

Monte-Carlo-Simulation des Teilchentransports und Anwendung in der Fusionsneutronik

U. Fischer, Y. Chen, IRS

Einführung

In der Plasmakammer eines Fusionsreaktors verschmelzen die leichten Atomkerne der Wasserstoffisotope Deuterium (d) und Tritium (t) bei hohen Temperaturen ($\cong 100$ Millionen Grad Celsius) zu Heliumkernen. Pro Fusionsreaktion wird ein Neutron emittiert, das mit 14.1 MeV den Löwenanteil der freigesetzten Bindungsenergie in Höhe von 17.6 MeV davon trägt. Die 14-MeV-Neutronen verlassen die Plasmakammer ungehindert und treten mit den Atomkernen der umgebenden Materialien in Wechselwirkung. Die Beschreibung des Ausbreitungsprozesses der Neutronen- und Photonenstrahlung („Teilchentransport“) im Fusionsreaktor ist Gegenstand der Fusionsneutronik. Das Monte-Carlo-Verfahren [1] ermöglicht es, den Teilchentransport auf mikroskopischer Ebene in beliebig komplexer Geometrie zu beschreiben und eignet sich damit speziell für die Fusionsneutronik. Im folgenden Beitrag wird die Monte-Carlo-Technik zur Beschreibung des Teilchentransports skizziert. Sodann wird ein Programmsystem vorgestellt, mit dessen Hilfe es möglich ist, dreidimensionale Dosisratenverteilungen nach Reaktorabschaltung zu bestimmen. Schließlich werden Anwendungsbeispiele präsentiert, die auf dem HPC Linux-Cluster des FZK im Parallelbetrieb gerechnet wurden.

Fusionsneutronik und Monte Carlo

Die kernphysikalischen Wechselwirkungsprozesse in den Materialien der das Plasma umgeben-

den Reaktorkomponenten führen zur Abbremsung und schließlich Absorption der schnellen 14-MeV-Neutronen. Dabei werden die Materialien aktiviert, es wird hochenergetische γ -Strahlung emittiert, die sich weiter ausbreitet, sowie geladene Teilchen, die in den Materialien schnell abgebremst werden und diese dabei aufheizen. Art und Umfang der stattfindenden Wechselwirkungsprozesse werden bestimmt durch die räumliche Materialverteilung und die zugehörigen nuklidspezifischen Wechselwirkungswahrscheinlichkeiten. Daraus ergibt sich dann die räumliche und energetische Verteilung der Neutronen- und Photonenfelder.

Die Ausbreitung der Neutronen und Photonen lässt sich aus mikroskopischer Sicht beschreiben. Das Monte-Carlo-Verfahren simuliert individuelle Teilchenschicksale wie sie analog in der physikalischen Realität ablaufen würden. Ausgehend von der „Geburt“ eines Teilchens, z. B. eines Neutrons in einer (d,t)-Fusionsreaktion, wird der ganze „Lebensweg“ des Teilchens bis zu seinem „Tod“ (z. B. Absorption) verfolgt. Dabei wird die probabilistische Natur der kernphysikalischen Wechselwirkungsprozesse ausgenutzt. Die Geburt eines Teilchens, seine Energie, seine Flugrichtung, seine weiteren Wechselwirkungen, die dadurch bedingte(n) Emission(en) neuer Teilchen, deren Energie, Flugrichtung und weitere Wechselwirkungen etc., all diese Ereignisse und Eigenschaften sind probabilistischer Natur und können „ausgewürfelt“, d.h. mit Hilfe generierter Zufallszahlen simuliert werden

(daher die Bezeichnung „Monte-Carlo-Verfahren“).

Das Monte-Carlo-Verfahren eignet sich zur Lösung komplexer Transportprobleme, die sich nicht oder nur schwer mit deterministischen Methoden berechnen lassen. Dies gilt insbesondere für geometrisch komplexe Materialanordnungen wie sie bei Fusionsreaktoren des Tokamak-Typs gegeben sind. Die Geometrie kann sehr flexibel dargestellt werden, im allgemeinen durch Schnittflächen räumlicher Körper (Kugel, Quader, Zylinder, Torus, etc.) im dreidimensionalen Raum. Bei der rechnerischen Verfolgung der Teilchenschicksale ist es lediglich erforderlich, die Schnittpunkte der Teilchenbahnen mit den die geometrischen Zellen begrenzenden Flächen zu berechnen. Die Grenzen der Anwendungsmöglichkeit werden bestimmt durch die Zahl der für ein Problem zu berücksichtigenden Teilchenschicksale, mithin durch die benötigte Rechenzeit. Der Aufwand an Rechenzeit wächst naturgemäß mit der Komplexität der behandelten Geometrie und ebenso mit der Zahl und Komplexität der zu berechnenden physikalischen Größen. Die in den letzten Jahren ständig steigende Rechenleistungen einschließlich der Verfügbarkeit von massiven Parallelrechnern haben die Anwendungsmöglichkeiten für Monte-Carlo-Rechnungen beträchtlich erweitert.

Berechnung von 3D-Dosisratenverteilungen für ITER

Der technische Entwurf für den Experimentalreaktor ITER [2] wur-

de in einer langjährigen internationalen Zusammenarbeit zwischen der EU, Japan, Russland und den USA ausgearbeitet. Mit ITER soll der Nachweis der wissenschaftlichen und technologischen Machbarkeit der Kernfusion als künftiger Energiequelle erbracht werden. Während des Betriebs von ITER muss gewährleistet sein, dass das Wartungspersonal Zugang zum Kryostaten hat, um dort befindliche Systemkomponenten zu warten und zu reparieren. Aufgrund der hohen Aktivierung der Reaktorkomponenten in diesem Bereich ist ein Zugang nur nach Abschaltung des Reaktors möglich. Eine wichtige Aufgabe ist es, die Dosisratenverteilung zu bestimmen, so dass fest-

gelegt werden kann wann und wo Zutritt möglich ist. Dies erfordert einerseits ein geeignetes Instrumentarium zur Berechnung der dreidimensionalen zeitabhängigen Dosisratenverteilung und andererseits ein geeignetes nukleares Experiment zu dessen Validierung. Ein solches Experiment wurde am Neutronengenerator in Frascati (FNG) als Kooperation zwischen ENEA Frascati, der TU Dresden und dem Forschungszentrum Karlsruhe durchgeführt [3]. Zur rechnerischen Analyse wurde am FZK ein Programmsystem erstellt, das eine weitgehend automatisierte Berechnung der dreidimensionalen Dosisratenverteilung nach Reaktorabschaltung erlaubt [4].

Programmsystem

Kernstücke des Programmsystems sind das Monte-Carlo-Programm MCNP [5], mit dem die Transportrechnungen für die Neutronen und die Zerfallsgammaquanten durchgeführt werden, sowie das Inventarprogramm FISPACT [6], mit dem die Quellterme der Zerfallsgammaquanten berechnet werden. Abb. 1 zeigt schematisch den Programmablauf. Unter Benutzung eines dreidimensionalen Geometriemodells werden zunächst die Neutronenflussspektren mit MCNP für alle Materialzellen berechnet, die nach Bestrahlung eine γ -Strahlenquelle darstellen können. Die Neutronenflussspektren werden über ein Interface an FISPACT übergeben zur Berechnung der Quellver-

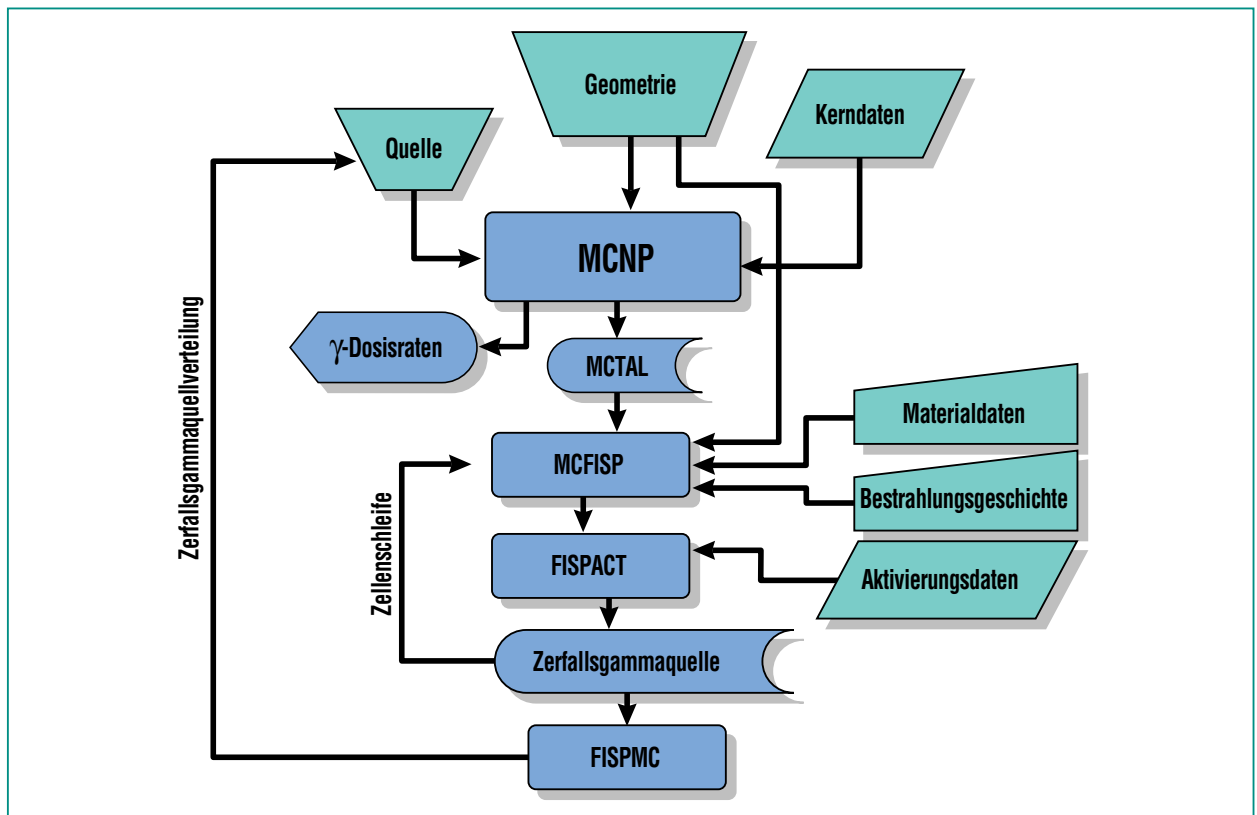


Abb. 1: Programmschema für die Berechnung dreidimensionaler Nachzerfallsdosisraten.

teilung der Zerfallsgammaquanten. Ein weiteres Interface stellt diese Verteilung dann MCNP für die Transportrechnung der Zerfallsgammaquanten zur Verfügung. Die rechnerische Verfolgung der Zerfallsgammaquanten mit MCNP ermöglicht es, die durch die Materialaktivierung während der Bestrahlung bedingte γ -Strahlendosis zu jedem Zeitpunkt nach Reaktorabschaltung an jedem Ort innerhalb des behandelten Geometriemodells zu bestimmen.

Validierung

Das Programmsystem wurde anhand des oben erwähnten Bestrahlungsexperimentes validiert. Eine ITER-typische Materialanordnung aus Stahl und wasseräquivalentem Material wurde zu diesem Zweck mit insgesamt $1.95 \cdot 10^{15}$ 14 MeV-Neutronen am Neutronengenerator Frascati be-

strahlt. Die Nachzerfallsdosisrate wurden in einem Hohlraum der Materialanordnung in einem Zeitraum von ≈ 1 h bis 20 Tage nach der Bestrahlung gemessen [3]. Die berechneten Nachzerfallsdosisraten sind in Abb. 2 mit den von einem Team der TU Dresden gewonnen Messwerten verglichen. Es zeigt sich insgesamt eine recht befriedigende Übereinstimmung. Die Abweichungen liegen bei maximal $\pm 15\%$ und sind im wesentlichen auf Unsicherheiten in den zu Grunde liegenden Aktivierungswirkungsquerschnitten zurückzuführen.

Dosisratenverteilung im Bereich der Handhabungsöffnung von ITER

Zum Nachweis seiner Eignung zur Behandlung großer und komplexer Systeme wurde das Programmsystem eingesetzt, um die

Dosisratenverteilung von ITER nach Reaktorabschaltung im Bereich der zentralen Handhabungsöffnung zu bestimmen. Abb. 3 zeigt hierzu einen Vertikalschnitt durch das von ITER Garching entwickelte MCNP-Torussektormodell. Abb. 4 zeigt einen Horizontalschnitt durch den Bereich der Handhabungsöffnung mit Materialzellen und zugeordneten Zellnummern. Die sehr aufwändige Berechnung der Neutronflusspektren für insgesamt 1663 Materialzellen wurde im Parallelbetrieb unter PVM („Parallel Virtual Machine“) [7] auf dem HPC-Linux-Cluster des FZK durchgeführt. Zur Bestimmung der Quellverteilung der Zerfallsgammaquanten wurde eine ITER-typische Bestrahlungsgeschichte mit einer 20-jährigen Betriebszeit bei einer mittleren Verfügbarkeit von 2.7% zu Grunde gelegt.

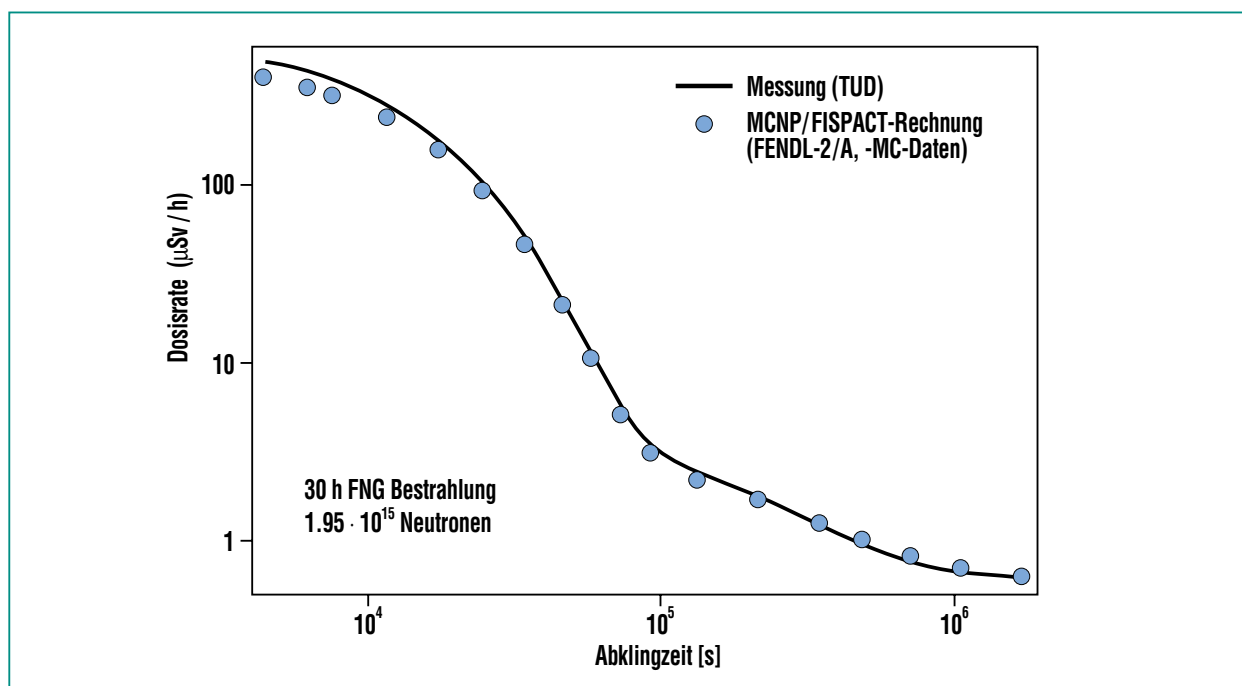


Abb. 2: Vergleich berechneter und gemessener Nachzerfallsdosisraten in einem Validierungsexperiment am Neutronengenerator Frascati.

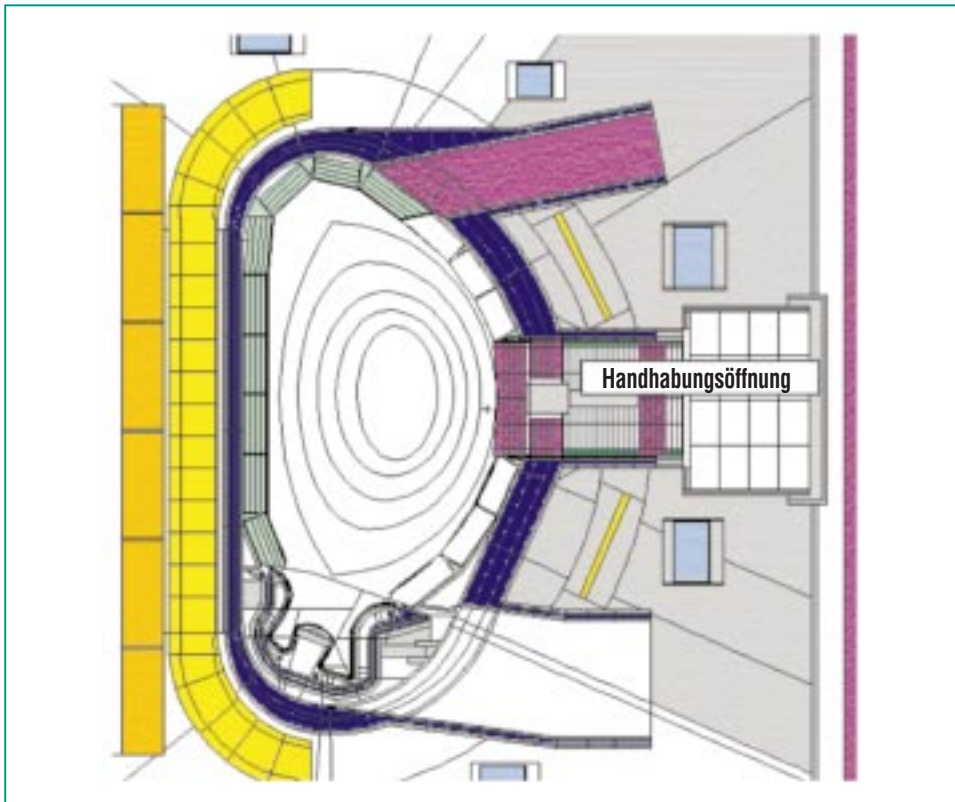


Abb. 3: MCNP-Modell von ITER (Vertikalschnitt) mit Handhabungsöffnung.

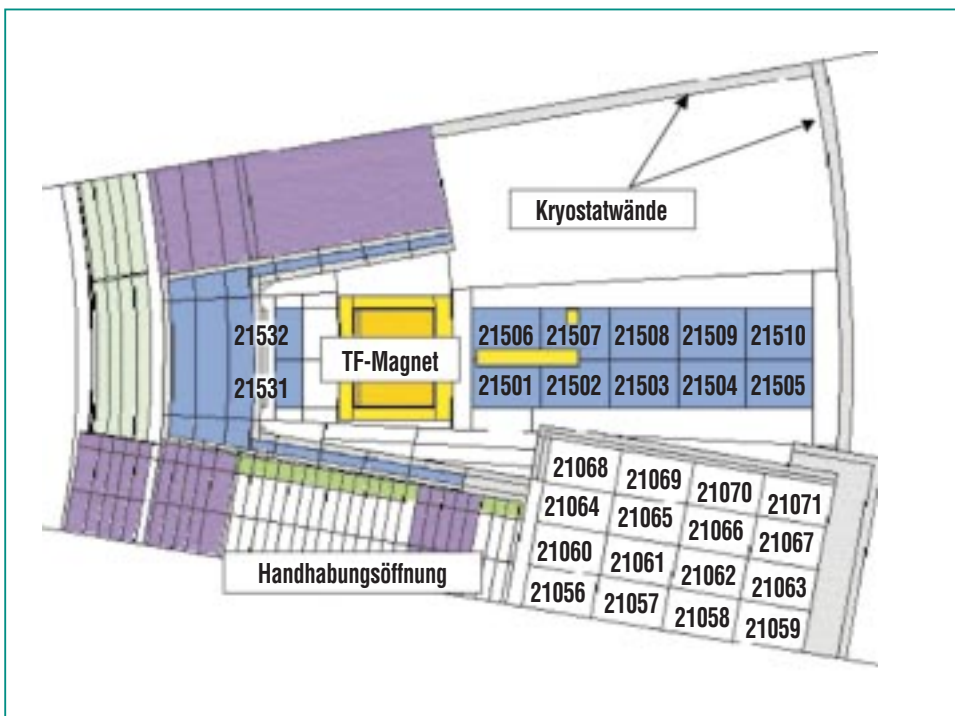


Abb. 4: Horizontalschnitt durch den Bereich der Handhabungsöffnung.

Abb. 5 zeigt die Nachzerfallsdosisraten die sich für die Zellen außerhalb der zentralen Handhabungsöffnung ergeben. Es zeigt sich, dass der Bereich um die Zellen #21502-21510 durch die Magnetfeldspulen recht gut abgeschirmt ist, so dass die Dosisrate dort innerhalb eines Tages unter den für das Wartungspersonal festgelegten Grenzwert von $100 \mu\text{Sv/h}$ fällt. Der Bereich um die Zellen #21531, 21532, ist hingegen nur durch Blanket und Vakuumgefäß abgeschirmt, so dass die Dosisleistung innerhalb des betrachteten Zeitraums von 30 Tagen über $100 \mu\text{Sv/h}$ bleibt. Wartungs- und Reparaturarbeiten sind unter den angenommenen Randbedingungen in diesem Bereich folglich nicht möglich.

Monte-Carlo-Rechnungen im Parallelmodus

Monte-Carlo-Simulationsrechnungen können prinzipiell parallel durchgeführt werden, da die Teilchenschicksale voneinander unabhängig sind. MCNP kann z. B. standardmäßig im Parallelmodus unter PVM [7] eingesetzt werden. Dabei wird die gleiche Monte-Carlo-Simulationsrechnung parallel auf mehreren Prozessoren durchgeführt. Die Gesamtzahl der zu berücksichtigenden Teilchenschicksale wird vom „Master“ auf die zur Verfügung stehenden Prozessoren aufgeteilt, indem diesen verschiedene Zufallszahlensequenzen zugewiesen werden. Die Ergebnisse der Simulationsrechnungen auf den verschiedenen Prozessoren werden nach Beendigung vom Master eingesammelt und zum Gesamtergebnis aufbereitet. Dieses ist völlig identisch

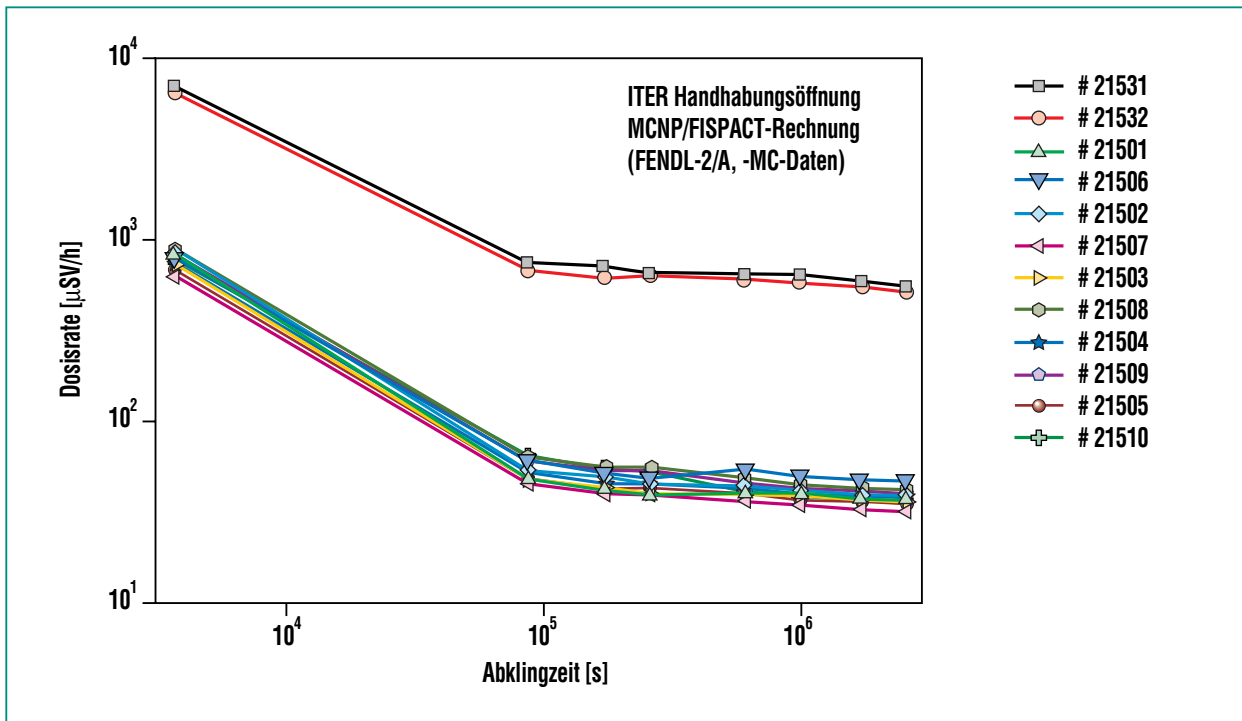


Abb. 5: Berechnete Nachzerfallsdosisraten im Bereich der Handhabungsöffnung.

mit dem Ergebnis das sich bei einer sequentiellen Rechnung auf einem Prozessor unter Verwendung der gleichen Zufallszahlensequenz ergeben würde. Auf dem benutzen HPC Linux-Cluster skaliert der Zeitgewinn dabei fast linear mit der Anzahl der genutzten Prozessoren, da sich die Kommunikation zwischen den Prozessoren auf die Zeiten beschränkt, bei denen die Teilergebnisse vom Master eingesammelt und ausgewertet werden. Die Häufigkeit dieser Kommunikationsprozesse wird durch die „Rendezvouszahl“

gesteuert, die Zahl aller – auf allen Prozessoren – bis zum Zeitpunkt des „Einsammelns“ berechneter Teilchenschicksale. Tab. 1 zeigt exemplarisch den Einfluss der Rendezvouszahl auf die Rechenzeit.

Zusammenfassung und Ausblick

Das Monte-Carlo-Verfahren ermöglicht es, den Teilchentransport auf mikroskopischer Ebene in beliebig komplexer Geometriedarstellung zu beschreiben. Mit dem

am Los Alamos National Laboratory LANL entwickelten Monte-Carlo-Programm MCNP und neueren Fusionskernbibliotheken steht ein Instrumentarium zur Verfügung, das sich vorzüglich zur Lösung neutronenphysikalischer Fragestellungen der Fusionstechnologie eignet. Die Lösung komplexer Probleme erfordert allerdings einen hohen Rechenaufwand, der unter Nutzung von Parallelrechnern wie dem HPC Linux-Cluster innerhalb eines überschaubaren Zeitrahmens geleistet werden kann. Damit war

Zahl der Prozessoren	1	15	15	15	11
Rendezvouszahl [Millionen]	–	1,0	0,5	0,1	0,8
Rechenzeit in Minuten („wall clock time“)	870	86	74	130	98

Tab. 1: Vergleich sequentieller und paralleler MCNP-Rechnungen auf dem HPC Linux-Cluster bei einer Gesamtzahl von 4,2 Millionen berechneter Teilchenschicksale.

es auch möglich, ein auf dem Monte-Carlo-Verfahren basierendes Programmsystem zu erstellen, mit dessen Hilfe drei-dimensionale Dosisratenverteilungen nach Reaktorabschaltung in beliebig komplexen Geometrien bestimmt werden können. Das Programmsys-

tem wurde anhand eines Bestrahlungsexperimentes am Neutronengenerator in Frascati validiert und anschließend auf den ITER-Reaktor angewandt. Zur Berechnung der Dosisratenverteilung in großen, die Reaktoranlage umgebenden Gebäuden, ist es not-

wendig, das Programmsystem zu erweitern. Eine Kopplung mit drei-dimensionalen deterministischen Rechenprogrammen ist dazu in Arbeit.

Literatur

- [1] I. Lux, L. Koblinger, *Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations*, CRC Press, Boca Raton 1991
- [2] ITER – International Thermonuclear Experimental Reactor, <http://www.iter.org>
- [3] P. Batistoni, M. Angelone, L. Petrizzi, M. Pillon, H. Freiesleben, D. Richter, K. Seidel, S. Unholzer, Y. Chen, U. Fischer, *Experimental Validation of Shutdown Dose Rates*, ENEA Report, June 2001
- [4] Y. Chen, U. Fischer, *Rigorous MCNP Based Shutdown Dose rate Calculations: Computational Scheme, Verification Calculations and Application to ITER*, 6th International Symposium on Fusion Nuclear Technology (ISFNT-6), San Diego, California, April 7-12, 2002
- [5] J.F. Briesmeister (ed.), *MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4C*, Los Alamos National Laboratory, Report LA-13709-M, April 2000.
- [6] R.A. Forrest, J.-Ch. Sublet, *FISPACT 99: User Manual*, UKAEA Fusion, Report UKAEA FUS 407, December 1998.
- [7] A. Geist et al, *PVM: A Users' Guide and Tutorial for Networked Parallel Computing*, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1994, <http://www.netlib.org/pvm3/book/pvm-book.html>