

文章编号: 0258-0926(2014)S2-0228-03; doi: 10.13832/j. jnpe. 2014. S2. 0228

# 大内存精细反应堆模型的蒙特卡罗 区域分解并行计算

李 刚<sup>1,2</sup>, 雷 伟<sup>3\*</sup>, 张宝印<sup>1</sup>, 邓 力<sup>1</sup>, 马 彦<sup>1</sup>, 李 瑞<sup>2</sup>,  
上官丹骅<sup>1</sup>, 付元光<sup>2</sup>, 胡小利<sup>2</sup>

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;  
3. 中核核电运行管理有限公司, 浙江海盐, 314300

摘要: 随着对核反应堆的数值模拟描述越来越精细, 全堆芯 pin-by-pin 精细建模需要的几何数量越来越多, 对计算机内存提出了更高要求。本文针对大内存模型对蒙特卡罗组合几何区域分解的并行算法开展研究, 详细阐述了基于树结构存储的区域剖分算法, 并使用区域分解技术计算了大亚湾核电站压水堆的全堆芯 pin-by-pin 模型, 初步验证了算法的可行性和正确性, 为精细模型的输运燃耗耦合计算提供了可行性。

关键词: 组合几何; 区域分解; 蒙特卡罗; pin-by-pin; JMCT

中图分类号: O571.51 文献标志码: A

## Domain Decomposition of Combinatorial Geometry Monte Carlo Simulation for Memory Overload Full-Core Nuclear Reactor

Li Gang<sup>1,2</sup>, Lei Wei<sup>3\*</sup>, Zhang Baoyin<sup>1</sup>, Deng Li<sup>1</sup>, Ma Yan<sup>1</sup>, Li Rui<sup>2</sup>,  
Shangguan Danhua<sup>1</sup>, Fu Yuanguang<sup>2</sup>, Hu Xiaoli<sup>2</sup>

1. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China;  
2. CAEP Software Center for High Performance Numerical Simulation, Beijing 100088, China;  
3. CNNC Nuclear Power Operations Management Co., Ltd., Haiyan, Zhejiang, 314300, China

Abstract: With the development of computer technology and the increasing requirement on nuclear reactor physics, the full-core reactor model contains too many cells and tallies to be loaded for Monte Carlo transport simulation on a single core processor. A domain decomposition of combinatorial geometry Monte Carlo transport is presented in this paper, to simulate the models overload the CPU memory. The tree-based decomposition and asynchronous communication of particle information between domains are also described in the paper. A full-core reactor model from Daya Bay nuclear power station is simulated to verify the domain decomposition algorithms. The domain decomposition provides an available way for the coupled transport and burn-up simulation of the full-core reactor model.

Key words: Combinatorial geometry, Domain decomposition, Monte Carlo, Pin-by-pin, JMCT

## 0 引言

随着计算机的快速发展和精密物理要求, 数值反应堆概念被提出来, 数值反应堆将几何、材

料、密度、温度精确处理, 按 pin-by-pin 描述堆芯, 使得模型的几何规模剧增, 对计算机内存的占用急速上升。对于内存占用大的问题, 目前还

收稿日期: 2014-10-19; 修回日期: 2014-11-27

基金项目: 国家自然科学基金(91118001); 国家自然科学基金青年科学基金项目(21303173); 科技部 863 专项(2012AA01A309, 2012AA01A303); 国防科工局核能开发项目(科工技[2012]1523); 中国工程物理研究院基金(2014B0202029)

作者简介: 李 刚(1980—), 男, 副研究员。现从事蒙特卡罗方法在粒子输运中的应用研究工作。

\*通讯作者: 雷 伟, E-mail: 13801684723@139.com

没有比较成熟的解决方法，区域分解并行计算被认为是一种可行的思路。美国三大实验室先后都开展了这方面的研究：劳伦斯利弗莫尔国家实验室（LLNL）早在 2003 年就对其正在开发的蒙特卡罗程序 MERCURY 提出了区域分解的设计，并先后在网格和组合几何上实现<sup>[1]</sup>；洛斯阿拉莫斯国家实验室（LANL）提出了数据分解的想法，把计算结点分为粒子结点和数据结点两层，数据分布存储到各个数据结点上，粒子在粒子结点上远程调用数据结点的数据进行模拟计算<sup>[2]</sup>；美国橡树岭国家实验室（ORNL）采用一种带有重叠边的区域分解格式，以此来降低粒子返回原区域的概率，减少粒子在 2 个区域间来回迁移的次数<sup>[3]</sup>。国内清华大学工程物理系研发的自主堆用蒙特卡罗程序（RMC）涉及了区域分解的初步研究<sup>[4]</sup>。在组合几何蒙特卡罗粒子运输支撑软件框架（JCOGIN）上开展区域分解并行计算研究，针对树型几何存储结构设计实现区域剖分策略。根据用户的要求，可以自动对模型区域分解，进行并行计算，并可与区域复制联合实现二级并行。

## 1 蒙特卡罗粒子运输并行计算思想

近几年来，随着反应堆 pin-by-pin 精细建模带来计算机内存不足问题的凸显，对蒙特卡罗粒子运输中的区域分解方法的研究逐步增多。“分而治之”是区域分解的基本思想，即将研究对象从几何上划分为若干区域，对不同的区域进行计算，通过建立区域间的数据通信关系确保整个研究对象的求解结果正确。它可以将大模型问题化为小模型问题，是解决计算机内存不足问题和实现并行计算的有效手段，现已大量应用于各种基于结构网格或非结构网格的计算。

区域分解方法的思想同样可以应用于蒙特卡罗粒子运输模拟的过程，粒子在一个区域上进行模拟，当遇到区域的边界，发生越界（从一个区域进入到另一个区域）时，程序通过区域间的数据通信，把粒子传递到相应区域内，由对方区域继续粒子的模拟。

## 2 基于树结构的区域分解算法

### 2.1 树结构管理几何体

JCOGIN 是针对组合几何结构的蒙特卡罗粒子运输支撑软件框架，包含成熟的组合几何数值

算法和大规模并行实现<sup>[5]</sup>。

JCOGIN 采用树型结构对组合几何体进行存储和管理，每个几何体都对存储树上的一个结点，整个模型外部是树的根结点。几何体之间的包含关系（空间上一个几何体完全被另一个几何体覆盖）、邻域关系转化为树结点间的父子关系和兄弟关系（图 1）。

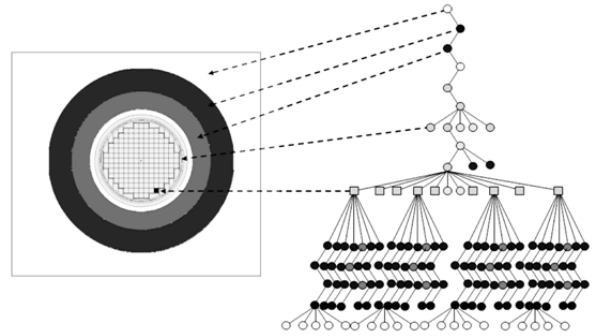


图1 几何体的树型管理结构

Fig. 1 Tree Management Structure of Geometry Cells

### 2.2 区域剖分算法

区域分解并行计算首先要对几何结构进行区域剖分。选择一个合适的几何体，对应结构树上的一个结点，称为剖分结点。剖分结点可由用户在输入文件中指定，也可自动搜索；其次，确定剖分方式，由用户输入 3 个整数表示笛卡尔坐标下 3 个方向的剖分份数。然后，JCOGIN 自动计算出剖分结点的包围盒（包含剖分结点整个几何的最小长方体），根据剖分方式对包围盒进行均匀剖分，把整个包围盒分成多个子区域；最后，计算出剖分结点的每个子结点的包围盒，对子结点进行分配：若子结点包围盒完全被某个子区域包含，则把该结点及其后代分配给该子区域；若子结点包围盒与多个子区域相交，则按照相交区域的大小来确定子结点所分配的区域。每个子区域分别复制剖分结点及其祖先结点、兄弟结点，就可把一棵树分成多个子树（图 2）。

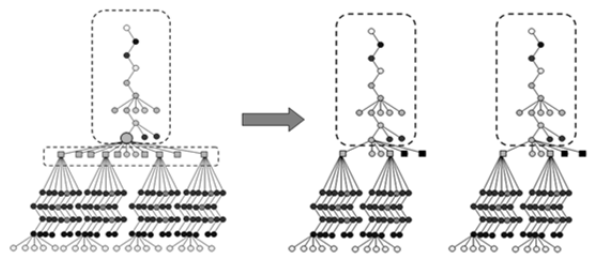


图2 一棵树剖分成两棵子树

Fig. 2 Tree Divided into Two Sub-Trees

每个进程分配一个子树,几何范围对应一个子区域,仅在子树的几何上对粒子进行模拟。当粒子输运到子区域边界时,就要把粒子迁移到对应的区域内,由对应进程继续模拟,这就是区域间的粒子通信。

### 2.3 区域间的粒子通信

区域间的粒子通信是蒙特卡罗区域分解算法的核心,不仅要确保粒子在区域间的传递正确,而且还要采用高效的通信算法保持并行效率。

保证粒子在区域间的传递正确包含 3 个要素:区域邻域关系、粒子个数、粒子属性。其中粒子属性的随机数序列可使粒子历史不会因区域分解而发生改变,是确保串并行结果一致或者使采用区域分解和不采用区域分解结果一致的关键。

在保证粒子在区域间正确传递的前提下,充分考虑通信高效性,采用异步通信模式处理区域间的粒子通信,重叠计算与通信,保持较高的并行效率。

## 3 模型验证

测试软件 JMCT 是基于 JCOGIN 开发的具有自主知识产权的中子光子耦合蒙特卡罗粒子输运软件<sup>[6]</sup>,支持多群和连续能量模拟,可进行区域复制并行、区域分解并行及两者联合的二级并行的粒子模拟计算,并具有良好的可扩展性。

测试模型为大亚湾核电站压水堆真实几何数据的临界反应堆全堆芯 pin-by-pin 模型。堆芯共有 157 个燃料组件,每个组件含  $17 \times 17$  个栅元,对应控制棒和燃料棒位置,其中燃料棒径向分为 2 层,内层是含铀燃料,轴向分为多层(图 3)。模型所有组件材料成分都相同。

为了验证区域分解并行计算能够进行大规模模型的模拟计算,将模型的含铀燃料轴向分为 256 层,使得模型的几何单元数达到千万量级;对所有

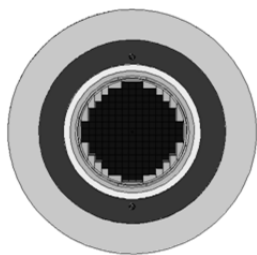


图3 pin-by-pin组件横截面图

Fig. 3 Cross-Sectional View of Pin-by-Pin Assembly

几何单元采用 49 群能量箱进行计数。该模型仅计算数量占据的内存空间就超过 12 G,远超单中央处理器(CPU)的内存量,无法使用粒子并行计算模拟。JMCT 程序采用八分区区域分解并行、与粒子并行耦合的两级并行计算,实现了对该模型的模拟计算。共计采用 4096 个 CPU,计算 300 代,舍弃前 100 代,每代模拟 20480 万个粒子,共花费 3.5 h。

输出结果包括所有燃料几何单元的分能量箱通量计数(含总通量)及相对误差。计算结果与物理分析符合,验证了算法的可行性和正确性。

## 4 结束语

本文针对超过单 CPU 内存的反应堆精细模型的模拟计算,开展蒙特卡罗粒子输运并行算法研究,设计了基于组合几何的区域分解并行算法,实现了与粒子并行算法耦合的二级并行计算,并集成到 JCOGIN 框架上。使用该算法计算了大亚湾核电站压水堆的全堆芯 pin-by-pin 模型,验证了算法的可行性和正确性。

致谢:

感谢北京应用物理与计算数学研究所高性能计算中心夏芳副研究员、艾志伟副研究员在图像显示方面的帮助。

参考文献:

- [1] Richard P, Janine T, Ivan C, et al. Design, implementation and testing of Mercury: a parallel Monte Carlo transport code[C]. USA: Nuclear Mathematical and Computational Science, 2003.
- [2] Forrest B, William M, Jaakko L. Reactor Physics Analysis with Monte Carlo, Pittsburgh, Pennsylvania[C]. USA, PHYSOR, May 9-14, 2010.
- [3] Wagner J C, Mosher S W, Evans T M, et al. Hybrid and parallel domain-decomposition methods development to enable monte carlo for reactor analyses[J]. Nuclear Science and Technology, 2011, 2: 815-820.
- [4] 梁金刚,蔡云,王侃,等. 中子输运蒙特卡罗模拟的区域分解方法研究[C]. 第 14 届反应堆数值计算与粒子输运学术会议,宁夏银川,2012.
- [5] 张宝印,李刚,邓力. 组合几何蒙特卡罗粒子输运支撑软件框架 JCOGIN 介绍[J]. 强激光与粒子束, 2013 25(1):173-176.
- [6] 李刚,张宝印,邓力,等. 蒙特卡罗粒子输运软件 JMCT 研制[J]. 强激光与粒子束, 2013 25(1):158-162.

(责任编辑:孙凯)