

3D 입자 수송코드 KATRIN 의 소개

Introduction to 3D Coupled Neutral-Charged Particle Transport Code KATRIN

조영식, 장종화, A. M. Voloschenko

한국원자력연구소

대전광역시 유성구 덕진동 150

요 약

중성자 가속기와 ADS 등에 대한 관심과 더불어 파쇄 과정과 하전입자를 포함한 고에너지 입자의 수송계산을 수행할 수 있는 코드의 개발이 활발히 이루어지고 있다. 현재 이러한 계산을 위하여 MCNPX와 LAHET 등의 Monte Carlo 코드가 주로 사용되고 있는데, 최근에 Discrete ordinates Method를 사용하여 중성자, 광자 및 하전입자의 수송계산을 수행할 수 있는 3D 코드인 KATRIN 이 러시아의 KIAM에서 개발되어 현재 계산시간의 단축 및 정확도 향상을 위한 최적화 작업이 이루어지고 있다. 본 논문에서는 KATRIN의 특징과 계산절차를 간략히 소개하고 아울러 KATRIN 을 사용해서 계산한 몇 가지 벤치마크 계산결과를 실험값 및 다른 코드로 계산한 결과와 비교해 보고자 한다. 아울러 이전의 2D 버전 코드인 KASKAD 의 계산결과와도 간략히 비교해 보았다.

Abstract

Growing interest in the proton accelerator and accelerator-driven system (ADS) is accompanied with the development of a code system to simulate the elementary production of particles in spallation reactions and transport of these particles in the target. General tools which are used for describing the high-energy particle transport are mostly the Monte Carlo codes such as MCNPX and LAHET. Recently, the three-dimensional deterministic code KATRIN has been developed at KIAM in Russia. In the present presentation, we briefly introduce the code and present the calculation results compared with LAHET and the measured data.

1. 서론

현재 하전입자를 포함한 고에너지 입자의 수송 계산용으로 주로 사용하는 코드로는 LAHET¹⁾과 MCNPX²⁾ 등이 있다. 이들 코드는 Monte Carlo Method를 사용하여 계산을 수행하며 복잡한 구조물의 해석이 가능하다는 이점이 있으나 Monte Carlo 코드의 특성상 계산시간이 길며 특히 계산 모델의 기하학적인 규모가 크고 디텍터의 위치가 소스로부터 충분히 먼 거리에 있을 경우 계산시간이 길고 정확도가 떨어지므로 이에 대처하기

위해서는 계산 모델의 최적화를 통한 숙련된 기술이 필요하다는 단점이 있다.

이러한 단점을 보완하는 코드로서 계산시간이 상대적으로 짧고 사용법이 비교적 쉬운 결정론적 코드를 들 수 있다. 대표적인 코드로는 2D 코드인 KASKAD³⁾와 최근에 개발한 3D 코드 KATRIN⁴⁾이 있다. 이 코드는 러시아의 KIAM (Keldysh Institute of Applied Mathematics)에서 최근에 개발한 코드로서 현재 개발자인 Voloschenko 박사가 내한하여 계산 시간의 단축 및 정확도 향상을 위한 최적화 작업을 수행하고 있다. 이 코드는 Discrete ordinates method를 사용하여 중성자, 광자 및 하전입자의 수송방정식을 계산하고 x, y, z 및 r, ϑ, z geometry를 이용한 3D 계산이 가능하며 Monte Carlo 코드에 비해 메모리 요구량이 적고 계산시간이 월등히 짧다는 장점이 있다.

2. 코드의 소개 및 계산 절차

2.1 코드의 소개

KATRIN 코드 패키지는 수송계산용 단면적 자료를 생산하기 위한 CONSYST⁵⁾ 및 SADCO⁶⁾ 와 수송계산 코드 KATRIN, 그리고 후처리 코드인 KATRIF⁴⁾ 로 이루어진다.

먼저 CONSYST 는 러시아의 균정수 라이브러리인 ABBN-93⁷⁾ 으로부터 중성자 및 광자를 위한 핵자료를 생산하며 KATRIN에서 사용되는 20 MeV 이하의 중성자 및 광자의 단면적 자료는 이 코드를 사용해서 만들 수 있다. 이 단계에서 출력된 자료파일은 ANISN⁸⁾ 형식으로 되어 있으므로 포맷 변환용 보조코드인 ARVES⁹⁾를 사용하여 KATRIN 코드 패키지에서 공용으로 사용하는 형태인 FMAC-M⁹⁾ 형식으로 변환하게 된다.

SADCO 는 두 가지의 기능을 하는 코드인데 그 하나는 20 MeV 이상의 중성자, 양성자 및 파이 중간자의 단면적을 생산하는 것이고 또 다른 하나는 생산한 20 MeV 이상의 자료를 CONSYST에서 얻은 광자 및 중성자의 단면적 자료와 병합하여 하나의 완전한 단면적 자료 파일을 만드는 것이다. SADCO의 출력형태는 FMAC-M 형식이다.

KATRIN은 중성자, 광자 및 하전입자 수송계산 코드로서 KATRIN의 전신이라 할 수 있는 2차원 코드 KASKAD와는 달리 x, y, z 및 r, ϑ, z geometry를 이용한 3차원 모델링이 가능하다. 중성자 수송계산의 경우 Boltzmann 방정식을 사용하며 하전입자는 Boltzmann-Fokker-Planck 방정식을 사용하여 계산한다. 입자의 산란 과정에서의 이방성은 P_L 근사를 사용해서 취급하고 있다.

KATRIF는 KATRIN의 후처리코드로서 KATRIN에서 출력한 바이너리 형태의 flux 및 source 파일 등을 읽어서 사용자가 원하는 부분을 텍스트 형태로 출력해 줌으로서 계산 결과의 확인 및 검증용으로 사용할 수 있다. 또한 필요에 따라 그래픽 프로그램인 Grapher 및 Surfer 용 입력파일도 출력할 수 있다.

2.2 계산 절차

대략적인 계산절차는 그림 1에 나와 있다. 20 MeV 이하의 중성 및 광자의 단면적은 CONSYST를 사용해서 얻고 20 MeV 이상의 중성자, 양성자 및 파이 중간자의 단면적 자료는 SADCO 코드를 사용해서 얻을 수 있다. SADCO 는 또한 이들 두 에너지 영역에

서의 단면적 파일을 하나의 단독 파일로 병합하는 역할도 하고 있다. 두 가지의 코드를 사용해서 얻은 단면적 파일은 KATRIN에서 처리할 수 있는 형태인 FMAC-M 형식으로 저장되며 이 후 3차원 계산모형을 선정한 후 KATRIN 코드를 실행함으로써 중성자 및 하전입자 수송 계산을 수행할 수 있다. 임의의 표적에 양성자를 충돌시켰을 때의 중성자의 수율이나 중성자속 스펙트럼 등의 값은 KATRIF를 수행함으로써 텍스트 형태로 가공된 출력을 얻을 수 있다.

3. 벤치마크 계산 결과

표 1에 직경이 20 cm 이고 길이가 60 cm 인 원통형의 납 표적에 양성자를 충돌시켰을 때의 중성자의 yield를 다양한 양성자 에너지에서 계산한 결과를 실험값 및 LAHET 계산 결과와 비교하여 나타내었다. 에너지 영역은 100 MeV에서 2 GeV 에 이르기까지 매우 넓으며 1.5 GeV 이상에서는 입사에너지가 증가할수록 실험값보다 커지는 양상을 보이지만 그 이하에서는 전반적으로 실험값과 잘 일치하는 것을 볼 수 있다.

표 2에는 양성자를 충돌시켰을 때의 상이한 크기의 텅스텐 및 납 표적에 대한 중성자의 yield를 역시 실험값 및 LAHET 계산 결과와 비교하여 표시하였다. 전반적으로 LAHET 계산결과에 비해 실험값을 보다 더 만족한다는 것을 볼 수 있다.

서로 다른 크기의 원통형 납 표적에 대한 중성자의 yield 계산 결과를 COSMOTRON 실험값과 비교한 결과는 표 3에 나타내었다. 두께와 길이가 작은 표적에 대한 계산결과의 경우 LAHET에 비해 실험값과의 더 좋은 일치를 보여주고 있다.

주석과 열화우라늄에 대한 중성자 수율 계산 결과를 LAHET 및 실험값과 비교한 결과는 표 4에 나타내었다. 열화우라늄의 경우 실험값 및 LAHET 계산결과에 비해 전반적으로 과소평가한 경향을 보여주고 있다.

그림 2에는 1 GeV 의 양성자를 납 표적에 충돌시켰을 때의 양성자, 중성자 및 파이 중간자의 축 방향 분포의 KATRIN 계산 결과를 기존의 KASKAD 계산 결과와 비교하여 도시하였다. 표적의 모양이 원통형으로서 2차원 모델링이 가능한 만큼 유사한 결과를 보여주어야 하며 실제 r, θ , z geometry를 사용해서 계산할 경우 기존의 2D 코드인 KASKAD를 사용해서 r, z geometry 로 계산한 결과와 일치하는 것을 볼 수 있다.

그림 3 및 4, 5에는 납 표적에 서로 다른 형태의 Gaussian 분포를 가지는 1 GeV 의 양성자를 충돌시켰을 때의 중성자속 분포를 X-Y 좌표상에 나타내었다. 그림 3의 경우 양성자의 공간 분포가 x 및 y 축 방향으로 동일한 모양을 가질 때의 계산 결과이며 그림 4과 5는 x 및 y 축 방향으로 상이한 양성자 분포를 가질 때의 계산 결과이다. 그림 4에서 x축 방향으로 편향된 양성자 소스의 분포로 인해 discrete ordinates 코드에서 흔히 볼 수 있는 약간의 ray effect를 관찰할 수 있지만 그 크기는 비교적 작다고 할 수 있다. quadrature 의 차수를 늘린 그림 5의 경우 ray effect 가 감소한 것을 확인할 수 있다.

4. 결론

최근에 러시아에서 개발한 3D 수송계산코드인 KATRIN을 간략히 소개하고 이 코드를 사용해서 수행한 몇 가지 벤치마크 계산결과를 기존의 Monte Carlo 코드인 LAHET 및

실험값과 비교하여 제시하였다. 일부 표적에 대한 벤치마크 계산 결과에서는 높은 에너지 영역에서 중성자 수율을 과대평가하는 경향이 있기는 하지만 전반적으로 실험값을 잘 만족하는 결과를 볼 수 있었다. 새로 개발한 코드의 검증을 위하여 2차원 상세계산이 가능한 geometry에서 기존의 2D 코드인 KASKAD를 사용해서 계산한 결과와의 비교 분석에서도 서로 잘 일치하는 결과를 볼 수 있었다. 또한 소스분포에 따라 ray effect 가 나타나지만 quadrature 의 차수를 높일 경우 그 효과가 감소하는 것을 확인할 수 있었다.

본 연구는 과학기술부의 원자력연구개발 중·장기계획사업 중 “원자력 연구개발용 핵자료 구축·평가” 과제의 일환으로 수행되었음.

참고문헌

1. R. E. Prael and D. G. Madland, "The LAHET Code System with LAHET2.8," LA-UR-00-2140 (January 2000).
2. "MCNPX User's Manual, Version 2.4.0," LA-CP-02-408 (September 2002).
3. A. M. Voloschenko and A. V. Shwetsov, "KASKAD-S-2.0 - Two-Dimensional Discrete-Ordinates Neutron, Photon and Charged Particles Transport Code," User's Guide, Report No. 7-2-2000, Keldysh Inst. of Appl. Math., Moscow (2000).
4. A. M. Voloschenko and V. P. Kryuchkov, "KATRIN-1.5: Three-dimensional Discrete Ordinates Neutron, Photon and Charged Particle Transport Code," KIAM, Moscow (To be published).
5. G. N. Manturov, M. N. Nikolaev and A. M. Tsyboulia, "CONSYST/ABBN Data Code System," IPPE Report No. 9865, Obninsk (1998).
6. D. V. Gorbatkov and V. P. Kryuchkov, "SADCO-2: A Modular Code System for Generating Coupled Nuclear Data Libraries to Provide High-Energy Particle Transport Calculation by Multigroup Methods," Nucl. Instr. & Meth. in Phys. Res., A 372, 297 (1996).
7. G. N. Manturov, M. N. Nikolaev and A. M. Tsyboulia, "ABBN-93 Group Data Library, Part1: Nuclear Data for the Calculations of Neutron and Photon Radiation Fields," Vienna, IAEA, INDC(CCP)-409 (1997).
8. W. W. Engle, "ANISN, A One-Dimensional Discrete Ordinates Transport Code with Anisotropic Scattering," K-1693, Oak Ridge (1967).
9. A. M. Voloschenko, S. V. Gukov and A. V. Shwetsov, "ARVES-2 - a Package of Utilities for FMAC-M Format: a Multigroup Macroscopic Cross-section Format for Discrete-ordinates Transport Codes," User's Guide, Report No. 7-3-2000, Keldysh Inst. of Appl. Math., Moscow (2000).
10. P. A. Landeyro et al., "Simulation of Thick Target Experiments for the Validation of Spallation Codes," Proc. Intern. Conf. on the Physics of Nuclear Science and Technology, October 5-8 (1998).
11. R. G. Vassil'kov and V. I. Yurevich, "Neutron Emission from an Extended Lead Target

Under the action of Light Ions in the GeV Range," JCANS XI International Collaboration on Advanced Neutron Sources, KEK, Tsurruta, October 22-26 (1990).

12. M. S. Zucker et al., "Spallation Neutron Production Measurements," Nuclear Science and Engineering, 129, 180-186 (1998).
13. W. A. Gibson et al., "Low-Energy Neutron Production by High-Energy Proton Bombardment of Thick Targets," pp. 110, 111, ORNL-3940, Oak Ridge National Laboratory (1966).

표 1. 직경 20cm, 길이 60cm 인 원통형 납 표적에 양성자를 충돌시켰을 경우의 중성자 수율 비교

Proton beam energy, MeV	Total group number used	KATRIN/ABBN-93/SADCO-2	LAHET (preequilibrium model) ¹⁰⁾	MRTI experimental data (1990) ¹¹⁾
100	70	0.431		
200	76	2.25		
400	82	6.63		6.54
600	88	11.70		11.77
800	97	17.41		16.58
1000	97	23.37	21.01	21.5
1500	103	39.75	32.50	32.5
2000	109	52.63	41.98	42.0

표 2. 텅스텐과 납 표적에 양성자를 충돌시켰을 경우의 각각의 중성자 수율 비교

Proton beam energy, MeV	W target $d = 10.2 \text{ cm}$ $l = 40 \text{ cm}$			Pb target $d = 10.2 \text{ cm}$ $l = 61 \text{ cm}$		
	BNL experimental data (1998) ¹²⁾	KATRIN/ABBN-93/SADCO-2	LAHET ¹²⁾	BNL experimental data (1998) ¹²⁾	KATRIN/ABBN-93/SADCO-2	LAHET ¹²⁾
800	15.11	15.97	17.47	13.60	14.13	14.96
1000	20.40	21.43	23.22	17.38	18.50	19.82
1200		26.84	28.81	22.31	22.38	24.25
1400	28.46	33.82	33.67	26.21	27.40	28.26

표 3. 상이한 크기의 납 표적에 양성자를 충돌시켰을 경우의 중성자 수율 비교

Proton beam energy, MeV	Pb target $d = 10.0 \text{ cm}$ $l = 40 \text{ cm}$			Pb target $d = 20.0 \text{ cm}$ $l = 60 \text{ cm}$		
	COSMOTRON experimental data (1966) ¹³⁾	KATRIN/ABBN-93/SADCO-2	LAHET (preequilibrium model) ¹⁰⁾	COSMOTRON experimental data (1966) ¹³⁾	KATRIN/ABBN-93/SADCO-2	LAHET (preequilibrium model) ¹⁰⁾
540	7.90	8.507	7.948	8.60	10.22	9.037
720	12.05	12.15	12.834	14.09	14.82	14.288
960	16.82	17.72	18.151	20.46	22.54	20.979
1470	26.82	27.80	30.136	31.82	37.89	32.240

표 4. 주석과 열화우라늄 표적에 양성자를 충돌시켰을 경우의 각각의 중성자 수율 비교

Proton beam energy, MeV	Sn target $d = 10.0 \text{ cm}$ $l = 40 \text{ cm}$			Depleted U target $d = 20.0 \text{ cm}$ $l = 60 \text{ cm}$		
	COSMOTRON experimental data (1966) ¹³⁾	KATRIN/ABBN-93/SADCO-2	LAHET (preequilibrium model) ¹⁰⁾	COSMOTRON experimental data (1966) ¹³⁾	KATRIN/ABBN-93/SADCO-2	LAHET (preequilibrium model) ¹⁰⁾
540	4.65	4.92	5.897	18.64	12.32	13.796
720	8.37	7.11	8.959	29.09	17.72	20.600
960	11.82	9.98	12.512	40.46	26.28	31.381
1470	16.36	14.37	18.192	57.73	42.53	50.295

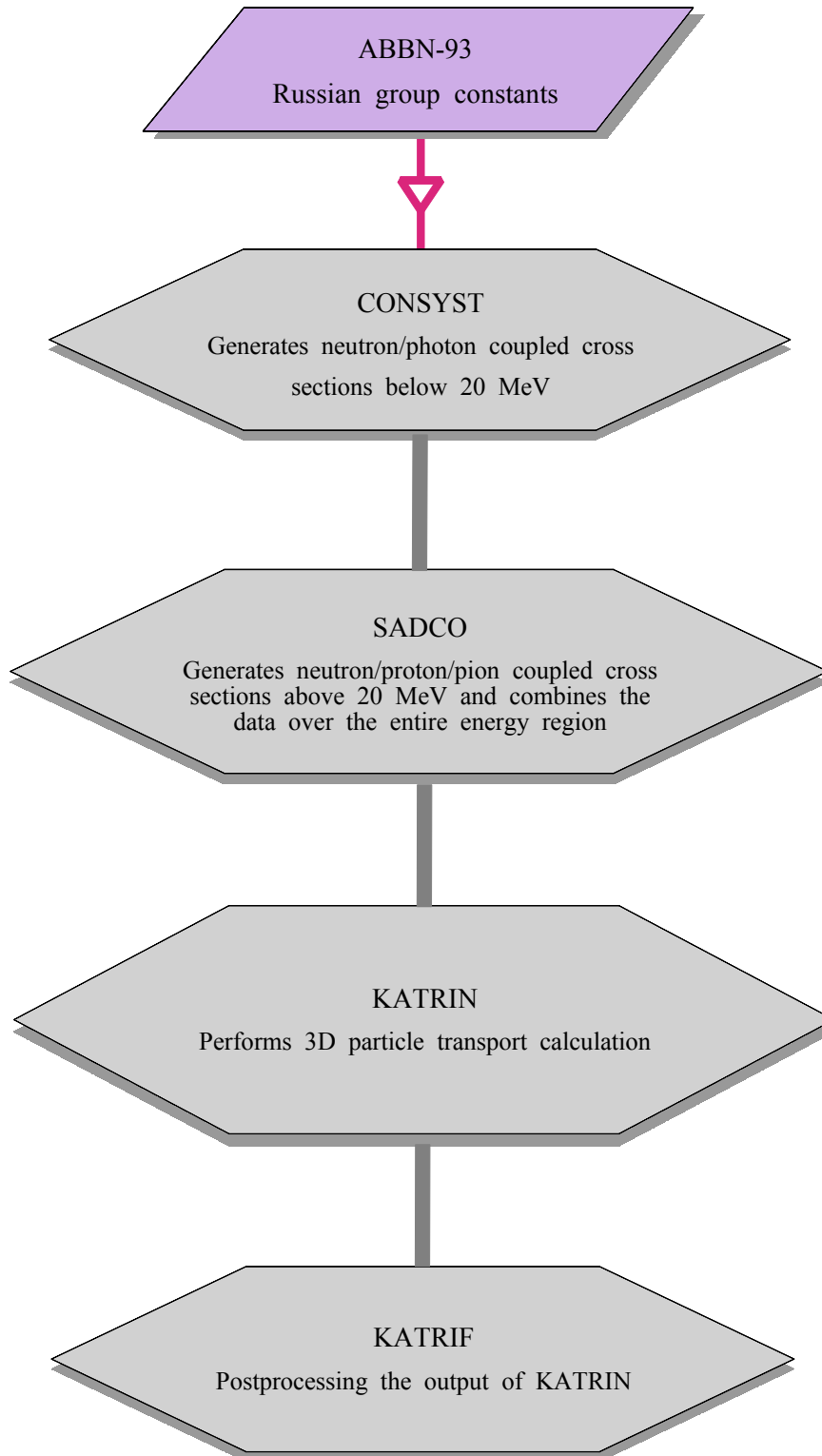


그림 1. KATRIN 코드를 이용한 수송계산 절차

Axial spatial distributions
at the axis of the lead target
bombarded by 1GeV
proton beam with $\sigma=1.6$ cm

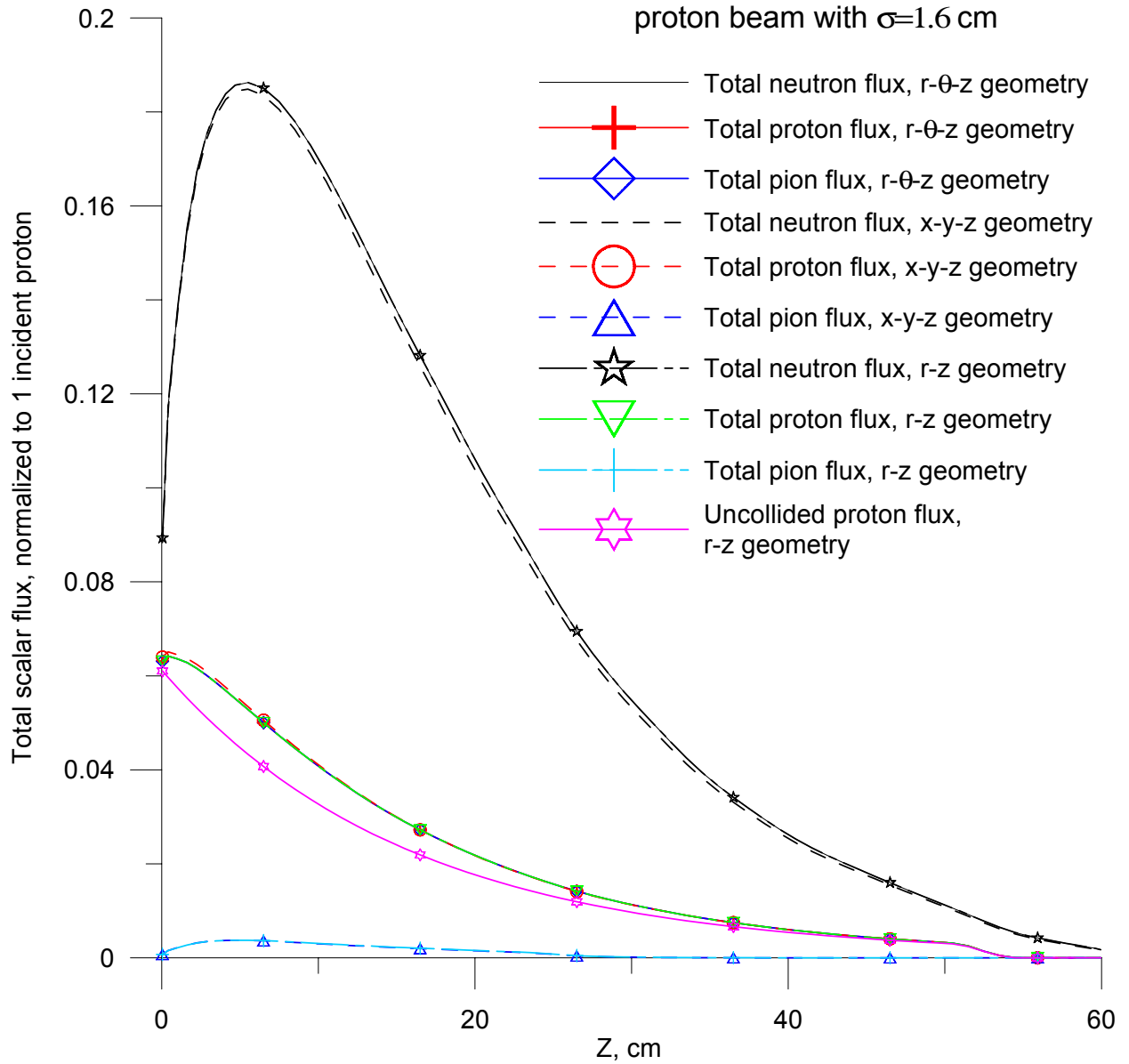


그림 2. 직경 20cm, 길이 60 cm 인 원통형 납 표적에 1 GeV 의 양성자를 충돌시켰을 때의 중성자를 포함한 여러 종류의 입자들의 축 분포. 양성자는 반지름 방향을 따라서 가우스 분포를 가지고 축과 평행하게 입사하도록 설정하였으며 x, y, z geometry 의 경우 표적을 각 변의 길이가 20, 20, 60 cm 인 평행육면체로 근사한 후 계산한 결과이다.

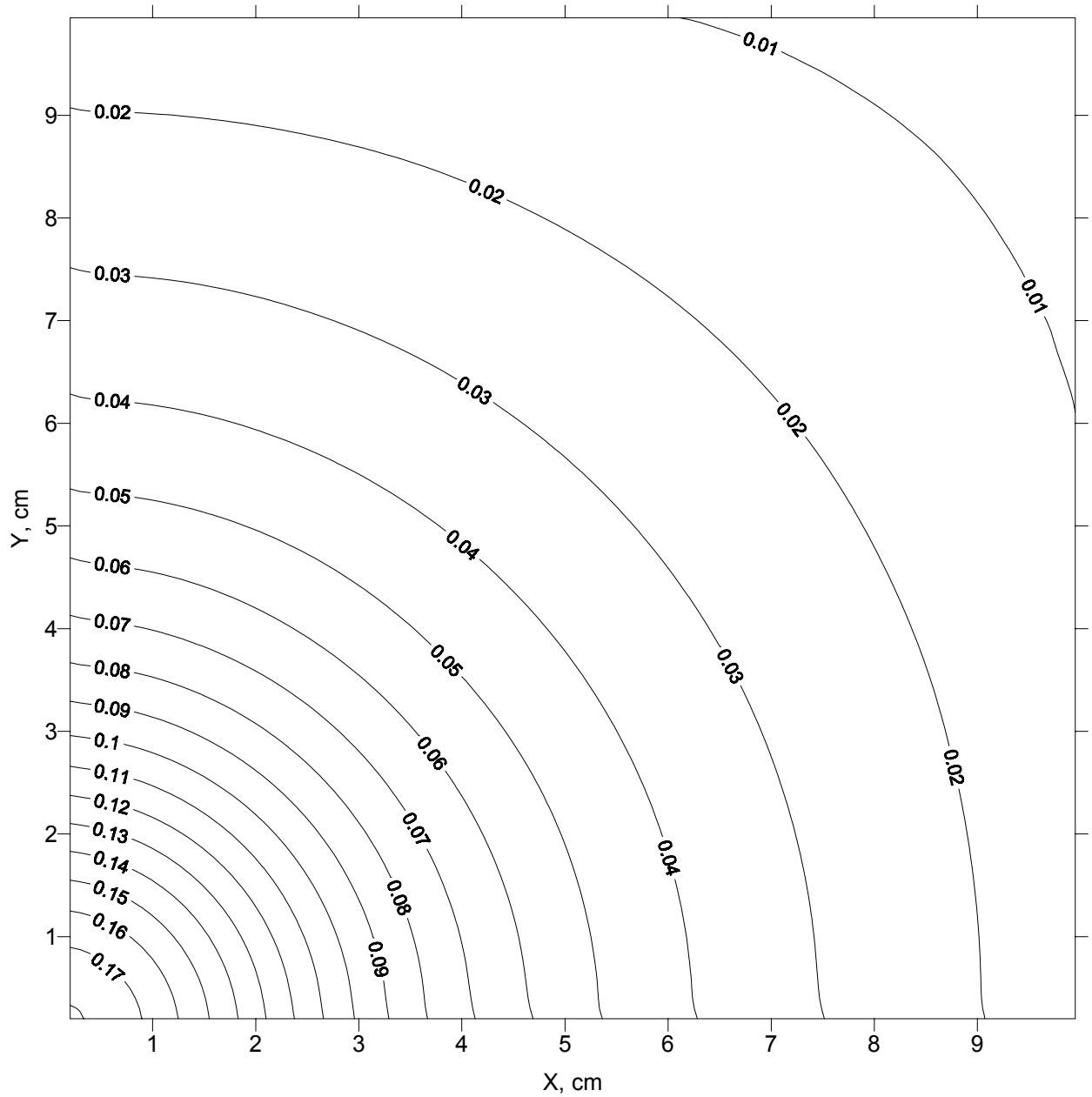


그림 3. 각 변의 길이가 20, 20, 60 cm 인 평행육면체인 납 표적에 1 GeV 의 양성자를 충돌시켰을 때의 중성자의 분포. 양성자는 바닥에 위치한 입사면의 반지름 방향을 따라서 가우스 분포를 가지고 입사면에 수직인 방향으로 입사하도록 설정하였다.

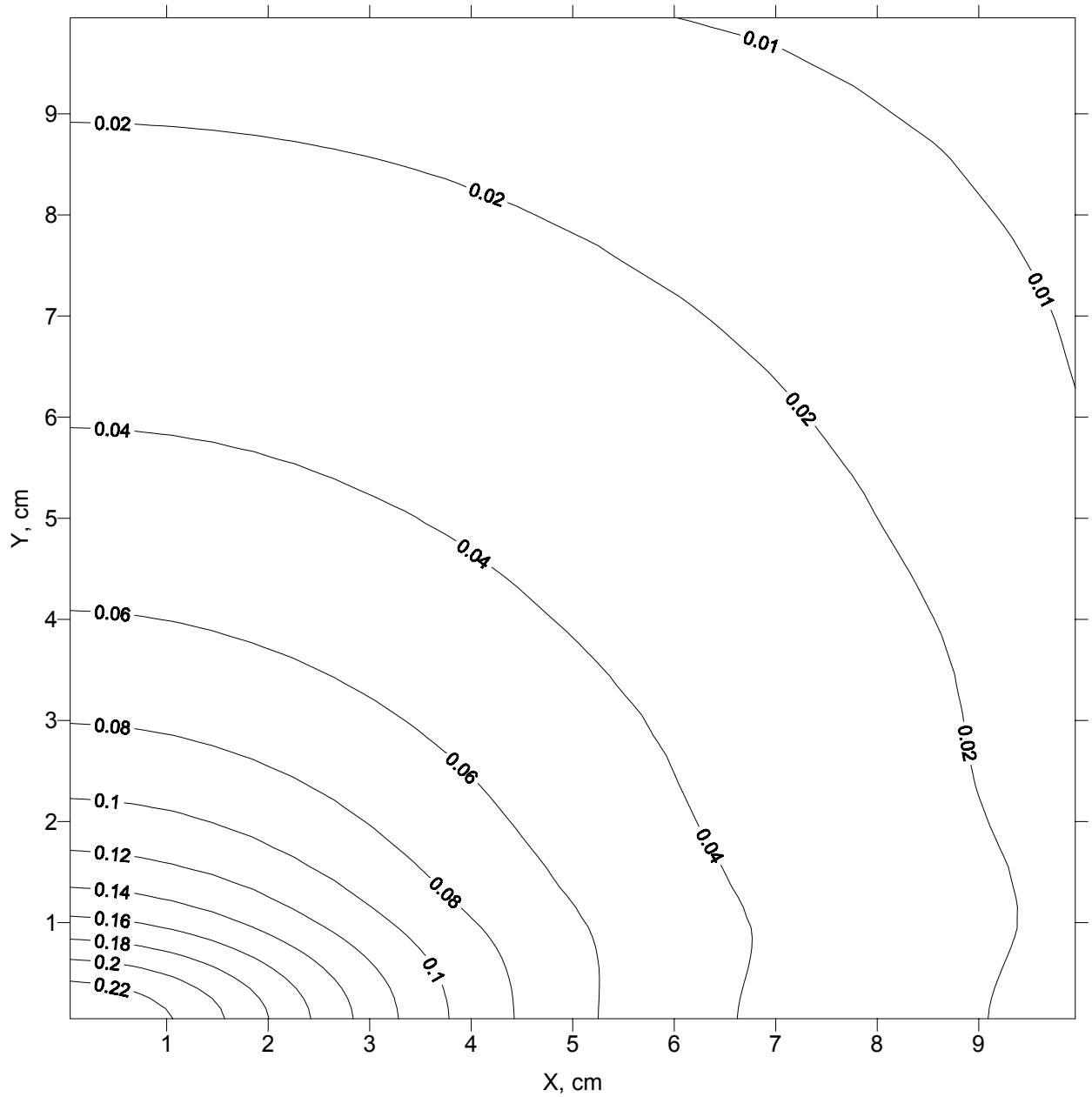


그림 4. 각 변의 길이가 20, 20, 60 cm 인 평행육면체인 납 표적에 1 GeV 의 양성자를 충돌시켰을 때의 중성자의 분포. 양성자는 바닥에 위치한 입사면의 x 축 방향으로 편향된 가우스 분포를 가지고 입사면에 수직인 방향으로 입사하도록 설정하였다. 20 MeV 이하는 P₅S₁₂ 근사를, 20 MeV 이상은 P₁₁S₁₄ 근사를 사용하여 계산한 결과이다.

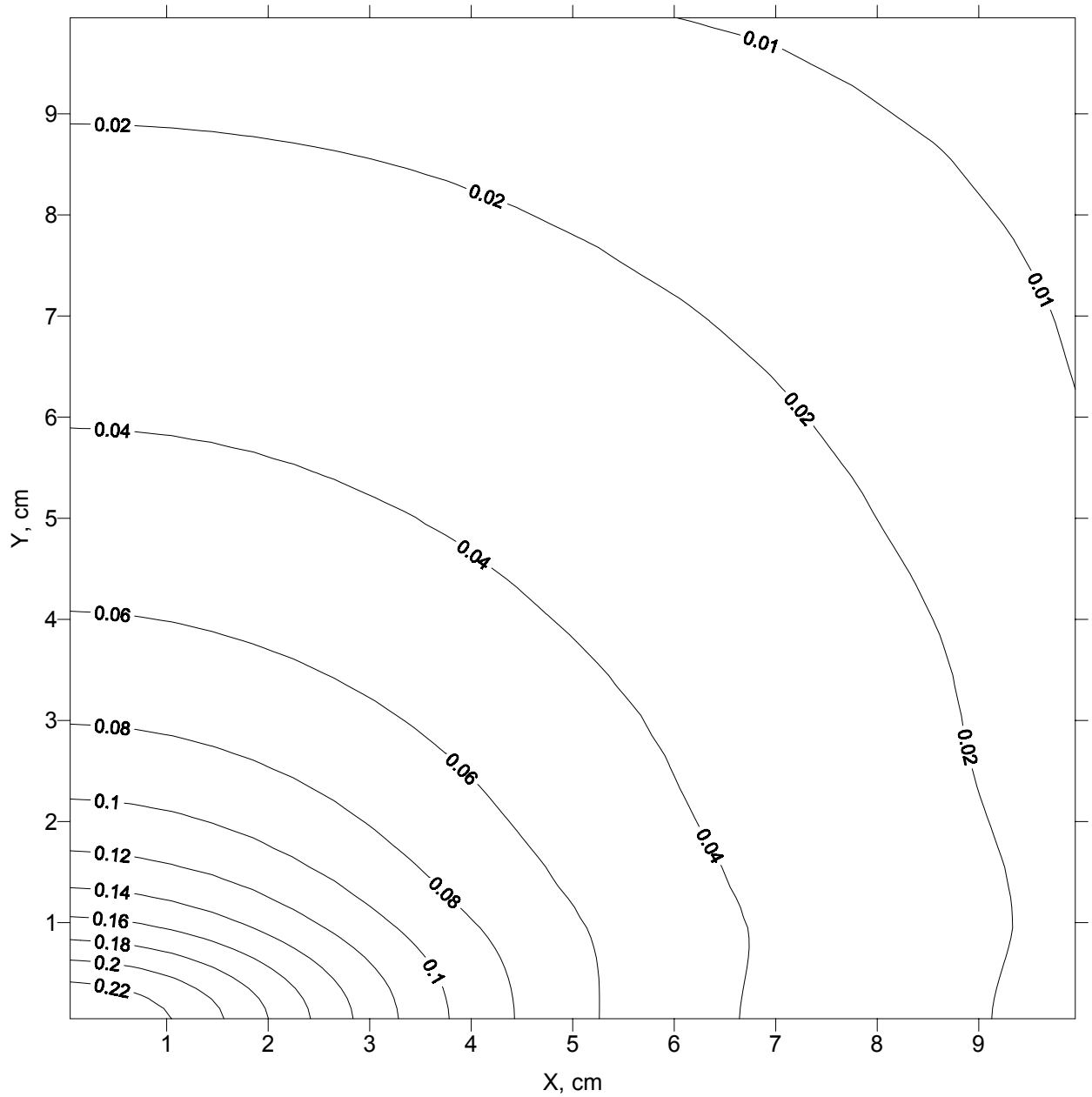


그림 5. 그림 5. 각 변의 길이가 20, 20, 60 cm 인 평행육면체인 납 표적에 1 GeV 의 양성자를 충돌시켰을 때의 중성자의 분포. 양성자는 바닥에 위치한 입사면의 x 축 방향으로 편향된 가우스 분포를 가지고 입사면에 수직인 방향으로 입사하도록 설정하였다. 20 MeV 이하는 P₅S₁₂ 근사를, 20 MeV 이상은 P₁₁S₂₄ 근사를 사용하여 계산하였으며 그림 4와 비교하여 ray effect가 감소한 것을 볼 수 있다.