中国科学:信息科学 2016年 第46卷 第10期:1489-1509

SCIENTIA SINICA Informationis

高性能科学计算若干前沿问题研究专刊



反应堆 Monte Carlo 临界计算加速收敛方法综述

潘流俊, 王瑞宏*, 江松, 许海燕, 上官丹骅, 姬志成

北京应用物理与计算数学研究所,北京 100094 * 通信作者. E-mail: wang_ruihong@iapcm.ac.cn

收稿日期: 2016-03-29; 接受日期: 2016-08-25; 网络出版日期: 2016-10-25 国家重点基础研究发展计划 (973 计划)(批准号: 2011CB309705) 资助项目

摘要 反应堆临界计算的核心问题是计算系统的裂变源分布,有了裂变源分布以后,就能够很方便 地得到有效增殖因子、系统的功率分布和反应率等物理量.在反应堆计算和分析中,Monte Carlo 方 法在处理复杂几何和中子参数等方面具有独特的优势.随着计算机软硬件能力的不断发展,Monte Carlo 临界计算已经逐步应用于实际反应堆的全堆芯模拟,同时有关这方面的研究已经发展成一个 热点.Monte Carlo 临界计算全堆芯模拟面临几个颇具挑战性的困难,其中包括收敛速度慢、缺乏有 效的收敛性判据和计算结果的不确定度被低估等几个方面.本文介绍了 Monte Carlo 临界计算的过 程和特点、存在的困难以及研究现状,综述了最新的加速收敛方法和降方差技巧.

关键词 反应堆分析 临界计算 裂变源分布 Monte Carlo 中子输运方程

1 引言

中子与物质相互作用及输运过程是核能开发利用和核武器物理研究中的重要课题,其核心任务是 有效地预测系统内的中子分布.中子输运过程的复杂性,导致了实际问题的研究往往需要借助数值模 拟技术来数值求解中子输运方程.中子输运数值计算方法及程序是开展核反应堆和核武器物理问题研 究的基础之一.

众所周知,中子输运数值计算方法可分为确定论方法 (比如 SN) 和 Monte Carlo (MC) 方法.确定 论方法具有较高的计算效率,但在面临以核反应堆为代表的具有复杂结构的工程问题时,确定论方法 存在因均匀化处理、分群近似、数值离散等引起的计算精度和普适性方面的问题; MC 方法可实现精 确的几何建模和采用连续能量点截面,克服了确定论方法在计算精度和普适性方面存在的问题,但存 在计算效率较低的缺陷.

计算机性能的不断提升以及大规模并行计算技术的发展无形中弱化了 MC 方法计算效率较低的 缺陷,使得该方法所具有的精确物理建模的能力受到了更广泛的关注.近些年大型核反应堆全堆芯 的 MC 临界计算已经发展成中子输运数值模拟中的一个热点.很多 Monte Carlo 程序实现了全堆芯 pin-by-pin 建模的临界计算,并在工程问题上获得了初步应用.其中的典型代表有:美国 Los Alamos

② 2016《中国科学》杂志社

引用格式: 潘流俊, 王瑞宏, 江松, 等. 反应堆 Monte Carlo 临界计算加速收敛方法综述. 中国科学: 信息科学, 2016, 46: 1489–1509, doi: 10.1360/N112016-00068

实验室的 MCNP 程序^[1]、美国海军实验室的 MC21 程序^[2]、美国 MIT 的 OpenMC 程序^[3]、芬兰的 Serpent 程序^[4],以及国内的 RMC 程序^[5]、JMCT 程序^[6]和 SuperMC 程序^[7].

虽然计算机性能、并行计算技术、计算方法和程序设计等方面的共同发展已经使得大型 MC 程序实现了全堆芯的临界输运计算,但 Brown 和 Martin 等指出:对于松散耦合的大型实际问题 (比如实际的核反应堆堆芯), MC 临界计算依然存在几个长期以来未解决的难题 ^[8~10], 其中 3 个比较突出的如下所述.

(1) 收敛速度慢. 传统的 Monte Carlo 临界计算采用幂迭代方法. 为了得到一定精度的结果, 必须 迭代足够多的循环代以保证裂变源分布已经达到收敛. 对大型松散耦合系统, 幂迭代方法的收敛速度 通常很慢, 如果初始源分布和真实的裂变源分布相差很远, 传统的 Monte Carlo 方法可能需要经过数 百甚至数千的循环代才能使得裂变源分布收敛. 同时, 为了保证一定的精度, 每个循环代必须跟踪足 够多的样本, 这两方面合起来带来的计算费用常常难以接受.

(2) 裂变源分布收敛的有效判据. 在 MC 临界计算中, 通常将裂变源收敛之前的迭代称为非有效 循环代, 收敛后的迭代称为有效循环代, 并根据有效循环代的信息, 统计出本征值与中子分布等物理 量. 由于缺乏裂变源分布收敛的判别方法, 使得非有效循环代数目的确定依赖于经验.

(3) 计算结果不确定度 (方差) 的无偏估计. 现有 MC 方法对有效增殖因子, 源分布等物理量计算 结果方差的估计是有偏的, 有效循环代之间的相关性往往使得计算结果的不确定度被低估.

针对 MC 临界计算依然存在的问题,世界经合组织核能机构 (OECD/NEA) 成立了有关临界安全 分析中裂变源收敛问题的专家组 (EGSCA, Expert Group on Source Convergence in Criticality Safety Analysis),并提供了 4 个基准问题供全世界有关的机构开展针对 MC 临界计算收敛性问题的研究^[11].

近些年国际上一些学者针对上述几个挑战性困难进行了大量的研究,本文对此进行了综述. 第 2 节简单介绍了 MC 临界计算的基本原理和实现过程; 第 3 和 4 节是本文的重点部分, 第 3 节总结了 MC 临界计算加速收敛方面的最新进展, 第 4 节讨论了 MC 临界计算中与加速方法密切相关的降方差 技巧; 第 5 和 6 节分别简单介绍了收敛性诊断和计算结果方差的无偏估计这两个方面的研究进展.

2 Monte Carlo 临界计算原理与实现

临界计算的核心是求解如下的本征值问题的中子输运方程:

$$\mathcal{L}\psi = \frac{1}{k_{\text{eff}}}\mathcal{F}\psi,\tag{1}$$

其中,

$$\mathcal{L}\psi = \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_t(\boldsymbol{r}, E)\psi(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) - \int_0^\infty \int_{\mathbf{S}^2} \sigma_s(\boldsymbol{r}, E', E, \boldsymbol{\Omega}', \boldsymbol{\Omega})\psi(\boldsymbol{r}, E', \boldsymbol{\Omega}') \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}' \mathrm{d}E',$$
(2)

$$\mathcal{F}\psi = \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_0^\infty \nu(\boldsymbol{r}, E') \sigma_f(\boldsymbol{r}, E') \int_{\mathbf{S}^2} \psi(\boldsymbol{r}, E', \boldsymbol{\Omega}') \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}' \mathrm{d}E'.$$
(3)

式中 ψ 为中子角通量, **r** 代表空间位置, *E* 代表中子能量, **Q** = (u, v, w) 代表中子飞行方向; $\sigma_t(\mathbf{r}, E)$, $\sigma_s(\mathbf{r}, E)$, $\sigma_f(\mathbf{r}, E)$ 分别为 **r** 位置处能量为 *E* 的中子对应的总截面、散射截面和裂变截面.

2.1 临界计算的幂迭代方法

无论是确定论方法还是 MC 方法,数值求解本征值和中子通量密度时通常采用幂迭代法.其计算步骤大致如下,先给定 k₀ (通常可取为 1) 和初始裂变源分布:

$$S^{(0)}(\boldsymbol{r}) = \int_0^\infty \mathrm{d}E' \int_{\mathbf{S}^2} \nu(E') \sigma_f \psi^{(0)}(\boldsymbol{r}, E', \boldsymbol{\Omega}') \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}'.$$
(4)

求解方程

$$\mathcal{L}\psi^{(1)} = \frac{\chi(E)}{4\pi k^{(0)}} S^{(0)},\tag{5}$$

得到新的中子通量密度 $\psi^{(1)}(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}')$, 将其替换式 (4) 中的 $\psi^{(0)}$ 便求出新的分布源 $S^{(1)}$; 然后用 $S^{(1)}$ 替换式 (5) 中的 $S^{(0)}$ 重新求解, 得到新的解 $\psi^{(2)}(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}'), \dots$, 依此类推. 例如, 对于第 n 次迭代有

$$\mathcal{L}\psi^{(n)} = \frac{\chi(E)}{4\pi k^{(n-1)}} S^{(n-1)},$$
(6)

$$k^{(n)} = \frac{\int S^{(n)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\int S^{(n-1)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} / k^{(n-1)}}.$$
(7)

在足够多的迭代次数以后, $S^{(n)}$ 将趋向于一个与 $S^{(0)}$ 无关的函数 S, 该函数就是裂变源分布, 而有效 增殖因子 k_{eff} 为

$$k_{\rm eff} = \lim_{n \to \infty} k^{(n)}.$$
 (8)

为了分析幂迭代法的收敛性,把初始通量分布 (任意给定) 按式 (1) 的所有特征向量展开

$$\psi^{(0)} = c_1 \boldsymbol{u}_1 + c_2 \boldsymbol{u}_2 + \dots + c_m \boldsymbol{u}_m + \dots, \qquad (9)$$

代入原问题,得到^[8]

$$\psi^{(n+1)} = C_1 \left[\boldsymbol{u}_1 + C_2 \left(\frac{k_2}{k_1} \right)^{n(n+1)} \boldsymbol{u}_2 + \cdots \right],$$
(10)

$$k^{(n+1)} = k_1 \left[1 + C_3 \left(\frac{k_2}{k_1} \right)^n \left(\frac{k_2}{k_1} - 1 \right) + \cdots \right].$$
(11)

以上公式中的 c_1, c_2, c_3 和 C_1, C_2, C_3 是不同的与 n 无关的常数. 由于 $\frac{k_2}{k_1} < 1$,从以上两式可以看出, 当 n 趋于无穷大时, $k^{(n)}$ 和 $\psi^{(n)}$ 将分别趋向于有效增殖因子和其对应的特征向量.从以上两式还可 以看出, $k^{(n)}$ 和 $\psi^{(n)}$ 的收敛特性很不一样, $\psi^{(n)}$ 的收敛速度取决于占优比 (dominance ratio) $\frac{k_2}{k_1} < 1$, 当占优比接近于 1 时 (实际大型反应堆问题中常遇到的情况), $\psi^{(n)}$ 的收敛速度很慢,而由于式 (11) 右 端括号中高阶项包含因子 $\frac{k_2}{k_1} - 1$, $k^{(n)}$ 往往并不难达到收敛.

2.2 幂迭代方法的 Monte Carlo 实现

对应上述幂迭代法的计算流程, MC 临界计算由一系列称之为"循环代"的迭代步骤组成, 具体实现过程如下^[1]:

(1) 通过某种猜测或是其他一些快速而精度不高的计算给出初始裂变源 $S^{(0)}(\mathbf{r})$.

(2) 开始一个循环代的计算: 依次跟踪模拟本代的裂变源中子, 直到满足结束跟踪的条件, 为此, 首 先根据初始猜测的裂变源分布或者上一循环代保存的裂变源抽取中子的初始位置、飞行方向和能量. 根据中子的总截面抽取碰撞距离, 中子沿直线飞行碰撞距离后发生碰撞; 然后根据具体的截面数据抽 取碰撞核、碰撞类型和碰撞后中子的物理特性. 这个过程一直重复下去直到中子漏失出系统或者中子 被吸收 (中子跟踪的详细过程参考文献 [1]). 如果中子和物质碰撞发生了裂变反应, 需要存储产生的裂 变中子信息, 作为下一个循环代的裂变源中子. 因此, 首次循环代的裂变源中子由初始裂变源给出, 其 余循环代的裂变源中子由上一循环代模拟给出. 将一个循环代内产生的裂变中子总数除以裂变源中子 总数得到当前代 *k*eff 的估计值. 与确定论方法 (迭代到收敛时就得到所需物理量) 不同, 由于 MC 方法 模拟过程存在的统计涨落, 在裂变源收敛后, 为使所计算的物理量达到一定的统计精度, 需继续进行 若干循环代的计算. 即前面已提及的分为 "非有效循环代"和"有效循环代"两个部分.

(3) 根据有效循环代的信息, 统计得到所需的物理量, 如有效增殖因子 keff、中子通量分布等.

由此可见, MC 临界计算中, 通过非有效循环代使得裂变增殖因子和裂变源分布达到收敛 (达到与 初值无关的状态), 然后在有效循环代中统计计算所需物理量.

裂变源中子的方向一般按照各向同性抽取.第一代中子的能量通常从标准的热裂变谱中抽取,也 可以从其他计算的分布中得到.对后续各代,通常按常规的处理裂变过程的方法抽取源中子的能量. 这一步骤是在上一代中完成的,在储存源中子的位置相关信息时,同时储存裂变中子的能量.

3 Monte Carlo 临界计算的加速收敛方法

对于实际问题中经常遇到的大型松散耦合系统,系统的占优通常很接近1,传统的幂迭代方法往往 需要经过数百甚至数千步的迭代才能使裂变源分布达到收敛.同时,为了保证统计精度,Monte Carlo 模拟的每个循环代必须花费大量的计算时间跟踪足够多的样本.由此带来的高昂的计算费用往往成为 Monte Carlo 方法用于临界计算的瓶颈.所以,与确定论方法相比,发展加速技巧在 Monte Carlo 临界 计算中有着更重要的意义.本节介绍目前公开文献中常见的几种针对 Monte Carlo 临界计算裂变源分 布收敛的加速技巧,如超历史方法、Wielandt 方法、CMFD 加速方法、裂变矩阵加速方法等.

3.1 超历史方法

传统的幂迭代方法每个循环跟踪中子的一代历史 (并且通常把一个循环称作一个循环代), 当中子 发生裂变时, 为下一循环抽取保存裂变中子源并终止跟踪中子的历史. 每个循环代中模拟的中子出发 时的信息是通过在上一循环代保存的裂变中子中抽样得到的. 超历史方法 ^[8,9] 的基本思想就是减少 这种抽样次数. 该方法在每个循环跟踪中子的若干代 (比如, N_g代) 历史, 并把这样的中子历史称作 "超历史", 把这样的一个循环称作 "超代"具体过程: (1) 中子出发 (从上一个"超代"保存的裂变中子 中抽取) 后跟踪中子, 直到泄露出系统或被吸收; (2) 当中子被吸收时, 可能会激发或产生裂变中子, 抽 取适当的裂变中子; (3) 如果是第 N_g 代裂变中子, 则保存起来作为下一个"超代"的中子源, 否则继续 跟踪产生的裂变中子的历史. "超代"中各代产生的中子之和除以各代出发的中子数之和就给出有效 增殖因子的一个估计. 传统幂迭代方法中, 循环代之间的中子源的频繁抽样会损失精度. 超历史方法减 少了这种抽样次数, 可以使用较小的样本量达到所需的效果, 从而减少了计算时间 (也就是起到了加 速的效果). 这种方法的不足之处在于每个"超代"为下一个"超代"保存的源中子的数量不好控制.

3.2 Wielandt 方法

Wielandt 方法首先在确定论计算中用于迭代收敛的加速. 在确定论计算中, 当系统占优比接近于 1 时, 这种加速技巧既有很好的加速效果又比较稳定, 很早就用于实际问题的计算.

Wielandt 方法的主要思想是在中子输运特征方程 (1) 中增加一个 k_e 因子, 使方程变为 Wielandt 方程

$$\left(\mathcal{L} - \frac{1}{k_e}\mathcal{F}\right)\psi = \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k_e}\right)\mathcal{F}\psi.$$
(12)

把方程左边括号部分当作一个算子,式 (12) 表示了一个新的特征值问题,该问题的特征值可表示为

$$k_w = \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k_e}\right)^{-1},\tag{13}$$

反过来, 方程 (1) 的特征值可表示为

$$k = \left(\frac{1}{k_w} + \frac{1}{k_e}\right)^{-1}.$$
(14)

假设方程 (1) 的一系列的本征值为 k₁ > k₂ > · · · ,则其占优比为 k₂/k₁,特征值问题 (12) 的占优比为

$$\frac{1/k_1 - 1/k_e}{1/k_2 - 1/k_e}.$$
(15)

容易看出,问题 (12) 的占优比更小,从而减少了达到收敛所需的迭代步数.

Wielandt 方法能够用于 Monte Carlo 计算中 ^[10~12]. 在一个循环代中, 当权重为 ω 的中子发生碰撞时, 如果可能发生裂变反应, 按一定的概率抽取一定量的裂变中子继续跟踪. 继续跟踪的裂变中子数目的期望值为

$$\frac{\sigma_f}{\sigma_t} \frac{\nu}{k_e}.$$
(16)

抽取的裂变中子和其他中子一样跟踪直到历史结束, (逸出系统或者被吸收且没有抽到新的裂变中子). 为了保证中子链能够正常结束, 选择的 k_e 必须小于系统的有效增殖因子 k_{eff}.

按照和通常统计 k_{eff} 的办法就可以统计出问题 (12) 的有效增殖因子 k_w, 利用式 (14) 就可以计算 出原系统的有效增殖因子 k_{eff}. 每当中子发生碰撞时, 为下一个循环代保存的中子源 (裂变中子) 数目 的期望值为 (ω 表示入射中子的权重)

$$\omega \frac{\sigma_f}{\sigma_t} \frac{\nu}{k_w} = \omega \frac{\sigma_f}{\sigma_t} \nu \left(\frac{1}{k_{\text{eff}}} - \frac{1}{k_e} \right). \tag{17}$$

每次碰撞为下一个循环代保存的中子源数目小于通常的 Monte Carlo 幂迭代方法. 但是 Wielandt 方 法跟踪的裂变链要长一些, 每个循环代为下一个循环代保存的总的中子源数目和通常的幂迭代方法 一样.

Wielandt 方法减少了达到收敛所需的迭代步数, 但是和确定论计算不一样, 在 Monte Carlo 模拟 中使用 Wielandt 方法增加了每个循环代需要的模拟时间, 从而并不一定能够减少总的模拟时间. 然 而, Wielandt 方法增加了一个循环代中每个中子的影响范围, 从而如果使用得当, 在一些问题中会起 到好的效果.

3.3 裂变矩阵加速

3.3.1 裂变矩阵

裂变矩阵是临界计算和分析中的重要工具,它的第 (*i*, *j*) 元素代表 *j* 区域中的中子源引起的在区 域 *i* 中的裂变中子个数的平均值.由于 MC 方法能够很方便地得到近似裂变矩阵,相比于确定论方法,裂变矩阵在 MC 临界计算中有着特殊的意义.

把式 (1) 改写成如下形式:

$$k\mathcal{F}\psi = \mathcal{F}\mathcal{L}^{-1}\mathcal{F}\psi.$$
 (18)

定义新的算符和变量

$$\mathcal{H} = \mathcal{F}\mathcal{L}^{-1}, \quad s = \mathcal{F}\psi,$$

得到原特征问题的新形式

$$\mathcal{H}s(\boldsymbol{r}, E) = ks(\boldsymbol{r}, E), \tag{19}$$

其中 s 就代表裂变源分布. 为了推导出裂变矩阵, 把算子 H 表示成如下形式:

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{r}, E) = \int_0^\infty \mathrm{d}E' \int_V \mathrm{d}\boldsymbol{r}' f(\boldsymbol{r}', E' \to \boldsymbol{r}, E) s(\boldsymbol{r}', E'), \tag{20}$$

f 为裂变核, $f(\mathbf{r}', E' \rightarrow \mathbf{r}, E)$ 表示从 (\mathbf{r}', E') 出发的单位中子引发的裂变中子的密度函数. f 是未知 的, 由中子输运方程决定.

对系统空间进行离散以后 (离散成 *M* 个区域, 要求离散的区域互不重叠且覆盖所用裂变区), 式 (11) 中的算子 *H* 可以用裂变矩阵 *H* 来近似. 矩阵 *H* 的第 (*i*,*j*) 元素代表 *j* 区域中的中子源引起的 在区域 *i* 中的裂变中子个数的平均值,

$$H_{i,j} = \frac{\int_0^\infty \mathrm{d}E \int_{V_i} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int_0^\infty \mathrm{d}E' \int_{V_j} \mathrm{d}\boldsymbol{r}' f(\boldsymbol{r}', E' \to \boldsymbol{r}, E) s(\boldsymbol{r}', E')}{\int_0^\infty \mathrm{d}E' \int_{V_j} \mathrm{d}\boldsymbol{r}' s(\boldsymbol{r}', E')}.$$
(21)

定义 M 维向量 S, S 的第 j 个元素表示第 j 个区域中的裂变中子数目,

$$S_j = \int_0^\infty \mathrm{d}E \int_{V_j} s(\boldsymbol{r}, E) \mathrm{d}\boldsymbol{r},\tag{22}$$

对式 (19) 进行积分, 容易看出裂变矩阵和向量 S 满足特征值方程

$$HS = kS. (23)$$

MC 模拟能够很方便地近似计算出裂变矩阵,只需要给中子打上标识并在输运过程中计数 (碰撞估计、 径迹长度估计等常用的计数方法) 就可以了. 当一个裂变源中子出发时,记录它的出发区域 *j*,在输运 过程中,假如这个中子在第 *i* 个区域会激发一定数量的裂变中子,把激发的裂变中子数目累加到裂变 矩阵的第 (*i*, *j*) 个元素,当所有的中子输运过程都跟踪完毕以后,裂变矩阵的第 (*i*, *j*) 个元素要除以第 *j* 个区域的裂变源的总强度.

3.3.2 裂变矩阵加速方法

得到裂变矩阵后,有很多常用方法可以数值求解出裂变矩阵的主特征值和主特征向量.为了利用裂变矩阵对 Monte Carlo 临界计算裂变源分布的收敛进行加速, Carter 和 McCormick^[13] 建议在 Monte Carlo 临界计算幂迭代的每一个循环代,计算出所谓的"代裂变矩阵",

$$\left(H^{(n)}\right)_{i,j} = \frac{\int_0^\infty dE \int_{V_i} d\mathbf{r} \int_0^\infty dE' \int_{V_j} d\mathbf{r}' f(\mathbf{r}', E' \to \mathbf{r}, E) s_{\rm mc}^{(n-1)}(\mathbf{r}', E')}{\int_0^\infty dE' \int_{V_j} d\mathbf{r}' s_{\rm mc}^{(n-1)}},\tag{24}$$

其中 *s*^(*n*-1) 代表 MC 模拟第 *n*-1 循环代得到的裂变源分布.利用代裂变矩阵的主特征向量对当前循环代为下一循环代保存的裂变中子源的权重进行调整,假设第 *m* 个裂变中子源在区域 *j* 中,其权重调整如下:

$$w_m \leftarrow \frac{(S_{\text{fm}}^{(n)})_j}{(S_{\text{fm}}^{(n-1)})_j} w_m, \quad \forall j,$$

$$(25)$$

其中 $S_{\text{fm}}^{(n)}$ 为代裂变矩阵 $H^{(n)}$ 的主特征向量.

Kadotani 等 ^[14] 建议使用另一种权重调整方法, 假设第 m 个裂变中子源在区域 j 中, 其权重调整如下:

$$w_m \leftarrow \frac{(S_{\text{fm}}^{(n)})_j}{(S_{\text{mc}}^{(n)})_j} w_m, \quad \forall j,$$

$$(26)$$

其中 $S_{\text{fm}}^{(n)}$ 为代裂变矩阵 $H^{(n)}$ 的主特征向量, $S_{\text{mc}}^{(n)}$ 为 Monte Carlo 模拟过程中计数得到的向量, 它的第 j 个元素代表 Monte Carlo 模拟过程中计数得到的第 j 个区域中的裂变源强占总裂变源强的比 ($S_{\text{fm}}^{(n)}$ 与 $S_{\text{mc}}^{(n)}$ 需要做相同的归一化).

Kitada 和 Takeda^[15] 用以上方法模拟了大型反应堆,发现计算"代裂变矩阵"的主特征向量 $S_{fm}^{(n)}$ 时很不稳定,他们建议在有效循环代开始之前就停止使用调整裂变中子源的权重.事实上,统计误差的存在往往导致用 Monte Carlo 模拟得到裂变矩阵,再利用其主特征向量的办法存在稳定性方面的问题^[16],这方面的问题很大程度上可以利用以下的"累计裂变矩阵"得到缓解:

$$\left(H^{(n)}\right)_{i,j} = \frac{\sum_{l=1}^{n} \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}E \int_{V_{i}} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}E' \int_{V_{j}} \mathrm{d}\boldsymbol{r}' f(\boldsymbol{r}', E' \to \boldsymbol{r}, E) s_{\mathrm{mc}}^{(l-1)}(\boldsymbol{r}', E')}{\sum_{l=1}^{n} \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}E' \int_{V_{i}} \mathrm{d}\boldsymbol{r}' s_{\mathrm{mc}}^{(l-1)}}.$$
(27)

3.3.3 内迭代限制

裂变矩阵加速技巧在很多模型计算中都显示出了很明显的加速效果. 然而, 该方法对裂变矩阵的 统计误差很敏感, 当样本数不足够大时, 统计误差的存在会导致这种方法很不稳定. 通过分析和数值 模拟可以发现, 这种不稳定性主要来源于在求解裂变矩阵的主特征向量时, 裂变矩阵各元素的统计误 差会被严重放大. 如果在 Monte Carlo 模拟中使用代裂变矩阵的主特征向量 $S_{\rm fm}^{(n)}$ 对裂变源分布进行 校正, 当 Monte Carlo 计数得到的 $S_{\rm nc}^{(n)}$ 接近真实分布 (裂变源分布接近收敛) 时, 统计误差有可能使 得 $S_{\rm fm}^{(n)}$ 与 $S_{\rm nc}^{(n)}$ 差异较大, 这种校正反而使得裂变源分布远离真实分布. 内迭代限制的裂变矩阵加速 方法 (FM-Lii) ^[17] 通过寻找新的向量校正裂变源分布来缓解这种不稳定性.

在裂变矩阵加速方法中,得到代裂变矩阵 $H^{(n)}$ 以后,需要计算 $H^{(n)}$ 的主特征向量.计算裂变矩阵的主特征向量最简单的办法是幂迭代方法.给定初始向量,通过下式迭代计算出 $S^{(n)}_{fm,k}, k = 1, 2, ...,$

$$S_{fm,k}^{(n)} = \frac{H^{(n)}S_{fm,k-1}^{(n)}}{\|H^{(n)}S_{fm,k-1}^{(n)}\|},$$
(28)

其中 || · || 为用于归一化的给定的一种模, 例如可取最大模

$$||S|| = \max_{i=1}^{n} S_i$$

一般来说,经过足够多的迭代, $S_{fm,k}^{(n)}$ 就会收敛到代裂变矩阵的主特征向量 $S_{fm}^{(n)}$.

FM-Lii 方法采用 Monte Carlo 模拟中计数得到的向量 $S_{mc}^{(n)}$ 作为初始向量. $S_{mc}^{(n)}$ 的各个元素的值 对应各个区域的相对裂变源强度. 不再采用充分收敛的向量, 也就是裂变矩阵的主特征向量进行校正, 而是采用只经过 K 步迭代得到的向量 $S_{fm,K}^{(n)}$ 对裂变源分布进行校正. 也就是假设第 m 个裂变中子 源在区域 j 中, 其权重调整如下:

$$w_m \leftarrow \frac{(S_{fm,K}^{(n)})_j}{(S_{\rm mc}^{(n)})_j} w_m, \quad \forall j,$$

$$\tag{29}$$

其中 K 是一个待定的常数. 当 K 不是很大的时候, FM-Lii 方法比裂变矩阵加速方法稳定很多. 这是 由于当系统的占优比接近 1 的时候, 得到的代裂变矩阵的占优比通常也接近 1, 需要经过很多步的迭 代才能得到充分收敛的代裂变矩阵的主特征向量. 只经过有限步迭代得到的向量 $S_{fm,K}^{(n)}$ 要比精确的 主特征向量 $S_{fm}^{(n)}$ 接近初始向量 $S_{mc}^{(n)}$ 很多, 当 $S_{mc}^{(n)}$ 已接近收敛时, 由于存在统计误差, 使用 $S_{fm}^{(n)}$ 进行 校正可能会使裂变源分布偏离真实分布很多, 而使用向量 $S_{fm,K}^{(n)}$ 进行校正则不会.

通过裂变矩阵计算和 Monte Carlo 模拟之间的关系可以分析 FM-Lii 方法的加速效果. 在没有统 计误差的情况, 为裂变矩阵划分的网格越细, 裂变矩阵的主特征向量与系统的裂变源分布越接近, 极 限情况下,精确(没有统计误差)裂变矩阵的主特征向量就是系统的裂变源分布.当网格划分足够细并 且样本数足够多的情况下,截断误差和统计误差可以忽略不计,系统的裂变源分布可以通过直接求解 裂变矩阵的主特征向量得到(这就是下一小节将介绍的 FM-BASED 方法的基本思想).在这种情况下, 通过幂迭代计算裂变矩阵主特征向量的一步迭代与 Monte Carlo 模拟的一个循环代等价. 所以, 在网 格划分足够细并且样本数足够多的情况下,由于 FM-Lii 方法的一个循环代包含了一代 Monte Carlo 模拟和 K 次内迭代, FM-Lii 方法的一个循环代相当于传统 Monte Carlo 方法的 K+1 个循环代.在 这种理想情况下, FM-Lii 方法的速度是传统 Monte Carlo 方法的 K+1 倍. 实际计算中, 网格通常比 较粗, 样本数也有限制, 考虑到截断误差和统计误差, 计算代裂变矩阵主特征向量的一个内迭代步和 Monte Carlo 模拟幂迭代的一个迭代步 (循环代) 并不等价. 这是由于首先, 内迭代的主要作用是平衡 各区域之间的裂变源强,而 Monte Carlo 模拟的循环代不但平衡区域间的裂变源,也平衡区域内的裂 变源强 (局部平衡). 其次, 内迭代会放大统计误差, 这就是传统的裂变矩阵加速方法不稳定的主要原 因. 但是由于和区域之间的平衡相比, 区域内的局部平衡可以很快达到, 当 K 不是很大的时候, 仍然 可以期望 FM-Lii 方法的速度是传统 Monte Carlo 方法的 K + 1 倍. 另外, 就像前面分析的那样, 当 K 不是很大的时候,内迭代对统计误差的放大远小于传统的裂变矩阵加速方法.

FM-Lii 方法比 FM 方法稳定很多,同时保留了很好的加速效果. 粗略地说, K 越大,加速效果越好,但是,由于在实际计算中, Monte Carlo 模拟得到的代裂变矩阵总是存在不可忽略的统计误差, K 越大,用于校正的向量可能的误差就越大. 过多的内迭代会使结果产生大的振荡,甚至导致结果完全无

意义. 所以, 选择适当的 K 似乎在 FM-Lii 方法中很关键. 但是幸运的是, 选择不大的 K 对统计误差 放大的很有限而加速效果就会很明显. 例如取 1 就能得到大约 2 倍的加速效果, 而在一些模拟结果显 示, 即使 K 取到 10 的时候, FM-Lii 方法也明显比 FM 方法稳定很多.

3.4 FM-BASED 方法

FM-BASED 方法利用 MC 模拟得到的裂变矩阵直接计算出有关的物理量.严格来说,该方法并不能算作是加速收敛方法,但是由于该方法和裂变矩阵加速方法有很密切的联系,在此一并介绍.

对整个系统的空间变量进行离散以后再通过 Monte Carlo 模拟求得的裂变矩阵是对裂变核的一种近似,这种近似的误差包括统计误差和截断误差两类. 当离散网格足够细以至于截断误差可以忽略不计的时候,可以通过裂变矩阵直接计算出中子裂变源分布的相关信息 ^[18,19]. 当离散网格足够细的时候, Monte Carlo 模拟计算得到的裂变矩阵受初始裂变中子源分布的影响也可以忽略不计,这样, 就不需要迭代到裂变源分布收敛. 在具体实现过程中仍然采用循环代的办法, Monte Carlo 模拟直接进入有效循环代,模拟若干代的中子输运过程,累计得到裂变矩阵,通过裂变矩阵计算出所需的物理量. 裂变矩阵直接计算方法另一个优势在于能够很方便地求解出系统的若干阶特征值和特征向量,这些物理量也是反应堆物理分析所需要的. 另外,裂变矩阵直接计算方法在并行计算方面具有很大优势 ^[20].

裂变矩阵的第 (*i*, *j*) 个元素代表 *j* 区域中的一个中子源引起的在区域 *i* 中的裂变中子个数. Monte Carlo 模拟得到的裂变矩阵的第 (*i*, *j*) 个元素的统计误差在很大程度上取决于在第 *j* 个区域中抽取的 中子源样本的个数. 实际计算时,由于各个区域的裂变源强不均匀,裂变矩阵中各元素的统计精度也 不均衡. 尤其是当有些区域的裂变源强很小的时候,按通常的抽样方式,这些区域对应的裂变矩阵中的元素的统计误差就会很大,裂变矩阵某些元素大的统计误差会导致计算出的物理量也有很大的统计误差. 这个问题可以通过改变源抽样方式得到缓解,即每个循环代在每个区域抽取相同个数的源中子 样本 ^[18].

M 个区域的网格划分对应 *M* 阶裂变矩阵,共有 *M*² 个元素.为了保证截断误差的影响可以忽略 不计,空间网格必须划分的足够细,这就会需要很大的存储空间.然而有两个原因保证利用裂变矩阵 直接计算的方法可以用于大型系统.第一,近些年计算机存储空间发展很迅速;第二,实际计算中,一个 中子很难到达距离出发区域很远的另一个区域,这就导致裂变矩阵中很多元素等于零或者很接近零, 由此可以通过忽略足够小的元素对裂变矩阵进行稀疏化处理并采用特殊的存储方法^[19].

Monte Carlo 模拟得到裂变矩阵的同时还可以给出裂变矩阵各元素的方差

$$\operatorname{Var}(H_{i,j}) = E(H_{i,j}^2) - E^2(H_{i,j}).$$
(30)

然而,通过裂变矩阵得到的有关物理量的不确定度并不容易计算.一个可行的办法是假定 Monte Carlo 模拟得到的裂变矩阵各元素服从正态分布.以实际模拟得到的裂变矩阵各元素的值为均值,以实际模 拟得到的方差为方差进行抽样得到若干矩阵,计算每个矩阵对应的物理量,统计得到计算结果的不确 定度^[21].

3.5 p-CMFD 方法

CMFD (coarse mesh finite difference) 方法是 Smith 于 1983 年提出的确定论方法^[22], 多年以来, 该方法已经成功地用于求解中子 Boltzmann 输运方程, 在一些确定论临界计算中取得了很好的加速效 果 ^[23,24]. CMFD 方法的一个改进方法是 p-CMFD 方法 ^[25], p-CMFD 加速用于离散纵标方法和特征 线方法中都是无条件稳定的.

为了在 Monte Carlo 临界计算中发挥 CMFD 方法的加速作用, Cho 等^[26]把 MCNP 程序和 p-CMFD 程序耦合起来进行多群模型的计算. 针对一些简化的多群反应堆模型, Lee 等^[27]把 CMFD 加速直接用于 Monte Carlo 临界计算并观察到了明显的加速效果. Yun 等^[28]在连续能量 Monte Carlo 程序中实现并考察了 p-CMFD 方法. CMFD 方法的一个改进形式叫做 GCMFD^[29] (general coarse mesh finite difference), 这种方法的效果更好, 但是目前只能用于一维模型的计算. 最近, Lee 等^[30]把 CMFD 加速用于大型反应堆的 Monte Carlo 临界计算并进行了一些改进. 值得一提的是, 和 CMFD 加速方法类似的方法还有泛函 Monte Carlo 方法^[31] ("functional Monte Carlo" method) 和 COMET 方法^[32]. 以下主要介绍一下 p-CMFD 加速方法的基本思想.

为此,重新写出中子输运本征方程

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_t(\boldsymbol{r}, E) \psi(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \int_0^\infty \int_{\mathbf{S}^2} \sigma_s(\boldsymbol{r}, E', E, \boldsymbol{\Omega}', \boldsymbol{\Omega}) \psi(\boldsymbol{r}, E', \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' dE' + \frac{1}{k} \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_0^\infty \nu(\boldsymbol{r}, E') \sigma_f(\boldsymbol{r}, E') \int_{\mathbf{S}^2} \psi(\boldsymbol{r}, E', \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' dE'.$$
(31)

传统的幂迭代方法可以用以下公式表达:

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi^{(l+1)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_t(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}) \psi^{(l+1)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{\Omega}) = \int_0^\infty \int_{\mathbf{S}^2} \sigma_s(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}', \boldsymbol{E}, \boldsymbol{\Omega}', \boldsymbol{\Omega}) \psi^{(l+1)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}', \boldsymbol{\Omega}') \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}' \mathrm{d}\boldsymbol{E}' + \frac{1}{k^{(l)}} \frac{\chi(\boldsymbol{E})}{4\pi} S^{(l)}(\boldsymbol{r}),$$
(32)

$$S^{(l)}(\boldsymbol{r}) = \int_0^\infty \nu(\boldsymbol{r}, E') \sigma_f(\boldsymbol{r}, E') \int_{\mathbf{S}^2} \psi^{(l)}(\boldsymbol{r}, E', \boldsymbol{\Omega}') \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}' \mathrm{d}E',$$
(33)

其中 l 代表第几个循环代.

p-CMFD 方法需要对系统的空间变量进行离散,使用"粗网格" (coarse mesh).同一个粗网格中不同空间位置的材料可以不同 (一个粗网格包含若干个细网格),这也是名称中"粗网格" (coarse mesh)的含义,在 p-CMFD 方法中把原中子输运本征方程叫做高阶方程,用 $\psi^{(l+1/2)}$ 表示第 l+1 个循环代中高阶方程的未知变量,在第 l+1 个循环代中先求解高阶方程

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi^{(l+1/2)}(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_t(\boldsymbol{r}, E) \psi^{(l+1/2)}(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \int_0^\infty \int_{\mathbf{S}^2} \sigma_s(\boldsymbol{r}, E', E, \boldsymbol{\Omega}', \boldsymbol{\Omega}) \psi^{(l+1/2)}(\boldsymbol{r}, E', \boldsymbol{\Omega}') \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega}' \mathrm{d}E' + \frac{1}{k^{(l)}} \frac{\chi(E)}{4\pi} S^{(l)}(\boldsymbol{r}).$$
(34)

求解出高阶方程的过程中,根据以下各式的定义统计得到用于低阶方程的 p-CMFD 参数:

$$\phi_m^{(l+1/2)} = \frac{1}{|V_m|} \int_{V_m} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int_0^\infty \mathrm{d}\boldsymbol{E} \int_{\mathbf{S}^2} \psi^{(l+1/2)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{\Omega}) \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega},\tag{35}$$

$$J_{mm'}^{+,(l+1/2)} = \frac{1}{|A_{mm'}|} \int_{A_{mm'}} d\Gamma \int_0^\infty dE \int_{\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{n} > 0} \psi^{(l+1/2)}(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) |\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{n}| d\boldsymbol{\Omega},$$
(36)

$$J_{mm'}^{-,(l+1/2)} = \frac{1}{|A_{mm'}|} \int_{A_{mm'}} d\Gamma \int_0^\infty dE \int_{\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{n} < 0} \psi^{(l+1/2)}(\boldsymbol{r}, E, \boldsymbol{\Omega}) |\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{n}| d\boldsymbol{\Omega},$$
(37)

$$\sigma_{t,m}^{(l+1/2)} = \frac{1}{\phi_m^{(l+1/2)} |V_m|} \int_{V_m} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int_0^\infty \mathrm{d}\boldsymbol{E} \int_{\mathbf{S}^2} \sigma_t(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}) \psi^{(l+1/2)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{\Omega}) \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega},\tag{38}$$

$$\nu \sigma_{f,m}^{(l+1/2)} = \frac{1}{\phi_m^{(l+1/2)} |V_m|} \int_{V_m} \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int_0^\infty \mathrm{d}\boldsymbol{E} \int_{\mathbf{S}^2} \nu(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}) \sigma_f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}) \psi^{(l+1/2)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{E}, \boldsymbol{\Omega}) \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega},\tag{39}$$

其中 m 是粗网格的编号, V_m 代表第 m 个粗网格, $|V_m|$ 是它的体积, $A_{mm'}$ 代表第 m 个粗网格和第 m' 个粗网格的共用边界, $|A_{mm'}|$ 是它的面积. 在求解 $J_{mm'}^{+,(l+1/2)}$ 和 $J_{mm'}^{-,(l+1/2)}$ 的式中, n 代表第 m 个 粗网格外法线方向, d\Gamma 代表面积分. 求得这些参数后, 利用中子通量的守恒关系, 就得到以下每个粗 网格中必须满足的低阶 p-CMFD 方程

$$\sum_{m'} |A_{mm'}| J_{mm'}^{(l+1)} + \sigma_{t,m}^{(l+1/2)} \phi_m^{(l+1)} V_m = \frac{1}{k^{(l+1)}} \nu \sigma_{f,m}^{(l+1/2)} \phi_m^{(l+1)} V_m.$$
(40)

上式中第1项表示对所有与网格 m 有共用边界的网格 m' 求和. 式中各项的含义如下:

$$J_{mm'}^{(l+1)} = J_{mm'}^{+,(l+1)} - J_{mm'}^{-,(l+1)},$$
(41)

$$J_{mm'}^{+,(l+1)} = \frac{-\tilde{D}_{mm'}^{(l+1/2)}(\phi_{m'}^{(l+1)} - \phi_m^{(l+1)}) + 2\hat{D}_{mm'}^{+,(l+1/2)}\phi_m^{(l+1)}}{2},\tag{42}$$

$$J_{mm'}^{-,(l+1)} = \frac{\tilde{D}_{mm'}^{(l+1/2)}(\phi_{m'}^{(l+1)} - \phi_m^{(l+1)}) + 2\hat{D}_{mm'}^{-,(l+1/2)}\phi_m^{(l+1)}}{2},\tag{43}$$

$$\tilde{D}_{mm'}^{(l+1/2)} = \frac{2}{3(\sigma_{t,m}^{(l+1/2)}|V_m| + \sigma_{t,m'}^{(l+1/2)}|V_{m'}|)},\tag{44}$$

$$\hat{D}_{mm'}^{+,(l+1/2)} = \frac{2J_{mm'}^{+,(l+1/2)} + \tilde{D}_{mm'}^{(l+1/2)}(\phi_{m'}^{(l+1/2)} - \phi_m^{(l+1/2)})}{2\phi_m^{(l+1/2)}},\tag{45}$$

$$\hat{D}_{mm'}^{-,(l+1/2)} = \frac{2J_{mm'}^{-,(l+1/2)} + \tilde{D}_{mm'}^{(l+1/2)}(\phi_{m'}^{(l+1/2)} - \phi_{m'}^{(l+1/2)})}{2\phi_m^{(l+1/2)}}.$$
(46)

求解出低阶方程,通过下式得到下一个循环代的裂变源分布:

$$S^{(l+1)}(\mathbf{r}) = \int_{0}^{\infty} \nu(\mathbf{r}, E') \sigma_{f}(\mathbf{r}, E') \int_{\mathbf{S}^{2}} \psi^{(l+1/2)}(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}') \mathrm{d}\mathbf{\Omega}' \mathrm{d}E'$$

$$\times \frac{\nu \sigma_{f,m}^{(l+1/2)}}{\int_{V_{m}} \mathrm{d}\mathbf{r} \int_{0}^{\infty} \nu(\mathbf{r}, E') \sigma_{f}(\mathbf{r}, E') \int_{\mathbf{S}^{2}} \psi^{(l+1/2)}(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}') \mathrm{d}\mathbf{\Omega}' \mathrm{d}E'}$$

$$= S^{(l+1/2)}(\mathbf{r}) \times \hat{a}_{m}^{(l+1)}, \qquad \forall \mathbf{r} \in V_{m}.$$

$$(47)$$

在 Monte Carlo 模拟中, 参数 (35)~(39) 通过计数得到, 式 (48) 通过对 Monte Carlo 模拟存储的 裂变源中子权重进行校正实现. $\hat{a}_m^{(l+1)}$ 就是第 *j* 个网格对应的权重校正因子. 通常把权重校正的过程称作低阶方程对高阶方程的"反馈".

低阶 p-CMFD 方程 (40) 通常采用迭代的方法求解, 给定初始值 $\phi_{m,0}^{(l+1)}$, 利用以下公式迭代求解:

$$\sum_{m'} |A_{mm'}| J_{mm'}^{(l+1)} + \sigma_{t,m}^{(l+1/2)} \phi_{m,i}^{(l+1)} V_m = \frac{1}{k_i^{(l+1)}} \nu \sigma_{f,m}^{(l+1/2)} \phi_{m,i-1}^{(l+1)} V_m.$$
(48)

在每个迭代步,由于右端是已知的,上式就是一个普通的线性代数方程组,从而容易求解出 $\phi_{m,i}^{(l+1)}$, *i* 足够大时, $\phi_{m,i}^{(l+1)}$ 就收敛到 $\phi_m^{(l+1)}$.

对一些多群截面参数模型和均匀化模型, CMFD 和 p-CMFD 加速方法往往具有很好的效果. 对 于裂变源分布随空间变化比较大的连续截面模型, 这类加速方法计算出的结果也可能出现大的振荡, 这时候也可以利用与裂变矩阵加速方法中类似的内迭代限制技巧. 另外, 尽管还没有严格的理论分析, 通常认为由于低阶 CMFD 方程中所需的参数对角通量 ϕ 的依赖性较弱, Monte Carlo 模拟得到的这些 参数的统计误差比 Monte Carlo 模拟得到的通量 ϕ 的统计误差要小 ^[31]. 因此, 在一些问题中, CMFD 方法可以用于有效循环代中用来减小有效增值因子和裂变源分布计算结果的统计误差 ^[28]. 尤其是在 一些单能截面参数模型中, CMFD 方法用于有效循环代中具有明显的降方差效果. 但在很多实际情况 下 CMFD 方程的解可能比传统 Monte Carlo 幂迭代计算结果涨落更大. CMFD 方法的降方差功能有 待进一步考察.

3.6 其他加速方法

Monte Carlo 临界计算方面还有其他一些加速方法,如分层抽样^[33] (stratified source sampling)、 "锚"方法^[34] ("anchoring" method) 和 "三明治"方法^[35] (sandwich method) 等. 另外,有些情况下, 使用确定论计算结果作为初始裂变源分布再进行 Monte Carlo 幂迭代计算也能达到好的效果^[36].

4 Monte Carlo 临界计算的降方差技巧

除了收敛速度慢以外, Monte Carlo 方法另一个困难来源于其统计误差. 对一些复杂问题来说, 为 了达到所需的精度, 每一迭代步都需要模拟大量的样本粒子, 迭代的步数和每步模拟的样本数的大小 共同决定了计算费用. MC 模拟在屏蔽计算等方面有大量的降方差技巧, 能够有效降低 Monte Carlo 模拟的统计误差, 提高计算精度. 但是很多降方差技巧都难以应用到临界计算. 近些年发展的一种确 定论和 Monte Carlo 耦合计算的方法利用确定论方法求解中子输运方程或者中子输运伴随方程, 指导 Monte Carlo 模拟中的重要性抽样, 在屏蔽问题和全局降方差等方面取得了很好的效果. 这种方法也被 推广到临界计算, 用来提高有效增殖因子的计算精度. 提高有效增殖因子的计算精度的另一种有效方 法是变分降方差技巧, 这种技巧也属于确定论和 Monte Carlo 耦合计算方法. 在裂变源分布方面, 把 CMFD 的反馈用于有效循环代中可以起到一定的作用 ^[28]. 除此之外, 泛函展开计数能够提高分布量 的计算精度.

4.1 Monte Carlo 模拟中的降方差技巧

对于光学厚度不大的模型, Monte Carlo 直接模拟能够达到理想的效果, 但是对于实际应用中常常 遇到的大型系统, 必须使用降方差技巧. Monte Carlo 模拟中最重要的降方差技巧有隐俘获、权窗和期 望估计等^[37~40].

隐俘获是最简单和常用的降方差技巧之一. 当粒子发生碰撞时,不再根据吸收截面占总截面的大 小按一定的概率结束粒子的历史,而是把粒子的权重降低一定的比例. 也就是说,当权重为 w 的粒子 在 (x, Ω, E) 发生碰撞时,把粒子的权重改变为

$$w \leftarrow \frac{\sigma_s(\boldsymbol{x}, E)}{\sigma_t(\boldsymbol{x}, E)} w. \tag{49}$$

隐俘获技巧通常使得粒子能够飞行更长的距离,从而使得每个计数量获得的信息更多.然而,隐 俘获可能会导致系统中粒子的权重波动太大.这时,方差主要由那些权重较大的粒子决定,系统中大 量权重很小的粒子却需要花费很长的计算时间.为了克服这一困难,隐俘获技巧通常要和另一降方差 技巧 —— 加权窗技巧结合起来使用.

加权窗技巧的基本思想是把 Monte Carlo 模拟的粒子的权重限制在一个固定的区间 (如 $[w_l, w_u]$) 内.为了给出权窗的上下限,通常指定一个中间值 w_c 作为参考,以 τw_c 作为上限,以 w_c/τ 作为下限. τ 一般不超过 4. 中间值 w_c 可以是一个依赖于空间、时间、能量和方向的函数. 实际应用中使用最多 的是 w_c 只依赖于空间的情况.

由于加权窗技巧对粒子的权重进行了限制,该技巧可以和隐俘获技巧结合起来使用,以克服隐俘获导致的权重涨落过大的困难.当粒子权重过大时,把该粒子分裂成几个权重较小的粒子,当粒子权 重过小时,对粒子进行轮盘赌.

4.2 利用确定论方法计算结果自动降方差

由于确定论方法与 Monte Carlo 方法的基本思想完全不同, 长期以来, 两种方法独立发展着. 但 从 20 世纪 90 年代以来, 一些学者渐渐认识到可以利用确定论方法求解伴随方程, 为 Monte Carlo 模 拟提供重要性函数, 指导 Monte Carlo 模拟的权窗设置, 从而把两种方法耦合起来, 得到更好的计算 效率^[41].

Monte Carlo 计算的许多问题可以归结为计算某些位置的响应量,等价于计算以下积分:

$$R = \int_{P} \psi(P)\sigma_d(P) \mathrm{d}P,\tag{50}$$

其中 *P* 代表相空间中的点 (x, Ω, E), $\psi(P)$ 是粒子通量, σ_d 是给定的响应函数. 可以推出, 当问题的 边界条件为真空边界条件时, *R* 也可以通过下式给出:

$$R = \int_{P} \psi^*(P)q(P)\mathrm{d}P,\tag{51}$$

其中 q 为源分布密度, $\psi^*(P)$ 为伴随通量, 其物理意义为相空间中位于 P 点的粒子对响应量的预期贡献, 也就是相空间中位于 P 点的粒子的重要性.

在 Monte Carlo 模拟中,首先要根据源分布密度函数 q 进行源抽样. 直接抽样时,抽出的粒子权 重为 1. 为了降低方差,往往采用偏倚抽样. 在积分中引入新的分布密度函数 $\hat{q}(P)$:

$$R = \int_{P} \left[\frac{\psi^*(P)q(P)}{\hat{q}(P)} \right] \hat{q}(P) \mathrm{d}P.$$
(52)

为了保证无偏,使用新的分布密度函数抽样以后,抽出的粒子的权重为

$$w(P) = \frac{q(P)}{\hat{q}(P)}.$$
(53)

如果伴随通量已知, 当 $\hat{q}(P)$ 取为

$$\hat{q}(P) = \frac{\psi^*(P)q(P)}{\int_P \psi^*(P)q(P)\mathrm{d}P},\tag{54}$$

可得到方差为零的 R. 当然, 在实际问题中, 精确的伴随通量是不知道的. R 不能直接通过积分求出.

利用确定论方法计算结果自动降方差的基本思想就是先由计算速度快的确定论方法 (如离散纵标 方法或扩散近似方法) 求解伴随方程 (伴随方程为伴随通量应当满足的方程,有关伴随方程的详细介 绍和推导,参考文献 [41]),得到不太精确的伴随通量,利用计算结果根据以上推导得到 Monte Carlo 模 拟所需的偏倚参数 *q̂*(*P*),指导 Monte Carlo 模拟,提高 Monte Carlo 模拟的计算效率.不精确的伴通量 只会影响 Monte Carlo 模拟的计算效率,不会导致计算结果的偏差.

利用确定论计算指导 Monte Carlo 模拟自动降方差的方法也可以用于全局降方差^[42,43]. 达到全局降方差的途径之一是 FW-CADIS 方法^[44], 该方法的核心是寻找重要函数指导 Monte Carlo 模拟中的偏倚抽样, 使得 Monte Carlo 模拟粒子的数目在整个系统或者某个区域内达到大致均匀的分布. 具体方法如下:第1步,确定论方法进行正向计算(求解中子输运方程),得到系统中近似的通量分布;第2步,建立伴随方程的源项,使得其在整个系统中分布并且与第一步求得的通量分布成反比;第3步,确定论方法求解伴随方程,以其求得的近似伴随通量指导 Monte Carlo 偏倚抽样.

4.3 临界计算中的零方差技巧

屏蔽问题计算中所用的零方差格式可以推广到 MC 临界计算, 用来降低有效增殖因子 k_{eff} 的方 差^[45]. 在屏蔽问题中往往要计算探测器的响应量:

$$R = \int_{P} \psi(P) \eta_{\psi}(P) \mathrm{d}P, \tag{55}$$

其中 η_ψ(*P*) 为响应函数, ψ(*P*) 为中子碰撞密度. 零方差技巧把响应函数作为伴随问题的源项, 用较低的代价 (通常使用确定论算法) 求得伴随方程的近似解 (不要求高的精度), 由此知道 Monte Carlo 方法重要性抽样, 达到降低方差的目的. 临界计算的幂迭代方法中有效增殖因子可以通过以下公式计算:

$$k_{\rm eff} = \frac{\int Q^{(n+1)}(P) dP}{\int Q^{(n)}(P) dP}.$$
(56)

在当前迭代步,上式分母部分是已知的,分子部分可表示成与式 (55) 类似的形式,

$$R = \int Q^{(n+1)}(P) dP = \int \frac{1}{4\pi} \chi_f(E) \int \int \frac{\nu \sigma_f}{\sigma_t} \psi_n(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) d\boldsymbol{\Omega} dE dV = \int \frac{\nu \sigma_f}{\sigma_t} \psi(P) dP,$$
(57)

然后就可以使用零方差技巧计算有效增殖因子.

4.4 临界计算中的变分降方差方法

提高有效增殖因子 k_{eff} 计算精度的另一种方法是变分降方差 (variational variance reduction) 方法 ^[46,47] (VVR 方法),下面介绍 VVR 方法的基本思想.

重新写出特征值问题,

$$\mathcal{L}\psi = \frac{1}{k}\mathcal{F}\psi.$$
(58)

定义两函数的内积为

$$\langle \psi^*, \psi \rangle = \int_0^\infty \int_{\mathbf{S}^+} \int_V \psi^*(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\Omega}, E) \psi(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\Omega}, E) \mathrm{d}V \mathrm{d}\boldsymbol{\Omega} \mathrm{d}E,$$
(59)

 \mathcal{L} 和 \mathcal{F} 的伴随算子 \mathcal{L}^* , \mathcal{F}^* 分别定义为 $\langle \psi^*, \mathcal{L}\psi' \rangle = \langle \mathcal{L}^*\psi^*, \psi' \rangle$ 和 $\langle \psi^*, \mathcal{F}\psi' \rangle = \langle \mathcal{F}^*\psi^*, \psi' \rangle$,问题 (58) 的伴随问题为

$$\mathcal{L}^*\psi^* = \frac{1}{k}\mathcal{F}^*\psi^*.$$
(60)

式 (58) 两边乘以任意 (非零非负) 函数 g(r), 全空间, 能量, 方向积分得到

$$\frac{1}{k} = \frac{\langle g, \mathcal{L}\psi \rangle}{\langle g, \mathcal{F}\psi \rangle}.$$
(61)

式 (61) 中函数 g 取为常数 1, 就是传统 Monte Carlo 方法求解 k 的公式. 当式 (61) 中 ψ 的误差是 $O(\varepsilon)$ 时, 1/k 的误差也是 $O(\varepsilon)$, 即

$$\frac{\langle 1, \mathcal{L}\psi \rangle}{\langle 1, \mathcal{F}\psi \rangle} = \frac{1}{k} + O(\varepsilon).$$
(62)

变分降方差方法取不同的函数 g. 假设 Ψ 为 ψ 的估计, 具有误差 $O(\varepsilon)$, Ψ^* 为 ψ^* 的估计, 具有误 $\hat{E} O(\varepsilon')$, 可以证明

$$\frac{\langle \Psi^*, \mathcal{L}\Psi \rangle}{\langle \Psi^*, \mathcal{F}\Psi \rangle} = \frac{1}{k} + O(\varepsilon) + O(\varepsilon').$$
(63)

于是,使用具有"一阶精度"的正向特征函数和伴随特征函数的估计,通过上式就得到的具有"二阶精度"的估计.如果用计算费用较低的确定论方法计算伴随特征函数,用 Monte Carlo 方法计算正向特征函数,就是一种耦合方法.由于需要求解伴随特征函数和内积,变分降方差方法计算比传统方法复杂.但是这种方法能够用较少的样本数更精确地求得有效增殖因子 *k*eff.

4.5 泛函展开计数和核密度估计

在临界计算中使用零方差技巧和变分降方差方法的主要作用是提高有效增殖因子的计算精度.临 界计算的另一个重要任务是要计算出裂变源分布,从而得出功率分布等其他物理量. 传统的 Monte Carlo 模拟方法在计算分布量方面具有一定的困难,近年来发展了提高分布量计算精度的新的计数方 法,具有代表性的有泛函展开计数 (fnctional expansion tally) 方法 ^[48] 和核密度估计 (kernel density estimation) 计数方法 ^[49],除了提高分布量计算精度,这两种方法用于 Monte Carlo 幂迭代计算时还能 够有效减少不同循环代的裂变源分布之间的相关性 ^[50].

泛函展开计数方法的基本思想是把未知的计数量用一组正交函数基展开,通过 Monte Carlo 模拟 估计相应的展开系数. 以一维问题计算 (-1,1) 区间的标通量的分布 φ(x) 作为例子. 选取一组定义在 区间上的完备正交基函数

$$\phi_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$
 (64)

由于中子标通量分布通常是比较光滑的,可以把 (-1,1) 区间上的标通量 φ(x) 按给定的正交基展开成 以下计数形式 (实际计算时根据所需精度对该式进行截断):

$$\phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{a}_n k_n \phi_n(x), \tag{65}$$

其中 kn 为第 n 阶基的归一化系数

$$k_n = \frac{1}{\left\|\phi_n\right\|^2},\tag{66}$$

 \bar{a}_n 为第 n 阶展开系数, 定义为

$$\bar{a}_n = \int_{-1}^1 \phi(x)\phi_n(x)\mathrm{d}x.$$
(67)

为了利用基函数展开 (65) 近似计算 (-1,1) 区间上的标通量 $\phi(x)$,只需要计算各阶展开系数,也就是积分式 (67). Monte Carlo 模拟中能够方便地计算出这些积分. 传统的 Monte Carlo 计数方法把 (-1,1) 区间分为若干个计数箱,直接统计穿过各个计数箱的径迹长度,显然,只有当中子通过某个计数箱时才会对该计数箱的计数有贡献,当计数箱的尺寸相对于系统的尺寸很小时,计数效率很低,需要模拟大量的中子才能达到所需的精度. 而采用泛函展开计数时模拟的每个中子对需要统计计算的展开系数都有贡献,所以泛函展开计数能够提高计数效率. 除了采用正交基函数展开,对二维或三维问题,也可以采用有限元多项式展开 [⁵¹].

核密度估计是统计学中的一种非参数估计方法. 这种方法通常先定义一个一维的核密度函数 k(x) (满足若干条件, 例如, 零阶矩为 1, 一阶矩为零, 二阶矩非零等的光滑函数). 已有一个 d 维的, 概率密度函数未知随机变量的若干样本, 通过下式来估计该概率密度函数

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} N \prod_{l=1}^{N} d \frac{1}{h_l} k \left(\frac{x_l - X_{l,i}}{h_l} \right),$$
(68)

其中 N 是样本总数, $x_l - X_{l,i}$ 是 x 的第 l 个坐标和第 i 个样本的位置的第 l 个坐标的差, h_1, \ldots, h_d 是给定的各个维度带宽.

核密度估计用于 MC 临界计算中能够给出裂变源分布的一个光滑的估计.

5 收敛性诊断

在确定论方法中,判断裂变源或中子通量收敛具有比较简单的准则:相邻两个迭代步计算结果的 相对偏差是否小于某个给定值(比如 10⁻⁴).由于计算结果存在统计涨落,上述收敛性判据通常不能用 于 MC 计算中.目前,在 MC 的临界计算中,通常根据经验预先设定非有效循环代的次数,当达到该次 数后,直接结束非有效循环代,而进入有效循环代,该过程中并未判断源分布是否收敛.由此可能导致 如下不良后果:如果非有效循环代次数少于裂变源分布达到收敛所需次数会导致计算结果不正确(有 偏),反之,过多的非有效循环代则会直接影响计算效率.

信息论采样诊断方法 [52] 利用后验熵的概念进行检验, 例如, 相对熵的定义为

$$D(S_n^B|T^B) = -\sum_{i=1}^B S_n^B(i) \log_2\left(\frac{S_n^B(i)}{T^B(i)}\right),$$
(69)

其中 B 是空间划分的区域数目, S_n^B 是第 n 代的归一化的裂变源分布, T^B 是参考分布. 具体的检验方法如下:

(1) 计算后一半有效循环 (代) 平均的源分布作为参考分布 T^B;

(2) 计算每一代的 $D(S_n^B|T^B)$, 相对于代数画图;

(3) 检查 $D(S_n^B|T^B)$ 是否在有效循环前越过 $D(S_n^B|T^B)$ 在后一半有效循环的平均值.

信息论采样诊断方法能够在计算完成后有效检验出裂变源分布是否在有效循环代开始之前就已 经达到收敛,就有较强的实用性.但是该方法不能用于迭代过程中作为非有效循环代结束的判据.

在 MC 临界计算中,目前还缺乏能够在迭代过程中自动判断裂变源分布收敛的有效办法. Kitada 等在研究裂变矩阵加速时建议利用裂变矩阵来自动判断裂变源分布是否达到收敛^[15].当连续两代模 拟得到的代裂变矩阵的主特征向量的相对差小于某个值时,就认为裂变源分布已经收敛,也就是下式 作为收敛性判据 (式中所用符号的意义和裂变矩阵加速小节中的符号相同):

$$\frac{(S_{\rm fm}^{(n)})_j - (S_{\rm fm}^{(n-1)})_j}{(S_{\rm fm}^{(n-1)})_j} \bigg| < \varepsilon, \quad \forall j.$$
(70)

由于存在统计误差,这种判据通常不能保证裂变源分布达到收敛.

杨锦安和 Naito 建议使用"三明治"方法来确定有效增殖因子是否达到收敛^[53].该方法选取两个 分别能够使得单步计算出的增殖因子接近最大和最小的两个初始裂变源分布,然后分别进行计算.当 分别计算出的增殖因子接近到一定的程度时,就认为有效增殖因子已经收敛.这个方法能够有效判断 有效增殖因子是否收敛.而实际问题中,尤其是对大型松散耦合系统来说,裂变源分布的收敛速度往 往远慢于有效增殖因子,"三明治"方法在诊断裂变源分布收敛方面存在局限性.

Shim 和 Kim 提出了一种利用不同循环代得到的裂变源分布之间的相关矩阵在计算过程中判断 裂变源分布是否收敛的办法^[54],这种方法比较复杂,而且其效率受网格划分影响较大.此外, Shim 和 Kim 还提出了一种与 Shannon 熵方法不同的后验诊断方法^[55].

总体来说,关于裂变源收敛的判据是目前 MC 方法研究的热点,还未有成熟且有效的结果,有待进一步的研究.

6 计算结果方差无偏估计

MC临界计算的结果是通过持续模拟若干有效循环代,然后对每代给出的统计值进行平均而得到的.为了表征统计涨落引起的计算结果不确定性,还需要给出计算结果的方差.MC方法对计算结果 方差的估计是以中心极限定理为基础的,该定理要求各样本之间相互独立.然而,MC临界计算中每 个循环代都需要上一循环代提供裂变源分布,必将导致各循环代计算结果间的相关性.因此,传统的 方差估计办法将导致裂变源分布等物理量的不确定度被严重低估.

Mervin 等通过对基准模型的模拟详细分析了各循环代之间的相关性,明确了这种相关性导致计算结果不确定度被低估的问题^[56].

Gelbard 和 Prael 把有效循环代分成互不重叠的若干组 (batch), 利用各组物理量的平均值来估计 方差 ^[57].由于各组平均物理量之间的相关性比各代物理量之间的相关性要小, 这种方法容易实现而 且取得了一定的效果, 但是各组物理量的平均值之间仍然具有一定的相关性, 而且很难确定如何分组 能够达到好的效果.

Shim 等把模拟的样本分为若干组,每组样本独立地进行 MC 幂迭代计算,把各组得到的物理量 的均值作为最终结果,并用各组得到的物理量来估计真实方差^[58].由于各组之间是独立的,当样本数 足够大时,这种方法能得到较好的结果.但是由于要分足够多的组,如果样本数不是很大,每组分到的 样本不足就会带来问题. Ueki 等提出了一种度量各代得到的的相关性的方法,并由此估计了传统方法得到的方差与真实 方差间的偏离程度^[59].

Shim 和 Kim 进一步提出了一种计算不同循环代得到的裂变源分布之间的相关性的方法^[60], 和 前面提到的他们提出的收敛性判据类似, 该方法比较复杂, 而且其效率受网格划分影响较大.

关于计算结果方差的真实估计是 MC 临界计算中一个长期未解决的问题, 仍需进一步发展有效 且易于实现的方差估计方案.

7 并行计算

高昂的计算费用一直是阻碍 Monte Carlo 方法在实际问题中大量应用的主要因素之一. 近些年计算机速度的迅速提高和大规模并行技术的不断发展使得 Monte Carlo 方法得到越来越多的关注. 可以说,临界计算的任何加速技巧对 Monte Carlo 方法的实用性的提高都比不上计算机技术和并行计算的发展. 有效的并行计算方法在 Monte Carlo 临界计算中具有重要的意义. 传统 Monte Carlo 程序所采用的并行方式主要是把模拟的样本分配给不同的处理器,也就是粒子并行^[61]. 近些年,区域分解并行得到迅速的发展^[62,63].

8 结束语

与其他方法相比, Monte Carlo 方法在几何和截面参数等建模方面具有很大的优势, 其在反应堆临 界计算求解系统中子增值因子和裂变源分布方面有着广泛的应用. 传统的 Monte Carlo 临界计算采用 幂迭代方法, 其主要挑战之一是收敛速度慢. 同时, Monte Carlo 模拟存在统计误差, 为了保证一定的 精度, 每个循环代必须跟踪足够的样本, 这两方面合起来带来的计算费用常常难以接受. 发展裂变源收 敛加速方法和降方差技巧具有很重要的意义. 目前已经发展了不少加速技巧, 其中裂变矩阵加速方法 和 CMFD 加速方法在很多模型的计算中都展示出了很明显的加速效果, 但是这两种方法在稳定性等 方面都存在一定的问题, 还需要进一步考察和发展.

传统的降方差技巧在临界计算中并不好用. 变分降方差方法和零方差技巧能够有效降低有效增殖 因子的方差. 在裂变源分布的统计涨落方面, 目前已有泛函展开计数、核密度估计和把 CMFD 方法用 于有效循环代等几种方法, 但这些方法都还不成熟.

裂变源分布的收敛性判据和计算结果的真实方差估计是 Monte Carlo 临界计算长期面临的另外 两个挑战性问题,目前还没有很有效的办法.

参考文献 --

 X-5 Monte Carlo Team. MCNP—a General N-Particle Transport Code, Version 5–Volume 1: Overview and Theory. LA-UR-03-1987, Los Alamos National Laboratory, 2003

² Griesheimer D P, Gill D F, Nease B R, et al. MC21 V.6.0 — a continuous-energy Monte Carlo particle transport code with integrated reactor feedback capabilities. Ann Nucl Energy, 2015, 82: 29–40

³ Romano P K, Horelik N E, Herman B R, et al. OpenMC: a state-of-the-art Monte Carlo code for research and development. Ann Nucl Energy, 2015, 82: 90–97

⁴ Leppanen J, Pusa M, Viitanen T, et al. The serpent Monte Carlo code: status, developments. Ann Nucl Energy, 2015, 82: 142–145

- 5 Wang K, Li Z, She D, et al. RMC a Monte Carlo code for reactor core analysis. Ann Nucl Energy, 2015, 82: 121–129
- 6 Deng L, Li G, Zhang B Y, et al. Simulation of full-core pin-by-pin model by JMCT Monte Carlo neutron-photon transport code. Atom Energy Sci Tech, 2014, 6: 1061–1066 [邓力, 李刚, 张宝印, 等. JMCT 蒙特卡罗中子 – 光子输 运全堆芯 Pin-by-Pin 模型的模拟. 原子能科学技术, 2014, 6: 1061–1066]
- 7 Wu Y, Song J, Zheng H, et al. CAD-based Monte Carlo program for integrated simulation of nuclear system superMC. Ann Nucl Energy, 2015, 82: 161–168
- 8 Brown F B. Recent advances and future prospects for Monte Carlo. In: Proceedings of Supercomputing in nuclear applications & Monte Carlo, Tokyo, 2010. 17–21
- 9 Martin W R. Challenges and prospects for whole-core Monte Carlo analysis. Nucl Eng Tech, 2012, 44: 151–160
- 10 Yamamoto T, Miyoshi Y. Reliable method for fission source convergence of Monte Carlo criticality calculation with Wielandt's method. J Nucl Sci Tech, 2004, 41: 99–107
- 11 Kiedrowski B C, Brown F. Using Wielandt's method to estimate confidence interval under prediction bias in MCNP5 criticality calculations. Trans Am Nucl Soc, 2008, 99: 338–340
- 12 She D, Wang K, Yu G. Asymptotic Wielandt method and superhistory method for convergence in Monte Carlo criticality calculation. Nucl Sci Eng, 2012, 172: 127–137
- 13 Carter L L, McCormick N J. Source convergence in Monte Carlo calculations. Nucl Sci Eng, 1969, 36: 438-441
- 14 Kadotani H, Hariyama Y, Shiota M, et al. Acceleration of fission distribution convergence using eigenvectors from matrix K calculations in the KENO code. In: Proceedings of International Conference on Nuclear Criticality Safety, Oxford, 1991
- 15 Kitada T, Takeda T. Effective convergence of fission source distribution in Monte Carlo simulation. J Nucl Sci Tech, 2001, 38: 324–329
- 16 Urbatsch T J. Iterative acceleration methods for Monte Carlo and deterministic criticality calculations. Dissertation for Ph.D. Degree. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 1995
- 17 Pan L, Wang R, Jiang S. Monte Carlo Fission matrix acceleration method with limited inner iteration. Nucl Sci Eng, 2015, 180: 199–208
- 18 Dufek J, Gudowski W. Fission matrix based Monte Carlo criticality calculations. Ann Nucl Energy, 2009, 36: 1270– 1275
- 19 Carney S E, Brown F B, Kiedrowski B C, et al. Fission Matrix Capability for MCNP Monte Carlo. LA-UR-12-24533, Los Alamos National Laboratory, 2012
- 20 Dufek J, Gudowski W. An efficient parallel computing scheme for Monte Carlo criticality calculations. Ann Nucl Energy, 2009, 36: 1276–1279
- 21 Wenner M, Haghighat A. A fission matrix based methodology for achieving an unbiased solution for eigenvalue Monte Carlo simulations. Prog Nucl Sci Tech, 2011, 2: 886–892
- 22 Smith K S. Nodal method storage reduction by nonlinear iteration. Trans Am Nucl Soc, 1983, 44: 265–266
- 23 Cho Y J, Joo H G, Lee C C, et al. Cell based CMFD formulation for acceleration of whole-core method of characteristics calculation. J Korean Nucl Soc, 2002, 34: 250–258
- 24 Zhong Z P, Downar T J, Xu Y L, et al. Implementation of two-level coarse-mesh finite difference acceleration in an arbitrary geometry, two-dimensional discrete ordinates transport method. Nucl Sci Eng, 2008, 158: 289–301
- 25 Cho N Z, Lee G S, Park C J. Partial Current-based CMFD acceleration of the 2D/1D fusion method for 3D whole-core transport calculations. Tran Am Nucl Soc, 2003, 594: 88–89
- 26 Cho N Z, Yun S, Lee K T, et al. Speedup of Monte Carlo k-eigenvalue calculations via p-CMFD rebalance. Trans Am Nucl Soc, 2004, 90: 550
- 27 Lee M J, Joo H G, Lee D, et al. Investigation of CMFD acceleration Monte Carlo eigenvalue calculation with simplified low dimensional multigroup formulation. In: Proceedings of the International Conference on the Physics of Reactors, Pittsburgh, 2010. 9–14
- 28 Yun S, Cho N Z. Acceleration of source convergence in Monte Carlo k-eigenvalue problem via anchoring with a p-CMFD deterministic method. Ann Nucl Energy, 2010, 37: 1649–1658
- 29 Wolters E R, Larsen E W, Martin W R. Hybrid Monte Carlo-CMFD methods for accelerating fission source convergence. Nucl Sci Eng, 2013, 174: 286–299

- 30 Lee M J, Joo H G, Lee D, et al. Coarse mesh finite difference formulation for accelerated Monte Carlo eigenvalue calculation. Ann Nucl Energy, 2014, 65: 101–113
- 31 Larsen E W, Yang J. A functional Monte Carlo methods for k-eigenvalue problems. Nucl Sci Eng, 2008, 159: 107–126
- 32 Zhang D, Rahnema F. An efficient hybrid stochastic/deterministic coarse mesh neutron transport method. Ann Nucl Energy, 2012, 41: 1–11
- 33 Gelbard E M, Roussel B. Proposed solution to the "keff of the world" problem. Trans Amer Nucl Soc, 1995, 73: 201
- 34 Yun S, Cho N Z. Monte Carlo anchoring method for loosely-coupled k-eigenvalue problems. In: Proceedings of International Conference on Advances in Mathematics, Computational Methods, and Reactor Physics. New York: Springs, 2009. 3–7
- 35 Yang J, Natio Y. The sandwich method for detering source convergence in Monte Carlo calculation. In: Proceeding of the 7th International Conference on Nuclear Criticality Safety, Ibaraki, 2003. 19
- 36 Ibrahim A M, Peplow D E, Wagner J C, et al. Acceration of Monte Carlo criticality calculations using deterministicbased starting sources. In: Proceedings of the International Conference on the Physics of Reactors, Knoxville, 2012
- 37 Booth T E. A weight window/importance generator for Monte Carlo streaming problems. In: Proceedings of the 6th International Conference on Radiation Shielding, Tokyo, 1983
- 38 Lewis E E, Miller W F. Computational Methods of Neutron Transport. New York: John Wiley & Sons, 1984
- 39 Kong R, Spanier J. Geometric convergence of adaptive Monte Carlo algorithms for radiative transport problems based on importance sampling methods. Nucl Sci Eng, 2011, 168: 197–225
- 40 Vanwijk A J, Vandeneynde G, Hoogenboom J E. An easy to implement global variance reduction procedure for MCNP. Ann Nucl Energy, 2011, 38: 2496–2503
- 41 Wagner J C, Peplow D E, Mosher S W, et al. Review of hybrid (determinitistic/Monte Carlo) rdiation transport methods, codes, and applications at Oak Ridge National Laboratory. In: Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2010 (SNA + MC2010), Tokyo, 2010
- 42 Cooper M A. Automated weight windows for global Monte Carlo particle transport calculations. Nucl Sci Eng, 2001, 137, 1–13
- 43 Becker T L, Wollaber A B, Larsen E W. A hybrid Monte Carlo-deterministic method for global particle transport calculations. Nucl Sci Eng, 2007, 155: 155–167
- 44 Wagner J C, Blakeman E D, Peplow D E. Forward-weighted CADIS method for global variance reduction. Trans Amer Nucl Soc, 2007, 97: 630–633
- 45 Christoforou S, Hoogenboom J E. A zero-variance-based scheme for Monte Carlo criticality calculations. Nucl Sci Eng, 2011, 167: 91–104
- 46 Densmore J D, Larsen E W. Variational variance reduction for Monte Carlo eigenvalue and eigenfunction problems. Nucl Sci Eng, 2004, 146: 121–140
- 47 Densmore J D, Larsen E W. Variational variance reduction for particle transport eigenvalue calculations using Monte Carlo adjoint simulation. J Comput Phys, 2003, 192: 387–405
- 48 Griesheimer D P, Martin W R, Holloway J P. Convergence properties of Monte Carlo functional expansion tallies. J Comput Phys, 2006, 211: 129–153
- 49 Kaushik B, Martin W R. Kernel density estimation method for Monte Carlo global flux tallies. Nucl Sci Eng, 2012, 170: 234–250
- 50 Griesheimer D P, Martin W R, Holloway J P. A functional expansion method for Monte Carlo eigenvalue calculations. In: Proceeding of American Nuclear Society Conference, Chattanooga, 2005
- 51 Martin W R, Holloway J P, Banerjee K, et al. Global Monte Carlo Simulation with Higher Order Polynomial Expansions. DE-FG07-04ID14607, University of Michigan, 2007
- 52 Ueki T, Brown F B. Stationarity modeling and informatics-based diagnostics in Monte Carlo criticality calculations. Nucl Sci Eng, 2005, 149: 38–50
- 53 Naito Y, Yang J A. The sandwich method for determing source convergence in Monte Carlo calculation. J Nucl Sci Tech, 2004, 41: 559–568
- 54 Shim H J, Kim C H. Stopping criteria of inactive cycle Monte Carlo calculations. Nucl Sci Eng, 2007, 157: 132–141
- 55 Shim H J, Kim C H. A new approach to check and diagnose the fission source convergence in Monte Carlo criticality calculations. Nucl Sci Eng, 2014, 178: 28–41

- 56 Mervin B T, Mosher S W, Wagner J C, et al. Uncertainty underprediction in Monte Carlo eigenvalue calculations. Nucl Sci Eng, 2013, 173: 276–292
- 57 Gelbard E M, Prael R E. Computation of standard deviations in eigenvalue calculations. Prog Nucl Energy, 1990, 24: 237–241
- 58 Shim H J, Choi S H, Kim C H. Real variance estimation by grouping histories in Monte Carlo eigenvalue calculations. Nucl Sci Eng, 2014, 176: 58–68
- 59 Ueki T, Mori T, Nakagawa M. Error estimations and their biases in Monte Carlo eigenvalue calculations. Nucl Sci Eng, 1997, 125: 1–11
- 60 Shim H J, Kim C H. Real variance estimation using an intercycle fission source correlation for Monte Carlo eigenvalue calculations. Nucl Sci Eng, 2009, 162: 98–108
- 61 Romano P K, Forget B. Parallel fission bank algorithms in Monte Carlo criticality calculations. Nucl Sci Eng, 2012, 170: 125–135
- 62 Brunner T A, Urbatsch T J, Evans T M, et al. Comparison of Four Parallel Algorithms for Domain Decomposed Implicit Monte Carlo. UCRL-JRNL-208745, LawRence Livermore National Laboratory, 2004
- 63 Siegel A. Analysis of communication costs for domian decomposed Monte Carlo methods in nuclear reactor analysis. J Comput Phys, 2012, 231: 3119–3125

Review of convergence acceleration methods in Monte Carlo criticality calculations for reactor analysis

Liujun PAN, Ruihong WANG*, Song JIANG, Haiyan XU, Danhua SHANGGUAN & Zhicheng JI

Beijing Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China *E-mail: wang_ruihong@iapcm.ac.cn

Abstract The core problem of criticality calculations in nuclear analysis is to calculate the fission source distributions of systems. As the computing performance of hardware and software has advanced, Monte Carlo methods have been applied to the nuclear analysis of whole core problems, because the accuracy of the Monte Carlo calculations has been enhanced by its ability to use continuous energy nuclear data and to handle complex geometry information. When approaching whole core analyses, the Monte Carlo criticality calculations must handle some challenging problems, such as slow convergence, the stopping criteria of source convergence, and real variance estimations. Here, the theory and challenges of Monte Carlo criticality are introduced, and progress in convergence acceleration methods and variance reduction techniques is reviewed.

Keywords reactor analysis, criticality calculation, fission source distribution, Monte Carlo, neutron transport equation



Liujun PAN was born in 1979. He received the Ph.D. degree in science from the Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing, in 2015. Currently, he is an associate researcher at the Institute of Applied Physics and Computational Mathematics. His research interests include computation mathematics and Monte Carlo methods in particle transportation.



since 1997.

Ruihong WANG was born in 1967. He graduated from the Department of Mathematics Jilin University, Changchun, in 1989. Currently, he is a professor at the Institute of Applied Physics and Computational His research interests Mathematics. include Monte Carlo methods and their applications in particle transportation. He has been a member of the Monte Carlo Specialization Committee China