

УДК 539.122:518.5

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО НЕУПРУГОГО РАССЕЙЯНИЯ МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ

А. Н. Иванов, Н. В. Иванов  
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Рассматривается проблема учета химических связей в задачах переноса медленных нейтронов. Предлагается эффективный способ моделирования траекторий медленных нейтронов методом Монте-Карло. Точность предлагаемого метода демонстрируется численными расчетами критических сборок.

*Ключевые слова:* метод Монте-Карло, медленные нейтроны, неупругое рассеяние.

### Введение

При решении задач переноса нейтронов методом Монте-Карло данные по сечениям взаимодействия с атомами среды готовятся из оцененных данных, хранящихся в библиотеках типа ENDF/B. Доплеровское уширение сечений быстрых нейтронов учитывается в модели свободного газа, в которой предполагается, что скорости атомов среды имеют распределение Максвелла с температурой среды. Усреднение сечений реакций по распределению Максвелла выполняется численно, и в результате получают поточечные тепловые сечения для заданной температуры среды. В методе Монте-Карло усреднение сечений можно выполнять непосредственно при моделировании траекторий нейтрона с помощью метода максимального сечения. Это позволяет обойтись без предварительного усреднения сечений и точно моделировать рассеяние нейтронов на движущихся атомах среды. Подобный способ учета теплового движения атомов разработан и реализован авторами статьи в методике С-007 [1].

Для медленных (с энергиями меньше 5 эВ) нейтронов модель свободного газа не описывает процессы замедления и рассеяния нейтронов в материалах, содержащих легкие атомы. При рассеянии медленный нейтрон может приобретать и терять энергию как за счет теплового движения атомов, так и за счет связей атомов среды. Для жидкостей надо учитывать молекулярные (химические) связи атомов, для твердых материалов — кристаллическую структуру вещества. Процесс рассеяния медленных нейтронов принято разбивать на три типа: когерентное и некогерентное упругое рассеяние без потери энергии и неупругое рассеяние с изменением энергии нейтрона. Дифференциальные сечения упругого рассеяния описываются достаточно простыми аналитическими формулами с коэффициентами, зависящими от температуры среды. Более сложным является двойное дифференциальное сечение неупругого рассеяния. Оно зависит от температуры и энергии налетающего нейтрона и описывает совместное распределение вторичной энергии и косинуса угла рассеяния в лабораторной системе координат.

В библиотеках типа ENDF/B это сечение выражается через закон рассеяния, задаваемый функцией двух безразмерных аргументов  $S(\alpha, \beta)$ . Первый аргумент есть приведенный квадрат переданного импульса, второй аргумент равен приведенной переданной энергии. Для практически интересных случаев функция  $S(\alpha, \beta)$  симметрична по второму аргументу. Для ряда материалов и нескольких температур в библиотеках ENDF/B хранятся таблицы значений  $S(\alpha, \beta)$  для ограниченной области аргументов:  $[0, \alpha_{\max}] \times [0, \beta_{\max}]$ . Для атомов, входящих в состав замедлителя, программа NJOY [2] из заданного таким образом закона рассеяния вычисляет табличные двойные дифференциальные

сечения неупругого рассеяния. При этом значения функции  $S(\alpha, \beta)$  вне области определения таблицы вычисляются в приближении SCT [2].

Для метода Монте-Карло программа NJOY [2] формирует таблицы: полного сечения неупругого рассеяния, распределения вторичной энергии и условного распределения косинуса угла рассеяния при данном изменении энергии нейтрона. Узлы сетки по вторичной энергии выбираются из условия линейной интерполяции с заданной точностью. Распределение косинуса угла рассеяния описывается заданным числом равновероятных интервалов, границы которых рассчитываются для каждого изменения энергии нейтрона. Эти таблицы используются в программах Монте-Карло для моделирования неупругого рассеяния нейтронов с энергиями меньше 5 эВ. Для неузловых значений температур и энергий сечения и распределения вычисляются с помощью линейной интерполяции.

В статье [3] описан алгоритм линейной интерполяции по температуре для программы MCNP. Тестовые расчеты  $K_{\infty}$  — коэффициента размножения для критической сборки, моделирующей ячейку реактора, показали, что сетка температур из библиотеки ENDF/B-VI является грубой для линейной интерполяции. К сожалению, библиотека ENDF/B-VI не содержит данных для табулирования функции  $S(\alpha, \beta)$  на более подробной сетке температур. В данной работе предлагается новый алгоритм интерполяции дифференциального сечения неупругого рассеяния.

Прежде чем перейти к описанию предлагаемого алгоритма, рассмотрим подробнее алгоритм линейной интерполяции сечений по энергии налетающего нейтрона и температуре среды.

### Линейная интерполяция дифференциального сечения

Пусть температура  $T$  принадлежит сеточному интервалу  $[T_1, T_2]$ , а энергия  $E$  — сеточному интервалу  $[E_1, E_2]$ . При линейной интерполяции по температуре дифференциальное сечение для энергии рассеянного нейтрона находится по формуле

$$\sigma(E, E', T) = w_T \sigma(E, E', T_1) + (1 - w_T) \sigma(E, E', T_2), \quad w_T = \frac{T_2 - T}{T_2 - T_1}.$$

Дифференциальные сечения в *узловых* температурах  $T_i$  вычисляются линейной интерполяцией по энергии:

$$\sigma(E, E', T_i) = w_E \sigma(E_1, E', T_i) + (1 - w_E) \sigma(E_2, E', T_i), \quad w_E = \frac{E_2 - E}{E_2 - E_1}.$$

Интегрируя эти формулы по вторичной энергии  $E'$ , получаем выражения для расчета полных сечений:

$$\begin{aligned} \sigma(E, T) &= w_T \sigma(E, T_1) + (1 - w_T) \sigma(E, T_2), \quad w_T = \frac{T_2 - T}{T_2 - T_1}; \\ \sigma(E, T_i) &= w_E \sigma(E_1, T_i) + (1 - w_E) \sigma(E_2, T_i), \quad w_E = \frac{E_2 - E}{E_2 - E_1}. \end{aligned}$$

Для демонстрации точности линейной интерполяции приведем два расчета сечения. В первом дифференциальное сечение для узловых точек энергии  $E = 0,096$  эВ и температуры  $T = 350$  К рассчитывалось с помощью интерполяции по температуре сечений для  $T_1 = 296$  К и  $T_2 = 400$  К в той же точке по энергии. Поскольку энергия  $E = 0,096$  эВ и температура  $T = 350$  К являются узловыми точками, дифференциальное сечение для них можно получить с помощью программы NJOY [2]. Во втором расчете оценивалась точность интерполяции по энергии. Для этого в сетку по начальным энергиям вводилась дополнительная точка  $E = 0,1$  эВ и сечение в этой точке при  $T = 350$  К считалось двумя способами: интерполяцией сечений в точках  $E_1 = 0,096$  эВ,  $E_2 = 0,1035$  эВ и по программе NJOY.

Отношения интерполированных сечений к точным для первого и второго расчетов показаны на рис. 1. Из рисунка видно, что для вторичных энергий  $E'/E \leq 1$  линейная интерполяция имеет достаточно хорошую точность и что ошибки интерполяции по температуре заметно больше ошибок интерполяции по энергии.

На рис. 2 демонстрируется поведение сечения передачи энергии как функции параметра  $\beta$ . Представлены сечение водорода в воде для энергии  $E = 0,86$  эВ и температуры  $T = 296$  К и это же

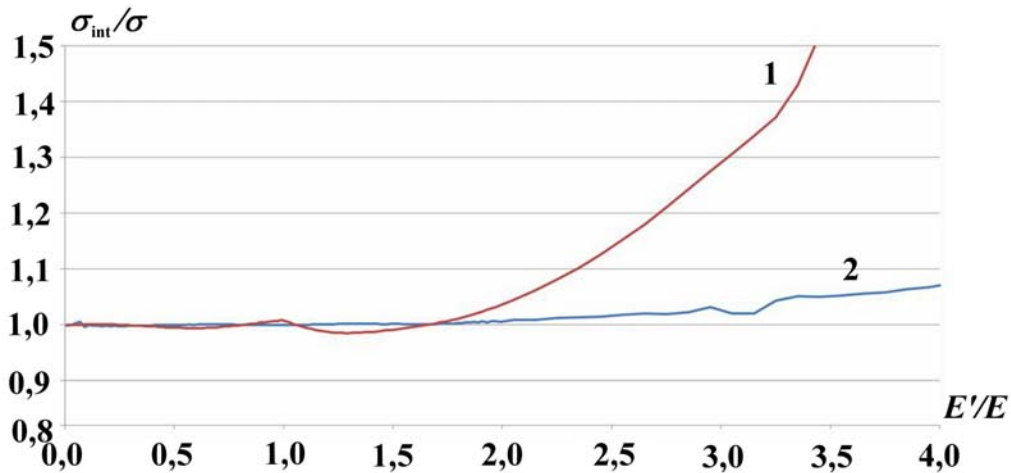


Рис. 1. Отношение интерполированных сечений к точным сечениям: 1 — расчет 1; 2 — расчет 2

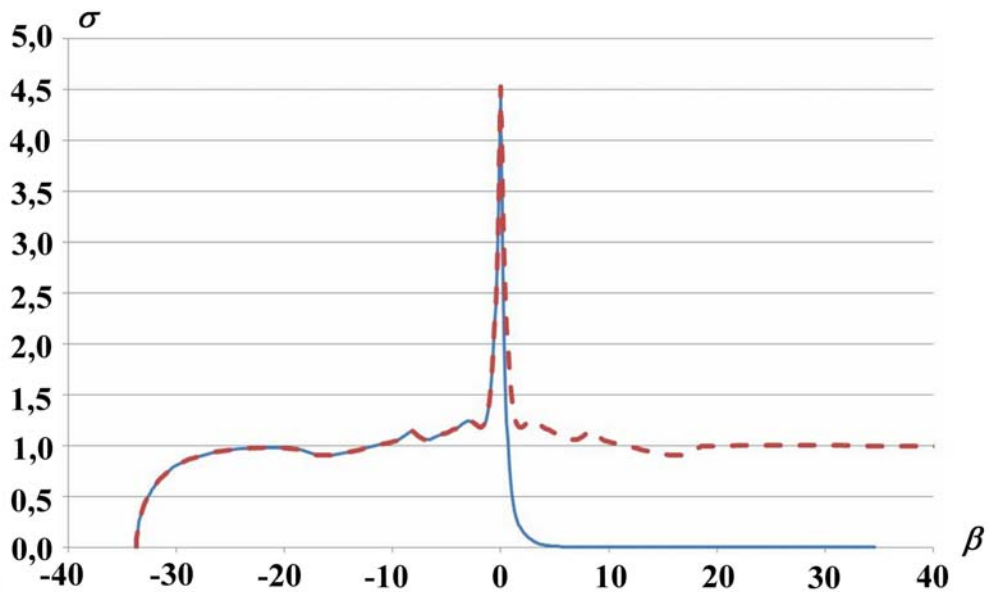


Рис. 2. Сечение передачи энергии на водороде в воде: — — исходное сечение; - - - сечение, умноженное на  $\exp(\beta)$

сечение, умноженное на  $\exp(\beta)$  для положительных значений  $\beta$  (набор энергии). Видно, что сечение, умноженное на экспоненту, имеет более гладкое поведение. Это наблюдение будем учитывать при интерполяции сечений по параметру  $\beta$ .

### Влияние линейной интерполяции сечений на стационарный поток

Ошибки линейной интерполяции сечений сказываются на точности решения задач переноса медленных нейтронов. Покажем это на примере расчета стационарного потока в бесконечной среде. Известно [4], что для симметричных по аргументу  $\beta$  законов рассеяния дифференциальное сечение  $\sigma(E, E', T)$  удовлетворяет принципу детального баланса:

$$E e^{-E/T} \sigma(E, E', T) = E' e^{-E'/T} \sigma(E', E, T).$$

Из него следует, что в однородной бесконечной среде без поглощения стационарным решением уравнения переноса является распределение Максвелла с температурой среды. При линейной интерпо-

лянии сечений принцип детального баланса нарушается и стационарное решение отклоняется от распределения Максвелла.

Для демонстрации отклонения рассмотрим модельное уравнение переноса нейтронов в бесконечной однородной непоглощающей среде с единичной плотностью и температурой  $T$ :

$$\frac{\partial f(t, E)}{\partial t} + v\sigma(E, T)f(t, E) = \int v'\sigma(E', E, T)f(t, E')dE' + Q(E).$$

Здесь  $f(t, E)$  — функция распределения нейтронов по энергии на момент времени  $t$ ;  $v$  — скорость нейтронов;  $Q(E)$  — источник нейтронов.

Для расчета стационарного решения была создана программа, которая методом Монте-Карло решает модельное уравнение с максвелловским источником нейтронов. Стационарное решение находится путем моделирования траекторий нейтронов на достаточно большом временном интервале.

При столкновении нейтрона с энергией  $E \in [E_1, E_2]$  для розыгрыша вторичной энергии  $E'$  используется метод стохастической интерполяции [5]. Он сводится к следующим действиям:

1. Случайным образом выбирается узловая температура  $T_*$ . С вероятностью  $w_T\sigma(E, T_1)/\sigma(E, T)$  она равна  $T_1$ , с противоположной вероятностью —  $T_2$ .
2. Затем разыгрывается узловая энергия  $E_*$ . С вероятностью  $w_E\sigma(E_1, T_*)/\sigma(E, T_*)$  она равна  $E_1$ , с противоположной вероятностью —  $E_2$ .
3. Вторичная энергия нейтрона моделируется по дифференциальному сечению  $\sigma(E_*, E', T_*)$ .

Программа рассчитывает стационарный поток нейтронов на сетке по безразмерной энергии  $E/T$ . В ячейках сетки поток находится с помощью оценки по пробегу. Результатом расчета является отношение стационарного потока нейтронов к максвелловскому потоку с температурой среды.

На рис. 3 приведены результаты двух расчетов для водорода в воде с температурой 350 К. В первом расчете сечения для температуры 350 К находились линейной интерполяцией на интервале между узловыми температурами  $T_1 = 296$  К и  $T_2 = 400$  К. Этот расчет демонстрирует ошибки за счет интерполяции по энергии и температуре. Во втором расчете использовалась интерполяция только по энергии с помощью таблицы сечений для температуры 350 К. Видно, что наблюдается заметное завышение потока при больших энергиях. При двойной интерполяции максимум отклонения составляет около 250 %, при интерполяции только по энергии он достигает 20 %.

Приведенные численные эксперименты показывают, что линейная интерполяция дифференциального сечения неупругого рассеяния имеет серьезные недостатки, которые могут заметно влиять на точность расчетов задач переноса медленных нейтронов. В то же время эксперименты свидетельствуют, что линейная интерполяция дифференциального сечения хорошо "работает" для вторичных

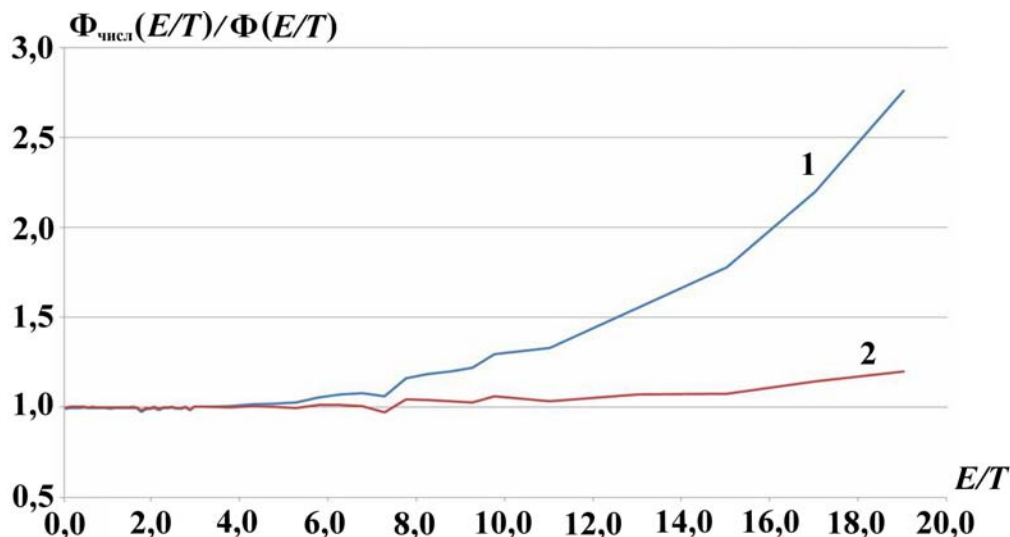


Рис. 3. Отношение расчетного стационарного потока к потоку Максвелла: 1 — расчет 1; 2 — расчет 2

энергий  $E' \leq E$ , т. е. при потере энергии нейтроном. Поэтому ниже предполагается, что для вычисления сечений при  $E' \leq E$  можно использовать линейную интерполяцию.

### Интерполяция сечений с учетом принципа детального баланса

Для получения формул интерполяции при наборе энергии воспользуемся принципом детального баланса. Рассмотрим сначала интерполяцию сечения по температуре для вторичных энергий  $E' \geq E$ . Предположим, что температура  $T$  находится на интервале между узловыми температурами  $T_1$  и  $T_2$ . Запишем выражение детального баланса для дифференциального сечения  $\sigma(E, E', T)$ :

$$E e^{-E/T} \sigma(E, E', T) = E' e^{-E'/T} \sigma(E', E, T).$$

В левой части этого равенства аргумент  $E$  имеет смысл первичной энергии, аргумент  $E'$  — вторичной энергии нейтрона. В правой части аргументы меняют смысл. Это означает, что при энергиях  $E' \geq E$  линейной интерполяцией можно воспользоваться в правой части равенства. Учитывая это, получаем следующее выражение  $\sigma_{\text{int}}(E, E', T)$  для сечения в области энергий  $E' \geq E$ :

$$E e^{-E/T} \sigma_{\text{int}}(E, E', T) = E' e^{-E'/T} \left[ w_T \sigma(E', E, T_1) + (1 - w_T) \sigma(E', E, T_2) \right].$$

Потребуем, чтобы детальный баланс был выполнен для узловых температур  $T_i$ . Тогда в правой части сечения  $\sigma(E', E, T_i)$  можно заменить выражениями

$$\sigma(E', E, T_i) = \frac{E}{E'} \sigma(E, E', T_i) e^{\beta_i}, \quad \beta_i = \frac{E' - E}{T_i}.$$

После несложных преобразований приходим к следующей формуле интерполяции сечения по температуре:

$$\sigma_{\text{int}}(E, E', T) = w_T e^{\beta(T/T_1 - 1)} \sigma(E, E', T_1) + (1 - w_T) e^{\beta(T/T_2 - 1)} \sigma(E, E', T_2), \quad \beta = \frac{E' - E}{T}. \quad (1)$$

Для узловых температур  $T_i$  формулы интерполяции по начальной энергии находятся аналогичным образом. При этом полезно ввести безразмерную вторичную энергию  $\bar{E} = E'/E$  и сечение интерполировать по начальной энергии при фиксированном значении  $\bar{E}$ . Дело в том, что при столкновениях с  $\bar{E} \leq 1$  нейтрон теряет энергию, а при  $\bar{E} \geq 1$  он ее приобретает. Фиксирование энергии  $\bar{E}$  позволяет не смешивать при интерполяции две физически разные области. Как и выше, будем считать, что линейная интерполяция по энергии работает для вторичных энергий  $E' \leq E$  и что в узловых точках по энергии выполнен принцип детального баланса. Тогда получим следующую формулу для интерполяции сечений по энергии в узловой температуре  $T_i$ :

$$\sigma_{\text{int}}(E, E', T_i) = w_E e^{\beta_i(E_1/E - 1)} \sigma(E_1, E', T_i) + (1 - w_E) e^{\beta_i(E_2/E - 1)} \sigma(E_2, E', T_i). \quad (2)$$

Из формул (1), (2) можно вывести общую формулу для двойной интерполяции по энергии и температуре:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{int}}(E, E', T) = & w_T \left[ w_E A_{11} \sigma_{11}(\beta) + (1 - w_E) A_{12} \sigma_{12}(\beta) \right] + \\ & + (1 - w_T) \left[ w_E A_{21} \sigma_{21}(\beta) + (1 - w_E) A_{22} \sigma_{22}(\beta) \right]. \end{aligned}$$

Здесь  $\sigma_{ij}(\beta) = \sigma(E_j, \beta, T_i)$  — исходные табличные сечения передачи энергии; коэффициенты  $A_{ij}$  равны единице для отрицательных значений  $\beta$ , а для положительных  $\beta$  они имеют следующий вид:

$$A_{ij} = \exp \left\{ \beta \left( \frac{T E_j}{E T_i} - 1 \right) \right\}.$$

Для проверки новых формул интерполяции были проведены расчеты дифференциальных сечений, аналогичные описанным выше для линейной интерполяции. Результаты расчетов приведены

на рис. 4 (см. также цветную вкладку). На цветном рисунке синим цветом выделены кривые, показывающие точность интерполяции по энергии, а красным — по температуре. Для удобства сравнения графики, полученные при линейной интерполяции, нанесены пунктирными линиями. Видим, что построенная авторами интерполяция сечений заметно лучше линейной интерполяции и имеет точность не менее 2% в широком диапазоне вторичных энергий  $\bar{E} = E'/E$ .

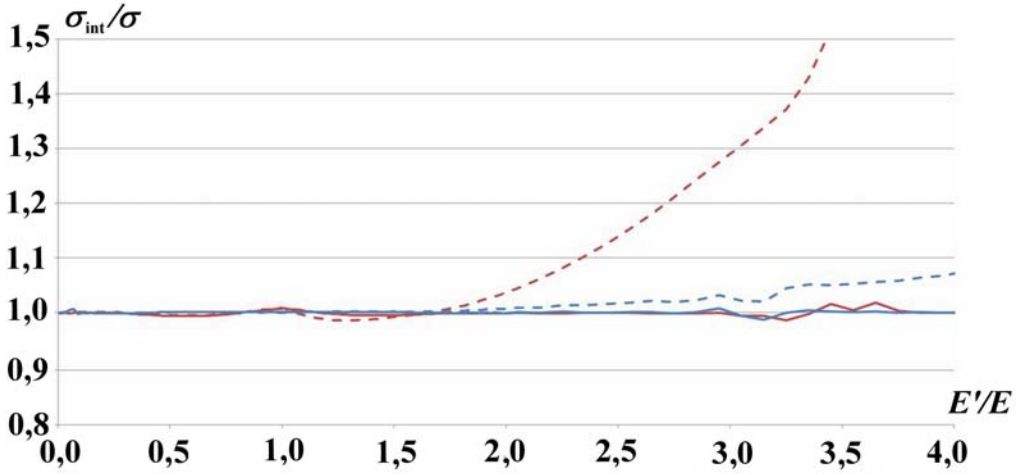


Рис. 4. Отношение интерполированных сечений к точным сечениям: — — по новым формулам; - - - - при линейной интерполяции

### Метод максимального дифференциального сечения

Интерполированное сечение  $\sigma_{\text{int}}(E, E', T)$  имеет один недостаток — оно является сложной нелинейной комбинацией исходных сечений. Вычисление полного сечения, а тем более моделирование рассеяния, практически невозможно. Эту проблему удалось решить путем модификации известного метода максимального сечения [6]. Данная модификация, которую авторы назвали методом *максимального дифференциального сечения*, основана на методе Неймана для моделирования ненормированных распределений.

В рассматриваемом случае ненормированным распределением является интерполированное сечение  $\sigma_{\text{int}}(E, E', T)$ . Оно описывает распределение вторичной энергии  $E'$  при фиксированных значениях температуры и начальной энергии. Согласно методу Неймана для сечения  $\sigma_{\text{int}}(E, E', T)$  требуется построить достаточно простую мажоранту  $\sigma_{\text{max}}(E, E', T) \geq \sigma_{\text{int}}(E, E', T)$ . Тогда алгоритм розыгрыша вторичной энергии сводится к следующим действиям.

Находим максимальную нормированную плотность распределения энергии  $E'$

$$P_{\text{max}}(E'|E, T) = \frac{\sigma_{\text{max}}(E, E', T)}{\sigma_{\text{max}}(E, T)}, \quad \sigma_{\text{max}}(E, T) = \int \sigma_{\text{max}}(E, E', T) dE'$$

Разыгрываем по этой плотности пробное значение  $\hat{E}'$ . С вероятностью  $q = \frac{\sigma_{\text{int}}(E, \hat{E}', T)}{\sigma_{\text{max}}(E, \hat{E}', T)}$  это значение принимается, а с противоположной вероятностью отвергается. Алгоритм обрывается, когда пробное значение принимается.

В методе максимального дифференциального сечения нормировка мажоранты  $\sigma_{\text{max}}(E, T) = \int \sigma_{\text{max}}(E, E', T) dE'$  трактуется как максимальное полное сечение, вероятность  $1 - q$  интерпретируется как вероятность *фиктивного* столкновения, без изменения энергии. При этом уравнение переноса приобретает следующий вид:

$$\frac{\partial f(t, E)}{\partial t} + v\sigma_{\text{max}}(E, T) f(t, E) = \int v'\sigma_{\text{max}}(E', T) P_{\text{max}}(E' \rightarrow \tilde{E}) \left[ q(E', \tilde{E}) \delta(\tilde{E} - E) + (1 - q(E', \tilde{E})) \delta(E' - E) \right] f(t, E') d\tilde{E} dE'$$

Можно показать, что это уравнение эквивалентно исходному уравнению переноса.

Отличие модифицированного метода от стандартного состоит в следующем. В стандартном методе вопрос о фиктивности столкновения решается на уровне полных сечений, в модифицированном методе фиктивность столкновения определяется после пробного розыгрыша результата столкновения, т. е. на уровне дифференциальных сечений. Эффективность методов определяется числом фиктивных столкновений.

### Алгоритм моделирования интерполированных сечений

Для применения метода максимального дифференциального сечения необходимо построить для интерполированного сечения  $\sigma_{\text{int}}(E, E', T)$  достаточно простую мажоранту. При построении будем предполагать, что имеются таблицы полного сечения  $\sigma_{ij} = \sigma(E_j, T_i)$  и сечения передачи энергии  $\sigma_{ij}(\beta_k)$ . Естественно стремиться, чтобы мажоранта  $\sigma_{\text{max}}(E, E', T)$  определялась существующими табличными сечениями. Простейший способ построения такой мажоранты сводится к максимизации коэффициентов  $A_{ij} = \exp\left\{\beta\left(\frac{TE_j}{ET_i} - 1\right)\right\}$ , что легко сделать на любом отрезке  $[\beta_k, \beta_{k+1}]$ . Авторы ограничились тремя отрезками:  $[\beta_0, \beta_1]$ ,  $[\beta_1, \beta_2]$  и  $[\beta_2, \beta_3]$ . Здесь  $\beta_0 = -E/T$ ;  $\beta_1 = 0$ ;  $\beta_3 = \beta_{\text{max}}$  — максимальное сеточное значение параметра  $\beta$ . Граница  $\beta_2$  подбирается из условия минимального числа фиктивных столкновений. Максимальные значения коэффициентов на отрезках обозначим  $A_{ij}^m$ ,  $m = 1, 2, 3$ .

В результате мажоранта для интерполированного сечения принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{max}}(E, E', T) = & w_T \left[ w_E \sum_{m=1}^3 A_{11}^m \sigma_{11}(\beta) + (1 - w_E) \sum_{m=1}^3 A_{12}^m \sigma_{12}(\beta) \right] + \\ & + (1 - w_T) \left[ w_E \sum_{m=1}^3 A_{21}^m \sigma_{21}(\beta) + (1 - w_E) \sum_{m=1}^3 A_{22}^m \sigma_{22}(\beta) \right]. \end{aligned}$$

Интегрируя мажоранту по вторичной энергии (параметру  $\beta$ ), получаем выражение для максимального полного сечения:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{max}}(E, T) = & w_T \left[ w_E \sigma_{\text{max}}^{11} + (1 - w_E) \sigma_{\text{max}}^{12} \right] + (1 - w_T) \left[ w_E \sigma_{\text{max}}^{21} + (1 - w_E) \sigma_{\text{max}}^{22} \right] = \\ = & w_T \sigma_{\text{max}}(E, T_1) + (1 - w_T) \sigma_{\text{max}}(E, T_2). \end{aligned}$$

Здесь  $\sigma_{\text{max}}^{ij} = \sum_{m=1}^3 A_{11}^m \sigma_{ij}^m$  — максимальные полные сечения для узлов  $T_i$  и  $E_j$ ;  $\sigma_{ij}^m$  — интеграл от табличного сечения  $\sigma_{ij}(\beta)$  по  $m$ -му интервалу параметра  $\beta$ .

В результате для модельного уравнения переноса алгоритм моделирования траекторий принимает следующий вид:

1. По сечению  $\sigma_{\text{max}}(E, T)$  разыгрывается свободный пробег.
2. В точке столкновения методом стохастической линейной интерполяции разыгрываются узлы  $i, j$  по температуре и энергии.
3. Затем разыгрываются номер отрезка  $m$  и пробное значение параметра  $\beta$  на этом отрезке.
4. С вероятностью  $A_{ij}(\beta) / A_{ij}^m$  столкновение считается реальным. С противоположной вероятностью столкновение будет фиктивным, без изменения энергии.

При реализации алгоритма учитывается экспоненциальное поведение сечения передачи энергии  $\sigma(\beta)$  на положительной полуоси параметра  $\beta$ , показанное на рис. 2. Для этого  $\sigma(\beta)$  на сеточных интервалах  $[\beta_1, \beta_2]$  аппроксимируется выражением

$$\sigma(\beta) = \left[ \sigma_1 + \frac{(\beta - \beta_1)(\sigma_2 e^{\Delta\beta} - \sigma_1)}{\Delta\beta} \right] e^{-(\beta - \beta_1)},$$

где  $\Delta\beta$  — длина интервала;  $\sigma_i$  — значения сечения на концах интервала. Для розыгрыша на интервале пробного значения  $\beta$  используется метод Неймана с линейной мажорантой:

$$\sigma(\beta) \leq \sigma_{\text{lin}}(\beta) = \sigma_1 + \frac{(\beta - \beta_1)(\sigma_2 e^{\Delta\beta} - \sigma_1)}{\Delta\beta}.$$

Описанная методика моделирования неупругого рассеяния была реализована для модельного уравнения переноса в бесконечной среде. Для сравнения с методом линейной интерполяции повторены расчеты стационарного потока для водорода в воде при температуре 350 К. Результаты приведены на рис. 5 (см. также цветную вкладку). На цветном рисунке кривая синего цвета соответствует расчету с интерполяцией по температуре между узлами  $T_1 = 296$  К и  $T_2 = 400$  К. Кривая красного цвета получена расчетом на узловой температуре 350 К. Для представления о статистической ошибке на синей кривой отмечено стандартное отклонение, равное  $2\sigma$ . Из рисунка видно почти идеальное совпадение потоков, что подтверждает высокую точность новой методики.

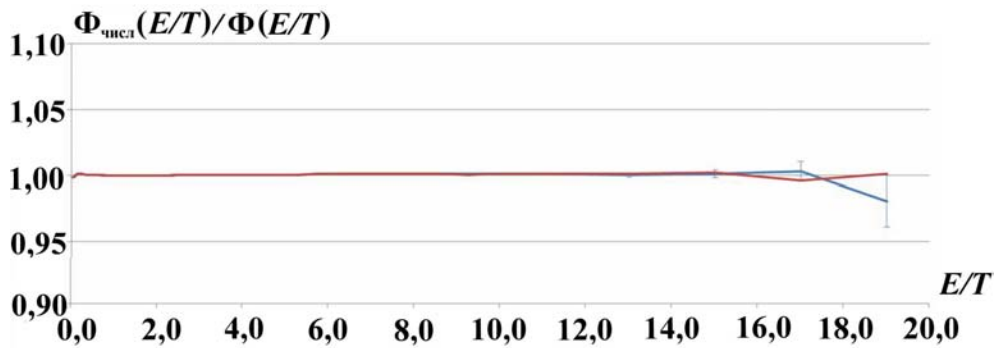


Рис. 5. Отношение расчетного стационарного потока к потоку Максвелла

### Расчеты по методике С-007

Для проверки нового метода моделирования медленных нейтронов были проведены расчеты стационарного потока нейтронов по методике С-007 [1], аналогичные выполненным выше по тестовой программе. Для этого задавалась однообластная сферическая задача. Радиус сферы был взят настолько большим, что задача практически моделировала бесконечную среду с заданной температурой. Для расчета стационарного потока использовалась оценка по пробегу.

В отличие от тестового расчета учитывались все процессы, существующие в тепловой области, а не только неупругое рассеяние. Следует отметить, что это не должно приводить к отклонению стационарного потока от максвелловского. Так как реакции упругого рассеяния не меняют энергии нейтрона, а сечение  $\gamma$ -захвата ведет себя как  $1/v$ , происходит равномерное по энергии уменьшение потока. В результате после нормировки стационарный поток не должен отличаться от потока Максвелла.

Расчеты были выполнены для следующих материалов: вода ( $\text{H}_2\text{O}$ ), полиэтилен ( $\text{CH}_2$ ), графит (С) и гидрид циркония ( $\text{ZrH}$ ). Вода и полиэтилен рассчитывались при температуре 325 К, а графит и гидрид циркония — при 350 К. Для температуры 325 К интерполяция сечений выполнялась между узловыми температурами 296 и 350 К, для температуры 350 К — между узловыми температурами 296 и 400 К.

На рис. 6 (см. также цветную вкладку) приведено отношение расчетного стационарного потока к точному. Материалам соответствуют следующие цвета кривых: голубой —  $\text{H}_2\text{O}$ , красный —  $\text{CH}_2$ , зеленый — С, фиолетовый —  $\text{ZrH}$ . Видно, что отклонение от точного решения не превышает 1% для всех материалов, за исключением водорода в цирконии, для которого ошибка достигает 5%. Отметим, что измельчение сетки по начальной энергии позволяет уменьшить эту ошибку до 1%.



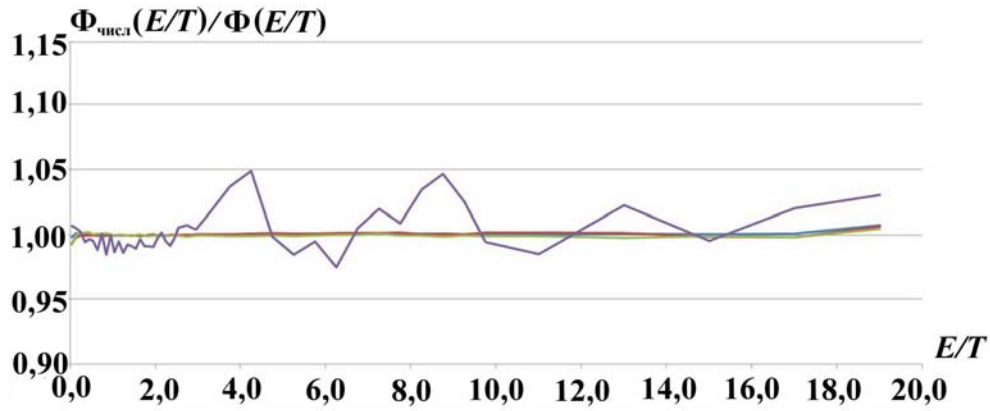


Рис. 6. Точность расчета стационарного потока по методике С-007

Точность вычисления  $K_{эф}$  демонстрируется на расчете критической сборки [3], моделирующей ячейку реактора (рис. 7). В центре цилиндрического блока находится топливо, окруженное кожухом из циркония, а снаружи — вода.

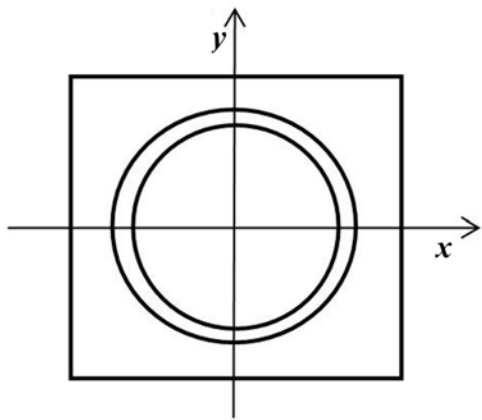


Рис. 7. Геометрия модельной ячейки реактора

ENDF/B, и отсутствуют точные данные о температурах материалов в задаче. Кроме того, в программе MCNP для быстрых нейтронов реализована модель свободного газа путем предварительного расчета доплеровского уширения сечений с последующей линейной интерполяцией по температуре,

Для расчетов использовались данные по сечениям взаимодействия из библиотеки ENDF/B-VI. В качестве узловых были взяты температуры: 296, 450 и 600 К. Коэффициент размножения рассчитывался при температурах 296, 350, 400, 450, 500, 550 и 600 К.

В статье [3] расчеты выполнены по программе MCNP [7] с помощью линейной интерполяции сечений по температуре. Затем эти расчеты были повторены с сечениями, рассчитанными для каждой температуры с использованием модуля NJOY [2]. Расчеты проводились со статистической точностью 0,00005.

В табл. 1 для сравнения приводятся результаты расчетов как по методике С-007, так и по программе MCNP. Прочерком помечены отсутствующие расчеты.

Наблюдаемые расхождения в значениях  $K_{эф}$ , полученных по этим программам, объясняются следующими причинами. В статье [3] не указаны параметры точности, задаваемые при подготовке таблиц сечений из данных библиотеки

Таблица 1

Результаты расчета  $K_{эф}$  по методике С-007 и программе MCNP

Т, К	Без интерполяции		С интерполяцией		Отн. отклонение	
	С-007	MCNP	С-007	MCNP	С-007	MCNP
296	1,193928	1,20242	—	—	—	—
350	1,193128	1,20158	1,193152	1,20138	-0,00002	0,00017
400	1,192321	1,20042	1,192288	1,20038	0,00003	0,00003
450	1,191421	1,19952	—	—	—	—
500	1,190390	1,19825	1,190428	1,19844	-0,00003	-0,00016
550	1,189397	1,19708	1,189287	1,19720	0,00009	-0,00010
600	1,188312	1,19588	—	—	—	—

а в методике С-007 модель свободного газа реализуется непосредственно при моделировании траекторий.

Малые значения относительных ошибок доказывают, что новый метод интерполирования сечения неупругого рассеяния имеет хорошую точность даже на грубых сетках по температуре.

### Расчеты критических сборок с замедлителем из воды

Для дальнейшего тестирования методики был проведен ряд расчетов коэффициента размножения нейтронов в 23 критических сборках. Эти сборки содержат различные типы топлива в активной зоне и замедлитель из воды. Подробное описание геометрии и состава сборок приведено в [8].

Для сравнения проводился расчет каждой задачи по стандартному и новому (с использованием предлагаемого метода) вариантам методики С-007. В табл. 2 даны результаты. Статистическая точность расчетов не менее 0,0001.

Таблица 2

Результаты расчетов  $K_{эф}$  по двум вариантам методики С-007

Крит. сборка	Стандарт. вариант	Новый вариант	Отн. отклонение
ORNL	0,995375	0,996015	0,0006
ORNL2	0,995551	0,996032	0,0005
ORNL3	0,993013	0,993260	0,0002
ORNL4	0,994419	0,994646	0,0002
ORNL10	0,995493	0,995544	0,0001
PNL-1	1,007317	1,007843	0,0005
PNL-2	0,999723	1,000296	0,0006
PNL-3	0,988574	0,989242	0,0007
PNL-4	0,995149	0,996050	0,0009
PNL-5	0,999393	1,000199	0,0008
PNL-6a	1,001290	1,001378	0,0001
PNL-6b	0,999456	0,999778	0,0003
PNL-7a	1,003405	1,004392	0,0010
PNL-7b	1,002923	1,003960	0,0010
PNL-8a	1,005350	1,006095	0,0007
PNL-8b	1,005187	1,006070	0,0009
PNL-9	0,993595	0,993859	0,0003
PNL-10	0,998018	0,998459	0,0004
PNL-11	1,009181	1,009143	0,0000
PNL-12a	1,004358	1,005266	0,0009
PNL-12b	1,004427	1,005206	0,0008

### Заключение

Построен алгоритм интерполяции дифференциального сечения неупругого рассеяния медленных нейтронов. На численных примерах показана достаточно высокая точность алгоритма. Для использования интерполированного сечения в программах Монте-Карло разработан метод максимального дифференциального сечения, который позволяет уменьшить затраты на вычисление сечения. Эффективность метода определяется числом фиктивных столкновений и зависит от подбора мажоранты для дифференциального сечения. Численные эксперименты показывают, что число фиктивных столкновений не превышает 40%. Расчеты коэффициента размножения для критических сборок с замедлителем из воды подтверждают высокую точность нового метода учета химических связей при рассеянии медленных нейтронов.

В настоящее время новый метод моделирования медленных нейтронов полностью реализован в программе СМК [9], созданной на базе методики С-007 [1]. При реализации предусмотрена возможность динамического изменения температуры среды, что важно для реакторных расчетов.

### Список литературы

1. *Житник А. К., Донской Е. Н., Огнев С. П. и др.* Методика С-007 решения методом Монте-Карло связанных линейных уравнений переноса нейтронов, гамма-квантов, электронов и позитронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 1. С. 17–24.
2. *MacFarlane R. E., Muir D. W.* The NJOY Nuclear Data Processing System. Version 91. Los-Alamos National Laboratory Report LA-12740-M. October 1994.
3. *Donnelly J. V.* Interpolation of temperature-dependent nuclide data in MCNP // Nucl. Sci. and Eng. 2011. Vol. 168. P. 180–184.
4. *Белл Д., Глестон С.* Теория ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1976.
5. *Brown F. B., Martin W. R., Mosteller R. D.* Monte-Carlo — advances and challenges. Los-Alamos National Laboratory Report LA-UR-08-05891. September 2008.
6. *Соболев И. М.* Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.
7. MCNP — A General Monte-Carlo N-Particle Transport Code. Version 5, volume 1. Los-Alamos National Laboratory Report LA-UR-03-1987. April 2003.
8. Cross Section Evaluation Working Group Benchmark Specification. Cross Section Evaluation Working Group Thermal Reactor Benchmark Compilation. Brookhaven National Laboratory Report BNL19302(ENDF-202). June 1974.
9. *Житник А. К., Залялов А. Н., Малькин А. Г. и др.* Свидетельство о государственной регистрации программы СМК для ЭВМ № 2011610500 // Электронный бюллетень. 2011. № 2. С. 123. <http://www.fips.ru>.

Статья поступила в редакцию 15.10.12.

---