MODEC程序说明文档

## MODEC程序理论描述

* 1. **数据库（需要介绍一下程序采用的截面类型和衰变数据类型）**

燃耗计算所需要的数据库一般包括衰变数据库、反应截面数据库以及裂变产额数据库。MODEC程序自身拥有一个衰变数据库，数据来源为ENDF/B-VII.1。同时MODEC还能读取ORIGEN-2格式的数据库以及ORIGEN-S格式的数据库。需要强调的是，ORIGEN-2数据库中只有8种锕系核素的裂变场数据，MODEC程序采用最近邻近似方法对ORIGEN-2数据库中的裂变份额进行修正，而对于ORIGEN-S，因其数据库中已包含30种锕系核素裂变场，无需进行裂变份额修正。

除了上述数据库外，裂变能和中子俘获能是影响中子通量与功率相互转换精确性从而影响燃耗计算精确性的重要数据。MODEC程序采用ORIGEN-S中的相关数据，对于特定的24种锕系核素和32种裂变产物核素给出具体的裂变能和中子俘获能，而其余核素分别认为裂变能近似为200MeV/fission，中子俘获能近似为5MeV/capture。

* 1. **燃耗求解模型**
     1. **传统燃耗方程及求解方法**

没有在线后处理和连续添料的传统燃耗方程如下：

式中，表示t时刻堆芯中的核素浓度，表示核素j发生一次核反应产生核素i的概率，表示核素j的单群总截面，表示堆芯中的平均中子通量，表示核素j衰变到核素i的分支比，表示衰变常数。对于燃耗链中的每一个核素均建立上述燃耗方程，可以得到矩阵形式的燃耗方程：

式中为燃耗矩阵，为核素密度向量。已知t0时刻的核素浓度向量为，则式（2）解的矩阵指数形式可表示如下：

由于参与燃耗计算的核素的衰变性质和截面性质千差万别，导致燃耗矩阵具有很强的刚性，传统燃耗求解方法会使得短寿命核素的计算不够准确。为了精确且快速的求解燃耗方程，MODEC程序采用CRAM方法求解燃耗方程。CRAM方法能够无需预处理强刚性的燃耗矩阵而直接求解燃耗方程，其计算精度与解析法的线性子链法（TTA）非常接近，但计算效率要高得多。燃耗方程的解的CRAM表达式如下：

式中，k为阶数，和分别为CRAM系数，为单位矩阵。相关研究表明，14阶和16阶CRAM已经能够充分满足燃耗计算的高精度要求。在MODEC程序中，选择16阶CRAM，即k=16。

* + 1. **在线后处理的处理方法**

国际上对于液态熔盐堆在线后处理的通用处理方法为在燃耗方程中引入“伪衰变因子”来描述后处理速率。的表达式如下：

式中，表示整个堆芯中的第i种核素完全处理需要的时间。将上式代入式（1）中即可得到考虑在线后处理的燃耗方程：

可以看到，引入伪衰变因子后，燃耗方程仍然为齐次燃耗方程，可以直接采用CRAM方法求解。另外，通过后处理提取到堆外储存的裂变产物核素也在时刻发生着衰变反应，堆外核素的衰变方程为：

式中，上标表示堆外存储的核素，上标core表示堆内演化的核素。上式最后一项表示堆外存储核素的源项即为堆内该类核素的提取项，因此为了准确追踪堆外核素的演化，需要耦合求解堆内核素及堆外存储核素的演化，耦合的燃耗方程的矩阵表达式如下：

上式中，为一对角矩阵，对角线上的元素为堆芯内各核素的后处理伪衰变因子；为增加伪衰变因子的堆芯核素的燃耗矩阵；为堆外存储核素的衰变矩阵。注意到，耦合方程的燃耗矩阵为下三角形式的分块矩阵，MODEC程序采用分块矩阵求解方法，可以较为容易的求解耦合燃耗方程。

* + 1. **连续添料的处理方法**

液态熔盐堆连续添料特点反映在燃耗方程中为在传统的燃耗方程中增加了一个常数项，用矩阵形式可以表示为

其中为添料率常向量。MODEC程序采用了两种方法处理燃耗方程中的添料率常数，分别为数值积分法和增广矩阵法。

1. 数值积分法

式（9）的解析解为通解加一特解，表达式如下：

对最右的积分项进行数值求解即可得到带添料率常数的燃耗方程的解。【参考文献】给出了复合梯形求积的数值积分形式。在MODEC程序中，为了获得更高数值精度，采用Gauss-Legendre求积式，得到的燃耗方程的解的表达式如下：

式中，为Gauss-Legendre求积点，为该点的权重；n为阶数。这样，只需在每个求积点上采用CRAM方法求解燃耗方程，相加即可得到带有添料率常数的燃耗方程的解。MODEC程序默认采用10阶，最高可选择32阶Gauss-Legendre积分。

1. 增广矩阵法【参考文献】

带有添料率常数的燃耗方程可以用增广矩阵形式给出，表达式如下：

根据上式，就可将非齐次的燃耗方程转换成齐次燃耗方程，即为：

在求解过程中，只需保证每个燃耗步的初始核素浓度向量的最后一个元素始终为1，即可用CRAM方法直接求解上式，从而得到带有添料率常数的燃耗方程的解。

* 1. **程序计算模式及流程**

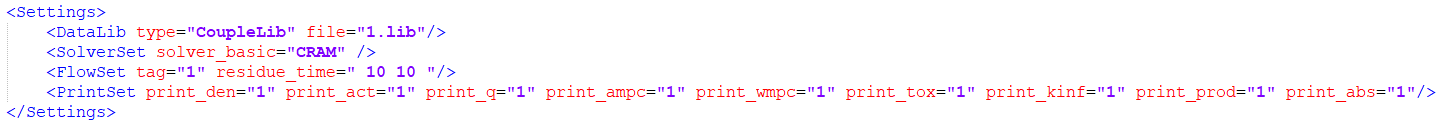
MODEC程序有三种计算模式，分别为纯衰变模式、定通量模式和定功率模式。定功率模式下，中子通量和功率的转换关系式如下：

式中，P表示功率，为核素密度，为裂变截面或者俘获截面，而表示每次裂变释放能量或者每次俘获释放能量。另外，MODEC还能计算任意燃耗时刻的放射性活度、衰变热以及放射性毒性等信息。

## MODEC程序输入卡说明

MODEC程序输入卡采用XML格式。根元素为<**MODEC**>，表征MODEC程序的输入或输出文件，<**MODEC**>下面按顺序分别包含<**Settings**>、<**Depletions**>、<**Nuclides**>、<**OnlineReprocessing**>和<**ContinouslyFeeding**>等5个一级子元素，下面将依次介绍这5个一级子元素及其各自的子元素的含义及基本设置。

1. **<Settings>元素，MODEC执行的通用设置，截图如下：**



其中包含DataLib、SolverSet、FlowSet和PrintSet四个子元素，下面分别详细介绍各个元素的参数设置

* 1. <DataLib>子元素

设置截图如下：



* + 1. 属性（Attributes）详解：

type用于设置截面文件的格式，分别具有”CoupleLib”,”DepthLib”,”DecayLib”和”FYLib”共四种不同属性，分别对应着COUPLE加工的截面文件格式、Depth程序截面文件格式、MODEC自带的衰变数据库格式和MODEC自带的裂变产物数据库格式；

file指定截面文件的名称，由用户自定义；

* 1. <SolverSet>子元素

设置截面如下：



* + 1. 属性（Attributes）详解：

solver\_basic用于求解器设置，包含”CRAM”和”TTA <cutoff>”两个属性，分别对应着采用CRAM算法求解器以及TTA算法，其中截断标准” <cutoff>”由用户自定义，一般建议设置不小于1.0e-20，否则计算耗时巨大；另外，需要请用户注意，TTA算法只能用于一般燃耗计算、一般的在线添料和在线后处理燃耗计算，对于流动燃耗计算以及堆外核素追踪的情况无法使用；

最后，如非燃耗算法的研究性计算，强烈建议使用CRAM方法。

* 1. <FlowSet>子元素

设置截面如下：



* + 1. 属性（Attributes）详解：

tag用于判断是否进行流动燃耗计算，0为不进行，1为进行；

residue\_time用于设置熔盐在堆芯和堆外流动的滞留时间，单位为秒；

* 1. <PrintSet>子元素

设置截面如下：





* + 1. 属性（Attributes）详解：

print\_den用于设置输出格式，0表示只输出初始和结束时刻的核素浓度以及其他放射性信息（如果输出），1表示输出每个中间时间步的核素浓度及其他放射性信息（如果输出）；

print\_act用于设置放射性活度输出，0表示不输出，1表示输出，格式由print\_den控制；

print\_q用于设置衰变热输出，0表示不输出，1表示输出，格式由print\_den控制；

print\_ampc用于设置AMPC输出，0表示不输出，1表示输出，格式由print\_den控制；

print\_wmpc用于设置WMPC输出，0表示不输出，1表示输出，格式由print\_den控制；

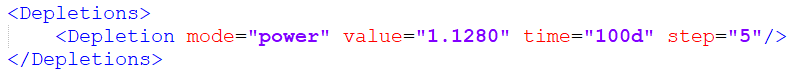
print\_tox用于设置放射性毒性输出，0表示不输出，1表示输出，格式由print\_den控制；

print\_kinf用于设置kinf输出，0表示不输出，1表示输出，格式由print\_den控制；

print\_prod用于设置中子产生率输出，0表示不输出，1表示输出，格式由print\_den控制；

print\_abs用于设置中子吸收率输出，0表示不输出，1表示输出，格式由print\_den控制；

1. **<Depletions>元素，MODEC燃耗计算的功率或通量，及时间等的设置，截图如下：**



其中包含一个子元素<Depletion>，下面将详细介绍该子元素的参数设置。

* 1. < Depletion >子元素

设置截面见上截图；

* + 1. 属性（Attributes）详解：

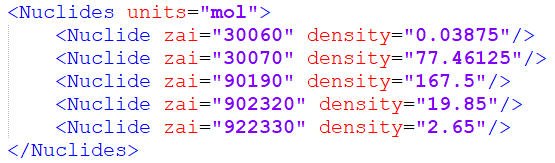
mode用于设置计算模式，分别包括”power”, “flux”和”decay” 三个模式，分别对应着定功率模式、定通量模式以及纯衰变模式；

value用于设置对应模式下的数值，对于定功率模式，value表示功率大小，单位为MW；对于定通量模式，value表示中子通量密度数值；**对于纯衰变模式，不要设置value值；**

time用于设置总的燃耗时间，包括数值和单位，其中可用单位包括：秒(s)，天(d, day, days)，月(m, month, months)，年(y, year, years)；

step用于设置总的燃耗步数；

1. **<Nuclides>元素，MODEC燃耗计算的初始核素浓度等的设置，截图如下：**



其中包含一个属性units和一类子元素<Nuclide>，下面分别详细介绍参数设置。

* 1. units属性

用于设置核素浓度的单位，可用单位包括：mol, g, kg, atom, atom/(barn-cm)

* 1. <Nuclide>子元素

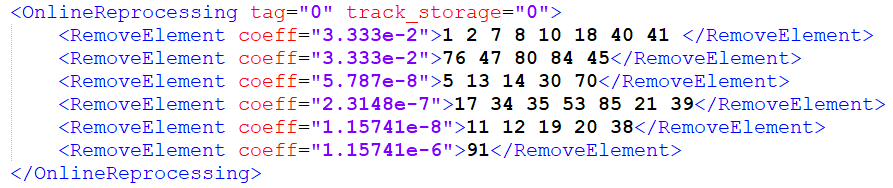
设置截面见上图；

* + 1. 属性（Attributes）详解：

zai对应核素编号，计算公式为，式中，Z表示核素的原子序数，A表示核素的相对原子质量，I表示核素是否处于激发态，0表示基态，1表示处于激发态；

density用于设置对应核素的浓度数值，单位由母元素的units属性控制；

1. **<OnlineReprocessing>元素，MODEC的在线后处理模块的设置，截图如下：**



其中包含两个属性tag和track\_storage，以及一类子元素<RemoverElement>，下面分别详细介绍参数设置。

* 1. tag属性

用于判断是否需要进行在线后处理，设为0表示不进行在线后处理，1表示进行在线后处理；

* 1. track\_storage属性

用于判断是否追踪堆外核素的演化，设为0表示不追踪，1表示追踪；

* 1. <RemoveElement>子元素

设置截面见上图；

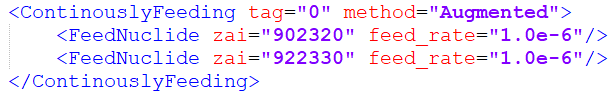
* + 1. 属性（Attributes）详解：

coeff用于设置对应一组核素的在线后处理系数；

* + 1. 内容（Context）详解：

该元素的内容为对应相同后处理系数的一组核素的原子序数；

1. **<ContinouslyFeeding>元素，MODEC的在线添料模块的设置，截图如下：**



其中包含两个属性tag和method，以及一类子元素<FeedNuclide>，下面分别详细介绍参数设置。

* 1. tag属性

用于判断是否需要进行在线添料，设为0表示不进行在线添料，1表示进行在线添料；

* 1. method属性

用于设置求解非齐次燃耗方程的方法，具有”Augmented”和”Gauss <order>”以及”Laplace”三个属性值，分别表示采用增广矩阵法、高斯数值积分方法以及拉普拉斯变换方法，其中<order>表示高斯-勒让德积分阶数，默认为10阶，最多为32阶，由用户自定义；

* 1. <FeedNuclide>子元素

设置截面见上图：

* + 1. 属性（Attributes）详解：

zai对应核素编号，具体设置见**<Nuclides>**中<Nuclide>子元素中的zai设置；

feed\_rate用于设置核素的在线添料率，单位为mol/s；

Reference:

1. Aufiero, M., et al., *An extended version of the SERPENT-2 code to investigate fuel MODEC-up and core material evolution of the Molten Salt Fast Reactor.* Journal of Nuclear Materials, 2013. **441**(1-3): p. 473-486.

## MODEC程序输出文件说明

MODEC输出文件同样为XML格式文件，同样通过一个<**MODEC**>根元素来表征该文件属于MODEC的输出文件，<**MODEC**>中按照顺序包含<**Time**>, <**Power**>, <**Flux**>, <**K-infinite**>, <**Nuclides**>等5个一级子元素，下面将分别详细介绍这些子元素。

1. <**Time**>元素，燃耗时间的输出模块，输出截面如下图所示：



元素包含一个unit属性，其值强制设定为秒(s)，而元素的内容为燃耗时间数值。

1. <**Power**>元素，功率值输出模块，输出截面如下图所示：



元素包含一个unit属性，其值强制设定为”MW”，而元素内容为对应各时间点的功率数值。

1. <**Flux**>元素，中子通量密度输出模块，输出截面如下图所示：



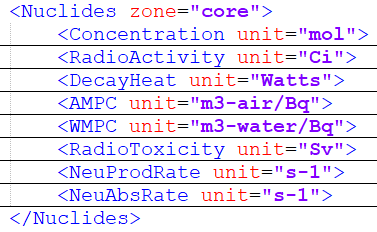
元素包含一个unit属性，表示中子通量密度的单位，元素内容则为对应各时间点的中子通量密度的值。

1. <**K-infinite**>元素，无限增殖因子输出模块，输出截面如下图所示：



元素的内容为对应各时间点的无限增殖因子的值。

1. <**Nuclides**>元素，核素信息输出模块，输出截面如下图所示：



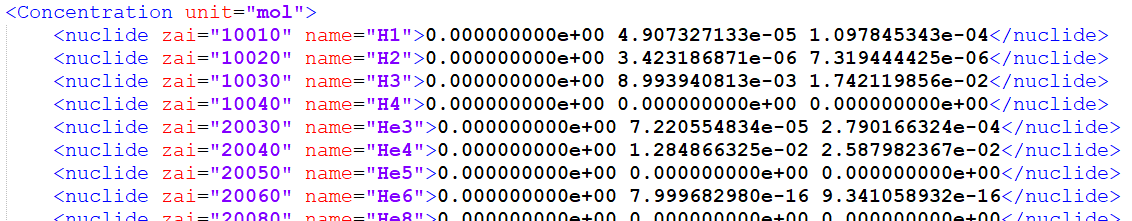
元素包含一个zone属性，和8个子元素，下面将详细介绍各参量的设置。

* 1. zone属性

包含”core”, “loop”和”stockage”三个属性值，分别表征堆芯核素，外回路核素以及堆外存储核素；其中”core”属性值对应的<Nuclides>是必输出结果，而其余两个属性值分别对应燃耗流动和追踪堆外存储核素演化的情况。

* 1. <Concentration>子元素

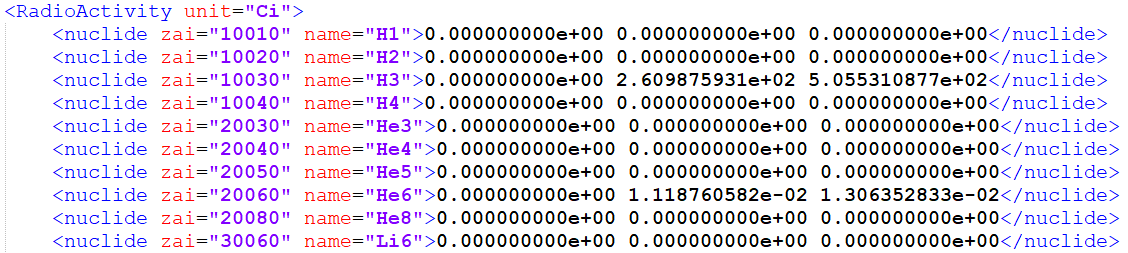
输出截面如下图所示：



该元素包含一个unit属性和一类子元素<nuclide>;

* + 1. unit属性单位对应输入卡中设定的单位；
    2. <nuclide>元素包含一个zai属性和一个name属性，分别对应输出核素的id和字符串名称，而元素的内容则为对应各时间点的核素浓度值。
  1. <RadioActivity>子元素

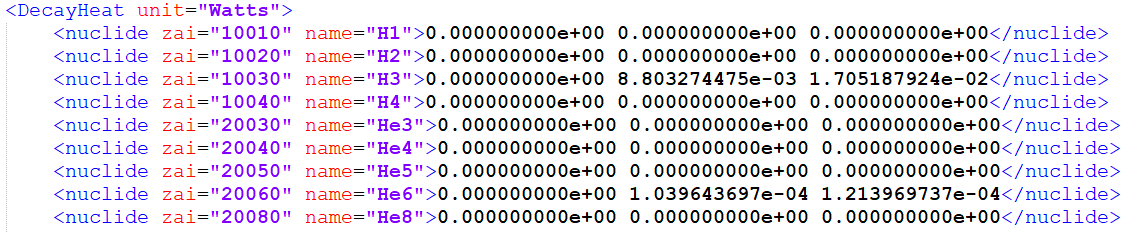
输出截面如下图所示：



该元素包含一个unit属性和一类<nuclide>子元素。

* + 1. unit属性单位为居里(Ci)；
    2. <nuclide>元素包含一个zai属性和一个name属性，分别对应输出核素的id和字符串名称，而元素的内容则为对应各时间点的核素放射性活度值。
  1. <DecayHeat>子元素

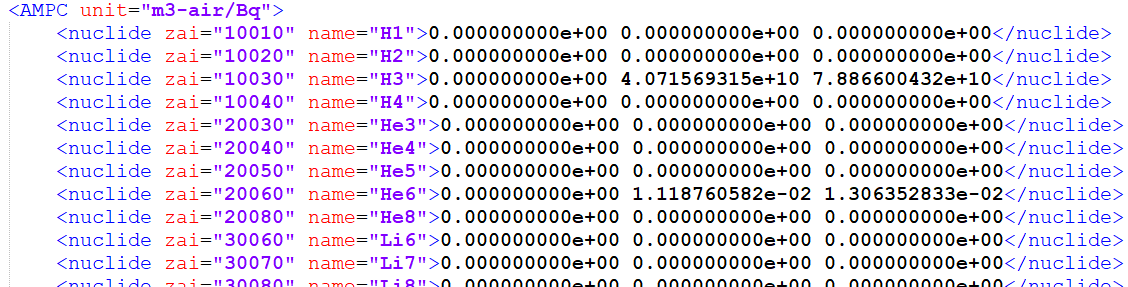
输出截面如下图所示：



该元素包含一个unit属性和一类<nuclide>子元素。

* + 1. unit属性单位为瓦特(Watts)；
    2. <nuclide>元素包含一个zai属性和一个name属性，分别对应输出核素的id和字符串名称，而元素的内容则为对应各时间点的核素衰变热数值。
  1. <AMPC>子元素

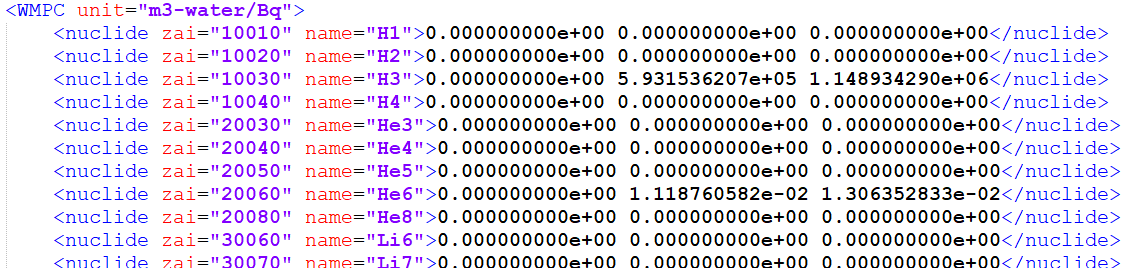
输出界面如下图所示：



该元素包含一个unit属性和一类<nuclide>子元素。

* + 1. unit属性单位为(m3-air/Bq)，表示每Bq需要多少立方米的空气才能稀释到放射性安全标准以下；
    2. <nuclide>元素包含一个zai属性和一个name属性，分别对应输出核素的id和字符串名称，而元素的内容则为对应各时间点的AMPC值。
  1. <WMPC>子元素

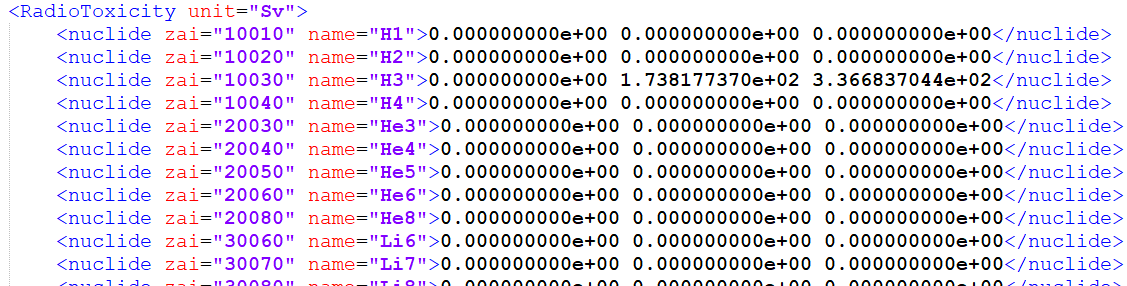
输出界面如下图所示：



该元素包含一个unit属性和一类<nuclide>子元素。

* + 1. unit属性单位为(m3-water/Bq)，表示每Bq需要多少立方米的水才能稀释到放射性安全标准以下；
    2. <nuclide>元素包含一个zai属性和一个name属性，分别对应输出核素的id和字符串名称，而元素的内容则为对应各时间点的WMPC值。
  1. <RadioToxicity>子元素

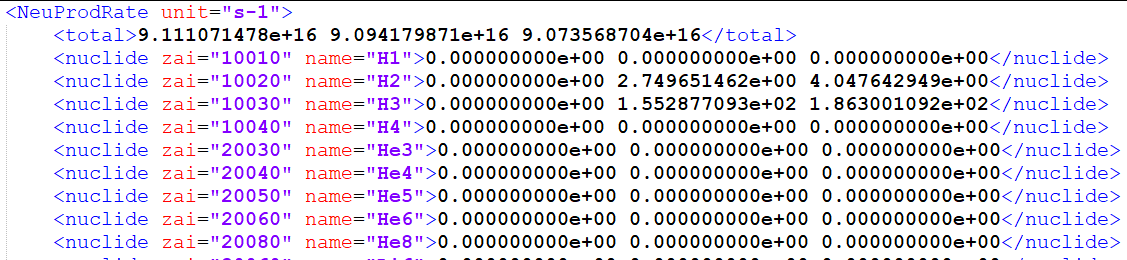
输出截面如下图所示：



该元素包含一个unit属性和一类<nuclide>子元素。

* + 1. unit属性单位为西弗(Sv)；
    2. <nuclide>元素包含一个zai属性和一个name属性，分别对应输出核素的id和字符串名称，而元素的内容则为对应各时间点的放射性毒性值。
  1. <NeuProdRate>子元素

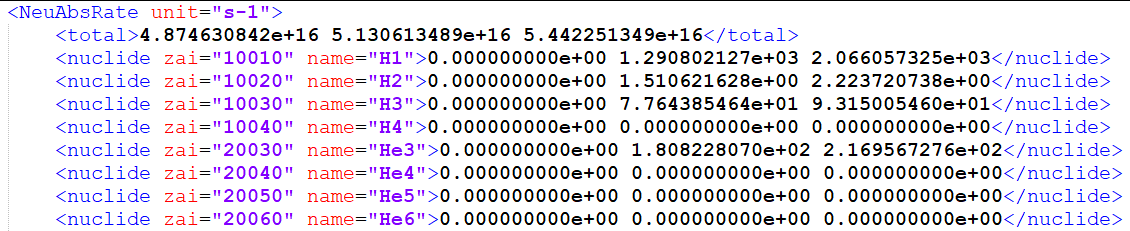
输出截面如下图所示：



该元素包含一个unit属性，一个<total>子元素和一类<nuclide>子元素。

* + 1. unit属性单位为秒分之一(s-1)；
    2. <total>元素内容对应各时间点各核素中子产生率总和；
    3. <nuclide>元素包含一个zai属性和一个name属性，分别对应输出核素的id和字符串名称，而元素的内容则为对应各时间点的中子产生率的值。
  1. <NeuAbsRate>子元素

输出截面如下图所示：



该元素包含一个unit属性，一个<total>子元素和一类<nuclide>子元素。

* + 1. unit属性单位为秒分之一(s-1)；
    2. <total>元素内容对应各时间点各核素中子吸收率总和；
    3. <nuclide>元素包含一个zai属性和一个name属性，分别对应输出核素的id和字符串名称，而元素的内容则为对应各时间点的中子吸收率的值。