

'99 춘계학술발표회 논문집
한국원자력학회

NJOY97을 이용한 32 bit 및 64 bit 전산기에서의 액체 수소 및 중수소의 MCNP Thermal Library 작성 및 비교 분석

Preparation and Comparitive Analysis of MCNP Thermal Libraries for Liquid Hydrogen and Deuterium using NJOY97 on 32 bit and 64 bit Computers

조영식, 김정도, 길충섭, 장종화

한국원자력연구소
305-353 대전광역시 유성구 덕진동 150번지

요 약

NJOY97을 사용하여 32 bit 전산기인 HP715와 64 bit 전산기인 SGI IP27에서 액체 수소 및 중수소의 scattering law를 계산하고 이를 이용하여 MCNP thermal library를 작성한 후 실험 자료와 비교해 보았다. 또한 작성한 자료를 이용하여 하나로의 냉중성자원 설계에 대한 MCNP 계산을 수행한 후 그 결과를 비교하여 전산기종의 차이가 실제 계산에 얼마나 영향을 미치는지 알아보았다.

Abstract

The scattering laws and MCNP thermal libraries for liquid hydrogen and deuterium are comparatively calculated on HP715 (32-bit computer) and SGI IP27 (64-bit computer) using NJOY97. The results are also compared with the experimental data. In addition, MCNP calculations for the nuclear design of a cold neutron source at HANARO are performed with the newly generated MCNP thermal libraries from two different computers and the results are compared.

1. 서론

NJOY[1]는 핵자료처리 코드로서 ENDF 포맷의 평가핵자료로부터 입자 수송 코드나 원자로 노심 계산코드 등에 필요한 라이브러리를 작성하는데 널리 사용되고 있다. NJOY는 수십 개의 모듈로 구성되어 있으며 각각의 모듈은 독립된 프로그램처럼 구성되어 있다. 기존의 NJOY94는 32-bit 전산기에서 LEAPR 모듈을 사용해서 극저온에서의 thermal scattering law[2]를 계산할 때 잘못된 값을 출력하고 NJOY의 THERMR 모듈에서 LEAPR 출력파일을 사용하고자 할 경우 실행 자체가 되지 않는 문제가 있었다. 최근에 발표한 NJOY97의 경우 이러한 문제가 많이 수정되었다고 알려져 있다. 따라서 본 논문에서는 32-bit 전산기종인 HP715에서 NJOY97을 사용하여 액체상태의 수소와 중수소의 scattering law $S(\alpha, \beta)$ 를 계산한 후 이를 토대로 Monte-Carlo 입자 수송 코드인

MCNP[3]의 thermal library를 작성하고 작성된 라이브러리내의 산란 단면적을 실험값과 비교해 보았다. 또한 64-bit 컴파일러가 가능한 SGI IP27 에서 동일한 계산을 수행하였으며 이 결과를 32-bit 전산기에서 계산한 결과와 비교해 보았다. 아울러 새로 구축한 라이브러리를 사용하여 MCNP 계산을 수행한 후의 계산 결과도 비교하였다.

2. 액체수소 및 중수소의 MCNP thermal library 작성

액체상태의 수소와 중수소는 냉중성자 설계에서 중요한 감속재로 사용되고 있는 매질이다. 액체 수소와 중수소는 각 원자의 스핀의 배열 상태에 따라 para와 ortho로 나누어지며 각각은 서로 다른 물성을 가지고 있다.

MCNP thermal library를 작성하려면 먼저 LEAPR 모듈을 사용하여 scattering law를 계산한 후 THERMR 및 ACER 등의 모듈을 사용하여 MCNP thermal library를 작성해야 한다. NJOY97의 경우 현재 4차례의 수정을 거쳐 97.62까지 나와 있으나 97.45가 실험치와 가장 근접하는 계산결과를 보여주고 있다. 본 계산에 사용한 버전은 NJOY97.45이다. 계산에 사용한 32-bit 전산기는 HP715이고 HP-UX Fortran 77로 컴파일하였다. 또한 이 계산 결과와 비교하기 위하여 64-bit 전산기에서 동일한 계산을 수행하였으며 사용한 기종은 SGI IP27이고 컴파일러는 MIPS Fortran 77 이다. HP715의 경우 single-word 옵션을 사용해서 NJOY97을 컴파일하였고 SGI IP27 에서는 이 옵션을 사용하지 않고 컴파일하였다. Single-word 는 32-bit 전산기에서 사용하는 옵션이다. NJOY 계산에 사용한 주요 상수를 표 1에 정리하였다.

표 1. NJOY 계산에 사용한 주요 상수

Parameter	para-H ₂	ortho-H ₂	para-D ₂	ortho-D ₂
ZA	1001	1001	1002	1002
weight ratio to neutron	0.99917	0.99917	1.9968	1.9968
free atom scattering cross section (b)	20,478	20,478	3,395	3,395
tolerance	0,005	0,005	0,005	0,005
number of equi-probable angles	8	8	8	8
number of principal atoms	2	2	2	2
maximum energy for thermal treatment (eV)	0.42	0.42	0.42	0.42

2.1 Scattering law 계산

4 eV 이하의 열에너지 영역에서의 산란에서는 산란에 의해 중성자가 얻거나 잃는 에너지의 크기가 표적핵의 운동에너지와 유사하기 때문에 표적핵의 구조나 운동 양식이 매우 중요하다. 특히 액체나 고체와 같이 표적핵이 구속되어 있는 경우에는 그 산란 효과를 표준화된 포맷으로 기술하며 현재 ENDF-6 포맷의 파일 7로 분류되어 있다. 열중성자 산란 효과는 coherent elastic과 incoherent elastic, inelastic scattering 등의 세 부분으로 나누어지는데, 이 중 비탄성 산란의 경우에는 thermal scattering law라는 함수로 표현하고 있다. 이러한 열중성자 산란 효과는 NJOY의 LEAPR 모듈을 사용하여 계산할 수 있다.

본 논문에서는 NJOY97.45 를 사용하여 20 K에서의 액체수소와 중수소의 scattering law를 작

성하였는데, 20 °K는 냉중성자를 얻기 위하여 일반적으로 사용되고 있는 감속재의 온도이다. 입력에 필요한 자료는 MacFarlane의 보고서[4]를 참고하였다. 액체 상태의 수소 및 중수소의 경우 분자 배열의 주기성의 결여로 탄성산란은 무시하며 비탄성 산란 효과만을 고려하여 계산하고 있다. 비탄성 산란의 경우 scattering law는 아래 식으로 표현할 수 있다.

$$S(\alpha, \beta) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\beta t} e^{-\gamma(t)} dt$$

는 $\hbar/(kT)$ 단위로 측정되는 시간이며 $\gamma(t)$ 는 다음 식으로 주어진다.

$$\gamma(t) = \alpha \int_{-\infty}^{\infty} P(\beta) [1 - e^{-i\beta t}] e^{-\beta|t|} d\beta$$

α 와 β 는 각각 산란 과정에서 입사 중성자와 표적핵 사이에 전송되는 운동량과 에너지의 크기를 나타내며 아래 식으로 주어진다.

$$\alpha = \frac{E + E' - 2\sqrt{E E'}}{A k T}$$

$$\beta = \frac{E - E'}{k T}$$

$P(\beta)$ 는 다음 식으로 계산된다.

$$P(\beta) = \frac{\rho(\beta)}{2\beta \sinh(\beta/2)}$$

$\rho(\beta)$ 는 입자계의 여기에 대한 진동수 스펙트럼으로서 eV 단위의 ϵ 의 함수로 입력한다.

2.2 MCNP thermal library 작성

Scattering law를 MCNP thermal library 형태로 가공하기 위하여 사용하는 NJOY 모듈은 RECONR과 BROADR, THERMR, ACER 등이다. RECONR은 ENDF 자료를 읽어서 재구성하며 BROADR은 Doppler broadening 효과를 계산한다. THERMR 은 BROADR 출력자료와 LEAPR에서 작성한 scattering law를 사용하여 열에너지 영역에서의 단면적을 계산한 후 ENDF-6 포맷의 파일 3에 기록하며 에너지 - 각 분포는 파일 6에 별도로 기록해 준다. 그리고 마지막으로 ACER 모듈은 THERMR에서 계산한 단면적 자료를 MCNP thermal library 형태로 변환해 주는 역할을 하고 있다. 계산 온도는 LEAPR에서와 같은 20 °K이며 0.42 eV까지 계산하였고 ENDF/B-VI Release 3을 사용하였다.

THERMR에서는 LEAPR에서 계산한 scattering law를 사용하여 다음과 같이 비탄성 산란 단면적을 계산한다.

$$\sigma(E \rightarrow E', \mu) = \frac{\sigma_b}{2kT} \sqrt{\frac{E'}{E}} e^{-\beta/2} S(\alpha, \beta)$$

여기서 E는 중성자의 입사에너지이고 E'는 산란된 중성자의 에너지이다. 그리고 μ 는 실험 좌표계에서의 산란 각도의 여현값이다.

2.3 계산 결과

NJOY97.45로 작성한 액체상태의 수소와 중수소의 MCNP thermal library에는 0.4 eV 이하의 에너지 영역에서의 중성자의 비탄성 산란 단면적과 에너지 - 각 분포가 들어 있다.

그림 1에 HP715에서 수행한 액체수소에 대한 중성자의 비탄성 산란 단면적 계산 결과가 입사 에너지의 함수로 나타나 있다. 심볼로 나타나 있는 실험자료는 Keinert 등의 논문[5]에서 발췌하였다. 그림을 보면 실험자료와 계산 결과가 잘 일치한다는 것을 알 수 있다. 또한 그림 1에는 MCNP4B와 함께 Los Alamos National Laboratory에서 입수한 MCNP thermal library도 같이 비교하였는데, para-hydrogen의 경우 실험치와 상당한 차이를 보이고 있다. 이 자료파일의 이름은 THERXS1이고 각각의 액체 수소 및 중수소 자료에 대하여 hpara.01t, hortho.01t, dpara.01t, dortho.01t란 ID가 붙어 있다.

그림 2에는 액체 중수소에 대한 중성자의 비탄성 산란 단면적 계산 결과를 나타내었다. 이 역시 실험 자료[6]와 잘 일치한다는 것을 알 수 있다. 하지만 LANL에서 배포한 기존 라이브러리의 경우 실험값 및 본 계산 결과와 현격한 차이를 보이고 있어 재평가가 필요한 것으로 보인다.

그림 3과 4에는 SGI IP27에서 계산한 결과와 비교하여 실었는데, 0.27 eV 이상에서 약간 어긋나는 것을 볼 수 있다. 이를 자세히 관찰하기 위하여 para hydrogen에 대한 이차 중성자의 에너지 분포를 그림 5와 6에 실어 놓았다. 입사 중성자의 에너지가 0.25 eV인 그림 5에서는 두 계산결과가 거의 일치하는 것을 볼 수 있지만 입사에너지가 0.27 eV인 그림 6을 보면 HP715에서 계산한 결과에서 불연속점이 나타나는 것을 관찰할 수 있다. 하지만 그 차이는 그리 크지 않다.

3 냉중성자원 설계 영향 검토

3.1 MCNP 계산 방법

HP715와 SGI IP27에서 작성한 MCNP thermal library를 사용하여 하나로의 냉중성자공에서 냉중성자 감속재로 액체 수소와 중수소를 사용했을 때의 감속재가 위치한 원통 내의 중성자속을 MCNP로 계산하여 비교해 보았다. 하나로 노심 전체에 대하여 MCNP 임계 계산을 수행할 경우 계산 시간이 길고 노심 외곽에 위치한 냉중성자공에 들어오는 중성자의 개수가 작아서 계산 오차가 커지기 때문에 본 계산에서는 일차적으로 임계 계산을 통하여 노심 중앙에서의 중성자 스펙트럼을 먼저 계산하고 두 번째 단계에서는 첫 번째 단계에서 계산한 중성자원을 사용하여 개략 모형으로 재계산하는 방법을 택하였다.[7] 그림 7에 두 번째 단계에서 사용한 MCNP 계산모형의 수평도와 수직도가 나타나 있다. 수직도는 냉중성자 유도관을 따라 절단한 그림이다. 그림에서 source surface로 표시한 네 개의 면이 첫 번째 단계에서 중성자 스펙트럼이 계산된 후 이진파일로 기록되는 평면이다. 두 번째 단계에서는 이 네 면에서의 중성자 분포를 읽어서 개략모형으로 냉중성자 감속재가 위치한 원통 내부에서의 중성자속 계산을 하게 된다.

3.2 계산 결과

두 전산기에서 작성한 MCNP thermal library를 사용하여 MCNP 계산을 수행한 결과가 그림 8에서 11까지 나타나 있다. 각각의 그림은 100 %의 para- 및 ortho- 수소, 중수소를 냉중성자 감속재로 사용했을 때의 계산 결과인데, 두 전산기종에서의 결과를 비교하기 위하여 SGI IP27에서 계산한 결과를 약간 오른 쪽으로 이동하였다. 두 계산 결과는 거의 일치하며 실제로 각각의 오차범위 내에 있는 것을 알 수 있다.

4. 결론

새로 입수한 NJOY97로 액체상태의 수소와 중수소의 scattering law를 계산하고 이를 사용하여 MCNP thermal library를 구축하였다. 계산에 사용한 NJOY의 버전은 97.45이다. 기존의 NJOY94의 경우 32-bit 전산기에서 MCNP thermal library를 구축할 때 계산 및 실행상의 문제가 발생했었는데, NJOY97의 경우 약간의 문제가 있었지만 일단 계산 자체는 성공적으로 수행되었다. 실제로 32-bit 전산기와 64-bit 전산기에서 계산한 결과의 차이는 그리 크지 않으며 MCNP 계산에 적용하였을 때도 오차범위 내의 차이를 보이고 있다. 따라서 여러 분야에서 널리 사용되고 있는 Monte-Carlo 입자 수송 코드인 MCNP의 thermal library 구축이 32-bit 전산기에서도 가능한 것으로 볼 수 있다. 또한 검정 과정에서 MCNP4B와 함께 배포된 LANL의 MCNP thermal library가 실험치와 상당한 차이를 보인다는 것이 드러났는데, 사용시 주의를 요한다.

본 연구는 과학기술부가 지원하는 원자력개발 중장기과제 중 “핵자료체제 구축” 과제의 일환으로 수행하였다.

참고문헌

1. R. E. MacFarlane and D. W. Muir, "The NJOY Nuclear Data Processing System Version 91," LA-12740-M (October 1994).
2. V. McLane, C. L. Dunford and P. F. Rose, "ENDF-102 Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF-6," BNL-NCS-44945 (February 1997).
3. Judith F. Briesmeister, "MCNP-A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4A" LA-12625-M (November 1993).
4. R. E. MacFarlane, "New Thermal Neutron Scattering Files for ENDF/B-VI, Release 2," LA-12639-MS (ENDF 356) (March 1994).
5. J. Keinert and J. Sax, "Investigation of Neutron Scattering Dynamics in Liquid Hydrogen and Deuterium for Cold Neutron Sources," Kerntechnik 51, 19 (1987)
6. W. D. Seiffert, "Messung der Streuquerschnitte von flüssigem und festem Wasserstoff, Deuterium, und Deuteriumhydrid für thermische Neutronen," EUR-5566d (1970)
7. Y. S. Cho et al., "Conceptual Study for the Moderator Selection of the Cold Neutron Source Facility for HANARO," J. Kor. Nucl. Soc., 30, 140 (April 1998)

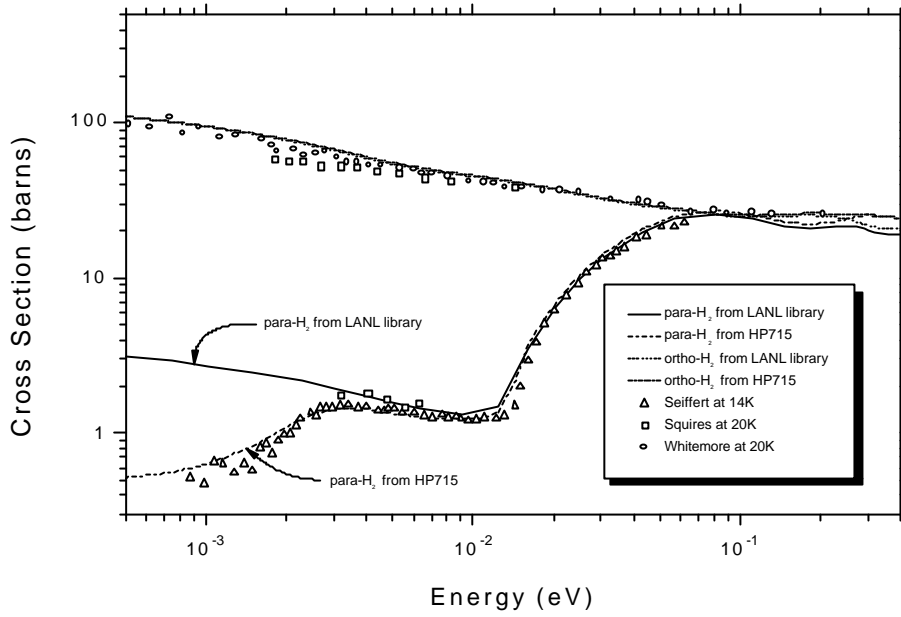


그림 1. 기존 라이브러리와 HP715에서 계산한 액체수소의 비탄성 산란 단면적 및 실험자료의 비교

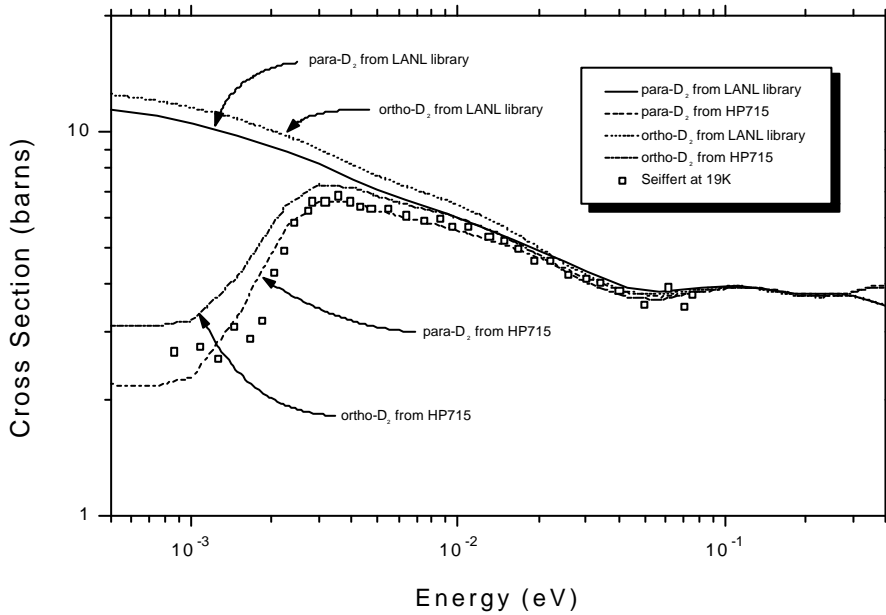


그림 2. 기존 라이브러리와 HP715에서 계산한 액체중수소의 비탄성 산란 단면적 및 실험자료의 비교

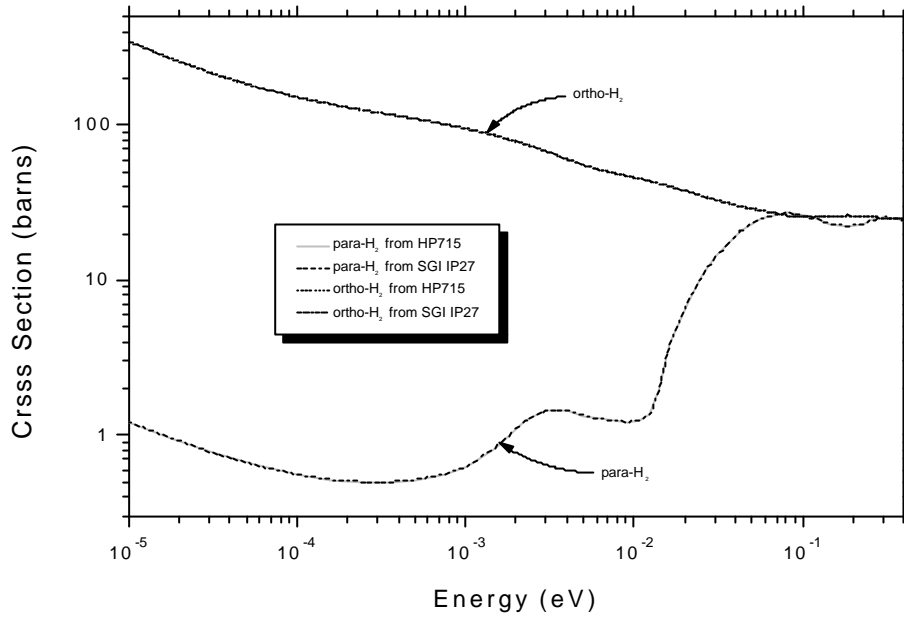


그림 3a. HP715와 SGI IP27에서 계산한 액체 수소의 비탄성 산란 단면적 비교

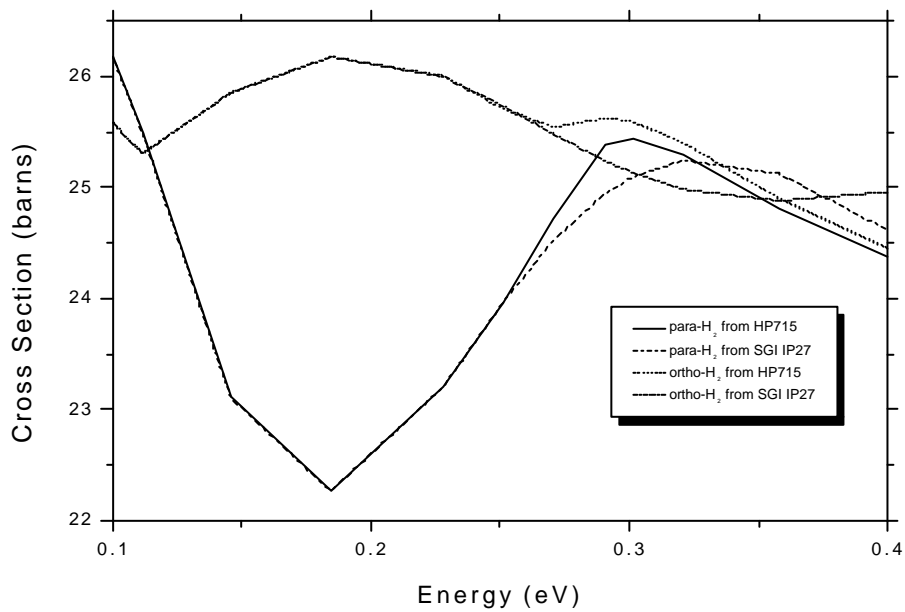


그림 3b. HP715와 SGI IP27에서 계산한 액체 수소의 비탄성 산란 단면적 비교

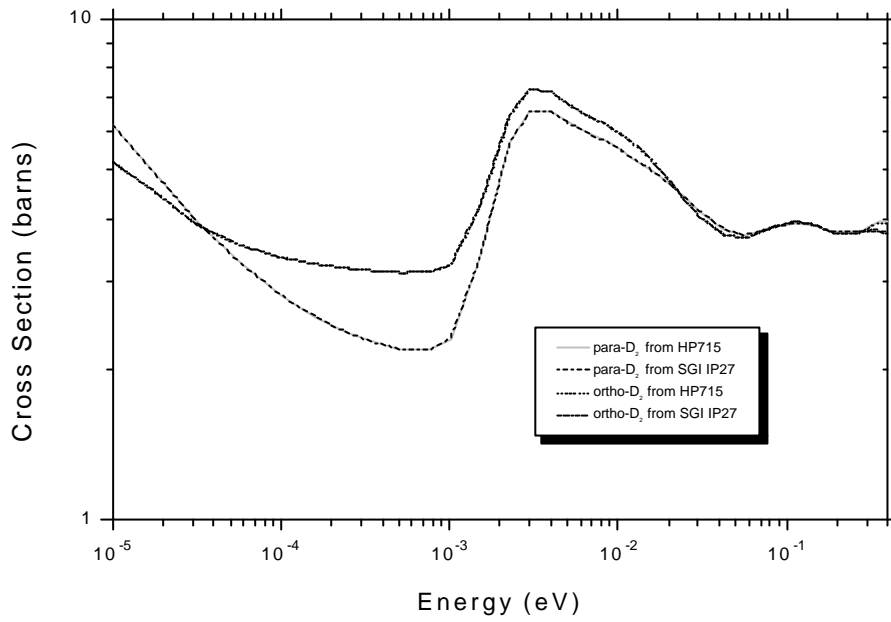


그림 4a. HP715와 SGI IP27에서 계산한 액체 중수소의 비탄성 산란 단면적 비교

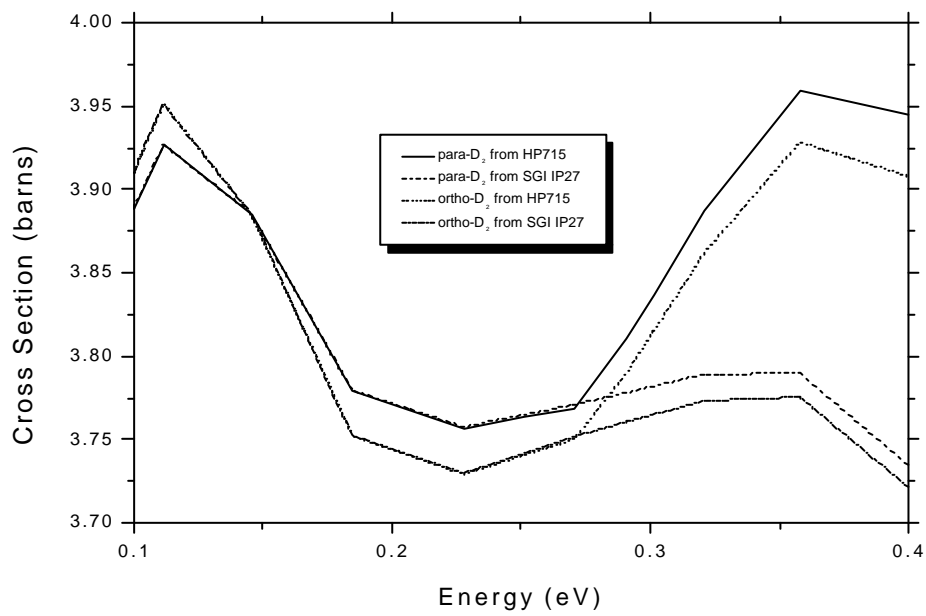


그림 4b. HP715와 SGI IP27에서 계산한 액체 중수소의 비탄성 산란 단면적 비교

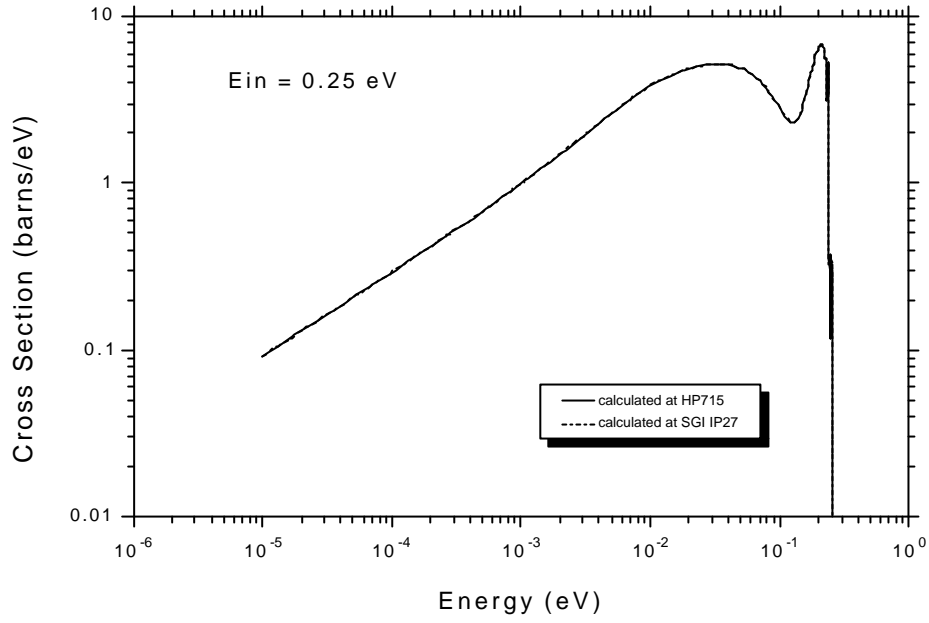


그림 5. 입사에너지가 0.25 eV일 때의 이차 중성자의 에너지 스펙트럼

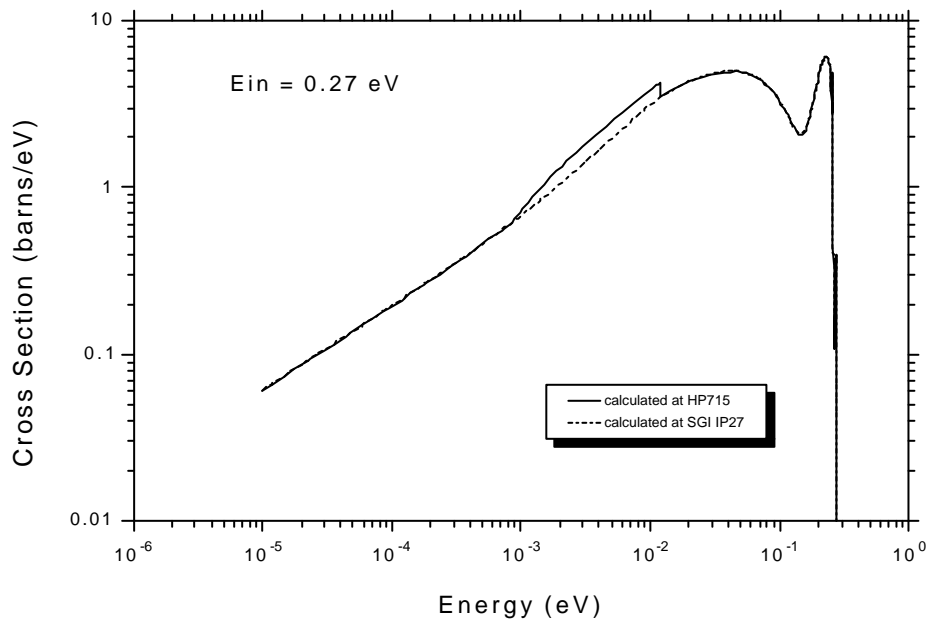
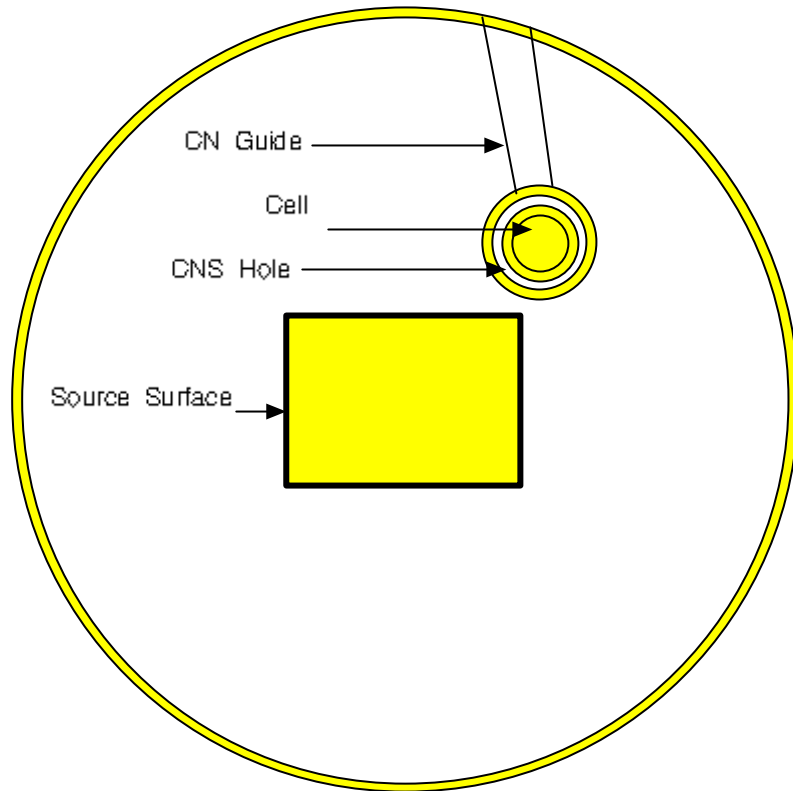
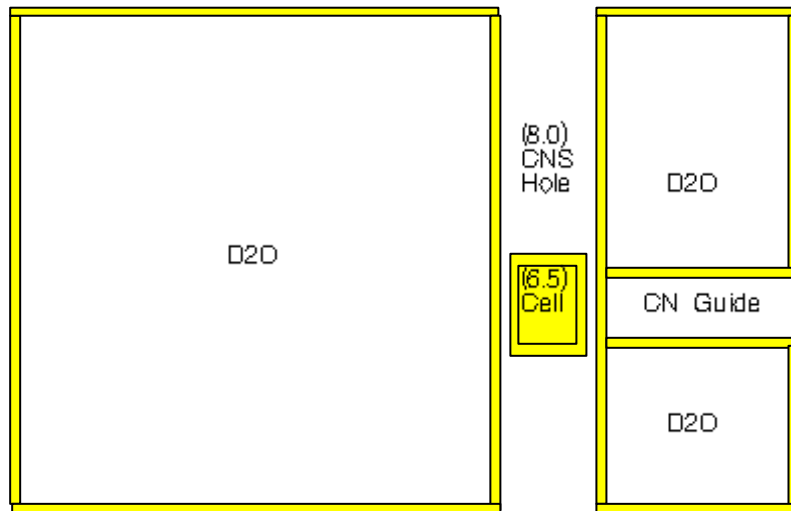


그림 6. 입사에너지가 0.27 eV일 때의 이차 중성자의 에너지 스펙트럼



수 평 도



수 직 도

그림 7. MCNP 계산 모형도

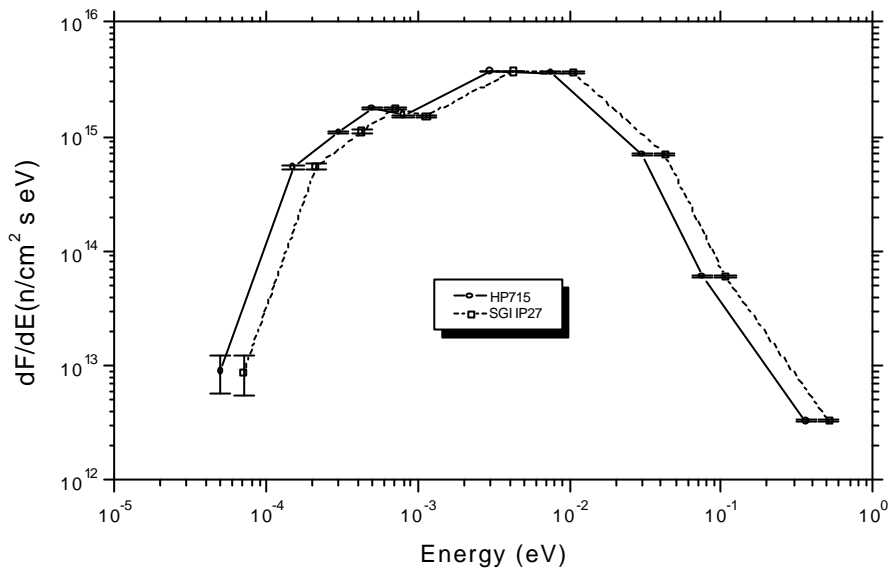


그림 8. HP715와 SGI IP27에서 계산한 para hydrogen의 MCNP 열중성자 라이브러리를 이용한 MCNP 계산 결과 비교 (SGI 결과는 오른쪽으로 이동하여 그렸음)

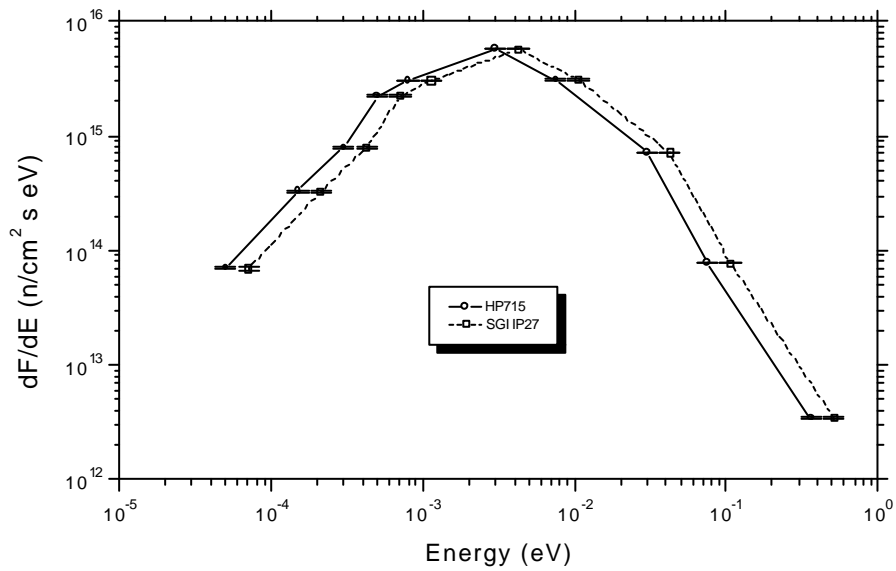


그림 9. HP715와 SGI IP27에서 계산한 ortho hydrogen의 MCNP 열중성자 라이브러리를 이용한 MCNP 계산 결과 비교 (SGI 결과는 오른쪽으로 이동하여 그렸음)

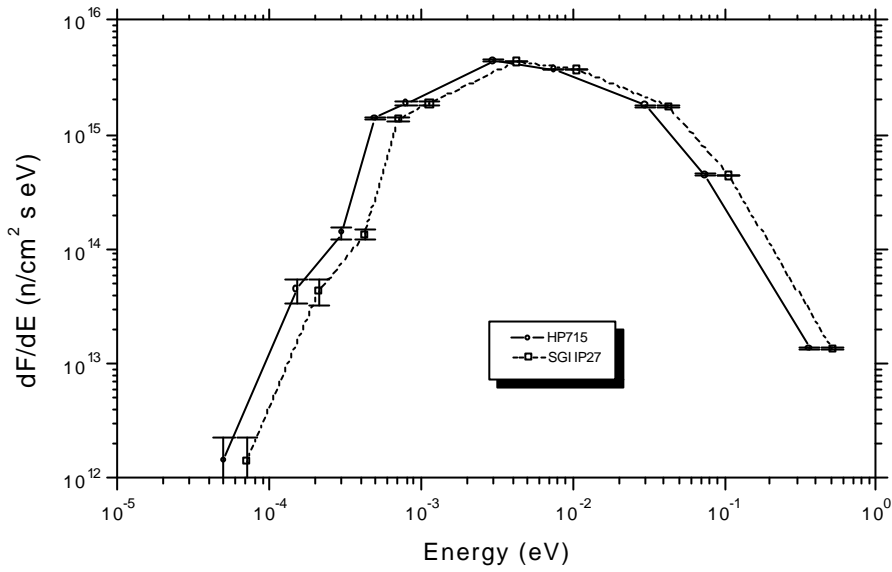


그림 10. HP715와 SGI IP27에서 계산한 para deuterium의 MCNP 열중성자 라이브러리를 이용한 MCNP 계산 결과 비교 (SGI 결과는 오른쪽으로 이동하여 그렸음)

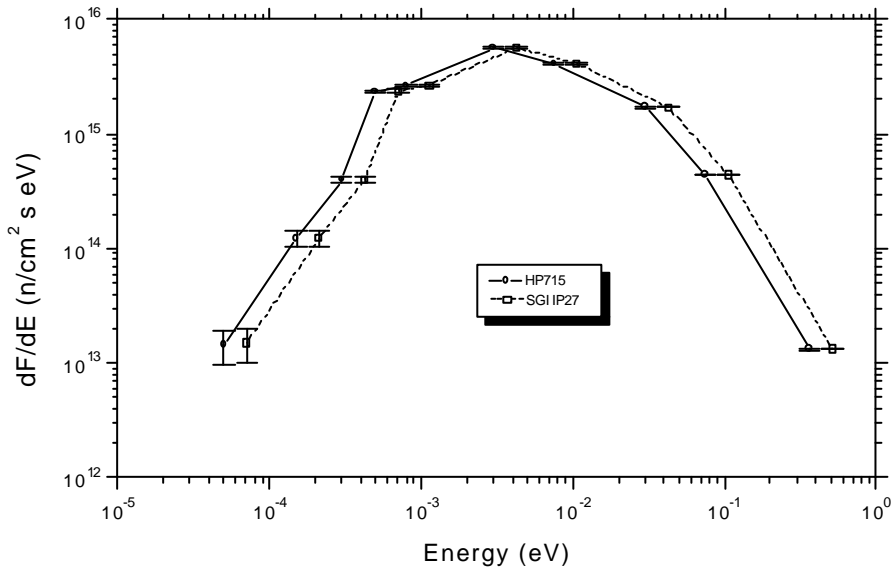


그림 11. HP715와 SGI IP27에서 계산한 ortho deuterium의 MCNP 열중성자 라이브러리를 이용한 MCNP 계산 결과 비교 (SGI 결과는 오른쪽으로 이동하여 그렸음)