

文章编号：0258-0926(2018)02-0086-04；doi:10.13832/j.jnpe.2018.02.0086

中子扩散三维非均匀变分节块法及 平源加速方法研究

张腾飞¹，吴宏春²，曹良志²，李云召²，熊进标¹，刘晓晶¹

1. 上海交通大学核科学与工程学院, 上海, 200240; 2. 西安交通大学核科学与技术学院, 西安, 710049

摘要：作为三维全堆芯非均匀运输计算的基础，基于扩散近似提出了三维非均匀变分节块法，能够采用节块内部的等参有限元和节块轴向表面的分片常量精细描述燃料棒的非均匀几何结构，消除均匀化过程。同时，为了降低计算代价，相应地提出了平源加速方法（FS）。数值结果表明，该方法具有可靠的精度，且 FS 能够在不影响精度的前提下有效地降低计算内存和计算时间。

关键词：中子扩散三维非均匀变分节块法；平源加速方法（FS）；等参有限元；分片常量

中图分类号：TL325 **文献标志码：**A

Study on Three-Dimensional Neutron Diffusion Heterogeneous Variational Nodal Method and Flat Source Acceleration Method

Zhang Tengfei¹, Wu Hongchun², Cao Liangzhi², Li Yunzhao²,
Xiong Jinbiao¹, Liu Xiaojing¹

1. School of Nuclear Science and Engineering, Shanghai Jiaotong University, Shanghai, 200240, China
2. School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049, China

Abstract: As a foundation of three-dimensional whole-core heterogeneous transport calculation, a 3D heterogeneous variational nodal method is proposed, which employs iso-parametric finite elements within each node and piecewise constants along nodal interfaces to explicitly describe the pin-resolved heterogeneous geometry. This means full elimination of the homogenization approximation. Meanwhile, the flat source acceleration method is proposed accordingly to reduce the computational costs. Numerical results show that the method is accurate and the flat source region acceleration method can effectively decrease the memory storage and computational time without degrading the accuracy.

Key Words: Three-dimensional neutron diffusion heterogeneous variational nodal method, Flat source region acceleration method, Iso-parametric finite element, Piecewise constants

0 引言

核反应堆中子学计算研究以核反应堆堆芯为应用对象，堆芯由许多不同种类的组件构成。根据堆型的不同，组件内部的几何结构和材料布置复杂多变。因此，反应堆中子学问题实际是一个三维非均匀几何的中子输运问题。对核反应堆进行快速、精确的中子学计算，是反应堆设计和校

核的基本保障^[1]。因此，作为三维全堆芯非均匀运输计算的基础，笔者提出一种三维中子扩散非均匀变分节块法，能够精细描述核反应堆棒束内部的非均匀几何和材料分布，从而消除均匀化过程。同时提出了适用于非均匀变分节块法的平源加速方法（FS），能够有效降低计算时间和计算内存。

收稿日期：2017-10-19；修回日期：2017-11-28

作者简介：张腾飞（1988—），男，讲师，现从事反应堆物理专业研究

1 理论模型

1.1 中子扩散三维非均匀变分节块法

针对某一特定能群，在扩散近似下，二阶偶阶中子扩散方程可写为：

$$-\Omega \cdot \nabla \Sigma_t^{-1} \Omega \cdot \nabla \phi + \Sigma_r \phi = q \quad (1)$$

式中， ϕ 为节块内部中子通量密度； Ω 为方位角向量； Σ_t 为中子总截面； Σ_r 为中子移出截面； q 为中子源项。根据变分原理，在由若干节块组成的整个求解域上，对应扩散方程的泛函可以写作各个节块内部及其表面上泛函的叠加贡献^[2]：

$$F[\phi, j] = \sum_v F_v[\phi, j] \quad (2)$$

式中， F 为整个问题求解域内的泛函； v 代表节块； F_v 为单个节块内部的泛函； j 为节块表面中子流。在扩散近似下，各节块泛函可以写为：

$$F_v[\phi, j] = \int_v dV [(3\Sigma_t)^{-1} (\nabla \phi)^2 + \Sigma_r \phi^2 - 2\phi q] + 2 \int_{\Gamma} d\Gamma \phi j_n \quad (3)$$

式中， Γ 是外部边界。利用 x - y 方向的有限元形状函数和 z 方向的正交多项式对节块内部中子通量密度、节块表面中子流分别展开：

$$\phi(\mathbf{r}) = \mathbf{f}_z^T(z) \otimes \mathbf{g}^T(x, y) \underline{\phi} \quad (4)$$

$$j_{\pm y}(\gamma', z) = \mathbf{f}'^T_z(z) \otimes \mathbf{f}'^T_\gamma(\gamma') \underline{j}_{\pm y} \quad (5)$$

$$j_{\pm z}(x, y) = \mathbf{h}^T(x, y) \underline{j}_{\pm z}, \quad z = \pm \frac{1}{2} \Delta z \quad (6)$$

式中， $\mathbf{f}_\gamma(\gamma)$ 为标准正交多项式向量， $\gamma = x, y, z$ ； $\mathbf{g}(x, y)$ 是 x - y 方向的等参有限元形状函数向量； \otimes 为克罗内克积（张量积）； $\mathbf{h}(x, y)$ 为节块 z 表面分片常量。有限元形状函数 $\mathbf{g}(x, y)$ 选取为等参有限元，能够精细描述压水堆栅元燃料棒的曲边几何形状。

将式 (4) ~ 式 (6) 代入式 (3)，可得节块内部泛函的离散形式：

$$F_v[\phi, j] = \underline{\phi}^T \mathbf{A}_{\phi\phi} \underline{\phi} - 2\underline{\phi}^T \mathbf{M}_{\phi j} \underline{j} \quad (7)$$

式中， \mathbf{A} 、 \mathbf{M} 矩阵分别为系数矩阵，与各方块的材料分布与空间几何有关。

利用变分原理，分别对 ϕ 、 j 求一阶变分使之为零，并经变形可得节块内部的中子标通量密度求解方程及代表节块内部和表面响应关系的响应矩阵方程：

$$\underline{\phi} = \mathbf{H} \underline{q} - \mathbf{C} (\underline{j}^+ - \underline{j}^-) \quad (8)$$

$$\underline{j}^+ = \mathbf{B} \underline{q} + \mathbf{R} \underline{j}^- \quad (9)$$

式中， ϕ 为中子标通量密度矩； q 为中子源项展开矩； \underline{j}^- 和 \underline{j}^+ 分别对应节块的入射和出射中子流密度矩。 \mathbf{H} 、 \mathbf{C} 、 \mathbf{B} 、 \mathbf{R} 为响应矩阵，与节块内部材料分布及空间几何相关。通常情况下，先采用传统的红-黑迭代^[2]方式求解式 (9) 得到出、入射中子流密度矩，再代入式 (8) 得到中子标通量密度矩。

1.2 FS

为了能够实际描述栅元的非均匀几何结构，且保证足够的计算精度，往往需要大量的有限元网格剖分，因此计算量较大。以图 1 中所示的 1 个 C5G7 压水堆基准题^[3]栅元为例，栅元包含燃料和冷却剂两区，分别以红色和蓝色标示，黑点代表有限元网格的节点。采用 2 阶等参有限元^[4]对其进行非结构网格剖分，共包含 32 个有限元，对应 97 个有限元节点。在一般的有限元方法中，问题求解的未知量与有限元节点数目相同。为了降低计算时间和计算内存，本文提出 FS。通过将有限元划分为平源区，以达到减小栅元中自由度的目的。在各平源区中，各有限元节点的源项被处理为与平源区内的平均源项相等。因此，在图 1 所示的问题中，若采用 FS 划分每个有限元为一个平源区，那么栅元中的自由度可以从 97 减少到 32，从而显著降低中子角通量密度矩的存储计算内存，同时提高计算效率。

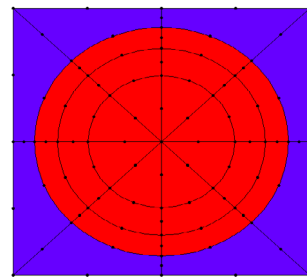


图 1 C5G7 压水堆基准题栅元的网格剖分
Fig. 1 Pin Cell Meshing Scheme of C5G7 PWR Benchmark

2 数值验证

基于以上理论模型，开发了三维非均匀变分节块程序 PANX1.0。由于非均匀几何的输运基准题较少，为验证程序的精度，采用均匀节块情况下不同扩散程序针对 KUCA 基准题和 Pin-by-Pin 堆芯问题进行了计算对比。此外，为检验 FS 对于

计算精度和计算代价的影响,选取了 C5G7 基准题^[3]中的不插棒问题进行了不同 FS 计算方案的对比。计算皆在单 CPU 条件下进行, CPU 型号为 Intel Xeon X7560、2.70 GHz。

2.1 计算精度的数值校验

KUCA 基准题^[5]模拟了 1 个小型轻水反应堆,几何尺寸为 50 cm×50 cm×50 cm,采用两群均匀化群常数计算,共分为插棒和不插棒两种堆芯布置。由于控制棒是强吸收体,采用扩散计算会引入计算误差,因此本文中仅采用插棒布置进行不同程序之间的校核。Pin-by-Pin 堆芯问题使用 DRAGON 程序^[6]生成 7 群少群截面,堆芯布置与 C5G7 基准题的不插棒布置相同。在两组问题的对比过程中,利用细网差分程序 CITATION 的计算结果作为参考解,同时采用阿贡国家实验室开发的扩散计算程序 NODAL^[7]辅助对比。PANX1.0 采用如图 2 的网格划分进行计算,其中红点为有限元节点。计算结果对比见表 1。

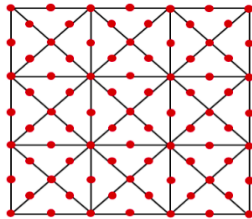


图 2 PANX1.0 计算所采用的有限元网格
Fig. 2 Finite Element Mesh Used in PANX1.0

表 1 KUCA 基准题 PANX1.0 与其他扩散程序的计算结果对比
Table 1 Result Comparison between PANX1.0 and Other Diffusion Codes for KUCA Benchmark

基准题名称	对比结果	PANX1.0	NODAL	CITATION
KUCA 基准题	k_{eff}	0.92827	0.92846	0.92905
	相对误差/ 10^{-5}	-84	-63	参考解
二维 Pin-by-Pin 问题	k_{eff}	1.18619	1.18619	1.18607
	相对误差/ 10^{-5}	13	10	参考解
三维 Pin-by-Pin 问题	k_{eff}	1.14325	1.14319	1.14291
	相对误差/ 10^{-5}	30	24	参考解

注: k_{eff} 为有效增值系数。

由表 1 的对比结果可知, PANX1.0 与参考解吻合较好,误差不超过 1.0×10^{-3} 。同时, PANX1.0 与 NODAL 的计算结果几乎完全相符,误差的绝

对值不超过 2.0×10^{-4} 。这是由于二者皆基于变分节块方法开发导致。然而, NODAL 在节块内采用正交多项式基函数,仅能处理均匀节块;而 PANX1.0 在节块内部采用等参有限元基函数,具备非均匀节块的处理能力。

2.2 FS 的数值分析

为检验 FS 的加速效果,采用 C5G7 基准题的不插棒布置进行计算时间和计算效率的对比。在计算过程中,各个栅元和冷却剂的网格剖分如图 1 所示。为了研究 FS 模型和轴向分层对计算结果、计算时间以及计算内存需求的影响,在计算中分别利用有/无 FS 进行计算,同时考虑了 3 种不同的轴向分层方案:9 层、18 层以及 45 层,并计算了不同轴向展开阶数下的计算结果。由于此节的结果皆采用三维扩散计算,使用基准题中蒙特卡罗的计算结果作为参考解将会存在低阶和高阶角度近似的理论误差。因此,将无 FS、轴向 45 层的计算结果作为对比的参考解, k_{eff} 和计算代价的对比结果见表 2。

表 2 中的对比结果表明:在同样的轴向层数、轴向 FS 阶数的情况下, PANX1.0 采用有 FS 相比于无 FS 计算得到的 k_{eff} 计算结果吻合很好。例如,在 2 阶轴向 FS 近似下,当轴向分为 9 层时,无 FS 的计算结果相对于参考解的误差为 4.7×10^{-4} ,有 FS 的计算误差为 4×10^{-4} ,二者相差 7×10^{-5} 。由此可见, FS 几乎不会对计算精度产生任何影响。然而,对于计算时间和计算内存的对比显示,使用 FS 能够显著地降低计算代价。考虑采用 2 阶轴向 FS 的情况:当问题的轴向分为 9 层时,有 FS 的计算速度相比于无 FS 快 4.1 倍;18 层时,有 FS 的计算速度相比于无 FS 快 3.4 倍;45 层时快 2.6 倍。3 种情况下有 FS 计算所需要的计算内存相比于无 FS 皆降低近 70%。此外,计算效率出现增幅随着层数的增加而减缓的现象,这是由 FS 的作用机理引起的:FS 通过降低节块内部自由度的数目达到提高计算效率、降低计算内存的目的,但它并不改变节块表面的自由度数目。因此,当层数增加时,节块表面数也随之增加,导致矩阵方程的求解时间有所增长,从而削弱了 FS 对于整体计算的加速能力。即便如此,以上结果依然显示出 FS 在降低计算内存和计算时间上具有较好的效果。

表 2 C5G7 MOX 基准题不插棒布置的扩散计算结果对比
Table 2 Comparison of Diffusion Calculation Results for C5G7 MOX Benchmark with Control Rods Fully Withdrawn

轴向层数	轴向展开阶数	k_{eff}	相对误差/ 10^{-5}	计算时间/h	计算内存/GB	
无 FS	9	2	1.13885	47	5.75	4.12
	18	2	1.13838	6	11.29	8.16
	45	2	1.13831	参考解	28.42	20.20
有 FS	9	0	1.11582	-1976	0.83	0.64
		1	1.13905	65	0.97	1.01
		2	1.13877	40	1.12	1.39
	18	0	1.13242	-517	1.94	1.25
		1	1.13836	5	2.08	2.00
		2	1.13829	-2	2.55	2.76
	45	0	1.13736	-84	5.98	3.10
		1	1.13827	-4	6.85	4.98
		2	1.13826	-5	7.98	6.82

3 结论与展望

本文提出的中子扩散非均匀变分节块法通过利用节块内部的等参有限元和节块轴向表面的分片常量，能够精细地描述棒束内部的非均匀几何结构，消除均匀化过程。数值结果表明，该方法具备可靠的精度。同时，提出的 FS 能够在不牺牲精度的前提下，显著地降低中子扩散非均匀变分节块法的计算时间和计算内存。基于此工作，通过引入中子通量密度的角度相关性，能够达到全堆芯三维非均匀运输计算的效果。

参考文献：

- [1] 邓力, 史敦服, 李刚. 高保真计算多物理耦合关键技术[J]. 计算物理, 2016, 33(6): 631-638.
- [2] Lewis EE, Carrico CB, Palmiotti G. Variational nodal formulation for the spherical harmonics equations[J].

Nuclear Science and Engineering, 1996, 122(2): 194-203.

- [3] Fish J, Belytschko T. A first course in finite elements [M]. John Wiley & Sons, 2007.
- [4] SMITH M A, LEWIS E E, NA B C. Benchmark on deterministic 2-D MOX fuel assembly transport calculations without spatial homogenization [J]. Progress in Nuclear Energy, 2004, 45(2): 107-118.
- [5] 卢皓亮. 基于三角形网格的中子扩散和运输节块方法研究[D]. 中国西安: 西安交通大学, 2007.
- [6] Marleau G, Hébert A, Roy R. A user's guide for DRAGON[Z], Montréal Canada: Ecole Polytechnique de Montréal, 1997.
- [7] 李云召. 基于变分节块法和节块 SP_3 方法的先进堆芯中子学计算方法研究[D]. 西安: 西安交通大学, 2012.

(责任编辑: 张祚豪)