中子输运 Sn 算法及其应用

阳述林*, 魏军侠, 洪振英, 刘会坡

北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094

* 通信作者. E-mail: yang_shulin@iapcm.ac.cn

收稿日期: 2016-03-31; 接受日期: 2016-10-13; 网络出版日期: 2016-10-25

国家重点基础研究发展计划 (973 计划) (批准号: 2011CB309705)、国家自然科学基金 (批准号: 11271054) 和中国工程物理研究院科学技术发展基金重点课题 (批准号: 2014A0202009) 资助项目

摘要 本文首先简要回顾了中子输运 Sn 方法的研究背景和发展概况, 然后结合实际应用情况重点介绍一些中子输运 Sn 方程的算法, 包括: 一维球几何输运方程计算方法, 二维柱几何输运方程差分方法和间断有限元方法, 以及二维输运方程多级并行算法. 本文最后给出了一些典型应用算例.

关键词 中子输运方程 Sn 方法 差分方法 间断有限元方法 并行算法

1 引言

动态核反应系统除直接用于核武器等国防尖端领域外, 还在反应堆、核电站、医疗诊断等众多民用领域中有广泛的应用. 动态核反应系统的物理行为主要由以中子为主的大量粒子在几何空间、能量、运动方向及时间上的分布决定, 基于这些分布才能计算中子与核的反应及热核反应, 进而得到系统的主要能源. 因而, 在研究大量微观粒子的宏观运动规律的物理背景下, 粒子输运理论得以建立. 再通过以输运理论为基础的物理建模, 从粒子的分布与运动的物理量守恒关系出发, 就得到数学上的粒子输运方程.

在 20 世纪 30 年代中子被发现以后, 随着对核反应堆和核武器的开发研究, 中子输运理论得到了极为迅速的发展. 由于中子输运方程本身的复杂性, 使得在一般情况下的解析求解几乎无法实现. 二战后由于电子计算机的问世, 中子输运方程的数值求解方法进入了数学家的研究领域. 半个多世纪以来, 计算机条件的日益更新以及核武器和核能产业的需求, 已成为推动输运方程计算方法进展的主要动力. 在各种有效、实用数值算法的基础上, 一大批应用程序软件得以产生并不断推陈出新.

中子输运方程数值求解最基本的方法就是多群能量近似方法, 即把中子能区划分成有限个称为“群”的小区间, 再通过能量区间积分, 将在连续能量下的输运方程近似为有能量关联的有限个方程, 这就是所谓的“多群输运方程”. 对不同的问题有不同的能群划分, 也形成不同的中子物理参数.

中子输运方程的数值计算方法发展到今天, 可归结为确定论方法和随机模拟方法两大类. 所谓“随机模拟方法”, 也就是人们常说的 Monte Carlo (简称 MC) 方法, 目前已成为模拟求解核物理系统特别是核反应堆问题的有效手段. 而本文所论述的内容, 都属于确定论方法.

引用格式: 阳述林, 魏军侠, 洪振英, 等. 中子输运 Sn 算法及其应用. 中国科学: 信息科学, 2016, 46: 1510–1526, doi: 10.1360/N112016-00078

确定论方法的核心基础之一是离散纵标法, 简称 Sn 方法, 起源于美国 Los Alamos 国家实验室 (LANL) 的研究工作. 1953 年, Carlson 在计算一维平板问题时首次提出一维离散纵标法^[1], 以后 Lathrop 和 Carlson 又发展了二维离散纵标法^[2].

此后在离散纵标法方面的进展包括: 1988 年 Walters 给出的多维 Chebychev-Legendre 乘积求积组^[3]和 More 提出的 Galerkin 求积技术^[4]; 1990 年, Walters 和 Morel 研究的针对一维球几何 Sn 方程的线性间断角方向差分^[5]; 1999 年 Dahl 等提出的用于生成正散射源的离散纵标方法^[6].

从 20 世纪 60 年代到 90 年代, LANL 开发研制了一系列离散纵标程序, 所有这些程序都采用 Sn 角方向离散和多群 Legendre 能量处理. 其中代表性的计算程序, 一维几何方面有 DTF-IV, ONETRAN, TIMEX, ONEDANT 等, 二维几何方面有 TWOTRAN, TRANZIT, TRIPLET, TRIDENT, TWODANT 等, 三维几何方面有 THRETRAN, THREEDANT, PARTISN, DANTE, PERICLES, ATTLA 等.

在中子输运方程的几何空间离散方面, 由于方程的双曲性质、有限体积、有限元、DG、特征线方法等都是有效的求解方法. LANL 的研究人员做出了不少具有开创性和标志性的工作, 例如: 1969 年, Lathrop 用步特征方法给出了 Sn 方程的第一个具有二阶精度的恒正离散格式^[7]; 1973 年, Reed 等提出了 Sn 方程的第一个线性间断空间离散方法^[8]; 1979 年, Alcouffe 等提出了第一个线性特征方法^[9]; 1981 年, Walters 和 O'Dell 针对 X-Y 几何的离散纵标方程提出了第一个高阶结点格式^[10]; 1994 年, Walters 和 Wareing 提出了第一个非线性指数特征方法^[11]和第一个非线性指数有限元法^[12]; 1999 年, Wareing 等在三维非结构网格上给出了 Sn 方程的间断有限元法^[13].

从 20 世纪末期到 21 世纪初期, 我们同俄罗斯科学院 Keldysh 应用数学所 (KIAM) 进行了二维辐射流体力学与中子输运计算方面的合作和交流. 在中子输运方程的研究方面, 他们已有了三、四十年的经验. 20 世纪 90 年代前期, Voronkov 和 Sychugova 在二维和三维平几何的菱形差分 (DD) 格式基础上, 提出了具有二阶精度的新方法 CDSN^[14]. 20 世纪 90 年代后期, 他们和其他同事又基于 DD 格式, 构造了加权菱形差分 (WDD) 格式和适应性加权菱形差分 (AWDD) 格式, 并研究了相应的加速收敛算法. 此后还研制完成了能与流体力学耦合, 模拟复杂结构区的二维非定态柱几何中子光子输运程序 NPTQT. 在这期间, 国际上对求解高维输运方程的各种结构和非结构网格的空间离散方法的研究, 也是层出不穷^[15,16].

在国内的输运算法研究中, 杜书华编著了较为全面地介绍粒子输运理论和计算的专著^[17]. 而杜明笙等研究的三角网格间断有限元方法^[18], 郭柏灵和沈隆钧研究的针对非线性中子输运方程的 Galerkin 有限元法^[19], 也反映了国内在一个时期的研究方向. 在 Pn 球谐近似方法特别是简化 Pn (即 SPn) 方法的研究方面, 国内有袁光伟和沈智军等的工作^[20,21], 国外的研究可见于 Morel 等^[22]及 Shin 和 Miller 的文章^[23].

在 20 世纪 90 年代中期以前的中子计算方面, 由于受到计算方法和软件研制难度以及计算机条件的限制, 国内还没有成熟的用于二维非定态中子输运计算的应用软件. 我们研究所的中子计算应用程序, 长期处于一维输运计算与二维扩散计算的层面上. 从 1995 年开始, 所里开展了二维非定态中子输运方程的数值计算方法研究与应用程序的研制设计工作, 到 1999 年编制完成了在二维非定态中子输运程序 2DSnDFE.

在我们的研究工作中, 对二维非定态中子输运方程的离散, 采用全隐或半隐差分的时间离散, Sn 离散纵标法以及任意三角形单元和四边形单元组合的几何空间间断有限元法的综合方式进行^[24], 其针对的动态物理系统具有以下特点:

- (1) 系统的几何结构是二维轴对称的;
- (2) 系统中的物质界面是运动的, 界面运动速度及物质区的质量密度随时间变化;

- (3) 系统核反应剧烈, 增殖很快, 各物质区的温度及各种核素的核子密度随时间变化;
- (4) 在高温物质区, 低能中子在其中的输运行为受到核热运动的影响;
- (5) 中子的输运行为影响到系统的流体力学效应.

上述因素的考虑使得中子输运计算与流体力学紧密关联, 成为十分复杂和规模巨大的计算问题. 要完成这样的计算, 需要高性能的计算机和高效率的计算方法, 特别是需要高效的并行计算.

二维中子输运计算不可避免的最大难点, 就是大计算量问题. 高维中子输运数值计算更是十分复杂和规模巨大的科学计算问题. 要完成这样的计算, 需要高性能的计算机和高效率的计算方法, 而并行算法对高维中子输运的大规模计算具有重要作用.

随着大型并行计算机的不断发展, 为输运方程的高效并行算法研究提供了有利条件. 1990 年, 第一个大规模三维无结构网格的 Sn 计算在 Los Alamos 的“连接计算机”(connection machine) 上进行. 1991 年, Morel 等的文章对此做了讨论^[25]. 1998 年, 第一个用源迭代方程的直接解法(与迭代解法相反)求解标准一阶 Sn 方程的大规模并行算法, 由 Baker 和 Koch 给出^[26].

我们通过分析二维柱几何 Lagrange 坐标系非结构网格上间断有限元 Sn 方法的内在并行度, 提出了相应的并行流水线 Sn 扫描算法, 实现了基于网格区域分解的可扩展并行计算, 并具体应用到程序 2DSnDFE 的并行化中. 近年来, 基于 JASMIN 支撑框架, 我们又设计了二维中子输运的能群克隆并行算法, 并实现了能群克隆并行算法与区域分解并行算法相结合的多级并行计算. 数值实验表明, 以上算法取得了显著的并行计算效率, 从而使二维中子输运方程在数千上万核的高效并行计算从理论变为了现实.

本文结合我们的自身工作与合作交流, 介绍一些中子输运 Sn 方程的算法研究与应用情况.

本文的主要内容: 第 2 节给出一般形式及不同坐标下的中子输运方程与定解条件; 第 3 节介绍一维球几何中子输运方程计算方法; 第 4 节和介绍二维柱几何输运方程计算方法, 在几何空间离散方面详述间断有限元方法和差分方法; 第 5 节重点介绍近年来在二维柱几何中子输运多级并行算法的研究成果; 第 6 节给出一些典型应用算例, 第 7 节为小结.

2 中子输运方程与定解条件

本文在研究中子输运问题时, 有以下的基本物理条件与假设:

(1) 中子是由其空间位置和速度完全描述的点粒子. 在此条件下, 可以忽略中子由于自旋和磁矩而引起的极化效应.

(2) 中子与原子核的相互作用由它们之间的相对速度决定, 即中子与核反应时起作用的是它们之间的相对运动能量.

(3) 中子运动时, 在与原子核的两次碰撞之间, 其速度大小和方向是不变的.

(4) 核系统内含有足够多的中子, 以致可以忽略中子数目的统计涨落; 另一方面, 中子密度也不能大到影响介质变化的程度. 在此假设下, 可以忽略中子-中子碰撞的效应.

本文在下面的论述中, 为使问题简化, 假设原子核是不运动的. 因此, 所涉及的中子速度既为相对速度, 又为绝对速度.

在以上基本物理条件与假设的基础上, 根据中子守恒关系, 得到以中子角通量为未知函数的非定态积分-微分中子守恒方程为^[17]

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \varphi + \sigma^t(\mathbf{R}, E, t) \varphi(\mathbf{R}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)$$

$$= q(\mathbf{R}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) + \iint \sigma^s(\mathbf{R}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, t) \varphi(\mathbf{R}, E', \boldsymbol{\Omega}', t) dE' d\boldsymbol{\Omega}', \quad (1)$$

其中 v 表示中子的速度, σ^t 表示中子的总截面, σ^s 表示中子的散射截面, q 表示与中子角通量无关的外源.

在以下的讨论中, 将右端源项合写为 q .

方程 (1) 中几何空间自变量 $\mathbf{R}$, 相空间 (方向) 自变量 $\boldsymbol{\Omega}$ 和中子输运项 $\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \varphi$ 在不同坐标下的具体形式如下 (在以下 (i)~(v) 中暂时略去能量自变量 E 和时间自变量 t).

(i) 三维直角坐标:

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi(x, y, z, \xi, \alpha), \quad \boldsymbol{\Omega} = \xi \mathbf{e}_x + \sqrt{1 - \xi^2} \cos \alpha \mathbf{e}_y + \sqrt{1 - \xi^2} \sin \alpha \mathbf{e}_z, \\ \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \varphi &= \xi \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \sqrt{1 - \xi^2} \cos \alpha \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \sqrt{1 - \xi^2} \sin \alpha \frac{\partial \varphi}{\partial z}. \end{aligned}$$

(ii) 三维柱坐标:

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi(x, r, \tau, \xi, \omega), \quad \boldsymbol{\Omega} = \xi \mathbf{e}_x + \sqrt{1 - \xi^2} \cos \omega \mathbf{e}_r + \sqrt{1 - \xi^2} \sin \omega \mathbf{e}_\tau, \\ \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \varphi &= \xi \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \sqrt{1 - \xi^2} \cos \omega \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{\sqrt{1 - \xi^2} \sin \omega}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} - \frac{\sqrt{1 - \xi^2} \sin \omega}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial \omega}. \end{aligned}$$

(iii) 三维球坐标:

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi(R, \theta, \tau, \mu, \beta), \quad \boldsymbol{\Omega} = \mu \mathbf{e}_R + \sqrt{1 - \mu^2} \cos \beta \mathbf{e}_\theta + \sqrt{1 - \mu^2} \sin \beta \mathbf{e}_\tau, \\ \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \varphi &= \mu \frac{\partial \varphi}{\partial R} + \frac{\sqrt{1 - \mu^2} \cos \beta}{R} \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} + \frac{\sqrt{1 - \mu^2} \sin \beta}{R \sin \theta} \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \frac{1 - \mu^2}{R} \frac{\partial \varphi}{\partial \mu} - \frac{\sqrt{1 - \mu^2} \sin \beta \cot \theta}{R} \frac{\partial \varphi}{\partial \beta}. \end{aligned}$$

在实际应用中, 几何空间应用最多的是二维柱坐标和一维球坐标, 可以分别由 (ii) 和 (iii) 退化得到.

(iv) 二维柱坐标:

$$\varphi = \varphi(x, r, \xi, \omega), \quad \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \varphi = \xi \frac{\partial \varphi}{\partial x} + \sqrt{1 - \xi^2} \cos \omega \frac{\partial \varphi}{\partial r} - \frac{\sqrt{1 - \xi^2} \sin \omega}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial \omega}.$$

(v) 一维球坐标:

$$\varphi = \varphi(R, \mu), \quad \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \varphi = \mu \frac{\partial \varphi}{\partial R} + \frac{1 - \mu^2}{R} \frac{\partial \varphi}{\partial \mu}.$$

输运方程 (1) 在几何空间一个有界区域 D 上的定解条件为

(1) 初始条件:

$$\varphi(\mathbf{R}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)|_{t=0} = \varphi^0(\mathbf{R}, E, \boldsymbol{\Omega}),$$

(2) 外边界条件 (无进流):

$$\varphi(\mathbf{R}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)|_{\Gamma_\Omega} = 0,$$

其中 Γ_Ω 为对应角方向 $\boldsymbol{\Omega}$ 的进流边界:

$$\Gamma_\Omega = \{\mathbf{R} \in \partial D; \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n} < 0\},$$

$\mathbf{n}$ 为对应 ∂D 上 $\mathbf{R}$ 点的单位外法向量.

3 一维球几何中子输运方程计算方法

在实际应用问题中, 中子输运方程需要考虑曲几何问题, 其中球几何输运问题在武器物理问题中得到了广泛应用. 基于一维球几何中子输运方程, 我们完成了适应动态多群中子输运问题的程序研制 (1DSN-sph), 该程序可采用有限体积方法的菱形格式 (DD)、指数格式 (EM) 以及线性间断有限元方法 (LD) 进行数值求解. 具有计算定态 α 本征值, K_{eff} 本征值及临界半径的功能, 同时可进行动态中子输运过程的数值模拟 [27]. 针对一维球几何多群动态输运方程和实际应用需求, 我们研究了有限体积方法和线性间断有限元方法, 以及相应的自适应算法和并行算法.

3.1 有限体积方法

在有限体积方法中, 根据网格边界处采用的外推形式, 可构造不同的离散格式, 如指数格式、菱形格式等.

指数格式采用如下外推形式 (空间变量、角度变量、时间变量):

$$\varphi_{g,m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{3}{2}} = \frac{\left(\varphi_{g,m,k+\frac{1}{2}}^{n+1}\right)^2}{\varphi_{g,m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}}, \quad \varphi_{g,m+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{\left(\varphi_{g,m,k+\frac{1}{2}}^{n+1}\right)^2}{\varphi_{g,m-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1}}, \quad \varphi_{g,m,k+1}^{n+1} = \frac{\left(\varphi_{g,m,k+\frac{1}{2}}^{n+1}\right)^2}{\varphi_{g,m,k}^{n+1}}.$$

菱形格式外推公式:

$$\begin{aligned} \varphi_{g,m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{3}{2}} &= f\varphi_{g,m,k+\frac{1}{2}}^{n+1} - (f-1)\varphi_{g,m,k+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}, \\ \varphi_{g,m+\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1} &= f\varphi_{g,m,k+\frac{1}{2}}^{n+1} - (f-1)\varphi_{g,m-\frac{1}{2},k+\frac{1}{2}}^{n+1}, \\ \varphi_{g,m,k+1}^{n+1} &= f\varphi_{g,m,k+\frac{1}{2}}^{n+1} - (f-1)\varphi_{g,m,k}^{n+1}, \end{aligned}$$

其中, $f=1$ 表示步格式, $f=2$ 为菱形格式.

3.2 线性间断有限元方法

在线性间断有限元方法中, 采用如下基函数及权重函数:

有限元基函数:

$$f_k(r) = \begin{cases} \frac{r_{k+1}-r}{\Delta r_k}, & r_k \leq r \leq r_{k+1}, \\ 0, & \text{其他}, \end{cases} \quad f_{k+1}(r) = \begin{cases} \frac{r-r_k}{\Delta r_k}, & r_k \leq r \leq r_{k+1}, \\ 0, & \text{其他}, \end{cases}$$

其中 $\Delta r_k = r_{k+1} - r_k$.

权重函数:

$$w_1(r) = 1, \quad w_2(r) = \begin{cases} r - r_k, & \mu_m > 0, \\ r_{k+1} - r, & \mu_m < 0. \end{cases}$$

把上述方法代入中子输运守恒方程、菱形格式及线性间断有限元方法给出线性方程组, 而指数格式给出非线性方程, 具体表达式可参见文献 [28].

3.3 自适应时间离散方法

针对实际多群动态中子输运问题中出现的關鍵物理特征量 (中子增殖常数) 出现数值解振荡的问题, 我们还研究了自适应时间离散方法, 采用了修正时间离散格式及二阶时间演化格式 [29,30]. 通过修正公式得到修正通量.

修正指数格式 (MEM) [30]:

$$\varphi_*^{n+\frac{1}{2}} = [(\varphi^n)^2 / (\varphi^{n-\frac{1}{2}})^{\frac{2\Delta t^{n+1}}{\Delta t^{n+1} + \Delta t^n}}]^{\frac{\Delta t^{n+1} + \Delta t^n}{2\Delta t^n}}.$$

修正菱形格式 (MDD):

$$\varphi_*^{n+\frac{1}{2}} = \frac{\varphi^n(\Delta t^{n+1} + \Delta t^n)}{\Delta t^n} - \varphi^{n-\frac{1}{2}} \frac{\Delta t^{n+1}}{\Delta t^n},$$

其中 $\Delta t^n = t^n - t^{n-1}$, $\Delta t^{n+1} = t^{n+1} - t^n$.

菱形格式的修正可能出现负通量, 出负时采用步格式修正.

修正指数格式 (MEM)、修正菱形格式 (MDD) 形式简单, 易于在已有大型应用程序中实现, 修正时间离散格式充分考虑了整个计算过程中时间步长的变化, 从而可以较好地模拟自适应时间步长的物理问题.

为了克服修正时间离散格式计算出壳量振荡问题, 对时间变量采用二阶时间演化 (SOTE) 格式, 此种格式充分考虑自适应时间步长的特点, 对通量在时间上的离散不必引入指数假定的指数外推或者线性假定的菱形外推.

结合空间指数格式、菱形格式, 构造时间变量采用二阶时间演化格式的 SOTE_EM 格式和 SOTE_DD 格式, SOTE_EM 格式得到的仍然是一个非线性二次方程的形式, SOTE_DD 格式得到的离散方程形式与菱形格式类似, 只是所给定的系数有所差别.

3.4 渐近保持性质的线性间断有限元方法

通过研究并应用渐近保持性质的线性间断有限元方法, 有效抑制了数值解的振荡现象. 因此对于求解多介质问题, 具有渐近保持格式的线性间断有限元方法可以在相同的网格下, 得到较精确的计算结果, 而且其物理曲线保持了很好的光滑性, 避免了指数格式、菱形格式计算的数值解局部大幅度振荡现象.

3.5 基于界面预估校正的并行计算格式

输运方程采用离散纵标方法求解时, 计算顺序是沿着中子的运动方向进行递推求解, 物理量之间是强相关的, 此串行本性成为制约实现高效的并行计算的瓶颈问题, 因此迫切需要研究适应于大型并行计算机的并行计算方法. 等效的一维球几何模型在实际问题中广泛应用, 而传统应用于二维问题的空间并行化算法在一维问题中是没有并行度的.

我们开展了球几何中子输运方程基于界面预估校正的并行计算格式研究 [31]. 利用基于界面修正的并行方法, 采用区域分解技术, 在子区域内界面处采用不同形式的预估方法并对其进行校正, 从而实现中子输运问题的并行求解.

文献 [31] 给出了一维球几何模型的数值算例, 计算结果表明该并行计算方法在稳定性、精度、并行度、简单性方面均具有良好的性质.

4 二维柱几何输运方程计算方法

将一般多群中子输运方程 (1) 进行输运项 $\Omega \cdot \nabla \varphi$ 的二维柱坐标展开和能群离散, 可得到非定态多群中子输运方程为

$$\frac{1}{\nu_g} \frac{\partial \varphi_g}{\partial t} + \xi \frac{\partial \varphi_g}{\partial x} + \mu \frac{\partial \varphi_g}{\partial r} - \frac{\varsigma}{r} \frac{\partial \varphi_g}{\partial \omega} + \sigma_g \varphi_g = Q_g.$$

该方程也可写成下面的形式:

$$\frac{1}{\nu_g} \frac{\partial \varphi_g}{\partial t} + \xi \frac{\partial \varphi_g}{\partial x} + \frac{\mu}{r} \frac{\partial r \varphi_g}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial \varsigma \varphi_g}{\partial \omega} + \sigma_g \varphi_g = Q_g, \quad (2)$$

其中 $\mu = \sqrt{1 - \xi^2} \cos \omega$, $\varsigma = \sqrt{1 - \xi^2} \sin \omega$, g 为群记号, $g = 1, 2, \dots, G$.

针对以上多群中子输运方程在定解区域中的离散, 主要有 Sn 角方向离散, 几何空间离散等几个方面.

4.1 时间离散

对给定的时间离散点

$$t^n = n\Delta t, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

采用中心差分或全隐式差分进行离散, 分别有以下的截断误差表示:

$$\left. \frac{\partial \varphi_g}{\partial t} \right|_{t^{n+\frac{1}{2}}} = \frac{\varphi_g^{n+1} - \varphi_g^n}{\Delta t} + O(\Delta t^2), \quad \left. \frac{\partial \varphi_g}{\partial t} \right|_{t^{n+1}} = \frac{\varphi_g^{n+1} - \varphi_g^n}{\Delta t} + O(\Delta t).$$

4.2 Sn 角方向离散

采用离散纵标法 (即 Sn 方法), 在角方向变量空间的单位半球面

$$\{(\xi, \mu, \varsigma); \xi^2 + \mu^2 + \varsigma^2 = 1, \varsigma \geq 1\}$$

上取全对称离散点集

$$(\xi_{m,s}, \mu_{m,s}, \varsigma_s), \quad m = 1, \dots, M_s; \quad s = 1, \dots, N.$$

对应 (ξ, ω) 坐标平面上的全对称离散点集为

$$(\xi_{m,s}, \omega_{m,s}), \quad m = 1, \dots, M_s; \quad s = 1, \dots, N,$$

其中 N 是偶数.

将单位球面关于 ξ 分为 N 层. 在一个象限中, 第 i 层取 i 个点, 这样半球面共有 $N(1 + \frac{N}{2})$ 个离散点, 亦即将半球面分为 $N(1 + \frac{N}{2})$ 块. 相应地, 在 (ξ, ω) 坐标中, 将矩形划分为 $N(1 + \frac{N}{2})$ 块.

图 1 是 (ξ, μ, ς) 球面及对应的 (ξ, ω) 坐标里 S_4 剖分的图例.

设在 (ξ, ω) 坐标中包含离散点 $(\xi_{m,s}, \omega_{m,s})$ 的网格面积为 $\bar{w}_{m,s}$, 则有 $\sum_{m,s} \bar{w}_{m,s} = 2\pi$. 记 $w_{m,s} = \frac{\bar{w}_{m,s}}{2\pi}$, 则归一化后的求积权重和为 $\sum_{m,s} w_{m,s} = 1$.

对式 (2) 中相空间变量的差分离散为

$$\left. \frac{\partial \varsigma \varphi_g}{\partial \omega} \right|_{(m,s)} = \frac{(\varsigma \varphi_g)_{m+\frac{1}{2},s} - (\varsigma \varphi_g)_{m-\frac{1}{2},s}}{\Delta \omega_{m,s}} = \frac{\beta_{m+\frac{1}{2},s} \varphi_{g,m+\frac{1}{2},s} - \beta_{m-\frac{1}{2},s} \varphi_{g,m-\frac{1}{2},s}}{w_{m,s}},$$

图 1 (网络版彩图) S_4 剖分的 (ξ, μ, ς) 球面 (a) 及对应的 (ξ, ω) 平面 (b)
Figure 1 (Color online) S_4 partition of (a) (ξ, μ, ς) sphere and (b) (ξ, ω) plane

其中

$$w_{m,s} = \frac{1}{2\pi} \Delta \xi_s \Delta \omega_{m,s}, \quad \beta_{m \pm \frac{1}{2}, s} = \frac{1}{2\pi} \Delta \xi_s \varsigma_{m \pm \frac{1}{2}, s}.$$

4.3 几何空间离散

在二维 (x, r) 平面对几何求解区域 D (代表三维几何空间的一个旋转体区域) 作三角形或凸四边形的网格单元剖分, 在每个网格单元 D_p 上有进流边界条件

$$\varphi_g(x, r, \xi, \mu, t)|_{\partial_{\Omega}^- D_p} = \chi_g(x, r, \xi, \mu, t),$$

其中 $\partial_{\Omega}^- D_p$ 为对应角方向 Ω 的进流边界:

$$\partial_{\Omega}^- D_p = \{\mathbf{R} \in \partial D_p; \Omega \cdot \mathbf{n} < 0\},$$

$\mathbf{n}$ 为对应 ∂D_p 上 $\mathbf{R}$ 点的单位外法向量.

结合我们的实际研究和应用, 本节在几何空间离散方面主要介绍间断有限元方法和差分方法.

4.3.1 间断有限元方法

将一般形式的多群输运方程简写为

$$A[\varphi_g] + \Omega \cdot \nabla \varphi_g = 0, \quad (3)$$

其中算子 A 与角通量的空间导数无关.

运用 Galerkin 方法离散 (3), 并利用边界条件, 对任一函数 ψ 有

$$(A[\varphi_g] + \Omega \cdot \nabla \varphi_g, \psi) + \langle \varphi_g - \chi, \psi \rangle = 0, \quad (4)$$

其中

$$(a, b) = \iint_{D_P} ab d\mathbf{R}, \quad \langle a, b \rangle = - \int_{\partial \bar{\Omega} D_P} ab \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n} ds.$$

对二维 (x, r) 坐标下的单位弧度旋转体, 其体积微元和旋转表面的面积微元分别为

$$d\mathbf{R} = r dx dr, \quad ds = r dl.$$

将 ψ 和 φ_g 限制在 D_p 上有限维的函数空间 $V(D_p)$ 内, 所得到的式 (4) 就称为间断有限元方程, $V(D_p)$ 为网格单元 D_p 上的有限元空间.

在我们自主研制的 2DSnDFE 程序中, 有限元空间 $V(D_p)$ 为 D_p 上的线性函数 (当 D_p 为三角形) 或双线性函数 (当 D_p 为四边形) 空间. 在每个三角形或四边形网格 D_p 上, 通过变换 Jacobi 矩阵, 将网格单元上的体积分计算转换为标准三角形或标准四边形上的面积分, 同时将网格边界上的面积分计算转换为标准三角形或标准四边形边上的线积分.

将时间隐式差分, Sn 离散纵标法和几何空间的间断有限元法相结合, 得到二维中子输运方程的离散格式为

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^I \varphi_{g,m,s,j}^{n+1} \left[\xi_{m,s} \left(\frac{\partial N_j}{\partial x}, N_i \right) + \mu_{m,s} \left(\frac{\partial N_j}{\partial r}, N_i \right) \right. \\ & \quad \left. + \beta_{m,s} \left(\frac{\partial N_j}{r}, N_i \right) + \left(\sigma_g^{t,n+1} + \frac{1}{v_g \Delta t} \right) (N_j, N_i) + \langle N_j, N_i \rangle \right] \\ & = \sum_{j=1}^I \left[\left(Q_{g,m,s,j}^{n+1} + \frac{1}{v_g \Delta t} \varphi_{g,m,s,j}^n \right) (N_j, N_i) + \beta_{m,s} \varphi_{g,m+\frac{1}{2},s,j}^{n+1} \left(\frac{N_j}{r}, N_i \right) \right] + \langle \chi, N_i \rangle, \end{aligned}$$

其中

- (1) $N_i(x, r)$ ($i = 1, \dots, I$) 是 $V(D_P)$ 的基函数;
- (2) 相空间插值关系

$$\varphi_{g,m,s} = \frac{1}{2} (\varphi_{g,m+\frac{1}{2},s} + \varphi_{g,m-\frac{1}{2},s});$$

- (3) 相空间边值项系数

$$\beta_{m,s} = \begin{cases} 0, & m = M_s + \frac{1}{2}, \\ \frac{2\zeta_{m,s}}{\Delta\omega_{m,s}}, & m = M_s, M_s - 1, \dots, 1. \end{cases}$$

基于以上离散方程的算法及程序实现的简要过程为: 对每一个确定的相空间离散点都要进行相应的网格排队, 再按此顺序逐个网格单元求解. 在三角形和四边形网格均为凸的情形下, 按照任何中子运动方向的网格排队都能够实现.

这样保证在每个网格计算时, 其进流边或者是计算区域的外边界的一部分, 或者是已计算过的邻网格边界. 每一网格计算中的边界条件 χ 取自相应进流边邻网格的中子角通量, 或者是计算区域的外边界条件. 在每一群和每一个 Sn 离散角方向的计算中, 每个网格单元上只需解一个 I ($=3$ 或 4) 阶的代数方程组.

4.3.2 差分方法

基于任意凸四边形网格, 用守恒差分格式求解非定态二维输运方程 (2).

将函数 φ_g 在四边形网格 D_p 顶点的值记为 $\varphi_{g,P_i,m,s}^n \equiv \varphi_{g,m,s}^n(x_i, r_i)$ ($i = 1, 2, 3, 4$), 在边上的值记为 $\varphi_{g,P(i,i+1),m,s}^n$, 在四边形中心的值记为 $\varphi_{g,P_0,m,s}^n$.

在方程 (2) 的两端乘以 r , 然后在四边形网格 D_p 上积分, 在有限单元 $[t_{n-\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}}] \times [\xi^-, \xi^+] \times [\omega^-, \omega^+]$ 上应用差分方法, 消去 $\Delta t_n \Delta \xi_m \Delta \omega_{m,s}$, 获得下面的离散方程:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta v}{v_g} \left[\frac{\varphi_{g,p_0,m,s}^{n+\frac{1}{2}} - \varphi_{g,p_0,m,s}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right] + \sum_{i=1}^4 R_{P(i,i+1),m,s} \varphi_{g,P(i,i+1),m,s}^n \\ + \frac{\Delta s}{w_{m,s}} (\alpha^+ \varphi_{g,\omega}^{n+} - \alpha^- \varphi_{g,\omega}^{n-}) + \sigma_g^t \varphi_{g,P_0,m,s}^n \Delta v = Q_{g,P_0,m,s}^n \Delta v, \end{aligned} \quad (5)$$

其中

$$\begin{aligned} R_{P(i,i+1),m,s} &= \frac{1}{2}(r_i + r_{i+1})[\mu_{m,s}(x_{i+1} - x_i) - \xi_{m,s}(r_{i+1} - r_i)], \\ \varphi_{g,P(4,5),m,s}^n &= \varphi_{g,P(4,1),m,s}^n, \quad R_{P(4,5),m,s} = R_{P(4,1),m,s}, \quad \Delta t_n = t_{n+\frac{1}{2}} - t_{n-\frac{1}{2}}, \\ \Delta \xi_m &= \xi^+ - \xi^-, \quad \Delta \omega_{m,s} = \omega^+ - \omega^-, \quad \xi_{m,\pm\frac{1}{2},s}^\pm = \xi_{m,\pm\frac{1}{2},s}, \quad \mu_{m,l} = \sqrt{1 - \xi_{m,s}^2} \cos \omega_{m,s}, \\ \omega_{m,\pm\frac{1}{2}}^\pm &= \omega_{m,s,\pm\frac{1}{2}}, \quad \varphi_{g,\omega}^{n\pm} = \varphi_{g,p_0,m,s,\pm\frac{1}{2}}^n, \quad \alpha_{m,\pm\frac{1}{2}}^\pm = \alpha_{m,s,\pm\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

对于给定的 m 与所有的 s , 有以下关系:

$$\alpha_{m,s+\frac{1}{2}} = \alpha_{m,s-\frac{1}{2}} - \mu_{m,s} \cdot w_{m,s}, \quad \alpha_{m,\frac{1}{2}} = \alpha_{m,L_m+\frac{1}{2}} = 0,$$

其中 $\Delta s = \iint_{\text{cell}} dx dr$ 是四边形单元的面积. $\Delta v = \iint_{\text{cell}} r dx dr$ 是单元围绕 x 轴旋转单位弧度的体积.

加上权重“菱形”关系式, 使方程 (5) 封闭:

$$\begin{aligned} \varphi_{g,\omega}^{n+} &= (1 + P_\omega) \varphi_{g,P_0,m,s}^n - P_\omega \varphi_{g,\omega}^{n-}, \\ \varphi_{g,p_0,m,s}^{n+\frac{1}{2}} &= (1 + P_t) \varphi_{g,P_0,m,s}^n - P_t \varphi_{g,p_0,m,s}^{n-\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

其中

$$0 \leq P_\omega \leq 1, \quad 0 \leq P_t \leq 1.$$

此外, 方程 (5) 的求解还需要给出几何空间的附加关系式, 附加关系式应保证在任意方向 ($\xi_{m,s}$, $\varphi_{m,s}$) 上使微分方程为非奇异的. 附加关系式的数量和形式由四边形单元的流入边决定.

对于空间变量, 采用公共权重 P , $0 \leq P \leq 1$, 根据网格对给定的中子角方向有一条进流边、两条进流边、三条进流边的不同情形, 给出相应的网格中心点、角点与边线点之间的附加关系式.

当 $P = 1$, $P_\omega = 1$ 和 $P_t = 1$, 可以得到二阶精度.

5 二维柱几何中子输运多级并行算法

二维柱几何下求解二维非定态中子输运方程涉及中子能群的 1 维, 速度相空间的 2 维, 几何空间的 2 维, 以及时间的 1 维等 6 维空间的离散, 是十分复杂和规模巨大的科学计算问题. 要完成这样的计算, 需要高性能的计算机和高效率的计算方法.

随着并行计算机和并行技术的不断发展, 中子输运并行计算方面的研究取得了很大进展, 主要工作集中在基于几何空间的网格区域分解并行算法.

二维柱几何中子输运方程能量采用多群离散, 相空间采用离散纵标法离散, 几何空间采用非结构四边形和三角形混合网格上的间断有限元离散, 在几何空间、相空间、能群均具有一定的并行度, 但其数据依赖关系非常复杂, 只有深入挖掘中子输运算法的并行度, 设计有效的并行算法, 才能实现二维柱几何非结构网格中子输运方程高效的并行计算.

在早期的研究工作中, 我们综合考虑几何空间与相空间的并行度, 应用二维柱几何非结构网格并行流水线 S_n 扫描算法, 实现了基于网格区域分解的可扩展并行计算.

在近期的研究工作中, 我们分析了中子输运源迭代算法及源项更新计算的特点, 应用基于 JASMIN 框架的克隆脉动通信方式将全局通信转化为局部通信, 设计了二维中子输运的能群克隆并行算法, 实现了中子输运基于能群并行的可扩展并行计算.

在最新的研究工作中, 我们基于结构网格支撑框架 JASMIN 底层, 将能群克隆并行算法与基于区域分解方法的并行算法相结合, 实现了二维柱几何中子输运的多级并行计算.

5.1 区域分解并行计算

中子输运方程的求解涉及到空间网格、方向、能群这几方面的循环求解, 由于沿群和离散纵标方向两个方面的并行度非常有限, 因此, 只有基于空间网格区域分解的并行才有可能实现中子输运问题的可扩展并行计算. 因此, 首先采用空间网格区域分解方法把整个问题划分成可并行计算的若干子问题.

采用间断有限元 S_n 方法, 对每一给定的离散方向 Ω_m , 空间网格的求解顺序不是按几何位置的顺序依次进行, 而是要根据 Ω_m 方向通过非结构网格边界的情况决定, 空间网格对于不同的离散方向可能有不同的求解顺序. 因此, 要对每一个离散方向进行试验, 利用 $(\Omega_m, \mathbf{n})$ (为网格某个面的法线方向) 的符号逐个检查每个面的中子流向, 以决定网格的求解顺序.

串行 S_n 扫描算法是对各个离散方向, 先确定所用网格的求解顺序, 然后按此顺序依次计算. 这在串行程序很有效, 但并行区域分解后, 不能满足各个进程并行执行的要求.

对高维非结构网格中子输运方程, 目前已有的并行算法是基于区域分解的并行流水线 S_n 扫描算法, 它把本区域的网格和其上的一个方向综合考虑成一个元素, 对可计算的元素按照优先级进行排序, 再依次计算.

在各个进程中并行流水线 S_n 扫描算法描述如下:

第 1 步: 确定本进程元素的依赖关系, 将可计算的元素按优先级插入队列中.

第 2 步: 如果队列中没有可计算的元素, 就接受所有进程给本进程发过来的消息, 判断是否有可计算元素, 将可计算元素按优先级插入队列中.

第 3 步: 如果队列中有可计算的元素, 就从队列中取出元素依次进行计算, 同时把它可计算的下游元素插入队列; 如果下游元素属于别的进程, 就把这个元素的节点通量发送给下游元素所在的进程.

第 4 步: 这样循环执行, 直到本进程所有元素都被计算完为止.

从元素的定义可知, 该算法综合考虑了几何空间和相空间的并行度, 既实现了空间区域分解的并行, 又包含了 S_n 角度离散方向的并行, 因此对于一定规模的问题它可以得到较高的并行效率.

然而, 由于并行流水线 S_n 扫描算法是基于隐式格式的, 隐式离散方法导致几何空间与相空间的并行度是有限的, 因而有些进程就需要空闲等待别的进程计算完相应的上游网格, 发送过来消息后才

表 1 能群配对分解示意图
Table 1 The partnership decomposability of energy group

Process serial no.	Group serial no.				
Process 1	(5,44)	(12,37)	(13,36)	(20,29)	(21,28)
Process 2	(6,43)	(11,38)	(14,35)	(19,30)	(22,27)
Process 3	(7,42)	(10,39)	(15,34)	(18,31)	(23,26)
Process 4	(8,41)	(9, 40)	(16,33)	(17,32)	(24,25)

能开始计算. 当子区域数增大到一定规模时, 空闲等待的子区域个数增多, 等待时间增长, 必然导致并行效率下降.

因此, 要达到二维柱几何非结构网格中子输运在数千上万核的高效并行计算, 必须更深入挖掘输运算法的并行度.

5.2 能群克隆并行计算

在各向异性散射的计算中, 源项更新部分的计算量很大, 其中散射源是把 1 到 g 群的角通量耦合起来, 随着群序数的增加, 所需要的计算量也增加.

为了保证能群计算中各进程的负载平衡, 可以采用配对分解法, 即让能群序数大小配对, 分配给同一个进程.

如果群个数不能平均分配给进程, 就把最小的群作为余数先分配给进程, 再对后面的群进行配对分配. 例如把 44 群分配给 4 个进程见表 1.

可将源项写成积分方程 $Q_{fg} = \sum_{g'=1}^{G_0} a_{gg'} b_{g'}$ 的形式, 并行计算时, 各处理机计算自己负责群组的 Q_{fg} 时需要所有的 $b_{g'}$ ($g' = 1, \dots, G_0$), 而克隆计算时 $b_{g'}$ 是按组 (每组的能群编号 g' 不一定是连续的) 分布在各个处理机.

全局累加需要全局通信, 通信复杂度为 $O(G_0 \log p)$; 并且, 由于通信量是关于网格、方向、能群的多维变量, 存储量为 $O(G_0)$.

我们设计了克隆脉动算法, 将全局通信转化为局部通信, 大幅减少了能群并行的通信复杂度与通信量, 通信复杂度降为 $p \times O(G_0/p) = O(G_0)$; 存储量降为 $O(G_0/p)$.

(a) P_0 将自己的 $b_{g'}$ 数据传给 P_1 , 同时 P_1 将自己的 $b_{g'}$ 数据传给 P_2 , 同时 P_2 给 $P_3, \dots$, 同时最后一个处理机 P_{p-1} 将自己的数据传给 P_0 (此步是并行执行, 并且是局部通信);

(b) 各处理机收到数据后应用数据进行计算;

(c) 然后再进行第一步轮转;

(d) 轮转 P 次后, 所有的处理机都应用所有的 $b_{g'}$ ($g' = 1, \dots, G_0$) 数据进行了计算, 同时自己的数据又换回.

通信复杂度为 $p \times O(G_0/p) = O(G_0)$; 存储量为 $O(G_0/p)$.

5.3 多级并行计算

JASMIN 框架 (J Adaptive Structured Mesh applications INfrastructure) 的全称为并行自适应结构网格应用支撑软件框架, 围绕科学与工程计算中普遍采用的结构网格或非结构拼接的结构网格, 提供丰富的数据结构, 算法构件与解法器, 屏蔽高性能并行计算 (数据通信, 负载平衡) 和网格自适应 (细化, 粗化) 的实现, 支撑多物理耦合模型的耦合计算方法研究与高效并行应用程序研制.

图 2 (网络版彩图) EM, MEM 和 SOTE-EM 计算的 (a) 出壳流和 (b) λ_{edge}
 Figure 2 (Color online) (a) J and (b) λ_{edge} of EM, MEM and SOTE-EM

JASMIN 框架底层实现了基于区域分解的并行 S_n 扫描排序算法与能群克隆并行算法, 并且实现了输运扫描算法的进程与线程混合并行计算. 针对二维柱几何中子输运计算的特点, 基于结构网格并行支撑框架 JASMIN, 我们将能群克隆并行算法与基于区域分解方法的并行算法相结合, 实现了二维柱几何中子输运的多级并行计算.

6 数值算例

6.1 一维数值算例

针对包含两种介质, 各向同性散射源的一维模型, 采用 S_4 角度离散, 时间步长 $10^{-4}\mu\text{s}$, 进行不同格式的对比较算.

下面给出指数格式、修正指数格式以及 SOTE-EM 格式计算结果^[29], 如图 2 所示.

数值结果表明, 修正指数格式以及修正菱形格式计算的中子数, 出壳流更加接近定时间步长的计算结果. 对于反映出壳流微分性质的 λ_{edge} (中子增殖常数), 原时间离散格式在时间步长发生变化的阶段微分曲线出现振荡, 修正时间离散格式以及 SOTE-DD 格式也存在振荡现象, 时间离散采用 SOTE 格式的 SOTE-EM 格式计算的 λ_{edge} 曲线比较光滑.

6.2 二维数值算例

应用间断有限元方法和“菱形”差分方法, 计算两个典型的快中子临界基准模型^[32], 求解模型的有效增值因子 k_{eff} , 验证程序的可靠性. 基准模型构型和材料如表 2, 计算结果见表 3.

6.3 多级并行数值算例

在某大型并行机上, 针对典型问题计算模型, 分别对多级并行计算效率进行了测试.

测试网格区域分解与中子输运能群克隆脉动的多级并行计算效率, 测试模型: 90000 个网格, 16 群, S_8 (48 个方向). 分别固定网格区域分解数为 64 与 128 个, 能群并行数从 1 到 8 变化, 测试结果见表 4 和 5.

表 2 基准模型构型和材料
Table 2 The structure and material of benchmark model

Serial no.	Shape	Core radius (cm)	Core materials ($10^{24}/\text{cm}^3$)	Ref. later (cm)	Ref. layer materials ($10^{24}/\text{cm}^3$)
1	Sphere	8.7407	U234: 4.9184E-4 U235: 4.4994E-2 U238: 2.4984E-3		
2	Sphere	6.1156	U234: 4.8869E-4 U235: 4.4482E-2 U238: 2.7038E-3	24.1242	U234: 2.6438E-6 U235: 3.4610E-4 U238: 4.7721E-2

表 3 有效增值因子 k_{eff} 计算结果
Table 3 The computational result k_{eff}

Serial no.	DFE sol.	DD sol.	Benchmark sol.
1	1.0019	1.0023	0.9997
2	1.0061	1.0038	1.0030

表 4 克隆脉动算法性能测试 (固定网格区域分解数为 64)
Table 4 Speedup of cloning pulsating algorithm (64 domains)

CPU	Total time (min)	Total speedup	Sweep time (min)	Sweep speedup	Trans. time (min)
64=64*1	22.5	1.00	16.9	1.00	0.0
128=64*2	12.7	1.77	8.98	1.88	0.72(0.57+0.15)
256=64*4	7.97	2.82	5.05	3.35	0.81(0.51+0.30)
512=64*8	5.59	4.03	3.06	5.52	0.75(0.39+0.36)

表 5 克隆脉动算法性能测试 (固定网格区域分解数为 128)
Table 5 Speedup of cloning pulsating algorithm (128 domains)

CPU	Total time (min)	Total speedup	Sweep time (min)	Sweep speedup	Trans. time (min)
128=128*1	11.2	1.00	7.80	1.00	0.31
256=128*2	6.90	1.65	4.05	1.93	0.79(0.25+0.53)
512=128*4	4.22	2.65	2.33	3.35	0.42(0.21+0.21)
1024=128*8	3.35	3.34	1.45	5.38	0.29(0.11+0.18)

测试结果表明: 扫描计算和脉动传输的时间随克隆数的增长显著下降, 从而总计算时间随克隆数的增长显著下降; 空间区域分解与能群克隆耦合的多级并行算法, 可以在已有空间区域分解并行效率的基础上再提高数倍, 有望实现二维中子输运数千上万核的高效并行.

为了测试多级并行计算在大规模并行机上的计算效率, 选取测试模型为数十亿自由度的输运多物理耦合计算问题, 即 36 万个网格, 16 群, S_8 (48 个方向).

下面表 6 为实际计算一个完整非定态中子输运过程的测试结果.

可以看出, 应用区域分解与能群克隆相结合的多级并行算法及进程与线程的混合并行计算, 实现了中子输运 Sn 程序在上万核上的高效并行计算.

表 6 多级算法性能测试
Table 6 Speedup of multi-level parallel algorithm

CPU kernel num.	Process num.	Thread num.	Run time (min)	Speedup	Parallel efficiency
384	64	6	105.56	1	1
768	128	6	54.37	1.94	0.971
1536	256	6	29.48	3.58	0.895
3072	512	6	17.13	6.16	0.770
6144	1024	6	10.62	9.94	0.621
12288	2048	6	8.181	12.9	0.403

7 小结

本文结合实际研究工作, 简要回顾了中子输运 S_n 方法的研究背景和发展概况, 综合介绍了中子输运方程 S_n 算法的研究与应用情况.

在一维球几何中子输运方程方面, 有限体积方法、线性间断有限元方法、自适应时间离散方法和渐近保持性质的线性间断有限元方法得到了研究和应用. 在二维柱几何中子输运方程方面, 差分方法和间断有限元方法得到了研究和应用. 针对二维中子输运大计算量问题, 区域分解并行算法、能群克隆并行算法以及二者相结合的多级并行算法得到了有效的应用.

此外, 通过一些典型应用算例, 论证了所研究和设计的算法的有效性. 特别是在多级并行计算方面, 展示了显著的并行效率.

参考文献

- 1 Carlson B G. Solution of the transport equation by s_n approximations. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-1599, 1953
- 2 Lathrop K D, Carlson B G. Discrete ordinates angular quadrature of the neutron transport equation. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-3186, 1965
- 3 Walters W F. Use of the chebychev-legendre quadrature set in discrete-ordinates codes. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-11342-C, 1988
- 4 Morel J E. A hybrid collocation-galerkin- s_n method for solving the boltzmann transport equation. Nucl Sci Eng, 1989, 101: 72–87
- 5 Walters W F, Morel J E. Investigation of linear-discontinuous angular differencing for the 1-D spherical geometry S_n equations. In: Proceedings of the International Topical Meeting on Advances in Mathematics, Computation, and Reactor Physics, Pittsburgh, 1991
- 6 Dahl J A, Ganapol B D, Morel J E. Positive scattering cross sections using constrained least-squares. In: Proceedings of M&C 99-Madrid: International Conference on Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications, Madrid, 1999
- 7 Lathrop K D. Spatial differencing of the transport equation: positivity vs. accuracy. J Comput Phys, 1969, 4: 475–498
- 8 Reed W H, Hill T R, Brinkley F W, et al. TRIPLET: a two-dimensional multigroup, triangular-mesh, planar geometry, explicit transport code. Los Alamos Scientific Laboratory report LA-5428-MS, 1973
- 9 Alcouffe R E, Larsen E W, Miller W F, et al. Computational efficiency of numerical methods for the multigroup discrete-ordinates neutron transport equations: the slab geometry case. Nucl Sci Eng, 1979, 71: 111–127
- 10 Walters W F, O'Dell R D. Nodal methods for discrete-ordinates transport problems in (x,y) geometry. In: Proceedings of ANS/ENS Joint Topical Meeting on Mathematical Methods in Nuclear Engineering, Munich, 1981. 115
- 11 Walters W F, Wareing T A. A non-linear positive method for solving the transport equation on coarse meshes. In: Proceedings of the 8th International Conference on Radiation Shielding, Arlington, 1994. 173

- 12 Wareing T A, Walters W F. Exponential-discontinuous scheme for X-Y geometry transport problems. *Trans American Nucl Soc*, 1995, 72
- 13 Wareing T A, McGhee J M, Morel J E, et al. Discontinuous finite-element methods sn methods on 3-d unstructured grids. In: *Proceedings of M&C'99-Madrid: International Conference on Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*, Madrid, 1999
- 14 Voronkov A V, Sychugova E P. CDSN —method for solving the transport equation. *Trans Theory Stat Phys*, 1993, 22: 221–245
- 15 Castrianni C L, Adams M L. A nonlinear corner-balance spatial discretization for transport on arbitrary grids. *Nucl Sci Eng*, 1998, 128: 278–296
- 16 Thompson K T, Adams M L. A spatial discretization for solving the transport equation on unstructured grids of polyhedra. In: *Proceedings of M&C 99-Madrid: International Conference on Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*, Madrid, 1999
- 17 Du S H. *Computer Simulation of Transport Problems*. Changsha: Hunan Science Technology Press, 1989 [杜书华. 输运问题的计算机模拟. 长沙: 湖南科学技术出版社, 1989]
- 18 Du M S, Feng T k, Fu L X, et al. The triangle discontinuous finite element methods of two dimension transport problems. *Chinese J Comput Phys*, 1984, 1: 84–99 [杜明笙, 冯铁凯, 傅连祥, 等. 解二维输运问题的三角网间断有限元方法. 计算物理, 1984, 1: 84–99]
- 19 Guo B L, Shen L J. Galerkin finite element methods for nonlinear neutron transport equation. *Commu Appl Math Comput*, 1989, 3: 8–20 [郭柏灵, 沈隆钧. 非线性中子输运方程的 Galerkin 有限元解. 应用数学与计算数学学报, 1989, 3: 8–20]
- 20 Yuan G W. Convergence of PN Approximation for the neutron transport equation with reflective boundary condition. *J Math Phys*, 2000, 41: 867–873
- 21 Shen Z J. Study on the numerical solution of the neutron transport equation and the lattice Boltzmann methods for Burgers equation. Dissertation for Ph.D. Degree. Mianyang: Chinese Engineering Physics, 2000 [沈智军. 中子输运方程数值解与 Burges 方程格子 Boltzmann 方法研究. 博士学位论文. 绵阳: 中国工程物理研究院, 2000]
- 22 Morel J E, McGhee J M, Larsen E W. A three-dimensional time-dependent unstructured tetrahedral-mesh spn method. *Nucl Sci Eng*, 1996, 123: 319–327
- 23 Shin U, Miller W F. The time-dependent simplified P2 equations: asymptotic analyses and numerical experiments. *Nucl Sci Eng*, 1998, 128: 27–46
- 24 Fu L X. The discontinuous finite element methods of two dimension non-stationary transport equations. In: *Proceedings of the 7th Conference on Numerical Calculations of Reactors and Particle Transport*, Kunming, 1998. 33–42 [傅连祥. 二维非定态中子输运方程的间断有限元法. 见: 第七届反应堆数值计算与粒子输运学术交流会论文集, 昆明, 1998. 33–42]
- 25 Morel J E, McGhee J M, Olvey L A, et al. Even-parity Sn equations on the connection machine. In: *Proceedings of the International Topical Meeting on Advances in Mathematics, Computation, and Reactor Physics*, Pittsburgh, 1991
- 26 Baker R S, Koch K R. An Sn algorithm for the massively parallel cm-200 computer. *Nucl Sci Eng*, 1998, 128: 312–320
- 27 Hang X D, Hong Z Y, Li S G, et al. Deterministic numerical methods for partical transport equations. *Chinese J Comput Phys*, 2014, 31: 127–154 [杭旭登, 洪振英, 李双贵, 等. 粒子输运方程的确定论计算方法. 计算物理, 2014, 31: 127–154]
- 28 Hong Z Y, Yuan G W. Linear Discontinuous finite element method for particle transport equation. *Chinese J Comput Phys*, 2009, 26: 325–334 [洪振英, 袁光伟. 粒子输运方程的线性间断有限元方法. 计算物理, 2009, 26: 325–334]
- 29 Hong Z Y, Yuan G W, Fu X D. Time discrete scheme matched adaptive time step for particle transport equations. *Prog Nucl Energy*, 2012, 59: 6–12
- 30 Hong Z Y, Yuan G W, Fu X D, et al. Modified time discrete scheme for time-dependent neutron transport equation. *Nucl Power Eng*, 2010, 31: 34–37 [洪振英, 袁光伟, 傅学东, 等. 动态中子输运方程的修正时间离散格式. 核动力工程, 2010, 31: 34–37]
- 31 Hong Z Y, Yuan G W. A parallel algorithm with interface prediction and correction for spherical geometric transport equation. *Prog Nucl Energy*, 2009, 51: 268–273
- 32 OECD/NEA. The international criticality safety benchmark evaluation project (ICSBEP). <http://icsbep.inel.gov/>

SN algorithms for neutron transport and their applications

Shulin YANG*, Junxia WEI, Zhenying HONG & Huipo LIU

Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China

*E-mail: yang_shulin@iapcm.ac.cn

Abstract In this paper, the background and development of the S_N method for neutron transport are concisely reviewed. Combined with practical applications, the main introduction concerns algorithms for the S_N neutron transport equations. These algorithms include computation methods for the transport equation under 1-D sphere geometry, the difference method and discontinuous finite element method for the transport equation under 2-D cylindrical geometry, and multi-level parallel algorithms for the 2-D transport equation. Finally, some examples of computations in typical applications are presented.

Keywords neutron transport equation, S_N method, difference method, discontinuous finite element method, parallel algorithm

Shulin YANG was born in 1963. He received the Ph.D. degree in computational mathematics from the Institute of Applied Physics and Computational Mathematics (IAPCM), Beijing, in 2004. Currently, he is a professor at IAPCM. His research interests include numerical methods for fluid dynamics and neutron transport.

Junxia WEI was born in 1975. She is a professor at the Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing. She received her Master's degree in Applied Mathematics from Xi'an Jiaotong University in 2002, Xi'an. Her research interests include numerical methods and efficient algorithms for the neutron transport equation.

Zhenying HONG was born in 1976. She received her Ph.D. degree in China Academy of Engineering Physics. She is a professor at the Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing. Her research interests include calculation methods for particle transport problems and numerical simulations of multi physical coupling process.

Huipo LIU was born in 1976. He received his Ph.D. degree in computational mathematics from the Academy of Mathematics and Systems Science, CAS. He is an associate professor at the Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing. His research interests include finite element methods and neutron transport equations.