

基于 AutoCAD 二次开发实现 中子输运方程特征线法求解

陈其昌, 吴宏春, 曹良志

(西安交通大学 核科学与技术学院, 陕西 西安 710049)

摘要: 在先进反应堆的组件设计计算中, 特征线方法(MOC)是沿生成的特征线求解中子输运方程, 理论上不受几何形状的限制, 但需对组件进行几何描述和射线追踪等预处理, 现有的 MOC 程序在几何预处理上实际还存在很多限制。为彻底消除特征线方法在几何方面的限制, 借助 AutoCAD 二次开发功能来实现 MOC 方法的几何预处理。在此基础上开发了 MOC 程序 AutoMOC, 对各种问题的计算表明, 程序不仅在几何处理上具有很高的灵活性, 同时, 其计算结果与 MCNP 等现有程序计算结果符合良好。

关键词: 特征线方法; AutoCAD; 二次开发; 复杂几何; 中子输运方程

中图分类号: TL323

文献标志码: A

文章编号: 1000-6931(2009)03-0257-06

Realization of Method of Characteristics Based on Customization of AutoCAD

CHEN Qi-chang, WU Hong-chun, CAO Liang-zhi

(School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: The method of characteristics (MOC) solves the neutron transport equation along each characteristics line. Theoretically, it is independent of the geometry shape of boundary and region. However, the geometry should be described, and ray tracing should be carried out firstly. In most of the existing MOC codes, the geometry description and ray tracing still have more or less limitation. To wipe off these geometry limitations for using MOC in more complex fuel assembly calculation, a new MOC code AutoMOC based on the customization of AutoCAD was developed. The numerical results show that AutoMOC not only has high flexibility in geometry but also gives accurate solutions in comparison with state-of-the-art methodologies.

Key words: method of characteristics; AutoCAD; customization; complex geometry; neutron transport equation

在未来的先进反应堆的组件设计计算中, 可能需精确求解复杂几何情况下的中子输运方

程。现有的各种基于确定论方法的反应堆物理计算程序大多针对特定几何形状,难以处理任意的复杂几何。特征线方法(method of characteristics, MOC)是沿着特征线求解中子输运方程的一种解析方法,理论上其求解过程与几何形状无关,这使得中子输运方程确定论求解摆脱几何上的限制成为可能。但 MOC 方法需事先对几何进行严格描述并进行射线(特征线)追踪处理,求得所有特征线与外边界及各区域的交点信息。实际上,多数现有的基于特征线方法的计算程序在任意几何描述和射线追踪方面都还存在一定的困难。目前在国际上,基于 MOC 的计算程序在几何描述与处理方面采用 R-function 实体模型^[1]、射线循环追踪^[2]、组合几何^[3]等,使得 MOC 的几何处理能力较其它确定论方法大为增加。但这些几何处理方法在外边界形状、离散角度的选择及边界条件处理上仍存在一定的限制。

为彻底消除以上限制,实现更为复杂几何问题的中子输运计算问题,采用 VBA (visual basic for application) 语言对 AutoCAD 进行二次开发来进行 MOC 几何的预处理。这样不仅可利用 AutoCAD 强大的图形处理功能实现对各种复杂问题的几何描述,同时可利用二次开发得到的宏程序完成特征线生成与交点计算。需说明, VBA 应用程序由多个宏组成,宏是 AutoCAD 二次开发中 1 个公共的可执行子程序,通过运行宏便可在 AutoCAD 中实现相应的功能。由于 AutoCAD 应用程序在绘图方面的功能极其强大,用户可用它方便地绘制各种复杂的反应堆组件。二次开发得到的宏程序,在进行射线追踪处理时,也可完全不受组件边界或区域划分几何形状及边界条件的限制,方位角的数目可任意选取。同时在 MOC 输运计算时,对于反射边界条件的处理采用方向插值,这使得反射外边界的取向和方位角数目均可任意选取。

1 MOC 理论模型

1.1 特征线方程

特征线方法在求解中子输运方程时,沿着事先生成的多个方向组的平行线(特征线)求解。对于角度变量,方位角采用均匀划分,数

目自由用户指定。极角可采用最佳两极角^[4]或根据高斯-勒让德求积组来确定。其中,最佳两极角的正弦值及其相应权重系数($\sin \theta_1 = 0.273\ 658$, $\omega(\theta_1) = 0.139\ 473$; $\sin \theta_2 = 0.865\ 714$, $\omega(\theta_2) = 0.860\ 527$)是 Leonard 在参考文献^[4]中给出的。该文献指出,很多问题的两极角计算结果甚至可比用高斯求积组选取 8 极角的结果更好。但实际计算表明,在中子通量随极角方向变化剧烈的情况下,仅采用两极角的计算精度是不够的。因此,本文开发的 AutoMOC 程序中既可采用最佳两极角也可根据高斯求积组选取多极角进行计算。对于空间变量,求解问题将被划分为多个求解区域,每个区域将保证有一定数目的特征线穿过。

假定每个区域内源项为常数(平原近似),中子沿着这些特征线与区域内介质发生作用。以单群为例,在区域 i 内 k 段特征线上,由中子输运方程得到的特征线方程的形式为:

$$\frac{d}{ds}\psi_{i,k}(s, \Omega_m) + \Sigma_{t,i}\psi_{i,k}(s, \Omega_m) = Q_i(\Omega_m) \quad (1)$$

其中: Ω_m 为第 m 个方向的角度; s 为沿特征线的长度; $\Sigma_{t,i}$ 为区域 i 的总截面; $\psi_{i,k}(s, \Omega_m)$ 为区域 i 内 k 段特征线上长度 s 处的角通量; $Q_i(\Omega_m)$ 为区域 i 内的平均源,它包括裂变源项 $Q_{i,f}$ 、散射源项 $Q_{i,s}(\Omega_m)$ 及独立外源项 S_i 。其中,散射源又可分为各向同性 $Q_{i,s}^{\text{iso}}$ 和线性各向异性 $Q_{i,s}^{\text{aniso}}(\Omega_m)$ 。最终源项表示为:

$$Q_i(\Omega_m) = Q_{i,f} + Q_{i,s}^{\text{iso}} + Q_{i,s}^{\text{aniso}}(\Omega_m) + S_i \quad (2)$$

裂变源认为各向同性,各向异性散射源根据文献^[3]中采用勒让德多项式展开得到,单群情况下各源项可分别表示为:

$$Q_{i,f} = \frac{1}{4\pi k_{\text{eff}}} (\nu\Sigma)_{f,i} \phi_i \quad (3)$$

$$Q_{i,s}^{\text{iso}} = \frac{1}{4\pi} \Sigma_{s0,i} \phi_i \quad (4)$$

$$Q_{i,s}^{\text{aniso}}(\Omega_m) = \frac{3}{4\pi} \Sigma_{s1,i} \sum_n \omega_n \phi_i(\Omega_n) \cdot$$

$$\left[u_m u_n + \sqrt{(1-u_m^2)(1-u_n^2)} \cos(\varphi_m - \varphi_n) \right] \quad (5)$$

其中: $\phi_i, \phi_i(\Omega_n)$ 分别为区域 i 的平均标通量和第 n 个方向的角通量; $u = \cos \theta, \theta, \varphi$ 分别为极角和辐角。

方程(1)的解析解为:

$$\psi_{l,k}(s, \Omega_m) = \psi_{l,k}^{\text{in}}(\Omega_m) \exp(-\sum_{t,i} s) + \frac{Q_i(\Omega_m)}{\sum_{t,i}} (1 - \exp(-\sum_{t,i} s)) \quad (6)$$

其中: $\psi_{l,k}^{\text{in}}(\Omega_m)$ 为区域 i 内 k 段特征线入口处中子角通量。

由式(6)可得其出口处中子角通量,有:

$$\psi_{l,k}^{\text{out}}(\Omega_m) = \psi_{l,k}^{\text{in}}(\Omega_m) \exp(-\sum_{t,i} s_{i,k}) + \frac{Q_i(\Omega_m)}{\sum_{t,i}} (1 - \exp(-\sum_{t,i} s_{i,k})) \quad (7)$$

其中: $s_{i,k}$ 为 k 段特征线的长度。

沿着 k 段特征线对式(6)积分可得该段特征线平均角通量,有:

$$\bar{\psi}_{l,k}(\Omega_m) = \frac{Q_i(\Omega_m)}{\sum_{t,i}} + \frac{\psi_{l,k}^{\text{in}}(\Omega_m) - \psi_{l,k}^{\text{out}}(\Omega_m)}{\sum_{t,i} s_{i,k}} \quad (8)$$

区域 i 的平均角通量可用体积权重得到:

$$\bar{\psi}_i(\Omega_m) = \frac{\sum_k \bar{\psi}_{l,k}(\Omega_m) s_{i,k} \delta A_k}{\sum_k s_{i,k} \delta A_k} \quad (9)$$

其中: δA_k 为 k 段特征线的宽度。

最终,区域 i 的平均标通量可写成:

$$\phi_i = \sum_{m=1}^M \omega_m \bar{\psi}_i(\Omega_m) \quad (10)$$

其中: ω_m 为方向 Ω_m 的权重系数; M 为总方向数目。

1.2 反射边界条件的处理

现有的 MOC 程序在边界条件处理方面,或多或少都受到外边界形状的限制。尤其在处理反射边界条件时,为了找到对应的入射方向,使得外边界形状和特征线离散方向的数目不能随意选取,或要求每条特征线在边界处不能断开。采用方向插值方法对反射边界条件进行处理,特征线离散方向数目完全不受外边界形状限制,外边界形状可是任意旋转的不规则多边形或曲边。

对于严格的反射边界条件,从外边界某点入射的角通量应等于该点处对称的出射方向的角通量。对于每段外边界,程序根据处于该段外边界上的区域又将其细分为多个小段。认为某个小段外边界上特征线的入射角通量等于该小段边界上的平均出射角通量。对于方向,由于任意取向的外边界法线方向,使得这个出射方向不一定能在事先选取的离散特征线方向中

找到,为此采用角度插值的办法(图 1)。入射角通量将由最邻近的出射方向角通量插值得到,插值系数则根据出射方向在插值区间的位置求得,有:

$$\psi_l = \psi_r = C_l \psi_m + (1 - C_l) \psi_n \quad (7)$$

$$C_l = \frac{\theta_n - \theta_r}{\theta_n - \theta_m} \quad (8)$$

其中: ψ_l 为边界上 l 的入射角通量; ψ_r 为反射方向的出射角通量; ψ_m 、 ψ_n 为相邻的出射角通量; C_l 为 l 入射方向的插值系数; θ_r 为出射方向的角度; θ_m 、 θ_n 为相邻出射方向的角度。

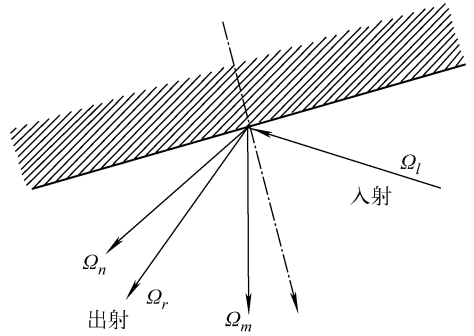


图 1 反射边界条件处理

Fig. 1 Interpolation of reflective boundary condition

2 几何预处理

2.1 几何描述

基于 AutoCAD 二次开发技术的 MOC 几何预处理,对于计算问题的几何描述其实是非常方便和直观的。由于 AutoCAD 是一款绘图功能十分强大的计算机辅助设计软件,用户可利用其提供的各种绘图、编辑、修改命令,很容易地绘制要计算的反应堆组件或堆芯平面图。在 AutoCAD 中,不仅可选用常见的矩形、圆形、椭圆形、正多边形等来绘制简单几何,还可用直线、圆弧、样条曲线等绘制更加任意的复杂几何形状。在 AutoCAD 中,区域的面积可自动计算得到,外边界可由用户选择指定,它可是直线、圆弧、椭圆弧、样条曲线等,计算区域和外边界将由宏程序自动编号。同时为处理反射边界条件,用户需指定边界-区域对照表,这样,每段外边界将根据其相邻的区域再细分为小段分别进行边界处理。

2.2 射线追踪

射线追踪过程将由二次开发得到的宏程

序完成。在开始射线追踪之前,程序将检查外边界是否闭合,射线的宽度和方向数目将由用户指定。由于反射边界采用了方向插值处理,因此,对于方位角数目的选择可完全不受外边界的形状限制。然后特征线将会根据用户设定的参数产生并求得每条特征线与各外边界和区域的交点。所有的特征线信息,包括起始点、穿过的边界/区域编号、特征线段的长度等将写入外部文件中,作为后续MOC输运计算的输入。

3 数值校验

基于 AutoCAD 二次开发技术,开发了特征线方法计算程序 AutoMOC,它可计算任意复杂的几何问题。为验证程序的正确性,本文仅给出部分问题的数值校验结果。

3.1 ISSA 一维两区问题

ISSA 给出的一维两区问题^[5]如图 2 所示。图 2 右边为真空边界,左边为反射边界。通过上下边的反射边界条件将其改造为二维问题。表 1 列出两区材料的宏观截面数据。计算结果与 FELTRAN^[6]、LESFES^[7]、ANISN 和 MCNP 进行了比较。表 2 列出 k_{eff} 的比较结果,图 3 示出通量分布的比较。从这些图表可看出,无论是 k_{eff} 还是通量分布,AutoMOC 的计算结果与参考结果都吻合得很好。方位角数目为 16 的情况下,程序计算 k_{eff} 与 MCNP 结果的相对偏差为 0.003%。

3.2 二维 BWR 问题

该问题为 1 个均匀化的沸水堆栅元,几何如图 4 所示,中心为燃料区,外围为轻水慢化剂

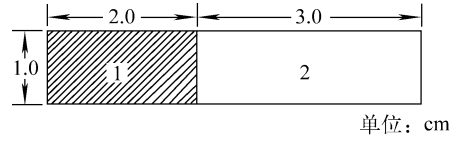


图 2 ISSA 一维两区问题

Fig. 2 ISSA 1D problem geometry

表 1 ISSA 一维问题宏观截面

Table 1 Macroscopic cross-sections of ISSA problem

区域	Σ_i/cm^{-1}	$\nu\Sigma_f/\text{cm}^{-1}$	Σ_s/cm^{-1}
1	1.0	1.0	0.5
2	0.8	0.0	0.4

区,四周为全反射边界条件。表 3 列出两区的截面参数。参考结果由文献[7]及 SURCU 程序给出,计算结果与参考结果的比较列于表 4。可看到,AutoMOC 和 SURCU 两者的计算结果吻合较好。通量最大相对偏差为 0.075%, k_{inf} 相对偏差为 0.082%。

3.3 不规则几何问题

为验证程序对于复杂几何问题的适用性,构造了 1 个不规则二维问题,其几何结构如图 5 所示。其上部外边界为半个椭圆弧,具有真空边界条件,下部为两条 120°张角的直边界,具有全反射边界条件。图中 1 区和 2 区为两个独立的燃料区,3 区为慢化剂区,各区的截面参数列于表 5。以 MCNP 的计算结果作为参考, k_{eff} 和通量分布的比较列于表 6。可看到,AutoMOC 的计算结果与 MCNP 的计算结果吻合得很好,两者通量最大相对偏差为 0.567%, k_{eff} 相对偏差为 0.009%。

表 2 ISSA 一维问题 k_{eff} 的比较

Table 2 Comparison of k_{eff} for ISSA problem

程序	k_{eff}				
	S_2	S_4	S_6	S_8	S_{16}
AutoMOC ¹⁾	1.644 79	1.675 99	1.677 38	1.678 84	1.678 81
ANISN			1.677 2		1.678 4
LESFES			1.677 365		1.678 486
FELTRAN	1.645 1	1.675 1	1.677 1		
MCNP			1.678 76 ± 0.000 36		

注:1) 极角选用最佳两极角(0~ $\pi/2$)

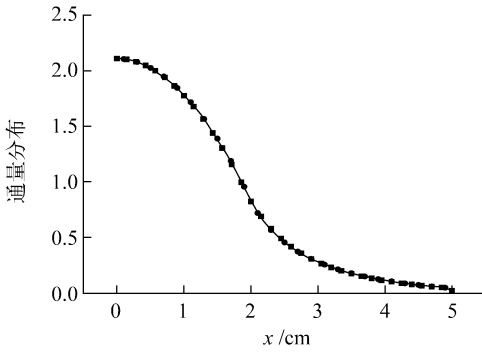


图3 ISSA 一维问题通量分布的比较

Fig. 3 Neutron flux distribution of ISSA problem

■——FELTRAN; ●——AutoMOC

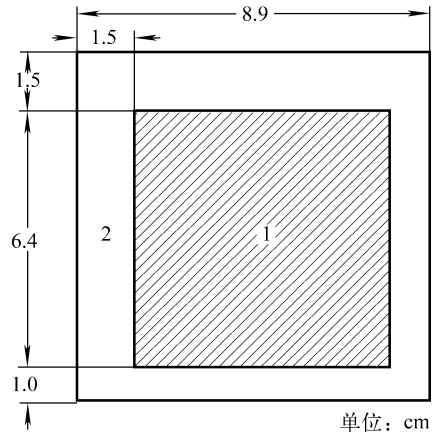


图4 BWR 栅元几何

Fig. 4 BWR problem geometry

表3 BWR 栅元截面参数

Table 3 Macroscopic cross-sections of BWR problem

能群	材料区	$(\nu\Sigma_f)_g/\text{cm}^{-1}$	$\Sigma_{g\rightarrow 1}/\text{cm}^{-1}$	$\Sigma_{g\rightarrow 2}/\text{cm}^{-1}$	Σ_t/cm^{-1}	χ_g
1	1	6.203×10^{-3}	1.78×10^{-1}	1.002×10^{-2}	1.96647×10^{-1}	1.0
	2	0.0	1.995×10^{-1}	2.188×10^{-2}	2.22064×10^{-1}	1.0
2	1	1.101×10^{-1}	1.089×10^{-3}	5.255×10^{-1}	5.96159×10^{-1}	0.0
	2	0.0	1.558×10^{-3}	8.783×10^{-1}	8.87874×10^{-1}	0.0

表4 BWR 栅元计算结果比较

Table 4 Comparison of k_{inf} and neutron flux distribution for BWR problem

程序	1 群通量		2 群通量		k_{inf}
	1 区	2 区	1 区	2 区	
AutoMOC ¹⁾	1.0	0.927 8	0.353 0	0.451 2	1.213 7
SURCU	1.0	0.927 1	0.352 9	0.450 9	1.212 7
LESFES (S_0)	1.0	0.932 0	0.354 0	0.453 9	1.214 0

注:1) 8 个方位角($0 \sim \pi$),极角选用最佳两极角($0 \sim \pi/2$)

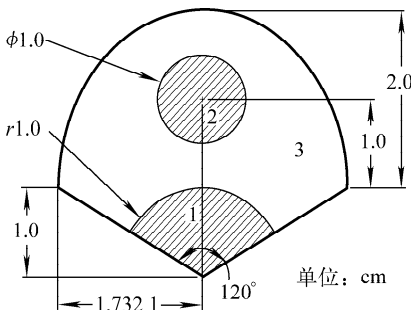


图5 不规则几何问题

Fig. 5 Irregular geometry problem

表5 不规则几何问题截面参数

Table 5 Cross-sections of irregular geometry problem

材料	Σ_t/cm^{-1}	$\nu\Sigma_f/\text{cm}^{-1}$	Σ_s/cm^{-1}
燃料	1.0	1.0	0.7
慢化剂	0.8	0.0	0.4

4 结论

中子输运方程特征线方法计算程序 AutoMOC 的几何预处理是基于 AutoCAD 二次开发的,由于 AutoCAD 具有强大的绘图功能,使

表 6 不规则几何问题计算结果比较

Table 6 Comparison of k_{eff} and flux distribution for irregular geometry problem

程序	1 区通量	2 区通量	3 区通量	k_{eff}
AutoMOC ¹⁾	0.797 69	0.209 66	0.152 79	1.201 62
MCNP	0.798 18	0.208 95	0.151 92	1.201 73±0.000 20

注:1) 8 个方位角($0\sim\pi$), 4 个极角($0\sim\pi/2$)根据高斯-勒让德求积组选取

得该程序对复杂几何的描述变得十分方便。另外,利用 VBA 语言开发得到的宏程序,可对任意几何的反应堆组件进行射线追踪处理,这样便实现了对任意几何问题的 MOC 方法输运计算。另外,由于采用方向插值法处理反射边界条件,使得对任意几何问题方位角的数目均可自由选取。

从校算的数值结果可看出,AutoMOC 程序能满足复杂几何中子输运的计算要求。

参考文献:

- [1] JEVREMOVIC T, VUJIC J, TSUDA K. ANEMONA—A neutron transport code for general geometry reactor assemblies based on the method of characteristics and R-function solid modeler[J]. *Ann Nucl Energy*, 2001, 28: 125-152.
- [2] ROY R. The cyclic characteristics method[C]// *Proceedings of International Conference on the Physics of Nuclear Science and Technology*. New York: American Nuclear Society, 1998: 407.
- [3] POSTMA T, VUJIC J. The method of characteristics in general geometry with anisotropic scattering [C]// *Proceedings of International Conference Mathematics and Computation, Reactors Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*. Madrid, Spain: [s. n.], 1999: 1 215.
- [4] CHARLES A L, McDANIEL T. Optimal polar angles and weights for the characteristics methods[J]. *Trans Am Nucl Soc*, 1995, 133: 172-174.
- [5] ISSA J G, RIYAIT N S, GODDARD A J H, et al. Multigroup application of the anisotropic FEM code FELTRAN to one, two, three-dimensional and R-Z problems[J]. *Progress in Nuclear Energy*, 1986, 18: 251-264.
- [6] FEYZI I. Verification of the three-dimensional modular nodal method for spherical harmonic equations[J]. *Ann Nucl Energy*, 1996, 23: 613-616.
- [7] JU H T, WU H C. A least-squares finite-element S_n method for solving first-order neutron transport equation[J]. *Nuclear Engineering and Design*, 2007, 238: 823-829.
- [8] ASKEW R. A characteristics formulation of the neutron transport equation in complicated geometries, Report AEEW-M 1108 [R]. Winfrith: United Kingdom Atomic Energy Establishment, 1972.
- [9] GOLDBERG L, VUJIC J, LEONARD A, et al. The method of characteristics in general geometry [J]. *Trans Am Nucl Soc*, 1995, 73: 173.
- [10] WU G J, ROY R. Anis characteristics algorithm for 3D transport calculations[J]. *Ann Nucl Energy*, 2003, 30: 1-16.
- [11] TELLIER R, HEBERT A. On the integration scheme along a trajectory for the characteristics method[J]. *Ann Nucl Energy*, 2006, 33: 1 260-1 269.
- [12] YAMAMOTO A. Reduction of the spatial discretization error in the method of characteristics using the diamond-difference scheme[J]. *J Nucl Sci Technol*, 2006, 43(11): 1 327-1 335.
- [13] KUGO T. Fast vector computation of the characteristics method[J]. *J Nucl Sci Technol*, 2002, 39(3): 256-263.
- [14] USHIO T, TAKEDA T, MORI M. Neutron anisotropic scattering effect in heterogeneous cell calculations of light water reactors[J]. *J Nucl Sci Technol*, 2003, 40(7): 464-480.
- [15] SUGIMURA N, YAMAMOTO A, USHIO T, et al. Neutron transport models of AGEIS: An advanced next-generation neutronics design system[J]. *Nucl Sci Eng*, 2007, 155: 276-289.
- [16] DAHMANI M, ROY R. Parallel solver based on the three-dimensional characteristics method: Design and performance analysis[J]. *Nucl Sci Eng*, 2005, 150: 155-169.