

# 用蒙特卡罗方法计算压水堆燃料 组件内的中子分布

焦 惠 先

对于压水堆燃料组件而言，栅格稠密、几何形状复杂、对中子的吸收较强。在这种情况下，如果采用扩散理论计算这种组件内的中子分布，会引起相当大的误差，但蒙特卡罗方法是非常适合于处理这种情况的。按照本文所提出的物理模型，只要中子历史足够多，其计算结果可完全在实验误差范围内。本文提出的物理模型的准确度，已为国内外大量物理实验所证实，并已用于压水堆的工程设计。

**关键词** 蒙特卡罗方法，压水堆，热中子谱，精细通量分布。

## 一、概 述

蒙特卡罗方法可以跟踪并记录任何状态下的中子行径。也就是说，描写中子飞行的波尔兹曼方程可以不用近似方法（如扩散近似、 $P_N$  近似、 $S_n$  近似等）而直接用蒙特卡罗方法严格地解出来。即各个能区的中子能谱和中子通量分布，甚至整个增殖系统的有效增殖因子都可以用蒙特卡罗方法计算出来。本文所涉及的内容仅限于热中子能谱和热中子通量分布。表 1 给出了热中子区的能组划分情况，共分 30 个能组。表中  $E_i$  为能组下限； $\bar{E}_i$  为组平均能量； $\bar{u}_i$  为组平均勒值； $\Delta u_i$  为勒宽度。

对于压水堆燃料组件，不但几何形状复杂、非均匀性很强，而且排列紧密、对中子的吸收较强。在这种情况下，中子输运方程的任何近似解法，都会带来相当大的误差。蒙特

卡罗方法最为适合这种情况，可以很方便地计算出栅格结构的某一微小变化给中子分布带来的影响。图 1 给出了我们所研究的栅格的最小对称栅元。为了处理方便，我们作了下列近似：（1）栅元轴向为无限长；（2）不考虑径向中子泄漏，即认为所研究的活性区是由无限多个最小对称栅元组成的，入射到最小对称栅元边界上的中子满足镜面反射条件：入射角（中子运动方向与边界面上法线的夹角）等于反射角。最小对称栅元内的区域数最多可为 16 区，燃料棒的位置是通过输入座标点  $(x_1, y_1) \dots (x_4, y_4)$  来确定<sup>[1]</sup>。后来又将区域数增加到 21 区甚至更多。但增加区域数的同时也势必延长机器的计算时间。

蒙特卡罗方法的最大缺点是计算时间较长，每处理一个中子的某一次碰撞，约需进行上万次运算。

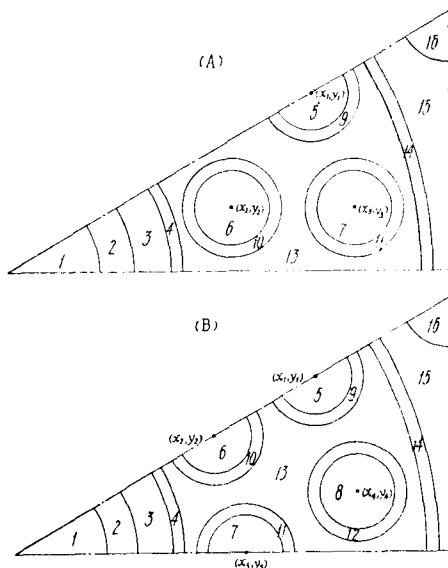


图 1 最小对称栅元示意图

表 1 热 中 子 区 的 能 组 划 分

能 组 $i$	$E_i, \text{eV}$	$\bar{E}_i, \text{eV}$	$\bar{\nu}_i$	$\Delta u_i$
55	0.51171	0.56836	16.683	0.2
56	0.41895	0.46533	16.883	0.2
57	0.34301	0.38098	17.083	0.2
58	0.28083	0.31192	17.283	0.2
59	0.22992	0.25538	17.483	0.2
60	0.18825	0.20309	17.683	0.2
61	0.15412	0.17119	17.883	0.2
62	0.12319	0.14015	18.083	0.2
63	0.10331	0.11475	18.283	0.2
64	0.084584	0.093947	18.483	0.2
65	0.069251	0.076918	18.683	0.2
66	0.056698	0.062975	18.883	0.2
67	0.046420	0.051559	19.083	0.2
68	0.038006	0.042213	19.283	0.2
69	0.031116	0.034561	19.483	0.2
70	0.025476	0.028296	19.683	0.2
71	0.020858	0.023167	19.883	0.2
72	0.017077	0.018968	20.083	0.2
73	0.013981	0.015529	20.283	0.2
74	0.011447	0.012714	20.483	0.2
75	0.0093721	0.010410	20.683	0.2
76	0.0076732	0.0085227	20.883	0.2
77	0.0062823	0.0069778	21.083	0.2
78	0.0051435	0.0057129	21.284	0.2
79	0.004	0.0045718	21.506	0.251
80	0.003	0.0035	22.173	0.287
81	0.002	0.0025	22.510	0.463
82	0.001	0.0015	23.020	0.693
83	0.0005	0.00075	23.714	0.694
84	0	0.00025	24.812	1.098

为了减少统计涨落，所计算的中子历史数又必须足够大。一座反应堆在初次启动时，单靠微弱的启动中子源，每秒在每个最小对称栅元内也可产生几万个中子，而 $3.1 \times 10^{10}$ 次中子裂变才能产生 1 瓦的功率。我们在进行蒙特卡罗计算时不可能计算这么多的中子数，但即使只计算 10000 个中子历史，也需要相当多的计算时间。

在研究一个新型活性区性能时，可以通过零功率实验，测量出这种栅格的基本参数，也可以通过蒙特卡罗计算得到这些基本参数。在进行零功率实验时，往往需要进行复杂的机械加工，周期较长，测量方法本身也有一定的误差。为了节省经费和缩短周期，常常用蒙特卡罗计算来代替这些实验。

## 二、计 算 模 型

在热能区内，中子与核发生下列碰撞：(1) 弹性散射碰撞；(2) 吸收碰撞（包括同裂变物质发生的裂变碰撞）。按照吸收截面随入射中子能量变化的特点，可将吸收核分成  $1/v$

吸收体和非  $1/v$  吸收体两种。非  $1/v$  吸收体的吸收截面随能量的变化，一般难以用解析表达式表示，应用时需对每一能组输入点值。裂变物质、控制材料和裂变产物等大都属于非  $1/v$  吸收体。堆内结构材料和慢化材料一般都属于  $1/v$  吸收体。 $1/v$  吸收体的吸收截面同入射中子的速度成反比，可按式计算：

$$\sigma_a^i(E) = \sqrt{\frac{E_0}{E}} \sigma_a^i(2200). \quad (1)$$

其中  $\sigma_a^i(2200)$  是在室温  $20.4^\circ\text{C}$  (相应的中子速度为  $2200 \text{ m/s}$ ) 下  $i$  物质的微观吸收截面； $E_0$  为相应于室温下的中子能量，等于  $0.0253 \text{ eV}$ 。

热中子与除氢、氧以外的核发生弹性碰撞时，可以近似认为：散射碰撞后的中子动能不变；散射后的中子角分布为质心系内各向同性；散射截面在整个热能区内不随入射中子能量而变化。初始热中子源可由共振区的蒙特卡罗计算给出，也可采用下面的近似方法：即热中子源只是均匀地分布在水内，源中子的角分布在实验室座标系统内各向同性。初始热中子源的能量分布  $S(E_i)$  被定义为能量在  $E_i$  到  $0.625 \text{ eV}$  间的中子份额，即

$$S(E_i) = \int_{E_i}^{0.625} \phi_w(E) dE / \int_0^{0.625} \phi_w(E) dE. \quad (2)$$

我们近似地取  $\phi_w(E)$  等于纯水介质内的热中子谱，这样，在  $\phi_w(E)$  没有计算出来之前，可先采用文献[2]所给出的实验数据。中子与氧核碰撞时的微分散射截面  $\sigma_s^o(E_i \rightarrow E_j)$  是用重气体模型算出的<sup>[3,4]</sup>。中子与氢核碰撞时的微分散射截面  $\sigma_s^H(E_i \rightarrow E_j, \mu_K)$  是用尼尔金 (Nelkin) 模型算出来的<sup>[5,6,7]</sup>。

**1. 中子与氧核的碰撞——重气体模型<sup>[3,4]</sup>** 中子与氧核发生弹性散射碰撞时，散射中子的角分布仍为质心系统内各向同性。采用重气体模型，可以得到氧的微分散射截面  $\sigma_s^o(E_i \rightarrow E_j)$  为：

$$\sigma_s^o(E_i \rightarrow E_j) = \sum_{k=1}^2 C_k \frac{(m+1)^2}{8m} \cdot \frac{\tau_k^3}{\lambda_k} \cdot \frac{1}{E_i} [\exp(-2\alpha_k \tau_k^2 E_i) \cdot (\text{erf } Z_1 + \xi \text{erf } Z_2) + \exp(2\beta^2(E_i - \lambda_k E_j)) \cdot (\text{erf } Z_3 - \xi \text{erf } Z_4)], \quad (3)$$

$$\xi = \begin{cases} +1, & \text{对 } E_j < E_i \\ -1, & \text{对 } E_j > E_i \end{cases} \quad (4)$$

$$\sigma_s^o(E_i \rightarrow E_j) = \frac{E_j}{E_i} \exp[2\beta^2(E_i - E_j)] \cdot \sigma_s^o(E_i \rightarrow E_i). \quad (5)$$

对入射能量为  $E_i$  的中子，氧的总散射截面  $\sigma_s^o(E_i)$  可写为：

$$\sigma_s^o(E_i) = \sum_{k=1}^2 C_k \tau_k^3 \left[ \left( \tau_k^3 + \frac{1}{4m\beta^2 E_i} \right) \text{erf}(\sqrt{2E_i m} \cdot \beta \tau_k) \exp(-2\alpha_k \tau_k^2 E_i) + \frac{\tau_k}{\beta \sqrt{2\pi m E_i}} \cdot \exp(2m\beta^2 E_i) \right], \quad (6)$$

其中，
$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du, \quad (7)$$

$$\beta^2 = \frac{1}{2KT}. \quad (8)$$

$$Z_1 = \beta \theta_k \sqrt{2E_i} - \beta \rho_k \sqrt{2E_i}, \quad (9)$$

$$Z_2 = \beta \theta_K \sqrt{2 E_i} + \beta \rho_K \sqrt{2 E_i}, \quad (10)$$

$$Z_3 = \beta \theta_K \sqrt{2 E_i} - \beta \rho_K \sqrt{2 E_i}, \quad (11)$$

$$Z_4 = \beta \theta_K \sqrt{2 E_i} + \beta \rho_K \sqrt{2 E_i}, \quad (12)$$

$$\theta_K = \frac{m+1}{2 \tau_K \sqrt{m}}, \quad (13)$$

$$\rho_K = \tau_K \sqrt{m} - \theta_K, \quad (14)$$

$$\tau_K = \sqrt{\frac{m f^2}{m \beta^2 + \alpha_K}}, \quad (15)$$

$$\lambda_K = 1 + m(1 - \tau_K^2). \quad (16)$$

上面公式中所用到的一些常数值如下： $c_1=3.73$ ； $c_2=10$ ； $\alpha_1=0$ ； $\alpha_2=120$ ； $m=16$ ；当介质温度为 20°C、270°C 和 700°C 时， $KT$  值分别为 0.025249、0.0467925 和 0.0838473。

2. 中子与氢核的碰撞——尼尔金模型<sup>[5,6,7]</sup> 中子与氢核发生散射碰撞时，碰撞后的中子角分布为质心系内各向异性。根据尼尔金散射核模型，氢的微分散射截面分布函数  $\sigma_s^H(E_i \rightarrow E_j, \mu_K)$  可以写成：

$$\begin{aligned} \sigma_s^H(E_i \rightarrow E_j, \mu_K) &= \frac{\sigma_0}{\pi} \sqrt{\frac{E_j}{E_i}} \cdot \sqrt{\frac{m}{2 \pi \bar{E} K^2}} \cdot \exp\left[-\frac{k^2}{2A}\right] \times \\ &\times \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{n\omega}{2T}\right] I_n\left(\frac{K^2}{2B}\right) \cdot \exp\left[-\frac{m}{2 \bar{E} K^2} \left(E_i - E_j - n\omega + \frac{k^2}{2m}\right)^2\right]. \end{aligned} \quad (17)$$

而氢的微分散射截面  $\sigma_s^H(E_i \rightarrow E_j)$  可以写成：

$$\begin{aligned} \sigma_s^H(E_i \rightarrow E_j) &= 2 \pi \int_{-1}^{+1} \sigma_s^H(E_i \rightarrow E_j, \mu_K) d\mu_K \\ &= 2 \pi \sum_{K=1}^{16} \sigma_s^H(E_i \rightarrow E_j, \mu_K) \Delta\mu_K. \end{aligned} \quad (18)$$

氢的总散射截面  $\sigma_s^H(E_i)$  可以写成：

$$\begin{aligned} \sigma_s^H(E_i) &= \int_0^{0.625} \sigma_s^H(E_i \rightarrow E_j) dE_j \\ &= \sum_{j=55}^{84} \sigma_s^H(E_i \rightarrow E_j) \Delta E_j. \end{aligned} \quad (19)$$

式中  $\sigma_0=22.4$  b，是氢的渐近自由散射截面； $T$  是以 eV 为单位的介质温度；

$$T = 0.000086174 \times (273 + t^\circ\text{C}) \text{eV}, \quad (20)$$

$$k^2 = \frac{1}{2} (E_i + E_j - 2 \mu_K \sqrt{E_i E_j}). \quad (21)$$

上面公式中所用到的其余常数  $m$ ， $\bar{E}$ ， $A$ ， $B$  和  $\omega$  可由下列公式算出：

(1) 当  $|E_i - E_j| < 0.205$  eV 时，

$$m = 18, \quad (22)$$

$$\bar{E} = T, \quad (23)$$

$$A^{-1} = \left(\frac{1}{3 \omega_1} + \frac{2}{3 \omega_2}\right) \frac{1}{m_v} + \left[m_r \omega_r \tanh\left(\frac{\omega_r}{2T}\right)\right]^{-1}, \quad (24)$$

$$B = m_r \omega_r \sinh \frac{\omega_r}{2T}, \quad (25)$$

$$\omega = \omega_r. \quad (26)$$

(2) 当  $0.205 \text{ eV} \leq |E_i - E_j| < 0.481 \text{ eV}$  时,

$$m^{-1} = (M^{-1} + m_r^{-1}), \quad (27)$$

$$\bar{E} = \frac{1}{m_r + M} \left[ T m_r + M \omega_r \left( \frac{1}{\exp[\omega_r/T] - 1} + \frac{1}{2} \right) \right], \quad (28)$$

$$A = \frac{m_v}{\frac{1}{3\omega_1} + \frac{2}{3\omega_2}}, \quad (29)$$

$$B = 3 m_v \omega_1 \sinh \frac{\omega_1}{2T}, \quad (30)$$

$$\omega = \omega_1. \quad (31)$$

(3) 当  $0.481 \text{ eV} \leq |E_i - E_j| \leq 1 \text{ eV}$  时,

$$m^{-1} = \left( \frac{1}{M} + \frac{1}{m_r} + \frac{1}{3 m_v} \right), \quad (32)$$

$$\bar{E} = m \left[ \frac{T}{M} + \frac{\omega_r}{m_r} \left( \frac{1}{\exp[\omega_1/T] - 1} + \frac{1}{2} \right) + \frac{\omega_1}{3 m_v} \left( \frac{1}{\exp[\omega_1/T] - 1} + \frac{1}{2} \right) \right], \quad (33)$$

$$A = \frac{3}{2} m_v \omega_2, \quad (34)$$

$$B = \frac{3}{2} m_v \omega_2 \sinh \left( \frac{\omega_2}{2T} \right), \quad (35)$$

$$\omega = \omega_2. \quad (36)$$

在以上公式中所用到的常数为:  $m_r = 2.32$ ;  $m_v = 1.95$ ;  $\omega_1 = 0.205 \text{ eV}$ ;  $\omega_2 = 0.481 \text{ eV}$ ;  $\omega_r = 0.06 \text{ eV}$ ;  $M = 18$ 。图 2 给出了用上面公式计算出来的氢的总散射截面  $\sigma_s^H(E_i)$ 。

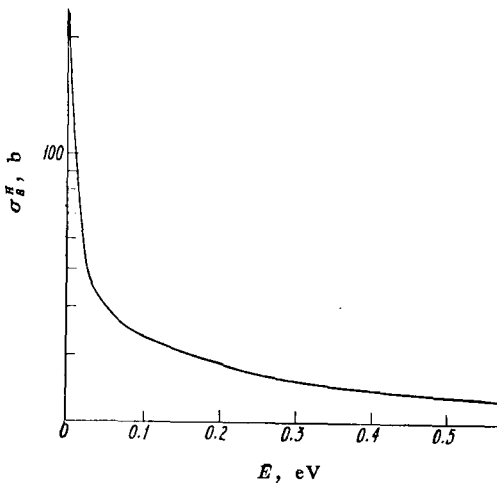


图 2 氢的总散射截面

### 三、部分计算结果

根据多组蒙特卡罗程序给出的燃料组件内的热中子空间能量分布  $\phi(\vec{r}, E)$ , 可以很容易地算出  $K$  区内的热中子谱  $\phi_K(E)$  和精细通量分布  $\phi_K(\vec{r})$ :

$$\phi_K(E) = \int_K \phi(\vec{r}, E) dV, \quad (37)$$

$$\phi_K(\vec{r}) = \int_0^{0.625} \phi(\vec{r}, E) dE. \quad (38)$$

$k$  区内  $i$  元素的平均参数  $\bar{\sigma}^i$  可由下式给出:

$$\bar{\sigma}^i = \frac{\int_0^{0.625} \sigma^i(E) \phi_K(E) dE}{\int_0^{0.625} \phi_K(E) dE}. \quad (39)$$

1/v 吸收体的平均吸收截面  $\bar{\sigma}_{a,1/v}^i$  可以写成:

$$\bar{\sigma}_{a,1/v}^i = \sigma_a^i(E_0) \sqrt{E_0} \frac{\int_0^{0.625} \frac{1}{\sqrt{E}} \phi_K(E) dE}{\int_0^{0.625} \phi_K(E) dE} \quad (40)$$

定义能谱平均权重系数  $\langle \frac{1}{v} \rangle^i$  为:

$$\langle \frac{1}{v} \rangle^i \equiv \frac{\sqrt{E_0} \int_0^{0.625} \frac{1}{\sqrt{E}} \phi_K(E) dE}{\int_0^{0.625} \phi_K(E) dE} \quad (41)$$

则有 
$$\bar{\sigma}_{a,1/v}^i = \sigma_a^i(E_0) \langle \frac{1}{v} \rangle^i \quad (42)$$

图 3 给出了在室温情况下用多组蒙特卡罗程序计算出的纯水介质内的热中子谱, 图中实测值取自文献[2]。从图中看出, 计算值与实测值基本一致。我们也计算了低浓铀水栅格。其水铀体积比为 3.17, 用 Zr-2 合金作燃料包壳。图 4 和图 5 分别给出了上述栅格不同介质内的热中子谱。从图中看出, 由于控制棒对中子的强吸收, 控制棒内的热中子谱“硬化”要比燃料内还要大。对铀水栅格的计算表明, 一个热中子从产生到被吸收要经过 5<sup>0</sup> 多次散射碰撞; 在有控制棒插入的情况下, 只经过 20 多次碰撞就被吸收了。

如果单纯计算栅格内的平均参数 (如吸收几率、区域平均通量等), 则可节省计算时间。当然, 在计算精细通量分布时, 为保持同前者同样的误差, 就要花费较多的计算时间。图 6 和图 7 分别给出了沿栅格某一方向的热中子精细通量分布, 实验值取自文献 [8, 9]。计算值与实测值都是将水洞中心处的热中子通量归一化为 1, 而这一点的计算误差要比其他点大, 再加上实验测量的某些偏差, 致使两者通量分布相对值有所差异, 但基本形状是一致的。图 8 给出了燃料棒表面周向通量变化, 其中实测值取自文献[8]。

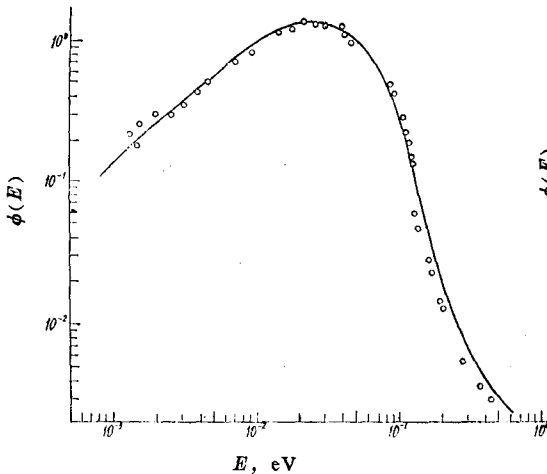


图 3 无限均匀水介质中的热中子谱  
 尼尔金核计算值与实验值<sup>[2]</sup>比较;  $\sigma_a(2200)$   
 $\approx 0.328$  b/氢原子。

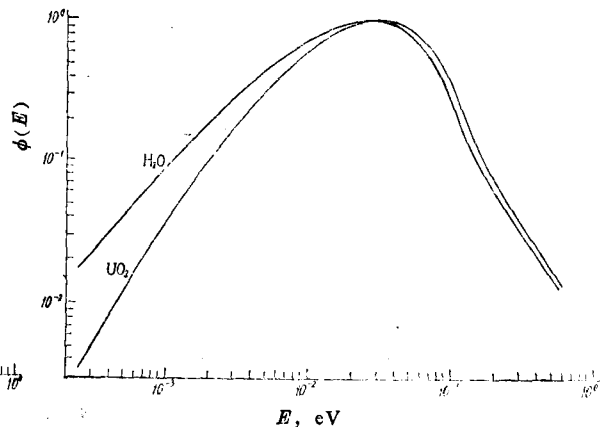


图 4 无控制棒插入时铀水栅格介质内的  
 热中子谱

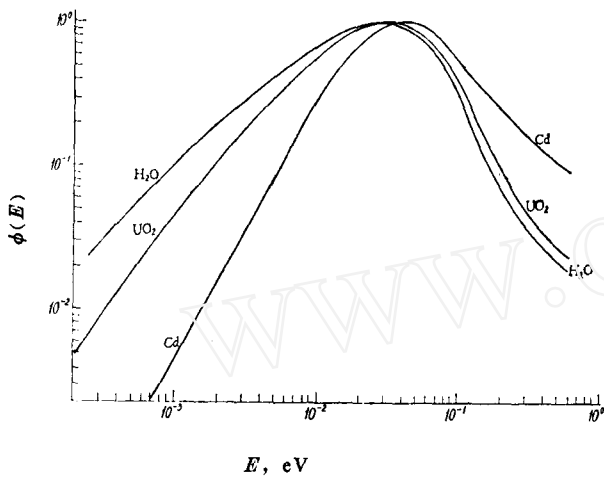


图 5 有控制棒插入时铀水栅格介质内的热中子谱

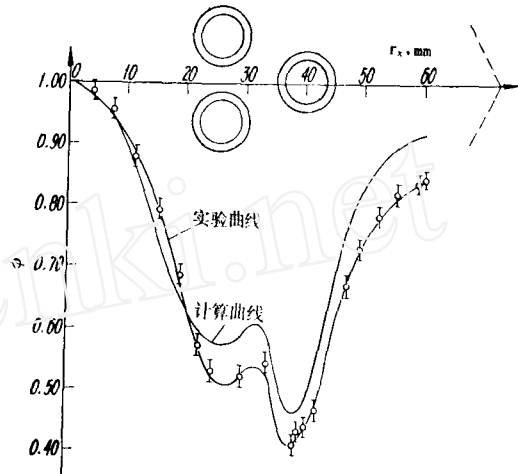


图 6 沿  $r_x$  方向精细通量分布的计算与实验值

归一化条件，取元件盒中心水腔原点处的通量值为 1；实验值没有对宏观通量分布的不均匀性进行修正。

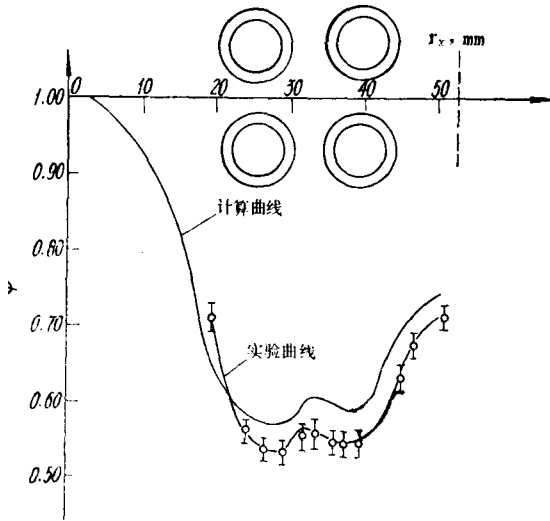


图 7 沿  $r_x$  方向精细通量分布的计算与实验值  
说明同图 6。

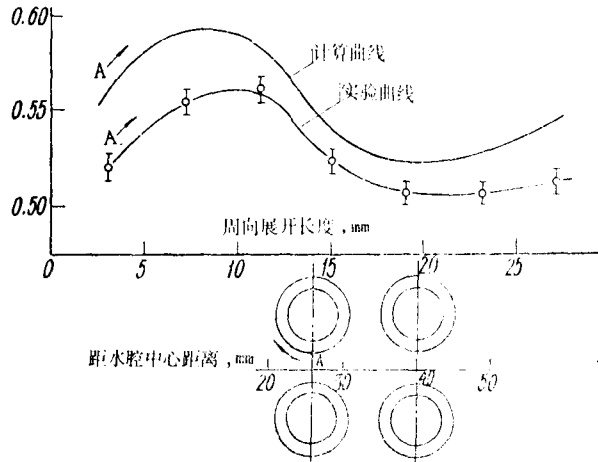


图 8 燃料棒周向通量分布的计算与实验值  
说明同图 6；A 点为周向分布起始测点。

## 四、结 束 语

我们在用热中子多组蒙特卡罗程序进行大量计算的同时，也利用了国内的一些实验装置进行了栅格参数的测量。从实验误差分析中给出：精细通量分布的测量误差在 5% 以内；吸收几率的测量误差在 1% 以内。当计算的中子历史数超过 30000 时，计算值的统计涨落完全在实验误差范围之内。用这种计算方法给出的组平均参数进行两维四群临界计算时，有效增殖因子的计算误差在 1% 以内。多年的实践已经充分证明了这种计算方法的可靠性。

因此,多组蒙特卡罗计算程序现已正式用于国内压水堆的工程设计。在处理体积小、吸收弱的区域时,尽管可以由程序直接算出该区的吸收几率,但统计涨落较大。此时,用不利因子和吸收截面推算出来的吸收几率还更为可靠一些。

这种方法的计算时间要比其他近似方法长一些。由于计算时采用了全反射边界条件,这就要求所计算的栅元足够多才可行。如果相邻两个燃料组件的成份不同,或者成份相同但组件位置是在靠近反射层的交界面处,这种计算方法就要多引进一部分误差。另外,计算中所采用的尼尔金散射核在低温时曾得到实验验证,它成功地解决了在轻水内由于氢和氧之间的化学键对氢原子散射的影响。但将尼尔金散射核用于 $200^{\circ}\text{C}$ 以上的高温状态时,其准确度还有待进一步证实。

多组蒙特卡罗方法现已广泛地用于反应堆的工程设计。在确定这种方法的物理模型时,曾得到阮可强同志的大力帮助。张孝泽、姚玲和许淑艳同志首先将压水反应堆设计所用的蒙特卡罗方法编制成计算机程序。以后又有张立吾、张玉琴、翁燕芬、钟友琴和张凯军等同志做了大量工作并给作者很大帮助。谨向这些同志表示感谢。

### 参 考 文 献

- [1] 张孝泽,原子能科学技术,1,20(1979).
- [2] J. R. Beyster et al., *Nucl. Sci. Eng.*, 9, 168 (1961).
- [3] 孟希哲,用重气体模型计算氧的微分散射截面,内部资料,1965年。
- [4] H. C. Honeck, BNL-821 (1963).
- [5] 孟希哲、张玉山,尼尔金散射核的计算,内部资料,1966年。
- [6] M. Nelkin, *Phys. Rev.*, 119, 741 (1960).
- [7] A. T. D. Butland et al., AEEW-R-701 (1970).
- [8] 铀水栅格精细通量分布测量,清华大学内部资料,1964年。
- [9] 非均匀栅格的精细通量分布测量,原子能研究所内部资料,1965年。

(编辑部收到日期:1980年8月2日)