

基于模块化射线追踪的矩阵 MOC 方法 (2)

——数值验证

吴文斌^{1,2}, 李庆², 王侃¹

1. 清华大学工程物理系, 北京, 100084; 2. 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, 610041

摘要: 根据对模块化矩阵特征线 (MOC) 方法进行的理论研究结果, 采用 C++ 语言编制模块化矩阵 MOC 程序。为验证该程序的计算精度和计算效率, 对沸水堆 (BWR) 栅格、UO₂ 组件、2D C5G7 三个基准题进行计算。数值结果表明, 模块化矩阵 MOC 方法具有良好的计算精度和较高的计算效率。

关键词: 矩阵 MOC; 模块化技术; 多群耦合 GMRES; 基准验证

中图分类号: TL329⁺.2 **文献标志码:** A

0 引言

根据对模块化矩阵特征线 (MOC) 方法进行的理论研究结果, 应用系数矩阵的数值特性, 结合多群耦合 GMRES 算法, 基于模块化射线追踪技术并充分利用堆芯或组件的对称性, 采用 C++ 语言编制了相关计算程序。利用该程序计算沸水堆 (BWR) 栅格、UO₂ 组件、2D C5G7 三个基准题, 以验证程序的计算精度和计算效率。

应用矩阵 MOC 系数矩阵的数值特性, 可以节省线性方程组的构造时间并降低系数矩阵的存储空间, 利用 C5G7 基准题对此进行了着重分析。同时, 由于 C5G7 基准题具有较强的上散射效应, 也被用于验证多群耦合 GMRES 算法的计算效率。UO₂ 组件基准题具有良好的对称性, 因而被用于验证模块化方法的各种对称计算模式。

1 基准题描述

1.1 BWR 栅格基准题

该基准题是一个 4×4 的 BWR 栅格问题^[1], 包含 2 根 Gd 棒, 外边界均采用全反射边界条件。BWR 栅格基准题的多群常数见参考文献[1]。该基准题提供了 k_{eff} 和功率分布的参考值。

1.2 C5G7 UO₂ 组件问题

该基准题是从 2D C5G7 基准题中提取的 UO₂ 组件问题, 采用全反射边界条件, 具有良好的对

称性。其群常数可在基准题文档^[2]中找到。

1.3 2D C5G7 基准题

2D C5G7 基准题由 OECD/NEA 发布^[2], 广泛用于程序验证。本文对 1/8 对称的 2D C5G7 问题进行计算。图 1a 是燃料栅元和慢化剂栅元的网格划分 A^[3]。由于在 MOX 燃料和慢化剂的交界面处, 能谱干涉效应比较强烈, 需要更精细的网格划分, 因此在二者的交界面处特别地采用网格划分 B (图 1b)。

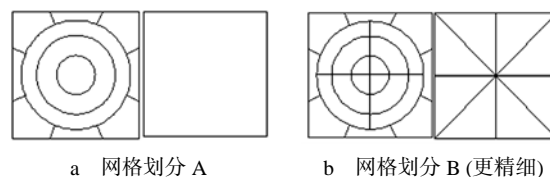


图 1 交界面处的 MOX 栅元和慢化剂栅元网格划分
Fig. 1 Division of MOX Cells and Moderator Cells
Nearby Interface

所有的计算都是在个人电脑上完成, 操作系统采用 Windows XP 32 位, 处理器为 Intel Core 2 Quad Q8300 2.5GHz, 内存为 2G。临界计算 k_{eff} 的收敛准则是 10^{-6} , 中子通量的收敛准则是 10^{-5} 。矩阵 MOC 的计算条件是: 16 个方位角, 2 个 Leonard 最优极角^[4], 每个方位角拥有 200 条特征线, 射线间距约为 0.01 cm。

2 系数矩阵数值特性验证

2.1 系数矩阵的稀疏性

系数矩阵具有良好的稀疏性，BWR 栅格、UO₂ 组件、2D C5G7 三个基准题系数矩阵稀疏度见表 1。随着问题规模的增大，系数矩阵越来越稀疏。

表 1 系数矩阵的稀疏度列表

Table 1 Sparsity of Coefficient-Matrix

基准题	<i>M</i>	<i>N</i>	<i>T</i>	稀疏度/%
BWR 栅格	448	1024	1472	20.2
C5G7 UO ₂ 组件	5780	3264	9044	11.4
2D C5G7	7570	6016	13586	7.3

M—细网格数目；*N*—反射边界角通量数目；*T*—总未知数数目

BWR 栅格基准题系数矩阵稀疏结构见图 2，子矩阵 *A*₁₁ 较稠密，*A*₁₂、*A*₂₁ 较稀疏，*A*₂₂ 最稀疏。

对于规模较大的 2D C5G7 基准题，子矩阵 *A*₁₁ 稀疏度为 21.1%，*A*₁₂、*A*₂₁ 稀疏度为 1.5%，*A*₂₂ 稀疏度为 0.02%，总的稀疏度为 7.3%，稀疏结构与 0 保持一致。从 0 中也可以定性地观察到系数矩阵的对称性。

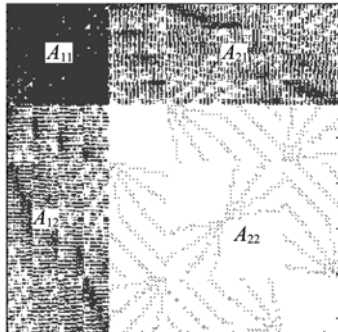


图 2 BWR 栅格基准题系数矩阵稀疏结构图

Fig. 2 Sparse Structure of Coefficient-Matrix of BWR Lattice Benchmark

2.2 计算精度验证

应用系数矩阵的数值特性，仅相当于对矩阵进行一系列的初等变换，矩阵元素数值未作任何改变。因此，改进前后的计算结果完全一致，本小节无需重复列出改进前后的数值结果对比。

BWR 栅格基准题的数值结果见表 2。*k*_{eff} 和功率分布与基准结果都符合得很好。

表 3 展示了 2D C5G7 基准题的计算结果。*k*_{eff} 相对误差为 -0.108%，棒功率最大相对误差小于 1%，与基准结果符合良好。基准题的数值结果表明，基于模块化的矩阵 MOC 程序具有良好的数

值精度，且应用矩阵数值特性完全不改变程序的计算结果。

表 2 矩阵 MOC 求解 BWR 栅格基准题的计算结果

Table 2 Matrix MOC Solution of BWR Lattice Benchmark

参数	参考值	矩阵 MOC 误差/%
<i>k</i> _{eff}	0.986561	0.04
归一化棒功率	棒 1	6.9391×10 ⁻²
	棒 2	6.6246×10 ⁻²
	棒 3	6.9398×10 ⁻²
	棒 4	7.2549×10 ⁻²
	棒 5	6.2429×10 ⁻²
	棒 6	2.4344×10 ⁻²

表 3 对 2D C5G7 基准题逐群 Gauss-Seidel 和多群 GMRES 耦合算法计算精度比较

Table 3 Accuracy Comparison of Gauss-Seidel and Multi-Group GMRES for 2D C5G7 Benchmark

参数	逐群 Gauss-Seidel 迭代	多群 GMRES 耦合
<i>k</i> _{eff} 误差 /%	-0.108	-0.108
组件功率误差 /%	内侧 UO ₂ 组件	0.048
	MOX 组件	0.059
	外侧 UO ₂ 组件	-0.349
棒功率误差 /%	功率最大棒	-0.011
	功率最小棒	0.156
	最大误差	0.961
	AVG ^[2]	0.305
	RMS	0.366
	MRE	0.271

AVG—平均值；RMS—均方根；MRE—平均径向误差

2.3 计算效率验证

模块化矩阵 MOC 方法的理论研究指出，综合利用系数矩阵的数值特性（1）、（2）、（3）、（4），可减少构造系数矩阵的计算量至约 23%，并降低存储需求至约 17%。针对 2D C5G7 基准题，下面将给出详尽的数值结果并予以分析。

表 4 给出计算 2D C5G7 基准题的内存消耗及矩阵准备时间，按列从左至右递进地使用系数矩阵的各项数值特性。

表 4 2D C5G7 基准题内存消耗及矩阵准备时间

Table 4 Memory Consume and Matrix Preparing Time of 2D C5G7

参数	无数值性质	数值性质 (2)	数值性质 (3)	数值性质 (4)	数值性质 (1)
内存需求 /MB	~2075	1106.8	1114.8	570.4	414.5
矩阵准备时间/s	~400	200.7	178.6	94.7	93.5

应用数值特性(2),即系数矩阵 A 和 B 的比例关系,可以省去矩阵 B 的存储空间和计算量。表 4 表明,计算量和存储需求都减至约 50%。

应用数值特性(3),即提取系数矩阵 A 的公因子,特征线扫描构造系数矩阵时重复的公因子相乘被省去,代之以一次初等变换。表 4 表明,计算量减至约 90%。

应用数值特性(4),即矩阵 a (即提取公因子后系数矩阵)的对称性,只须构造和存储 a 的下三角部分。表 4 表明,计算量和存储空间都减少至约 50%。

应用数值特性(1),即不同能群的系数矩阵共享一套 CSR 格式稀疏结构。表 4 表明,内存需求减至约 $f(G) = 72\%$ 。

综上所述,充分利用系数矩阵的数值特性,可以有效地减少系数矩阵的构造时间并节约存储空间。

3 多群耦合 GMRES 算法验证

分别采用逐群 Gauss-Seidel 迭代和多群 GMRES 耦合算法计算 2D C5G7 基准题。如表 3 所示,2 种方法的计算结果与基准值都符合得很好,多群 GMRES 耦合算法和逐群 Gauss-Seidel 迭代处理多群上散射问题具有相同的计算精度。

表 5 列出了逐群 Gauss-Seidel 迭代和多群 GMRES 耦合算法的外迭代次数和计算时间;图 3 是 2 种方法的 k_{eff} 误差 ($k_{\text{eff}}\text{-err}$) 和中子标通量误差 (Flux-err) 衰减曲线。从表 5 和图 3 可以看出,多群耦合 GMRES 算法 $k_{\text{eff}}\text{-err}$ 和 Flux-err 随着外迭代的进行快速衰减,外迭代的次数大幅减少,由 226 次变为 44 次,约为原来的 1/5。然而,线性求解计算时间却仅缩短至原来的 3/5。这是因为多群耦合 GMRES 算法求解的矩阵规模由 T 阶变为 $T \times G$ 阶,且散射矩阵的并入使得方程奇异性增强,以致多群 GMRES 耦合算法的迭代次数由约 20 次增大为约 60 次。多群 GMRES 耦合算法在

表 5 求解 2D C5G7 基准题外迭代次数和计算时间
Table 5 Outer Iteration Count and Computational Time for 2D C5G7

迭代方法	外迭代次数	矩阵构造时间/s	线性求解时间/s	总时间/s
逐群 Gauss-Seidel	226	91.7	939.7	1031.4
多群 GMRES 耦合	44	91.1	582.0	673.1

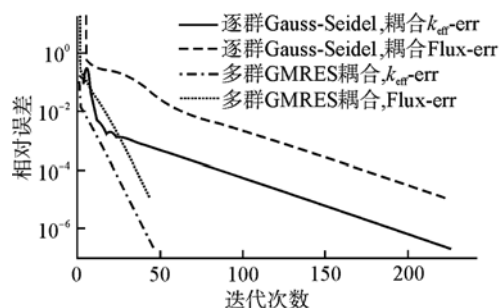


图 3 k_{eff} 和标通量的误差衰减曲线
Fig. 3 Error Decreasing of k_{eff} and Scalar Flux

保证计算精度的前提下,能有效地提高计算效率。

4 对称模式的模块化方法验证

UO₂ 组件具有良好的对称性,采用 6 种对称模式对该问题进行计算:①全组件;②三角形半组件;③竖直半组件;④横向半组件;⑤1/4 组件;⑥1/8 组件。表 6 列出了 6 种对称模式的计算结果和计算时间, k_{inf} 的参考值由多群 Monte Carlo 程序 MCMG 提供^[5]。如表 6 所示,6 种对称模式得到的 k_{inf} 与参考解符合良好。结果表明,采用对称模式进行计算时,矩阵准备时间和线性求解时间均大幅减少。由此可见,在模块化矩阵 MOC 中,充分利用问题的对称性是非常必要的提高计算效率的手段。

表 6 不同对称模式下 UO₂ 组件的计算结果
Table 6 Results of UO₂ Assembly Calculated in Various Symmetric Modes

模式	k_{inf}	k_{inf} 误差 /%	矩阵构造时间/s	线性求解时间/s	总时间 /s
MCMG	1.333419	—	—	—	—
①	1.332878	-0.041	33.7	28.9	62.6
②	1.332893	-0.039	12.6	12.8	25.4
③	1.332881	-0.040	12.7	10.9	23.6
④	1.332881	-0.040	12.7	11.0	23.7
⑤	1.332886	-0.040	5.2	4.5	9.7
⑥	1.332919	-0.037	2.2	2.5	4.7

5 结论与展望

通过对 3 个基准题的求解,对理论研究部分的结论进行了充分的验证:利用系数矩阵的数值特性,可有效地减少系数矩阵的构造时间并节约存储空间;基于模块化射线追踪的矩阵 MOC 方法,能够充分利用问题的对称性以提高计算效率;

上散射存在时，多群耦合的 GMRES 算法在保证计算精度的前提下，能够显著地减少外迭代次数，节约计算时间。

尽管利用了系数矩阵良好的数值特性，但其构造仍须花费较长时间，下一步可在能群和角度方面将该过程并行化。结合多群 GMRES 耦合算法，下一步将把 Wielandt 加速和隐式再启动的 Arnoldi 算法（IRAM）用于外迭代，以进一步加速外迭代的收敛。

参考文献：

- [1] Yang X, Satvat N. MOCUM: A two-Dimensional method of characteristics code based on unstructured meshing for general geometries[C]. PHYSOR 2012 Advances in Reactor Physics Linking Research, Industry, and Education, Knoxville, TN, United states, American Nuclear Society, 2012.
- [2] Lewis E E, Smith M E. Benchmark specification for deterministic 2-D/3-D MOX fuel assembly transport calculations without spatial homogenisation (C5G7 MOX)[R]. OECD/NEA Report, 2001.
- [3] Zhang H, Wu H, Cao L. An acceleration technique for 2D MOC based on krylov subspace and domain decomposition methods [J]. Annals of Nuclear Energy, 2011, 38: 2742-2751.
- [4] Leonard A M C T. Optimal polar angles and weights for the characteristics method [J]. Trans. Am. Nucl. Soc, 1995, 73: 172-173.
- [5] Zhang Z, Wang K, Li Q. Acceleration and parallelization of arbitrary trajectory based three-dimensional method of characteristics[C]. Proceedings of the 2012 20th International Conference on Nuclear Engineering, Anaheim, California, USA, 2012.

Matrix Method of Characteristics Based on Modular Ray Tracing (2)——Numerical Verification

Wu Wenbin^{1,2}, Li Qing², Wang Kan¹

1. Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing, 100084, China;

2. Science Technology on Reactor System Design Technology Laboratory, Nuclear Power Institute of China, Chengdu, 610041, China

Abstract: In the companion paper, Matrix MOC based on modular ray tracing was studied, the numeric properties of the coefficient matrix were analyzed and multi-group GMRES method was proposed. Based on these theories, a modular ray tracing MOC code was developed in CPP programming language. To verify the efficiency and accuracy, three benchmarks were computed, which are BWR lattice benchmark, UO₂ assembly and 2D C5G7 benchmark. Numerical results of the benchmarks demonstrate that Matrix MOC based on modular ray tracing can obtain good efficiency and accuracy.

Key words: Matrix MOC, Modular ray tracing, Multi-group GMRES, Numerical verification

作者简介：

吴文斌（1987—），男，博士研究生。2009年毕业于清华大学工程物理系，获学士学位。现主要从事反应堆物理中子输运计算。

李庆（1971—），男，研究员级高级工程师，硕士生导师。1997年毕业于清华大学核研院，获硕士学位。现主要从事反应堆堆芯核设计和技术管理工作。

王侃（1965—），男，教授，博士生导师。1993年毕业于西安交通大学能源与动力工程系反应堆工程与反应堆安全专业，获博士学位。现主要从事核能科学与工程方向的科研与教学工作。

（责任编辑：刘君）