

文章编号: 0258-0926(2018)S2-0051-06; doi: 10.13832/j.jnpe.2018.S2.0051

NECP-Atlas 中共振弹性散射核处理模块的开发与验证

徐嘉隆, 祖铁军*, 曹良志, 吴宏春

西安交通大学核科学与技术学院, 西安, 710049

摘要: 在多群截面和散射矩阵产生中考虑了靶核热运动以及共振弹性散射。首先, 采用了任意勒让德阶数的各向异性共振弹性散射核公式, 以计算准确的多普勒展宽能量转移核。使用了半解析积分方法来进行共振弹性散射核的计算。结合共振弹性散射核计算, 提出了一种线性化方法来产生共振弹性散射核插值表。利用该插值表可精确插值共振弹性散射核以减少计算成本。其次, 基于共振弹性散射核开发了慢化方程求解器从而代替传统的渐进散射核。该求解器可以正确地考虑中子上散射效应对中子能谱的影响。在多群截面归并时使用更加精确的中子能谱, 以此可以得到更加精确的多群截面。上述所有方法都已集成至核数据处理程序 NECP-Atlas。数值结果表明, 所提出的方法可以为下游计算提供准确的多群截面; 相比于传统方法所产生的多群截面及散射矩阵, 当上散射效应被考虑时, 使用确定论程序所计算的燃料温度系数以及特征值有较大的变化。

关键词: 共振弹性散射核; 核数据处理; 多普勒燃料温度系数; NECP-Atlas

中图分类号: TL325 **文献标志码:** A

Development and Verification of Resonance Elastic Scattering Kernel Data Processing Module in Nuclear Data Processing Code NECP-Atlas

Xu jialong, Zu tiejun*, Cao liangzhi, Wu hongchun

School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049, China

Abstract: The thermal motion of target nuclei and the resonance elastic scattering have been considered in the generation of multi-group cross sections and scattering matrices. Firstly, the resonance elastic scattering kernel (RESK) formulations for anisotropic scattering up to any Legendre order has been adopted to calculate the exact Doppler broadened energy transfer kernels. A semi-analytical integration method is applied to perform the RESK calculations. Combining with the RESK calculation, a linearization algorithm is proposed to generate the RESK interpolation tables. The RESK data can be interpolated precisely based on the RESK interpolation tables to reduce the calculation burden. Secondly, a neutron slowing-down equation solver is developed based on the RESK instead of the conventional asymptotic scattering kernel. The effect of neutron up-scattering on the neutron energy spectrum can be exactly taken into account by the solver. More precise multi-group cross sections are obtained when more precise energy spectrum are adopted in the group collapsing procedures. All the methods mentioned above have been implemented into the nuclear data processing code called NECP-Atlas. Numerical results show that the proposed methods are capable of producing accurate multi-group cross sections for downstream calculation; Compared

收稿日期: 2018-10-13; 修回日期: 2018-10-29

基金项目: 国家自然科学基金 (11605128, 11522544)

作者简介: 徐嘉隆 (1991—), 男, 博士研究生, 现从事反应堆计算物理研究

*通讯作者: 祖铁军, E-mail: tiejun@xjtu.edu.cn

with the multi-group cross sections and scattering matrices generated by the conventional methods, the fuel Doppler coefficients and eigenvalues calculated by the deterministic codes change greatly when the up-scattering effect is considered.

Key words: Resonance elastic scattering kernel, Nuclear data processing, Doppler fuel temperature coefficient, NECP-Atlas

0 引言

核数据处理程序中的一个重要功能是将 0 K 数据多普勒展宽为指定温度下的数据。核数据处理会将评价核数据转化为下游计算程序所需要的特定格式数据库,如 NJOY、PREPRO 以及 AMPX 等都是广泛使用的核数据处理程序。在多普勒展宽处理过程中考虑了靶核的热运动,当中子以较慢的速度与重核发生碰撞时,有可能会获得能量,该现象即为中子上散射效应。同时,有些核素具有共振弹性散射反应^[1],这会增加中子上散射的概率。因此,散射截面与能量转移核都必须进行多普勒展宽计算。在上述核数据库处理程序中,散射截面通常会被准确地多普勒展宽^[2-4],所使用的方法为核心展宽法。然而对于能量转移核,弹性散射截面被近似为常数,忽略了弹性散射截面共振现象。该近似会直接导致所计算的多普勒展宽能量转移核有较大的误差。

本研究先提出了一种计算共振弹性散射核的方法,基于该方法可以正确计算任意入射能量、出射能量以及勒让德阶数下的共振弹性散射核。开发了一个新的处理模块以处理共振弹性散射核,在该模块中,可以产生 1 个离线的二维共振弹性散射核插值表,从而使得下游处理模块可以快速地获得精确的共振弹性散射核。然后基于共振弹性散射核开发了 1 个新的慢化方程求解器,使用该求解器可以避免渐进散射核所带来的误差。考虑中子上散射效应可以获得更精确的多群截面及散射矩阵。

1 理论方法

1.1 共振弹性散射核理论

文献[1]提出的任意勒让德阶数的共振弹性散射核公式为:

$$\sigma_{sn}^T(E \rightarrow E') = \frac{\beta^{5/2}}{4E} \exp\left(\frac{E}{kT}\right) \int_0^\infty t \sigma_{s,0} \left(\frac{kT}{A} t^2\right) \exp\left(-\frac{t^2}{A}\right) \psi_n(t) dt \quad (1)$$

$$\beta = (A+1) / A \quad (2)$$

式中, E 为入射能量; E' 为出射能量; t 为中子速度相关变量; k 为玻尔兹曼常数; T 为材料温度; $\sigma_{s,0}$ 为由 NECP-Atlas 共振重构及线性化后产生的 0 K 表格截面; A 为靶核与中子质量比; $\psi_n(t)$ 为 n 阶角度项; σ_{sn}^T 为弹性散射微分截面矩。

基于传统的线性化以及共振重构方法,可以得到 0 K 表格截面的能量网格。基于该网格将第 1 层积分离散成多个积分子区间,并使用高斯-勒让德求积求解各个积分子区间并最终求和。另外,由于整个积分区间是零到正无穷,在积分过程中, $\sigma_{s,0}$ 的自变量可能超出其定义域。为了处理这种情况,近似认为该情况下的截面是以 $1/v$ 变化。共振弹性散射核 $[P_n^T(E \rightarrow E')]$ 可以精确求解,如下:

$$P_n^T(E \rightarrow E') = \frac{\sigma_{sn}^T(E \rightarrow E')}{\sigma_{s,0}^T(E)} \quad (3)$$

式中, P_n^T 为勒让德系数。基于式(3),可以产生散射核插值表。

1.2 插值表的产生

在并群计算过程中涉及大量数值积分,在积分过程中需要利用 $P_n^T(E \rightarrow E')$ 以计算得到准确的多群散射截面以及散射矩阵。若 $P_n^T(E \rightarrow E')$ 都基于 1.1 节中的公式进行直接计算,则总的计算量将会非常大。因此,使用插值表是一种折中的方案,该方案可同时满足精度和效率的要求。更重要的是,对于不同的能群结构,可以重复利用插值表来产生多群截面及散射矩阵。

基于上述原因,提出了 1 种线性化算法以产生 1 个二维插值表。插值表中的第 1 个插值变量为入射能量,第 2 个插值变量为出射能量。理论上可以使用非常密集的入射能量网格,但是现实中该做法不可取。原因是:大量的入射能量点会增加内存负担和数据寻址的时间;能量转移核的形状随入射能量的变化比较缓慢。由图 1 可以看到,4.5、5.0、5.5、6.0 eV 下的 0 阶共振弹性散射核形状变化缓慢,这意味着可以使用几个能量点来表示能量转移核的变化趋势。因此,大量的入射能量插值点是没有必要的。

图 1 中,自散射点连线由上述 4 个能量转移

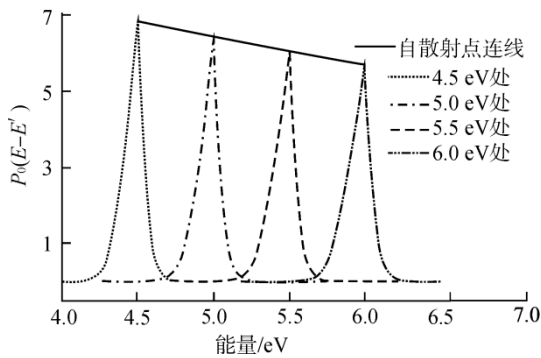


图1 多个能量的0阶能量转移核

Fig. 1 Energy Transfer Kernels of 0th Order for Multiple Energies

核的自散射点连接起来的。可以看出自散射点连线是一条光滑的线。因此，可以近似认为能量转移核的形状与自散射点的值高度相关，若自散射点可以被线性插值，那么能量转移核可使用 NJOY2016 中的出射概率插值方法进行插值。所提出的线性化算法原则是保证任意 2 个 0 阶自散射点[即 $P_0(E \rightarrow E)$]之间的插值所得值与直接计算值的相对误差小于 0.1%。通过该算法可以重构出插值表中的入射能量插值点，而在这些重构的入射能量插值点上会进行 1.1 节中所提及的共振弹性散射核计算。线性化方法见图 2。

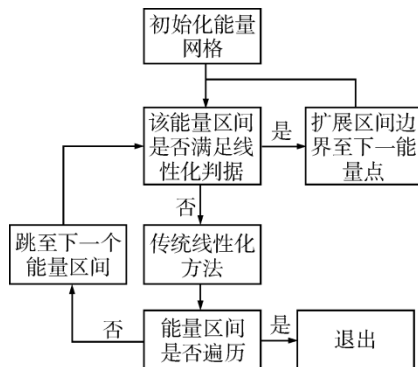


图2 改进的线性化算法流程图

Fig. 2 Flow Chart of Improved Linearization Algorithm

在每一个重构能量点下，利用传统的线性化算法在统一的次级能量网格下得到不同阶数的线性化共振弹性散射核。这不仅可以得到光滑的各阶共振弹性散射核，还可以在插值过程中一次性插值所有勒让德阶数下的共振弹性散射核。NECP-Atlas 是由西安交通大学开发的核数据处理程序，可以处理多种不同的评价核数据。NECP-Atlas 采用了自定义的反应道编号(ENDF-6 格式) 来储存和输出共振弹性散射核数据，即“MF6 MT300”。处理所得到的数据会输出到

PENDF 文件。根据不同的需求，可基于该文件产生不同的多群截面及散射矩阵。

1.3 慢化方程的求解

产生多群截面及散射矩阵是核数据处理中一个重要的功能。为了求得多群截面及散射矩阵，需要准确的权重注量。为了在共振区得到可靠的自屏权重注量，通常求解中子慢化方程，如下：

$$\sum_{i=1}^N \Sigma_{t,i}(E) \phi(E) = \sum_{i=1}^N \int_0^{\infty} P_i(E' \rightarrow E) \Sigma_{s,i}(E') \phi(E') dE' \quad (4)$$

式中， $\phi(E)$ 为入射能量中子注量率； i 为核素索引号； N 为总的核素类型数； $\Sigma_{t,i}(E)$ 为宏观总截面； $\Sigma_{s,i}(E)$ 为宏观弹性散射截面； $P_i(E' \rightarrow E)$ 为 0 阶能量转移核。 $\phi(E')$ 为出射能量中子注量率。在接下来的公式中，温度 T 的角标会被忽略。

求解问题为 ^1H 与指定核素混合的无限均匀问题，中子慢化方程从高能向低能逐点求解。通过堆叠每个核素的表格截面能量点，离散式(4)，即：

$$\sum_{i=1}^N \Sigma_{t,i}(E) \phi(E) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \int_{\Delta E_j} P_i(E_j \rightarrow E) \Sigma_{s,i}(E_j) \phi(E_j) dE_j \quad (5)$$

方程中所需要的截面可直接在 PENDF 中通过线性插值得到。同时，基于 1.2 节中所提及的出射概率插值方法以及插值表，能量转移核也可以由 PENDF 得到。因为在中子慢化方程中考虑到了中子上散射，所以有必要对中子慢化方程进行迭代求解。使用高斯赛德尔求解策略求解中子慢化方程。初值越接近真解，迭代次数越少。基于渐进散射核所求解的注量认为是接近真解的，采用可递推的超细群方法求解中子慢化方程以获得超细群注量。在多群归并计算中，通常使用的是连续能量注量而不是超细群注量。因此，近似认为超细群中点的点注量等于超细群的平均注量，如下：

$$\phi(E_{\text{mid}}) \approx \frac{\phi_g}{\Delta E_g} \quad (6)$$

式中， E_{mid} 为超细群 g 的中点能量； ϕ_g 为群注量率； ΔE_g 为能群能量间隔。

整个求解流程见图 3。

1.4 多群数据库的产生

通过传统的并群方法，NECP-Atlas 可以产生

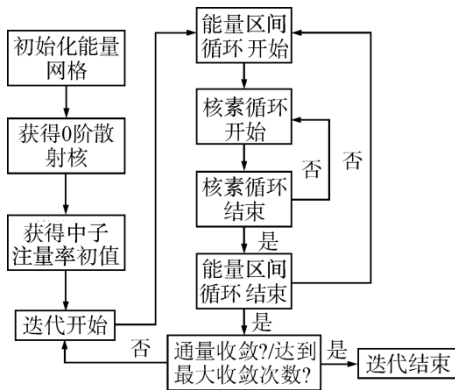


图3 中子慢化方程求解流程图
Fig. 3 Flow Chart of Solving Neutron Slowing down Equation

出多群常数。多群截面和转移矩阵的计算公式为：

$$\sigma_{x,g}^n = \frac{\int_{\Delta E_g} \sigma_x(E) \phi_n(E) dE}{\int_{\Delta E_g} \phi_n(E) dE} \quad (7)$$

$$\sigma_{sn}^{g \rightarrow g'} = \frac{\int_{\Delta E_g} \int_{\Delta E_{g'}} \sigma_{sn}(E \rightarrow E') \phi_n(E) dE' dE}{\int_{\Delta E_g} \phi_n(E) dE} \quad (8)$$

式中, $\sigma_{x,g}^n$ 为 x 反应道的第 g 群 n 阶群截面; $\sigma_{sn}^{g \rightarrow g'}$ 为从第 g 群至第 g' 的 n 阶散射矩阵; $\phi_n(E)$ 为 n 阶入射能量中子注量率; $\sigma_x(E)$ 为 x 反应道的微观截面; ΔE_g 为能群宽度。

式(8)中,若处理的是“MF6 MT300”数据,使用梯形积分以及共振弹性散射核插值表数据进行计算。其他多群常数可根据传统的处理方法获得,包含处理 ENDF 中的文档 3、文档 4、文档 5 和文档 6^[5]。

2 计算结果验证

在第 1 节中所描述的方法均已整合进 NECP-Atlas。为了研究更加精确的核数据处理方法,NECP-Atlas 整合了多种不同的功能处理模块。所有处理得到数据均基于 ENDF/B-VII.1。

2.1 共振弹性散射核计算验证

^{235}U 的共振弹性散射核计算结果与文献[3]的结果一致。6.0 eV 处的共振弹性散射核见图 4。所示结果为线性化后的结果。1000 K 时,6.0 eV 处 ^{235}U 、6.52 eV 处 ^{238}U 的前 6 阶共振弹性散射核见图 5、图 6。

2.2 插值表验证

利用 NECP-Atlas 制作了 ^{238}U 、 ^{239}Pu 和

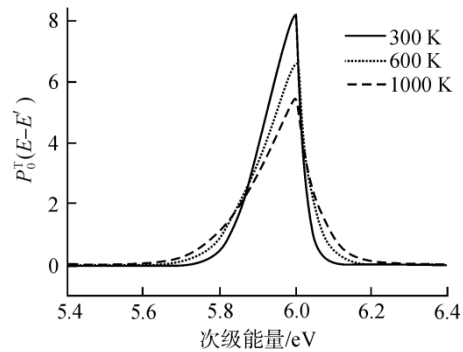


图4 不同温度下 6.0 eV 处 ^{235}U 的 0 阶共振弹性散射核
Fig. 4 RESK of ^{235}U at Various Temperatures for Neutrons of Energy 6.0 eV

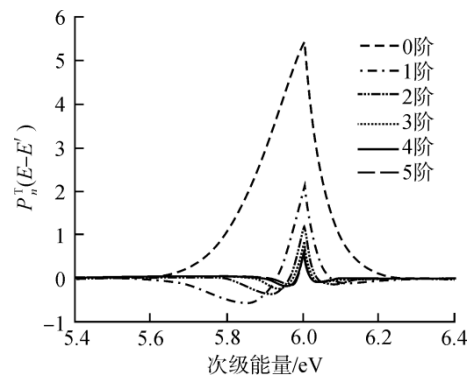


图5 6.5 eV 处 ^{235}U 的各阶共振弹性散射核
Fig. 5 Different Orders of RESK for ^{235}U for Neutrons of Energy 6.5 eV

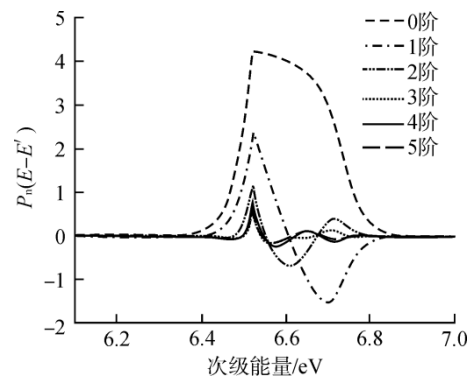


图6 6.52 eV 处 ^{238}U 的各阶共振弹性散射核
Fig. 6 Different Orders of RESK for ^{238}U for Neutrons of Energy 6.52 eV

^{242}Pu 在 900 K 下插值表并插值 0 阶共振弹性散射核。图 7 为 $10^{-5} \sim 100$ eV 处 ^{238}U 插值表的入射能量网格。可以看到,在共振峰附近,能量点会更加密集。从 $10^{-5} \sim 100$ eV,总共有 870 个点构成了插值表中的能量网格。在 20.87 eV 附近 (^{238}U 的第 2 个 s 波共振峰) 有 172 个点。入射能量网格根据共振峰的位置会被优化。900 K 下 6.52 eV 处

^{238}U 的插值与计算值最大误差为 0.5%，0.15 eV 处 ^{239}Pu 的插值与计算值最大误差为 0.08%，插值与计算值结果见图 8 和图 9。误差较大的位置所对应的散射概率点绝对值很小。

2.3 慢化方程求解器验证

设计了 2 个混合 ^{238}U 与 ^1H 的无限均匀系统，温度为 900K， ^{238}U 的背景截面分别为 10^{-22}cm^2

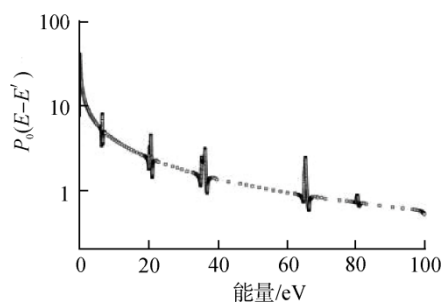


图 7 900 K 下 ^{238}U 的入射能量网格
Fig. 7 Incident Energy Grid for ^{238}U at 900 K

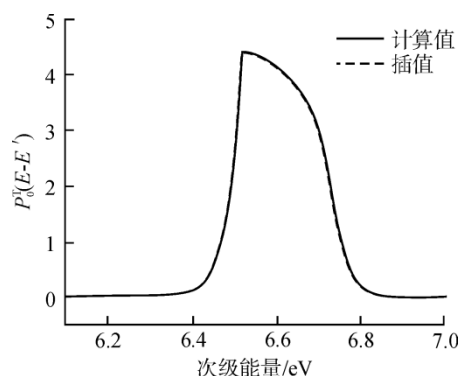


图 8 6.52 eV 处 ^{238}U 的 0 阶共振弹性散射核插值与计算值
Fig. 8 Interpolated and Calculated Values of RESK of 0th Order at 6.52 eV for ^{238}U

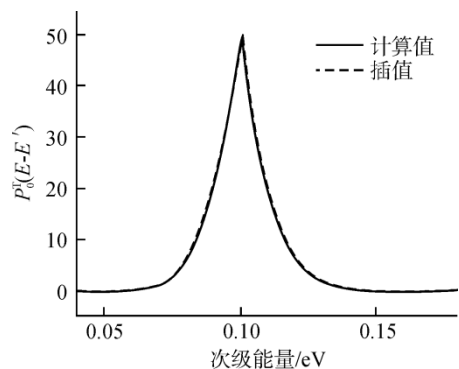


图 9 0.15 eV 处 ^{239}Pu 的 0 阶共振弹性散射核插值与计算值
Fig. 9 Interpolated and Calculated Values of RESK of 0th Order at 0.15 eV for ^{239}Pu

和 10^{-21}cm^2 。中子慢化方程分别基于渐进散射核与插值表得出的共振弹性散射核进行求解。结果表明，共振弹性散射核对中子注量率影响较大，并会显著提高吸收率。同时，在考虑到共振弹性散射核之后，吸收截面越小，吸收率会增大的更多。截面为 10^{-22}cm^2 时， ^{238}U 36.68 eV 共振峰附近的结果见图 10。整个计算过程需要 5.58 s，包含 1 次初始化和 2 次计算。对于同 1 个温度只需要进行 1 次初始化，需要 5.42 s，而计算部分耗时较少。计算平台为 Intel i7-7700 @ 3.60Ghz。

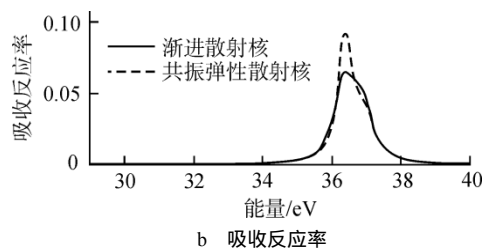
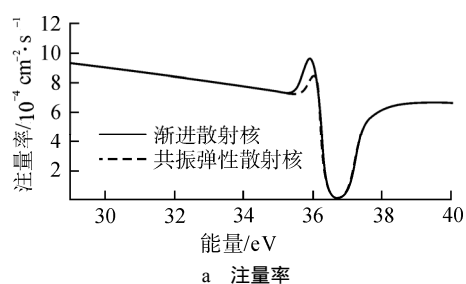


图 10 10^{-22}cm^2 背景截面下的中子注量率和吸收率
Fig. 10 Neutron Flux and Absorption Rate at Background Cross Section 10^{-22}cm^2

2.4 多普勒基准题计算验证

基于 NECP-Atlas 产生的 EPRI-CPM-69 群 WIMS-D 格式多群数据库，使用 DRAGON5 程序计算 Mosteller 基准题^[6-7]。基于共振弹性散射核与渐进散射核产生了 2 套数据库。如表 1~表 3 所示，特征值以及多普勒温度系数会由于吸收率的增加而发生较大变化。基于共振弹性散射核，特征值以及多普勒温度系数会由于吸收率的增加而发生较大变化，多普勒温度系数会变负约 8%~10%；同时，在热态满功率情况下，特征值会变负 0.1%~0.2%。该计算结果与文献^[4-8]结果符合良好。

3 结论

本文首先使用 1 种半解析方法求解共振弹性散射核公式，提出了一种结合共振弹性散射核计算的线性化算法来产生二维插值表，使用该插值

表 1 Mosteller UOX 燃料基准题特征值及燃料温度系数

Table 1 Eigenvalues and Fuel Temperature Coefficients for Mosteller UOX Fuel Benchmark

UO ₂ 质量分数/ %	渐进散射核			共振弹性散射核		
	热态零功率	热态满功率	燃料温度系数/ $10^{-5} K^{-1}$	热态零功率	热态满功率	燃料温度系数/ $10^{-5} K^{-1}$
0.71	0.66656	0.66076	-4.39	0.66631	0.65991	-4.85
1.60	0.96140	0.95291	-3.09	0.96105	0.95169	-3.41
2.40	1.09918	1.08953	-2.69	1.09879	1.08816	-2.96
3.10	1.17679	1.16653	-2.49	1.17639	1.16509	-2.75
3.90	1.23902	1.22831	-2.35	1.23861	1.22683	-2.58
4.50	1.27416	1.26321	-2.27	1.27376	1.26171	-2.50
5.00	1.29831	1.28719	-2.22	1.29790	1.28569	-2.44

表 2 Mosteller 反应堆回收燃料基准题特征值及燃料温度系数

Table 2 Eigenvalues and Fuel Temperature Coefficients for Mosteller Reactor-Recycle MOX Fuel Benchmark

PuO ₂ 质量分数/ %	渐进散射核			共振弹性散射核		
	热态零功率	热态满功率	燃料温度系数/ $10^{-5} K^{-1}$	热态零功率	热态满功率	燃料温度系数/ $10^{-5} K^{-1}$
1.00	0.94611	0.93574	-3.90	0.94554	0.93420	-4.28
2.00	1.02198	1.01053	-3.70	1.02130	1.00883	-4.03
4.00	1.07645	1.06435	-3.52	1.07582	1.06268	-3.83
6.00	1.10585	1.09343	-3.42	1.10517	1.09177	-3.70
8.00	1.13016	1.11766	-3.30	1.12945	1.11600	-3.56

表 3 Mosteller 武器级燃料基准题特征值及燃料温度系数

Table 3 Eigenvalues and Fuel Temperature Coefficients for Mosteller Weapon-Grade MOX Fuel Benchmark

PuO ₂ 质量分数/ %	渐进散射核			共振弹性散射核		
	热态零功率	热态满功率	燃料温度系数/ $10^{-5} K^{-1}$	热态零功率	热态满功率	燃料温度系数/ $10^{-5} K^{-1}$
1.00	1.09023	1.07993	-2.92	1.08968	1.07837	-3.21
2.00	1.18164	1.16969	-2.88	1.18096	1.16791	-3.15
4.00	1.25102	1.23801	-2.80	1.25024	1.23611	-3.05
6.00	1.28781	1.27453	-2.70	1.28701	1.27264	-2.92

表可以快速准确地获得共振弹性散射核, 结果证明插值表的入射能量网格可以被优化, 并且插值所得结果与直接计算所得结果符合良好。其次, 开发了新的中子慢化方程求解器以考虑中子上散射效应, 利用该求解器可以获得准确的权重注量率从而最终获得准确的多群截面及散射矩阵, 可以避免由渐进散射核所引起的误差。上述所提到的方法均已整合进核数据处理程序 NECP-Atlas。数值结果表明基于共振弹性散射核所产生的多群截面以及多群矩阵会对 Mosteller 多普勒基准题的计算结果产生较大的影响。

参考文献:

- [1] Ouisloumen M, Sanchez R. A model for neutron scattering off heavy isotopes that accounts for thermal agitation effects[J]. Nuclear Science and Engineering, 1991, 107(3): 189-200.
- [2] Lee D, Smith K, Rhodes J. The impact of 238U resonance elastic scattering approximations on thermal reactor Doppler reactivity[C]. International Conference on Reactor Physics, Nuclear Power: A sustainable Resource, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.

- [3] Ghayeb S Z, Ouisloumen M, Ougouag A M, et al. Deterministic modeling of higher angular moments of resonant neutron scattering[J]. Annals of Nuclear Energy, 2011, 38: 2291-2297.
- [4] Ouisloumen M, Ougouag A M, Ghayeb S Z. Anisotropic Elastic Resonance Scattering Model for the Neutron Transport Equation[J]. Nuclear Science and Engineering, 2015, 179 (2) : 59-84.
- [5] Trkov A, Herman M, Brown D A. ENDF-6 Formats, Manual Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files ENDF/B-VI, ENDF/B-VII and ENDF/B-VIII: BNL-203218-2018-INRE [R]. National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, 2018.
- [6] Mosteller R D. Computational benchmark for the Doppler reactivity defect: LA-UR-06-2968 [R]., Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2006.
- [7] Marleau G, Hébert A, Roy R A. User guide for dragon version 5: Technical Report IGE 335 [R]., École Polytechnique de Montréal, 2014.
- [8] Ghayeb S Z, Ougouag A M, Ouisloumen M. Multi-group formulation of the temperature-dependent resonance scattering model and its impact on reactor core parameters[J]. Annals of Nuclear Energy, 2014, 63(4): 751-762.

(责任编辑: 王中强)