

并行蒙特卡罗方法及其在核工程中应用

刘擎宇 (核工业二院) 魏公毅 (中科院计算中心)

摘要:本文讨论并行蒙特卡罗方法及其在核工程中的应用。在江南II型和Transputer并行机上基于并行随机数实现并行模拟核工程上广泛应用的质点随机游动,其结果是满意的。同时给出两机器实际统计模拟试验的例子,不同算法,不同模拟量的加速比。对小模拟量,算法I效果不明显,算法II不论模拟量大小效果明显,对两个处理器的加速比接近2。

1.引言

近十几年来,计算机的发展趋向微型、巨型、网络化、多媒体、智能化,而并行化则是共同的要求,并行机的速度、容量大、高精度、输入输出吞吐量大等特点,已在各个应用领域显示其巨大潜力。

古典 Monte Carlo 方法本身有很强的并行性,尤其在核工程上广泛应用的质点随机游动的统计模拟方法,每个质点的游动过程均为独立的随机过程,同时核工程上的临界,棒效率等统计模拟方法模拟数量大,精度要求高,常常耗费大量机时,若把大量的模拟均分给各处理机,然后再综合处理,效果一定很好。

2.并行随机数产生

在计算机上,人们比较普遍重视产生伪随机数的数学方法为乘同余法,其递推公式为:

$$\begin{aligned} x_{i+1} &\equiv \lambda x_i \pmod{M} \\ i &= 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (1)$$

其中 λ 为乘子, X 为初值, M 为模。注意,实际使用 $(0,1)$ 区间上的随机数序列应为 $\{r_i = x_i / M\}$,下面遇到的类似情况,不再重复说明。

在向量计算机上,可以构造维数 p 的乘同余向量递推公式

$$\begin{aligned} X_{i+1} &\equiv A X_i \pmod{M} \\ i &= 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (2)$$

其中乘子 $A \equiv \lambda^p \pmod{M}$

初值 $X_0 = (x_1, x_2, \dots, x_p)^T$

而 x_1, x_2, \dots, x_p 是由(1)产生的前 p 个随机数。

按递推公式(2),可以产生如下随机数向量:

$$X_1 = (x_{p+1}, x_{p+2}, \dots, x_{2p})^T$$

;

乘子 A 按下式计算:

$$A \equiv \lambda^p \pmod{M}$$

$$\equiv (\dots \cdot ((\lambda * \lambda) \pmod{M} * \lambda) \pmod{M} \dots * \lambda) \pmod{M}$$

对于多处理机情况,假设 p 表示处理机的个数,这时,上述的随机数向量 X_i 的 p 个分量,按顺序分别与 p 台处理机的随机数序列相对应。实际上,每个处理机都使用同样的乘同余法随机数发生器,差别就在于初值不一样。若把式(2)按分量改写,则第 j ($j = 1, 2, \dots, p$) 个处理机的乘同余法递推公式为:

$$\begin{aligned} y_{i+1}^j &\equiv A y_i^j \pmod{M} \\ i &= 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (3)$$

式中 $y_0^j = x_j$ 表示第 j 个处理机随机数序列初值。这样就形成了 p 个并行随机数子序列。

3.并行随机数检验

在串行机上使用随机数序列之前,一般都要先经过各种统计检验才能知道随机数发生器的好坏。我们希望使用独立性、均匀性都满足要求的随机数发生器。统计软件包 SASD 提供了一个随机数检验程序系统 SUTEST,它包括 12 类,27 种不同的统计检验方法,共有 61 个统计量。它从均匀性、随机性、独立性和统计模拟计算等许多不同的方面,为随机数检验提供了完整、配套的统计检验方法和有效可行的算法。这个程序系统使用灵活、方便,是对随机数进行统计检验的有力工具。

对于并行随机数序列的基本要求,应当与串行随机数序列一样。首先,在每个处理机上都要产生满足要求

的随机数序列,为此在每个处理机上都要使用系统 SUTEST 进行检验。其次,还要作到各处理机随机数序列相关不显著,这就需要进行相关系数的显著性检验。

对于 $p=2,4,6,8,10$ 的并行随机数序列,已用随机数检验程序系统 SUTEST 详细地进行独立性、均匀性、相关不显著检验。各项指标都很好,详细情况见〔1〕。

4. 并行蒙特卡罗方法在棒栅效率计算中的应用

核反应堆工程设计中堆芯栅元中棒的吸收率和热利用率计算,以二维平面几何的物理模型为例(已在实际工程设计中用过),如图 1 所示。由于栅元横断面(X, Y)中各种棒的布置对称,只需计算中子在下三角几何区中的随机游动:

设中子以 $P_s = \sum_s / \sum_t$ 概率散射,以 $P_a = \sum_a / \sum_t$ 概率被吸收,中子源据各几何区的物质成份确定起始权重,然后抽样其自由程 l 及方向余弦(u, v),以确定中子游动的新位置座标:

$$X \equiv X_0 + l * u$$

$$Y \equiv Y_0 + l * v$$

每经散射或吸收中子权重数受损失,按俄罗斯轮盘赌法则计算并判定中子是否死亡或继续随机游动,一旦中子游动到几何边界或反射或逃脱。一个中子随机游动生命到中子死亡或逃脱为结束,完成一次统计模拟试验,经过大量的模拟试验,根据统计学原理,评价其结果和精度。

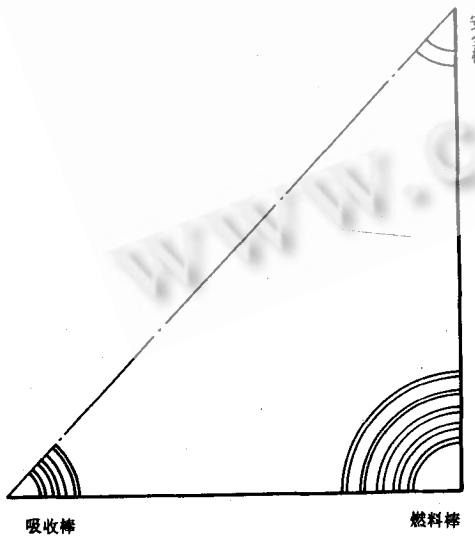


图 1 堆芯棒栅元布置结构

(1) 栅元中棒效率计算的串行算法

堆芯栅元中棒的吸收率和热利用率计算串行算法模块结构如图 2 所示。

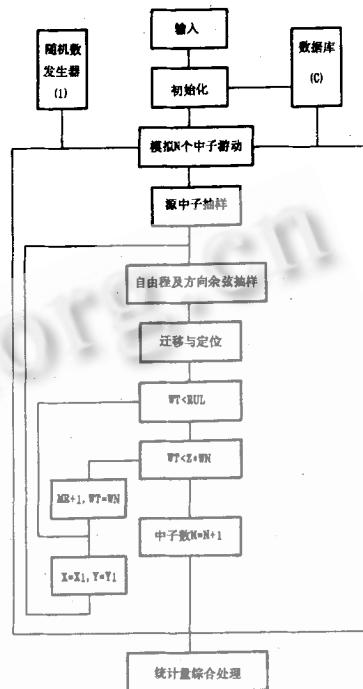


图 2 栅元中棒效率计算串行算法模块结构

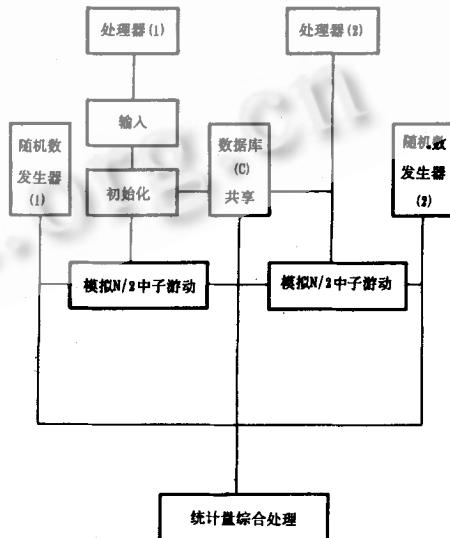


图 3 栅元中棒效率计算并行算法 I 模块结构

(2) 栅元中棒效率计算并行算法 I

以二个处理器为例,各处理器共享同一个数据库(I),每个处理器各有自己的随机数发生器,遇到几个处理器同时使用某变量时,可根据变量性质予以“上锁”(只许一个处理器使用,其它处于等待中),“开锁”。

在统计量综合处理前加“栅”,以便等各处理器都完成后处理器进行统计量综合处理,其算法模块结构如图3所示。

(3) 棚元中棒效率计算并行算法 II

以二个处理器为例,各处理器完全独立地中子随机游动,同时有各自的随机数发生器,数据库,只是数据初值由主处理器(1)传送到其它处理器(2),和结果由其它处理器传回主处理器。算法模块结构如图4所示。

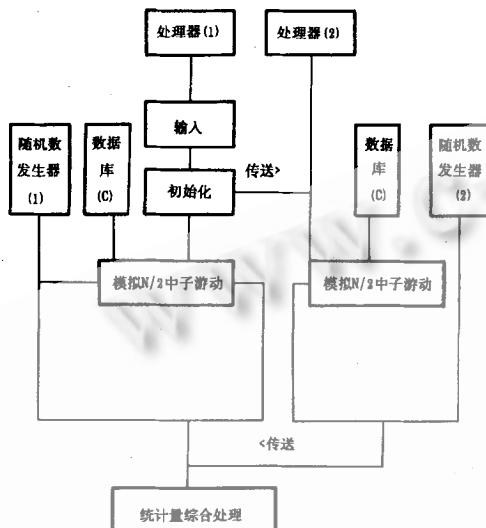


图4 棚元中棒效率计算并行算法II模块结构

(4) 数值结果

棚元中棒效率计算串行算法精确(十万中子数)数值结果:

热利用率为 0.622

棒吸收率为 0.579

并行机江南 II 上模拟实现。结果见表 1。

表1. 棚元中棒效率计算并行算法 I(并行机江南 II 上)模拟结果

处理器数	中子数	热利用率	棒吸收率	时间(秒)	加速比
1	1000	0.605	0.568	132	
2	1000	0.606	0.569	104	1.27

在 Transputer 上使用 1,2,4 个处理器产生并行随机数,并应用棚元中棒效率计算并行算法 II。计算结果如下:

表2. 棚元中棒效率计算并行算法 II

(并行机 Transputer 上)模拟结果

处理器数	中子数	热利用率	棒吸收率	时间(秒)	加速比
1	1000	0.638	0.594	257	
2	1000	0.619	0.582	130	1.98
2	20000	0.623	0.582	1280.47	
4	20000	0.618	0.580	650.25	1.97

以上并行算法 II 例子,当中子数为 1000 时,使用二个处理器,其加速比接近于 2。如果使用更多个处理器将会有更高的加速比。

最后指出,并行算法 I 由于模拟量较少,因算法本身缘故,当前处理器上锁时其它处理器要等待其开锁,同时系统消耗相对较大其效率更低;但随模拟量的增大,其效率可望提高。

参考文献:

[1] 魏公毅、刘擎宇,并行机上的伪随机数发生器,《计算机系统应用》1994.10

[2] 裴鹿成、张孝译著,蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用,科学出版社,1980。

[3] V.C.Bhavsar,Parallel algorithms for Monte Carlo Solutions of some linear Operator problems, Dept. of Electrical Engg., Indian Institute of Technology, Bombay,ph.D.Thesis(Nov.1981),236pp.

[4] V.C.Bhavsar,etc.,Monte Carlo neutron transport on the Alliant FX / 8,Proc.1987 Int. Conf. Par. Proc., pp. 421-423.

[5] 王嘉漢、沈毅,并行计算方法(下册),国防工业出版社,1992。

国家级重点新产品

金刚防霉磁盘(DAM)

新产品试销期一律七折优惠
DAM 1.2M 价格 5.60 元

地址:广州市新港西路大江冲 25 号广州南方软件有限公司
联系人:王凌 电话:(020) 4433508, 4451349
邮编: 510262