适用于任意几何的特征线边界条件处理方法

杨 睿,胡 赟,单浩栋,徐 李

(中国原子能科学研究院反应堆工程技术研究部,北京 102413)

摘要:边界条件处理是特征线方法(MOC)向任意三维几何拓展时遇到的难点之一。本文提出一种边界 条件处理方法,既保留循环特征线中首尾相连的特性,又能像插值方法一样适用于任意几何。首先推导 了平源近似下的特征线方程,提出了一种将源项和边界角通量分离处理的内迭代解法。然后证明了该 解法具有唯一解,并类似于循环特征线方法给出解的构造方法。最后借助数值积分和权重插值给出迭 代计算流程。采用 Takeda 算例、单铀球水腔模型和 C5G7 算例进行验证计算,k_{eff}的最大计算误差分别为 21、319 和 138.8 pcm,表明方法可靠。该方法可应用于任意几何,且不需存储边界通量和进行边界迭代。 关键词:中子输运方程;特征线法;任意几何;边界条件 中图分类号:TL329.2 文献标志码:A 文章编号:1000-6931(2020)11-2145-08

doi:10.7538/yzk.2019.youxian.0849

Boundary Condition Processing Method for MOC Calculation in Arbitrary Geometry

YANG Rui, HU Yun, SHAN Haodong, XU Li

(Division of Reactor Engineering Technology Research, China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China)

Abstract: Boundary condition processing is one of the difficulties encountered in the application of method of characteristics (MOC) to arbitrary three-dimensional geometry. In this paper, a boundary condition processing method was proposed, which not only preserved the track continuity as cyclic track method, but also could be applied to arbitrary geometry as the interpolation method. The MOC equation was derived under the flat source approximation and an internal iterative method was proposed in which the source term and the boundary angular flux were processed separately. It was proved that the equation had a unique solution which could be constructed similarly to the cyclic track method. The iterative calculation flow was given by numerical integration and weight interpolation. Takeda benchmark, single uranium sphere model with water cavity and C5G7 benchmark were calculated to test the accuracy. The maximum error of $k_{\rm eff}$ is 21, 319 and 138.8 pcm respectively, which shows that the method is reliable. This

收稿日期:2019-11-19;修回日期:2020-02-07

基金项目:国家重点研发计划资助项目(2017YFB0202300)

作者简介:杨 睿(1994一),男,安徽芜湖人,硕士研究生,反应堆物理专业

网络出版时间:2020-05-06;网络出版地址:http://kns.cnki.net/kcms/detail/11.2044.TL.20200430.1657.010.html

method can be applied to arbitrary geometry without storing boundary fluxes and performing boundary iteration.

Key words: neutron transport equation; method of characteristics; arbitrary geometry; boundary condition

特征线方法(MOC)具有强大的几何处理 能力和天然的可并行性,是实现下一代三维全 堆芯高精度、高保真物理计算的优秀方案^[1]。 当前,直接三维全堆 MOC 计算程序主要有 MPACT3D^[2]、OpenMOC3D^[3]和 APOLLO3 中的 TDT^[4]等。出于减少存储和便于处理边 界条件的目的,这些程序均进行了一定程度几 何简化,并没有真正适用于任意三维几何。

为向任意几何拓展,需研究任意几何下的边 界条件处理问题。当前主流的边界计算方法包 括循环特征线法^[5]、插值方法^[6-7]、打混方法^[7] 等。在循环特征线法中,特征线能首尾相连,处 理简单,不引入边界误差,但只能处理规则几何, 对几何有很大限制。插值方法理论上可处理任 意几何,但在实践中实现起来较麻烦,另外插值 也会引入边界误差。打混方法将边界划分为若 干个面,认为每个面上的入射通量是均匀的,计 算时将各方向的所有出射通量收集起来进行反 射,处理相对简单,但引入误差最多,不仅会引入 空间上的模糊,对于曲面也会引入角度的模糊。 上述方法均要求为边界条件进行迭代求解,增加 了迭代次数。插值和打混方法还要求收集边界

为更好地解决边界条件处理问题,本文提 出一种将角通量场拆成源场和边界场分离计算 的方法,可同时保留循环特征线方法的连续性 和插值方法的几何任意性。

1 特征线方法

离散能群后的稳态中子输运方程可写为: $\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi_{g}(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{r}) + \Sigma_{\iota,g}(\boldsymbol{r}) \phi_{g}(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{r}) = Q_{g}(\boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{r})$ (1)

其中: $\phi_{g}(\Omega, r)$ 为角通量; $\Sigma_{t,g}(r)$ 为总截面; $Q_{g}(\Omega, r)$ 为总角度源; Ω 为立体角;r为空间位置;g为能群标号。

反照、反射、周期等边界条件可写成统一 形式:

$$\phi_g(\mathbf{r}_0, \mathbf{\Omega}) = \alpha(\mathbf{r}') \phi_g(\mathbf{r}'_{\text{out}}, \mathbf{\Omega}') \qquad (2)$$

其中: r_{0} 和 Ω 为入射位置和角度; r'_{out} 和 Ω' 为出 射位置和角度; $\alpha(r')$ 为反照率,满足 $0 \leq \alpha \leq 1$ 。 式(2)表示某处某角度的入射角通量是另一位 置和角度下出射角通量乘以反照率。

取
$$r=r_0+s\Omega$$
,代人式(1)可得:

$$\frac{d\phi_g(r_0,\Omega,s)}{ds}+\sum_{t,g}(s)\phi_g(r_0,\Omega,s) = Q_g(r_0,\Omega,s)$$
(3)

其中,s为从 r_0 出发沿 Ω 方向移动的距离。

截面参数中省去 r₀,通过常数变易法解得 特征线方程:

$$\phi_{g}(\boldsymbol{r}_{0},\boldsymbol{\Omega},s) = \int_{s'=0}^{s} Q_{g}(\boldsymbol{r}_{0},\boldsymbol{\Omega},s') e^{\int_{s'=s'}^{s} -\Sigma_{t,g}(s')ds'} ds' + \frac{1}{s} \left((\boldsymbol{r}_{0},\boldsymbol{\Omega}) e^{\int_{s'=s}^{s} -\Sigma_{t,g}(s')ds'} \right) ds' + \frac{1}{s} \left($$

式(4)中截面与空间有关,源项与空间和角 度有关,需进行相关处理。

1.1 空间和角度处理

类似于 S_N 方法,取求积组为角度{ Ω_m }和 求积系数{ ω_m },每个角度的角通量均满足 式(4),角度矩的计算使用数值积分表示;认为 空间中材料是由若干等材料区域组成,等材料 区域内截面不变;将等材料区域中源项的空间 变量以0阶基函数(平源)展开。经上述处理, 在每个平源近似区 F 中的式(4)变为:

$$\phi_{m,g}^{F}(s) = \frac{Q_{m,g}^{F}}{\Sigma_{t,g}^{F}} (1 - e^{-\Sigma_{t,g}^{F}s}) + \phi_{m,g}^{F}(\mathbf{r}_{0}) e^{-\Sigma_{t,g}^{F}s}$$
(5)

其中, m为角度的标号。

平角度源项可写为:

$$Q_{m,g}^{F} = \sum_{p=0}^{P} \sum_{l=-p}^{l} \widetilde{Y}_{p,l}(\boldsymbol{\Omega}_{m}) \sum_{g'=1}^{G} \Sigma_{s,g' \to g,p}^{F} \Phi_{g',p,l}^{F} + \frac{1}{k_{\text{eff}}} \frac{\chi_{g}^{F}}{2\sqrt{\pi}g_{g'=1}^{F}} \sum_{g'=1}^{G} (\nu \Sigma_{f})_{g'}^{F} \Phi_{g',0,0}^{F}$$
(6)

其中: $\tilde{Y}_{p,l}$ (Ω_m)为归一化后的球谐函数; $\Sigma_{s,g' \to g,p}^{F}$ 为区域中g'到g能群的p阶散射截面; χ_{g}^{F} 为裂变份额; $(\nu \Sigma_{l})_{g'}^{F}$ 为区域中g'群的裂变截 面乘以有效裂变中子数; $\Phi_{g',p,l}^{F}$ 为(p,l)阶角度 矩的 0 阶空间矩(体积积分的平均值),可写为:

$$\Phi_{g',p,l}^{F} = \frac{1}{V_{F}} \sum_{M} \omega_{m} \widetilde{Y}_{p,l} (\boldsymbol{\Omega}_{m}) \iiint_{V_{F}} \boldsymbol{\phi}_{m,g'}^{F} (\boldsymbol{r}) \,\mathrm{d}\boldsymbol{r} \qquad (7)$$

其中:V_F为体积;M为总的离散角度数。

1.2 空间矩计算和源更新

图 1 示出空间矩积分示意图,其中 $\mathbf{r}_{0,m}^{F}(\sigma)$ 表示法平面上的 1 个小面积 σ 和方向 Ω_{m} 对应的直线在区域 F 中的起点。将式(7)转换为按照垂平面积分计算:

$$\Phi_{g',p,l}^{F} = \frac{1}{V_{F}} \sum_{M} \omega_{m} \tilde{Y}_{p,l}(\boldsymbol{\Omega}_{m}) \iint_{S_{m}^{F}} \phi_{m,g'}(\sigma) l_{m}^{F}(\sigma) d\sigma$$
(8)

其中: S_m^F 为区域 F 在 Ω_m 方向的法平面上的投影,如图 1 所示; $l_m^F(\sigma)$ 为该直线对应的在区域 F中的距离,对于非凸几何体, $l_m^F(\sigma)$ 可能存在 几段; $\bar{\phi}_{m,g'}(\sigma)$ 为从所有投影为 σ 的段上的平均 通量,可由式(5)积分得到。



图 1 空间矩积分 Fig. 1 Integration of space moment

大部分特征线方法空间矩中的积分计算使 用了控制容积法,本文使用数值积分法,将式(8) 中的面积分离散为若干个点来求解积分,即:

$$\iint_{S_{m}^{F}} \overline{\phi}_{m,g'}(\sigma) l_{m}^{F}(\sigma) d\sigma = \sum_{I_{m}^{F}} w_{m}^{i \in S_{m}^{F}} l_{m}^{i \in S_{m}^{F}} \overline{\phi}_{m,g'}^{i \in S_{m}^{F}}$$
(9)

其中: I_m^F 为离散的点数,其上的点记为 $i \in S_m^F$; $w_m^{i \in S_m^F}$ 为求积系数; $\overline{\phi}_{m,s'}^{i \in S_m^F}$ 为 $\overline{\phi}_{m,s'}(\sigma_i)$; $l_m^{i \in S_m^F}$ 为 $l_m^F(\sigma_i)$ 。取 $l_m^F(\sigma)$ 作为权函数,求积系数相等,可解得:

$$w_m = \frac{V_F}{\sum_{I_m^F} I_m^{i \in F}} \tag{10}$$

代入式(8)和(9)中可得到:

$$\Phi_{k',p,l}^{F} = \sum_{M} \omega_{m} \widetilde{Y}_{p,l} (\boldsymbol{\Omega}_{m}) \frac{\sum_{l_{m}^{F}} l_{m}^{i \in F} \boldsymbol{\phi}_{m,g}^{-i \in S_{m}^{F}}}{\sum_{l_{m}^{F}} l_{m}^{i \in F}} \quad (11)$$

如果近似认为:

$$w_m = \frac{V_F}{\sum_{I_m^F} l_m^{i \in F}} \approx \Delta s_m \tag{12}$$

其中,Δs_m为射线密度。则式(12)与控制容积 法得到的结果是一致的。数值积分法可避免讨 论由于边界不一致引入的误差,式(11)的代数 精度为0阶,误差由积分的一阶项决定。

如果各方向的射线密度相同,可近似取:

$$\sum_{I_m^F} l_m^{i \in F} \approx \frac{1}{M} \sum_M \sum_{I_m^F} l_m^{i \in F} = L^F \qquad (13)$$

其中,L^F 为各方向的总长度,与角度无关。

实际上对于任意三维几何,由于不能使用 循环特征线,所以任意方向的射线密度可以也 应当取为相同。通过式(11)可对式(6)进行更 新。在源迭代中,源更新的同时还需进行 k_{eff}的 更新,和一般迭代相同,使用:

$$k_{\rm eff}^{(l+1)} = k_{\rm eff}^{(l)} \frac{\sum_{F} \sum_{G} Q_{\rm f,g}^{F,(l+1)}}{\sum_{F} \sum_{G} Q_{\rm f,g}^{F,(l)}}$$
(14)

式(6)和(14)组成的源更新在每次内迭代 计算完成后进行。

2 边界分离计算

内迭代处理的是边界条件(式(2))和特征 线方程式(式(4))联立的方程,式(4)的计算可 通过平源近似(式(5))处理,还需要解决的是边 界条件。

2.1 源和边界分离

将式(4)分解为来自源项和边界的两部分: $\phi_{g}(\mathbf{r}_{0}, \mathbf{\Omega}, s) = \phi_{g}^{S}(\mathbf{r}_{0}, \mathbf{\Omega}, s) + \phi_{g}^{B.C.}(\mathbf{r}_{0}, \mathbf{\Omega}, s)$ (15)

其中:

$$\phi_{g}^{S}(\boldsymbol{r}_{0},\boldsymbol{\Omega},s) = \int_{s'=0}^{s} Q_{g}(\boldsymbol{r}_{0},\boldsymbol{\Omega},s') e^{\int_{s'=s'}^{s} -\Sigma_{t,g}(s') ds'} ds'$$
(16)

$$\phi_{g}^{\text{B.C.}}(\boldsymbol{r}_{0},\boldsymbol{\Omega},\boldsymbol{s}) = \phi_{g}(\boldsymbol{r}_{0},\boldsymbol{\Omega}) e^{\int_{s'=0}^{s} -\Sigma_{t,g}(s') ds'}$$
(17)

其中:B.C. 表示真空边界条件; ϕ_s^s 等价于真空 边界条件下进行的射线追踪,它由源项完全确 定,称之为源场; $\phi_s^{B,C}$ 为边界角通量产生的分 布,它与源项无关,称之为边界场。在内迭代 中,源项 $Q_s(r_0, \Omega, s')$ 是常数,在式(15)中看作 是一定值。式(17)中边界入射角通量 $\phi_{g}(\mathbf{r}_{0}, \mathbf{\Omega})$ 未知,需联立式(2)。由于边界分布同样也 由源场和边界场两部分组成,可将式(2)写为: $\phi_{g}(\mathbf{r}_{0}, \mathbf{\Omega}) = \alpha(\mathbf{r}')(\phi_{g}^{\text{B.C.}}(\mathbf{r}'_{\text{out}}, \mathbf{\Omega}') + \phi_{g}^{\text{S}}(\mathbf{r}'_{\text{out}}, \mathbf{\Omega}'))$ (18)

其中,边界出射角通量 $\phi_s^{S}(\mathbf{r}'_{out}, \boldsymbol{\Omega}')$ 也被认为是 定值。问题转为求解式(17)和(18)联立的边界 计算方程,它有个非齐次项 $\phi_s^{S}(\mathbf{r}'_{out}, \boldsymbol{\Omega}')$ 。首先 利用反证法证明它有唯一解。假设存在两组成 立解,一组为 $\phi_s^{*,B,C}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$,另一组为 $\phi_s^{*,B,C}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$ + $\Delta \phi_s^{B,C}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$,分别代入式(17)和(18) 并相减可得到:

$$\begin{cases} \Delta \boldsymbol{\phi}_{g}^{\text{B.C.}}\left(\boldsymbol{r}_{0},\boldsymbol{\Omega},s\right) = \Delta \boldsymbol{\phi}_{g}^{\text{B.C.}}\left(\boldsymbol{r}_{0},\boldsymbol{\Omega}\right) e^{\int_{s'=0}^{s} -\Sigma_{t,g}\left(s'\right) ds'} \\ \Delta \boldsymbol{\phi}_{g}^{\text{B.C.}}\left(\boldsymbol{r}_{0},\boldsymbol{\Omega}\right) = \alpha\left(\boldsymbol{r}_{\text{out}}'\right) \Delta \boldsymbol{\phi}_{g}^{\text{B.C.}}\left(\boldsymbol{r}_{\text{out}}',\boldsymbol{\Omega}_{\text{out}}'\right) \end{cases}$$

$$(19)$$

即 $\Delta \phi_{s}^{\text{B.C.}}(\mathbf{r}_{0}, \boldsymbol{\Omega}, s)$ 可使齐次(无源)方程成 立。设计算区域外边界为 Γ ,在 Γ 上对式(19) 的第 2 个公式积分可得:

$$\iint_{\Gamma} d\sigma \iint_{\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{n}(\sigma) < 0} \Delta \phi_{g}^{\mathrm{B, C.}} (\boldsymbol{r}(\sigma), \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} =$$
$$\iint_{\Gamma} d\sigma \iint_{\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{n}(\sigma) > 0} \alpha(\boldsymbol{r}(\sigma)) \Delta \phi_{g}^{\mathrm{B, C.}} (\boldsymbol{r}(\sigma), \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} (20)$$

其中, $n(\sigma)$ 为 σ 上方向向外的法向量。

由式(19)中第1个公式可知 $\Delta \phi_{s}^{\text{B.C.}}(\mathbf{r}_{0}, \mathbf{\Omega}, s_{\text{out}}) < \Delta \phi_{s}^{\text{B.C.}}(\mathbf{r}_{0}, \mathbf{\Omega}, 0), 积分得到:$

$$\int_{\Gamma} ds \iint_{\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{n}(s) > 0} \Delta \boldsymbol{\phi}_{g}^{\text{B.C.}}(\boldsymbol{r}(s), \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} < \\
\iint_{\Gamma} ds \iint_{\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{n}(s) < 0} \Delta \boldsymbol{\phi}_{g}^{\text{B.C.}}(\boldsymbol{r}(s), \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} \quad (21) \\
\mathbb{Z} \ 0 \leqslant \alpha(\boldsymbol{r}(s)) \leqslant 1, \text{th}: \\
\iint_{\Gamma} ds \iint_{\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{n}(s) > 0} \alpha(\boldsymbol{r}(s)) \Delta \boldsymbol{\phi}_{g}^{\text{B.C.}}(\boldsymbol{r}(s), \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} < \\
\iint_{\Gamma} ds \iint_{\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{n}(s) < 0} \Delta \boldsymbol{\phi}_{g}^{\text{B.C.}}(\boldsymbol{r}_{0}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} \quad (22)$$

式(22)和(20)矛盾,故不存在齐次(无源) 方程成立的解,所以边界计算有唯一解,它由源 场决定。下面求解这个解。首先考虑源场仅在 某处和某角度有出射角通量,其他位置为 0:

 $\phi_{g}^{S}(\boldsymbol{r}_{\text{out}},\boldsymbol{\Omega}_{\text{out}}) = \phi_{g}^{S}(\boldsymbol{r}_{\text{out}}',\boldsymbol{\Omega}_{\text{out}}')\delta(\boldsymbol{r}_{\text{out}}',\boldsymbol{\Omega}_{\text{out}}')$ (23)

如图 2 所示,源场追踪(红色)产生了 1 个 出射通量 $\phi_{g}^{s}(\mathbf{r}'_{out}, \mathbf{\Omega}'_{out})$ 。利用式(2)得到第 1 段蓝色线的入射通量,进而利用式(17)进行体 内追踪直到出射;出射通量再根据式(2)得到另一段的入射通量,继续用式(17)追踪。以此类推,直至角通量小于1个限定的最小角通量或遇到真空边界条件停止。



图 2 边界追踪示意图 Fig. 2 Boundary tracking diagram

在追踪过程中自动满足了反射边界式(2) 和(17),而小于最小角通量后的追踪可近似看 作是0解,也成立,所以它是1组可行解,所产 生的分布即为式(23)的解。由于反照率小于等 于1,且式(17)只会发生衰减,所以整个边界追 踪中角通量一直都在缩小,故必然可在有限长 度下完成计算。

对于任意源场产生的边界分布可写为: $\phi_{g}^{S}(\mathbf{r}'_{out}, \mathbf{\Omega}'_{out}) = \sum \phi_{g}^{S}(\mathbf{r}'_{out}, \mathbf{\Omega}'_{out}) \delta(\mathbf{r}'_{out}, \mathbf{\Omega}'_{out})$ (24)

其中,δ为δ函数。

容易知道式(17)和(18)的对真空出射通量 具有线性叠加性,所以边界场为每个源场出射 通量经过边界追踪后的结果的叠加。

这里对分离算法做一解释,如图 3 所示,黄 色为计算区域,上侧和右侧为反射边界条件。 它实际可等效为1个通过翻转生成的 4 个原图



图 3 分离算法的解释 Fig. 3 Explanation of separation algorithm

形的组合,翻转时的方向如箭头所示。对于从真 空边界出发到达另一真空边界的绿→蓝→红射 线,它等效于绿虚线→蓝虚线→红线。特征线方 程类似于积分输运方程,都使用了首次碰撞的思 想,中子生成后一旦发生包括散射在内的首次碰 撞就认为消失。这样绿虚线上生成的中子只会 按原方向沿蓝虚线、红线组成的射线向前运动, 运动时只会发生衰减,即绿线(源场)中生成中 子,在蓝、红线(边界场)中衰减。同样,蓝虚线上 也会生成中子,在红线中衰减。绿虚线、蓝虚线 和它们的后续追踪,加上红线部分就构成了整条 线上的角通量分布,也即分离计算的流程。

在实际计算时,认为源场产生的边界分布 的离散方式与内部追踪的离散方式一致。这样 源场中的1条射线追踪完成后,可不进行下一 条源场射线追踪,而是接着进行边界场中的追 踪。源场和边界场的射线可实现完全的首尾相 连,不需进行插值方法的复杂处理。同时由于 边界场天然有限,不要求和循环特征线一样返 回原点,解除了几何限制。

2.2 空间矩计算

空间矩计算同样是源场和边界场的叠加, 其中源场严格按照求积组生成,可使用式(13) 计算空间矩。但由于边界的任意性,边界场中 的射线各段未必在给定的求积组或离散点上, 因此不能直接按照式(13)更新空间矩。如图 4 所示,反射场的某段在某个平源近似区中,入射 点为 r_0 ,角度为 Ω ,长度为l,平均通量为 $\bar{\phi}_g^{\rm B,C}$ 。 由于 Ω 不在求积组{ Ω_m }中,自然该段在空间上 也不可能与任何源场中的段重合,需要计算求 积系数 $\omega(\Omega)$ 。





为此通过插值方法计算该段的角度和空间 求积系数。先进行角度插值,由于绝大多数求 积组的方位角是均匀分布的,故每一极角层中 各方位角的权重一致。假设 Ω 的极角余弦为 μ ,它介于 μ_n 和 μ_{n+1} 两层之间,每层求积系数分 别是 ω_n 和 ω_{n+1} ,则可取:

$$\omega(\mathbf{\Omega}) = \frac{\mu_{n+1} - \mu}{\mu_{n+1} - \mu_n} \omega_n \cdot w(\mu_n, \varphi) + \frac{\mu - \mu_n}{\mu_{n+1} - \mu_n} \omega_{n+1} \cdot w(\mu_{n+1}, \varphi)$$
$$\mu_n < \mu < \mu_{n+1} \qquad (25)$$

其中,φ为方位角。空间求积系数的计算为:

$$w(\mu_{n},\varphi) = \frac{\varphi_{i+1} - \varphi}{\varphi_{i+1} - \varphi_{i}} w(\mu_{n},\varphi_{i}) + \frac{\varphi - \varphi_{i}}{\varphi_{i+1} - \varphi_{i}} w(\mu_{n},\varphi_{i+1}) \quad \varphi_{i} < \varphi < \varphi_{i+1} \quad (26)$$

角度的空间求积系数 w(μ_n,φ_i)按式(10) 计算。若各方向射线密度相同,利用式(13),则 各方向空间求积系数相同,不需要计算式(26)。

权重计算完成后,空间矩计算可写为:

$$\Phi_{g,p,l}^{F} = \sum_{M} \omega_{m} \widetilde{Y}_{p,l}(\boldsymbol{\Omega}_{m}) \frac{\sum_{l_{m}^{F}} l_{m}^{i \in F} \overline{\phi}_{m,g^{m}}^{i \in S_{m}^{F},S}}{\sum_{l_{m}^{F}} l_{m}^{i \in F}} + \sum_{\boldsymbol{\omega}(\boldsymbol{\Omega})} \widetilde{Y}_{p,l}(\boldsymbol{\Omega}) l^{\text{B.C.}}(\boldsymbol{\Omega},\boldsymbol{r}_{0}) \overline{\phi}_{g}^{\text{B.C.}}(\boldsymbol{\Omega},\boldsymbol{r}_{0})$$
(27)

2.3 迭代计算流程

迭代计算流程如图 5 所示。这里虽保留了 内迭代的说法,但内迭代实际只是角度、真空射 线、能群的循环,不存在迭代。

在实际实现时,源场中射线各段信息是按 照预先设定的射线密度提前追踪完成。但反射 场中的射线由于开始时并不知道要追踪多长, 因此采用了一种"需要时生成并保存"的方式 (图 5 中虚线框)。当射线到达边界且出射通量 没有达到最小通量时,那么检测反射射线是否已 生成,若未生成,生成并保存;若已生成,则沿着 先前保存的射线信息计算。另外,由于权重计算 只与角度有关而与具体追踪过程无关,且计算成 本很小,可以在发生反照或反射时进行计算。

每条源场射线的初始通量为 0,先按式 (16)进行有源计算,然后通过边界处理式(2)后 开始边界追踪。虚线框下的通量过小判断实际 是在计算式(17)的同时进行,对于式(17)中的 每一段均会检测,如果出现通量小于限定值则 进入下一源场射线追踪。如果该边界线追踪完 成后还没有过小则继续追踪下一条边界线。因 为边界追踪是持续衰减的,所以经过有限长度 后必然可以小于给出的限定值。



图 5 迭代计算示意图 Fig. 5 Scheme of iteration calculation

边界分离计算是指源场射线和它的反射射 线采用有源和无源两种方法,是计算方法的分 离,但几何和通量传递上是连续的。与循环特征 线方法相比,这种方法相当于一种长度有限的循 环特征线方法,特征线首尾相连。但由于边界自 然衰减至0,并不要求特征线需经过若干次反射 回归原点,避免了繁琐的讨论及几何限制。相比 于插值方法,该方法相当于将边界上的空间角度 插值转移到角度权重插值,而特征线中的求积组 又是固定的,插值简单且一次性。

此外该方法还有两个优点:1)单次特征线 循环就可保证边界条件收敛,不需存储边界出 射角通量,也不需边界迭代;2)每条特征线均 是独立计算,与其他特征线的角通量无关,初始 和结束都为0,不需保存或传递中间通量,便于 实现特征线并行计算。

3 数值验证

3.1 Takeda 算例

采用 Takeda 算例^[8] 的问题 1 验证本文方 法的正确性。Takeda 算例是 1 个三维简化堆 芯模型,几何布置如图 6 所示。



图 6 Takeda 算例问题 1 几何模型

Fig. 6 Calculation geometry of Takeda problem 1

图 6 中 x=0, y=0 和 z=0 平面为反射边 界条件,其余为真空边界条件;能群数为 2。 case1 中红色部分填充材料为空块,case2 中红 色部分填充材料为控制棒。

计算时的参数选择为:网格尺寸取为 0.5 cm, 射线密度取为 0.05 cm×0.05 cm,求积组选择 勒让德-切比雪夫求积组,8 极角和 16 方位角。 k_{eff} 计算结果列于表 1,循环特征线的计算结果 来自 MPACT3D^[2]。由表 1 可看出, k_{eff} 计算结 果误差很小。比较了 3 种材料中各能群平均通 量的误差,结果列于表 2。

表 1 k_{eff}计算结果 Table 1 Calculation result of k_{eff}

计算方法	case1		case2	
	$k_{ m eff}$	误差/pcm	k _{eff}	误差/pcm
参考解	0.977 80(\pm 60 pcm)		0.962 40(\pm 60 pcm)	
循环特征线	0.977 63	-17	0.962 53	13
边界分离	0.977 59	-21	0.962 57	17

表 2	平均通量误差的计算结果
-----	-------------

Table 2 Calculation result of error of average flux

答励	计算力计	6K 파사	平均通量的误差/%		
异例	1 异刀 伝	月匕 石干	<u>堆芯</u> -0.13 0.28 0.082 0.27 -0.69 0.12 -0.40 0.28	空块/控制棒	反射层
case1	循环特征线	1	-0.13	0.47	0.51
		2	0.28	-2.0	-3.2
	边界分离	1	0.082	-0.21	0.42
		2	0.27	-1.9	-3.0
case2	循环特征线	1	-0.69	0.31	0.11
		2	0.12	2.2	-3.3
	边界分离	1	-0.40	-0.0081	-0.12
		2	0.28	2.4	-2.1

由表2可看出,大部分区域计算结果与参 考解的误差总体很小。然而无论是 casel 还是 case2,空块和反射层中第2群的计算结果的误 差均较大。这一问题同样在 MPACT3D 中出 现,初步分析主要原因可能是低阶散射带来的 影响。为排除这一因素,使用相同截面单独与 MAPCT3D 的结果进行对比,结果列于表3。 由表3可看出,循环特征线方法与边界分离计 算的平均通量结果相差很小,均在0.5%以内。

表 3 与循环特征线通量结果对比 Table 3 Flux comparison with cyclic characteristics method

答问	能群	平均通量的误差/%			
异例		堆芯	空块	反射层	
case1	1	0.20	-0.006 8	-0.088	
	2	-0.0047	0.11	0.16	
case2	1	0.29	-0.32	0.46	
	2	0.40	0.15	0.39	

3.2 C5G7 算例

本文方法可用于 1/8、1/6 或 1/12 对称的 堆芯。以 C5G7-2D 算例^[9]为例,在上、下表面 设置反射边界条件以构成三维算例。根据对称 性,该问题是 1/8 对称,取分界面如图 7a 对角 线所示,每个组件均会被一分为二,存在半栅元 (图 7b)。该分界面被设置为全反射边界条件。

分别计算了没有分界面的 1/4 堆芯和有分 界面的 1/8 堆芯,栅元内的网格划分为两环和 8 个扇区,计算结果列于表 4。由表 4 可见,1/4 和 1/8 堆芯的计算结果相差很小,但 1/8 堆芯 可节约48.27%的时间。此类问题需将组件和 栅元进行切割,在常规确定论计算中较少见,借 助于边界分离算法可进行求解。



图 7 1/8的C5G7问题 Fig. 7 Eighth C5G7 problem

表 4 C5G7 问题计算结果

Table 4 Calculation result of C5G7 problem

算例	$k_{ m eff}$	k _{eff} 误差/ pcm	组件功率最大 绝对值误差/%	计算 时间/s
1/4	1.185 192	135.8	0.704	2 650.6
1/8	1.185 162	138.8	0.710	1 371.1

3.3 单铀球水腔模型

为进一步验证边界的任意性,采用文献 [10]中单铀球水腔模型进行验证。该问题的最 外层为球形反射边界条件,内部为轻水,外部为 燃料 U-10Zr,模型构型如图 8 所示。

因文献[10]中未给出具体温度,这里温度 取为 297 K,U-10Zr 的密度取为 15.92 g/cm³。 利用 Scale 程序进行并群,表 5 列出 MOC 程序 和 Scale 程序的计算结果。

计算时采用了 0 阶散射,对于这种各向异 性较强的问题,从计算结果看误差相对于前两 个算例较大,但仍在可接受范围内。



图 8 单铀球水腔模型构型 Fig. 8 Profile of single uranium sphere model with water cavity

表 5 单铀球水腔模型的 k_{eff}计算结果 Table 5 k_{eff} calculation result

of single uranium sphere model with water cavity

水密度/	k _{eff} 计算	误差/	
$(g \cdot cm^{-3})$	Scale 程序	MOC 程序	pcm
1	0.915 91	0.917 70	179
0.9	0.905 83	0.904 95	- 88
0.8	0.89274	0.890 06	-268
0.7	0.875 62	0.872 43	-319
0.6	0.853 01	0.850 99	-202
0.5	0.823 10	0.824 36	126

4 结论

本文提出了一种适用于任意几何的特征线 边界计算方法,将角通量场分离成源场和边界 场处理,基于数值积分和权重插值给出了迭代 计算流程,兼具了插值方法的几何适应性和循 环特征线的首尾相连性。经 Takeda 算例、单 铀球水腔模型和 C5G7 算例验证,与参考解 keff 的最大误差分别为 21、319 和 138.8 pcm,表明 在多种边界条件下计算结果仍然可靠。在该方 法下,边界严格对齐且不需存储边界通量,避免 了边界条件的迭代;每条特征线可完全孤立计 算,适用于特征线并行计算。后续正在开发全 堆任意几何的特征线并行计算程序。

参考文献:

 SANCHEZ R. Prospects in deterministic threedimensional whole core transport calculation[J].
 Nuclear Engineering and Technology, 2012, 44 (2): 113-150.

- [2] KOCHUNAS B M. A hybrid parallel algorithm for the 3-D method of characteristics solution of the boltzmann transport equation on high performance compute clusters[D]. Michigan: University of Michigan, 2013.
- [3] SHANER S, GUNOW G, FORGET B, et al. Verification of the 3D method of characteristics solver in OpenMOC[C] // Proceedings of Physics of Reactors Conference 2016 (Physor 2016). USA: American Nuclear Society, 2016.
- [4] SCIANNANDRONE D, SANTANDREA S, SANCHEZ R. Optimized tracking strategies for step MOC calculations in extruded 3D axial geometries[J]. Annals of Nuclear Energy, 2016, 87: 49-60.
- [5] 汤春桃.中子输运方程特征线解法及嵌入式组 件均匀化方法的研究[D].上海:上海交通大学 机械与动力工程学院,2009.
- [6] 柴晓明,姚栋,王侃. 基于特征线方法的三维中 子输运程序,I:边界条件的插值处理[J]. 核动 力工程,2010,31(2):11-15.
 CHAI Xiaoming, YAO Dong, WANG Kan. Three dimension neutron transport characteristics method code, I: Interpolation treatment of boundary condition[J]. Nuclear Power Engineering, 2010, 31(2): 11-15(in Chinese).
- [7] 吴宏春,郑友琦,曹良志,等. 中子输运方程确定 论数值解法[M]. 北京:中国原子能出版社,2018.
- [8] TAKEDA T, IKEDA H. Final report on the 3-D neutron transport benchmarks[R]. [S. l.]: Organisation for Economic Co-operation and Development Nuclear Energy Agency, 1991.
- [9] KELLER S E, OLIVEIRA D, CASSIANO R E. Two-dimensional C5G7 mox fuel assembly benchmark calculations using the FEM-PN code EVENT[J]. Progress in Nuclear Energy, 2004, 45(2-4): 255-263.
- [10] 马纪敏,刘永康,李茂生.次临界能源堆用多群 截面库的研制与校验[J].核动力工程,2012,33 (5):16-21.

MA Jimin, LIU Yongkang, LI Maosheng. Development and validation of multi-group crosssection library for subcritical energy reactor[J]. Nuclear Power Engineering, 2012, 33(5): 16-21 (in Chinese).