

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕНОСА НЕЙТРОНОВ НИЗКИХ ЭНЕРГИЙ В ПРОГРАММЕ ПРИЗМА

Д. Г. Модестов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ», г. Снежинск

Работа посвящена описанию моделей переноса низкоэнергетических нейтронов, используемых в программе ПРИЗМА. Приводятся результаты некоторых расчетов, предназначенных для проверки выполнимости основных физических принципов и для сравнения с экспериментом. Также проводится сравнение с программой MCNP.

Ключевые слова: методы статистического моделирования, методы Монте-Карло, перенос нейтронов, сечение рассеяния, оцененные ядерные данные, ядерные реакторы.

SIMULATION OF LOW-ENERGY NEUTRON TRANSPORT IN THE PRIZMA CODE / D. G. MODESTOV //

The paper describes models which are used to simulate the transport of low-energy neutrons in PRIZMA, and calculations which were done to verify the basic physical principles and compare calculated results with experiment. Comparison with MCNP calculations is also provided.

Key words: methods of statistical modeling, Monte-Carlo method, neutron transfer, scatter cross-section, evaluated nuclear data, nuclear reactors.

Введение

Программа ПРИЗМА, краткое описание возможностей которой приведено в [1], предназначена для решения задач переноса частиц различной природы, в том числе и нейтронов, методом статистического моделирования. Достоинством данного метода является возможность проводить расчеты с использованием минимальных приближений, что, в свою очередь, требует построения как можно более точных моделей взаимодействия частиц с веществом. Одной из этих моделей, имеющих большое значение при расчете тепловых реакторов, является модель взаимодействий низкоэнергетических нейтронов, описанию которой посвящена настоящая работа.

Однако прежде всего необходимо отметить, в программе ПРИЗМА температура среды является функцией координат, что должно учитываться при моделировании. Кроме того, следует определить объекты, которые используются в этой программе для описания реакций частиц. Это два обязательных: интегральное сечение в табличном представлении и процедура выборки параметров

вторичных частиц; один необязательный – функция вычисления весового множителя и выборки значения энергии в зависимости от направления движения вторичной частицы. Отсутствие последнего объекта не влияет на аналоговое моделирование, но делает проблематичным использование весовых методов, применяемых для уменьшения дисперсии функционалов, связанных с детекторами малых размеров. Для всех типов угловых распределений нейтральных вторичных частиц, образующихся при взаимодействии нейтронов с неподвижным атомом, представляемых в формате ENDF [2], указанные функции реализованы. Соответственно, в задачах, где атомы можно считать неподвижными, имеется возможность применения методов понижения дисперсии. Это не всегда допустимо в тех случаях, когда необходим учет движения структурных элементов среды. Также следует отметить, что используемый в настоящее время алгоритм выборки угла вылета вторичной частицы предполагает существование плотности распределения вектора направления и потому не может быть использован для точечных распределений.

Общая схема

Для описания взаимодействий низкоэнергетических нейтронов в программе ПРИЗМА реализованы две модели. Наиболее простая из них основана на приближении максвелловского одноатомного идеального газа. Для моделирования переноса в ней используется метод «мажорирующего сечения», описанный в работе [3], с возможностью расчета в двух приближениях. Первое из них, заключающееся в отсутствии дополнительных приближений, не позволяет использовать методы уменьшения дисперсии при выборке параметров вторичных частиц на неупругих реакциях. Второе отличается тем, что при моделировании этих реакций атомы среды считаются покоящимися в лабораторной системе отсчета. Учитывая, что характерные энергии таких реакций намного превосходят энергию медленных нейтронов и температуру среды, это приближение можно считать не слишком грубым. В то же время оно дает возможность использовать методы понижения дисперсии, вычисляя весовой множитель для неупругих реакций в приближении покоящегося атома. Для упругого рассеяния весовой множитель рассчитывается в рамках любого приближения по методике, описанной в [4].

Другой моделью является модель учета химической связи в веществе. В настоящее время эта модель базируется на данных, представленных в формате FILE 7 ENDF [2]. В этом представлении влияние межатомных взаимодействий учитывается только в приложении к низкоэнергетической части упругого рассеяния нейтронов на свободных атомах. В формализме, используемом ENDF, эта часть определяется максимальной энергией ($E \leq E_{\max}$) и интервалом температур ($T \in [T_{\min}, T_{\max}]$) и рассматривается как комбинация упругого и неупругого рассеяния на всем веществе. Причем неупругое рассеяние обычно рассматривается в некогерентном приближении, а упругое, если его учет необходим, считается либо полностью когерентным, либо полностью некогерентным.

В соответствии с данными формата ENDF модель учета химической связи строится следующим образом: на диаграмме энергия–температура выделяется прямоугольник $E \leq E_{\max}$ и $T \leq T_{\max}$. Взаимодействия нейтронов вне прямоугольника описываются аналогично модели идеального газа. То же самое делается и для неупругих ядерных реакций внутри прямоугольника. А в качестве уп-

ругого рассеяния в этом прямоугольнике рассматриваются реакции, заданные в FILE 7 ENDF. Причем в случае $T < T_{\min}$ модель строится как при $T = T_{\min}$. Последнее приближение в общем случае является спорным. Оно оправдано при отсутствии фазовых переходов и тогда, когда тепловые колебания при $T = T_{\min}$ сравнимы с «нулевыми». Но оно необходимо для построения замкнутой модели и исходит из предположения полноты данных в библиотеке. Определение физичности используемого приближения полностью ложится на оператора. Впрочем, это же замечание касается и области $T > T_{\max}$, для которой модель может быть нефизичной по другим причинам.

Учитывая, что температура среды представляется функцией координат, как это было отмечено выше, в качестве интегрального сечения для этих реакций используется максимальное сечение по всем температурам в системе с добавлением реакции δ -рассеяния, зависящей от температуры. Далее рассматривается построение объектов, необходимых для программы ПРИЗМА. Будем использовать следующие обозначения: E_0 – энергия первичного нейтрона, E – энергия вторичного нейтрона, μ – косинус угла рассеяния, T – температура среды.

Когерентное упругое рассеяние

Этот тип рассеяния связан с интерференцией нейтронных волн, отраженных от кристаллических плоскостей. И, соответственно, оно характерно только для веществ, находящихся в кристаллическом состоянии. Особенности этого рассеяния описаны в [5] и [6]. Для моделирования переноса существенны два его свойства, которые связаны с необходимостью выполнения условия Брэгга – Вульфа. Во-первых, это условие приводит к тому, что рассеяние, при определенной энергии, может происходить только в дискретный набор углов. Во-вторых, его следствием является существование минимальной энергии нейтрона, определяемой из условия равенства длины волны удвоенному максимальному межплоскостному расстоянию, ниже которой рассеяния не происходит. Дифференциальное сечение когерентного упругого рассеяния в формате ENDF [2] можно представить в следующем виде:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial E \partial \mu} (E_0 \rightarrow E, \mu | T) =$$

$$= \frac{\delta(E - E_0)}{E_0} \sum_{i/E_i < E_0} \tilde{s}_i(T) \delta(\mu - \mu_i), \quad (1)$$

где E_i – брегговские энергии, $\tilde{s}_i(T)$ – соответствующие им структурные факторы, $\mu_i = 1 - \frac{2E_i}{E_0}$ – соответствующие косинусы углов рассеяния. Формат ENDF требует задания набора брегговских энергий E_i и соответствующих им величин $S_i(T)$, представляющих сумму структурных факторов $S_i(T) = \sum_{k=1}^i \tilde{s}_k(T)$. Выражение (1) легко интегрируется и дает зависимость сечения от энергии и температуры

$$\sigma(E_0 | T) = \frac{S_i(T)}{E_0}, \quad \text{где } i/E_0 \in [E_i, E_{i+1}). \quad (2)$$

Выборка косинуса угла рассеяния производится из дискретного распределения, получаемого из (1):

$$P(\mu = \mu_k | E_0, T) = \frac{\tilde{s}_k(T)}{S_i(T)}, \quad k \leq i,$$

где структурный фактор, стоящий в числителе, вычисляется следующим образом:

$$\tilde{s}_k(T) = \begin{cases} S_1(T) & , \quad k=1 \\ S_k(T) - S_{k-1}(T) & , \quad k>1 \end{cases}$$

а i – то же самое, что было определено при вычислении сечения (2). С учетом того, что рассеяние происходит на дискретные углы, процедура вычисления весового множителя в настоящее время не реализована.

Некогерентное упругое рассеяние

Дифференциальное сечение данной реакции, согласно [2], представляется в следующем виде:

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial E \partial \mu}(E_0 \rightarrow E, \mu | T) = \frac{\sigma_b}{2} e^{-2EW(T)(1-\mu)} \delta(E_0 - E), \quad (3)$$

где σ_b – сечение связанного атома, а $W(T)$ – функция, пропорциональная фактору Дебая – Валлера. Интегрированием выражения (1) по всей области изменений переменных E и μ легко получается интегральное сечение

$$\sigma(E_0 | T) = \sigma_b \frac{1 - e^{-4E_0W(T)}}{4E_0W(T)}.$$

С учетом того, что функция $\frac{1 - e^{-x}}{x}$ является всюду убывающей, максимальное по температуре значение сечения находится в точке минимума $W(T)$. Исходя из физического смысла параметров модели [5, 6], можно сделать вывод, что σ_b имеет смысл интегрального сечения рассеяния на «замороженной» решетке, т. е. решетке, состоящей из неподвижных атомов, находящихся в положении равновесия. Фактор Дебая – Валлера вносит поправку на колебания решетки. При этом сам фактор пропорционален среднему квадрату смещения атома от равновесного положения. При $T < T_{\min}$, в соответствии с предположением полноты, используемой при построении модели в программе ПРИЗМА, считается, что значение $W(T_{\min})$ полностью определяется неидеальностью решетки и наличием «нулевых» колебаний, соответственно, в этом случае $W(T) = \text{const}$.

Согласно (3) единственным разыгрываемым параметром вторичной частицы является косинус угла рассеяния, который определяется по формуле

$$\mu = 1 + \frac{\ln(1 - \zeta(1 - e^{-4x}))}{2x},$$

где $x = E_0W(T)$, а ζ – случайное число, равномерно распределенное на интервале $(0,1)$. А в качестве весового множителя используется плотность функции распределения косинуса угла рассеяния, которая имеет вид

$$w = \frac{2E_0W(T)}{1 - e^{-4E_0W(T)}} e^{-2EW(T)(1-\mu)}.$$

Энергия при этом не меняется.

Некогерентное неупругое рассеяние

Наверное, не вызывает сомнения, что данная реакция является наиболее важной при описании нейтронных взаимодействий с учетом химической связи в веществе. Дифференциальное сечение в этом случае представляется как сумма сечений рассеяния на атомах вещества. При реализации в программе ПРИЗМА рассеяние на каждом атоме

моделируется независимо, поэтому удобнее всего рассмотреть реализацию этой реакции на отдельном атоме. В формате ENDF [2] ее дифференциальное сечение имеет вид

$$\frac{\partial^2 \sigma}{\partial E \partial \mu}(E_0 \rightarrow E, \mu | T) = \frac{\sigma_b}{2T} \sqrt{\frac{E}{E_0}} e^{-\frac{\beta}{2}} S(\alpha, \beta, T), \quad (4)$$

где σ_b – сечение связанного атома, A – атомный вес, $\alpha = \frac{E_0 + E - 2\mu\sqrt{E_0 E}}{A \cdot T}$ – квадрат приведенного

переданного импульса, $\beta = \frac{E - E_0}{T}$ – приведенная

переданная энергия, а $S(\alpha, \beta, T)$ – закон рассеяния, который является уникальным для каждого соединения. Формат ENDF предлагает 4 различных приближения для представления закона рассеяния: 3 аналитических (приближение максвелловского одноатомного идеального газа, диффузионное приближение, приближение мгновенного столкновения, short-collision-time) и одно табличное, которое, впрочем, включает приближение мгновенного столкновения для описания асимптотического поведения закона рассеяния. В программе ПРИЗМА для приближения идеального газа используется вышеописанная модель, основанная на алгоритмах, приведенных в работах [3] и [4]. Диффузионное приближение не реализовано, так как оно отсутствует в доступных библиотеках. Для приближения мгновенного столкновения используется несколько иное представление закона рассеяния, чем в руководстве [2], явный вид которого и его обоснование приводятся в [7]. Основные алгоритмы моделирования взаимодействий нейтронов в этом представлении описаны в работе [8]. Кроме того, в [8] приведены основные формулы для вычисления интегрального сечения в табличном представлении.

Здесь следует остановиться на вычислении весового множителя. При его вычислении в качестве энергии вторичного нейтрона используется энергия, полученная при аналоговой выборке. Соответственно, в качестве весового множителя выступает условная, при этой энергии, плотность функции распределения косинуса угла рассеяния. То есть для весового множителя используется следующее представление:

$$w(E_0, E, \mu, T) = \frac{\frac{\partial^2 \sigma}{\partial E \partial \mu}(E_0 \rightarrow E, \mu | T)}{\int_{-1}^1 d\mu \cdot \frac{\partial^2 \sigma}{\partial E \partial \mu}(E_0 \rightarrow E, \mu | T)}. \quad (5)$$

Для его вычисления удобно представить интегральное сечение так, как это сделано в работе [8]:

$$\sigma(E_0 | T) = \sigma_b \frac{A_n T}{4E_0} \int_{-\varepsilon}^{\infty} d\beta e^{-\frac{\beta}{2}} G(\beta, E_0, T), \quad (6)$$

где, в соответствии с (4), $\varepsilon = \frac{E_0}{T}$, $\alpha^{\pm} =$

$$= \frac{(\sqrt{\varepsilon + \beta} \pm \sqrt{\varepsilon})^2}{A} \text{ и}$$

$$G(\beta, E_0, T) = \int_{\alpha^-}^{\alpha^+} d\alpha S(\alpha, \beta, T). \quad (7)$$

Используя эти обозначения и принимая во внимание явный вид якобиана преобразования

$$\frac{\partial(E, \mu)}{\partial(\alpha, \beta)} = \frac{AT^2}{2\sqrt{E_0 E}}, \quad \text{выражение (5) приводим}$$

к виду

$$w(E_0, E, \mu, T) = \frac{2\sqrt{E_0 E}}{AT} \frac{S(\alpha, \beta, T)}{G(\beta, E_0, T)},$$

который и используется в программе ПРИЗМА.

Таким образом, для построения полной картины моделирования взаимодействий низкоэнергетических нейтронов остается описать выборку параметров рассеяния в случае табличного представления. Необходимая для построения этой выборки плотность функции распределения представляется, как и в [8], в виде произведения одномерных плотностей

$$f(\alpha, \beta) = f_{\beta}(\beta) f_{\alpha}(\alpha | \beta), \quad (8)$$

где с использованием (7) обозначено:

$$f_{\beta}(\beta) \sim e^{-\frac{\beta}{2}} G(\beta, E_0, T), \quad (9)$$

$$f_{\alpha}(\alpha | \beta) \sim S(\alpha, \beta, T). \quad (10)$$

Сам закон рассеяния в табличном представлении удобно записать следующим образом:

$$S(\alpha, \beta, T) = \begin{cases} S^T(\alpha, \beta, T), & (\alpha, \beta) \in [0, \alpha_{\max}] \times [\beta_{\min}, \beta_{\max}] \\ S^{SCT}(\alpha, \beta, T), & (\alpha, \beta) \notin [0, \alpha_{\max}] \times [\beta_{\min}, \beta_{\max}] \end{cases}, \quad (11)$$

где $S^T(\alpha, \beta, T)$ – некоторая двумерная табличная функция, а для граничных значений, которые в общем случае могут зависеть от температуры,

выполняются следующие условия: $\beta_{\min} < 0$, $\beta_{\max} > 0$, $\alpha_{\max} > 0$. Учитывая громоздкость (11), процедура выборки имеет такой же громоздкий вид. Поэтому она будет описана без излишних подробностей. Для ее построения в соответствии с (9) и (11) на этапе подготовки рассчитываются зависящие от E_0 и T вероятности того, что значение переданной энергии находится слева (P_-), внутри (P_0) и справа (P_+) относительно интервала $[\beta_{\min}, \beta_{\max}]$. Опуская нормировочный множитель, эти вероятности, в зависимости от ε , можно представить в следующем виде:

$$\varepsilon \leq -\beta_{\min} :$$

$$P_- \sim 0, \quad P_0 \sim I^T(-\varepsilon, \beta_{\max}, E_0, T),$$

$$P_+ \sim I_+^{SCT}(\beta_{\max}, E_0, T);$$

$$\varepsilon > -\beta_{\min} :$$

$$P_- \sim I_-^{SCT}(\beta_{\min}, E_0, T),$$

$$P_0 \sim I^T(\beta_{\min}, \beta_{\max}, E_0, T), \quad P_+ \sim I_+^{SCT}(\beta_{\max}, E_0, T).$$

Достаточно громоздкие выражения для I_{\pm}^{SCT} и I^T , являющиеся значениями интегралов вида $\int_{\beta_-}^{\beta_+} d\beta \cdot e^{-\frac{\beta}{2}} G(\beta, E_0, T)$, приведены в работе [8]. На

этапе моделирования по этим вероятностям определяется интервал, на котором находится β . В том случае, если этот интервал находится вне $[\beta_{\min}, \beta_{\max}]$, то параметры рассеяния (α , β) выбираются по алгоритмам, описанным в [8], для закона рассеяния в представлении мгновенного взаимодействия. В противном случае, согласно (9), производится выборка переданной энергии из произведения экспоненты на табличную функцию. Выборка второго параметра рассеяния α в этом случае, согласно (10) и (11), строится аналогично. То есть вычисляются вероятности попадания этого параметра в табличную область и область SCT -представления. В соответствии с вычисленными вероятностями выбирается интервал и производится розыгрыш значения α либо из табличного распределения, если $\alpha \leq \alpha_{\max}$, либо по алгоритмам, приведенным в [8], если $\alpha > \alpha_{\max}$. Здесь следует отметить, для наибольшей эффективности в табличном представлении используется линейно-линейная интерполяция, что требует перестройки сеток на этапе расчета начальных данных.

Построенная таким образом модель переноса низкоэнергетических нейтронов содержит ряд приближений, связанных как с представлением данных, так и с физической моделью. Поэтому требуется проверка, результаты которой представлены ниже.

Принцип детального равновесия

Как известно (см., например [9]), при достаточно общих предположениях, спектр нейтронов, находящихся в тепловом равновесии с веществом, с которым они взаимодействуют только упруго, является максвелловским, что, в свою очередь, является следствием выполнимости принципа детального равновесия. Можно также показать, что в том случае, когда присутствует и чистое поглощение, сечение которого обратно пропорционально скорости нейтрона, интегральный по времени и пространству поток нейтронов от максвелловского источника в бесконечной среде имеет энергетическое распределение:

$$f(E) = \frac{E}{T^2} e^{-\frac{E}{T}}. \quad (12)$$

Отклонение от него расчетного спектра может служить некоторым критерием нефизичности используемой модели.

В качестве вещества, с достаточно хорошей точностью удовлетворяющего указанным выше требованиям, может служить легкая вода, описание свойств которой к тому же важно и при расчете тепловых реакторов. Для проверки выполнимости принципа детального равновесия при моделировании взаимодействий нейтронов в воде было рассмотрено решение стационарного уравнения переноса с максвелловским источником в бесконечной среде с комнатной температурой 293,6 К (0,02530051611 эВ). В качестве результатов рассматривался относительный интегральный поток нейтронов, попадающий в десять равновероятных, с плотностью (12), энергетических интервалов. В качестве проверяемых моделей, кроме реализованных в программе ПРИЗМА моделей идеального газа и химической связи, рассматривались их аналоги из программы MCNP [10], а также модель для программы ПРИЗМА, основанная на преобразовании представления нейтронных данных через закон рассеяния в представление в виде интегрального сечения и энерго-углового распределе-

ния посредством программы NJOY [11]. При этом использовалась библиотека оцененных ядерных данных ENDF/B-VI, рекомендованная МАГАТЭ [12]. Результаты, имеющие относительную статистическую погрешность не более 10^{-4} , представлены в табл. 1. Как можно видеть из этой таблицы, идеальноегазовая модель программы ПРИЗМА дает результаты, совпадающие с теорией с точностью до статистики. Из этого, в частности, можно сделать вывод, что влияние отклонения сечения поглощения от закона обратных скоростей в рассматриваемой задаче пренебрежимо мало. У аналогичной модели MCNP согласие несколько хуже, а относительное отклонение достигает $2,5 \times 10^{-3}$, что, вероятно, обусловлено использованием дополнительных приближений при реализации данной модели. Чуть поменьше отличие, 2×10^{-3} , наблюдается для модели учета химической связи, реализованной в программе ПРИЗМА. Здесь отличие от теории связано с погрешностями таблично-го представления. При этом модель, построенная на данных, полученных с помощью программы NJOY, дает на порядок большую погрешность, $\sim 3 \times 10^{-2}$. И примерно такую же, $1,7 \times 10^{-2}$, дает мо-

дель учета химической связи, реализованная в MCNP, что, вероятно, определяется использованием NJOY при подготовке данных для MCNP.

Дополнительно к распределенным результатам в нижней строке табл. 1 приводится интегральное отклонение выборочной плотности от теоретической, вычисленное по формуле

$$\Delta f = \int_0^{\infty} dE \cdot |f(E) - \tilde{f}(E)|,$$

где $f(E)$ определено выражением (12), а $\tilde{f}(E)$ представляется в виде

$$\tilde{f}(E) = p(E) \cdot e^{-\frac{E}{T}},$$

с полиномом четвертой степени $p(E)$, который оценивался по методике, описанной в [13]. При этом результаты приводятся только для программы ПРИЗМА, так как в MCNP подобная оценка отсутствует. Сами оцененные полиномы для разных моделей приведены в табл. 2.

Таблица 1

Распределение потока нейтронов в воде при температуре 293,6 К по различным энергетическим интервалам

№	ПРИЗМА, идеальный газ	ПРИЗМА, хим. связь	ПРИЗМА, NJOY	MCNP, идеальный газ	MCNP, хим. связь
1	0,099999	0,099802	0,100438	0,09985	0,09967
2	0,100001	0,099961	0,100253	0,09988	0,09893
3	0,099999	0,099983	0,099867	0,09991	0,10059
4	0,100001	0,100000	0,099951	0,09993	0,10038
5	0,100001	0,100017	0,100504	0,09995	0,09994
6	0,099999	0,100027	0,100935	0,09998	0,09979
7	0,099998	0,100033	0,097154	0,10001	0,09831
8	0,100000	0,100037	0,100682	0,10006	0,09916
9	0,100000	0,100053	0,099972	0,10011	0,10176
10	0,099999	0,100086	0,100242	0,10025	0,10142
Δf	9×10^{-6}	5×10^{-4}	2×10^{-3}	–	–

Таблица 2

Полиномиальная часть оценки плотности функции распределения потока нейтронов в воде при температуре 293,6 К

Приближение	Зависимость функции распределения
Модель	$p(E)$
Теория	$1562,216566 \cdot E$
Идеальный газ	$0,000558112 + 1562,12 \cdot E + 3,54553 \cdot E^2 - 35,8491 \cdot E^3 + 103,354 \cdot E^4$
Хим. связь	$-0,0250413 + 1563,06 \cdot E - 2,5592 \cdot E^2 + 85,6085 \cdot E^3 - 216,382 \cdot E^4$
NJOY	$0,0835083 + 1559,65 \cdot E - 127,715 \cdot E^2 + 1766,3 \cdot E^3 - 2955 \cdot E^4$

Значения Δf , приведенные в табл. 1, подтверждающее сделанное выше утверждение о выполнимости принципа детального равновесия для газовой модели, несколько уменьшают различие между моделями, описывающими химическую связь в программах ПРИЗМА и NJOY. Однако это различие все равно остается существенным.

Сравнение с экспериментом

Кроме выполнимости основных физических принципов, важным критерием адекватности модели является воспроизведение экспериментальных данных. Для проведения сравнений с этими данными всюду при расчетах использовалась библиотека ENDF/B-VII, рекомендованная МАГАТЭ [12]. Экспериментальные данные, кроме оригинальных работ, можно найти в библиотеке EXFOR, ссылки на которую также имеются на сайте МАГАТЭ [12]. Если существуют оценки экспериментальных погрешностей, то при сравнении на графиках приводятся значения в трех средних квадратичных отклонениях.

Одним из важных замедлителей, используемых в ядерных реакторах, является легкая вода. Сравнение интегральных сечений для разных температур, используемых в программе ПРИЗМА и полученных в экспериментах, приводится на рис. 1 и 2. Согласие представляется достаточно хорошим для расчета реакторных задач. Также для этого вещества на рис. 3 и 4 приводятся распределения косинуса угла рассеяния, полученные

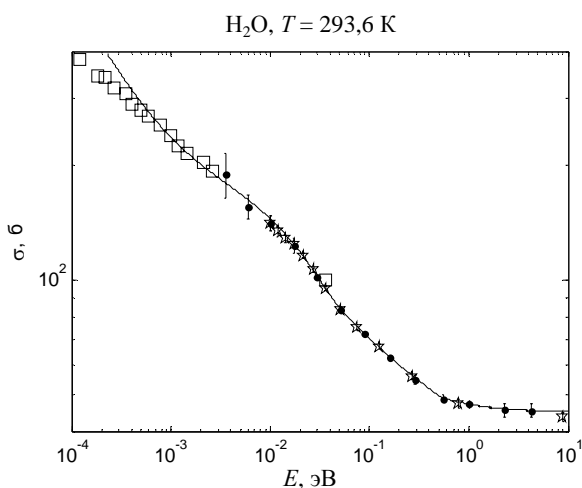


Рис. 1. Интегральное сечение рассеяния в легкой воде при комнатной температуре (— — расчет по алгоритмам [8], \square — экспериментальные данные из [14], \bullet — экспериментальные данные из [15], \star — экспериментальные данные из [16])

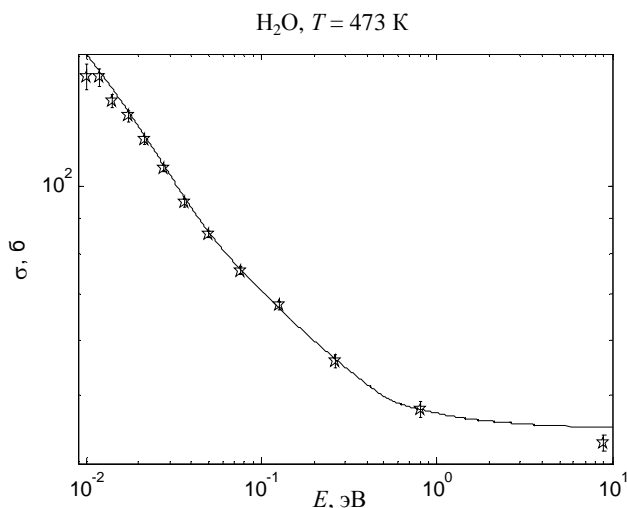


Рис. 2. Интегральное сечение рассеяния в легкой воде при температуре 473 К (— — расчет по алгоритмам [8], \star — экспериментальные данные из [16])

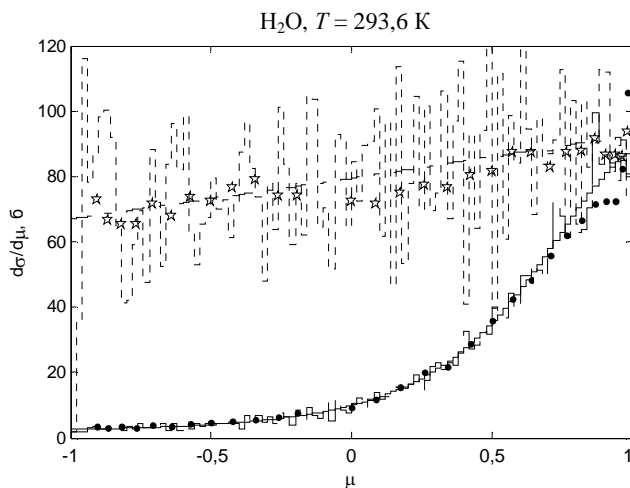


Рис. 3. Дифференциальное, по косинусу угла рассеяния, сечение в легкой воде при комнатной температуре (\star — экспериментальные данные из [17] для $E_0 = 0,0063$ эВ, $- \cdot -$ — расчет по алгоритмам из настоящей работы для $E_0 = 0,0063$ эВ, $- - -$ — расчет с использованием NJOY для $E_0 = 0,0063$ эВ, \bullet — экспериментальные данные из [17] для $E_0 = 2,2$ эВ, $- - -$ — расчет по алгоритмам из настоящей работы для $E_0 = 2,2$ эВ, $- \cdot -$ — расчет с использованием NJOY для $E_0 = 2,2$ эВ)

аналогично. Согласие тоже представляется приемлемым. Кроме того, на рис. 3 показано дифференциальное сечение, оцененное с помощью программы ПРИЗМА по данным, полученным по программе NJOY [11]. Видно, что при низких энергиях получается нефизичная «гребенка», которая определяется представлением выходных данных NJOY. При увеличении энергии амплитуда колебаний уменьшается. Здесь можно высказать пред-

Сравнение с программой MCNP

положение, что сильное рассогласование с принципом детального равновесия для программ NJOY и MCNP связано именно с этой нефизичностью углового распределения.

Еще более важным соединением, используемым в реакторах, является топливо, в частности, двуокись урана. Сравнение интегрального сечения используемого в программе ПРИЗМА, с экспериментальными данными для этого вещества приведено на рис. 5. Также видно неплохое согласие.

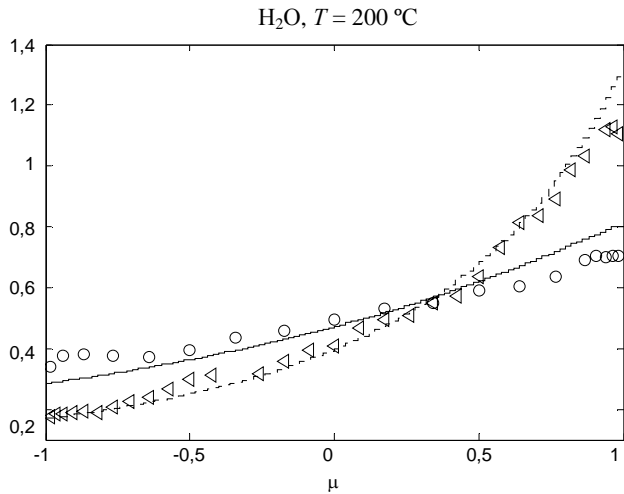


Рис. 4. Плотность распределения косинуса угла рассеяния в легкой воде при температуре $200\text{ }^\circ\text{C}$ (o – экспериментальные данные из [18] для $E_0 = 0,0225\text{ эВ}$, ∇ – экспериментальные данные из [18] для $E_0 = 0,105\text{ эВ}$, — – расчет по алгоритмам из настоящей работы для $E_0 = 0,0225\text{ эВ}$, - - - – расчет по алгоритмам из настоящей работы для $E_0 = 0,105\text{ эВ}$)

Программа MCNP [10] является, наверное, наиболее широко используемой в мире среди программ, предназначенных для решения задач переноса нейтронов методами статистического моделирования. Соответственно, сравнение результатов расчетов с аналогичными величинами, полученными по MCNP, представляется показательным для оценки возможностей программы. Для этого была решена модельная задача прохождения нейтронов, рождающихся от точечного моноэнергетического (1 эВ) источника, находящегося в центре водяного шара радиусом 5 см при комнатной температуре. В качестве результата рассматривался ток нейтронов через поверхность шара, распределенный на 100 энергетических интервалах. Сразу следует отметить, что в приближении идеального газа различие в результатах, полученных по программам ПРИЗМА и MCNP, несущественно и потому не приводится. Но при учете химической связи наблюдается расхождение, что можно видеть на рис. 6. Выбросы в спектре вылетевших нейтронов, рассчитанном по MCNP, которые можно видеть на этом рисунке, представляются нефизичными. Вероятно, причина их появления та же, что и нефизичность углового распределения, полученного с использованием программы NJOY (рис. 3). В то же время гладкий спектр, полученный по программе ПРИЗМА, представляется более реалистичным.

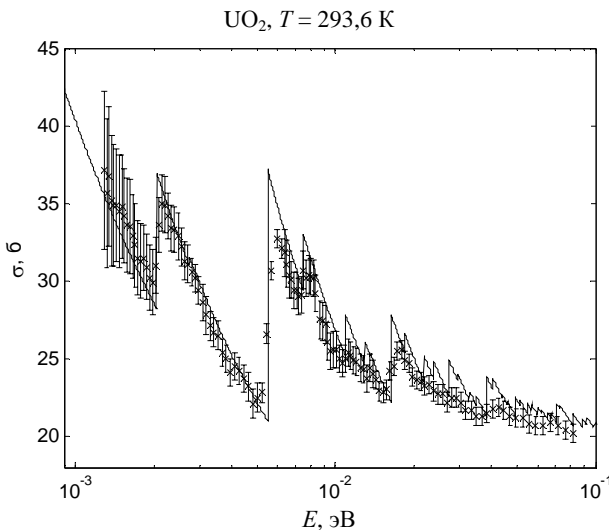


Рис. 5. Интегральное сечение рассеяния в двуокиси урана при комнатной температуре (— – расчет по алгоритмам [8], \times – экспериментальные данные из [19])

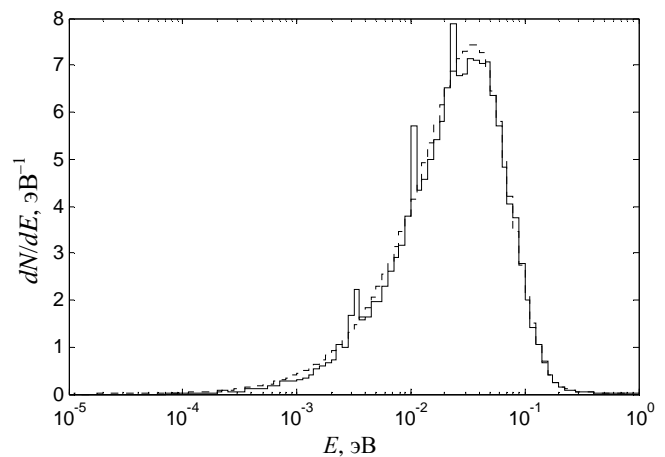


Рис. 6. Дифференциальный ток нейтронов через поверхность водяного шара, рассчитанный по программам ПРИЗМА (- - -) и MCNP (—) с учетом химической связи

Заключение

Реализованная в программе ПРИЗМА модель взаимодействий нейтронов низких энергий, с одной стороны, не противоречит рассмотренным экспериментальным данным, а с другой – удовлетворяет базовым физическим принципам, по крайней мере, не хуже MCNP, что, в частности, может служить некоторым обоснованием для использования этой модели при расчете реакторов на тепловых нейтронах. При этом дифференциальные характеристики нейтронного поля, полученные с помощью программы ПРИЗМА, выглядят более физичными, чем аналогичные величины, полученные по MCNP (см. рис. 3 и 6). Скорее всего, это связано с тем, что в программе MCNP, в отличие от алгоритма, представленного в настоящей работе, выборка параметров рассеянных частиц производится не из закона рассеяния, а из табличного энерго-углового распределения, полученного из этого закона, что, в свою очередь, приводит к дополнительным погрешностям представления.

Некоторым недостатком реализации модели переноса тепловых нейтронов в программе ПРИЗМА можно считать отсутствие процедуры вычисления весового множителя для когерентного упругого рассеяния, что связано с сингулярностью углового распределения этой реакции. Однако, учитывая, что данная реакция в большинстве прикладных задач не является ведущей, этот недостаток, не сильно теряя в эффективности, можно обойти с помощью более тяжелых методов типа расщепления и релетки.

Таблица 3

Расчет коэффициента размножения для ВВЭР-1000

Модель	$K_{эф}$	Время
Идеальный газ	1,0021	1
Хим. связь в H ₂ O	1,0017	1,14
Хим. связь в H ₂ O и UO ₂	1,0015	1,18

В заключение хотелось бы оценить влияние учета химической связи при расчете реакторных задач. Так в табл. 3 приведены значения коэффициента размножения, оцененные с использованием разных моделей, для состояния 2 реактора ВВЭР-1000, описанного в [1]. В третьей колонке этой таблицы приведено время расчета задачи (статистика везде одинакова), отнесенное ко времени расчета модели идеального газа. Как видим, влияние модели на результат в этой системе

сравнительно невелико. Но что представляется интересным, учет химической связи только в воде, что обычно считается достаточным при расчете ВВЭР, дает эффект всего в два раза больший, чем добавочный учет данной связи в топливе. При этом время расчета с использованием более точного приближения увеличивается незначительно.

Список литературы

1. Зацепин О. В., Кандиев Я. З., Кашаева Е. А., Малышкин Г. Н., Модестов Д. Г. Расчеты методом Монте-Карло по программе ПРИЗМА нейтронно-физических характеристик активной зоны реактора ВВЭР-1000 // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2011. Вып. 4. С. 64–73.
2. ENDF-102. Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files, ENDF-6. BNL-NCS-44945-01/04-Rev., Informal Report, Revised April 2001, N.Y., 11973-5000.
3. Огибин В. Н., Орлов А. И. Применение метода «мажорирующего сечения» для моделирования прохождения нейтронов в движущейся среде // ВАНТ. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики, 1984. Вып. 2(16). С. 6–9.
4. Модестов Д. Г. Вычисление функции плотности распределения нейтронов при упругом рассеянии // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов, 2010. Вып. 1. С. 55–58.
5. Гуревич И. И., Тарасов Л. В. Физика нейтронов низких энергий. – М.: НАУКА, 1965.
6. Игелстафф П. Рассеяние тепловых нейтронов. – М.: АТОМИЗДАТ, 1970.
7. Модестов Д. Г. К вопросу об описании рассеяния медленных нейтронов в формате ENDF // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов, 2008. Вып. 3. С. 47–54.
8. Модестов Д. Г. Использование приближения мгновенного столкновения для моделирования переноса медленных нейтронов // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов, 2008. Вып. 3. С. 55–67.
9. Белл Д., Глесстон С. Теория ядерных реакторов. – М.: Атомиздат, 1974.
10. X-5 Monte Carlo Team. MCNP – A General Monte Carlo N – Particle Code, Version 5. Los Alamos National Laboratory. LA-UR-03-1987. 2003.
11. MacFarlane R.E., Muir D.W. The NJOY Nuclear Data Processing System, version 9.1. Los Alamos National Laboratory, 1994.

12. IAEA Nuclear Data Centre, <http://www-nds.iaea.org>.

13. Модестов Д. Г., Хатунцев К. Е. Функциональные оценки в методах статистического моделирования // ВАИТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов, 2009. Вып. 3. С. 34–44.

14. K. Heinloth. SCATTERING OF SUBTHERMAL NEUTRONS BY H₂O, CH₂O₂ AND C₆H₆. Zeitschrift fuer Physik; 1961. Vol. 163, p. 218.

15. Russell Jr J. L., Neill J. M., Brown J. R. TOTAL CROSS SECTION MEASUREMENTS IN H₂O. General Atomic Div. Reports; 1966. N 7581.

16. Dritsa M., Kostikas A. TOTAL CROSS-SECTION OF WATER AT ROOM TEMPERATURE AND 200 DEG C. Report from misc. OECD Countries to EANDC; 1967. N 63.

17. Beyster J. R. NEUTRON SCATTERING FROM LIGHT WATER. Nuclear Science and Engineering; 1968. Vol. 31, p. 254.

18. Lemmel H. D. Bestimmung der Diffusionskonstanten D(E,T) und D_v(T) thermischer Neutronen in H₂O, Phenylen, ZrH_{1,92} und D₂O durch Messung der Streuwinkelverteilungen $\frac{4\pi}{\sigma} \frac{d\sigma}{d\Omega}$, Teil I: H₂O, Nukleonik 7, 265 (1965).

19. Rodriguez C., Vinhas L. A., Herdade S. B., Amaral L. Q. Total cross-section of UO(2) versus lambda and thermal absorption cross-section. Inst. de Energia Atomica, Sao Paulo, Reports; 1967. N 152, p. 91.

Контактная информация –

Модестов Дмитрий Геннадьевич,
РФЯЦ-ВНИИТФ,
тел.: 8-35-146-5-47-30,
e-mail: d.g.modestov@vniitf.ru

Статья поступила в редакцию 31.08.2012.

Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов, 2012, вып. 3, с. 60–69.