DOI:10.11918/202504076

二阶间断有限元特征线耦合中子输运计算方法

张广春,彭靖含

(哈尔滨工业大学 能源科学与工程学院 核科学与技术研究所,哈尔滨 150001)

摘 要:轴向函数展开中子输运计算方法作为一种新的全堆高保真输运计算途径,具有稳定迭代收敛的优势,能避免传统2D/1D方法在强非均匀条件下可能出现的数值不稳定性。然而,现有研究大多仅采用一阶轴向试探函数,为达到足够精度需要细化轴向网格,轴向层数和内存占用显著增加。针对这一问题,将轴向试探函数扩展至二阶,推导了对应3×3系数矩阵的解析矩阵逆和矩阵指数求解方法,并在3D C5G7国际基准算例上实现和验证了二阶求解器的性能。结果表明:在较粗轴向网格条件下,二阶轴向展开方法能够显著提高燃料栅元功率分布计算精度(将功率计算相对误差降低至一阶方法的1/2~1/5),并使达到同等精度所需的轴向分层数减少为一阶方法的约1/3,从而将内存需求降低约50%。同时,二阶近似保持了稳定的数值迭代特性。然而,由于粗轴向网格条件下传统粗网扩散差分(coarse mesh finite difference,CMFD)迭代加速方法效率下降,二阶方法收敛所需迭代步数较一阶方法有所增加,总计算时间未出现明显缩减。总体而言,本文提出的二阶轴向函数展开方法在保持全堆输运计算高精度的同时,大幅降低了对轴向网格划分和内存资源的要求,对于开发高效高保真反应堆物理计算工具具有重要意义。

关键词:轴向函数展开方法;间断有限元方法;二阶试探函数;C5G7基准题

中图分类号:TL323 **文献标志码**:A **文章编号**:0367-6234(2026)10-0188-07

Second-order discontinuous finite element characteristic-line coupled method for neutron transport calculations

Zhang Guangchun, Peng Jinghan

(Institute of Nuclear Science and Technology, School of Energy Science and Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

Abstract: The axial function expansion method for neutron transport offers a novel full-core, high-fidelity transport calculation approach with the advantage of stable iterative convergence, avoiding the numerical instabilities that traditional 2D/1D methods may encounter under strongly heterogeneous conditions. However, most existing axial expansion implementations use only first-order (linear) axial trial functions; achieving sufficient accuracy therefore requires very fine axial meshes, leading to a substantial increase in the number of axial layers and high memory usage. To address this issue, this paper extends the axial expansion to second-order (quadratic) trial functions. Analytical solutions for the inverse and matrix exponential of the resulting 3×3 coefficient matrix are derived, and the performance of the second-order solver is implemented and validated on the 3D C5G7 international benchmark. The results demonstrate that with relatively coarse axial meshes, the quadratic approximation significantly improves the pin-wise power calculation accuracy (reducing the relative power error to about 1/2-1/5 of that of the first-order method), and decreases the number of axial layers required to achieve equivalent accuracy to roughly one-third of that needed by the linear method, thereby reducing the memory requirement by roughly 50%. Concurrently, the quadratic method also retains stable iterative convergence behavior. However, due to the diminished effectiveness of the conventional coarse-mesh finite-difference (CMFD) acceleration scheme on large axial mesh cells, the quadratic approximation requires more iterations to converge than the first-order method, so no significant reduction in total computing time was observed. In summary, the proposed second-order axial expansion method maintains high-fidelity in whole-core transport calculation accuracy while substantially lowering the mesh density and memory demand, which is of great significance for the development of efficient high-fidelity reactor-physics simulation tools.

Keywords: axial functional expansion method; discontinuous finite element method; quadratic trial functions; C5G7 benchmark problem

收稿日期:2025-04-28;**录用日期**:2025-06-17;**网络首发日期**:2025-08-04
网络首发地址:https://link.cnki.net/urlid/23.1235.T.20250804.1457.004
基金项目:国家自然科学基金(12375167)
作者简介:张广春(1986—),男,副教授,博士生导师
通信作者:张广春,gczhang@hit.edu.cn

三维(3D)全堆非均匀输运计算能够提供高保真、高分辨率的堆芯功率分布，受到越来越多的关注。2D/1D 方法最先由韩国学者提出，并成功地应用于压水堆(PWR)的全堆输运计算[1-3]。在 2D/1D 方法中，3D 问题在轴向上被分解为多个 2D 问题，这些 2D 问题采用二维特征线法(MOC)求解，并通过轴向的泄漏项耦合起来。轴向 1D 输运方程通常采用保真度较低的方法求解，如节块展开法(NEM)或简化球谐函数方法(SP3)[4]。然而，2D/1D 方法在应用于小轴向网格、强轴向非均匀性或低密度区域的问题时，会表现出数值不稳定的问题[4]。为了消除 2D/1D 的不稳定性问题，Kelly 和 Larsen 提出了一种改进的 2D/1D 近似方法，该方法保留了径向的输运特征和轴向的扩散近似，并提出了一种稳定的迭代方法[5]。值得注意的是，基于三维射线追踪技术的三维 MOC 程序[6-7]可以避免 2D/1D 方法的数值不稳定问题，但计算成本高，难以应用于实际的全堆高保真中子学计算。

为克服 2D/1D 方法的问题，阿贡国家实验室提出了轴向函数展开中子输运计算方法，并据此开发了高保真全堆输运程序 PROTEUS-MOC[8-9]。该程序在径向上采用 MOC 方法刻画堆芯因燃料、慢化剂及冷却剂复杂布置引起的强非均匀性；采用间断伽辽金有限元方法描述中子在轴向的分布。与传统 2D/1D 方法相比，轴向函数展开方法避免了横向积分过程，各层之间的耦合更紧密，更好地保留了轴向的中子输运特征，数值计算非常稳定。在轴向函数展开方法中，径向上每个单元的轴向角通量变化用一组正交多项式展开。目前，PROTEUS-MOC 程序仅实现了一阶轴向展开(一阶近似)，需要较细的轴向网格以实现较高的计算精度。为减少轴向函数展开方法的内存负担，本文将轴向一阶试探函数推广至二阶试探函数，提出二阶近似；利用 3D C5G7 基准题对二阶求解器进行了验证和性能测试。西安交通大学开发的 NECP-X 高保真反应堆物理程序则采用多级并行的 2D/1D 耦合方法(径向平面上使用 MOC，轴向使用较低阶的近似求解)，在轴向网格较细时可能出现迭代稳定性方面的挑战。相比之下，本文提出的二阶轴向函数展开方法在国内尚属首次实现。通过采用更高阶的轴向近似，本方法大幅减少了达到同等精度所需的轴向层数，降低了内存需求，并避免了过细网格可能引发的数值不稳定性，优于上述现有方法。

1　轴向函数展开计算方法的理论模型

从 3D 稳态中子输运方程的多群离散纵标形式出发：

$$\left(\mu_m\frac{\partial}{\partial x}+\eta_m\frac{\partial}{\partial y}+\xi_m\frac{\partial}{\partial z}\right)\psi_{gm}(\vec{r})+\Sigma_{tg}(\vec{r})\psi_{gm}(\vec{r})=Q_{sgm}(\vec{r})+\lambda Q_{fgm}(\vec{r}),m=1,2,\cdots,M,g=1,2,\cdots,G \tag{1}$$

式中：g 为能群索引，G 为最大能群数，m 为角度索引，M 为最大角度数，$\vec{r}$ 为空间变量，μ_m、η_m 和 ξ_m 为 m 方向的角度余弦，$\Sigma_{tg}(\vec{r})$ 为第 g 群总截面，$\psi_{gm}(\vec{r})$ 为第 g 群第 m 个角度的中子角通量，$Q_{sgm}(\vec{r})$ 和 $Q_{fgm}(\vec{r})$ 分别为第 g 群和第 m 个方向的散射源和裂变源，λ 为特征值。

轴向函数展开方法适用于轴向拉伸几何模型。首先，将 2D 问题拉伸为 3D 问题。其次，将径向上每个单元的角通量 $\psi_m(x,y,z)$ 及源 $Q_m(x,y,z)$ 在轴向上的变化用正交基函数表示，即

$$\psi_m(x,y,z)\approx\sum_{j=1}^{J}\tilde{\psi}_{m,j}(x,y)u_j(z) \tag{2}$$

$$Q_m(x,y,z)\approx\sum_{j=1}^{J}\tilde{Q}_{m,j}(x,y)u_j(z) \tag{3}$$

式中：J 为展开阶数，m 为角度方向索引，$u_j(z)$ 为第 j 阶基函数，$\tilde{\psi}_{m,j}(x,y)$ 和 $\tilde{Q}_{m,j}(x,y)$ 分别为角通量及源的展开系数。

将式(2)及式(3)代入中子输运方程式(1)，并应用间断伽辽金权重残差方法，将 3D 中子输运方程转化为一组相互耦合的 2D 方程系统。如第 k 层的耦合方程系统可以写作如下形式：

$$\left(\mu_m\frac{\partial\tilde{\psi}_{kmj}}{\partial x}+\eta_m\frac{\partial\tilde{\psi}_{kmj}}{\partial y}\right)\int_{z_k^-}^{z_k^+}\mathrm{d}z[u_j(z)]^2+\xi_m u_j(z_k^+)\sum_{j'=1}^{J}\tilde{\psi}_{kmj'}(x,y)u_{j'}(z_k^+)-\xi_m\sum_{j'=1}^{J}\tilde{\psi}_{kmj'}(x,y)\int_{z_k^-}^{z_k^+}\mathrm{d}zu_{j'}(z)\frac{\partial u_j}{\partial z}+\Sigma_{tk}\tilde{\psi}_{kmj}(x,y)\int_{z_k^-}^{z_k^+}\mathrm{d}z[u_j(z)]^2=\tilde{Q}_{kmj}(x,y)\int_{z_k^-}^{z_k^+}\mathrm{d}z[u_j(z)]^2+\xi_m\psi_{km}(x,y,z_k^-)u_j(z_k^-),j=1,2,\cdots,J \tag{4}$$

式中：z_k^- 和 z_k^+ 分别为第 z 层的下边界和上边界，$\psi_{km}(x,y,z_k^-)$ 为第 k 层的入射中子角通量。式(4)代表的方程系统可以写作如下矩阵形式：

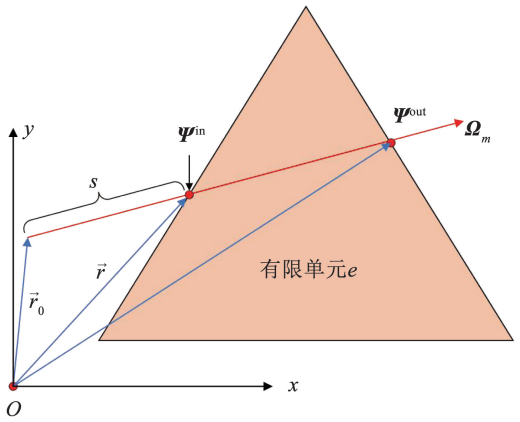
$$\boldsymbol{\Omega}\cdot\nabla\boldsymbol{\psi}_{k,m}(x,y)+\boldsymbol{\Sigma}_{k,m}\boldsymbol{\psi}_{k,m}(x,y)=\boldsymbol{S}_{k,m} \tag{5}$$

式中：$\boldsymbol{\psi}_{k,m}(x,y)$ 为展开系数组成的向量，$\boldsymbol{\Sigma}_{k,m}$ 为 $J\times J$ 阶系数矩阵，$\boldsymbol{S}_{k,m}$ 为源展开系数组成的向量。利用

特征线法对式(3)进行解析求解,即

$$\boldsymbol{\psi}_{k,m}(s)=\exp(-\boldsymbol{\Sigma}_{k,m}s/\sin\theta_m)\boldsymbol{\psi}_{k,m}(0)+\boldsymbol{\Sigma}_{k,m}^{-1}[\boldsymbol{I}-\exp(-\boldsymbol{\Sigma}_{k,m}s/\sin\theta_m)]\boldsymbol{S}_{k,m} \tag{6}$$

式中:$\boldsymbol{I}$ 为 $J\times J$ 阶单位矩阵,s 为特征线段长度,θ_m 为第 m 个方向的极角。式(4)的求解依赖于相邻轴向层提供的出射角通量信息。因此,$\theta_m>0$ 时,输运扫描过程从底层向顶层进行;当 $\theta_m<0$ 时,输运扫描过程由顶层向底层进行。特征线方法的方程系统如图 1 所示。



注:$\boldsymbol{\psi}^{\text{in}}=(\tilde{\psi}_1^{\text{in}},\cdots,\tilde{\psi}_J^{\text{in}})^{\mathrm{T}}$ 为入射通量,$\boldsymbol{\psi}^{\text{out}}=(\tilde{\psi}_1^{\text{out}},\cdots,\tilde{\psi}_J^{\text{out}})^{\mathrm{T}}$ 为出射通量。

图 1 特征线方法计算的坐标系统

Fig. 1 Coordinates system of the MOC calculation

由式(6)可以看出,求解特征线上的中子通量需要对符号矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{k,m}$ 进行求逆和矩阵指数的操作,这在展开函数为一阶时较为简单,而在展开函数为高阶时比较困难。本文推导出了 $\boldsymbol{\Sigma}_{k,m}$ 为 3×3 矩阵时的矩阵逆和矩阵指数的解析表达式,并在 1.1 节中给出。

1.1 一阶近似下的基函数及系数矩阵

对于轴向层 $[z_{k-1},z_k]$,一阶基函数 $\{v_{kj}(z),j=1,2\}$ 及试探函数 $\{b_{kj}(z),j=1,2\}$ 定义如下:

$$v_{k1}(z)=b_{k1}(z)=\begin{cases}1, & \text{if } z\in[z_{k-1},z_k]\\ 0, & \text{otherwise}\end{cases} \tag{7}$$

$$v_{k2}(z)=b_{k2}(z)=\begin{cases}\dfrac{2}{Z_k}\left(z-\dfrac{z_{k-1}+z_k}{2}\right), & \text{if } z\in[z_{k-1},z_k]\\ 0, & \text{otherwise}\end{cases} \tag{8}$$

式中 $Z_k=z_k-z_{k-1}$ 为第 k 层的高度。系数矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{k,m}$ 和源向量 $\boldsymbol{S}_{k,m}$ 可以显式写作

$$\boldsymbol{\Sigma}_{k,m}=\begin{cases}\begin{bmatrix}\Sigma_{k,t}+\xi_m/Z_k & \xi_m/Z_k\\ -3\xi_m/Z_k & \Sigma_{k,t}+3\xi_m/Z_k\end{bmatrix}, & \xi_m\geqslant 0\\ \begin{bmatrix}\Sigma_{k,t}-\xi_m/Z_k & \xi_m/Z_k\\ -3\xi_m/Z_k & \Sigma_{k,t}-3\xi_m/Z_k\end{bmatrix}, & \xi_m<0\end{cases} \tag{9}$$

$$\boldsymbol{S}_{k,m}=\begin{cases}\begin{bmatrix}Q_{k,m,1}+\xi_m\psi_{k,m}(z_k^-)/Z_k\\ Q_{k,m,2}-3\xi_m\psi_{k,m}(z_k^-)/Z_k\end{bmatrix}, & \xi_m\geqslant 0\\ \begin{bmatrix}Q_{k,m,1}-\xi_m\psi_{k,m}(z_k^+)/Z_k\\ Q_{k,m,2}-3\xi_m\psi_{k,m}(z_k^+)/Z_k\end{bmatrix}, & \xi_m<0\end{cases} \tag{10}$$

式中:$\xi_m=\cos\theta_m$,$\Sigma_{k,t}$ 为第 k 层网格单元上的总截面。

此时,矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{k,t}$ 的逆为

$$\boldsymbol{\Sigma}_{kem}^{-1}=\frac{1}{\Sigma_{tke}^2\pm 4\Sigma_{tke}\omega_{km}+6\omega_{km}^2}\begin{bmatrix}\Sigma_{tke}\pm 3\omega_{km} & -\omega_{km}\\ 3\omega_{km} & \Sigma_{tke}\pm\omega_{km}\end{bmatrix} \tag{11}$$

其中 $\omega_{km}=\xi_m/Z_k$。

$\boldsymbol{\Sigma}_{k,t}$ 的矩阵指数 $\bar{\bar{\alpha}}=\exp(-\boldsymbol{\Sigma}_{k,e,m}s/\sin\theta_m)$ 可以写作

$$\bar{\bar{\alpha}}=\exp\left[-\frac{s}{\sqrt{1-\xi_m^2}}(\Sigma_{tke}\pm 2\omega_{km})\right]\begin{bmatrix}\alpha_{11} & \alpha_{12}\\ \alpha_{21} & \alpha_{22}\end{bmatrix} \tag{12}$$

其中

$$\begin{aligned}\alpha_{11}&=\cos\left(\frac{s}{\sqrt{1-\xi_m^2}}\sqrt{2}\omega_{km}\right)\pm\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\left(\frac{s}{\sqrt{1-\xi_m^2}}\sqrt{2}\omega_{km}\right),\\ \alpha_{12}&=-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\left(\frac{s}{\sqrt{1-\xi_m^2}}\sqrt{2}\omega_{km}\right)\\ \alpha_{21}&=\frac{3}{\sqrt{2}}\sin\left(\frac{s}{\sqrt{1-\xi_m^2}}\sqrt{2}\omega_{km}\right),\\ \alpha_{22}&=\cos\left(\frac{s}{\sqrt{1-\xi_m^2}}\sqrt{2}\omega_{km}\right)\mp\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\left(\frac{s}{\sqrt{1-\xi_m^2}}\sqrt{2}\omega_{km}\right)\end{aligned} \tag{13}$$

(14)

1.2 二阶近似下的基函数及系数矩阵

对于轴向层 $[z_{k-1},z_k]$,二阶基函数 $\{v_{kj}(z),j=1,3\}$ 及试探函数 $\{b_{kj}(z),j=1,3\}$ 中的零阶和一阶函数与式(5)和式(6)具有相同的形式。二阶函数基函数和试探函数如下:

$$v_{k3}(z)=b_{k3}(z)=\begin{cases}\dfrac{6}{Z_k^2}\left(z-\dfrac{z_{k-1}+z_k}{2}\right)^2-\dfrac{1}{2}, & \text{if } z\in[z_{k-1},z_k]\\ 0, & \text{otherwise}\end{cases} \tag{15}$$

系数矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_{k,m}$ 和源向量 $\boldsymbol{S}_{k,m}$ 可以显式写作

$$\boldsymbol{\Sigma}_{k,m}=\begin{cases}\begin{bmatrix}\Sigma_{k,t}+\omega_{km} & \omega_{km} & \omega_{km}\\ -3\omega_{km} & \Sigma_{k,t}+3\omega_{km} & 3\omega_{km}\\ 5\omega_{km} & -5\omega_{km} & \Sigma_{k,t}+5\omega_{km}\end{bmatrix}, & \xi_m\geqslant 0\\ \begin{bmatrix}\Sigma_{k,t}-\omega_{km} & \omega_{km} & -\omega_{km}\\ -3\omega_{km} & \Sigma_{k,t}-3\omega_{km} & 3\omega_{km}\\ -5\omega_{km} & -5\omega_{km} & \Sigma_{k,t}-5\omega_{km}\end{bmatrix}, & \xi_m<0\end{cases} \tag{16}$$

$$\boldsymbol{S}_{k,m}=\begin{cases}\begin{bmatrix}Q_{k,m,1}+\xi_m\psi_{k,m}(z_k^-)/Z_k\\ Q_{k,m,2}-3\xi_m\psi_{k,m}(z_k^-)/Z_k\\ Q_{k,m,3}+5\xi_m\psi_{k,m}(z_k^-)/Z_k\end{bmatrix}, & \xi_m\geqslant 0\\ \begin{bmatrix}Q_{k,m,1}-\xi_m\psi_{k,m}(z_k^-)/Z_k\\ Q_{k,m,2}-3\xi_m\psi_{k,m}(z_k^-)/Z_k\\ Q_{k,m,3}-5\xi_m\psi_{k,m}(z_k^-)/Z_k\end{bmatrix}, & \xi_m<0\end{cases} \tag{17}$$

$\boldsymbol{\Sigma}_{k,e,m}$的逆可以写作

$$\boldsymbol{\Sigma}_{kem}^{-1}=\frac{1}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{kem})}\begin{bmatrix}30\omega_{km}^2\pm 8\omega_{km}\Sigma_{tke}+\Sigma_{tke}^2 & \mp\omega_{km}(10\omega_{km}\pm\Sigma_{tke}) & \mp\omega_{k,m}\Sigma_{tke}\\ 3\omega_{km}(\pm 10\omega_{km}+\Sigma_{tke}) & \Sigma_{tke}(\pm 6\omega_{km}+\Sigma_{tke}) & \mp 3\omega_{km}(2\omega_{km}\pm\Sigma_{tke})\\ \mp 5\omega_{km}\Sigma_{tke} & 5\omega_{km}(\pm 2\omega_{km}+\Sigma_{tke}) & 6\omega_{km}^2\pm 4\omega_{km}+\Sigma_{tke}^2\end{bmatrix} \tag{18}$$

矩阵指数$\bar{\bar{\alpha}}=\exp(-\boldsymbol{\Sigma}_{k,e,m}s/\sin\theta_m)$可以写作

$$\bar{\bar{\alpha}}=\exp(\tilde{a}\tau)\{\boldsymbol{A}+\exp(\tilde{b}\tau)[\cos(\tilde{c}\tau)\boldsymbol{B}+\sin(\tilde{c}\tau)\boldsymbol{C}]\} \tag{19}$$

$$\tau=-\frac{s}{\sqrt{1-\xi_m^2}} \tag{20}$$

$$\begin{aligned}\tilde{a}&=[\Sigma_{tke}\pm\omega_{km}(3-3^{1/3}+3^{2/3})]\\ \tilde{b}&=\pm\frac{3}{2}\omega_{km}(3^{1/3}-3^{2/3})\\ \tilde{c}&=\frac{3}{2}\omega_{km}(3^{-1/6}+3^{1/6})\end{aligned} \tag{21}$$

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{3(3+3^{1/3}-3^{2/3})}\begin{bmatrix}5-3^{1/3}+3^{5/3} & \mp(1+7\cdot 3^{-1/3}-3^{1/3}) & -1+3^{1/3}+3^{2/3}\\ \pm(3+7\cdot 3^{2/3}-3^{4/3}) & 3+3^{1/3}-5\cdot 3^{2/3} & \mp(3-3^{2/3}-3^{4/3})\\ 5(-1+3^{1/3}+3^{2/3}) & \pm 5(1-3^{-1/3}-3^{1/3}) & 1-3^{2/3}+3^{4/3}\end{bmatrix} \tag{22}$$

$$\boldsymbol{B}=\frac{1}{3(3+3^{1/3}-3^{2/3})}\begin{bmatrix}2(2+2\cdot 3^{1/3}-3^{5/3}) & \pm(1+7\cdot 3^{-1/3}-3^{1/3}) & 1-3^{1/3}-3^{2/3}\\ \mp(3+7\cdot 3^{2/3}-3^{4/3}) & 2(3+3^{1/3}+3^{2/3}) & \pm(3-3^{2/3}-3^{4/3})\\ 5(1-3^{2/3}-3^{1/3}) & \mp 5(1-3^{-1/3}-3^{1/3}) & 2(4-3^{2/3})\end{bmatrix} \tag{23}$$

$$\boldsymbol{C}=\begin{bmatrix}\mp(7\cdot 3^{-5/6}-3^{-1/6})/2 & -3^{-7/6}+2\cdot 3^{-5/6} & \mp(3^{-5/6}-3^{-1/6})/2\\ 3^{-1/6}-2\cdot 3^{1/6} & \mp(3^{-1/6}-3^{1/6}) & 3^{-1/6}\\ \mp 5(3^{-5/6}-3^{-1/6})/2 & -5\cdot 3^{-7/6} & \pm(3^{-5/6}+3^{-1/6})/2\end{bmatrix} \tag{24}$$

1.3　粗网有限差分(CMFD)理论模型

在实际计算中，全堆输运问题的占优比常常接近于1，这导致输运程序的迭代收敛十分缓慢。为此，引入了粗网有限差分(CMFD)加速方法。其思想类似于多重网格技巧，主要是利用粗网的低阶方程来加速细网的高阶输运方程。粗网格和细网格对应关系如图2所示。

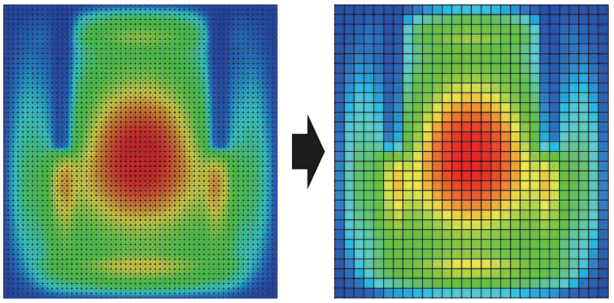


图2　CMFD 网格示意

Fig. 2　Schematic of CMFD's mesh

根据中子守恒推导得到粗网上的控制方程：

$$\sum_J J_g^c(I,J)S^c(I,J)+\bar{\Sigma}_{t,g}^c(I)\,\bar{\Phi}_g^c(I)V^c(I)=\bar{Q}_g^c(I)V^c(I) \tag{25}$$

$$\bar{Q}_g^c(I)=\sum_{g'=1}^{G}\bar{\Sigma}_{s,g'\to g}^c(I)\,\bar{\Phi}_{g'}^c(I)+\frac{1}{k_{\text{eff}}^c}\chi_g^c(I)\sum_{g'=1}^{G}\nu\,\bar{\Sigma}_{f,g'}^c(I)\,\bar{\Phi}_{g'}^c(I) \tag{26}$$

$$J_g^c(I,J)=-\tilde{D}_g^c(I,J)(\bar{\Phi}_g^c(J)-\bar{\Phi}_g^c(I))+\hat{D}_g^c(I,J)(\bar{\Phi}_g^c(J)+\bar{\Phi}_g^c(I)) \tag{27}$$

$$\bar{\Phi}_g^c(I)=\frac{\sum_{i\in\vec{r}}\Phi_g(i)V_i}{V^c(I)} \tag{28}$$

$$\bar{\Sigma}_{x,g}^c(I)=\frac{\sum_{i\in I}\Sigma_{x,g}(i)\Phi_g(i)V_i}{\bar{\Phi}_g^c(I)V^c(I)} \tag{29}$$

$$\bar{D}_g^c(I)=\frac{1}{3\,\bar{\Sigma}_{t,g}^c(I)} \tag{30}$$

$$\tilde{D}_g^c(I,J)=\frac{2\,\bar{D}_g^c(I)\bar{D}_g^c(J)}{\bar{D}_g^c(I)\Delta x(J)+\bar{D}_g^c(J)\Delta x(I)} \tag{31}$$

$$\hat{D}_g^c(I,J)=\frac{\bar{J}_g^c(I,J)+\tilde{D}_g^c(I,J)(\bar{\Phi}_g^c(J)-\bar{\Phi}_g^c(I))}{\bar{\Phi}_g^c(J)+\bar{\Phi}_g^c(I)} \tag{32}$$

式中：$V^c(I)$ 和 $S^c(I,J)$ 分别为粗网单元 I 的体积和其与粗网单元 J 的公共面面积，$\bar{\Phi}_g^c(I)$ 和 $\bar{\Phi}_g^c(J)$ 分别为两个粗网单元的标通量，$\tilde{D}_g^c(I,J)$ 和 $\hat{D}_g^c(I,J)$ 分别为粗网单元 I 关于粗网单元 J 的差分扩散系数和中子流修正系数，$J_g^c(I,J)$ 和 $\bar{J}_g^c(I,J)$ 分别为根据式(12)和输运计算结果统计得到的粗网单元 I 对粗网单元 J 的净中子流，细网单元 i 被粗网单元 I 所覆盖，其余带上标“c”和顶线“ – ”的符号是与输运方程中各符号对应的粗网参数。

将式(12)代入式(10)，整理得如下算子形式：

$$A_g^c\boldsymbol{\Phi}_g^c = \sum_{g'=1,g'\neq g}^{G} S_{g'\to g}^c\boldsymbol{\Phi}_{g'}^c + \frac{1}{\bar{k}_{\text{eff}}}\sum_{g'=1}^{G} F_{g'\to g}^c\boldsymbol{\Phi}_{g'}^c \tag{33}$$

$$S_{g'\to g}^c[I,J] = \begin{cases} \bar{\Sigma}_{s,g'\to g}^c(I)\times V^c(I), & I=J \\ 0, & I\neq J \end{cases} \tag{34}$$

$$F_{g'\to g}^c[I,J] = \begin{cases} \bar{\chi}_g^c(I)\times\nu\bar{\Sigma}_{f,g'}^c(I)\times V^c(I), & I=J \\ 0, & I\neq J \end{cases} \tag{35}$$

$$A_g^c[I,J] = \begin{cases} \sum_{f=1}(\hat{D}_g^{c,f}(I,J)+\tilde{D}_g^{c,f}(I,J))S^c(I,J)+(\bar{\Sigma}_{t,g}^c(I)-\bar{\Sigma}_{s,g'\to g}^c(I))V^c(I), & I=J \\ (\hat{D}_g^{c,f}(I,J)-\tilde{D}_g^{c,f}(I,J))S^c(I,J), & J=I+e \\ 0, & J\neq I \text{ and } J\neq I+e \end{cases} \tag{36}$$

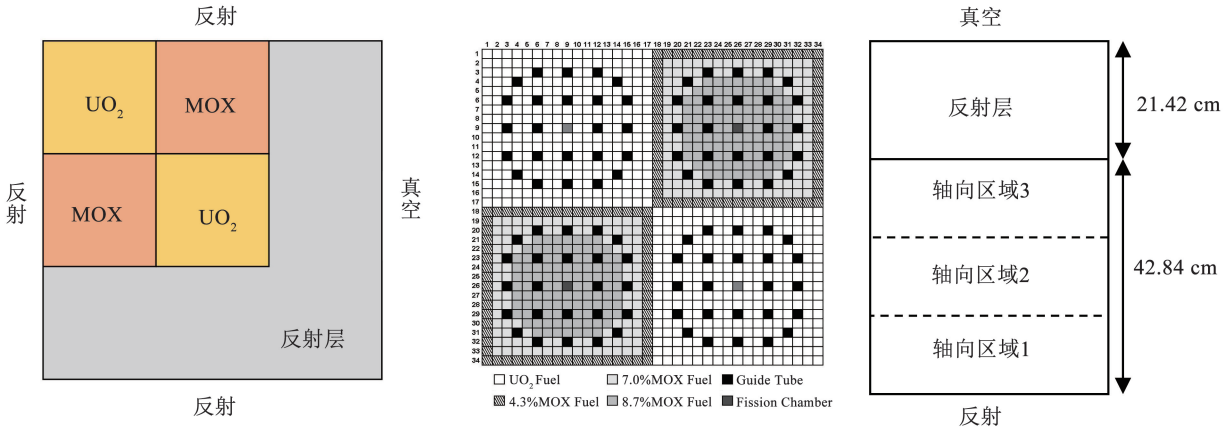
在完成对粗网扩散近似方程的计算后，程序将使用式(37)和式(38)对输运通量和特征值进行更新，以实现加速效果。式(37)和式(38)中的 n 表示第 n 次输运迭代，$n+1/2$ 表示更新后的输运结果，$\boldsymbol{\Phi}_g^{n+1/2}$ 和 $k_{\text{eff}}^{n+1/2}$ 将用于第 $n+1$ 次输运迭代更新源项。

$$\boldsymbol{\Phi}_g^{n+1/2}(i) = \frac{\bar{\Phi}_g^c(I)}{\bar{\Phi}_g^{c,t}(I)}\boldsymbol{\Phi}_g^n(i),\ i\in I \tag{37}$$

$$k_{\text{eff}}^{n+1/2} = k_{\text{eff}}^c \tag{38}$$

2 数值结果

利用 3D C5G7 基准题[10]（由 OECD/NEA 提出的三维非均匀堆芯中子输运基准问题）对二阶近似方法的性能进行测试。如图 3 所示，3D C5G7 基准题由两个 MOX 和两个 UO_2 燃料组件组成，燃料组件周围为水反射层。每个燃料组件包含 263 个燃料栅元，25 个导向管以及 1 个裂变室。C5G7 模型的堆芯活性区高度为 42.84 cm，轴向水反射层高度为 21.42 cm。轴向顶部的边界条件为真空边界，底部为反射边界条件。C5G7 的详细参数见文献[10]。



(a) 径向布置 (b) 4个燃料组件内的栅元布置 (c) 轴向布置

图 3 3D C5G7 问题

Fig. 3 3D C5G7 problem

利用二阶轴向函数展开方法对 3D C5G7 问题进行了计算。计算参数如下：每个栅元内的燃料棒和慢化剂在半径上分别被离散为 3 区和 2 区；整个燃料栅元径向上被离散为 160 个单元；控制棒和导向管在半径上离散为 5 区；整个角度相空间被离散为 384 个角度；特征值、裂变源的收敛准则为 1.0e-5；中子角通量的收敛准则为 1.0e-4；计算采用定点迭代格式[8]，每次外迭代进行两次输运扫描。为方便比较一阶近似和二阶近似方法的精度，准备了两套轴向网格并分别进行了计算。在轴向网格 1 中，堆芯活性区和轴向反射层分别离散为 18 和 12 层，此时采用一阶近似计算得到的燃料栅元功率分布的最大误差不超过 2%；轴向网格 2 由轴向网格 1 放粗 3 倍得到，此时二阶近似（采用轴向网格 2）具有与

一阶近似(采用轴向网格 1)相似的计算精度。

3D C5G7 问题的基准结果来自文献[10]，由 MCNP 程序计算得到。为方便确定论程序和蒙卡程序的比较，文献[10]给出了图 3(c)中 3 个不同轴向段上的每个栅元的积分功率。程序的精度由以下 4 个误差标定，即最大误差(E_{MAX})、平均误差(E_{AVG})、均方根误差(E_{RMS})以及平均相对误差(E_{MR})。这 4 个误差的具体定义如下：

$$E_{MAX} = \max_n |e_n|,\ E_{AVG} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}|e_n|,$$

$$E_{RMS} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}e_n^2},\ E_{MR} = \frac{1}{N\cdot P_{avg}}\sum_{n=1}^{N}|e_n|P_n \quad (39)$$

式中：N 为燃料栅元的数量，P_n 为第 n 个燃料栅元的功率，e_n 为第 n 个栅元功率的百分比误差，P_{avg} 为组件的平均功率。

表 1 展示了分别采用一阶近似和二阶近似方法计算得到的特征值结果，以及相对 MCNP 基准结果的功率误差，MCNP 计算得到的特征值为 1.143 08。可以看出：一阶近似使用轴向网格 1 时计算得到的特征值误差为 −4 pcm，最大轴向段功率误差仅为 1.7%，发生在靠近反射层的轴向段 3；当使用轴向网格 2 时，一阶近似的计算结果并不理想，特征值误差为 41 pcm，最大功率误差为 4%。而采用轴向网格 2 的二阶近似得到了与采用轴向网格 1 的一阶近似相近的计算结果：特征值误差仅为 2 pcm，同时在 3 个轴向段的最大功率误差为 0.98%，1.12% 和 1.72%，与一阶近似精度相当。同时还可以看出，二阶近似得到的 E_{AVG} 和 E_{RMS} 结果远小于最大误差值(E_{MAX})，表明在该问题中大多数燃料栅元功率相对误差在 1% 以下，只有个别栅元的功率误差大于 1%；轴向段 3 中的 E_{MR} 为 0.08%，与轴向段 1 和 2 的结果相近，表明轴向段 3 中功率误差较大的情况发生在功率相对较小的栅元内。表 1 的结果表明，二阶近似在保证计算精度相同的前提下，所需的轴向网格层数仅为一阶近似的 1/3，所需内存仅为一阶近似的 1/2(二阶近似需要额外的内存空间存储第 3 个展开系数)。

表 1　分别采用一阶和二阶近似计算得到的特征值及相对 MCNP 结果的功率误差

Tab. 1　Calculation results of eigenvalue and power errors with respect to the MCNP results obtained by linear and quadratic approximations respectively

	一阶近似						二阶近似		
轴向网格数	30			10			10		
活性区网格大小/cm	2.38			7.14			7.14		
反射层区网格大小/cm	1.785			5.355			5.355		
特征值	1.143 04			1.143 49			1.143 10		
特征值误差/pcm	−4			41			2		
轴向段功率误差/%	轴向段			轴向段			轴向段		
	1	2	3	1	2	3	1	2	3
E_{MAX}	1.043	1.175	1.707	1.265	0.847	3.992	0.982	1.125	1.719
E_{AVG}	0.211	0.222	0.418	0.678	0.380	2.494	0.216	0.220	0.483
E_{RMS}	0.269	0.298	0.517	0.722	0.428	2.561	0.267	0.291	0.577
E_{MR}	0.086	0.068	0.070	0.334	0.154	0.475	0.093	0.069	0.083

通过比较一阶近似和二阶近似的结果还可以看出，当这两种方法使用相同的较粗的轴向网格(即均使用轴向网格 2)时，二阶近似可以大幅提高计算精度，将特征值的误差从 41 pcm 降至 2 pcm，最大功率误差(E_{MAX})从 4% 降至 1.7%。在中子通量变化较为平缓的轴向段 1 和 2 中，二阶近似计算的精度(以 E_{AVG}、E_{RMS} 和 E_{MR} 标定)是一阶近似方法的 2 ~ 3 倍；在中子通量变化较为剧烈的轴向段 3 中，二阶近似的精度是一阶近似的 5 倍左右。

表 2 对比了二阶近似(采用轴向网格 2)和一阶近似(采用轴向网格 1)时的计算效率，此时这两种方法的计算精度相当。一阶计算和二阶计算采用了相同的处理器数量(480 个 CPU 核)，但是基于不同的轴向和径向区域分解。可以看出，尽管达到相同计算精度所需的网格层更少，但是二阶近似(29 次)比一阶近似(14 次)需要更多的外迭代次数才能收敛，从总计算时间上来看，二阶近似并不比一阶近似的效率更高。二阶近似的计算效率结果表明，传统的 CMFD 加速算法在采用大的轴向网格层时计算效率并不高。随着轴向单元高度增大，粗网格内的通量分布近似变得更为粗糙，CMFD 对跨层中子流误差的校正能力被削弱，进而增大了特征值谱半径，

使得外层迭代在达到既定收敛准则时需要更多步数,从而出现迭代退化现象。

从表 2 还可以看出,二阶近似单次输运扫描时间由线性近似的 1.15 s 缩减至 0.56 s,主要原因在于:一方面,二阶展开仅需 10 层轴向网格,相比线性展开的 30 层网格将射线追踪段数和相关矩阵运算量直接削减为 1/3;另一方面,虽然二阶近似在每条射线段上需对 3 × 3 系数矩阵执行解析逆和矩阵指数运算,而线性方法仅需处理 2 × 2 矩阵,但此项额外开销仍远小于层数减少带来的整体运算量下降;同时,本工作在并行区域划分上采用了 6 × 10(轴向 × 径向)的分区方式,相较于线性方法的 4 × 15 分区更有利于负载均衡,降低了 MPI 通信等待时间;此外,层数减少也使得出射角通量的跨层交换次数和源项的更新广播开销同步下降,进一步提升了单次扫描效率。

表 2 一阶近似和二阶近似在计算精度相当时的计算效率对比

Tab. 2 Comparison of computational performance of linear and quadratic approximations for comparable accuracy

方法	总轴向网格数	轴向区域分解	径向区域分解	总处理器数量	单次输运扫描时间/s	总外迭代次数	总扫描次数	总计算时间/s
一阶近似	30	4	15	480	1.15	14	196	566.1
二阶近似	10	6	10	480	0.56	29	406	627.2

3 结 论

1)相比一阶近似,二阶近似可以在保证计算精度的条件下使用较粗的轴向网格,从而大幅减少网格层数,降低内存占用。具体来说,对于 3D C5G7 基准题,二阶近似将所需的轴向网格数降低至一阶近似的 1/3,内存降低为 1/2。

2)由于粗网差分加速算法在大轴向网格层下的性能较差,需要较多的外迭代次数才能达到收敛,二阶近似的计算效率相比一阶近似并没有优势。

3)在未来的工作中将着重开展两方面研究:针对大轴向网格条件下迭代加速性能下降的问题,设计并实现子层 CMFD 加速方法,将传统粗网格扩散差分算法拓展为分层加速结构,通过在不同粗网层次间耦合粗—细网格信息,进一步提升迭代收敛速率;引入基于谱半径优化的迭代控制策略,在 Krylov 子空间框架下动态调整迭代步长与松弛参数,最大程度地压缩特征值谱宽度,以提高整体求解效率。

参考文献

[1] Cho N Z, Lee G S, Park C J. Refinement of the 2-D/1-D fusion method for 3-D whole-core transport calculation[J]. Trans Am Nucl Soc, 2002, 87: 412

[2] Joo H G, Cho J Y, Kim K S, et al. Methods and performance of a three-dimensional whole-core transport code DeCART [C]//Proc Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems: Global Developments (PHYSOR-2004). Chicago, Illinois: [s. n.], 2004

[3] Chen Jun, Liu Zhouyu, Zhao Chen, et al. A new high-fidelity neutronics code NECP-X[J]. Annals of Nuclear Energy, 2018, 116: 417. DOI: 10.1016/j.anucene.2018.02.049

[4] Hursin M. Full core, heterogeneous, time dependent neutron transport calculations with the 3D code DeCART[D]. Berkeley: University of California, 2010

[5] Kelley B W, Collins B, Larsen E W. 2D/1D approximations to the 3D neutron transport equation. II: numerical comparisons[C]//Proc Mathematics and Computation (M&C 2013). Sun Valley, Idaho: [s. n.], 2013

[6] Smith M A, Kaushik D, Wollaber A, et al. New neutronics analysis tool development atargonne national laboratory[C]//Proc of Int Conf on Fast Reactors and Related Fuel Cycles (FR09). Kyoto: [s. n.], 2009

[7] Gunow G, Shanner S, Forget B, et al. Reducing 3D MOC storage requirements with axial on-the-fly ray tracing[C]//Proc PHYSOR 2016. Sun Valley, Idaho: [s. n.], 2016

[8] Lafleche A M, Smith M A, Lee C. Proteus-MOC: a 3D deterministic solver incorporating 2D method of characteristics [C]//Proc Mathematics and Computation (M&C 2013). Sun Valley, Idaho: [s. n.], 2013

[9] Zhang Guangchun, Hsieh A, Yang W S, et al. Consistent pCMFD acceleration schemes of the three-dimensional transport code PROTEUS-MOC[J]. Nuclear Science and Engineering, 2019, 193 (157): 1. DOI: 10.1080/00295639.2018.1560854

[10] OECD/NEA. Benchmark on deterministic transport calculations without spatial homogenization: a 2-D/3-D MOX fuel assembly 3-D benchmark[R]. Paris: OECD/NEA, 2003

(编辑 刘 彤)