

文章编号: 1007-4627(2004)04-0415-04

## 混合评价核数据库 HENDL1.0/MG/MC 研制\*

许德政, 高纯静, 郑善良, 刘海波, 朱晓翔, 李静惊, 吴宜灿, FDS Team

(中国科学院等离子体物理研究所, 安徽 合肥 230031)

**摘 要:** 根据世界几个主要核评价数据库, 如 ENDF/B-6(美国)、JEF-2.2(欧盟)、JENDL-3.2(日本)、BROND-2.2(俄罗斯)、CENDL-2.1(中国)和 FENDL-2(IAEA/NDS), 兼顾聚变、裂变以及聚变-裂变次临界混合堆设计研究的多种需要, 经过甄别、筛选, 最后集成为包含 213 个核素的基本评价文件, 名为 HENDL1.0/E 的核评价数据库. 在此基础上, 利用目前流行的群常数加工程序系统 NJOY 和输运截面制备程序 TRANSX 制作两套用于中子或/和光子输运计算的输运截面工作库: ①参考 Vitamin-J 能群结构制作了 175 群中子和 42 群光子、中子-光子耦合多群工作数据库 HENDL1.0/MG, 可用于离散纵标 Sn 法程序计算; ②连续能群结构、紧凑 ENDF(ACE)格式中子截面库 HENDL1.0/MC, 可用于蒙特卡罗方法输运计算, 如 MCNP. 另外还制作了可用于燃耗(嬗变)计算的燃耗库 BURNUP.LIB 和响应函数库 RESPONSE.LIB 两个专用数据库. 同时, 也对 HENDL1.0 综合评价核数据库的有效性进行了抽样测试、基准检验和初步确认.

**关键词:** 数据库; 聚变; 裂变; HENDL

**中图分类号:** O571.44      **文献标识码:** A

### 1 引言

所谓核数据, 一般是指那些基本核数据. 亦即关于对物质核特性进行科学调查得到的定量结果. 核数据的应用范围很广, 几乎涉及核科学和核技术的所有领域, 包括能源应用、非能源应用以及某些基础研究(如: 核天体物理学)和教学等其它方面应用.

所谓评价核数据库就是由核物理专家们对尽可能多收集到的实验数据进行客观的、科学的分析, 并结合理论模型的计算, 将得到的整套核数据存入文档中以推荐给用户使用. 其中, 由于中子核数据库应用面广, 特别是核科学研究和核能技术及其利用的需求, 国际上各核数据中心都建立了自己的评价中子核数据库.

尽管评价核数据库已经包含了比较完备的原子核数据(包括中子和带电粒子), 但这些数据有时并不能直接用于核数据分析和数值模拟计算, 如反应堆设计等. 因此, 世界上不少国家相继开发研制出

各种数据再处理程序和应用数据库, 以满足各自不同的科学研究和工程设计的需要.

本文以国际上几大评价核数据库 ENDF/B-VI (USA), JENDF-3(Japan), JEF-2(Europe), CENDL-2 (China), BROND-2 (Russia), FENDL-2 (IAEA)和 EPDL97 为基本数据源<sup>[1, 2]</sup>, 利用流行的核数据处理程序 NJOY<sup>[3]</sup>和 TRANSX<sup>[4]</sup>, 兼顾聚变、裂变以及聚变-裂变次临界混合堆设计研究的实际需求, 研制成一个混合型多用途核数据库 HENDL1.0. 并对 HENDL1.0 综合评价核数据库的有效性进行了抽样测试、基准检验和初步确认.

### 2 HENDL 混合多用数据库制作

HENDL1.0 多用途核数据库包括 HENDL 1.0/MG 和 HENDL 1.0/MC 两大功能库. 其中 HENDL 1.0/MG 库又由三个不同功能的子工作库组成: (1)基本输运库 transport.lib; (2)燃耗库 burnup.lib; (3)响应函数库 response.lib. 下面将

收稿日期: 2004 - 08 - 16

\* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10175068)

作者简介: 许德政(1949—), 男(汉族), 安徽怀宁人, 高级工程师, 从事核反应堆技术与核数据处理工作;

E-mail: dzxu@ipp.ac.cn

完整地介绍 HENDL1.0 工作库的制作过程和基本特征.

(1) 数据来源(国际上几大评价核数据库): ENDF/B-VI(USA), JENDF-3(Japan), JEF-2(Europe), CENDL-2(China), BROND-2(Russia), FENDL-2(IAEA).

(2) 基本核素的选择(114 个), 见表 1.

(3) 程序的使用

1) NJOY (Version 97.95) 程序: MODER, BROADR, UNRESR, [ THERMR ], HEATR, [ GASPR ], GROUPE, RECONR, GAMINR, MATXS.

表 1 HENDL1.0 多用途核数据库基本核素表

轻元素(40 个)			裂变产物						铜系元素(43 个)		
			裂变产物(31 个)			FPEFF* 合成核素(43 个)					
H	D	T	Ga <sup>nat</sup>	Ge <sup>nat</sup>	<sup>75</sup> As	<sup>77</sup> Se	<sup>78</sup> Se	<sup>79</sup> Se	<sup>230</sup> Th	<sup>232</sup> Th	<sup>233</sup> Th
<sup>3</sup> He	<sup>4</sup> He	<sup>6</sup> Li	<sup>79</sup> Se	<sup>80</sup> Se	<sup>90</sup> Sr	<sup>81</sup> Br	<sup>83</sup> Kr	<sup>84</sup> Kr	<sup>234</sup> Th	<sup>231</sup> Pa	<sup>232</sup> Pa
<sup>7</sup> Li	( <sup>Li<sup>nat</sup></sup> )	<sup>9</sup> Be	<sup>89</sup> Y	<sup>93</sup> Zr	<sup>93</sup> Zr	<sup>85</sup> Kr	<sup>86</sup> Kr	<sup>85</sup> Rb	<sup>233</sup> Pa	<sup>232</sup> U	<sup>233</sup> U
<sup>10</sup> B	<sup>11</sup> B	( <sup>B<sup>nat</sup></sup> )	<sup>94</sup> Nb	<sup>94</sup> Nb	<sup>Mo<sup>nat</sup></sup>	<sup>87</sup> Rb	<sup>88</sup> Sr	<sup>89</sup> Sr	<sup>234</sup> U	<sup>235</sup> U	<sup>236</sup> U
<sup>12</sup> C	<sup>C<sup>nat</sup></sup>	<sup>14</sup> N	<sup>107</sup> Pd	<sup>107</sup> Pd	<sup>Pd<sup>nat</sup></sup>	<sup>90</sup> Sr	<sup>90</sup> Y	<sup>91</sup> Y	<sup>237</sup> U	<sup>238</sup> U	<sup>236</sup> Np
<sup>15</sup> N	( <sup>N<sup>nat</sup></sup> )	<sup>16</sup> O	<sup>126</sup> Sn	<sup>126</sup> Sn	<sup>127</sup> I	<sup>93</sup> Zr	<sup>95</sup> Mo	<sup>97</sup> Mo	<sup>237</sup> Np	<sup>238</sup> Np	<sup>239</sup> Np
<sup>O<sup>nat</sup></sup>	<sup>19</sup> F	<sup>23</sup> Na	<sup>129</sup> I	<sup>133</sup> Cs	<sup>135</sup> Cs	<sup>98</sup> Mo	<sup>99</sup> Tc	<sup>101</sup> Ru	<sup>236</sup> Pu	<sup>237</sup> Pu	<sup>238</sup> Pu
<sup>Mg<sup>nat</sup></sup>	<sup>27</sup> Al	<sup>Si<sup>nat</sup></sup>	<sup>137</sup> Cs	<sup>Nd<sup>nat</sup></sup>	<sup>151</sup> Sm	<sup>102</sup> Ru	<sup>103</sup> Ru	<sup>104</sup> Ru	<sup>239</sup> Pu	<sup>240</sup> Pu	<sup>241</sup> Pu
<sup>31</sup> P	<sup>S<sup>nat</sup></sup>	<sup>Cl<sup>nat</sup></sup>	<sup>Sm<sup>nat</sup></sup>	<sup>Eu<sup>nat</sup></sup>	<sup>Gd<sup>nat</sup></sup>	<sup>106</sup> Ru	<sup>103</sup> Rh	<sup>105</sup> Pd	<sup>242</sup> Pu	<sup>241</sup> Am	<sup>242</sup> Am
<sup>K<sup>nat</sup></sup>	<sup>Ca<sup>nat</sup></sup>	<sup>Ti<sup>nat</sup></sup>	(FPEFF*)			<sup>107</sup> Pd	<sup>125</sup> Sb	<sup>128</sup> Te	<sup>242m</sup> Am	<sup>243</sup> Am	<sup>244</sup> Am
<sup>51</sup> V	<sup>V<sup>nat</sup></sup>	<sup>Cr<sup>nat</sup></sup>				<sup>129</sup> I	<sup>131</sup> Xe	<sup>132</sup> Xe	<sup>244m</sup> Am	<sup>242</sup> Cm	<sup>243</sup> Cm
<sup>55</sup> Mn	<sup>Fe<sup>nat</sup></sup>	<sup>59</sup> Co				<sup>134</sup> Xe	<sup>136</sup> Xe	<sup>133</sup> Cs	<sup>244</sup> Cm	<sup>245</sup> Cm	<sup>246</sup> Cm
<sup>Ni<sup>nat</sup></sup>	<sup>Cu<sup>nat</sup></sup>	<sup>181</sup> Ta				<sup>135</sup> Cs	<sup>137</sup> Cs	<sup>145</sup> Nd	<sup>247</sup> Cm	<sup>246</sup> Cm	<sup>249</sup> Bk
<sup>W<sup>nat</sup></sup>	<sup>197</sup> Au	<sup>Pb<sup>nat</sup></sup>				<sup>146</sup> Nd	<sup>147</sup> Nd	<sup>149</sup> Sm	<sup>250</sup> Bk	<sup>249</sup> Cf	<sup>251</sup> Cf
<sup>209</sup> Bi						<sup>151</sup> Eu			<sup>252</sup> Cf		

2) TRANSX (Version 2.15) 程序, 包括 BBC (Version 2.5).

3) 物理参量的选取:

◆ 对于 NJOY 程序

◇ 能群结构: 中子群结构 VITAMIN-J (175 群); 光子群结构 VITAMIN-J (42 群).

◇ 权重类型: VITAMIN-E 权重函数(中子), 1/e + ROLLOFFS(光子).

◇ 勒让德阶数: 6 (即 P0, P1, ..., P5) (in modules GROUPE, GAMINR).

◇ 介质温度: 300 K (室温)

◇ 背景截面( $\sigma_0$ ): 1.0 e+10 (infinite diluted).

◇ 误差设定: 共振积分误差: 0.001; 细群允许误差: 0.001.

◆ 对于 TRANSX 程序

◇ 能群结构: 175 群中子 + 42 群光子.

◇ 输出文件格式: 6E12.5.

◇ 粒子耦合: 3 种粒子(N, G, NG).

◇ 裂变时间: 稳态.

◇ 输运修正: diagonal (ITRC = 2).

◇ 勒让德表个数: 6 (P0, P1, ..., P5).

◇ 初始通量: 使用库权重.

◇ 截面编辑项:

① heat [局域产热截面( $\sigma_{heat}$ )].

② remova (removal) [去弹性散射截面( $\sigma_r$ )],

③ fission [总裂变截面( $\sigma_{fiss}$ )],

④ ng (capture) [辐射俘获截面( $\sigma_{capture}$ )],

⑤ n2n [(N, 2N) 截面( $\sigma_{multi}$ )],

⑥ absorption [吸收截面( $\sigma_{abs}$ )],

⑦ nu\* fission [裂变产额( $\nu \sigma_{fiss}$ )],

⑧ total cross section [总截面( $\sigma_{total}$ )].

(4) HENDL 混合多用途库数据子库及流程

HENDL 混合多用途库包含以下 6 个子库: 1) 评价核数据库 HENDL1.0/E; 2) 输运库 TRANS-

PORT.lib; 3) 燃耗库 BURNUP.lib; 4) 响应函数数据库 RESPONSE.lib; 5) 多群库(matxs格式) HENDL1.0/MG; 6) 连续群库(ACE格式) HENDL1.0/MC.

### 3 数据测试与正确性评估

类似于评价核数据库的制作过程,任何应用工作库的制成都需经过严格的测试和检验之后方能交付用户使用.事实上,应用工作库的测试和检验是一项复杂而细致的工作.我们根据目前可能得到的基准检验实际例子,使用不同算法和程序(如 VisualBUS, ANISN, MCNP)、不同的数据库(HENDL1.0/MG/MC和FENDL/MG-2.0),并将理论计算的结果与基准实验值比较,同时给出误差量级和吻合程度.

用于数据测试(宏观检验)的相关组件有:程序 VisualBUS, ANISN, MCNP 以及数据库 HENDL1.0/MG/MC和FENDL/MG-2.0.测试方法分别采用单核测试:如 $^9\text{Be}$ , ...<sup>[5]</sup>和综合测试:如聚变驱动次临界系统 FDS 包层, ...<sup>[6]</sup>.测试结果(以计算铍[ $^9\text{Be}$ ]和钼[ $\text{Mo}^{nat}$ ]球壳泄漏率为例)如图1所示.

正确性评估:从已经测试的诸多算例结果可以看出,对于大多数核而言分别由 HENDL1.0和FENDL-2库得到的计算值吻合很好;使用不同程序(如 ANISN和VisualBUS)的计算结果也十分接近.就计算值与实验值比较来讲,二者的吻合程度并不令人满意,个别能区的对应值误差在20%左右.不过,整体上说我们制作的 HENDL 混合多用途库是可以使用的.

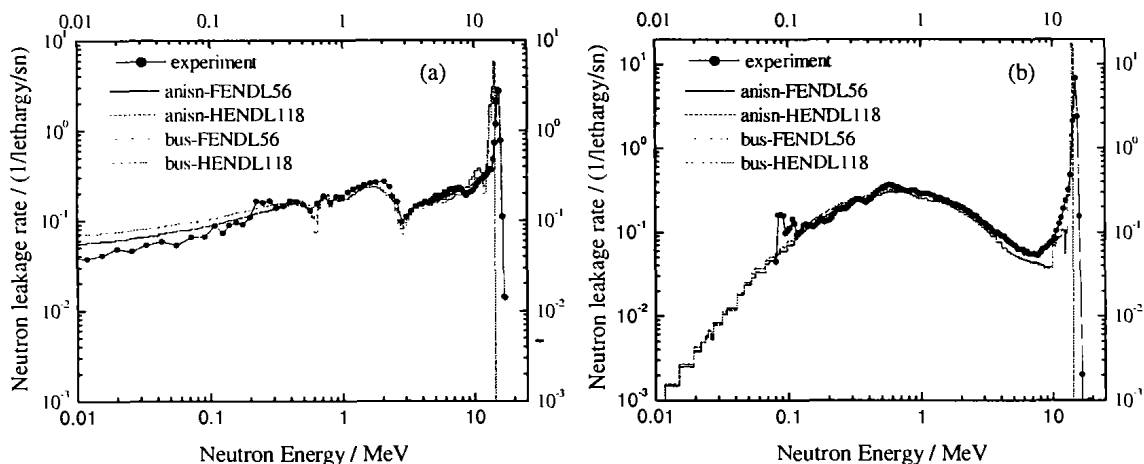


图1 HENDL 混合多用途库数据测试结果

(a) OKTAVIAN  $^9\text{Be}$  shell neutron spectr, (b) OKTAVIAN  $\text{Mo}^{nat}$  shell neutron spectra. 图中 sn 代表源中子(source neutro), lethargy 表示平均对数能降(the average logarithmic energy decxement).

### 4 总结与讨论

本文以国际上几大评价核数据库 ENDF/B-VI (USA), JENDF-3(Japan), JEF-2(Europe), CENDL-2 (China), BROND-2 (Russia), FENDL-2 (IAEA/NDS)为基本数据源,利用流行的核数据处

理程序 NJOY 和 TRANSX, 兼顾聚变、裂变以及聚变-裂变次临界混合堆设计研究的实际需求,研制成一个混合型多用途核数据库 HENDL1.0. 经过测试和分析认为 HENDL1.0/MG/MC 制作方法是正确的.

#### 参 考 文 献:

- [1] Lemmel H D, McLaughlin P K. Document IAEA-NDS-107, Rev 12, Nuclear Data Sectio, International Atomic Energy Agency, November, 2000.
- [2] Cullen D E, Hubbell J H, Kissel L. Report UCRL-ID-50400, 1997, 6, Rev. 5.
- [3] MacFarlane R E, Muir D W. The NJOY Nuclear Data Pro-

- cessing System, Version 91, LA-12740-M, Los Alamos National Laboratory, October, 1994.
- [4] MacFarlane R E. TRANSX 2: A Code for Interfacing MATXS Cross Section Libraries to Nuclear Transport Codes, LA-12312-MS, 1992.
- [5] Gao Chunjing, Xu Dezheng, Li Jingjing, *et al.* Plasma Science and Technology, 2004, 6(4):
- [6] Wu Yican, Ke Yan, Zheng Shanliang, *et al.* Chinese Journal of Nuclear Science and Engineering, 2004, 24(1).

## Development on Hybrid Evaluated Nuclear Data Library HENDL1.0/MG/MC\*

XU De-zheng, GAO Chun-jing, ZHENG Shan-liang, LIU Hai-bo,  
ZHU Xiao-xiang, LI Jing-jing, WU Yi-can, FDS Team

(*Institute of Plasma Physics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China*)

**Abstract:** A Hybrid Evaluated Nuclear Data Library(HENDL) named as HENDL1.0 has been developed by Fusion Design Study (FDS) team of Institute of Plasma Physics, Academia Sinica (ASIPP) to take into account the requirements in design and research relevant to fusion, fission and fusion-fission sub-critical hybrid reactor. HENDL1.0 contains one basic evaluated sub-library naming HENDL1.0/E and two processed working sub-libraries naming HENDL1.0/MG and HENDL1.0/MC, respectively. Through carefully comparing, distinguishing and choosing, HENDL1.0/E integrated basic evaluated neutron data files of 213 nuclides from the several main data libraries for evaluated neutron reaction cross sections including ENDF/B-VI (USA), JEF-2.2 (OECD/NEA, Europe), JENDL-3.2 (Japan), CENDL-2 (China), BROND-2 (Russia) and FENDL-2 (IAEA/NDS, ITER program). Basing on this, 175-group neutron and 42-group photon neutron-photon coupled multi-group working library HENDL1.0/MG used for discrete ordinate Sn method transport calculation (such as ANISN code) and a compact ENDF form (ACE), continuous energy structure (pointwise) neutron cross section library HENDL1.0/MC for Monte Carlo method transport simulation (as MCMP code) can be attainable with the current group constants processing system NJOY and transport cross section preparation code TRANSX referring to the Vitamin-J energy group structure. In addition, two special bases i. e. transmutation (burnup) library BURNUP.DAT and response function library RESPONSE.DAT, have been also made for fuel cycle calculation and reactivity analyses of nuclear reactor. The relevant sample testing, benchmark checking and primary confirmation are also carried out to assess the validity of multi-purpose data library HENDL1.0.

**Key words:** data libraries; fusion; fission; HENDL

\* Foundation item: National Natural Science Foundation of China(10175068)