

УДК 539.17

СИСТЕМЫ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЯДЕРНЫХ РЕАКЦИЙ И ПОДГОТОВКИ АКТИВАЦИОННЫХ ЯДЕРНЫХ ДАННЫХ

А. А. Андрианов, Ю. А. Коровин, И. С. Купцов, А. А. Наталенко
(Институт атомной энергетики НИЯУ МИФИ, г. Обнинск)

Дается описание разработанных авторами интегрированных программных систем IViS SMPI и InIS HAND, предназначенных для повышения эффективности фундаментальных и прикладных исследований в области константного обеспечения расчетов перспективных ядерно-энергетических установок. Описывается алгоритм получения оцененных ядерно-физических данных с использованием разработанного программного обеспечения, основанный на современных методах теории принятия решений при многих критериях.

Ключевые слова: модели высокоэнергетических ядерных реакций, программные комплексы, интерактивные среды, методы многокритериальной теории принятия решений, факторный анализ, оцененные ядерно-физические данные.

Введение

В последнее десятилетие возрос интерес к ядерным реакциям при высоких энергиях, что обусловлено как научными проблемами, так и многочисленными приложениями: создание высокоэнергетических нейтронных источников, производство медицинских радиоизотопов, радиационная защита космических аппаратов и ускорителей [1, 2] и др.

Решение указанных задач требует большого количества ядерных данных для широкого спектра нуклидов и энергий, достигающих нескольких десятков гигаэлектронвольт. Получить все данные экспериментально невозможно, поэтому необходимо развитие аналитических методов, точность которых должна проверяться по измерениям, проводимым в определенных условиях.

В настоящее время растет количество моделей и программ, предназначенных для моделирования ядерных реакций в различных диапазонах энергии и массовых чисел, а также критериев и алгоритмов проверки адекватности моделей ядерных реакций данным натурального эксперимента. Однако следует отметить, что до сих пор нет общепринятых теоретических представлений и моделей, которые бы удовлетворительно

объясняли весь спектр рассматриваемых ядерных реакций.

Современные модели и программные средства расчета высокоэнергетических ядерных реакций

В настоящее время такие организации, как МАГАТЭ, Национальный институт ядерной физики и техники (Франция), Лос-Аламосская национальная лаборатория (США), Ядерный исследовательский центр "Нахаль Сорек" (Израиль), и ряд других организаций и исследовательских лабораторий проявляют активный интерес к программным кодам расчета выходов продуктов глубокого расщепления (табл. 1). Эти программы основаны либо на методе Монте-Карло, либо на подходе квантово-молекулярной динамики.

В 2008 г. эксперты по физике высоких энергий в рамках проекта МАГАТЭ по верификации моделей реакций глубокого расщепления [1] пришли к выводу, что существующие модели реакций необходимо верифицировать на современных экспериментальных данных для определения точности и надежности получаемых с их по-

Характеристики наиболее распространенных современных транспортных кодов

Характеристика	MCNPX-2.6, LANL	PHITS-2.09, RIST, GSI	FLUKA-2006.3, CERN, INFN	GEANT4-4.9.1, CERN, INFN, KEK, SLAC	MARS-15 FNAL
Язык программирования	Fortran 90/C	Fortran 77	Fortran 77	C++	Fortran 90/C
Возможность параллельных вычислений	Возможно	Возможно	Возможно	Возможно	Возможно
Модели высокоэнергетических ядерных реакций	ABLA, Bertini, ISABEL, CEM, LAQGSM, FLUKA89	GEM, JAM, JQMD > 3 GeV	PEANUT, DPMJET, GLAUBER, neutrinos	ABLA, Bertini, INCL, GEM	CEM, LAQGSM, DPMJET
Веб-сайты с описанием	mcnpx.lanl.org	rcww.kek.jp/ research/shield/ phits.html	fluka.org	geant4.web. cern.ch/geant4	www-ap.fnal.gov/ MARS/

мощью данных в различных массовых и энергетических диапазонах.

Компьютерное моделирование является единственным способом, посредством которого можно понять механизм взаимодействия нуклонов в области высоких энергий, чему всецело способствует повышение производительности вычислительной техники. Получившие в последнее время широкое распространение *параллельные* вычисления дают большие преимущества, позволяя моделировать огромное число событий за короткий период времени.

При возможности протекания реакции глубокого расщепления по различным каналам дифференциальное сечение при высоких энергиях рассчитывается как функция энергии и направления вторичной частицы типа j , образующейся, когда адрон типа h_i с энергией E_i взаимодействует с ядром-мишенью A_{targ} :

$$\frac{d\sigma}{dE d\Omega} = (E_j, \Omega, h_i, E_i, A_{targ}).$$

Всю необходимую информацию для адекватного экспериментальным данным построения модели реакции невозможно получить из эксперимента. В частности, для оценки потенциала мишени как источника нейтронов реакции скалывания понадобятся энергии и угловые распределения пяти типов частиц (p, n, π^\pm, π_0), испускаемых этой мишенью, образованных четырьмя налетающими частицами (p, n, π^\pm) при энергиях от 20 МэВ до 3 ГэВ; для предсказания распределения массы и заряда вылетающих ядер при различных значениях энергии налетающих частиц

понадобится дополнительно сечение кумулятивного выхода легких ядер (D, T, ^4He и т. д.).

В настоящее время существуют объективные трудности детального описания данной области энергий и, как следствие, получил широкое распространение подход, основанный на предварительной разработке моделей с наличием совокупности свободных параметров, которые впоследствии подбираются для конкретной реакции на основе количественного сопоставления с экспериментом. Модели, прошедшие валидацию, включаются в комплексы программ расчета переноса излучений, позволяющие, в конечном счете, рассчитать последствия взаимодействия облученных частиц с веществом.

Усовершенствованные транспортные коды для изучения взаимодействия излучения с веществом и все генераторы взаимодействия частиц с ядрами с указанием их особенностей приведены в табл. 1 и 2 соответственно [2–5].

Широкое распространение получила модель внутриядерного каскада, основанная на методе Монте-Карло, соединенная с испарительной моделью снятия возбуждения. Эта модель используется для расчета выходов и характеристик всех частиц, образующихся в реакциях глубокого расщепления. Иногда между двумя стадиями включают предравновесную стадию эмиссии частиц.

Описания процессов нуклон-нуклонных взаимодействий, модели ядра мишени и траекторий нуклонов практически одинаковые во всех программах. Значительные расхождения обнаруживаются в критериях выхода из стадии внутриядерного каскада, в модельных описани-

Генераторы событий взаимодействия частиц с ядрами

Внутриядерный каскад (< 3 ГэВ)	Квантово-молекулярная динамика	Испарение/деление	Внутриядерный каскад/испарение
Bertini, CEM, INCL, ISABEL	JQMD, QMD-SDM, BUU, SMM	ABLA, ALICE/ASH, EVAP- versions, GEM, GEMINI, JULIAN, PACE, ORNL-fission, RAL-fission	BRIC, DISCA, MICRES

ях предравновесной стадии, процесса испускания кластеров и образования пионов.

В настоящее время активно ведутся работы по стандартизации кодов и входящих в них параметров. Обсуждаются две возможности решения этой проблемы. Первое решение состоит в подборе параметров и программных модулей для получения требуемых данных. Второе направление базируется на унификации и согласовании фундаментальных параметров. При этом существует вероятность того, что расчеты, выполненные с таким набором параметров, в конечном счете, могут хуже согласовываться с экспериментом.

Энергетический диапазон, в котором применим данный набор моделей, достаточно широк: от нескольких десятков мегаэлектронвольт до нескольких гигаэлектронвольт. В некоторых программах, например в каскадной модели INCL4, соединенной с испарительной моделью ABLA [6], предравновесная стадия отсутствует. Расчеты по программам INCL4/ABLA, CEM03 и LAQGSM [7] дают хорошее согласие с экспериментальными данными в широком диапазоне энергий налетающих частиц и массовых чисел ядер-мишеней. Однако ни одна из существующих моделей не способна воспроизвести экспериментальные данные во всей энергетической области и для всех ядер-мишеней.

Среди всего набора каскадных моделей особое место занимает модель, разработанная в Дубне в конце 60-х годов прошлого века [8]. Развитие внутриядерного каскада в данном случае моделируется во времени. В течение последних двадцати лет эта модель развивалась в Обнинском институте атомной энергетики, и на ее основе был создан комплекс программ CASCADE/INPE [9] (впоследствии получивший название CASCADE/ASF) для расчета переноса частиц.

В последнее время эта модель была объединена со статистической моделью, описываю-

щей равновесную эмиссию частиц. Новая программа, получившая название CASCADeX 1.2 (CASCADE eXtended), предназначена для моделирования взаимодействий с веществом налетающих частиц и ядер с массовым числом до 240 а.е. Массовые числа ядер-мишеней (A) варьируются в диапазоне от 2 до 240 а.е. Энергии налетающих частиц составляют до 2 ГэВ/нуклон для ядер-мишеней с массой меньше 40 а.е. и до 1 ГэВ/нуклон для ядер тяжелее 40 а.е.

Избежать несовершенства каждого расчетного кода можно путем комбинирования отдельных моделей в одном программном комплексе и дополнив его алгоритмами проверки адекватности моделей ядерных реакций на основе данных натурального эксперимента. Эта схема последовательно развивается и используется в данной работе.

Системы подготовки высокоэнергетических ядерных данных

Для повышения эффективности научных исследований в области константного обеспечения расчетов перспективных ядерно-энергетических установок разрабатываются два типа программных систем на базе современных моделей ядерных реакций при высоких энергиях. Их цель — обеспечить возможность получения более точных и полных моделей в данной предметной области на основе количественного сопоставления с экспериментом и снижения трудоемкости научных исследований [10, 11].

Первая категория разрабатываемых программных систем — это так называемые интерактивные графические системы IViS (Interactive Visual Systems). Их целесообразность продиктована тем, что модели высокоэнергетических ядерных реакций являются многопараметрическими, в связи с чем возникает задача по выбору наилучших свободных параметров моде-

ли. Эту задачу и решают данные системы, в которых реализованы современные методы многокритериальной теории принятия решений. В настоящий момент разработана интерактивная графическая система для идентификации параметров моделей реакций глубокого расщепления IViS SMPI (Interactive Visual Systems — Spallation Models Parameters Identificator).

Вторая категория разработок — справочно-информационные интерактивные комплексы InIS (Information Interactive System) — связана с необходимостью интеграции существующих моделей ядерных реакций с целью создания комплексной среды по кросс-верификации и валидации различных моделей и формированию по результатам этой работы оцененных библиотек ядерно-физических данных (ЯФД). К настоящему времени создан комплекс InIS HAND (High Energy Activation Nuclear Data), обеспечивающий автоматизацию подготовки активационных ЯФД в высокоэнергетической области.

Разработанные программные системы взаимодополнительны (рис. 1). Так, оптимальные значения параметров различных моделей высокоэнергетических ядерных реакций, найденные в результате работы системы IViS SMPI, могут быть переданы в систему InIS HAND для кросс-верификации различных моделей с выбранными параметрами.

Остановимся подробнее на методике расчетных исследований с использованием разработанного инструментария.

Система IViS SMPI включает в себя расчетный код физической модели, формы входных и выходных данных, подлежащие заполнению, оптимизационный модуль и модуль обработки результатов расчетов. Также имеется доступ к готовым библиотекам ЯФД, к экспериментальным данным и результатам расчетов по другим моделям, хранящимся в XML-формате.

Основная функция системы IViS SMPI — это выбор параметров модели, обеспечивающих наилучшее согласие с экспериментом (рис. 2). 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 параметры случайного поиска. 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 данные, взятые из библиотеки ЯФД. Если число критериев более двух, то после расчета происходит автоматический отбор эффективных наборов параметров модели. Окончательный выбор оптимального набора параметров осуществляется с использованием методов теории принятия решений при многих критериях.

В данный момент для окончательного выбора наилучшего набора параметров модели из сово-

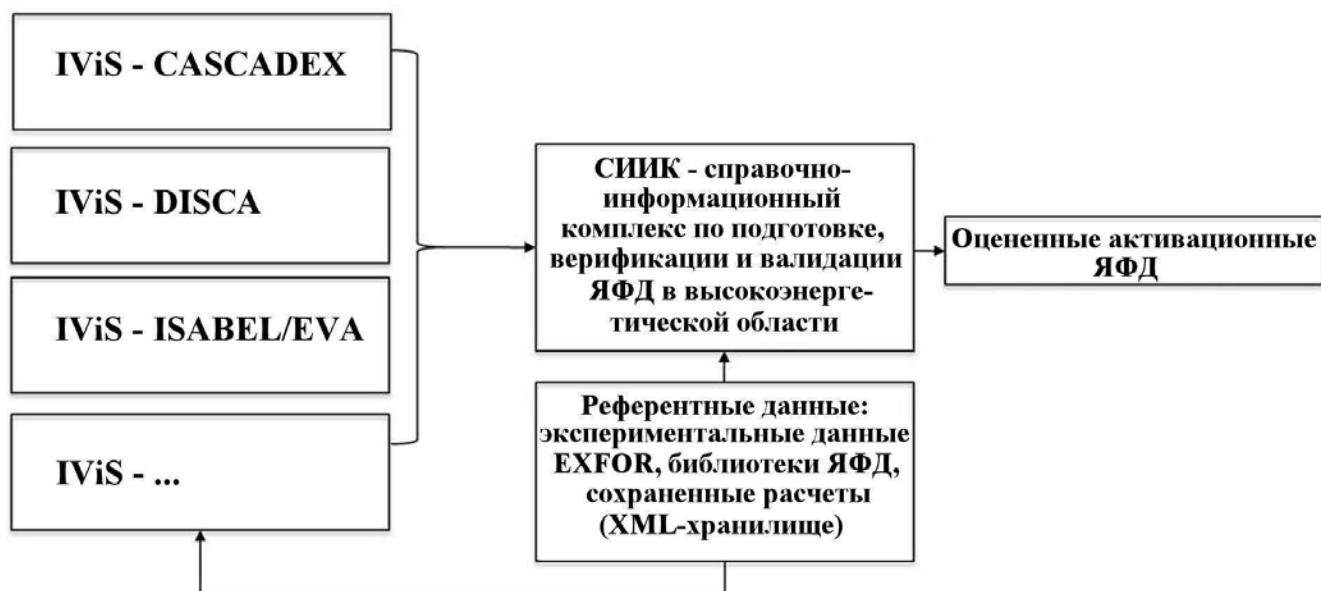


Рис. 1. Связь систем IViS SMPI и InIS HAND

купности недоминируемых реализован метод анализа иерархий в аддитивной и мультипликативной формах. Для использования данного метода пользователю необходимо провести попарное сравнение критериев отбора. Конечным результатом выполнения программы являются наиболее подходящие относительно выбранных референтных данных и предпочтений пользователя параметры модели. В настоящий момент авторы расширяют функциональные возможности программных систем за счет включения в них иных методов дискретного анализа решений (MAVT, TOPSIS, PROMETHEE, MAUT). Для подбора параметров модели был предложен и реализован метод глобальной оптимизации, основанный на использовании так называемых равномерно распределенных последовательностей точек.

Система InIS HAND позволяет пользователю, не имеющему специальной квалификации, подготовить активационные ЯФД, статистически их оценить на имеющихся экспериментах, верифи-

цировать модели и графически представить результаты. Схема функционирования системы представлена на рис. 3.

Алгоритм выбора наилучшей модели в системе InIS HAND сходен с алгоритмом выбора наилучших параметров в IViS-системе. Главное отличие состоит в том, что сравниваются расчеты по различным моделям, в которых, в частности, могут быть заданы оптимальные параметры по каждой модели, определенные в результате функционирования систем IViS. В InIS HAND отсутствует блок, предназначенный для поиска оптимальных параметров моделей, однако в системе реализован большой набор сервисных функций, обеспечивающий пользователю комфортную работу с различными моделями (визуализация, запись в формате ENDF, обработчик библиотек оцененных и экспериментальных ядерных данных, *сшивка* расчетов и др.).

Данная программная система состоит из двух структурных элементов: проекты и решения (рис. 4). Проекты представляют собой базовый элемент системы, содержащий необходимую для анализа расчетную и экспериментальную ин-



Рис. 2. Схема функционирования системы IViS SMPI

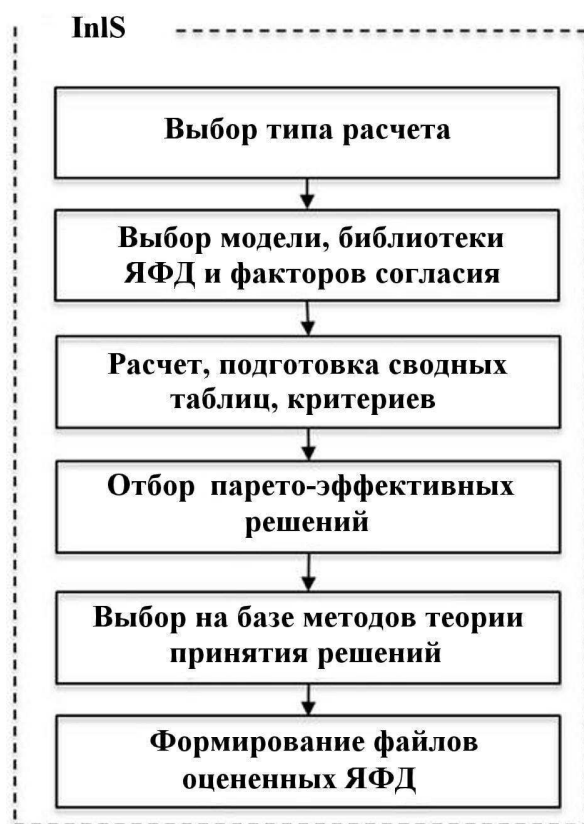


Рис. 3. Схема функционирования системы InIS HAND

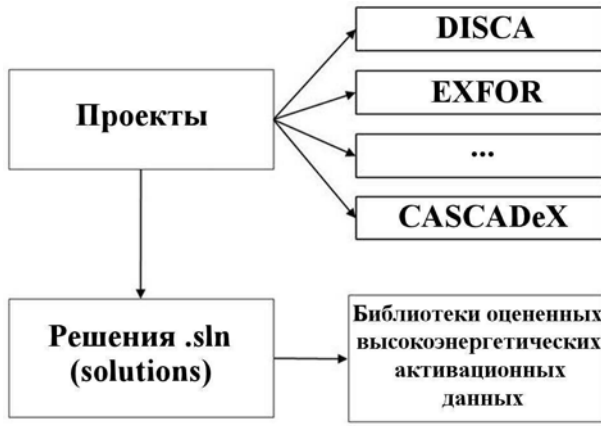


Рис. 4. Структура данных InIS HAND

формацию. Каждое решение объединяет несколько проектов и предоставляет весь спектр сервисных функций, необходимых для работы по формированию оцененных файлов активационных ядерных данных.

Одна из проблем в данной области связана с отсутствием экспериментальных данных как в определенном энергетическом диапазоне, так и диапазоне массовых чисел. Для компенсации отмеченного недостатка был предложен алгоритм выбора модели в области, в которой отсутствует необходимая экспериментальная информация (рис. 5).

В описанных программных системах для оценки согласования расчетов с референтными данными используются как факторы согласия, широко используемые в настоящее время в данной предметной области, так и ряд факторов, предложенных авторами, отражающих их представления о возможных способах оценки расчетов. Вся совокупность факторов представлена

в табл. 3. Единовременное рассмотрение столь широкого набора факторов согласия продиктовано тем, что в настоящий момент в данной предметной области отсутствует общепринятая и согласованная методология сравнения с экспериментом.

Для создания систем InIS HAND и IViS SMPI были выбраны Microsoft.NET в качестве основной платформы и основным язык разработки приложений для нее C# [12]. 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". Созданные ранее библиотеки для численных расчетов или код, написанный на другом языке программирования, можно интегрировать непосредственно в приложения на C#. Это позволяет одновременно писать коды на нескольких языках, а затем интегрировать их или использовать совместно, что в особенности полезно при разработке рассматриваемых программных систем.

Некоторые приложения разработанного программного обеспечения

Разработанное 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 [1].

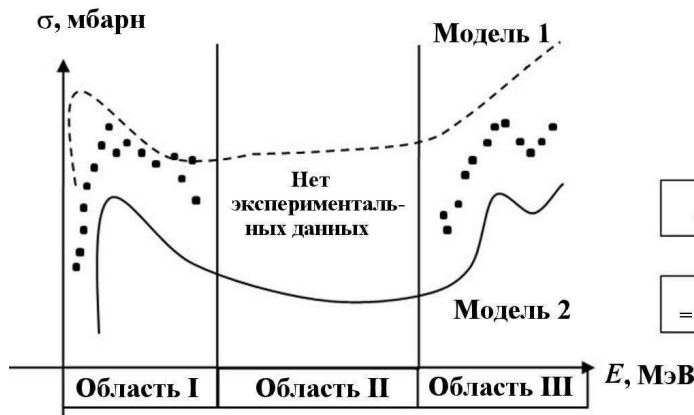
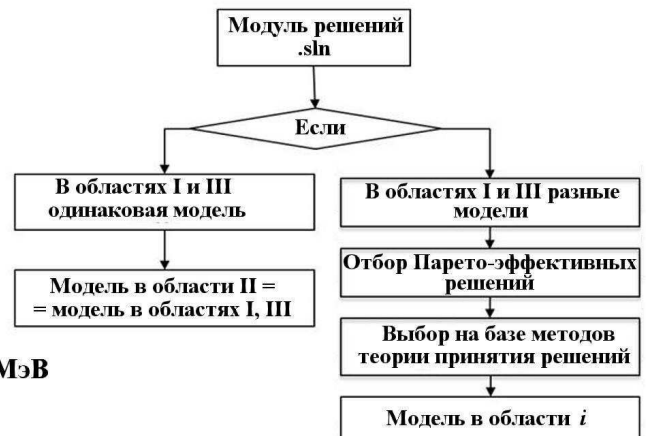


Рис. 5. Отбор моделей в InIS HAND



Факторы согласия

Фактор	Формула	Примечание
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	$H = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\frac{\sigma_i^{exp} - \sigma_i^{calc}}{\Delta \sigma_i^{exp}} \right]^2}$	Показатель степени отражает допустимую степень компенсации малых значений одних слагаемых большими значениями других. Чем больше значение показателя, тем больше степень возможной компенсации
D	$D = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left \frac{\sigma_i^{exp} - \sigma_i^{calc}}{\Delta \sigma_i^{exp}} \right $	Оценка интегральной близости к эксперименту при условии обеспечения примерно одинакового вклада различных областей
L	$L = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N \left[\frac{\sigma_i^{calc}}{\Delta \sigma_i^{exp}} \right]^2 \left[\frac{\sigma_i^{exp} - \sigma_i^{calc}}{\sigma_i^{calc}} \right]^2}{\sum_{i=1}^N \left[\frac{\sigma_i^{calc}}{\Delta \sigma_i^{exp}} \right]^2}}$	Оценка интегральной относительной близости к эксперименту
R	$R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_i^{calc}}{\sigma_i^{exp}}$	Оценка тенденций поведения сечений
Корреляция	$cor = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (\sigma_i^{exp} - \langle \sigma^{exp} \rangle) (\sigma_i^{calc} - \langle \sigma^{calc} \rangle)}{\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (\sigma_i^{exp} - \langle \sigma^{exp} \rangle) \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} (\sigma_i^{calc} - \langle \sigma^{calc} \rangle)}$	Оценка тенденций поведения сечений

Результаты сравнительного анализа моделей реакций глубокого расщепления.

Сравнительный анализ факторов согласия по моделям, входящим в "Benchmark of Spallation Models", для реакций $^{nat}\text{Pb}(p, x)$ представлен в табл. 4. Светло-серым цветом в таблице отмечены модели (incl4abla, incl4gemini, incl4simm), рекомендованные экспертами МАГАТЭ. Модели, рассчитанные по совокупности факторов согласия, которые удовлетворяют условию парето-оптимальности (CASCADE/ASF, CEM2k, g4bic, phits4jam, CASCADeX 1.2), в данной и последующих таблицах выделены более темным цветом. Разница указанных совокупностей указывает на различия при использовании одно- и многофакторного подходов к выбору наилучшей модели из тех, по которым были осуществлены расчеты в ходе реализации проекта.

В рамках многофакторного анализа проведено сравнение модели CASCADeX 1.2 с моделями расчета высокоэнергетических нуклон-нуклонных реакций, входящих в программный комплекс MCNPX. По программе CASCADeX 1.2 были выполнены расчеты фак-

торов для различной пороговой энергии на основании экспериментов, использованных в работе [13]. Результаты представлены в табл. 5, 6, где использованы обозначения: N — количество экспериментальных точек; $\sigma_{\text{пол}}$ — полное сечение неупругого рассеяния; E_p — энергия налетающего протона.

Обработка всей совокупности данных для ^{184}W на основе методов многокритериального анализа показала преимущества моделей Bertini/Dresner, CASCADE, CASCADE/ASF, CASCADeX 1.2. Анализ параметра пороговой энергии показал наилучшее совпадение с экспериментом при пороговой энергии 0 и 50 МэВ для ^{184}W . Более того, 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.

В случае с ^{59}Co эффективными оказались модели, реализованные в программах Bertini/Dresner, INCL4/Dresner, CEM2k, CAS-

Факторы согласия для реакций ${}^{\text{nat}}\text{Pb}(p, x)$ в интегральном расчете ($N = 279$)

Модель	H	D	R	F	Количество полученных расчетных точек
CASCADE	6,17	0,69	0,91	5,14	276
CASCADE/ASF	4,62	0,49	0,91	2,57	278
CASCADEx 1.2	5,82	0,71	0,46	10,98	261
CEM2k	4,84	0,51	1,05	2,44	279
CEM03	5,21	0,56	1,06	2,46	279
g4bert	14,80	1,02	1,40	4,00	266
g4bic	4,39	0,53	0,69	3,73	258
incl4abla	9,61	0,81	1,51	2,04	264
incl4gemini	20,26	1,28	2,04	2,48	250
incl4smm	9,57	0,87	1,27	3,67	263
BertDres	7,37	0,72	1,15	2,59	279
IsabelaAbla	13,13	1,08	1,77	2,29	250
IsabelGemini	30,30	1,70	2,49	2,79	240
Isabelasmm	10,04	0,92	1,35	4,04	250
Phitsjqmd	42,86	2,23	2,26	6,43	270
phits4jam	5,63	0,54	0,93	2,12	277
phits/bertini	6,75	0,61	1,16	2,08	277

CADeX 1.2, с пороговой энергией, равной 50 МэВ. При этом наилучшей моделью (при условии, что все факторы равнозначны) стала модель CASCADEx 1.2. Необходимо также отметить, что решения по моделям Bertini/Dresner и CASCADEx 1.2 для данных реакций всегда входят в совокупность парето-эффективных.

Верификация и валидация библиотек активационных ядерных данных JENDL/HE-2007 и HEAD-2009 на основе экспериментальной базы данных EXFOR. Сегодня в мире существует две высокоэнергетические библиотеки оцененных активационных ядерных данных, содержащие данные по сечениям образования остаточных ядер в реакциях с нуклонами в широком массово-энергетическом диапазоне. Это библиотека JENDL/HE-2007 [14], являющаяся частью японской библиотеки оцененных ядерных данных JENDL, и библиотека HEAD-2009 [15], разработанная в России. В табл. 7 приведено сравнение указанных библиотек.

С помощью интерактивного комплекса InIS HAND была проведена валидация данных из библиотек HEAD-2009 и JENDL/HE-2007 и верификация полученных результатов на основе результатов экспериментов из базы данных EXFOR [16]. Всего было отобрано 103 реакции,

для которых есть данные в EXFOR. Для этих реакций была рассчитана совокупность факторов согласия между данными из EXFOR и библиотек JENDL/HE-2007 и HEAD-2009. Предварительно была сделана сплайн-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.

Посчитать корреляцию между данными из EXFOR, JENDL/HE-2007 и HEAD-2009 для большинства реакций не представляется возможным. Программа JAM, по которой проводились расчеты данных из библиотеки JENDL/HE-2007 в области энергий свыше 350 МэВ, основана на методах квантовой молекулярной динамики, а программа GNASH, по которой проводились расчеты в области ниже 250 МэВ, — на подходе Хаузер—Фешбаха. В ряде случаев в диапазоне энергий 250—350 МэВ возникает нефизический скачок в значениях сечений.

На рис. 6, 7 приведены примеры сравнения данных из EXFOR и библиотек JENDL/HE-2007 и HEAD-2009. На рис. 7 можно наблюдать пример скачка в значениях сечений образования остаточных ядер, обусловленного применением программ, основанных на двух различных под-

Таблица 5

Факторы согласия для различных моделей для реакции $p+^{184}\text{W}$

Модель	$E_p = 0,8 \text{ ГэВ}, N = 67,$ $\sigma_{\text{non}} = 1 \text{ 636 мбарн}$				$E_p = 1,6 \text{ ГэВ}, N = 91,$ $\sigma_{\text{non}} = 1 \text{ 687 мбарн}$				Интегральный расчет, $N = 158$			
	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	0,80	2,60	5,28	0,41	0,79	2,40
ISABEL/ABLA	5,35	0,38	0,78	2,13	5,91	0,40	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	0,40	0,85	2,57	6,12	0,41	0,81	2,56
CEM2k	4,85	0,43	0,80	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*	4,9	0,35	0,83	2,85**	4,82	0,37	0,81	2,39***
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 1.2 (50 МэВ)	5,64	0,43	0,69	1,65*	4,89	0,36	0,75	4,63**	5,20	0,39	0,73	3,40***

* $N = 58.$

** $N = 86.$

*** $N = 144.$

Таблица 6

Факторы согласия для различных моделей для реакции $p+^{59}\text{Co}$

Модель	$E_p = 1,2 \text{ ГэВ}, N = 20,$ $\sigma_{\text{non}} = 772 \text{ мбарн}$				$E_p = 1,6 \text{ ГэВ}, N = 20,$ $\sigma_{\text{non}} = 773 \text{ мбарн}$				$E_p = 2,6 \text{ ГэВ}, N = 20,$ $\sigma_{\text{non}} = 770 \text{ мбарн}$				Интегральный расчет, $N = 60$			
	H	D	R	F	H	D	R	F	H	D	R	F	H	D	R	F
Bertini/Dresner	4,87	0,32	0,70	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 (50 МэВ)	3,50	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

Сравнение библиотек HEAD-2009 и JENDL/HE-2007

Библиотека	Первичные частицы	Общее количество изотопов	Зарядовый диапазон изотопов	Энергетический диапазон первичных нуклонов	Шаг расчета в диапазоне энергий 150–1 000 МэВ	Программы, примененные для расчетов
HEAD-2009	Протоны	682	1–84	150–1 000 МэВ	150–250 МэВ: 5 МэВ, 250–600 МэВ: 25 МэВ, 600–1 000 МэВ: 50 МэВ (всего 33 значения)	MCNPX 2.6 C CASCADE/ ASF
	Нейтроны	682	1–84	150–1 000 МэВ	150–250 МэВ: 5 МэВ, 250–600 МэВ: 25 МэВ, 600–1 000 МэВ: 50 МэВ (всего 33 значения)	MCNPX 2.5 D MCNPX 2.6 C CASCADE/ ASF
JENDL/HE-2007	Протоны	106	1–95	До 3 000 МэВ	150–250 МэВ: 10 МэВ и точки 350, 500, 600, 700, 800, 1 000, 1 500, 2 000, 3 000 МэВ (всего 20 значений)	GNASH JAM
	Нейтроны	106	1–95	До 3 000 МэВ	150–250 МэВ: 10 МэВ и точки 350, 500, 600, 700, 800, 1 000, 1 500, 2 000, 3 000 МэВ (всего 20 значений)	GNASH JAM

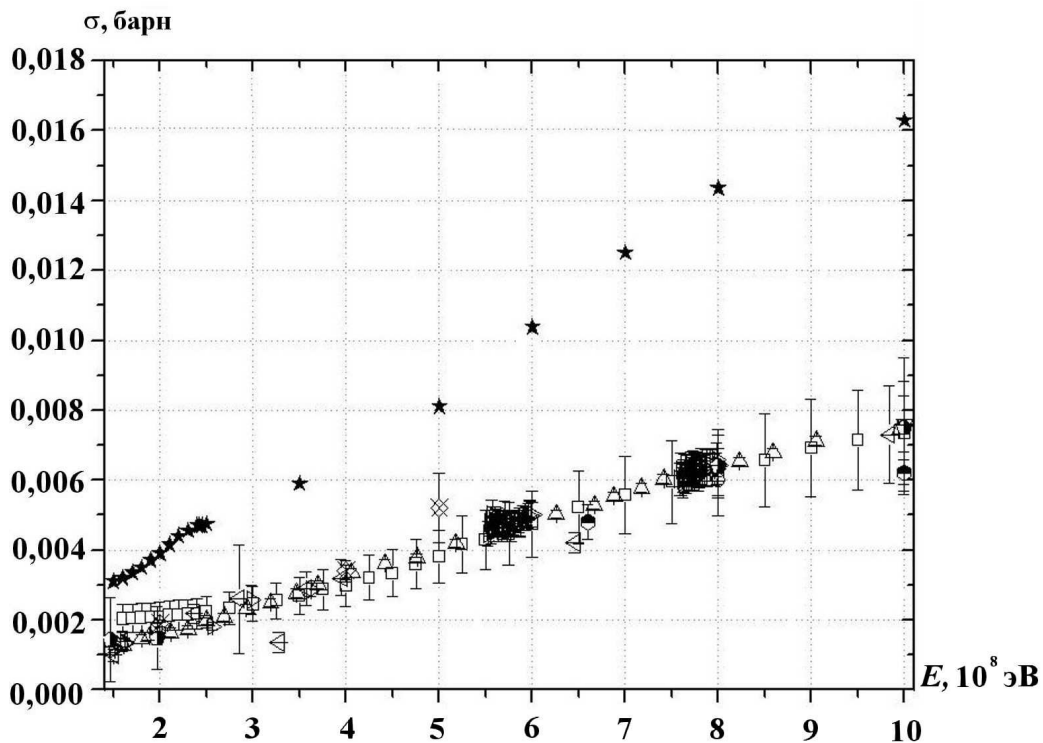


Рис. 6. Сечение образования изотопа ^{27}Be в реакции $^{27}\text{Al}(p, x)$: \square — HEAD-2009; \star — JENDL/HE-2007; другие маркеры — EXFOR (1958–2003 гг.)

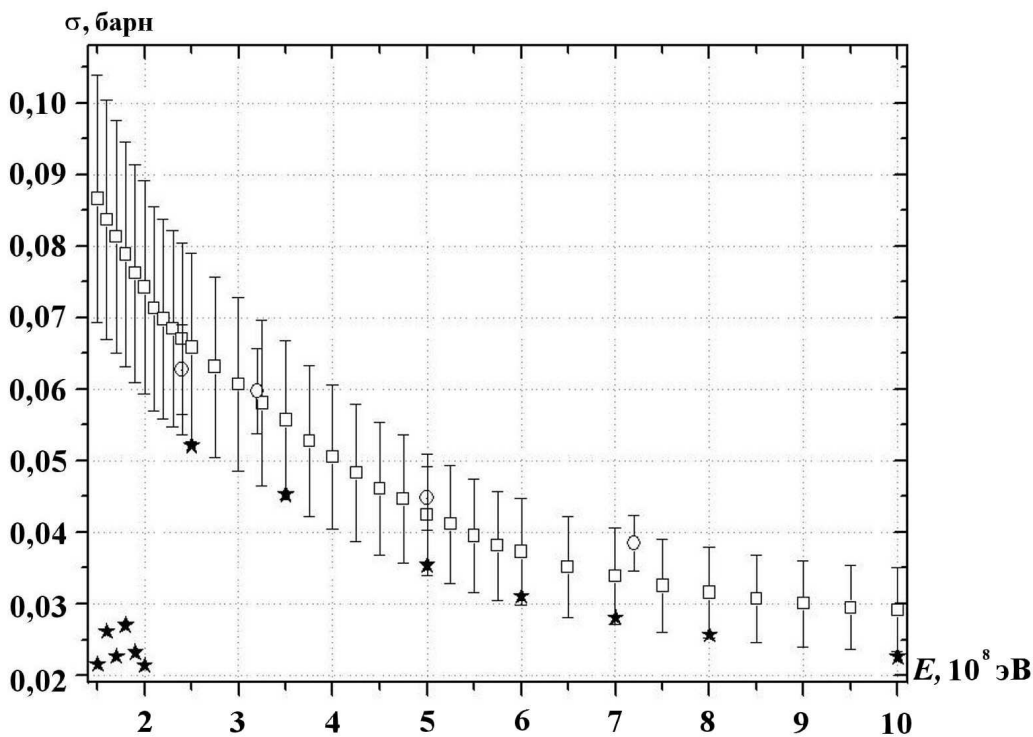


Рис. 7. Сечение образования изотопа ^{89}Zr в реакции $^{93}\text{Nb}(p, x)$: \square — HEAD-2009; \star — JENDL/HE-2007; \circ — EXFOR (1964 г.)

ходах к описанию высокоэнергетических взаимодействий. Применение же каскадно-предравновесно-испарительных моделей не приводит к появлению таких разрывов.

Заключение

Разработанные системы IViS SMPI и InIS HAND компьютерного моделирования высокоэнергетических ядерных реакций и подготовки активационных ядерных данных представляют собой инструменты, предназначенные для ускорения научных и проектных исследований в области константного обеспечения расчетов инновационных ядерно-энергетических установок. Данные программные средства обеспечивают возможности многовариантных серийных расчетов, обоснованного выбора параметров моделей по результатам количественного сопоставления с экспериментом и включают в себя широкий спектр средств обработки и представления результатов расчетов.

Описанные системы могут быть использованы в учебном процессе при освоении соответствующих курсов, а также полезны специалистам, работающим в смежных предметных областях

и не имеющим возможности углубляться в тонкости, связанные с особенностью использования отдельных программных средств.

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

Список литературы

1. Benchmark of Spallation Models. http://nds121.iaea.org/alberto/mediawiki-1.6.10/index.php/Main_Page.
2. Leray S. Needs for a benchmark of spallation models for reliable simulation of spallation related applications // PSI Proc. 09-01 ARIA. January, 2009. P. 89.
3. Hendricks J. S. MCNPX Version 26C. LA-UR-06-7991. Los-Alamos, 2006.
4. GEANT 4 Code Description. <http://geant4.web.cern.ch/geant4/>.
5. FLUKA Code Description. <http://www.fluka.org>.

6. Boudard A., Cugnon J., Leray S., Volant C. Intranuclear cascade model for a comprehensive description of spallation reaction data // Phys. Rev. C. 2002. Vol. 66. P. 044615 (1–28).
7. Mashnik S. G., Gudima K. K., Baznat M. I. et al. LANL Report LA-UR-06-1764. Los-Alamos, 2006.
8. Барашенков В. С., Тонеев В. Д. Взаимодействие высокоэнергетических частиц и атомных ядер с ядрами. М.: Атомиздат, 1972.
9. Барашенков В. С., Конобеев А. Ю., Коровин Ю. А., Соснин В. Н. Компьютерная программа CASCADE/INPE // Атомная энергия. 1999. № 87. С. 283.
10. Andrianov A. A., Korovin Yu. A., Kupstov I. S., Stankovskiy A. Yu. Interactive information system for preparation and verification of nuclear data in the high-energy range // J. of the Korean Physical Society. 2011. Vol. 59, No. 23. P. 1096–1099.
11. Андрианов А. А., Коровин Ю. А., Купцов И. С. и др. Справочно-информационный интерактивный комплекс подготовки и верификации ядерно-физических данных в высокоэнергетической области // Известия вузов. Ядерная энергетика. 2009. № 3. С. 66–76.
12. Microsoft Development Library Online Resource. <http://msdn.microsoft.com>.
13. Broeders C. H. M., Konobeyev A. Yu., Mercatali L. Uncertainty in cross-section calculations for reactions induced by neutrons with energy above 0,1 MeV // Kerntechnik. 2006. Vol. 71. P. 174.
14. High Energy Nuclear Data Library JENDL. <http://www.oecd-nea.org/dbforms/data/eva/evatapes/jendl-he-2007/>.
15. Korovin Yu. A., Natalenko A. A., Stankovskiy A. Yu. et al. High energy activation data library (HEAD-2009), Nuclear instruments and methods // Phys. Research A. 2010. Vol. 624, Issue 1. P. 20–26.
16. On Behalf of the Nuclear Reaction Data Centres Network: EXFOR Formats Description for Users (EXFOR Basis) / Ed. by O. Schwerer. IAEA-NDS-206. June 2008.

Статья поступила в редакцию 07.02.12.