

反应堆蒙特卡罗临界模拟中均匀裂变源算法的改进

上官丹骅 李刚 邓力 张宝印 李瑞 付元光

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

Shangguan Dan-Hua Li Gang Deng Li Zhang Bao-Yin Li Rui Fu Yuan-Guan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 052801 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.052801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.052801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I5>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

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>

大粒子数二维硬核玻色子系统的量子蒙特卡罗模拟

Simulation of two-dimensional many-particle hardcore bosons by using the quantum Monte Carlo method

物理学报.2012, 61(11): 110207 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.110207>

阳极杆箍缩二极管产生 X 射线能谱的模拟计算

Numerical investigation of x-ray energy spectrum of rod-pinch diode

物理学报.2011, 60(10): 100204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.100204>

反应堆蒙特卡罗临界模拟中均匀裂变源算法的改进*

上官丹骅¹⁾ 李刚¹⁾ 邓力¹⁾ 张宝印^{1)†} 李瑞²⁾ 付元光²⁾

1) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

2) (中物院高性能数值模拟软件中心, 北京 100083)

(2014年10月15日收到; 2014年11月26日收到修改稿)

在反应堆 pin-by-pin 精细建模及蒙特卡罗模拟计算研究中, 由于不同栅元的功率密度差异较大, 导致蒙特卡罗方法临界计算的样本在不同栅元之间的分配不均衡, 由此引起栅元内的各种计数的统计误差差异较大. 为使大部分栅元内计数的统计误差降至一个合理的水平, 单纯增加总样本已不是一个高效的解决方法. 通过在特定临界计算迭代算法的基础上改进并实现均匀裂变源算法的思想, 对大亚湾压水堆 pin-by-pin 模型取得了具有较高效率的数值结果. 本工作为具有自主知识产权的蒙特卡罗粒子输运模拟软件 JMCT 最终达到反应堆 pin-by-pin 模型 (包括一系列国际基准模型) 的模拟性能要求提供了一个有效的工具.

关键词: 反应堆 pin-by-pin 模拟, 均匀裂变源算法, 蒙特卡罗方法

PACS: 28.41.Ak, 02.50.Ng

DOI: 10.7498/aps.64.052801

1 引言

由于大规模并行计算机平台的性价比日益提升, 对于大规模利用蒙特卡罗方法 (Monte Carlo 方法, MC 方法) 进行反应堆设计^[1] 和其他核相关设备的研究^[2,3] 在逐步增多, 其核心是中子-光子的输运计算问题. 反应堆建模的日渐精细 (即所谓的 pin-by-pin 模拟) 一方面体现了 MC 方法几何描述及截面数据方面固有的优势, 一方面也对基于 MC 方法的输运程序所需考虑的物理过程模拟能力和所需达到的性能提出了更高的要求, 因 MC 方法计算收敛的统计特性显然决定了要在合理时间内求出大量精细栅元上的低误差且符合物理现实的计数结果是一个困难的目标. 由于 MC 方法的估计量的误差正比于 $\frac{q}{\sqrt{N}}$ (其中 N 为样本数, q 为估计量的标准差), 为了实现这个目标, 一方面需要方法上

的探索以减少 q , 另一方面大规模并行计算也成为必不可少的手段, 而其并不是靠简单地增加样本并调用越来越多的处理器. 由于现代大规模并行计算平台的架构日益复杂化, 高效利用其提供的计算能力并不能被认为是一个理所当然能实现的目标.

为了评价不同架构的 MC 输运程序在反应堆 pin-by-pin 模拟方面的表现和该领域研究的进展, 在综合考虑了反应堆设计的各种需求和大量堆工数据之后, 一系列基准模型^[4,5] 被提出并通过相关机构进行了发布. 顺利实现这些模型的计算已经对现有 MC 程序提出了巨大的挑战, 而且还要求在合理时间内达到所需的统计精度. 一个被研究者普遍接受的标准是所谓的 95/95 标准^[6,7], 即要求对基准模型的计算必须在限定的时间内至少使 95% 的栅元内的功率密度计算值以 95% 的置信水平取得不大于 1% 的相对误差. 根据调研, 现阶段还没有一个 MC 程序可以完全达到这些要求, 其实现将需

* 国家自然科学基金重点项目 (批准号: 91118001)、国家高技术研究发展计划 (863 计划) (批准号: 2012AA01A303)、国防科工局核能开发项目、中国工程物理研究院基金重大项目 (批准号: 2012A0102005) 和中国工程物理研究院科学基金 (批准号: 2014B0202029) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zby@iapcm.ac.cn

要一段较长时间的研究探索和软件开发. 均匀裂变源算法^[6-8](uniform-fission-site algorithm, UFS 算法)的基本思想就是在达到 95/95 标准的探索过程中被首先提出的.

2 均匀裂变源算法

2.1 算法的基本思想

在反应堆 pin-by-pin 模拟中, 由于栅元数目巨大且不同栅元的功率密度差异较大, 导致 MC 临界计算的样本集中出现在功率密度较大的部分特定栅元内, 而那些功率密度最小的若干栅元始终没有足够样本经过. 由于 MC 统计量的误差与样本数的开平方成反比, 所以这些没有足够径迹经过的栅元内的计数误差较大, 使计算结果达不到 95/95 标准的要求. 更本质的困难是, 即使增加总样本数也不能高效地解决此问题, 因增加的样本将集中在功率密度大的区域, 功率密度小的区域能增加的有效径迹仍然严重不足.

基于以上事实, 在文献^[6-8]中提出了均匀裂变源算法的思想并基于 MC21 程序(由美国海军实验室开发的蒙特卡罗粒子输运模拟软件)的临界计算迭代方法加以实现. 该算法大意如下: 由于计数过程应该在系统达到本征分布后进行, UFS 算法并不改变未激活迭代步的输运过程. 在完成所有未激活迭代步后, 在以后的每个激活迭代步计算中, 一旦中子在含裂变物质的栅元 k 发生碰撞, 产生的次级裂变中子期望数由原来的

$$m_{\text{std}} = w_{\text{in}} \frac{\nu \Sigma_f}{\Sigma_t} \quad (1)$$

改变为

$$m_{\text{ufs}} = w_{\text{in}} \frac{\nu \Sigma_f v_k}{\Sigma_t s_k}, \quad (2)$$

其中, m_{std} 是无 UFS 算法时的次级裂变中子期望数, m_{ufs} 是启动 UFS 算法后的次级裂变中子期望数, w_{in} 是入射中子的权重, ν 是平均次级裂变中子数, Σ_f 是裂变截面, Σ_t 是总截面, v_k 是栅元 k 的体积占总可裂变栅元体积和的百分比, s_k 是栅元 k 中产生裂变源点占总裂变源点个数的百分比. 如果 $v_k/s_k = 1$, 则说明裂变源点的分布是绝对均匀的. 一般地, s_k 是未知的, 其必须通过上一迭代步的数据统计得到. 完成当前迭代步对次级裂变中子期望数的偏倚后, 在下一迭代步开始时, N 个源点 (N 是事先约定的每一迭代步的样本数) 仍然从当前迭代

步产生的次级裂变中子库中等概率抽样产生, 但初始中子的权重必须从未采用 UFS 算法时的 1 纠偏为 s_k/v_k . 为了避免过大的初始中子权的涨落, UFS 算法在 MC21 程序中是与权窗技巧联合使用的. 分析(2)式即可看出, 对上一步迭代中产生次级裂变中子较少的栅元, 本次迭代步将以很大的概率产生多个小权重裂变源点, 为了避免这些小权重中子被赌死, 从而减弱 UFS 算法的效果, 权窗的下界应设置得足够小. 在文献^[8]中, 特别发展了一种由程序自动调整权窗上下界的方法, 一定程度上减少了人为选取参数的困难. 在反应堆 pin-by-pin 模型中, 裂变栅元数目巨大且每个栅元体积占总体积的份额很小, 如要统计每一个裂变栅元的 s_k , 其统计涨落是非常大的, 必将影响方法的效果. 基于这一考虑, MC21 程序提供了一套非输运使用的 MESH 网格, 将位于每一 MESH 网格内的所有裂变栅元作为一个整体考虑. MESH 网格的设计要求使用者对反应堆模型的细节比较了解. 在文献^[8]中对不同尺度的 MESH 网格的影响进行了详细的分析.

2.2 均匀裂变源算法的改进及实现

由于上一小节所述的 MC21 程序的临界迭代算法只是众多此类算法中的一种, 而目前国际上用户群最广的蒙特卡罗粒子输运软件 MCNP 和国内具有自主知识产权的软件 JMCT 使用的临界计算迭代算法是不同于 MC21 程序的(在国内, 已经有多家研究院和大学开始具有自主知识产权的 MC 输运程序的开发并取得了阶段性的成果. 由北京应用物理与计算数学研究所(IAPCM)主持研发的 JMCT (Jointed Monte Carlo Transport) 软件^[9]即为其中之一. 该软件充分利用了层次化、模块化和面向对象的现代软件构建技术. 其底层基于 JCOGIN (J COmbinatorial Geometry Monte Carlo transport Infrastructure) 框架^[10], 上层是输运模块、物理模块^[11]、源模块和计数模块^[12]等. JMCT 软件配有前后处理的可视化软件^[13], 前处理建模软件负责三维几何模型设计与转换, 后处理软件可把各种结果数据进行三维可视化展示及图像处理, 因此极大地提高了用户使用的方便性. 目前, 该软件已顺利模拟计算了大量基准模型且结果已得到验证, 正在增加并考核各种技巧, UFS 算法也是其关注的技巧之一. 该软件使用的临界计算迭代算法与 MCNP 相同). 简言之, JMCT 软件在上一迭代步得到特征值 k_{eff} 的估值后, 对于当前迭

代步的中子的每一次碰撞, 其次级裂变中子期望数 $m_{\text{std}}^{\text{JMCT}}$ 为

$$m_{\text{std}}^{\text{JMCT}} = w_{\text{in}} \frac{1}{k_{\text{eff}}^0} \frac{\nu \Sigma_f}{\Sigma_t}, \quad (3)$$

其中, k_{eff}^0 表示上一步得到的 k_{eff} 的估值, 其他变量的含义同于(1)式. 在当前迭代步求得所有裂变源点后, 下一迭代步并不是等概率挑选 N 个源点, 而是遍历所有库中的裂变源点且出发中子的权重不为1, 而是 N/N_{bank} , 其中 N_{bank} 是次级裂变中子库中分支的个数. 按照(2)式, 在JMCT的迭代算法基础上, 显然采用UFS算法思想后的次级裂变中子期望数 $m_{\text{ufs}}^{\text{JMCT}}$ 为

$$m_{\text{ufs}}^{\text{JMCT}} = w_{\text{in}} \frac{1}{k_{\text{eff}}^0} \frac{\nu \Sigma_f v_k}{\Sigma_t s_k}, \quad (4)$$

但实际计算表明, 如果这样产生次级裂变中子并在下一迭代步中遍历所有分支(出发中子的权重为 $w_{\text{ufs}}^0 = \frac{N}{N_{\text{bank}}} \frac{s_k}{v_k}$), 计算时间将大为增加从而抵消UFS算法的效果. 基于此, JMCT程序对得到的每一个裂变源点, 以概率 $p = N/N_{\text{bank}}$ 决定是否对其进行输运模拟(如果 $N \geq N_{\text{bank}}$ 则不需进行赌, 依次遍历所有裂变源点即可), 对于赌活的分支, 其权重应从 w_{ufs}^0 纠偏为 w_{ufs}^0/p . 事实上, 在计算 p 时, 使用事先约定的每一迭代步的样本数 N 并不是必须的, 完全可以利用任意的 N_1 代替 N (其中 $N_1 > N$), 这一做法对于效率的影响将在以后的工作中考虑.

在统计 s_k 时, 考虑到用户对于反应堆模型本身并不一定非常了解, 由用户给出合适的虚拟 MESH 网格可能较为困难, 所以 JMCT 程序改为由用户提供一个整数 M_{hb} , 程序将自动在统计 s_k 时合并考虑 M_{hb} 个裂变栅元, 这是目前唯一需要由用户按经验提供的数据, 其设置原则是该数不能过小或过大, 过小则统计的涨落太大, 过大则抵消了UFS算法的效果, 一个不错的选择是使 $M_s = M_{\text{tot}}/M_{\text{hb}}$ (M_{tot} 是总裂变栅元数) 接近千或百的量级且使样本数 N 足够大(例如使 N/M_s 至少达到百或千的量级).

按照文献[8]的建议, 在统计 s_k 时可以不局限于当前迭代步, 而是将激活后的每一迭代步在栅元(或合并后的栅元)内产生的裂变源点累加并归一化, 这样统计得到的 s_k 涨落更小. JMCT 软件实现了这种方法, 但在实际计算中发现, 当大规模计算时, 对每一激活的迭代步累加栅元内产生的裂变源点数 N_f 将会使该数在若干步后超过计算机所能表

示的最大双精度数. 基于这一事实, 目前采取的方法是当 $N_f > 1e + 300$ 时抛弃已经得到的 N_f , 从当前步开始重新统计.

在UFS算法的并行实现过程中, 由于不同进程是独立统计栅元上相应的数据, 需要在每一迭代步结束时进行归约并广播到所有进程, 这一过程的实现是基于底层 JCOGIN 框架集成的高效并行算法, 在将相应数据归约后自动广播到所有进程而不需显示地调用广播语句. 由于栅元上需要统计的数据从性质上类似于一个计数量, 所以通过框架在每一个栅元上注册一个特别的量就可以得到数据存放的地址空间. 而由于广播必然带来时间上的开销, 所以必须特别注意在不启动UFS算法或启动UFS算法但计算未到达激活迭代步时不激活相应数据的并行操作.

由于JMCT程序还未实现权窗技巧, 目前的UFS算法是单独实现的. 下一节的数值结果将显示, 即使未采取权窗技巧, UFS算法已经获得了效率上的较大提高.

3 数值结果及分析

以大亚湾反应堆堆芯的 pin-by-pin 模型(如图1所示)作为例题考察了JMCT程序实现了UFS算法后的效率变化. 该模型由157个组件组成, 每个组件有25个控制棒和264个燃料棒分布在 17×17 的六面体内. 沿径向一个燃料棒分成两个同轴圆柱, 外层由金属 Zr 组成, 内层是 U 燃料. 沿轴向一个燃料棒按功率分布被分成16层. 该模型共有758054个栅元, 其中含裂变物质的栅元数超过600000. 在进行临界计算的同时对模型中的所有栅元都求得了体平均通量计数(即所谓的F4计数)和中子沉积能计数(即所谓的F6计数). 计算总共有600个迭代步, 激活后300代, 每代样本数为5000000, 利用500CPU进行了并行计算.

文献[8]基于MC方法对效率因子的基本定义, 对UFS算法的效率采用 FOM_MAX 和 FOM_95 这两个指标衡量, 其定义为

$$\text{FOM_MAX} = \frac{1}{\sigma_{\text{max}}^2 T}, \quad (5)$$

$$\text{FOM_95} = \frac{1}{\sigma_{95}^2 T}, \quad (6)$$

其中 T 为激活迭代步计算的总时间(因UFS算法不影响未激活迭代步的计算), σ_{max} 为所有栅元中计

数的相对误差的最大值, σ_{95} 表示某一栅元的相对误差, 其使至少 95% 的栅元的计数相对误差都不大于该值. 为更详细考察 UFS 算法的效果, 仿照文献 [8] 的建议, 本文类似定义了另一个效率因子指标

$$\text{FOM}_{99} = \frac{1}{\sigma_{99}^2 T}, \quad (7)$$

其中 σ_{99} 表示某一栅元的相对误差, 其使至少 99% 的栅元的计数相对误差都不大于该值.

计算结果显示, 由于未结合权窗技巧, 启动 UFS 算法时计算时间增加了大约 5% (体平均通量计数) 和 12% (中子沉积能计数), 但由于相对误差的显著降低, 导致总体效率有了较大提高, 这与文献 [8] 的结论是一致的. 而从求得的特征值 k_{eff} 值来看, 是否采用 UFS 算法的差别很小, 分别是 1.01344 (不启动 UFS 算法) 和 1.01341 (启动 UFS 算法), 表明 UFS 算法并不影响结果的无偏性, 只是调整了样本粒子在栅元中的分布. 表 1 给出了两种计数当启用 UFS 算法后效率的变化, 可以看出, 无论对于何种计数和采用哪个指标, UFS 算法都明显提高了效率, 尤其是对于体平均通量计数, 其表明对于该模型, 中子沉积能计数比体平均通量计数更难以收敛. 图 2 和图 3 给出了所有含裂变物质栅元中两个计数量相对误差的分布情况.

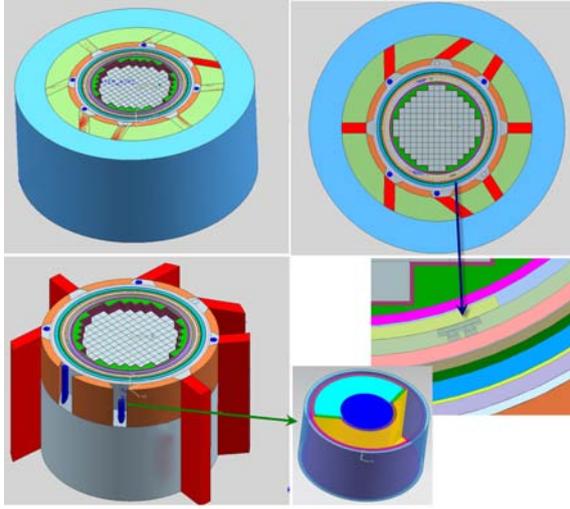


图 1 (网刊彩色) 大亚湾压水堆模型图

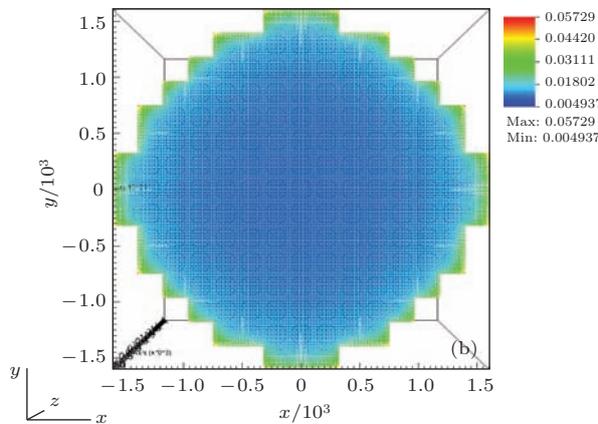
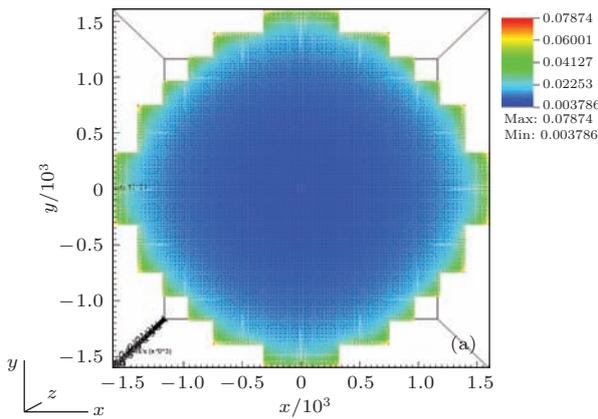


图 2 (网刊彩色) 体平均通量计数的相对误差分布 (沿轴向的俯视图) (a) 不启动 UFS 算法; (b) 启动 UFS 算法

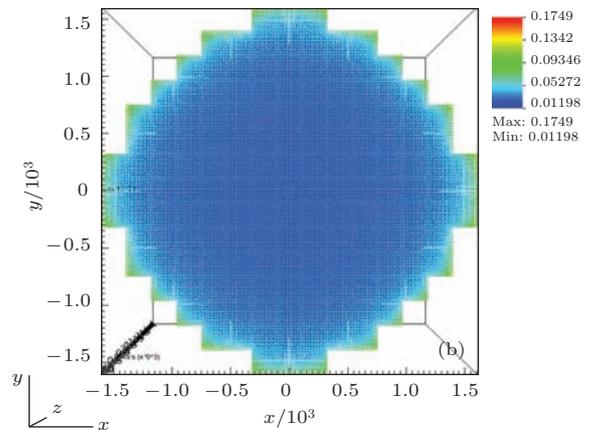
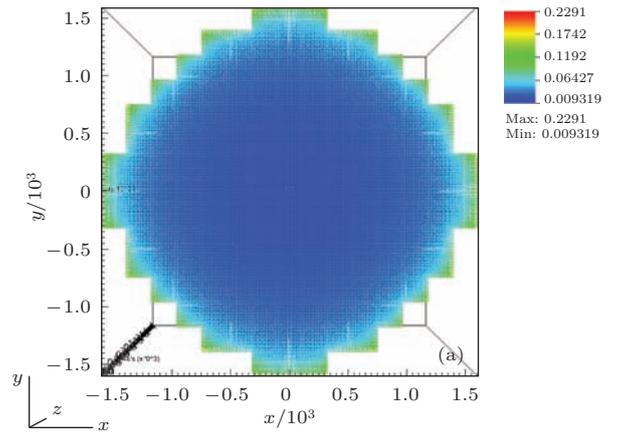


图 3 (网刊彩色) 中子沉积能计数的相对误差分布 (沿轴向的俯视图) (a) 不启动 UFS 算法; (b) 启动 UFS 算法

表1 相关算法性能比较

FOM 类型	体平均通量计数		中子沉积能计数	
	不启用 UFS 算法	启用 UFS 算法	不启用 UFS 算法	启用 UFS 算法
FOM_MAX	0.09675	0.17371	0.01099	0.01568
FOM_99	0.54819	0.95526	0.08902	0.13232
FOM_95	1.36417	2.09921	0.21744	0.28602

4 结 论

本文结合并行蒙特卡罗中子-光子输运程序 JMCT 的临界计算迭代算法和并行架构改进并实现了均匀裂变源算法的基本思想. 对大亚湾压水堆 pin-by-pin 模型的计算结果显示, 虽然启动 UFS 算法增加了计算时间, 但由于栅元中各种计数的相对误差显著减少, 所以效率得到了提高. 下一步的工作包括对 UFS 算法进行优化设计并消除需要用户提供经验参数的不方便之处, 对于 JMCT 软件启用 UFS 算法后是否能使国际压水堆基准模型的模拟计算达到 95/95 标准的要求还需进一步考查, 其实现可能还需综合应用多种技巧. 不可否认的一点是, 启用 UFS 算法对于在临界计算中提高各种计数的效率是有较大促进作用的, 可以解决靠单纯增加总样本数所不能解决的问题.

参考文献

- [1] Martin W R 2012 *Nucl. Engi. Tech.* **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] Nicholas Horelik, Bryan Herman, Benoit Forget, Kord Smith 2013 *Proceedings of M&C 2013* Sun Valley, Idaho, USA, May 5–9, 2013 p2986
- [5] Kord Smith, Benoit Forget 2013 *M&C 2013* Sun Valley, Idaho, USA, May 5–9, 2013 p18
- [6] Daniel J Kelly, Thomas M Sutton, Stephen C Wilson 2012 *Proceedings of PHYSOR 2012-Advances in Reactor Physics-Linking Research, Industry, and Education* Knoxville, Tennessee, USA, April 15–20, 2012
- [7] Daniel J Kelly, Brian N Aviles, Bryan R Herman 2013 *M&C 2013* Sun Valley, Idaho, USA, May 5–9, 2013 p2962
- [8] Jessica L Hunter, Thomas M Sutton 2013 *M&C 2013* Sun Valley, Idaho, USA, May 5–9, 2013 p2780
- [9] Deng L, Li G, Zhang B Y, Shangguan D H, Li S, Hu Z H, Ma Yn, Ji Z C 2014 *Atomic Energy Science and Technology* **48** 1061 (in Chinese) [邓力, 李刚, 张宝印, 上官丹骅, 李树, 胡泽华, 马彦, 姬志成 2014 原子能科学技术 **48** 1061]
- [10] Zhang B Y, Li G, Deng L 2013 *High Power Laser and Particle Beams* **25** 173 (in Chinese) [张宝印, 李刚, 邓力 2013 强激光与粒子束 **25** 173]
- [11] Li G, Zhang B Y, Li R, Deng L 2013 *Atomic Energy Science and Technology* **47** 453 (in Chinese) [李刚, 张宝印, 李瑞, 邓力 2013 原子能科学技术 **47** 453]
- [12] Shangguan D H, Li G, Deng L, Zhang B Y 2013 *Transactions of ANS* **109** 1428
- [13] Ma Y, Fu Y G, Li S, Li G, Zhang B Y, Deng L 2013 *Atomic Energy Science and Technology* **47** 443 (in Chinese) [马彦, 付元光, 李树, 李刚, 张宝印, 邓力 2013 原子能科学技术 **47** 443]

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

Shangguan Dan-Hua¹⁾ Li Gang¹⁾ Deng Li¹⁾ Zhang Bao-Yin^{1)†} Li Rui²⁾ Fu Yuan-Guan²⁾

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

2) (*CAEP Software Center of High Performance Numerical Simulation, Beijing 100083, China*)

(Received 15 October 2014; revised manuscript received 26 November 2014)

Abstract

Because of a very non-uniform power distribution in core region, a very non-uniform distribution of relative uncertainties exists for tallies in Monte Carlo criticality calculations of pin-by-pin reactor model. To make a large part of cells obtain small enough relative uncertainties with reasonable time costs, increasing the total sample scale is not a good choice. By realizing a modified uniform-fission-site algorithm on the basis of source iteration algorithm of parallel Monte Carlo transport code JMCT, we obtain higher efficiencies for tallies in the calculations of pin-by-pin model of the Dayawang reactor plant. This work supplies a useful tool for matching the goal of simulating the benchmark pin-by-pin reactor models with a pre-described standard(the so called Kord-Smith challenge).

Keywords: pin-by-pin simulation, uniform-fission-site algorithm, Monte Carlo method

PACS: 28.41.Ak, 02.50.Ng

DOI: [10.7498/aps.64.052801](https://doi.org/10.7498/aps.64.052801)

* Project supported by the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 91118001), the National High Technology Research and Development Program of China (Grant No. 2012AA01A303), the Nuclear Power Development Project of the Science, Technology and Industry for National Defense of China, the Key Foundation of China Academy of Engineering Physics,China(Grant No. 2012A0102005), and the Science Foundation of China Academy of Engineering Physics, China (Grant No.2014B0202029).

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