

基于抽样方法的核数据敏感性与不确定性分析

蔡周桐¹ 刘晓晶² 张腾飞^{1,2}

1(上海交通大学 国家电投智慧能源创新学院 上海 200240)

2(上海交通大学 核科学与工程学院 上海 200240)

摘要 核数据是核反应堆物理计算结果不确定度的主要来源,研究核数据的不确定性对结果的影响能提高核反应堆物理计算精度,进而保障核反应堆系统经济性与安全性。本文利用核数据抽样工具SANDY对核素截面限制在协方差允许的范围内进行多次抽样扰动,并基于BEAVRS商用压水堆基准题热态零功率堆芯物理模型,结合蒙特卡罗输运计算程序OpenMC计算扰动后的有效增殖因子(k_{eff}),通过拟合 k_{eff} 分布曲线,量化分析评价核数据库中核素截面不确定性对 k_{eff} 的影响。结果表明:在BEAVRS基准题热态零功率下, ^{235}U 的裂变截面最为敏感,敏感性系数为0.45; ^{238}U 的非弹性散射截面不确定性对 k_{eff} 的影响最为显著, k_{eff} 的标准差可达 9.1×10^{-4} 。通过对比计算结果,说明基于SANDY的抽样方法在核数据截面的不确定性分析上具有可行性和适用性。

关键词 核数据, BEAVRS基准题, 有效增殖因子, 不确定性分析, 抽样方法

中图分类号 TL334

DOI: 10.3724/j.0253-3219.2026.hjs.49.250168

CSTR: 32193.14.hjs.CN31-1342/TL.2026.49.250168

Sensitivity and uncertainty analysis of nuclear data based on sampling method

CAI Zhoutong¹ LIU Xiaojing² ZHANG Tengfei^{1,2}

1(College of Smart Energy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

2(School of Nuclear Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 202400, China)

Abstract [Background] Nuclear data has been identified as the primary source of uncertainty in nuclear reactor physics calculations, which directly impacts the predictive accuracy of reactor parameters. Quantitative research on the propagation of these uncertainties is essential to enhance calculation precision, thereby ensuring the economic efficiency and safety of nuclear reactor systems. [Purpose] This study aims to evaluate the impact of nuclear data uncertainties on the effective multiplication factor (k_{eff}) using a sampling-based method and to validate its applicability in complex full-core models. [Methods] Firstly, the nuclear data sampling tool SANDY was employed to perform multiple stochastic perturbations on nuclide cross-sections within the covariance ranges specified in the ENDF-6 format files, and a high-fidelity physics model was constructed based on the BEAVRS commercial pressurized water reactor benchmark at hot zero-power (HZP) conditions. Then, the Monte Carlo transport code OpenMC was utilized to calculate the k_{eff} for each perturbed nuclear database on a high-performance computing cloud platform; to improve computational efficiency, the perturbation module was isolated for parallel execution, and Message passing interface (MPI) technology was implemented to accelerate the OpenMC transport simulations.

国家自然科学基金(No.12175138)、上海市青年科技启明星项目、中核集团领创科研项目资助

第一作者: 蔡周桐, 男, 2000年出生, 2026年毕业于上海交通大学, 现为硕士研究生, 研究领域为核反应堆物理

通信作者: 张腾飞, E-mail: zhangtengfei@sjtu.edu.cn

收稿日期: 2025-04-22, 修回日期: 2026-03-25

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.12175138), Shanghai Rising-Star Program and Lingchuang Foundation of China National Nuclear Corporation

First author: CAI Zhoutong, male, born in 2000, graduated from Shanghai Jiao Tong University in 2026, master student, focusing on nuclear reactor physics

Corresponding author: ZHANG Tengfei, E-mail: zhangtengfei@sjtu.edu.cn

Received date: 2025-04-22, revised date: 2026-03-25

Finally, the resulting k_{eff} distribution was fitted and statistically analyzed to quantify the sensitivity and uncertainty propagation. **[Results]** Results of the sensitivity analysis indicate that the ^{235}U fission cross-section is the most sensitive parameter under the HZP condition of the BEAVRS benchmark, with a sensitivity coefficient of 0.45. The uncertainty analysis reveals that the ^{238}U inelastic scattering cross-section has the most significant impact on k_{eff} , resulting in a standard deviation (σ) of up to 9.1×10^{-4} whilst the ^{235}U fission and ^{238}U capture cross-sections are highly sensitive, their contribution to the overall k_{eff} uncertainty remains moderate due to their relatively small covariance values in the library. **[Conclusions]** The uncertainty analysis workflow based on SANDY and OpenMC proposed in this study is feasible and highly applicable for complex, large-scale reactor geometries, as demonstrated by the BEAVRS full-core benchmark under HZP conditions. The generated perturbation files support both ACE and HDF5 formats, ensuring broad compatibility across different Monte Carlo simulation platforms including OpenMC and MCNP.

Key words Nuclear data, BEAVRS benchmark, Effective multiplication factor, Uncertainty analysis, Sampling methods

近年来,现代数值计算技术飞速发展,加之高性能计算平台的广泛应用,使得构建核反应堆系统内复杂物理过程的数学-物理模型变得更加精确和高效。这种技术进步不仅提升了模拟精度,还大幅缩短了计算时间,从而在安全性与经济性等关键领域为商用核反应堆系统带来了显著优势。同时,模拟精度的提升对数值的不确定性也提出了更高的要求。其中,核数据被普遍认为是影响反应堆分析精度的主要不确定性来源之一^[1]。因此,量化研究核

数据的不确定性传播不仅能够提升核反应堆物理计算精度,还对保障系统安全性和提升经济性具有重要意义。

1 背景介绍

1.1 研究背景

目前国际上广泛使用的 uncertainty 量化和传递方法主要可分为如图1所示两大类。

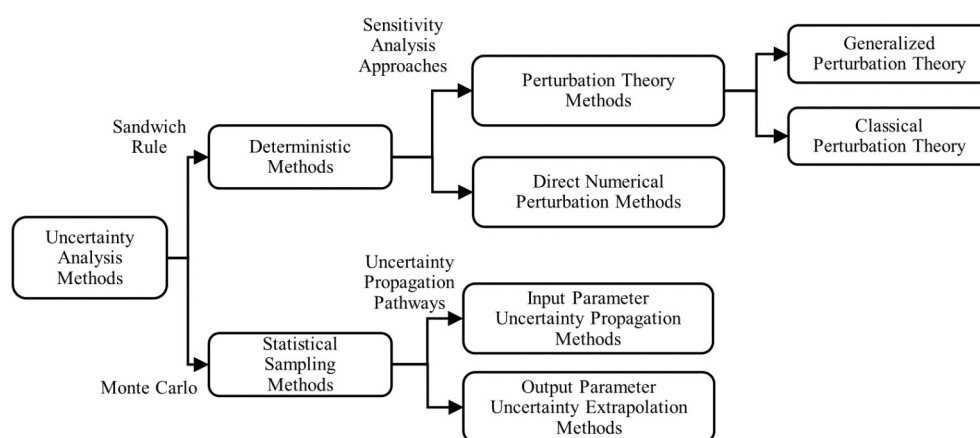


图1 核数据不确定性分析方法分类图
Fig.1 Classification diagram of nuclear data uncertainty analysis methods

第一类是基于相对灵敏度系数的确定论方法。这种方法的基本思想是:基于响应关于输入参数的相对灵敏度系数向量和输入参数的相对协方差矩阵,利用“Sandwich Rule”^[2]方法计算得到响应的相对协方差矩阵。确定论方法的关键在于敏感性分析,广泛使用的方法包括微扰理论方法和直接数值扰动方法。

根据分析对象的不同,微扰理论方法^[3-4]可进一

步划分为经典微扰理论(Classical Perturbation Theory, CPT)和广义微扰理论(Generalized Perturbation Theory, GPT)^[5-6], CPT只用于特征值的敏感性分析计算,而对于其他响应,例如少群均匀化参数、功率分布等的敏感性分析,需要采用GPT方法^[7]。微扰理论的主要优势在于,当模拟系统中响应数目远少于输入参数数目时具有较高效率。然而,对于不同的核反应堆物理计算程序和响应类型,

微扰理论需要建立对应的微扰方程,并根据模拟系统的理论计算模型修改程序源代码以添加所需的计算功能,所以该方法对源程序的依赖和改动大,适用性弱。直接数值扰动方法(Direct Numerical Perturbation Method, DNPM)^[8-10]采用差商求解偏导的方式计算相对灵敏度系数。该方法需要对模拟系统的输入参数人为添加特定大小的扰动,然后记录扰动后的响应以求得相对灵敏度系数。对于不同类型的响应,该方法无需额外的处理步骤,适用性强,并且一直作为基准检验方法,用于验证基于微扰理论的敏感性分析结果的准确性。

第二类是统计抽样方法(Statistical Sampling Method, SSM)^[11-13],根据不确定性传播途径的不同,统计性不确定性分析方法又可以分为:基于输入参数不确定性传播方法和基于输出参数不确定性外推方法^[14]。目前国际上主要采用的方法是基于输入参数不确定性传播方法,其核心思想是:在输入参数的分布范围内选取一定数量的样本点作为模拟系统的输入,执行计算并获得相应的响应值,进而对所有响应样本进行统计分析,以获取响应的不确定度及相关信息,从而实现不确定度量化研究。统计抽样方法是将模拟系统视为“黑匣子”,无需修改源程序,因此具有较强的适用性。然而,该方法对样本数量要求较高,不确定度量化过程相对耗时。

对比分析两类常见的不确定性分析方法可以发现:确定论方法虽然在特定场景下计算效率较高,但其本质上依赖一阶线性近似,在处理大扰动和非线性问题时存在显著局限,且针对不同响应需要额外建模,难以满足跨模型适配的要求。相比之下,统计抽样方法无需依赖低阶近似,能够更准确地捕捉系统非线性及大扰动下的响应特性。虽然该方法对样本数量要求较高,导致计算时间较长,但统计抽样方法的各个计算任务间完全不相关,所以这一局限性可以通过并行计算或云计算等技术手段有效缓解。

此外,针对统计抽样方法计算成本高的问题,近年来基于机器学习的高精度代理模型(Surrogate Models)逐渐受到关注。该方法通过高斯过程回归(Gaussian Process Regression, GPR)、人工神经网络或多项式混沌展开(Polynomial Chaos Expansion, PCE)等算法,利用少量高保真计算样本构建输入参数与响应值之间的数学映射,从而实现对复杂系统响应的快速预测。虽然代理模型在降低计算开销方面具有显著潜力,展现出较强的可行性,但其精度依赖于训练样本的质量与覆盖范围,且在处理高度非线性物理问题时可能存在泛化能力受限的问题。因

此,本文目前仍侧重于通过并行计算技术优化传统抽样方法的效率,以确保分析结果的物理保真度,并将代理模型与现有框架的耦合作为后续研究的方向。

1.2 研究现状

目前,基于统计抽样方法开发的不确定性分析程序已取得一定进展。在国际研究方面,美国橡树岭国家实验室(Oak Ridge National Laboratory, ORNL)开发的SAMPLER程序^[15]作为其SCALE(Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation)代码系统的核心模块,通过统计抽样技术实现了对核反应堆物理计算中截面、裂变产额等参数的不确定性传播分析,并已广泛应用于各类商用压水堆的安全性评估。在欧洲研究领域,比利时核研究中心(SCK·CEN)开发的核数据采样与不确定性分析工具(Sampling Analysis of Nuclear Data with sYstemic uncertainties, SANDY)程序^[16]代表了目前统计抽样方法的重要进展。该程序通过直接解析ENDF-6格式文件中的协方差矩阵来生成扰动核数据库,能够灵活适配多种蒙特卡罗输运程序。此外,英国原子能管理局(United Kingdom Atomic Energy Authority, UKAEA)针对欧洲示范聚变堆(DEMONstration Power Plant, DEMO)开展了大规模的产氚包层(Tritium Breeding Ratio, TBR)不确定性分析研究^[17],进一步验证了统计抽样方法在处理聚变系统复杂核数据不确定性问题中的可靠性。

在国内研究方面,Wan等^[18]基于UNICORN程序实现了基于“两步法”的不确定性传播研究^[19],其本质上采用了统计抽样方法,并通过两次抽样避免了统计误差,但在更换计算模型后仍需重新抽样,适用性仍有待提升。孙静宇等^[20]基于SANDY使用统计抽样方法研究了核数据不确定度对日本3号修改型研究堆(Japan Research Reactor No.3 Modified, JRR-3M)有效增殖因子(Effective Multiplication Factor, k_{eff})计算的影响。然而,研究堆的几何设计相对简单,功率水平较低,其分析过程与商用堆存在一定差异,例如计算方式的优化等。基于上述分析可以发现:使用抽样方法针对商用堆这种复杂几何结构的核数据截面不确定性分析研究较少。同时,在核数据库截面不确定性分析中,避免针对每个应用场景单独建模,并实现对不同类型反应堆系统的统一代码分析,能够减少因重复生成模型而导致的工作量和误差累积。此外,支持OpenMC(Open-source Monte Carlo particle transport code)和MCNP(Monte Carlo N-Particle transport code)等工具的使用,可以对比不同工具下的计算结果,从而为核数据

库截面影响分析提供更加可靠的理论依据。基于研究现状与上述需求,开发一套适用性强的流程具备实际意义,亟需开展相关研究。

本文先使用直接数值扰动方法对典型核素截面进行敏感性分析,以验证 SANDY 可行性。本文基于商用压水堆基准题(Benchmark for Evaluation And Validation of Reactor Simulations, BEAVRS),利用核数据抽样工具 SANDY^[16]在协方差限定范围内对核素截面进行扰动,并结合 OpenMC 计算扰动后的 k_{eff} ,同时编写 Python 脚本量化和展示拟合的 k_{eff} 分布图。为解决多样本计算效率低的问题,本文通过超级计算服务器加速 OpenMC 计算,并开发 Python 脚本解决 SANDY 无法同时生成多个抽样样本的问题,从而显著提升计算效率。

2 理论模型

SANDY 是用于对评价核数据库格式文件(Evaluated Nuclear Data File, ENDF-6)进行读写操作的 Python 包,其输出是一组受扰动的 ENDF-6 格式文件。这种传播不确定性的方法可用于暴力破解不确定性传播,并且适用于任何兼容 ENDF-6 格式文件模型、响应或计算机代码。此外,扰动文件不受任何由于处理生成的隐式影响的约束,例如多组近似、共振自屏或温度效应^[1]。本文首先通过敏感性分析确定了需要关注的核素,随后采用统计抽样方法,并使用 SANDY 与 OpenMC 完成抽样与计算。最后,利用 Python 脚本实现拟合曲线,分析不确定性。

2.1 敏感性分析

为验证 SANDY 在核数据截面扰动中的可行性,本研究先采用直接数值扰动法对关键核素进行敏感性分析,通过对比分析结果以验证该工具对截面扰动的可行性。直接数值扰动方法采用式(1)所示的差商来近似求解微分,获取输出参数的敏感性系数。

$$S(R) = \frac{dR/R}{d\sigma/\sigma} \quad (1)$$

式中: R 表示模型的输出,比如有效增殖因子 k_{eff} ; σ 表示核素的微观截面。

在敏感性分析对象的筛选方面,本研究主要参考了 Hassan 等^[21]针对 BEAVRS 基准题的敏感性研究结论。该研究表明,在热态零功率工况下, ^{235}U 裂变截面与 ^{238}U 俘获截面对有效增殖因子 k_{eff} 的影响占据主导地位。基于此,本文选取了敏感性系数绝对值大于 0.05 且为堆芯关键物质组成的典型核素及其

反应道作为研究对象。同时,为确保直接数值扰动法在计算敏感性系数时能够有效兼顾计算效率与精度,微扰量的选取需平衡线性近似误差与蒙特卡罗计算的数值噪声。依据核数据协方差分布呈现的 3σ 统计特性,本研究将微扰量统一设定为 1%,以确保响应值的变化量显著超过统计涨落,从而获取具有物理意义的敏感性系数。

2.2 抽样原理

SANDY 基于 ENDF-6 格式文件的截面协方差矩阵(MF=33)抽取随机核数据样本。然而,ENDF-102 手册^[22]并未明确声明核反应截面的分布函数类型,但协方差矩阵的数学形式与正态分布的统计特性高度兼容。因此,为了简化统计处理和量化核数据的不确定性,核反应截面通常被假定服从正态分布或近似正态分布。这一假设在蒙特卡罗抽样和其他核数据处理工具中被广泛应用。

本文进一步假设核素截面遵循多元正态分布,其相关性由 ENDF-6 文件中提供的协方差矩阵定义。首先,SANDY 从 ENDF-6 格式文件中提取协方差矩阵 Σ ,并构造多元正态分布 $N(0, \Sigma)$ 。为了从多元正态分布中抽样,首先需要生成一个 $m \times n$ 的矩阵 X :

$$X = \begin{bmatrix} x_1^{(1)} & x_1^{(2)} & \cdots & x_1^{(n)} \\ x_2^{(1)} & x_2^{(2)} & \cdots & x_2^{(n)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_m^{(1)} & x_m^{(2)} & \cdots & x_m^{(n)} \end{bmatrix} \quad (2)$$

式中:每一列都是独立、服从标准正态分布 $N(0, 1)$ 的随机变量; m 为能量点数量; n 是样本数量; $x_i^{(j)}$ 是样本值。

为将 X 转换成服从目标分布 $N(0, \Sigma)$ 的样本 K ,定义一个线性算子 L ,使得 $K = LX$ 。线性算子 L 具有如下两点性质:

1) L 的线性性质可确保分布形状保持不变,且不改变分布的均值,即:

$$E[K] = E[LX] = LE[X] = 0 \quad (3)$$

2) 通过线性代数推导可得:

$$E[KK^T] = E[(LX)(LX)^T] = LE[XX^T]L^T \quad (4)$$

由于 XX^T 是单位矩阵,所以 $E[XX^T] = 1$,即:

$$E[KK^T] = LL^T = \Sigma \quad (5)$$

为了找到符合上式的线性算子 L ,SANDY 使用了特征值分解法:

$$\Sigma = Q\Lambda Q^T, L = QA^{-\frac{1}{2}} \quad (6)$$

式中: Q 为协方差矩阵; Λ 为特征向量矩阵; A 为对应的特征值对角矩阵。

在得到样本 K 后,SANDY将分布均值平移到单位向量,从而得到最终的样本矩阵 P :

$$P = K + 1 \quad (7)$$

因此, P 是一个 $m \times n$ 的矩阵且服从 $N(1, \Sigma)$ 分布。以 j 列为例,如下式所示,每列元素是一个样本,总共有 n 个样本,每个样本由 m 个能量点对应的扰动值组成。

$$p^{(j)} = [p_1^{(j)}, p_2^{(j)}, \dots, p_m^{(j)}]^T \quad (8)$$

2.3 抽样次数

统计抽样方法的关键在于样本量需有效覆盖参数空间。本研究采用 Wilks 公式^[23]来确定满足给定置信水平与概率水平所需的最小抽样次数,其计算公式如下:

$$\beta \leq 1 - \gamma^N - N(1 - \gamma)\gamma^{N-1} \quad (9)$$

式中: β 为置信水平; γ 为概率水平; N 为最小抽样次数。在核工程分析中,通常要求满足“99%/99%”的高可靠性准则。将置信水平 $\beta=0.99$ 与概率水平 $\gamma=0.99$ 代入上述二阶一侧容差限不等式中,通过数值迭代求解可得所需最小样本量 $N=663$ 。因此,本研究取整数663作为理论最小抽样次数。为进一步提高统计分布的稳定性并降低残余随机误差,本文最终选择执行1 000次独立采样计算。

2.4 计算流程

考虑到1 000次抽样的计算量巨大且 SANDY

不支持信息传递接口(Message Passing Interface, MPI)并行,为此将程序中可并行计算的应用扰动部分单独拆分,并基于 ProcessPoolExecutor 在超级计算服务器中同时生成64组不同温度点的紧凑型评价核数据库(A Compact ENDF, ACE)格式文件,并将其转换为第5代分层数据(Hierarchical Data Format version 5, HDF5)格式文件。实验结果表明,设置节点核数为64,每1 000次抽样需要约160的CPU核时,实际时间约2.5 h,显著缩短了计算时间。整体计算流程如图2所示,具体流程可以分为以下三步:

1)抽样阶段:SANDY通过下载ENDF-6格式文件作为输入,并调用Python API实现重建截面、读取矩阵、执行抽样,应用扰动等数据处理过程。最终,SANDY通过get_ace函数生成各个温度点下的ACE文件。

2)计算阶段:使用OpenMC提供的ace-to-hdf5脚本将各组ACE文件转换成对应的HDF5文件,从而替换原先数据库中的HDF5文件。然后,使用OpenMC计算生成替换核数据库后的statepoint文件。

3)统计阶段:利用Python脚本批量读取statepoint文件,并拟合出 k_{eff} 分布图,通过均值和方差进行不确定性量化分析。

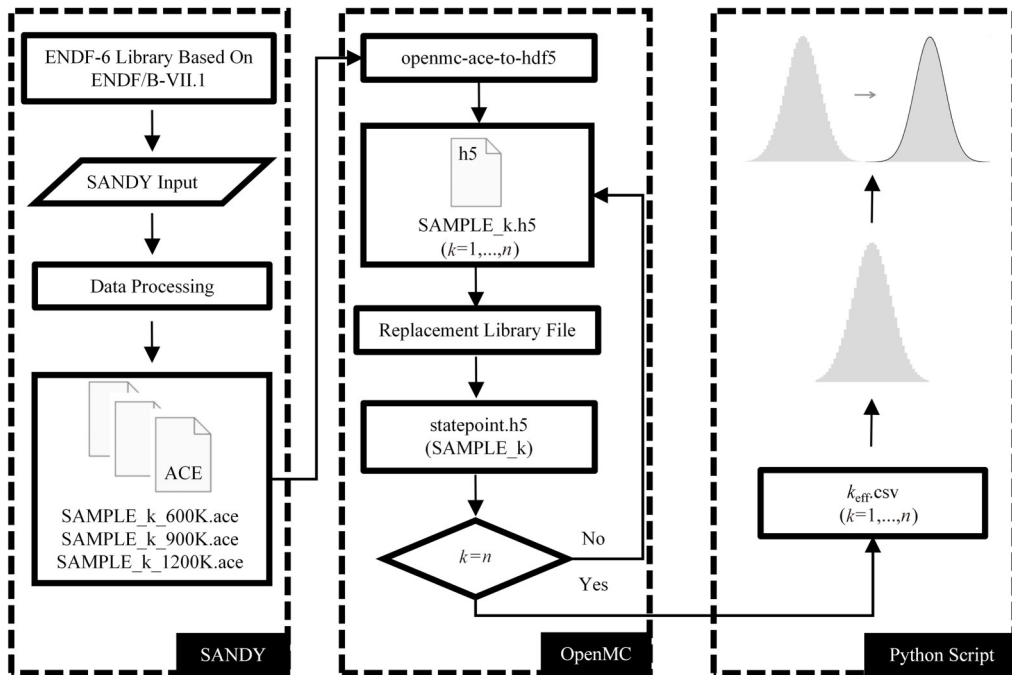


图2 基于SANDY的抽样方法计算流程图
Fig.2 Calculation flowchart of sampling method based on SANDY

3 数值结果

3.1 BEAVRS 基准题

BEAVRS 基准题^[24]是依据实际核电厂构建的商用压水堆堆芯中子学计算模型,在反应堆计算分析工具的验证中具有重要地位。堆芯由 193 个 17×17 型燃料组件组成,其中燃料棒栅元共计 264 个,根据 ^{235}U 的富集度不同分为 3.1%、2.4% 和 1.6% 三种。除燃料栅元外的 25 个栅元分别是仪表管、可燃毒物棒和控制棒,仪表管分散布置在不同位置的组件上,可燃毒物棒的个数和排列与组件位置相关。控制棒可分为功率调节棒和停堆棒,其中功率调节棒分为 A、B、C、D 4 种,停堆棒分为 SA、SB、SC、SD、SE 5 种。

堆芯整体呈 1/4 旋转对称结构,高富集度的燃料组件包围在堆芯四周,中低富集度燃料组件依次间隔排列在堆芯内部,通过 OpenMC 绘制的 BEAVRS 计算模型的几何结构如图 3 所示。

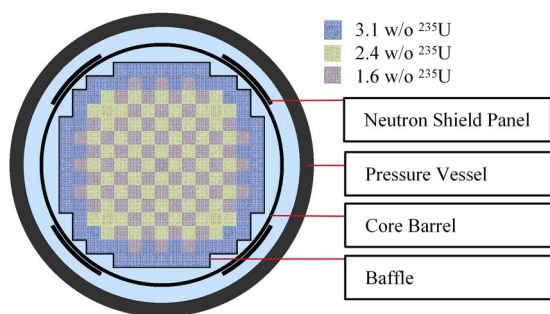


图3 BEAVRS 堆芯几何示意图(彩图见网络版)
Fig.3 Geometry of BEAVRS core (color online)

本文选取控制棒 D 全插入工况开展研究,而非全提棒工况,主要考虑到控制棒的插入会导致堆芯局部中子能谱发生偏移,并产生较强的空间非均匀性,所以选择该工况是为了更全面地测试本文分析流程在复杂工况下的稳健性。此外,该工况也是评估停堆裕量等关键安全参数的重要状态点。在此工况下,设置硼浓度为 902 ppm (parts per million),以计算热零功率 (Hot Zero Power, HZP) 状态下的 k_{eff} 。在数据库选择方面,本文采用了 ENDF/B-VII.1 版本^[25]。虽然目前已有更新的 ENDF/B-VIII.0 或 VIII.1 版本,但为了确保计算结果能与 BEAVRS 基准题原始定义以及 Hassan 等^[22]、唐霄等^[26]的已有研究成果进行严格的对等对比,并准确量化流程验证的可靠性,本文在现阶段维持了数据库版本的一致性。计算时,每代中子数设为 100 万个,总中子代数

为 500 代,略过前 100 代中子以排除初始非活跃代数的影响。计算得出的基准 k_{eff} 值为 $1.001\,73 \pm 0.000\,03$ 。对比之下,唐霄等人在相同工况下计算的 k_{eff} 为 $1.000\,80 \pm 0.000\,04$ 。考虑到 BEAVRS 模型细节差异等因素, 93×10^{-5} 的误差仍处于合理且可接受的范围内。

3.2 敏感性分析

由于直接数值扰动法对扰动量的大小有一定限制,本研究使用 SANDY 提取各核素截面的标准差 σ ,并依据正态分布的 3σ 法则,将扰动值设定为 1%,以确保扰动的合理性。考虑到数值误差湮没问题,OpenMC 计算中设置每代中子数为 100 万个,总中子代数为 500 代,以实现更高精度的计算结果。

Hassan 等^[22]基于微扰理论研究了在全提棒工况下, BEAVRS 基准题中 k_{eff} 关于核素截面的敏感性,结果表明, ^{235}U 裂变截面最为敏感,且敏感性系数为 0.437,说明 k_{eff} 随着裂变截面的增加而增加,且增加的幅度最为剧烈。 ^{238}U 俘获截面也相对敏感,但敏感性系数为负数,表明 k_{eff} 随着俘获截面的增加而减小。基于上述调研结果,并考虑到 BEAVRS 的核燃料组成特性,本文选取了表 1 中所示的几种关键核素截面用于验证研究。通过式(1)计算得到的敏感性系数,其对比结果如图 4 所示。

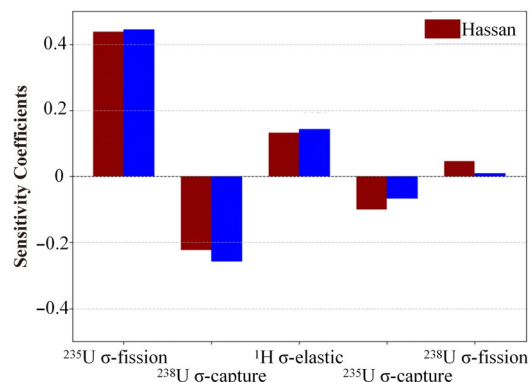


图4 BEAVRS 典型核数据截面敏感性系数柱形图(彩图见网络版)

Fig.4 Grouped bar chart of BEAVRS typical nuclear data cross-section sensitivity coefficient (color online)

表 1 记录了各截面扰动后具体的 k_{eff} 值和敏感性系数,通过对比 Hassan 计算的敏感性系数可以看出,敏感性系数的大小趋势基本一致,但由于工况存在轻微差异,数值上也有所不同,这种差异在合理范围内。因此, SANDY 对截面扰动的可行性得到了验证。

表1 k_{eff} 和敏感性系数计算结果
Table 1 Calculation results of k_{eff} and sensitivity coefficient

截面类型 Type of cross-section	有效增殖因子 Effective multiplication factor	敏感性系数 Sensitivity coefficient	参考的敏感性系数 Reference sensitivity coefficient
^{235}U 裂变截面 ^{235}U fission cross-section	1.006 23±0.000 04	0.45	0.437
^{238}U 俘获截面 ^{238}U capture cross-section	0.999 15±0.000 04	-0.257	-0.223
^1H 弹性散射截面 ^1H elastic scattering cross-section	1.003 28±0.000 04	0.155	0.132
^{235}U 俘获截面 ^{235}U capture cross-section	1.001 06±0.000 05	-0.067	-0.100
^{238}U 裂变截面 ^{238}U fission cross-section	1.001 83±0.000 04	0.01	0.046

3.3 不确定性分析

考虑到1 000次应用OpenMC所需的计算量很大,因此将每一代中子的数量、总中子代数和 inactive 代数分别调整为20万、100代和20代,同时控制棒插入情况和硼浓度维持不变,最终计算得到当前设置下的基准 k_{eff} 变为1.001 29±0.000 23。

经过实验可得,每1 000次抽样计算所需的CPU核时约为4 000。为了减少实际计算时间,使用超级计算服务器中OpenMC支持的MPI并行技术完成计算任务。挑选的4种核素截面的不确定性分布如图

5所示。表2记录了经过抽样计算后,四种截面的不确定性分布的均值与标准差。

结果表明,尽管 ^{235}U 裂变截面和 ^{238}U 俘获截面的敏感性系数要显著高,但不确定性却与 ^{235}U 俘获截面相差不大,与Hassan等^[22]的研究结果一致。值得注意的是, ^{238}U 的非弹性散射截面的敏感性系数极小(<0.01),但其不确定性分布的标准差却相对较大,约为 1×10^{-3} 。原因在于核素敏感性高并不意味着核素截面标准差也高,以 ^{235}U 裂变截面和 ^{238}U 非弹性散射截面为例,两个截面的标准差分布图如图6所示,可以发现, ^{238}U 的非弹性散射截面的标准差整

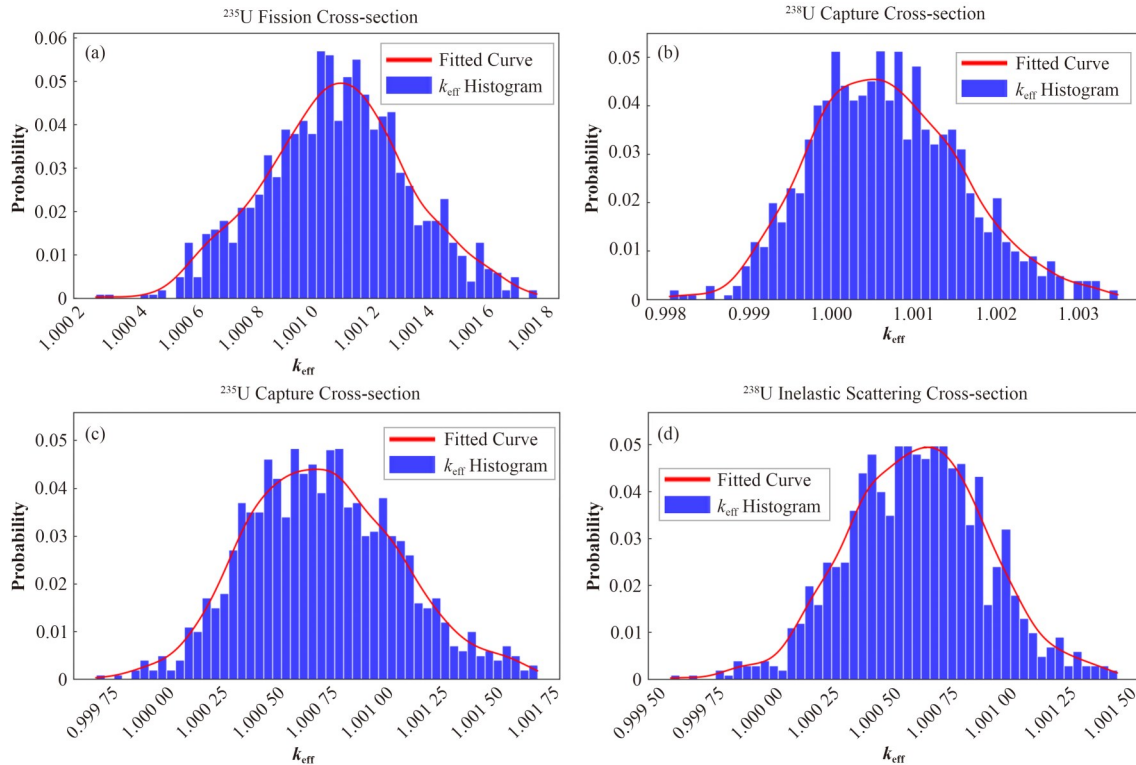


图5 BEAVRS典型核数据截面不确定性分布(彩图见网络版)
Fig.5 Uncertainty distributions of BEAVRS typical nuclear data cross-section (color online)

表2 4种截面的不确定性分布的均值与标准差
Table 2 Mean and standard deviation of uncertainty distributions for four cross-sections

截面类型 Type of cross-section	均值 Mean value	标准差 Standard deviation / 10^{-4}
^{235}U 裂变截面 ^{235}U fission cross-section	1.001 09	2.5
^{238}U 俘获截面 ^{238}U capture cross-section	1.000 62	3.0
^{235}U 俘获截面 ^{235}U capture cross-section	1.000 72	3.4
^{238}U 非弹性散射截面 ^{238}U inelastic scattering cross-section	1.000 67	9.1

体上确实明显大于 ^{235}U 的裂变截面,因此会出现核素截面高敏感性但低不确定性的情况。因此,基于SANDY的抽样方法在研究核数据不确定性对商用堆的影响上具有可行性。

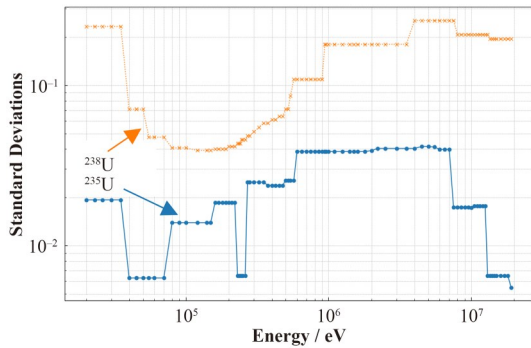


图6 不同能量下的 ^{235}U 裂变截面和 ^{238}U 非弹性散射截面标准差对比(彩图见网络版)

Fig.6 Comparison of standard deviation of ^{235}U fission cross-section and ^{238}U inelastic scattering cross-section at different energies (color online)

3.4 适用性分析

在前述针对BEAVRS基准题热态零功率工况的分析基础上,本研究提出的不确定性分析流程在跨工具协作与多场景扩展方面展现出较强的通用性。从方法论角度看,统计抽样法将物理模型视为“黑匣子”,其有效性并不依赖于特定的堆芯几何或运行状态。通过SANDY工具包,本流程能够直接处理ENDF-6格式的原始评价核数据,并在协方差矩阵(MF=33)允许的范围内生成受扰动的核数据样本。这意味着,不确定性的源头,即核素截面的分布特性,在不同运行工况下是具有一致性的。

SANDY的get_ace函数支持在数据处理阶段引入特定的温度参数,从而批量生成对应不同温度点(如功率工况下的燃料平均温度或冷却剂温度)的扰动ACE文件,因此,针对温度变化工况,本流程具有良好的适配能力。这一特性使得该流程不仅能处理热态零功率下的等温工况,也能为变温工况下的不确定性分析提供精确的输入数据。由于生成的扰动库兼容HDF5与ACE格式,本方法可迁移至MCNP等程序,具备较强的跨平台适配性。

需要明确的是,本文目前的定量分析结论主要

基于热态零功率工况。在实际运行的功率工况下,由于存在多普勒反馈及慢化剂密度反馈等复杂的多物理场耦合机制,核素截面的敏感性系数及不确定性传播路径会受到能谱硬化或软化的影响而发生偏移。尽管如此,本研究所构建的计算分析框架通过统计抽样传播输入参数不确定性,在处理高维、非线性系统时依然具有可行性,所以在方法论层面并不受特定物理状态的限制。未来研究可直接沿用此分析架构,结合OpenMC的多物理场耦合接口,进一步探讨功率反馈效应与核数据不确定性之间的非线性演化规律,从而实现对全功率运行工况下安全裕量的更精准量化。

4 结语

本文介绍了一种基于SANDY的核数据截面不确定性分析流程,并以商用压水堆基准题BEAVRS为例,验证了该方法在复杂几何下的可行性并说明了其适用性。研究通过直接数值扰动方法对选定的关键核素进行了敏感性分析,结果表明在BEAVRS基准题热态零功率工况下, ^{235}U 的裂变截面最为敏感,敏感性系数为0.45。随后在截面协方差允许范围内开展的抽样计算发现, ^{238}U 的非弹性散射截面不确定性对 k_{eff} 影响最显著,其标准差可达 9.1×10^{-4} 。研究表明,该流程能够实现对核数据库的扰动,且生成的扰动文件能够适配OpenMC、MCNP等多种蒙特卡罗程序,支持跨模型及多工况分析。

虽然本文通过验证说明了基于SANDY的抽样方法在商用堆分析中的可行性,但目前研究主要聚焦于研究发现和对结果的总结,仍存在一定的局限性。本文关于参数不确定性的结论主要基于热态零功率工况下的分析结果,尚未充分讨论其不同运行工况(如功率工况或温度变化条件)下的适用性。考虑到功率工况下存在复杂的多物理场耦合效应,未来研究需引入热工反馈等模块,进一步评估核数据不确定性在含反馈效应系统中的传播特性。

此外,不确定性传播通常需要大量样本以获得稳定的统计分布,虽然本文通过并行计算缓解了计算压力,但对于燃耗计算等复杂任务,计算成本依然是一个重要挑战。后续研究可在背景介绍中进一步

讨论并引入基于机器学习的高精度代理模型,探讨利用该类模型降低计算成本的潜在可行性与局限性。同时,针对本文未使用更新版本 ENDF/B-VIII.0 或 VIII.1 数据库的情况,未来可开展不同版本核数据库的对比分析,以更全面地评估核数据质量对反应堆物理计算精度的影响。综上所述,本文建立的流程为复杂核能系统的不确定性量化提供了有力工具,而多物理场耦合与智能代理模型的引入将是后续研究的核心方向。

作者贡献声明 蔡周桐负责论文初稿编写,建模和验证,分析解释数据;刘晓晶负责研究思路,对文章的知识性内容作批评性审阅;张腾飞负责提出理论指导,写作指导和审阅,研究资金获取。

参考文献

- Fiorito L. Sandy docs[EB/OL]. [2024-08-09]. <http://luca-fiorito-11.github.io/sandy-docs/index.html>.
- Cacuci D G. Sensitivity and uncertainty analysis[M]. Vol.1: Theory. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 2003. DOI: 10.1201/9780203494592.
- Rearden B, Petrie L, Jessee M. SAMS: Sensitivity analysis module for SCALE[R]. Oak Ridge: Oak Ridge National Laboratory, 2009. DOI: 10.2172/972173.
- Pusa M. Incorporating sensitivity and uncertainty analysis to a lattice physics code with application to CASMO-4[J]. Annals of Nuclear Energy, 2012, **40**(1): 153–162. DOI: 10.1016/j.anucene.2011.10.013.
- Jessee M, Williams M, Dehart M. Development of generalized perturbation theory capability within the SCALE code package[C]//Proceedings of M&C 2009. Saratoga Springs, NY, 2009. DOI: 10.13140/2.1.2530.1448.
- Pusa M. Adjoint-based sensitivity and uncertainty analysis of lattice physics calculation with CASMO-4[C]//International Conference on the Physics of Reactors (PHYSOR 2014). Kyoto, Japan, 2014.
- 万承辉. 核反应堆物理计算敏感性和不确定性分析及其在程序确认中的应用研究[D]. 西安: 西安交通大学, 2018.
WAN Chenghui. Study on sensitivity and uncertainty analysis of nuclear reactor physics calculation and its application in code validation[D]. Xi'an: Xi'an Jiaotong University, 2018.
- Ball M R, Novog D R, Luxat J C. Analysis of implicit and explicit lattice sensitivities using DRAGON[J]. Nuclear Engineering and Design, 2013, **265**: 1–12. DOI: 10.1016/j.nucengdes.2013.07.011.
- Ball M R. Uncertainty analysis in lattice reactor physics calculations[D]. Canada: McMaster University, 2012.
- Wieselquist W, Zhu T, Vasiliev A, *et al.* PSI methodologies for nuclear data uncertainty propagation with CASMO-5M and MCNPX: results for OECD/NEA UAM benchmark phase I[J]. Science and Technology of Nuclear Installations, 2013: 549793. DOI: 10.1155/2013/549793.
- Helton J, Davis F. Sampling-based methods for uncertainty and sensitivity analysis[R]. New Mexico: Sandia National Laboratories, 2000. DOI: 10.2172/759450.
- Helton J C, Davis F J. Illustration of sampling-based methods for uncertainty and sensitivity analysis [J]. Risk Analysis, 2002, **22**(3): 591 – 622. DOI: 10.1111/0272-4332.00041.
- Helton J C, Johnson J D, Sallaberry C J, *et al.* Survey of sampling-based methods for uncertainty and sensitivity analysis [J]. Reliability Engineering & System Safety, 2006, **91**(10–11): 1175–1209. DOI: 10.1016/j.ress.2005.11.017.
- 彭翠媛, 胡梦岩, 熊青文, 等. 反应堆多物理场耦合计算中的不确定性研究概述[J]. 核科学与技术, 2024, **12**(1): 36–51. DOI: 10.12677/nst.2024.121005.
PENG Cuiyuan, HU Mengyan, XIONG Qingwen, *et al.* Overview of uncertainty research in coupled calculations of multiphysics fields in reactors[J]. Nuclear Science and Technology, 2024, **12**(1): 36–51. DOI: 10.12677/nst.2024.121005.
- Williams M, Wiarda D, Smith H, *et al.* Development of a statistical sampling method for uncertainty analysis with SCALE[C]//Proceedings of M&C 2012. La Grange Park: American Nuclear Society, Inc., 2012.
- Fiorito L, Žerovnik G, Stankovskiy A, *et al.* Nuclear data uncertainty propagation to integral responses using SANDY[J]. Annals of Nuclear Energy, 2017, **101**: 359–366. DOI: 10.1016/j.anucene.2016.11.026.
- Packer L, Gilbert M R, Diez C J, *et al.* Statistical analysis of tritium breeding ratio deviations in the DEMO due to nuclear data uncertainties[J]. Applied Sciences, 2021, **11**(11): 5234. DOI: 10.3390/app11115234.
- Wan C H, Cao L Z, Wu H C, *et al.* Code development for eigenvalue total sensitivity analysis and total uncertainty analysis[J]. Annals of Nuclear Energy, 2015, **85**: 788–797. DOI: 10.1016/j.anucene.2015.06.036.

- 19 Wan C H, Cao L Z, Wu H C, *et al.* Uncertainty analysis for the assembly and core simulation of BEAVRS at the HZP conditions[J]. Nuclear Engineering and Design, 2017, **315**: 11 – 19. DOI: 10.1016/j. nucengdes. 2017. 02.020.
- 20 孙静宇, 马纪敏. 核数据引起的研究堆有效增殖因子计算不确定度量化的研究[J]. 强激光与粒子束, 2024, **36**(9): 124–130. DOI: 10.11884/HPLPB202436.230353.
- SUN Jingyu, MA Jimin. Quantification of calculated effective multiplication factor uncertainty caused by nuclear data in research reactor[J]. High Power Laser and Particle Beams, 2024, **36**(9): 124 – 130. DOI: 10.11884/HPLPB202436.230353.
- 21 Hassan M. Sensitivity and uncertainty analysis of BEAVRS benchmark[J]. Arab Journal of Nuclear Sciences and Applications, 2021, **54**(1): 151 – 161. DOI: 10.21608/ajnsa.2020.38566.1392.
- 22 Herman M, Trkov A. ENDF-102 manual: data formats and procedures for the evaluated nuclear data file ENDF-6 [R]. New York: Brookhaven National Laboratory, 2009.
- 23 Wilks S S. Determination of sample sizes for setting tolerance limits[J]. The Annals of Mathematical Statistics, 1941, **12**(1): 91–96. DOI: 10.1214/aoms/1177731788.
- 24 Horelik N, Herman B, Forget B, *et al.* Benchmark for evaluation and validation of reactor simulations (BEAVRS) [C]//Proceedings of International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2013). Sun Valley, ID, 2013: 2986–2999.
- 25 Macfarlane R E. Code system for producing pointwise and multigroup neutron and photon cross-sections from ENDF/B data[R]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2000.
- 26 唐霄, 梁金刚, 王侃, 等. 基于 BEAVRS 全堆基准题的 RMC 临界计算验证[J]. 核动力工程, 2014, **35**(S2): 235–238. DOI: 10.13832/j.jnpe.2014.S2.0235.
- TANG Xiao, LIANG Jingang, WANG Kan, *et al.* Verification of RMC critical calculation based on BEAVRS full-stack benchmark problem[J]. Nuclear Power Engineering, 2014, **35**(S2): 235 – 238. DOI: 10.13832/j.jnpe.2014.S2.0235.