

基于离散纵标输运计算方法的 三维燃耗程序发展研究

李静惊, 陈明亮, 郑善良, 蒋洁琼,
许德政, 何兆忠, 吴宜灿, FDS 团队

(中国科学院等离子体物理研究所, 安徽 合肥 230031)

摘要:为了精确描述和分析具有强烈各向异性中子注量率空间分布的反应堆燃耗过程, 本文实现了三维 SN 输运计算与燃耗计算的耦合, 发展了相应的三维输运燃耗耦合计算程序。该程序系统采用接口程序自动耦合三维 SN 输运计算程序和同位素燃耗计算程序的方法实现对三维中子学计算模型的精细燃耗计算, 获得燃料同位素成分、燃耗反应性、中子注量率空间分布等参数随燃耗时间的变化量。采用 IAEA 基准校核例题对程序系统进行了校核, 计算结果初步证明了所开发的三维燃耗程序系统的正确性。

关键词:燃耗; 三维; 输运; 离散纵标法

中图分类号: TL32

文献标识码: A

文章编号: 0258-0918(2007)04-0379-06

Development of three-dimensional burnup code system based on discrete ordinates (SN) transport method

LI Jing-jing, CHEN Ming-liang, ZHENG Shan-liang, JIANG Jie-qiong,
XU De-zheng, HE Zhao-zhong, WU Yi-can, FDS Team

(Institute of Plasma Physics, Chinese Academy of Sciences, Hefei of Anhui Prov. 230031, China)

Abstract: The burnup analysis program based on three dimensional discrete ordinates (SN) neutron/photon transport method has been developed by the FDS team, China, to aid in analysis, prediction, and optimization of fuel burnup performance in a nuclear reactor. The program uses output parameters generated by three-dimensional SN transport code to determine the isotopic inventory and anisotropic flux distribution as a function of time. For a fueled region, neutron transmutation, fuel depletion, fission-product poisoning, actinide generation, and burnable poison loading and depletion effects are included in the calculation. The IAEA benchmark test problem has been correctly calcu-

收稿日期: 2007-10-30; 修回日期: 2007-12-03

基金项目: 国家自然科学基金项目、中科院知识创新工程项目

作者简介: 李静惊(1980—), 女, 四川人, 博士, 主要从事中子物理学研究工作

lated and analyzed to validate the system.

Key words: burnup; three-dimension; transport; discrete ordinates method

燃料燃耗分析是反应堆堆芯燃料管理、燃耗信任制技术应用、核燃料的转化增殖和嬗变研究,以及乏燃料后处理、贮存等分析的基础。随着核能科学技术的研究发展,燃料燃耗计算分析精度要求越来越高。现有的扩散程序对组件和堆芯几何进行了均匀化等效,不能准确反映出空间能谱效应的影响。对于燃料和堆芯布置是非均匀的反应堆系统(如新概念裂变堆、聚变堆、混合堆等),采用扩散理论程序计算燃料及同位素成分就更加的困难。针对这类具有强烈各向异性中子注量率空间分布的反应堆,目前国际上通常使用两种输运程序来模拟研究,一种是基于蒙特卡罗计算方法(MC)的概率论计算程序,另一种则是以离散纵标方法(SN)为主的确论计算程序。MC计算程序具有非常强大精细的几何描述能力,但如果要计算系统粒子注量率精细空间分布,则相当的耗时。虽然目前大量MC程序并行化的研究用于解决运算时间的问题,但这仍旧是其在研究和实际应用中最大的困难。因此,尽管现在已有大量基于MC输运计算方法的燃耗程序出现^[1-5],但能够真正与工程结合并应用的实例还很少。和MC计算程序相比,SN计算程序虽然难以处理复杂的几何模型,但它可以相对快速的得到堆内的空间分布量,精细模拟具有各向异性的粒子注量率分布特性下的堆内核素燃耗情况,因此成为现今核电燃耗程序研究发展的主要耦合对象之一。

近几十年来,基于确定论输运计算的燃耗程序得到了广泛的发展,比如波兰矿业大学在日本东京大学研发的BISON1.5^[6]基础上开发的一维输运燃耗耦合程序BISON-C^[7],美国橡树林实验室研发的SCALE5多功能程序系统^[8]中的一维输运燃耗程序SAS2H和二维输运燃耗程序TRITON,基于碰撞概率法输运理论燃耗计算程序有日本原子能研究所研发的SWAT程序^[9],西安交通大学开发的二维输运燃耗程序系统ANISN-DOT4.2-ORIGEN2^[10],中科院等离子体物理研究所FDS团队开发的

基于二维离散纵标法的输运燃耗程序BU-DOT^[11]等。但目前国际上还没有发布基于三维SN计算方法的燃耗程序。

针对中子物理学在反应堆物理设计、燃料管理优化、辐射屏蔽防护、环境监测、核安全分析等各个领域的应用,中科院等离子体所FDS团队自主研发了大型集成多功能中子学计算与分析系统VisualBUS^[12]。在VisualBUS程序系统中,开发了基于SN方法的三维燃耗程序,用于精确研究核反应堆中燃料同位素成分、反应性、中子注量率空间分布等参数随燃耗时间的变化。本文将从计算方法、程序实现与测试等方面来介绍该程序系统的发展现状。

1 计算方法

中子输运方程是一个含有空间、能量、运动方向和时间等自变量的偏微分末积分方程,其求解方法可分为两类:非确定性方法(如蒙特卡罗方法)和确定性方法(如离散纵标法)。目前反应堆物理计算中采用的三维确定论输运计算程序主要有TORT^[13]和THREEDANT^[14]等,其中TORT是由美国橡树林实验室研发的三维SN输运计算程序,能够处理三维 $x-y-z, r$ - θ - z 模型,求解中子、光子、电子的输运问题,提供固定源、本征值、临界浓度或者临界尺寸搜索等计算。

燃耗方程表示了核素的变化率等于核素产生率与核素消失率的差值。燃耗计算是通过 (n, p) 、 $(n, 2n)$ 和 (n, f) 等多种反应方式计算燃耗过程中各种核素生成、衰变和转化情况。目前燃耗计算方法主要有四种:Bateman方法求解燃耗链、龙格库塔方法、矩阵指数法和指数欧拉法。Bateman方法是将复杂的燃耗链分解为一系列的线性链,再对这些线性链分别解析求解,不需要做任何时间步的拆分求解,但当涉及到核素非常多时,建燃耗链工作非常繁琐、复杂,拆解燃耗链也存在一定的物理近似。目前BISON-C程序就是采用这种计算方法进行燃耗计算。而龙格库塔方法、矩阵指数法和指数

欧拉法都属于数值计算方法,需要进行燃耗时间步拆分求解,存在一定的数学近似,但其燃耗链建链方式简单易实现,可以充分考虑多个核素之间的相互作用,比如点燃耗程序 ORIGEN 就是采用矩阵指数法求解燃耗方程。

在对反应堆进行燃耗计算的过程中,随着反应堆的运行,各个核素核密度都在不断的变化,同时也影响着中子注量率在不停地变化。为简化运输燃耗的求解,需要假设在确定的时间间隔内保持中子注量率为常量,在此基础上求解燃耗方程,得到新的核密度,再返回进行下一步的运输计算。本文第 3 节在运输燃耗计算方法的基础上,介绍相关程序的实现过程。

2 程序实现

FDS 团队开发的基于 SN 方法的三维燃耗程序系统采用两个接口程序将三维 SN 运输计算程序 TORT 和同位素燃耗计算程序自动连接,分别生成同位素燃耗计算所需要的输入文件和燃耗后运输计算所需要的输入文件,充分利用 TORT 程序计算三维精细注量率的能力,又结合同位素燃耗计算程序计算核素生成、衰变和转化的能力来实现精确燃耗计算。文件传递的耦合方式保持了运输计算程序和同位素燃耗计算程序的独立性,支持各个模块的独立升级与更新。三维燃耗程序系统流程图如图 1 所示。

其中接口程序 SN-Burn 的主要功能是解析运输计算输出文件,自动生成燃耗计算的输入文件,而接口程序 Burn-SN 的主要功能是处理燃耗计算输出文件,并利用燃耗计算得到的新的核素成分,更新三维 SN 运输计算输入文件。对新生成的裂变产物的处理是更新 SN 运输计算输入文件时的关键之一。

运输燃耗耦合计算方法的关键问题之一是燃耗后返回运输计算的裂变产物的确定。在实际情况下,中子轰击重核后裂变生成的裂变产物上千种,在反应堆运行时间内,裂变产物不断积累,并与中子发生反应,影响反应堆的特性。最理想的运输燃耗计算模拟是将燃耗计算所得的所有裂变产物全部返回运输计算。然而,这种方式需要运输库含有所有的裂变产物微观截

面,而目前运输库的核素有限,很难在运输计算中考虑所有的裂变产物核。Burn-SN 接口程序提供了两种计算方式:一种是伪裂变产物来代替所有的裂变产物返回运输计算;另一种是提供了所有燃耗生成的裂变产物直接返回运输计算。用户可以根据实际所使用的运输库的不同选择所需要的计算方式。

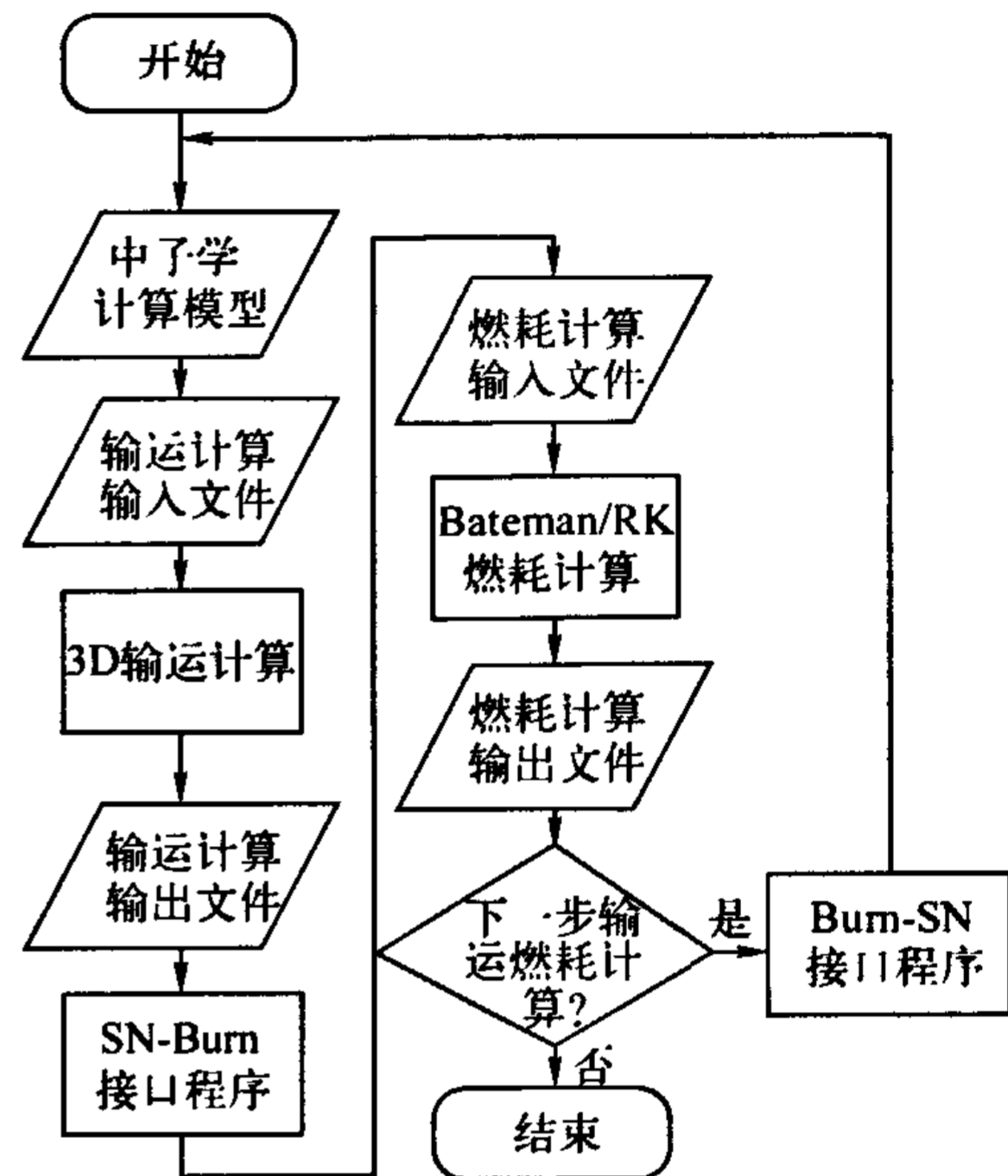


图 1 基于 SN 方法的三维燃耗程序示意图
Fig. 1 Flow chart of three-dimensional burnup program

3 程序测试

三维运输燃耗耦合计算方法的测试采用了国际原子能机构(International Atomic Energy Agency, IAEA)颁布的加速器驱动次临界系统(Accelerator Driven System, ADS)基准例题来验证其正确性^[10, 15]。

3.1 基准模型描述

IAEA-ADS 基准模型是一个以²³³U 为燃料,²³²Th 为增殖材料,Pb 为反射层的圆柱体结构次临界堆。其几何模型为一个 320 cm×640 cm 的 R-Z 柱模型,包括 5 个材料区,一个各向同性外中子源在系统中心区域的小圆柱体内均匀发射。

为精细的考察不同区域内中子注量率对燃耗计算的影响,将堆芯材料 1、2、3 区再划分为

若干二维燃耗分区。参考文献[10]的划分方式,在本文计算中,对1区,轴向划分为5层,径向分为5层,共25个燃耗分区;对2区,轴向分为5层,径向分为7层,共35个燃耗区;对3区,轴向分为5层,径向分为3层,共15个燃耗区。模型几何布置如图2所示。

基准例题给出了 ADS 运行初期(Begin Of Life, BOL)冷态(20 °C)1~5区各核素的核密度。靶区材料为铅,核密度为 $3.05 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ 。质子能量为 1.0 GeV,加速器电流根据系统的 K_{eff} 进行调节以保证 ADS 的热功率为 1 500 MW。散裂中子的能量上限为 20 MeV。各区材料份额以及散列源能谱结构描述参见文献[15]。其中,1、2区给出的为 ^{232}Th 和 ^{233}U 的核密度之和, ^{233}U 的富集度需要根据 K_{eff} 的要求进行调节。论文测试初始时刻 K_{eff} 为 0.94 时的稳态参数以及 K_{eff} 和源强随燃耗时间的变化。

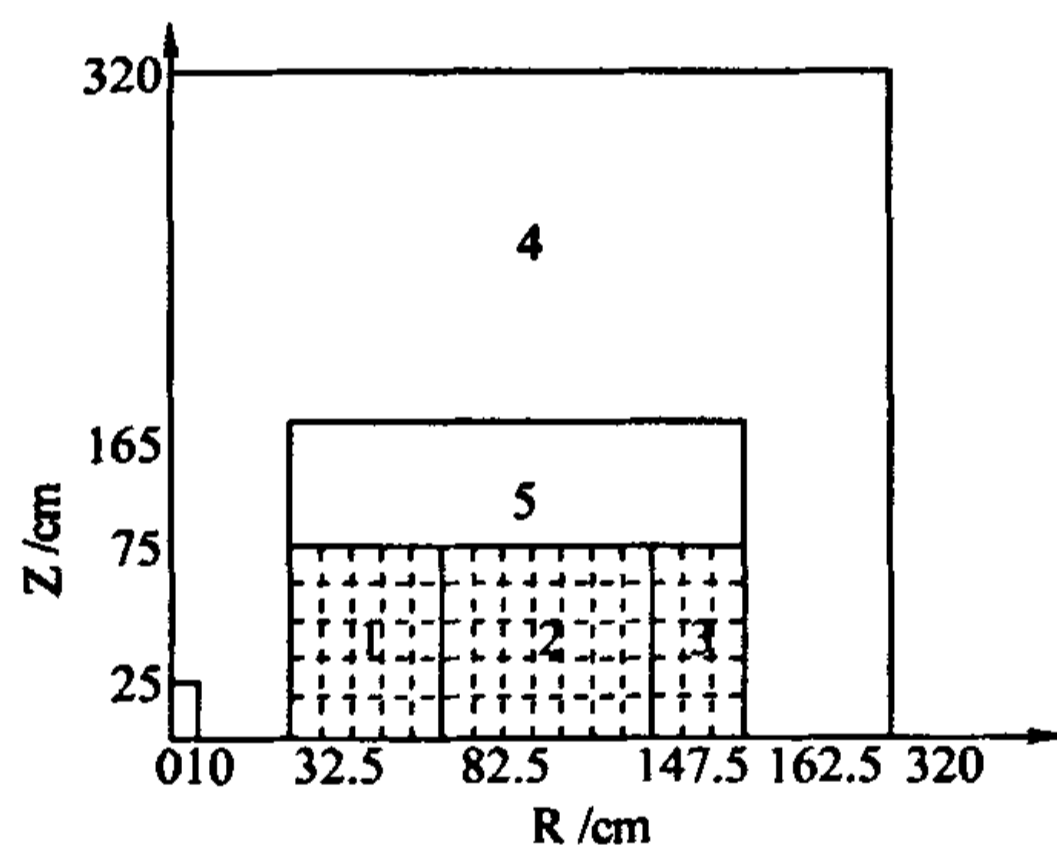


图2 IAEA-ADS 基准例题模型示意图
Fig. 2 IAEA-ADS benchmark model

3.2 结果比较

计算中使用的数据来自 FDS 团队自主研发的混合评价数据库 HENDL2.0 (Hybrid Evaluated Nuclear Data Library 2.0)^[16]。它包含了 400 多个核素输运截面,囊括了目前输运计算中所使用到的大部分重要的轻核、锕系核和主要裂变产物,最高能量高达 20 MeV。因此,在裂变产物返回输运计算过程中,没有作伪裂变产物的近似,采取所有燃耗生成的裂变产物直接返回输运计算的方式。

3.2.1 ^{233}U 富集度

基准例题通过给定初始时刻 K_{eff} , 求出与之对应的 1 区和 2 区的 ^{233}U 富集度(两个区保持相同的富集度),测试时选取的初始 K_{eff} 为 0.94。表 1 给出了当初始 K_{eff} 为 0.94 时, VisualBUS 计算所得的 ^{233}U 富集度和有关国家计算结果的比较。本文的计算结果基本处于各单位的平均值水平。

表 1 第 1、2 区初始时刻 ^{233}U 富集度 (%)
Table 1 ^{233}U enrichment (E in %) in the zones 1 and 2 (BOL)

参与国家(单位)	K_{eff}	参与国家(单位)	K_{eff}
使用程序	0.94	使用程序	0.94
俄罗斯(扩散近似)	9.38	荷兰	9.49
俄罗斯(MC)	9.61	日本	9.1
瑞士	9.25	比利时	9.85
意大利	9.63	瑞典	9.771
法国	9.61	韩国	9.2
德国	9.36	中国(西安交通大学)	9.629
各国平均值	9.49		
本文结果	9.53		

注:表中其他国家的数据取自参考文献,平均值计算不包括最大值和最小值。

3.2.2 功率密度空间分布

第一部分 ^{233}U 富集度比较证明了程序在进行无源计算时的正确性;第二部分功率密度空间分布的比较则对外源计算获取中子注量率空间分布进行校核。ADS 例题给出了径向与轴向功率密度空间分布的比较。本文使用 2.5 cm × 2.5 cm 区域内平均功率密度来近似表述某一点的功率密度值。

1) 径向功率分布

初始时刻 $K_{\text{eff}} = 0.94$ 时径向功率分布 ($Z=0.0 \text{ cm}$ 处)的计算结果如图 3 所示。从图中可以看出,由于易裂变同位素 ^{233}U 和增殖材料 ^{232}Th 的核密度变化,使得在第 1 区和第 2 区交界处有功率峰存在。

2) 轴向功率分布

同样, $K_{\text{eff}} = 0.94$ 时初始时刻轴向功率分布 ($R=42.5 \text{ cm}$ 处)的计算结果如图 4 所示。

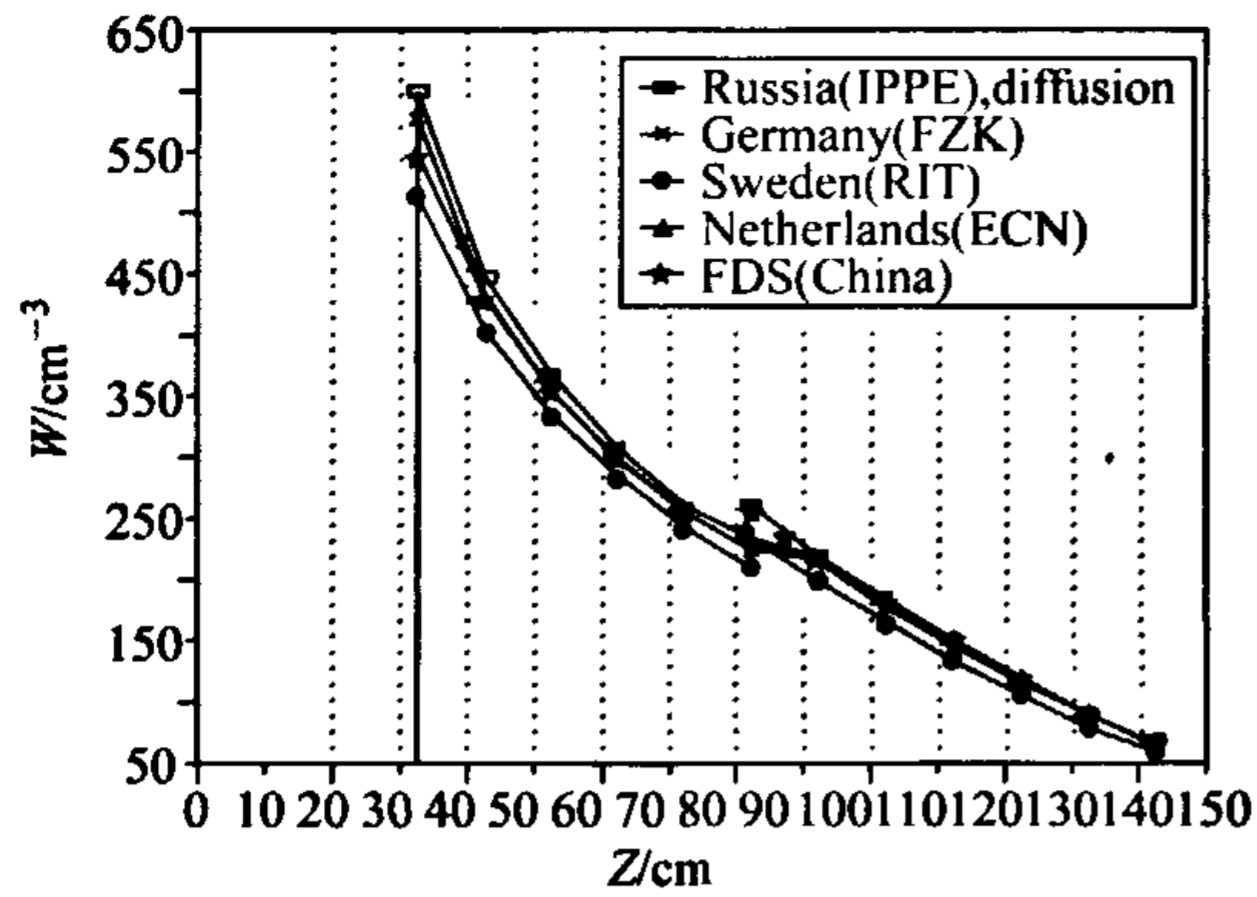


图3 径向功率密度分布($K_{eff}=0.94, Z=0.0\text{ cm}$)
Fig. 3 Specific radial core power distribution
at $Z=0.0\text{ cm}$, $K_{eff}(t=0)\approx 0.94$

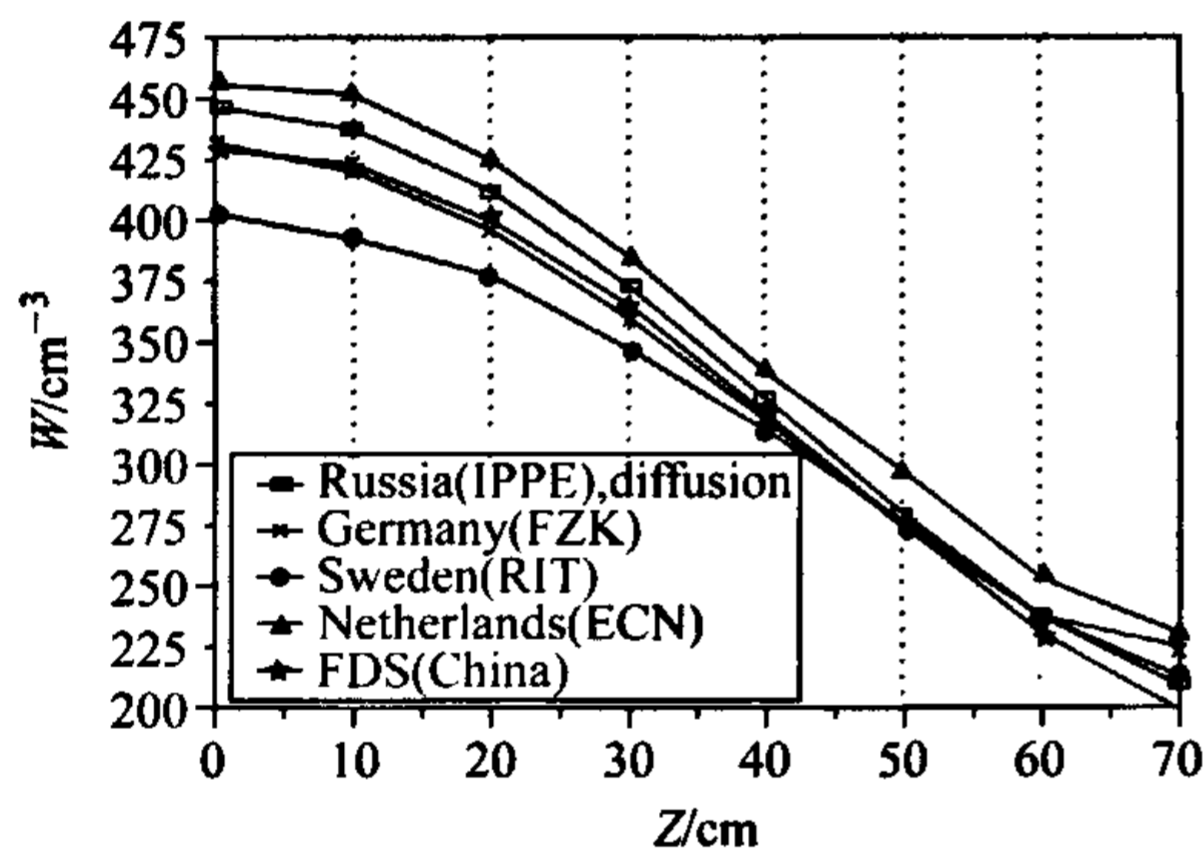


图4 轴向功率密度分布($K_{eff}=0.94, R=42.5\text{ cm}$)
Fig. 4 Axial core power distribution
at $R=42.5\text{ cm}$, $K_{eff}(t=0)\approx 0.94$

3.2.3 燃耗计算结果比较

1) K_{eff} 随燃耗的变化关系

使用初始为 0.94 的 K_{eff} 对应的 ^{233}U 富集度计算 K_{eff} 随燃耗时间的变化曲线如图 5 所示。时间从 0 到 2 250 d, 时间步长为 150 d, 整个燃耗时间内依靠调节源强来保持次临界包层热功率恒定为 1 500 MW。

从图 5 可以看出, 燃耗过程中每个时间步的 K_{eff} 与参考文献提供的比较值基本接近, K_{eff} 随燃耗时间的变化规律基本吻合。 K_{eff} 值相差最大在第四步(600 d)时, 比文献最大的参考值高 0.004。

本文在测试这道基准例题时使用的燃耗

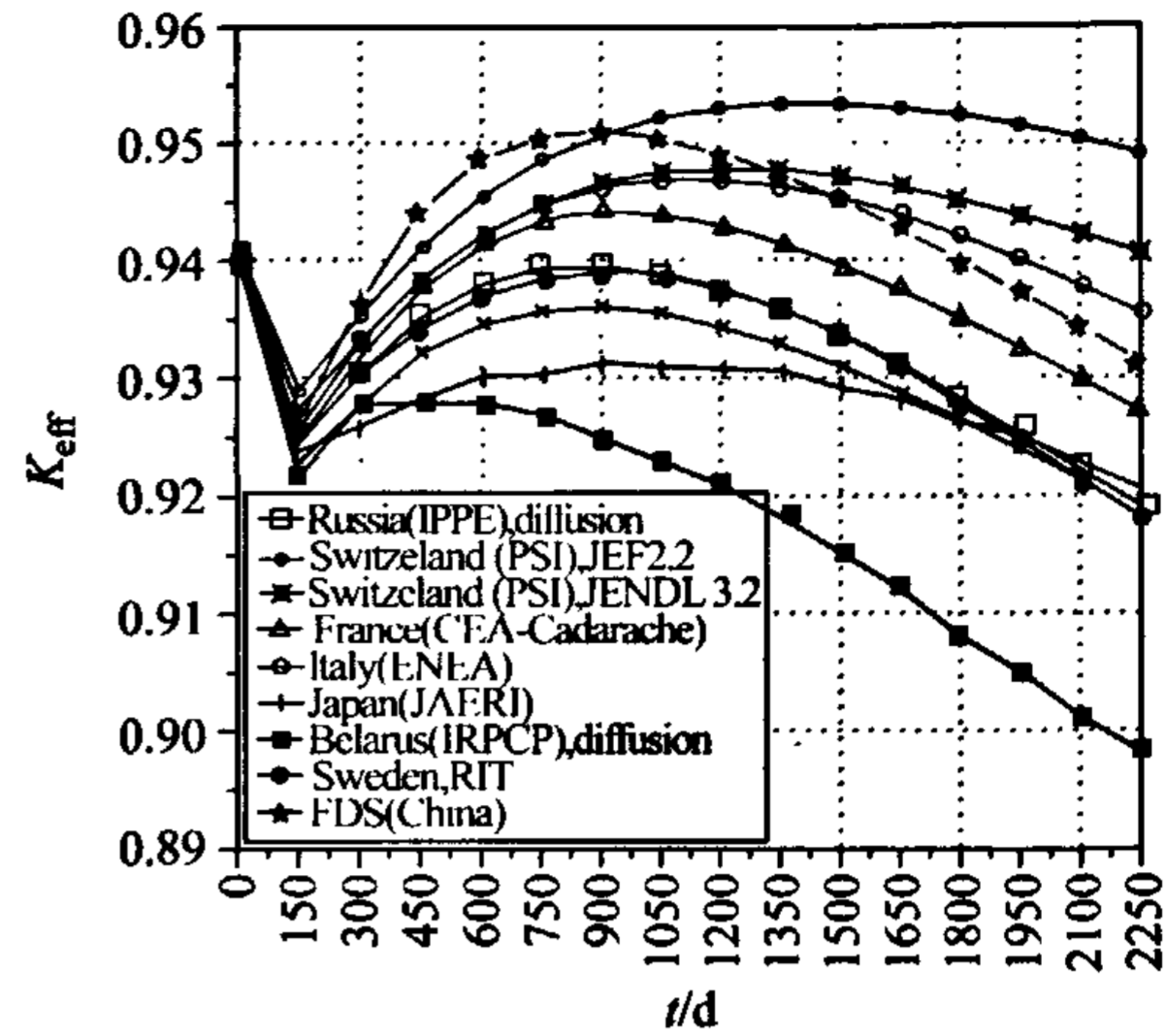


图5 K_{eff} 随燃耗时间的变化
Fig. 5 K_{eff} evolution results, $K_{eff}(t=0)\approx 0.94$

库, 其裂变产物份额累积只考虑到 1.44, 比其他数据库少 0.56, 因此燃耗后得到的裂变产物核比其他程序计算得到的少, 从而返回输运计算得到随燃耗时间变化的 K_{eff} 值有所偏高。

为了验证这种猜测, 我们在燃耗库内, 将裂变产物份额归一化到 2, 其他计算条件保持不变, 得到的 K_{eff} 随燃耗时间变化如图 6 所示。由于返回的裂变产物核增多以及每一次裂变产物核素的累积, 燃耗 600 d 之后, K_{eff} 随燃耗时间的增多下降的很快。图 6 的近似方式验证了裂变产物份额对 K_{eff} 的影响。

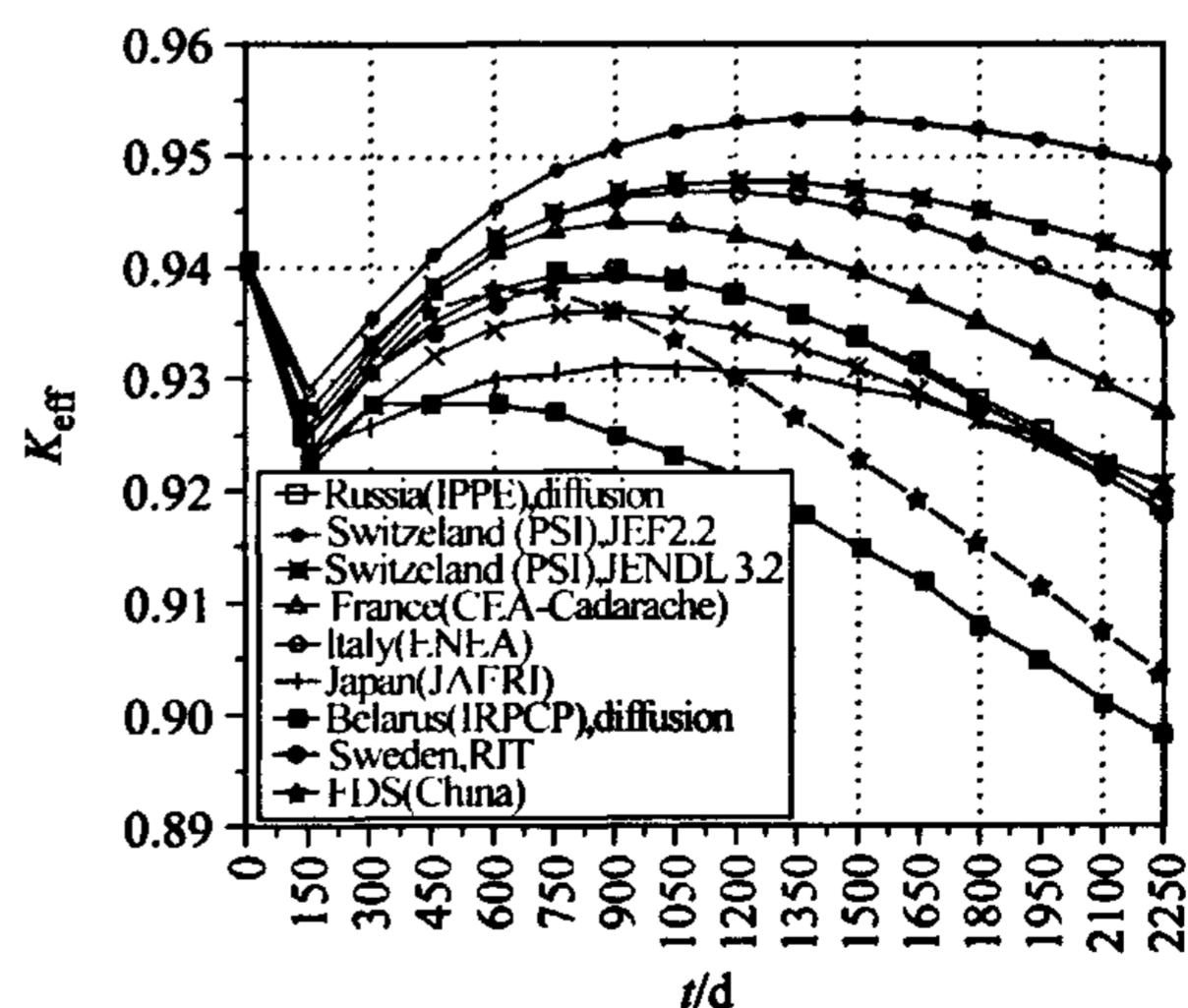


图6 K_{eff} 随燃耗时间的变化
Fig. 6 K_{eff} evolution results, $K_{eff}(t=0)\approx 0.94$

2) 外源强度随燃耗变化关系

ADS运行中,由于易裂变同位素的消耗、裂变产物的积累等因素, K_{eff} 将随燃耗深度变化。此时,为了维持一定的功率,外源的强度也要随着变化。基于该基准例题,图7给出了保持系统功率在1500 MW时外源强度随燃耗时间的变化。

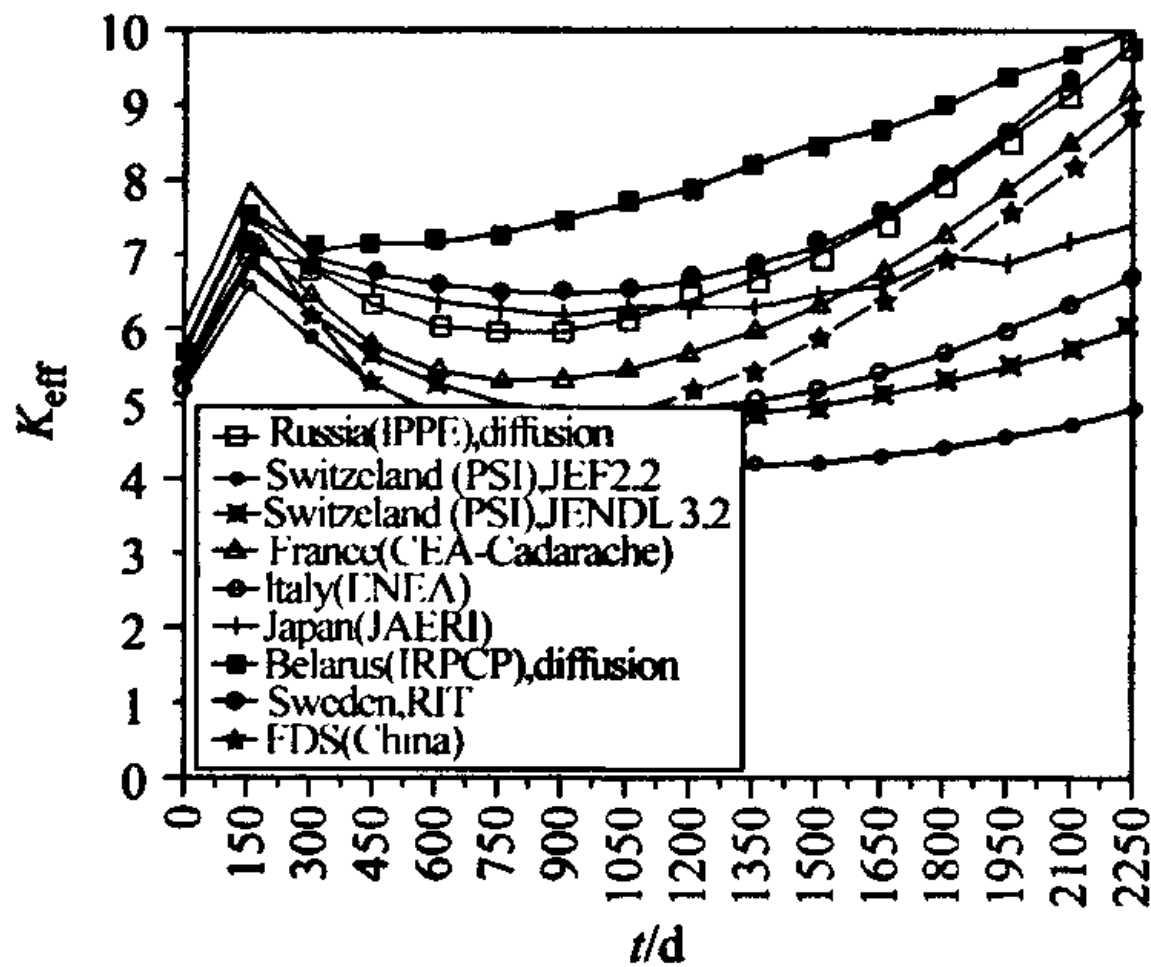


图7 外源强度随燃耗时间的变化

Fig. 7 Source evolution results, $K_{eff}(t=0) \approx 0.94$

4 结论

为了精确描述和分析具有强烈各向异性中子注量率空间分布的反应堆燃耗过程,中科院等离子体所FDS团队开发了基于SN方法的三维燃耗程序。采用接口程序将三维SN输运计算程序TORT和同位素燃耗计算程序自动耦合,既充分利用TORT计算得到三维精细注量率的能力,又结合同位素燃耗计算程序计算核素生成、衰变和转化的能力来实现输运燃耗计算。

为校核程序系统的有效性,选用IAEA关于加速器系统ADS燃烧铀系核素的基准例题对程序做校核。与各个国家的计算结果相比,所得的计算结果都处于合理的范围内,初步证明了三维燃耗程序系统正确性。另一方面,计算数据在可接受范围内仍有不同,更深入的分析还需要继续进行,如针对各种数据库不同带来的差异的分析以及计算方法差异的分析等都是下一步需要展开的工作。

参考文献:

- [1] Moore R L, Schnitzler B G, Wemple C A, et al. MO-CUP: MCNP-ORIGEN2 Coupled Utility Program[J]. INEL-95/0523, Sept. 1995.
- [2] TRELLE H R, POSTON D I. User's Manual, Version 2.0, for MonteBurns, Version 5B[M]. LA-UR-99-4999, 1999.
- [3] 余纲林,王佩,王煜宏. MCBurn——MCNP和ORIGEN耦合程序系统. 原子能科学技术, 2003, 37(3): 250-254.
- [4] 蒋校丰,谢仲生. 蒙卡—燃耗程序系统及ADS基准题的计算. 核科学与工程, 2003, 23(4): 325-331.
- [5] 薛小刚,周培德,柯国土,等. 基于蒙特卡罗方法的三维燃耗计算研究. 核科学与工程, 2005, 25(1): 24-29.
- [6] Furuta K, Oka Y, Kondo S. CCC-464/BISON1. 5, RSIC, Oak Ridge National Laboratory, 1987.
- [7] Jerzy Cetnar, Piotr Groniek. BISON-C: Upgraded One-Dimensional Transport and Burnup Calculation Code for Unix System[J]. University of Mining and Metallurgy, 1997.
- [8] Stephen M. BOWMAN, Daniel F. HOLLENBACH, Mark D. DeHART, et al. SCALE 5: Powerful New Criticality Safety Analysis Tools[J]. presented at the 7th International Conference on Nuclear Criticality Safety (ICNC2003), Tokai-mura, Japan, Oct. 20-24, 2003.
- [9] Suyama K, Mochizuki H, Kiyosumi T. Revised burnup code system SWAT: Description and validation using postirradiation examination data[J]. Nuclear Technology, 2002, 138: 97-110.
- [10] 蒋校丰,谢仲生. ANISN-DOT4. 2-ORIGEN2 输运-燃耗程序系统及ADS基准题的计算. 中国核科技报告, 2001: 25-38.
- [11] 刘海波. 基于2D输运理论燃耗计算程序的研发及其初步应用[J]. 中国科学院等离子体物理研究所, 2005.
- [12] 吴宜灿,李静惊,陈明亮,等. 大型集成多功能中子学计算与分析系统VisualBUS的研究与发展[J]. 核科学与工程.
- [13] Rhoades W A, Childs R L. TORT: A Three-Dimensional Discrete Ordinates Neutron/Photon Transport Code [J]. Nuclear Science & Engineering, 1991, 107(4), 397-398.
- [14] Alcouffe R E, Baker R S, Brinkley F W, et al. DAN-TSYS: A Diffusion Accelerated Neutral Particle Transport Code System[J]. LA-12969-M, 1995.
- [15] Slessarev I, Tchistiakov A. IAEA ADS-Benchmark Results and Analysis[J]. TCM-Meeting, Madrid, Sept. 17-19, 1997.