

多群截面处理模块 ARES-MACXS 屏蔽 计算适用性分析

胡家驹 张 斌 刘 聪 陈义学
(华北电力大学 核科学与工程学院 北京 102206)

摘要 在聚变和裂变装置的屏蔽计算中确定论方法应用广泛,多群截面数据的精度对计算结果具有至关重要的影响。为得到适用于各类屏蔽问题的多群截面,自主开发了基于邦达连科共振处理方法的截面处理模块 ARES-MACXS。模块具备共振处理、温度插值、输运修正、上散射处理、中子-光子截面耦合处理、并群等功能。使用指数插值方法,以得到更加精确的多群截面。分别处理 KASHIL_E70 库、FENDLL-3.1d 库进行单核素计算,并与连续能量蒙特卡罗结果对比;对 ill-Fe、OKTAVIAN-AI 等基准题进行了计算,并与实验测量值进行对比。输运计算结果与蒙特卡罗计算值误差小于 1%,与实验测量值吻合良好,误差小于 20%。计算结果表明产生的多群截面具有可靠精度,可以应用于基准题验证,具有应用于工程问题计算的潜力。

关键词 屏蔽计算, 多群截面, MATXS, 共振自屏

中图分类号 TL328

DOI: 10.11889/j.0253-3219.2021.hjs.44.050601

Applicability analysis of multi-group cross sections processing code ARES-MACXS for shielding calculation

HU Jiaju ZHANG Bin LIU Cong CHEN Yixue

(School of Nuclear Science and Engineering, North China Electric Power University, Beijing 102206, China)

Abstract [Background] Deterministic method is widely used in shielding calculation for fusion and fission devices. The data accuracy of multi-group cross section has significant influence on the deterministic calculation results. [Purpose] This study aims to obtain a multi-group cross-section library suitable for various shielding problems by developing a multi-group cross-section processing code ARES-MACXS based on Bondarenko resonance processing method with functionalities of resonance processing, temperature interpolation, transport correction, up-scattering processing, collapse group, and so on, and uses the exponential interpolation method to obtain more accurate multi-group cross sections. [Method] First of all, KASHIL_E70 library and FENDLL-3.1d library were respectively processed by ARES-MACXS for single nuclide calculation to verify the correctness of the code, and the results were compared with continuous energy Monte Carlo code. Then, the ill-Fe, OKTAVIAN-AI and other benchmarks were calculated to verify the applicability of the code to different nuclides, and the results were compared with the continuous energy Monte Carlo code. Finally, the ill-Fe, OKTAVIAN-AI and other benchmarks calculated by ARES-MACXS were compared with experimental measurements. [Results] The error between the

国家自然科学基金(No.11975097)资助

第一作者: 胡家驹, 男, 1990 年出生, 2013 年毕业于华北电力大学, 现为博士研究生, 研究领域为确定论屏蔽计算多群截面研究

通信作者: 张斌, E-mail: zhangbin@ncepu.edu.cn

收稿日期: 2020-09-04, 修回日期: 2021-02-23

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.11975097)

First author: HU Jiaju, male, born in 1990, graduated from North China Electric Power University in 2013, doctoral student, focusing on multi-group cross sections for shielding calculation

Corresponding author: ZHANG Bin, E-mail: zhangbin@ncepu.edu.cn

Received date: 2020-09-04, revised date: 2021-02-23

deterministic transport calculation result and the Monte Carlo calculation result is less than 1%, the error between the deterministic transport calculation result and experimental measurement values is less than 20%. **[Conclusions]** The results show that the multi-group cross sections calculated by ARES-MACXS have reliable accuracy and can be applied to the verification of benchmarks, hence can be applied to the calculation of engineering problems.

Key words Shielding calculation, Multi-group cross-section, MATXS, Resonance self-shielding

辐射屏蔽计算作为核安全计算的重要组成部分,其准确性对设备辐照损伤和人员剂量率计算十分重要。确定论方法进行辐射屏蔽计算时,材料截面通常使用多群截面。ARES^[1]是基于 S_N 方法的确定论屏蔽计算程序,具有一维、二维和三维输运计算模块。程序具备计算各类屏蔽问题的能力,能够对深穿透问题、大型核装置屏蔽等特殊问题进行准确的输运计算。为使ARES程序得到更加准确的输运计算结果,减小多群截面数据误差,本文针对确定论屏蔽计算的多群截面数据库制作开展相关研究工作,自主开发了多群截面处理模块ARES-MACXS。针对聚变核装置、裂变核装置及其他不同类型屏蔽问题,开发多个截面数据处理模块。该模块处理MATXS^[2]格式多群中子截面数据库,生成ARES输运计算前处理文件以及anish或anishb格式的多群截面文件。下文使用不同截面库从单核素自设例题、设计基准题两部分对ARES-MACXS模块进行测试计算,并与蒙特卡罗计算结果和实验测量值对比,验证多群截面数据的正确性;与国际通用的多群截面处理程序TRANSX^[3]进行了对比计算,并验证该程序产生的多群截面的准确性^[4]。本文具有一定的研究意义,能够为屏蔽问题计算提供精确的多群截面数据库,有效提高了辐射屏蔽计算的精度。

1 ARES-MACXS多群宏观截面处理模块

ARES-MACXS宏观截面处理模块针对不同类型屏蔽计算需求,开发多个计算模块对核素截面进行处理。针对不同类型计算问题,可以调用不同计算模块,生成适用于实际问题的多群截面。包括共振计算、截面温度插值、光子截面处理、上散射截面处理、输运修正、并群计算等功能。图1为程序处理流程。

共振处理是程序的核心功能,ARES-MACXS使用邦达连科共振处理方法^[5]。该方法基于窄共振近似,假设中子每次碰撞损失的能量远小于靶核的共振峰宽度。邦达连科方法共振处理流程图如图2所示。

使用邦达连科方法进行共振计算时,需要计算自屏因子,其定义如下:

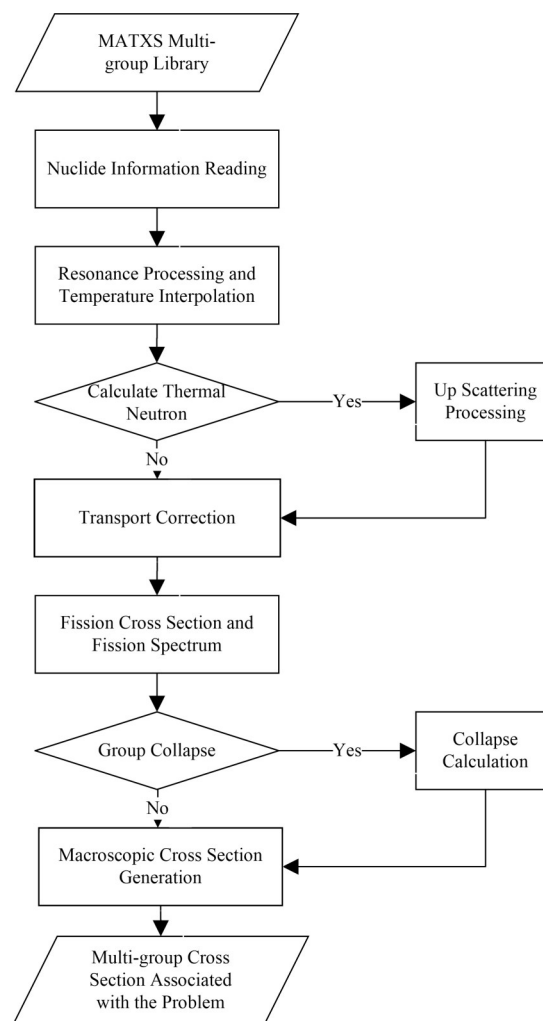


图1 ARES-MACXS处理流程
Fig.1 Processing flow of ARES-MACXS

$$f_{x,i,g}(\sigma_0, T) = \frac{\sigma_{x,i,g}(\sigma_0, T)}{\sigma_{x,i,g}(\infty, T)} \quad (1)$$

自屏因子是温度 T 、本底截面 σ_0 的函数,在求解共振截面时需要对温度、本底截面进行插值。线性插值是国际上常用的插值方法,其计算速度快,不会引入非物理震荡。但温度、本底截面与自屏因子并不存在严格的线性关系,使用线性插值会降低共振计算精度。为提高插值方法的精度,采用指数插值方法,使得曲线总是可以满足三个单调点^[6],得到如图2所示的自屏因子曲线,并能有效避免曲线3~4段可能出现的两种变化情况。

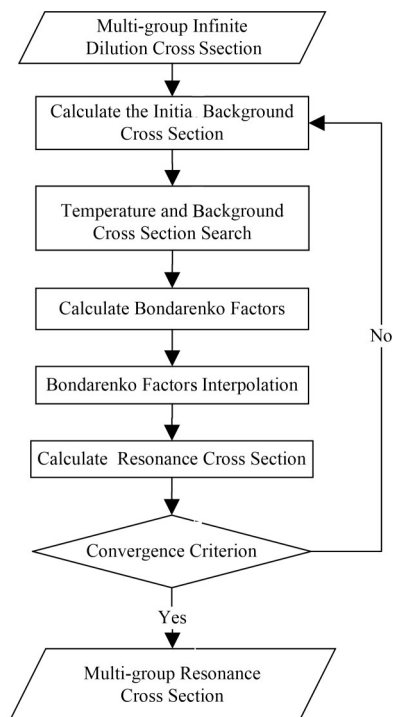


图2 邦达连科共振处理方法流程图
Fig.2 Flowchart of Bondarenko resonance method processing

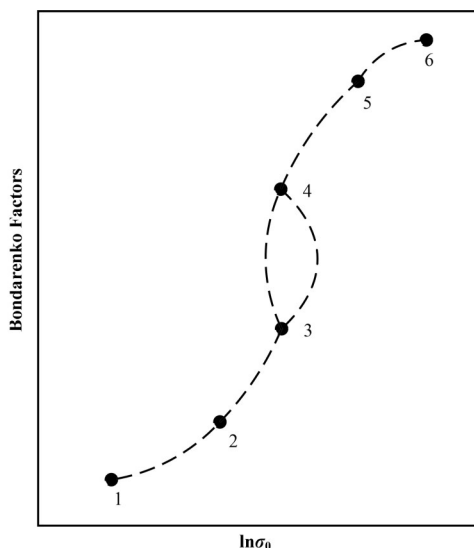


图3 自屏因子关于本底截面典型“S型”变化示意图
Fig.3 Variation diagram of Bondarenko factors vs. typical “S-shape” of σ_0

2 基准题计算截面验证

为验证 ARES-MACXS 模块计算的正确性,从单核素自设问题、设计基准装置两方面进行测试验证,用于验证截面处理的正确性。ANISN^[7]作为国际上通用的一维输运计算程序,被广泛用于基准题计算和多群截面验证等工作。本文主要目标为验证

制作截面的准确性。国际相关基准计算及多群截面验证都使用 ANISN 程序。因此为与实验基准值及国际上相关验证作对比,排除输运程序引入的不确定性因素,本章所有输运计算都使用 ANISN 程序。

2.1 单核素自设问题验证

TRANSX 程序是国际通用的多群截面处理程序,广泛应用于屏蔽计算。该程序同样基于邦达连科共振处理方法,具有温度插值、共振处理、输运修正、上散射处理等功能。

分别使用 ARES-MACXS 和 TRANSX 程序生成多群截面对自设一维球模型输运计算,并使用 RMC (Reactor Monte Carlo code)^[8] 计算结果作为基准进行对比。计算模型示意图如图 4 所示,球半径为 60 cm,中子源为在球心的能量为 17.3~19.6 MeV 的点源,分别使用石墨和 ¹⁶O 两种材料进行计算。使用 ANISN 程序进行输运计算,统计球体表面处中子通量密度与蒙特卡罗结果的对比。RMC 使用 5 亿粒子进行模拟,各群中子通量密度统计误差小于 1%。

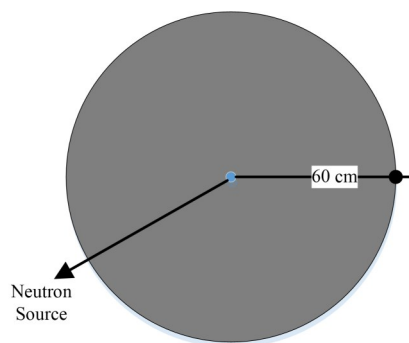


图4 一维球模型示意图
Fig.4 Diagram of one-dimensional sphere model

2.1.1 FENDL-3.1d 多群库测试

为测试截面处理模块对不同截面库的计算适用性,对 MATXS 格式的 FENDL-3.1d 多群截面库进行测试,并使用 TRANSX 程序对比计算。该库具有 211 群中子、42 群光子,适用于高能中子及聚变装置的计算。图 5 是使用石墨材料源归一化后距球心 59~60 cm 处三个程序计算的中子通量密度对比。由图 5 可知,在中子能量高于 10 MeV 的能量区间,ARES-MACXS 和 TRANSX 与 RMC 程序都吻合得较好。随着能量降低,ARES-MACXS 结果仍然与蒙特卡罗程序保持一致;而 TRANSX 结果与蒙特卡罗结果相比偏大很多。为检查差异原因,对两个程序产生的截面信息进行对比。结果表明:除 P_0 阶群内散射截面外,其他截面信息基本一致。 P_0 阶群内散射截面如图 6 所示,从图 6 可知,从 0.01~10 MeV 能量区间 TRANSX 群内散射截面值偏大,造成输运计

算中子通量密度计算值偏大;高阶群内散射截面两程序计算值相同。表明 TRANSX 程序在对石墨进行共振计算时存在误差。ARES-MACXS 模块计算结果与蒙特卡罗程序计算值误差小于 1%。

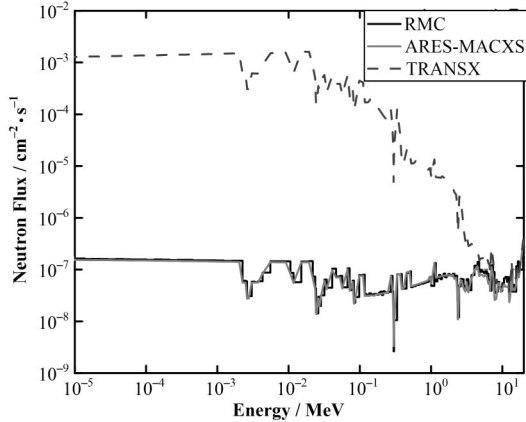


图5 石墨球中子通量密度对比
Fig.5 Comparison of neutron flux of graphite sphere

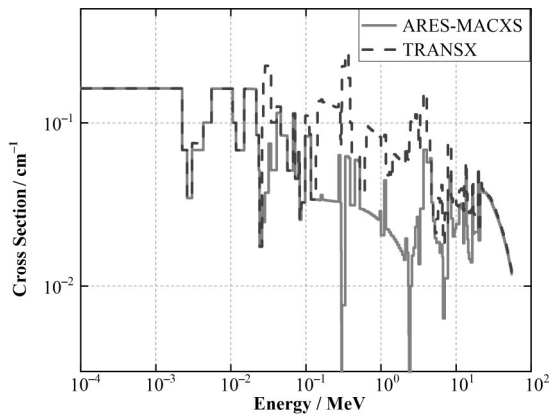


图6 石墨 P_0 阶群内宏观散射截面对比
Fig.6 Comparison of macroscopic in-group scattering cross sections of graphite sphere

将材料替换为 ^{16}O , 原子核密度设置为 1×10^{-2} ($10^{24} \text{ atoms} \cdot \text{cm}^{-3}$) 进行输运计算, 并与 TRANSX 的计算结果进行了对比, 中子通量密度对比结果如图 7 所示。与石墨材料的计算情况相同, TRANSX 对 ^{16}O 共振处理计算得到的中子通量密度也出现偏大的趋势, P_0 阶群内散射截面存在误差。使用 ARES-MACXS 模块产生的多群中子截面数据计算得到的中子通量密度结果与蒙特卡罗模拟的计算结果吻合良好, 大部分能群误差在 1% 以内。说明 ARES-MACXS 模块能够对 FENDL-3.1d 数据库进行处理, 生成准确的多群截面数据。

2.1.2 KASHIL_E70 库测试

为测试 ARES-MACXS 对不同多群截面库截面的适用性, 使用 KASHIL_E70 库进行验证。该库采

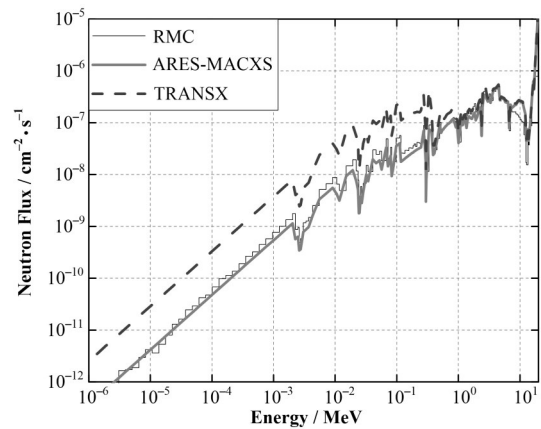


图7 ^{16}O 球中子通量密度对比
Fig.7 Comparison of neutron flux of ^{16}O sphere

用 VITAMIN-B7^[9] 能群结构, 具有 199 群中子、42 群光子, 主要用于裂变反应堆及相关核装置的屏蔽计算。首先对 60 cm 石墨球进行计算, 59~60 cm 处中子通量密度对比如图 8 所示, 两程序计算结果与蒙特卡罗计算值基本一致。结果说明: ARES-MACXS 可以准确处理石墨材料; TRANSX 程序处理该库的石墨材料时结果与蒙特卡罗结果保持一致。

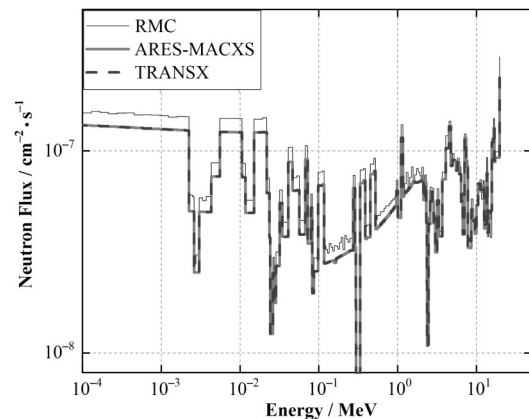
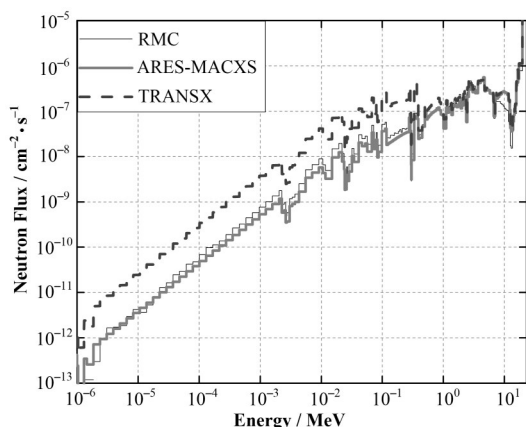


图8 199 群石墨球中子通量密度对比
Fig.8 Comparison of 199 group neutron flux in graphite sphere

将材料替换为 ^{16}O , 原子核密度设置为 1×10^{-2} ($10^{24} \text{ atoms} \cdot \text{cm}^{-3}$), 计算得到的中子通量密度如图 9 所示。ARES-MACXS 处理截面的计算结果与蒙特卡罗结果保持一致; 由于 P_0 阶群内散射截面存在误差, TRANSX 处理截面计算结果在 1 MeV 以下随能量降低中子通量密度计算值与蒙特卡罗计算结果误差逐渐增大。结果表明: ARES-MACXS 模块能够准确对多群截面进行共振处理; TRANSX 程序处理含 ^{16}O 材料时会造成 P_0 阶群内散射截面误差, 引起中子通量密度计算值偏大。

图9 199群 ^{16}O 球中子通量密度对比Fig.9 Comparison of 199 groups neutron flux in ^{16}O sphere

2.2 基准题验证

KASHIL_E70 是屏蔽计算常用多群数据库,涵盖能量范围满足裂变装置、聚变装置计算需求。后续程序测试将用该库作为 MATXS 格式多群截面库进行验证计算。

2.2.1 ill-Fe 基准题

此基准题是伊利诺斯大学于 1975 年建立的铁球基准实验。主要目的是对比铁球壳快中子泄露能谱的测量值和计算值,以验证中子截面库的有效性和准确性。ill-Fe^[10]基准装置分为两区:中子源位于球心,内区是半径为 7.65 cm 的空气;外区为厚度 30.5 cm 的铁质外壳。其材料组成见表 1。

表 1 ill-Fe 基准装置材料组成
Table 1 ill-Fe benchmark device material composition

核素 Nuclide	原子核密度 Nuclear density / $10^{24} \text{ atoms} \cdot \text{cm}^{-3}$
Fe	8.4309×10^{-2}
Mn	3.9903×10^{-4}
C	1.7829×10^{-4}
P	1.1037×10^{-5}
S	2.0375×10^{-6}

该装置使用两种中子源:1) ^{252}Cf 自发裂变源;2)中子发生器产生的 D-T 聚变中子源。基准题提供了多群中子源的强度,并给出大于 1 MeV 能量点的中子泄漏率测量值,用于与计算值进行比较。

使用 ARES-MACXS 产生多群截面,ANISN 程序进行输运计算,得到模型的表面泄漏率,并与基准题报告中的实验测量值进行比较。图 10 为计算得到的基准装置表面 199 群中子泄漏率与实验测量值的比较。

由图 10 可知,程序计算值与实验测量值吻合良好。Fe 作为重要的屏蔽材料,具有强烈的共振效

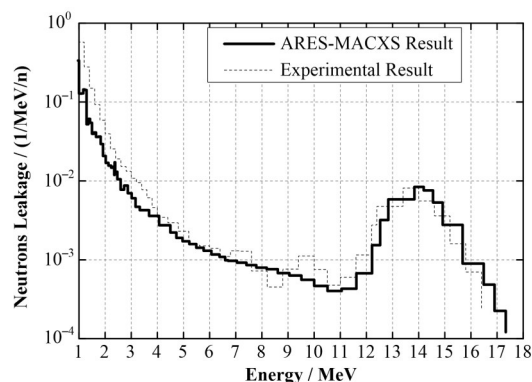


图10 ill-Fe基准装置表面中子泄露率

Fig.10 Neutrons leakage of ill-Fe benchmark device

应。ARES-MACXS 使用共振处理模块得到与问题相关的能多群截面并进行输运计算,能够得到更加精确的中子泄漏率结果。程序计算值与实验测量值误差基本保证在 20% 以内。

2.2.2 OKTAVIAN-AI^[11]基准题

OKTAVIAN 装置是大阪大学建造的一个 14 MeV D-T 中子发生器,通过采用飞行时间方法测量铁球等多种球壳样品的中子泄漏率。为验证 ARES-MACXS 对其他常见屏蔽材料截面处理的正确性,选取 OKTAVIAN-AI 基准装置进行计算,其主要屏蔽材料为铝。基准装置的一维模型如图 11 所示,共有内外两层不锈钢球壳,内层球壳中心位置放有中子源,材料为空气;外层不锈钢球壳外为空气,两层球壳厚度均为 0.2 cm,两层球壳中间放置铝粉。其材料组成如表 2 所示。

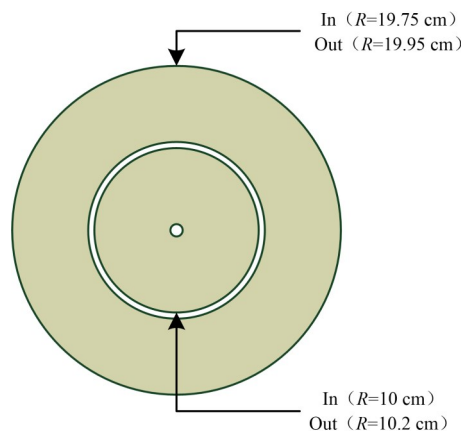


图11 OKTAVIAN-AI基准题模型

Fig.11 Model of OKTAVIAN-AI benchmark

使用 ANISN 进行输运计算。分别统计基准题的中子泄漏率与光子泄漏率,并与基准报告实验测量值进行对比。中子泄漏率如图 12 所示,计算值与实验测量值整体趋势一致,在能高区域数值符合良好。证明截面处理模块对中子截面的处理合理。在

表2 OKTAVIAN-AI基准装置材料组成表
Table 2 OKTAVIAN-AI benchmark device material composition

位置 Location	核素 Nuclide	原子核密度 Nuclear density / $10^{24} \text{ atoms} \cdot \text{cm}^{-3}$
中子源 Neutron Source	N	4.0867×10^{-5}
	O	9.3912×10^{-6}
不锈钢球壳 Stainless steel spherical shell	Fe	5.5766×10^{-2}
	Cr	2.2926×10^{-2}
	Ni	8.8595×10^{-3}
铝屏蔽层 Aluminum shield	Al	2.7120×10^{-2}
	Si	3.9345×10^{-5}
	Fe	2.6230×10^{-5}
	Cu	1.1476×10^{-5}

能量 0.1~0.5 MeV 区间计算结果与实验测量值存在误差, 由于在该能量区间铝材料存在向下的共振峰, 邦达连科方法无法准确对其进行描述, 因此输运计算结果与实验测量值存在一定误差。在能量大于 0.5 MeV 区间误差在 5% 以内。

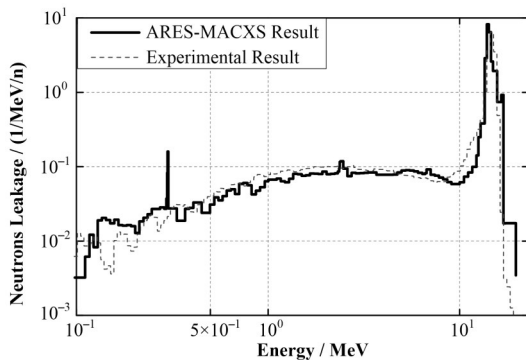


图12 OKTAVIAN-AI基准题中子泄漏率
Fig.12 Neutrons leakage rate of OKTAVIAN-AI benchmark device

为得到更加准确的输运计算结果, ARES-MACXS使用中子-光子耦合模块计算得到多群共振光子产生截面。光子泄漏率如图13所示, 计算值整体趋势与实验测量值保持一致, 大部分能群误差在20%以内, 结果符合良好。ARES-MACXS模块处理多群光子截面的方法正确, 能够保证光子多群截面的准确性。

2.2.3 自设H₂O例题

为验证程序在低能区对上散射截面处理的正确性, 使用自设H₂O例题进行测试验证, 并使用RMC计算结果作为基准参考。该例题的几何模型如图14所示。模型共有内外两层0.2 cm厚的不锈钢球壳, 内层球壳中心放置14 MeV的D-T中子源, 其余空间为空气; 内层球壳与外层球壳间充满H₂O屏蔽

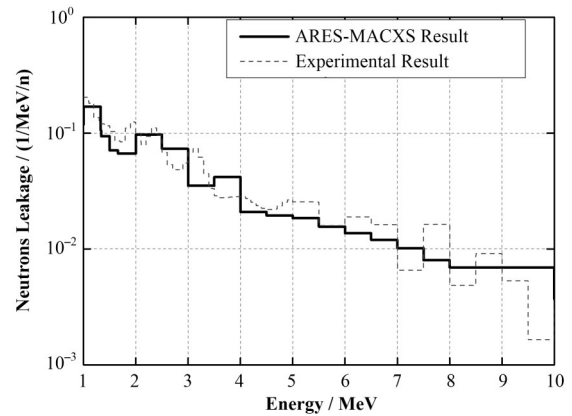


图13 OKTAVIAN-AI基准题光子泄漏率
Fig.13 Photons leakage rate of OKTAVIAN-AI benchmark device

层。模型共包含4个区域, 其材料组成见表3。

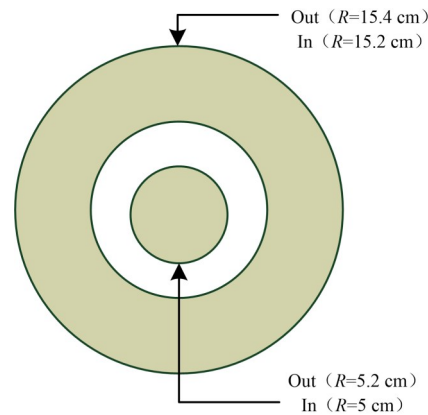


图14 自设H₂O例题几何模型
Fig.14 Model of H₂O benchmark

表3 自设H₂O例题材料组成
Table 3 H₂O benchmark material composition

区域 Region	材料 Material	核素 Nuclide	原子核密度 Nuclear density / $10^{24} \text{ atoms} \cdot \text{cm}^{-3}$
1	Air	N	4.0867×10^{-5}
		O	9.3912×10^{-6}
2	SS304	Fe	5.9200×10^{-2}
		Cr	2.3103×10^{-2}
		Ni	8.8595×10^{-3}
3	H ₂ O	H	6.6734×10^{-2}
		O	3.3370×10^{-2}
4	SS304	与2区相同 Same as region 2	与2区相同 Same as region 2

使用ANISN进行输运计算, 统计中子泄漏率。由于H₂O在热中子能区存在强烈的上散射效应, 为提高热能区中子截面的精度, ARES-MACXS使用上散射处理模块对材料采用上散射模型进行处理, 得

到具有上散射截面的多群截面用于输运计算。使用单位源中子泄漏率与蒙特卡罗计算结果的对比如图15所示,可以看出,确定论计算结果与RMC计算结果整体趋势相同,在低能处存在高峰是由于热中子在低能区的上散射效应,计算误差在5%以内。结果证明:ARES-MACXS上散射处理方法正确,能够准确处理得到低能区中子宏观截面。

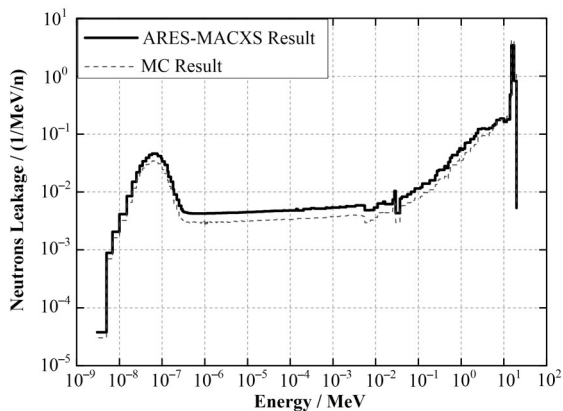


图15 自设H₂O例题中子泄漏率

Fig.15 Neutrons leakage rate of H₂O benchmark

通过对以上三个基准题的计算,对ARES-MACXS模块进行了验证。对比结果表明各个模块的理论方法正确,能够准确地处理屏蔽材料在高能区、热区的多群中子截面以及光子截面,具有工程实际问题计算的潜力。

3 结语

为满足屏蔽计算需求,自主开发ARES-MACXS多群截面处理模块。模块使用成熟的邦达连科共振处理方法,并使用指数线性插值方法代替传统的线性插值,插值精度得到提升。使用不同截面库及不同类型的屏蔽问题多群截面进行了测试并与TRANSX程序结果进行对比。结果表明:TRANSX程序在处理某些核素时P₀阶群内散射截面会产生误差,造成中子通量密度计算值偏大。使用ARES-MACXS模块处理的多群截面输运计算结果与蒙特卡罗计算结果吻合良好,误差基本保证在5%以内;并与实验值接近,误差在工程计算允许的20%以内。ARES-MACXS可以作为多群截面处理模块,为屏蔽输运计算提供精确的多群截面数据。后续研究工作在少群结构、并群权重谱、强共振峰处理方法等方面开展。该模块在工程实际问题的适用性需进一步验证。

参考文献

- 1 Zhang L, Zhang B, Zhang P H, *et al.* Verification of ARES transport code system with TAKEDA benchmarks [J]. Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section A-Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment, 2015, **797**: 297 – 303. DOI: 10.1016/j.nima.2015.07.014.
- 2 MacFarlane R, Muir D W, Boicourt R M, *et al.* The NJOY nuclear data processing system, version 2016[R]. Office of Scientific and Technical Information (OSTI), 2017. DOI: 10.2172/1338791.
- 3 MacFarlane R E. TRANSX 2.15: a code for interfacing MATXS cross-section[M]. Los Alamos National Laboratory, 1998.
- 4 Konno C, Kwon S, Fischer G. Effect of IAEA Patch for TRANSX2.15[R]. Vienna, Austria: IAEA, 2018.
- 5 Bondarenko I I. Ed. Group constants for nuclear reactor calculations[M]. New York: Consultants Bureau, 1964.
- 6 Greene N M. BONAMI: resonance self-shielding by the BONDARENKO method[R]. ORNL/TM-2005/39. 2005.
- 7 Engle W W. A users manual for anisn: a one dimensional discrete ordinates transport code with anisotropic scattering[R]. Office of Scientific and Technical Information (OSTI), 1967. DOI: 10.2172/4448708.
- 8 余顶, 梁金刚, 李泽光, 等. 反应堆蒙特卡程序RMC用户使用手册[M]. 北京: 清华大学工程物理系核能科学与工程研究所, 反应堆工程计算分析实验室, 2015.
- 9 SHE Ding, LIANG Jingang, LI Zeguang, *et al.* The user's manual of Monte Carlo code RMC for reactor core analysis[M]. Beijing: Institute of Nuclear Energy Science and Engineering Management, Department of Engineering Physics, Tsinghua University, 2015.
- 9 Risner J M, Wiarda D, Dunn M E, *et al.* Production and testing of the VITAMIN-B7 fine-group and BUGLE-B7 broad-group coupled neutron/gamma cross-section libraries derived from ENDF/B-VII.0 nuclear data[R]. Office of Scientific and Technical Information (OSTI), 2011. DOI: 10.2172/1411183.
- 10 Hertel N E. High-energy neutron transport through tungsten and iron[R]. 1979.
- 11 Sumita K, Takahashi A, Iida T, *et al.* Osaka university 14 MeV intense neutron source and its utilizations for fusion studies (oktavian program)[M]. Fusion Technology 1982. Amsterdam: Elsevier, 1983: 675 – 680. DOI: 10.1016/b978-1-4832-8374-6.50096-4.