

蒙特卡罗临界计算全局计数效率新算法研究

上官丹骅 邓力 李刚 张宝印 马彦 付元光 李瑞 胡小利

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

Shangguan Dan-Hua Deng Li Li Gang Zhang Bao-Yin Ma Yan Fu Yuan-Guang Li Rui Hu Xiao-Li

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 65, 062801 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.062801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.062801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I6>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

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>

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>

蒙特卡罗临界计算全局计数效率新算法研究*

上官丹骅^{1)†} 邓力¹⁾ 李刚¹⁾ 张宝印¹⁾ 马彦¹⁾ 付元光²⁾
李瑞²⁾ 胡小利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 100083)

(2015年9月6日收到; 2015年12月20日收到修改稿)

为提高蒙特卡罗临界计算时全局计数的整体效率, 对比分析了新提出的均匀计数密度算法、均匀径迹数密度算法和原有的均匀裂变点算法. 以大亚湾核反应堆 pin-by-pin 模型的全局平均通量计数和中子沉积能计数为例, 前两种算法较均匀裂变点算法都获得了整体效率的提高. 上述算法已经在自主开发的并行蒙特卡罗输运程序 JMCT 上予以实现.

关键词: 蒙特卡罗方法, 临界计算, 全局计数

PACS: 28.41.Ak, 02.50.Ng

DOI: 10.7498/aps.65.062801

1 引言

蒙特卡罗方法 (Monte Carlo method, MC 方法) 是进行核装置模拟^[1,2], 特别是进行临界计算的强大工具^[3]. 对于一个通用型 MC 输运程序而言, 迭代方法是最常用的进行临界计算的技巧. 为了得到准确的本征值和同时统计的各类全局计数, 一般来说, 必须在裂变源分布已经收敛的前提下才能启动计数 (在结合均匀裂变点算法和 CMFD 源收敛加速算法时, 这一点不是必须的^[4]). 因此, 必须抛弃足够数目的非激活迭代步. 但即使裂变源分布已经完全收敛, 同期进行的全局计数依然会面对一个现实的困难问题. 这是由于真实反应堆内不同区域的功率密度是有较大差异的, 在低功率区域, 每个迭代步中产生于该区域的中子数相对不足, 而高功率区域产生的中子数又会过多. 上述过多或不足是指对各种全局计数而言, 低功率区域的计数量的

统计误差较大而高功率区域的计数量的统计误差已经可以满足要求. 按照核工程计算的实际需求, 全局计数的要求不应该是追求尽可能小的最小误差, 而应该是追求至少相当份额的栅元内的统计误差降至一个合理的水平. 有些研究者已经提出了所谓的 95/95 标准^[5], 意指计算应使 95% 以上的栅元内的统计误差以至少 95% 的置信度达到 1% 以下. 这一标准的提出是有充分实际工程应用背景的. 为了达到这一标准, 实际计算表明, 单靠增加总样本数是低效的, 甚至可以说是不现实的. 因为增加的样本数将有很大部分分配给高功率区域, 而其统计误差早已达到 1% 以下, 低功率区域增加的有效样本数依然达不到要求, 从而使满足误差要求的栅元的份额在 95% 以下. 基于以上事实, 在新一代蒙特卡罗粒子输运程序 MC21 的开发过程中引入了均匀裂变点算法 (uniform fission site algorithm, UFS 算法) 并在一系列基准问题的计算^[6-8]中取得了较

* 能源局专项 (批准号: 2015ZX06002008)、国家自然科学基金重点项目 (批准号: 91118001)、国防科工局核能发展计划 (批准号: [2012]1523)、中国工程物理研究院科学基金 (批准号: 2014B0202029) 和国家高技术研究发展计划 (批准号: 2012AA01A303) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: sgdh@iapcm.ac.cn

好的效果. 该算法的主要思想是利用已完成激活迭代步中获得的特定数据进行当前激活迭代步中裂变次级粒子数的偏倚, 进而减少径迹数不足的栅元中的计数统计误差, 但同时也会使统计误差最小的那部分栅元中的计数误差相对增大, 最终的结果是使计算达到上述的 95/95 标准. 在一类非常运输问题的多步 MC 模拟当中^[1], 也尝试过利用上一时间步的全局通量计数及误差对当前时间步的粒子源进行偏倚抽样, 在保证总样本数不变的前提下, 获得了整体计数误差的平均化效果, 利用的其实也是同样的思路.

本文基于 UFS 算法的启发提出了两种偏倚裂变次级粒子数的策略, 它们是利用不同的数据作为偏倚标准. 第一种策略称为均匀径迹数密度算法 (uniform track number density algorithm, UTND 算法), 其偏倚依赖的数据是栅元中的径迹数体平均密度; 第二种策略称之为均匀计数密度算法 (uniform tally density algorithm, UTD 算法), 其依赖的数据是栅元中目标计数的体平均密度. 显然, UTND 算法中偏倚所依赖的数据对于任何以径迹长度估计法求解的计数都能适用, 而 UTD 算法偏倚所依赖的数据随用户关心的全局计数种类的变化而变化, 由此具有更大的普遍性. 直观上, 上述偏倚策略可能具有更高的效率表现, 其细节将在第 3 节予以详述.

上述所有策略 (包含 UFS 算法) 已经在 JMCT 程序^[9]上予以实现, 该程序是由 JMCT 团队开发的一款并行蒙特卡罗粒子输运模拟软件, 其底层依赖于 JCOGIN (J COmbinatorial Geometry Monte Carlo transport INfrastructure) 框架^[10]. 该框架负责模拟的几何处理部分和并行部分, 而 JMCT 程序则集中关注模拟的物理部分和输运算法部分. 通过比较 JMCT 程序对大量基准问题的计算结果和其他程序 (例如 MCNP 程序) 及实验的结果, JMCT 程序已经完成了充分的确认和验证^[11].

本文结构如下: 第 2 节描述了在 JMCT 程序中实现 UFS 算法的主要变化, 由于 JMCT 程序的临界计算迭代流程不同于 MC21 程序, 所以其 UFS 算法的实现细节也不同于 MC21 程序; 第 3 节介绍了 UTND 算法和 UTD 算法的主要思想; 第 4 节提供了针对大亚湾核反应堆 pin-by-pin 模型的计算结果, 对三种策略的效率进行了详细的分析; 最后一个小节给出了本文的总结.

2 JMCT 程序中 UFS 算法的改进

在 JMCT 的临界计算迭代方案中, 当前迭代步的裂变次级粒子数 $m_{\text{JMCT}}^{\text{std}}$ 由下式决定^[9]:

$$m_{\text{JMCT}}^{\text{std}} = w_{\text{in}} \frac{\gamma \Sigma_f}{\hat{k}_{\text{eff}} \Sigma_t}. \quad (1)$$

其中: \hat{k}_{eff} 为上一迭代步得到的特征值的估计, w_{in} 为进入碰撞的中子权重, $\gamma \Sigma_f$ 为发生碰撞所在栅元的宏观中子产生, Σ_t 为发生碰撞所在栅元的总截面.

在下次迭代开始后, 本次迭代步所产生的所有裂变源点以初始权重 $N_{\text{hist}}/N_{\text{bank}}$ 被跟踪, 其中, N_{hist} 是每代约定的样本数, N_{bank} 是上次迭代产生的裂变源点数. 显然, 按照 MC21 程序的 UFS 算法的方案, JMCT 程序的 UFS 算法应该将裂变次级粒子数 $m_{\text{JMCT}}^{\text{UFS}}$ 设置为^[9]

$$m_{\text{JMCT}}^{\text{UFS}} = w_{\text{in}} \frac{\gamma \Sigma_f}{\hat{k}_{\text{eff}} \Sigma_t} \frac{v_k}{s_k}, \quad (2)$$

其中: v_k 为碰撞所在含裂变物质栅元 k 的体积占含裂变物质栅元总体积 V 的百分比, V 为含裂变物质栅元的总体积, s_k 为含裂变物质栅元 k 中产生的裂变点数占总裂变点数的百分比.

但是如果按上式产生次级裂变中子数且全部跟踪其轨迹的话 (初始权重为 $\frac{N_{\text{hist}}}{N_{\text{bank}}} \frac{s_k}{v_k}$), 计算量将会急剧增加从而抵消 UFS 算法的效果. 所以, 作为一种统计等价的替代方案, 将以概率 $p = N_{\text{hist}}/N_{\text{bank}}$ 决定是否跟踪产生的每一个源粒子, 如果该粒子得以幸存, 其权重将调整为 $\frac{N_{\text{hist}}}{N_{\text{bank}}} \frac{s_k}{v_k p}$.

3 UTD 算法和 UTND 算法

如前所述, UFS 算法的目的是将大部分栅元内计数的统计误差降至一个合理的水平. 在作为其偏倚标准的数值 ν_k/s_k 中, s_k 是栅元 k 中产生裂变源点数占总裂变源点数的百分比. 由此可以得知, 在理想情况下, UFS 算法将会使各个栅元产生的裂变源点的体密度保持一个大致平均的水平. 显然, 上述偏倚数值标准不是惟一的, 栅元内所经过径迹数的体密度和待求计数的体密度也能作为偏倚的标准, 理想情况下, 将会在栅元中产生大致均匀的径

迹数体密度和待求计数体密度. 按此定义, UTD 算法的裂变平均次级粒子数 $m_{\text{JMCT}}^{\text{UTD}}$ 为

$$m_{\text{JMCT}}^{\text{UTD}} = w_{\text{in}} \frac{\gamma \Sigma_f v_k}{\hat{k}_{\text{eff}} \Sigma_t t_k}, \quad (3)$$

其中, t_k 是栅元 k 中所记录的待求计数的体密度. 而 UTND 算法的裂变平均次级粒子数 $m_{\text{JMCT}}^{\text{UTND}}$ 为

$$m_{\text{JMCT}}^{\text{UTND}} = w_{\text{in}} \frac{\gamma \Sigma_f v_k}{\hat{k}_{\text{eff}} \Sigma_t d_k}, \quad (4)$$

其中 d_k 是栅元 k 中所通过的径迹数的体密度. 上述两种算法的其他细节显然同 UFS 算法是一样的.

在原来的 UFS 算法中, 裂变源点体密度不是在每一个真实的含裂变物质栅元内统计的, 而是事先设定了一个虚拟 MESH 网格, 裂变源点体密度在每一个 MESH 网格内统计, 其包含多个真实栅元, 这种处理的目的是减少按真实栅元统计的 s_k 的涨落. 同上述方法不同, 我们的方案是由用户指定一个正整数 M , 程序将会自动合并考虑 M 个真实栅元, 所有数值, 即 s_k , t_k 和 d_k , 都将在合并后的 M 个真实栅元内进行统计, 这些数值的统计涨落显然会降低从而满足实际应用的要求. 同时, 由于

JMCT 程序的并行语言是 MPI, 将合并后的少数虚拟网格上的数值进行广播归约显然要比广播数目庞大的真实栅元上的相应数值高效得多.

4 数值结果

为测试上述三种策略 (UFS 算法, UTND 算法和 UTD 算法) 的效率, 在 JMCT 程序中实现了所有方法并在大亚湾反应堆 pin-by-pin 模型上以体平均通量计数和沉积能计数为例分析了三种策略的效率表现.

4.1 大亚湾反应堆 pin-by-pin 模型简介

如图 1 所示, 大亚湾反应堆 pin-by-pin 模型由 157 个组件组成, 每个组件包含 25 根控制棒和 264 根燃料棒. 在径向, 每个燃料棒被分成两层, 外层由金属锆组成, 内层是 U 燃料. 在轴向, 每根燃料棒被分成 16 节, 具有不同的功率密度. 整个模型包含 758973 个栅元, 其中含裂变物质栅元的总数超过 60 万.

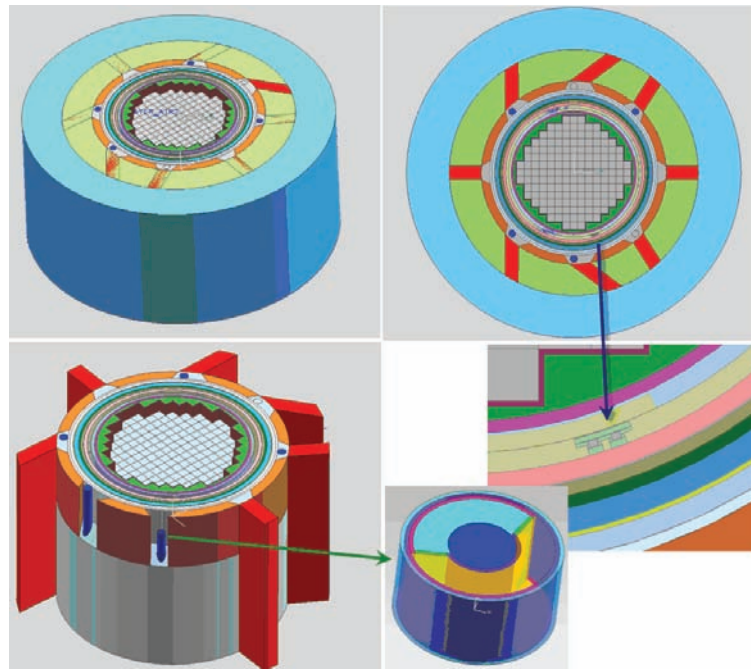


图 1 (网刊彩色) 大亚湾反应堆 pin-by-pin 模型示意图

Fig. 1. (color online) The Dayawan pin-by-pin nuclear reactor model.

4.2 数值结果分析

在大型机上利用 300 核对上述模型进行了大规模计算. 每次计算都设置为 600 代, 激活后 300

代, 每代 5000000 样本, 经合并后用以统计偏倚数据的栅元数为 600.

从表 1 可以看出, 所有的算法都不影响特征值的无偏性. 由于所有三种算法都没有对每一迭代步

的初始中子的权重利用权窗做任何调整(因此这种做法的效率显然依赖于权窗参数的选取,而每种算法导致的初始权重涨落不同,利用同一套权窗参数显然是不公平的),所以其涨落比不采取任何算法的情况大,导致特征值的统计误差相对增大,但仍然保持在一个相对较低的水平.已有的关于UFS算法的研究表明^[7],如果利用了合适的权窗,初始中子权重的涨落只会给特征值的统计误差带来极小的影响.

从表2和表3可以看出,按照FOM-MAX和FOM-95这两个整体指标,UTD算法是三种策略中效率最高的(其中FOM-MAX指标定义为计算时间和最大相对误差平方之积的倒数,FOM-95指

标定义为计算时间和处于第5%最高水平相对误差平方之积的倒数),这表明基于目标计数的体密度的偏倚准则可以最大程度地均匀化该计数的整体误差分布情况.而UTND算法的指标接近或略好于UFS算法的指标.

表1 特征值及其相对误差
Table 1. The multiplication factor and its uncertainty.

	特征值	相对误差
无偏倚情形	1.01342	1.67738×10^{-5}
UFS算法	1.01339	2.31931×10^{-5}
UTND算法	1.01343	2.41103×10^{-5}
UTD算法	1.01337	2.38019×10^{-5}

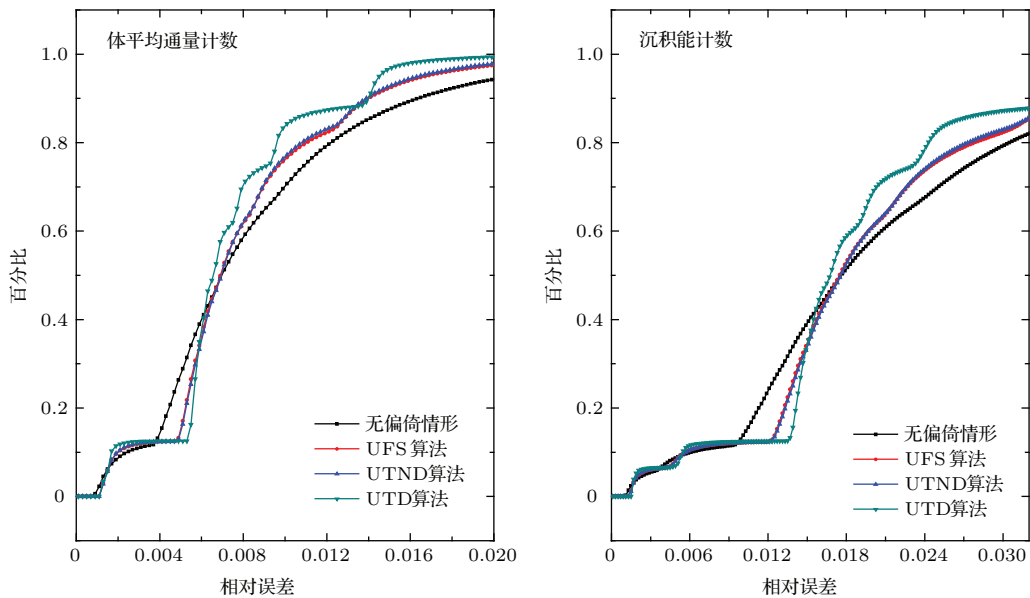


图2 (网刊彩色) 相对误差累积分布

Fig. 2. (color online) Cumulative distributions of relative uncertainties.

表2 体平均通量计数的效率比较

Table 2. The comparison of efficiency of the global volume averaged cell flux tally.

	相对误差			FOM	
	最小值	最大值	第5%最高水平	MAX	95
无偏倚情形 (运行时间: 4792 s)	2.90612×10^{-4}	0.07608	0.02096	0.03605	0.47501
UFS情形 (运行时间: 4856 s)	2.25274×10^{-4}	0.06255	0.01681	0.05263	0.72876
UTD情形 (运行时间: 5167 s)	1.68955×10^{-4}	0.04143	0.01460	0.11275	0.90794
UTND情形 (运行时间: 5013 s)	2.14960×10^{-4}	0.05657	0.01649	0.06233	0.73302

从图2可以更清楚地看出上述结论.图2是所有栅元的计数相对误差的累积分布图,其中横坐标表示相对误差的大小,纵坐标表示其相对误差小于

特定横坐标值的栅元所占的百分比.虽然在不采用任何算法时,统计误差最小的那部分栅元所占的百分比是最高的,其表明这部分栅元有充分的粒子径

迹经过, 但是所有三种算法都减少了这部分栅元的百分比, 而大大增大了具有稍大误差值的那部分栅元的百分比. 这表明三种算法的效果都不同程度地减少了计数已经充分收敛的那部分栅元内的径迹数, 而增大了更多百分比栅元内的径迹数, 其中 UTD 算法的调整效率是最高的, 而 UTND 算法的效果略好于 UFS 算法. 这是因为 UTND 算法中的径迹数和 UFS 算法中的裂变点数虽然是不同的量, 但二者具有统计正相关性.

由于并不知道该模型的占优比, 而如果占优比

接近于 1, 则由于迭代步之间的相关性, 统计出的计数误差有可能被低估. 为排除此种相关性的影响, 对于上述三种算法都进行了 20 轮独立的计算, 每次计算都使用不同的随机数发生器种子, 每代的样本数调整为 250000. 结果如表 4 所示. 可以看出, 由于相关性, 相对误差确实被低估. 而在排除了相关性的影响之后, UTD 算法仍然具有最高的效率, UTND 算法次之, 而原有的 UFS 算法的效率是最低的.

表 3 沉积能计数的效率比较

Table 3. The comparison of efficiency of the global energy deposition tally.

	相对误差			FOM	
	最小值	最大值	第 5% 最高水平	MAX	95
无偏倚情形 (运行时间: 4951 s)	3.33812×10^{-4}	0.23869	0.05144	0.00355	0.07633
UFS 情形 (运行时间: 4993 s)	2.59528×10^{-4}	0.18372	0.04170	0.00593	0.11518
UTD 情形 (运行时间: 5046 s)	1.95599×10^{-4}	0.11265	0.03667	0.01562	0.14738
UTND 情形 (运行时间: 4966 s)	2.47964×10^{-4}	0.19081	0.04110	0.00553	0.11921

表 4 体平均通量计数的效率经 20 轮独立计算后的结果比较

Table 4. Efficiency of the global volume average cell flux tally using 20 independent runs.

	相对误差			FOM	
	最小值	最大值	第 5% 最高水平	MAX	95
UFS 情形 (运行时间: 3554 s)	0.00152	0.07369	0.022	0.05182	0.58135
UTD 情形 (运行时间: 3424 s)	0.00125	0.06043	0.021	0.07064	0.66226
UTND 情形 (运行时间: 3425 s)	0.00107	0.06889	0.021	0.06152	0.66206

5 结 论

本文比较了三种在临界计算时提高全局计数整体效率的算法. 其中, UTD 算法是基于已完成激活迭代步的目标计数体密度, 其实现依赖于具体的计数类型, UTND 算法是基于已完成激活迭代步的径迹数体密度, 适合于所有利用径迹长度估计法的计数, 具有较好的实现方便性. 经大亚湾反应堆 pin-by-pin 模型的计算表明, UTD 算法具有最高的整体效率, UTND 算法的整体效率表现稍好于 UFS 算法. 下一步的研究包括基于已完成激活迭代步的整体效率表现自动追加样本数等工作.

参考文献

[1] 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]

[2] 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]
 [3] Brown F B 2009 *Proceedings of International Conference of Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics* Saratoga Springs, New York, USA, May 3–7, 2009
 [4] Herman B R 2014 *Ph. D. Dissertation* (Cambridge: Massachusetts Institute of Technology)
 [5] Smith K S 2011 *Trans. Am. Nucl. Soc.* **104** 313
 [6] Kelly D J, Sutton T M, Wilson S C 2012 *Proceedings of PHYSOR 2012* Knoxville, Tennessee, USA, April 15–20, 2012
 [7] Kelly D J, Aviles B N, Herman B R 2013 *Proceedings of M&C 2013* Sun Valley, Idaho, USA, May 5–9, 2013 p2962
 [8] Hunter J L, Sutton T M 2013 *Proceedings of M&C 2013* Sun Valley, Idaho, USA, May 5–9, 2013 p2780
 [9] Shanguan D H, Li G, Deng L, Zhang B Y, Li R, Fu Y G 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 052801 (in Chinese) [上官丹

- 骅, 李刚, 邓力, 张宝印, 李瑞, 付元光 2015 物理学报 **64** 052801]
- [10] Zhang B Y, Li G, Deng L, Ma Y, Shanguan D H, Zhang A Q, Cao X L, Mo Z Y 2014 *Proceedings of PHYSOR*

- 2014 Kyoto, Japan, Sep. 28–Oct. 3, 2014
- [11] Deng L, Ye T, Li G, Zhang B Y, Shanguan D H 2014 *Proceedings of PHYSOR 2014* Kyoto, Japan, Sep. 28–Oct. 3, 2014

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

Shangguan Dan-Hua^{1)†} Deng Li¹⁾ Li Gang¹⁾ Zhang Bao-Yin Ma Yan¹⁾
Fu Yuan-Guang²⁾ Li Rui²⁾ Hu Xiao-Li²⁾

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

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

(Received 6 September 2015; revised manuscript received 20 December 2015)

Abstract

Based on the research of the uniform fission site algorithm, the uniform tally density algorithm and the uniform track number density algorithm are proposed and compared with the original uniform fission site algorithm in this paper for seeking high performance of global tallying in Monte Carlo criticality calculation. Because reducing the largest uncertainties to an acceptable level simply by running a large number of neutron histories is often prohibitively expensive, the researches are indispensable for the calculation to reach the goal of practical application (the so called 95/95 standard). Using the global volume-averaged cell flux tally and energy deposition tally of the pin-by-pin model of Dayawan nuclear reactor as two examples, these new algorithms show better results. Although the uniform tally density algorithm has the best performance, the uniform track number density algorithm still has the advantage of being applicable to any type of tally, which is based on the track length estimator without any modification. All the algorithms are realized in a recently developed parallel Monte Carlo particle transport code JMCT.

Keywords: Monte Carlo method, criticality calculation, global tally

PACS: 28.41.Ak, 02.50.Ng

DOI: 10.7498/aps.65.062801

* Project supported by the Special Projects of the National Energy Administration, China (Grant No. 2015ZX06002008), the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 91118001), the State Administration of Science, Technology and Industry for National Defense, PRC (Grant No.[2012]1523), the Science Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 2014B0202029), and the National High Technology Research and Development Program of China (Grant No. 2012AA01A303).

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