Федеральное государственное бюджетное учреждение
«Национальный исследовательский центр»
«Курчатовский институт»

Алгоритм восстановления температурной зависимости дважды дифференциальных сечений для энергетической области термализации в расчётах методом Монте-Карло

Белоусов В.И., Иоаннисиан М.В., Малков М.Р.

12.07.2024

Введение

- В программном комплексе КИР реализован алгоритм непрерывного учета температурной зависимости для дважды-дифференциальных сечений в тепловой энергетической области.
- Создана библиотека, позволяющая выполнять моделирование рассеяния нейтронов в тепловой энергетической области для произвольной температуры в диапазоне от 300 K до 1000 K для водорода в воде и от 300 K до 1000 K для графита

Некогерентное неупругое рассеяние

$$\sigma\left(E \to E',\mu,T\right) = \frac{\sigma_b}{2kT}\sqrt{\frac{E'}{E}}e^{-\frac{\beta}{2}}S\left(\alpha,\beta,T\right)$$

$$\sigma_b = \sigma_f\left(\frac{A+1}{A}\right)^2$$

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

$S\left(\alpha,\beta,T\right)$ - функция рассеяния

Минимальное и максимальное значение параметра α

$$\alpha_{-} = \frac{\left(\sqrt{E} - \sqrt{E + \beta kT}\right)^2}{AkT}$$

$$\alpha_{+} = \frac{\left(\sqrt{E} + \sqrt{E + \beta kT}\right)^2}{AkT}$$

Функции распределения параметров α и β

$$G(\beta,E,T)=\frac{\int_{\beta_-}^{\beta} e^{-\frac{\beta}{2}}\int_{\alpha_-}^{\alpha_+} S(\alpha,\beta,T)\,d\alpha\, d\beta}{\int_{\beta_-}^{\beta_+} e^{-\frac{\beta}{2}}\int_{\alpha_-}^{\alpha_+} S(\alpha,\beta,T)\,d\alpha\, d\beta}$$

$$H(\alpha,\beta,E,T)=\frac{\int_{\alpha_-}^{\alpha} S(\alpha,\beta,T)\,d\alpha}{\int_{\alpha_-}^{\alpha_+} S(\alpha,\beta,T)\,d\alpha}$$

$$\hat{H}(\alpha,\beta,T)=\frac{\int_{0}^{\alpha} S(\alpha,\beta,T)\,d\alpha}{\int_{0}^{\infty} S(\alpha,\beta,T)\,d\alpha}$$

Модель полиномиальной регрессии

$$\beta\left(P_j, E_i, T\right) = \sum_{n=-N}^{N} a_{ijn} T^{\frac{n}{2}} + e_{ij}$$

$$\alpha\left(P_l, \beta_k, T\right) = \sum_{m=-M}^{M} b_{klm} T^{\frac{m}{2}} + e_{kl}$$

Моделирование некогерентного неупругого рассеяния

1. В энергетической сетке находим E_i и E_{i+1} такие, что $E_i \le E \le E_{i+1}$

2. С датчика псевдослучайных чисел берем число ξ_β в сетке вероятностей находим два значения, такие что $P_j \le \xi_\beta \le P_{j+1}$

3. Для температуры T находим значения β для энергий E_i и E_{i+1} и вероятностей P_j и P_{j+1} : β_{ij} β_{ij+1} β_{i+1j} β_{i+1j+1}

вычисляем β для энергии E и вероятности ξ_β : $\beta = f_1\left(\beta_{ij}g_1 + \beta_{i+1j}g_2\right) + f_2\left(\beta_{ij+1}g_1 + \beta_{i+1j+1}g_2\right)$

где $f_1 = \dfrac{P_{j+1} - \xi_\beta}{P_{j+1} - P_j}$ $f_2 = \dfrac{\xi_\beta - P_j}{P_{j+1} - P_j}$ $g_1 = \dfrac{E_{i+1} - E}{E_{i+1} - E_i}$ $g_2 = \dfrac{E - E_i}{E_{i+1} - E_i}$

4. Для энергии E, температуры T и смоделированного β находим границы α : α_- и α_+

5. Для смоделированного β находим β_i и β_{i+1} такие что $\beta_i \le \beta \le \beta_{i+1}$

Моделирование некогерентного неупругого рассеяния

6. Для значений β_i и β_{i+1} находим границы изменения α и соответствующие им вероятности P_- и P_+

7. С датчика псевдослучайных чисел берем число ξ и загоняем его в нужные нам границы: $\xi' = \xi\left(P_+ - P_-\right) + P_-$

8. В сетке вероятностей находим P_j и P_{j+1} такие, что $P_j \le \xi' \le P_{j+1}$

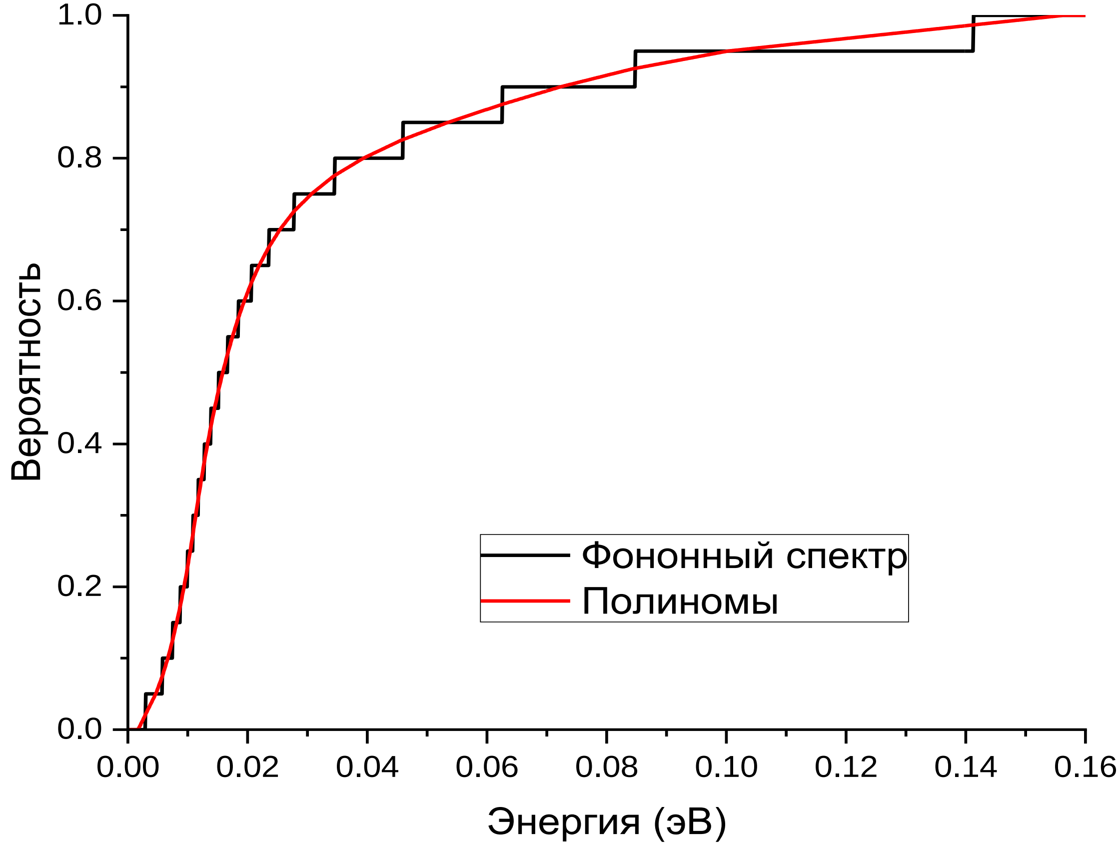
9. Аналогично шагу 3 находим значения α для β_i и β_{i+1} и вероятностей P_j и P_{j+1} находим смоделированное α : $\alpha = f_1\left(\alpha_{ij} g_1 + \alpha_{i+1j} g_2\right) + f_2\left(\alpha_{ij+1} g_1 + \alpha_{i+1j+1} g_2\right)$
где $f_1 = \dfrac{P_{j+1} - \xi'}{P_{j+1} - P_j}$ $\quad f_2 = \dfrac{\xi' - P_j}{P_{j+1} - P_j}$ $\quad g_1 = \dfrac{\beta_{i+1} - \beta}{\beta_{i+1} - \beta_i}$ $\quad g_2 = \dfrac{\beta - \beta_i}{\beta_{i+1} - \beta_i}$

10. Вычисляем энергию вторичного нейтрона и косинус угла рассеяния

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

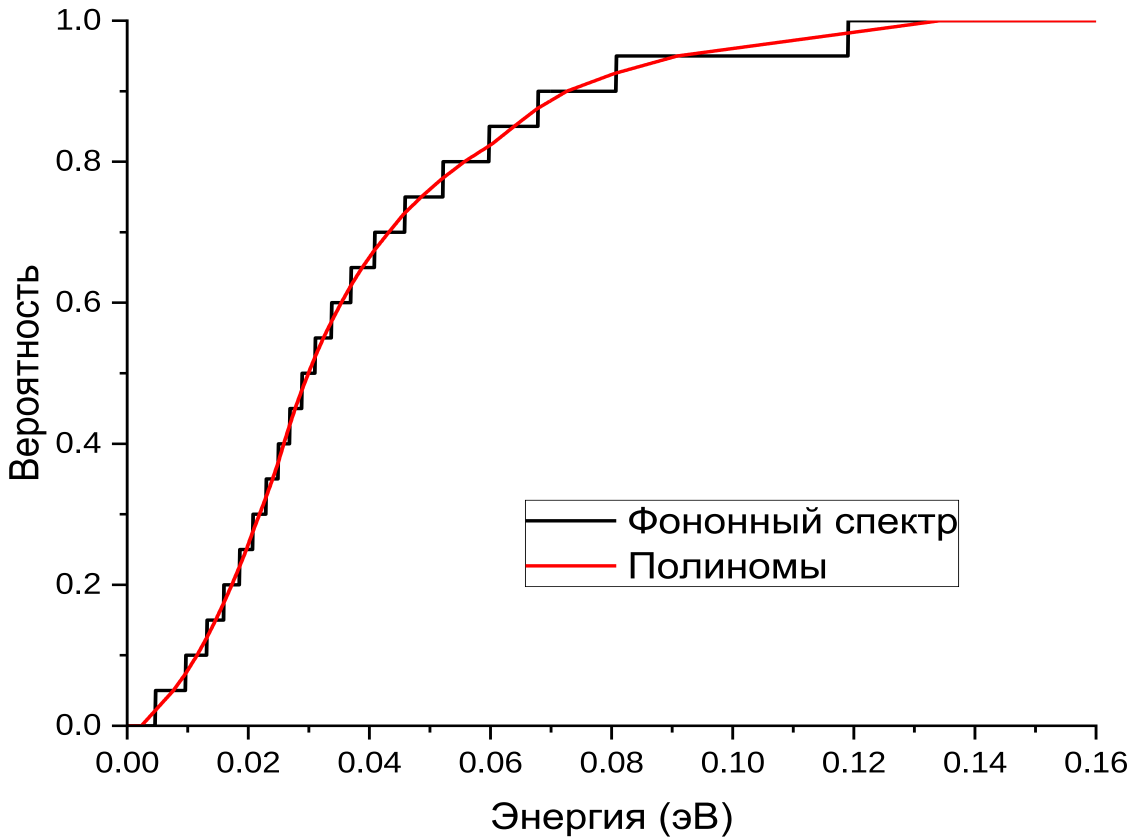
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Сравнение функции распределения энергии вторичного нейтрона



Водород в воде начальная энергия 0.01136 эВ температура 300 К

Сравнение функции распределения энергии вторичного нейтрона

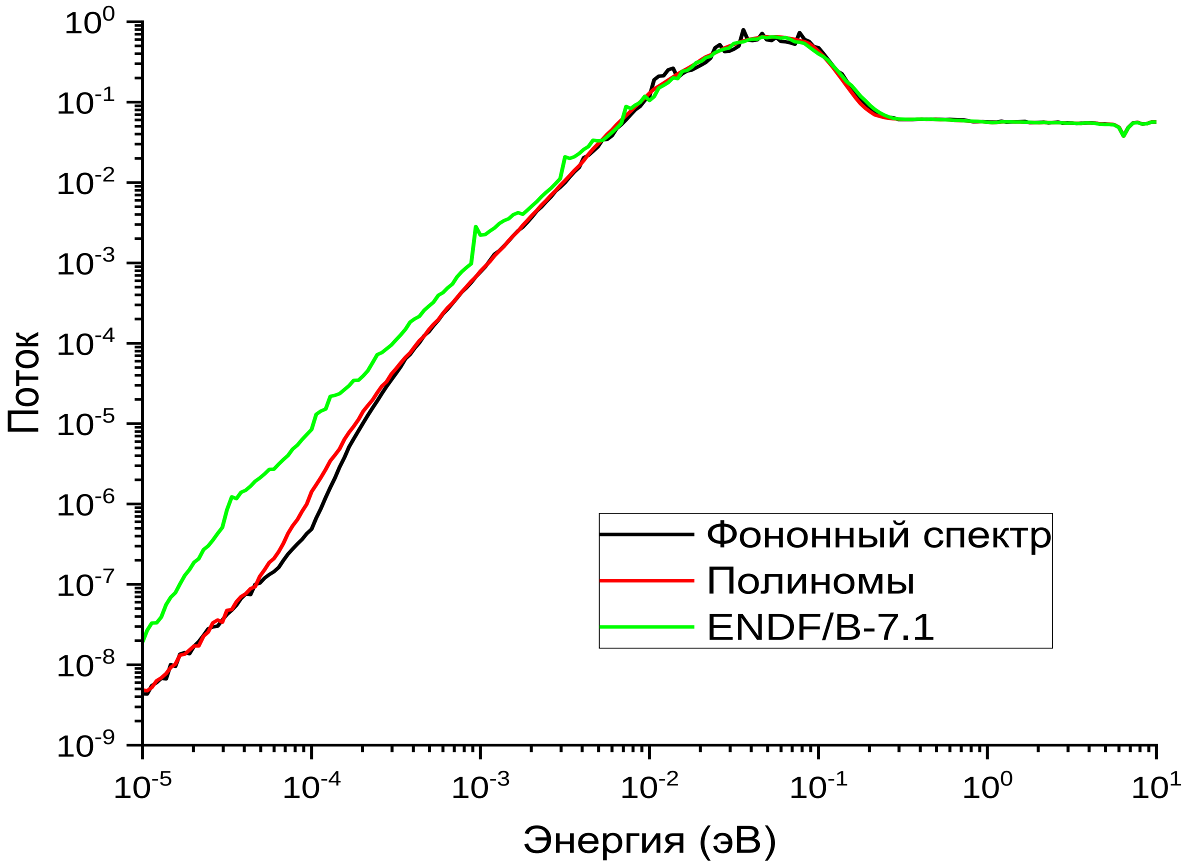


Графит температура 300 К начальная энергия 0.01136 эВ

Результаты расчета бенчмарк-эксперимента MATR

Вариант	$S(\alpha,\beta)$ из ENDF/B 7.1	$S(\alpha,\beta)$ из фононного спектра	Полиномы из фононного спектра
1	1.00293654	1.00061510	1.00050961
2	1.00227204	1.00084034	0.99992474
3	1.00572583	1.00310507	1.00357587
4	1.00105157	0.99888310	0.99804107
5	1.00430629	1.00173857	1.00176303
6	1.00207185	1.00029425	0.99909632

График потока нейтронов для бенчмарка MATR вариант 1



Когерентное упругое рассеяние

$$\frac{d^2\sigma}{dEd\Omega}(E \to E', \mu, T) = \frac{1}{E}\sum_{i=1}^{E_i<E} s_i(T)\delta(\mu-\mu_i)\delta(E-E')/2\pi$$

E_i - энергетические границы ступенек Брэгга

μ_i - косинусы углов рассеяния, соответствующие ступенькам Брэгга

s_i - структурные множители ступенек Брэгга

$$\mu_i = 1 - \frac{2E_i}{E},$$

Как можно видеть из формул, угол рассеяния является дискретной случайной величиной:

$$P(\mu = \mu_i) = \frac{s_i(T)}{\sum_{i=1}^{m} s_i(T)},$$

Моделирование когерентного упругого рассеяния

Обозначим $S_k(T) = \sum_{i=1}^{k} s_i(T)$

для каждого k находим коэффициенты полинома

$$S_k(T) = \sum_{n=-N}^{N} a_{kn} T^{\frac{n}{2}} + e_k$$

и записываем их в библиотеку

на этапе монтекарловского расчета моделируем Брэгговскую ступеньку для нужной температуры:

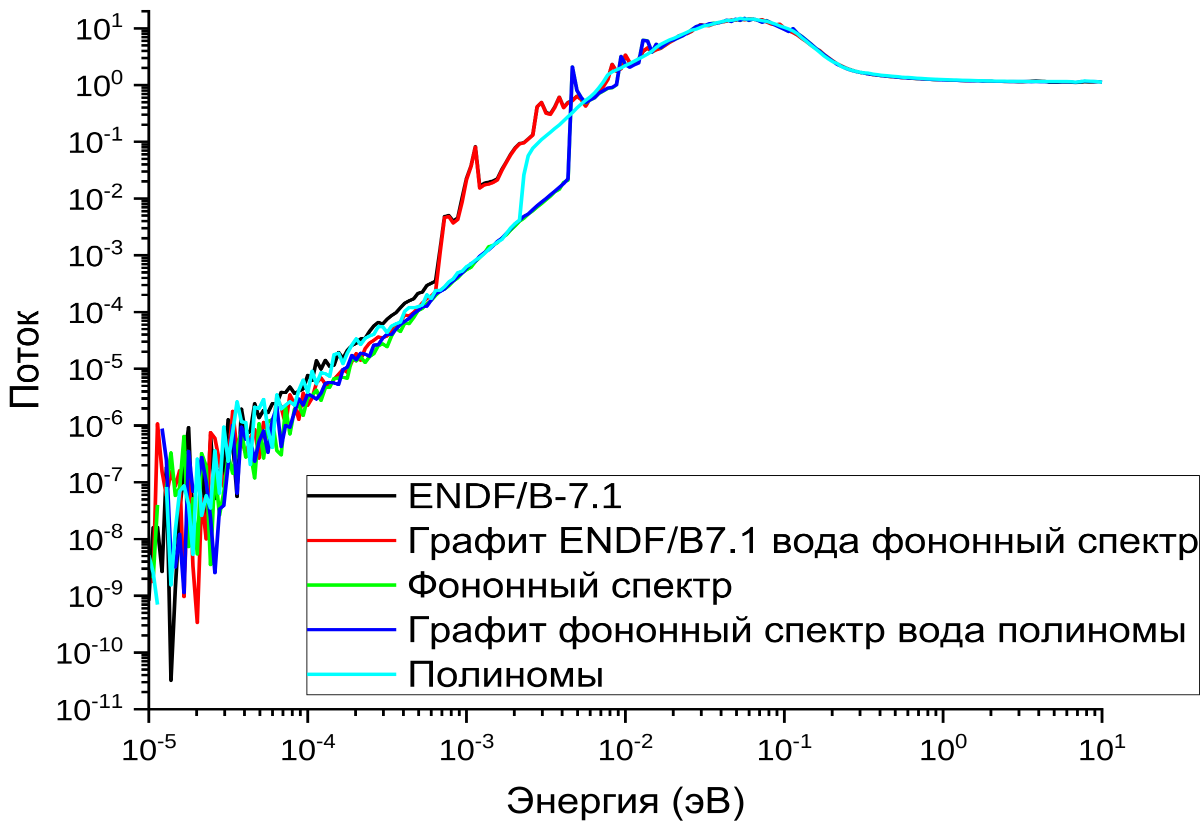
$$S_{i-1}(T) < \gamma S_m(T) \le S_i(T)$$

Результаты расчета бенчмарк-эксперимента IGR

Вариант	$S(\alpha,\beta)$ из ENDF/B 7.1 для воды и для графита	Для графита $S(\alpha,\beta)$ из ENDF/B 7.1, для воды $S(\alpha,\beta)$ из фононного спектра	$S(\alpha,\beta)$ из фононного спектра для графита и для воды	Для воды полиномы из фононного спектра, для графита $S(\alpha,\beta)$ из фононного спектра	Полиномы из фононного спектра для графита и для воды
1	1.02303639	1.02371986	1.01216187	1.01154555	1.00702075
2	1.00512488	1.00431283	0.99410252	0.99361352	0.98894752
3	1.00271261	1.00194024	0.98900988	0.98784219	0.98273899
4	1.00879538	1.00881535	0.99677996	0.99576171	0.99241079
5	1.01913612	1.01928867	0.99337571	0.99364787	0.99320065
6	1.02220906	1.02419256	0.99599363	0.99577578	0.99840119

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Поток нейтронов бенчмарк IGR вариант 1



Некогерентное упругое рассеяние

$$\frac{d^2\sigma}{dEd\Omega}\left(E \to E', \mu, T\right) = \frac{\sigma_b}{4\pi} e^{-2EW'(T)(1-\mu)} \delta\left(E - E'\right),$$

$$f_\mu(x) = ke^{-2EW'(T)(1-\mu)(1-x)},$$

$$W'(T) = \sum_{n=-N}^{N} a_n T^{\frac{n}{2}} + l$$

$$\mu = 1 + \frac{\ln\left(e^{-4EW'(T)} + \gamma\left(1 - e^{-4EW'(T)}\right)\right)}{2EW'(T)},$$

Заключение

В программном комплексе КИР модифицирован физический модуль, добавлена возможность моделирования рассеяния нейтронов в тепловой энергетической области при произвольной температуре

Разработана независимая программа для подготовки библиотек коэффициентов полиномов для вышеуказанного модуля

Подготовлены библиотеки коэффициентов полиномов для водорода в воде и углерода в графите

По обновленной версии КИР были проведены тестовые расчеты, которые показали корректную работу разработанных алгоритмов

Работа основана на статье

Andrew T. Pavlou, Wei Ji, Forrest B. Brown

Implementation and testing of the on-the-fly thermal scattering Monte Carlo sampling method for graphite and light water in MCNP6

Annals of Nuclear Energy, Volume 91, May 2016, Pages 111 - 126

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Спасибо за внимание!