

文章编号: 0258-0926(2014)S2-0080-03; doi: 10.13832/j.jnpe.2014.S2.0080

# 基于 S/U 分析方法的钍基熔盐装置 核数据需求初步分析

王文明, 张环宇, 吴海成, 刘 萍

中国原子能科学研究院核数据重点实验室, 北京, 102413

摘要: 采用蒙特卡罗微扰方法计算钍基熔盐堆装置 (MSRE) 的  $k_{\text{eff}}$  对关键核数据的灵敏度, 结合数据中心制作的多群协方差核数据库, 应用 S/U 分析方法分析核数据引入的不确定度, 给出了核素数据重要性的排序。

关键词: 钍基熔盐堆; 核数据; 灵敏度; 不确定度

中图分类号: TL329<sup>+</sup>.3 文献标志码: A

## Nuclear Data Requirement Analysis of TMSR Facility Basing on S/U Analysis

Wang Wenming, Zhang Huanyu, Wu Haicheng, Liu Ping

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

Abstract: The sensitivity of  $k_{\text{eff}}$  of MSRE facility to the critical nuclear data is calculated by Monte Carlo perturbation method. Based on the multi-group covariance data library developed by China Nuclear Data Center, the uncertainty of nuclear data introduction is analyzed by S/U method, and the importance of the nuclear data is listed in order.

Key words: MSRE, Nuclear Data, Sensitivity, Uncertainty

### 0 前 言

计算机模拟计算是核装置设计的主要手段之一。模拟计算量 (即积分参数) 的不确定度分析有助于确定设计的裕量, 以期提高工程设计的安全性和经济性。

核装置积分参数的不确定度来源主要有 3 个方面<sup>[1]</sup>: 理论模型本身引入的不确定度; 实验装置物理参数测量的不确定度; 由基础物理数据 (主要为核反应数据) 引入的计算不确定度。

随着计算机技术、测量技术以及输运理论的发展, 核数据不确定度引入的影响逐渐成为积分参数模拟的主要不确定度来源。

在所有被模拟的积分参量中, 有效增殖系数 ( $k_{\text{eff}}$ ) 是衡量临界/超临界装置设计和运行的关键指标, 直接反映了装置的临界程度和运行水平。

本研究以熔盐堆实验装置 (MSRE) 为例, 应用灵敏度/不确定度 (S/U) 分析方法, 分析 MSRE 装置  $k_{\text{eff}}$  的模拟计算过程中由于核数据的

不确定度引入的不确定度, 进而给出该装置的核数据评价优先级。

### 1 S/U 分析的基本理论和方法

S/U 分析方法旨在分析复杂的非线性系统, 以期得到输出响应对于输入数据的敏感性。

S/U 分析涉及 3 个基本概念: 灵敏度、协方差和不确定度。灵敏度 ( $S_{R,q}$ ) 反映了输出响应  $R = R(q_1, q_2, \dots, q_n)$  对于输入参量  $q$  的敏感程度, 其直接定义为:

$$S_{R,q} = \frac{dR/R}{dq/q} \quad (1)$$

式中,  $q$  即为基础核数据, 在实际的核工程使用中, 即为多群常数。

协方差反映的是数据间的关联及不确定度, 其定义为:

$$\text{rcov}(q, q') = \left\langle \frac{dq}{q} \frac{dq'}{q} \right\rangle \quad (2)$$

令  $R=k_{\text{eff}}$ ，其相对标准差或不确定度为：

$$\text{var}(k_{\text{eff}}) = \mathbf{S}\mathbf{V}\mathbf{S}^T \quad (3)$$

式中， $\mathbf{S}$  为  $k_{\text{eff}}$  对参数  $q$  的灵敏度矩阵； $\mathbf{V}$  为参数  $q$  间协方差阵。此即就是 S/U 分析的数学基础。

如果以两个反应道  $a, b$  为例，由式(3)可得：

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{total}}^2 &= \mathbf{S}\mathbf{V}\mathbf{S}^T \\ &= \mathbf{S}_a\mathbf{V}_a\mathbf{S}_a^T + \mathbf{S}_b\mathbf{V}_b\mathbf{S}_b^T + (\mathbf{S}_a\mathbf{R}\mathbf{S}_b^T + \mathbf{S}_b\mathbf{R}^T\mathbf{S}_a^T) \\ &= \sigma_a^2 + \sigma_b^2 + 2\sigma_{ab} \end{aligned} \quad (4)$$

由式(4)可见， $k_{\text{eff}}$ 的不确定度的来源为3项：反应道 $a$ 自身引入的不确定度；反应道 $b$ 自身引入的不确定度；反应道 $a, b$ 间关联引入的不确定度。对于更多反应道的S/U分析，可以同样对不确定度进行分解，追溯其来源。

基于以上理论，MSRE装置 $k_{\text{eff}}$ 的S/U分析可以有图1所示的技术路线。整个S/U分析系统整合了群常数制作系统NJOY<sup>[2]</sup>、输运模拟系统MCNP5以及S/U分析程序NewS，包含了多个复杂格式的标准I/O接口，最终生成可视的分析结果。

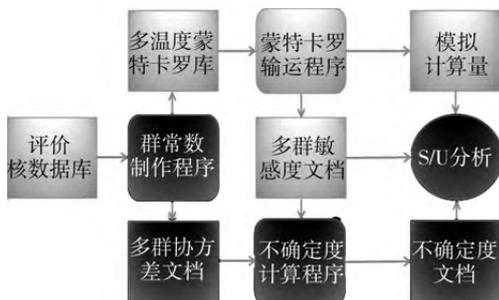


图1 MSRE的 $k_{\text{eff}}$ 灵敏度与不确定度分析的流程  
Fig. 1 Flowchart of S/U Analysis for  $k_{\text{eff}}$  of MSRE  
(深色部分为本研究的主要工作)

## 2 数据准备和加工

不管是装置的输运模拟计算，还是进行S/U分析，选取合适的基础数据库是至关重要的。选取美国ENDF/B-VII.1的评价数据作为输入量用于MSRE装置分析，因为2011年发布的此库中包含了MSRE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<sup>[3]</sup>。

选定评价数据库后，应用中国核数据中心的GENACEII程序以及NJOY程序将上述评价库加工制作成连续点截面库进行计算。

用于S/U分析的多群协方差库则利用核数据中心的preCOV处理系统，结合NJOY的ERRORR模块

完成。从评价数据出发，利用上述制作系统可以得到GENDF格式的多群协方差数据库<sup>[4]</sup>。

多群协方差数据选用WIMS-69群结构。经多年的检验证明，该群结构适用于热装置，涵盖了热能区至10 MeV的能区，在共振能区适当有所增密。协方差库的核素根据装置特点及其灵敏度计算结果选择，有可见反应的核素和反应道列于表1。

表1 多群协方差库核素和反应道列表  
Table 1 Nuclide and Channel Lists of Multi-Group Covariance Library

核素	反应道	核素	反应道
<sup>6</sup> Li	(n,t)	<sup>232</sup> Th	(n,el)(n,γ)
<sup>7</sup> Li	(n,el)(n,γ)	<sup>233</sup> U	(n,f)(n,γ)
<sup>9</sup> Be	(n,el)(n,2n)(n,γ)	<sup>234</sup> U	(n,γ)
<sup>12</sup> C	(n,el)(n,incl)(n,γ)	<sup>235</sup> U	(n,incl)(n,f)(n-γ)
<sup>19</sup> F	(n,el)(n,γ)(n,p)(n,α)	<sup>236</sup> U	(n,γ)
<sup>55</sup> Zr	(n,el)(n,γ)	<sup>238</sup> U	(n,γ)
<sup>58</sup> Ni	(n,el)(n,γ)	—	—

注：n—中子；t—氚；el—弹性散射；g—俘获；p—质子；f—裂变；incl—非弹性散射

## 3 $k_{\text{eff}}$ 模拟结果和灵敏度分析

MSRE的燃料熔盐成分为LiF-BeF<sub>2</sub>-ZrF<sub>4</sub>-UF<sub>4</sub>，其摩尔分数分别为65%、29.2%、5%、0.8%，密度为2.286 g/cm<sup>3</sup>，结构件为IRON-8钢材。此装置可用MCNP<sup>[5]</sup>进行几何建模。

$k_{\text{eff}}$ 的灵敏度分析同样用MCNP5进行微扰计算。分别对上述材料的弹性散射截面、非弹性散射截面、裂变截面、俘获截面等相关核反应截面引入2%的扰动，计算 $k_{\text{eff}}$ 的变化量。每循环历史事件数为10000，总循环代数数为1100代，跳过最初的100代，得到统计误差约为0.02%~0.04%，灵敏度的结果最终由连续点截面的灵敏度并群为69群截面数据的灵敏度。灵敏度的提取和标准灵敏度交换文档的生成由配套工具getpert完成。

忽略所有的0项(在此计算条件下无可观测的结果扰动)，进一步对数据的灵敏度进行分析，可以定义如下的灵敏度指标：

$$I_{i,c} = \sum_g |S_{k_{\text{eff}},i,g,c}| \quad (5)$$

式中， $I$ 为灵敏度指标，是某核素某反应道的灵敏度在全能区进行绝对值相加，此指标可以简单地衡量此数据对于目标装置的重要性；下标 $i$ 为核素， $g$ 为能群， $c$ 为反应道。

由此可得到按重要度排序的前10个反应道

(表2),这是MSRE装置最重要的核素及反应数据,也是最应该加强评价和提高质量的基础核数据。

表2 MSRE装置数据灵敏度指标  
Table 2 Sensitivity Index of MSRE Facility

核素-反应道	灵敏度指标	核素-反应道	灵敏度指标
$^{235}\text{U}-(n,f)$	0.2636	$^{233}\text{U}-(n,f)$	0.0402
$^{235}\text{U}-(n,\gamma)$	0.123	$^9\text{Be}-(n,el)$	0.0198
$^{232}\text{Th}-(n,\gamma)$	0.079	$^6\text{Li}-(n,t)$	0.0184
$^{19}\text{F}-(n,el)$	0.045	$^7\text{Li}-(n,el)$	0.0164
$^{58}\text{Ni}-(n,el)$	0.0416	$^7\text{Li}-(n,\gamma)$	0.0124

#### 4 不确定度分析

装置积分参数计算量的不确定度分析,要综合多群协方差数据以及装置的灵敏度数据,并基于S/U分析软件包NewS进行。

NewS是中国核数据中心在Sen-1D<sup>[6]</sup>的基础上新开发的S/U分析工具,当前版本可用于一维SN方法和三维蒙特卡洛方法的装置S/U分析,可分析 $k_{eff}$ /泄漏谱等积分量。

根据计算结果,整个装置的 $k_{eff}$ 模拟总不确定度约3.25%。贡献最大的核素为 $^{235}\text{U}$ 和 $^7\text{Li}$ ,不确定度约2%;最小的 $^6\text{Li}$ ,不确定度约0.02%,可以忽略。根据前述分解方法进一步分解不确定度,可以将其分解到由于每个反应道之间的关联产生的关联不确定度。对不确定度贡献最大的是由于 $^7\text{Li}$ 各群俘获截面间关联误差所引入的不确定度;其次为 $^{235}\text{U}$ 的各群俘获截面间关联引入的不确定度。值得注意的是: $^9\text{Be}$ 的弹性与n-2n数据的关联以及 $^{58}\text{Ni}$ 的弹性与俘获数据的关联,它们对不确定度的贡献为负。这说明考虑了数据之间的关联,有可能会降低模拟量的不确定度。

根据前述S/U分析方法,对MSRE装置初装料时 $k_{eff}$ 模拟的关键数据(灵敏度最高)和需要改进数据(引入的不确定度最大)归纳于表3。

表3 MSRE装置核数据需求初步分析结果  
Table 3 Preliminary Results of Nuclear Data Requirements Analysis for MSRE Facility

关键核素-反应道数据	优先评价核素-反应道数据
$^{235}\text{U}-(n,f)$	$^7\text{Li}-(n,\gamma)$
$^{235}\text{U}-(n,\gamma)$	$^{235}\text{U}-(n,\gamma)$
$^{232}\text{Th}-(n,\gamma)$	$^{19}\text{F}-(n,el)$
$^{19}\text{F}-(n,el)$	$^{234}\text{Th}-(n,\gamma)$
$^{58}\text{Ni}-(n,el)$	$^{235}\text{U}-(n,f)$
$^{233}\text{U}-(n,f)$	$^{58}\text{Ni}-(n,\gamma)$
$^9\text{Be}-(n,el)$	$^7\text{Li}-(n,el)$
$^6\text{Li}-(n,t)$	$^6\text{Li}-(n,t)$
$^7\text{Li}-(n,el)$	$^7\text{Li}-(n,el)$
$^7\text{Li}-(n,\gamma)$	$^7\text{Li}-(n,\gamma)$

由核数据引入的模拟量不确定度来源分析是一个十分复杂的分析过程,受数据关联性大小、数据不确定度大小和数据灵敏度等多重因素的影响,需要进行系统的分析。

#### 5 结论

综上所述,对于MSRE的 $k_{eff}$ 模拟由于核数据引入的不确定度,可以有如下结论:

(1) 装置的S/U分析是个复杂的系统,需要综合考虑多种因素。

(2) MSRE最关键(灵敏度高)的反应数据为 $^{235}\text{U}$ 的裂变和俘获、 $^{232}\text{Th}$ 的俘获、 $^{19}\text{F}$ 的弹性、 $^{58}\text{Ni}$ 的弹性以及 $^{233}\text{U}$ 的裂变。

(3) 用于MSRE急需改进(不确定度贡献较大)的反应数据有 $^7\text{Li}$ 的俘获、 $^{235}\text{U}$ 的俘获、 $^{19}\text{F}$ 的弹性以及 $^{232}\text{Th}$ 的俘获。

本研究意义在于一方面量化了模拟积分量的不确定度,可以为设计提供参考;另一方面,提出了目标装置相关的核数据评价的需求以及方向,便于提高核数据和模拟结果的精度。

对于反应堆的数据需求,特别是在不同燃耗深度下的关键物理参数对应的数据需求,需要考虑很多方面。由于篇幅所限,只讨论了在初装料时MSRE装置 $k_{eff}$ 模拟的数据需求,更多的是提供一种思路和方法,以便于针对不同的应用来提出核数据的量化具体需求。

#### 参考文献:

- [1] Childs R L. SEN1: A one-dimensional cross-section sensitivity and uncertainty module for criticality safety analysis[R]. Oak Ridge National Laboratory, 1999.
- [2] MacFarlane R E, Muir D W. NJOY99.0, code system for producing pointwise and multigroup neutron and photon cross sections from ENDF/B data[R]. Los Alamos National Laboratory, LA-12740-M, 2000.
- [3] Chadwick M B, Herman M, Oblozinsky P, et al. ENDF/B-VII.1 Nuclear data for science and technology: cross sections, covariances, fission product yields and decay data[J]. Nuclear Data Sheets, 2011, 112 (12):2887-2996.
- [4] 王文明, 张环宇, 刘萍, 等. 用于TMSR模拟计算S/U分析的多群协方差文档制作[R]. CNDC, 2014.
- [5] Los Alamos National Laboratory. MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5[R]. LA-UR-03-1987, 2003.
- [6] 王文明, 吴海成. 一维临界基准装置 $k_{eff}$ 对核数据的灵敏度和不确定度分析方法[R]. China Nuclear Data Center, 2012.

(责任编辑:左成元)