

三维中子输运方程的非结构网格离散纵标数值解法

巨海涛¹, 吴宏春¹, 姚栋², 咸春宇²

(1. 西安交通大学能源与动力工程学院, 710049, 西安; 2. 中国核动力研究设计院核反应堆系统设计技术国家级重点实验室, 610041, 成都)

摘要: 从一阶三维中子输运方程出发, 对方向变量采用离散纵标方法展开, 得到一系列关于空间变量的偏微分方程, 从而避免了二阶方程由于分母上存在截面, 不能准确描述内含真空介质的问题. 对这些关于空间变量的方程采用最小二乘有限元方法进行离散, 形成的刚度矩阵是对称的, 因此可以采用快速迭代方法求解. 据此编制了三维中子输运方程的非结构网格离散纵标计算程序, 并采用三棱柱元素和四面体元素剖分对一系列基准问题做了验算. 计算结果表明, 该方法能用于非结构网格, 并具有较高的计算精度, 对多数问题, 有效增值系数的误差都小于 0.3%, 通量误差都小于 3.0%.

关键词: 离散纵标方法; 最小二乘; 有限元; 非结构网格

中图分类号: TP301 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-987X(2007)03-0363-04

Discrete Ordinates Method for Three-Dimensional Neutron Transport Equation Based on Unstructured-Meshes

Ju Haitao¹, Wu Hongchun¹, Yao Dong², Xian Chunyu²

(1. School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;

2. National Key Laboratory of Reactor System Design Technology, Nuclear Power Institute of China, Chengdu 610041, China)

Abstract: A discrete ordinates method for three-dimensional neutron transport equation based on unstructured-meshes was derived from the first-order neutron transport equation. A set of differential equations about the spatial variables were obtained. It avoids the singularity in void regions from the second-order form of the equation, which implies the inversion of the total cross-section. The differential equations were solved iteratively using the least-squares finite element method. For the symmetric stiffness matrix, the fast iteration method can be used. A three-dimensional transport calculation code was programmed. The triangular prism and the tetrahedron elements were used in the calculation. The numerical results of some benchmark problems show that this method can be used in unstructured-meshes and can give high precise result. For most problems, the error is less than 0.3% for the eigenvalue and 3.0% for the angular flux, respectively.

Keywords: discrete ordinate method; least-square; finite element; unstructured-mesh

长期以来, 在三维中子输运方程的空间变量离散求解方法中, 有限差分方法是有效和精确的方法之一, 并被广泛采用. 近年来, 节块或粗网格方法在中子输运问题中也得到了广泛的应用^[1-2]. 但是, 这些方法特别适用于比较规则的几何问题, 不能求解

非结构网格问题, 而有限元方法可以采用任意形状的网格剖分求解区域, 对区域的形状有很大的适应性, 因此可应用于非结构网格问题的求解.

目前, 国际上对输运方程的有限元方法研究主要分为两大类, 分别基于一阶方程和二阶方程. 二阶

方程由于在分母上存在截面,因此不能准确描述真空介质(截面为0),对求解内含真空区域的问题是不利的^[3].一阶方程的有限元求解方法主要有不连续有限元方法(DFEM)^[4-5]、传统的 Galerkin 方法和最小二乘有限元方法. DFEM 方法的主要缺点是由于在非均匀介质上对输运方程作了精确处理,因而在三维情况下会加大运算量,而传统的 Galerkin 方法形成的刚度矩阵非对称,因此不利于方程组的快速迭代求解. 最小二乘有限元方法则避免了这两者的缺点,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]. 文献[7-8]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 S_n 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,并据此开发了三维非结构网格下求解中子输运方程的程序,对一系列基准问题作了计算.

1 一阶中子输运方程的最小二乘有限元方法变分

1.1 一阶中子输运方程的离散纵标形式

传统的一阶中子输运方程为

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Phi + \Sigma_t \Phi = Q_s + Q_f + S \quad (1)$$

式中: $\boldsymbol{\Omega}$ 为单位方向矢量; Φ 为中子注量率, $\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$; Σ_t 为宏观总截面, cm^{-1} ; Q_s 为散射源, $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$; Q_f 为裂变源, $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$; S 为固定外源, $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$.

在三维直角坐标下,多群一阶中子输运方程的离散纵标形式可以表示为

$$\mu_m \frac{\partial \Phi_{m,g}}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \Phi_{m,g}}{\partial y} + \xi_m \frac{\partial \Phi_{m,g}}{\partial z} + \Sigma_{t,g} \Phi_{m,g} = Q_{s,g} + Q_{f,g} + S_g \quad (2)$$

式中: μ_m, η_m, ξ_m 为中子运动方向 $\boldsymbol{\Omega}$ 离散后的方向余弦; $\Phi_{m,g} = \Phi_{m,g}(x, y, z, \mu_m, \eta_m, \xi_m)$ 是坐标为 (x, y, z) 处节点上第 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. $Q_{s,g}, Q_{f,g}, \Phi_{m,g}$ 分别表示如下.

(1) 散射源为各向异性时

$$Q_{s,g} = Q_{s,g}(x, y, z, \mu_m, \eta_m, \xi_m) =$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2\pi} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{g' \rightarrow g, l} [P_l(\mu_m) \cdot \\ & \sum_{m'=1}^M W_{m'} P_l(\mu_{m'}) \Phi_{g'}(x, y, z, \mu_{m'}, \eta_{m'}, \xi_{m'})] + \\ & \frac{1}{\pi} \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{2} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{g' \rightarrow g, l} \left[\sum_{k=1}^l \frac{(l-k)!}{(l+k)!} P_l^k(\mu_m) \cdot \right. \\ & \left. \sum_{m'=1}^M W_{m'} P_l^k(\mu_{m'}) \cos k(\varphi_{m'} - \varphi_m) \cdot \right. \\ & \left. \Phi_{g'}(x, y, z, \mu_{m'}, \eta_{m'}, \xi_{m'}) \right] \end{aligned} \quad (3)$$

式中: $(\mu_{m'}, \eta_{m'}, \xi_{m'})$ 为 (μ_m, η_m, ξ_m) 的对称方向.

(2) 散射源为各向同性时

$$Q_{s,g} = Q_{s,g}(x, y, z, \mu_m, \eta_m, \xi_m) =$$

$$\frac{1}{4\pi} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{g' \rightarrow g} \sum_{m'=1}^M W_{m'} \Phi_{g'}(x, y, z, \mu_{m'}, \eta_{m'}, \xi_{m'}) \quad (4)$$

裂变源

$$Q_{f,g} = \frac{\chi_g}{4\pi k} \sum_{g'=1}^G (\nu \Sigma_f)_{g'} \cdot$$

$$\sum_{m'=1}^M W_{m'} \Phi_{g'}(x, y, z, \mu_{m'}, \eta_{m'}, \xi_{m'}) \quad (5)$$

假设边界条件为:

(1) 在对称边界 Γ_1 上

$$\Phi_{m,g} = \Phi_{m,g}(x, y, z, \mu_m, \eta_m, \xi_m) = \Phi_{m,g}(x, y, z, \mu_{m'}, \eta_{m'}, \xi_{m'}) \quad (x, y, z) \in \Gamma_1 \quad (6)$$

(2) 在真空边界 Γ_2 上

$$\Phi_{m,g} = \Phi_{m,g}(x, y, z, \mu_m, \eta_m, \xi_m) = 0 \quad (x, y, z) \in \Gamma_2 \quad (7)$$

将方程(2)表示为以下算子形式

$$L\Phi_{m,g} = F \quad (8)$$

1.2 最小二乘有限元变分形式

选取子空间

$$V := \{\Phi^0 \in H^1(\boldsymbol{\Omega})\} \quad (9)$$

式中: $H^1(\boldsymbol{\Omega})$ 为 Hilbert 空间. 方程(8)的最小二乘极小化泛函为

$$\min_{\Phi_{m,g} \in V} \tilde{F}(\Phi_{m,g}), \tilde{F}(\Phi_{m,g}) := \int [L\Phi_{m,g} - F]^2 dr \quad (10)$$

从而得到最小二乘变分问题

$$\begin{aligned} & \left. \begin{aligned} & \text{Find } \Phi_{m,g} \in V \text{ s. t.} \\ & \tilde{a}(\Phi_{m,g}, \Phi^0) = \tilde{b}(\Phi^0) \quad \forall \Phi^0 \in V \end{aligned} \right\} \quad (11) \\ & \left. \begin{aligned} & \tilde{a}(\Phi_{m,g}, \Phi^0) := (L\Phi_{m,g}, L\Phi^0) = \int L\Phi_{m,g} L\Phi^0 dr \\ & \tilde{b}(\Phi^0) := \int F L\Phi^0 dr \end{aligned} \right\} \quad (12) \end{aligned}$$

则方程(2)的最小二乘有限元变分形式可表示为

$$\begin{aligned} & \iint \left(\mu_m \frac{\partial \Phi_{m,g}}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \Phi_{m,g}}{\partial y} + \xi_m \frac{\partial \Phi_{m,g}}{\partial z} + \Sigma_t \Phi_{m,g} \right) \cdot \\ & \left(\mu_m \frac{\partial \Phi^0}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \Phi^0}{\partial y} + \xi_m \frac{\partial \Phi^0}{\partial z} + \Sigma_t \Phi^0 \right) dx dy dz = \\ & \iint (Q_{s,g} + Q_{f,g} + S_g) \cdot \\ & \left(\mu_m \frac{\partial \Phi^0}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \Phi^0}{\partial y} + \xi_m \frac{\partial \Phi^0}{\partial z} + \Sigma_t \Phi^0 \right) dx dy dz \end{aligned} \quad (13)$$

方程(13)是一个标准的有限元变分形式,因此可以采用通用的标准有限元程序来求解。在求解某个方向的中子角注量时,假设右端向量中的变量都是已知的,所有方向的角注量都可以通过迭代来求解,此时边界条件采用强加约束条件来处理。

2 基准问题的验证

根据上述理论模型,编制了三维输运程序 LESFES(least-squares finite element solution of neutron transport equation)。计算时,可以采用本程序的剖分功能或者采用有限元分析软件 ANSYS 对基准问题的几何图形进行三棱柱元素或四面体元素剖分,本程序提供了与 ANSYS 的剖分接口。

2.1 三维双区(芯部-反射层)正方体装置 K_{eff} 的计算

该问题由芯部和反射层 2 种材料组成,其截面和几何参数参见文献[1]。

有效增值系数 K_{eff} 的计算结果列于表 1 中,为便于与基准问题的参考值相比较,特征值和通量的收敛判据分别为 5.0×10^{-5} 和 10^{-4} 。其中 DNTM 方法是发展最早也是比较精确的粗网离散节块方法。

从表 1 中可以看出,采用节块方法的 DNTM 程序采用不同的网格大小时,结果相差很大,而有限元

表 1 三维双区基准问题的 K_{eff} 计算结果比较

程序	网络	K_{eff}	
		S_2	S_4
DNTM	$a=3 \times 3 \times 3^{1)}$	0.995 85	0.996 35
	$a=6 \times 6 \times 6$	0.978 88	0.979 91
	$a=9 \times 9 \times 9$	0.975 27	0.976 29
LESFES	$b=3 \text{ cm}^{2)}$	0.971 25	0.972 10
	$b=2 \text{ cm}$	0.971 69	0.972 57
	$b=1.5 \text{ cm}$	0.971 73	0.972 75

1):一个卦限内的节块数,节块宽度相同^[1];2):三棱柱剖分的底边三角形边长。

方法受网格大小的影响较小。

2.2 三维 FBR 问题

三维 FBR 问题同样是由 OECD/NEACRP 发布的 TAKEDA 基准题^[9],模拟一个小型的快增殖反应堆问题。该模型由 4 种材料和 4 个能群组成,其截面和几何参数参见文献[9]。

控制棒全提情况下 K_{eff} 的计算结果列于表 2。各区域平均中子通量结果列于表 3。其中 Monte-Carlo 和球谐函数方法 MARK- P_n 的结果来自文献[9]。本问题采用了三棱柱元素剖分。

表 2 FBR 基准问题的 K_{eff} 计算结果比较

程序	Monte-Carlo	MARK- P_n	LESFES
K_{eff}	0.973 2	0.979 4	0.971 1

尽管 LESFES 计算所采用的是阶数很低的 S_2 全对称求积组系数,但从表 2 中可以看出,采用 LESFES 计算得到的 K_{eff} 与采用 Monte-Carlo 计算得到的结果误差为 0.22%,采用 MARK- P_n 计算的结果与采用 Monte-Carlo 计算得到的结果误差为 0.64%。从表 3 可以看出,LESFES 的结果与 Monte-Carlo 参考值的大多数误差都小于 3.0%,而最大值出现在钠填充区的第 4 能群,为 13.8%。钠

表 3 FBR 基准问题区域平均中子注量率的结果比较

程序	能群	$\Phi_g / \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$			
		燃料区	轴向增殖区	径向增殖区	钠填充区
Monte-Carlo	1	$4.281 4 \times 10^{-5}$	$5.185 0 \times 10^{-6}$	$3.325 2 \times 10^{-6}$	$2.534 4 \times 10^{-5}$
	2	$2.408 1 \times 10^{-4}$	$4.691 2 \times 10^{-5}$	$3.089 3 \times 10^{-5}$	$1.665 8 \times 10^{-4}$
	3	$1.641 1 \times 10^{-4}$	$4.697 8 \times 10^{-5}$	$3.283 4 \times 10^{-5}$	$1.264 8 \times 10^{-4}$
	4	$6.224 7 \times 10^{-6}$	$3.773 6 \times 10^{-6}$	$2.047 3 \times 10^{-6}$	$6.984 0 \times 10^{-6}$
MARK- P_n	1	$4.237 0 \times 10^{-5}$	$5.449 2 \times 10^{-6}$	$3.559 5 \times 10^{-6}$	$2.513 0 \times 10^{-5}$
	2	$2.392 6 \times 10^{-4}$	$5.369 6 \times 10^{-5}$	$3.535 4 \times 10^{-5}$	$1.679 5 \times 10^{-4}$
	3	$1.667 9 \times 10^{-4}$	$5.755 1 \times 10^{-5}$	$4.026 1 \times 10^{-5}$	$1.318 7 \times 10^{-4}$
	4	$6.285 5 \times 10^{-6}$	$5.006 3 \times 10^{-6}$	$2.678 5 \times 10^{-6}$	$7.918 2 \times 10^{-6}$
LESFES	1	$4.157 5 \times 10^{-5}$	$5.359 5 \times 10^{-6}$	$3.413 1 \times 10^{-6}$	$2.802 0 \times 10^{-5}$
	2	$2.339 5 \times 10^{-4}$	$4.599 9 \times 10^{-5}$	$3.037 5 \times 10^{-5}$	$1.662 5 \times 10^{-4}$
	3	$1.586 2 \times 10^{-4}$	$4.523 7 \times 10^{-5}$	$3.172 3 \times 10^{-5}$	$1.202 8 \times 10^{-4}$
	4	$5.918 0 \times 10^{-6}$	$3.504 8 \times 10^{-6}$	$1.999 9 \times 10^{-6}$	$6.019 5 \times 10^{-6}$

填充区出现这种误差较大的情况,与计算时所剖分的网格较大有关,此时剖分所采用的三棱柱底边三角形边长为 5 cm,当边长减小为 4.5 cm 时,相应的钠填充区的第 4 能群的中子平均通量为 6.2153×10^{-6} ,误差减小为 11.0%,而 MARK- P_n 在该区该群的计算误差也很大,达到 13.3%。

2.3 ISSA 各向异性基准问题

本文提出的理论模型可以应用于三维各向异性散射问题,然而迄今为止,已有文献中还没有合适的三维 S_n 各向异性基准问题可供比较。因此,为了验证程序的正确性,对一维 ISSA 各向异性散射问题^[10]进行了三维计算。在 y, z 方向上分别取长度为 1 cm,并且在相应端面应用全反射边界条件。

K_{eff} 的计算结果列于表 4 中。本问题分别采用了三棱柱元素和四面体元素剖分。

表 4 ISSA 基准问题的 K_{eff} 计算结果比较

S_n 离散阶数	S_2	S_4	S_6	S_8	S_{16}
K_{eff} (参考值)			1.677 2		1.678 4
K_{eff} (LESFES ¹⁾)	2.153 1	1.673 8	1.677 6	1.678 1	
K_{eff} (LESFES ²⁾)	2.143 0	1.671 1	1.675 0	1.677 5	
P_n 离散阶数	P_1	P_3	P_5		
K_{eff} (FELTRAN)	1.645 1	1.675 1	1.677 1		

1):三棱柱元素剖分;2):四面体元素剖分。

从表 4 中可以看出,无论采用三棱柱元素剖分或四面体元素剖分,当采用 S_2 求积组时,误差特别大,这是因为在各向异性情况下, S_2 求积组的精度很低的缘故。随着离散阶数的增加,LESFES 的结果逐渐接近参考值,在 S_6 情况下,采用三棱柱元素剖分或四面体元素剖分计算得到的 K_{eff} 和参考值的结果相比,误差分别为 0.024% 和 0.13%,而在 S_8 情况下,采用 LESFES 程序计算得到的 K_{eff} 和 S_{16} 的参考值的结果相比,误差分别减小为 0.018% 和 0.05%。由于本文所采用的四面体元素的形状函数为二次多项式,而三棱柱元素采用双二次元素的形状函数,因此采用三棱柱元素剖分的结果比四面体元素剖分的结果好。

3 结 论

本文从一阶中子输运程序出发,推导出对方向变量采用离散纵标方法离散、对空间变量采用最小二乘有限元方法求解的计算模型,并编制了相应的程序,通过对基准问题的校验,得到了吻合良好的计算结果。由于有限元部分采用了三棱柱和四面体元

素剖分,而 2 种元素对网格都具有比较好的适应性,因此本程序可以用来计算非结构网格问题。

参考文献:

- [1] 谢仲生, Dorning J J. 三维中子输运方程离散纵标节块数值解法[J]. 核科学与工程, 1986, 6(4):311-322. Xie Zhongsheng, Dorning J J. A discrete nodal method for three-dimensional neutron transport numerical calculations[J]. Chinese Journal of Nuclear Science and Engineering, 1986, 6(4):311-322.
- [2] 吴宏春, 谢仲生, 祝学华. 三维平几何各向异性散射问题的节块离散纵标输运计算[J]. 核动力工程, 1994, 15(2):138-141. Wu Hongchun, Xie Zhongsheng, Zhu Xuehua. The nodal discrete-ordinate transport calculation of anisotropy scattering problem in three-dimensional Cartesian geometry[J]. Nuclear Power Engineering, 1994, 15(2):138-141.
- [3] Varin E, Samba G. Spherical harmonics finite element transport equation solution using a least-squares approach[J]. Nucl Sci Eng, 2005, 151(2): 167-183.
- [4] Wareing T A, McGhee J M, Morel J E, et al. Discontinuous finite element S_n methods on three-dimensional unstructured grids[J]. Nucl Sci Eng, 2001, 138(3): 256-268.
- [5] Warsa J S, Wareing T A, Morel J E. Fully consistent diffusion synthetic acceleration of linear discontinuous S_n transport discretizations on unstructured tetrahedral meshes[J]. Nucl Sci Eng, 2002, 141(3): 236-251.
- [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]. 西安交通大学理学院, 2003.
- [7] Manteuffel T A, Ressel K J, Starke G. Least-squares finite-element solution of the neutron transport equation in diffusive regimes[J]. Siam J Numer Anal, 1998, 35(2): 806-835.
- [8] Manteuffel T A, Ressel K J. A boundary functional for the least-squares finite-element solution of neutron transport problems[J]. Siam J Numer Anal, 2000, 37(2): 556-586.
- [9] Takeda T, Ikeda H. 3-D neutron transport benchmarks. Technical Report OECD/NEA Committee on Reactor Physics(NEACRP-L-330) [R]. Osaka, Japan:Department of Nuclear Engineering. 1991.
- [10] Issa J G, Riyait N S, Goddard A J H, et al. Multi-group application of the anisotropic FEM code FELTRAN to one, two, three-dimensional and R-Z problems[J]. Prog Nucl Eng, 1986, 18(1):251-264.

(编辑 王焕雪)