

基于反复裂变几率法的敏感性分析初步研究

丘意书, 梁金刚, 王 侃

清华大学工程物理系, 北京, 100084

摘要: 为研究在连续能量蒙特卡罗程序临界计算中 k_{eff} 对核数据的敏感性分析方法, 讨论 k_{eff} 对核数据的敏感性分析的理论基础。然后, 阐述当前在连续能量蒙特卡罗程序中广泛应用于伴随通量计算的反复裂变几率法的基本原理, 以及伴随通量加权反应率的计数方法。最后, 基于自主堆用蒙特卡罗程序 (RMC), 使用反复裂变几率法对聚乙烯球临界基准题进行敏感性分析。RMC 计算结果与 SCALE 程序计算结果符合良好。

关键词: 蒙特卡罗; 反复裂变几率; 敏感性分析; RMC

中图分类号: TL32 **文献标志码:** A

Preliminary Study of Sensitivity Analysis Based on Iterated Fission Probability Method

Qiu Yishu, Liang Jingang, Wang Kan

Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing, 100084, China

Abstract: In order to investigate the analysis methodology for k_{eff} sensitivity to nuclear data in continuous-energy Monte Carlo codes, the theory about calculating the eigenvalue sensitivity coefficients to nuclear data is introduced. And the foundation of the Iterated Fission Probability (IFP) method which is widely used for calculating the adjoint flux in continuous-energy Monte Carlo codes and approaches for tallying the adjoint-weighted reaction rates are discussed. Finally, with the continuous-energy Reactor Monte Carlo code RMC, sensitivity analysis is performed on a polyethylene sphere criticality benchmark based on the IFP method and the results are compared to those calculated by SCALE.

Key words: Monte Carlo, Iterated fission probability, Sensitivity analysis, RMC

0 引言

敏感性分析一般基于伴随通量计算方法。早期, 这方面的研究主要基于确定论程序以及多群蒙特卡罗 (下文简称蒙卡) 程序, 不能有效地用于连续能量蒙特卡罗程序中, 需要提出新的方法。

本研究以反复裂变几率法 (IFP)^[1-3] 作为研究的起点, 在清华大学工程物理系开发的堆用蒙特卡罗程序 (RMC)^[4] 基础上开发了 k_{eff} 对核数据的敏感性分析功能。

1 敏感性分析理论基础

敏感性系数定义为核数据的相对变化量所引

起的 k_{eff} 的相对变化量。从一阶线性微扰理论出发, 可以推导得:

$$S_{k,x(r,E)} = \frac{x\Delta k}{k\Delta x} = \frac{\left\langle \Psi^* \frac{1}{k} \frac{x\partial M}{\partial x} \Psi \right\rangle}{\left\langle \Psi^* \frac{1}{k} M \Psi \right\rangle} + \frac{\left\langle \Psi^* \frac{x\partial S}{\partial x} \Psi \right\rangle - \left\langle \Psi^* \frac{x\partial T}{\partial x} \Psi \right\rangle}{\left\langle \Psi^* \frac{1}{k} M \Psi \right\rangle} \quad (1)$$

式中, 等式右边分子的第一项为裂变项:

$$\Psi^* \frac{1}{k} \frac{x \partial M}{\partial x} \Psi$$

$$= \frac{\chi(r, E)}{4\pi} \bar{\nu} \sum_f (r, E') \Psi(r, \Omega', E') \Psi^*(r, \Omega, E)$$

分子的第二项为散射项：

$$\Psi^* \frac{x \partial S}{\partial x} \Psi$$

$$= \Psi^*(r, \Omega, E) \sum_s (r, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) \Psi(r, \Omega', E')$$

分子的第三项为总相互作用项：

$$\Psi^* \frac{x \partial T}{\partial x} \Psi = \Psi^*(r, \Omega, E) x(r, E) \Psi(r, \Omega, E)$$

等式右边的分母为伴随通量加权的裂变源：

$$\left\langle \Psi^* \frac{1}{k} M \Psi \right\rangle$$

$$= \iiint \frac{\chi \Psi^*(r, \Omega, E)}{4\pi k} \iiint \bar{\nu} \sum_f \Psi(r, \Omega', E') d\Omega' dE' d\Omega dV dE$$

式中, r 为空间位置; E' 和 Ω' 为碰撞(包括散射和裂变)前的中子能量和方向角; E 和 Ω 为碰撞后的中子能量和方向角; $x(r, E)$ 是在位置 r 处, 中子能量 E 的某个核数据, 为简便起见, 将 $x(r, E)$ 简写为 x ; k 表示 k_{eff} ; $S_{k, x(r, E)}$ 为 k 对 $x(r, E)$ 的敏感性系数; Ψ 表示通量; Ψ^* 表示伴随通量; Δk 表示由核数据 x 的扰动量 Δx 所引起的 k_{eff} 的变化量; M 为玻尔兹曼方程中的裂变算符; S 为散射算符; T 为总相互作用算符; ∂ 表示微分运算; 尖括号表示对相空间进行积分; \sum_s 和 \sum_f 分别为散射截面和裂变截面; χ 为裂变中子谱; $\bar{\nu}$ 为平均裂变中子数。

2 反复裂变几率法

2.1 原理

伴随通量是敏感性系数计算的关键物理量, 表征引入反应堆的某个中子在无穷远代引起的裂变次数^[2]。

反复裂变几率与伴随通量成正比, 可替代伴随能量。根据反复裂变几率的物理含义, 在蒙特卡洛模拟过程中, 人为地将蒙特卡洛模拟的活跃代分为 3 种类型, 即初始代、过渡代和渐进代。初始代收集祖先中子, 以及统计特定核素特定截面的反应率, 在过渡代跟踪祖先中子产生的后代, 经过足够的过渡代, 在渐进代中系统达到稳定。此时, 统计属于相同的祖先中子的后代中子发生裂变的次数, 得到伴随权重的大小。

跟踪后代的过程如图 1 所示, 第一代初始代, 2~N-1 代为过渡代, 第 N 代为渐进代。一般认为 $N=10$ 时, 对于大部分系统已经足够稳定。对于堆芯尺寸比较小、泄漏率比较大的系统, N 可减到 5 左右。对于堆芯尺寸更大的系统, N 可能增加到 20。

反复裂变几率法不需要求解伴随方程, 直接在前向计算中可获得伴随权重的信息。

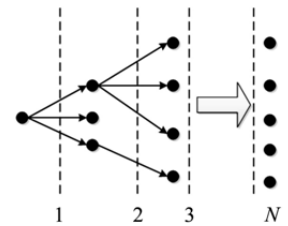


图 1 反复裂变几率法示意图

Fig. 1 Introduction of Iterated Fission Probability Method

2.2 计数方法

在蒙特卡洛模拟中, 为了获得更精确的结果, 并不需要划分空间网格计算出反复裂变几率的大小, 而是使用所谓的伴随权重计数。

对于碰撞项, 使用径迹长度法进行统计, 可以表示为:

$$\Psi^*(r, \Omega, E) x(r, E) \Psi(r, \Omega, E) = Q N_i \sigma_j(r, E) w_0 l$$

式中, $x(r, E) = N_i \sigma_j(r, E)$; N_i 代表核素 i 的密度; $\sigma_j(r, E)$ 代表 j 微观截面; Q 是渐进代中统计得到的伴随通量; w_0 为粒子的初始权重; l 为中子走过的距离。

初始代中, 中子每走过一段距离 l , 就获得大小为 $N_i \sigma_j(r, E) w_0 l$ 的计数。每次裂变产生的中子数是通过式 (2) 模拟:

$$\eta = [w \nu \sigma_f / \sigma_t + \xi] \quad (2)$$

式中, w 为粒子的当前权重; ν 为平均裂变中子数; σ_f 为微观裂变截面; σ_t 为微观总截面; ξ 为随机数。

因此, 粒子的当前权重 w 在统计伴随通量 Q 的过程中已经体现, 因而碰撞项的统计用的是粒子的初始权重 w_0 , 而不是当前权重 w 。

对于散射项和裂变项, 使用碰撞估计法进行统计, 可以表示为:

$$\Psi^*(r, \Omega, E) \sum_s (r, E' \rightarrow E) \Psi(r, \Omega', E')$$

$$=w \frac{\sum_s(r, E' \rightarrow E)}{\sum_t(r, E')} Q \quad (3)$$

$$\begin{aligned} & \bar{v} \sum_f(r, E') \Psi(r, \Omega', E') \Psi^*(r, \Omega, E) \\ & =w \frac{\bar{v} \sum_f(r, E')}{\sum_t(r, E')} Q \end{aligned} \quad (4)$$

由于每发生一次散射反应的概率为 $\frac{\sum_s(r, E' \rightarrow E)}{\sum_t(r, E')}$ ，而采用隐俘获法，发生碰撞后的

粒子的当前权重 w 在伴随通量 Q 中已经体现，因而散射项在初始代的统计为每发生一次特定类型的反应，就加 1。同理，裂变项为每发生一次裂变就在初始代中获得计数为 1 的贡献。

对于伴随权重 Q 的统计，它可以采用裂变反应率或者裂变中子数作为统计值。如果采用裂变反应率作为统计值， Q 值可以表示为 $Q = \sum_{\tau} w_{\tau} v \Sigma_f l_{\tau}$ ，其中 τ 为所跟踪的祖先中子所产生的后代中子在渐进代的径迹， w_{τ} 和 l_{τ} 为该径迹所对应的粒子权重和径迹长度。如果采用裂变中子数作为统计值，则统计所跟踪的祖先中子在渐进代中产生的后代中子总数。

3 计算结果

RMC 基础上开发了 k_{eff} 对核数据的敏感性分析功能，并选取一个聚乙烯球临界基准题进行敏感性分析。该基准题是一个半径为 38.5 cm 的球形反应堆，含有 ^{235}U 、 ^{238}U 、 ^1H 、 ^{12}C 以及 ^{19}F 共 5 种核素。其中 ^{235}U 与 ^1H 的原子比为 294:1。本文将比较 RMC 与 SCALE6.1 程序的一维敏感性和不确定性分析模块 TSUNAMI-1D，以及三维敏感性和不确定性分析模块 TSUNAMI-3D，对该临界基准题进行敏感性计算的结果。

表 1 给出 TSUNAMI-1D、TSUNAMI-3D 以及 RMC 程序计算得到的部分重要敏感性系数。可见， C/E 的值大体分布在 [0.86, 1.03] 区间，表明 RMC 与 TSUNAMI-1D 和 TSUNAMI-3D 计算结果吻合良好。

3 个程序间的差异主要由以下几个方面造成：

所用的数据库不同，TSUNAMI-1D 和 TSUNAMI-3D 模块使用的是 SCALE 程序包自带的 238 群的 AMPX 多群格式数据库，而 RMC 采用的是连续能量点截面数据库；计算流程以及方法不同，TSUNAMI-1D 和 TSUNAMI-3D 模块

表 1 部分重要敏感性系数的比较

Table 1 Comparison of Most Sensitive Nuclear Data

核素	反应	T-1D	T-3D	RMC	C/E
^{235}U	裂变	3.64×10^{-1}	3.65×10^{-1}	3.70×10^{-1}	1.02
^{235}U	(n, γ)	-1.13×10^{-1}	-1.12×10^{-1}	-1.10×10^{-1}	0.98
^{235}U	nubar	9.50×10^{-1}	9.50×10^{-1}	9.49×10^{-1}	1.00
^{238}U	裂变	3.34×10^{-2}	3.35×10^{-2}	3.44×10^{-2}	1.03
^{238}U	(n, γ)	-2.87×10^{-1}	-2.86×10^{-1}	-2.81×10^{-1}	0.98
^{238}U	nubar	5.00×10^{-2}	5.01×10^{-2}	5.13×10^{-2}	1.03
^1H	弹性散射	3.19×10^{-1}	3.16×10^{-1}	3.21×10^{-1}	1.01
^1H	(n, γ)	-1.01×10^{-1}	-1.01×10^{-1}	-9.94×10^{-2}	0.98
^{12}C	弹性散射	2.43×10^{-2}	2.45×10^{-2}	2.32×10^{-2}	0.95
^{12}C	总俘获	-6.65×10^{-4}	-6.68×10^{-4}	-6.61×10^{-4}	0.99
^{19}F	弹性散射	2.94×10^{-2}	2.97×10^{-2}	2.73×10^{-2}	0.92
^{19}F	(n, γ)	-2.39×10^{-3}	-2.38×10^{-3}	-2.33×10^{-3}	0.98
^{19}F	(n, p)	-2.24×10^{-4}	-2.29×10^{-4}	-2.31×10^{-4}	1.02
^{19}F	(n, d)	-1.11×10^{-5}	-1.14×10^{-5}	-1.11×10^{-5}	0.99
^{19}F	(n, t)	-2.32×10^{-6}	-2.43×10^{-6}	-2.05×10^{-6}	0.86
^{19}F	(n, α)	-2.90×10^{-3}	-2.94×10^{-3}	-2.98×10^{-3}	1.02

注：T-1D 为 TSUNAMI-1D；T-3D 为 TSUNAMI-3D；C/E 为 RMC 的计算结果与 TSUNAMI-1D 和 TSUNAMI-3D 的计算结果的平均值的比值

由于需要执行共振自屏计算，因而需要计算隐式敏感性系数，最终的敏感性系数分为输运计算中 k_{eff} 对共振自屏修正截面的显式敏感性系数以及共振自屏修正截面对原始核截面的隐式敏感性系数 2 部分，而连续能量蒙卡程序 RMC 不需要执行共振自屏计算，不需要计算隐式敏感性系数。另外，由表 1 可见， k_{eff} 对 ^{235}U 的每次裂变中子数最为敏感，约为 0.95。

图 2~图 5 分别给出了不同程序计算得到的 k_{eff} 对于 ^{235}U 和 ^{238}U 的每次裂变中子数以及总俘获截面的敏感性系数曲线。由图中可见，RMC 与 TSUNAMI-1D 以及 TSUNAMI-3D 的计算结果总体符合良好。

从图 2 可见， k_{eff} 对 ^{235}U 的每次裂变中子数在低能区更敏感，该区域与 ^{235}U 容易发生裂变的能量范围一致。从图 3 可见， k_{eff} 对 ^{235}U 的俘获截面在低能区和中能区更敏感，而且热能区的影响大于中能区，在中能区因为共振峰的存在有比较明显的波动。从图 4 可见， k_{eff} 对于 ^{238}U 的每次裂变中子数在高能区更敏感，这与 ^{238}U 容易发生裂变的能量范围一致。从图 5 可见 k_{eff} 对于 ^{238}U 俘获截面在低能区和中能区更敏感，尤其在共振能区，而且共振能区的影响大于热能区，且存在强烈的波动。

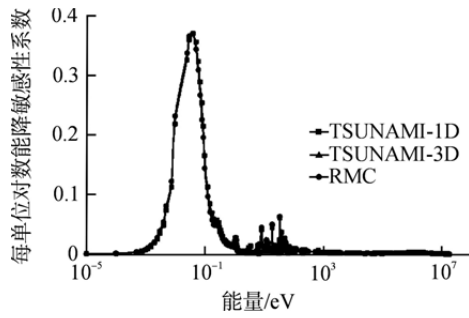


图 2 k_{eff} 对 ^{235}U 的每次裂变中子数的敏感性系数曲线
Fig. 2 Profiles of k_{eff} Sensitivities to ^{235}U Nubar

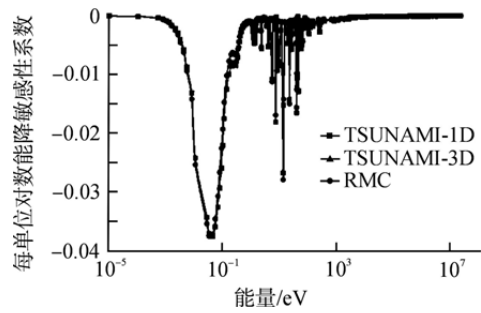


图 3 k_{eff} 对 ^{235}U 的俘获截面的敏感性系数曲线
Fig. 3 Profiles of k_{eff} Sensitivities to ^{235}U Capture Cross-Section

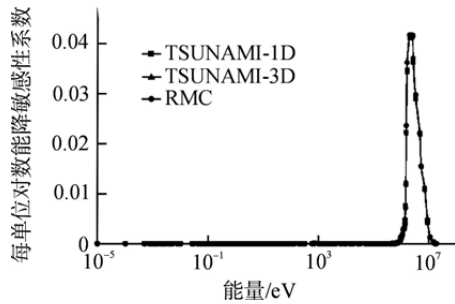


图 4 k_{eff} 对 ^{238}U 的每次裂变中子数的敏感性系数曲线
Fig. 4 Profiles of k_{eff} Sensitivities to ^{238}U Nubar

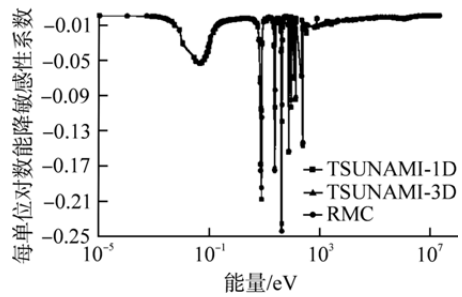


图 5 k_{eff} 对 ^{238}U 的俘获截面的敏感性系数曲线
Fig. 5 Profiles of k_{eff} Sensitivities to ^{238}U Capture Cross-section

4 结束语

本文基于反复裂变几率法，在连续能量蒙特卡罗程序 RMC 基础上开发了敏感性分析功能。选取了聚乙烯球临界基准题进行敏感性分析，将 RMC 计算结果与 SCALE6.1 的 TSUNAMI-1D 以及 TSUNAMI-3D 的计算结果进行了比较，计算结果符合良好。反复裂变几率法的优点是无须对相空间进行划分，计算结果精确，无须求解伴随方程，直接在前向计算中获得伴随权重的信息，无需额外执行一次伴随计算；在连续能量蒙特卡罗临界计算中不需要考虑共振带来的隐式敏感性效应，同时，该方法物理概念清晰，便于编程实现。然而，该方法需要过高的内存占用，影响了程序的性能。

参考文献：

- [1] Kiedrowski B C, Brown F B. Adjoint-based k-eigenvalue sensitivity coefficients to nuclear data using continuous-energy monte carlo[J]. Nuclear Science and Engineering. 2013, 174: 227-244.
- [2] Shim H J, Kim C H. Adjoint Sensitivity and uncertainty analyses in monte carlo forward calculations[J]. Journal of Nuclear Science and Technology, 2011.05: 1453-1461.
- [3] Perfetti C M, Rearden B T. Development of a SCALE tool for continuous-energy eigenvalue sensitivity coefficient calculations[C]. Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2013 (SNA+MC 2013), Paris, France, 2013.
- [4] Wang K, LI Z, S D, et al. RMC - a monte carlo code for reactor core analysis[J]. Ann Nucl Energy, 2014.08.48.

(责任编辑：张祚豪)