

GIỚI THIỆU BỘ CHƯƠNG TRÌNH SRAC SỬ DỤNG TRONG TÍNH TOÁN VẬT LÝ LÒ PHẢN ỨNG

NỘI DUNG

I. Các đặc điểm chính của bộ chương trình SRAC.....	2
II. Tổ chức hệ thống thư viện số liệu hạt nhân.	5
III. Cấu trúc nhóm năng lượng trong các thư viện số liệu hạt nhân.	6
IV. Các khái niệm cơ bản sử dụng trong bộ chương trình SRAC	7
1. Các modun tính toán.....	7
2. Các vùng không gian	7
V. Các thành phần điều khiển chương trình	10
VI. Các phương pháp xử lý cộng hưởng.....	11

I. Các đặc điểm chính của bộ chương trình SRAC.

Bộ chương trình SRAC được thiết kế cho các tính toán vật lý lò phản ứng neutron nhiệt. Hệ thống chương trình bao gồm các công đoạn từ chuẩn bị các hằng số nhóm vi mô và vĩ mô hiệu dụng, thực hiện các tính toán ô mạng và tính toán toàn lò, bao gồm cả các tính toán đốt cháy nhiên liệu. Các đặc điểm cơ bản của hệ thống bao gồm:

- 1) Tập hợp các thư viện số liệu hạt nhân JENDL, ENDF/B và JEF với hơn 300 đồng vị.
- 2) Module sử dụng phương pháp xác suất và chạm PIJ áp dụng cho 16 mô hình hình học ô mạng khác nhau, đáp ứng hầu hết các tính toán ô mạng cho các loại lò hiện có.
- 3) Người sử dụng có thể xây dựng quy trình tính toán bằng việc lựa chọn và kết hợp các chức năng có sẵn trong bộ chương trình. Trao đổi số liệu tiết diện giữa các module được thực hiện tự động trong chương trình.
- 4) Trong vùng năng lượng cộng hưởng, việc tính toán hấp thụ cộng hưởng được thực hiện với ba lựa chọn: Các tiết diện hiệu dụng thu được bằng phương pháp lập bảng thông thường dựa trên gần đúng cộng hưởng hẹp (NR) có thể thay bằng phương pháp dựa trên gần đúng cộng hưởng trung gian (IR). Ngoài ra, chương trình còn bao hàm Module PEACO giải bài toán ô mạng nhiều vùng bằng phương pháp xác suất và chạm sử dụng cấu trúc nhóm năng lượng gần như liên tục cho vùng năng lượng cộng hưởng.
- 5) Việc nội suy các thừa số chắn cộng hưởng và ma trận tán xạ nhiệt cho phép chọn nhiệt độ bất kỳ cho các vật liệu.
- 6) Thừa số hiệu chỉnh Dancoff sử dụng trong các phép nội suy các thừa số tự chắn cộng hưởng được tính toán một cách tự động.
- 7) Hệ thống chương trình SRAC có thể chạy trên hầu hết các máy tính với hệ

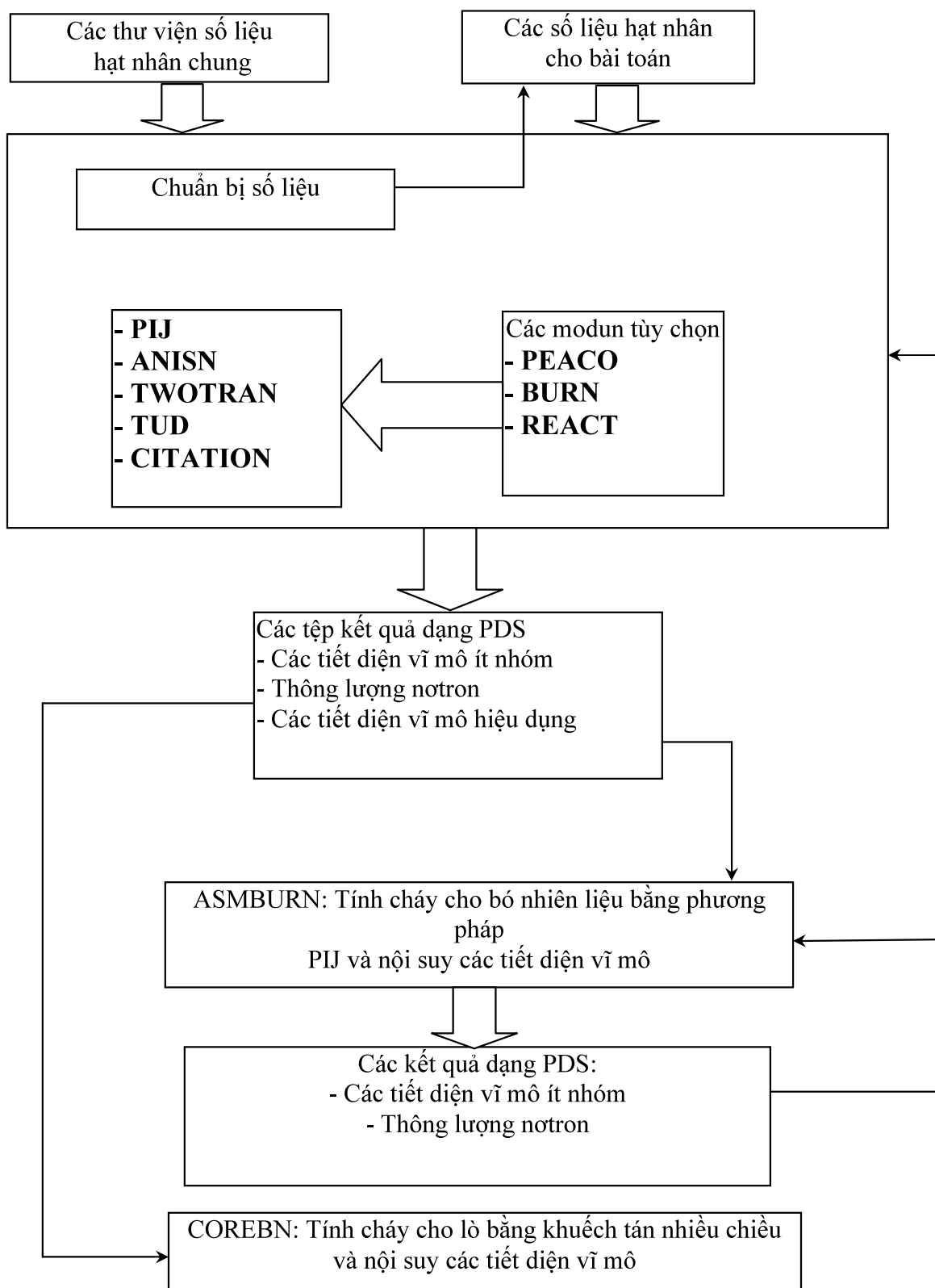
điều hành UNIX hoặc LINUX, FreeBSD.

- 8) Các dữ liệu quan trọng được lưu trữ dưới dạng số liệu nhị phân trong các tệp dữ liệu riêng phần (PDS) nhằm giúp quá trình đọc ghi dữ liệu và trao đổi dữ liệu giữa các module tính toán được nhanh hơn, tuy nhiên, để có thể xem xét các kết quả trung gian cần phải có kinh nghiệm và những nghiên cứu cần thiết để thực hiện công việc này.
- 9) Hệ thống chương trình khá đồ sộ, bao gồm nhiều thông số đòi hỏi người sử dụng phải được chuẩn bị kỹ lưỡng cả về kiến thức vật lý lò phản ứng cũng như kỹ thuật sử dụng phần mềm máy tính để có thể áp dụng có hiệu quả chương trình trong các bài toán của mình.

Cấu trúc hệ thống chương trình SRAC bao gồm các phần chính như sau:

- + Từ thư viện chung của chương trình người sử dụng chuẩn bị thư viện cho bài toán cụ thể. Ví dụ: chọn thư viện JENDL-3.2 hay EDF/B-IV hay kết hợp cả hai để tạo ra thư viện người sử dụng.
- + Từ các số liệu về kích thước hình học, thành phần vật liệu của bài toán, người sử dụng lập input cho bài toán cụ thể.
- + Các module tính toán: tính ô mạng bằng phương pháp xác suất va chạm (PIJ), tính toàn vùng hoạt bằng phương pháp tọa độ rời rạc một và hai chiều (ANISN, TWOTRAN) và bằng phương pháp giải phương trình khuếch tán một và nhiều chiều (TUD, CITATION).
- + Các module tính toán tùy chọn: Xử lý cộng hưởng siêu mịn (PEACO), tính tốc độ phản ứng (REACT) và tính cháy cho ô mạng nhiên liệu (BURN)
- + Các module tính cháy cho bó thanh nhiên liệu (AMSBURN) và toàn vùng hoạt (COREBURN)

Hình 1.1 sau đây biểu diễn sơ đồ khối chung của hệ thống SRAC.



II. Tổ chức hệ thống thư viện số liệu hạt nhân.

Hệ thống thư viện số liệu hạt nhân được sử dụng trong SRAC bao gồm các thư viện số liệu hạt nhân của Mỹ EDF/B-1V, -V, -VI, Nhật Bản JENDL-3.1, 3.2, 3.3 và châu Âu JEF-2.2. Các thư viện này có tới hơn 300 đồng vị cần trong tính toán vật lý neutron chia làm 107 nhóm trong dải năng lượng 10^{-5} eV đến 10 MeV.

Tùy thuộc vào người sử dụng lựa chọn thư viện số liệu nào trong các thư viện ban đầu nói trên hoặc kết hợp giữa chúng, sau đó các dữ liệu từ thư viện số liệu hạt nhân này lại được SRAC tổ chức lại dưới dạng các thư viện chung.

Các thư viện chung bao gồm:

- Thư viện các nhóm nhanh PFAST (Public Fast Library): cung cấp các số liệu tiết diện các nhóm neutron năng lượng nhanh.
- Thư viện các nhóm nhiệt PTHERMAL (Public Thermal Library): thiết lập các tiết diện nhóm năng lượng nhiệt.
- Thư viện các nhóm cộng hưởng PMCROSS (Public MCROSS Library): chứa các số liệu tiết diện điểm trong vùng năng lượng cộng hưởng.

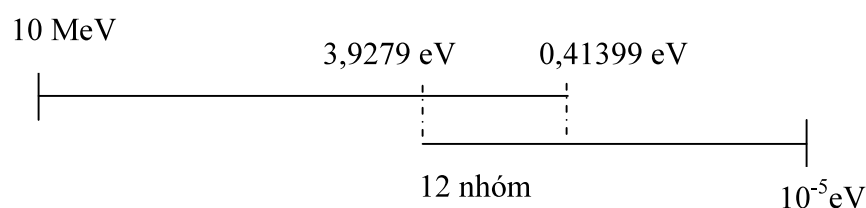
Trước khi thực hiện tính toán, chương trình thực hiện đọc các số liệu hạt nhân theo yêu cầu của bài toán từ các thư viện chung để thiết lập thư viện người sử dụng nhằm tối ưu việc sử dụng bộ nhớ máy tính và giảm thời gian đọc số liệu từ thư viện chung trong một lượng lớn các đồng vị. Các thư viện người sử dụng cũng được tổ chức tương tự như các thư viện chung:

- UFAST: Thư viện các nhóm nhanh.
- UTHERMAL: Thư viện các nhóm nhiệt.
- UMCROSS: Thư viện các nhóm cộng hưởng.

Các thư viện số liệu người sử dụng chỉ bao gồm các số liệu tiết diện của các đồng vị thành phần cần cho bài toán của người sử dụng theo cấu trúc nhóm năng lượng cho tính toán ít nhóm mà người sử dụng xác lập, trong đó các hằng số nhóm được tự động co nhóm theo phổ tiệm cận điển hình của các lò phản ứng neutron nhiệt có sẵn trong các thư viện chung.

III. Cấu trúc nhóm năng lượng trong các thư viện số liệu hạt nhân.

Cấu trúc nhóm năng lượng của các thư viện chung bao gồm 107 nhóm, trong đó có 74 nhóm nhanh và 48 nhóm nhiệt, với 12 nhóm chồng lên nhau. Thư viện các nhóm nhanh và nhiệt bao gồm các số liệu tiết diện trong các vùng năng lượng $0,41399 \text{ eV} < E < 10 \text{ MeV}$ (nhanh) và $10^{-5} \text{ eV} < E < 3,9279 \text{ eV}$ (nhiệt). Người sử dụng có thể chọn giới hạn năng lượng nhiệt trong số các biên của các nhóm năng lượng nằm trong các vùng trùng nhau, tức là vùng năng lượng $0,41399 \text{ eV} < E < 3,9279 \text{ eV}$.



Hình 1.2: Sơ đồ cấu trúc nhóm năng lượng

Việc lựa chọn giới hạn năng lượng nhiệt phụ thuộc vào nhiều yếu tố khác nhau: Giới hạn năng lượng nhiệt có thể cao hơn trong trường hợp có tán xạ ngược của các neutron nhiệt của các vật liệu ở nhiệt độ cao. Tuy nhiên, việc chọn giới hạn năng lượng nhiệt sẽ hạ thấp giới hạn năng lượng trong xử lý cộng hưởng của modun PEACO, chẳng hạn để có thể xử lý cộng hưởng đầu tiên của Pu-240 ở năng lượng 1,06 eV, cần chọn giới hạn năng lượng nhiệt dưới 1 eV. Với các lò nước nhẹ trong các điều kiện nhiệt độ cao, do tiết diện tán xạ của Hydro ở trạng thái nguyên tử tự do trong thư viện P THERMAL khác với tiết diện tán xạ của Hydro ở dạng nguyên tử tự do trong thư viện P FAST ở năng lượng 1 eV nên để đảm bảo tính liên

tục của tiết diện tán xạ của các hạt nhân phức hợp, giới hạn năng lượng nhiệt vào khoảng 2 eV thường được áp dụng.

IV. Các khái niệm cơ bản sử dụng trong bộ chương trình SRAC

1. Các modul tính toán

Các modul trong hệ thống SRAC có thể thực hiện tính toán theo hai kiểu bài toán:

a, Bài toán nguồn cố định:

Trong bài toán dạng nguồn cố định, việc tính toán thông lượng được tiến hành bằng cách tách riêng các nhóm nhanh và các nhóm nhiệt. Thư viện số liệu hạt nhân cho các nhóm nhanh PFAST và UFAST thiết lập phổ neutron phân hạch như nguồn mặc định tạo bởi phân hạch trên neutron nhiệt của U-235. Khi đó, nguồn có định với phổ này phân bố đồng đều trong vùng nhiên liệu, sau đó phân bố không gian và năng lượng của thông lượng trong các nhóm nhanh được tính toán. Sau khi kết thúc quá trình tính toán cho các nhóm nhanh, nguồn làm chậm cho vùng năng lượng nhiệt được tính, tiếp theo thông lượng thu được bằng phương pháp lặp. Trong bài toán dạng này, việc phân vùng không gian của mô hình cho phân giải các vùng năng lượng nhiệt và nhanh có thể khác nhau khi sử dụng modul PIJ.

b, Bài toán trị riêng:

Trong bài toán này, quá trình tính toán thông lượng được tiến hành trên toàn bộ dải năng lượng. Việc phân vùng không gian (vùng R) là như nhau trên toàn bộ các nhóm năng lượng và thông lượng cũng như nguồn phân hạch thu được bằng phương pháp lặp. Do đó, phân bố nguồn phân hạch trong bài toán này chính xác hơn.

2. Các vùng không gian

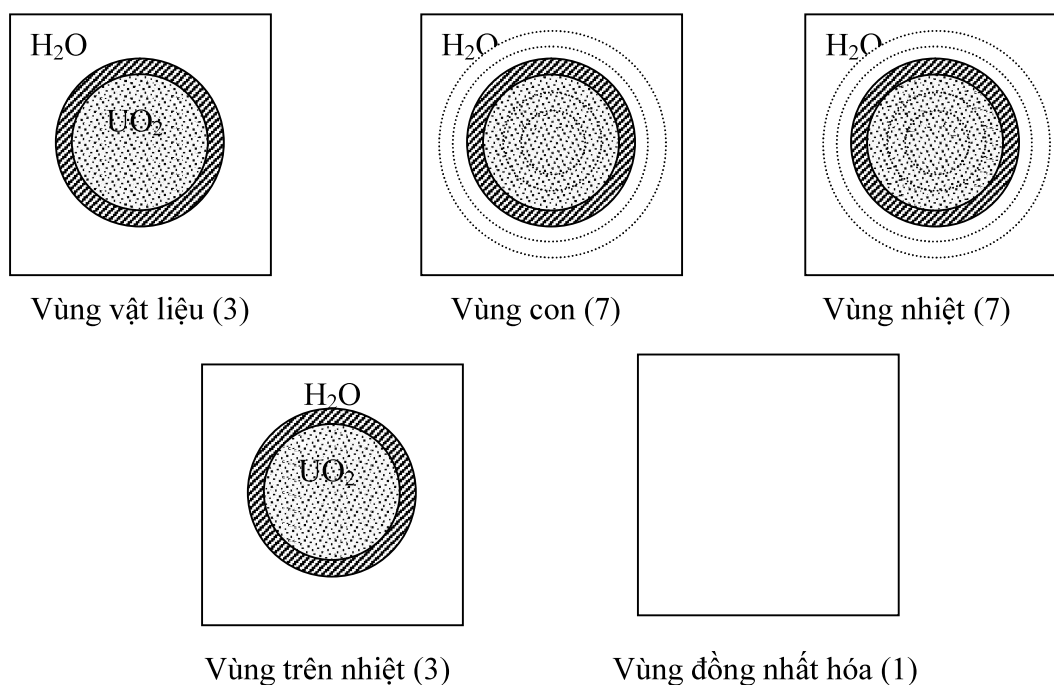
SRAC sử dụng hệ thống khái niệm chia vùng không gian của hình học bài toán nhằm nâng cao độ chính xác của bài toán và tiết kiệm việc sử dụng bộ nhớ máy tính, bao gồm:

- a) SR (vùng con S): Khái niệm vùng con chỉ được sử dụng trong modul PIJ, nó đơn giản là một hình học phân chia bởi các đường thẳng hoặc các vòng tròn được sử dụng để định vị các vùng con cho phương pháp tính toán xác suất va chạm. Việc đánh số vùng con là cố định tùy thuộc mô hình hình học của bài toán. Các vùng con được xác định không ảnh hưởng trực tiếp tới độ chính xác của các tính toán thông lượng neutron. Để thuận tiện trong quá trình mô tả, ta gọi vùng con này là vùng S.
- b) TR (vùng nhiệt T): Trong bài toán nguồn cố định khoảng năng lượng nhiệt và năng lượng nhanh được tính toán tách biệt nhau. Các thông lượng nhiệt có Gradient dốc hơn so với các thông lượng neutron nhanh. Do đó các tính toán thông lượng trong vùng năng lượng nhiệt đòi hỏi việc phân vùng không gian mịn hơn so với vùng năng lượng nhanh. Một đơn vị phân vùng không gian trong tính toán thông lượng nhiệt được gọi là vùng nhiệt, để tránh nhầm lẫn với vùng năng lượng trong quá trình sử dụng chương trình ta gọi ngắn gọn khái niệm này là vùng T. Vùng T là kết hợp của một hoặc nhiều vùng con S với việc tính đến sự đối xứng hình học. Một số vùng S lân cận với độ dày quang học mỏng có thể tạo nên một vùng T. Trong các tính toán S_N hay khuếch tán, một bước lưới không gian nhỏ nhất được xử lý như một vùng T.
- c) RR (vùng trên nhiệt R): Khi phân bố thông lượng neutron trong vùng năng lượng phân hạch và cộng hưởng khá phẳng so với vùng năng lượng nhiệt, không nhất thiết phải phân vùng không gian hình học thành nhiều bước lưới như trong tính toán với vùng năng lượng nhiệt. Trong bài toán nguồn cố định, một đơn vị phân vùng không gian được sử dụng trong tính toán thông lượng nhanh và cộng hưởng được gọi là vùng R. Người sử dụng xác lập vùng R bằng tập hợp một số vùng T bằng cách đánh giá mức độ “phẳng” của phân bố thông lượng. Trong bài toán trị riêng, vùng R là vùng không gian trong toàn bộ vùng năng lượng. Vật liệu được xác định cho mỗi vùng R.
- d) XR (vùng đồng nhất hóa X): Một tính toán vùng hoạt yêu cầu các tiết diện đồng nhất trong một lưới ô mạng. Do đó, một hay nhiều tính toán ô mạng trên các ô mạng không đồng nhất là cần thiết trước khi tính toán toàn lò. Thông thường

các tiết diện đồng nhất tìm được từ khối lượng thông lượng thể tích của các tiết diện của các vật liệu hợp thành. Một vùng X là một vùng không gian hợp nhất. Vùng X nhận được bằng cách tập hợp một vài vùng R. Các tiết diện đồng nhất và các thông lượng được lưu trữ trong tệp PDS. Trong các trường hợp thông thường, một vùng X phù hợp với toàn bộ đơn vị ô mạng mà tại đó các tiết diện đồng nhất được cung cấp cho tính toán toàn lò.

- e) MR (vùng vật liệu M): Vùng này được xác lập nhằm mục đích định vị các vật liệu có trong mô hình. Vùng M được tạo bởi một hoặc nhiều vùng R có cùng thành phần vật liệu. Trong các tính toán tiết diện nền σ_0 dựa trên các gần đúng cộng hưởng NR và IR, các xác suất va chạm được tính cho vùng M. Các tiết diện vi mô hiệu dụng được truyền cho module tính cháy bởi vùng M.

Theo các định nghĩa như trên, bài toán ô mạng cho thanh nhiên liệu lò LWR có cấu trúc như sau:



Hình 1.3: Ô mạng nhiên liệu lò nước nhẹ

Các phân vùng được xác lập như sau:

- Các vùng vật liệu (MR): 3 vùng, tương ứng với 3 vật liệu có mặt trong mô

hình. Vùng 1: nhiên liệu; vùng 2: vỏ bọc nhiên liệu và vùng 3 là nước làm chậm.

- Các vùng con (SR): 7 vùng, tương ứng 7 vùng như được phân chia trên hình. Các đường đậm liên kết nét là các thành phần cầu thành ô mạng như nhiên liệu, vỏ bọc và nước.
- Các vùng nhiệt (TR): 7 vùng, vùng T là kết hợp của một hoặc nhiều vùng con S với việc tính đến sự đối xứng hình học, trong trường hợp này số các vùng T được lấy bằng số các vùng S.
- Các vùng trên nhiệt (RR): 3 vùng, tương ứng với 3 vùng cấu hình chính của ô mạng: nhiên liệu, vỏ bọc và nước. Như vậy với các tính toán cho vùng năng lượng trên nhiệt ta chỉ cần 3 vùng.
- Các vùng tính toán đồng nhất hóa (XR): 1 vùng. Các tiết diện thu được trong tính toán sẽ được đồng nhất hóa và sử dụng cho các bài toán tiếp theo.

Với các cấu hình phức tạp hơn, việc phân chia thành các vùng sẽ phức tạp hơn nhiều.

V. Các thành phần điều khiển chương trình

Dữ liệu điều khiển tính toán trong hệ thống SRAC bao gồm các phần cơ bản như sau:

- 1) Các tham số điều khiển chung và xác lập cấu trúc nhóm năng lượng.(Phần bắt buộc cho mọi bài toán).
- 2) Thiết lập thư viện người sử dụng.(Phần bắt buộc cho mọi bài toán).
- 3) PIJ: tính toán xác suất va chạm.
- 4) ANISN: Giải phương trình vận chuyển neutron bằng phương pháp tọa độ rời rạc S_N một chiều.
- 5) TWOTRAN: Giải phương trình vận chuyển neutron bằng phương pháp tọa độ rời rạc S_N hai chiều.

- 6) TUD: Giải phương trình khuếch tán một chiều.
- 7) CITATION: Giải phương trình khuếch tán nhiều chiều.
- 8) Xác định các thành phần vật liệu.(Phần bắt buộc cho mọi bài toán).
- 9) Tính chấy đối với bài toán ô mạng.
- 10) Tính toán tốc độ phản ứng (tùy chọn).
- 11) PEACO: Xử lý cộng hưởng siêu mịn (tùy chọn).

Ngoài các thành phần bắt buộc với mọi bài toán, các lựa chọn tính toán khác do người sử dụng xác định thông qua các phần số liệu nhập vào riêng biệt hoặc các lựa chọn trong các tham số điều khiển chung của chương trình. Người tính toán có thể sử dụng một hay nhiều module trong cùng một bài toán.

VI. Các phương pháp xử lý cộng hưởng

SRAC thực hiện tính hệ số nhân neutron vô hạn k_{inf} theo ba phương pháp: Xấp xỉ cộng hưởng hẹp, xấp xỉ cộng hưởng trung bình và PEACO.

- Xấp xỉ cộng hưởng hẹp: Các tiết diện cộng hưởng hiệu dụng được tìm từ một phép nội suy Spline bậc 3, từ một bảng các giá trị đã biết, từ đó tìm được xác suất tránh hấp thụ cộng hưởng trong công thức 4 thừa số và tính được k_{inf} . Phương pháp này thường dùng cho các vật liệu có nhiều hỗn hợp cộng hưởng và là mặc định cho tính toán các tiết diện cộng hưởng.
- Xấp xỉ cộng hưởng trung bình: Phương pháp này cũng tương tự như phương pháp xấp xỉ cộng hưởng hẹp, tuy nhiên, phương pháp này bị giới hạn trong khoảng năng lượng từ 0,419 eV đến 130,07 eV. Phương pháp này thường áp dụng cho các vật liệu chỉ có một hỗn hợp cộng hưởng và thường áp dụng cho ba loại hạt nhân là: Th-232; U-238; Pu-240.
- PEACO: Tính các tiết diện cộng hưởng hiệu dụng trực tiếp bằng cấu trúc nhóm năng lượng siêu mịn, áp dụng cho tính toán ô lưới không đồng nhất, bao gồm một hay nhiều hỗn hợp cộng hưởng trong thư viện MCROSS, tìm phổ siêu mịn và từ đó tính trực tiếp các tiết diện hiệu dụng, qua đó tính được k_{inf} . Tuy nhiên,

với các hạt nhân không có trong thư viện MCROSS, các tiết diện của nó không được hiệu chỉnh bằng PEACO.