

第1章

高保真中子输运计算加速算法的需求

1.1 中子输运计算发展概述

反应堆物理的基本问题之一是确定堆内中子通量密度(也称中子注量率)的分布。中子通量密度是核反应堆物理中一个重要参数,它的大小反映了堆芯内核反应率的大小,从而反映出反应堆的功率水平。因此,求解反应堆内中子通量密度非常重要。

由于中子与原子核的无规则碰撞,中子在介质内的运动是一种看似杂乱无章的但具有统计性质的运动,即初始在堆内某一位置具有某种能量及某一运动方向的中子,过些时候将运动到堆内的另一位置以另一能量和另一运动方向出现。这一现象称为中子在介质内的输运过程。描述中子输运过程的精确方程为玻耳兹曼输运方程(Boltzmann transport equation),通过求解该方程就可以得到反应堆内中子通量密度。

玻耳兹曼输运方程最开始由路德维希·玻耳兹曼(Ludwig Eduard Boltzmann)于1872年提出,最早用于研究气体扩散,用来描述气体从非平衡态到平衡态过渡过程的偏微分方程。1910年,德国数学家希尔伯特(Hilbert)证明了玻耳兹曼输运方程解的存在性与唯一性,奠定了粒子输运理论的数学基础。1932年发现中子以后,随着核反应堆及核武器的出现,中子输运理论得到极快速的发展,玻耳兹曼输运方程被应用于中子输运过程,成为中子输运方程,描述中子在反应堆内的运动行为。早期的工作主要集中在处理与能量无关的中子空间与角度分布的单能近似理论方面。1940年,美籍意大利物理学家费米(Fermi)等首先提出用年龄理论处理中子能量变化的输运问题。随着计算机的研制成功,应用数值方法求解中子输运方程得到了快速发展和广泛应用。1943年,由Wick等提出,由Marshak和Mark等发展,球谐函数方法最先应用于数值求解中子输运方程,使得高精度求解中子输运方程成为可能。随后,Carlson提出了离散纵标方法,即早期的Sn方法。1946年,针对裂变中子随机输运问题,美国数学家冯·诺伊曼(Von Neumann)和乌拉姆(Ulam)等提出蒙特卡罗模拟方法,并建立了第一个用随机模拟方法计算中子链

式反应的程序^[1]。而近 30 年来,随着计算机技术的进步,数值求解中子输运方程得到了快速发展,并产生了一大批应用程序和软件,部分方法和程序的精度与效率达到了相当完善的程度,并在实际工程中得到了成功应用。

回顾中子输运计算的发展历史,其经历了从早期基于简单模型的理论解析求解到目前基于大规模并行计算的全堆芯高保真中子输运计算的发展历程。在 20 世纪 50—70 年代,受限于计算机硬件条件和数值方法,普遍使用以均匀化理论为基础产生的“三步法”。所谓“三步法”,首先,是对反应堆内所有不同类型的栅元进行均匀化计算。其次,基于栅元计算结果,采用输运计算方法进行燃料组件的均匀化与并群计算,产生各类燃料组件在特定工况下的少群截面及不连续因子等宏观少群参数。最后,利用得到的少群参数做全堆芯的扩散计算以求出堆芯的有效增殖系数和功率分布。另外,为了获得组件内的精细功率分布,通常采用精细功率分布重构技术。20 世纪 70 年代后,为了减少栅元均匀化计算引入的误差,通常将栅元均匀化计算省去,发展形成了以先进组件均匀化理论和现代粗网节块法为基础的“两步法”。

均匀化方法的核心思想是对于在空间与中子能量尺度上跨度较大、分布较为复杂的介质,在局部范围内用“等效”的均匀介质近似代替一定的非均匀介质。其本质是在不影响宏观整体计算精度的前提下舍弃微观局部的特征,利用相应的“等效”均匀化参数进行堆芯低阶输运计算,以提高计算效率。传统的确定论“三步法”或“两步法”具有工程应用经验丰富、技术成熟度高的特点,其针对排布比较规则、非均匀性不太强的当前轻水堆效率较好。但是它无法对反应堆内的真实物理过程进行“高保真”的还原和反映。进入 21 世纪,“两步法”发展了一套新的技术路线,就是只对栅元进行一次均匀化处理,然后直接计算由均匀化的栅元构成的全堆芯,实现三维全堆芯的 Pin-by-Pin 输运计算。可以看出,全堆芯 Pin-by-Pin 输运计算是对于传统“两步法”的优化改进。随着计算机的快速发展,全堆芯 Pin-by-Pin 模拟计算逐步成熟,是一种拥有较高计算精度且较易实现的全堆芯精细化计算策略。

近年来,伴随着高性能计算集群的快速发展,以及具备更高计算精度、效率和分辨率的、新的数值计算方法的发展,采用精细化模型和高保真数值计算方法,直接求解中子输运方程已成为现实可行的计算方案,被称为“一步法”^[2-3]。“一步法”是指直接从多群核数据库中的截面信息和实际反应堆堆芯的非均匀几何结构出发,在不做简化或只进行较少简化的条件下,通过求解三维中子输运方程获得堆芯有效增殖因子和精细化中子通量密度分布等关键参数^[4]。“一步法”摒弃均匀化思想,从根本上解决了均匀化所引入的计算误差,实现中子学计算方法所追求的高精度目标^[5-6]。但由于实际问题中几何、材料和结构的复杂性及非均匀性,针对实际问题精确求解中子输运方程极其困难,通常也会引入一系列近似条件,并采用相应的数值计算方法进行求解。“一步法”主要包括两大类:蒙卡方法(Monte Carlo, MC)和确定论方法^[7-8]。

中子的输运过程具有大量随机性,蒙卡方法采用随机数模拟中子的空间位置、能量、飞行方向和与介质的相互作用,取统计平均值作为待求解物理量的近似值,并用标准差表示近似值的不确定度^[9],通过随机抽样方法模拟单个中子在堆芯介质中的真实运动历史,从而求解中子输运方程。蒙卡方法具有能够较为逼真地描述中子运动规律、受几何条件限制小、对复杂几何形状区域计算的适应性强、收敛速度与问题未知变量维数无关、程序结构简单易于实现、计算精度高等优点,因而被广泛应用,并为确定论计算方法提供参考解。其缺点是收敛速度慢、误差具有概率性、降低分布的统计误差代价更大且进行模拟的前提是各输入变量是相互独立的。特别是,蒙卡模拟计算量大、耗时长、多物理耦合计算难度大,因此到目前为止,还没有广泛应用于核反应堆堆芯物理的工程设计中。但随着计算机的快速发展和自身方法的改进优化,在不久的将来应用于堆芯设计是完全有可能的。目前,基于蒙卡方法开发的代表性中子输运计算程序主要有中国清华大学的 RMC 程序^[10]、美国劳斯阿拉莫斯国家实验室(Los Alamos National Laboratory, LANL)的 MCNP 程序^[11]、美国橡树岭国家实验室(Oak Ridge National Laboratory, ORNL)的 KENO 程序^[12]等。

确定论方法针对时间、空间、中子能量、角度变量进行离散处理或近似处理,以尽可能真实地求解中子输运方程,确定核反应堆堆芯的中子学性能参数。在确定论方法中,根据问题所建立起的数学模型可以用一个或一组确定的数学物理方程来表示,然后对这些方程采用数学方法求出它的精确解或近似解。相比于蒙卡方法,确定论方法在几何适应性和计算精度方面稍差,但总体计算量更小、计算耗时更短、能直接给出精细分布。早期的中子输运计算方法主要是求解积分形式的中子输运方程,比如碰撞概率法、穿透概率法等,该类计算方法简单、计算效率高,但引入“平源”和“平中子通量密度”的假设后,限制了子区的大小,特别是各子区间的碰撞概率计算量非常大。因此,该类方法主要集中于布置有规律、简单的栅元计算和组件计算。而对于积分微分形式的中子输运方程,是关于时间、空间、角度、中子能量的高维方程,数学上很难对其进行直接求解,而数值求解过程也极其复杂。为了对其进行数值求解,需要对时间、空间、中子能量、角度变量进行离散处理或近似处理。其中,针对角度变量的离散方法主要有球谐函数方法(Pn)、离散纵标法(Sn)等。离散纵标法的基本思想是将角度变量离散,利用有限个角度方向代表整个角度空间,得到有限个方向上的中子平衡方程。离散纵标法中每个离散方向的方程相对独立,应用迭代法求解时,数值过程比较简单,便于编写通用程序。相比于球谐函数等方法,离散纵标法对边界条件的离散精确自洽,便于处理真空边界。但为得到足够的精度,需要足够密的离散点,这导致数值计算耗用大量内存和时间,尤其对于三维问题,挑战更为严峻。另外,离散纵标法通常采用简化方法来处理几何和源模型,使其在处理复杂几何及精确源模拟上存在一定的缺陷。

近年来,一种基于射线追踪的特征线方法(method of characteristics, MOC)受

到了广泛关注。其基本思想是通过坐标变换,同时处理角度变量和空间变量,将偏微分形式的中子输运方程转换成沿不同中子飞行方向即特征线的一阶常微分方程,进而沿着一系列覆盖求解域的平行特征线进行一维中子输运方程的求解,计算中子通量密度在相应特征线上的分布,再通过积分求解各个子区的总中子通量密度。从理论上说,MOC 能够适应任意几何模型,不受几何形状的限制,无须做附加的均匀化处理,能准确处理强各向异性问题。MOC 求解中子输运方程时,通常采用平源近似,几何处理时可采用模块化特征线追踪方法,重复结构共用一套特征线信息,从而节省存储空间,提高计算效率。特别是,因空间、能群、角度离散,不同特征线上的求解相对独立,所以 MOC 具有天然的并行性。但是,为了保证计算精度,MOC 必须采用细密的特征线布置和平源区划分,这样会导致求解复杂问题时计算效率显著降低,在三维计算中尤为突出。因此,需要研究加速技术,提高 MOC 计算效率。

针对全堆芯高保真中子输运计算的“一步法”求解,MOC 和 S_n 方法具有巨大的潜力。 S_n 方法具有理论模型简单、计算效率高的优点,在简单或规则几何下开展全堆芯中子输运计算具有较大的潜力。而 MOC 能够适应任意几何模型是其主要特点,另外模块化特征线法的应用及其天然的良好并行特性,使其大规模应用成为可能。因此,在目前的“一步法”中子输运计算确定论方法中,MOC 是公认的高保真中子输运计算的首选方法。

1.2 高保真中子输运计算的必要性和现实性

1.2.1 高保真中子输运计算的必要性

核安全是核能和平利用的前提与基础,保证核安全就需对核反应堆的内在规律有深刻的认识。目前主要依赖于缩比实验、工程验证实验、实验堆等,但设计周期长、成本高。建模与仿真技术也是核反应堆系统设计、研发、优化和安全分析的重要研究手段,并且仿真技术已在反应堆及系统的设计研发、运行管理、安全分析、人员培训等方面取得了一定成功。但是,现在用于反应堆及系统分析计算与设计的软件采用的模型过于粗糙,比如中子物理多采用扩散模型,求解这些模型仅能得到系统平均化宏观参数的动态响应,且计算结果存在一定的不确定性。同时,还不能实现对反应堆内小尺度局部现象的精细化模拟。因此,目前主流的建模与仿真技术对反应堆行为预测范围和精度有限,不能为核反应堆设计、运行、安全分析提供先进、可靠的技术手段,需要研究新的、高保真、高效建模与仿真技术,以预测反应堆及系统的各种行为、现象,揭示其内在规律,保证核安全。

另外,为推动核动力技术创新与进步,也需要重新认识反应堆堆芯精细的内在规律,发展精确、高效的科学计算工具为核动力系统设计、研发提供先进的技术手段。因此,世界核能强国不断创新先进建模与仿真技术,瞄准数字化、智能化,并充

分考虑下一代核反应堆设计研发的需求,一种全新的核反应堆高保真数值模拟技术应运而生,不仅可深入认识核反应堆的内在物理规律,实现对反应堆及系统内物理现象的准确预测,以加深对反应堆物理规律的理解,为反应堆的基础研究、新型反应堆的设计研发及新一轮的核能技术革新提供先进、可靠的技术手段,同时也为多物理场耦合分析提供基础。其中最具代表性的有中国的数字化反应堆项目、美国能源部的 CASL 计划和 NEAMS 项目^[13]。

而作为核反应堆的“心脏”,反应堆中子学计算是反应堆各项计算的基础。通过“实用、快速”的高保真中子输运计算实现核反应堆高保真物理建模与仿真,可以深化对核反应堆物理基本现象和规律的认识,为数字化反应堆技术研究及反应堆设计研发提供先进、可靠的技术手段。基于高保真数值模拟的思想,就是用最少的近似,求解最本质的中子输运方程,直接准确获得堆芯任一燃料芯块内的详细功率分布信息。

同时,反应堆物理数值计算的发展趋势也是利用最本质的数学模型去描述物理问题、利用最少的近似来对数学模型进行数值求解,从而更加真实地还原和预测反应堆堆芯物理行为。特别是,近些年随着高性能计算集群的快速发展,对中子输运方程的直接求解方法研究成为中子学领域的研究热点,对于几何结构复杂、非均匀性强、各向异性强烈的堆型进行高保真中子输运计算是一个新的发展方向 and 必然趋势。而高保真中子输运计算所建立的精细化模型可以充分考虑空间效应、非均匀性等对中子通量密度分布的影响,以准确地求出堆芯功率和中子通量密度分布随空间、时间的变化,从而减少计算模型引入的不确定性,得到更加可靠的预测结果^[14]。经过 10 余年的发展,国内外相关研究团队基于高保真中子输运计算方法已开发了先进的堆芯高保真中子物理程序,如 MPACT^[14-15]、NECP-X^[16]、HNET^[17]等。

因此,从保证核安全、推动核能技术创新与进步及核反应堆物理数值计算发展趋势来看,开展高保真中子输运计算研究都是十分必要的。

1.2.2 高保真中子输运计算的现实性

核反应堆物理数值计算与计算机的发展紧密相关。核反应堆物理计算需要大规模数值求解的特点决定了其对计算机发展的依赖性。事实上,核反应堆物理各种计算方法的发展实际上是取决于一定时期内计算机的发展水平,通过对中子输运方程进行不同程度的近似,尽可能真实、准确地求解中子输运方程,以确定堆芯中子学性能。

1965 年,Intel 创始人之一戈登·摩尔提出了著名的“摩尔定律”,简而言之就是计算机的性能每隔 18 个月提高一倍。50 多年来,计算机硬件的性能及算力一直遵循甚至超越这个定律飞速发展着。近年来,超算快速发展,其算力发展如图 1.1 所示^[18]。根据 2021 年 11 月发布的 TOP500 超级计算机榜单,世界上运行

速度最快的超级计算机为日本的“Fugaku”(富岳)超级计算机,其峰值运算速度达到 442Pflops/s(千万亿次/秒)。目前,世界各国,特别是美国和中国,正在大力发展“E 级”和“10E 级”超级计算机。我国在超算领域经过多个五年计划的规划发展和长期投入,在硬件领域取得了长足的进步,获得了与美国相媲美的强大运算能力。因此,基于我国当前的超算发展水平,实现全国产软硬件的全堆芯高保真中子输运计算成为现实。

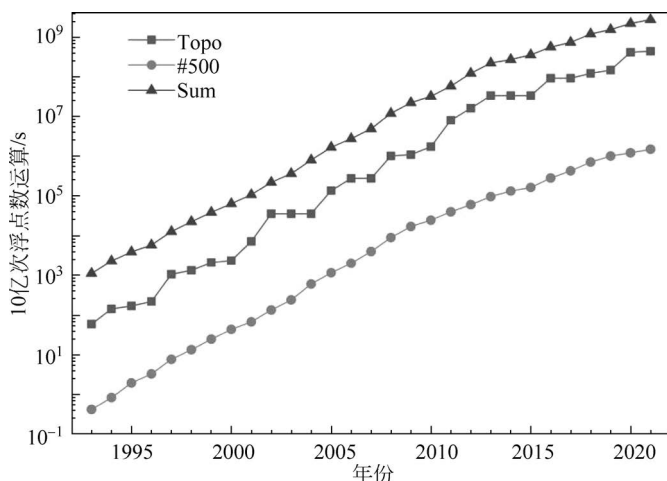


图 1.1 世界超算算力发展图

其次,从方法学角度看,无论是蒙卡方法,还是确定论方法中的 MOC 方法、Sn 方法都已经成熟并有实际应用的经验。因此,具备开展全堆芯高保真中子输运计算的现实性。然而,直接采用标准的三维中子输运方法开展全堆芯高保真中子输运计算,计算速度缓慢且占用大量存储空间。针对压水堆堆芯,考虑堆芯的非均匀性主要来源于堆芯径向布置,轴向布置相对均匀,国际上提出了一种实用且切实可行的方案,即二维/一维方案,该方案通过定义轴向泄漏项和径向泄漏项,将全三维中子输运计算问题转化为多个径向二维输运计算耦合多个轴向一维低阶输运计算问题。二维问题通常采用 MOC 方法求解,一维问题采用 Sn 或节块法求解,通过横向泄漏项耦合二维和一维计算,近似得到三维中子输运方程的解。相对于直接三维计算,二维/一维方案能够大幅减少精细化中子输运求解的计算量和计算存储,同时其计算精度与三维计算结果相当,因此一经提出就得到广泛应用,如今已成为三维全堆芯高保真中子输运计算的主流方法^[19]。

以二维/一维方案为基础衍生出了两种数值方法。第一种是“二维/一维方法”(2D/1D method),由韩国原子能研究机构提出并应用到 DeCART 程序,采用节块法开展轴向计算,并且对横向泄漏项采用角度近似处理^[20]。第二种是“二维/一维聚合算法”(2D/1D fusion method),最先由韩国先进科技研究院提出并应用到 CRX 程序,采用输运方法(如 Sn 方法)开展轴向计算,对横向泄漏项不做角度近

似^[21]。对比上述两种方法,二维/一维方法采用更多的角度近似,因而内存占用更少、计算效率更高;而二维/一维聚合算法能够考虑横向泄漏项的各向异性,使得其计算精度更高。在此基础上,为了平衡计算精度、效率与内存占用,美国密歇根大学 MPACT 团队提出了一种基于方位角傅里叶级数展开的轴向 SN 方法,在保持计算精度的前提下减少内存占用、提升计算效率^[4]。本书重点介绍“二维/一维方法”开展高保真中子输运计算。

1.3 高保真中子输运计算面临的挑战

高保真数值模拟的思想就是用最少的近似,求解最本质的中子输运方程,直接、准确地获得堆芯任一燃料芯块内的详细功率分布信息及功率历史。然而,高保真数值模拟势必使全堆芯中子学计算面临计算规模巨大特别是计算时间消耗过长的挑战。尽管二维/一维方法在计算效率以及存储空间的需求方面具有优势,且胜于三维特征线方法和蒙卡方法,但计算量大、计算时间过长的挑战仍然存在。如再考虑实际工程设计,又面临与热工、瞬态等机制的多层、反复迭代,这使得计算时间呈几何级增长。事实上,计算时间过长已成为制约反应堆高保真中子输运计算发展的瓶颈。以典型压水堆的全堆芯高保真中子输运计算为例,针对该典型模型的稳态计算,未知量数目高达 $10^{13} \sim 10^{14}$ 。而瞬态计算又需成千上万次分布计算,计算规模可高达千万亿($10^{16} \sim 10^{17}$),其中空间离散:典型三维堆芯模型包含约 158 个燃料组件和 100 个反射层组件,共计约 258 个组件;每个组件划分为约 100 个轴向层;组件每层包含 $17 \times 17 = 289$ 个栅元单元;每个栅元包含约 50 个径向精细网格。能量离散:约 50 个能群;角度离散:按照极角、方位角,全角度空间划分为约 120 个角度方向。

全堆芯高保真中子输运计算时间消耗过长是国际共性难题。以美国 CASL 计划的中子学程序 MPACT 为例,模拟三维全堆芯 5s 短动态过程,使用美国爱达荷国家实验室(Idaho National Laboratory, INL)Falcon 高性能计算系统的 6264 个计算核,在使用标准瞬态多级加速技术(transient multi-level, TML)的情况下,需要约 47h 完成计算;采用最近提出的自动变步长技术和 TML-4 方法进行加速,仍需要约 25h 完成高保真瞬态计算^[16]。

事实上,中子输运方程是关于空间、时间、中子能量和运动方向等多维自变量的微分积分方程,其数值求解过程极其复杂,也非常耗时。而数值离散后中子输运方程转变成了线性方程组求解问题或者矩阵特征值问题,由于阶数大,需要使用迭代算法反复求解。对于三维全堆问题,占优比非常接近 1.0,如采用 MOC 方法计算,需要成百上千次迭代才能收敛到指定精度,每次迭代又需对所有离散的特征线进行扫描计算。因此,全堆芯高保真中子输运计算时间势必面临计算时间过长的挑战。研究适用于高保真中子输运计算的加速方法是破解该难题的关键技术。

因此,加速算法一直是核反应堆数值计算的重要研究内容。20 世纪七八十年代,粗网加速方法被提出并成功用于加速中子输运计算,其中麻省理工学院 K. Smith 提出的粗网有限差分加速方法(CMFD method)^[22],由于加速效果好、便于实施及适用范围广,被广泛应用以加速全堆芯一步法精细化中子输运计算。但是,用于加速的低阶系统求解往往引入额外的计算负担。以典型压水堆堆芯为例,建立的“Sub-pin”尺度的多能群 CMFD 系统的未知量数目可高达 10^9 ,求解该系统非常耗时,尤其瞬态模拟,CMFD 求解时间与 MOC 中子输运求解时间相当^[23]。另外,迭代加速的基础是建立不同能群、空间、时间分辨率下的等价方程。传统的 CMFD 提供了很好的思路,通过引入“不连续因子”、修正扩散系数等方式以实现该目标。但 CMFD 方程仍然规模很大,传统 CMFD 存在数值不稳定的天然缺陷,如何定义及准确计算不连续因子及扩散系数修正因子是难题,以研究新的、更加稳定且有效的等价方式,保证迭代加速效果。其次,如何在并行计算环境下高效、快速求解该 CMFD 系统,直接影响加速效果。Krylov 子空间迭代法是最优选择,如广义极小残差法和稳定双共轭梯度法。但该方法需要高效的预处理技术,特别是针对大规模并行计算。因此,适合于大规模并行计算的高效预处理技术的研究也是挑战。

目前,中子输运计算加速方法的研究主要聚焦于稳态中子输运计算的迭代加速方法,对瞬态中子输运的加速方法研究较少,加速方法可选的很少,已有的加速效果还不够好。虽然迭代加速方法能够有效减少中子输运计算的迭代次数以实现加速,但是其自身的计算代价又成为限制加速效果的瓶颈。针对瞬态中子输运,一般是通过减少时间步以提高瞬态中子输运计算效率,实现加速。因为,时间步长越小,待求解的时间步数量越多,瞬态中子输运的计算量越大、计算时间越长,反之越小。但是,时间步长对时间导数项的差分结果具有显著影响,当时间步长过大时,时间导数项的差分形式代替微分形式会引入较大误差,从而降低瞬态中子输运计算的整体计算精度。因此,在较大时间步长下进行高保真瞬态中子输运计算时,还需引入新的方法保证时间导数项差分结果的计算精度,进而确保瞬态中子输运的高效、精确计算。预估校正准静态方法提供了很好的思路,可以实现在大时间步长开展高保真中子输运计算,而在小时间步长上开展计算代价极低的点堆动力学计算,即能保证全局计算精度,使加速成为可能。但是,点堆动力学计算幅值函数后,形状函数仍然具有全局空间分布的差别,这样在使用差分代替微分时,时间步仍然不能太长,否则高保真中子输运计算精度将无法保证,从而严重影响加速效果。因此,瞬态中子输运计算的加速方法又进一步面临很大的挑战。

最终,并行计算是加速的基础和核心。事实上,超算的快速发展为全堆芯高保真中子输运计算提供了强有力的支撑。然而,科学与工程计算领域,或者说反应堆物理数值计算领域,很难直接、轻易地从计算机硬件性能的快速发展中获益,因为新的硬件结构和硬件性能需要与之相适应的算法、模型和软件。例如,高性能计算集群的应用要求科研人员在算法研究和程序开发中深入考虑任务划分和通信

对于并行计算模型的要求,特别是近几年异构计算机系统的发展则要求对原有并行模型进行更深入的改造和优化。虽然在核反应堆物理数值计算领域,相关学者和研究人员对并行计算做了很多研究与尝试,也取得了一定的成效,但是大规模工业应用仍然需要艰苦卓绝的努力。

1.4 加速算法的必要性及研究进展

适用于高保真中子输运计算的高效加速方法可实现高保真中子物理计算的快速、精确求解,进而对堆芯物理进行高保真数值模拟和准确预测反应堆内的物理现象,加深对反应堆基本物理现象和规律的认识,为反应堆的基础研究和设计研发提供先进、可靠的技术手段,特别是推动高保真中子输运计算向实际应用迈进重要一步。目前,对于基于中子输运计算的不同流程,高保真中子输运计算的加速方法可以分为三类:针对中子输运源迭代过程的迭代加速方法、针对瞬态中子输运计算的时间步加速方法及针对计算机仿真过程的并行加速方法。

1.4.1 高保真中子输运计算的迭代加速方法

迭代加速,核心要减少迭代次数,其基本思路是通过建立空间、中子能量、角度方面的低分辨率系统为高分辨率的精细化中子输运计算提供更好初值,使其更接近收敛值,从而减少迭代次数,实现加速。实际上,采用特征线方法或者离散纵标法开展二维径向输运计算具有很大的相似性,且加速方法的思想是一致的,常用的加速方法有粗网格再平衡(coarse mesh rebalance, CMR)方法、粗网有限差分(coarse mesh finite difference, CMFD)方法等。

粗网格再平衡方法是一种用粗网格加速细网格的方法^[24],其基本思路是在中子输运计算的细网格上,剖分出一些非重合的粗网格,并且保证粗网格的边界与细网格的边界相重合,并在每一次中子输运计算的源迭代完成后,根据中子在粗网守恒原则计算得到一个“粗网再平衡因子”,将它乘以迭代所得到的中子通量密度作为该次迭代的最后解,以强制最后解在粗网格范围内满足中子守恒关系。该方法已应用于 CRX 程序的中子输运内迭代过程中^[25]。但是,粗网格再平衡方法的收敛速度对粗网格的尺寸比较敏感,并且在某些计算条件下可能出现不收敛的情况。针对这个问题,Yamamoto 等提出了广义粗网格再平衡方法(generalized coarse mesh rebalance method, GCMR),通过重新定义粗网格间中子通量密度的关系(依赖于粗网格的尺寸),削弱了该方法对粗网格尺寸的敏感程度,使其收敛速度和迭代稳定性得到了一定程度的改善^[26],实现了更加高效的数值加速。

粗网有限差分也是另一种利用粗网格加速细网格的方法,该方法通过引入“不连续因子”等使扩散形式的方程逼近输运方程,用扩散方程低成本地得到更好的解,从而起到加速收敛的作用。由于其加速效果好、便于实施及适用范围广,目前

被广泛应用以加速全堆芯高保真中子输运计算,尤其是在二维/一维方法中应用广泛。因为,二维/一维方法收敛速度较慢,CMFD 不仅能够有效地加快全局迭代的收敛速度,还能够作为全局算法框架支持整体计算^[27]。但传统 CMFD 存在数值不稳定的天然缺陷,因此新的、更加稳定且有效的 CMFD 方法应运而生,如最佳扩散 CMFD^[5]、基于偏流的 CMFD^[28]、基于广义等价理论的 gCMFD^[29] 及以线性近似解代替均匀解的 lpCMFD^[30]。

传统 CMFD 方法一般应用于空间加速,但由于高保真中子输运计算通常在中子能量上采用多群近似,因此基于空间 CMFD 加速的思路,也可以在中子能量尺度进一步加速。用于加速的低阶多群 CMFD 系统计算量也很大。为进一步提高计算速度,多级 CMFD 加速算法成为研究热点,如①能群多级加速, Yuk^[28]、Cornejo^[31]、Zhou 等^[32] 通过建立等价的两群 CMFD,以加速多群 CMFD。本书作者提出了单群 CMFD 加速多群 CMFD,并以此为基础,开展多级加速理论及应用研究。②空间多级加速, Yuk 等^[28] 通过等价空间大网格 pCMFD 加速栅元多群 pCMFD 系统,西安交通大学部分学者也研究了空间多级加速方法。③混合多级加速, Yee 等^[33] 开展能群及空间的混合多级加速,并成功实施于 CASL 计划的 MPACT 程序,MPACT 还具备在时间、能群及空间尺度上的多级加速方案。通过对多级 CMFD 的傅里叶分析,本书作者进一步提出了基于 1/4 栅元均匀化的多群 CMFD 方案及平源区 CMFD 加速方案,并将其用于加速平源区尺度上的中子输运计算,并以此为基础发展了空间、中子能量混合的多级 CMFD 加速方法,以进一步减少输运计算的迭代次数,提高计算效率^[29]。

上述 CMFD 加速方法更多应用于可划分规则粗网格的堆芯物理计算。而针对非规则网格, Santandrea 等^[34] 提出了 DPN 加速技术,并应用于石墨反应堆 RBMK 及压水堆燃料组件二维中子输运计算; Kim 等^[28] 基于非直角网格,研究了基于偏流的 CMFD 加速方法,但上述研究主要针对三角形或六角形标准网格问题; Yamamoto 等^[26] 提出的广义粗网再平衡(GCMR)方法理论上可以应用于非结构化网格;基于 GCMR 的思路,柴晓明^[35] 提出了广义 CMFD 方法,通过引入具有等效宽度的规则网格使广义 CMFD 可以在任意粗网格进行加速计算。

1.4.2 瞬态中子输运计算的求解及时间步加速方法

在较早的研究中,受限于计算条件,无法直接求解瞬态中子输运方程,故而对方程进行简化和近似处理。假设中子通量密度的时间、空间、中子能量、角度自变量可以分离,且认为中子通量空间分布的形状函数与时间无关,最后通过集总参数来描述反应堆的动态过程,形成了基于点堆动力学方程(point kinetics equation, PKE)表征中子密度变化的“点堆”动力学模型^[36-37]。当反应堆接近临界且局部扰动不大时,点堆模型能够较准确反映中子通量密度随时间变化的“总体”情况。但是,在面对设计复杂的大型反应堆时,一些局部的反应性扰动,如弹棒事故,可以引