

УДК 004.415.535 539.125.523.348

ВЕРИФИКАЦИЯ ПРОГРАММЫ TDMCC ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ РАДИАЦИОННОЙ ЗАЩИТЫ ОТ ЗАДАННЫХ ИСТОЧНИКОВ НЕЙТРОННОГО И ФОТОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

*Т. В. Семенова, А. К. Житник, Е. В. Артемьева, Н. А. Волков, К. С. Ломтева,
О. Н. Шукаева*

Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, Саров

В докладе представлены результаты работ по верификации программного средства (ПС) TDMCC предназначенного для моделирования процессов переноса нейтронов и гамма-квантов в трехмерных системах методом Монте-Карло. Верификация проводилась в обоснование расчетов радиационной защиты от заданных источников нейтронного и фотонного излучений.

Рассмотрены различные тесты и эксперименты, на основе которых сформирована матрица верификации. Приведено сравнение результатов расчетов тестов и бенчмарк-экспериментов по программе TDMCC с экспериментальными данными и результатами расчетов по другим программам. Определена погрешность расчетов плотностей потоков и мощностей доз от нейтронного и фотонного излучений за преградами из различных материалов.

Ключевые слова: верификация программного средства, матрица верификации, радиационная безопасность, бенчмарк-эксперимент, погрешность расчета, плотность потока частиц, мощность дозы, метод Монте-Карло.

Введение

В настоящее время, в связи с появлением современных компьютерных систем, становится все более привлекательным применение метода Монте-Карло для анализа нейтронно-физических характеристик ядерных реакторов и для расчетов нейтронных и/или фотонных полей при заданных источниках нейтронов или фотонов. На сегодняшний день стало возможным моделировать большое количество историй частиц (нейтронов, фотонов), получая, тем самым, высокую статистическую точность рассматриваемых параметров реакторных систем.

В РФЯЦ ВНИИЭФ разработана программа TDMCC [1], предназначенная для решения задач совместного переноса нейтронов и гамма-квантов методом Монте-Карло.

TDMCC – это многоцелевая программа. С ее помощью можно решать задачи оценки критичности и ядерной безопасности отдельных сборок, активных зон реакторных установок, хранилищ ядерного топлива, оценивать радиационную безопасность, рассчитывать защиту от излучений, подбирать параметры для получения заданного значения k_{eff} , а также проводить расчеты выгорания топлива и моделировать топливные циклы реакторных установок.

К настоящему моменту ПС TDMCC аттестовано для решения задач ядерной безопасности объектов, содержащих делящиеся материалы.

В докладе представляется работа по верификации ПС TDMCC, работающей в режиме моделирования процессов переноса нейтронов и фотонов от заданных источников нейтронного и фотонного излучения.

Доклад подготовлен на основе материалов Верификационного отчета, переданного на аттестацию в НТЦ ЯРБ.

1. О программе TDMCC

В программе TDMCC реализовано численное решение линейных неоднородных уравнений переноса нейтронов и фотонов в трехмерной геометрии аналоговыми и неаналоговыми методами Монте-Карло. Расчеты выполняются без упрощений относительно геометрии с использованием точных моделей взаимодействия нейтронов и фотонов с веществом. Для выдачи результатов допустимо использование дополнительной геометрии, наложенной на систему. Результаты могут быть распределены по набору фазовых параметров с произвольными границами. В программе используются оценки потока по области, пересечению поверхности, а также свертки с произвольными функциями.

Для повышения эффективности счета в программе реализован ряд алгоритмов, которые позволяют получать статистически более точные результаты за меньшее время. Прежде всего, это расщепление и рулетка, а также метод пробных частиц – аналог DXTRAN в MCNP.

Программа TDMCC использует константы с непрерывной энергетической зависимостью из библиотек, сформированных для моделирования переноса нейтронов и процессов гамма-образования на основе файлов оцененных ядерных данных ENDF/B-VI (релиз 8) с добавлением недостающих констант из файлов ENDF/B-VII, ENDL-82, JENDL. Для моделирования переноса фотонов используются константы из библиотеки EPDL-97.

Для учета движения атомов среды используется модель свободного газа, в которой распределение скоростей атомов считается максвелловским с температурой, равной температуре области. В программе реализована возможность моделирования нейтронных траекторий с учетом химических связей атомов при произвольной температуре материала.

В области неразрешенных резонансов для учета резонансного поглощения в программе используются 2 метода: прямой метод и метод вероятностных таблиц.

Программа TDMCC работает как в однопроцессорном, так и в параллельном режимах. В основе алгоритмов распараллеливания используется модель с передачей сообщений, реализуемая библиотекой межпроцессорных обменов MPI.

Для решения задач линейного переноса, когда траектории частиц являются абсолютно независимыми, разработан параллельный алгоритм асинхронного счета пакетов траекторий, который позволяет получать почти 100 % эффективность на любом числе процессоров. В этом алгоритме каждый из запущенных процессов является независимым расчетом, который моделирует траектории на своих подцепочках случайных чисел и обменивается с другими только через определенные промежутки времени.

При расчетах эффективных доз в программе TDMCC используется свертка потока с функцией дозы на единичный флюенс для соответствующего типа частиц.

2. Особенности верификации ПС на радиационную безопасность

Верификация ПС для решения задач радиационной защиты от заданных источников нейтронного и фотонного излучений имеет ряд особенностей:

Во-первых, в отличие от верификации ПС на ядерную безопасность, отсутствует единая верификационная база (в случае ядерной безопасности – это международный справочник по критическим экспериментам ICSBER [9]).

В качестве верифицируемых функционалов были выбраны:

- интегральная плотность потока нейтронов и фотонов,
- дозы от нейтронного и фотонного излучений.

Поскольку экспериментов, в которых мерялась доза от излучений не так уж много, было предложено также использовать те тестовые задачи, в которых мощность дозы непосредственно не измерялась, но в их описаниях имеются данные об энергетическом распределении (спектре) плотности потока излучения. Сравнивая интегрированные экспериментальные и расчетные спектры с весовой функцией перевода потока в мощность дозы, можно получать оценки погрешности определения именно мощности дозы.

Одной из особенностей верификации ПС на радиационную безопасность является расширенный набор исходных данных, для которых должны быть обоснованы величины погрешностей – это источники с разным энергетическим, угловым и пространственным распределением, разный химический состав защитных материалов, разные толщины защитных материалов и др.

Кроме того, задачи на радиационную безопасность требуют большее количество вычислительных ресурсов. Иногда приходится подключать методы повышения эффективности расчетов, без которых трудно получить достаточную статистику за приемлемое время.

3. Матрица верификации

ПС предназначено для расчетов нейтронных и/или фотонных полей при заданных источниках нейтронов или фотонов.

Верифицируемые величины:

- интегральная плотность потока нейтронов;
- мощность дозы нейтронов;
- мощность дозы фотонов.

Область применения ПС по типу объекта использования атомной энергии:

Оборудование, упаковки, контейнеры, хранилища с ДМ, РАО или другими радионуклидными источниками, радиационная защита РУ

Защитные материалы:

- Нейтроны – свинец, железо (сталь), графит, вода, п/э;
- Фотоны – свинец, железо(сталь), вода, п/э.

Перечень задач и описание верифицируемых функционалов представлены в табл. 1 и на рис. 1.

Таблица 1

Перечень задач для верификации

№	Эксперимент	Источник	Верифицируемый функционал
1	Аналитический тест KOBAYASHY	[0]	Плотность потока в точках наблюдения
2	ASP_FE	SINBAD 2010	Скорости реакций на различных толщинах железной защиты
3	ASP_FE88		Скорости реакций на различных толщинах железной защиты
4	ASP_GRAP		Скорости реакций
5	ASP_H2O		Скорости реакций
6	KFK_FE		Скорости реакций
7	ASP_NG		Скорости реакций
8	JANUS-1		Скорости реакций
9	NESDIP2		Скорости реакций
10	NIST_H2O		Скорости реакций
11	ALARM-CF-AIR-SHIELD-001		HANDBOOK 2010
12	ALARM-CF-FE-SHIELD-001	Энергетическое распределение нейтронов и гамма-квантов	
13	ALARM-CF-PB-SHIELD-001	Энергетическое распределение нейтронов и гамма-квантов	
14	ALARM-REAC-AIR_SKY («Байкал»)	Энергетическое распределение нейтронов и гамма-квантов	

Окончание таблицы 1

№	Эксперимент	Источник	Верифицируемый функционал
15	ALARM-CF-AIR-LAB		Плотность потока нейтронов
16	SHIPING CASK		Измерения мощности дозы от нейтронного и фотонного излучений из защитного контейнера для перевозки ядерного топлива
17	TK-13		Мощность экв. дозы при внешнем облучении источниками нейтронов и гамма-квантов, образующихся в ОЯТ

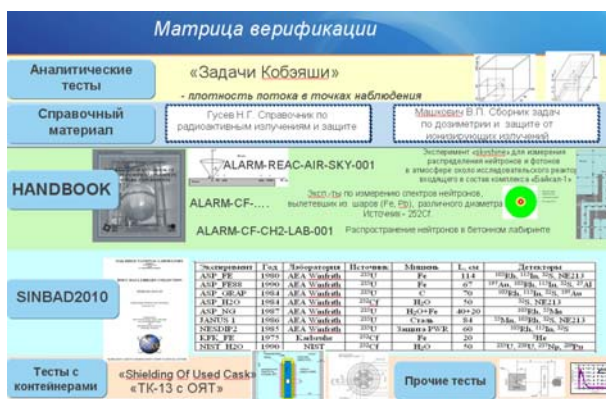


Рис. 1. Матрица верификации

4. Верификация на аналитических тестах

Для верификации программ основанных на стохастических и детерминистических методах профессором Кейсукэ Кобэяши из университета Киото были предложены задачи на перенос нейтронного излучения, имеющие аналитическое решение, в которых пустые области граничат с чисто поглощающими. Всего было рассмотрено три теста, геометрии которых представлены на рис. 2.

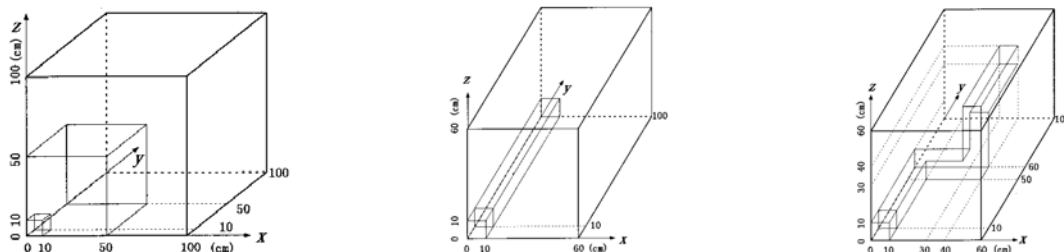


Рис. 2. Задачи Кобэяши

Результаты расчетов нейтронных характеристик по программе TDMCC и другим расчетным кодам находятся в хорошем согласии между собой в пределах статистической погрешности и с хорошей точностью совпадают с аналитическим решением.

Верификация на аналитических тестах подтверждает, что точность расчета программы TDMCC определяется только точностью оцененных ядерных данных и статистической погрешностью результата вне зависимости от геометрии системы

По рекомендациям экспертов были проведены сравнительные расчеты прохождения фотонов через защитные материалы для сопоставления с данными из справочников [10, 11]:

- расчет нерассеянного гамма-излучения
- расчет дозовых факторов накопления гамма – излучения
- расчет толщины защиты из железа ($= 7,89 \text{ г/см}^3$) для различных кратностей ослабления γ -лучей (широкий пучок).

5. Верификация на экспериментальных данных

Тесты из международного справочника по критическим экспериментам

ALARM-REAC-AIR-SKY-001. Эксперимент «skyshine» проводился для измерения пространственного распределения нейтронов и фотонов в атмосфере поблизости от исследовательского реактора, входящего в состав комплекса «Байкал-1» и расположенного недалеко от Семипалатинска. На протяжении двух лет (1996 – 1997 гг.) в атмосфере были измерены: потоки тепловых и быстрых нейтронов и фотонов над реактором, энергетическое и пространственное распределение нейтронов на различных расстояниях от реактора.

В [8] представлено описание двух моделей – точной и приближенной, первая из которых достаточно подробно описывала геометрию и материалы реальной конструкции реактора. В результате экспериментов были измерены скорости реакций рассеяния на индиевом датчике на трех высотных уровнях, потоки тепловых нейтронов на трех высотных уровнях на разных расстояниях от оси реактора, потоки и мощности доз нейтронов на разных расстояниях от оси реактора.

Пространственное и энергетическое распределение нейтронного и фотонного излучений в дальнейшем использовалось для создания упрощенной модели эксперимента. Эта модель представляет собой точечный источник нейтронов с заданными спектрально-угловыми и энергетическими распределениями.

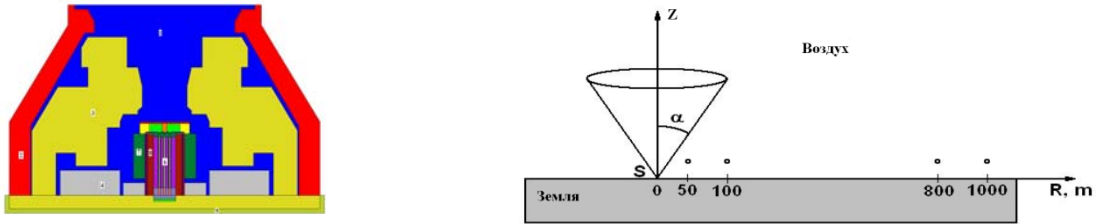
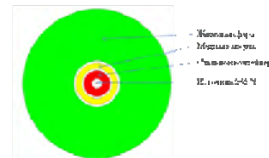


Рис. 3. ALARM-REAC-AIR-SKY-001

Для верификации ПС TDMCC использовались обе модели.

Эксперименты по измерению спектров нейтронов, вылетевших из шаров (железо, свинец). При сравнении спектров, полученных в расчетах, с результатами экспериментов учитывалась функция разрешения детекторов. В расчетах для этого обычно используют функцию Гаусса с определенным набором параметров. Для получения спектров с учетом «размытия» по Гауссу в программу TDMCC встроен пересчет спектров по формуле

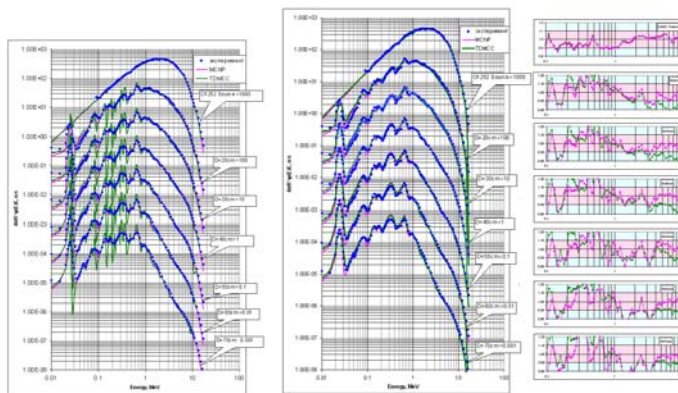
$$\tilde{f}(E) = C \int_0^{\infty} f(E') \exp\left(-\left(\frac{E-E'}{A}\right)^2\right) dE',$$



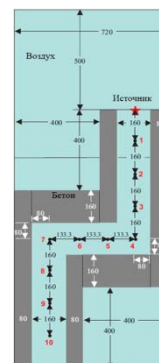
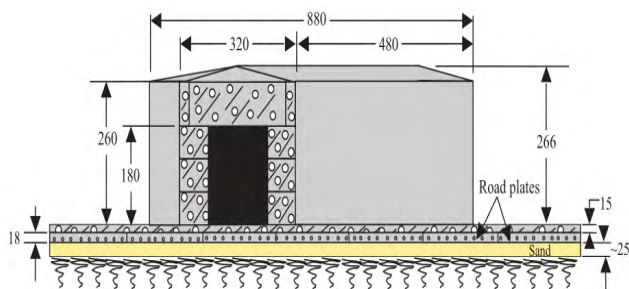
где C – нормализующий коэффициент, E – энергия, $A = \frac{a + b\sqrt{E + cE^2}}{2\sqrt{\ln 2}}$

Параметры A , B и C задаются пользователем при описании заказных результатов.

Далее, на рисунке приводятся результаты сравнения расчетных и экспериментальных нейтронных спектров для шаров диаметрами 20, 30, 40, 50, 60 и 70 см соответственно на экспериментальной 119-групповой энергетической сетке. При этом спектры, которые приведены в таблицах, получены с использованием функции размытия по Гауссу с параметрами, рекомендованными в [0]. Для сравнения там же приведены нейтронные спектры, полученные без использования гауссианов. Видно, что в среднем, они хорошо совпадают с экспериментальными данными и результатами расчетов по MC NP.



Распространение нейтронов в бетонном лабиринте. Этот эксперимент был выбран для верификации неаналогового моделирования, а именно метода пробных частиц.



В отчете приводятся и сравниваются с экспериментальными данными и с расчетами по другим программам результаты расчета функционалов от плотности потока нейтронов и фотонов при заданных пространственно-энергетических распределениях источников нейтронного и фотонного излучения.

Тесты из международного справочника SINBAD-2010

В качестве тестовых задач были использован ряд бенчмарк экспериментов из международной базы данных экспериментов по радиационной защите и дозиметрии SINBAD. База данных была создана и поддерживается агентством по атомной энергии (NEA – Nuclear Energy Agency) при европейской организации экономического сотрудничества и развития (OECD – Organization for Economic Co-operation and Development) и информационно-вычислительным центром по радиационной защите (RSICC – Radiation Safety Information Computational Center) США.

Из большой совокупности экспериментов, представленных в базе данных SINBAD, были отобраны эксперименты, выполненные с источниками нейтронов имеющих делительный спектр. В качестве источников нейтронов были использованы: во-первых, конверсионные платы из сплавов обогащенного урана с алюминием, облучаемые тепловыми нейтронами от исследовательского реактора; во-вторых, источники на основе спонтанно делящегося изотопа ^{252}Cf . Интенсивности источников нейтронов тщательно измерялись. В случае использования конверсионных плат измерялись также распределение интенсивности источника по объему делящегося материала, которое учитывалось в расчетах с различной степенью детализации.

Из сборника SINBAD были выбраны тесты ASP_H2Oи KFK_FE, поскольку в них есть экспериментальная информация о нейтронных спектрах, которые можно «свернуть» в мощность дозы и сравнить с результатами расчетов.

Тесты ASP_NG, JANUS-1, NESDIP2, NIST_H2O с водой и сталью в качестве защитных материалов рассматривались как некоторые несущественные дополнения к тестам CF_FE, CF_H2O, CF_CH2, CF_FE_H2O из матрицы. Тесты из сборника SINBAD-2010 показаны на рис. 4.

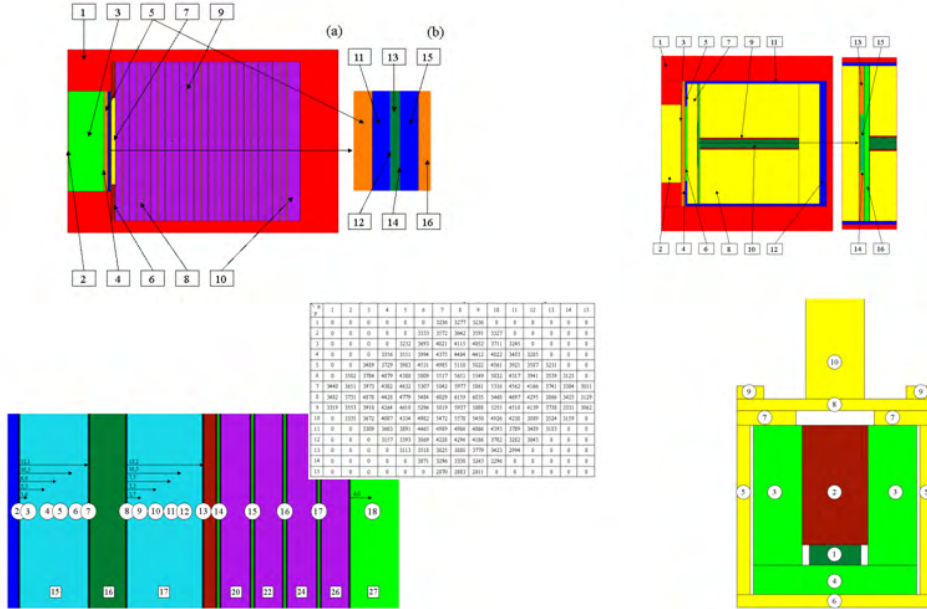


Рис. 4. Тесты из сборника SINBAD-2010

Дополнительные тесты

Поскольку число решенных тестовых задач было недостаточным для обоснования требуемой по ТЗ точности расчетов мощности дозы, были подобраны дополнительные тесты и сформирована расширенная матрица верификации, учитывающая необходимость охвата большего числа защитных материалов и типов источников излучения (по спектральному составу). Дополнительные тесты показаны на рис. 5.

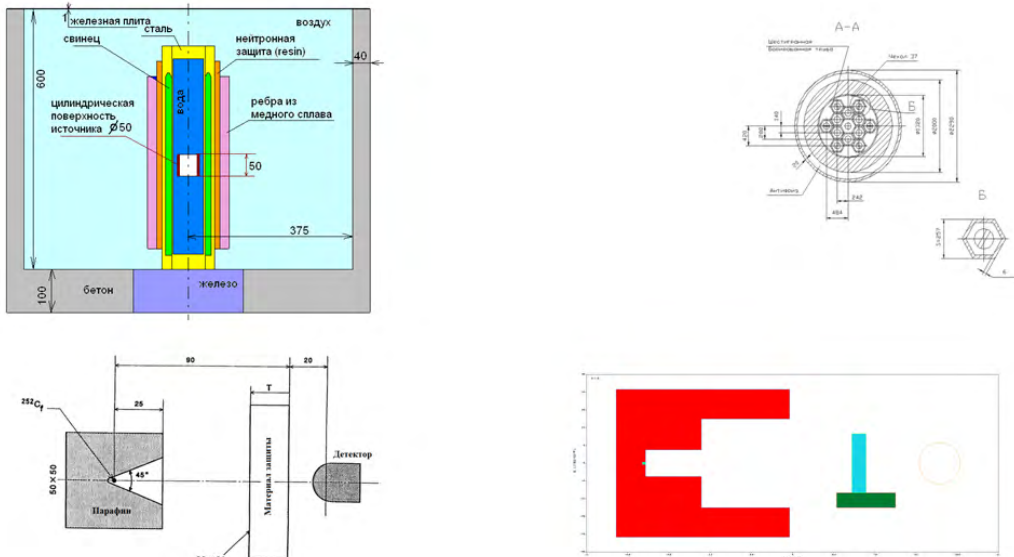


Рис. 5. Дополнительные тесты

6. Результаты верификации

Степень влияния полученных отклонений расчетных (P) и экспериментальных (\mathcal{E}) значений потоков фотонов на различия в значениях мощности дозы оценивалось в ϵ по величине параметра $\delta_H = (H_P/H_{\mathcal{E}} - 1) \cdot 100$ %, где $H = \int \varphi(E) k_H(E) dE$ есть результат «свертки» плотности потока частиц $\varphi(E)$ с функцией $k_H(E)$ ее перевода в мощность дозы; значения функций $k_H(E)$ взяты из НРБ-99/2009 для внешнего облучения тела человека параллельными пучками нейтронов и фотонов.

Результаты такой обработки спектров нейтронов и фотонов, полученных в экспериментах и расчетах для всех рассмотренных тестовых задач, приведены в таблице с привязкой к интервалам толщин защитных материалов и для каждой тестовой задачи.

Погрешности, полученные в результате верификационных расчетов, были сведены в табл. 2 и распределены по составам и толщинам защитных материалов. Анализ этой таблицы позволил определить величины погрешностей, которые потом вошли в паспорт ПС TDMCC.

Таблица 2

материалы защиты - железо, сталь					
Нейтронный спектр			Доза нейтронов		
Толщина, см	AL,AMM, CF, FE	AMP, FE, KFK, JANUS	AL,AMM, CF, FE, AMP, FE	KFK, JANUS	
0			10	-2.3	
5	+1	+0.5	11.5	-0.8	
10			12.5	-0.8	
15.3		+1.5	13.0	-0.8	
15.6		+0.8	13.5	-0.8	
15.34		+0.8	13.5	-0.8	-0.9
17.4		+1.5	13.6	-0.7	
19.0	+4.4		20.0	+2.0	-12.0
20.0		+1.5	21.00		
21.00		+1.8	21.00	+1.7	+17
21	+3.0		21	+3.0	
25	+3.0		21	+3.0	-0.6
27.00		+0.1	21	+3.0	
34	+7.3		11.24	+7.3	-1.4
37.14	+4.4	+1.7	105.78	+4.4	
100.7	101		114.3	7.96	
114.3	110				

материалы защиты - вода					
Нейтронный спектр			Доза нейтронов		
Толщина, см	AMP, H2O	CF, H2O	AMP, H2O	CF, H2O	
0	-2.4		10.10	-2.4	
15	-0.3		11.20	-1.6	
20	-0.3		12.03	-0.8	
25	-0.3		12.40	-1.0	
30	-0.3		12.40	-1.1	
33	-0.9	+2.4	13.7	-0.8	
37.5	-0.9		14.1	-0.8	
50.8	-1.1		50.8	-0.7	EEB

материалы защиты - графит					
Нейтронный спектр			Доза нейтронов		
Толщина, см	^{12}C , ^{13}C , ^{14}C , ^{15}C , ^{16}C , ^{17}C , ^{18}C , ^{19}C , ^{20}C	^{12}C , ^{13}C , ^{14}C , ^{15}C , ^{16}C , ^{17}C , ^{18}C , ^{19}C , ^{20}C	Толщина, см	CF, RB	FC, LMM, G, L, G, RB
0			17	-0.2	
10	-2	10	17	-0.2	
15	-6	14	17	-0.2	
20	-6	14	17	-0.2	
30	-6	14	17	-0.2	
40	-6	14	17	-0.2	
50	-6	14	17	-0.2	
70	-6	14	17	-0.2	

материалы защиты - алюминий					
Нейтронный спектр			Доза нейтронов		
Толщина, см	CF, RB	FC, L, LMM, G, L, G, RB	Толщина, см	CF, RB	FC, LMM, G, L, G, RB
10	1.4		10	1.4	
15	1.4		15	1.4	
20	4.4		20	4.4	6.4

материалы защиты - полиэтилен					
Нейтронный спектр			Доза нейтронов		
Толщина, см	CF, CH2	FC, L, LMM, G, L, G, RB	Толщина, см	CF, CH2	CONS [лучен. M]
20	0.2		15	0.2	1.0
			15	0.2	1.0
			20	0.0	10.0

материалы защиты - вода					
Поток фотонов			Доза фотонов		
Толщина, см	CF, H2O	FC, H2O	Толщина, см	CF, H2O	SNP, CASK
13.3	+17	+1.8	13.3	-24	-2.1
			15	+18	+1.8

материалы защиты - железо, сталь					
Поток фотонов			Доза фотонов		
Толщина, см	AL, CF, FE, E=1 MeB	CONS	AL, CF, FE	SNP, CASK	FC, AM, Zmax
14			4.00	-5.7	-2.7
			5	-2.7	
			7.00	-11.0	-6.5
			9.00	-13.3	-8.0
			11.7		
			14	-11	+1.5
			15	2.7	
			20	19.5	
			25	14.4	
			30	12.5	
			37	-11	+1.5

материалы защиты - полиэтилен					
Поток фотонов			Доза фотонов		
Толщина, см	CF, CH2	FC, CH2	Толщина, см	CF, CH2	FC, AM, Zmax
20	-10	-10	4.00	-2.91	-2.55
			5.0	-3.00	-2.82
			6.00	-4.00	-2.93
			10	-3.5	
			20.7	-13	+0.1

материалы защиты - алюминий					
Поток фотонов			Доза фотонов		
Толщина, см	AL, CF, RB, E=1 MeB	FC, L, LMM, G, L, G, RB	Толщина, см	SNP, CASK	FC, AM, Zmax
0			1.3	-2.7	-2.97
5			1.63	-1.8	-2.1
9			1.63	-1.1	-1.6
15			1.63	-1.1	-1.6
20			1.63	-1.1	-1.6
30			1.63	-1.1	-1.6
40			1.63	-1.1	-1.6
50			1.63	-1.1	-1.6
70			1.63	-1.1	-1.6
100			1.63	-1.1	-1.6
150			1.63	-1.1	-1.6
20	-40		1.63	-1.1	-1.6

Воздух					
Доза нейтронов			Доза фотонов		
От -10 ¹ до +10			От -10 ¹ до +21		

\mathcal{E} - на расстоянии от режора 800 м

Фрагмент паспорта приведен на слайде.

Заключение

Экспертиза и аттестация ПС TDMCC проводилась в соответствии с требованиями руководящих документов Ростехнадзора РД-03-33-2008 и РД-03-34-2000.

К настоящему моменту получены положительные заключения экспертов и рекомендация секции № 1 «Нейтронно-физические расчеты» экспертного Совета по аттестации программных средств при Ростехнадзоре об утверждении результатов экспертизы.

Ожидается решение экспертного Совета по аттестации программных средств при Ростехнадзоре.

Авторы выражают благодарность:

АО «Атомэнергопроект» – за материальную поддержку и за проведение верификационных расчетов, ИБРАЭ РАН – за консультации, за помощь в подборе и поиске расчетных тестов, АО ОКБ Гидропресс – за помощь в подборе и поиске расчетных тестов, экспертам – за ценные замечания и экспертизу верификационных материалов

Литература

1. Свид-во о госрегистрации № 2010614412. РФ. Программа TDMCC (Time Dependent Monte Carlo Code) / Житник А. К., Рослов В. И., Семенова Т. В. и др.; ФГУП «РФЯЦ ВНИИЭФ».
2. Briesmeister J. F.: MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code. Version 4C. LA-12625-M, Los Alamos National Laboratory. 2000.
3. Гомин Е. А. Статус MCU-4 // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов. – 2006. – Вып. 1. – С. 6-32.
4. Kobayashi K., Sugimura N., Nagaya Ya. 3-D radiation transport benchmark problems and results for simple geometries with void regions // OECD/NEA. November. 2000.
5. International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments, NEA/NCS/DOC(95)3 September 2010 Edition, 2010. [Electronic resource].
6. Rsicc Data Library Collection SINBAD-2010.5 // Radiation Safety Information Center. OECD/NEA, ORNL. [Electronic resource].
7. Иванов В. И., Константинов И. Е., Машкович В. П. Сборник задач по дозиметрии и защите от ионизирующих излучений. – М.: Атомиздат, 1964.
8. Гусев Н.Г. Справочник по радиоактивным излучениям и защите. – М.: Медгиз, 1956.

VERIFICATION OF THE TDMCC CODE AS APPLIED TO COMPUTATIONS OF RADIATION PROTECTION AGAINST GIVEN NEUTRON AND GAMMA SOURCES

*T. V. Semenova, A. K. Zhitnik, E. V. Artemieva, N. A. Volkov, K. S. Lomteva,
O. N. Shukaeva*

Russian Federal Nuclear Center –
All-Russian Research Institute of Experimental Physics, Sarov

The paper reports the verification results for the TDMCC code, which serves for Monte Carlo simulations of neutron and gamma transport in three-dimensional systems. The verification was performed in order to validate radiation protection computations for given sources of neutron and gamma radiation.

Different tests and experiments were considered, based on which a verification matrix was developed. Results of the TDMCC test and benchmark computations were compared with experimental data and computations by other codes. Computational errors for neutron and gamma radiation fluences and dose rates behind walls from different materials were estimated.

Key words: code verification, verification matrix, radiation safety, benchmark experiment, computational error, particle fluence, dose rate, Monte Carlo method.