

ДЕТАЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА IRON 88 НА УСТАНОВКЕ ASPIS В (r, z) - И (x, y, z) -ГЕОМЕТРИЯХ

О.В. Николаева, С.А. Гайфулин, Л.П. Басс

*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН
125047, Москва, Миусская пл., 4*

Р

Приведены результаты моделирования известного эксперимента Iron 88 из базы данных SINBAD по измерению скоростей реакций $^{32}\text{S} (n,p) ^{32}\text{P}$, $^{115}\text{In} (n,n') ^{115m}\text{In}$, $^{103}\text{Rh} (n,n') ^{103m}\text{Rh}$, $^{27}\text{Al} (n,\alpha) ^{24}\text{Na}$ и $^{197}\text{Au} (n,\gamma) ^{198}\text{Au}$. Основная проблема состоит в моделировании реакции на золоте, поскольку сам детектор и его чехол (кадмий) существенно меняют потоки нейтронов.

Моделирование реакции на золоте выполняется при задании детекторов и чехлов с помощью пространственной сетки. Для вычисления скоростей реакции используются значения потоков нейтронов в ячейках, образующих детекторы. Расчеты выполняются как в двумерной (r, z) -геометрии, так и в трехмерной (x, y, z) -геометрии. В последнем случае для задания детекторов и чехлов используется неструктурированная тетраэдрическая сетка. Расчеты выполняются с многогрупповыми системами констант ENDFB-VII, БНАБ-93, БНАБ-РФ. Расчеты остальных (пороговых) реакций выполняются без задания самих детекторов.

Показано, что результаты расчета пороговых реакций в различных геометриях и с разными системами констант в целом удовлетворительно согласуются друг с другом и с экспериментальными данными. Результаты расчета реакции на золоте согласуются с экспериментом только при расчете в трехмерной (x, y, z) -геометрии при учете детектора и чехла.

При моделировании активации золота в эксперименте Iron 88 необходимо учитывать влияние измерительного прибора на поле нейтронов.

Ключевые слова: эксперимент Iron 88, скорости реакций, моделирование эксперимента, тетраэдрические сетки, параллельные вычисления, многогрупповые константы.

ВВЕДЕНИЕ

Эксперимент «Winfrith Iron 88 Benchmark» [1, 2] из базы данных SINBAD [3] был выполнен на установке ASPIS, представляющей собой тележку-короб. В эксперименте тележка помещается в полость, примыкающую к реактору NESTOR. Выходящий из реактора тепловой поток нейтронов попадает на расположенный в установке ASPIS конвертор – пластину из сплава урана с алюминием. Пластина имеет толщину 2 см и эффективный радиус 56 см. Обогащение урана составляет 93%; конвертор преобразует тепловой поток нейтронов реактора в поток нейтронов со спектром деления ^{235}U . Мощность конвертора – 17.04 Вт.

© **О.В. Николаева, С.А. Гайфулин, Л.П. Басс, 2019**

Параллельно конвертору располагаются 13 пластин из мягкой стали. В поперечном сечении каждая пластина имеет размер 1.8×1.9 м. Толщина каждой пластины – 5.1 см. Общая толщина всей защитной композиции – 67 см. Величины зазоров между пластинами – 0.74 см. В эти зазоры, в зазоры перед и после композиции вставляются детекторы. Детекторы помещаются вдоль горизонтальной оси, проходящей через центр конвертора.

В качестве детекторов используются активационные фольги из различных материалов – Al, In, Rh, S, Au. Детектор из золота облучается в кадмиевом чехле толщиной 0.127 мм. Высота каждого детектора равна величине зазора – 0.74 см.

Измеряются скорости эпикадмиевой ^{197}Au (n, γ) ^{198}Au и пороговых ^{32}S (n, p) ^{32}P , ^{115}In (n, n') $^{115\text{m}}\text{In}$, ^{103}Rh (n, n') $^{103\text{m}}\text{Rh}$, ^{27}Al (n, α) ^{24}Na реакций. Определяется интенсивность источника нейтронов путем спектрометрирования гамма-излучения продуктов деления и измерения пространственного распределения потока нейтронов перед и за конвертором.

Излучение источника содержит вклад от конвертора и от активной зоны (АЗ) реактора NESTOR. Фоновые потоки нейтронов от АЗ находятся с помощью измерений с конвертором и без конвертора и вычитаются из результатов измерений с конвертором. Все представляемые результаты нормируются на мощность конвертора.

Данный эксперимент позволяет оценить точность различных систем констант при расчете энергетических распределений потоков нейтронов. Результаты эксперимента в настоящее время используются для оценки ядерных данных [2, 4].

Авторы эксперимента оценивают его полную погрешность на уровне 1σ в 5 – 7% [2]. Полная погрешность включает в себя статистическую погрешность, погрешность калибровки детекторов, а также погрешность определения абсолютной мощности конвертора. В работе [5] предлагается использовать уровень 3σ и оценивать погрешность в 20%.

Экспериментальная установка является осесимметричной. Пространственное распределение потоков нейтронов от конвертора является почти осесимметричным (среднее отклонение потока нейтронов от его аппроксимации осесимметричной функцией – 6%). Поэтому моделирование данного эксперимента сеточным методом обычно выполняется в осесимметричной геометрии [5]. Также при моделировании используется метод Монте-Карло [2].

Однако, если скорости пороговых реакций удастся рассчитать с хорошей точностью, то вычисление скорости эпикадмиевой реакции ^{197}Au (n, γ) ^{198}Au сталкивается с трудностями. Вычисленные значения оказываются более чем вдвое больше измеренных.

Для объяснения этого факта используются две гипотезы. Первая гипотеза опирается на тот факт, что в описании эксперимента отсутствует информация, позволяющая оценить погрешность измерения фона [2]. Предполагается, что оценка величины фона занижена, и при моделировании в расчетную область перед конвертором включается дополнительный блок графита толщины 1 м. Считается, что блок ослабляет фоновые потоки. В результате удастся получить хорошее согласие между вычисленными и измеренными скоростями реакций. При этом в ближайших к конвертору детекторах вычисленные величины оказываются заниженными (до 10%), а в удаленных детекторах – завышенными (также до 10%) [2].

Вторая гипотеза опирается на тот факт, что и золото (детектор), и кадмий (чехол детектора) существенно влияют на распределение потоков нейтронов, вызывающих реакцию ^{197}Au (n, γ) ^{198}Au . Поэтому применяется блокированное сечение реакции ^{197}Au (n, γ) ^{198}Au , найденное с учетом золотой фольги и кадмиевого чехла [5]. Тогда отклонение рассчитанных скоростей реакций от экспериментальных данных не

превышает 20%.

Ниже приведены результаты моделирования реакции $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$ без включения в область расчета дополнительных элементов, но с прямым учетом детекторов и их чехлов как в осесимметричной (r, z) -, так и в трехмерной (x, y, z) -геометрии. Скорости реакций находятся с использованием стандартных сечений реакций.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Для задания геометрии установки вводятся системы координат. Начало декартовой системы (X, Y, Z) помещается в центр конвертора, ось Z помещается на его ось. Детекторы оказываются расположенными на оси Z , а конвертор – в плоскости (X, Y) . При переходе к цилиндрической системе (R, Z) пара переменных (X, Y) заменяется на радиус $R = (X^2 + Y^2)^{1/2}$.

Для задания установки в (r, z) -геометрии используется пространственная сетка, содержащая 112 ячеек по радиусу и 174 ячейки по высоте. Средний шаг сетки по высоте – 1 см, по радиусу – 0.94 см. Поскольку Au-детектор и его чехол являются цилиндрами, их границы точно задаются выбранной сеткой.

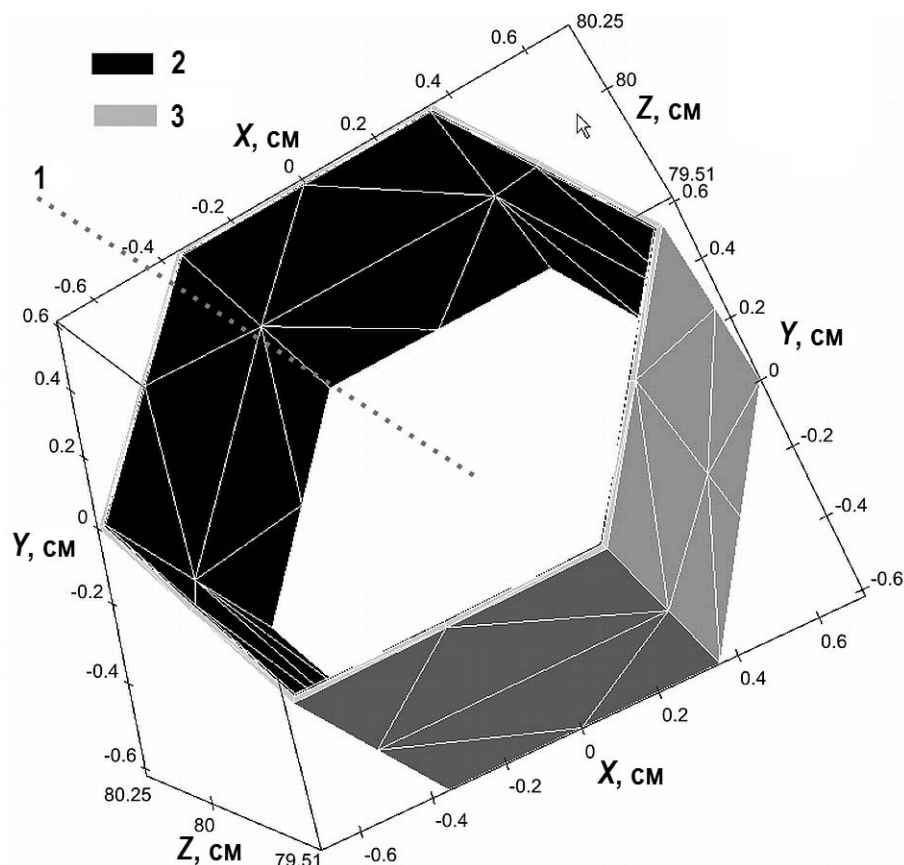


Рис. 1. Ячейки-тетраэдры, задающие Au-детектор и Cd-чехол в (x, y, z) -геометрии: 1 – ось детектора; 2 – Au; 3 – Cd

В трехмерной (x, y, z) -геометрии с помощью программы Salome [6] по методу NETGEN [7] строится неструктурированная тетраэдрическая сетка. Эта сетка задает каждый Au-детектор в Cd-чехле с помощью приблизительно 230 ячеек-тетраэдров. На рисунке 1 представлен самый дальний от конвертора детектор в системе координат (X, Y, Z) . Ребра ячеек-тетраэдров на внешней поверхности детектора и чехла показаны светлыми отрезками.

Благодаря использованию специальных опций программы Salome общее число ячеек сетки оказывается небольшим – порядка 270 тысяч. При этом средний радиус ячейки (радиус сферы того же объема) составляет 1.36 см. Среднее по ячейкам значение параметра качества – отношение самого короткого ребра ячейки к самому длинному – равно 0.42.

В качестве угловой сетки выбирается ES₁₂-квадратура Карлсона [8].

В расчетах используются три многогрупповые библиотеки констант: ENDFB-VII [9] (199 нейтронных групп), БНАБ-93 [10] и БНАБ-РФ [11] (по 299 нейтронных групп). БНАБ-РФ использует библиотеку оцененных данных РОСФОНД [12]. Резонансная блокировка сечений изотопов учитывается с помощью f-факторов Бондаренко без учета гетерогенных эффектов. Файлы сечений, полученные в формате ANISN, преобразуются в формат FMACM с помощью программы ARVES [13]. Для вычисления сечений реакций используется модуль Groups [14] и дозиметрическая библиотека IRDFF [15].

В (r, z)-геометрии расчеты выполняются на персональном компьютере по программе КАСКАД [16] с использованием AWDD-схемы с кусочно-постоянным представлением решения в ячейке [17]. В (x, y, z)-геометрии расчеты выполняются по программе РадугаТ [18] по ThetraLc-схеме с кусочно-линейным представлением решения [19]. Расчет на 64-х ядрах суперкомпьютера «Ломоносов» [20] с использованием 199-ти групп (константы ENDFB-VII) выполняется за 10 суток, с использованием 299-ти групп (константы БНАБ) – за 14 суток.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОРОГОВЫХ РЕАКЦИЙ

При измерении скоростей пороговых реакций ³²S (n,p) ³²P, ¹¹⁵In (n,n') ^{115m}In, ¹⁰³Rh (n,n') ^{103m}Rh, ²⁷Al (n,α) ²⁴Na использовались детекторы без чехлов. Детекторы-цилиндрические трубки располагались вдоль оси Z; их оси совпадали с осью Z.

Численное моделирование реакций проводится без задания детекторов. Поэтому при моделировании потоки нейтронов, формирующие искомые скорости реакций, вычисляются в точках, расположенных не в самих детекторах-цилиндрах, а на их оси.

Таблица 1
Средние по детекторам отклонения (%) вычисленных скоростей реакций от экспериментальных данных

	²⁷ Al (n,α) ²⁴ Na	³² S (n,p) ³² P	¹¹⁵ In (n,n') ^{115m} In	¹⁰³ Rh (n,n') ^{103m} Rh	¹⁹⁷ Au (n,γ) ¹⁹⁸ Au
(r, z), ENDFB-VII	22	8	12	4	22
(r, z), БНАБ-93	30	13	16	2	198
(r, z), БНАБ-РФ	22	4	4	16	20
(x, y, z), ENDFB-VII	30	12	10	3	14
(x, y, z), БНАБ-93	51	7	15	7	108
(x, y, z), БНАБ-РФ	28	14	6	12	15

В таблицах 1, 2 приведены средние по детекторам отклонения (в процентах) сеточных решений друг от друга и от экспериментальных значений. Анализ приведенных данных позволяет сделать следующие выводы.

Для трех реакций ³²S (n,p) ³²P, ¹¹⁵In (n,n') ^{115m}In, ¹⁰³Rh (n,n') ^{103m}Rh все отклонения от эксперимента не превышают 20%. Наименьшее отклонение (3%) достигается при вычислении скорости реакции ¹⁰³Rh (n,n') ^{103m}Rh.

Скорость реакции ²⁷Al (n,α) ²⁴Na находится с большей ошибкой (в лучшем случае 22%). Наименьшие отклонения получены с системами констант ENDFB-VII и

БНАБ-РФ, большие (до 50%) – с системой констант БНАБ-93. Аналогичный результат получен в [5].

Таблица 2

Средние по детекторам отклонения (%) между вычисленными скоростями реакций

	$^{27}\text{Al} (n,\alpha) ^{24}\text{Na}$	$^{32}\text{S} (n,p) ^{32}\text{P}$	$^{115}\text{In} (n,n') ^{115m}\text{In}$	$^{103}\text{Rh} (n,n') ^{103m}\text{Rh}$	$^{197}\text{Au} (n,\gamma) ^{198}\text{Au}$
(r, z), ENDFB-VII – (x, y, z), ENDFB-VII	11	18	4	3	24
(r, z), БНАБ-93 – (x, y, z), БНАБ-93	13	20	4	4	29
(r, z), БНАБ-РФ – (x, y, z), БНАБ-РФ	9	15	3	6	24
(r, z), ENDFB-VII – (r, z), БНАБ-93	19	5	9	7	159
(r, z), БНАБ-93 – (r, z), БНАБ-РФ	17	11	18	15	62
(r, z), ENDFB-VII – (r, z), БНАБ-РФ	3	4	21	22	2
(x, y, z), ENDFB-VII – (x, y, z), БНАБ-93	21	4	8	6	143
(x, y, z), БНАБ-93 – (x, y, z), БНАБ-РФ	20	6	15	13	59
(x, y, z), ENDFB-VII – (x, y, z), БНАБ-РФ	4	1	17	18	2

Таблица 3

Среднее и максимальное отклонения (%) сечений из системы констант БНАБ-93 от сечений из системы констант БНАБ-РФ

Материал	Энергия более 3 МэВ				Энергия менее 1 МэВ			
	Полные сечения		Сечения внутригруппового рассеяния		Полные сечения		Сечения внутригруппового рассеяния	
	Средн.	Макс.	Средн.	Макс.	Средн.	Макс.	Средн.	Макс.
Алюминий	0.2	0.63	0.38	1	6.9	53	7.2	79.7
Графит	2.19	12.3	4.5	20.3	0.56	12	1.95	232
Топливная пластина	0.19	0.56	0.38	0.92	3.9	36	4	71.7
Мягкая сталь	1.7	3.9	5.7	11.3	6	46	10.8	69.5
Нержавеющая сталь	1.95	6.6	6.7	15.3	7.3	63	11	69.7
Бетон	1.86	5.5	9.95	25.7	2.1	33	7.7	77.7
Кадмий					29.7	553	15.4	106
Золото					13.8	140	13.3	97.7

Реакция $^{27}\text{Al} (n,\alpha) ^{24}\text{Na}$ вызывается только нейтронами с энергией более 3 МэВ. Можно видеть (табл. 3), что, хотя среднее различие в сечениях БНАБ-93 и БНАБ-РФ

невелико, в некоторых группах оно может достигать 25%. Это и приводит к значительным отличиям (22%) в вычисленных значениях скоростей реакции $A1^{27}(n,\alpha)Na^{24}$ (см. табл. 2).

В целом можно сказать, что переход от БНАБ-93 к БНАБ-РФ сближает с экспериментальными данными расчетные значения для скоростей реакций $^{27}Al(n,\alpha)^{24}Na$, $^{32}S(n,p)^{32}P$, $^{115}In(n,n')^{115m}In$ и, наоборот, удаляет для $^{103}Rh(n,n')^{103m}Rh$ (см. табл. 1). Такой же результат получен в [5]. Можно сказать, что здесь проявляется интегральный эффект многочисленных, но небольших изменений в групповых сечениях, причем во всех материалах.

Влияние геометрии (r, z) или (x, y, z) на отклонение расчетных величин от экспериментальных для всех пороговых реакций не превышает 20%. Заметим, что изменение геометрии – это замена задающей плотность источника конвертора функции трех переменных (x, y, z) на функцию двух переменных $(r = (x^2 + y^2)^{1/2}, z)$ со средним искажением в 6%. Отклонение в 20% в значениях скоростей реакций показывает, что моделирование пороговых реакций может проводиться и в (r, z) -геометрии.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ $^{197}Au(n,\gamma)^{198}Au$

При численном моделировании этой реакции плотности потока нейтронов вычисляются в ячейках, расположенных непосредственно в детекторах, а не на их оси (см. рис. 1).

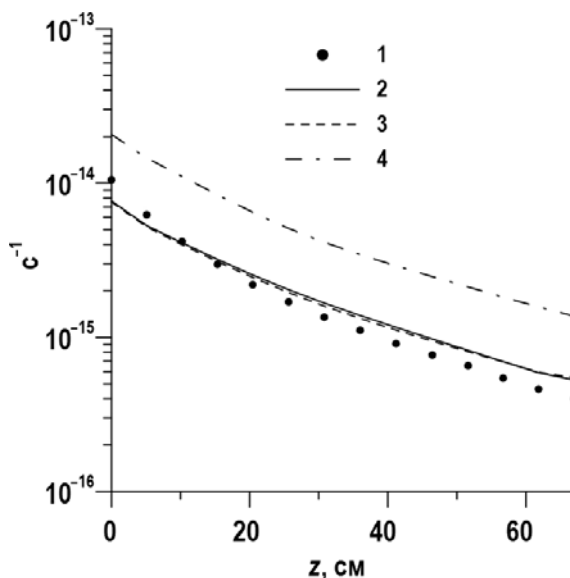


Рис. 2. Скорости реакции $^{197}Au(n,\gamma)^{198}Au$, экспериментальные и полученные в расчетах в (r, z) -геометрии во всех детекторах: 1 – эксперимент; 2 – ENDFB-VII; 3 – БНАБ-РФ; 4 – БНАБ-93

На рисунке 2 приведены значения скорости реакции $^{197}Au(n,\gamma)^{198}Au$ в зависимости от толщины защиты z . Согласие с экспериментом наблюдается для систем констант ENDFB-VII и БНАБ-РФ, но не для системы БНАБ-93. Отметим, что, хотя средние отклонения сечений системы БНАБ-РФ и ее предшественницы БНАБ-93 невелики (табл. 3), максимальные – значительны. Наибольшее отклонение в сечениях наблюдается не в золоте, а в кадмии.

Из рисунка 3 видно, что скорость реакции действительно нужно вычислять в ячейках, образующих детектор, поскольку детектор и чехол существенно меняют пространственное распределение скорости реакции, а значит, и плотности потока нейтронов.

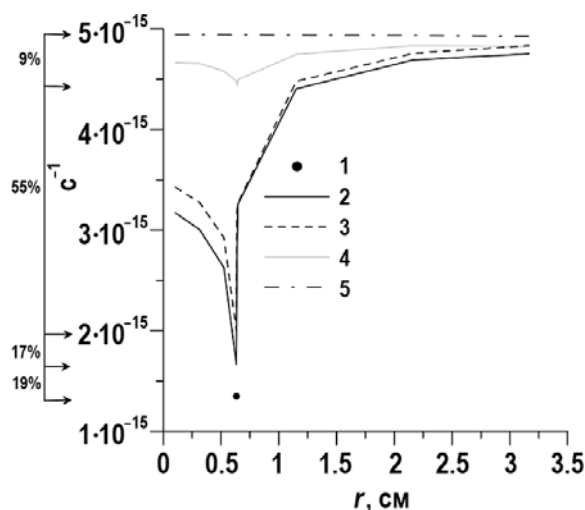


Рис. 3. Радиальные распределения скорости реакции $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$ на линии, проведенной через центральный детектор. Расчет в (r, z) -геометрии с системой констант ENDFB-VII: 1 – эксперимент; 2 – с детектором и чехлом; 3 – с детектором без чехла; 4 – с чехлом без детектора; 5 – без детектора и чехла

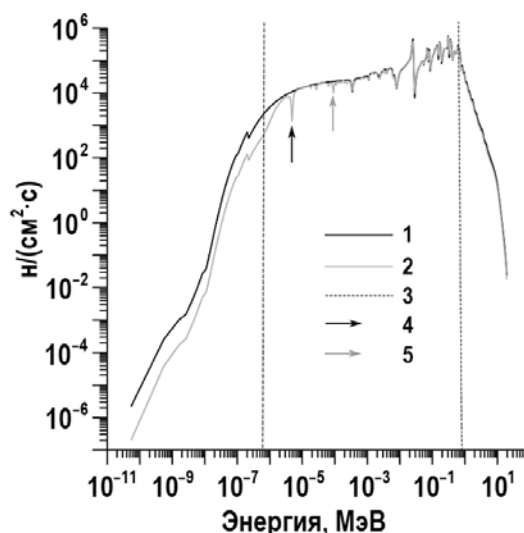


Рис. 4. Плотности потока нейтронов в центральном детекторе. Расчет в (r, z) -геометрии с системой констант БНАБ-РФ: 1 – расчет без учета детектора и чехла; 2 – расчет с учетом детектора и чехла; 3 – границы интервала энергий нейтронов, вклад от которых в скорость реакции составляет 99%; 4 – энергия 4.8 эВ; 5 – энергия 90.9 эВ

Влияние детектора и чехла на энергетическое распределение плотности потока нейтронов показано на рис. 4. Наибольшее отличие в плотностях потока, полученных с учетом и без учета детектора и чехла, наблюдается для энергий 4.8 и 90.9 эВ. Основной (99%) вклад в скорость реакции вносят медленные нейтроны (с энергией от 1 эВ до 1 МэВ). Потоки быстрых нейтронов, формирующие пороговые реакции, в активации золота почти не участвуют. Вклад тепловых нейтронов незначителен (менее 1%), хотя влияние измерительного инструмента является наибольшим именно для потоков тепловых нейтронов.

Альтернативный путь состоит в выполнении расчета без учета детектора и чехла, но с использованием найденного с их учетом заблокированного сечения реакции. Из рисунка 5 можно видеть, что использование заблокированного сечения из [5] позволяет получить величины, не более отклоняющиеся от экспериментальных данных,

чем величины, рассчитанные со стандартным сечением реакции.

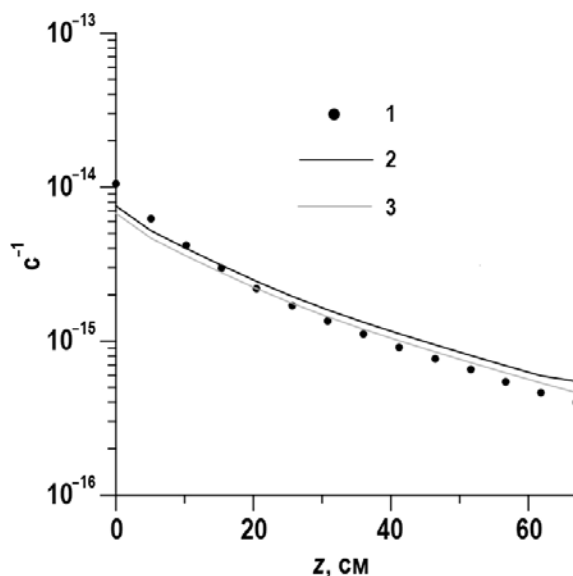


Рис. 5. Скорости реакции $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$. Расчет с системой констант БНАБ-РФ в (r, z) -геометрии: 1 – эксперимент; 2 – расчет при учете детектора и чехла со стандартным сечением реакции; 3 – расчет без учета детектора и чехла с заблокированным сечением реакции

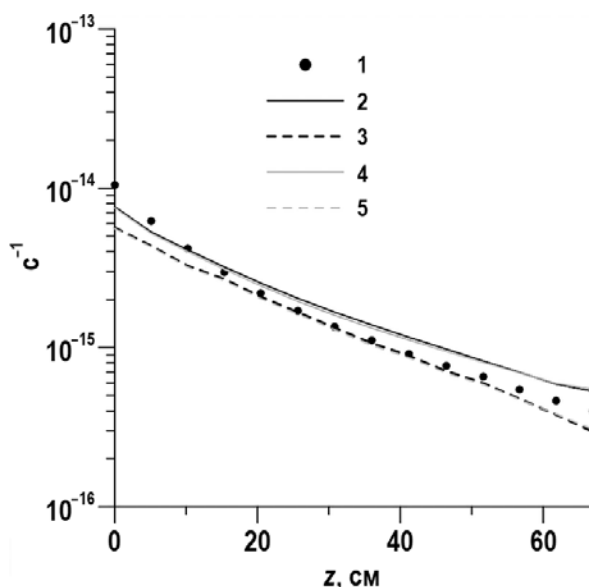


Рис. 6. Экспериментальные и расчетные скорости реакции $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$: 1 – эксперимент; 2 – (r, z) , ENDFB-VII; 3 – (x, y, z) , ENDFB-VII; 4 – (r, z) , БНАБ-РФ; 5 – (x, y, z) , БНАБ-РФ

Влияние геометрии (r, z) или (x, y, z) на значения рассчитанной со стандартным сечением скорости реакции $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$ можно оценить на основании рис. 6, 7. Хорошее согласие (отклонение менее 10%) наблюдается в центральных детекторах только для величин, полученных в (x, y, z) -расчетах.

Из таблицы 1 можно видеть, что наименьшее влияние на результаты моделирования оказывает система констант – переход от БНАБ-РФ к ENDFB-VII меняет значение скорости реакции на 2%. Больше влияние оказывает геометрия – переход

от (r, z) - к (x, y, z) -геометрии меняет результат в среднем на 24%. Отметим, что для пороговых реакций такой переход меняет результат в среднем на 10% для реакции $A1^{27}(n, \alpha) Na^{24}$, на 17% для реакции $^{32}S(n, p) ^{32}P$, на 4% для реакций $^{115}In(n, n') ^{115m}In$ и $^{103}Rh(n, n') ^{103m}Rh$ (см. табл. 2). Можно заключить, что приближенный учет пространственного распределения источника нейтронов в конверторе существенно влияет на результаты расчетов скорости реакции $^{197}Au(n, \gamma) ^{198}Au$. Таким образом, при моделировании активации золота учитывать трехмерность задачи необходимо.

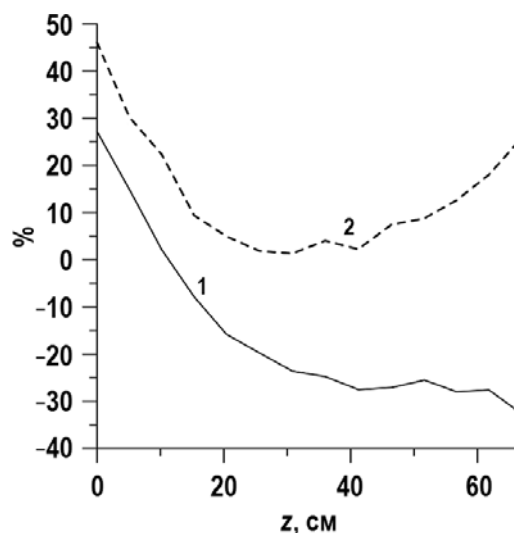


Рис. 7. Отклонения вычисленных с константами ENDFB-VII значений скорости реакции $^{197}Au(n, \gamma) ^{198}Au$ от экспериментальных данных: 1 – расчет в (r, z) -геометрии; 2 – расчет в (x, y, z) -геометрии

Отметим, что в детекторах, близких к конвертору, расчетные результаты всегда ниже экспериментальных. Следуя работе [2], можно предположить некоторое занижение расчетных результатов в близких детекторах из-за погрешности в учете фонового излучения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнена серия расчетов эксперимента по радиационной защите «Winfrith Iron 88 Benchmark» из базы данных SINBAD. Расчеты проведены в (r, z) - и (x, y, z) -геометриях с использованием программ КАСКАД и РадугаТ соответственно с многогрупповыми системами констант ENDFB-VII, БАНБ-93, БНАБ-РФ. Расчеты в (r, z) -геометрии выполнены на регулярных сетках с помощью персонального компьютера. Для расчетов в (x, y, z) -геометрии на неструктурированных тетраэдрических сетках использован суперкомпьютер «Ломоносов».

Полученные со всеми системами констант в обеих геометриях скорости пороговых реакций $^{32}S(n, p) ^{32}P$, $^{115}In(n, n') ^{115m}In$, $^{103}Rh(n, n') ^{103m}Rh$ и $^{27}Al(n, \alpha) ^{24}Na$ отклоняются от экспериментальных данных в среднем не более, чем на 20%. Переход от двумерной к трехмерной геометрии меняет результат моделирования не более чем на 17%. Таким образом, моделирование пороговых реакций в эксперименте «Winfrith Iron 88 Benchmark» может проводиться в двумерной (r, z) -геометрии.

Наибольшую трудность представляет расчет скорости реакции $^{197}Au(n, \gamma) ^{198}Au$, поскольку и детектор – золотая фольга, и кадмиевый чехол детектора существенно меняют потоки нейтронов, вызывающих эту реакцию. Поэтому моделирование выполняется с учетом и детектора, и чехла, задаваемых с помощью пространственной

сетки. Для вычисления скорости реакции используются потоки нейтронов из ячеек, образующих детектор. Показано, что расчеты могут быть выполнены с системами констант ENDFB-VII и БНАБ-РФ; более ранняя система констант БНАБ-93 не подходит для моделирования реакции $^{197}\text{Au} (n,\gamma) ^{198}\text{Au}$.

Отклонение от эксперимента менее 10% достигается только для центральных детекторов при расчетах в (x, y, z) -геометрии. Для удаленных от источника детекторов отклонение достигает 25%, а для самого близкого к источнику детектора – 45%.

Причиной столь больших отклонений может быть недостаточно точный учет фонового излучения от активной зоны самого реактора NESTOR. С другой стороны, можно предположить недостаточно точный учет внутренней структуры системы детектор-чехол. Наконец, к большей точности может привести учет гетерогенных эффектов при резонансной блокировке сечений. Возможно, лучшее согласие с экспериментом может быть получено с помощью метода Монте-Карло при детальном описании детектора и чехла.

Благодарности

Авторы благодарят А.В. Салеева (ОКБМ им. И.И. Африкантова) за постановку задачи и А.М. Волощенко (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН) за полезные обсуждения данной работы.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

Литература

1. Iron88 benchmark. Интернет-ресурс: https://www.oecd-nea.org/science/wprs/shielding/sinbad/asp_fe88/as88-abs.htm (дата обращения 16.04.2019).
2. Kodeli I.A., Plevnik L. Nuclear data adjustment exercise combining information from shielding, critical and kinetics benchmark experiments ASPIS-Iron 88, Popsy and SNEAK-7A/7B. // *Progress in Nuclear Energy*. – 2018. – Vol. 106. – PP. 215-230. DOI: doi.org/10.1016/j.pnucene.2018.03.007.
3. Kodeli I., Milocco A., Ortego P., Sartori E. 20 Years of SINBAD (Shielding Integral Benchmark Archive and Database). // *Progress in Nucl. Sci. and Tech.* – 2014. – Vol. 4. – PP. 308-311.
4. Palmiotti G, Salvatores M, Hursin M, Kodeli I., Gabrielli F, Hummel A. New approaches to provide feedback from nuclear and covariance data adjustment for effective improvement of evaluated nuclear data files. // *EPJ Web of Conferences*. – 2017. – Vol. 146. – No 06003. DOI: doi.org/10.1051/epjconf/201714606003.
5. Грабежной В.А., Ломаков Г.Б., Мантуров Г.Н. Расчет серии экспериментов по радиационной защите из базы данных SINBAD с использованием БНАБ-РФ. // *Ядерная и информационная безопасность*. – 2017. – № 2 (84). – С. 3-17. blog.secnrs.ru/2017/07/sinbad/.
6. Salome platform. Интернет-ресурс: <https://www.salome-platform.org> (дата обращения 16.04.2019).
7. Schoberl J. NETGEN. An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules. // *Computing and Visualization in Science*. – 1997. – Vol. 1. – No 1. – PP. 41-52. DOI: doi.org/10.1007/s007910050004.
8. Carlson B.G. A Method of Characteristics and Other Improvements in Solutions Methods for the Transport Equations. // *Nuclear Science and Engineering*. – 1976. – Vol. 61. – PP. 408-425. DOI: doi.org/10.13182/NSE76-A26927.
9. Chadwick M.B., Oblozinsky M., Herman M. et al. ENDF/B-VII.0: Next Generation Evaluated Nuclear Data Library for Nuclear Science and Technology. // *Nuclear Data Sheets*. – 2006. – Vol. 107. – No 12. – PP. 2931-3060. DOI: doi.org/10.1016/j.nds.2006.11.001.
10. Забродская С.В., Корчагина Ж.А., Коцеев В.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М. Библиотека сечений нейтронных реакций в системе константного обеспечения БНАБ-93. // *ВАНТ*.

Серия: Ядерные константы. – 1999. – Вып. 2. – С. 93-101. vant.ippe.ru/year1999/2/nuclear-reactor-data/636-11.html/.

11. Коцеев В.Н., Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М. Библиотека групповых констант для расчетов реакторов и защиты. // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2014. – № 3. – С. 93-101. nuclear-power-engineering.ru/article/2014/03/10/.

12. Забродская С.В., Игнатюк А.В., Коцеев В.Н., Манохин В.Н., Николаев М.Н., Проняев В.Г. РОСФОНД – Российская национальная библиотека оцененных нейтронных данных. // ВАНТ. Серия: Ядерные константы. – 2007. – Вып. 1-2. – С. 3-31. vant.ippe.ru/year2007/neutron-constants/543-1/.

13. Волощенко А.М., Гуков С.В., Швецов А.В. ARVES-2.5 – комплекс программ, обслуживающих файл макроконстант в формате FMACM, для решения многогруппового уравнения переноса. Инструкция для пользователя. / Отчет по НИР. Инв. № 7_24_004. – М.: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2004.

14. GROUPS. Электронный ресурс: yadi.sk/d/u-c1sE8lHILCCg (дата обращения 16.04.2019).

15. IRDFF library. Электронный ресурс: www-nds.iaea.org/IRDFF/ (дата обращения 16.04.2019).

16. Волощенко А.М., Швецов А.В. КАСКАД-1.5 – программа для решения уравнения переноса нейтронов, фотонов и заряженного излучения в двумерных геометриях. / Тезисы докладов VII Российской научной конференции «Защита от ионизирующих излучений ядерно-технических установок» 22 – 25 сентября 1998. – Обнинск: ФЭИ, 1998. – С. 49-51.

17. Волощенко А.М. KP1-схема ускорения внутренних итераций для уравнения переноса в двумерной геометрии, согласованная со взвешенной алмазной схемой. // Ж. Вычисл. Матем. и Матем. Физ. – 2001. – Т. 41. – № 5. – С. 1379-1398. mi.mathnet.ru/zvmmf1290.

18. Николаева О.В., Басс Л.П., Гайфулин С.А. Параллельные алгоритмы решения уравнения переноса нейтронов в защитах ядерных реакторов на неструктурированных тетраэдреских сетках в программе РадугаТ. / Труды Международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2018)». – Ростов-на-Дону, 2–6 апреля 2018. – С. 319-331. elibrary.ru/item.asp?id=34919261.

19. Николаева О.В. Нодальная сеточная схема для уравнения переноса излучения на неструктурированной тетраэдральной сетке. // Математические модели и компьютерное моделирование. – 2015. – Т. 7. – № 5. – С. 581-592. DOI: doi.org/10.1134/S2070048215060071.

20. Параллельные информационные технологии. Интернет-ресурс: <https://parallel.ru/> (дата обращения 16.04.2019).

Поступила в редакцию 11.04.2019 г.

Авторы

Николаева Ольга Васильевна, с.н.с.,
E-mail: nika@kiam.ru

Гайфулин Сергей Андреевич, н.с.
E-mail: sagarb@yandex.ru

Басс Леонид Петрович, с.н.с.
E-mail: bass@kiam.ru

DETAILED SIMULATION OF WINFRITH IRON 88 BENCHMARK (ASPIS) IN (r, z) - AND (x, y, z) -GEOMETRIESNikolaeva O.V., Gaifulin S.A., Bass L.P.Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS
4 Miusskaya sq, Moscow, 125047 Russia

ABSTRACT

We present results of simulation of the well-known experiment Iron 88 of database SINBAD. Rates of reactions $^{32}\text{S} (n, p) ^{32}\text{P}$, $^{115}\text{In} (n, n') ^{115\text{m}}\text{In}$, $^{103}\text{Rh} (n, n') ^{103\text{m}}\text{Rh}$, $^{27}\text{Al} (n, \alpha) ^{24}\text{Na}$ and $^{197}\text{Au} (n, \gamma) ^{198}\text{Au}$ have been measured in this experiment. The main difficulty is simulation of gold activation, as the detectors and their covers (cadmium) influence significantly on neutron flux.

We present the gold reaction simulation results as detectors and covers are specified by means of spatial grids. We simulate the experiment in both the two-dimensional (r, z) -geometry and the three-dimensional (x, y, z) -geometry. In last case we use a unstructured tetrahedral grid to specify detectors. We use neutron flux in cells forming detectors to find the gold reaction rate. We apply the multigroup cross-section libraries ENDFB-VII, ABBN-93, ABBN-RF in computations. The rest (threshold) reactions are simulated no taking into account detectors.

It is shown, that results of simulation of threshold reaction rates in different geometries with different cross-section libraries are agreed with each other and experimental data well. Results of simulation of the gold reaction are agreed with experimental data only when detectors and covers are taken into account via a spatial grid and three-dimensional (x, y, z) -geometry is used.

Simulation of gold foil activation in the Iron 88 benchmark should take into account influence of detectors on neutron flux.

Key words: Iron 88 benchmark, reactor rates, experiment simulation, tetrahedral grids, parallel computations, multigroup cross sections.

REFERENCES

1. Sinbad abstract NEA-1517/35. Available at: https://www.oecd-nea.org/science/wprs/shielding/sinbad/asp_fe88/as88-abs.htm (accessed Apr 16, 2019).
2. Kodeli I.A., Plevnik L. Nuclear data adjustment exercise combining information from shielding, critical and kinetics benchmark experiments ASPIS-Iron 88, Popsy and SNEAK-7A/7B. *Progress in Nuclear Energy*. 2018, v. 106, pp. 215-230. DOI: doi.org/10.1016/j.pnucene.2018.03.007.
3. Kodeli I., Milocco A., Ortego P., Sartori E. 20 Years of SINBAD (Shielding Integral Benchmark Archive and Database). *Progress in Nuclear Science and Technology*. 2014, v. 4, pp. 308-311. Available at: <http://www.aesj.net/publish/jnst/volume-index-pnst/pnst4> (accessed Apr 16, 2019).
4. Palmiotti G, Salvatores M, Hursin M, Kodeli I., Gabrielli F, Hummel A. New approaches to provide feedback from nuclear and covariance data adjustment for effective improvement of evaluated nuclear data files. *EPJ Web of Conferences*. 2017, v. 146, no. 06003. DOI: doi.org/10.1051/epjconf/201714606003.
5. Grabezhnoy V.A., Lomakov G.B., Manturov G.N. Calculation of series of radiation shielding experiments from data SINBAD with using the ABBN-RF multigroup cross section library. *Yadernaya i Radiatsionnaya Bezopasnost'*. 2017, no. 2(84), pp. 3-17 (in Russian). blog.secnrs.ru/2017/07/sinbad/
6. Salome platform. Available at: <https://www.salome-platform.org> (accessed Apr 16, 2019).
7. Schoberl J. NETGEN. An advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules. *Computing and Visualization in Science*. 1997, v. 1, no. 1, pp. 41-52. DOI: doi.org/10.1007/s007910050004.

8. Carlson B.G. A Method of Characteristics and Other Improvements in Solutions Methods for the Transport Equations. *Nuclear Science and Engineering*. 1976, v. 61, pp. 408-425. DOI: doi.org/10.13182/NSE76-A26927.
9. Chadwick M.B., Oblozinsky M., Herman M., Greene N.M., McKnight R.D., Smith D.L., Young P.G., MacFarlane R.E., Hale G.M., Frankle S.C., Kahler A.C., Kawano T., Little R.C., Madland D.G., Moller P., Mosteller R.D., Page P.R., Talou P., Trelue H., White M.C., Wilson W.B., Arcilla R., Dunford C.L., Mughabghab S.F., Pritychenko B., Rochman D., Sonzogni A.A., Lubitz C.R., Trumbull T.H., Weinman J.P., Brown D.A., Cullen D.E., Heinrichs D.P., McNabb D.P., Derrien H., Dunn M.E., Larson N.M., Leal L.C., Carlson A.D., Block R.C., Briggs J.B., Cheng E.T., Huria H.C., Zerkle M.L., Kozier K.S., Courcelle A., Pronyaev V., van der Marck S.C. ENDF/B-VII.0: Next Generation Evaluated Nuclear Data Library for Nuclear Science and Technology. *Nuclear Data Sheets*. 2006, v. 107, no. 12, pp. 2931-3060. DOI: doi.org/10.1016/j.nds.2006.11.001
10. Zabrodskaia S.V., Korchagina J.A., Koshcheev V.N., Nikolaev M.N., Tsiboulia A.M. Neutron reactions cross-sections library in BNAB-93 constant system. *VANT. Ser.: Yadernye Konstanty*. 1999, iss. 2, pp. 93-101 (in Russian). vant.ippe.ru/year1999/2/nuclear-reactor-data/636-11.html/
11. Koshcheev V.N., Manturov G.N., Nikolaev M.N., Tsiboulia A.M. Group cross-sections library for reactor and shielding calculations. *Izvestia Vysshikh Uchebnikh Zavedeniy. Yadernaya Energetika*. 2014, no. 3, pp. 93-101 (in Russian). nuclear-power-engineering.ru/article/2014/03/10/
12. Zabrodskaia S.V., Ignatjuk A.V., Koshcheev V.N., Manohin V.N., Nikolaev M.N., Pronjaev V.G. ROSFOND – Russian National Library Of Evaluated Neutron Data. *VANT. Ser.: Yadernye Konstanty*. 2007, iss. 1-2, pp. 3-21 (in Russian). vant.ippe.ru/year2007/neutron-constants/543-1/
13. Voloschenko A.M., Gukov S.V., Shvetsov A.V. ARVES-2.5 code for processing cross-section files in FMAC-M format for solving multi-group transport equation. User's Manual. Rep. of KIAM RAS. No 7_24_004. Moscow. KIAM Publ., 2004 (in Russian).
14. GROUPS utility. Available at: <https://yadi.sk/d/u-c1sE8lHILCCg> (accessed Apr 16, 2019).
15. IRDFF library. Available at: <https://www-nds.iaea.org/IRDFF/> (accessed Apr 16, 2019).
16. Voloschenko A.M., Shvetsov A.V. KASKAD-1.5 – the code to solving neutron, photons and charge radiation transport equation in 2D geometries. *Proc. of the VII Russian Scientific Conference «Shielding of Nuclear-Technical Plants»*. Obninsk. FEI Publ., 1998, pp. 49-51 (in Russian).
17. Voloschenko A.M. KP1 acceleration scheme for inner iterations consistent with the weighted diamond differencing scheme for transport equation in a two-dimensional geometry. *Zhurnal Vychislitel'noj Matematiki i Matematicheskoy Fiziki*. 2001, v. 41, no. 5, pp. 1379-1398 (in Russian). mi.mathnet.ru/zvmmf1290
18. Nikolaeva O.V., Bass L.P., Gaifulin S.A. Parallel algorithm to solving the neutron transport equation in reactor shielding via unstructured tetrahedral grids by the code RadugaT. *Proc. of the Int. Conf. «Parallel Computational Technologies»*. Rostov-na-Donu. 2018, pp. 319-331 (in Russian). elibrary.ru/item.asp?id=34919261.
19. Nikolaeva O.V. Nodal scheme for the radiation transport equation on an unstructured tetrahedral mesh. *Matematicheskie Modeli i Komp'yuternoe Modelirovanie*. 2015, v. 7, no. 5, pp. 581-592 (in Russian). DOI: doi.org/10.1134/S2070048215060071.
20. Parallel information technologies. Available at: <https://parallel.ru/> (accessed Apr 16, 2019) (in Russian).

Authors

Nikolaeva Olga Vasilievna, Senior Researcher

E-mail: nika@kiam.ru

Gaifulin Sergey Andreevich, Researcher

E-mail: sagapb@yandex.ru

Bass Leonid Petrovich, Senior Researcher

E-mail: bass@kiam.ru