

# 微观燃耗方程的求解算法比较与性能分析

卑 华<sup>1</sup>, 张经瑜<sup>2</sup>, 陈其昌<sup>1</sup>, 司胜义<sup>1</sup>

(1. 上海核工程研究设计院, 上海 200233; 2. 上海交通大学, 上海 200240)

**摘要:** 燃耗方程的求解是燃耗计算的核心。常见的算法包括泰勒方法、Pade 方法、子空间方法、切比雪夫有理近似方法和龙格库塔法等。通过数值实验, 对每种算法在精度、效率、稳定性方面进行分析比较。结果表明: 子空间方法、泰勒方法在计算效率方面具有优势; 计算精度及稳定性方面, 泰勒方法和 Pade 方法均占优势。综合考虑, 泰勒方法在 3 个方面均表现突出, 可作为燃耗计算的优选算法。

**关键词:** 燃耗计算; 指数矩阵; 燃耗算法

中图分类号: TL11

文献标志码: A

文章编号: 1000-6931(2013)S0-0335-03

doi: 10. 7538/yzk. 2013. 47. S0. 0335

## Comparison and Performance Analysis of Microscopic Depletion Equation Solving Method

BEI Hua<sup>1</sup>, ZHANG Jing-yu<sup>2</sup>, CHEN Qi-chang<sup>1</sup>, SI Sheng-yi<sup>1</sup>

(1. Shanghai Nuclear Engineering Research & Design Institute, Shanghai 200233, China;

2. Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

**Abstract:** The solving of depletion equation is the key to carry burnup calculation out. The common methods are Taylor method, Pade method, Krylov method, Chebyshev rational approximation method (CRAM) and Runge-Kutta method, and so on. By means of numerical experiment, analysis comparison was undertaken from angles of efficiency, accuracy and stability. The results show that Krylov method and Taylor method take the advantage in efficiency, and Taylor method and Pade method take advantage in both accuracy and stability. In a word, Taylor method behaves best as a whole, which can be chosen as the candidate for the final depletion method.

**Key words:** burnup calculation; exponential matrix; depletion method

燃耗计算是整个反应堆堆芯计算中一非常重要的方面, 它为组件输运或堆芯扩散计算提供详细的核数据信息。而燃耗方程的求解是燃耗程序的核心, 本文侧重于算法的实现, 并对不同算法在精度、效率、稳定性等方面给予评价。

### 1 燃耗方程基本理论

燃耗基本方程是燃耗算法求解的对象, 它表达了核素密度随燃耗变化的一般规律。通常情况下, 反应堆中核素密度的变化可由裂变、衰变、俘获等反应引起, 燃耗方程的一般表达式为:

$$\frac{d\mathbf{N}(t)}{dt} = \left. \frac{d\mathbf{N}(t)}{dt} \right|_{\text{fission}} + \left. \frac{d\mathbf{N}(t)}{dt} \right|_{\text{decay}} + \left. \frac{d\mathbf{N}(t)}{dt} \right|_{\text{capture}} = \mathbf{A}(t)\mathbf{N}(t)$$

其中： $\mathbf{N}$ 为核密度； $\mathbf{A}$ 为系数矩阵。该方程的解为 $\mathbf{N}(t) = e^{\mathbf{A}t}\mathbf{N}_0$ ，即指数矩阵表达式，其中 $\mathbf{N}_0$ 为初始核密度。

## 2 燃耗算法介绍

### 1) 泰勒方法(Taylor)<sup>[1-2]</sup>

$$\mathbf{N}_1 = \left( I + \frac{\Delta t}{1!}\mathbf{A} + \frac{(\Delta t)^2}{2!}\mathbf{A}^2 + \dots + \frac{(\Delta t)^i}{i!}\mathbf{A}^i + \dots \right) \mathbf{N}_0 = \mathbf{N}_0 + \mathbf{A}\Delta t \left( \mathbf{N}_0 + \frac{\mathbf{A}\Delta t}{2} \left( \mathbf{N}_0 + \frac{\mathbf{A}\Delta t}{3} \left( \mathbf{N}_0 + \frac{\mathbf{A}\Delta t}{4} \left( \mathbf{N}_0 + \dots \right) \right) \right) \right)$$

其中， $\mathbf{N}_1$ 为 $\Delta t$ 时刻的核密度。

### 2) Pade方法<sup>[3]</sup>

$$\mathbf{N}_1 = e^{\mathbf{A}\Delta t}\mathbf{N}_0 = C_{pq}(\mathbf{A})^{-1}D_{pq}(\mathbf{A})\mathbf{N}_0$$

其中， $C_{pq}$ 、 $D_{pq}$ 为Pade方法( $p, q$ )阶展开系数。

### 3) 子空间方法(Krylov)<sup>[4]</sup>

构造  $p$  维子空间  $\mathbf{K}_p = \{\mathbf{N}_0, \mathbf{A}\Delta t\mathbf{N}_0, (\mathbf{A}\Delta t)^2\mathbf{N}_0, \dots, (\mathbf{A}\Delta t)^{p-1}\mathbf{N}_0\}$  的 1 组正交基  $\mathbf{V}_p: [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3, \dots, \mathbf{v}_p]$ 。令  $\beta\mathbf{V}_p\mathbf{e}_1 = \mathbf{N}_0$ ，则有  $\mathbf{N}_{1, \text{approx}} = \beta\mathbf{V}_p \exp(\mathbf{H}_p\Delta t)\mathbf{e}_1$ ，其中  $\mathbf{H}_p$  为海森伯格矩阵。

### 4) 切比雪夫有理近似(Cram方法)<sup>[5]</sup>

$$\mathbf{N}_1 = \alpha_0\mathbf{N}_0 + 2\text{Re}\left(\sum_{j=1}^{k/2}\alpha_j(\mathbf{A}t - \theta_j I)^{-1}\right)\mathbf{N}_0$$

其中： $\theta_j$ 为极点； $\alpha_j$ 为留数； $k$ 为展开项。

### 5) 四阶龙格库塔法(Runge-Kutta)<sup>[6]</sup>

$$\begin{cases} \mathbf{N}_1 = \mathbf{N}(t_0) \\ \mathbf{N}_2 = e^{-\frac{h}{2}\mathbf{B}}\mathbf{N}(t_0) + \frac{h}{2}e^{-\frac{h}{2}\mathbf{B}}\mathbf{E}\mathbf{N}_1 \\ \mathbf{N}_3 = e^{-\frac{h}{2}\mathbf{B}}\mathbf{N}(t_0) + \frac{h}{2}\mathbf{E}\mathbf{N}_2 \\ \mathbf{N}_4 = e^{-h\mathbf{B}}\mathbf{N}(t_0) + h e^{-\frac{h}{2}\mathbf{B}}\mathbf{E}\mathbf{N}_3 \\ \mathbf{N}(t_0 + h) = e^{-h\mathbf{B}}\mathbf{N}(t_0) + \end{cases}$$

$$\frac{h}{6}\left(e^{-h\mathbf{B}}\mathbf{E}\mathbf{N}_1 + 2e^{-\frac{h}{2}\mathbf{B}}\mathbf{E}\mathbf{N}_2 + 2e^{-\frac{h}{2}\mathbf{B}}\mathbf{E}\mathbf{N}_3 + \mathbf{E}\mathbf{N}_4\right)$$

其中： $\mathbf{B}$ 为 $\mathbf{A}$ 的近似矩阵； $\mathbf{E} = \mathbf{A} - \mathbf{B}$ 。

## 3 计算与分析

### 3.1 问题描述

表 1 列出 7 种初始核素的核密度，中子注量率为  $3.892 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ，容许的相对误

差为  $1 \times 10^{-12}$ 。输入库数据参考 ORIGEN2.1 程序的压水堆库文件中的数据，共计 221 个核素，包括 45 个锕系核素及 176 个裂变产物。计算环境为：奔腾双核 CPU-3.2 GHz；2.0 GB 内存；XP 操作系统。

表 1 初始核密度

Table 1 Initial nuclide density

核素	初始核密度	核素	初始核密度
<sup>235</sup> U	$8.90 \times 10^{19}$	<sup>236</sup> U	$2.35 \times 10^{21}$
<sup>238</sup> U	$6.62 \times 10^{21}$	<sup>239</sup> Pu	$2.55 \times 10^{21}$
<sup>240</sup> Pu	$9.93 \times 10^{18}$	<sup>241</sup> Pu	$7.80 \times 10^{18}$
<sup>242</sup> Pu	$2.02 \times 10^{18}$		

### 3.2 计算结果

#### 1) 效率比较

不同计算耗时比较示于图 1。由图 1 可看出，子空间方法在运算效率上具有绝对优势，这是由于子空间方法降低矩阵的阶数，计算量大幅减小；其次是泰勒方法和龙格库塔法，其主要操作是矩阵-矢量相乘操作；Pade 方法效率较低，这是因为 Pade 方法需进行耗时较多的线性方程组求解及矩阵相乘操作；切比雪夫方法效率最低，其主要运算时间消耗在 7 次逆矩阵求解上。

#### 2) 精度比较

泰勒方法在划分足够细子步长并展开足够多项时，其截断误差、舍入误差足够小，单个燃耗计算值趋近理论真解。本工作以泰勒方法结果作为参考解，并与其他方法进行比较。图 2 示出不同算法相对泰勒方法在计算 221 种核素核密度时的相对误差，燃耗步长为 10 d，纵坐标采用对数坐标。从图 2 可看出：Pade 方法相对

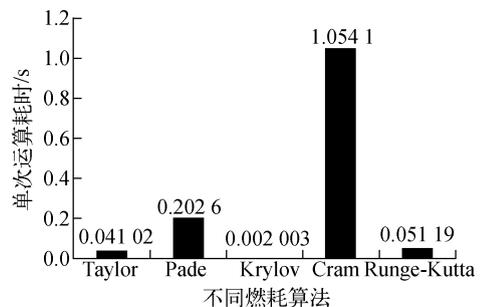


图 1 不同燃耗计算方法耗时比较

Fig. 1 Comparison of runtime between different methods

于泰勒方法的误差在 $-15 \sim -14$ 次方量级附近,相对误差最小;子空间方法相对误差次之,但不同核素相对误差区别较大,具有一定的核素相关,B区(包含次铀系核素 Cm、Bk 和 Cf)的相对误差较大,因子空间方法采用最小二乘剩余法来求近似的,因此对于较小质量份额的 Cm、Bk、Cf 引入的误差大;切比雪夫有理近似除 B 区引入的误差大外,其他核素相对于泰勒方法的误差在 $-8 \sim -7$ 次方量级附近;龙格库塔法相对于其他方法误差最大,这是由于该方法采用逐分步长的方法求解,因系统误差较大,无法获得较高精度的收敛解,该方法在计算 Cm、Bk 和 Cf 等核素时还出现负的核密度。

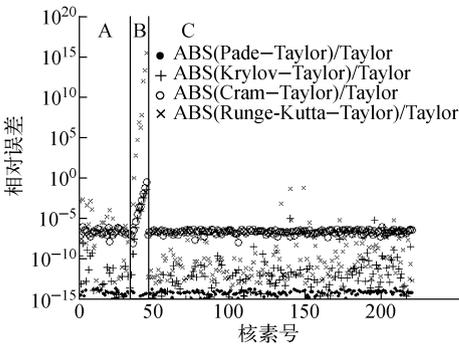


图 2 不同算法相对于泰勒方法计算结果的相对误差  
Fig. 2 Relative error of four methods with respect to Taylor method

### 3) 稳定性比较

不同算法在计算较长燃耗步长问题时可能存在误差累积与放大的情况,由于这种不稳定性因素的存在,有可能最终产生不合理的解(极大解或负解),因此不稳定性问题应尽量避免。采用 100 d 作为燃耗时长,1 步计算有可能导致误差积累,而 10 d $\times$ 10 步的接续计算相对更接近于真实解,因此对这两种方法的结果进行比较,以获得稳定性方面的结论。

不同算法稳定性比较示于图 3。从图 3 可看出:Pade 方法的稳定性最好,泰勒方法次之,但分布更窄;龙格库塔法与切比雪夫方法均较差,龙格库塔法对于大多核素稳定性优于切比雪夫方法,少数核素的稳定性较切比雪夫方法更为严重;子空间方法稳定性最差,这是由算法本身引起的,该算法对质量份额小的核素引起的误差有放大作用。

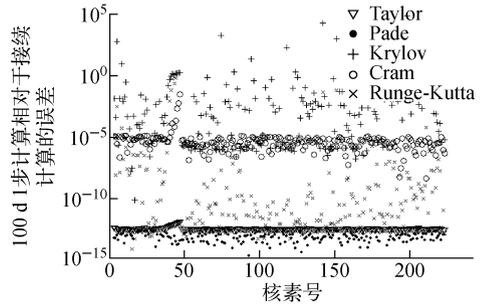


图 3 不同算法稳定性比较

Fig. 3 Stability comparison of different methods

## 4 结论

由上述分析可定性得到不同算法在计算精度、计算效率和稳定性等方面的特性及优劣。其中,子空间方法、泰勒方法在计算效率方面具有优势;计算精度及稳定性方面,泰勒方法和 Pade 方法均占优势。综合看,泰勒方法在 3 个方面均表现突出,可作为燃耗计算的优选算法。

### 参考文献:

- [1] HERMANN O W, WESTFALL R M. ORIGIN-S: Scale system module to calculate fuel depletion, actinide transmutation, fission product buildup and decay, and associated radiation source terms, NUREG/CR-0200/Rev 6 [R]. USA: Oak Ridge National Laboratory, 1998.
- [2] MOLER C, van LOAN C. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, twenty-five years[J]. Society for Industrial and Applied Mathematics Review, 2003, 45(1): 3-49.
- [3] ARIOLI M, CODENOTTI B, FASSINO C. The Pade method for computing the matrix exponential[J]. Linear Algebra and its Applications, 1996, 240(6): 111-130.
- [4] YAMAMOTO A, MASAHIRO T, NAOKI S. Numerical solution of stiff burnup equation with short half lived nuclides by the Krylov subspace method[J]. J Nucl Sci Technol, 2007, 44(2): 147-154.
- [5] PUSA M, LEPPANEN J. Computing the matrix exponential in burnup calculations[J]. Nucl Sci Eng, 2010, 164(2): 140-150.
- [6] CASTILLO P, SAAD Y. Preconditioning the matrix exponential operator with applications[J]. Journal of Scientific Computing, 1998, 13(3): 275-302.