

文章编号: 0258-0926(2014)S2-0221-03; doi: 10.13832/j. jnpe. 2014. S2. 0221

高分辨率粒子输运 MC 软件 JMCT 开发

邓力^{1,2}, 雷炜^{3*}, 李刚^{1,2}, 张宝印^{1,2},
上官丹骅^{1,2}, 胡泽华^{1,2}, 马彦^{1,2}

1. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京, 100094; 2. 中国工程物理研究院高性能数值模拟软件中心, 北京, 100088;
3. 中核核电运行管理有限公司, 浙江海盐, 314300

摘要: 基于并行无网格组合几何应用编程框架(JCOGIN)开发研制的高分辨率三维中子-光子输运蒙特卡罗(MC)软件 JMCT, 配可视前后处理, 实现了区域分解和关于粒子数(MPI)及关于区域(OpenMP)的二级并行, 计算给出了大亚湾核电站反应堆全堆芯 pin-by-pin 模型寿期初和寿期中的功率分布及有效增殖因子(k_{eff})结果, 验证了 JMCT 的计算有效性和并行高效性。

关键词: JMCT; JCOGIN 框架; 区域分解; pin-by-pin; pin 功率分布

中图分类号: TP29 文献标志码: A

Development of High Resolution Particle Transport Monte Carlo Code JMCT

Deng Li^{1,2}, Lei Wei^{3*}, Li Gang^{1,2}, Zhang Baoyin^{1,2},
Shangguan Danhua^{1,2}, Hu Zehua^{1,2}, Ma Yan^{1,2},

1. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing, 100094, China; 2. CAEP Software Center for High Performance Numerical Simulation, Beijing, 100088, China; 3. Nuclear Power Operation and Management Co. Ltd., Haiyan, Zhejiang, 314300, China

Abstract: 3-D Monte Carlo neutron and photon transport code JMCT has been developed based on the JCOGIN toolbox. The viewdata is equipped in pre-processor and post processor. The domain decomposition and the parallel computation about particle (MPI) and spatial domain (OpenMP) have been realized. The full-core pin-mode from Chinese Daya Bay Nuclear Power Station is simulated. The detail pin-power distribution and k_{eff} result are shown in this paper. The validity of JMCT has been proved.

Key words: JMCT, JCOGIN toolbox, Domain decomposition, Pin-by-pin, Pin-power distribution.

0 前言

反应堆屏蔽设计是工程设计的重要组成部分, 安全性与经济性是设计考虑的主要因素。屏蔽设计涵盖反应堆压力容器屏蔽、堆腔辐射漏束屏蔽、主系统及各辅助系统屏蔽等, 包括各种孔道、台架、屏蔽体及厂房等复杂对象, 空间尺度大、几何结构复杂、建模难度大, 材料组分复杂, 涉及

中子(光子)深穿透问题, 从堆芯到屏蔽体外衰减十多个量级, 对数值模拟的计算分辨率要求非常高。

在进行反应堆堆芯物理分析时, 燃烧区达数十上百万, 要使堆芯物理分析更加科学, 需要将设计方案的验证和评估逐步建立在科学的基础上, 要将“组件均匀化”近似建模提升到 pin-by-pin

收稿日期: 2014-10-10; 修回日期: 2014-10-20

基金项目: 国防科工局核能开发项目; 科技部 863 专项(2012AA01A303); 能源局 06 重大专项资助

作者简介: 邓力(1960—), 男, 研究员, 现从事蒙特卡罗粒子输运方法及应用研究

*通讯作者: 雷炜, E-mail: lei_wei@iapcm.ac.cn

精细建模和高分辨率模拟。对反应堆全堆芯 pin-by-pin问题的模拟,由于几何栅元数达数百万、计数达数十亿,要求组件每个栅元的功率误差小于1%,内存到TB量级,成为挑战计算机和计算方法的难题。国内粒子输运及辐射屏蔽计算多采用美国洛斯阿拉莫斯国家实验室研制的多粒子输运蒙特卡罗(MC)程序MCNP^[1],由于该程序不具备可视建模,且受内存、几何栅元数、计数等限制,无法实现反应堆高分辨率数值模拟,加之MCNP禁止向我国转让,需要自主创新研制具有自主知识产权的反应堆核心粒子输运软件。

本文主要介绍高分辨率三维中子-光子输运MC软件JMCT的主要算法及应用。

1 计算方法

MC方法针对Boltzmann输运方程等价的积分方程进行求解,其优点是复杂几何处理能力强,对能量、方向近似少,特别采用连续点截面进行输运计算,当样本数足够多时,基本可以逼近解析解。MC方法的主要不足是收敛慢和误差大,计算耗时多、深穿透问题是一大瓶颈,需要发展一些特殊技巧。此外,当计数区域相对系统较小时,因统计信息不充分,会导致计算结果失真。随着计算机技术的发展,MC方法及软件在反应堆堆芯及屏蔽计算中的作用越来越重要。

JMCT软件采用3级结构,分别由计算方法、截面数据、支撑框架和前后处理组成。JMCT底层支撑框架为JCOGIN,它集成了MC粒子输运的共性算法,如几何布尔运算、径迹计算、随机数产生、计数、并行计算等。JMCT的顶层为物理数学层,对应应用软件的基本算法,采用串行编程,通过与框架无缝对接,自动实现并行计算,起到了用户与计算机之间的桥梁作用。

1.1 JCOGIN 核心数据结构设计

JCOGIN核心数据结构也分3层,其中几何层对应粒子并行区,几何块对应区域分解层;几何单元层为单个粒子的输运全程;区域分解主要用于解决单核内存无法存储的问题。目前主要针对反应堆全堆芯 pin-by-pin这类问题的求解。若考虑全堆芯精细功率分布计算,则计算所需的内存数达数十个GB,考虑燃耗后甚至达到TB级。JCOGIN负责与几何相关的处理。几何单元包括

几何体及其空间位置、系统几何单元编号(Cid)和用户几何单元编号(Uid)、物质编号和计数器集合。

1.2 多层嵌套并行实现

区域分解给并行带来很大的不确定性,对MC软件输运计算而言,在成熟的关于粒子数并行的前提下,需要考虑空间区域分解及其并行实现。在考虑区域分解的情况下,原来的一级并行将变为关于粒子数和区域的二级并行。为此,需要解决一些问题,包括:核心数据结构支撑,即克隆技术的合理使用;区域剖分、区域合并及并行实现;确保串、并行结果一致的随机数发生器设计。为了保证串、并行结果一致,区域分解后并行粒子必须能跟踪随机数链。由于不同区域的粒子在同步发射,设计十分复杂,而对各种算法融合在一起的新软件,保证串、并行结果一致是十分必要的;非规则粒子通讯及映像区的设定。

要合理使用千万亿次以上规模的高性能计算机系统,需要基于框架提供的大规模并行计算能力来保证计算效率,选择合理的匹配并行编程,是保障并行效率不因区域分解而下降太大的关键。我们仍然选择MPI作为粒子并行的首选;针对区域分解,选择OpenMP在结点内实现共享内存并行计算。

1.3 几何相同、材料不同下重复结构实现

MCNP程序(版本5)仅支持几何相同、材料相同的重复结构,这对反应堆堆芯初态是可行的。考虑燃耗后,会出现几何相同、材料不同的情况。为了突破MCNP遇到的限制,JMCT采用替换材料的处理,以相同材料输入,再以文件方式读入实际的材料。同时,JMCT还实现了输运-燃耗的内耦合,支撑数十万燃耗区的计算。

1.4 基于拓扑关系不变的区域分解与复制

把单核无法存储的数据分解存储到不同处理器核上是目前解决大数据内存不够的普遍方法。美国利弗莫尔国家实验室(LLNL)研制的Mercury软件^[2]成功实现了区域分解,但在处理无法等分的区域时,要改变拓扑关系,出现某个区被一分为二的情况,进而导致串、并行计算结果不一致,给分析计算结果差异原因带来不确定性。借鉴Mercury软件区域分解的部分思想,并基于保持拓

扑关系不变的前提条件,研究给出了一套新的区域分解算法,通过巧妙设计映像区和随机数链,保证了串、并行计算结果的一致。

1.5 深穿透屏蔽计算关键技术

解决深穿透问题的各种技巧中,有一个共同的原则:调整粒子抽样方案,使更多粒子轨迹出现在感兴趣的区域。只是不同的技巧实现重要抽样的方法有别,而且各种技巧都有各自的优缺点。赌与分裂技术是实现调整粒子抽样方案的重要手段之一,是MC方法中最古老也是应用最广泛的一种降低方差、改善粒子抽样的技术。当赌与分裂技术合理运用时,能极大地节省运算时间。当粒子沿着重要的(所希望的)方向迁移时,其数量会增加以改善抽样,当粒子向不重要的方向迁移时,它们会按照一种无偏倚的方式被“杀死”。通过伴随计算,统计每个网格内的伴随通量,以此构造伴随权窗重要性函数、mesh权窗重要性函数和伴随重要性函数,可以提高MC屏蔽计算的效率。

2 计算结果

2.1 大亚湾核电站1号机组反应堆组件均匀化模拟

大亚湾核电站1号机组均匀化模型见图1,反应堆堆芯主要数据为:组件数157;轴向分层数16;采用组件均匀化处理,几何块总栅元数503;材料数253。计算含硼与不含硼情况下的有效增殖因子(k_{eff})。模拟分别采用MCNP-4C和JMCT,表1给出两个程序计算结果对比。

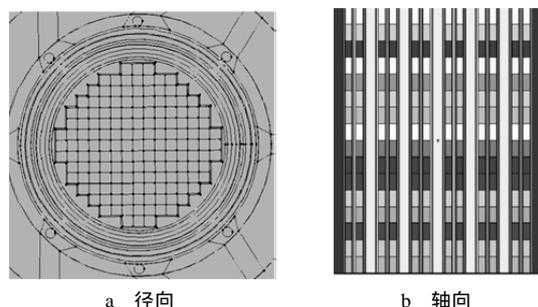


图1 大亚湾核电站反应堆堆芯组件均匀化模型

Fig. 1 Uniform Core Model for Reactors in Daya Bay Nuclear Power Station

表1 组件均匀化模型系统 k_{eff} 比较

Table 1 Comparison of k_{eff} for Uniform Core Model

工况	MCNP k_{eff} (误差)	JMCT k_{eff} (误差)	R
含硼	0.92019(0.00050)	0.92068(0.00044)	1.00053
不含硼	1.11734(0.00043)	1.11853(0.00046)	1.00107

注: R 为 JMCT 与 MCNP 计算 k_{eff} 之比

2.2 大亚湾核电站1号机组反应堆堆芯 pin-by-pin 模拟

大亚湾核电站1号机组反应堆堆芯 pin-by-pin 模型主要数据为:每个组件 $17 \times 17 = 289$ 个 pin(其中25个为导向管和控制棒,每个导向管分4层),其他同均匀化模型;堆芯总栅元数为757839;临界计算共200代,舍弃前20代,统计后180代,每代4800万粒子历史,使用960个处理器,计算时间2~2.5 h,分寿期初和寿期中两种情况。从计算结果可以看出,由于95%的 pin 功率误差在1%以内,堆芯功率分布保持了很好的对称性。这个结果与 MC21 在 PHYSOR2012 上公布的结果很相似^[3]。

3 结束语

自主研发的高分辨率粒子输运MC软件JMCT,以反应堆堆芯及屏蔽计算为目标,采用先进数据体系结构,配以可视前后处理,采用分段并行随机数发生器,使随机数周期能够支撑数亿粒子历史的模拟,通过空间区域分解和两层嵌套并行,成功完成了数百万几何栅元的反应堆全堆芯 pin 模型的模拟。

参考文献:

- [1] Briesmeister J F. MCNP-A General Monte Carlo code for N-particle transport code [R]. US: 1997, LA-12625-M. Initial MCNP6 Release Overview - MCNP6 Beta 3, 2012, LA-UR-12-26631.
- [2] Cullen D E. Verification and validation of MERCURY a modern Monte Carlo particle transport code[R]. Lawrence Livermore National Laboratory, UCRL-CONF-208667, 2004.
- [3] William Martin, David Griesheimer. Prospects for full-core Monte Carlo simulation including multiphysics feedback[C]. PHYSOR2012-Monte Carlo workshop, Knoxville, USA, April 15-20, 2012.

(责任编辑:王中强)