

基于评价核数据库的连续点截面处理模块 ACEXS的开发与验证

马璇, 马续波*, 黄钰琴, 胡 旭, 张 斌

华北电力大学核科学与工程学院, 北京

收稿日期: 2022年5月7日; 录用日期: 2022年5月19日; 发布日期: 2022年7月7日

摘 要

蒙特卡罗在反应堆物理计算中具有重要作用, 而目前反应堆的蒙特卡罗程序, 如MCNP、RMC等, 都采用连续能量点截面, 开发基于评价核数据库的连续能量点截面处理程序对于蒙特卡罗计算具有重要意义。利用倒栈法, 自主开发了连续能量点截面处理模块ACEXS。ACEXS的主要功能是把ENDF数据库中的角分布和能量分布数据转化成概率表形式, 包括MF4、MF5和MF6中的所有的反应道, 这些反应道包括裂变、 $(n, 2n)$ 、 $(n, 3n)$ 等。然后基于ENDF/B-VII.1评价核数据库制作了连续能量点截面数据库, 对比了ACEXS产生的概率分布与NJOY2016的结果, 概率密度最大误差不超过0.5%, 累积密度最大不超过0.1%。利用ICSBEP手册中的临界基准题对数据库精度进行了验证, ACEXS与ACER的结果绝对偏差小于100 pcm。最后采用快堆基准题ZPR6/7, 计算了基准题有效增殖因子, ACEXS的计算结果与ACER的偏差为6 pcm, 由此说明程序开发正确, 计算结果与ACER的计算结果吻合较好。

关键词

核数据处理, 连续能量点截面, 概率表, AXSP

Development and Verification of Continuous Point Section Processing Module ACEXS Based on Evaluated Nuclear Database

Xuan Ma, Xubo Ma*, Yuqin Huang, Kui Hu, Bin Zhang

College of Nuclear Science and Engineering, North China Electric Power University, Beijing

Received: May 7th, 2022; accepted: May 19th, 2022; published: Jul. 7th, 2022

*通讯作者。

文章引用: 马璇, 马续波, 黄钰琴, 胡旭, 张斌. 基于评价核数据库的连续点截面处理模块 ACEXS 的开发与验证[J]. 核科学与技术, 2022, 10(3): 152-164. DOI: 10.12677/nst.2022.103016

Abstract

Monte Carlo plays an important role in reactor physical calculation, and the current reactor Monte Carlo program, such as MCNP, RMC, etc., all use continuous energy point cross section. It is of great significance to develop continuous energy point cross section processing program based on evaluation nuclear database for Monte Carlo calculation. A continuous energy point cross section processing module, ACEXS, is developed by using backward stack method. The main function of ACEXS is to convert the angular distribution and energy distribution data in ENDF database into probability table form, including all reaction paths in MF4, MF5 and MF6, including fission, (n, 2n), (n, 3n), etc. Then, based on ENDF/B-VII.1 evaluation kernel database, the continuous energy point cross section database was made, and the probability distribution generated by ACEXS was compared with the results of NJOY2016. The maximum error of probability density was less than 0.5%, and the maximum cumulative density was less than 0.1%. The accuracy of the database was verified by the critical benchmark in ICSBEP manual, and the absolute deviation between ACEXS and ACER was less than 100 pcm. Finally, fast reactor benchmark ZPR6/7 was used to calculate the effective proliferation factor of the benchmark. The deviation between ACEXS and ACER was 6 pcm, indicating that the program was developed correctly and the calculated results were in good agreement with those of ACER.

Keywords

Nuclear Data Processing, Continuous Point Section, Probability Table, AXSP

Copyright © 2022 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

评价核数据库是核工程设计与核技术研究的重要基础,但评价核数据库并不能直接应用于核工程设计,而是需要经过复杂的处理,然后生成为核工程设计和核技术应用的核数据库。蒙特卡罗程序 MCNP [1]和 RMC [2]所需要的 ACE 格式连续能量点截面库是其中一种。目前具备生成 ACE 格式数据库功能的程序有美国洛斯·阿拉莫斯国家实验室开发的 NJOY2016 [3],日本原子能研究所开发的 FRENDRY [4],清华大学开发的 RXSP [5],西安交通大学开发的 NECP-Atlas [6]等。NJOY2016 程序已经开源,但其它程序都很难获得源代码,如果想采用新的处理对原有程序进行改进,往往变的非常困难。况且,研究发现 NJOY 在处理中子释热的时候,对某些核素也会出现处理不正确的现象[7]。还有 NJOY 中的 UNRES 模块,在低本底截面时,计算的共振自屏截面,由于采用近似也会导致不精确的问题 [8]。为此,华北电力大学 IRPS 实验室自主开发了先进评价库处理程序 AXSP,AXSP 主要功能包括共振峰的重造[8]、多普勒展宽、不可分辨共振峰的处理、连续能量点截面的生成、多群截面的生成、多群协方差数据库等模块。ACEXS 是 AXSP 程序中连续能量点截面处理模块,主要功能是采用倒栈法,把经过共振峰的重造、多普勒展宽、不可分辨共振峰的处理的 PENDF 数据转化成连续能量点截面数据,以便给蒙特卡罗程序使用。ACE 格式数据库作为一种紧凑型评价核数据库格式,是一种与温度相关的连续能量核截面库,里面数据量大,包含信息广,包括各反应截面、主体能量框架、瞬缓发中子数、裂变中子数以及除弹性散射外其他所有反应类型的反应释热、次级粒子角分布概率表、次级粒子能量分布概率表等数据。本文首先介绍了 ACE 格式数据库处理理论,然后同 NJOY 产生的概率分布进行对比,以验证程序

处理正确性。然后采用 ICSBEP 基准手册[9]中的临界基准题 ZPR-6/7, 对程序产生的连续能量点截面数据库精度进行了验证。

2. 概率表生成理论

ACEXS 的主要功能是将 ENDF 中以不同形式存储的数据, 转化成蒙特卡罗程序能用的概率表形式。ENDF 中的原始数据, 主要包括次级粒子的角度分布和能量分布, 一般采用多种形式存储, 如勒让德系数、裂变谱公式或者 Kalbach-Mann 公式。下面分别对上述不同形式的转化方法理论给予分析。

2.1. MF4 数据概率表转化

ENDF 文件中 MF4 用于描述出射中子的角度分布与能量分布具有强关联的情况。一般情况下, 它只适用于入射中子或 γ 光子的反应, 而不应用于任何其他入射粒子。对满足两体动力学的反应, 如弹性散射(MT = 2)和分离能级非弹性散射(MT = 51~90), 能量和角度具有确定的对应关系, MF4 中的角分布数据存在 4 种形式: 勒让德系数形式、列表概率分布形式、纯各向同性形式, 以及低能区为勒让德系数, 高能区为列表概率分布的形式, 对于概率表形式不需要进行计算, 可直接对其读取。对于勒让德系数形式, 则需要将勒让德系数转换为概率表。用勒让德系数表示出射例子能量和角度分布的表达式为

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

其中, l 为勒让德阶数, a_l 为勒让德系数, 由 MF4 中读取, P_l 为 l 阶勒让德多项式。对于用公式(1)表示的能量和角度分布形式, 需要根据 μ 所在区间[-1, 1], 通过倒栈法(或二分法)重构出所需要的角度来线性化描述角分布曲线, 再求得每个角度对应的概率密度。对于概率表形式, 评价核数据库中已给出概率分布, 只需对其原有分布数据进行归一化。

2.2. MF5 数据概率表转化

MF5 用于描述出射中子的能量分布, MF5 中给出了除 MF4、MF6 中给出的其他产生次级中子的反应。在 ENDF/B 文件中根据 LF 的不同, 数据的分布也有不用, 计算概率的处理方法也有所不同, 主要有六种分布, 六种分布的分布类型及对应公式如表 1 所示。

Table 1. Six types of energy distribution in ENDF/B format database
表 1. ENDF/B 格式数据库中对应的六种能量分布类型

LF	分布类型	对应公式和归一化常数公式	对应 ACE 中分布律
1	通用列表函数	$f(E \rightarrow E') = g(E \rightarrow E')$	4
5	通用蒸发谱	$f(E \rightarrow E') = g(E'/\theta(E))$	5
7	简单麦克斯韦谱	$f(E \rightarrow E') = \frac{\sqrt{E'}}{I} e^{-E'/\theta(E)}$ $I = \theta^{3/2} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf} \left(\sqrt{(E-U)/\theta} \right) - e^{-(E-U)/\theta} \right]$	7
9	蒸发谱	$f(E \rightarrow E') = \frac{\sqrt{E'}}{I} e^{-E'/\theta(E)}$ $I = \theta^2 \left[1 - e^{-(E-U)/\theta} \left(1 + \frac{E-U}{\theta} \right) \right]$	9

Continued

		$f(E \rightarrow E') = \frac{e^{-E'/a}}{I} \sinh(\sqrt{bE'})$	
11	能量相关的 watt 谱	$I = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi a^3 b}{4}} \exp\left(\frac{ab}{4}\right) \left[\operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{E-U}{a}} - \frac{ab}{4}\right) + \operatorname{erf}\left(\sqrt{\frac{E-U}{a}} + \frac{ab}{4}\right) \right]$ $- a \exp\left[-\left(\frac{E-U}{a}\right)\right] \sinh\sqrt{b(E-U)}$	11
12	能量相关的 裂变中子谱	$f(E \rightarrow E') = \frac{1}{2} [g(E', E_F(L)) + g(E', E_F(H))]$	4

如果 PENDF 文件所给能量框架相邻两能量点间隔过大需要进行加密, 利用倒栈法插入新的能量点, 构建出新的能量框架。另外 LF = 2, 3, 4, 6, 8 时, 不适合 ENDF-6 [10] 格式, ENDF 评价库不再使用。

2.3. MF6 数据概率表转化

MF6 主要用于描述较复杂的核反应, 在 ENDF/B 文件中根据 LAW 参数的不同, 数据的分布也有不用, 计算概率的处理方法也有所不同, 主要有八种分布。目前的 ACEXS 主要处理了次级中子的数据, 包括 LAW = 1、6、7 的情况。当 LAW = 1 时又根据 LANG 可以分为 LANG = 1 和 LANG = 2 两种形式。

其中各 LAW 分布与 ACE 中分布对应关系如表 2 所示:

Table 2. Correspondence of LAW distributions in MF6 and ACE

表 2. MF6 中各 LAW 分布与 ACE 中分布对应关系

LAW	分布类型	对应 ACE 中分布律
LAW = 1, LANG = 1	连续能量 - 角度分布, 勒让德形式	61
LAW = 1, LANG = 2	连续能量 - 角度分布, Kalbach 形式	44
LAW = 6	多项体空间分布	66
LAW = 7	实验室能量 - 角度分布	67

对于 LAW = 1, LANG = 1 的勒让德系数形式, 对于给定入射能量 E , 对于每一个出射能量 E' , 需使用倒栈法重构出在 $[-1, 1]$ 上的 μ 的分布, 包括概率密度分布函数和累积概率分布函数; 对于 LAW = 1, LANG = 2 的 Kalbach 系统学形式, 前提条件为假设每个次级粒子都是从同一个原始复合核发射出, 相应的转化过程中, 如果 ENDF/B 库中已经给出 $a(E_a, E_b)$ 了, 则只需复制相应的数据, 如果未给出则需要使用相应的 Kalbach 系统学公式计算。

3. 程序测试和验证

基于上述概率表生成理论, 在自主研发的核数据处理程序 AXSP 的基础上, 采用 Fortran2003 开发了 ACE 格式数据库制作模块 ACEXS, 并利用临界基准题对 ACEXS 做的库与 NJOY2016 中 ACER 模块制

作的库以及实验值进行了结果对比。ACEXS 程序的流程图如图 1 所示。由图 1 可见，程序主要包括了对截面的处理、角分布的处理和对能量分布的处理。

连续能量点截面库制作时，用到了共振峰重造模块 RECONR、多普勒展宽模块、HEATR 模块、中子热化模块和 PURR 模块以及产生 ACE 数据库的模块。为了对比 ACEXS 程序和 ACER 模块的计算结果，除了产生 ACE 数据库的模块 ACEXS 和 ACER 不同外，其它的都采用了 NJOY2016 中的模块。

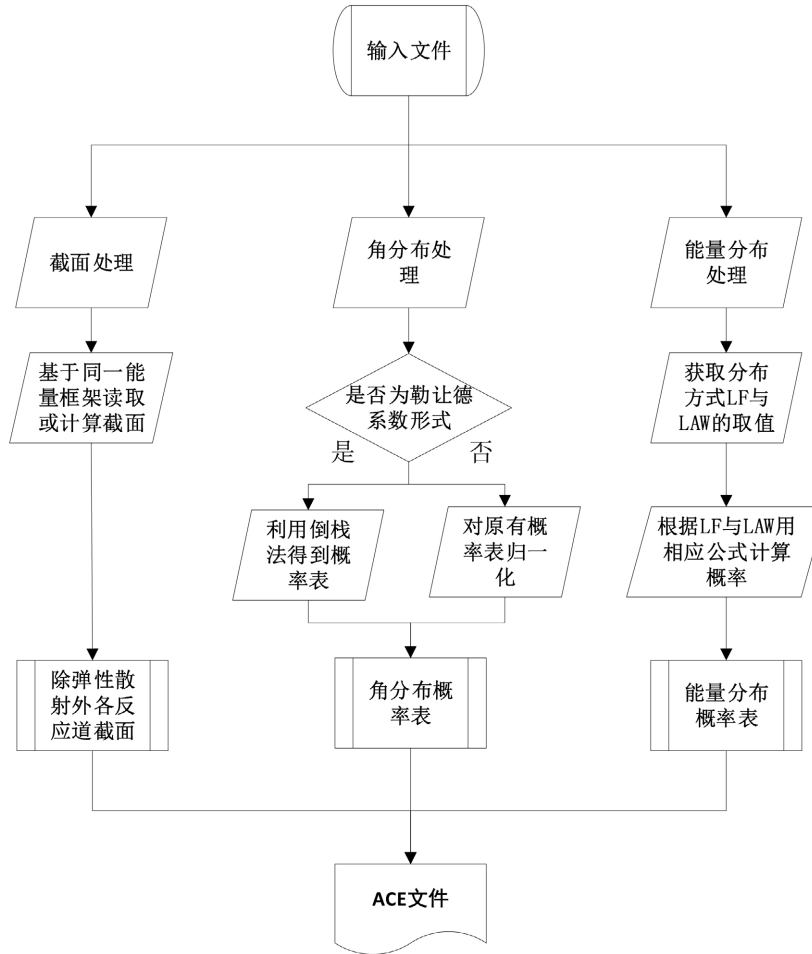


Figure 1. Flow chart of ACEXS program
图 1. ACEXS 程序流程图

3.1. 概率分布对比

ACE 格式数据库中角分布为概率表的形式，出射能量和出射角度具有确定对应关系，因而一个入射能量对应一个出射角分布。角分布对应关系为一个角度对应一个概率密度和一个累积密度。以 ^{235}U 弹性散射的一个角分布为例(对应能量 $E = 19 \text{ MeV}$)，图 2 和图 3 分别给出了 ACEXS 计算的角分布概率密度和累积概率与 ACER 模块计算结果对比。由图 2 和图 3 可见，角分布的概率密度以及累积概率吻合较好，概率密度最大相对误差不超过 0.25%，累积密度最大相对误差不超过 1.5%。图 4 和图 5 分别给出了针对 $LAW = 1, LANG = 1$ 的情况下二者对比结果，概率密度最大相对误差不超过 0.2%，累积密度最大相对误差不超过 0.1%，图 6 和图 7 分别给出了针对 $LAW = 1, LANG = 2$ 的情况下二者对比结果，由图 6 和

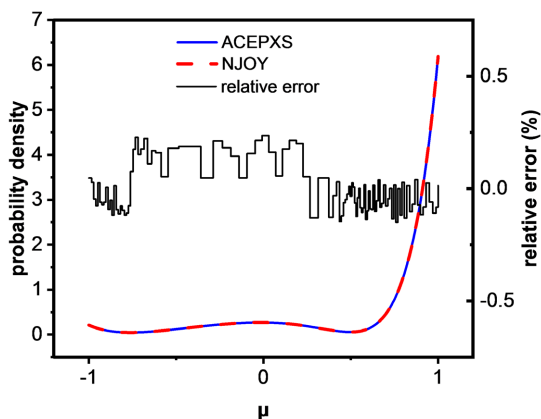


Figure 2. Comparison of angular distribution probability density and relative error between ACEXS and ACER

图 2. 角分布概率密度对比以及 ACEXS 与 ACER 的相对误差

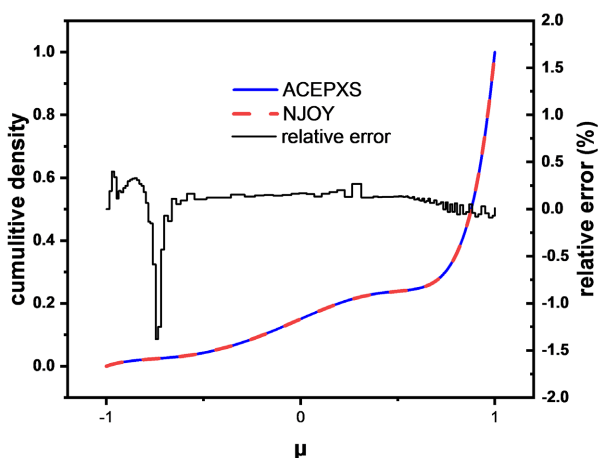


Figure 3. Comparison of angular distribution cumulative density and relative error between ACEXS and ACER

图 3. 角分布累积密度对比以及 ACEXS 与 ACER 的相对误差

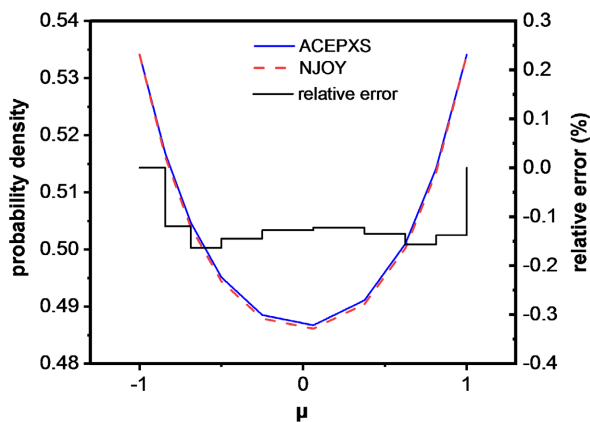


Figure 4. Comparison of energy Angle probability density and relative error between ACEXS and ACER when LAW = 1 and LANG = 1

图 4. LAW = 1, LANG = 1 时能量角度概率密度对比以及 ACEXS 与 ACER 相对误差

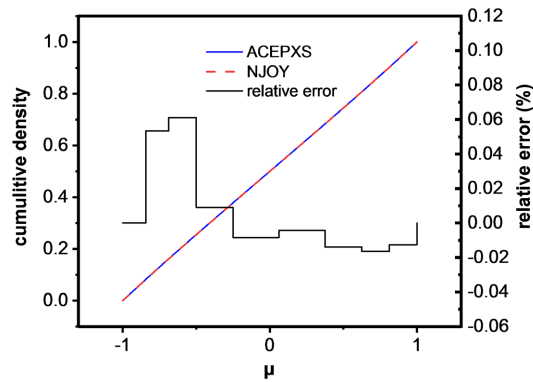


Figure 5. Comparison of cumulative density of energy angle distribution and relative error between ACEXS and ACER when LAW = 1 and LANG = 1

图 5. LAW = 1, LANG = 1 时能量角度分布累积密度对比以及 ACEXS 与 ACER 相对误差

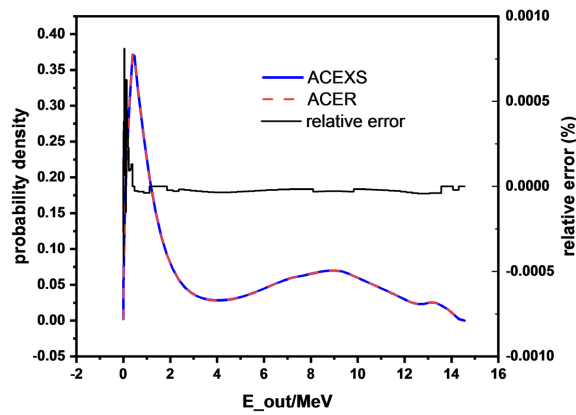


Figure 6. Comparison of energy spectrum probability density and relative error between ACEXS and ACER when LAW = 1 and LANG = 2

图 6. LAW = 1, LANG = 2 时能谱概率密度对比以及 ACEXS 与 ACER 相对误差

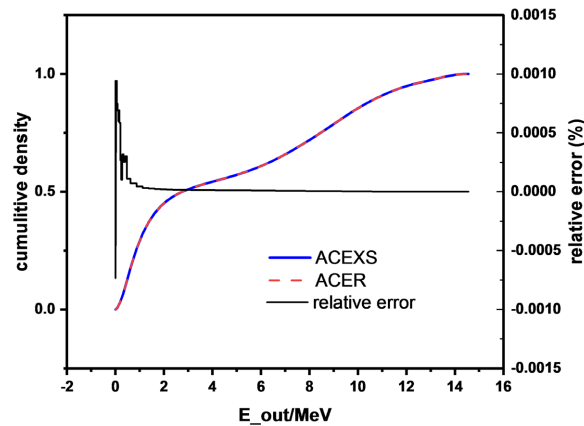


Figure 7. Comparison of energy spectrum cumulative density and relative error between ACEXS and ACER when LAW = 1 and LANG = 2

图 7. LAW = 1, LANG = 2 时能谱累积密度对比以及 ACEXS 与 ACER 相对误差

图 7 可见, 能量分布概率密度和累积概率都不超过 0.001%, 图 8 和图 9 给出了 LAW = 6 时, 二者对比结果, 由图 8 和图 9 可见, 概率密度的相对误差小于 0.0005%, 累积概率的相对误差小于 0.0001%, 计算结果符合较好。

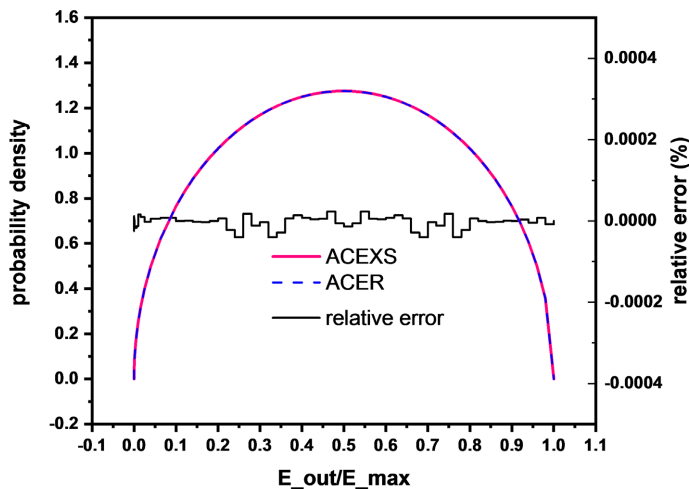


Figure 8. Comparison of energy spectrum probability density and relative error between ACEXS and ACER at LAW = 6

图 8. LAW = 6 时能谱概率密度对比以及 ACEXS 与 ACER 相对误差

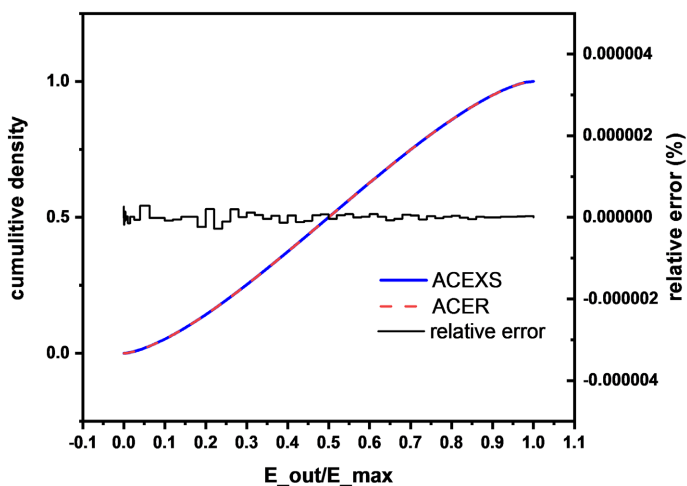


Figure 9. Comparison of energy spectrum cumulative density and relative error between ACEXS and ACER at LAW = 6

图 9. LAW = 6 时能谱累积密度对比以及 ACEXS 与 ACER 相对误差

3.2. 临界基准题验证

为了进一步验证 ACEXS 程序的工程适用性, 这里选用了国际临界安全基准评价手册(ICSBEF)中的基准题对所产生的数据库的精度做了进一步验证。基于 ENDF/B-VII.1 评价核数据库, 分别采用 ACEXS 程序和 NJOY2016 中的 ACER 程序制作了连续能量点截面数据库, 采用清华大学开发的蒙卡程序 RMC 计算临界基准值, 并于国际临界安全基准评价工程手册中的评价 k_{eff} 值做比较。RMC 计算时共设置循环 1000 代, 其中 50 代为非活跃代, 每一代设置 20000 个粒子, 此时统计误差小于 15 pcm。测试的临界基

准题如表 3 所示, 共包括 30 个基准题, 69 个核素, ACEXS 与 ACER 计算出的临界基准值与实验值的相对误差如图 10 所示。

Table 3. List of critical benchmarks
表 3. 临界基准题列表

编号.	基准题	简称
1	u233-met-fast-001	23umt1
2	u233-met-fast-002-case-1	23umt2a
3	u233-met-fast-002-case-2	23umt2b
4	u233-met-fast-003-case-1	23umt3a
5	u233-met-fast-003-case-2	23umt3b
6	u233-met-fast-004-case-1	23umt4a
7	u233-met-fast-004-case-2	23umt4b
8	u233-met-fast-006	23umet6
9	pu-met-fast-006	pumet6
10	pu-met-fast-008-case-1	pumet8a
11	pu-met-fast-008-case-2	pumet8b
12	pu-met-fast-009	pumet9
13	pu-met-fast-010	pumet10
14	pu-met-fast-011	pumet11
15	pu-met-fast-018	pumet18
16	heu-met-fast-001-case-2	umet1ss
17	heu-met-fast-003-case-1	umet3a
18	heu-met-fast-003-case-2	umet3b
19	heu-met-fast-003-case-3	umet3c
20	heu-met-fast-003-case-4	umet3d
21	heu-met-fast-003-case-5	umet3e
22	heu-met-fast-003-case-6	umet3f
23	heu-met-fast-003-case-7	umet3g
24	heu-met-fast-003-case-12	umet3l
25	heu-met-fast-028	umet28
26	heu-sol-therm-013-case-1	usol13a
27	heu-sol-therm-013-case-2	usol13b
28	heu-sol-therm-013-case-3	usol13c
29	heu-sol-therm-013-case-4	usol13d
30	heu-sol-therm-032	usol132

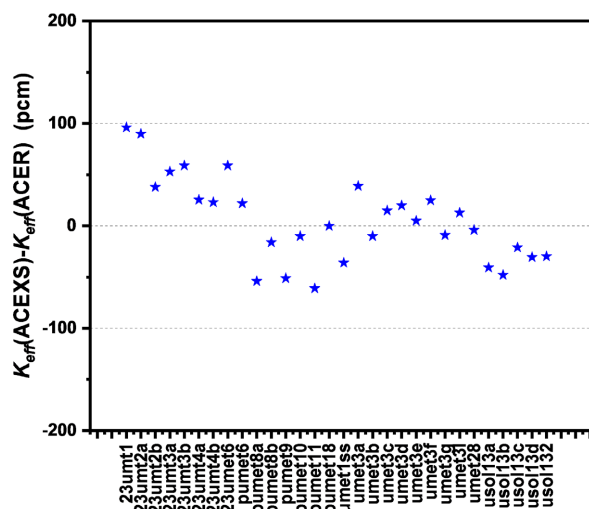


Figure 10. Absolute error between ACEXS and ACER

图 10. ACEXS 与 ACER 计算结果绝对误差

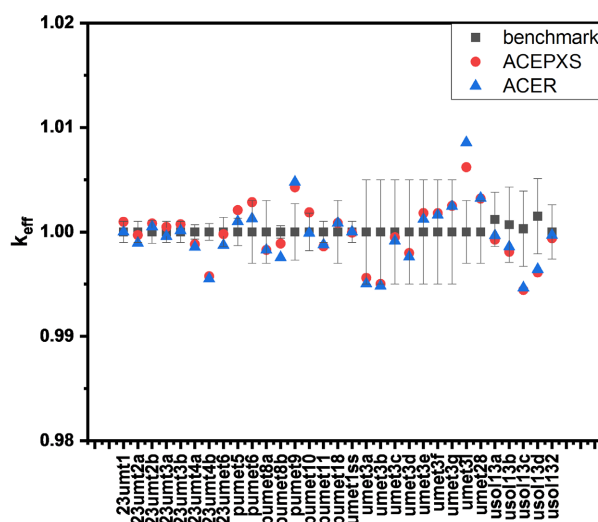


Figure 11. Calculation results and reference values of ACEXS and ACER

图 11. ACEXS 和 ACER 计算结果与基准值

从图 10、图 11 中可以看出，整体上 ACEXS 跟 ACER 符合较好，最大误差不超过 0.1%。

3.3. ZPR6-7 基准题验证

ZPR6-7 是美国阿贡实验室建立的零功率快堆临界装置之一[11]，燃料为 Pu-U-Zr，反射区为贫化铀和不锈钢，装置按照区域组分以及体积构建均匀 R-Z 模型，堆芯在径向分为两部分，即内堆芯和外堆芯，堆芯外围的第一层反射区分为轴向和径向两类，第一层反射区外围为第二层反射区，第二层反射区为一个整体，外部为真空边界，ZPR6/7 的 RZ 模型尺寸及分区如图 12 所示。整个装置包含 40 个核素。用 RMC 对 ZPR6-7 基准题临界计算，循环代数设置与 ICSBEP 基准题相同，此处统计误差为 15 pcm。结果如表 4 所示，ACER 和 ACEXS 计算结果绝对误差为 6 pcm。图 13、图 14 分别为 ZPR6/7 内堆芯和径向最外层

在能量为 $5 \times 10^{-4} \sim 10$ MeV 通量对比, 由图 13 可以看出在内堆芯处整个能区内 ACEXS 与 ACER 的通量吻合较好, 相对误差在 $\pm 1\%$ 以内。由图 14 可以看出有两个能群误差较大, 该能群处通量较小, 对结果影响不大, 除此之外二者相对误差在 $\pm 1\%$ 以内。

Table 4. ZPR6-7 thresholds for NJOY and ACEXS calculated by RMC
表 4. NJOY 和 ACEXS 由 RMC 计算的 ZPR6-7 临界值

	ACER	ACEXS	二者绝对误差(pcm)
Keff	0.98714	0.98708	6

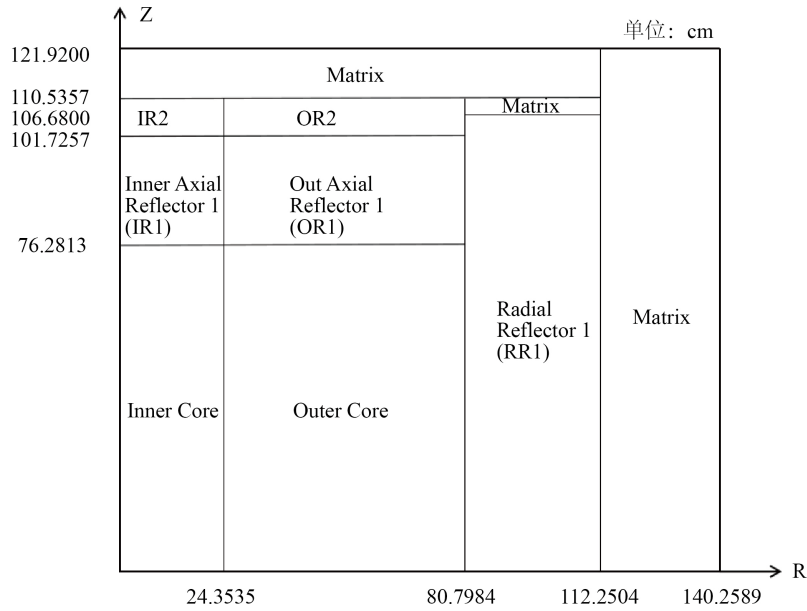


Figure 12. ZPR6-7 core RZ model [11]

图 12. ZPR6-7 堆芯 RZ 模型[11]

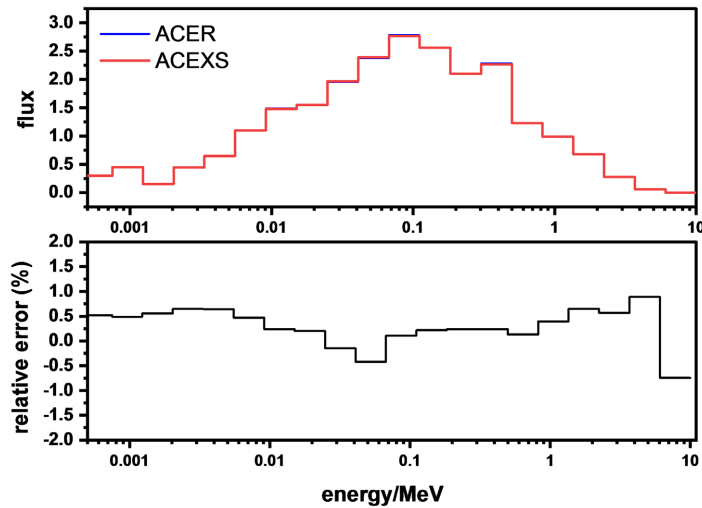


Figure 13. Core flux comparison in ZPR6/7

图 13. ZPR6/7 内堆芯通量对比

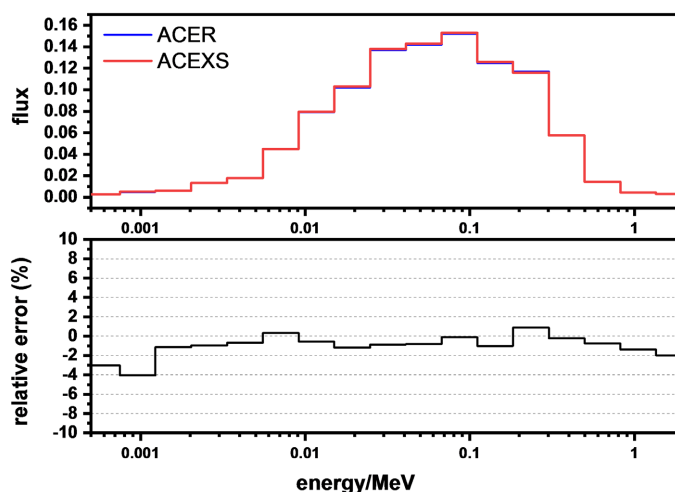


Figure 14. Comparison of radial outermost flux of ZPR6/7
图 14. ZPR6/7 径向最外层通量对比

4. 结论

本文在自主研发的核数据处理程序 AXSP 的基础上, 增加了 ACE 格式文件制作模块 ACEXS, 并利用国际临界安全基准题 ICSBEP 以及 ZPR6/7 基准题进行了验证。基于 ENDF/B-VII.1 评价核数据库制作了连续能量点截面数据库, 对比了 ACEXS 产生的概率分布与 ACER 的结果, 概率密度最大误差不超过 0.5%, 累积密度最大不超过 0.1%。利用 ICSBEP 手册中的临界基准题对数据库精度进行了验证, ACEXS 与 ACER 的结果绝对偏差小于 100 pcm。最后采用快堆基准题 ZPR6/7, 计算了基准题有效增殖因子, ACEXS 的计算结果与 NJOY2016 的偏差为 6 pcm, 由此说明程序开发正确, 计算结果与 NJOY2016 结果吻合较好。目前程序还不具有处理光子截面数据功能, 未来需要在光子截面处理上进一步开展工作。

基金项目

国家自然科学基金(11875128)。

参考文献

- [1] Brown, F.B., Barrett, R.F., Booth, T.E., *et al.* (2002) MCNP Version 5. *Transactions of the American Nuclear Society*, **87**, 02-3935.
- [2] Wang, K., Li, Z., She, D., *et al.* (2015) RMC—A Monte Carlo Code for Reactor Core Analysis. *Annals of Nuclear Energy*, **82**, 121-129. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.08.048>
- [3] Macfarlane, R., Muir, D.W., Boicourt, R.M., Kahler, A.C. and Conlin, J.L. (2016) The NJOY Nuclear Data Processing System: LA-UR-17-20093. Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM.
- [4] Tada, K., Nagaya, Y., *et al.* (2017) FRENDY: A New Nuclear Data Processing System Being Developed at JAEA. *EPJ Web of Conferences*, **146**, 02028.
- [5] 余健开, 李松阳, 王侃, 王冠博, 余纲林. 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.
- [6] 祖铁军, 徐嘉隆, 吴宏春, 曹良志. 核数据处理程序 NECP-Atlas 的开发与验证[J]. 原子能科学技术, 2018, 52(7): 1160-1165.
- [7] Konno, C., Sato, S., Ohta, M., *et al.* (2016) New Remarks on KERMA Factors and DPA Cross Section Data in ACE Files. *Fusion Engineering and Design*, **109-111**, 1649-1652. <https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2015.10.038>
- [8] 黄自锋. 共振峰重构与快堆超精细能群截面制作方法研究[D]: [硕士学位论文]. 北京: 华北电力大学, 2021. <https://doi.org/10.27140/d.cnki.gbbu.2021.000489>

- [9] Frankle, S.C. (1999) A Suite of Criticality Benchmarks for Validating Nuclear Data. Los Alamos National Lab., Los Alamos, NM.
- [10] Herman, M. (2009) Cross Sections Evaluation Working Group. ENDF-6 Formats Manual Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF/B-VI and ENDF/B-VII. Brookhaven National Lab. (BNL), Upton, NY. National Nuclear Data Center (NNDC).
- [11] Simth, M.A., Lell, R.M., Moneo, P., *et al.* (2003) ZPR-6 ASSEMBLY 7: A Cylindrical Assembly with Mixed (pu,u)-Oxide Fuel and Sodium with a Thick Depleted-Uraniumreflector: NEA/NSC/DOC(95)03/VI. Argonne National Laboratory.