

ARES 屏蔽程序的开发与初步验证

陈义学, 张斌, 臧启勇, 袁龙军, 陈蒙腾, 张鹏鹤, 赵京昌,
董正云, 马续波, 曹博, 吴军

(华北电力大学核科学与工程学院, 北京 102206)

摘要: ARES 是基于离散纵标法开发的一维、二维、三维多群各向异性散射屏蔽运输程序系统, 应用于核装置的屏蔽计算和分析。采用菱形差分、theta 权重、非连续有限元多种空间离散策略, 离散求积组自适应选择, 能处理多种边界条件和屏蔽源项。采用首次碰撞源法消除或减轻孤立点源、大空腔模型、强吸收介质等屏蔽问题中的射线效应难题。加速模块采用扩散综合加速、角度多重网格、区域分解的 MPI 并行, 能对不同屏蔽计算模型产生有效的加速效果。采用基准例题和程序对标的方法对部分模块进行初步验证。

关键词: 辐射运输; 屏蔽程序; 离散纵标; 射线效应; MPI 并行

中图分类号: TL32 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-6931(2013)S1-0477-06

doi: 10. 7538/yzk. 2013. 47. S1. 0477

Development and Preliminary Verification of ARES Shielding Code

CHEN Yi-xue, ZHANG Bin, ZANG Qi-yong, YUAN Long-jun,
CHEN Meng-teng, ZHANG Peng-he, ZHAO Jing-chang, DONG Zheng-yun,
MA Xu-bo, CAO Bo, WU Jun

(School of Nuclear Science and Engineering, North China Electric Power University, Beijing 102206, China)

Abstract: ARES is a multi-group of anisotropic scattering transport code based on discrete ordinates method. It is primarily used for the nuclear device's shielding calculation and analysis in the case of one-dimension, two-dimension and three-dimension. A variety of options allow spatial variables to be dispersed by the diamond difference, theta weight or discontinuous finite element method. The quadrature set can be adaptively selected. Variety of boundary conditions and sources can be treated. First collision source method was used to eliminate or mitigate the ray effect. The acceleration module consists of diffusion synthetic acceleration (DSA), angular multigrid and MPI parallel of domain decomposition. The preliminary verification for part module of the shielding code has been done by benchmark and reference code.

收稿日期: 2013-10-23; **修回日期:** 2013-11-24

基金项目: 国家科技重大专项资助项目(2011ZX06004-007-006); 中央高校基本科研业务费专项资金资助项目(13QN34); 新世纪优秀人才支持计划资助项目(NCET-11-0631)

作者简介: 陈义学(1972—), 男, 山东青岛人, 教授, 博士, 核能科学与工程专业

Key words: radiation transport; shielding code; discrete ordinates; ray effect; MPI parallel

辐射屏蔽系统设计是核工程设计的重要组成部分,其设计方案直接关系到核装置及人员的辐射安全,并极大的影响装置总体性能及工程造价等。我国在反应堆屏蔽设计中所用的关键程序均是从国外引进的,如基于离散纵标法(S_N 方法)的一维屏蔽程序 ANISN^[1]、二维屏蔽程序 DORT^[2]、三维屏蔽程序 TORT^[3]。 S_N 方法是目前国际上通用的核反应堆、核装置屏蔽计算的主要方法。基于 S_N 方法的屏蔽程序优点是计算速度快、精度高,适合解决“深穿透”问题等,但由于对方向离散的原因存在射线效应问题。三维 S_N 屏蔽计算方法由于空间几何网格非常多、中子能群数目较多、离散方向的数目等原因,对于反应堆屏蔽计算,计算量非常大,同时也非常耗时,因此屏蔽输运计算加速方法的研究也是重要内容。传统空间差分 S_N 方法不具备处理复杂几何的能力,为满足对屏蔽设计的更高要求,深入研究三维辐射屏蔽理论模型,对有效解决复杂几何处理、射线效应等关键技术问题,开发具有完全自主知识产权的屏蔽设计软件具有重要意义。

1 ARES 屏蔽程序系统

ARES 是基于离散纵标法开发的一维、二维、三维多群各向异性散射屏蔽输运程序系统,应用于核装置的屏蔽计算和分析。ARES 屏蔽程序计算流程图如图 1 所示。

核反应堆屏蔽设计中,一般采用国际上通用的离散纵标法求解输运方程,计算中子、光子的空间分布,得到屏蔽体中的剂量率分布,从而确定屏蔽设计方案。输运方程空间变量离散采用菱形差分、theta 权重、非连续有限元等,有限元^[4]适应于复杂几何问题的数值计算;能量变量采用分群理论;方向变量采用离散纵标法。稳态一阶多群输运方程为:

$$\Omega \cdot \nabla \psi_g(r, \Omega) + \Sigma_{t,g}(r) \psi_g(r, \Omega) = \frac{\chi_g}{4\pi} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}(r) \phi_{g'}(r) \sum_{n=0}^N \sum_{m=-n}^n \frac{2n+1}{4\pi} \Sigma_{sn,g' \rightarrow g} \cdot \sum_{m=-n}^n \phi_{n,m,g'}(r) Y_{n,m}(\theta, \varphi) + S_{\text{ext},g}$$

$$g' = 1, 2, \dots, G \quad (1)$$

式中: $\Omega \cdot \nabla \psi_g(r, \Omega)$ 为泄漏率; $\Sigma_{t,g}$ 为宏观总截面, cm^{-1} ; $\psi_g(r, \Omega)$ 为中子通量密度; $\Sigma_{sn,g' \rightarrow g}$ 为各阶宏观散射截面, cm^{-1} ; $\Sigma_{f,g'}$ 为宏观裂变截面, cm^{-1} ; ν 为每次裂变释放的平均中子数; $\phi_{n,m,g'}$ 为中子角通量球谐矩; χ_g 为裂变谱; $Y_{n,m}$ 为第 n 阶下第 m 次球谐函数; $S_{\text{ext},g}$ 为外源项。

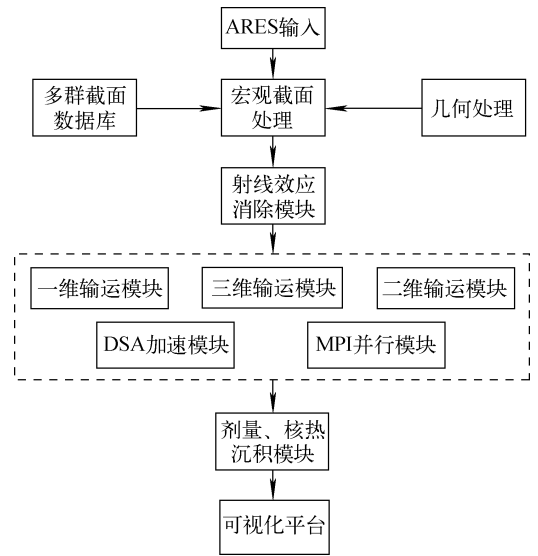


图 1 ARES 屏蔽程序计算流程图
Fig. 1 Flow chart of ARES shielding code

S_N 方法对方向进行离散,存在射线效应问题,尤其对于孤立点源、大空腔模型、强吸收介质等问题射线效应非常明显,使计算结果与实际结果相差较大。这种现象的产生并非由于数值过程的误差所致,而是由于求解输运方程时只沿少数几个特定方向(特征线)进行所引起的,以及将原来连续的方向变量转换成有限的离散方向求解所引起的。为有效解决射线效应问题采用首次碰撞源方法^[5-6],具有原理简单、计算速度较快等优点,而且对于一般工程计算,只需将射线效应减弱到一个可接受的程度,而不需完全将其消除,所以首次碰撞源方法具有广泛的工程应用价值。

基于首次碰撞源方法的射线效应消除计算

过程如下:首先获取几何模型和源项参数,利用射线追踪方法求出从点源到计算网格中心点及边界点的指数衰减,并用其算术平均值作为网格各面的平均指数衰减,然后利用解析法求出网格的未碰撞中子通量密度,并以此求得首次碰撞源项分布。下一步将首次碰撞源返回输运模块进行输运计算,最后将未碰撞中子通量密度的解析解与输运计算所得解加和,最终得到整个屏蔽体的通量密度分布。研究消除射线效应的方法对于完善 S_N 屏蔽计算方法非常重要。

基于首次碰撞源方法思想,将中子通量密度分为两部分:

$$\psi(r, \Omega) = \psi^{(w)}(r, \Omega) + \psi^{(c)}(r, \Omega) \quad (2)$$

$$\psi^{(w)}(r, \Omega) = \delta(\Omega - \Omega_r) \frac{q_p}{4\pi} \cdot \frac{e^{-\tau(r, r_p)}}{|r - r_p|^2} \quad (3)$$

其中: $\psi^{(w)}(r, \Omega)$ 为未碰撞中子角通量密度; $\psi^{(c)}(r, \Omega)$ 为碰撞中子通量密度; $\delta(\Omega - \Omega_r)$ 为克罗内克函数; q_p 为源强; $\tau(r, r_p)$ 为源点到目标点的平均自由程; $|r - r_p|$ 为源点到目标点的距离。

三维 S_N 屏蔽计算方法由于几何空间、能量、方向的离散等原因,屏蔽计算量非常大,同时也非常耗时。加速模块采用扩散综合加速^[7]、角度多重网格^[8]、区域分解的 MPI 并行^[9],能对不同屏蔽计算模型产生有效的加速效果。DSA 方法是 Alcouffe 提出的一种用于 S_N 方法中的加速收敛较为有效的方法,其基本思想是:针对每次迭代(如第 l 次迭代)计算得到的中子通量密度,在它进行第 $l+1$ 次迭代之前,采用具有一定输运精度的“扩散方程”进行求解,将计算结果用于第 $l+1$ 次输运方程的迭代计算。

屏蔽计算中存在强各向异性散射,离散纵标方法的收敛速度会非常缓慢,且很多加速方法加速效果很不理想。为解决该问题,Morel 提出了角度多重网格方法,并取得良好的加速效果。利用细网格上的松弛光滑特性消除迭代误差的高频分量,同时利用粗网格上的残差校正特性消除迭代误差的低频分量,通过细网和粗网的结合,迅速降低误差。粗网格上的残差求解方程为:

$$\xi_m^{(2)} \frac{\partial f^{n+1}(r, g, \Omega_m^{(2)})}{\partial z} + \sum_{i, g'} f^{n+1}(r, g, \Omega_m^{(2)}) =$$

$$\sum_{g'=1}^G \sum_{l=0}^L \sum_{sn, g' \rightarrow g} \sum_{k=0}^l Y_{l, k} [\Omega_m^{(2)}] \times [\phi_{l, k}^{n+1}(r, g') - \phi_{l, k}^n(r, g')] \quad (4)$$

其中:

$$\phi_{l, k}^{n+1}(r, g) = \sum_{m=1}^{M_1} Y_{l, k} [\Omega_m^{(1)}] \psi^{n+1}(r, g, \Omega_m^{(1)}) \tau_{\omega_m}$$

$$\phi_{l, k}^n(r, g) = \sum_{m=1}^{M_1} Y_{l, k} (\Omega_m^{(1)}) \psi^n(r, g, \Omega_m^{(1)}) \tau_{\omega_m}$$

式中: μ_m 、 η_m 、 ξ_m 为方向 Ω_m 分别在 x 、 y 、 z 轴上的投影; f 为粗网格上的残差。

消息传递并行编程环境 MPI (message passing interface) 是目前国际上最流行、可移植性和可扩展性很好的并行程序设计平台,并被当前流行的所有高性能并行机支持,ARES 三维输运模块采用目前并行计算最为常用的两种方法:几何区域分解和角方向区域分解。

2 初步验证结果

2.1 三维输运模块的初步验证

采用 ARES 屏蔽程序的三维输运模块^[10]对 Kobayashi 基准题^[11]计算分析, OECD/NEA 于 1996 年发布,用于三维输运计算方法及程序的验证。Kobayashi 基准题模型 I 为 $100 \text{ cm} \times 100 \text{ cm} \times 100 \text{ cm}$ 的立方体,分为全吸收截面与半吸收截面两种情形。源强、各区材料宏观截面列于表 1, Kobayashi 基准题模型 I 如图 2 所示。

表 1 Kobayashi 模型 I 源强及材料宏观截面
Table 1 Source and cross section of Kobayashi model I

区域	源强/ ($\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$)	总截面/ cm^{-1}	散射截面/ cm^{-1}	
			无散射	半散射
源区	1	0.1	0	0.05
空腔区	0	1.0×10^{-4}	0	0.5×10^{-4}
反射层	0	0.1	0	0.05

ARES 计算结果、基准值及 TORT 计算结果示于图 3、4。当屏蔽材料为全吸收(无散射)时,由于射线效应的影响,部分网格 ARES 和 TORT 计算结果与基准值存在较小偏差,但在整个区域内 ARES 和 TORT 计算结果吻合较

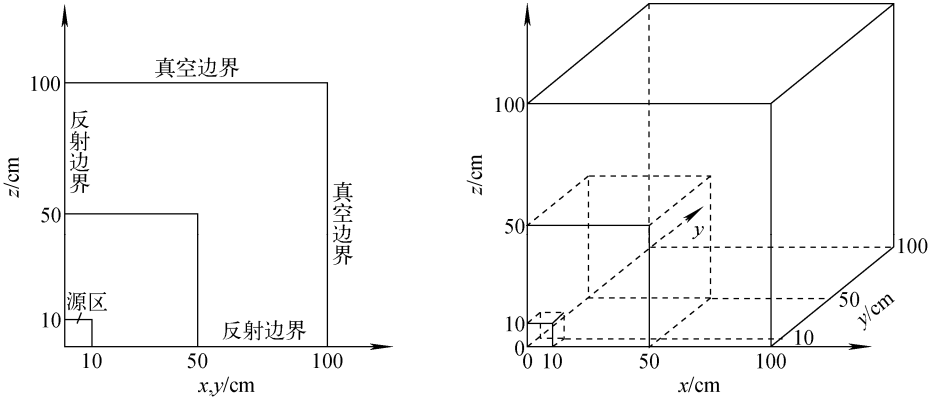


图2 Kobayashi 几何模型

Fig. 2 Geometry of Kobayashi model I

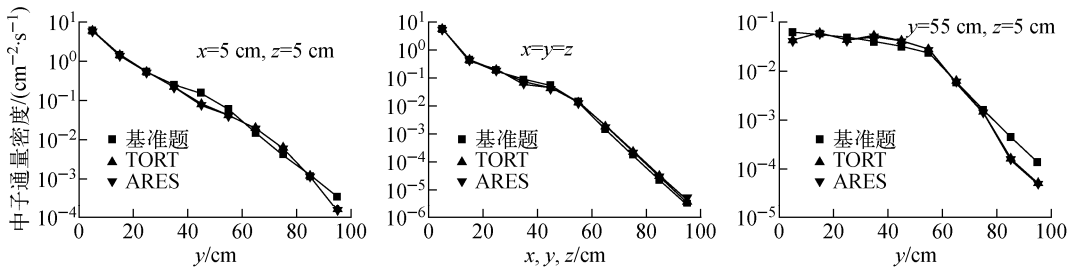


图3 全吸收模型中子通量密度

Fig. 3 Neutron flux density of no scattering model

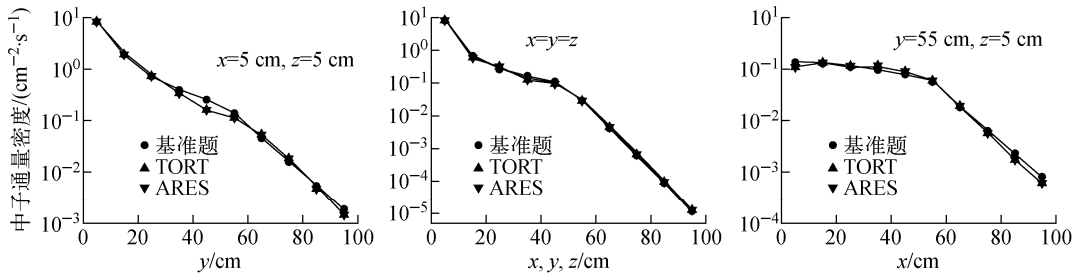


图4 半散射模型中子通量密度

Fig. 4 Neutron flux density of half scattering model

好。当屏蔽材料为半散射(半吸收)时,ARES 计算得到的不同网格中子通量密度与基准值最大相对误差小于5%。全吸收模型和半吸收模型中子通量密度的平均误差约为3%。

2.2 二维射线效应消除模块

ARES屏蔽程序的三维射线效应消除模块已经过初步测试^[12],为验证 ARES 程序二维射线效应消除模块的准确性,建立由孤立点源区、弱散射屏蔽体组成的模型如图5所示,采用反射和真空边界条件,源强与截面信息列于表2。

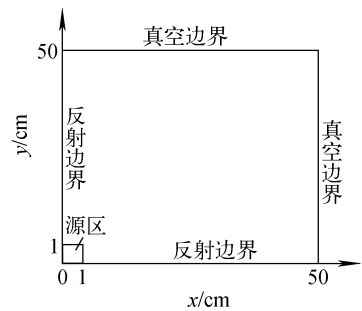


图5 弱散射几何模型

Fig. 5 Geometry model of weak scattering

表 2 源强与截面信息

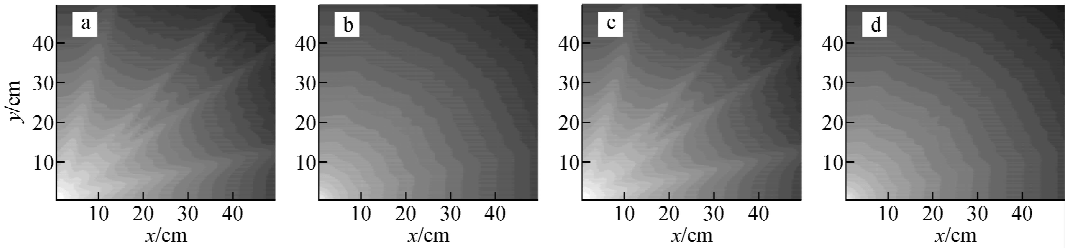
Table 2 Source and cross section data

区域	源强/($\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$)	Σ_t/cm^{-1}	Σ_s/cm^{-1}
源区	100	2.267×10^{-1}	8.591×10^{-2}
屏蔽层	0	2.267×10^{-1}	8.591×10^{-2}

对于弱散射情况,在使用射线效应消除模块后,射线效应虽未完全消失,但已得到很大程度的减弱且与 GRTUNCL 处理的结果分布趋势相同,结果示于图 6。这表明,ARES 射线效应消除模块具有与 GRTUNCL 相当的射线效应减弱能力。

2.3 三维输运并行模块

基于 SPMD(单程序多数据流)并行编程



a——DORT 无 GRTUNCL;b——DORT 有 GRTUNCL;c——ARES 无 ARES 射线效应;d——ARES 有 ARES 射线效应

图 6 中子通量密度分布

Fig. 6 Distribution of neutron flux density

表 3 加速比及并行效率

Table 3 Speedup ratio and parallel efficiency

进程数目	15 625 个网格			90 000 个网格		
	计算时间/s	加速比	并行效率	计算时间/s	加速比	并行效率
1	1 537.515	1	1	9 257.47	1	1
2	831.984 6	1.848	0.924	4 830.914	1.916	0.958
4	453.151 7	3.393	0.848	2 628.414	3.522	0.881
6	352.640 3	4.36	0.727	2 026.718	4.568	0.761
8	328.038 9	4.687	0.586	1 756.056	5.272	0.659

3 小结

ARES 屏蔽程序按照严格的软件质保要求,采用 V 字型的软件开发生命周期模型,经历需求分析、概要设计、详细设计、代码开发、测试验证等开发阶段。ARES 屏蔽程序目前已完成部分模块的开发并进行了初步测试,具备初步屏蔽计算功能,能有效减轻射线效应影响,并行加速模块取得明显效果,为下阶段屏蔽程序

模式的持续改进、模块完善奠定了基础。

模式,ARES 实现了基于方向区域分解的并行计算。在包含 8 个 CPU 的计算机上,针对 Takeda 基准题^[13],用 S_{16} 角方向对不同问题规模(网格划分为 $25 \times 25 \times 25$ 和 $45 \times 40 \times 50$)进行并行计算性能测试,计算结果列于表 3。

对于相同的问题规模,随着进程数目的增多,并行计算时间逐渐减小,然而由于随着进程数目的增多,进程之间通信开销逐渐增大,增大了计算时间,使并行效率逐渐减小;对于相同的进程,随着问题规模的增加,并行计算比重逐渐增大,因而使并行加速比增大,并行效率增大。

的持续改进、模块完善奠定了基础。

参考文献:

[1] ENGLE W W. ANISN: A one dimensional discrete ordinates transport code with anisotropic scattering[R]. USA: Oak Ridge National Laboratory, 1967.

[2] RHOADES W A, CHIDLS R L. The DORT two-dimensional discrete ordinates transport code

- [J]. Nuclear Science and Engineering, 1988, 99 (1): 88-89.
- [3] RHOADES W A, SIMPSON D B. The TORT three dimensional discrete ordinates neutron and photon transport code. ORNL/TM13221 [R]. USA: Oak Ridge National Laboratory, 1997.
- [4] WAREING T A, McGHEE J M, MOREL J E. ATTLA: A three dimensional, unstructured tetrahedral mesh discrete ordinates code [J]. Trans Am Nucl Soc, 1996, 75: 146-147.
- [5] WAREING T A, MOREL J E, PARSONS D K. A first collision source method for ATTLA: An unstructured tetrahedral mesh discrete ordinates code[R]. USA: Los Alamos National Laboratory, 1996.
- [6] LILLIE R A. GRTUNCL3D: A three dimensional XYZ geometry first collision source and uncollided flux code[R]. USA: Oak Ridge National Laboratory, 1998.
- [7] ALCOUFFE R E. Diffusion synthetic acceleration methods for the diamond differenced discrete ordinates equations[J]. Nuclear Science and Engineering, 1977, 64(3): 344-355.
- [8] MOREL J E, MANTEUFFEL T A. An angular multigrid acceleration technique for S_N equations with highly forward-peaked scattering[J]. Nuclear Science and Engineering, 1991, 107(4): 330-342.
- [9] JAMES W F, AZMY Y Y. Comparison via parallel performance models of angular and spatial domain decompositions for solving neutral particle transport problems[J]. Progress in Nuclear Energy, 2007, 49: 37-60.
- [10] 臧启勇, 陈义学, 王伟金, 等. 三维中子-光子离散纵标输运程序 CTDOS 开发与验证[J]. 原子能科学技术, 2013, 47(增刊): 346-349.
- ZANG Qiyong, CHEN Yixue, WANG Weijin, et al. Development and validation of the 3-D discrete ordinates neutron and photon transport code CTDOS[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2013, 47 (Suppl.): 346-349 (in Chinese).
- [11] KOBAYASHI K, SUGINURA N, NAGAYA Y. 3-D radiation transport benchmark problems and results for simple[R]. USA: OECD/NEA Committee, 2000.
- [12] 胡也, 陈义学, 张斌, 等. 基于首次碰撞源方法的多维 SN 射线效应研究[J]. 原子能科学技术, 2013, 47(增刊): 9-14.
- HU Ye, CHEN Yixue, ZHANG Bin, et al. Research on ray effect of multi-dimensional SN method based on first collision scheme [J]. Atomic Energy Science and Technology, 2013, 47(Suppl.): 9-14(in Chinese).
- [13] TAKEDA T, IKEDA H. 3-D neutron transport benchmark[J]. Journal of Nuclear Science and Technology, 1991, 28(7): 656-669.