2021 年6月

文章编号:0258-0926(2021)03-0229-05; doi:10.13832/j.jnpe.2021.03.0229

基于广义微扰理论与 CMFD 加速的敏感性分析

吴 屈,彭星杰,于颖锐,李 庆

中国核动力研究设计院核反应堆系统设计技术重点实验室,成都,610213

摘要:为实现反应堆物理设计程序 KYLIN- 的核数据广义敏感性分析功能,本研究采用广义微扰理论, 依据响应形式构建具有正交定解条件的广义固定源方程,求解广义共轭通量从而计算得到核数据的广义敏感 性系数。此外,提出通过采用粗网有限差分算法求解广义固定源方程,达到加速求解的目的。研究结果表明, 使用的加速算法使得求解效率提高了约4.3 倍,且计算得到的核数据敏感性系数与直接扰动法相比基本一致。 因此,本研究建立的基于广义微扰理论与粗网有限差分加速算法能够用于核数据广义敏感性分析。 关键词:敏感性分析;广义微扰理论;粗网有限差分;核数据;广义固定源方程

中图分类号:TL329 文献标志码:A

Generalized Perturbation-Theory-Based Sensitivity Analysis with CMFD Acceleration

Wu Qu, Peng Xingjie, Yu Yingrui, Li Qing

Science and Technology on Reactor System Design Technology Laboratory, Nuclear Power Institute of China, Chengdu, 610213, China

Abstract: To perform the generalized sensitivity analysis for nuclear data in a reactor physics design code, KYLIN- , the generalized perturbation theory is adopted and several generalized fix-source equations with the orthogonal definite condition need to be solved when the sensitivity coefficients are figured out. Besides, the paper develops a new approach, CMFD-based generalized fix-source equation solution, to accelerate the convergence. The convergence efficiency of the generalized fixed-source equation is improved by roughly 4.3 times, and the sensitivity coefficients calculated by the GPT accord with those calculated by the direct perturbation theory, which demonstrates the sensitivity analysis ability in KYLIN- .

Key words: Sensitivity analysis, Generalized perturbation theory, Coarse mesh finite difference, Nuclear data, Generalized fixed-source equation

0 引 言

核数据敏感性系数是用于量化物理响应对核 数据的敏感性程度,常采用微扰理论计算^[1]。中 子输运方程本征值对核数据的敏感性系数一般基 于传统微扰理论(CPT)进行计算^[1-2]。对于其他 响应,如线性比率(反应率之比或少群截面等) 或双线性比率(多普勒系数或动态参数等),则 需要采用基于广义微扰理论(GPT)的敏感性分 析方法^[3-4]。在求解特定响应对应的广义固定源方 程(GFE)时,GPT 能够分析该响应对核数据的 敏感性系数^[5],但存在2个缺点: 当要求分析 较多的输出响应时,需求解的GFE 将线性增加, GPT 计算量大; GFE 很可能存在负源项,并满 足正交定解条件^[5],影响固定源求解的迭代流程, 此时需对求解器进行修正,在无任何加速技巧的 情况下,GFE 的收敛速度慢。针对第1个问题, 在此前的研究中采用了 GPT-free 方法^[6-7],可有 效避免采用 GPT 造成计算量大的问题,即可同时

收稿日期:2020-10-26;修回日期:2020-11-26

基金项目:国家自然科学基金(11905214)

作者简介:吴 屈(1993—),男,博士研究生,现主要从事反应堆物理研究,E-mail:wuq2011@163.com

)

分析所有响应对核数据的敏感性系数;对于第 2 个问题 , 目前研究还较少 , 限制了 GPT 的进一步 应用。

因此,本研究提出基于粗网有限差分 (CMFD)的GFE求解方法(C-GFE),并在反 应堆物理设计程序 KYLIN-^[8]中开发敏感性与 不确定性分析功能。

1 GPT 的基础理论及应用

本研究的主要目标是使用 GPT 预测响应对 核数据的敏感性系数。反应堆物理中绝大部分响 应可表达为通量与共轭通量的线性泛函或双线性 泛函之比的形式。通量与共轭通量分别是中子输 运方程与共轭中子输运方程的解。本节详细介绍 利用 GPT 进行敏感性分析的基础理论以及在 KYLIN- 程序中的应用。

1.1 GPT 基础理论

从中子输运方程与共轭中子输运方程的算子 形式出发,推导广义响应敏感性的具体表达,即:

$$L\psi = \frac{1}{k_{\rm eff}} F\psi \qquad (1)$$

$$\boldsymbol{L}^* \boldsymbol{\psi}^* = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \boldsymbol{F}^* \boldsymbol{\psi}^* \qquad (2)$$

$$R = \frac{\left\langle \boldsymbol{\psi}^* \boldsymbol{H}_1 \boldsymbol{\psi} \right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{\psi}^* \boldsymbol{H}_2 \boldsymbol{\psi} \right\rangle} \tag{3}$$

式中, L 为中子泄漏、吸收和散射算符; F 为中 子裂变算符; ψ 为中子角通量; L^* 与 F^* 分别为 L与 F 的共轭算子; ψ^* 为共轭中子角通量; H_1 与 H_2 分别为计算响应 R 的 2 个算子; k_{eff} 为有效 增殖因子; $\langle \rangle$ 代表相空间内积。式(2)是式(1) 的共轭形式, 共轭算子与共轭通量满足如下关 系式:

$$\left\langle \boldsymbol{\psi}^{*} \left(\boldsymbol{L} - \frac{1}{k_{\text{eff}}} \boldsymbol{F} \right) \boldsymbol{\psi} \right\rangle = \left\langle \boldsymbol{\psi} \left(\boldsymbol{L}^{*} - \frac{1}{k_{\text{eff}}} \boldsymbol{F}^{*} \right) \boldsymbol{\psi}^{*} \right\rangle$$
(4)

响应 R 对核数据(σ)的敏感性系数($S_{R,\sigma}$)的定义式为:

$$S_{R,\sigma} = \frac{\sigma}{R} \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\sigma} \tag{5}$$

将式(3)代入式(5)并保留一阶导数项, 可得:

$$S_{R,\sigma} \approx D + I_{\partial\psi} + I_{\partial\psi^{*}} \qquad (6)$$

$$D = \sigma \left(\frac{\left\langle \psi^{*} \frac{\partial H_{1}}{\partial \sigma} \psi \right\rangle}{\left\langle \psi^{*} H_{1} \psi \right\rangle} - \frac{\left\langle \psi^{*} \frac{\partial H_{2}}{\partial \sigma} \psi \right\rangle}{\left\langle \psi^{*} H_{2} \psi \right\rangle} \right)$$

$$I_{\partial\psi} = \sigma \left(\frac{\left\langle \psi^{*} H_{1} \frac{\partial \psi}{\partial \sigma} \right\rangle}{\left\langle \psi^{*} H_{1} \psi \right\rangle} - \frac{\left\langle \psi^{*} H_{2} \frac{\partial \psi}{\partial \sigma} \right\rangle}{\left\langle \psi^{*} H_{2} \psi \right\rangle} \right)$$

$$I_{\partial\psi^{*}} = \sigma \left(\frac{\left\langle \frac{\partial \psi^{*}}{\partial \sigma} H_{1} \psi \right\rangle}{\left\langle \psi^{*} H_{1} \psi \right\rangle} - \frac{\left\langle \frac{\partial \psi^{*}}{\partial \sigma} H_{2} \psi \right\rangle}{\left\langle \psi^{*} H_{2} \psi \right\rangle} \right)$$

式中, D可视为直接项, 量化核数据扰动对 H_1 与 H_2 的直接影响; $I_{\partial \psi} \subseteq I_{\partial \psi^*}$ 视为间接项, 分别量 化核数据的扰动对 $\psi \subseteq \psi^*$ 的间接影响。在给出 ψ $\subseteq \psi^*$ 的条件下,即可计算直接项D。然而, $\psi \subseteq \psi^*$ 不能写成 σ 的函数形式,因此不能直接计算间 接项 $I_{\partial \psi} \subseteq I_{\partial \psi^*}$ 中的 $\partial \psi / \partial \sigma \subseteq \partial \psi^* / \partial \sigma$ 。

为了求解 $\partial \psi / \partial \sigma$ (求解 $\partial \psi^* / \partial \sigma$ 的过程类似, 不再赘述),在式(1)两边同时对 σ 求偏导可得:

$$\left(\boldsymbol{L} - \frac{1}{k_{\text{eff}}}\boldsymbol{F}\right)\frac{\partial\boldsymbol{\psi}}{\partial\sigma} = -\left(\frac{\partial\boldsymbol{L}}{\partial\sigma} - \frac{1}{k_{\text{eff}}}\frac{\partial\boldsymbol{F}}{\partial\sigma}\right)\boldsymbol{\psi} - \frac{1}{k_{\text{eff}}^2}\frac{\partial k_{\text{eff}}}{\partial\sigma}\boldsymbol{F}\boldsymbol{\psi}$$
(7)

定义广义共轭方程为:

$$\left(\boldsymbol{L}^{*}-\frac{1}{k_{\text{eff}}}\boldsymbol{F}^{*}\right)\boldsymbol{\Gamma}^{*}=\boldsymbol{S}^{*}$$

$$\boldsymbol{S}^{*}=\frac{\boldsymbol{H}_{1}^{*}\boldsymbol{\psi}^{*}}{\left\langle\boldsymbol{\psi}^{*}\boldsymbol{H}_{1}\boldsymbol{\psi}\right\rangle}-\frac{\boldsymbol{H}_{2}^{*}\boldsymbol{\psi}^{*}}{\left\langle\boldsymbol{\psi}^{*}\boldsymbol{H}_{2}\boldsymbol{\psi}\right\rangle}$$
(8)

式中, Γ^* 为广义共轭通量; $H_1^* 与 H_2^*$ 分别为 H_1 与 H_2 的共轭算子。将式(8)代入式(6)中 可得:

$$I_{\partial \psi} = -\sigma \left\langle \boldsymbol{\Gamma}^* \left(\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \sigma} - \frac{1}{k_{\text{eff}}} \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial \sigma} \right) \boldsymbol{\psi} \right\rangle - \frac{1}{k_{\text{eff}}^2} \frac{\partial k_{\text{eff}}}{\partial \sigma} \left\langle \boldsymbol{\Gamma}^* \boldsymbol{F} \boldsymbol{\psi} \right\rangle$$
(9)

由于算子 $(L^* - 1/k_{eff} F^*)$ 是奇异的,源项 S^* 满足正交性关系 $(\langle S^* \psi \rangle = 0)$,因此式(9)存在 无数个解, ψ^* 是方程的通解。若能给出其中一个 特解 Γ_0^* ,则式(9)所有的解可表达为:

$$\boldsymbol{\Gamma}^* = \boldsymbol{\Gamma}_0^* + c\boldsymbol{\psi}^* \tag{10}$$

式中 , c 为任意实数。

引入正交定解条件 $\langle \boldsymbol{\Gamma}^* \boldsymbol{F} \boldsymbol{\psi} \rangle = 0$,可使式(9) 中的最右端项为 0,则无需计算 $\partial k_{\text{eff}} / \partial \sigma$ 。将式 (10)代入正交定解条件中,可得定解的表达 式为:

$$\boldsymbol{\Gamma}^{*} = \boldsymbol{\Gamma}_{0}^{*} - \frac{\left\langle \boldsymbol{\psi} \boldsymbol{F}^{*} \boldsymbol{\Gamma}_{0}^{*} \right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{\psi} \boldsymbol{F}^{*} \boldsymbol{\psi}^{*} \right\rangle} \boldsymbol{\psi}^{*}$$
(11)

因此,一旦求解得到*Ⅰ*^{*},则式(9)可通过 下式计算:

$$I_{\partial \psi} = -\sigma \left\langle \boldsymbol{\Gamma}^* \left(\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \sigma} - \frac{1}{k_{\text{eff}}} \frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial \sigma} \right) \boldsymbol{\psi} \right\rangle \quad (12)$$

1.2 CMFD 加速求解 GFE

应用 GPT 的关键在于高效并准确地求解广 义共轭方程(8),本节详细介绍 C-GFE。

KYLIN- 程序采用二维特征线方法(MOC) 求解中子输运方程与共轭中子输运方程。在采用 二维 MOC 求解广义共轭方程(8)时,需要注意 2个问题: 由于 S^* 可能会出现负值,因此求解 器中应去掉负通量修正项; 由于求解时需在每 个迭代步满足正交定解条件 $(\langle \Gamma^* F \psi \rangle = 0)$ 才能得 到期望的解,因此外迭代时需要进行滤波操作,即:

$$\boldsymbol{L}^{*}\boldsymbol{\Gamma}_{n+1}^{*} = \frac{1}{k_{\text{eff}}}\boldsymbol{F}^{*}\left(\boldsymbol{\Gamma}_{n}^{*} - \frac{\left\langle\boldsymbol{\psi}\boldsymbol{F}^{*}\boldsymbol{\Gamma}_{n}^{*}\right\rangle}{\left\langle\boldsymbol{\psi}\boldsymbol{F}^{*}\boldsymbol{\psi}^{*}\right\rangle}\boldsymbol{\psi}^{*}\right) + \boldsymbol{S}^{*} (13)$$

式中, n 为内迭代次数。

定义第 n 次内迭代源项 (Q_n^*)为:

$$\boldsymbol{Q}_{n}^{*} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \boldsymbol{F}^{*} \left(\boldsymbol{\Gamma}_{n}^{*} - \frac{\left\langle \boldsymbol{\psi} \boldsymbol{F}^{*} \boldsymbol{\Gamma}_{n}^{*} \right\rangle}{\left\langle \boldsymbol{\psi} \boldsymbol{F}^{*} \boldsymbol{\psi}^{*} \right\rangle} \boldsymbol{\psi}^{*} \right) + \boldsymbol{S}^{*} \quad (14)$$

式(13)可改写为:

$$L^{*}\Gamma_{n+1}^{*} = Q_{n}^{*}$$
 (15)

每次迭代时,右端源项 Q_n^* 已知,式(15)通

过二维 MOC 扫描迭代求解,但收敛速度很慢。 为了加速收敛,本研究提出利用 CMFD 方法加速 求解式(15)。CMFD 加速方程可表达为:

 $A^* \Gamma_{n+1/2}^{*,\text{CMFD}} = Q_n^{*,\text{CMFD}}$ (16)

式中, A^* 为 CMFD 方程的中子泄漏、吸收和散射的共轭矩阵; $\Gamma_{n+1/2}^{*,CMFD}$ 为粗网上的广义共轭通量; $Q_n^{*,CMFD}$ 为粗网的中子裂变源项。下一次迭代的初始共轭通量可由下式修正:

$$\boldsymbol{\Gamma}_{n+1,i}^{*,\text{MOC}} = \boldsymbol{\Gamma}_{n+1/2,i}^{*,\text{MOC}} \frac{\boldsymbol{\Gamma}_{n+1/2,p}^{*,\text{CMFD}}}{\sum_{i \in p} \boldsymbol{\Gamma}_{n+1/2,i}^{*,\text{MOC}}}, \quad i \in p \ (17)$$

式中,下标*i*表示二维 MOC 计算的细网格索引; 下标 p表示 CMFD 计算的粗网格索引; $\Gamma_{n+1}^{*,MOC}$ 为 修正后下次跌代求解的初始细网广义共轭通量; $\Gamma_{n+1/2}^{*,MOC}$ 为修正前当前迭代求解得到的细网广义 共轭通量。

C-GFE 的计算步骤如图 1 所示,首先分别求 解式(1)及式(2)得到通量与共轭通量后,初 始化广义共轭通量,采用式(14)更新广义裂变 源项后,进入内迭代;内迭代先利用二维 MOC 扫描计算细网广义共轭通量,再构建 CMFD 方程 计算粗网广义共轭通量后,采用式(17)进行修 正,若前后 2 次修正后的所有细网广义共轭通量 的最大相对误差小于收敛判据,内迭代结束,返 回外迭代;外迭代中的广义共轭通量进行滤波后, 若 2 次滤波后的所有细网广义共轭通量的最大相 对误差小于收敛判据,外迭代结束。



Fig. 1 Flow Chart of C-GFE

2 结果与讨论

本节基于 MOX 燃料栅元问题^[9],使用 KYLIN- 的 GPT 计算响应对核数据的敏感性系 数,以直接扰动法^[2](DPT)计算得到的敏感性 系数作为参考值。响应为²³⁹Pu 单群裂变截面,即:

$$R = \frac{\left\langle \Sigma_{\rm f}^{^{239}\rm{Pu}} \psi \right\rangle}{\left\langle \psi \right\rangle} \tag{18}$$

为了验证 C-GFE 方法的效果, KYLIN- 使用 CMFD 加速与不使用 CMFD 加速 2 种方式进行内迭代。如,在求解²³⁹Pu 单群裂变截面时,如果不使用 CMFD 加速,每次内迭代的次数为 60次;如果使用 CMFD 加速时,内迭代的次数降为 14次,迭代效率提高了 4.3 倍。外迭代次数 2 者一致,因此使用 CMFD 加速迭代时间大大减小。

图 2 为使用 CMFD 加速和不使用 CMFD 加 速时,²³⁹Pu 单群裂变截面对应的广义共轭通量随 中子能量的变化。可以看出,广义共轭通量在某 些能群会出现负解,且使用 CMFD 加速计算与不 使用 CMFD 加速计算得到的广义共轭通量一致, 验证了添加 CMFD 功能的正确性。



表1总结了 MOX 单栅元算例中²³⁹Pu 单群裂 变截面对几个重要核数据的敏感性系数,包括¹H 的总散射截面、²³⁹Pu 的裂变截面与总俘获截面以 及²³⁸U与²⁴⁰Pu 的总俘获截面。在 DPT 方法中, 对每个核数据进行 5%的相对扰动,从表 1 可以 看出,使用 GPT 与 DPT 分析的敏感性系数基本 一致。从表 1 中还可以看到²³⁹Pu 单群裂变截面对 ²³⁹Pu 俘获截面的敏感性系数偏差较大,其原因可 能是由于共振区截面偏差偏大造成。

图 3 展示了²³⁹Pu 单群裂变截面对²³⁹Pu 裂变

与俘获截面敏感性系数随中子能量的变化。可以 看出,GPT与DPT符合良好,且²³⁹Pu裂变截面 与俘获截面扰动对²³⁹Pu单群裂变截面的变化影 响是相反的。

图 4 展示了²³⁹Pu 的裂变截面对¹H 散射截面 敏感性系数随中子能量的变化,¹H 的快群散射截 面扰动对²³⁹Pu 单群裂变截面的影响较大。

表 1 ²³⁹Pu 单群裂变截面对几个重要核数据的 敏感性系数

Tab. 1Sensitivity Coefficients of 239Pu Single-Group
Fission Cross Section with Respect to Several
Important Nuclear Data

核素截面	GPT	DPT	<i>Re</i> /%
¹ H的 Σ_{scat}	0.943	0.945	-0.23
239 Pu 的 $\Sigma_{ m f}$	0.654	0.614	6.51
239 Pu 的 Σ_{cap}	-0.198	-0.216	-8.00
²³⁸ U的 <i>Σ</i> _{cap}	-0.146	-0.147	-0.45
240 Pu的 Σ_{cap}	-0.115	-0.122	-5.10

 Σ_{scat} —总散射截面; Σ_t —裂变截面; Σ_{cap} —总俘获截面; Re—GPT 与 DPT 计算的敏感性系数的相对偏差



- 图 3 ²³⁹Pu 单群裂变截面对 ²³⁹Pu 裂变截面与俘获截面 敏感性系数
- Fig. 3 Sensitivity Coefficient of ²³⁹Pu Single-Group Fission Cross-Section to ²³⁹Pu Fission and Capture Cross-Sections



图 4 ²³⁹Pu 单群裂变截面对 ¹H 散射截面敏感性系数

Fig. 4 Sensitivity Coefficient of ²³⁹Pu Single-Group Fission Cross-Section to ¹H Scattering Cross-Section

3 结束语

本研究提出 C-GFE,通过 CMFD 加速,确保 广义共轭中子输运方程的高效性。通过该方法, 还可以求解反应堆的反应率比率、单群裂变截面 等响应对核数据的敏感性系数,可以显著减少计 算时间,提升效率。数值结果表明,本研究建立 的基于 GPT 与 CMFD 加速算法能够用于核数据 广义敏感性分析。

参考文献:

- [1] 吴屈,彭星杰,唐霄,等.基于 2D/1D 输运程序
 KYCORE的敏感性分析[J].核动力工程 2018, 39(S2): 15-19.
- [2] WU Q, YU J, SHI G, et al. Eigenvalue sensitivity and uncertainty analysis based on a 2-D/1-D whole-core transport code KYADJ[J]. Annals of Nuclear Energy, 2018 (122): 185-192.
- [3] 刘勇,曹良志,吴宏春,等.基于子群共振自屏方法 的特征值隐式敏感性分析[J].核动力工程,2014, 35(S2):87-90.
- [4] CHILDS R L. Generalized perturbation theory using

two-dimensional, discrete ordinates transport theory: ORNL/CSD/TM-127[R]. Tennessee: Oak Ridge National Laboratory, 1980.

- [5] TAKEDA T, KASANO, KITADA T. Sensitivity analysis based on transport theory[J]. Journal of Nuclear Science and Technology, 2006, 43(7): 743-749.
- [6] KENNEDY C, RABITI C, ABDEL-KHALIK H. Generalized perturbation theory–free sensitivity analysis for eigenvalue problems[J]. Nuclear Technology, 2012(179): 169-179.
- [7] WU Q, PENG X, XU F, et al. Generalized sensitivity analysis of responses to nuclear data in 2-D/1-D transport code KYADJ[J]. Progress in Nuclear Energy, 2019(113): 128-134.
- [8] 柴晓明,涂晓兰,芦韡,等.先进中子学栅格程序 KYLIN-2 中特征线方法模块的开发与验证[J].核动力 工程,2016,37(04):154-159.
- [9] AVRAMOVA M, IVANOV K, KOZLOWSKI T, et al. Multi-physics and multi-scale benchmarking and uncertainty quantification within OECD/NEA framework[J]. Annals of Nuclear Energy, 2013(84): 178-196.

(责任编辑:杨灵芳)