·蒙特卡罗方法及其应用·



JMCT 的高浓铀模型验证计算

史 博, 刘晓波

(中国工程物理研究院核物理与化学研究所,四川绵阳 621900)

摘要:为了对JMCT程序的准确性和适用性进行验证,从国际临界基准库中选取了56个模型,通过使用JLAMT程序进行建模,然后利用JMCT程序计算了模型的有效增殖因子,并与基准值、MCNP程序计算结果进行对比。计算结果表明,JMCT计算值基本都在基准值的3倍标准差以内,且JMCT计算结果和基准值的相对偏差基本都在2%以下。在一定程度上验证了JMCT程序的准确性和适用性,为后续JMCT程序的使用验证提供借鉴。
关键词:JLAMT; JMCT; 高浓铀模型; 检验和验证
中图分类号:TL329
文献标志码: A doi: 10.11884/HPLPB202234.210352

The validation and calculation of highly enriched uranium models in JMCT

Shi Bo, Liu Xiaobo

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

Abstract: To verify the accuracy and applicability of JMCT program, 56 models are selected from the International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments. Models are established in JLAMT, and the effective multiplication factors are calculated by JMCT and compared with the reference values and MCNP calculation results. The results show that the calculated values of JMCT are generally within three standard deviations of the reference values and the relative deviations between the JMCT calculation results and the reference values are generally less than 2%. The study has verified the accuracy and applicability of JMCT program to a certain extent, and it provides a reference for the subsequent application and verification of JMCT.

Key words: JLAMT; JMCT; highly enriched uranium models; validation and verification

在反应堆领域,对核系统临界问题的研究有两种方法:一种为确定论方法,一种为蒙特卡罗方法。一般由于所 需要计算的系统较为复杂,确定论方法很难得到准确的答案,而蒙特卡洛方法计算所需时间较长。随着计算机性 能的不断提高,蒙特卡罗方法计算所需时间大大减少,得到了广泛的应用。如今,国际上较为出名的基于蒙特卡罗 方法开发的程序有 MCNP, MONK, TRIPOLI, KENO, MCU, Geant4 等,这些程序通过广泛的验证和多年的使用已经 比较完善^[1]。国内近年也研发了一些基于蒙特卡罗方法的粒子运输程序,如 JMCT, RMC, SuperMC, RShieldMC 等, 这些程序经过不断地验证和升级改进,逐渐达到更加准确、高效及更好适用性的目的。本文从国际临界基准手册^[2] 中选取 56 个高浓铀实验模型,通过使用 JMCT 和 MCNP 计算有效增殖因子,并对比 JMCT、MCNP 和基准值的结 果,来对 JMCT 程序进行验证。

1 程序介绍

JMCT 是北京应用物理与计算数学研究所开发的一款通用三维蒙特卡罗粒子运输模拟软件,支持中子、光子 及其耦合的固定源(外源)与临界计算^[3]。JMCT 输入采用标准的 GDML 格式文件,具有较强的通用性,并且通过配 套使用可视化建模工具 JLAMT 降低了建模难度,使得用户不需要经过长时间的培训就能熟悉掌握建立模型的方 法。JLAMT 是北京应用物理与计算数学研究所在 UG-NX 平台上开发的可视化 CAD 建模工具^[4],通过基本体和布 尔运算来建立所需模型,可以生成 GDML 文件,为 JMCT 计算提供所需的几何、材料、温度等信息。

自 2013 年开发至今, JMCT 不断完善和发展, 在几何栅源数、计数等方面具有很好的支持, 目前能够快速的实

^{*} 收稿日期:2021-08-13; 修订日期:2021-10-25 联系方式:史 博,1279806784@qq.com。 通信作者:刘晓波,13881190590@163.com。

现反应堆全堆芯的 pin by pin 精细建模与模拟,并且在对大亚湾核电站反应堆精细建模^[5]、秦山核电厂反应堆屏蔽 分析^[6]等应用中取得良好结果;同时程序在开发完善过程中,也需要利用基准临界实验数据对程序临界计算的准 确性和可靠性进行检验验证。

2 理论原理

有效增殖因子 k_{eff} 为反应堆内一代裂变中子总数与上一代裂变中子总数之比,故要求得 k_{eff} 需要先求解出中子 通量密度 ø,中子通量密度 ø一般通过求解中子运输方程得到。中子运输方程有微分-积分形式和积分形式两种, 一般认为确定论是对积分-微分方程求解,蒙特卡罗方法是对积分方程求解,然而因为积分-微分和积分方程只是 一种方程的不同形式,故对其中一个求解另一个也就解决了。中子运输方程的微分-积分形式为

 $\frac{1}{v}\frac{\partial\phi}{\partial t} + \Sigma_{t}(r,E)\phi = \int_{0}^{E_{max}} \int_{4\pi} \Sigma_{s}(r,E')f(r,E' \to E, \Omega' \to \Omega)\phi(r,E',\Omega',t)dE'd\Omega' + Q_{f}(r,E,\Omega,t) + S(r,E,\Omega,t)$ (1)

式中: ϕ 为中子通量密度;t为时间;v为中子速度;r为中子位置; Ω 为中子运动方向;E为中子能量; $\Sigma_x(x=t,s)$ 为反应宏观截面;f为散射函数; Q_f 为裂变核反应引起的中子产生率;S为外中子源。

蒙特卡罗方法是一种非确定论算法,主要是通过进行大量随机试验,然后得到随机试验的某些特征值,并将其 作为问题的解。在中子运输过程中即通过模拟大量的中子在物质中运输的状况,使得中子运动的统计规律得以重 现,且由于是通过数值方法进行模拟,可以方便地追踪中子运输的全过程,并得到相关数据。蒙特卡罗方法模拟中 子运输过程分为以下5步:(1)确定初始状态;(2)确定下个碰撞点;(3)确定碰撞粒子和类型;(4)确定碰撞后能量 和运动方向;(5)重复前4步,直到达到设定循环数或截止时间。

使用蒙特卡罗方法求得中子通量密度 ø 后根据有效增殖因子的定义即可得到第 n 代有效增殖因子 k_{eff} 值。对 于有效增殖因子 k_{eff} 蒙特卡罗方法有三种估计方法,分别为碰撞估计、吸收估计和径迹长度估计,计算公式分别为

$$k_C^{(n)} = \frac{1}{\tilde{N}^{(n-1)}} \sum_i w_i \left[\frac{\sum_k \bar{v}_k \sigma_{f,k}}{\sum_k \sigma_{f,k}} \right]$$
(2)

$$k_A^{(n)} = \frac{1}{\tilde{N}^{(n-1)}} \sum_i w_i \bar{v}_k \frac{\sigma_{f,k}}{\sigma_{c,k} + \sigma_{f,k}} \tag{3}$$

$$k_T^{(n)} = \frac{1}{\tilde{N}^{(n-1)}} \sum_i w_i d_i \rho \sum_k \bar{v}_k \sigma_{f,k} \tag{4}$$

式中: $\tilde{N}^{(n-1)}$ 为每次循环归一化源大小; v_k 为中子与 k 核发生裂变释放出的平均中子数; w_i 为碰撞时的中子权; d_i 为 穿过系统的径迹长度; $\sigma_x(x=f, k, c)$ 为微观截面; ρ 为原子密度。结合三种估计方法, 通过最大似然估计计算得最终 k_{eff} 值, 也即有效增殖因子 k_{eff} 的最优解。

3 模型及验证条件

3.1 模型分类和计算条件

本文从国际临界基准库中挑选了 56 个高浓铀实验模型,覆盖了热谱、中能能谱、快谱以及混合能谱,增强了 验证计算的可靠性,模型具体选取情况如表1所示。先使用 JLAMT 软件建立模型并生成 GDML 文件,然后使用 JMCT 进行计算并对比验证结果。JMCT 和 MCNP 计算条件为每代模拟 100 000 粒子数,模拟 250 代,舍去前 50 代,核数据采用 ENDF/B-VII.0 数据库。

表1 模型选取分类情况

	Table 1 Cat	egorization of the benchm	arking models sel	ected	
	thermal	intermediate	fast	mixed	total
metal	6	5	17	3	31
compound	6	3	2	2	13
solution	8	2	0	0	10
miscellaneous	2	0	0	0	2
total	22	10	19	5	56

本文使用 3σ准则和相对偏差及相对偏差的平均值来分析比较程序计算结果的正确性和可靠性。相对偏差和 相对偏差的均值公式为

$$d_i = \left| \frac{x_i - \bar{x}}{\bar{x}} \right| \tag{5}$$

$$\bar{d}_i = \sum_{i=1}^n \frac{d_i}{n} \tag{6}$$

式中:xi为程序计算值; x为基准值; n为模型个数; di为相对偏差; di为相对偏差的均值。

3.2 热谱模型描述

热谱模型共选取22个,具体情况如表2所示。

	表 2 热谱模型描述
Table 2	Description of the thermal models

identifier	description	major fission nuclides	major nonfissionable nuclides
HEU-MET-THERM-001	stacking of square plates	U^{235}, U^{238}	Si, C, H, O
HEU-MET-THERM-006	lattices of square fuel elements	U^{235}, U^{238}	Н, О
HEU-MET-THERM-007	square arrangement of fuel elements	U^{235}, U^{238}	Fe, Cr, H, O
HEU-MET-THERM-009	stacking of square plates	U^{235}, U^{238}	Mg, C, H, O
HEU-MET-THERM-011	rectangular basket with built-in fuel plates	U^{235}, U^{238}	H, O, Al
HEU-MET-THERM-012	stacking of square plates	U^{235}, U^{238}	С, Н
HEU-COMP-THERM-001	square arrangement of fuel cans	U^{235}, U^{238}	С, Н, О
HEU-COMP-THERM-003	arrangement of cross-shaped fuel rod	U^{235}, U^{238}	C, H, O, Cu
HEU-COMP-THERM-005	hexagonal arrangement of fuel cluster	U^{235}, U^{238}	C, H, O, Cu
HEU-COMP-THERM-007	arrangement of cross-shaped fuel rod	U^{235}, U^{238}	C, H, O, Zr, Cu
HEU-COMP-THERM-010	fuel-pin arrays in water	U^{235}, U^{238}	H, O, Be
HEU-COMP-THERM-012	square arrangement of fuel rods	U^{235}, U^{238}	H, O, Si
HEU-SOL-THERM-001	unreflected tanks filled with uranyl nitrate	U^{235}, U^{238}	H, O, N
HEU-SOL-THERM-003	plexiglas reflected tanks filled with uranyl nitrate	U ²³⁵	H, O, N, C
HEU-SOL-THERM-005	cylindrical tank filled with fission solution	U^{235}, U^{238}	H, O, N, B, Si
HEU-SOL-THERM-007	concrete-reflected arrays of tanks filled with fission solution	U ²³⁵	N, H, O, C, Al, Cr, Fe
HEU-SOL-THERM-009	sphere with a fuel region	U ²³⁵	H, O, F, Al
HEU-SOL-THERM-011	sphere with a fuel region	U ²³⁵	H, O, F, Al
HEU-SOL-THERM-013	sphere with a fuel region	U^{235}, U^{238}	H, O, N, Al
HEU-SOL-THERM-032	sphere containing uranyl nitrate	U^{235}, U^{238}	H, O, N, Al
HEU-MISC-THERM-001	lattices of square fuel elements	U^{235}, U^{238}	H, O, B, N
HEU-MISC-THERM-002	lattices of fuel pins	U^{235}, U^{238}	B, N, O, H

3.3 中能能谱模型描述

中能能谱模型共选取10个,具体情况如表3所示。

表 3 中能能谱模型描述

Table 3 Description of the intermediate model	Table 3	Description	of the intermediate mode	els
---	---------	-------------	--------------------------	-----

identifier	description	major fission nuclides	major nonfissionable nuclides
HEU-MET-INTER-001	stacking of core fuel plates	U^{235}, U^{238}	Fe, Cr
HEU-MET-INTER-002	stacking of cylindrical plates	U^{235} , U^{238}	C, H, Ti
HEU-MET-INTER-003	stacking of cylinders with reflector	U^{235} , U^{238}	Be, O
HEU-MET-INTER-004	stacking of cylinders with reflector	U^{235} , U^{238}	С, Н
HEU-MET-INTER-008	assemblies of cylindrical tubes	U ²³⁵ , U ²³⁸ , Th ²³²	C, H, O, Al
HEU-COMP-INTER-001	complex cone configuration with fuel	U^{235}	O, Be, H, Zr, W, Al
HEU-COMP-INTER-003	cylindrical arrangement of component parts	U^{235} , U^{238}	H, O, N, Be, C
HEU-COMP-INTER-006	hexagonal tank with fuel tubes in square reflector tank	U^{235}, U^{238}	O, H, C
HEU-SOL-INTER-001	four-region sphere	U ²³⁵	H, O, F
HEU-SOL-INTER-002	three-region sphere with critical height fuel solution	U^{235}, U^{238}	H, O, F, Fe, C

3.4 快谱模型描述

快谱模型共选取19个,具体情况如表4所示。

表 4 快谱模型描述 Table 4 Description of the fast models

identifier	description	major fission nuclides	major nonfissionable nuclides
HEU-COMP-FAST-001	fuel cans configured in rectangular-pitched array	U^{235}, U^{238}	С, Н, О
HEU-COMP-FAST-003	hexagonal tank with fuel tubes in square reflector tank	U^{235}, U^{238}	О, С, Н
HEU-MET-FAST-001	unreflected set of concentric spherical shells	U^{235}, U^{238}	N, O
HEU-MET-FAST-003	tuballoy-reflected sphere	U^{235}, U^{238}	-
HEU-MET-FAST-004	sphere stands on the seat	U ²³⁵	С, Н, О
HEU-MET-FAST-008	part of symmetric spheres	U ²³⁵	Fe, Cu
HEU-MET-FAST-009	part of symmetric spheres	U^{235}, U^{238}	Be, Fe, Cu
HEU-MET-FAST-011	sphere with two hemisphere shell	U^{235}, U^{238}	С, Н
HEU-MET-FAST-012	part of symmetric spheres	U ²³⁵	Al, Cu, Fe
HEU-MET-FAST-013	part of symmetric spheres	U^{235}, U^{238}	Cu, Fe
HEU-MET-FAST-014	part of symmetric spheres	U^{235}, U^{238}	Al, Fe
HEU-MET-FAST-015	two cylinder with axial holes	U^{235}, U^{238}	Fe
HEU-MET-FAST-018	hollow sphere	U^{235}, U^{238}	C, Fe
HEU-MET-FAST-019	hollow sphere with reflector	U^{235}, U^{238}	С
HEU-MET-FAST-020	sphere with reflector	U^{235}, U^{238}	С, Н
HEU-MET-FAST-021	hollow sphere with reflectors	U^{235}, U^{238}	C, Fe
HEU-MET-FAST-022	hollow sphere with reflector	U^{235}, U^{238}	C, Al, Cu
HEU-MET-FAST-026	square arrangement of cylinders with reflectors	U^{235}, U^{238}	C, H, Fe
HEU-MET-FAST-028	sphere with reflector	U^{235}, U^{238}	-

3.5 混合能谱模型描述

混合能谱模型共选取5个,具体情况如表5所示。

表 5 混合能谱模型描述 Table 5 Description of the mixed models

identifier	description	major fission nuclides	major nonfissionable nuclides
HEU-MET-MIXED-001	stacking of cylinders with reflector	U^{235}, U^{238}	C, H, Ti, Fe
HEU-MET-MIXED-003	six-region sphere	U ²³⁵	С, Н
HEU-MET-MIXED-006	stacking of cylinders	U^{235} , U^{238}	C, H, Fe
HEU-COMP-MIXED-001	fuel cans configured in rectangular-pitched array	U ²³⁵	C, Fe, H, O, C
HEU-COMP-MIXED-003	complex cone configuration with fuel	U ²³⁵	O, Be, H, Zr, W, Al

4 模型计算结果及分析

4.1 热谱模型

22 个热谱模型计算结果见图 1,图 1(a)为不同模型的有效增殖因子结果,模型排列顺序和表 2 列项顺序相同,图 1(b)为不同模型 EALF 值和有效增殖因子结果,其中 EALF 为裂变平均对数能降。相关统计分析见表 6,其中 JMCT 程序计算结果的标准差都在 87×10⁻⁵ 以下,MCNP 计算结果的标准差都在 25×10⁻⁵ 以下。

从图 1 中可以看出, JMCT 计算结果、MCNP 计算结果和基准值都在 0.985~1.015 之间, 且模型计算结果基本都在基准值的 3 倍标准差范围内。从表 6 可以看出, JMCT 与基准值的相对偏差和 MCNP 与基准值的相对偏差在 2% 以下, 相对偏差的均值在 1% 以下。可以认为 JMCT 计算结果和 MCNP 计算结果、基准值较为符合。

4.2 中能能谱模型

10个中能能谱模型计算结果见图 2,图 2(a)为不同模型的有效增殖因子结果,模型排列顺序和表 3 列项顺序



Fig. 1 Results of thermal model calculation

图 1 热谱模型计算结果

表 6 热谱模型结果统计分析

Table 6 Statistical analysis of thermal model results

	relative deviation of $k_{\rm eff}$		
	average	minimum	maximum
JMCT results	0.006 55	0.000 41	0.018 91
MCNP results	0.005 46	0.000 26	0.014 78

相同,图 2(b)为不同模型 EALF 值和有效增殖因子结果。相关统计分析见表 7,其中 JMCT 计算结果的标准差都在 52×10⁻⁵ 以下,MCNP 计算结果的标准差都在 230×10⁻⁵ 以下。



Fig. 2 Results of intermediate model calculattion

图 2 中能能谱模型计算结果

表 7 中能能谱模型结果统计分析

Table 7 Statistical analysis of intermediate model results

	relative deviation of $k_{\rm eff}$		
	average	minimum	maximum
JMCT results	0.017 21	0.001 04	0.044 78
MCNP results	0.009 76	0.000 49	0.034 95

从图 2 中可以看出, JMCT 计算结果、MCNP 计算结果和基准值都在 0.96~1.05 之间, 部分数据在基准值的 3 倍标准差范围之外, 其中对第 4 和第 6 个模型 JMCT 计算结果和 MCNP 计算结果相差较大。从表 7 可以看出, JMCT 与基准值的相对偏差和 MCNP 与基准值的相对偏差最大值分别为 4.478% 和 3.495%, 相对偏差的均值分别 为 1.721% 和 0.976%。对于模型 4 和 6 出现的显著差异, 还需要对 JMCT 建模的各项数据再进行核实, 查找差异出现的原因。

4.3 快谱模型验证结果

19个快谱模型计算结果见图 3,图 3(a)为不同模型的有效增殖因子结果,模型排列顺序和表 4 列项顺序相同,图 3(b)为不同模型 EALF 值和有效增殖因子结果。相关统计分析见表 8,其中 JMCT 计算结果的标准差都在 80×10⁻⁵ 以下,MCNP 计算结果的标准差都在 17×10⁻⁵ 以下。



Fig. 3 Results of fast model calculation 图 3 快谱模型计算结果

表 8 快谱模型结果统计分析 Table 8 Statistical analysis of fast model results

	relative deviation of $k_{\rm eff}$		
	average	minimum	maximum
JMCT results	0.003 22	0.000 08	0.012 00
MCNP results	0.004 30	0.000 00	0.026 19

从图 3 中可以看出, JMCT 计算结果、MCNP 计算结果和基准值都在 0.985~1.03 之间, 且模型计算结果基本都 在基准值的 3 倍标准差范围内, 其中对第 2 个模型 JMCT 计算结果和 MCNP 计算结果相差较大。从表 8 可以看出, JMCT 与基准值的相对偏差和 MCNP 与基准值的相对偏差最大值分别为 1.2% 和 2.6%, 相对偏差的均值分别为 0.322% 和 0.43%。对于模型 2 出现的显著差异, 还需要对 JMCT 建模的各项数据再进行核实, 查找差异出现的原因。

4.4 混合能谱模型及结果

5 个混合能谱模型计算结果见图 4,图 4(a)为不同模型的有效增殖因子结果,模型排列顺序和表 5 列项顺序中相同,图 4(b)为不同模型 EALF 值和有效增殖因子结果。相关统计分析见表 9,其中 JMCT 计算结果的标准差都在 42 pcm 以下,MCNP 计算结果的标准差都在 19 pcm 以下。

从图 4 中可以看出, JMCT 计算结果、MCNP 计算结果和基准值都在 0.99~1.01 之间, 部分数据在基准值的



Fig. 4 Results of mixed model calculation 图 4 混合能谱模型计算结果

表 9 混合能谱模型结果统计分析 Table 9 Statistical analysis of mixed model results			
relative deviation of $k_{\rm eff}$			
	average	minimum	maximum
JMCT results	0.008 40	0.001 56	0.025 02
MCNP results	0.003 52	0.000 44	0.007 95

3 倍标准差范围之外,其中对第5个模型 JMCT 计算结果和 MCNP 计算结果相差较大。从表9可以看出, JMCT 与基准值的相对偏差和 MCNP 与基准值的相对偏差最大值分别为 2.502% 和 0.795%,相对偏差的均值分别为 0.84%和 0.352%。对于模型5 出现的显著差异,还需要对 JMCT 建模的各项数据再进行核实,查找差异出现的原因。

5 结 论

本文从国际临界基准库中选取了 56 个高浓铀临界基准实验模型,通过计算其有效增殖因子对 JMCT 程序进行验证。计算结果表明对于高浓铀模型, JMCT 的计算结果基本都在基准值 3 倍标准差范围以内,且 JMCT 的计算结果和基准值的相对偏差基本都在 2% 以下。此外,计算结果中部分模型 JMCT 的计算结果和基准值差异较大,还需要进一步寻找差异存在原因。综合来说, JMCT 计算结果和基准值较为符合,在一定程度上验证了 JMCT 的正确性。

致谢 感谢北京应用物理与计算数学研究所给予的指导和帮助。

参考文献:

- [1] 李云龙,杨海峰,易璇,等. JMCT程序临界安全基准校验计算与分析[J]. 强激光与粒子束, 2017, 29: 016007. (Li Yunlong, Yang Haifeng, Yi Xuan, et al. Critical safety benchmark verification calculation and analysis of JMCT program[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2017, 29: 016007)
- [2] Blair B J, Rugama Y, Thompson M A, et al. International handbook of evaluated criticality safety benchmark experiments[M]. Paris France: Organization for Economic Cooperation and Development, Nuclear Energy Agency, 2006.
- [3] 李刚,张宝印,邓力,等.蒙特卡罗粒子输运程序JMCT研制[J].强激光与粒子束, 2013, 25(1):158-162. (Li Gang, Zhang Baoyin, Deng Li, et al. Development of Monte Carlo particle transport program JMCT[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2013, 25(1): 158-162)
- [4] 马彦, 付元光, 秦桂明, 等. 面向领域的大规模可视建模工具JLAMT的设计与实现[J]. 计算物理, 2016, 33(5): 606-612. (Ma Yan, Fu Yuanguang, Qin Guiming, et al. Design and implementation of JLAMT, a domain-oriented large-scale visual modeling tool[J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2016, 33(5): 606-612)
- [5] 邓力, 李瑞, 丁谦学, 等. 基于JMCT秦山核电厂一期反应堆屏蔽计算与分析[J]. 核动力工程, 2021, 42(2): 173-179. (Deng Li, Li Rui, Ding Qianxue, et al. Qinshan-I reactor shielding simulation and sensitivity analysis based on JMCT Monte Carlo code[J]. Nuclear Power Engineering, 2021, 42(2): 173-179)
- [6] 付元光,马彦,上官丹骅,等.基于JMCT的大亚湾核电站反应堆精细建模与计算[J]. 核动力工程, 2014, 35(S2): 239-241. (Fu Yuanguang, Ma Yan, Shang Guan Danhua, et al. Sophisticated modeling and calculation of Daya Bay nuclear power station reactor based on JMCT[J]. Nuclear Power Engineering, 2014, 35(S2): 239-241)