

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ И КОМПЛЕКСЫ

УДК 621.039.513 + 621.039.538

В.В. Андреев¹, А.В. Саляев², С.Г. Усынина², С.В. Бронников^{1,2}

МОДЕЛИРОВАНИЕ БЕНЧМАРК-ЭКСПЕРИМЕНТА IRON 88 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММ НА ОСНОВЕ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева¹
Опытное конструкторское бюро машиностроения им. И.И. Африкантова²

Проведено исследование переноса нейтронного излучения в композиции защиты из углеродистой стали бенчмарк-эксперимента IRON 88. Расчет выполнен по программе MCNP 5 с использованием непрерывных по энергии библиотек нейтронных микросечений, основанных на современных файлах оцененных ядерных данных ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII.0, JEFF-3.3 и РОСФОНД-2010, а также с использованием программного комплекса SCALE-6.2 и библиотек на базе файлов ENDF/B-VII.1. Сравнение результатов расчета скоростей реакций $^{32}\text{S}(n,p)^{32}\text{P}$, $^{115}\text{In}(n,n')^{115\text{m}}\text{In}$, $^{103}\text{Rh}(n,n')^{103\text{m}}\text{Rh}$, $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$ и $^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$ с экспериментальными данными позволило выполнить валидацию программы MCNP 5, комплекса SCALE 6.2 совместно с библиотеками нейтронных микросечений применительно к расчету переноса нейтронного излучения в композиции защиты из углеродистой стали. Показано, что ослабление различных скоростей реакций в защитной композиции наиболее точно описывается с использованием библиотек на основе ENDF/B-VII.1, наименее точно, для большинства скоростей реакций – с использованием библиотек ENDF/B-VIII.0 и JEFF-3.3. Путем сравнения результатов расчета, полученных по MCNP 5 и SCALE 6.2, оценена неопределенность результатов расчета скоростей реакций, обусловленная различными методами подготовки непрерывных по энергии библиотек, основанных на одних и тех же файлах оцененных ядерных данных ENDF/B-VII.1. Определена погрешность результатов расчета скоростей реакций при использовании 200-групповой библиотеки микросечений в сравнении с непрерывной по энергии библиотек.

Ключевые слова: IRON 88, MCNP 5, SCALE-6.2, ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII.0, JEFF-3.3, РОСФОНД-2010, скорость реакции, неопределенность, бенчмарк-эксперимент, микросечение, Монте-Карло.

Введение

Точность проведения проектных расчетов радиационной защиты обеспечивается использованием современных программ и библиотек констант с учетом имеющейся экспериментальной информации. Наиболее точными программами для расчета переноса излучений считаются программы, реализующие метод Монте-Карло. Точность расчета по таким программам обусловлена, в основном, имеющимися неопределенностями в микросечениях ядерных реакций взаимодействия излучений с веществом. Наиболее известными программами, реализующими метод Монте-Карло, являются программа MCNP 5 [1] и программы, входящие в пакет SCALE 6.2 [2], в том числе – модуль MONACO, предназначенный для решения задач радиационной защиты. Решение различных тестовых задач с помощью этих программ очень часто используется для кросс-верификации инженерных кодов, реализующих детерминистские методы решения уравнения переноса нейтронов и фотонов в групповом приближении.

Первоочередной задачей исследований была валидация библиотек нейтронных микросечений совместно с программой MCNP 5.

Вторая задача заключалась в оценке неопределенности методов подготовки непрерывных по энергии библиотек для программ, реализующих метод Монте-Карло, из оригинальных файлов, оцененных ядерных данных. Эта задача решалась путем сопоставления ре-

зультатов расчета с использованием различных библиотек с непрерывной по энергии зависимостью микросечений, основанных на одних и тех же файлах оцененных ядерных данных.

На третьем этапе исследований оценена погрешность расчета, обусловленная использованием многогрупповой библиотеки, путем прямого сопоставления результатов расчета по модулю MONACO, полученных с использованием двухсотгрупповой и непрерывной по энергии библиотек.

Исследования проводились на базе бенчмарк-эксперимента IRON 88 из базы данных SINBAD [3]. Композиция защиты в данном эксперименте представляет собой набор стальных листов из углеродистой стали. Данный тип защиты характерен для различных типов реакторных установок. Эксперимент хорошо описан и документирован, включает подробные данные по погрешностям экспериментальных данных, очень часто используется для валидации различных кодов и библиотек констант [4, 5].

Описание экспериментальной установки

Серия экспериментов по исследованию прохождения нейтронного излучения в различных композициях защиты была выполнена на установке ASPIS на исследовательском реакторе NESTOR в Уинфрите [3]. Установка ASPIS представляет собой транспортабельную тележку в виде короба, в котором могут размещаться различные защитные композиции в форме пластин, блоков или баков, заполненных исследуемым материалом. Установка ASPIS включает в себя конвертор нейтронов, предназначенный для преобразования спектра, выходящего из реактора NESTOR нейтронного потока.

Установка ASPIS во всех экспериментах располагалась в полости «С» реактора NESTOR (рис. 1). Компоненты защитной композиции, которые могут представлять собой плиты, блоки или баки, устанавливаются вертикально в транспортабельном коробе, который имеет внутреннюю площадь поперечного сечения 1,8х1,9 м и длину 3,7 м.

Конвертор нейтронов расположен в пределах экспериментальной композиции защиты. Загруженный короб транспортируется в полость, где тепловые нейтроны, выходящие из внешнего графитового отражателя активной зоны реактора NESTOR, преобразуются конвертором в хорошо определяемый экспериментально нейтронный источник. Конвертор состоит из алюминиевого каркаса с наружными размерами по высоте и ширине, равными размерам короба ASPIS. В каркас вставлены тринадцать топливных элементов.

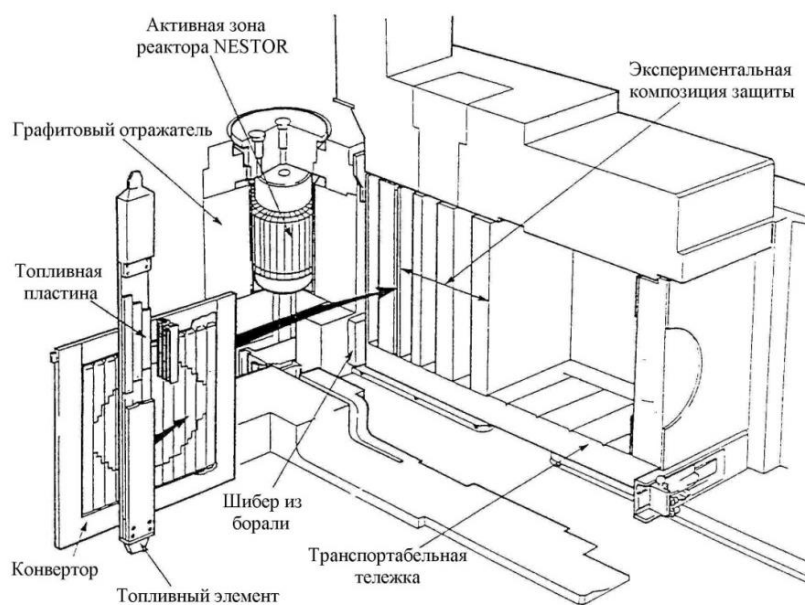


Рис. 1. Схема транспортабельной установки ASPIS

Абсолютная интенсивность источника нейтронов определялась спектрометрированием гамма-излучения продуктов деления, а также с помощью измерений пространственного распределения низкоэнергетического потока нейтронов (перед конвертором и за конвертором) и скоростей пороговых реакций после конвертора активационными детекторами.

Уровни нейтронного потока в пределах исследуемой композиции защиты содержат вклады от конвертора и от активной зоны реактора NESTOR. Фоновая составляющая от активной зоны определяется посредством отдельных измерений (с конвертором и без конвертора, включая комбинации измерений с закрытым и открытым шибером) и вычитается из результатов измерений с конвертором.

Описание экспериментальной композиции защиты

Экспериментальная композиция защиты IRON 88, облучаемая на установке ASPIS, схематично показана на рис. 2. В направлении от передней стенки тележки экспериментальная композиция состоит из трех областей: область источника, включающая графитовый замедлитель и конвертор; исследуемую композицию защиты из тринадцати листов малоуглеродистой стали, каждый приблизительно толщиной 5,1 см; толстую торцевую защиту из малоуглеродистой и нержавеющей сталей. Детекторы в исследуемой композиции защиты размещались в зазорах между листами.

В эксперименте измерялись следующие скорости реакций $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$, $^{32}\text{S}(n,p)^{32}\text{P}$, $^{115}\text{In}(n,n')^{115\text{m}}\text{In}$, $^{103}\text{Rh}(n,n')^{103\text{m}}\text{Rh}$ и $^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$. Расчетно-экспериментальное соотношение мощностей между конвертором и реактором NESTOR составило $5,68 \cdot 10^{-4}$, т.е., при мощности реактора NESTOR 30 кВт мощность конвертора составляет 17,04 Вт. Результаты измерений скоростей реакций представлены в табл. 1. Скорости реакций нормированы на величину мощности конвертора 17,04 Вт. Величина полной погрешности при уровне 1 σ , представленная в табл. 1, включает статистическую погрешность измерений, погрешность калибровки детекторов, а также погрешность определения абсолютной мощности конвертора. Все результаты измерений представлены с учетом поправки на фоновую составляющую нейтронного излучения от активной зоны реактора NESTOR.

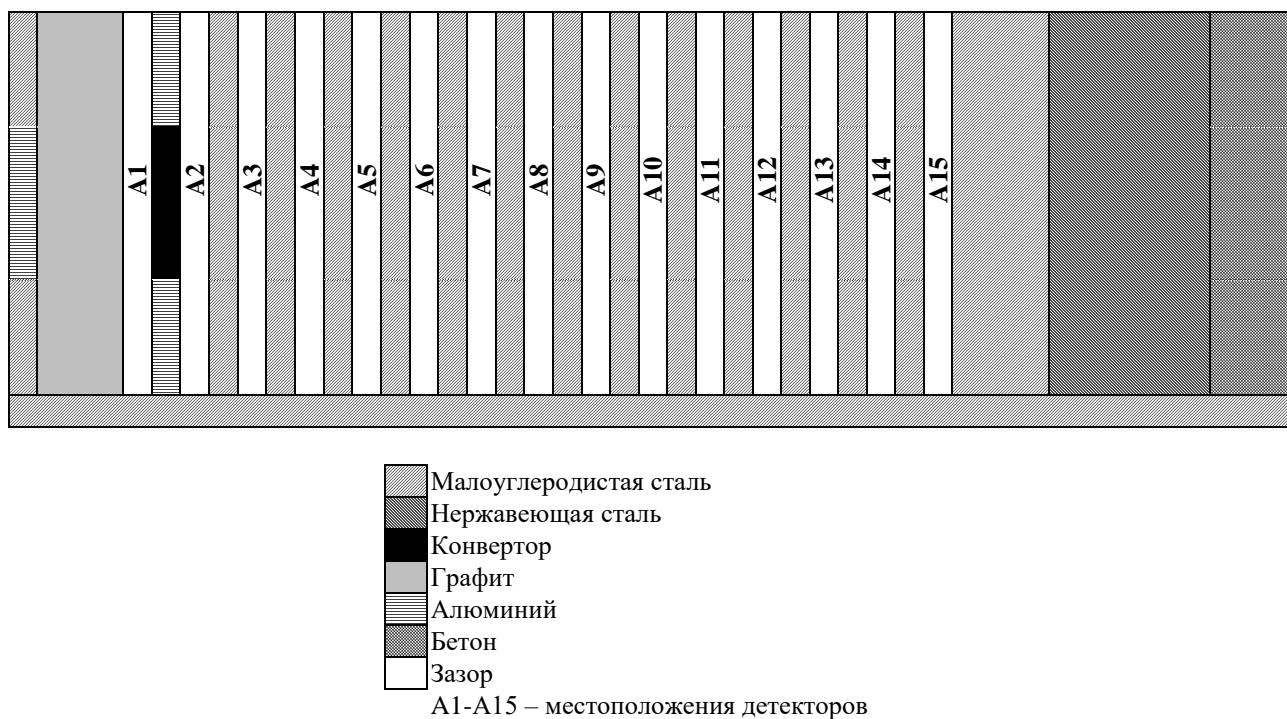


Рис. 2. Схема бенчмарк-эксперимента IRON 88

Таблица 1

Экспериментальные значения скоростей реакций (с^{-1}) и погрешность измерений, %

Позиция	$^{32}\text{S}(n,p)^{32}\text{P}$		$^{115}\text{In}(n,n')^{115\text{m}}\text{In}$		$^{103}\text{Rh}(n,n')^{103\text{m}}\text{Rh}$		$^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$		$^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$	
A2	1.980E-17	6.5	6.880E-17	4.5	3.283E-16	5.1	-	-	1.053E-14	4.2
A3	4.204E-18	6.5	2.352E-17	4.5	1.392E-16	5.2	2.230E-20	4.7	6.240E-15	4.2
A4	1.372E-18	6.5	1.039E-17	4.5	7.624E-17	5.1	-	-	4.188E-15	4.2
A5	5.018E-19	6.5	5.037E-18	4.5	4.606E-17	5.1	2.550E-21	4.7	2.969E-15	4.2
A6	1.872E-19	6.5	2.479E-18	4.5	2.803E-17	5.2	9.560E-22	4.7	2.194E-15	4.2
A7	6.987E-20	6.5	1.294E-18	4.5	1.784E-17	5.1	3.560E-22	4.7	1.700E-15	4.2
A8	2.646E-20	6.6	7.066E-19	4.5	1.176E-17	5.1	-	-	1.350E-15	4.2
A9	1.009E-20	6.5	3.851E-19	4.6	7.811E-18	5.2	-	-	1.106E-15	4.2
A10	3.851E-21	6.5	2.166E-19	4.6	5.370E-18	5.2	-	-	9.098E-16	4.2
A11	1.460E-21	6.5	1.254E-19	4.7	3.763E-18	5.2	-	-	7.665E-16	4.2
A12	5.615E-22	6.5	-	-	2.626E-18	5.1	-	-	6.419E-16	4.2
A13	2.225E-22	6.9	-	-	1.852E-18	5.2	-	-	5.331E-16	4.2
A14	8.359E-23	8.6	-	-	1.313E-18	5.1	-	-	4.528E-16	4.2
A15	3.430E-23	21.0	-	-	-	-	-	-	3.910E-16	4.2

Моделирование эксперимента

Расчетная модель

Модель бенчмарк-эксперимента IRON 88, используемая в расчетах по программе MCNP 5 и комплексу SCALE 6.2.2, показана на рис. 3. Расчетная модель, помимо собственно композиции IRON 88, расположенной в тележке и подробно описанной в [3], также включает окружение из бетона и наружный графитовый отражатель реактора NESTOR, без моделирования которых невозможно получить корректные расчетные результаты вблизи конвертора.

Составы используемых материалов принимались в соответствии с [3].

Описание источника нейтронов

Источник нейтронов описывался в явном виде, соответствующим фактическому 3-d экспериментальному распределению, включающему данные по 141 пространственной области конвертора. Спектральное распределение источника нейтронов моделировалось спектром Уатта с параметрами «а» и «b» при делении ^{235}U тепловыми нейтронами, которые принимались в соответствии с данными [1] – $a=0,988$ МэВ, $b=2,249$ МэВ $^{-1}$.

Библиотеки нейтронных микросечений

Расчет по программе MCNP 5 проводился с использованием библиотек нейтронных микросечений в формате ACER, полученных разработчиками файлов оцененных ядерных данных:

- ENDF/B-VII.1 [6];
- ENDF/B-VIII.0 [7];
- JEFF-3.3 [8];
- РОСФОНД-2010 [9].

В расчетах использовались микросечения, подготовленные для температуры 293,6 или 300,0 К. Файл «xsdir», необходимый для расчетов по программе MCNP 5, также заимствовался с сайтов разработчиков [6-9]. Все библиотеки в формате ACER были подготовлены с использованием программы NJOY 99 [10] или последующих версий.

Расчет по программному комплексу SCALE 6.2.2 проводился с использованием библиотеки с непрерывными по энергии микросечениями и 200-групповой библиотеки, основанных на файлах оцененных ядерных данных ENDF/B-VII.1 и входящих в состав комплекса. Подготовка библиотек проводилась по программному комплексу AMPX-6 [11].

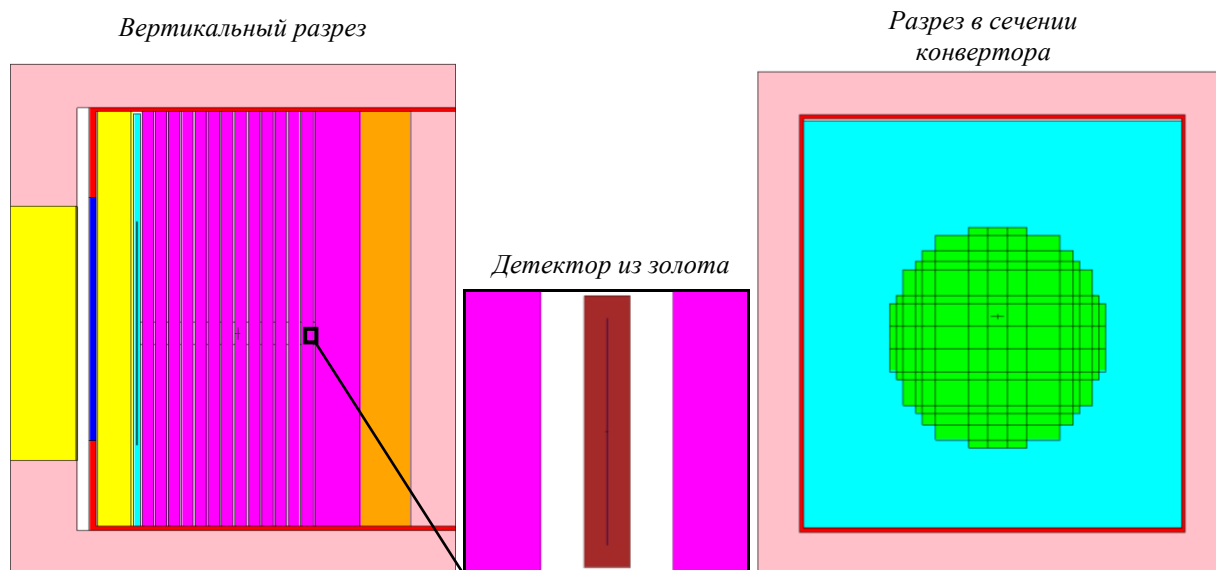


Рис. 3. Модель бенчмарк-эксперимента IRON 88

Микросечения ядерных реакций детекторов

При расчете скоростей реакций, измеренных в эксперименте, в основном использовались рекомендуемые микросечения из дозиметрической библиотеки IRDFF [12]. Скорость реакции $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$ рассчитывалась с использованием микросечений, входящих в состав используемых в расчетах библиотек. Скорость реакции $^{32}\text{S}(n,p)^{32}\text{P}$ дополнительно рассчитывалась и с использованием микросечений из библиотеки ENDF/B-VI, значительно отличающихся от данных IRDFF. Отметим, что данные по микросечениям реакции $^{32}\text{S}(n,p)^{32}\text{P}$ остались аналогичными версии VI и в последующих оценках файлов ENDF/B версий VII и VIII, а также в РОСФОНД-2010. Используемые в расчетах микросечения пороговых реакций приведены на рис. 4.

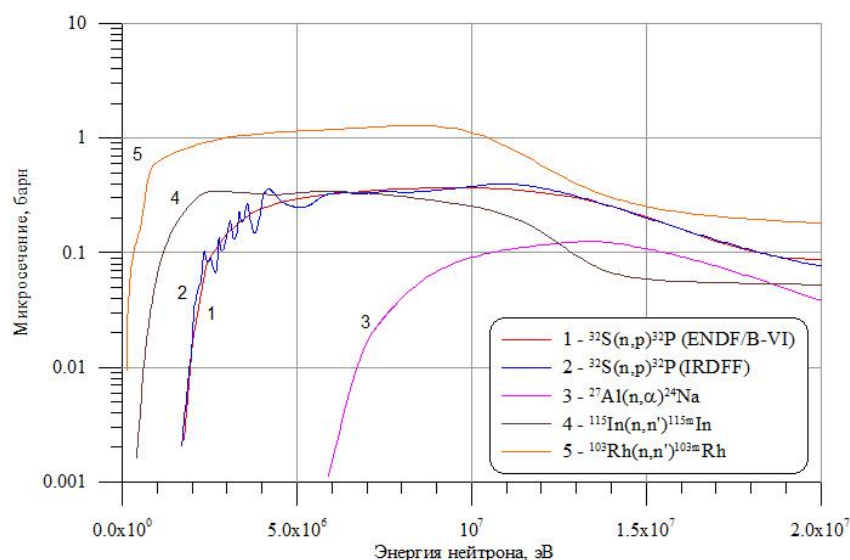


Рис. 4. Микросечения пороговых реакций

Моделирование детекторов

В расчетах по программе MCNP 5 пороговые детекторы непосредственно не моделировались. Регистрационные объемы для подсчета этих скоростей реакций представляли из себя цилиндры радиусом 5 см и высотой 0,74 см каждый, расположенные на оси конвертора в зазорах между стальными листами. Отметим, что аналогичный подход используется

и в примере модели, представленной в [3]. Детекторы из золота моделировались в явном виде. Толщина детектора принималась равной 0,05 мм, радиус – 6,35 мм. Детектор со всех сторон был окружен слоем кадмия толщиной 1,27 мм. Детекторы в модели были расположены в середине соответствующих зазоров.

В расчетах по программному комплексу SCALE 6.2.2 для подсчета пороговых скоростей реакций использовались точечные детекторы. Золотые детекторы моделировались, как и в MCNP.

Особенности расчетов

Расчеты скоростей реакций пороговых детекторов и детекторов из золота по программе MCN 5 проводились отдельно. Практически для всех скоростей реакций и позиций детекторов принята целевая статистическая погрешность подсчетов менее 1-2 % при уровне доверительной вероятности 1σ (что значительно меньше погрешности эксперимента) была достигнута без применения методов уменьшения дисперсии при количестве историй от 1 до 10 млрд. Исключение составили подсчеты скорости реакции $^{32}\text{S}(n,p)^{32}\text{P}$ для периферийных позиций детекторов, статистическая погрешность подсчетов которой была более 10 %. Для достижения целевой статистической погрешности расчеты были повторены с монотонным увеличением значения ценности нейтронов от прилегающих к конвертору стальных листов к периферийным от 1 до 128. Целевая точность была достигнута, другие критерии, характеризующие корректность полученных оценок, также выполнены.

Расчет по программному комплексу SCALE 6.2 проводился с использованием последовательности MAVRIC, основанной на методологии CADIS. MAVRIC разработана специально для решения задач радиационной защиты с использованием неаналоговых методов Монте-Карло и реализует последовательный процесс вычислений с использованием модулей DENOVO (расчет прямой и сопряженной задач в трехмерной геометрии методом дискретных ординат) и MONACO (трехмерный транспортный модуль расчета с фиксированным источником, использующий метод Монте-Карло). С полученной посредством модуля XSPROC проблемно-ориентированной многогрупповой библиотекой и определенной пользователем «грубой» сеткой MAVRIC выполняет расчет прямой и сопряженной задач в трехмерной геометрии методом дискретных ординат, используя модуль DENOVO. В качестве источника для сопряженной задачи используется реверсированная функция отклика в позициях детекторов, полученная из решения прямой задачи. Информация из решения сопряженной задачи используется далее для построения пространственно и энергезависимого поля ценности (или так называемых «весовых окон»), используемого при моделировании транспорта частиц, и распределения источника. Эта информация передается в модуль MONACO для получения итогового решения задачи методом Монте-Карло с использованием непрерывных по энергии или многогрупповых библиотек. При моделировании эксперимента IRON 88 поля ценности рассчитывались по модулю DENOVO отдельно для каждого детектора в каждой позиции, также проводился отдельный расчет и по MONACO для каждой позиции детектора. Количество историй для достижения целевой статистической погрешности не превышало 5 млн.

Результаты расчетов

Результаты расчетов скоростей реакций по программе MCNP приведены в табл. 2, по SCALE 6.2 – в табл. 3. Результаты расчета скорости реакции $^{32}\text{S}(n,p)^{32}\text{P}$ в этих таблицах приведены с использованием микросечений из библиотеки IRDFF, результаты расчета с библиотекой ENDF/B-VI согласуются с данными IRDFF в пределах 1 %.

На рис. 5 приведено сравнение результатов расчета различных скоростей реакций между программой MCNP 5 и SCALE 6.2 с различными библиотеками, подготовленными из одних и тех же файлов ENDF/B-VII.1, в виде относительного отклонения результатов расчета по SCALE 6.2 от MCNP 5.

На рис. 6 представлены данные по относительному отклонению результатов расчета скоростей пороговых реакций с использованием 200-групповой библиотеки от результатов с использованием непрерывной по энергии библиотеки микросечений. Значение скорости реакции $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$ с многогрупповой библиотекой в среднем по всем позициям примерно на 47 % меньше, чем с непрерывной по энергии библиотекой.

На рис. 7 приведено сравнение результатов расчета по программе MCNP 5 с экспериментальными данными в виде относительного отклонения расчетных значений от экспериментальных. На рис. 5 также представлена погрешность экспериментальных данных, соответствующая 2σ (доверительная вероятность 95 %).

Таблица 2

Результаты расчетов скоростей реакций по MCNP 5 (с^{-1}) и статистическая погрешность, %

Позиция	$^{32}\text{S}(n,p)^{32}\text{P}$		$^{115}\text{In}(n,n')^{115\text{m}}\text{In}$		$^{103}\text{Rh}(n,n')^{103\text{m}}\text{Rh}$		$^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$		$^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$	
ENDF/B-VII.1										
A2	1.779E-17	0.03	6.646E-17	0.02	3.238E-16	0.02			9.630E-15	0.48
A3	3.878E-18	0.04	2.170E-17	0.03	1.392E-16	0.02	2.586E-20	0.25	5.918E-15	0.51
A4	1.305E-18	0.05	9.603E-18	0.04	7.716E-17	0.03			4.141E-15	0.56
A5	4.740E-19	0.06	4.578E-18	0.06	4.585E-17	0.03	2.972E-21	0.40	3.049E-15	0.63
A6	1.777E-19	0.09	2.288E-18	0.08	2.851E-17	0.04	1.149E-21	0.56	2.280E-15	0.69
A7	6.651E-20	0.11	1.170E-18	0.10	1.814E-17	0.04	4.404E-22	0.69	1.741E-15	0.78
A8	2.523E-20	0.16	6.275E-19	0.12	1.195E-17	0.05			1.373E-15	0.86
A9	9.490E-21	0.21	3.464E-19	0.15	8.019E-18	0.06			1.129E-15	0.97
A10	3.619E-21	0.29	1.976E-19	0.18	5.480E-18	0.07			9.267E-16	1.07
A11	1.359E-21	0.37	1.150E-19	0.21	3.789E-18	0.07			7.729E-16	1.15
A12	5.221E-22	0.53			2.670E-18	0.08			6.489E-16	1.28
A13	2.073E-22	0.65			1.917E-18	0.09			5.530E-16	1.33
A14	8.080E-23	0.90			1.388E-18	0.11			4.710E-16	1.51
A15	3.226E-23	1.11							4.153E-16	1.58
ENDF/B-VIII.0										
A2	1.750E-17	0.03	6.580E-17	0.02	3.222E-16	0.01			9.636E-15	0.47
A3	3.561E-18	0.04	2.062E-17	0.02	1.355E-16	0.02	2.462E-20	0.26	5.835E-15	0.51
A4	1.147E-18	0.06	8.928E-18	0.03	7.443E-17	0.02			4.036E-15	0.56
A5	4.021E-19	0.07	4.180E-18	0.04	4.394E-17	0.02	2.671E-21	0.42	2.882E-15	0.62
A6	1.461E-19	0.10	2.060E-18	0.06	2.717E-17	0.03	9.997E-22	0.60	2.161E-15	0.70
A7	5.309E-20	0.13	1.047E-18	0.07	1.726E-17	0.03	3.694E-22	0.76	1.663E-15	0.79
A8	1.969E-20	0.18	5.547E-19	0.09	1.130E-17	0.04			1.293E-15	0.86
A9	7.294E-21	0.23	3.029E-19	0.11	7.543E-18	0.04			1.043E-15	0.98
A10	2.705E-21	0.33	1.706E-19	0.13	5.119E-18	0.05			8.628E-16	1.05
A11	9.972E-22	0.41	9.832E-20	0.16	3.516E-18	0.05			7.330E-16	1.17
A12	3.839E-22	0.60			2.458E-18	0.06			6.166E-16	1.32
A13	1.492E-22	0.74			1.748E-18	0.07			5.156E-16	1.41
A14	5.866E-23	1.05			1.252E-18	0.08			4.449E-16	1.49
A15	2.260E-23	1.28							3.768E-16	1.64
JEFF-3.3										
A2	1.79E-17	0.03	6.689E-17	0.02	3.262E-16	0.02			9.563E-15	0.47
A3	4.00E-18	0.04	2.233E-17	0.03	1.431E-16	0.02	2.575E-20	0.25	5.950E-15	0.51
A4	1.38E-18	0.05	1.009E-17	0.04	8.076E-17	0.03			4.109E-15	0.55
A5	5.14E-19	0.06	4.891E-18	0.06	4.851E-17	0.03	2.953E-21	0.40	2.963E-15	0.61
A6	1.98E-19	0.09	2.472E-18	0.07	3.029E-17	0.04	1.115E-21	0.56	2.233E-15	0.70
A7	7.60E-20	0.11	1.277E-18	0.10	1.930E-17	0.04	4.23E-22	0.71	1.719E-15	0.79
A8	2.96E-20	0.15	6.860E-19	0.12	1.265E-17	0.05			1.369E-15	0.87
A9	1.15E-20	0.19	3.763E-19	0.15	8.401E-18	0.06			1.133E-15	0.97

Продолжение табл. 2

Позиция	$^{32}\text{S}(n,p)^{32}\text{P}$		$^{115}\text{In}(n,n')^{115\text{m}}\text{In}$		$^{103}\text{Rh}(n,n')^{103\text{m}}\text{Rh}$		$^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$		$^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$	
JEFF-3.3										
A10	4.52E-21	0.26	2.128E-19	0.18	5.669E-18	0.07			9.408E-16	1.06
A11	1.74E-21	0.33	1.228E-19	0.22	3.866E-18	0.08			7.681E-16	1.15
A12	6.88E-22	0.46			2.673E-18	0.09			6.675E-16	1.25
A13	2.76E-22	0.56			1.884E-18	0.10			5.554E-16	1.35
A14	1.12E-22	0.77			1.337E-18	0.11			4.906E-16	1.48
A15	4.47E-23	0.94							4.085E-16	1.58
РОСФОНД-2010										
A2	1.78E-17	0.03	6.678E-17	0.02	3.251E-16	0.02			9.516E-15	0.68
A3	3.97E-18	0.04	2.217E-17	0.03	1.415E-16	0.02	2.577E-20	0.25	5.912E-15	0.72
A4	1.36E-18	0.05	9.937E-18	0.04	7.937E-17	0.03			4.086E-15	0.78
A5	5.04E-19	0.06	4.774E-18	0.06	4.757E-17	0.03	2.954E-21	0.40	3.019E-15	0.88
A6	1.92E-19	0.09	2.400E-18	0.08	2.979E-17	0.04	1.121E-21	0.56	2.259E-15	1.00
A7	7.30E-20	0.11	1.234E-18	0.10	1.913E-17	0.04	4.305E-22	0.71	1.735E-15	1.12
A8	2.82E-20	0.16	6.618E-19	0.12	1.268E-17	0.05			1.376E-15	1.26
A9	1.08E-20	0.19	3.654E-19	0.15	8.572E-18	0.06			1.114E-15	1.35
A10	4.18E-21	0.27	2.087E-19	0.17	5.911E-18	0.06			9.118E-16	1.63
A11	1.61E-21	0.34	1.218E-19	0.21	4.122E-18	0.07			7.794E-16	1.68
A12	6.17E-22	0.48			2.927E-18	0.08			6.424E-16	1.84
A13	2.46E-22	0.59			2.124E-18	0.09			5.535E-16	1.94
A14	9.65E-23	0.85			1.549E-18	0.10			4.609E-16	2.09
A15	3.88E-23	1.08							4.134E-16	2.31

Таблица 3

Результаты расчетов скоростей реакций по SCALE 6.2 (с^{-1}) и статистическая погрешность, %

Позиция	$^{32}\text{S}(n,p)^{32}\text{P}$		$^{115}\text{In}(n,n')^{115\text{m}}\text{In}$		$^{103}\text{Rh}(n,n')^{103\text{m}}\text{Rh}$		$^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$		$^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$	
			$^{\text{m}}\text{In}$		$^{\text{m}}\text{Rh}$		a		Au	
Непрерывная по энергии библиотека										
A2	1.791E-17	0.17	6.699E-17	0.15	3.258E-16	0.15			9.519E-15	1.35
A3	3.914E-18	0.33	2.191E-17	0.24	1.401E-16	0.19	2.597E-20	0.47	5.771E-15	1.38
A4	1.319E-18	0.40	9.729E-18	0.28	7.840E-17	0.20			3.995E-15	0.85
A5	4.724E-19	0.45	4.639E-18	0.29	4.653E-17	0.21	3.048E-21	0.72	2.916E-15	0.93
A6	1.772E-19	0.48	2.332E-18	0.37	2.904E-17	0.22	1.152E-21	0.79	2.220E-15	1.01
A7	6.568E-20	0.53	1.194E-18	0.31	1.863E-17	0.22	4.425E-22	0.83	1.683E-15	0.88
A8	2.541E-20	0.57	6.405E-19	0.31	1.226E-17	0.23	2.597E-20	0.47	1.368E-15	0.88
A9	9.587E-21	0.57	3.548E-19	0.34	8.204E-18	0.24			1.091E-15	1.10
A10	3.609E-21	0.58	2.015E-19	0.33	5.588E-18	0.25			9.181E-16	0.86
A11	1.354E-21	0.61	1.183E-19	0.35	3.883E-18	0.27			7.584E-16	0.82
A12	5.183E-22	0.61			2.728E-18	0.27			6.422E-16	0.83
A13	2.068E-22	0.76			1.964E-18	0.28			5.409E-16	0.83
A14	7.950E-23	0.66			1.410E-18	0.32			4.650E-16	0.71
A15	3.115E-23	0.72							4.018E-16	0.69
200-групповая библиотека										
A2	1.832E-17	0.17	6.785E-17	0.15	3.262E-16	0.16			5.206E-15	1.10
A3	3.990E-18	0.31	2.219E-17	0.23	1.442E-16	0.20	2.841E-20	0.42	3.031E-15	0.65
A4	1.337E-18	0.38	9.784E-18	0.26	8.138E-17	0.22			2.126E-15	0.95
A5	4.836E-19	0.51	4.570E-18	0.29	4.883E-17	0.23	3.314E-21	0.61	1.576E-15	0.95
A6	1.799E-19	0.47	2.239E-18	0.31	3.041E-17	0.23	1.271E-21	0.68	1.169E-15	0.73
A7	6.632E-20	0.50	1.111E-18	0.31	1.924E-17	0.24	4.895E-22	0.73	9.141E-16	0.80
A8	2.490E-20	0.53	5.685E-19	0.32	1.251E-17	0.24			7.319E-16	0.60

Продолжение табл. 3.

Позиция	$^{32}\text{S}(n,p)^{32}\text{P}$		$^{115}\text{In}(n,n')^{115}\text{mIn}$		$^{103}\text{Rh}(n,n')^{103}\text{mRh}$		$^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$	$^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$	
200-групповая библиотека									
A9	9.353E-21	0.55	3.009E-19	0.33	8.264E-18	0.27		6.004E-16	0.67
A10	3.492E-21	0.56	1.637E-19	0.33	5.501E-18	0.26		4.980E-16	0.65
A11	1.294E-21	0.58	9.023E-20	0.34	3.689E-18	0.29		4.126E-16	0.97
A12	4.956E-22	0.59			2.510E-18	0.27		3.399E-16	0.50
A13	1.886E-22	0.59			1.714E-18	0.28		2.863E-16	0.77
A14	7.139E-23	0.59			1.179E-18	0.28		2.382E-16	1.09
A15	2.682E-23	0.62						2.025E-16	1.45

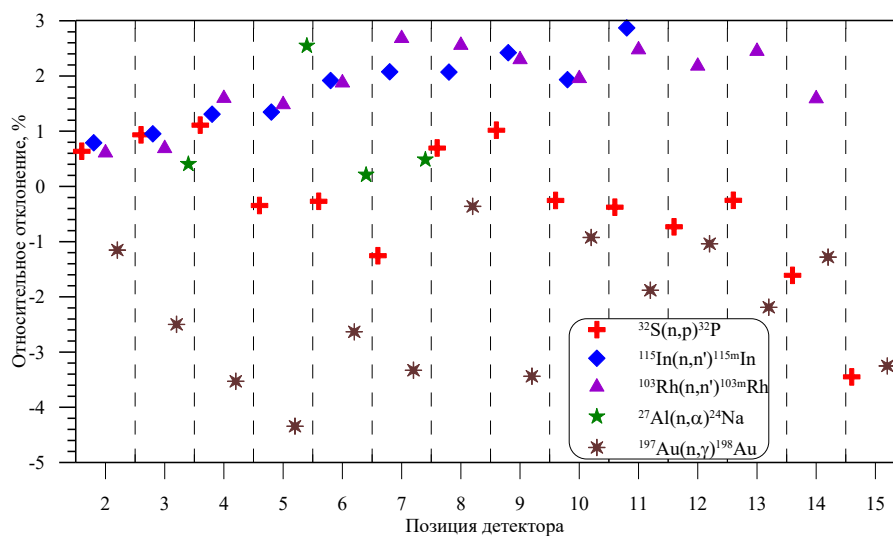


Рис. 5. Относительное отклонение результатов расчета по SCALE 6.2.2 от MCNP 5

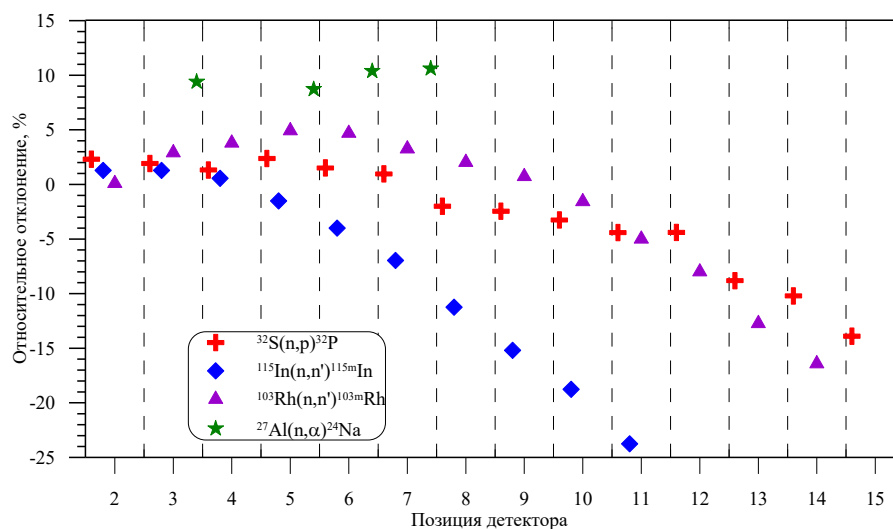


Рис. 6. Относительное отклонение результатов расчета с 200-групповой библиотекой от результатов с непрерывной по энергии библиотекой

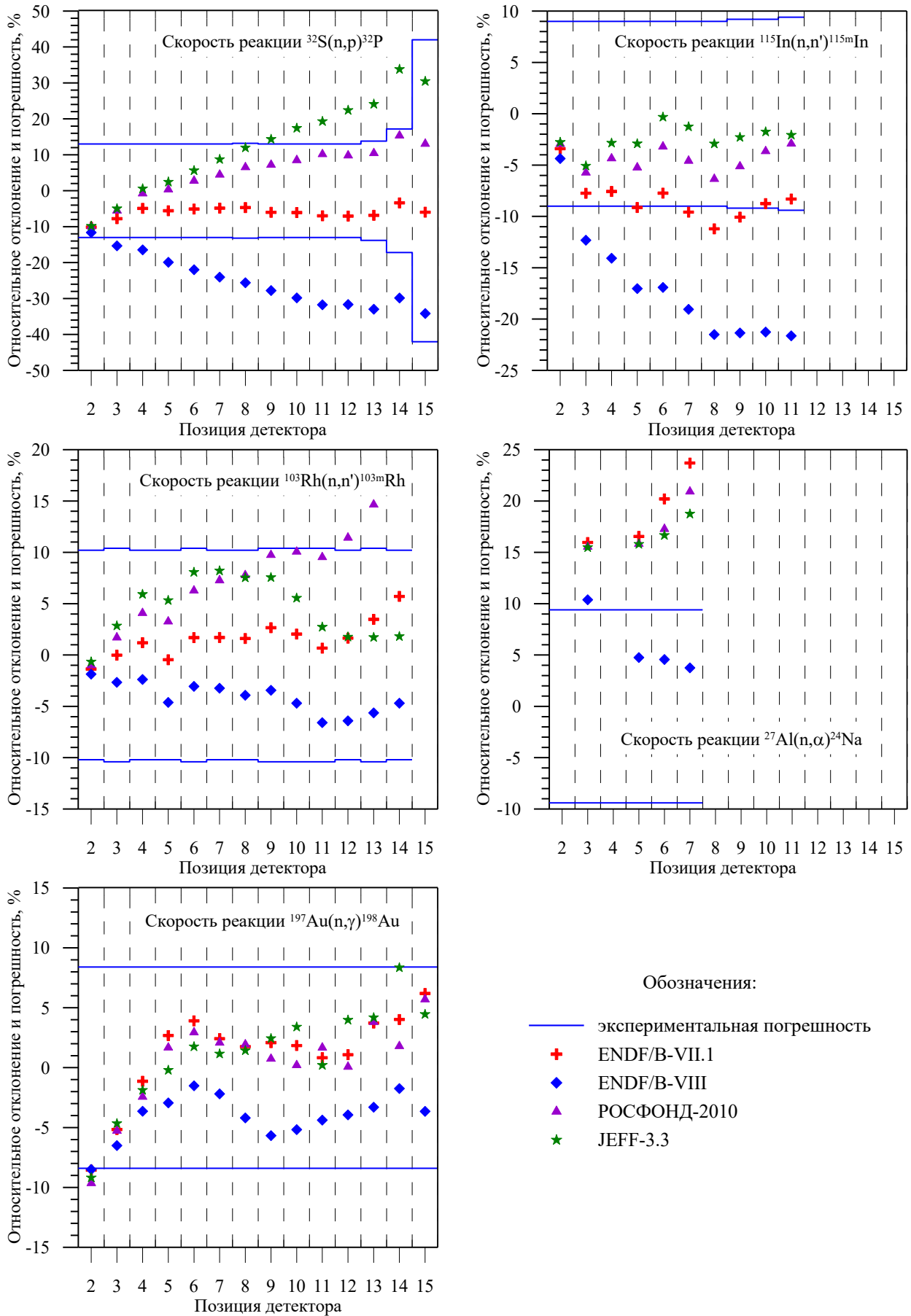


Рис. 7. Относительное отклонение результатов расчета по MCNP 5 с различными библиотеками от экспериментальных данных

Обсуждение результатов

Результаты расчета по MCNP 5 и SCALE 6.2.2 (рис. 5) с различными библиотеками, подготовленными из одних и тех же файлов ENDF/B-VII.1, удовлетворительно коррелируют между собой, максимальное отклонение не превышает 4,3 % и реализуется для скорости реакции $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$. Это свидетельствует как о корректности подготовки библиотек, так и собственно метода Монте-Карло, реализованного в этих программах.

Из анализа данных, представленных на рис. 6, можно сделать вывод, что результаты расчета с использованием многогрупповой библиотеки значительно отличаются от результатов расчета с использованием непрерывной по энергии зависимостью микросечений.

Из сравнения результатов расчета скоростей реакций по программе MCNP 5 с различными библиотеками микросечений с экспериментальными данными отметим следующее.

1. Результаты расчета скорости реакции $^{32}\text{S}(n,p)^{32}\text{P}$ удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными только для библиотек ENDF/B-VII.1 и РОСФОНД-2010. При этом максимальная величина относительного отклонения для этих библиотек находится в пределах экспериментальной погрешности при уровне 2σ . Результаты расчета с библиотекой JEFF-3.3 по мере удаления от конвертора значительно выше экспериментальных данных (до 33,8 %), а с библиотекой ENDF/B-VIII.0 – ниже экспериментальных данных (до 34,1 %). Наилучшее согласие с экспериментом наблюдается для библиотеки ENDF/B-VII.1.

2. Результаты расчета скорости реакции $^{115}\text{In}(n,n')^{115\text{m}}\text{In}$ удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными для всех библиотек за исключением результатов расчета с библиотекой ENDF/B-VIII.0, максимальное относительное отклонение для которой достигает – 21,6 %. Результаты расчета с JEFF-3.3 имеют наименьшее отличие от эксперимента.

3. Расчетные скорости реакции $^{103}\text{Rh}(n,n')^{103\text{m}}\text{Rh}$ удовлетворительно согласуются с экспериментом для всех библиотек за исключением РОСФОНД-2010 в периферийных позициях детекторов. При этом для библиотеки РОСФОНД-2010 наблюдается монотонное возрастание относительного отклонения.

4. Результаты расчета скорости реакции $^{27}\text{Al}(n,\alpha)^{24}\text{Na}$ удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными только для библиотеки ENDF/B-VIII.0. Для других библиотек результаты расчета мало отличаются между собой, а относительное отклонение от эксперимента возрастает по мере удаления от конвертора. Отметим, что на результаты расчета этой скорости реакции значимое влияние оказывает спектр нейтронов деления, неопределенность оценки которого в высокоэнергетической области значительна.

5. Результаты расчета скорости реакции $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$ удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными для всех библиотек.

Заключение

Проведена валидация библиотек нейтронных микросечений, подготовленных из файлов оцененных ядерных данных ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII.0, JEFF-3.3 и РОСФОНД-2010, применительно к бенчмарк-эксперименту IRON 88, включающему композицию защиты из малоуглеродистой стали. Результаты расчетов по программе MCNP 5 с использованием различных библиотек нейтронных микросечений значительно отличаются между собой (до 2 раз по скорости реакции $^{32}\text{S}(n,p)^{32}\text{P}$), что свидетельствует о имеющихся неопределенностях в микросечениях ядерных реакций на железе. Результаты расчетов с наиболее поздними оценками из ENDF/B-VIII.0 имеют наибольшее отличие от эксперимента. Наиболее точные по отношению к эксперименту результаты расчета наблюдаются при использовании библиотеки ENDF/B-VII.1. Методы подготовки библиотек с непрерывной по энергии зависимостью с использованием комплексов NJOY различных версий и AMPX-6 представляются корректными. Использование многогрупповых библиотек в сочетании с методом Монте-Карло вно-

сит значимую погрешность в результаты расчета, при этом использование непрерывных по энергии библиотек предпочтительнее.

Представленные результаты могут быть полезны оценщикам ядерных данных, разработчикам многогрупповых библиотек, а также разработчикам детерминистских транспортных кодов для верификации используемых численных методов.

Библиографический список

1. MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5. LA-UR-03-1987. LANL, 2003.
2. **Rearden B.T., Jessee M.A.** Editors. SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39 Version 6.2.2, 2017.
3. SINBAD 2000. Shielding Integral Benchmark Archive and Database. DLC-191. ORNL, 2000.
4. **Kodeli, Ivan** Examples of Use of SINBAD Database for Nuclear Data and Code validation / Ivan Kodeli, Gašper Žerovnik, Alberto Milocco // EPJ Web of Conferences 153, 02010 (2017).
5. **Грабежной, В.А.** Расчет серии экспериментов по радиационной защите из базы данных «SINBAD» с использованием констант «БНАБ-РФ» / В.А. Грабежной, Г.Б. Ломаков, Г.Н. Мантуров // Ядерная и радиационная безопасность. – №2 (84). – 2017.
6. ACE formatted files for the ENDF/B-VII.1 Evaluated Nuclear Data Library. <https://www.nndc.bnl.gov/endl/b7.1/acefiles.html>.
7. Lib80x – Library based on ENDF/B-VIII.0. <https://nucleardata.lanl.gov/ACE/Production/Lib80x.html>
8. JEFF-3.3. http://www.oecd-nea.org/dbdata/jeff/jeff33/#_jeff-33_downloads.
9. РОСФОНД – Российская библиотека Файлов Оцененных Нейтронных Данных. <https://www.ippe.ru/reactors/reactor-constants-datacenter/rosfond-neutron-database>.
10. NJOY99.0 «Code System for Producing, Pointwise and Multigroup Neutron and Photon Cross Sections from ENDFB Data». PSR-480, RSICC, 2000.
11. AMPX-6: A modular code system for processing ENDF/B evaluations. ORNL/TM-2016/43, 2016.
12. International Reactor Dosimetry and Fusion File IRDFF v.1.05, 09 October, 2014. – Режим доступа: <https://www-nds.iaea.org/IRDFF>.

*Дата поступления
в редакцию: 18.12.2019*

V.V. Andreev¹, A.V. Salyaev², S.G. Usynina², S.V. Bronnikov¹

MODELLING THE BENCHMARK EXPERIMENT IRON 88 WITH USE OF PROGRAMS ON THE BASIS OF METHOD MONTE-CARLO

Nizhny Novgorod state technical university n.a. R.E. Alekseev¹
Federal State Unitary Enterprise I.I. Afrikantov OKB Mechanical Engineering²

Purpose: The purpose was validating MCNP5 and SCALE 6.2 together with neutron libraries as applied to the calculation of neutron radiation transport in mild steel shielding of benchmark experiment IRON88.

Design/methodology/approach: We simulated the benchmark experiment by means of MCNP5 and SCALE6 code system using a continuous-energy and 200 multigroup of neutron cross section library.

Findings: As a result, the obtained reaction rates of threshold detectors were compared with the benchmark experiment IRON88. We also determined the error in the result of calculating the reaction rates when using a 200-group library of cross sections in comparison with a continuous-energy library.

Research limitations/implications: The present study can be useful to estimators of nuclear data, developers of multigroup libraries, and also developers deterministic transport codes to verification of used numerical methods.

Originally/value: It is generally accepted that uncertainty of the calculation of reaction rates in benchmark programs depends only on the uncertainty of the estimated nuclear data. Carried out research shows, that methods of preparation of energy-continuous libraries based on the same files of evaluated nuclear data can be of great importance.

Key words: IRON 88, MCNP 5, SCALE-6.2.2, ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII.0, JEFF-3.3, РОСФОНД-2010, continuous-energy library, reaction rate, uncertainty, benchmark experiment, cross section, code, Monte-Carlo.