

# 压水堆燃耗数据库的制作与验证

吴小飞, 吴海成, 刘萍, 葛智刚, 温丽丽, 肖越

(中国原子能科学研究院核数据重点实验室, 中国核数据中心, 北京 102413)

**摘要:** 基于评价数据库 ENDF/B-VIII.0 和 EAF-2010 研制了一套适用于 CINDER90 程序的压水堆用燃耗数据库, 该数据库包含中子反应截面、衰变数据和裂变产额数据 3 部分。中子反应截面的加工分为两步, 首先采用 Inverted-Stack 算法和 CRECTJ6 程序将 EAF-2010 库的截面分支比融入 ENDF/B-VIII.0 库全套中子评价数据, 然后用 NJOY2016 程序处理成 63 群截面。衰变数据和裂变产额数据分别由 MF8/MT457 和 MF8/MT454 数据加工得到, 裂变产额数据共包含 36 个裂变核的 60 组产额数据。以 SFCOMPO-2.0 中 Takahama-3 压水堆燃料组件为基准题, 对研制的燃耗数据库进行了验证。结果表明, 本文制作的燃耗数据库的方法是正确的, 对于某些核素, 如  $^{242}\text{Am}^m$ , 制作的数据库比自带库的计算结果更接近实验值。

**关键词:** CINDER90; 燃耗数据库; Takahama-3

中图分类号: O571.5

文献标志码: A

文章编号: 1000-6931(2022)05-0944-08

doi: 10.7538/yzk.2022.youxian.0212

## Development and Validation of Burnup Library for PWR

WU Xiaofei, WU Haicheng, LIU Ping, GE Zhigang, WEN Lili, XIAO Yue

(China Nuclear Data Center, Key Laboratory

of Nuclear Data, China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China)

**Abstract:** Burnup calculation is an important field in the nuclear physics calculations by which the changes in the isotopic composition of materials is computed. Burnup calculation is of significant importance for a wide range of applications in various stages of design, licensing, operation, waste management and decommissioning. The role of the nuclear data library is very important to the accuracy of burnup calculations. CINDER90 is a widely used point nuclear depletion code and its library was released in the year 2000. The raw data which are used for processing CINDER90 library are primarily from ENDF/B-V, ENDF/B-VI and EAF-3. It is necessary to update this library with newly released evaluated nuclear data. In this paper, a CINDER90 burnup library for PWR was developed based on nuclear data library ENDF/B-VIII.0 and EAF-2010, which consists of three parts: neutron cross section, decay data and fission product yields. The processing of neutron cross section was divided into two parts, firstly the branching ratios of EAF-2010 were integrated into ENDF/B-VIII.0 library using the inverted-stack algorithm and CRECTJ6 program, and then the pointwise cross section was processed into 63-group infinitely diluted cross sections by the open-source nuclear data processing code NJOY2016. The cross-section data were Doppler broadened at 293.6 K and the

mid-life PWR flux spectrum with a fusion peak added (IWT=5) was applied as weighting function. Decay data and fission-product yields data were processed based on the MF8/MT457 and MF8/MT454 separately. Continuum delayed photon emission data was converted into a series of discrete lines by defining a set of energy bins with a width of 10 keV that spans the range of the continuum. Fission-product yields data contain 60 datasets from 36 fissionable actinides. When yield data are not available for an isotope identified in the library as fissionable,  $^{239}\text{Pu}$  fast yield set is given for neutron induced fission and  $^{252}\text{Cf}$  spontaneous fission yield set is given for spontaneous fission. The Takahama-3 benchmark from SFCOMPO-2.0 database was used to validate the new library. For most of the nuclides, the inventory calculation results obtained by using the new library and the old library are in well agreement except for  $^{242}\text{Am}^m$ , of which the calculated value using the new library is closer to the experimental value. After investigating the 63-group neutron cross sections, we believe that the inelastic cross sections in the old library are unreasonable. It can be concluded that the processing method proposed in this paper is correct and the calculation accuracy is improved for some important nuclides.

**Key words:** CINDER90; burnup library; Takahama-3

燃耗计算是反应堆堆芯燃料管理、燃耗信用制技术应用、核燃料的转换增殖和嬗变研究以及乏燃料后处理、贮存、运输等分析的基础,燃耗计算的准确性在堆芯物理分析中至关重要。燃耗数据库是燃耗计算最基本的输入参数,其精度直接决定了燃耗计算本身的精度。MCNP6<sup>[1]</sup>内耦合了点燃耗程序 CINDER90<sup>[2]</sup>,在核电站和后处理设计中应用较为广泛。CINDER90 程序自带数据库发布于 2000 年,其基础评价数据来源于 ENDF/B-V、ENDF/B-VI 和 EAF-3 库<sup>[3]</sup>。目前 ENDF/B 库和 EAF 库的最新版本分别是 ENDF/B-VIII.0<sup>[4]</sup>和 EAF-2010<sup>[5]</sup>,有必要根据新的评价数据库制作新的 CINDER90 燃耗数据库。

国内目前开展的燃耗数据库加工制作方法主要基于 ORIGEN-S 程序<sup>[6-7]</sup>,针对 CINDER90 开展的燃耗数据库的制作方法研究较少。本文开展 CINDER90 燃耗数据库制作方法研究,开发相应的制作程序,以实现大量核素的批量加工。基于 ENDF/B-VIII.0 和 EAF-2010 制作压水堆用燃耗数据库,并利用 Takahama-3 基准题进行数据库的验证。

## 1 基本原理

依据原子核密度守恒关系,考虑核反应堆

中占据主导的中子反应和衰变反应两种核素转换过程,可列出描述原子核密度场随时间变化规律的燃耗方程<sup>[8]</sup>:

$$\frac{d}{dt}N_i(t,r) = -(\lambda_i^{\text{decay}} + \int_0^\infty \sigma_{a,j}(E)\phi(t,r,E)dE) \cdot N_i(t,r) + \sum_j b_{j,i}\lambda_j^{\text{decay}} \cdot N_j(t,r) + \sum_k \sigma_{k,i}(E)\phi(t,r,E) \cdot N_k(t,r) + F_i(t,r) \quad (1)$$

式中: $N_i(t,r)$ 为时刻  $t$  位置  $r$  处第  $i$  核素原子核密度; $\lambda_i^{\text{decay}}$  为第  $i$  核素衰变常量; $\sigma_{a,j}(E)$  为第  $j$  核素微观中子吸收截面; $\phi(t,r,E)$  为时刻  $t$  位置  $r$  处中子通量密度; $b_{j,i}$  为第  $j$  核素衰变至第  $i$  核素的分支比; $\sigma_{k,i}(E)$  为第  $k$  核素产生第  $i$  核素的微观中子截面; $F_i(t,r)$  为时刻  $t$  位置  $r$  处第  $i$  核素的净迁入率。

假定在某一燃耗步内微观中子反应率为常数,且忽略核素迁移效应,可得到某一位置处的齐次点燃耗方程如下:

$$\frac{d}{dt}N_i(t) = -(\lambda_i^{\text{decay}} + \sigma_{a,i}\phi) \cdot N_i(t) + \sum_j b_{j,i}\lambda_j^{\text{decay}} \cdot N_j(t) + \sum_k \sigma_{k,i}(E)\phi \cdot N_k(t) \quad (2)$$

式中: $\sigma_{a,i}$  为第  $i$  核素单群微观中子吸收截面; $\phi$  为单群中子通量密度; $\sigma_{k,i}$  为第  $i$  核素产生第  $i$  核素的单群微观中子截面。

式(2)可写成更为紧凑的矩阵形式:

$$\mathbf{N}(t) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{N}(t) \quad (3)$$

式中,  $\mathbf{A}$  为燃耗矩阵。

式(3)的解可借助矩阵指数表示为:

$$\mathbf{N}(t) = e^{\mathbf{A}t} \cdot \mathbf{N}(0) \quad (4)$$

燃耗计算过程中的每个燃耗步, MCNP6 首先进行输运计算得到 63 群中子通量和  $(n, 2n)$ 、 $(n, 3n)$ 、 $(n, \text{fission})$ 、 $(n, \gamma)$ 、 $(n, p)$  和  $(n, d)$  6 种反应的反应率等信息<sup>[9]</sup>, 并传递给 CINDER90。CINDER90 程序利用 63 群中子通量和反应率以及燃耗数据库中的 63 群中子活化截面、衰变数据和裂变产额数据构造燃耗矩阵, 然后采用线性子链分析 (TTA) 方法求解燃耗方程。TTA 方法是基于单个线性核素链的解析计算方法, 具有精度高、时间步长灵活的优点, 并且避开了燃耗方程组刚性问题。

## 2 燃耗数据库制作

### 2.1 中子反应截面

#### 1) 截面分支比转换

ENDF/B-Ⅷ.0 的中子反应数据比较全面, 但截面分支比信息匮乏, 活化数据库 EAF-2010 中截面分支比信息较为全面, 但反应截面值相对陈旧。为了将二者很好地结合, 本文将 EAF-2010 的截面分支比信息加入到 ENDF/B-Ⅷ.0 中子反应数据中。EAF-2010 库中大部分反应的截面分支比是通过分反应截面来表示的, 在评价库中的文档 10(MF10) 中给出。为了将截面分支比信息融入评价数据库, 首先需要将截面分支比表示方式从分反应截面转换为多重数 (multiplicity), 即将 MF10 转换为文档 9(MF9)。

MF10 以表格的形式给出分反应截面, 同时给出相应的插值方式, 表 1 列出 ENDF-6 格式<sup>[10]</sup> 支持的 5 种插值方式。

MF10 中分反应截面与能量通常满足线性关系, 假设某反应存在两个分支, 分反应截面与能量分别满足式(5)、(6):

$$y_1 = a_1 E + b_1 \quad (5)$$

$$y_2 = a_2 E + b_2 \quad (6)$$

式中:  $y_1$ 、 $y_2$  为截面;  $E$  为能量;  $a_1$ 、 $a_2$ 、 $b_1$ 、 $b_2$  为常数。转换为多重数后, 两个分反应的多重数  $f(E)$  与能量  $E$  的关系依次为式(7)、(8):

$$f_1(E) = \frac{a_1 E + b_1}{(a_1 + a_2)E + b_1 + b_2} \quad (7)$$

$$f_2(E) = \frac{a_2 E + b_2}{(a_1 + a_2)E + b_1 + b_2} \quad (8)$$

表 1 评价核数据库中的截面插值方式

Table 1 Interpolation law used in evaluated nuclear data file

编号	描述插值方法	数学表达式
1	$y$ 随 $x$ 的变化是常数	$y = \text{constant}$
2	$y$ 与 $x$ 是线性关系	$y = y_k + A_k(x - x_k)$
3	$y$ 与 $\lg x$ 是线性关系	$y = y_k + B_k \lg(x/x_k)$
4	$\lg y$ 与 $x$ 是线性关系	$\lg y = \lg y_k + C_k(x - x_k)$
5	$\lg y$ 与 $\lg x$ 是线性关系	$\lg y = \lg y_k + D_k \lg(x/x_k)$

显然, 多重数  $f_1(E)$ 、 $f_2(E)$  和  $E$  的关系无法使用表 1 中任何一种插值方法来表达。本文借鉴 NJOY 程序<sup>[11]</sup> RECONR 模块中截面线性化的方法, 通过经典的 Inverted-Stack 算法将多重数进行线性化处理。Inverted-Stack 算法的基本思路如图 1 所示。

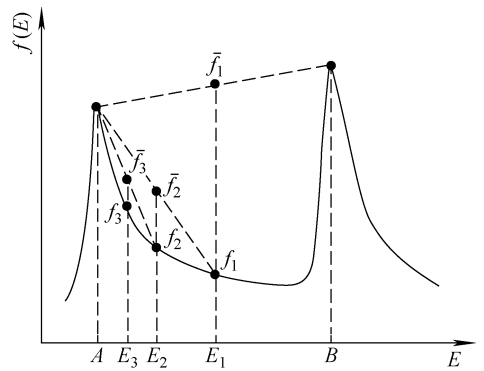


图 1 Inverted-Stack 算法示意图

Fig. 1 Schematic diagram of Inverted-Stack algorithm

图 1 中横坐标为入射中子能量  $E$ , 纵坐标为通过式(7)和(8)计算得到的“真实”分支比  $f(E)$ 。通过对所讨论区间进行不断地半分, 比较线性插值得到的分支比  $\bar{f}(E)$  与“真实”分支比  $f(E)$  的相对误差, 如果不满足收敛准则, 则在能量框架中保留该半分点, 如果满足收敛准则, 则该区间处理完成, 开始讨论下一区间, 算法具体细节参见 NJOY 手册。多重数线性化

处理完成后,利用 CRECTJ6 程序<sup>[12]</sup>将 ENDF/B-Ⅷ.0 全套中子数据中的文档 8(MF8)和 MF9 替换为转换后的 EAF-2010 库的相应文档。

2) 中子多群截面加工

截面分支比转换完成后,首先利用核数据处理程序 NJOY2016<sup>[11]</sup>将评价数据加工成 GENDF 格式的多群数据,然后将 GENDF 格式多群数据转换成 CINDER90 库格式。图 2 示出了中子吸收截面处理流程。

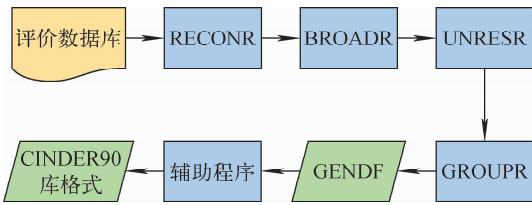


图 2 中子吸收截面处理流程  
Fig. 2 Processing flow of neutron absorption cross section

(1) 权重谱的选取

群常数制作中,通常权重谱对多群截面计算有重大影响。本文选用了典型的压水堆中期中子通量谱(IWT=5),其在热堆计算中具有一定的通用性。

(2) 温度的选取

在反应堆中,燃料、结构材料、慢化剂的温度各不相同。根据温度展宽理论,热能区的 $1/v$ 截面随温度无变化,但常数截面随温度升高而增大为 $1/v$ 形式的截面。在燃耗计算中,具有 $1/v$ 形式的吸收截面随温度变化不大,可近似忽

略其影响。为了简化计算,同时考虑到数据库的通用性,本工作中吸收截面取常温 293.6 K。

(3) 能群结构及反应道

能群结构和 CINDER90 自带库的能群结构保持一致。群截面产生模块 GROUPR 采用邦达连科方法计算 63 群中子截面,考虑了反应道(即 MT 值)为 4、11、16、17、18、22~25、28、29、30、32~37、41、42、44、45、102~109、111~117 等 38 种反应。

2.2 衰变数据和裂变产额制作

衰变数据制作方法是依次从评价库 ENDF/B-Ⅷ.0 的 MF8/MT457 读取每个核素的半衰期、衰变类型、衰变分支比、平均衰变放能和缓发光子谱等信息,然后写成 CINDER90 库格式。缓发光子谱能群结构和自带库一致,以 25 群形式给出。评价库中的缓发光子谱以分立能级和连续谱两种形式来表示。对于以连续谱形式给出的缓发光子谱,本文参考 ORIGEN-S 衰变库加工方法<sup>[13]</sup>,将连续能谱划分成间隔不大于 10 keV 的能量区间进行积分,转换成分立能级。

裂变产额数据基于 ENDF/B-Ⅷ.0 裂变产额子库(包括自发裂变和中子诱发裂变)加工制作。其制作方法是从小 MF8/454 加工得到包含 36 个裂变核的 60 组独立裂变产额数据,表 2 列出了 36 个裂变母核及诱发裂变的入射中子的能量。这 36 个核素之外的核素如果被标记为可裂变核素(即给出了裂变反应截面或自发裂变分支比),则作以下处理:中子诱发裂变用 <sup>239</sup>Pu 快中子裂变产额数据代替,自发裂变用 <sup>252</sup>Cf 自发裂变产额数据代替。

表 2 裂变核素和诱发裂变的入射中子能量

Table 2 Fissionable nuclides and induced neutron energy

裂变核	入射中子能量				裂变核	入射中子能量			
	S	T	F	HE		S	T	F	HE
<sup>227</sup> Th		✓			<sup>241</sup> Am		✓	✓	✓
<sup>229</sup> Th		✓			<sup>242</sup> Am <sup>m</sup>		✓		
<sup>232</sup> Th			✓	✓	<sup>243</sup> Am			✓	
<sup>231</sup> Pa			✓		<sup>242</sup> Cm			✓	
<sup>232</sup> U		✓			<sup>243</sup> Cm		✓	✓	
<sup>233</sup> U		✓	✓	✓	<sup>244</sup> Cm	✓		✓	
<sup>234</sup> U			✓	✓	<sup>245</sup> Cm		✓		

续表 2

裂变核	入射中子能量				裂变核	入射中子能量			
	S	T	F	HE		S	T	F	HE
$^{235}\text{U}$		✓	✓	✓	$^{246}\text{Cm}$	✓		✓	
$^{236}\text{U}$			✓	✓	$^{248}\text{Cm}$	✓		✓	
$^{237}\text{U}$			✓		$^{249}\text{Cf}$		✓		
$^{238}\text{U}$	✓		✓	✓	$^{250}\text{Cf}$	✓			
$^{237}\text{Np}$		✓	✓	✓	$^{251}\text{Cf}$		✓		
$^{238}\text{Np}$			✓		$^{252}\text{Cf}$	✓			
$^{238}\text{Pu}$			✓		$^{253}\text{Es}$	✓			
$^{239}\text{Pu}$		✓	✓	✓	$^{254}\text{Es}$		✓		
$^{240}\text{Pu}$		✓	✓	✓	$^{254}\text{Fm}$	✓			
$^{241}\text{Pu}$		✓	✓		$^{255}\text{Fm}$		✓		
$^{242}\text{Pu}$		✓	✓	✓	$^{256}\text{Fm}$	✓			

注:S代表自发裂变;T代表热中子;F代表快中子;HE代表高能中子

### 3 数值验证

#### 3.1 基准题描述

日本原子能研究所对 Takahama-3 压水堆 NT3G23 与 NT3G24 组件的 3 根燃料棒 SF95、SF96 和 SF97 的 16 个样品进行了辐照后检验实验(PIE),实验值可在 OECD/NEA 乏燃料成分数据库 SFCOMPO-2.0<sup>[14-15]</sup>中查询。本文仅对 SF95 燃料棒的 5 个样品点进行分析。SF95 棒的燃料为  $\text{UO}_2$ ,燃料棒的半径为 0.402 5 cm,燃料棒包壳内径、外径分别为 0.411、0.475 cm,由于 SF95 燃料棒被相同类型燃料棒包围,无控制棒导向管及可燃毒物对中子通量密度的影响,均匀性较好,所以建立单栅元模型,二维几何模型如图 3 所示,在模型周围设置全反射边界条件。

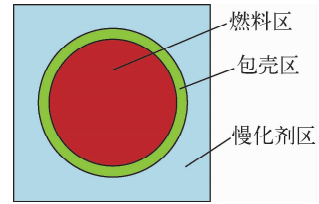


图 3 SF95 系列样品计算模型

Fig. 3 Computational model of SF95 samples

#### 3.2 结果与分析

使用 MCNP6 程序分别利用自带库和新制库对基准题进行建模和计算,将得到的核素积存量计算值(C)与实验值(E)进行比对,得到相对偏差  $C/E-1$ ,比对结果如图 4~8 所示。

比对结果表明,除了  $^{242}\text{Am}^m$  外,其他核素采用本文制作的燃耗库的计算结果与自带库的

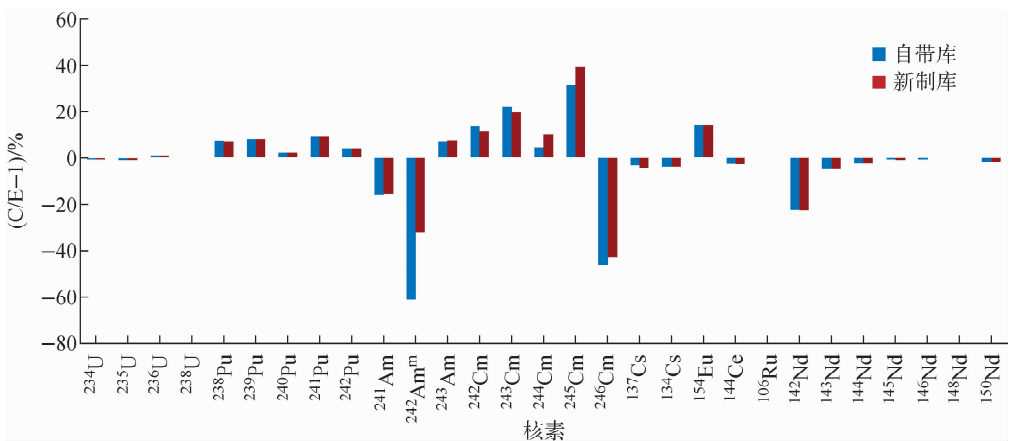


图 4 SF95-1 计算值与实验值的偏差

Fig. 4 Difference between simulated and experimental values for SF95-1 sample

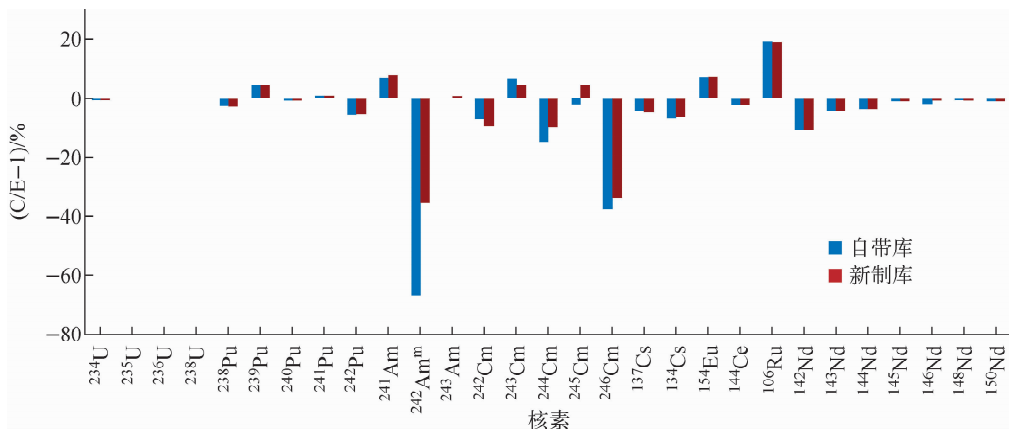


图 5 SF95-2 计算值与实验值的偏差

Fig. 5 Difference between simulated and experimental values for SF95-2 sample

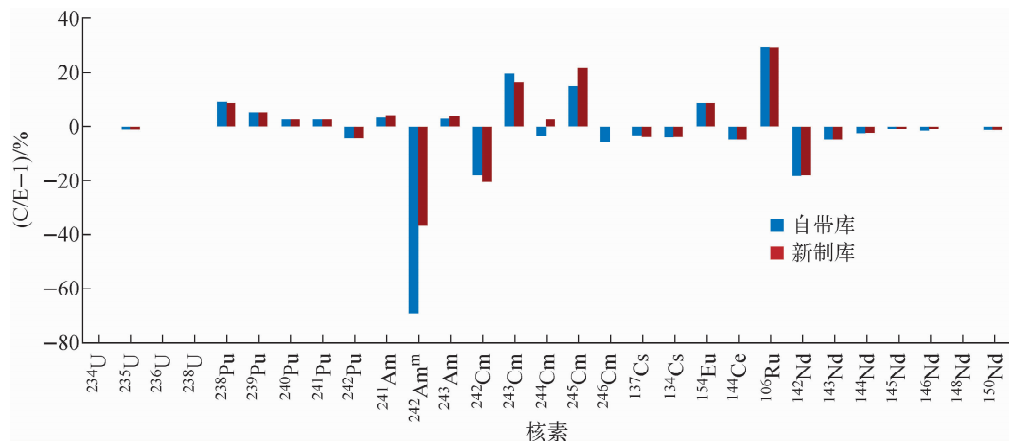


图 6 SF95-3 计算值与实验值的偏差

Fig. 6 Difference between simulated and experimental values for SF95-3 sample

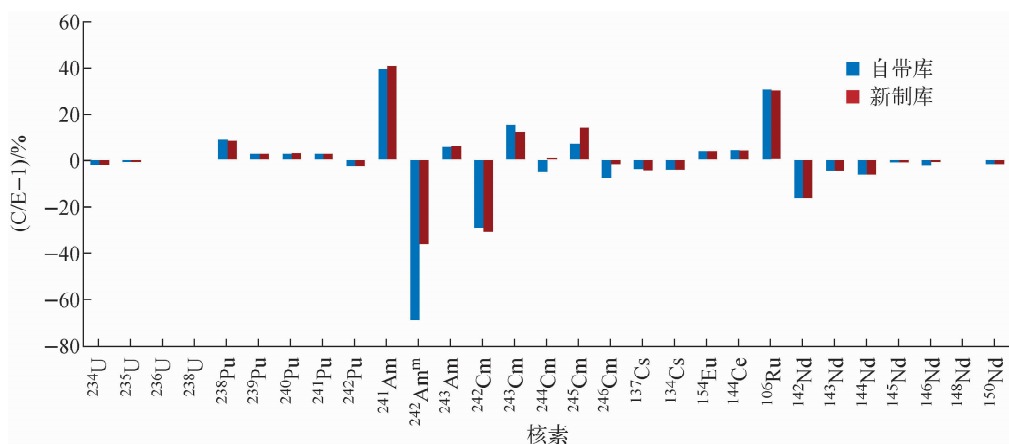


图 7 SF95-4 计算值与实验值的偏差

Fig. 7 Difference between simulated and experimental values for SF95-4 sample

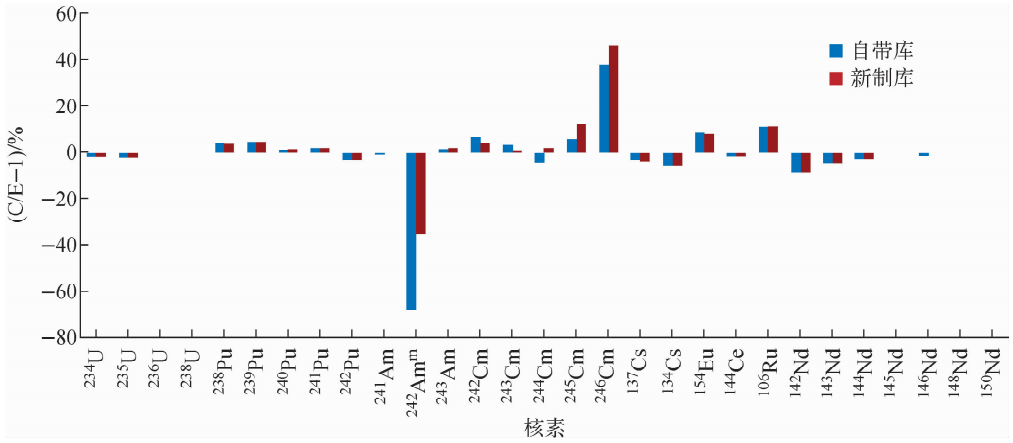
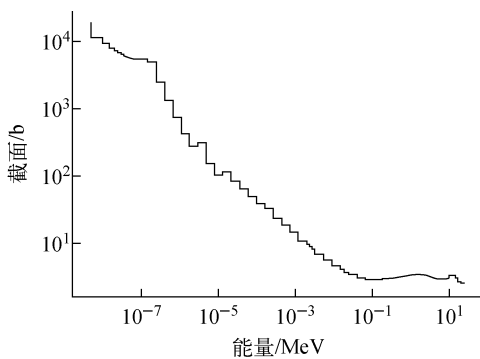


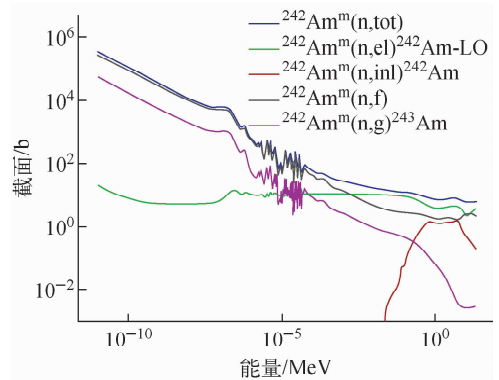
图 8 SF95-5 计算值与实验值的偏差

Fig. 8 Difference between simulated and experimental values for SF95-5 sample

计算结果吻合得很好。图 9 示出了自带库中  $^{242}\text{Am}^m$  反应生成  $^{242}\text{Am}$  的截面, 该截面在热能区非常大, 使得自制库  $^{242}\text{Am}^m$  消失量增加。图 10 示出了 ENDF/B-Ⅷ.0 库  $^{242}\text{Am}^m$  的主要几个反应截面, 依据该图可判断自带库中  $^{242}\text{Am}^m$  反应生成  $^{242}\text{Am}$  的截面是不合理的。本文制作库中  $^{242}\text{Am}^m$  的计算结果相比自带库偏高, 但与实验值更加接近, 同时  $^{242}\text{Am}^m$  积存量的增加也造成  $^{244, 245, 246}\text{Cm}$  的计算结果相比自带库略微偏高。因此, 对于某些核素, 基于本文制作库的结果比自带库更接近实验值。

图 9  $^{242}\text{Am}^m$  生成  $^{242}\text{Am}$  的反应截面Fig. 9 Inelastic cross section of  $^{242}\text{Am}^m$ 

成分数据库 SFCOMPO-2.0 中 Takahama-3 压水堆组件基准题进行了验证。验证结果表明, 对于某些核素如  $^{242}\text{Am}^m$ , 本文制作的燃耗数据库比 CINDER90 程序自带库的计算结果更接近实验值, 验证了制作方法及程序的正确性。

图 10  $^{242}\text{Am}^m$  的主要中子反应截面Fig. 10 Principal neutron cross section of  $^{242}\text{Am}^m$ 

#### 参考文献:

- [1] GOORLEY T, JAMES M, BOOTH T, et al. Initial MCNP6 release overview[J]. Nuclear Technology, 2012, 180(3): 298-315.
- [2] WILSON W B, ENGLAND T R, HERMAN M, et al. CINDER'90 code for transmutation calculations[C]//Conference Proceedings-Italian Physical Society. Italy: Italian Physical Society, 1997: 1 454-1 457.
- [3] TAVAKKOLI E, ZANGIAN M, MINUCHEHR A, et al. Improvement of CINDER library for

## 4 总结

本文介绍了用于 CINDER90 程序的燃耗数据库加工制作方法并开发了相应的制作程序。基于评价核数据库 ENDF/B-Ⅷ.0 和 EAF-2010 研制了一套压水堆用燃耗数据库。利用乏燃料

- PWR burnup calculations[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2020, 144: 107547.
- [4] BROWN D A, CHADWICK M B, CAPOTE R, et al. ENDF/B-VIII.0: The 8th major release of the nuclear reaction data library with CIELO-project cross sections, new standards and thermal scattering data[J]. *Nuclear Data Sheets*, 2018, 148: 1-142.
- [5] SUBLET J C, PACKER L W, KOPECKY J, et al. The European activation file: EAF-2010 neutron-induced cross section library[R]. UK: Culham Centre for Fusion Energy, 2010.
- [6] 王继亮. 快堆燃耗数据库的开发与初步应用分析[D]. 北京:华北电力大学,2013.
- [7] 彭超,丁谦学,梅其良,等. 压水堆燃耗库的开发与验证[J]. *核科学与工程*, 2020, 40(3): 375-382.
- PENG Chao, DING Qianxue, MEI Qiliang, et al. Processing and validation of burnup library for PWR[J]. *Nuclear Science and Engineering*, 2020, 40(3): 375-382(in Chinese).
- [8] 黄凯. 数值反应堆的高保真燃耗计算方法研究[D]. 西安:西安交通大学,2016.
- [9] FENSIN M L. Development of the MCNPX depletion capability: A Monte Carlo linked depletion method that automates the coupling between MCNPX and CINDER90 for high fidelity burnup calculations[D]. US: University of Florida, 2008.
- [10] HERMAN M, Cross Sections Evaluation Working Group. ENDF-6 formats manual data formats and procedures for the evaluated nuclear data file ENDF/B-VI and ENDF/B-VII [R]. US: BNL, Upton, NY, NNDC, 2009.
- [11] MacFARLANE R, MUIR D W, BOICOURT R M, et al. The NJOY nuclear data processing system, version 2016[R]. US: LANL, 2017.
- [12] NAKAGAWA T. CRECTJ: A computer program for compilation of evaluated nuclear data[R]. Japan: Japan Atomic Energy Research Institute, 1999.
- [13] RYMAN J C. ORIGEN-S data libraries[R]. [S. l.]: [s. n.], 1984.
- [14] MICHEL-SENDIS F, GAULD I, MARTINEZ J S, et al. SFCOMPO-2.0: An OECD NEA database of spent nuclear fuel isotopic assays, reactor design specifications, and operating data[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2017, 110: 779-788.
- [15] GAULD I C. Technical development on burn-up credit for spent LWR fuel[R]. US: ORNL, TN, 2001.