

基于 OpenMC 执行码的编译检测及临界基准验证

苏 适 谢 芹 陈珍平 谢金森 曾文杰 刘紫静 赵鹏程 何丽华 于 涛

(南华大学 核科学与技术学院 衡阳 421001)

摘要 开源蒙特卡罗程序 OpenMC (Open Monte Carlo code)只提供源代码而没有执行码,在编译 OpenMC 的过程中发现不同版本的辅助程序与之存在兼容性问题。本文通过分析 OpenMPI、Mpich 及 HDF5 各版本辅助程序,对 0.6.2 版本 OpenMC 源代码的支持情况进行研究,为正确编译 OpenMC 执行码给出了直接参考。为进一步验证 OpenMC 执行码计算临界问题的正确性,选择国际临界安全基准评价实验手册(The International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project, ICSBEP)中的 96 道代表性例题进行基准校验,与通用蒙特卡罗程序的计算结果进行对比并以实验值作为参考。结果表明,OpenMC 计算值与实验值及其他程序计算值吻合较好,验证了 OpenMC 临界计算的可行性和正确性,上述结论将为程序以后的实际应用及完善奠定基础。

关键词 OpenMC, OpenMPI, Mpich, HDF5, 国际临界安全基准评价实验手册

中图分类号 TL32

DOI: 10.11889/j.0253-3219.2017.hjs.40.100501

Compiling validity and critical benchmark verification based on OpenMC execution code

SU Shi XIE Qin CHEN Zhenping XIE Jinsen ZENG Wenjie LIU Zijing

ZHAO Pengcheng HE Lihua YU Tao

(School of Nuclear Science and Technology, University of South China, Hengyang 421001, China)

Abstract Background: The open source Monte Carlo code (OpenMC) released by Massachusetts Institute of Technology (MIT) only provides source code rather than executable code. **Purpose:** This study aims at the compatibility issues for different versions of the auxiliary programs in the compilation of OpenMC. **Methods:** The various versions of OpenMPI, Mpich and HDF5 programs that support OpenMC were compiled and checked, and the complied OpenMC was validated using 96 representative routines recommended in the international criticality safety benchmark evaluation project (ICSBEP). The calculation results were compared with those of the ICSBEP experiments using general MC code. **Results:** The calculated values by complied OpenMC are in line with the experimental values of the ICSBEP benchmarks, as well as calculations by other programs. **Conclusion:** This study provides a reference for the correct compilation of the OpenMC with feasibility. It is useful in future applications and improvements of these programs.

Key words OpenMC, OpenMPI, Mpich, HDF5, ICSBEP

蒙特卡罗方法具有方法简单直观、受几何条件限制小、收敛速度与维度无关等优点,所以很早就被用于中子输运、反应堆数值计算等方面。几十年

来,随着计算机性能的不断提高,其在反应堆数值模拟方面的应用也越来越广泛^[1]。大规模全堆计算是新一代蒙特卡罗程序的目标,在临界计算问题中,

国家自然科学基金(No.11575079、No.11605085)资助

第一作者: 苏适, 男, 1991 年出生, 2014 年毕业于南华大学, 现为硕士研究生, 从事蒙特卡罗粒子输运程序方法及应用研究

通信作者: 于涛, E-mail: yutao29@sina.com

收稿日期: 2017-05-18, 修回日期: 2017-07-08

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.11575079, No.11605085)

First author: SU Shi, male, born in 1991, graduated from University of South China in 2014, master student, focusing on Monte Carlo particle transport procedures, methods and applications

Corresponding author: YU Tao, E-mail: yutao29@sina.com

Received date: 2017-05-18, accepted date: 2017-07-08

首要问题是巨额的内存占用, 其次是大量的时间消耗, 而并行计算技术是解决蒙特卡罗的内存占用和计算时间消耗重要手段^[2]。传统蒙特卡罗程序计算大规模全堆模型效率低, 而新型蒙特卡罗程序 MC21^[3]、OpenMC^[4]和 RMC (Reactor Monte Carlo code)^[5]等在超过一千核的计算平台上计算效率不会降低^[6], 具有极大并行可扩展性, 使蒙特卡罗程序可以充分利用大规模并行计算资源, 大大缩短计算时间。

OpenMC 程序是新型开源、针对大规模并行运算的蒙特卡罗中子输运模拟软件, 由麻省理工学院的反应堆物理计算小组自 2011 年开始研发^[7]。OpenMC 程序的使用需要多种辅助程序的支持, 如使用 MPI (Message Passing Interface) 进程并行运算、使用 HDF5 (Hierarchical Data Format-5) 输出并行化数据格式文件和使用 PETSc (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation) 来支持 CMFD (Coarse Mesh Finite Difference) 计算程序, OpenMC 需要的辅助程序见图 1。由于 OpenMC 在网上只有源代码而没有执行码, 而编译 OpenMC 的过程中需要一些辅助程序进行支持, 但各支持程序的版本与 OpenMC 之间存在支持性问题, 对于不同版本辅助程序与蒙特卡罗程序存在的支持性问题, 国内尚无对此的文献发表, 所以对此进行研究对蒙特卡罗程序的正确编译具有启发意义, 并对其他蒙特卡罗程序与不同版本辅助程序的兼容性提供了思考。

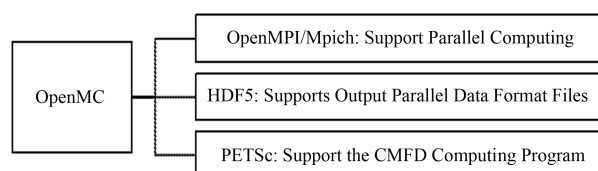


图 1 OpenMC 的相关辅助程序
Fig.1 OpenMC related auxiliary program.

为了能够编译正常使用的 OpenMC, 需要将 OpenMPI、Mpich、HDF5 对 OpenMC 的支持性进行研究, 对这些程序在虚拟机 Linux (Ubuntu-15.04) 系统下进行编译, 并在 OpenMC-0.6.2 下自检, 得出了能否成功编译与自检通过的结果, 找出了自检错误项并对自检错误值和正确值进行了对比, 结果对编译能自检通过的 OpenMC 运行环境提供了直接参考。并选择国际临界安全基准评价实验手册(The International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project, ICSBEP)中的 96 道代表性例题对 OpenMC 进行基准校验, 使用的核数据库为 ENDF/B-VII.0 库, 将 OpenMC 的计算结果与 SuperMC (Super Monte Carlo Simulation Program for Nuclear and

Radiation Process)和 MCNP (Monte Carlo Neutron Particle transport code)的结果以及实验结果进行了对比验证。

1 OpenMC 与辅助程序介绍

目前, 最新版本 OpenMC 可应用于固定源与 k_{eff} 问题的计算; 可以描述一阶、二阶曲面构成的几何体, 可以描述重复栅格并可以对栅元进行旋转和移动, 使输入卡的书写更为简便。

使用 XML 输入文件格式^[8], 包括几何卡(geometry.xml)、材料卡(materials.xml)、粒子数卡(settings.xml)、计数卡(tallies.xml)和制图卡(plots.xml)等。其中 OpenMC 使用碰撞估计与径迹长度估计两种计数方式, 可以根据计数卡对面和体积进行网格计数; 同时, OpenMC 具备二维与三维的标准图片输出模块, 可以根据制图卡做出体素图。OpenMC 使用的截面格式为通用的 ACE (A Compact ENDF) 格式, 可以使用 MCNP 或 Serpent^[9]中提供的截面数据库。OpenMC 自带了 Python 脚本^[10]用于提取输出文件中的有效数据并进行运用, 如 statepoint_3d.py、voxel.py 等, 其输出的 Statepoint 文件、Voxel 文件等经过 Python 脚本数据提出后可进一步使用 VisIt 和 ParaView 软件进行数据可视化处理。作为一款开源、开发中的程序, OpenMC 通过 GitHub 的代码托管并跟踪 bug, 有利于其他使用者进行接口的编写与扩展开发。

OpenMC 主要针对大规模计算机应用而开发, 使用约 40 000 行的 Fortran 2008 代码编写, 基于蒙特卡罗方法本身的优点, OpenMC 能有效地还原真实的物理过程; 基于其开发目的, 能适应于并行框架与数据结构, 可以使用 OpenMPI/Mpich 用于支持 MPI 并行计算, 其中 MPI 是信息传递应用程序接口^[11], 采用基于信息传递的并行编程技术, 可以将一个大型任务分解成多个进程, 再把这些进程分配给多个节点进行并行处理, 通过计算结果的综合得到最终结果, OpenMPI 和 Mpich 是 MPI 的应用实现。同时, OpenMC 可以使用 HDF5 分层数据格式输出, HDF5 是 HDF 系列的最新版本, 由美国国家超级计算机中心进行开发, 一般用来储存不同类型的图形与数据信息, 用于满足各个领域需求的高效存储与科学数据的分发^[12]。

2 OpenMC 在 Linux 下的计算模块检测

OpenMC 可以在 Linux、Mac OS X 或 Windows 操作系统下编译和运行, 但纵观全世界的大规模计

算平台，大多使用 Linux 系统，因此在 Linux 下编译 OpenMC，并分析辅助程序对 OpenMC 的支持性显得十分有意义，选择 Linux 系统对 OpenMC 进行计算模块检测。使用的系统为虚拟机下的 Linux 系统(Ubuntu-15.04)，OpenMC 版本为 0.6.2。

对 OpenMPI/Mpich 的自检包括 6 种自检类型：mpi-normal、mpi-debug、mpi-optimize、mpi-omp-normal、mpi-omp-debug、mpi-omp-optimize。每种自检类型均要自检 OpenMC 自带的 85 道例题，每道例题均包括 geometry.xml、materials.xml、settings.xml 基本计算模块，这三种基本模块缺一不可。有的例题还包括 tallies.xml（计数模块）、cmfd.xml（粗网格有限差分法模块）等。其中 normal、debug、optimize 为 OpenMC 的三种编译方式，normal 为未优化的编译方式，debug 为在编译时进行调试的编译方式，optimize 为在编译时能高度优化的编译方式，对 gfortran 和 Intel Fortran 编译器使用 -O3 优化方式。对 HDF5 的自检使用全环境检测，包括 33 种自检类型：basic-normal、basic-debug、basic-optimize、omp-normal、omp-debug、omp-optimize、HDF5-normal、HDF5-debug、HDF5-optimize、omp-HDF5-normal、omp-HDF5-debug、omp-HDF5-optimize、mpi-normal、mpi-debug、mpi-optimize、mpi-omp-normal、mpi-omp-debug、mpi-omp-optimize、pHDF5-normal、pHDF5-debug、pHDF5-optimize、pHDF5-omp-normal、pHDF5-omp-debug、pHDF5-omp-optimize、petsc-normal、petsc-debug、petsc-optimize、pHDF5-petsc-normal、pHDF5-petsc-debug、pHDF5-petsc-optimize、omp-pHDF5-petsc-

normal、omp-pHDF5-petsc-debug、omp-pHDF5-petsc-optimize，每种自检类型也均要自检 OpenMC 自带的 85 道例题。在以下的自检中针对 85 道例题及上述各种自检类型都进行了编译自检。

OpenMPI、Mpich、HDF5 开发的版本很多，在本研究中，针对每个程序的代码均下载了超过 20 个版本进行检测，但对于早期的版本未对其进行测试，因考虑其在对现有软件的适用性上可能存在差异，所以对其不进行更多的测试，具体测试的程序版本见下文。

测试的是其官网上能下载到的最新 20 个版本，由于早期的版本不太适用于后期开发的软件，所以对早前的版本不进行测试。

2.1 基于 OpenMPI 的 OpenMC 计算模块检测

对不同版本的 OpenMPI 进行编译，并在 OpenMC 下自检，结果见表 1。从表 1 结果可看出，自检通过的版本为：1.8.4、1.8.3、1.8.2、1.8.1、1.8.0、1.7.5、1.7.4。发生自检错误的例题及结果见表 2，其中，自检为 Fail 的不同版本发生自检错误的自检例题均相同，同时不同版本间对应的相同自检错误例题产生的 k_{eff} 错误结果也相同，都包含三种发生自检错误的自检类型：mpi-omp-normal、mpi-omp-debug、mpi-omp-optimize。每种发生自检错误的自检类型均含有自检错误例题：

- 1) test_void.py
- 2) test_reflective_cylinder.py
- 3) test_confidence_intervals.py

表 1 不同版本 OpenMPI 的编译自检结果
Table 1 Different versions of the OpenMPI compiler and self checking results.

OpenMPI 版本号 OpenMPI's version number	自检结果 Self checking results	OpenMPI 版本号 OpenMPI's version number	自检结果 Self checking results	OpenMPI 版本号 OpenMPI's version number	自检结果 Self checking result
2.0.1	Fail	1.8.7	Fail	1.7.4	Ok
2.0.0	Fail	1.8.6	Fail	1.7.3	Not
1.10.5	Fail	1.8.5	Fail	1.7.2	Not
1.10.4	Fail	1.8.4	Ok	1.7.1	Not
1.10.3	Fail	1.8.3	Ok	1.7.0	Not
1.10.2	Fail	1.8.2	Ok	1.6.5	Fail
1.10.1	Fail	1.8.1	Ok	1.6.4	Fail
1.10.0	Fail	1.8.0	Ok		
1.8.8	Fail	1.7.5	Ok		

注：Fail 为编译通过，但自检出错；Not 为无法成功编译；Ok 为成功编译，并可以并行，自检通过

Notes: “Fail” represents it can be compiled but failed in self checking; “Not” means it can not be compiled successfully; “Ok” means can be successfully compiled and executed parallelly, and passed the self checking.

表 2 自检错误项及结果
Table 2 Error items and results.

三种发生自检错误的自检类型 3 self checking types of errors	每种自检错误类型均含有以下自检错误项 Each self checking error type contains the following self checking error items	自检的 k_{eff} 正确值 (误差) Correct value of k_{eff} for self checking (deviation)	实际自检产生的 k_{eff} 错误值 (误差) k_{eff} error value generated by actual self checking (error)
mpi-omp-normal	test_void.py	1.069 802 ($2.223\ 092 \times 10^{-2}$)	1.017 732 ($2.380\ 879 \times 10^{-2}$)
mpi-omp-debug	test_reflective_cylinder.py	2.276 055 ($3.186\ 525 \times 10^{-3}$)	2.274 800 ($7.381\ 382 \times 10^{-3}$)
mpi-omp-optimize	test_confidence_intervals.py	$2.913\ 599 \times 10^{-1}$ ($6.738\ 749 \times 10^{-3}$)	$2.938\ 580 \times 10^{-1}$ ($6.543\ 265 \times 10^{-3}$)

2.2 Mpich 的编译和自检

对不同版本的 Mpich 进行编译, 并在 OpenMC 下自检, 结果为各版本的 Mpich 均不能通过自检, 其中 Mpich-3.2-Mpich-1.3 的 16 个版本均为编译通过, 但自检为 Fail; Mpich-1.2.1-Mpich-0.9 的 20 个版本均为不能成功编译。Mpich 和 OpenMPI 自检为 Fail 的计算结果相同。

由于 MIT 对 OpenMC 的基准测试结果采用的是 OpenMPI 编译环境下的计算结果, 只有当 OpenMC 计算结果与基准结果完全一样时才能通过自检。虽然 Mpich 可以实现并行, 但由于 Mpich 存储时保存数位和传递过程中保存等问题, 可能对计

算产生一定的影响, 导致计算结果与基准结果存在一定差异, 最终体现自检结果为 Fail, 但这并不代表其结果是不正确的, 而我们更倾向于使用 OpenMPI 的编译环境。

2.3 HDF5 的编译和自检

HDF5 并行版需要 MPI 进行编译, 选择 OpenMPI-1.8.4 编译不同版本的 HDF5 并行版并使用 OpenMC 全环境检测, 得到结果见表 4。从表 4 中结果可看出, 自检通过的 HDF5 版本为: 1.10.0、1.8.17、1.8.16、1.8.15、1.8.14、1.8.13、1.8.12, 其他版本均无法成功编译。

表 3 使用 OpenMPI-1.8.4 编译不同版本 HDF5 的 OpenMC 自检结果
Table 3 Self checking results of OpenMC using OpenMPI-1.8.4 to compile different versions of HDF5.

HDF5 版本号 HDF5's version number	自检结果 Self checking results	HDF5 版本号 HDF5's version number	自检结果 Self checking results
1.10.0	Ok	1.8.0	Not
1.8.17	Ok	1.6.9	Not
1.8.16	Ok	1.6.8	Not
1.8.15	Ok	1.6.7	Not
1.8.14	Ok	1.6.6	Not
1.8.13	Ok	1.6.5	Not
1.8.12	Ok	1.6.4	Not
1.8.11	Not	1.6.3	Not
1.8.10	Not	1.6.2	Not
1.8.9	Not	1.6.1	Not
1.8.8	Not	1.6.0	Not
1.8.7	Not	1.4.4	Not
1.8.6	Not	1.4.3	Not
1.8.5	Not	1.4.2	Not
1.8.4	Not	1.4.1	Not
1.8.3	Not	1.4.0	Not
1.8.2	Not	1.2.2	Not
1.8.1	Not		

经上述分析可知, OpenMPI 自检通过的版本为: 1.8.4、1.8.3、1.8.2、1.8.1、1.8.0、1.7.5、1.7.4。Mpich

各版本均不能通过自检。HDF5 自检通过的版本为: 1.10.0、1.8.17、1.8.16、1.8.15、1.8.14、1.8.13、1.8.12。

使用以上自检通过的版本的辅助程序能够编译计算结果正确的 OpenMC 执行码,对于 OpenMC 的 MPI 并行不建议使用 Mpich 程序。

3 基准题验证

使用 OpenMC 自带的例题能够初步验证编译成执行码的 OpenMC 的临界计算的正确性,为了进一

步验证 OpenMC 执行码对于临界安全计算的可行性和正确性,选择 ICSBEP 基准题来进行验证。

ICSBEP 是由 OECD-NEA (Organisation for Economic Co-operation and Development-Nuclear Energy Agency)组织编撰,目的是为校验进行具有裂变材料装置的临界计算方法和技术,以及确定临界预警的需求^[13]。从该手册中选取了 96 道典型例

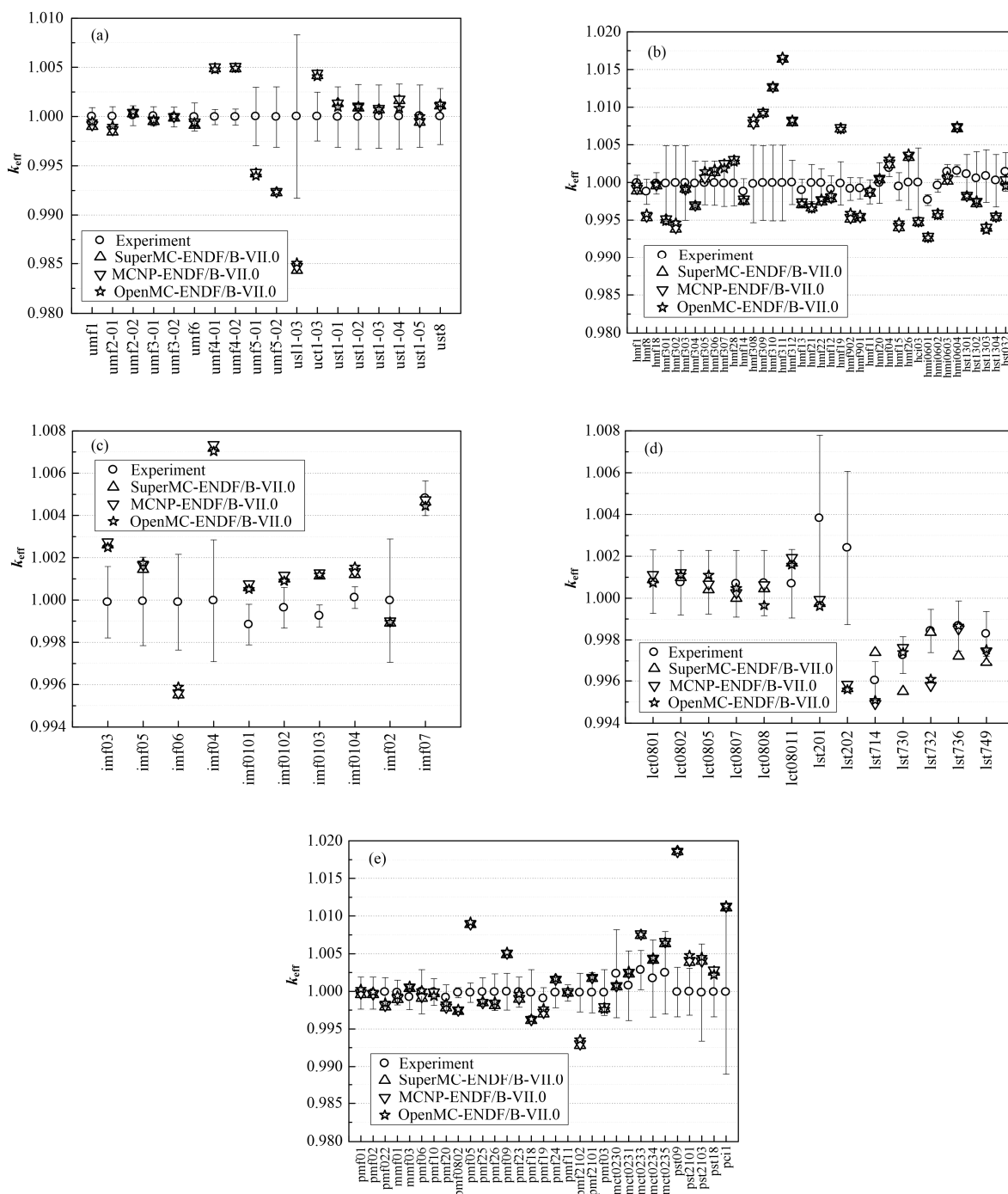


图 2 ^{233}U (a)、HEU (b)、IEU (c)、LEU (d)、Pu (e)基准题结果
Fig.2 Results of OpenMC applied to the ^{233}U (a), HEU (b), IEU (c), LEU (d) and Pu (e) benchmarks.

题。例题组包括多种裂变材料、反射材料和能谱。物理形式的裂变材料包括金属系统(Metal Systems, MET)、化合物(Compound, COMP)、溶液(Solution, SOL)和混合系统(Miscellaneous Systems, MISC)。基准题涉及各种反射材料,如 C、Be、BeO、Al、W、Ni、Fe 以及裸堆和溶液堆。基准题的例题组包括三种主要的裂变同位素: ^{233}U 、 ^{235}U 、 ^{239}Pu 。此外,根据燃料中的 ^{235}U 富集度,将 ^{235}U 基准题类分成三类:高富集度铀(Highly Enriched Uranium, $\text{HEU} \geq 60\%$)、中等富集度铀($10\% < \text{Intermediate Enriched Uranium}$, $\text{IEU} < 60\%$)和低富集度铀(Low Enriched Uranium, $\text{LEU} \leq 10\%$)。例题组也包含各种中子能谱,包括快谱、中间谱及热谱。快谱例题包括了裸球、带重材料反射层的堆芯、轻材料反射层的堆芯。LEU 类只包括热谱例题,因为系统不能在中间谱和快谱中达到临界。钚基准题在例题组中用 Pu 和 mix 表示。

选取的 96 道例题均有实验值作为参考,计算的粒子代数 3 000 代,非活跃代数 20,每代 10 000 个粒子。使用 OpenMC-0.6.2 计算 96 道基准题,使用与文献中 SuperMC 和 MCNP 相同的 ENDF/B-VII.0^[14]核数据库,将计算结果与文献[15]中的结果进行对比,并使用实验值作为参考。所有基准题的计算结果和 k_{eff} 的实验值及不确定度见图 2 (使用 ICSBEP 例题的首字母来简化例题名称,例如,例题名 HEU-MET-FAST-001 简化为 hmf1)。结果表明,OpenMC 计算值与实验值及其他程序计算值吻合较好,验证了 OpenMC 临界安全问题计算的可行性和正确性。

4 结语

本文在 Linux 系统下对 OpenMPI、Mpich 及 HDF5 各版本程序对 0.6.2 版本 OpenMC 源代码的支持情况进行研究,对编译并能通过自检的 OpenMC 执行码给出了直接参考。选择 ICSBEP 中的 96 道代表性例题对 OpenMC 进行临界基准校验,将 OpenMC 与通用蒙特卡罗程序的计算结果进行了对比验证并以实验值作为参考,结果表明 OpenMC 计算值与实验值及其他程序计算值吻合较好,验证了 OpenMC 临界计算的可行性和正确性,上述结论将为程序以后的实际应用及完善奠定基础。

参考文献

- 汪晖, 宋婧, 孙光耀, 等. 基于钠冷快堆 BN-600 的 SuperMC 基准校验分析[J]. 原子能科学技术, 2015, 49(增 1): 17–21. DOI: 10.7538/yzk.2015.49.S0.0016.
WANG Hui, SONG Jing, SUN Guangyao, et al. Benchmarking of SuperMC based on sodium cooled fast reactor BN-600[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2015, 49(Suppl 1): 17–21. DOI: 10.7538/yzk.2015.49.S0.0016.
- 梁金刚. 反应堆蒙特卡罗程序 RMC 大规模计算数据并行方法研究[D]. 北京: 清华大学, 2015.
LIANG Jingang. Research on data parallel methods for large-scale calculations with reactor Monte Carlo code RMC[D]. Beijing: Tsinghua University, 2015.
- Sutton T M, Donovan T J, Trumbull T H, et al. The MC21 Monte Carlo transport code[C]. ANS Mathematics & Computation Division Topical Meeting, 2007.
- MIT Computational Reactor Physics Group. OpenMC documentation release 0.6.2[EB/OL]. [2015-05-04]. <https://github.com/mit-crpg/openmc/tree/v0.6.2/docs>.
- Wang K, Li Z, She D, et al. RMC: a Monte Carlo code for reactor physics analysis[C]. Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo (SNA+MC), Paris, France: French Alternative Energies and Atomic Energy Commission, 2013.
- Romano P K, Forget B. Parallel fission bank algorithms in Monte Carlo criticality calculations[J]. Nuclear Science and Engineering, 2012, 170(2): 125–135.
- Romano P K, Forget B. The OpenMC Monte Carlo particle transport code[J]. Annals of Nuclear Energy, 2013, 51: 274–281.
- Extensible Markup Language (XML) 1.0.2 edition[EB/OL]. [2016-10-20]. <http://www.w3.org/TRREC-xml>.
- Jaakko Leppänen. Serpent progress report 2010[R]. VTT-R-01362-11, 2010.
- 肖建, 林海波. Python 编程基础[M]. 北京: 清华大学出版社, 2003.
XIAO Jian, LIN Haibo. Based on Python programming[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2003.
- 张治宏. 基于 MPI 的并行计算研究[D]. 北京: 中国地质大学(北京), 2006.
ZHANG Zhihong. The study of parallel computing based on MPI[D]. Beijing: China University of Geosciences (Beijing), 2006.
- The HDF Group. HDF5 file format specification[EB/OL]. [2016-10-6]. <http://www.hdfgroup.org/HDF5>.
- 宋婧, 孙光耀, 陈珍平, 等. 蒙特卡罗有效增殖因子计算方法研究[J]. 核科学与工程, 2015, (2): 241–245. DOI: 10.3969/j.issn.0258-0918.2015.02.008.

- SONG Jing, SUN Guangyao, CHEN Zhenping, *et al.* Study on Monte Carlo k -effective calculation method[J]. Nuclear Science and Engineering, 2015, (2): 241–245. DOI: 10.3969/j.issn.0258-0918.2015.02.008.
- 14 Chadwick M B, Obložinský P, Herman M, *et al.* ENDF/B-VII.0: next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology[J]. Nuclear Data Sheets, 2006, **107**: 2931–3060.
- 15 Zhang B, Song J, Sun G, *et al.* Criticality validation of SuperMC with ICSBEP[J]. Annals of Nuclear Energy, 2016, **87**: 494–499.