

# 栅元有效共振积分的 CUDA 算法设计与实现

任成磊<sup>1</sup>, 蒲鹏<sup>2</sup>, 韩定定<sup>1</sup>

REN Chenglei<sup>1</sup>, PU Peng<sup>2</sup>, HAN Dingding<sup>1</sup>

1. 华东师范大学 多维度信息处理重点实验室, 上海 200241

2. 华东师范大学 信息科学技术学院, 上海 200241

1. Shanghai Key Laboratory of Multidimensional Information Processing, East China Normal University, Shanghai 200241, China

2. School of Information Science and Technology, East China Normal University, Shanghai 200241, China

**REN Chenglei, HAN Dingding, PU Peng. Algorithm Designed and Implemented for Calculating Effective Resonance Integral with CUDA. Computer Engineering and Applications**

**Abstract:** The nucleon reactor needs real-time accurate calculation of effective resonance integral or group-averaged effective cross section to achieve the safety control of the reactor. Because the whole calculation process involves a lot of integral operation and huge section data, the consumption of calculation is considerable with the conventional calculation methods. Based on CUDA platform, the whole calculation process with multithreaded operation at the same time can greatly improve computing speed and reduce the consumption by using the GPU computing power. The experimental results show that the parallel computing results on the GPU has no significant difference with the original data, and accelerates significantly.

**Key words:** Moderated source recurrence formula; Effective resonance integral; CUDA; Parallel computing; GPU

**摘要:** 核反应堆中需要实时精确的计算堆芯和增殖材料的有效共振积分或群截面来实现反应堆的安全控制。整个计算过程因为涉及大量的积分运算和庞大的核素截面数据, 采用常规的计算方法, 计算的时耗相当大。基于 CUDA 平台, 利用 GPU 的计算能力, 对整个计算过程进行并行化分解, 多线程同时运算, 大幅度提升计算速度, 降低时耗。实验结果表明, 在 GPU 上并行计算所得结果与原始数据没有明显差异, 且加速效果显著。

**关键词:** 慢化源递推公式; 有效共振积分; CUDA; 并行计算; GPU

**文献标志码: A 中图分类号: TP311**

## 1 引言

热中子反应堆物理计算, 特别是与反应堆的安全控制有关的燃料及其它吸收体多普勒反应性温度系数的计算, 要求精确的计算栅元有效共振积分或群截面。整个计算基于碰撞几率法的基本原理<sup>[1][2]</sup>, 推导反应堆中中子的碰撞几率, 再利用慢化源递推公式求解慢化方程<sup>[3]</sup>, 得到中子通量谱, 从而计算出双重非均匀栅元有效共振积分。数值法求解多区慢化方程的方法既可较精确地处理燃料共振峰密集及存在不同吸收体共振峰偶然重叠的情况, 又可较精确地处理栅元内空间非均匀效应<sup>[4]</sup>。

计算分为低能可分辨区和高能不可分辨区两部分, 对于热中子反应堆来说, 不可分辨区的贡献较可分辨区的贡献小的多, 因此关键是精确地计算低能可分辨区的有效共振积分。本文利用递推公式求解具有双重非均匀效应栅元中子慢化方程的数值方法, 计算燃料和增殖材料可分辨区有效共振积分和群截面。

GPU 相比 CPU 具有更多的运算单元, 更高的数据吞吐带宽和浮点运算能力, 这使得 GPU 比 CPU 更加适合密集的运算<sup>[5]</sup>。CUDA 是 NVIDIA 公司推出的目前最流行的 GPU 开发平台, 不需要借助图形学的

**作者简介:** 任成磊 (1990—), 男, 硕士, 研究领域为智能计算、复杂网络; 蒲鹏 (1978—), 男, 硕士, 工程师, 研究领域为智能计算、WEB 应用; 韩定定 (1968—), 女, 博士, 教授, 研究领域为智能计算、复杂网络。E-mail: puxiaoming@163.com

API, 就可以使用图像并行栅元处理的方法进行开发<sup>[6]</sup>, 而且它支持 C++和 Fortran 语言, 使得传统开发的计算模块可以轻松移植到 CUDA 平台。因 GPU 计算能力强大, 开发容易, 目前已被广泛的应用到图像处理、计算生物学, 流体力学等领域。

本文基于 CUDA 平台, 在 GPU 上实现了双重非均匀栅元有效共振积分的算法。通过对算法中各模块在 GPU 上的实现方法和加速效果进行对比分析, 结果表明该算法在 GPU 上计算结果准确, 并且加速效果显著。

## 2 栅元有效共振积分算法介绍

本节从理论上对栅元有效共振积分算法进行介绍, 从目标出发, 逐步解决求解过程中遇到的未知量, 从而实现栅元有效共振积分的求解。

### 2.1 基本积分方程

在能量为  $(E_g, E_{g-1})$  内,  $k$  吸收体的有效共振积分分为:

$$I_{k,x}^g = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_{k,x}(E) \phi(E) dE \quad (1)$$

其中  $x$  表示俘获反应 ( $c$ ), 裂变反应 ( $f$ ) 和吸收反应 ( $a$ ),  $\sigma_{k,x}(E)$  为  $k$  吸收体的反应截面,  $\phi(E)$  为中子通量谱。  $k$  吸收体的反应截面通过对核素的截面数据进行插值处理得到, 而栅元内中子通量谱满足如下多区积分输运慢化方程:

$$V_n \sum_m (E) \phi_n(E) = \sum_{m=1}^N V_m P_{m,n}(E) \sum_k \frac{N_{m,k}}{1-\alpha_k} \int_E^{E/\alpha_k} \sigma_{sk}(E') \phi_m(E') d(E')(n=1,2,\dots,N)$$

其中  $m, n$  为空间区域编号,  $N$  是总区数,  $k$  为材料编号,  $\phi_m(E')$  为  $m$  区能量为  $E'$  的中子通量谱,  $V_m$  为  $m$  空间体积,  $\Sigma_m(E)$  为中子宏观总截面,  $N_{m,k}$  为  $m$  区内  $k$  材料的密度,  $\sigma_{sk}(E')$  为  $k$  材料微观散射截面,  $\alpha_k = ((A_k - 1)/(A_k + 1))^2$ ,  $A_k$  为  $k$  材料的原子量。  $P_{m,n}(E)$  为  $m$  区内能量为  $E$  的一个中子在  $n$  区内发生碰撞的几率, 方程的初始条件为: 当  $E > E_l$  时,  $\phi(E) = 1/E$ ,  $E_l$  为求解能量的上限。此时栅元有效共振积分的求解就转向中子通量谱和中子碰撞几率的求解。

### 2.2 利用递推公式求解慢化方程

在利用递推公式求解慢化源方程时, 可以取一个恰当的值作为最小步长  $\varepsilon$ , 这样既可以满足物理精度的要求, 又可简化程序、降低程序时耗。对各

种物质慢化区间长度  $\Delta k$ , 设  $\Delta k = (n_k + \delta_k)\varepsilon$ , 其中  $n_k$  为整数部分,  $\delta_k$  为小数部分。

离散对数能量坐标下, 对数能量点是等步长的, 设离散后的对数能量坐标为  $\mu_j (j=1,2,\dots)$ , 利用梯形积分公式计算多区积分输运方程 (2) 右侧最后一项积分式, 得到慢化源:

$$S_{m,k,j} = \int_{\mu_{j-\Delta k}}^{\mu_j} d\mu' \sigma_{sk}(\mu') \phi_m(\mu') = \frac{\varepsilon}{2} (f_j + 2 \sum_{l=j-n_k+1}^{j-1} f_l + f_{j-n_k}) + \delta_k \varepsilon (1 - \frac{\delta_k}{2}) f_{j-n_k} + \frac{\varepsilon}{2} \delta_k^2 f_{j-n_k-1} \quad (3)$$

其中  $f_j = (\sigma_{sk} \phi_m)_j$ , 将式 (3) 右侧包含的未知量  $\frac{\varepsilon}{2} f_j$  移到公式左侧, 令  $\tilde{S}_{m,k,j} = S_{m,k,j} - \frac{\varepsilon}{2} f_j$ , 此时慢化源公式为:

$$\tilde{S}_{m,k,j} = S_{m,k,j} - \frac{\varepsilon}{2} f_j = \varepsilon \sum_{l=j-n_k+1}^{j-1} f_l + \varepsilon (\frac{1}{2} + \delta_k - \frac{\delta_k^2}{2}) f_{j-n_k} + \frac{\varepsilon}{2} \delta_k^2 f_{j-n_k-1} \quad (4)$$

慢化源公式 (4) 代入到多区积分输运慢化方程 (2) 中, 得到慢化源积分方程:

$$V_n (\sum_{m,j} - \frac{\varepsilon}{2} P_{n,n,j} \sum_{k \in K_1} \frac{N_{n,k}}{1-\alpha_k} \sigma_{sk,j}) \phi_{n,j} - \sum_{n \neq m} \frac{\varepsilon}{2} V_m P_{m,n,j} \sum_{k \in K_1} \frac{N_{m,k}}{1-\alpha_k} \sigma_{sk,j} \phi_{m,j} = \sum_{m=1}^N V_m P_{m,n,j} \sum_{k \in K_1} \frac{N_{m,k}}{1-\alpha_k} \tilde{S}_{m,k,j} \quad (5)$$

求解慢化源积分方程可以得到中子通量谱  $\phi_{n,j}$ , 但是在此之前首先要解决方程中的慢化源  $\tilde{S}_{m,k,j}$  和中子碰撞几率  $P_{m,n,j}$ 。将式 (4) 中的下标  $j$  换成  $j-1$ , 并与原式相减, 得到慢化源递推公式:

$$\tilde{S}_{m,k,j} - \tilde{S}_{m,k,j-1} = \varepsilon f_{j-1} - \varepsilon (\frac{1}{2} - \delta_k + \frac{\delta_k^2}{2}) f_{j-n_k} - (\frac{1}{2} + \delta_k - \delta_k^2) f_{j-n_k-1} - \frac{\varepsilon}{2} \delta_k^2 f_{j-n_k-2} \quad (6)$$

初始慢化源  $\tilde{S}_0$  可以由初始条件求的, 之后的慢化源便可由慢化源递推公式 (6) 求得, 而中子碰撞几率要利用中子碰撞积分公式求解得到。

## 2.3 基于碰撞概率法推导中子碰撞几率

慢化源积分方程中的碰撞几率  $N$  区有  $N(N-1)/2$  个是独立的, 双区问题仅有一个是独立的。反应堆碰撞几率计算有近似处理和精确处理两种方法<sup>[7][8][9]</sup>。近似方法计算简单, 但对某些燃料球元件, 近似方法精度不够高, 本文采用精确方法计算反应堆的碰撞几率<sup>[10]</sup>。考虑双区非均匀效应, 把颗粒芯作为第一区, 颗粒壳、球芯及球壳作为第二区, 相关的物理模型和碰撞几率表达式见下图:

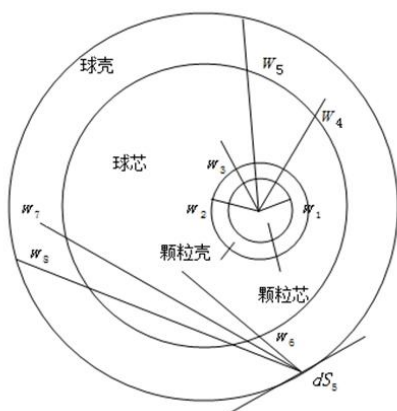


图1 燃料球内碰撞几率

其中  $w_1$  为颗粒芯内一个中子跑出颗粒芯在本颗粒壳内发生碰撞的几率,  $w_2$  为颗粒芯内一个中子跑出本颗粒的几率,  $w_3$  为本颗粒内跑出的一个中子在其他颗粒壳内发生碰撞的几率,  $w_4$  为本颗粒内跑出的一个中子在本球壳内碰撞的几率,  $w_5$  为本颗粒内跑出的一个中子跑出本球球壳的几率,  $w_6$  为进入球的一个入射中子与颗粒壳碰撞的几率,  $w_7$  为进入球的一个入射中子与球壳碰撞的几率,  $w_8$  为进入球的一个入射中子跑出燃料球的几率。

基于碰撞概率法求出以上各个碰撞几率分量后, 得到双区碰撞几率  $P_{12}(E)$ :

$$P_{12}(E) = w_1 + w_2(w_3 + w_4) + w_2 w_5 \frac{w_6 + w_7}{1 - w_8} \quad (6)$$

其余的双区碰撞几率可以根据对易关系和归一化关系得到。

## 3 有效共振积分的 CUDA 算法实现

为了研究反应堆有关的安全系数, 需要实时精确的计算堆芯和增殖材料的有效共振积分或群截面。但是当反应堆元素种类增多时, 计算双重非均匀栅元有效共振积分将会是一个非常耗时的过程<sup>[11][12][13][14]</sup>。虽然利用递推公式计算慢化源可以一定程度的提高计算速度, 但是加速效果不明显。为了

实时准确的计算反应堆的有效共振积分, 本文基于 CUDA 平台, 利用 GPU 强大的计算能力, 大幅度提高计算速度, 快速实现积分计算。

## 3.1 程序计算框架设计

为了提高程序的可读性, 方便程序的修改, 在程序设计之初就根据实际的物理模型, 采用面向对象的理论将其设计成以下几个类: 核素类 (Nucleon)、颗粒芯类 (Core)、颗粒壳类 (Shell)、颗粒类 (Grain)、燃料球类 (Fball)。工程上求解栅元有效共振积分的过程应该是先求解反应堆中的中子碰撞几率, 然后利用递推公式求解慢化源积分方程得到中子通量谱, 最后将之前得到的中子碰撞几率和中子通量谱代入基本积分方程完成栅元有效共振积分的求解。图2是栅元有效共振积分的算法流程图。

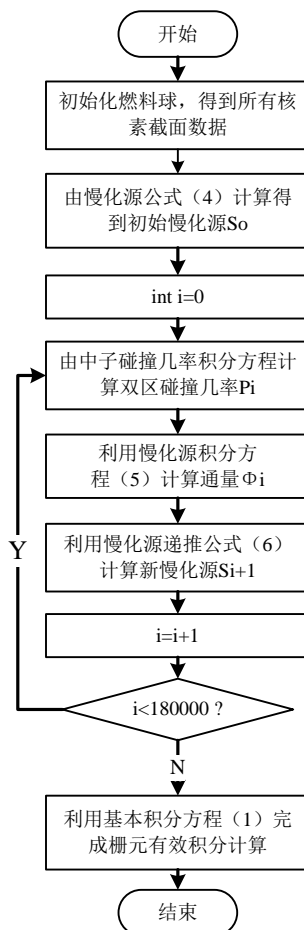


图2 栅元有效共振积分算法流程图

程序开始之初, 首先经过初始化, 由已知条件得到所有核素的截面数据, 并计算出各核素的初始慢化源。在对数能量求解区间内, 根据中子碰撞几率积分公式, 求解当前对数能量坐标下的中子碰撞几率; 将中子碰撞几率和慢化源代入到慢化源积分

方程(5)解得当前对数能量坐标下的中子通量谱,然后将新求解到的中子通量代入到慢化源递推公式(6),计算下一个对数能量点的慢化源,重复上述过程,循环求出对数能量区间内的所有中子碰撞几率和中子通量。最后将中子碰撞几率和中子通量谱代入到基本积分方程(1)中,完成栅元有效共振积分的求解。

### 3.2 程序耗时分析

Intel VTune Amplifier XE<sup>[15]</sup>是Intel公司推

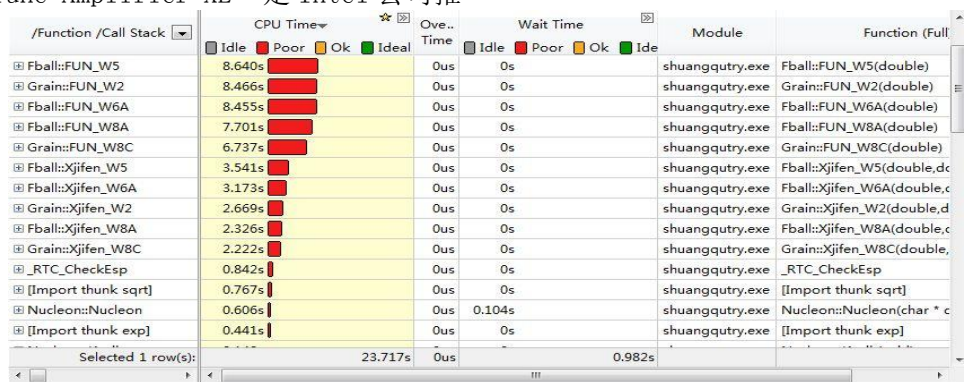


图3 程序耗时分析图

上图中积分步长为200,从图中可以看出,整个程序的耗时主要集中在求解碰撞几率分量的积分公式上。 $w_5$ 、 $w_{6A}$ 、 $w_2$ 等碰撞几率分量的积分运算采用梯形公式法,是整个程序中最耗时的部分。在求解碰撞几率分量的时候,积分步数越多,得到的碰撞几率准确性越高,而计算耗时也会越高。所以要想提高程序整体的计算速度,降低时耗并兼顾数据的准确性,必须重点对碰撞几率分量进行计算分解和并行化。

### 3.3 基于CUDA的中子碰撞几率求解

在原始串行程序中,中子碰撞几率的求解和中子通量的求解是一个循环的过程。根据上节中对程序的耗时分析, $w_5$ 、 $w_{6A}$ 、 $w_2$ 等碰撞几率分量的积分公式求解是主要耗时部分,所以主要应该考虑 $w_5$ 、 $w_{6A}$ 、 $w_2$ 等碰撞几率分量的并行求解。若继续采用原始的串行程序框架结构,直接对 $w_5$ 、 $w_{6A}$ 、 $w_2$ 等碰撞几率分量的积分公式进行并行,则需要在对数能量求解区间内循环调用内核函数,完成碰撞几率的并行计算。这个过程非常耗时,并行后的程序效率甚至远不及原始的串行程序,所以需要调整程序框架结构进行调整。为了尽可能多的使用GPU运算单元,以及避免反复调用内核函数,调整后的并行

程序在计算得到初始慢化源 $S_0$ 之后,便调用内核函数直接计算整个能量区间上的所有碰撞几率,而不是在对数能量求解区间内反复调用内核函数求解

出的一款性能分析器,因其独立于编译器和语言之外,可与C、C++、Fortran、C#、Java、.NET等一起使用,帮助程序员对程序进行深入分析。为了实现程序的合理化并行,本文利用Intel VTune Amplifier XE挖掘程序中主要耗时部分,并对程序进行有针对性的并行化设计。图3是程序的耗时分析图。

相应对数能量坐标下的碰撞几率分量。图4是碰撞几率分量的并行算法流程图。

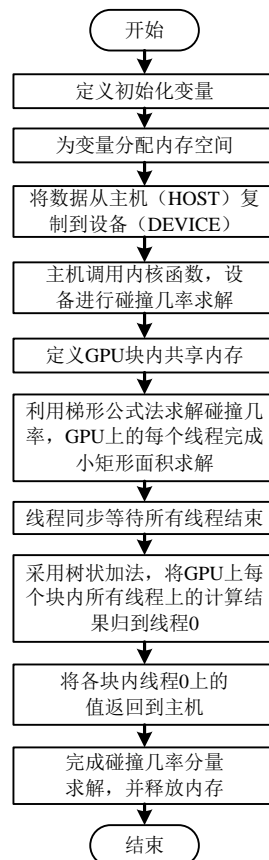


图4 碰撞几率分量并行算法流程图

结构调整后的并程序，在碰撞几率分量的求解上主要有以下几个关键改进点。对原始串行程序框架进行调整，程序开始后先进行碰撞几率分量的求解，调用一次内核函数完成整个能量区间上的碰撞几率分量求解，提高了 GPU 的数据吞吐带宽，发挥了 GPU 强大的计算能力。采用共享内存的方法，使用在 GPU 上的内存，所以存取的速度相当快，令 GPU 上的每个线程（THREAD）完成一个独立的矩形面积求解，此时一个块（BLOCK）完成了一个对数坐标下整个积分步长内的面积求解。理论上 BLOCK 内所有线程的加总，是可以并行化的，本文采用树状加法，加快最后结果的累加工作，进一步提高碰撞几率分量的求解，图 5 是树状加法执行过程。

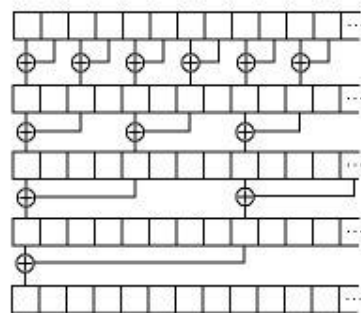


图 5 树状累加

## 4 实验与讨论

### 4.1 实验平台

实验设计在两个不同的实验平台上进行，实验

平台 1 和实验平台 2 的主要环境参数如表 1 和表 2 所示。

表 1 实验平台 1 的主要环境

Configuration	Parameter	
Hardware	CPU	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2643 ,3.30GHz Main Frequency
	Memory	8GB
Software	Operating System	Windows Server 2012 R2 Standard
	Develop Tool	Visual Studio 2010

表 2 实验平台 2 的主要环境

Configuration	Parameter	
Hardware	CPU	Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2643 ,3.30GHz Main Frequency
	GPU	NVIDIA Geforce GTX660, Bandwidth 144.2 GB/s
	Memory	8GB
Software	Operating System	Windows Server 2012 R2 Standard
	Develop Tool	Visual Studio 2010
	CUDA	CUDA Toolkit 5.0(64bit)

### 4.2 结果与讨论

实验分别在实验平台 1 和实验平台 2 上进行，在相同积分步长下，通过对比程序计算得到的碰撞几率、慢化源来检测并行结果的正确性。

基于碰撞概率法计算得到的双区概率曲线如图 6 所示。在图 6 中 p11\_c、p12\_c、p21\_c 和 p22\_c 是程序在实验平台 1 上计算得到的双区碰撞几率，p11\_g、p12\_g、p21\_cg 和 p22\_g 是程序在实验平台 2 上计算得到的双区碰撞几率。得到双区碰撞几率后，再利用慢化源递推公式得到双区通量如图 7 所示。在图 7 中，flux1\_c 和 flux2\_c 是程序在实验平台 1 上计算得到的双区通量，flux1\_g 和 flux2\_g 是程序在实验平台 2 上计算得到的双区通量。最后

利用基本积分方程，采用梯形积分法计算 U235 的裂变与俘获截面数据如表 3 所示。在表 3 中 If\_1(裂变)表示的是程序在平台 1 上得到的 U235 裂变有效共振积分，If\_1(俘获)表示的是程序在平台 1 上得到的 U235 俘获有效共振积分；If\_2(裂变)表示的是程序在平台 2 上得到的 U235 裂变有效共振积分，If\_2(俘获)表示的是程序在平台 2 上得到的 U235 俘获有效共振积分。实验结果表明，在平台 1 和平台 2 上的计算结果几乎完全一样。因为 CPU 是双精度，而 GPU 是单精度，所以最后的结果可能略微有所差别，但是并不影响准确性。

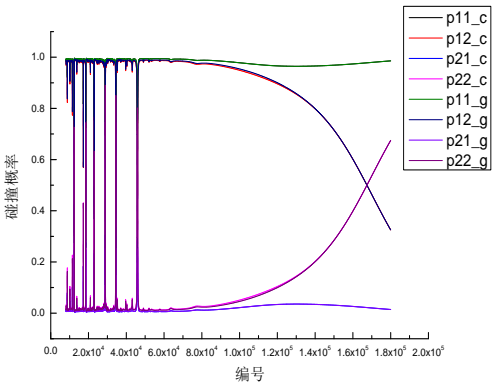


图6 两个平台下碰撞几率的对比

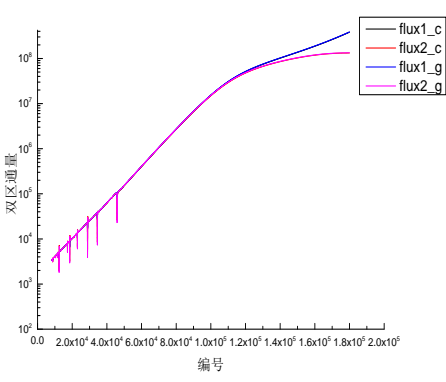


图7 两个平台下通量的对比

表3 U235 裂变与俘获共振积分

E(eV)	If_1(裂变)	If_2(裂变)	If_1(俘获)	If_2(俘获)
100——215	20.0261	20.0424	11.7253	11.737
46.5——100	34.1437	34.1628	16.3183	16.3257
21.5——46.5	41.9104	41.9742	25.5696	25.6251
10——21.5	46.7014	46.7421	41.6669	41.6931
4.65——10	48.9296	49.0036	36.9732	37.0908
2.15——4.65	17.3363	17.3402	7.34309	7.34545
1——2.15	35.7345	35.744	12.6426	12.6452
0.465——1	64.9218	64.9227	8.08592	8.08607

在本程序中，积分步长影响程序的运算时间和计算精度，当积分步数增加时，计算结果会更加准确，但是耗时也会上升。表4是在不同的积分步长下，在平台1和平台2上的程序运行时间。

表4 平台1和平台2程序耗时对比

步长	平台1	平台2	加速比
16	7645	1682	4.55
32	13353	1727	7.73
64	24854	1890	13.15
128	46566	2886	16.14
256	92168	4936	18.67

从表4中可以看到，随着积分步数的逐渐增加，程序耗时也逐渐变长，主要原因是随着积分步长的增加，碰撞几率分量积分公式求解时间变长，从而导致程序耗时增加。在实验平台2中对碰撞几率积分公式进行并行化，实验结果表明利用CUDA加速后，随着积分步数的增加，加速比也逐渐变大，程序并行效果更加显著，同时CPU使用率也有大幅度降低。

5 结束语

针对反应堆中有效共振积分计算耗时长的问题，

本文提出将CUDA平台引入反应堆群常数计算系统，建立基于CUDA的快速反应堆群常数计算，以实时精确的计算堆芯和增殖材料的有效共振积分或群截面。实验结果表明，利用GPU并行化计算，可以大幅度加快有效共振积分的计算，而不影响准确性。在计算复杂度增强的情况下，加速比会更加明显。因为反应堆的控制是一个复杂的过程，需要大量的计算，所以往往需要以大型机群为依托，实现反应堆的安全控制。通过此实验，利用GPU并行同样可以大幅度提高计算速度，而在相同的加速效果下，GPU成本更低。在未来的工作中，根据实际的需求和应用场景，可以尝试将GPU并行应用到核反应堆的安全控制中。

6 致谢

本文作者衷心感谢中国科学院上海应用物理研究所蔡翔舟、郭威、张地大、战志超等人对于本文所提供支持。

参考文献



- [1]Roshd M H M, Chow H C. GETRANS-a two dimensional integral transport code[R]. Atomic Energy of Canada Ltd., Sheridan Park, Ontario. Power Projects, 1978.
- [2]马逸尘, 高伟, 唐富初, 等. 三维中子积分输运方程的数值解——中子碰撞概率的计算[J]. 工程数学学报, 1984, 1.
- [3]胡永明, 经荣清, 王桂林. 用递推公式计算栅元有效共振积分[J]. 核动力工程, 1982, 3:005.
- [4]P. H. Kier and A. A. Rabba, "RABBLE, A Program for Computation of Resonance Absorption in Multi- region Reactor Cells," ANL-7326 (1967).
- [5]Wen M W.GPU Computing gems Jade Edition[M].NVIDIA Corp,2011.
- [6]曾博, 雷友诚, 王丛知, 邱维宝, 冯歌, 曾成志, 杨戈, 郑海荣. 基于 CUDA 的声辐射力弹性成像算法研究[J]. 计算机工程与应用, 2014.
- [7]Lane R K, Nordheim L W, Sampson J B. Resonance absorption in materials with grain structure[J]. Nuclear Science and Engineering, 1962, 14: 390-396.
- [8]Adir J, Lathrop K D. Theory of Methods Used in the GGC-4 Multigroup Cross Section Code[J]. GA-9021, 1968.
- [9]Dyos M W. The Construction of Statistical Neutron Resonances[R]. Westinghouse Electric Corp., Madison, Pa., 1968.
- [10]Teuchert E. Resonanzabsorption in einer zweifach heterogenen Anordnung kugelförmiger Brennelemente[J]. Nukleonik, 1968, 11: 68.
- [11]G. F. Kuncir. A Program for the Calculation of Resonance Integrals, GA-2525, General Atomic.(August 1961)
- [12]L. W. Nordhem. A Program of Research and Calculations of Resonance Absorption. GA-2527.(August 1961)
- [13]E. Teuchert, R. Breitbarth.Resonanzintegral-berechnung für Mehrfach Heterogene Anordnungen Jul-551-RG(September 1968)
- [14]C. A. Sterens and C. V. Smith. A Computer Program for Evaluating ResonanceAbsorption Including Resonance Overlap, Rep. GA-6637 (1965).
- [15]Marowka A. On performance analysis of a multithreaded application parallelized by different programming models using intel vtune[M]//Parallel Computing Technologies. Springer Berlin Heidelberg, 2011: 317-331.
1. 联系人: 蒲鹏 ; 2. 通讯地址 (邮政编码): 上海市中山北路 3663 号华东师范大学计算中心 (200062); 3. 电子信箱、电话: puxiaoming@163.com、13636305668。