCADeX отсутствует. Считается, что при необходимости более глубокий анализ можно провести с помощью программы TALYS 1.2, в которой данная возможность реализована
Характеристики программного комплекса	
Область применения программы	Быстрая стадия каскада была верифицирована на ядрах мишени в диапазоне массовых чисел от 2 до 240. Значения энергии налетающей частицы могут быть до 2 ГэВ/нуклон для мишеней с массовым числом ниже 40 и до 1 ГэВ/нуклон для мишеней с массовым числом больше 40
Время счета программы	Для статистики в миллион историй расчет по программе занимает около 40–60 мин на процессоре с тактовой частотой 3 МГц для программы CASCADeX 1.2, откомпилированной под Intel Fortran Compiler 11.X. На других компиляторах немного больше (gcc, Compaq Fortran Compiler 6.X). Расчет испарительной стадии по программе TALYS 1.2 занимает от 3 до 24 ч в зависимости от количества ядер после каскадной стадии на компьютере с той же тактовой частотой

Дважды дифференциальные сечения вылета легких ядер

Для расчета дважды дифференциальных сечений вылета легких ядер (d, t, ^3He , ^4He) была использована модель движущегося источника [7, 8]. Эта модель, несмотря на то, что является феноменологической, показала неплохое согласие с экспериментальными данными и в настоящее время широко используется.

Дважды дифференциальное сечение в модели движущегося источника находится следующим образом:

$$\frac{d^2N}{d\Omega dE} = N_0 \cdot \sqrt{E_{ac}} \cdot \exp \left\{ \frac{[-E - Z \cdot E_c + E_1 - 2 \cdot \sqrt{E_1} \cdot \sqrt{E_{ac}} \cdot \cos(\theta)]}{T(\theta)} \right\},$$

где N_0 – нормировочная константа; $E_{ac} = E - Z \cdot E_c$ – энергия отталкивания, обусловленная кулоновским взаимодействием; E_c – энергия кулоновского отталкивания, приходящаяся на единичный заряд; Z – заряд испущенной частицы; $E_1 = m \cdot V^2/2$ – кинетическая энергия частицы массой m в системе центра масс при скорости V ; $T(\theta) = T_0 \cdot \exp(-\theta/45.5)$ – температура ядра; θ – угол детектирования. Домножая и деля на квадрат скорости света выражения для кинетической энергии E_1 , переходим к более удобной форме ее расчета:

$$E_1 = m \cdot c^2 \cdot \beta^2/2,$$

где $\beta = V/c$; масса налетающей частицы берется в электронвольтах.

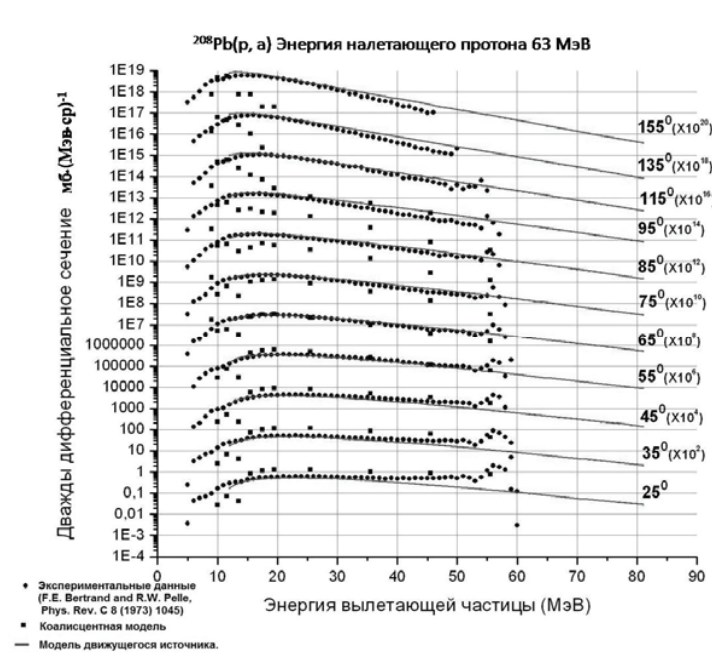


Рис. 1. Зависимость дважды дифференциального сечения от энергии альфа-частицы для реакции $^{208}\text{Pb}(p, \alpha)$

Для примера на рис. 1 приведен характерный спектр вылета неравновесных альфа-частиц в реакции $p+^{208}\text{Pb}$. Параметры P_0 для коалицентной модели и T_0 , N_0 и β для модели движущегося источника подбирались в каждом случае отдельно так, чтобы наилучшим образом соответствовать экспериментальным данным, рекомендованным для верификации в рамках проекта МАГАТЭ по сравнительному анализу моделей реакций «Benchmark of Spallation Models») [12].

Некоторые особенности компиляции CASCADEX

В силу того, что расчет испарительной стадии по программе TALYS 1.2 может занимать существенное время, определяемое, в конечном счете, количеством ядер после каскадной стадии, была проведена работа по выбору типа компилятора с целью повышения эффективности расчетов. Так исходный код программного комплекса CASCADEX 1.2 был откомпилирован компиляторами Fortran g95, Compaq Fortran 6.x, Intel Fortran 9.x и 11.x. Проведенный анализ скорости счета програм-

мы CASCADeX 1.2 на компьютере с тактовой частотой 3 МГц выявил, что CASCADeX 1.2, откомпилированный под Intel Fortran, рассчитывает на 10–15% быстрее, чем под другими компиляторами. Выбор данного типа компилятора также обусловлен возможностью организации расчетов в параллельном режиме в рамках технологии OPEN MP, поддерживаемой данным компилятором. Кроме сравнения различных версий компиляторов проведена адаптация CASCADeX 1.2 под платформы Linux Suse 11.x и Windows XP.

ИНТЕРАКТИВНЫЙ ВИЗУАЛЬНЫЙ ИНТЕРФЕЙС IVIS CASCADEX

Для целей автоматизации расчетов и обработки результатов, а также подбора параметров моделей была разработана система визуального моделирования IViS (Interactive Visual System) для программы CASCADeX 1.2. Эта программная система нацелена на решение проблем обработки, оценки, согласования, верификации и наглядного представления полученных данных как для непосредственного применения существующих техник, так и для отработки новых. Данный класс проблем сравним по значимости с проблемами совершенствования физических моделей, позволяющих более точно рассчитывать ядерные реакции в том случае, если данные получить экспериментально невозможно. В конечном счете, данная система может быть использована для генерации большого количества оцененных ядерных данных в обширном круге нуклидов и энергий, необходимых в различных приложениях.

Данная система визуального моделирования включает в себя следующие компоненты: расчетная модель; графический интерфейс; система управления расчетами; система визуализации входных и выходных данных; система обработки результатов. Также IViS-система имеет доступ к готовым библиотекам ядерно-физических данных, к экспериментальным данным и расчетам по другим моделям.

В данной системе реализована процедура автоматического выбора параметров модели, обеспечивающих наилучшее согласие с экспериментом. Первым шагом является выбор типа расчета в соответствии с имеющимися экспериментальными данными: массовые распределения, функции возбуждения, дважды дифференциальные сечения. После этого необходимо указать диапазон варьируемых параметров, набор критериев и выбрать метод стохастической оптимизации (методы перебора, ЛП_τ-поиск).

Для проведения процедуры оценки необходимо указать референтные данные, на основании которых будут вычисляться факторы согласия. Референтными данными могут быть результаты ранее сделанных расчетов, экспериментальные данные или же взятые из библиотек активационных ядерно-физических данных.

Для оценки согласования расчетов с референтными данными используются как факторы согласия, широко используемые в настоящее время в данной предметной области, так и факторы, предложенные авторами, отражающие их представления о возможных способах оценки расчетов. Единовременное рассмотрение столь широкого набора факторов согласия продиктовано тем обстоятельством, что в настоящий момент отсутствует общепринятая и согласованная методология проведения сравнения с экспериментом в данной предметной области. Некоторые факторы согласия, необходимые для понимания сути излагаемого, представлены в табл. 2.

В отличие от традиционных подходов к выбору оптимальной модели или набора свободных модельных параметров, где решение выбирается на основе одного из совокупности факторов согласия или свертки нескольких, в IViS реализованы методы векторной постановки задачи, основанные на принципе компромисса

Таблица 2

Факторы согласия

F	$\langle F \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N F_i}{N} = 10 \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\lg(\sigma_i^{exp}) - \lg(\sigma_i^{calc}))^2}{N}}$	Оценка интегральной близости к эксперименту при условии, что данные могут сильно различаться
H	$H = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\sigma_i^{exp} - \sigma_i^{calc}}{\Delta \sigma_i^{exp}} \right]^2}$	Оценка интегральной близости к эксперименту. Показатель степени отражает допустимую степень компенсации малых значений одних слагаемых большими значениями других.
D	$D = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left \frac{\sigma_i^{exp} - \sigma_i^{calc}}{\Delta \sigma_i^{exp}} \right $	Чем больше значение показателя, тем больше степень возможной компенсации
R	$R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_i^{calc}}{\sigma_i^{exp}}$	Оценка интегральной относительной близости к эксперименту

(принятия взвешенного решения, в котором фигурируют в определенной пропорции все действующие факторы), т.е. если число критериев более одного, то после расчета осуществляется автоматический отбор эффективных наборов параметров модели (удовлетворяющих определению парето-оптимальности), обеспечивающих приемлемое по совокупности значений факторов решение. Очевидно, при этом предлагается не однозначный ответ, а лишь область разумных (рациональных) решений. Принятие же однозначного решения остается прерогативой лица, принимающего решение, поддержка выбора которого может быть осуществлена с использованием современных методов теории принятия решений при многих критериях.

В данный момент для окончательного выбора наилучшего набора параметров модели из совокупности недоминируемых реализован метод анализа иерархий. Для использования данного метода пользователю необходимо провести попарное сравнение критериев отбора. Конечным результатом работы программы являются наиболее подходящие параметры модели относительно выбранных референтных данных и предпочтений пользователя. Данная опция внедрена для целей сравнительного анализа техники оценки.

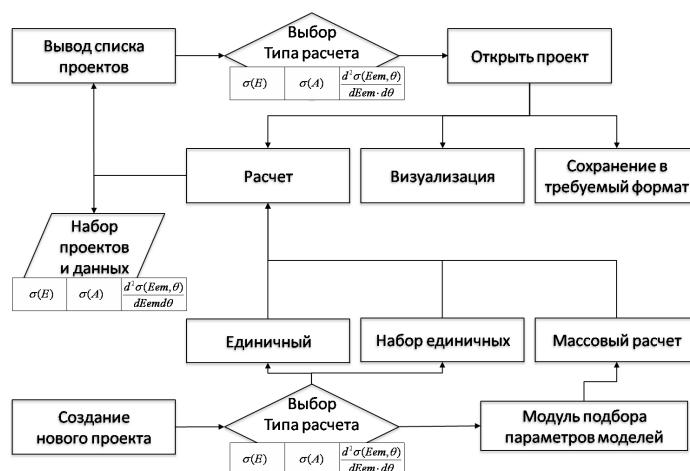


Рис. 2. Блок-схема IViS CASCADeX

В качестве основной платформы создания данной системы была выбрана платформа Microsoft .NET и основной язык разработки приложений для нее C# [14]. Выбор технологии .NET обусловлен как возможностью эффективно разрабатывать приложения под Windows, web-приложения и web-сервисы, так и тем, что в .NET встроена поддержка взаимодействия языков. Она позволяет существующему коду, написанному на другом языке, эффективно взаимодействовать с кодом на C#. В результате созданные ранее библиотеки для численных расчетов или код, написанный на другом языке программирования, можно интегрировать непосредственно в C# приложения. Это позволяет одновременно писать код на нескольких языках, а затем интегрировать его или использовать совместно. Это оказывается полезным при разработке данного рода программных систем.

НЕКОТОРЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ РАЗРАБОТАННОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

Программное обеспечение было использовано для проведения расчетов в рамках проекта, организованного МАГАТЭ по сравнительному анализу моделей реакций глубокого расщепления («Benchmark of Spallation Models»), а также обновлению библиотек активационных данных.

Определение оптимальных параметров модели CASCADEX 1.2

С целью дать рекомендации по областям применимости CASCADEX 1.2 и значений свободных параметров модели в диапазоне энергий от 150 МэВ до 1 ГэВ и массовых чисел от 13 до 240 была проведена серия расчетов, по результатам которых были определены значения свободных параметров, обеспечивающих наилучшее согласование с экспериментом. Экспериментальные значения были взяты из базы данных EXFOR, а также из экспериментов, представленных в проекте МАГАТЭ «Benchmark of Spallation Models» [12].

На основании количественных сопоставлений с экспериментами, представленных в [12], проведена оценка свободных параметров модели выхода легких ядер. Оптимальные значения коэффициентов T_0 , N_0 и β для модели движущегося источника представлены в табл. 3.

Сравнительный анализ факторов согласия по моделям, входящих в «Benchmark of Spallation Models», для реакций $^{nat}\text{Pb}(p, x)$ представлен в табл. 4, в которой выделены жирным шрифтом модели, рекомендованные экспертами МАГАТЭ (incl4abla, incl4gemini, incl4smm). Модели, рассчитанные по совокупности факторов согласия, которые удовлетворяет условию парето-оптимальности (CASCADE/ASF, CEM02, g4bic, phits4jam, CASCADEX 1.2) выделены серым цветом.

Сравнительный анализ с моделями, входящими в MCNPX

В рамках многофакторного анализа, предоставляемого средой IViS CASCADEX, был проведен сравнительный анализ CASCADEX 1.2 с моделями расчета высокоэнергетических нуклон-нуклоновых реакций, входящих в программный комплекс MCNPX. В работе были проведены расчеты факторов для различных энергий перехода на испарительную стадию программы CASCADEX 1.2 (50, 100, 150, 200 МэВ) на основании экспериментов, использовавшихся в [15].

Обработка всей совокупности данных для ^{184}W на основе методов многокритериального анализа показала преимущества моделей Bertini/Dresner, CASCADE, CASCADE/ASF, CASCADEX 1.2. При условии, что все факторы одинаково значимы и в качестве агрегированного показателя эффективности используется их линейная свертка, CASCADE/ASF представляет собой наилучшую модель для расчета сечений реакции $^{184}\text{W}(p, x)$ при соответствующих энергиях налетающей частицы (табл. 5).

Таблица 3

Оценка параметров моделей выходов легких ядер

Мишень	Реакция	Энергия протона, МэВ	Модель движущегося источника			$Z_{\text{ес}}$	Рабочая группа	Ссылка
			N_0	β	T_0			
Pb	Pb(p, α)	63	0,15	0,035	5,5	19,837	LANL, USA	F.E. Bertrand and R.W. Pelle, Phys. Rev. C 8 (1973) 1045
	Pb(p,3He)	63	0,011	0,068	8,5	19,804		
	Pb(p,t)	63	0,1	0,06	9,5	10,024		
	Pb(p,d)	63	0,205	0,068	10,5	10,024		
Au	Au(p, α)	2500	7	0,015	7	19,458	COSY, Germany	A. Bubak et al., Phys. Rev. C 76 (2007) 014618
	Au(p,3He)	2500	0,4	0,004	11	19,804		
	Au(p,t)	2500	2,2	0,02	13,5	10,024		
	Au(p,d)	2500	3,3	0,015	11,5	10,024		
Ni	Ni(p, α)	175	0,21	0,33	7	10,298	COSY, Germany	S.V. Förtsch et al., Phys. Rev. C 43 (1991) 691
	Ni(p,3He)	175	0,039	0,03	13	10,235		
	Ni(p,t)	175	0,06	0,028	9	5,307		
	Ni(p,d)	175	0,4	0,028	8	5,275		
Ta	Ta(p, α)	1200	8,6	0,01	4,5	18,452	COSY, Germany	C.-M. Herbach et al., Nucl. Phys. A 765 (2006) 426
	Ta(p,3He)	1200	0,17	0,021	12,5	18,418		
	Ta(p,t)	1200	1,7	0,02	7,5	9,337		
	Ta(p,d)	1200	2,9	0,025	7,5	9,319		
Bi	Bi(p,3He)	62	0,0186	0,088	5,92	19,984	LANL, USA	F.E. Bertrand and R.W. Pelle, Phys. Rev. C 8 (1973) 1045
	Bi(p,t)	62	0,11	0,07	6,5	10,2		
	Bi(p,d)	62	0,2	0,07	10,5	10,1		
Fe	Fe(p, α)	62	0,39	0,02	4,5	9,656	LANL, USA	F.E. Bertrand and R.W. Pelle, Phys. Rev. C 8 (1973) 1045
	Fe(p,3He)	62	0,042	0,045	5,8	9,595		
	Fe(p,t)	62	0,06	0,045	5,4	4,989		
	Fe(p,d)	62	0,45	0,055	6,5	4,958		
Al	Al(p, α)	160	0,09	0,04	10	6,083	iTHEMBA, South Africa	A. Cowley et al., Phys. Rev. C 54 (1996) 778

В случае с ^{59}Co эффективными оказались модели, заложенные в программы Bertini/Dresner, INCL4/Dresner, CEM2k, CASCADEX 1.2, с пороговой энергией, равной 50 МэВ. При этом наилучшей моделью при условии, что все факторы равнозначны, стала CASCADEX 1.2 (табл. 6). Необходимо также отметить, что модели Bertini/Dresner и CASCADEX 1.2 для данных реакций всегда входят в совокупность парето-эффективных решений. Результаты интегрального расчета ^{59}Co и ^{184}W для количества экспериментальных точек, равного 218, представлены в табл. 7.

Таблица 4

Факторы согласия для реакций $^{nat}\text{Pb}(p,x)$

Модель	H	D	R	F	Число рассчитанных точек (279)
Cas4	6,17	4,83	0,09	6,87	276
CasASF	4,61	3,47	0,09	5,74	278
CASCADEx 1.2	5,82	5,16	0,54	6,04	261
CEM02	4,84	3,64	0,05	6,49	279
CEM03	5,21	3,99	0,06	6,57	279
g4bert	14,80	5,58	0,40	6,69	266
g4bic	4,39	3,51	0,31	4,45	258
incl4abla	9,61	5,85	0,51	8,79	264
incl4gemini	20,26	11,05	1,04	11,69	250
incl4smm	9,57	5,72	0,27	7,33	263
BertDres	7,36	4,57	0,15	6,38	279
IsabelaAbla	13,13	7,79	0,76	9,94	250
IsabelGemini	30,30	15,15	1,49	13,53	240
Isabelasmm	10,04	6,50	0,34	8,33	250
phitsjqmd	42,86	15,69	1,26	7,08	270
phits4jam	5,63	3,39	0,07	5,22	277
phits/bertini	6,75	3,90	0,16	6,60	277

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе приведено описание расширенных возможностей программного комплекса CASCADEx 1.2 и интерактивной системы визуального моделирования IViS CASCADEx, позволяющей упростить и автоматизировать процесс работы с комплексом в соответствии с поставленной задачей за счет широкого спектра сервисных функций, реализованных в системе. К их числу относятся поиск оптимальных параметров модели, проведение серийных расчетов функций возбуждения, массовых распределений, кумулятивных выходов, дважды дифференциальных сечений выходов легких ядер.

Для соответствующих диапазонов подобраны значения модельных параметров CASCADEx 1.2 для обеспечения наилучшего согласования с экспериментом и даны рекомендации по областям применимости программного комплекса в диапазоне энергий от 150 МэВ до 1 ГэВ и массовых чисел от 13 до 240.

Авторы выражают благодарность Н.К. Калугину, Л.И. Светличному, А.А. Довгову за помощь в проведении расчетов, представленных в данной работе.

Работа выполнена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг.

Таблица 5

Факторы согласия для различных моделей (реакция p+184W)

Модели	Энергия налетающего протона 0.8 ГэВ, количество экспериментальных точек 67, $\sigma_{\text{пол}} = 1636$ мб				Энергия налетающего протона 1.6 ГэВ, количество экспериментальных точек 91, $\sigma_{\text{пол}} = 1687$ мб				Интегральный расчет, количество экспериментальных точек 158			
	$\sigma_{\text{пол}} = 1636$ мб				$\sigma_{\text{пол}} = 1687$ мб				Интегральный расчет, количество экспериментальных точек 158			
	H	D	R	F	H	D	R	F	H	D	R	F
Bertini/Dresner	5,08	0,38	0,83	1,76	6,89	0,48	0,87	1,87	6,19	0,44	0,85	1,82
Bertini/ABLA	5,04	0,39	0,83	2,28	5,67	0,44	0,89	2,63	5,41	0,42	0,86	2,48
ISABEL/Dresner	5,05	0,37	0,78	2,13	5,45	0,44	0,8	2,6	5,28	0,41	0,79	2,40
ISABEL/ABLA	5,35	0,38	0,78	2,13	5,91	0,4	0,83	2,83	5,68	0,41	0,81	2,58
INCL4/Dresner	5,56	0,41	0,75	2,2	5,25	0,38	0,79	2,73	5,38	0,39	0,77	2,51
INCL4/ABLA	6,18	0,43	0,75	2,54	6,08	0,4	0,85	2,57	6,12	0,41	0,81	2,56
CEM2k	4,85	0,43	0,8	2,89	5,88	0,45	0,89	3,6	5,47	0,42	0,85	3,30
CASCADE	4,72	0,39	0,78	1,65 ^a	4,9	0,35	0,83	2,85 ^b	4,82	0,37	0,81	2,39 ^c
CASCADE/ASF	4,34	0,33	0,86	1,57	4,51	0,33	0,87	1,69	4,44	0,33	0,87	1,64
CASCADEX (200 МэВ)	5,07	0,39	0,73	2,47 ^a	7,52	0,44	0,86	5,86 ^b	6,64	0,42	0,81	4,40 ^c
CASCADEX (150 МэВ)	4,96	0,40	0,72	1,99 ^a	6,49	0,40	0,83	7,05 ^b	5,92	0,40	0,79	4,81 ^c
CASCADEX (100 МэВ)	5,39	0,41	0,71	1,82 ^a	5,15	0,37	0,80	4,37 ^b	5,25	0,39	0,76	3,33 ^c
CASCADEX (50 МэВ)	5,64	0,43	0,69	1,65 ^a	4,89	0,36	0,75	4,63 ^b	5,20	0,39	0,73	3,40 ^c
CASCADEX (0 МэВ)	4,88	0,38	0,70	1,68 ^a	4,93	0,35	0,79	3,27 ^b	4,82	0,36	0,75	2,29 ^c

^a – Количество точек N равно 58, ^b – N = 86, ^c – N = 144.

Таблица 6

Факторы согласия для различных моделей (реакция $p+^{59}\text{Co}$)

Модели	Энергия налетающего протона 1.2 ГэВ, $\sigma_{\text{нел}} = 772$ мб				Энергия налетающего протона 1.6 ГэВ, $\sigma_{\text{нел}} = 773$ мб				Энергия налетающего протона 2.6 ГэВ, $\sigma_{\text{нел}} = 770$ мб				Интегральный расчет			
	H	D	R	F	H	D	R	F	H	D	R	F	H	D	R	F
Bertini/Dresner	4,87	0,32	0,7	1,74	4,51	0,33	0,71	1,96	4,29	0,32	0,71	1,76	4,56	0,32	0,71	1,82
Bertini/ABLA	15,85	0,81	1,5	2,07	13,79	0,81	1,43	2,11	13,71	0,8	1,42	2,11	14,71	0,81	1,45	2,1
ISABEL/Dresner	4,58	0,28	0,89	1,58	5,66	0,33	1,01	1,65	5,78	0,34	1,15	1,55	5,37	0,32	1,02	1,59
ISABEL/ABLA	21,17	1,1	1,83	2,31	23,16	1,27	2,04	2,45	28,15	1,63	2,38	2,75	24,34	1,33	2,08	2,5
INCL4/Dresner	4,16	0,25	0,91	1,56	4,30	0,25	0,95	1,51	4,42	0,27	1,03	1,47	4,29	0,26	0,96	1,51
INCL4/ABLA	20,35	1,02	1,78	2,21	20,05	1,13	1,87	2,30	26	1,45	2,23	2,55	22,3	1,2	1,96	2,35
CEM2k	6,52	0,41	0,93	1,78	5,82	0,37	0,84	1,78	5,23	0,36	0,8	1,86	5,88	0,38	0,86	1,81
CASCADE	12,79	0,6	1,12	2,52	11,80	0,59	1,11	2,38	10,26	0,58	1,08	2,31	11,66	0,59	1,1	2,4
CASCADE/ASF	6,02	0,36	1,1	1,5	5,51	0,37	1,09	1,48	5,51	0,37	1,08	1,49	5,69	0,37	1,09	1,49
CASCADEx 1.2 (200 МэВ)	10,43	0,59	1,15	2,14	9,33	0,59	1,14	2,16	9,57	0,62	1,16	2,13	9,79	0,6	1,15	2,14
CASCADEx 1.2 (150 МэВ)	10,13	0,61	1,19	1,96	9,17	0,6	1,19	1,93	8,48	0,55	1,15	1,87	9,29	0,59	1,18	1,92
CASCADEx 1.2 (100 МэВ)	6,27	0,38	1,09	1,52	6,37	0,43	1,08	1,7	6,08	0,4	1,08	2,04	6,24	0,4	1,08	1,76
CASCADEx 1.2 (50 МэВ)	3,5	0,22	0,99	1,32	3,47	0,23	1,01	1,38	3,85	0,27	1,03	1,39	3,61	0,24	1,01	1,36
CASCADEx 1.2 (0 МэВ)	16,0	0,74	1,44	2	14,5	0,73	1,43	1,98	14,1	0,76	1,44	2	14,9	0,74	1,44	1,99

Таблица 7

Интегральный расчет ^{59}Co и ^{184}W

Модели	Интегральный расчет ^{59}Co и ^{184}W , количество экспериментальных точек 218			
	<i>H</i>	<i>D</i>	<i>R</i>	<i>F</i>
Bertini/Dresner	5,79	0,41	0,81	1,82
Bertini/ABLA	8,99	0,53	1,02	2,38
ISABEL/Dresner	5,30	0,39	0,85	2,19
ISABEL/ABLA	13,65	0,66	1,16	2,56
INCL4/Dresner	5,10	0,35	0,82	2,25
INCL4/ABLA	12,81	0,63	1,13	2,50
CEM2k	5,59	0,41	0,85	2,90
CASCADE (original)	7,51	0,43	0,90	2,39 ^d
CASCADE/ASF	4,82	0,34	0,93	1,60
CASCADEX 1.2 (0 МэВ)	9,02	0,47	0,95	2,20 ^d
CASCADEX 1.2 (50 МэВ)	4,79	0,35	0,81	2,83 ^d
CASCADEX 1.2 (100 МэВ)	5,56	0,39	0,86	2,88 ^d
CASCADEX 1.2 (150 МэВ)	7,08	0,46	0,90	3,92 ^d
CASCADEX 1.2 (200 МэВ)	7,70	0,47	0,91	3,71 ^d

Литература

1. Станковский А.Ю., Конобеев А.Ю., Купцов И.С. Программа CASCADEX для расчета взаимодействий частиц и ядер промежуточных и высоких энергий с веществом // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2008. – № 4. – С. 65 (2008).
2. Барашенков В.С., Конобеев А.Ю., Коровин Ю.А., Соснин В.Н. // Атомная энергия. – 1999. – № 87. – С. 283.
3. Барашенков В.С., Тонеев В.Д. Взаимодействие высокоэнергетических частиц и атомных ядер с ядрами. – М: Атомиздат, 1972.
4. Barashenkov V.S. et al. // Nucl. Phys. – 1980. – A 338 413.
5. Barashenkov V.S. // Comput. Phys. Commun. – 2000. – 126 28.
6. Barashenkov V.S. // Nucl. Phys. – 1974. – A 231, 462.
7. Kozlowski M., Muller H.H. Study of the thermalization process in 72 MeV (p, ^3He) and (p, ^4He) inclusive reactions // Nuclear Physics. – 1987.
8. Awes T.C. // Light particle emission in ^{16}O -induced reactions at 140, 215, and 310 MeV / T.C. Awes, S. Saini, G. Poggi, C.K. Gelbke, and D. Cha // Phys. Rev. – 1982. – C 25, 2361-2390.
9. Koning A.J., Hilairey S., Duijvestijn M. TALYS-1.2 A nuclear reaction program: User Manual. – Netherlands, Nuclear Research and Consultancy Group, 2009.
<http://www.talys.eu/fileadmin/talys/user/docs/talys1.2.pdf>.
10. Sierk A.J. // Phys. Rev. – C33 2039 (1999).
11. Konobeyev A.Yu., Korum Yu.A., Vecchi M. Kerntechnik 64, 216. (1999).
12. Денисов Ф.П., Мехедов В.Н. Ядерные реакции при высоких энергиях. – М.: Атомиздат, 1972.
13. http://nds121.iaea.org/alberto/mediawiki-1.6.10/index.php/Main_Page.
14. <http://msdn.microsoft.com>.
15. Broeders C.H.M., Konobeyev A.Yu., Mercatali L. Kerntechnik 71, 174 (2006).

Поступила в редакцию 20.11.2010

ABSTRACTS OF THE PAPERS

УДК 539.17

Modified CASCADEX 1.2 Software for Spallation Reaction Calculation \A.A. Andrianov, A.Yu. Konobeev, Yu.A. Korovin, I.S. Kuptsov, A.Yu. Stankovskiy; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2011. – 12 pages, 7 tables, 2 illustrations. – References, 15 titles.

The paper describes an improved version software system CASCADEX 1.2 designed to calculating high-energy spallation reactions. Improvements included latest version TALYS 1.2 code integration, double-differential cross-sections light nuclei (p, n, d, t, ^3He , ^4He) emission calculation module implementation, based on moving source model, cluster formation process accounting. The article also describes Interactive Media IviS CASCADEX, providing an opportunity for multiple-criteria serial calculations, meaningful choice of model parameters on the results of quantitative comparison with experiment, and includes a wide range of processing and presentation calculation results. The results, based on developed software, for constant improvement goal is shown.

УДК 621.039.51

The Determination of Reactor Control and Safety System Regulating Units Efficiency and Active Zone Skewness of Kalinin NPP Third Unit \V.A. Lititsky, B.V. Kutin, V.A. Tereshonok, V.A. Pitilimov; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2011. – 7 pages, 2 tables, 3 illustrations. – References, 1 title.

This article describes measurement techniques of reactor control and safety system regulating units efficiency and active zone skewness during first criticality of Kalinin nuclear power plant third unit.

УДК 621.039.62

Electricity Generation System Small Nuclear Power Plant Using High Effective Low Temperature Thermionic Process \P.A. Maslov; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2011. – 10 pages, 4 tables, 7 illustrations. – References, 10 titles.

Considered of a small nuclear power plant AIST-MP and the proposed bases design solutions for the construction of electricity power generating elements and channels. Proposed a method for equalizing the temperature of collectors EGC height EGE. Calculations of the characteristics EGC with a dynamic feed of cesium vapor, is confirmed the high efficiency of energy conversion, which is comparable with the efficiency of nuclear power plants on the basis of turbomachine conversion cycle.

УДК 621.039.517

The SM Reactor Calculation Model and Its Testing Results when Evaluating Fuel Burnup and Fission Products Distribution \V.A. Starkov, Y.B. Chertkov; Editorial board of journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2011. – 9 pages, 2 tables, 6 illustrations. – References, 10 titles.

This paper presents the description of SM reactor core calculation model developed on the MCU-RR2 base. The approach to the initial data assignment allows the geometric characteristics to be described in details and the reactor core structure heterogeneity to be taken into account, power density calculation being done for each fuel element. The MCU-RR2 add-ons code allows modeling the movement of the control rods during a reactor run as well as determining the distribution of power density throughout fuel elements without application of averaging (homogenizing) methods. Coefficients of power density distribution non-uniformity throughout reactor cells, FA profile and height, thermal flux density on fuel elements surface and critical power ratio can be determined as well.