



# 基于微观及宏观核数据的瞬发裂变中子谱评价研究

报告人：陈家豪

杨波、叶涛、郭海瑞、贾清刚、李瑞等

2024/08/24

散裂中子源科学中心



- 1. 研究背景
- 2. 基于随机抽样的微观宏观数据同步优化
- 3. 优化结果及讨论
- 4. 总结与展望

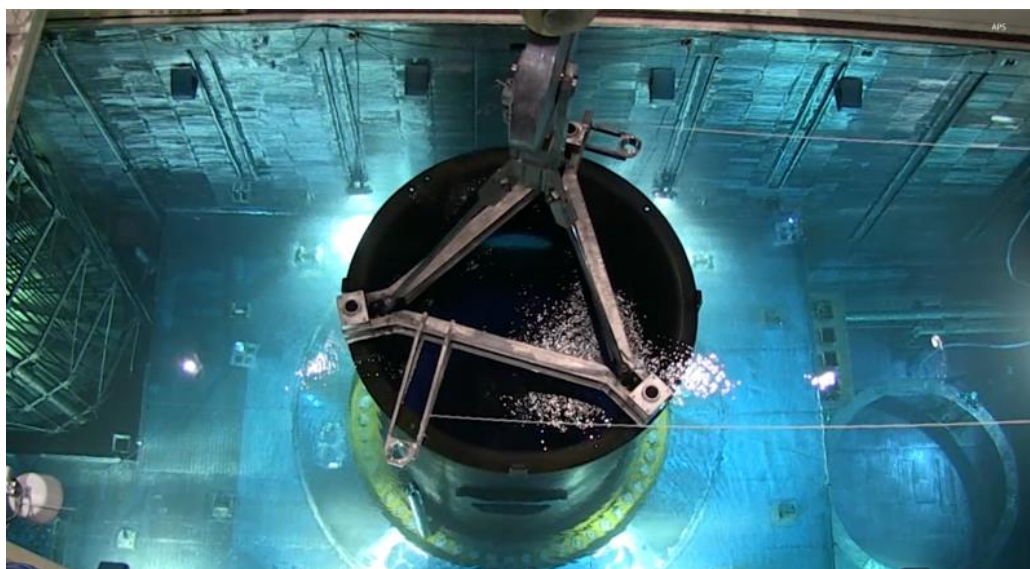


- 1. 研究背景
- 2. 基于随机抽样的微观宏观数据同步优化
- 3. 优化结果及讨论
- 4. 总结与展望

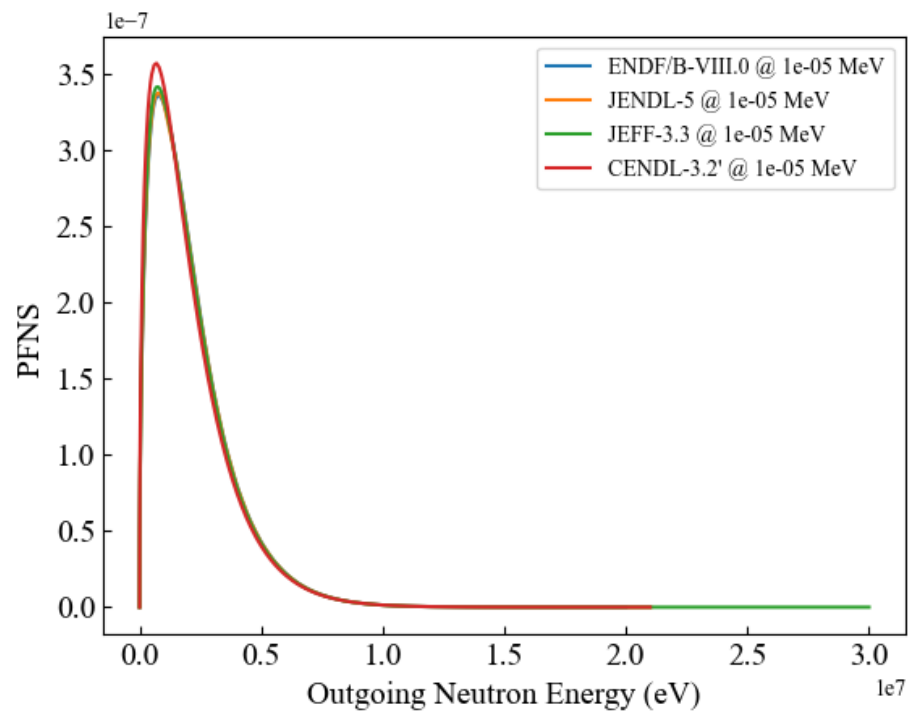
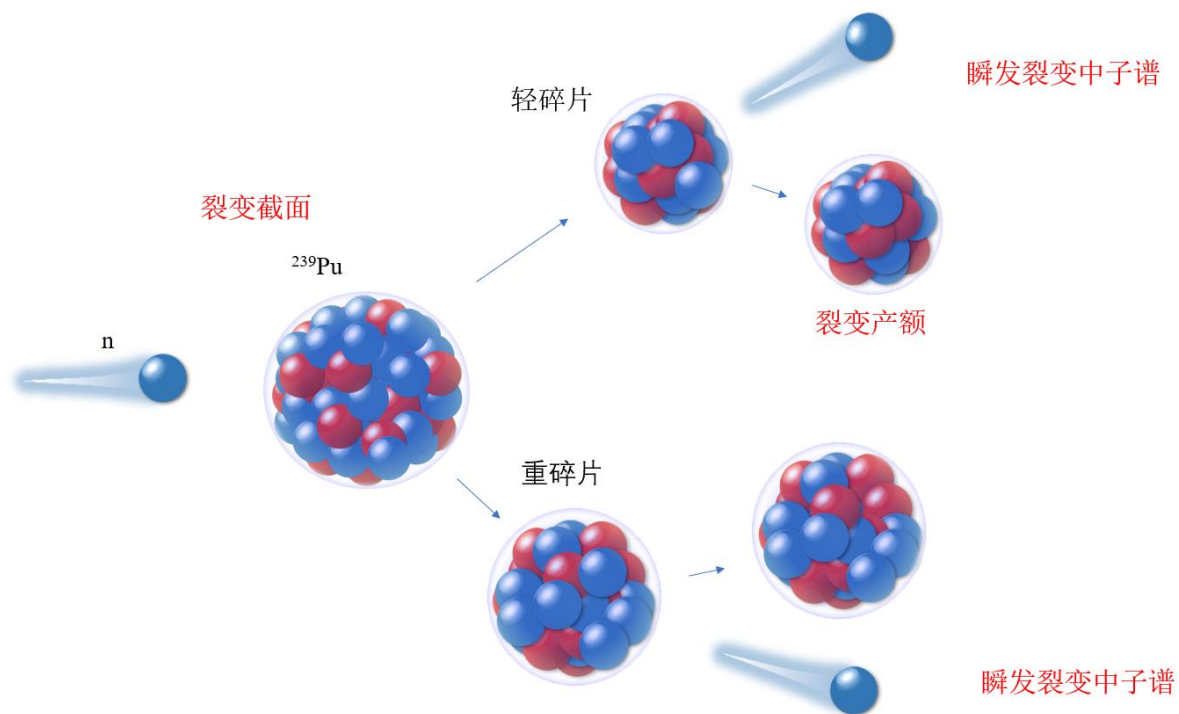


# 研究背景

- 原子核裂变过程会释放出大量能量，被广泛应用于**核能生产**领域。
- 核裂变是一个非常复杂的过程，涉及各种基本观测量，如：总裂变截面、裂变产额、**裂变中子/ $\gamma$ 能谱**、角分布、总动能等。
- 其中**瞬发裂变中子谱**作为一个**关键物理量**在反应堆计算和屏蔽、核燃料和核废物处理、裂变机制研究等方面均有重要作用



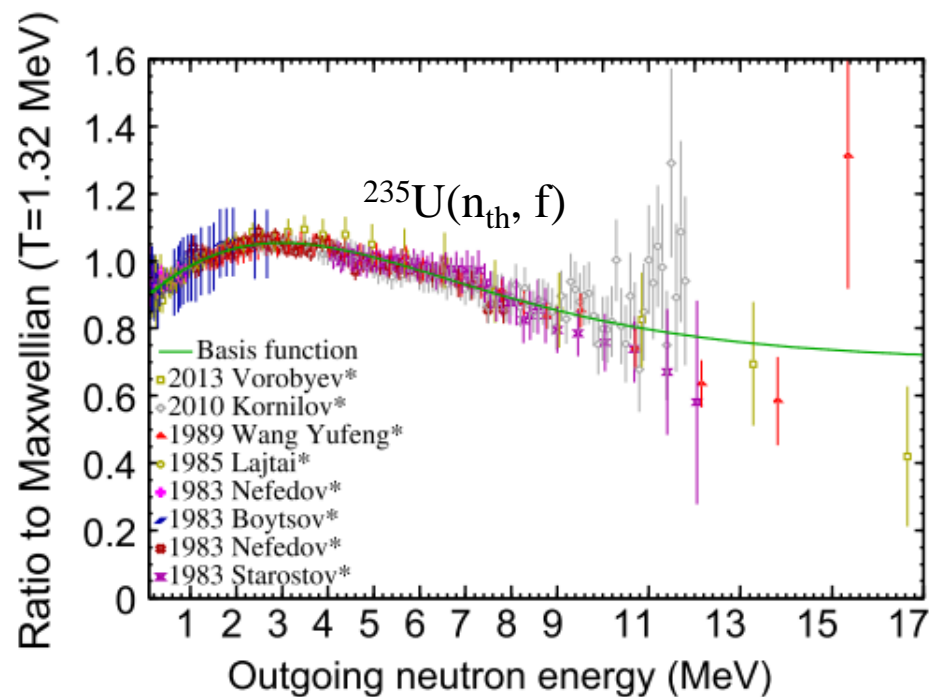
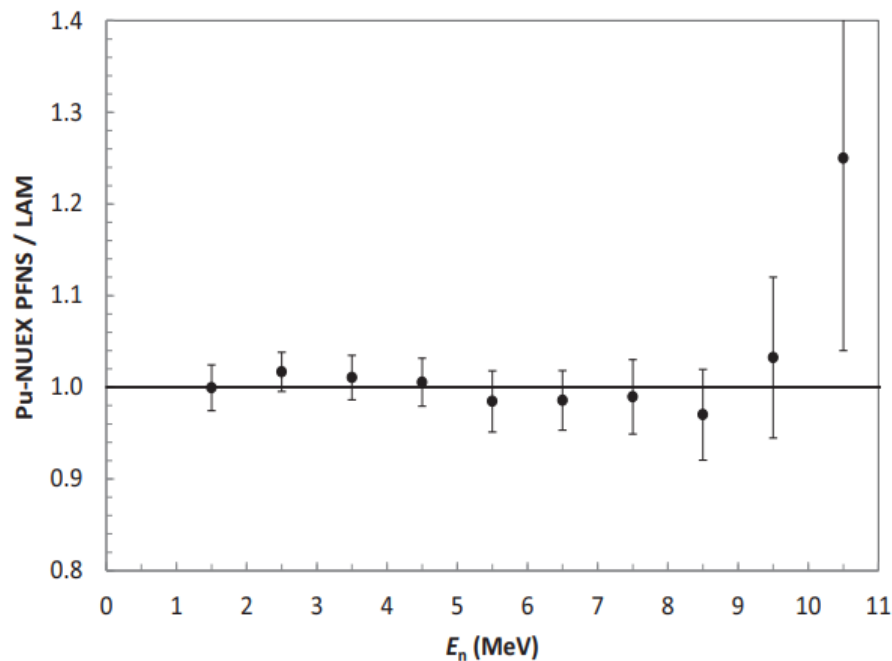
- 中子诱发原子核裂变一般经过下面的物理过程。
- 瞬发中子的归一化的能谱即为瞬发裂变中子谱（形状谱）





# 研究背景

- 瞬发裂变中子谱 (PFNS) 在核反应动力学的理论和实验研究中有重要应用。尽管几十年来已针对PFNS开展了大量研究，但较高能段的测量不确定度仍较大，且已有的实验、评价数据之间存在较大差异



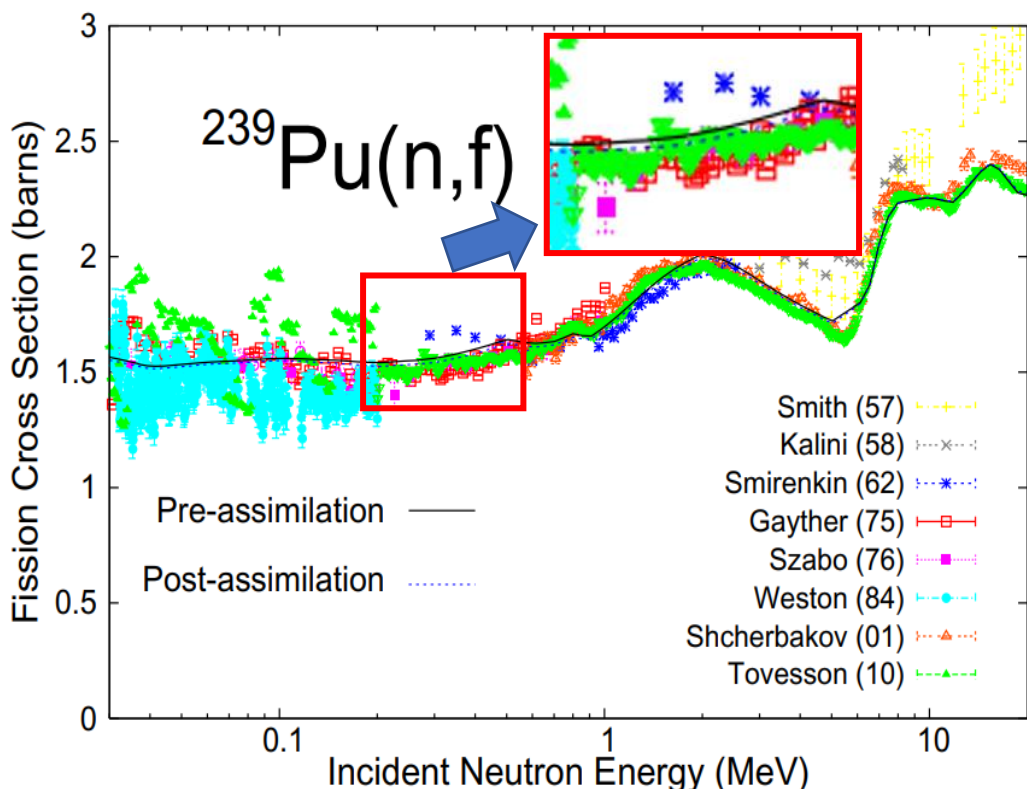
[1] J. P. Lestone et al. Nuclear Data Sheets 119 (2014) 213-216

[2] R. Capote, et al. Nuclear Data Sheets 131(2016)1-106



# 研究背景

- 针对中子诱发核裂变瞬发中子谱的评价计算，目前主要依赖于一系列唯象模型和微观模型。
- 常见唯象模型如：Los Alamos Model(LAM)
- 这种基于经验模型的评价尽管会考虑一些物理事实，但是依然存在较大的近似，如在 LAM 中通常只考虑一种衰变碎片组合。
- 由于微观实验数据通常误差较大，这种只考虑微观实验数据的结果的评价方式会引入较大的不确定度。



基于模型 (KALMAN-EMPIRE) 的微观宏观同化:

积分实验作为截面的全局约束, 利用  $k_{\text{eff}}$  对微观模型参数的敏感度信息, 加入KALMAN拟合中。宏观参数对微分截面的微小修改敏感, 这些修改远小于目前大多数微分数据集的不确定性。同化前和同化后截面的这些微小差异足以使  $k_{\text{eff}}$  与实验结果更加吻合。

$$k_{\text{eff}} = 1.00516 \pm 0.00008 \quad (\text{同化前})$$

$$k_{\text{eff}} = 0.99959 \pm 0.00008 \quad (\text{同化后})$$



# 研究背景

- 宏观数据测量精度相对较高，寻找宏观信息约束微观数据，可以发现异常数据及帮助修正系统误差。
- 利用中子输运程序将微观数据与宏观数据联系起来，即可充分利用现有数据对已有微观PFNS进行限制。
- 基于纯数据的方式可尽可能地避免模型自身不确定度引入的问题。
- 故考虑利用临界基准装置上的 $k_{\text{eff}}$ 作为检验物理量来优化已有数据。



- 1. 研究背景
- 2. 基于随机抽样的微观宏观数据同步优化
- 3. 优化结果及讨论
- 4. 总结与展望



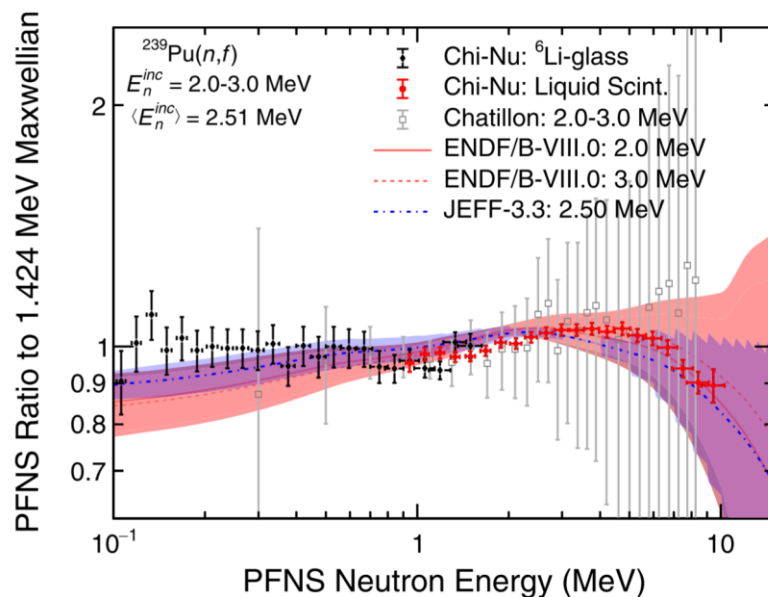
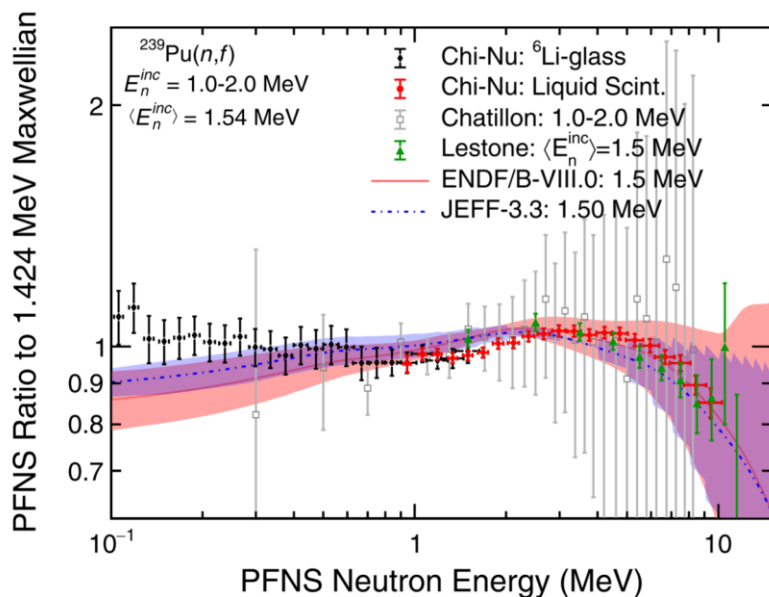
# 基于随机抽样的微观宏观数据同步优化

- 考虑到灵敏度分析的线性要求较为严格、以及利用现有简化唯象模型的物理描述不足以完全描述瞬发裂变中子谱这一物理量，我们采用**纯数据驱动的方式来利用宏观数据对PFNS进行约束。**
- 具体流程如下：
  - 从EXFOR中获取并处理最新的中子诱发 $^{239}\text{Pu}$ 裂变的瞬发中子谱
  - 产生协方差矩阵（自由产生/文献提供）
  - 利用协方差矩阵对原始微观数据进行随机扰动
  - 对扰动后的数据进行输运计算



# 数据预处理

- 以 $n + {}^{239}\text{Pu}$ 的瞬发裂变中子谱为例，选取最新的微观实验数据作为本次研究的重点，即Chi-Nu实验获得的 $n + {}^{239}\text{Pu}$ 的瞬发裂变中子谱
- 由于在EXFOR中的数据在低能 ( $<100 \text{ keV}$ )时误差极大且出现负值，为了保证后续抽样数据的稳定性，选择与文献报道一致的大于 $100 \text{ keV}$ 的实验数据进行研究



[1] K. Kelly et al. Physical Review C 102 (2020) 034615



# 协方差数据的产生

- 由于实验的结果往往不直接报道协方差数据，我们选取误差数据作为参考，利用假定的相关系数矩阵来产生协方差数据，假设元素相距越远其相关性越弱，这里使用元素位置编号作为假定的位置坐标，利用高斯函数对其进行相关性下降。

- 即 
$$\text{cor}_{ij} = e^{-0.5 * \left(\frac{\text{distance}}{\sigma}\right)^2}$$

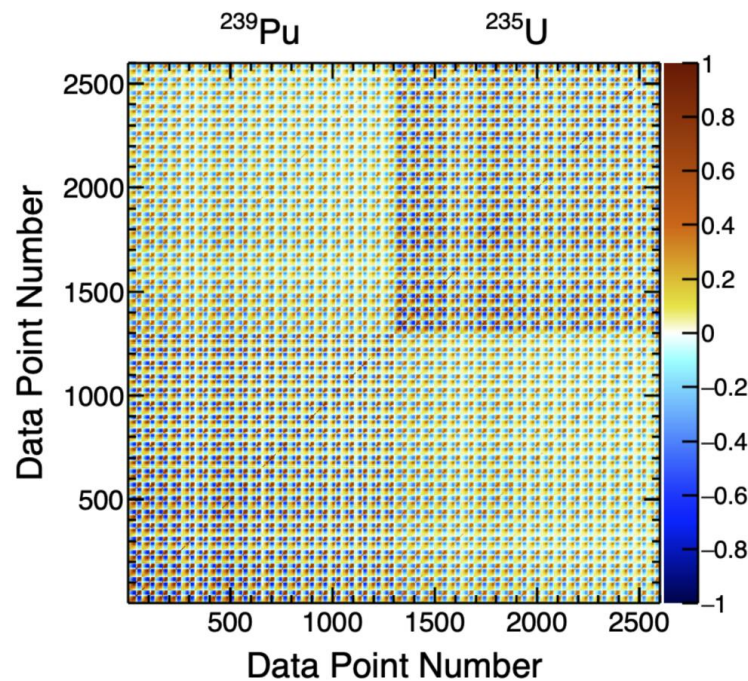
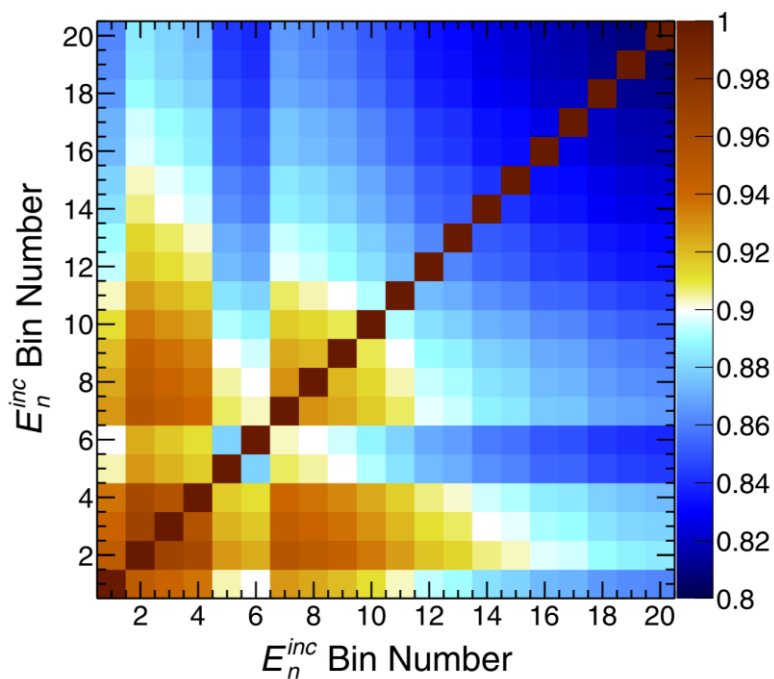
- $$\text{distance} = |i-x| \quad x \text{为所在行对角元坐标}$$

- 抽样时选取  $\sigma = 1$

- 如有三个数据点时：
$$\text{cor} = \begin{bmatrix} 1 & e^{-0.5} & e^{-0.5*2^2} \\ e^{-0.5} & 1 & e^{-0.5} \\ e^{-0.5*2^2} & e^{-0.5} & 1 \end{bmatrix}$$

# 协方差数据的产生

- 这里假定不同入射能量下的PFNS的相关系数矩阵相同，并且对于谱平均能量入射能量之间强相关，故假设对与PFNS，入射能量之间也是强相关的，因此可做如此近似。又为了体现这种强相关性，对于不同入射能做晃动抽样时选择相同的随机数种子，来近似这种强相关性。



[1] K. Kelly et al. Physical Review C 102 (2020) 034615

[2] K. Kelly et al. EPJ Web of Conferences 281, 00026 (2023)

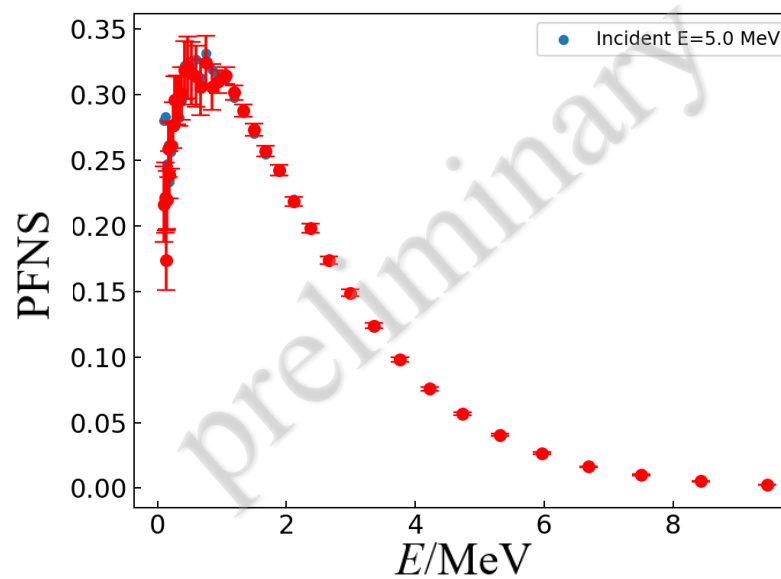
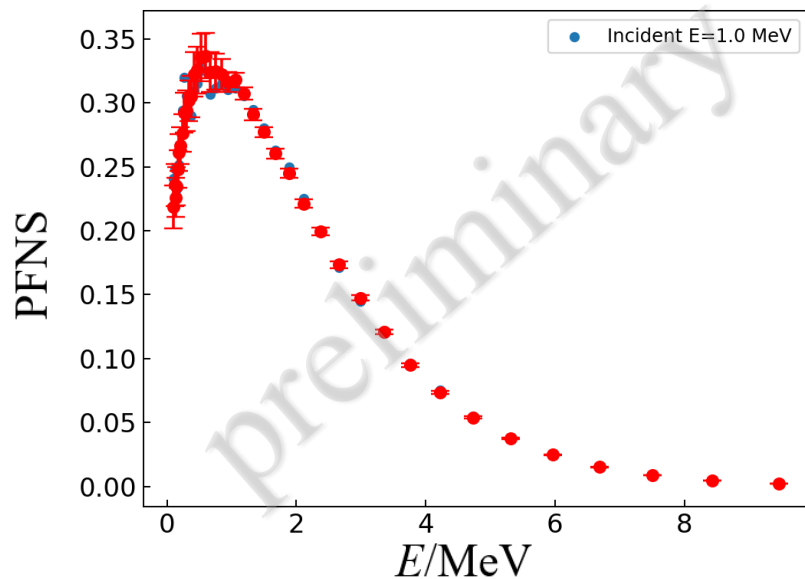


# 协方差数据的产生

- 利用从EXFOR读取的误差生成误差矩阵
- 则协方差矩阵

$$\text{COR}_{ij} = \frac{\text{COV}_{ij}}{\sqrt{\text{COV}_{ii}\text{COV}_{jj}}}$$

- 根据该协方差矩阵即可抽样得到一组经过扰动的PFNS





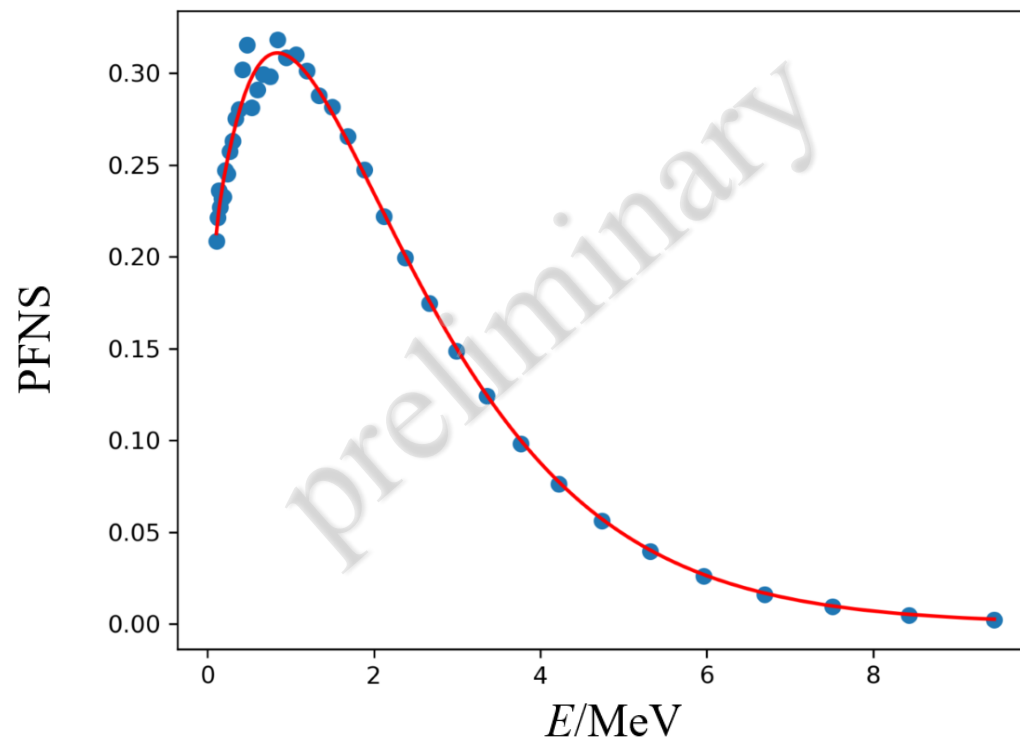
# 协方差数据的处理

- 获得该扰动的数据仍需保证实际使用PFNS的归一性以及非负性
- 故选用Maxwell-Watt函数对微扰后的数据进行拟合，如此得到的PFNS天然的保证了光滑、非负及归一性

$$f_{WM}(E) = w_M f_M(E, E_M) + (1 - w_M) f_W(E, a_W, b_W)$$

$$f_M(E, E_M) = K_M \sqrt{E} e^{-E/E_M}$$

$$f_W(E, a_W, b_W) = K_W e^{-E/a_W} \sinh \sqrt{b_W E}$$





# ENDF对应能量数据的产生

- 由于实验数据是包含了平均入射能量为1.54~19.56 MeV的20个入射能点的PFNS，而ENDF/B-VIII.0是包含了 $1e^{-5}$ ~20 MeV的23个入射能点的数据，这里对于处于实验数据范围内的数据，我们选择利用两个能谱进行线性内插得到新的对应于ENDF/B-VIII.0入射能点的PFNS。
- 对于实验点外的入射能量只能外推，依然选择线性外推并始终保证谱是非负且归一的。



# 批量模拟

- 通过上述方法则可以产生大量基于实验数据均值和误差得到的微扰PFNS数据，利用NJOY将这些PFNS加工成ACE格式的数据，交由中子输运程序JMCT来进行输运计算，为了保证输运过程的误差尽可能小、同时尽可能覆盖实验数据所在区域，我们选择几何形状简单的5个临界基准算题：

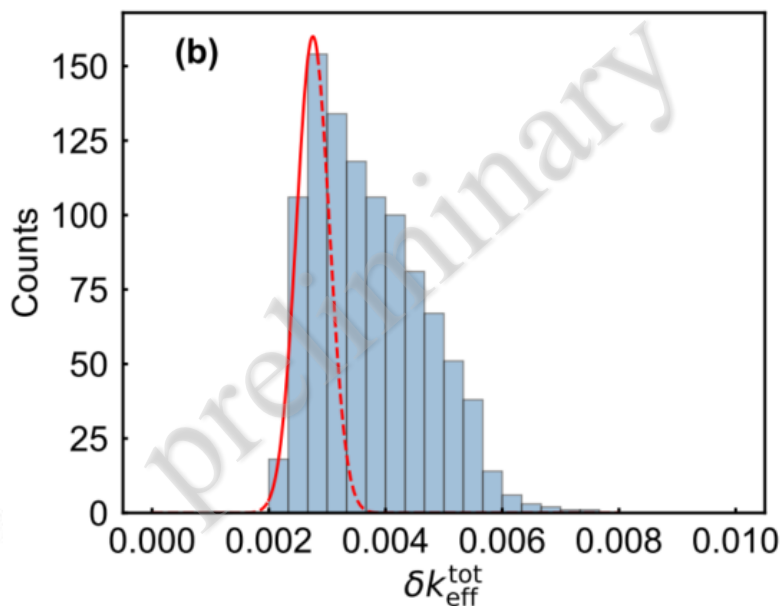
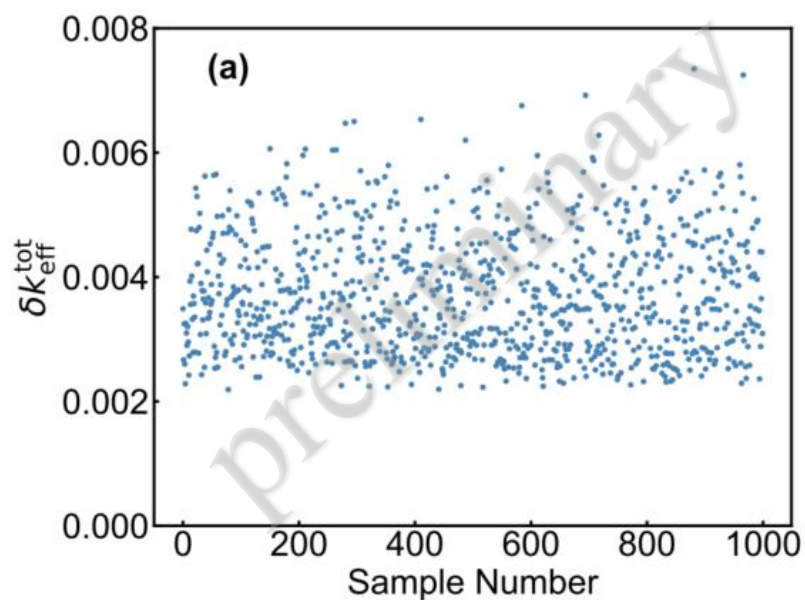
算题	$k_{\text{eff}}$ Benchmark
Pu-Met-Fast-002	1.000
Pu-Met-Fast-003	1.000
Pu-Met-Fast-008	1.000
Pu-Met-Fast-009	1.000
Pu-Met-Fast-010	1.000

- 通过替换PFNS计算输运、得到临界基准装置的 $k_{\text{eff}}$ 并将其于Benchmark值进行对比，得到最优的PFNS微扰数据



# 模拟结果

- 利用上面产生的数据计算1000组微扰PFNS得到下图所示的结果
- 纵轴为  $\Delta k_{\text{eff}} = \frac{\sum_{i=1}^5 |k_i - 1|}{5}$
- 并可得到一组最优的PFNS参数，使五个临界基准装置的  $k_{\text{eff}}$  计算结果

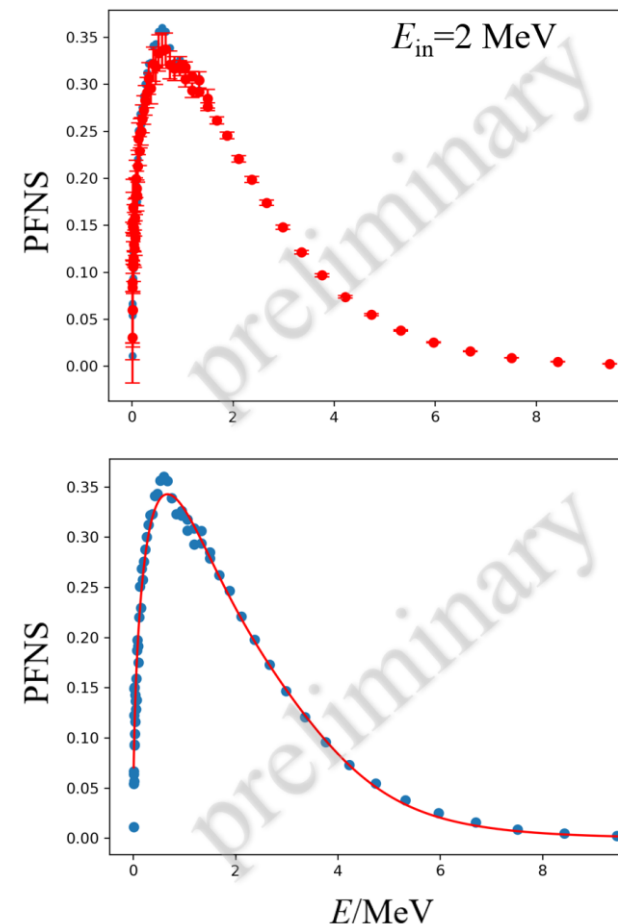
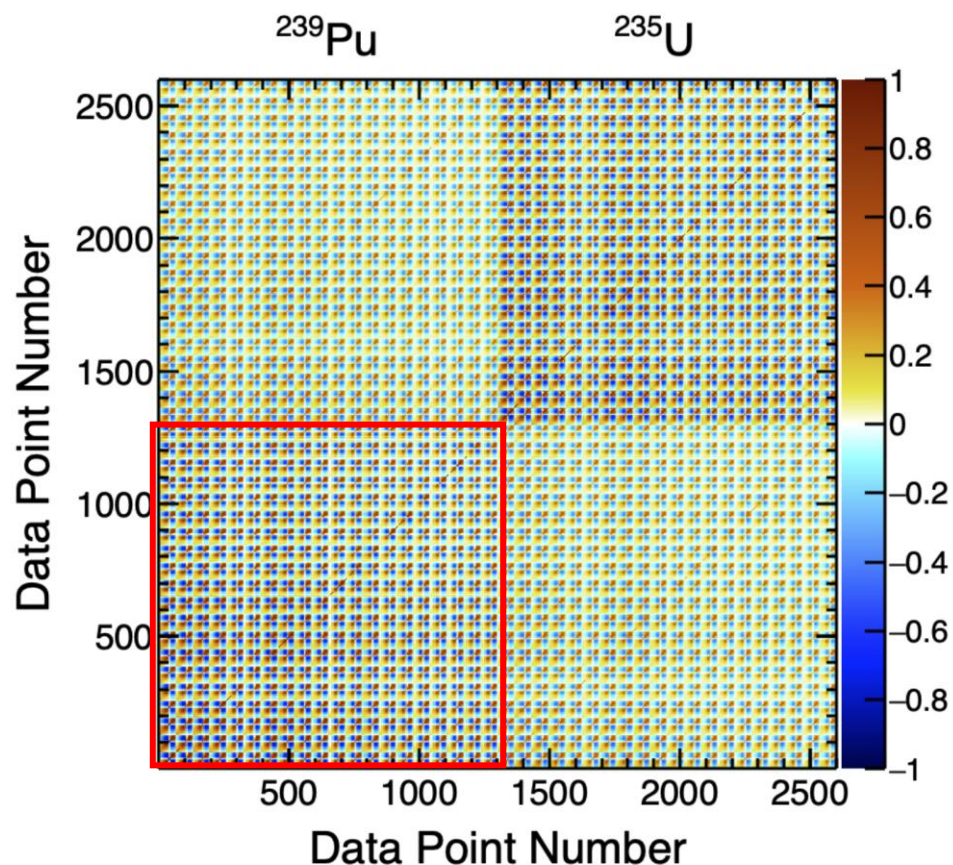


最优  $\Delta k_{\text{eff}} = 0.00218918$

ENDF/B-VIII.0

$\Delta k_{\text{eff}} = 0.00298838$

- 由于最新的实验提供了协方差矩阵信息，故亦可直接使用文献提供的协方差矩阵，结合之前的方法进行抽样

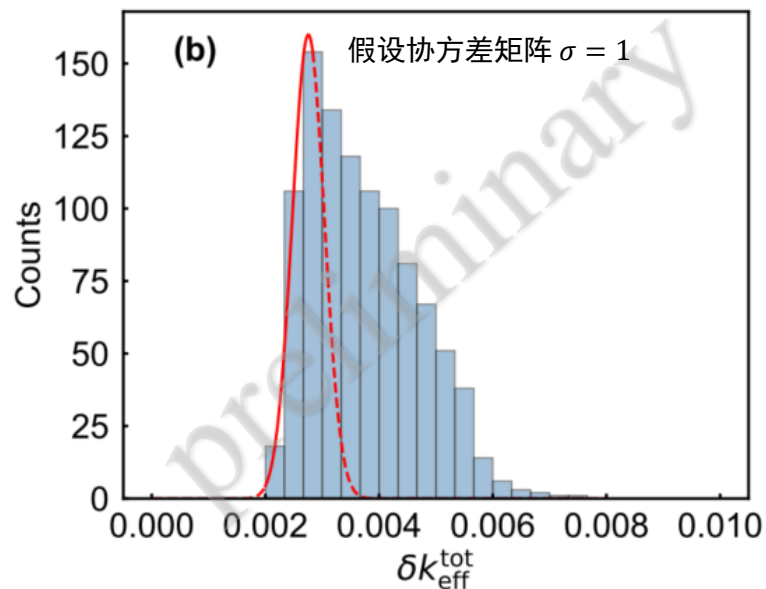
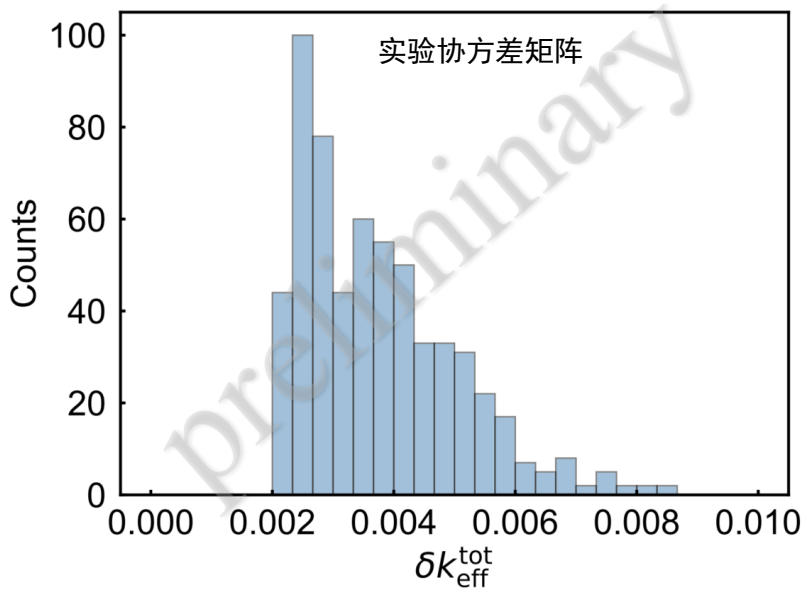


[1] K. Kelly et al. EPJ Web of Conferences 281, 00026 (2023)



# 模拟结果

- 利用实验提供的协方差矩阵，根据之前的方式来抽样产生600组PFNS数据。基于实验提供的协方差矩阵进行的抽样结果在 $\delta k_{\text{eff}}^{\text{tot}}$ 附近分布更多，有利于抽样得到最优值。



$$\text{最优} \Delta k_{\text{eff}} = 0.00207976$$

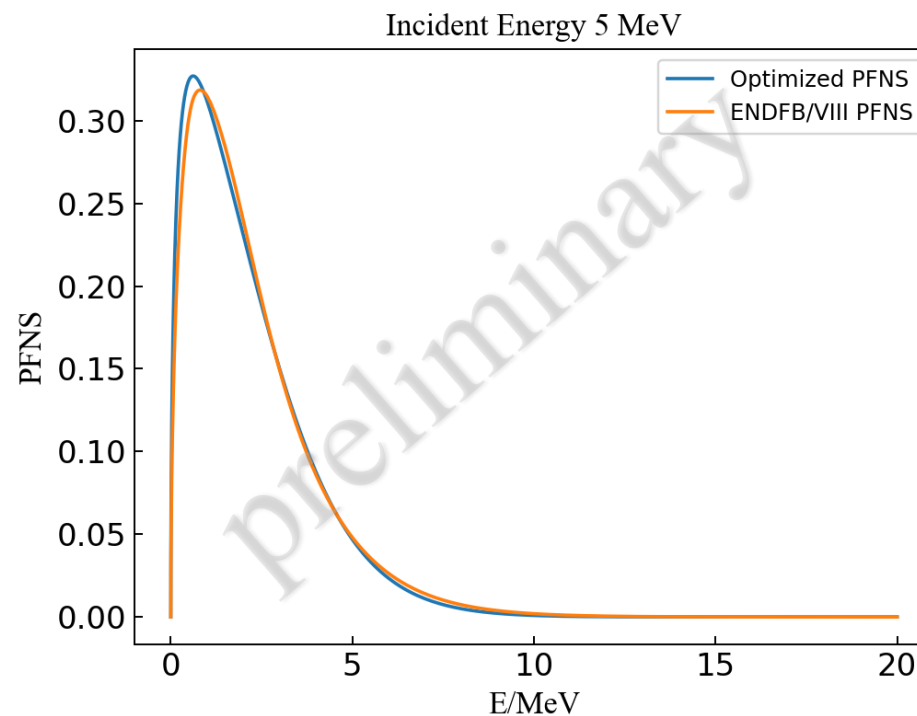
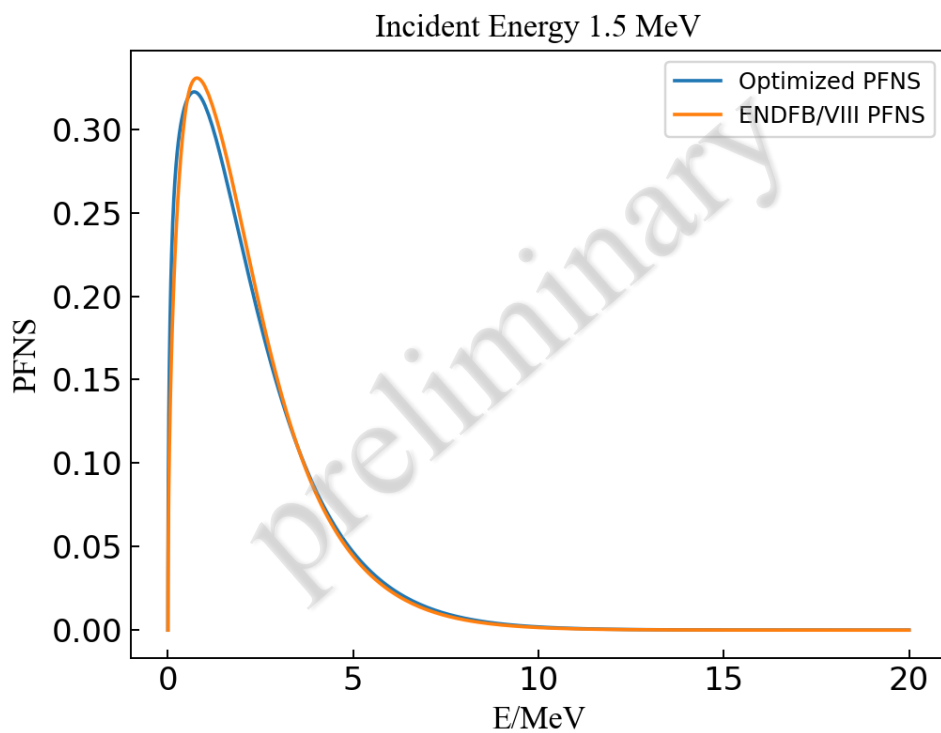
ENDF/B-VIII.0

$$\Delta k_{\text{eff}} = 0.00298838$$



# 最优结果

- 在上面抽样中得到的数据，基于实验提供的协方差矩阵的随机抽样，其PFNS谱形如下所示：





# 优化结果及讨论

- 利用随机抽样的方式可以得到对应的PFNS最优值。这种对于PFNS的微调一般在微观实验的误差带之内，但是这种小变化可以有效地改善 $k_{\text{eff}}$ 的计算结果。
- 随着更多次数的抽样的加入，可以获得更加同时符合微观和宏观实验数据的PFNS谱。
- 基于实验提供的协方差矩阵得到的抽样在低 $\delta k_{\text{eff}}^{\text{tot}}$ 分布更多，即有更高的抽样效率，但是对于没有提供足够实验信息的实验，采取假定相关系数矩阵的方式也可以在有限次计算得到优化的结果



# 总结与展望

- 目前已经基于随机抽样的方式，根据假设或实验提供的相关系数矩阵结合实验误差对PFNS进行扰动，计算了每组PFNS的5个临界基准装置的 $k_{\text{eff}}$ 值，得到了一组最佳的PFNS。
- 所得的优化结果均收敛到0.002附近，并不是“0”，因此对于ENDF/B-VIII.0，仅调整PFNS无法使得 $k_{\text{eff}}$ 与Benchmark值相同。这意味着可能需要对其他物理量如瞬发裂变中子多重数 $\bar{\nu}$ 、裂变截面等物理量进行联合调整。
- 这种微观宏观同步优化的思想亦可应用于多物理量的验证与优化。



谢谢大家!