

文章编号: 1007-4627(2001)03-0188-04

WIMS 多群截面库更新时 NJOY 输入参数研究^{*}

刘 萍

(中国核数据中心, 北京 102413)

摘 要: 以最新的微观评价库 CENDL-2.1 为基础, 用先进的群常数制作程序系统——NJOY 来制作新的 WIMS 69 群截面库, 研究不同的 NJOY 输入参数对 WIMS 程序所计算的积分量的影响, 并给出了详细的参数研究结果, 同时还分析和讨论了计算结果与基准实验结果的对比。

关键词: 群常数库; 积分量 K_{eff} ; 基准检验; 反应率

中图分类号: O571 **文献标识码:** A

1 引言

WIMS/D4^[1] 是英国人研制的非商业性的栅元计算程序, 该程序已在我国得到了广泛应用, 并且该程序所带的多群截面库——WIMS 库也被广泛地应用于热中子反应堆的计算中, 但该库却很陈旧, 随着 ENDF/B-6.5, JEF-2.2, JENDL-3.2 和 CENDL-2.1 等最新微观评价数据库的相继释出^[2], 对 WIMS 库的更新也势在必行, 为此, IAEA 还建立了“WIMS 库更新计划”的国际协调研究项目 (CRP), 目的是使用最新的微观评价库制作一个全新的 WIMS 多群截面库, 我们也参加了该 CRP 项目。

NJOY 数据处理程序系统^[3] 被用来更新这一多群截面库, 与其它群常数制作程序相比, NJOY 程序系统有很多优点, 因为它是一个综合性的自动处理的程序系统, 它能产生反应堆应用中所需的所有数据, 并且它可以处理 ENDF-B6 格式的数据, 而最新的微观评价数据库均采用 ENDF-B6 格式。

本文研究了不同的 NJOY 输入参数对计算积分量的影响, 即分析积分量对 NJOY 输入参数的灵敏度, 从而最佳化数据处理方法。

2 输入选择

在制作 WIMS 69 群群常数库时, 主要用到了 NJOY 程序系统中以下一些模块:

- (1) RECONR 共振重造
- (2) BROADR Doppler 展宽
- (3) UNRESR 不可分辨共振数据处理
- (4) THERMR 中子热化处理
- (5) GROUPE 产生群平均截面

这些模块在产生多群常数库时起到很重要的作用, 下面一些重要的输入参数要合理选取:

权重谱 最精确的权重函数是装置本身的能谱, 但制作群常数之前, 无法计算装置的能谱, 权重函数是未知的, 为此人们通常选取标准谱即“Maxwellian 谱 + 1/E 谱 + 裂变谱”作为权重函数 (即在 GROUPE 模块中取参数 $IWT=4$), 从而计算出群常数, 本工作选择美国 EPRI (Electric Power Research Institute) 轻水堆栅元谱 (即在 GROUPE 模块中取参数 $IWT=5$)。

Bonarenko σ_0 值 与温度网格一样, 邦达连柯本底截面 σ_0 是根据可能用到的核素的维数及组成成分来选取的, 粗略估计一般可根据与群无关的势散射截面和 Goldstein-Cohen 参数来估计, 考虑到几何的非均匀性, 通过下面的等式来计算 σ_0 值:

$$\sigma_0 = \frac{1}{N_A} \left\{ \sum_{j=A} N_{i,j} \lambda_{G,j} \sigma_{p,j} + \frac{\alpha}{\lambda} \right\}, \quad (1)$$

其中, N_A 为吸收核的核密度, $N_{i,j}$ 为同一区 j 核的核密度, $\lambda_{G,j}$ 为 j 核的第 G 群的 Goldstein-Cohen 参数; $\sigma_{p,j}$ 为 j 核的势散射截面; α 为 Bell 因子 ($\alpha =$

收稿日期: 2001-01-08; 修改日期: 2001-03-27

* 基金项目: 国际原子能机构资助的国际协调研究 (CRP) 基金资助项目 (10889/R0)

作者简介: 刘 萍 (1966-), 女 (汉族), 辽宁庄河人, 副研究员, 从事核数据研究。

1.16): \bar{l} 为给定几何结构中此材料的平均弦长(对无限大圆柱, \bar{l} 为圆柱直径; 对无限大平板, \bar{l} 为平板厚度的两倍), 利用等式 (1), 就可以计算出一些典型栅元的 σ_0 值。

(6) WIMSR 产生 WIMS 格式的多群常数库。此模块的输入中, 下面的输入参数要仔细选取: (1) 参考 σ_0 值; (2) 势散射截面值; (3) Goldstein-Cohen λ_G 值; (4) 裂变谱。

参考 σ_0 值 在 WIMS 库中, 主要共振核素给出了对应于不同温度、不同 σ_0 情况下的共振积分(共振吸收和共振裂变)。WIMS 程序对共振核进行自屏处理, 是基于 Bondarenko 方法, 根据栅元的结构、成分、温度等参数, 计算出实际 σ_0 值, 对共振积分表进行内插。然而, 许多结构材料核及控制棒材料也存在共振自屏, 但 WIMS 库中不给出这类核素的共振积分表。因此, 在制作 WIMS 库时, WIMSR 模块只能在许多给定的 σ_0 中选择其中之一, 在 WIMS 库中给出相应的截面。为了使制作的 WIMS 库更具有普适性, 参考 σ_0 的选取应与大多数装置相似。

裂变谱 裂变谱可以在 NJOY 的 WIMSR 模块中输出。在 WIMS 库中, 对所有裂变核给定一个裂变谱。原则上是在反应堆堆芯燃料中最常出现的核素的综合效应。本工作采用 7.5% ^{238}U 和 92.5% 的 ^{235}U 贡献的混合谱, 因为就本工作所用到的 5 个基准装置平均而言, ^{235}U 裂变中子的贡献约占总量的 92.5%。

3 参数研究

为了确认制作 WIMS 多群常数库时 NJOY 输入参数的合理性以及评价输入参数的变化对积分量的影响, 需要对输入参数进行研究。本工作用 WIMSD5A 程序分析了 TRX-1, 2 和 BAPL-1, 2, 3 等 5 个热堆基准装置^[5] 的积分量对 NJOY 输入参数的灵敏度。

3.1 共振重造误差对积分量的影响

在 RECONR 模块中, 每个核的重造误差 ERR 均从 0.2% 增加到 0.4%, 结果只对 H 核和 ^{238}U 核有影响, 并且对 H 核的影响可以忽略。研究结果表明, 积分量对共振重造误差不太灵敏。

3.2 截面薄化误差对积分量的影响

在 BROADR 模块中, 每个核的截面薄化误差 ERRTHN 从 0.3% 增加到 0.6%, 结果对 ^{235}U 及 ^{238}U 有影响, 并且对 K_{eff} (有限介质增殖因子) 的影响未超过 0.05%, 而其他参数的差异均为 0.2%。分析结果表明, 积分量对截面薄化误差不太灵敏。

3.3 Goldstein-Cohen λ_G 参数对积分量的影响

Goldstein-Cohen 参数 λ_G 与共振积分表是有密切关系的。通过研究 λ_G 值对积分量的影响, 可以看出, ^{235}U 的 λ_G 值对积分量影响不大; ^{238}U 的 λ_G 值对积分量有影响, 但不是很大; 而在有氢和氧的情形下积分量对 λ_G 值还是相当灵敏的, 特别是氧化物燃料栅元, 积分量 K_{eff} 值降低 0.1% 以上, 而 ρ^{238} 值 (^{238}U 超热俘获与热俘获之比) 几乎增加 1%。

3.4 参考邦达连柯本底截面 σ_0 对积分量的影响

WIMS 程序根据栅元的结构、成分、温度等参数, 计算出实际 σ_0 值, 对共振积分表进行内插, 并通过引入 Goldstein-Cohen 参数, 采用中间近似获得有效自屏截面。从自屏观点出发, 在这些栅元中最重要的核素是 ^{238}U 。计算结果表明, 积分量对参考 σ_0 还是很灵敏的。另外, 计算结果还表明, 对所用到的核素的数据必须包括自屏处理, 至少散射截面需作自屏处理。

3.5 裂变谱对积分量的影响

为了评价 WIMS 库中选取不同的裂变谱对积分量的影响, 在更新 WIMS 库时分别选择以下几种裂变谱: (1) 纯 ^{235}U 裂变谱; (2) 纯 ^{238}U 裂变谱; (3) WIMS 老库的裂变谱; (4) 本工作所采用的裂变谱是 7.5% ^{238}U 和 92.5% ^{235}U 的贡献的混合谱。研究表面, 积分量 δ^{238} (^{238}U 裂变与 ^{235}U 裂变之比) 对裂变谱是很灵敏的。

3.6 权重谱对积分量的影响

在 NJOY 的 GROUPR 模块中, 分别选择 $IWT = \pm 4$ (即 Maxwellian + 1/E + fission 谱) 及 $IWT = \pm 5$ (EPRI-CELL LWR 谱) 两种权重谱来制作群常数。可以看出, 产生 H 和 ^{238}U 群截面的不同的权重谱对积分量的影响还是很大的。总体而言, δ^{235} 和 K_{eff} 的误差分别大约为 3% 及 0.14%, 其他积分量的差别在 -0.25% 左右, 可见, 积分量对权重谱还是

很灵敏的、因此，在制作群常数时正确选择权重谱还是很重要的。

3.7 微观评价库对积分量的影响

本工作分别产生了基于 CENDL-2.1 及 ENDF/B-6.5 微观库的 WIMS 库，并运行 WIMSD5A 程序分别计算了 5 个基准装置的积分量，并将几个库的计算结果与基准实验结果进行了比较，结果在表 1

中给出。从表中可以看出，除了 δ^{23} 以外，其它积分量与实验结果符合得很好，并且在允许的参考间隔范围以内。 ρ^{26} 高估了 1%—2%，低估了 K_{eff} 值，特别是 ^{238}U 核有强烈自屏的 TRX 栅元。 δ^{25} (^{235}U 超热裂变与热裂变之比) 略微超过了平均值一点， δ^{28} 系统地低估了近 3%，这个量对于裂变谱及权重谱很灵敏。

表 1 计算结果比对

栅元	$K_{eff}(\Delta K_{eff})$	$\rho^{26}(\Delta\rho^{26})$	$\delta^{25}(\Delta\delta^{25})$	$\delta^{28}(\Delta\delta^{28})$	$C^*(\Delta C^*)$
TRX-1	1 1.000 00 (~0.30)	1.320 (~1.6)	0.098 7 (~1.0)	0.094 6 (~4.3)	0.797 (~1.0)
	2 0.996 16 (~0.39)	1.376 (~4.2)	0.098 0 (~0.72)	0.095 8 (+1.3)	0.797 (~0.06)
	3 0.987 74 (~1.2)	1.358 (~2.9)	0.097 7 (~1.0)	0.099 6 (+5.3)	0.805 (+1.0)
	4 0.993 14 (~0.69)	1.342 (+1.6)	0.097 9 (~0.81)	0.100 9 (+6.6)	0.783 (~0.99)
TRX-2	1 1.000 00 (~0.10)	0.837 (~1.9)	0.061 4 (~1.3)	0.069 3 (~5.1)	0.647 (~0.93)
	2 0.997 40 (~0.26)	0.862 (+3.0)	0.060 2 (~1.9)	0.068 3 (~1.4)	0.641 (~0.88)
	3 0.990 06 (~1.0)	0.850 (+1.6)	0.060 0 (~2.3)	0.070 6 (+1.8)	0.649 (+0.23)
	4 0.994 82 (~0.52)	0.840 (+0.38)	0.060 2 (~1.9)	0.072 1 (+4.0)	0.638 (~1.4)
BAPL-1	1 1.000 00 (~0.10)	1.390 (~0.72)	0.084 0 (~2.4)	0.078 0 (~5.1)	0.800
	2 1.000 52 (+0.05)	1.437 (+3.4)	0.082 7 (~1.6)	0.074 6 (~4.4)	0.811
	3 0.993 74 (~0.63)	1.413 (+1.7)	0.082 3 (~2.0)	0.076 8 (~1.6)	0.817
	4 0.998 87 (~0.11)	1.404 (+1.0)	0.082 7 (~1.5)	0.078 6 (+0.79)	0.805
BAPL-2	1 1.000 00 (~0.10)	1.120 (~0.89)	0.068 0 (~1.5)	0.070 0 (~5.7)	0.800
	2 1.000 64 (+0.06)	1.195 (+6.7)	0.067 5 (~0.76)	0.064 2 (~8.3)	0.735
	3 0.993 87 (~0.62)	1.175 (+4.9)	0.067 1 (~1.3)	0.065 9 (~5.8)	0.744
	4 0.998 20 (~0.18)	1.169 (+4.3)	0.067 6 (~0.59)	0.067 8 (~3.2)	0.734
BAPL-3	1 1.000 00 (~0.10)	0.906 (~1.1)	0.052 0 (~1.9)	0.057 0 (~5.3)	0.800
	2 1.001 18 (+0.12)	0.938 (+3.5)	0.051 9 (~0.21)	0.052 6 (~7.7)	0.859
	3 0.994 88 (~0.52)	0.923 (+1.8)	0.051 6 (~0.77)	0.054 0 (~5.3)	0.865
	4 0.998 68 (~0.13)	0.918 (+1.3)	0.052 1 (+0.12)	0.055 7 (~2.2)	0.856
Average	1 0.15	1.32	1.69	4.86	0.83
	2 -0.03 (~0.22)	4.16 (~1.35)	-1.04 (~0.61)	-5.60 (~4.74)	-0.01 (~0.74)
	3 -0.81 (~0.25)	2.59 (~1.27)	-1.48 (~0.60)	-2.30 (~4.69)	0.82 (~0.42)
	4 -0.35 (~0.24)	1.74 (~1.36)	-0.94 (~0.71)	-0.11 (~4.49)	-0.93 (~0.42)

注： $\Delta K_{eff} = (K_{eff}(\text{Cal.}) - K_{eff}(\text{Exp.})) / (K_{eff}(\text{Exp.})) \%$ ， $\Delta\rho^{26}$ 等定义类似；

1 Experiment, 2 CENDL-2.1, 3 ENDF/B-6.5, 4 WIMS86.

从上表中还可以看出，对上述所有基准装置而言，CENDL-2.1 所计算的 K_{eff} 值与实验值符合得很好，特别是 TRX 装置，CENDL-2.1 的计算结果好于其它库的结果；其它的积分量，几个库的计算结果较接近，并与实验值符合得较好。

4 结果分析与问题讨论

参数研究表明，积分量对 NJOY 的一些输入参数的选取还是相当灵敏的，尤其是对 Goldstein-Cohen λ_G 值的选取、参考 σ_0 的选取、裂变源谱的选取以

及权重谱等的选取更是很灵敏。由于 WIMS 库是适用于热堆计算的, 通常选 92.5% ^{235}U 及 7.5% ^{238}U 贡献的混合谱时积分量的计算结果更好。

通过分析和研究积分量对 NJOY 输入参数的灵敏度, 可以看出, 选择不同的 NJOY 输入参数对不同的积分量的影响程度是不同的。可见, 为了使 WIMS 多群截面库的普适性更强, 在选择输入参数时, 积分量灵敏的输入参数要精确并合理地给出。

另外, 通过采用不同的微观评价库制作 WIMS 库来计算积分量, 得到的结论是: 就 5 个热堆基准装置而言, 中国评价库 CENDL-2.1 所计算的 K_{eff} 值与

实验值符合得很好, 特别是 TRX 装置, CENDL-2.1 的计算结果好于 ENDF/B-6.5 的计算结果; 其它的积分量, 几个库的计算结果较接近。可以看出, 不同的微观评价库对积分量的影响还是很大的, 因此, 在制作群常数时正确选择微观评价库也是很重要的。

参数研究还表明, 灵敏度分析还应扩大到对所感兴趣的其他参数的研究中去, 即在快能区, 计算结果有差别的原因也有可能是能量网格太粗的原因, 这一假定是根据积分量对权重谱有很高灵敏度得出的。

参 考 文 献:

- [1] Askew J R, Fayers F J, Kemsbell P B. A General Description of the Code WIMS[J]. Jou, British Nucl Energy Soc, Oct. 1966, 5(4): 564.
- [2] Lemmel H D. Index of Nuclear Data Libraries Available from the IAEA Nuclear Data Section[R]. IAEA, IAEA-NDS-7, Rev 97/12, December 1997.
- [3] MacFarlane R E, *et al.* NJOY91.91 A Code System for Producing Point-wise and Multi-group Neutron and Photon Cross Sections from ENDF/B Evaluated Nuclear Data, LANL, Contribution to RSIC Peripheral Shielding Routine Collection[R]. PSR-171, 1994.
- [4] Cullen D E. Report on the IAEA Cross Section Processing Code Verification Project[R]. IAEA, IAEA-NDS-39 Rev 4, 1989.
- [5] Trkov A, Zidi T, Ganesan S. NJOY Verification for WIMS Library Preparation[R]. Institute "Jozef Stefan", Ljubljana, Slovenia, IJS-DP-6622, May 1993.

Study of NJOY Input Parameters for Update of WIMS Library*

LIU Ping

(China Nuclear Data Center, Beijing 102413, China)

Abstract: WIMS multi-group constant library is the associated working library of WIMS/D4 lattice code, and it was created by using rather old and obsolete data based on ENDF/B-3(1972). Recently, the new evaluated data files such as ENDF/B-6.5, JEF-2.2, CENDL-2.1 and JENDL-3.2 were released. It's necessary to update the old library by the new evaluated data. The parameter study is performed to investigate the sensitivity of the integral parameters calculated with WIMS/D4 on the selection of various input option of NJOY. CENDL-2.1 data are used in the analysis. Detailed results of the parameter study are presented.

Key words: multi-group constants library; integral parameter K_{eff} ; benchmark testing; reaction rate

* Foundation item: The Coordination Research Project of International Atomic Energy Agency (J0889/RO).