

反应堆中子学计算程序系统PASC-1 (扩充版)

王耀清

(中国核数据中心, 北京)

PASC-1 是将 AMPX-II/SCALE-3 中的某些 IBM 版本群常数处理模块改成 CDC 版, 经过若干修改后, 与一维 S_N 程序 ANISN、二维 S_N 程序 DOT 3.5 及 1—3 维扩散程序 CITATION 相连接的程序系统。它是 1988 年中国核数据中心与荷兰能源研究中心 ECN 的科研人员共同合作, 在 ECN 的 CYBER-170/855 机上建立的。1989 年, PASC-1 被移植到北京原子能院 CDC-CYBER-170/825 机上, 经扩充模块和修改, 使其不仅可用于热堆计算, 而且可用于快堆计算。文章对此程序系统作简单介绍。

关键词 群常数处理模块, 程序系统。

一、引言

1. PASC-1^[1]程序系统产生的由来

在过去几年中, CSRL-IV 218 群^[2], IRI 123 群^[3]和 JEF-1 219 群^[4]截面库已经产生, 并且散发给许多用户, 其中包括荷兰的 ECN。前面两个库是用 ENDF/B-IV 微观数据制成的, 后一个是用 JEF-1 (NEA DATA BANK 成员国合搞的) 微观数据制成的。这些多群截面库都是 AMPX 主接口库格式 (AMPX Master Interface Format)。为了应用这些数据库和改进过去的反应堆物理计算程序, ECN 决定选用 AMPX-II^[5]/SCALE-3^[6] 中的某些群常数处理模块和某些计算程序, 如 ANISN, DOT 3.5 及 CITATION 等程序, 连接起来形成一个在 CDC-CYBER 计算机上可实际运行的程序系统, 以用于 ECN 的反应堆计算。由于此工作是在 ECN (它的所在地是荷兰的 Petten) 的 CDC-CYBER-170/855 计算机上进行的, 该程序系统称为 The Petten AMPX/SCALE Code System PASC-1 for Reactor Neutronics Calculations, 简称 PASC-1。

在 PASC-1 中, 有少数模块取自 SCALE-3, 而不都是 AMPX-II 模块, 这是因为 SCALE-3 中的某些模块 (SCALIAS^[6]) 是用 FORTRAN-77 语言编写的, 它比较容易安装在 CDC-CYBER 机上, 而 AMPX-II 模块是 IBM 版本的, 用的是 IBM-FORTRAN H 语言。因此, 对 AMPX-II 模块, 我们首先将它改成 CDC 版本并翻译成 FORTRAN-77。为了测试这些模块及把它们与 ANISN, DOT 和 CITATION 等程序连接起来, 我们对 PASC-1 的每个模块按不同的模块执行系列进行了大量例题计算。在测试和连接计算中, 发现某些模块如 MALOCS, REVERT, CONVERT 以及 SUBLIB (FORTRAN-77 子程序库) 中的某些子程序都有错误。经过各种修改, 特别是对错误较多的模块, 如 REVERT 模块作了大量修改 (后易名为 REVERT-I) 之后, PASC-1 系统才连接成功, 计算的例题结果才正

确。关于这些错误以及修改说明和例题计算结果，已在文献[1]中作了详细介绍。

2. 对 PASC-1 程序系统的扩充

在 ECN 建立的 PASC-1 程序系统可用于热堆计算，而不适用于快堆计算，因为它只包含热堆群常数处理模块，即只能处理象 CSRL-IV, IRI, SCALE-45 及 JEF-1 这样的群常数库。由于这些群常数库都是把共振参数从 AMPX 主库中一直保留下来，直到 NIT-AWL-S 模块用罗尔德汉(Nordheim)方法计算共振积分产生共振自屏截面为止，这种群常数处理方法更适用于热堆计算；而快堆计算，较普遍地采用邦达连柯 (Bondarenko) 群常数库。为适应快堆计算需要，必须增加对含邦达连柯因子的 AMPX 主接口库格式的群常数库(如 VITAMIN-C)进行处理的模块。因此，1989 年，PASC-1 被带回移植到原子能院 CYBER-170/825 机之后，根据快堆需要，把 BONAMI-S 模块作了相应修改扩充到 PASC-1 系统中去。此外，在 ECN 期间，虽然对原 REVERT 模块作了大量修改，产生了 REVERT-I，但 REVERT-I 只能对不含邦达连柯因子的 AMPX 主库进行格式转换，对含该因子的则不能作格式转换。为用于快堆计算，对 REVERT-I 再次进行了修改，改成现在的 REVERT-II。REVERT-II 对含与不含邦达连柯因子的 AMPX 主库都能进行格式转换。这

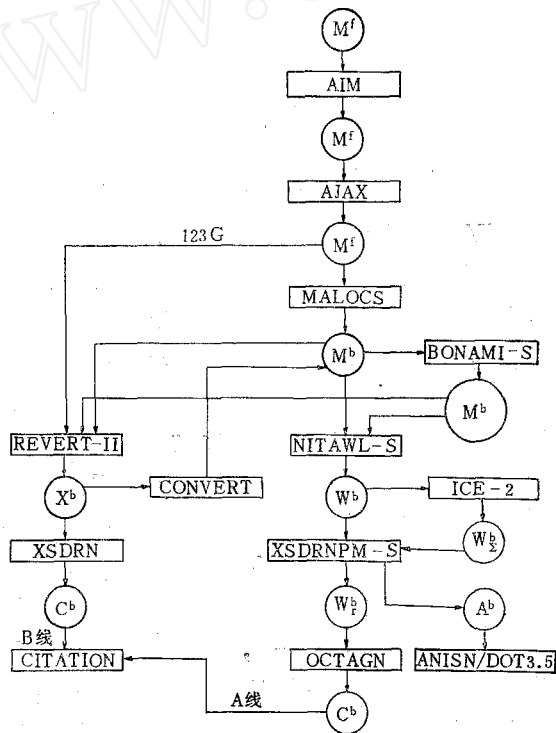


图 1 新的 PASC-1 程序系统流程图

Fig. 1 Flowchart for the new PASC-1 system

- f——精细群；
- b——宽群；
- M——AMPX 主接口库；
- W——AMPX 工作库；
- T——AMPX 权重库；
- Σ——宏观截面。
- A——ANISN 格式库；
- X——XSDRN 格式库；
- C——CITATION 格式库
- S——SCALE-3 模块；
- II——REVERT 改进板；

样,经修改和扩充后新的 PASC-1 程序系统不仅能用于热堆计算,而且也能用于快堆计算。新的 PASC-1 程序系统的流程图示于图 1,它包括 AIM, AJAX, MALOCS, NITAWL-S, REVERT-II, ICE-2, CONVERT, JUAN, OCTAGN, XSDRNPM-S, XSDRN, ANISN, DOT 3.5 和 CITATION。从 AMPX 精细群库出发,直到 CITATION, ANISN 和 DOT 3.5 计算,每个模块计算所用的截面数据均可通过二进制文件传输。各种 AMPX 主接口库(包含或不包含邦达连柯因子的 AMPX 主接口库格式),如 VITAMIN-C, JEF-1, CSRL-IV, IRI, SCALE-45 以及老的 XSDRN 库(COBB)等,均可用于新的 PASC-1 系统进行计算。

二、PASC-1 的模块和程序功能简介

现将修改和扩充后的 PASC-1 系统中所用的模块和程序的主要功能简单介绍如下:

AIM——AMPX-II 模块:实行 BCD 和二进制格式互换,即将 BCD 格式的 AMPX 主接口库转换成二进制格式,反之亦然。

AJAX——AMPX-II 模块:挑选核素的模块,即从 AMPX 主接口库选出需要的核素,形成一个新的 AMPX 主接口库。它也可用来将两个或多个 AMPX 主接口库合成一个 AMPX 主接口库,或者重新整理库的核次序。

MALOCS——AMPX-II 模块:它是并群模块,可将 AMPX 主接口库格式的精群体库合并为宽群库。权重函数可采用精群体库自带的 MT-1099 1-D 数组(做精群体截面时用的权重函数),也可由用户自己输入。

BONAMI-S——SCALE-3 模块:根据问题的几何结构、成分和温度,对具有邦达连柯因子的 AMPX 主接口库,作内插迭代处理,计算共振自屏,产生与问题有关的有效截面。

NITAWL-S——SCALE-3 模块:对保留共振参数的 AMPX 主库,将根据问题的几何结构、成分和温度,用罗尔德汉(Nordheim)方法计算共振自屏,产生与问题有关的有效截面,同时它将 AMPX 主接口库格式转换为 AMPX 工作库或灵敏度分析数据库格式输出。对含邦达连柯因子的 AMPX 主库,经 BONAMI-S 处理后,到 NITAWL-S 中只是作格式转换。

REVERT-II——REVERT(AMPX-II)的再次改进版:将 AMPX 主接口库转换成老的 XSDRN 格式库(对含与不含邦达连柯因子的 AMPX 主库都能转换)。

CONVERT——AMPX-II 模块:将老的 XSDRN 库格式转换为 AMPX 主接口库格式。

ICE-2——AMPX-II 模块:从 AMPX 工作库产生混合截面库,即接受 AMPX 工作库截面和输入的核密度计算混合宏观截面,以 AMPX 工作库、ANISN 库或者 Monte Carlo 程序所要求的格式输出。由它计算混合宏观截面后,可以减少迁移计算程序对内存的要求。

OCTAGN——AMPX-II 模块:从 AMPX 权重工作库产生 CITATION 库。但 $(n, 2n)$ 截面包括在散射矩阵中,因此来自 OCTAGN 的数据库可能不太适合于 CITATION 的燃耗计算(如果 $(n, 2n)$ 反应在燃耗计算中起重要作用的话)。但 K_{eff} 计算、微扰计算等能给出正确结果。

JUAN——将BCD格式的XSDRN库转换成二进制格式的XSDRN库，反之亦然。

XSDRNPM-S——SCALE-3模块：具有一维 S_N 计算能力。给定一个工作库，XSDRN-PM-S实行具有各向异性散射的一维离散座标(S_N)计算。此模块能够用来进行空间谱权重，将精细群截面并为宽群截面，可给出栅元平均或者分区平均截面，并可以AMPX权重库，CCCC/S ISOTXS 或者 ANISN 格式输出。其中 AMPX 权重库经 OCTAGN 模块处理后，可产生 CITATION 格式库。

XSDRN^[7]——一维离散座标谱平均程序，它是 XSDRNPM-S 老的版本。给定一个老的 XSDRN 格式的截面库，XSDRN 实行具有各向异性散射的一维离散座标(S_N)计算。它能用来对截面实行空间谱平均，将精细群截面并为宽群截面，给出栅元平均或者分区平均截面，并可以 XSDRN 工作库、CITATION 格式库或者 ANISN 格式库输出。XSDRN 对(n,2n)反应截面的处理，完全符合 CITATION 的要求。

ANISN^[8]——具有各向异性散射的一维离散座标迁移计算程序。

DOT 3.5^[9]——具有各向异性散射的二维离散座标迁移计算程序。

CITATION^[10]——核反应堆中心分析程序(1—3 维扩散程序)。

关于上述模块和程序的详细说明，请阅参考文献[5—10]。

三、例题计算

在文献[1]中，已用 CSRL-IV, JEF-1, IRI, SCALE-45 和 COBB 等多群截面库，按 PASC-1 系统的各种模块系列的执行路径，作了大量例题计算，结果正确。由于篇幅所限，此处不予重复。近年来，中国核数据中心与荷兰 ECN 合作，在 ECN 用 PASC-1 系统和 JEF-1 219 群及 CSRL-IV 218 群截面库，对热堆问题作了大量基准检验计算，均取得了满意的结果，充分证明了 PASC-1 系统及有关数据库的可靠性。本文仅就扩充后的 PASC-1 系统，用 VITAMIN-C 库(包含邦达连柯因子的 AMPX 主接口库)，对快堆基准问题所作的计算描述如下：

1. 例题 1

所计算的快堆基准装置是 GODIVA，它是一个裸的球状浓缩铀系统，活性区半径为 8.741 cm，球均匀模型系统，成分如下：

同 位 素	核密度/ $\times 10^{24}$ 原子 \cdot cm $^{-3}$
^{234}U	0.000492
^{235}U	0.04500
^{238}U	0.002498

本征值测量值为 $K_{\text{eff}} = 1.000 \pm 0.003$ 。

计算从 VITAMIN-C^[11] 171 群库出发，直到 CITATION 计算，如图 1 描述的沿 XSDRNPM-S 和 XSDRN 两条路线(以下分别简称为 A 线和 B 线)进行：

(1) A 线的模块和程序执行步骤: AIM(BCD 格式库→二进制格式库)→AJAX(挑核)→MALOCS(併群, 171→52群)→BONAMI-S(邦达连柯因子内插迭代, 产生有效截面)→NITAWL-S(AMPX 主接口格式库→AMPX 工作库)→XSDRNPM-S(一维 S_N 计算, 空间谱平均, 52→4 群)→(ANISN格式库)→ANISN(一维 S_N 计算)

(AMPX 权重库)→OCTAGN(产生 CITATION 库)→CITATION(一维扩散计算)。计算结果列于表 1。

表 1 用 PASC-1 A 线模块系列计算 GODIVA K_{eff} 结果

Table 1 K_{eff} from the calculations in executing A line modules of PASC-1 system for GODIVA

计算程序	XSDRNPM-S (S_8P_1)	CITATION (一维扩散)	ANISN (S_8P_1)
能群数	52	4	4
K_{eff}	1.00325	0.97246	1.00601

(2) B 线的模块和程序执行步骤: AIM→AJAX→MALOCS→BONAMI-S(以上模块执行与 A 线相同, 在执行 A 线模块后, 可直接用先前结果)→REVERT-II(AMPX 主接口库格式→XSDRN 格式)→XSDRN(一维 S_N 计算, 空间谱平均, 52→4 群, CITATION 格式输出)→CITATION(一维扩散计算)。计算结果列于表 2。

表 2 用 PASC-1 B 线模块和程序计算 GODIVA K_{eff} 结果

Table 2 K_{eff} from the calculations in executing B line modules of PASC-1 system for GODIVA

计算程序	XSDRN (S_8P_1)	CITATION (一维扩散)
能群数	52	4
K_{eff}	1.00348	0.97472

由上述结果可看出, 用 A 线和 B 线模块计算的结果基本相同, S_N 程序算得的 K_{eff} 值与实验值符合较好, XSDRNPM-S 和 XSDRN 52 群计算的 K_{eff} 误差都小于 0.4%。ANISN 4 群计算的 K_{eff} 误差约为 0.6%, 其误差增大的原因是因为群数太少, 其次是因为 4 群结构是任意选取的, 未对群边界选取作仔细推敲。CITATION 计算的 K_{eff} 值明显低于 S_N 程序计算值, 这是因为 GODIVA 是一个半径只有 8.741 cm 的小球装置, 对这样小的装置, 用扩散方法求解显然误差较大。以上结果说明 PASC-1 系统及 VITAMIN-C 库用于快堆计算是可靠的。

2. 例题 2

计算的是快堆基准装置 ZPR-3-11, 此装置给出两种模型:

(A) 双区球模型装置 内球为活性区, 半径为 31.61 cm, 外球为反射层, 半径为 61.61

cm, 即反射层厚度为 30 cm。

(B) 二维双区圆柱模型 内圆柱为活性区, 径向半径为 29.64 cm, 轴向半高度为 25.5 cm, 外圆柱为反射层, 径向半径为 64.2 cm, 轴向半高度为 56 cm, 即径向反射层厚度为 34.56cm, 轴向反射层厚度为 30.5 cm。

装置的成分和核密度列于表 3, K_{eff} 测量值为 1.0000 ± 0.0025 。

表 3 ZPR-3-11 基准装置的原子密度
Table 3 Atom Densities in ZPR-3-11

材 料	密度/ $\times 10^{24}$ 原子 \cdot cm $^{-3}$	
	活 性 区	反 射 层
^{235}U	0.004567	0.000089
^{238}U	0.034392*	0.040925
^{234}U	0.000046	—
Fe	0.005651	0.004925
Cr	0.001486	0.001196
Ni	0.009718	0.000536
Mn	0.00208	0.000111

* 其中包括密度为 0.000019 的 ^{236}U 。

计算从 VITAMIN-C 171 群库出发, 执行的模块系列和步骤与例题 1 A 线相同, 对模型 B 的二维圆柱计算所用的双区 4 群截面, 近似用模型 A 双区球模型计算得到的双区 4 群截面, 最后算得的 K_{eff} 值列于表 4。

表 4 用 PASC-1A 线模块系列计算 ZPR-3-11 装置模型 A 和 B 的 K_{eff} 结果
Table 4 K_{eff} from the calculations in executing A line modules of PASC-1 for ZPR-3-11 model A and B

计算程序	XSDRNPM-S (一维, S_0P_1) 模型 A	CITATION (一维扩散) 模型 A	ANISN (一维, S_0P_1) 模型 A	CITATION (二维扩散) (r, z) 模型 B	DOT 3.5 (二维, S_0P_1) (r, z) 模型 B
能群数	52	4	4	4	4
K_{eff}	1.00448	1.011	1.01277	1.00978	1.0155

上列结果与例 1 结果基本相同, XSDRNPM-S 52 群计算结果相当好, K_{eff} 计算值与实验值相比, 误差小于 0.5 %。其余几个程序的 4 群计算结果大致相同, K_{eff} 误差略大于 1 %, 其原因主要是群数太少, 其次是因为 4 群群结构是任意选取的, 未对群边界选取作仔细斟酌。同时, 上列程序本身的某些输入参数有各种选择, 本计算只是选定其中的某一种, 未对其他选择作比较, 因此 4 群计算结果还有很大改进的余地。

综上所述, PASC-1 程序系统和 VITAMIN-C 库用于快堆设计是可靠的。1989—1990 年, 我们用该程序系统处理了 VITAMIN-C 库, 将其处理成 39 个核素的 45 群和 25 群中子截面及 37 个核素的中子- γ 耦合群截面, 连同 PASC-1 有关模块和程序一起提供快堆设计使用。

参 考 文 献

- [1] Wang Yaoqing et al., ECN-89-005 and NEWS from the NEA DATA BANK, No. 9, (1989).
- [2] RSIC, DLC-43/ORNL (1984).
- [3] de Leeges, P., A 123 Group Neutron Cross Section, DELFT University (1987).
- [4] Cuccoli, E. et al., JEF/DLC-181 (1987).
- [5] Greene, N. M. et al., RSIC-PSR-63/AMPX-II (1984).
- [6] Landers, N. F. et al., RSIC-CCC-475/SCALIAS-77 (1986).
- [7] Greene, N. M. et al., ORNL-TM-2496 (1969).
- [8] Engle, W. W., K-1693 (1967).
- [9] Rhoades, W. A. et al., RSIC-CCC-276/ORNL (1977).
- [10] Fowler, T. B. et al., ORNL-TM-2496 (1969).
- [11] Roussin, R. W. et al., RSIC-DLC-41/VITAMIN-C (1978).

(编辑部收到日期: 1991年3月30日)

A CODE SYSTEM PASC-1 FOR REACTOR NEUTRONICS CALCULATIONS

(Extended Version)

WANG YAOQING

(Chinese Nuclear Data Center, P. O. Box 275, Beijing)

ABSTRACT

PASC-1 is a reactor neutronics calculation programme system in which AMPX-II/SCALE-3 modules, ANISN, DOT3.5 and CITATION codes are linked together for calculations on a CDC-CYBER computer. The IBM version source codes of modules of AMPX-II are translated into CDC version in FORTRAN-77 and some changes are made for several modules. The PASC-1 system was first set up on CDC-CYBER-855 computer by the cooperation of CNDC and ECN researchers at Petten of The Netherlands in 1988, so called as "The Petten AMPX/SCALE Code System PASC-1".

In 1989, the PASC-1 system was implemented and further extended on CDC-CYBER-825 computer at IAE. The new PASC-1 system can be used not only for thermal neutron reactors, but also for fast neutron reactors. It is briefly introduced in the paper.

Key words Multigroup constant processing module, Code system.