

文章编号: 1007-4627(2014) 04-0555-06

# MCADS 程序的开发和 ADS 基准题计算

张勋超, 齐记, 张雅玲, 闫雪松, 杨磊

(中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000)

**摘要:** 由于加速器驱动次临界堆存在外中子源, 堆芯结构复杂, 中子注量的各向异性严重, 所以相关燃耗计算在次临界系统设计中起着重要作用。为实现次临界系统的燃耗计算, 结合粒子输运程序 MCNP 处理复杂几何和燃耗程序 LITAC 处理核素全面的特点, 开发了接口程序 MCADS 耦合 MCNP 和 LITAC。然后选取 IAEA-ADS 基准题对耦合程序进行了验证计算。结果表明, 燃耗、外源强度、空泡效应、初始功率分布等方面的计算结果和其他国家的计算结果相比有很好的 consistency, 证实了 MCADS 在次临界模式计算中的可靠性。

**关键词:** 加速器驱动次临界系统; 基准题; 燃耗; 蒙特卡罗方法

**中图分类号:** TL329   **文献标志码:** A   **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.31.04.555

## 1 引言

核废物问题是核能可持续发展的重要制约因素之一。一座百万千瓦的压水堆(PWR), 每年卸除燃料约 25 t, 其中次锕系核素(MAs: Np, Am, Cm)约 20 kg, 长寿命裂变产物(LLFPs:  $^{99}\text{Tc}$ ,  $^{129}\text{I}$ 等)约 30 kg。这些核废物寿命长, 放射性毒性大, 对人类及环境危害严重。加速器驱动次临界装置(Accelerator Driven sub-critical System, ADS)是利用加速器产生中高能(1 GeV 左右)质子束流去轰击散裂靶(Pb, W 等)产生散裂中子, 然后利用散裂中子驱动次临界堆发生裂变反应产生电能, 净余中子去嬗变 MAs 和 LLFPs, 因此 ADS 有望成为处理核废物的先进核能装置。由于次临界堆由散裂靶与包裹在靶外的堆芯组成, 结构比较复杂, 次临界堆的计算与常规临界堆有很大的不同。靶作为中子源向堆芯发射散裂中子, 散裂中子具有较高能量(10 MeV)和复杂的空间分布, 导致堆芯的中子注量率梯度大和各向异性严重。国际原子能机构(IAEA)提出了 ADS 基准题<sup>[1]</sup>, 目的在于检验不同计算方法、不同中子评价数据库的可靠性和不确定性。

## 2 计算方法和程序

MCNP<sup>[2]</sup>作为蒙特卡罗粒子输运计算程序, 具有处理连续能量、任意几何、时间相关的中子/光子/电子耦合等问题的能力, 同时能够计算裂变系统的有效增殖因子。随着计算机硬件的发展, MCNP 的并行计算时间得到了有效的缩短, 使得 MCNP 满足堆芯物理中子输运和临界计算。基于 ORIGEN2.1 程序<sup>[3]</sup>和数据库我们编写了燃耗程序 LITAC。LITAC 是点堆单群燃耗及放射性衰变计算模块, 采用 C 语言编写, 该模块用矩阵指数法求解一个联立的、线性的、一阶常微分方程组, 能够计算核燃料循环过程中放射性物质的积累、衰变、程序输出核素的成分、产物质量分数、放射性活度、衰变热、化学毒性等参数。ADS 核燃料中 MA 核素占有相当大的比例, 针对此特点, LITAC 扩充了有直接裂变产物贡献的次锕系核素(增加了  $^{237}\text{Np}$ ,  $^{238}\text{Np}$ ,  $^{238}\text{Pu}$ ,  $^{240}\text{Pu}$ ,  $^{242}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Am}$ ,  $^{242\text{m}}\text{Am}$ ,  $^{243}\text{Am}$ ,  $^{242}\text{Cm}$ ,  $^{243}\text{Cm}$ ,  $^{244}\text{Cm}$ ,  $^{246}\text{Cm}$  的裂变产物), 使得有裂变产物贡献的核素达到了 20 种, LITAC 提高了数据的输出精度。参考国内外三维燃耗计算的程序 MONTEBURNS<sup>[4]</sup>, MOCUP<sup>[5]</sup>,

收稿日期: 2013-12-08; 修改日期: 2014-02-21

基金项目: 中国科学院战略性先导科技专项项目(XDA03030100); 国家自然科学基金资助项目(91026005)

作者简介: 张勋超(1980-), 男, 河北保定人, 研究实习员, 硕士, 从事 ADS 中子学研究; E-mail: zhangxunchao@impcas.ac.cn

通信作者: 杨磊, E-mail: lyang@impcas.ac.cn.

RMC<sup>[6]</sup>, ALEPH<sup>[7]</sup>等, 开发程序MCADS(Monte-Carlo Activation and Depletion Code System)。MCADS结合了MCNP对复杂几何、复杂材料、连续能量截面的处理能力优势和ORIGEN2.1对核燃料以、结构材料、冷却剂、散裂靶的嬗变能力的优势; 能够精确描述反应堆和散裂靶的几何构型、材料、ADS嬗变物理过程; 适用于ADS次临界系统的中子学概念设计。

### 2.1 MCADS 运算执行的流程

在反应堆或散裂靶的整个运行周期内, 中子截面、功率和中子注量率会随时间和空间变化。把空间和时间划分为若干个区域和间隔, 称之为燃耗区和燃耗步长, 在每个燃耗步长内, 同一个燃耗区内的中子注量率是一个定值。为保证耦合程序运算结果的精度, MCNP和LITAC之间的耦合需要特别的注意。由于在实际每个燃耗步长初始时刻的各种值并不代表整个燃耗步长内的平均值, 我们采用了类似于MONTEBURNS的处理方式(见文献[4]), 采取半步长法。假定某个燃耗步长间隔为  $[T_{n-1}, T_n]$ , 选取中间时刻  $t = (T_{n-1} + T_n) / 2$  运行MCNP来计算中子注量、截面等数据。这样可以使燃耗步长尽量长, 从而节约计算时间。

如图1所示, MCADS的执行顺序图, 在每一个

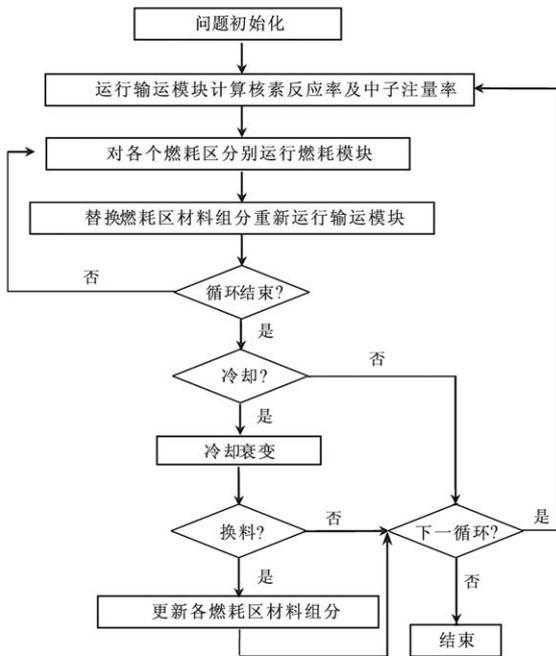


图 1 MCADS 执行流程

时间节点上运行运输计算得到燃耗计算所需要的输入量; 然后在每两个时间节点中间执行燃耗, 如此实现了半步长法执行程序运行。

### 2.2 中子通量归一化

MCNP的F4卡以径迹长度统计的方式来给出每个燃耗区的中子注量, 它是归一到每个源粒子(SDEF模式)或者是每个裂变中子(KCODE模式)的。MCNP计算的中子通量需要乘上一个常数归一化因子(FMT)转换为LATIC燃耗, 计算需要的中子通量密度。SDEF模式用于存在外中子源下的次临界堆计算; KCODE模式用于常规临界堆的计算, 两种模式的FMT是不同的, 通常根据反应堆功率计算出FMF。FMT<sub>1</sub>和FMT<sub>2</sub>确定KCODE模式和SDEF模式的FMT:

$$FMT_1 = \frac{\bar{\nu}P}{ek_{eff}Q}, \tag{1}$$

$$FMT_2 = \frac{P}{efQ}, \tag{2}$$

$$Q = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{x_j} N_{ij}^f \sigma_{ij}^f Q_{ij}}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{x_j} N_{ij}^f \sigma_{ij}^f}, \tag{3}$$

$$Q_i = 1.29927 \times 10^3 (Z^2 A^{0.5}) + 33.12 \text{ (MeV)}. \tag{4}$$

在上述公式中  $\bar{\nu}$  为平均每次裂变所产生的中子数;  $e$  为基本电荷  $1.602 \times 10^{-19} \text{C}$ ;  $\bar{f}$  为每个外源中子在堆芯引发的裂变次数;  $k_{eff}$  为反应堆的增殖因子;  $P$  为反应堆总功率(MW);  $Q$  值为堆芯内每次裂变所释放的能量(MeV/fission);  $Q_i$  为  $i$  核素每次裂变的返回能;  $n$  为堆芯燃耗区数目;  $x_j$  为  $j$  燃耗区内裂变核素数目;  $N_{ij}^f$  为燃耗  $i$  内易裂变核素  $j$  的核子数目;  $\sigma_{ij}^f$  为燃耗  $i$  内易裂变核素  $j$  的单群裂变截面, 由MCNP的F4卡结合FM卡计算得到;  $Q_{ij}$  为燃耗  $i$  内易裂变核素  $j$  的裂变返回能。

### 3 计算结果

IAEA基准题是一个以<sup>233</sup>U为燃料, <sup>232</sup>Th为增殖材料, 天然铅为反射体的圆柱体结构次临界系统, 其反应堆中间放置散裂靶作为外中子发射源。IAEA-ADS基准题提出的目的在于检验不同次临界度

下 ADS(<sup>233</sup>U -<sup>232</sup>Th 燃料) 堆的有效增殖因数和一些其他重要反应性随燃料深度的变化情况。

MCADS 燃耗计算中, 整个堆芯划分为 150 个燃耗区, 径向分为 15 层, 轴向分为 10 层。基准题计算所需的中子评价数据库来自 IAEA 官方公布的 ADS 核数据库 V2.0, 其中包含了关键核素 300 ~ 1800 K 温度下的中子截面库, 计算中核燃料温度设为 1 200 K, 结构材料和冷却剂温度为 900 K。LITAC 燃耗计算所采用的衰变和裂变产物数据库取自 ORIGEN2.1 截面库, 单群截面由 MCNP 计算得出。燃耗计算取燃耗步长为 150 d, 堆芯裂变功率 1 500 MW; MCNP 输运计算中投入的外中子源个数为  $2 \times 10^5$  (NPS); KCODE 临界计算中每代粒子为 5 000 个, 运行 250 代(舍弃前 20 代); tally 统计误差已经小于 0.5%。

### 3.1 给定有效增殖因子 $K_{eff}$ 下, <sup>233</sup>U 富集度的计算

根据基准题初始设定, 堆芯分为三个大区: 一区、二区为燃料区(两个区的 <sup>233</sup>U 富集度不同); 三区为增殖区(不含 <sup>233</sup>U)。我们调整了 <sup>233</sup>U 的富集度

得到了不同的有效增殖因子  $K_{eff}$ 。表 1 列出了国外计算一区和二区平均富集度的平均值与本文计算值的对比, 可以看出 <sup>233</sup>U 富集度的计算与 IAEA 给出的各国计算结果基本一致。各国的差异主要来源于使用的评价库的不同, 还有一区和二区的 <sup>233</sup>U 富集度的比例未做限制。

表 1 初始 <sup>233</sup>U 富集度\*

$K_{eff, BOL}$	各国平均值	本文计算值
0.98	10.17	10.11
0.96	9.85	9.79
0.94	9.53	9.51

\* 本表和以下图表的各国数据均来自文献[1]。BOL表示Begin of life。

### 3.2 空泡效应

基准题的空泡反应性效应是在 BOL 时一区无铅和一、二区无铅两种情况下计算的, 计算结果见表 2。国外对空泡效应的计算结果差异比较大, 有的符号甚至相反。从表 2 可以看出一区空泡效应平均为正, 当扩展到整个堆芯时空泡效应平均为负; 有效增殖因子  $K_{eff}$  与空泡效应的关联不大。

表 2 一区空泡效应/一、二区空泡效应\*

参与者	$K_{eff, BOL} = 0.98$	$K_{eff, BOL} = 0.96$	$K_{eff, BOL} = 0.94$
意大利	+863/-596	+892/-554	+1152/-354
瑞典	+1103/-141	+1053/-220	+1120/-299
日本	+3290/+4730	+3364/+4820	+3744/+4968
国外平均值	+959/-220	+944/-250	+1023/-140
本文计算值	+920/-345	+846/-377	+995/-205

\* pcm (反应性 reactivity  $10^{-5}$ )。

### 3.3 功率密度空间分布 (BOL)

次临界堆的特点在于堆芯中放置了作为外中子源产生装置的散裂靶, 这种特殊的结构导致了堆芯中子

注量率空间分布不均匀。堆芯功率密度在堆芯中心区很高, 沿着轴向和径向向外功率密度剧烈下降。相对临界堆而言, 次临界堆有着更大的功率峰因子。图 2 所示为初始  $K_{eff} = 0.96$  下堆芯的功率密度空间分布,

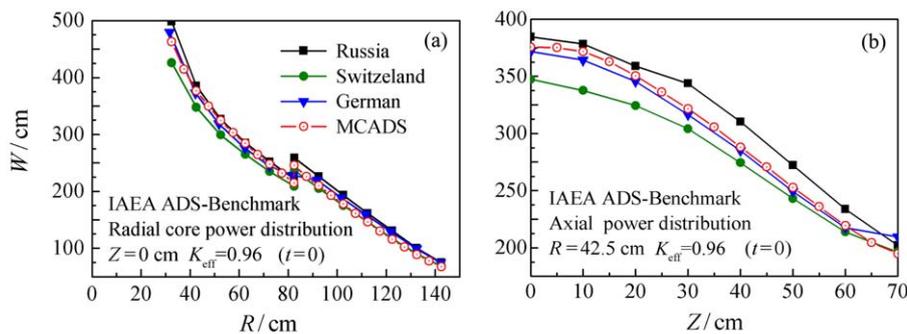


图 2 (在线彩图)  $K_{eff}=0.96$ (BOL) 堆功率密度径向和轴向的分布

可以看出堆芯临近外中子源处有着最高的功率密度。由于  $^{233}\text{U}$  的富集度不同，在一区和二区交界的地方会出现功率密度的跃变。

### 3.4 谱指数: $^{232}\text{Th}$ fission/ $^{233}\text{U}$ fission(BOL)

图 3 计算了在堆芯  $Z = 0$  cm 平面上  $^{232}\text{Th}/^{233}\text{U}$  单群裂变截面随堆芯径向变化，谱指数的变化反映了中子能谱随堆芯径向变化的性质。靶区内 ( $R < 15$  cm) 散裂中子有着很高的能量导致了很高的谱指数。从图 3 中可以看出三种  $K_{\text{eff}}$  下堆芯内的中子能谱差别不大，较低  $K_{\text{eff}}$  需要较大外源强度，故较低的  $K_{\text{eff}}$  下靶区的中子平均能量更高，也造成了更大的谱指数。

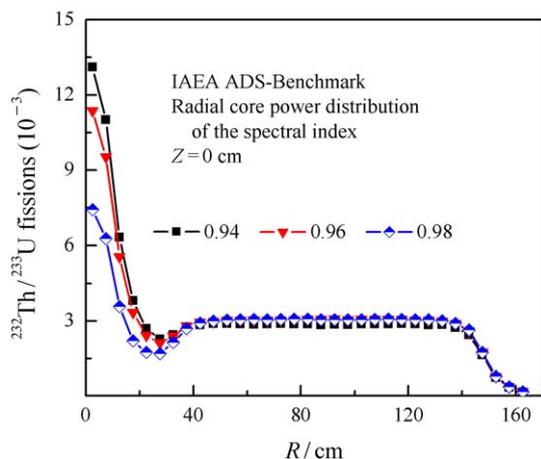


图 3 (在线彩图)堆芯谱指数( $^{232}\text{Th}/^{233}\text{U}$  fission)径向分布

### 3.5 燃耗计算

#### 3.5.1 $K_{\text{eff}}$ 随时间的变化

图 4 列出了本文在三种初始设定下  $K_{\text{eff}}$  随时间的变化，并且和其他国家计算的结果做了对比。在燃耗的  $0 \sim 150$  d，可以看到明显的  $K_{\text{eff}}$  降低然后再升高。造成这种现象的原因是镤 ( $^{233}\text{Pa}$ ) 的半衰期 (27 d)，在初始 150 d 内  $^{233}\text{U}$  被消耗得较多而增殖的  $^{233}\text{U}$  未得到补偿，使得反应性降低。约 5 个  $^{233}\text{Pa}$  半衰期后， $^{233}\text{U}$  增殖的量开始增多，补充了堆的反应性。从图 4 中可以看出耦合程序 MCADS 计算的结果从趋势和数值上都落在了合理的范围之内，与其他国家的计算结果有很好的 consistency。

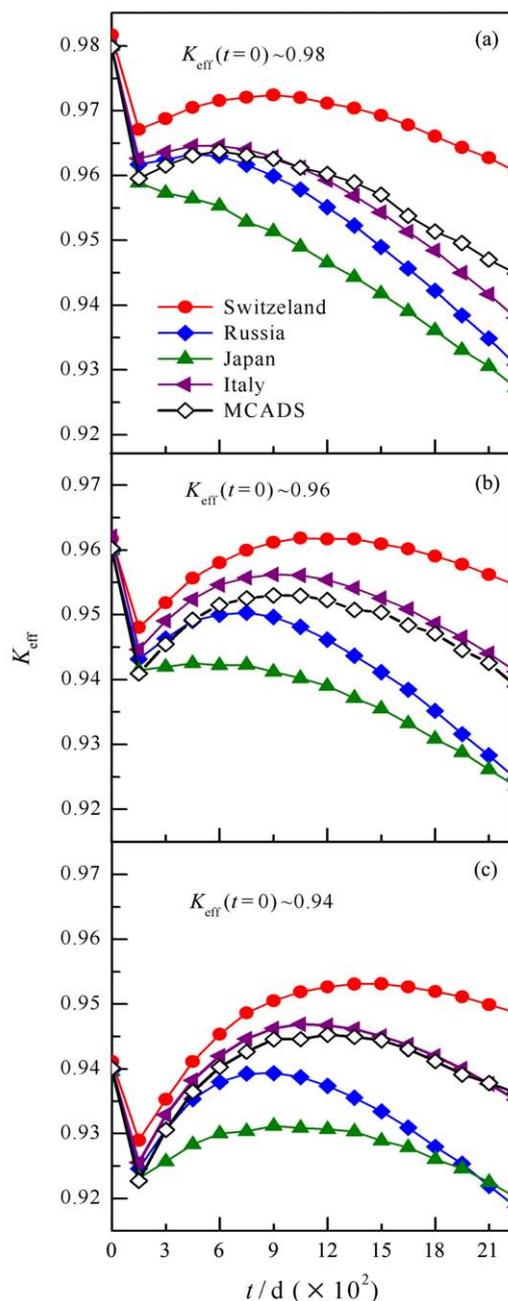


图 4 (在线彩图)IAEA 基准题  $K_{\text{eff}}$  随运行时间的变化

#### 3.5.2 外源强度随时间的变化

ADS 依靠散裂靶产生的外源中子来驱动次临界堆运行，为了获得一定的功率，必须依靠相应强度的外中子源来维持。如图 5 所示，MCADS 计算的次临界堆在 3 种不同  $K_{\text{eff}}$  (BOL) 下需要的外中子源强度随着燃耗时间的变化以及与不同国家计算的对比。可以看出外源强度和系统的次临界度有关；随着燃耗的加深， $K_{\text{eff}}$  会随着堆芯内核素的变化而变化。为了维持一定的功率，外中子源强度也要随之变化。

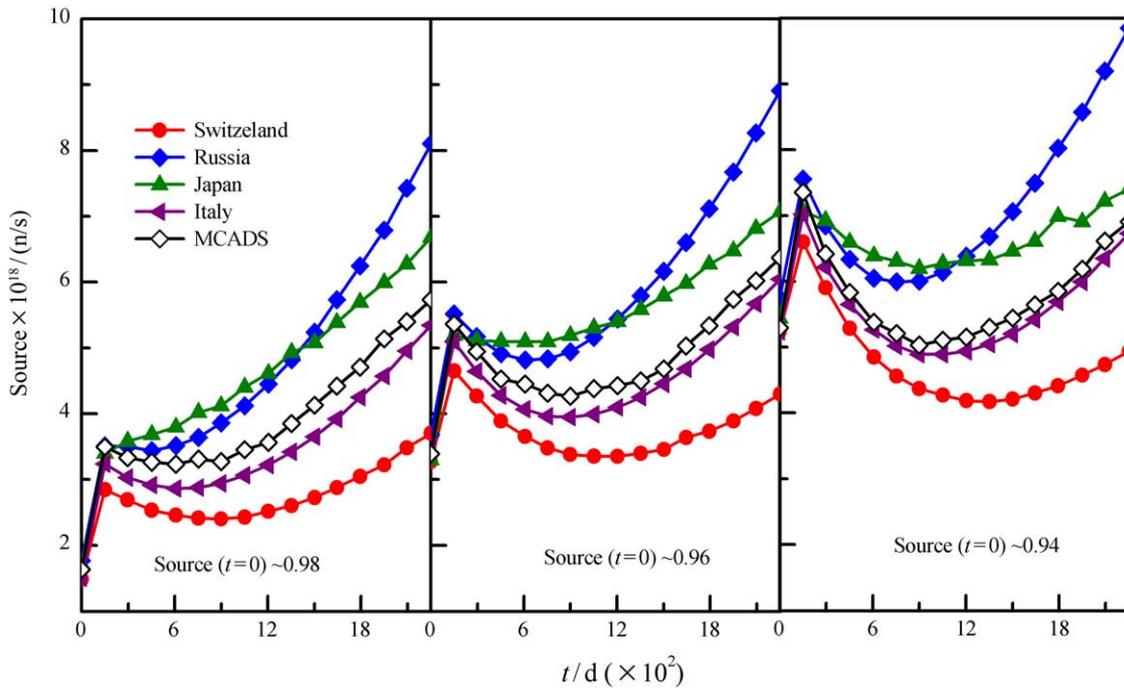


图 5 (在线彩图) 外源强度随运行时间的变化

### 3.5.3 乏燃料的放射性活度

表 3 列出了次临界堆初始  $K_{\text{eff}}$  取 0.98 时, 不同的国家计算燃料辐照 2250 d 后放射性活度  $A_i$  随时间的

变化, 在初始冷却的几百年之内各国结果差异最大, 但在千年后各国结果有着较好的一致。本文计算的结果落在了合理的范围之内。

表 3 堆芯燃料辐照后放射性活度随时间的变化 ( $K_{\text{eff}} = 0.98$ )\*

单位: Bq/g

冷却时间/a	$A_1$	$A_2$	$A_3$	$A_4$	$A_5$	$A_0$
100	$2.20 \times 10^8$	$5.21 \times 10^7$	$4.10 \times 10^7$	$3.55 \times 10^7$	$6.08 \times 10^9$	$2.69 \times 10^9$
1000	$5.50 \times 10^7$	$6.18 \times 10^7$	$6.23 \times 10^7$	$5.42 \times 10^7$	$5.95 \times 10^7$	$5.79 \times 10^7$
10000	$1.70 \times 10^8$	$1.97 \times 10^8$	$2.04 \times 10^8$	$1.76 \times 10^8$	$1.87 \times 10^8$	$1.87 \times 10^8$
100000	$1.97 \times 10^8$	$2.15 \times 10^8$	$2.25 \times 10^8$	$2.02 \times 10^8$	$2.07 \times 10^8$	$1.98 \times 10^8$
1000000	$5.20 \times 10^6$	$5.97 \times 10^6$	$6.30 \times 10^6$	$5.67 \times 10^6$	$6.43 \times 10^6$	$5.31 \times 10^6$

\*  $A_1$ : 俄罗斯;  $A_2$ : 瑞士;  $A_3$ : 法国;  $A_4$ : 意大利;  $A_5$ : 日本;  $A_0$ : 本文结果。

## 4 结语

对 ADS 基准题的计算结果分析得知, MCADS 计算的结果都处于各个参与国家的计算范围之内, 这检验了耦合程序外源模式计算燃料的正确性。各国的计算结果彼此分离度较大, 主要原因在核数据的不确定性引起。ADS 散裂中子最高能量达到几百 MeV, 对质子的反应截面要求为 1 ~ 2 GeV 左右, 对于多种次铀系核素的截面提出更高要求。近几年国际上核评价数据库都在不断的更新, 有很多专门针对 ADS 的数据库建立。目前这些发展对于工程设计来说精度还是不够的。未来 ADS 系统概念设计中,

MCADS 程序可以用来研究次临界堆核燃料的嬗变行为与核燃料循环、散裂靶与次临界堆结合段中子设计、与反应堆热工软件结合进行热工与余热导出系统设计, 今后的设计中 MCADS 会不断地得到完善和检验。

### 参考文献:

[1] SLESSAREV I, TCHISTIYAKOV A. IAEA ADS-Benchmark Results and Analysis [A]. Madrid: TCM-Meeting, September 1997: 451.  
 [2] BRIESMEISTER J F. MCNP-A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4C[R]. LA-13709-M. US,

- Los Alamos National Laboratory, 2000: 1.
- [3] CROFF A G. A User's Manual for the ORIGEN2 Computer Code[R]. ORNL/TM-7175. Oak Ridge National Laboratory, 1980: 1.
- [4] HOLLY R T. Development of Monteburns: A Code That Links MCNP and ORIGEN2 in an Automated Fashion for Burnup calculations [D]. LA-13514.US, Los Alamos National Laboratory, 1998: 1.
- [5] WANG K, LOU T P, GREENSPAN E, *et al.* Nuclear Power Engineering, 2003, **24**(3): 332.
- [6] SHE D, LIU Y X, WANG K, *et al.* Annals of Nuclear Energy, 2013, **51**: 289.
- [7] WIM H, BERNARD V. ALEPH1.1.2 A Monte Carlo Burn-Up Code [R]. SCK CEN-BLG-1003 Rev.0. Belgian Nuclear Research Centre, 2006: 1.

## Development of MCADS Code and ADS Benchmark Calculation

ZHANG Xunchao, QI Ji, ZHANG Yaling, YAN Xuesong, YANG Lei

(*Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China*)

**Abstract:** Burnup analysis plays an important role in the design of ADS since subcritical reactor has complex geometry structure as well as anisotropic flux distribution caused by external source. In order to simulate burnup, a Monte-Carlo Activation and Depletion Code System (MCADS) has been developed combining advantages of MCNP in complex geometry neutron transport calculation with LITAC in fast and precise inventory calculation. Then, IAEA ADS-Benchmark (stage1) is worked out, verifying that the code can be used to deal with subcritical reactor with an external source. Also, burnup, source evolution, void reactivity, initial spatial power density distribution are figured out with the code, showing good agreement with results from other countries.

**Key words:** accelerator driven sub-critical system; benchmark; burnup; Monte Carlo method

**Received date:** 8 Dec. 2013; **Revised date:** 21 Feb. 2014

**Foundation item:** Strategic Priority Research Program of Chinese Academy of Sciences (XDA03030100); National Natural Science Foundation of China(91026005)

**Corresponding author:** YANG Lei, E-mail: lyang@impcas.ac.cn.

<http://www.npr.ac.cn>