



·蒙特卡罗方法及其应用·

## 基于 RMC 的微观截面参数化\*

冯致远, 李凯文, 骆浩, 王侃

(清华大学 工程物理系, 北京 100084)

**摘 要:** 为了进行堆芯计算, 需要通过组件计算提前构建少群截面参数库。传统确定论的组件截面参数化方法针对宏观截面进行截面参数化, 但这种方式不仅需要考虑到多种物理状态参数, 而且需要考虑到历史效应对截面的影响。提出了基于核素微观截面的蒙特卡罗程序参数化方法, 该方法可以消除燃耗历史的影响, 且考虑的物理状态仅为燃耗深度以及材料温度。利用蒙特卡罗程序产生组件截面参数库耦合堆芯程序进行堆芯计算, 首先用蒙特卡罗程序同时统计对应状态点下的核素密度以及核素少群微观截面, 再利用核素微观截面进而获得宏观截面进行后续堆芯计算。为了验证方法正确性, 构造了一个自定义的压水堆模型, 计算结果与连续能量蒙特卡罗计算结果符合良好。

**关键词:** 截面参数化; RMC; 少群微观截面; 燃耗深度; 有效增殖因子

**中图分类号:** TL32 **文献标志码:** A **doi:** 10.11884/HPLPB202234.210309

## Micro cross-section parameterization based on RMC code

Feng Zhiyuan, Li Kaiwen, Luo Hao, Wang Kan

(Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

**Abstract:** To perform realistic core calculations, few-group neutron cross-sections library by functions of burn-up and thermal hydraulics parameters should be prepared in advance. Traditional deterministic parameterization process is based on the macro cross-section. However, this method should consider the historical effect of some physical states, which increases the number of calculation branches. Thus, this paper proposes a new parameterization process based on the micro cross-section of nuclide. This method effectively eliminates the historical impact. Therefore, only burn-up and material temperature need to be considered. The calculation process is performed by RMC code. Firstly, all of material nuclides micro cross-section and nuclides density is calculated. Then, macro cross-section is obtained by the micro cross-section lib. To test the method accuracy, a self-design pressurized water reactor model is built. The test results agree well with the reference results calculated by RMC full core calculation.

**Key words:** cross-section parameterization; RMC; few-group micro cross-section; burn-up; effective multiplication factor

根据对 neutron 输运过程的不同求解方式, 反应堆物理分析方法可以分为传统确定论方法以及蒙特卡罗方法<sup>[1]</sup>。然而, 由于输运方程的复杂性, 确定论方法在求解过程会引入一系列简化和假设, 而这些假设对于不同堆型, 不同能谱有不同的适用性<sup>[2-3]</sup>。同时, 新型反应堆的复杂几何和能谱结构给确定论程序求解带来更大挑战。而蒙特卡罗方法可以精准模拟 neutron 行为, 不需要简化处理, 更具有普适性。因此, 目前一些蒙特卡罗程序已经开发了群常数产生功能以耦合下游堆芯程序, 包括 Serpent<sup>[4]</sup>, OpenMC<sup>[5]</sup>, McCard<sup>[6]</sup> 以及 MVP<sup>[7]</sup>。其中, Serpent 采用全反射组件模型产生群常数<sup>[4]</sup>, 并提出了 SPH 因子的计算方法<sup>[8]</sup>。但传统的截面参数化方法基于宏观截面进行, 这种方式需要考虑到材料相关的物理参数, 且考虑到燃耗历史效应, 需要考虑到硼浓度历史, 慢化剂温度历史等影响因素。因此截面参数库的构建需要计算大量的再启动计算以及辅线计算, 从而显著增加了蒙特卡罗组件程序的计算量<sup>[4]</sup>。本文针对这种情况, 提出了一种基于微观核素多群截面构建截面参数库的截面参数化流程。该流程可以将材料相关的物理因素以及燃耗历史效应体现在微观核素密度当中。因此, 蒙特卡罗组件计算的物理因素只需要考虑到材料温度以及燃耗深度, 分支计算维度可以显著降低。

\* 收稿日期: 2021-07-22; 修订日期: 2021-09-06

基金项目: 国家自然科学基金项目(11775127); 科技部重点研发计划(2020YFB1901700)

联系方式: 冯致远, fengzy17@mails.tsinghua.edu.cn。

## 1 理论模型

截面参数化方法的基础是群常数产生,与确定论组件程序不同,基于蒙特卡洛方法产生群常数依据的是统计方法。对于少群截面采用径迹长度法,对于散射矩阵则采用碰撞概率法统计。

### 1.1 群常数产生方法

实际运行反应堆建模是极其复杂的,为了提高堆芯分析的计算效率,需要开展均匀化计算。与三维全堆非均匀化的高保真计算相比,应用均匀化少群常数进行堆芯计算分析不可避免会损失信息,从而导致计算精度的下降。所以均匀化计算需要保证一些能体现反应堆特性的重要物理量的守恒,经典反应堆物理教材中通常选取反应率守恒、均匀化界面流守恒以及系统特征值守恒三个守恒条件

$$\int_{V_i} \sum_{x,g} \phi_g(r) dV = \int_{V_i} \sum_{x,g} \bar{\phi}_g(r) dV \quad x = a, f, s, \dots, \quad g = 1, 2, \dots, G \quad (1)$$

$$\int_{S_p} J_g^u(r) \cdot dS = - \int_{S_p} \bar{D}_g(r) \cdot \frac{\partial \bar{\phi}_g(r)}{\partial u} dS \quad (2)$$

$$- \sum_{p=1}^P \int_{S_p} \bar{D}_g(r) \cdot \nabla \bar{\phi}_g(r) \cdot dS + \int_{V_i} \sum_{t,g} \bar{\phi}_g(r) = \sum_{g=1}^G \left( \int_{V_i} \sum_{s,g' \rightarrow g} \phi_{g'}(r) dV + \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \int_{V_i} V \sum_{f,g'} \bar{\phi}_{g'}(r) dV \right) \quad (3)$$

式中:  $\phi$  为通量;  $\sum$  为反应截面; 积分式对均匀化区域进行积分;  $i$  指均匀化区域编号;  $V_i$  表示均匀化区域;  $S_p$  表示均匀化区域的某个面;  $x$  指反应类型,  $a, f, s, t$  分别表示吸收、裂变、散射、总反应等反应类型;  $G$  为能群数目;  $u$  指面  $p$  上中子流方向;  $P$  为面的数目;  $g'$  为入射能群编号,  $g$  为出射能群编号;  $J$  表示中子流;  $D$  为扩散系数;  $\chi$  表示裂变谱;  $k_{\text{eff}}$  表示有效增殖因子。

少群反应率和少群通量可以分别用体积通量权重的方法和径迹长度法统计。因此群常数截面可以表示为

$$\sum_{g,j} = \frac{\sum_{m=1}^N \left( WTL_{g,V_i}^m \cdot \left( \sum_{k=1}^K N_{k,i} \cdot \sigma_{k,j}(E) \right)_{V_i} \right)}{\sum_{m=1}^N WTL_{g,V_i}^m} \quad (4)$$

式中:  $WTL$  表示粒子权重乘径迹长度,  $\sigma$  表示微观截面,  $j$  为截面类型,  $E$  为中子能量,  $m$  为中子序号,  $k$  表示核素序号,  $K$  表示核素种类,  $N$  表示中子总数。同理,可以得到均匀化区域的微观截面群常数截面为

$$\sigma_{k,g,j} = \frac{\sum_{m=1}^N \left( WTL_{g,V_i}^m \cdot (N_{k,i} \cdot \sigma_{k,j}(E))_{V_i} \right)}{N_k \sum_{m=1}^N WTL_{g,V_i}^m} \quad (5)$$

式中:  $N_{k,i}$  为  $i$  区域的某种核素的核素密度,  $N_k$  为均匀化区域的核素密度。多群方法需要提供群间转移截面,即需要计算散射矩阵,其定义为

$$\sum_{s,g' \rightarrow g} = \frac{\int_{\Delta E'} \int_{\Delta E} \int_V \phi(r, E') \cdot \sum_s (r, E' \rightarrow E) dV dE dE'}{\int_{\Delta E'} \int_V \phi(r, E') dE' dV} \quad (6)$$

式中:  $\Delta E'$ ,  $\Delta E$  分别表示入射中子能群  $g'$  和出射中子能群  $g$  的能量宽度。同理,可以得到微观截面的散射矩阵统计公式为

$$\sigma_{k,s,g' \rightarrow g} = \frac{\int_{\Delta E'} \int_{\Delta E} \int_V \phi(r, E') \cdot \sigma_{k,s}(r, E' \rightarrow E) N_{k,i} dV dE dE'}{N_k \int_{\Delta E'} \int_V \phi(r, E') dE' dV} \quad (7)$$

### 1.2 参数化流程设计

截面参数化的一个重要部分就是控制计算流程,实现不同物理状态点下的再启动以及辅线计算。该流程控制已经通过外部的 Python 软件包实现。通过读取给定格式的 Python 程序输入文件,产生一系列不同物理状态点下

的 RMC 输入文件。这些输入文件会分别放置在对应的再启动或辅线文件夹内,方便文件管理。所有状态点下的 RMC 输入文件会自动计算,并生成对应的截面文件。具体的流程设计如图 1 所示。

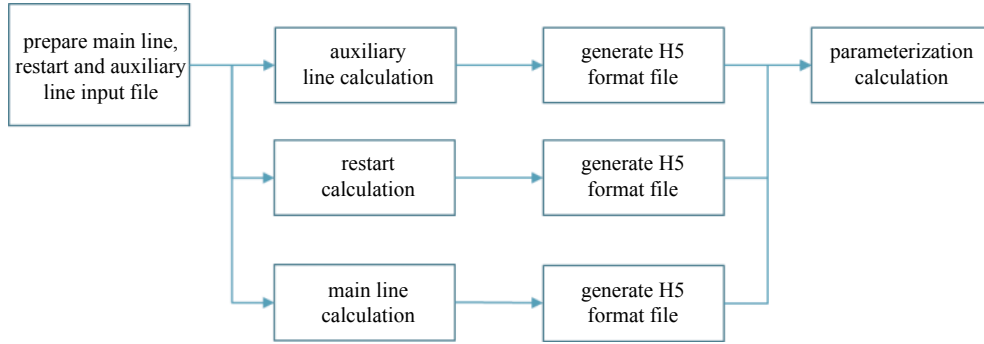


Fig. 1 Multi-physical conditions calculation process

图 1 Python 计算流程图

目前考虑的物理状态包括 2 个: 燃耗和材料温度, 具体材料由用户在 python 的输入卡中指定。

## 2 计算结果与分析

构建了一个自定义的随机介质压水堆模型, 该模型为  $10 \times 10$  的小堆, 该堆芯组件为  $17 \times 17$  结构, 264 根燃料棒, 24 根冷却剂通道, 1 根导向管。为了增加堆芯几何结构的复杂性, 堆芯考虑了两种富集度的燃料组件。且两种富集度组件均有可燃毒物组件。燃料棒内填充有弥散 TRISO 颗粒。高富集度燃料的 TRISO 颗粒内 U5 富集度为 16%, 低富集度为 8%。毒物棒材料为硼玻璃可燃毒物, 毒物棒结构如图 2 所示。

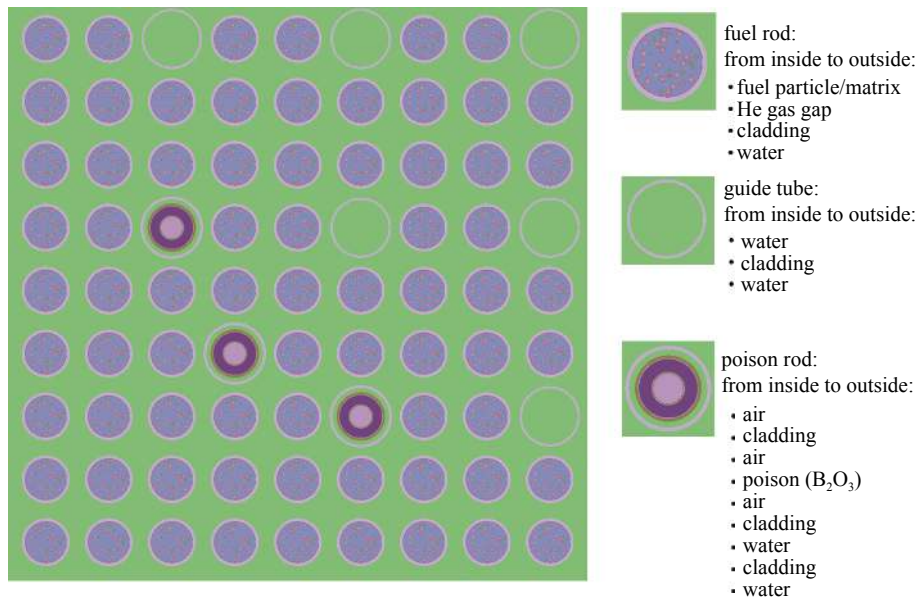


Fig. 2 Burnable poison assembly geometry

图 2 可燃毒物组件

验证工作采用 RMC 组件程序-RMC 多群程序耦合的方式进行堆芯两步法计算, 并将两步法的计算结果与 RMC 连续能量计算结果进行对比。多群计算的截面数据通过核素微观截面处理获得。

利用 RMC 的画图功能, 堆芯几何结构如图 3 所示。

实际堆芯计算需要利用不同温度点的截面构成一个参数库, 再利用热工程序算出温度分布, 基于温度场和截面库进行插值计算, 获取温度场对应的实际截面。验证工作假定堆芯实际平均温度为 550 K, 该温度由热工程序计算反馈得

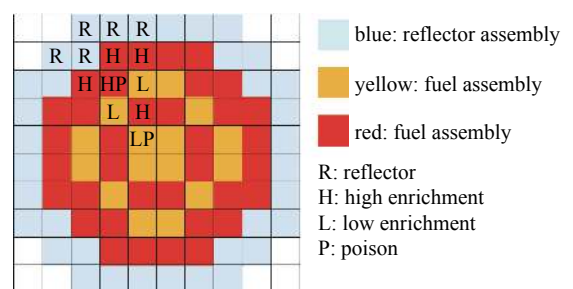


Fig. 3 Radial model of core

图 3 堆芯径向布置图

到。参数化验证过程为：(1)预先产生 400, 500, 600 K 三个温度点的截面库。三个点中, 600 K 为主线计算, 400, 500 K 利用 Python 流程控制进行辅线计算, 生成辅线计算截面库; (2)利用获得的微观截面库插值获得 550 K 的核素微观截面以及核素密度; (3)利用 550 K 的核素微观截面库获得宏观截面用于 RMC 多群计算; (4)我们将截面参数库插值得到的 550 K 多群计算结果与 550 K 连续能量 RMC 精确计算结果进行对比来验证。

燃耗点设置如表 1 所示。

计算结果在图 4、表 2 中列出。表 2 列出了各个燃耗点下的多群有效增殖因子  $k_{eff}$  以及 RMC 精确计算  $k_{eff}$ 。RMC 精确计算采用连续能量 ENDF/B VII 库进行计算。多群计算利用插值得到的 550 K 多群截面库进行计算。图 4 是表 2 数据对应的图线, 可以更直观地展示两种计算方式的  $k_{eff}$  偏差。

表 1 燃耗设置

Table 1 Setting of burnup

step	time/day	burnup(MWD/kgHM)
0	0.00	0.00
1	1.44	0.05
2	2.88	0.10
3	5.76	0.20
4	8.64	0.30
5	14.41	0.50
6	21.61	0.75
7	28.81	1.00
8	43.22	1.50
9	72.03	2.50
10	100.85	3.50
11	129.66	4.50
12	158.47	5.50
13	187.29	6.50
14	216.10	7.50
15	244.91	8.50
16	273.73	9.50
17	302.54	10.50
18	331.35	11.50

表 2 550 K 燃耗点  $k_{eff}$  数据对比

Table 2 Comparison of  $k_{eff}$  of multigroup RMC and continues energy RMC under 550 K

step RMC	Continuous energy	multi-group	relative error /pcm
0	1.179 881	1.178 647	123.4
1	1.149 456	1.149 575	11.9
2	1.166 661	1.165 65	101.1
3	1.165 531	1.164 513	101.8
4	1.164 228	1.163 652	57.6
5	1.162 347	1.161 281	106.6
6	1.160 69	1.160 169	52.1
7	1.159 095	1.157 965	113
8	1.156 514	1.154 763	175.1
9	1.144 95	1.144 422	52.8
10	1.139 64	1.138 056	158.4
11	1.135 396	1.134 719	67.7
12	1.130 832	1.130 409	42.3
13	1.126 472	1.126 33	14.2
14	1.122 124	1.121 316	80.8
15	1.117 846	1.117 473	37.3
16	1.113 375	1.112 881	49.4
17	1.108 662	1.109 897	123.5
18	1.104 564	1.104 411	15.3

从图 4 及表 2 可以看出, 最大偏差为 175 pcm, 完全符合工程精度要求。因此可以证明程序的截面参数化功能是正确的。同时, 进一步验证 550 K 不同燃耗点下的功率分布情况。功率分布通过蒙卡统计功能获取, 并且功率分布数据均已进行了归一化处理。结果如图 5~7 所示。图中数据为各个组件的功率相对偏差, 用百分数表示。

从图 5~图 7 可以看出, 插值温度 550 K 的功率分布与连续能量计算结果符合良好。径向分布功率最大偏差均小于 2%, 且功率峰因子偏差小于 2%。因此, 微观核素截面库能够进行精确的堆芯计算。进一步分析三个燃耗点下的功率分布图像, 在 0.05 MWD/tHM 燃耗点下, 反射层相邻的边缘组件功率偏差较大, 尤其是两个外围的可燃毒物组件偏差均达到了 1.5% 以上。对于边缘组件, 由于泄露较强, 中子通量各向异性较大, 因此均匀化会对结果产生较大影响。对于可燃毒物组件, 由于内部存在大量可燃毒物, 因而组件内毒物棒附近吸收截面很大, 同样会造成通量各向异性较大。随着燃耗加深到 2.5 MWD/tHM, 边缘组件的

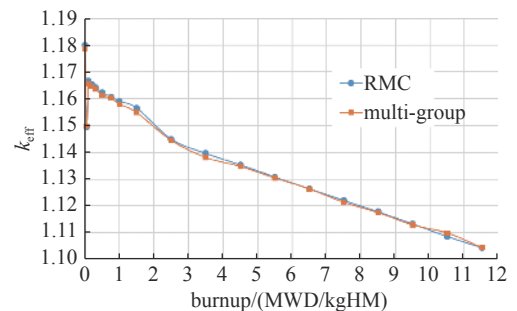


Fig. 4 Comparison of multigroup RMC and continues energy RMC under 550 K

图 4 550 K 燃耗点数据对比

0.73%	0.26%	0.44%	1.42%
0.54%	0.04%	1.58%	1.59%
0.44%	1.55%	0.32%	
0.60%	0.73%		

Fig. 5 Relative difference in radial power distribution under 0.05 MWD/tHM burnup

图 5 0.05 MWD/KgHM 的功率分布相对偏差

0.05%	1.07%	0.63%	1.17%
0.39%	0.27%	1.13%	1.42%
1.14%	1.24%	0.79%	
1.31%	0.35%		

Fig. 6 Relative difference in radial power distribution under 2.5 MWD/tHM burnup

图 6 2.5 MWD/KgHM 的功率分布相对偏差

泄露减少, 均匀化计算的精度得到提高。可燃毒物组件内毒物显著减少后, 均匀化计算的精度也相应提高。在燃耗末期, 外围燃料组件由于通量泄露进一步减少, 均匀化计算精度进一步提高。但次外围燃料组件由于堆芯燃耗分布不均以及组件富集度不同, 次外围组件中子通量各向异性仍然显著, 因此功率统计偏差仍然较大。

### 3 结论

本文采用核素微观截面构建截面参数库, 因此, 考虑的物理因素减少为燃耗深度和材料温度两个因素。通过自定义的随机介质压水堆模型进行计算验证, 耦合的多群全堆计算结果与连续能量 RMC 参考结果符合良好, 堆芯燃耗过程最大  $k_{\text{eff}}$  偏差 175 pcm, 功率偏差小于 2%。从结果可以看出, 核素微观截面库具备精确计算复杂堆芯结构能力, 且可以有效减少参数化的物理状态维数, 为堆芯计算分析提供了新的计算流程与方式。

#### 参考文献:

- [1] Weston M. S. Nuclear reactor physics[M]. America: Wiley Interscience, 2001.
- [2] Wang Y, Bangerth W, Ragusa J. Three-dimensional h-adaptivity for the multi-group neutron diffusion equations[J]. *Progress in Nuclear Energy*, 2009, 51(3): 543-555.
- [3] Sugimura N, Yamamoto A. Resonance treatment based on ultra-fine-group spectrum calculation in the AEGIS code[J]. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 2007, 44: 958-966.
- [4] Fridman E, Leppanen J. On the use of the Serpent Monte Carlo code for few-group cross section generation[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2011, 38(6): 1399-1405.
- [5] Liu Z, Smith K, Forget B, et al. Cumulative migration method for computing rigorous diffusion coefficients and transport cross sections from Monte Carlo[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2018, 112: 507-516.
- [6] Shim H, Cho Y, Song S, et al. Generation of few group diffusion theory constants by Monte Carlo code[J]. *Transactions of the American Nuclear Society*, 2008, 172: 66-77.
- [7] Shinzaburo M. MVP/GMVP II: General purpose Monte Carlo codes for neutron and photon transport calculations based on continuous energy and multigroup methods[M]. Japan: Japan Atomic Energy Research Institute, 2005.
- [8] Nikitin E, Fridman E, Mikityuk K. On the use of the SPH method in nodal diffusion analyses of SFR cores[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2015, 85: 544-551.

0.80%	1.22%	0.87%	0.36%
0.63%	0.48%	1.66%	0.57%
1.29%	1.45%	0.30%	
0.22%	0.21%		

Fig. 7 Relative difference in radial power distribution under 11.5 MWD/tHM burnup

图 7 11.5 MWD/KgHM 的功率分布相对偏差