

# 多群数据库处理程序 NECP-Atlas 的开发与验证

徐嘉隆, 曹良志, 刘宙宇, 吴宏春

(西安交通大学, 西安 710049)

**摘要:** 确定论反应堆物理计算中, 多群核数据库为共振和输运计算提供准确的共振参数和多群截面数据, 是物理计算的重要基础。基于国内外多群数据库的发展现状, 多群数据库制作方法研究及程序开发具有重要的意义。本文基于评价核数据 (ENDF) 及点截面数据 (PENDF), 依据多群截面制作理论研制了多群数据库制作软件 NECP-Atlas, 实现了多群数据库制作功能, 并针对散射模型、混合核素截面制作、并行计算方面进行改进, 最终可产生标准格式的多群数据库。数值结果表明, 本文理论模型正确, 所研制程序可针对单核素和混合核素快速计算得到高精度的多群截面参数。

**关键词:** 多群数据库; NECP-Atlas;

## 1 引言

在确定论的核物理计算中, 多群数据库至关重要。多群数据库中有两类主要数据, 即多群截面和多群散射矩阵以及在共振计算中所需要的共振积分表。由多群理论可知, 为获取准确的多群常数, 从 ENDF/B<sup>[2]</sup> 中获得关于入射粒子准确的连续能量截面以及次级粒子的能量/角分布至关重要, 同时在共振能区也需要准确的权重通量。由西安交通大学 NECP 实验室自主研发的多群数据库制作软件 NECP-Atlas 实现了加工这些重要核数据的功能。

## 2 理论方法

### 2.1 共振截面

非热区截面基于由 NJOY<sup>[3]</sup> 的 RECONR\BROADR\UNRESR 模块所产生的 PEDNF, 根据相应格式读取连续能量截面插值表。

### 2.2 热散射截面产生

#### 2.2.1 相干弹性散射

双微分散射截面为:

$$\frac{d^2\sigma}{dE'd\Omega}(E \rightarrow E', \mu, T) = \frac{1}{E} \sum_{i=1}^{E_i < E} s_i(T) \delta(\mu - \mu_i) \delta(E - E') / 2\pi \quad (1)$$

其中,  $\mu_i = 1 - \frac{2E_i}{E}$ ,  $E$  为入射中子能量,  $E'$  为次级中子能量,  $\mu$  为散射角余弦,  $T$  为温度,  $E_i$  为

Bragg 边界,  $s_i$  为结构因子分数,  $\mu_i$  为每组晶格面特征散射余弦。

根据此双微分截面计算公式, 积分  $E'$  和  $\mu$  可以得到相干弹性散射总截面计算公式, 即

$$\sigma(E) = \frac{1}{E} \sum_{i=1}^{E_i < E} s_i(T) \quad (2)$$

其中,  $\sum_{i=1}^{E_i < E} s_i(T)$  在 ENDF/B 中实际形式为  $S(E, T) = \sum_{i=1}^{E_i < E} s_i(T)$

### 2.2.2 不相干弹性散射

双微分散射截面为:

$$\frac{d^2\sigma}{dE'd\Omega}(E \rightarrow E', \mu, T) = \frac{\sigma_b}{4\pi} e^{-2EW'(T)(1-\mu)} \delta(E - E') \quad (3)$$

其中,  $\sigma_b$  为特征束缚截面,  $W'$  为单位原子质量 Debye Waller 积分。

根据此双微分截面计算公式, 积分  $E'$  和  $\mu$  可以得到相干弹性散射总截面计算公式, 即

$$\sigma(E) = \frac{\sigma_b}{2} \left( \frac{1 - e^{-4EW'}}{2EW'} \right) \quad (4)$$

### 2.2.3 不相干非弹性散射

$$\frac{d^2\sigma}{dE'd\Omega}(E \rightarrow E', \mu, T) = \sum_{n=0}^{NS} \frac{M_n \sigma_{bn}}{4\pi kT} \sqrt{\frac{E'}{E}} e^{-\beta/2} S_n(\alpha, \beta, T) \quad (5)$$

其中,  $NS$  为分子或晶胞中的非主要散射原子个数,  $M_n$  为分子或晶胞中的第  $n$  中类型原子的个数,  $T$  为温度,  $E$  为入射中子能量,  $E'$  为次级中子能量,  $\alpha = [E' + E - 2\mu\sqrt{EE'}] / A_0 kT$  为动量转移,  $\beta = (E' - E) / kT$  为能量转移,  $A_0$  为主要散射原子质量,  $A_n$  为第  $n$  中散射原子质量,  $\sigma_{bn} = \sigma_{fn} \left( \frac{A_n + 1}{A_n} \right)^2$ ,  $\sigma_{fn}$  为第  $n$  种原子的自由原子散射截面,  $k$  为玻尔兹曼常数,  $\mu$  为实验系下散射角余弦。

对于  $\alpha$  或者  $\beta$  超出了  $S_n(\alpha, \beta, T)$  插值表所提供的插值范围时, 采用 short-collision-time(SCT)近似, 即

$$S^{SCT}(\alpha, \beta, T) = \frac{\exp\left[-\frac{(\alpha - |\beta|)^2 T}{4\alpha T_{eff}(T)} - \frac{|\beta|}{2}\right]}{\sqrt{4\pi\alpha \frac{T_{eff}(T)}{T}}} \quad (6)$$

其中,  $T_{eff}$  为有效温度, 由 ENDF/B 提供。

## 2.3 自由气体散射核

近几年的研究<sup>[5]</sup>表明, 在低于 210eV 的超热能区, 由于靶核的自由气体运动和共振散射会引起共振上散射效应, 各阶散射矩可表示为:

$$\sigma_{sn,T}(E \rightarrow E') = \frac{\beta^{5/2}}{4E} \exp(E/kT) \int_0^\infty t \sigma_{s,0} \left( \frac{kT}{A} t^2 \right) \times \exp(-t^2/A) \psi_n(t) dt, \quad \beta = (A+1)/A \quad (7)$$

其中,  $E$  为入射中子能量,  $E'$  为次级中子能量,  $A$  为靶核与中子的质量比,  $T$  为温度,  $k$  为玻尔兹曼常数。

在求解式 (7) 中的积分时为保证精确求解, 需要将整个积分区间划分为许多很细的积分区间, 根据入射能量自适应地确定积分细区个数, 即:

$$N = N_1 \times 10^{**} \left( \log_{10}(E/E_1) \times \log_{10} \left( \frac{N_2/N_1}{E_2/E_1} \right) \right) \quad (8)$$

$$N_1 = 10k, N_2 = 10M, E_1 = 1.0eV, E_2 = 1000eV.$$

其中,  $N$  为积分区间个数,  $E$  为入射能量。

采用并行技术求解式 (7) 中的积分, 产生每一种核素每一个温度下的自由气体散射概率表数据库, 使用反向堆栈方法根据自散射概率对入射能量进行线性化, 再针对每一个线性化后的入射能量, 计算出射能量的散射概率。在使用该概率表时, 采用 unit-base 插值方式以保证二维插值准确。

## 2.4 高能区次级粒子能量/角度分布处理

### 2.4.1 次级中子角分布 (MF4) 处理

ENDF/B 中 MF4 中提供了次级中子角的归一化概率分布, 即

$$\int_{-1}^1 f(\mu, E) d\mu = 1 \quad (9)$$

该分布可由勒让德多项式表达, 即

$$f(\mu, E) = \sum_{l=0}^{NL} \frac{2l+1}{2} a_l(E) P_l(\mu) \quad (10)$$

其中,  $\mu$  为散射角余弦,  $E$  为入射中子能量,  $l$  为勒让德多项式阶数,  $a_l$  为阶  $l$  勒让德多项式系数。

该分布还可以由关于入射中子能量  $E$  以及散射角余弦  $\mu$  的插值表获得。

由于 MF4 中提供了质心系下的次级粒子角分布, 可通过两体动力学根据散射角度求解次级粒子能量, 如图所示:

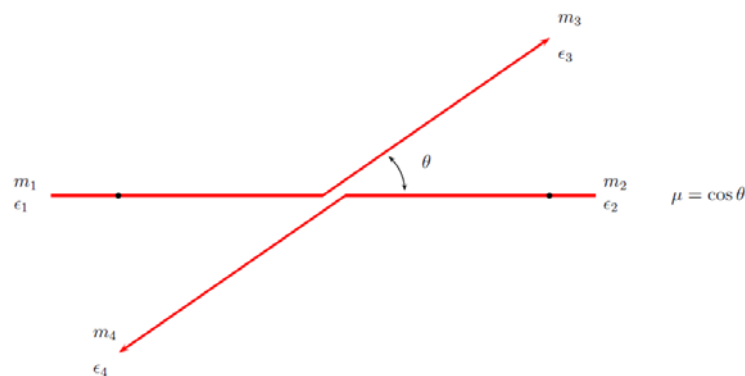


图 2-1 质心系两体动力学示意图

其中,  $m_1, m_2, m_3, m_4$  分别为入射粒子, 出射粒子, 靶核, 反冲靶核的质量。出射粒子能量  $E_3$  与入射粒子

能量  $E_1$  的关系, 即:

$$\frac{E_3}{E_1} = \frac{A'}{(1+A)^2} (\beta^2 + 1 + 2\beta\mu) \quad (11)$$

其中,  $\beta = \left( \frac{A(A+1-A')}{A'} \left[ 1 + \frac{1+A}{A} \frac{Q}{E_1} \right] \right)^{1/2}$ ,  $A = \frac{m_2}{m_1}$ ,  $A' = \frac{m_3}{m_1}$ ,  $Q$  为该反应  $Q$  值。

#### 2.4.2 次级中子能量分布 (MF5) 处理

ENDF/B 中 MF5 提供了次级中子能量的归一化概率分布, 即

$$\begin{aligned} \int_0^{E'_{\max}} p(E \rightarrow E') dE' &= 1 \\ p(E \rightarrow E') &= \sum_{k=1}^{NK} p_k(E) f_k(E \rightarrow E') \\ \sum_{k=1}^{NK} p_k(E) &= 1 \end{aligned} \quad (12)$$

其中,  $E'_{\max}$  为最大次级中子能量并与入射中子能量相关。

对于  $f_k(E \rightarrow E')$ , MF5 中提供了 6 种分布律, 以 LF 号表示, 即:

##### 1. 插值表 (LF=1)

$$f(E \rightarrow E') = g(E \rightarrow E') \quad (13)$$

MF5 中给出了  $g(E \rightarrow E')$  关于入射中子能量  $E$ , 次级中子能量  $E'$  的插值表。

##### 2. 通用蒸发谱 (LF=5)

$$f(E \rightarrow E') = g(E' / \theta(E)) \quad (14)$$

MF5 给出了  $\theta(E)$  关于入射能量  $E$  的插值表,  $g(x)$  是关于  $x$  的插值表,  $x = E' / \theta(E)$ 。

##### 3. 简单麦克斯韦谱 (LF=7)

$$f(E \rightarrow E') = \frac{\sqrt{E'}}{I} e^{-E'/\theta(E)} \quad (15)$$

其中  $I$  为归一化常数, 即:

$$I = \theta^{3/2} \left[ \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf} \left( \sqrt{(E-U)/\theta} \right) - e^{-(E-U)/\theta} \right] \quad (16)$$

$U$  为常数, 用于定义次级中子的最大能量, MF5 提供了  $U$ , 和  $\theta$  关于入射能量  $E$  的插值表。

##### 4. 蒸发谱 (LF=9)

$$f(E \rightarrow E') = \frac{\sqrt{E'}}{I} e^{-E'/\theta(E)} \quad (17)$$

其中  $I$  为归一化常数, 即:

$$I = \theta^2 \left[ 1 - e^{-(E-U)/\theta} \left( 1 + \frac{E-U}{\theta} \right) \right] \quad (18)$$

$U$  为常数, 用于定义次级中子的最大能量, MF5 提供了  $U$ , 和  $\theta$  关于入射能量  $E$  的插值表。

#### 5. 能量相关 Watt 谱 (LF=11)

$$f(E \rightarrow E') = \frac{e^{-E'/a}}{I} \sinh(\sqrt{bE'}) \quad (19)$$

其中  $I$  为归一化常数, 即:

$$I = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi a^3 b}{4}} \exp\left(\frac{ab}{4}\right) \left[ \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{E-U}{a}} - \frac{ab}{4}\right) + \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{E-U}{a}} - \frac{ab}{4}\right) \right] - a \exp\left[-\left(\frac{E-U}{a}\right)\right] \sinh \sqrt{b(E-U)} \quad (20)$$

$a, b$  与入射中子能量相关,  $U$  为常数, 用于定义次级中子的最大能量。

#### 6. 能量相关裂变中子谱 (LF=12)

$$f(E \rightarrow E') = \frac{1}{2} \left[ g(E', E_f(L)) + g(E', E_f(H)) \right] \quad (21)$$

其中,

$$g(E', E_f) = \frac{1}{3\sqrt{(E_f T_M)}} \left[ u_2^{3/2} E_1(u_2) - u_1^{3/2} E_1(u_1) + \gamma\left(\frac{3}{2}, u_2\right) - \gamma\left(\frac{3}{2}, u_1\right) \right] \quad (22)$$

其中,

$$u_1 = \left( \sqrt{E'} - \sqrt{E_f} \right)^2 / T_M \quad (23)$$

$$u_2 = \left( \sqrt{E'} + \sqrt{E_f} \right)^2 / T_M \quad (24)$$

其中  $E_f(X)$  为 MF5 中给出的常数 EFL、EFH, 分别代表较轻和较重的裂变碎片中平均每个核子所携

带的动能。  $T_M$  是关于入射能量  $E$  的插值表。

#### 2.4.3 次级产物能量-角分布 (MF6) 处理

ENDF/B 中 MF6 提供了次级产物的能量-角分布的归一化概率分布, 即

$$\int dE' \int d\mu f_i(\mu, E, E') = 1 \quad (25)$$

其中,  $i$  代表次级产物序号。

对于  $f_i(E \rightarrow E')$ , 不考虑带电粒子弹性散射, MF6 中提供了 5 种分布律, 以 LAW 号表示, 即

#### 1. 连续能量-角度分布 (LAW=1)

该分布下根据参数 LANG 的取值分为两种形式

勒让德系数形式 (LANG=1), 即

$$f(\mu, E, E') = \sum_{l=0}^{NA} \frac{2l+1}{2} f_l(E, E') P_l(\mu) \quad (26)$$

Kalbach-Mann 系统学形式 (LANG=2), 其研究形式如下:



其中, A 为靶核, a 为入射粒子, C 为复合核, b 为出射粒子, B 为剩余核

令  $E_a$  为入射粒子实验系下入射粒子能量,  $\varepsilon_a$  为入射道能量

$$\varepsilon_a = E_a \times \frac{AWR_A}{AWR_A + AWR_a} \quad (28)$$

令  $E_{b,cm}$  为出射粒子实验系下入射粒子能量,  $\varepsilon_b$  为出射道能量

$$\varepsilon_b = E_{b,cm} \times \frac{AWR_B}{AWR_B + AWR_b} \quad (29)$$

对于非光子入射反应:

$$f(\mu_{b,cm}, E_a, E_{b,cm}) = \frac{af_0}{2 \sinh(a)} (\cosh(a\mu_{b,cm}) + r \sinh(a\mu_{b,cm})) \quad (30)$$

其中  $r = r(E_a, E_{b,cm})$  为预复合分数, 由 MF6 提供。  $a = a(E_a, E_{b,cm})$  是一个简单的参数化函数, 可由 MF6 提供, 或者有如下公式计算, 即

$$a = C_1 X_1 + C_2 X_1^3 + C_3 M_a m_b X_3^4 \quad (31)$$

其中  $e_a = \varepsilon_a + S_a$ ,  $e_b = \varepsilon_b + S_b$ ,  $R_1 = \min(e_a, E_{t1})$ ,  $R_3 = \min(e_a, E_{t3})$ ,  $X_1 = R_1 e_b / e_a$ ,

$X_3 = R_3 e_b / e_a$ ,  $C_1 = 0.04 / \text{MeV}$ ,  $C_2 = 1.8 \times 10^{-6} / (\text{MeV})^3$ ,  $C_3 = 6.7 \times 10^{-7} / (\text{MeV})^4$ ,  $E_{t1} = 130 \text{MeV}$ ,

$E_{t3} = 41 \text{MeV}$ ,  $M_n = 1$ ,  $M_p = 1$ ,  $M_d = 1$ ,  $M_\alpha = 0$ ,  $m_n = 1/2$ ,  $m_p = 1$ ,  $m_d = 1$ ,  $m_t = 1$ ,  $m_{3He} = 1$ ,

$m_\alpha = 2$ 。

## 2. 离散两体散射 (LAW=2)

该分布律与 MF4 中的勒让德系数表达方式相同, 该分布律用来描述出射粒子。

## 3. 离散两体反冲 (LAW=4)

该分布律与 LAW=2 同时出现, 用来描述与出射粒子对应的反冲核, 满足两体动力学。

## 4. 多体相空间分布 (LAW=6)

质心系中, 粒子 i 的相空间分布为:

$$P_i^{CM}(\mu, E, E') = C_n \sqrt{E'} (E_i^{\max} - E')^{(3n/2)-4} \quad (32)$$

其中  $C_n$  为归一化常数,  $E_i^{\max}$  为粒子  $i$  的最大概然能量。  $C_3 = \frac{4}{\pi(E_i^{\max})^2}$ ,  $C_4 = \frac{105}{32\pi(E_i^{\max})^{1/2}}$ ,

$$C_5 = \frac{256}{14\pi(E_i^{\max})^5}。$$

实验系中, 分布为:

$$P_i^{lab}(\mu, E, E') = C_n \sqrt{E'} \left[ E_i^{\max} - (E^* + E' - 2\mu\sqrt{E^*E'}) \right]^{(3n/2)-4} \quad (33)$$

其中,  $E^* = E \frac{A^{incident}}{AWR + A^{exit}}$ ,  $A^{incident}$  和  $A^{exit}$  分别为入射粒子和出射粒子的质量与中子质量比。

$E_i^{\max}$  由如下表示:

$$E_i^{\max} = \frac{M - m_i}{M} E_a \quad (34)$$

其中,  $E_a = \frac{m_T}{m_p + m_T} E + Q$ ,  $m_T$  为靶核质量与中子质量比,  $m_p$  为入射粒子与中子质量比,  $E$  为实验

系下入射粒子能量,  $Q$  为该反应道  $Q$  值。

#### 5. 实验室角-能量分布律 (LAW=7)

该分布律直接提供关于入射粒子能量  $E$ , 散射角余弦  $\mu$ , 出射粒子能量  $E'$  分布  $f(E, \mu, E')$  的插值表。

### 2.5 权重通量

在中子入射能量为 10000eV 以下的能量范围, 求解无限均匀的 0 维慢化方程; 在中子入射能量为 10000eV 以上的能量范围, 采取窄共振近似求解通量。

针对 0 维慢化方程求解, 采取超细群方法<sup>[6]</sup>进行求解。

连续能量的中子输运方程写为:

$$\Omega \nabla \phi(E, r, \Omega) + \Sigma_t(E, r) \phi(E, r, \Omega) = Q_s(E, r, \Omega) + Q_f(E, r, \Omega) + S(E, r, \Omega) \quad (35)$$

其中  $Q_s(E, r)$  是散射源,  $Q_f(E, r)$  是裂变源,  $S(E, r, \Omega)$  是外源。对于一个无限均匀系统, 泄漏项为零。

对于中子慢化, 一般考虑的能量区域为 1 eV~10000 eV。在这个能量范围内, 裂变源可以忽略。同时在中子慢化的计算中不考虑外源, 式(40)可以简化为:

$$\Sigma_t(E) \phi(E) = Q_s(E) \quad (36)$$

写成对数坐标:

$$\Sigma_t(\mu) \phi(\mu) = Q_s(\mu) \quad (37)$$

对于散射源, 采取两种处理方式:

第一种处理方法认为系统中的所有核素为渐进散射核, 慢化方程写为:

$$Q_s(\mu) = \sum_k Q_{s,k}(\mu) = \sum_k \int_{\Delta\mu} \frac{e^{-(\mu-\mu')}}{1-\alpha_k} N_k \sigma_{s,k}(\mu) \phi(\mu) d\mu \quad (38)$$

其中  $k$  是核素的编号,  $N_k$  是核素  $k$  的核子密度,  $\sigma_{s,k}(\mu)$  是核素  $k$  的散射截面。  $\alpha_k = \left( \frac{A_k-1}{A_k+1} \right)^2$ ,  $A_k$  是核素  $k$  的质量数。对所求解的能量范围进行等勒宽划分, 每一个细群的勒宽为  $\Delta\mu$ , 对式(31)在第  $g$  个细群上积分:

$$\Sigma_{t,g} \phi_g = Q_{s,g} \quad (39)$$

其中:

$$Q_{s,g} = \Sigma_{s,g' \rightarrow g} \phi_{g'} + S_g = \Sigma_{s,g' \rightarrow g} \phi_{g'} + \sum_k \sum_{m=1}^{M_k} P_{m,k} \Sigma_{s,g-m,k} \phi_{g-m} \quad (40)$$

$S_g$  是从其他细群到第  $g$  细群的散射源;  $P_{m,k}$  是中子向下散射  $m$  个细群的概率;  $M_k$  是中子与第  $k$  个核素发生弹性碰撞时最大的向下散射细群数, 表示为  $\varepsilon_k / \Delta\mu$ ;  $\varepsilon_k = \ln(1/\alpha_k)$ 。

式(46)中的  $P_{m,k}$  可以通过解析求解得到:

$$P_{m,k} \Delta\mu = \frac{1}{1-\alpha_k} \int_{\mu_0}^{\mu_0+\Delta\mu} \int_{\mu_0-m\Delta\mu}^{\mu_0-(m-1)\Delta\mu} e^{-(\mu-\mu')} d\mu' d\mu = \frac{1}{1-\alpha_k} (1-e^{-\Delta\mu})^2 e^{-(n-1)\Delta\mu} \quad (41)$$

其中  $\mu_0$  是出射中子的能量。为了简化散射源的计算, 现对  $P_{m,k} \Delta\mu$  进行简化:

$$P_{m,k} \Delta\mu \approx \frac{\Delta\mu}{1-\alpha_k} (1-e^{-\Delta\mu}) (1-\Delta\mu/2) e^{-(n-1)\Delta\mu} \approx \frac{\Delta\mu}{1-\alpha_k} (1-e^{-\Delta\mu}) e^{-(n-1)\Delta\mu} \quad (42)$$

因此  $S_g$  可以简化为:

$$\begin{aligned} S_g &= \sum_k \sum_{m=1}^{M_k} P_{m,k} \Sigma_{s,g-m,k} \phi_{g-m} \\ &= \sum_k \left( P_{1,k} \Sigma_{s,g-1,k} \phi_{g-1} - P_{N_k+1,k} \Sigma_{s,g-N_k-1,k} \phi_{g-N_k-1} + \sum_{m=2}^{N_k+1} P_{m,k} \Sigma_{s,g-m,k} \phi_{g-m} \right) \\ &= \sum_k \left( P_{1,k} \Sigma_{s,g-1,k} \phi_{g-1} - P_{N_k+1,k} \Sigma_{s,g-N_k-1,k} \phi_{g-N_k-1} + \sum_{m=1}^{N_k} P_{m+1,k} \Sigma_{s,g-m-1,k} \phi_{g-m-1} \right) \\ &\approx \sum_k \left( P_{1,k} \Sigma_{s,g-1,k} \phi_{g-1} - P_{N_k+1,k} \Sigma_{s,g-N_k-1,k} \phi_{g-N_k-1} + \sum_{m=1}^{N_k} e^{-\Delta\mu} P_{m,k} \Sigma_{s,g-m-1,k} \phi_{g-m-1} \right) \\ &= \sum_k \left( P_{1,k} \Sigma_{s,g-1,k} \phi_{g-1} - e^{-\Delta\mu} P_{M_k,k} \Sigma_{s,g-N_k-1,k} \phi_{g-N_k-1} + e^{-\Delta\mu} S_{g-1,k} \right) \end{aligned} \quad (43)$$

因此,  $S_g$  可以通过递推得到, 极大地简化了计算。

第二种处理方法精确的描述系统中每一个核素散射模型, 即认为在 210eV~10000eV 的范围采用渐进散射核模型, 在 4eV~210eV 的范围采用自由气体模型从而考虑共振上散射效应, 在 1eV~4eV 采用由 ENDF/B 所提供的不相干非弹性散射模型。

在 210eV~10000eV 范围仍然使用第一种处理方法求解, 在其他能群需要逐群依次求解散射源, 无法递



推得到, 散射源计算可由式 (5) 和式 (7) 获得, 同时由于存在上散射效应, 在求解通量时需要迭代求解。

按照以上方法求解得到 0 阶通量, 高阶通量基于  $B_0$  近似求解, 即

$$\phi_n(E) = \frac{\phi_{n-1}(E)}{\sum_{k=1}^{NK} \Sigma_{t,k}(E)} \quad (44)$$

NJOY 中所构造无限均匀系统是由单一指定重核与不同背景截面的背景核素构成, 对背景核素的散射源使用窄共振近似计算, 对于指定重核基于渐进散射模型进行了精细求解。与 NJOY 不同, 本文中的方法按照真实核素构造无限均匀系统, 可以求解混合多种目标重核成为一个目标伪核素, 进而求解慢化方程, 能考虑到重核之间的共振干涉效应, 在使用渐进散射核时, 求解速度相较于 NJOY 也有较大提升, 同时根据需要也能更加精确的考虑超热区以下的散射模型, 从而提高了权重通量的精度。

### 2.6 并群计算

基于上述所获得的数据, 通过并群计算求解所需要的多群常数, 如多群截面、散射矩阵等, 计算公式如下:

$$\sigma_{x,g} = \frac{\int_{E_g} \sigma_x(E) \phi(E) dE}{\int_{E_g} \phi(E) dE} \quad (45)$$

$$\sigma_{x,g \rightarrow g'}^n = \frac{\int_{E_{g'}} f(E \rightarrow E', \mu) P_n(\mu) d\mu dE' \int_{E_g} \sigma_x(E) \phi_n(E) dE}{\int_{E_g} \phi_n(E) dE} \quad (46)$$

其中,  $x$  为某一反应道,  $g$  为入射能群,  $g'$  为出射能群,  $n$  为勒让德阶数。

## 3 数值验证

为了验证 NECP-Atlas 所计算的热散射截面以及获取的各类反应道次级粒子能量/角分布的精确度和共振区的多群截面, 选取若干核素的部分反映, 进行微观数值验证。

### 3.1 热散射截面验证

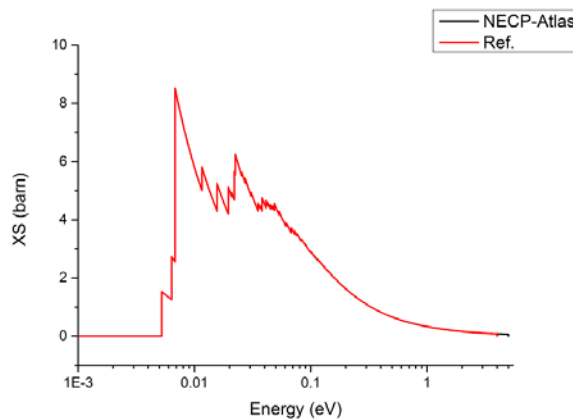


图 3-2 温度为 300K 下的金属铪的相干弹性散射截面  
图中, 横坐标为入射中子能量, 纵坐标为截面。数据表现出了很好的一致性。

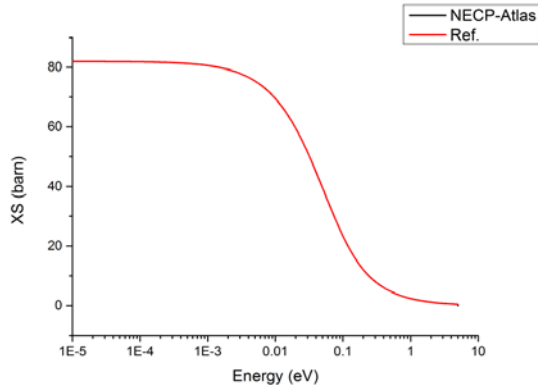


图 3-3 温度为 300K 下的氢化锆中氢的相干弹性散射截面  
 图中，横坐标为入射中子能量，纵坐标为截面。数据表现出了很好的一致性。

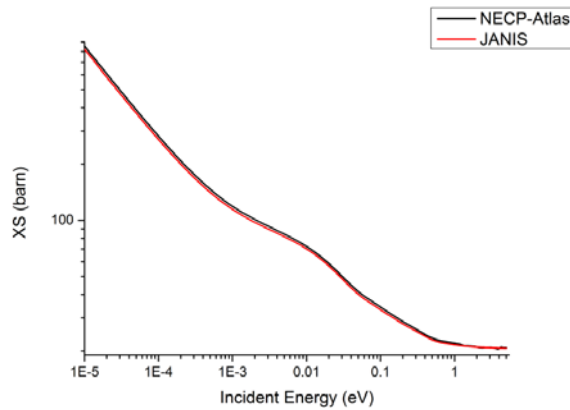


图 3-4 温度为 300K 下的水中氢的不相干非弹性散射截面

图中，横坐标为入射中子能量，纵坐标为截面 barn，参考值来源 NJOY。最大截面偏差为 4%，该偏差来源与在于积分式 (5) 时，NJOY 在计算  $\sigma(E \rightarrow E')$  时，对于每一个入射能量点，其最大出射能量  $E'$  是由 ENDF/B 中的  $S_n(\alpha, \beta, T)$  插值表中所提供的最大  $\beta$  值计算得出并在此截断，对于更高的出射能量，没有使用 short-collision-time 近似，导致散射总截面偏小。

### 3.2 自由气体散射核验证

在温度为 300K,600K,900K 下，选取了入射能量为 6.8eV 的  $^{235}\text{U}$  散射核数据以及入射能量为 6.52eV 的  $^{238}\text{U}$  散射核数据验证数值计算。

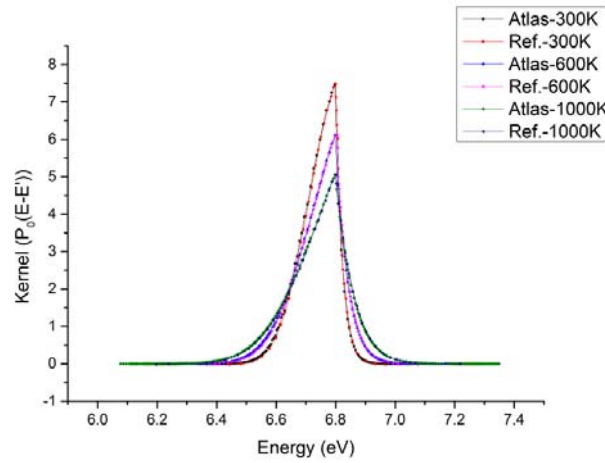


图 3-5 温度为 300K,600K,900K 下, 入射能量为 6.80eV 的 <sup>235</sup>U 散射核数据

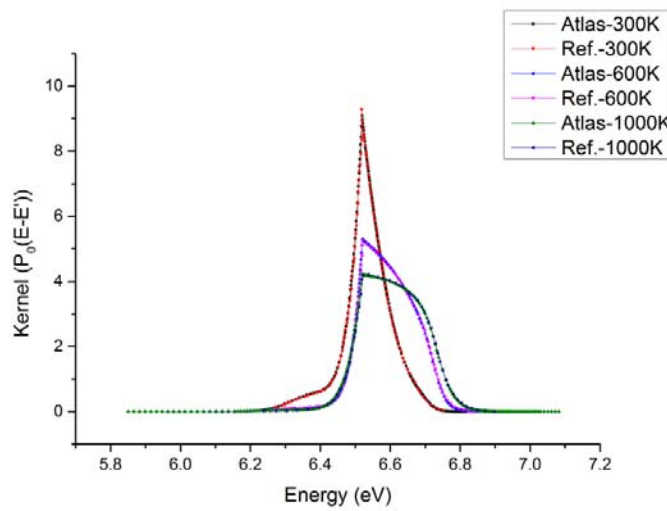


图 3-6 温度为 300K,600K,900K 下, 入射能量为 6.52eV 的 <sup>238</sup>U 散射核数据

图中, 横坐标为次级中子能量, 纵坐标为分布。数据表现出了很好的一致性。

### 3.3 次级中子角分布 (MF4)

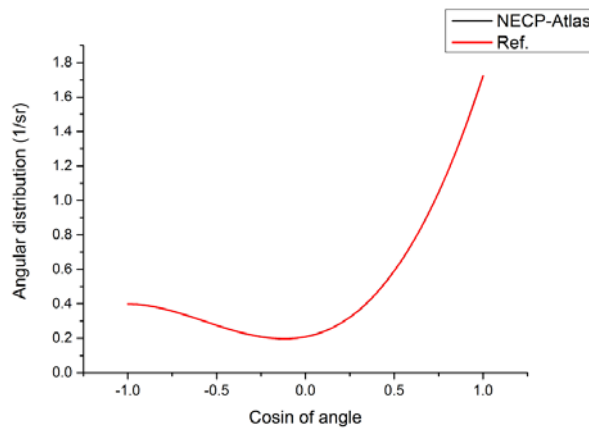


图 3-7 中子入射能量为 738 keV 的 <sup>56</sup>Fe 的弹性散射次级中子角分布

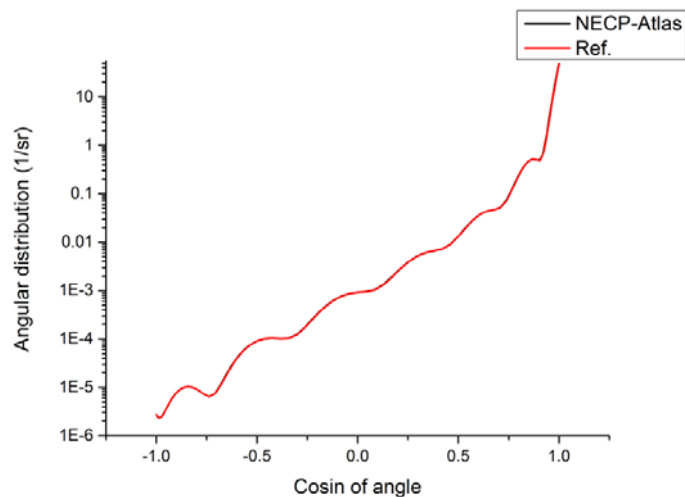


图 3-8 中子入射能量为 20 MeV 的  $^{56}\text{Fe}$  的弹性散射次级中子角分布

图中, 横坐标为散射角余弦, 纵坐标为分布。数据表现出了很好的一致性。

### 3.4 次级中子能量分布 (MF5) 验证

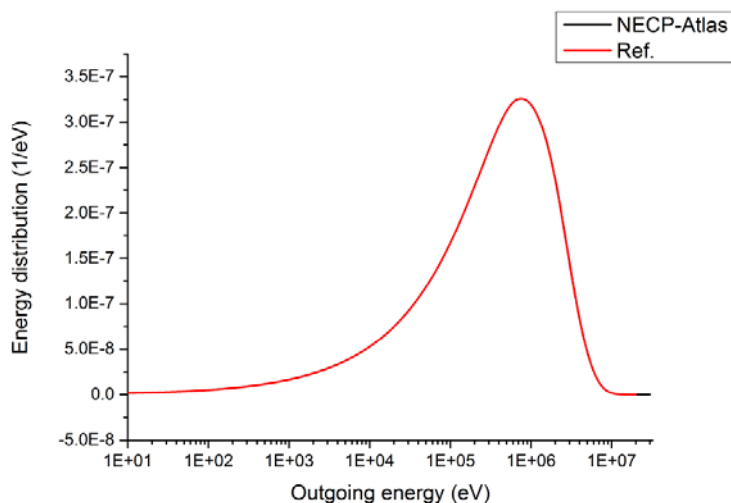


图 3-9 中子入射能量为 5.5 MeV 的  $^{239}\text{Pu}$  瞬发裂变次级中子能量分布

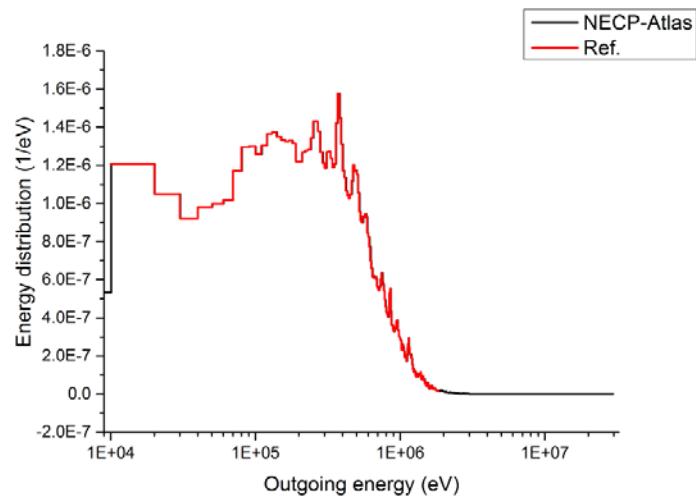


图 3-10 中子入射能量为 20 MeV 的  $^{239}\text{Pu}$  缓发裂变中子能量分布

图中, 横坐标为出射中子能量, 纵坐标为分布。数据表现出了很好的一致性。

### 3.5 次级产物能量-角分布 (MF6) 验证

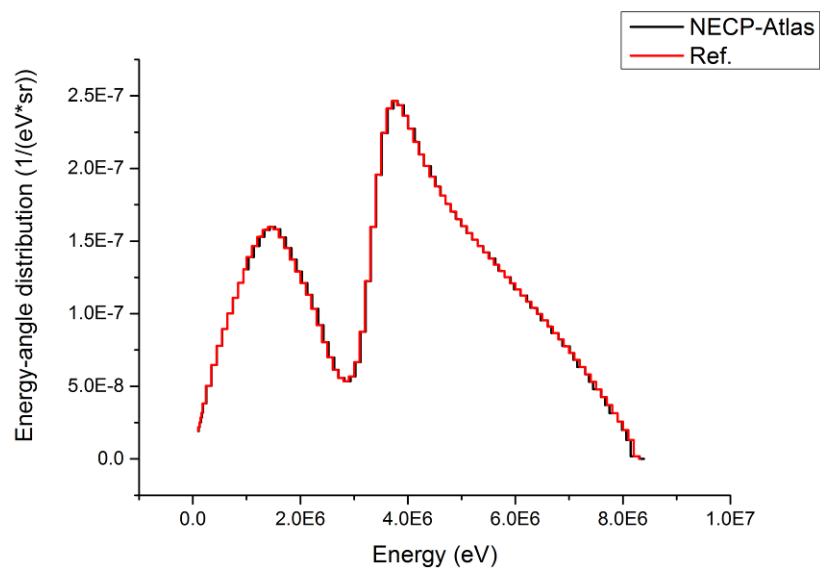


图 3-11 中子入射能量为 9.2MeV 的  $^{9}\text{Pu}$  ( $n, n_{\text{continuum}}$ ) 反应次级产物 ( $n$ ) 能量-角分布

图中, 横坐标为次级产物能量, 纵坐标为分布。数据表现出了很好的一致性。

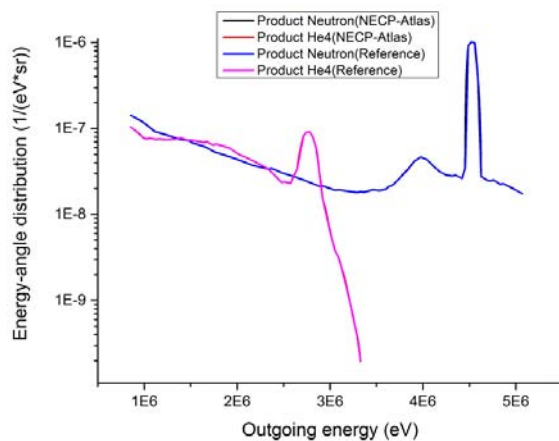


图 3-12 中子入射能量为 8.4MeV 的  ${}^9\text{Be}(n, 2n)$  反应次级产物 (n) 能量-角分布  
图中, 横坐标为次级产物能量, 纵坐标为分布。数据表现出了很好的一致性。

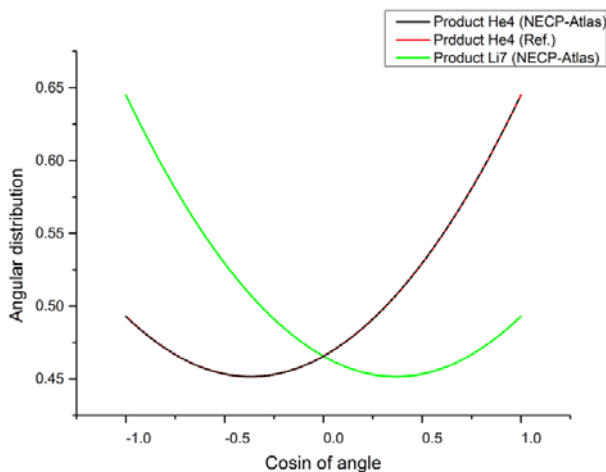


图 3-13 中子入射能量为 925 keV 的  ${}^{10}\text{B}(n, \alpha)$  反应次级产物 ( ${}^4\text{He}, {}^7\text{Li}$ ) 角分布

图中, 横坐标为散射角余弦, 纵坐标为分布。数据表现出了很好的一致性。对于产物  ${}^7\text{Li}$  的角分布, 根据质心系下的两体动力学可以直接通过  ${}^4\text{He}$  的角分布求得  ${}^7\text{Li}$  的角分布。

### 3.6 权重通量以及多群常数验证

#### 3.6.1 考虑渐进散射核或自由气体散射核的权重通量验证

由于超细群能群过多, 不宜全部进行对比, 选取 36.68eV 附近的中子能谱进行对比, 构建一个由  ${}^{238}\text{U}$ ,  ${}^1\text{H}$  所组成的无限均匀问题, 分别对  ${}^{238}\text{U}$  采取渐进散射核和自由气体散射核,  ${}^1\text{H}$  采取渐进散射核, 稀释截面分别为 100barn, 1000barn, 温度为 900K。

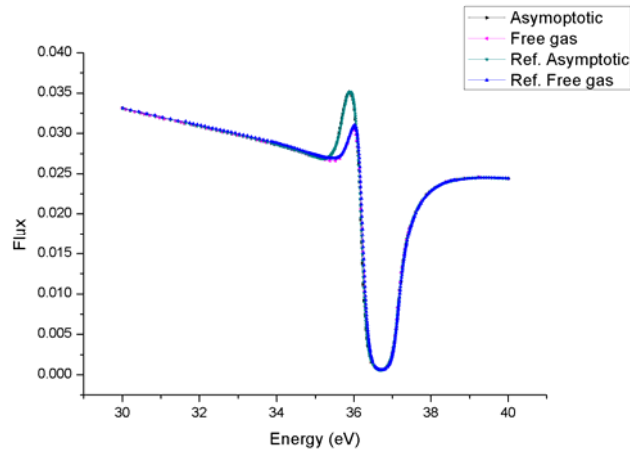


图 3-14 稀释截面为 100barn 的中子能谱对比

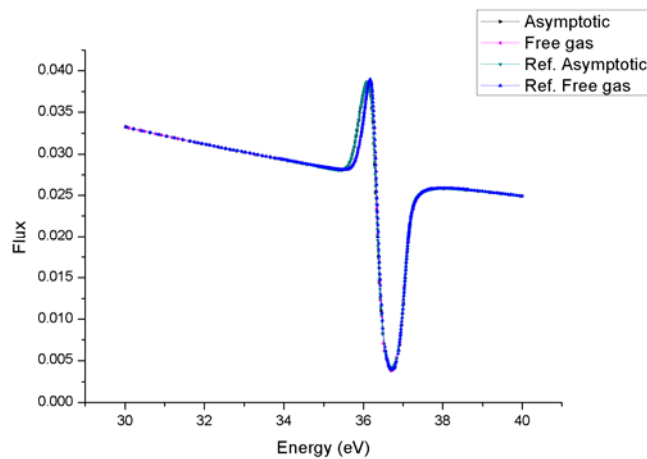


图 3-15 稀释截面为 1000barn 的中子能谱对比

图中，横坐标为 neutron 入射能量，纵坐标为能谱。数据表现出了很好的一致性。

### 3.6.2 多群常数验证

选取 WIMS-D4 多群数据库中所采用的 69 群中的 13 个共振群直接进行多群截面比较，构建一个由  $^{235}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$ ,  $^1\text{H}$  组成的无限均匀问题，温度为 900K。

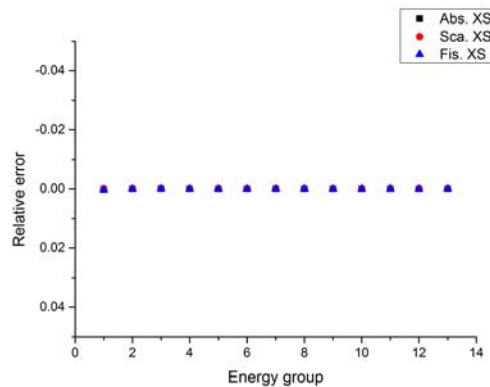


图 3-16  $^{235}\text{U}$  各个能群的吸收、散射、裂变截面相对误差

图中, 横坐标为能群数, 纵坐标为与参考值的相对误差, 参考值来源 RMET21。最大误差小于 0.04%。

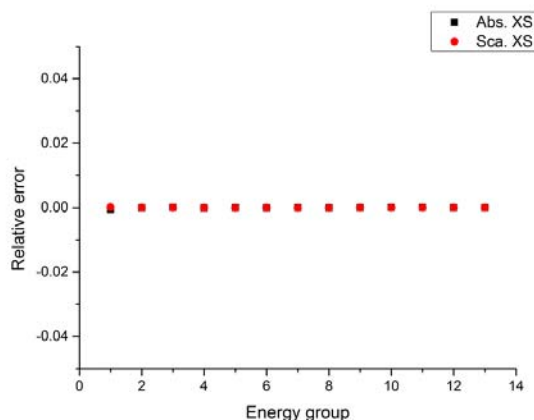


图 3-17  $^{238}\text{U}$  各个能群的吸收、散射截面相对误差

图中, 横坐标为能群数, 纵坐标为与参考值的相对误差, 参考值来源 RMET21。最大误差小于 0.06%。

构建一个由  $^{238}\text{U}, ^1\text{H}$  组成的无限均匀问题, 温度为 900K。对比  $^{238}\text{U}$  共振区弹性散射 (MT=2) 矩阵, 背景截面为 50barn; 对比热能和快区的弹性散射矩阵, 背景截面为无限稀释。对比快区剩余核为第一激发态散射 (MT=51) 矩阵, 背景截面为无限稀释。

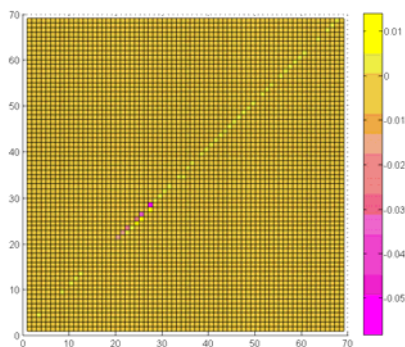


图 3-18  $^{238}\text{U}$  的 69 群弹性散射矩阵

图中, X 轴为入射能群, Y 轴为出射能群, Z 轴为相对误差。参考值来源 NJOY, 误差集中于共振区的散射截面, 该误差来源于 Atlas 的慢化方程求解其较 NJOY 更为精确, 是该误差的来源。

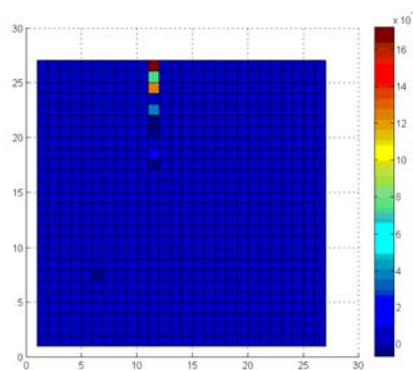


图 3-19



图中, X 轴为入射能群, Y 轴为出射能群, Z 轴为相对误差。参考值来源 NJOY, 最大误差为 11 群向 29 群的下散射截面, 为 1.5%。由于其绝对值量级为  $1E-9$ , 对于最终的宏观问题影响可以忽略。

## 4 结 论

由西安交通大学 NECP 实验室自主开发的多群数据库处理程序 NECP-Atlas 实现了多群常数的加工功能, 能够基于 ENDF 格式获取到所需要的连续能量截面或次级产物能量/角分布, 计算出的多群常数具有较高的精度。相较于 NJOY, 通过自由气体散射模型考虑到了共振上散射效应, 引入了并行计算并提供自由气体散射核数据库, 最终计算出精度更高的权重通量和  $P_n$  矩阵; 能够制作伪核素多群数据库, 能够准确地考虑重核之间的共振干涉效应, 计算出的权重通量更加可靠。

## 参考文献

- [1] 谢仲生.核反应堆物理分析[M].西安:西安交通大学出版社,2004:18-19.
- [2] M. Herman and A. Trkov, Eds., ENDF-6 Formats Manual, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF/B-VI and ENDF/B-VII, Brookhaven National Laboratory report BNL-90365-2009 (ENDF-102) (June 2009).
- [3] A.C.Kahler, R.M Boicourt, et al. The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2012. Report LA-UR-12-27079. Los Alamos National Laboratory, December 20, 2012.
- [4] Dan Gabriel Cacuci. Handbook of Nuclear Engineering. Institute for Nuclear Technology and Reactor Safety.
- [5] Mohamed Ouisloumen and Richard Sanchez. A Model for Neutron Scattering Off Heavy Isotopes That Accounts for Thermal Agitation Effects. NUCLEAR SCIENCE AND ENGINEERING: 107, 189-200 (1991)
- [6] Francisco Leszczynski, "NRSC: Neutron Resonance Spectrum Calculation System Version 2001.0 User's Manual," Centro Atómico Bariloche, CNEA, Argentina.

# Development and verification of multi-group library processing code NECP-Atlas

Xu Jialong, Cao Liangzhi, Liu Zhouyu, Wu Hongchun

(School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiao tong University, Xi'an 710049)

**Abstract:** In deterministic physics calculation field, multi-group library plays a significant role in supplying precise multi-group data for resonance calculation and transport calculation. Based on the development on multi-group library at home and abroad, processing method research and code development have great significance. In this paper, a multi-group processing code NECP-Atlas has been developed based on evaluated nuclear data file (ENDF) and point-wise evaluated nuclear data file (PENDF) and multi-group theory. It realizes the function of multi-group processing and make improvements on scattering model and has the ability to output different standard formats library. It shows reasonable result through verification.