

文章编号: 0258 - 0926(2014)S2-0224-04; doi: 10.13832/j. jnpe. 2014. S2. 0224

基于随机抽样的在线多普勒展宽研究

杨 烽, 梁金刚, 余纲林, 王 侃, 李万林

清华大学工程物理系, 北京, 100084

摘要:介绍了一种基于随机抽样的考虑靶核热运动的在线多普勒展宽方法, 在每一个碰撞点精确展宽截面。该方法只读入零开式温度下的截面数据, 不需要考虑模型材料中的温度分布, 从而摆脱对专用截面加工程序的依赖。本文首先实现了基于随机抽样的多普勒展宽模块, 在微观上对该算法进行验证, 随后结合自主堆用蒙特卡罗程序(RMC), 实现了RMC的在线多普勒展宽功能, 在宏观上对该算法进行验证, 证明该方法能处理核截面的温度效应。

关键词: 在线; 多普勒展宽; 随机抽样; 基于随机抽样的在线展宽算法(SDB)

中图分类号: TL32 **文献标志码:** A

Research of On-the-fly Doppler Broadening Based on Stochastic Sampling Algorithm

Yang Feng, Liang Jingang, Yu Ganglin, Wang Kan, Li Wanlin

Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing, 100084, China

Abstract: This paper introduces an on-the-fly Doppler broadening method considering the effect of thermal motion based on the stochastic sampling algorithm, at every collision sets. The method only requires the cross sections at a temperature of 0K, but not the the temperature distribution in the model material, and consequently to eliminate the need of Doppler processing codes. At first, this paper implements the Doppler module to validate the SDB method on the microscopic level, then combining the Reactor Monte Carlo code(RMC), implements its on-the-fly Doppler broadening function to validate the SDB method on the macroscopic level. On the basis of current study, the capability of the SDB method to deal with temperature reactivity effect is proved.

Key words: On-the-fly (OTF), Doppler broadening, Stochastic sampling, SDB

0 引言

蒙特卡罗中子输运程序使用连续能量中子点截面数据库, 计算结果的精度决定于截面数据库的精度。受多普勒效应影响, 核反应截面与材料温度相关。实际的蒙特卡罗中子输运计算需要使用与模型材料温度一致的截面数据库, 即进行多普勒展宽处理。对于反应堆多物理模拟计算问题, 考虑热工水力反馈的影响, 材料的温度复杂多样, 对截面处理是个挑战。

传统的解决办法是离线展宽截面数据, 即使

用专用的截面加工软件按照一定温度间隔加工出若干温度点下的截面数据库, 利用插值技术得到目标温度下的截面数据, 但当计算精度要求较高时, 该方法的内存消耗巨大^[1]。

为了解决内存限制, 科研工作者提出了在线展宽的思想, 即只需读入 0 K 截面, 输运程序根据需要动态展宽至特定温度。一种方法是运用数值积分思想对 Kernel Broadening^[2]精确展宽算法进行改进, 提出了快速多普勒展宽算法(FDB), 该方法已经应用到清华大学反应堆工程计算分析

实验室 (REAL) 团队自主研发的堆用核数据处理软件 RXSP^[3] 中。另一种方法^[4] 是基于 Alder-Alder 共振表示和系数拟合理论, 该方法已经应用到蒙特卡罗中子输运程序 MCNP6 中, 该方法效率很高, 其缺点在于虽然在一定程度上减小了内存需求, 不过由于要存储大量的拟合出的系数数据, 内存限制依然存在。Benoit Forget 提出了一种基于 Reich-Moore 共振表示的近似多极点法^[5], 看似可能从根本上解决内存限制, 不过现在还处于研究阶段, 距离实用还需要大量的研究工作。另外一种方法是使用 0 K 下的截面数据库, 在蒙特卡罗中子输运计算中进行动态多普勒展宽, 该方法在近几年得到了广泛的关注, 详见文献^[6,7]。

在本次研究中, 基于文献^[8] 提出了一种基于随机抽样的在线多普勒展宽方法 (SDB)。在文献^[8] 的基础上深入研究 SDB 算法, 实现多普勒展宽模块和 RMC^[9] 程序在线展宽功能, 兼顾了效率和精度。

1 SDB 展宽算法和程序实现

1.1 Kernel Broadening 精确展宽方程

由 Cullen 导出的精确多普勒展宽公式^[10] 使用了一个积分方程描述靶核热运动对核截面的影响。该公式应用了自由气体模型, 假设靶核的热运动是各项同性的, 速度分布符合麦克斯韦玻尔兹曼分布。温度 T 下的多普勒展宽有效截面由式 (1) 给出:

$$\rho v \bar{\sigma}(v, T) = \int dV_t \rho v \sigma(v', 0) P(V_t, T) \quad (1)$$

式中, T 为开氏温度; $\bar{\sigma}(v, T)$ 为 T 温度下的入射中子速度为 v 的有效展宽截面; $\sigma(v', T)$ 为零开式温度下入射中子速度为 v' 下的核截面; ρ 为靶核的核密度; V_t 为靶核热运动的速度; v' 为中子对靶核的相对速度; $P(V_t, T)$ 为靶核的热运动的速度分布函数, 在自由气体模型下, 麦克斯韦玻尔兹曼分布为:

$$P(V_t, T) dV_t = \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{3/2}} \exp(-\alpha V_t^2) dV_t \quad (2)$$

$$\alpha = \frac{M}{2k_B T} \quad (3)$$

式中, k_B 为玻尔兹曼常数; M 为靶核质量。

综合上述公式, 得到:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{\alpha^{1/2}}{\pi^{1/2} v^2} \int_0^\infty dv' \sigma(v', 0) v'^2 \times \left\{ e^{-\alpha(v'-v)^2} - e^{-\alpha(v'+v)^2} \right\} \quad (4)$$

上述公式中, 式 (1) 被称为精确多普勒展宽方程, 式 (4) 是 Cullen 在 1976 年提出的 Kernel Broadening 展宽方法, 在 NJOY 程序的模块 BROADR 中的 SIGMA1 模块中得到了应用。

1.2 SDB 展宽算法

从 1.1 节中公式可推出:

$$\bar{\sigma}(v, T) = \int_0^\infty \frac{v'}{v} \sigma(v', 0) P(V_t, T) dV_t \quad (5)$$

式 (5) 右侧积分项可以通过随机论方法计算出, 计算流程为: 从麦克斯韦玻尔兹曼分布函数中抽样出靶核热运动速度 V_t , 按照各项同性抽样出靶核速度和中子速度的夹角的余弦值 μ , 使用式 (6) 计算得到相对速度 v' , 查表得到此时的截面数据 $\sigma(v', 0)$, 如此根据需要重复进行任意 N 次, 按照下列公式求出有效展宽截面。

$$v' = \sqrt{v^2 + V_t^2 - 2vV_t\mu} \quad (6)$$

$$\bar{\sigma}(v, T) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{v_i'}{v} \sigma(v_i', 0) \quad (7)$$

1.3 程序实现

基于 SDB 算法, 开发多普勒展宽程序模块。该模块读取零开式温度下连续能量中子截面数据库 (ACE) 格式数据库, 使用 SDB 算法产生任意给定温度 T 下的截面。通过对比 NJOY 程序精确加工的截面, 测试 SDB 算法的正确性和精度, 即微观验证。

将 SDB 多普勒展宽模块集成到反应堆蒙特卡罗程序 (RMC) 中, 实现在线多普勒展宽功能。RMC 初始读取 0 K 截面数据, 在输运过程中, 根据材料温度的不同, 利用 SDB 模块将核素反应截面展宽至所需温度, 供蒙特卡罗中子输运计算使用。选取临界基准题对在展宽 RMC 程序和使用精确展宽截面程序进行对比, 测试 SDB 在线展宽的效率, 即宏观验证。

2 测试验证

2.1 多普勒展宽模块验证 (微观验证)

选择典型的共振核素 ²³⁵U 和 ²³⁸U 进行多普勒模块的微观验证, 选择温度点为 300 K 和 3000 K, 参考结果由 NJOY99 程序在加工精度为 0.001 下

精确计算得到。

在微观验证中, 抽样次数 $N = 10^5$, 在典型的能量点下, 相对误差不超过 1%。可以看出, SDB 方法在精度上和 NJOY 的精确展宽结果有较好的一致性。

通过更广泛的对比计算表明, 在本次研究的展宽能量范围内, 抽样次数 N 很大时, SDB 算法展宽的精度和 Kernel Broadening 精确展宽方法的精度在误差范围内保持了一致性。SDB 算法是一种基于随机论的方法, 展宽后的多普勒有效截面在真值附近涨落, 基于该特性, 在进行在线展宽功能开发时, 可以认为在大量输运粒子数和 neutron 代数下, 选择较小的抽样次数即可达到宏观上较高的精度。

2.2 在线功能的基准验证 (宏观验证)

选择 5 个基准算例对在线展宽功能进行测试, 其中包括 2 个快谱算例 (Godiva 临界基准题、Jezebel 临界基准题)、3 个热谱算例 (金属铀球临界基准题、堆芯临界基准题、PWR 全堆算例), 在表 1 中依次命名为 fast-1、fast-2、therm-1、therm-2、therm-3。

表1 宏观验证SDB算法

Table 1 Macroscopic Validation of SDB Method

基准题	程序	k_{eff}	相对误差/%
fast-1	RMC+NJOY99	1.000356±0.000244	0.0878
	RMC+SDB	0.999478±0.000236	
fast-2	RMC+NJOY99	0.999745±0.000222	0.0227
	RMC+SDB	0.999972±0.000216	
therm-1	RMC+NJOY99	0.994024±0.000254	0.0200
	RMC+SDB	0.993825±0.000240	
therm-2	RMC+NJOY99	0.997629±0.000464	0.0749
	RMC+SDB	0.996882±0.000447	
therm-3	RMC+NJOY99	1.321547±0.000098	0.0756
	RMC+SDB	1.322546±0.000101	

测试包括功能的验证和性能对比 2 个方面。测试的方法为前文所述的 SDB 展宽算法, 考虑到效率和精度的权衡, 选取抽样次数 $N = 200$, 在图 1 中以 SDB 注明, 使用 NJOY 软件制作出精确温度下的 ACE 数据库进行计算得到参考结果, 在图 1 中以 NJOY 注明, 使用的蒙特卡罗程序为 RMC 2.0, 如不做特殊说明, 所有核素温度为 600 K。

以下计算结果的计算平台为 Intel 计算平台 X5670×2 服务器, CPU 主频 2.93 GHz, 共 12 个处理器核心, 并行核数为 12 核。

Jezebel 堆芯能谱对比图如图 1 所示。

从 5 个基准题测试计算结果可以看出, 使用 SDB 算法进行在线多普勒展宽可以达到较好的精度, 有效增殖系数相对误差均在 1% 以下, 在仅使用 0 K 截面库的基础上完成了输运程序的在线多普勒展宽功能, 大大降低了输运程序的内存限制。

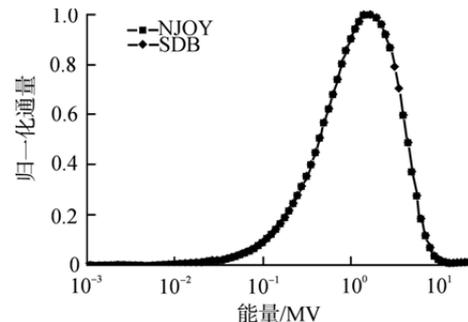


图1 Jazabel临界基准题能谱对比图

Fig. 1 Normalized Spectrum in Jezebel Benchmark

2.3 在线功能的性能测试

本节主要对 2.2 节测试使用的 5 个算例进行效率统计, 即消耗时间统计, 结果见表 2。

表2 在线功能的效率分析

Table 2 Efficiency of On-the-fly SDB Method

基准题	RMC+NJOY/min	RMC+SDB/倍数
fast-1	0.1712	1.48
fast-2	0.1265	1.33
therm-1	3.2782	16.92
therm-2	7.1070	1.96
therm-3	26.0328	4.72

对效率的分析主要以蒙特卡罗程序 RMC 给出的总的临界计算时间为基准, RMC 使用 NJOY 制作出的精确温度的数据库时间为参考时间, SDB 在线展宽时间以倍数给出, 即为前者消耗时间的多少倍, 简称效率因子。

通过上述效率分析表可以发现, 影响效率因子的因素有堆芯能谱、材料中核素的种类、堆芯的几何复杂程度。一般来说, 堆芯能谱为热谱、材料中核素种类较多、几何复杂程度高, 效率因子较大。

从总体上来说, SDB 在线展宽算法具有较高的效率, 并且算法的使用灵活便利, 达到了实用的程度。

3 结束语

本次研究对基于随机抽样的在线多普勒展宽方法进行了研究和编程实现，编写多普勒展宽模块在微观层面上对 SDB 算法进行验证。验证的结果表明，应用 SDB 方法进行多普勒展宽，在精度上和 Kernel Broadening 精确展宽方法基本一致。耦合堆用蒙卡程序 RMC 2.0 开发了在线展宽功能，运用 4 个基准算例在宏观上验证了 SDB 算法，发现对于在线展宽来说，在大量输运粒子数和中子代数条件下，SDB 方法的随机性使得误差水平可以在抽样次数较小的情况下达到精度要求。

参考文献：

- [1] Trumbull T. Treatment of nuclear data for transport problems containing detailed temperature distributions [R]. Knolls Atomic Power Laboratory (KAPL), Niskayuna, NY, 2006.
- [2] 李松阳. 在线多普勒展宽与核截面处理方法研究[D]. 清华大学博士学位论文, 2012.
- [3] 余健开, 李松阳, 王侃, 等. 反应堆用核截面处理程序 RXSP 的研发与验证[J]. 核动力工程, 2013, S1: 10~13.
- [4] Brown F B, Martin W R, Yesilyurt G, et al. Progress with On-The-Fly Neutron Doppler Broadening in MCNP[R]. Los Alamos National Laboratory (LANL), 2012.
- [5] Forget B, Xu S, Smith K. Direct Doppler broadening in Monte Carlo simulations using the multipole representation[J]. Annals of Nuclear Energy, 2014, 64: 78-85.
- [6] Becker B, Dagan R, Broeders C H M, et al. An Alternative Stochastic Doppler Broadening Algorithm [C]. International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics. Saratoga Spring, NY-USA, 2009.
- [7] Viitanen T, Leppanen J. Optimizing the implementation of the target motion sampling temperature technique —How fast can it get[J]. Proc.M&C2013, Sun Valley, ID, 2013, 5-9.
- [8] 李松阳, 王侃, 余纲林. 中子核截面在线多普勒展宽方法研究[J]. 原子能科学技术, 2013(3): 337-342.
- [9] Wang K, Li Zeguang, She Ding, et al. RMC-A Monte Carlo code for reactor physics analysis[C]. Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo (SNA + MC), 2013, Paris, France
- [10] Cullen D E, Weisbin C R. Exact Doppler broadening of tabulated cross sections[J]. Nuclear Science and Engineering, 1976, 60(3): 199-229.

(责任编辑：张明军)