

文章编号: 0258-0926(2018)02-0124-05; doi:10.13832/j.jnpe.2018.02.0124

# 基于 NECP-X 的全局-局部耦合 共振自屏计算方法研究

贺清明, 曹良志, 刘宙宇\*, 祖铁军, 吴宏春

西安交通大学, 西安, 710049

**摘要:**为应对高保真共振自屏计算所遇到的挑战,提出了全局-局部耦合共振自屏计算方法。将所有共振自屏效应及相关效应分为全局的效应和局部的效应 2 类,其中全局的效应较弱或者与能量无关,而局部的效应较为强烈。因此将共振自屏计算分为全局计算、耦合计算和局部计算 3 个步骤:全局计算建立粗糙模型,采用中子流方法计算丹可夫修正因子,处理全局的效应;耦合计算根据丹可夫修正因子守恒将待求解问题中的燃料棒等效成一维模型;局部计算采用较为精确的共振伪核素子群方法,处理局部的效应。基于 NECP-X 实现了该方法,数值结果表明,该方法在效率方面比传统方法提高至少一个量级,无限介质增殖因数的计算精度也提高了 100~300 pcm。

**关键词:**高保真计算;共振自屏;全局-局部耦合方法;共振伪核素;NECP-X

**中图分类号:**TL324 **文献标志码:**A

## Research of Global-Local Resonance Self-Shielding Calculation Method Based on NECP-X

He Qingming, Cao Liangzhi, Liu Zhouyu\*, Zu Tiejun, Wu Hongchun

Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049, China

**Abstract:** To meet the challenges faced in high-fidelity resonance self-shielding calculations, the global-local self-shielding calculation method is proposed. The resonance self-shielding and correlated effects are classified into global and local effects. The global effects are weak or independent of energy, while the local effects are strong. Therefore, the resonance self-shielding calculation is split into global, coupling and local calculations. Coarse model is built for global calculation and the neutron current method is employed to compute Dancoff correction factors, where the global effects are considered. The coupling calculation is based on preservation of the Dancoff correction factors and the equivalent 1-D models of the fuel rods are obtained. The pseudo-resonant-nuclide subgroup method is employed to perform the local calculation to treat the local effects. This method is realized in NECP-X. The numerical results show that the efficiency of this method is increased by one order of magnitude compared with the conventional method. Besides, the precision of infinite medium multiplication factor is increased by 100~300 pcm.

**Key words:** High-fidelity calculation, Resonance self-shielding, Global-local method, Pseudo resonant nuclide, NECP-X

## 0 引言

近年来,随着计算机能力的提高和对计算精度要求的提高,高保真计算逐渐成为研究的热点。高保真计算在空间上进行一步法的计算,消除了

空间均匀化的问题。在角度上,将扩散方程替换成输运方程,提高了对角度变量的处理精度。然而在能量上仍然采用多群的近似,因此对能量变量的处理,即共振自屏计算,就成为决定高保真

收稿日期:2017-09-11;修回日期:2017-12-05

基金项目:国家自然科学基金(11605128,11605130,11775169)

作者简介:贺清明(1991—),男,博士研究生,现从事反应堆物理研究工作

\*通讯作者:刘宙宇, E-mail:zhouyuliu@xjtu.edu.cn

计算精度的关键性因素。

高保真共振自屏计算遇到几个方面的挑战。首先是空间上规模庞大，需要求解全堆规模的问题；其次是需要考虑更多的效应以提高计算精度，这些效应包括：共振弹性散射效应<sup>[1]</sup>、空间自屏效应<sup>[2]</sup>、共振干涉效应<sup>[3]</sup>、温度分布效应<sup>[4]</sup>、边缘效应和多群等效效应<sup>[5,6]</sup>等。传统的共振自屏计算方法如等价理论方法<sup>[7]</sup>和子群方法<sup>[8]</sup>能够计算大规模的问题，但是不能完全考虑上述效应，精度较低。而超细群方法<sup>[9]</sup>和函数展开方法<sup>[10]</sup>能够考虑各种效应，精度满足要求，但是计算效率较低，不能求解大规模的问题。因此需要发展新的方法应对高保真共振自屏计算的挑战。

本文将所有共振自屏效应及相关效应分为全局的效应和局部的效应两类，并基于这种分类提出了全局-局部耦合共振自屏计算方法。

## 1 理论模型

### 1.1 效应的分类

将共振自屏效应及相关效应分为全局的效应和局部的效应 2 类，全局的效应包括：全局的共振干涉效应、全局的温度分布效应和全局的空间自屏效应；局部的效应包括：共振弹性散射效应、局部的空间自屏效应、局部的共振干涉效应、局部的温度分布效应、边缘效应和多群等效效应。采用丹可夫修正因子处理全局的效应；采用共振伪核素子群方法处理局部的效应。

### 1.2 全局计算

采用中子流方法<sup>[11]</sup>计算丹可夫修正因子，丹可夫修正因子定义为：

$$C_b = \frac{\phi_{f,0} - \phi_{f,1}}{\phi_{f,0}} \quad (1)$$

式中， $C_b$  为丹可夫修正因子； $\phi_{f,0}$  为孤立棒问题的中子标通量密度； $\phi_{f,1}$  为真实几何结构的中子标通量密度。

### 1.3 耦合计算

如图 1 所示，将栅格中间水棒右边第 1 根燃料棒等效成 1 个一维的栅元。一维栅元的边界为白边界，燃料区、气隙和包壳的材料及几何结构与栅格中对应栅元的一致，慢化剂的材料与栅格中对应栅元的一致，而慢化剂的外半径  $r_M$  未知，需要通过计算得到。

燃料到慢化剂的首次飞行碰撞概率  $P_{f \rightarrow M}$  是

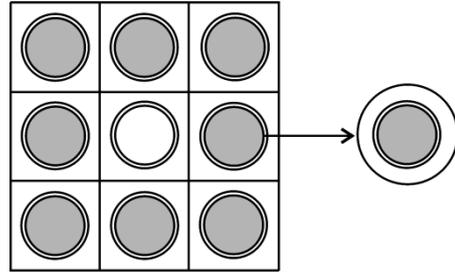


图 1 等效一维模型示意图

Fig. 1 Diagram of Equivalent 1-D Model

慢化剂的外半径的函数，因此丹可夫修正因子也是慢化剂的外半径的函数，可以写为：

$$C_b(r_M) = \frac{P_{e,f} - P_{f \rightarrow M}(r_M)}{P_{e,f}} \quad (2)$$

式中， $P_{e,f}$  为 neutron 逃脱概率。

在已知丹可夫修正因子的情况下，慢化剂区的外半径可以用二分法得到。

### 1.4 局部计算

采用共振伪核素子群方法进行局部效应的计算。

#### (1) 第 1 步定义共振伪核素

共振伪核素的连续能量截面由共振核素的连续能量截面按照燃料区体积平均核子密度的比例加权得到，表示为：

$$\sigma_{\text{pseudo}}(u) = \frac{\sum_{k \in R} \bar{N}_k \sigma_k(u)}{\sum_{k \in R} \bar{N}_k} \quad (3)$$

式中， $\sigma_{\text{pseudo}}$  为共振伪核素； $k$  为核素的序号； $R$  为共振核素的集合； $\bar{N}_k$  为棒平均核子密度； $\sigma_k$  为核素的微观截面； $u$  为对数能降。

采用超细群方法求解共振伪核素的中子慢化方程得到共振伪核素的多群截面。

#### (2) 第 2 步拟合子群参数

将多群截面写成子群离散的形式：

$$\begin{aligned} \sigma_{x,g} &\approx \frac{\int_{\Delta u_g} \sigma_x(u) \frac{\sigma_b(u)}{\sigma_{\text{inter,pseudo}}(u) + \sigma_b(u)} du}{\int_{\Delta u_g} \frac{\sigma_b(u)}{\sigma_{\text{inter,pseudo}}(u) + \sigma_b(u)} du} \\ &\approx \frac{\sum_{i=0}^I \sigma_{x,g,i} p_{g,i} \frac{\sigma_{b,g}}{\sigma_{\text{inter,pseudo},g,i} + \sigma_{b,g}}}{\sum_{i=0}^I p_{g,i} \frac{\sigma_{b,g}}{\sigma_{\text{inter,pseudo},g,i} + \sigma_{b,g}}} \quad (4) \end{aligned}$$

式中,  $x$  为反应道;  $g$  为能群编号;  $\Delta u_g$  为能群的对数能降宽度;  $\sigma_b$  为背景截面;  $\sigma_{\text{inter,pseudo}}$  为共振伪核素的中间截面;  $i$  为子群编号;  $I$  为子群数目;  $\sigma_{x,g,i}$  为子群截面;  $p_{g,i}$  为子群概率;  $\sigma_{\text{inter,pseudo},g,i}$  为共振伪核素的子群中间截面。

采用帕德近似方法对式(4)进行拟合, 得到共振伪核素的子群中间截面、子群概率和子群分道截面。

### (3) 第3步求解子群固定源方程

对于等效一维模型, 子群固定源方程可写为:

$$V_n \Sigma_{t,n,g,i} \phi_{n,g,i} = \sum_{m=1}^N V_m P_{m \rightarrow n,g,i} Q_{n,g,i} \quad (5)$$

式中,  $n$  和  $m$  为区域的编号;  $V_n$  为区域  $n$  的体积;  $\Sigma_{t,n,g,i}$  为宏观子群总截面;  $\phi_{n,g,i}$  为子群中子标通量密度;  $P_{m \rightarrow n,g,i}$  为截面为子群截面的值时在区域  $m$  中产生的各向同性中子在区域  $n$  中发生首次碰撞的概率;  $Q_{n,g,i}$  为子群散射源。

求解方程(5)得到子群中子标通量密度, 利用子群中子标通量密度归并子群截面得到各个共振核素的有效自屏截面:

$$\sigma_{x,n,g} = \frac{\sum_{i=0}^I \sigma_{x,g,n,i} \phi_{n,g,i}}{\sum_{i=0}^I \phi_{n,g,i}} \quad (6)$$

### (4) 第4步考虑多群等效效应

由于角通量是与角度相关的, 采用连续能量的角通量归并连续能量截面得到的多群截面也应该与角度相关。但为了后续多群输运计算的方便, 一般采用与角度无关的多群截面。因此需要考虑多群等效效应, 本文采用超级均匀化方法<sup>[12]</sup>考虑。

## 2 数值验证

本文研制的多群核数据库是基于 WIMS Library Update Project (WLUP) 在 2006 年发布的基于 ENDF/B-VII.0 的 WIMS 格式 69 群核数据库改进研制。在此基础上本文做了几点改进, 首先拓展了共振能群, 考虑了钚铀氧化物混合 (MOX) 燃料 Pu 的同位素在热能区的共振; 其次计算了与能群相关的 Goldstein-Cohen 因子, 提高了中间近似的精度; 最后制作共振弹性散射的多群修正因子, 考虑了共振弹性散射效应, 研制了连续能量的数据库, 使程序能够在线求解中子慢化方程。多群数据库和连续能量数据库都基于 ENDF/B-VII.0 制作。基于全局-局部耦合共振自屏计算方法在高保真计算程序 NECP-X<sup>[13]</sup> 中开发了共振自屏计算模块。

### 2.1 VERA 基准题组件问题

表 1 对比了不同共振自屏计算方法的技术细节, 参考解由 KENO 计算。表 2 对比了不同共振自屏计算方法计算 VERA 基准题组件问题<sup>[14]</sup> 的无限介质增殖因数 ( $k_{\text{inf}}$ ) 偏差, 可以发现 3 种方法中 NECP-X GL 的计算精度最高; NECP-X SUB 对所有问题的偏差都是负的, 主要原因在于没有考虑多群等效效应, 并且采用 Bondarenko 迭代方法处理共振干涉效应, 这两个方面的偏差都是负的; MPACT SUB 对所有问题的偏差也是负的, 主要原因在于没有考虑多群等效效应, 并且共振干涉因子方法并不能完全考虑共振干涉效应。

表 3 对比了不同共振自屏计算方法的计算时间, 可以发现 3 种方法中 NECP-X GL 的计算效率最高, 相比于 NECP-X SUB 加速了 2 个数量级, 相比于 MPACT SUB 加速了 1 个数量级。

表 1 不同共振自屏计算方法技术细节对比

Table 1 Detailed Comparison of Different Resonance Self-Shielding Calculation Methods

共振自屏计算方法	NECP-X GL	NECP-X SUB	MPACT SUB
	全局-局部耦合方法	子群方法	子群方法
全局效应	丹可夫修正因子	子群方法	子群方法
多群等效效应	超级均匀化方法	不处理	不处理
局部的共振干涉效应	共振伪核素子群方法	Bondarenko 迭代方法	共振干涉因子方法
散射源	中间共振近似	中间共振近似	简化中间共振近似
包壳的共振自屏	处理	不处理	不处理
最大子群数	5	6	4
共振积分表/截面表	均匀问题	均匀问题	非均匀问题

表 2 不同共振自屏计算方法计算的  $k_{inf}$  偏差  
Table 2 Errors of  $k_{inf}$  Computed by Different Resonance Self-Shieldign Calculation Methods

问题描述	参考 $k_{inf}$	$k_{inf}$ 偏差/pcm (1 pcm= $10^{-5}$ )		
		NECP-X GL-OPT	NECP-X SUB	MPACT SUB
565 K	1.18218	59	-443	-80
600 K	1.18336	51	-479	-118
900 K	1.17375	54	-522	-213
1200 K	1.16559	47	-573	-258
12 Pyrex	1.06963	76	-399	-43
24 Pyrex	0.97602	71	-380	-11
Instrument Thimble	1.17992	61	-444	-94
Instr. + 24 Pyrex	0.97519	80	-372	-4
Zoned + 24 Pyrex	1.02006	93	-394	-3
80 IFBA	1.01892	-98	-536	-365
128 IFBA	0.93880	-140	-545	-466
104 IFBA + 20 WABA	0.86962	-157	-536	-285
Zirc4 Spacer Grid	1.17194	-49	-504	-243

表 3 不同共振自屏计算方法计算时间  
Table 3 Time of Different Resonance Self-Shielding Calculation Methods

问题描述	共振自屏计算时间/s		
	NECP-X GL-OPT	NECP-X SUB	MPACT SUB
565 K	14	3332	455
600 K	14	3408	470
900 K	14	3335	450
1200 K	14	3354	453
12 Pyrex	15	3546	467
24 Pyrex	14	3662	477
Instrument Thimble	14	3887	444
Instr. + 24 Pyrex	14	4115	473
Zoned + 24 Pyrex	15	3654	472
80 IFBA	35	13402	467
128 IFBA	46	13993	476
104 IFBA + 20 WABA	45	11622	493
Zirc4 Spacer Grid	16	4384	—

### 2.2 VERA 基准题二维堆芯问题

测试 VERA 基准题二维压水堆堆芯问题<sup>[14]</sup>。采用的方法为 NECP-X GL，共振自屏计算时间为 1459 s，占总时间 3.83%，计算时间可以接受。

该算例  $k_{eff}$  的偏差为 40 pcm (1 pcm= $10^{-5}$ )。图 2 给出了堆芯参考棒功率分布，图 3 给出了 NECP-X 计算的棒功率分布的偏差，其中最大偏差为 1.68%，均方根偏差为 0.51%，计算精度较高。

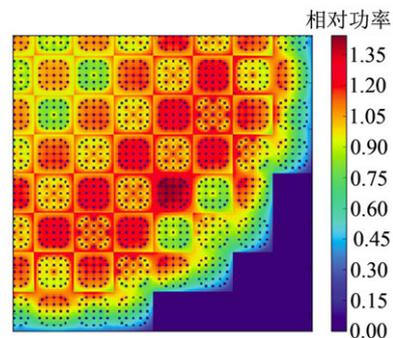


图 2 二维压水堆堆芯参考棒功率分布  
Fig. 2 Reference Pin Power Distribution of 2-D Core Problem

### 3 结论与展望

为应对高保真共振自屏计算的挑战，本文提出了全局-局部耦合共振自屏计算方法，基于该方法在 NECP-X 程序中开发了共振自屏计算模块，

数值结果表明本文提出的方法在计算精度和计算效率上都优于其他方法；并且开发的 NECP-X 共

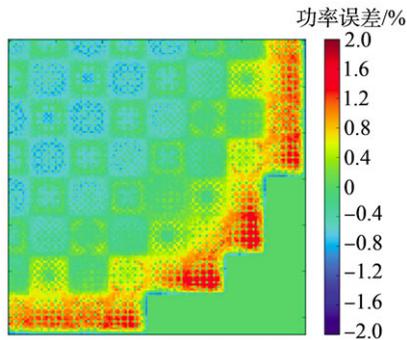


图3 二维压水堆堆芯 NECP-X 计算的棒功率偏差  
Fig. 3 PIN Power Errors of 2-D Core Problem  
Computed by NECP-X

振自屏计算模块和研制的核数据库能够适用于高保真的共振自屏计算。

#### 参考文献：

- [1] Lee D, Smith K, Rhodes J. The impact of  $^{238}\text{U}$  resonance elastic scattering approximations on thermal reactor Doppler reactivity[C]. Interlaken, Switzerland: PHYSOR 2008, 2008.
- [2] Matsumoto H, Ouisloumen M, Takeda T. Development of spatially dependent resonance shielding method[J]. Journal of Nuclear Science and Technology, 2005, 42(8): 688-694.
- [3] Williams M. Correction of multigroup cross sections for resolved resonance interference in mixed absorbers[J]. Nuclear Science and Engineering, 1983, 83(1): 37-49.
- [4] Jung Y S, Lim C H, Joo H G. Temperature dependent subgroup formulation with number density adjustment for direct whole core power reactor calculation[J]. Annals of Nuclear Energy, 2016, 96: 249-263.
- [5] Hebert A. The ribbon extended self-shielding model[J]. Nuclear Science and Engineering, 2005, 151: 1-24.
- [6] Park H, Joo H G. Practical resolution of angle dependency of multigroup resonance cross sections using parametrized spectral SPH factors[C]. Jeju, Korea: M&C 2017, 2017.
- [7] Stamm'ler R, Abbate M. Methods of steady-state reactor physics in nuclear design[M]. London: Academic press, , 1983.
- [8] Nikolaev M N, Ignatov A A, Isaev N V, et al. The method of subgroups for considering the resonance structure of the cross sections in neutron calculations[J]. Atomnaya Energiya, 1970, 29(1): 11-16.
- [9] Kier P, Robba A. RABBLE, a program for computation of resonance absorption in multiregion reactor cells[R]. ANL-7326, Argonne National Laboratory, 1967.
- [10] Yang W, Wu H, Zheng Y, et al. Application of wavelets scaling function expansion method in resonance self-shielding calculation[J]. Annals of Nuclear Energy, 2010, 37: 653-663.
- [11] Sugimura, S, Yamamoto, A. Evaluation of Dancoff factors in complicated geometry using the method of characteristics[J]. Journal of Nuclear Science and Technology, 2006, 43(10): 1182-1187.
- [12] Hebert A. A consistent technique for the pin-by-pin homogenization of a pressurized water-reactor assembly[J]. Nuclear Science and Engineering, 1993, 113(3): 227-238.
- [13] Chen J, Cao L, Liu Z, et al. Development of the high-fidelity neutronics and thermal-hydraulic coupling code NECP-X/SUBSC[C]. Jeju, Korea: M&C 2017, 2017.
- [14] Godfrey A. VERA core physics benchmark progression problem specifications[R]. CASL-U-2012-0131-004, Oak Ridge National Laboratory, 2014.

(责任编辑：马蓉)