

MCNP 与 DORT 耦合计算方法研究

杨德锋, 薛娜, 程和平, 毛亚蔚

中国核电工程有限公司, 北京 100840

摘要 基于蒙特卡罗方法的 MCNP 程序和离散纵标法的 DORT 程序, 在解决辐射屏蔽设计过程中确定屏蔽方案时, 单独使用 MCNP 或 DORT 计算屏蔽效果的两个粒子输运程序各自存在某方面缺陷的问题。通过研究 MCNP 与 DORT 两个程序的功能与特点, 编写接口程序, 实现了 MCNP 与 DORT 的耦合计算, 弥补各自运算中的缺陷, 扩展了程序的适用范围。通过验证, 表明自主开发的接口程序能够完成两个程序输入输出文件的相互转化, 耦合计算精度满足要求, 且对各类问题有较好的处理能力, 该耦合接口程序已初步应用于工程计算。

关键词 MCNP; DORT; 耦合计算; 接口

中图分类号 TL329.2

文献标志码 A

doi 10.3981/j.issn.1000-7857-2013.18.008

MCNP and DORT Couputation Method

YANG Defeng, XUE Na, Cheng Heping, MAO Yawei

China Nuclear Power Engineering Co., Ltd., Beijing 100840, China

Abstract Shielding is a common measure for the radiation protection. In the design process, radiation shielding calculation using computer codes is employed to achieve the proper shielding plan. MCNP and DORT are common programs used for computing radiation shielding. Based on different principles and algorithms, each of these programs has its own defect at certain areas. Achieving MCNP and DORT coupling is taken aim at, by studying the functions and features of MCNP and DORT, and the interface code is programmed. The method for converting data between MCNP and DORT is realized, Coupling between MCNP and DORT is achieved. So that the application scope of these two programs is able to be enlarged. After the validation, the conclusion is drawn that the interface code is able to convert the input and output files of MCNP and DORT successfully. Both accuracy and efficiency for coupling calculation are acceptable, having quite good management ability for all kinds of problems. The coupling method has been applied to technical problems and would be further validated by the feedback data.

Keywords MCNP; DORT; coupling computation; interface

0 引言

基于蒙特卡罗方法的 MCNP 程序^[1]和离散纵标法的 DORT 程序^[2]是反应堆工程屏蔽设计中广泛使用的基本程序, 其适用性在工程实际计算中已得到了充分验证。但对于一些大型复杂问题, 由于程序自身的缺点, 两个程序的使用都受到一定的限制。考虑到 MCNP 与 DORT 优缺点大致是互补的, 如果能实现耦合计算, 就有可能扩展屏蔽计算程序的适用范围。

国外对于蒙特卡罗法和离散纵标法的耦合计算进行过研究, 开发出了一系列方法和程序, 并且在一些工程问题上也得到了应用^[3-5], 国内也开展了相关的研究^[6]。但总体来说,

各种方法或程序还都或多或少地存在一些问题, 目前在反应堆工程设计中并没有一个标准的、通用的耦合计算方法。

本文中从 MCNP 和 DORT 两个程序的内部计算过程出发, 根据程序内部的数据特点, 尝试通过编写接口程序, 完成 MCNP 与 DORT 的耦合计算, 并采用简化的 1/4 堆芯布置方案等系列模型, 验证自主开发接口程序的可靠性。

1 程序简介

1.1 MCNP 程序

MCNP 程序由美国 Los Alamos 国家实验室开发, 基于蒙特卡罗方法, 能计算中子、光子、电子或者耦合中子、光子、电

收稿日期: 2013-03-06; 修回日期: 2013-03-19

作者简介: 杨德锋, 助理工程师, 研究方向为辐射防护, 电子信箱: jeverhast@gmail.com

子的运输,也能计算临界系统的特征值。MCNP 能准确地描述几何问题,从而减小建模引入的误差。MCNP 程序的缺点是收敛速度慢,尤其对于大系统和深穿透问题,计算耗时长,甚至根本得不到结果,这同样也是蒙特卡罗方法的固有缺陷。

1.2 DORT 程序

DORT 程序隶属于 DOORS3.2 程序包,是美国橡树岭国家实验室开发的二维粒子输运程序。该程序基于离散纵标方法,可以处理一维或二维的中子/光子输运。DORT 主要用来计算中子和光子的深穿透问题,也可求解反应堆的特征值问题。DORT 程序的局限在于几何问题不能太复杂,否则难于描述,另外维度上限是二维,对实际的三维问题要做简化,这会引入一定的误差。

2 耦合计算简介

耦合计算的一般思路:对于较大型的问题,根据模型的特点将问题分成几个部分,每个部分分别计算结果,再用一定的方法整合最终结果。

研究发现,MCNP 和 DORT 都有分段计算的功能,这可以理解为程序自身的耦合。自身耦合为相互耦合提供了便利,因为从自身耦合的过程中容易发现程序内部数据的特点,并以此为依据编写相互耦合的接口。

2.1 MCNP 自身耦合

在作者早期的工作中,对 MCNP 程序的自身耦合计算做过一些研究^[7],对耦合方法有如下结论:选定适当的分界面,借助程序的 SSW (Surface Source Write) 卡和 SSR (Surface Source Read) 卡分别在二进制文件 wssa 中写入和读取分界面处的源粒子信息;前端计算使用真空外边界条件,后端计算使用全反射的外边界条件。经过验证,这种 MCNP 自身耦合的算法适用性较好,精度也较高。

通过深入解析 MCNP 程序 workflow,发现其中间输出文件 wssa 的内容对相互耦合研究是比较重要的。该文件的内容可分为两部分。第一部分是一些基本信息,包括程序开始运行的时间,程序版本,模拟的粒子总数等参数。其中粒子数、分界面编号等对后面的计算会产生影响。第二部分是穿过分界面的粒子参数,对于每个按指定方向穿过曲面的粒子,其信息记录在一个 11 维双精度浮点数组中,包括粒子种类(中子或光子等)、粒子权重、能量、几何坐标(x, y, z)、粒子运动方向的 x 和 y 分量、运动方向与源面法向量的夹角余弦等。这些信息完整描述了单个粒子的种类、能量、权重、空间位置和运动方向。

2.2 DORT 自身耦合

DORT 自身耦合过程与 MCNP 类似,选定适当的分界面,通过特定的输入和输出选项,得到一个记录边界粒子信息的二进制文件 fort.n (其中 n 为输入文件中指定的编号),该文件的读写也是由程序自动完成的。DORT 自身耦合的精度非常高,耦合计算的结果与基准值相比,差异在 0.1% 以内。DORT 自身耦合计算对外边界条件无要求。

fort.n 文件的内容同样分两部分。第一部分是基本信息,主要是程序版本、运行时间等,对分段计算毫无影响。第二部分是各能群、各网格、各离散方向上的粒子通量密度。通量密度是衡量粒子流强弱的一个重要的物理量,其意义是在空间某点处单位时间内进入以该点为中心的单位横截面的小球体内粒子的数目。fort.n 中详细记录了每个能群、每个网格处的中子/光子通量密度数据。

3 耦合接口的开发

通过前面的分析,可看出两个二进制文件 wssa 和 fort.n 包含了详细的边界粒子流信息,对其中的信息做适当的整理和转换,就有可能使一个程序的输出变成另一个程序的输入。耦合接口正是基于这种思路编制的。换言之,接口编制的开发过程也就是将两个程序中的粒子通量密度数据做转换的过程。

3.1 粒子能量、空间坐标的转换

MCNP 中的能量和空间坐标是连续变化的,而 DORT 中的能量和空间坐标是离散的。对于连续变量与离散变量转换的方法,见图 1。

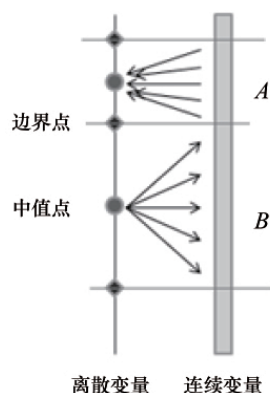


图 1 离散变量与连续变量的转换方法

Fig. 1 Conversion method between discrete variables and continuous variables

将连续变量按照离散变量的边界点划分为若干个区间,连续变量 \rightarrow 离散变量时(图 1 中转换 A),将整个连续区间内的通量密度值加和,变成离散变量中值处的通量密度;反过来,离散变量 \rightarrow 连续变量时(图 1 中转换 B),将离散中值点的通量密度平均分配到连续的区间中。由于能量和空间坐标都是一维变量,用这种方法很容易实现 MCNP 与 DORT 中能量和空间坐标的相互转换。

连续变量和离散变量做转换时,一定会引入误差。考虑到两种计算方法的差异,当一个变量(能量或坐标等)区间内通量密度值变化较小时,这种误差是可以接受的。但如果通量密度值在变量区间内变化较大,则有可能对后续结果产生影响。因此在转换连续变量和离散变量时,应注意变量区间边界点的选取,保证在每个区间内通量密度值相对均匀,必

要时可以做简单的试算, 确定粒子通量密度的大致分布, 并以此为依据划分变量区间。

3.2 粒子运行方向的转换

MCNP 中粒子运动方向是连续变化的三维向量, DORT 中粒子运动方向由离散的求积组定义, 转换方式与图 1 相同。只不过对于多维变量, 离散变量的边界点较难确定。下面具体介绍离散方向变量边界点的计算方法。

图 2 给出了离散纵标法中求积向量的定义方式^[8]。每个求积向量 Ω_m 可以看成单位球面上的一个点, 包含 μ_m, ξ_m, η_m 和 ω_m 4 个参数, 其中 μ_m, ξ_m 和 η_m 是与 3 个坐标轴对应的分量, ω_m 为该点在球面上的邻域面积。DORT 是二维程序, 输入文件中定义了 μ_m, τ_m 和 ω_m 。

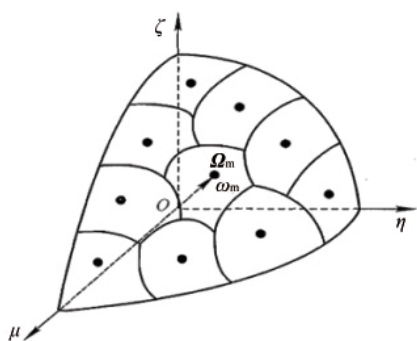


图 2 求积向量示意图

Fig. 2 Scheme of quadrature vector

由于 ω_m 有邻域面积的意义, 考虑用面积等效的办法为连续方向变量划分区间, 实际操作中按“经线”和“纬线”找到分隔点。以 τ 方向为例, 首先确定最上端的分隔点 ξ_4 , 见图 3。将 $\tau > \xi_4$ 的求积向量的 ω 相加得到面积 S ; 通过积分, 容易求出 ξ_4 以上的球表面积为 $S=(1-\xi_4)/2$, 这样就得到了第 1 个边界值 ξ_4 , 用同样的方法逐级计算, 就可以求出所有方向向量的边界点。

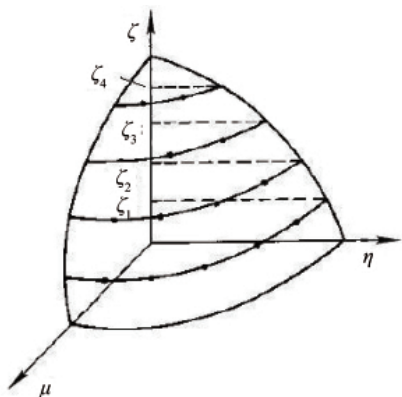


图 3 角度边界值 ξ_m 示意图

Fig. 3 Scheme of degree boundary value ξ_m

3.3 通量密度转换

DORT 的中间文件 fort.n 给出了粒子通量密度值, MCNP

的中间文件 wssa 中给出的是粒子权重, 权重有粒子数的含义。从数据的物理意义出发, 根据 3.1 节的离散变量与连续变量的转换方法, 经过一系列较为复杂的推导, 得到通量密度转换公式。以分界面垂直于第 k 个方向的情况为例, 其表达式为

$$\frac{\sum W}{|\mu_k| A} \frac{1}{N_{MCNP}} = \frac{\psi_{i,j,k} w_k}{I}$$

式中, W 为 MCNP 中单个粒子的权重, A 为边界面的面积, μ_k 为粒子运动方向与分界面的夹角余弦, N_{MCNP} 为 MCNP 中模拟的粒子总数; $\psi_{i,j,k}$ 为 DORT 中第 i 个能群、第 j 个网格、第 k 个方向的通量密度, w_k 为第 k 个方向的权重, I 为 DORT 中总源强。这些参数都包含在文件 wssa 和 fort.n 中, 或者 MCNP 与 DORT 的输入参数中。

4 耦合接口的验证

为证明 MCNP 与 DORT 耦合接口的可靠性, 选取多种不同几何类型的模型, 分别进行 MCNP→DORT、DORT→MCNP 以及多次耦合计算, 并与单独的 MCNP 和 DORT 计算结果做比较。下面以一个 R- Θ 模型为例, 说明整个验证的过程。

4.1 计算条件选择

验证过程要尽量排除其他因素带来的误差, 使计算结果的误差能最大限度地反映接口误差, 因此在选取模型等计算条件时, 要保证 MCNP 与 DORT 两个程序的输入尽可能保持一致。但这一限制只针对接口验证, 对于实际应用则没有任何限制。

(1) 几何。由于 MCNP 是三维程序, 而 DORT 是二维程序, 为保证几何一致, 需将 MCNP 中的第三个维度(在 R- Θ 几何中为 z 方向)的边界面设为全反射边界条件, 即在 z 方向上没有粒子逃逸, 这样 MCNP 模拟的问题也变成二维的。

将反应堆堆芯横截面简化, 变成一个 1/4 R- Θ 模型, 尺寸和材料见图 4 中标示, 燃料区为均匀分布的裂变谱中子源, 总活度 $3.14 \times 10^{12} \text{Bq}$ 。

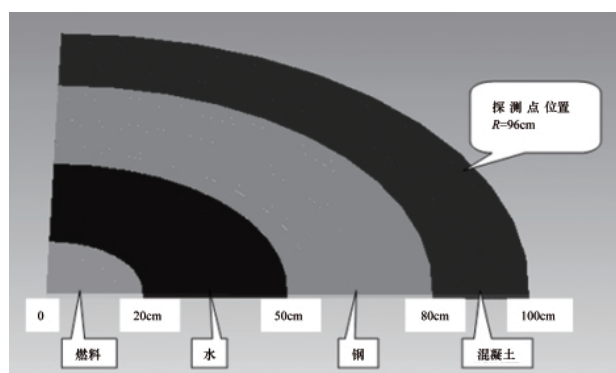


图 4 1/4 R- Θ 模型

Fig. 4 Model of 1/4 R- Θ

(2) 截面库。反应堆工程设计中在 DORT 计算时一般采用程序自带的 42 群中子/光子截面库 text10, 该库是专门为轻水堆机组研发的, 经过分析和比较, MCNP 中与之对应的是多群截面库 MGXSNP, 对于同一问题, DORT 用 text10 库算出的结果和 MCNP 用 MGXSNP 库算出的结果很接近, 因此这种截面库的选择非常适用于耦合接口的验证。

(3) 边界条件。耦合计算过程中要对一个问题分为多段解决, 这就要确定分段后的外边界条件。MCNP 自身耦合要求前段计算使用真空外边界条件, 后段计算使用全反射的外边界条件。DORT 自身耦合对边界条件无要求。综合以上分析, 做 MCNP 与 DORT 的耦合计算时, 边界条件要按 MCNP 程序的需求来选, 即前段计算使用真空外边界条件, 后段计算使用全反射的外边界条件。

4.2 计算结果

分别用 MCNP 和 DORT 程序计算, 对上述问题进行描述。分别在 $R=60\text{cm}$ 处做 MCNP→DORT 耦合、DORT→MCNP 耦合。在 $R=50\text{cm}$ 和 $R=70\text{cm}$ 处做 MCNP→DORT→MCNP 耦合。在 $R=96\text{cm}$ 的位置设置计数器, 分别探测中子和光子的通量密度。结果汇总见表 1。

表 1 验证结果比较

Table 1 Comparison between validation results

计算方式	中子通量密度/ ($10^7\text{cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$)	光子通量密度/ ($10^7\text{cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$)
MCNP	6.14	2.18
DORT	6.18	2.17
MCNP→DORT	6.14	2.12
DORT→MCNP	6.03	2.15
MCNP→DORT→MCNP	6.10	2.17

从表 1 中可以看出, MCNP 与 DORT 本身算出的中子和光子通量密度结果很接近, 经过一次或多次耦合, 得到的结果也相差不大。考虑到 MCNP 基于蒙特卡罗方法, 结果本身带有一定的统计误差, 则可以认定不同程序(方法)的计算结果吻合得很好, 从而初步验证了耦合接口以及耦合计算方法的可靠性。

从计算时间上分析, MCNP 单独计算耗时 40min, DORT 单独计算耗时约 30s, 耦合计算达到 MCNP 单独计算的精度时, 消耗时间总共约 22min。对于本次验证的问题, 由于模型相对简单, 耦合计算的优势并没有体现出来。通常计算中使用蒙特卡罗方法是为了精确描述问题几何, 减小建模误差; 使用离散纵标法是为了实现快速计算并得到大量的粒子通量密度输出, 对于实际的工程问题, 局部使用 MCNP 做精细计算, 而其他部分使用 DORT 完成快速计算, 则有可能在精度与计算效率之间找到一个最佳的平衡, 得到想要的结果; 还有可能解决那些单独使用 MCNP 或 DORT 都有困难的大型问题。

从蒙特卡罗法的误差角度分析, 如 3.1 节所述, 合理划分能量/坐标区间, 可保证耦合计算引起不太大的额外误差。达到同样的误差水平, 耦合计算消耗的时间比单独 MCNP 计算消耗时间的 1/2 略多即可证明这一点。

除了以上描述的简化堆芯模型验证外, 还针对 xy 几何、 rz 几何等不同模型做了大量计算验证, 结果表明开发的耦合接口能用于各类问题, 耦合计算方法对各类问题有较好的处理能力。

5 结论

(1) MCNP 与 DORT 是当前广泛使用的辐射屏蔽计算程序, 由于二者各有缺陷, 使得其应用都受到一定限制。在耦合接口程序开发过程中对蒙特卡罗方法和离散纵标法的数据结构进行了深入的探索和研究, 接口程序的应用可以取长补短, 充分发挥 MCNP 与 DORT 程序各自的优点, 减少计算产生的误差, 提高计算效率。

(2) 通过验证, 可以证明自行开发的接口程序能够实现 MCNP 与 DORT 的耦合计算, 耦合方法有较高的精度, 且对各类问题有较好的处理能力。

(3) 此耦合接口程序已初步应用于工程计算, 未来将用实测值进一步验证耦合计算的可靠性。

参考文献 (References)

- [1] Briesmeister J F. MCNP-A General Monte Carlo N-particle transport code, version 4C[R]. California: Los Alamos National Laboratory, 2000.
- [2] Oak Ridge National Laboratory. One, two and three dimensional discrete ordinates neutron/photon transport code system[R]. Tennessee: Oak Ridge National Laboratory, 1999.
- [3] Gallmeier F X, Pevey R E. Creation of a set of interface utilities to allow coupled Monte Carlo/discrete ordinate shielding analysis [C]//Third International Topical Meeting on Nuclear Applications of Accelerator Technology. California: American Nuclear Society, 1999: 404-409.
- [4] Chen Y. Coupled Monte Carlo-discrete ordinates computational scheme for three-dimensional shielding calculations of large and complex nuclear facilities [D]. Karlsruhe: Forschungszentrum Karlsruhe, 2005.
- [5] Masahiko Kurosawa, TORT/MCNP coupling method for the calculation of neutron flux around a core of BWR [J]. Radiation Protection Dosimetry, 2005, 116(1-4): 513-517.
- [6] 刘桂莲. 秦山核电二期工程反应堆堆坑底部辐射通量分布计算[J]. 核动力工程, 1998, 19(4): 375-379.
Liu Guilian. Nuclear Power Engineerin, 1998, 19(4): 375-379.
- [7] 杨德锋, 程和平. MCNP 程序分段-衔接计算方法研究[J]. 核动力工程, 2010, 31(S2): 48-52.
Yang Defeng, Cheng Heping. Nuclear Power Engineering, 2010, 31(S2): 48-52.
- [8] 谢仲生. 核反应堆物理数值计算[M]. 北京: 原子能出版社, 1997: 62
Xie Zhongsheng. Reactor physics numerical calculation [M]. Beijing: Atomic Energy Press, 1997: 62.

(责任编辑 赵业玲)