

文章编号: 0258-0926(2014)S2-0123-04; doi: 10.13832/j.jnpe.2014.S2.0123

# 确定论方法中共振弹性散射的修正方法研究

贺清明, 曹良志, 吴宏春, 祖铁军

西安交通大学能源与动力工程学院, 西安, 710049

**摘要:** 截面加工软件 (NJOY) 程序求解无限均匀慢化方程时采用渐进散射核, 忽略了共振弹性散射的影响, 给特征值和多普勒系数的计算带来较大的误差。为在确定论程序中考虑这种效应, 本文采用多普勒展宽舍弃修正 (DBRC) 方法修改了蒙特卡罗程序 (MCNP) 的自由气体模型, 利用 MCNP 代替 NJOY 制作共振积分表。基于子群共振方法分析了轻水堆燃料棒的无限介质增殖因数和温度系数, 并与 MCNP 的结果进行对比。数值结果表明, 由于考虑了共振弹性散射效应, 本文提出的修正方法提高了确定论方法的计算精度。

**关键词:** NJOY; MCNP; 共振弹性散射; 子群方法

**中图分类号:** TL32 **文献标志码:** A

## Method for Resonance Elastic Scattering Correction in Deterministic Method

He Qingming, Cao Liangzhi, Wu Hongchun, Zu Tiejun

School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049, China

**Abstract:** The asymptotic scattering kernel is applied in NJOY to solve the slowing down equation, where the resonance elastic scattering is neglected. This assumption contributes considerable errors to eigenvalue and Doppler Coefficient (DC). To take this effect into account in deterministic method, the Doppler Broadening Rejection Correction (DBRC) method is employed to correct the free gas model of MCNP, which is used to generate the resonance integral tables instead of NJOY. The infinite medium multiplication factor and DC of Light Water Reactor (LWR) are analyzed based on the subgroup method and the results are compared with those of MCNP. The numerical results show that the correction method proposed in this paper can be used to consider the resonance elastic scattering and promote the precision of the deterministic method.

**Key words:** NJOY, MCNP, Resonance elastic scattering, Subgroup method

### 0 引言

确定论方法一般采用截面加工软件 (NJOY) 制作多群数据库<sup>[1]</sup>, 共振计算使用 NJOY 求解无限均匀慢化得到共振积分表。NJOY 在求解慢化方程时采用渐进散射模型, 即假设实验室坐标系下靶核是静止的。根据这种假设, 能量为  $E$  的中子与靶核碰撞后的出射能量在  $[E, \alpha E]$  上均匀分布, 忽略上散射。因此基于 NJOY 制作的多群数据库的确定论方法受制于 NJOY 所作的假设。

为在确定论方法中考虑共振弹性散射效应, 本文采用多普勒展宽舍弃修正 (DBRC) 方法<sup>[2]</sup>对 MCNP<sup>[3]</sup>的自由气体模型进行修正, 利用 MCNP 代替 NJOY 制作部分共振核素的共振积分表。基于新的共振积分表制作了子群参数, 用于子群共振方法, 并与 MCNP 的计算结果进行对比。对比结果表明, 本文提出的方法能够在确定论方法中有效地考虑共振弹性散射, 提高确定论的计算精度。

收稿日期: 2014-10-29; 修回日期: 2014-11-27

作者简介: 贺清明 (1991—), 男, 在读博士研究生。现主要从事反应堆物理研究

## 1 理论模型

### 1.1 传统的弹性散射模型

在超热能量段（几电子伏特到几十电子伏特），MCNP 采用自由气体模型处理靶核的热运动，通过对靶核速度的抽样模拟例子与靶核的自由碰撞进行对比，靶核速度的概率分布为：

$$P(V, \mu | v_n) = \frac{\sigma_s(v_{rel}, 0) v_{rel} P(V)}{2\sigma_s^{eff}(v_n, T) v_n} \quad (1)$$

式中， $V$  是靶核的速率； $\mu$  是幅角余弦； $v_n$  是中子速率； $T$  为介质温度； $\sigma_s$  为弹性散射截面； $v_{rel}$  为中子相对靶核的速率； $P(V)$  是麦克斯韦分布。在传统自由气体模型中，为提高抽样的效率， $\sigma_s^{eff}(v_n, T)$  被假设为常数，即弹性散射截面不随能量的变化而变化。因此式（1）可以进一步写为：

$$P(V, \mu | v_n) = C \left\{ \frac{v_{rel}}{v_n + V} \right\} \{P_1 f_1(V) + P_2 f_2(V)\} \quad (2)$$

其中，

$$C = \frac{(2 + \sqrt{\pi} \beta v_n) \sigma_s(v_{rel}, 0)}{2\sigma_s^{eff}(v_n, T) \sqrt{\pi} \beta v_n} ; P_1 = \frac{1}{1 + \frac{\sqrt{\pi} \beta v_n}{2}}$$

$$P_2 = 1 - P_1 ; f_1(V) = 2\beta^4 V^3 e^{-\beta^2 V^2}$$

$$f_2(V) = \frac{4\beta^3}{\sqrt{\pi}} V^2 e^{-\beta^2 V^2} ; \beta = \sqrt{\frac{AM_n}{2kT}}$$

式中， $M_n$  是中子的质量； $k$  是玻尔兹曼常数。

确定论的共振计算方法（如等价理论、子群方法等）都是基于 NJOY 加工的共振积分表进行计算。NJOY 通过求解无限均匀慢化方程得到不同稀释截面下的共振积分或有效自屏截面。无限均匀问题的慢化方程为：

$$\sigma(E)\phi(E) = \int_0^\infty f(E' \rightarrow E)\phi(E')dE' \quad (3)$$

式中， $E$  为出射能量； $E'$  是入射能量； $\sigma(E)$  是截面； $\phi(E)$  是中子注量率。NJOY 假设实验室坐标系下靶核静止，采用渐进散射模型，散射函数  $f(E' \rightarrow E)$  可以写为：

$$f(E' \rightarrow E) = \frac{1}{(1 - \alpha)E'} \quad (4)$$

$$\alpha = \left( \frac{A-1}{A+1} \right)^2$$

式中， $A$  是靶核的质量数。

式（3）右端项的积分区间为  $[E, \alpha E]$ 。因而，所有基于 NJOY 加工的多群数据库的确定论方法都限于渐进散射模型，忽略上散射的影响。

### 1.2 DBRC 方法

本文采用 DBRC 方法对 MCNP 进行修正。根据舍选抽样方法，靶核速度的概率分布函数为：

$$P(V, \mu | v_n) = C' \left[ \frac{\sigma_s(v_{rel}, 0)}{\sigma_s^{max}(v_\xi, 0)} \right] \left( \frac{v_{rel}}{v_n + V} \right) \times \{P_1 f_1(V) + P_2 f_2(V)\} \quad (5)$$

$$C' = \frac{(2 + \sqrt{\pi} \beta v_n) \sigma_s^{max}(v_\xi, 0)}{2\sigma_s^{eff}(v_n, T) \sqrt{\pi} \beta v_n}$$

式中， $\sigma_s^{max}(v_\xi, 0)$  表示介质温度为绝对零度时  $\left[ v_n - \frac{4}{\sqrt{\alpha}}, v_n + \frac{4}{\sqrt{\alpha}} \right]$  所对应能量范围内弹性散射截面的最大值。

### 1.3 子群共振方法

本文的子群共振方法基于核工程计算物理实验室（NECP）开发的任意几何子群共振计算程序（SUGAR）<sup>[4]</sup>。子群方法来自于蒙特卡罗方法中处理不可分辨共振的概率表方法。子群方法主要分为子群参数的计算和子群输运方程的求解。如图 1 所示，在一个宽群内，子群方法根据截面的大小划分子群。图 1 中  $E_g$  和  $E_{g+1}$  分别表示第  $g$  能群的能群下界和上界， $\sigma_i$  表示第  $i$  子群的总截面下界（ $i=1 \sim 5$ ），阴影部分所对应的即为第 3 个子群的能量段。

在第  $i$  个子群内，分别对子群截面  $\sigma_{x,g,i}$ 、子群注量  $\phi_{g,i}$  进行定义：

$$\sigma_{x,g,i} = \frac{\int_{E \in \Delta E_i} \sigma_x(E) \phi(E) dE}{\int_{E \in \Delta E_i} \phi(E) dE} \quad (6)$$

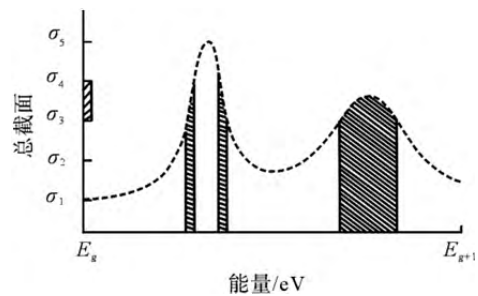


图 1 子群的定义

Fig. 1 Definition of the Subgroup

$$\phi_{g,i} = \int_{E \in \Delta E_i} \phi(E) dE \quad (7)$$

子群截面通过拟合或矩守恒方法求得，子群注量通过求解子群输运方程求得。根据子群截面和子群注量，通过下式得到有效自屏截面  $\sigma_{\text{eff},x,g}$ ：

$$\sigma_{\text{eff},x,g} = \frac{\sum_i \sigma_{x,g,i} \phi_{g,i}}{\sum_i \phi_{g,i}} \quad (8)$$

传统子群方法采用帕德近似求解子群参数。但这种方法不能保证子群截面的非负性，进而违背其物理含义。因此本文将子群参数的求解转化为带约束条件的极小值问题，通过最优化方法求解。求解子群总截面和子群概率的最优化问题为：

$$\text{Min} \left\{ \sum_j \left[ \frac{\sum_i \frac{p_{g,i} \sigma_{t,g,i} \sigma_{0,j}}{\sigma_{t,g,i} + \sigma_{0,j}} - \frac{\sigma_{t,g} \sigma_{0,j}}{\sigma_{t,g} + \sigma_{0,j}}}{\frac{\sigma_{t,g} \sigma_{0,j}}{\sigma_{t,g} + \sigma_{0,j}}} \right] \right\} \quad (9)$$

约束条件为：

$$\begin{aligned} \sigma_{t,g,i} &> 0 \\ p_{g,i} &> 0 \\ \sum_i p_{g,i} &= 1 \end{aligned}$$

得到子群总截面和子群概率后，求解其他子群截面的最优化问题：

$$\text{Min} \left\{ \sum_j \left[ \frac{\sum_i \frac{p_{g,i} \sigma_{x,g,i} \sigma_{0,j}}{\sigma_{t,g,i} + \sigma_{0,j}} - \frac{\sigma_{x,g} \sigma_{0,j}}{\sigma_{t,g} + \sigma_{0,j}}}{\frac{\sigma_{x,g} \sigma_{0,j}}{\sigma_{t,g} + \sigma_{0,j}}} \right]^2 \right\} \quad (10)$$

约束条件为：

$$\sigma_{x,g,i} > 0$$

子群输运方程为：

$$\begin{aligned} \Omega \nabla \phi_{g,i}(\mathbf{r}, \Omega) + \sum_{t,g,i} \mathbf{r} \phi_{g,i}(\mathbf{r}, \Omega) \\ = p_i [Q_{s,g}(\mathbf{r}, \Omega) + Q_{f,g}(\mathbf{r}, \Omega)] \end{aligned} \quad (11)$$

式中， $\Omega$  表示中子运动方向的单位向量； $\mathbf{r}$  是位置向量； $\Sigma_{t,g,i}$  是子群总截面； $Q_{f,g}(\mathbf{r}, \Omega)$  是裂变源； $Q_{s,g}(\mathbf{r}, \Omega)$  是散射源。由于裂变源只在共振区占据很小的份额，因而可以忽略。本文采用任意几何特征线方法输运计算程序 (AutoMOC) [5] 和矩阵特征线程序 (MMOC) [6] 求解子群输运方程。

## 2 数值结果及分析

本文采用 NJOY、RMET21 [7] 和 MCNP 程序制作多群中子数据库。其中 RMET21 制作不需要考虑共振弹性散射的核素的共振积分表，MCNP 制作需要考虑共振弹性散射的核素共振积分表，NJOY 制作数据库的其他部分。

采用 Mosteller 基准题 [8] 对 SUGAR 程序和本文制作的多群数据库 (不包括共振弹性散射修正) 进行验证。在此基础上，通过 SUGAR 程序与本文修改的 MCNP 程序之间的对比，验证确定论方法中共振弹性散射修正方法的正确性。

### 2.1 SUGAR 程序的验证

Mosteller 基准题是轻水堆多普勒基准题。基准题包括混合氧化物核燃料 (MOX) 燃料棒的例题和 UO<sub>2</sub> 燃料棒的例题，分热态零功率和热态满功率 2 种工况。热态零功率时燃料的温度为 600 K，包壳和冷却剂温度为 600 K；热态满功率时燃料温度为 900 K，包壳和冷却剂温度为 600 K。

采用 MCNP 程序的计算结果作为基准结果，验证 SUGAR 程序和本文制作的多群数据库的正确性。其中 MCNP 和 SUGAR 程序都不进行共振弹性散射修正。

表 1 给出了 SUGAR 程序与 MCNP 程序对 MOX 燃料例题计算的无限介质增殖因数 ( $k_{\text{inf}}$ ) 的结果对比。可以看出，在不同工况及各种富集度下，SUGAR 程序的计算误差都在 0.3% 以内。表 2 给出了 UO<sub>2</sub> 燃料棒 SUGAR 程序和 MCNP 程

表 1 MOX 燃料棒 SUGAR 程序与 MCNP 程序的  $k_{\text{inf}}$  对比  
Table 1 Comparison of  $k_{\text{inf}}$  of MOX Fuel Pin between SUGAR and MCNP

富集度/%	热态零功率			热态满功率		
	MCNP	SUGAR	误差/%	MCNP	SUGAR	误差/%
1.0	0.94747	0.94538	-0.22	0.93763	0.93746	-0.02
2.0	1.02317	1.02144	-0.17	1.01231	1.01234	0.00
4.0	1.07839	1.07737	-0.09	1.06655	1.06762	0.10
6.0	1.10697	1.10654	-0.04	1.09516	1.09666	0.14
8.0	1.13040	1.13017	-0.02	1.11856	1.12025	0.15

序计算结果的对比。除富集度为 0.771% 的燃料棒在热态满功率下的结果误差较大外( 0.36% 的误差也可以接受)，其他结果的误差都很小( 0.3% 以内)。因此 SUGAR 程序和本文制作的多群数据库( 不考虑共振弹性散射) 是可靠的。

表 2 UO<sub>2</sub> 燃料棒 SUGAR 程序与 MCNP 程序的  $k_{inf}$  对比  
Table 2 Comparison of  $k_{inf}$  of UO<sub>2</sub> Fuel Pin between SUGAR and MCNP

富集度 /%	热态零功率			热态满功率		
	MCNP	SUGAR	误差 /%	MCNP	SUGAR	误差 /%
0.771	0.66699	0.66823	0.19	0.66122	0.66362	0.36
1.600	0.96242	0.96174	-0.07	0.95417	0.95522	0.11
2.400	1.10057	1.09925	-0.12	1.09135	1.09185	0.05
3.100	1.17856	1.17690	-0.14	1.16895	1.16913	0.02
3.900	1.24139	1.23933	-0.17	1.23119	1.23129	0.01
4.500	1.27680	1.27465	-0.17	1.26666	1.26649	-0.01
5.000	1.30085	1.29893	-0.15	1.29090	1.29069	-0.02

## 2.2 修正方法的验证

表 3 给出了对 SUGAR 程序进行共振弹性散射修正前后计算的  $k_{inf}$  的百分误差。其中基准结果由 MCNP 提供，MCNP 采用 DBRC 方法修正共振弹性散射。计算的例题是 Mosteller 基准题 UO<sub>2</sub> 满功率问题。从表中可见，本文的共振弹性散射修正方法对  $k_{inf}$  的修正量为 0.14%~0.2%，具有较

表 3 SUGAR 程序修正前后计算的  $k_{inf}$  误差  
Table 3 Error of SUGAR before and after Correction

富集度/%	修正前的误差/%	修正后的误差/%
0.771	0.55	0.35
1.600	0.29	0.08
2.400	0.21	0.00
3.100	0.18	-0.02
3.900	0.17	-0.02
4.500	0.17	-0.02
5.000	0.18	-0.01

好的修正效果。

## 3 结论

本文采用 DBRC 方法修正 MCNP，考虑共振弹性散射效应，并利用修正的 MCNP 代替 NJOY 制作共振积分表，拟合了新的子群参数，用于子群共振方法。数值结果表明：

(1) SUGAR 程序和本文多群数据库( 不考虑共振弹性散射) 是可靠的。

(2) 本文提出的共振弹性散射修正方法可在确定论方法中考虑共振弹性散射，提高了确定论方法的计算精度。

参考文献：

- [1] MacFarlane R, Muir D. The NJOY Nuclear Data Processing System Version91[R]. LA-12740-M, New Mexico, Los Alamos National Laboratory, 1994.
- [2] Becker B, Dagan R, Lohnert G. Proof and implementation of the stochastic formula for ideal gas, energy dependent scattering kernel[J]. Annals of Nuclear Energy, 2009, 36(4): 470-474.
- [3] X-5 Monte Carlo Team. MCNP—A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version-5[R]. LA-CP-03-0284, New Mexico, Los Alamos National Laboratory, 2003.
- [4] Lei He, Hongchun Wu, Liangzhi Cao. et al. Improvement of the Subgroup Resonance Calculation Code SUGAR[J]. Annals of Nuclear Energy, 2014, 66: 5-12.
- [5] 陈其昌. 基于任意几何的特征线方法及其在直接循环堆组件均匀化参数计算中应用[D]. 西安交通大学, 2010.
- [6] 张宏博. 基于区域分解的矩阵特征线方法及二维/一维耦合中子学计算方法研究[D]. 西安交通大学, 2012.
- [7] Leszczynski F. Neutron Resonance Treatment with Details in Space and Energy for Pin Cells and Rod Clusters[J]. Ann. Nucl. Energy, 1987, 14(11): 589-601.
- [8] Mosteller R D. Computational Benchmarks for the Doppler Reactivity Defect[R]. LA-UR-06-2968, New Mexico, Los Alamos National Laboratory, 2006.

(责任编辑：孙 凯)