

ТОЧНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ ТЕПЛОВЫХ НЕЙТРОНОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ПО МОДЕЛИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА И ПРИБЛИЖЕНИЮ НАИКРАТЧАЙШЕГО ВРЕМЕНИ СТОЛКНОВЕНИЯ

П.А. Андросенко*, М.Р. Малков, Н.А. Соловьев****

**Обнинский государственный технический университет атомной энергетики,
г. Обнинск*

***ГНЦ РФ-Физико-энергетический институт, им. А.И. Лейпунского, г. Обнинск*



Описана методика точного моделирования рассеяния тепловых нейтронов по модели идеального газа и приближению наикратчайшего времени столкновения, реализованная в программном комплексе BRAND. Дается сравнение этого комплекса с программами MCNP и MCU. Приводится пример расчетной задачи на прохождение нейтронами барьера из O в H_2O . Результаты расчетов по BRAND и MCU практически полностью совпадают, а результаты MCNP отклоняются от них. Причина этих расхождений может заключаться в том, что BRAND выполняет расчеты в соответствии с рекомендованным стандартом ENDF-6, а алгоритмы NJOY и MCNP, по-видимому, скорректированы для лучшего совпадения с результатами benchmark-экспериментов.

ВВЕДЕНИЕ

На современном этапе развития ядерных энергетических установок (ЯЭУ) к ряду актуальных задач можно отнести повышение их безопасности, обеспечение надежности и решение проблем экологии. Повышение точности вычислительных расчетов нейтронно-физических характеристик ЯЭУ в большой степени помогает решению рассматриваемых задач. Оптимальное решение многих вопросов, связанных с проблемами переноса ионизирующих излучений, невозможно без знания подробных дифференциальных характеристик радиационных полей, порождаемых этими излучениями. Обеспечение необходимой точности при решении уравнения переноса возможно, как правило, лишь при подробном описании реальной трехмерной геометрии исследуемого объекта и при детальном учете информации о взаимодействии излучения с веществом, что наиболее корректно может быть выполнено в рамках метода Монте-Карло. Требования повышения точности выполняемых расчетов диктуют необходимость использования самой современной информации, которая содержится, как правило, в файлах оцененных ядерных данных (например, зарубежные библиотеки ENDF/B-6 [1], JENDL-3 [2], FENDL-2 [3], отечественная BROND-2 [4]). Наиболее корректно обработка и использование константных данных могут быть выполнены

© П.А. Андросенко, М.Р. Малков, Н.А. Соловьев, 2004

при использовании программных комплексов, основанных на методе Монте-Карло. Поэтому разработка монте-карловских программ, приспособленных к использованию библиотек оцененных данных, является актуальной и практически важной задачей.

Как известно, в ходе монте-карловских расчетов информация из библиотек оцененных данных используется обычно не напрямую, собственно из файлов, а после предварительной обработки, т.е. после процессинга, который осуществляется специализированными программами (например, американской программой NJOY [5]), и это происходит на стадии подготовки исходных данных для монте-карловских расчетов. Очевидно, что идея процессинга имеет как положительные, так и отрицательные моменты. К положительным сторонам можно отнести удобный формат представления переработанных данных и высокое быстродействие программ их использующих. Очевидным недостатком является тот момент, что процессинг привносит в результаты расчетов дополнительную, неопределимую погрешность, т.к. его погрешность не представляется возможным отделить от погрешности самих расчетных результатов. Последнее замечание обусловлено тем, что хотя подготовленные процессинговыми программами данные и не содержат дополнительной погрешности, тем не менее, при их использовании в ходе вычислений возникает необходимость использования различных методов, снижающих точность проводимых расчетов, например, таких как различные методы интерполяции. Поэтому несомненный интерес вызывает возможность интегрирования процессинга в алгоритмы монте-карловских программ.

До последнего времени в мире не существовало монте-карловских программ, которые имели бы в своем составе константный модуль (КМ), работающий со всей информацией напрямую из библиотек оцененных данных. В связи с чем одним из самых важных, ключевых направлений при разработке монте-карловского программного комплекса оказывается проектирование и реализация высокоточных и быстродействующих подпрограмм КМ, работающих с информацией из библиотек оцененных ядерных данных. В течение вот уже более чем двадцати последних лет в государственном научном центре РФ-Физико-энергетическом институте им. А.И. Лейпунского совместно с Обнинским университетом атомной энергетики разрабатывается монте-карловский программный комплекс BRAND [6]. Данный комплекс ориентирован на возможно точное решение уравнения переноса ионизирующих излучений. На сегодняшний день, разработанный константный модуль комплекса BRAND не имеет аналогов в мире и в этом смысле обладает несомненной новизной.

РАССЕЯНИЕ ПО МОДЕЛИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА И ПО ПРИБЛИЖЕНИЮ НАИКРАТЧАЙШЕГО ВРЕМЕНИ СТОЛКНОВЕНИЯ

Информация о рассеянии тепловых нейтронов содержится в файле 7 формата ENDF-6. Некогерентное неупругое рассеяние тепловых нейтронов представлено как

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}(E \rightarrow E', \mu, T) = \sum_{n=0}^{NS} \frac{M_n \sigma_{bn}}{4\pi kT} \sqrt{\frac{E'}{E}} e^{-\beta/2} S_n(\alpha, \beta, T),$$

где $(NS+1)$ типов атомов в молекуле или ячейке кристаллической решетки (т.е. для H_2O , $NS = 1$) и M_n – количество атомов типа n в молекуле или ячейке кристаллической решетки; T – температура замедлителя (К), E – энергия взаимодействующего нейтрона (эВ); E' – энергия вторичного нейтрона (эВ); β – изменение энергии,

$\beta = \frac{E' - E}{kT}$; α – изменение импульса, $\alpha = \frac{E + E' - 2\mu\sqrt{EE'}}{A_0 kT}$, σ_{bn} – сечение связанного

атома типа n , $\sigma_{bn} = \sigma_{fn} \left(\frac{A_n + 1}{A_n} \right)^2$; σ_{fn} – сечение рассеяния свободного атома типа n ;

k – постоянная Больцмана; μ – косинус угла рассеяния (в лабораторной системе); A_n – масса атома типа n (а.е.м.).

$S_n(\alpha, \beta, T)$ может быть представлена либо в виде таблицы с различными законами интерполяции, либо аналитически в виде модели идеального газа или приближения наикратчайшего времени столкновения. Например, в случае H_2O закон рассеяния для водорода представлен таблично, а для кислорода – аналитически в виде модели идеального газа, в случае BeO закон рассеяния для бериллия представлен таблично, а для кислорода – в виде приближения кратчайшего времени столкновения. Реализованные в BRAND'e алгоритмы для табличного случая и их верификация были представлены в [7]. В настоящей работе рассматриваются алгоритмы для модели идеального газа и приближения наикратчайшего времени столкновения.

$S_n(\alpha, \beta, T)$ для модели идеального газа имеет вид:

$$S(\alpha, \beta, T) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\alpha}} e^{-\frac{\alpha^2 + \beta^2}{4\alpha}}.$$

Этот же закон рассеяния в работе [8] записывается в других обозначениях:

$$\sigma(\mu, Z) d\mu dZ = \sigma_{fr} [1 + 1/A]^2 \pi^{-0.5} \chi^* \Phi(\mu, Z) \exp\{-[h(\mu, Z) \chi^*]^2\} d\mu dZ,$$

где $Z = v'/v$; v – скорость нейтрона до рассеяния; v' – скорость нейтрона после рассеяния; σ_{fr} – сечение рассеяния на свободном ядре.

$$c^* = v(A/(2kT))^{0.5}, \quad \Phi(\mu, Z) = Z^2 (1 - 2Z\mu + Z^2)^{-0.5}, \quad h(\mu, Z) = \frac{Z^2 (1 + \lambda) - 2\lambda Z\mu - (1 - \lambda)}{2(1 - 2Z\mu + Z^2)^{0.5}},$$

$$\lambda = m/A.$$

В последнем соотношении m – масса нейтрона.

Область $R(\mu, Z)$ возможных значений (μ, Z) : $-1 \leq \mu \leq 1$, $0 \leq Z < \infty$.

Для приближения наикратчайшего времени столкновения $S_n(\alpha, \beta, T)$ имеет вид

$$S^{scr}(\alpha, \beta, T) = \frac{e^{-\left(\frac{(\alpha - \beta)^2 T}{4\alpha T_{eff}(T)} + \frac{|\beta|}{2}\right)}}{\sqrt{4\pi\alpha \frac{T_{eff}(T)}{T}}},$$

где $T_{eff}(T)$ – эффективная температура.

АЛГОРИТМ MCNP МОДЕЛИРОВАНИЯ РАССЕЯНИЯ ПО МОДЕЛИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Реализованный в MCNP [9] алгоритм состоит в следующем. Сначала разыгрывается скорость движения ядра, на котором происходит рассеяние. Затем моделируется неупругое рассеяние в системе отсчета, в которой ядро неподвижно и скорость нейтрона после рассеяния пересчитывается на лабораторную систему. Для моделирования неупругого рассеяния MCNP использует набор равновероятных косинусов углов рассеяния, заранее подготовленный процессинговой программой (обычно NJOY) и хранящийся в библиотеке, т.е. для разыгрывания рассеяния по модели свободного газа MCNP использует процессинг.

ФАКТОРИЗАЦИЯ ПЛОТНОСТИ РАССЕЯНИЯ ДЛЯ ГАЗОВОЙ МОДЕЛИ

Главная идея [8] заключается в переходе к таким новым переменным p и q

$$\sigma(\mu, Z) d\mu dZ = \sigma[\mu(p, q), Z(p, q)] \frac{\partial(\mu, Z)}{\partial(p, q)} dp dq,$$

чтобы плотность распределения

$$\sigma(p, q) = P(p)Q(q)$$

факторизовалась в две одномерные плотности $P(p)$ и $Q(q)$.

Используя подстановку

$$p = (1 - 2Z\mu + Z^2)^{0.5}, \quad q = \chi^* \frac{\lambda(1 - 2Z\mu + Z^2) - 1 + Z^2}{2(1 - 2Z\mu + Z^2)^{0.5}},$$

которая дает якобиан

$$\frac{\partial(p, q)}{\partial(Z, \mu)} = \chi^* \frac{Z^2}{p^2}$$

в работе [8] получено выражение

$$\sigma(p, q) = \sigma_{fr} [1 + 1/A]^2 \pi^{-0.5} p \exp(-q^2).$$

Область $R(\mu, Z)$ однозначно переходит в область $R(p, q)$:

$$0 \leq p < \infty, \quad \left(\frac{1+\lambda}{2} p - 1 \right) \chi^* \leq q \leq \left(\frac{1+\lambda}{2} p + 1 \right) \chi^*.$$

На этой замене переменных основан алгоритм, предложенный в работе [8], а также алгоритмы MCU [10] и BRAND'a моделирования рассеяния по модели идеального газа. Они включают в себя два этапа:

- 1) используя факторизованную плотность распределения, пропорциональную $p \exp(-q^2)$ разыгрывается пара (p, q) в области $R(p, q)$;
- 2) вычисляется новая энергия нейтрона и косинус угла рассеяния в лабораторной системе координат.

Полное сечение рассеяния для нейтрона с энергией E вычисляется по формуле

$$\sigma_s(E) = \frac{\sigma_{fr}}{\chi^{*2}} \left[\left(\chi^{*2} + \frac{1}{2} \right) \operatorname{erf} \chi^* + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \chi^* \exp(-\chi^{*2}) \right],$$

где $\operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$ – интеграл ошибок.

В [8] для ускорения расчетов выборочных значений (p, q) предлагается затабулировать полные сечения рассеяния и некоторые вспомогательные функции, но в алгоритмах MCU и BRAND'a никакое табулирование для газовой модели не используется.

ЗАМЕНА ПЕРЕМЕННЫХ ДЛЯ ПРИБЛИЖЕНИЯ НАИКРАТЧАЙШЕГО ВРЕМЕНИ СТОЛКНОВЕНИЯ

Замена переменных, предложенная для модели идеального газа автором [9] для приближения наикратчайшего времени столкновения, приводит к следующему результату:

$$f(p, q) = p e^{-(Ap^2 + Bpq + Cq^2)},$$

$$\text{где } A = \left(\frac{T}{T_{eff}(T)} - I \right) \frac{E}{A_0 kT}, \quad B = 2 \left(I - \frac{T}{T_{eff}(T)} \right) \sqrt{\frac{E}{A_0 kT}}, \quad C = \frac{T}{T_{eff}(T)},$$

$$I = \begin{cases} 0 & \text{если } p \leq 2, q \leq \frac{p}{2} \sqrt{\frac{E}{A_0 kT}}, \\ 1 & \text{иначе.} \end{cases}$$

АЛГОРИТМ BRAND'А МОДЕЛИРОВАНИЯ РАССЕЯНИЯ ПО МОДЕЛИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Обозначим $a = \frac{1+\lambda}{2}\chi^*$, $b=c^*$.

Необходимо смоделировать двумерную случайную величину с плотностью $f(p,q) = pe^{-q^2}$ в области $0 \leq p < \infty$, $ap-b \leq q \leq ap+b$.

Сначала разыгрываем p с плотностью

$$f(p) = \int_{ap-b}^{ap+b} f(p,q) dq = p [\operatorname{erf}(ap+b) - \operatorname{erf}(ap-b)].$$

Очевидно, что $f(p) \leq 2p$ (т.к. $\operatorname{erf} x \leq 1$ для любого x). Поскольку при $x \geq 5$ значения $\operatorname{erf} x$ становятся очень близкими к 1, то при $p \geq \frac{b+5}{a}$ значения $f(p)$ будут очень близки к нулю. Пренебрегая значениями $f(p)$ при $p \geq \frac{b+5}{a}$, имеем следующую мажорирующую плотность:

$$\tilde{f}(p) = \begin{cases} 2p & p \leq \frac{b+5}{a}, \\ 0 & p > \frac{b+5}{a}. \end{cases}$$

Выборка из плотности $f(p)$ осуществляется методом отбора (плотность $\tilde{f}(p)$ моделируется методом, предложенным в [11]). Имея смоделированное значение p , разыгрываем случайную величину q на интервале $ap-b \leq q \leq ap+b$ с плотностью e^{-q^2} с помощью метода, описанного в [12], отбрасывая значения q , если они выходят за пределы интервала. Вычисляем изменение энергии и изменение импульса

$$\alpha = \frac{Ep^2}{AkT}, \quad \beta = 2q\sqrt{\alpha} - \alpha.$$

Затем вычисляем новую энергию нейтрона и косинус угла рассеяния по формулам

$$E' = E + \beta kT, \quad \mu = \frac{E' + E - \alpha AkT}{2\sqrt{EE'}}.$$

АЛГОРИТМ BRAND'А МОДЕЛИРОВАНИЯ РАССЕЯНИЯ ПО ПРИБЛИЖЕНИЮ НАИКРАТЧАЙШЕГО ВРЕМЕНИ СТОЛКНОВЕНИЯ

Необходимо смоделировать двумерную случайную величину с плотностью распределения $f(p,q) = pe^{-(Ap^2 + Bpq + Cq^2)}$ в области $0 \leq p < \infty$, $ap-b \leq q \leq ap+b$.

Обозначим $c = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E}{A_0 kT}}$.

Область моделирования p и q разобьем на три подобласти.

Первая: $0 \leq p \leq 2$, $ap-b \leq q \leq cp$.

Вторая: $0 \leq p \leq 2$, $cp < q \leq ap+b$.

Третья: $2 < p < \infty$, $ap-b \leq q \leq ap+b$.

В каждой из подобластей величины A , B и C не зависят от p и q .

Алгоритм моделирования рассеяния состоит из следующих этапов.

1. Разыгрываем подобласть для моделирования p и q в соответствии с вероятностями попадания в каждую подобласть.
2. В заданной подобласти разыгрываем значение p .
3. Вычисляем границы интервала для моделирования q при разыгранном значении p для подобласти, полученной в п.1.
4. Разыгрываем q на заданном интервале из гауссовского распределения.
5. По полученным p и q вычисляем энергию вторичного нейтрона и косинус угла рассеяния.

В первой подобласти плотность распределения для выборки p равна

$$f_1(p) = \int_{ap-b}^{cp} f(p, q) dq = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{C}} p \left(\operatorname{erf} \left(\left(\frac{B}{2\sqrt{C}} + \sqrt{C}c \right) p \right) - \operatorname{erf} \left(\left(\frac{B}{2\sqrt{C}} + \sqrt{C}a \right) p - \sqrt{C}b \right) \right).$$

Разыгрываем p с этой плотностью аналогично тому, как это делается для модели идеального газа.

Во второй подобласти плотность распределения для выборки p равна

$$f_2(p) = \int_{cp}^{ap+b} f(p, q) dq = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{C}} p e^{\left(\frac{B^2}{4C} - A \right) p^2} \left(\operatorname{erf} \left(\left(\frac{B}{2\sqrt{C}} + \sqrt{C}a \right) p + \sqrt{C}b \right) - \operatorname{erf} \left(\left(\frac{B}{2\sqrt{C}} + \sqrt{C}c \right) p \right) \right).$$

Очевидно, что $f_2(p) \leq \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{C}} p e^{\left(\frac{B^2}{4C} - A \right) p^2}$ (т.к. $0 \leq \operatorname{erf} x \leq 1$ для любого $x \geq 0$). Если при

$x > 5$ значения $\operatorname{erf} x$ становятся очень близкими к единице, то при $p > \frac{5}{\frac{B}{2\sqrt{C}} + \sqrt{C}c}$ зна-

чения $f_2(p)$ будут близки к нулю. Пренебрегая этими значениями, имеем следующую мажорирующую плотность:

$$\tilde{f}_2(p) = \begin{cases} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{C}} p e^{\left(\frac{B^2}{4C} - A \right) p^2} & \text{при } p \leq \frac{5}{\frac{B}{2\sqrt{C}} + \sqrt{C}c}, \\ 0 & \text{при } p > \frac{5}{\frac{B}{2\sqrt{C}} + \sqrt{C}c}. \end{cases}$$

Выборка из плотности $f_2(p)$ осуществляется методом отбора (из плотности $\tilde{f}_2(p)$ – методом обратных функций).

В третьей подобласти плотность для разыгрывания p равна

$$f_3(p) = \int_2^\infty f(p, q) dq = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{C}} p e^{\left(\frac{B^2}{4C} - A \right) p^2} \left(\operatorname{erf} \left(\left(\frac{B}{2\sqrt{C}} + \sqrt{C}a \right) p + \sqrt{C}b \right) - \operatorname{erf} \left(\left(\frac{B}{2\sqrt{C}} + \sqrt{C}a \right) p - \sqrt{C}b \right) \right).$$

Аналогично предыдущему случаю получаем следующую мажорирующую плотность

$$\tilde{f}_3(p) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\pi}{C}} p e^{\left(\frac{B^2}{4C} - A \right) p^2} & \text{при } p \leq \frac{\sqrt{C}b + 5}{\frac{B}{2\sqrt{C}} + \sqrt{C}a}, \\ 0 & \text{при } p > \frac{\sqrt{C}b + 5}{\frac{B}{2\sqrt{C}} + \sqrt{C}a}. \end{cases}$$

Выборка из этой плотности осуществляется методом обратных функций. Плотность $f_3(p)$ моделируется методом отбора.

После того, как разыграно p , моделируется q из гауссовского распределения:

$$f(p, q) = p e^{-(Ap^2 + Bpq + Cq^2)} = p e^{\left(\frac{B^2}{4C} - A\right)p^2} e^{\frac{\left(q + \frac{Bp}{2C}\right)^2}{\frac{1}{4C}}}$$

Вероятности попадания в каждую из подобластей вычисляются следующим образом. Обозначим $p_1 = \int_0^2 f_1(p) dp$, $p_2 = \int_0^2 f_2(p) dp$, $p_3 = \int_2^\infty f_3(p) dp$ (все интегралы берутся аналитически, получаемые выражения весьма громоздкие, поэтому здесь не приводятся). Вероятность попадания в i -ю подобласть будет равна $\frac{p_i}{p_1 + p_2 + p_3}$.

МОДИФИЦИРОВАННЫЙ АЛГОРИТМ МСУ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАССЕЯНИЯ ПО МОДЕЛИ ИДЕАЛЬНОГО ГАЗА

Из определений p , q и неравенств, определяющих пределы изменения p и q , следует, что

$$-\chi^* \leq q < \infty, \left(\frac{q}{\chi^*} - 1\right) \frac{2}{1+\lambda} \leq p \leq \left(\frac{q}{\chi^*} + 1\right) \frac{2}{1+\lambda}.$$

Поскольку $0 \leq p$, то $p_{\min} \leq p \leq p_{\max}$, где $p_{\min} = \begin{cases} 2(q/\chi^* - 1)/(1+\lambda), & q > \chi^*, \\ 0, & q \leq \chi^*, \end{cases}$

$$p_{\max} = \left(\frac{c}{\chi^*} + 1\right) \frac{2}{1+\lambda}.$$

Сначала моделируем q из распределения

$$f(q) = \int_{p_{\min}}^{p_{\max}} p e^{-q^2} dp = \frac{1}{2} (p_{\max}^2 - p_{\min}^2) e^{-q^2} = \begin{cases} f_1(q) & q > \chi^*, \\ f_2(q) & q \leq \chi^*, \end{cases}$$

$$\text{где } f_1(q) = \frac{8qe^{-q^2}}{\chi^*(1+\lambda)^2}, \quad f_2(q) = 2\left(\frac{q}{\chi^*} + 1\right)^2 \frac{e^{-q^2}}{(1+\lambda)^2}.$$

Для этого сначала вычисляем вероятность того, что $q > \chi^*$ по формуле

$$x = \frac{\int_{\chi^*}^{\infty} f(q) dq}{\int_{-\chi^*}^{\infty} f(q) dq} = \frac{4e^{-\chi^{*2}}}{2e^{-\chi^{*2}} + \left(2\chi^* + \frac{1}{\chi^*}\right) \sqrt{\pi} \operatorname{erf} \chi^*}$$

и затем, если $g < x$, то моделируем q на интервале $\chi^* < q < \infty$ с плотностью $f_1(q)$, иначе на интервале $-\chi^* \leq q \leq \chi^*$ с плотностью $f_2(q)$. (g – случайная величина, равномерно распределенная на интервале $(0,1)$). Плотность $f_1(q)$ моделируется методом обратных функций по формуле

$$p = \sqrt{\chi^{*2} - \ln g}.$$

Плотность $f_2(q)$ моделируется методом отбора из нормального распределения. Из неравенства $-\chi^* \leq q \leq \chi^*$ следует, что $\left(\frac{q}{\chi^*} + 1\right)^2 \leq 4$ и $f_2(q) \leq \frac{8e^{-c^2}}{(1+\lambda)^2}$.

После того, как смоделировано значение q , вычисляются p_{\max} , p_{\min} и моделируется значение p методом обратных функций $p = \sqrt{\gamma(p_{\max}^2 - p_{\min}^2) + p_{\min}^2}$.

Затем из соотношений $Z = \left(\frac{2pq}{\chi^{*2}} \lambda p^2 + 1 \right)^{0.5}$, $v' = Zv$, $\mu = \frac{1 + Z^2 - p^2}{2Z}$ вычисляются скорость нейтрона после рассеяния v' и косинус угла рассеяния.

ТЕПЛОВОЕ ДВИЖЕНИЕ ЯДЕР

Эффективные сечения (кроме сечения рассеяния) для материала при температуре T определяются так, чтобы они соответствовали той же скорости реакции для стационарного ядра, как и истинные сечения для движущегося ядра. Следовательно

$$\rho v \bar{\sigma}(v, T) = \int d\mathbf{v}' \rho |\mathbf{v} - \mathbf{v}'| \sigma(|\mathbf{v} - \mathbf{v}'|) P(\mathbf{v}', T),$$

где \mathbf{v} – скорость налетающего нейтрона; \mathbf{v}' – скорость ядра-мишени; ρ – плотность ядер-мишени; σ – сечения для стационарного ядра; $P(\mathbf{v}', T)$ – распределение скоростей движения ядра-мишени.

Направление движения ядра-мишени полагается изотропным и распределение скоростей может быть описано распределением Максвелла-Больцмана:

$$P(\mathbf{v}', T) d\mathbf{v}' = \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\pi^{\frac{3}{2}}} e^{(-\alpha v'^2)} d\mathbf{v}',$$

где $\alpha = \frac{M}{2kT}$; k – постоянная Больцмана; M – масса ядра-мишени.

Согласно распределению Максвелла-Больцмана моделируется модуль скорости движения ядра $|\mathbf{v}'|$. Направление движения $\Omega' = (U', V', W')$ полагается изотропным.

Далее вычисляется косинус угла между направлениями движения нейтрона $\Omega = (U, V, W)$ и ядра Ω' :

$$\cos \mu = U \cdot U' + V \cdot V' + W \cdot W'.$$

Затем вычисляется модуль относительной скорости $\tilde{v} = |\mathbf{v} - \mathbf{v}'|$, по которой находится «относительная» энергия нейтрона \tilde{E} . Величины сечений для нейтрона с энергией E восстанавливаются по «относительной» энергии \tilde{E} .

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Рассчитывался энергетический спектр вторичных нейтронов, рассеявшихся на кислороде для энергий 5, 3, 2, 1, 10^{-1} , 10^{-2} , 10^{-3} и 10^{-4} эВ при температуре замедлителя 300°K по алгоритму BRAND'a, модифицированному алгоритму MCU и аналитичес-

ки (численно вычисляя интеграл $\int_{-1}^1 f(E', \mu) d\mu$). При всех энергиях наблюдалось хорошее согласие между спектрами, рассчитанными аналитически и по алгоритмам BRAND и MCU. Поэтому мы приводим здесь на рис. 1 только спектры вторичных нейтронов для энергии 2 эВ.

Рассчитывался энергетический спектр нейтронов, прошедших через барьер толщиной 25 см из кислорода с плотностью ядер, равной плотности O в H_2O и спектр отраженных нейтронов. Расчеты проводились по BRAND'у с алгоритмом BRAND'a, по BRAND'у с модифицированным алгоритмом MCU и по MCNP для нейтронов, имеющих начальную энергию 5, 3, 2, 1, 10^{-1} , 10^{-2} , 10^{-3} и 10^{-4} эВ для температур замедлителя 1K

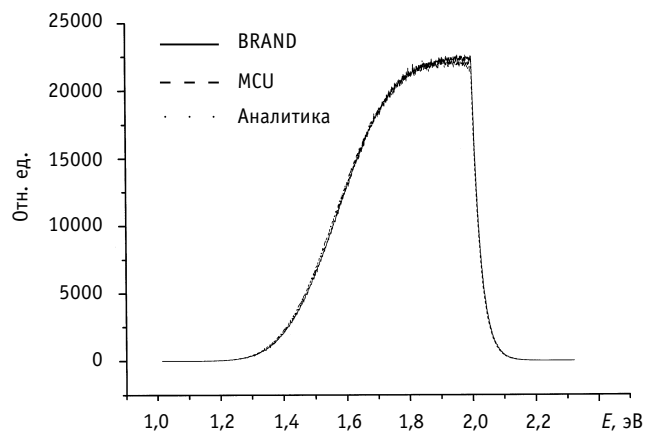


Рис. 1. Спектр вторичных нейтронов для энергии 2 эВ

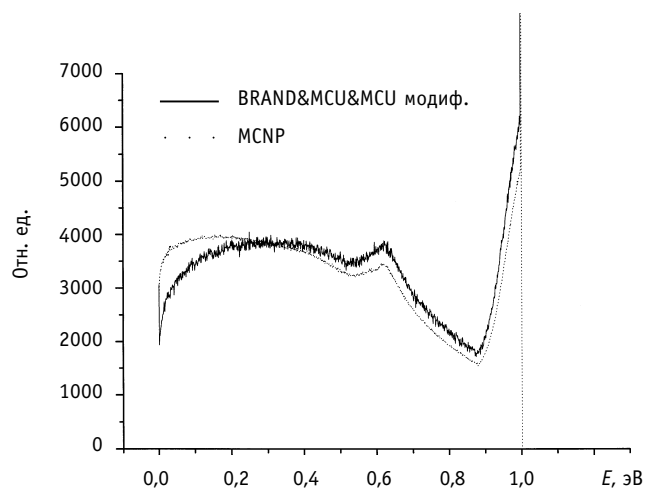


Рис. 2. Спектр нейтронов, прошедших через барьер 25 см при температуре 1 К для начальной энергии 1 эВ

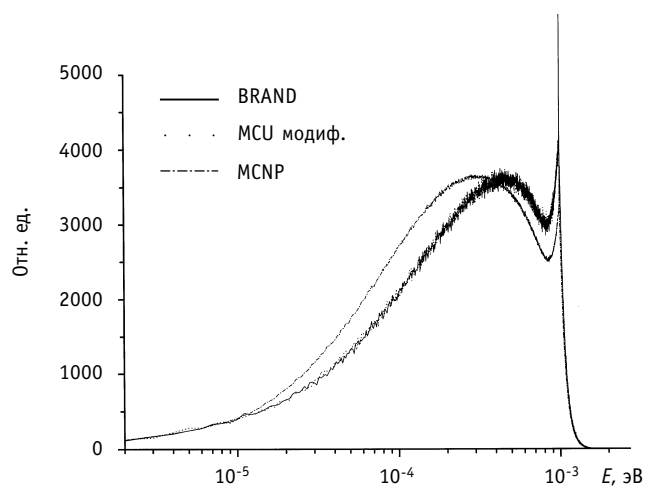


Рис. 3. Спектр нейтронов, прошедших через барьер 25 см при температуре 1 К для начальной энергии 10^{-3} эВ

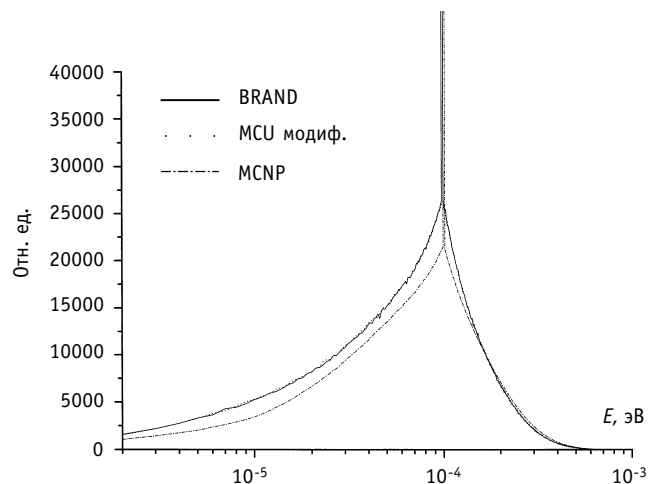


Рис. 4. Спектр нейтронов, прошедших через барьер 25 см при температуре 1 К для начальной энергии 10^{-4} эВ

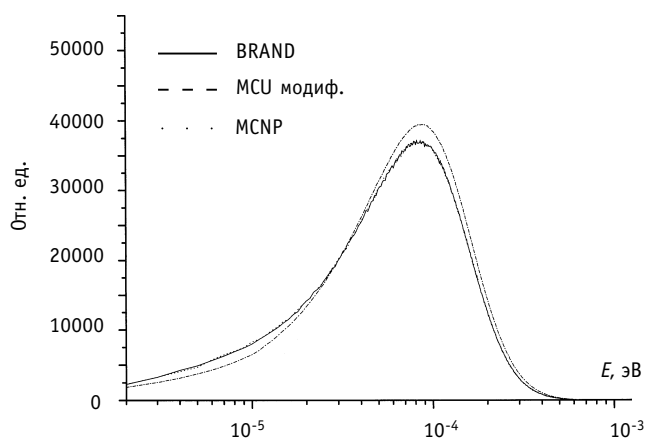


Рис. 5. Спектр нейтронов, отраженных от барьера 25 см при температуре 1 К для начальной энергии 10^{-4} эВ

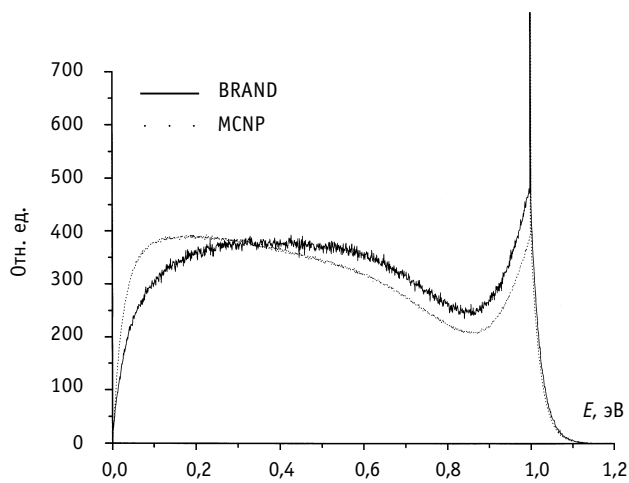


Рис. 6. Спектр нейтронов, прошедших через барьер 25 см при температуре 300 К для начальной энергии 1 эВ

и 300 К. Совпадение между расчетами по BRAND'у и по MCU хорошее. Наибольшие отклонения наблюдались между этими расчетами и данными, полученными по MCNP, особенно для задач на прохождение нейтронов. Источник этих расхождений требует детального сравнения алгоритмов BRAND и NJOY+MCNP. Спектры нейтронов, прошедших через барьер для энергий 1, 10^{-3} и 10^{-4} эВ для температуры 1 К приведены на рис. 2–4, спектры для отраженных нейтронов для энергии 1 эВ для температуры 1 К приведены на рис. 5. Спектр нейтронов, прошедших через барьер для начальной энергии 1 эВ для температуры 300 К приведен на рис. 6.

Сравнения времени счета алгоритма настоящей работы с модифицированным алгоритмом MCU показали, что время моделирования по нашим программам в 1,5–2 раза меньше при энергиях более 1 эВ, а при энергиях менее 1 эВ предпочтительнее модифицированный алгоритм MCU.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В программном комплексе BRAND реализованы алгоритмы точного моделирования рассеяния по модели идеального газа и по приближению наикратчайшего времени столкновения. В работе приводятся результаты расчетов по BRAND, MCU и MCNP. Результаты, полученные по BRAND, хорошо согласуются с MCU, но расходятся с MCNP. Источник этих расхождений требует детального сравнения алгоритмов BRAND и NJOY+MCNP.

Литература

1. Rose R.F., Dunford C.L. ENDF-6 Format Manual // IAEA-NDS-76, 1991.
2. Shibata K., Nakagawa T., Asami T., Fukahori T., Narita T., Chiba S., Mizumoto M., Hasegawa A., Kikuchi Y., Nakajima Y., Igarasi S. Japanese Evaluated Nuclear Data Library, Version 3, JENDL-3. JAERI-1319, 1990.
3. FENDL-2.0. Fusion Evaluated Nuclear Data Library, Version 14 January 1999. IAEA-NDS-CD-06.
4. Manokin V.N. BROND, USSR Evaluated Neutron Data Library. International Atomic Energy Agency Nuclear Data Services, Documentation Series of IAEA Nuclear Data Section. IAEA-NDS-90, Rev. 2, 1989.
5. MacFarlane R.E., Muir D.W. The NJOY Nuclear Data Processing System, version 91. Los Alamos National Laboratory, 1994.
6. Androsenko A.A., Androsenko P.A. et. al. Monte Carlo Simulation of Neutron Transport Process, Photons and Charged Particles. Preprint FEI-2205, Obninsk, 1991.
7. Androsenko P.A., Malkov M.R. Simulation of thermal neutron transport processes directly from the Evaluated Nuclear Data Files. // Advanced Monte Carlo for Radiation Physics, Particle Transport Simulation and Applications, Proceedings of Monte Carlo 2000 Conference, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2001, p. 675
8. Eriksson J.R. Slow Neutron Scattering Routine from the Gas Model // Nuclear Science and Engineering vol. 41 No. 2, Aug. 1970, pp. 307-309.
9. Breisemeister J.F. (Ed.): MCNP – Version 4A, LA-12625-M, November 1996.
10. Gomin E.A., Maigorov L.V. The MCU-RFFI Monte Carlo Code for Reactor Design Applications. Proc. Of Intern. Conf. On Mathem. And Comput., Reac. Phys. And Envir. Analyses. April, 30 – May, 4, 1995, Portland, Oregon, USA.
11. Андросенко П.А., Попова Г.В. Эффективный метод моделирования распределения Клейна-Нишшина-Тамма // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1981. – Т. 21. – № 4.
12. Франк-Каменецкий А.Д. Моделирование траекторий нейтронов при расчете реакторов методом Монте-Карло. – М.: Атомиздат, 1978.

Поступила в редакцию 20.11.2003

ABSTRACTS OF THE PAPERS

УДК 621.039.56

On Expediency of Change of Requirements RNS RI APP to Sodium Density a Component of Reactivity of a Feedback In Fast Reactors \ A.V. Danilytshev, D.G. Elistratov, V.I. Matveev; Editorial board of Journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2004. – 16 pages, 5 tables, 10 illustrations. – References, 11 titles.

Most generalizing requirement GSR-88/89 to all effects of reactivity is added in RNS RI APP with the additional limiting requirement of negativity sodium density reactivity coefficient. At the analysis of the major accidents obviously expressed communication of their consequences with the given additional requirement is not found out. It is shown, that at observance by the designer of basic requirements OPB-88/ in a combination to correct selection of interrelation of all others a component of reactivity and Thermal-physical properties of materials of an active zone the additional requirement of negativity sodium density reactivity may be considered as the account excessive.

УДК 621.039.56

On Inverse Kinetics Method for Reactivity Determination \ B.D. Abramov; Editorial board of Journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2004. – 13 pages, 1 illustration. – References, 29 titles.

In the paper some mathematical problems of the reactors neutron kinetic simulation and reactivity determination are considered.

УДК 621.039.51:519.85

Direct Simulation of Thermal Neutron Scattering by Monte Carlo Method Using Free Gas Model and Short Collision Time Approximation \ P.A. Androsenko, M.R. Malkov, N.A. Soloviev; Editorial board of Journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2004. – 11 pages, 6 illustrations. – References, 12 titles.

Direct simulation algorithms of thermal neutron scattering using free gas scattering law and short collision time approximation realized in BRAND code collection are described. The comparison of BRAND algorithms with MCNP algorithms and modified MCU algorithms is given. An example of calculation task on neutron penetration through O in H₂O barrier is given. The agreement between BRAND results and MCU results is rather good but there is disagreement between BRAND results and MCNP results. The reason for this disagreement is likely to be caused in the fact that BRAND carry out the calculations using the algorithms that recommended by ENDF-6 format whereas the algorithms of MCNP is corrected to better coincide with benchmark experiments results.

УДК 621.039.524: 621.039.526

The Method for Description of Fission Fragments by Two Pseudo-Fission Fragments. Part II – Testing. \ Yu. V. Volkov, O.B. Duginov; Editorial board of Journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2004. – 7 pages, 5 tables, 4 illustrations. – References, 5 titles.

The model for description of isotope transitions taking into account the most significant for the neutron balance isotopes and two pseudo-fission fragments has been tested. This model was applied for thermal and fast reactors.

УДК 621.039.524.4: 621.039.519.2

Integral In-Pile Experiments with a VVER-Type Fuel Assembly «SB-LOCA»-Test. A. V. Goryachev, I. V. Kiseleva, V. M. Makhin, V. N. Shulimov; Editorial board of Journal «Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika» (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) – Obninsk, 2004. – 9 pages, 2 tables, 3 illustrations. – References, 10 titles.

Results of 19-rod and 7-rod VVER-type fuel assembly tests «SB LOCA» in research reactor MIR are presented. The influence of regime parameters LOCA and design peculiarities of fuel assembly on fuel behaviour was investigated.