

多物理耦合计算中动态输运问题高效蒙特卡罗模拟方法

上官丹骅 闫威华 魏军侠 高志明 陈艺冰 姬志成

Efficient Monte Carlo algorithm of time-dependent particle transport problem in multi-physics coupling calculation

Shangguan Dan-Hua Yan Wei-Hua Wei Jun-Xia Gao Zhi-Ming Chen Yi-Bing Ji Zhi-Cheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 090501 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20211474

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211474>

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

热辐射输运问题的高效蒙特卡罗模拟方法

An efficient Monte Carlo simulation method for thermal radiation transport

物理学报. 2020, 69(2): 029501 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191315>

蒙特卡罗临界计算全局计数问题新策略研究

New strategy for global tallying in Monte Carlo criticality calculation

物理学报. 2019, 68(12): 122801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182276>

光子与相对论麦克斯韦分布电子散射截面的蒙特卡罗计算方法

Monte Carlo method for computing relativistic photon-Maxwellian electron scattering cross sections

物理学报. 2018, 67(21): 215201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180932>

特征 γ 射线谱分析的蒙特卡罗模拟技术

Monte Carlo simulation technology based on characteristic γ -ray spectrum analysis

物理学报. 2020, 69(11): 112801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200279>

基于蒙特卡罗-离散纵标方法的氘氚激光等离子体聚变反应率数值模拟

Numerical simulation of deuterium-tritium fusion reaction rate in laser plasma based on Monte Carlo-discrete ordinate method

物理学报. 2019, 68(21): 215201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190440>

基于蒙特卡罗原理的混合颗粒三相体系声衰减计算模型研究

Ultrasonic attenuation model of mixed particle three-phase system based on Monte Carlo method

物理学报. 2022, 71(7): 074303 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211869>

多物理耦合计算中动态输运问题高效蒙特卡罗模拟方法*

上官丹骅 闫威华 魏军侠 高志明 陈艺冰 姬志成†

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

(2021 年 8 月 10 日收到; 2022 年 1 月 24 日收到修改稿)

多物理耦合计算在众多领域都有重要应用. 如果其包含粒子输运过程, 用蒙特卡罗方法模拟粒子输运常占据大部分的计算时间, 因此多物理耦合计算中动态输运问题的高效蒙特卡罗模拟方法意义重大, 其不可避免地依赖于大规模并行. 基于动态输运问题的特点, 本文提出了两种新方法: 一是针对输运燃料耦合计算的新型计数规约算法; 二是动态输运计算样本数自适应算法. 两种算法都能在保持计算结果基本不变的前提下使计算时间大幅减少, 从而提高了效率.

关键词: 多物理耦合计算, 动态输运, 蒙特卡罗方法

PACS: 05.60.Cd, 02.70.Uu

DOI: 10.7498/aps.71.20211474

1 引言

在定量讨论各种核系统 (如反应堆等) 的动态行为时, 中子的时-空及能量分布是很关键的. 中子与原子核反应导致核能释放, 从而导致介质温度、密度和运动速度等物理量发生变化; 反过来, 因为中子与核的反应依赖于二者之间的相对运动能量, 从而介质中原子核热运动和流体运动将影响中子的输运过程. 基于物理上的考虑, 可以用 Maxwell 分布来描述核的热运动. 在对核的密度分布函数作为权重求平均以后, 中子输运方程中的系数将只依赖于中子与流体运动之间的相对速度. 基于相空间中子数守恒原理, 可得考虑流体宏观运动的中子输运方程^[1]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla N + \frac{d\mathbf{V}}{dt} \cdot \nabla_{\mathbf{V}} N + V \Sigma(\mathbf{r}, V) N(\mathbf{r}, \mathbf{V}, t) = \int \Sigma' f' V' N' d\mathbf{V}' + q(\mathbf{r}, \mathbf{V}, t), \quad (1)$$

其中 $\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$ 是相对速度, \mathbf{v} 是中子速度, \mathbf{u} 是流

体速度, $N(\mathbf{r}, \mathbf{V}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{V}$ 是 t 时刻 \mathbf{r} 处体积元 $d\mathbf{r}$ 内相对速度 \mathbf{V} 处 $d\mathbf{V}$ 范围内的中子可几数, $\Sigma' f' V' N' = \Sigma(\mathbf{r}, V') f(\mathbf{r}, \mathbf{V}' \rightarrow \mathbf{V}) V' N(\mathbf{r}, V', t)$, $\Sigma(\mathbf{r}, V)$ 是宏观总截面, $\Sigma(\mathbf{r}, V') f(\mathbf{r}, \mathbf{V}' \rightarrow \mathbf{V}) = \sum_i \sum_x \Sigma_x^i(\mathbf{r}, V') \times f_x^i(\mathbf{V}' \rightarrow \mathbf{V})$, $\Sigma_x^i(\mathbf{r}, V')$ 是一个中子在单位距离内与 i 类核经受某一由 x 标志的特定反应的速率, $f_x^i(\mathbf{r}, \mathbf{V}' \rightarrow \mathbf{V})$ 表示 \mathbf{r} 处速度为 \mathbf{V}' 的中子与 i 类核发生 x 类反应产生速度为 \mathbf{V} 的中子的概率, $q(\mathbf{r}, \mathbf{V}, t) d\mathbf{r} d\mathbf{V}$ 表示 \mathbf{r} 处 $d\mathbf{r}$ 体积元内产生的速度为 \mathbf{V} 处 $d\mathbf{V}$ 范围内的中子数. 严格来说, 由于宏观截面依赖于中子通量, 所以上述方程中宏观截面是随时间变化的. 所以, 输运方程其实是一个非线性的微分-积分方程. 由于流体运动的时间尺度较中子运动的时间尺度长, 所以可选一个时间间隔, 其相对于中子输运相当长, 而对于流体运动来说相当短, 从而在该间隔内可以忽略核数密度改变的影响. 在时间间隔末通过解线性输运方程得到中子角通量以后, 就可以利用所得中子角通量、流体力学方程组和燃料方程组求解新的物质密度和核数密

* 中国工程物理研究院科学基金 (批准号: CX20200028) 和国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 11705011) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: ji_zc@139.com

度. 这样就把非线性输运方程转化为多时间步的线性输运问题, 形成了多物理耦合计算 (本文仅考虑流体力学、输运和能耗的多物理耦合计算).

随着科学技术的发展, 特别是并行计算能力的飞跃, 粒子输运问题的建模 (包括几何建模、物理建模等) 越来越逼近真实情况, 以前由于计算能力不足而不得不采取的各种近似逐渐被替换, 这就给蒙特卡罗粒子输运模拟带来了巨大的挑战. 以反应堆 pin-by-pin 模型蒙特卡罗粒子输运模拟领域著名的 Kord-Smith 挑战^[2]为例, 由于其高达百万以上栅元, 几十亿数量级的计数规模的设置, 使得蒙特卡罗模拟面临存不下、算不快和算不准的难题. 对于多物理耦合计算中的动态蒙特卡罗粒子输运模拟而言, 其面临挑战的难度相较 Kord-Smith 挑战而言只高不低. 这主要是由动态输运问题高达千万以上网格的几何建模、由于极端反应条件造成的数十万以上的计算步、由于输运与能耗耦合而必须求解的大量网格计数所造成的, 而且动态输运问题由于时间累积效应, 定态输运蒙特卡罗模拟所常用的许多技巧并不能直接应用, 需要根据动态问题的特点设计新的算法.

在公开发表的文献中, 反应堆大型 pin-by-pin 模型的高效蒙特卡罗模拟方法呈现出蓬勃发展的趋势. 区域分解^[3,4]和数据分解^[5,6]方法的提出主要是为了解决存不下的问题; 为了解决算不快的问题, 提出了若干高效样本数并行算法; 为了解决全局计数算不准的问题, 除了加大样本并高效并行以外, 还提出了 UFS (uniform fission site method)^[7,8]和 UTD (uniform tally density method)^[9,10]等算法 (这些算法都属于偏倚算法). 表 1 列出了常见的大型反应堆 pin-by-pin 模型的蒙特卡罗模拟方法对于存不下、算不快和算不准这 3 个难点各自的优

缺点分析. 其中“√”表示左边的算法对上面难点的解决有促进作用, “×”表示表示左边的算法对上面难点的解决有阻碍作用, “—”表示没有影响. 框内的语句表示的是促进或阻碍作用最本质的原因. 这些研究对于动态输运问题的高效蒙特卡罗模拟也具有重要的借鉴作用.

从表 1 可以看出, 各种算法在解决一个问题的同时常引入新的问题. 对于本文关注的动态输运问题, 由于其不同的特点, 上述算法可以借鉴但不能照搬. 鉴于动态输运蒙特卡罗模拟极大的计算量, 设计高效算法的一个基本思路就是在基本不改变大样本直接模拟结果的基础上尽可能减少计算时间. 为此, 本文开展了针对输运能耗耦合计算的计数规约优化算法和针对样本并行的样本数自适应算法研究. 这些研究是在北京应用物理与计算数学研究所自主开发的极端条件下三维多物理多介质问题数值模拟软件 JUPITER (jointed numerical simulation software for multi-physics and multi-materials problems under extreme conditions) 上进行的, 此平台对模型采取三维非结构网格建模, 在此基础上进行多物理耦合计算. 其中的蒙特卡罗粒子输运模拟模块 (以下简称为 JUPITER-MC 程序) 以区域分解加样本并行为基本架构, 可支持数千万三维非结构多面体网格、数百亿样本的中子输运及能耗耦合计算, 具备数万处理器核的高效并行计算能力.

本文第 2 节介绍了一种基于输运能耗耦合计算模式的计数规约新算法; 第 3 节基于蒙特卡罗模拟分批计算提出了一种样本数自适应算法; 第 4 节的数值结果表明两种算法都可以在基本不改变计算结果的前提下大幅减少计算时间, 从而提高了效率; 最后是总结.

表 1 常见算法优缺点比较
Table 1. Relative merits of common algorithms.

相关算法	大规模动态和定态输运问题高效蒙特卡罗模拟难点		
	存不下	算不快	算不准
区域分解	√ 每个进程存储分片网格	× 通信增加时间、负载不平衡	× 方差无法精确估计
数据分解	√ 输运与计数进程分离	× 增加额外通信时间	— 无影响
样本并行	× 区域复制, 增加内存	√ 减少单进程计算量	— 无影响
偏倚算法	× 增加算法相关内存	√ 效率提高	√ 效率提高
增加样本	× 增加样本数相关内存	× 计算量增加	√ 大数定律保证

2 计数规约优化算法

2.1 输运燃耗耦合计算模式

对于大规模动态输运蒙特卡罗模拟问题,为解决存不下的难题, JUPITER-MC 程序采取了区域分解加样本并行的二级并行模式. 整个模型进行网格分片, 每个进程只存储单个网格片 (包含若干非结构网格) 并分配若干样本粒子, 一旦粒子逃逸出该网格片, 就将粒子属性信息发送给相应的其他进程 (其存储的是逃逸粒子所应到达的网格片). 在输运燃耗耦合计算时, 燃耗方程求解的是网格片上所有网格内所有核素新的核数密度. 由于燃耗方程的输入是网格片上所有网格的多种微观反应率等计数, 存储同一网格片的不同进程需要将这些计数进行规约平均并全局广播, 以此保证求解同一网格片的不同进程上的燃耗计算输入是一致的, 由此可以保证求解同一网格片的不同进程的燃耗计算的输出 (即新的核数密度) 是一致的 (并不需要规约平均).

2.2 计数规约新算法

由 2.1 节所述, 同一网格片上所有网格的微观反应率需要规约平均并全局广播, 而燃耗计算所得核数密度自然保持一致, 并不需要费时的规约平均操作. 但是, 若网格片所含网格数目较多, 或者存储同一网格片的进程数较多, 需要规约平均并全局广播的微观反应率数据本身就是网格数目的多倍, 由此导致并行通信的时间是不可忽略的 (同一进程上, 网格片所含网格数相对于样本数越多, 计数规约所占的时间比例越高). 仔细分析输运燃耗耦合模式, 可以发现燃耗计算的输出数据几乎必然远少于输入数据. 因此, 本文提出了一种计数规约的新算法, 即燃耗计算只利用本地的微观反应率数据进行计算, 所以其输入端不需要费时的通信, 而输出端 (即新的核数密度) 由于不同进程不再能保持一致, 所以将存储同一网格片的不同进程的燃耗输出端按相应进程数进行规约平均并全局广播. 虽然此种算法只是将费时的通信从燃耗输入端转移到输出端, 但由于通信的数据量可以大幅减少, 预期可以从总体上减少通信时间. 值得注意的是, 这种算法从原理上就不能保证串并行严格一致, 但在样本数趋于无穷时, 串并行结果是趋于一致且与原算法的结果是趋于一致的.

3 样本数自适应算法

3.1 研究基础

对于动态输运问题蒙特卡罗模拟进行样本数自适应研究, 起源于三个方面的研究基础, 即香农熵概念引入定态临界计算以指示裂变源分布的收敛、临界计算全局计数算法的研究和临界计算全局计数问题的样本数自适应算法研究.

3.1.1 香农熵

对于定态输运临界计算问题, 理论上只有当裂变源分布已经收敛时才能进行各种计数, 否则结果是包含系统性误差的. 当迭代计算进行时, 可以利用信息论中香农熵的概念对裂变源分布是否收敛进行后验检验. 假设系统包含 N 个栅元, 在某一步迭代计算后产生了 M 个裂变点, 每个栅元包含 M_i ($i = 1, 2, \dots, N$) 个裂变点, 则裂变源分布对应的香农熵 H 为

$$H = - \sum_{i=1}^N p_i \ln p_i, \quad (2)$$

其中 $p_i = M_i/M$. 每一迭代步将产生一个熵值, 当计算完成时, 若判断出 K 步以后熵序列已经收敛而开启计数的迭代步号大于等于 k , 则认为所得计数没有系统性误差. 当然, 也存在一些基于熵概念对裂变源分布是否收敛的实时诊断方法研究^[11–13].

3.1.2 临界计算全局计数算法

在定态临界计算时常常伴随着全局计数的求解, 由于全局计数问题目标众多且核系统各部分之间反应性的不均匀, 全局计数问题单靠增加样本数是低效的. 为此, 基于对裂变次级中子数进行不同标准的偏倚, 产生了 UFS 和 UTD 等算法, 这些算法以若干全局计数整体效率指标进行衡量, 都大幅提高了计算效率.

3.1.3 临界计算全局计数问题的样本数自适应算法

由于定态临界计算何时启动全局计数是凭经验设置的, 且每步样本数是固定不变的, 所以可能存在过早启动全局计数 (即裂变源分布还未收敛就启动全局计数) 和冗余计算 (即全局计数结果已经满足要求还在计算) 的问题. 文献^[14]提出了一种临界计算全局计数问题的样本数自适应算法,

其基于对香农熵序列的一种实时收敛性诊断方法和对一种全局计数精度指标的实时监测,可以保证在更合理的地方启动全局计数并且节省不必要的计算.

3.2 样本数自适应算法

在国际著名的定态蒙特卡罗粒子输运模拟软件 MCNP 中,存在根据某一计数的相对误差变化进行样本数自适应调整的方法.但这一方法并不适合动态输运蒙特卡罗模拟.因为动态计算中反馈给其他物理过程的全局反馈量很难确定哪一个重要,无法根据某个计数结果的相对误差进行样本数自适应调整.基于定态输运临界计算和动态多步输运计算的类比,即定态临界计算的裂变源中子对应于动态输运计算上一步传递给本步的未死亡粒子(称之为时间源粒子),定态临界计算的全局计数对应于多物理耦合计算中动态输运反馈给其他物理过程的全局反馈量,可以设计动态输运蒙特卡罗模拟的一种样本数自适应算法,详述如下.

3.2.1 基本思路

由于 JUPITER-MC 程序是样本数分批计算,每批计算都会形成时间源中子和全局反馈量计数.时间源中子形成的时间源分布和全局反馈量计数对于整个多物理耦合计算来说是最重要的两个因素.所以,一旦某批次计算完成,根据某种判断标准表明时间源分布已经抽样充分且全局反馈量计数已经整体收敛,则可以提前结束本步的计算,不再进行剩余批次的计算.这是多物理耦合计算中动态输运蒙特卡罗模拟样本数自适应算法的基本思想.

3.2.2 基本工具

上述基本思路的实现需要 3 个基本工具.一是根据什么定量指标表明时间源分布已经抽样充分;二是根据什么定量指标表明全局反馈量计数已经充分收敛;三是如何根据批次的增加实时判断上述两个指标已经收敛.前两个工具的实现离不开香农熵概念的推广.第 3 个工具则是一种熵值序列的实时收敛性诊断方法.

由于时间源中子是时间源分布的抽样,对于某一固定的相空间网格(这里仅考虑空间和能量组成

的相空间),假设共包含 N 个网格 ($S_i, i = 1, 2, \dots, N$)、 G 个能群 ($g_i, i = 1, 2, \dots, G$) 和 M 个时间源中子,令 $p_{ij} (i = 1, 2, \dots, N; j = 1, 2, \dots, G)$ 是包含在相空间网格 $S_i \times g_j$ 中的时间源中子数除以总时间源中子数再除以 V_i (V_i 是相应网格的体积),则

$$H_s = - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^G p_{ij} \ln p_{ij}, \quad (3)$$

H_s 是一个指示时间源中子是否已经足够代表时间源分布的类香农熵指标.基于同样的考虑和全局反馈量都是通量与某响应函数的积分的事实,可设计指示全局反馈量计数是否整体收敛充分的类香农熵指标如下:

$$H_f = - \sum_{i=1}^N f_i \ln f_i, \quad (4)$$

其中 f_i 是第 i 个网格上的体通量除以总通量.注意到上述两个指标是第一次提出用以指示时间源中子是否充分和全局反馈量计数是否整体收敛,虽然指示全局反馈量计数是否整体收敛的指标不止一个.

对于分批计算,每完成一批计算就会得到新的熵值 H_s 和 H_f .可以设计熵值序列的实时收敛性诊断方法如下:对每一种熵值序列,在第 n 批计算完成后构造随机振荡指标 K_n ,其定义为^[15]

$$K_n = \frac{H_n - H_{\min}^{n,p}}{H_{\max}^{n,p} - H_{\min}^{n,p}}, \quad (5)$$

其中 $H_{\max}^{n,p}, H_{\min}^{n,p}$ 是第 n 批之前所有 p 批对应熵值序列中的最大值和最小值; H_n 是当前熵值.如果熵值序列收敛,则 K_n 应该在 0.5 附近无规振荡,所以一旦 K_n 的序列满足^[15]:

$$|K_n - 0.5| < \varepsilon \text{ 且 } \left| \frac{1}{m} \sum_{i=0}^{m-1} K_{n+i} - 0.5 \right| < \varepsilon, \quad (6)$$

则可认为对应熵值序列已经收敛 (p, m, ε 固定为 20, 50, 0.1).

4 数值结果及讨论

如引言中所述,本文只关注力学、输运和能耗的多物理耦合计算问题,因此本节将给出若干此类模型的计算结果.必须指出的是,同样的方法是可应用到其他多物理耦合计算过程的.

4.1 计数规约优化算法结果

考虑一个包含 141 万非结构六面体网格的模型, 该模型包含 5 种介质, 其中有含裂变物质的材料. 对其进行多介质 ALE (arbitrary Lagrange-Euler) 力学、中子输运和燃耗的耦合计算. 其中蒙特卡罗粒子输运模拟采取每步 1600 万样本, 160 核并行, 不进行区域分解 (经物理分析, 此样本数对于本模型是足够的). 由于计数规约优化算法在减少燃耗输入端规约数据的同时增加了燃耗输出端的规约数据, 所以比较计数规约时间和燃耗计算时间之和 (包含燃耗输出端的规约时间) 是合理的.

如图 1 所示, 计数规约时间和燃耗计算时间之和减少了大约 30%. 表 2 是该模型一个完整的计算结果, 其中把原程序对总释放能量的计算结果取为标准 1. 从表 2 可以看出, 总释放能量只有约 1% 的变化, 而总计算时间减少了约 15%. 可见, 计数规约优化算法可以在基本保持原结果不变的前提下实现计算时间的减少, 从而提高了效率.

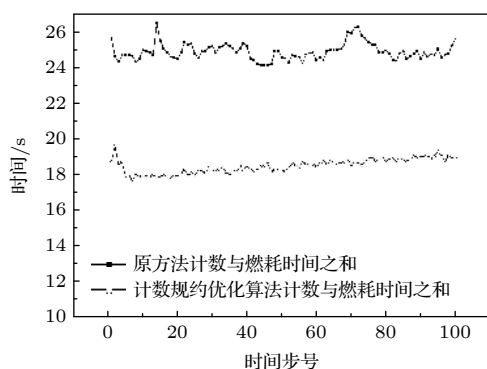


图 1 新旧方法计数与燃耗计算时间之和的对比

Fig. 1. Comparison of the total time of tally reduce and burnup calculation by using old and new methods.

表 2 对于一个包含 141 万非结构六面体网格的模型, 全过程计算结果与计算时间比较

Table 2. Comparison of the results and calculation time for the whole simulation for the model including 1.41 million unstructured hexahedral meshes.

	总释放能量	总计算时间/h
原程序	1.000	22.43
采用计数规约优化算法	1.009	18.98

4.2 样本数自适应算法结果

首先考虑一个包含 550 万非结构六面体网格的模型, 含 7 种不同的轻重介质, 其中包含裂变材料. 对其进行定态迭代计算求解中子时间增殖常数:

$$\lambda = \frac{d \ln N(t)}{dt} = \frac{1}{N(t)} \frac{dN(t)}{dt}, \quad (7)$$

其中 $N(t)$ 是 t 时刻系统中的中子数. 蒙特卡罗模拟迭代 100 步, 每步 3200 万样本, 64 核并行. 表 3 是其计算结果及时间. 可见, 最终的 λ 只变化了 0.5%, 而计算时间减少了约 57%.

表 3 对于一个包含 550 万非结构六面体网格的模型, 定态迭代计算结果与计算时间比较

Table 3. Comparison of the λ and calculation time for the iteration calculation for the model including 5.50 million unstructured hexahedral meshes.

	λ	总计算时间/h
原程序	2.964	21.38
采用样本数自适应算法	2.979	9.09

其次考虑一个包含 2233 万非结构六面体网格的模型, 同样含 7 种不同的轻重介质, 其中包含裂变材料. 对其进行多介质 ALE 力学、中子输运和燃耗的耦合计算. 蒙特卡罗模拟每步 1.6 亿样本, 8000 核并行, 区域分解为 250 个网格片 (注意, 由于此模型足够精细, 若不进行区域分解, 大型机的内存仍然不够). 表 4 是其计算结果及计算时间. 其中, 原程序的总释放能量取为标准 1. 可见, 最终的总释放能量只变化了 0.4%, 而计算时间减少了约 39%.

表 4 对于一个包含 2233 万非结构六面体网格的模型, 全过程计算结果与计算时间比较

Table 4. Comparison of the results and calculation time for the whole simulation for the model including 22.33 million unstructured hexahedral meshes.

	总释放能量	总计算时间
	—	d
原程序	1.000	9.63
采用样本数自适应算法	0.996	5.88

从上面两个模型的计算结果可以明显看出, 样本数自适应算法可以在基本保持原结果不变的前提下实现计算时间的大幅减少, 从而提高了整体计算效率.

5 结 论

基于多物理耦合计算中动态输运问题的特点, 本文在香农熵概念的启发下通过设计新的指标和利用一种实时熵值序列诊断方法, 实现了对动态输

运蒙特卡罗模拟的样本数进行自适应调节的方法,避免了过多的冗余计算. 同时,基于对多物理耦合计算中运输燃耗耦合模式的分析,提出了一种新的 MPI 环境下的计数规约算法,可以在保持结果统计等价的前提下减少必须规约的数据量,从而减少时间. 经若干大型模型的检验,两种算法都能在保持计算结果基本不变的前提下使计算时间大幅减少,从而提高了效率.

参考文献

- [1] Du S H, Zhang S F, Feng T G, Wang Y Z, Xing J R 1989 *Computer Simulation of Transport Problems* (Changsha: Hunan Science and Technology Press) p47 (in Chinese) [杜书华, 张树发, 冯庭桂, 王元璋, 邢静茹 1989 输运问题的计算机模拟 (长沙: 湖南科技出版社) 第47页]
- [2] Smith K, Forget B 2013 *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering* SunValley, Idaho, USA, May 5–9, 2013 p18
- [3] Alme H J 2001 *J. Supercomput.* **18** 5
- [4] Li G, Lei W, Zhang B Y, Deng L, Ma Y, Li R 2014 *Nucl. Power Eng* **S2** 228 (in Chinese) [李刚, 雷伟, 张宝印, 邓力, 马彦, 李瑞 2014 核动力工程 **S2** 228]
- [5] Brown F B, Martin W R 2004 *High Performance Computing and Monte Carlo* (Los Alamos: Los Alamos National Lab.) Report No. LA-UR-04-4532
- [6] Romano P, Forget B, Brown F 2011 *Prog. Nucl. Sci. Technol.* **2** 670
- [7] Kelly D J, Sutton T M, Wilson S C 2012 *Proceedings of PHYSOR 2012* Knoxville, Tennessee, USA, April 15–20, 2012 p1
- [8] Kelly D J, Aviles B N, Herman B R 2013 *Proceedings of M&C 2013* Sun Valley, Idaho, USA, May 5–9, 2013 p2962
- [9] 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]
- [10] 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
- [11] Ueki T, Brown F B 2005 *Nucl. Sci. Eng.* **149** 38
- [12] Natio Y, Yang J 2004 *J. Nucl. Sci. Technol.* **41** 559
- [13] Ueki T 2008 *Nucl. Sci. Eng.* **160** 242
- [14] Shangguan D H, Ji Z C, Deng L, Li R, Li G, Fu Y G 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 122801 (in Chinese) [上官丹骅, 姬志成, 邓力, 李瑞, 李刚, 付元光 2019 物理学报 **68** 122801]
- [15] Shangguan D H, Deng L, Li G, Zhang B Y 2018 *High Power Laser and Particle Beams* **30** 016004 (in Chinese) [上官丹骅, 邓力, 李刚, 张宝印 2018 强激光与粒子束 **30** 016004]

Efficient Monte Carlo algorithm of time-dependent particle transport problem in multi-physics coupling calculation^{*}

Shangguan Dan-Hua Yan Wei-Hua Wei Jun-Xia Gao Zhi-Ming
Chen Yi-Bing Ji Zhi-Cheng[†]

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

(Received 10 August 2021; revised manuscript received 24 January 2022)

Abstract

Multi-physics coupling calculation has applications in many important research fields. If particle transport process is included in this calculation, Monte Carlo method is often used to simulate this process and usually a large amount of calculation time is needed. So, efficient Monte Carlo algorithm for time-dependent particle transport problem is important for an efficiently coupling calculation, which inevitably relies on large-scale parallel calculation. Based on the characteristic of time-dependent particle transport problem, two methods are proposed in this paper to achieve high- efficiency calculation. One is a tally-reducing algorithm which is used in the coupling of transport simulation and burnup calculation. By reducing the quantity of data which should be reduced necessarily, this method can reduce the calculation time largely. It can be seen that a new coupling mode for these two processes in MPI environment has a larger value when model scale is larger than the sample size. The other method is an adaptive method of setting the sample size of Monte Carlo simulation. The law of large number assures that the Monte Carlo method will obtain an exact solution when the sample scale tends to infinity. But generally, no one knows which sample scale is big enough for obtaining a solution with target precision in advance. So, the common strategy is to set a huge-enough sample scale by experience and conduct the posterior check for all results. Apparently, this way cannot be efficient because the calculation will go on after the precision of solution has reached an object value. Another popular method is to set the sample size to rely on the relative error of some single calculation. The sample size is enlarged without a break until the relative error is less than some presetting value. This method is not suitable either, because Monte Carlo particle transport simulation will gives feedbacks to other process which is composed of many tallies. It is inappropriate to adjust the sample size according to the relative error of any calculation. Relying on the generalization of the Shannon entropy concept and an on-the-fly diagnosis rule for a entropy value sequence, the adaptive method proposed in this paper can reduce the original huge sample scale to a reasonable level. By numerically testing some non-trivial examples, both algorithms can reduce the calculation time largely, with the results kept almost unchanged, so the efficiency is high in these cases.

Keywords: multi-physics calculation, time-dependent transport problem, Monte Carlo method

PACS: 05.60.Cd, 02.70.Uu

DOI: 10.7498/aps.71.20211474

^{*} Project supported by the Science Foundation of China Academy of Engineering Physics, China (Grant No. CX20200028) and the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11705011).

[†] Corresponding author. E-mail: ji_zc@139.com