离散纵标中子/光子输运计算软件包的测试与评价分析

中文摘要

粒子物理和核物理研究实验设施投资大、系统复杂,易引起与放射性相关的安全问题,并且中子学基本理论非常成熟,有系统完整的基本核数据库。这些特点为利用计算机程序模拟进行粒子物理研究和工程设计提供了必要性和可能性。这也是为什么粒子物理研究自始至终如此依赖计算机的缘由。

在科学研究和工程设计中,有许多不确定因素,除了设计方案的合理性和可 行性外,另一个重要的方面来自于研究者和设计者所使用的工具和所采用的数据 的可靠性,因此,研究设计中所使用的各种程序和数据库就成了最重要的两个方 面。

程序的不确定性主要来自于所采用方法和模型固有的缺陷,另一个方面依赖 于所使用的物理硬件,如所使用计算机本身的性能,稳定性,精度等。数据库的 不确定性主要来自于处理数据所采用的模型方法的优劣和所取精度的大小。这些 都要通过在实际使用当中,通过大量的计算,不断的检验和修正,做出反馈,予 以修正和完善。

本文正是从这个角度出发,对在粒子物理和核物理领域广泛应用的数值模拟

计算程序 NGSN, ANISN, DOT 等程序和核数据库 UW, FENDL-2 等数据库作一系统的校核和发展,最终形成离散纵标粒子输运计算软件包,并初步探讨了它们的应用,为粒子物理和核物理的研究和设计提供保障。

本软件包的发展主要包括程序的完善,程序和数据库的校核,系统的集成以 及系统稳定性和可靠性的测试。



★ 本课题的主要研究工作是在中科院等离子体物理研究所进行的,得到了 中科院知识创新工程课题和国家自然科学基金课题(No. 10175068)的支持。

The Testing And Benchmark Analysis Of Discrete Ordinate Neutron/Photon Transport Calculating Software Kit

ABSTRACT

Just because of the particle physics and nuclear physics study's characteristics, to study the particle physics and to design the engineering projects come into the necessities and possibility through the imitation proceeding of the computer program. That's also the answer why the research of the particle physics depends on the computer entirely.

The indetermination of the code mainly comes from the deficiency of the module and method which be adopted. Also, it is determined by the used physical hardware, such as the performance stability precision of the computer itself. etc. The indetermination of the data library results from the module and methods tackling the data and the interceptive error. Therefore, it is necessary to improve and develop it though vastly practical calculation.

Based on this, the paper deals with the numerical simulated calculating codes of NGSN, ANISN, DOT and the nuclear libraries of WU, FENDL-2 which have been frequently used on the field of particle physics and nuclear physics. It is through benchmark and development that the discrete ordinate particle transport calculating software kit is formed. And also its applications are primarily probed into. The aim is to bring a possible security for the research and design of particle and nuclear physics.

This software kit includes the development of codes, the benchmark of codes and library, the integrity of system and the testing of stability and reliability.

KEY WORDS: Discrete Coordinate Transporting Calculation Numerical Simulation Nuclear Library

独创性声明

本人声明所呈交的学位论文是本人在导师指导下进行的研究工作及取得的 研究成果。据我所知,除了文中特别加以标注和致谢的地方外,论文中不包含 其他人已经发表或撰写过的研究成果,也不包含为获得 <u>合肥工业大学</u>或其他 教育机构的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作过的同志所做的任何贡 献均已在论文中作了明确的说明并表示致谢。

学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解_<u>合肥工业大学</u>有关保留、使用学位论文的规定,有权保留并向国家有关部门或机构递交论文的复印件和磁盘,允许论文被

查阅和借阅。本人授权 <u>合肥工业大学</u>可以将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索,可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。

(保密的学位论文在解密后适用本授权书)

导师签名: 35 签字日期: 13年6月1日

学位论文作者毕业后去向:

工作单位: 合取 化大学 通讯地址: 今年年も渡路1133

电话: (0551) 4656435 邮编: 23000

致谢

第一个和首先要感谢的是我的导师、合肥工业大学理学院罗乐副教授。感谢 先生给予我学业上精心的指导,生活上无微不至的关心。导师渊博的学术知识、 严谨的治学态度,是最值得我敬佩的。导师不光教我治学,而且教我做人。科学 的终极目的是求真、求美,我想做人也一样。

感谢中国科学院等离子体物理研究所吴宜灿研究员,在本论文写作过程中给 予的悉心指导。他对科研忘我的精神、严谨的治学态度,是值得我认真学习的。

这三年期间,我认识到了协作精神的重要性,我认识到了一种比知识更重要 的东西,那就是一种学习的能力,一种获取知识的能力,一种对自己所需要知识 孜孜不倦追求的重要性。

更重要的是,我的人格得到了健全,我学会了独立思考,我懂得了运用自己 的大脑辨识的重要性,我懂得了这不是结束而仅仅只是一个开始。任何时候都不 要满足,任何时候都要心存感激,感激每一次机会的出现,感激受到的教益。

感谢合肥工业大学何晓雄教授、邓铁如教授、邓小玖教授、高峰副教授、梅 忠义副教授及夫人、宗仁鹤教授对我学习的指导。

感谢中国科学院等离子体物理研究所黄群英副研究员、许德政老师等对本论 文工作的指导。

感谢合肥工业大学王建国、朱晓翔、刘成岳、张学勇、张鉴、袁航、孙林、 胡智文、张静、崔莉莉、时钟涛、刘彩霞、杨艳芳、姚凤薇、王红艳等同学及中 国科学院等离子体物理研究所刘海波、郑善良、陈朝斌等同学对我的帮助。

特别感激父母的养育之恩,对我多年来默默的始终如一的支持。也感激安徽 中医学院郜峦同学对我精神上和生活上的支持。

感谢每一个支持我进步的、给予我关心的、在此没有提到名字的长辈、老师、 同学和朋友。

李锋刚 2003 年 5 月

第一章 前 言

1.1 核能发展的特点

粒子物理和核物理的发展,离不开计算机技术的发展,而计算机技术最初的 发展,则正是由于粒子物理和核物理的发展。计算机技术的发展,包括硬件技术 的发展和软件技术的发展。这两种技术飞速的发展,都有力的促进了粒子物理和 核物理的发展。

粒子物理和核物理研究具有以下特点:

- 1> 实验设施投资大、系统复杂,因此,实验数据是有限的、珍贵的;
- 2> 与放射性相关的安全问题,主要是这些实验设施和实验材料本身的生物危害 以及基于政治因素所引起的安全问题;
- 3> 由于核武器和裂变核能的发展,中子学基本理论非常成熟;
- 4> 核物理进展促使形成了系统完整的基本核数据库。

以上特点为利用计算机程序模拟进行粒子物理研究和工程设计提供了必要 性和可能性。这也是为什么粒子物理研究自始至终如此依赖计算机的缘由。

1.2 国内外概况

在粒子物理和核物理领域,当前国际上已经发展和使用着许多程序系统及核数据库,它们对这一领域的发展起了极大的推动作用。目前国际上使用的程序系统包括:



图 ——1 专用程序系统



图 ——2 输运程序系统

由图一一1和图一一2可以看出,这些程序分为输运程序和专用程序两大类, 其中输运程序又包括基于统计理论的蒙特卡罗和基于离散坐标的程序,而专用程 序包括用于进行灵敏性与不确定性分析的和用于活化计算分析的两大类程序。

目前国际上使用的核数据库如图一一3所示。核数据库包括群状库和点状库 以及数据处理程序。

注意:ORNL代表美国橡树岭国家实验室,LANL代表美国洛斯·阿拉莫斯国家实验室, PPPL代表普林斯顿等离子体物理实验室。

1.3 论文内容简介

由此可以看出国际上使用的程序系统和数据库系统非常庞大,要对它们一一 校核和评价,是非常困难的,本文只拟对其中的基于离散坐标的输运程序和群状 数据库作以校核和评价分析,在此基础上形成输运计算软件包,并初步探讨了它 们的应用。

2



图 一一3 数据库系统

本论文第二章论述粒子输运计算理论,包括中子输运方程和理论基础,以及 输运计算的确定论方法(离散变量法)。第三章是软件包内程序及其数据库介绍 分析,包括输运计算程序NGSN、ANSIN、DOT3.5以及核子数据库UW、FENDL2。 第四章通过对计算条件的比较确定各个输入参数对计算结果的影响程度,从而可 在后面工作中选择合适的参数,为其展开奠定基础。数据库的比较是对 ANSIN 在调用 UW 和 FENDL2 两个数据库计算的中子泄漏率结果予以分析来实现。输 运程序的比较以 NGSN、ANSIN、DOT3.5 调用 UW、FENDL2 数据库得到的计 算结果来分析和评价输运程序。本文还通过对 HT-7U 辐射场计算和求取 FDS-RT-FBB 球模型中子学参数进一步验证前面的比较。第五章是对数据库 FENDL-2 的分析和评价过程(BENCHMARK),主要是通过与工程实验中得到 的数据进行比对。第六章通过一个实例简单探讨了它的应用。最后对本文所做工 作予以总结和回顾。

第二章 输运计算理论

2.1 中子输运方程及理论基础

中子运动时与原子核发生散射碰撞,原来在某一位置具有某一能量和运动方向的中子,经过一些时间将在另一位置以另一能量和运动方向出现,这种过程叫做输运过程,研究中子输运过程的理论便叫做中子输运理论。

对单个中子来讲,它是以杂乱无章的折线轨迹在介质内进行随机运动的,直 到它被吸收或从表面逸出为止,这是一个随机的过程。实际上,我们研究的是在 空间不同点处中子密度的宏观期望分布问题。因而可以像气体分子动力学一样, 用一种处理大量中子行径的宏观理论来推导出和气体分子输运方程相类似的中 子输运方程,或称作玻尔兹曼输运方程。

研究中子输运过程所应用的一条基本原则,就是中子数目守恒或中子平衡, 即给定微元内,中子密度随时间的变化率应等于它的产生率减去泄漏率和移出 率,即

这里面^{dn} 是中子密度随时间的变化率。当系统处于平衡状态(稳态)时, dt 它便等于零。

中子输运方程是一个含有空间坐标 r(x,y,z)、能量 E、中子运动方向 Ω(θ,φ) 和时间 t 等七个变量的微分-积分方程,即使在稳态情况下,由于实际问题中几 何和结构的复杂性和非均匀性,同时考虑到各种材料(裂变和非裂变的)原子核 的截面随能量变化的大量细节,要精确地求解这一方程几乎是不可能的,只有在 极个别的简单或简化情况下才是可能的。所以,在实际的计算问题中通常是采用 一些近似的方法求解。在所有近似方法中,数值离散方法是最重要和有效的方法, 因为它可以利用计算机很快地求得所需精度的数值解。所以,数值离散方法及其 相应程序软件已成为目前反应堆物理及屏蔽设计不可缺少的方法和手段。

和其它物理或工程问题一样,可以把研究中子输运问题的方法分成二类, 一类称为"确定论方法"。在这方法中,根据问题的物理性质所建立起的数学模. 型可以用一个或一组确定的数学物理方程来表示,然后,对这些方程可以采用数 学方法求出它的精确或近似的解。另一类方法称为试验统计或蒙特卡罗方法,也 称"非确定论方法",它是基于统计(或概率)理论的数值方法,对所要研究问 题构造一随机模拟模型来加以计算。在蒙特卡罗方法中,利用一系列的随机数来 模拟中子在介质中运动的行径,追踪每个中子的历史,然后对获得的信息加以分 析。它具有对任何复杂几何形状域以及中子截面随能量变化很复杂的特性进行计 算的适应性,并能获得精确的结果。但是,它需要巨大的计算机时间,这是限制 它广泛应用的主要障碍。所以,目前在反应堆物理及屏蔽设计中主要是应用确定 性的方法,而蒙特卡罗方法主要用于设计方案的最终校核。

中子输运方程数值解法中变量的离散和近似方法,主要考虑:

(1) 能量变量的离散——多群方法

既把连续能量离散成一些能段进行处理。D-T 聚变反应放出 14.1Mev 高能中子,中子与屏蔽材料作用后能量分布从 0Mev 到 20Mev。在我们使用 ANISN 进行计算时,把 0~20Mev 能段分成 175 群处理,根据 175 群能量分布(参阅附录 1), D-T 反应放出的中子位于第8群。

(2) 方向角变量的近似

常用的近似方法是把变量 Ω 直接离散的数值方法,即只对选定的若干个离散方向 Ω_m 对输运方程求解。这时角度变量 Ω_m 在方程中则仅是一个参变量。离散方向的数目取决于计算精度的要求。这就是所谓离散坐标方法,习惯称为 "S_N"方法,这里下标 N 表示向量 Q 在某个方向,例如 N 方向坐标轴上的离散点数目,当 N 取得比较大时,例如 N>8 时,S_N方法可以得到较高的精确度。它是目前求解中子输运方程的有效数值方法。

对于尺寸比较小而非均匀性很强烈的一些问题,例如燃料栅元燃料组件的计算,还常用积分输运理论方法。它是从积分形式的中子输运方程出发,在源项和中子散射为各向同性的情况下将方程对Ω积分,这样便消去了变量Ω,得到一个与中子运动方向Ω无关的关于φ(r,E)的积分输运方程。

中子通量密度扩散方程的积分形式为

$$\phi(x) = \int_{\infty}^{\infty} S(x') G_{pl}(x, x') dx'$$

(3) 空间变量的离散

对空间变量的近似处理的方法中,传统的离散数值方法,特别是有限差分方 法是最为常用的和有效的方法。无论是中子输运方程,还是中子扩散方程的数值 求解都广泛地应用有限差分方法,它有比较完善的理论基础,并且目前在核工程 界已有一系列完善的差分程序在及中子输运和扩散问题中成功的应用。差分方法 的主要缺点是,为了保证一定计算精度,网距必须取得很小。因此,它占用的存 贮量和计算时间比较大,特别是对于多维问题。八十年代以来,发展起来的粗网 节块方法则能很好地解决这方面的问题。

2.2 确定论方法(离散变量法)

中子输运方程只是在极简单的情况下才能够得到精确的解析解,对于一般实际问题,必须采用一些近似方法数值求解。在数值求解中,对于能量自变量,通

常都应用传统的"分群近似"方法进行离散处理。对于空间坐标 r (x, y, z), 则可采用传统的有限差分近似或有限元等其它方法离散。对于方向变量Ω的近 似,尤其是多维情况,往往采用离散坐标 S₄方法。

离散坐标方法在国外通常称为离散纵坐标方法(Discrete Ordinates Method), 它最早是由卡尔逊(B. G. Carlson)应用于输运方程的求解,习惯称为离散 S_N 方法。近年来随着电子计算机的发展和对 S_N方法研究的深入,S_n方法已经成为研 究粒子(中子和γ)输运问题的有效的数值方法之一,特别是在屏蔽计算中获得 了广泛的应用。数值结果表明 S_N方法可以达到很高的精度。通常工程计算中应用 S_n近似已可满足精度要求[1]。

在中子输运方程中,中子通量密度是 r, E, Ω 的函数。离散坐标方法是 在相空间 r*E* Ω 内,像对 r 和 E 的离散化处理一样,对方向自变量 Ω 也采用直 接离散方法数值求解。它的具体做法是:对于函数 $\varphi(\Omega)$,首先把 Ω 空间离散化, 得到离散点列 $\Omega_1,...\Omega_N$,然后设法求出这些离散点的函数值中 $\varphi(\Omega_i)$,并用它们 近似地表示函数 $\varphi(\Omega)$ 。当离散点取得足够密时,便可得到所需要的精度。

因而,对 S_{*}方法的研究主要包括下面几个方面问题:

1. 离散方向及求积权重系数——求积组的选取;

2. 中子输运方程的离散化(空间和方向变量)方法及离散(差分)方程组的获得;

3. 离散方程的求解,包括加速收敛的方法等。

离散坐标方法的优点在于它对所有自变量都采用直接离散,因而数值过程比

较简单。这样,当应用迭代法求解时,源项作为已知项,每个离散方向的方程便都是相对独立的,并具有相似的数值过程便于编程。同时更重要的是它可以编成适用于不同离散方向数N(阶)的通用程序,当需提高或改变计算精度时只需改变输入的离散方向数N即可,这给工程计算带来极大的方便。

中子在介质中的运动可用中子输运方程来研究,其多群近似中子输运方程具有下列形式:

在离散坐标方法中,将 Ω 离散化,选择一组离散方向 Ω_m ,m=1,...,N。然后对 上式求解,假定在单位球面上已选定了离散方向 Ω_m ,它的分量为 μ_m , η_m 和 ξ_m 。每个方向 Ω_n 可以看成单位球面上的一个点,其邻域面积为 W_m ,又称为求积

$$\Omega \bullet \nabla \phi_g(r,\Omega) + \sum_{i,g} (r) \phi_g(r,\Omega) = \sum_{g'=1}^G \int_{\Omega'} \sum_{g' \to g} (r,\Omega' \bullet \Omega) \phi_{g'}(r,\Omega') d\Omega'$$
$$+ \frac{\chi_g}{4\pi k} \sum_{g'=1}^G (\gamma \sum_f)_{g'} \phi_{g'}(r) + S_g(r,\Omega) \qquad g=1,2...G$$

权重系数。对于 $\Omega \bullet \nabla \phi$ 项选用守恒形式的表达式。在离散方向 Ω_n 附近区域 $\Delta \Omega_n$ 上对方程积分,得,

式中

$$\phi_m \equiv \phi_g(r, \Omega_m)$$

离散坐标(S_N)方法是中子输运方程数值求解的重要方法之一。数十年来各国研究设计单位已先后研究编制出许多适用于各种问题和用途的计算程序,其中一些由于其优越的计算功能已在实际计算中广泛应用,并发展成为国际通用程序。同时,这些程序发行以来,不断获得改进,并时有新版本出现。

对于一维几何模型,本文使用世界上著名的、在中子学领域内已广泛使用的 一维 S_N离散坐标法输运程序 ANISN[**9**]进行中子学计算与分析。该程序是美国橡 树岭国家实验室研制的一维、多群、带有一般各向异性散射的多功能中子、光子 输运离散纵标方法计算程序。该程序广泛应用于核反应堆物理(包括临界搜索、 源问题和栅元均匀化等),核反应堆中子学及核屏蔽问题的计算。该程序可求解 一维平板,球,柱几何的中子和γ以及中子-γ输运方程。文中将首先基于一维 几何模型,用此程序对 HT-7U 装置及周围辐射场进行计算,同时也考察了所使 用的几何模型、计算模型和各种计算条件对结果的影响。

•

.

第三章 软件包内程序、数据库

3.1 一维离散坐标中子/光子输运程序 NGSN

NGSN[2][3]是在国家基金项目、 国家核安全局攻关课题和核工业部核电软件中心资助下开发的一维、多群、带有一般各向异性散射的多功能中子、光子离散节块输运计算程序,主要用于进行堆物理、辐射屏蔽及其它粒子输运计算与研究,可用于求解一维平板、球及柱几何问题,与 ANISN 等程序相比,具有高效率、高精度的特点。

NGSN 程序是在文献[4](一维直角坐标系中节块 SN 方法)及文献[2](一维曲 线坐标系中节块 SN 方法)的基础上发展起来的考虑各向异性到 P 8 的一维节块 SN 输运程序。

一维离散节块输运程序 NGSN 是应用粗网节块离散纵标方法数值求解圆柱、 平板、球等三种几何下的多群中子输运方程的程序。它可用于计算上述三种几何 下的临界问题和源问题,也可用于反应堆物理和屏蔽计算中的某些中子学问题,不 仅可求解散射各向同性问题,而且可求解散射各向异性问题。本程序在中子学方 面的功能与目前常用的一维 SN 程序 ANISN 基本一致,并且配制了直接使用 ANISN 形式的数据库接口,但本程序更加实用。由于本程序采用粗网节块方法, 所需网点数目比 ANISN 显著减少,并采用粗网再平衡加速收敛技术,因而它比 ANISN 具有更快的计算速度,更为经济。

对这个程序,本文在原有程序的基础上,对其作一扩展,为程序配上 uw_46 群数据库,并运行作以测试,并且为程序配上 FENDL-2 数据库,其中,取样数 据以调试通过,还需进一步发展。

3.2 一维离散坐标中子/光子输运程序 ANISN

ANISN[5][6][7]是美国橡树岭国家实验室 ORNL 开发的 Fortran 版,各向异 性散射一维离散坐标中子-光子输运程序。所谓各向异性散射,即程序采用离散 坐标法,就是 Sn 方法,对角度变量Ω进行离散,解平板,圆柱,球几何的中子 和 Y 光子输运以及中子-Y 光子耦合输运的一维玻尔兹曼方程。该程序广泛应用 于核反应堆物理(包括临界搜索、源问题和栅元均匀化等),核反应堆中子学及 核屏蔽问题的计算。

ANISN 程序的流程如下:



图 三一1 ANISN 程序流程图

程序各流程图的说明

1 MAIN: 主程序,开始运算,并把公共存储置0 2 CONTRL:对程序的信息,流程和覆盖的控制 3 CLEAR:清内存 4 ERRO:打印错误信息 5 WOT:通用打印子程序 6 CLOCK:计时子程序 7 ITIME:求时间步子程序 8 PLSNT:变量长度及输入数据控制,分配地址 9 FIDO:扩充的读输入数据子程序 10 FFREAD:读输入数据,分配地址 11 TP:读截面,源,通量及裂变初值

12 S805: 对截面及有关数据进行伴反转

13 ADJNT:对检索的数据数组进行伴反转

14 S804:检索 SN 常数,并计算 P1 常数等

15 S814:计算面积元,体积元,固定源,并将源归一化

16 WOT8: 通用打印子程序

17 S966:读磁带中的截面库数据

18 GUTS:迭代循环控制

19 S807:混合截面

20 S810:计算与几何有关的数组

21 S821:计算裂变源,通量,流,并归一化

22 S824:计算各分点的总源

23 DT:内迭代扩散理论计算

24 CELL:无限大均匀一区单元计算

25 S833:输运理论内迭代计算

26 S851:外迭代收敛检验,本征值搜寻计算

27 FINPRI:活性及截面加权的存储分配

28 FINPR:打印通量,计算并打印活性

29 FFPUN:通过穿孔卡片进行输出

30 FLTFX6:把浮点数转换为整数

31 BT:平衡表的存储分配

32 SUMARY:打印各区平衡表数据(包括计算这些数据)

- 33 FACTOR:计算并打印有利因子
- 34 FEWG:截面加权的预备计算
- 35 WTAE:截面加权计算及输出
- 36 WANDR5:一般短名单方法输入/输出过程

3.3 二维离散坐标中子/光子输运程序 DOT

DOT3.5[8]程序是用二维几何(X,Y),(R,Z),(R,θ)的离散纵坐标法近似求 解定态玻尔兹曼粒子输运方程。主要用于中子或光子输运问题,也可以用于无外 力场作用的其它粒子输运问题。程序可计算核反应的本征值问题如有效增殖因子 keff,时间吸收α,堆尺寸δ及核浓度C;也可计算独立外源问题如固定体分布 源,固定边界源及首次解析碰撞源;还可求伴随解。程序采用外部存储方式,解 决了存储需要量很大的问题,因此对大型输运问题比如深穿透问题尤其适合。

DOT3.5程序将空间方向(X,Y), (R,Z), (R, θ)变量离散化, 只考虑每个变量

的离散值:能量变量用多群近似,每一群对应一能量间隔,平均出多群截面,在 所给的能量范围内考虑所有粒子的运动及其相互作用;粒子运动方向是通过选择 一组有序的离散方向及其有关的权重来处理,粒子沿着离散方向运动且要满足平 衡条件。

齐次问题可求有效增殖因子(keff)及其等效的时间吸收(α),也可以改变区 域厚度(δ本征值)和材料成分(C本征值)以达到k或规定的值。这类问题通 常是研究系统的临界性,一般通过内迭代,外迭代和本征值迭代来求解。

非齐次问题(固定外源)一般是在系统中心或边界给一个恒定的外源,研究 辐射屏蔽或穿透问题。这类问题一般求解方法是对有裂变的系统采取内外迭代方法;对无裂变的系统则只需要内迭代就可以了。

求伴随解是为了研究特定系统内中子的"价值",它广泛用于与反应堆性能有关的敏感度分析,在 DOT3.5 程序中用"倒算"的方法把所有与能群有关的量,比如截面,裂变谱,群速度等倒转来求解齐次问题来求伴随解。

DOT3.5程序是从美国 ORNL(橡树岭国家实验室)引进的 CDC 版本 FORTRAN IV 语言程序。它是 1975年由 ORNL 的 W. A. Rhoades 在 DOT 的基础上进行某些改进的 修改版本,是作为 DOTIII, DOTIV 之间的一种过渡。DOT3.5 为实现 DOTIV 的一 些新想法提供了实验工具,其最显著的改进就是考虑了加速迭代方法即采用了空 间再平衡的衰减局部流加速,特别是对求空间变换因子(SPACSCALING FACTARS) 的子程序 WEESOL 可灵活给出收敛判别。这样对各种问题均可大大提高收敛速度, 比如对一类深穿透问题计算速度可以提高 3—4 倍。

用灵活的 FIDO 格式输入初始数据并且采取短数组输入方式。打印结果也具 有很大的灵活性,视需要来选择输出参数从而确定不同的输出量。对某些输出数 据进行加工形成盘或带文件直接用作某些相关程序的初始输入数据集。计算量采 用内部和外部存储结合的方式而且采取可变场界数组,这样对很大的问题内存也 能满足需要。一次还可以计算多个模型。

可以按群选择二维扩散理论计算,散射阶也可以按群选择。边界源可给在水平(左,右)内边界,或垂直(顶,底)内边界也可同时给在两个方向的外边界。可以输出任何径向或轴向的角通量直接作为边界源输入数据集用以解决分段计算很大的问题或收敛差的问题。为克服二维射线效应的影响可进行解析首次碰撞源计算。

可以指定收敛区而且按区选择收敛判别标准,外迭代可以限制在整个群结构中的一个子集,矩形格式和加权格式可单独作为一种插值公式也可以用在混合格式中来处理负通量。

DOT3.5 程序和一维 ANISN 程序, MORSE 程序, MCNP 程序, NJOY 程序 以及 BUGLE-80 数据库等组成了一个辐射屏蔽系统程序包, 为核能应用的辐射 屏蔽安全分析提供了可靠的计算工具。

3.4 UW 威斯康星大学核数据库

核数据,特别是核截面数据的选择和处理,是核计算的出发点和重要依据。 为了提高计算的精度,一方面是要努力对计算的模型和方法进行改进,另一方面 则是要设法提高原始核数据的精确性。

由于核计算中要涉及到大量的同位素,以及在各个能量区域内中子截面和能量的复杂关系,因而核反应堆计算需要用到的核截面数据的数量是很庞大的。然而,由于不同的实验对于同一截面可能给出不同的数值,同时对某些核素、某些能域还存在着空白,因而在进行反应堆核计算时需要注意正确地选择和评价这些截面和其它核数据。

UW 库[9]是 University of Wisconsin 做的核数据库,它包括 48 种核素的 25 群中子和 21 群光子的 96 种截面值,它是在核物理中常用的一个核数据工作库。这个数据库中的数据扩展到 P1 阶,并且具有 FENDL2 库中所不具有的 U、Pu、Am 等核素。

库编号	核素	截面表位置	库编号	核素	截面表位置
100	H-1	P0	2100	Ti	P0
101	H-1	P1	2101	Ti	P1
200	H-2	P0	2200	v	P0
201	H-2	P1	2201	ν	P1
300	H – 3	PO	2300	Cr	P0
301	H-3	P1	2301	Cr	P1
400	He-3	P0	2400	Mn-55	PO
401	He-3	P1	2401	Mn-55	P1
500	He-4	P0	2500	Fe	P0
501	He-4	P1	2501	Fe	P1
600	Li-6	P0	2600	Ni	P0
601	Li-6	P1	2601	Ni	P1
700	Li-7	P0	2700	Cu	P0
701	Li-7	P1	2701	Cu	P1
800	Be	P0	2800	Zr	P0
801	Be	P1	2801	Zr	P1
900	B-10	P0	2900	Nb-93	PO
901	B-10	P1	2900	Nb-93	P1

表 三一1 UW 截面库的内容

1000	B-11	P0	3000	Мо	P0			
1001	B-11	P1	3001	Mo	P1			
1100	C-12	P0	3100	Sn	P0			
1101	C-12	P1	3100	Sn	P1			
1200	N-14	P0	3200	Ta-181	P0			
1201	N-14	P1	3201	Ta-181	P1			
1300	0-16	P0	3300	₩-182	PO			
1301	0-16	P1	3301	₩-182	P1			
1400	F	P0	3400	₩-183	P0			
1401	F	P1	3401	₩-183	P1			
1500	Na	P0	3500	₩-184	P0			
1501	Na	P1	3501	₩-184	P1			
1600	Mg	P0	3600	₩-186	PO			
1601	Mg	P1	3601	₩-186	P1			
1700	A1-27	P0	3700	Pb	P0			
1701	A1-27	P1	3701	Pb	P1			
1800	Si	P0	3800	Th-232	P0			
1801	Si	P1	3801	Th-232	P1			
1900	K	P0	3900	U-233	P0			
1901	K	P1	3901	U-233	P1			
2000	Ca	PO	4000	U-234	P0			
2001	Ca	P1	4001	U-234	P1			
4100	U-235	PO	4500	Pu-239	P0			
4101	U-235	P1	4501	Pu-239	P1			
4200	U-236	P0	4600	Pu-241	P0			
4201	U-236	P1	4601	Pu-241	P1			
4300	U-238	P0	4700	Pu-242	P0			
4301	U-238	P1	4701	Pu-242	P1			
4400	Pu-238	P0	4800	Am-241	P0			
4401	Pu-238	P1	4801	Am-241	P1			
备注	25 群中子+21 群光子,共46 种核素截面							

UW 库的(Anisn、DOT35 输入)几个控制参数

ISCT	••••	散射截面的勒让德展开阶数	3
IGM	•••••	能群数目	46
IHT		截面表中总截面的位置	50
IHS	••••	截面表中群内散射截面的位置	51
IHM	•••••	截面表的长度	96

UW 截面表格式(对每一群,有 IHM 个按照下列表排列的数据)

- 1 中子和 y 光子动能沉积因子
- 2 中子动能沉积因子
- 3 y光子动能沉积因子
- 4 位移截面--A
- 5 位移截面——B
- 6 总产氢截面
- 7 总产氘截面
- 8 总产氦截面
- 9 总截面
- 10 弹性散射截面
- 11 总非弹性散射截面
- 12 (n, 2n) 截面
- 13 (n, 3n)截面
- 14 总裂变截面
- 15 (n, n') T 截面
- 16 (n, n')截面
- 17 (n, γ)截面
- 18 (n, p)截面
- 19 (n, D)截面
- 20 (n, T)截面
- 21 (n, ³He)截面
- 22 (n, α)截面
- 23 弹性散射动能沉积因子
- 24 (n, n')带电粒子动能沉积因子
- 25 非弹性能级的散射动能沉积因子
- 26 (n,带电粒子)动能沉积因子
- 27 (n, 2n)动能沉积因子
- 28 (n, 3n)动能沉积因子

- 29 裂变动能沉积因子
- 30 非弹性散射连续动能沉积因子
- 31 辐射俘获连续动能沉积因子
- 32 中子和y光子群中间能量
- 33 中子群中间能量
- 34 γ光子群中间能量
- 35 (n, 2n)截面
- 36 (n, 3n)截面
- 37 总裂变截面
- 38 (n, n')α截面
- 39 (n, 2n) α 截面
- 40 非弹性散射连续截面
- 41 (n, γ)截面
- 42 (n, p)截面
- 43 (n, D)截面
- 44 (n, T)截面
- 45 (n, ³He)截面
- 46 (n, α)截面
- 47 \bar{v}
- 48 吸收截面

49 v×裂变截面

50 总截面

51-96 群转移截面

3.5 IAEA 聚变核数据库 FENDL-2 简介

FENDL (Fusion Evaluation Nuclear Data Library) [10]是 1999年为设计国际热 核聚变实验堆 ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor),由 IAEA (International Atomic Energy Agency)的核数据部发起并协调,用于热核聚变 堆研究的工作库。这个数据库的第一个版本是 FENDL/E-1 已经被编辑并出版,且被作为 ITER 的工程设计阶段计算用的参考数据库。

这个数据库的第二个版本是 FENDL/E-2 , 它是一个混合核数据库, 其数据 来源于已经过评价的核数据库 ENDF/B-VI(美国), JENDL-3 和 JENDL-FF(日本), BROND-2(俄联邦), EFF-3(欧盟)。FENDL-2 包括六个子库:

①放射量测定库(FENDL/DS-2.0):用于放射量测定的中子活化反应截面数据,依据是箔活化,辐射损伤反应截面和基准中子谱。

②衰变库(FENDL/D-2.0): 1867 种核素和异构体的核衰变性质(衰变类型, 衰变能量,半衰期),是 ENDF-6 格式及经过处理的用于 MCNP 程序格式的数 据。

③活化库(FENDL/A-2.0): 0~20Mev 范围的中子和 739 个靶(从 ¹H到²⁴⁸Cm)的13006种反应的活化截面。

④聚变库(FENDL/C-2.0):从ENDF/B-6选取的用于聚变反应 D(d,n), D(d,p), T(d,n), T(t,2n), He-3(d,p) 的核反应截面数据。

⑤输运库:包括与聚变相关的 57 种核素数据,是经过验证的基本核数据(中子一核子相互作用,包括光子产出,光子一核相互作用反应截面)及 ENDF-6 格式的基本评价库 FENDL/E-2.0。除此之外,还包括用于离散坐标程序 ANISN 的数据 FENDL/MG-2.0 和用于连续能量蒙特卡罗程序 MCNP 的数据 FENDL/MC-2.0。

⑥基准评价库: 收集了用于确认 FENDL-2.0 的基准。

考虑中子散射反应截面的各项异性,所以核数据库中的散射截面都是通过勒 让德展开的。FENDL-2 更新了 FENDL-1 库的十个评价,又增加了其它七个核素。 已评价过的早先版本 FENDL/E-1.0 被用作初值文件,可用于聚变反应堆设计的 中子一光子耦合输运计算。在建 FENDL-2 库之前做了大量标定工作,包括积分 聚变中子实验和数据实验。

除此之外,近年来,科研工作者为校核聚变核数据而做了大量的中子学积分 实验,实验使用了各种和聚变有关的材料,如球形铁壳,铍壳,鋁壳,硅壳,钼

壳, 钻壳, 铬壳, 铜壳, 钛壳, 锰壳, 锌壳, 铌壳, 钨壳, 钒壳, 测得了它们的 积分泄漏谱。

FENDL-2 截面表结构见表 三-2, FENDL-2 截面库见表 三-3。

表	$\Xi - 2$	FENDL-2	聚变核数据多群工作库截而表
			$n \sim n \sim$

位置	截面形式	位置	截面形式
1	发热截面		群转移截面及本群
2	Kerma 因子		到本群的散射截面
. 3	辐射损伤截面		0
4	吸收截面	7~223	(217 <i>-g</i>)个0
5	裂变截面		$\sigma_{g ightarrow g}$
6			$\sigma_{g^{-1 ightarrow g}}$
			• • • • • • • • •
			$\sigma_{i ightarrow g}$

表 三一3 FENDL-2 截面库

序号	FENDL-2	核素	截面表	序号	FENDL-2	核素	截面表
	库编号		位置		库编号		位置
1	1	H1	P ₀	29	169	Cr50	P ₀
2	7	D	P ₀	30	175	Cr52*	P ₀
3	13	H3	P ₀	31	181	Cr53	P ₀
4	19	He3	P ₀	32	187	Cr54	P ₀
5	25	He4	P ₀	33	193	Mn-55	P ₀
6	31	Li6	P ₀	34	199	Fe54	P ₀
7	37	Li7	P ₀	35	205	Fe56*	P ₀
8	43	Be9	P ₀	36	211	Fe57	P ₀
9	49	B10	P ₀	37	217	Fe58	P ₀
10	55	B11	P ₀	38	223	Co59	P ₀
11	61	C-12	P ₀	39	229	Ni58*	P ₀
12	67	N-14	P ₀	40	235	Ni60	P ₀
13	73	N15	P ₀	41	241	Ni61	P ₀
14	79	0-16	P ₀	42	247	Ni62	P ₀
15	85	F19	P ₀	43	253	Ni64	P ₀
16	91	Na23	P ₀	44	259	Cu63	P ₀
17	97	Mgnat	P ₀	45	265	Cu65	P ₀
18	103	Al27	P ₀	46	271	Zr-0	P ₀
19	109	Si-28*	P ₀	47	277	Nb-93	P ₀
20	115	Si-29	P ₀	48	283	Mo-0	P ₀
21	121	Si-30	P ₀	49	289	Snnat	Po
22	127	P31	P ₀	50	295	Tal81	P ₀
23	133	Snat	P ₀	51	301	W-0	P ₀
24	139	Clnat	P ₀	52	307	Au197	P ₀
25	145	Knat	P ₀	53	313	Pb206	P ₀
26	151	Canat	P ₀	54	319	Рь207	P ₀
27	157	Tinat	P ₀	55	325	Pb208	P ₀
28	163	V-51	P ₀	56	331	Bi209	P ₀
友沪	X*为该同位	素中主要用	成分核素;	Xnat' 是	指 X 元素的	的天然核素	成分;
田仁	175 群中子-	+42 群光于	² , 共 56 ⁵	种核素菌	团		

本文所使用的 FENDL-2 数据库 (Fusion Engineering Nuclear Data Library) 是来自 IAEA 最新的 9904 版数据库,它是 175 群中子、42 群光子输运截面以及 响应函数评价数据库,包含了聚变堆设计中常用的 57 种重要核素的耦合中子、 光子输运截面库。

.

每一个核素都拥有 6*217 个聚变核数据库截面表, 6 为散射截面展开的勒让 德级数的项数, 217 为中子、光子总群数,即对不同散射截面展开的勒让德级数 项数,不同群、核素都拥有一个聚变核数据库截面表。

.

•

第四章 软件包测试与评价分析

为比较全面的测试和评价本软件包所包含的 NGSN、ANISN、DOT 程序和 UW、 FENDL 数据库, 特构建了不同厚度的柱状模型和球状模型, 在大量计算的基础上, 对计算条件、数据库、输运程序逐一进行比较,测试分析其误差,做出评价。

4.1 计算条件比较

为了比较和校核 UW 和 FENDL-2 数据库以及 NGSN、ANISN、DOT 输运计算程 序,需要充分了解在采用离散纵标方法求解玻尔兹曼中子输运方程时,对各种变 量的处理,包括角度离散、空间离散等的处理,从而形成的计算条件对计算结果 的影响。在此主要考察角网格、空间网格、迭代精度、负通量、加速收敛、散射 阶等对计算结果泄漏率的影响。

考察计算条件选用美国 ORNL (橡树岭国家实验室) 引进的 CDC 版本 FORTRAN 语言 DOT3.5 程序,核数据库采用 FENDL (Fusion Evaluation Nuclear Data Library), 它是 1999 年为设计国际热核聚变实验堆 ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor), 由 IAEA (International Atomic Energy Agency)的核数据部发起并协调, 用于热核聚变堆研究的工作库。目前最新版 本 FENDL/E-2 , 是一个混合核数据库, 其数据选自经过评价的核数据库 ENDF/B-VI(美国),JENDL-3 和 JENDL-FF(日本), BROND-2(俄联邦), EFF-3(欧 盟)。

本模型采用内径 10cm, 外径 110cm 的铁材料圆柱几何 (r,Z), 如表 四-1 和图四-1 所示,模型分为两个区,真空区和材料区,真空区为14.1M 归一化强中 子源, 材料区填充为质量密度为 7.86g/cm3 的天然铁材料。右边界条件采用真空 边界,上下左边界采用反射边界,Z方向取 1cm。采用 14.1M 归一化强中子源, 考察第8群,第175群和总中子的泄露率情况,典型输入文件见附录。铁材料同 位素丰富,选用壳层厚,具有深穿透的特点,这样便于充分显示计算条件对结果 的影响。

区号	区域	厚度	材料及	核子密度	径向坐标	质量密度
			体积份额	$(10^{24}/cm^3)$	(cm)	(g/cm3)
1	真空区	10	Vacuum	0	10	0
2	材料区	100	5.8%Fe54	4.916e-003	110	7.86
			91.8%Fe56	7.780e-002		
			2.1%Fe57	1.780e-003		
			0.3%Fe58	2.543e-004		

表 四一1 铁材料几何物理条件表



图 四一1 铁材料柱儿何模型

表 四一2 计算条件比较表 (DOT/Fe100cm): 计算泄漏率

角	空	迭	负	加	散	第8群	第 175 群	总中子
网	间	代	通	速	射	泄漏率	泄漏率	泄漏率
格	网	精	量	收	阶			
	格			敛		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	l 1	
S ₁₆	0.1	10-5	0	0	P ₅	3. 03527E-09	5.97122E-06	7.3557E-02
	0.1	10 ⁻⁵	0	0	P ₅	2. 55932E-09	5. 96872E-06	7.3202E-02
	0.2	10-5	0	0	P ₅	2.55080E-09	5.96711E-06	7.3198E-02
1	0.5	10-5	0	0	P ₅	2.50756E-09	5.96623E-06	7.3173E-02
S ₈	1.0	10-5	0	0	P ₅	2.56745E-09	5.96238E-06	7.3072E-02
	2.0	10-5	0	0	P ₅	1.96701E-09	5.95109E-06	7.2759E-02
	5.0	10-5	0	0	P ₅	4. 09772E-09	6.00258E-06	7. 3252E-02
			0	0	P ₅	1.32245E-09	5.81140E-06	7.1279E-02
			0	1	P ₅		不可迭代	
			0	2	P ₅	1.20963E-09	5.81299E-06	7.1274E-02
S.	1 0	10 ⁻⁵	1	0	P ₅	1.20965E-09	5.81283E-06	7.1273E-02
54	1.0	10	2	0	P ₅	9.26353E-09	1.21567E-05	9. 6089E-02
			3	0	P ₅	1.22736E-09	5. 79279E-06	6. 9146E-02
			4	0	P ₅	1.32914E-09	5.81053E-06	7.1273E-02
			0	0	P ₃	1.32245E-09	5.81140E-06	7.1279E-02
			0	0	P ₁	1.32245E-09	5.81140E-06	7.1279E-02
			0	0	P ₀	1.32245E-09	5.81140E-06	7.1279E-02
		10 ⁻³	0	0	P5	1.32245E-09	5.91504E-06	7.1332E-02
		10 ⁻¹	0	0	P5	1.32245E-09	1.03542E-04	1.6065E-01
备	注	DOT3.	5 /FEN	NDL2 /	Fe100c	m/圆柱几何(1	c, Z)	
	I-1	右边界(真空)、上下边界(反射).Z=1cm						

从表 四-2 可以看出,角网格 S_N常数对中子泄露率有一定影响,对总中子 泄露率的影响不到 2%。对空间网格来说,从 0.1cm 到 1.0cm,数据结果几乎没 有变化,分隔大于 1.0cm,才逐渐有变化。对迭代精度,到 10⁻³ 已比较精确,到 10⁻⁵ 已完全精确,再增加精度也不会对结果产生影响。负通量(FXT)计算模型 对结果有较大影响,FXT =0,线性一梯形混合模型,FXT =1,线性模型,FXT =2, 梯形模型,FXT =3,权重差分模型,FXT =4,线性一权重差分混合模型,可以看出, 采用 0、1、4 模型,结果比较接近。对于加速收敛(IP1)方法,IP1=0,空间无关 变比例加速方法,IP1=1,超松弛方法,IP1=2,空间向关变比例加速方法,其中, 0 和 2 加速技巧,计算结果比较接近,对 1 超松弛方法则不可迭代。对于散射阶 P_N,当模型几何尺寸较大时,其对结果影响非常小,但对几何尺寸较小的模型, 为保证计算结果足够精确,P_N仍需取大一点。

因此,对于后面数据库和程序校核,本文在计算中,角网格采用 S₈、空间 网格 0.1cm,迭代精度 10⁻⁵,负通量模型采用线性一梯形混合模型(0),加速收 敛用空间无关变比例加速方法(0),散射阶对数据库比较采用 P₁,输运程序比 较采用 P₅,具体见各自说明。

4.2 数据库比较

对数据库比较,本文在计算条件统一的情况下,即采用经过4.1.1 计算条件 比较后得出的可靠条件,对测试问题 C-10cm, C-100cm, Fe-10cm, Fe-100cm, 通过第 s 群 (s=1(对 UW)或 8(对 FENDL-2))中子泄漏率、第 t 群 (t=25(对 UW) 或 175(对 FENDL-2))中子泄漏率、总中子泄漏率、总光子泄漏率来考察 UW 和 FENDL-2 核数据工作库。

数据库比较选用 ANISN+UW 和 ANISN+ FENDL-2 两种组合方式。ANISN 是美国 橡树岭国家实验室 ORNL 开发的 Fortran 版,各向异性散射一维离散坐标中子一 光子输运程序。该程序广泛应用于核反应堆物理,核反应堆中子学及核屏蔽问题 的计算。UW 库则是 University of Wisconsin 做的核数据库,它包括 48 种核素 的 25 群中子和 21 群光子的 96 种截面值,它是在核物理中常用的一个核数据工 作库。FENDL-2 库见上 4.1.1 简述。

数据库比较选用圆柱几何模型,分为两个区,内真空区和外材料区,内半径 取 10cm,外半径分别取 20cm 和 110cm,因此共形成 4 个测试问题, 8 种组合, 见表 4-4。对铁材料几何物理参数及模型参见表 4-1 和图 4-1,此测试中同时取 铁材料外半径 110cm。对石墨材料,取质量密度 2.25 g/cm3,左边界反射边界, 右边界真空边界,14.1M 归一化强中子源,几何物理参数及模型见表四—3 和图 四-2。详细参数见表 四-4 备注及附录典型输入文件。

21

表 四一3 石墨材料输入参数表

区号	区域	厚	材料及体	核子密度	径向坐标	质量密度
		度	积份额	$(10^{24}/cm^3)$	(cm)	(g/cm3)
1	真空区	10	Vacuum	0	10	0
2	材料区	10	100%C	1.1281e-1	20	2.25
		100			110	



表 四一4 数据库比较表(UW vs. FENDL2): 计算泄漏率

测试	数据库	第 s 群	第t群	总	总	备			
问题		中子	中子	中子	光 子	注			
C	UW	2.45760E-01	1.44460E-02	8.7712E-01	3.0659E-01				
10cm	FENDL2	1.91170E-01	9.78229E-03	8.8162E-01	2.8985E-01				
C	UW	3. 44126E-06	3.15726E-01	3. 1771E-01	3.6445E-02				
100cm	FENDL2	8. 23011E-07	2.58615E-01	2. 6037E-01	3. 9260E-02				
Fe	UW	1. 49321E-01	5.15221E-05	1.0818E+00	3.8302E-01				
10cm	FENDL2	1.48495E-01	3.74540E-07	1.1052E+00	3.7506E-01				
Fe	UW	1.69240E-08	4.07950E-06	2.7068E-03	4.6383E-04				
100cm	FENDL2	2.55118E-08	6.21096E-06	9.0590E-02	4.2512E-03				
	ANISN、圆	杜几何、固定	源项归一、不做	坎通量校 正	(0)、不采用加	速技			
备注	巧(0)角	巧(0)角网格 S ₈ 、空间网格(0.1cm)、迭代精度(10 ⁻⁵)、散射阶(P ₁)							
	源区(半	径10cm/真空)、	右边界(真空	()、上下边界	(反射)				
	s=1 (对U	₩) 或 8 (对 1	FENDL-2), $t=2$	25 (对 UW) 或	175 (对 FENI	DL-2)			

通过表四-4可以看出,对C-10cm,第s群相差20%,第t群相差30%,总 中子相差0.5%,总光子相差6%。对C-100cm,第s群相差75%,第t群相差 18%,总中子相差18.7%,总光子相差7%。对Fe-10cm,第s群相差0.6%,第 t群相差一倍,总中子相差2.7%,总光子相差2%。对Fe-100cm,第s群相差 33%,第t群相差33.8%,总中子相差33倍,总光子相差88%。 由此,可以知道,对 UW 和 FENDL-2 核数据库,当模型材料厚度较小,则 泄漏率误差也较小(10cm,总中子不足 3%,总光子最大 6%),当模型材料厚度 较大,则泄漏率误差也较大。在相同厚度时,石墨材料比铁材料泄漏率误差小 (10cm,石墨总中子 0.5%,铁材料总中子 2.7%)。这种误差的形成主要是由于 不同的机构对数据库采用不同的处理方法造成的,例如,对于同位素的处理(UW 对 Fe 的同位素混合处理,FENDL-2 则分别处理)、对于截断项的处理(UW 库中截 断相只到 P₁,但 FENDL-2 则达到 P₅、处理数据所使用的计算机等。因此,两数据 库存在一定的误差是必然的。总体上说来,这些误差在合理的范围内,并且 FENDL-2 数据库从总体上要优于 UW 核数据库。

4.3 输运程序比较

为对输运程序 NGSN,ANISN,DOT3.5 进行比较,除建立柱几何模型外,还建 立球几何模型,采用 C-10cm, C-100cm, Fe-10cm, Fe-100cm 四个测试问题。 用 ANISN(柱)+FENDL2, DOT (r,Z)+FENDL2, DOT(r,θ)+FENDL2, 对 ANISN 和 DOT 予以比较。用 ANISN(柱)+UW, ANISN(球)+UW, NGSN(柱)+UW 对 ANISN 和 NGSN 予以比较。

NGSN 是在国家基金项目、 国家核安全局攻关课题和核工业部核电软件中心 资助下开发的一维、多群、带有一般各向异性散射的多功能中子、光子离散节块 输运计算程序。由于本程序采用粗网节块方法,所需网点数目比 ANISN 显著减 少,并采用粗网再平衡加速收敛技术,因而它比 ANISN 具有更快的计算速度,更 为经济。这一特点在下面的测试问题中得到体现。NGSN 的介绍参见第三章 3.1。 ANISN 及 DOT3.5 的介绍参见第三章 3.2 和 3.3。

对于柱几何模型参见图 四一1 和图 四一2。所建球几何模型如下图 四一3 和图 四一4 所示。采用石墨和天然铁材料物理及几何参数参见表 四一1 和表 四一3。此计算中同样采用 14.1M 强中子固定归一化源,其它条件符合 4.1.1 约定。 需要说明的是在计算中,NGSN 空间网格用 5cm。各计算条件参见表 四一5 备 注。



表 四—5 输运程序比较表 (ANISN vs. DOT3.5): 计算泄漏率

测试问题	程序	第8群 中子	第 175 群 中子	总中子	总 光 子	备 注
С	ANISN(柱)	1.91170E-01	9.78229E-03	8.8162E-01	2.8985E-01	
10cm	DOT (r,Z)	1.75639E-01	1.30431E-02	8.6654E-01	3.1484E-01	
	DOT(r, θ)	1.75635E-01	1.31285E-02	8.6660E-01	3.1485E-01	
С	ANISN(柱)	8. 23011E-07	2.58615E-01	2. 6037E-01	3. 9260E-02	
100cm	DOT (r,Z)	3.85703E-07	3. 50334E-01	3. 5083E-01	3.0328E-02	
	DOT(r, θ)	3.84896E-07	3. 51141E-01	3. 5168E-01	3.1047E-02	
- Fe	ANISN(柱)	1.48495E-01	3.74540E-07	1.1052E+00	3.7506E-01	
10cm	DOT (r,Z)	1.12181E-01	4.68482E-07	1.1073E+00	2.9782E-01	
	DOT(r, θ)	1.12210E-01	4.84310E-07	1.1070E+00	2.9769E-01	
Fe	ANISN(柱)	9.41502E-08	6.20476E-06	9.0861E-02	4.2673E-03	
100cm	DOT (r,Z)	2. 55932E-09	5.96872E-06	7.3202E-02	2.9982E-03	
	DOT(r, θ)	2. 55719E-09	6. 22292E-06	7.3513E-02	3. 0516E-03	
备注	圆柱几何、 角网格 S ₈ 、 数据库(FE 界(反射)	固定源项归一、 空间网格(0.1 NDL-2)、源区	不做负通量校 cm)、迭代精度 (半径 10cm/真	₹正(0)、不采 〔(10 ⁻⁵)、散射 〔空)、右边界	民用加速技巧 甘阶(P₅) (真空)、上下	(0) ⁻ 边

分析表 四-5, C-10cm, ANISN(柱)与 DOT, 总中子相差 1.7%, 总光 子相差 7.9%, DOT(r, Z)与 DOT(r, θ), 总中子和总光子都完全吻合。

C-100cm, ANISN(柱)与DOT, 总中子相差 25.7%, 总光子相差 23%, DOT(r, Z)与 DOT(r, θ), 总中子完全吻合, 总光子相差 3.2%, 。

Fe-10cm, ANISN(柱)与DOT, 总中子相完全吻合, 总光子相差 20%, DOT(r, Z)与 DOT(r, θ), 总中子与总光子都完全吻合。

Fe-100cm, ANISN(柱)与DOT, 总中子相差 19%, 总光子相差 29.5%, DOT(r, Z)与 DOT(r, θ), 总中子相差 0.4%, 总光子相差 1.7%。

从以上对误差的分析中可以看出,无论对那种情况,DOT(r, 2)与 DOT(r, θ) 计算的结果都吻合的非常好。ANISN(柱)与 DOT 对模型的径向尺寸较小(10cm) 的情况下,总中子吻合的也很好(不足 2%),总光子差别稍大些,而在径向尺寸 较大(100cm)时,总中子和总光子差别也偏大些。

对输运程序 ANISN 和 NGSN 同样测试 C-10cm, C-100cm, Fe-10cm, Fe-10cm, Fe-100cm 所得计算结果如表 四-6 所示。

表四一6 输运程序比较表 (ANISN vs. NGSN): 计算泄漏率

测试	程序	第8群	第 175 群	总中子	总光子	备
问题		中子	中子			注
C	ANISN(球)	3.1491E-01	5.9714E-03	8.9435E-01	2.8068E-01	
10cm	ANISN(柱)	2.45760E-01	1.44460E-02	8.7712E-01	3.0659E-01	
	NGSN (球)	2.8484E-01	4.7201E-03	8. 9247E-01	2. 9822E-01	
C	ANISN(球)	8.1297E-06	4.0730E-01	4.1159E-01	4.9673E-02	
100cm	ANISN(柱)	3.44126E-06	3.15726E-01	3. 1771E-01	3.6445E-02	
	NGSN (球)	1.9170E-05	8.1661E-02	1.0393E-01	3. 0125E-02	
Fe	ANISN(球)	1.9867E-01	2.8049E-05	1.0912E+00	4.3535E-01	-
10cm	ANISN(柱)	1.49321E-01	5.15221E-05	1.0818E+00	3.8302E-01	
	NGSN (球)	1.5822E-01	1.9695E-05	1.1040E+00	7.4727E-01	
Fe	ANISN(球)	4.3645E-08	8.7333E-06	5.9017E-03	1.0028E-03	
100cm	ANISN(柱)	1.6924E-08	4.07950E-06	2.7068E-03	4.6383E-04	
	NGSN(球)	6. 2784E-08	2.1542E-05	3. 38316E-02	6.46922E-03	
	固定源项归	一、不做负通	量校正(0)、			
久 注	角网格 S₅、	迭代精度(10-5	`)、散射阶(P₀)	, 空间网格 0.1	cm	
田仁	数据库(uw)、源区(半径	10cm/真空)、	右边界(真空)		
	NGSN:空间网	习格 5cm				

C-10cm, NGSN (球)与ANISN (球) 总中子相差 0.2%, 总光子相差 6%。 C-100cm, NGSN (球)与ANISN (球) 总中子 4 倍, 总光子相差 38%。 Fe-10cm, NGSN (球)与ANISN (球) 总中子相差 0.9%, 总光子相差 39%。

Fe-100cm, NGSN (球)与 ANISN (球) 总中子 5.5 倍, 总光子相差 6 倍。

NGSN 与 ANISN 相比,模型的径向尺寸较小(10cm)的情况下,总中子吻合的也很好(不足 1%),总光子差别稍大些,而在径向尺寸较大(100cm)时,总中子和总光子差别较大。

从表中可看出, C-10cm, 总中子泄漏率是第8群中子的5倍, C-100cm, 总中子与第175群中子泄漏率相当, Fe-10cm, 总中子泄漏率是第8群中子的10倍, Fe-100cm, 则不具有明显规律。并且, C由10cm到100cm, 总中子泄漏率大致减少了2.5倍, 总光子泄漏率大致减少了10倍; Fe由10cm到100cm, 总中子泄漏率大致减少了15倍, 总光子泄漏率大致减少了100倍。这是与石墨材料和天然铁材料的物理性质相符和的。

从表 四-6 可知, NGSN 与其它程序相比,具有快速收敛的特征。同时, 从上述分析中可知, NGSN 与 ANISN 相比与 ANISN(柱)与 DOT 相比,所表 现出来的规律完全一致。DOT(r, Z)与 DOT(r,θ)计算的结果吻合完好。因此,可 以得出结论, NGSN、ANISN、DOT3.5 输运程序是稳定的、可靠的。

4.4 HT-7U 辐射场计算

HT-7U 超导托卡马克是通过磁约束进行核聚变反应的试验装置,它的结构 复杂,体积庞大。用它进行真实的试验代价昂贵,要耗费大量的人力和财力,利 用计算机数值模拟方法进行预研究试验具有重要的意义,因此,建立了HT-7U 超导托卡马克装置的一维计算模型,利用 ANISN+FENDL2 和 DOT3.5+FENDL2 进行计算。



图 四一5 HT-7U 超导托卡马克一维计算模型

本模型是对真实试验装置的一维简化,中心取在装置赤道面与中心螺管轴线 交叉处,即为装置的几何轴心。计算中假设中子源分布在等离子体区,为14.1M

强源,空间均匀分布,角度各向同性。

区号	区域	厚度	材料及	核子密度	径向坐标	质量密度
		(cm)	体积份额	$(10^{24}/\text{cm}^3)$	(cm)	(g/cm3)
1	真空区	118.5	Vacuum	0.0	118.5	0.0
2	不锈钢	0.75	100%S. S.	8.6764e-2	119.25	8.0
3	硼水层	5.0	100%B-H ₂ 0	1.0041e-1	124.25	1.0116
4	不锈钢	0.75	100%S. S.	8.6764e-2	125. 0	8.0
5	真空区	10.0	Vacuum	0.0	135.0	0.0
6	等离子体	80.0	Vacuum	0.0	215.0	0.0
7	真空区	62.4	Vacuum	0.0	277.4	0.0
8	不锈钢	0. 75	100%S. S.	8.6764e-2	278.15	8.0
9	硼水层	5.0	100%B-H₂O	1.0041e-1	283. 15	1.0116
10	不锈钢	0. 75	100%S. S.	8.6764e-2	283.9	8.0

表 四一7 HT-7U 超导托卡马克一维计算模型材料表

A	空气	816.1	100%Air	5.3457e-5	1100. 0	0. 00129
В	混凝土	150.0	100%Concrete	8.1424e-2	1250. 0	2.30
С	空气	50.0	100%Air	5.3457e-5	1300. 0	0. 00129

本计算模型所采用参数,在空间方向分 13 个区,251 个网格,纵向长度 1300cm,其中,空间分区中不同材料的网格宽度是不同的,硼水(B-H₂O): 0.5 cm,混凝土(Concrete):1 cm,空气(Air):10 cm,真空(Void(plusma)):10 cm, 不锈钢(S.S.): 0.5 cm,计算中采用归一化源,即源强:S_{tot}=1.0,在DOT计算 中所用高度(dot):10 cm(5 网格)。所用模型如图 四-5 所示。所用材料参见表 四 -7。

程序	S _N	通 量	加 速	8	175	总中子	总光子
		0	0	8.0917E-09	6.8654E-06	1.0616E-05	1.4328E-04
		1	0	8. 0255E-09	6.8414E-06	1.0526E-05	1. 4235E-04
ANISN+	S ₈	2	0	1.9031E-08	1.7638E-05	2. 4642E-05	2. 2165E-04
FENDL2(柱)		3	0	7.5324E-09	6.6021E-06	1.0186E-05	1.3865E-04
	:	4	0	8.0406E-09	6.8493E-06	1.0590E-05	1.4311E-04
	S ₄	0	0	8.0406E-09	6.8493E-06	1.0590E-05	1.4311E-04
	S ₈	0	0	1.9285E-08	1.1108E-05	1.7439E-05	2.1825E-04
		1	0	1.9209E-08	1.1078E-05	1.7389E-05	2.1792E-04
ANISN+		2	0	4.0956E-08	2.6811E-05	3. 7970E-05	3. 2439E-04
FENDL2(球)		3	0	1.6606E-08	1.0364E-05	1.6182E-05	2.0605E-04
		4	0	1.9257E-08	1.1098E-05	1.7422E-05	2.1817E-04
	S ₄	0	0	5.6419E-09	8.9769E-06	1.3715E-05	1.8645E-04
		0	0	3. 0310E-09	1.7085E-04	1.7085E-04	3. 9872E-04
		1	0	2.8766E-09	1.6948E-04	1.6948E-04	3.9748E-04
DOT+FENDL2 (柱)	S ₈	2	0	7.8054E-09	2.1373E-04	2.1373E-04	4.1564E-04
		3	0		不迭	代	
		4	0	3.0608E-09	1.6941E-04	1.6941E-04	3. 9826E-04
	S ₄	0	0	1.3881E-09	1.6722E-04	1.6722E-04	3.9173E-04

表 四一8 HT7U 大尺寸泄漏率计算结果

	计算中,径向尺寸1300.0cm,到达混凝土外面空气 50cm 远处。
	固定源项归一、不做负通量校正(0)、角网格 S ₈ 、迭代精度(10 ⁻⁵)、
	散射阶(P ₅)、数据库(FENDL2)、右边界(真空)、左上下边界(反
	射)、空间径向网格根据不同材料划定,达到足够精度;

表 四-8,从对 HT-7U 辐射场计算的第8 群和第175 群的泄漏率可以看出, ANISN+FENDL2(柱) 和 DOT+FENDL2(柱) 第8 群泄漏率相差 62.5%,第175 群 泄漏率相差 62.5%,总中子相差 15 倍,总光子相差 2.8 倍。这种误差的造成是 因为 ANISN 是用一维几何模型来模仿柱模型,在空间认为是无限长的。而在二维 DOT 模仿柱几何模型时,底边界和顶边界采用反射边界,能较好的真实模仿。

对 ANISN+FENDL2(球) 和 DOT+FENDL2(柱)予以比较,第8 群泄漏率相差6倍,第175 群泄漏率相差15倍,总中子相差10倍,总光子相差1.8倍。可 看出,球模型与柱模型相比,第8 群即高能中子部分更是偏大,而第175 群即低 能中子部分,DOT 比 ANISN 要大,但 ANISN(球)要更接近 DOT。由于模型几何 尺寸达 1300cm,含有众多的材料成分,再加上不同程序及数据库对模型及材料 的不同处理,因此误差较大。

程序	几何	轴向	Z	第8群	第175群	总中子	总光子
	模型	尺寸	或				
			θ				
			向				
			格				
		1cm	1	2. 5650E-01	5. 3801E-05	4.9562E-01	4.6246E-01
	柱	10cm	10	2.6553E-01	6.6116E-05	5. 4279E-01	5.6391E-01
DOT	(r, z)	10cm	20	2.6601E-01	6. 6198E-05	5.4356E-01	5. 6467E-01
		20cm	20	2.6582E-01	6. 6196E-05	5. 4339E-01	5.6454E-01
	球	1cm	10	2.6587E-01	6. 6198E-05	5. 4343E-01	5.6472E-01
	(r, θ)	1cm	100	2.6589E-01	6. 6194E-05	5. 4341E-01	5.6460E-01
ANISN	柱	无		2.8040E-01	9. 9923E-05	6. 2905E-01	5. 6919E-01
	球	无		3.8157E-01	9.1516E-05	7.3076E-01	5. 2136E-01
	计算中,	径向月	えす 2	83.9cm,到达 s	s.s 层外面,其	它条件严格统	·
说明	固定源项	页归、	不做	负通量校正(())、角网格 Sa	8、迭代精度(〔10 ⁻⁵ 〕、散射
~u /J	阶(P ₅)、	数据库	Ē (FE	NDL2)、右边界	(真空)、左	上下边界(反	射)、空间径
	向网格相	見据不同	司材料	划定,达到足(够精度;		

表 四一9 HT7U 较小尺寸泄漏率计算结果

为了验证尺寸对结果的影响,本论文采用同样的模型,但是计算较小的径向

尺寸,即计算点在不锈钢外面,从几何中心向外 283.9cm 处的第8 群泄漏率,第 175 群泄漏率,总中子泄漏率,总光子泄漏率。计算中各条件严格统一,参见图 四-5 和表 四-9 说明。计算结果如表 四-9 所示。

从表 四一9 可以看出, DOT(r, z) 几何 Z 向尺寸较小时, 计算结果误差偏大。 而且, 柱(r, θ) 几何中, θ 向取 10 和 100 个网格, 对结果影响甚微。ANISN 球 模型和柱模型结果有一定差别(总中子相差 13.6%,总光子相差 8.4%)。DOT((r, z) 和 ANISN 柱模型第 8 群泄漏率相差 5%, 第 175 群泄漏率相差 33.3%, 总中子相 差 13.5%, 总光子相差 0.7%。

由表 四-8 和表 四-9 的比较结果可知,当几何尺寸较小时,用 DOT 和 ANISN 计算结果,无论在那种情况下,都要明显优于几何尺寸较大的情况下的计 算结果。因此,在进行工程计算和设计时,要特别注意几何尺寸的影响。

4.5 FDS—RT—FBB 球模型中子学参数

FDS(Fusion-Driven Hybrid System)聚变中子源驱动的次临界清洁核能系统 是根据聚变反应是富中子、贫能量(14MeV/次)而裂变反应恰好是贫中子、富能量 (200MeV/次)的特点,利用外源进入一个叫包层的次临界系统,在研究各种核 材料(核燃料/结构材料/冷却剂/中子增值剂/氚增值剂等)的基础上,优化按排包 层。关于 FDS 的定义、特点和基本框架,参见文献[11][12][13][14]。关于燃料 增殖包层 FBB 初步物理设计,参见文献[15]。这一研究对于核物理中裂变反应完 全成熟并得到广泛应用,而聚变反映在目前尚不能实现的现状下,作为一个过渡 阶段的研究,无论从理论上还是现实中,都具有重要的意义。





为全面考察聚变物理反应中的各种参数,反应率、燃料增殖率、泄露率、发

热率、K有效等参数,建立了FDS-RT-FBB 球几何模型,见图 四-6。本模型共 26 个区,如果以等离子体区为中心,则向两边分布依次为内外刮削层、内外产氘区、外燃料区、内外反射层、内外屏蔽层和内真空。本模型外产氘区和燃料区都各为三个区,利于氚增值和燃料增值,也利于实现多功能的目的。计算中所采用材料及其构成以及几何尺寸均考虑了实际工程中的可行性和现实性。具体几何及材料参数见表 四-10。

区号	区域	厚	材料及体积份额	核子密	径向	质量
		度		度(10	坐标	密度
				$^{24}/cm^{3})$		(g/cm3)
1	真空区	200	Vacuum	0	200	0
2	内屏蔽层	10	70%316L;30%He	0.0608	210	5.6
3	内反射层	22	90%Gra;10%He	0.1015	232	2.025
4.6.8.12.					1	
14.1618	壁	1	70%316L;30%He	0.0607		5.6
20.22.24						
5	内产氚区	40	100%Li ₁₇ Pb ₈₃ (⁶ Li: 90%)	0.0331	273	9.51
7	铍层	10	60% Be; 40%He-gas	0.0742	284	1.11
9	内刮削层	15	Vacuum	0	300	0
10	离子区	200	Vacuum	0	500	0
11	外刮削层	15	Vacuum	0	515	0
13	外产氘区 I	15	100%Li ₁₇ Pb ₈₃ (⁶ Li: 90%)	0.0331	531	9.51
15	外产氘区 II	5	100%Li ₁₇ Pb ₈₃ (⁶ Li: 90%)	0.0331	537	9.51
17	外产氘区 III	3	100%Li ₁₇ Pb ₈₃ (⁶ Li: 90%)	0.0331	541	9.51
19	燃料区 I	12	9%UO ₂ ;6%SiC;45%Gra; 40%He-gas	0.0630	554	2.1861
21	燃料区Ⅱ	12	9%UO ₂ ;6%SiC;45%Gra; 40%He-gas	0.0630	567	2.1861
23	燃料区III	11	9%UO ₂ ;6%SiC;45%Gra; 40%He-gas	0.0630	579	2.1861
25	外反射层	10	90%Gra;10%He	0.1015	590	2.025
26	外屏蔽层	10	70%316L;30%He	0.0607	600	5.6

表 四一10 FDS—RT—FBB 球模型材料表

备注	计算中,源中子能量范围: 14.0155MeV~14.3705MeV;负通量修正: 混
	合:角度离散 S _N =16;网格间距除真空区:0.5cm;氦气用真空代替;

在计算中,中子能量取 14.1MeV 强中子源,为了保证计算的准确性,空间 网格划分较细,除真空区外,均取 0.5cm,用混合负通量修正,角度离散取 $S_N = 16$, 由于氦气极其稀薄,计算中用真空取代。为便于比较计算情况的优,ANISN 计 算结果与 MCNP 蒙特卡罗计算结果进行比较。MCNP/4B 是美国 Los Alamos 试 验实编制的大型多功能三维中子一光子输运程序。计算结果如表 四一11、四一 12、四一13所示。

区号	ANISI	MCNP	
	①F:U238(n,γ)	②F:U238(n,γ)	F:U238(n,γ)
19	0.162391	0.138274	0.12611(0.40%)
	0.139764	0.11756	0.11996(0.45%)
23	0.096228	0.081855	0.07420(0.60%)
SUM	0.398384	0.337690	0.32027(0.31%)
备注	UW 库中, (①对应17号截面,②对	应 41 号截面

表 四一11 ANISN 与 MCNP 反应率比较表

由 ANISN 和 MCNP 在保持相同的条件下计算的 F:U238(n,y)的反应率可以看 出,总误差只达到5%,它们符合的很好。

风石	ANISN	i+UW	MCNP		
12 J	$T[^{6}Li(n,\alpha T)]$	$T[^{7}Li(n,n^{1}T)]$	T[⁶ Li(n,aT)]	$T[^{7}Li(n,n^{1}T)]$	
5	0.25207	0.0001791	0.25841(0.46%)	0.00019(1.1%)	
13	0.700824	0.0020290	0.65246(0.20%)	0.00181(0.22%)	
15	0.17573	0.0001624	0.17236(0.25%)	0.00017(0.63%)	
17	0.114602	0.00005648	0.14364(0.33%)	0.00006(0.88%)	
SUM	1.24323	0.0024272	1.22686(0.15%)	0.00222(0.22%)	

表 四一12 ANISN 与 MCNP 燃料增殖率比较表

由 ANISN 和 MCNP 在保持相同的条件下, 计算的 T[⁶Li(n,aT)]和 T[⁷Li(n,n¹T)] 的燃料增值率总误差分别为1.3%和8%,也符合很好。

米別	泄》	扇率	发热率(17 -t- 24	
天府	中子	光子	中子	光子	K 有效
ANISN+UW	0.01978	0.01444	12.2917	8.99301	0.09124
MCNP	0.02404 (1.11%)	0.01831 (1.82%)	15.0995 (0.14%)	8.36743 (0.20%)	0.12476

表 四一13 ANISN 与 MCNP 泄漏率、发热率、K 有效比较表

由 ANISN 与 MCNP 计算的中子泄漏率相差 17%, 光子泄漏率相差 21%, 中子 发热率相差 18.6%, 光子发热率相差 6.9%, K 有效相差 26.8%。

本方案如果采用 ANISN+FENDL2 可能会更精确些,但 Fend12 中不包括 U 元素,因此只能采用 ANISN+UW 的组合。从上面的比较可看出,对反应率和燃料增值率,两程序计算的结果吻合的很好。但对中子、光子泄漏率、K 有效则误差较大。因此,只要在控制泄露率和发热率在误差允许的范围内,就可以借助此方案配合 ANISN+UW 求得最佳反应率和燃料增值率,达到优化安排包层的目的

-

第五章 数据库 FENDL-2 测试和评价

5.1 数据库测试和评价过程

国际上数据库 Benchmark 过程主要是利用现有及正在进行的中子学积分实验结果和国际上最新、主要的输运计算程序对国际上几家主要核数据中心研制的 聚 变 核 数 据 库,如:FENDL-1(IAEA),EFF-2,-3(欧州),JENDL-FF(日本),ENDF-B/VI(美国),进行全面综合的基准计算与分析,以达到优选数据、校核程序,并给出改进意见的目的。



图 五一1 数据库 BENCHMARK 过程

此项研究的直接目的是在广泛分析最新欧、美、日、俄四家主要核数据库的 基础上,优选建立国际评价核数据库 FENDL-2[16][17][18],并推荐为 ITER(国 际热核聚变实验堆)设计的参考基准库。数据库 Benchmark 过程如图五-1 所示。 在最新版 FENDL-2 (6 月,2000 年)出来之前,前人作了大量的工作 [19][20][21][22]。

5.2 实验几何结构和材料

本文在查阅大量文献的基础上,统计出 FENDL-2 库中所有材料(核素)的 来源库,即 FENDL-2 库最新版本采用国际上哪几家核数据中心研制的聚变核数 据库。同时,对国际上一些实验机构分别作过 FENDL-2 库中那些材料(核素)的 人工试验,也给予统计[23][24][25]。见表 五-1 所示。其中,*代表一维试验, ** 代表二维试验。

机构	材料	来源库	机构	材料	来源库
	H-1	ENDF/B-VI.1	*OKTAVIAN	Cr-53	ENDF/B-VI.1
	H-2	BROND2.1	*OKTAVIAN	Cr-54	ENDF/B-VI.1
	H-3	ENDF/B-VI.0	*OKTAVIAN	Mn-55	JENDL-3.1
	He-3	ENDF/B-VI.1	* IPPE	Fe-54	ENDF/B-VI.1
	He-4	ENDF/B-VI.0	* IPPE	Fe-56	EFF-3
* IPPE	Li-6	ENDF/B-VI.1	* IPPE	Fe-57	ENDF/B-VI.1
* IPPE	Li-7	ENDF/B-VI.0	* IPPE	Fe-58	ENDF/B-VI.1
* IPPE	Be-9	JENDL-FF	*OKTAVIAN	Co-59	ENDF/B-VI.1
	B-10	ENDF/B-VI.1	*OKTAVIAN	Ni-58	ENDF/B-VI.1
	B-11	ENDF/B-VI.0	*OKTAVIAN	Ni-60	ENDF/B-VI.1
**FNS	C-12	JENDL-FF	*OKTAVIAN	Ni-61	ENDF/B-VI.1
**FNS	N-14	JENDL-FF	*OKTAVIAN	Ni-62	ENDF/B-VI.1
**FNS	N-15	BROND2.1	*OKTAVIAN	Ni-64	ENDF/B-VI.1
**FNS	O-16	JENDL-FF	*OKTAVIAN	Cu-63	ENDF/B-VI.2
*OKTAVIAN	F-19	ENDF/B-VI.0	*OKTAVIAN	Cu-65	ENDF/B-VI.2
	Na-23	JENDL-3.1		Ga-nat	JENDL-3.2
	Mg-nat	JENDL-3.1	*OKTAVIAN	Zr-nat	JENDL-FF
*OKTAVIAN	Al-27	EFF-3	*OKTAVIAN	Nb-93	JENDL-FF
*OKTAVIAN	Si-28	ENDF/B-VI	*OKTAVIAN	Mo-nat	JENDL-FF

表 五一1 FENDL-2 数据库材料表

*OKTAVIAN	Si-29	ENDF/B-VI		Sn-nat	BROND2.1
*OKTAVIAN	Si-30	ENDF/B-VI		Ta-181	JENDL-3.1
	P-31	ENDF/B-VI.0	*OKTAVIAN	W-nat	JENDL-FF
	S-nat	ENDF/B-VI.0		Au-197	ENDF/B-VI.1
	Cl-nat	ENDF/B-VI.0	* IPPE	Pb-206	ENDF/B-VI.0
	Ca-nat	JENDL-3.1	* IPPE	РЬ-208	ENDF/B-VI.0
*OKTAVIAN	Ti-nat	JENDL-3.1		Bi-209	JENDL-3.1
* IPPE	V-51	JENDL-FF			
*OKTAVIAN	Cr-50	ENDF/B-VI.1			
*OKTAVIAN	Cr-52	ENDF/B-VI.1		<u> </u>	

表 五一2 积分实验中几何尺寸和材料信息

	材料	外半径	内半径	平均	质量密度	核子密度	数据来源	-
		(cm)	(cm)	自由程	(g/cm3)	(g /cm3)		
	A1	20.0	10.2	0.5	1. 22	2.723e-002	OKTAVIAN	-
	Si	30.0	10.0	1.1	1.29	2.766e-002	OKTAVIAN	
	Mo	30. 5	3.0	1.5	2.15	1.350e-002	OKTAVIAN	
	Со	20.0	10.2	0.5	1.94	1.982e-002	OKTAVIAN	
Ì	Cr	20.0	10.2	0. 7	3.72	4. 308e-002	OKTAVIAN	
	Cu	30.5	3.0	4.7	6.23	5.904e-002	OKTAVIAN	
ļ	Ti	20.0	10.2	0.5	1.54	1.936e-002	OKTAVIAN	
	Mn	30.5	3.0	3.4	4.37	4.790e-002	OKTAVIAN	
	Zr	30.5	3.0	2.0	2.84	1.875e-002	OKTAVIAN	
	Nb	14.0	2.8	1.1	4.39	2.846e-002	OKTAVIAN	
	W	20. 0	10.2	8.0	4.43	1.451e-002	OKTAVIAN	
	Be	11.0	6.0		1.85	1.236 e-002	IPPE	
		17.35	5.7		1.85	1.236 e-002	OKTAVIAN	
	Fe	12.0	4.5		7.86	8.370 e-002	IPPE	
		30.0	2.0	6.1	7.86	8. 4755e-002	OKTAVIAN	
	Pb	12.0	4.5		11.4	3.130 e-002	IPPE	
	V	12.0	1.5		5.8	6.8485e-002	IPPE	
L								

本文进行的实验的所有几何结构都被简化为一维球几何模型。表 五-2.给 出了所测试和评价的材料名称,所用几何的内/外半径,以及材料的质量密度和 核子密度。关于 A1, Co, Cr, Cu, Mn, Nb, Si, Ti, W, Zr, Mo 实验详细的信 息参见文献[26], Be, Fe, Pb 在文献[27], Fe(28cm) 在文献[28], Be(11.65cm) 在文献[29],而 V 在文献[30]。 14.1 MeV 源中子来自于 D-T 聚变反应球型外壳 的内部。为了使一维输运计算能相应被用来模拟泄露谱而便于比较,测量的中子 谱已经作了修改。在计算中我们采用带有统一的源能量谱的各向异性中子源。

5.3 结果和分析

表 五-3 和图 五-2 至图 五-16 给出了中子泄露谱图以及在中子积分实 验中得到的泄漏率值与真实试验测定值的比率 C/E。从表 五-3 和中子泄露谱图 中,可得到如下结论:

对 Al,总体上来说在评价数据中,达到了最好的吻合,尽管在能段 0.1-10 MeV 之间,低估了大约 30%而在能段 10-20 MeV 之间 10%。

对 Si,总体上与实验图也吻合的很好。而且,与铝的结果相比教,还有提高。

对 Mo,可以发现最大的偏差大约 30% 在能段 5.0-10.0 MeV 之间,其他能段则表现了较好的吻合。

对 Co, 一个严重的低估超过 30% 在低能段和中能段被观察到。在高能段和 在总体上, 实验结果和计算结果符合的很好。

对 Cr, 一个总体上的偏差大约 10% 被观察到。在实验值和计算值之间达到

了较好的吻合。

对 Cu, FENDL-2 在能段 5-10 MeV 之间给出了高估 26% 的测量积分泄露 谱。

对 Ti,除了 5-10 MeV 能段,所有的数据比测量的泄露谱总体上高估超过 20%。

对 Mn,所有的数据偏离不超过 10%,所以这是一个可靠的数据组。

对 Zr,在低能段和高能段,高估了超过 20%。然而,在能段 5-10 MeV,数据低估了 16%。

对 Nb, 在低于 1.0 MeV 能段, 低估了大约 40%在 5-10 MeV 能段, 低估了大约 30%。

对 W,测量泄露谱总体上,除了能量低于 1.0 MeV,测量的泄露谱表明总体 上有一个低估。

对 Fe,在能量低于 1.0 MeV 的能段,高估达 23%,而在 5-10 MeV 能段,低估大约 18%。

对 Pb, 5-10 MeV 能段间, 高估达 35%, 而在 10-20 MeV 能段, 低估大约

33% 。

对 Be,在 5-10 MeV 能段,高估大约 32%,总体上高估大约 19%。 对 V,总体上的高估不到 10%,但是能量低于 1.0 MeV 和在能量段 10-20 MeV 分别高估大约 24%。

5.4 总结

从对所有数据的中子泄露 C/E 结果的分析和中子泄露谱图中,我们可得到以下结论:

1> 对 Cr, Ti, Mn, Zr, Nb, W, Fe, 对能量段低于 1.0 MeV, 都存在一个高估。

2> 对 Mo, Co, Ti, Zr, Nb, W, Fe, Pb, 最不理想的低估在能量段 5.0-10.0 MeV 之间。是什么导致了这样的结果还不清楚, 需要进一步分析和研究。

总体上来说,无论是与以前的版本相比,还是与其它库相比,例如 ENDF/B(USA), BROUND(Russia Federation), JENDL(Japan) 和 EFF(Europe),结构材料的 FENDL-2 多群库已具有较高的水平,虽然并不是所有的数据都符合的 很好[31]。

作为一个重要的结果,我们注意到,总的说来,FENDL-2 库中的结构材料 的实验结果与积分实验,即计算结果,吻合的很好。然而,我们发现在 0.1 MeV 和 1.1 MeV 能量点附近,所有结果都有一个显著的偏差。因此,进一步的工作 需要评价数据库中的结构材料,找到发生偏差的原因。

表 五一3 各种球形实验材料积分泄露的 C/E

***	AP THE PHILE	* 3 Junio 2011 20-0 - 2 -		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
11 11		计算泄漏率	计算值/试验值	C/E(MCNP+
	(Mev)	(1/sn)	C/E(Anisn+MG)	FENDL2)
	0.1~1.0	. 069	0.619	0.90
A1	1.0~5.0	. 148	0.760	0.85
(9.8cm)	5.0~ 10.0	. 050	0.784	0. 74
	10.0~20.0	. 675	1.11	1.10
	> 0.1	. 942	1.00	1.13
	0.1~1.0	. 093	0. 743	0.89
Si	1.0~5.0	. 171	0.808	0.93
(20. 0cm)	5.0~10.0	. 047	0.911	0.94
	10.0~20.0	. 482	1.10	1.11
	> 0.1	. 793	0. 985	1.03

	0.1~1.0	. 516	0. 917	0.90
No.	1.0~5.0	. 287	0.852	0.89
(27 5 cm	5.0~10.0	. 043	0.711	0.82
(41. JUII	10. 0~20. 0	. 524	0.982	0. 93
	> 0.1	1.37	0. 922	0. 91
	0.1~1.0	. 242	0. 702	0.63
Co.	1.0~5.0	. 295	0.564	0.61
(0.8cm)	5.0~10.0	. 0554	0. 403	0. 49
	10.0~20.0	. 729	1.03	1.02
	> 0.1	1.32	0. 839	0.83
	0.1~1.0	. 211	1.10	1.07
Cr	1.0~5.0	. 221	1.13	1.13
(9 8cm)	5.0~10.0	. 041	1. 12	1.14
	10.0~20.0	549	0. 946	0.97
	> 0.1	1.02	1.03	1.04
	0.1~1.0	. 66	. 100	1.09
Cu	1.0~5.0	. 145	. 994	1.05
(27 5cm)	5.0~10.0	. 0133	1.23	1.28
	10.0~20.0	. 0794	. 972	0.99
	> 0.1	. 973	. 923	1.07
	0.1~1.0	. 086	1.39	1.31
Ti	1.0~5.0	. 152	1.21	1.33
(9.8cm)	5.0~10.0	. 038	0.720	0.98
(0.000)	10.0~20.0	. 598	1.23	1.19
	> 0.1	. 874	1.22	1.22
	0.1~1.0	. 661	1.08	1.08
Mn	1.0~5.0	. 271	1.09	1.14
(27.5cm)	5.0~10.0	. 0279	0.960	1.00
(21 × 00m/	10.0~20.0	. 154	0. 927	0.95
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	<u>> 0.1</u>	1.14	1.03	1.05

	0.1~1.0	. 442	1.21	1.21
7~	1.0~5.0	. 307	1.03	1.07
(27.5 cm)	5.0~10.0	. 033	0.840	0. 99
	10.0~20.0	. 317	1.27	1.21
	> 0.1	1.10	1.17	1.16
	0.1~1.0	. 335	1.43	1.37
Nh	1.0~5.0	. 219	1.03	1.04
(11.2 cm)	5.0~10.0	. 0355	0. 765	0. 93
(11.2011)	10.0~20.0	. 510	1.09	1.04
	> 0.1	1.10	1.17	1.14
	0.1~1.0	. 360	1.05	0. 93
w	1.0~5.0	. 241	0. 773	0.79
(9 8cm)	5.0~10.0	. 040	0. 544	0.69
	10. ~20. 0	. 710	0. 953	0.94
	> 0.1	1.35	0.937	0.90
	0.1~1.0	3.01E-01	1.23	
Fo	1.0~5.0	2. 70E-01	1.08	
(7.5cm)	5.0~10.0	4.10E-02	0.820	
	10.~20.0	3. 74E-01	0.996	
	> 0.1	9.78E-01	1.09	
	0.05~1.0	0. 786	1.02	1.08
Fe	1.0~5.0	0. 115	0. 796	1.06
(28cm)	5.0~10.0	0.00627	0.860	0.98
	10. ~20. 0	0. 0343	0. 799	1.08
	> 0.05	0. 941	0. 987	1.08
	0.1~1.0	3. 77E-01	0.978	
Ph	1.0~5.0	4.98E-01	1.04	
(7.5cm)	5.0~10.0	5. 41E-02	0.645	
	10. ~20. 0	3.74E-01	1.33	
	> 0.1	1. 30E+00	1.09	

•

	hedgestan			
	0.1~1.0	2. 33E-01	0.913	
Ro	1.0~5.0	1.86E-01	1.15	0.99 0.84 0.90 1.20 0.99 1.23 1.03 1.23 1.03 1.27 0.97 1.09
(5 Ocm)	5.0~10.0	1.16E-01	1.08	
	10.~20.0	5.21E-01	1. 32	
	> 0.1	1.04E+00	1.19	
Be (11.65cm)	0.0003 \sim 1.0 1.0 \sim 5.0 5.0 \sim 10.0 10. \sim 20.0 > 0.0003	. 469E+00 . 315E+00 . 143E+00 . 324E+00 . 126E+01	1.08 0.871 1.01 1.28 1.06	0. 99 0. 84 0. 90 1. 20 0. 99
V (10.5cm)	0. $1 \sim 1.0$ 1. $0 \sim 5.0$ 5. $0 \sim 10.0$ 10. ~ 20.0 > 0.1	0. 391 0. 301 0. 0377 0. 381	1.24 1.04 1.24 0.953 1.09	1. 23 1. 03 1. 27 0. 97

A Shell Neutron Spectra ---- Calculate with Anian Si Shell Neutron Spectra



图 五一2 Al 壳中子泄露谱

图 五一3 Si 壳中子泄露谱

Calculate with Anish

---- Experiment Data





图 五一14 Pb 中子泄露谱

图 五一15 Be 中子泄露谱





.

43

.

.

.

第六章 应用实例

粒子物理和核物理领域计算模拟程序众多,其应用各有细微差别,在此不详 细探讨。本论文只拟就软件包所包含的一维、二维离散坐标输运计算程序作初步 的应用研究。

6.1 质子加速器辐射防护屏蔽计算

此模型是以中国科学院等粒子物理研究所微生物实验室拥有的质子加速器 为基础而建立模型的。此模型为一维球形模型,分为四个区,采用归一化源,使 用 ANISN 程序调用 FENDL-2 核数据库作数值模拟计算。模型示意图如图 六 -1 所示。



图 六一1 质子加速器球模型示意图

本方案计算中使用的条件,在 Sn 中, N = 16,网格细分程度小于 1.0 cm (屏 蔽部分),负通量修正用混合法,源的能量范围在 10.0 MeV~~ 12.0 MeV, E_s =11.595 MeV,采用归一化源计算。

注: 计算中基本常量, e = -1.602e-19C, 1A = 1C/S, 1mA = 6.21422e+15 n/s

对此防护屏蔽计算采用六种计算方案,主要屏蔽材料考虑混凝土、铁、水以 及它们的混合物,方案如表 六-1。

材料	屏蔽厚度(m)				
concrete	0.5	1.0	1.5	2.0	3.0

表 六一1 辐射防护屏蔽计算方案

Fe	0.2	0.5	1.0	1.5
H ₂ O	0.2	0.5	1.0	1.5
Fe+ Concrete	0.2+0.5	0.5+0.5	0.5-	+1.0
H ₂ O+Concrete	0.5+0.5	president in the second s	0.5+1.0	

此实验的主要目的是考察由质子加速器诱发产生的中子对各种材料的穿透 情况,从而考察这种中子辐射对人体造成的潜在危害大小。计算结果见表 六-2、 六-3、六-4、六-5、六-6。

表 六一2 质子加速器诱发中子对不同厚度混凝土 concrete 剂量率

屏蔽厚度(m)	0.5	1.0	1.5	2.0	3.0
Dose(Sv/S)	8.392E-19	6.309E-20	4.750E-21	3.093E-22	1.455E-24
5mADose(Sv/S)	2.607E -2	1.967E -3	1.483E -4	9.610E -6	4.52085e-8
5mADose(Sv/h)	9.3852e+1	7.0812e+0	5.3388e-1	3.4597e-2	1.6275e-4

表 六一3 质子加速器诱发中子对不同厚度 Fe 材料剂量率

.

屏蔽厚度(m)	0.2	0.5	1.0	1.5
Dose(Sv /S)	1.250E-19	1.250E-22	9.767E-28	6.791E-33
5mADose(Sv/S)	7.768E-04	.77678E-06	.60694E-11	.42201E-16
5mADose(Sv/h)	.27964E+01	.27964E-02	.21850E-07	.15192E-12

表 六一4 质子加速器诱发中子对不同厚度 H₂O 层剂量率

屏蔽厚度(m)	0.2	0.5	1.0	1.5
Dose(Sv /S)	5.815E-18	3.185E-18	1.072E-18	3.453E-19
5mADose(Sv/S)	.36136E-01	.19792E-01	.66616E-02	.21458E-02
5mADose(Sv/h)	.13009E+03	.71252E+02	.23982E+02	.77248E+01

表 六一5 质子加速器诱发中子对不同厚度 Fe+ Concrete 剂量率

屏蔽厚度(m)	0.2+0.5	0.5+0.5	0.5+1.0
Dose(Sv /S)	8.416E-21	7.318E-24	4.798E-25
5mADose(Sv/S)	.52299E-04	.45476E-07	.29816E-08
5mADose(Sv/h)	.18828E+00	.16371E-03	.10734E-04

表 六—6 质子加速器诱发中子对不同厚度 H₂O+Concrete 剂量率

屏蔽厚度(m)	0.5+0.5	0.5+1.0	
Dose(Sv /S)	2.660E-19	1.935E-20	
5mADose(Sv/S)	.16530E-02	.12025E-03	
5mADose(Sv/h)	.59507E+01	.43288E+00	

通过建立以上几种试验方案和模型,用一维中子输运计算 ANISN 程序配 FENDL-2 数据库进行数值模拟计算,得到的辐射剂量率结果。通过对以上数 据结果的分析,可以洞悉中子在不同材料中输运时的衰减情况,也就是对材料 的穿透情况。

1. 对混凝土 (Concrete), 中子衰减 13 倍/50cm

2. 对铁 (Fe), 中子衰减 10⁵ /50cm

3. 对水 (H₂O),中子衰减 3 倍/50cm

.

由表 六-5 和表 六-6 可以看出,对 5mA 的质子加速器,0.2m+0.5m 的 Fe+ Concrete 产生的剂量率甚至要优于 0.5m+0.5m 的 H₂O+Concrete 达 30 倍, 而 0.5m+1.0m 的 H₂O+Concrete 也只比 0.2m+0.5m 的 Fe+ Concrete 好 1 倍。

由以上的分析我们可以看出,铁材料对中子的屏蔽效果最好,混凝土次之, 水较差。似乎由此我们会选择铁材料,但是如果考虑到成本,水是最经济的。 因此,选择什么材料,需要根据具体的工程环境,需要根据各种场合对材料的 不同要求来决定。

-

.

第七章 总结和结论

本论文第一章论述了核物理的发展促进了计算机技术的发展,而计算机技术 的发展反过来又加速了核物理的发展,核物理发展具有实验设施投资大、系统复 杂,试验安全与政治影响,中子学基本理论非常成熟,形成了系统完整的基本核 数据库,这就为利用计算机程序模拟进行粒子物理研究和工程设计提供了必要性 和可能性。同时,介绍了国际上常用的一些模拟程序包括专用程序和输运程序以 及核数据库处理程序,常用的群状数据库和点状数据库,即国内外在这一领域的 发展情况,并提出本论文的主要内容。

第二章介绍了本论文展开工作的理论基础,输运过程和中子输运理论,引入 玻尔兹曼输运方程,即中子输运过程所遵循的规律。这一方程是一个与空间坐标 r (x, y, z)、能量 E、中子运动方向 Ω(θ,φ) 和时间 t 等七个变量相关的微分-积分方程,要精确求解几乎不可能,在实际的计算问题中通常是采用一些近似的 方法求解,其中,数值离散方法是最重要和有效的方法。此种方法及其相应程序 软件已成为目前反应堆物理及屏蔽设计不可缺少的方法和手段。研究中子输运问 题的方法有"确定论方法"和"非确定论方法",或称"试验统计或蒙特卡罗方 法"。本论文所作的工作及所使用的工具都是基于"确定论方法"。中子输运方程 数值解法中变量的离散主要考虑能量变量的离散——多群方法,方向角变量的近 似,空间变量的离散等。

离散纵标方法是在确定论方法的基础上发展起来的一种方法。它的研究主要

包括离散方向及求积权重系数——求积组的选取,中子输运方程的离散化(空间 和方向变量)方法及离散(差分)方程组的获得,离散方程的求解,包括加速收 敛的方法等。用此种方法编制的数值模拟程序数目众多,既有一维,也有二维、 三维,本文主要探讨一维和二维输运程序以及与其配套的数据库。

在第三章,本文介绍了软件包内包括的程序和数据库。NGSN 是应用粗网节 块离散纵标方法数值求解圆柱、平板、球等三种几何下的多群中子输运方程的程 序,由于本程序采用粗网节块方法,所需网点数目比 ANISN 显著减少,并采用粗 网再平衡加速收敛技术,因而它比 ANISN 具有更快的计算速度,更为经济。 ANISN 是各向异性散射一维离散坐标中子一光子输运程序,该程序广泛应用于核 反应堆物理(包括临界搜索、源问题和栅元均匀化等),核反应堆中子学及核屏 蔽问题的计算。DOT3.5程序是用二维几何(X,Y),(R,Z),(R,θ)的离散纵坐标法 近似求解定态玻尔兹曼粒子输运方程。主要用于中子或光子输运问题,也可以用 于无外力场作用的其它粒子输运问题。程序可计算核反应的本征值问题如有效增 殖因子 keff,时间吸收α、堆尺寸δ及核浓度C;也可计算独立外源问题如固定 体分布源,固定边界源及首次解析碰撞源;还可求伴随解。

UW 威斯康星大学核数据库是一个包括 48 种核素的 25 群中子和 21 群光子

的 96 种截面值,它是在核物理中常用的一个核数据工作库。这个数据库中的数据扩展到 P₁阶,并且具有 FENDL2 库中所不具有的 U、Pu、Am 等核素。FENDL 是为设计国际热核聚变实验堆 ITER,由 IAEA 的核数据部发起并协调,用于热核聚变堆研究的工作库。它是 175 群中子、42 群光子输运截面以及响应函数评价数据库,包含了聚变堆设计中常用的 57 种重要核素的耦合中子、光子输运截面库。其中,数据扩展到 P₅阶。

第四章本论文的核心之一软件包测试与评价分析,考察计算条件选用 DOT3.5 程序,核数据库采用 FENDL2,建立圆柱几何模型对计算中的各种影响条件作一 比较。确定了后面数据库和程序校核使用的计算条件,角网格采用 S₈、空间网 格 0.1cm,迭代精度 10⁻⁵,负通量模型采用线性一梯形混合模型(0),加速收敛 用空间无关变比例加速方法(0),散射阶对数据库比较采用 P₁,输运程序比较 采用 P₅。

数据库比较对 C-10cm, C-100cm, Fe-10cm, Fe-100cm 四个测试问题, 建 立圆柱几何模型, 选用 ANISN+UW 和 ANISN+ FENDL-2 两种组合方式, 分八种情 况比较了 UW 和 FENDL-2 核数据库。最后发现两个数据库之间存在一定差别。这 些误差在合理的范围内, 并且 FENDL-2 数据库从总体上要优于 UW 核数据库。

输运程序的比较,建立了柱几何和圆几何模型,采用 C-10cm, C-100cm, Fe -10cm, Fe-100cm 四个测试问题,用 ANISN(柱)+FENDL2, DOT (r, Z)+FENDL2, DOT (r, θ)+FENDL2, NGSN (柱)+UW 共十五种组合,对 NGSN,ANISN,DOT3.5 进 行比较。从结果的分析中得到,NGSN 与其它程序相比,具有快速收敛的特征。 NGSN 与 ANISN 相比与 ANISN (柱)与 DOT 相比,所表现出来的规律完全一 致。DOT (r, Z)与 DOT (r, θ)计算的结果吻合完好。因此,可以得出结论,NGSN、 ANISN、DOT3.5 输运程序是稳定的、可靠的。

对 HT - 7U 辐射场计算, 建立一维几何模型, 通过 ANISN+FENDL2(球)、ANISN +FENDL2(柱) 和 DOT+FENDL2(柱), 对第 8 群和第 175 群的泄漏率的比较, 发现结果之间存在一定差异。这主要是由于模型几何尺寸达十几米, 含有众多的 材料成分, 加上不同程序及数据库对模型及材料的不同处理所造成的。

为优化按排包层,全面考察聚变物理反应中的各种参数,建立了 FDS—RT —FBB 球几何模型,对反应率、燃料增殖率、泄露率、发热率、K有效等参数, 用 ANISN+UW 计算,并与 MCNP 计算结果予以比较。发现对反应率和燃料增值率, 两程序计算的结果吻合的很好。但对中子、光子泄漏率、K有效则误差较大。因 此,只要在控制泄露率和发热率在误差允许的范围内,就可以借助此方案配合 ANISN+UW 求得最佳反应率和燃料增值率,达到优化安排包层的目的。

第五章本论文的核心之二数据库 FENDL-2 测试和评价, 国际上数据库 Benchmark 过程主要是利用现有及正在进行的中子学积分实验结果, 在广泛分析 最新欧、美、日、俄四家主要核数据库的基础上, 对 FENDL-1(IAEA), EFF-2, -3(欧

州), JENDL-FF(日本), ENDF-B/VI(美国), 进行全面综合的基准计算与分析, 以达 到优选数据、校核程序, 并给出改进意见的目的, 优选建立国际评价核数据库 FENDL-2, 并推荐为 ITER(国际热核聚变实验堆)设计的参考基准库。

本文在查阅大量文献的基础上,统计出 FENDL-2 库中所有材料(核素)的 来源库,即 FENDL-2 库最新版本采用国际上哪几家核数据中心研制的聚变核数 据库。同时,对国际上一些实验机构分别作过 FENDL-2 库中那些材料(核素)的 人工试验,也给予统计。

本文进行的 Al, Co, Cr, Cu, Mn, Nb, Si, Ti, W, Zr, Mo 实验的所有几何 结构都被简化为一维球几何模型。实验的结果以中子泄露谱图以及在中子积分实 验中得到的泄漏率值与真实试验测定值的比率 C/E 的形式给出。最后的到的结论 是,无论是与以前的版本相比,还是与其它库相比,结构材料的 FENDL-2 多群 库已具有较高的水平,虽然并不是所有的数据都符合的很好。

第六章给出了一个简单的应用实例。以中国科学院等粒子物理研究所拥有的 质子加速器为基础建立一维球模型。此实验主要考察的是由质子加速器诱发产生 的中子对各种材料的穿透情况,这里使用的屏蔽材料是较常用且价格低廉的混凝 土、铁、水以及它们的混合物,从而尽量避免中子辐射对人体造成的潜在危害。,

通过 ANISN 程序配 FENDL-2 数据库进行数值模拟计算,得到的辐射剂 量率结果。通过对数据结果的分析,得到中子在不同材料中输运时的衰减情况, 发现对混凝土 (Concrete),中子衰减 13 倍/50cm,对铁 (Fe),中子衰减 10⁵ /50cm,对水 (H₂O),中子衰减 3 倍/50cm,即铁材料对中子的屏蔽效果最好, 混凝土次之,水较差。

总之,本论文对在粒子物理和核物理领域广泛应用的数值模拟计算程序 NGSN, ANISN, DOT 等程序和核数据库 UW, FENDL-2 等数据库,通过大量的计算, 从各个方面对系统作了校核和发展,证明各个程序和数据库是稳定的和可靠的, 最终形成离散纵标粒子输运计算软件包,并初步探讨了它们的应用,为粒子物理 和核物理的研究和设计提供保障。

本软件包的发展主要包括程序的完善,程序和数据库的校核,系统的集成 以及系统稳定性和可靠性的测试。

参考文献:

- [1] 谢仲生、张少泓, 核反应堆物理理论与计算方法(M), 西安交通大学出版社, 2000.6, pp.2-45。
- [2] 吴宜灿,一维离散节块输运方法在曲线坐标系中应用的研究(D),西安交通 大学硕士学位论文,1988, pp. 1-30。
- [3] Y.C. Wu, Z.S. Xie, U. Fischer, A Discrete Ordinates Nodal Method for One-Dimensional Neutron Transport Numerical Calculation in Curvilinear Geometries (J), J. Nuclear Science & Engineering, Vol. 133, No. 3, 1999, pp. 350-357.
- [4] R D Lawrence , J J Dorning, New Coarse-mesh Difficusion and Transport Theory Methods for the Efficient Numerical Calculation of Multi-Dimonsional Reactor Power Distribution, Meeting on Calculaion of 3-D Rating Distributions in Operating Reactors 8, NOV, 1970-Paris, pp. 26-2
- [5] 陈献武, ANISN 程序使用手册(CDC 版本)(R), 1985, pp. 1-46。.
- [6] 廖清宫、赵玉钧, ANISN 程序使用手册(R),北京应用物理与计算数学研究 1988, 6, pp. 1-53。
- [7] 方帮城, ANISN 程序使用说明书(R), 原子能院, 核工业软件中心, 1990, 5, pp. 1-24。
- [8] 赵成昆、付守信编译, DOT-3.5 二维离散坐标辐射输运程序使用手册(R), 核工业部一院设计部, 1985, 10, pp. 4-15。
- [9] 廖清富,赵玉均,UW 库说明书(R),北京应用物理与计算数学研究所, 1988, pp. 1-13。
- [10] A.B. Pashenko, H. Wienke, FENDL/E-2.0(R), IAEA-NDS-175, March, 1997.
- [11] Y. Wu, Progress in fusion-driven hybrid system studies in China(J), Fusion Engineering and Design 63-64 (0), 2002, pp. 73-80.
- [12] Y. C. Wu, J. P. Qian and J. N. Yu, The fusion-driven hybrid system and its material selection(J), Journal of Nuclear Materials, Volumes 307-311, Part 2 December 2002, pp. 1629-1636
- [13] Yican Wu, A Fusion Neutron Source Driven Sub-critical Nuclear Energy System: A Way for Early Application of Fusion Technology (J), Plasma Science and Technology, No. 6, Vol. 3, 2001, pp. 56-59.
- [14] 吴宜灿, 邱励俭, 聚变中子源驱动的次临界清洁核能系统—— 聚变能技术的早期应用途径(J), 核技术, 第 23 卷第 8 期, 2000, pp. 519-525。
- [15] Zheng Shan-liang, Wu Yi-Can, Huang Qun-Ying, Neutronics Optimization of Tritium Breeding Blanket for the FDS(J), Plasma Physics and Technology, Vol. 4, No. 2, 2002, pp. 46-49.
- [16] "FENDL/E-2.0, Evaluated nuclear data library of neutron nuclear interaction cross sections and photon production cross sections and photon-atom interaction cross sections for fusion applications, released on May 15, 1998", summary documentation A. B. Pashchenko, and H. Wienke, report IAEA-NDS-175 Rev. 1 (International Atomic Energy Agency, March 1997). Data library FENDL/E version May 15,

1998, received on tape from the IAEA Nuclear Data Section.

- [17] "FENDL/MG-2.0 and FENDL/MC-2.0, The processed cross-section libraries for neutron-photon transport calculations, version 1 of February 1998". Summary documentation H. Wienke and M. Herman, report IAEA-NDS-176 Rev. 0, Data received on tape.
- [18] DS Data Libraries FENDL-2, (International Atomic Energy Agency, May 1998). Data received on tape (or: retrieved on-line) from the IAEA Nuclear Data Section.
- [19] Yican WU, et al.: Integral data test of FENDL-2 fusion nuclear data library with neutronic integral experiments(J), Journal of Nuclear Science and Technology, Supplement 1, March, 2000, pp. 697-702.
- [20] Y. Wu, U. Fischer, : Integral Data Tests of the FENDL-1, EFF-2, EFF-3 and JENDL-FF Fusion Nuclear Data Libraries(C). Forschungszentrum Karlsruhe Technik und Umwelt, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 5953, February 1998, pp. 48-51.
- [21] U.Fischer(Ed.): Integral Data Tests of the FENDL-1 Unclear Data Library for Fusion Applications(C). Forschungszentrum Karlsruhe Technik und Umwelt, Wissenschaftliche Berichte, FZKA 5785, INDC(GER)-14, August, 1996, pp. 46-49.
- [22] U. Fischer, et al.: FENDL data testing for beryllium, lead, iron and copper(J), Fusion Engineering and Design, 28, 1995, pp. 437-445.
- [23] Sumita K., et al. : proc. 12th SOFT(R), Vol. 1, 1982, pp. 135-138.
- [24] Takahashi A., et al.: OKTAVIAN Report(R), C-83-02, 1983, pp. 1-45.
- [25] Collection of Experimental data for fusion Neutron Benchmark(C), JAERI-M-94-014.1994, pp. 54-58.
- [26] Maekawa F., Yamamoto J., Ichihara C., et al.:Collection of Experimental data for fusion Neutron Benchmark(M), JAERI-M-94-014.1994, pp. 46-49.
- [27] S. P. Simakov, B. V. Devkin, et al.: neutron leakage spectra from Be, Fe, Pb, PbLi SHELLS with 14MeV neutron source.", Preparation of Fusion benchmarks in electronic format for nuclear data validation studies, December 1993, IAEA, Vienna, pp. 13-16.
- [28] Devkin, B.V., Giese, H., Kobozev, M.G., et al.: Neutron Leakage Spectra from Spherical Iron Shells(R), Forschungszentrum Karlsruhe internal report 31-06-32/01A, 1995, pp. 156-162.
- [29] S. P. Simakov, A. A. Androsenko e. a. Neutron leakage spectra from Be, Al, Fe, Ni, Pb, Pb17Li, Bi, U and Th spheres with T(d, n) and 252-Cf neutron sources(J), Fusion Technology 1992, (C. Ferro, M. Gasparotto and H. Knoepfel, eds.), Elsevier, 1993, v. 2, pp. 1489
- [30] Moelendorff, U.V., Devkin, B.V., Fischer, U., B.I.Fursov et al.: Proc. The 19th Symposium on Fusion Technology(R),1996, pp. 235-239.
- [31] Yican WU, et al.: Integral data test of FENDL-2 fusion nuclear data library with neutronic integral experiments(C), proceedings of the 1999 symposium on nuclear data, JAERI-Conf, 2000-05, pp. 235-241.

附录:

1. 典型输入文件 1:

*ANISN-INP ht7u 03-3-23 0:50 clindrosymmetric+s8 101 0 15\$\$ 1 0 10 55 0 8 2 1 32 44 2176 223 66 0 7 1 0 200 600 0 0 0 0 0 0 0 1 0 1 3 0 0 1 16** 0.00001 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.5 0.0 0.0 0.0 0.00001 0.0 0.0 0.0 Τ 13\$\$ 1 2 49 50 55 56 61 62 67 68 79 80 91 92 103 104 109 110 145 146 151 152 175 176 193 194 205 206 229 230 283 284 Т 17** 1.E-18 45R0.0 9R0. 55R0. 5Q55 27R0.0 8R1.1368E-5 20R0.0 55R0. 166Q55 9R0. 45R0.0 1.E-18 55R0. 40Q55 Т 3** F1.0 Τ 1** F0.01 4** 1110.0 11118.5 91119.25 11124.25 125.0 71135.0 51215.0 11277.4 91278.15 11283.15 283.9

- 5** F1.0
- 6** 0. 2R.0604939 0. 4R.0453704 0. .0453704 .0462963 .0453704 Q3 0. .0604939 .0453704 N2 Q4
- 7** -.3086068 -.2182179 M1
 - -.6172134 -.5773503 -.2182179 M2
 - -.8164966 -.7867958 -.5773503 -.2182179 M3
 - -.9759001 -.9511897 -.7867958 -.5773503 -.2182179 M4

8\$\$ 12R1 2R2 10R3 2R4 5 8R6 6R7 2R8 10R9 2R10

- 9\$\$ 43 33 35 33 43 43 43 33 35 33
- 10\$\$ 33 34 7Q2
 - 35 36 4Q2
 - 37 38 9Q2
 - 39 40 2Q2
 - ·41 42 4Q2

 - 43 44 Q2
- 11\$\$ 2R0 7 8 17 18 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32
 - 2R01234561112
 - 2R0 1 2 7 8 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 29 30
 - 2R0 9 10 11 12
 - 2R0 1 2 11 12 15 16 17 18
 - 2R012
- 12** 2R0.0 2R1.0-4 2R1.46-3 2R1.57-2 2R1.31-3 2R5.56-2 2R1.11-2
 - 2R1.25-3
 - 2R0.0 2R6.69-2 2R1.30-3 2R2.41-5 2R3.35-2

2R0.0 2R1.39-2 2R1.15-4 2R4.59-2 2R9.64-4 2R1.74-3 2R1.66-2 2R4.61-4 2R1.50-3 2R3.28-4 2R0.0 2R4.20-5 2R1.13-5 2R0.0 2R1.69-2 2R2.70-2 2R1.98-3 2R8.96-3 2R0.0 2R0.0 19\$\$ F1 21** 12R0.0 14R1.0 15R0.0 210R1.0 T

FFFF

2.典型输入文件 2:

```
Dot C+s16 full symmeTRic,fdl,8dt,43dd 03-1-8 9:53
  0
61$$02132511021767223 66 0 32 4414811011
     600 200 200 0 0 0 4R0 0 3R0 1 5R0
     308R02147R0
     0
62$$ 11R0 2000000 0 0
63** 0.0 1.0E-5 1.0E-5 15R0.0
  T
7**
 -30861-5 -21822-5 +21822-5 -61721-5 -57735-5 -21822-5
 +21822-5 +57735-5 -81650-5 -78680-5 -57735-5 -21822-5
 +21822-5 +57735-5 +78680-5 -97590-5 -95119-5 -78680-5
 -57735-5 -21822-5 +21822-5 +57735-5 +78680-5 +95119-5
 -30861-5 -21822-5 +21822-5 -61721-5 -57735-5 -21822-5
 +21822-5 +57735-5 -81650-5 -78680-5 -57735-5 -21822-5
 +21822-5 +57735-5 +78680-5 -97590-5 -95119-5 -78680-5
 -57735-5 -21822-5 +21822-5 +57735-5 +78680-5 +95119-5
3R-95119-5 5R-78680-5 7R-57735-5 9R-21822-5 3R+95119-5 5R+78680-5
7R+57735-5 9R+21822-5
```

Т 6** 0+0 2R+30247-6 + 0+0 +22685-6 2R+22685-6 +22685-6 ╋ 0+0 +22685-6 +23148-6 2R+22685-6 +23148-6 ÷ +22685-6 0+0 +30247-6 +22685-6 +22685-6 2R+30247-6 + +22685-6+22685-6 +30247-6 + 0+0 2R+30247-6 + 0+0 +22685-6 2R+22685-6 +22685-6 + 0+0 +22685-6 +23148-6 2R+22685-6 +23148-6 +22685-6 + 0+0 +30247-6 +22685-6 +22685-6 2R+30247-6 +22685-6 +22685-6 +30247-6 Т 13\$\$ 1 2 49 50 55 56 61 62 67 68 79 80 91 92 103 104 109 110 145 146 151 152 175 176 193 194 205 206 229 230 283 284 T 17** F0.0 T 17** 27R0.0 8R1.1368E-6 16R0.0 200R0.0 9Q251 Т 17** F0.0 T 17** F0.0T (共217个17**)

3** F1.0E5 T

1** F0.01

2** 910.0 10.0

4** 1110.0 11118.5 91119.25 11124.25 125.0 71135.0

51215.0 11277.4 91278.15 11283.15 401283.9 14911100.0

4I1250.0 1300.0

5** F1.0

8\$\$ 12R1 2R2 10R3 2R4 5 8R6 6R7 2R8 10R9 2R10 41R11 150R12 5R13

9Q251

9\$\$ 43 33 35 33 43 43 43 33 35 33 39 37 39

10**\$** 33 34 7Q2

35 36 4Q2

37 38 9Q2

39 40 2Q2

41 42 4Q2

43 44 Q2

11\$\$ 2R0 7 8 17 18 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32

2R0 1 2 3 4 5 6 11 12

2R0 1 2 7 8 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 29 30

2R0 9 10 11 12

2R0 1 2 11 12 15 16 17 18

2R0 1 2

12** 2R0.0 2R1.0-4 2R1.46-3 2R1.57-2 2R1.31-3 2R5.56-2 2R1.11-2

2R1.25-3

2R0.0 2R6.69-2 2R1.30-3 2R2.41-5 2R3.35-2

2R0.0 2R1.39-2 2R1.15-4 2R4.59-2 2R9.64-4 2R1.74-3 2R1.66-2

2R4.61-4 2R1.50-3 2R3.28-4

2R0.0 2R4.20-5 2R1.13-5

2R0.0 2R1.69-2 2R2.70-2 2R1.98-3 2R8.96-3

2R0.0 2R0.0

TT

3. 典型输入文件 3:

```
uw+Void + fe+0.1cm+100cm+s8
*ANSIN
15$$ 1110
              1 8
                      2
                                 2
                             0
                         1
      46 50
              51 96 8
                                 6
                             2
                         0
                                     1
                                          0
                  200 0
                             0
                                 0
                                     50
          0
              0
                        0
                                          0
       1
          0
                  1
      0
              0
                      1
                          3
16**
      0.0
                     0.00001
              0.0
                             0.0
                                     0.0
      0.0
              0.0
                     0.0
                            0.0
                                    0.5
      0.00001 0.0
                      0.0
                             0.0
  Т
13$$
      2500 2501
  Τ
17**
      10R3.1831E-3
                         1000R0.0
      1010R0.
                   •
      23Q1010
      1.E-18 9R0.
                      1000R0.0
      1010R0.
      19Q1010
  Τ
3** F1.0
  Τ
1** F0.01
4**
     9I0.0 999110.0
                     110
5**
    F1.0
```

1

6** 0. 2R.0604939 0. 4R.0453704 0. .0453704 .0462963 .0453704 Q3 0. .0604939 .0453704 N2 Q4 7** -.3086068 -.2182179 M1 -.6172134 -.5773503 -.2182179 M2 -.8164966 -.7867958 -.5773503 -.2182179 M3 -.9759001 -.9511897 -.7867958 -.5773503 -.2182179 M4 8\$\$ 10R1 1000R2 9\$\$ 3 5 10\$\$34 Q2 56 Q2 11\$\$ 2R0 1 2 2R0 1 2 12**2R0.0 2R0.0 2R0.0 2R8.4755E-2 19**\$\$** F1 21** 10R0.0 1000R1.0 T FFFF 4. 典型输入文件 4: Dot fe+s8 R-Theta,fdl,100cm 0 61\$\$ 0 2 2 1010 1 217 6 7 223 42 0 24 36 1 48 2 1 0 2 2 600 200 200 0 0 0 4R0 0 3R0 1 5R0 308R02147R0 0 62\$\$ 11R0 2000000 0 0 63** 0.0 1.0E-5 1.0E-5 15R0.0 T 7** -30861-5 -21822-5 +21822-5 -61721-5 -57735-5 -21822-5 +21822-5 +57735-5 -81650-5 -78680-5 -57735-5 -21822-5

+21822-5 +57735-5 +78680-5 -97590-5 -95119-5 -78680-5 -57735-5 -21822-5 +21822-5 +57735-5 +78680-5 +95119-5 -30861-5 -21822-5 +21822-5 -61721-5 -57735-5 -21822-5 +21822-5 +57735-5 -81650-5 -78680-5 -57735-5 -21822-5 +21822-5 +57735-5 +78680-5 -97590-5 -95119-5 -78680-5 -57735-5 -21822-5 +21822-5 +57735-5 +78680-5 +95119-5 3R-95119-5 5R-78680-5 7R-57735-5 9R-21822-5 3R+95119-5 5R+78680-5 7R+57735-5 9R+21822-5 Т 6** 0+0 2R+30247-6 + 0+0 +22685-6 2R+22685-6 +22685-6 0+0 +22685-6 +23148-6 2R+22685-6 +23148-6 +22685-6 ****** 0+0 +30247-6 +22685-6 +22685-6 2R+30247-6 +22685-6 +-+22685-6 +30247-6 + 0+0 2R+30247-6 + 0+0 +22685-6 2R+22685-6 +22685-6 + 0+0 +22685-6 +23148-6 2R+22685-6 +23148-6 +22685-6 + 0+0 +30247-6 +22685-6 +22685-6 2R+30247-6 +22685-6 +22685-6 +30247-6 Т 13\$\$ 199 200 201 202 203 204 205 206 207 208 209 210 211 212 213 214 215 216 217 218 219 220 221 222 Т 17** F0.0 T 17** F0.0 T 17** F0.0 T 17** F0.0 T

17** F0.0 T 17** F0.0 T 17** F0.0 T 17** 10R3.1831E-3 1000R0.0 Т 17** F0.0 T (共 217 个 17**) 3** F1.0E5 T 1** F0.01 2** I0.0 1.0 4** 910.0 999110.0 110.0 5** F1.0 8\$\$ 10R1 1000R2 9\$\$ 25 31 10\$\$ 25 26 27 28 29 30 Q6 31 32 33 34 35 36 4Q6 11\$\$ 6R0 1 2 3 4 5 6 6R0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 12** 6R0.0 6R0.0 Void 6R0.0 6R4.91E-3 6R7.77E-2 6R1.78E-3 6R2.54E-4 fe TT

•

.

56

-

.

.

.