

蒙特卡罗临界计算全局计数问题新策略研究

上官丹骅 姬志成 邓力 李瑞 李刚 付元光

New strategy for global tallying in Monte Carlo criticality calculation

Shangguan Dan-Hua Ji Zhi-Cheng Deng Li Li Rui Li Gang Fu Yuan-Guang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 122801 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20182276

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182276>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

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 <https://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 <https://doi.org/10.7498/aps.64.052801>

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

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

物理学报. 2016, 65(14): 142801 <https://doi.org/10.7498/aps.65.142801>

球形黑腔辐射输运问题的蒙特卡罗模拟

Monte Carlo simulation of the radiation transport of spherical holhraum

物理学报. 2015, 64(14): 145203 <https://doi.org/10.7498/aps.64.145203>

用推广的量子轨迹蒙特卡罗方法研究强场光电子全息

Strong field photoelectron holography studied by a generalized quantum-trajectory Monte Carlo method

物理学报. 2016, 65(22): 223207 <https://doi.org/10.7498/aps.65.223207>

用量子蒙特卡罗方法研究二维超流-莫特绝缘体相变点附近的希格斯粒子

Higgs mode near superfluid-to-Mott-insulator transition studied by the quantum Monte Carlo method

物理学报. 2015, 64(18): 180201 <https://doi.org/10.7498/aps.64.180201>

蒙特卡罗临界计算全局计数问题新策略研究*

上官丹骅¹⁾ 姬志成¹⁾ 邓力¹⁾ 李瑞^{2)†} 李刚¹⁾ 付元光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)

(2018 年 12 月 26 日收到; 2019 年 4 月 2 日收到修改稿)

基于一个裂变源分布对应香农熵序列的在线收敛性诊断方法, 为提高全局计数整体效率的均匀裂变点算法将在首次激活迭代步和首次判断收敛迭代步的最大值之后启动. 之后, 整体精度指标将每隔固定迭代步数计算一次, 一旦达到事先设定的精度标准, 整个临界迭代计算将提前终止. 这一判断过程将一直持续到事先设定的最大迭代步数为止. 通过一个反应堆基准问题 C5G7 模型的计算表明上述新策略在合适的参数下有助于提高蒙特卡罗临界计算全局计数问题的整体效率.

关键词: 临界问题, 全局计数, 蒙特卡罗方法, 香农熵

PACS: 28.41.Ak, 02.50.Ng

DOI: 10.7498/aps.68.20182276

1 引言

计算核相关系统的临界性在核科学与工程领域是常见而重要的问题. 作为一种成熟的计算方法, 蒙特卡罗算法由于其几何、物理建模的精确性以及高度的可并行性等特点在临界计算中得到广泛的运用.

在最近的研究^[1-4]中, 由于计算机硬件与模拟计算方法、软件的巨大进步, 使得过去由于能力不足而采取的近似手段有了可以进一步精确化处理的能力, 例如反应堆设备的 pin-by-pin 计算等. 这些趋势反过来对于计算方法和软件提出了更大的挑战. 对于临界问题的蒙特卡罗模拟而言, 由于核设备的精细化建模及多物理耦合计算需求, 在计算临界特性 (即特征值) 的同时进行大规模的全局计数成为一个难以高效解决的问题^[5-7]. 困难一方面来自于计数规模的庞大; 另一方面来自于计算目标不能仅仅瞄准于最大程度地减少最小误差, 而是必

须提高全局计数的整体效率, 这就使得单纯增加样本数是一种低效甚至无效的策略, 因为在功率较高、误差较小的区域更容易得到新增样本, 而功率较低、误差较大的区域反而得不到新增样本, 从而使整体效率难以提高.

为提高临界计算全局计数问题的整体效率, 出现了一些算法上的研究. 这些研究以 95/95 准则^[5] (即要求在一定时间内, 至少 95% 的栅元内计数的相对误差要以至少 95% 的置信度位于 1% 以下) 为指导, 力图在总样本数一定的前提下获得更高的整体效率, 其中均匀裂变点 (UFS) 算法^[5-7]是最早提出的一种. 该算法在假设裂变源本征分布已经达到的前提下, 通过统计已完成迭代步的裂变点数密度, 以此来偏倚当前迭代步的裂变次级平均粒子数, 然后通过纠偏的手段保持结果的无偏性, 最终的效果是在统计意义上使得计算误差较大的区域产生更多的低权重粒子而在计算误差较小的区域产生更少的高权重粒子, 从而使整体效率得到较大的提高. 但是如果在裂变源分布还未收敛的

* 国防科工局基础科研项目 (批准号: C1520110002) 和能源局专项 (批准号: 2015ZX06002008) 资助课题.

† 通信作者. E-mail: li_rui@iapcm.ac.cn

情况下启动 UFS 算法, 由于统计得到的裂变点密度具有系统误差, 将会导致算法应用失败, 解决这一问题的方法一般是凭经验选择一个足够大的非激活迭代步数来保证裂变源分布的收敛. 同时, 由于只在完成所有的设定迭代步计算后才统计整体效率, 即使计算早已达到事先设定的整体效率标准, 也不得不进行多余的计算. 在后续的研究中还出现了效率更高的均匀计数密度算法^[8,9].

本文提出了一种进一步提高临界计算全局计数问题整体效率的新策略. 这一策略在自主研发的定态蒙特卡罗粒子输运模拟软件 JMCT 上进行了验证. 本文第 2 节将介绍包含两个部分的新策略; 第 3 节给出了相应的数值结果; 第 4 节给出了结论.

2 提高临界计算全局计数问题效率的新策略描述

这一新策略包含两个部分. 首先, 基于一个裂变源分布对应香农熵的实时收敛性诊断方法, 为提高全局计数整体效率而设计的 UFS 算法将在首次激活迭代步和首次判断收敛迭代步的最大值之后被激活, 这就为保证裂变源分布已经收敛提供了双重保障, 从而保证了 UFS 算法所使用的偏倚数据更加合理; 其次, 在 UFS 算法被启动后, 将定期监测全局计数的一个整体精度指标, 一旦这个指标小于事先约定的数值, 则认为全局计数已经很好地收敛, 整个计算将被终止, 而不必等到事先设定的最大迭代步数全部完成. 下面将详细介绍这两部分.

2.1 基于香农熵的裂变源分布实时收敛性诊断方法

香农熵最先引入蒙特卡罗临界计算是作为判断裂变源分布是否收敛的后验指标, 同时, 也存在另一些基于其他熵的实时收敛性诊断方法研究^[10-12]. 基于香农熵的实时收敛性诊断方法在减少非定常输运问题的计算时间方面获得了成功的应用^[13]. 将这一实时收敛性诊断方法应用在定态蒙特卡罗临界计算方面还属首次.

裂变源分布对应香农熵 H 的基本定义如下^[10]:

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

式中, N 为含裂变物质栅元的数目; $P_i = \frac{M_i}{M}$, 其中

M 为所有裂变源中子的个数, M_i 为裂变源中子其空间坐标位于第 i 个含裂变物质栅元中的总个数.

基于香农熵的实时收敛性判断准则依赖于多个香农熵值组合出的随机振子指标 K_n , 定义为^[11]

$$K_n = \frac{H^n - H_{\min}^{n,p}}{H_{\max}^{n,p} - H_{\min}^{n,p}}. \quad (2)$$

其中, H_n 是当前第 n 个迭代步的香农熵值, $H_{\max}^{n,p}$ 和 $H_{\min}^{n,p}$ 分别是当前第 n 迭代步之前所有 p 个香农熵中的最大值和最小值. 在香农熵值序列已经收敛的前提下, K_n 将在 0.5 附近做无规随机涨落. 实时判断香农熵是否收敛的准则在于判断当前第 n 迭代步及之前所有 m 个随机振子指标是否满足不等式^[13]

$$|K^{n-m+1} - 0.5| < \varepsilon \text{ 且 } \left| \frac{1}{m} \sum_{i=0}^{m-1} K^{n-i} - 0.5 \right| < \varepsilon, \quad (3)$$

一旦满足, 则认为裂变源分布已经收敛, 可以在 n 和事先约定的非激活迭代步的最大值之后启动计数过程及 UFS 算法; p, m, ε 按参考文献^[11] 的推荐取为 20, 50, 0.1.

2.2 基于全局计数整体精度指标定期监测的提前结束计算方法

衡量全局计数整体效率的 95/95 准则的本质在于以尽可能少的计算时间获得尽可能高的整体精度. 整体精度指标其实有很多种, 都从一个方面反映了全局计数的整体收敛状况. 95/95 准则使用的整体精度指标是 Pre_95, 即所有计数的相对误差中至少 95% 的相对误差都不大于该值. 要在并行计算环境下定期监测这一整体精度指标, 就必须在激活 UFS 算法后每隔固定迭代步数计算一次所有计数的相对误差, 而通常来说, 并行蒙特卡罗程序需要进行规约之后才能得到计数的相对误差, 一般仅在所有迭代步完成之后进行规约并输出计数. 为解决这一问题, JMCT 采用了对象序列化与在线反序列化技术 (由于 JMCT 采用面向对象的编程方式实现, 程序运行时将产生多个对象实例, 其内存排布是无序的. 但重启及续算功能需要将对象保存在文件中, 需要内存对象是有序且连续的. 在数据备份时对无序对象进行的操作就是序列化, 在恢复运行时对数据的操作就是反序列化), 以最小的 I/O 开销实现了并行环境的备份与恢复, 从

而支持在任意迭代步中进行计数规约操作.

3 数值结果

以 C5G7 模型 (图 1) 作为验证上述策略的基准模型. 该模型是 NEA 发布的程序检验基准例题. 其中包含两种组件, 分别是铀氧化物 UOX 组件和铀钼混合氧化物 MOX 组件, 交叉 2×2 布置. 每个组件内有 17×17 个 pin-cell, 其中又分为 264 个燃料 pin、24 个导向管 pin 和一个仪表管 pin. UOX 组件中, 包含一种富集度; MOX 组件中包含三种富集度. 该模型大约包含 2 万个栅元, 其详细介绍可以参考文献 [14].

以全局体平均通量计数作为计算目标. 由于没有标准答案, 所以, 通过大规模 1000 迭代步的计算 (每代 5 百万样本, 跳过前 500 代) 获得基准解, 这一计算规模对于该问题是足够的. 图 2 所示裂变源分布对应香农熵的变化反映了这一点. 分四种情况进行了计算: 1) 不启动策略和 UFS 算法 (简称为 no_stra_no_UFS); 2) 不启动策略、启动 UFS 算法 (简称为 no_stra_with_UFS); 3) 启动策略、不启动 UFS 算法 (简称为 with_stra_no_UFS);

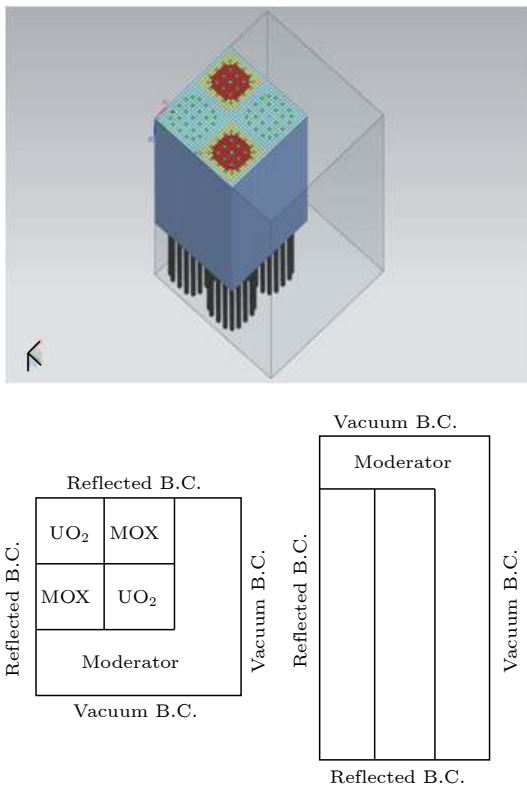


图 1 C5G7 模型图

Fig. 1. C5G7 model.

4) 启动策略和 UFS 算法 (简称为 with_stra_with_UFS). 最初的设置是 1500 迭代步, 跳过 200 代, 每代 20 万样本数. 图 3 显示了不启动策略时有无 UFS 算法裂变源分布所对应香农熵的变化, 可以看出, 200 代的非激活迭代数目是不够的, 也就是 UFS 算法利用了不够精确的数据进行偏倚. 为考察全局计数的整体精度, 设计了整体精度指标 E_{global} , 定义如下:

$$E_{global} = \sum_{i=1}^{cell_number} \left(\frac{T^i - T_{benchmark}^i}{T_{benchmark}^i} \right)^2, \quad (4)$$

其中, $T_{benchmark}^i$ 是第 i 个栅元内体平均通量的基准解, T^i 是各种情况下第 i 个栅元内体平均通量的计算结果. 这个指标从一个方面度量了全局计数的整体精度高低, 越小表明整体精度越高.

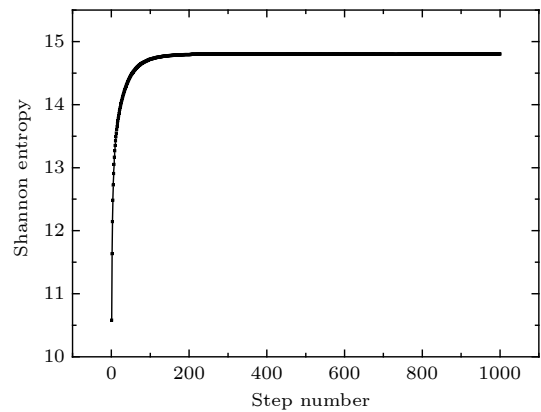


图 2 基准解裂变源分布对应香农熵的变化

Fig. 2. Shannon entropy of fission source distribution for benchmark result.

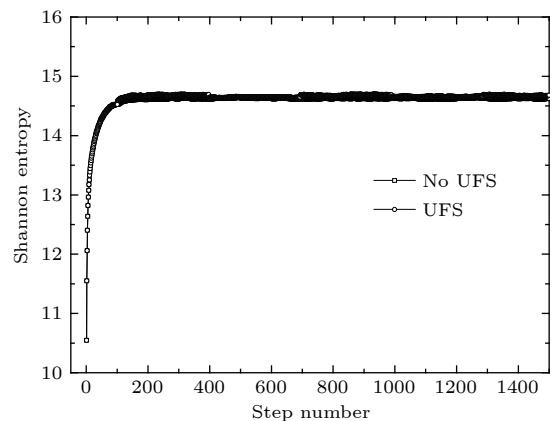


图 3 不启动策略时有无 UFS 算法的裂变源分布对应香农熵的变化

Fig. 3. Shannon entropy of fission source distribution for two cases (without strategy and with or without UFS algorithm).

当启动策略时,原先约定的在第 201 步启动计数或 UFS 算法被推迟到第 224 步,显示香农熵的实时诊断方法判断直到第 224 步裂变源分布才收敛得比较充分. 如果要求只要整体精度指标 Pre_{95} 不大于 0.004 就结束整个计算,且每隔 40 步判断一次,则不启动 UFS 算法时在第 944 步达到要求,而启动 UFS 算法时在第 824 步就达到了要求. 从表 1 可以看出,各种情况下计算得到的特征值 k_{eff} 基本没有什么变化,说明各种方法得到的结果都是无偏的. 由于不启动策略时 UFS 算法启动得过早(在第 201 步启动),no_stra_with_UFS 这种情况下的整体计算精度 E_{global} 是较差的,

即使其已经完成了全部 1500 个迭代步的计算. 对于 with_stra_no_UFS 情形,虽然启动计数过程较晚,裂变源分布收敛得已经比较充分,但由于总共只有 944 个迭代步,有效样本较 no_stra_no_UFS 情形少很多,又没有 UFS 算法使全局计数的相对误差平均化,所以整体精度指标 E_{global} 是最差的,即使此时指标 Pre_{95} 已经小于 0.004. 而对于 with_stra_with_UFS 情形,虽然结束计算的时刻更早(在第 824 步),从而有效样本数更少,但由于启动 UFS 算法对全局计数误差的平均化效应,其整体精度指标 E_{global} 是最好的.

表 1 结果比较
Table 1. Comparison of results.

方法	k_{eff}	计算时间/s	E_{global}	Pre_{95}
no_stra_no_UFS	1.17660	8816.0	0.7689	0.00284
no_stra_with_UFS	1.17650	10189.2	1.2567	0.00259
with_stra_no_UFS (在第224启动计数,在第944步结束)	1.17657	5580.4	1.9800	0.00396
with_stra_with_UFS (在第224启动计数,在第824步结束)	1.17629	4831.1	0.5616	0.00396

4 结 论

对于蒙特卡罗临界计算全局计数问题,基于已有的 UFS 算法,提出了一种进一步提高效率的新策略. 该策略通过基于裂变源分布对应香农熵的实时判断收敛准则和对全局计数整体精度指标的定期监控,可进一步确保 UFS 算法获得质量更高的数据并且在保证精度的前提下减少冗余计算,从而提高了整体效率. 对 C5G7 基准模型的计算表明本文提出的策略在参数合适时是高效的. 当然,由于新策略中还有经验参数,利用更智能化的方法消除这些参数是下一步工作的目标.

参考文献

[1] Martin W 2012 *Nucl. Eng. Tech.* **44** 2
[2] Li G, Deng L, Zhang B Y, Li R, Shi D F, Shangguan D H, Hu Z H, Fu Y G, Ma Y 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 052801 (in Chinese) [李刚, 邓力, 张宝印, 李瑞, 史敦福, 上官丹骅, 胡泽

华, 付元光, 马彦 2016 *物理学报* **65** 052801]
[3] Veluri V K, Sengupta S, Mammen S, Bhattacharya S 2018 *Nucl. Technol.* **204** 1
[4] Maul L 2018 *Ann. Nucl. Energy* **115** 523
[5] Daniel J K, Tomas M S, Stephen C W 2012 *Proceedings of PHYSOR 2012-Advances in Reactor Physics-Linking Research, Industry, and Education* Knoxville, Tennessee, USA, April 15–20, 2012
[6] Daniel J K, Brian N A, Bryan R H 2013 *Proceedings of M&C 2013* Sun Valley, Idaho, USA, May 5–9, 2013 p2962
[7] Jessica L H, Thomas M S 2013 *Proceedings of M&C 2013* Sun Valley, Idaho, USA, May 5–9, 2013 p2780
[8] Shangguan D H, Deng L, Li G, Zhang B Y, Ma Y, Fu Y G, Li R, Hu X L 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 062801 (in Chinese) [上官丹骅, 邓力, 李刚, 张宝印, 马彦, 付元光, 李瑞, 胡小利, 2016 *物理学报* **65** 062801]
[9] Shangguan D H, Li G, Zhang B Y, Deng L, Ma Y, Fu Y G, Li R, Hu X L 2016 *Nucl. Sci. Eng.* **182** 555
[10] Ueki T, Brown F B 2005 *Nucl. Sci. Eng.* **149** 38
[11] Natio Y, Yang J 2004 *J. Nucl. Sci. Tech.* **41** 559
[12] Ueki T 2008 *Nucl. Sci. Eng.* **160** 242
[13] Shangguan D H, Deng L, Li G, Zhang B Y 2018 *High Power Laser and Particle Beams* **30** 016004
[14] Cavarec C, Perron J, Verwaerde D, West J 1994 *The OECD/NEA Benchmark Calculations of Power Distributions within Assemblies* (Electricité de France)

New strategy for global tallying in Monte Carlo criticality calculation*

Shangguan Dan-Hua¹⁾ Ji Zhi-Cheng¹⁾ Deng Li¹⁾ Li Rui^{2)†}
 Li Gang¹⁾ Fu Yuan-Guang²⁾

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

2) (*CAEP Software Center of High Performance Numerical Simulation, Beijing 100088, China*)

(Received 26 December 2018; revised manuscript received 2 April 2019)

Abstract

Traditionally, the Monte Carlo criticality calculation must set a maximum inactive step by experience to ensure that a fission source distribution has converged. The tallying process can only be invoked after this maximum inactive step to avoid the system error caused by the non-converged fission source distribution. In the same way, the uniform fission site algorithm for increasing the whole efficiency of global tallying should also be invoked after the fission source distribution has converged fully. The calculation must reach a maximum iteration step, then, this process can be stopped and the tallies can be printed. This old strategy has two defects. Firstly, the appointed maximum inactive step can only be set by experience, which will be insufficient in some cases; secondly, some iteration steps can be wasted because the precision of tallies has been enough and no one knows it. So, a new strategy is proposed in this article to overcome these defects. Based on an on-the-fly diagnostic method for the convergence of Shannon entropy sequence corresponding to the fission source distribution of each iteration step, the uniform fission site algorithm will be invoked after the iteration step whose serial number is the maximum of the first active step and the first converged step diagnosed by the above-mentioned rule. This rule will be helpful in ensuring that the uniform fission site algorithm can use enough accurate data to bias the secondary fission neutron number, thus avoiding the system error to some degree. Then, a global precision index will be calculated at each fixed step to judge whether the precision standard is reached. If so, the whole calculation is stopped. This process will be repeated until the pre-set maximum step number is reached. In this way, superfluous calculations can be skipped but the calculation precision can be guaranteed. In a word, this new strategy is beneficial to increasing the efficiency of global tallying in the Monte Carlo criticality calculation when appropriate parameters are adopted. This conclusion can be proved by the numerical result from the C5G7 benchmark model.

Keywords: criticality calculation, global tallying, Monte Carlo method, Shannon entropy

PACS: 28.41.Ak, 02.50.Ng

DOI: 10.7498/aps.68.20182276

* Project supported by the Technology and Industry for National Defense, China (Grant No. C1520110002) and the Special Project of the National Energy Administration, China (Grant No. 2015ZX06002008).

† Corresponding author. E-mail: li_rui@iapcm.ac.cn