

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ЯДЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

УДК 537.534.74

АЛГОРИТМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ КОРРЕКЦИИ СЕЧЕНИЙ НА ШАГЕ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ВЫХОДА НЕЙТРОНОВ В МИШЕНИ НЕЙТРОННОГО ГЕНЕРАТОРА

© 2025 г. А. А. Галюзов^а, *, М. В. Косов^а, **

^аВсероссийский Научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, Москва, 127055 Россия

*E-mail: aagalyuzov@vniia.ru

**E-mail: Kosov@vniia.ru

Поступила в редакцию 23.05.2025 г.

После доработки 30.06.2025 г.

Принята к публикации 01.07.2025 г.

При моделировании нейтронных dd -генераторов необходимо учитывать падение энергии дейтронов на шаге моделирования, которое приводит к быстрому падению сечений неупругих dd -взаимодействий. Предложен алгоритм оптимального выбора шага моделирования для неупругого dd -взаимодействия, учитывающий снижение энергии дейтронов на шаге. С использованием закона Линдхарда (при малых энергиях энергетические потери заряженной частицы пропорциональны ее скорости) разработан алгоритм коррекции потерь энергии дейтронов на шаге. Использование этих алгоритмов позволяет ускорить моделирование мишени нейтронного dd -генератора на порядок.

Ключевые слова: реакция неупругого dd -рассеяния, нейтронные dd -генераторы, электронные энергетические потери

DOI: 10.56304/S2079562925060077

1. ВВЕДЕНИЕ

При численном Монте-Карло моделировании выхода нейтронов в нейтронных dd -генераторах обычно возникает неточность, связанная с конечностью шага моделирования в связи с тем, что сечения всех физических процессов зависят от энергии в начале шага без учета уменьшения энергии на длине шага. При уменьшении энергии сечение реакции неупругого dd -рассеяния экспоненциально падает в соответствии с фактором Гамова как

$$P(E_{\text{CM}}) = \frac{1}{E_{\text{CM}}} e^{-\sqrt{\frac{E_g}{E_{\text{CM}}}}}, \quad (1)$$

где $E_g = 2\mu(\pi\alpha z Z)^2$ — энергия Гамова, в случае dd -рассеяния равная 0.986 МэВ, $E_{\text{CM}} = E_{\text{LS}}M/(m + M)$ — кинетическая энергия в системе центра масс, $\mu = mM/(m + M)$ — приведенная масса реакции, α — постоянная тонкой структуры, а z , Z и m , M — заряды и массы налетающего ядра и ядра-мишени соответственно. Поскольку энергия пучка дейтронов, которым в нейтронных генераторах облучается мишень, порядка сотни килоэлектронвольт, падение сечения на шаге моделирования существенно снижает выход нейтронов по сравнению с предсказанием моделирования.

Поскольку при Монте-Карло моделировании в однородной среде энергия дейтрона считается неизменной на шаге, а сечение быстро падает при уменьшении энергии, средняя длина свободного пробега оказывается заниженной, и число неупругих dd -реакций завышается, что в итоге приводит к переоценке расчетной величины нейтронного выхода. Чтобы снизить эту систематическую погрешность, обычно уменьшают ограничение шага моделирования до предельно допустимых по времени счета значений и экстраполируют расчетный нейтронный выход к нулевому шагу, но это очень затратная по времени процедура. Более оптимальным решением является алгоритм непрерывной интегральной коррекции энергии сечения неупругой dd -реакции в соответствии с законом Линдхарда и слабым изменением астрофизического S -фактора. Такой выбор оптимального шага избавляет от необходимости ограничивать шаг очень малой величиной, а, значит, увеличивает производительность моделирования мишеней нейтронных dd -генераторов.

2. ЭЛЕКТРОННЫЕ ПОТЕРИ ЭНЕРГИИ dE/dx В ОБЛАСТИ МАЛЫХ ЭНЕРГИЙ

В области малых энергий электронные энергетические потери dE/dx дейтронов в дейтериде ти-

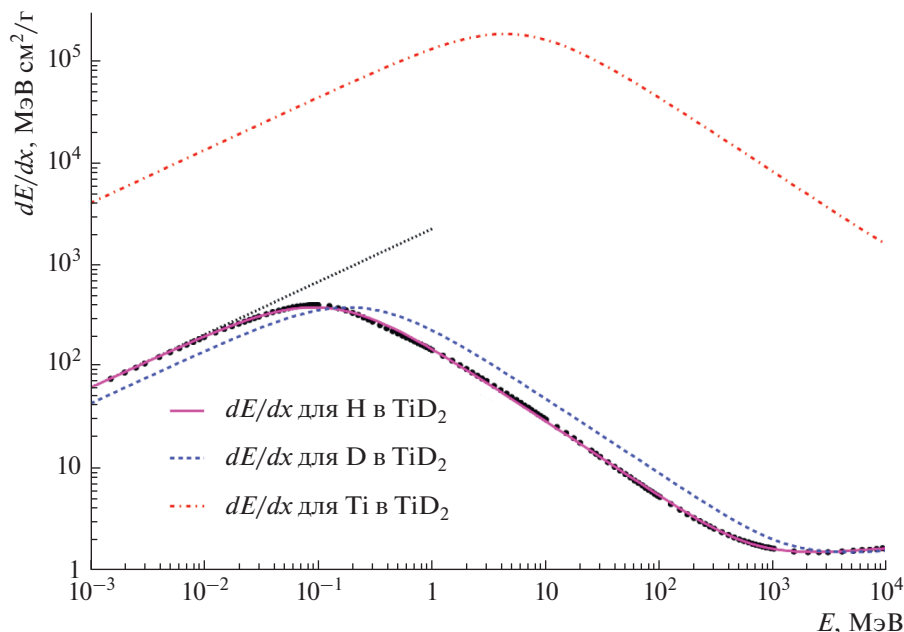


Рис. 1. Электронные энергетические потери dE/dx для протонов, дейтронов и ионов титана в дейтериде титана.

тана, как и во многих других материалах, с хорошей точностью подчиняются зависимости $dE/dx \propto V$, что показано черной точечной прямой на рис. 1. Черными точками на рис. 1 изображены оцененные электронные энергетические потери протонов в дейтериде титана, полученные при использовании удельных электронных потерь протонов в дейтерии и титане из базы данных PSTAR [1] по формуле $\frac{dE}{dx} = \sum \omega_j \frac{dE}{dx}_j$ [2], позволяющей вычислять потери в составном материале, представляющем собой смесь элементов с массовой долей ω_j с удельными энергетическими потерями $\frac{dE}{dx}_j$ в каждом из моноэлементных материалов. Сплошной кривой изображена аппроксимирующая функция:

$$\frac{dE_{\text{TiD}_2}^p}{z^2 dx} = \frac{1.02}{(E_{\text{LS}}/m)^{0.75} + 0.74 \cdot 10^{-5} (E_{\text{LS}}/m)^{-0.5}} + 3.56 (E_{\text{LS}}/m)^{1.65} \frac{\text{МэВ} \cdot \text{см}^2}{\text{г}}, \quad (2)$$

где z и m — заряд и масса иона. Обычно dE/dx разных ионов в одном и том же материале зависит от скейлинговой переменной E_{LS}/m [2]. Пунктирная кривая показывает удельные энергетические потери для дейтронов, а штрихпунктирная — для ионов титана.

$$d(m_D V^2/2)/dx = m_D V dV/dx = \rho_{\text{TiD}_2} B_{\text{TiD}_2} V, \quad (3)$$

где используется безразмерная величина скорости в единицах скорости света c , масса дейтрона

$m_D = 1875.6$ МэВ, плотность дейтерида титана считается постоянной, равной $\rho_{\text{TiD}_2} = 3.91$ г/см³, а коэффициент пропорциональности $B_{\text{TiD}_2} = 5.75 \cdot 10^4$ МэВ · см²/г был найден путем аппроксимации экспериментальных данных на рис. 1. В результате интегрирования получаем

$$V = \frac{\rho_{\text{TiD}_2} B_{\text{TiD}_2}}{m_D} x_E, \quad (4)$$

где x_E — расстояние до точки остановки дейтрона, в которой $x_E = 0$, или при $V = \sqrt{2E/m_D}$:

$$x_E = \frac{\sqrt{2m_D E_{\text{LS}}}}{\rho_{\text{TiD}_2} B_{\text{TiD}_2}}. \quad (5)$$

Расстояние до точки полной остановки дейтрона с $E_{\text{LS}} = 100$ кэВ — примерно 0.86 мкм.

3. КОРРЕКЦИЯ СЕЧЕНИЯ НЕУПРУГОГО dd -РАССЕЯНИЯ НА ШАГЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Сечение реакции неупругого dd -рассеяния записывается как

$$\sigma_{dd}^{\text{in}}(E_{\text{CM}}) = P(E_{\text{CM}}) S^{\text{in}}(E_{\text{CM}}), \quad (6)$$

где $S^{\text{in}}(E_{\text{CM}})$ — астрофизический S-фактор, а фактор Гамова $P(E_{\text{CM}})$ определен в (1).

Астрофизические S-факторы обоих каналов ($n + {}^3\text{He}$ и $p + t$) реакции неупругого dd -рассеяния изображены на рис. 2, где экспериментальные точки взяты из базы оцененных ядерных данных

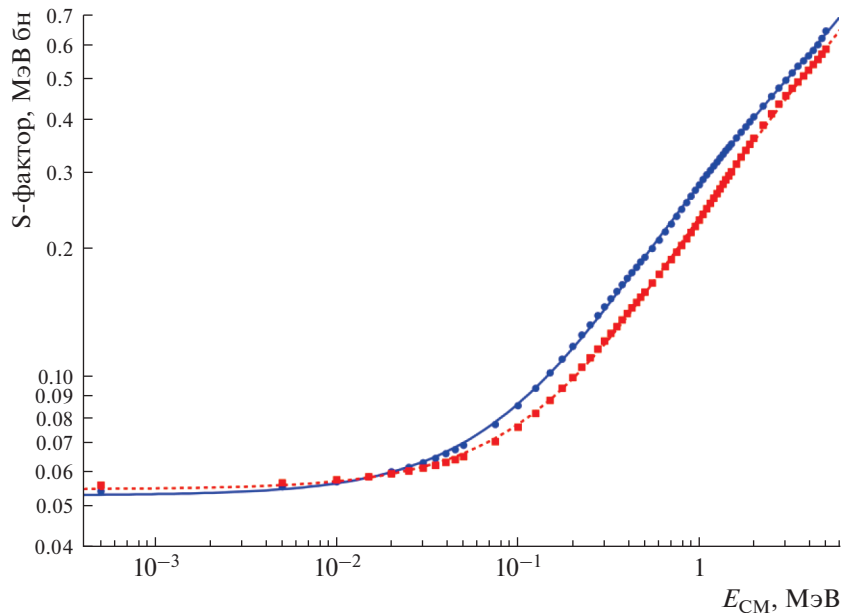


Рис. 2. S-факторы каналов реакции неупругого dd -рассеяния в зависимости от кинетической энергии в системе центра масс (сплошная кривая — $d(d, n)^3\text{He}$, штриховая — $d(d, p)t$).

ENDF/B-VII.1 [3] и аппроксимировались схожими дробно-рациональными функциями:

$$S_{n+^3\text{He}}^{\text{in}}(E_{\text{CM}}) = 0.0529 \times \frac{(1 + E_{\text{CM}}/0.135)(1 + E_{\text{CM}}/10.89)}{1 + E_{\text{CM}}/1.38} \quad (7)$$

для $n + ^3\text{He}$ канала и

$$S_{p+t}^{\text{in}}(E_{\text{CM}}) = 0.0547 \times \frac{(1 + E_{\text{CM}}/0.215)(1 + E_{\text{CM}}/15.88)}{1 + E_{\text{CM}}/2.55} \quad (8)$$

для $p + t$ канала неупругой dd -реакции, где все константы дроби и E_{CM} измеряются в мегаэлектронвольтах, а коэффициенты пропорциональности в МэВ · бн.

Поскольку при dd -рассеянии $E_{\text{CM}} = E_{\text{LS}}/2$ и в области малых энергий с хорошей точностью выполняется (5), можно написать

$$\sigma_{dd}^{\text{in}}(E_{\text{LS}}) = \frac{4m_{\text{D}}S^{\text{in}}(E_{\text{LS}}/2)}{\rho_{\text{TiD}_2}^2 B_{\text{TiD}_2}^2 x_E^2} e^{-\frac{x_G}{x_E}}, \quad (9)$$

где

$$x_G = \frac{2\sqrt{m_{\text{D}}E_G}}{\rho_{\text{TiD}_2} B_{\text{TiD}_2}} = 2.7 \text{ мкм}$$

и в качестве S-фактора используется либо (7), либо сумма выражений (7) и (8) для обоих каналов реакции в зависимости от того, какая величина рассчитывается: либо только выход нейтронов в

$n + ^3\text{He}$ выходном канале реакции, либо полное число произошедших реакций неупругого рассеяния.

Если на мишень нейтронного генератора падает поток из N дейтронов, то доля дейтронов ΔN , которые примут участие в реакции неупругого рассеяния при прохождении расстояния x в мишени, определяется как

$$\frac{\Delta N}{N} = n_{\text{D}} \sigma_{dd}^{\text{in}}(E_{\text{LS}}) x, \quad (10)$$

где n_{D} — концентрация дейтронов в мишени. Тогда вероятность дейтрону принять участие в неупругой dd -реакции до точки своей полной остановки можно рассчитать, как

$$W = \int_0^{x_E} n_{\text{D}} \sigma_{dd}^{\text{in}}(E_{\text{LS}}) dl = \frac{4n_{\text{D}}m_{\text{D}}S^{\text{in}}(E_{\text{LS}}/2)}{\rho_{\text{TiD}_2}^2 B_{\text{TiD}_2}^2} \times \times \int_0^{x_E} \frac{e^{-\frac{x_G}{x_E-l}}}{(x_E-l)^2} dl = \frac{4n_{\text{D}}m_{\text{D}}S^{\text{in}}(E_{\text{LS}}/2)}{\rho_{\text{TiD}_2}^2 B_{\text{TiD}_2}^2 x_G} e^{-\frac{x_G}{x_E}}. \quad (11)$$

Здесь l имеет смысл длины шага дейтрона, что позволяет связать переменные интегрирования как $x = x_E - l$. При кинетической энергии налетающего дейтрона 100 кэВ вероятность взаимодействия $W = 5.7 \cdot 10^{-8}$, а при 10 кэВ — $W = 3.1 \cdot 10^{-12}$.

Отсюда для случайного числа R , равномерно распределенного на отрезке от 0 до 1, длина шага l дейтрона в реакции неупругого dd -рассеяния разыгрывается как

$$l = \frac{x_E \ln R}{\ln R - x_G/x_E}. \quad (12)$$

Предлагаемый алгоритм коррекции пробега в реакции неупругой dd -рассеяния состоит из двух этапов и осуществляется для каждого дейтрона на каждом шаге моделирования. На первом этапе необходимо вычислить вероятность W (11) дейтрону принять участие в неупругой dd -реакции до остановки. Далее, если равномерно распределенное на отрезке от 0 до 1 случайное число $R_1 > W$, то дейтрон на шаге не принимает участия в неупругой dd -реакции. В противном случае при помощи случайного числа R_2 согласно (12) разыгрывается шаг дейтрона до неупругого взаимодействия, и эта величина участвует в конкуренции с шагами, соответствующими всем другим процессам физических взаимодействий, и только в случае, если она оказывается наименьшей из них, дейтрон неупруго взаимодействует с дейтроном мишени в конце шага моделирования. Понятно, что сечение упругого рассеяния много больше сечения неупругой dd -реакции, поэтому шаги до неупругого взаимодействия дейтрона случаются крайне редко.

4. КОРРЕКЦИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ dE/dx НА ШАГЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Величину удельных электронных энергетических потерь dE/dx ионов дейтерия в материале мишени в начале шага можно рассчитывать по точной аппроксимации (2) экспериментальных данных с учетом скейлингового пересчета от протонов к дейтронам и ионам титана. Для полученного значения нужно для каждого дейтрона на каждом шаге согласно (3) вычислить соответствующий коэффициент пропорциональности

$$B_{\text{TiD}_2} = \frac{dE_{\text{TiD}_2}^p}{dx}(E_{\text{in}}) \rho_{\text{TiD}_2} / V_{\text{in}}. \quad \text{Этот коэффициент,}$$

деленный на m_D , дает связь между изменением скорости и величиной пробега дейтрона в предположении (3). То есть при длине пробега дейтрона на шаге l можно вычислить его скорость в конце шага как $V_{\text{fin}} = V_{\text{in}} - B_{\text{TiD}_2}/m_D l$ и, таким образом, подсчитать энергию в конце шага как $m_D V_{\text{fin}}^2/2$. В результате величина потеря энергии дейтрона на шаге будет равна $m_D(V_{\text{in}}^2 - V_{\text{fin}}^2)/2$. Такой алгоритм позволяет в соответствии с (3) вычислять непрерывное уменьшение энергии частиц на шаге.

5. МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫХОДА НЕЙТРОНОВ В МИШЕНИ НЕЙТРОННОГО dd -ГЕНЕРАТОРА

Моделирование проводилось с использованием разработанной во ВНИИА им. Духова высоко-

производительной параллельной программы переноса радиации TPT3 [6]. Перпендикулярно торцу мишени из вакуума в нее запускалось 25 млрд первичных дейтронов с энергией 100 кэВ. Мишень считалась состоящей из однородного материала дейтерида титана, т.е. не учитывалась возможная неоднородность ее набивки, а также оксидный слой на ее поверхности, который слабо влияет на результаты моделирования.

Программа TPT3 помимо запуска на центральных процессорах может запускаться и на видеокартах NVIDIA, на которых при помощи стандарта препроцессорных директив OpenAcc [7] и языка программирования CUDA C [8] осуществляются высокопроизводительные расчеты.

При моделировании применялся метод масштабирования (biasing) малых сечений, используемый также в приложениях программы Geant4 [9], который позволяет за то же время счета увеличить статистическую точность результатов моделирования. Применительно к относительно малому сечению неупругой dd -реакции этот метод заключается в том, что сечение σ_{dd}^{in} (примерно 0.03 бн при 100 кэВ), на 7 порядков меньшее сечения упругого рассеяния (примерно 690 кбн), умножается на масштабирующий коэффициент порядка 10^4 . Во столько же раз уменьшается число полученных в моделировании неупругих реакций. При моделировании мишени нейтронного генератора этот метод позволяет за то же время на два порядка увеличить статистическую точность расчетов.

Вероятность нейтронного выхода можно оценить и без непосредственного моделирования протекания в мишени неупругой dd -реакции. Достаточно посчитать флюенс дейтронов в мишени и свернуть его с энергетической зависимостью сечения неупругой реакции. Поскольку флюенс имеет физический смысл плотности потока частиц в моделируемой области объемом V , то как плотность потока после деления на V измеряется в единицах $\text{см}^{-2} \cdot \text{МэВ}^{-1}$. Чтобы учесть, с чем взаимодействует поток дейтронов, надо умножить его на концентрацию дейтронов в мишени $2n^{\text{TiD}_2}$:

$$\int_{E_{\text{min}}}^{E_{\text{max}}} \frac{dl}{dE} 2n^{\text{TiD}_2} \sigma_{D(d,n)^3\text{He}}^{\text{in}}(E) dE = 3 \cdot 10^{-8}. \quad (13)$$

Это выражение определяет количество рожденных нейтронов на один запущенный дейтрон. Физическим смыслом подынтегрального выражения является то, сколько нейтронов производит первичный дейтрон при уменьшении его энергии от $E + \Delta E$ до E . Аналогичное (13) для полного сечения неупругой dd -реакции количество неупругих реакций составило примерно вдвое большую величину $5.88 \cdot 10^{-8}$. Было найде-

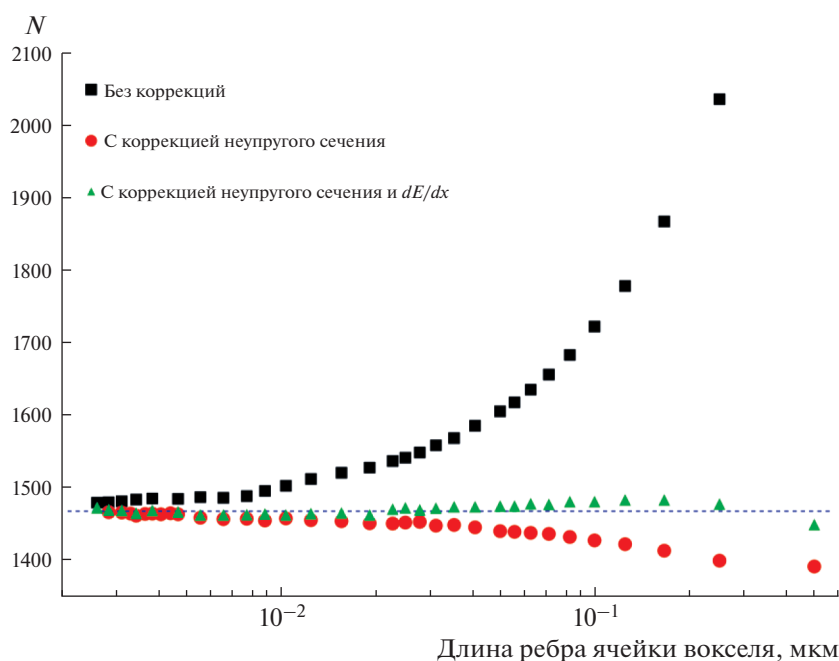


Рис. 3. Число произошедших реакций неупругого dd -рассеяния в мишени из дейтерида титана для 25 млрд запущенных первичных дейтронов с начальной кинетической энергией 100 кэВ в зависимости от длины ребра ячейки вокселя.

но, что уже при 20 кэВ вклад дейтронов в производство нейтронов составляет менее 3% от вклада дейтронов с энергией $E_{\max} = 100$ кэВ, поэтому в качестве энергии обрезания была с запасом выбрана величина $E_{\min} = 10$ кэВ, при кинетической энергии ниже которой дейтроны исключались из моделирования.

Результаты моделирования числа произошедших реакций неупругого dd -рассеяния без коррекции, с коррекцией по энергии пробегов дейтронов в неупругих взаимодействиях, а также с коррекцией удельных электронных энергетических потерь dE/dx представлены на рис. 3.

Поскольку сечение реакции неупругого dd -рассеяния вычисляется как функция кинетической энергии дейтрона в начале шага, это приводит к переоценке числа произошедших неупругих реакций, которая уменьшается ограничением на максимальный размер шага моделирования. Программа TRT3 использует воксельную геометрию, т.е. декартову сетку, разбивающую моделируемый объем на прямоугольные параллелепипеды (воксели). Размер вокселя ограничивает в программе максимальный шаг моделирования. На рис. 3 зависимость полученного числа неупругих реакций от размера вокселя без коррекций показана квадратами. С уменьшением размера вокселя число неупругих реакций, уменьшаясь, стремится к расчетной величине. Расчетная величина определяется интегралом свертки и составляет $25 \cdot 10^9 \cdot 5.88 \cdot 10^{-8} = 1470$. Величина нейтронного

выхода вычисляется в первом приближении как половина этого значения, а для точного расчета необходимо учесть соотношение интегралов свертки для $n + {}^3\text{He}$ и для обоих каналов неупругой dd -реакции. Вариант без коррекций стремится к расчетному значению медленно, так что для хорошей точности совпадения с расчетной пунктирной прямой необходимо уменьшать ограничение шага (длину ребра вокселя) до 2.6 нм, что соответствует самому левому квадрату на рисунке.

При использовании коррекции шага до неупругой dd -реакции (круги на рис. 3) число неупругих dd -реакций снизу-вверх приближается к тому же расчетному значению. Это вызвано тем, что коррекция шага неупругой реакции немного занижает среднее сечение. Соответственно, при большой длине ребра вокселя на правой части рис. 3 эффект занижения сечения приводит к выходу нейтронов меньше расчетного значения, а при уменьшении длины шага он стремится к расчетному значению значительно быстрее, чем без коррекций. Погрешности точек, показанных на рис. 3, меньше размера маркеров.

Наилучшее совпадение с расчетным значением практически без дополнительного ограничения шага моделирования демонстрирует вариант коррекции по кинетической энергии сечения неупругой dd -реакции и коррекции энергетических потерь иона на шаге моделирования, изображенный треугольниками. Как видно из рис. 3, он обеспечивает процентную точность вычисления числа произошедших неупругих реакций даже без

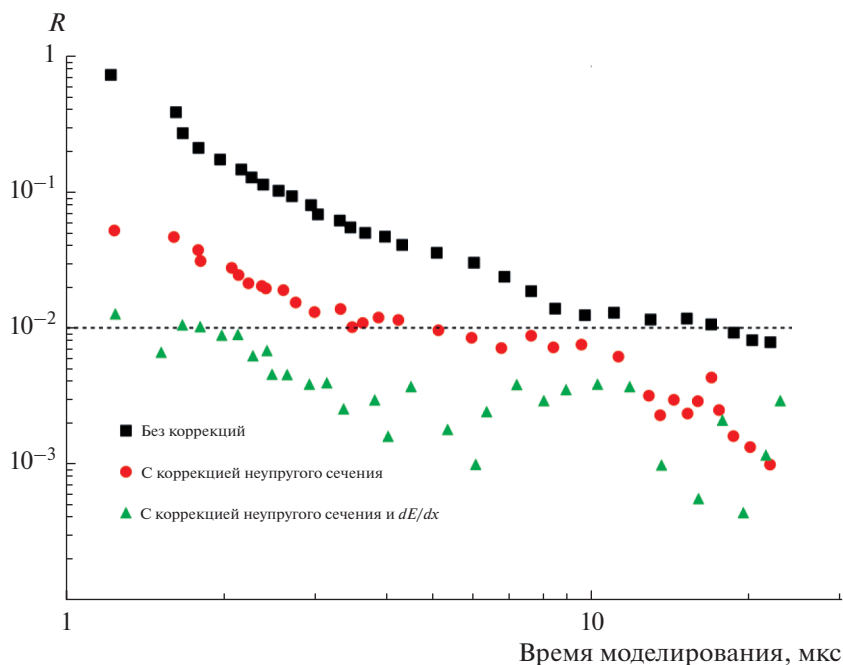


Рис. 4. Зависимость абсолютной величины относительной разности между полученным в ходе моделирования значением числа реакций неупругого dd -рассеяния и его расчетным значением, вычисленным с помощью интеграла свертки, от времени моделирования на один запущенный дейтрон.

ограничения на шаг моделирования (самый правый треугольник).

На рис. 4 показана абсолютная величина относительного отклонения промоделированного значения нейтронного выхода от его значения, рассчитанного при помощи флюенса дейтронов в мишени и интеграла свертки, в зависимости от времени счета на один запущенный дейтрон. Как видно, при моделировании без коррекций (квадраты) при наибольшей длине ребра вокселей $a = 0.5$ мкм величина нейтронного выхода определяется с погрешностью в примерно 70%, а при достижении естественного предела ограничения шага, определяемого расстоянием между атомами, не опускается ниже 1%. В то же время вариант моделирования с коррекцией сечения неупругой dd -реакции даже без ограничения на шаг моделирования обеспечивает точность примерно в 5%, а использование дополнительно коррекции dE/dx дает точность определения нейтронного выхода на уровне 1% (самые левые круги и треугольники).

Как видно из рис. 4, по скорости сходимости результатов к точному решению вариант моделирования с обеими коррекциями на порядок быстрее моделирования без коррекций (примерно 1.5 мкс против 15 мкс на один первичный дейтрон) обеспечивает процентную точность определения величины нейтронного выхода. В то же время точность выхода нейтронов в 1% при моделировании с коррекцией только на шаг неупругого dd -рассеяния

достигается за 4 мкс на один первичный дейтрон, т.е. обе коррекции примерно в равной степени важны.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Показано, что предложенные алгоритмы коррекции шага моделирования для неупругой dd -реакции и удельных электронных энергетических потерь dE/dx ионов дейтерия на шаге моделирования позволяют примерно на порядок ускорить расчет выхода нейтронов с точностью 1% в нейтронных dd -генераторах. Предлагаемое решение при однородной набивке мишени дейтронами и тритонами применимо и для мишеней нейтронных dt -генераторов. С небольшими дополнениями предложенный метод можно применять и при наличии оксидного слоя на поверхности мишени, и при ступенчатом описании неравномерной набивки титана ионами водорода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Berger M.J. ESTAR, PSTAR and ASTAR: Computer Programs for Calculating Stopping-Power and Range Tables for Electrons, Protons and Helium Ions. NISTIR 4999. 1992. Gaithersburg: NIST.
2. Zyla P., Barnett R., Beringer J., et al. (Particle Data Group) // Prog. Theor. Exp. Phys. 2020. V. 2020. P. 083C01.

3. Chadwick M.B., Oblozinsky P., Herman M., et al. // Nucl. Data Sheets. 2006. V. 107. P. 2931.
4. Ziegler J.F., Ziegler M.D., Biersack J.P. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B. 2010. V. 268. P. 1818.
5. Галюзов А.А., Косов М.В. // Ядерн. физ. инжинир. 2022. Т. 13 (2). С. 132 [Galyuzov A.A., Kosov M.V. // Phys. At. Nucl. 2021. V. 84. P. 1821].
6. Галюзов А.А., Косов М.В. // Программные продукты и системы. 2025. Т. 38 (2). С. 269.
7. <https://www.openacc.org>.
8. <https://www.developer.nvidia.com/cuda-toolkit>.
9. Agostinelli S., Allison, J., Apostolakis, J., et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. 2003. V. 506. P. 250.

Algorithm for Energy Correction of Cross Sections at the Modeling Step in Simulation of Neutron Yield in Neutron Generators

A. A. Galyuzov^{1, *} and M. V. Kosov^{1, **}

¹*Dukhov All-Russian Research Institute of Automation, Moscow, 127055 Russia*

**e-mail: aagalyuzov@vniia.ru*

***e-mail: Kosov@vniia.ru*

Received May 23, 2025; revised June 30, 2025; accepted July 1, 2025

Abstract—When modeling neutron *dd*-generators, it is necessary to take into account the deuteron energy drop in the simulation step, which leads to a rapid drop in the inelastic *dd*-interaction cross sections. An algorithm for optimal choice of the modeling step for inelastic *dd*-interaction is proposed, taking into account the decrease of the deuteron energy per step. Using the Lindhard law (at low energies, the energy losses of a charged particle are proportional to its velocity), an algorithm for correcting deuteron energy loss per step has been developed. Using these two algorithms can speed up the modeling of a neutron *dd*-generator target by an order of magnitude.

Keywords: inelastic *dd*-scattering reaction, neutron *dd*-generators, electron energetic losses