

基于质量矩阵集总技术的非结构网格二维 有限元屏蔽计算程序研发

宗智伟 程懋松

(中国科学院上海应用物理研究所 上海 201800)

摘要 精细化几何建模是高保真中子输运计算的重要基础,而非结构网格对复杂几何模型具有较强的适应性,能弥补结构网格建模能力的不足。为了提高屏蔽计算程序对复杂模型的建模能力,从一阶中子输运方程出发,建立了二维离散纵标-伽辽金有限元求解模型,对比分析了连续有限元和间断有限元方法的计算性能,进一步采用质量矩阵集总技术以提高求解模型的可靠性,并开发了相应的计算程序 ThorSNIPE。选用 BWR cell 临界基准题、阿贡实验室 5-A1 固定源基准题和 Dog leg duct 基准题,验证 ThorSNIPE 程序的正确性。数值计算结果表明:ThorSNIPE 程序的计算结果与基准值吻合较好,初步验证了程序的正确性,ThorSNIPE 程序适用于复杂屏蔽计算分析;质量矩阵集总技术在不影响计算精度的情况下,能够有效抑制非物理振荡问题。

关键词 屏蔽计算, 离散纵标法, 有限元, 非结构网格, 质量矩阵集总技术

中图分类号 TL328

DOI: 10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.020602

A two-dimensional finite element shielding calculation code with mass-matrix lumping technique and unstructured meshes

ZONG Zhiwei CHENG Maosong

(Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)

Abstract [Background] The high-fidelity neutron transport calculation requires refined geometric modeling whilst the unstructured meshes have strong adaptability to copy with the changes bring by complex geometry structure, and overcome the deficiencies of structured meshes in modeling capability. [Purpose] This study aims to develop and validate a two-dimensional shielding calculation code ThorSNIPE which can be used to improve the modeling ability for analysis complex problems. [Methods] First of all, problem solving model was established with discrete ordinates method and finite element method on the basis of the first order Boltzmann transport equation. The computational performance of continuous finite element method and discontinuous finite element method were compared and analyzed. Mass-matrix lumping technique was further applied to improve the reliability of solving model. Then, a two-dimensional discrete ordinate-finite element shielding calculation program ThorSNIPE was developed on the basis of above model. Finally, the code was validated by BWR cell critical benchmark, Argonne-5-A1 fixed source benchmark and Dog leg duct benchmark. [Results & Conclusions] The numerical results show that calculation value provided by ThorSNIPE is in good agreement with reference value, indicating that ThorSNIPE is suitable for

中国科学院科技战略先导项目(No.XD02001005)资助

第一作者: 宗智伟, 男, 1996 年出生, 2021 年于华北电力大学获硕士学位, 研究领域为中子输运数值计算方法

通信作者: 程懋松, E-mail: mscheng@sinap.ac.cn

收稿日期: 2022-08-05, 修回日期: 2022-12-06

Supported by Strategic Pilot Science and Technology Project of Chinese Academy of Sciences (No.XD02001005)

First author: ZONG Zhiwei, male, born in 1996, graduated from North China Electric Power University with a master's degree in 2021, focusing on numerical calculation method for neutron transport problem

Corresponding author: CHENG Maosong, E-mail: mscheng@sinap.ac.cn

Received date: 2022-08-05, revised date: 2022-12-06

complex shielding calculation, and Mass-matrix lumping technique can effectively suppress the non-physical spatial oscillations without reducing the calculation accuracy.

Key words Shielding calculation, Discrete ordinates method, Finite element method, Unstructured meshes, Mass-matrix lumping technique

精确求解任意几何结构的中子输运问题,减少物理模型几何近似,是高精度核装置屏蔽计算的基础。离散纵标法(S_N)计算速度较快、精度高,适合求解大尺度深穿透输运问题,是常用的屏蔽计算方法之一^[1-2]。 S_N 输运求解的空间网格按照数据类型和几何形状可以分为结构网格和非结构网格。结构网格因其排列的规律性和对空间离散格式友好的特性被广泛使用,但对于带有曲率的复杂模型,往往需要可观的网格数量才能满足屏蔽计算要求^[3]。非结构网格采用任意形状剖分网格,每个单元都是相对独立的个体,对几何模型具有较强的适应性,弥补了结构网格对任意连通区域建模能力的不足。伴随着有限元理论的日益成熟,非结构网格在计算格式上具备了二阶以上的计算精度,在计算效率上得到了提升。因此,面向大型复杂屏蔽问题的高保真建模与仿真需求,开展基于非结构网格的 S_N 有限元方法研究具有重要意义。

有限元方法在 S_N 方程上的应用可以分为两类:一类基于一阶 S_N 方程,另一类基于二阶 S_N 方程。二阶 S_N 方程是自共轭方程,适合有限元方法求解,但由于方程中对总截面求逆,求解空腔问题时需要特殊处理,所以本文主要关注一阶 S_N 有限元方法。一阶 S_N 有限元方法主要包括最小二乘有限元(Least-Squares, LS)^[4]、间断伽辽金有限元(Discontinuous Galerkin Finite Element, DGFEM)^[5]和连续伽辽金有限元(Continuous Galerkin Finite Element, CGFEM)^[6]方法。LS形成的刚度矩阵具有对称性,适合共轭梯度法(Conjugate Gradient, CG)快速求解,但标准的LS格式与源迭代不兼容,同时需要强制的边界条件弥补显式边界积分项的缺失。DGFEM具有较高的计算精度,待求变量和试函数在相邻单元间的边界上间断,采用迎风阶格式和跳跃值增加形状函数在间断位置处的限制,基于DGFEM开发的 S_N 程序有ATTILA^[7]、MINARET^[8]、Rattlesnake^[9]、TefTran1.0^[10]和AETIUS^[11]。CGFEM保留了相邻网格边界处的连续性,其有限元节点由边界顶点和相邻网格间的悬挂点组成,计算成本相对较低,基于CGFEM开发的 S_N 程序有FEGT^[12]和SPARK-SFEM^[13]。CGFEM和DGFEM是伽辽金有限元方法的不同变形,该方法需要解决空间离散的数值扩散和非物理振荡问题。

常用的抑制非物理振荡问题和负通量技术主要有三类:通量密度修正^[14]、严格的非负空间离散格式^[15]和矩阵集总^[16]。前两者通过修正解向量保证出射角通量密度严格非负,但会导致输运系统非线性,增加矩阵求解的难度。矩阵集总技术保留单元内部所有节点对单元刚度矩阵和单元列向量的贡献,在大多数实际应用中可以获得精确解,经典矩阵集总技术包括质量矩阵、表面矩阵和梯度矩阵集总,此外还有使用拉格朗日插值点处的数值求积创建对角质量矩阵的自集总(Self-lumping, SL)^[17]。目前国内外关于矩阵集总技术的应用主要集中在DGFEM上,在CGFEM上还没有相关应用。

本文基于有限元方法和中子输运理论,推导基于三角形网格的线性CGFEM和DGFEM格式的一阶 S_N 方程,结合经典的质量矩阵集总技术和成熟的C++开源有限元数值计算库deal.II-9.3.0^[18],开发了二维离散纵标-有限元屏蔽计算程序ThorSNIPE,选用一系列基准题进行程序初步验证,并通过不同的计算模型测试CGFEM和DGFEM的计算性能。

1 数值方法

1.1 S_N 方程的弱形式

S_N 对能量变量采用多群近似,对角度变量进行直接离散,二维直角坐标系下,稳态、单群下的一阶 S_N 方程^[2]如下所示:

$$\vec{\Omega}_m \vec{\nabla} \psi_m(\vec{r}) + \Sigma_t(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}) = Q_m(\vec{r}), \vec{r} \in D, \\ m = 1, 2, \dots, M \quad (1)$$

$$\phi_m(\vec{r}) = \sum_{m=1}^M \omega_m \psi_m(\vec{r}) \quad (2)$$

式中: D 表示求解域; $\vec{\Omega}_m$ 表示离散方向 m 下的角度变量; $\vec{\nabla}$ 表示梯度算子; $\psi_m(\vec{r})$ 和 $\phi_m(\vec{r})$ 分别表示离散方向 m 下 \vec{r} 位置处的角通量密度和标通量; $\Sigma_t(\vec{r})$ 表示 \vec{r} 位置处的宏观总截面; $Q_m(\vec{r})$ 表示离散方向 m 下的源项; ω_m 表示求积组权重; M 表示离散方向总数。

式(1)是复杂的一阶线性“双曲型”方程,很难直接求得解析解。需要先将这种“强形式”的微分-积分方程转化为“弱形式”进行求解,首先将整个求解域分解成 K 个网格, D_k 表示第 k 个网格的面积, ∂D_k 表示第 k 个网格的边界。然后在方程两端同时乘

以试函数 $\psi_m^*(\vec{r}) \in H^1$, $\vec{r} \in D_k$, 并在 D_k 内积分, 关于试函数的说明在 §1.2 中解释。

$$\int_{D_k} \psi_m^*(\vec{r}) \vec{Q}_m \vec{\nabla} \psi_m(\vec{r}) d^2\vec{r} + \int_{D_k} \psi_m^*(\vec{r}) \Sigma_i(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}) d^2\vec{r} = \int_{D_k} \psi_m^*(\vec{r}) Q_m(\vec{r}) d^2\vec{r}, k = 1, 2, \dots, K \quad (3)$$

接着对方程左边的泄漏项积分, 应用格林公式和分部积分得到:

$$\int_{\partial D_k} \psi_m^*(\vec{r}) \vec{n}(\vec{r}) \vec{Q}_m \psi_m(\vec{r}) d\vec{r} - \int_{D_k} \psi_m(\vec{r}) \vec{Q}_m \vec{\nabla} \psi_m^*(\vec{r}) d^2\vec{r} + \int_{D_k} \psi_m^*(\vec{r}) \Sigma_i(\vec{r}) \psi_m(\vec{r}) d^2\vec{r} = \int_{D_k} \psi_m^*(\vec{r}) Q_m(\vec{r}) d^2\vec{r} \quad (4)$$

式中: $\vec{n}(\vec{r})$ 表示 \vec{r} 位置处垂直于网格边界的单位外法线向量。为了推导的简便性, 将式(4)以算子形式表示为^[19]:

$$\langle \psi_m^*, \psi_m \rangle - (\Omega_m \nabla \psi_m^*, \psi_m) + (\psi_m^*, \Sigma_i \psi_m) = (\psi_m^*, Q_m) \quad (5)$$

根据网格在求解域中的位置, 可以将 ∂D_k 分为出射边界、入射边界和内边界, 分别用 ∂D_k^+ 、 ∂D_k^- 、 ∂D_k^{in} 表示, 代入式(5)移项后得到:

$$\langle \psi_m^*, \psi_m^{\text{out}} \rangle^+ + \langle [\psi_m^*], \psi_m^{\text{upwind}} \rangle^{\text{in}} - (\Omega_m \nabla \psi_m^*, \psi_m) + (\psi_m^*, \Sigma_i \psi_m) = (\psi_m^*, Q_m) - \langle \psi_m^*, \psi_m^{\text{inc}} \rangle^- \quad (6)$$

式中: ψ_m^{out} 和 ψ_m^{inc} 分别表示出射和入射方向上的角通量密度; ψ_m^{upwind} 表示来自上风方向的角通量密度, 入射边界取上风方向相邻网格的值, 出射边界取当前网格的值。[·]算子表示跳跃值, 即共享该边界的相邻网格上的值。式(6)即为 S_N 方程的弱形式。

1.2 S_N 方程的伽辽金有限元格式

有限元方法是从输运方程的“弱形式”出发, 基于函数逼近的思想, 在整个求解域内寻求能表示真实解且满足边界条件的试函数来近似无穷维空间。在每个三角形单元内, 采用线性多项式表示角通量密度的分布形状:

$$\psi_m = [b_1, b_2, b_3] [\varphi_{m,1}, \varphi_{m,2}, \varphi_{m,3}]^T = b^T \varphi_m \quad (7)$$

式中: b_i 为“拉格朗日”基函数, $b^T = [b_1, b_2, b_3]$; $\varphi_{m,j}$ 为待求系数, $\varphi_m = [\varphi_{m,1}, \varphi_{m,2}, \varphi_{m,3}]$ 。伽辽金有限元离散格式中, 试函数采用与基函数相同的函数空间 $\psi_m^* = b$, 将方程(6)中各项以同样的方式展开, 可以得到:

$$\langle b, b^T \rangle^+ \varphi_m^{\text{out}} + \langle [b], b^T \rangle^+ \varphi_m^{\text{upwind}} - (\Omega_m \nabla b, b^T) \varphi_m + (b, \Sigma_i b^T) \varphi_m = (b, b^T) \varphi_m - \langle b, b^T \rangle^- \varphi_m^{\text{inc}} \quad (8)$$

对于 CGFEM, 由于待求变量和试函数在单元边界处连续, 所以 $[\psi_m^*] = 0$, 代入方程后该项为零。去除内边界项后可以得到:

$$\langle b, b^T \rangle^+ \varphi_m^{\text{out}} - (\Omega_m \nabla b, b^T) \varphi_m + (b, \Sigma_i b^T) \varphi_m = (b, b^T) \varphi_m - \langle b, b^T \rangle^- \varphi_m^{\text{inc}} \quad (9)$$

式(8)和(9)即分别为 DGFEM 和 CGFEM 的空间离散格式。

1.3 质量矩阵集总技术

将移出项和源项中的截面常数和待求系数 φ_m 提取出来后可以得到质量矩阵 M_k :

$$[M_k]_{ij} = \int_{D_k} b(\vec{r}) b^T(\vec{r}) d^2\vec{r} \quad (10)$$

质量矩阵集总即将矩阵中的非对角线位置处的数值迭代到对角线上, 然后置零:

$$[M_k^{\text{lump}}]_{ij} = \delta_{ij} \sum_{j'=1}^3 [M_k]_{ij'} = \delta_{ij} \int_{D_k} b(\vec{r}) d^2\vec{r} \quad (11)$$

可以看出, 质量矩阵集总技术可以减小刚度矩阵的跨度, 由此得到的方程更好地限制抵抗负通量的出现, 并且更迅速地抑制振荡。

2 程序计算流程

依据以上求解模型, 采用面向对象的编程思想和高级 C++ 编程语言, 基于开源有限元数值计算库 deal.II-9.3.0 开发了屏蔽计算程序 ThorSNIPE。方程中的每一项算子都通过独立的类成员函数实现, 再进行抽象封装。构造有限元矩阵时, 先在局部坐标系下计算每个网格的单元刚度矩阵和单元列矩阵, 再根据局部坐标-全局坐标转换关系式将单元网格对整个求解域的贡献迭加到总刚度矩阵和总列矩阵上。有限元稀疏矩阵的求解通过调用 deal.II 数值计算库的求解器完成, 支持多种求解器和预处理技术。

图 1 为程序计算流程图, 整个计算流程分为前处理、输运求解和后处理三部分。前处理所需的控制参数、几何和截面数据分别由预设输入卡、网格划分工具 Gmsh^[20] 和宏观截面处理程序 Transx^[21] 提供。输运求解分为外迭代求解过程和内迭代求解过程, 外迭代在求解临界问题时进行, 每次迭代需要更新裂变源, 然后按照能群求解顺序进行内迭代; 内迭代是散射源的迭代过程, 每次迭代时, 裂变源、固定源和群间散射源作为已知源项, 通过更新群内散射源进行求解。后处理支持输出全局标通量分布和每个材料区域的平均中子通量密度功能。

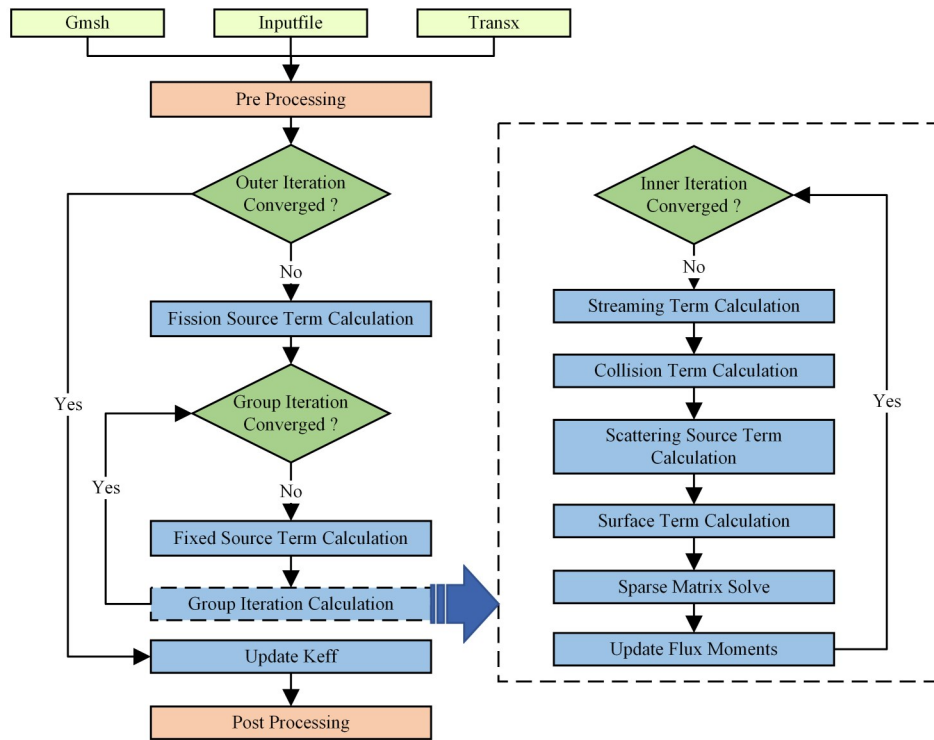


图1 程序计算流程图
Fig.1 Calculation flowchart of ThorSNiPE

3 程序验证

为了验证 ThorSNiPE 屏蔽计算程序的正确性及其计算效率,选取了一系列算例进行测试验证。BWR cell 基准题,旨在验证程序对特征值问题的计算精度和求积组阶数的选择对理论方法的影响; Argonne-5-A1 基准题,旨在测试质量矩阵集总技术对非物理振荡问题的抑制效果和计算多群固定源问题的正确性; Dog leg duct 基准题,旨在测试程序对复杂孔道问题的计算能力和网格尺度对理论方法的影响。

3.1 BWR cell 基准题

BWR cell 基准题^[22]是一个两群临界问题,其几何结构和材料截面分别如图2和表1所示。通量密度的迭代收敛准则为 1×10^{-4} ,特征值的收敛准则为 1×10^{-5} 。根据网格敏感性分析,设置网格尺度为 1 cm,总网格数为 228,CGFEM 和 DGFEM 的自由度

分别为 133、684。表2展示了不同阶数的勒让德切比雪夫($P_N T_N$)求积组下各区域的平均中子通量密度和特征值,相对偏差的参考基准为基准题提供的表面通量计算程序 SURCU 的计算结果。平均中子通量密度以第1群区域1的数值为基准进行了归一化处理。CGFEM 和 DGFEM 的计算结果随着离散角度增加逐渐收敛于相近数值, S_{16} 设置下,两者的特征值计算结果相对偏差在 50×10^{-5} 以内。DGFEM 的时间计算成本是 CGFEM 的4倍以上,其计算精度优势并不明显。

3.2 Argonne-5-A1 基准题

阿贡实验室 5-A1 基准题^[23]是一个两群固定源问题,其几何结构和材料截面分别如图3和表3所示。采用 $P_N T_N S_{32}$ 求积组,通量密度的迭代收敛准则为 1×10^{-4} 。根据网格敏感性分析,设置网格尺度为 2 cm,总网格数为 11 082,CGFEM 和 DGFEM 的自由度分别为 5 679、33 246。基准题提供了 $Y=80$ cm

表1 截面参数
Table 1 Isotropic cross sections

区域 Region	能群 Group	总截面 $\Sigma_t / \text{cm}^{-1}$	散射截面 $\Sigma_{s,g-1} / \text{cm}^{-1}$	散射截面 $\Sigma_{s,g-2} / \text{cm}^{-1}$	裂变截面 $\nu \Sigma_{s,1-g} / \text{cm}^{-1}$
R1	1	$1.966\ 47 \times 10^{-1}$	1.780×10^{-1}	1.002×10^{-2}	6.203×10^{-3}
	2	$5.961\ 59 \times 10^{-1}$	1.089×10^{-3}	5.255×10^{-1}	1.101×10^{-1}
R2	1	$2.220\ 64 \times 10^{-1}$	1.995×10^{-1}	2.188×10^{-2}	0
	2	$8.878\ 74 \times 10^{-1}$	1.558×10^{-3}	8.783×10^{-1}	0

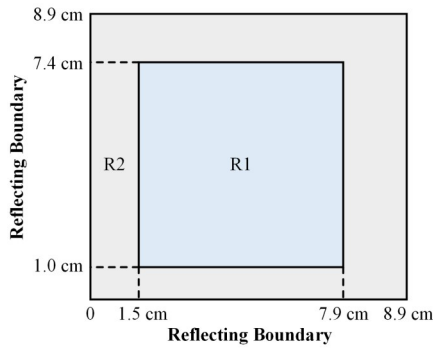


图2 BWR基准题几何结构图
Fig.2 Geometry of BWR cell benchmark

处的由球谐函数 P_{19} 阶展开计算得到的134组中子通量密度,设置4组计算模型进行分析对比:使用连续有限元方法且不采用质量矩阵集总技术(CGFEM-no)、使用连续有限元方法并采用质量矩阵集总技术

(CGFEM-mass)、使用间断有限元方法且不采用质量矩阵集总技术(DGFEM-no)、使用间断有限元方法并采用质量矩阵集总技术(DGFEM-mass)。

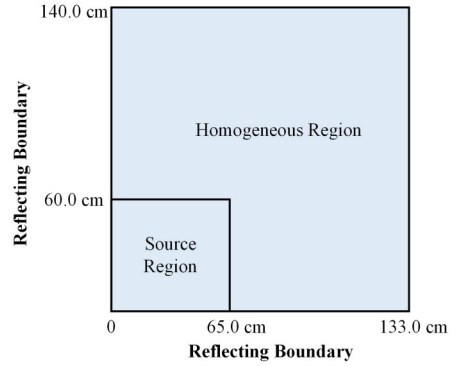


图3 阿贡国家实验室5-A1基准题几何结构图
Fig.3 Geometry of Argonne-5-A1 benchmark

表2 各区域的平均中子通量密度和特征值
Table 2 Average scalar fluxes and eigenvalues in regions 1 and 2

计算模型 Calculation models	能群1 Group 1			能群2 Group 2			k_{eff}	相对偏差 Relative error	时间 Time / s	
	R1	R2	相对偏差 Relative error	R1	相对偏差 Relative error	R2				相对偏差 Relative error
Reference	1.0	0.926 9	—	0.352 7	—	0.451 4	—	1.212 7	—	
CGFEM(S_4)	1.0	0.938 6	0.012 6	0.918 4	-0.009 2	0.463 6	0.027 0	1.215 1	0.002 0	7.1
CGFEM(S_8)	1.0	0.923 5	-0.003 7	0.359 5	0.019 4	0.459 3	0.017 5	1.214 0	0.001 0	25.7
CGFEM(S_{16})	1.0	0.918 4	-0.009 2	0.355 1	0.006 8	0.457 4	0.013 2	1.213 3	0.000 5	95.4
DGFEM(S_4)	1.0	0.944 1	0.018 6	0.364 0	0.032 0	0.464 3	0.028 6	1.215 1	0.001 9	46.2
DGFEM(S_8)	1.0	0.930 1	0.003 5	0.358 9	0.017 5	0.461 1	0.021 5	1.213 7	0.000 8	139.3
DGFEM(S_{16})	1.0	0.925 0	-0.002 1	0.357 6	0.013 8	0.459 5	0.017 9	1.213 2	0.000 4	463.4

表3 截面和源强参数
Table 3 Isotropic cross sections and source density

能群 Group	总截面 $\Sigma_t / \text{cm}^{-1}$	散射截面 $\Sigma_{s,g-1} / \text{cm}^{-1}$	散射截面 $\Sigma_{s,g-2} / \text{cm}^{-1}$	源强密度 Source density / $\text{n}\cdot\text{cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$
1	$9.210\ 40 \times 10^{-2}$	$6.947\ 0 \times 10^{-3}$	0	$6.546\ 0 \times 10^{-3}$
2	$1.008\ 77 \times 10^{-1}$	$2.343\ 4 \times 10^{-2}$	$4.850\ 0 \times 10^{-3}$	$1.770\ 1 \times 10^{-2}$

第一群和第二群的标通量分布如图4和图5所示。如图4(a)和图5(a)所示,CGFEM-no出现严重的非物理振荡和负值。作为对比,DGFEM在没有采用矩阵集总技术的情况下也能合理描述中子通量密度的分布,表明其具备更优的空间相容性,可以有效抑制空间离散的数值扩散效应和非物理振荡。采用矩阵集总技术后,CGFEM的通量密度的非物理振荡得到抑制,并且获得了与DGFEM相同的计算精度。

图6展示了4种计算模型的结果与基准值的百分比偏差。可以看出,CGFEM-mass和DGFEM-no的计算结果与基准值吻合较好,偏差在4%以内,满

足屏蔽计算要求。CGFEM-no的数值计算结果波动明显,不满足计算要求。

3.3 Dog leg duct 基准题

Dog leg duct 基准题是一个单群固定源问题^[24],其几何结构和材料截面分别如图7和表4所示。该基准题旨在测试程序对复杂孔道的计算能力,采用 $P_N T_N S_{32}$ 求积组,通量密度的迭代收敛准则为 1×10^{-4} 。

首先进行网格敏感性分析,图8展示了 $X=6.0\text{ cm}$ 处的 L_2 范数与网格数的对应关系。如图8所示,DGFEM的计算精度优于同网格尺度下的CGFEM。在网格尺度较大的情况下,矩阵集总技术

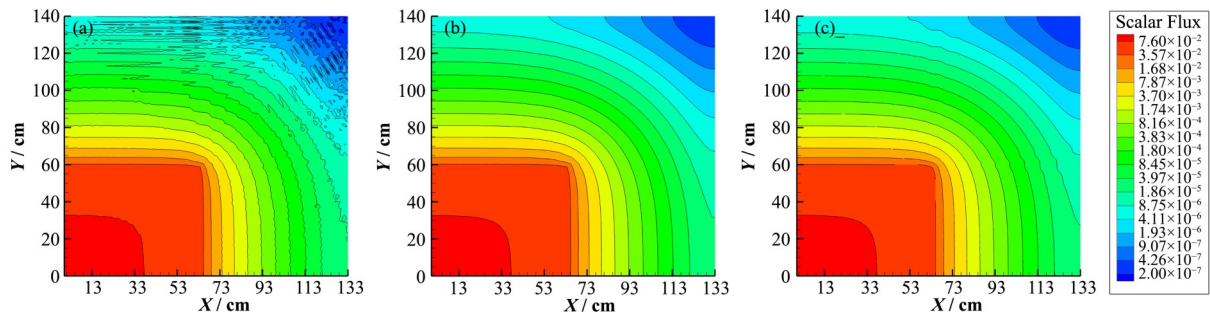


图4 第一群标通量分布 (a) 连续有限元-无集总, (b) 连续有限元-集总, (c) 间断有限元-无集总
Fig.4 Scalar flux distribution of group 1 (a) CGFEM-no, (b) CGFEM-mass, (c) DGFEM-no

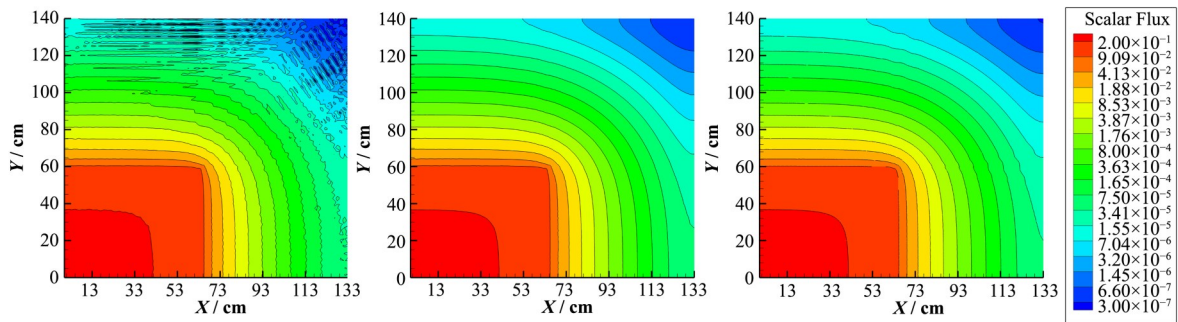


图5 第二群标通量分布 (a) 连续有限元-无集总, (b) 连续有限元-集总, (c) 间断有限元-无集总
Fig.5 Scalar flux distribution of group 2 (a) CGFEM-no, (b) CGFEM-mass, (c) DGFEM-no

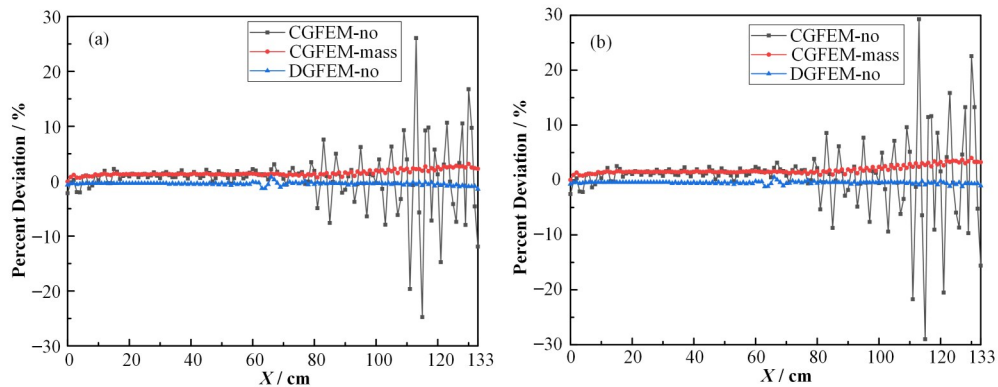


图6 第一群(a)和第二群(b)计算值与基准值的百分比偏差
Fig.6 Percent deviation of calculated value and reference value of group 1 (a) and group 2 (b)

表4 截面和源强参数
Table 4 Isotropic cross sections and source density

材料 Material	总截面 $\Sigma_t / \text{cm}^{-1}$	散射截面 $\Sigma_s / \text{cm}^{-1}$	源强密度 Source density / $\text{n}\cdot\text{cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$
R1	0.5	0.0	1.0
R2	0.5	0.0	0.0
R3	0.0	0.0	0.0
R4	0.5	0.0	0.0

在一定程度上降低 DGFEM 的数值计算精度,但对 CGFEM 计算精度的影响不明显。当网格数量大于 10^3 次方量级时,4 种计算模型都能获得二阶以上的计算精度,继续增加网格数,计算精度的变化趋势趋于平缓。

表 5 展示了不同网格尺度下使用矩阵集总技术对计算结果的影响。由表 5 可以看出,CGFEM 对网格尺度的敏感性高于 DGFEM,在未采用矩阵集总技术的情况下,即使降低网格尺度也不能保持严格非负性;采用矩阵集总技术后,在网格尺度较小的情

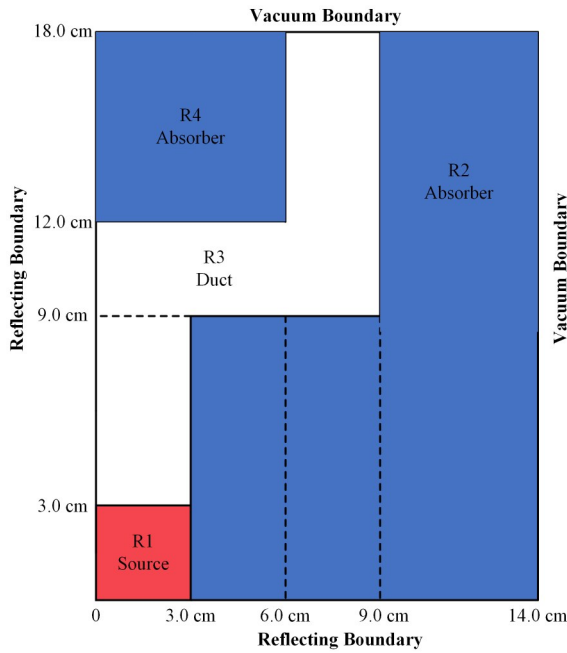


图7 Dog leg duct基准题几何结构图
Fig.7 Geometric structure diagram of Dog leg duct benchmark

况下能获得符合物理规律的非负解。对于DGFEM而言,在未采用矩阵集总技术的情况下,仅在网格尺度大于1.5 cm时出现负值,采用矩阵集总技术后可以保证严格非负性。

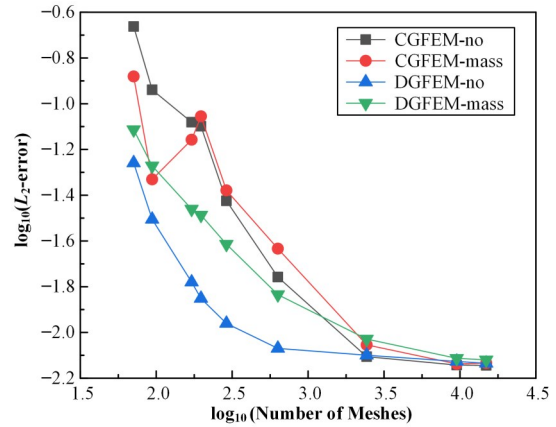


图8 不同计算模型下 L_2 范数与网格计算量关系
Fig.8 Correlation comparison between L_2 -error norm and mesh computing under different calculation models

表5 不同计算模型下通量密度的严格非负性
Table 5 Strict non-negativity under different calculation models

网格尺度 Mesh diameter	网格数 Mesh number	计算模型 Calculation models			
		CGFEM-no	CGFEM-mass	DGFEM-no	DGFEM-mass
0.2	14 904	-	+	+	+
0.25	9 516	-	+	+	+
0.5	2 432	-	+	+	+
1.0	632	-	-	+	+
1.5	290	-	-	+	+
2.0	197	-	-	-	+
2.5	171	-	-	-	+
3.0	94	-	-	-	+
5.0	71	-	-	-	+

注：“-”表示出现负通量，“+”表示未出现负通量
Notes: "-" means negative flux occurs, and "+" means no negative flux occurs

根据上述网格敏感性分析,将网格尺度设置为0.25 cm,总网格数为9 516,CGFEM和DGFEM的自由度分别为4 887、28 548。4种计算模型的计算时间分别为56.9 s、56.2 s、219.9 s和219.1 s。图9展示了 $X=6.0$ cm处的标通量沿 Y 轴方向的分布及百分比偏差,参考值由基准题提供。可以看出,CGFEM-no受数值扩散效应影响,波动幅度较大;其他三种情况的最大偏差主要集中在14~18 cm处的孔道内,受 S_N 的射线效应影响,偏差高于5%,但都控制在10%以内,满足屏蔽计算要求,验证了程序的正确性。

4 结语

结合 S_N 和有限元理论,推导了 S_N 方程的

CGFEM和DGFEM格式,并开发了适用于非结构网格的二维有限元屏蔽计算程序ThorSNIPE。针对伽辽金方法在计算光学厚度较厚的运输模型能力不足的问题,采用了质量矩阵集总技术抑制非物理振荡问题。通过BWR cell和Argonne-5-A1基准题分别开展临界问题和固定源问题的测试和分析,结果表明:ThorSNIPE程序的计算结果与基准题参考值吻合较好,初步验证了ThorSNIPE程序在屏蔽计算中的正确性和可靠性。通过Dog leg duct基准题测试了ThorSNIPE程序对复杂孔道问题的计算能力和网格尺度对有限元方法的影响,结果表明:DGFEM的鲁棒性强于CGFEM;CGFEM的计算精度受网格尺度影响较大,但在网格尺度较低的情况下能获得与

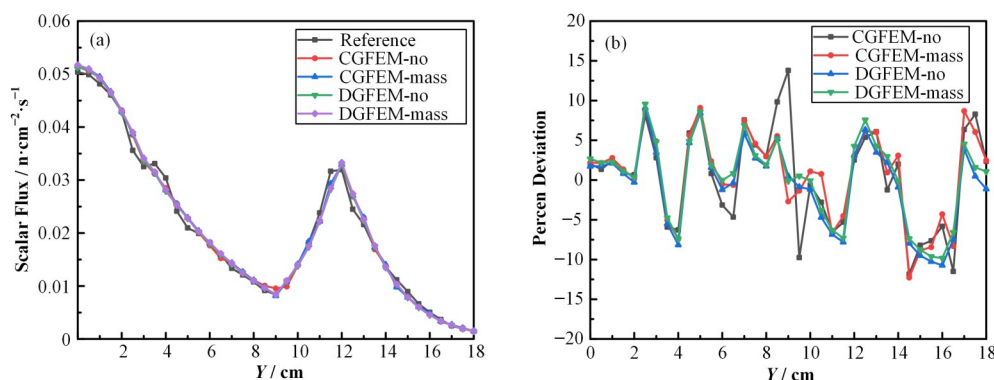


图9 $X=6.0$ cm位置处的标通量分布(a)和百分比偏差(b)
Fig.9 Scalar fluxes distribution (a) and percent deviation of scalar fluxes (b) along Y at $X=6.0$ cm

DGFEM 相近的计算精度,且计算成本低于 DGFEM;质量矩阵集总技术可以在不影响 CGFEM 计算精度的情况下,减少非物理振荡对计算结果的影响。下一步工作将扩展 ThorSNIFE 程序的三维计算功能以及研究有限元矩阵求解加速技术提高程序的计算效率。

作者贡献声明 宗智伟:进行程序开发及验证,数据分析及文章撰写;程懋松:提出研究思路,文章审阅与修订、研究方案指导、研究进度监督、研究项目管理和研究资金获取。

参考文献

- Lewis E E, Miller W F. Computational methods of neutron transport[M]. Illinois: American Nuclear Society, Inc, 1993.
- 谢仲生, 邓力. 中子输运理论数值计算方法[M]. 西安: 西北工业大学出版社, 2005.
XIE Zhongsheng, DENG Li. Numerical calculation method of neutron transport theory[M]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University Press, 2005.
- Orsi R. BOT3P: bologna transport analysis pre-post-processors version 1.0[J]. Nuclear Science and Engineering, 2002, **142**(3): 349 - 354. DOI: 10.13182/nse02-a2313.
- Manteuffel T A, Ressel K J. Least-squares finite-element solution of the neutron transport equation in diffusive regimes[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1998, **35**(2): 806 - 835. DOI: 10.1137/S0036142996299708.
- Ackroyd R T, Wilson W E. Discontinuous finite elements for neutron transport analysis[J]. Progress in Nuclear Energy, 1986, **18**(1 - 2): 39 - 44. DOI: 10.1016/0149-1970(86)90011-9.
- Zienkiewicz O C, Taylor R L, Zhu J Z. The finite element method: its basis and fundamentals[M]. 7th Ed. London: Butterworth-Heinemann, 2013.
- Wareing T A, McGhee J M, Morel J E. ATILA: a three-dimensional, unstructured tetrahedral mesh discrete ordinates transport code[J]. Transactions of the American Nuclear Society, 1996, **75**: 146-147.
- Moller J Y, Lautard J J. MINARET: a deterministic neutron transport solver for nuclear core calculations[C]. International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011), Rio de Janeiro, Brazil, 2011.
- Wang Y Q, Schunert S, Ortensi J, et al. Rattlesnake: a MOOSE-based multiphysics multischeme radiation transport application[J]. Nuclear Technology, 2021, **207**(7): 1047 - 1072. DOI: 10.1080/00295450.2020.1843348.
- 高产. 基于非结构网格的三维中子输运方程求解方法[J]. 原子能科学技术, 2014, **48**(10): 1830 - 1835. DOI: 10.7538/yzk.2014.48.10.1830.
GAO Chan. Solution method for 3D neutron transport equation based on unstructured meshes[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2014, **48**(10): 1830 - 1835. DOI: 10.7538/yzk.2014.48.10.1830.
- Kim J W, Lee Y O. A deep penetration problem calculation using AETIUS: an easy modeling discrete ordinates transport code using unstructured tetrahedral mesh, shared memory parallel[J]. EPJ Web of Conferences, 2017, **153**: 06025. DOI: 10.1051/epjconf/201715306025.
- 肖锋. 一阶中子输运方程的离散纵标有限元方法研究[J]. 原子能科学技术, 2017, **51**(3): 444 - 449. DOI: 10.7538/yzk.2017.51.03.0444.
XIAO Feng. Research on finite element method discrete ordinates solution of the first order neutron transport equation[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2017, **51**(3): 444 - 449. DOI: 10.7538/yzk.2017.51.03.

- 0444.
- 13 Guo H W, Chen W, Jiang X B, *et al.* A new continuous finite element S_N method for solving first-order neutron transport equation[J]. *Annals of Nuclear Energy*, 2022, **175**: 109237. DOI: 10.1016/j.anucene.2022.109237.
- 14 Fichtl E D, Warsa J S, Densmore J D. The Newton-Krylov method applied to negative-flux fixup in S_N transport calculations[J]. *Nuclear Science and Engineering*, 2010, **165**(3): 331 - 341. DOI: 10.13182/nse09-51.
- 15 Maginot P G, Morel J E, Ragusa J C. A non-negative moment-preserving spatial discretization scheme for the linearized Boltzmann transport equation in 1-D and 2-D Cartesian geometries[J]. *Journal of Computational Physics*, 2012, **231**(20): 6801 - 6826. DOI: 10.1016/j.jcp.2012.06.018.
- 16 Adams M L. Discontinuous finite element transport solutions in thick diffusive problems[J]. *Nuclear Science and Engineering*, 2001, **137**(3): 298 - 333. DOI: 10.13182/nse00-41.
- 17 Maginot P G, Ragusa J C, Morel J E. Lumping techniques for DFEM S_N transport in slab geometry[J]. *Nuclear Science and Engineering*, 2015, **179**(2): 148 - 163. DOI: 10.13182/nse13-65.
- 18 Arndt D, Bangerth W, Blais B, *et al.* The deal.II library, version 9.3[J]. *Journal of Numerical Mathematics*, 2021, **29**(3): 171 - 186. DOI: 10.1515/jnma-2021-0081.
- 19 Wang Y. Adaptive mesh refinement solution techniques for the multigroup S_N transport equation using a higher-order discontinuous finite element method[D]. College Station: Texas A&M University, 2009.
- 20 Geuzaine C, Remacle J F. Gmsh: a 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2009, **79**(11): 1309 - 1331. DOI: 10.1002/nme.2579.
- 21 Macfarlane R E. TRANSX 2: a code for interfacing MATXS cross-section libraries to nuclear transport codes [R]. New Mexico: Los Alamos National Laboratory, 1992.
- 22 Stepanek J, Auerbach T, Haelg W. Calculation of four thermal reactor benchmark problems in X - Y geometry[R]. New York: EPRI NP-2855, 1983.
- 23 Argonne. Code center: benchmark problem book[R]. Specific Nuclear Reactors & Associated Plants, 1977. DOI: 10.2172/5037820.
- 24 Ackroyd R T. Finite element methods for particle transport: applications to reactor and radiation physics [M]. Hoboken: John Wiley & Sons Incorporated, 1997.