

文章编号: 1007-4627(2017)03-0598-06

一维快装置中心反应率模拟计算的灵敏度和不确定度分析

王文明, 吴海成, 刘萍, 张环宇

(中国原子能科学研究院, 北京 102413)

摘要: 采用广义微扰理论和离散纵标输运计算方法, 推导了中心反应率比值对重要核反应参数的灵敏度的计算公式。以一维快基准装置 Jezebel-Pu239 为例, 计算了其中心反应率比值对关键核数据的灵敏度, 并结合多群协方差数据, 分析了其中心反应率比值计算中由于核数据的不确定度所引入的不确定度及其来源。根据计算结果以及评价数据的协方差信息, 建议对 Pu-239 的非弹截面数据进行更精细的评价, 以期降低反应率比的模拟计算不确定度。

关键词: 灵敏度; 不确定度; 核数据; 反应率比值

中图分类号: TL329⁺.3 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.34.03.598

1 引言

积分参数是表征核装置设计或运行的重要指标参数, 它反映的是核装置的物理过程所带来的累积效应。对核数据工作有着重要意义的积分参数包括无限增殖系数 (K_{eff})、中心反应率比等等。这些积分参数的大小直接表征了装置的工作状态, 因此其模拟的不确定度水平直接决定了装置的设计水平以及工程建设参数。

对于 K_{eff} 而言, 在其模拟计算中存在较大的补偿效应, 因而有可能在较差的输入参数条件下反而能得到较好的中心值; 与之相比, 中心反应率比的突出影响因素一般较少, 其计算的准确性往往能较好地反映数据的好坏程度。

全面地考虑积分参数模拟的不确定度, 其来源主要来自三方面:

- (1) 理论模型本身引入的不确定度;
- (2) 对一个反应系统的测量引入的不确定度 (如核密度、物理尺寸等);
- (3) 由输入的基础物理量引入的不确定度, 即主要是指核数据引入的不确定度。

随着核装置物理计算模型和计算机技术的发展, 目前积分参数模拟的不确定度来源主要源自第三方面, 即由输入的核数据所引入的不确定度。

核装置物理过程的模拟是一个复杂的非线性过程, 因此定量地衡量由输入参数 (核数据) 引入的输入参数 (积分参数) 的不确定度不能简单地由误差传递方法来计算, 需要一些特殊的数学和物理上的处理方法, 这个

系统的分析方法即称为 S/U (灵敏度/不确定度) 分析方法^[1]。

2 基本概念

S/U 分析主要涉及如下几个数学和物理概念。

积分参数 (Integral Parameters): 根据前面的定义, 可将各类积分参数 R 定义为输入参数 q (核数据) 的响应函数:

$$R = R(q_1, q_2, \dots, q_n)。$$
 (1)

协方差 (Covariance): 协方差的数学定义反映了两个变量之间的关联, 对于两个量 q_1 和 q_2 的相对协方差, 其定义如下:

$$\begin{aligned} r_{\text{cov}}(q_1, q_2) &= \frac{\text{cov}(q_1, q_2)}{q_1 q_2} \left\langle \frac{dq_1}{q_1} \frac{dq_2}{q_2} \right\rangle \\ &= \frac{\langle q_1 q_2 \rangle - \langle q_1 \rangle \langle q_2 \rangle}{q_1 q_2}。 \end{aligned}$$
 (2)

式中尖括号表示参数的数学期望值, 对于任意两个核数据来讲 (可能对应于不同核素的不同反应道), 其协方差不仅反映了各自的不确定度水平, 还反映了核数据的测量和评价所引入的数据间的关联。目前核数据协方差是指微观评价核数据的协方差数据, 要将之应用于工程设计, 必须通过一定的手段把它加工成为多群参数的协方差。

灵敏度 (Sensitivity): 灵敏度又称敏感性, 它反映了输出参数 (积分参数 R) 对于输入参数 (某一核数据 q)

收稿日期: 2016-12-07; 修改日期: 2017-05-04

作者简介: 王文明(1983-), 男, 江苏东台人, 副研究员, 博士, 从事核数据研究; E-mail: eaglewmm@163.com。

的变化敏感程度，其定义如下^[2]：

$$S_{R,q} = \frac{\delta R/R}{\delta q/q} = \frac{q}{R} \frac{\delta R}{\delta q} \quad (3)$$

如果把核装置简化为一个简单的黑箱模型，输入参数为各类核数据 q ，输出参数为各类模拟积分参数 R ，那么 R 对于 q 的灵敏度应该是这个核装置的固有属性，应用不同的计算方法得出的灵敏度不应该有太大差异，这又称装置的指纹效应。

不确定度 (Uncertainty)：不确定度反应了积分参数模拟的不确定水平。不同装置的设计对其有着不同的不确定度要求。

从前面积分参数的定义出发，对其取微分并且作一阶展开可以有

$$\delta R = \sum_i \frac{\partial R}{\partial q_i} \delta q_i \quad (4)$$

实际上，对于两个不同的积分参数 R_j 和 $R_{j'}$ ，我们可以根据定义计算其相对协方差：

$$\begin{aligned} \text{rcov}(R_j, R_{j'}) &= \left\langle \frac{dR}{R} \frac{dR'}{R'} \right\rangle \\ &= \left\langle \left(\sum_i \frac{\partial R_j}{\partial q_i} dq_i \sum_{i'} \frac{\partial R_{j'}}{\partial q_{i'}} dq_{i'} \right) \right\rangle \\ &= \sum_{i,i'} S_{j,i} S_{j',i'} \left\langle \frac{dq_i}{q_i} \frac{dq_{i'}}{q_{i'}} \right\rangle \\ &= \sum_{i,i'} S_{j,i} S_{j',i'} \text{rcov}(q_i, q_{i'}) \end{aligned} \quad (5)$$

上式可以写成矩阵形式，记输入参数 q 的协方差阵为 Q ，参数 R 对数据的灵敏度矩阵为 S ，则

$$R\text{cov}(R_i, R_j) = S_i Q S_j^T \quad (6)$$

如果取 $i = j$ ，那么上式就是积分参数 R_i 的相对标准差：

$$\frac{\sigma R_i^2}{R_i^2} = S_i Q S_i^T \quad (7)$$

由上式可见：最终该装置的输出量 (积分参数) 的不确定度应该由装置的属性 (灵敏度) 以及输入参数 (各类核数据) 的不确定度共同决定，可以使用上述“三明治”公式进行计算。这样，问题的关键就在于得到输入参数的协方差以及装置的灵敏度。

3 理论基础

3.1 系统响应的灵敏度定义

对于一个反应系统，用 ϕ 和 ϕ^* 分别为系统的中子通量以及价值函数，在稳态情况下，它们分别满足玻尔

兹曼方程及其共轭方程：

$$\begin{aligned} A\phi &= \lambda B\phi, \\ A &= (\Omega \bullet \nabla + \Sigma_t) - \int_{\Omega'} d\Omega' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega), \end{aligned} \quad (8)$$

$$B = \frac{\chi(\mathbf{r}, E)}{4\pi} \int_{\Omega'} d\Omega' \int_0^\infty dE' v(\mathbf{r}, E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E')$$

$$A^* \phi^* = \lambda B^* \phi^*,$$

$$A^* = (-\Omega \bullet \nabla + \Sigma_t) - \int_{\Omega'} d\Omega' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega), \quad (9)$$

$$B^* = v(\mathbf{r}, E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E') \int_{\Omega'} d\Omega' \int_0^\infty dE' \frac{\chi(\mathbf{r}, E)}{4\pi}.$$

定义玻尔兹曼算符： $L = A - \lambda B$ ，则上述方程转为

$$L\phi = 0, \quad (10)$$

以及

$$L^* \phi^* = 0. \quad (11)$$

对于响应函数 R ，它是输入参数 q 的函数：

$$R = R(q_1, q_2, \dots, q_n). \quad (12)$$

我们可以定义其灵敏度为

$$S_{R,\Sigma} = (dR/R)/(d\Sigma/\Sigma) = \frac{\Sigma}{R} \frac{dR}{d\Sigma}. \quad (13)$$

3.2 线性比率的灵敏度

此类响应函数中较为典型的积分参数为反应率比，可以将比值表示成：

$$R = \frac{\langle \Sigma_1 \phi \rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle}. \quad (14)$$

对其作微分：

$$\begin{aligned} \frac{dR}{d\Sigma} &= \frac{\langle \Sigma_1 \phi \rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} \left(\frac{\langle \frac{d\Sigma_1 \phi}{d\Sigma} \rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} - \frac{\langle \frac{d\Sigma_2 \phi}{d\Sigma} \rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} + \right. \\ &\quad \left. \frac{\langle \Sigma_1 \frac{d\phi}{d\Sigma} \rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} - \frac{\langle \Sigma_2 \frac{d\phi}{d\Sigma} \rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} \right), \end{aligned} \quad (15)$$

前两项被称作直接项，而后两项则被称为间接项 (与通量有关)。

对于一个反应系统，在截面微小变化之后应该保证达到临界，因此对于微扰而言，它满足如下方程：

$$(L + dL)(\phi + d\phi) = 0. \quad (16)$$

或者, 忽略二阶小项:

$$dL\varphi + Ld\varphi = 0 \quad (17)$$

由此出发, 我们可以将通量的微分转化为玻尔兹曼算符的微分。

我们定义广义价值函数 Γ^* , 使其满足下式:

$$L^* \Gamma^* = Q^* = \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \varphi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \varphi \rangle}。 \quad (18)$$

应用共轭算符的关系:

$$\left\langle \frac{d\varphi}{d\Sigma} L^* \Gamma^* \right\rangle = \left\langle \Gamma^* L \frac{d\varphi}{d\Sigma} \right\rangle。 \quad (19)$$

应用式 (17) 的关系, 我们可以得到

$$\left\langle \Gamma^* L \frac{d\varphi}{d\Sigma} \right\rangle = - \left\langle \Gamma^* \frac{dL}{d\Sigma} \varphi \right\rangle。 \quad (20)$$

这样, 我们可以将间接项进入如下变换:

$$\begin{aligned} S_{\text{indirect}} &= \frac{\langle \Sigma_1 \frac{d\varphi}{d\Sigma} \rangle}{\langle \Sigma_1 \varphi \rangle} - \frac{\langle \Sigma_2 \frac{d\varphi}{d\Sigma} \rangle}{\langle \Sigma_2 \varphi \rangle} \\ &= \left\langle \left(\frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \varphi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \varphi \rangle} \right) \times \frac{d\varphi}{d\Sigma} \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{d\varphi}{d\Sigma} L^* \Gamma^* \right\rangle = - \left\langle \Gamma^* \frac{dL}{d\Sigma} \varphi \right\rangle。 \quad (21) \end{aligned}$$

将反应道号 x 代入, 最终反应率的灵敏度为^[3-6]

$$\begin{aligned} S_{R, \Sigma_x} &= \Sigma_x \times \left(\frac{\langle \frac{d\Sigma_1}{d\Sigma_x} \varphi \rangle}{\langle \Sigma_1 \varphi \rangle} - \frac{\langle \frac{d\Sigma_2}{d\Sigma_x} \varphi \rangle}{\langle \Sigma_2 \varphi \rangle} - \left\langle \Gamma^* \frac{dL}{d\Sigma_x} \varphi \right\rangle \right) \\ &= \Sigma_x \times \left(\frac{\langle \delta_{1,x} \varphi \rangle}{\langle \Sigma_1 \varphi \rangle} - \frac{\langle \delta_{2,x} \varphi \rangle}{\langle \Sigma_2 \varphi \rangle} - \left\langle \Gamma^* \frac{dL}{d\Sigma_x} \varphi \right\rangle \right)。 \quad (22) \end{aligned}$$

整个问题的求解最终就化为对广义价值函数 Γ^* 的求解, 本文采用现有的求解器, 通过源项迭代的方法进行了求解。出于篇幅考虑, 有关的求解在此不再详述, 详情可参考文献[1]。

3.3 有关不确定度的进一步讨论

对于不确定度而言, 我们可以有进一步的讨论, 由式 (7) 可知, 相对不确定度可以用三明治公式来计算, 如果我们特别地考虑有两个反应道的情况:

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{total}}^2 &= SVS^T \\ &= \begin{pmatrix} S_a & S_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_a & R \\ R^T & V_b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_a^T \\ S_b^T \end{pmatrix} \\ &= S_a V_a S_a^T + S_b V_b S_b^T + (S_a R S_b^T + S_b R^T S_a^T)。 \quad (23) \end{aligned}$$

式中, S_a 和 S_b 分别为积分参数对于 a 和 b 反应道的灵敏度向量, 而 V_a 和 V_b 为 a 和 b 反应道各群之间的自相关方阵, 而 R 为 a 、 b 反应道之间的关联阵。由此可见, 不确定度变成四项, 前两项分别是 a 、 b 反应道自身关联引入的不确定度, 而后两项为 a 、 b 反应道之间的关联引入的不确定度。这样我们就可以将不确定度进行分解 (Break Down), 追溯其来源。

4 数据准备

在 S/U 分析中需要用到两类数据, 一类为输运计算和灵敏度计算所需要的多群数据库; 另外一类是不确定度计算需要用到的多群协方差数据。这里的计算采用了美国 ENDF/B-VII.1 的评价数据作为输入量, 这是因为 2011 年释放的该数据库包含了感兴趣装置分析所需要的所有核素的核反应数据, 而且也给出了其配套的协方差文档, 便于自治地进行 S/U 分析。

多群库的制作采用的是中国核数据中心的 NPLC2 系统, 其核心程序为 NJOY99 程序, NJOY 的输出至 AMPX 格式的处理和转换使用的是 MILER4 程序。最终多群输运模拟计算采用的是 AMPX 格式的主库, 为了方便比对, 其群结构采用的是 WPEC 工作组下 SG-33 工作组所推荐的 33 群结构。多群库包括了 U-233, U-234, U235, U-238, Pu-239, Pu-240, Pu-241 和 Np-237 等核素重要反应道的数据, 包括弹性、非弹、俘获、裂变、裂变中子数, 裂变能谱等等。

用于 S/U 分析的多群协方差库的制作则使用的是核数据中心的 preCOV 处理程序, 并结合 NJOY99 的 ERRORR 模块完成。

AMPX 库、SCALE 计算结果以及 ERRORR 输出的 GENDF 格式协方差库的 I/O 均在下文的 NewS 程序系统中实现。

5 装置建模和模拟

这里选用了 Jezebel-Pu239 装置^[7]的 F49/F25 (即 Pu-239 的裂变率与 U-235 的裂变率之比) 作为示例参数。Jezebel-Pu239 装置的建模采用的是简单的裸球模型, 其半径为 6.3849 cm。装置的成份核素和核密度见表 1。

中心反应率的计算采用的是 SCALE4.3 系统进行, AMPX 格式主库经 AJAX 挑核并库, 再经 BONAMI 作邦达连科计算之后再用 NITWAL 制作成工作库, 最后用 XSDRN 进行输运计算, 得到 K_{eff} 和中心反应率比值。此外, 根据上文中灵敏度计算中相空间积分的展开形式, XSDRN.out 中还需要包括灵敏度计算所需的通

表 1 不同形变量及退火前后 (200) 晶面方向晶粒的尺寸变化

装置	核素	核密度/(atom/barn·cm)	核素	核密度(atom/barn·cm)
Jezebel-Pu239	Ga-069	8.36005×10^{-4}	Pu-239	3.7047×10^{-2}
	Ga-071	5.39195×10^{-4}	Pu-240	1.7512×10^{-3}
	U-235/U-238	10×10^{-12} *	Pu-241	1.1674×10^{-4}

* 给微量核密度，计算能谱指标使用

量和角通量数据。值得注意的是，根据微扰理论，XSDRN 还需要进行一次共轭计算以得到价值函数和共轭角通量数据。此外，基于式 (22)，中心反应率的 S/U 分析还需要进行一次共轭价值函数及其角通量/矩的计算。

对于 F49/F25 而言，Jezebel-Pu239 装置的计算值为 1.4369，而实验测量值为 1.4609，C/E 值约为 0.9841，偏差值 $|C-E|/E\% = 1.59\%$ 。而实验测量误差为 0.89%。

6 装置 F49/F25 反应率比的 S/U 分析

与 K_{eff} 的灵敏度计算不同，中心反应率比值的灵敏度计算需要计算广义通量，如图 1 所示，在计算出中心反应率后，还需要应用输出结果来构建广义通量的源项，再求解源项共轭方程求出广义价值函数，因此，其数据流与 K_{eff} 的计算有些许不同，需要构建源项，并对裂变谱作进一步处理。

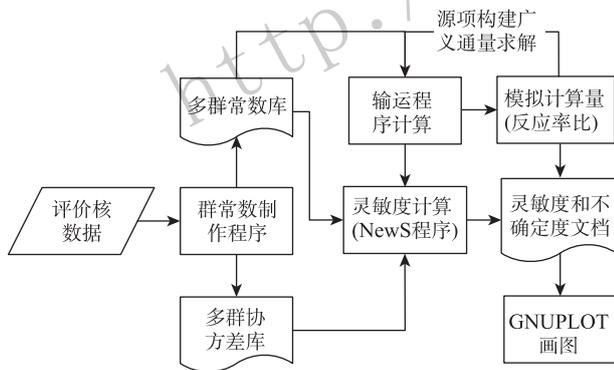


图 1 中心反应率灵敏度计算流程

6.1 灵敏度

对于 Jezebel-Pu239 的 F49/F25 而言，如图 2 所示，最为灵敏的反应道为 Pu-239 和 U-235 的裂变道。这在物理上是合理的，因为这是比值数据，因此中子能谱的贡献就在一定程度上减小了，这样只影响能谱的其它反应道对比值的影响就更小；比值实际上是两个裂变道数据之间的直接关系，因此，它对于这两个裂变道最为敏感。分子上的反应道的灵敏度为正，分母上的反应道的灵敏度为负，这在数学上也是正确的。

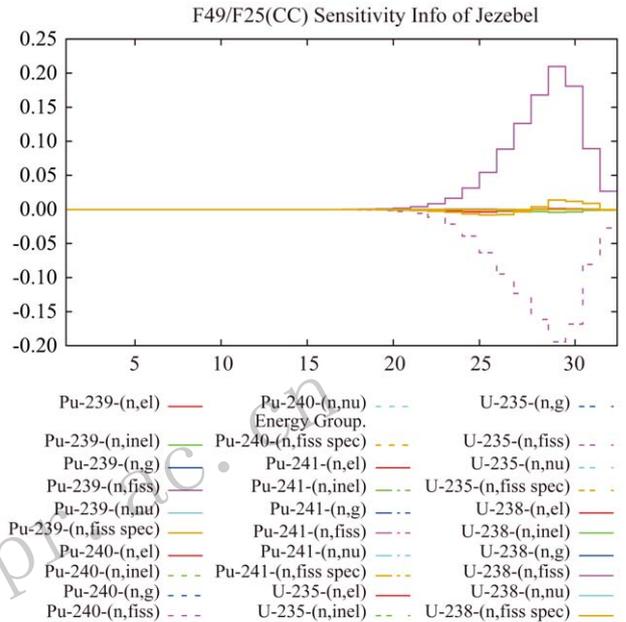


图 2 (在线彩图) Jezebel-Pu239 的 F49/F25 中心反应率比的灵敏度计算结果

观察主要核素的话，如图 3 所示，Pu-239 的裂变反应道起着主要作用，但作为成分核素，它的其它反应道的数据因为对能谱有影响，因而也有较小的灵敏度。如图 4 所示，U-235 由于只参与裂变率比的测量，而非装置的成分核素，因而它只有裂变数据有灵敏度。

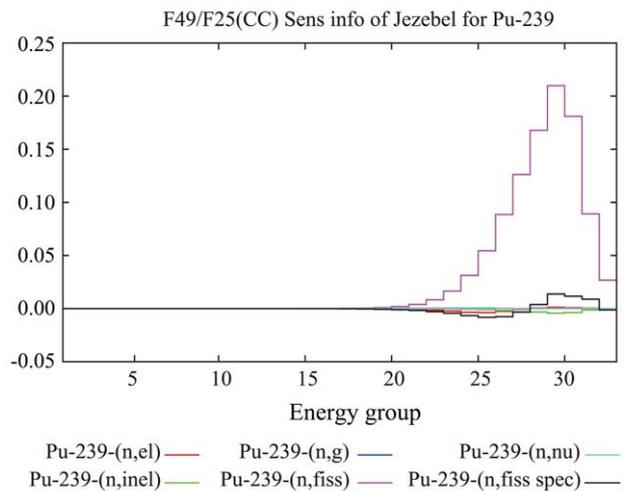


图 3 (在线彩图) Jezebel-Pu239 装置 F49/F25 对 Pu-239 重要反应道的灵敏度

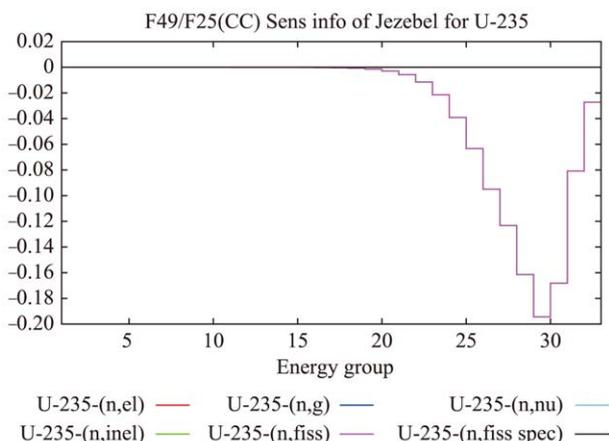


图 4 (在线彩图) Jezebel-Pu239 装置 F49/F25 对 U-235 重要反应道的灵敏度

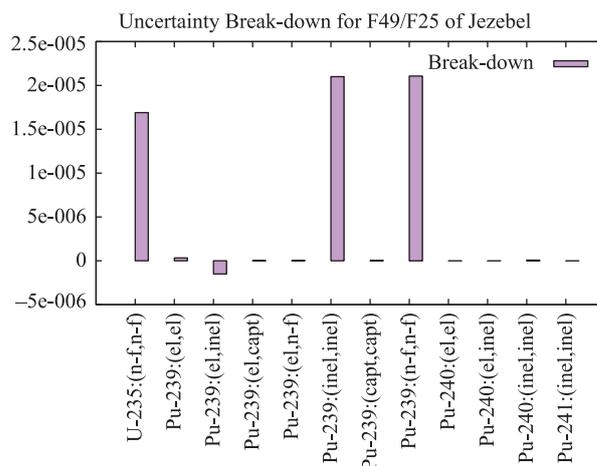


图 6 (在线彩图) Jezebel-Pu239 装置 F49/F25 不确定度的溯源分析

6.2 不确定度

结合多群协方差数据，我们可以得到 Jezebel-Pu239 装置 F49/F25 模拟计算的不确定度，计算显示，由于核数据引入的不确定度约为 0.75%。

如图 5 所示，F49/F25 的不确定度主要贡献核素是 Pu-239 和 U-235，这和物理常识以及上述的灵敏度分析结果是一致的，如果进一步将不确定度分解的话，如图 6 所示(忽略了不确定度贡献 $< 10^{-8}$ 次的项)，不确定度的主要来源是源自 Pu-239 的裂变反应道的自相关、Pu-239 非弹反应道的自相关以及 U-235 裂变反应道的自相关。但是 Pu-239 裂变自相关引入的不确定度要高于 U-235 裂变引入的不确定度，这是因为虽然两者的灵敏度量级相当，如图 7 和图 8 所示，但是 Pu-239 裂变反应数据本身的质量要逊于 U-235 裂变反应的数据。此外，如图 9 所示，Pu-239 的非弹截面的评价数据质量较差，标准差高达 20%~30%，因此引入了较大的不确定度。

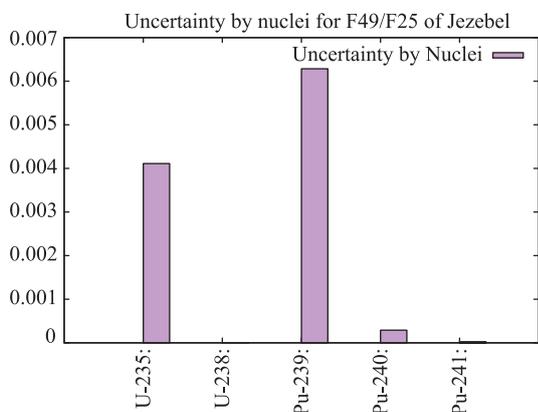


图 5 (在线彩图) Jezebel-Pu239 装置成份核素的核数据对 F49/F25 模拟计算不确定度的贡献

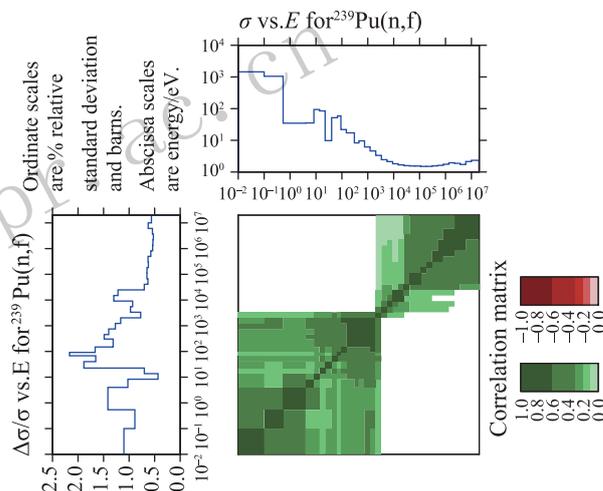


图 7 (在线彩图) Pu-239 的裂变截面自相关协方差数据

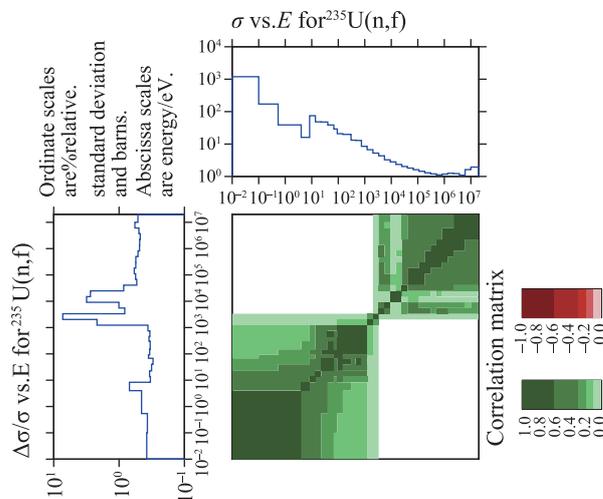


图 8 (在线彩图) U-235 的裂变截面自相关协方差数据

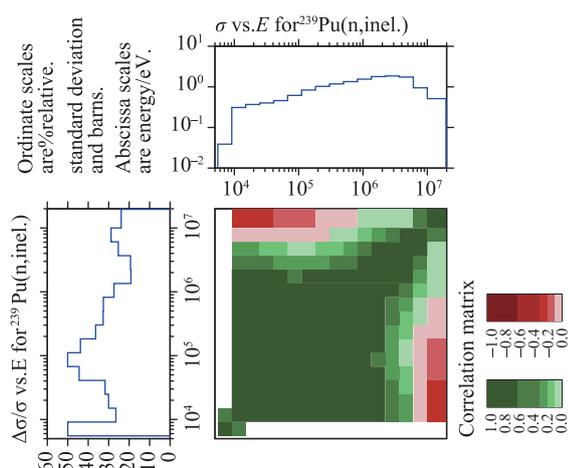


图9 (在线彩图) Pu-239的非弹散射截面自相关协方差数据

综合上述分析结果, 如要改进模拟计算结果的话, 需要对 Pu-239 的非弹截面数据进行更为精细的评价。

7 结论与讨论

反应率比的S/U分析较为复杂, 其关键难点在于广义微扰理论的应用。解决了广义通量和广义价值函数的求解, 就可以解决广义微扰理论用于灵敏度计算的瓶颈, 本文采用源项迭代和裂变能谱替换的方法得到了一种方便的求解思路, 并以 Jezebel-Pu239 装置的 F49/F25 中心裂变反应率比能谱指标为例进行了试算, 得到了较好的结果。

有关中心反应率比的灵敏度和不确定度计算有如下基本结论:

(1) 影响反应率比的灵敏度的因素较多。最直接的

影响来自分母和分子上的对应反应道, 而另一方面, 能谱的影响虽然比直接对应的对应道重要性有所降低, 但其影响不可忽略;

(2) 对于灵敏度而言, 因非弹反应不仅改变中子方向, 而且改变其能量, 因此一般而言, 它对能谱的影响要比弹性截面要大。这点与 K_{eff} 的灵敏度有所区别;

(3) 反应率比的不确定度不仅取决于其灵敏度, 另一个重要因素是其协方差数据, 对于较差的非弹截面而言, 其对反应率比值计算不确定度的贡献可能会占主导。

参考文献:

- [1] WANG Wenming. Sensitivity and Uncertainty Analysis for the Integral Parameters of Fast Benchmarking Facilities, CNDC-Report-2015012[R]. China Nuclear Data Center, 2015. (in Chinese)
(王文明. 快装置积分参数的灵敏度与不确定度计算[R]. 核数据中心报告 2015012, 核数据重点实验室, 2015.)
- [2] OBLOW E M. Nucl Sci and Eng, 1976, **59**: 187.
- [3] STACEY W M. J Math Phys, 1972, **13**(8): 1119.
- [4] GANDINI A. J Nucl Eng, 1967, **21**: 755.
- [5] USACHEV L N. J Nucl Eng Pts A/B 1964, **18**: 571.
- [6] BARTINE D E. SWANLAKE: A Computer Code Utilizing ANISN Radiation Transport Calculations for Cross Section Sensitivity Analysis[R]. ORNL/TM-3809, Oak Ridge National Laboratory, 1973.
- [7] The International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments, NEA/NSC/DOC(95)03[M]. USA: Nuclear Energy Agency Nuclear Science Committee of the Organization for Economic Cooperation and Development, 2006.

Sensitivity and Uncertainty Analysis of Reaction Rates Ratio for 1-D Fast Critical Benchmarking Facilities

WANG Wenming¹⁾, WU Haicheng, LIU Ping, ZHANG Huanyu

(China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413)

Abstract: On the base of the generalized perturbation theory and SN method, the theoretical model for calculating the sensitivity and uncertainty of reaction rates ratio (RRR) versus nuclear data is developed. Taking Jezebel-Pu239 critical benchmarking facility as an example, the sensitivity of F49/F25 ratio versus important nuclear data is calculated, as well as the uncertainty arising from the nuclear data. Basing on the sensitivity and uncertainty analysis as well as the covariance information of input evaluated data, refined evaluation of the inelastic data of Pu-239 is considered as a feasible measure to reduce the uncertainty of reaction rates ratios.

Key words: sensitivity; uncertainty; nuclear data; reaction rates ratio

Received date: 7 Dec. 2016; Revised date: 4 May 2017

1) E-mail: eaglewmm@163.com.