文章编号:1673-0062(2017)04-0031-06

蒙特卡罗中子输运计算中弥散型颗粒燃料的 子网格随机模型研究

陈珍平1,谢金森1,郭 倩2,谢 芹1,刘紫静1,谢 超2,于 涛1*

(1.南华大学 核科学技术学院,湖南 衡阳 421001;2.南华大学 环境与安全工程学院,湖南 衡阳 421001)

摘要:弥散型颗粒燃料在燃料元件中的随机分布特性给传统的堆芯物理计算方法
 带来巨大困难与挑战.主要针对蒙特卡罗中子输运计算,开展基于子网格模型的颗粒燃料随机模型建模方法研究,探讨了网格尺寸大小对随机模型建模效率和堆芯物理
 计算精度的影响,给出了最佳网格尺寸参数.数值结果表明,基于最佳网格尺寸参数
 的子网格模型可较好地满足弥散型颗粒燃料的堆芯物理计算需求.
 关键词:蒙特卡罗;颗粒燃料;子网格模型;堆芯物理
 中图分类号:TL32
 文献标志码:A

Sub-fine Lattice Modeling of Dispersion Particle Fuels in Monte Carlo Neutron Transport Simulation

CHEN Zhen-ping¹, XIE Jin-sen¹, GUO Qian², XIE Qin¹, LIU Zi-jing¹, XIE Chao², YU Tao^{1*}

(1.School of Nuclear Science and Technology, University of South China, Hengyang, Hunan 421001, China; 2.School of Environment and Safety Engineering, University of South China, Hengyang, Hunan 421001, China)

Abstract: The dispersion particle fuel element in which the fuel particles statistically distributed in the background material presents new challenges for the conventional reactor physics methods. Based on the Monte Carlo method, the sub-fine lattice modeling of dispersion particle fuels in neutron transport simulation was studied, and the impacts on the modeling efficiency and calculation accuracy of the lattice sizes were given. The numerical results showed that the sub-fine lattice modeling with optimal lattice size can meet the re-

收稿日期:2017-01-11

基金项目:国家自然科学基金资助项目(11605085;11575079);湖南省教育厅科学研究资助项目(16B222;16C1361); 南华大学博士科研启动基金资助项目(2015XQD06;2015XQD12)

作者简介:陈珍平(1987-),男,讲师,博士,主要从事蒙特卡罗中子输运计算方法与软件研发.E-mail:chzping@yeah. net.*通讯作者:于涛,E-mail:yutao29@sina.com.

quirements of reactor physics simulations for the dispersion particle fuel. key words:Monte Carlo;particle fuel;sub-fine lattice model;reactor physics

0 引 言

为了促进核能安全、高效、可持续的发展,目 前世界各国正在加紧研发安全性和经济性更好的 第四代新型核能系统.弥散型颗粒燃料因其具有 承受燃耗深、包容裂变产物能力强和导热性好等 优点而被广泛应用在高温气冷堆[1]、固态熔盐 堆^[2]等新型核能系统中,同时近年来也被广泛应 用在新型弥散型燃料压水堆^[3]概念设计中.弥散 型燃料因燃料颗粒在基体材料中的随机分布特性 给传统堆芯物理计算方法带来了极大挑战.传统 的"两步法"(先均匀化燃料颗粒,再进行燃料球 的均匀化组件计算)经数值验证^[4]已不能完全满 足目前的计算要求,特别针对弥散型燃料中填充 多种燃料颗粒(如含有可燃毒物颗粒)的复杂堆 芯模型,要求计算时应该对燃料颗粒的随机分布 特性加以充分考虑才能获得可靠结果.本文主要 研究在采用蒙特卡罗方法对弥散型燃料进行中子 输运计算时,利用子网格模型构建燃料颗粒随机 模型的基本原理和方法,并探讨了网格尺寸大小 对随机模型建模效率和堆芯物理计算精度的影 响,给出了最佳网格尺寸参数.

1 弥散型颗粒燃料

弥散型颗粒燃料^[5]是一种先进的核燃料元件形 式,它由燃料颗粒(U或Pu化合物)弥散地随机分布 在惰性基体材料(如金属、陶瓷或石墨等非裂变材 料)中,构成一种随机介质.弥散型颗粒燃料被主要 应用在高温气冷堆和固态熔盐堆的堆芯设计中.

以第四代核能系统球床高温气冷堆为例,球 床堆芯通常使用球形燃料元件(燃料球),颗粒燃 料在其中石墨基质中弥散地随机分布.把一定量 的球形燃料元件随机填充堆芯中,即可得到球床 结构的堆芯.以我国清华大学自主研发的 10 MW 球床高温气冷堆(HTR-10)^[6]为例,其采用的球形 燃料元件由燃料区和无燃料区组成,其中最重要 的组成单元是 TRISO(TRstructural ISOtropic)型包 覆燃料颗粒(如图 1).包覆燃料颗粒由直径约 500 μm的 UO₂ 核芯和 4 层包覆层组成,从里往 外:低密度疏松热解炭层、内致密各向同性热解炭层.



Fig.1 TRISO-type dispersion particle fuels

因此,弥散型燃料元件在一般非均匀性(燃料芯体、包壳、慢化剂或冷却剂)之外引入了新的 非均匀性,即燃料芯体的非均匀性(燃料颗粒弥 散地随机分布在石墨基体材料中),形成燃料元 件的双重非均匀性.而燃料颗粒在燃料元件内的 不规则分布则是由燃料元件的加工制造原理造成 的.在燃料元件的加工制造过程中,通常把包覆燃 料颗粒直接压进燃料元件中,把包覆燃料颗粒直 接压进燃料元件中,把包覆燃料颗粒直 超中并不对包覆燃料颗粒在燃料元件内的分布人 为的设置要求(这在燃料元件的制造过程中通常 是难以实现的),这也就相应的造成了在当前高 温气冷堆的燃料元件中使用的包覆颗粒燃料具有 随机分布特性.因此,有必要针对弥散型颗粒燃料 开展随机模型建模及中子输运计算方法研究.

2 子网格随机模型

网格模型是弥散型颗粒燃料建模中最常用的 建模方法之一^[7].如图2所示,通过构建一系列规 则分布的网格,然后将每个燃料颗粒放置在网格 的中心.通常为了保障建模效率,传统网格模型中 其网格尺寸比燃料颗粒尺寸大很多,而每个网格 有且仅包含一个燃料颗粒,导致其最大缺点在于 难以保有所需的燃料体积份额(小于0.524),难 以工程应用^[8].同时,由于传统网格模型直接采用 燃料颗粒固定网格中心的分布模式,未考虑燃料 颗粒在石墨基质中的随机分布特性,使得在组件 临界计算时有效增殖因子的结果比真实结果大 0.1%~0.2%^[9],而全堆芯临界计算时则会导致更 大的误差.



图 2 网络狭空小息图 Fig.2 Lattice model for particle fuels

子网格模型(sub-fine lattice)是一种随机分 布模型^[10],它是从传统网格模型进一步发展而 来.与传统网格模型相比,子网格模型同样采用规 则分布网格,包覆燃料颗粒或者说包覆燃料颗粒 的中心点在网格里面随机分布.因此,子网格模型 是一种随机模型,其考虑了燃料颗粒在石墨基质 中的随机分布特性.在子网格模型建模过程中,并 没有严格规定网格的尺寸大小,但余慧等人^[11]建 议选择子网格的尺寸大小为2*R*/√3(*R* 为燃料颗 粒的几何半径),以保证每个网格只包含一个颗 粒燃料,其目的在于提高随机模型的建模效率.因 此,子网格随机模型的基本原理和实现流程(图 3)如下:

1)根据给定的网格尺寸,建立规则分布的三 维网格模型;

2)随机选择一个网格,判断该网格是否被燃 料颗粒填充;

3)若选择的网格已被燃料颗粒填充,则返回 第2)步;否则,进入第4)步;

4) 在选择的网格里面, 基于抽样的伪随机 数, 随机产生一个空间点坐标, 并将燃料颗粒的中 心布置在该点;

5)检查燃料颗粒是否越出模型外边界;若是 返回第2)步,否则到第6)步;

6)检查当前网格填充的燃料颗粒是否与该 网格相邻网格内的燃料颗粒重叠;若是则返回第2)步,否则进入第7)步;

7) 在当前选择的网格里面, 以当前产生的随 机点为中心填充一个燃料颗粒;

8)判断网格模型中填充的燃料颗粒是否达 到预期数目,或者燃料颗粒的填充比是否达到预 期值;若否,则返回第2)步;若是,则建模结束.

子网格模型通常选取比传统网格模型更小的 网格尺寸,并允许放置其中的燃料颗粒的中心点 在子网格中随机移动.因此,相比传统网格模型方法,子网格模型可以保有工程实际应用所需的燃料填充比,且一定程度地考虑了燃料颗粒在石墨 基质中的随机分布特性,更切合实际工程应用 需求.



图 3 子网格随机模型建模流程 Fig.3 The modeling scheme for particle fuels using sub-fine lattice model

3 计算结果与分析

3.1 子网格模型数值验证

为了验证本文子网格方法实现及开发程序的 正确性和可靠性,本节基于 TRISO 颗粒燃料自定 义弥散燃料模型进行数值验证.定义一个边长为 0.4754 cm 的石墨基质立方体模型,在模型里面 基于子网格方法随机填充 100 个 TRISO 包覆燃料 颗粒.模型中采用的 TRISO 燃料颗粒的具体材料、 尺寸和几何结构来自美国的高温气冷堆设计参 数^[12],如表1 所示.

表1	TRISO 型燃料颗粒的几何与材料组成
Table 1	Geometry and material composition for
	TRISO-type fuel particles

		· · · · · · · ·	
材料区域	厚度/ µm	核素 组成	密度 / (g・cm ⁻³)
铀燃料颗粒	175	UC ^{0.5} O ^{1.5}	10.5
疏松热解炭	100	С	1.0
内致密热解炭	40	С	1.9
碳化硅	35	SiC	3.2
外致密热解炭	40	С	1.9

在进行建模计算时,所采用的石墨基质为美国棱柱型高温气冷堆中常用的 H-451 型石墨,其密度设定为 2.25 g/cm³.该模型中铀燃料采用低富集度的碳化铀和二氧化铀混合燃料,其中铀-235 的富集度为 10.36%,而 U、C、O 元素的原子比为 2:1:3.以 2*R*/√3 为网格尺寸,基于子网格模型构建的弥散燃料颗粒模型如图 4~图 6 所示,从图中可以看出 TRISO 燃料颗粒在石墨基质中具有较好的随机分布特性.



图 4 弥散燃料模型 X-Y 横截面图 Fig.4 The X-Y cross-sectional view



图 5 弥散燃料模型 Y-Z 横截面图 Fig.5 The Y-Z cross-sectional view



图 6 弥散燃料模型 X-Z 横截面图 Fig.6 The X-Z cross-sectional view

采用美国洛斯阿拉莫斯国家实验室开发的蒙 特卡罗粒子输运计算程序 MCNP(Monte Carlo neutron particle transport code)对自定义模型进行无限 增殖因子(k_)计算.在进行 MCNP 计算时,模型的 外边界均采用全反射边界条件.模拟计算条件为: 总共计算1000代,略去前300个非活跃代,每代 1 000个源中子.以随机顺序增加(random sequential addition,RSA)方法的结果为参考值.RSA 方法的主 要思想:在模型空间中随机选取一个点,把一个颗 粒燃料的中心放在选择的点上:然后将另一个颗粒 燃料放在已经减少的体积中,一直重复此步骤.RSA 方法在建模时,不会人为地对模型进行网格划分, 是一种较为真实的随机过程,能够保证建立的燃料 颗粒模型相比网格模型具有更好地随机分布特性, 因此用作参考解.从表2看出,本文实现的子网格 方法的计算结果误差为 0.16% (小于0.50% 经验误 差准则),与RSA 方法的参考值吻合一致,验证了 本文子网格方法及程序的正确性.

表 2 子网格模型数值验证

Table 2 Numerical verification for sub-fine lattice model

建模方法	k_{∞}	统计误差 σ	
子网格方法	1.292 65	0.000 87	
RSA 方法	1.290 58	0.000 95	

3.2 子网格尺寸的影响分析

为了分析子网格尺寸大小对弥散燃料颗粒模型建模效率与计算精度的影响,本节主要开展子网格尺寸的影响分析研究.首先,研究子网格尺寸大小对弥散燃料模型建模效率的影响.测试模型与前节所采用的模型一致,即边长为0.4754 cm 的立方体模型,分析采用不同网格尺寸的子网格模型建模时填入不同数量燃料颗粒时的建模效率.

表 3~表 5 给出了子网格模型建模效率随网格 尺寸大小的数值关系.从表 3 和表 4 中可以看,到当 燃料数较大时,采用 R 为网格尺寸的子网格模型的 建模时间比采用 2R/√3 为网格尺寸的模型的建模时 间稍小.这是由于一定情况下,采用 R 为网格尺寸的 模型其网格数要比采用 2R/√3 为网格尺寸的模型网 格数多一些,采样速度要稍快一些.从表 5 可以看到, 以2R/√5 为网格尺寸的子网格模型建模所花费的时 间明显要比采用前两种尺寸的模型所用时间大很多. 这主要是因为:当采用 2R/√5 作为网格尺寸时,那么 需要进行重叠检查的网格数将会是中心网格(当前 待填充网格)周围的 342 个网格,而不是前两种情况 下的 124 个网格.这约是前两种情况的 2.76 倍.所以 采用 2*R*/√5为网格尺寸建模时,其重叠检查的循环 次数多,相应的建模速度就要慢很多,大概是前两种 模型的 3 倍左右.如果边长更小或者填入的燃料颗粒 数更多时,这种情况还将会不断加剧.由此可以得出 结论:从建模效率来考虑,取网格尺寸为 *R* 时最佳, 2*R*/√3次之;在非必要情况下,尽量不要选取 2*R*/√5 及更小的网格尺寸,这会使建模时间快速增加.

表 3 子网格尺寸为 $2R/\sqrt{3}$ 时的建模效率 Table 3 Modeling efficiency when the sub-fine

lattice size is $2R/\sqrt{3}$			
燃料颗粒数目/个	建模时间/s		
10	0.101		
45	0.589		
75	1.741		
100	7.908		

表 4 子网格尺寸为 *R* 时的建模效率 Table 4 Modeling efficiency when the sub-fine lattice size is *R*

燃料颗粒数目/个	建模时间/s
10	0.097
45	0.568
75	1.507
100	7.250

表 5 子网格尺寸为 2*R*/√5 时的建模效率

 Table 5
 Modeling efficiency when the sub-fine

lattice size is $2R/\sqrt{5}$

燃料颗粒数目/个	建模时间/s	
10	0.244	
45	1.342	
75	4.695	
100	25.540	

为了进一步测试不同网格尺寸建模对蒙特卡 罗中子输运计算精度的影响,对 3.1 节的模型分 别采用 2*R*/√3、*R*、2*R*/√5 三种网格尺寸进行建模, 并利用 MCNP 程序进行无限增殖因子(*k*_s)计算, 并以 RSA 模型计算结果为参考值,分析不同网格 尺寸对计算精度的影响.

表 6 给出了不同网格尺寸的子网格模型对计 算精度的影响.从表 6 中可以看到,随着网格尺寸 的不断减小,基于 MCNP 程序对子网格随机模型 计算得到的 k_x值在逐渐减小,并不断接近于随机 顺序增加模型(RSA)给出的参考值.这是因为随 着网格尺寸的减小,能布置燃料颗粒中心点的位 置点数量会增加,燃料颗粒所能达到的区域也在 增加,从而为模型引入更大的随机性,使其越来越 接近于燃料颗粒的真实分布.与此同时,随着网格 尺寸减小,建模时需要进行重叠检查的网格数目 也将不断增加,建模速度会越来越慢.

表 6	ィ	「同网格	尺寸	对计算	精度	的影	向
Table	6	Effects	of di	fferent	grid	sizes	on

calculation accuracy

网格尺寸	k_{∞}	统计误差 (σ)
$2R/\sqrt{3}$	1.292 65	0.000 87
R	1.291 34	0.000 87
$2R\sqrt{5}$	1.290 32	0.000 91
RSA	1.290 58	0.000 95

从理论上分析,当网格尺寸趋向于零时,需进 行重叠检查的网格数也将相应趋向于无穷,此时 的真实情况就会变成新放入的燃料颗粒要与该区 域中已经存在的所有燃料颗粒进行重叠检查,此 时子网格随机模型实际上就已蜕变为随机顺序增 加模型(RSA).因此,随着网格尺寸的不断减小, 子网格随机模型将不断趋向于随机顺序增加模 型.当网格尺寸等于零时,子网格随机模型实际上 就已经变成随机顺序增加模型.

3.3 讨论与归纳

通过对 3.1 节和 3.2 节的数值验证结果进行 讨论分析,可以得出:不断缩小网格尺寸,子网格 随机模型将越来越趋向于随机顺序增加模型,这 也就相应的为子网格模型增添了更多的随机性. 但与此同时,网格尺寸的减小将会带来建模时间 的快速增加,使得子网格模型失去其最大的速度 优势.因此,需要根据具体的实际情况去选取合适 的网格尺寸,在速度和精度两方面上做出一定的 取舍.当主要考虑建模效率时,需要选择较大的网 格尺进行建模.若要求计算结果更加接近于真实 值,则需要对网格尺寸进行适当的减小.其中,以 R 为网格尺寸的子网格模型要比以 2R/√3 为网格 尺寸的子网格模型引入的随机性要大,同时要比 以2R/√5)为网格尺寸的子网格模型建模速度更 快.因此,综合考虑建模效率与计算精度,本文推 荐使用 R 作为最佳的子网格模型的网格尺寸来 进行弥散型颗粒燃料建模.

4 结 论

弥散型颗粒燃料的随机分布特性给传统的堆 芯物理计算方法带来的困难与挑战.针对该问题, 详细介绍了基于蒙特卡罗中子输运计算方法对弥 散型颗粒燃料进行临界计算时,利用子网格模型 进行弥散颗粒燃料随机建模的基本方法和原理. 基于自定义的 TRISO 燃料颗粒模型,对子网格随 机模型的建模效率和计算精度进行了研究、测试 和比较.从数值结果中可以看出,在一定的误差范 围内,子网格随机模型的计算结果与参考模型的 结果符合较好,证明其是正确的和有效的.同时, 子网格模型所采用的网格尺寸会对子网格模型的 建模效率和计算精度产生较大影响.综合考 虑建模效率和计算精度两个方面,本文推荐以*R* 作为子网格模型建模时网格尺寸的最佳选择.

参考文献:

- [1] FUTTERER M A, LI F, SINK C, et al. Status of the very high temperature reactor system [J]. Progress in nuclear energy, 2014, 77:266-281.
- [2] 朱贵凤.氟盐冷却球床高温堆钍利用研究[D].上海: 中国科学院上海应用物理研究所,2015.
- [3] BAE G, HONG S G.A small long-cycle PWR core design concept using fully ceramic micro-encapsulated (FCM) and UO₂-ThO₂ fuels for burning of TRU[J].Journal of nuclear science and technology, 2015, 52(12):1540-1551.

(上接第30页)

- [8] VINOTH S., AJAY KUMAR L. Applying real time seismic monitoring technology for slope stability assessment—An Indian opencast coal mine perspective [J]. International journal of mining science and technology, 2014, 24 (1): 75-80.
- [9] GUO M, GE X, WNAG S. Slope stability analysis under seismic load by vector sum analysis method[J].Journal of rock mechanics and geo-technical engineering, 2011, 3 (03):282-288.
- [10] SIMPLICE F. E24 profile slope stability analysis in haizhou opencast coal mine of fuxin [J]. Global geology, 2007(2):171-184.
- [11] ATAEI M, BODAGHABADI S.Comprehensive analysis of slope stability and determination of stable slopes in the Chador-Malu iron ore mine using numerical and limit e-

- [4] 秦冬, 巨海涛, 强胜龙, 等. 双重非均匀性对燃耗计算影响 的初步分析[J]. 科技创新导报, 2015, 12(24): 247-249.
- [5] 李冠兴, 武胜. 核燃料 [M]. 北京: 化学工业出版 社,2007.
- [6] LI F. Very high temperature reactor system [R]. Chiba, Japan: GIF Symposium, 2015.
- [7] BROWN F B, MARTIN W R.Stochastic geometry capability in MCNP5 for the analysis of particle fuel[J]. Annals of nuclear energy, 2004, 31(17): 2039-2047.
- [8] KIM T K, YANG W S, TAIWO T A, et al. Preliminary assessment of lattice physics capabilities for VHTR analysis [J].Transactions of the American nuclear society, 2004, 91: 543-544.
- [9] BROWN F B, MARTIN W R, JI W, et al. Stochastic geometry and HTGR modeling with MCNP5 [C]//LaGrange Park: Amrican Nuclear Society, 2005:1-11.
- [10] CHO N Z, YU H.Sub-fine lattice stochastic modeling of randomly distributed particle fuels with variability in packing fraction[C]//Gyeongju:Korean Nuclear Society, 2006:1-2.
- [11] 余慧, Cho N Z.蒙特卡罗计算中颗粒型燃料的随机 分布模型比较[J].强激光与粒子束, 2013, 25(1): 143-146.
- [12] MACDONALD P E, STERBENTZ J W, SANT R L, et al. NGNP point design-results of the initial neutronics and thermal-hydraulic assessments during FY-03, Rev.1[R]. Idaho: Office of scientific and technical information technical reports, 2003.

quilibrium methods [J]. Journal of China university of mining & technology, 2008, 18(4):488-493.

- [12] 吴森,李虎杰,陈国辉,等.基于贡献率权重法的区域 滑坡影响因子敏感性分析[J].中国地质灾害与防治 学报,2016,27(1):26-31.
- [13] 李艳萍,洗国栋,王维,等.管道应力应变监测试验规 程研究[J].油气储运,2008,27(10):21-23.
- [14] 吴森,李虎杰,陈国辉,等.基于贡献率权重法的区域 滑波影响因子敏感性分析[J].中国地质灾害与防治 学报,2016,27(1):26-31.
- [15] 张万涛.基于正交设计的滑坡敏感性分析[J].铁道标准设计,2011(10):33-36,40.
- [16] 刘长春,殷坤龙,李远耀.巴东县文家滑坡稳定性计
 算及其敏感性分析[J].水文地质工程地质,2010,37
 (1):113-117,123.