



·蒙特卡罗方法及其应用·

基于 SuperMC 的随机介质程序在双重非均匀性问题中的应用*

朱 彤¹, 陈玉清¹, 李 昂¹, 谢明亮¹, 叶 磊²

(1. 海军工程大学 核科学技术学院, 武汉 430033; 2. 海军装备部, 西安 710054)

摘 要: 与传统的棒状燃料采用单一 UO₂ 陶瓷芯体不同, 弥散型板状燃料元件是将燃料微球混合在金属基体中, 燃料球与基体间微观上还存在体积的非均匀性。如果不能有效处理弥散燃料的局部空间, 自屏效应将对物理特性参数计算带来一定偏差。但传统确定论程序的填卡方式忽略了弥散型燃料具有双重非均匀性的特点。针对板状弥散型燃料栅元, 基于 SuperMC 程序编写随机介质程序, 分别建立体积均匀模型和颗粒模型来验证分析弥散型燃料中由空间自屏效应引起的非均匀性。结果表明, 该随机介质程序用于 SuperMC 中, 可以解决具有双重非均匀性的弥散型燃料的粒子输运数值模拟问题, 再通过建立传统 RPT 等效模型修正燃料和基体间非均匀性带来的计算偏差。

关键词: 弥散型燃料; 随机介质程序; SuperMC; 双重非均匀性

中图分类号: TL3

文献标志码: A

doi: 10.11884/HPLPB202234.210301

Application of random media program based on SuperMC in solving double-heterogeneity

Zhu Tong¹, Chen Yuqing¹, Li Ang¹, Xie Mingliang¹, Ye Lei²

(1. College of Nuclear Science and Technology, Naval University of Engineering, Wuhan 430033, China;

2. Department of Naval Armaments, Xi'an 710054, China)

Abstract: The dispersed fuel element is often used in small integrated PWR. The fuel core is composed of a large number of small fuel microspheres mixed in the metal matrix, and the volume heterogeneity exists between the fuel particles and the matrix. If the local space self-screen effect of the dispersion fuel can not be effectively treated, it will bring some deviation to the calculation of physical property parameters. The traditional deterministic method neglects the double-heterogeneity of dispersive fuel. In this paper, the explicit modelling and the random media program based on SuperMC are used to establish the volumetric homogenization model and grain model to verify double-heterogeneity. The traditional reactivity-equivalent physical transformation (RPT) model of the dispersive plate-fuel was established to correct the calculation deviation. The results show that the random media program combined with SuperMC can simulate the calculation of transport and burnup of various types of particles, and can well analyze and solve the double-heterogeneity problem.

Key words: particle-dispersed fuel; random media program; SuperMC; double-heterogeneity

弥散型燃料及其组成的堆芯结构属于随机非均匀介质^[1]。相较于传统棒状 UO₂ 陶瓷型燃料元件, 板状弥散型燃料一般是将 UO₂ 燃料颗粒弥散在金属基体中, 这样可以获得更好的燃料换热性能, 从而为提高堆芯功率密度、优化热工安全性提供支撑, 在小型一体化反应堆和实验堆中得到了广泛重视和应用^[2]。

在开展弥散型燃料堆芯物理特性分析时, 燃料元件除了芯体、包壳和冷却剂这一宏观层面的非均匀性外, 芯体内还存在着弥散燃料元件与金属基体间的非均匀性, 也就是具有双重非均匀性。传统的组件均匀化程序主要是处理栅元层面的非均匀性, 一般默认芯体内材料是均匀分布的, 但实际上燃料是以微小颗粒的形式存在于基体之

* 收稿日期: 2021-07-20; 修订日期: 2021-09-06

基金项目: 国家自然科学基金项目(11502298); 核反应堆系统设计技术重点实验室基金项目(HT-KFKT-02-2017103)

联系方式: 朱 彤, 511763596@qq.com.

中,这种非均匀性会造成一定的局部空间自屏蔽效应。实践表明,采用传统的均匀化方法进行物理特性计算时,分析结果与真实值存在一定的偏差,某些情况下超出了工程允许范围。

目前国际上主要采取以下几种方式处理双重非均匀性问题^[3]:(1) Sanchez-Pomranin 方法^[4],这种方法结合特征线方法(MOC)求解双重非均匀系统中的中子输运方程;(2)丹可夫方法^[5],通过中子逃脱共振概率计算丹可夫因子来修正有效共振截面,这也能较好地提高计算的准确性。(3)缺陷因子法^[6],通过对随机介质的截面因子进行修正使得介质均匀化,从而将双重非均匀性问题转化为传统单一非均匀性来提高计算的准确性。但这些方法使用的程序都需要两步完成,都需要对双重非均匀性进行修正以后再放入确定论的程序进行计算。而反应性等效物理变换法(RPT)^[7],可以通过蒙特卡罗程序对复杂几何的弥散燃料颗粒模型进行建模分析,并基于反应性等效原理找到颗粒模型所对应的体积均匀模型,从而修正计算偏差。

针对上述问题,与传统确定论程序相比,蒙特卡罗程序^[8]能精确描述复杂的几何结构,精确度高和高效的并行计算能力,在处理随机介质问题中有着独特的优势。本文在 SuperMC^[9]原有的基础上使用 Python 语言编写外部接口程序,该程序具有随机产生不同种类、半径、位置和数目颗粒的功能,以此达到模拟随机介质的目的。在建立好随机介质计算板块的基础上,构造板状弥散型燃料的两种模型即体积均匀模型(VHM)和颗粒模型(GM)以此验证弥散型燃料中的双重非均匀性。

1 随机介质程序

目前使用蒙特卡罗方法模拟随机介质的研究工作中,国际上主要采取以下几种方式:(1)重复结构随机栅格法,在随机介质重复排列的基础上,使栅格内填充的物质在原位置上发生随机扰动,这种方法虽然简单但无法描述紧密堆积结构并且发生的扰动也不能过大。(2)弦长抽样法,主要在输运过程中对随机介质的距离和角度进行抽样,这种方法可以简化几何结构提高计算效率。(3)显示模拟法为本文所运用的方法,区别于弦长抽样法,显示模拟是在几何建模时,对随机介质的位置预先进行抽样,然后再进行输运燃耗计算,这种方法具有很高的精确度,但计算效率相对较低内存占用较大。

本文结合 SuperMC 程序对弥散型燃料颗粒进行显式模拟计算,利用 SuperMC 的燃耗计算功能,把每个颗粒作为 1 个燃耗区进行计算,这样提高了计算的精细程度。为模拟弥散型燃料的分布,使用 Python 语言编写随机小球分布程序,利用 random 函数随机产生小球的坐标,可以修改随机小球产生的位置范围、小球数目和半径,并且还可以设定不同小球所占总数的比例,同时设定小球相互间不重合,所建模型如图 1 所示。这种随机介质程序能同时描述多种不同类型的燃料微球,达到精准建模目的。



Fig. 1 Random particles model

图 1 随机颗粒模型

2 单板栅元分析模型的建立与验证

2.1 分析模型的建立与验证

在第 1 节建立随机介质程序的基础上,为模拟研究需要,本文假想某一单板弥散型燃料元件栅元,燃料芯体采用涂铀 UO_2 燃料颗粒弥散在 Zr-2 基体中,包壳、支撑板的材料为 Zr-4 合金,包壳两侧为冷却剂流道,具体物理参数如表 1 所示。

使用 SuperMC 程序对单板燃料分别采用体积均匀模型和颗粒模型进行建模,以燃料芯体为中心,从内向外两侧分别排布包壳和水隙,再使用塞条固定芯体结构,如图 2 所示。在建立体积均匀化模型时,采用传统的材料填卡方式,认为燃料与基体材料是均匀混合的。在处理颗粒模型时,芯体部分分为 UO_2 燃料微球栅元和 Zr 基体栅元填卡,从而精细地建立燃料微球弥散在金属基体中的模型,使得模型最接近真实情况。同时,2 种单板模型均采用全反射边界条件。

为初步检验 SuperMC 模型的正确性,本文还使用 MCNP 程序建立了相应的体积均匀模型进行对比分析,2 个程序的计算结果如表 2 所示。从表 2 可以看出,两种程序计算的不同燃料富集度 0 燃耗临界特征值结果符合得较

表 1 单板均匀模型主要物理参数

Table 1 Physical parameters of volumetric homogeneous model physical parameters

offuel core length/cm	fuel core width/cm	clad length/cm	clad thickness/cm	moderator length/cm
1.50	0.05	1.50	0.015	1.50
moderator width/cm	plate length/cm	plate width/cm	fuel height/cm	volume of UO ₂ /%
0.08	0.10	0.08	1.20	12

好, 误差均小于 50×10^{-5} 。SuperMC 程序建模计算精度较高, 为本文后续计算分析奠定了基础。

2.2 弥散颗粒位置分布对计算的影响

外部接口程序产生弥散颗粒的坐标是随机的, 所以颗粒的分布有成千上万种可能, 为此, 本文模拟计算了 1000 个半径为 $120 \mu\text{m}$ 的燃料颗粒弥散在 Zr 基体中的 5 种不同分布的颗粒模型, 分析位置的变化对双重非均匀性的影响。不同分布的颗粒模型 k_{eff} 计算结果如表 3 所示。

由表 3 可知, 弥散颗粒五种不同的分布对 k_{eff} 的影响均在 35×10^{-5} 以内, 满足工程应用的要求。所以随机程序产生的颗粒位置对 k_{eff} 的影响并不大, 在后续的计算中, 可忽略颗粒的分布位置对结果的影响。

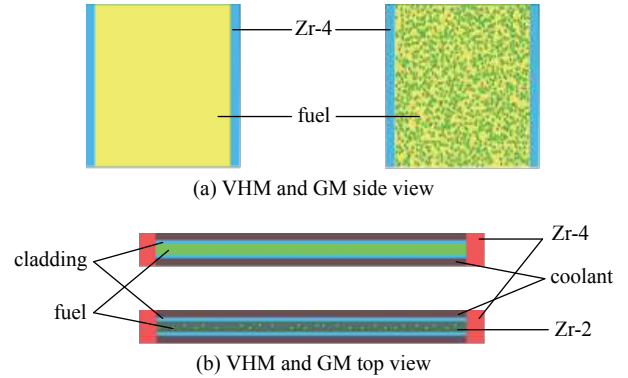


Fig. 2 Volumetric Homogenization Model (VHM) and Grain Model (GM) geometric figure

图 2 体积均匀模型与颗粒模型几何图

表 2 0 燃耗下的模型验证

Table 2 Model validation at zero burnup

fuel enrichment/%	SuperMC k_{eff}	MCNP k_{eff}	error/ 10^{-5}
20	1.41055	1.41100	-45
50	1.68305	1.68319	-14
80	1.77759	1.77797	-38

表 3 不同分布的颗粒模型 k_{eff} 计算结果Table 3 Grain model k_{eff} values with different distributions

No.	GM k_{eff}	average k_{eff}	error/ 10^{-5}
1	1.40346		-34
2	1.40356		-24
3	1.40408	1.40380	28
4	1.40390		10
5	1.40400		20

3 随机介质程序在双重非均匀性问题中的应用

弥散型燃料除栅元之间的非均匀性外, 还有微观上微球与基体之间的非均匀性, 即双重非均匀性。基于 SuperMC 程序建立的随机介质模型可以更直观地展现双重非均匀性问题。为此, 本文建立以下 2 种弥散型板状燃料栅元分析模型: (1) 仅燃料微球弥散在基体 Zr 中, 即单颗粒模型; (2) 燃料微球和可燃毒物 B₄C 微球同时弥散在基体 Zr 中, 即双颗粒模型。分别建立 2 种模型对应的颗粒模型和体积均匀模型, 模型几何结构与 2.1 节相同, 且保证燃料的总质量相等, 以此验证弥散型燃料元件中存在的双重非均匀性。

3.1 单颗粒模型的双重非均匀性验证

基于 SuperMC 程序的燃耗计算功能分析 20% 富集度单板随燃耗的 k_{eff} 结果, 如图 3 所示。从图 3 可以看出, 整个燃耗期内体积均匀模型的 k_{eff} 比颗粒模型大, 造成这种现象的主要原因为: 传统的体积均匀打混的方式高估了燃料对中子的吸收。在实际的弥散颗粒情况中, 大量体积微小的颗粒随机弥散在基体中存在非均匀性, 加上空间自屏效应影响了芯体中心位置燃料对中子的吸收, 所以使得常用的体积均匀打混方式得到的计算结果比真实的弥

散颗粒更大。

经研究发现,当满足式(1)不等式时需要考虑弥散颗粒的双重非均匀性^[8]。从判定式中可知,影响双重非均匀性大小的因素主要为燃料颗粒的宏观截面即富集度和直径(当光学长度大于0.1则表示颗粒内部中子通量差值达到10%,此时颗粒的双重非均匀性不可忽视)。

$$|\Sigma_{\text{matrix}} - \Sigma_{\text{grain}}|d_{\text{grain}} > \varepsilon \quad (1)$$

式中: Σ_{matrix} 和 Σ_{grain} 分别表示基体的宏观截面和颗粒的宏观截面; d_{grain} 表示弥散颗粒的直径; ε 表示光学长度限值。

3.2 双颗粒模型的双重非均匀性验证

与棒状可燃毒物棒不同,在弥散型燃料中可燃毒物也以弥散颗粒的形式存在。在3.1节分析的基础上采用随机介质程序,新增一种半径不同的可燃毒物 B_4C 颗粒,用双颗粒模型更加精细地描述弥散型燃料的几何结构,对含可燃毒物颗粒的模型进行燃耗计算,结果如图4所示。

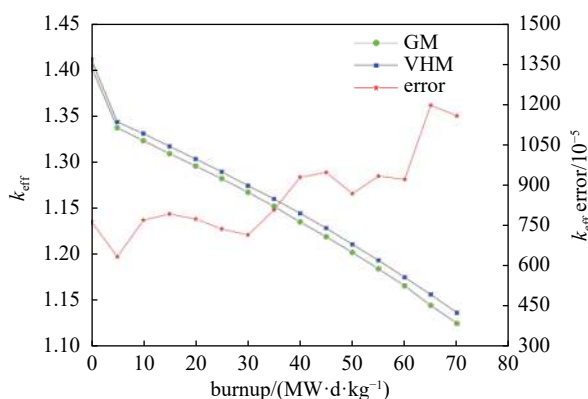


Fig. 3 Calculation deviation of fuel consumption for single-type particle model

图3 单颗粒模型燃耗计算偏差

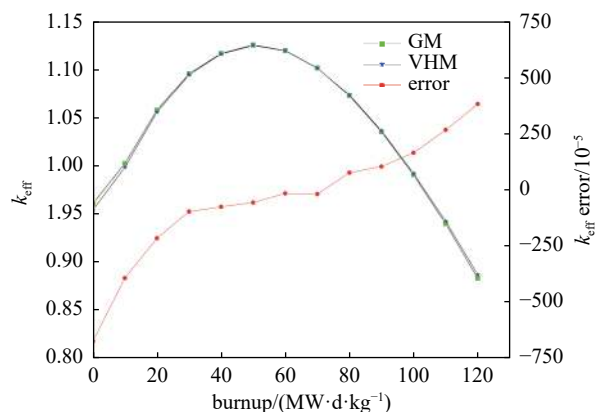


Fig. 4 Deviation of fuel consumption for two-type particle model

图4 双颗粒模型燃耗计算结果

计算结果同样验证了弥散型燃料的双重非均匀性。寿期初,体积均匀方法更容易吸收中子,对于吸收截面较大的可燃毒物双重非均匀性体现得愈加明显,所以最初VHM模型中可燃毒物吸收了更多的中子使其 k_{eff} 比GM模型的更小。随着燃耗加深可燃毒物颗粒也逐渐消耗,计算偏差渐渐趋近于0,但由于单颗粒模型中也存在双重非均匀性,所以VHM模型的 k_{eff} 又大于GM模型的 k_{eff} 。

4 RPT方法

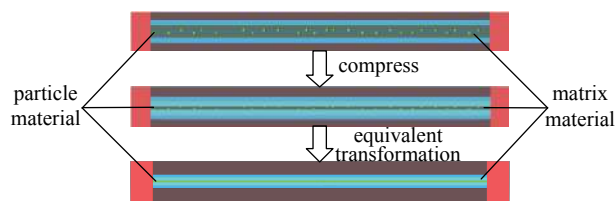
4.1 RPT方法的简介

反应性等效物理变换法^[7]即RPT方法。其主要原理是使模型的 k_{eff} 与参考解相等来确定等效厚度,等效原理如图5所示。首先,把燃料颗粒压缩在一定的区域内,接着对区域内的燃料根据体积权重进行均匀化。均匀化以后的模型可继续放入传统的物理计算程序中进行计算。对于RPT方法来说,使用蒙卡软件是最好的选择,颗粒模型能在蒙卡程序中实现,并且蒙卡程序能得到高保真的计算结果,而等效以后的模型计算也可以通过蒙卡程序进行计算。

4.2 传统RPT方法对单颗粒模型的等效结果

以20%富集度的单颗粒模型为例,使用线性差插值的方法来寻找燃料颗粒被压缩的等效厚度,并对等效过后的模型进行燃耗计算,结果如图6所示。在燃耗初期,使用传统RPT方法修正双重非均匀性带来的计算偏差效果较好,RPT等效模型的计算结果基本与颗粒模型重合,但随着燃耗的加深,计算偏差逐渐增大,最大大约在 300×10^{-5} 。

采用传统RPT方法把燃料颗粒压缩在较小的区域内再使用体积均匀化方法来修正计算偏差。这种方法使得压缩后的区域内核子密度更高,这能一定程度上反映空间自屏效应,但中心区域的中子吸收率增大燃耗速率较快



Schematic diagram of traditional RPT method

图5 传统RPT等效原理图

再加上截面随燃耗变化的影响,使得一开始确定的等效半径在燃耗的中后期不一定适用。对于这种现象,可以考虑采用随燃耗变化的等效厚度的办法来更加精确的修正计算偏差。总得来说,传统 RPT 方法能有效地修正双重非均匀性带来的影响。

5 结 论

本文针对弥散型燃料的粒子输运数值模拟问题采用了显示模拟法,基于 SuperMC 程序加入随机介质建模,分别对单颗粒和双颗粒模型下的双重非均匀性进行验证。该随机介质程序结合 SuperMC 可以较好地实现弥散型燃料的精细建模,还可以通过可视化功能直观地展现颗粒的分布、半径和数目。通过计算验证了弥散型燃料中由空间自屏蔽效应带来的非均匀性,在燃料富集度和颗粒半径确定的情况下,0 燃耗时颗粒位置分布对 k_{eff} 的影响较小,可忽略不计,弥散燃料的富集度和半径才是影响双重非均匀性的主要因素。同时基于 SuperMC 程序采用传统 RPT 方法对计算偏差进行修正,结果表明,传统 RPT 方法在燃耗期内能有效地修正双重非均匀性带来的计算误差。但 RPT 方法作为一种近似的方法,随着燃耗的加深,芯体中产生了新的核素,同时各种核素的截面也在随着燃耗的加深而改变,所以最初确定的等效厚度在寿期中后期不一定适用。

蒙卡程序虽然可以进行大规模并行计算,但在处理复杂的多颗粒模型的建模计算时,存在计算效率低和如何合理进行燃耗分区等问题。本文建立的随机介质程序在 SuperMC 中的使用为后续双重非均匀性问题的研究奠定了良好的基础,使用传统 RPT 方法简单的等效后,也证明了蒙卡方法有能力对这类问题进行完整的分析和处理。

参考文献:

- [1] 刘仕倡. 基于RMC的反应堆全寿期高保真模拟与随机介质精细计算[D]. 北京: 清华大学, 2018. (Liu Shichang. Reactor high fidelity life-cycle simulation and precise calculation of stochastic media based on RMC code[D]. Beijing: Tsinghua University, 2018)
- [2] 郭玉川. 板状燃料元件堆流道堵塞事故分析[D]. 北京: 中国工程物理研究院, 2019. (Guo Yuchuan. Analysis on a flow blockage incident at a plate-type fuel reactor[D]. Beijing: China Academy of Engineering Physics, 2019)
- [3] 李颂, 张乾, 张志俭, 等. 基于子群方法的双重非均匀性共振计算方法研究[J]. 原子能科学技术, 2020, 54(10): 1892-1899. (Li Song, Zhang Qian, Zhang Zhijian, et al. Resonance treatment for double heterogeneity based on subgroup method[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2020, 54(10): 1892-1899)
- [4] Hébert A. A collision probability analysis of the double-heterogeneity problem[J]. *Nuclear Science and Engineering*, 1993, 115(2): 177-184.
- [5] Shmakov V M, Lyutov V D, Dean V F. Effective cross sections for calculations of criticality of dispersed media[C]//Proceedings of Advances in Reactor Physics, and Mathematics and Computation into the Next Millennium. 2000: 7-11.
- [6] Li Jian, She Ding, Shi Lei. An improved reactivity-equivalent physical transformation for treating FCM fuel with burnable poisons[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2018, 121: 577-581.
- [7] 娄磊, 姚栋, 柴晓明, 等. 耐事故燃料双重非均匀性RPT方法研究[J]. 核技术, 2020, 43(8): 20-24. (Lou Lei, Yao Dong, Chai Xiaoming, et al. Research of the RPT method on double-heterogeneity of accident tolerance fuel[J]. Nuclear Techniques, 2020, 43(8): 20-24)
- [8] 李耀东, 余纲林, 李万林, 等. 蒙卡燃耗中的氙振荡现象分析及计算研究[J]. 强激光与粒子束, 2018, 30: 036004. (Li Yaodong, Yu Ganglin, Li Wanlin, et al. Xenon oscillation analysis in Monte Carlo burnup calculation[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2018, 30: 036004)
- [9] Xu Y B, Bedenko S V. Study of k_{eff} values of different distributions and types of burnable poisons in VVER-1000 reactor using SuperMC[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2021, 1989: 012022.

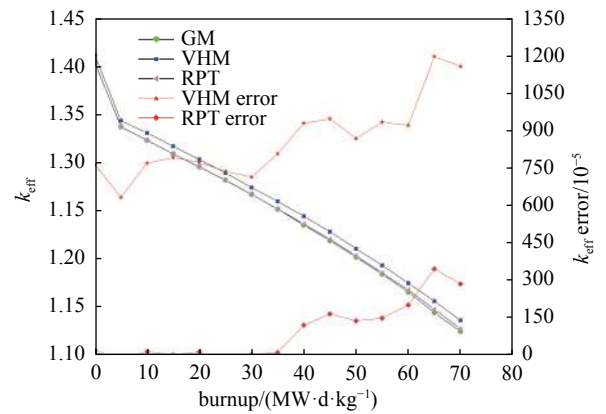


Fig. 6 Equivalent results of the RPT method

图 6 传统 RPT 方法等效结果图