

# 非定常辐射输运问题的蒙特卡罗自适应偏倚抽样<sup>\*</sup>

李刚<sup>1)2)</sup> 邓力<sup>1)†</sup> 李树<sup>1)</sup> 莫则尧<sup>1)</sup>

1) (北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室, 北京 100088)

2) (中国工程物理研究院北京研究生部, 北京 100088)

(2009年12月1日收到; 2010年5月19日收到修改稿)

用蒙特卡罗 (MC) 方法模拟高温、高压、多介质、大变形辐射输运问题时, 由于网格体积悬殊, 导致各网格通量的统计误差涨落很大, 随着时间步的增加, 误差积累甚至会导致计算结果失真. 为此, 发展了针对全局网格计算的源偏倚抽样技巧. 用于源偏倚抽样的价值函数基于上个时间步各网格通量及误差, 通过加权构造产生, 它比传统 MC 通过解伴随方程获取价值的性价比要高得多. 数值试验表明, 全局源偏倚抽样通过自适应分配当前时间步各网格的粒子数, 有效地降低了当前步重要网格通量误差.

关键词: 非定常, 辐射输运, 蒙特卡罗, 源偏倚抽样

PACS: 24.10.Lx, 02.70.Tt, 28.20.Gd

## 1. 引言

蒙特卡罗 (MC) 方法仿真能力强, 物理建模完善, 对空间、能量、方向的处理近似度最少, 因而, 成为粒子输运问题模拟的首选方法. 其主要不足是计算耗时和误差的概率性, 计算整体积分量的精度较高, 而计算局部量的精度相对较差<sup>[1,2]</sup>. 在惯性约束聚变 (ICF) 研究中<sup>[3,4]</sup>, 辐射输运问题具有高温、高压、网格大变形、系统状态随时间变化等特点<sup>[5-7]</sup>. 模拟通常对空间、时间进行离散, 在每个小时间步内, 系统近似假定为一常态. 模拟过程涉及流体力学与辐射输运耦合计算, 输运计算通常采用力学空间网格, 而力学网格体积大小悬殊巨大 (3—5 个量级), 确保每个网格估计量有较高精度是数值计算方法需要研究的一大难题<sup>[8,9]</sup>.

辐射输运对流体力学的作用主要通过各网格的通量响应得到, 算好每个网格的通量至关重要. MC 方法作为一种统计方法, 模拟粒子数的多少决定了计算量的精度, 采用直接模拟, 分配到各网格的粒子数与体积成正比, 小网格的估计量价值大, 但计算的误差也大. 随着时间步的增加, 累积误差

对最终结果的影响是物理数学非常关心的问题. 研究提高每个时间步空间网格估计量精度的方法是提高最终计算结果置信度的关键.

传统 MC 定常计算中通常先用确定论方法或 MC 方法, 通过解伴随方程获取各网格的价值, 用于指导 MC 粒子尽可能朝价值大的网格输运, 减少在不重要网格的粒子轨迹, 通过无偏修正来保证计算结果的正确. 然而对上万时间步的辐射输运问题, 若每步都产生价值函数, 显然这既不经济, 也不适用, 因为解伴随方程的计算量与正算相当.

本文提出不解伴随方程直接获得价值函数的方法, 指导每个时间步各空间网格的源粒子发射, 做到价值大的网格多发粒子, 价值小的网格少发粒子.

## 2. 问题的提出

非定常辐射输运问题涉及流体力学与辐射输运耦合计算, 其中辐射输运方程的形式为<sup>[10,11]</sup>

$$\phi(P) = S(P) + \int K(P' \rightarrow P) \phi(P') dP', \quad (1)$$

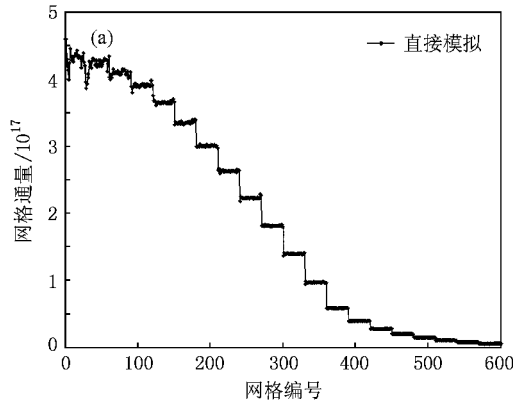
其中  $P = (r, E, \Omega, \mu)$ ,  $S(P)$  为源,  $K(P' \rightarrow P)$  为空间、方向、能量和时间转移函数. 此方程为非线性方

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金重点项目 (批准号: 61033009) 和国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2011CB309702) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: deng\_li@iapcm.ac.cn

程,采用迭代法求解.

方程中的空间变量  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ , 时间  $t$  采用力学网格和时间步长. 在每个时间步  $\Delta t_m = t_m - t_{m-1}$



内,解方程(1),算出每个网格  $D_k$  的体通量

$$\Phi_{D_k} = \int_{V_{D_k}} \phi(\mathbf{P}) d\mathbf{P}. \quad (2)$$

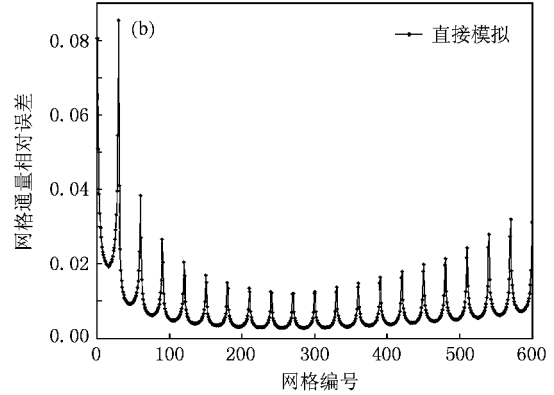


图1 直接模拟结果图 (a) 网格通量, (b) 网格通量相对误差

由于力学网格体积相差悬殊, MC 采用径迹长度估计, 通量误差与网格体积大小成反比. 如图1所示, 最中心的网格通量价值最大, 但由于其体积最小, 直接模拟导致相对误差很大. 单靠增大模拟样本数难以从根本上解决误差涨落问题.

另一方面, 各网格的重要性不同, 主要体现在反馈给力学程序的通量上. 通量越大, 网格对模型整体的贡献越大, 网格越重要. 算准算好重要网格是关键.

传统 MC 定常计算表明, 若能构造出好的价值函数指导 MC 粒子轨迹的赌分裂, 则 MC 计算效率可以提高一个量级<sup>[12]</sup>. 因此, 不同网格  $D_k$  价值函数  $J_k$  的构造是问题的关键.

源和转移函数的偏倚

$$\begin{aligned} \tilde{S}(\mathbf{r}) &= S(\mathbf{r}) J_k, \quad \mathbf{r} \in D_k, \\ \tilde{K}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}) &= K(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}) J_l / J_k, \quad \mathbf{r}' \in D_k, \mathbf{r} \in D_l. \end{aligned} \quad (3)$$

通过粒子权重无偏修正来保证计算结果的无偏, 纠偏权取为

$$\tilde{w} = \begin{cases} w/J_i & \Leftrightarrow \tilde{S}(\mathbf{r}), \\ wJ_i/J_j & \Leftrightarrow \tilde{K}(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}). \end{cases} \quad (4)$$

### 3. 计算方法

#### 3.1. 直接模拟抽样

非定常辐射输运采用多个时间步进行, 每个时

间步 MC 输运模拟的粒子都来自前一时间步截止时没有死亡的粒子所构成的源粒子库, 相当于从离散分布中抽样, 抽样概率取决于粒子权重. 下面给出直接模拟的各网格粒子的抽样概率  $P_i$ .

设模型共有  $K$  个网格, 当前时间步源粒子库中含有  $N$  个粒子, 则网格  $k$  中粒子的抽样概率为

$$P_k = \frac{\sum_{i=1, i \in I(k)}^N w_i}{\sum_{j=1}^N w_j}, \quad (5)$$

其中  $w_i$  为第  $i$  个粒子的权重,  $I(k)$   $k = 1, 2, \dots, K$  表示属于网格  $k$  的粒子构成的集合.

#### 3.2. 偏倚抽样

关于价值函数  $J_k$  的产生, 定常输运通常通过确定论方法解伴随方程得到, 但对非定常辐射输运问题, 每个时间步都解伴随方程显然是不经济的, 下面采用偏倚技巧来达到相同目的.

按如下方法构造偏倚系数  $b_k$   $k = 1, 2, \dots, K$ :

1) 计算源粒子库中各网格粒子权重和的平均值  $\bar{w}$

$$\bar{w} = \frac{\sum_{k=1}^K \left( \sum_{i=1, i \in I(k)}^N w_i \right)}{K} = \frac{\sum_{i=1}^N w_i}{K}, \quad (6)$$

2) 以前一时间步各网格通量值  $\Phi_k$  为系数, 确定偏倚系数

$$b_k = \frac{\bar{w}}{\sum_{i=1, i \in I(k)}^N w_i} \cdot \Phi_k, \quad k = 1, 2, \dots, K. \quad (7)$$

由此确定的偏倚系数,可保证通量值越高的网格价值越大,计算的精度越高.从而网格  $k$  的粒子抽样概率变为

$$\tilde{P}_k = \frac{\sum_{i=1, i \in I(k)}^N w_i \cdot b_i}{\sum_{j=1}^N w_j \cdot b_j} = b_k \cdot \frac{\sum_{i=1, i \in I(k)}^N w_i}{\sum_{j=1}^N w_j \cdot b_j}. \quad (8)$$

以  $\tilde{P}_k$  概率在网格  $k$  中抽样,相当于对源进行了价值函数为  $J_k$  的偏倚,其中

$$J_k = \tilde{P}_k / P_k. \quad (9)$$

由于时间步长有限,绝大部分粒子不能输运出原来的网格,所以偏倚转移函数效果不明显,只考虑源的偏倚.源粒子抽取后,权重粒子权重无偏修正为

$$\tilde{w}_k = \frac{w_k}{J_k}. \quad (10)$$

对全局进行源偏倚抽样,针对非定常辐射输运中网格大变形导致的网格体积差异悬殊的特点,合理分配各网格的样本数,能够提高高通量网格的计算精度.由于没有增加模拟样本,本质上并不能同时提高所有网格的通量精度,即一些网格的通量相对误差减小了,而另一些网格的相对误差增加了,但误差可以通过总样本数,把它控制在一个合理范围.

#### 4. 数值试验

在 Godiva 模型外增加一个  $^{238}\text{U}$  反射层,内层  $^{235}\text{U}$  和  $^{238}\text{U}$  的比例进行调整,使系统达到超临界.对该球模型进行径向分层和切向分片处理,形成一个二维空间网格模型.在模拟过程中,系统随时间变化.模型中心区的通量最大,按从内至外的顺序对网格编号.

分 3000 个时间步进行模拟,每个时间步结束时系统内粒子数多于初始粒子数(对应超临界),在下个时间步开始采用抽样方法舍弃多余粒子.每个时间步根据各网格通量及相对误差,调整价值函数,指导当前时间步的粒子源偏倚.限于篇幅,本文只给出其中任意一个时间步的结果比较.

直接模拟由于粒子分配不均及网格变形,导致各网格误差相差很大,某时间步的网格通量相对误差如图 2 所示,误差呈现周期性波动,这是模型的分片分层结构导致的.

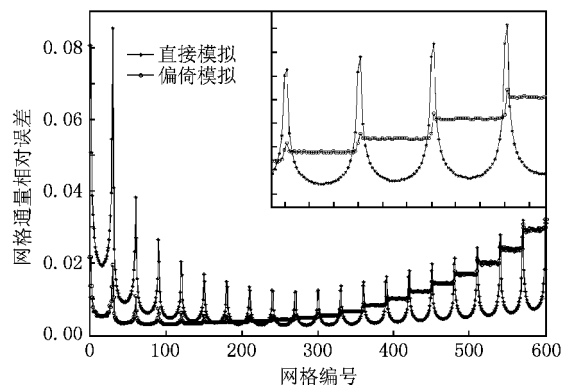


图 2 网格通量相对误差对比图 内插图为局部放大图

现采用偏倚系数确定的价值函数指导 MC 进行模拟,网格通量误差图呈现新的特征:1) 不同层的网格越靠近中心,误差越小,体现了偏倚效果,需要指出的是最中心的两层网格由于体积太小,大多数粒子在极短的时间内就逃逸出该网格,导致网格与其他内层网格相比,相对误差有所上升,但远小于直接模拟的网格误差;2) 同层网格相对误差大致相同,近似一条直线,这是由于同层网格的通量近似相等(图 3),使得其价值函数也大致相等,计算结果同步收敛;3) 部分网格偏倚后,相对误差变大了,这是偏倚抽样的平衡效果,这些网格本身通量小,对系统的贡献小.

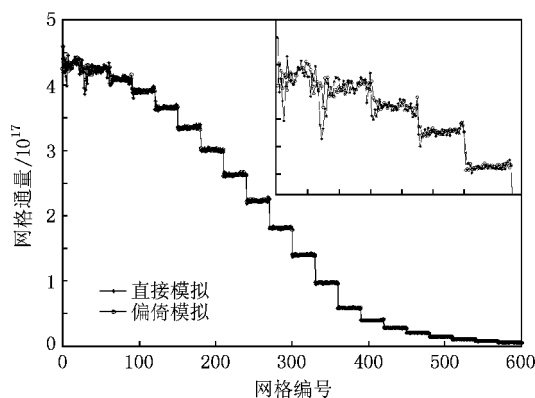


图 3 网格通量对比图 内插图为局部放大图

由图 3,偏倚模拟的通量结果与直接偏倚结果基本一致,说明偏倚抽样的通量结果可靠.另一方面,由于价值函数的产生主要是计算偏倚系数,基本上没有花费时间,偏倚模拟和直接模拟的模拟时间相差无几.

## 5. 结 论

针对非定常辐射输运问题的 MC 模拟,采用全局自适应源偏倚抽样,价值函数基于上个时间步的通量和误差,与通过解伴随方程获取价值函数的传统做法相比,该方法的计算量小.通过调节各网格的初始源粒子数,提高了重要网格的源粒子数,从而提高了这些网格估计量的计算精度.虽然,某些

网格估计量的误差增大了,但由于这些网格的价值较小,它对系统误差影响很小,相反,由于提高了价值大网格估计量的计算精度,因此,系统误差也相应下降.数值模拟结果显示,自适应源偏倚抽样改善了每个时间步辐射输运计算精度,从而降低了误差积累对最终结果的影响.数值实验表明整体计算基本没有增加时间,因此,可以说这是一种非常经济实用的方法.

- 
- [1] Du S H, Zhang S F, Feng T G, Wang Y Z, Xing J R 1989 *Computer Simulation of Transport Problems* (in Chinese) (Changsha: Hunan Science and Technology Press) p589 [杜书华、张树发、冯庭桂、王元璋 1989 输运问题的计算机模拟 (长沙: 湖南科技出版社) 第 589 页]
  - [2] Liu L Y, Gardner R P 1997 *Nuclear Science and Engineering* **125** 188
  - [3] Zhang J T, He B, He X T, Chang T Q, Xu J B, Andreev N E 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 921 (in Chinese) [张家泰、何 斌、贺贤士、常铁强、徐林宝、安德列夫 N. E. 2001 物理学报 **50** 921]
  - [4] 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]
  - [5] Yuan G W, Hang X D, Sheng Z Q, Yue J Y 2009 *Chin. J. Comput. Phys.* **26** 475 (in Chinese) [袁光伟、杭旭登、盛志强、岳晶岩 2009 计算物理 **26** 475]
  - [6] Li S G, Hang X D, Li J H 2009 *Chin. J. Comput. Phys.* **26** 247 (in Chinese) [李双贵、杭旭登、李敬宏 2009 计算物理 **26** 247]
  - [7] Yuan G W, Hang X D 2003 *China Academy of Engineering Physics Annual Report* **1** 418 (in Chinese) [袁光伟、杭旭登 2003 工程物理研究院科技年报 **1** 418]
  - [8] Deng L, Yuan G X, Huang Z F, Xu H Y, Wang R H, Li S 2003 *J. Numer. Meth. Comput. Appli.* **24** 111 (in Chinese) [邓 力、袁国兴、黄正丰、许海燕、王瑞宏、李 树 2003 数值计算与计算机应用 **24** 111]
  - [9] Deng L, Zhang W Y, Huang Z F 2005 *Chin. J. Comput. Phys.* **22** 527
  - [10] Bell G I, Glasstone S (Translated by Qian L) 1979 *Nuclear Reactor Theory* (Beijing: Atomic Energy Press) p16 [贝尔 G I, 格拉斯登 S 著 千里译 1979 核反应堆理论 (北京: 原子能出版社) 16]
  - [11] Xie Z S, Deng L 2005 *Numerical Methods of Neutron Transport Theory* (Xi'an: Northwestern Polytechnical University Press) p380 (in Chinese) [谢仲生、邓 力 2005 中子输运理论数值方法 (西安: 西北工业大学出版社) 第 380 页]
  - [12] Emmett M B 1985 *A Monte Carlo Radiation Transport Code with Array Geometry Capability* MORSE-CGA ORNL-6174

# Adaptive source biasing sampling for time-dependent radiation transport problems<sup>\*</sup>

Li Gang<sup>1)2)</sup> Deng Li<sup>1)†</sup> Li Shu<sup>1)</sup> Mo Ze-Yao<sup>1)</sup>

1) (*Laboratory of Computational Physics , Institute of Applied Physics and Computational Mathematics , Beijing 100088 , China*)

2) (*Graduate School of China Academy of Engineer Physics , Beijing 100088 , China*)

(Received 1 December 2009; revised manuscript received 19 May 2010)

## Abstract

Monte Carlo method is used to simulate the radiation transport problems which have characteristics of high temperature , high pressure , multi-media and large deformation of the grid. Due to the nonuniform particle distribution and great difference in the sizes of the grid , it makes the statistical errors of the grid fluxes fluctuate wildly. The error accumulation after many time steps may even influence the truth of the calculated results. So the global source biasing technique is developed. The importance function used here for source biasing sampling is based on the grid fluxes and errors of the previous time step. This is much faster than the traditional methods for solving the adjoint equation. The numerical tests showed that the neutron flux errors in the important grids are obviously reduced by using global source biasing which adaptively assigns the number of particles in each grid.

**Keywords:** time-dependent , radiation transport , Monte Carlo , source biasing sampling

**PACS:** 24. 10. Lx , 02. 70. Tt , 28. 20. Gd

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 61033009 ) and the State Key Development Program for Basic Research of China ( Grant No. 2011CB309702 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: deng\_li@iapcm. ac. cn