

基于非结构网格的中子输运方程计算方法研究

吴宏春, 巨海涛, 卢皓亮, 刘国明, 曹良志

(西安交通大学能源与动力工程学院, 710049, 西安)

摘要: 针对非结构网格下中子输运方程的求解方法问题, 分别研究了球谐函数(P_n)有限元方法、离散纵标(S_n)有限元方法、三角形穿透概率方法和三角形节块 S_n 方法的计算模型. 结果表明: 有限元方法具有比较高的计算精度; P_n 方法避免了 S_n 方法中的“射线效应”现象, 而 S_n 有限元方法则具有容易处理真空边界条件的优点; 三角形穿透概率方法的计算时间最快; 三角形节块 S_n 方法则可以保证在计算较快的情况下同时具有较高的计算精度. 根据上述 4 种方法分别研制了相应的计算程序, 利用基准题进行了验证并分析了各自的优缺点, 计算结果表明每种方法均能得到满意的计算精度.

关键词: 中子输运; 非结构网格; 计算方法

中图分类号: TP301 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-987X(2007)05-0562-05

Study of Numerical Computation Methods for Neutron Transport Equation Based on Unstructured-Meshes

Wu Hongchun, Ju Haitao, Lu Haoliang, Liu Guoming, Cao Liangzhi

(School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: For the numerical solutions of the neutron transport equation based on unstructured-meshes, four types of new methods were developed including the spherical harmonics (P_n) finite element method, the discrete ordinates (S_n) finite element method, the triangle transmission probability method, and the triangle nodal method. The precision of the finite element methods is the highest. The P_n method avoids the ray effect in the S_n method. The S_n method can treat void boundary condition easily. The CPU time of the transmission probability method based on triangle meshes is the least. The nodal S_n method has less CPU time and better precision. The numerical computation was conducted with the present four new methods for some benchmark problems. The results show that the precision of the four new methods is high.

Keywords: neutron transport; unstructured-mesh; numerical method

中子输运方程的数值计算是先进核反应堆设计的核心研究课题. 近几十年来, 由于核电事业的发展, 中子输运方程的数值求解方法有了较大的发展, 并有了精度较高的计算软件, 比较有代表性的有细网差分离散坐标方法程序 DOT 和粗网节块离散坐标方法程序 DNTM. 这些程序都只能运用于像现有核反应堆这样的介质稳定(不流动)、结构化几何区域、中子散射各向异性不强等一类问题的求解. 但

是, 新一代先进核反应堆的发展使得模拟中子运动的中子输运方程的求解变得非常复杂, 现有的中子输运计算软件许多已无法满足要求.

处理中子输运方程方向变量的方法主要有离散纵标(S_n)方法、球谐函数(P_n)方法和穿透概率方法. 穿透概率方法比 P_1 近似或扩散理论的精确度要高, 而计算却较 S_n 方法简单许多. S_n 方法比 P_n 方法简单, 具有容易处理真空边界以及计算速度较

快的优点. P_n 方法则避免了 S_n 方法中的“射线效应”现象. 离散空间变量的方法主要有有限元方法和节块方法等, 其中节块方法发展比较成熟, 而有限元方法的计算精度则比较高. 本文针对各种方法的特点分别研究了 P_n 有限元方法, S_n 有限元方法、三角形穿透概率方法和三角形节块 S_n 方法, 并对计算结果进行了分析比较.

1 计算模型简介

这里因篇幅限制, 只能简单介绍 4 种算法的计算模型, 详细模型可参见文献[1-4].

1.1 P_n 有限元方法

传统的 P_n 方法主要研究基于一阶的输运方程或者二阶的奇偶自共轭输运方程. 文献[5]提出了一种新的二阶自共轭角通量密度输运方程 (self-adjoint angular flux, SAAF), 并指出与传统的一阶输运方程和二阶奇偶自共轭方程相比, SAAF 方程具有很多独特的数值求解优点, 这为 P_n 方法的研究开辟了一条新的道路.

SAAF 方程的基本形式为

$$-\mathbf{\Omega} \cdot \nabla (\Sigma_t - S)^{-1} \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) + (\Sigma_t - S) \Phi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) = q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) - \mathbf{\Omega} \cdot \nabla (\Sigma_t - S)^{-1} q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}) \quad (1)$$

式中: $\mathbf{\Omega}$ 为单位方向矢量, Φ 为中子注量率; Σ_t 为宏观总截面; S 为固定外源.

中子角通量密度用球谐函数展开为

$$\Phi_g(x, y, \theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n [\Psi_{n,m,g}(x, y) \cos m\varphi + \gamma_{n,m,g}(x, y) \sin m\varphi] P_n^m(\cos\theta) \quad (2)$$

散射截面用勒让特多项式展开为

$$\Sigma_{s,g}(\mathbf{r}, \mu_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{4\pi} \Sigma_{s,g}(\mathbf{r}) P_n(\mu_0) \quad (3)$$

式中: 散射角余弦 $\mu_0 = \cos(\mathbf{\Omega}' \rightarrow \mathbf{\Omega})$.

本文据此模型研制了球谐有限元计算程序 TEPFEM^[1].

1.2 S_n 有限元方法

根据不同的变分形式, 有限元方法可以分为三大类: Rayleigh-Ritz 方法、Galerkin 方法和最小二乘有限元方法. 和其他方法相比, 最小二乘有限元方法最适应于求解一阶偏微分方程, 而且在大多数情况下, 可以证明最小二乘有限元解是最佳的数值逼近^[6]. 与二阶中子输运方程相比, 一阶中子输运方程能适用于真空区的求解. 文献[7]从单群各向同性的中子输运方程的球谐函数形式出发, 研究了最小二

乘有限元方法在其中的应用, 但这些研究仅仅局限于单群、各向同性问题的球谐函数形式, 对于多群、各向异性问题的离散纵标形式都没有涉及.

本文对多群各向异性的一阶中子输运方程进行离散纵标方法展开, 在得到一系列偏微分方程后, 采用最小二乘有限元方法进行求解, 据此研制了二维非结构网格下求解中子输运方程的程序 LES-FES^[2].

传统的一阶中子输运方程为

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Phi + \Sigma_t \Phi = Q_s + Q_f + S \quad (4)$$

式中: Q_s 为散射源; Q_f 为裂变源.

在直角坐标下, 二维多群一阶中子输运方程的离散纵标形式可以表示为

$$\mu_m \frac{\partial \Phi_{m,g}}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \Phi_{m,g}}{\partial y} + \Sigma_t \Phi_{m,g} = Q_{s,g} + Q_{f,g} + S_g \quad (5)$$

式中: μ_m 、 η_m 为中子运动方向 $\mathbf{\Omega}$ 离散后的方向余弦; $\Phi_{m,g} = \Phi_{m,g}(x, y, \mu_m, \eta_m)$ 是坐标为 (x, y) 处节点的第 g 群的中子注量率; $Q_{s,g}$ 为离散后第 g 群的散射源 (各向异性或各向同性); $Q_{f,g}$ 为离散后第 g 群的裂变源; S_g 为第 g 群的固定外源.

式(5)的最小二乘有限元变分形式可以表示为

$$\iint \left(\mu_m \frac{\partial \Phi_{m,g}}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \Phi_{m,g}}{\partial y} + \Sigma_t \Phi_{m,g} \right) \cdot \left(\mu_m \frac{\partial \Phi^0}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \Phi^0}{\partial y} + \Sigma_t \Phi^0 \right) dx dy = \iint (Q_{s,g} + Q_{f,g} + S_g) \left(\mu_m \frac{\partial \Phi^0}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \Phi^0}{\partial y} + \Sigma_t \Phi^0 \right) dx dy \quad (6)$$

1.3 三角形网格穿透概率方法

穿透概率法的基本思想是将系统分为若干子区 (见图 1), 且认为每个子区的材料性质是均匀的, 并在每个子区建立中子输运方程. 各子区之间通过界面上中子流必须连续的条件来耦合, 每个子区都只和其相邻的子区耦合, 所以也称为界面流方法. 迄今为止, 国内外已有许多用穿透概率法进行组件计算的程序, 如 TPFAP、TPHEX、COXY、SURCU 程序和 QP1 程序. 但是, 前人的研究都是针对方形^[8]和六角形几何^[9], 其子区划分多采用矩形和正六边形.

由于任意形状的三角形网格可以对曲边或者多边形区域很好地逼近, 因此, 本文研究了基于三角形网格的穿透概率法求解基于非结构网格的中子输运方程. 基本方程如下

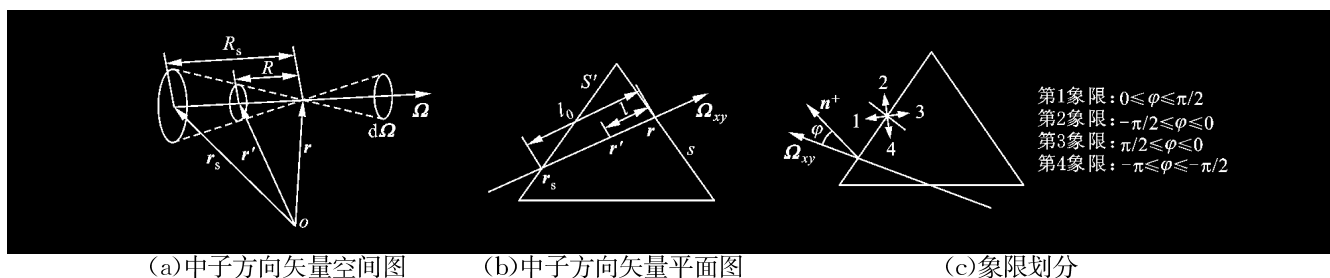


图1 三角形子区的中子方向矢量和象限划分

$$\Phi_{k,q}^+ = \int_{S_k} dS_k \int_q d\Omega \int_0^{l_0} Q(r', \Omega) e^{-\Sigma_t l / \cos \theta} \frac{dl}{\cos \theta} + \sum_{k' \neq k} \int_{S_{k'}} dS_{k'} \int_{q'} \Phi^-(r_{k'}, \Omega) e^{-\Sigma_t l_0 / \cos \theta} \frac{(\Omega \cdot n_{k'}^-)}{(\Omega \cdot n_k^+)} d\Omega \quad (7)$$

$$J_{k,q}^+ = \int_{S_k} dS_k \int_q (\Omega \cdot n_k^+) d\Omega \int_0^{l_0} Q(r', \Omega) e^{-\Sigma_t l / \cos \theta} \frac{dl}{\cos \theta} + \sum_{k' \neq k} \int_{S_{k'}} dS_{k'} \int_{q'} (\Omega \cdot n_{k'}^-) \Phi^-(r_{k'}, \Omega) e^{-\Sigma_t l_0 / \cos \theta} d\Omega \quad (8)$$

(k, k' = 1 ~ 3; q = 1, 2; q' = 3, 4)

设子区 e 的体积为 V_e , 根据中子平衡可得

$$\bar{\Phi}_e = \bar{Q}_e / \Sigma_{t,e} - J_e / \Sigma_{t,e} V_e \quad (9)$$

式中: $\bar{\Phi}_e$ 为子区 e 的平均通量密度; $\Sigma_{t,e}$ 为子区 e 的总截面; $\bar{Q}$ 为子区 e 内的平均源强(包括散射源、裂变源、外中子源); J_e 为子区 e 的净出射中子流。

式(7)~式(9)构成三角形穿透概率法的基本方程, 它可用于求解特征值和固定源问题. 本文据此模型研制了三角形穿透概率计算程序 TPTRI^[3].

1.4 三角形节块 S_n 方法

目前, 用于非结构网格计算的确定论方法主要有 P_n 有限元方法、 S_n 有限元方法及特征线方法等, 这些方法的计算量都比较大, 如应用于网格数较多的中子输运问题计算, 计算时间将会显著增长. 为了获得既快又具有良好精度的方法, 本文研究了三角形节块 S_n 方法, 并研制了计算程序 DNTR^[4].

考虑各向同性问题, S_n 离散后的二维中子输运方程可写为

$$\mu^m \frac{\partial \psi_x^{g,m}(x, y)}{\partial x} + \eta^m \frac{\partial \psi_y^{g,m}(x, y)}{\partial y} + \Sigma_t^g \psi^{g,m}(x, y) = Q^g(x, y) \quad (10)$$

利用面积坐标将任意三角形转变成正三角形(见图2).

利用横向积分技术, 在 $y \in [-y_s, y_s]$ 上对方程(3)积分, 可得如下的一维方程

$$\mu_x^m \frac{d\{y_s(x) \bar{\psi}_x^m(x)\}}{dx} + \Sigma_t y_s(x) \bar{\psi}_x^m(x) = y_s(x) \bar{Q}_x(x) - Lr_x^m(x) \quad (11)$$

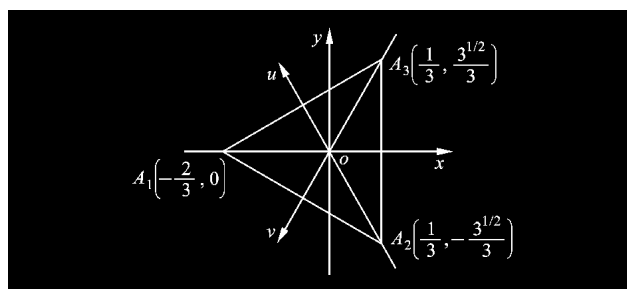


图2 正三角形节块

其中

$$\bar{\psi}_x^m(x) = \int_{-y_s}^{y_s} \psi^m(x, y) dy / (2y_s)$$

$$\bar{Q}_x(x) = \int_{-y_s}^{y_s} Q(x, y) dy / (2y_s)$$

$$Lr_x^m(x) = (\mu_u^m \psi_u^m(x) + \mu_v^m \psi_v^m(x)) / 3^{1/2}$$

$$\mu_u^m = -(\mu_x^m - (3)^{1/2} \eta_x^m) / 2$$

$$\mu_v^m = -(\mu_x^m + (3)^{1/2} \eta_x^m) / 2$$

$$\psi_u^m(x) = \psi^m(x, y_s); \psi_v^m(x) = \psi^m(x, -y_s)$$

2 数值结果

2.1 二维 BWR 基准题

该基准题为一个沸水堆栅元问题, 表1给出了计算结果的比较. 由表1的计算结果可见, 各个程序的计算结果与 SURCU 计算结果一致, K_{eff} 的最大误差不超过 0.08%; 与 SURCU 相比较, TPTRI 的 2

表1 BWR 问题计算结果比较

程序	$\Phi/\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$				K_{eff}	t/s
	(快群)		(热群)			
	1 区	2 区	1 区	2 区		
SURCU	1.0	0.927	0.353	0.451	1.213	
TEPFEM(1/2)	1.0	0.921	0.356	0.454	1.214	
LESFES(S ₁₆)	1.0	0.928	0.353	0.452	1.213	
TPTRI(1/2)	1.0	0.864	0.353	0.420	1.213	2.469
DNTR	1.0	0.936	0.355	0.455	1.212	0.5

注: 量率归一化原则; 1区快群中子注量率等于 1.0.

区中子注量率存在较大误差,应该是 TPTRI 理论模型中的平源近似引入了误差,而且 TPTRI 与 DNTR 的计算时间都很短.

2.2 IAEA 轻水堆问题

该算例模拟一个单群 5 区轻水池式反应堆. 计算结果与文献[7]中的结果比较见表 2. DOT4.2 程

序采用 96×86 的剖分网格,角度为 S_4 离散. 可以看出,除第 3 区由于中子注量率很低导致误差较大,TPTRI 由于平源近似引入误差以外,各个程序的计算结果与参考程序的结果符合得较好, K_{eff} 的最大误差不超过 0.15%,而且 DNTR 程序计算时间也只有 TEPFEM 程序的 20%,DOT4.2 程序的 18%.

表 2 IAEA 基准题计算结果比较

程序	$\Phi/\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$					K_{eff}	t/s
	1 区	2 区	3 区	4 区	5 区		
SURCU	0.016 86	0.000 125	0.000 041	0.000 295	0.000 791	1.008 3	
FELICIT	0.016 85	0.000 127	0.000 042	0.000 300	0.000 797	1.006 9	
DOT4.2	0.016 86	0.000 124	0.000 037	0.000 294	0.000 789	1.008 8	126.922
TEPFEM	0.016 86	0.000 125	0.000 033	0.000 297	0.000 784	1.007 9	115.438
LESFES(S_8)	0.016 86	0.000 124	0.000 037	0.000 294	0.000 789	1.008 8	
TPTRI	0.016 85	0.000 130	0.000 026	0.000 282	0.000 766	1.007 0	
DNTR	0.016 86	0.000 125	0.000 035	0.000 295	0.000 791	1.008 5	22.953

注量率均按照 $\int_V \sum_i \Phi_i dV = 1$ 归一化获得.

2.3 非结构几何问题

本问题的几何和截面参见文献[2]. 计算结果见表 3,可以看出:本文介绍的各个方法计算的各区中子注量率与 TEPFEM、MCNP 的计算结果基本一致; K_{eff} 的最大误差不超过 0.35%,这说明本文的 4 个方法都可以应用于非结构几何问题的求解.

表 3 非结构网格问题的结果

程序	$\Phi/\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$				K_{eff}
	(快群)		(热群)		
	燃料区	慢化区	燃料区	慢化区	
MG-MCNP3B	1.0	1.800	0.552	1.086	1.175
TEPFEM	1.0	1.828	0.557	1.107	1.172
LESFES	1.0	1.827	0.558	1.109	1.171
TPTRI	1.0	1.794	0.548	1.100	1.172
DNTR	1.0	1.827	0.558	1.105	1.175

注量率归一化原则:燃料区快群中子注量率等于 1.0.

3 结 论

本文针对非结构网格下的中子输运方程求解方法进行了研究,分别研究了 P_n 有限元、 S_n 有限元、穿透概率方法和节块方法,并分别研制了计算程序,利用基准题进行了验证,分析比较了各个方法的优缺点. 本文的研究结果为非结构网格中子输运计算

研究工作的深入奠定了基础,对新概念反应堆设计计算具有良好的应用前景,但尚需更多的算例验证和工程检验. 本文的计算模型均可直接应用到三维非结构几何,这一工作作者正在进行中. 另外,作者对适合于求解复杂几何的特征线方法和用于提高复杂几何计算速度的加速计算技术等研究也在进行中.

参考文献:

- [1] 曹良志,吴宏春. 非结构网格中子输运方程的球谐函数解法研究[J]. 核动力工程,2004,25(5): 395-398.
Cao Liangzhi, Wu Hongchun. Spherical-harmonics method for neutron transport equation based on unstructured-meshes [J]. Nuclear Power Engineering, 2004,25(5): 395-398.
- [2] 巨海涛,吴宏春,曹良志,等. 二维中子输运方程的非结构网格离散纵标数值解法[J]. 核动力工程,2006,27(3):1-5.
Ju Haitao, Wu Hongchun, Cao Liangzhi, et al. Discrete ordinates method for two-dimensional neutron transport equation based on unstructured-meshes [J]. Nuclear Power Engineering, 2006,27(3): 1-5.
- [3] 刘萍萍,吴宏春. 基于三角形网格的穿透概率方法研究[J]. 核动力工程,2006,27(5): 12-18.
Liu Pingping, Wu Hongchun. Study of transmission probability method based on triangle meshes [J]. Nu-

- clear Power Engineering, 2006, 27(5): 12-18.
- [4] 卢皓亮, 吴宏春, 曹良志, 等. 中子输运方程的三角形节块 S_n 方法研究[J]. 核动力工程, 2006, 27(5): 6-11.
- Lu Haoliang, Wu Hongchun, Cao Liangzhi, et al. Nodal S_n method for neutron transport equation in triangular geometry [J]. Nuclear Power Engineering, 2006, 27(5): 6-11.
- [5] Morel J E, McGhee J M. A self-adjoint angular flux equation[J]. Nuclear Science and Engineering, 1999, 132(3): 312-325.
- [6] 应根军. 三维扩散占优中子输运方程的最小二乘有限元数值模拟[D]. 西安: 西安交通大学能源与动力工程学院, 2003.
- [7] Manteuffel T A, Ressel K J. Least-squares finite-element solution of the neutron transport equation in diffusive regimes[J]. Siam J Numer Anal, 1998, 35(2): 806-835.
- [8] 黄群英. 穿透几率方法在轻水堆燃料组件计算中的应用 [D]. 西安: 西安交通大学能源与动力工程学院, 1989.
- [9] 张颖. 二维六角形几何中子积分输运方程数值解法及压水堆六角形组件计算软件包研制[D]. 西安: 西安交通大学能源与动力工程学院, 2000.
- (编辑 王焕雪)