



基于蒙特卡罗方法制作用于中子输运SN程序的多群截面库

杨西荣 杨永伟 吴翔 房鹏 高庆瑜 赵泽龙 刘杰

Fabrication of Multi-group Neutron Transport Cross Section Library for SN Program Based on OpenMC

YANG Xirong, YANG Yongwei, WU Xiang, FANG Peng, GAO Qingyu, ZHAO Zelong, LIU Jie

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.40.2022090>

引用格式:

杨西荣, 杨永伟, 吴翔, 房鹏, 高庆瑜, 赵泽龙, 刘杰. 基于蒙特卡罗方法制作用于中子输运SN程序的多群截面库[J]. *原子核物理评论*, 2023, 40(3):485–491. doi: 10.11804/NuclPhysRev.40.2022090

YANG Xirong, YANG Yongwei, WU Xiang, FANG Peng, GAO Qingyu, ZHAO Zelong, LIU Jie. Fabrication of Multi-group Neutron Transport Cross Section Library for SN Program Based on OpenMC[J]. *Nuclear Physics Review*, 2023, 40(3):485–491. doi: 10.11804/NuclPhysRev.40.2022090

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

钍基熔盐堆用238群中子-48群光子耦合多群常数库的屏蔽基准验证

Shielding Benchmarks of the 238-Neutron and 48-gamma Ray Coupled Group Constant Library for Thorium Molten Salt Reactor
原子核物理评论. 2017, 34(3): 682–690 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.34.03.682>

新一代堆芯多群常数库制作系统的研制

Development of Group-Constants Production System for the New Generation of Reactors
原子核物理评论. 2017, 34(3): 691–698 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.34.03.691>

碳离子束射程快速验证方法的蒙特卡罗模拟研究

Monte Carlo Study on the Method of Rapid Range Verification of Carbon Ion Beam
原子核物理评论. 2020, 37(4): 901–907 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.37.2019064>

MPI在蒙特卡罗程序GMT中的应用和发展

Application and Development of MPI in Monte Carlo Code GMT
原子核物理评论. 2017, 34(2): 204–210 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.34.02.204>

400~1500 MeV质子轰击铅靶和钨靶的出射中子能谱的FLUKA和Geant4模拟研究

FLUKA and Geant4 Simulation of Spallation Neutrons from Lead and Tungsten Targets Bombarded with 400~1500 MeV Protons
原子核物理评论. 2018, 35(1): 100–104 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.35.01.100>

ENDF/B-VIII. β 与ENDF/B-VII.1中水的热中子散射截面数据对比分析

Comparison of the Thermal Neutron Scattering Cross Section of Water Based on ENDF/B-VIII. β and ENDF/B-VII.1
原子核物理评论. 2018, 35(3): 335–338 <https://doi.org/10.11804/NuclPhysRev.35.03.335>

文章编号: 1007-4627(2023)03-0485-07

基于蒙特卡罗方法制作用于中子输运SN程序的多群截面库

杨西荣^{1,2,3}, 杨永伟^{1,2,3,†}, 吴翔^{1,2,3}, 房鹏^{1,2,3}, 高庆瑜^{1,2,3}, 赵泽龙^{1,2,3}, 刘杰^{1,2}

1. 中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000;
2. 中国科学院大学核科学与技术学院, 北京 100049;
3. 先进能源科学与技术广东省实验室, 广东 惠州 516003)

摘要: 在反应堆计算中, 确定论计算软件如 ANISN 计算速度快, 适合复杂的物理-热工耦合计算任务。但对于确定论计算程序, 其计算精度主要受制于多群截面数据库的制作。本工作基于蒙特卡罗计算软件 OpenMC 制作用于确定论程序的多群截面库。首先利用 OpenMC 进行建模计算, 然后区分能群统计总反应率、裂变中子产生率、吸收反应率、中子通量以及高阶勒让德散射率, 最后通过自主编写的 Fortran 截面转换程序得到 BUGLE-96 格式的多群截面数据。为了验证所制作截面库的可靠性, 将新制作的截面库提供给 ANISN 程序进行基准题计算, 计算结果和蒙特卡罗程序及 BUGLE-96 库进行对比。结果表明, 基于 OpenMC 和自主编写的截面转换程序制作的截面库用于 ANISN 计算时, K_{eff} 和通量与蒙特卡罗程序计算结果相吻合, 并且比使用 BUGLE-96 库计算结果偏差更小, 验证了本方法制作中子输运 SN 程序的多群截面库的有效性。

关键词: ANISN; OpenMC; 蒙特卡罗方法; BUGLE-96; 中子多群截面库

中图分类号: TL329

文献标志码: A

DOI: 10.11804/NuclPhysRev.40.2022090

0 引言

中子输运方程的求解方法可以分为两大类——确定论计算和蒙特卡罗模拟。离散纵坐标方法, 简称 SN 方法, 是确定论计算中求解中子输运方程的重要方法之一。在 SN 方法中, 中子输运方程是中子能量 E 、中子当前坐标 r 、中子运动方向 Ω 的函数。对于中子能量 E , 通常采用“分群”方法离散处理。SN 方法主要是对中子当前坐标 r 和中子运动方向 Ω , 尤其是对中子运动方向 Ω 离散化处理^[1]。SN 方法的特点是数值计算过程简单, 基于该方法可以编写适用于多个离散方向数上的通用确定论求解程序, 给核科学研究和核工程计算带来了极大的便利。

随着核能产业的快速发展, 反应堆计算逐渐由单一的物理或热工计算发展成更加复杂的物理-热工耦合计算, 对反应堆计算软件的要求也不断提高。与蒙特卡罗计算软件相比, 确定论计算软件如 ANISN 程序计算速度更快, 可以处理深穿透问题, 能计算出详细的角度谱分布, 更加适合这类复杂的耦合计算任务^[2]。从 20 世纪末期开始, 国际上逐渐发展起来众多物理-热工耦合

计算程序, 西屋公司等单位研发的 TRAC-M/PARCS、RELAP5/PARCS^[3] 和 POLCA-T^[4] 程序, 可以处理复杂三维物理-热工耦合问题; 国内清华大学、中国核动力设计研究院以及西安交通大学等单位也纷纷开展物理-热工耦合研究计算工作, 如西安交通大学 NECP 实验室开发的 SARAX-LAVENDER 程序便是适用于物理-热工耦合计算的确定论堆芯计算程序^[5]。对于此类确定论计算程序, 其计算精度主要受制于多群截面数据库的制作, 这意味着对用于确定论程序的截面库制作提出了新的挑战^[6]。

理论上可以用蒙特卡罗计算软件通过统计特定体积和能量内的中子通量和反应率, 经过处理得到截面数据。经典的蒙特卡罗计算软件如 TRIPOLI、MCNP、MCNPX 等并不能统计中子多群勒让德散射反应率, 而在 2011 年由麻省理工学院开发的开源蒙特卡罗计算程序 OpenMC 可以统计高阶勒让德散射反应率^[7]。确定论程序如 ANISN 快速准确的堆芯输运计算离不开准确可靠的多群截面数据, OpenMC 是具有高分辨率、高精度的蒙特卡罗连续能量计算软件, 且在计算过程中会自动考虑共振自屏能效应引起的误差, 非常适合为确定论程序

收稿日期: 2022-08-26; 修改日期: 2022-09-28

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (12035019)

作者简介: 杨西荣 (1998-), 男, 甘肃平凉人, 硕士研究生, 从事凝聚态物理研究; E-mail: yangxirong@impcas.ac.cn

† 通信作者: 杨永伟, E-mail: yangyongwei@impcas.ac.cn

制作准确可靠的高精度截面数据。本文正是在 OpenMC 统计高阶勒让德散射反应率功能的基础上, 分区分能群统计所需物理量, 最终制作完成确定论程序可用的多群截面数据库。基于该方法制作精细截面数据库, 研究人员进行了初步可行性分析, 本文在此基础上, 进行更加复杂的快堆和热堆基准题计算, 并进一步讨论群间向上散射、能群结构优化对于计算结果的影响。

1 计算方法及软件

为了制作完整可靠的截面数据库, 首先利用 OpenMC 进行建模计算, 并分区分能群统计总反应率、裂变中子产生率、吸收反应率、中子通量分布以及高阶勒让德散射率^[8], 然后通过编写的 Fortran 截面转换程序经过处理得到核素的多群截面数据, 转换成 ASCII 的 BUGLE-96 格式的截面库, 最后提供给 ANISN 程序进行计算, 将采用原始 BUGLE-96 库和采用新制作截面库的 ANISN 的计算结果分别与蒙特卡罗计算结果进行对比。详细计算流程如图 1 所示。

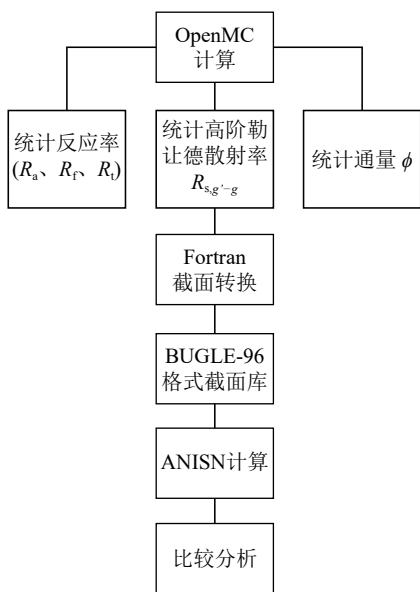


图 1 蒙特卡罗方法制作中子多群截面库流程图

1.1 OpenMC 程序简介

OpenMC 是一款开源高速并行蒙特卡罗计算程序^[9-10], 它由美国麻省理工学院 (Massachusetts Institute of Technology, MIT) 2011 年开发, 2012 年 12 月正式公布。OpenMC 使用连续能量截面和构造性立体几何表示方法, 可以实现核反应堆和其他系统的高保真建模。OpenMC 的输入文件采用 XML 格式, 必须的输入文件包括材料、几何结构、参数设置和截面库文件。此外还包括统计文件、绘图文件以及用于设置收敛参数的文件

等。与其他蒙特卡罗计算软件相比, OpenMC 开发较晚, 在计数中添加了 PN(勒让德散射反应率)的计数结果。

本文首先使用 OpenMC 进行建模计算, 统计数据提供给编写的 Fortran 截面转换程序进行处理, 截面转换程序首先设置总能群数 N_g 和总核素数 N_n , 按能群读取每一区的体通量 Φ 和每种核素的吸收率 R_a 、裂变率 R_f 、总反应率 R_t 以及各阶勒让德散射率 $R_{s,g'-g}$, 然后各反应率除以对应能群通量得到宏观反应截面 Σ , 最后按 BUGLE-96 格式写入截面文件供 ANISN 调用计算。

1.2 ANISN 程序及处简介

ANISN 程序是由美国橡树岭国家实验室 (ORNL) 的 Engle 所开发的用于中子、光子输运计算的一维、多群、各向异性散射离散纵标确定论计算程序, 它被广泛应用于反应堆屏蔽问题、反应堆中子学以及反应堆物理计算中^[11]。ANISN 程序由 1966 年开发的 DTF-II 程序发展而来^[12-13], 于 1967 年开发完成并投入计算。ANISN 自带的 BUGLE-96 库包含 47 群中子、20 群光子的 P5 多群勒让德散射截面^[14-15], 含有美国评价数据库 ENDF/B-VII.0 库所包含的大部分核素的响应函数和截面数据^[16]。作为反应堆物理确定论计算程序, ANISN 程序具有计算速度快, 便于精确处理一维物理模型的优点。ANISN 程序中, 对于散射截面 Σ_s 的处理是按勒让德多项式展开, 然后代入散射积分中, 具体处理过程如下:

由相空间小体积元内粒子数守恒, 导出离散纵标下的输运方程差分格式为

$$W_m \mu_m (A_{i+1} \Psi_{g,i+1,m} - A_i \Psi_{g,i,m}) + \alpha_{m+\frac{1}{2}} \Psi_{g,i+\frac{1}{2},m+\frac{1}{2}} - \alpha_{m-\frac{1}{2}} \Psi_{g,i+\frac{1}{2},m-\frac{1}{2}} + W_m \Sigma_{g,i+\frac{1}{2}} V_{i+\frac{1}{2}} \Psi_{g,i+\frac{1}{2},m} = W_m V_{i+\frac{1}{2}} S_{g,i+\frac{1}{2},m}, \quad (1)$$

式中: A_i 、 $V_{i+\frac{1}{2}}$ 是与几何形状有关的面积元和体积元; Σ_g 为 g 群总截面; α 满足相应的递推公式。源项 S_g 包括散射源、裂变源及外加独立项, 记外源独立项为 $Q_{g,i+\frac{1}{2}}^{\text{外}}$, 此时裂变源为

$$Q_{g,i+\frac{1}{2}}^{\text{f}} = \chi_g \sum_{h=1}^{IGM} \nu \sum_{h,i+\frac{1}{2}}^{\text{f}} \sum_{m=1}^{MM} W_m \Psi_{h,i+\frac{1}{2},m} \quad (2)$$

散射源是将散射截面 σ_s 按勒让德多项式展开, 取到 L 阶, 再代入散射积分中, 以平面几何为例:

球几何:

$$Q_{g,i+\frac{1}{2},m}^{\text{s}} = \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu_m) \sum_{h=1}^{IGM} \sum_{h \rightarrow g,i+\frac{1}{2}}^{\text{s}} \sum_{ml=1}^{MM} W_{ml} P_l(\mu_{ml}) \Psi_{h,i+\frac{1}{2},ml}; \quad (3)$$

柱几何：

$$Q_{g,i+\frac{1}{2},m}^s = \sum_{l=0}^L (2l+1) \left\{ \sum_{h=1}^{IGM} \sum_{h \rightarrow g,i+\frac{1}{2}}^s \left[P_l(\xi_m) \sum_{ml=1}^{MM} W_{ml} P_l(\xi_{ml}) \Psi_{h,i+\frac{1}{2},ml} + 2 \sum_{r=1}^l \frac{\langle (l-r)! \rangle}{\langle (l+r)! \rangle} P_l^r(\xi_m) \sum_{ml=1}^{MM} W_{ml} P_l^r(\xi_{ml}) \cos(\varpi_m - \varpi_{ml}) \cdot \Psi_{h,i+\frac{1}{2},ml} \right] \right\}; \quad (4)$$

得到的最终源项为

$$S_{g,i+\frac{1}{2},m} = Q_{g,i+\frac{1}{2}}^f + Q_{g,i+\frac{1}{2},m}^s + Q_{g,i+\frac{1}{2}}^{s'} \quad (5)$$

OpenMC 输出文件可以统计并给出本能群到其他各阶能群的散射分量^[17-18]。值得注意的是，OpenMC 在处理散射分量时，不会自动通过执行权重调整来降低误差，相当于忽略散射反应中产生的任何额外粒子，这将导致计算结果缺乏准确性，因为总粒子数将不守恒。为了修正误差，OpenMC 在生成库时可以根据需要减小吸收截面以保持粒子守恒。设总截面为 $\sigma_{t,g}$ ，OpenMC 中吸收截面将调整为

$$\sigma_{a,g} = \sigma_{t,g} - \sum_{g'} \nu_s \sigma_{s,g \rightarrow g'} \quad (6)$$

这为本文基于蒙特卡罗方法作用于反应堆中子输运 SN 程序的多群截面库提供了保证。

ANISN 所用的截面库格式中，各物质截面数据按序按能群排列。以 3 群中子为例，具体的截面库格式如表 1 所列。在截面库中，每种物质的信息由两部分组成：标识行和截面表，标识行包含的基本信息有：群数 N1、表长 N2、控制数 N3、标识 N4 和注释 NOL；截面表前三行为吸收截面 Σ_a 、裂变截面 $\nu\Sigma_f$ 和总截面 Σ_t ，接下来是按能群按散射阶数依次排列的散射截面 $\Sigma_{s,g' \rightarrow g}$ ，值得注意的是，在 ANISN 自带的 BUGLE-96 格式库中，群间向上散射截面默认为 0。

表 1 ANISN 截面库格式

标识行	N1	N2	N3	N4	NOL
		Σ_a		Σ_a	Σ_a
		$\nu\Sigma_f$		$\nu\Sigma_f$	$\nu\Sigma_f$
		Σ_t		Σ_t	Σ_t
截面表	$\Sigma_{s,1-1}$		$\Sigma_{s,2-2}$		$\Sigma_{s,3-3}$
	0		$\Sigma_{s,1-2}$		$\Sigma_{s,2-3}$
	0		0		$\Sigma_{s,1-3}$

2 模型及验证

为了检验该方法的可行性及准确性，本文基于 AN-

ISN 程序使用手册自带的 GODIVA 临界球模型和压水堆基准题萨凡纳模型进行计算验证。GODIVA 临界球半径为 8.740 6 cm。萨凡纳反应堆在 1962 年建造并投入使用，它是典型的压水堆，设计功率为 69 MW，采用富集度为 4.4% 的 UO₂ 作为燃料，燃料总质量为 8 050 kg。萨凡纳反应堆是由堆芯、热屏蔽层、压力容器、空气绝缘、一次屏蔽层、设备与二次屏蔽层组成的圆柱状反应堆，总半径达 673.7 cm，其中堆芯半径为 78.8 cm，总燃料活动区的长度为 167.7 cm^[19]。由于蒙特卡罗计算软件无法处理深穿透问题，为了简化计算模型，我们采用萨凡纳反应堆堆芯进行计算。表 2 和表 3 给出了 GODIVA 临界球模型和萨凡纳堆芯模型的具体材料组分。由于 ANISN 是反应堆物理确定论计算一维计算软件，在进行圆柱模型计算时需要采用曲率修正因子，一般取 1.420 892，表 4 给出了 ANISN 具体计算参数。OpenMC 计算时默认温度为 293.6 K，共计循环 1 000 代，其中非活跃代数为 100 代，每代粒子数为 10⁶ 个，采用的数据库为国际上通用的 ENDF/B-VII.0 库，能群结构采用 BUGLE-96 参数，即中子 47 群结构，具体能群划分由表 5 给出。

表 2 GODIVA 临界球材料组分

核素	份额/%
²³⁵ U	93.71
²³⁸ U	6.29

表 3 萨凡纳堆芯材料组分

核素	份额/%
¹ H	1.343 0
¹⁶ O	17.772 4
²³⁵ U	2.300 8
²³⁸ U	50.629 4
⁵⁰ Cr	0.221 6
⁵² Cr	4.445 5
⁵³ Cr	0.513 7
⁵⁴ Cr	0.130 3
⁵⁵ Mn	0.559 1
⁵⁴ Fe	1.096 8
⁵⁶ Fe	17.854 9
⁵⁷ Fe	0.419 7
⁵⁸ Fe	0.056 8
⁵⁸ Ni	1.784 5
⁶⁰ Ni	0.711 0
⁶¹ Ni	0.031 4
⁶² Ni	0.101 8
⁶⁴ Ni	0.026 7

表 4 ANISN 计算参数

计算模型	分区数目	节点数目	勒让德散射阶数	离散方向数目	左右边界条件	内外迭代次数
临界球	1	30	3	8	反射 真空	200 200
萨凡纳堆芯	1	200	3	16	反射 真空	400 400

表 5 BUGLE-96 库中子能群结构

群数	能量上限 /eV	群数	能量上限 /eV	群数	能量上限 /eV	群数	能量上限 /eV
1	1.733 3×10 ⁷	13	2.365 3×10 ⁶	25	2.972 0×10 ⁵	37	1.584 6×10 ³
2	1.419 1×10 ⁷	14	2.345 7×10 ⁶	26	1.831 6×10 ⁵	38	4.540 0×10 ²
3	1.221 4×10 ⁷	15	2.231 3×10 ⁶	27	1.110 9×10 ⁵	39	2.144 5×10 ²
4	1.000 0×10 ⁷	16	1.920 5×10 ⁶	28	6.737 9×10 ⁴	40	1.013 0×10 ²
5	8.607 1×10 ⁶	17	1.653 0×10 ⁶	29	4.086 8×10 ⁴	41	3.726 7×10 ¹
6	7.408 2×10 ⁶	18	1.353 4×10 ⁶	30	3.182 8×10 ⁴	42	1.067 7×10 ¹
7	6.065 3×10 ⁶	19	1.002 6×10 ⁶	31	2.605 8×10 ⁴	43	5.043 5×10 ⁰
8	4.965 9×10 ⁶	20	8.208 5×10 ⁵	32	2.417 6×10 ⁴	44	1.855 4×10 ⁰
9	3.678 8×10 ⁶	21	7.427 4×10 ⁵	33	2.187 5×10 ⁴	45	8.764 2×10 ⁻¹
10	3.011 9×10 ⁶	22	6.081 0×10 ⁵	34	1.503 4×10 ⁴	46	4.139 9×10 ⁻¹
11	2.725 3×10 ⁶	23	4.978 7×10 ⁵	35	7.101 7×10 ³	47	1.000 0×10 ⁻¹
12	2.466 0×10 ⁶	24	3.688 3×10 ⁵	36	3.354 6×10 ³		

利用 Fortran 截面转换程序将 OpenMC 的 tallies.out 统计输出文件处理得到 BUGLE96 格式的截面库文件, 提供给 ANISN 进行计算。比较 ANISN 的原始 BUGLE-96 库、新制作截面库及蒙特卡罗计算结果之间的差异, 这里列出有效增殖因子计算结果及通量统计结果。

2.1 有效增殖因子计算

利用 OpenMC 的统计结果经过处理得到截面库数据, 表 6 给出了有效增殖因子计算的具体结果, 计算结果表明, 在进行 GODIVA 临界球计算时, ANISN 采用自带的 BUGLE-96 库计算结果与 OpenMC 基于 ENDF/B-VII.0 库得到的结果符合得很好, 相对偏差仅为 0.055%, 利用新制作的截面库的计算结果与 OpenMC 计算结果相对偏差为 0.173%。总体而言, 在进行一维 GODIVA 临界球计算时, 无论是采用 ANISN 采用自带的 BUGLE-

96 库, 还是采用新制作的截面库, ANISN 计算结果都与 OpenMC 符合得很好。但在进行圆柱状萨凡纳堆芯计算时, 计算结果发生了明显变化, ANISN 采用自带的 BUGLE-96 库得到的计算结果仅为 0.528 41, 与实际情况差距非常大。采用新制作的截面库提供给 ANISN 进行计算时, 得到的计算结果为 0.919 62, 虽然与原始 BUGLE-96 库相比计算结果有所改善, 但与 OpenMC 基于 ENDF/B-VII.0 库得到的结果相比, 相对偏差为 19.276%。

表 6 K_{eff} 计算结果

计算模型	ANISN BUGLE-96	ANISN ENDF/B-VII.0	OpenMC ENDF/B-VII.0/pcm	K_{eff} 实验值
临界球	0.995 76	0.996 94	0.995 21±22	1.0
萨凡纳堆芯	0.528 41	0.919 62	1.112 38±9.9	-

2.2 通量统计结果

利用 ANISN 自带的 BUGLE-96 库和新制作的截面库通过计算统计中子通量, 并与 OpenMC 计算结果进行对比。详细计算结果见图 2, 通过计算临界球模型和萨凡纳堆芯模型, 在中能区, 无论是 BUGLE-96 库还是新制作的截面库, ANISN 计算结果都与 OpenMC 符合得很好; 差异主要分布在低能区与高能区, 在低能区, 相比于 ANISN 自带的 BUGLE-96 库, 采用新制作的截面库的 ANISN 计算结果与 OpenMC 符合得更好, 相对偏差也由 BUGLE-96 库的 80% 降低到 20% 以内; 在高能区, 采用 BUGLE-96 库与采用新制作的截面库 ANISN 计算结果几乎相同, 与 OpenMC 计算结果相对偏差达到 40% 以上。通过分析比较, 引起低能区与高能区中子通量计算结果相对偏差较大的主要原因是由于能群划分较细 (47 群), 中子能量存在群间向上散射的影响。此外, 低能区与高能区中子通量较小, 统计误差较大, 也是相对偏差较大的原因之一。总体而言, 计算结果符合较好。

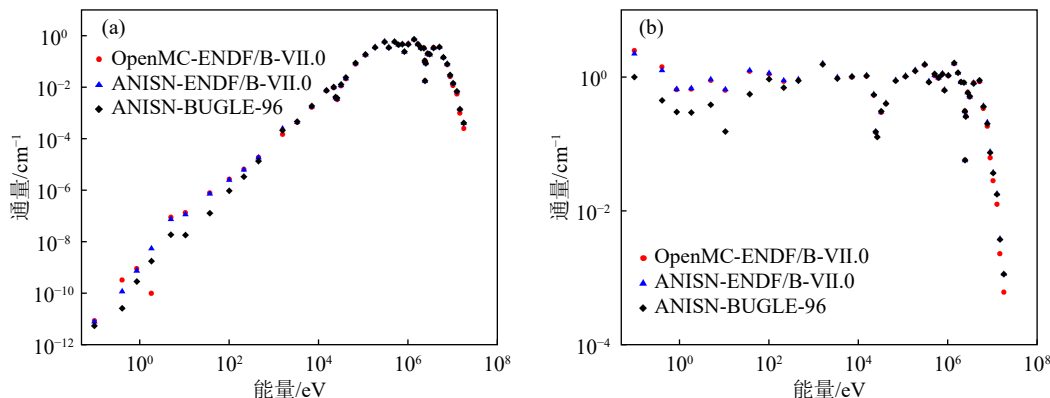
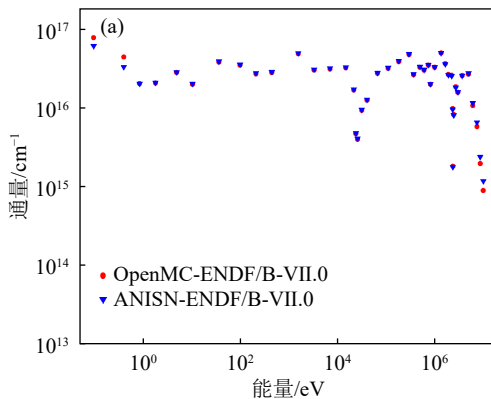


图 2 (a) 临界球和 (b) 萨凡纳堆芯通量对比 (在线彩图)

2.3 群间向上散射的影响

分析临界球模型和萨凡纳堆芯计算结果，相比于ANISN自带的BUGLE-96截面库，在计算中子增殖因子和通量分布时，采用基于蒙特卡罗方法制作的截面库计算结果与OpenMC计算结果符合得更好。通过进一步分析，新制作的截面库计算结果相较于ANISN自带的BUGLE-96截面库有了很大改善，在计算简单临界球模型时有效增殖因子计算结果很准确，但在计算更为复杂的萨凡纳反应堆堆芯时，无论是有效增殖因子，还是通量分布与OpenMC计算结果均有一定的偏差，经过深入分析，我们发现引起偏差的主要原因是，在制作新的截面库时，采用BUGLE-96库参数，即中子47群能群结构。BUGLE-96格式库里，群间散射截面从群内散射开始，群间向上散射截面为0。但由于能群划分较细，热群中子群间向上散射非常明显，此外萨凡纳堆芯中氢元素群间向上散射尤为严重，为了降低由于能群划分造成的群间向上散射的影响，我们将低能区前4群合并为一个能群，进行了萨凡纳堆芯43群计算，比较它们与47群计算结果的差异。



能群结构由原先ANISN自带的BUGLE-96库划分的47群通过合并前4群得到43群群结构，群间向上散射减弱。详细计算结果见表7，在有效增殖因子计算中，采用新制作截面库ANISN的计算结果与OpenMC计算结果的相对偏差由原来47群的19.276%降低到0.034%。详细通量统计对比结果见图3，在通量计算结果比较分析中，相较于47群中子通量计算结果，43群低能区通量分布相对偏差由原来的20%降低到2%以内。同时我们也看到，不论能群划分是47群还是43群，在高能区中子通量计算结果仍有80%左右的偏差，这是由于高能区中子通量相对来说比较小，统计误差较大造成的。但处于高能区的中子份额占比较少，对于计算结果的影响不大。总体来看，通过并群减轻群间向上散射的影响，计算结果明显改善。

表7 萨凡纳堆芯不同能群 K_{eff} 计算结果

模型	ANISN ENDF/B-VII.0	OpenMC ENDF/B-VII.0	相对偏差/%
萨凡纳堆芯-47群	0.919 62	1.112 38±9.9 pcm	19.276
萨凡纳堆芯-43群	1.112 76		0.034

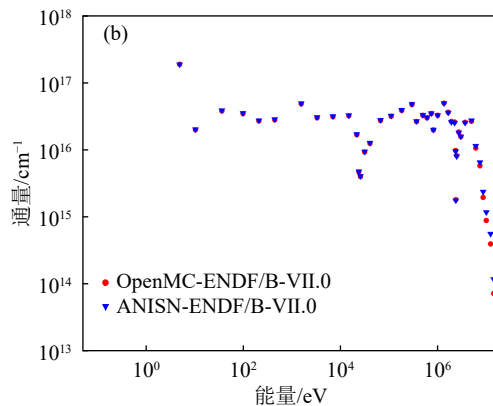


图3 (a) 萨凡纳堆芯47群和(b) 43群通量计算对比(在线彩图)

3 结论与展望

本文采用MIT开发的反应堆中子输运蒙特卡罗程序OpenMC基于国际上通用的ENDF/B-VII.0库制作反应堆核素的47群中子截面库，用Fortran程序将OpenMC输出的截面结果转换成ASCII的BUGLE-96格式库。利用一维SN程序ANISN结合制作好的BUGLE-96格式的数据库进行GODIVA临界球基准题和萨凡纳堆芯模型计算，将采用原始BUGLE-96库和采用新制作截面库的ANISN计算结果分别与蒙特卡罗计算结果进行对比。计算结果表明，相比于ANISN自带的原始BUGLE-96截面库，新制作截面库计算结果更加准确。在此基础上，

通过对BUGLE-96库的深入探究，我们发现BUGLE-96库中子群间向上散射截面默认置为0，但在实际热堆模型萨凡纳堆芯计算中，低能区中子群间向上散射不可忽略，通过改进新制作截面库能群结构，有效增殖因子计算结果相对偏差由原来的17.329%降低到0.034%，低能区通量分布也符合得较好。

在此工作基础上，未来有必要进一步开展更加复杂快堆基准题、热堆基准题计算验证工作，给出科学合理的能群划分准则。在中子输运截面库制作完成后，在OpenMC源代码中添加中-光子耦合输运多群勒让德散射反应率统计功能，制作更加完善的中光子输运多群截面库。

参考文献:

- [1] XIE Zhongsheng. Physical Analysis of Nuclear Reactors[M]. Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press, 2004: 7. (in Chinese)
(谢仲生. 核反应堆物理分析[M]. 西安: 西安交通大学出版社, 2004: 7.)
- [2] GUO Haibing, HUANG Hongwen, MA Jimin, et al. A Deterministic Neutronics and Thermal-Hydraulics Coupling Method Based on Common Fine-mesh[C]//Proceedings of the 14th National Symposium on Reactor Thermo-Hydrological Fluids and the 2015 Annual Conference of the Key Laboratory of Thermal Hydraulic Technology for Nuclear Reactors of China Nuclear Reactors. Beijing: Key Laboratory of Advanced Reactor Engineering and Safety, Ministry of Education, Tsinghua University, 2015: 906. (in Chinese)
(郭海兵, 黄洪文, 马纪敏, 等. 基于精细网格的确定论物理-热工耦合方法[C]//第十四届全国反应堆热工流体学术会议暨中核核反应堆热工水力技术重点实验室2015年度学术年会论文集. 北京: 清华大学先进反应堆工程与安全教育部重点实验室, 2015: 906.)
- [3] KOZLOWSKI T, MILLER R M, DOWNAR T J, et al. *Nuclear Technology*, 2004, 146(1): 15.
- [4] BREDOLT U. POLCA T: System Analysis Code with Three-Dimensional Core Model[R]. State of Texas: Tech Rep Westinghouse, 2007.
- [5] CHEN Jianda, ZHENG Youqi, DU Xia'nian, et al. *Morden Applied Physics*, 2012, 12(1): 75. (in Chinese)
(陈建达, 郑友琦, 杜夏楠, 等. *现代应用物理*, 2012, 12(1): 75.)
- [6] CHEN Chong. The Development and Application of Ultra-fine Group Nuclear Database System Research[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2014(5). (in Chinese)
(陈冲. 超细群核数据库系统的开发及应用研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2014(5).)
- [7] ROMANO P K, FORGET B. *Annals of Nuclear Energy*, 2013, 51: 274.
- [8] HONG Shuang, YANG Yongwei, ZHANG Lu, et al. *Nuclear Techniques*, 2017, 40(4): 47. (in Chinese)
(洪爽, 杨永伟, 张璐, 等. *核技术*, 2017, 40(4): 47.)
- [9] ROMANO P K, HORELIK N E, HERMAN B R et al. *Annals of Nuclear Energy*, 2015, 82: 90-97.
- [10] SU Shi. Validation of Reactor Criticality and Shielding Based on OpenMC[D]. Hengyang: University of South China, 2018. (in Chinese)
(苏适. 基于OpenMC的反应堆临界与屏蔽验证研究[D]. 衡阳: 南华大学, 2018.)
- [11] LIAO Qingfu, ZHAO Yujun. ANISN Program Manual[M]. Beijing: Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, 1988: 5. (in Chinese)
(廖清富, 赵玉钧. ANISN程序使用手册[M]. 北京: 应用物理与计算数学研究所, 1988: 5.)
- [12] CHALHOUB E S, GARCIA R D M. Inclusion of a General Volumetric Source Option in the ANISN Code: Brazil [P]. 1997[2022].
- [13] DMITRY V G, VYACHELAV P K. *Nucl Instr and Meth A*, 1996, 374(1): 95.
- [14] HONG Shuang. Application of FLUKA and OpenMC in the ADS Coupling Calculation[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2017(5). (in Chinese)
(洪爽. FLUKA和OpenMC在ADS靶堆耦合计算中的应用[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2017(5).)
- [15] ENGLE J R. A User's Manual for ANISN, A One-Dimensional Discrete Ordinates Transport Code with Anisotropic Scattering[M]. Tennessee: Oak Ridge National Laboratory, 1967.
- [16] WHITE J E, INGERSOL L. BUGLE-96: A Revised Multigroup Cross Section Library for LWR Applications Based on ENDF/B-VI Release 3[M]. Tennessee: Oak Ridge National Laboratory, 1996.
- [17] YOSUKE I, TATSUHIKO O. *Nucl Instr and Meth B*, 2017, 396: 26.
- [18] PENG Xingjie, LIANG Jingang, BENOIT F, et al. *Annals of Nuclear Energy*, 2019, 128: 231.
- [19] YING Dongchuan, XIAO Feng, ZHANG Hongyue, et al. *Nuclear Power Engineering*, 2016, 37(4): 160.

Fabrication of Multi-group Neutron Transport Cross Section Library for SN Program Based on OpenMC

YANG Xirong^{1,2,3}, YANG Yongwei^{1,2,3,†}, WU Xiang^{1,2,3}, FANG Peng^{1,2,3}, GAO Qingyu^{1,2,3}, ZHAO Zelong^{1,2,3}, LIU Jie^{1,2}

(1. Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China;

2. School of Nuclear Science and Technology, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;

3. Advanced Energy Science and Technology Guangdong Laboratory, Huizhou 516003, Guangdong, China)

Abstract: In reactor calculation, deterministic calculation software such as ANISN is fast and suitable for complex physical thermal coupling calculation tasks. But for the deterministic calculation program, the calculation accuracy is mainly restricted by the making of multi-group cross section library. In this paper, based on the Monte Carlo software OpenMC, a multi-group cross section library for deterministic programs is developed. Firstly, modeling and calculation are carried out by using OpenMC. Then, the total reaction rate, neutron fission rate, absorption reaction rate, neutron flux and high-order Legendre scattering rate are calculated by different regions and energy groups. Finally, multi-group cross section data in BUGLE-96 format is obtained by Fortran cross section conversion program. In order to verify the reliability of the cross-section library, the new cross-section library is provided to ANISN program for benchmark calculation, and the calculation results are compared with Monte Carlo program and BUGLE-96 library. The results show that the K_{eff} and flux calculated by the cross section library based on OpenMC and the cross section conversion program are consistent with those calculated by Monte Carlo program, and the error is smaller than that calculated by BUGLE-96 library, which verifies the effectiveness of the multi-group cross section library of neutron transport SN program.

Key words: ANISN; OpenMC; Monte Carlo method; BUGLE-96; neutron multi-group cross section library

Received date: 26 Aug. 2022; **Revised date:** 28 Sep. 2022

Foundation item: National Natural Science Foundation of China(12035019)

† **Corresponding author:** YANG Yongwei, E-mail: yangyongwei@impcas.ac.cn