



·蒙特卡罗方法及其应用·

蒙卡程序计算临界基准题测试检验 ENDF/B-VIII.0 核数据库*

刘晓波¹, 胡泽华²

(1. 中国工程物理研究院核物理与化学研究所, 四川 绵阳 621900; 2. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

摘 要: 采用 MCNP 程序和 ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII.0 核数据库, 对 119 个模型构成的临界基准题进行了临界计算测试检验。此临界基准题模型包含 ²³³U、高浓铀、中浓铀、低浓铀和钚材料的临界实验系统, 中子能量覆盖了快中子、中能中子和热中子能谱。采用 ENDF/B-VIII.0 核数据库的计算有效增殖因子 k_{eff} 结果与基准实验结果相对偏差的均值和标准差分别为 -68.98×10^{-5} 和 407.88×10^{-5} , 检验计算 k_{eff} 结果与基准实验结果的偏差与基准实验不确定度比值在 1σ (σ 为标准不确定度) 以内、 $1\sigma \sim 3\sigma$ 区间和大于 3σ 的数量分别为 107, 9 和 3 个; 将此结果与相同条件下 ENDF/B-VII.1 核数据库的计算结果进行了比较, 表明 ENDF/B-VIII.0 核数据库对临界计算更准确, 与实验模型结果符合更好。

关键词: 蒙卡程序; 临界基准题; 核数据; ENDF/B-VIII.0; 测试检验

中图分类号: TL329

文献标志码: A

doi: 10.11884/HPLPB202234.210366

Monte Carlo calculation of critical benchmarking models for testing ENDF/B-VIII.0 nuclear data

Liu Xiaobo¹, Hu Zehua²

(1. Institute of Nuclear Physics and Chemistry, CAEP, Mianyang 621900 China;

2. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)

Abstract: The MCNP program and the ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII.0 nuclear data were used to calculate the criticality respect to the critical benchmarking suits of 119 models for nuclear data testing. The benchmarking suits consists of ²³³U, high-enriched uranium, intermediate enriched uranium, low-enriched uranium and Pu critical configurations in fuel type, covering the spectra of fast, intermediate, and thermal neutrons. With ENDF/B-VIII.0 nuclear data, the average and standard deviation of the relative deviation between the calculation k_{eff} and the benchmarking k_{eff} were -68.98×10^{-5} and 407.88×10^{-5} respectively, and the tallies that the ratio of deviation to experimental uncertainty within 1σ , among $1\sigma \sim 3\sigma$ and beyond 3σ were 107, 9 and 3, respectively. The resultant data were compared to the calculation results with ENDF/B-VII.1 in the same computation conditions, which indicates that the ENDF/B-VIII.0 nuclear data was more accurate, and more consistent with the benchmarking results for criticality calculation.

Key words: Monte Carlo program; critical benchmarking models; nuclear data; ENDF/B-VIII.0; testing and verification

临界基准实验数据库在中子输运程序和核反应数据的检验验证方面得到大量应用, 是考核模拟计算程序及核数据准确性和有效性的重要手段。利用 ICSBEP 数据库手册^[1-2] 的实验基准题和 IAEA 数值模拟基准题, 国内各相关单位对开发研究的数值模拟程序及核数据进行了大量的检验实践, 如中子模拟输运软件临界计算可靠性的检验^[3-7]、通用及专用核数据库的临界计算检验^[8-13]; 这些研究工作直接服务于中子输运模拟程序开发和应用、核数据改进和升级的研究过程中, 取得了显著的检验确认效果。国内针对核数据库的临界计算检验既有国产的 CENDL 核数据库^[14-15], 也有基于 ENDF/B-VII.0^[16] 和 ENDF/B-VII.1^[17] 的核数据库。

* 收稿日期: 2021-08-25; 修订日期: 2021-12-26
联系方式: 刘晓波, 13881190590@163.com。

在 MCNP 程序发展和 ENDF/B 核数据库发展过程中, 研究人员从 ICSBEP 数据库手册中选择具有代表性的模型作为测试验证基准题, 对程序和核数据库的计算精度和可靠性进行测试评估, 并逐渐扩充完善形成的一个包含 119 个临界基准模型的扩展检验包^[18-19], 文献 [20] 采用此扩展检验包对 ENDF/B-VII.1 和 ENDF/B-VII.0 的临界计算测试进行了比较分析, 结果表明前者对临界计算结果的预测准确性相比后者有显著提高。

本文采用 MCNP5 程序^[21-22] 和最新发布的 ENDF/B-VIII.0 核数据^[23], 对文献 [19] 取自 ICSBEP 手册的 119 个临界基准模型开展了临界计算, 将计算结果与基准题实验结果和相同条件下采用 ENDF/B-VII.1 核数据计算结果进行了比较, 表明 ENDF/B-VIII.0 核数据库相比 ENDF/B-VII.1 对临界计算更准确, 与实验模型结果更符合。

1 计算验证条件

MCNP 程序是美国洛斯阿拉莫斯国家实验室(LANL)开发的通用三维蒙特卡罗粒子运输模拟软件, 迄今已发展到 MCNP6.2 版本^[24], 国内目前普遍使用的为 MCNP5-1.6 版本, 本文采用的计算程序为 MCNP5 版本。ENDF/B 核数据由隶属美国布鲁克海文国家实验室(BNL)的美国核数据中心(NNDC)研制发布并维护升级, 最近两次的升级版本为 2011 年发布的 ENDF/B-VII.1 核数据和 2018 年发布的 ENDF/B-VIII.0 核数据。MCNP 程序使用的核数据格式为 ACE 格式, 为此采用 NJOY 程序^[25] 将 ENDF 格式的核数据转化成 ACE 格式供 MCNP 程序计算使用, 热散射数据采用 ENDF/B-VII.1 版本。

模拟计算增殖有效增殖因子 k_{eff} 时的计算条件为每代粒子数为 1×10^5 , 迭代次数为 150 次, 舍去前 25 次; 在此计算条件下, 计算结果的统计涨落误差在 0.00015~0.00035 之间, 远小于临界基准模型结果的实验不确定度, 约为后者的 1/10。

2 测试检验方法

假设临界基准实验模型测试集总数为 N , 第 i 个基准模型的 k_{eff} 和不确定度为 k_{ei} 和 u_{ei} , 采用 MCNP 计算得到的 k_{eff} 定义为 k_{ci} , 则计算结果与实验结果的相对偏差 r_i 为

$$r_i = \frac{k_{ci} - k_{ei}}{k_{ei}} \times 10^5 \quad (1)$$

采用 ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII.0 两种核数据分别计算临界基准题的有效增殖因子 k_{eff} , 通过比较相对偏差 r_i 的统计特征量: 即 r_i 平均值、 r_i 标准差和 r_i 平方和开根号的均值来判断核数据的准确性, 分别记为 $E(r_i)$, $STD(r_i)$ 和 $F_2(r_i) = \frac{1}{N} \sqrt{\sum r_i^2}$ 。

考虑到每个临界基准实验模型的不确定度各不相同, 将计算结果与实验结果的偏差与基准模型不确定度 u_{ei} 的比值 R_i (简称偏差比) 作为特征量能更准确地反映模拟计算结果的准确性, 偏差比 R_i 定义为

$$R_i = \frac{k_{ci} - k_{ei}}{u_{ei}} \quad (2)$$

同样的, 通过比较偏差比 R_i 的统计特征量: 即 R_i 平均值、 R_i 标准差和 R_i 平方和开根号的均值来判断核数据的准确性, 分别记为 $E(R_i)$, $STD(R_i)$ 和 $F_2(R_i) = \frac{1}{N} \sqrt{\sum R_i^2}$ 。

由于蒙卡计算的统计涨落不确定度远小于实验结果的不确定度, 在计算相对偏差时的合成不确定度时, 直接以 u_{ei} 代替。

3 基准模型构成

由 119 个临界基准题模组成的扩展检验包包含 ^{233}U 、高浓铀(HEU)、中浓铀(IEU)、低浓铀(LEU)和钚材料组成的临界实验系统, 中子能量覆盖了快中子、中能中子和热中子能谱范围, 包含了主要的结构材料元素如 Be, BeO, C, Cu, Al, Fe, Ni, W, Th, Cd, Zr, ^{233}U , 天然铀和贫化铀等。具体模型分类构成如表 1 所示。

表 1 中 HEU, IEU 和 LEU 按照铀燃料中 ^{235}U 同位素丰度的质量分数 $w(^{235}\text{U})$ 进行分类, 分别为 $w(^{235}\text{U}) \geq 60\%$, $5\% \leq w(^{235}\text{U}) < 60\%$ 和 $w(^{235}\text{U}) < 5\%$ 。此临界检验模型库中低浓度铀燃料分类的界限为 5%, 与 ICSBEP 手册设定的 10% 界限不同, 主要是考虑到大型核电站使用的核燃料中 $w(^{235}\text{U})$ 均小于 5%。中子能谱分类的标准为: 快中子能谱指大于等于 50% 的裂变是由能量大于等于 100 keV 的中子诱发的; 中能中子能谱指大于等于 50% 的裂变是由中子能量介于 100 keV 和 0.625 eV 之间的中子诱发的; 热中子能谱指大于等于 50% 的裂变是由能量小于 0.625 eV 的中子诱发裂变的。

表 1 基准模型的分类构成

Table 1 Categorization of the benchmarks in the expanded criticality validation suite

fuel type	number of benchmarks			
	fast	intermediate	thermal	total
²³³ U	10	1	7	18
HEU	29	5	6	40
IEU	10	1	6	17
LEU	0	0	8	8
Pu	21	1	14	36
total	70	8	41	119

4 计算结果与分析

对 119 个临界基准模型分别采用 ENDF/B-VII.1 和 ENDF/B-VIII.0 核数据计算结果与模型基准值的相对偏差 r_i 分布如图 1 所示,从图 1 中可以看出,采用 ENDF/B-VIII.0 核数据的相对偏差 r_i 更小,更向零值线附近集中。

相对偏差 r_i 的 3 个特征统计量如表 2 所示。从表 2 中可以看到,对所有模型模拟计算结果的平均相对偏差从 ENDF/B-VII.1 的正偏差变为 ENDF/B-VIII.0 的负偏差,这样使模拟计算在核临界安全设计及应用时更偏保守;在 $STD(r_i)$ 和 $F_2(r_i)$ 两个特征量上, ENDF/B-VIII.0 核数据的模拟结果略优于 ENDF/B-VII.1 核数据的。

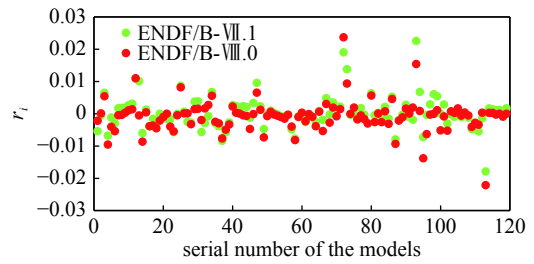


Fig. 1 Distribution pattern of relative deviation r_i

图 1 相对偏差 r_i 的分布图

表 2 相对偏差 r_i 的统计特征量比较

Table 2 Comparison of the statistics values for relative deviation r_i

nuclear data	statistical value of $r_i/10^{-5}$		
	$E(r_i)$	$STD(r_i)$	$F_2(r_i)$
ENDF/B-VII.1	15.45	416.56	38.05
ENDF/B-VIII.0	-68.98	407.88	37.77

偏差与基准模型不确定度比值 R_i 的分布如图 2 所示。从图 2 中可以看出,应用 2 个核数据库得到的偏差比 R_i 大部分都集中在 2σ 区间,但是采用 ENDF/B-VIII.0 核数据的偏差比 R_i 更小,更向零值线附近集中。

偏差比 R_i 的 3 个特征统计量如表 3 所示。从表 3 中可以看出, ENDF/B-VII.1 和 ENDF/B-VIII.0 数据库对所有模型模拟计算结果的平均偏差比均为负,但后者偏离更大(达到了 0.272σ),也说明使用 ENDF/B-VIII.0 模拟计算时在核临界安全设计及应用时更偏保守;但是在 $STD(R_i)$ 和 $F_2(R_i)$ 两个特征量上, ENDF/B-VIII.0 核数据的计算结果略优于 ENDF/B-VII.1 核数据。

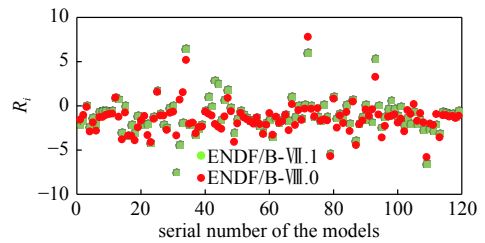


Fig. 2 Distribution pattern of the ratio of the deviation to uncertainty R_i

图 2 偏差与不确定度比值 R_i 的分布图

表 3 中也给出了偏差比 R_i 偏离程度的统计数据,可以看到 ENDF/B-VIII.0 核数据的计算结果偏差在 1σ 以内、

表 3 偏差比 R_i 的统计特征量比较

Table 3 Comparison of the statistics values for deviation ratio R_i

nuclear data	statistical value of R_i/σ			counts of R_i		
	$E(R_i)$	$STD(R_i)$	$F_2(R_i)$	$\leq 1\sigma$	$1\sigma \sim 3\sigma$	$> 3\sigma$
ENDF/B-VII.1	-0.029	1.732	0.158	94	20	5
ENDF/B-VIII.0	-0.272	1.540	0.143	107	9	3

在 $1\sigma\sim 3\sigma$ 区间的频次分别为 107 个和 9 个, 相比 ENDF/B-VII.1 有了较大改进, 后者分别为 94 个和 20 个; 大于 3σ 的异常数据个数, ENDF/B-VIII.0 计算结果相比 ENDF/B-VII.1 也从 5 个减少为 3 个。

从相对偏差 r_i 和偏差比 R_i 两个参考量的综合比较, 以及计算结果在实验不确定度 3σ 内的符合程度比较, 应用 ENDF/B-VIII.0 核数据的临界模拟计算结果更准确, 与实验模型结果符合得更好。

5 结 论

采用 MCNP5 程序和 ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII.0 核数据库, 对 119 个模型构成的临界基准题验证包进行了临界计算测试检验, 将计算结果与实验基准结果的相对偏差和标准差比与 ENDF/B-VII.1 的对应结果进行了分析比较。采用 ENDF/B-VIII.0 核数据库的检验计算 k_{eff} 结果与基准实验结果相对偏差的均值和标准差分别为 -68.98×10^{-5} 和 407.88×10^{-5} , 检验计算 k_{eff} 结果与基准实验结果的偏差与基准实验不确定度比值在 1σ 以内、 $1\sigma\sim 3\sigma$ 之间和大于 3σ 的频次分别为 107, 9 和 3 个; 将此结果与相同条件下 ENDF/B-VII.1 核数据库的对应计算结果进行了比较, 表明 ENDF/B-VIII.0 核数据库对临界计算更准确, 与实验模型结果符合得更好。

参考文献:

- [1] Organization for Economic Co-Operation and Development Nuclear Energy Agency – OECD/NEA, Seine L. International handbook of evaluated criticality safety benchmark experiments, NEA/NSC/DOC(95)03[R]. Paris France: OECD Nuclear Energy Agency Report, 2009.
- [2] Bess J D, Ivanova T, Hill I, et al. The 2019 edition of the ICSBEP handbook[J]. Transactions of the American Nuclear Society, 2019, 121(1): 901-904.
- [3] 乔录成, 徐家云, 白立新, 等. 临界计算程序CHMCK-III的临界安全基准检验计算[J]. 原子能科学技术, 2003, 37(6): 548-550. (Qiao Lucheng, Xu Jiayun, Bai Lixin, et al. Verifying the criticality calculation code CHMCK-III with the benchmark experiments and MCNP-4B code[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2003, 37(6): 548-550)
- [4] 张春早, 吴宜如, 许德政, 等. HENDL1.1/MG数据库和VisualBUS1.0程序的临界基准计算与分析[J]. 原子核物理评论, 2006, 23(2): 142-145. (Zhang Chunzao, Wu Yican, Xu Dezheng, et al. Numerical testing of HENDL1.1/MG data library and VisualBUS1.0 code with evaluated critical safety benchmark experiments[J]. Nuclear Physics Review, 2006, 23(2): 142-145)
- [5] 邓力, 胡泽华, 陈朝斌, 等. 三维多群中子输运蒙特卡罗程序MCMG-II基准检验[J]. 原子能科学技术, 2009, 43(s1): 32-36. (Deng Li, Hu Zehua, Chen Chaobin, et al. 3-D Monte-Carlo neutron transport code MCMG-II and benchmark tests[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2009, 43(s1): 32-36)
- [6] Zhang Binhang, Song Jing, Sun Guangyao, et al. Criticality validation of SuperMC with ICSBEP[J]. Annals of Nuclear Energy, 2016, 87: 494-499.
- [7] 李云龙, 杨海峰, 易璇, 等. JMCT程序临界安全基准校验计算与分析[J]. 强激光与粒子束, 2017, 29: 016007. (Li Yunlong, Yang Haifeng, Yi Xuan, et al. Benchmark experiment and analysis of JMCT on nuclear critical safety[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2017, 29: 016007)
- [8] 何兆忠, 许德政, 邹俊, 等. HENDL2.1/CG数据库的临界基准测试与分析[J]. 核科学与工程, 2009, 29(1): 67-70. (He Zhaozhong, Xu Dezheng, Zou Jun, et al. Numerical testing of HENDL2.1/CG data library with evaluated critical benchmark experiments[J]. Chinese Journal of Nuclear Science and Engineering, 2009, 29(1): 67-70)
- [9] 张华, 刘萍, 吴海成. CENDL-3.1临界基准装置的积分检验[J]. 核动力工程, 2010, 31(s2): 145-149. (Zhang Hua, Liu Ping, Wu Haicheng. Benchmark CENDL-3.1 with international handbook of evaluated criticality safety benchmark experiments[J]. Nuclear Power Engineering, 2010, 31(s2): 145-149)
- [10] 陈朝斌, 陈文学, 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. (Chen Chaobin, Chen Yixue, Hu Zehua, et al. Verification and validation of ACE-format library created from ENDF/B-VII. 0[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2009, 43(9): 834-838)
- [11] 吴海成, 覃英参, 张环宇, 等. CENDL-NP热谱临界基准检验[J]. 核动力工程, 2014, 35(s2): 176-178. (Wu Haicheng, Qin Yingcan, Zhang Huanyu, et al. Validation with CENDL-NP thermal criticality benchmark[J]. Nuclear Power Engineering, 2014, 35(s2): 176-178)
- [12] 王小鹤, 胡继峰, 陈金根, 等. 钍铀燃料循环专用核数据库CENDL-TMSR-V1的基准检验[J]. 原子能科学技术, 2019, 53(8): 1466-1474. (Wang Xiaohe, Hu Jifeng, Chen Jin'gen, et al. Benchmark test of CENDL-TMSR-V1 nuclear data library for thorium-uranium fuel cycle[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2019, 53(8): 1466-1474)
- [13] 唐海波, 张彬航, 袁显宝, 等. 基于ENDF/B-VII. 1库的AHD1.0加工与基准验证[J]. 核技术, 2020, 43: 020601. (Tang Haibo, Zhang Binhang, Yuan Xianbao, et al. Development and validation of AHD1.0 based on ENDF/B-VII. 1[J]. Nuclear Techniques, 2020, 43: 020601)
- [14] Ge Zhigang, Wu Haicheng, Chen Guochang, et al. CENDL project, the Chinese evaluated nuclear data library[J]. EPJ Web of Conferences, 2017, 146: 02002.
- [15] Ge Zhigang, Xu Ruirui, Wu Haicheng, et al. CENDL-3.2: The new version of Chinese general purpose evaluated nuclear data library[J]. EPJ Web of Conferences, 2020, 239: 09001.
- [16] Chadwick M B, Obložinský P, Herman M, et al. ENDF/B-VII. 0: next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology[J]. Nuclear Data Sheets, 2006, 107(12): 2931-3036.
- [17] Chadwick M B, Herman M, Obložinský P, et al. ENDF/B-VII. 1 nuclear data for science and technology: cross sections, covariances, fission product yields and decay data[J]. Nuclear Data Sheets, 2011, 112(12): 2887-2996.
- [18] Mosteller R D. An expanded criticality validation suite for MCNP, LA-UR-10-06230[R]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2010.

- [19] Mosteller R, Brown F, Kiedrowski B. An expanded criticality validation suite for MCNP, LA-UR-11-00240[R]. Monte Carlo Codes: Los Alamos National Laboratory, 2011.
- [20] Mosteller R D. Comparison of ENDF/B-VII. 1 and ENDF/B-VII. 0 results for the expanded criticality validation suite for MCNP and for selected additional criticality benchmarks[J]. [Nuclear Data Sheets](#), 2014, 118: 442-445.
- [21] Forster R A, Cox L J, Barrett R F, et al. MCNPTM version 5[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2004, 213: 82-86.
- [22] Brown F B. MCNP—a general Monte Carlo N-particle transport code, version 5, LA-UR-03-1987[R]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2003.
- [23] Brown D A, Chadwick M B, Capote R, et al. ENDF/B-VIII. 0: the 8th major release of the nuclear reaction data library with CIELO-project cross sections, new standards and thermal scattering data[J]. [Nuclear Data Sheets](#), 2018, 148: 1-142.
- [24] Werner C J, Bull J S, Solomon C J Jr, et al. MCNP version 6.2 release notes, LA-UR-18-20808[R]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2018.
- [25] MacFarlane R, Muir D W, Boicourt R M, et al. The NJOY nuclear data processing system, version 2016, LA-UR-17-20093[R]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2017.