



·蒙特卡罗方法及其应用·

基于 Dakota 的燃料棒设计验证不确定度研究*

许多挺, 金鑫, 卫小艳, 刘琥瀚, 朱亚楠

(中广核研究院有限公司 反应堆工程软件研究所, 广东 深圳 518026)

摘 要: 燃料棒设计验证是评价燃料棒在反应堆内运行时安全性能的过程, 其中输入参数的不确定度对评价结果有非常重要的影响。为了系统研究燃料棒设计验证的不确定度, 使用 Dakota 中蒙特卡罗与拉丁超立方的非参数抽样方法, 结合燃料棒性能分析软件开展了燃料棒设计验证计算, 并与传统的不确定度计算方法进行了比较。结果表明, 传统方法未充分考虑输入参数的不确定度, 导致内压准则在正常运行条件下容易受到挑战, 统计性的抽样方法弥补了这一缺陷, 获得了较大的安全裕量, 为燃料棒安全性以及经济性的提升提供了理论依据; 同时, 2 种抽样方法所获得的燃料温度计算结果较传统方法更加具有参考意义; 对于包壳腐蚀准则以及包壳应变准则, 由于不确定度输入参数选取得当, 抽样方法与传统方法的计算结果无明显区别。因此, 基于非参数抽样的统计法对于评价燃料棒在反应堆内的安全性能更加具有实用性。

关键词: 燃料棒; 不确定度; 非参数抽样; 蒙特卡罗; 拉丁超立方; Dakota

中图分类号: TB9 文献标志码: A doi: 10.11884/HPLPB202234.210298

Uncertainty research of fuel rod design verification based on Dakota

Xu Duoting, Jin Xin, Wei Xiaoyan, Liu Xiaohan, Zhu Yanan

(China Nuclear Power Technology Research Institute Co., Ltd., Shenzhen 518026, China)

Abstract: Fuel rod design verification is the evaluation process of fuel rod safety performance during operation in reactor, in which the uncertainty of input parameters has important effect on evaluation results. To study the uncertainty systematically, fuel rod performance analysis software has been coupled with Dakota software to carry out fuel rod design verification, the results of nonparametric Monte Carlo and Latin Hypercube Sampling have been compared with those of traditional method. It turns out that the fuel rod inner pressure criterion is vulnerable to be under challenge for the reason of input uncertainty under consideration by traditional method. The defects can be made up by statistical nonparametric sampling, by which a larger safety margin is obtained, and a theoretical basis for fuel rod safety and economic performance enhancement is provided. Meanwhile, the temperature calculation result obtained by two sampling methods can be more referential compared with traditional method. For the cladding corrosion and strain criterion, the results of sampling methods and traditional method show no significant difference, for the reason that the uncertain input parameters are selected suitably. In conclusion, the statistical method based on nonparametric sampling can be more practically significant for safety performance evaluation of fuel rod in operation.

Key words: fuel rod; uncertainty; nonparametric sampling; Monte Carlo sampling; Latin Hypercube Sampling; Dakota software

为保证核电站的安全运行, 在燃料棒设计验证过程中, 必须对燃料芯块温度等关键参数进行分析, 确保其运行不超过设计准则。燃料棒的设计验证采用确定性软件进行计算, 但是该计算软件的输入参数和采用的物理模型都存在不确定度, 需要对其进行正确的评定, 这对预测燃料棒失效、提高燃料经济性具有重要意义。在工程应用中, 通常使用确定性的方法考虑输入参数的不确定度^[1-2], 而统计方法正越来越多地应用到反应堆安全评价中^[3-6]。近年来, 有学者使用统计方法对燃料棒的性能分析开展了不确定度研究^[7-11], 相关企业和研究机构也针对燃料棒性能分析软件进行了不确定度分析功能的开发, 例如法国 AREVA 公司的 GALILEO 软件、美国西屋公司的 PAD 软件、美国西北太平洋国家实验室的 FRAPCON 软件等。

使用不确定度工具软件评价不确定度已成为一种发展趋势, 近年来, Dakota 软件已广泛地应用于核能领域的

* 收稿日期: 2021-07-19; 修订日期: 2021-09-09
联系方式: 许多挺, xuduoting411767430@163.com。

各个方向,例如事故分析^[12-14]、堆芯物理分析^[15]的不确定度研究。本文将 Dakota 软件与燃料棒性能分析软件相耦合,通过非参数抽样对燃料棒设计验证不确定度进行了研究,并与传统方法的计算结果进行了比较。

1 软件介绍

1.1 燃料棒性能分析软件

开展燃料棒设计验证所用的性能分析软件由中广核研究院自主研发,其主要功能为根据燃料棒制造参数和辐照功率史信息来模拟燃料棒的堆内辐照行为。通过分析软件输出结果,可以判断燃料棒在寿期内是否满足设计准则,简化的计算流程如图 1 所示。

1.2 Dakota 软件

Dakota 软件是由美国桑迪亚国家实验室开发的,经过优化已广泛应用于结构分析、流体力学计算、非线性动力学、传热学等领域,其主要功能包括参数分析、实验设计、不确定度量化等。Dakota 最简单和常见的使用方法是与外部软件建立松耦合关系,数据通过文件形式在 2 个软件之间进行交互。Dakota 与燃料棒性能分析软件的耦合关系如图 2 所示。

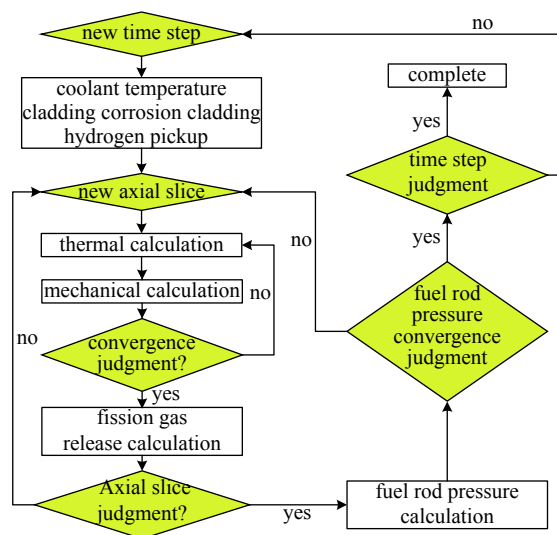


Fig. 1 Calculation flow of fuel rod performance analysis software

图 1 燃料棒性能分析软件计算流程框图

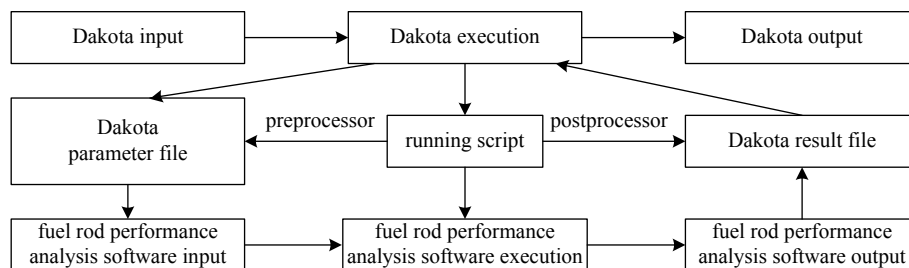


Fig. 2 Coupling relationship between Dakota and fuel rod performance analysis software

图 2 Dakota 与燃料棒性能分析软件之间的耦合关系

2 计算方法

2.1 计算内容

本文计算所采用的数据为 CPR1000 堆型燃料棒设计验证的名义值,燃料棒设计验证准则包括 4 个方面。

(1)内压准则:由于裂变气体释放和初始充压所引起的燃料棒内压须小于使得芯块-包壳间隙增加或者重新打开的极限内压;(2)燃料温度准则:在 II 类工况下,燃料最高温度需低于燃料熔点,考虑了不确定度的限值为 2590 ℃;(3)包壳腐蚀准则:稳态运行工况下,包含不确定性的氧化层厚度需小于 100 μm;(4)包壳应变准则:在 II 类工况下,瞬态功率波动引起的总的应变增加不能超过 1%。

2.2 不确定输入

开展燃料棒设计验证需考虑的不确定输入参数主要分为 2 类,即燃料棒制造参数和模型参数。分布类型主要有:(1)均匀分布,包括芯块直径、芯块孔隙率、包壳外径、包壳内径、冷态气腔长度、芯块富集度、活性段长度、芯块烧结引起的密度变化、包壳腐蚀模型等;(2)正态分布,包括芯块热导率模型、芯块固体肿胀模型、包壳蠕变模型等。同时,还需要考虑输入参数之间的相关性,例如在燃料棒总长不变的条件下,冷态气腔长度与燃料棒活性段长度呈负相关。

当涉及到的输入参数信息不完备时,根据最大信息熵原理确定分布类型,表达式为

$$H(X) = - \sum_{x \in \mathcal{X}} p_i(x) \lg(p_i(x)) \quad (1)$$

式中: $H(X)$ 为信息熵; $p_i(x)$ 为事件 x_i 的概率。例如,已知输入参数上下限,可估计为矩形分布,以最大限度地考虑随机变量的不确定性,此时 $H(X)$ 取得最大值。

2.3 传统方法

工程上广泛采用平方和开平方方法(SRSS)来进行不确定度的评价。SRSS 方法的主要思想是分析输入参数取极值时输出参数的取值,是一种保守的估算方法,优点是计算量小,过程简单,表达式为

$$\Delta X = \sqrt{\sum_i (X_{nom} - X_i)^2} \quad (2)$$

式中: ΔX 为总的 uncertainty; X_{nom} 为名义工况下计算的设计参数; X_i 为考虑不确定变量 i 计算的设计参数。总的 uncertainty 为每个变量对于总的 uncertainty 的贡献相加。

在进行燃料棒设计验证计算时,传统方法并不考虑所有输入参数的 uncertainty,而是依据相关理论和经验考虑部分参数的 uncertainty,例如在计算极限内压时,仅考虑燃料肿胀以及包壳蠕变的不确定性等。

2.4 MC 抽样与拉丁超立方抽样

Dakota 软件 uncertainty 量化功能中的抽样方法包含蒙特卡罗(MC)抽样方法与拉丁超立方抽样(LHS)方法。其中蒙特卡罗抽样方法为根据输入参数的分布特征进行随机抽样,而拉丁超立方抽样方法涉及到分层抽样理念,在抽样次数足够多的情况下,精度高,方差小。

满足特定容忍区间的最小抽样数目由 Wilks 公式确定,它保证了计算结果有意义。但是通常情况下,需要增加抽样次数以保证计算的可靠性。本文使用 Dakota 软件中递增抽样的方法,逐次增加抽样次数,通过比较不同抽样次数计算结果的平均值来确定最终抽样次数。名义工况下,抽样次数的确定过程如图 3 所示,对于预测结果平均值,使用 LHS 方法可在样本较少时得到收敛的结果,而使用 MC 抽样方法在抽样次数较少的区间,其计算结果会有较大波动,随着抽样次数的增加而逐渐收敛。为了便于不同方法的比较并兼顾计算效率,在计算中统一将抽样次数设定为 960 次。

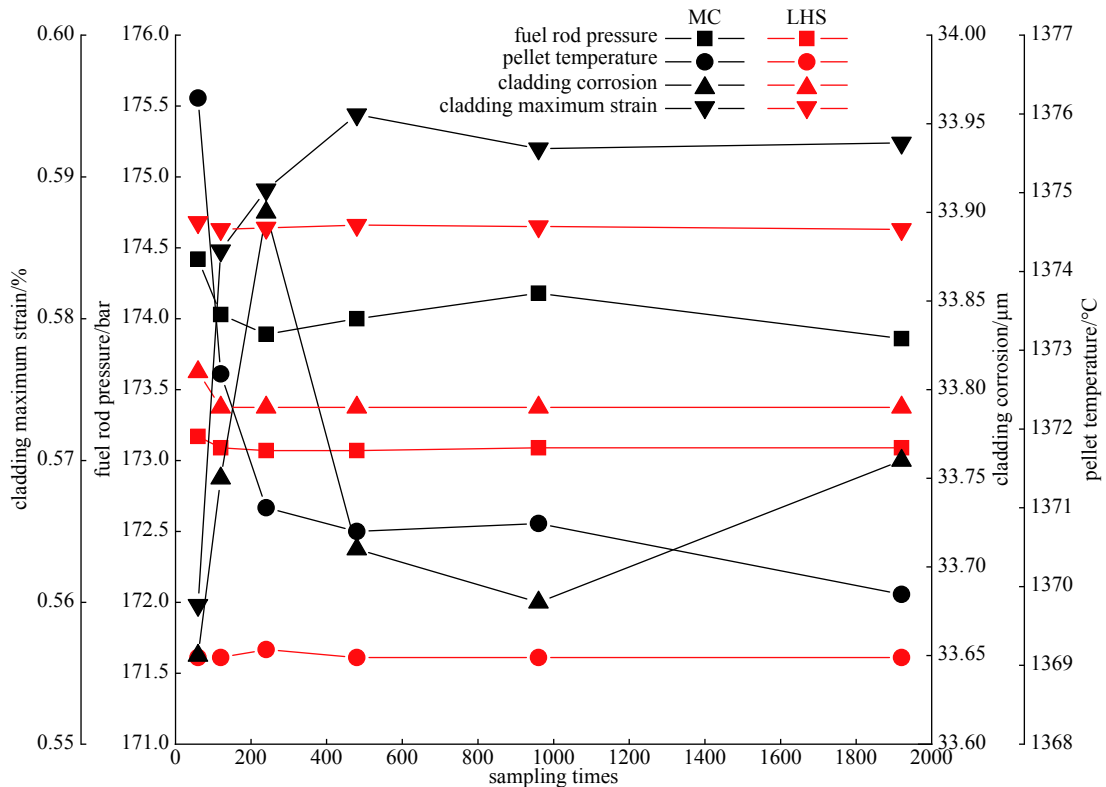


Fig. 3 Sampling frequency determination process

图 3 抽样次数确定过程

2.5 分位数区间估计

在大样本的情况下,可利用样本 p 分位数 ζ_p 的渐进正态性,构成置信区间。假设 $X_{(1)} \leq \dots \leq X_{(n)}$ 为样本次序统计量,则分布函数 $F(X_{(k)})$ 为区间 $(0, 1)$ 均匀分布的 $\frac{k}{n}$ 分位数, $\frac{\sqrt{n}(nF(X_{(k)}) - k)}{\sqrt{k(n-k)}}$ 渐进正态 $N(0, 1)$ 分布^[16]。

对于单侧置信区间上限,下式成立

$$P\{\xi_p \geq X_{(k)}\} = P\{p \geq F(X_{(k)})\} = P\left\{\frac{\sqrt{n}(nF(X_{(k)}) - k)}{\sqrt{k(n-k)}} \leq \frac{\sqrt{n}(np - k)}{\sqrt{k(n-k)}}\right\} \approx \Phi\left\{\frac{\sqrt{n}(np - k)}{\sqrt{k(n-k)}}\right\} \quad (3)$$

而 k 应该满足下式

$$\frac{\sqrt{n}(np - k)}{\sqrt{k(n-k)}} \leq u \quad (4)$$

式中: n 为抽样次数; p 为用户定义的分位数; k 为样本次序统计量的排位; u 为 95% 置信水平确定的标准正态分布的分位数, 即 -1.645, 满足式 (4) 的最小正整数 k 即为所求。当 $n=960, p=0.95$ 时, $k=922$, 即第 922 个最小值为所求。同理, 对于 0.05 分位数单侧置信区间下限, 第 38 个最小值为所求。

3 计算结果

3.1 抽样结果

典型的抽样结果如图 4 所示。图中芯块孔隙率为均匀分布, 使用 MC 方法抽样时, 当抽样次数为 60 次时, 会导致在部分区间没有取值, 当抽样次数增加至 960 次时, 输入参数的均匀性分布得以体现; 使用 LHS 方法抽样时, 不同的抽样次数均可以较好地展现出参数的均匀分布特性。该结果展现出了分层抽样的优势, 即在各个等概率样本区间取到相同的样本数量。

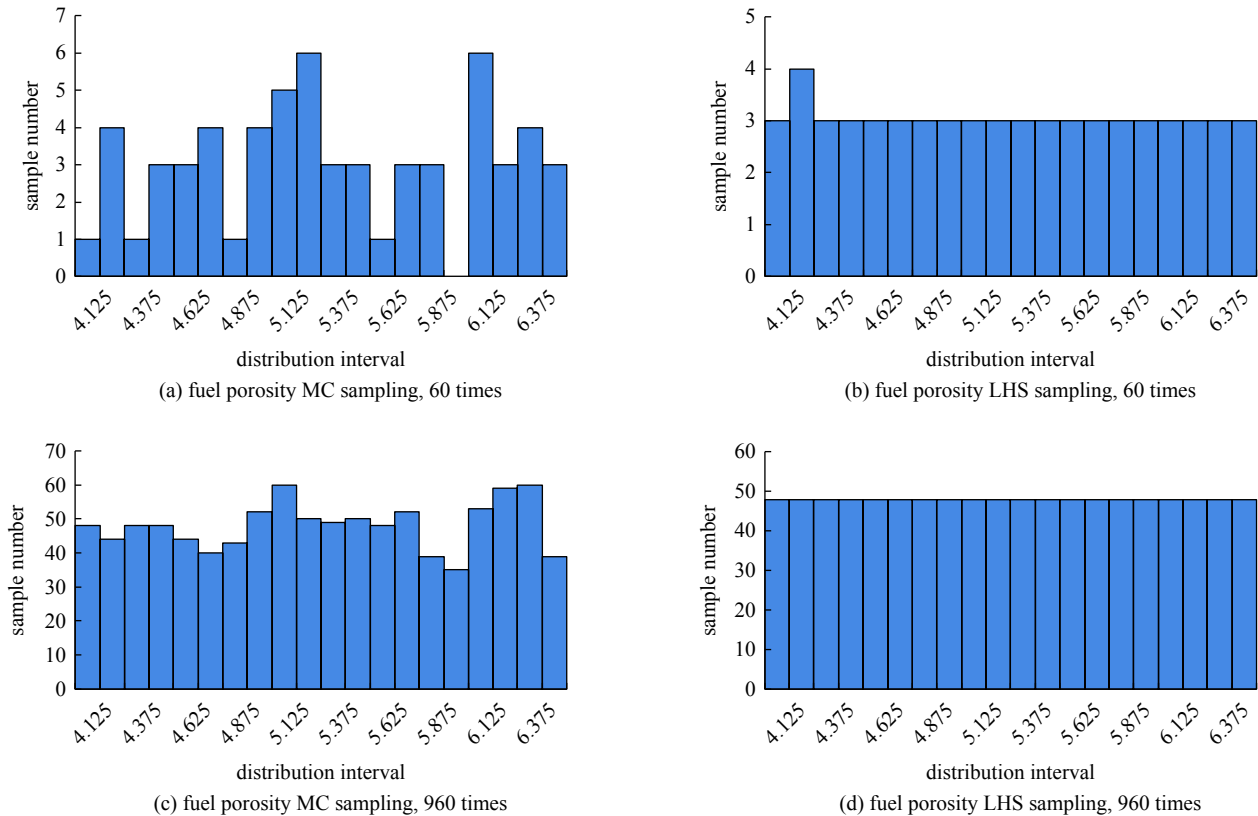


Fig. 4 Sampling results

图 4 抽样结果

3.2 燃料棒设计验证结果

使用 MC 抽样法和 LHS 方法得到的燃料棒设计验证计算结果如图 5 所示。图 5(a) 为燃料棒内压准则验证结果, 由 SRSS 方法得到的燃料棒内压裕量仅为 0.048 MPa, 成为影响燃料棒正常运行的首要因素, 而使用 MC 抽样方法和 LHS 方法可以得到 0.991 MPa 和 0.967 MPa 的安全裕量, 在很大程度上保证了不超过设计准则。在 SRSS 方法中, 计算燃料棒内压所考虑的不确定度包含芯块外径、包壳内径、裂变气体释放模型、芯块烧结引起的密度变化以及冷态气腔长度, 计算极限压力所考虑的不确定度包含燃料肿胀模型以及包壳蠕变模型; 但使用非参数抽样方法考虑大范围输入参数的不确定性后, 获得的内压裕量较大, 这表明燃料棒的正常运行不会受到内压的威胁, 燃料棒可采用更加灵活的运行方式, 为获取燃料的经济性提供了有效的理论依据。

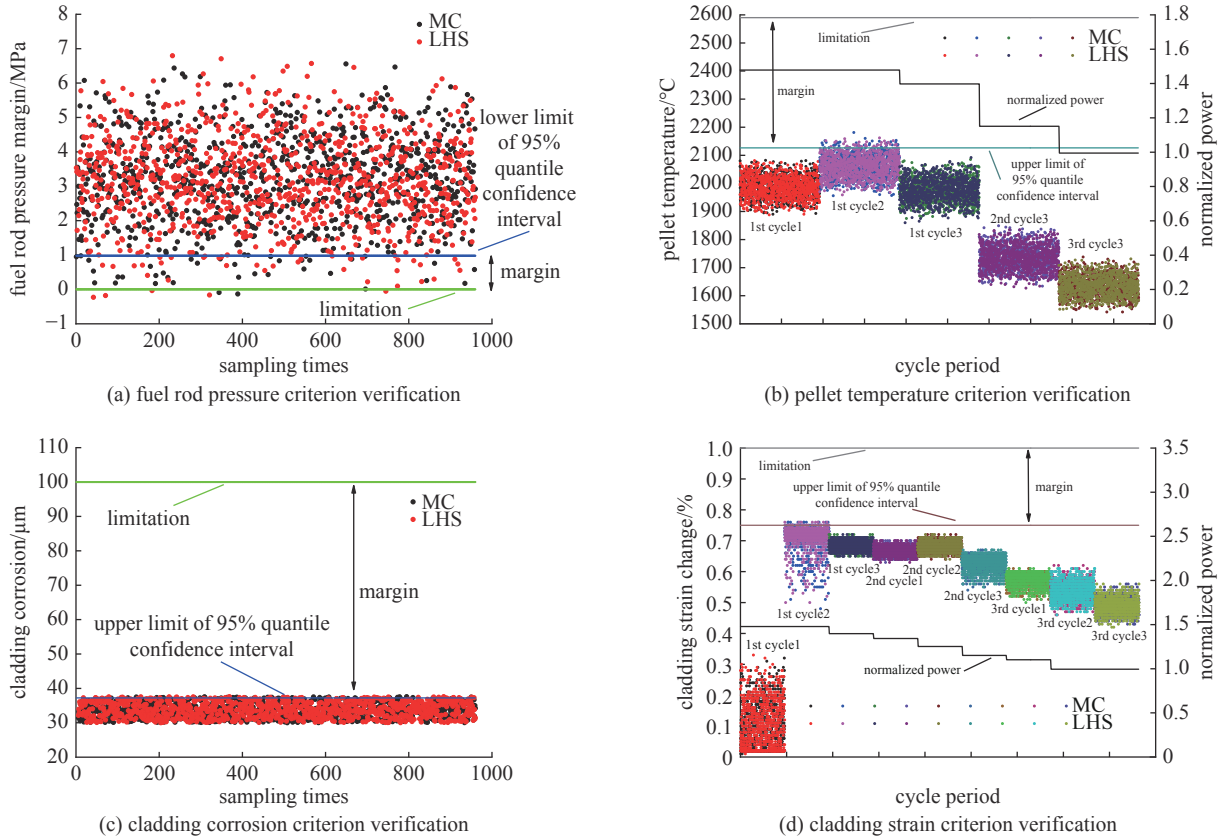


Fig. 5 Results of fuel rod design verification by MC sampling and LHS

图 5 MC 抽样法与 LHS 方法燃料棒设计验证计算结果

图 5(b) 为燃料温度准则验证结果, 考虑 5 个主要阶段。在 SRSS 方法中, 只考虑燃料棒特定位置(即包壳氧化膜厚度最大的位置), 最终得到 500 °C 的安全裕量。影响燃料芯块中心温度的因素很多, 在寿期初, 芯块包壳间隙尚未闭合, 存在较大的气隙热阻, 导致芯块运行在较高的温度下; 随着燃耗的加深, 芯块的热导率降低, 但是芯块和包壳之间的间隙逐渐闭合, 气隙热阻减小, 加之燃料棒功率相对较大, 导致在第 1 循环中期, 引入 II 类瞬态功率后, 得到了更高的燃料芯块中心温度; 随着燃耗的持续加深, 芯块热导率降低, 在间隙闭合的情况下, 间隙热阻增加, 此时引入 II 类瞬态功率得到较低的芯块中心温度, 主要原因在于燃料棒运行在相对较低的功率水平下。使用 MC 抽样方法和 LHS 方法时, 考虑了燃料棒所有位置的温度, 温度裕量有所降低, 约为 464 °C。在燃料棒正常运行时, 通常燃料棒的温度准则不会受到威胁, 而使用 MC 抽样方法和 LHS 方法, 虽然牺牲了部分温度裕量, 但获得了更加真实有效的运行数据, 得到的温度裕量对于保证燃料的运行安全具有更加实际的参考意义。

图 5(c) 和图 5(d) 分别为包壳腐蚀准则和应变准则验证结果。在计算包壳腐蚀时, 由 SRSS 方法和两种抽样法分别获得了 62.5 μm 和 62.8 μm 的氧化层厚度裕量。在计算包壳应变时, 由于在第 1 循环初期, 芯块和包壳无接触, 所以即使燃料温度较高, 也无法由瞬态功率变化引起较大的包壳应变变化; 但是在循环中期, 芯块和包壳间隙闭合, 产生接触压力, 加上燃料芯块运行在较高的温度条件下, 所以此时引入功率瞬态, 会导致包壳发生较大的应变变化, 由 SRSS 方法和两种抽样法得到的裕量分别为 0.27% 和 0.25%。总体来讲, 燃料正常运行时, 包壳腐蚀准则以及包壳应变准则均未受到挑战, 且 MC 抽样方法和 LHS 方法计算得到的裕量无明显变化, 此时通过取输入参数不确定度极限值的 SRSS 方法可以较为准确地预测包壳腐蚀层厚度与功率波动引起的包壳应变变化。

3.3 敏感性分析

使用相关系数可以对输入参数进行敏感性分析, 定义如下

$$C(x, y) = \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_i (x_i - \bar{x})^2 \sum_i (y_i - \bar{y})^2}} \quad (5)$$

式中: $C(x, y)$ 为参数 x 和 y 的相关系数; x_i 和 y_i 为样本值; \bar{x} 和 \bar{y} 为样本均值。

Dakota 提供不同类别的相关系数,其中偏相关系数考虑了输入参数之间相关性的影响。由于本文中涉及到的部分输入参数存在相关性,所以借助偏相关系数进行敏感性分析。各项相关系数汇总如表 1 所示。

表 1 输入输出偏相关系数
Table 1 Partial correlation between input and output

item	partial correlation coefficient							
	fuel rod pressure		pellet temperature		cladding corrosion		cladding strain change	
	MC	LHS	MC	LHS	MC	LHS	MC	LHS
fuel OD	-0.957	-0.961	-0.365	-0.348	0.054	0.090	0.291	0.253
fuel porosity	0.996	0.996	0.999	0.999	0.059	0.019	0.403	0.411
cladding OD	0.071	0.015	0.025	0.040	-0.403	-0.104	0.022	-0.040
cladding ID	0.185	0.018	-0.013	-0.037	0.053	0.040	-0.035	0.037
plenum length	-0.262	-0.041	0.028	-0.024	-0.025	0.036	0.024	-0.001
²³⁵ U enrichment	0.120	0.083	0.407	0.462	0.096	0.007	-0.037	0.013
fuel column length	0.034	-0.004	0.030	-0.024	-0.053	0.029	0.024	-0.001
fuel conductivity	-	-	-0.999	-0.999	-0.024	-0.041	-0.419	-0.415
density change by resintering	-0.987	-0.987	-0.996	-0.996	-0.053	-0.056	-0.422	-0.466
cladding corrosion model	0.458	0.459	0.646	0.690	1.000	1.000	-0.022	0.067
fuel solid swell model	0.240	0.177	-0.294	-0.323	0.033	-0.003	0.116	0.102
cladding creep model	-0.367	-0.450	-0.017	0.038	0.055	0.016	0.366	0.351

由相关系数的计算结果可知,抽样方法的不同会对相关系数产生影响。但是总体来看,对于呈明显正相关或者负相关的参数(相关系数绝对值大于 0.3),不同抽样方法的计算结果差别较小。根据相关系数绝对值的大小可以初步判断输入参数对输出结果的影响,例如,在计算包壳腐蚀时,除了包壳腐蚀模型对结果影响较大之外,其余参数重要程度均较小,这也从侧面印证了在 SRSS 方法中,计算包壳腐蚀只考虑包壳腐蚀模型不确定度的做法。

在内压计算中,敏感性分析结果显示,对结果影响较大的输入参数包括燃料外径、燃料孔隙率、芯块烧结引起的密度变化、包壳腐蚀以及包壳蠕变;在燃料温度计算中,对结果影响较大的输入参数包括芯块外径、芯块孔隙率、²³⁵U 富集度、芯块热导率、芯块烧结引起的密度变化以及包壳腐蚀模型因子。这两项计算与在 SRSS 方法中考虑的相关因素不一致,这也解释了通过大范围考虑输入不确定度,获得了较大的内压裕量,但是牺牲了部分温度裕量(部分原因归结于考虑了不同的燃料棒位置)的计算结果。通过非参数抽样的方法,不一定能得到更加保守的计算结果,但是对于评价燃料棒的安全性更具有参考意义,在 SRSS 方法中,只考虑部分输入参数的不确定度是不充分的。

对于包壳应变的计算,相关系数绝对值较大的输入参数与在 SRSS 方法中考虑的不确定输入参数基本一致,所以两类方法得到的结果相似。

4 结 论

Dakota 提供了一种方便的、可开展实际应用的不确定度分析的方法,通过将 Dakota 与燃料棒性能分析软件相耦合,采用 MC 抽样和 LHS 方法进行了燃料棒设计验证不确定度计算,得到如下结论:

(1) 相比于 MC 方法,使用 LHS 方法可以较快地实现计算结果的收敛,当抽样次数达 960 次时,燃料棒设计验证计算名义值收敛于相近的结果,且裕量值计算结果无明显区别,在一定程度上消除了分层抽样的技术性优势;

(2) 内压准则在燃料棒设计验证过程中比较容易受到挑战,在 SRSS 方法中,内压裕量非常小,主要原因是未充分考虑输入参数的不确定度,MC 抽样和 LHS 方法弥补了这一缺陷,获得了较大的内压裕量,为燃料棒安全性和经济性的提升提供了理论依据;

(3) MC 抽样和 LHS 方法均牺牲了部分温度裕量,但是其计算结果对于评价燃料棒的安全性较传统方法更具参考意义;

(4) 通过敏感性分析得到了对计算结果影响较大的输入参数,可矫正 SRSS 方法中不确定度输入参数的选取,也为后续燃料棒性能分析软件的优化提供了方向。

参考文献：

- [1] 王璐, 张林, 徐腾, 等. 燃料棒设计关键参数敏感性分析[J]. 应用科技, 2019, 46(6): 69-72. (Wang Lu, Zhang Lin, Xu Teng, et al. Sensitivity analysis of key parameters in fuel rod design[J]. Applied Science and Technology, 2019, 46(6): 69-72)
- [2] 周勤. 压水堆燃料棒设计参数不确定性研究[J]. 原子能科学技术, 2003, 37(s1): 5-9. (Zhou Qin. Research on uncertainty of design parameters for PWR fuel rod[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2003, 37(s1): 5-9)
- [3] International Atomic Energy Agency. Best estimate safety analysis for nuclear power plants: uncertainty evaluation[R]. Vienna: International Atomic Energy Agency, 2008.
- [4] Briggs L L. Uncertainty quantification approaches for advanced reactor analyses[R]. Chicago: Argonne National Laboratory, 2008.
- [5] Prošek A, Mavko B. The state-of-the-art theory and applications of best-estimate plus uncertainty methods[J]. Nuclear Technology, 2007, 158(1): 69-79.
- [6] 陈炼, 房芳芳, 邓程程, 等. 核电站最佳估算安全分析中的不确定度评估方法分析[J]. 原子能科学技术, 2015, 49(7): 1237-1242. (Chen Lian, Fang Fangfang, Deng Chengcheng, et al. Analysis on uncertainty evaluation method in best estimate safety analysis of nuclear power plant[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2015, 49(7): 1237-1242)
- [7] Wensauer A, Distler I, Heins L. Probabilistic uncertainty analysis applied to fuel rod design[M]//Spitzer C, Schmocker U, Dang V N. Probabilistic Safety Assessment and Management. London: Springer, 2004: 2791-2796.
- [8] Bouloure A. Importance of uncertainty quantification in unclear fuel behavior modeling and simulation[C]//Best Estimate Plus Uncertainty International Conference. Lucca, 2018.
- [9] Bratton R N, Jessee M A, Wieselquist W A, et al. Rod internal pressure distribution and uncertainty analysis using FRAPCON[J]. Nuclear Technology, 2017, 197(1): 47-63.
- [10] Hernandez-Solis A, Ekberg C, Jensen A O, et al. Statistical uncertainty analyses of void fraction predictions using two different sampling strategies: Latin hypercube and simple random sampling[C]//Proceedings of the 18th International Conference on Nuclear Engineering. Xi'an, China: ASNE, 2010: 1059-1068.
- [11] Ikonen T, Tulkki V. The importance of input interactions in the uncertainty and sensitivity analysis of nuclear fuel behavior[J]. Nuclear Engineering and Design, 2014, 275: 229-241.
- [12] 王国栋, 王喆, 扈本学, 等. 应用DAKOTA程序耦合WGOTHIC程序进行安全壳压力响应敏感性分析[J]. 原子能科学技术, 2015, 49(12): 2176-2180. (Wang Guodong, Wang Zhe, Hu Benxue, et al. Sensitivity analysis on containment pressure response using coupled DAKOTA and WGOTHIC codes[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2015, 49(12): 2176-2180)
- [13] Wang J R, Tsai C W, Lin H T, et al. Performing uncertainty analysis of IIST facility SBLOCA by TRACE and DAKOTA[R]. Washington DC: Nuclear Regulatory Commission, 2013.
- [14] 高新力, 靖剑平, 温爽, 等. DAKOTA-RELAP不确定性分析方法在大破口事故中的应用[J]. 核安全, 2016, 15(1): 66-70. (Gao Xinli, Jing Jianping, Wen Shuang, et al. Application of DAKOTA-RELAP method in the uncertainty analysis of LB-LOCA[J]. Nuclear Safety, 2016, 15(1): 66-70)
- [15] 兰兵, 潘昕铎, 石兴伟, 等. DAKOTA法量化AP1000堆芯物理不确定性[J]. 核电子学与探测技术, 2019, 39(6): 668-672. (Lan Bing, Pan Xinyi, Shi Xingwei, et al. Application of DAKOTA method in AP1000 core physics uncertainty quantization[J]. Nuclear Electronics & Detection Technology, 2019, 39(6): 668-672)
- [16] 孙山泽. 非参数统计讲义[M]. 北京: 北京大学出版社, 2020: 147-150. (Sun Shanze. Nonparametric statistics handout[M]. Beijing: Peking University Press, 2020: 147-150)