

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
им. М.В. Келдыша
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

А.В. Воронков, В.В. Сеница

GNPDL-30/19:
БИБЛИОТЕКА НЕЙТРОННО-ФОТОННЫХ ГРУППОВЫХ КОНСТАНТ
ДЛЯ РАСЧЕТА ПОДКРИТИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ВНЕШНЕЙ ПОДСВЕТКОЙ

Часть 2. Подготовка макроконстант

Москва-2001

АННОТАЦИЯ

В представленной работе дано описание методики подготовки макроскопических сечений для решения мультигруппового уравнения переноса методом дискретных ординат на основе библиотеки микроконстант GNPDL-30/19; приведены результаты демонстрационных расчетов.

Работа выполнена при финансовой поддержке
Международного научно-технического центра
(код проекта № 115-95)

A.V. Voronkov, V.V. Sinitsa

GNPDL-30/19:
LIBRARY OF NEUTRON-PHOTON GROUP CONSTANTS
FOR ADS CALCULATIONS
Part 2. Preparation of macroconstants

ABSTRACT

Here is a description of methods of preparing macroscopic cross sections for solving a multigroup equation of transference by the method of discrete ordinates on the base of a library of microconstants GNPDL-30/19; the results of demonstration calculations are presented.

The work was supported by the International Science-Technical Center
(Project № 115-95)

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Введение	4
2. Константы уравнения Больцмана	5
2.1 Многогрупповое уравнение переноса	5
2.2 Транспортные приближения	6
2.3 Учет резонансной самоэкранировки	7
2.4 Поправки на гетерогенность	8
2.5 Поправка в сечение замедления	10
2.6 Сопряженная задача	11
3. Файл макроконстант и скоростей процессов	11
3.1 Структура макроконстант	11
3.2 Программа расчета макроконстант TRANSX	13
3.3 Программы сопровождения и доступа	17
4. Тестовые расчеты	18
4.1 Критические эксперименты	18
4.2 Подкритический реактор ADS	19
4.3 Сферические пропускания	22
Литература	23
ПРИЛОЖЕНИЕ. Структура файла макроконстант GOXS	24

1. ВВЕДЕНИЕ

Подготовка макроконстант является ответственным этапом переработки данных для использования в задачах расчета переноса излучения, требующим умения учесть геометрические и физические особенности рассчитываемой системы. Это умение базируется на знании физики процесса переноса излучения и методов учета различных эффектов в рамках используемой математической модели. Обычно эти модели закладываются в алгоритмы программ расчета макроконстант, которые оставляют пользователю выбор той или иной опции и заданием соответствующих параметров. В настоящей работе приводится описание методов расчета макроскопических сечений и скоростей реакций, реализованных в программе TRANSX[1]. Эта программа была разработана в Лос-Аламосской национальной лаборатории США для обеспечения ядерными данными программ решения мультигруппового уравнения переноса методом дискретных ординат: ANISN[2], ONEDANT/TWODANT[3], и т.п. Она базируется на формате MATXS, который используют в библиотеке микроконстант GNPDL-30/19.

Ниже изложены основные сведения, необходимые для пользования этой программой TRANSX и корректного внесения поправок на основные физические и геометрические эффекты. В ней также приведены результаты расчетов некоторых бенчмарков, которые здесь следует рассматривать как демонстрационные, а не валидационные, поскольку они не систематизированы и не полны. Описание программы и методов расчета взяты из работы [1].

2. КОНСТАНТЫ УРАВНЕНИЯ БОЛЬЦМАНА

2.1. Многогрупповое уравнение переноса

Мультигрупповое S_N - уравнение переноса в одномерной плоской геометрии имеет вид:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \phi_g(\mu, x) + \sigma_g^S(x) \phi_g(\mu, x) = \sum_{l=0}^N P_l(\mu) \sum_{g'} \sigma_{lg \leftarrow g'}^S(x) \phi_{lg} + S_g(\mu, x), \quad (1)$$

где μ - косинус угла рассеяния, x - пространственная координата, $\phi_g(\mu, x)$ - поток в группе g , ϕ_{lg} - l -момент потока, $P_l(\mu)$ - полином Лежандра, $S_g(\mu, x)$ - источник нейтронов в группе. Сечения в уравнении (1) должны быть определены таким образом, чтобы поток ϕ_g был максимально приближен к решению уравнения Больцмана. Соответственно мультигрупповое P_N - уравнение может быть записано в виде:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi_g(\mu, x) + \sum_{l=0}^N P_l(\mu) \sigma_{lg}^{PN}(x) \psi_{lg} = \sum_{l=0}^N P_l(\mu) \sum_{g'} \sigma_{lg \leftarrow g'}^{PN}(x) \psi_{lg'} + S_g(\mu, x), \quad (2)$$

где P_N - сечения даются следующими выражениями:

$$\sigma_{lg}^{PN} = \frac{\int_g \sigma_t(E) W_l(E) dE}{\int_g W_l(E) dE} \quad (3)$$

и

$$\sigma_{lg \leftarrow g'}^{PN} = \frac{\int_{g'} dE' \int_g dE \sigma_l(E' \rightarrow E) W_l(E) dE}{\int_{g'} dE' W_l(E')} \quad (4)$$

этих формулах $\sigma_t(E)$ и $\sigma_l(E' \rightarrow E)$ - полное сечение и сечение рассеяния, $W_l(E)$ - весовая функция, максимально приближенная к функции ψ . Требуемые P_N - сечения содержатся в MATXS - файлах. Из уравнений (1) и (2) следует, что:

$$\sigma_{lg \leftarrow g'}^{SN} = \sigma_{lg \leftarrow g'}^{PN}, \quad \text{при } g' \neq g, \quad (5)$$

и

$$\sigma_{lg \leftarrow g}^{SN} = \sigma_{lg \leftarrow g}^{PN} - \sigma_{ltg}^{PN} + \sigma_g^{SN}, \quad (6)$$

где σ_g^{SN} не определено. Выбор σ_g^{SN} составляет суть "транспортного приближения", для которого предусмотрены следующие альтернативы.

2.2. Транспортные приближения

Удобно переписать уравнение (6) в виде:

$$\sigma_{lg \leftarrow g}^{SN} = \sigma_{lg \leftarrow g}^{PN} - (\sigma_{1tg}^{PN} - \sigma_{0tg}^{PN}) - \Delta_g^N, \quad (7)$$

и

$$\sigma_g^{SN} = \sigma_{0tg}^{PN} - \Delta_g^N \quad (8)$$

Поправочный член в скобках (...) вносит поправку на анизотропию в сечении полного взаимодействия в уравнении Больцмана, выбор параметра Δ_g^N производится таким образом, чтобы минимизировать эффект пренебрежения членами разложения при $l=N$.

Р-согласованное приближение:

$$\Lambda_g^N = 0, \quad (9)$$

Р-несогласованное приближение:

$$\Lambda_g^N = \sigma_{0tg}^{PN} - \sigma_{N+1,tg}^{PN}, \quad (10)$$

Диагональное транспортное приближение:

$$\Lambda_g^N = \sigma_{0tg}^{PN} - \sigma_{N+1,tg}^{PN} + \sigma_{N+1,g \leftarrow g}^{PN}, \quad (11)$$

Белл-Хансен-Сэндмайера или расширенное транспортное приближение:

$$\Lambda_g^N = \sigma_{0tg}^{PN} - \sigma_{N+1,g}^{PN} + \sum_g \sigma_{N+1,g' \leftarrow g}^{PN}, \quad (12)$$

"Обобщенное" транспортное приближение:

$$\Lambda_g^N = \sigma_{0tg}^{PN} - \sigma_{N+1,tg}^{PN} + \frac{\sum_{g'} \sigma_{N+1,g \leftarrow g'}^{PN} \phi_{N+1,g'}}{\phi_{N+1,g}}. \quad (13)$$

Первые два приближения лучше использовать рассеяние порядка выше N мало, причем **Р-несогласованное** приближение устраняет большую часть вклада от дельта-функции рассеяния вперед путем внесения поправки на анизотропию полного рассеяния и обычно сходится лучше, чем согласованное.

Диагональное и Белл-Хансен-Сэндмайера (BHS) приближения корректируют анизотропию в матрице рассеяния и особенно эффективны в случае преимущественного рассеяния вперед. Лучше использовать BHS приближение, но в случаях, когда оно приводит к отрицательным решениям, его следует заменить на диагональное.

"Обобщенное" транспортное приближение позволяет сделать $N+1$ член P_N -разложения исчезающе малыми, но требует хорошего знания $N+1$ моментов потока из предварительных расчетов. Это приближение сводится к BHS для систем, находящихся в детальном равновесии (например, в тепловой области). Диффузионное уравнение, использующее "обобщенное" приближение, эквивалентно P1-транспортному уравнению. Эти поправки требуют данные для $(N+1)$ -го момента сечения.

2.3 Учет резонансной самоэкранировки

Использование мультигруппового приближения, огрубляющее резонансное поведение сечений, приводит к необходимости учета эффекта резонансной самоэкранировки. В общем случае этот эффект является сложной функцией геометрии и композиции системы. Широкое распространение получила простая модель, получившая название метода Бондаренко, основанная на понятии сечения разбавления. Несмотря на простоту, она дает удивительно хорошие результаты для многих приложений. Согласно этой модели поток для усреднения сечения изотопа i в группе может быть записан в виде (если в смеси присутствуют другие изотопы):

$$\phi_i^i(E) = \frac{C(E)}{[\sigma_o^i + \sigma_t^i(E)]^{l+1}}, \quad (14)$$

Влияние полного сечения в знаменателе состоит в моделировании провала в потоке в пике резонанса сечения, а сечение разбавления задает относительную глубину провала.

Зависимость от l применима для больших систем с почти изотропным рассеянием (B_0 - приближение) и содержится в данных MATXS. Выражение (14) основано на приближении узкого резонанса и является не вполне корректным для широких низкоэнергетических резонансов, что несущественно для быстрых систем.

Для бесконечных гомогенных систем соответствующее сечение разбавления вычисляется из уравнения:

$$\phi_{lg}^i(E) = \frac{Cg}{[\sigma_{og}^i + \sigma_{tg}^i]^{l+1}}. \quad (15)$$

где N_i - ядерная концентрация i -го изотопа. Поскольку σ_t зависит от σ_o , значение σ_o вычисляется итерациями.

В мультигрупповой форме поток имеет вид:

$$\sigma_0^i = \frac{1}{N_i} \sum_{j \neq i} N_j \sigma_{tg}^i(\sigma_{0g}^j) \quad (16)$$

Если некоторое тело из резонансного материала поместить в большую замедляющую среду, утечка нейтронов из него также увеличит сечение разбавления. Это дополнительное сечение утечки описывается формулой:

$$\sigma_{xg}^i = \frac{1}{N\bar{l}} \quad , \quad (17)$$

где \bar{l} - средняя длина хорды для тела, вычисляемая по формуле:

$$\bar{l} = \frac{4V}{S} \quad , \quad (18)$$

V и S - объем и площадь поверхности тела (например, для цилиндра $\bar{l} = 2r$)
Средняя хорда \bar{l} может быть вычислена из соотношения (18) с учетом наличия других тел (поправка Данкова) или, исходя из вероятности - уравнение (17) (фактор Белла). Программа TRANSX обеспечивает вычисление этих поправок исходя из значения параметра \bar{l} .

Уравнения (16) и (17) показывают, что имеется своего рода эквивалентность между эффектом самоэкранировки вследствие гомогенного присутствия замедлителя, и эффектом, обусловленным конечным размером образца (гетерогенный эффект). Физически для узких резонансов это означает, что если появился нейтрон с энергией, попадающей на поглощающий резонанс изотопа i , он может избежать поглощения либо замедлившись на рассеивающем материале j , либо вылетев за границы образца. Очевидно, что эти эффекты аддитивны, а следовательно для их описания можно использовать один параметр - сечение разбавления.

2.4 Поправки на гетерогенность

Если тела, стержни или пластины, содержащие резонансный топливный материал, находятся недалеко друг от друга, имеется вероятность, что нейтрон покинув один стержень пройдет сквозь заполняющий материал и прореагирует с топливом в другом стержне. Такое событие эквивалентно тому, как если бы нейтрон вообще не покидал топливного материала. Вероятность утечки при этом уменьшается. Для учета этого эффекта используется поправка Данкова. В программе TRANSX предусмотрены следующие опции:

Аппроксимация Белла для цилиндра:

$$C = \frac{1}{1 + \lambda} \quad ; \quad (19)$$

Аппроксимация Зауэра для цилиндра в гексагональной решетке

$$C = \frac{e^{-r\lambda}}{1 + (1-r)\lambda} ; \quad (20)$$

где

$$r = \left(.9523 \sqrt{1 + \frac{V_M}{V_M + V_C}} - 1 \right) \frac{\sqrt{1 + V_C}}{V_M} - .12 \left(1 + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{V_C}{1 + V_C}} \right), \quad (21)$$

Аппроксимация Зауэра для цилиндра в квадратной решетке:

$$C = \frac{e^{-r\lambda}}{1 + (1-r)\lambda} ; \quad (22)$$

где

$$r = \left(.8862 \sqrt{1 + \frac{V_M}{V_M + V_C}} - 1 \right) \frac{\sqrt{1 + V_C}}{V_M} - .08 \left(1 + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{V_C}{1 + V_C}} \right), \quad (23)$$

Аппроксимация Белла для плоской ячейки:

$$C = \frac{0.5}{1 + \lambda_R} + \frac{0.5}{1 + \lambda_L}; \quad (24)$$

E_3 аппроксимация вероятности столкновений для плоской ячейки:

$$C = E_3(\lambda_R) + E_3(\lambda_L). \quad (25)$$

В этих выражениях λ - оптический путь в области замедлителя, $\bar{l}_m \sigma_m$, λ_L и λ_R - оптический пути слева и справа от области, содержащей материал i к слоям с тем же материалом, V_M и V_C - отношения объема замедлителя и оболочки к объему топлива, E_3 - эллиптический интеграл третьего порядка.

Сечение утечки с поправкой Данкова в этих случаях имеет вид:

$$\sigma_{xg}^i = \frac{1}{N_i \bar{l}} \frac{b_1(1-C)}{1 + (b_2 - 1)C}, \quad (26)$$

где b_1 и b_2 - так называемые поправки Данкова (обычно принимаемые равными 1.09 для слоя и 1.35 для цилиндра). Если $b_1 = b_2$, эту константу обычно обозначают A и называют "фактор Левина".

2.5 Поправка в сечение замедления

Для получения библиотеки групповых констант (2), (3), (4) необходимо выбрать модельную весовую функцию. Реальный поток в рассчитываемых системах может существенно отличаться от принятой модели. Задача усложняется для многозонных системах, в которых поток меняется от области к области. Для векторных сечений (сечений захвата, деления), влияние отличия модельного от реального потока можно уменьшить, сделав группы достаточно узкими. Это не справедливо для упругого замедления на тяжелых ядрах, которое происходит в узком интервале вблизи нижней границы группы. Введем параметр γ - отношение потока вблизи нижней граница группы к среднегрупповому потоку. Сечение увода из группы в результате упругого рассеяния очень чувствительно к этому параметру, который может сильно отличаться для модельного и реального потоков. Пренебрегая локальными отличиями этого параметра в группах, в которых проявляются индивидуальные особенности отдельных резонансов, оценим эффективную производную потока в интервале, охватывающим несколько групп. Для многих важных функционалов, например $k_{\text{эфф}}$, это приближение оказывается достаточно хорошим.

Запишем увод из группы g в группу g' :

$$R_{g' \leftarrow g}^M = \int_g du \int_{g'} du' \sigma_e(u' \leftarrow u) \phi^M(u) \quad (27)$$

где u - лётаргия, σ_e - дифференциальное сечение упругого рассеяния, ϕ^M - модельный поток. Запишем отличие истинного потока на нижней границе группы от модельного потока в виде линейного множителя:

$$\phi(u) = [a - b(u_g - u)] \phi^M(u), \quad (28)$$

где u_g - значение лётаргии на нижней границе.

Тогда для скорости увода нейтронов из группы получим:

$$R_{g' \leftarrow g} = R_{g' \leftarrow g}^M [a - b\gamma_{g' \leftarrow g}], \quad (29)$$

где

$$\gamma_{g' \leftarrow g} = \frac{\int_g du \int_{g'} du' (u_g - u) \sigma_e(u' \leftarrow u) \phi^M(u)}{\int_g du \int_{g'} du' \sigma_e(u' \leftarrow u) \phi^M(u)}. \quad (30)$$

Представим сглаженное отношение потоков в группе g в виде:

$$\ln(\phi / \phi^M) = x_0 + x_1(u_g - u) + x_2(u_g - u)^2 \quad (31)$$

Величина $\gamma_g = \sum_g \gamma_{g' \leftarrow g}$ представляет собой константу замедления γ используемую для коррекции матрицы упругого рассеяния.

Коэффициенты x_0, x_1, x_2 можно определить методом наименьших квадратов по значениям средних потоков, приписывая их центральным точкам некоторого количества групп, окружающих выделенную группу (скажем, три сверху и три снизу). Параметры a и b , вычисленные на нижней границе группы и значение сглаженного отношения потоков в центре группы позволяют вычислить искомую поправку в скорость увода.

2.6 Сопряженная задача

Решение сопряженного уравнения переноса используется для вычисления изменений функционалов системы при малых возмущениях, а также для расчета величины возмущения, необходимого для получения требуемого изменения функционала. Сопряженные потоки чаще всего используются для расчета чувствительности функционала к изменениям основных сечений.

Сопряженное уравнение переноса может быть получено из прямого путем транспонирования матриц рассеяния и деления. Однако при этом рассеяние "вниз" становится рассеянием "наверх". Если обратить порядок подгрупп и одновременно изменить вектор направления на противоположный, нахождение сопряженного потока может быть найдено решением прямого уравнения. Связь прямого и сопряженного решений дается выражением:

$$\phi^+(g, \vec{\Omega}) = \phi(N - g + 1, -\vec{\Omega}) \quad (32)$$

3. ФАЙЛ МАКРОКОНСТАНТ И СКОРОСТЕЙ ПРОЦЕССОВ

3.1 Структура макроконстант

Как было показано выше, для решения S_N уравнения (1) требуются набор сечений:

$$\sigma_g, \sigma_{lg \leftarrow g'}, \bar{v}\sigma_{fg} \text{ и } \chi_g, \quad (33)$$

называемый базовым набором (индекс SN для краткости опущен). Традиционно программы решения уравнения переноса методом SN используют также сечение баланса частиц (или сечение "поглощения"), определяемое как:

$$\sigma_{ag} = \sigma_g - \sum_{g'} \sigma_{0g' \leftarrow g} \quad (34)$$

Это сечение становится отрицательным, если количество частиц, образующихся в реакциях (n, xn) превосходит количество поглощенных в реакциях $(n, \gamma), (n, p), (n, \alpha)$ и др.

После того, как поток найден, часто возникает необходимость вычислить такие функционалы, как тепловыделение, смещение на атом, образование газообразных продуктов, образование фотонов, дозу и пр. Для этого в исходной библиотеке помимо базовых, непосредственно входящих в уравнения переноса, должны содержаться некоторые дополнительные сечения, обозначаемые ниже σ_{Eg} . Традиционно всю эту информацию представляют в форме "транспортных таблиц":

Таблица 1. Структура транспортной таблицы

NED = число дополнительных сечений ($NED \geq 0$)

NUP = максимальное число групп с рассеяние наверх

NTABL = длина таблицы ($NED+4+NUP \leq NTABL \leq NED+4+NUP+NGROUP$)

NGROUP = число энергетических групп

IPTOT = $NED+3$ = позиция полного сечения

Позиция	Содержание для группы g	
1		
.	}	
.	}	σ_{Eg} Дополнительные сечения
.	}	
NED		
.....
NED+1	}	σ_{ag}
NED+2	}	$\bar{v}\sigma_{fg}$ Базовые сечения
NED+3	}	σ_g
.....		
NED+4		
.	}	
.	}	$\sigma_{g \leftarrow g'}$ Рассеяние наверх ($g' > g$)
.	}	
NED+NUP+3		
.....
NED+NUP+4		$\sigma_{g \leftarrow g'}$ Рассеяние "в себя" ($g' = g$)
.....
NED+NUP+5		
.		
.		$\sigma_{g \leftarrow g'}$ Рассеяние вниз ($g' < g$)
.		
NTABL		

Транспортные таблицы подобного рода требуются для каждой группы, момента, материала. По способу их упорядочивания различают таблицы "материал-группы" и "группа-материалы". Упорядочивание по материалам

естественно в процессе получения групповых констант. Однако, в расчетных программах данные требуются по группам. Схема решения S_N уравнения такова, что сначала требуются все материалы и моменты для 1-й (верхней по энергии) группы, затем для 2-й, и далее, в порядке возрастания номеров групп. При разработке форматов файлов-интерфейсов учитывается эта особенность доступа к данным.

Одним из наиболее распространенных форматов хранения транспортной таблицы является формат GOXS [2]. Полное описание формата можно найти в Приложении. Здесь же приводятся его краткие характеристики.

GOXS формат разработан в рамках СССР-стандартов и совместим с форматом MACRXS, используемым в программах ONEDANT/TWODANT. Данные в нем упорядочены по типу "группа-материалы". Так же, как и формат MATXS, материалы и типы взаимодействия именуется в нем с помощью текстовых констант. Количество типов сечений в нем произвольно и практически неограниченно. Наличие имен позволяет разработчикам программ обеспечивать легко читаемую выдачу результатов.

Матрица рассеяния в файле GOXS упаковывается таким образом, чтобы минимизировать количество нулей.

Такие программы, как ONEDANT/TWODANT используют эту возможность.

3.2 Программа расчета макроконстант TRANSX

Программа TRANSX предназначена для получения таблиц констант для решения многогруппового уравнения переноса нейтронов, фотонов и других частиц методом дискретных ординат (SN) и диффузионного уравнения. Входной библиотекой для нее служит библиотека в формате MATXS. При получении констант учитываются эффекты гомогенной и гетерогенной резонансной самоэкранировки, рассеяние в области термализации, деление на мгновенных нейтронах и в установившемся процессе; предусмотрено использование различных поправок в транспортное сечение, в упругое рассеяние. Имеется возможность получения скоростей комбинации процессов как для отдельных материалов, так и их смесей, свертки групп с заданным потоком, гомогенизация сечений, получение констант для сопряженной задачи.

Исходные данные

карта 1 заголовок задачи -

текст до 72 символов без ограничителей

stop - остановка задания

карта 2 опции

- iprint печать (0=полная/1=сокращенная)
- іout выходной формат
- 0 не требуется
 - 1 типа card (6e12)
 - 2 claw - card с вынесенным в начало блоком сечений
 - 3 fido - компактная запись повторяющихся чисел
 - 4 anisn - fido с фактором 2^{*l+1}
 - 5 goxs - бинарный упорядоченный по группам
 - 6 isotxs - бинарный упорядоченный по материалам, стандарт cccc-iv
 - 7 anisnb - бинарный anisn
 - 8 anigif - упорядоченный по группам бинарный anisn
- іprob задача (0=прямая/1=сопряженная)
- іset іset=i - простая таблица констант для частицы типа i,
іset=ij - составная таблица констант для частиц i и j,
іset=ijk - составная таблица констант для 3-х частиц и т.д.
- iform iform - тип упорядоченности: 1=по материалам/2=по группам
- іtime время деления (1=стационарное/2=мгновенное)
- іdecay время распада (не используется)
- іtrc транспортная поправка
- 0 отсутствует
 - 1 р-согласованная
 - 2 диагональная
 - 3 Bell-Hansen-Sandmeier
 - 4 «обобщенная»
 - 5 р-несогласованная
- іcoll свертка (0=нет/nfine=да)
- іnitf способ ввода потока для свертки
- 0 использовать библиотечный для p0 потока
 - 1 прочитать p0 поток с карт
 - 2 файл rtflux -полный поток в стандарте cccc-iv
 - 3 файл rzmflx - моменты потока по зонам
 - 4 rzflux - поток в зонах в стандарте cccc-iv
- 12-14 признак ввода карты соответствий поток-область
- n ввести поправку на форму спектра внутри группы в сечение рассеяния
- для последних 5 пунктов, по умолчанию активен первый пункт

карта 3 параметры

- ngroup число групп в таблице
- ngroup<0 - материалы заданы в виде отдельных файлов
- nl число моментов

ntabl длина таблицы
 nup число групп с рассеянием наверх
 nthg число тепловых групп
 nmix число материалов или смесей на выходе
 nreg число областей
 nmixs число описателей смеси
 ned число дополнительных выходных величин
 neds число описателей выходных величин

карта 3a (если ngroup < 0)

mpath путь к директории с файлами matxs (до 24 символов)

карта 4 имена смесей

hmixn nmix тексовых имен mix (до 6 символов)

карта 5 описание областей и гетерогенности

hregn имя области (до 6 символов)
 rtemp температура области (k) (по умолчанию=300)
 rvol объем области (по умолчанию=1.)
 ihet тип гетерогенности (по умолчанию=0=самоэкранировка отсутствует)
 0 самоэкранировка отсутствует
 1 постоянное сечение утечки
 2 аппроксимацией Белла для цилиндра
 3 цилиндр в гексогональной решетке с аппроксимацией Зауера
 4 цилиндр в квадратной решетке с аппроксимацией Зауера
 5 плоская ячейка с аппроксимацией Белла (отражение)
 6 плоская ячейка с E_3 аппроксимацией (отражение)
 7 плоская ячейка с аппроксимацией Белла (периодическая)
 8 плоская ячейка с E_3 аппроксимацией (периодическая)
 -n продолжение описания ячейки

последующие параметры на карте 5 определяются значением ihet.

Эти величины задаются только для первой области каждой ячейки.

-- ihet=1 -- утечка постоянная

chord - длина средней хорды (см)

-- ihet=2 до 8 -- поправка Данкова

bell1 поправка Белла для рациональной аппроксимации.

bell2 поправка Белла в знаменателе

повторить карту 5 nreg раз

карта 6 карта соответствий (|initf| ≥ 12)

для потоков в точках, зонах, областях из входного файла
указываются соответствия каждой области (nreg целых)

карта 7 описание смесей

imix номер смеси (от 1 до nmix)

ireg номер области

hmix имя изотопа в библиотеке matxs

dens множитель (концентрация или плотность) (по умолчанию=1)

hinc имя тепловых данных по неупругому рассеянию (по
умолчанию=пробел),

или признак принадлежности сечения

("rc" - принадлежит области, "cc" - ячейке)

hcoh имя тепловых данных по упругому рассеянию (по
умолчанию=пробел)

hmod тип взаимодействия для матрицы (по умолчанию=пробел=полная)

повторить карту 7 nmixs раз

карта 8 имена выходных величин

hed ned текстовых имен (не более 6 символов)

карта 9 описания величин

jedpos ее положение в списке (обычно в диапазоне от 1 до ned)

(-n означает включение запаздывающих фотонов в группу n
составной таблицы констант)

hednam имя типа взаимодействия в библиотеке matxs

edfact множитель (по умолчанию=1)

hedmat имя изотопа в библиотеке MATXS (по умолчанию=пробел)

если пробел - используются макроданные (сумма по всем изотопам)

повторить карту 9 neds раз

карта 10 описание свертки (icoll > 0)

указывается число узких групп в каждой широкой группе

карта 11 поток - весовая функция (если initf=1)

inwt поток в узких группах для всех моментов и областей

специальные имена

hed=*chi* спектр деления chi

hednam=*chi* то же самое

hed=*trd* транспортное сечение для уравнения диффузии. Если задан или рассчитан момент потока p1, используется inflo определение, в противном случае - outflo.

hednam=*trd* то же самое

hed=*gam* первое из ngg данных для фотонов.

3.3 Программы сопровождения и доступа

Для расширения области применимости предлагаемой системы констант и облегчения ее адаптации к другим вычислительным системам, для выходных файлов констант разработано программное обеспечение аналогичное тому, которое имелось для файлов MATXS.

Mod_goxs - программа модификации типа представления бинарный/текстовый и наоборот; запрашиваемый параметр nmod определяет тип выходного файла goxs:

nmod = 0 - бинарный,
= 1 - текстовый.

Используемые файлы:

goxs - бинарный файл,
text - текстовый файл.

Get_goxs- процедура поиска данных в файле GOXS и записи нужного фрагмента в буферный массив. Контрольные параметры данных заносятся в область данных

COMMON /BGETGOXS/ NMAT,NGROUP,NORD

NMAT - число материалов,

NGROUP - число групп,

NORD - число моментов.

Вызов процедуры:

call Get_goxs(NAME,kg,ig,l,array)

Входные параметры

NAME - текстовая константа (A8) - имя данных, может принимать одно из следующих значений:

energy - групповые границы (эВ)

d - коэффициент диффузии

siy - сечение увода

nsf - $\bar{v}\sigma_f$

chi - спектр деления

sit - полное сечение

sie - сечение упругого рассеяния

sif - сечение деления

sic - сечение захвата

siz0 - сечение замедления

sigs - сечение рассеяния "в себя"
 sigtr0 - матрица замедления P_0
 sigtr1 - матрица замедления P_1
 sigpq - матрица замедления P_N
 sigel0 - матрица упругого рассеяния P_0
 micro - дополнительные сечения
 (специальные величины, скорости реакций и пр.)

kg - номер группы

Выходные данные:

ig - номер верхней по энергии группы-источника
 (только для матриц рассеяния)
 l - длина вектора данных
 array(l) - вектор данных

4. ТЕСТОВЫЕ РАСЧЕТЫ

4.1 Критические эксперименты

Расчеты критических экспериментов проводились по программе ANISN-OR в P5/S16 приближении. Сравнивались эффективные коэффициенты размножения и центральные спектральные индексы. Обозначения: F- деление, ^{233}U , ^{235}U , ^{238}U , ^{237}Np , ^{239}Pu . В скобках при названиях сборок указаны их идентификационные номера в соответствии с документом [4].

GODIVA (HEU-MET-FAST-001): сфера из обогащенного урана без отражателя.

Состав:

Имя элемента	Ядерная концентрация в $\cdot 10^{24}$
^{234}U	4.9184-4
^{235}U	4.4994-2
^{238}U	2.4984-3

Радиус сферы: $R = 8.741$ см

	эксперимент	расчет
Кэфф	1.000 ± 0.001	0.9987
F23/F25	1.59	1.5900
F28/F25	0.1647	0.1582
F37/F25	0.837	0.8029
F49/F25	1.402	1.3785

JEZEBEL (PU-MET-FAST-001): сфера из металлического плутония без отражателя;

Состав:

Имя элемента	Ядерная концентрация в $\cdot 10^{24}$
^{239}Pu	0.03705
^{240}Pu	0.001751
^{241}Pu	0.000117
Ga	0.001375

Радиус сферы: $R = 6.385$ см

	эксперимент	расчет
Кэфф	1.000 ± 0.002	0.9972
F28/F25	0.2137 ± 0.0023	0.2044
F23/F25	1.578 ± 0.027	1.5773
F37/F25	0.962 ± 0.016	0.9295
F49/F25	1.448 ± 0.029	1.4188

4.2 Подкритический реактор ADS

Подкритический реактор ADS с топливом $^{233}\text{U} + ^{232}\text{Th}$ и свинцовым теплоносителем был принят в качестве бенчмарка в международном тесте, в котором принимали участие ряд европейских стран - Франция, Италия, Германия, Нидерланды, Швеция, а также Россия и Япония. Условия теста подробно описаны в работе [5], ниже приведена только часть, касающаяся первого пункта, а именно:

определение относительной концентрации ^{233}U в топливных зонах реактора I, II в смеси $^{233}\text{U} + ^{232}\text{Th}$, обеспечивающей при начальной загрузке реактора критичность 0.94, и 0.98. Расчеты проводились на основе сформированной 30-групповой библиотеки групповых констант GNPDL-30/19 в P1/S8 приближении. Файл макроскопических констант готовился с помощью программы TRANSX. В качестве расчетной программы была использована программа TWODANT[3].

На рис.1 приведены размеры и расположение зон реактора ADS при температуре 20°C. Состав зон 1-5 указан в таблице 1. В таблице 2 приведены относительные концентрации ^{233}U в смеси $^{233}\text{U} + ^{232}\text{Th}$, полученные различными участниками теста, их среднее значение и результаты настоящей работы. Как видно из таблицы, полученные концентрации наиболее близки к среднему значению (при усреднении результаты настоящей работы не учитывались):

$$A_{AV} = \frac{1}{N-2} \left\{ \sum_n^N A_n - A_{\max} - A_{\min} \right\} ,$$

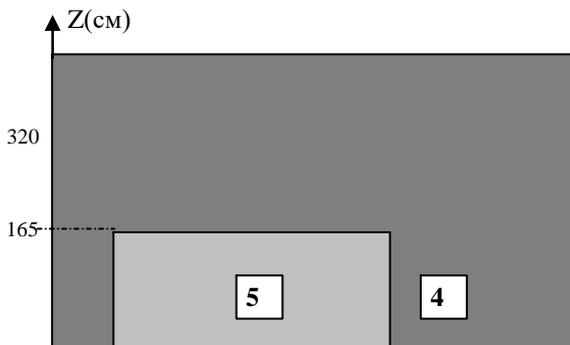


Рис.1 Геометрия реактора ADS при 20°C

Таблица 1. Ядерные концентрации при 20°C·10²⁴

Материал	Область 1	Область 2	Область 3	Область 4	Область 5
²³² Th			7.45-E03		
²³³ U+ ²³² Th	6.35-E03	7.45-E03			
O	1.27-E02	1.49-E02	1.49-E02		
Fe	8.10-E03	8.87-E03	8.87-E03		6.63-E03
Cr	1.12-E03	1.06-E03	1.06-E03		8.00-E04
Mn	4.60-E05	5.10-E05	5.10-E05		3.80-E05
W	4.60-E05	5.10-E05	5.10-E05		3.80-E05
Pb	1.77-E02	1.56-E02	1.56-E02	3.05-E02	2.41-E02

Таблица 2. Обогащение ²³³U в областях 1,2 при начальной загрузке реактора ADS (%)

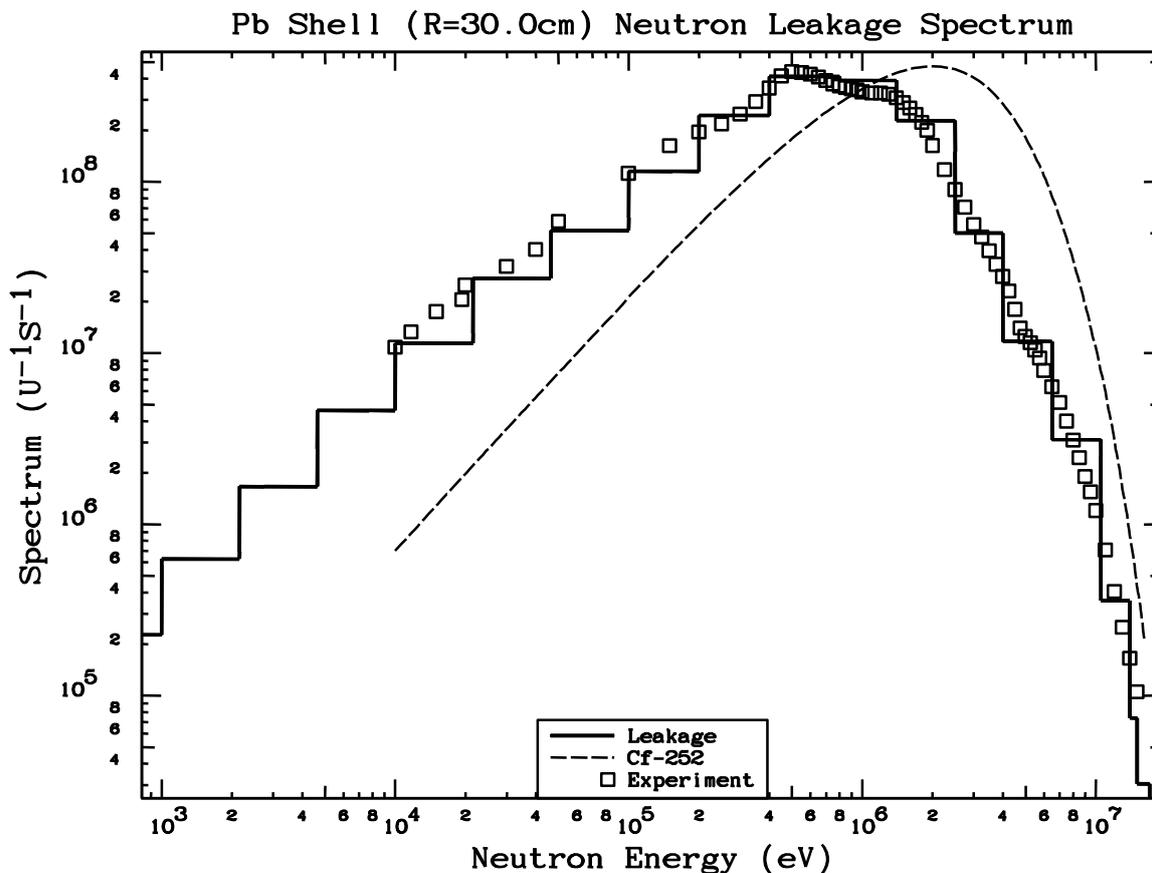
K _{эфф}	Россия (ФЭИ) МК	Швеция (PSI) JEF2.2	Швеция JENDL- 3.2	Франция (CEA)	Япония (JAERI)	Италия (ENEA)
0.98	9.97	10.28	9.88	10.28	9.7	10.29
0.96	9.65	9.95	9.57	9.95	9.4	9.96
0.94	9.34	9.62	9.25	9.62	9.1	9.63

Таблица 2. Продолжение

K _{эфф}	Германия	Нидерланды	Среднее	Настоящая
------------------	----------	------------	---------	-----------

	(FZK)	(ECN)	обогащение	работа
0.98	10.0	10.38	10.1	10.01
0.96	9.68	10.05	9.79	9.678
0.94	9.36	9.71	9.47	9.362

4.3 Защитные эксперименты



В качестве примера расчета защитного бенчмарка приведено сравнение спектров утечки из свинцового шара с ^{252}Cf источником нейтронов в центре, полученных экспериментально и рассчитанных по системе констант GNPDL-30/19.

Расчеты выполнены по программе ANISN-OR в P5/S16 приближении.

ЛИТЕРАТУРА

1. R.E.MacFarlane "TRANSX-2: A Code for Interfacing MATXS Cross-Section Libraries to Nuclear Transport Codes",LA-12312-MS(1992)
2. W.W.Engle,Jr., "A User's Manual for ANISN: A One-Dimensional Discrete Ordinates Transport Code with Anisotropic Scattering", Oak Ridge Gaseous Diffusion Plant Computing Technology Center report K-1693(1967)
3. "TWO-DANT - One- and Two- Dimensional, Multigroup, Discrete-Ordinates Transport Code System", - RSIC Computer Code Collection, Code Number CCC-547, ORNL,1990
4. "Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments", Handbook NEA/NSC/DOC(95)03
5. "IAEA-ADS BENCHMARK(STAGE 1). Results and preliminary analysis". Proc. RCM-Meeting, Bologna, March 24-26,1997

Приложение. Структура файла макроконстант GOXS.

```

cs      структура файла
cs
cs      тип записи                наличие
cs      =====
cs      заголовок файла           всегда
cs      параметры файла          всегда
cs      данные файла             всегда
cs      *****(в цикле по группам)
cs      *      групповая структура      всегда
cs      *      сечения                 всегда
cs      *      параметры рассеяния     всегда
cs      *      данные рассеяния       всегда
cs      *****
с
с -----
cr      заголовок файла
с

cl      hname,(huse(i),i=1,2),ivers
с
cw      1+3*mult
с
cs      format(4h 0v ,a8,1h*,2a8,1h*,i6)
с
cd      hname - текстовое имя файла - GOXS - (A8)
cd      huse  - текстовое имя пользователя (A8)
cd      ivers - номер версии файла
cd      mult  - параметр двойной точности
cd            1- A8 - одинарное слово
cd            2- A8 - двойное слово
с
с -----
с -----
cr      параметры файла
с
cl      ngroup,nmat,nord,ned,idpf,lng,maxup,maxdn,nprin,i2lp1
с
cw      10
с
cd      ngroup - число групп

```

cd nmat - число материалов
 cd nord - порядок разложения по полиномам Лежандра
 cd ned - число требуемых сечений
 cd (дополнительно к базовым)
 cd idpf - признак двойной точности для сечений и матриц
 cd (1/2 = одинарная/двойная)
 cd lng - номер последней нейтронной группы для составных таблиц
 cd maxup - максимальное число групп с рассеянием вверх
 cd maxdn - максимальное число групп с рассеянием вниз
 cd nprin - число базовых сечений (0,4 или 6)
 cd i2lp1 - наличие в данных множителя $2l+1$ (0/1 = нет/да)

c

c-----

c

c-----

сг **данные файла**

c

cl (hmat(i),i=1,nmat),hed(j),j=1,nedt),(vel(k),k=1,ngroup),

cl 1(eg(k),k=1,ngroup),emin

c

cw (nmat)+ned)*mult+2*ngroup+1

c

cd hmat(i) - текстовое имя материала

cd hed(j) - текстовые имена дополнительных сечений

cd vel(k) - средняя скорость для группы k (см/сек)

cd eg(k) - верхняя граница энергии для группы k (эВ)

cd emin - нижняя граница энергии для группы k (эВ)

cd nedt - ned+nprin

c

c-----

c

c-----

сг **сечения**

c

cl ((edxs(i,j),i=1,nmat),j=1,nedt_

c

cw nmat*nedt

c

cd edxs(i,j) - сечения. В зависимости от признака NPRIN

cd всегда присутствуют следующие типы сечений:

cd NPRIN=4

cd TOTAL - полное транспортное сечение

cd ABS - балансное сечение поглощения
 cd NUSIGF - произведение $v\sigma_f$
 cd CHI - спектр деления
 cd NPRIN=5 дополнительно к перечисленным задается
 cd TRD - диффузионное транспортное сечение

c

c-----

c

c-----

cr **параметры данных по рассеянию**

c

cl ((njj(l,i),l=1,nord),i=1,nmat),

cl 1((ijj(l,i),l=1,nord),i=1,nmat)

c

cw 2*nord*nmat

c

cd njj(l,i)- число групп в блоке

cd ijj(l,i) - первая группа в блоке

c

c-----

c

c-----

cr **данные по рассеянию**

c

cl (scat(i),i=1,ntab)

c

cw ntab

c

cd scat(k) - данные по рассеянию

cd ntab - сумма njj(l,i) по l от 1 до lord

cd и по i от 1 до nmat

c

c-----

