

文件编号：	NECP2022-HTR-05
页 数：	共 73 页
版 本：	B
保管期限：	长期

[非密]

高温气冷堆堆芯物理热工计算方法研究项目 技术方案

编写：____ 吴宇轩 ____

校对：____ 张运升 ____

审核：____ 王永平 ____

批准：____ 曹良志 ____

西安交通大学
核工程计算物理实验室
2022 年 10 月

文件修改记录

版本	日期	章节号	页码	修改内容		
A	2022.10.22	1 <				

目 录

1	总体技术路线.....	5
2	物理计算.....	12
2.1	均匀化群常数计算.....	12
2.1.1	燃料球均匀化群常数计算.....	13
2.1.2	石墨球均匀化群常数计算.....	14
2.1.3	反射层均匀化群常数计算.....	14
2.1.4	混合球床区域均匀化群常数计算.....	16
2.2	三维堆芯计算.....	19
2.2.1	计算方程.....	20
2.2.2	横向积分技术.....	21
2.2.3	节块展开和响应方程.....	22
2.2.4	节块中子平衡方程.....	30
2.2.5	迭代求解流程.....	30
2.3	中子泄漏修正.....	32
2.3.1	群常数中子泄漏修正.....	32
2.3.2	中子流效应计算.....	34
2.4	燃耗计算.....	37
2.5	反应性参数计算.....	40
2.6	探测器响应计算.....	42
2.7	瞬态动力学计算.....	43
2.7.1	中子动力学方程.....	43
2.7.2	中子通量密度方程.....	44
2.7.3	准静态近似.....	46
2.7.4	幅度函数求解.....	48
2.7.5	时间步进流程.....	50
2.8	燃料管理.....	51
2.8.1	堆外燃料循环.....	51
2.8.2	堆内燃料流动.....	52
3	热工计算.....	55

3.1 流体换热计算 55

3.1.1 动量守恒方程 55

3.1.2 能量守恒方程 57

3.1.3 质量守恒方程 58

3.1.4 热物性方程 59

3.1.5 流体换热计算流程 59

3.2 燃料球传热计算 60

3.2.1 导热方程 60

3.2.2 边界条件 60

3.2.3 燃料球导热方程的求解 61

3.2.4 燃料球中心和表面温度 64

3.2.5 不同批次燃料球的热源密度 68

3.2.6 燃料球有效边界条件 69

3.2.7 燃料球流出的净热量 72

图 目 录

图 1	球床式高温气冷堆堆芯物理热工计算软件开发总体流程	6
图 2	球床式高温气冷堆物理热工计算总体技术路线	8
图 3	球床式高温气冷堆堆芯物理计算流程图	11
图 4	球床式高温气冷堆堆芯物理热工计算软件开发结构示意图	12
图 5	组件均匀化群常数计算流程	13
图 6	燃料球均匀化群常数计算模型	13
图 7	石墨球均匀化群常数计算模型	14
图 8	反射层均匀化群常数计算模型	15
图 9	含控制棒通道（无控制棒）反射层划分示意图	16
图 10	混合球床模型	16
图 11	混合球床区域均匀化群常数计算流程	19
图 12	矩形节块模拟圆柱几何边界示意图	20
图 13	圆柱几何节块示意图	21
图 14	基于三维圆柱几何节块方法的三维堆芯计算流程	31
图 15	中子泄漏修正模型	32
图 16	含孔道反射层简化模型	35
图 17	基于穿透概率守恒假设的含孔道反射层均匀化过程	36
图 18	预估-校正法的燃耗计算流程	38
图 19	简单的核素转化关系	38
图 20	通过线性化产生的线性链	39
图 21	预估校正准静态方法的时间步示意图	50
图 22	堆外燃料循环示意图	52
图 23	球床模型网格划分示意图	53
图 24	球床区域内燃料球流动路线	54
图 25	球床流动模拟计算示意图	54
图 26	一维燃料球壳示意图	61
图 27	燃料球中心温度外推示意图	66

1 总体技术路线

本项目中高温气冷堆物理热工软件开发拟采取的总体路线如图 1 所示, 主要分为以下几个方面:

(1) 需求分析

根据技术规格书、项目合同、双方沟通以及实际工程计算要求, 详细分析球床式高温气冷堆堆芯物理热工计算需求, 明确软件的功能、性能、软硬件兼容性需求, 编制详细需求分析报告, 作为软件开发的重要依据文件之一。

(2) 实施方案

依据需求分析报告, 进行软件整体框架设计, 建立各功能模块的数学计算模型, 确定详细技术路线, 同时制定和编写技术方案、工作大纲、质保大纲、质量计划、进度计划等文件。

(3) 软件开发

制定各软件模块详细的开发计划, 进行软件编码, 主要包括截面数据库开发、物理计算软件开发、热工水力计算软件开发。

(4) 功能模块测试验证

对各功能模块进行单元测试, 包括功能测试(测试软件是否具备堆芯临界-燃耗、关键安全参数、燃料管理计算, 不停堆换料模拟等功能)、性能测试(测试各功能模块的计算精度和效率是否满足项目需求)、兼容性测试(测试软硬件的适配性), 并根据测试结果对相关功能模块进行修改或完善。同时, 解读并掌握现有 VSOP 程序的使用方法, 利用 VSOP 程序进行计算分析, 其结果可作为本项目开发软件的对比结果之一。

(5) 热工物理耦合系统集成

设计、开发模块接口程序, 形成物理热工耦合系统, 实现物理、热工耦合计算, 具备正常工况和事故工况的计算能力; 同时, 开发便捷的输入输出功能, 内置缺省参数, 根据用户需求提供相应功能, 以方便用户使用该软件。

(6) 软件系统测试验证

测试验证包括内部测试验证和第三方测试验证, 主要包括两部分内容: 1. 对软件编码进行测试, 保证编码的规范性和代码的鲁棒性, 同时对功能、精度、性能、兼容性测试(软硬件的适配性)进行测试; 2. 通过国际基准题库以及 HTR-

10、HTR-PM 运行数据等对软件进行系统验证，进一步对软件计算精度、效率、兼容性进行评估。

（7）软件完善优化

将软件测试和验证情况反馈程序开发过程，进行迭代与改进，最终形成精度、效率、可用性满足需求的球床式高温气冷堆堆芯物理热工计算软件。

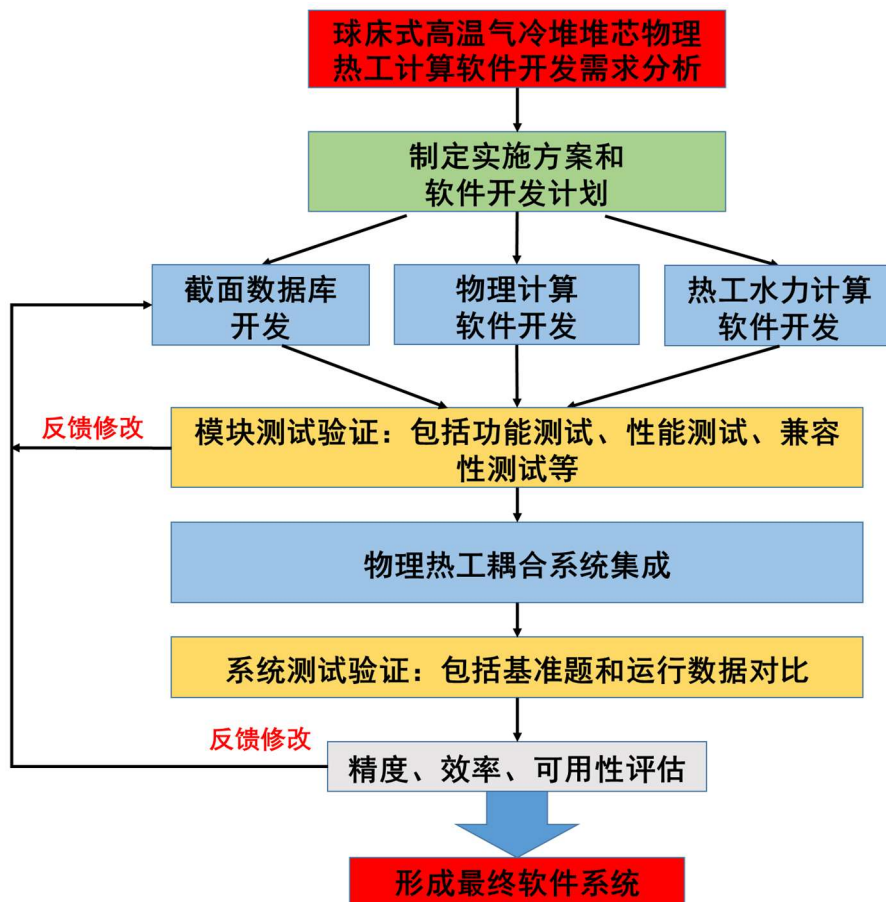


图1 球床式高温气冷堆堆芯物理热工计算软件开发总体流程

由上述描述可知，本项目主要的技术重点和难点在于球床式高温气冷堆堆芯物理热工计算软件的开发。为此，拟采取的技术路线如图2所示，总体计算流程为：

（1）基于评价核数据库（如 ENDF/B-VII），利用西安交通大学自主化核数据加工软件 NECP-Atlas 计算产生 ACE 格式连续能量核数据库。

（2）进行组件计算产生堆内所有材料的群常数，包括燃料球、石墨球、反射层、控制棒、吸收球等。由于组件计算采用的是无限（全反射边界）模型，未考虑各材料之间的中子泄漏，而且由于高温气冷堆瘦长的几何结构特点，中子泄漏对堆芯能谱影响显著，因此拟采取中子泄漏修正模型对均匀化群常数进行修正。

为此,在组件计算时拟同时产生两套均匀化群常数:细群(361群)均匀化群常数和宽群(6群)均匀化群常数。基于宽群均匀化群常数进行三维全堆扩散计算,获得空间各节块在各个方向上的泄漏率;利用该泄漏率求解各个节块内各批次球的细群中子无限介质慢化方程得到细群泄漏修正通量能谱;基于该细群能谱重新归并更新各批次球宽群均匀化群常数,再重新计算混合球床各节块宽群均匀化群常数;然后再次进行三维全堆扩散计算,重复进行上述过程直至宽群均匀化群常数收敛,获得当前状态下的宽群均匀化群常数并通过三维堆芯计算获得堆芯 k_{eff} 、中子通量分布及功率分布。当堆芯材料组分、温度、燃耗等影响群常数的因素发生变化时,都需要进行上述中子泄漏修正。同时,为了模拟控制棒或吸收球动作等原因引起的堆芯瞬态,堆芯三维计算具备中子时空动力学模拟功能,能够计算获得瞬态过程中的中子通量及功率随时间变化的数据,从而使程序具备一定的堆芯事故分析能力。瞬态动力学计算拟采用预估校正准静态策略进行离散,将瞬态中子通量密度和缓发中子先驱核密度分解为跟时间强相关的幅值函数和跟时间弱相关的形状函数,在大时间步和小时间步上分别计算形状函数和幅值函数,更新中子通量密度和缓发中子先驱核密度,提升瞬态计算效率。

(3) 根据堆芯功率分布,进行热工计算。求解氦气能量、动量及质量守恒方程,获得氦气在堆芯内的速度、温度及压力分布;以氦气的温度分布作为燃料球导热方程的外边界条件,进行固体传热计算获得燃料球及 TRISO 颗粒的温度分布,温度分布可用于更新材料的均匀化群常数;堆芯物理热工迭代计算直至收敛。

(4) 全堆燃耗计算。基于堆芯中子通量分布,求解堆芯活性区的燃耗方程,获得堆芯活性区的燃耗深度以及重要核素核子密度随时间的变化量,燃耗数据可用于更新材料的均匀化群常数。

(5) 燃料管理计算,用于模拟堆芯内球流过程和堆外燃料循环过程。拟通过定义通道、层、区域、批次来模拟燃料在堆内的流动,通过进一步定义堆外不同类型贮存罐(如达到规定燃耗深度的乏燃料贮存罐、未达到规定燃耗深度的燃料贮存罐、破损燃料球贮存罐等)实现对堆外的再循环等倒料动作和过程的模拟。将堆芯活性区的各批次燃料球数量信息反馈到初始计算条件,完成一次燃料循环计算,基于更新后的初始计算条件开始下一次燃料循环计算。

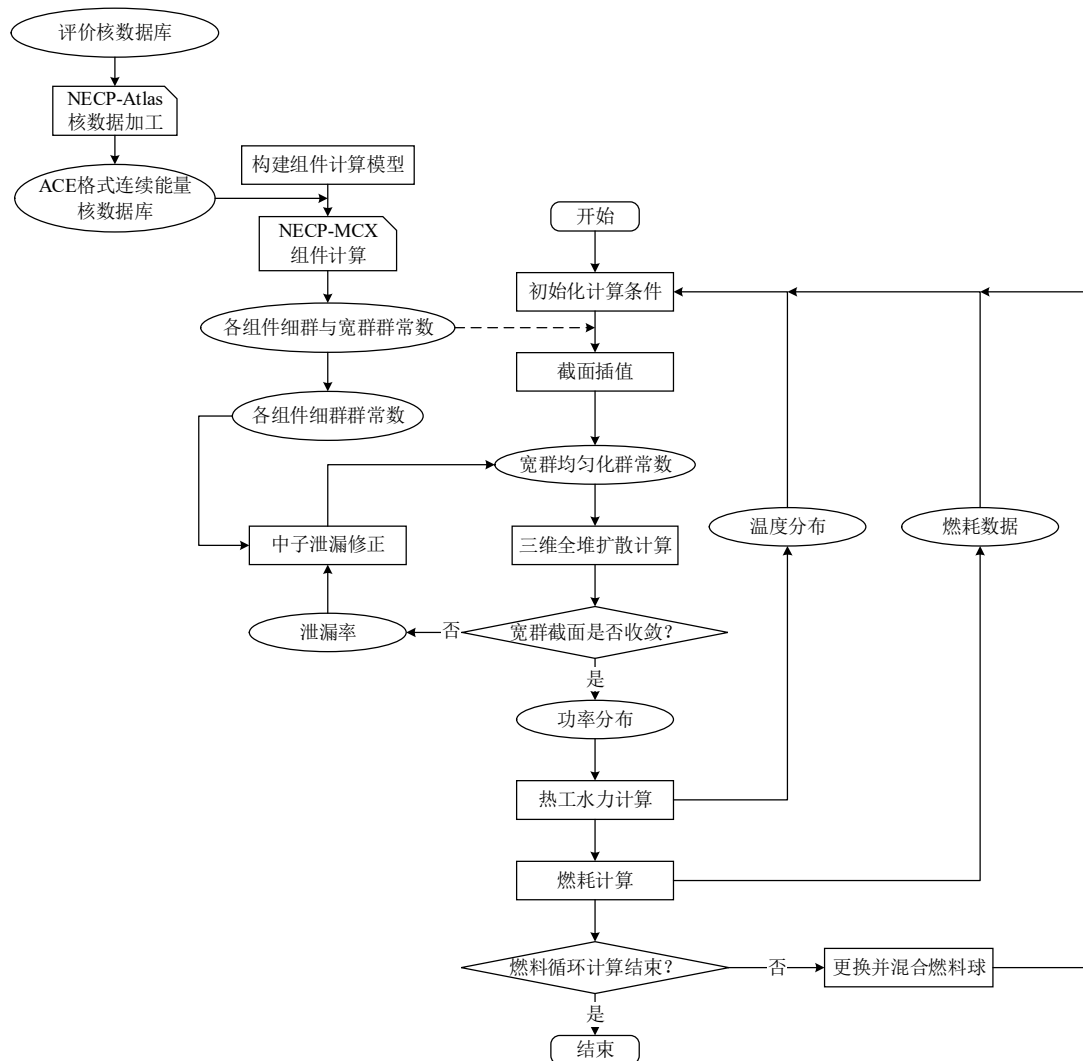
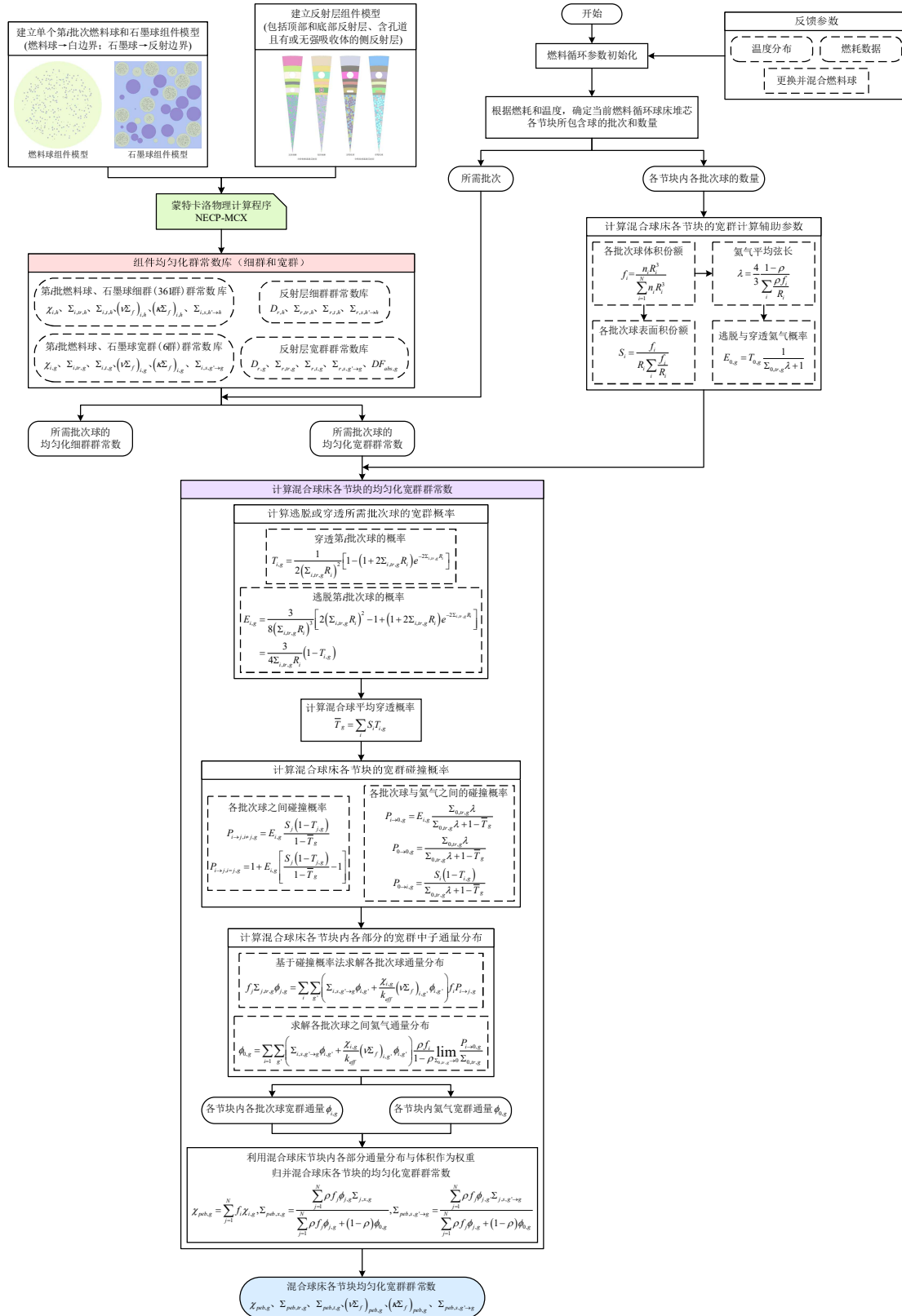


图2 球床式高温气冷堆物理热工计算总体技术路线

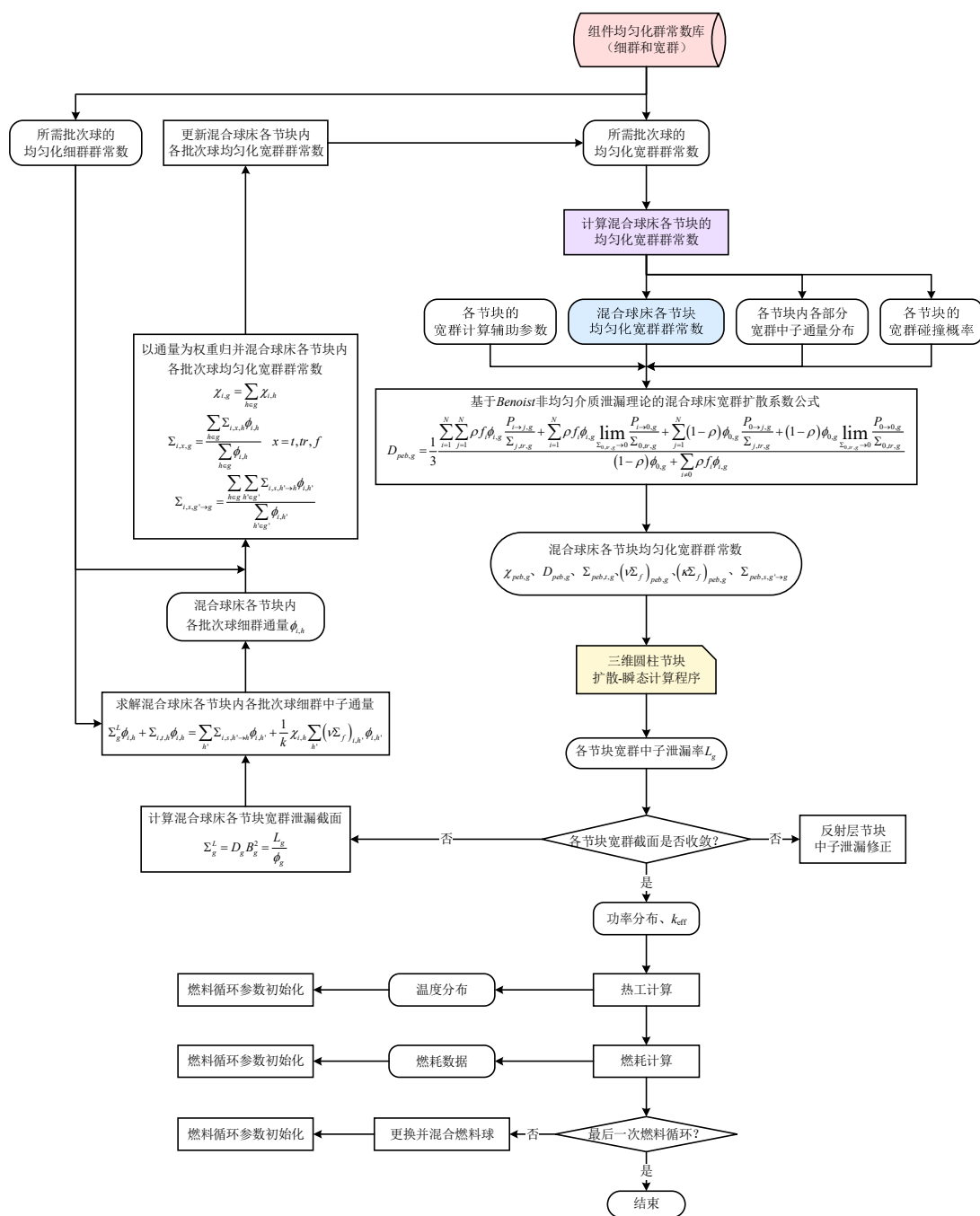
其中，球床式高温气冷堆堆芯物理计算主要分为3个部分，分别是：

- (1) 组件均匀化群常数和混合球床均匀化宽群群常数计算；
- (2) 混合球床中子泄漏修正；
- (3) 反射层中子泄漏修正。

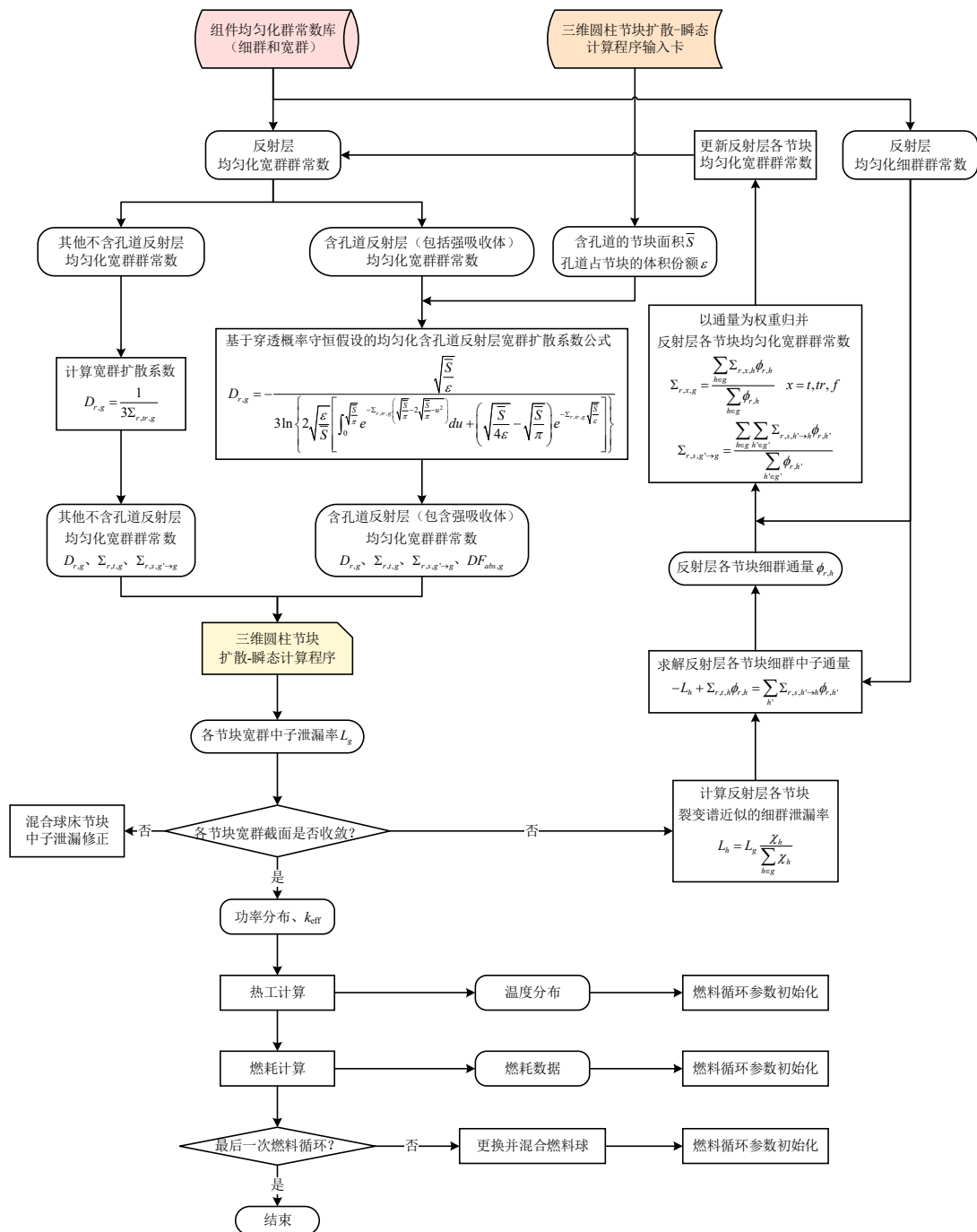
球床式高温气冷堆堆芯物理3个部分的计算流程如图3所示。



(a) 组件均匀化群常数和混合球床均匀化宽群群常数计算



(b) 混合球床中子泄漏修正



(c) 反射层中子泄漏修正

图3 球床式高温气冷堆堆芯物理计算流程图

总体来说,球床式高温气冷堆堆芯物理热工计算方法研究及软件研发主要分为两个模块,即物理计算模块和热工计算模块,如图4所示。其中,物理计算的重点和难点主要包含均匀化群常数计算、三维堆芯计算、中子泄漏修正、燃耗计算、反应性计算、探测器响应计算、动力学计算和燃料管理;热工计算的重点和难点主要包含流体换热计算及燃料球传热计算,以下将对上述重点及难点进行具

体技术方案的阐述。值得一提的是，以下技术方案的选取，均是基于现有软件和方法的基础上进一步考虑了方法的普适性，使得最终研制的软件能对多种球床式高温气冷堆进行计算，如 AVR、THTR-300、HTR-10、HTR-PM，同时对后续可能出现的改进型球型燃料和堆芯具备一定的建模计算能力和可拓展性。

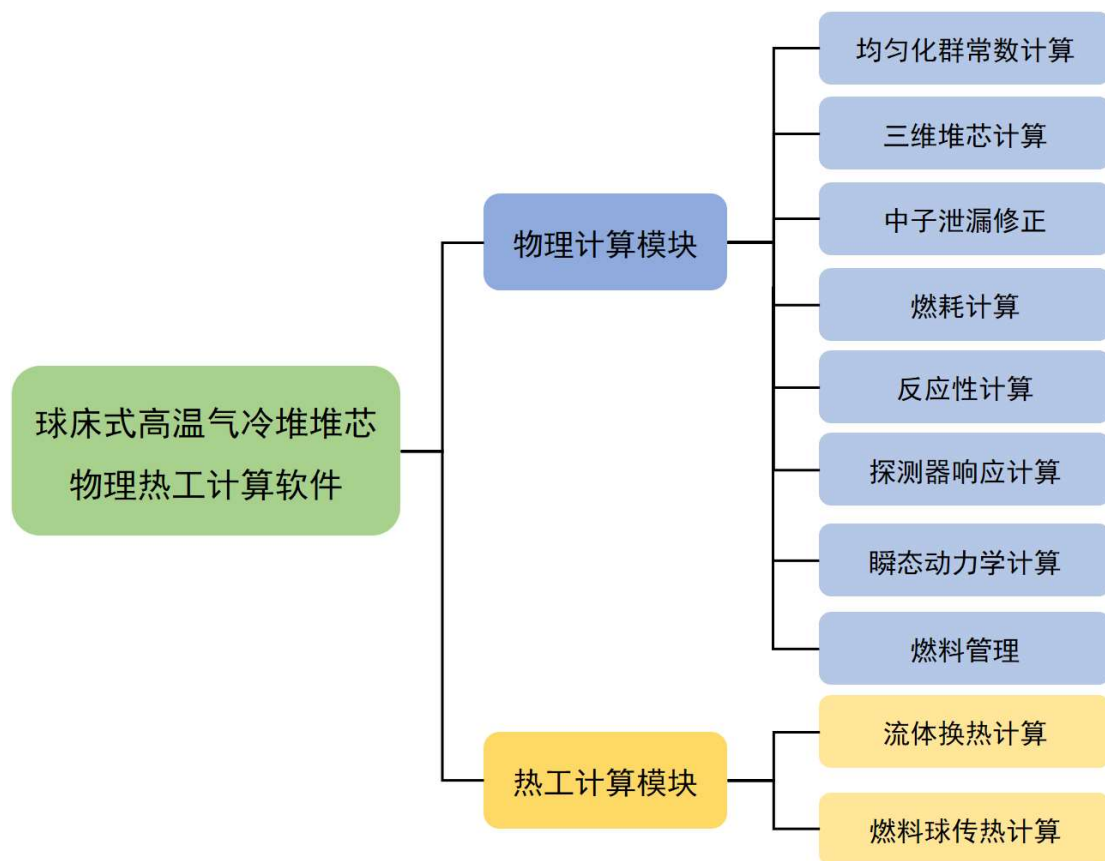


图 4 球床式高温气冷堆堆芯物理热工计算软件开发结构示意图

2 物理计算

2.1 均匀化群常数计算

均匀化群常数是进行堆芯物理计算的关键基础数据。本项目拟采用西安交通大学自主研发的蒙特卡罗程序 NECP-MCX（后简称为 MCX），完成组件均匀化群常数的预制计算，形成群常数库，计算流程如图 5 所示。首先，分别搭建各组件精细计算模型；然后，使用 MCX 分别对各组件模型进行计算；最后，归并获得各组件的细群（361 群）群常数及宽群（6 群）群常数，主要包括各种宏观反应截面、散射矩阵、扩散系数、裂变能谱、裂变能量、不连续因子等。其中，细

群常数制成库，后续根据反应堆的不同运行工况插值获取该工况下的群常数；宽群常数作为三维堆芯计算的初始群常数。

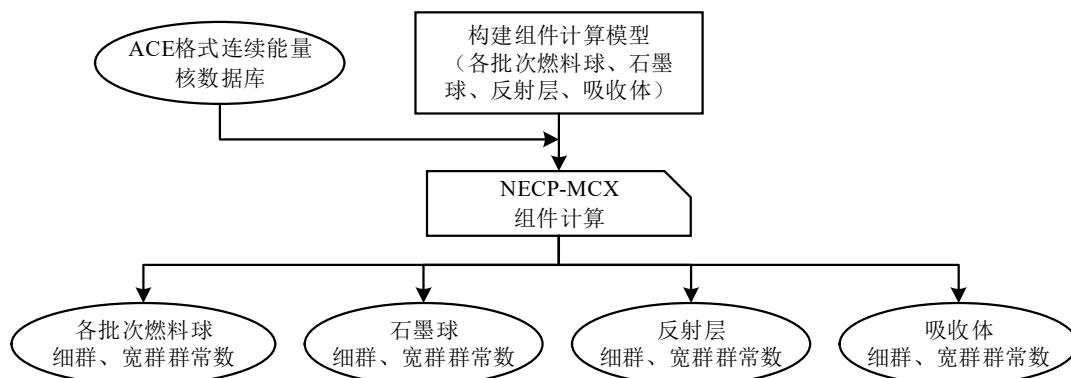


图5 组件均匀化群常数计算流程

2.1.1 燃料球均匀化群常数计算

对于某一批次的燃料球，其均匀化群常数计算模型如图6所示，即一个半径为3cm的燃料球，燃料球边界设置成白边界，利用MCX进行该模型的中子输运计算，统计获得空间均匀化的燃料球均匀化群常数。按照上述方法计算所有批次的燃料球的均匀化群常数。

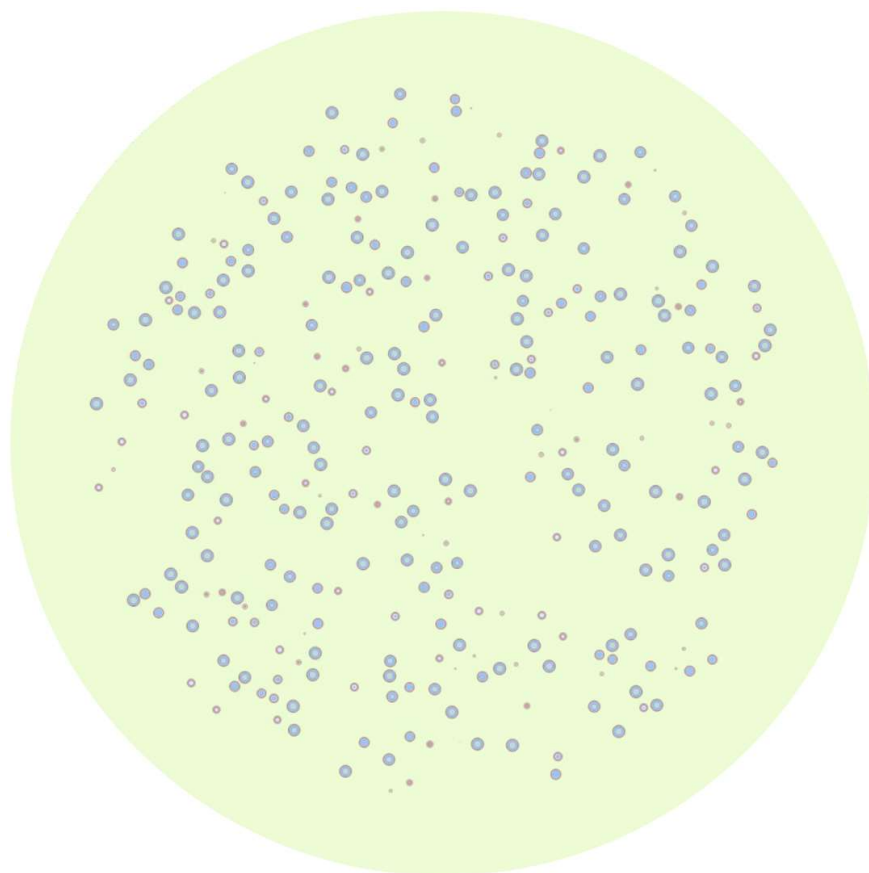


图6 燃料球均匀化群常数计算模型

2.1.2 石墨球均匀化群常数计算

由于石墨球内没有裂变物质,无法直接对石墨球进行组件计算,因此石墨球均匀化群常数需要进行“超组件计算”。石墨球均匀化群常数计算模型如图 7 所示,将燃料球和石墨球按照目标问题的配比随机混合在一个立方体中,球与球之间的介质为氦气,立方体的边界均设置成全反射边界,利用 MCX 计算统计石墨球的均匀化群常数。

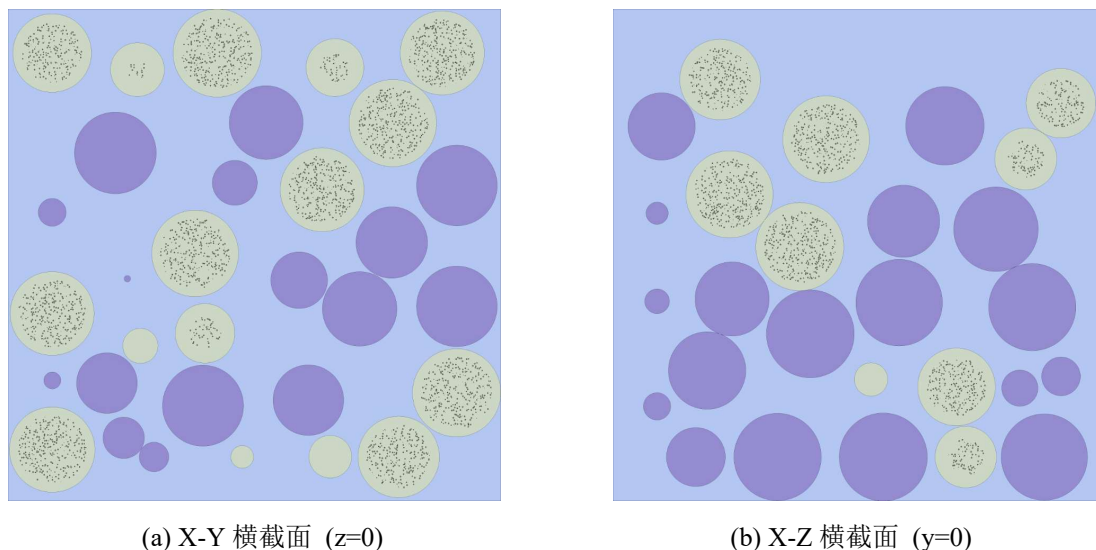


图 7 石墨球均匀化群常数计算模型

2.1.3 反射层均匀化群常数计算

反射层均匀化群常数计算以 HTR-PM 为例,它的反应性控制系统布置在活性区外,在反射层的周向上布置了 24 个控制棒通道和 6 个吸收球通道,两种通道几何形状不一致,因此需要分别计算含控制棒通道反射层和含吸收球通道反射层的均匀化群常数。由于反射层内也没有裂变物质,因此也需要进行“超组件计算”。

反射层均匀化群常数计算模型选取 1/30 扇形圆柱模型,模型包含 1 个强吸收体(控制棒或吸收球)通道和 1 个冷氦气通道。混合球床区域填充燃料球和石墨球,例如按 7: 8 比例填充,1/30 扇形圆柱模型的上下两面和半径边界设置成全反射边界,圆弧边界设置成真空边界。当强吸收体通道不含强吸收体时,通道内部近似视为真空。控制棒模型为真实模型,即内外棒组合。由于吸收球系统启用时,吸收球在吸收球通道内的填充率约为 61%,计算含吸收球反射层时可近似认为吸收球通道填满吸收球材料(75%石墨+25%碳化硼),密度为吸收球材料的

61%。综上所述,反射层均匀化群常数计算模型分为4种,分别是含控制棒通道(有/无控制棒)反射层和含吸收球通道(有/无吸收球)反射层,如图8所示。

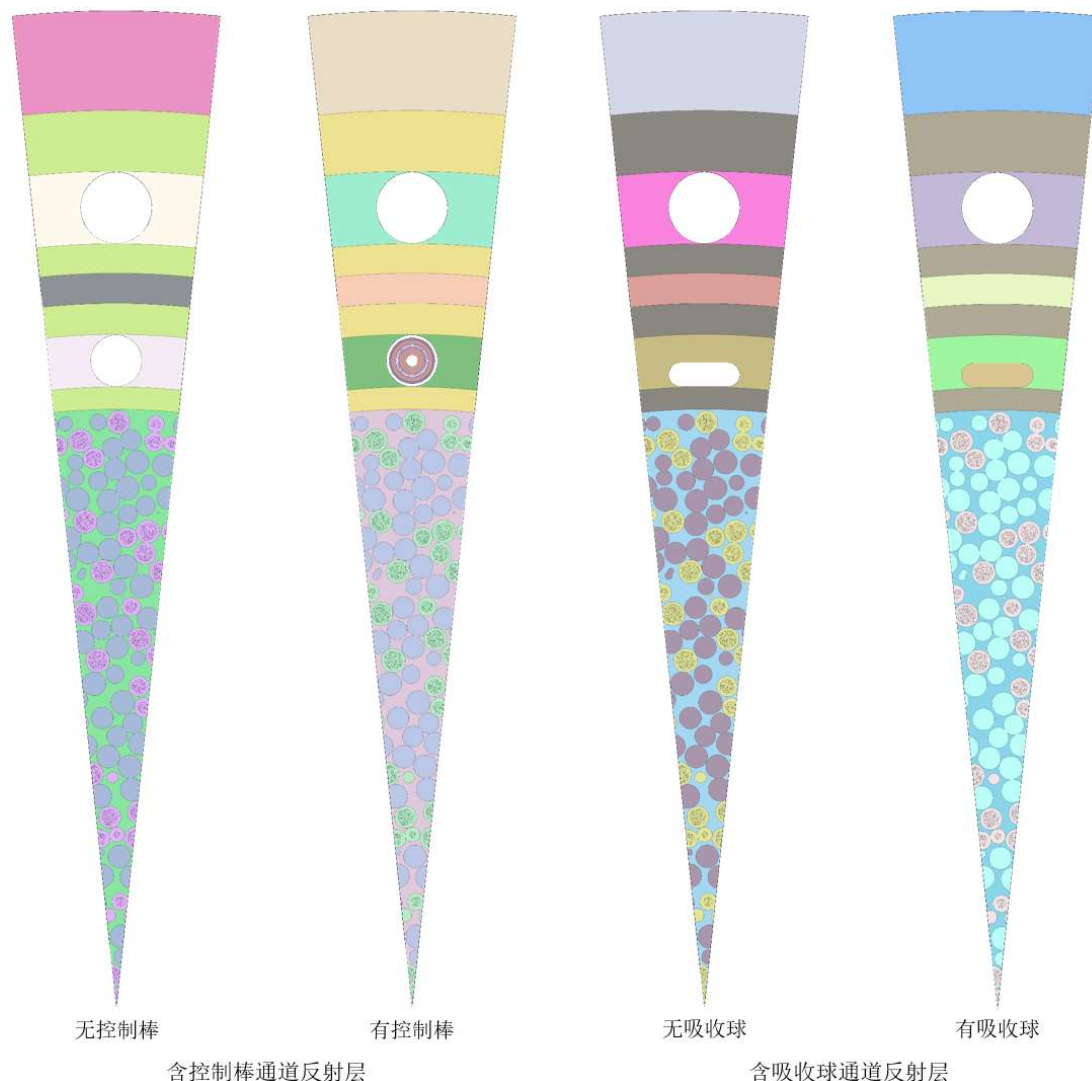


图8 反射层均匀化群常数计算模型

以含控制棒通道反射层为例,反射层可分为8层,如图9所示,包括4层标准反射层、1层带间隙的反射层、1层带控制棒通道(或吸收球通道)的反射层、1层带冷氦气通道的反射层和1层硼化碳砖。MCX在进行组件计算时,将分别统计这8层反射层的均匀化群常数,提供给后续三维堆芯计算使用。

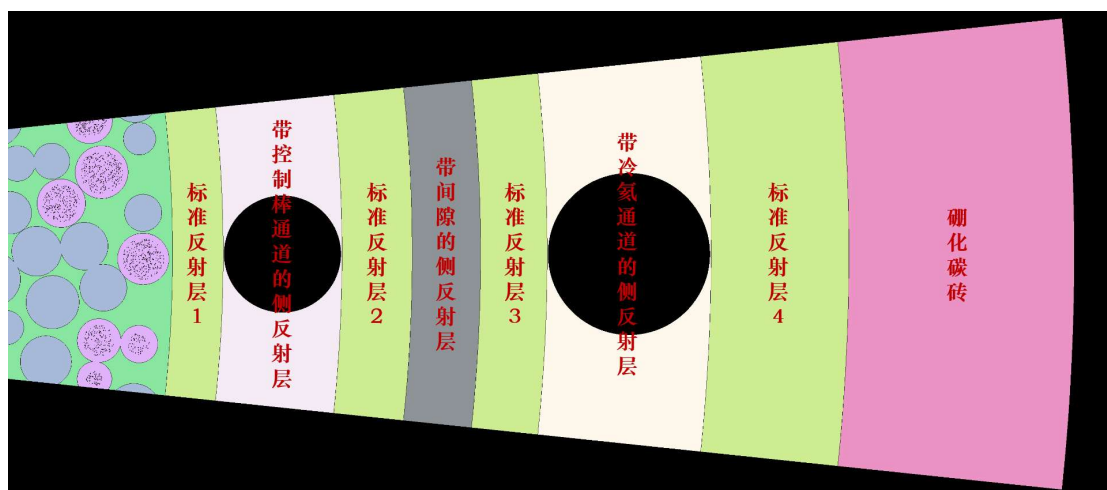


图9 含控制棒通道（无控制棒）反射层划分示意图

2.1.4 混合球床区域均匀化群常数计算

在堆芯计算中，混合球床区域内往往包含多种批次的燃料球及石墨球，如图10所示。

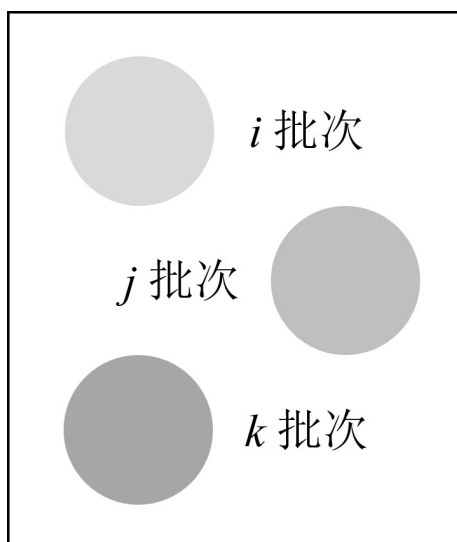


图10 混合球床模型

为获得包含多批次球的球床区域均匀化群常数，计算流程如下所示：

(1) 计算各批次球之间的碰撞概率

定义逃脱概率 E_i ：在第 i 批次球内均匀产生的中子未经碰撞首次逃脱该球的概率，经推导得到

$$E_{i,g} = \frac{3}{8(\Sigma_{i,tr,g} R_i)^3} \left[2(\Sigma_{i,tr,g} R_i)^2 - 1 + (1 + 2\Sigma_{i,tr,g} R_i) e^{-2\Sigma_{i,tr,g} R_i} \right] \quad (2-1)$$

定义穿透概率 T_i ：各向同性进入第 i 批次球的中子未经碰撞穿透该球的概率，经推导得到

$$T_{i,g} = \frac{1}{2(\Sigma_{i,tr,g} R_i)^2} \left[1 - (1 + 2\Sigma_{i,tr,g} R_i) e^{-2\Sigma_{i,tr,g} R_i} \right] \quad (2-2)$$

其中， R_i 为第 i 批次球的半径， $\Sigma_{i,tr,g}$ 为第 i 批次球第 g 群的宏观输运截面。

由球的体积和表面积关系可知，各批次球表面积份额为

$$S_i = \frac{\frac{f_i}{R_i}}{\sum_i \frac{f_i}{R_i}} \quad (2-3)$$

其中， f_i 为第 i 批次球的体积份额。

定义 \bar{T}_g 为混合球的平均穿透概率，即

$$\bar{T}_g = \sum_i S_i T_{i,g} \quad (2-4)$$

考虑以下碰撞过程：从第 i 批次中某个球内产生的源中子逃脱该球，各向同性地进入到下一个球；所进入的球属于第 j 批次的概率为 f_j ，中子在该球发生碰撞的概率为 $1 - T_j$ ；若中子未经碰撞穿透该球，则继续进入到下一个球，重复上述过程。根据碰撞概率的物理意义，得到各批次球之间的碰撞概率：

$$P_{i \rightarrow j, i \neq j, g} = E_{i,g} \frac{S_j (1 - T_{j,g})}{1 - \bar{T}_g} \quad (2-5)$$

$$P_{i \rightarrow j, i = j, g} = 1 + E_{i,g} \left[\frac{S_j (1 - T_{j,g})}{1 - \bar{T}_g} - 1 \right] \quad (2-6)$$

(2) 计算各批次球和空隙之间的碰撞概率

混合球床中球与球之间形成空隙，空隙也应被包含在碰撞概率计算的框架之内，将空隙的批次视为“0”。

空隙平均弦长为

$$\lambda = \frac{4}{3} \frac{1 - \rho}{\sum_i \frac{\rho f_i}{R_i}} \quad (2-7)$$

假设空隙的截面不为零，用“假截面” $\Sigma_{0,tr,g}$ ，可得穿透概率和逃脱概率：

$$T_{0,g} = \frac{1}{\Sigma_{0,tr,g}\lambda + 1} \quad (2-8)$$

$$E_{0,g} = \frac{1}{\Sigma_{0,tr,g}\lambda + 1} \quad (2-9)$$

从而可计算各批次球和空隙之间的碰撞概率：

$$P_{i \rightarrow 0,g} = E_{i,g} \frac{\Sigma_{0,tr,g}\lambda}{\Sigma_{0,tr,g}\lambda + 1 - \overline{T}_g} \quad (2-10)$$

$$P_{0 \rightarrow 0,g} = \frac{\Sigma_{0,tr,g}\lambda}{\Sigma_{0,tr,g}\lambda + 1 - \overline{T}_g} \quad (2-11)$$

$$P_{0 \rightarrow i,g} = \frac{S_i(1 - T_{i,g})}{\Sigma_{0,tr,g}\lambda + 1 - \overline{T}_g} \quad (2-12)$$

(3) 计算各批次球和空隙的细群通量分布

组件计算已经得到各批次燃料球和石墨球的宽群均匀化群常数，结合上述碰撞概率，求解以下宽群球床碰撞概率方程组，得到各批次球的宽群通量分布。

$$f_j \Sigma_{j,tr,g} \phi_{j,g} = \sum_i \sum_{g'} \left(\Sigma_{i,s,g' \rightarrow g} \phi_{i,g'} + \frac{\chi_{i,g}}{k_{eff}} (v \Sigma_f)_{i,g'} \phi_{i,g'} \right) f_i P_{i \rightarrow j,g} \quad (2-13)$$

空隙的通量方程：

$$\phi_{0,g} = \sum_{i=1} \sum_{g'} \left(\Sigma_{i,s,g' \rightarrow g} \phi_{i,g'} + \frac{\chi_{i,g}}{k_{eff}} (v \Sigma_f)_{i,g'} \phi_{i,g'} \right) \frac{\rho f_i}{1 - \rho} \lim_{\Sigma_{0,tr,g} \rightarrow 0} \frac{P_{i \rightarrow 0,g}}{\Sigma_{0,tr,g}} \quad (2-14)$$

方程中的极限可联立式(2-10)进行求解。

(4) 计算混合球床区域宽群均匀化群常数

以各批次球和空隙的细群通量分布与各批次球的体积作为权重，利用下列各式计算得到混合球床区域的宽群均匀化群常数。

$$\chi_g = \sum_{j=1}^N f_j \chi_{j,g} \quad (2-15)$$

$$\tilde{\Sigma}_{x,g} = \frac{\sum_{j=1}^N \rho f_j \phi_{j,g} \Sigma_{j,x,g}}{\sum_{j=1}^N \rho f_j \phi_{j,g} + (1 - \rho) \phi_{0,g}} \quad (2-16)$$

$$\tilde{\Sigma}_{s,g' \rightarrow g} = \frac{\sum_{j=1}^N \rho f_j \phi_{j,g'} \Sigma_{j,s,g' \rightarrow g}}{\sum_{j=1}^N \rho f_j \phi_{j,g'} + (1-\rho) \phi_{0,g'}} \quad (2-17)$$

上述计算流程如图 11 所示,这种方法能够有效考虑混合球床的非均匀效应,提升混合球床区域均匀化群常数的计算精度。

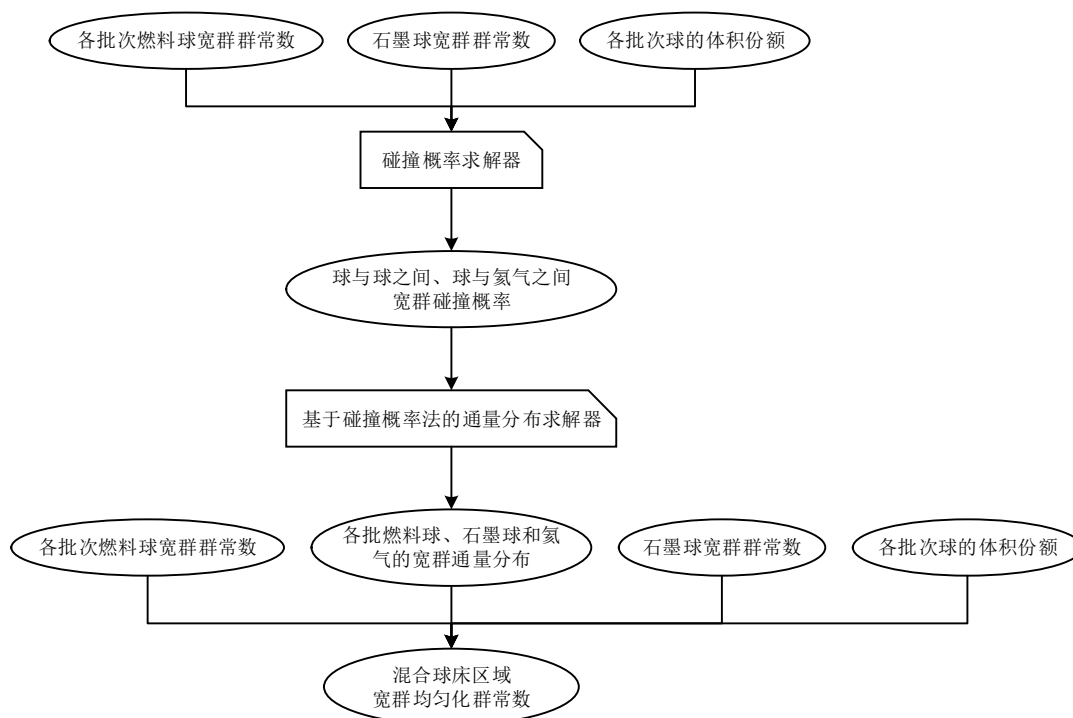


图 11 混合球床区域均匀化群常数计算流程

2.2 三维堆芯计算

三维堆芯计算是获得堆芯中子通量、功率及临界特性的核心步骤。现有计算软件中基于矩形几何网格的扩散计算无法精确模拟高温气冷堆圆柱几何边界,需要几何近似处理,容易引入误差,如图 12 所示。虽然减小矩形网格尺寸能够减少几何近似误差,但网格数量的增加显然需要耗费更多的计算内存和计算时间。因此,本项目拟采用圆柱几何节块展开方法进行三维堆芯中子扩散计算,为堆芯物理计算提供高精度、高效率的核心求解器。

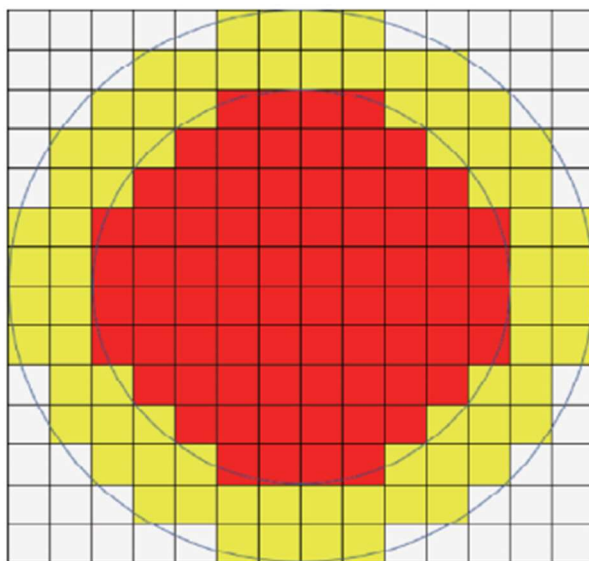


图 12 矩形节块模拟圆柱几何边界示意图

2.2.1 计算方程

为模拟中子在堆芯中的输运过程，考虑工程实用性并结合国内外知名程序的技术方案，本项目拟求解三维空间多群稳态中子扩散方程，如下所示：

$$-D_g(\mathbf{r})\nabla^2\phi_g(\mathbf{r})+\Sigma_{rg}(\mathbf{r})\phi_g(\mathbf{r})=Q_g(\mathbf{r}) \quad (2-18)$$

$$Q_g(\mathbf{r})=\sum_{\substack{h=1 \\ h \neq g}}^G \Sigma_{s,h \rightarrow g}(\mathbf{r})\phi_h(\mathbf{r})+\frac{\chi_g(\mathbf{r})}{k_{eff}}\sum_{h=1}^G \nu\Sigma_{fh}(\mathbf{r})\phi_h(\mathbf{r}) \quad (2-19)$$

其中的符号定义为：

\mathbf{r} —— 空间位置向量

ϕ_g —— 第 g 能群中子通量密度

D_g —— 扩散系数

ν —— 每次裂变产生的平均中子数

Σ_{fh} —— 第 h 群宏观裂变截面

χ_g —— 第 g 能群的裂变能谱

k_{eff} —— 有效增殖系数

$\Sigma_{s,h \rightarrow g}$ —— 第 h 群散射至第 g 群的宏观散射截面

Σ_{rg} —— 第 g 群宏观移出截面，为总截面减去自散射截面：

$$\Sigma_{rg} = \Sigma_{lg} - \Sigma_{s,g \rightarrow g} \quad (2-20)$$

在三维圆柱 (r, θ, z) 几何下, 将圆柱进行节块划分, 如图 13 所示, 节块 k 的中子扩散方程的形式可写为:

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_g^k \frac{\partial \phi_g^k(\mathbf{r})}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(D_g^k \frac{\partial \phi_g^k(\mathbf{r})}{\partial \theta} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(D_g^k \frac{\partial \phi_g^k(\mathbf{r})}{\partial z} \right) + \Sigma_{rg}^k \phi_g^k(\mathbf{r}) = Q_g^k(\mathbf{r}) \quad (2-21)$$

其中, r 为径向半径坐标, θ 为周向角度坐标, z 为轴向高度坐标。节块 k 的坐标取值范围为:

$$r \in [r_k - a_k, r_k + a_k], \theta \in [\theta_k - b_k, \theta_k + b_k], z \in [z_k - c_k, z_k + c_k] \quad (2-22)$$

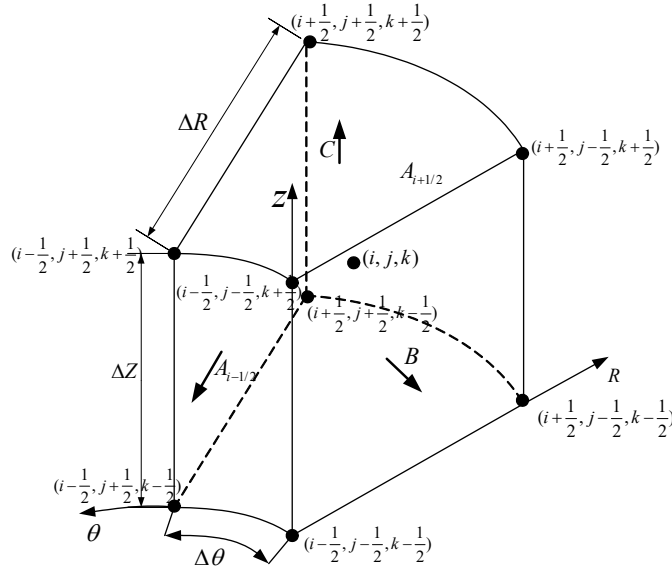


图 13 圆柱几何节块示意图

2.2.2 横向积分技术

在三维圆柱几何下, 对节块 k 的中子扩散方程进行横向积分处理, 得到三个一维方程:

- 1) 对 $d\theta dz$ 平面进行积分, 可得 r 方向一维方程:

$$-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r D_g^k \frac{d\phi_{g,r}^k(r)}{dr} \right) + \Sigma_{rg}^k \phi_{g,r}^k(r) = Q_{g,r}^k(r) - \frac{1}{2r_k b_k} \frac{1}{r_k} (L_{g,\theta,R}^k(r) - L_{g,\theta,L}^k(r)) - \frac{1}{2c_k} (L_{g,z,R}^k(r) - L_{g,z,L}^k(r)) \quad (2-23)$$

- 2) 对 $rdrdz$ 平面进行积分, 可得 θ 方向一维方程:

$$-\frac{1}{r_k} \frac{d}{d\theta} \left(D_g^k \frac{d\phi_{g,\theta}^k(\theta)}{r_k d\theta} \right) + \Sigma_{rg}^k \phi_{g,\theta}^k(\theta) = Q_{g,\theta}^k(\theta) - \left(\frac{r_k + a_k}{2a_k r_k} L_{g,r,R}^k(\theta) - \frac{r_k - a_k}{2a_k r_k} L_{g,r,L}^k(\theta) \right) - \frac{1}{2c_k} (L_{g,z,R}^k(\theta) - L_{g,z,L}^k(\theta)) \quad (2-24)$$

3) 对 $drd\theta$ 平面进行积分, 可得 z 方向一维方程:

$$-\frac{d}{dz} \left(D_g^k \frac{d\phi_{g,z}^k(z)}{dz} \right) + \Sigma_{rg}^k \phi_{g,z}^k(z) = Q_{g,z}^k(z) - \left(\frac{r_k + a_k}{2a_k r_k} L_{g,r,R}^k(z) - \frac{r_k - a_k}{2a_k r_k} L_{g,r,L}^k(z) \right) - \frac{1}{2r_k b_k} \frac{1}{r_k} (L_{g,\theta,R}^k(z) - L_{g,\theta,L}^k(z)) \quad (2-25)$$

可见, 每个方程等号右边存在由其他两个方向产生的泄漏源项, 这些泄漏源项将三个方程耦合在一起。

2.2.3 节块展开和响应方程

轴向 (z 方向) 一维方程和周向 (θ 方向) 一维方程可统一写为如下形式:

$$-\lambda \frac{d}{d\xi} \left(D_g^k \frac{d\phi_{g,\xi}^k(\xi)}{d\xi} \right) + \Sigma_{rg}^k \phi_{g,\xi}^k(\xi) = \tilde{Q}_{g,\xi}^k(\xi) \quad (2-26)$$

若 $\xi = z$, 即表示轴向一维方程时, $\lambda = 1$ 且源项表达式为

$$\tilde{Q}_{g,z}^k(z) = Q_{g,z}^k(z) - \left(\frac{r_k + a_k}{2a_k r_k} L_{g,r,R}^k(z) - \frac{r_k - a_k}{2a_k r_k} L_{g,r,L}^k(z) \right) - \frac{1}{2r_k b_k} \frac{1}{r_k} (L_{g,\theta,R}^k(z) - L_{g,\theta,L}^k(z)) \quad (2-27)$$

若 $\xi = \theta$, 即表示周向一维方程时, $\lambda = \frac{1}{r_k^2}$ 且源项表达式为

$$\tilde{Q}_{g,\theta}^k(\theta) = Q_{g,\theta}^k(\theta) - \left(\frac{r_k + a_k}{2a_k r_k} L_{g,r,R}^k(\theta) - \frac{r_k - a_k}{2a_k r_k} L_{g,r,L}^k(\theta) \right) - \frac{1}{2c_k} (L_{g,z,R}^k(\theta) - L_{g,z,L}^k(\theta)) \quad (2-28)$$

以轴向一维方程为例, 将轴向通量和源项进行二阶展开:

$$\phi_{g,z}^k(z) = \sum_i \phi_{g,zi}^k P_i^k(z), i = 0, 1, 2 \quad (2-29)$$

$$\tilde{Q}_{g,z}^k(z) = \sum_i q_{g,zi}^k P_i^k(z), i = 0, 1, 2 \quad (2-30)$$

其中展开函数为:

$$P_0^k(z) = 1 \quad (2-31)$$

$$P_1^k(z) = \frac{z - z_k}{c_k} \quad (2-32)$$

$$P_2^k(z) = \frac{3}{2} \left(\frac{z - z_k}{c_k} \right)^2 - \frac{1}{2} \quad (2-33)$$

展开函数具有以下性质

$$\frac{1}{2c_k} \int_{z_k - c_k}^{z_k + c_k} P_i^k(z) dz = 0, i \neq 0$$

$$\frac{1}{2c_k} \int_{z_k - c_k}^{z_k + c_k} P_i^k(z) dz = 1, i = 0$$

对一维方程在轴向 $z \in [z_k - c_k, z_k + c_k]$ 内积分，可得节块的平衡方程：

$$R^k (J_{g,z,R}^k - J_{g,z,L}^k) + \Sigma_{rg}^k \bar{\phi}_{g,z}^k = \bar{Q}_{g,z}^k \quad (2-34)$$

其中：

$$R^k = \frac{\lambda}{2c_k} \quad (2-35)$$

$$J_{g,z,R}^k = -D_g^k \left. \frac{d\phi_{g,z}^k(z)}{dz} \right|_{z_k + c_k} \quad (2-36)$$

$$J_{g,z,L}^k = -D_g^k \left. \frac{d\phi_{g,z}^k(z)}{dz} \right|_{z_k - c_k} \quad (2-37)$$

$$\bar{\phi}_{g,z}^k = \frac{1}{2c_k} \int_{z_k - c_k}^{z_k + c_k} \phi_{g,z}^k(z) dz \quad (2-38)$$

$$\bar{Q}_{g,z}^k = \frac{1}{2c_k} \int_{z_k - c_k}^{z_k + c_k} \tilde{Q}_{g,z}^k(z) dz \quad (2-39)$$

由上面定义可知：

平均通量为：

$$\bar{\phi}_{g,z}^k = \phi_{g,z0}^k \quad (2-40)$$

平均源项为：

$$\bar{Q}_{g,z}^k = q_{g,z0}^k \quad (2-41)$$

右边净流为：

$$J_{g,z,R}^k = -\frac{D_g^k}{c_k}(\phi_{g,z1}^k + 3\phi_{g,z2}^k) \quad (2-42)$$

左边净流为：

$$J_{g,z,L}^k = -\frac{D_g^k}{c_k}(\phi_{g,z1}^k - 3\phi_{g,z2}^k) \quad (2-43)$$

右边面通量为：

$$\phi_{g,z,R}^k = \phi_{g,z0}^k + \phi_{g,z1}^k + \phi_{g,z2}^k \quad (2-44)$$

左边面通量为：

$$\phi_{g,z,L}^k = \phi_{g,z0}^k - \phi_{g,z1}^k + \phi_{g,z2}^k \quad (2-45)$$

为提高计算效率，以节块表面偏流为中间变量构建迭代计算格式，利用以下几式：

右边净流为两个偏流之差：

$$J_{g,z,R}^k = J_{g,z,R}^{k,out} - J_{g,z,R}^{k,in} \quad (2-46)$$

左边净流为两个偏流之差：

$$J_{g,z,L}^k = J_{g,z,L}^{k,in} - J_{g,z,L}^{k,out} \quad (2-47)$$

右边净流可由菲克定律求得：

$$J_{g,z,R}^k = -\frac{D_g^k}{c_k}(\phi_{g,z1}^k + 3\phi_{g,z2}^k) \quad (2-48)$$

左边净流可由菲克定律求得：

$$J_{g,z,L}^k = -\frac{D_g^k}{c_k}(\phi_{g,z1}^k - 3\phi_{g,z2}^k) \quad (2-49)$$

右边面通量为两个偏流之和的两倍：

$$\phi_{g,z,R}^k = \phi_{g,z0}^k + \phi_{g,z1}^k + \phi_{g,z2}^k = 2(J_{g,z,R}^{k,out} + J_{g,z,R}^{k,in}) \quad (2-50)$$

左边面通量为两个偏流之和的两倍：

$$\phi_{g,z,L}^k = \phi_{g,z0}^k - \phi_{g,z1}^k + \phi_{g,z2}^k = 2(J_{g,z,L}^{k,out} + J_{g,z,L}^{k,in}) \quad (2-51)$$

最终可得出射偏流与平均通量和入射偏流的关系式：

$$J_{g,z,L}^{k,out} = A_{g,0}^k \bar{\phi}_{g,z}^k + A_{g,1}^k J_{g,z,L}^{k,in} + A_{g,2}^k J_{g,z,R}^{k,in} \quad (2-52)$$

$$J_{g,z,R}^{k,out} = A_{g,0}^k \bar{\phi}_{g,z}^k + B_{g,1}^k J_{g,z,L}^{k,in} + B_{g,2}^k J_{g,z,R}^{k,in} \quad (2-53)$$

$$A_{g,0}^k = \frac{3D_g^k}{6D_g^k + c_k} \quad (2-54)$$

$$A_{g,1}^k = \frac{-12(D_g^k)^2 + c_k^2}{(6D_g^k + c_k)(2D_g^k + c_k)} \quad (2-55)$$

$$A_{g,2}^k = \frac{-4c_k D_g^k}{(6D_g^k + c_k)(2D_g^k + c_k)} \quad (2-56)$$

$$B_{g,1}^k = \frac{-4c_k D_g^k}{(6D_g^k + c_k)(2D_g^k + c_k)} \quad (2-57)$$

$$B_{g,2}^k = \frac{-12(D_g^k)^2 + c_k^2}{(6D_g^k + c_k)(2D_g^k + c_k)} \quad (2-58)$$

将平衡方程中净流用偏流表示：

$$R^k J_{g,z,R}^{k,out} + R^k J_{g,z,L}^{k,out} + \sum_{rg}^k \bar{\phi}_{g,z}^k = \bar{Q}_{g,z}^k + R^k J_{g,z,R}^{k,in} + R^k J_{g,z,L}^{k,in} \quad (2-59)$$

根据偏流更新 1 阶展开矩的关系式：

$$\phi_{g,z,1}^k = J_{g,z,R}^{k,out} + J_{g,z,R}^{k,in} - J_{g,z,L}^{k,out} - J_{g,z,L}^{k,in} \quad (2-60)$$

根据偏流更新 2 阶展开矩的关系式：

$$\phi_{g,z,2}^k = J_{g,z,R}^{k,out} + J_{g,z,R}^{k,in} + J_{g,z,L}^{k,out} + J_{g,z,L}^{k,in} - \phi_{g,z,0}^k \quad (2-61)$$

根据平均通量和横向泄漏计算平均源项的关系式：

$$\bar{Q}_{g,z}^k = \sum_{\substack{h=1 \\ h \neq g}}^G \Sigma_{s,h \rightarrow g}^k \bar{\phi}_{h,z}^k + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,h}^k \bar{\phi}_{h,z}^k - \bar{L}_{g,z}^k \quad (2-62)$$

将平衡方程代入“出射偏流与平均通量和入射偏流的关系式”，可得最终出射偏流与平均通量和入射偏流的关系式：

$$J_{g,z,L}^{k,out} = \tilde{A}_{g,0}^k \bar{Q}_{g,z}^k + \tilde{A}_{g,1}^k J_{g,z,L}^{k,in} + \tilde{A}_{g,2}^k J_{g,z,R}^{k,in} \quad (2-63)$$

$$J_{g,z,R}^{k,out} = \tilde{A}_{g,0}^k \bar{Q}_{g,z}^k + \tilde{B}_{g,1}^k J_{g,z,L}^{k,in} + \tilde{B}_{g,2}^k J_{g,z,R}^{k,in} \quad (2-64)$$

其中的系数为：

$$\tilde{A}_{g,0}^k = \frac{A_{g,0}^k}{2A_{g,0}^k R^k + \Sigma_{rg}^k} \quad (2-65)$$

$$\tilde{A}_{g,1}^k = \frac{A_{g,0}^k R^k (1 + A_{g,1}^k - B_{g,1}^k) + \Sigma_{rg}^k A_{g,1}^k}{2A_{g,0}^k R^k + \Sigma_{rg}^k} \quad (2-66)$$

$$\tilde{A}_{g,2}^k = \frac{A_{g,0}^k R^k (1 + A_{g,2}^k - B_{g,2}^k) + \Sigma_{rg}^k A_{g,2}^k}{2A_{g,0}^k R^k + \Sigma_{rg}^k} \quad (2-67)$$

$$\tilde{B}_{g,1}^k = \frac{A_{g,0}^k R^k (1 - A_{g,1}^k + B_{g,1}^k) + \Sigma_{rg}^k B_{g,1}^k}{2A_{g,0}^k R^k + \Sigma_{rg}^k} \quad (2-68)$$

$$\tilde{B}_{g,2}^k = \frac{A_{g,0}^k R^k (1 - A_{g,2}^k + B_{g,2}^k) + \Sigma_{rg}^k B_{g,2}^k}{2A_{g,0}^k R^k + \Sigma_{rg}^k} \quad (2-69)$$

径向 (r 方向) 一维方程为:

$$-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r D_g^k \frac{d\phi_{g,r}^k(r)}{dr} \right) + \Sigma_{rg}^k \phi_{g,r}^k(r) = \tilde{Q}_{g,r}^k(r) \quad (2-70)$$

其中:

$$\tilde{Q}_{g,r}^k(r) = Q_{g,r}^k(r) - \frac{1}{2r_k b_k} \frac{1}{r_k} (L_{g,\theta,R}^k(r) - L_{g,\theta,L}^k(r)) - \frac{1}{2c_k} (L_{g,z,R}^k(r) - L_{g,z,L}^k(r)) \quad (2-71)$$

将通量和源项进行二阶展开:

$$\phi_{g,r}^k(r) = \sum_i \phi_{g,ri}^k P_i^k(r), i = 0, 1, 2 \quad (2-72)$$

$$\tilde{Q}_{g,r}^k(r) = \sum_i q_{g,ri}^k P_i^k(r), i = 0, 1, 2 \quad (2-73)$$

其中:

$$P_0^k(r) = 1 \quad (2-74)$$

$$P_1^k(r) = 3 \left(\frac{r - r_k}{a_k} \right) - \frac{a_k}{r_k} \quad (2-75)$$

$$P_2^k(r) = 3 \left(\frac{r - r_k}{a_k} \right)^2 - 1 \quad (2-76)$$

展开函数具有以下性质:

$$\frac{1}{2r_k a_k} \int_{r_k - a_k}^{r_k + a_k} P_i^k(r) r dz = 0, i \neq 0$$

$$\frac{1}{2r_k a_k} \int_{r_k - a_k}^{r_k + a_k} P_i^k(r) r dr = 1, i = 0$$

把一维方程对 rdr 在 $r \in [r_k - a_k, r_k + a_k]$ 内积分，可得节块的平衡方程：

$$R^k J_{g,r,R}^k - L^k J_{g,r,L}^k + \Sigma_{rg}^k \bar{\phi}_{g,r}^k = \bar{Q}_{g,r}^k \quad (2-77)$$

其中：

$$J_{g,r,R}^k = -D_g^k \left. \frac{d\phi_{g,r}^k(r)}{dr} \right|_{r_k+a_k} \quad (2-78)$$

$$J_{g,r,L}^k = -D_g^k \left. \frac{d\phi_{g,r}^k(r)}{dr} \right|_{r_k-a_k} \quad (2-79)$$

$$R^k = \frac{r_k + a_k}{2a_k r_k}, L^k = \frac{r_k - a_k}{2a_k r_k} \quad (2-80)$$

$$\bar{\phi}_{g,r}^k = \frac{1}{2r_k a_k} \int_{r_k-a_k}^{r_k+a_k} \phi_{g,r}^k(r) dr \quad (2-81)$$

$$\bar{Q}_{g,r}^k = \frac{1}{2r_k a_k} \int_{r_k-a_k}^{r_k+a_k} \tilde{Q}_{g,r}^k(r) dr \quad (2-82)$$

那么由以上定义可知：

平均通量为：

$$\bar{\phi}_{g,r}^k = \phi_{g,r0}^k \quad (2-83)$$

平均源项为（可由通量展开系数和横向泄漏求得）：

$$\bar{Q}_{g,r}^k = q_{g,r0}^k \quad (2-84)$$

右边净流为：

$$J_{g,r,R}^k = -\frac{D_g^k}{a_k} (3\phi_{g,r1}^k + 6\phi_{g,r2}^k) \quad (2-85)$$

左边净流为：

$$J_{g,r,L}^k = -\frac{D_g^k}{a_k} (3\phi_{g,r1}^k - 6\phi_{g,r2}^k) \quad (2-86)$$

右边面通量为：

$$\phi_{g,r,R}^k = \phi_{g,r0}^k + (3 - \frac{a_k}{r_k}) \phi_{g,r1}^k + 2\phi_{g,r2}^k \quad (2-87)$$

左边面通量为：

$$\phi_{g,r,L}^k = \phi_{g,r0}^k - (3 + \frac{a_k}{r_k})\phi_{g,r1}^k + 2\phi_{g,r2}^k \quad (2-88)$$

为提高计算效率，同样以节块表面偏流为中间变量构建迭代计算格式，利用
 以下几式：

右边净流为两个偏流之差为：

$$J_{g,r,R}^k = J_{g,r,R}^{k,out} - J_{g,r,R}^{k,in} \quad (2-89)$$

左边净流为两个偏流之差为：

$$J_{g,r,L}^k = J_{g,r,L}^{k,in} - J_{g,r,L}^{k,out} \quad (2-90)$$

右边净流可由菲克定律求得：

$$J_{g,r,R}^k = -\frac{D_g^k}{a_k}(3\phi_{g,r1}^k + 6\phi_{g,r2}^k) \quad (2-91)$$

左边净流也可由菲克定律求得：

$$J_{g,r,L}^k = -\frac{D_g^k}{a_k}(3\phi_{g,r1}^k - 6\phi_{g,r2}^k) \quad (2-92)$$

右边面通量为两个偏流之和的两倍：

$$\phi_{g,r,R}^k = \phi_{g,r0}^k + (3 - \frac{a_k}{r_k})\phi_{g,r1}^k + 2\phi_{g,r2}^k = 2(J_{g,r,R}^{k,out} + J_{g,r,R}^{k,in}) \quad (2-93)$$

左边面通量为两个偏流之和的两倍：

$$\phi_{g,r,L}^k = \phi_{g,r0}^k - (3 + \frac{a_k}{r_k})\phi_{g,r1}^k + 2\phi_{g,r2}^k = 2(J_{g,r,L}^{k,out} + J_{g,r,L}^{k,in}) \quad (2-94)$$

可推导出射偏流与平均通量和入射偏流的关系式

$$J_{g,r,L}^{k,out} = A_{g,0}^k \bar{\phi}_{g,r}^k + A_{g,1}^k J_{g,r,L}^{k,in} + A_{g,2}^k J_{g,r,R}^{k,in} \quad (2-95)$$

$$J_{g,r,R}^{k,out} = A_{g,0}^k \bar{\phi}_{g,r}^k + B_{g,1}^k J_{g,r,L}^{k,in} + B_{g,2}^k J_{g,r,R}^{k,in} \quad (2-96)$$

其中的系数为：

$$A_{g,0}^k = \frac{3D_g^k}{6D_g^k + a_k} \quad (2-97)$$

$$A_{g,1}^k = \frac{-12r_k (D_g^k)^2 + 2a_k^2 D_g^k + a_k^2 r_k}{r_k (6D_g^k + a_k)(2D_g^k + a_k)} \quad (2-98)$$

$$A_{g,2}^k = \frac{-4a_k r_k D_g^k - 2a_k^2 D_g^k}{r_k (6D_g^k + a_k)(2D_g^k + a_k)} \quad (2-99)$$

$$B_{g,1}^k = \frac{-4a_k r_k D_g^k + 2a_k^2 D_g^k}{r_k (6D_g^k + a_k)(2D_g^k + a_k)} \quad (2-100)$$

$$B_{g,2}^k = \frac{-12r_k (D_g^k)^2 - 2a_k^2 D_g^k + a_k^2 r_k}{r_k (6D_g^k + a_k)(2D_g^k + a_k)} \quad (2-101)$$

将平衡方程中净流用偏流表示，平衡方程可写为：

$$R^k J_{g,r,R}^{k,out} + L^k J_{g,r,L}^{k,out} + \Sigma_{rg}^k \bar{\phi}_{g,r}^k = \bar{Q}_{g,r}^k + R^k J_{g,r,R}^{k,in} + L^k J_{g,r,L}^{k,in} \quad (2-102)$$

根据偏流更新 1 阶展开矩的关系式：

$$\varphi_{g,r1}^k = \frac{1}{3} (J_{g,r,R}^{k,out} + J_{g,r,R}^{k,in} - J_{g,r,L}^{k,out} - J_{g,r,L}^{k,in}) \quad (2-103)$$

根据偏流更新 2 阶展开矩的关系式：

$$\begin{aligned} \varphi_{g,r2}^k = & -\frac{1}{2} \varphi_{g,r0}^k + \frac{1}{2} (J_{g,r,R}^{k,out} + J_{g,r,R}^{k,in} + J_{g,r,L}^{k,out} + J_{g,r,L}^{k,in}) \\ & + \frac{a_k}{6r_k} (J_{g,r,R}^{k,out} + J_{g,r,R}^{k,in} - J_{g,r,L}^{k,out} - J_{g,r,L}^{k,in}) \end{aligned} \quad (2-104)$$

根据平均通量和横向泄漏计算平均源项的关系式：

$$\bar{Q}_{g,r}^k = \sum_{h=1, h \neq g}^G \Sigma_{s,h \rightarrow g}^k \bar{\phi}_{h,r}^k + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{fh}^k \bar{\phi}_{h,r}^k - \bar{L}_{g,r}^k \quad (2-105)$$

将平衡方程代入“出射偏流与平均通量和入射偏流的关系式”，可得最终的出射偏流与平均通量和入射偏流的关系式：

$$J_{g,r,L}^{k,out} = \tilde{A}_{g,0}^k \bar{Q}_{g,r}^k + \tilde{A}_{g,1}^k J_{g,r,L}^{k,in} + \tilde{A}_{g,2}^k J_{g,r,R}^{k,in} \quad (2-106)$$

$$J_{g,r,R}^{k,out} = \tilde{A}_{g,0}^k \bar{Q}_{g,r}^k + \tilde{B}_{g,1}^k J_{g,r,L}^{k,in} + \tilde{B}_{g,2}^k J_{g,r,R}^{k,in} \quad (2-107)$$

其中的系数为：

$$\tilde{A}_{g,0}^k = \frac{A_{g,0}^k}{A_{g,0}^k (L^k + R^k) + \Sigma_{rg}^k} \quad (2-108)$$

$$\tilde{A}_{g,1}^k = \frac{A_{g,0}^k \left[L^k + (A_{g,1}^k - B_{g,1}^k) R^k \right] + \sum_{rg}^k A_{g,1}^k}{A_{g,0}^k (L^k + R^k) + \sum_{rg}^k} \quad (2-109)$$

$$\tilde{A}_{g,2}^k = \frac{A_{g,0}^k (1 + A_{g,2}^k - B_{g,2}^k) R^k + \sum_{rg}^k A_{g,2}^k}{A_{g,0}^k (L^k + R^k) + \sum_{rg}^k} \quad (2-110)$$

$$\tilde{B}_{g,1}^k = \frac{A_{g,0}^k (1 - A_{g,1}^k + B_{g,1}^k) L^k + \sum_{rg}^k B_{g,1}^k}{A_{g,0}^k (L^k + R^k) + \sum_{rg}^k} \quad (2-111)$$

$$\tilde{B}_{g,2}^k = \frac{A_{g,0}^k \left[R^k + (B_{g,2}^k - A_{g,2}^k) L^k \right] + \sum_{rg}^k B_{g,2}^k}{A_{g,0}^k (L^k + R^k) + \sum_{rg}^k} \quad (2-112)$$

2.2.4 节块中子平衡方程

对节块 k 进行体积积分，可得节块中子平衡方程：

$$(A_R^k J_{g,\theta,R}^k - A_L^k J_{g,\theta,L}^k) + \frac{B^k}{r_k} (J_{g,\theta,R}^k - J_{g,\theta,L}^k) + C^k (J_{g,z,R}^k - J_{g,z,L}^k) + V_k \sum_{rg}^k \bar{\phi}_g^k = V_k \bar{Q}_g^k \quad (2-113)$$

其中， A, B, C 为净流对应面的节块表面面积。利用中子平衡方程可求得节块内中子平均通量密度。

2.2.5 迭代求解流程

方程求解所使用的数值计算方法是传统幂迭代方法，包含裂变源迭代、多群迭代和内迭代，计算流程如图 14 所示。其中裂变源迭代更新计算裂变源和有效增殖因子；多群迭代更新各能群中子通量密度；内迭代进行空间扫描更新计算节块表面出射偏流。

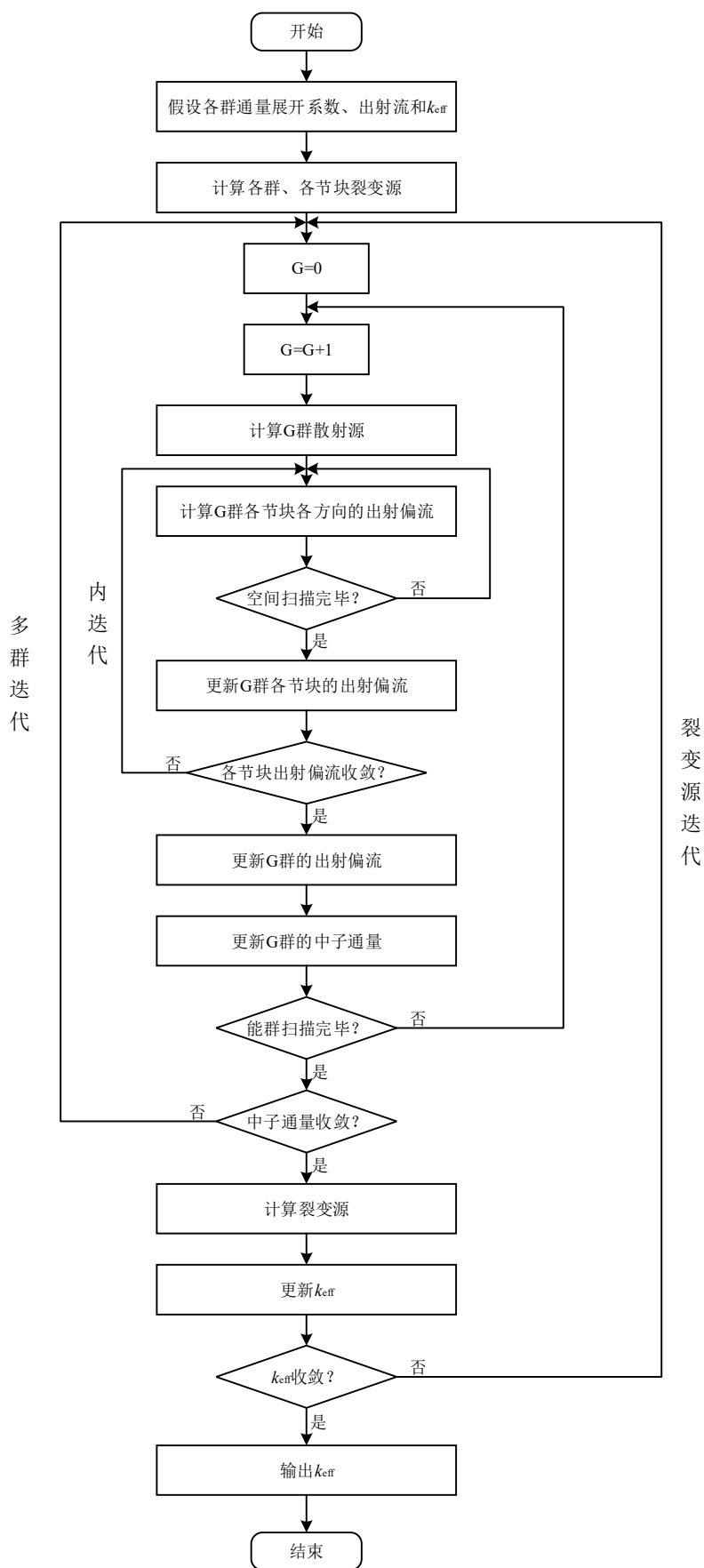


图 14 基于三维圆柱几何节块方法的三维堆芯计算流程

2.3 中子泄漏修正

2.3.1 群常数中子泄漏修正

组件计算采用的是无限(全反射边界)模型,未考虑各材料之间的中子泄漏。然而,高温气冷堆具有瘦长的几何结构特点,活性区径向中子泄漏对堆芯能谱影响显著,因此拟采取中子泄漏修正模型对均匀化群常数进行修正,修正流程如图 15 所示。

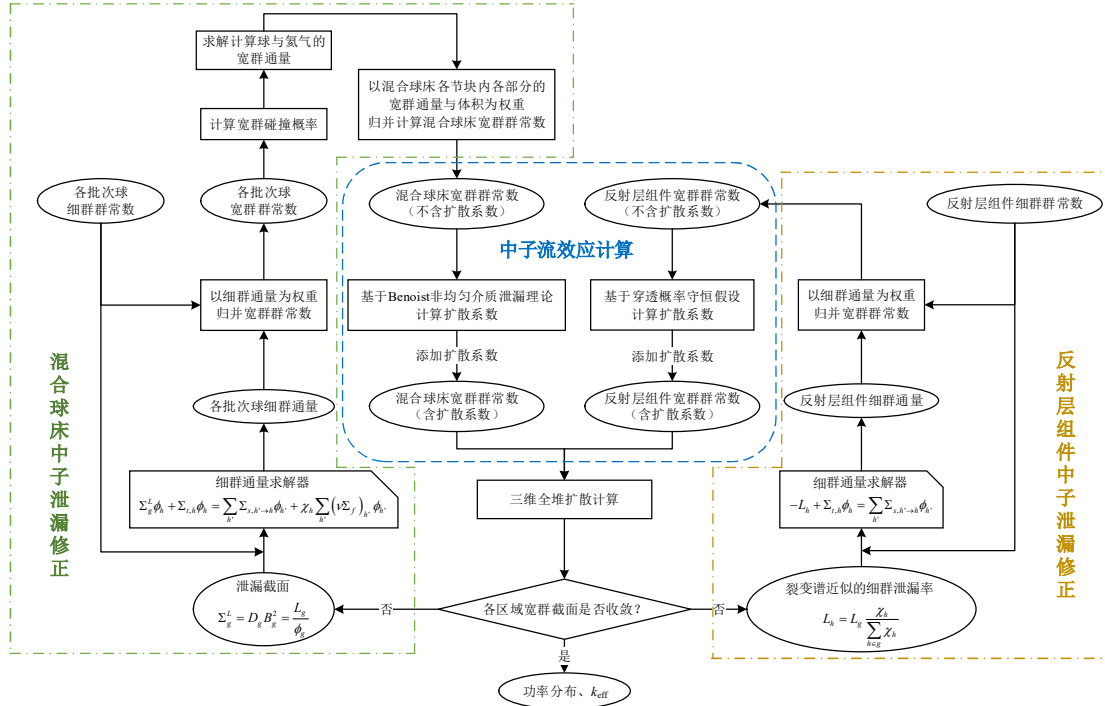


图 15 中子泄漏修正模型

组件计算得到的堆芯各组件宽群群常数和混合球床宽群群常数作为三维全堆扩散计算的初始群常数,扩散计算获得空间各节块的泄漏率。

定义宽群泄漏截面为

$$\Sigma_g^L = D_g B_g^2 = \frac{L_g}{\phi_g} \quad (2-114)$$

假设一个宽群内的所有细群具有相同的宽群泄漏截面,利用宽群泄漏截面和组件计算得到的各批次球细群均匀化群常数,对混合球床每个区域(节块)的每一批次球求解细群中子无限介质慢化方程:

$$\Sigma_g^L \phi_h + \Sigma_{t,h} \phi_h = \sum_{h'} \Sigma_{s,h' \rightarrow h} \phi_{h'} + \chi_h \sum_{h'} (\nu \Sigma_f)_{h'} \phi_{h'} \quad (2-115)$$

得到混合球床每个区域的每一批次球的细群泄漏修正中子通量能谱,并基于该细群能谱和各批次球细群均匀化群常数,重新归并更新各批次球宽群均匀化群常数,计算公式为

$$\chi_g = \sum_{h \in g} \chi_h \quad (2-116)$$

$$\Sigma_{x,g} = \frac{\sum_{h \in g} \Sigma_{x,h} \phi_h}{\sum_{h \in g} \phi_h} \quad (2-117)$$

$$\Sigma_{s,g' \rightarrow g} = \frac{\sum_{h \in g} \sum_{h' \in g'} \Sigma_{s,h' \rightarrow h} \phi_{h'}}{\sum_{h' \in g'} \phi_{h'}} \quad (2-118)$$

其中 x 表示截面类型,包括总、裂变和输运。

对于反射层组件区域,由于无裂变材料,细群中子无限介质慢化方程为

$$-L_h + \Sigma_{t,h} \phi_h = \sum_{h'} \Sigma_{s,h' \rightarrow h} \phi_{h'} \quad (2-119)$$

其中 L_h 为裂变谱近似的细群泄漏率,即

$$L_h = L_g \frac{\chi_h}{\sum_{h \in g} \chi_h} \quad (2-120)$$

同样,求解得到的反射层组件区域的细群泄漏修正通量能谱,结合预先计算的反射层组件细群均匀化群常数,代入式(2-116)和(2-117)归并更新反射层组件宽群均匀化群常数。

上述重新归并计算得到的宽群均匀化群常数不包含扩散系数,需要分别对混合球床区域和含孔道反射层组件区域进行中子流效应计算,得到考虑中子流效应的扩散系数,完成宽群均匀化群常数的一次更新。用更新后的宽群均匀化群常数,再次进行三维全堆计算,重复进行上述过程直至宽群均匀化群常数收敛,即完成中子泄漏修正。

2.3.2 中子流效应计算

中子流效应是指当系统存在强烈空间非均匀性时，中子泄漏也呈现非均匀性。球床式高温气冷堆内存在大量多孔结构，包括堆芯球床中球与球之间的孔隙和反射层孔道，具有中子流效应，导致均匀化计算方法出现较大偏差。扩散系数是中子泄漏强弱的直接反映，因此中子流效应计算的实质就是含孔结构的均匀化扩散系数的计算，可以通过合适的均匀化扩散系数来考虑中子流效应。

对于混合球床区域的均匀化扩散系数，可以基于 Benoist 非均匀介质泄漏理论进行推导计算。该方法从中子输运方程出发，对通量进行通量 **Bn** 基模近似，得到中子通量的实数项-虚数项耦合输运方程组。根据泄漏项与扩散系数、几何曲率之间的关系，通过虚数项与实数项的输运解计算非均匀系统的均匀化扩散系数，该计算过程非常复杂。然而，球床区域的材料分布呈现各向同性，并且在燃料球均匀化过程中已经针对各向异性散射进行了输运修正，也就是在计算时利用“宏观输运截面”代替“宏观总截面”。当具备以上两个条件时，结合碰撞概率法，推导得到适用于混合球床区域的均匀化扩散系数计算公式，即

$$\bar{D}_g = \frac{1}{3} \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \rho f_i \phi_{i,g} \frac{P_{i \rightarrow j,g}}{\Sigma_{j,tr,g}} + \sum_{i=1}^N \rho f_i \phi_{i,g} \lim_{\Sigma_{0,tr,g} \rightarrow 0} \frac{P_{i \rightarrow 0,g}}{\Sigma_{0,tr,g}} + \sum_{j=1}^N (1-\rho) \phi_{0,g} \frac{P_{0 \rightarrow j,g}}{\Sigma_{j,tr,g}} + (1-\rho) \phi_{0,g} \lim_{\Sigma_{0,tr,g} \rightarrow 0} \frac{P_{0 \rightarrow 0,g}}{\Sigma_{0,tr,g}}}{(1-\rho) \phi_{0,g} + \sum_{i \neq 0} \rho f_i \phi_{i,g}} \quad (2-121)$$

其中的符号定义为：

ρ —— 球床某区域内球的填充率

f_i —— 批次 i 的球的体积份额

$\phi_{i,g}$ —— 批次 i 的球的第 g 群的中子通量密度

$P_{i \rightarrow j,g}$ —— 批次 i 的球产生的第 g 群中子在批次 j 的球发生首次碰撞的概率

$\Sigma_{j,tr,g}$ —— 批次 j 的球的第 g 群宏观输运截面

$P_{i \rightarrow 0,g}$ —— 批次 i 的球产生的第 g 群中子在空隙中发生首次碰撞的概率

$\Sigma_{0,tr,g}$ —— 空隙的第 g 群宏观输运截面

$\phi_{0,g}$ —— 空隙的第 g 群的中子通量密度

$P_{0 \rightarrow j, g}$ —— 空隙的第 g 群中子在批次 j 的球中发生首次碰撞的概率

$P_{0 \rightarrow 0, g}$ —— 空隙的第 g 群中子在空隙中发生首次碰撞的概率

高温气冷堆反射层中的孔道的空间分布、几何形状和中子各向异性方面与混合球床中的孔隙有很大的差异，因此基于 Benoist 非均匀介质泄漏理论不适用于含孔道反射层的均匀化扩散系数计算。

含孔道反射层的均匀化扩散系数计算公式需要基于穿透概率守恒假设进行推导，首先定义均匀化扩散系数 \bar{D}_g 和均匀化输运截面 $\bar{\Sigma}_{tr, g}$ 具有以下关系

$$\bar{D}_g = \frac{1}{3\bar{\Sigma}_{tr, g}} \quad (2-122)$$

根据反射层孔道的特点，建立简化模型，模型如图 16 所示。

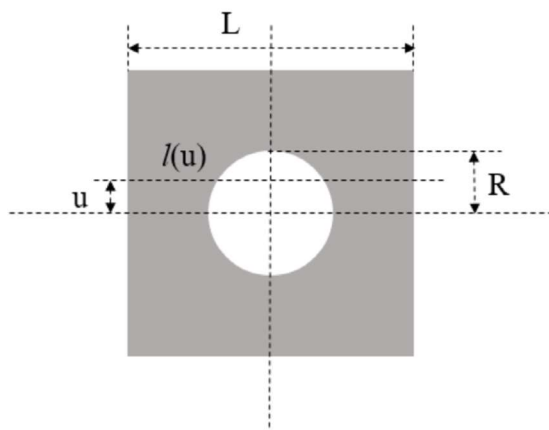


图 16 含孔道反射层简化模型

含孔道反射层简化模型是一个无限长方体等效模型，模型中央是一个无限长的真空圆柱，等效反射层内的孔道，周围为反射层石墨材料。反射层中不同几何形状的孔道都进行几何近似，等效为圆形孔道。孔道的等效半径 R 可用下式计算

$$R = \sqrt{\frac{\bar{S}}{\pi}} \quad (2-123)$$

其中 \bar{S} 是孔道的平均面积，简化模型的尺寸 L 可通过下式确定

$$L = \sqrt{\frac{\pi}{\varepsilon}} R \quad (2-124)$$

其中 ε 为孔道体积份额。

中子流

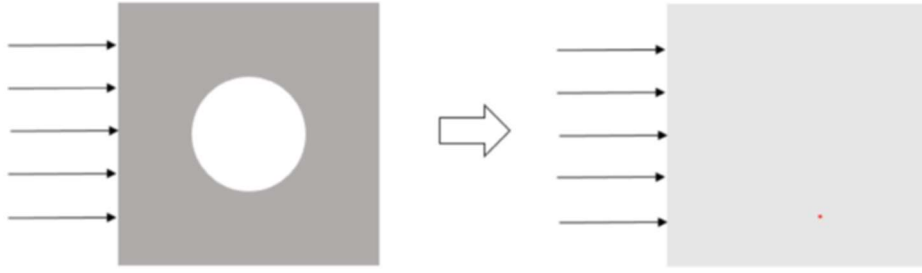


图 17 基于穿透概率守恒假设的含孔道反射层均匀化过程

假设一束中子平行入射到简化模型，如图 17 所示，则中子穿透概率可用以下积分式表示

$$p_g = \frac{2}{L} \int_0^{\frac{L}{2}} e^{-\bar{\Sigma}_{tr,g} l(u)} du \quad (2-125)$$

其中 $l(u)$ 是中子在反射层材料中的径迹长度，定义为

$$l(u) = \begin{cases} L - 2\sqrt{R^2 - u^2} & u > R \\ L & u \leq R \end{cases} \quad (2-126)$$

假设该模型被均匀化介质替代，仍以一束中子平行入射，则穿透概率为

$$p_g = e^{-\bar{\Sigma}_{tr,g} L} \quad (2-127)$$

其中 $\bar{\Sigma}_{tr,g}$ 为第 g 群均匀化宏观输运截面。

假设均匀化前后穿透概率守恒，则均匀化宏观输运截面和穿透概率具有如下关系

$$\bar{\Sigma}_{tr,g} = -\frac{\ln p_g}{L} \quad (2-128)$$

从而可得宏观输运截面表达式

$$\bar{\Sigma}_{tr,g} = -\frac{\ln \left\{ 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{\bar{S}}} \left[\int_0^{\sqrt{\frac{\bar{S}}{\pi}}} e^{-\bar{\Sigma}_{tr,g} \left(\sqrt{\frac{\bar{S}}{\varepsilon}} - 2\sqrt{\frac{\bar{S}}{\pi} - u^2} \right)} du + \left(\sqrt{\frac{\bar{S}}{4\varepsilon}} - \sqrt{\frac{\bar{S}}{\pi}} \right) e^{-\bar{\Sigma}_{tr,g} \sqrt{\frac{\bar{S}}{\varepsilon}}} \right] \right\}}{\sqrt{\frac{\bar{S}}{\varepsilon}}} \quad (2-129)$$

将式(2-129)代入式(2-122)可得含孔道反射层均匀化扩散系数计算公式

$$\bar{D}_g = - \frac{\sqrt{\frac{S}{\varepsilon}}}{3 \ln \left\{ 2 \sqrt{\frac{\varepsilon}{S}} \left[\int_0^{\sqrt{\frac{S}{\pi}}} e^{-\Sigma_{tr,g} \left(\sqrt{\frac{S}{\pi}} - 2 \sqrt{\frac{S}{\pi}} u^2 \right)} du + \left(\sqrt{\frac{S}{4\varepsilon}} - \sqrt{\frac{S}{\pi}} \right) e^{-\Sigma_{tr,g} \sqrt{\frac{S}{\varepsilon}}} \right] \right\}} \quad (2-130)$$

2.4 燃耗计算

基于堆芯功率, 燃耗计算以燃耗区为单位计算核素成分随燃耗的变化, 获得关键锕系核素、重要裂变产物(如氙、钐等)等核素浓度的三维空间分布, 并反馈影响堆芯均匀化群常数。燃耗计算需要划分燃耗步来求解燃耗方程, 在燃耗方程中, 各核素的原子核密度的变化由微观反应率水平直接影响, 同时核素核子密度的变化又会影响中子通量水平, 从而影响微观反应率, 因此在堆芯物理计算中, 需要进行燃耗方程和输运方程的耦合求解。在实际求解燃耗方程时, 往往需要假定在这段时间内微观反应率不发生变化, 这就需要在整个燃耗过程中划分若干燃耗步来提高计算精度。在早期的燃耗计算中, 往往取很小的燃耗步来获得较为精确可靠的结果, 但是需要耗费很大的计算资源, 耗时很长。

球床式高温气冷堆堆芯物理热工计算软件的燃耗计算拟采用成熟的预估-校正方法, 计算流程如图 18 所示。第一步, 即预估步, 根据当前步的原子核密度、中子通量和微观截面, 计算出当前的微观反应率, 然后利用该微观反应率求解燃耗方程得到该燃耗步末的原子核密度, 该原子核密度被称为预估步的原子核密度。第二步, 在新的原子核密度条件下, 通过中子输运计算, 可以得到新的中子通量密度。第三步, 即校正步, 利用上一步得到的新的中子通量密度重新计算得到新的微观反应率, 利用新的微观反应率在当前步再次求解燃耗方程, 计算得到该燃耗步末的原子核密度, 该原子核密度又被称为校正步的原子核密度。第四步, 计算预估步的原子核密度与校正步的原子核密度的算术平均数, 预估-校正法认为燃耗步末真实的原子核密度就是该算术平均数。最后一步, 在燃耗步真实原子核密度的基础上再次进行堆芯输运计算, 得到燃耗步末的真实中子通量, 从而完成一次燃耗步的计算。利用预估-校正法可以在较大的燃耗步下得到较好精度的计算结果, 能够节省大量的计算资源和计算时间。高温气冷堆的燃耗链拟调研参考现有 PANGU 及 VSOP 程序采用的燃耗链, 同时也可通过燃耗链压缩技术(项目组已有成熟技术)定量分析获得一条适合球床式高温气冷堆的燃耗链。

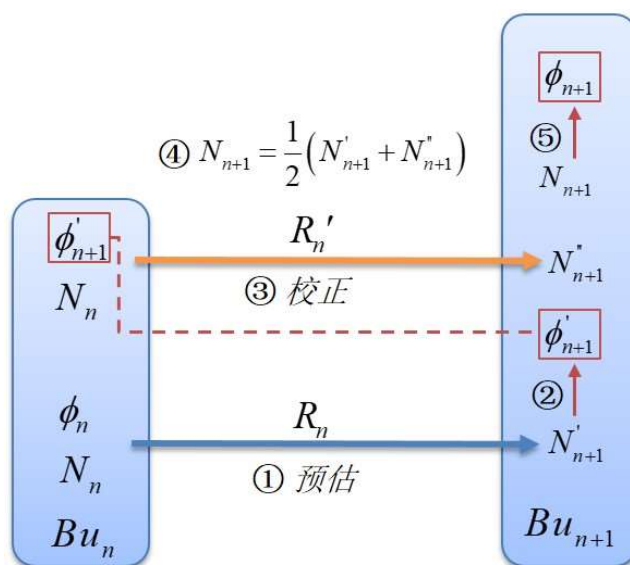


图 18 预估-校正法的燃耗计算流程

对于点燃耗方程的求解，拟采用线性子链法（TTA）。线性子链法整体计算主要分为两部分内容：第一部分需要对复杂的燃耗链进行线性化；第二部分需要分别计算每个线性链对各核素原子核密度的贡献。

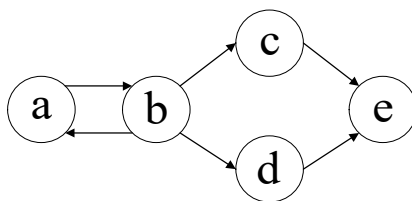


图 19 简单的核素转化关系

对于图 19 所示的核素转化关系，假设初始核素 a 的原子核密度不为零，线性链的搜索过程如下：

- 1) 首先选择初始原子核密度不为零的核素作为根节点；
- 2) 向下开始搜索子核，核素 a 仅存在一个反应通道到达子核 b，子核 b 存在三个反应通道，假设选择反应通道到达核素 c，c 也只有一个反应通道到达子核 e，e 没有反应通道，到此为止，一条线性链 a-b-c-e 就搜索到了；
- 3) 从核素 e 开始沿着刚刚搜索到的线性链向前搜索，搜索前序核素是否存在没有经过的反应通道；对于该燃耗链，搜索到 b 核素，还存在两个反应通道没有经过，选取其中一个反应通道到达了核素 d，同理，搜索到第二条线性链 a-b-d-e；

- 4) 从核素 e 沿 a-b-d-e 向前搜索, 可以搜索到 b 核素还有一条回 a 核素的反应通道, 继续进行, 可以发现后面会重复步骤 2) 到 4) 的过程;
- 5) 出现循环的情况后, 搜索出来的线性链也会越来越长, 从核素 a 能够反应转化到线性链末端的核素 e 的原子核密度也越来越小。引入截断值将重要性低的线性链截断。

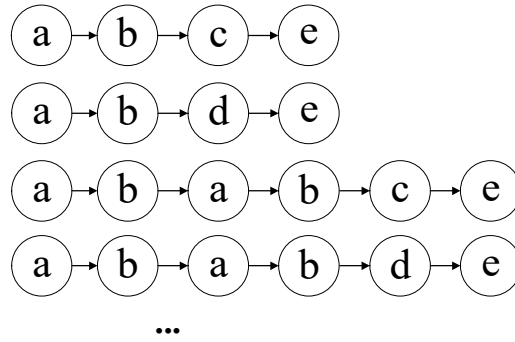


图 20 通过线性化产生的线性链

通过以上的搜索过程, 就可以把燃耗链分解为图 20 所示的一系列线性链。下面就需要计算每个线性链对相关核素的贡献, 然后将计算出所有线性链的贡献进行线性累加就完成点燃耗的求解。对于单个线性链, 燃耗方程可以写成式(2-131)。

$$\begin{aligned} \frac{dN_1}{dt} &= -\lambda_1 N_1 \\ \frac{dN_i}{dt} &= \lambda_{i-1} N_{i-1} - \lambda_i N_i \quad (i = 2, \dots, n) \end{aligned} \quad (2-131)$$

式中, N_1 为根节点核素原子核密度, N_i 为线性链中第 i 个核素的原子核密度; λ_i 为线性链中第 i 个核素的消失系数。

该方程的初始条件设置根节点核素原子核密度不为零, 其余核素初始核子密度为零。对于这样的方程 Bateman 采用了拉普拉斯变换的方法, 解析求出了线性链上每个核素的原子核密度表达式

$$N_m(t) = \frac{N_1(0)}{\lambda_m} \sum_{i=1}^m \lambda_i a_i e^{-\lambda_i t} \quad (2-132)$$

$$\alpha_i = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{\lambda_j}{(\lambda_j - \lambda_i)} \quad (2-133)$$

基于上述方法可计算获得关键铀系核素、重要裂变产物（如氙、钐等）等核素浓度的三维空间分布。值得注意的是，计算 TRISO 燃料颗粒的燃耗时，所采用的功率（或通量）应为堆芯计算网格区域的平均值与 TRISO 颗粒缺陷因子（反映了燃料颗粒中子通量与区域平均中子通量的比例关系）的乘积。

2.5 反应性参数计算

反应性一直是反应堆安全分析的重要指标和事故分析的重要依据，如等温温度系数、燃料多普勒温度系数、功率系数、控制棒价值、吸收球价值、停堆裕量、剩余反应性等，因此反应性计算是物理计算程序的重要功能。反应性计算方法有直接法和微扰法两种，两种方法各有优势、相互补充，因此需针对不同的反应性采用不同的方法计算。

直接法是反应性计算最为简单直观的方法，计算扰动发生前后的两种堆芯状态，得出有效增殖因子，从而计算出反应性引入，如控制棒价值、停堆裕量、剩余反应性、堆芯集总温度系数等。直接法计算反应性引入简单直观，对于反应性引入较大的情况下，由于计算不存在近似，所以计算精度很高。但是这种方法对于反应性引入非常小的问题，两种状态下计算出的有效增殖因子会非常接近，数值计算误差非常容易影响最后的计算结果。而且，直接法计算难以给出反应性引入贡献的空间分布。对于需要计算多种扰动时，直接法需要对每个扰动进行输运计算，计算代价较大。

微扰理论可以很好地处理小反应性引入的计算问题，通过一次前向输运计算和共轭计算后就可以快速求解多种反应性引入，并且可以提供反应性引入贡献的空间分布，方便后续的堆芯瞬态安全分析程序进行计算。

微扰理论整体以中子输运（或扩散）方程的扰动方程为基础，以扩散方程为例，扰动方程的基础形式可以写成式(2-134)的形式。相关的稳态中子扩散方程和共轭方程可以分别写成式(2-135)和式(2-136)的形式。

$$\langle \phi^* | \delta(L - \lambda F) \phi \rangle = 0 \quad (2-134)$$

式中 ϕ 为中子通量密度； ϕ^* 为中子共轭通量密度。

$$L\phi - \lambda F\phi = 0 \quad (2-135)$$

$$L^*\phi^* - \lambda F^*\phi^* = 0 \quad (2-136)$$

式中：

$$L\phi = -D\nabla^2\phi + \Sigma_r\phi - \sum_{\substack{h=1 \\ h \neq g}}^G \Sigma_{s,h \rightarrow g}\phi \quad (2-137)$$

$$L^*\phi^* = -D\nabla^2\phi^* + \Sigma_r\phi^* - \sum_{\substack{h=1 \\ h \neq g}}^G \Sigma_{s,h \rightarrow g}\phi^* \quad (2-138)$$

$$F\phi = \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{fh}\phi \quad (2-139)$$

$$F^*\phi^* = \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{fh}\phi^* \quad (2-140)$$

假设系统引入了一个微小扰动，使得算子 L 和 F 发生相应的变化，从而引起特征值 λ 也发生变化。扰动采用一阶微扰近似，舍弃扰动的高阶项，于是可以令 $L' = L + \delta L$ ， $F' = F + \delta F$ ， $\lambda' = \lambda + \delta \lambda$ ，并代入到式(2-134)可得。

$$\langle \phi^* | \delta L \phi \rangle - \langle \phi^* | \lambda \delta F \phi \rangle - \langle \phi^* | \delta \lambda F \phi \rangle = 0 \quad (2-141)$$

反应性可由式(2-142)计算得到。

$$\rho = 1 - \lambda \quad (2-142)$$

将式(2-142)带入式(2-141)可以得到

$$\delta \rho = \frac{\langle \phi^* | \lambda \delta F \phi \rangle - \langle \phi^* | \delta L \phi \rangle}{\langle \phi^* | F \phi \rangle} \quad (2-143)$$

式(2-143)就是中子输运方程的扰动方程。各种宏观截面的微小扰动都可以体现到算子 L 和 F 的变化，从而计算出反应性引入。

2.6 探测器响应计算

对于堆内及堆外探测器的响应计算，本项目拟采用共轭法进行计算，其主要思想基于堆芯内功率分布，通过共轭计算求解堆芯各位置处功率对探测器响应的权重，从而加权计算获得探测器响应。探测器 R 可表示为：

$$R = \int_V P(\mathbf{r})W(\mathbf{r})d\mathbf{r} \quad (2-144)$$

其中， $P(\mathbf{r})$ 为堆芯 \mathbf{r} 处的功率， $W(\mathbf{r})$ 为堆芯 \mathbf{r} 处的探测器电离室响应的权重函数； V 为堆芯总体积。 $P(\mathbf{r})$ 可根据三维堆芯计算直接获得，因此本方法的重点在于计算响应的权重函数 $W(\mathbf{r})$ 。

堆芯 \mathbf{r} 处的通量和共轭通量可通过求解前向方程和共轭方程得到：

$$L\phi(\mathbf{r}, E, \Omega) = \frac{1}{4\pi} \chi(E) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad (2-145)$$

$$L^*\phi^*(\mathbf{r}, E, \Omega) = \frac{1}{4\pi} \Sigma_D(E) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \quad (2-146)$$

式中， L 为包含泄漏、总反应率和散射反应率的算符； $\chi(E)$ 为燃料中子裂变能谱， $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ 为三维狄拉克函数， \mathbf{r}_0 为探测器位置， $\Sigma_D(E)$ 为堆外探测器的反应道截面， ϕ 和 ϕ^* 分别为前向中子通量密度和共轭中子通量密度。

堆芯某位置 \mathbf{r}_i 处响应函数 $W(\mathbf{r}_i)$ 可表示为：

$$W(\mathbf{r}_i) = \iiint_{\mathbf{r} E \Omega} \frac{1}{4\pi} \phi(\mathbf{r}, E, \Omega) \cdot \Sigma_D(E) \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) d\mathbf{r} dE d\Omega \quad (2-147)$$

由共轭性质：

$$[\phi, L^*, \phi^*] = [L\phi, \phi^*]$$

代入可得 $W(\mathbf{r}_i)$ 的计算表达式：

$$W(\mathbf{r}_i) = \int_E \chi(E) \phi^*(\mathbf{r}_i, E) dE \quad (2-148)$$

其中 $\chi(E)$ 为已知数据，因此只需计算获得共轭通量即可。

对于高温气冷堆堆芯的共轭计算，根据共轭方程性质，只需将输入数据进行调整：即散射矩阵转置、中子产生矩阵转置，同时将能群扫描顺序倒置，利用 2.2 节中阐述的堆芯计算方法，便可计算获得堆芯三维共轭通量。因此，基于上述理论，便能够计算获得探测器响应。

2.7 瞬态动力学计算

为模拟控制棒动作等原因引起的堆芯瞬态，在物理计算中需进行中子时空动力学模拟，拟对中子动力学方程采用预估校正准静态策略进行时间离散，在不同时间尺度上计算幅度函数和形状函数，提高计算效率，以下简要介绍具体理论模型。

2.7.1 中子动力学方程

考虑缓发中子的衰变产生以及中子通量密度的时间导数关系，多群中子扩散动力学方程为：

$$\frac{1}{v_g(\mathbf{r},t)} \frac{\partial \phi_g(\mathbf{r},t)}{\partial t} = D_g(\mathbf{r},t) \nabla^2 \phi_g(\mathbf{r},t) - \Sigma_{rg}(\mathbf{r},t) \phi_g(\mathbf{r},t) + \sum_{\substack{h=1 \\ h \neq g}}^G \Sigma_{s,h \rightarrow g}(\mathbf{r},t) \phi_h(\mathbf{r},t) + \frac{\chi_g^p(\mathbf{r},t)}{k_{eff}^s} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,h}(\mathbf{r},t) \phi_h(\mathbf{r},t) + \sum_{i_p=1}^{I_p} \chi_{i_p,g}^d(\mathbf{r},t) \lambda_{i_p}(\mathbf{r},t) C_{i_p}(\mathbf{r},t) + q_g(\mathbf{r},t) \quad (2-149)$$

式中：

I_p —— 缓发中子先驱核分组数目；

i_p —— 缓发中子分组标识， $i_p = 1, \dots, I_p$ ；

k_{eff}^s —— 瞬态初始状态下的有效增殖因子；

$v_g(\mathbf{r},t)$ —— 中子速度；

$C(\mathbf{r},t)$ —— 缓发中子先驱核浓度；

$\lambda(\mathbf{r},t)$ —— 缓发中子先驱核衰变常数；

$q(\mathbf{r},t)$ —— 外中子源密度；

G —— 能群数目；

h, g —— 能群标识， $h, g = 1, \dots, G$ 。

相应的，缓发中子先驱核方程为：

$$\frac{\partial C_{i_p}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{\beta_{i_p}(\mathbf{r}, t)}{k_{\text{eff}}^s} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,h}(\mathbf{r}, t) \phi_h(\mathbf{r}, t) - \lambda_{i_p}(\mathbf{r}, t) C_{i_p}(\mathbf{r}, t) \quad (2-150)$$

其中，总缓发中子份额是各组的加和：

$$\beta(\mathbf{r}, t) = \sum_{i_p=1}^{I_p} \beta_{i_p}(\mathbf{r}, t) \quad (2-151)$$

令式(2-149)、(2-150)时间导数项为 0，即稳态初始状态：

$$\frac{1}{\nu_g(\mathbf{r}, t)} \frac{\partial \psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t)}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial C_{i_p}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (2-152)$$

则：

$$C_{i_p}(\mathbf{r}, t) = \frac{\beta_{i_p}(\mathbf{r}, t)}{\lambda_{i_p}(\mathbf{r}, t) k_{\text{eff}}^s} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,h}(\mathbf{r}, t) \psi_h(\mathbf{r}, t) \quad (2-153)$$

代入至式(2-149)，得到稳态形式的多群中子扩散方程：

$$-D_g(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi_g(\mathbf{r}) + \Sigma_{rg}(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}) = \sum_{\substack{h=1 \\ h \neq g}}^G \Sigma_{s,h \rightarrow g}(\mathbf{r}) \phi_h(\mathbf{r}) + \frac{\chi_g^s(\mathbf{r})}{k_{\text{eff}}^s} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{fh}(\mathbf{r}) \phi_h(\mathbf{r}) + q(\mathbf{r}) \quad (2-154)$$

其中

$$\chi_g^s(\mathbf{r}, t) = \chi_g^p(\mathbf{r}, t) [1 - \beta(\mathbf{r}, t)] + \sum_{i_p=1}^{I_p} \chi_{i_p,g}^d(\mathbf{r}, t) \beta_{i_p}(\mathbf{r}, t) \quad (2-155)$$

解方程(2-154)即得到初值条件 k_{eff}^s 、 $\phi_g(\mathbf{r}, t_0)$ 。

2.7.2 中子通量密度方程

预估校正准静态策略的主要思想为：使用准静态近似下的广义因子分裂，将时空中子扩散动力学方程变为关于幅度函数的点堆动力学方程与关于形状函数的大时间步上的固定源方程，并通过预估-校正过程避免幅度函数与形状函数的非线性迭代，提高计算效率。

采用数值微分法，对先驱核浓度方程(2-150)进行全隐式时间离散，得到：

$$\frac{C_m(\mathbf{r}, t_{n+1}) - C_m(\mathbf{r}, t_n)}{\Delta t_{n+1}} = \beta_m(t_{n+1}) S^p(\mathbf{r}, t_{n+1}) - S_m^d(\mathbf{r}, t_{n+1}) \quad (2-156)$$

其中：

$$S^p(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{1}{k_{eff}^s} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,h}(\mathbf{r}, t) \phi_h(\mathbf{r}, t) \quad (2-157)$$

$$S_m^d(\mathbf{r}, t) \equiv \lambda_{i_p}(\mathbf{r}, t) C_{i_p}(\mathbf{r}, t) \quad (2-158)$$

由式(2-157)可以得到先驱核浓度的计算表达式：

$$C_{i_p}(t_{n+1}) = \frac{1}{1 + \lambda_{i_p}(t_{n+1}) \Delta t_{n+1}} \left[C_{i_p}(\mathbf{r}, t_n) + \Delta t_{n+1} \beta_{i_p}(t_{n+1}) S^p(\mathbf{r}, t_{n+1}) \right] \quad (2-159)$$

同样的，对中子通量密度方程(2-149)进行全隐式格式离散：

$$\frac{1}{\nu_g(t_{n+1})} \frac{\phi_g(\mathbf{r}, t_{n+1}) - \phi_g(\mathbf{r}, t_n)}{\Delta t_{n+1}} = R_g(\mathbf{r}, t_{n+1}) \quad (2-160)$$

其中：

$$R_g(\mathbf{r}, t) \equiv M_g(\mathbf{r}, t) + \chi_g^p(\mathbf{r}, t) [1 - \beta(\mathbf{r}, t)] S^p(\mathbf{r}, t) + \sum_{i_p=1}^{I_p} \chi_{i_p,g}^d(\mathbf{r}, t) S_{i_p}^d(\mathbf{r}, t) + q_g(\mathbf{r}, t) \quad (2-161)$$

则当前时刻的中子通量密度 $\phi_g(\mathbf{r}, t_{n+1})$ 可以直接迭代求解，将(2-159)带入(2-160)并且将其按照稳态方程形式进行整理，如下：

$$\begin{aligned} -D_g(\mathbf{r}, t_{n+1}) \nabla^2 \phi_g(\mathbf{r}, t_{n+1}) + \Sigma'_{rg}(\mathbf{r}, t_{n+1}) \phi_g(\mathbf{r}, t_{n+1}) &= \sum_{\substack{h=1 \\ h \neq g}}^G \Sigma_{s,h \rightarrow g}(\mathbf{r}, t_{n+1}) \phi_h(\mathbf{r}, t_{n+1}) + \\ &Q_{f,g}(\mathbf{r}, t_{n+1}) + S_g(\mathbf{r}, t_{n+1}) \end{aligned} \quad (2-162)$$

其中（省略位置坐标）：

$$\Sigma'_{r,g}(t_{n+1}) = \Sigma_{r,g}(t_{n+1}) + \frac{1}{\nu_g(t_{n+1}) \Delta t_{n+1}} \quad (2-163)$$

$$Q_{f,g}(t_{n+1}) = \left[\chi_g^s(t_{n+1}) - \sum_{i_p=1}^{I_p} \frac{\chi_{i_p,g}^d(t_{n+1}) \beta_{i_p}(t_{n+1})}{1 + \lambda_{i_p}(t_{n+1}) \Delta t_{n+1}} \right] S^p(t_{n+1}) \quad (2-164)$$

$$S_g(t_{n+1}) = \sum_{i_p=1}^{I_p} \frac{\chi_{i_p,g}^d(t_{n+1}) \lambda_{i_p}(t_{n+1}) C_{i_p}(\mathbf{r}, t_n)}{1 + \lambda_{i_p}(t_{n+1}) \Delta t_{n+1}} + \frac{\phi_g(t_n)}{\nu_g(t_{n+1}) \Delta t_{n+1}} + q_g(t_{n+1}) \quad (2-165)$$

式(2-162)是同时含有裂变源和外中子源项的问题, 其中外中子源项包含上一时间点缓发中子的贡献、上一时间点中子通量密度的贡献以及当前时刻实际外中子源的贡献, 称为时间相关固定源问题。

中子通量密度方程(2-162)的预估求解是预估-校正过程中位置相关的形状函数的来源, 其占据整个瞬态计算中的主要计算时间。方程的具体求解采用 2.2 节中所介绍的基于横向积分技术的节块展开法进行固定源计算进行求解。

2.7.3 准静态近似

采用准静态近似下的广义因子分裂, 将中子时空动力学方程的分布函数分为强时间相关的幅度函数部分与弱时间相关的形状函数部分:

$$\begin{aligned} \psi_g(\mathbf{r}, t) &= n(t) \cdot \tilde{\psi}_g(\mathbf{r}, t) \\ C_{i_p}(\mathbf{r}, t) &= c_{i_p}(t) \cdot \tilde{C}_{i_p}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (2-166)$$

代入式(2-149)、(2-150), 得到:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\nu_g(t)} \frac{\partial \tilde{\phi}_g(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= D_g(\mathbf{r}, t) \nabla^2 \tilde{\phi}_g(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{rg}(t) \tilde{\phi}_g(\mathbf{r}, t) + \sum_{\substack{h=1 \\ h \neq g}}^G \Sigma_{s,h \rightarrow g}(\mathbf{r}, t) \tilde{\phi}_h(\mathbf{r}, t) + \\ &\quad \frac{1}{k_{\text{eff}}^s} \frac{\chi_g^p(t) [1 - \beta(t)]}{4\pi} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,h}(\mathbf{r}, t) \tilde{\phi}_h(\mathbf{r}, t) + \\ &\quad \frac{c_{i_p}(t)}{n(t)} \sum_{i_p=1}^{I_p} \chi_{i_p,g}^d(\mathbf{r}, t) \lambda_{i_p}(\mathbf{r}, t) \tilde{C}_{i_p}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{n(t)} \frac{dn}{dt} \cdot \frac{1}{\nu_g(t)} \tilde{\phi}_g(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (2-167)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{C}_{i_p}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \frac{n(t)}{c_{i_p}(t)} \frac{\beta_{i_p}(\mathbf{r}, t)}{k_{\text{eff}}^s} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,h}(\mathbf{r}, t) \tilde{\phi}_h(\mathbf{r}, t) \\ &\quad - \frac{1}{c_{i_p}(t)} \frac{dc_{i_p}}{dt} \tilde{C}_{i_p}(\mathbf{r}, t) - \lambda_{i_p}(\mathbf{r}, t) \tilde{C}_{i_p}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (2-168)$$

选取权重函数为稳态时的共轭通量，通过求解稳态共轭中子扩散方程得到，由 2.2 节中所介绍的基于横向积分技术的节块展开法进行共轭计算进行求解：

$$-D_g(\mathbf{r})\nabla^2\phi_g^*(\mathbf{r})+\Sigma_{rg}(\mathbf{r})\phi_g^*(\mathbf{r})=\sum_{\substack{h=1 \\ h\neq g}}^G\Sigma_{s,h\rightarrow g}(\mathbf{r})\phi_h^*(\mathbf{r})+\frac{\chi_g(\mathbf{r})}{k_{eff}^*}\sum_{h=1}^G\nu\Sigma_{fh}(\mathbf{r})\phi_h^*(\mathbf{r}) \quad (2-169)$$

其中特征值满足关系式：

$$\frac{1}{k_{eff}^*}=\frac{1}{k_{eff}^s} \quad (2-170)$$

引入形状函数的归一化限制条件，使分裂过程唯一：

$$\begin{aligned} \sum_{g=1}^G\int_V\frac{\phi_g^*(\mathbf{r})\tilde{\phi}_g(\mathbf{r},t)}{\nu_g(t)}d\mathbf{r}&=1 \\ \sum_{g=1}^G\int_V\phi_g^*(\mathbf{r})\chi_{i_p,g}^d(t)\tilde{C}_{i_p}(\mathbf{r},t)d\mathbf{r}&=1, \quad i_p=1,\dots,I_p \end{aligned} \quad (2-171)$$

忽略截面及动力学参数对时间导数，利用归一化限制条件，对方程(2-167)、(2-168)两端乘以共轭通量、(2-170)两端乘以形状函数，并将各式在除时间外的相空间区域积分并做变形和整理，得到点堆方程：

$$\begin{aligned} \frac{dn(t)}{dt}&=\frac{\rho(t)-\bar{\beta}(t)}{\Lambda(t)}n(t)+\sum_{m=1}^M\bar{\lambda}_{i_p}c_{i_p}(t) \\ \frac{dc_{i_p}(t)}{dt}&=\frac{\bar{\beta}_{i_p}(t)}{\Lambda(t)}n(t)-\bar{\lambda}_{i_p}c_{i_p}(t) \end{aligned} \quad (2-172)$$

其中：

$$F(t)\equiv\sum_{g=1}^G\int_Vd\mathbf{r}\frac{\phi_g^*(\mathbf{r},\boldsymbol{\Omega})\chi_g^s(t)}{k_{eff}^s}\sum_{h=1}^G\nu\Sigma_{f,h}(\mathbf{r},t)\tilde{\phi}_h(\mathbf{r},t) \quad (2-173)$$

$$\rho(t) \equiv \frac{1}{F(t)} \cdot \sum_{g=1}^G \int_V d\mathbf{r} \left\{ \begin{aligned} & -\Delta\Sigma_{r,g} \tilde{\phi}_g(\mathbf{r}, t) \phi_g^*(\mathbf{r}) + \\ & \phi_g^*(\mathbf{r}) \sum_{\substack{h=1 \\ h \neq g}}^G \Delta\Sigma_{s,h \rightarrow g}(\mathbf{r}) \tilde{\phi}_h(\mathbf{r}, t) + \\ & \frac{\phi_g^*(\mathbf{r}) \chi_g^s}{k_{\text{eff}}^s} \sum_{h=1}^G \Delta v \Sigma_{f,h}(\mathbf{r}, t) \tilde{\phi}_h(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \right\} \quad (2-174)$$

$$\bar{\beta}_{i_p}(t) \equiv \frac{\sum_{g=1}^G \int_V d\mathbf{r} \left(\phi_g^*(\mathbf{r}) \frac{\chi_{i_p,g}^d \beta_{i_p}}{k_{\text{eff}}^s} \sum_{h=1}^G v \Sigma_{f,h}(\mathbf{r}, t) \tilde{\phi}_h(\mathbf{r}, t) \right)}{F(t)} \quad (2-175)$$

$$\bar{\beta}(t) = \sum_{i_p=1}^{I_p} \bar{\beta}_{i_p}(t) \quad (2-176)$$

$$\Lambda(t) \equiv \frac{\sum_{g=1}^G \int_V \frac{\phi_g^*(\mathbf{r}) \tilde{\phi}_g(\mathbf{r}, t)}{v_g(t)} d\mathbf{r}}{F(t)} = \frac{1}{F(t)} \quad (2-177)$$

$$\bar{\lambda}_{i_p}(t) \equiv \frac{\sum_{g=1}^G \int_V d\mathbf{r} \left\{ \phi_g^*(\mathbf{r}) \chi_{i_p,g}^d(t) \lambda_{i_p}(t) \tilde{C}_{i_p}(\mathbf{r}, t) \right\}}{\sum_{g=1}^G \int_V d\mathbf{r} \left\{ \phi_g^*(\mathbf{r}) \chi_{i_p,g}^d(t) \tilde{C}_{i_p}(\mathbf{r}, t) \right\}} \quad (2-178)$$

式中:

$\Delta\Sigma_x = \Sigma_x(t) - \Sigma_x(t_0)$ —— 截面的变化量;

x —— 截面的反应道。

当选取权函数为稳态共轭中子通量时, 估算的反应性误差是扰动状态通量密度变化的一阶小量。同时, 利用上述公式计算可获得堆芯反应性、缓发中子份额、中子代时间、缓发中子先驱核衰变常数, 并可进一步计算获得反应堆周期、瞬发中子寿命、缓发中子寿命等堆芯动力学参数。

2.7.4 幅度函数求解

点堆动力学方程组(2-172)为刚性方程组, 通常的常微分方程组数值求解方法效率较差, 本程序采用的时间离散方法如下:

将缓发中子先驱核幅度函数方程右端的产生项 $\frac{\bar{\beta}_p(t)}{\Lambda(t)}n(t)$ 近似为插值点为 t_{i-1} 、

t_i 、 t_{i+1} 的二次插值多项式，并在 $[t_i, t_{i+1}]$ 区间对方程积分，变形得：

$$c_{i_p}(t_{i+1}) = e^{-\bar{\lambda}_{i_p}(t_i)\Delta t_i} c_{i_p}(t_i) + \omega_{i_p}^{i-1} \frac{\bar{\beta}_{i_p}(t_{i-1})}{\bar{\lambda}_{i_p}(t_{i-1})} n(t_{i-1}) + \omega_{i_p}^i \frac{\bar{\beta}_{i_p}(t_i)}{\bar{\lambda}_{i_p}(t_i)} n(t_i) + \omega_{i_p}^{i+1} \frac{\bar{\beta}_{i_p}(t_{i+1})}{\bar{\lambda}_{i_p}(t_{i+1})} n(t_{i+1}) \quad (2-179)$$

式中：

$$\omega_{i_p}^{i-1} = \frac{k_{i_p}^{i-1} - k_{i_p}^i}{\gamma_i(\gamma_i + 1)} \quad (2-180)$$

$$\omega_{i_p}^i = k_{i_p}^{i+1} - \frac{k_{i_p}^{i-1} + (\gamma_i - 1)k_{i_p}^i}{\gamma_i} \quad (2-181)$$

$$\omega_{i_p}^{i+1} = \frac{k_{i_p}^{i-1} + \gamma_i k_{i_p}^i}{\gamma_i + 1} \quad (2-182)$$

并定义：

$$\begin{aligned} \gamma_i &\equiv \frac{\Delta t_i}{\Delta t_{i+1}} = \frac{t_i - t_{i-1}}{t_{i+1} - t_i} \\ k_{i_p}^{i+1} &= 1 - e^{-\bar{\lambda}_{i_p}(t_i)\Delta t_{i+1}} \\ k_{i_p}^i &= 1 - \frac{k_{i_p}^{i+1}}{\bar{\lambda}_{i_p}(t_i)\Delta t_{i+1}} \\ k_{i_p}^{i-1} &= 1 - \frac{2k_{i_p}^i}{\bar{\lambda}_{i_p}(t_i)\Delta t_{i+1}} \end{aligned} \quad (2-183)$$

将式(2-179)代入方程(2-172)，得到：

$$n(t_{i+1}) = \frac{\frac{n(t_i)}{\Delta t_{i+1}} + \sum_{i_p=1}^{I_p} \left(\bar{\lambda}_{i_p}(t_i) e^{-\bar{\lambda}_{i_p}(t_i)\Delta t_i} c_{i_p}(t_i) + \frac{\omega_{i_p}^i \bar{\beta}_{i_p}(t_i)}{\Lambda(t_i)} n(t_i) + \frac{\omega_{i_p}^{i-1} \bar{\beta}_{i_p}(t_{i-1})}{\Lambda(t_{i-1})} n(t_{i-1}) \right)}{\frac{1}{\Delta t_{i+1}} - \frac{\rho(t_{i+1}) - \bar{\beta}(t_{i+1})}{\Lambda(t_{i+1})} - \sum_{i_p=1}^{I_p} \frac{\omega_{i_p}^{i+1} \bar{\beta}_{i_p}(t_{i+1})}{\Lambda(t_{i+1})}} \quad (2-184)$$

式(2-179)及(2-184)即为点堆方程组(2-172)的数值求解公式。在中时间步内求解时，方程中的动力学参数由时间步端点值线性插值得到。

2.7.5 时间步进流程

动力学求解的整体思路是在大时间步 Δt 上预估求解通量密度分布，中时间步 δt 上插值更新形状函数并由此计算点堆动力学参数，幅函数方程求解时将 δt 进一步离散为小时间步，其时间离散及步进流程如图 21 所示。

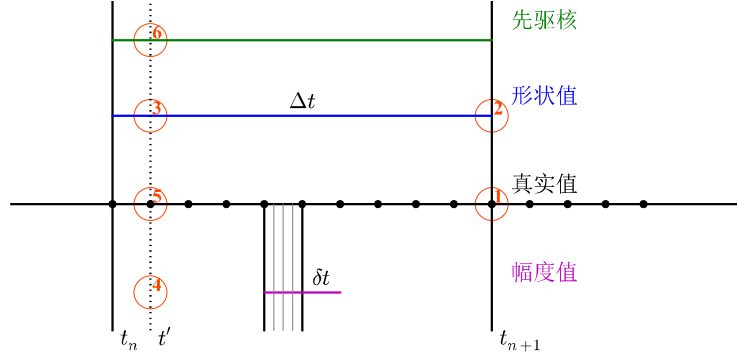


图 21 预估校正准静态方法的时间步示意图

具体流程如下：

（1）计算通量形状：根据上一时刻中子通量密度分布 $\phi_g(\mathbf{r}, t_n)$ 和先驱核密度分布 $C_{ip}(\mathbf{r}, t_n)$ ，通过求解 2.7.2 节中固定源方程，预估 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ 时刻中子通量密度 $\phi_g(\mathbf{r}, t_{n+1})$ ，并计算响应缓发中子先驱核密度 $C_{ip}(\mathbf{r}, t_{n+1})$ ；

（2）生成形状函数：由归一化条件生成 t_{n+1} 时刻的中子通量和缓发中子先驱核形状函数；

（3）插值形状函数：根据 t_n 和 t_{n+1} 时刻形状函数在 t' 时刻采用线性插值得到中子通量和缓发中子先驱核形状函数，并以此计算幅度函数方程组的系数矩阵；

（4）计算幅度函数：利用生成的系数矩阵计算 t' 时刻的幅度函数；

（5）校正通量密度：利用步骤（4）中得到的幅度函数和步骤（3）中得到的形状函数得到校正的通量密度函数，如下：

$$\phi_g(\mathbf{r}, t_2) = n(t_2) \tilde{\phi}_g(\mathbf{r}, t_2) \quad (2-185)$$

（6）计算先驱核：利用校正的通量密度更新先驱核浓度。

重复步骤（3）到步骤（6）直至 $t' = t_{n+1}$ 时即完成了一个步进过程。在下一个 Δt 的大时间步上重复上面整个过程。

以上动力学求解在 t_0 时刻的初始值由如下过程给出：

(1) 分布函数：中子通量密度的初值通过求解稳态中子输运方程式(2-154)得到，同时另式(2-150)左端的时间导数项为零，得到缓发中子先驱核浓度的初值：

$$C_{i_p}(\mathbf{r}, t_0) = \frac{1}{k_{\text{eff}}^s} \frac{\beta_{i_p}(\mathbf{r}, t_0)}{\lambda_{i_p}(\mathbf{r}, t_0)} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,h}(\mathbf{r}, t_0) \phi_h(\mathbf{r}, t_0) \quad (2-186)$$

(2) 幅度函数：中子通量密度的幅度函数的初值取为 $n(t_0)=1$ ，缓发中子先驱核的幅度函数的初值由式(2-172)时间导数为零得到：

$$c_{i_p}(t_0) = \frac{\bar{\beta}_{i_p}(t_0)}{\bar{\lambda}_{i_p}(t_0) \Lambda(t_0)} \quad (2-187)$$

(3) 形状函数：由真实分布和幅度函数直接得到，通量密度的形状函数为：

$$\tilde{\phi}_g(\mathbf{r}, t_0) = \phi_g(\mathbf{r}, t_0) \quad (2-188)$$

先驱核浓度的初始形状函数为：

$$\tilde{C}_{i_p}(\mathbf{r}, t_0) \equiv \frac{C_{i_p}(\mathbf{r}, t_0)}{c_{i_p}(t_0)} = \frac{\bar{\lambda}_{i_p}(t_0) \Lambda(t_0)}{\bar{\beta}_{i_p}(t_0)} \frac{1}{k_{\text{eff}}^s} \frac{\beta_{i_p}(\mathbf{r}, t_0)}{\lambda_{i_p}(\mathbf{r}, t_0)} \sum_{h=1}^G \nu \Sigma_{f,h}(\mathbf{r}, t_0) \phi_h(\mathbf{r}, t_0) \quad (2-189)$$

2.8 燃料管理

2.8.1 堆外燃料循环

球床式高温气冷堆采用连续在线换料策略，新投入的燃料球与未达到燃耗深度的燃料球从顶部中央燃料装料管落入反应堆球床堆芯，燃料球与石墨球随机混合，并在球床内不同位置往下流动，然后通过堆芯底部的燃料排放管排出，排出的燃料球逐个通过燃耗测量装置。当燃料球达到燃耗深度设计值或者出现破损的情况，就会被排放并输送到乏燃料贮存系统或碎球罐，其他批次的燃料球被输送回堆芯顶部。同时，新的燃料球被装载到堆芯顶部，与其他批次的燃料球装入堆芯作再循环，以保持混合球床燃料球的总数量稳定。在软件开发中，拟通过定义堆外不同类型贮存罐（如达到规定燃耗深度的乏燃料贮存罐、未达到规定燃耗深

度的燃料贮存罐、破损燃料球贮存罐等)实现堆外再循环等倒料动作和过程的模拟,如图 22 所示。

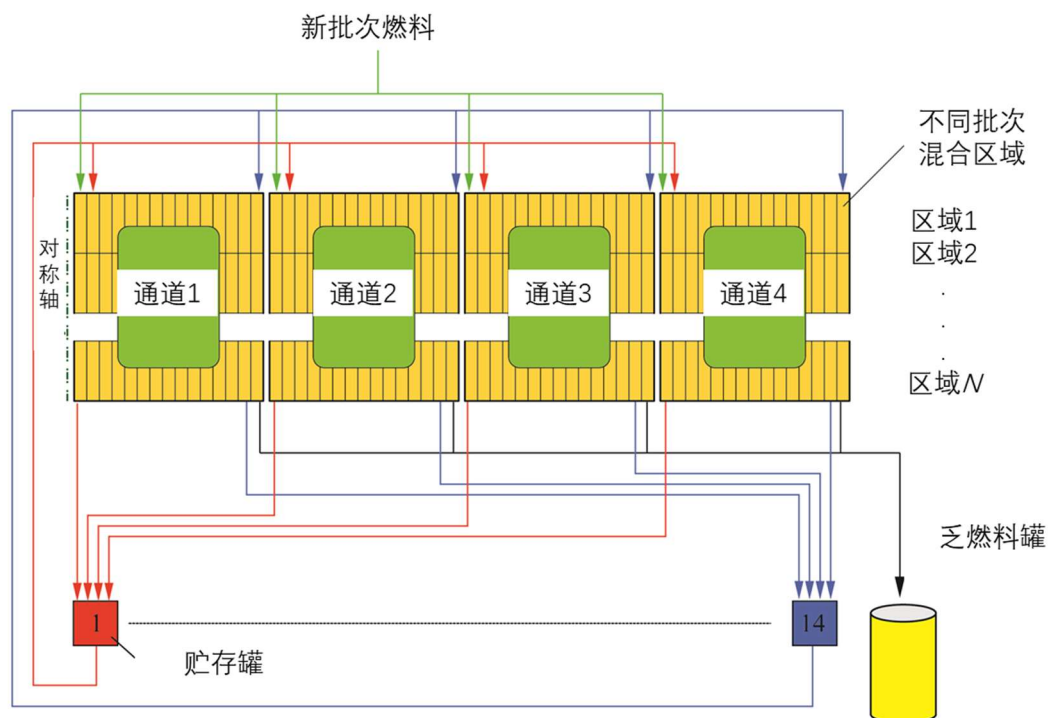


图 22 堆外燃料循环示意图

2.8.2 堆内燃料流动

为了模拟燃料球和石墨球的连续流动和再循环过程,拟借鉴 VSOP 和 PANGU 总体燃料循环计算策略,通过定义通道、层、区域、批次来模拟燃料在堆内的流动,如图 23 所示。其中各定义含义为:

- 1) 通道(Channel): 球床区域在径向上分为多个通道,根据流型的不同,通道的边界可以是直表面,也可以是曲面;
- 2) 层(Layer): 每个通道在轴向上可以平均分成若干层,如果需要描述沿通道的不同流速,每个通道的层数可能不同;
- 3) 区域(Region): 一个区域对应于球床区域中某一通道的某一层,所有区域通常具有相同体积;
- 4) 批次(Batch): 再循环过程中,一个区域内含有多个不同批次的燃料球,认为同一批次的燃料球具有相同的物性参数,例如材料成分和群常数。

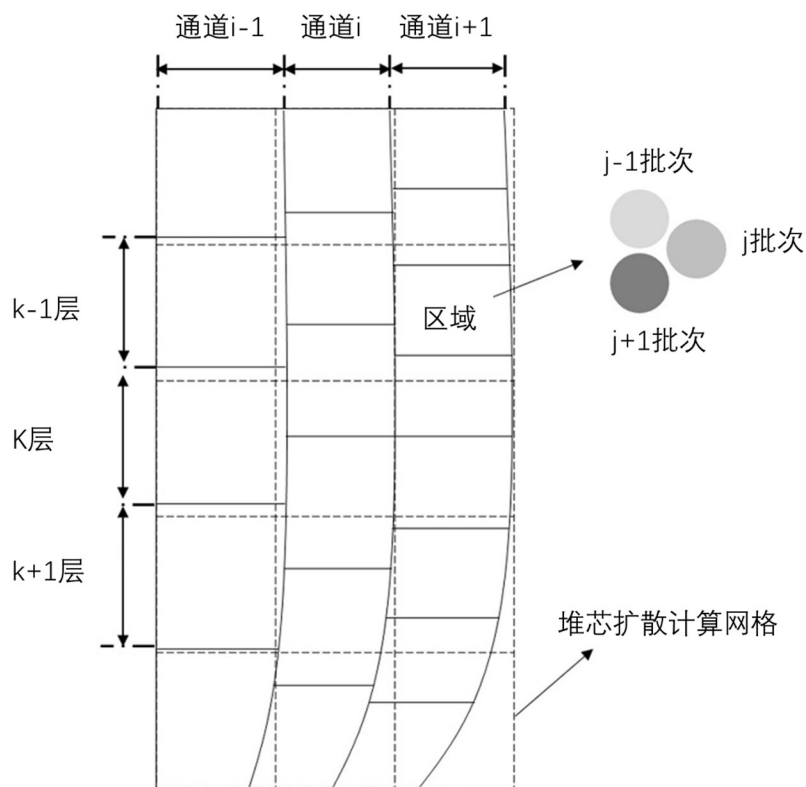


图 23 球床模型网格划分示意图

一个完整的燃料循环，认为一个区域中的球完全沿着通道流入下游区域，从所有通道底层出来的球被一批一批地结合在一起，用新的燃料球替换部分乏燃料球，然后再循环到球床的顶层。

为了获得堆芯不同位置球的流动速度和路线，可利用已知实验或现有数值模拟产生通道内燃料球的流动路线，然后通过插值计算获得所有通道流动路线，如图 24 所示。已知通道内燃料球的流动路线，即可通过计算获得球床区域的速度分布，利用速度分布求解上下游区域合并份额，从而模拟球在球床堆芯内部流动，如图 25 所示。

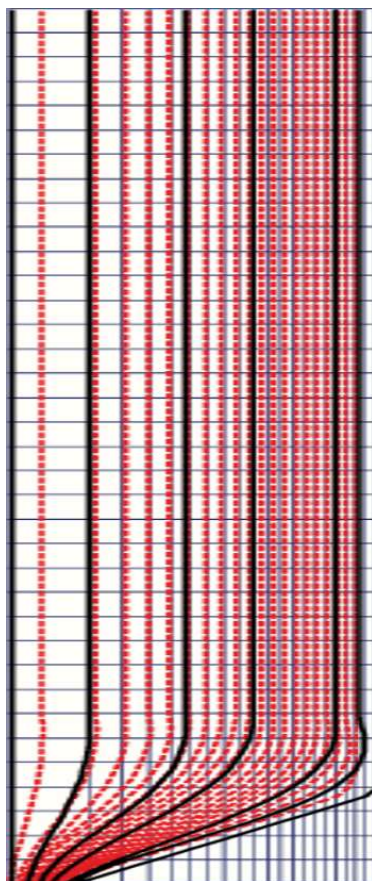


图 24 球床区域内燃料球流动路线

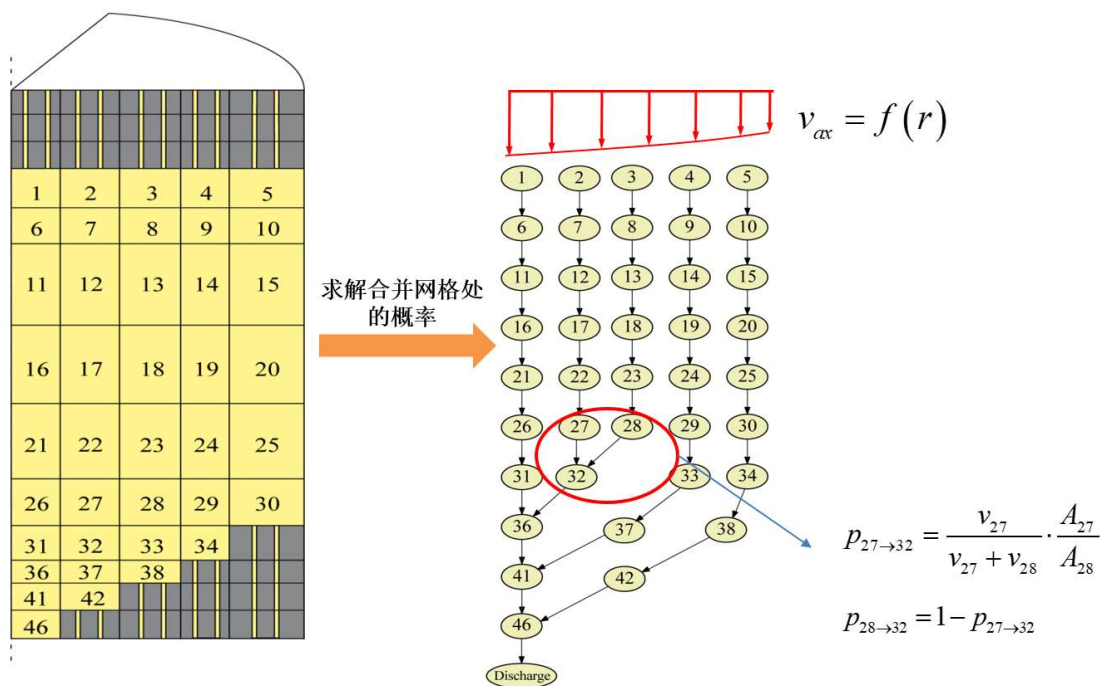


图 25 球床流动模拟计算示意图

3 热工计算

3.1 流体换热计算

氦气流动换热计算是高温气冷堆热工计算的重要内容。球床式高温气冷堆的堆芯内部随机堆积的燃料球和石墨球使得氦气的流动边界十分复杂,对比管道流动来看,在管道中流体从层流向湍流转变的雷诺数在 2300 左右,而在球床中氦气流体的临界雷诺数很大程度上取决于球床的孔隙率、球的排布方式等多种因素。由于求解球床内氦气流速分布十分复杂,因此往往并不直接求解 N-S 方程,而是将球床对流速的影响简化为压降-速度关系式,并忽略湍流的影响。由于球床式高温气冷堆的堆芯结构符合多孔介质特征,因此,本项目拟采用多孔介质的理论模型进行球床式高温气冷堆的热工水力分析。

3.1.1 动量守恒方程

动量守恒方程形式如下:

$$\frac{\partial \varepsilon_g \rho_m \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \varepsilon_g \rho_m \vec{u} \vec{u} - \vec{\nabla} \cdot (\varepsilon_g \underline{\tau}) = -\varepsilon_g \vec{\nabla} P + \varepsilon_g \rho_m \vec{g} + \vec{u}_m S_m - \vec{B} \quad (3-1)$$

式中, $\underline{\tau}$ 为粘性应力张量; ε_g 为气体份额; \vec{g} 为加速度矢量; $\vec{u}_m S_m$ 为气体出入口处的增加或减少的动量; \vec{B} 为冷却剂流过多孔介质所产生的阻力,在相应实验条件下得出。根据惯例,向量用上箭头表示,张量用下划线表示, $\vec{u} \vec{u}$ 是两个向量的并矢积。假设质量源以零速度进入网格单元,因此方程中去掉 $\vec{u}_m S_m$ 一项。

氦气是一种轻气体,氦气中的声速大于空气中声速,故而在流动条件发生微小变化时,压强等物理量将在全堆内快速响应,这意味着流量很快会调整到新的平衡,所以可以假设流量是准稳态的。根据上述准稳态假设,可以从动量方程中消除时间项,得到:

$$\vec{\nabla} \cdot \varepsilon_g \rho_m \vec{u} \vec{u} - \vec{\nabla} \cdot (\varepsilon_g \underline{\tau}) = -\varepsilon_g \vec{\nabla} P + \varepsilon_g \rho_m \vec{g} - \vec{B} \quad (3-2)$$

在冷却剂的流动方向引入阻力系数 W 的概念,令其与 \vec{B} 有如下关系:

$$\vec{B} = -\varepsilon_g W \rho_g \varepsilon_g \vec{u} \quad (3-3)$$

通过引入正确的 W 代替方程中的粘性剪切应力和动量变化，即将上式左边两项的影响全部考虑在 W 中，之后再通过实验测得阻力系数 W 。经过以上化简，得到多孔介质中的准静态速度-压降模型：

$$-\vec{\nabla}P + \rho_g \vec{g} + W \rho_g \varepsilon_g \vec{u} = 0 \quad (3-4)$$

该假设对大部分瞬态情况而言都成立。式(3-4)又可以写成：

$$\vec{u} = \frac{\vec{\nabla}P + \rho_g \vec{g}}{W \rho_g \varepsilon_g} \quad (3-5)$$

而后将其转化成圆柱坐标系下轴向动量守恒方程：

$$u_z = \frac{\frac{\partial P}{\partial z} + \rho_g g}{W \rho_g \varepsilon_g} \quad (3-6)$$

对上式在 z 方向上离散，得到：

$$u_z = \frac{\frac{\Delta P}{\Delta z} + \rho_g g}{W \rho_g \varepsilon_g} \quad (3-7)$$

同样，可以得到圆柱坐标系下径向动量守恒方程：

$$u_r = \frac{\frac{\partial P}{\partial r}}{W \rho_g \varepsilon_g} \quad (3-8)$$

在 r 方向上离散后的形式为：

$$u_r = \frac{\frac{\Delta P}{\Delta r}}{W \rho_g \varepsilon_g} \quad (3-9)$$

现在讨论动量守恒方程中阻力 W 的形式。对于球床堆，在德国核安全标准 KTA3102 中规定，高度为 H ，随机填充球床中的单位高度压力变化为：

$$\frac{\Delta P}{\Delta H} = \Psi \frac{(1 - \varepsilon_g)}{\varepsilon_g^3} \frac{1}{d} \frac{1}{2 \rho_m} \frac{(\rho_m \varepsilon_g u A)^2}{A^2} \quad (3-10)$$

式中， A 是流道横截面积； d 是燃料球直径。

流动阻力项是在相应实验条件下得出的，实验条件下方程(3-2)中的左边两项和重力项可以认为是 0，从而有：

$$\vec{B} = \varepsilon_g \vec{\nabla} P \quad (3-11)$$

将式(3-3)、式(3-10)和式(3-11)相互比较，可以得到阻力 W 的表达式：

$$W = \Psi \frac{(1-\varepsilon_g)}{\varepsilon_g^3} \frac{1}{d} \frac{1}{2\rho_m} \rho_m \varepsilon_g |u| \quad (3-12)$$

式中系数 Ψ 定义为：

$$\Psi = \frac{320}{\left(\frac{Re}{1-\varepsilon_g}\right)} + \frac{6}{\left(\frac{Re}{1-\varepsilon_g}\right)^{0.1}} \quad (3-13)$$

雷诺数定义为：

$$Re = \frac{\rho_g \varepsilon_g u d}{\mu} \quad (3-14)$$

雷诺数的计算中， μ 为动力粘性系数； T 为燃料球表面温度和冷却剂温度的算数平均值(K)； d 为燃料球直径。

3.1.2 能量守恒方程

同样只考虑稳态情况，忽略时间项，则能量守恒方程的具体形式为：

$$C_p \nabla \cdot (\rho_g \vec{u} T_g) = \nabla \cdot (k \nabla T_g) + q \quad (3-15)$$

式中， C_p 为定压比热容，其值可取定值 5195 J/(kg·K)； ρ_g 为气体密度； T_g 为气体冷却剂温度； k 为气体热导率； q 为热源项，来自于网格内固体部分产生的热量。

为了简化计算，认为网格间冷却剂温差很小，忽略气体间的热传导。该假设在功率分布不均匀程度较小时成立，若网格间功率分布差异很大，将导致计算误差。

由上述假设，在式(3-15)中消去等号右边第一项，并对式两边求体积分，得到：

$$\int_V (C_p \nabla \cdot (\rho_g \vec{u} T_g)) dV = Q \quad (3-16)$$

式中, Q 为控制体内功率。对上式使用高斯定理, 得到:

$$C_p \int_{\vec{S}} (\rho_g \vec{u} T_g) \cdot d\vec{S} = Q \quad (3-17)$$

上式中, \vec{S} 表示网格边界面。将积分写为各个面的求和, 得到:

$$C_p \sum_{f=\text{allfaces}} (\rho_g \vec{u} T_g)_f \cdot \vec{A}_f = Q \quad (3-18)$$

可进一步变换为以下形式:

$$C_p \Delta(\dot{m}T) = Nav \cdot V \cdot \varphi + \sum q_j \quad (3-19)$$

式中, \dot{m} 为控制体内轴向质量流量; Nav 为平均功率密度; V 为控制体体积; φ 为功率归一化因子; $\sum q_j$ 为相邻通道流入所计算控制体内流体所携带的能量, 当计算无横流情况时, 该项为 0。式(3-19)的物理意义为网格内冷却剂的轴向焓升等于网格内产生的热量加上横流带入或带出的热量。

3.1.3 质量守恒方程

在质量守恒方程的推导中, 由准静态消除时间项, 得到如下的质量守恒方程:

$$\nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}) = 0 \quad (3-20)$$

它在圆柱坐标系下的形式为:

$$\frac{\partial}{\partial r} (\varepsilon_g \rho_g u_r) + \frac{\partial}{\partial z} (\varepsilon_g \rho_g u_z) = 0 \quad (3-21)$$

式中, u_r 为速度沿径向分量, u_z 为速度沿轴向分量。在离散过程中, 首先对式(3-20)在空间上积分, 可以得到:

$$\int_V (\nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{u})) dV = 0 \quad (3-22)$$

对式(3-22)使用高斯定理, 得到:

$$\int_{\vec{S}} (\varepsilon_g \rho_g \vec{u}) \cdot d\vec{S} = 0 \quad (3-23)$$

和能量守恒方程化简过程一样, 将上式写成各个面的质量流量之和的形式:

$$\sum_{f=\text{allfaces}} \left(\varepsilon_g \rho_g \vec{u} \right)_f \cdot \vec{A}_f = 0 \quad (3-24)$$

式中，下标 f 表示控制体四个面。式(3-24)即为离散的质量守恒方程形式，其物理含义为沿控制体四个面流入流出的质量流量之和为 0。

3.1.4 热物性方程

氦气的密度、比热容、动力粘度等热物性也可采用德国安全导则中的标准，依据 KTA3102.1，相关计算公式如下所示：

$$\rho = 48.14 \cdot \frac{P}{T} \left(1 + 0.4446 \cdot \frac{P}{T^{1.2}} \right)^{-1} \quad (3-25)$$

$$C_p = 5195 \text{ J / (kg} \cdot \text{K)} \quad (3-26)$$

$$\mu = 3.674 \times 10^{-7} \cdot T^{0.7} \quad (3-27)$$

其中，压力的单位为 10^5 Pa ，温度单位为 K。

上述氦气热物性计算公式在以下范围内适用：

$$1 \text{ Mpa} \leq P \leq 10 \text{ Mpa}$$

$$293 \text{ K} \leq T \leq 1773 \text{ K}$$

3.1.5 流体换热计算流程

氦气流动换热的计算流程如下：

- (1) 设置氦气入口温度、入口压力和入口流速；
- (2) 第一步计算时先假设无横流，求解能量守恒方程可得到全局网格温度；
- (3) 由(2)求得的温度，根据无横流的假设条件可得到全部网格的出口处速度；
- (4) 根据(3)计算得到的出口速度求解轴向动量守恒方程，得到全部网格的压力；
- (5) 得到压力后根据径向动量守恒方程，可解出全部网格的横流速度；
- (6) 横流速度更新后，需要对温度、出口速度进行更新。首先由质量守恒方程得到更新后全部网格的轴向流量；
- (7) 由更新后的轴向流量及横流速度求解能量守恒方程，对网格温度进行更新，并由更新后的温度得到新的物性参数及轴向流速；
- (8) 根据更新后的轴向流速，由轴向动量守恒方程，求解得到全部网格的压力；
- (9) 判断压力是否收敛，若收敛则结束计算，若不收敛则回到第(5)步继续更新，直至收敛。

3.2 燃料球传热计算

燃料球的表面温度会影响冷却剂气体、固体反射层和邻近的燃料球。同时，燃料球中的 TRISO 颗粒的温度决定了重要的燃料多普勒温度反馈等效应，因此，燃料球的温度计算是高温气冷堆热工计算的重要部分。

3.2.1 导热方程

由总能量守恒推导出固体中随时间变化的热传导方程：

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + q \quad (3-28)$$

其中， ρ 为密度， c_p 为定压比热容， t 为时间， T 为固体中的温度， λ 为热传导率， q 为单位体积时间的产热量。

对于具有球对称性的求坐标（具有对称热分布的燃料球），该方程简化为：

$$\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) + q \quad (3-29)$$

其中， r 是从燃料球中心向外的径向距离。

3.2.2 边界条件

燃料球中心的边界条件为对称（或绝热）边界条件：

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \bigg|_{r=0} = 0 \quad (3-30)$$

燃料球表面的边界条件是一个流出边界(热流的符号将决定是流入还是流出)。边界处热流大小由边界环境决定，例如相邻燃料球的温度、冷却剂流量和温度。将 $S(t)$ 定义为每个网格单元的均匀体积源热密度， $S(t)$ 是产生于燃料球边界的均匀化网格单元值。为了保证整体的能量守恒，某个特定网格单元的 $S(t)$ 将用于定义单个燃料球边界的边界条件。因此，将 $S(t)$ 乘以网格单元的体积 V 再除以单个网格单元燃料球的总表面积 A 就可以得到燃料球表面单位表面积上的热流：

$$\frac{V}{A} S(t) = -\lambda \frac{\partial T(t)}{\partial r} \bigg|_{r=R} = \left(\alpha^* \frac{V}{A} \right) (T(R, t) - \theta^*(t)) \quad (3-31)$$

上式中, α^* 是考虑对流换热、球与球之间辐射和热传导的单位体积有效传热系数, $\theta^*(t)$ 是燃料球表面裸露的区域的代表性温度。因此, α^* 大于燃料球和冷却剂之间的传热系数, 同时 $\theta^*(t)$ 也大于燃料球周围冷却气体的温度。

3.2.3 燃料球导热方程的求解

将燃料球划分为有限数量的球壳, 如图 26 所示。

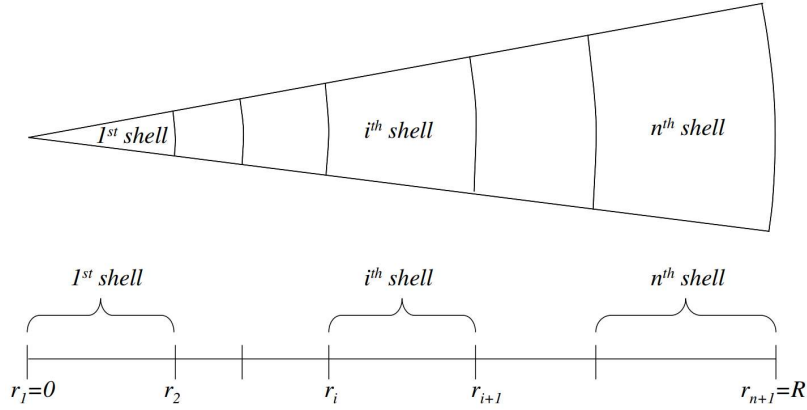


图 26 一维燃料球壳示意图

将式(3-28)在第 i^{th} 层, 体积 V_i 、时间步长 δt 内积分可以得到:

$$\int_t^{t+\delta t} \int_{V_i} \frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} dV dt = \int_t^{t+\delta t} \int_{V_i} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) dV dt + \int_t^{t+\delta t} \int_{V_i} q dV dt \quad (3-32)$$

将高斯定理应用于热传导项(式(5-5)右侧第一项), 将体积积分改写为曲面积分:

$$\int_t^{t+\delta t} \int_{V_i} \frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} dV dt = \int_t^{t+\delta t} \int_{\partial V_i} (\lambda \nabla T)_f \cdot d\vec{S} dt + \int_t^{t+\delta t} \int_{V_i} q dV dt \quad (3-33)$$

上式中 ∂V_i 是第 i^{th} 层的表面(边界)。

对于足够小的壳层, 式(3-33)的有限体积空间离散化可简化为:

$$\int_t^{t+\delta t} \left(\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} \right)_i V_i dt = \int_t^{t+\delta t} \sum_{f=\text{all faces}} (\lambda \nabla T)_f \cdot \vec{A}_f dt + \int_t^{t+\delta t} q_i V_i dt \quad (3-34)$$

上式中 \vec{A}_f 是指向外部的面的面积向量。

将式(3-34)除以体积 V_i 可以得到:

$$\int_t^{t+\delta t} \left(\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} \right)_i dt = \int_t^{t+\delta t} \frac{1}{V_i} \sum_{f=\text{all faces}} (\lambda \nabla T)_f \cdot \vec{A}_f dt + \int_t^{t+\delta t} q_i dt \quad (3-35)$$

引入一个新的变量 c_i ，该变量代表壳层的净热流出：

$$c_i = -\frac{1}{V_i} \sum_{f=\text{all faces}} \left(\lambda \vec{\nabla} T \right)_f \cdot \vec{A}_f \quad (3-36)$$

将(3-36)代入到(3-35)中，可以得到：

$$\int_t^{t+\delta t} \left(\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} \right)_i dt = - \int_t^{t+\delta t} c_i dt + \int_t^{t+\delta t} q_i dt \quad (3-37)$$

对于小时间步长，方程(3-37)的二阶 Crank-Nicolson 时间积分可简化为：

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\delta t} \left(\frac{\partial \rho c_p T}{\partial t} \right)_i (T_i^{t+\delta t} - T_i^t) &= - \frac{c_i^t + c_i^{t+\delta t}}{2} + \frac{q_i^t + q_i^{t+\delta t}}{2} \\ &= - \frac{c_i^t + c_i^{t+\delta t}}{2} + q_i^{t+\delta t/2} \end{aligned} \quad (3-38)$$

式中 $T_i, i=1,2,\dots,n$ 是壳层的平均温度，但是，在应用有限体积法时，隐含地假定壳平均值是控制体积中心的点值的良好近似值。上标 $t, t + \delta t/2, t + \delta t$ 是变化的计算时间步长，即为时间步长的开始、中间和结束。

方程(3-38)用一个包含两个未知数——温度 T 和净热通量 c 的方程完成了有限体积空间和时间的积分。通过引入新变量 \tilde{Q} 并使用修正的稳态空间矩阵 \underline{D} ，可以将方程(3-38)转换为仅包含未知净热通量 c 的方程。为此，将等式(3-38)乘以 2，同时等式两边减去包含代表性环境温度 θ^* 的项，并进行代数运算，可以获得：

$$\frac{2}{\partial t} (\rho c_p)_i^{t+\delta t/2} (T_i^{t+\delta t} - \theta^{*t+\delta t}) + c_i^{t+\delta t} = \tilde{Q}_i^{t+\delta t/2} \quad (3-39)$$

上式中，

$$\tilde{Q}_i^{t+\delta t/2} = \frac{2}{\partial t} (\rho c_p)_i^{t+\delta t/2} T_i^t - c_i^t + 2q_i^{t+\delta t/2} - \frac{2}{\partial t} (\rho c_p)_i^{t+\delta t/2} \theta^{*t+\delta t} \quad (3-40)$$

在矩阵形式中，等式(3-40)可化为：

$$\frac{2}{\partial t} (\rho c_p)^{t+\delta t/2} \left(\vec{T}^{t+\delta t} - \vec{\theta}^{*t+\delta t} \right) + \vec{c}^{t+\delta t} = \vec{\tilde{Q}}^{t+\delta t/2} \quad (3-41)$$

其中

$$\rho c_p \Rightarrow \rho c_{p\ ij} = \begin{cases} \rho c_p & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases} \quad (3-42)$$

引入新的矩阵 \underline{D} ，使得：

$$\underline{D}^{t+\delta t/2} \vec{c}^{t+\delta t} = (\rho c_p)^{t+\delta t/2} \begin{pmatrix} \vec{T}^{t+\delta t} \\ -\vec{\theta}^{*t+\delta t} \end{pmatrix} \quad (3-43)$$

或

$$\vec{T}^{t+\delta t} = \vec{\theta}^{*t+\delta t} + \left((\rho c_p)^{t+\delta t/2} \right)^{-1} \underline{D}^{t+\delta t/2} \vec{c}^{t+\delta t} \quad (3-44)$$

将等式(3-43)代入(3-41)，可得：

$$\left(\frac{2}{\partial t} \underline{D}^{t+\delta t/2} + \underline{1} \right) \vec{c}^{t+\delta t} = \vec{Q}^{t+\delta t/2} \quad (3-45)$$

或

$$\vec{c}^{t+\delta t} = \left(\frac{2}{\partial t} \underline{D}^{t+\delta t/2} + \underline{1} \right)^{-1} \vec{Q}^{t+\delta t/2} \quad (3-46)$$

其中 $\underline{1}$ 是单位矩阵。

公式(3-40)可以根据已知值计算 $\vec{Q}_i^{t+\delta t/2}$ 。如果矩阵 $\underline{D}^{t+\delta t/2}$ 已知，公式(3-45)可以用来计算 $\vec{c}^{t+\delta t}$ 。将后两个变量代入方程(3-44)，用来计算平均壳温 $\vec{T}^{t+\delta t}$ 。定义：

$$\underline{D}^{t+\delta t/2} = (\rho c_p)^{t+\delta t/2} \left[\frac{\underline{\varepsilon}}{\alpha^*} \underline{S} + \underline{A}_1 (\underline{\Lambda}^{t+\delta t/2})^{-1} + (\underline{A}_2 + \underline{T}_2) (\underline{\Lambda}^{t+\delta t/2})^{-1} \underline{B} + \underline{T}_1 (\underline{\Lambda}^{t+\delta t/2})^{-1} \right] \quad (3-47)$$

其中矩阵 $\underline{\Lambda}$ 是包含每层球壳的导热系数的对角矩阵，矩阵 $\underline{S}, \underline{B}, \underline{A}_1, \underline{T}_1, \underline{T}_2$ 包含几何数据，具体形式如下所示：

$$\underline{\Lambda} \Rightarrow \lambda_{ij} = \lambda_i \delta_{ij} = \begin{cases} \lambda_j & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases} \quad (3-48)$$

$$\underline{\Lambda}^{-1} \Rightarrow \lambda_{ij} = \frac{1}{\lambda_j} \delta_{ij} = \begin{cases} 1/\lambda_j & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases} \quad (3-49)$$

$$\underline{S} \Rightarrow S_{ij} = 1/R^3 (r_{j+1}^3 - r_j^3) \quad \text{for all } i \quad (3-50)$$

$$\underline{B} \Rightarrow B_{ij} = \begin{cases} 1/3 (r_{j+1}^3 - r_j^3) & \text{for } i < j \\ 1/3 r_{j+1}^3 & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i > j \end{cases} \quad (3-51)$$

$$\underline{A}_1 \Rightarrow A_{1\ ij} = \begin{cases} \frac{1}{6}(r_{j+1}^2 - r_j^2) & \text{for } i < j \\ \frac{1}{6}r_{j+1}^2 & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i > j \end{cases} \quad (3-52)$$

$$\underline{A}_2 \Rightarrow A_{2\ ij} = \begin{cases} \left(\frac{1}{r_j} - \frac{1}{r_{j+1}} \right) & \text{for } i < j \\ -\frac{1}{r_{j+1}} & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i > j \end{cases} \quad (3-53)$$

$$\underline{T}_1 = T_{1\ ij} = \begin{cases} \frac{-1(r_{j+1}^5 - r_j^5)}{10(r_{j+1}^3 - r_j^3)} & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases} \quad (3-54)$$

$$\underline{T}_2 = T_{2\ ij} = \begin{cases} \frac{3(r_{j+1}^2 - r_j^2)}{2(r_{j+1}^3 - r_j^3)} & \text{for } i = j \\ 0 & \text{for } i \neq j \end{cases} \quad (3-55)$$

注意不要将包含空间元素的矩阵 \underline{T}_1 和 \underline{T}_2 与包含燃料球球壳平均温度的温度矢量 \vec{T} 混淆。

方程(3-44)用于计算平均壳温 $\vec{T}^{t+\delta t}$ 。对于 $t \rightarrow \infty$ 时的稳态计算, 根据等式(3-37), 时间项变为零, 因此 $c_i = q_i$ 。从等式(3-47)可以得出, 对于平衡情况:

$$\underline{D}^{t_\infty} = (\rho c_p)^{t_\infty} \left[\frac{\varepsilon}{\alpha^*} \underline{S} + \underline{A}_1 (\underline{\Lambda}^{t_\infty})^{-1} + (\underline{A}_2 + \underline{T}_2) (\underline{\Lambda}^{t_\infty})^{-1} \underline{B} + \underline{T}_1 (\underline{\Lambda}^{t_\infty})^{-1} \right] \quad (3-56)$$

将上述内容代入方程(3-44), 得到稳态计算的平均壳温:

$$\begin{aligned} \vec{T}^{t_\infty} &= \vec{\theta}^{*t_\infty} + \left((\rho c_p)^{t_\infty} \right)^{-1} \underline{D}^{t_\infty} \vec{q}^{t_\infty} \\ &= \vec{\theta}^{*t_\infty} + \left[\frac{\varepsilon}{\alpha^*} \underline{S} + \underline{A}_1 (\underline{\Lambda}^{t_\infty})^{-1} + (\underline{A}_2 + \underline{T}_2) (\underline{\Lambda}^{t_\infty})^{-1} \underline{B} + \underline{T}_1 (\underline{\Lambda}^{t_\infty})^{-1} \right] \vec{q}^{t_\infty} \end{aligned} \quad (3-57)$$

3.2.4 燃料球中心和表面温度

从以单元为中心有限体积角度出发, 采用基于近边界梯度的外推法来预测边界值。由方程(3-36)可知, 中心壳体具有以下特征:

$$\begin{aligned}
c_1 &= -\frac{1}{V_1} \sum_{f=f_1, f_2} \left(\lambda \nabla T \right)_f \cdot \vec{A}_f \\
&= \frac{1}{V_1} \left[\left(\lambda \nabla T \right)_{f_1} A_{f_1} - \left(\lambda \nabla T \right)_{f_2} A_{f_2} \right]
\end{aligned} \tag{3-58}$$

上式中， f_1 和 f_2 分别表示在 $r_1=0$ 和 r_2 处的球壳边界， $(\lambda \nabla T)_f$ 表示在球面面积矢量方向上的温度梯度的分量。除等式(3-58)外，燃料球最内层的关系式为：

$$V_1 = \frac{4}{3} \pi r^3 \tag{3-59}$$

$$A_{f_2} = 4 \pi r_2^2 \tag{3-60}$$

$$(\nabla T)_{f_1} = \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{f_1} = \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r_1} = 0 \tag{3-61}$$

通过代数运算将方程式(3-61)，(3-60)和(3-59)代入(3-58)进行代数运算可得：

$$(\nabla T)_{f_2} = \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{f_2} = -\frac{V_1 c_1}{A_{f_2} \lambda_1} = -\frac{r_2}{3} \frac{c_1}{\lambda_1} \tag{3-62}$$

等式(3-61)和(3-62)给出了燃料球中心壳两个边界的温度梯度。可以合理地假设，燃料球最内层内任何一点的温度梯度都应由两个边界梯度来界定，即：

$$0 \leq \left| \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r_1 \leq r \leq r_2} \right| \leq \left| \frac{r_2}{3} \frac{c_1}{\lambda_1} \right| \tag{3-63}$$

因此，可以引入 $0 \leq \beta \leq 1$ 使得：

$$\frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r_1 \leq r \leq r_2} = -\beta \frac{r_2}{3} \frac{c_1}{\lambda_1}, \quad 0 \leq \beta \leq 1 \tag{3-64}$$

通常，在有限体积近似的精度范围内，假定 β 在控制体积内呈线性变化。

图 27 给出了用于计算燃料球中心温度的外推示意图。

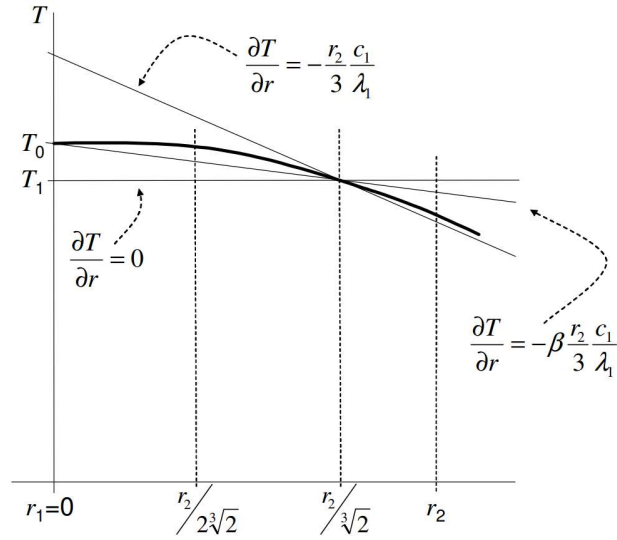


图 27 燃料球中心温度外推示意图

燃料球中心的离散梯度和等式(3-64)中定义的梯度用于获得:

$$\frac{T_1 - T_0}{\frac{r_2}{\sqrt[3]{2}}} = -\beta \frac{r_2}{3} \frac{c_1}{\lambda_1} \quad (3-65)$$

方程(3-65)的可转化为:

$$T_0 = T_1 - \frac{-\beta}{3\sqrt[3]{2}} \frac{r_2^2}{1} \frac{c_1}{\lambda_1} \quad (3-66)$$

规定:

$$\begin{aligned} T_0 &= T_1 - \frac{-1}{10} \frac{(r_2^5 - r_1^5)}{(r_1^3 - r_1^3)} \frac{c_1}{\lambda_1} \\ &= T_1 - \frac{-1}{10} \frac{r_2^2}{1} \frac{c_1}{\lambda_1} \end{aligned} \quad (3-67)$$

由等式(3-66)和(3-67)可以得到 β 的数值为:

$$\frac{-\beta}{3\sqrt[3]{2}} = \frac{-1}{10} \Rightarrow \beta = \frac{3\sqrt[3]{2}}{10} = 0.377976 \quad (3-68)$$

基于线性变化和图 26 所示的几何考虑, β 的数值为:

$$\beta = \frac{1}{2\sqrt[3]{2}} = 0.39685 \quad (3-69)$$

燃料球的表面温度通过方程(3-31)计算:

$$T_{n+1}^{t+\delta t} = \theta^{*t+\delta t} + \frac{1}{\alpha^*} \frac{A}{V} \left(-\lambda \frac{\partial T(t)}{\partial r} \Big|_{r=R} \right)^{t+\delta t} \quad (3-70)$$

整个燃料球壳的 $c_i V_i$ 的总和以零项开头, 然后是不同壳层边界的成对热流, 这些热流相互抵消, 并以非零项结束, 该非零项包含从燃料球外边界处流出的热流:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n c_i V_i &= 0 + \left((-\lambda \nabla T)_{f_1} A_{f_1} + (\lambda \nabla T)_{f_1} A_{f_1} \right) + (0) + \dots - (\lambda \nabla T)_{f_n} A_{f_n} \\ &= -(\lambda \nabla T)_{f_n} A_{f_n} \end{aligned} \quad (3-71)$$

方程(3-71)可化简为如下形式:

$$\begin{aligned} -\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} &= -(\lambda \nabla T)_{f_n} \\ &= \frac{1}{A_{f_n}} \sum_{i=1}^n c_i V_i \end{aligned} \quad (3-72)$$

对等式(3-72)进一步变形可以产生适用于代入等式(3-70)的表达式:

$$\begin{aligned} -\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} &= \frac{1}{A_{f_n}} \sum_{i=1}^n c_i V_i \\ &= \frac{N}{N} \frac{1}{A_{f_n}} \sum_{i=1}^n c_i V_i = N \frac{1}{A} \sum_{i=1}^n c_i V_i \\ &= \frac{\varepsilon V}{V_R} \frac{1}{A} \sum_{i=1}^n c_i V_i \\ &= \frac{V}{A} \frac{\varepsilon}{V_R} \sum_{i=1}^n c_i V_i \end{aligned} \quad (3-73)$$

上式中, V_R 是单个燃料球的体积, N 是每个网格单元内燃料球的数量。

将等式(3-73)代入等式(3-70), 得出瞬态计算的燃料球表面温度:

$$\begin{aligned} T_{n+1}^{t+\delta t} &= \theta^{*t+\delta t} + \frac{1}{\alpha^*} \frac{A}{V} \left(\frac{V}{A} \frac{\varepsilon}{V_R} \sum_{i=1}^n c_i V_i \right)^{t+\delta t} \\ &= \theta^{*t+\delta t} + \frac{1}{\alpha^*} \left(\sum_{i=1}^n c_i \varepsilon \frac{V_i}{V_R} \right)^{t+\delta t} \end{aligned} \quad (3-74)$$

对于与时间无关的稳态情况, 等式(3-74)简化为:

$$\begin{aligned}
T_R^{t_\infty} &= \theta^{*t_\infty} + \frac{1}{\alpha^*} \left(\sum_{i=1}^n q \varepsilon \frac{V_i}{V_R} \right)^{t_\infty} \\
&= \theta^{*t_\infty} + \frac{1}{\alpha^*} q^{t_\infty} \varepsilon \left(\frac{\sum_{i=1}^n V_i}{V_g} \right) \\
&= \theta^{*t_\infty} + \frac{1}{\alpha^*} q^{t_\infty} \varepsilon \left(\frac{V_R}{V_R} \right) \\
&= \theta^{*t_\infty} + \frac{1}{\alpha^*} q^{t_\infty} \varepsilon
\end{aligned} \tag{3-75}$$

3.2.5 不同批次燃料球的热源密度

公式(3-28)中使用的热源 q 是单位固体体积时间的热量,与位置和燃料球类型相关。计算网格单元的单位体积时间分别产生一个局部和非局部热源 Q_l 和 Q_n 。对于不同批次燃料,局部裂变热系数用 F_k 表示,则:

$$\sum_{k=1}^{\text{number of batches}} F_k = 1 \tag{3-76}$$

每个网格单元中特定类型或批次的燃料球的份额用 p_k 表示,同时:

$$\sum_{k=1}^{\text{number of batches}} p_k = 1 \tag{3-77}$$

等式(3-76)和(3-77)可用于计算 q_k ,第 k 批次的燃料球的单位体积时间内的热源如下:

$$\begin{aligned}
q_k &= Q_n \frac{V}{\varepsilon V} + Q_f \frac{V}{1} \frac{F_k}{1} \frac{1}{p_k \varepsilon V} \\
&= Q_n \frac{1}{\varepsilon} + Q_f \frac{1}{\varepsilon} \frac{F_k}{p_k}
\end{aligned} \tag{3-78}$$

等式(3-78)表示在某一批次燃料中沉积的热量。不同壳层的热量可能会不同,需要区分每个燃料球的内部燃料区和外部石墨层,内部燃料区由均匀分布在石墨基体中的 TRISO 颗粒组成,外部石墨层没有燃料。局部热量沉积在内部燃料区域。为此,对于每个燃料元件外壳 $i=1,2,\dots,n$ 定义了局部热密度系数 ρ_{Q_i} ,非零

值表示存在燃料颗粒, $\rho_Q=0$ 表示不存在燃料颗粒。此外, ρ_{Q_i} 可以用于获得每个燃料壳的体积加权分布:

$$F_{Q_i} = \frac{\rho_{Q_i} V_i}{\sum_{i=1}^n \rho_{Q_i} V_i} \quad (3-79)$$

考虑不同的份额, 第 k 批次燃料球的不同球壳 $i=1, 2, \dots, n$ 的固体热源密度

q_{k_i} 为:

$$\begin{aligned} q_{k_i} &= Q_n \frac{1}{\varepsilon} + \left[Q_\ell \frac{1}{\varepsilon} \frac{F_k}{p_k} \right] \frac{V_R}{1} \frac{F_{Q_i}}{1} \frac{1}{V_i} \\ &= Q_n \frac{1}{\varepsilon} + \left[Q_\ell \frac{1}{\varepsilon} \frac{F_k}{p_k} \right] \frac{V_R}{1} \left(\frac{\rho_{Q_i} V_i}{\sum_{i=1}^n \rho_{Q_i} V_i} \right) \frac{1}{V_i} \\ &= Q_n \frac{1}{\varepsilon} + Q_\ell \left(\frac{\rho_{Q_i} V_R}{\varepsilon \sum_{i=1}^n \rho_{Q_i} V_i} \right) \frac{F_k}{p_k} \end{aligned} \quad (3-80)$$

3.2.6 燃料球有效边界条件

有效边界传热系数适用于考虑辐射、传导和对流的有效温度环境。在当前的几何离散中, 每个网格单元中有若干个燃料球。因此, 网格单元的体积 V 比单个燃料球的体积 V_R 大得多。基于固体分数 ε 的多孔介质流动模型用于模拟球床堆芯中的流动和相关现象, 网格单元固体部分的燃料球在宏观上经历了两种热损失 (或热增益), 一种是在特定网格单元中周围气体部分的热损失 (或热增益), 另一种是相邻网格单元的固体部分的热损失 (或热增益)。

从燃料球表面中的网格单元流向周围气体 J_g 的热量为:

$$J_g = \alpha A (\bar{T}_R - T_g) \quad (3-81)$$

其中, A 是暴露在网格单元中气体部分的所有燃料球表面的总和, \bar{T}_R 是网格单元中燃料球的平均表面温度, T_g 是网状单元周围气体部分的温度, α 是网格单元中的燃料球表面和周围的冷却气体之间的温差。

流向相邻固体网格单元 J_s 可写成：

$$J_s = \sum_f J_f \quad (3-82)$$

其中， J_f 表示流过网格单元面 f 的热流：

$$J_f = \frac{\lambda_f A_f}{\delta \ell_f} (\bar{T}_{Rf} - \bar{T}_{Rfn}) \quad (3-83)$$

其中， A_f 是用来表示被标记的表面的边界指向的坐标方向， $\delta \ell_f$ 表示相邻网格单元中心间距， \bar{T}_{Rf} 表示距表面 f 最近的均匀化球形燃料中的细网格单元表面温度， \bar{T}_{Rfn} 表示均匀化燃料球与细网格单元相邻处温度， λ_f 表示用调和平均法计算网格单元表面的有效热传导。

将等式(3-83)代入等式(3-82)得到：

$$\begin{aligned} J_s &= \sum_f \frac{\lambda_f A_f}{\delta \ell_f} (\bar{T}_{Rf} - \bar{T}_{Rfn}) = \sum_f \alpha_f (\bar{T}_{Rf} - \bar{T}_{Rfn}) \\ &= \sum_f \alpha_f \bar{T}_{Rf} - \sum_f \alpha_f \bar{T}_{Rfn} \\ &= \left(\frac{\sum_f \alpha_f \bar{T}_{Rf}}{\bar{T}_R} \right) \bar{T}_R - \sum_f \alpha_f \bar{T}_{Rfn} \\ &= V \alpha_s \bar{T}_R - V \sum_f \alpha_f \bar{T}_{Rfn} \end{aligned} \quad (3-84)$$

其中， $\alpha_f = \frac{\lambda_f A_f}{V \delta \ell_f}$ ， $\alpha_s = \left(\frac{\sum_f \alpha_f \bar{T}_{Rf}}{V \bar{T}_R} \right)$ ， \bar{T}_R 为网格单元中燃料球表面温度。

每个网格单元的均匀化体源热密度为：

$$\begin{aligned} S(t) &= (J_g + J_s) / V \\ &= \frac{\alpha A}{V} (\bar{T}_R - T_g) + \frac{\alpha_s}{V} \bar{T}_R - \sum_f \alpha_f \bar{T}_{Rfn} \\ &= \left(\frac{\alpha A}{V} + \alpha_s \right) \bar{T}_R - \left(\frac{\alpha A}{V} + \sum_f \alpha_f \bar{T}_{Rfn} \right) \end{aligned} \quad (3-85)$$

等式(3-85)表示燃料元件的边界热通量，这些热通量来源可能是来自离开某个网络单元的固体部分，或是穿过网格单元边界从而进入相邻网格单元的固体部

分,或是到达所考虑的网格单元内的气体部分。区分不同通道的燃料球,并以下列方式将等式(3-85)应用于第 k 批次的燃料球:

$$S_k(t) = \left(\frac{\alpha A}{V} + \alpha'_f \right) T_{Rk} - \left(\frac{\alpha A}{V} + \sum_f \alpha_f \bar{T}_{Rfn} \right) \quad (3-86)$$

其中, T_{Rk} 表示第 k 批次的燃料球表面温度。等式(5-59)成立的前提是不同批次释放的热量加起来等于预测释放的热量,这里预测释放的热量是用每个网格单元的均匀化体源热密度计算得出:

$$\begin{aligned} S(t) &= \left(\sum_k p_k V S_k(t) \right) \frac{1}{V} \\ &= \sum_k p_k S_k(t) \end{aligned} \quad (3-87)$$

将方程(3-85)和(3-86)代入方程(3-87),经过整理,得到网格单元中所有燃料球表面温度的表达式:

$$\bar{T}_R = \sum_k p_k T_{Rk} \quad (3-88)$$

等式(3-58)给出了每个网格单元体积的净速率的表达式,在该速率下,所有波长的热辐射向所有方向离开相同批次的燃料球表面,如第 k 批次燃料球。因此,如果乘以网格单元的体积,其结果将是由于燃料球之间辐射而流过第 k 批次燃料球表面的热量。等式(3-86)给出了相同批次燃料球的每个网格单元的均匀化体源热密度的表达式,例如第 k 批次燃料球。因此,如果乘以与第 k 批次燃料球的网格单元的体积 $p_k V$,结果将是由于宏观床层热传导、辐射和对流而流过第 k 批次燃料球表面的热量。因此,第 k 批次燃料球的每个网格单元的均匀化体源热密度为:

$$\begin{aligned} S_k(t) &= \left(\frac{\alpha A}{V} + \alpha_s \right) T_{Rk} - \left(\frac{\alpha A}{V} + \sum_f \alpha_f \bar{T}_{Rfn} \right) + \sum_j \alpha_j (T_{Rk} - T_{Rj}) \\ &= \left(\left(\frac{\alpha A}{V} + \alpha_s \right) + \sum_j \alpha_j \right) T_{Rk} - \left(\left(\frac{\alpha A}{V} + \sum_f \alpha_f \bar{T}_{Rfn} \right) + \sum_j \alpha_j T_{Rj} \right) \end{aligned} \quad (3-89)$$

其中, α_j 是关于表面温度 T_{Rj} 和 T_{Rk} 的非线性函数,而 T_{Rj} 和 T_{Rk} 通过迭代方法计算:

$$\alpha_j = \frac{1}{p_k} \left(\left(\frac{3\varepsilon_{sf}\sigma}{R} \right) p_k \frac{\varepsilon_k}{\varepsilon} \right) \left(p_j \varepsilon_j (T_{Rk}^2 + T_{Rj}^2) (T_{Rk} + T_{Rj}) \right) \quad (3-90)$$

等式(3-90)可以写为:

$$S_k(t) = \alpha_k^* (T_{Rk} - \theta_k^*) \quad (3-91)$$

其中,

$$a_k^* = \left(\left(\frac{\alpha A}{V} + \alpha_s \right) + \sum_j \alpha_j \right) \quad (3-92)$$

$$\theta_k^* = \frac{1}{a_k^*} \left(\left(\frac{\alpha A}{V} + \sum_f \alpha_f \bar{T}_{Rfn} \right) + \sum_j \alpha_j T_{Rj} \right) \quad (3-93)$$

3.2.7 燃料球流出的净热量

对于稳态计算, 根据能量平衡关系, 所有燃料球中释放的热量都将流出燃料球。因此, 网格单元的单位体积释热率 Q 可由等式(3-78)计算得出:

$$\begin{aligned} Q &= \left(\sum_k q_k \varepsilon V p_k \right) / V \\ &= \varepsilon \sum_k q_k p_k \\ &= \sum_k \left(Q_n + Q_\ell \frac{F_k}{p_k} \right) p_k \end{aligned} \quad (3-94)$$

对于瞬态计算, 燃料球分为两个区域, 即所有内层燃料球壳和外层燃料球壳。周围的氦气和相邻网格单元的固体中的可用热量是从燃料球的内层流出的热量以及沉积在最外面的燃料球壳中的热量。

设 n' 表示对应于网格最后一层的细网格间隔, 然后间隔 $1, 2, \dots, n'$ 表示内壳, $n' + 1, \dots, n$ 表示外壳。流出内壳的热量为:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n'} c_i V_i &= 0 + \left((-\lambda \nabla T)_{f_1} A_{f_1} + (\lambda \nabla T)_{f_1} A_{f_1} \right) + (0) + \dots - (\lambda \nabla T)_{f_{n'}} A_{f_{n'}} \\ &= -(\lambda \nabla T)_{f_{n'}} A_{f_{n'}} \end{aligned} \quad (3-95)$$

外壳中沉积的热量为 $\sum_{i=n'+1}^n q_i V_i$ 。因此, 瞬态网格单元的每网格单元体积时间的

的平均热源密度为:

$$\begin{aligned} Q(t) &= \sum_k \left(\left(\sum_{i=1}^{n'} c_{ki} V_i + \sum_{i=n'+1}^n q_{ki} V_i \right) \frac{\varepsilon V}{V_R} \frac{p_k}{1} \right) \frac{1}{V} \\ &= \sum_k \left(\sum_{i=1}^{n'} c_{ki} \varepsilon \frac{V_i}{V_R} + \sum_{i=n'+1}^n q_{ki} \varepsilon \frac{V_i}{V_R} \right) p_k \end{aligned} \quad (3-96)$$

基于上述理论模型便可求解得到燃料球的温度分布。

以上对球床式高温气冷堆物理和热工计算的主要核心模块进行了技术方案阐述，包含了均匀化群常数计算、三维堆芯计算、中子泄漏修正、燃耗计算、反应性计算、探测器响应计算、动力学计算、燃料管理、流体换热计算、燃料球传热计算。基于上述核心功能模块，采取一定的计算流程，便可具备反应堆堆芯分析的能力，能够满足球床式高温堆堆芯物理热工设计、校算和电站堆芯燃料管理的要求。研制的软件能够具备球型燃料元件及全球床堆芯物理热工计算功能，包括功率能力、堆芯物理场时空分布、反应性计算、探测器响应、动力学参数等，也同时具备反应堆运行预测、制定反应性计划、评价换料安全参数的功能。