

基于数值积分的核截面在线生成方法研究

陈 锐^{1,2} 周书民²

1 (东华理工大学 江西省新能源工艺及装备工程技术研究中心 南昌 330013)

2 (东华理工大学 核技术应用教育部工程研究中心 南昌 330013)

摘要 为准确模拟反应堆内不同温度下中子与各种材料间的相互作用,当反应堆堆芯温度变化时,需要在线生成不同温度下的反应截面。现有在线截面生成方法中,以MCNP6的曲线拟合法使用较为普遍,但该方法的截面生成效率偏低。为此,本文开展了基于数值积分的核截面在线生成方法研究,结合双指数变换与 Gauss-Hermite 积分替代原有解析积分,提高展宽截面生成效率。典型核素与多普勒反应性系数基准例题结果显示,数值积分方法的曲线拟合计算效率比原始方法平均高 10 倍以上,且精度与原始方法相对偏差在 1.54%以内,验证了本文方法的有效性,可用于反应堆多物理耦合计算。

关键词 中子截面, 数值积分, 在线, 多普勒展宽

中图分类号 TL329.2

DOI: 10.11889/j.0253-3219.2018.hjs.41.120602

On-the-fly nuclear cross section generation based on numerical integral method

CHEN Rui^{1,2} ZHOU Shumin²

1(Jiangxi Engineering Research Center of Process and Equipment for New Energy,
East China University of Technology, Nanchang 330013, China)

2(Engineering Research Center for Nuclear Technology Application, Ministry of Education,
East China University of Technology, Nanchang 330013, China)

Abstract [Background] When the reactor core temperature changes, the reaction cross sections at different temperatures need to be generated with on-the-fly methods. Among the existing on-the-fly cross-section generation methods, the curve fitting method is becoming a common tool used in MCNP6, but the efficiency of this method is quite low. [Purpose] This study aims to accurately simulate the interaction between neutrons and various materials at different temperatures in the reactor by developing an on-the-fly generation method of nuclear cross sections. [Methods] In order to overcome the low efficiency of Doppler broadening in the parameter fitting method of MCNP6, double exponential method and Gauss-Hermite method are combined to replace the original analytical integral method to increase the width of the cross section generate efficiency. [Results] The typical nuclides test results showed that the curve fitting calculation efficiency of the numerical integration method is more than 10 times higher than the original one. Doppler reactivity coefficient benchmark example shows that the curve fitting of the numerical integration method is relative to the accuracy of the original method within 1.54%. [Conclusion] This method can be

国家重大科学研究计划项目(No.2017YFF0104200)、国家自然科学基金(No.11565002)、江西省教育厅计划项目(No.GJJ150558)、江西省新能源工艺与装备工程技术研究中心开放基金(No.JXNE2017-04)、教育部工程研究中心开放基金(No.HJSJYB2017-2)资助

第一作者: 陈锐, 男, 1981 年出生, 2017 年于中国科学技术大学获博士学位, 研究领域为核数据处理

通信作者: 周书民, E-mail: smzhou@ecit.edu.cn

收稿日期: 2018-07-16, 修回日期: 2018-09-03

Supported by Major Scientific Research Projects of the State (No.2017YFF0104200), National Natural Science Foundation of China (No.11565002), Jiangxi Provincial Education Department Project (No.GJJ150558), Open Project Program of Jiangxi Engineering Research Center of Process and Equipment for New Energy (No.JXNE2017-04), Open Project of Ministry of Education Engineering Research Center (No.HJSJYB2017-2)

First author: CHEN Rui, male, born in 1981, graduated from University of Science and Technology of China with a doctoral degree in 2017, focusing on nuclear data processing

Corresponding author: ZHOU Shumin, E-mail: smzhou@ecit.edu.cn

Received date: 2018-07-16, revised date: 2018-09-03

used for multi-physics coupling calculation of reactors.

Key words Neutron cross section, Numerical integration, On-the-fly, Doppler broadening

核反应堆在运行过程中,堆芯的温度不断变化,对于某些高温核能系统,因温度效应造成的反应性偏差会对反应堆安全造成较大影响^[1-2]。为了准确模拟反应堆内中子与材料的相互作用,必须在模拟时以在线(on-the-fly)的方式获取不同温度对应的反应截面。目前,国内外核截面在线生成方法中,以MCNP6的曲线拟合法使用较为普遍^[3]。该方法以共振能区的Adler-Adler公式为依据,推导出某一能量下各共振反应截面与展宽温度之间的关系,使用Kernel Broadening多普勒展宽方法生成一定温度范围、一定温度间隔的展宽截面,再根据这些展宽截面使用回归分析方法计算得到与温度相关的曲线拟合参数^[4]。由于Kernel Broadening方法生成目标温度截面效率偏低,致使该方法生成不同温度拟合参数的性能不高^[5]。

本文在MCNP6的曲线拟合法基础上,提出使用数值积分法代替Kernel Broadening方法,按能量范围不同分别使用双指数方法与Gauss-Hermite方法,以提高展宽截面生成效率。

1 多普勒展宽原理

在自由气体模型假设下,一般认为靶核热运动速度满足麦克斯韦-玻尔兹曼分布。假设当前温度反应截面为 $\sigma_{T_1}(E)$,其中: E 为入射中子能量; T 为靶核材料的热力学温度。将当前 T_1 温度截面展宽为 T_2 温度($T_1 > T_2$)的截面的展宽方程可表示为:

$$\sigma_{T_2}(E) = \frac{\sqrt{\beta}}{2E\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \sigma_{T_1}(E_r) \sqrt{E_r} [e^{-\beta(\sqrt{E_r}-\sqrt{E})^2} - e^{-\beta(\sqrt{E_r}+\sqrt{E})^2}] dE_r \quad (1)$$

式中: $\beta = A/[k(T_2 - T_1)]$, $A = M/m$; m 为中子质量; M 为靶核质量; k 为玻尔兹曼常数; E_r 为中子与靶核的相对能量^[6]。

引入无量纲变量 x, y ,使得 $x = (\beta E_r)^{1/2}$, $y = (\beta E)^{1/2}$,根据式(1)中被积对象的取值范围可将该式改写成如下分段形式:

$$\sigma_{T_2}(y) = \begin{cases} \frac{1}{y^2\sqrt{\pi}} \int_0^{y+4} x^2 \sigma_{T_1}(x) [e^{-(x-y)^2} - e^{-(x+y)^2}] dx, & y \leq 4 \\ \frac{1}{y^2\sqrt{\pi}} \int_0^\infty x^2 \sigma_{T_1}(x) e^{-(x-y)^2} dx, & y > 4 \end{cases} \quad (2)$$

该分段形式的依据是指数函数的衰减特性^[7]。

使用解析方法求解式(2)的方法称为Kernel Broadening方法,由于该方法使用泰勒级数展开及误差函数求解,使得该方法计算效率较低。由于MCNP6的参数拟合中采用该方法作为不同温度截面的生成方法,故有必要对该方法加以改进。

2 基于数值积分的核截面生成方法

2.1 双指数方法

对于积分 $I = \int_a^b f(x) dx$,如采用梯形数值积分法则,被积函数 $f(x)$ 在积分区间 (a, b) 范围内的数值积分表达式为:

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \sum_{k=-N/2}^{N/2} f(kh) \quad (3)$$

式中: N 为积分级数; h 为等量步长。通过变量替换,可将积分 I 变换为:

$$\int_a^b f(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} f(\psi(x)) \psi'(x) dx \quad (4)$$

代入式(4)后,得:

$$\int_a^b f(x) dx \approx I_h = h \sum_{k=-N/2}^{N/2} f(\psi(kh)) \psi'(kh) \quad (5)$$

这里 $\psi(x)$ 称为双指数函数,它是一个将区间 $(-\infty, \infty)$ 映射到 (a, b) 的绝对连续单调递增函数^[8-9]。 $\psi(x)$ 其中一种表示形式为:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{b-a}{2} \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh x\right) + \frac{b+a}{2} \\ \psi'(x) &= \frac{(b-a)}{2} \frac{\pi \cosh x}{2 \cosh^2\left(\frac{\pi}{2} \sinh x\right)} \end{aligned} \quad (6)$$

为简化计算,可将双指数函数简写成节点 x_k 与权重 w_k 的形式,即:

$$\begin{cases} \psi(x) = \frac{b-a}{2} x_k + \frac{b+a}{2}, x_k = \tanh\left(\frac{\pi}{2} \sinh kh\right) \\ \psi'(x) = \frac{b-a}{2} w_k, w_k = \frac{\frac{\pi}{2} \cosh kh}{\cosh^2\left(\frac{\pi}{2} \sinh kh\right)} \end{cases} \quad (7)$$

相应地,式(5)可改写成:

$$I_h = \frac{b-a}{2} h \sum_{k=-N/2}^{N/2} f\left(\frac{b-a}{2} x_k + \frac{b+a}{2}\right) w_k \quad (8)$$

因此,当 $y \leq 4$ 时将式(5)以双指数函数变换表

示后, 可得:

$$\begin{aligned}\sigma_{T_2}(y) &= \frac{1}{y^2\sqrt{\pi}} \int_0^{y+4} x^2 \sigma_{T_1}(x) \left[e^{-(x-y)^2} - e^{-(x+y)^2} \right] dx \\ &= \frac{y+4}{2y^2\sqrt{\pi}} h \sum_{k=-N/2}^{N/2} f\left(\frac{y+4}{2}x_k + \frac{y+4}{2}\right) w_k \quad (9)\end{aligned}$$

其中: $f(x) = x^2 \sigma_{T_1}(x) [e^{-(x-y)^2} - e^{-(x+y)^2}]$ 。

为验证方法的有效性, 表 1 给出了反应堆常用核素(^1H 、 ^{10}B 、 ^{16}O 、 ^{90}Zr 、 ^{232}Th 、 ^{235}U 、 ^{238}U)在 $y \leq 4$, 步长 $h=1/16$, $k \in [-4, 4]$ 条件下, 分别使用双指数方法与 Kernel Broadening 方法生成不同温度 (600 K、900 K 与 1 200 K) 总截面时的最大相对偏差。

表 1 不同方法在线生成不同温度总截面的最大相对偏差
Table 1 Max relative deviation of the total cross section of the various target temperatures generated with different methods

典型核素 Typical nuclides	最大相对偏差 Max relative deviation / %		
	600 K	900 K	1 200 K
^1H	0.002 59	0.001 28	0.001 72
^{10}B	0.005 77	0.004 67	0.003 56
^{16}O	0.001 71	0.001 73	0.002 41
^{90}Zr	0.002 42	0.001 51	0.001 27
^{232}Th	0.001 24	0.003 76	0.002 12
^{235}U	0.003 50	0.005 48	0.003 81
^{238}U	0.002 52	0.002 59	0.002 41

从表 1 可以看出, 在步长 $h=1/16$ 时使用双指数方法在线生成的核截面与 Kernel Broadening 方法相对偏差均小于 0.006%, 证明了该方法的准确性。

2.2 Gauss-Hermite 方法

当 $y > 4$ 时, 令 $x=z+y$, 代入式(2)可得:

$$\sigma_{T_2}^*(y) = \frac{1}{y^2\sqrt{\pi}} \int_{-y}^{\infty} (z+y)^2 \sigma_{T_1}(z+y) e^{-z^2} dz \quad (10)$$

对于式(10)中指定的积分项 $f(z)e^{-z^2}$, 可使用 Gauss-Hermite 积分公式近似表示为:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(z) e^{-z^2} dz \approx \sum_{k=1}^n w_k f(z_k) \quad (11)$$

其中: $f(z) = (z+y)^2 \sigma_{T_1}(z+y)$, z_k 为 Hermite 多项式 H_n 的节点, 定义为:

$$H_n(z_k) = (-1)^n e^{z_k^2} \frac{d^n}{dz_k^n} e^{-z_k^2} \quad (12)$$

将式(2)进一步推导得:

$$\begin{aligned}\sigma_{T_2}^*(y) &= \frac{1}{y^2\sqrt{\pi}} \left[\int_{-y}^{\infty} (z+y)^2 \sigma_{T_1}(z+y) e^{-z^2} dz - \right. \\ &\quad \left. \int_{-\infty}^{-y} (z+y)^2 \sigma_{T_1}(z+y) e^{-z^2} dz \right] \quad (13)\end{aligned}$$

考虑到 Kernel Broadening 方法中 x 的取值范围 ($y-4 \leq x \leq y+4$), 当 $y > 4$ 时式(13)积分项中的 $\int_{-\infty}^{-y} (z+y)^2 \sigma_{T_1}(z+y) e^{-z^2} dz$ 贡献很小, 可忽略不计。

此时目标温度的截面 $\sigma_{T_2}(y)$ 可表示为:

$$\sigma_{T_2}(y) \approx \frac{1}{y^2\sqrt{\pi}} \sum_k^N f(z_k) w_k \quad (14)$$

根据上述分析, 表 2 给出了反应堆常用核素(^1H 、 ^{10}B 、 ^{16}O 、 ^{90}Zr 、 ^{232}Th 、 ^{235}U 、 ^{238}U)在 $y > 4$ 、节点 $k=16$ 条件下, 使用 Gauss-Hermite 方法与 Kernel Broadening 方法生成不同温度 (600 K、900 K、1 200 K) 总截面时的最大相对偏差。

表 2 不同方法生成目标温度总截面的最大相对偏差
Table 2 Max relative deviation of the total cross section of the target temperature generated with different methods

典型核素 Typical nuclides	最大相对偏差 Max relative deviation / %		
	600 K	900 K	1 200 K
^1H	0.001 08	0.000 29	0.000 59
^{10}B	0.038 04	0.038 25	0.035 41
^{16}O	0.039 56	0.055 87	0.067 90
^{90}Zr	0.083 98	0.092 05	0.098 57
^{232}Th	0.040 38	0.050 01	0.089 01
^{235}U	0.036 35	0.041 56	0.084 87
^{238}U	0.047 89	0.055 63	0.088 34

从表 2 可以得出, 在节点 $k=16$ 时, 使用 Gauss-Hermite 方法生成的核截面与 Kernel Broadening 方法相对偏差均小于 0.1%, 证明了该方法的准确性。

3 基于数值积分的曲线拟合核截面在线生成方法

MCNP6 的拟合参数法首先基于某一温度截面, 通过 Kernel Broadening 方法生成某一能量 E_i 在 T_0 , T_1 , ..., T_n 温度点的等效截面 $\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_n$, 通过这些温度点与等效截面建立如下关系:

$$\begin{pmatrix} 1 & T_0^{-1/2} & T_0^{1/2} & \cdots & T_0^{-k/2} & T_0^{k/2} \\ 1 & T_1^{-1/2} & T_1^{1/2} & \cdots & T_1^{-k/2} & T_1^{k/2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & T_n^{-1/2} & T_n^{1/2} & \cdots & T_n^{-k/2} & T_n^{k/2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c \\ a_1 \\ \vdots \\ b_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_0 \\ \sigma_1 \\ \vdots \\ \sigma_n \end{pmatrix} \quad (15)$$

式中: k 取值与截面随温度变化关系有关, 通常值取为 8; 系数 a_i, b_i, c 与能量及反应截面类型呈线性关系, 其结果可采用矩阵奇异值分解(Singular Value Decomposition, SVD)求解。经一系列推导后, 可得任意温度总截面(σ_t)、辐射俘获截面(σ_γ)与裂变截面(σ_f)的拟合形式:

$$\sigma_{t,\gamma,f}(E, T) \cong \sum_{i=1}^k \frac{a_i}{T^{i/2}} + \sum_{i=1}^k b_i T^{i/2} + c \quad (16)$$

其具体计算流程如图 1 所示。

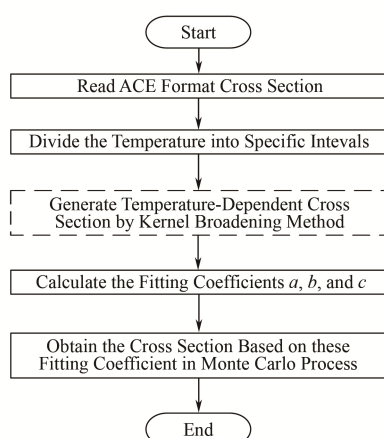


图 1 原曲线拟合法截面在线生成流程

Fig.1 On-the-fly generation procedure of cross section using original curve fitting method

该方法主要的时间消耗为指定温度间隔的 Kernel Broadening 截面展宽(图 1 虚框显示)。为此, 本文基于 MCNP6 拟合参数程序 fit_otf, 编写了基于数值积分法的拟合参数程序 ni_fit_otf, 在截面展宽中使用本文提出的数值积分法代替 Kernel Broadening 方法(图 1 虚框显示), 提高截面的生成效率, 其生成流程见图 2。

图 3 给出了使用 ni_fit_otf 与 fit_otf 生成 300 K 温度间隔下典型核素总截面的生成效率之比。从图 3 可以看出, 前者中的数值积分方法的计算效率比后者中的 Kernel Broadening 方法平均高 10 倍以上, 轻核部分加速近 40 倍, 证明了该方法核截面生成效率相对于原始方法获得了较大的提升。

本文采用多普勒反应性系数基准例题测试数值积分方法的有效性, 该基准例题采用一个栅元结构模型, 中心燃料为 UO_2 , 燃料外的包壳材料为 Zr, 最外层为含 ^{10}B 及轻水的正方体反射层, 反应性多

普勒系数基准例题轴向设置为无穷大, 使用全反射边界条件^[10]。模型结构如图 4 所示。

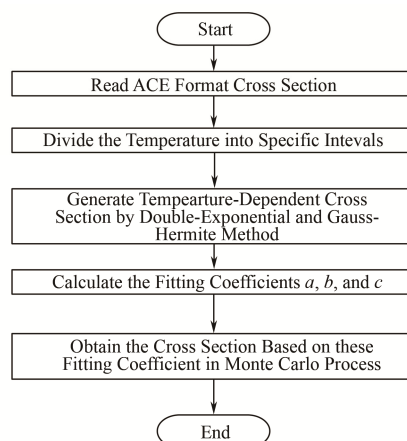


图 2 基于本文方法的曲线拟合法截面在线生成流程

Fig.2 Curve fitting method of cross section on-the-fly generation process based on integration method

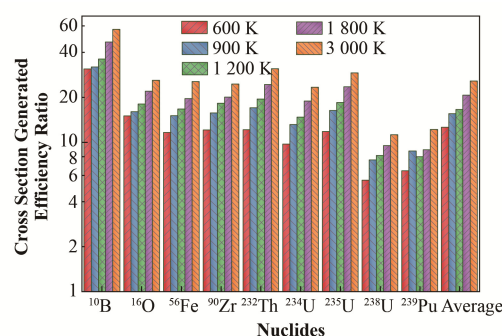


图 3 不同方法生成典型核素截面的生成效率比

Fig.3 Generation efficiency ratio of typical cross sections generated by using different methods

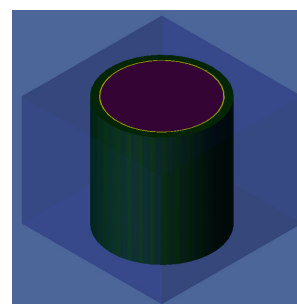


图 4 反应性多普勒系数基准例题模型

Fig.4 Model of Doppler coefficient of reactivity

该例题中慢化剂的温度固定为 600 K, 其中燃料区的温度有 600 K 和 900 K 两种, 分别代表热态零功率(Hot Zero Power)与热态满功率(Hot Full Power)。该基准模型中通过分别计算燃料温度为 600 K 和 900 K 时的有效增殖因数, 得到温度引起的反应性多普勒系数 D_c , 其表达形式如下:

$$D_c = \frac{\Delta\rho_{\text{Dop}}}{\Delta T_{\text{fuel}}} \quad (17)$$

其中： $\Delta\rho_{\text{Dop}}=(k_{\text{HFP}}-k_{\text{HZP}})/(k_{\text{HFP}}\times k_{\text{HZP}})$ ， $\Delta T_{\text{fuel}}=300\text{ K}$ ，分别计算 0.711%、1.6%、2.4%、3.1%、3.9%、4.5%、5.0%富集度下的燃料多普勒系数。反应性多普勒系数基准模型旨在验证反应性多普勒系数计算结果的准确性，要求计算结果与基准值的相对偏差不超过 10%^[10]。

本文使用原始温度为 293.6 K 的 ACE 格式截面^[11]，分别使用 ni_fit_otf 与 fit_otf 曲线拟合法生成拟合参数，通过 MCNP6 计算反应性多普勒系数。每代计算粒子数为 100 000，总计模拟 5 100 代并舍去前 100 个非活跃代。UO₂ 燃料的反应性多普勒系数的计算结果如图 5 所示。

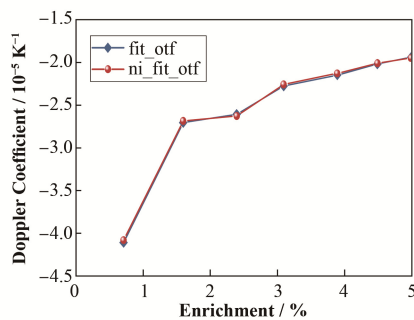


图 5 反应性多普勒系数结果对比
Fig.5 Results comparison of reactive Doppler coefficient

结果显示：使用 ni_fit_otf 方法计算得到的不同富集度下反应性多普勒系数均与 fit_otf 方法计算结果相当，最大相对偏差仅为 1.54%，表明本文方法计算结果的精度符合基准例题要求，验证了本文方法的准确性与有效性。

4 结语

本文针对 MCNP6 的曲线拟合在线截面生成方法中截面展宽效率较低问题，提出使用数值积分法代替 Kernel Broadening 方法，按能量范围不同分别使用双指数方法与 Gauss-Hermite 方法生成不同温度截面，提高截面的生成效率。典型核素测试结果显示，数值积分方法的曲线拟合计算效率比采用 Kernel Broadening 方法平均高 10 倍以上，多普勒反应性系数基准例题结果显示，数值积分方法的曲线拟合与原始方法精度相对偏差在 1.54% 内，验证了本文方法的有效性，可用于反应堆多物理耦合计算。

参考文献

- 1 陈锐, 郝丽娟, 宋婧, 等. 基于分段高斯积分的在线多温度核截面生成方法研究[J]. 核技术, 2017, **40**(4): 040503. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2017.hjs.40.040503. CHEN Rui, HAO Lijuan, SONG Jing, *et al.* On-the-fly Doppler broadening method based on piecewise Gauss quadrature for generating neutron cross section[J]. Nuclear Techniques, 2017, **40**(4): 040503. DOI: 10.11889/j.0253-3219.2017.hjs.40.040503.
- 2 Chen R, Hao L J, Wu B, *et al.* On-the-fly Doppler broadening method based on optimal double-exponential formula[J]. Nuclear Science and Techniques, 2017, **28**(11): 166. DOI: 10.1007/s41365-017-0318-4.
- 3 Pelowitz D, Goorley J, Fensin M, *et al.* MCNP6 user's manual version 1.0 LA-CP-13-00634, Rev.0[R]. Los Alamos National Laboratory, 2013.
- 4 Yesilyurt G, Martin W, Brown F. On-the-fly Doppler broadening for Monte Carlo codes[J]. Nuclear Science and Engineering, 2012, **171**(3): 239-257. DOI: 10.13182/NSE11-67.
- 5 Cullen D. Program SIGMA1 (version 79-1): Doppler broaden evaluated cross sections in the evaluated nuclear data file/version B (ENDF/B) format, UCRL-50400[R]. Lawrence Livermore Laboratory, 1979.
- 6 Macfarlane R. The NJOY nuclear data processing system[R]. LA-UR-12-27079, Los Alamos National Laboratory, 2012.
- 7 Cullen D E, Weisbin C R. Exact Doppler broadening of tabulated cross sections[J]. Nuclear Science & Engineering, 1976, **60**: 199-229.
- 8 Mori M, Sugihara M. The double-exponential transformation in numerical analysis[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2001, **127**: 287-296. DOI: 10.1016/S0377-0427(00)00501-X.
- 9 Chen R, Hao L J, Song J, *et al.* On-the-fly Doppler broadening method based on optimal double exponential formula[J]. Nuclear Science and Techniques, 2017, **28**(11): 166. DOI: 10.1007/s41365-017-0318-4.
- 10 Mosteller R. ENDF/B-V, ENDF/B-VI, ENDF/B-VII.0 results for the Doppler-defect benchmark[R]. LA-UR-07-0922, Los Alamos National Laboratory, 2007.
- 11 Lib80x—Library based on ENDF/B-VIII.0[OL]. <https://nucldata.lanl.gov/ACE/Production/Lib80x.html>, 2018.