

燃耗截面基本库对输运燃耗耦合计算的 影响分析

杨万奎 袁宝新 黄 欢 王冠博 张松宝

(中国工程物理研究院核物理与化学研究所 绵阳 621900)

摘要 基于蒙特卡罗中子输运程序和 ORIGEN2 点燃耗程序的蒙特卡罗输运燃耗耦合计算方法应用广泛。但现有评价库中子连续截面的核素个数远小于燃耗计算涉及到的核素数量,即通过输运计算得到的燃耗截面不足以完全替代燃耗计算的基本库。采用经过栅元验证的蒙特卡罗燃耗程序 MCBMPI,对最新的 VERA 燃耗计算基准题进行验证计算,对比分析不同的燃耗截面基本库对输运燃耗计算的影响。分析结果表明:1)在实际应用中尽量不要采用典型热中子截面库,会带来较大偏差;2)在燃耗计算核素替换较多的情况下,对该基准题而言,选取典型压水堆基本库还是典型快堆基本库,对结果影响不大,二者 k_{eff} 偏差在 8% 以内,燃耗末期 ^{235}U 偏差在 4% 以内, ^{135}Xe 偏差在 5% 左右;3)建议选取与研究对象能谱相近的基本库。

关键词 燃耗截面, 蒙特卡罗燃耗, MCBMPI, VERA 基准题

中图分类号 TL99

DOI: 10.11889/j.0253-3219.2020.hjs.43.040004

Impact analysis of basic burnup cross section on coupled calculation of neutron transport burnup

YANG Wankui YUAN Baoxin HUANG Huan WANG Guanbo ZHANG Songbao

(Institute of Nuclear Physics & Chemistry, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

Abstract [Background] Monte Carlo depletion method is based on Monte Carlo neutron transport code and ORIGEN2 point depletion code, it is widely used for neutron transport burnup. However, the continuous energy neutron cross sections of the nuclides in the current evaluation library are less than the cross section used in the depletion calculation. Therefore, the depletion cross sections generated by Monte Carlo transport calculation cannot replace all the cross sections in the basic depletion library. [Purpose] This study aims to analyse the influence of different basic depletion libraries on coupled calculation of neutron transport burnup. [Methods] The Monte Carlo transport depletion code MCBMPI (Monte Carlo Burnup code in MPI version) was employed to calculate the new VERA (Virtual Environment for Reactor Applications) depletion benchmark. The influence of different basic burnup cross section on the burnup calculation in transportation was compared and analyzed. [Results] Calculation results show that relative error of k_{eff} is less than 8% in all the depletion stages, and the mass variation of ^{235}U and ^{135}Xe are less than 4% and 5% respectively, in the last depletion stage. The variation between thermal and fast neutron spectrum cross section library is small in this benchmark. [Conclusions] It is recommended to select a basic depletion cross section library containing similar neutron spectrum instead of a typical thermal neutron cross section library in real application.

Key words Depletion cross section, Monte Carlo depletion, MCBMPI, VERA benchmark

基于蒙特卡罗输运程序与点燃耗计算程序
ORIGEN2^[1]的输运燃耗耦合计算应用广泛^[2-5]。中

子输运计算生成燃耗截面,供燃耗计算调用,但输运
计算能计算的燃耗截面有限,较新的 ENDF/B-VII.0

第一作者: 杨万奎, 男, 1988 年出生, 2013 年于中国工程物理研究院获硕士学位, 从事反应堆物理及高性能计算研究

收稿日期: 2020-01-16, 修回日期: 2020-02-22

First author: YANG Wankui, male, born in 1988, graduated from China Academy of Engineering Physics with a master's degree in 2013, focusing on reactor physics and high performance computing

Received date: 2020-01-16, revised date: 2020-02-22

中子库仅包含 393 个核素, ENDF/B-VII.1 中子库增加至 423 个核素。而燃耗计算相关的核素约 1 700 种核素, 因此, 必然有大部分核素的截面是沿用 ORIGEN2 自带的燃耗基本库进行燃耗计算。因此, 分析不同基本燃耗库对输运燃耗计算的结果影响具有重要意义。

1 ORIGEN2 的燃耗基本库

ORIGEN2 的燃耗基本库由文献[1]给出。根据不同的研究对象, ORIGEN2 配置了不同的截面库, 每个截面库分为“活化产物”、“锕系及其子体”以及“裂变产物”三大类截面, 分别给予不同的编号进行区分。研究对象涵盖了当前的大部分堆型, 包括压水堆、沸水堆、快堆以及典型热中子等。

不失代表性, 选取的截面库需涵盖热谱和快谱, 同时为了减小计算量, 分别选取 Lib201~Lib203 的热中子截面库、Lib204~Lib206 的典型压水堆截面库、Lib331~Lib333 的典型快堆截面库进行计算对比分析。

2 VERA 基准题

采用美国 CASL 计划发布的 VERA 燃耗计算基准题^[6]进行影响因素分析。该基准题库包含栅元级、组件级多类型的不同组合, 形成了一系列基准题。本文旨在分析燃耗基本库对输运燃耗耦合计算的影响, 同时考虑计算耗时的因素, 选取几何较为简单的栅元级基准题进行建模计算。

选取的 1c 基准题几何示意图如图 1 所示, 高度为 4 cm, 其描述如表 1 所示。

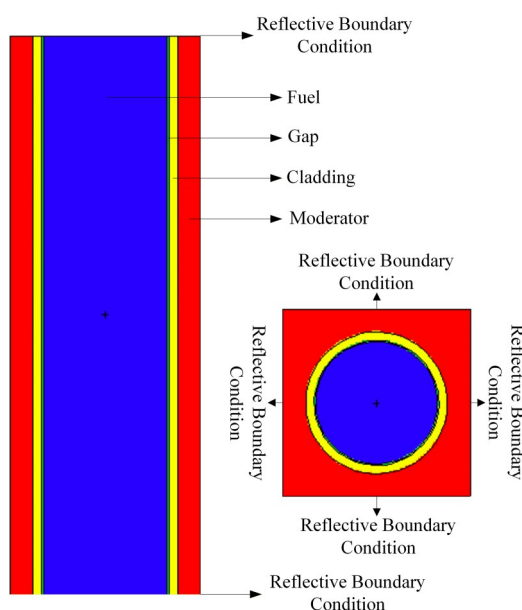


图1 VERA-1c 基准题几何示意图
Fig.1 Geometry sketch map of benchmark VERA-1c

表1 VERA-1c 基准题描述
Table 1 Description of Benchmark VERA-1c

项目 Item	参数名称 Parameter	参数值 Value
燃料 Fuel	材料 Material	UO ₂ ($\epsilon=3.1\%$)
	密度 Density / g·cm ⁻³	10.257
	芯块半径 Pellet radius / cm	0.409 6
	温度 Temperature / K	900
包壳 Cladding	材料 Material	Zircaloy-4
	密度 Density / g·cm ⁻³	6.560
	内半径 Inner radius / cm	0.418
	外半径 Outer radius / cm	0.475
慢化剂 Moderator	材料 Material	硼酸 Boric acid
	密度 Density / g·cm ⁻³	0.700
	温度 Temperature / K	600

3 输运燃耗计算相关设置

3.1 温度相关截面

温度相关的截面制作, 采用最新的开源 NJOY2016^[7]程序, 基于 ENDF/B-VII.1 中子库, 制作基准题中要求的温度为 900 K 和 600 K 的连续能谱 ace 截面库。典型的计算流程如图 2 所示。

其中, MODER 模块进行文件格式转换, RECONR 进行共振重构计算, BROADR 进行多普勒展宽, HEATR 进行反应热计算, GASPR 进行自由气体模型处理, PURR 进行不可分辨共振自屏计算, ACER 进行格式转换输出为 ace 格式截面。

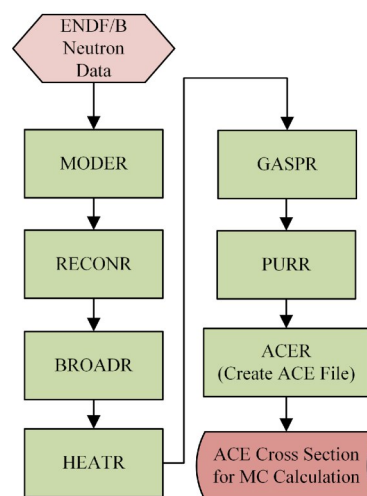


图2 NJOY2016 截面制作流程图
Fig.2 Flow chart of NJOY2016 cross section generation

3.2 时间步长

时间步长的设定如表 2 所示。根据功率密度, 以及典型的 UO₂ 高燃耗深度, 计算至 100 MW·d⁻¹·kg⁻¹ (U)。

同时,由于中子毒物Xe、Sm的核子密度在寿期初(~2 d)的变化较为剧烈,需要较小的时间步长以降低计算误差,并且为防止出现因燃耗时间步长设置不

合理可能出现的数值氙振荡^[8-9],在燃耗初期采用小时间步长,基本达到氙平衡后逐步增大时间步长,详细的时间步长设置如表2所示。

表2 VERA-1c基准题计算的时间步长设置
Table 2 Time Step Setup of Benchmark VERA-1c Calculation

步长 Step	燃耗 Burnup / MW·d ⁻¹ ·kg ⁻¹	步长 Step	燃耗 Burnup / MW·d ⁻¹ ·kg ⁻¹	步长 Step	燃耗 Burnup / MW·d ⁻¹ ·kg ⁻¹
1	0.000 034 7	23	4.0	45	47.5
2	0.017 7	24	5.0	46	50.0
3	0.035 0	25	6.0	47	52.5
4	0.052 3	26	7.0	48	55.0
5	0.069 7	27	8.0	49	57.5
6	0.087 0	28	9.0	50	60.0
7	0.012 2	29	10.0	51	62.5
8	0.015 6	30	11.0	52	65.0
9	0.019 1	31	12.5	53	67.5
10	0.022 6	32	15.0	54	70.0
11	0.026 0	33	17.5	55	72.5
12	0.033 0	34	20.0	56	75.0
13	0.039 9	35	22.5	57	77.5
14	0.046 8	36	25.0	58	80.0
15	0.053 8	37	27.5	59	82.5
16	0.060 7	38	30.0	60	85.0
17	0.078 0	39	32.5	61	87.5
18	0.1	40	35.0	62	90.0
19	0.5	41	37.5	63	92.5
20	1.0	42	40.0	64	95.0
21	2.0	43	42.5	65	97.5
22	3.0	44	45.0	66	100.0

4 计算结果及分析

4.1 有效增殖因数 k_{eff}

计算得到系统的有效增殖因数(k_{eff})随燃耗的变化趋势如图3所示。图3中Lib201表示典型热中子截面基本库,Lib204表示典型压水堆基本库,Lib331表示典型快堆基本库。由图3可知:1)典型压水堆基本库和典型快堆基本库的计算结果相差不大;2)采用典型热中子截面基本库得到的 k_{eff} 比典型压水堆和典型快堆得到的 k_{eff} 要大。由于该基准题为压水堆燃料棒栅元,故选取典型压水堆基本库计算结果作为参考解。

为定量比较三个基本库之间的差别,其余两个基本库得到的 k_{eff} 与参考解之间的相对误差随燃耗的变化趋势如图4所示。图4中,RE201表示典型热中子截面基本库计算得到的 k_{eff} 与参考解之间的相对误差,RE331表示典型快堆基本库计算得到的 k_{eff} 与参考解之间的相对误差。通过定量比较可知:1)

RE201表现出完全正偏差,即基于Lib201基本库计算得到的 k_{eff} 总是要比Lib204库的 k_{eff} 大,最大处接近2%;2)RE331表现出正负波动,且波动绝对值大部分在5‰以内,最大偏差为8‰,即Lib331库和Lib204库得到的 k_{eff} 相差较小,在整个燃耗范围内,大部分可保持在0.000 5以内。

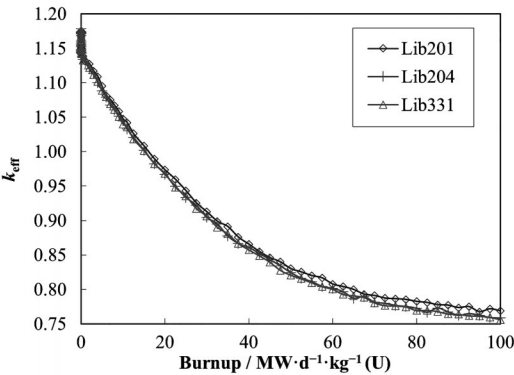


图3 系统 k_{eff} 随燃耗的变化
Fig.3 Variation of k_{eff} with burnup

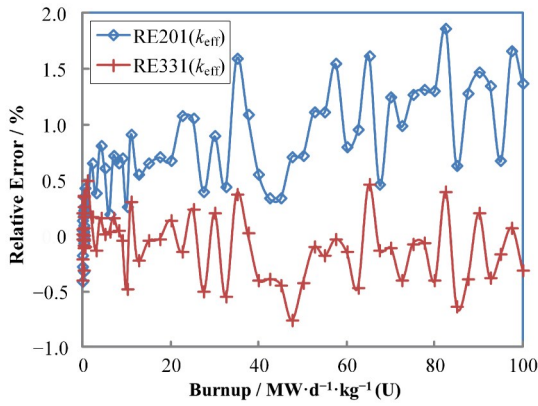


图4 基本库之间的 k_{eff} 相对误差随燃耗的变化
Fig.4 Variation of k_{eff} relative errors between basic depletion libraries with burnup

4.2 典型核素含量

计算得到 ^{235}U 和 ^{135}Xe 的质量随燃耗的变化趋势分别如图5和图6所示。三个基本库之间的定量差别如图7所示。结合图5~图7可知:1)三个库计算得到的 ^{235}U 差别较小,但Lib201库计算得到的 ^{235}U 质量与Lib204库计算得到的 ^{235}U 质量之间的相对误差随燃耗的增加而呈现增大的趋势,最大接近8%;

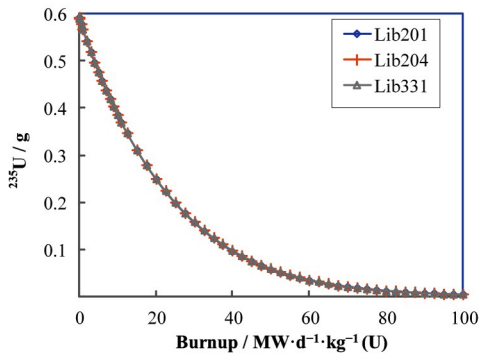


图5 ^{235}U 随燃耗的变化
Fig.5 Variation of ^{235}U with burnup

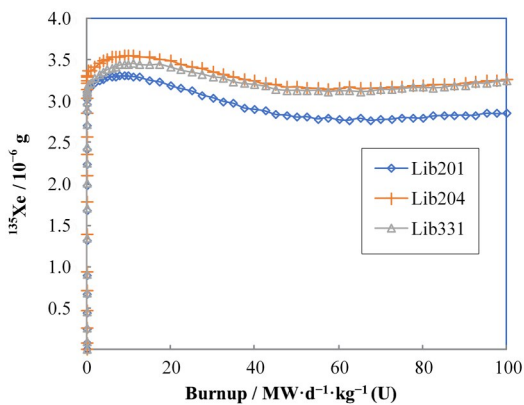


图6 ^{135}Xe 随燃耗的变化
Fig.6 Variation of ^{135}Xe with burnup

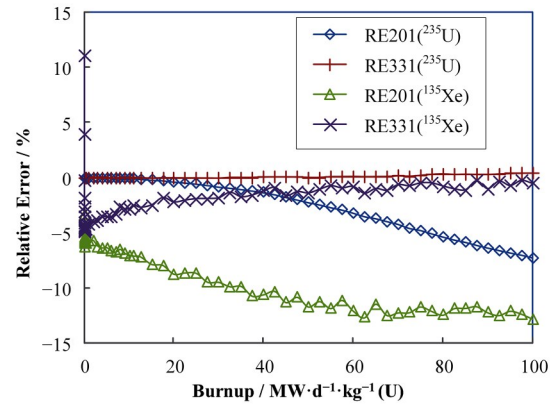


图7 基本库之间的核素质量相对误差随燃耗的变化
Fig.7 Variation of nuclides mass relative errors among basic depletion libraries with burnup

而Lib331库和Lib204库的相对误差基本保持较低水平,均小于4%;2) ^{135}Xe 差别较大,尤其是Lib201库明显小于其余两个库,同样以Lib204库为参考,则Lib201库差别最大处要比Lib204库低13%,而Lib331库与Lib204库之间的差别在逐渐缩小,到燃耗末期差别仅为5%。

4.3 计算结果对比

与已有的基准题结果进行对比,2018年韩国原子能研究所进行了该基准题的计算,给出了 k_{eff} 随燃耗的变化。二者的对比如图8所示。图8中的MCBMPI为本文采用的蒙特卡罗输运燃耗计算程序,McCARD为韩国人的计算程序,对该基准题其燃耗深度计算至60 $\text{MW}\cdot\text{d}^{-1}\cdot\text{kg}^{-1}(\text{U})$ ^[10],而本文的燃耗深度根据高燃耗要求计算至100 $\text{MW}\cdot\text{d}^{-1}\cdot\text{kg}^{-1}(\text{U})$,二者可对比的燃耗部分吻合得较好。

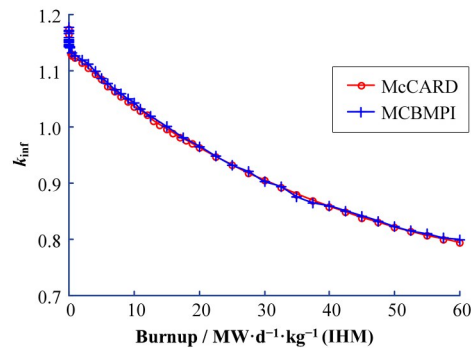


图8 与基准题已有结果的比较
Fig.8 Comparison of calculation results with benchmark results

4.4 截面替换核素明细

由于替换核素的截面直接影响计算结果,并且目前的截面替换策略是每个燃耗步根据核素的质量及中子吸收份额进行动态调整,对该基准题而言是最后一个燃耗步替换的核素截面最多,因此作为参

考,本文给出采用 Lib204 库计算时的最后一个燃耗 3 所示。涉及到 62 种锕系核素及其子体和 192 种裂变的锕系核素及裂变产物核素截面替换情况,如表 变产物核素。

表 3 最后一个燃耗步截面替换的核素

Table 3 Nuclides of replaced cross section in last burnup time step

锕系元素 Actinides			裂变产物 Fission Products								
1	²⁰⁶ Pb	49	²⁴⁵ Cm	1	³ H	49	⁹⁷ Mo	97	¹²⁴ Sn	145	¹⁴³ Ce
2	²⁰⁷ Pb	50	²⁴⁶ Cm	2	⁶ Li	50	⁹⁸ Mo	98	¹²⁴ Sb	146	¹⁴³ Pr
3	²⁰⁸ Pb	51	²⁴⁷ Cm	3	⁷ Li	51	⁹⁹ Mo	99	¹²⁴ Te	147	¹⁴³ Nd
4	²⁰⁹ Bi	52	²⁴⁸ Cm	4	⁹ Be	52	⁹⁹ Tc	100	¹²⁵ Sn	148	¹⁴⁴ Ce
5	²²³ Ra	53	²⁴⁹ Cm	5	⁶⁹ Ga	53	⁹⁹ Ru	101	¹²⁵ Sb	149	¹⁴⁴ Nd
6	²²⁴ Ra	54	²⁵⁰ Cm	6	⁷¹ Ga	54	¹⁰⁰ Mo	102	¹²⁵ Te	150	¹⁴⁵ Nd
7	²²⁶ Ra	55	²⁴⁹ Bk	7	⁷² Ge	55	¹⁰⁰ Ru	103	¹²⁶ Sn	151	¹⁴⁶ Nd
8	²²⁷ Ac	56	²⁵⁰ Bk	8	⁷³ Ge	56	¹⁰¹ Ru	104	¹²⁶ Sb	152	¹⁴⁷ Nd
9	²²⁷ Th	57	²⁴⁹ Cf	9	⁷⁴ Ge	57	¹⁰² Ru	105	¹²⁶ Te	153	¹⁴⁷ Pm
10	²²⁸ Th	58	²⁵⁰ Cf	10	⁷⁵ As	58	¹⁰³ Ru	106	¹²⁷ Te	154	¹⁴⁷ Sm
11	²²⁹ Th	59	²⁵¹ Cf	11	⁷⁶ Ge	59	¹⁰³ Rh	107	¹²⁷ I	155	¹⁴⁸ Nd
12	²³⁰ Th	60	²⁵² Cf	12	⁷⁶ Se	60	¹⁰⁴ Ru	108	¹²⁸ Te	156	¹⁴⁸ Pm
13	²³² Th	61	²⁵³ Cf	13	⁷⁷ Se	61	¹⁰⁴ Pd	109	¹²⁸ Xe	157	¹⁴⁸ Sm
14	²³³ Th	62	²⁵⁴ Cf	14	⁷⁸ Se	62	¹⁰⁵ Ru	110	¹²⁹ Te	158	¹⁴⁹ Pm
15	²³⁴ Th			15	⁷⁹ Se	63	¹⁰⁵ Rh	111	¹²⁹ I	159	¹⁴⁹ Sm
16	²³¹ Pa			16	⁷⁹ Br	64	¹⁰⁵ Pd	112	¹²⁹ Xe	160	¹⁵⁰ Nd
17	²³² Pa			17	⁸⁰ Se	65	¹⁰⁶ Ru	113	¹³⁰ Te	161	¹⁵⁰ Sm
18	²³³ Pa			18	⁸⁰ Kr	66	¹⁰⁶ Pd	114	¹³⁰ I	162	¹⁵¹ Pm
19	²³² U			19	⁸¹ Br	67	¹⁰⁷ Pd	115	¹³⁰ Xe	163	¹⁵¹ Sm
20	²³³ U			20	⁸² Se	68	¹⁰⁷ Ag	116	¹³¹ I	164	¹⁵¹ Eu
21	²³⁴ U			21	⁸² Kr	69	¹⁰⁸ Pd	117	¹³¹ Xe	165	¹⁵² Sm
22	²³⁵ U			22	⁸³ Kr	70	¹⁰⁸ Cd	118	¹³² Te	166	¹⁵² Eu
23	²³⁶ U			23	⁸⁴ Kr	71	¹⁰⁹ Ag	119	¹³² Xe	167	¹⁵² Gd
24	²³⁷ U			24	⁸⁵ Kr	72	¹¹⁰ Pd	120	¹³³ Xe	168	¹⁵³ Sm
25	²³⁸ U			25	⁸⁵ Rb	73	¹¹⁰ Ag	121	¹³³ Cs	169	¹⁵³ Eu
26	²³⁹ U			26	⁸⁶ Kr	74	¹¹⁰ Cd	122	¹³⁴ Xe	170	¹⁵⁴ Sm
27	²⁴⁰ U			27	⁸⁶ Rb	75	¹¹¹ Ag	123	¹³⁴ Cs	171	¹⁵⁴ Eu
28	²³⁵ Np			28	⁸⁶ Sr	76	¹¹¹ Cd	124	¹³⁴ Ba	172	¹⁵⁴ Gd
29	²³⁶ Np			29	⁸⁷ Rb	77	¹¹² Cd	125	¹³⁵ I	173	¹⁵⁵ Eu
30	²³⁷ Np			30	⁸⁷ Sr	78	¹¹³ Cd	126	¹³⁵ Xe	174	¹⁵⁵ Gd
31	²³⁸ Np			31	⁸⁸ Sr	79	¹¹³ In	127	¹³⁵ Cs	175	¹⁵⁶ Eu
32	²³⁹ Np			32	⁸⁹ Sr	80	¹¹⁴ Cd	128	¹³⁵ Ba	176	¹⁵⁶ Gd
33	²³⁶ Pu			33	⁸⁹ Y	81	¹¹⁴ Sn	129	¹³⁶ Xe	177	¹⁵⁷ Eu
34	²³⁷ Pu			34	⁹⁰ Sr	82	¹¹⁵ Cd	130	¹³⁶ Cs	178	¹⁵⁷ Gd
35	²³⁸ Pu			35	⁹⁰ Y	83	¹¹⁵ In	131	¹³⁶ Ba	179	¹⁵⁸ Gd
36	²³⁹ Pu			36	⁹⁰ Zr	84	¹¹⁵ Sn	132	¹³⁷ Cs	180	¹⁵⁹ Tb
37	²⁴⁰ Pu			37	⁹¹ Y	85	¹¹⁶ Cd	133	¹³⁷ Ba	181	¹⁶⁰ Gd
38	²⁴¹ Pu			38	⁹¹ Zr	86	¹¹⁶ Sn	134	¹³⁸ Ba	182	¹⁶⁰ Tb
39	²⁴² Pu			39	⁹² Zr	87	¹¹⁷ Sn	135	¹³⁸ La	183	¹⁶⁰ Dy
40	²⁴³ Pu			40	⁹³ Zr	88	¹¹⁸ Sn	136	¹³⁹ La	184	¹⁶¹ Dy
41	²⁴⁴ Pu			41	⁹³ Nb	89	¹¹⁹ Sn	137	¹⁴⁰ Ba	185	¹⁶² Dy
42	²⁴¹ Am			42	⁹⁴ Zr	90	¹²⁰ Sn	138	¹⁴⁰ La	186	¹⁶³ Dy
43	²⁴² Am			43	⁹⁴ Nb	91	¹²¹ Sb	139	¹⁴⁰ Ce	187	¹⁶⁴ Dy
44	²⁴³ Am			44	⁹⁵ Zr	92	¹²² Sn	140	¹⁴¹ Ce	188	¹⁶⁵ Ho
45	²⁴⁴ Am			45	⁹⁵ Nb	93	¹²² Te	141	¹⁴¹ Pr	189	¹⁶⁶ Er
46	²⁴² Cm			46	⁹⁵ Mo	94	¹²³ Sn	142	¹⁴² Ce	190	¹⁶⁷ Er
47	²⁴³ Cm			47	⁹⁶ Zr	95	¹²³ Sb	143	¹⁴² Pr	191	¹⁶⁸ Er
48	²⁴⁴ Cm			48	⁹⁶ Mo	96	¹²³ Te	144	¹⁴² Nd	192	¹⁶⁹ Tm

5 结语

针对燃耗计算验证过程中遇到的不同燃耗基本库的使用可能导致不同程度的偏差的问题,选取最新的VERA栅元燃耗基准题进行了对比验证计算分析,分析结果表明:在实际应用中尽量不要采用典型热中子截面库,会带来较大偏差;在该基准题的计算条件下,即燃耗计算核素替换较多的情况下,选取典型压水堆基本库还是典型快堆基本库,对结果影响不大, k_{eff} 偏差在8%以内,燃耗末期 ^{235}U 偏差在4%以内, ^{135}Xe 偏差在5%左右;但是,还是建议选取与研究对象能谱相近的基本库。

参考文献

- 1 Croff A G. ORIGEN2: a versatile computer code for calculating the nuclide compositions and characteristics of nuclear materials[J]. Nuclear Technology, 1983, **62**(3): 335–352. DOI: 10.13182/nt83-1.
- 2 杨万奎, 刘耀光, 马纪敏, 等. 消息传递并行燃耗程序 MCBMPI 的栅元验证[J]. 原子能科学技术, 2014, **48** (S1): 138–143.
YANG Wankui, LIU Yaoguang, MA Jimin, *et al.* Cell verification of a parallelized burnup calculation program MCBMPI based on MPI[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2014, **48**(S1): 138–143.
- 3 Moore R L, Schnitzler B G, Wemple C A, *et al.* MOCUP: MCNP-ORIGEN2 coupled utility program[ED/OL]. 1995-09-30. https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Public/27/033/27033420.pdf.
- 4 Zheng M, Tian W, Wei H, *et al.* Development of a MCNP-ORIGEN burn-up calculation code system and its accuracy assessment[J]. Annals of Nuclear Energy, 2014, **63**(1): 491–498. DOI: 10.1016/j.anucene.2013.08.020.
- 5 Sun G M, Cheng M S. Development of a MCNP5 and ORIGEN2 based burnup code for molten salt reactor[J]. Nuclear Science and Techniques, 2016, **27**(3): 65. DOI: 10.1007/s41365-016-0070-1.
- 6 Godfrey A. VERA core physics benchmark progression problem specifications[R]. US: Consortium for Advanced Simulation of Light Water Reactors (CASL-U-2012-0131-004). 2014.
- 7 Macfarlane R, Muir D W, Boicourt R M, *et al.* The NJOY nuclear data processing system (version 2016) [R]. US: Los Alamos National Laboratory (LA-UR-17-20093), 2017.
- 8 李万林, 余纲林, 王侃, 等. 基于RMC的蒙特卡罗燃耗计算氙振荡抑制方法研究[J]. 核动力工程, 2018, **39**(2): 137–140. DOI: 10.13832/j.jnpe.2018.02.0133.
LI Wanlin, YU Ganglin, WANG Kan, *et al.* Research on preventing xenon oscillation in Monte Carlo burnup calculation based on RMC[J]. Nuclear Power Engineering, 2018, **39** (2): 137 – 140. DOI: 10.13832/j.jnpe.2018.02.0133.
- 9 Zarei M, Minuchehr A, Ghaderi R. A semi-analytical treatment of xenon oscillations[J]. Annals of Nuclear Energy, 2017, **106**: 127 – 135. DOI: 10.1016/j.anucene.2017.03.043.
- 10 Ho J P, Dong H L, Byoung K J, *et al.* Monte Carlo burnup and its uncertainty propagation analyses for VERA depletion benchmarks by McCARD[J]. Nuclear Engineering and Technology, 2018, **50**(7): 1043–1050.