

快堆群常数连接程序 LEK

余佩华

(中国原子能科学研究院, 北京)

LEK核数据处理程序是实现从 ENDF/B-IV^[1] 格式的评价核数据库中, 用计算机自动取出快堆群常数程序 KQCS^[2] 的输入数据的程序。LEK取数既准确又节省大量的人力, 改变了 KQCS 程序需手工输入上万个核数据的繁琐、落后局面, 使中国核数据中心 (CNDC) 用计算机计算大量核素的快中子反应堆多群常数成为可能, 为检验中国评价核数据库 (CENDL) 创造了条件。

关键词 评价核数据, 群常数。

一、引言

LEK 程序是个模块程序系统, 它由 5 个模块程序组成。它们分别是 GETENDF, LINK 2, LINK 3, LINK 4 和 LINK 5。LEK 共有 12 个输入、输出数据文件。它们分别为 ENDFB4, FOR 001, FOR 002, FOR 003, FOR 004, FOR 005, REST 1, REST 2, REST 3, REST 4, REST 5 和 RESULT。它们之间的关系示于图 1。执行的次序是 GETENDF, LINK 2, LINK 4, LINK 3 和 LINK 5。

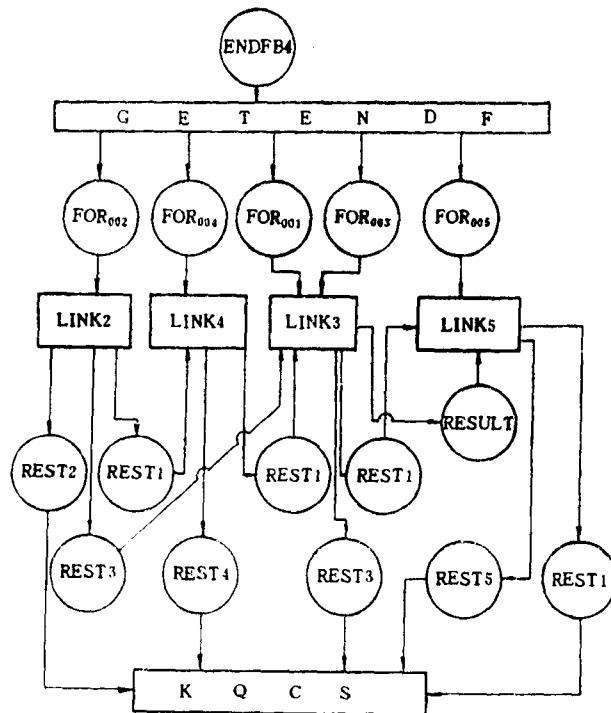


图 1 LEK 程序系统结构图

LEK是在CYBER-170/825机上用FORTRAN-V编制的程序。用LEK对ENDF/B-IV数据带上的 ^{235}U (MAT=1261)和 ^{238}U (MAT=1262)进行取数,取出的数作为KQCS程序的输入,然后,用KQCS程序计算群常数。试算结果与国外同类程序的26群邦达里柯结果^[3]进行了分析比较,试算结果可靠。经过KQCS程序自检,结果自洽。

二、程序描述

1. GETENDF

在ENDF/B-IV库中,每一个核素有一个MAT值。例如: ^{238}U 的MAT值是1262。在执行GETENDF程序时,只需从终端输入所取核素的MAT值。运行的结果是将该核素的文档1—5分别放入数据文件FOR 001—005中。如果该核素无文档5,则FOR 005中只放入一个ENDF/B-IV的文档结束记录。

2. LINK 2

LINK 2程序从FOR 002中取出KQCS程序所需共振参数,放入共振参数文件REST 2中。取出的同位素个数JAM、同位素丰度FAM(10)及同位素原子量AAM(10)放入截面数据REST 3中。LINK 2根据KQCS的要求,允许同位素的个数最多为10个。

3. LINK 3

LINK 3程序从FOR 003数据文件MT值为2, 102, 18, 103, 107, 104, 105, 4, 16 (6, 7, 8, 9), 17, 28, 22中分别取出(n,n), (n, γ), (n,f), (n,p), (n, α), (n,D), (n,T), (n,n'), (n,2n), (n,3n), (n,n'p)和(n,n'a)的反应截面数据。LINK 3还从FOR 001中取出每次裂变所产生的中子数的有关数据。所取出的数据都放入截面数据文件REST 3中。

当下列三种情况之一出现时,该核素的评价核数据必须先用LINEAR^[4]程序对文档3的数据进行线性化处理,再用GETENDF程序进行取数。(a)上述12种反应道的截面值随能量变化的内插区数有一个大于4。(b)MT从51—91的反应截面随能量的变化内插方式有一个不为第2种内插方式。(c)MT从6—9和MT为16同时出现,或只有MT从6—9而无MT为16,截面随能量变化的内插方式有一个不为第2种内插方式。

在ENDF/B-IV格式的数据库的文档3中,(n,n')反应总截面在MT为4的节段中给出。它是MT为51, 52, ……90的分立能级激发截面和MT为91的连续非弹性散射截面之和。

$$\sigma_{n,n'}(E) = \sum_{MT=51}^{91} \sigma_{n,n'}^{MT}(E) \quad (1)$$

KQCS程序要求给出非弹性散射次级中子能谱,而ENDF/B-IV格式的文档5中,仅给出MT为91的连续非弹性散射次级中子能谱,并规定MT为51到90分立能级非弹性激发就作为

$$f(E \rightarrow E') = \delta \left[E' - \frac{A^2 + 1}{(A + 1)^2} E + \frac{A}{A + 1} \theta \right] \quad (2)$$

谱型给出。 E 为入射中子能量， E' 为出射中子能量， A 为靶核质量与中子质量比， θ 为剩余核能级激发能。与(2)式有关的参数已在文档3中给出，在文档5中不再给出。因此，LINK 3程序将 MT 为50—91的节段中给出的截面数据和反应阈能也取出，并算出次级中子能谱权重函数 $P_{n,n'}^{MT}(E)$

$$P_{n,n'}^{MT}(E) = \frac{\sigma_{n,n'}^{MT}(E)}{\sigma_{n,n'}(E)} \quad (3)$$

$$MT = 51, 52, \dots, 90, 91$$

权重函数 $P_{n,n'}^{MT}(E)$ 满足归一化条件

$$\sum_{MT=51}^{91} P_{n,n'}^{MT}(E) = 1 \quad (4)$$

在 ENDF/B-IV 格式的数据库的文档3中， $(n, 2n)$ 反应总截面应该等于 MT 为6, 7, 8, 9和16所给出的截面之和。

$$\sigma_{n,2n}(E) = \sum_{MT=6}^9 \sigma_{n,2n}^{MT}(E) + \sigma_{n,2n}^{MT=16}(E) \quad (5)$$

因此，LINK 3程序将 MT 为6, 7, 8, 9和16的截面数据取出，并按(5)式算出总的 $(n, 2n)$ 反应截面放入SG 9数组中。LINK 3程序亦算出 $(n, 2n)$ 反应的次级中子能谱权重函数 $P_{n,2n}^{MT}(E)$ ：

$$P_{n,2n}^{MT}(E) = \frac{\sigma_{n,2n}^{MT}(E)}{\sigma_{n,2n}(E)} \quad (6)$$

$$MT = 6, 7, 8, 9, 16$$

权重函数满足归一化条件

$$\sum_{MT=6}^9 P_{n,2n}^{MT}(E) + P_{n,2n}^{MT=16}(E) = 1 \quad (7)$$

将算出的 (n, n') 和 $(n, 2n)$ 反应的权重函数放入数据文件RESULT之中。

根据KQCS程序的要求，要给出 (n, n') ， $(n, 2n)$ ， $(n, 3n)$ ， $(n, n'p)$ ， $(n, n'\alpha)$ 反应道的截面的间断点。间断点的定义是，在 $\sigma(E)$ 数表中，在同一个能量值上给出了两个不同的截面值，则该能量点称为间断点。LINK 3程序对上面5种反应道的截面进行检查，找出间断点并统一计数放入数组SG中。次序为 $(n, 2n)$ ， $(n, 3n)$ ， $(n, n'\alpha)$ ， $(n, n'p)$ ， (n, n') 。每个反应道的间断点的个数，按次序放入NS1数组中。NS1数组及SG数组均放入文件RESULT中，以便LINK 5程序作为输入数据来用。

4. LINK 4

在 ENDF/B-IV 格式的评价核数据库中，弹性散射角分布数据可用质心系或实验室系的勒让德系数或二维数表 $P(\mu, E)$ 四种方式之一给出。若 $f_i(E)$ 系数或 $P(\mu, E)$ 随能量变化的内插区数大于2，则KQCS程序无法处理这样的弹性散射角分布数据，因此LINK 4也不处理。若随能量变化仅为一个内插区，则分成二个能区：各向同性和各向异性。若随

能量变化有二个内插区, 则分成三个能区: 各向同性为一个能区, 各向异性分为二个能区。当各向同性仅给出一个能量时, 则各向同性能区的能点数为 2, 即为 2 个该能量值。若各向同性能区的能点数大于 2, 则第 1 能点取作最低能点, 第 2 能点取作最高能点, 该点也是各向异性能区的第一能点。

KQCS 程序计算多群常数时, 对于以勒让德系数给出的弹性散射角分布函数只需很少计算机时间, 而若以二维数表 $P(\mu, E)$ 给出弹性散射角分布数据, KQCS 要化费 10 倍于前者的计算机时间。

LINK 4 程序遇到以二维数表形式给出的弹性散射角分布数据时, 首先将二维数表转换成勒让德系数^[5], 再放入输出文件 REST 4 中。

弹性散射角分布函数二维数表转换成勒让德系数的条件是 $P(\mu, E)$ 随 E 的变化为第 1, 2, 3 类内插方式, 随 μ 的变化为第 2 类内插方式。若不符合上述条件则无法转换成勒让德系数, 此时把 $P(\mu, E)$ 数表取出放入 REST 4 中。在 ENDF/B-IV 库中所有以二维数表形式给出的弹性散射角分布数据都符合可以用转换程序的条件。

5. LINK 5

在 ENDF/B-IV 格式的评价核数据库中, 文档 5 给出了次级中子能量分布。根据 KQCS 程序的要求, 要给出 (n, n') , $(n, 2n)$, $(n, 3n)$, $(n, n'p)$, $(n, n'\alpha)$ 的次级中子能谱。其中 (n, n') 和 $(n, 2n)$ 反应的分立能级非弹性次级中子谱的数据已由 LINK 3 程序处理并放入文件 RESULT 中, 在执行 LINK 5 时由文件 RESULT 中读入。

根据 ENDF/B-IV 库中所出现的情况, LINK 5 程序规定, 对于 (n, n') 反应中 MT 为 91 的次级中子能谱的项数只能为 1。对于 $(n, 2n)$ 反应, 若当 MT 为 6, 7, 8, 9 之一和 MT 为 16 同时出现时, MT 为 16 的次级中子能谱的项数只能为 1。若仅有 MT 为 16 的 $(n, 2n)$ 反应, 则次级中子能谱的项数最多可为 4。 $(n, 3n)$, $(n, n'p)$, $(n, n'\alpha)$ 反应的次级中子能谱的项数最多也为四项。

若出现任意列表函数 $g(E \rightarrow E')$ 时, 在一个反应道中它出现的次数只能为 1, 若此时次级中子能谱项数大于 1, 则任意列表函数必为最后一项次级中子谱。所取出的数据都放入 REST 5 文件中。

三、输入输出

1. 输入文件: ENDFB 4
2. 输入卡片: MAT 值(所需取数材料的 MAT 值)。
3. 输出文件: REST 2, REST 3, REST 4, REST 5, REST 1。
4. 接口文件: RESULT, REST 1。
5. KQCS 程序的输入数据文件为 REST 3, REST 4, REST 5, REST 2 组成的文件。REST 1 为 KQCS 程序的数组界文件。

四、LEK 与 KQCS 的连接

用 LEK 程序对 ENDF/B-IV 评价核数据库中²³⁵U 和²³⁸U 分别取数, 作为 KQCS 程序的输入数据。然后, KQCS 对²³⁵U 和²³⁸U 进行了试算。将试算得到的 26 群群常数与苏联邦达里柯 26 群群常数进行了分析比较, 试算结果可靠。

KQCS 程序具有自检功能, 对试算结果进行自检, 结果自治。

LEK 程序成功地将 ENDF/B-IV 格式的评价核数据库与快堆多群常数程序 KQCS 连接起来。使中国核数据中心(CNDC)用计算机大量计算快中子反应堆多群常数成为可能。为检验中国评价核数据库(CENDL)创造了条件。

LEK 在 CYBER-170/825 计算机上执行的顺序是 GETENDF, LINK 2, LINK 4, LINK 3, LINK 5。在执行每一个模块的目标程序之前, 必须对所有文件进行反绕。

参 考 文 献

- [1] Garber, D. et al., ENDF-102, 10(1975).
- [2] 王耀清等, 核科学与工程, 4(4), 321(1984)。
- [3] Bondarenko, I. I., Group Constants for Nuclear Reactor Calculations, New York, 1964.
- [4] Cullen, D.E., UCRL-50400, 17, Part A, 1979.
- [5] 余佩华, 核动力工程, 3(3), 28(1982)。

(编辑部收到日期: 1985 年 5 月 7 日)

LEK—A CODE FOR LINKING ENDF/B-IV FORMAT DATA WITH CODE KQCS

YU PEIHUA

(Institute of Atomic Energy, P. O. Box 275, Beijing)

ABSTRACT

LEK is an interface code. It is used to link ENDF/B-IV format data with Fast Reactor Multigroup Constant Generation Code KQCS. LEK gives out the nuclear data from ENDF/B-IV format files as the input data of KQCS automatically. LEK makes it possible to generate the fast reactor multigroup constants from Chinese Evaluated Nuclear Data Library in Chinese Nuclear Data Center. It is possible now for CNDC to make benchmark testing for CENDL.

Key words Evaluated nuclear data, Group constant.