

基于医院中子照射器 I 型堆的 MCNP 中子截面库研制

王立鹏¹, 江新标¹, 赵柱民¹, 朱养妮¹, 陈立新¹, 周永茂²

(1. 西北核技术研究所, 西安 710024; 2. 中国核工业集团中原对外工程有限公司, 北京 100191)

[摘要] 利用 NJOY 程序制作了用于医院中子照射器 I 型堆 (in-hospital neutron irradiator mark 1 reactor, IHNI-1) 物理计算的 MCNP 中子截面库。着重考虑了反应堆运行温度范围内的温度点, 制作了多温度点 ACE (a compact ENDF) 格式中子截面数据库。利用 MCNP/4B 自带库验证了自制库的正确性, 利用 ICSBEP (International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project, 国际临界安全基准评价工程手册) 基准题对结果进行了验证和反应性温度系数计算, 分析了不同参数的影响作用。结果表明, 所制作的截面库是正确的, 能够用于 IHNI-1 反应堆物理设计计算。

[关键词] NJOY; ENDF/B VII.0 评价库; MCNP; ACE 格式

[中图分类号] TL329.2 **[文献标识码]** A **[文章编号]** 1009-1742(2012)08-0042-05

1 前言

核反应参数在核工程领域有重要的作用, 核素的中子截面对中子注量率分布和反应性等有很大影响。在 MCNP 程序^[1]自带的中子截面库中, 大多数核素只给出了常温下 (293.6 K) 的截面库, 缺少与温度相关的中子截面数据; 对于裂变核素, 核数据库的精度将间接影响反应性温度系数计算的精度; MCNP/4B 程序数据库大多是在 20 世纪 80 年代采用 ENDF/B V.0 或 ENDF/B VI.0 数据库加工而成的, 数据陈旧, 已经不能满足目前的工程需要。因此, 需要重新制作 MCNP 多温度点中子截面库, 以供特定反应堆的物理计算使用。

文章研究了医院中子照射器 IHNI-1 堆物理参数计算用的核数据库制备方法, 基于最新的 ENDF/B VII.0 和 JENDL 4.0 库 (参考), 采用 NJOY 程序制作了 IHNI-1 堆 MCNP 温度相关的连续点截面数据库, 并对结果进行了验证。

2 多温度点 MCNP 格式中子截面库制作

IHNI-1 堆以 30 kW 功率运行时燃料最高温度为 94.8 °C, 反应堆从启动到稳定运行堆芯温度变化达 60 ~ 80 °C, 当发生弹棒等反应性引入事故时, 堆芯燃料最高温度可达 150 °C, 采用 MCNP 软件自带的冷态点截面数据库 (绝大部分为 293.6 K) 计算 IHNI-1 热态物理参数, 会给工程计算带来了一定的误差。因此有必要制作多温度点截面数据库, 以供 MCNP 计算 IHNI-1 堆芯物理参数用。文章利用 NJOY 软件^[2] 制作了 IHNI-1 用多温度点 MCNP 格式截面库。

NJOY 程序由一系列模块组成, 制作连续能量点 MCNP 格式中子截面库具体包括: MODER 模块, 将原始的 ENDF/B VI 格式的数据库转化为二进制格式; RECONR 模块, 截面库的共振重造, 重建误差设为 0.001; BROADR 模块, 多普勒展宽, 薄化误差设为 0.001; HEATR 模块, 生成热以及原子位移损伤 (displacements per atom, DPA) 计算; GASPR 模块, 合成一个气体产额的反应道; UNRESR/PURR 模块, 不可分辨共振区处理, 前者采用解析方法, 即邦达连科方法, 后者

[收稿日期] 2012-04-20

[作者简介] 王立鹏 (1988—), 男, 陕西合阳县人, 助理研究员, 硕士研究生, 研究方向为核能科学与工程; E-mail: wang0214@126.com

采用概率表方法,文章推荐使用 PURR,它在 ACE 格式数据库的制作中被广泛使用,UNRESR 主要用在多群数据库的制作;THERMR 模块,热区散射处理,对于 MCNP 连续能量点中子截面库来说,采用自由气体模型;ACER 模块,输出 ACE 格式数据库。NJOY 程序数据流程如图 1 所示,ACER 模块最后生成两个数据文件:一个是新制的 MCNP 中子截面库文件,放到 MCNP 截面库文件夹内;另一个是路径文件,用来添加到 MCNP 软件的索引文件 XSDIR 里面,以供 MCNP 程序计算时调用相应截面库。

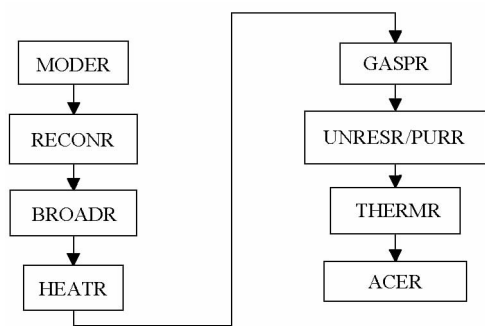


图 1 NJOY 程序制作 ACE 格式中子截面库数据流程图

Fig.1 Flow chart of ACE format data processing by NJOY code

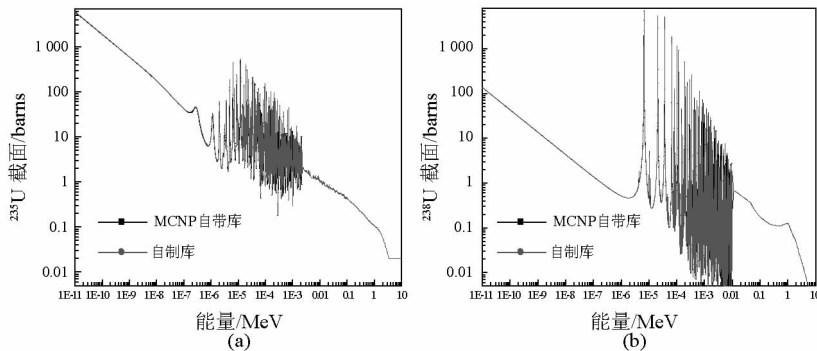


图 2 ^{235}U 和 ^{238}U (n, γ) 反应截面数据自制库和 MCNP 标准库的对比图

Fig.2 Comparison of self-making and MCNP standard library of ^{235}U and ^{238}U (n, γ) reaction

3.2 ICSBEP 基准题验证

美国截面评价工作组对 ENDF/B VI 格式的数据库做了较全面的基准检验,文章主要基于 2005 年版的 ICSBEP (International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project, 国际临界安全基准评价工程手册)^[3,4] 中的部分基准装置进行了数值模拟。考虑到 IHIN-1 的堆芯设计,文章分别选择以高浓度 UAl_4 合金和中低浓度 UO_2 为燃料的不同富集度下的临界基准装置,以 ENDF/B VII.0 评价库制作的

3 温度相关中子截面库的验证

按图 1 所示流程,文章制作了多温度点的中子截面库。以裂变核素的中子截面库制作为例,为了验证截面库的正确性,首先把自制库与 MCNP 自带库进行比较,温度均为 293.6 K,然后利用制作的截面库开展了相关基准题校核,同时分析了不同参数和不同评价库对计算结果的影响。

3.1 反应截面值比较

以 ^{235}U 和 ^{238}U 的辐射俘获截面数据为例,自制库与 MCNP 自带库截面值的比较结果如图 2 所示。可以看出两者的数据基本符合,在不可分辨共振区有极少数共振峰的截面值有偏差,但不影响整体的趋势,这是由于 PURR 模块中概率表的随机误差不会对计算结果产生很大影响。考虑到 MCNP 程序数据库制作比较早,文章采用的原始评价库为 ENDF/B VI.8,从结果可以看出与 ENDF/B VI.2 (.60c) 差别不大,截面数据可靠、正确。另外还比较了其他反应道,从得到的结果来看,均符合较好。

连续能量点中子截面库为基础,采用 MCNP 程序计算了基准装置模型的有效增殖因子 k_{eff} 。装置的能谱涵盖了快谱、中能谱、热谱,谱型分类的依据主要是以 0.625 eV 和 100 keV 两个能点为能量边界将整个能区分为 3 群,能谱特征用份额大于 50% 的群来表征,3 群份额均小于 50% 的装置称为混合谱。 ^{235}U 和 ^{238}U 数据分别采用 MCNP 自带的“.60c”库(基于 ENDF/B VI.2)和基于 ENDF/B VII.0 评价库的自制库(以 .70c 标识)。 k_{eff} 的计算结果列于

表1,可以看出自制库和MCNP原库的结果基本一致,而且比MCNP原库更接近ICSBEP中给出的实验评价值,说明了基于ENDF/B VII.0制作的ACE格式的截面库比MCNP自带截面库在反应堆计算中有更可靠的精度。其他核素的基准题分析与上述分析类似,结果表明自制库、原库和评价值 k_{eff} 计算结果基本一致,从而证明了文章所述自制库的正确性。

表1 ^{235}U 和 ^{238}U 截面库的临界检验结果
Table 1 Critical benchmark results for ^{235}U and ^{238}U cross-section library

装置燃料 类型	谱型	ICSBEP 编号	k_{eff}		
			.60c	.70c	评价值
UAl _x (高浓铀)	热谱	HEU - MET -	1.000 51 ± 0.000 81	1.000 11 ± 0.000 78	1.000 0 ± 0.004 0
		THERM - 006(CASE3)			
	快谱	IEU - COMP -	0.986 65 ± 0.000 36	0.987 82 ± 0.000 34	0.993 9 ± 0.002 3
		FAST - 001 (CASE1)			
UO ₂ (中等 浓度铀)	中能谱	IEU - COMP - INTER - 002 (KBR - 20)	1.021 22 ± 0.000 51	1.006 40 ± 0.000 53	1.014 0 ± 0.006 0
	热谱	IEU - COMP -	0.997 49 ± 0.000 75	0.998 67 ± 0.000 77	1.001 4 ± 0.003 9
		THERM - 002 (CASE1)			
UO ₂ (低浓铀)	热谱	LEU - COMP - THERM - 001 (CASE1)	0.996 14 ± 0.001 60	1.002 57 ± 0.001 51	0.999 8 ± 0.003 0

3.3 反应性多普勒系数基准题

为了分析所制作的核数据库对反应性温度系数的影响,采用一个简单的栅元几何模型做基准验证^[5,6],如图3所示,中心为UO₂燃料棒,包壳为锆合金,冷却剂和慢化剂为含硼水,轴向为无限长,慢化剂表面为全反射边界条件,燃料区的温度有600 K和900 K两种。首先用NJOY制作了 ^{235}U 、 ^{238}U 、 ^{18}O 、 ^{nat}Zr 、 ^1H 和 ^{10}B 在600 K和900 K下的截面库(.71c/.72c),然后通过计算燃料温度从600 K变为900 K所引起的反应性变化,即可得到该栅元的多普勒系数,计算公式为: $C_D = \frac{k_{\text{eff}}^{900\text{K}} - k_{\text{eff}}^{600\text{K}}}{k_{\text{eff}}^{600\text{K}} k_{\text{eff}}^{900\text{K}} \delta T}$,其中 δT 为温度的变化,即300 K。计算的时候包壳和慢化剂的温度始终固定在600 K,温度相关中子截面库均采用最新的.71c库。该基准题包含5种不同富

集度下的燃料多普勒温度系数,即0.711%、1.6%、2.4%、3.1%和3.9%(质量分数)。使用MCNP程序进行计算,计算条件为10 000个中子、100次循环,舍弃前10次。对MCNP自带库(.14c/.16c,ENDF/B VI.2)和自制库的差别进行对比,计算结果列于表2。可以看出,自带库与自制库的结果基本一致,但是和基准题的ENDF/B V库的计算结果差别比较大,而且数值明显比基准题小很多,这从反应堆安全角度考虑是不容忽视的,说明了核数据库的制作在反应堆设计中很重要。

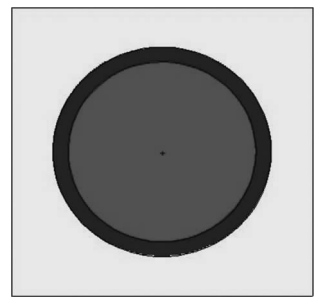


图3 多普勒温度系数基准题模型描述
Fig.3 Description of Doppler temperature coefficient benchmark

表2 燃料多普勒温度系数计算结果

燃料富集 度(质量 分数)/%	燃料多普勒温度系数/($\times 10^{-5} \cdot \text{°C}^{-1}$)		
	基准题 (ENDF/B V)	自带库 (.14c/.16c)	自制库 (.71c/.72c)
0.711	-5.47 ± 0.32	-4.358 0 ± 0.47	-3.755 3 ± 0.50
1.6	-3.39 ± 0.21	-2.552 2 ± 0.31	-2.805 0 ± 0.30
2.4	-2.75 ± 0.16	-1.222 9 ± 0.25	-1.474 1 ± 0.28
3.1	-2.79 ± 0.14	-2.120 7 ± 0.23	-2.388 0 ± 0.22
3.9	-2.53 ± 0.15	-2.377 1 ± 0.21	-2.259 1 ± 0.21

4 温度对数据库的影响

考虑到IHNI-1堆物理设计的需要,选定了从293.6 K到1 000 K范围内的9个温度点进行数据库的制作,并分别对应9个库的名称,如表3所示。图4分别列出了 ^{235}U 和 ^{238}U 的温度比较图,由于温度主要影响截面的多普勒展宽效应,作用区域在共振区,因此图中主要截取了这一能量段的截面数值进行比较。由图4分析可知, ^{235}U 和 ^{238}U 在不同温度下的截面值有一定的变化,共振峰的宽度随着温度的上升而增加,同时峰值截面也逐渐减小,导致中子通量密度的能谱变硬,共振吸收的中子数增加,逃

脱共振俘获概率减小,堆芯反应性减小,从而保证反应堆的安全。

表 3 温度与库名的关系

Table 3 Temperature and name of library

温度/K	库名	温度/K	库名
293.6	.70c	600	.75c
350	.71c	700	.76c
400	.72c	800	.77c
450	.73c	900	.78c
500	.74c	1 000	.79c

5 不同核评价数据库的对比

ENDF 系统包含两个核数据库: A 库和 B 库,其中 B 库是评价过的,目前已发展到 ENDF/B VII.0,

ENDF/B VI.8 是 ENDF/B VI 的最后一个版本,另外,国际上还有几个数据库采用 ENDF 格式,选取了最新公布的 JENDL4.0 与前两种库进行对比,图 5 是 3 个库的 (n, γ) 截面数据对比图,对于 ^{235}U 和 ^{238}U , ENDF/B VI.8、ENDF/B VII.0 和 JENDL4.0 差别不大,只是在不可分辨共振区数据有些偏差。计算了不同数据库下的 IHNI-1 堆临界状态下的有效增殖因子: $k_{\text{eff}}(\text{ENDF/B VII.0}) = 0.99335 \pm 0.00031$, $k_{\text{eff}}(\text{ENDF/B VI.2}) = 0.99106 \pm 0.00031$ 。可见,核评价数据库的选择对于反应堆的计算影响很大,基于最新的 ENDF/B VII.0 的计算结果更可靠。因此,文章以最新 ENDF/B VII.0 和 JENDL4.0(参考)库作为最终数据来源。

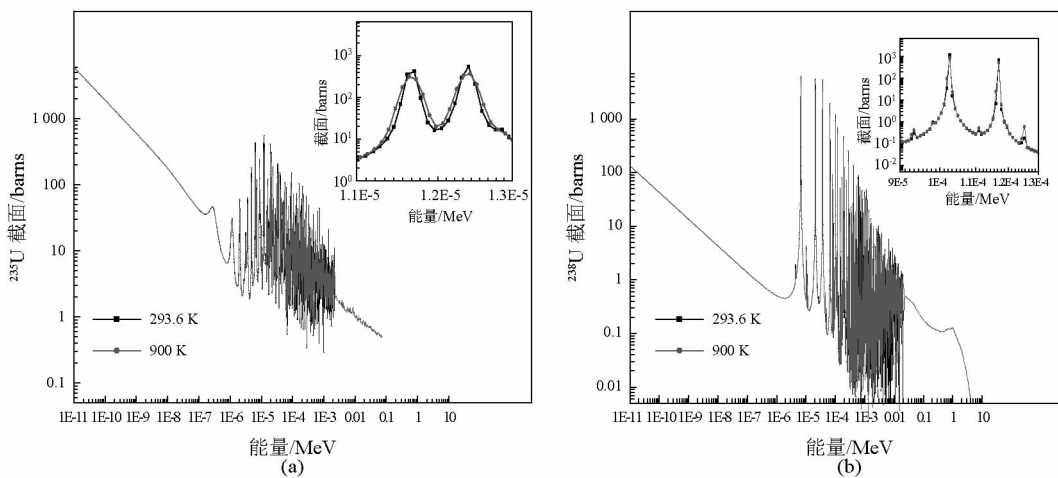


图 4 核素 ^{235}U 和 ^{238}U 不同温度 (n, γ) 截面对比图

Fig. 4 Comparison of different temperatures of ^{235}U and ^{238}U (n, γ) cross-section

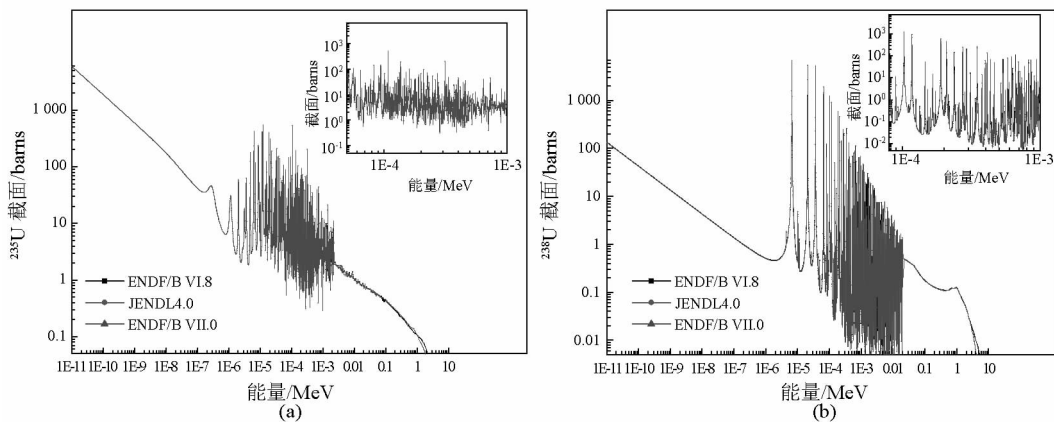


图 5 ^{235}U 和 ^{238}U 不同核数据库 (n, γ) 截面对比图

Fig. 5 Comparison of different libraries of ^{235}U and ^{238}U (n, γ) cross-section

6 结语

建立了利用 NJOY 程序制作 MCNP 多温度点中子截面库的方法,并对制作方法的验证进行了说明。制作方法的可靠性微观上从自制截面和 MCNP 自带截面的对比加以验证,宏观上通过基准题的检验加以验证。分析了 NJOY 程序在制作 MCNP 格式数据库中各类参数和不同原始评价库对最终结果的影响及其原因。基于最新的 ENDF/B VII.0 库和 JENDL4.0 库,制作了全新的 MCNP 温度相关的数据库,为 IHNI-1 堆相关计算提供了可靠的数据来源。所制作的截面库在 IHNI-1 堆物理计算中得到了较好的应用。

参考文献

[1] X M C Team. MCNP: A General Monte Carlo N-Particle Transport

Code, Version 5, LA-UR-03-1987 [M]. Los Alamos, New Mexico, USA; Los Alamos National Laboratory, 2003.

[2] MacFarlane R E, Muir D W. The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 91, LA-12740-M [M]. Los Alamos, New Mexico, USA; Los Alamos National Laboratory, 1994.

[3] Blair J B, Michael A T, Yolanda R, et al. International handbook of evaluated criticality safety benchmark experiments, NEA/NSC/DOC (95) 03 [R]. North Fremont: Nuclear Energy Agency, 2006.

[4] Russell D, Mostell E R, Eisenhart D. Benchmark calculations for the Doppler coefficient of reactivity[J]. Nuclear Science and Engineering, 1991, 107: 265-271.

[5] 李松阳,王侃,余纳林. MCNP 温度相关中子截面库的研制及基准验证[J]. 原子能科学技术, 2009, 43(5): 385-388.

[6] 陈朝斌,陈义学,胡泽华,等. 基于 ENDF/B VII.0 核评价库的 ACE 格式参数制作与初步检验[J]. 原子能科学技术, 2009, 43(9): 834-838.

Study on neutron cross-section library generated for MCNP in in-hospital neutron irradiator mark 1 reactor

Wang Lipeng¹, Jiang Xinbiao¹, Zhao Zhumin¹, Zhu Yangni¹,
Chen Lixin¹, Zhou Yongmao²

(1. Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an 710024, China; 2. China Zhongyuan Engineering Corporation, China National Nuclear Corporation, Beijing 100191, China)

[Abstract] A temperature-dependent neutron cross-section library for MCNP in in-hospital neutron irradiator mark 1 reactor was generated using NJOY software. Accounting for the temperature range for reactor operation, a compact ENDF (ACE) data library was created. The accuracy of the self-making library was validated by comparing data with MCNP/4B standard library and the results were tested by ICSBEP (International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project) benchmark problems, which was used in the calculation of Doppler temperature coefficient. Influence of different parameters in the processing was also analyzed. The results showed that the ACE format library produced in this paper was correct and could be used reliably for physics design at IHNI-1 reactor.

[Key words] NJOY; ENDF/B VII.0; MCNP; ACE format