



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

Engineering

journal homepage: [www.elsevier.com/locate/eng](http://www.elsevier.com/locate/eng)



Research  
Clean Energy—Article

## 用于先进核反应堆综合设计的计算工具

Nicholas W. Touran, John Gilleland\*, Graham T. Malmgren, Charles Whitmer, William H. Gates III

TerraPower, LLC, Bellevue, WA 98005, USA

### ARTICLE INFO

#### Article history:

Received 16 March 2017

Revised 7 July 2017

Accepted 12 July 2017

Available online 3 August 2017

#### 关键词

模拟  
核能  
发电  
先进反应堆  
行波反应堆

### 摘要

先进核反应堆可为全世界提供安全、清洁、可靠的电能。从概念设计前期，到详细设计工作、执照申请和电站运行等不同阶段，开发先进核反应堆对计算模型的依赖程度都非常高。一个综合性反应堆建模框架不仅可以实现无缝通信、连接、自动化和连续开发等功能，更可以极大地提高反应堆设计工作的能力和效率。在这种系统中，各种关键性能指标（如最优燃料管理、设计基础事故状态下包壳的峰值温度、平准化发电成本等）可以明确地与设计输入数据（如集成模块管道的厚度、容差等数据）联系在一起，保证极高的设计一致性。此系统结合高性能计算系统之后，能够同时执行数千个集成的案例对整个系统进行敏感性分析，从而高效、可靠地评估各种设计，确定最优方案。TerraPower公司开发了一款类似的工具，他们将其命名为“高级反应堆建模接口系统”（ARMI），并已将其应用于目前正在开发的TerraPower行波反应堆设计及其他创新性能源产品的设计工作中。ARMI系统使用之前已有的、具有强大谱系的各种工具，以及创新性设计所需的多种新的物理和数据管理模块。此系统将之前已有的和各种新的物理测量值（这些数据对任何优秀的设计而言都是非常重要的基础数据）进行了对比确认和验证。本文综述了集成反应堆堆芯工程设计工具的情况和TerraPower公司的生产实践情况。

© 2017 THE AUTHORS. Published by Elsevier LTD on behalf of the Chinese Academy of Engineering and Higher Education Press Limited Company. This is an open access article under the CC BY-NC-ND license (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

## 1. 引言

计算环境可以为所有工程设计工作提供一个巨大的虚拟实验室，在这个实验室中各种想法都可以被开发为各种成熟的、复杂的、最优化的系统。由于各种物理数据非常复杂，试验成本也很高，因此使用虚拟设计系统对核电行业来说一直都极为重要。实际上，现代化的计算技术和核技术是同时诞生的，因为在1945年，人类第一台计算机的第一项任务就是为Edward Teller解决氘-氚行为涉及的一系列的偏微分方程建模问题[1]。

第一座核反应堆是根据试验获得的分析方法设计的。之后不久，人们就开始采用早期的计算机解决辐射

迁移的数学问题，用作屏蔽层和反应堆堆芯设计工作的补充。1949年，Knoll原子能实验室潜艇核反应堆设计师采用一台IBM 604计算机，第一次解出了中子扩散方程，这是计算机第一次用于解决相关问题[2]。随着计算机变得越来越强大，以及1957年在IBM 704上使用的Fortran编程语言的出现，人们开始可以用计算机处理各种更加复杂的物理数据。同时，存储技术的同步发展使得可扩展的核数据库的存在成为可能，而可扩展的核数据库代表着反应概率，是反应堆模拟的关键输入。然而，时至今日，新的反应堆设计概念一般是物理模拟，通常采用试验用堆芯实物模型中燃料集成模块的零功率临界配置来完成。

\* Corresponding author.

E-mail address: [johng@terrapower.com](mailto:johng@terrapower.com)

从20世纪70年代到90年代，反应堆模拟软件变得越来越精确，能够很好地模拟各种独立的物理问题，包括中子物理学、传热、燃料性能、瞬态分析以及力场等。这些软件基本上是独立开发的，开发者通常是特定领域的专家，只负责自己开发部分的功能。很多情况下，设计团队会创建一些标准接口用于传输数据，再采用手动的但更加有效的方法处理整个系统的其他问题。现在的很多商业化工具都能处理一些重要的组合物理数据（如中子物理学和水冷反应堆的热力学/水力学问题），但是先进反应堆领域的很多建模工作却越来越关注高精度的物理数据模型，这样一来，研究人员就可以利用现代化的计算机系统结构来进行优化计算。现在，为了减少不确定性，加强理解，产生具有预测性的模型，科研工作者致力于采用高精度、多物理参数的模型。虽然这种复杂模型往往不能被工业化。

2006年，TerraPower公司开始通过行波反应堆（TWR）项目开发可持续的、大规模的低碳核能，新的核反应堆是一种独特的四代液态钠冷却、金属-燃料反应堆，使用一步到位的深度燃烧燃料循环来获得更多快反应堆能力（自然安全、废弃物更少、减少并最终消除浓缩的需求、极高的燃料效率和热效率）而不需要再处理过程[3]。高保真（但是无耦合）的计算机模型从根本上证明了TWR设计的可行性。随着组织不断发展，新的软件不断被开发出来并且被采购用于支持同样发展中的反应堆设计工作。2009年6月，TerraPower公司开始进行先进反应堆建模系统接口的开发工作，目的在于将各种数据管理和自动化常规系统功能融入反应堆设计工具箱中，整合各种新的和之前已有的物理数据建模工具。初期较小的团队基本上是从零开始，应用现代设计模式和编辑理念来解决高效、大规模一体化反应堆设计工作中的挑战。随着框架和数据管理系统的发展，各专业的专家都

在关注如何建立新的物理数据模块或连接系统，进而获得高质量的物理数据解决方案。整合各种工具之后，每个团队的每个成员都可以运行整个系统分析软件。在基础设计阶段，对各种瞬态数据而言，从确定燃料棒尺寸和容差到计算系统成本和包壳峰值温度等功能都可以比较简单地实现。可以很轻松地完成详细的、有意义的设计、创新和敏感性研究等工作。这个系统使TerraPower公司能够采用一个较小的、灵活的团队在有限的时间内完成各种设计工作。

## 2. 结构

高级反应堆建模接口的结构框架包括两个关键部分：反应堆模型和接口堆栈模块。反应堆模型负责将反应堆的全部物理参数维持在内部一致状态下，包括其几何结构、材料性质、功率和温度等的一致性。接口堆栈模块部分则负责使用和更新反应堆模型，进行各种物理参数建模工作。这种面向对象的结构可以结合反应堆的物理数据和分析工具，同时促进源代码本身的解耦。由于先进核反应堆设计工具需要处理的事务非常多，而负责反应堆运行的有经验的工程师又是高度专业化的，因此这是一种非常理想的结构。各种不同专业背景的高级反应堆界面参与者（这些人在工程设计方面具有丰富的经验）建议，采用易于学习的编程语言来进行数据管理（如Python<sup>†</sup>）。

### 2.1. 反应堆模型

高级反应堆建模接口系统中的反应堆模型是一个复合系统[4]，此系统可以反映出图1所描述的核反应堆堆芯的各个物理分量的情况。反应堆对象由一系列集成模块组成，集成模块由一些被称为block的子系统构成，

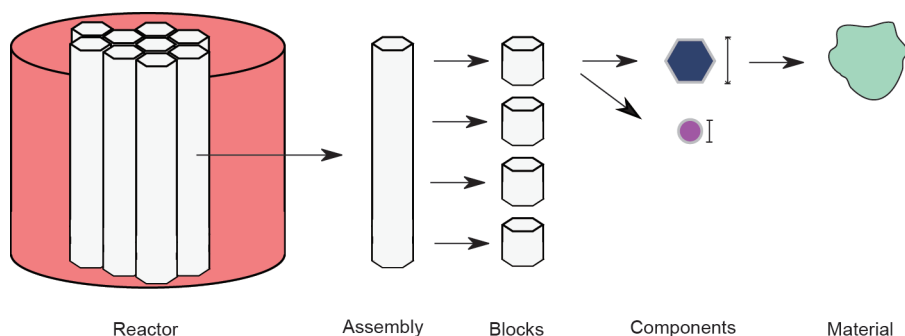


图1. 高级反应堆建模接口系统的六边形复合反应堆模式。

<sup>†</sup> 1991年 Guido van Rossum 开发的一种使用极广的编程语言。

各个block则是由一些定型组件（如燃料棒、包壳和冷却剂）组成。每个组件都与某种物质连接，物质具有独立的温度、成分等属性。高级反应堆建模接口系统的数据管理任务只涉及通过确定的模型接口读写反应堆模型的相关状态数据。这个反应堆模型的标准化对高级反应堆建模接口系统的多物理量的交互性操作具有至关重要的作用，所有数据经过此系统处理后都不再局限于原来的特定领域的用途，而是成为所有领域都可使用的数据。

应用编程接口（API）可以为用户和编程人员提供复杂的访问权限，以便相关人员可以访问整个反应堆模型。可即时查看随机选择的反应堆的任意状态变量的加权平均值，且所有状态变化情况（如冷却剂密度变化）都可通过编程得到，一条程序语句就可以实现。

一个一致的、可编辑访问的材料属性数据库，对集成式反应堆设计非常重要。材料对象由一系列属性组成，如质量密度、热膨胀、热容量、黏度、导热性、杨氏模量、屈服强度等。以往，某物理模块可能查询过某一区域当前温度下钠的属性数据，现在只需查询冷却剂的属性即可。然后，通过对输入数据做简单的线性变换，以往计算钠密度系数的模块马上就能计算反应中氟化钠的系数。自动评估关联范围并将评估结果打印在报告中以供离线使用的特点也具有非常大的价值。另外，与物料库之间的复杂的联系可以提供从冷到热的自动化连续热膨胀模拟功能，从制造尺寸到全功率尺寸都能够模拟。

物理数据解算器通常会提供多种几何近似。因此，高级反应堆建模接口系统可以将反应堆状态转换为不同的几何表示（反之亦然）。转换器可自动进行质量守恒转换，消除了手动转换带来误差的可能性。如图2所示，如果需要在某些区域或条件下进行核相互作用概率测试的准备工作，该特点可以将3D六角形容器转换成等效的1D或圆柱形模型（如用于超高能量分辨率、

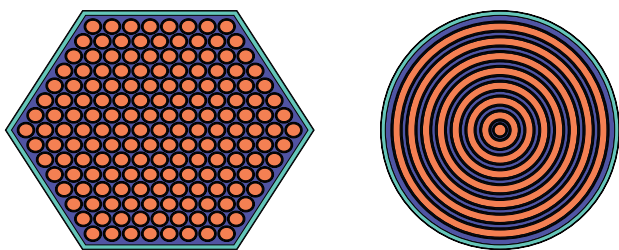


图2. 采用高级反应堆建模接口系统生成1D等效设计的燃料集成模块，用于超高能量分辨率晶格物理模拟。这种自动化转换对含有多种不同集成模块设计的复杂反应堆堆芯建模非常重要。

低空间分辨率模拟）。同时也保持了利用3D图形来生成截面的方法。

## 2.2. 接口堆栈

接口堆栈堆由一些物理模块和记录系统组成，可以维持一个自洽的反应堆模型。单独的高级反应堆建模接口模拟过程中实现的顺序模块和特定模块功能都依赖于用户的输入以及所需的工程评估。接口堆栈在不同的模拟时间（如整个工作开始时、周期开始时、周期中间、周期结束时和整个工作结束时）会调用特定用户的模块。调用的顺序是由物理相关性决定的（如火力发电与工艺需要的冷却剂流量之间的关系），但是在很多耦合物理问题中尚无明确恰当的顺序。

例如，接口堆栈的设计（图3）可以让核耗减的模块被另外一个高精度模块换出，或使用其他独立的方法换出。其他物理模块将在不做调整的情况下与所有新的模块产生相互作用。这种互换操作常被用于敏感度研究、独立验证、重要升级，以及解决一个模块区域以外的各种问题。表1中给出了一个高级反应堆建模接口系统中的高层次模块和适配系统的清单。

## 3. 物理模块

核反应堆堆芯中会发生大量的物理相互作用，空间和温度方面的变化会达到多个数量级。寿命为 $3 \times 10^{-7}$  s的中子会导致核裂变，并且在随后的 $3 \times 10^{12}$  s中释放出衰变热。裂变产生的伽马射线可加热屏蔽层，但加热效果是不对称的，故会导致屏蔽层出现机械弯曲，并且挤压反应堆堆芯集成模块，对燃料管理产生一定挑战。相邻的各个集成模块中的冷却剂因此会具有不同的能量，然后会出现剧烈的混合过程，以将反应堆堆芯仪器上的热量带走。如果想有效地设计一个核反应堆，必须同时考虑许多类似的相互耦合作用。

### 3.1. 中子学

堆芯中的链式核反应是核电站的热源。核模拟过程必须确定中子的空间分布、速度、行进方向，以及中子和周围的原子核发生多种交互作用（即散射、捕获、裂变等）的速度。裂变和捕获速度决定热量生成和燃料耗尽的速度，散射交互作用则与辐射剂量和物料损失有较大的关联。高级反应堆建模接口系统对可以建模的反应堆类型是很灵活的，但是由于TerraPower公司的多数设



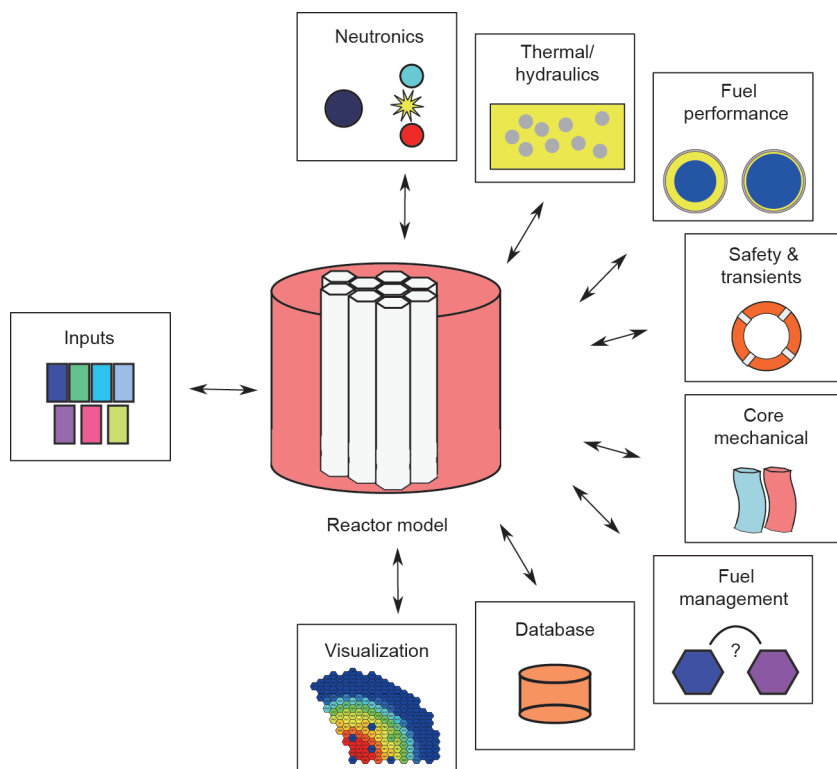


图3. 对反应堆模型上运行的接口堆栈的说明。

计都涉及快中子，因此高级反应堆建模接口系统中有外部代码适配系统，以便使用阿贡国家实验室（ANL）的稳态快中子反应堆物理数据组件，包括MC<sup>2</sup> [5]、DIF3D/VARIANT [6]和REBUS [7]，模拟在快照事件的多种数字化近似下的链式反应中的这些事件。由于中子和光子布居的基本情况，高级反应堆建模接口的中子模块会按照分析结果执行表1中列出的多项计算任务。

在判断高级反应堆设计优点的过程中，必须要知道相应装置一系列的性能状况，以及一类装置中第一个装置的早期性能情况。系统在燃料循环平衡状态下运行数十年之后，一个反应堆中装入物料和取出物料都是完全重复的，可以说明一类装置中第N个装置的性能，因此，对设计人员而言是显式循环处理工作中的一个目标。为支持这种重要的模式，高级反应堆建模接口系统中一个新的模块采用了REBUS技术[8]，可以在后台计算平衡燃料循环，进而进行快速分析和迭代处理。

燃料管理工作中有很多重大问题，尤其是在行波反应器等某些先进的反应堆中尤为突出。要使用浓缩的铀-235启动反应堆堆芯，通过增殖和燃烧过程过渡至钚-239燃料，并且维持相对较稳定的功率、反应性和冷却分配，会面临很多严峻的挑战，必须经过大量的计算才能实现相关要求。利用超级计算机，高级反应堆

建模接口系统内部开发的具有强适应性的燃料管理方法，可同时模拟数百项潜在的燃料管理方案，模拟装置运行寿命为60年。实际上，这只是高级反应堆建模接口系统被用于TerraPower公司的项目完成的第一个任务。目前的执行工作中需要评估的各种选择由人脑和人工智能（多数是启发式的）共同决定，这种技术依赖于机器学习技术的成熟。

和其他物理模块类似，核能模拟依赖于反应堆的物理布局和反应堆堆芯的组成。但是，要想恰当地模拟核相互作用，还需要一些单独评估核能的数据。中子-核素相互作用的速度和随之产生的中子能量的测量很困难，使用来自全世界的多个研究机构和国家实验室开发的核物理模型进行补充后，得到了Evaluated Nuclear Data File [9]等数据库。关于这些数据的敏感性和容差问题，高级反应堆建模接口系统中建立了一个不确定度定量（UQ）模块，根据联合国经济合作与发展组织核能机构（OECD/NEA）的33小组（SG33）的相关工作结果处理和传送不确定度数据[10]。图4中给出了我们对文献[10]中定义的SG33基准的执行情况。

MCNPX辐射转移代码的一个版本[11]被TerraPower公司修改过之后应用于某些验证任务，以及参考临界值和屏蔽系统的计算[12]。各项调整重点关注运行时间优化、燃料管理、燃料性能耦合、质量守恒等问题，并且

表1 关键ARMI模块清单

Module type	Module name	
Framework	Reactor model	
	Material library and thermal expansion	
	Loose and tight physics coupling	
	History tracking and summaries	
	Database storage of results	
	Multi-objective optimization	
	Nonlinear regressions	
	Neutronics adapter	MC <sup>2</sup> /DIF3D/REBUS <sup>a</sup> MCNPX <sup>a</sup>
	Neutronics	Fuel-shuffling design and optimization
		Fast equilibrium fuel cycle iteration
Parallelized depletion solver		
Microscopic cross-section manager		
Fission product models		
Fuel cycle economics		
Pin-level flux reconstruction		
Reactivity effects of distortions		
Sensitivity coefficients		
Uncertainty quantification		
Thermal/hydraulics adapter	COBRA <sup>a</sup> (communicating subchannel) MONGOOSE <sup>b</sup> (communicating subchannel)	
	Thermal/hydraulics	Subchan (non-communicating subchannel) Thermo (simple 1D) Flow-orificing system
	Fuel performance adapter	FEAST <sup>a</sup> ALCHEMY <sup>b</sup> (detailed)
Fuel performance	CRUCIBLE (simple)	
Core mechanical adapter	NUBOW <sup>a</sup>	
Core mechanical	OXBOW	
Transient analysis adapter	SASSYS/SAS4A <sup>a</sup> (plant & transients) DIF3D-K <sup>2</sup> (spatial kinetics) RELAP5 <sup>a</sup>	
	Transient analysis	Reactivity coefficients Control rod worth, shutdown margin Frequency stability margin
	Visualization	XTVIEW

<sup>a</sup> Adapter to off-the-shelf third-party code.

<sup>b</sup> Adapter to in-house TerraPower code.

在10<sup>3</sup>个处理器上可以高效地运行大约10<sup>6</sup>个独立的耗尽区。高级反应堆建模接口系统可以为此代码写出详细的输入文件，帮助快速建立一些非常复杂的模型。与所有物理解决方案类似，高级反应堆建模接口系统的功能可以扩展，以便自动化使用其他Monte Carlo工具。

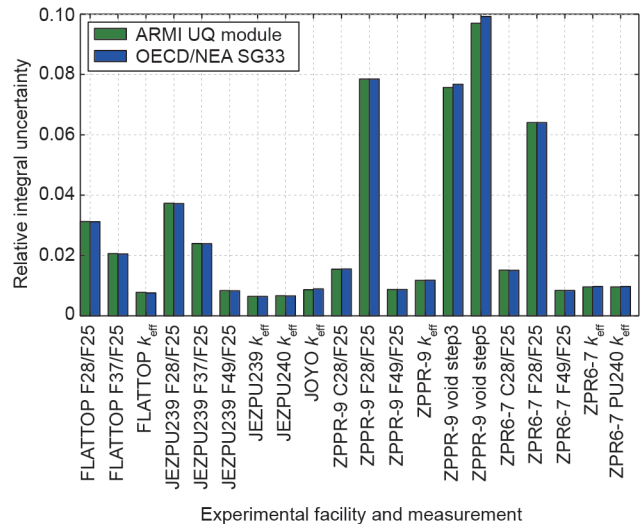


图4. 使用OECD/NEA的33小组的相关结果作为基准，用于很多试验设施和测量工作中的高级反应堆建模接口的核能数据不确定性定量模型。

### 3.2. 热工水力学

裂变的原子核释放出的能量必须转移至电能转化系统中，且转移的速度必须等于能量释放的速度。为此常采用水、液态金属、气体或熔盐等可流动的冷却剂。冷却剂的流动特征值决定了主要设备（如泵和热交换器）的相关参数。

燃料集成模块中的燃料/冷却剂的面积比必须谨慎确定，须权衡考虑链式核反应和冷却剂的流速情况。由于冷却剂的压力与流速的平方成正比，如果要采用高速冷却剂，则必须采用性能更强（即更厚）的结构件，但是这样一来就会影响链式核反应的一些方面。

链式核反应和冷却剂之间的耦合反应可能会很强。冷却剂被加热时，热膨胀会导致其密度下降，散射导致的中子慢化也会减少。在水冷的慢中子反应堆中，这是一种负面效果，因为冷却剂是一种中子慢化剂。中子速度在冷却剂中降低，得到铀-238的寄生俘获保护，可以使铀-235在再次进入燃料棒时高效地裂变。相反，在快中子反应堆中，冷却剂密度降低产生的影响通常是正面的：快中子可以使每次裂变释放出来的次生中子更多，且不太可能出现寄生俘获的情况。

在高级反应堆建模接口系统中，可以根据需要做不同精度等级的子通道分析（即分析在燃料棒之间的冷却剂流动和温度情况）。简单的非通信子通道模块可以提供快速的查看结果功能，复杂的多集成通信子通道可以实现高精度的分析计算工作。高精度处理涉及从高级反应堆建模接口系统到一个由TerraPower公司开发的名为MONGOOSE的单相子通道代码，连续地传递

燃料棒级的功率分布。流体动力学计算模型和相关试验被用于生成子通道代码中使用的关联关系。目前，MONGOOSE系统中有钠冷却的快反应堆特有的管理关系数据，以及TWR特有的验证工作数据，还可提供其他流体的单相关联数据。

第一代TWR设计中的燃料管理方面的挑战是，受到各个集成模块位置以下的固定冷却剂节流孔的限制。为详细分析，需要对装置的整个使用寿命做两次模拟。在第一次模拟时，相关参数设置可在不同运行周期有所变化，以便将各个集成模块的包壳的峰值温度控制在设计限值以内（包括 $2-\sigma$ 不确定性）。第二次模拟时，已记录了每个位置的最大流速并优化了多个离散孔口区域和相关的设置，因此在装置的整个使用寿命中，不会有任何集成模块超过其温度限制。由于模拟工作的加倍会导致工作负担加重，因此通常只有在大型设计已经解决了一系列优先的设计任务后，才开始孔口模拟工作。通过模块化设计，高级反应堆建模接口系统中的流量节流程序可以在隐式平衡燃料循环下被激活，提供了实际的孔口设置，以启动燃料管理设计迭代。

### 3.3. 燃料性能

核燃料系统包括燃料和周围的包壳，需要能够承受核电站中最极端的热环境、辐射环境和化学环境。要设计出可靠的反应堆，必须深入研究、把握燃料系统的变化情况。

TerraPower公司通过下列两种工具处理与燃料性能相关的问题：ALCHEMY和CRUCIBLE [13]。ALCHEMY是针对一个燃料棒的非常详细的基于有限元的力学模型，模型中有以往的辐射燃料检查工作的数据库提供支持。高级反应堆建模接口系统提供使用期中的能量和冷却剂温度的历史数据作为边界条件，ALCHEMY可以确定内部孔隙度、裂变气体释放、温度、应力和应变等参数。

ALCHEMY采用集中运行方式，因此不会与基本的高级反应堆建模接口循环体系产生直接耦合。相反，CRUCIBLE模块则是作为一个低级代理体系被开发出来的，模块会采用ALCHEMY的相关结果。这个模块每次运行接口堆栈中的相关步骤，都更新独立于燃料的包壳应力、轴向燃料应力、裂变气体释放、热熔黏合（若适用）、包壳腐蚀，以及燃料导热性等数据。这些状态变量对反应性和温度场的影响，以及范围更广的总体设计

可行性的影响都是可以评估的，因此，必须将其整合在所有高级反应堆设计工具中。

### 3.4. 机械和地震分析

反应堆开发工作中堆芯集成模块和其支持结构之间的机械交互作用很强。堆芯设计中需要进行机械计算，原因如下：①由于冷却剂流体产生向上的作用力，而在正常运行期间各个集成模块必须保持在压紧状态下；②冷却剂产生的压力导致集成模块出现非弹性形变，可能会锁定反应堆堆芯并且导致在停电期间出现较长（且比较昂贵）的燃料管理延迟；③径向扩张/弯曲扩张活动反馈是保障快速反应堆安全和处理负荷的一个重要的组成部分。在一个瞬变现象中，堆芯上有交互作用的负荷衬垫会变热，然后热膨胀会将这些衬垫分开。因中子通量梯度的变化而产生的燃料位置变化的情况非常复杂，在启动期间不同的功率/流速比情况下，反应性效果开关信号发生变化时，燃料位置也会发生变化。这种行为还高度依赖于反应堆堆芯约束系统设计[即是自由流动设计还是受到自由弓配置（free bow configuration）限制的]。

集成式反应堆设计需要与机械分析紧密地结合在一起。在高级反应堆建模接口系统中，这个过程是以类似于燃料性能的方式完成的。一个被称为OXBOW[14]的高精度、长时间运行的有限元分析机械代码已被开发，这个代码系统可从高级反应堆建模接口系统中接收某一个系统集成模块的温度、剂量、流速等历史数据。此代码系统可以计算作为功率、流速和辐射等历史数据的各种应力、弹性应变/塑性应变，以及几何形变，进而可以详尽地评估一个设计方案。功率上升期间、稳定状态下或者地震等外部事件导致的任何形变数据，都可导出至高级反应堆建模接口系统，然后使用新的、更精细的方法计算反应性效果以进行后继分析。一个基于OXBOW结果的运行速度快、有各种关联关系的形变模块，可以在正常的高级反应堆建模接口系统运行期间同时运行，为高级反应堆建模接口系统的设计优化提供变形数据。

### 3.5. 安全和瞬态分析

为了理解装置的正常运行状态和非正常运行状态的相关情况（如装置如何应对泵或涡轮机跳闸的情况），需要进行大量的分析工作。安全和瞬态分析是监管和执照申请工作的一个重点关注事项，因此对集成式设计工具而言极为重要。



在高级反应堆建模接口中，瞬态分析系统包括ANL最初为支持美国的快反堆项目而开发的SASSYS代码[15]。高级反应堆建模接口反应性系数模块可以自动计算耦合的中子-热力学/水力学瞬态分析所需要的动力学参数，包括缓发中子的比例、瞬发中子的寿命、反应性的径向膨胀系数，以及燃料的3D空间分布情况、结构、冷却剂、多普勒和无效多普勒反应性系数。高级反应堆建模接口系统融合了反应堆模型集成模块尺寸、燃料组成和流体特征等，可以直接写入SASSYS输入的堆芯段数据。SASSYS的装置模型不是高级反应堆建模接口系统创建的，而是从用户创建的文件中被添加至输入文件中。我们计划继续扩大高级反应堆建模接口系统，以便在将来强化装置和堆芯的各个方面。

拥有一个完整的SASSYS输入文件之后，高级反应堆建模接口系统可以执行一个或多个SASSYS任务。系统可以执行多个设计基础或设计基础以外的瞬态操作（如有保护或无保护的流体损失、散热损失、瞬态功率超高）以及一系列不同功率/流速比的应用实例，计算功率亏量。扫描具有不同震荡频率的反应性扰动，用来计算装置的全频域功率传递函数，计算结果输入频率稳定性好的高级反应堆建模接口模块中，用于估算收益和相位稳定裕度，这是所有放大器类装置的一个关键设计参数。

利用反应性系数和其他反应堆输入数据的统计取样结果，超级计算机平台并行运行数百项SASSYS应用实例，以确定输入的不确定性数据的目标值。这使得不确定数据能够被智能化地确定，进而用于确定设计方案的选择、容差规格和期望得到的核能不确定度数据。

## 4. 设计优化

多目标设计优化（MDO）在很多工程领域中的用途非常广。高级反应堆建模接口系统中整合了很多物理能力并且做了自动化处理，因此多目标设计优化系统可以用于设计高级核反应堆。

### 4.1. 参数扫描

在概念设计和初步设计期间，工程师会提出一系列假设，目的在于改善产品的性能。高级反应堆建模接口系统的参数扫描功能提供了一个强大的工具，可以帮助分析和评估这些假设。用户可指定一个多维区域的尺寸、构成、燃料管理参数、功率等级或其他所有输入数

据的边界值。然后，高级反应堆建模接口对设计空间进行抽样，并且对很多关键点进行全面分析。

对TWR设计而言，高级反应堆建模接口系统能够计算临界平衡燃料周期的相关数据（以及结合燃料性能等），生成反应性系数，并运行一系列设计基础的或设计基础以外的瞬态现象。这个系统层面的自动化程度在超级计算机上使用时具有巨大的价值。

### 4.2. 代理模型

由于核反应堆的复杂性，可以预期，高级反应堆建模接口模拟工作中会有很多自变量和因变量。评估多种折中方案（在泛函求极小值的系列步骤中）时，根据参数扫描结果不断修正的快速运行的代理模型非常必要。因此，高级反应堆建模接口系统使用交替条件期望（ACE）[16]这个非线性、非参数回归的模型。ACE是一个纯粹的统计模型，可以梳理其他回归方式很难处理的相关性问题。除了用于生成优化的准确、快速的回归模型以外，独立变量的中间变换功能可以为分析人员提供一种直觉，以帮助理解在TWR设计中以及图5中所示的集成模块数量降低时，燃料尺寸（有效密度）变化和进料浓缩如何影响临界平衡周期长度，以及影响的程度。

高级反应堆建模接口系统可以对 $M$ 个自变量的 $N$ 个因变量函数中的每一个做ACE回归处理。建立之后，这个回归集将代表参数扫描的一个连续替代过程。输入提供的所有设计组合数据之后，即刻就能得到一系列反应堆性能标准。

### 4.3. 物理编程

有了设计空间的快速代理模型之后，实际的MDO过程就可以开始了。建立的优化方法运行起来很有效，但是必须决定如何对多种目标功能做加权处理。折中处理对工程设计非常重要，虽然成本对权重选择很敏感，但是根据反应堆堆芯损坏频率确定恰当的平准化发电成本相对权重却并不简单。相应的，高级反应堆建模接口系统会执行物理编程[17]，这种算法可以将工程参考数据转化为一些一致的权重函数。然后可以使用标准方法优化得到的集合目标函数，确认最优设计折中方案。

### 4.4. 设计迭代的速度

反应堆设计人员完成一项设计的速度往往会受到提出变更和经相关分析得出结论之间的时差的限制。高级反应堆建模接口系统可以实现快速的全系统反馈，借此

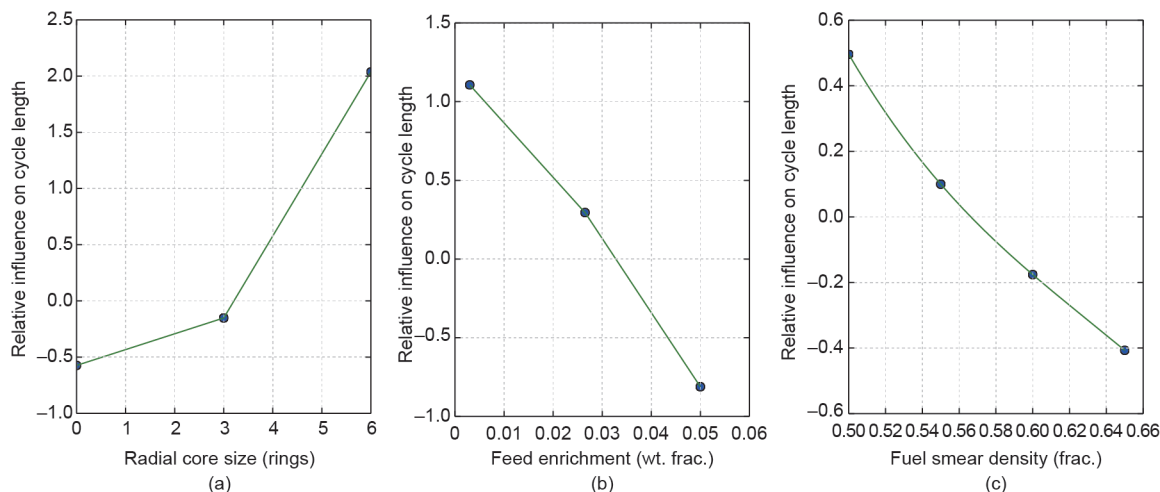


图5. 一次ACE运行的结果, 显示三个设计变量对TWR设计中的临界平衡周期长度的依赖性情况。图中显示, 放射状堆芯的规格(集成模块的数量)是主要变量, 集成模块数量越多, 周期长度越长; 进料的浓缩程度越高(最高为5%的铀-235)则周期长度越短, 只是影响没有堆芯规格的影响那么大; 提高燃料的有效密度会缩短周期长度, 但是产生的影响相比于前两种影响非常小。中间ACE变换的变量在y轴上给出。

快速推进各项设计工作。高级反应堆建模接口系统常提供3D平衡分析的反馈结果, 反馈时间大约要2 h, 如果要调用为期40年装置的使用寿命中的各个周期的详细结果, 也只要8 h, 这保证了大型设计迭代工作能够在一天之内完成。

## 5. 质保

计算机代码验证与确认是一个极为重要的步骤, 因为其可以证明反应堆设计的初期阶段符合设计要求, 且能够支持最后的执照申请工作所需要的安全分析工作。高级反应堆建模接口软件符合ASME NQA-1 2008 [18]和NQA-1a-2009 [19]标准中规定的内部流程控制。

### 5.1. 验证测试

根据已确定的反应堆设计、分析和许可需求, 提出并记录每个高级反应堆建模接口系统的需求。已经开发了一个由单元测试和使用中测试组成的测试套件用于测试各种需求的实现程度。每项测试都明确关系到一个或多个需求, 并形成自动需求追溯模型。确定由于持续的开发工作产生的回归问题是这个测试套件的第二个用途。

### 5.2. 试验确认

用中子试验确认高级反应堆模型因相对缺少高质量数据而面临很多问题。国际反应堆物理实验评价手册(IRPhEP) [20]已经编辑了一些最佳数据。TWR反应堆的第一阶段确认工作仍在进行中, 确认工作涉及评估

IRPhEP的多项试验基准(有按照合约的规定获得的其他试验数据的补充)。文献[21]中讨论了TerraPower公司的第一个反应堆的关键设施的相关情况。图6中给出了IRPhEP的BFS-73-1试验中铀-235的空间反应速率与基准值之间的一个令人满意的比较结果。

历史上, 先进反应堆的设计工作曾依赖于反应堆堆芯的专用临界状态实体模型的测量数据。但是现在, 由于有了之前的经验、高精度建模和更加复杂的核能数据评估工作, 核数据验证工作可以依赖于历史上的相关试验。为此, 必须要获得一些强大的证据来说明试验可适用于目标反应堆系统。可以比较核数据的敏感度系数和整体测量的敏感度系数, 像代表性因素[9]中标准化处理的数据一样, 从原子能的角度来建立此证据。ENDF/B-VII.1数据库中可用的核能数据协方差方面的工作已有极大的进步, 已经可以通过软件对数据的不确定度进行估算, 当然这方面仍需很多其他开发工作。

除了核试验以外, 必须指出的是, 要建立试验数据库来补充相关的模型还需要大量的工作。TerraPower公司正在数十家科研机构执行与验证和确认工作相关的大量的技术开发测试工作。这些工作包括燃料和材料开发与测试工作, 全尺寸燃料束生产及钠流速测试、控制和诊断, 以及其他很多任务。例如, 图7中显示的TerraPower实验室的测试平台, 对全尺寸的集成模块使用各种受力和温度梯度, 精确地测量各种位移情况, 用以验证OXBOW模型。

### 5.3. 连续集成和政策

高级反应堆建模接口系统仍需要很多开发工作。既



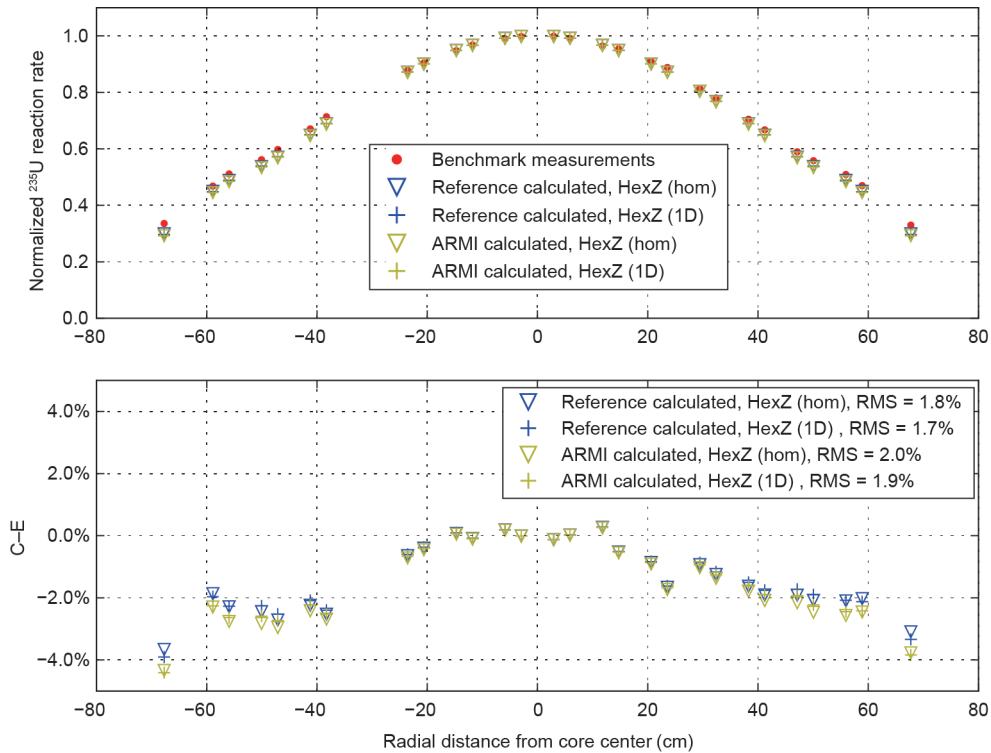


图6. 高级反应堆建模接口计算得到的铀-235反应速率和BFS-73-1试验中测得的铀-235反应速率(标准化数据)之间的比较。

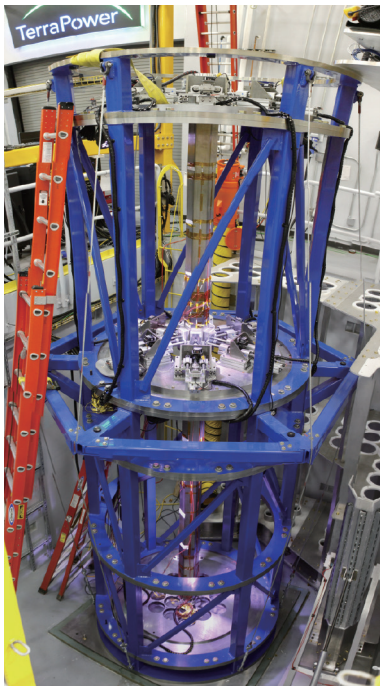


图7. TerraPower实验室用于验证OXBOW弯曲计算结果的一个实验装置。

要保证质量还要保留前期研究工作中完成、发布的确认和验证结果的巨大价值。高级反应堆建模接口系统开发团队需要由一个具有合适技能的工程师来审查高级反应堆建模接口系统中所有软件变化的代码情况。我们的源代码资源库是一个系统内部管理的，可以实现代码审

查、权限控制和其他政策要求。高级反应堆建模接口系统开发团队在正式的设计分析工作中只允许使用已发布的分支程序代码。期望的反应堆分析工作通常在新特性发布前已经完成，允许对原型分支程序代码做各种尖端的分析或探索性分析，但是任何设计决策结果都必须由已发布的代码支持。

高级反应堆建模接口系统设计团队使用连续集成技术，借鉴软件行业的相关经验，可以为此进行自动化代码建构、测试和健康检查等工作。连续集成系统可以自动化完成很多任务，包括在收到代码申请请求时进行相关的测试工作。新的代码通过审查人批准并且启动之后，连续集成系统将执行全部测试工作，并且提供反馈信息，为将来的各种变化更新审查基线。每天晚上要测试连续集成系统，确认环境是否有任何变化。最后，为了确保之前的验证和确认工作继续维持有效，连续集成系统会执行全部验证工作，并且执行当前的基线反应堆设计实例。多种代码的健康和稳定性指标都能得以详细的跟踪。

## 6. 结论

TerraPower公司已将现代化的软件工程实践用于建立集成式反应堆设计系统。此系统已从燃料管理领域的

常规开发软件发展成为能够实现快速、高精度、持续稳定的系统分析的全面系统框架。目前业界使用的很多物理数据求解程序都只针对钠冷却快反应堆，但高级反应堆建模接口系统的总体框架通过详细的工程设计和操作，已经能够适用于大量反应堆的概念设计和运行期间的相关事务。目前，系统正在评估软件质量，同时验证和确认之前和现在的试验。在TWR设计从执照申请到实际施工建设的过程中，高级反应堆建模接口系统已被证明是非常珍贵的工具，并且未来将会支持TWR装置的运行工作。随着创新概念逐渐走向成熟，此系统还将提供更多价值。核反应堆的设计、施工建设和运行等工作均严重依赖于计算机系统，未来还将继续维持这种依存度。系统化软件模型开始较为简单，后来逐渐变得复杂，到现在已经演变成为真正集成化的全系统工具。未来的系统无疑会增加人工智能等特点，利用高级反应堆建模接口系统等集成模型，在用户输入基础特征和性能目标之后自动生成物理一致的概念化设计。可以预见，未来运行中的核电装置将使用这些模型与仪器和控制系统相结合，以确保装置平稳、高效、安全运行。

## Acknowledgements

The authors would like to acknowledge their colleagues for providing numerous technical and editorial contributions to this paper, including Zhiwen Xu, Mark Werner, Mark Onufer, Pavel Hejzlar, Robert Petroski, Jesse Cheatham, Bao Truong, Sam Miller, Chris Gross, Dustin Langewisch, Evan Albright, Peter McNabb, and others.

## Compliance with ethics guidelines

Nicholas W. Touran, John Gilleland, Graham T. Malmgren, and Charles Whitmer are employed by TerraPower, LLC, which is working to commercialize traveling wave reactor technology. William H. Gates III is the TerraPower chairman.

Nicholas W. Touran, John Gilleland, Graham T.

Malmgren, Charles Whitmer, and William H. Gates III declare that they have no conflict of interest or financial conflicts to disclose.

## References

- [1] Haigh T, Priestley M, Rope C. ENIAC in action: Making and remaking the modern computer. Cambridge: MIT Press; 2016.
- [2] Greenspan H, Kelber CN, Okrent D, editors. Computing methods in reactor physics. New York: Gordon and Breach Science Publishers; 1968.
- [3] Gilleland J, Petroski R, Weaver K. The traveling wave reactor: Design and development. *Engineering* 2016;2(1):88–96.
- [4] Gamma E, Helm R, Johnson R, Vlissides H. Design patterns: Elements of reusable object-oriented software. Boston: Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc; 1995.
- [5] Lee C, Yang WS. MC<sup>2</sup>-3: Multigroup cross section generation code for fast reactor analysis. *Nuclear Sci Eng*. Epub 2017 Jun 30.
- [6] Derstine KL. DIF3D: A code to solve one-, two-, and three-dimensional finite-difference diffusion theory problems. Report. Illinois: Argonne National Laboratory; 1984 Apr. Report No.: ANL-82-64.
- [7] Olson A. A users guide for the REBUS-PC code, version 1.4. Illinois: Argonne National Laboratory; 2001 Dec. Report No.: ANL/RERTR/TM-32. Contract No.: W-31-109-ENG-38.
- [8] Hosteny RP. ARC system fuel cycle analysis capability, REBUS-2. Report. Illinois: Argonne National Laboratory; 1978 Jan. Report No.: ANL-772-1.
- [9] Chadwick MB, Herman M, Obložinský P, Dunn ME, Danon Y, Kahler AC, et al. ENDF/B-VII. 1. Nuclear data for science and technology: Cross sections, covariances, fission product yields and decay data. *Nucl Data Sheets* 2011;112(12):2887–996.
- [10] Salvatores M, Palmiotti G, Aliberti G, Archier P, De Saint Jean C, Dupont E, et al. Methods and issues for the combined use of integral experiments and covariance data: Results of a NEA international collaborative study. *Nucl Data Sheets* 2014;118:38–71.
- [11] Pelowitz DB. MCNPX user's manual version 2.5.0. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory; 2005 Apr. Report No.: LA-CP-05-0369.
- [12] Ellis T, Petroski R, Hejzlar P, Zimmerman G, McAlees D, Whitmer C, et al. Traveling-wave reactors: A truly sustainable and full-scale resource for global energy needs. In: Proceedings of ICAPP'10; 2010 Jun 13–17; San Diego, USA. Illinois: American Nuclear Society; 2010. p. 10189.
- [13] Miller SJ, Latta R. Fuel performance modeling of traveling wave reactor fuel elements [poster session]. In: Materials Modeling and Simulation for Nuclear Fuels 2013 Workshop; 2013 Oct 14–16; Chicago, IL, USA. 2013.
- [14] Cohen M, Werner M, Johns C. Mechanical model of a TerraPower, traveling wave reactor fuel assembly duct. In: 22nd International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology; 2013 Aug 18–23; San Francisco, CA, USA. Red Hook: Curran Associates, Inc.; 2014.
- [15] Dunn FE, Prohammer FG. The SASSYS LMFBR systems analysis code. *Math Comput Simul* 1984;26(1):23–6.
- [16] Breiman L, Friedman JH. Estimating optimal transformations for multiple regression and correlation. *J Am Stat Assoc* 1985;80(391):580–98.
- [17] Messac A. Physical programming-effective optimization for computational design. *AIAA J* 1996;34(1):149–58.
- [18] American Society of Mechanical Engineers. Quality assurance requirements for nuclear facility applications. NQA-1-2008. New York: American Society of Mechanical Engineers; 2008.
- [19] American Society of Mechanical Engineers. Addenda to ASME NQA-1-2008. Quality assurance requirements for nuclear facility applications. NQA-1a-2009. New York: American Society of Mechanical; 2009.
- [20] OECD Nuclear Energy Agency. International handbook of evaluated reactor physics benchmark experiments. Paris: OECD Nuclear Energy Agency; 2009.
- [21] Xu Z, Onufer M, Touran N. Reactor physics benchmark suite development for nuclear analysis codes and methods validations in travelling wave reactor applications. In: Proceedings of the Physics of Reactors Conference: Unifying Theory and Experiments in the 21st Century (PHYSOR 2016); 2016 May 1–5; Sun Valley, ID, USA. Illinois: American Nuclear Society; 2016. p. 362–76.