

# NECP 软件包中 NECL 子群数据与 任意几何共振模块研制

贺 雷, 吴宏春, 曹良志\*, 张宏博

(西安交通大学 核科学与技术学院, 陕西 西安 710049)

**摘要:** 本文基于子群方法对 NECP 软件包开发了多群数据库模块和子群共振计算模块。采用本实验室开发的二维任意几何输运程序矩阵 MOC 作为子群共振模块的求解器。使用 MCNP 与子群程序计算一系列的共振基准题, 并比较了两者所计算的无限增殖因数  $k_{inf}$  和  $^{235}\text{U}$  与  $^{238}\text{U}$  的微观截面。结果表明, 子群程序对任意几何有良好的适应性和精度, 可适用于二维任意几何的共振计算。

**关键词:** 共振计算; 任意几何; 子群方法

中图分类号: TL324

文献标志码: A

文章编号: 1000-6931(2013)S0-0355-05

doi: 10. 7538/yzk. 2013. 47. S0. 0355

## Design of NECL Subgroup Data Module and Arbitrary Geometry Resonance Calculation Code in Neutronics Evaluation Comprehensive Package

HE Lei, WU Hong-chun, CAO Liang-zhi\*, ZHANG Hong-bo

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

**Abstract:** A multi-group data module and a subgroup resonance calculation code were designed for Neutronics Evaluation Comprehensive Package based on subgroup method in this paper. A self-advanced 2D transport module called matrix MOC was employed as solver in subgroup resonance calculation module. Finally, a series of resonance benchmarks were calculated by MCNP and subgroup code respectively, and the  $k_{inf}$  and macro cross section of  $^{235}\text{U}$  and  $^{238}\text{U}$  by MCNP and subgroup code were compared. The results show that the subgroup code has enough accuracy and adaptability for arbitrary geometries and it's suitable for 2D arbitrary resonance calculation.

**Key words:** resonance calculation; arbitrary geometry; subgroup method

共振计算是组件参数计算的基础, 连接着多群数据库和多群输运计算。共振计算的主要任务是根据多群数据库提供的截面信息来计算具体问题的共振自屏截面, 其计算精度直接影

响后续的多群中子输运方程的计算精度。新型的实验反应堆大多使用新型的堆内布置及燃料循环设计, 这导致在反应堆堆内的中子不均匀性增强。共振方法对燃料的几何、成分、分布情

收稿日期: 2013-01-25; 修回日期: 2013-03-26

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(91126005); 863 计划资助项目(2013AA051402)

作者简介: 贺 雷(1987—), 男, 陕西西安人, 博士研究生, 从事反应堆物理研究

\* 通信作者: 曹良志, E-mail: caolz@mail.xjtu.edu.cn

况均有影响,复杂的几何、多样的核素成分、多模块的分布等导致传统的共振方法无法满足要求。因此,开展适应复杂几何、多共振核素成分、多模块分布的共振方法十分必要。

传统的共振自屏计算方法包括基于等价理论的有理近似求解等效稀释截面法及利用超细群数据库进行超细群慢化方程求解的超细群法<sup>[1-2]</sup>,这些方法由于存在对碰撞概率求解的限制,仅能针对有限的若干种简单几何进行计算。小波共振方法通过小波函数或小波尺度函数对共振能段连续中子能谱展开精确的中子能谱计算,可实现对任意几何及多共振区问题的计算,但由于小波展开计算的系数方程数目巨大,导致效率相对低<sup>[3]</sup>。子群方法基于多群数据库的共振积分,得到共振核素截面随能量的概率分布,使用较少的群数即可较精确的描述共振现象。通过输运方程作为求解器,分别进行子群输运计算和多群输运计算,可实现任意几何、多共振核素、多共振区的共振自屏计算<sup>[4-5]</sup>。本文基于SHEM361群群结构研发适用于NECP程序格式的多群数据库,通过数据库中的共振插值表求解子群参数和子群概率,耦合本实验室开发的二维任意几何输运程序MMOC作为输运求解器求解子群输运方程和多群输运方程,以得到宏观少群截面、有效增殖因数、通量等。

## 1 理论模型

### 1.1 数据库

由于子群方法对共振能群内中子分布进行了概率假设,使其在处理高能量段密集共振峰情况的计算中具有非常高的精度。在低能共振群,由于共振峰分布稀疏,甚至存在孤立的共振峰,导致在处理多核素共振问题时,由于共振核素共振峰间的相互影响,使子群方法精度下降,因此,传统的能群结构不能胜任子群方法,应提高共振区下界的能量数值,避免子群方法对孤立峰的计算。针对此问题,本文采用SHEM361群的能群结构,此能群结构的共振中子能量区和热中子能量区的分界线为22.5 eV,基本避免了孤立峰使用子群方法的情况,而是使用较精细的能群数目来减小自屏效应。

本工作使用NJOY程序,在WIMS格式的基础上修改和扩展,完成了自有数据库格式的设计,同时研制了辅助和维护程序。此程序可将NJOY产生的多群数据转变成适应于NECP程序的数据库,同时可对数据库进行维护,包括添加、修改、删除数据等功能。适用于子群的多群数据库制作流程示于图1。

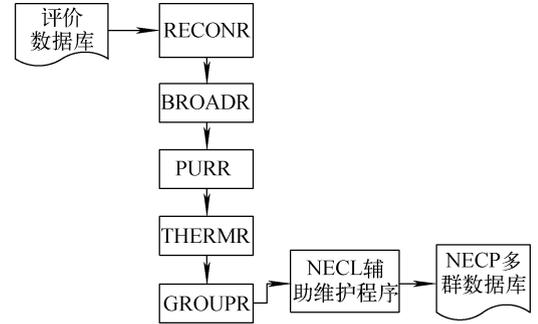


图1 多群数据库制作流程

Fig. 1 Flow of multi-group library produce

针对<sup>235</sup>U与<sup>238</sup>U间的共振干涉,在数据库产生时采取了能谱耦合修正的方法,有效降低共振干涉对结果造成的影响。

### 1.2 子群共振计算

共振核素的核反应截面随中子能量的变化十分剧烈,某些核素的波动范围可跨4个数量级。影响共振计算的因素包括燃料的不均匀布置、温度多普勒效应、几何的不规则性、弹性散射共振及多个共振核素间的相互干涉等。这些因素会造成传统共振方法在某些方面不能适应而导致误差偏大,因此,研究新型共振方法十分必要。子群方法和其他方法相比,具有明显的优势(表1)。

表1 共振方法比较

Table 1 Comparison of resonance calculation methods

| 方法        | 几何适应性  | 核心计算    | 效率 |
|-----------|--------|---------|----|
| 等价理论      | 简单规则几何 | 等效稀释截面  | 高  |
| 超细群方法     | 多种规则几何 | 超细群中子能谱 | 高  |
| 连续能量和小波方法 | 任意几何   | 连续中子能谱  | 低  |
| 子群方法      | 任意几何   | 子群中子能谱  | 高  |

子群共振自屏计算与传统方法本质的区别为:子群方法不以中子能量的变化作为截面划

分的依据,而针对剧烈波动震荡的截面自身划分。图 2 示出核素的微观截面随能量变化的曲线。传统的共振计算方法是对横坐标即能量变量进行划分得到多群截面,而子群方法是对纵坐标即截面变量进行划分得到子群截面。

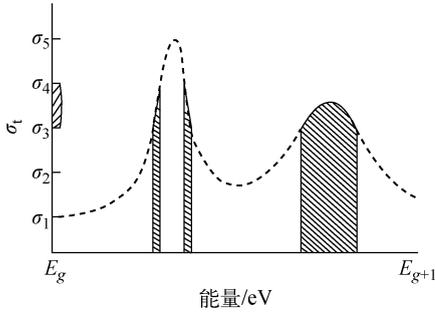


图 2 子群方法中子群截面划分方式

Fig. 2 Subgroup cross section dividing mode in subgroup method

定义子群截面为<sup>[6]</sup>:

$$\sigma_{t3} = \frac{\int_{\Delta E_3} \sigma_t(E)\phi(E)dE}{\int_{\Delta E_3} \phi(E)dE} \quad (1)$$

其中:σ<sub>t3</sub>为第 3 子群总截面;σ<sub>t</sub>(E)为多群总截面;φ(E)为随能量变化的中子通量密度。

将子群截面按能群给出为:

$$\sigma_{tg} = \frac{\int_{E_g} \sigma_t(E)\phi(E)dE}{\int_{E_g} \phi(E)dE} = \frac{\sum_{i=1,4} \int_{\Delta E_i} \sigma_t(E)\phi(E)dE}{\sum_{i=1,4} \int_{\Delta E_i} \phi(E)dE} = \frac{\sum_{i=1,4} \int_{\Delta E_i} \sigma_t(E)\phi(E)dE}{\sum_{i=1,4} \phi_i} = \frac{\sum_{i=1,4} \sigma_{ti}\phi_i}{\sum_{i=1,4} \phi_i} \quad (2)$$

其中:σ<sub>tg</sub>为能群 g 的多群总截面;σ<sub>ti</sub>为第 i 子群的多群总截面;φ<sub>i</sub>为第 i 子群的子群中子通量。

式(2)表示多群总截面和子群总截面及子群通量密度之间的关系。将多群截面的求解转换为子群截面及子群通量密度的求解。

将式(2)用等价理论的形式表达并经格式转换,可得到子群截面的求解方程为:

$$\sigma_{tg} = \left( \sigma_{t,1} \frac{p_1}{(\sigma_{t,1} + \sigma_{bg})} + \sigma_{t,2} \frac{p_2}{(\sigma_{t,2} + \sigma_{bg})} + \dots + \sigma_{t,N} \frac{p_N}{(\sigma_{t,N} + \sigma_{bg})} \right) / \left( \frac{p_1}{(\sigma_{t,1} + \sigma_{bg})} + \frac{p_2}{(\sigma_{t,2} + \sigma_{bg})} + \dots + \frac{p_N}{(\sigma_{t,N} + \sigma_{bg})} \right) \quad (3)$$

其中:σ<sub>t,N</sub>为第 N 子群的子群总截面;p<sub>N</sub>为第 N 子群的子群概率;σ<sub>bg</sub>为第 g 群背景截面。

由式(3)可知,使用数据库中多群总截面和背景截面的关系,即可求出共振区共振能群的子群截面。由式(2)可知,有效共振自屏截面可用子群通量密度对子群截面权重得到,因此,在已知子群截面的情况下,求出子群通量密度,即可得到多群有效共振自屏截面。

子群输运方程在形式上与多群中子输运方程是一致的,因此,子群输运方程可由成熟的多群输运计算程序求解。本文使用本实验室自主研发的基于二维任意几何特征线方法的程序矩阵 MOC(MMOC)作为求解器求解通量密度。

在 MMOC 中,子群形式的输运方程为:

$$\Omega \cdot \nabla \phi_{g,i}(r, \Omega) + \Sigma_{t,g,i}(r) \phi_{g,i}(r, \Omega) = Q_{s,g,i}(r, \Omega) + Q_{f,g,i}(r, \Omega) \quad (4)$$

其中:φ<sub>g,i</sub>(r,Ω)为能群 g 中第 i 子群平均通量密度;Σ<sub>x,g,i</sub>(r)为能群 g 第 i 子群反应 x 的宏观子群截面,x 可为总截面 t、吸收 a、散射 s、裂变 f 等;Q<sub>s,g,i</sub>(r,Ω)为能群 g 第 i 子群的散射源项;Q<sub>f,g,i</sub>(r,Ω)为能群 g 第 i 子群的裂变源项。

通过求解该输运方程得到子群中子通量,再根据式(2)即可得到多群有效共振自屏截面。

## 2 数值验证

为对共振模块验证,选择了一维压水堆(PWR)栅元问题、超临界水堆(SCWR)复杂问题对各种共振工况进行验证。

### 2.1 一维 PWR 栅元问题

在一维 PWR 栅元问题中,选取 UO<sub>2</sub> (5% 富集度)作为燃料,轻水作为慢化剂,Zr 为包壳,对程序进行数值校验。几何参数示于图 3。

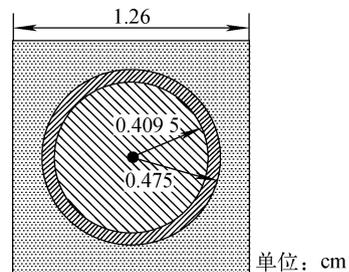


图 3 PWR 栅元几何参数

Fig. 3 PWR cell geometry parameters

在子群输运方程求解中,选取全对称角度离散求积组,阶数为8,外边界条件为白边界。MCNP计算结果作为基准解,每代投入20 000个粒子,共计算600代,前50代不参加结果统计。子群程序的计算结果和MCNP基准解的无限增殖因数 $k_{inf}$ 比较列于表2。

由表2可看出,栅元计算中,子群程序计算的与MCNP基准解的 $k_{inf}$ 相对偏差小于0.2%,达到了精度要求。另外,通过计算燃料区的子群中子通量密度能谱,可得到共振核素各共振能群的平均截面。 $^{235}\text{U}$ 与 $^{238}\text{U}$ 共振能群微观截

面计算结果与MCNP的模拟计算结果比较示于图4。由图4可见,子群共振程序与MCNP计算得到的 $^{235}\text{U}$ 与 $^{238}\text{U}$ 共振能区的微观截面较为一致。

表2 栅元计算中两种方法计算的 $k_{inf}$

Table 2 Comparison of  $k_{inf}$  for two methods in cell calculation

| 程序   | $k_{inf}$ |
|------|-----------|
| MCNP | 1.485 67  |
| 子群   | 1.482 75  |

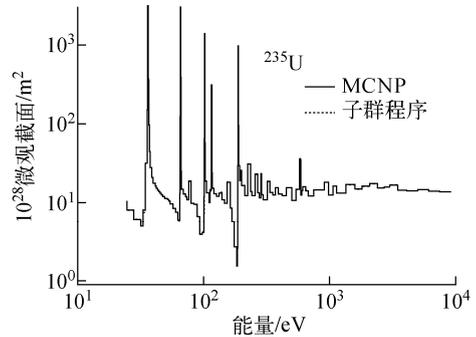
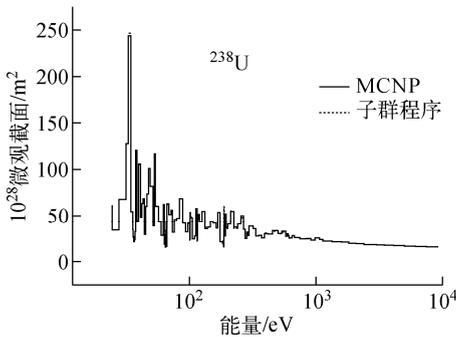


图4  $^{238}\text{U}$ 和 $^{235}\text{U}$ 微观截面

Fig. 4 Micro cross sections of  $^{238}\text{U}$  and  $^{235}\text{U}$

## 2.2 SCWR 复杂几何

复杂几何问题由超临界水堆组件修改而来<sup>[7]</sup>,如图5所示。超临界水堆温度和压力均很高,轻水作为慢化剂密度很低,为满足慢化能力,中间设有很大尺寸的方形水洞。这种设计导致超临界水堆组件具有很强的非均匀性,且其几何较复杂,用传统的共振计算方法

难以直接计算。本文采用子群共振程序对该问题进行计算。

MCNP计算结果作为基准解,每代投入20 000个粒子,共计算900代,前50代不参加结果统计。子群程序的计算结果和MCNP基准解的 $k_{inf}$ 比较列于表3。

表3 SCWR 组件 $k_{inf}$ 计算结果

Table 3  $k_{inf}$  comparison of SCWR assembly

| 程序   | $k_{inf}$ |
|------|-----------|
| MCNP | 1.401 11  |
| 子群   | 1.402 50  |

由表3可看出,对超临界水堆的复杂几何组件,子群程序计算的与MCNP基准解的 $k_{inf}$ 相对偏差小于0.1%,达到了计算精度的要求。因此,该子群程序适用于复杂几何问题的共振计算,对任意几何具有良好的适应性。

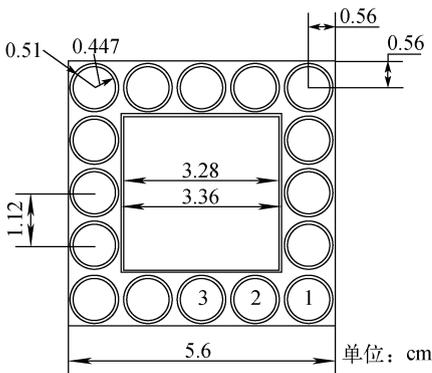


图5 SCWR 组件几何

Fig. 5 SCWR assembly geometry

### 3 结论

本文开发了适用于子群共振计算方法的多群数据库。利用核评价数据库加工软件 NJOY 及自行开发的辅助程序,完成了不同温度下快群、热群多群截面的加工及共振能群总截面、分截面关于背景截面插值表的制作。

基于子群理论和多群中子输运理论,导出了子群截面与子群概率的求解方法。建立了多群中子输运方程形式一致的子群中子输运方程。同时,耦合了矩阵 MOC 作为求解器,可求解二维任意几何共振问题。

使用程序对压水堆栅元问题、SCWR 复杂组件问题进行了数值验证,以 MCNP 作为基准解对  $k_{\text{inf}}$  和微观截面的计算结果进行比较。其中,  $k_{\text{inf}}$  的相对偏差在 0.2% 以内,达到了计算精度的要求。

#### 参考文献:

- [1] HÉBERT A, MARLEAU G. Generalization of the Stamm'ler method for the self-shielding of resonant isotopes in arbitrary geometries[J]. Nuclear Science and Engineering, 1991, 108(3): 230-239.
- [2] TSUCHIHASHI K, TAKANO H, HORIKAMI K. SRAC: Jaeri thermal reactor standard code

system for reactor design and analysis[R]. [S. l.]: [s. n.], 1983.

- [3] TELLIER R, FOURNIER D, RUGGIERI J M. A wavelet-based finite element method for the self-shielding issue in neutron transport[J]. Nuclear Science and Engineering, 2009, 163(1): 34-55.
- [4] HÉBERT A. Development of the subgroup projection method for resonance self-shielding calculation [J]. Nuclear Science and Engineering, 2009, 162(1): 56-75.
- [5] USHIO T, TAKEDA T. Application of multi-band method to pin cell calculation[J]. Journal of Nuclear Science and Technology, 1993, 30(11): 1 167-1 174.
- [6] LIU Q, WU H, CAO L. Self-shielding and criticality calculation in spent fuel dissolving vessel [C]. Xi'an, China: [s. n.], 2010.
- [7] 杨伟焱,吴宏春,曹良志,等. 小波尺度函数展开在连续能量中子输运方程计算中的应用[J]. 核动力工程,2009,30(5):18-22.  
YANG Weiyan, WU Hongchun, CAO Liangzhi, et al. Application of wavelets scaling function expansion to continuous-energy neutron transport calculation [J]. Nuclear Power Engineering, 2009, 30(5):18-22(in Chinese).