

核数据处理程序 NECP-Atlas 的开发与验证

祖铁军, 徐嘉隆, 吴宏春, 曹良志

(西安交通大学 核科学与技术学院, 陕西 西安 710049)

摘要: 本文开发了自主化的核数据处理程序 NECP-Atlas, 该程序将不同的核数据处理功能封装为不同的程序模块, 可将评价核数据经过共振重构及线性化、多普勒展宽计算、不可分辨共振区处理、热中子散射计算、多群截面计算等过程, 处理为 WIMS-D/E 格式多群数据库。采用 WLUP (WIMSD library update project) 基准题、国际临界安全基准题 ICSBEP (international criticality safety benchmark evaluation project) 等对 NECP-Atlas 加工产生的核数据进行验证, 结果显示 NECP-Atlas 和 NJOY-2016 程序精度相当。

关键词: 核数据处理; 多群截面; 多普勒展宽; 热中子散射; 共振截面重构; 不可分辨共振

中图分类号: TL32 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-6931(2018)07--

doi: 10. 7538/yzk. 2018. 52. 07.

Development and Validation of Nuclear Data Processing Code NECP-Atlas

ZU Tiejun, XU Jialong, WU Hongchun, CAO Liangzhi

(School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: A home-developed nuclear data processing code named as NECP-Atlas was described in this paper, which included different code modules for different data processing functions. This code can generate WIMS-D or WIMS-E format multigroup library from evaluated nuclear data file, through reconstruction of resolved resonance cross section and linearization of cross sections, Doppler broadening, calculation of unresolved resonance cross sections, calculation of thermal neutron scattering cross sections, calculation of multigroup constant, and so on. The NECP-Atlas code was tested against WIMSD library update project (WLUP) benchmark and international criticality safety benchmark evaluation project (ICSBEP). The numerical results show that the NECP-Atlas code can get results comparable with NJOY-2016 code.

Key words: nuclear data processing; multigroup cross section; Doppler broadening; thermal neutron scattering; reconstruction of resonance cross section; unresolved resonance

近年来,我国核电软件自主化得到广泛的关注,各类核电软件纷纷出现。核数据是反应

堆中子学计算的重要基础,而我国对核数据处理程序的研究相对较少,成为我国核电深度自

主化的瓶颈问题。评价核数据库中的核数据种类繁多,并且不同类型的数据存储格式不一,无法直接用于反应堆的中子学计算,需经过专门的核数据处理程序加工成特定格式才能被中子学程序使用,如 WIMS 程序等使用的 WIMS-D 格式、蒙特卡罗程序使用的 ACE 格式等。

国外对核数据处理程序的研究较为深入,如美国洛斯阿拉莫斯国家实验室开发的 NJOY 程序^[1]是目前使用最为广泛的核数据处理程序,可加工产生 WIMS-D、MATXS、ACE 等多种格式的数据库;AMPX 程序是美国橡树岭国家实验室开发的核数据处理程序^[2],可产生多种形式的多群和连续能量截面数据库;MC² 程序是美国阿贡国家实验室开发的用于快堆分析的多群截面制作程序^[3],具有核数据处理、共振计算、一维能谱计算等功能。我国的核数据处理程序的研究相对较少,中国核数据中心开发了核数据处理程序 Ruler^[4],目前可输出 WIMS-D 格式的多群数据库;清华大学以蒙特卡罗程序 RMC 为应用对象,进行过初步核数据处理研究^[5]。

我国先进反应堆(如快中子反应堆、高温反应堆)、高保真数值反应堆等研究不断深入,对核数据也提出了更多的需求。为加快我国核数据处理程序自主化进程,掌握核数据处理核心技术,西安交通大学拟开发核数据处理程序 NECP-Atlas,并采用 WLUP(WIMS-D library update project)计划基准题、ICSBEP(international criticality safety benchmark evaluation project)临界基准题对 NECP-Atlas 的精度进行验证。

1 核数据处理模型

核数据处理程序的任务是将评价核数据库中的数据加工成特定的格式供中子学程序使用。中子输运计算需要的核数据包括中子反应截面、次级粒子角度-能量分布。目前国际上主流的评价核数据均采用 ENDF-6 格式^[6],对中子输运计算需要的核数据根据其特点采用不同的形式给出,核数据处理程序需根据不同的数据形式以及评价库中给定的计算模型对核数据进行加工。核数据处理程序 NECP-Atlas 中关键功能的模型包括共振重构及线性化、多普勒

展宽计算、不可分辨共振区处理、热中子散射计算、多群截面计算等。

1.1 共振重构及线性化

对于可分辨共振区的中子反应截面,ENDF-6 格式评价数据库中给出了共振参数以及相应的重构公式,目前国际上主流评价核数据库中包含的共振公式主要有:单能级 Breit-Wigner、多能级 Breit-Wigner、Reich-Moore、Adler-Adler、有限 R 矩阵等,以上各公式共振参数的存储格式、共振截面的计算过程可参见文献^[6]。NECP-Atlas 可读取评价数据库中的共振参数,按以上各公式计算获得可分辨共振区的截面数据。高能区和低能区中子区截面随能量的变化比较平滑,评价数据库以表格形式给出,并且给出了相应的插值率,一般包括表 1 列出的 5 种插值率。

表 1 评价核数据库中使用的截面差值方法

Table 1 Interpolation law used in evaluated nuclear data file

编号 K	描述插值率	数学表达式
1	y 随 x 的变化是常数	$y = \text{constant}$
2	y 与 x 是线性关系	$y = y_k + A_k(x - x_k)$
3	y 与 $\lg x$ 是线性关系	$y = y_k + B_k \lg(x/x_k)$
4	$\lg y$ 与 x 是线性关系	$\lg y = \lg y_k + C_k(x - x_k)$
5	$\lg y$ 与 $\lg x$ 是线性关系	$\lg y = \lg y_k + D_k \lg(x/x_k)$

理论上,按高能区和低能区截面的插值方法、可分辨共振区的重构公式,即可获得不同能量点的截面,但核数据处理过程中需进行线性化处理,主要原因包括:一是保证按插值方法获得的总截面与各分反应道截面加和的数值一致性;二是不同的核素在可分辨共振区无统一的重构公式,需对其进行线性化获得统一的截面插值方式,方便在后续的多普勒展宽等计算中使用。

NECP-Atlas 基于二分法对截面进行线性化,线性化过程中除了保证线性插值误差满足指定精度外,还采用多重判据控制线性化的精度和数据量。例如:某些反应道截面在可分辨共振区变化平滑,线性化后能量网格较粗,但经多普勒展宽后截面随能量变得倾斜,粗能量网格插值精度较差,因此,NECP-Atlas 在网格较

粗的能量范围内会自动增加一定的网格点,以保证精度;另外,靠近不可分辨共振区的能量范围,共振峰非常窄,线性化需要大量的能量点,这样会增加数据的输出量,但对于热谱反应堆,此能量范围内中子的重要性相对较小,因此,NECP-Atlas增加了按 $1/E$ 谱加权的共振积分作为收敛判据,控制能量网格数量。

1.2 多普勒展宽计算

中子和靶核发生反应的截面仅与二者的相对速度相关,即无论环境温度是多少,只要二者的相对速度相同,则反应截面相同。评价核数据库中中子的能量即为相对系下的能量,而中子输运方程中中子能量为实验室参考系下的能量。在实验室参考系中,固定能量 E 的中子与靶核碰撞时,由于不同温度下靶核运动状态不同,所以二者相对运动的速度不同,造成实验室参考系中不同温度下中子和靶核反应的截面不同。因此,需将评价库中的截面转化为实验室参考系下不同温度的截面,即进行多普勒展宽。

多普勒展宽时应遵循相对参考系和实验室参考系下的反应率守恒的原则,并假设靶核的运动速度满足麦克斯韦分布,且运动方向为各向同性,则可获得实验室参考系中温度为 T 时精确的多普勒展宽方程:

$$\sqrt{E}\sigma(E, T) = \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha}{\pi E} \right)^{1/2} \int_0^{\infty} \sqrt{E_r} \sigma(E_r, 0) dE_r \cdot \{ \exp[-\alpha(\sqrt{E} - \sqrt{E_r})^2] - \exp[-\alpha(\sqrt{E} + \sqrt{E_r})^2] \} \quad (1)$$

式中: E 为实验室参考系中子能量; E_r 为中子与靶核相对能量; $\sigma(E, T)$ 为实验室系中温度为 T 、中子能量为 E 时的反应截面; $\sigma(E_r, 0)$ 为评价库中相对能量为 E_r 时的中子反应截面; $\alpha = A/KT$, A 为靶核相对中子的质量, K 为玻尔兹曼常数。

NECP-Atlas采用Kernel Broadening方法对方程(1)进行求解,该方法利用线性化的截面对方程中 $\sigma(E_r, 0)$ 进行处理,经过推导,将多普勒展宽方程中的指数积分转化为余误差函数,具体的推导过程可参考文献[7]。

1.3 不可分辨共振区处理

不可分辨共振区由于共振峰非常密集,实验无法获得精确的共振峰分布,评价库中给出了共振峰分布的概率函数,所以核数据处理程

序仅能获得某能量范围内平均的中子截面。另外,虽然实验无法测量共振峰的分布,但物理上共振峰是实际存在的,所以平均中子截面需进行共振自屏处理。根据以上讨论,某能量范围 $[E_1, E_2]$ 之间的平均截面可表示为:

$$\bar{\sigma}_x(E^*) = \frac{\int_{E_1}^{E_2} \sigma_x(E) \phi(E) dE}{\int_{E_1}^{E_2} \phi(E) dE} \quad (2)$$

式中: $\bar{\sigma}_x$ 为能量范围 $[E_1, E_2]$ 内 x 反应道的平均截面; E^* 为 $[E_1, E_2]$ 内的有效能量; $\phi(E)$ 为权重能谱。

NECP-Atlas中采用基于窄共振近似的Bondarenko模型获得各阶权重谱,将 x 反应道的截面 $\sigma_x(E)$ 表示为光滑部分和共振部分的相加,可获得 $\bar{\sigma}_x(E^*)$ 的表达式:

$$\bar{\sigma}_x(E^*) = b_x + \frac{\bar{\sigma} I_x}{1 - I_x} \quad (3)$$

式中: b_x 为 x 反应道截面的光滑部分,可从评价库核数据库中读取; $\bar{\sigma}$ 为本底截面; I_x 为 x 反应道的共振积分,当 $x=t$ 时表示总截面。求解上式的关键在于 I_x 的计算, I_x 表达式为:

$$I_x = \frac{1}{E_2 - E_1} \int_{E_1}^{E_2} \frac{\sum_s \sum_r \sigma_{xsr}(E - E_{sr})}{\bar{\sigma} + \sum_s \sum_r \sigma_{tsr}(E - E_{sr})} dE \quad (4)$$

式中: s 为自旋序列索引; r 为某自旋序列中共振能级索引; E_{sr} 为 s 自旋序列、 r 能级的中心能量; σ_{xsr} 为 s 自旋序列、 r 能级的共振截面,评价库中以单能级Breit-Wigner公式给出。

NECP-Atlas采用统计积分方法对上式的积分进行求解,最终获得共振积分的计算公式为:

$$I_x = \sum_s A_{xs} \quad (5)$$

$$A_{xs} = (B_{xs} - V_{xs}) \left(1 - \sum_{s' \neq s} A_{xs'} \right) \quad (6)$$

式中: B_{xs} 为自旋序列内孤立共振能级积分; V_{xs} 为同一自旋序列内不同共振能级间的叠加效应; A_{xs} 为不同自旋序列间的叠加效应。为对方程(6)进行求解,国际上的核数据处理程序对该方程引入了一定的近似,例如MC²和NJOY等程序忽略了自旋序列内不同共振能级间的叠加效应,即认为 $V_{xs} = 0$,另外,两程序还对第3项序列间叠加项进行了简化,假设 $B_{xs} = A_{xs}^{[1]}$ 。NECP-Atlas使用了以上第1个假设,但未采用第2个假设,精确考虑了不同自旋序列间的

叠加效应。由于评价数据库中不可分辨共振区的共振参数按单能级 Breit-Wigner 公式给出,因此,NECP-Atlas 采用 Phi-Chi 方法进行直接多普勒展宽,获得不同温度下的截面。

1.4 热中子散射计算

在热能区,中子的波长接近分子的尺寸和晶体材料的晶格的尺寸,此时中子的散射效应需考虑中子的波动性,中子散射机理不同于高能区的两体碰撞,散射机理由量子力学决定。对于晶体材料(如石墨材料)的相干弹性散射、含 H-1 非晶体材料(如聚乙烯、ZrH)的非相干弹性散射,NECP-Atlas 读取评价数据库中热散射数据,计算获得热能区点态的中子散射截面,各类散射模型可参见文献[6]。对于评价数据库中给出 $S(\alpha, \beta)$ 散射数据的材料,NECP-Atlas 直接读取该数据计算热散射截面以及能量点之间的转移关系,对于评价核数据库中未给出 $S(\alpha, \beta)$ 散射数据的材料,按自由气体模型计算获得散射数据。

1.5 多群截面计算

多群截面计算的任务是计算权重能谱,根据用户指定的能群结构,将以上模型获得的点截面转化为多群截面和各阶群间散射矩阵等。当前处理的核素和慢化核素构成的均匀问题的精确权重能谱满足如下慢化方程:

$$(\sigma_{i,1}(E) + \sigma_{i,2}(E))\phi(E) = \int_E^{E/a_1} \frac{\Sigma_{s,1}(E')}{(1-\alpha_1)E'} \cdot \phi(E')dE' + \int_E^{E/a_2} \frac{\Sigma_{s,2}(E')}{(1-\alpha_2)E'} \phi(E')dE' \quad (7)$$

式中:下标 1 表示慢化核素,2 表示当前处理的核素; $\alpha = [(A-1)/(A+1)]^2$ 。

NECP-Atlas 程序计算权重能谱时,首先按用户指定的本底截面构造当前处理核素和慢化核素均匀混合的问题,然后采用窄共振近似方法获得权重能谱,由此获得权重能谱为:

$$\phi(E) = \frac{\sum_{i=1}^N \Sigma_{i,p}}{\sum_{i=1}^N \Sigma_{i,t}(E)} C(E) \quad (8)$$

式中: N 为核素个数; $\Sigma_{i,t}$ 为 i 核素的总截面; $\Sigma_{i,p}$ 为 i 核素的势散射截面; $C(E)$ 为能量 E 下的典型能谱。

为减少窄共振近似在可分辨共振区引入的误差,NECP-Atlas 可在指定能量范围对所构

造的均匀问题进行精确的超细群计算获得连续能量的权重能谱。此外,NECP-Atlas 还包含 1 维棒几何、1 维球几何超细群能谱的计算功能,以便获得问题相关的非均匀共振积分表。获得权重能谱后,可将上文介绍各模块处理获得的点截面归并为多群截面、能群间散射矩阵、多群裂变谱等多群参数,具体的计算公式可参见文献[1]。

2 NECP-Atlas 的开发与验证

基于以上理论模型,采用 Fortran2003 语言,以面向对象的程序开发方法,将不同的核数据处理功能进行对象封装,开发了核数据处理程序 NECP-Atlas,程序不同的对象之间依靠内存进行数据传输。各对象可按 NJOY 程序使用的 PENDF 格式或 GENDF 格式文件进行数据输出,以便 NJOY 程序的功能模块采用 NECP-Atlas 的数据。

目前 NECP-Atlas 在进行共振重构及线性化、多普勒展宽计算、不可分辨共振区处理、热中子散射计算、多群截面计算之后,可将多群数据转化为 WIMS-D 和 WIMS-E 格式的多群数据库。为测试 NECP-Atlas 程序的计算精度,首先对比了 NECP-Atlas 加工产生的点截面,然后采用 WLUP 计划基准题、国际临界安全基准题 ICSBEP 对其进行了数值验证。WLUP 计划基准题的验证思路为:采用 NJOY-2016 和 NECP-Atlas,基于 ENDF/B-7.1 分别制作 WIMS-D 格式数据库,利用 DRAGON 程序读取 WIMS-D 格式数据库对基准题进行计算,对比 NJOY-2016 和 NECP-Atlas 的计算精度。ICSBEP 基准题的验证思路:由于 NECP-Atlas 目前不包含 ACE 格式数据库的输出功能,验证时首先采用 NECP-Atlas 进行共振重构及线性化、多普勒展宽计算、不可分辨共振区处理、热中子散射计算获得点态截面,将点态截面数据输出给 NJOY-2016 的 ACER 模块,获得 ACE 格式的数据库,然后将获得的 ACE 格式数据和完全采用 NJOY-2016 获得的 ACE 格式的数据库进行 ICSBEP 基准题的验证计算,计算时采用的程序为 MCNP。

2.1 点截面对比

本文首先给出了采用 NECP-Atlas 和 NJOY-

2016 加工产生的温度为 293 K 下的点截面,图 1 为 ^{235}U 和 ^{238}U 的总截面,可看出 NECP-Atlas 加工产生的总截面和 NJOY-2016 吻合,对于 ^{235}U 在 1 000 eV 左右误差较大,此能量为 ^{235}U 可分辨共振区和不可分辨共振区的分界点,由于两程序对分界点采用了不同的处理方式,所以产生图中所示的误差; ^{238}U 在 10 000 eV 左右的误差也是以上原因造成的。在 NECP-Atlas 中,总截面由其他分截面加和得到。

2.2 WLUP 基准题的验证

验证中计算了二氧化铀-轻水冷却 46 个基准题、金属燃料-轻水冷却 49 个基准题、二氧化铀-含硼轻水冷却 25 个基准题、混合氧化物燃料-轻水冷却 35 个基准题、钚燃料-轻水冷却 8

个基准题、钚燃料-重水冷却 8 个基准题,表 2 列出了采用 NECP-Atlas 加工的数据库和 NJOY-2016 加工的核数据库以上各类问题计算结果的均方根误差。

从表 2 可看出,计算结果和基准题的实验结果误差均很大,这是由于计算结果受多方面的影响,如数据库的精度、数据库的能群结构、共振计算方法、各向异性散射处理方法等,确定宏观检验的误差来源仍需后续系统性的研究。本文的目的是介绍 NECP-Atlas 的开发与验证,所以在 DRAGON 程序使用两个数据库计算基准题时的计算条件完全一致,用此方法来排除其他因素的影响,仅验证 NECP-Atlas 的计算精度。

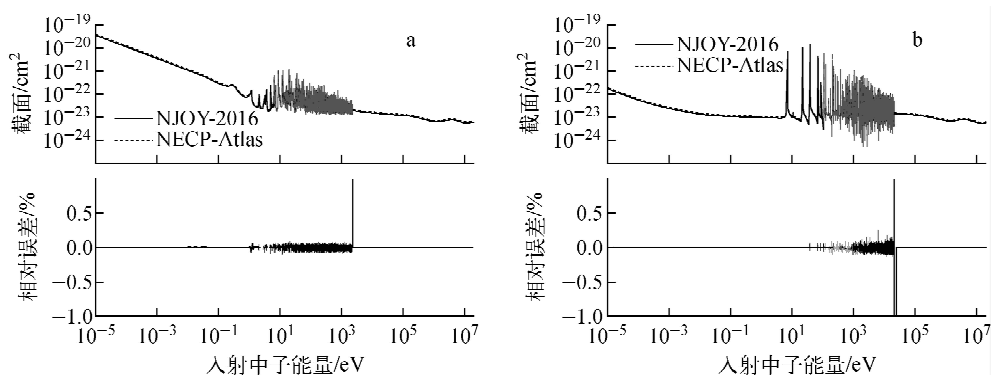


图 1 ^{235}U (a)和 ^{238}U (b)总截面

Fig. 1 Total cross sections of ^{235}U (a) and ^{238}U (b)

表 2 WLUP 基准题计算结果

Table 2 Result for WLUP benchmark

基准题类型	NECP-Atlas 的均方根误差/pcm	NJOY-2016 的均方根误差/pcm
二氧化铀-轻水	712	723
金属燃料-轻水	639	659
二氧化铀-含硼轻水	924	960
混合氧化物燃料-轻水	683	661
钚燃料-轻水	1 159	1 189
钚燃料-重水	341	351

对比两个数据库的计算结果,除混合氧化物燃料-轻水问题外,其他问题 NECP-Atlas 的计算结果均有不同程度的提高,原因在于多群截面处理模块慢化方程的求解方式不同,图 2 示出了使用 NECP-Atlas 和 NJOY-2016 计算

的本底截面为 $2.40 \times 10^{-22} \text{ cm}^2$ 时获得的 ^{235}U 吸收截面和 MCNP 直接计算获得的多群截面的误差,可发现 NECP-Atlas 的精度较高。

2.3 ICSBEP 基准题的验证

验证中计算了高富集度铀-溶液-热谱 14

个基准题、高富集度铀-化合物-中间能谱 6 个基准题、高富集度铀-金属-混合谱 13 个基准题、高富集度铀-金属-快谱 20 个基准题。表 3 列出了采用 NECP-Atlas 加工的数据库和 NJOY-2016 加工的核数据库以上各类问题计算结果的均方根误差,使用 NECP-Atlas 加工的核数据库相对 NJOY-2016 精度提高了 20~70 pcm。NECP-Atlas 精度改进的主要原因包括:NECP-Atlas 采用了 9 位有效数字输出,数据精度更高;不可分辨共振区能量点更密;热散射截面能量点更密,是直接用的弹性散射的能量点。

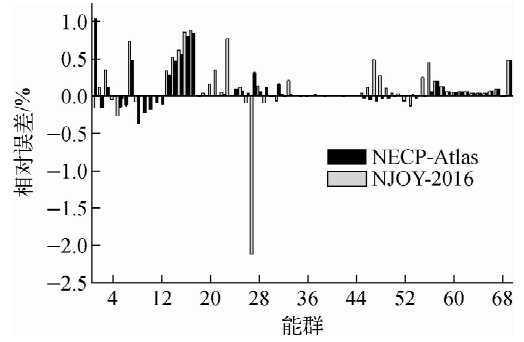


图 2 ^{235}U 多群吸收截面

Fig. 2 Multi-group absorption cross section of ^{235}U

表 3 ICSBEP 基准题计算结果

Table 3 Result for ICSBEP benchmark

基准题类型	NECP-Atlas 的均方根误差/pcm	NJOY-2016 的均方根误差/pcm
高富集度铀-溶液-热谱	405	458
高富集度铀-化合物-中间能谱	473	541
高富集度铀-金属-混合谱	332	355
高富集度铀-金属-快谱	297	295

3 小结

介绍了西安交通大学开发的核数据处理程序 NECP-Atlas 的理论模型、程序的开发与验证情况。使用 WLUP 基准题和国际临界安全基准题 ICSBEP 对 NECP-Atlas 的计算精度的数值验证结果表明,NECP-Atlas 可得到与 NJOY-2016 相当的精度。

参考文献:

[1] MACFARLANE R E, MUIR D W, BOICOURT R M, et al. The NJOY nuclear data processing system, LA-UR-12-27079[R]. USA: Los Alamos National Laboratory, 2012.

[2] WIARDA D, DUNN M E, GREENE N M, et al. AMPX-6: A modular code system for processing ENDF/B, ORNL/TM-2016/43[R]. USA: Oak Ridge National Laboratory, 2016.

[3] LEE C H, YANG W S. MC²-3: Multigroup cross section generation code for fast reactor

analysis, ANL/NE-11-41 Rev. 2[R]. USA: Argonne National Laboratory, 2013.

[4] LIU P, WU X, GE Z, et al. Progress on China nuclear data processing code system[C]// Proceedings of the ND2016. Bruges, Belgium: [s. n.], 2016.

[5] 余健开,李松阳,王侃,等. 反应堆用核截面处理程序 RXSP 的研发与验证[J]. 核动力工程, 2013,34(S1):10-13.

YU Jiankai, LI Songyang, WANG Kan, et al. Development and validation of nuclear cross section processing code for reactor analysis: RXSP[J]. Nuclear Power Engineering, 2013, 34(S1): 10-13(in Chinese).

[6] TRKOV A, HERMAN M, BROWN D A. ENDF-6 formats manual, BNL-90365-2009 Rev.2 [R]. USA: Brookhaven National Laboratory, 2012.

[7] CACUCI D G. Handbook of nuclear engineering [M]. Germany: Springer, 2010.