

非定常输运问题适应于消息传递并行编程环境的香农熵计算方法

上官丹骅 邓力 张宝印 姬志成 李刚

Efficient method of calculating Shannon entropy of non-static transport problem in message passing parallel programming environment

Shangguan Dan-Hua Deng Li Zhang Bao-Yin Ji Zhi-Cheng Li Gang

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 65, 142801 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.142801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.142801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I14>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于节块展开法的 Jacobian-Free Newton Krylov 联立求解物理-热工耦合问题

Jacobian-Free Newton-Krylov based on nodal expansion method for neutronic-thermal hydraulic coupling problem

物理学报.2016, 65(9): 092801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.092801>

蒙特卡罗临界计算全局计数效率新算法研究

Algorithm researches for efficient global tallying in criticality calculation of Monte Carlo method

物理学报.2016, 65(6): 062801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.062801>

反应堆蒙特卡罗临界模拟中均匀裂变源算法的改进

Modified uniform-fission-site algorithm in Monte Carlo simulation of reactor criticality problem

物理学报.2015, 64(5): 052801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.052801>

蒙特卡罗模拟中相关变量随机数序列的产生方法

Generation of correlated pseudorandom variables in Monte Carlo simulation

物理学报.2012, 61(22): 220204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.220204>

非定常输运问题适应于消息传递并行编程环境的香农熵计算方法*

上官丹骅 邓力 张宝印 姬志成 李刚†

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

(2016年1月27日收到; 2016年5月8日收到修改稿)

在多计算步的非定常输运问题的蒙特卡罗模拟中, 为自动调整每一步的样本数以获得较高的计算效率, 可以有多种准则. 一种可选的方法是在每一步每隔若干样本监测一次系统中未死亡粒子属性分布对应的香农熵的收敛情况以决定何时停止追加样本, 此种方法需要在每一步频繁计算香农熵值. 由于在MPI消息传递并行编程环境下香农熵的经典计算方法必须广播大量的数据, 导致每一步的计算时间随香农熵计算频率的提高而快速增大, 这显然是不能满足实际需求的. 本文提出了一种适应于消息传递并行编程环境的香农熵计算新方法, 该方法计算得到的香农熵值并不等价于经典方法, 但二者之间的差别会随着样本数的增加而趋于零. 新方法的巨大优势是高频计算香农熵值的时间代价大为降低, 为最终实现基于香农熵收敛判断的每步样本数的自动调整奠定了必要的基础.

关键词: 非定常输运问题, 蒙特卡罗方法, 香农熵

PACS: 28.41.Ak, 02.50.Ng

DOI: 10.7498/aps.65.142801

1 引言

由于计算机硬件性价比的大幅提高和并行化计算的日益普及, 利用蒙特卡罗方法(Monte Carlo方法, 简称为MC方法)进行反应堆等核相关设备的研究^[1-3]正在成为一种被频繁使用的研究手段, 其核心是粒子的输运问题. 按照模拟的问题是否含时间变量, 可粗略地将输运问题分为定常输运和非定常输运两大类. 前者包含常见的反应堆临界计算等^[4,5], 而后者的研究范围显得更广泛一些, 例如惯性约束聚变研究^[6]中那些输运背景随时间发生明显变化的系统, 这些系统的模拟常常具有学科交叉的特点.

熵这一物理量是统计物理学中的核心概念, 而现代信息论在借鉴了这一概念的深刻内涵后在本领域提出了信息熵(也称为香农熵)的思想. 对于粒子输运问题的蒙特卡罗模拟来说, 经过若干研

究, 香农熵的收敛已经成为定常输运临界问题计算中一个经典的判断裂变源分布是否收敛的后验判断^[7,8], 其本身是一个必要条件而不是充分条件.

由于非定常输运问题本身的特点, 决定了利用蒙特卡罗方法对其进行模拟必然是分多计算步进行, 上一计算步结束时系统中未死亡粒子将作为下一计算步的部分源项继续进行跟踪. 从物理上分析, 在每一计算步结束时显然存在一个系统中未死亡粒子属性的分布, 虽然其为未知的, 需要大样本计算后由未死亡粒子的大量离散属性进行代表. 由于调控每一计算步的样本数的困难性(主要是缺乏成熟的调控准则), 最简单的做法显然是事先将每一计算步的样本数设为一个固定的充分大的常数, 该常数的选择往往基于经验, 此种方法显然会带来额外计算时间, 因为对某些状态的计算步而言可能根本不需要那么多的样本. 如将适用于临界计算中裂变源分布收敛判断的香农熵概念移植到非定常

* 能源局专项(批准号: 2015ZX06002008)和中国工程物理研究院科学技术发展基金(批准号: 2014B0202029)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: li_gang@iapcm.ac.cn

运输问题每一计算步未死亡粒子的未知属性分布上, 显然就存在一个天然的调控每一计算步样本数的准则, 即一旦根据已完成样本生成的未死亡粒子的属性计算出的香农熵值已经收敛, 则可以不再追加样本进行更大规模的计算. 显然, 上述准则是否能提高计算效率要靠数值实验, 但由于实现上述准则的先决条件之一是必须在每一计算步每隔若干样本计算一次香农熵值, 如果高频次计算香农熵值的时间代价太大, 则此种调控样本数的方法是没有应用前景的. 由于MPI消息传递并行编程环境应用的广泛性, 在此环境下进行高计算负荷的非定常运输问题的并行计算是最常见的选择, 因此, 研究适用于MPI消息传递并行编程环境的高效香农熵计算方法就具有现实的必要性. 由于香农熵的定义必须要求统计未死亡粒子的某些属性位于任意虚拟相空间网格中的频率, 在MPI环境下, 这就要求全局通信归约所有进程位于所有相空间网格的未死亡粒子数, 而由于相空间网格的数目对于任何实际的问题都不会是小量, 高频率地通信归约如此大量的数据显然是一个沉重的负担, 需要从方法上予以改进.

本文内容安排如下: 第2节提出了适应于MPI消息传递并行编程环境的香农熵计算新方法, 并在简化情形下进行了理论分析; 第3节以一个一维非定常运输模型为例考察了新方法的效率; 最后一个小节给出了结论.

2 适应于MPI环境的香农熵计算方法

由于未死亡粒子的属性有多种(位置、能量和飞行方向等), 这些属性的任一边缘分布或联合分布都有对应的香农熵值, 为简单起见, 本文考虑空间一维非定常运输问题且关心的粒子属性只包括位置和能量, 即 (r, E) , 其中 r 代表位置, E 代表能量, 与此对应, 计算香农熵的相空间为二维 (r, E) 空间.

香农熵 H 的基本定义如下^[7]:

$$H = - \sum_{i=1}^N P_i \log_2(P_i). \quad (1)$$

其中, $N =$ 相空间网格的数目, $P_i = M_i/M$, $M =$ 所有未死亡粒子的个数, $M_i =$ 所有未死亡粒子中, 其 (r, E) 属性位于 i 相空间网格的个数.

若处于MPI消息传递并行编程环境下, 按照定义, 为正确地计算香农熵值, 必须事先将每一进程的 N 个数值 $M_i (i = 1, 2, \dots, N)$ 进行归约求和, 在 N 较大的情况下, 高频率地调用这一过程显然是非常耗时的.

基于以上事实, 新的香农熵计算方法的核心要点是不再广播归约如此大量的数据, 而是每个进程独立计算基于本进程数据的香农熵值, 然后将每个进程计算出的香农熵值归约求和(因此每个进程只归约一个数), 再将归约求和后的结果除以总进程数, 以此得到的数值作为最终的香农熵值. 此种方法不能减少数据归约的次数, 但减少了每次归约广播的数据总量, 由此带来时间上的节省.

为简化符号起见, 以两个进程的简化情形分析新方法计算出的香农熵的基本性质. 设两个进程以数字 1, 2 代表, 进程 1 得到的未死亡粒子数、所有未死亡粒子中其 (r, E) 属性位于 i 相空间网格的个数为 $M^{(1)}$ 和 $M_i^{(1)}$, 进程 2 得到的未死亡粒子数、所有未死亡粒子中其 (r, E) 属性位于 i 相空间网格的个数为 $M^{(2)}$ 和 $M_i^{(2)}$, 则原有计算方法得到的香农熵值 H_{old} 为

$$H_{\text{old}} = - \sum_{i=1}^N \frac{M_i^{(1)} + M_i^{(2)}}{M^{(1)} + M^{(2)}} \log_2 \left(\frac{M_i^{(1)} + M_i^{(2)}}{M^{(1)} + M^{(2)}} \right), \quad (2)$$

新方法计算得到的熵值 H_{new} 为

$$H_{\text{new}} = - \frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^N \frac{M_i^{(1)}}{M^{(1)}} \log_2 \left(\frac{M_i^{(1)}}{M^{(1)}} \right) + \sum_{i=1}^N \frac{M_i^{(2)}}{M^{(2)}} \log_2 \left(\frac{M_i^{(2)}}{M^{(2)}} \right) \right]. \quad (3)$$

显然, 在样本数为有限的情况下, H_{old} 和 H_{new} 将具有不同的数值. 但如果总样本数 N_h 趋于无穷, 则 $M^{(1)}, M^{(2)}$ 趋于无穷且

$$\begin{aligned} \lim_{M^{(1)} \rightarrow +\infty} \frac{M_i^{(1)}}{M^{(1)}} &= \lim_{M^{(2)} \rightarrow +\infty} \frac{M_i^{(2)}}{M^{(2)}} \\ &= \lim_{(M^{(1)}+M^{(2)}) \rightarrow +\infty} \frac{M_i^{(1)} + M_i^{(2)}}{M^{(1)} + M^{(2)}} = P_i, \end{aligned} \quad (4)$$

则有

$$\begin{aligned} \lim_{N_h \rightarrow +\infty} H_{\text{old}} &= \lim_{N_h \rightarrow +\infty} H_{\text{new}} \\ &= - \sum_{i=1}^N P_i \ln_2(P_i). \end{aligned} \quad (5)$$

即在样本数趋于无穷的前提下, 两种方法得到的熵值趋于一致. 而由于每个进程只需归约一个数, 可

以预期新方法计算熵值的时间将大为减少, 计算频率越高则新方法的优势越明显. 同时, 由于新方法的计算时间理论上不依赖于相空间网格的规模(原有方法做不到这一点), 因为无论是何种规模的网格, 新方法的每个进程都只是归约一个数而原有方法需要归约的数据规模随相空间网格数规模的扩大而增加.

3 数值结果

在基准临界 Godiva 模型外增加一个 ^{238}U 反射层^[2], 内层 ^{235}U 和 ^{238}U 的比例进行调整, 使系统达到超临界. 初始时刻, 内层球和外层球壳各等距剖分为 8 和 12 层同心球, 在模拟过程中, 系统几何等随时间发生变化, 形成一个空间一维非常运输模型. 分 3000 个计算步进行蒙特卡罗模拟计算, 由于超临界, 每一计算步结束时未死亡粒子数都多于初始粒子数, 所以在下一计算步开始后, 采取舍选法保证初始粒子数为事先设定的样本数.

图 1(a) 和表 1 是在每步 500 万样本情况下, 每隔 2000 样本计算一次香农熵时的若干计算步所需时间比较. 每次计算都统计三个熵值: 空间一维边缘分布、能量一维边缘分布和空间能量二维联合分布对应的香农熵, 其中用以统计香农熵值的空间网格数为 100, 能量网格数为 60, 空间能量二维相空间网格数为 6000(本文所有计算都利用了 50 个 CPU). 可以看出相对于原有方法, 新方法计算香农熵的时间代价大为减少, 新方法的时间大约增加了 27%—60%, 而原有方法的计算时间则增加了约 1000%. 由于在实际应用中一般一次只计算一个分布对应的熵值, 所以可以预期新方法的计算时间将更为接近于不计算任何香农熵值时的计算时间. 图 1(b) 和表 2 就是只计算空间能量二维联合分布对应的香农熵的时间结果, 二维相空间网格数仍为 6000, 可以看出, 新方法的时间只增加了大约 3%—7%, 原方法的计算时间仍然增加了约 1000%. 这是由于在其他参数固定的情况下, 新方法的增加时间只依赖于计算熵值的个数(因每增加一个熵值的计算, 每个进程都将多归约一个数), 而原方法的增加时间是依赖于相空间网格的规模, 只计算空间能量二维联合分布对应的香农熵时的 6000 网格规模和计算上述所有三个熵值的 6160 的网格规模相差无几.

图 2 是某一计算步两种方法所计算熵值随样本数的变化比较. 同理论分析的结果一致, 在样本数较少时, 两种方法计算的熵值有明显的差别, 但随着样本数逐渐增大, 二者的差别逐渐消失. 上述结果说明新方法不仅计算效率高, 在样本数充分大时仍具有原定义香农熵的收敛指示功能.

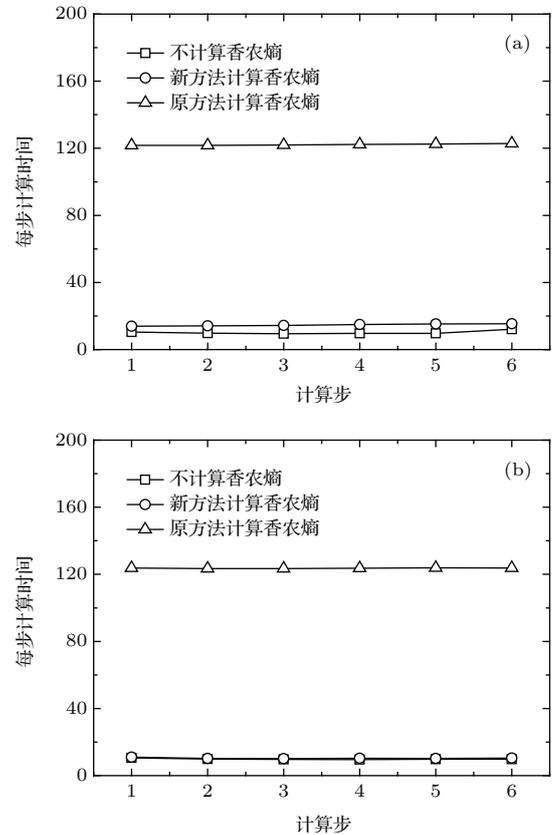


图 1 计算时间结果图 (a) 同时计算 3 个熵值; (b) 只计算 1 个熵值

Fig. 1. The results for computational time: (a) Calculating three entropies synchronously; (b) only calculating one entropy.

表 1 新旧方法计算时间比较 (同时计算 3 个熵值)

Table 1. comparison of computational time for all methods (calculate three entropies synchronously).

计算步	新方法增加时间 百分比/%	原方法增加时间 百分比/%
1	32.9	1066
2	44.6	1145
3	53.1	1200
4	53.9	1163
5	59.1	1175
6	27.2	917

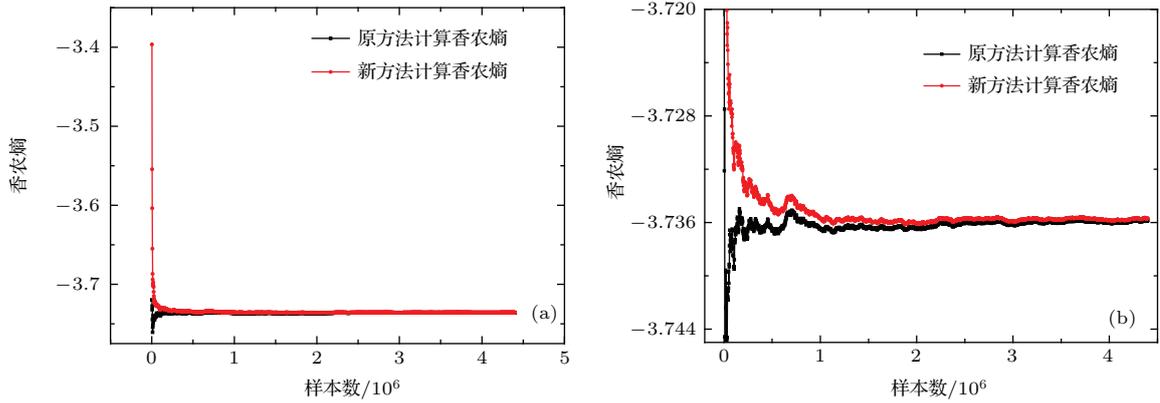


图2 (网刊彩色) 不同方法计算熵值结果 ((b) 为局部放大图)

Fig. 2. (color online) Comparison of Shannon entropy calculated by different methods ((b) is the enlarged one).

表2 新旧方法计算时间比较 (只计算 1 个熵值)

Table 2. comparison of computational time for all methods (only calculate one entropy).

计算步	新方法增加时间 百分比%	原方法增加时间 百分比%
1	4.5	1079
2	3.5	1155
3	4.6	1180
4	7.7	1192
5	4.8	1165
6	6.3	1160

4 结 论

在 MPI 消息传递并行编程环境下, 由于大量减少了计算香农熵时所需归约的数据量, 本文提出的计算香农熵的方法极大减小了高频诊断香农熵是否收敛时所需付出的时间代价, 使基于香农熵的收敛情况自动调整非定常输运问题每一计算步的样本数成为可能. 相同的方法也可以应用到定常输

运临界计算问题的自动调整样本数的策略研究中.

参考文献

- [1] Martin W 2012 *Nucl. Eng. Technol.* **44** 2
- [2] Li G, Deng L, Li S, Mo Z Y 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 022401 (in Chinese) [李刚, 邓力, 李树, 莫则尧 2011 物理学报 **60** 022401]
- [3] Li S, Li G, Tian D F, Deng L 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 249501 (in Chinese) [李树, 李刚, 田东风, 邓力 2013 物理学报 **62** 249501]
- [4] Horelik N, Herman B R, Forget B, Smith K 2013 *Proceedings of M&C 2013* Sun Valley, Idaho, USA, May 5-9, 2013 p2986
- [5] Smith K S, Forget B 2013 *Proceedings of M&C 2013*, Sun Valley, Idaho, USA, May 5-9, 2013 p1809
- [6] Lan K, He X T, Lai D X, Li S G 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 3789 (in Chinese) [蓝可, 贺贤士, 赖东显, 李双贵 2006 物理学报 **55** 3789]
- [7] Brown F B 2006 *Proceedings of PHYSOR 2006* Vancouver, BC, Canada, September 10-14, 2006C081
- [8] Ueki T, Brown F B 2005 *Nucl. Sci. Eng.* **149** 38

Efficient method of calculating Shannon entropy of non-static transport problem in message passing parallel programming environment*

Shangguan Dan-Hua Deng Li Zhang Bao-Yin Ji Zhi-Cheng Li Gang[†]

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)

(Received 27 January 2016; revised manuscript received 8 May 2016)

Abstract

For the Monte Carlo simulation of the non-static transport problem, there must be many calculation steps. Because some particles cannot finish their transport in the last step, they are naturally used as the source particles of the present step. These particles are called undied particles. It is difficult to adjust the history number of each step to obtain higher efficiency because the adjusting rule is hard to find. The most direct method is to set a large enough history number for all steps. But evidently, it is unnecessary for some steps. Among all possible rules, one candidate of adjusting the history number is to check the convergence situation of Shannon entropy (corresponding to the distribution of some undied particle attributes) every some samples in each step to determine whether or not to simulate more particles. So, this method needs to calculate the Shannon entropy frequently. Because the classical method of calculating Shannon entropy in message passing parallel programming environment must reduce massive data, it is unpractical to be used in this situation for the great increasing of computation time with the high frequency of entropy calculation. In this paper, we propose an efficient method of calculating the entropy in the message passing parallel programming environment by letting each process calculate its entropy value based on the local data in each processor and calculating the final entropy by averaging all the entropy values gotten by all processes. The entropy value calculated by this method is not the same as that by the classical method when using finite history number, but the difference goes to zero when the history number goes to infinity. The most remarkable advantage of this method is the small increasing of computation time when calculating the entropy frequently. It is a suitable method of calculating Shannon entropy when adjusting the history number automatically based on the judgment of the convergence situation of Shannon entropy.

Keywords: non-static transport problem, Monte Carlo method, Shannon entropy

PACS: 28.41.Ak, 02.50.Ng

DOI: 10.7498/aps.65.142801

* Project supported by the Special Project of National Energy Administration, China (Grant No. 2015ZX06002008) and the Science and Technology Development Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 2014B0202029).

[†] Corresponding author. E-mail: li_gang@iapcm.ac.cn