

文章编号: 1007-4627(2012)04-0430-06

高温 ACE 格式连续能量点截面数据 产生程序 SIGACE 的验证

李志峰, 于涛, 谢金森, 秦勉

(南华大学核科学技术学院, 湖南 衡阳 421001)

摘要: 以最新发布的 ENDF/B-VII.1 评价库为基础, 使用 SIGACE 程序将低温 ACE 格式中子截面文件加工成较高温度的 ACE 格式文件, 生成了一个与温度相关的中子截面文档。为校核截面数据, 选取 ICT、标准 CANDU 组件燃料温度反应性系数、LWR 栅格多普勒系数以及 SEFOR 基准题对 SIGACE 加工的核数据进行了验证。基准题计算结果均与参考值符合较好, 表明 SIGACE 生成的高温 ACE 格式截面数据可用于反应堆相关中子学参数的计算。

关键词: SIGACE; MCNP; 连续能量点截面文档; 基准检验

中图分类号: TL329+.3 **文献标志码:** A

1 引言

MCNP4C^[1]全名为 A General Monte Carlo N-particle Transport Code, 它能够使用 ACE 格式连续能量点截面数据来计算中子、光子和电子输运问题。ACE 格式 (A Compact ENDF) 文件为 MCNP 程序支持的数据格式的一种。在 MCNP4C 自带的核数据库中, 只有一些重要铀系核素和慢化剂核素包括多温度数据。许多核装置, 如 ADS (Accelerator Driven Sub-critical System)、高温气冷堆和快中子反应堆等的研究和设计中, 都需要较高温度的核反应截面数据。因此, 使用截面加工程序来制作温度相关的中子核反应截面数据库是非常有必要的^[2]。

NJOY^[3]是国际上公认的应用最广的核数据加工处理程序。NJOY 程序由美国 Los Alamos 实验室编制, 可将 ENDF-6 格式^[4]的评价库处理生成供多种计算程序 (如 MCNP, WIMS^[5] 和 DORT^[6]) 使用的核数据库, 目前最新的版本是 NJOY99.364。它可以将 ENDF-6 格式中子截面评价数据加工成 ACE 格式连续能量点截面数据。NJOY 程序模块较多, 其中的 BROADR 模块用来实现多普勒展

宽, ACER 模块用来实现 ACE 格式文件的转换等。高版本的 NJOY 程序不易获得, 而 SIGACE 能够较简单地实现高温 ACE 格式文件的加工, 可从国际原子能机构 (IAEA) 的网站下载。

2 SIGACE 简介

SIGACE^[7]是 IAEA 核能与核安全司核数据科研发的, 其目的在于为 MCNP 使用者提供一种得到较高温度的 ACE 格式文件的工具。该程序的开发者为检验 SIGACE 程序的适用性, 开展过基于 FENDL-2.0 的截面对比分析, 同时也指出: 在高温 ACE 格式文档的生成过程中, 能量与角度分布的信息没有进行任何修改。这可能会造成高温 ACE 格式文档数据不精确, 因此在 SIGACE 程序应用于工程设计之前必须进行足够的积分基准验证。

SIGACE 程序包通过组合多个核数据处理程序实现高温 ACE 文档的制作。加工高温下的 ACE 格式文件的过程共需 4 个输入文件: 第一号输入文件为 ACELST 程序的输入, 将较低温度下的 ACE 格式文件转换为 ENDF 格式文件; 第二号输入文件为 PREPRO12^[8] 程序系统中 SIGMA1 程序

收稿日期: 2012-04-13; 修改日期: 2012-05-13

基金项目: 湖南省教育厅项目 (12C0333)

作者简介: 李志峰 (1988—), 男, 硕士研究生, 从事核能科学与工程研究; E-mail: nhdxlzf@163.com

通信作者: 于涛, E-mail: yutao39@sina.com

的输入, 用于进行 ENDF 数据的多普勒展宽; 第三号输入文件为 SIGACE 程序的输入, 将 SIGMA1 程序的输出即多普勒展宽后的 ENDF 格式文件转换成 ACE 格式文件, 该输入包含 5 张卡, 分别为初始 ACE 文件名、多普勒展宽的 ENDF 格式输入文

件名、多普勒展宽的 ACE 格式输出文件名、XS-DIR 文件的附加材料号、薄化误差, 本文误差选为 1%; 第四号输入文件提供给 COMPLIT, 用于比较两个不同输入版本的评价数据, 如图 1 所示。

SIGACE 所需较低温度下的 ACE 格式文件仍

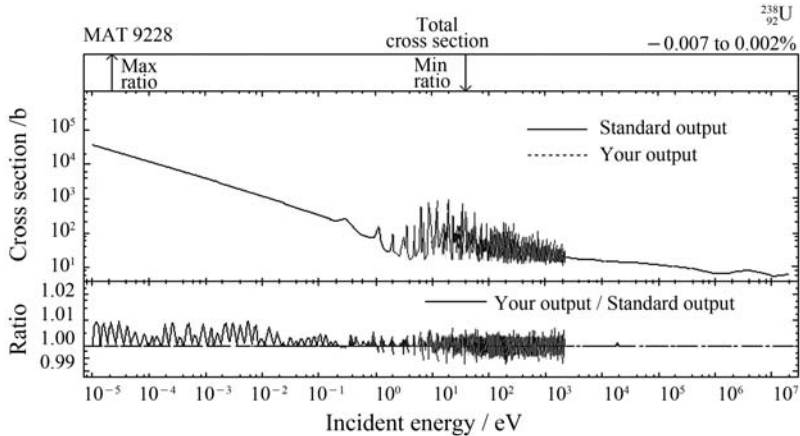


图 1 COMPLIT 程序界面

需 NJOY 程序加工而成, 本文以 IAEA 于 2012 年 1 月最新发布的 ENDF/B-VII.1^[9] 为基础库, 使用 NJOY 程序对所需核素的截面评价数据进行加工, 生成温度为 293 K 下的 ACE 格式文档。在使用 NJOY 程序加工过程中, reconr 和 broadr 的误差限 (截面文件所容许的最大误差) 在积分条件满足时均设为 0.001, thermr 能量上限设为 1.0 eV^[10]。

3 计算结果的基准验证

基准验证部分应用了 ICT 基准题^[11]、标准 CANDU 组件燃料温度反应性系数基准题^[12]、LWR 多普勒系数的数值基准题^[13]以及 SEFOR 实验基准题^[14]。首先, 由 NJOY 加工基准题中涉及到的核素, 生成温度为 293 K 下的 ACE 格式文档, 再使用 SIGACE 程序将这些常温下的 ACE 格式温度加工成更高温度的 ACE 格式文档, 最后将这些高温 ACE 格式文档提供给 MCNP4C 程序进行基准验证分析。

3.1 ICT 基准分析

该基准题源自国际核临界安全手册 (ICSBEP2005)^[11], 采用较高富集度燃料的热谱实验装置 (Intermediate Enriched Uranium systems, Compound, Thermal neutron spectrum systems,

IEUCT), 轴向布置有富集度为 17% 的圆柱形燃料棒, 慢化剂和反射层皆为水, 如图 2 所示。

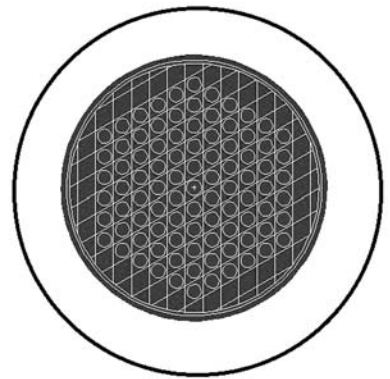


图 2 IEUCT 装置截面图

本基准分析涉及的 6 个基准题中, ICT-002-001, ICT-002-003 和 ICT-002-005 基准题均为常温, ICT-002-002, ICT-002-004 和 ICT-002-006 基准题温度较高, 分别为 491.56, 423.16 和 423.22 K, 目的在于比较 SIGACE 加工的 ACE 文件与原基准的有效增殖因子, 其中 ICT-002-001 与 ICT-002-002, ICT-002-003 与 ICT-002-004, ICT-002-005 与 ICT-002-006 基准分别是成对的实验。在比较中, 计算温度系数可以降低因为评价库的不同而带来绝对量的偏差, 更侧重热散射数据变化带来的

影响。该基准题涉及到的材料有¹H, C-Nat, ¹²C, ¹⁶O, ²⁷Al, Si-Nat, Ti-Nat, Cr-Nat, Mn-Nat, Fe-Nat, ¹⁵²Gd, ¹⁵⁴Gd, ¹⁵⁵Gd, ¹⁵⁶Gd, ¹⁵⁷Gd, ¹⁵⁸Gd, ¹⁶⁰Gd, Ni-Nat, Cd-Nat, ²³⁴U, ²³⁵U 和 ²³⁸U 等, 除核素¹²C 来自 CENDL-3.1 外, 其余核素均来自 ENDF/B-VII.1, 对于 Si-Nat 和 Ti-Nat 等元素则按

其在自然界的同位素丰度分解。ICT 实验装置基准 K_{eff} 验算的结果使用其计算值与基准值之比 C/E 来表示, 温度系数的结果也列于表 1。可以看出, 使用 SIGACE 加工而成的自制库的计算结果与文献[15]中的计算结果吻合良好。

表 1 ICT 实验装置基准验算结果

基准题号	K_{eff} (C/E 值)		温度系数($\Delta\rho/\Delta t$)/($10^{-5} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$)	
	文献计算值	本文计算值	文献计算值	本文计算值
ICT-002-001	0.992 2±0.004 0	0.992 4±0.004 0	1.983 3	1.931 9
ICT-002-002	0.995 6±0.004 1	0.995 7±0.004 1		
ICT-002-003	0.996 9±0.004 5	0.997 0±0.004 5	-4.110 1	-4.031 4
ICT-002-004	0.991 4±0.004 5	0.991 6±0.004 5		
ICT-002-005	0.991 7±0.004 4	0.992 0±0.004 4	-4.390 5	-4.466 6
ICT-002-006	0.985 9±0.004 5	0.986 1±0.004 5		

3.2 标准 CANDU 组件燃料温度反应性系数基准分析

该基准题采用天然 UO_2 燃料, 慢化剂和冷却剂均为重水。其中燃料区、包壳、冷却剂和慢化剂的温度分别为 960.16, 561.16, 561.16 和 342.16 K。其燃料元件棒束在径向分为 4 圈: 中心第一圈为 1 根, 由内向外第 2 圈 6 根, 第 3 圈 12 根, 第 4 圈 18 根, 燃料元件将 Zr 作为包壳材料, 外面有 Zr-4 合金压力管和排管, 它们之间充有 0.2 MPa 下的 CO_2 气体。慢化剂外表面设为全反射边界条件。标准 CANDU 组件燃料温度反应性系数基准分析结果列于表 2, 该计算结果与原基准题结果吻合较好。

表 2 标准 CANDU 组件燃料温度反应性系数基准分析验算结果

基准题结果/ ($10^{-5} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$)	计算结果/ ($10^{-5} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$)	计算值/ 基准值
-1.738±0.098	-1.809±0.043	1.041

3.3 LWR 多普勒数值基准题校验

LWR 多普勒系数的数值基准验证是在压水堆的运行工况下进行的, 这组基准验证被用于计算 LWR 的多普勒反应性系数。LWR 多普勒系数的数值基准模型最里层为 UO_2 燃料圆柱, 燃料外面为由

Zr 金属制成的包壳(气隙也均匀化到 Zr 包壳中), 最外层是截面为正方形的含硼轻水反射层。燃料圆柱外径为 0.393 06 cm, 包壳外径为 0.458 02 cm, 栅距为 1.262 09 cm, 如图 3 所示。计算时将栅元设为轴向无限长, 将慢化剂的外表面设为全反射边界条件。对于 UO_2 燃料, 该基准题要求计算 5 种 ²³⁵U 富集度下的燃料多普勒系数, ²³⁵U 的富集度分别为 0.711%, 1.6%, 2.4%, 3.1% 和 3.9%; 对应于热态零功率和热态满功率, 燃料温度分别为 600 和 900 K; 计算结果列于表 3。从表 3 可以看出, 计算值在多普勒亏损和多普勒系数等方面都与原基准题吻合得较好。

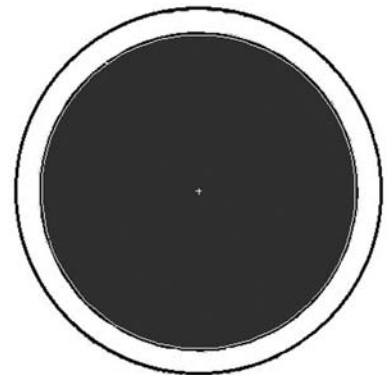


图 3 LWR 栅元模型示意图

表 3 UO₂ 燃料多普勒系数计算结果

富集度/%	基准题结果		计算结果	
	多普勒亏损	多普勒系数/ (10 ⁻⁵ °C ⁻¹)	多普勒亏损	多普勒系数/ (10 ⁻⁵ °C ⁻¹)
0.711	-0.016 3 ± 0.002 3	-5.4 ± 0.8	-0.015 0 ± 0.001 0	-5.0 ± 0.3
1.6	-0.010 8 ± 0.000 9	-3.6 ± 0.3	-0.010 2 ± 0.000 6	-3.4 ± 0.2
2.4	-0.008 1 ± 0.000 8	-2.7 ± 0.3	-0.008 4 ± 0.000 5	-2.8 ± 0.2
3.1	-0.007 8 ± 0.000 7	-2.6 ± 0.2	-0.007 5 ± 0.000 5	-2.5 ± 0.1
3.9	-0.007 1 ± 0.000 6	-2.4 ± 0.2	-0.006 9 ± 0.000 4	-2.3 ± 0.1

3.4 SEFOR 基准分析

SEFOR (Sodium cooled fast reactor benchmark) 这种基准装置设计成模拟液态金属快中子增殖堆 (LMFBR) 的运行环境, 用以测量在 LMFBR 运行工况下的多普勒系数, 基准验算的结果与反应堆结构、燃料温度范围及燃料微观结构有关。其一维简化模型如图 4 所示。

使用 ENDF/B-VII.1 中的 26 种核素: ⁵⁴Fe, ⁵⁶Fe, ⁵⁷Fe, ⁵⁸Fe, ⁵⁰Cr, ⁵²Cr, ⁵³Cr, ⁵⁴Cr, ⁵⁸Ni, ⁶⁰Ni, ⁶¹Ni, ⁶²Ni, ⁶⁴Ni, ²³⁹Pu, ²⁴⁰Pu, ²³⁸U, ²³⁵U, C-Nat, ⁹Be, ¹⁰B, ¹¹B, ²⁷Al, ²³Na, Mo-Nat, ¹⁶O 以及 ¹⁷O。由于 ENDF/B-VII.1 数据库中缺少核素 Mo-Nat 的数据, 故将 Mo-Nat 的核密度按其在自

然界的丰度分解为 ⁹²Mo, ⁹⁴Mo, ⁹⁵Mo, ⁹⁶Mo, ⁹⁷Mo, ⁹⁸Mo 和 ¹⁰⁰Mo 等核素。26 种核素的核子密度见表 4。

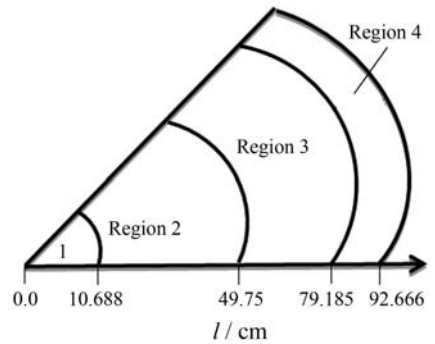


图 4 SEFOR 一维模型示意图

表 4 SEFOR 多普勒基准装置各区域核素核密度 (nuclei/10⁻³⁰ m³)

材料	第一区	第二区	第三区	第四区
Fe	1.357 4 × 10 ⁻²	1.388 6 × 10 ⁻²	5.893 2 × 10 ⁻³	7.858 7 × 10 ⁻³
Cr	3.957 4 × 10 ⁻³	3.951 1 × 10 ⁻³	2.891 3 × 10 ⁻³	2.462 3 × 10 ⁻³
Ni	2.029 2 × 10 ⁻³	2.358 0 × 10 ⁻³	3.017 8 × 10 ⁻²	1.331 5 × 10 ⁻³
Na	1.661 5 × 10 ⁻²	6.809 9 × 10 ⁻³	5.449 3 × 10 ⁻³	1.307 0 × 10 ⁻³
Be		3.601 1 × 10 ⁻³	1.832 7 × 10 ⁻⁵	
O		2.099 1 × 10 ⁻²	1.259 7 × 10 ⁻⁴	
Mo		1.199 9 × 10 ⁻⁴	1.560 5 × 10 ⁻⁵	
¹⁰ B		6.110 0 × 10 ⁻⁵		5.768 4 × 10 ⁻³
¹¹ B		2.460 0 × 10 ⁻⁴		2.310 0 × 10 ⁻²
²³⁵ U		1.537 4 × 10 ⁻⁵	1.172 4 × 10 ⁻⁷	
²³⁸ U		6.980 8 × 10 ⁻³	5.343 8 × 10 ⁻⁵	
²³⁹ Pu		1.590 1 × 10 ⁻³		
²⁴⁰ Pu		1.435 5 × 10 ⁻⁴		
Al		1.435 5 × 10 ⁻⁴		
C			2.233 0 × 10 ⁻³	6.580 0 × 10 ⁻³

将表 4 中核素常温下(293 K)的 ACE 格式截面文件应用 SIGACE 程序加工至 677 和 1 365 K, 生成对应 677 K 和 1 365 K 温度下的两组 ACE 格式截面文件, 并将这两组 ACE 文件提供给 MCNP4C 调用, 分别得到两个有效增殖系数 k_1 和 k_2 。于是等温多普勒系数可以写成:

$$T \frac{dk}{dT} = \frac{k_2 - k_1}{\ln \frac{T_2}{T_1}} = \frac{k_2 - k_1}{0.7006},$$

式中: $T_1 = 677$ K 为零功率时的平均燃料温度; $T_2 = 1365$ K 为 20 MW 时的平均燃料温度; k_1 和 k_2 则是 T_1 和 T_2 对应的有效增殖系数。

表 5 SEFOR 基准装置等温多普勒系数计算结果

实验值	计算值	修正值	考虑修正因子后的相对偏差/%
-0.008 0 ± 0.001 0	-0.007 413 ± 0.001 3	0.007 913 ± 0.001 3	1.1

表 5 中的计算结果还需加上一个 -0.000 5 的修正因子, 该修正因子由共振不均匀性和组分不均匀性以及其它因素造成, 详细描述可参见文献 [16]。修正值与实验结果仅有 1.1% 的相对偏差。

4 结论

本文介绍了 SIGACE 程序加工 ACE 格式高温连续能量中子截面文档的方法, 并应用多类基准题对自制的温度相关中子截面文件进行了基准校验。校验结果表明, 使用自制库得到的结果与原基准题的结果吻合得较好, 由此说明了本工作中 SIGACE 加工方法和生成的基于 ENDF/B-VII.1 评价库的高温 ACE 格式文档的正确性。然而, SIGACE 加工高温连续能量中子截面文档所需的较低温度下的 ACE 格式文件还需使用 NJOY 程序来得到, 因此 SIGACE 只能作为一个辅助的高温中子核反应 ACE 文档制作程序, 需对 SIGACE 程序进行改进, 开发能直接加工 MCNP 自带 ACE 格式截面文件的高温 ACE 格式连续能量点截面数据产生程序, 从而省去 NJOY 的加工环节, 这将是进一步研究的方向。

参考文献 (References):

[1] BRIESMEISTER J F. MCNP4C™-A General Monte Carlo N-particle Transport Code. Version 4C. New Mexico: LANL, 2000, 1-7.

[2] CHAI Xiaoming, WANG Kan, YU Ganglin. Nuclear Physics Review, 2006, **23**(2): 111(in Chinese). (柴晓明, 王侃, 余纲林. 原子核物理评论, 2006, **23**(2): 111.)

[3] MACFARLANE R E, MUIR D W. NJOY91.91 A Code System for Producing Point-wise and Multi-group Neutron and Photon Cross Sections from ENDF/B Evaluated Nuclear Data [M]. New Mexico: LANL, 1994: 171.

[4] CSEWG. ENDF-102 Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF-6[M]. SUFFOLK COUNTY: National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, 2000: 1-387.

[5] ASKEW J R, FAYERS F J, KEMSHELL P B. British Nucl Energy Soc, 1966, **5**(4): 564.

[6] RHOADES W A, CHILDS R L. Nuclear Science and Engineering, 1988, **99**: 1.

[7] AMIT R S, GANESAN S, TRKOV A, *et al.* The SIGACE Package For Generating High Temperature ACE Files [EB/OL]. [2012-01-10]. <http://www.nds.iaea.org/fendl21/>.

[8] CULLEN D E. PREPRO 2002: 2002 ENDF/B Pre-processing Codes [C]. Vienna, Austria: International Atomic Energy Agency, Report IAEA-NDS-39, Rev. 11, Feb, 2002: 1-5.

[9] BROWN D. Release of the ENDF/B-VII.1 Evaluated Nuclear Data File [C]. Hyatt Regency Chicago, IL: Presented at the 2012 ANS Annual Meeting, June, 2012: 1-6.

[10] LI Songyang, WANG Kan, YU Ganglin. Nuclear Power Engineering, 2008, **29**(4): 10(in Chinese). (李松阳, 王侃, 余纲林. 核动力工程, 2008, **29**(4): 10.)

[11] NEA. International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments [C] //US, NEA/NSC/DOC(95)03/I-VII, OECD/NEA, 2003: 1-3.

[12] GYUHONG R, HANGBOK C. Nuclear Technology, 2000, **132**: 128.

[13] RUSSELL D, MOSTELLE R, EISENHART D, *et al.* Nuclear Science and Engineering, 1991, **107**: 265.

[14] SHARMA A R, GANESAN S, TRKOV A, *et al.* SIGACE Code For Generating High Temperature ACE Files Validation and Benchmarking [C]. IAEA, Final Report on Integral Validation and Use of Improved Nuclear Data in Fusion Blanket Studies, Ref: -302-F4-IND-11566 B5-IND-29641, 2005: 1-

15.

[15] LAN J S, MILLER E M, PUGH R J. MCNP5 Criticality Validation and Bias for Intermediate Enriched Uranium Systems, Fluor Government Group, CHPRC-00455, REV. 0, May 2007; 10–14.

[16] CSEWG. ENDF-202, Cross Section Evaluation Working Group Benchmark Specifications[C]. US, Report No. BNL-19302 (ENDF-202), Nov 1974; 164–170.

Verification of SIGACE Code for Generating ACE Format Cross-section Files with Continuous Energy at High Temperature

LI Zhi-feng, YU Tao, XIE Jin-sen, QIN Mian

(School of Nuclear Science and Technology, Nanhua University, Hengyang 421001, Hunan, China)

Abstract: Based on the recently released ENDF/B-VII.1 library, high temperature neutron cross-section files are generated through SIGACE code using low temperature ACE format files. To verify the processed ACE file of SIGACE, benchmark calculations are performed in this paper. The calculated results of selected ICT, standard CANDU assembly, LWR Doppler coefficient and SEFOR benchmarks are well conformed with reference value, which indicates that high temperature ACE files processed by SIGACE can be used in related neutronics calculations.

Key words: SIGACE code; MCNP code; cross-section files with continuous energy; benchmark testing