



Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Nukleáris Technika Intézet

GPU-alapú, időfüggő Monte Carlo módszer reaktordinamikai
szimulációkhoz

Ph.D. téziszfüzet

Molnár Balázs

Témavezető: Dr. Légrády Dávid

Budapest

2020

1 Bevezetés

Multiplikatív közegekben lejátszódó, időfüggő neutrontranszport jelenségekkel foglalkozunk. A neutronteret az időfüggő Boltzmann-egyenletek írják le:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)}{\partial t} = -\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) - \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) + \sum_{i=1}^I \chi_i(E) \lambda_i C_i(\vec{r}, t) \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\lambda_i C(\vec{r}, t) + Q_i(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \quad \text{for } i = 1, 2, \dots, I \quad (1.2)$$

ahol Q és Q_i rendre a neutron- és későneutron-forrás:

$$Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, E' \rightarrow E, t) \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) + \chi_p(\vec{r}, E, t) (1 - \beta(\vec{r}, E', t)) \nu(\vec{r}, E', t) \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) dE' d\vec{\Omega}' + S(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \quad (1.3)$$

$$Q_i(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = \int_{4\pi} \int_0^\infty \beta_i(\vec{r}, E', t) \nu(\vec{r}, E', t) \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) dE' d\vec{\Omega}' \quad (1.4)$$

használva a Table 1 táblázat jelöléseit. Az egyenletekhez tartozó kezdőfeltételek pedig adottak $\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, 0) = \Phi_0(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ és $C_i(\vec{r}, 0) = C_{i,0}(\vec{r})$ alakban minden $i = 1, 2, \dots, I$ -re.

Atomreaktorok dinamikus viselkedésének leírásához az egyenleteket visszacsatolások jelenlétében kell megoldanunk. Néhány másodperces időtartamú reaktortranziensek esetén a neutronfűtés miatt fellépő termikus visszacsatolásokat kell figyelembe vennünk. A teljes matematikai leírást így kiegészítik még a termo-hidraulikai és termo-mechanikai jelenségek modelljei. Ilyen számítások elvégzésére léteznek módszerek, ez nem alkotja az értekezés témáját. Modern, dinamikus számítások elvégzésére alkalmazott módszerek különböző, független kódok összecsatolására támaszkodnak. Ebben a tekintetben például az értekezés témáját adó dinamikus MC módszer egy olyan neutronikai MC modellre utal, ami képes megoldani az Eq. 1.1 és Eq. 1.2 egyenleteket, miközben megengedi a termikus visszacsatolások miatt fellépő hatáskeresztmetszet változásokat is. Mivel egy ilyen számítás rendkívül nagy gépi kapacitást igényel, emiatt kifejlesztettünk egy dinamikus MC módszert, ami Grafikus Feldolgozó Egységeket (GPU-kat) használ a számítás gyorsítására. Ez az értekezés a GUARDYAN (GpU Assisted Reactor DYnamic ANalysis) 3D, folytonos energiájú, direkt időfüggésű MC kóddal kapcsolatos fejlesztések bemutatására is szolgál.

v	- neutron sebesség
\vec{r}	- térbeli pozíció
$\vec{\Omega}$	- repülési irány
E	- energia
t	- idő
Φ	- neutron fluxus
Σ_t	- teljes makroszkópikus hatáskeresztmetszet
Σ_s	- szórási hatáskeresztmetszet
Σ_f	- hasadási hatáskeresztmetszet
β	- későneutron hányad
β_i	- i. későneutron-anyamag család részhányada
ν	- hasadási neutronok száma
χ_p	- prompt hasadási spektrum
χ_i	- i. későneutron család hasadási spektruma
λ_i	- i. későneutron-anyamag család bomlási állandója
C_i	- i. későneutron-anyamag család koncentrációja
I	- későneutron-anyamag családok száma
S	- külső forrás

Table 1: Az értekezésben használt jelölések

2 Módszerek

A GUARDYAN számos egyedülálló számítástechnikai megoldással rendelkezik, amelyekre két okból volt szükség: ezek a GPU hardver és az időfüggés. Az előbbi például megkívánja, hogy a MC fejlesztőknél már rutinszerűen alkalmazott splitting/Russian roulette, vagyis a trajektória felhasítás és orosz rulett, technikákat elvessük, és más algoritmusok után nézzünk. A GUARDYAN-ben fésülést [12] és kényszerített hasadást [13] alkalmazunk a statisztikus szórás csökkentésére, illetve a kritikustól távol eső rendszereknél tipikusan felmerülő populáció-kontroll problémákra. Az explicit időfüggés a hatáskeresztmetszetek megváltozását okozó geometriai változások (rúdmozgások) és a termo-hidraulikai visszacsatolások figyelembevételét követeli meg. A GUARDYAN ezért az MCNP kódokban is alkalmazott generációról-generációra követés helyett időlépéseket használ.

A prompt neutronok és a későneutronok élettartama közötti különbség akár több nagyságrend is lehet, mivel a prompt élettartam termikus rendszerekben tipikusan néhányszor $10 \mu s$, míg a későneutronok várható

élettartama 0,1 s és 100 s közé esik. Emiatt a későneutronok analóg MC szimulációja nem jöhet számításba, a gyakorlatban kétféle probléma jelentkezik: a prompt neutron hasadási láncok eltűnnek a szimulációból a későneutronok alulmintavételezése miatt; maguk a későneutronok a keletkezésüket kiváltó hasadási eseménytől számítva csak sok-sok prompt generáció után lépnek kölcsönhatásba az anyaggal, egészen addig feleslegesen tárolnánk. A szakirodalom erre a problémára a prekursorok mintavételezését ajánlja. Nem triviális kérdés, hogy hogyan osszuk fel a MC mintákat prekursorok és neutronok között. Az analóg mintavételezés azt diktálná, hogy az egy neutronra jutó prekursor minták száma 1000-10000 kell, hogy legyen. Nyilvánvalóan a reaktor teljesítményének becslése szempontjából a prekursorok fontossága el lenne így túlozva, így a GUARDYAN-ben nem analóg módon kezeljük a prekursorok mintavételezését. Egy prekursor minta a szimulációban valójában prekursor atomok egy populációját képviseli a prekursor statisztikus súlyon keresztül. Az optimális minta-elosztás prekursorok és neutronok között változik az időben, ahogy a rendszer sincs egyensúlyban. Szubkritikus rendszerekben például a korábban létrehozott prekursorok fontosabb szerepet játszanak, hiszen ha a prekursorokat alulmintavételeznénk, a prompt neutron minták hamar eltűnnek a rendszerből. Szuperkritikus esetben ez nem okozna komoly gondot, ekkor a prompt neutron láncok is stabil teljesítménymentet produkálnak. Ez a gondolatmenet arra mutat rá, hogy a minták optimális felosztásához a kódoknak előre kellene tudnia a tranziens menetét, időfüggő adjungált függvényre lenne szükség. Ennek kiküszöbölésére GUARDYAN-ben egy robusztus későneutron kezelő modult alkalmazunk, ami nem-analóg technikákkal mintavételezi a későneutronokat anélkül, hogy időfüggő adjungáltra lenne szüksége. GUARDYAN a neutronokat és prekursorokat a GPU globális memóriájában tárolja, ez alkotja a részecsketömböt. A tömb méretének megváltoztatása nem megengedett, mivel a GPU rögzített hosszú adatfolyamokon a leghatékonyabb. Hogy mégis megengedjünk dinamikus változásokat, a tömb egy része kezdetben üres, ami egyfajta pufferként funkcionál. A prekursorokból mintavételezett későneutronok először erre az üres helyre kerülnek, majd összefésüljük őket a prompt neutronok súlyának átlagára. Emiatt a szubkritikus esetben, miközben a promptok súlya csökken, a későneutron mintákból egyre több lesz, megátolva a populáció kihalását. Szuperkritikus állapotban a prompt neutronok átlagsúlya növekszik, így a későneutronok egyre kevésbé lesznek reprezentálva, de ez nem okoz gondot a teljesítménybecslés szempontjából, hiszen ekkor a prompt láncok fenntartják a stabilitást. A prekuzorminták eközben végig pontosan ugyanannyian maradnak a kényszerített bomlás technikának köszönhetően. A könnyebb megértés érdekében tekintsük az 1 ábrát. A szimuláció kezdődhet azzal, hogy a felhasználó megadja a részecskék kezdeti eloszlását, vagy kritikus állapothoz tartozó kezdőfeltételt is generálhatunk. A GPU részecsketömböt két egyforma részre osztjuk, az első felében a prompt neutronokat tároljuk, míg a második fele további két egyenlő részre van bontva, amiben a prekursorok és a belőlük mintavételezett későneutronok foglalnak helyet, ez utóbbi kezdetben üres. Ez a kiindulópont látható az 1 ábra első oszlopaként. Minden időlépés azzal fejeződik be, hogy a tömböt

erre a struktúrára rendezzük vissza. Az ábrán megkülönböztetjük az éppen következő időlépésben reakcióba lépő neutronokat (n) azoktól, amelyek kölcsönhatás nélkül átrepülnek a szakaszt (n'). Ez még a szabadúthossz sorsolásánál eldől. A prekursorokat C -vel jelöljük.

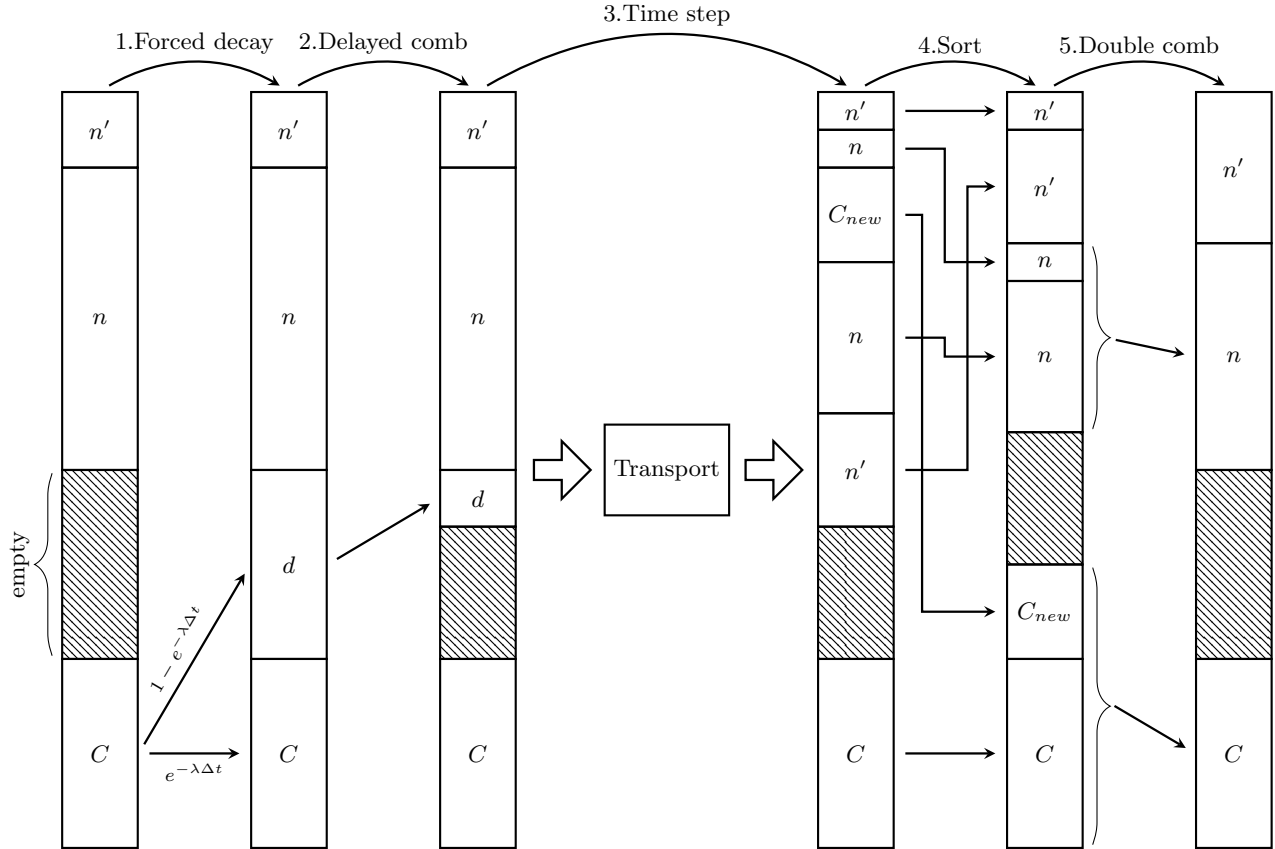


Figure 1: A részecskemintákon egy időlépésben végrehajtott műveletek összefoglalása

A részecsketömbben egy időlépésben a következő műveleteket hajtjuk végre:

- Minden prekursor minta kényszerített bomlásokon [1] megy keresztül, a későneutronok feltöltik az üres helyet $1 - e^{-\lambda\Delta t}$ súllyal, a prekursor minták pedig megmaradnak, de csak $e^{-\lambda\Delta t}$ súllyal. A kényszerített bomlás mindig elegendő mennyiségű neutron mintát szolgáltat a következő időlépésre, tapasztalatok szerint ennek alkalmazása elengedhetetlen.
- A későneutronokat a promptok súlyának átlagára fésüljük a [2]-ben bemutatott egyszerű fésüléssel.
- Az n -nel és d -vel jelölt neutronokon végrehajtuk egy időlépés lejátszását. Az időlépés után megváltozik a vesszőtlen és vesszővel jelölt populációk definíciója, ugyanis más neutronok fognak részt venni a következő időlépésben, mint eddig, az ábrán is ezt követhetjük. Egy időlépés alatt lejátszódó hasadási

események termelhetnek prekursorokat is, ezt egy külön reakcióként vesszük figyelembe: egy neutron β valószínűséggel prekursor mintává válhat minden hasadáskor. Ha a mintavételezett bomlási ideje kívül esik az aktuális időszakon, akkor az időlépés elején még neutronként jegyzett mintát a szakasz végére prekursor mintaként könyveljük. Így mind az n mind a d populációból kerülhet ki a szakasz végén prekursor minta, ezeket jelöljük C_{new} -val.

- A következő lépésben sorbarendezzük a mintákat úgy, hogy először a neutronok, utána üres hely, majd a prekursorok legyenek feljegyezve.
- Utolsó lépésben külön fésüljük a következő időlépésben résztvevő neutronokat és a prekursorokat is, ezáltal a kiinduló helyzettel analóg struktúrát kapunk.

3 Tézispontok

1. Kimutattam, hogy grafikus kártyák segítségével a prompt neutronláncok időfejlődése belátható időn belül szimulálható Monte Carlo módszerekkel. Kidolgoztam egy olyan módszertant, ami képes a populáció-kontroll probléma megoldására az elágazásmentes neutrontörténet és populáció fésülés módszereivel [P1] [P2] [P3] [P4].
2. A későneutron anyagok nem-analóg mintavételezése révén sikeresen kezeltem a prompt- és későneutronok időskálájának eltérését. Kifejlesztettem egy robusztus algoritmust ami automatikusan a prompt neutron mintákhoz hozzáadja a későneutron minta-populációt úgy, hogy a mintavétel követi a rendszer időfejlődését. Bemutattam, hogy az algoritmus stabil, még erős transziensek esetén is [P1] [P3].
3. Kidolgoztam a Torzított Woodcock (Biased Woodcock) virtuális ütközéseken alapuló keretrendszert, ami lehetőséget ad hatékony szabadúthossz mintavételre inhomogén közegekben. Összefoglaltam az eredeti Woodcock módszeren alapuló algoritmusokat és kimutattam, hogy mindegyik értelmezhető a Torzított Woodcock keretrendszer határeseteként, valamint, ebből kifolyólag, egyik sem optimális általánosan sem a statisztikus szórásra sem a hatékonyságra nézve. Optimális stratégiákat kerestem a keretrendszeren belül, ebben a tekintetben egy hasznos tulajdonságot, az exponenciális transzformációval való kapcsolatot fedeztem fel [P5] [P6] [P7] [P8].
4. A neutrontörténetek feldolgozásának átrendezése révén összehasonlítást végeztem a a GPU-kon népszerű esemény-alapú és a hagyományos történet-alapú stratégiák között. Kimutattam, hogy bonyolult geometriák esetén az esemény-alapú módszer nem teljesít jobban, valamint, hogy ennek oka a szabadúthossz sorsolásban keresendő [P4].

5. Elsőként kíséreltem meg teljes zónás számításokat időfüggő Monte Carlo kóddal végrehajtani, valamint a szimulációt időfüggő mérési adatokkal összehasonlítani. A BME Oktatóreaktorában egy tranziens kísérletet terveztem és megmutattam, hogy a Monte Carlo szimuláció képes a kísérleti adatok reprodukciójára a benchmark modell közelítésein belül. Kimutattam, hogy a futásidő túlszárnyalja a létező referenciákét. [P3] [P1].

Publikációs lista

- [P1] Balazs Molnar, Gabor Tolnai, and David Legrady. A GPU-based direct Monte Carlo simulation of time dependence in nuclear reactors. *Annals of Nuclear Energy*, 132:46 – 63, 2019.
- [P2] D. Legrady, A. Claret, B. Molnar, and G. Tolnai. Validation of the interaction physics of GUARDYAN a novel GPU-based Monte Carlo code for short time scale reactor transients. In *PHYSOR 2018: Reactor Physics paving the way towards more efficient systems*, 2018.
- [P3] B. Molnar, G. Tolnai, B. Toth, and D. Legrady. Guardyan – a novel GPU-based Monte Carlo code for simulating reactor transients (in Hungarian). *Nukleon*, 2019.
- [P4] B. Molnar, G. Tolnai, D. Legrady, and M. Szieberth. Vectorized Monte Carlo for GUARDYAN – a GPU accelerated reactor dynamics code. In *PHYSOR 2018: Reactor Physics paving the way towards more efficient systems*, 2018.
- [P5] B. Molnar, G. Tolnai, and D. Legrady. Variance reduction and optimization strategies in a biased Woodcock particle tracking framework. *Nuclear Science and Engineering*, 190(1):56–72, 2018.
- [P6] B. Molnar and D. Legrady. Variance analysis of Woodcock type tracking. In *M&C 2017 - International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering*, 2017.
- [P7] D. Legrady, B. Molnar, M. Klausz, and T. Major. Woodcock tracking with arbitrary sampling cross section using negative weights. *Annals of Nuclear Energy*, 102:116–123, 2017.
- [P8] László Szirmay-Kalos, Iliyan Georgiev, Milán Magdics, Balázs Molnár, and Dávid Légrády. Unbiased light transport estimators for inhomogeneous participating media. In *Computer Graphics Forum*, volume 36, pages 9–19. Wiley Online Library, 2017.

References

- [1] David Legrady and J Eduard Hoogenboom. Scouting the feasibility of Monte Carlo reactor dynamics simulations. In *Proceedings of the International Conference on the Physics of Reactors 2008 (PHYSOR08)*, Interlaken, Switzerland, 2008. Paul Scherrer Institut.
- [2] TE Booth. A weight (charge) conserving importance-weighted comb for Monte Carlo. Technical report, Los Alamos National Lab., NM (United States), 1996.